



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



اثرات شکاف باند خطی تراکم نقص الکترون و حفره در لایه جاذب سلول

خورشیدی پروسکایت با لایه جاذب $\text{K}_{0.05}\text{Rb}_{0.05}(\text{FA}_{0.85}\text{MA}_{0.15})_{0.95}\text{Pb}(\text{I}_{0.85}\text{Br}_{0.15})_3$

امین رضا مهندس، محمود مرادی و حمید نادگران

گروه فیزیک، پردیس علوم، دانشگاه شیراز، ۷۱۹۴۶-۸۴۷۹۵ شیراز، ایران

a.mohandes@shirazu.ac.ir, mmoradi@shirazu.ac.ir, nadgaran@shirazu.ac.ir

چکیده - برای اولین بار، لایه جاذب جدیدی از پرو سکایت کاتیون چهارگانه تحت عنوان KRbFAMA معرفی شده است. در این تحقیق، منحنی‌های شبیه‌سازی چگالی جریان-ولتاژ (J-V) و بازده کوانتومی خارجی (EQE) به صورت عددی توسط دستگاه شبیه ساز SCAPS انجام گرفت. کارایی سلول خورشیدی پرو سکایتی با در نظر گرفتن اثرات تراکم نقص الکترون و حفره در لایه جاذب افزایش یافت. پس از بهینه‌سازی پارامترهای ذکر شده، بازده سلول به ۲۳٫۹۱٪ رسید.

کلید واژه- بازده کوانتومی خارجی، پروسکایت، تراکم نقص الکترون، تراکم نقص حفره، چگالی جریان-ولتاژ

Effects of linear band gap on electron and hole defect density on the perovskite solar cell with the absorption layer $\text{K}_{0.05}\text{Rb}_{0.05}(\text{FA}_{0.85}\text{MA}_{0.15})_{0.95}\text{Pb}(\text{I}_{0.85}\text{Br}_{0.15})_3$

Aminreza Mohandes, Mahmood Moradi, and Hamid Nadgaran

Department of Physics, College of Science, Shiraz University, 71946-84795 Shiraz, Iran

Aminreza Mohandes (a.mohandes@shirazu.ac.ir), Mahmood Moradi (mmoradi@shirazu.ac.ir), and Hamid Nadgaran (nadgaran@shirazu.ac.ir)

Abstract- For the first time, a novel of quadruple-cation perovskite absorber, KRbFAMA , is introduced. The simulation of current density-voltage (J-V) and external quantum efficiency (EQE) curves of perovskite solar cell (PSC) were numerically simulated by SCAPS. The efficiency of the PSC was enhanced by considering the effects of electron and hole defect densities in the layer of absorber. After optimizing the mentioned parameters, efficiency is reached to ۲۳٫۹۱٪.

Keywords: Current density-Voltage, Electron defect density, External quantum efficiency, Hole defect density, and Perovskite

$$\frac{dn_p}{dt} = G_n - \frac{n_p - n_{p0}}{\tau_n} + n_p \mu_n \frac{d\xi}{dx} + \mu_n \xi \frac{dn_p}{dx} + D_n \frac{d^2 n_p}{dx^2} \quad (2)$$

$$\frac{dp_n}{dt} = G_p - \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_p} + p_n \mu_p \frac{d\xi}{dx} + \mu_p \xi \frac{dp_n}{dx} + D_p \frac{d^2 p_n}{dx^2} \quad (3)$$

جایی که G_p ، G_n میزان تولید الکترون و حفره را نشان می‌دهد، μ_p و μ_n تحرک الکترون و حفره است، ξ میدان الکتریکی است، D ضریب پخش است، τ_{np} طول عمر الکترون‌ها و حفره‌ها است، ϵ ضریب دی الکتریک است، ψ پتانسیل الکترواستاتیک است، q بار الکترون است، n_t و p_t غلظت الکترون‌ها و حفره‌های به دام افتاده است، N_D و N_A غلظت دهنده و گیرنده کم عمق هستند.

ساختار دستگاه و پارامترهای شبیه سازی

ساختار سلول خورشیدی پروسکایتی در شبیه‌سازی شامل اکسید قلع آلاییده شده با فلورین (FTO)/لایه مسدود کننده/لایه جاذب پروسکایت/لایه انتقال دهنده حفره (HTL)/طلا می‌باشد، که در شکل ۱ نشان داده شده است. پارامترهای ورودی در جدول ۱ بطورمختصر آورده شده است. هر لایه در شبیه سازی، جایی که پارامترهای فیزیکی لایه مسدود کننده، پروسکایت (لایه جاذب) و لایه انتقال دهنده حفره (HTL)، همانطور که در شکل ۱ نشان داده شده است، به ترتیب توسط SnO_2 ، $\text{K}_{0.8}\text{Rb}_{0.2}(\text{FA}_{0.8}\text{MA}_{0.2})_{0.9}\text{Pb}(\text{I}_{0.8}\text{Br}_{0.2})_3$ و $\text{N,N-p-dimethoxy-phenylamino}-9,9'$ -tetraakis (Spiro-OMeTAD) Spirobifluorene ساخته شده است. در جدول ۱، N_D و N_A چگالی کم عمق گیرنده و دهنده است، ϵ_r ضریب دی الکتریک است، χ الکترون خواهی است، μ_p و μ_n تحرک الکترون و حفره است و N_t تراکم نقص در قسمت بالک است. نوع حامل لایه جاذب پروسکایت، با

مقدمه

پروسکایت‌هایی که از طریق روش‌های محلول با هزینه کم، انرژی اتصال کم اکسیژن از جمله خصوصیات اپتوالکترونیکی قابل توجه، انرژی اورباخ کوچک و جذب شدید تهیه می‌شوند، دارای ساختار ABX_3 هستند، که در آن A^+ یک کاتیون آلی یا غیر آلی یک ظرفیتی است، از جمله متیل آمونیم (MA^+)، فرمامیدینیوم (FA^+) و سزیم (Cs^+)، کاتیون‌های فلزی B^{2+} مثلاً سرب (Pb^{2+}) یا قلع (Sn^{2+}) و X^- یک آنیون هالوژنی تک ظرفیتی است، به عنوان مثال کلرید (Cl^-)، برومید (Br^-) و یدید (I^-) [۱]. اخیراً بازده تبدیل نیرو (PCE) به بیش از ۲۵ درصد رسیده است [۲].

در این مطالعه، در ابتدا شبیه‌سازی مشخصه J-V و طیف EQE با لایه جاذب، $\text{K}_{0.8}\text{Rb}_{0.2}(\text{FA}_{0.8}\text{MA}_{0.2})_{0.9}\text{Pb}(\text{I}_{0.8}\text{Br}_{0.2})_3$ ، با استفاده از SCAPS بدست می‌آید. در لایه جاذب با بهینه‌سازی اثرات تراکم نقص الکترون و حفره بازده سلول خورشیدی پروسکایتی افزایش یافت.

روش شناسی

از شبیه‌ساز ظرفیت خورشیدی (SCAPS) در این تحقیق استفاده شده است. نرم‌افزار SCAPS یک برنامه شبیه‌سازی یک بعدی است که مشخصات J-V و پاسخ طیفی (EQE) با استفاده از سه معادله اساسی نیمه‌هادی محاسبه می‌کند: معادله پواسون و معادلات پیوستگی برای الکترون و حفره. به عنوان مثال در معادلات زیر، تحت شرایط حالت پایدار نشان داده شده است.

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} = \frac{\partial p_n}{\partial t} = 0$$

$$\frac{d}{dx} \left(-\epsilon(x) \frac{d\psi}{dx} \right) = q[p(x) - n(x) + N_D^+(x) - (N_A^-(x) + p_t(x) - n_t(x))] \quad (1)$$



شکل ۱: ساختار دستگاه سلول خورشیدی پروسکایتی، KRbFAMA
به عنوان یک لایه جاذب

جدول ۱: پارامترهای اساسی برای شبیه سازی

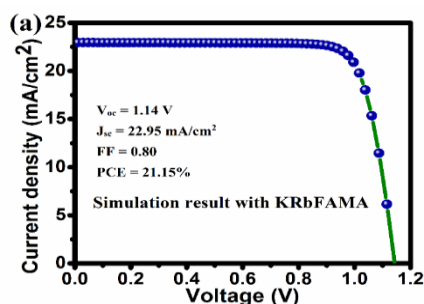
Parameter	SnO ₂	Perovskite	Spiro-OMeTAD
Thickness (nm)	۵۰	۷۰۰	۳۰۰
N _A (cm ⁻³)	-	-	1×10^{18}
N _D (cm ⁻³)	1×10^{19}	2×10^{16}	-
E _g (eV)	۳.۴	۱.۵۷-۱.۶۰	۳.۰
χ (eV)	۴.۰۹	۳.۹۳	۳.۴۵
ε _r	۹	۳۲	۳.۰
μ _n (cm ² /V.s)	۲۴۰	۵۲	2×10^{-2}
μ _p (cm ² /V.s)	۲۵	۵۲	2×10^{-2}
N _i (cm ⁻³)	1×10^{18}	7.87×10^{15} 3.14×10^{15}	1×10^{15}

جدول ۲: چگالی نقص رابط

Parameters	absorber/HTL
Defect type	Neutral
Capture cross section for electron and holes (cm ²)	1.0×10^{-14}
Energetic distribution	Single
Reference for defect energy level E _r	Above the highest E _v
Energy with respect to Reference (eV)	۰.۳۵
Total density (cm ⁻³)	4.5×10^4

نتیجه‌گیری و بحث در مورد آن

ما در ابتدا منحنی EQE و J-V مربوط به سلول خورشیدی پروسکایتی را با لایه جاذب KRbFAMA به صورت عددی محاسبه می‌کنیم، شبیه‌سازی با در نظر گرفتن جداول ۱ و ۲ انجام می‌شود.



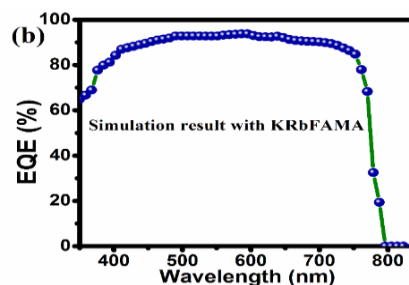
عنوان KRbFAMA، از نوع n است و تراکم نقص الکترون و حفره در پروسکایت به ترتیب 7.87×10^{15} و 3.14×10^{15} cm⁻³ و 3.94×10^{15} در نظر گرفته می‌شود [۳]. تراکم موثر حالت‌های باند نوارهای هدایت و ظرفیت به ترتیب روی 2.2×10^{18} و 1.8×10^{19} cm⁻³ تنظیم شده‌اند [۷].

بو و همکاران گزارش کرده‌اند که برای RbFAMA و CsFAMA، دارای یک شکاف باند هستند که به طور خطی بین ۱.۵۷ تا ۱.۶۰ eV تغییر می‌کند [۴]. بنابراین، ما انتظار داریم که مقدار مشابهی برای KRbFAMA و KCsFAMA وجود داشته باشد. همچنین، بو و همکاران گزارش کردند که از روی منحنی TRPL برای طول عمر حامل RbFAMA و CsFAMA برای طول عمر حامل الکترون و حفره تقریباً یکسان است. بنابراین، ما انتظار داریم که مقدار یکسان برای KCsFAMA و KRbFAMA برابر ۲۴۰ ns باشد و برای KRbFAMA که منجر به طول انتشار حامل L_p و L_n و به ترتیب ۵.۷ و ۵.۷ میکرومتر می‌شود [۴]. علاوه بر این، الکترون خواهی برای KCsFAMA، ۳.۹ eV است و در جدول تناوبی، می‌دانیم که روبیدیم بالاتر از سزیم است و همچنین می‌دانیم که الکترون خواهی روبیدیم نسبت به سزیم باید بیشتر باشد [۵]. بنابراین، انتظار داریم که الکترون خواهی برای KRbFAMA تقریباً ۳.۹۳ eV باشد. بعلاوه، از آنجا که هدایت الکتریکی روبیدیم بالاتر از سزیم است و بعلاوه رابطه مستقیمی بین تحرک و هدایت الکتریکی وجود دارد، بنابراین انتظار می‌رود که تحرک در KRbFAMA بیشتر از KCsFAMA باشد (برای KCsFAMA، 50 cm²/Vs و برای KRbFAMA، 50 cm²/Vs است، هم برای تحرک الکترون و هم برای حفره) [۶].

شکل ۳: PCE (الف) به عنوان تابعی از تراکم نقص حفره و ب) تراکم نقص الکترون در پروسکایت که از 1.0×10^{12} تا $1.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ در حال تغییر است

مرجع‌ها

- [۱] Q. Lin, A. Armin, R.C.R. Nagiri, P.L. Burn, P. Meredith, "Electro-optics of perovskite solar cells", Nat. Photonics, Vol. ۹, No. ۲, pp. ۱۰۶-۱۱۲, ۲۰۱۵.
- [۲] O.J. Usiobo, H. Kanda, P. Gratia, I. Zimmermann, T. Wirtz, M.K. Nazeeruddin, J.-N. Audinot, "Nanoscale Mass-Spectrometry Imaging of Grain Boundaries in Perovskite Semiconductors", J. Phys. Chem. C, Vol. ۱۲۴, pp. ۴۲, ۲۳۲۳۰-۲۳۲۳۶, ۲۰۲۰.
- [۳] T. Bu, X. Liu, Y. Zhou, J. Yi, X. Huang, L. Luo, J. Xiao, Z. Ku, Y. Peng, F. Huang, Y.B. Cheng, J. Zhong, "A novel quadruple-cation absorber for universal hysteresis elimination for high efficiency and stable perovskite solar cells", Energy Environ. Sci., Vol. ۱۰, No. ۱۲, pp. ۲۵۰۹-۲۵۱۵, ۲۰۱۷.
- [۴] T. Bu, X. Liu, J. Li, W. Li, W. Huang, Z. Ku, Y. Peng, F. Huang, Y.B. Cheng, J. Zhong, "Sub-sized monovalent alkaline cations enhanced electrical stability for over ۱۷% hysteresis-free planar perovskite solar mini-module", Electrochimica Acta, Vol. ۳۰۶, pp. ۶۳۵-۶۴۲, ۲۰۱۹.
- [۵] R. Duraisamy, P. Liebing, N. Harmgarth, V. Lorenz, L. Hilfert, M. Feneberg, R. Goldhahn, F. Engelhardt, F.T. Edelmann, "Rubidium and Cesium Enediamide Complexes Derived from Bulky ۱, ۴-Diazadienes", ACS omega, Vol. ۵, No. ۳۰, pp. ۱۹۰۶۱-۱۹۰۶۹, ۲۰۲۰.
- [۶] M. Huma, M. Rashid, Q. Mahmood, E. Algrafy, N.A. Kattan, A. Laref, A.S. Bhatti, "Physical properties of lead-free double perovskites $A_2\text{SnI}_4$ ($A = \text{Cs}, \text{Rb}$) using ab-initio calculations for solar cell applications", Mater. Sci. Semicond. Process, Vol. ۱۲۱, ۱۰۵۳۱۳, ۲۰۲۱.
- [۷] T. Minemoto, Y. Kawano, T. Nishimura, J. Chantan, "Numerical reproduction of a perovskite solar cell by device simulation considering band gap grading" Opt. Mater., Vol. ۹۲, pp. ۶۰-۶۶, ۲۰۱۹.
- [۸] M. Zhang, J. Bing, Y. Cho, Y. Li, J. Zheng, C.F.J. Lau, M.A. Green, S. Huang, A.W. Ho-Baillie, "Synergistic effect of potassium and iodine from potassium triiodide complex additive on gas-quenched perovskite solar cells", Nano Energy, Vol. ۶۳, p. ۱۰۳۸۵۳, ۲۰۱۹.



شکل ۲: الف) شبیه‌سازی منحنی چگالی جریان-ولتاژ و ب) شبیه‌سازی منحنی بازده کوانتوم خارجی KRBFA زمانیکه انرژی شکاف باند بین ۱.۵۷ و ۱.۶۰ الکترون ولت به صورت خطی در حال تغییر است [۸]

تأثیر شکاف باند خطی KRBFA بر تراکم نقص الکترون و حفره در لایه جاذب پروسکایت

PCE حداکثر مقدار در $3.162 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ با بازده ۲۱.۷۹٪، ولتاژ مدار باز ۱.۱۶۷، جریان اتصال کوتاه $22.97 \frac{\text{mA}}{\text{cm}^2}$ و فاکتور پرشدگی ۰.۸۱ (۸۱.۴۱٪) می‌باشد. شکل ۳ ب، PCE در برابر تراکم نقص الکترون در لایه پروسکایت را نشان می‌دهد در از 1.0×10^{12} تا $1.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ PCE در $1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ تغییر می‌کند. بزرگ شده است با راندمان ۲۳.۹۱٪، ولتاژ مدار باز ۱.۲۴۷، جریان اتصال کوتاه $22.98 \frac{\text{mA}}{\text{cm}^2}$ و فاکتور پرشدگی ۰.۸۳ (۸۳.۵۰٪) می‌باشد.

