



بررسی تأثیر لایه‌های مختلف انتقال حفره بر روی راندمان سلول خورشیدی پرووسکایت بدون سرب مبتنی بر نانومیله اکسید روی

حامد نعمتیان^{۱*}، غلامرضا بنی صدر^۲

۱- گروه الکترونیک، دانشکده مهندسی برق، دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام خمینی (ره) شهرری، تهران، ایران.

h.nematian.n@gmail.com

۲- گروه الکترونیک، دانشکده مهندسی برق، دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام خمینی (ره) شهرری، تهران، ایران.

rbanisadr@yahoo.com

خلاصه

در این مقاله تأثیر لایه‌های مختلف Cu_2O ، CuSCN و spiro-OMeTAD به عنوان لایه انتقال حفره (HTM) و همچنین اثر تغییرات ضخامت لایه جاذب بر روی کارایی سلول‌های خورشیدی مبتنی بر تری یدید قلع متیل آمونیوم ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$) با استفاده از نرم‌افزار SCAPS-1D مورد بررسی قرار گرفته است. در ساختارهای مورد نظر، آرایه نانومیله اکسید روی (ZnO nr) به عنوان لایه انتقال الکترون (ETM) لحاظ شده است. نتایج حاصل از تجزیه و تحلیل و شبیه‌سازی حاکی از راندمان بالاتر ساختار $\text{ZnO(nr)/CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}$ نسبت به سایر ساختارهای بررسی شده می‌باشد.

کلمات کلیدی: سلول‌های خورشیدی پرووسکایت، تری یدید قلع متیل آمونیوم، نانومیله ZnO ، ضخامت لایه جاذب، لایه انتقال‌دهنده حفره، CuSCN ، Cu_2O ، spiro-OMeTAD .

۱. مقدمه

در سال‌های اخیر، سلول‌های خورشیدی پرووسکایت (PSC) به دلیل خواص الکترونیک نوری مناسب، راندمان تبدیل توان بالا (PCE) و هزینه ساخت پایین، توجه قابل ملاحظه‌ای از جامعه تحقیقاتی را به خود جلب کرده‌اند [۱]. به طور کلی، مواد پرووسکایت هالید ارگانولید که برای تولید سلول‌های خورشیدی پرووسکایت استفاده می‌شود، فاقد پایداری لایه جاذب طولانی مدت هستند و با توجه به دارا بودن سرب (Pb) خطرات بهداشتی و زیست محیطی را به همراه دارند [۲]. با استفاده از $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ به عنوان لایه جاذب، می‌توان از این خطرات پرهیز کرد [۳]. برای کاربردهای نوری، این ماده با شکاف باند مستقیم 1.30 eV ، در بین ترکیبات $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{BX}_3$ ($\text{B}=\text{Sn, Pb; X}=\text{Cl, Br, I}$) از مناسب‌ترین خواص نوری و محدوده جذب نور برخوردار است [۱][۴].

مطالعات اخیر نشان داده است که ZnO می‌تواند به عنوان جایگزینی مناسب برای TiO_2 در لایه ETM مورد استفاده قرار گیرد. این در حالی است که این جایگزینی تأثیر قابل توجهی بر روی عملکرد PSCها نخواهد داشت [۵][۶]. شکاف باند مستقیم 3.37 eV در ZnO منجر به تحرک بالای انتقال الکترون می‌شود. با استفاده از نانوساختارها در لایه ETM، می‌توان کارایی سلول خورشیدی را بهبود بخشید. برخلاف ZnO خالص، نانومیله ZnO دوپ شده با Au-/Al (nr) به دلیل

نوار رسانایی بزرگتر، منجر به تحرک سریع تر الکترون و افزایش چگالی جریان الکترون می شود [۷]. با بهینه سازی طول و قطر نانومیله های اکسید روی، عملکرد سلول خورشیدی فتوولتائیک را می توان تغییر داد. علاوه بر این، جایگزینی TiO_2 در لایه ETM با نانومیله های ZnO ، کاهش قابل ملاحظه هزینه را به دنبال خواهد داشت [۸][۹].

۲. ساختار پیشنهادی و نتایج شبیه سازی

در این مقاله ساختار نشان داده شده در شکل ۱ با استفاده از پارامترهای تعیین شده در جدول ۱ توسط برنامه SCAPS شبیه سازی شده است. در ادامه، به منظور دستیابی به راندمان بالاتر، استفاده از مواد $CH_3NH_3SnI_3$ و $CH_3NH_3PbI_3$ به عنوان لایه جاذب مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین، تأثیر استفاده از سه ماده Cu_2O ، Spiro-OMeTAD و $CuSCN$ در لایه انتقال دهنده حفره بر روی راندمان سلول مورد بررسی و مقایسه قرار گرفته است.



شکل ۱ - پیکربندی PSC تری یدید متیل آمونیوم مبتنی بر نانومیله ZnO ، (الف) با لایه جاذب $CH_3NH_3SnI_3$ ، (ب) با لایه جاذب $CH_3NH_3PbI_3$

جدول ۱ - پارامترهای تنظیم شده در شبیه ساز SCAPS-1D

مقادیر پارامترها در هر لایه	ZnO nr	$CH_3NH_3SnI_3$	$CH_3NH_3PbI_3$	Cu_2O	Spiro-OMeTAD	$CuSCN$
Thickness(nm)	500	450	350	350	350	350
Bandgap(ev)	3.47	1.30	1.50	2.17	3.2	3.4
Electron affinity(eV)	4.3	4.20	3.9	3.2	2.1	2.19
Dielectric permittivity	9	10	10	7.1	3	10
CB effective density of states($1/cm^3$)	$2E+18$	$1.0E+18$	$2.25E+18$	$2.50E+18$	$2.5E+18$	$2.5E+18$
VB effective density of states($1/cm^3$)	$1.8E+20$	$1.0E+18$	$1.0E+18$	$1.8E+19$	$1.8E+19$	$1.8E+19$
Electron thermal velocity(cm/s)	$1E+7$	$1E+7$	$1.0E+7$	$1E+7$	$1.0E+7$	$1E+7$
Hole thermal velocity(cm/s)	$1E+7$	$1E+7$	$1.0E+7$	$1E+7$	$1.0E+7$	$1E+7$
Electron mobility(cm^2/Vs)	$1.0E+2$	$1.6E+0$	$2.20E+0$	$2.0E+2$	$2.0E-4$	$2.0E-4$
Hole mobility(cm^2/Vs)	$2.5E+1$	$1.6E+0$	$2.20E+0$	$8.0E+2$	$2.0E-4$	$100E-2$
Sallow uniform acceptor density, $N_A(1/cm^3)$	0	$3.2E+15$	$1.0E+18$	$9.0E+21$	$1.0E+20$	$1E+18$
Sallow uniform donor density, $N_D(1/cm^3)$	$1E+19$	0	0	0	0	0
Defect type	-	Neutral	Neutral	Neutral	Neutral	Neutral
Capture cross section electrons(cm^3)	-	$1E-16$	$1E-13$	$1E-15$	$1E-15$	$1E-15$
Capture cross section holes(cm^3)	-	$1E-14$	$1E-13$	$1E-15$	$1E-15$	$1E-15$
Energetic distribution	-	Single	Single	Single	Single	Single
Reference for defect energy level E_t	-	Above E_V	Above E_V	Above E_V	Above E_V	Above E_V
Energy level with respect to reference(eV)	-	0.7	0.7	0.10	0.10	0.10
N_t total ($1/cm^3$) uniform	-	$4.5E+12$	$1E+12$	$1E+14$	$1.00E+14$	$1.00E+14$

۱.۲. محاسبه راندمان با به کارگیری $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ در لایه جاذب و HTM های مختلف

سلول های خورشیدی پروسکایت به دلیل راندمان تبدیل توان بالا و هزینه ساخت پایین از سوی مراکز تحقیقاتی مورد استقبال می باشند. به منظور بررسی تأثیر به کارگیری لایه های مختلف انتقال حفره بر روی راندمان سلول خورشیدی پروسکایت مبتنی بر نانومیله اکسید روی، سه ساختار ذکر شده در جدول ۲ مورد مقایسه قرار گرفته اند. نتایج شبیه سازی ها نشان می دهد سلول خورشیدی پروسکایت با استفاده از لایه جاذب $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ و با به کارگیری لایه انتقال دهنده حفره Cu_2O نسبت به Spiro-OMeTAD و CuSCN از راندمان بالاتری برخوردار می باشد. لازم به ذکر است بازده تبدیل توان سلول خورشیدی (PCE%) به سه پارامتر جریان اتصال کوتاه (I_{sc}) ضریب پرشوندگی (FF%) و ولتاژ مدار باز (V_{oc}) وابسته است. لذا، مقادیر محاسبه شده مربوط به هر ساختار نیز در جدول ۲ ارائه شده است.

جدول ۲- عملکرد PSC های مبتنی بر نانومیله ZnO حاوی سرب با لایه های مختلف HTM

ترکیب ساختار	V_{oc}	I_{sc}	FF%	PCE%
$\text{ZnO(nr)}/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3/\text{Cu}_2\text{O}$	1/2	24/51	61/62	18/26
$\text{ZnO(nr)}/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3/\text{CuSCN}$	0/82	25/65	83/95	17/90
$\text{ZnO(nr)}/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3/\text{Spiro-OMeTAD}$	0/84	25/56	82/58	17/82

۲.۲. محاسبه راندمان با به کارگیری $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ در لایه جاذب و HTM های مختلف

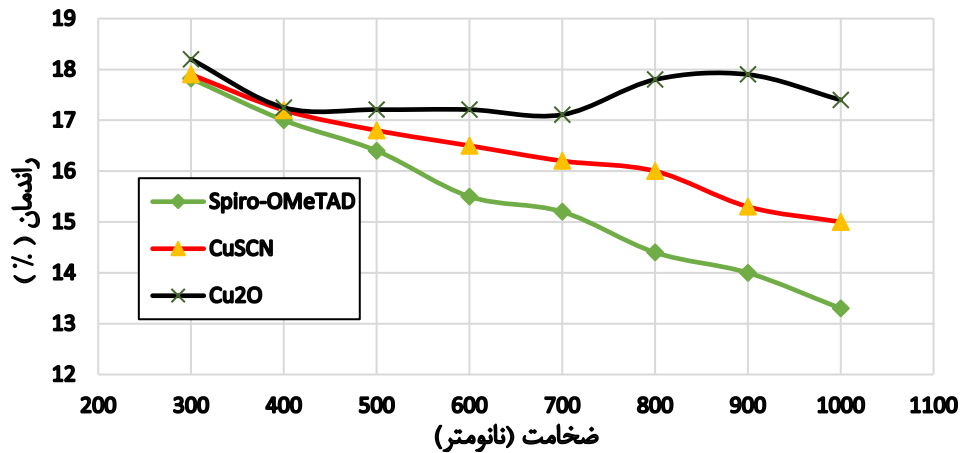
با توجه به معایب استفاده از سرب در سلول خورشیدی پروسکایت، در این بخش، جایگزینی آن با نانومیله ZnO مورد بررسی قرار گرفته است. علاوه بر این، با تغییر ماده تشکیل دهنده لایه انتقال حفره، تأثیر آن بر راندمان سلول خورشیدی پروسکایت بررسی شده است. در جدول ۳ نتایج شبیه سازی ساختار مورد نظر با به کارگیری لایه جاذب $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ ، لایه انتقال دهنده الکترون نانومیله ZnO و ۳ لایه مختلف انتقال دهنده حفره ارائه شده است. این نتایج بیانگر آن است که با استفاده از لایه انتقال دهنده حفره Cu_2O ، راندمان سلول افزایش خواهد یافت. همچنین، جایگزینی قلع به جای سرب منجر به استفاده سلول خورشیدی پروسکایت در محدوده وسیع تری از کاربردها خواهد شد.

جدول ۳- عملکرد PSC های مبتنی بر نانومیله ZnO بدون سرب با لایه های مختلف HTM

ترکیب ساختار	V_{oc}	I_{sc}	FF%	PCE%
$\text{ZnO(nr)}/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}$	0.98	32/96	62/76	21/24
$\text{ZnO(nr)}/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{CuSCN}$	0.89	32/51	65/02	19/66
$\text{ZnO(nr)}/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Spiro-OMeTAD}$	0.87	32/13	63/74	17/89

۳.۲. بررسی اثر تغییر ضخامت لایه جاذب $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ بر راندمان سلول خورشیدی با HTM های مختلف

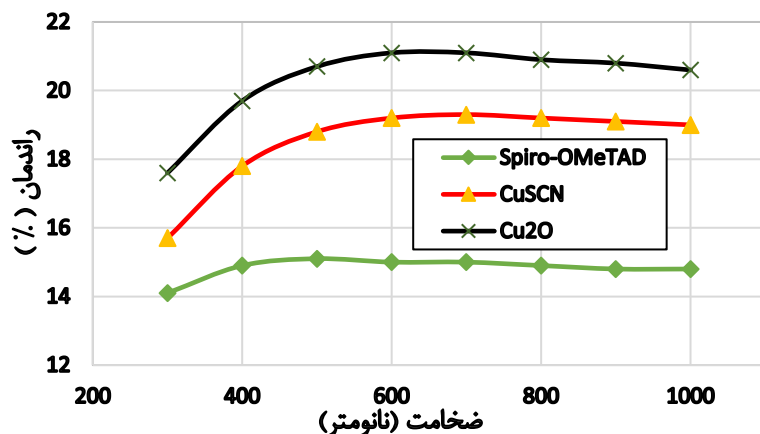
به منظور کاهش تلفات باز ترکیب و هزینه ساخت، بهینه سازی ضخامت لایه جاذب در طراحی سلول خورشیدی حائز اهمیت است. در این راستا باید توجه داشت که پارامترهای عملکردی مانند V_{oc} و I_{sc} نیز تحت تأثیر ضخامت لایه جاذب قرار می گیرند. اثر تغییر ضخامت لایه جاذب $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ در سه ساختار با ماده انتقال دهنده حفره مختلف، در شکل ۲ نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می شود، کاهش ضخامت تا ابعاد ۴۰۰ نانومتر در هر سه ساختار منجر به رفتار کاهشی راندمان و بعد از آن در لایه HTM با ماده Cu_2O شاهد ثابت شدن تقریبی راندمان و ادامه روند کاهشی (حدود ۲ درصد) در ماده های Spiro-OMeTAD و CuSCN خواهیم بود.



شکل ۲- اثر تغییر ضخامت لایه جاذب $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ بر راندمان PSC با HTM های مختلف

۴.۲. بررسی اثر تغییر ضخامت لایه جاذب $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ بر راندمان سلول خورشیدی با HTM های مختلف

در ادامه، با در نظر گرفتن $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ به عنوان لایه جاذب، اثر تغییر ضخامت این لایه بر روی راندمان سلول خورشیدی مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج حاصل از شبیه سازی در شکل ۳ نشان داده شده است. در اثر تغییر ضخامت لایه جاذب $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ در سه ساختار با لایه های انتقال دهنده حفره Cu_2O ، CuSCN و Spiro-OMeTAD ، مشاهده می شود تا ضخامت حدود ۵۰۰ نانومتر، راندمان افزایش داشته است و بعد از آن علیرغم افزایش ضخامت لایه جاذب، تغییرات قابل ملاحظه ای در راندمان مشاهده نمی شود. لذا، ضخامت لایه جاذب ۵۰۰ نانومتر به عنوان ضخامت بهینه لحاظ شده است. علت بروز رفتار افزایشی اولیه ناشی از افزایش تحرک حامل ها و کاهش اثرات باز ترکیبی سطح می باشد. نکته دیگر اینکه لایه انتقال دهنده حفره Cu_2O راندمان بالاتری نسبت به دو ساختار دیگر نشان داده است. نتیجه مقایسه راندمان های به دست آمده در شکل های ۲ و ۳ نشان می دهد که در ساختار مورد بررسی، به کارگیری لایه انتقال حفره از نوع Cu_2O در هر دو ساختار $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ و $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ منجر به افزایش راندمان می شود و ساختار با لایه جاذب $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ از راندمان بالاتری برخوردار است.



شکل ۳- اثر تغییر ضخامت لایه جاذب $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ بر راندمان PSC با HTM های مختلف



۳. نتیجه گیری

مطابق نتایج به دست آمده، استفاده از Cu_2O به عنوان لایه انتقال دهنده حفره سلول خورشیدی پرووسکایت نسبت به CuSCN و Spiro-OMeTAD منجر به افزایش راندمان سلول خواهد شد. افزایش ضخامت لایه انتقال دهنده الکترون به دلیل کسری جذب نور، جذب بخش بیشتری از فوتون‌ها توسط ETM و تغییر در مقاومت سری، منجر به کاهش راندمان سلول خواهد شد. علاوه بر این، به کارگیری نانومیله ZnO به عنوان لایه انتقال دهنده الکترون و نیز استفاده از لایه جاذب $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ در مقایسه با لایه جاذب $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ افزایش حدود ۳ درصد راندمان را در پی خواهد داشت. همچنین، با افزایش ضخامت لایه جاذب $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ تا ضخامت بهینه حدود ۵۰۰ نانومتر، میزان راندمان سلول خورشیدی به دلیل افزایش تحرک حامل‌ها و کاهش اثرات باز ترکیبی سطح، افزایش پیدا می‌کند. پس از آن، با افزایش بیشتر ضخامت لایه جاذب، تغییری در راندمان سلول خورشیدی ایجاد نمی‌شود.

۴. مراجع

- Du, H.-J, Wang, W.-C. and Zhu, J.-Z. (2016), "Device simulation of lead-free $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ perovskite solar cells with high efficiency," Chinese Physics B, vol. 25, article 108802.
- Umari, P., Mosconi, E. and De Angelis, F. (2014), "Relativistic GW calculations on $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ and $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ perovskites for solar cell applications," Scientific Reports, vol. 4, pp 4467.
- Yasin, S., Al Zoubi, T. and Moustafa, M. (2021), "Design and simulation of high efficiency lead-free heterostructure perovskite solar cell using SCAPS-1D," College of Engineering and Technology, American University of the Middle East, Kuwait.
- الهام کریمی و سید محمد باقر قریشی (۱۳۹۷)، "طراحی و بهینه سازی سلول خورشیدی پرووسکایت با به کارگیری دو لایه انتقال دهنده الکترون،" مجله پژوهش سیستم‌های بس ذره‌ای، دوره ۹، شماره ۱، دانشکده فیزیک، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران.
- Kumar, M., Kumar, A., Raj, A., Chandra Sati, P., Sahni, M. and Anshu A. (2020), "Organic-inorganic perovskite-based solar cell designs for high conversion efficiency: A comparative study by SCAPS simulation," Experimental Research Laboratory, Department of Physics, ARSD College, University of Delhi, New Delhi India.
- Tala-Ighil Zair, R., Oudjehani, C. and Tighilt, K. (2021), "SCAPS Simulation for Perovskite Solar Cell," Institute of Electrical & Electronic Engineering, University M'hamed Bougara Boumerdes, Route de indépendance, 35000, Algeria.
- Yang, X. Liu, T., Li, Z. and et al. (2016), "Preparation and photovoltaic properties of perovskite solar cell based on ZnO nanorod arrays," Applied Surface Science, vol. 388, Part A, pp. 89–96.
- Dong, J., Zhao, Y., Shi, J. and et al. (2014), "Impressive enhancement in the cell performance of ZnO nanorod-based perovskite solar cells with Al-doped ZnO interfacial modification," Chemical Communications, vol. 50, no. 87, pp. 13381–13384.
- Son, D.Y., Im, J. H., Kim, H. S. and Park, N.G. (2014) "efficient perovskite solar cell based on ZnO nanorods: an effective charge collection system," The Journal of Physical Chemistry C, vol. 118, no. 30, pp. 16567–16573.



10. Hao, L., Li, T., Ma, X., Wu, J., Qiao, L., Wu, X., Hou, G., Pei, H., Wang, X. and Zhang, X. (2012), "A tin-based perovskite solar cell with an inverted hole-free transport layer to achieve high energy conversion efficiency by SCAPS device simulation," Shanghai 200090, China.
11. Nine, K.B., Hossain, M.F. and Mahmood, Sh.A. (2019) "Analysis of Stable, Environment Friendly and Highly Efficient Perovskite Solar Cell," Bangladesh University of Engineering and Technology Dhaka, Bangladesh.
12. Mandadapu, U., Vedanayakam, S.V. and Thyagarajan, K. (2018) "Optimisation of high efficiency tin halide perovskite solar cells using SCAPS-1D," Department of Physics, Madanapalle Institute of Technology and Science, Madanapalle, Andhra Pradesh, India.
13. Muradov, F., Samusenkov, Zh. and Kot, S. (2021), "Methods of Stability Control of Perovskite Solar Cells for High Efficiency," Energies.
14. Mehrnezhad, H. Behjat, A., Torabi, N. and Jahanbakhshizade, N. (2018), "Investigation Zinc Oxide thin film perovskite solar cell using Fullerene and copper Phthalocyanine," a Photonics Research Group, Engineering Research Center, Yazd University, Yazd, Iran.