شبیه‌سازی تأثیر سطح مشترک لایه‌ها بر کارایی سلول خورشیدی پروسکایتی مسطح

غلامحسین حیدری*[۱]، فروغ هدایی[۱]

۱ گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ملایر، ملایر

Email: moh1135@gmail.com
frghodaei@gmail.com

چکیده – در این مقاله، اثر مهندسی سطح مشترک در ساخت سلول خورشیدی پروسکایتی مسطح شبیه‌سازی گردید. برای این منظور در مرز مشترک لایه فعال سلول خورشیدی با لایه‌های مجاور، بواسطه ناهمواری‌های سطحی که در حین ساخت ایجاد می‌گردند، دو لایه *IL1* و *IL2* در نظر گرفته و به ساختار متعارف سلول پروسکایتی اضافه گردید. بعنوان مهم‌ترین مشخصه در بررسی‌های اپتیکی، تابع دی الکتریک دو لایه، توسط تئوری مؤثر بروگمن تخمین زده شد. در ادامه تأثیر ضخامت لایه‌های *IL1* و *IL2* بر کارایی سلول خورشیدی پروسکایتی با استفاده از روش تئوری *TMM* و روش شبیه‌سازی *FDTD* جهت مدل توسعه داده شده، بررسی گردید. نتایج نشان می‌دهند که ضخامت لایه‌های *IL1* و *IL2* تأثیر شدیدی بر جذب جزئی لایه فعال دارا می‌باشند که باید در ساخت سلول پروسکایتی مسطح در نظر گرفته شوند.

کلید واژه - سلول خورشیدی پروسکایتی، مهندسی سطح مشترک، روش TMM و FDTD، تئوری محیط مؤثر بروگمن.

Simulation of the interface layers effect on the efficiency of planar perovskite solar cell

Gholamhosain Haidari[1*], Forough Hodaei[1]

1 Department of Physics, Faculty of Sciences, Malayer University, Malayer, Iran

Abstract - In this paper, the effect of interface engineering in the construction of a planar perovskite solar cell was simulated. For considering the interface between active layer and adjacent layers, the two layers IL1 and IL2 were added to the conventional structure of the solar cell, due to the surface roughness created during the fabrication. As the most important property in optical investigations, the dielectric function of two interface layers, were estimated by the Bruggeman effective medium theory. The effect of the thickness of IL1 and IL2 layers on the efficiency of perovskite solar cell was investigated by using TMM theory and FDTD simulation for this developed model. The results show that the thickness of the IL1 and the IL2 layers have a severe effect on the parasitic absorption of the active layer, which should be considered in the formation of planar perovskite solar cell.

Keywords: Perovskite solar cell, Interface engineering, TMM and FDTD method, Bruggeman effective medium theory.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-10-31]

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

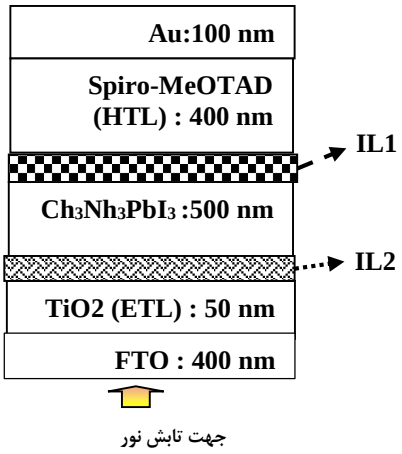
۱- مقدمه

ساختار پروسکایتی به ساختار بلورین مشابه با ساختار نمونه اولیه $CaTiO_3$ برمی‌گردد. ساختارهای پروسکایتی فرم کلی ABX_3 را دارا می‌باشند که برای سلول خورشیدی $Ch_3Nh_3PbI_3$، کاتیون A یون متیل آمونیوم، B سرب و X هالید می‌باشد. متیل آمونیوم سرب یدید ($Ch_3Nh_3PbI_3$) یک نیمه‌رسانا با باندگپ مستقیم ۱/۵۵ eV~ می‌باشد و آن را بعنوان یک جذاب خوب برای طیف مریی تابش خورشیدی در ساختار سلول خورشیدی معرفی می‌کند که برای اولین بار نیز در سال ۲۰۰۹ معرفی شد. میاساکا و همکارانش پروسکایت‌های ارگانومتالیک را در سلول‌های خورشیدی حساس به رنگینه (DSSC) به کار بردند و بازدهی در حدود ۳٫۸٪ را به دست آوردند[۱]. در ادامه محققان متعددی به بررسی سلول‌های خورشیدی پروسکایتی پرداخته و نتایج جالب توجهی را درباره‌ی بازدهی بالا با روش‌های مختلف ساخت به دست آوردند. اخیراً محققان بازدهی ۲۲٪~ را گزارش کرده‌اند[۲]. جدای همه موارد مثبت ذکر شده، هنوز انواع سلول‌های خورشیدی (از جمله سلول‌های پروسکایتی) نیاز به بازدهی و طول عمر بیشتری دارند تا در رقابت با منابع انرژی فسیلی، اقتصادی‌تر شوند. برای ساخت سلول خورشیدی مسطح روش‌های لایه نشانی چرخشی تک و دو مرحله‌ای وجود دارد. در این میان مهندسی سطح لایه‌های نازک یکی از گزینه‌های بسیار مهم در غلبه یافتن بر نقاط ضعف سلول‌های خورشیدی می‌باشد[۳و۴]. در این تحقیق جهت بررسی اثرات وابسته به سطح تماس مشترک لایه‌ها ، دو لایه مؤثر بین "لایه پروسکایتی/لایه عبور دهنده حفره" و "لایه پروسکایتی/ لایه عبور دهنده الکترون" نسبت می‌دهیم (این لایه‌ها به ترتیب IL۱ و IL۲ نام‌گذاری گردیدند). درواقع به‌واسطه ناهمواری (roughness) دو لایه در محل تماس، می‌توان محل تماس را یک لایه کامپوزیتی دانست که ترکیبی از لایه‌های بالایی و پایینی است (شکل ۱). در این تحقیق به شبیه‌سازی اثرهای اپتیکی تداخلی منتج از در نظر گرفتن این دو لایه IL۱ و IL۲ بر طیف جذبی لایه فعال سلول خورشیدی (شامل اثرات تداخلی و طیف جذبی جزئی) پرداخته‌شده است. برای این منظور از روش تفاضل محدود در حوزه زمان (FDTD) استفاده گردید.

۲- روش‌های مورداستفاده در شبیه‌سازی

۲-۱ روش شبیه‌سازی FDTD

روش FDTD یکی از روش‌های عددی حل معادلات ماکسول می‌باشد. مزیت اولیه روش FDTD سرراست بودن آن در کار با سلول مکعبی "یی" بوده بطوریکه مؤلفه‌های میدان الکترومغناطیسی در نقاط مختلف فضای شبیه‌سازی به‌طور مستقیم و بدون نیاز به معکوس کردن ماتریس محاسبه می‌گردند. بمنظور در نظر گرفتن پاشندگی محیط در بررسی‌های اپتیکی نیاز به دانستن تابع دی الکتریک حقیقی- موهومی (یا معادل آن ضریب شکست حقیقی – موهومی) می‌باشد که برای مواد سلول پروسکایتی توسط محققان بواسطه روش‌های تجربی مرتبط، اندازه‌گیری شده است (شکل ۲) [۵]. برای انجام شبیه‌سازی FDTD از محیط نرم‌افزاری لومریکال استفاده گردید.



شکل ۱: نمایش نوعی سلول پروسکایتی مسطح. ازآنجایی‌که سطح مشترک لایه‌ها در یکدیگر فرورفتگی‌هایی دارند، لایه‌های مجاور MAPbI3 با دو لایه HTL و ETL با دو لایه مؤثر جایگزین گردیدند به‌این‌ترتیب که با در نظر گرفتن IL1 و IL2 ، مدل مورد استفاده در شبیه‌سازی، توسعه داده شد. از این سلول جهت شبیه سازی FDTD استفاده شده است.

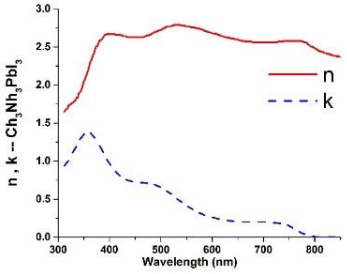
۲-۲ روش محیط مؤثر بروگمن (Bruggeman)

در نظر گرفتن تابع دی الکتریک حقیقی-موهومی برحسب طول‌موج برای لایه IL۱ و IL۲ کار ساده‌ای نیست. این دو

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

[Downloaded from opsi.ir on 2026-10-31]

لایه حدس زده شده درواقع ساختاری دارند که ترکیبی از جنس دو لایه مجاور سطح مشترک می‌باشند.



شکل ۲: نمایش مقدارهای ضریب شکست حقیقی (n) و موهومی (k) بر حسب طول موج مربوط به ماده پروسکایتی. تمامی ضریب شکست های مورد استفاده از مرجع [۵] اقتباس گردیده اند.

برای غلبه بر این مشکل یک راه استفاده از روش محیط مؤثر می‌باشد. در این تحقیق از روش محیط مؤثر بروگمن جهت محاسبه تابع دی الکتریک لایه‌های I L۱ و I L۲ استفاده شد[۶]:

$$f\frac{\varepsilon_1-\varepsilon_{eff}}{\varepsilon_1+2\varepsilon_{eff}}+(1-f)\frac{\varepsilon_2-\varepsilon_{eff}}{\varepsilon_2+2\varepsilon_{eff}}=0 \qquad (۱)$$

که در آن f کسر حجمی ، ε۱ و ε۲ تابع دی الکتریک دو محیط مجاور و ε_{eff} تابع دی الکتریک لایه مؤثر می‌باشند. در این بررسی f برابر ۰/۵ انتخاب گردید. برای تعیین ε_{eff} بر اساس روش بروگمن، کدی در محیط متلب برنامه‌نویسی گردید.

۳-۲ روش ماتریس انتقال (TMM)

تئوری حاکم بر این روش به فراوانی در دسترس می باشد. در این روش، ماتریس کلی سیستم چندلایه‌ای به صورت زیر تعریف می‌شود :

$$\begin{bmatrix}B\\C\end{bmatrix}=\left\{\prod_{r=1}^{k}\begin{bmatrix}\mathrm{Cos}\delta_r & \frac{i\mathrm{Sin}\delta_r}{\eta_r}\\ i\eta_r\mathrm{Sin}\delta_r & \mathrm{Cos}\delta_r\end{bmatrix}\right\}\begin{bmatrix}1\\ \eta_{k+1}\end{bmatrix} \qquad (۲)$$

که K تعداد لایه‌ها، $\boldsymbol{\delta_r}$ فاز ضخامت هر لایه، $\boldsymbol{\eta_r}$ هدایت ظاهری نوری برای هر لایه که برای قطبش sوp متفاوت می‌باشد. درنهایت، توان عبور (T) و بازتابش (R)، نسبت شدت ورودی $|\mathbf{E_0}|^2$ به‌شدت بازتاب شده یا عبور کرده، تعریف می‌گردد و جذب عبارت است از: A=۱-T-R.

در این تحقیق برای بررسی صحت انجام شبیه‌سازی سلول خورشیدی به‌وسیله روش شبیه‌سازی FDTD، از مطابقت جواب‌های شبیه‌سازی سلول پایه بدست آمده از روش FDTD با روش تئوری TMM استفاده گردید. جهت روش TMM از کدی در محیط متلب استفاده شد.

۳-بحث و نتایج

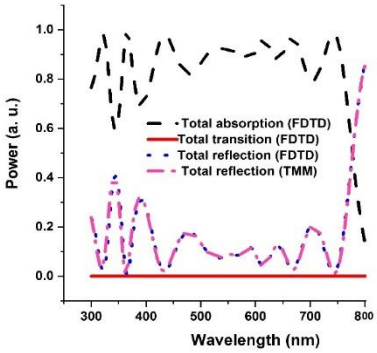
در ابتدا برای سلول پایه بدون I L۱ و I L۲ توان بازتاب، توان جذبی و توان عبوری مربوط به کل ساختار سلول پایه شبیه‌سازی گردید. همانگونه که در شکل ۲ ذکر گردید، از مرجع [۵]، جهت ضریب شکست مواد مورد استفاده در طول موج های مختلف استفاده گردید.

ساختار و ضخامت سلول پایه عبارت است از :

Au/Spiro/Perovskite/TiO2/FTO

100 nm/400 nm/500 nm/50 nm/400nm

مطابقت خوب توان بازتاب کل محاسبه‌شده با روش TMM و روش FDTD (شکل ۳)، نمایشی از صحت شبیه‌سازی انجام‌گرفته بر اساس روش FDTD می‌تواند در نظر گرفته شود. به علت لایه فلزی طلا در انتهای ساختار، توان کل عبوری نزدیک به صفر است.



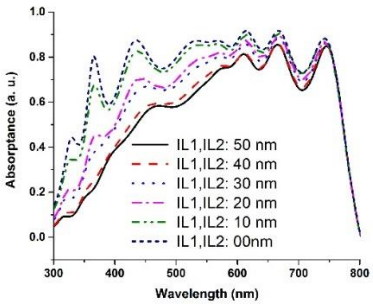
شکل ۳ : منحنی‌های توان کل بازتاب، عبور و جذب مربوط به سلول پروسکایتی پایه شبیه‌سازی‌شده توسط FDTD. توان کل بازتابیده شده به روش TMM نیز جهت مقایسه دو روش، نشان داده شده است.

همان‌گونه که شکل ۳ نشان می‌دهد جذب خوبی برای کل ساختار وجود دارد. این جذب در محدوده مادون‌قرمز به‌شدت کاهش پیدا می‌کند که با توجه به گاف پروسکایت که نزدیک ۱،۵ eV می‌باشد (حدود ۸۰۰ nm) معقول به نظر می‌رسد. در ادامه ساختار سلول پروسکایتی متعارف را توسعه داده و دو لایه ی مفروض IL1 و IL2 را به ساختار اضافه کردیم. در نمونه های مختلف، برای این دو لایه به صورت همزمان ضخامت‌های ۱۰nm، ۲۰nm، ۳۰nm، ۴۰nm، ۵۰nm را در نظر گرفتیم. به عبارت دیگر، در هر

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

[Downloaded from opsi.ir on 2026-10-31]

نمونه ضخامت IL1 و IL2 یکسان می‌باشند و به این ترتیب اضافه می‌گردند که در مرز مشترک دو لایه، با سهم یکسان از ضخامت لایه‌های مجاور کسر می‌گردد تا لایه های مفروض IL1 و IL2 با ضخامت مورد نظر به دست آیند. جهت انجام کلیه محاسبات روش TMM و یا FDTD، تابع دی الکتریک حقیقی–موهومی لایه‌های IL1 و IL2 با استفاده از تئوری محیط مؤثر بروگمن محاسبه گردیدند. با توجه به اینکه مرتبه ضخامت لایه‌های فصل مشترکی بسیار کوچک و از مرتبه چند ده نانومتر انتخاب گردیده است، استفاده از روش شبیه‌سازی FDTD در مقایسه با روش تئوری TMM می‌تواند دقیق‌تر باشد. ازاین‌رو در شبیه‌سازی جذب جزئی لایه پروسکایتی (Ch3Nh3PbI3=MAPbI3) سلول توسعه داده‌شده، تنها از روش FDTD استفاده گردید. این جذبی است که در لایه فعال سلول خورشیدی اتفاق می‌افتد و به تولید اکسیتون منجر می‌گردد. با در نظر گرفتن بازده کوانتومی داخلی ۱۰۰ درصد، تمام این اکسیتونها می‌توانند در فرآیند جریانی سلول خورشیدی وارد شوند. بنابراین این طیف جذبی جزئی لایه فعال می تواند نمایشی از بازده سلول خورشیدی نیز در نظر گرفته شود.



شکل ۴ : طیف جذبی جزئی لایه MAPbI3 سلول خورشیدی پروسکایتی توسعه داده‌شده، برای ضخامت‌های مختلف لایه‌های IL1 و IL2. ضخامت صفر به معنی عدم در نظر گرفتن لایه‌های سطح مشترکی می‌باشد. ضخامت کل سلول خورشیدی در همه‌ی نمونه‌ها مقدار ثابت ۱۴۵۰ nm انتخاب‌شده است.

همان‌گونه که از شکل ۴ در مقایسه با شکل ۳ آشکار می‌گردد جذب جزئی لایه فعال نزدیک به قسمت ماوراءبنفش طیف (بیشترین شدت طیف خورشیدی مربوط به این ناحیه است) به شدت تحت تأثیر ضخامت لایه IL1 و IL2 قرار می‌گیرد و کاهش شدیدی را نشان می‌دهد. از این رو مهندسی سطح در ساخت سلول پروسکایتی مسطح از اهمیت زیادی برخوردار می‌شود به‌نحوی‌که روش ساخت تجربی باید به‌گونه‌ای انتخاب گردد که مرز تیزی در فصل مشترک دو لایه ایجاد گردد و یا به عبارت دیگر لایه‌ها دارای کمترین ناهمواری (Roughness) باشند.

۴- نتیجه‌گیری

تأثیر ناهمواری در سطح مشترک لایه‌های MAPbI3/HTL و MAPbI3/ETL بر عملکرد سلول خورشیدی پروسکایتی شبیه‌سازی و بررسی گردید. برای این منظور دولایه‌ی مفروض IL1 و IL2 معرفی و به ساختار متعارف سلول پروسکایتی اضافه گردیدند. به‌واسطه ناهمواری دولایه در مرز، درواقع لایه‌های فوق به نوعی کامپوزیتی است که از دو ماده مجاور آن تشکیل‌شده است. برای تخمین تابع دی الکتریک (حقیقی-موهومی) دو لایه مفروض از روش محیط مؤثر بروگمن استفاده گردید. در ادامه با استفاده از سلول پروسکایتی توسعه داده شده و روش FDTD، طیف جذبی جزئی لایه فعال سلول خورشیدی شبیه‌سازی گردید. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهند که به ویژه در ناحیه مهم نزدیک به ماورا بنفش تا نزدیک به انتهای طیف مریی، جذب جزئی لایه فعال به شدت به ضخامت لایه‌های IL1 و IL2 وابسته است و با افزایش ضخامت لایه های مفروض، از میزان جذب کاسته می گردد. بنابراین مهندسی سطح مشترک در ساخت سلول‌های پروسکایتی مسطح باید بسیار مورد توجه قرار گیرد.

مراجع

[1] Yusoff, A.R. and M.K. Nazeeruddin, Perovskite Solar Cells - Fabrication and Characterization. Wiley-VCH Verlag GmbH, 2019 (The initial version is usable, now).

[2] Ulsan National Institute of Science and Technology(UNIST). "New world efficiency record with perovskite solar cells." ScienceDaily. ScienceDaily, 25 July 2017.

[3] Zhou, H., et al., Interface engineering of highly efficient perovskite solar cells. Science, 345(6196), pp. 542-546, 2014.

[4] Yang, G., et al., Interface engineering in planar perovskite solar cells: energy level alignment, perovskite morphology control and high performance achievement. Journal of Materials Chemistry A, 5(4), pp. 1658-1666, 2017.

[5] Ball, James M., et al., Optical properties and limiting photocurrent of thin-film perovskite solar cells. Energy & Environmental Science, 8, pp. 602-609, 2015.

[6] Choy, T.C., Effective Medium Theory: Principles and Applications. 2016: Oxford University Press, 2016.

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

[Downloaded from opsi.ir on 2026-10-31]