

РЕФЕРАТ

Звіт: с. 29, рис. 5, табл. 2, джерел 37.

Об'єкт дослідження – однокомпонентні тонкоплівкові системи Me_1 та Me_2 , двокомпонентні тонкоплівкові системи Me_1-Me_2 та Me_2-Me_1 .

Мета роботи – визначити дифузійні та термодинамічні характеристики досліджуваних систем на основі теорії функціоналу щільності.

Методи дослідження – комп'ютерне моделювання на основі теорії функціоналу щільності із застосуванням програмного забезпечення VASP.

Новизна роботи полягає у використанні першопринципних методів із застосуванням квазігармонічних наближень для дослідження дифузійних бар'єрів фронтальних контактів кремнієвих сонячних батарей.

Результати даної роботи можуть бути використані в області енергетики при виробництві сонячних батарей.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: ФРОНТАЛЬНІ КОНТАКТИ СОНЯЧНИХ БАТАРЕЙ,
ДИFUЗІЙНИЙ БАР'ЄР, САМОДИFUЗІЯ, ГЕТЕРОДИFUЗІЯ,
ПЕРШОПРИНЦИПНЕ МОДЕЛЮВАННЯ