



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



بررسی تاثیر عیب های حجمی و سطح مشترکی بر عملکرد سلول خورشیدی سیلیکونی لایه نازک

معصومه، صمدی^۱؛ غلامحسین، حیدری^{۲،۳}؛ حامد، بحیرایی^۱،

^۱ گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ملایر، ملایر^۲ گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه

شهرکرد، شهرکرد^۳ پژوهشکده نانوتکنولوژی، دانشگاه شهرکرد

samadi_masumeh@yahoo.com, hamedbahiraei@gmail.com, moh^{۱۱۳۵}@gmail.com

چکیده - سیلیکون در پژوهشها اغلب به صورت ایده آل در نظر گرفته می شود در حالی که شکل واقعی تر آن دارای نقص هایی می باشد از جمله در حجم لایه سیلیکون و یا در سطح مشترک با لایه های دیگر که آنها عملکرد سلول را تحت تاثیر قرار می دهند. ما در این پژوهش ابتدا با روش FDTD قسمت اپتیکی سلول سیلیکون لایه نازک (سلول سیلیکونی نسل جدید با ضخامت ۳ میکرون) را که دارای یک پوشش ضد بازتاب به ضخامت ۴۶، ۸۲ و ۱۱۲ نانومتر می باشد شبیه سازی کردیم. در ادامه برای شبیه سازی قسمت الکتریکی سه حالت سلول ایده آل، سیلیکون با نقص حجمی و سیلیکون با هر دو نقص همزمان حجمی و در فصل مشترک با سایر لایه ها را در نظر گرفته شده است. برای این منظور سه شیوه باز ترکیب تابشی، باز ترکیب اوزه و باز ترکیب به کمک عیب ها در نظر گرفته شد. نتایج شبیه سازی الکتر و اپتیکی انجام شده نشان داد که عملکرد مربوط به سیلیکون واقعی تر نسبت به سیلیکون ایده آل کاهش چشم گیری دارد به نحویکه حتی در بهترین ضخامت از لایه ضد بازتاب منجر به کاهش حدود ۵۰٪ در بازده سلول نسبت به سلول ایده آل می شود.

کلید واژه - سلول خورشیدی سیلیکونی لایه نازک، شبیه سازی الکتر و اپتیکی، عیب حجمی، عیب سطحی

Investigation of The Effect of Bulk and Interface defects on The Performance of Thin layer silicon solar cell

Samadi, Masoumeh^۱; Haidari, Gholamhosain^{۲،۳}; Hamed Bahirai^۱

^۱ گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ملایر، ملایر^۲ گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه

Shahrekord University, Shahrekord,^۳ Nanotechnology Research Institute, Shahrekord University

samadi_masumeh@yahoo.com, hamedbahiraei@gmail.com, moh^{۱۱۳۵}@gmail.com

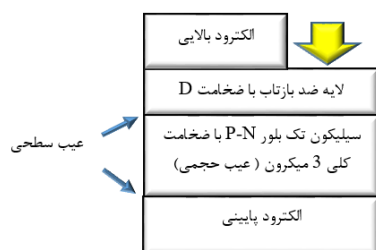
Abstract - Silicon is often considered ideal in research, while its more realistic form has defects, such as in the volume of the silicon layer or at the interface with other layers that affect cell performance. In this study, we first simulated the optical part of a thin layer silicon cell (new generation silicon cell with a thickness of ۳ microns) which has an anti-reflective coating with a thickness of ۴۶, ۸۲, and ۱۱۲ nm by FDTD method. To simulate the electrical part, three states including ideal silicon, silicon with volume defect, and silicon with both simultaneous volumetric defects and at the interface with other layers, have been considered. For this purpose, three methods of radiative recombination, Auger recombination, and recombination by defects were considered. The results of electro-optical simulation showed that the performance of the more real silicon cell than the ideal one is significantly reduced so that even at the best thickness of the anti-reflective layer (۸۲ nm) leads to a reduction of about ۵۰٪ in cell efficiency compared to the ideal cell.

Keywords: Thin Film Silicon Solar Cell, Bulk defect, Interface defect, Electro-optical Simulation

مقدمه

در طبیعت ماده‌ای کاملاً بلورهای و بی نقص وجود ندارد. همچنین خواص فیزیکی و مکانیکی برخی مواد به شدت تحت تأثیر حضور عیوب می‌باشد این عیوب در اشکال مختلفی ظاهر می‌شوند که از جمله آن عیوب سطحی در فصل مشترک لایه ها و عیب حجمی است. عیب های حجمی در ساختارهای آمورف (بی شکل) می تواند وجود داشته باشد که به دلیل سرد شدن سریع نمی‌توانند ساختار بلوری منظم تشکیل دهند. سلولهای خورشیدی سیلیکونی از دیرباز به عنوان متداول ترین نوع سلولها مورد مطالعه و تجاری سازی شده قرار گرفته اند. روشهای متعددی برای بهبود بازدهی و کاهش هزینه تمام شده این نوع سلولها بررسی و عملیاتی شده است. استفاده از سیلیکون لایه نازک (ضخامت حدود ۱۸۰ میکرومتر) تک بلور به جای سیلیکون آمورف، علاوه بر بازدهی بالاتر، هزینه تمام شده کمتری را حاصل می‌شود. اما پژوهشگران امروزه به سلول های بسیار نازکتر سیلیکونی (ضخامت حدود چند میکرون) با هزینه های بسیار کمتر فکر می کنند. بازده این سلول های نازک سیلیکونی (نسل جدید) در مقایسه با سلول سیلیکونی متعارف، کمتر می- باشد. ساخت لایه ی جاذب نازکتر، به علت کوچکتر شدن دانه ها و بزرگتر شدن مرزدانه ها، با تلفات بازترکیب و کاهش بازده سلول همراه شده است که با قرارگیری لایه های ضدبازتاب تا حدودی می‌توان بر مشکل کمبود بازده غلبه کرد. حداکثر بازده تبدیل توان سلولهای خورشیدی سیلیکونی با خواص ذاتی سیلیکون مانند انرژی شکاف باند یا ویژگیهای بازترکیب حامل بار محدود می‌شود. این محدودیت ذاتی برای تحقیقات فتوولتائیک از اهمیت اساسی برخوردار است. به ویژه اینکه پیشرفت های مستمر در فناوری منجر به نزدیک شدن شرایط عملکرد سلول های خورشیدی به این محدوده اساسی می‌شود [۱]. شاکلی و کوئیسر بر اساس توازن دقیق چگالی انرژی تابشی و تولید شده با در نظر گرفتن تنها بازترکیب تابشی، بیشینه بازده را برای سلولهای خورشیدی ایده آل تک پیوندی تعیین کردند [۲]. در سیلیکون بلوری فرایندهای بازترکیب غیر تابشی قابل توجهی وجود دارد، به ویژه بازترکیب اوزه یا جذب حامل آزاد اتلافی. تیدجه وهمکاران [۳] نشان دادند که در واقع بازترکیب

اوزه مکانیسم اتلافی ذاتی غالب سلولهای خورشیدی سیلیکونی است. کر و همکاران به تأثیر این ترکیب مجدد اوزه تقویت شده توسط کولن بر محدود سازی بازه پرداخته اند [۴]. با استفاده از پارامترسازی کلی میزان ترکیب مجدد ذاتی [۵] حداکثر بازده ۲۹/۰۵ برای سلول های خورشیدی سیلیکونی ایده آل محاسبه شده است. در این تحقیق به بررسی تأثیر عیوب حجمی سیلیکون لایه نازک و عیوب در سطح مشترک سیلیکون با لایه های دیگر پرداخته شده است. در همین راستا ابتدا نرخ تولید الکترون-حفره در شبیه سازی اپتیکی به روش FDTD همراه با لایه ضدبازتاب نیتريد سیلیکون تعیین گردید. برای این لایه سه ضخامت مجزا در نظر گرفته شد. این ضخامت ها به ترتیب ۴۶، ۸۲، ۱۱۲ نانومتر انتخاب شد. این ضخامت ها به گونه ای انتخاب شده که میزان بازتاب کل از سطح سلول به ترتیب در سه طول موج ۴۰۰، ۶۰۰ و ۸۰۰ نانومتر کمینه باشد. به عنوان مثال اگر ضخامت لایه بازتاب ۴۶ نانومتر باشد کمترین بازتاب را در طول موج ۴۰۰ نانومتر دارد [۶]. سپس در شبیه سازی الکتریکی بواسطه معادلات حاکم بر انتقال حامل ها برای لایه فعال سیلیکون غیر ایده آل (با نقص های حجمی-سطحی در سطح مشترک سیلیکون با لایه های مجاور)، منحنی J-V شبیه سازی و با حالت ایده آل مقایسه شد. برای این شبیه سازی از نرم افزار لومریکال استفاده شد. ساختار سلول شبیه سازی شده در شکل ۱ آورده شده است.



شکل ۱: طرح کلی سلول سیلیکونی لایه نازک شبیه سازی شده

روش و بررسی

روش FDTD معادلات ماکسول وابسته به زمان را با تقریب مرکزی و با در نظر گرفتن شرایط مرزی مناسب، در فضای گسسته حل نموده و میدانهای الکتریکی و مغناطیسی را در فضای شبیه سازی به دست می آورد [۸] طبق قوانین ترمودینامیک، بازده سلول خورشیدی سیلیکونی تحت نور خورشید ۳۲/۳۳ درصد است [۱]

قابلیت تبدیل به انرژی الکترونیکی را دارد (۳۳۷ وات بر متر مربع). نرخ تولید جریان در این حالت:

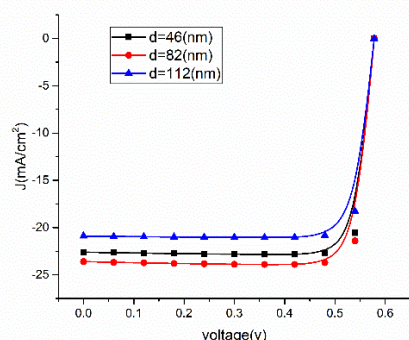
$$I_{sh} = q(t_s f_{\omega} Q_s - 2t_c Q_c) \quad (3)$$

است که در آن $f_{\omega} Q_s$ تعداد فوتون‌هایی است که بالای انرژی شکاف نواری بر روی سلول در واحد سطح قرار می‌گیرند، و t_s کسری از آنهاست که یک جفت الکترون-حفره ایجاد می‌کنند. این نرخ تولید به دلیل جریان "اتصال کوتاه" (در واحد سطح) I_{sh} نامیده می‌شود. [۷] ما فرض می‌کنیم که هر فوتون جذب شده در شدت طیف AM ۱/۵، یک جفت الکترون-حفره منفرد ایجاد می‌کند. در این شرایط برای یک سلول ایده آل سیلیکونی لایه نازک، با ضخامت ۳ میکرومتر بدون در نظر گرفتن عیوب سطحی در فصل مشترک سیلیکون با سایر لایه ها و عیوب حجمی، ۴ پارامتر اساسی سلول خورشیدی شبیه سازی شده در جدول ۱ آورده شده است.

جدول ۱: پارامترهای شبیه سازی سلول سیلیکونی ایده آل

Cell	λ (nm)	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm ^۲)	FF	η (%)
سیلیکون ایده آل	۴۰۰	۰٫۵۹۲	۲۲٫۶۰۵	۰٫۸۲۹	۱۱٫۱۰۴
	۶۰۰	۰٫۵۹۱	۲۳٫۵۹۷	۰٫۸۲۸	۱۱٫۵۶۲
	۸۰۰	۰٫۵۷۷	۲۰٫۸۹۵	۰٫۸۲۷	۹٫۹۹۲

همچنین شکل ۱ منحنی J-V سلول ایده آل برای سه ضخامت D لایه ضد بازتاب را نشان می‌دهد.



شکل ۱: منحنی J-V برای سلول سیلیکونی ایده آل در سه ضخامت مختلف لایه ضد بازتاب

اما مقادیر جدول ۱ برای حالتی که سلول سیلیکونی فقط نقص حجمی سیلیکون لایه نازک و سپس علاوه بر نقص حجمی، نقص در فصل مشترک لایه سیلیکون با لایه های دیگر در جدول ۲ آورده شده است.

جدول ۲: پارامترهای شبیه سازی سلول سیلیکونی واقعی تر (با نقص حجمی - و همزمان نقص حجمی و سطحی).

این حد بر اساس فرضیات جذب خورشیدی کامل و بدون تلفات ناشی از ترکیب مجدد حامل بار غیر تابشی است. بهترین سلول خورشیدی سیلیکونی در جهان واقعی تاکنون، که توسط شرکت کانکا ساخته شده است، قادر به دستیابی به بازده تبدیل ۲۶/۷ درصد است. تجزیه و تحلیل این سلول با ضخامت ۱۶۵ میکرومتر نشان می‌دهد که در صورت عدم وجود مکانیسم از دست دادن خارجی، کارایی محدود کننده چنین سلول ۲۹/۱ درصد است. عیوب در سیلیکون های بانقص حجمی و سطحی به سه شکل بازترکیب تابشی، اوزه و شاکلی-کویسر بروز می‌کنند. بازترکیبی تابشی به انتقال مستقیم الکترون از نوار رسانش به نوار ظرفیت در حین گسیل یک فوتون اشاره دارد. این فرآیند معکوس جذب فوتون است. چگالی حامل بار اضافی تولید Δn با $n = n_0 + \Delta n$ و $p = p_0 + \Delta p$ رami توان به دلیل ترکیب مجدد حامل های بار با نرخ بازترکیب R که طول عمر τ حامل های بار اضافی را تعیین می کند کاهش داد.

$$\tau = \Delta n R \quad (1)$$

بازترکیب اوزه و بازترکیب شاکلی-کویسر فرآیندهای غیر تابشی هستند که بازده سلول فتوولتائیک خورشیدی را به زیر حد تابش ایده آل کاهش می‌دهند در بازترکیب اوزه انرژی اضافی حاصل از بازترکیب الکترون-حفره به الکترون ها یا حفره هایی منتقل می‌شود که متعاقباً به جای تولید فوتون (فرایند تابشی) به حالت های انرژی بالاتر در همان باند برانگیخته می‌شوند. بازترکیبی اوزه ممکن است شامل باندهای ظرفیت متفاوت و برهمکنش با فونون ها باشد نرخ بازترکیبی اوزه توسط رابطه ۲ بدست می‌آید.

$$R_{Aug} = (C_n n + C_p p)(np - n_0 p_0) \quad (2)$$

که C_n و C_p ضرایب اوزه هستند. محدودیت شاکلی-کویسر یا محدودیت تعادلی جزیی به ماکزیمم راندمان نظری یک سلول خورشیدی که از اتصال (P-n) استفاده می‌کند بر می‌گردد. این محدودیت بیشینه راندمان تبدیل انرژی خورشیدی را در حدود ۳۳٫۷ درصد قرار می‌دهد با این فرض که یک اتصال p-n با شکاف انرژی ۱/۱ eV مانند سیلیکون داریم. یعنی از تمام انرژی نور خورشید که به سلول خورشیدی سیلیکونی می‌رسد (حدود ۱۰۰۰ وات بر متر مربع) فقط ۳۳٫۷ درصد آن

این تحقیق بررسی تاثیر مهندسی ضخامت لایه ضد بازتاب بر روی عملکرد سلول سیلیکونی لایه نازک واقعی تر نسبت به حالت ایده آل را نشان می دهد. این سه ضخامت به گونه ای به دست آمد که بازتاب کل از سطح سلول به ترتیب در طول موج های ۴۰۰، ۶۰۰، ۸۰۰ نانومتر کمینه باشد. در ادامه با استفاده از روش FDTD و شدت طیفی خورشید ۱/۵AM میزان الکترون حفره ایجاد شده در لایه فعال محاسبه گردید. سپس دینامیک این الکترون-حفره ها با استفاده از در نظر گرفتن عیوب مختلف در حجم و فصل مشترک لایه سیلیکون نازک (بویژه عیب اوژه) در رسیدن به الکترودهای سلول در شبیه سازی الکتیکی بررسی گردید و منحنی J-V و ۴ پارامتر اساسی سلول به دست آمد. مقایسه این پارامترها برای سلول لایه نازک سیلیکونی با در نظر گرفتن عیب حجمی و سطحی (سلول واقعی تر) ، میزان تاثیر لایه ضد بازتاب در بهبود عملکرد سلول را نشان می دهد. نتایج این بررسی نشان داد که برای سلول با ضخامت ۸۲ نانومتری از لایه ضد بازتاب، بازده به اندازه تقریبی ۵۰٪ نسبت به سلول ایده آل، کاهش پیدا می کند.

مرجع ها

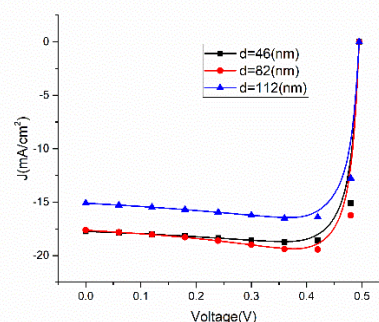
- [۱] Bhattacharya, S., John, S. Beyond ۳۰٪ Conversion Efficiency in Silicon Solar Cells: A Numerical Demonstration. *Sci Rep* ۹, ۱۲۴۸۲ (۲۰۱۹).
- [۲] W. Shockley and H. J. Queisser, "Detailed balance limit of efficiency of pn junction solar cells", *J. Appl. Phys.*, vol. ۳۲, pp. ۵۱۰-۹, ۱۹۶۱.
- [۳] T. Tiedje, E. Yablonovitch, G. D. Cody, and B. G. Brooks, "Limiting efficiency of silicon solar cells", *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ۳۱, pp. ۷۱۱-۶, ۱۹۸۴.
- [۴] M. J. Kerr, A. Cuevas, and P. Campbell, "Limiting efficiency of crystalline silicon solar cells due to Coulomb-enhanced Auger recombination", *Prog. Photovolt: Res. Appl.*, vol. ۱۱, pp. ۹۷-۱۰۴, ۲۰۰۳.
- [۵] Ibrahim, M. L., and Anvar A. Zakhidov. "An improved model for describing the net carrier recombination rate in semiconductor devices." *arXiv preprint arXiv:2108.10172* (۲۰۲۱).

[۶] صمدی معصومه، بحیرایی حامد، حیدری غلامحسین،
بررسی تاثیر ضخامت لایه ضد بازتاب بر عملکرد سلول
سیلیکونی نسل جدید بواسطه شبیه سازی الکترو-اپتیکی"
کنفرانس فیزیک ایران. ۱۴۰۰.

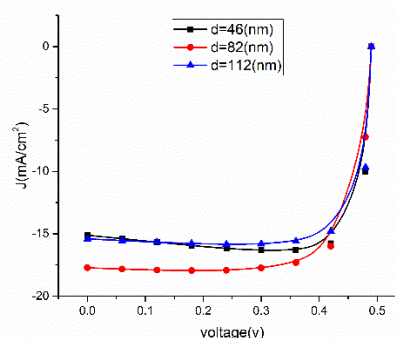
- [۷] Law, Yann-Meing, and Jean-Christophe Nave. "FDTD Schemes for Maxwell's Equations with Embedded Perfect Electric Conductors Based on the

Cell	λ (nm)	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm ^۲)	FF	η (%)
نقص سطحی	۴۰۰	۰٫۵۱۰	۱۷٫۷۳۹	۰٫۸۶۲	۷٫۸۰۰
	۶۰۰	۰٫۵۱۳	۱۷٫۶۲۵	۰٫۹۰۲	۸٫۱۵۹
	۸۰۰	۰٫۵۰۴	۱۵٫۰۹۴	۰٫۹۰۴	۶٫۸۸۵
نقص سطحی-حجمی	۴۰۰	۰٫۴۹۳	۱۵٫۱۲۶	۰٫۸۸۷	۶٫۶۲۹
	۶۰۰	۰٫۴۸۷	۱۷٫۷۲۸	۰٫۷۷۷	۶٫۷۲۳
	۸۰۰	۰٫۴۹	۱۵٫۴۰۸	۰٫۸۱۱	۶٫۲۱۵

همچنین نمودار J- این حالتها در شکل ۲ و ۳ آورده شده است.



شکل ۲: منحنی J-V برای سلول سیلیکونی فقط با نقص حجمی در سه ضخامت مختلف لایه ضد بازتاب



شکل ۳: منحنی J-V برای سلول سیلیکونی همزمان با نقص حجمی و سطحی در سه ضخامت مختلف لایه ضد بازتاب

با مقایسه جدول ها و نمودارهای بدست آمده مشاهده شد که در حالت واقعی تر سلول سیلیکونی، پارامترها شبیه سازی نسبت به حالت ایده آل تقریباً کاهش چشم گیری داشته است. اما تاثیر ضخامتهای لایه ضد بازتاب و مهندسی ضخامت آن نیز دیده می شود. در بهترین حالت لایه ضد بازتاب (ضخامت ۸۲ نانومتر) مقادیر J_{sc} , V_{oc} , FF و η سلول واقعی نسبت به سلول ایده آل به ترتیب ۲۲، ۳۳، ۶ و ۵۰ درصد کاهش بواسطه اثر عیب های مختلف را نشان داد.

نتیجه گیری

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

Correction Function Method." *Journal of Scientific
Computing* ۸۸,۳ (۲۰۲۱).