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

اثر چگالی نقص بر عملکرد سلول خورشیدی غیرآلی $CsPbI_3$: مطالعه شبیه-سازی

پریسا کریمی مونه[۱]، زهرا مخلص آبادی فراهانی[۲]، نفیسه شریفی[۱و۲]

[۱]گروه فوتونیک و پلاسما، دانشکده فیزیک، دانشگاه کاشان، کاشان ۸۷۳۱۷، ایران

[۲]پژوهشکده علوم و فناوری نانو، دانشگاه کاشان، کاشان ۸۷۱۳۷، ایران

parisa.mjkarimi@grad.kashanu.ac.ir, farahanizahra۸۷٤@gmail.com, sharifi@kashanu.ac.ir

چکیده- در این مقاله با ا ستفاده از نرم افزار یک بعدی **SCAPS** ساختار سلول خور شیدی پرو سکایتی غیرآلی **FTO/i-ETL/CsPbI۳/i-HTL/Au** شبیه سازی شده و تغییرات بازدهی الکتریکی و بازدهی کوانتومی در دوحالت: با حضور لایه های مجازی **IDL۱** و **IDL۲** و بدون حضور آن‌ها و همچنین با در نظر گرفتن نقص‌های سطحی بین لایه‌های **IDL** ها و پروسکایت مورد بررسی قرار گرفت. در این ساختار از **SnO_2** به عنوان لایه انتقال دهنده الکترون و از **Spiro-OMeTAD** به عنوان لایه انتقال دهنده حفره و همچنین برای در نظر گرفتن تاثیر نقص‌های بازترکیبی سطحی از لایه‌های مجازی **IDL۱** و **IDL۲** به ترتیب بین **HTL/perovskite** و **perovskite/ETL** استفاده شده است. با وارد کردن نقص‌های بازترکیبی سطحی بازدهی الکتریکی این ساختار از ٪۱۳,۱۵ به ٪۱۱,۹۱ کاهش یافته است.

کلید واژه- پروسکایت، سلول های خورشیدی غیرآلی، لایه‌های مجازی، نقص‌های بازترکیبی سطحی

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

Parisa Karimi Mooneh[۱], Zahra Mokhles Abadi Farahani[۲], Nafiseh Sharifi[۱،۲]

[۱] □□□□□□□□□□ □□ □□□□□□□□□ □□□ □□□□□□, □□□□□□□ □□ □□□□□□□, □□□□□□□□□□ □□ □□□□□□, □□□□□□ ۸۷۳۱۷, □□□□

۲ □□□□□□□□□ □□ □□□□□□□□□□□□ □□□ □□□□□□□□□□□□□□□, □□□□□□□□□□ □□ □□□□□□, □□□□□□ ۸۷۳۱۷, □□□□

parisa.mjkarimi@grad.kashanu.ac.ir, farahanizahra۸۷٤@gmail.com, sharifi@kashanu.ac.ir

Abstract-In this paper, the structure of an inorganic perovskite solar cell consisting of FTO/i-ETL/CsPbI۳/i-HTL/Au was simulated by SCAPS-۱D. electrical efficiency and quantum efficiency were calculated in two conditions: with virtual layer IDL۱ and IDL۲ and without them. The interface recombination layer between the IDL layers and the perovskite was considered. In this structure, SnO_2 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 (IDL۱ and IDL۲, not indicated in the figure) between HTL/CsPbI۳ was considered to simulate a more realistic situation. By considering

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-06]

the Interface recombination defects, the electrical efficiency of this structure has decreased from ۱۳,۱۵٪ to ۱۱,۹۱٪.
Keywords: Perovskite, Inorganic solar cells, virtual layer, interface recombination defects.

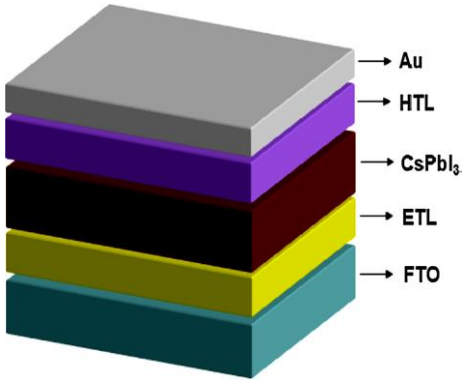
[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-06]

مقدمه

در بین نسل‌های سلول‌های خورشیدی، نسل سوم سلول خورشیدی پروسکایتی آلی-غیرآلی به دلیل فرآیند 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 فتوولتائیک به خود جلب کرده است [۱] و [۲] . با این حال ناپایداری حرارتی و شیمیایی پروسکایت‌های آلی-غیرآلی می‌تواند مانعی برای تجاری‌سازی این نسل از سلول‌های خورشیدی باشد. اخیرا پروسکایت‌های هالیدی معدنی با جایگزینیCs به جای مواد آلی بدست آمده است، به عنوان مثال پروسکایت‌های هالیدی معدنی $CsPbX_3$ (X = Cl, 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 لایه‌های انتقال دهنده الکترون و حفره غیرآلی است که ساختار سلول کاملا از مواد غیرآلی باشد. در این مطالعه یک بررسی دقیق روی ساختار سلول با $CsPbI_3$ با در نظر گرفتن نقص‌های بازترکیبی سطحی احتمالی به وجود آمده بین لایه‌ها 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/$CsPbI_3$/i-HTL/Au است(شکل۱). پارامترهای مورد نیاز شبیه‌سازی شامل انرژی شکاف نواری (E_g)، ضریب الکترون‌خواهی (χ)، ضریب گذردهی (ε_r)، تحرک الکترون (μ_n) و حفره (μ_p)، چگالی حامل‌های نوار رسانش (N_C) و نوار ظرفیت (N_V)، چگالی حامل‌های دهنده (N_A) و پذیرنده (N_D) و چگالی نقص‌ها (N_t) است. سرعت گرمایی برای الکترون و حفره □/□□۱۰^{۷} در نظر گرفته شده. به منظور در نظر گرفتن نقص-های بازترکیبی سطحی از دو لایه مجازی IDL۱ و IDL۲ به ترتیب بین HTL/perovskite و perovskite/ETL استفاده شده. خصوصیات فیزیکی این دو لایه به جز چگالی نقص‌ها مشابه با لایه جاذب است. توزیع نقص‌های ذاتی به صورت گاوسی، انرژی مشخصه □،۱□□ ، در حالت mid-gap، چگالی الکترون‌های گیرافتاده در سطح مقطع ۲×۱۰$^{-۱۴}$□□$^{-۲}$ 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 تحقیقات تئوری جمع آوری شده. [۷]و [۸].



شکل ۱: شماتیک ساختار سلول پروسکایت شبیه سازی شده

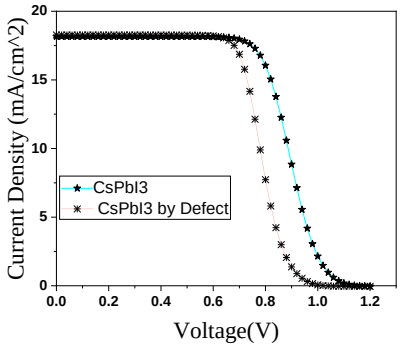
[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-06]

نتایج و بحث

نمودار جریان-ولتاژ ساختار این سلول با حضور نقص‌ها و بدون حضور آن‌ها طبق پارامترهای (جدول۱) 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 ۶۲/۸۵٪ بدست آمد در صورتی که همین ساختار با حضور نقص ها دارای بازدهی ۱۱/۹۱٪، جریان اتصال کوتاه ۱۸/۲۷ میلی‌آمپر بر سانتی متر مربع، ولتاژ مدار باز ۱/۰۲ ولت و فاکتور پرشدگی۶۳/۳۹ 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 می‌شود.

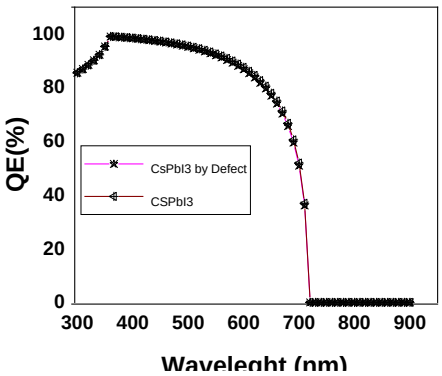
جدول ۱: پارامترهای جریان- ولتاژ ساختار شبیه‌سازی شده

	V_{OC} (V)	J_{SC} (mA/cm^2)	FF (%)	PCE (%)
$CsPbI_3$	۱/۱۵	۱۸/۱۵	۶۲/۸۵	۱۳/۱۵
$CsPbI_3$ by defect	۱/۰۲	۱۸/۲۷	۶۳/۳۹	۱۱/۹۱



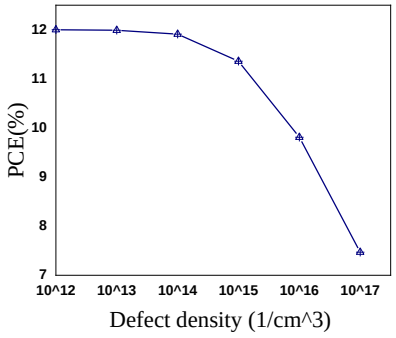
شکل ۲: نمودار جریان-ولتاژ $CsPbI_3$ با نقص‌ها و بدون حضور آن‌ها.

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 $CsPbI_3$ با نقص‌ها و بدون حضور آن ها

در مرحله بعد تغییرات بازدهی با افزایش چگالی نقص‌ها لایه جاذ $CsPbI_3$ 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

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-06]

نتیجه گیری

در مطالعات باید تا حد امکان تلاش شود که شبیه‌سازی به حالت واقعی‌تر 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 $۱۰^{۱۷}$ بازدهی از ۱۲ درصد به ۷,۴۷ درصد کاهش یافته است که این می‌تواند نتیجه بازترکیب شدن حامل‌ها با نقص‌های موجود باشد.

مرجع‌ها

[۱] "Dong, Q., Zhu, C., Chen, M., Jiang, C., Guo, J., Feng, Y., ... & Zhou, Y. (۲۰۲۱). Interpenetrating interfaces for efficient perovskite solar cells with high operational stability and mechanical robustness. *Nature communications*, *12*(۱), ۱-۹.".

[۲] "Best Research-Cell Efficiency Chart: https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html".

[۳] "Gao, P., Grätzel, M., & Nazeeruddin, M. K. (۲۰۱٤). Organohalide lead perovskites for photovoltaic applications. Energy & Environmental Science, ۷(۸), ۲٤٤۸-۲٤٦۳".

[٤] "Beal, R. E., Slotcavage, D. J., Leijtens, T., Bowring, A. R., Belisle, R. A., Nguyen, W. H., ... & McGehee, M. D. (۲۰۱٦). Cesium lead halide perovskites with improved stability for tandem solar cells. The journal of physical chemistry letters, ۷(٥), ۷٤٦-۷٥۱".

[٥] "Burgelman, M., Nollet, P., & Degrave, S. (۲۰۰۰). Modelling polycrystalline emiconductor solar cells. Thin solid films, ۳٦۱, ٥۲۷-٥۳۲.".

[٦] "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(٥), ۰٥٤٥۰٥.".

[۷] "Dastidar, S., Li, S., Smolin, S. Y., Baxter, J. B., & Fafarman, A. T. (۲۰۱۷). Slow electron–hole recombination in lead iodide perovskites does not require a molecular dipole. ACS Energy Letters, ۲(۱۰), ۲۲۳۹-۲۲٤٤".

[۸] "Deng, Q., Li, Y., Chen, L., Wang, S., Wang, G., Sheng, Y., & Shao, G. (۲۰۱٦). The effects of electron and hole transport layer with the electrode work function on perovskite solar cells. Modern Physics Letters B, ۳۰(۲۷), ۱٦٥۰۳٤۱.".

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-06]