



# بررسی نظری عملکرد نانوساختار $\text{SnS}_2$ بعنوان لایه بافر در سلول خورشیدی $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{S}(e)_2$ و مقایسه آن با $\text{CdS}$

مریم حقیقی<sup>۱</sup> | مهران مین‌باشی<sup>۲</sup> | نیما تقوی‌نیا<sup>۳،۱\*</sup> | سید محمد مهدوی<sup>۳،۱</sup> | امیرحسین احمدخان کردبچه<sup>۲</sup>

<sup>۱</sup> پژوهشکده علوم و فناوری نانو، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

<sup>۲</sup> دانشکده فیزیک، دانشگاه علم و صنعت، تهران

<sup>۳</sup> دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

**چکیده:** در این مقاله، ابتدا سلول خورشیدی  $\text{CIGS}(e)$  با نسبت مختلف  $\text{Ga}/\text{Ga}+\text{In}$  بر اساس داده‌های تجربی با استفاده از نرم افزار SCAPS مدل‌سازی شده است. سپس، ترکیب  $\text{SnS}_2$  بعنوان بافری مناسب جهت حذف ترکیب سمی  $\text{CdS}$  مطرح شده است. با توجه به نتایج مدل‌سازی،  $\text{SnS}_2$  ماده‌ای بسیار مناسب جهت جایگزینی با ماده سمی  $\text{CdS}$  می‌باشد.

**واژگان کلیدی:** سلول خورشیدی  $\text{CIGS}(e)$ ، نرم افزار SCAPS، لایه بافر، لایه نانوساختار  $\text{SnS}_2$ ، خمش نوار رسانش.

taghavinia@sharif.edu

## ۱- مقدمه

است [۵-۷]. اگر خمش نوار رسانش از نوع spike باشد، در واقع، سد پتانسیلی در فصل مشترک ایجاد می‌شود که ارتفاع آن مهم است. زیرا این سد پتانسیل، همانطور که از بازترکیب بین الکترون-های نوار رسانش لایه بافر و حفره‌های نوار ظرفیت جاذب، جلوگیری می‌کند [۵-۷]، می‌تواند بدلیل ایجاد یک سد بلند در برابر الکترون‌های تولیدشده،  $J_{sc}$  و FF و در نتیجه عملکرد سلول را کاهش دهد [۷]. بطور کلی، در حالت spike، cliff و flat، سد پتانسیل flat احتمال بازترکیب الکترون‌های نوار رسانش لایه بافر و حفره‌های نوار ظرفیت جاذب، افزایش می‌یابد [۵-۷]. بطور معمول در ساختار سلول خورشیدی  $\text{CIGS}(e)$ ،  $\text{CdS}$  به عنوان لایه بافر استاندارد پذیرفته شده است [۸ و ۹]. اما خطر زیست محیطی حاصل از بکارگیری  $\text{CdS}$  در استفاده گسترده تکنولوژی فوتوولتاییک  $\text{CIGS}(e)$  امری غیرقابل چشم‌پوشی است [۱۲-۱۰]. البته بیشترین بازدهی این سلول خورشیدی (۲۲/۹٪) نیز با

عواملی مانند آلودگی زمین و کمبود منابع انرژی، بشر را ملزم به کاهش مصرف انرژی و حفاظت از محیط زیست کرده است. بهترین راه، بهره‌برداری از منبع انرژی خورشیدی تجدیدپذیر می‌باشد [۳-۱]. سلول‌های خورشیدی بس بلور لایه نازک  $\text{CuInS}(e)_2$  (CIS(e)) و آلیاژ  $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{S}(e)_2$  ( $\text{CIGS}(e)$ ) مواد با گاف نواری مستقیم می‌باشند. این کالکوزن‌ها دارای ضرایب جذب بسیار بالا هستند که برای جذب بخش قابل توجهی از تابش خورشید، فقط نیازمند به لایه‌های بسیار نازک (۱-۲ میکرومتر) می‌باشند. علاوه بر این،  $\text{CIS}(e)/\text{CIGS}(e)$  دارای راندمان بالا، پایداری طولانی مدت و پتانسیلی برای تولید و فرآوری کم هزینه هستند [۴]. همترازی نامناسب نوار رسانش بین لایه جاذب و لایه بافر یکی از عوامل کاهش  $V_{oc}$  در سلول می‌باشد. بطور کلی، خمش نوار رسانش (CBO) در فصل مشترک جاذب و بافر می‌تواند به سه صورت flat، spike و cliff باشد که مناسبترین آنها spike

لایه بافر CdS می‌باشد [۱۳].

های مختلفی مانند رسوب حمام شیمیایی [۱۷]، فرآیند هیدروترمال [۱۵] و اسپری پیرولیز [۱۸ و ۱۹] استفاده می‌شود. تاکنون از این ماده بعنوان لایه بافر در سلول خورشیدی CIGS(e) استفاده نشده است.

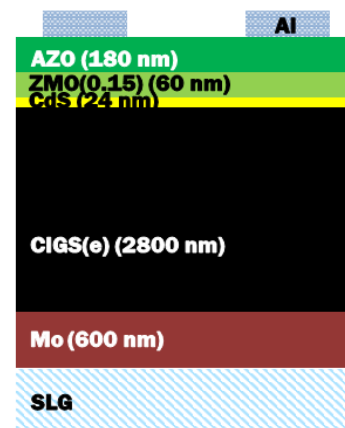
در این مقاله، ابتدا سلول خورشیدی CIGS(e) بصورت گرادینانی از نسبت مختلف (GGI) Ga/Ga+In بر اساس داده های تجربی با استفاده از نرم افزار SCAPS مدلسازی شده است. در این مدلسازی پارامترهای لایه جاذب مانند گاف نواری، الکترونخواهی، نسبت ترکیب مواد و چگالی حامل های حفره بر حسب تابعی از ضخامت لایه جاذب، بر اساس داده های تجربی مدل شده اند تا مدل، نزدیک

جدول ۱: نتایج تجربی سلول CIGS(e) مدلسازی شده

CIGS(e)/CdS	
eff (%)	22.00
V <sub>oc</sub> (V)	0.734
J <sub>sc</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	36.90
FF (%)	81.00
R <sub>st</sub> (Ω.cm <sup>2</sup> )	0.45
R <sub>sh</sub> (kΩ.cm <sup>2</sup> )	12.50

## ۲- مدلسازی

طرحواره ای از سطح مقطع سلول خورشیدی CIGS(e) تجربی بر اساس نتایج گروه پاولا [۲۰ و ۲۱] در شکل ۱ نمایش داده شده است. در مدلسازی نیز ساختار به همین صورت در نظر گرفته شده است. در این مدل، ساختار سلول به صورت (Mo/MoSe<sub>2</sub>/CIGS(e)/CdS/ZMO(0.15)/AZO/Al) می-باشد. مولیبدن بعنوان کانتکت پشتی، ترکیب CIGS(e) بعنوان لایه جاذب، CdS در نقش لایه بافر، ZnMgO بعنوان لایه پنجره با مقاومت بالا، Al:ZnO، بعنوان لایه اکسید رسانای شفاف و آلومینیوم بعنوان اتصال جلویی سلول به کار گرفته شده است. جزئیات بیشتر از ساختار این سلول خورشیدی در مرجع [۲۱] بیان شده است. مدلسازی بر اساس نتایج تجربی حاصل از سلول خورشیدی CuIn<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>Se<sub>2</sub> با بازدهی



شکل ۱: طرحواره ای از سطح مقطع ساختار سلول خورشیدی CIGS(e)

به شرایط واقعی سلول شود. در ادامه، مقایسه ای بین ماده SnS<sub>2</sub> بعنوان ماده ای جایگزین بافر و CdS انجام شده است.

ترکیب SnS<sub>2</sub> به عنوان یکی از مهم ترین مواد کالکوتزن فلزی است که خصوصیات نوری و الکتریکی بسیار مشابهی با ماده CdS دارد. گاف نواری این ماده نیمه هادی نوع-n، غیرمستقیم و در بازه eV ۲/۸۸ - ۱/۸۲ گزارش شده است [۱۶-۱۴ و ۱۰]. از جمله مزایای این ماده نسبت به ماده تجاری و مرسوم CdS، غیرسمی و ارزان بودن است [۱۶-۱۴ و ۱۰]. برای ساخت این ماده از روش

جدول ۲: مقادیر پارامترهای ورودی لایه های مختلف CIGS(e) [۲۰-۲۹]

Parameter and units	Buffer (CdS)	Buffer (SnS <sub>2</sub> )	Window (ZMO(0.15))	AZO
Thickness (nm)	24	24	60	180
Electron affinity (eV)	4.20	4.33	4.18	4.6
Bandgap (eV)	2.4	2.27	3.49	3.6
Dielectric permittivity (relative)	10.0	17.7	9	9
CB effective density of states (cm <sup>-3</sup> )	1×10 <sup>18</sup>	7.32×10 <sup>18</sup>	2.2×10 <sup>18</sup>	2.2×10 <sup>18</sup>
VB effective density of states (cm <sup>-3</sup> )	1×10 <sup>19</sup>	1×10 <sup>19</sup>	1.8×10 <sup>19</sup>	1.8×10 <sup>19</sup>
Electron mobility (cm <sup>2</sup> /Vs)	100	50	100	100
Hole mobility (cm <sup>2</sup> /Vs)	25	25	25	31
Shallow uniform donor density N <sub>D</sub> (cm <sup>-3</sup> )	1×10 <sup>18</sup>	6.14×10 <sup>18</sup>	1×10 <sup>18</sup>	0
Shallow uniform acceptor density N <sub>A</sub> (cm <sup>-3</sup> )	0	0	0	1.0×10 <sup>20</sup>

جدول ۳: جزییات پارامترهای ورودی لایه جاذب  $[20, 21] \text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{S}(e)_2$

Parameter and units	Composition Dependence P		
Thickness ( $\mu\text{m}$ )	2.8		
Composition y at left and right side of layer	pure $\text{CuInSe}_2$ ( $y = 0$ )	pure $\text{CuGaSe}_2$ ( $y = 1$ )	From Exp File
Bandgap (eV)	1.035	1.675	Parabolic (bowing parameter=0.15)
Electron affinity (eV)	4.5	3.86	Parabolic (bowing parameter=-0.15)
Dielectric permittivity (relative)	10.0	13.6	Uniform
CB effective density of states ( $1/\text{cm}^3$ )	$2.2 \times 10^{18}$	$2.2 \times 10^{18}$	Uniform
VB effective density of states ( $1/\text{cm}^3$ )	$1.8 \times 10^{19}$	$1.8 \times 10^{19}$	Uniform
Electron mobility ( $\text{cm}^2/\text{Vs}$ )	100	100	Uniform
Hole mobility ( $\text{cm}^2/\text{Vs}$ )	25	25	Uniform
Shallow uniform donor density $N_D$ ( $1/\text{cm}^3$ )	0	0	-
Shallow uniform acceptor density $N_A$ (y) ( $1/\text{cm}^3$ )	$7.5 \times 10^{16}$	$4 \times 10^{15}$	Beta Function (a=900, b=11)
Absorption constant A ( $1/\text{cm eV}^{(2)}$ )	$3.7 \times 10^4$	$3.7 \times 10^4$	-
Absorption constant B ( $\text{eV}^{(2)}/\text{cm}$ )	0	0	-
Defect type	Double Single Donor		
Capture cross section electrons ( $\text{cm}^2$ )	$4.0 \times 10^{-16}$	$4.0 \times 10^{-15}$	-
Capture cross section holes ( $\text{cm}^2$ )	$4.0 \times 10^{-14}$	$4.0 \times 10^{-13}$	-
Energy level with respect to Reference (eV)	0.26	0.34	--

پارامترهای ورودی لایه جاذب جهت مدلسازی در جدول ۳ آورده شده است.

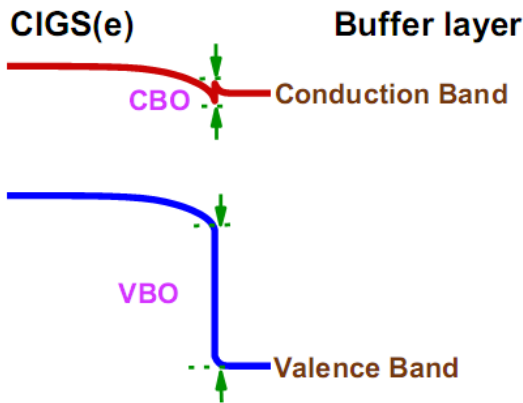
### ۳- نتایج و بحث

شکل ۲ منحنی های بدست آمده از مدلسازی و مقایسه آن با نتایج تجربی سلول خورشیدی  $\text{CIGS}(e)$  را نشان می دهد که نتایج بدست آمده از مدلسازی بسیار نزدیک به نتایج تجربی می باشند. منحنی های بدست آمده از سلول خورشیدی  $\text{CIGS}(e)$  مدلسازی شده با لایه بافر  $\text{SnS}_2$  و مقایسه آن با نتایج تجربی و مدلسازی با  $\text{CdS}$  (شکل ۲ و جدول ۴) نشان می دهد که نتایج بدست آمده از مدلسازی با  $\text{SnS}_2$ ، بسیار نزدیک به نتایج حاصل از بافر  $\text{CdS}$  می باشد. همانگونه که مشاهده می شود،  $V_{OC}$  در هر دو ماده تقریباً یکسان بوده اما  $J_{SC}$  با جایگزینی  $\text{CdS}$  با  $\text{SnS}_2$  تا حدودی افزایش یافته است که دلیل این امر کاهش سد انرژی  $\text{CBO}$  در مقابل الکترون از  $0.21 \text{ eV}$  به  $0.08 \text{ eV}$  است.

۲۲٪ انجام شده که بطور خلاصه در جدول ۱ آورده شده است. همچنین مقادیر ورودی لایه های جاذب،  $\text{ZMO}$  و  $\text{AZO}$  بر اساس مراجع ۲۰ و ۲۱ انجام شده است. جزییات مقادیر ورودی برای لایه های مختلف در جدول ۲ آورده شده است. پس از اعتبار سنجی مدل، لایه بافر  $\text{CdS}$  با ماده  $\text{SnS}_2$  جایگزین شده و مجدداً مدلسازی انجام شد، بطوریکه مقادیر پارامترهای مختلف  $\text{SnS}_2$  از جمله گاف نواری [۲۲]، الکترونخواهی [۲۲-۲۷]، چگالی حالات موثر نوار رسانش [۲۸ و ۲۹]، چگالی حامل [۲۸]، تحرک پذیری [۹، ۱۷، ۱۸ و ۲۸] و ضریب دی الکتریک [۳۰، ۲۸ و ۳۱] با سایر گزارش مطابقت دارد. با توجه به قواعد تعریف شده در  $\text{SCAPS}$ ، جهت تعیین نسبت مواد در ترکیبات آلیاژی نیمه هادی بصورت  $A_{1-x}B_x$  عمل می کند که در آن  $x = [A]/[A]+[B]$  است [۳۲].

در آن  $x = [A]/[A]+[B]$  است [۳۲]. در نتیجه، برای ترکیب  $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{S}(e)_2$ ، پارامتر A برای  $\text{CuInS}(e)_2$  و پارامتر B برای  $\text{CuGaS}(e)_2$  تعریف می شود و  $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{S}(e)_2 = (1-x) \text{CuInS}(e)_2 + x \text{CuGaS}(e)_2$  است. نسبت  $x = \text{GGI} = \text{Ga}/\text{Ga}+\text{In}$  بر حسب ضخامت را می توان از داده های تجربی [۲۰] بصورت فایل در نرم افزار وارد کرد. جزییات

خصوصاً در حضور نقص‌های فصل مشترک افزایش می‌یافت که در نهایت باعث کاهش  $V_{OC}$  در سلول می‌شد [۷].



شکل ۳: طرحواره‌ای از منحنی نوار انرژی در فصل مشترک لایه بافر و جاذب CIGS(e)

جدول ۵: مقادیر CBO و VBO محاسبه شده برای سلول خورشیدی CIGS(e) با لایه بافر CdS و SnS<sub>2</sub>

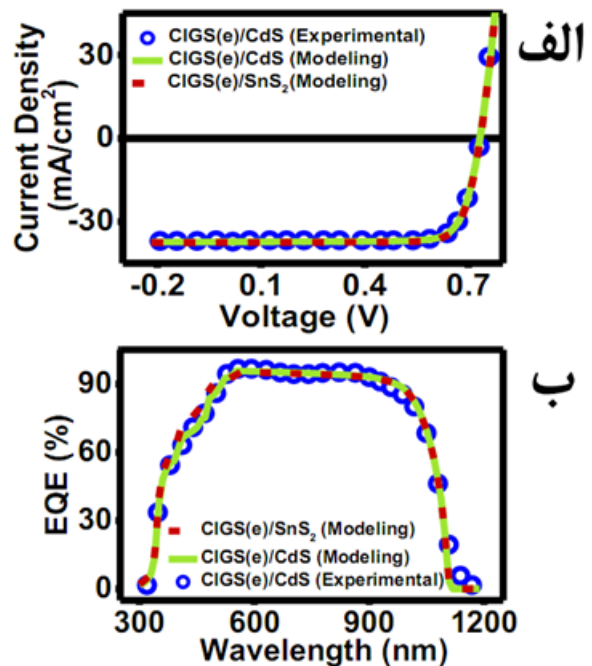
Cell	CBO (eV)	VBO (eV)
CIGS(e)/CdS	+0.21	-0.8
CIGS(e)/SnS <sub>2</sub>	+0.08	-0.8

## ۴- نتیجه گیری

سلول خورشیدی CIGS(e) با لایه بافر CdS و SnS<sub>2</sub> با نرم افزار SCAPS مدل‌سازی شد. با توجه به نتایج مدل‌سازی، SnS<sub>2</sub> ماده‌ای بسیار مناسب جهت جایگزینی با ماده سمی CdS می‌باشد. همچنین، عملکرد سلول خورشیدی CIGS(e) با لایه بافر SnS<sub>2</sub> به اندازه سلول خورشیدی CIGS(e) با لایه بافر CdS مطلوب است ( $V_{OC}=0.735$  V,  $J_{SC}=37/53$  mA/cm<sup>2</sup>) بطوریکه بازدهی آن نسبت به CdS تقریباً ۲/۱۴ درصد افزایش یافته است.

## مراجع

[1] B. W. Lavery, S. Kumari, H. Konermann, G. L. Draper, J. Spurgeon, and T. Druffel, "Intense Pulsed Light Sintering of CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> Solar Cells," ACS Appl. Mater. Interfaces, 8, 8419–8426, 2016.



۲: منحنی J-V (الف) و EQE سلول خورشیدی CIGS(e) با لایه بافر CdS (تجربی و مدل شده) و SnS<sub>2</sub> (مدل شده) شکل

جدول ۴: مقایسه عملکرد سلول خورشیدی CIGS(e) با لایه بافر CdS (تجربی و مدل شده) و SnS<sub>2</sub> (مدل شده)

Cell	eff (%)	$J_{SC}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	$V_{OC}$ (V)	FF (%)
CIGS(e)/CdS (Experimental)	22.00	36.90	0.734	81.00
CIGS(e)/CdS (Modeling)	22.03	37.28	0.734	80.53
CIGS(e)/SnS <sub>2</sub> (Modeling)	22.47	37.53	0.735	81.44

طرحواره‌ای از منحنی نوار انرژی در فصل مشترک لایه بافر و جاذب در شکل ۳ نشان داده شده است که خمش نوار رسانش (CBO) سد انرژی در مقابل الکترون و خمش نوار ظرفیت (VBO) سد انرژی در مقابل حفره است که مقادیر آنها بصورت  $CBO = \chi_{CIGS(e)} - \chi_{Buffer}$  و  $VBO = (\chi_{CIGS(e)} + E_g^{CIGS(e)}) - (\chi_{Buffer} + E_g^{Buffer})$  محاسبه می‌شود [۳۳ و ۳۴] (جدول ۵). همانگونه که در جدول ۵ مشاهده می‌شود، مقدار CBO برای هر دو بافر مثبت می‌باشد که نشان دهنده نوع spike است. در همه گزارش‌ها، در سلول‌های خورشیدی CIGS(e) بر پایه CdS، اتصال ناهمگون CIGS(e)/CdS از نوع I یا spike است که لایه نوار رسانش در لایه CIGS(e) نسبت به CdS، در موقعیت پایین‌تری قرار دارد [۳۵ و ۷]. مقدار مطلوب برای این سد پتانسیل eV ۰/۰-۴ گزارش شده است. در صورتی که مقدار CBO منفی بوده و از این بازه کمتر می‌بود (نوع cliff)، باز ترکیب در فصل مشترک

- [11] Y. Wu et al., "Synthesis and Photovoltaic Application of Copper (I) Sulfide Nanocrystals," *NANO Lett*, 8, 2551–2555, 2008.
- [12] Y. Liao, Y. Wang, Y. Yen, C. Chen, D. Hsieh, and S. Chen, "Non-antireflective Scheme for Efficiency Enhancement of Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> Nanotip Array Solar Cells," *ACS Nano*, 7, 7318–7329, 2013.
- [13] [http://www.solar-frontier.com/eng/news/2017/1220\\_press.html](http://www.solar-frontier.com/eng/news/2017/1220_press.html), "Solar Frontier Achieves World Record Thin-Film Solar Cell Efficiency: 22.9%," *Solar Frontier*.
- [14] Z. Wu, Y. Xue, Y. Zhang, J. Li, and T. Chen, "SnS<sub>2</sub> nanosheet-based microstructures with high adsorption capabilities and visible light photocatalytic activities," *RSC Adv*, 5, 24640–24648, 2015.
- [15] J. Yu, C. Xu, F. Ma, S. Hu, Y. Zhang, and L. Zhen, "Monodisperse SnS<sub>2</sub> Nanosheets for High-Performance Photocatalytic Hydrogen Generation," *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 6, 24, 22370–22377, 2014.
- [16] G. Radovsky, R. Popovitz-biro, and R. Tenne, "Study of Tubular Structures of the Misfit Layered Compound SnS<sub>2</sub>/SnS," *Chem. Mater.*, 24, 15, 3004–3015, 2012.
- [17] X. Hu et al., "Phase-controlled synthesis and photocatalytic properties of SnS, SnS<sub>2</sub> and SnS/SnS<sub>2</sub> heterostructure nanocrystals," *Mater. Res. Bull.*, 48, 2325–2332, 2013.
- [18] R. K. Gupta and F. Yakuphanoglu, "Photoconductive Schottky diode based on Al/p-Si/SnS<sub>2</sub>/Ag for optical sensor applications," *Sol. Energy*, 86, 1539–1545, 2012.
- [19] B. Thangaraju and P. Kaliannan, "Spray Pyrolytic Deposition and Characterization of SnS and SnS<sub>2</sub> Thin Films," *J. Phys. D - Appl. Phys.*, 33, 9, 1054–1059, 2000.
- [20] A. Bauer, S. Sharbati, and M. Powalla, "Systematic survey of suitable buffer and high resistive window layer materials in CuIn<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>Se<sub>2</sub> solar cells by numerical simulations," *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 165, 119–127, 2017.
- [21] P. Jackson, R. Wuerz, D. Hariskos, E. Lotter, W. Witte, and M. Powalla, "Effects of heavy alkali
- [2] M. a, Y. Diaz, H. C. Avila, J. Chen, C. Kalappattil, V. Das, R. Phan, M. H. Čadež, T. Carmelo, J. M. Asensio, M. C. Batzill, "Angle resolved photoemission spectroscopy reveals spin charge separation in metallic MoSe<sub>2</sub> grain boundary," *Nat. Commun*, 8, 14231-14243, 2017.
- [3] D. K. Nam, Junggyu, Y. Kang, D. Lee, J. Y. Yang, Y. S. Kim, Ch. B. Mo, S. Park, "Achievement of 17.9% efficiency in 30×30 cm<sup>2</sup> Cu(In,Ga)(Se,S)<sub>2</sub> solar cell sub-module by sulfurization after selenization with Cd-free buffer," *Prog. Photovolt Res. Appl*, 24, 175–182, 2016.
- [4] W. Liu, D. B. Mitzi, M. Yuan, A. J. Kellock, S. Jay Chey, and O. Gunawan, "12% Efficiency CuIn(Se,S)<sub>2</sub> photo-voltaic device prepared using a hydrazine solution process," *Chem. Mater*, 22, 1010–1014, 2010.
- [5] B. Von Roedern and G. H. Bauer, "Material requirements for Buffer layers used to obtain Solar Cells with High open Circuit Voltages," *MRS online Proceeding Libr. Arch*, 557, 1-6, 1999.
- [6] A. Redinger, M. Mousel, M. H. Wolter, N. Valle, and S. Siebentritt, "Influence of S/Se ratio on series resistance and on dominant recombination pathway in Cu<sub>2</sub>ZnSn(SSe)<sub>4</sub> thin film solar cells," *Thin Solid Films*, 535, 291–295, 2013.
- [7] C. Yan et al., "Band alignments of different buffer layers (CdS, Zn(O,S), and In<sub>2</sub>S<sub>3</sub>) on Cu<sub>2</sub>ZnSnS<sub>4</sub>," *Appl. Phys. Lett*, 104, 17, 1739011-1739014, 2014.
- [8] L. a Burton et al., "Synthesis, Characterization, and Electronic Structure of Single-Crystal SnS, Sn<sub>2</sub>S<sub>3</sub>, and SnS<sub>2</sub>," *Chem. Mater*, 25, 4908–4916, 2013.
- [9] A. Voznyi, V. Kosyak, A. Opanasyuk, N. Tirkusova, L. Grase, and A. Medvids, "Structural and electrical properties of SnS<sub>2</sub> thin films," *Mater. Chem. Phys*, 173, 52–61, 2016.
- [10] C. Mondal, M. Ganguly, J. Pal, A. Roy, J. Jana, and T. Pal, "Morphology controlled synthesis of SnS<sub>2</sub> nanomaterial for promoting photocatalytic reduction of aqueous Cr(VI) under visible light," *Langmuir*, 30, 4157–4164, 2014.



- [30] Y. Sun et al., “Freestanding Tin Disulfide Single-Layers Realizing Efficient Visible- Light Water Splitting,” *Angew. Chem. Int. Ed*, 51, 35, 8727–8731, 2012.
- [31] N. Takeda and B. A. Parkinson, “Adsorption Morphology, Light Absorption, and Sensitization Yields for Squaraine Dyes on SnS<sub>2</sub> Surfaces,” *J. Am. Chem. Soc*, 125, 5559–5571, 2003.
- [32] S. D. Marc Burgelman, Koen Decock, Alex Niemegeers, Johan Verschraegen, *SCAPS Manual*, 17th ed., 2016.
- [33] J. Lindahl, J. Keller, O. Donzel-Gargand, P. Szaniawski, M. Edoff, and T. Torndahl, “Deposition temperature induced conduction band changes in zinc tin oxide buffer layers for Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> solar cells,” *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 144, 684–690, 2016.
- [34] M. Gloeckler, “Device physics of Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> thin-film solar cells,” *Colorado State University*, 2005.
- [35] O. Gunawan, T. K. Todorov, and D. B. Mitzi, “Loss mechanisms in hydrazine-processed Cu<sub>2</sub>ZnSn(S<sub>e</sub>,S)<sub>4</sub> solar cells,” *Appl. Phys. Lett*, 97, 2335061- 2335063, 2010.
- elements in Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> solar cells with efficiencies up to 22.6%,” *Phys. Status Solidi - Rapid Res. Lett*, 10, 583–586, 2016.
- [22] T. J. Whittles, L. A. Burton, J. M. Skelton, A. Walsh, T. D. Veal, and V. R. Dhanak, “Band Alignments, Valence Bands and Core Levels in the Band Alignments, Valence Bands and Core Levels in the Tin Sulfides SnS, SnS<sub>2</sub> and Sn<sub>2</sub>S<sub>3</sub>: Experiment and Theory,” *Chem. Mater*, 28, 3718–3726, 2016.
- [23] N. K. Konstantinos C. Christoforidis, Armelle Sengele, Valérie Keller, “Single-step synthesis of SnS<sub>2</sub> nanosheets decorated TiO<sub>2</sub> anatase nanofibers as efficient photocatalysts for the degradation of gas phase diethylsulfide,” *Appl. Mater. Interfaces*, 7, 19324–19334, 2015.
- [24] A. Sánchez-Juárez, a. Tiburcio-Silver, and a. Ortiz, “Fabrication of SnS<sub>2</sub>/SnS heterojunction thin film diodes by plasma-enhanced chemical vapor deposition,” *Thin Solid Films*, 480–481, 452–456, 2005.
- [25] R. H. Williams, R. B. Murray, D. W. Govan, J. M. Thomas, and E. L. Evans, “Band structure and photoemission studies of SnS<sub>2</sub> and SnSe<sub>2</sub> . I. Experimental,” *J. Phys. C Solid State Phys*, 6, 3631–3642, 1973.
- [26] Y. Shiga, N. Umezawa, N. Srinivasan, S. Koyasu, E. Sakai, and M. Miyauchi, “A metal sulfide photocatalyst composed of ubiquitous elements for solar hydrogen production,” *Chem. Commun*, 52, 7470–7473, 2016.
- [27] Y. Xu and M. A. A. Schoonen, “The Absolute Energy Positions of Conduction and Valence Bands of Selected Semiconducting Minerals,” *Am. Mineral*, 85, 543–556, 2000.
- [28] O. Madelung, *Semiconductors: Data Handbook*. New York: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2004.
- [29] N. G. Deshpande, A. A. Sagade, Y. G. Gudage, C. D. Lokhande, and R. Sharma, “Growth and characterization of tin disulfide (SnS<sub>2</sub>) thin film deposited by successive ionic layer adsorption and reaction (SILAR) technique,” *J. Alloys Compd*, 436, 421–426, 2007.



# Theoretical Study of the SnS<sub>2</sub> Nanostructure Performance as a Buffer Layer in CuIn<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>S(e)<sub>2</sub> Solar Cell and its Comparison with CdS

M. Haghghi<sup>1</sup>, M. Minbashi<sup>2</sup>, N. Taghavinia<sup>1,3\*</sup>, S. M. Mahdavi<sup>1,3\*</sup>, A. A. Kordbacheh<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Institute for Nanoscience and Nanotechnology, Sharif University of Technology, Tehran

<sup>2</sup>Department of Physics, Iran University of Science and Technology, Tehran

<sup>3</sup>Department of Physics, Sharif University of Technology, Tehran

**Abstract:** In this paper, firstly, the CIGS(e) solar cell with a different Ga/Ga+In ratio was modeled based on experimental data using the SCAPS software. Then, the SnS<sub>2</sub> composition was proposed as a suitable buffer for the elimination of toxic CdS compounds. According to the modeling results, SnS<sub>2</sub> is a very suitable material for substitution of the toxic CdS.

**Keywords:** CIGS(e) solar cell, SCAPS software, Buffer layer, SnS<sub>2</sub> nanostructure layer, Conduction band offset