بیست و هشتمین کنفرانس اپتیک و
فوتونیک ایران و چهاردهمین کنفرانس
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،
دانشگاه شهید چمران اهواز،
خوزستان، ایران.
12-14 بهمن 1400

بررسی اثر ضخامت و چگالی نقص در لایه جاذب بر عملکرد سلول خورشیدی مبتنی بر پروسکایت

کوثر جعفری زاده، زهرا حسینی

zahrahosseini@shirazu.ac.ir

چکیده – گاف انرژی نسبتاً بزرگ پروسکایت های مبتنی بر سرب مانع اصلی دستیابی به بازده بالا در سلول‌های خورشیدی مبتنی بر پروسکایت است. جایگزینی سرب با قلع منجر به ایجاد گاف انرژی کوچکتر در پروسکایت‌های بدون سرب می شود. در اینجا، ما کاربرد ماده پروسکایت مبتنی بر قلع-سرب، $(FASnI_3)_{0.6}(MAPbI_3)_{0.4}$ با گاف انرژی 1/24 eV را به عنوان ماده جاذب در سلول خورشیدی با ساختار معکوس بررسی کرده‌ایم. شبیه‌سازی سلول با استفاده از نرم‌افزار شبیه‌سازی SCAPS انجام شده است. همچنین، تأثیر پارامترهای مختلف مانند کیفیت و ضخامت لایه جاذب، برعملکرد سلول خورشیدی مبتنی بر $(FASnI_3)_{0.6}(MAPbI_3)_{0.4}$ مورد بررسی قرار گرفته است.

کلید واژه- بازده تبدیل توان، پروسکایت، چگالی نقص، سلول خورشیدی، ولتاژ مدار باز

Investigation of The Effect of Thickness and Defect Density in The Absorber Layer on Perovskite-based Solar Cell Performance

Kosar Jafarizade, Zahra Hosseini

zahrahosseini@shirazu.ac.ir

Abstract- The relatively large bandgaps of the methylammonium lead halide perovskites are the major obstacle to achieving efficiency in the lead-based perovskite solar cells. Substituting lead with tin leads to smaller bandgaps for lead-free perovskite materials. Although lead-free perovskite solar cells show broader spectral response extended to near infrared region, they usually have relatively low responsivity. Here, we investigated the application of a mixed tin-lead perovskite material, ($(FASnI_3)_{0.6}(MAPbI_3)_{0.4}$), with small bandgap of 1.24 eV as the absorber material in a perovskite solar cell with inverted structure. The device simulation is performed by using SCAPS-1D simulation software. The effect of different parameters such as absorber layer quality and thickness on the performance of the $(FASnI_3)_{0.6}(MAPbI_3)_{0.4}$ solar cell is studied.

Keywords: defect density, PCE, perovskite, solar cell, V_{OC}

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

مقدمه

سلول‌های خورشیدی پروسکایت به دلیل بازده بسیار بالا، هزینه مواد اندک و فرایند ساخت آسان مورد توجه بسیاری قرار گرفته است (1). این سلول‌های خورشیدی دارای خواص نوری منحصربفردی از جمله: ضریب جذب بالا، تحرک حامل بالا و طول نفوذ طولانی هستند (2,3) . بازده تبدیل توان سلول‌های خورشیدی پروسکایت با استفاده از مهندسی لایه انتقال دهنده حامل‌ها، بهینه‌سازی ترکیب جاذب و روش‌های لایه نشانی در طی یک دهه اخیر از 3/8٪ به 25/2٪ رسیده است (4,5) .

بطورکلی پروسکایت های مبتنی بر سرب ($APbX_3$) که A در آن کاتیون‌های تک ظرفیتی مانندMethylammonium (MA) و Formamidinium (FA) و X آنیون‌هایی مانند کلر، بروم و ید می‌باشد، دارای لبه‌ی جذبی تا محدوده‌ی مرئی هستند. در حالیکه سلول‌های خورشیدی مبتنی بر قلع لبه‌ی جذب گسترده‌ای تا محدوده‌ی نزدیک مادون قرمز دارند. بنابراین با افزایش نسبت قلع در ترکیبات پروسکایت میتوان لبه جذب آن را تا طول موج‌های نزدیک به مادون قرمز گسترش داد.

همچنین، سمیت زیست محیطی سرب ممکن است کاربردهای تجاری سازی سلول‌های خورشیدی پروسکایت را محدود کند. یافتن راه‌هایی برای سلول‌های خورشیدی

پروسکایت بدون سرب بدون به خطر انداختن عملکرد سلول به ویژه برای پروسکایت‌های فتوولتائیک بسیار مهم است.

در سال 2017، Zhao و همکارانش سلول خورشیدی با گاف انرژی برابر با 1/25 الکترون ولت با ترکیب قلع و سرب، با بازده تبدیل توانی برابر با 17/6٪ گزارش کرده‌ان (6). در این گزارش ولتاژ مدار باز بالاتر از 0/85 V است. همچنین این سلول خورشیدی دارای بازده کوانتومی بالاتر از 70٪ در محدوده‌ی مادون قرمز نزدیک است.

در این مطالعه، شبیه سازی سلول خورشیدی مبتنی بر ترکیب پروسکایت $(FASnI_3)_{0.6}(MAPbI_3)_{0.4}$ انجام شده و اثر پارامترهایی چون ضخامت لایه پروسکایت و چگالی نقص در این لایه بر عملکرد سلول خورشیدی مورد بررسی قرار گرفته است. شبیه سازی توسط نرم افزار SCAPS -1D انجام شده که برنامه شبیه‌سازی سلول‌های خورشیدی یک بعدی است که در بخش الکترونیک و سیستم های اطلاعاتی دانشگاه Gent بلژیک توسعه یافته است (7).

ساختار سلول خورشیدی مورد بررسی در این پژوهش به صورت ITO/PEDOT:PSS/$(FASnI_3)_{0.6}(MAPbI_3)_{0.4}$ /C60/Ag می‌باشد. خلاصه پارامترهای ورودی برای هر لایه شبیه‌سازی شده مطابق مراجع است (8-10). همچنین، تمام شبیه سازی‌ها تحت نور AM 1.5G انجام شده است

نتایج و تحلیل پژوهش

بررسی اثر چگالی نقص و ضخامت بر عملکرد سلول خورشیدی

در سلول خورشیدی، حامل‌های بار در لایه جاذب تولید می‌شوند. فرایند انتشار در توده لایه جاذب به دلیل گرادیان غلظت اتفاق می‌افتد. سپس در دو طرف لایه جاذب یعنی در HTM / جاذب و جاذب / ETM، حامل‌های بار از یکدیگر جدا شده و در جهات مختلف تحت میدان الکتریکی حرکت می‌کنند. بنابراین کیفیت و ضخامت لایه جاذب، پارامترهای محدود کننده عملکرد سلول خورشیدی هستند. کیفیت لایه جاذب در واقع تعیین کننده طول نفوذ الکترون (L_n) و طول نفوذ حفره (L_p) می‌باشد. طول نفوذ حامل‌ها با فرمول زیر تعریف می‌شود.

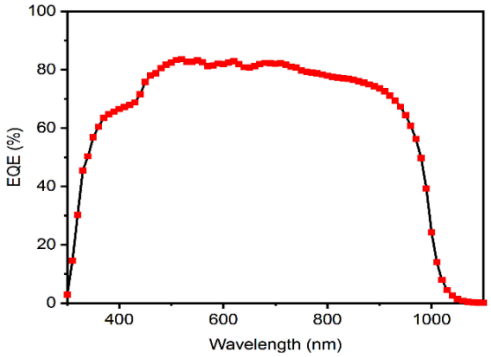
$$L = \sqrt{D \times \tau} \qquad (1$$

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

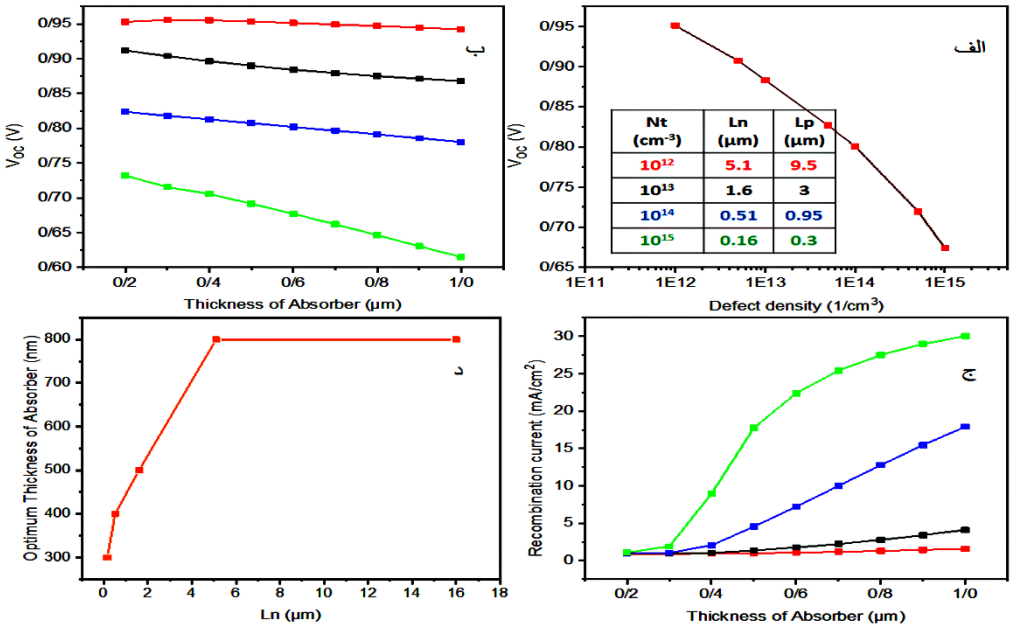
که در آن D و τ به ترتیب ضریب انتشار و طول عمر حامل بار هستند.

تغییر ضخامت لایه جاذب بطور همزمان بر میزان جذب نور و بر میزان جمع‌آوری حامل‌های بار اثر می‌گذارد. اگر ضخامت لایه جاذب کمتر باشد میزان جذب نور کاهش می‌یابد و در نهایت بازده کاهش می‌یابد. اگر ضخامت لایه جاذب زیاد باشد، بسته به میزان چگالی نقص و طول نفوذ حامل‌های بار در این لایه، ممکن است حامل‌های بار نتوانند به سمت لایه جمع‌آوری بار حرکت کنند. بنابراین برآورد ضخامت بهینه لایه جاذب با توجه به میزان چگالی نقص در این لایه، برای دستیابی به بازده بالا ضروری است. در این تحقیق میزان تغییرات پارامترهای فوتوولتاییک سلول خورشیدی پروسکایت مبتنی بر ترکیب $(FASnI_3)_{0.6}(MAPbI_3)_{0.4}$، با تغییر ضخامت لایه جاذب به ازای میزان چگالی نقص مختلف در این لایه مورد بررسی قرار گرفته است. همانگونه که در شکل 1 مشاهده می‌شود با افزایش میزان چگالی نقص در لایه جاذب سلول خورشیدی ولتاژ مدار باز آن کاهش می‌یابد.

نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهند بالاترین میزان ولتاژ مدار باز زمانی به دست می‌آید که چگالی نقص در لایه جاذب برابر 10^{12} $(1/cm^3)$ و ضخامت لایه جاذب برابر با nm 800 باشد. در این حالت بازده سلول خورشیدی پروسکایت برابر 21.52٪ خواهد بود که با بهینه کردن پارامترهای سلول خورشیدی پروسکایت مبتنی بر قلع-سرب امکان دستیابی به بازده بالا فراهم می باشد. همچنین، نمودار بازده کوانتومی این سلول خورشیدی نشان می دهد که بازه پهنی از طول موج ها از ناحیه فرابنفش تا فروسرخ با بازده کوانتومی بالا 70٪ در این سلول جذب شده است (شکل2).



شکل2: نمودار بازده کوانتومی سلول خورشیدی مبتنی بر $(FASnI_3)_{0.6}(MAPbI_3)_{0.4}$



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

شکل 1: الف) نمودار V_{OC} به عنوان تابعی از چگالی نقص ب) نمودار تغییر V_{OC} با تغییرات ضخامت ج) جریان بازترکیبی در برابر ضخامت د) تغییرات ضخامت بهینه لایه جاذب با L_n

نتیجه گیری

در این مطالعه، ما پتانسیل بالای مواد پروسکایت قلع-سرب مخلوط را به عنوان ماده جاذب در سول خورشیدی باند پهن نشان دادیم. شبیه سازی سلول خورشیدی با ساختار $ITO/PEDOT:PSS/(FASnI_3)_{0.6}(MAPbI_3)_{0.4}/C_{60}/Ag$ انجام شده است که تاثیر پارامترهایی چون ضخامت و چگالی نقص را نشان داده ایم. رویکرد شبیه‌سازی مبتنی بر تنوع پارامترهای سلول است تا تأثیر آن بر عملکرد سلول خورشیدی را دیده و بینش عمیقی در مورد دلیل تأثیر آن به دست آورد. نتایج شبیه سازی نشان می دهد که ضخامت بهینه لایه جاذب به شدت تحت تأثیر کیفیت این لایه است. در مورد کیفیت لایه جاذب، لایه‌های جاذب ضخیم‌تر از 500 نانومتر با چگالی نقص (10^{12} $(1/cm^3)$ را می‌توان در $(FASnI_3)_{0.6}(MAPbI_3)_{0.4}$ استفاده کرد تا جذب کامل نور فرودی را برآورده کند.

مرجع‌ها

[1] N.S. Lewis, Science (80-.). 315(5813) (2007) 798–801. 10.1126/science.1137014.

[2] C. Huo,, B. Cai,, Z. Yuan,, B. Ma,, H. Zeng, Small Methods 1(3) (2017) 1–13. 10.1002/smtd.201600018.

[3] A. Fakharuddin,, F. De Rossi,, T.M. Watson,, L. Schmidt-Mende,, R. Jose, APL Mater. 4(9) (2016). 10.1063/1.4962143.

[4] A. Kojima,, K. Teshima,, Y. Shirai,, T. Miyasaka, J. Am. Chem. Soc. 131(17) (2009) 6050–1. 10.1021/ja809598r.

[5] J. Burschka,, N. Pellet,, S.J. Moon,, R. Humphry-Baker,, P. Gao,, M.K. Nazeeruddin,, M. Grätzel, Nature 499(7458) (2013) 316–9. 10.1038/nature12340.

[6] D. Zhao,, Y. Yu,, C. Wang,, W. Liao,, N. Shrestha,, C.R. Grice,, A.J. Cimaroli,, L. Guan,, R.J. Ellingson,, K. Zhu,, X. Zhao,, R.G. Xiong,, Y. Yan, Nat. Energy 2(4) (2017) 1–7. 10.1038/nenergy.2017.18.

[7] A. Niemegeers,, M. Burgelman,, K. Decock, SCAPS Man. (december) (2016).

[8] A. Wang,, X. Gan,, J. Yu, Opt. Mater. (Amst). 112(November 2020) (2021) 110751. 10.1016/j.optmat.2020.110751.

[9] T. Jiang,, Z. Chen,, X. Chen,, T. Liu,, X. Chen,, W.E.I. Sha,, H. Zhu,, Y. Yang, Sol. RRL 4(3) (2020) 1–7. 10.1002/solr.201900467.

[10] N. Lakhdar,, A. Hima, Opt. Mater. (Amst). 99(November) (2020) 109517. 10.1016/j.optmat.2019.109517.

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