

Investigation of Using Anti-Reflecting Coatings in CZTS Solar Cells to Enhance the Light Absorption: Optimization by FDTD Method

Mina Mirzaei¹, *Ph.D Student*, Javad Hasanzadeh¹, *Assistant Professor*, Ali Abdolazadeh Ziabari², *Assistant Professor*, Mehdi Mirzaei³, *Assistant Professor*

¹Department of Physics- Takestan Branch, Islamic Azad University, Takestan, Iran
minamirzayi64@yahoo.com, javadhasanzadeh649@gmail.com

²Nano Research Lab- Lahijan Branch, Islamic Azad University, Lahijan, Iran
Ali_abdolazadeh@liau.ac.ir

³Department of Basic Sciences, Miyaneh Branch- Islamic Azad University, Miyaneh, Iran
m_mirzayi2003@yahoo.com

Abstract:

In the few past years, Solar cells based on $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ (CZTS) are very promising thin-film solar cells due to their appropriate absorption coefficient and optical band gap, low-cost, non-radioactive and environmental friendly behavior. However, CZTS devices show poor efficiency and identifying deficiencies and making improvements is necessary. In the present study, various anti-reflection coatings at the top surface of the solar cell were proposed. Minimization of the reflectance is carried out to optimize the thickness of ARC layers using Lumerical software. The density of the short-circuit photocurrent increases from $18.4 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ for solar cells without an antireflection coating to $36 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ for those with MgF_2 layer coating.

Keywords: CZTS solar cells, anti-reflective coating, external quantum efficiency, FDTD

Received: 14 January 2021

Revised: 13 February 2021

Accepted: 18 March 2021

Corresponding Author: Dr. Javad Hasanzadeh

Citation: M. Mirzaei, J. Hasanzadeh, A. Abdolazadeh-Ziabari, M. Mirzaei, "Investigation of using anti-reflecting coatings in CZTS solar cells to enhance the light absorption: optimization by FDTD method", Journal of Intelligent Procedures in Electrical Technology, vol. 12, no. 47, pp. 61-71, December 2021 (in Persian).

 DOR: [20.1001.1.23223871.1400.12.3.5.5](https://doi.org/10.1001.1.23223871.1400.12.3.5.5)

مقاله پژوهشی

بررسی به‌کارگیری پوشش‌های ضدبازتاب در سلول‌های خورشیدی لایه نازک CZTS برای افزایش جذب نور: بهینه‌سازی با استفاده از روش FDTD

مینا میرزایی^۱، دانشجوی دکتری، جواد حسن‌زاده^۲، استادیار، علی عبدالله‌زاده ضیابری^۲، استادیار، مهدی میرزایی^۳، استادیار

۱- گروه فیزیک- واحد تاکستان، دانشگاه آزاد اسلامی، تاکستان، ایران
ebiamoupour@yahoo.com, javadhasanzadeh649@gmail.com

۲- آزمایشگاه تحقیقاتی نانو- واحد لاهیجان، دانشگاه آزاد اسلامی، لاهیجان، گیلان، ایران
Ali_abdolahzadeh@liau.ac.ir

۳- دانشکده علوم پایه- واحد میانه، دانشگاه آزاد اسلامی، میانه، ایران
m_mirzayi2003@yahoo.com

چکیده: در چند سال گذشته، سلول‌های خورشیدی مبتنی بر سولفید قلع روی مس (CZTS) به دلیل ضریب جذب و شکاف باند مناسب، کم هزینه بودن، رفتار غیر رادیواکتیو و سازگار با محیط زیست، جزو سلول‌های خورشیدی لایه نازک بسیار امیدوار کننده هستند. با این حال، سلول‌های CZTS بازدهی ضعیفی نشان می‌دهند و شناسایی کمبودها و ایجاد پیشرفت لازم است. در این مقاله، استفاده از پوشش‌های مختلف لایه‌های ضد بازتاب^۱ (ARC) در سطح بالای سلول خورشیدی پیشنهاد شده است. حداقل‌سازی بازتاب برای بهینه‌سازی ضخامت لایه‌های ضد بازتاب با استفاده از نرم افزار لومریکال انجام شده است. چگالی جریان اتصال کوتاه از ۱۸/۴۸ میلی-آمپر بر سانتیمترمربع برای سلول‌های خورشیدی بدون پوشش ضد بازتاب به ۲۰/۷۶ میلی-آمپر بر سانتیمترمربع برای سلول‌هایی که دارای پوشش لایه ضدبازتاب MgF_2 هستند افزایش می‌یابد.

کلمات کلیدی: بازده کوانتومی خارجی، پوشش لایه ضدبازتاب، سلول‌های خورشیدی CZTS، FDTD.

تاریخ ارسال مقاله: ۱۳۹۹/۱۰/۲۳

تاریخ بازنگری مقاله: ۱۳۹۹/۱۱/۲۳

تاریخ پذیرش مقاله: ۱۳۹۹/۱۲/۲۸

نام نویسنده‌ی مسئول: دکتر جواد حسن‌زاده کلاشمی

نشانی نویسنده‌ی مسئول: تاکستان- کیلومتر ۵ جاده همدان- دانشکده علوم- دانشگاه آزاد اسلامی واحد تاکستان

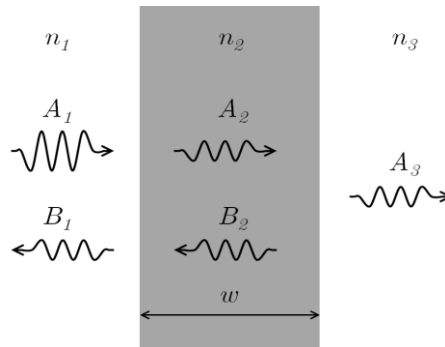
۱- مقدمه

سلول های خورشیدی مبتنی بر سولفید قلع روی مس (Cu_2ZnSnS_4) برای اولین بار در سال ۱۹۶۶ کشف شد [۱] و در سال ۱۹۸۸ نشان داده شد که دارای اثر فتوولتائیک است [۲]. سولفید قلع روی مس یک ترکیب نیم رسانای چهارتایی است که از اواخر دهه ۲۰۰۰ میلادی برای ساخت سلول خورشید لایه نازک مورد توجه بیشتری قرار گرفته است. تکنیک های مختلف فیزیکی و شیمیایی متعددی برای ساختن این سلول های خورشیدی لایه نازک مبتنی بر CZTS به کار گرفته شده اند. از این جمله می توان به تبخیر حرارتی، اسپاترینگ اولیه، رسوب پالس لیزر، روش سل ژل^۲ و رسوب الکتروود و ... اشاره نمود. CZTS دارای خواص نوری مشابه CIGS است به همین خاطر ماده مناسبی به عنوان لایه جذب در سلول خورشیدی لایه نازک است. همچنین بر خلاف سایر سلول های خورشیدی لایه نازک مانند CIGS و CdTe از عناصری با فراوانی زیاد و غیرسمی تشکیل شده است [۳]. اما بازده سلول خورشیدی CZTS هنوز هم به طور قابل توجهی پایین تر از CIGS و CdTe است، به طوری که در سال ۲۰۱۸ به حدود ۱۰ درصد رسیده است [۴]. به همین دلیل از چالش های جدی در ساخت این نوع سلول خورشیدی لایه نازک استفاده از تکنیک های مختلف جهت افزایش جذب در لایه جذب است. یکی از روش های موثر برای افزایش بازده سلول خورشیدی استفاده از لایه های ضد بازتاب است. مقاله های زیادی راجع به جزییات افزایش جذب با استفاده از این روش وجود دارد. کازی اسلام و همکاران [۵] روش های به حداقل رساندن بازتاب با استفاده از لایه های مختلف ضد بازتاب مانند ITO، $ZnO:Al$ و Si_3N_4 در سطح بالای سلول خورشیدی a-Si:H را بررسی کرده اند. نتایج نشان می دهد که Si_3N_4 به ضخامت ۶۰ نانومتر بهترین لایه ضد بازتاب در بین سه مورد بررسی شده است. همچنین ساختار دو لایه Al_2O_3 و ZrO_2 بر روی سلول خورشیدی GaAs مطالعه شده است [۶] که ضخامت بهینه لایه بالایی (Al_2O_3) و پایینی (ZrO_2) به ترتیب ۴۵ نانومتر و ۴۹ نانومتر به دست آمده است. در سال ۲۰۱۸ اثر لایه های ضد بازتاب بر روی سلول خورشیدی سیلیکون بررسی شد [۷]. نتایج نشان داد که لایه های ضد بازتاب SiO_2/TiO_2 و SiN_x در محدوده طول موج بین ۴۰۰ و ۱۱۰۰ نانومتر، تلفات بازتاب متوسط را به ترتیب به کمتر از ۹ درصد و ۲/۳ درصد کاهش داده اند. نرم افزارهای متعددی برای شبیه سازی سلول های خورشیدی وجود دارد که هر کدام مزیت های خاص خود را دارد. در سال ۲۰۲۰ سلول خورشیدی CZTS با ضخامت ۲۵۰۰ نانومتر توسط نرم افزار شبیه سازی توان سلول خورشیدی^۳ (SCAPS) شبیه سازی شد. نتایج نشان داد استفاده از لایه ZnS به عنوان لایه بافر موجب افزایش جذب در طول موج های ۴۰۰ تا ۵۰۰ نانومتر خواهد شد [۸]. اما برای اولین بار yee، در سال ۱۹۶۶ نسخه ساده ای با ویژگی های عددی بسیار جالب توجه ولی با بار محاسباتی زیاد، برای حل معادلات ماکسول در حوزه زمان ارائه داد [۹]. این روش تاکنون توسعه بسیاری یافته و به دلیل توانایی در حل مسائل پیچیده الکترومغناطیس در حوزه زمان به ویژه برهم کنش نور با انواع مواد خطی غیرخطی پاشنده و ... از اهمیت ویژه ای برخوردار است. هدف ما در این مطالعه بررسی اثر Al_2O_3 ، MgF_2 ، ZnO و SiN به عنوان لایه ضد بازتاب بر روی سلول های خورشیدی CZTS با استفاده از دو ماژول FDTD و Device است. در این مقاله، ابتدا با شبیه سازی سلول خورشیدی با استفاده از روش تفاضل محدود در حوزه زمان^۴ (FDTD)، جذب نور در ناحیه ای فعال این نوع سلول ها را محاسبه کرده و سپس با حل معادلات رانش-انتشار^۵ در ماژول Device با استفاده از نتایج حاصل از شبیه سازی اپتیکی، توانستیم مشخصه های الکتریکی آنها را استخراج نماییم. سپس ضخامت لایه ضد بازتاب را بهینه سازی کرده و در نهایت اثر لایه ضد بازتاب را در جذب نور و افزایش بازده سلول خورشیدی بررسی کرده ایم.

۲- تاثیر لایه ضد بازتاب در افزایش جذب نور

وقتی نور از یک محیط به محیطی با ضریب شکست مختلف وارد می شود درصدی از آن بازتاب و مابقی وارد محیط دوم می شود. ایجاد پوشش ضد بازتاب در سطح سلول، مهمترین روش برای به دام انداختن نور جهت جبران سازی کاهش جریان ناشی از بازتاب سطحی است. اساس کاهش بازتاب در این پوشش ها، پدیده داخل ویرانگر^۶ در فصل مشترک لایه های مختلف است. بنابراین مهمترین عوامل موثر بر کاهش بازتاب در این پوشش ها نوع ماده پوشش، ضریب شکست آن، هماهنگی با زیر لایه و همچنین ضخامت لایه پوشش است به طوری که با تعیین حد بهینه هر کدام از این پارامترها شرایط برای دستیابی به کمترین

بازتاب و بیشترین میزان عبور فراهم می‌شود. برای بررسی ساز و کار این لایه ضریب انعکاس یک سیستم سه لایه مانند شکل (۱) را بررسی می‌کنیم.



شکل (۱): بازتاب نور از سه لایه‌ی مختلف.
Figure (1): Reflection of light from three different layers.

معادله‌ی بازتاب طبق رابطه‌ی زیر به دست می‌آید [۱۰]:

$$R = \left| \frac{B_1}{A_1} \right| = \left| \frac{\Gamma_{12} + \Gamma_{23} e^{2j\beta_2 \omega}}{1 + \Gamma_{12} \Gamma_{23} e^{2j\beta_2 \omega}} \right|^2 \quad (1)$$

که در آن Γ ضریب انعکاس ω ضخامت لایه بازتاب و β ثابت فاز است. برای پوشش ضدبازتاب ایده‌آل ضریب انعکاس باید صفر گردد:

$$\Gamma_{12} + \Gamma_{23} e^{2j\beta_2 \omega} = 0 \quad (2)$$

به این منظور باید رابطه زیر برقرار باشد:

$$e^{2j\beta_2 \omega} = -1 \quad (3)$$

بنابراین داریم:

$$\Gamma_{12} = \Gamma_{23} \quad (4)$$

بنابراین برای نور فرودی داریم:

$$\frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} = \frac{n_2 - n_3}{n_2 + n_3} \quad (5)$$

با حل معادله برای n_2 داریم:

$$n_2 = \sqrt{n_1 n_3} \quad (6)$$

با داشتن مقدار ضریب شکست نیم‌رسانا در این طول موج و ضریب شکست هوا و جای‌گذاری در رابطه بالا مقدار ضریب شکست ایده‌آل برای پوشش ضدبازتاب به دست می‌آید. از سویی دیگر با توجه به شرط (۳) در رابطه بالا به ضخامت بهینه لایه-ی ضدبازتاب می‌رسیم:

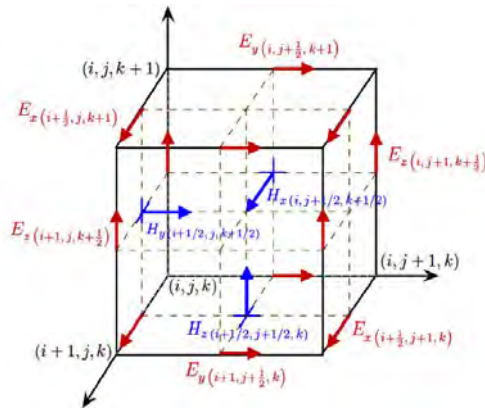
$$\beta_2 \omega = \frac{\pi}{4} \quad \text{or} \quad \omega = \frac{\lambda}{4n_2} \quad (7)$$

بنابراین در صورتی که طول لایه‌ی وسط یک چهارم اندازه‌ی طول موج فرودی در محیط لایه باشد، یک لایه‌ی بدون بازتاب خواهیم داشت.

۳- روش شبیه‌سازی

روش FDTD به‌طور مستقیم معادلات چرخشی ماکسول یعنی معادلات مربوط به قوانین آمپر و فارادی را حل می‌کند و نیازی به تعریف پتانسیل‌ها ندارد. در این روش مطابق شکل (۲) فضای شبیه‌سازی به سلول‌های مکعبی تقسیم می‌شود. الگوریتم

شبکه یک نقطه‌ای شروع محاسبات بر پایه روش تفاضل محدود در حوزه زمانی است. همان گونه که شکل نشان می‌دهد در این روش بردارهای موج میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی تولیدی گسترش یافته‌اند که مولفه‌های میدان مغناطیسی نصف واحد طول با میدان الکتریکی فاصله دارد.



شکل (۲): سلول محاسباتی Yee. هر مولفه میدان توسط چهار مولفه احاطه می‌شود [۱۱].
Figure (2): Computational cell Yee. Each field component is surrounded by four components [11].

با در نظر گرفتن تقریب تفاضل مرکزی برای هر دو مشتقات زمانی و مکانی معادلات ماکسول می‌توان مستقیماً مقادیر همه مولفه‌های میدان الکتریکی و میدان مغناطیسی را در هر سه بعد فضایی محدوده‌ی محاسباتی (i, j, k) اندازه‌گیری کرد [۱۲]:

$$D_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k + \frac{1}{2}) = D_z^{n-\frac{1}{2}}(i, j, k + \frac{1}{2}) + \frac{\Delta t}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \left(\frac{H_y^n(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2}) - H_y^n(i - \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2})}{\Delta x} - \frac{\Delta t}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \left(\frac{H_x^n(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}) - H_x^n(i, j - \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2})}{\Delta y} \right) \right) \quad (8)$$

برای سایر مولفه‌های میدان نیز روابط مشابه‌ای داریم. بعد از محاسبه این پارامترها میزان جذب بر واحد حجم از طریق دیورژانس بردار پوینتینگ^۷ قابل محاسبه است [۱۳]:

$$p_{abs} = -0.5 \text{real}(\Delta \cdot P) \quad (9)$$

رابطه بالا را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$p_{abs} = -0.5 \text{real}(i\omega \epsilon \cdot D) \quad (10)$$

با استفاده از توان جذب شده می‌توان نرخ تولید الکترون - حفره‌ها را با استفاده از معادله‌ی زیر به دست آورد:

$$G(r) = \int \frac{p_{abs}}{h\omega} d\omega \quad (11)$$

به منظور ارزیابی بازده سلول خورشیدی در جذب کمیته‌ی به نام ضریب افزایش جذب کل G^A به صورت زیر معرفی می‌شود [۱۴]:

$$G(\lambda) = \frac{IQE_{ARC}}{IQE_{Bare}} = \frac{\int \lambda P_{abs}(\lambda) I_{AMI.5}(\lambda) d\lambda}{\int \lambda P_{in}(\lambda) I_{AMI.5}(\lambda) d\lambda} \quad (12)$$

که در آن $IQE(\lambda)$ بازده کوانتومی و $P_{in}(\lambda)$ و $P_{abs}(\lambda)$ به ترتیب توان نور جذب شده و فرودی در طول موج λ و $I_{AMI.5}$ توان نور فرودی خورشید در حدود ۱۰۰ میلی-وات بر سانتی مترمربع است. این پارامتر در واقع بیانگر نسبت بازده کوانتومی کل سلول خورشیدی با لایه بازتاب به سلول ساده است. در گام بعدی پارامترهای نوری شامل نرخ تبدیل فوتون به الکترون را از ماژول FDTD وارد نرم افزار DEVICE می‌نماییم و ولتاژ مورد نظر را اعمال می‌کنیم. این نرم افزار معادلات رانش-انتشار را برای

حامل‌های بار حل می‌کند و در نهایت نمودار جریان ولتاژ به دست خواهد آمد. از این نمودار می‌توان برای محاسبه بازده استفاده کرد:

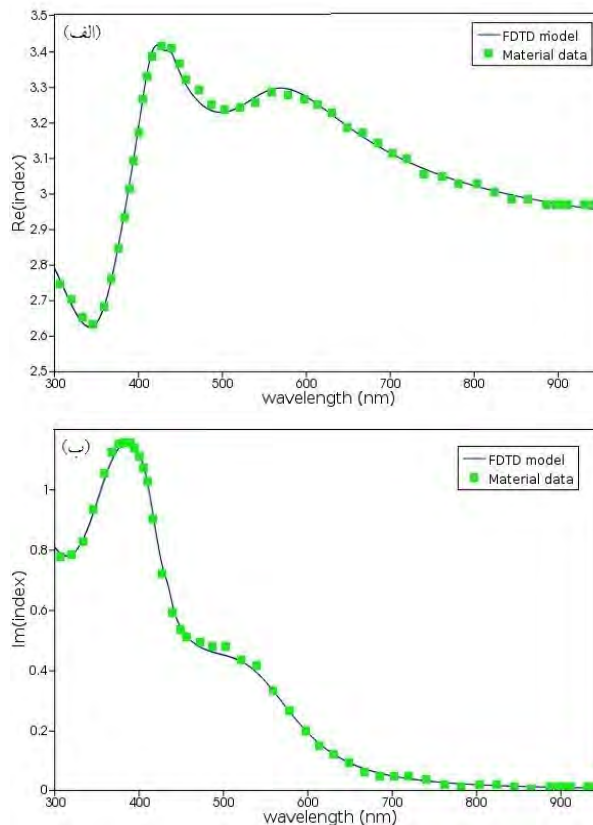
$$\eta = \frac{FF \times V_{oc} \times J_{sc}}{P_{in}} \tag{13}$$

که در آن FF ضریب پرشدگی^۹ پارامتری است که بیشترین مقدار توان قابل استحصال از سلول را مشخص می‌نماید، V_{oc} ولتاژ مدار باز، J_{cs} چگالی جریان مدار کوتاه است. پارامتر مهم دیگر در ارزیابی سلول بازده کوانتومی خارجی^{۱۰} (EQE) است که به صورت نسبت تعداد حامل‌های بار جمع شده توسط سلول خورشیدی به تعداد فوتون‌های یک طول موج و انرژی معین که از خارج به سلول خورشیدی می‌تابند (فوتون‌های فرودی) تعریف می‌شود. در واقع این پارامتر نشان می‌دهد که چند درصد از نور خورشید تبدیل به جریان الکتریسیته می‌شود. برای محاسبه بازده کوانتومی خارجی از رابطه‌ی زیر استفاده خواهیم کرد: [۱۵]

$$EQE = 1240 \frac{J_{sc}(\lambda) A_{cm-2}}{\lambda[nm] P_{in}(\lambda) W_{cm-2}} \tag{14}$$

۴- اعتبار سنجی شبیه‌سازی

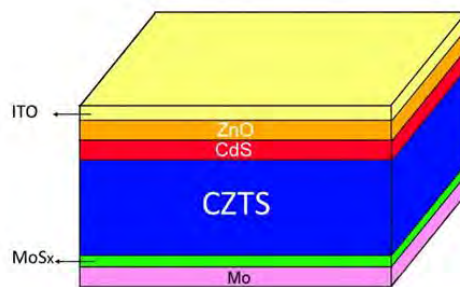
ماژول FDTD برای شبیه‌سازی نیازمند ضریب شکست حقیقی و موهومی است که برای برخی مواد از کتاب راهنمای ثابت نوری جامدات از قبل تعریف شده است [۱۶]. اما برای مواد جدیدی مانند CZTS باید این ضرایب اپتیکی تجربی در سه ستون طول موج، ضریب شکست موهومی و حقیقی به صورت داده‌های نمونه وارد شود [۱۷]. پس از وارد کردن دیتای تجربی این ماده، ماژول FDTD یک چندجمله‌ای با بیشترین دقت و متناسب با نقاط را پیدا می‌کند که در شکل (۳) نشان داده شده است.



شکل (۳): (الف) ضریب شکست حقیقی و (ب) ضریب شکست موهومی ماده CZTS.

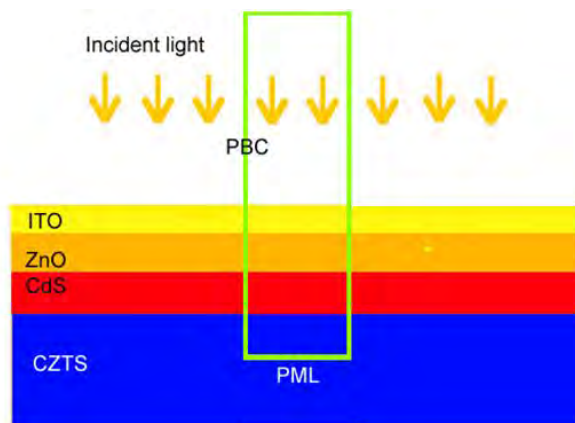
Figure (3): Real and imaginary refractive index of CZTS material.

به منظور اعتبارسنجی و اطمینان از صحت نتایج شبیه سازی شده از ساختار شکل (۴) که به طور آزمایشگاهی بررسی شده است، استفاده کرده ایم [۱۸]. این ساختار شامل یک لایه ITO (ایندیم اکسید آلیبده شده با قلع) به ضخامت ۳۵۰ نانومتر و ZnO به ضخامت ۴۰ نانومتر است که به عنوان TCO^{11} در سلول خورشیدی به کار می رود. این لایه باید دارای دو ویژگی مهم باشد: شفافیت مورد نیاز برای رسیدن نور کافی به لایه جاذب را فراهم کند، یعنی دارای گاف نواری بالایی باشد و رسانش کافی مورد نیاز برای انتقال جریان فوتونی تولید شده به مدار خارجی بدون اتلاف مقاومتی بیش از اندازه را فراهم نماید. بعد از آن لایه CdS به ضخامت ۵۰ نانومتر قرار دارد که نیم رسانایی از نوع n است و به عنوان لایه بافر بین لایه های TCO و CZTS عمل می کند. این لایه سبب عملکرد بهتر سلول خورشیدی می شود. سپس لایه جاذب CZTS به ضخامت ۱۵۰۰ قرار دارد که لایه اصلی و فعال سلول خورشیدی و نوعی نیم رسانا از نوع p است. این لایه دارای گاف انرژی مستقیم است و با لایه بافر، یک پیوند p-n را تشکیل می دهد. معمولاً یک لایه MoS_x در بین دو لایه $Mo/CZTS$ به دلیل واکنش بین CZTS و Mo در طی مراحل ساخت تشکیل می شود. ضخامت این لایه به دمای پخت و ضخامت لایه CZTS وابسته است [۱۹]. در پایین ترین قسمت سلول یک لایه ۹۰۰ نانومتری Mo به عنوان اتصال پشتی و بازگرداننده نور جذب نشده روی زیرلایه قرار دارد. اتصال پشتی یک فلز است که جذب پائینی دارد و نقش آن جمع کردن حامل ها از لایه جاذب و فرستادن آنها به صورت جریان بار خارجی است. همچنین لازم است که اتصال پشتی تابع کار مناسب و مقاومت ویژه پایین داشته باشد و در برابر اکسیداسیون و خوردگی و ... مقاوم باشند. پلاتینیوم، طلا، نقره، مس، و مولیبدنیوم چندین فلز مناسب برای اتصال الکتریکی پشتی هستند. در این بین، مولیبدنیوم نسبت به فلزات دیگر ترجیح داده می شود که دلیل آن پایداری در فرایندهای دمایی و مقاومت پایین در اتصال با CZTS است. همان طور که در ساختار بالا ذکر شد شبیه سازی ساختار اولیه بدون لایه بازتاب برای اثبات صحت درستی شبیه سازی انتخاب شده است.



شکل (۴): شماتیک سلول خورشیدی CZTS ساده.
Figure (4): Schematic of simple CZTS solar cells.

یکی از مهم ترین مسائل در نرم افزار FDTD دستور مش بندی است. مش بندی ضعیف منجر به خطاهای شبیه سازی و دقیق نبودن نتایج می شود. برای اطمینان از درست بودن نتایج باید تعداد نقاط مش بندی کافی باشد. با در نظر گرفتن این نکته هر چه تعداد نقاط مش بندی بیشتر باشد، زمان شبیه سازی بیشتر خواهد شد. در این قسمت، یک منبع تخت نوری با طول موج ۳۰۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر به صورت عمود در راستای y قرار گرفت. همان طور که در شکل (۵) نشان داده شده است، شرایط مرزی در راستای x به صورت دوره ای و در راستای y به صورت کاملاً همسان اعمال شد تا نور به طور کامل جذب گردد. برای تعریف مواد جدید در ماژول Device نیاز به اطلاعاتی مانند گاف انرژی، موبیلیتی اکترون و حفره، جرم موثر اکترون و حفره و ... مواد است. مقادیر این پارامترها در جدول (۱) درج شده است. پس از وارد کردن مواد جدید باید الکترودهای جلویی و پشتی تعریف شوند. سپس فایل های خروجی ماژول FDTD را در این ماژول وارد می کنیم. نرخ تولید اکترون حفره به راحتی و بدون نیاز به اسکریپت وارد این ماژول می شود. با استفاده از آن می توان با اعمال ولتاژ نمودار چگالی جریان-ولتاژ را رسم کرد. همان طور که شکل (۶) نشان می دهد نمودار حاصل از شبیه سازی و نتایج تجربی [۱۸] سازگاری خوبی با هم نشان می دهند.

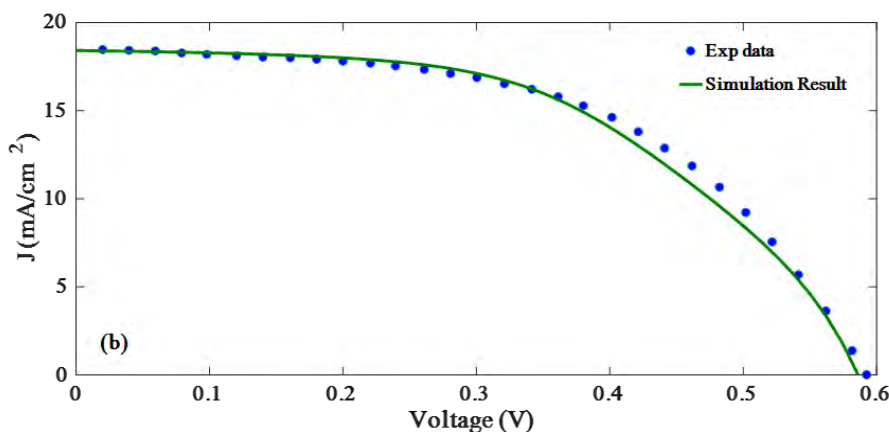


شکل (۵): شماتیک از محیط شبیه‌سازی.
Figure (5): Schematic of the simulation environment.

Table (1): Input parameters in Device.

جدول (۱): پارامترهای ورودی در Device.

| پارامترها | CZTS | CdS | ZnO | ITO |
|--|------|-----|-----|-----|
| ضخامت (nm) | ۱۵۰۰ | ۵۰ | ۴۰ | ۳۵۰ |
| گذردهی ϵ/ϵ_0 | ۸ | ۱۰ | ۹ | ۱۰ |
| موبیلیتی الکترون (cm^2/Vs) | ۱۰۰ | ۱۰۰ | ۱۰۰ | ۱۰۰ |
| موبیلیتی حفره (cm^2/Vs) | ۲۵ | ۲۵ | ۲۵ | ۲۵ |
| جرم موثر الکترون | ۰/۲ | ۰/۲ | ۰/۲ | ۰/۲ |
| جرم موثر حفره | ۰/۷ | ۰/۷ | ۰/۷ | ۰/۷ |
| گاف انرژی (eV) | ۱/۴ | ۲/۴ | ۳/۳ | ۳/۶ |
| وابستگی الکترونی | ۴/۵ | ۴/۸ | ۴/۸ | ۴/۳ |

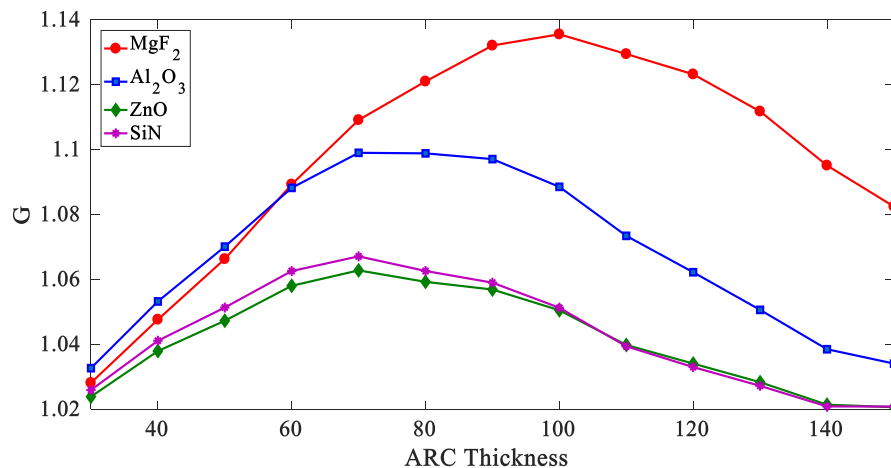


شکل (۶): منحنی‌های J-V سلول خورشیدی مرجع و سلول خورشیدی شبیه‌سازی شده CZTS.
Figure (6): Reference solar cell J-V curves and CZTS simulated solar cell.

۵- نتایج شبیه‌سازی با لایه ضد بازتاب

با توجه به بازتاب نور از سطح سلول‌ها، به منظور افزایش به دام‌اندازی نور و افزایش جذب ناچار به استفاده از لایه‌ی ضد بازتاب هستیم. هدف ما در این بخش مطالعه اثر MgF_2 ، Al_2O_3 و ZnO به عنوان لایه ضد بازتاب بر روی سلول‌های خورشیدی CZTS

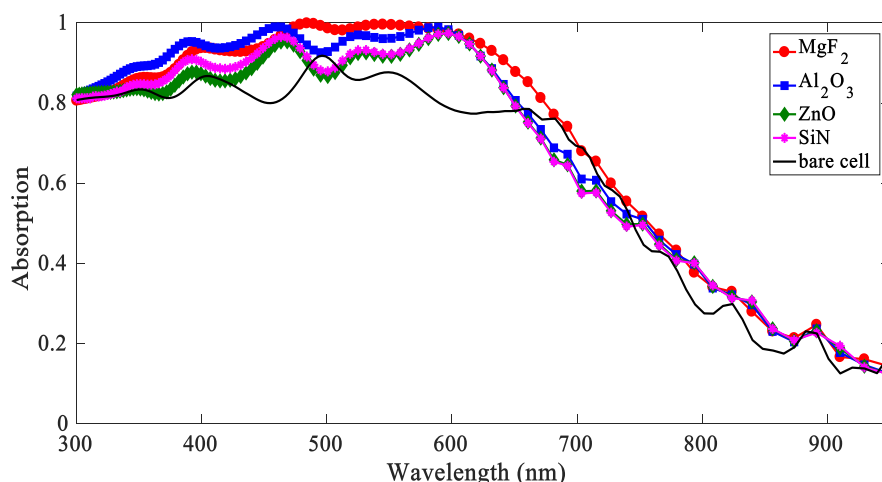
است. انتخاب صحیح ضخامت این لایه برای فرآیند به دام‌انداختن نور سلول‌های خورشیدی بسیار مهم است. لایه‌ی ضدبازتاب بسیار ضخیم باعث کاهش جذب نوری و راندمان سلول خورشیدی می‌شود. برای یافتن ضخامت مطلوب، ضریب افزایش جذب G ، برای ضخامت‌های ۳۰ تا ۱۵۰ نانومتر با فاصله ۲۰ نانومتر محاسبه کردیم. شکل (۷) رابطه تغییرات ضریب G و ضخامت‌های مختلف لایه بازتاب را نشان می‌دهد. همان‌طور که این شکل نشان داده می‌دهد، برای Al_2O_3 ، ZnO ، MgF_2 و SiN ضخامت بهینه به ترتیب ۱۰۰، ۷۰، ۷۰ و ۷۰ نانومتر است که لایه نازک‌تر یا ضخیم‌تر از آن باعث کاهش چگالی جریان می‌شود.



شکل (۷): تغییرات ضریب افزایش جذب (G) با ضخامت لایه ضدبازتاب.

Figure (7): variation in the absorption enhancement coefficient (G) with the thickness of the anti-reflective layer.

شکل (۸) طیف جذب را به‌عنوان تابعی از طول موج برای سلول CZTS ساده و با ضخامت‌های مختلف بهینه لایه بازتاب مقایسه می‌کند. همان‌طور که شکل نشان می‌دهد جذب در طیف گسترده‌ای از طول موج‌ها برای هر چهار لایه ARC افزایش یافته، که این امر را می‌توان به کاهش بازتاب نور نسبت داد. همچنین می‌توان مشاهده کرد، بیش‌ترین مقادیر جذب (تقریباً ۱) در طول موج ۵۰۰-۶۰۰ نانومتر است و افزایش آن برای طول موج‌های بلندتر کمتر است.

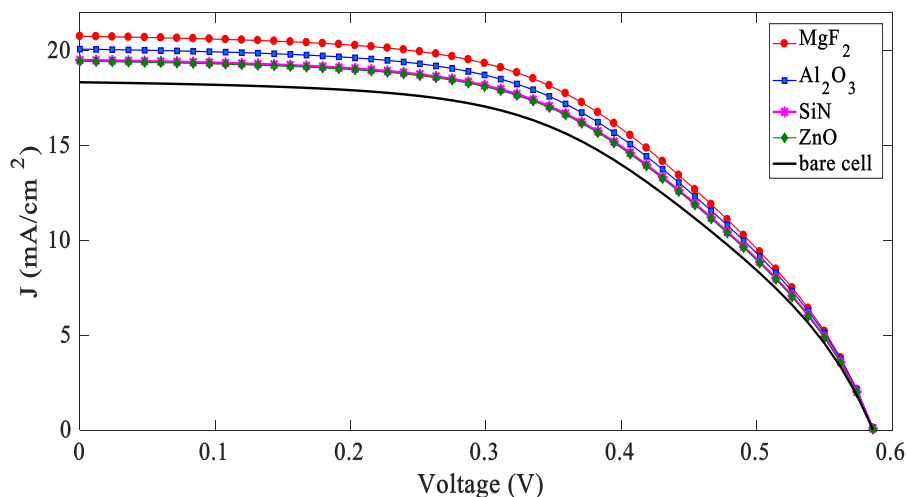


شکل (۸): طیف جذب سلول خورشیدی CZTS با لایه‌های ضدبازتاب مختلف در مقایسه با سلول خورشیدی مرجع.

Figure (8): variation in the absorption enhancement coefficient (G) with the thickness of the anti-reflective layer.

مشخصات جریان-ولتاژ سلول خورشیدی با و بدون لایه ضدبازتاب در شکل (۹) نشان داده شده است. این شکل پیشرفت قابل توجه‌ای در جریان اتصال کوتاه را با استفاده از لایه‌های مختلف ضدبازتاب، نشان می‌دهد. جریان اتصال کوتاه، ولتاژ مدار باز،

ضریب پرتشدگی و بازده سلول خورشیدی CZTS مربوط به لایه‌های ضدبازتاب مختلف در جدول (۲) ارائه شده است. سلول خورشیدی با پوشش MgF_2 بهترین دستاورد فوتوولتاییک را نشان داده است. جریان اتصال کوتاه سلول خورشیدی CZTS بدون لایه‌ی بازتاب $18/48$ میلی‌آمپر بر سانتیمتر مربع است، در حالی که با پوشش MgF_2 تقریباً به مقدار $20/76$ میلی‌آمپر بر سانتیمتر مربع می‌رسد.



شکل (۹): منحنی J-V سلولهای خورشیدی CZTS با و بدون لایه‌ی ضدبازتاب.

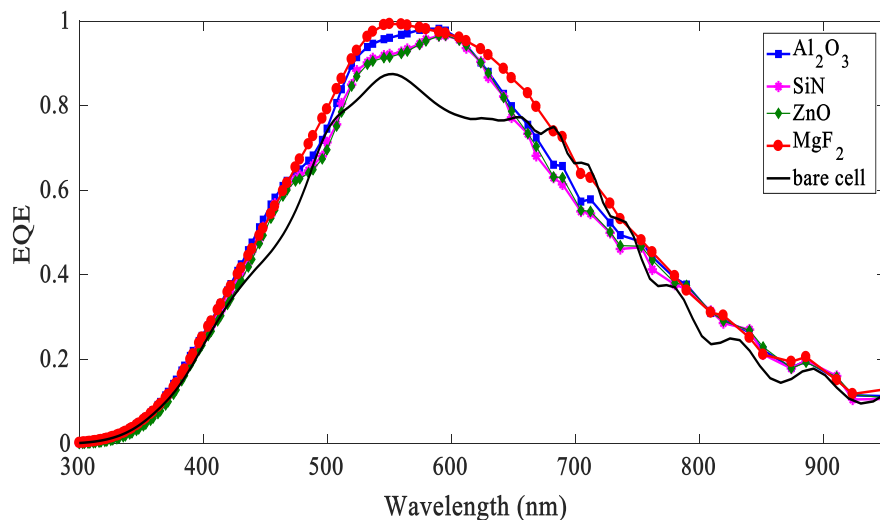
Figure (9): J-V curve of CZTS solar cells with and without anti-reflective layer.

Table (2): Photovoltaic characteristics of CZTS solar cells with and without different anti-reflective layers.

جدول (۲): مشخصات فتوولتاییک سلول خورشیدی CZTS با و بدون لایه‌های ضدبازتاب مختلف.

| ARC | J_{sc} (mA/cm ²) | V_{oc} (v) | η (%) | FF |
|-----------|--------------------------------|--------------|------------|-------|
| No ARC | 18/40 | 0/58 | 5/64 | 52/56 |
| Al_2O_3 | 20/08 | 0/58 | 6/21 | 52/80 |
| ZnO | 19/44 | 0/58 | 5/99 | 52/66 |
| MgF_2 | 20/76 | 0/58 | 6/40 | 52/69 |
| SiN | 19/5 | 0/58 | 6/0 | 52/74 |

برای تأیید اثر لایه‌ی ضدبازتاب، نمودار بازده کوانتومی خارجی سلول خورشیدی CZTS با و بدون لایه‌های ضدبازتاب در شکل (۱۰) شبیه‌سازی شده است. افزایش این پارامتر در اغلب طول موج‌ها در سلول خورشیدی روکش شده با MgF_2 در مقایسه با Al_2O_3 ، ZnO و SiN بیشتر است که نتایج بازدهی در جدول (۲) مویده آن است. همانطور که قبلاً ذکر شد، این افزایش به دلیل کاهش بازتاب با استفاده از لایه‌ی ضدبازتاب است.



شکل (۱۰): بازده کوانتومی خارجی (EQE) سلول خورشیدی CZTS با و بدون لایه های ضد بازتاب مختلف.
Figure (10): External Quantum Efficiency (EQE) of CZTS solar cells with and without different anti-reflective layers.

۶- نتیجه گیری

به طور خلاصه، عملکرد لایه های ضد بازتاب مختلف Al_2O_3 ، MgF_2 ، ZnO و SiN از طریق ماژول های FDTD و Device برای سلول های خورشیدی لایه نازک CZTS بررسی شد. نتایج به دست آمده از بازده کوانتومی خارجی و طیف جذب نشان داد MgF_2 با ضخامت بهینه حدود ۱۰۰ نانومتر کاندیدای بهتری نسبت به ZnO ، Al_2O_3 و SiN است. به طوری که نمودار چگالی جریان-ولتاژ نشان داد که چگالی از ۱۸/۴۸ میلی-آمپر بر سانتیمتر مربع در سلول بدون لایه بازتاب به ۲۰/۷۶ میلی-آمپر بر سانتیمتر مربع با حضور لایه بازتاب افزایش می یابد. این بهبود کارایی به دلیل افزایش جذب نور در لایه CZTS است. بنابراین استفاده از پوشش ضد بازتاب با ضخامت مناسب انتخاب خوبی برای افزایش کارایی سلول خورشیدی است. در ادامه مطالعات، برای دستیابی به بازده تبدیل بالاتر می توان از نانوذرات پلاسמוنی نیز در این لایه بازتاب استفاده نمود.

References

مراجع

- [1] R. Nitsche, D. F. Sargent, P. Wild, "Crystal growth of quaternary 1_2246_4 chalcogenides by iodine vapor transport", Journal of Crystal Growth, vol. 1, pp. 52-53, Oct. 1966 (doi:10.1016/0022-0248(67)90009-7).
- [2] K. Ito, T. Nakazawa, "Electrical and optical properties of stannite-type quaternary", Japanese Journal of Applied Physics, vol. 27, pp. 2094-2097, Sep. 1988.
- [3] X. Song, X. Ji, M. Li, W. Lin, X. Luo, H. Zhang, "A review on development prospect of CZTS based thin film solar cells", International Journal of Photoenergy, vol. 2014, May. 2014 (doi:10.1155/2014/613173).
- [4] M. A. Green, E. D. Dunlop, J. Hohl-Ebinger, M. Yoshita, N. Kopikadis, X. Hao, "Solar cell efficiency tables (version 56)", Progress in Photovoltaics: Research and Applications, vol. 28, pp. 629-638, June 2020 (doi:10.1002/pip.3303).
- [5] K. Islam, A. Alnuaimi, H. Ally, Ammar Nayfeh, "ITO, Si_3N_4 and $ZnO:Al$ - Simulation of different anti-reflection coatings (ARC) for thin film a-Si:H solar cells", Institute of Science and Technology, pp. 673-676, 2013 (doi: 10.1109/EMS.2013.112).
- [6] Z.I. Alexieva, Z.S. Nenova, V.S. Bakardjieva, M.M. Milanova, H.M. Dikov, "Antireflection coatings for GaAs solar cell applications", Journal of Physics: Conference Series, 2010 (doi:10.1088/1742-6596/223/1/0-12045).
- [7] M. Moustapha Diop, A. Diaw, N. Mbengue, O. Ba, M. Diagne, O.A. Niasse, B. Ba, J. Sarr, "Optimization and modeling of antireflective layers for silicon solar cells: In search of optimal materials", Materials Sciences and Applications, pp. 705-722, July 2018 (doi:10.4236/msa.2018.98051).
- [8] H. Benzetta, M. Abderrezek, M.E. Djeghlal, "Numerical analysis of potential buffer layer for Cu_2ZnSnS_4 (CZTS) solar cells", Optik, vol. 204, Feb. 2020 (doi:10.1016/j.ijleo.2019.164155).
- [9] K.S. Yee, "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media", IEEE Trans. on Antennas and Propagation, vol. AP-14, pp. 302-307, May. 1966.

- [10] J.R. Nagel, "Advanced methods for light trapping in optically thin silicon solar cells", *Electrical and Computer Engineering*, Dec. 2011 (<https://collections.lib.utah.edu/ark:/87278/s6qc0j64>).
- [11] K. N'Konou, P. Torchio, "Optical absorption modeling of plasmonic organic solar cells embedding Ag-SiO₂ core-shell nanoparticles", *Noble Metal-Metal Oxide Hybrid Nanoparticles: Fundamentals and Applications*, pp. 265-282, 2019 (doi:10.1016/B978-0-12-814134-2.00013-9).
- [12] H. Jia, J. Li, Z. Fang, M. Li, "A new FDTD scheme for Maxwell's equations in Kerr-type nonlinear media", *Springer Science+Business Media, LLC*, Sept. 2018 (doi:10.1007/s11075-018-0602-3).
- [13] S. Royanian, A. Abdolhazadeh Ziabari, R. Yousefi, "Efficiency enhancement of ultra-thin CIGS Solar Cells using bandgap grading and embedding Au plasmonic nanoparticles", *Plasmonics*, vol. 15, pp. 1173-1182, Feb. 2020 (doi:10.1007/s11468-020-01138-2).
- [14] M. Mirzaei, J. Hasanzadeh, A. Abdolhazadeh Ziabari, "Efficiency enhancement of CZTS solar cells using Al plasmonic nanoparticles: The effect of size and period of nanoparticles", *Journal of Electronic Materials*, vol. 49, pp. 7168-7178, Oct. 2020 (doi:10.1007/s11664-020-08524-w).
- [15] B.J. Trzeźniewski, I.A. Digdaya, T. Nagaki, S. Ravishankar, I. Herraiz-Cardona, D.A. Vermaas, A. Longo, S. Gimenez, W.A. Smith, "Near-complete suppression of surface losses and total internal quantum efficiency in BiVO₄ photoanodes", *Energy and Environmental Science*, vol. 10, pp. 1517-1529, May. 2017 (doi:10.1039/c6ee03677e).
- [16] E.D. Palik, "In handbook of optical constants of solids", *Academic Press*, vol. 3, New York, 1998.
- [17] H. Zhao, C. Persson, "Optical properties of Cu(In,Ga)Se₂ and Cu₂ZnSn(S,Se)₄", *Thin Solid Films*, vol. 519, pp. 7508-7512, Jan. 2011 (doi:10.1016/j.tsf.2010.12.217).
- [18] V. Tunuguntla, W.C. Chen, P.H. Shih, I. Shown, Y.R. Lin, J.S. Hwang, C.H. Lee, L.C. Chen, K.H. Chen, "A nontoxic solvent based sol-gel Cu₂ZnSnS₄ thin film for high efficiency and scalable low-cost photovoltaic cells", *Journal of Materials Chemistry A*, vol. 3, pp. 15324-15330, May. 2015 (doi:10.1039/c5ta02833g).
- [19] G. K. Dalapati, S. Zhuk, S. Masudy-Panah et al, "Impact of molybdenum out diffusion and interface quality on the performance of sputter grown CZTS based solar cells", *Scientific Reports*, vol. 7, pp. 1-12, May. 2017 (doi:10.1038/s41598-017-01605-7).

زیر نویس‌ها:

1. Anti-reflection coatings
2. Sol-gel
3. Solar cell capacitance simulator
4. Finite-difference time-domain
5. Drift diffusion equations
6. Destructive interference
7. Poynting
8. Integrated quantum efficiency
9. Fill factor
10. External quantum efficiency styles
11. Transparent conductive oxides