

بیست و هشتمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران و چهاردهمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران، دانشگاه شهید چمران اهواز، خوزستان، ایران. ۱۴۰۰ بهمن ۱۴۰۰



اثر چگالی نقص بر عملکرد سلول خورشیدی غیر آلی CsPbI^۳ :مطالعه شبیه-سازی

پریسا کریمی مونه^۱ ، زهرا مخلص آبادی فراهانی^۲ ، نفیسه شریفی^{۱۰۲} ^۱گروه فوتونیک و پلاسما، دانشکده فیزیک، دانشگاه کاشان، کاشان ۸۷۳۱۷، ایران ^۲پژوهشکده علوم و فناوری نانو، دانشگاه کاشان، کاشان ۸۷۱۳۷، ایران parisa.mjkarimi@grad.kashanu.ac.ir, farahanizahra^{۸۷ &}@gmail.com, sharifi@kashanu.ac.ir

چکیده- در این مقاله با ۱ ستفاده از نرم افزار یک بعدی SCAPS ساختار سلول خور شیدی پرو سکایتی غیرآلی -iDL۱ و iDL۱ و FTO/i-ETL/CsPbI^۳/i- با حضور لایه های مجازی IDL۱ و iDL۱ و xoor در دوحالت: با حضور لایه های مجازی IDL۱ و iDL۱ و snO۲ و snO۲ مخضور آنها و همچنین با در نظر گرفتن نقصهای سطحی بین لایههای IDL ها و پروسکایت مورد بررسی قرار گرفت. در این ساختار از snO۰ به عنوان لایه انتقال دهنده حفره و همچنین با در نظر گرفتن نقصهای سطحی بین لایههای IDL ها و پروسکایت مورد بررسی قرار گرفت. در این ساختار از snO۰ به عنوان لایه انتقال دهنده حفره و همچنین با در نظر گرفتن تقصهای سطحی بین لایههای IDL۱ ها و پروسکایت مورد بررسی قرار گرفت. در این ساختار از snO۰ به عنوان لایه انتقال دهنده حفره و همچنین برای در نظر گرفتن تاثیر نقصهای به عنوان لایه انتقال دهنده حفره و همچنین برای در نظر گرفتن تاثیر نقصهای بازترکیبی سطحی از لایه انتقال دهنده مفره و همچنین برای در نظر گرفتن تاثیر نقصهای بازترکیبی سطحی از لایههای IDL۱ و IDL/perovskite/ETL و ITL/perovskite شده است. با وارد کردن نقصهای بازترکیبی سطحی بازدهی الکتریکی این ساختار از ۱۳٫۱۵ به ۲٫۱۵٫۱۵ به ۱۱٫۹۱۲ کاهش یافته است.

The effect of defect on the performance of CsPbI3 inorganic perovskite solar cells : a simulation study

Parisa Karimi Mooneh', Zahra Mokhles Abadi Farahani', Nafiseh Sharifi','

Abstract-In this paper, the structure of an inorganic perovskite solar cell consisting of FTO/i-ETL/CsPbI[¶]/i-HTL/Au was simulated by SCAPS-¹D. electrical efficiency and quantum efficiency were calculated in two conditions: with virtual layer IDL¹ and IDL[¶] and without them. The interface recombination layer between the IDL layers and the perovskite was considered. In this structure, SnO[¶] and Spiro OMeTAD was used as the electron transfer layer and hole transfer layer, respectively. To consider the influence of interface recombination, the thin virtual layer (IDL¹ and IDL[¶], not indicated in the figure) between HTL/CsPbI[¶] was considered to simulate a more realistic situation. By considering بیست و پنجمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران و یازدهمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران

the Interface recombination defects, the electrical efficiency of this structure has decreased from 17,10% to 11,41%.

Keywords: Perovskite, Inorganic solar cells, virtual layer, interface recombination defects.

بیست و هشتمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران و چهاردهمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران، دانشگاه شهید چمران اهواز، خوزستان، ایران، ۱۲– ۱۴ بهمن ۱۴۰۰

مقدمه

در بین نسلهای سلولهای خورشیدی، نسل سوم سلول خورشيدى پروسكايتى آلى-غيرآلى به دليل فرآيند ساخت آسان، هزینههای کمتر در مقایسه با سلولهای خورشیدی سیلیکونی و نسلهای دیگر و همچنین دست یافتن به بازدهی بالای ۲۵ درصد، توجه زیادی را در صنعت فتوولتائيك به خود جلب كرده است [۱] و [۲] . با اين حال ناپایداری حرارتی و شیمیایی پروسکایتهای آلی-غیرآلی می تواند مانعی برای تجاری سازی این نسل از سلول های خورشیدی باشد. اخیرا پروسکایتهای هالیدی معدنی با جایگزینیCs به جای مواد آلی بدست آمده است، به عنوان CsPbX^m (X = Cl, مثال پروسکایتهای هالیدی معدنی Br, I) پایداری بالاتری نسبت به سایر ساختارهای پروسکایت دارند و به این دلیل مورد توجه بیشتری قرار گرفته اند[۳]و [۴]. هدفهای بعدی تلاش برای دستیابی به پروسکایتهای غیر آلی با بازدهی و پایداری بالا و همچنین لايههاى انتقال دهنده الكترون و حفره غيرآلى است كه ساختار سلول كاملا از مواد غير آلى باشد. در اين مطالعه یک بررسی دقیق روی ساختار سلول با CsPbI^۳ با در نظر گرفتن نقصهای بازترکیبی سطحی احتمالی به وجود آمده بین لایه ها انجام شد و بازدهی الکتریکی و بازدهی کوانتومی با در نظر گرفتن نقصها و بدون حضور آنها مقایسه شدند تا شبیهسازی به حالت آزمایشگاهی نزدیکتر شود.

پارامترهای شبیهسازی

شبیهسازی این دادهها بر پایه نرمافزار یک بعدی SCAPS است که اساس این نرم افزار سه معادله جفت شده : معادلات پیوستگی برای الکترون و حفره و معادله پواسون میباشد [۵]. با این معادلات میتوان غلظت حاملها، مشخصات جریان-ولتاژ، بازدهی کوانتومی و نوارهای انرژی را محاسبه کرد. ساختار سلول بدین صورت -FTO/i-ETL/CsPbI^۳/i

HTL/Au است(شکل۱). پارامترهای مورد نیاز شبیهسازی شامل انرژی شکاف نواری (E_g)، ضریب الکترون خواهی (χ)، ضریب گذردهی (εr)، تحرک الکترون (μn) و حفره (μp)، چگالی حاملهای نوار رسانش (Nc) و نوار ظرفیت (Nv)، چگالی حاملهای دهنده (NA) و پذیرنده (ND) و چگالی نقصها (Nt) است. سرعت گرمایی برای الکترون و حفره □/□□/ در نظر گرفته شده. به منظور در نظر گرفتن نقص-های بازترکیبی سطحی از دو لایه مجازی IDL^۱ و IDL به ترتيب بين HTL/perovskite و PTL/perovskite استفاده شده. خصوصیات فیزیکی این دو لایه به جز چگالی نقصها مشابه با لایه جاذب است. توزیع نقصهای ذاتی به صورت گاوسی، انرژی مشخصه ۵۵.۰۰، در حالت mid-gap، چگالی الکترونهای گیرافتاده در سطح مقطع ۲−۵۵'۰۰×۲ و تابع کار FTO و Au به ترتیب ۴٫۷ و ۵٫۱ الکترون ولت در نظر گرفته شده است[۶].خصوصیات فیزیکی مواد از تحقيقات تئوري جمع آوري شده. [٧]و [٨].



شکل ۱: شماتیک ساختار سلول پروسکایت شبیه سازی شده

نتايج و بحث

نمودار جریان-ولتاژ ساختار این سلول با حضور نقصها و بدون حضور آنها طبق پارامترهای (جدول ۱) با استفاده از شبیهسازی بدست آمده است. با توجه به مقایسه این دو ساختار بازدهی سلول بدون حضور نقص ها ۱۳/۱٪ ، جریان اتصال کوتاه ۱۸/۱۵ میلیآمپر بر سانتی متر مربع، ولتاژ مدار باز ۱/۱۵ ولت و فاکتور پرشدگی آن ۱۸/۲۵٪ بدست آمد در صورتی که همین ساختار با حضور نقص ها دارای بازدهی متر مربع، ولتاژ مدار باز ۲۰/۱ ولت و فاکتور پرشدگی ۶۳/۳۹ است، که کاهش بازدهی را میتوان به کاهش ولتاژ مدار باز سلول با حضور نقص ها ارتباط داد که این نقص ها باعث بازترکیب شدن حاملها و در ادامه به وجود امدن ولتاژ مدار باز کمتری نسبت به زمانی که نقصها وجود ندارد، شده اند. نمودار مقایسه بازدهی این دو ساختار در (شکل ۲) مشاهده

جدول ۱: پارامترهای جریان- ولتاژ ساختار شبیهسازی شده

	V _{OC} (V)	J _{SC} (mA/cm [*])	FF (%)	PCE (%)
CsPbI"	1/18	۱۸/۱۵	88/80	18/10
CsPbI" by defect	1/•۲	18/22	۶۳/۳۹	11/91



شکل ۲: نمودار جریان-ولتاژ CsPbI۳ با نقصها و بدون حضور آنها.

بازدهی کوانتومی این ساختار(شکل۳) با حضور نقصها و بدون حضور آنها مورد بررسی قرار گرفت و مشخص شد که این نمودار به دلیل اینکه تغییرات جریان اتصال کوتاه ناچیز بوده است تقریبا بدون تغییر است.



شکل۳: نمودار بازده کوانتومی ۳CsPbI با نقصها و بدون حضور آن ها

در مرحله بعد تغییرات بازدهی با افزایش چگالی نقصها لایه جاذ ۳CsPbI بررسی شد، و مشخص شد با افزایش چگالی نقصهای بازدهی کاهش مییابد، که این می تواند به دلیل افزایش بازترکیب حاملهای به وجود آمده با نقصهای در نظرگرفته شده باشد. نمودار تغییرات بازدهی بر حسب تغییرات چگالی نقصها در (شکل۴) نشان داده شده است.



شکل۴: تاثیر چگالی نقصهای لایه جاذب بر بازدهی سلول

بیست و هشتمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران و چهاردهمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران، دانشگاه شهید چمران اهواز، خوزستان، ایران، ۱۲– ۱۴ بهمن ۱۴۰۰

مرجعها

- ['] "Dong, Q., Zhu, C., Chen, M., Jiang, C., Guo, J., Feng, Y., ... & Zhou, Y. ('`'). Interpenetrating interfaces for efficient perovskite solar cells with high operational stability and mechanical robustness. *Nature communications*, 12('), '-9.".
- [^Y] "Best Research-Cell Efficiency Chart: https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html".
- [^r] "Gao, P., Grätzel, M., & Nazeeruddin, M. K.
 (^γ · ^γ ^ε). Organohalide lead perovskites for photovoltaic applications. Energy & Environmental Science, ^ν(^Λ), ^γ ^ε ^ε ^Λ ⁻ ^γ ^ε ^γ.
- [2] "Beal, R. E., Slotcavage, D. J., Leijtens, T., Bowring, A. R., Belisle, R. A., Nguyen, W. H., ... & McGehee, M. D. ((1)). Cesium lead halide perovskites with improved stability for tandem solar cells. The journal of physical chemistry letters, ^V(°), ^V (1-V°)".
- [°] "Burgelman, M., Nollet, P., & Degrave, S. (⁽···). Modelling polycrystalline emiconductor solar cells. Thin solid films, ⁽⁷⁾, ⁽⁾, ⁽⁾).
- [7] "Minemoto, T., & Murata, M. (۲۰۱٤). Device modeling of perovskite solar cells based on structural similarity with thin film inorganic semiconductor solar cells. Journal of applied physics, ۱۱٦(°), •٥٤٥٠٥.".
- [^V] "Dastidar, S., Li, S., Smolin, S. Y., Baxter, J. B., & Fafarman, A. T. (^γ · ^γ). Slow electron-hole recombination in lead iodide perovskites does not require a molecular dipole. ACS Energy Letters, ^γ(¹ ·), ^γΥ^γ^q-ΥΥξέ".
- [^A] "Deng, Q., Li, Y., Chen, L., Wang, S., Wang, G., Sheng, Y., & Shao, G. (^Y · ^Y³). The effects of electron and hole transport layer with the electrode work function on perovskite solar cells. Modern Physics Letters B, ^F · (^{YY}), ^{Y²} · ^{F²} · ^{Y²}.

نتيجه گيرى

در مطالعات باید تا حد امکان تلاش شود که شبیهسازی به حالت واقعی تر و آزمایشگاهی نزدیک شود. با توجه به شبیه سازی انجام شده با در نظر گرفتن نقصهای احتمالی که از ترکیب شدن حاملها بین لایه ها می تواند به وجود بیاید، بازدهی الکتریکی ۲ درصد کاهش پیدا کرد.

نمودار بازده کوانتومی ساختار دچار تغییرات نشده و این نشان از تغییرات ناچیز جریان اتصال کوتاه است و در ادامه میتوان نتیجه گرفت که حضور نقصها تاثیر بیشتری بر ولتاژ مدار باز دارد و کاهش بازدهی ناشی از کاهش ولتاز مدار باز می باشد. همچنین با افزایش چگالی نقصها از ۱۰^{۱۲} تا ۱۰^{۱۲} بازدهی از ۱۲ درصد به ۷٫۴۷ درصد کاهش یافته است که این میتواند نتیجه بازترکیب شدن حاملها با نقصهای موجود باشد.