



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 $\text{CsPbI}_3$ : مطالعه شبیه-سازی

پریسا کریمی مونه<sup>۱</sup>، زهرا مخلص آبادی فراهانی<sup>۲</sup>، نفیسه شریفی<sup>۳</sup>

<sup>۱</sup>گروه فوتونیک و پلاسما، دانشکده فیزیک، دانشگاه کاشان، کاشان ۸۷۳۱۷، ایران

<sup>۲</sup>پژوهشکده علوم و فناوری نانو، دانشگاه کاشان، کاشان ۸۷۱۳۷، ایران

[parisa.mjkarimi@grad.kashanu.ac.ir](mailto:parisa.mjkarimi@grad.kashanu.ac.ir), [farahanizahra874@gmail.com](mailto:farahanizahra874@gmail.com), [sharifi@kashanu.ac.ir](mailto:sharifi@kashanu.ac.ir)

چکیده- در این مقاله با استفاده از نرم افزار یک بعدی SCAPS ساختار سلول خورشیدی پرو سکایتی غیرآلی  $\text{FTO/i-ETL/CsPbI}_3/\text{i-HTL/Au}$  شبیه سازی شده و تغییرات بازدهی الکتریکی و بازدهی کوانتومی در دو حالت: با حضور لایه های مجازی  $\text{IDL}^1$  و  $\text{IDL}^2$  و بدون حضور آن ها و همچنین با در نظر گرفتن نقص های سطحی بین لایه های  $\text{IDL}$  ها و پروسکایت مورد بررسی قرار گرفت. در این ساختار از  $\text{SnO}_2$  به عنوان لایه انتقال دهنده الکترون و از Spiro-OMeTAD به عنوان لایه انتقال دهنده حفره و همچنین برای در نظر گرفتن تاثیر نقص های بازترکیبی سطحی از لایه های مجازی  $\text{IDL}^1$  و  $\text{IDL}^2$  به ترتیب بین  $\text{HTL/perovskite}$  و  $\text{perovskite/ETL}$  استفاده شده است. با وارد کردن نقص های بازترکیبی سطحی بازدهی الکتریکی این ساختار از ۱۳٫۱۵٪ به ۱۱٫۹۱٪ کاهش یافته است. کلید واژه- پروسکایت، سلول های خورشیدی غیرآلی، لایه های مجازی، نقص های بازترکیبی سطحی

## The effect of defect on the performance of $\text{CsPbI}_3$ inorganic perovskite solar cells : a simulation study

Parisa Karimi Mooneh<sup>۱</sup>, Zahra Mokhles Abadi Farahani<sup>۲</sup>, Nafiseh Sharifi<sup>۱,۳</sup>

<sup>۱</sup>گروه فوتونیک و پلاسما، دانشکده فیزیک، دانشگاه کاشان، کاشان ۸۷۳۱۷، ایران

<sup>۲</sup>پژوهشکده علوم و فناوری نانو، دانشگاه کاشان، کاشان ۸۷۱۳۷، ایران

[parisa.mjkarimi@grad.kashanu.ac.ir](mailto:parisa.mjkarimi@grad.kashanu.ac.ir), [farahanizahra874@gmail.com](mailto:farahanizahra874@gmail.com), [sharifi@kashanu.ac.ir](mailto:sharifi@kashanu.ac.ir)

**Abstract-**In this paper, the structure of an inorganic perovskite solar cell consisting of  $\text{FTO/i-ETL/CsPbI}_3/\text{i-HTL/Au}$  was simulated by SCAPS-۱D. electrical efficiency and quantum efficiency were calculated in two conditions: with virtual layer  $\text{IDL}^1$  and  $\text{IDL}^2$  and without them. The interface recombination layer between the IDL layers and the perovskite was considered. In this structure,  $\text{SnO}_2$  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 ( $\text{IDL}^1$  and  $\text{IDL}^2$ , not indicated in the figure) between  $\text{HTL/CsPbI}_3$  was considered to simulate a more realistic situation. By considering

**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.

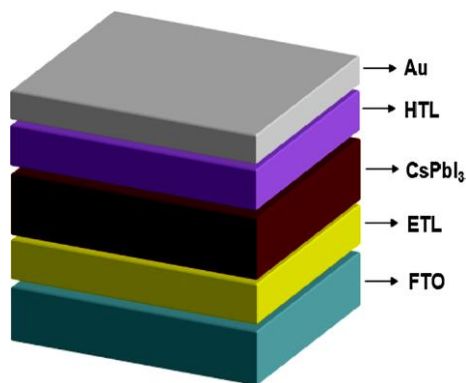
## مقدمه

در بین نسل‌های سلول‌های خورشیدی، نسل سوم سلول خورشیدی پروسکایتی آل-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 آل-غیرآلی می‌تواند مانعی برای تجاری‌سازی این نسل از سلول‌های خورشیدی باشد. اخیراً پروسکایت‌های هالیدی معدنی با جایگزینی Cs به جای مواد آل بدست آمده است، به عنوان مثال پروسکایت‌های هالیدی معدنی  $\text{CsPbX}_3$  ( $X = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$ ) پایداری بالاتری نسبت به سایر ساختارهای پروسکایت دارند و به این دلیل مورد توجه بیشتری قرار گرفته‌اند [۳] و [۴]. هدف‌های بعدی تلاش برای دستیابی به پروسکایت‌های غیر آل با بازدهی و پایداری بالا و همچنین لایه‌های انتقال دهنده الکترون و حفره غیرآلی است که ساختار سلول کاملاً از مواد غیرآلی باشد. در این مطالعه یک بررسی دقیق روی ساختار سلول با  $\text{CsPbI}_3$  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 نرم‌افزار 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  $\text{FTO}/\text{i-ETL}/\text{CsPbI}_3/\text{i-ETL}/\text{Au}$

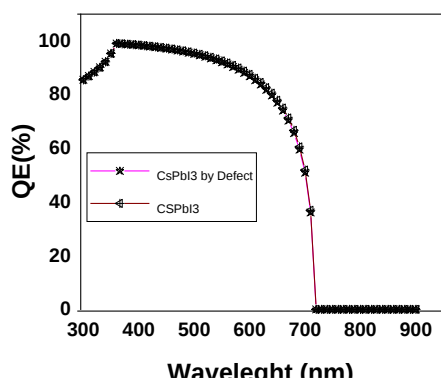
HTL/Au است (شکل ۱). پارامترهای مورد نیاز شبیه‌سازی شامل انرژی شکاف نواری ( $E_g$ )، ضریب الکترون خواهی ( $\chi$ )، ضریب گذردهی ( $\epsilon_r$ )، تحرک الکترون ( $\mu_n$ ) و حفره ( $\mu_p$ )، چگالی حامل‌های نوار رسانش ( $N_C$ ) و نوار ظرفیت ( $N_V$ )، چگالی حامل‌های دهنده ( $N_A$ ) و پذیرنده ( $N_D$ ) و چگالی نقص‌ها ( $N_t$ ) است. سرعت گرمایی برای الکترون و حفره  $10^7 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  در نظر گرفته شده. به منظور در نظر گرفتن نقص‌های بازترکیبی سطحی از دو لایه مجازی  $\text{IDL}^1$  و  $\text{IDL}^2$  به ترتیب بین  $\text{HTL}/\text{perovskite}$  و  $\text{perovskite}/\text{ETL}$  استفاده شده. خصوصیات فیزیکی این دو لایه به جز چگالی نقص‌ها مشابه با لایه جاذب است. توزیع نقص‌های ذاتی به صورت گاوسی، انرژی مشخصه  $0.1 \text{ eV}$ ، در حالت mid-gap، چگالی الکترون‌های گیرافتاده در سطح مقطع  $2 \times 10^{-14} \text{ cm}^{-2}$  و تابع کار  $\text{FTO}$  و  $\text{Au}$  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

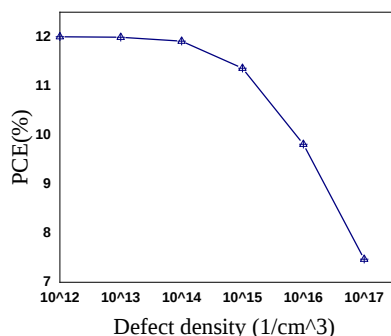
## نتایج و بحث

بازدهی کوانتومی این ساختار (شکل ۳) 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 تقریباً بدون تغییر است.



شکل ۳: نمودار بازده کوانتومی  $\text{CsPbI}_3$  با نقص‌ها و بدون حضور آن‌ها

در مرحله بعد تغییرات بازدهی با افزایش چگالی نقص‌ها لایه جاذب  $\text{CsPbI}_3$  بررسی شد، و مشخص شد با افزایش چگالی نقص‌های بازدهی کاهش می‌یابد، که این می‌تواند به دلیل افزایش بازترکیب حامل‌های به وجود آمده با نقص‌های در نظرگرفته شده باشد. نمودار تغییرات بازدهی بر حسب تغییرات چگالی نقص‌ها در (شکل ۴) نشان داده شده است.

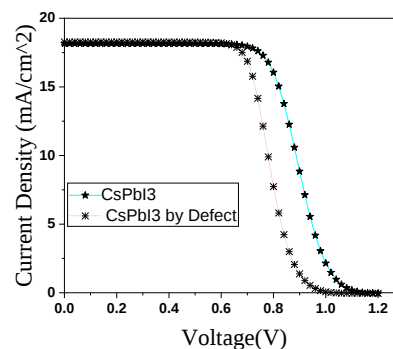


شکل ۴: تاثیر چگالی نقص‌های لایه جاذب بر بازدهی سلول

نمودار جریان-ولتاژ ساختار این سلول با حضور نقص‌ها و بدون حضور آن‌ها طبق پارامترهای (جدول ۱) با استفاده از شبیه‌سازی بدست آمده است. با توجه به مقایسه این دو ساختار بازدهی سلول بدون حضور نقص‌ها  $13/15\%$ ، جریان اتصال کوتاه  $18/15$  میلی‌آمپر بر سانتی متر مربع، ولتاژ مدار باز  $1/15$  ولت و فاکتور پرشدگی آن  $62/85\%$  بدست آمد در صورتی که همین ساختار با حضور نقص‌ها دارای بازدهی  $11/91\%$ ، جریان اتصال کوتاه  $18/27$  میلی‌آمپر بر سانتی متر مربع، ولتاژ مدار باز  $1/02$  ولت و فاکتور پرشدگی  $63/39\%$  است، که کاهش بازدهی را می‌توان به کاهش ولتاژ مدار باز سلول با حضور نقص‌ها ارتباط داد که این نقص‌ها باعث بازترکیب شدن حامل‌ها و در ادامه به وجود آمدن 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 <sup>2</sup> ) | FF (%) | PCE (%) |
|----------------------------|--------------|--------------------------------|--------|---------|
| $\text{CsPbI}_3$           | ۱/۱۵         | ۱۸/۱۵                          | ۶۲/۸۵  | ۱۳/۱۵   |
| $\text{CsPbI}_3$ by defect | ۱/۰۲         | ۱۸/۲۷                          | ۶۳/۳۹  | ۱۱/۹۱   |



شکل ۲: نمودار جریان-ولتاژ  $\text{CsPbI}_3$  با نقص‌ها و بدون حضور آن‌ها.

## نتیجه گیری

در مطالعات باید تا حد امکان تلاش شود که شبیه سازی به حالت واقعی تر و آزمایشگاهی نزدیک شود. با توجه به شبیه سازی انجام شده با در نظر گرفتن نقص های احتمالی که از ترکیب شدن حامل ها 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 می توان نتیجه گرفت که حضور نقص ها تاثیر بیشتری بر ولتاژ مدار باز دارد و کاهش بازدهی ناشی از کاهش ولتاژ مدار باز می باشد. همچنین با افزایش چگالی نقص ها از ۱۰<sup>۱۲</sup> تا ۱۰<sup>۱۷</sup> بازدهی از ۱۲ درصد به ۷٫۴۷ درصد کاهش یافته است که این می تواند نتیجه بازترکیب شدن حامل ها با نقص های موجود باشد.

## مرجع ها

- [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. (۲۰۱۴). Organohalide lead perovskites for photovoltaic applications. *Energy & Environmental Science*, ۷(۸), ۲۴۴۸-۲۴۶۳”.
- [۴] “Beal, R. E., Slotcavage, D. J., Leijtens, T., Bowering, A. R., Belisle, R. A., Nguyen, W. H., ... & McGehee, M. D. (۲۰۱۶). Cesium lead halide perovskites with improved stability for tandem solar cells. *The journal of physical chemistry letters*, ۷(۵), ۷۴۶-۷۵۱”.
- [۵] “Burgelman, M., Nollet, P., & Degraeve, S. (۲۰۰۰). Modelling polycrystalline semiconductor solar cells. *Thin solid films*, ۳۶۱, ۵۲۷-۵۳۲”.
- [۶] “Minemoto, T., & Murata, M. (۲۰۱۴). Device modeling of perovskite solar cells based on structural similarity with thin film inorganic semiconductor solar cells. *Journal of applied physics*, ۱۱۶(۵), ۰۵۴۵۰۵”.
- [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), ۲۲۳۹-۲۲۴۴”.
- [۸] “Deng, Q., Li, Y., Chen, L., Wang, S., Wang, G., Sheng, Y., & Shao, G. (۲۰۱۶). The effects of electron and hole transport layer with the electrode work function on perovskite solar cells. *Modern Physics Letters B*, ۳۰(۲۷), ۱۶۵۰۳۴۱”.