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

اثرات شکاف باند خطی تراکم نقص‌الکترون و حفره در لایه جاذب سلول خورشیدی پروسکایت با لایه جاذب $K_{0.05}Rb_{0.00}(FA_{0.80}MA_{0.15})_{0.95}Pb(I_{0.85}Br_{0.15})_3$

امین رضا مهندس، محمود مرادی وحمید نادگران

گروه فیزیک، پردیس علوم، دانشگاه شیراز، ۸۴۷۹۵-۷۱۹۴۶ شیراز، ایران

a.mohandes@shirazu.ac.ir, mmoradi@shirazu.ac.ir, nadgaran@shirazu.ac.ir

چکیده - برای اولین بار، لایه جاذب جدیدی از پرو سکایت کاتیون چهارگانه تحت عنوان KRbFAMA معرفی شده ا ست. در این تحقیق، منحنی‌های شبیه‌سازی چگالی جریان-ولتاژ (J-V) و بازده کوانتومی خارجی (EQE) به صورت عددی توسط دستگاه شبیه ساز SCAPS انجام گرفت. کارایی سلول خور شیدی پرو سکایتی با در نظر گرفتن اثرات تراکم نقص الکترون و حفره در لایه جاذب افزایش یافت. پس از بهینه‌سازی پارامترهای ذکر شده، بازده سلول به ۲۳,۹۱٪ رسید.

کلید واژه- بازده کوانتومی خارجی، پروسکایت، تراکم نقص الکترون، تراکم نقص حفره، چگالی جریان-ولتاژ

Effects of linear band gap on electron and hole defect density on the perovskite solar cell with the absorption layer $K_{0.05}Rb_{0.00}(FA_{0.80}MA_{0.15})_{0.95}Pb(I_{0.85}Br_{0.15})_3$

Aminreza Mohandes, Mahmood Moradi, and Hamid Nadgaran

Department of Physics, College of Science, Shiraz University, ۷۱۹۴۶-۸۴۷۹۵ Shiraz, Iran

Aminreza Mohandes (a.mohandes@shirazu.ac.ir), Mahmood Moradi (mmoradi@shirazu.ac.ir), and Hamid Nadgaran (nadgaran@shirazu.ac.ir)

Abstract- For the first time, a novel of quadruple-cation perovskite absorber, KRbFAMA, is introduced. The simulation of current density-voltage (J-V) and external quantum efficiency (EQE) curves of perovskite solar cell (PSC) were numerically simulated by SCAPS. The efficiency of the PSC was enhanced by considering the effects of electron and hole defect densities in the layer of absorber. After optimizing the mentioned parameters, efficiency is reached to ۲۳,۹۱٪.

Keywords: Current density-Voltage, Electron defect density, External quantum efficiency, Hole defect density, and Perovskite

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

مقدمه

پروسکایت‌هایی که از طریق روش‌های محلول با هزینه کم، انرژی اتصال کم اکسیتون از جمله خصوصیات اپتوالکترونیکی قابل توجه، انرژی اورباخ کوچک و جذب شدید تهیه می‌شوند، دارای ساختار ABX_3 هستند، که در آن A^+ یک کاتیون آلی یا غیر آلی یک ظرفیتی است، از جمله متیل آمونیم (MA^+)، فرمامیدینیوم (FA^+) و سزیم (Cs^+)، کاتیون‌های فلزی B^{2+} مثلا سرب (Pb^{2+}) یا قلع (Sn^{2+}) و X^- یک آنیون‌هالوژنی تک ظرفیتی است، به عنوان مثال کلرید (Cl^-)، برومید (Br^-) و یدید (I^-) [۱]. اخیراً بازده تبدیل نیرو (PCE) به بیش از ۲۵ درصد رسیده است [۲].

در این مطالعه، در ابتدا شبیه‌سازی مشخصه J-V و طیف EQE با لایه جاذب، $K_{0.05}Rb_{0.05}(FA_{0.85}MA_{0.15})_{0.95}Pb(I_{0.85}Br_{0.15})_3$، با استفاده از SCAPS بدست می آید. در لایه جاذب با بهینه‌سازی اثرات تراکم نقص الکترون و حفره بازده سلول خورشیدی پروسکایتی افزایش یافت.

روش شناسی

ازشبیه‌ساز ظرفیت خورشیدی (SCAPS) در این تحقیق استفاده شده است. نرم‌افزار SCAPS یک برنامه شبیه‌سازی یک بعدی است که مشخصات JV و پاسخ طیفی (EQE) با استفاده از سه معادله اساسی نیمه‌هادی محاسبه می‌کند: معادله پواسون و معادلات پیوستگی برای الکترون و حفره. به عنوان مثال در معادلات زیر، تحت شرایط حالت پایدار نشان داده شده است.

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} = \frac{\partial p_n}{\partial t} = 0$$

$$\frac{d}{dx}\left(-\epsilon(x)\frac{d\psi}{dx}\right) = q[p(x) - n(x) + N_D^+(x) - (N_A^-(x) + p_t(x) - n_t(x)] \quad (۱)$$

$$\frac{dn_p}{dt} = G_n - \frac{n_p - n_{p0}}{\tau_n} + n_p\,\mu_n\,\frac{d\xi}{dx} + \mu_n\,\xi\,\frac{dn_p}{dx} + D_n\frac{d^2 n_p}{dx^2} \quad (۲)$$

$$\frac{dp_n}{dt} = G_p - \frac{p_n - p_{n.}}{\tau_p} + p_n\,\mu_p\,\frac{d\xi}{dx} + \mu_p\,\xi\,\frac{dp_n}{dx} +) D_p\,\frac{d^2 p_n}{dx^2} \quad (۳)$$

جایی که G_n، G_p میزان تولید الکترون و حفره را نشان می‌دهد، μ_n و μ_p تحرک الکترون و حفره است، ξ میدان الکتریکی است، D ضریب پخش است، τ_{np} طول عمر الکترون‌ها و حفره‌ها است، ϵ ضریب دی الکتریک است، ψ پتانسیل الکترواستاتیک است، q بار الکترون است، n_t و p_t غلظت الکترون‌ها و حفره‌های به دام افتاده است، N_D و N_A غلظت دهنده و گیرنده کم عمق هستند.

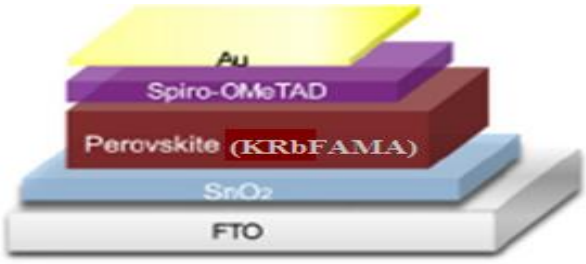
ساختار دستگاه و پارامترهای شبیه سازی

ساختارسلول خورشیدی پروسکایتی در شبیه‌سازی شامل اکسید قلع آلائیده شده با فلورین (FTO)/لایه مسدود کننده/لایه جاذب پروسکایت/لایه انتقال دهنده حفره (HTL)/طلا می‌باشد، که در شکل ۱ نشان داده شده است. پارامترهای ورودی در جدول ۱ بطورمختصر آورده شده است. هر لایه در شبیه سازی، جایی که پارامترهای فیزیکی لایه مسدود کننده، پروسکایت (لایه جاذب) و لایه انتقال دهنده حفره (HTL)، همانطور که در شکل ۱ نشان داده شده است، به ترتیب توسط SnO_2، $K_{0.05}Rb_{0.05}(FA_{0.85}MA_{0.15})_{0.95}Pb(I_{0.85}Br_{0.15})_3$ و-۲،۲،۷،۷ tetrakis (N,N-p-dimethoxy-phenylamino)-۹،۹′ - spirobifluorene (Spiro-OMeTAD) ساخته شده است. در جدول ۱، N_A و N_D چگالی کم عمق گیرنده و دهنده است، ϵ_r ضریب دی الکتریک است، χ الکترون خواهی است، μ_n و μ_p تحرک الکترون و حفره است و N_t تراکم نقص در قسمت بالک است. نوع حامل لایه جاذب پروسکایت، با

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

عنوان KRbFAMA، از نوع n است و تراکم نقص الکترون و حفره در پروسکایت به ترتیب $۷,۸۷ \times ۱۰^{۱۵}$ و $cm^{-۳}$ $۳,۹۴ \times ۱۰^{۱۵}$ در نظر گرفته می‌شود [۳]. تراکم موثر حالت‌های باند نوارهای هدایت و ظرفیت به ترتیب روی $۲,۲ \times ۱۰^{۱۸}$ و $cm^{-۳}$ $۱,۸ \times ۱۰^{۱۹}$ تنظیم شده‌اند [۷].

بو و همکاران گزارش کرده اند که برای RbFAMA و CsFAMA، دارای یک شکاف باند هستند که به طور خطی بین ۱,۵۷ تا ۱,۶۰ eV تغییر می کند [۴]. بنابراین، ما انتظار داریم که مقدار مشابهی برای KRbFAMA و KCsFAMA وجود داشته باشد. همچنین، بو و همکاران گزارش کردند که از روی منحنی TRPL برای طول عمر حامل RbFAMA و CsFAMA برای طول عمر حامل الکترون و حفره تقریباً یکسان است. بنابراین، ما انتظار داریم که مقدار یکسان برای KCsFAMA و KRbFAMA برابر ۲۴۰ ns باشد و برای KRbFAMA که منجر به طول انتشار حامل L_n و L_p و به ترتیب ۵,۷ و ۵,۷ میکرومتر می‌شود [۴]. علاوه بر این، الکترون خواهی برای KCsFAMA، ۳,۹ eV است و در جدول تناوبی، می‌دانیم که روبیدیم بالاتر از سزیم است و همچنین می دانیم که الکترون خواهی روبیدیوم نسبت به سزیم باید بیشتر باشد [۵]. بنابراین، انتظار داریم که الکترون خواهی برای KRbFAMA تقریباً ۳,۹۳ eV باشد. بعلاوه، از آنجا که هدایت الکتریکی روبیدیوم بالاتر از سزیم است و بعلاوه رابطه مستقیمی بین تحرک و هدایت الکتریکی وجود دارد، بنابراین انتظار می‌رود که تحرک در KRbFAMA بیشتر از KCsFAMA باشد (برای KCsFAMA، ۵۰ $cm^۲/Vs$ و برای KRbFAMA، $cm^۲/Vs$ ۵۲ است، هم برای تحرک الکترون و هم برای حفره) [۶].



شکل ۱: ساختار دستگاه سلول خورشیدی پروسکایتی، KRbFAMA به عنوان یک لایه جاذب

جدول ۱: پارامترهای اساسی برای شبیه سازی

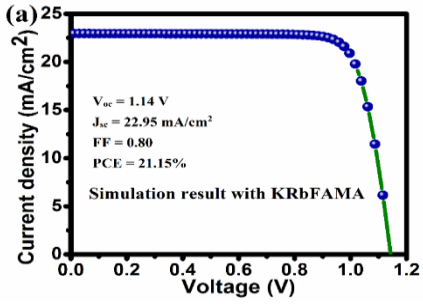
Parameter	SnO_2	Perovskite	Spiro-OMeTAD
Thickness (nm)	۵۰	۷۰۰	۲۰۰
N_A (cm^{-3})	-	-	۱×۱۰^{۱۸}
N_D(cm^{-3})	۱×۱۰^{۱۹}	۲×۱۰^{۱۶}	-
E_g(eV)	۴,۰۴	۱,۵۷-۱,۶۰	۳,۰
$\chi(eV)$	۴,۰۹	۳,۹۳	۲,۴۵
ϵ_r	۹	۳۲	۳,۰
μ_n ($cm^۲/_{V,S}$)	۲۴۰	۵۲	۲×۱۰^{-۴}
μ_p ($cm^۲/_{V,S}$)	۲۵	۵۲	۲×۱۰^{-۴}
N_t (cm^{-3})	۱×۱۰^{۱۸}	$۷,۸۷ \times ۱۰^{۱۵}$ $۳,۹۴ \times ۱۰^{۱۵}$	۱×۱۰^{۱۵}

جدول ۲: چگالی نقص رابط

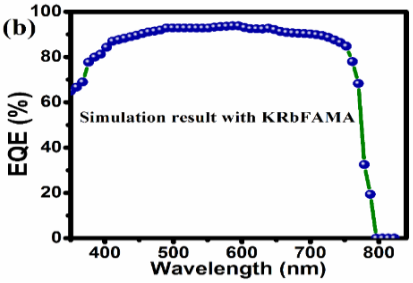
Parameters	absorber/HTL
Defect type	Neutral
Capture cross section for electron and holes ($cm^۲$)	$۱,۰ \times ۱۰^{-۱۴}$
Energetic distribution	Single
Reference for defect energy level E_t	Above the highest Ev
Energy with respect to Reference (eV)	۰,۳۵
Total density ($cm^{-۲}$)	$۴,۵ \times ۱۰^{۸}$

نتیجه‌گیری و بحث در مورد آن

ما در ابتدا منحنی EQE و J-V مربوط به سلول خورشیدی پروسکایتی را با لایه جاذب KRbFAMA به صورت عددی محاسبه می‌کنیم، شبیه‌سازی با در نظر گرفتن جداول ۱ و ۲ انجام می‌شود.



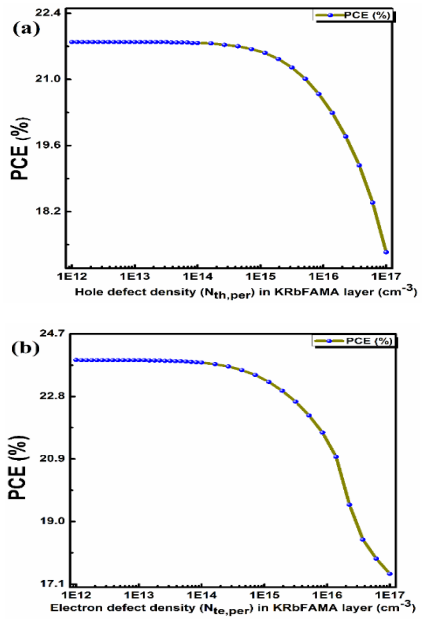
[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-06]



شکل ۲: الف) شبیه‌سازی منحنی چگالی جریان-ولتاژ و ب) شبیه‌سازی منحنی بازده کوانتوم خارجی KRbFAMA زمانیکه انرژی شکاف باند بین ۱٫۵۷ و ۱٫۶۰ الکترون ولت به صورت خطی در حال تغییر است [۸]

تأثیر شکاف باند خطی KRbFAMA بر تراکم نقص الکترون و حفره در لایه جاذب پروسکایت

PCE حداکثر مقدار $۳٫۱۶۲ \times ۱۰^{۱۳}\ cm^{-۳}$ با بازده ۲۱٫۷۹٪، ولتاژ مدار باز $۱٫۱۶ V$، جریان اتصال کوتاه $۲۲٫۹۷ \frac{mA}{cm^۲}$ و فاکتور پر شدگی ۰٫۸۱ (۸۱٫۴۱٪) می‌باشد شکل ۳ ب، PCE در برابر تراکم نقص الکترون در لایه پروسکایت را نشان می‌دهد در از $۱٫۰ \times ۱۰^{۱۲}\ cm^{-۳}$ تا $۱٫۰ \times ۱۰^{۱۷}$ تغییر می‌کند. PCE در $۱٫۰ \times ۱۰^{۱۲}\ cm^{-۳}$ بزرگ شده است با راندمان ۲۳٫۹۱٪، ولتاژ مدار باز $۱٫۲۴ V$، جریان اتصال کوتاه $۲۲٫۹۸ \frac{mA}{cm^۲}$ و فاکتور پر شدگی ۰٫۸۳ (۸۳٫۵۰٪) می‌باشد.



شکل ۳: PCE الف) به عنوان تابعی از تراکم نقص حفره و ب) تراکم نقص الکترون در پروسکایت که از $۱٫۰ \times ۱۰^{۱۲}$ تا $۱٫۰ \times ۱۰^{۱۷}\ cm^{-۳}$ در حال تغییر است

مرجع‌ها

[۱] Q. Lin, A. Armin, R.C.R. Nagiri, P.L. Burn, P. Meredith, "Electro-optics of perovskite solar cells", Nat. Photonics, Vol. ۹, No. ۲, pp. ۱۰۶-۱۱۲, ۲۰۱۵.
[۲] O.J. Usiobo, H. Kanda, P. Gratia, I. Zimmermann, T. Wirtz, M.K. Nazeeruddin, J.-N. Audinot, "Nanoscale Mass-Spectrometry Imaging of Grain Boundaries in Perovskite Semiconductors", J. Phys. Chem. C, Vol. ۱۲۴, □□. ۴۲, □□. ۲۳۲۳۰□۲۳۲۳۶, ۲۰۲۰.
[۳] T. Bu, X. Liu, Y. Zhou, J. Yi, X. Huang, L. Luo, J. Xiao, Z. Ku, Y. Peng, F. Huang, Y.B. Cheng, J. Zhong, "A novel quadruple-cation absorber for universal hysteresis elimination for high efficiency and stable perovskite solar cells", Energy Environ. Sci., Vol. ۱۰, No. ۱۲, pp. ۲۵۰۹□۲۵۱۵, ۲۰۱۷.
[۴] T. Bu, X. Liu, J. Li, W. Li, W. Huang, Z. Ku, Y. Peng, F. Huang, Y.B. Cheng, J. Zhong, "Sub-sized monovalent alkaline cations enhanced electrical stability for over ۱۷٪ hysteresis-free planar perovskite solar mini-module", Electrochimica Acta, Vol. ۳۰۶, pp. ۶۳۵-۶۴۲, ۲۰۱۹.
[۵] R. Duraisamy, P. Liebing, N. Harmgarth, V. Lorenz, L. Hilfert, M. Feneberg, R. Goldhahn, F. Engelhardt, F.T. Edelmann, "Rubidium and Cesium Enediamide Complexes Derived from Bulky ۱, ۴-Diazadienes", ACS omega, Vol. ۵, No. ۳۰, pp. ۱۹۰۶۱-۱۹۰۶۹, ۲۰۲۰.
[۶] M. Huma, M. Rashid, Q. Mahmood, E. Algrafy, N.A. Kattan, A. Laref, A.S. Bhatti, "Physical properties of lead-free double perovskites $A_۲SnI_۶$ (A= Cs, Rb) using ab-initio calculations for solar cell applications", Mater. Sci. Semicond. Process, Vol. ۱۲۱, ۱۰۵۳۱۳, ۲۰۲۱.
[۷] T. Minemoto, Y. Kawano, T. Nishimura, J. Chantan, "Numerical reproduction of a perovskite solar cell by device simulation considering band gap grading" Opt. Mater., Vol. ۹۲, pp. ۶۰–۶۶, ۲۰۱۹.
[۸] M. Zhang, J. Bing, Y. Cho, Y. Li, J. Zheng, C.F.J. Lau, M.A. Green, S. Huang, A.W. Ho-Baillie, "Synergistic effect of potassium and iodine from potassium triiodide complex additive on gas-quenched perovskite solar cells", Nano Energy, Vol. ۶۳, p.۱۰۳۸۵۳, ۲۰۱۹.

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