اثر ضخامت شبکه آلی-فلزی نانوکریستالی ZIF-8 بر عملکرد سلول خورشیدی پروسکایتی

سمانه مظفری[1]

[1]دانشگاه دریانوردی و علوم دریایی چابهار، دانشکده علوم

چکیده - در این پژوهش، نانو کریستال‌های ZIF-8 با قطر تقریبی ۶۳ nm تهیه و در ساخت سلول‌های خورشیدی پروسکایتی به‌کار گرفته شدند. پارامترهای اپتیکی، ساختار و مورفولوژی نانو کریستال‌های سنتز شده توسط تکنیک‌های مختلفی مانند UV-vis، XRD و SEM شناسایی شد. نانوذرات کریستالی به سبب داشتن تخلخل و مساحت سطح ویژه بالا بر روی لایه مزومتخلخل TiO_2 لایه‌نشانی شدند و اثر ضخامت لایه مرزی ZIF-8 بر عملکرد سلول خورشیدی پروسکایتی مورد بررسی و مطالعه قرار گرفت. بهترین عملکرد سلول خورشیدی با جریان مدار بسته ۷,۴۸ mA cm^{-2} ، ولتاژ مدار باز ۰,۶۴ V، فاکتور پرشدگی ۰,۵۶ و بازدهی ۲,۷۱٪.برای سلول خورشیدی با یک مرتبه لایه نشانی ZIF-8 بر روی لایه TiO_2 به‌دست آمد.

کلید واژه- سطح ویژه بالا، سلول خورشیدی پروسکایتی، شبکه آلی-فلزی، مزومتخلخل

Effect of thickness of nanocrystal metal organic feramwork (ZIF-8) on performance of perovskite solar cells

Samaneh Mozaffari[1]

[1]Faculty of Science, Chabahar Maritime University

Abstract- In this paper, nanocrystal metal organic framework (ZIF-8) was synthesized and used in the fabrication of perovskite solar cells. ZIF-8 nanoparticles were coated on the mesoporuse TiO_2 layer. Effect of thickness of ZIF-8 was investigated on the performance of perovskite solar cells. The cell with spin coating once exhibited the best performance with a short-circuit current density of 7.48 mA cm^{-2}, open circuit voltage of 0.64 V, fill factor 0.56 and the highest photo-conversion efficiency of 2.71% under the illumination of 100 mw cm^{-2}. Furthermore, optical parameters, structure and morphology of the ZIF-8 nanocrystals was studied using the appropriated instrumental techniques: SEM, XRD and UV-vis spectroscopy. The average crystallite size of ZIF-8 nanoparticles was estimated 63 nm by SEM that it agrees well with the value obtained from XRD.

Keywords: Large surface area, Perovskite solar cell, Metal organic framework, Mesoporuse

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-05]

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

۱- مقدمه

مواد متخلخل را می‌توان به دو دسته متخلخل آلی و معدنی که هر یک دارای مزایا و معایبی هستند، تقسیم بندی نمود. برای مثال مواد نانو ساختار آلی، سطح تماس بالایی داشته ولی حفرات نامنظمی دارند. درحالی‌که نانوساختارهای معدنی، نظم ساختاری بالا، حفرات یک اندازه و مقاومت حرارتی و مکانیکی بیشتری دارند، اما سطح تماس آن‌ها نسبت به نانوساختارهای آلی کمتر است. برای دستیابی به مواد نانو ساختار با مزایای هر دو گروه، شبکه آلی-فلزی تهیه شدند. بنابراین، شبکه‌های آلی-فلزی که به‌نام پلیمرهای متخلخل کئورودیناسیون نیز شناخته شده‌اند، زیر مجموعه مواد نانوساختاری می-باشند که حاصل پیوند میان یک یون یا خوشه فلزی و لیگاند آلی هستند [۱]. این دسته از مواد، مساحت سطح و تخلخل نسبی بالا، سطح تماس و مقاومت زیاد و حفرات فوق العاده منظمی دارند و در سال‌های اخیر با تغییر متصل کننده‌های آلی، سعی در تهیه شبکه آلی-فلزی با تخلخل و مساحت سطح بالاتر، زیاد شده است و شبکه آلی-فلزی با مساحت سطح بیش از $۷۰۰۰\ m^2/g$ نیز تهیه شده است. با توجه به ویژگی‌های منحصر به‌فرد مانند وجود اجزاء آلی و معدنی در کنار یکدیگر در شبکه‌ای منظم، قابلیت الحاق چند نوع گروه عاملی به ساختار، برهم کنش مناسب با حلال‌های آلی و آبی و تخلخل فوق العاده بالا، شبکه‌های آلی-فلزی کاندیای مناسبی برای مصارف گوناگونی می‌باشند. تاکنون از این دسته از مواد در زمینه جذب گازها، حسگرها، حمل داروها، جاذب و سلول‌های خورشیدی استفاده شده است [۲]. در این مقاله از شبکه آلی-فلزی ZIF-8 از خانواده زئولیتی ایمیدازولی در سلول خورشیدی پروسکایت استفاده شده است. ZIF-8 با استفاده از لایه نشانی چرخشی بر روی لایه مزومتخلخل TiO_2 لایه نشانی شد، و اثر آن بر روی عملکرد سلول خورشیدی پروسکایت مورد مطالعه قرار گرفت. با توجه به این‌که پروسکایت $CH_3NH_3PbI_3$ می-تواند هم‌زمان به‌عنوان جمع کننده نور و رسانای حفره عمل کند، در اینجا سلول‌های ساخته شده، فاقد هر گونه ماده نوع P برای انتقال حامل بار مثبت می‌باشند.

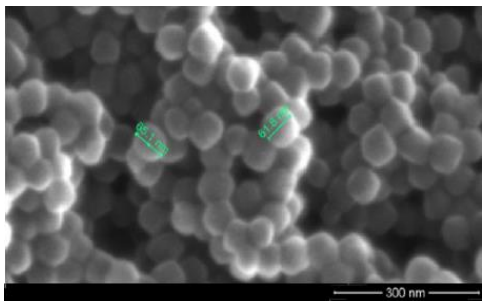
۲- روش آزمایش

۲-۱ تهیه نانوذرات ZIF-8

۲٫۴ g، $ZnNO_3.6H_2O$ درون ۹۰٫۴ g، متانول ریخته شد. در ظرفی دیگر، ۵٫۲۸ g، 2-methylimidazol در ۹۰٫۴ g، متانول حل شد و به محلول اول اضافه و به مدت ۱ ساعت در دمای ۲۵C-۲۰° هم زده شد. نانو کریستال‌های ZIF-8 پس از سانتریفیوژ و چندین بار شستشو با متانول به‌مدت ۱۲ ساعت تحت دمای ۸۰ °C خشک شدند. شکل ۱ تصویر SEM نانو کریستال‌های ZIF-8 با قطر تقریبی ۶۳ nm را نشان می‌دهد. همچنین در شکل ۲، الگوی پراش (XRD) برای ZIF-8 رسم شده است، که با الگوی پراش ارائه شده توسط پارک مطابقت دارد[۳]. با توجه به شکل، پیکی با شدت بالا در $2\Theta=7.6\ °$ مشاهده می‌شود که نشان‌دهنده کریستالیتی بالا نمونه است. با استفاده از الگوی XRD و معادله دبای-شرر (معادله ۱) قطر ذرات در حدود ۶۱ nm تخمین زده شد، که بسیار نزدیک به قطر ذرات به‌دست آمده با استفاده از تصویر SEM است [۳].

$$D=0.9\ \lambda/\beta\cos\Theta \qquad (۱)$$

در رابطه بالا، λ ، طول موج تابش (1.54 A) Cu Kα و β، پهنای پیک در نصف ارتفاع بیشینه (0.13 °) است.



شکل۱: تصویر SEM نانو کریستال‌های ZIF-8

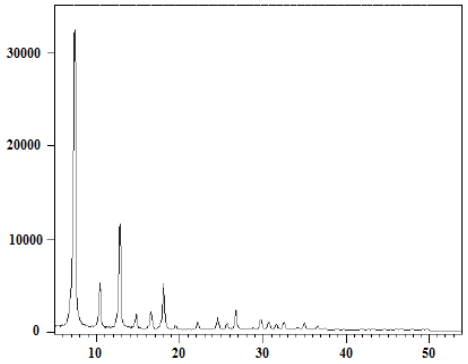
طیف UV-vis، نانو ذرات ZIF-8، باند جذبی را در طول موج ۲۶۰ nm نشان می‌دهد (شکل ۳). با استفاده از معادله ۲، گاف نواری اپتیکی ۴٫۷۶ eV ، برای نانو ذرات ZIF-8 به دست آمد [۴].

$$E_g=hc/\lambda=1240\ nm\ eV/\lambda \qquad (۲)$$

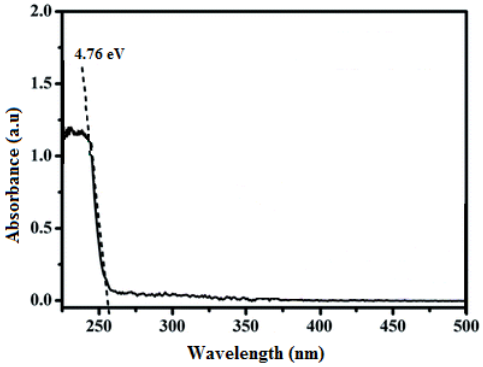
۲-۲ ساخت سلول‌های خورشیدی پروسکایتی

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-05]



شکل ۲: الگوی XRD برای نانوکریستال‌های ZIF-8



شکل ۳: طیف UV-vis، نانو ذرات ZIF-8

ابتدا شیشه‌های FTO توسط پودر روی و محلول ۲ M HCl، سونش و سپس تحت آلتراسونیک، با آب مقطر، استون و اتانول هر کدام به مدت ۳۰ دقیقه کاملا شستشو داده شدند. پس از آن، لایه‌ها توسط محلول اسیدی تیتانیم ترا ایزوپروپکساید (TTIP) در اتانول به عنوان لایه سد کننده حفره با سرعت ۲۰۰۰ دور بر دقیقه به مدت ۳۰ ثانیه لایه نشانی شد. زیر لایه‌ها تحت دمای ۵۰۰ °C به مدت ۳۰ دقیقه قرار گرفتند و سپس نانوذرات مزومتخلخل TiO_2 (۲۰ nm) که خمیر آن به نسبت ۱ به ۳,۵ توسط اتانول رقیق شده بود، با استفاده از لایه نشانی چرخشی، بر روی زیرلایه‌ها، لایه نشانی و در دمای ۵۰۰ °C به مدت ۳۰ دقیقه پخت داده شدند. نانو ذرات ZIF-8 در متانول (۰,۵ g در ۱۰ cc حلال) با ضخامت‌های مختلف که ضخامت آن‌ها توسط دفعات لایه نشانی کنترل شدند با سرعت ۶۰۰۰ دور بردقیقه به مدت ۳۰ ثانیه بر روی فیلم‌های مزومتخلخل TiO_2 نشانده و به مدت ۳۰ دقیقه در دمای ۸۰ °C حرارت داده شدند. یک قطره محلول ۱ مولار pbI_2 در حلال DMF با استفاده از لایه-نشانی چرخشی با سرعت ۶۵۰۰ دور بر دقیقه به مدت ۵ ثانیه به‌منظور لایه‌نشانی فیلم پروسکایت مورد استفاده قرار گرفت. سپس لایه‌ها به مدت ۳۰ دقیقه در دمای °C ۷۰ حرارت داده شدند. در مرحله بعد، پس از آن‌که دمای لایه‌ها به دمای اتاق رسید، در محلول CH_3NH_3I (حلال ایزوپروپانول) قرار داده شدند. فیلم‌های پروسکایت تهیه شده با حلال ایزوپروپانول شستشو داده و در دمای °C ۷۰ به مدت ۳۰ دقیقه حرارت داده شدند. در نهایت کاتد طلا به روش تبخیر حرارتی در فشار 10^{-5} torr بر روی لایه‌ها نشانده شد.

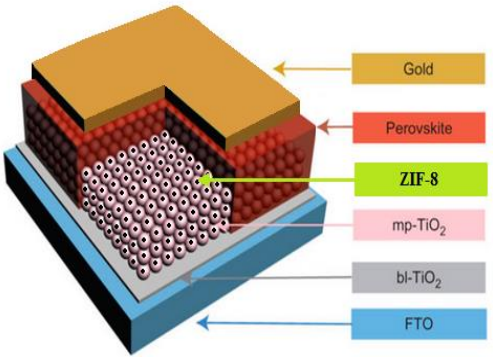
۳- بحث و نتایج

شکل ۴ الف، طرحواره و شکل ۴ ب تصویر SEM از سلول‌خورشیدی پروسکایتی با لایه ZIF-8 را به‌عنوان لایه مرزی نشان می‌دهد. در شکل ۵ نمودار جریان-ولتاژ برای نمونه های ساخته شده با لایه مرزی ZIF-8 با یک، دو و سه مرتبه لایه‌نشانی چرخشی رسم شده است. همچنین، جدول ۱ پارامترهای‌های به‌دست آمده از نمودار-جریان ولتاژ را نشان می‌دهد. با توجه به نتایج حاصل از جدول، مشخص است که با افزایش ضخامت لایه ZIF-8، ولتاژ مدار باز (V_{oc}) به تدریج افزایش یافته است.از آنجایی که ولتاژ مدار باز، اختلاف تراز رسانش TiO_2 با تراز HOMO ماده پروسکایت است، به احتمال زیاد لایه نشانی نانو کریستال‌های ZIF-8 بر روی لایه مزومتخلخل TiO_2، لبه باند رسانش آن را به سمت پتانسیل‌های منفی‌تر جابه جا کرده و میزان بازترکیب را در مرز مشترک TiO_2/ZIF-8/perovskite کاهش داده است [۵]. اما جریان مدار بسته (J_{sc}) با افزایش ضخامت ZIF-8 مقدار کمتری را نشان می‌دهد. با توجه به‌اینکه شبکه آلی-فلزی ZIF-8، تخلخل و مساحت سطح ویژه بالایی دارد ، انتظار بر این است که ماده پروسکایت به آسانی وارد خلل و فرج لایه ZIF-8 شود و در نتیجه میزان جذب نور و متعاقب آن تولید اکسیتون را به میزان قابل توجهی افزایش دهد. اما جریان مدار بسته، علاوه بر جذب فوتون و جدایی اکسیتون‌ها در مرزها، به تزریق الکترون از پروسکایت به تراز رسانش TiO_2 نیز بستگی دارد [۶]. جابه‌جایی باند رسانش TiO_2 به سمت پتانسیل‌های منفی‌تر، میزان تزریق الکترون‌ها را در مرز مشترک TiO_2/ZIF-8/perovskite به علت وجود لایه ZIF-8، کاهش داده که این عامل سبب کم شدن جریان مدار بسته با افزایش ضخامت لایه ZIF-8 شده است. همچنین، مشاهده می‌شود، بهترین عملکرد

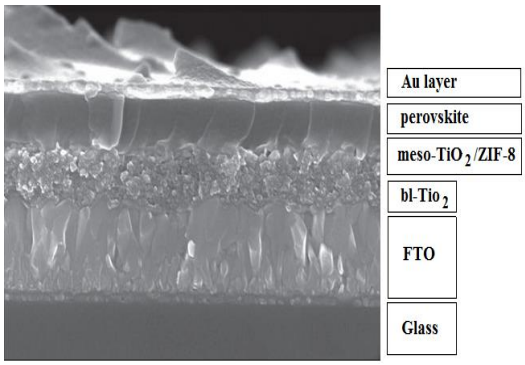
این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-05]

سلول مربوط به یک مرتبه لایه‌نشانی ZIF-8 بر روی لایه مزومتخلخل TiO_2 با $J_{sc}=7.48\ mA\ cm^{-2}$، $V_{oc}=0.64\ V$ و بازدهی ۲,۷۱٪ است.



(الف)

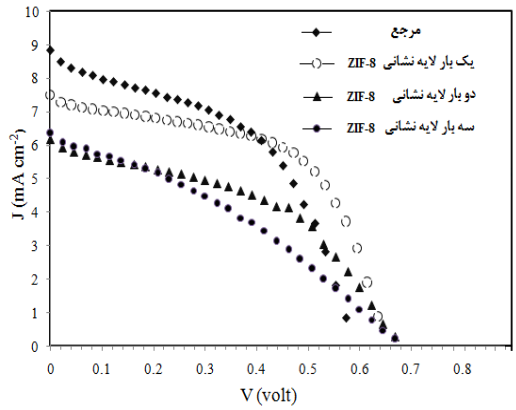


(ب)

شکل ۴: الف) طرحواره و ب) تصویر SEM سلول خورشیدی پروسکایتی با لایه ZIF-8

۴- نتیجه گیری

سلول‌های خورشیدی پروسکایت بدون استفاده از ماده انتقال دهنده حفره و با استفاده از ماده $CH_3NH_3PbI_3$ هم به‌عنوان جاذب نور و هم انتقال دهنده حفره ساخته شدند. نانو کریستال‌های ZIF-8 به عنوان لایه مرزی با استفاده از لایه نشانی چرخشی بین ماده پروسکایت و لایه مزومتخلخل TiO_2 لایه‌نشانی شدند. اثر ضخامت لایه ZIF-8 بر روی عملکرد سلول خورشیدی پروسکایتی مورد ارزیابی قرار گرفت. بهترین بازدهی سلول (۲,۷۱٪) برای ضخامت بهینه لایه ZIF-8 با یک مرتبه لایه نشانی بر روی لایه TiO_2 به‌دست آمد.



شکل ۵: نمودار جریان-ولتاژ برای سلول خورشیدی پروسکایتی با یک، دو و سه مرتبه لایه‌نشانی ZIF-8 و سلول خورشیدی پروسکایتی مرجع

	Voc(volt)	Jsc(mA cm $^{-2}$)	Fill factor	Efficiency(%)
مرجع	0.58	8.84	0.49	2.51
یک بار لایه نشانی ZIF-8	0.64	7.48	0.56	2.71
دو بار لایه نشانی ZIF-8	0.68	6.35	0.33	1.45
سه بار لایه نشانی ZIF-8	0.68	6.16	0.45	1.90

جدول ۱: پارامترهای به‌دست آمده از نمودار جریان ولتاژ برای سلول خورشیدی پروسکایتی با یک، دو و سه مرتبه لایه‌نشانی ZIF-8 و سلول خورشیدی پروسکایتی مرجع

مراجع

[1] D. J. L. Ryan, J. Kuppler, Q. R. Fang, J. R. Li, T. A. Zhou, D. Y. Mark, D. Young, D. Zhao, W. Zhou, "Potential applications of metal-organic frameworks" Coord. Chem. Rev., Vol. 253, pp. 3042-3066, 2009.

[2] A. U. Czaja, U. Trukhan, U. Muller, "Industrial applications of metal-organic frameworks" Chem. Soc. Rev. Vol. 38, pp. 1284-1293, 2009.

[3] K. S. Park, Z. Ni, A. P. Côté, J. Y. Choi, R. Huang, F. J. Uribe-Romo, H. K. Chae, M. O'Keeffe, O. M. Yaghi, "Exceptional chemical and thermal stability of zeolitic imidazolate frameworks" Proc. Natl. Acad. Sci., Vol. 103, pp. 10186-10191, 2006.

[4] M. Dadestani, A. pourghazi, "Optical properties of strontium monochalcogenides from first principles" Phys. Rev. B, Vol. 73, pp. 195102, 2006.

[5] M. Turrion, J. Bisquert, P. Salvador, "Flat band potential of F:SnO_2 in a TiO_2 dye-sensitized solar cell: an interference reflection study" J. Phys. Chem. B, Vol. 107, pp. 9397-9403, 2003.

[6] M. Z. H. Khan, M. R. Al-Mamun, P. K. Halder, M. A. Aziz, "Performance improvement of modified dye-sensitized solar cells' Renew Sust Energy Rev., Vol. 71, pp. 602-617, 2017.

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-05]