



بیست و هفتمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران و سیزدهمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان، ایران.
۱۴-۱۶ بهمن ۱۳۹۹



کد مقاله : ۱-۲۵۰۰-۱۰-A

مطالعه‌ی شبیه‌سازی و بهینه‌سازی سلول خورشیدی پروسکایتی مسطح مبتنی بر C_{60} و $CuPc$ و بررسی تاثیر دما بر عملکرد آن

رضا ابراهیمی نسب، دکتر سید محمدباقر قریشی
دانشگاه کاشان، دانشکده فیزیک، گروه لیزرفوتونیک
Reza.Ebrahiminasab@grad.kashanu.ac.ir
mghorashi@kashanu.ac.ir

چکیده - در این تحقیق یک مطالعه‌ی شبیه سازی به کمک نرم افزار SCSPS-1D صورت گرفته است تا قبل از ساخت عملی یک سلول خورشیدی پروسکایتی مسطح، اطلاعات مربوط به این ساختار پیش‌بینی شود و با استفاده از پارامترهای بدست آمده از نتایج تجربی مختص مواد تشکیل دهنده‌ی سلول خورشیدی پروسکایتی و در نظر گرفتن تاثیر باز ترکیب‌های تابشی و غیرتابشی (اوزه)، ساختار $FTO / C_{60} / CH_3NH_3PbI_3 / CuPc / Au$ شبیه سازی شده و تاثیر ضخامت لایه‌های مختلف سلول خورشیدی مورد بررسی قرار گرفته تا ضخامت بهینه‌ی آنها مشخص شود و رهنمودهایی برای افزایش بازدهی تبدیل توان ارائه شود. پس از انجام شبیه سازی ضخامت‌های بهینه برای لایه‌ی انتقال دهنده‌ی الکترون، لایه‌ی انتقال دهنده‌ی حفره و پروسکایت به ترتیب ۱۰، ۵۰ و ۳۰۰ نانومتر بدست آمد. نهایتاً برای این ضخامت‌های بهینه در دمای اتاق مقادیر (V) ۱/۰۲۹، (mA/cm^2) ۲۳/۱۴۱، $(\%)$ ۶۲/۹۳، $(\%)$ ۱۵ به ترتیب برای ولتاژ مدار باز، چگالی جریان اتصال کوتاه، ضریب پرشدگی و بازدهی بدست آمد. پس از بررسی تاثیر دما مشخص شد که با افزایش دما عملکرد سلول بهبود می‌یابد.

کلید واژه- شبیه‌سازی، سلول خورشیدی پروسکایتی مسطح، تاثیر دما، SCAPS-1D، تاثیر باز ترکیب

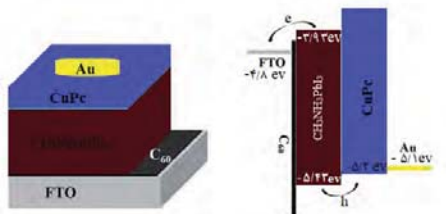
Simulation and optimization studies of planar perovskite solar cells based on C_{60} and $CuPc$ and investigation of the effect of temperature on its performance

Reza Ebrahiminasab, Dr Seyed Mohammadbagher Ghorashi
Kashan University, Physics College, Laser Photonic Group

Abstract- In this research, a simulation study has been performed using SCSPS-1D software. In order to predict the information about this structure before making a planar perovskite solar cell. The structure of $FTO / C_{60} / CH_3NH_3PbI_3 / CuPc / Au$ is simulated using the parameters obtained from the experimental results specific to the constituents of perovskite solar cells and considering the effect of radiative and non-radiative recombination (Auger). The thickness effect of different layers of solar cell has been investigated to determine their optimal thickness and provide guidelines to increase power conversion efficiency. After simulating the optimal thicknesses for the electron transfer layer, the hole transfer layer and perovskite were obtained at 10, 50 and 300 nm, respectively. Finally, for these optimal thicknesses at room temperature, the values 1.029 (V), 23.141 (mA/cm²), 62.93 (%), 15 (%) were obtained for open circuit voltage, short-cut current density, fill factor and efficiency, respectively. After examining the effect of temperature, it was found that with increasing temperature, cell function improves.

Keywords: Simulation, Planar perovskite solar cell, Temperature effect, SCAPS-1D, Recombination effect

بررسی تاثیر ضخامت لایه‌های مختلف و تاثیر دما بر عملکرد دستگاه انجام شده است.



شکل ۱: شماتیک و مکان نوارهای انرژی مربوط به ساختار شبیه‌سازی شده

روش شبیه‌سازی

نرم افزار SCAPS-1D قابلیت حل عددی معادلات پایه-ی نیمرسانا را دارد: معادله‌ی پواسون (۱) که رفتار حامل‌های بار در نیمرساناها را توصیف می‌کند:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = \frac{q}{\epsilon} (N(x) + n(x) - p(x)) \quad (1)$$

همچنین معادلات چگالی جریان الکترون‌ها (۲) و حفره‌ها (۳) عبارتند از:

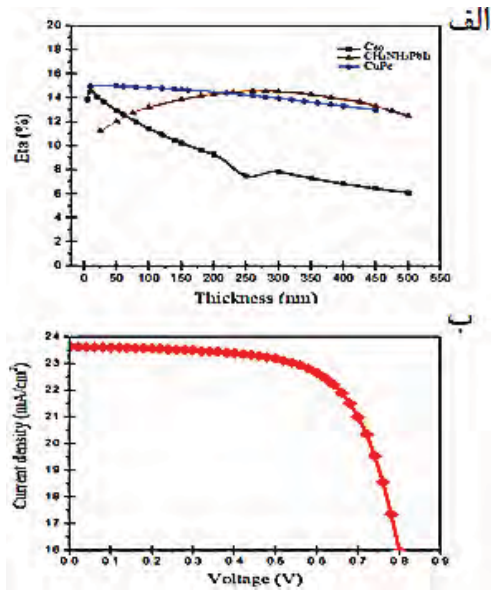
$$J_n = J_{diffusion} + J_{drift} = qD_n \frac{\partial n}{\partial x} + \mu_n qn \frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (2)$$

$$J_p = -qD_p \frac{\partial p}{\partial x} + \mu_p qp \frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (3)$$

با حل این معادلات می‌توان خروجی‌هایی از قبیل شکاف انرژی، بازترکیب حامل‌های بار و مقدار چگالی جریان-ولتاژ را محاسبه کرد. لازم به ذکر است که چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها تمایل دارند که به حالت تعادل خود باز گردند، این کار از طریق فرآیندی به نام بازترکیب انجام می‌شود و شامل بازترکیب بر اثر چگالی نقایص، بازترکیب تابشی و بازترکیب غیر تابشی (اوزه) است که به ترتیب برابر با (cm^{-3}) 1×10^{14} ، $(\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1})$ $1/5 \times 10^{-10}$ و $(\text{cm}^{-6} \text{s}^{-1})$ 10^{-28} در $3/4 \times 10^4$ در نظر گرفته شده‌اند [۵]. در بازترکیب تابشی انرژی الکترون‌هایی که به ترازهای پایین‌تر می‌روند به صورت فوتون آزاد می‌شوند و در بازترکیب غیر تابشی این انرژی به صورت انرژی جنبشی به الکترون دیگری منتقل می‌شود. با استفاده از پارامترهای موجود در جدول ۱ و در نظر گرفتن ضرایب بازترکیب برای لایه‌ی جاذب، ساختار یک

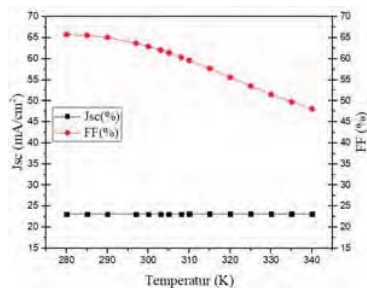
مقدمه

در چند سال اخیر سلول‌های خورشیدی مبتنی بر پروسکایت هالید متیل آمونیوم سرب به دلیل تولید به روش‌های نسبتاً ارزان قیمت و ثبت بازدهی ۲۱ درصدی [۱]، مورد توجه محققان قرار گرفته است و آن را آینده‌ی سلول‌های خورشیدی می‌دانند. در ساختار سلول‌های خورشیدی پروسکایتی چند صد نانومتر لایه-ی جاذب پروسکایت بین لایه‌ی انتقال دهنده‌ی الکترون (ETL) و لایه‌ی انتقال دهنده‌ی حفره (HTL) قرار دارد. زوج‌های الکترون-حفره پس از جذب نور ایجاد می‌شوند و این حامل‌های بار باید خود را به الکترون‌ها برسانند، بنابراین انتخاب و مهندسی این مسیرهای انتقال دهنده‌ی حامل‌های بار تأثیر زیادی در بازدهی و کاهش هزینه‌ها دارد. به عنوان مثال، اکسیدهای فلزی مقاوم و پایدار از جمله تیتانیوم دی‌اکساید (TiO_2) [۲]، به عنوان لایه‌ی انتقال دهنده‌ی الکترون با موفقیت در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی استفاده شده‌اند. علی-رغم این واقعیت که مهم‌ترین سلول‌های خورشیدی پروسکایتی تاکنون دارای موادی مبتنی بر TiO_2 هستند، باید در نظر داشت که اینگونه سلول‌ها پس از قرار گرفتن در معرض تابش اشعه ماورابنفش تخریب می‌شوند [۳]. علاوه بر این TiO_2 معمولاً به بازپخت در دمای بالای ۵۰۰ درجه سانتیگراد نیاز دارد که باعث افزایش هزینه و زمان تولید می‌شود. برای جایگزینی TiO_2 از C_{60} نیز به دلیل تحرک الکترون‌ها و مکان نوار رسانش مناسب که نسبت به مکان نوار رسانش پروسکایت پایین‌تر است و تزریق الکترون‌های تولید شده توسط تابش نور خورشید در لایه‌ی جاذب پروسکایت به لایه‌ی انتقال دهنده‌ی الکترون و سپس به آند را تسهیل می‌کند، همچنین به دلیل قابلیت لایه نشانی به روش محلول و بازپخت در دمای پایین، برای صرفه جویی در مصرف انرژی و هزینه استفاده می‌شود [۴]. از مواد آلی و معدنی بسیاری از جمله فتالوسیانین مس (CuPc) به دلیل شکاف انرژی مناسب و چگالی موثر بالای نوار رسانش و ظرفیت به عنوان لایه‌ی انتقال دهنده‌ی حفره استفاده شده است. شکل ۱ شماتیکی از سلول خورشیدی پروسکایتی استفاده شده در این شبیه‌سازی و مکان نوارهای انرژی مربوط به لایه‌های تشکیل دهنده‌ی این ساختار را نشان می‌دهد. در این تحقیق تجزیه و تحلیل عددی سلول‌های خورشیدی برای



شکل ۲: الف) نمودار بازدهی بر حسب ضخامت‌های مختلف لایه‌ها ب) نمودار چگالی جریان - ولتاژ برای ضخامت‌های بهینه

افزایش دما توسط تابش نور یا اعمال جریان، منجر به برانگیختگی ناشی از حرارت می‌شود و با انتقال الکترون‌ها از نوار ظرفیت به نوار رسانش، تعدادی از حالت‌های زیر انرژی فرمی خالی شده و همان تعداد حالت بالای انرژی فرمی پر می‌شوند. با تغییر دما از ۲۸۰ کلوین تا ۳۴۰ کلوین، میزان تغییر در عملکرد سلول خورشیدی پروسکایتی شبیه سازی شده در این تحقیق مورد بررسی قرار گرفت. با توجه به وابستگی چگالی حالت‌های موثر نوار رسانش و نوار ظرفیت به دما، می‌توان نتیجه گرفت که افزایش دما منجر به افزایش چگالی حالت‌های موثر می‌شود. شکل ۳ الف) تغییرات جریان اتصال کوتاه و ضریب پرتشدگی و ب) تغییرات ولتاژ مدار باز و بازدهی را نسبت به تغییرات دما نشان می‌دهد.



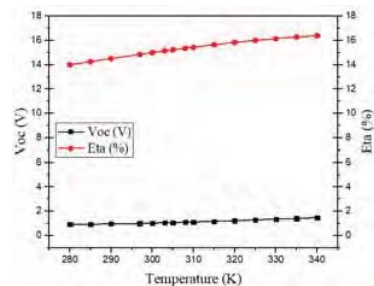
شکل ۳: الف) نمودار تاثیر دما بر جریان اتصال کوتاه و ضریب پرتشدگی

سلول خورشیدی پروسکایتی مسطح شبیه‌سازی شده است.

جدول ۱: پارامترهای ساختاری مورد نیاز برای شبیه‌سازی

Parameters	C ₆₀	CH ₃ NH ₃ PbI ₃	CuPc
Thickness(nm)	۱۰	۳۰۰	۵۰
Eg(ev)	۱/۷	۱/۵	۱/۷
χ(ev)	۴/۲	۳/۹	۲/۸
ε _r	۵	۳۰	۲/۵
N _c (cm ⁻³)	۱/۷×۱۰ ^{۱۹}	۲/۷۵×۱۰ ^{۱۸}	۱۰ ^{۱۹}
N _v (cm ⁻³)	۲/۱×۱۰ ^{۱۸}	۳/۹×۱۰ ^{۱۸}	۱۰ ^{۱۹}
μ _e	۳۰۰	۵۰	۱۰ ^{-۵}
μ _h	۳	۵۰	۱۰ ^{-۴}
N _A	۰	۱۰ ^{۱۷}	۱۰ ^{۱۶}
N _D	۳/۸×۱۰ ^{۱۸}	۰	۰
V _e	۱۰ ^۷	۱۰ ^۷	۱۰ ^۷
V _h	۱۰ ^۷	۱۰ ^۷	۱۰ ^۷

ضخامت لایه‌ها خصوصاً ضخامت لایه‌ی جاذب، عامل مهمی در تغییر عملکرد سلول خورشیدی پروسکایتی به شمار می‌رود. در مورد ضخامت لایه‌های انتقال دهنده‌ی حامل‌های بار نیز می‌توان گفت که هر چه این ضخامت کمتر باشد، نور بیشتری به لایه‌ی جاذب می‌رسد و احتمال جذب حداکثر نور دریافتی بیشتر می‌شود. بنابراین بدست آوردن ضخامت بهینه برای لایه‌ها که در آن سلول بهترین عملکرد را دارد امری ضروری است. شکل ۲ الف) نمودار بازدهی بر حسب ضخامت‌های متفاوت از لایه‌های تشکیل دهنده‌ی این ساختار را نشان می‌دهد. با توجه به این نمودار ضخامت‌های بهینه برای لایه‌ی انتقال دهنده‌ی الکترون، حفره و پروسکایت به ترتیب ۱۰، ۵۰ و ۳۰۰ نانومتر در نظر گرفته می‌شود و نمودار چگالی جریان-ولتاژ برای این ضخامت‌ها در شکل ۲ ب) نشان داده شده است.



شکل ۳: ب) نمودار تاثیر دما بر ولتاژ مدار باز و بازدهی سلول خورشیدی پروسکایتی

نتیجه‌گیری

شبیه‌سازی‌های انجام شده مشخص می‌کند که کاهش ضخامت لایه‌ی جاذب باعث می‌شود سطح اتصال پشتی به ناحیه‌ی تخلیه نزدیک‌تر شود بنابراین الکترون‌ها به راحتی جذب سطح اتصال پشتی می‌شوند و به دلیل شرکت آنها در پدیده‌ی بازترکیب، میزان الکترون‌های موثر بر روی بازدهی کم می‌شود. کاهش ضخامت لایه‌های انتقال دهنده‌ی حامل‌های بار باعث رسیدن نور بیشتر به لایه‌ی جاذب می‌شود. همچنین افزایش دمای ناشی از تابش نور خورشید منجر به بهبود عملکرد سلول خورشیدی می‌شود.

مراجع

- [۱] N. G. Park, "Organometal perovskite light absorbers toward a 20% efficiency low-cost solid-state mesoscopic solar cell," *J. Phys. Chem. Lett.*, vol. 4, no. 15, pp. 2423–2429, 2013.
- [۲] M. A. Green, A. Ho-Baillie, and H. J. Snaith, "The emergence of perovskite solar cells," *Nat. Photonics*, vol. 8, no. 7, pp. 506–514, 2014.
- [۳] T. Leijtens, G. E. Eperon, S. Pathak, A. Abate, M. M. Lee, and H. J. Snaith, "Overcoming ultraviolet light instability of sensitized TiO₂ with meso-superstructured organometal trihalide perovskite solar cells," *Nat. Commun.*, vol. 4, pp. 1–8, 2013.
- [۴] H. Mehrmezhad, A. Behjat, N. Torabi, N. Jahanbakhshizade, and M. Group, "Investigation Zinc Oxide thin film perovskite solar cell using Fullerene and copper Phthalocyanine," pp. 301–304, 2017.
- [۵] G. R. Berdiyrov, F. El-mellouhi, M. E. Madjet, F. H. Alharbi, F. M. Peeters, and S. Kais, "Solar Energy Materials & Solar Cells Effect of halide-mixing on the electronic transport properties of organometallic perovskites," *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, no. 2015, pp. 1–9, 2020.