

## طراحی و شبیه‌سازی سلول خورشیدی اتصال شاتکی گرافن/سیلیکن شانه‌ای بر پایه فلزکاری نامتقارن به منظور افزایش

## بازدهی

زینب پورمحمدی<sup>۱</sup>، عاطفه رحمانی نژاد<sup>۲</sup>، مینا امیر مزلقانی<sup>۳</sup><sup>۱</sup> کارشناسی ارشد برق افزارهای میکروناوالکترونیک، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، z.pourmohammadi@srttu.edu<sup>۲</sup> کارشناسی ارشد برق الکترونیک، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی<sup>۳</sup> استادیار دانشکده برق، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی

## چکیده

با استفاده از گرافن در ساختار شاتکی سلول خورشیدی گرافن/سیلیکن، نه تنها می‌توان از خواص منحصر بفرد این ماده به عنوان الکتروود استفاده کرد بلکه امکان بهره‌مندی از آن به عنوان ماده جاذب نیز فراهم می‌شود. در این مقاله، دو ساختار جدید از سلول خورشیدی بر پایه پیوند گرافن/سیلیکن پیشنهاد شده است که در آن‌ها امکان جمع‌آوری حامل‌های نوری تولید شده در گرافن، علاوه بر سیلیکن، وجود دارد و این موضوع موجب افزایش بازدهی سلول خورشیدی می‌شود. در پیوند شاتکی گرافن/سیلیکن، میدان الکتریکی ذاتی ایجاد شده در اثر سد شاتکی مابین گرافن و سیلیکن، موجب جداشدن زوج‌های الکترون-حفره تولید شده در سیلیکن شده و جریان نوری در مدار خارجی را موجب می‌شود. در ساختارهای پیشنهادی با ایجاد میدان الکتریکی دیگری در سطح گرافن، امکان تفکیک زوج‌های الکترون-حفره تولید شده در گرافن نیز فراهم می‌شود. این میدان الکتریکی با بهره‌گیری از اثر فلزکاری سطح گرافن بر روی باند دیاگرام آن ایجاد می‌شود. فلزکاری معمول برای اینگونه قطعات دارای ساختاری پنجره‌ای شکل می‌باشد. در چنین ساختاری از گرافن تنها به عنوان الکتروود نیمه شفاف بهره گرفته می‌شود. دو ساختار پیشنهادی، ساختار فلزکاری نامتقارن و شانه‌ای می‌باشند. نتایج شبیه‌سازی‌های انجام شده با نرم‌افزار TCAD Silvaco حاکی از آن است که در سلول خورشیدی اتصال شاتکی گرافن/سیلیکن با ساختار معمول (پنجره‌ای) بازدهی تبدیل توان قطعه ۲۷٪ است در صورتیکه از طریق فلزکاری نامتقارن با استفاده از فلزات با تابع کار متفاوت، بازدهی تبدیل توان قطعه به ۳۵٪ خواهد رسید و با استفاده از فلزکاری سطح بصورت شانه‌ای، این مقدار به ۴۳٪ افزایش می‌یابد.

## کلیدواژه

گرافن، سلول خورشیدی اتصال شاتکی، TCAD Silvaco، فلزکاری سطح

## مقدمه

الکتریکی داخلی پیوند شاتکی از هم تفکیک شده و توسط الکتروودها جمع‌آوری می‌شوند [۳]. در واقع فیلم گرافن یک ترکیب منحصر بفرد از رسانایی الکتریکی بالا و شفافیت نوری در نواحی نور مرئی و مادون قرمز نزدیک را داراست که آن را به یک گزینه مناسب برای استفاده در سلول‌های خورشیدی تبدیل کرده است [۴].

تاکنون ساختارهای مختلفی از سیلیکن، از جمله آرایه‌های ستونی [۵]، نانوسیم‌ها [۶ و ۷] و آرایه‌های میکرو حفره‌ای [۸] در اتصال شاتکی با گرافن جهت ساخت سلول‌های خورشیدی مورد بررسی قرار گرفته‌اند. از سوی دیگر بهینه‌سازی تعداد لایه-های گرافن [۴]، استفاده از نانو نوارهای گرافن [۹]، و آرایش

نگرانی‌های گسترده در مورد منابع انرژی، موجی از تلاش‌ها را برای کشف و گسترش سلول‌های خورشیدی به راه انداخته است. سد شاتکی که از اتصال یک فلز با نیمه‌رسانای آلیایش شده ایجاد می‌شود، از جمله ساختارهای پذیرفته شده برای تبدیل انرژی خورشیدی به الکتریسیته است. اتصال شاتکی در مقایسه با اتصال pn محاسنی از قبیل عمومیت مواد مورد استفاده، هزینه کم و فرآیند ساخت آسان را داراست [۱]. در میان سلول‌های خورشیدی سد شاتکی، اتصال شاتکی گرافن و سیلیکن در سال-های اخیر بطور گسترده‌ای از سوی محققین و پژوهشگران مورد استقبال قرار گرفته است. در چنین سلولی، با توجه به جذب ۲/۳ گرافن در محدوده نور مرئی و فروسرخ نزدیک [۲]، نور خورشید به داخل آن نفوذ کرده و به سد شاتکی می‌رسد. زوج-های الکترون-حفره تولید شده در سیلیکن، در اثر میدان

وقتی اهمیت بیشتری پیدا می‌کند که از گرافن به جای فلز در پیوند شاتکی استفاده می‌شود. گرافن قابلیت جذب امواج الکترومغناطیس در محدوده فرسرخ نزدیک و فرسرخ میانی را دارد. چنانچه بتوان به طریقی حامل‌های نوری تولید شده در گرافن را نیز در مدار خارجی جذب نمود، می‌توان علاوه بر طیف مرئی نور خورشید، از فرسرخ نیز در تولید جریان و ولتاژ استفاده نمود. قابل ذکر است که توان تولید شده به ازای تابش‌های فرسرخ در گرافن، بسیار کمتر از توان تولید شده به ازای نور مرئی در سیلیکن خواهد بود، اما این موضوع در مناطقی که تابش نور خورشید کم است از اهمیت ویژه‌ای برخوردار خواهد بود.

در این مقاله، دو ساختار نامتقارن و شانه‌ای برای فلزکاری سطح قطعه پیشنهاد شده و با ساختار معمولی که برای فلزکاری سطح سلول‌های خورشیدی اتصال شاتکی Gr/Si استفاده می‌شود، مقایسه شده‌اند. در هر دو ساختار پیشنهادی با ایجاد میدان الکتریکی در لایه گرافن، عملیات تفکیک زوج‌های الکترون-حفره تولیدی در گرافن تا حد امکان بهبود بخشیده شده و جریان نوری کل افزایش یافته است.

به منظور تست ساختارهای طراحی شده، شبیه‌سازی با استفاده از نرم‌افزار TCAD Silvaco انجام گرفته است. نتایج شبیه‌سازی حاکی از افزایش ۱/۳ و ۱/۶ برابری بازدهی تبدیل توان قطعه با استفاده از ساختارهای پیشنهادی نسبت به ساختار معمول می‌باشد.

## طراحی و شبیه‌سازی

### ۱- سلول خورشیدی شاتکی Gr/Si با الکتروود پنجره‌ای

ساختار سلول خورشیدی اتصال شاتکی گرافن/سیلیکن بطور معمول متشکل از یک بستر سیلیکونی می‌باشد که یک لایه اکسید سیلیکن بر روی آن رشد داده شده است. بر روی این ویفر، فلز الکتروود لایه‌نشانی می‌شود. به منظور اتصال گرافن با سیلیکن، ابتدا پنجره‌ای بر روی اکسید و فلز باز می‌شود و سپس گرافن بر روی سطح قطعه منتقل می‌شود بطوریکه از طریق پنجره‌ی باز شده با سیلیکن در تماس است و از اطراف بر روی اتصال فلزی پنجره‌ای شکل قرار دارد. در واقع اکسید مابین فلز و سیلیکن تنها جهت اطمینان از عدم اتصال فلز با سیلیکن در ساختار منظور می‌شود. الکتروود دوم نیز معمولاً از پشت ویفر سیلیکونی گرفته می‌شود [۱ و ۳ و ۱۴].

با توجه به آنکه در هنگام شبیه‌سازی مشکل اتصال فلز سطحی با سیلیکن و انتقال گرافن بر روی سطح قطعه وجود ندارد، ساختار معمول برای سلول خورشیدی سد شاتکی Gr/Si به صورت شکل ۱ در نظر گرفته می‌شود که در آن گرافن بر روی

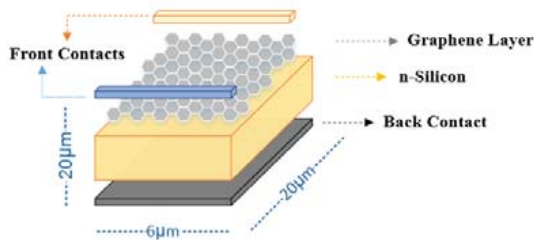
گرافن با موادی همچون TFSA<sup>۱</sup> [۱۰]، HNO<sub>3</sub> و نانوذرات طلا [۳]، SOCl<sub>2</sub> [۷]، AuCl<sub>3</sub> [۸]، P<sub>3</sub>HT [۱۳] و اکسید گرافن [۱۴] نیز جهت ارتقاء بازدهی سلول‌های خورشیدی مورد ارزیابی گروه-های مختلفی قرار گرفته‌اند. در این میان، آلایش دوگانه گرافن با نیتريد اسید و نانوذرات طلا با دستیابی به ماکزیمم بازدهی تبدیل توان ۱۰/۲۰٪ [۳] و اتصال آرایه‌های میکرو حفره سیلیکن و گرافن آلایش شده با AuCl<sub>3</sub> بازدهی تبدیل توان ۱۰/۴۰٪ [۸] را می‌توان از جمله راهکارهای موفقیت‌آمیز جهت بهبود بازدهی سلول خورشیدی سد شاتکی Graphene/Si برشمرد. راهکاری که ما برای بهبود بازدهی این قطعه پیشنهاد می‌کنیم، طراحی ساختار قطعه با هدف بهره‌مندی از خواص ممتاز شبه‌فلز گرافن با رویکردی متفاوت است.

زوج‌های الکترون-حفره تولید شده در شبه‌فلز گرافن در اثر تابش نور بطور طبیعی در زمانی در حدود چند پیکوثانیه بازترکیب شده و از بین می‌روند. با توجه به طول عمر کوتاه حامل‌های نوری در گرافن، بر خلاف سایر نیمه‌رساناها، جریان نفوذی حاصل از این حامل‌ها قابل صرف نظر کردن است [۱۱]. بنابراین تولید جریان نوری در گرافن به وجود یک میدان الکتریکی محلی در سطح وابسته است. بزرگی جریان نوری بطور مستقیم با استفاده از قدرت این میدان محاسبه می‌شود. با توجه به اینکه برای گرفتن اتصال از گرافن نیاز به اتصال فلز بر روی آن هست؛ بنابراین می‌توان از این اتصال به منظور ایجاد میدان الکتریکی داخلی بهره برد. زمانیکه گرافن با یک فلز اتصال پیدا می‌کند، به دلیل اثر متقابل فلز و گرافن از نظر شیمیایی و همچنین انتقال الکترون بین فلز و گرافن، سطح فرمی در گرافن جابجا می‌شود و در نتیجه گرافن با الکترون‌ها و یا حفره‌ها آلایش می‌شود [۱۲]. حال اگر، فلزهای بر روی سطح گرافن، دارای توابع کار متفاوت باشند در نتیجه‌ی جابجایی حامل‌ها و ایجاد شیب در سطح فرمی در عرض قطعه، میدان الکتریکی داخلی مورد نیاز برای جمع‌آوری حامل‌ها در گرافن فراهم خواهد شد. بنابراین در این ساختار علاوه بر جمع‌آوری حامل‌های ایجاد شده در سیلیکن توسط میدان الکتریکی ناشی از سد شاتکی، حامل‌های تولید شده در گرافن نیز توسط میدان الکتریکی ناشی از فلزکاری سطح جمع‌آوری می‌شوند و در نتیجه جریان نوری کل افزایش می‌یابد. معمولاً امکان استفاده از حامل‌های ایجاد شده در فلز زمانی که از پیوند شاتکی برای سلول خورشیدی استفاده می‌شود وجود ندارد. ایده نوآورانه مقاله، استفاده از میدان‌های الکتریکی سطحی در گرافن با استفاده از فلزکاری نامتقارن در کنار پیوند شاتکی است که علاوه بر حامل‌های نوری تولید شده در نیمه‌هادی، بتوان از حامل‌های نوری تولید شده در گرافن نیز، بهره برد. این موضوع

<sup>۱</sup> (CF3SO2)2NH

## ۲- سلول خورشیدی شاتکی Gr/Si با ساختار پیشنهادی فلزکاری نامتقارن

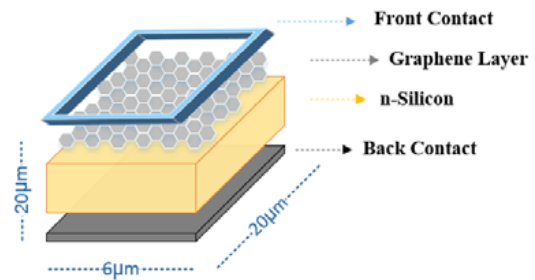
چنانچه مطرح شد زمانیکه گرافن با یک فلز اتصال پیدا می‌کند، به دلیل اثر متقابل فلز و گرافن از نظر شیمیایی و همچنین انتقال الکترون بین فلز و گرافن، سطح فرمی در گرافن جابجا می‌شود و در نتیجه گرافن با الکترون‌ها و یا حفره‌ها آرایش می‌شود. مقدار و علامت آلودگی با استفاده از اختلاف تابع کار فلز و گرافن تعیین می‌شود. با استفاده از این خصوصیت، ساختار شکل ۳ به منظور فلزکاری سطح پیشنهاد می‌شود. در این ساختار به دلیل انتخاب دو نوع فلز با تابع کار مختلف، مقدار آلودگی در دو انتهای صفحه گرافن متفاوت خواهد بود. بنابراین در اثر جابجایی سطح فرمی در دو انتهای صفحه گرافن، سطح فرمی دارای شیب نامتقارن خواهد شد و میدان الکتریکی مورد نیاز برای تفکیک حامل‌ها در این نواحی تأمین می‌شود.



شکل ۳. شکل شماتیک سلول خورشیدی اتصال شاتکی  
گرافن/سیلیکن با فلزکاری نامتقارن

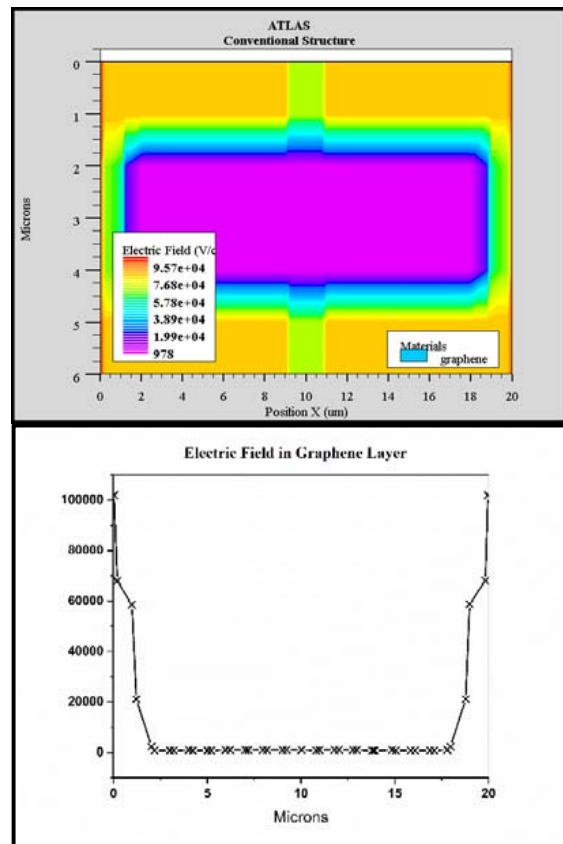
پروفیل میدان الکتریکی بدست آمده در لایه گرافن با توجه به ساختار پیشنهادی با فلزکاری نامتقارن در شکل ۴ ارائه شده است. همانطور که مشخص است، در صورت استفاده از دو فلز با تابع کار متفاوت، پروفیل میدان الکتریکی در داخل قطعه، متقارن نبوده و این امر موجب می‌شود که برآیند جریان نوری بدست آمده از حامل‌های گرافن صفر نباشد. بنابراین انتظار می‌رود که جریان حاصل از حامل‌های تولید شده در گرافن به جریان نوری قطعه اضافه شود. نتایج شبیه‌سازی در قسمت بعد، افزایش جریان نوری را در حالتی که از فلزهای نامتقارن به جای فلزهای متقارن استفاده شده است، نشان می‌دهد. نکته‌ی قابل توجه در شکل ۲ و ۴ این است که اگرچه پروفیل نامتقارن میدان به هنگام استفاده از فلزات متفاوت موجب ایجاد جریان نوری در صفحه گرافن می‌شود، اما همچنان در بیشتر سطح گرافن، این میدان داخلی صفر است و جریان نوری تنها در اطراف الکترودها وجود دارد. برای گسترش این میدان نامتقارن در بیشتر سطح گرافن، استفاده از الکترودهای شانه‌ای با تابع کارهای متفاوت پیشنهاد می‌شود. این ایده در قسمت بعد، بررسی و پیاده‌سازی شده است.

سیلیکن واقع شده و فلزکاری سطح آن به شکل پنجره‌ای می‌باشد.



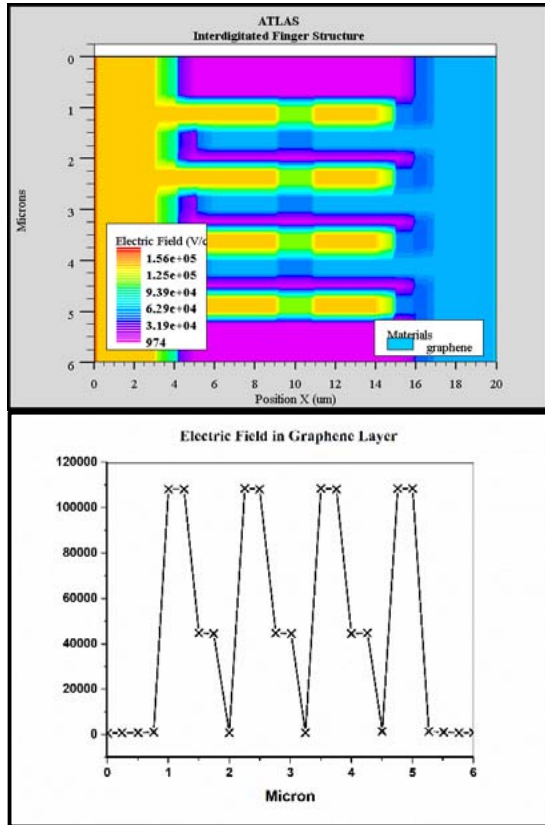
شکل ۱. شکل شماتیک سلول خورشیدی اتصال شاتکی  
گرافن/سیلیکن با فلزکاری پنجره‌ای

در این نوع فلزکاری که با عنوان پنجره‌ای نامیده می‌شود، با توجه به حضور میدان الکتریکی محلی نزدیک سطح تماس گرافن/فلز، زوج‌های الکترون-حفره نزدیک این محل تفکیک شده و می‌توانند در تولید جریان نوری مشارکت کنند اما با توجه به متقارن بودن پروفیل میدان در صفحه گرافن، چنانچه در شکل ۲ نیز مشاهده می‌شود، جریان نوری کل حاصل از تفکیک زوج‌های الکترون-حفره در گرافن صفر خواهد بود. همچنین در نواحی دور از این محل نیز به دلیل نبود میدان الکتریکی قوی، زوج‌های الکترون-حفره تولیدی در گرافن بازترکیب خواهند شد.



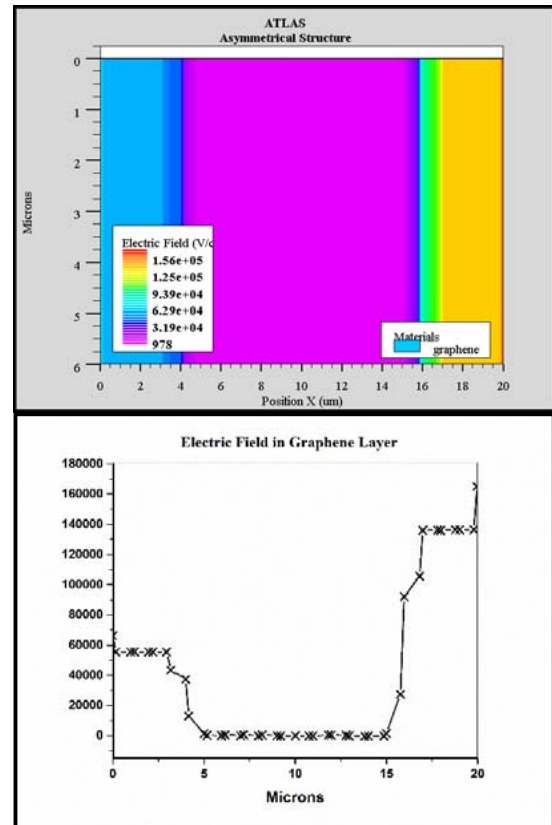
شکل ۲. پروفیل میدان الکتریکی در لایه گرافن در ساختار پنجره‌ای

در این ساختار که به ساختار شانه‌ای یا انگشتی معروف است، اتصالات فلزی با عرض  $0.25$  میکرومتر و طول  $10$  میکرومتر، در طول قطعه گسترده شده‌اند بدون آنکه مانع از نفوذ نور به درون قطعه شوند. چنانچه در شکل ۶ مشخص است، این ساختار امکان ایجاد میدان الکتریکی قوی در کل سطح گرافن را فراهم خواهد کرد.



شکل ۶. پروفیل میدان الکتریکی در لایه گرافن در ساختار شانه‌ای

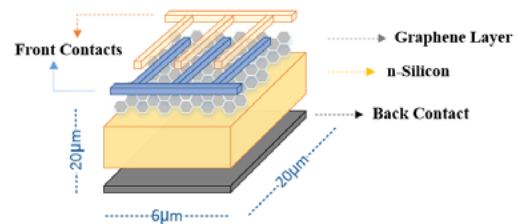
اگر در ساختار ارائه شده، هر دو الکتروود از یک فلز باشند آنگاه پروفیل میدان الکتریکی داخلی بین دو شانه مجاور بصورت شکل ۷-الف خواهد بود و بنابراین جریان نوری کل صفر خواهد شد. اما در صورتیکه الکتروودها از دو جنس مخالف باشند پروفیل میدان الکتریکی بین دو شانه مجاور مطابق شکل ۷-ب خواهد شد و جریان نوری مجاور هر الکتروود با یکدیگر هم جهت بوده و جریان نوری کل افزایش خواهد یافت [۱۵]. بنابراین در ساختار ملاحظه انتخاب شده‌اند تا جریان نوری کل بیشینه شود.



شکل ۴. پروفیل میدان الکتریکی در لایه گرافن در ساختار نامتقارن. همان‌طور که مشخص است، میدان الکتریکی در نزدیکی الکتروودها متقارن نیست و این امر موجب خواهد شد که برآیند جریان نوری تولید شده در لایه گرافن صفر نباشد.

### ۳- سلول خورشیدی شاتکی Gr/Si با ساختار پیشنهادی فلزکاری شانه‌ای

بهینه‌سازی فلزکاری سطح به اینجا ختم نمی‌شود. چرا که جریان نفوذی زوج‌های الکترون-حفره تولید شده در گرافن در ساختار فلزکاری نامتقارن همچنان به دلیل دور بودن نواحی مرکزی از فلزکاری سطح و طول عمر کوتاه این حامل‌ها، کم است. ساختاری که در این مقاله به منظور بهره‌مندی حداکثری از امکان تولید زوج‌های الکترون-حفره در گرافن پیشنهاد می‌شود، بصورت شماتیک در شکل ۵ ارائه شده است.



شکل ۵. شکل شماتیک سلول خورشیدی اتصال شاتکی گرافن/سیلیکن با فلزکاری شانه‌ای نامتقارن

جدول ۱. پارامترهای شبیه‌سازی قطعات در محیط Atlas

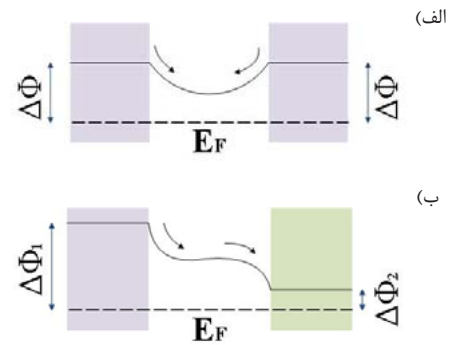
مقادیر	پارامترها
0 (eV)	بندگپ گرافن در ۳۰۰ کلوبین (EG300)
4.8 (eV)	میزان الکترون‌خواهی گرافن
15000 (cm <sup>2</sup> /V s)	میزان تحرک‌پذیری حفره‌ها در گرافن
15000 (cm <sup>2</sup> /V s)	میزان تحرک‌پذیری الکترون‌ها در گرافن
25	ثابت دی الکترونیک گرافن
10 <sup>16</sup> (cm <sup>-3</sup> )	مقدار آرایش سیلیکن از نوع n

به‌منظور محاسبه بازدهی تبدیل توان سلول خورشیدی ( $\eta$ )، لازم است مقادیر ولتاژ مدار باز ( $V_{oc}$ )، جریان اتصال کوتاه ( $I_{sc}$ ) و ضریب انباشت (FF) سلول خورشیدی از روی منحنی مشخصه قطعه استخراج شوند. جریان اتصال کوتاه، مقدار جریان قطعه در ولتاژ صفر و ولتاژ مدار باز، مقدار ولتاژ قطعه در جریان صفر هستند. طبق رابطه ۱، ضریب انباشت با استفاده از مقادیر جریان و ولتاژ در بیشینه توان ( $I_{mp}$  و  $V_{mp}$ ) محاسبه می‌شود. بازدهی تبدیل توان قطعات نیز طبق رابطه ۲ محاسبه می‌شود. در این رابطه  $P_s$  تابش ورودی خورشید است.

شکل ۸ منحنی جریان-ولتاژ ساختار پنجره‌ای را تحت تابش و در حالت تاریکی نشان می‌دهد. با توجه به این منحنی جریان اتصال کوتاه و ولتاژ مدار باز به ترتیب برابر  $3.05 \text{ mA/cm}^2$  و  $0.185 \text{ V}$  می‌باشند. طبق رابطه ۱ مقدار ضریب انباشت  $0.575$  است و با توجه به رابطه ۲ بازدهی تبدیل توان این قطعه تحت تابش  $100 \text{ mW/cm}^2$  برابر با  $2/7\%$  محاسبه می‌شود.

$$FF = \frac{P_{max}}{P_T} = \frac{P_{max}}{V_{oc}I_{sc}} = \frac{V_{mp}I_{mp}}{V_{oc}I_{sc}} \quad (1)$$

$$\eta = \frac{FF \cdot V_{oc}I_{sc}}{P_s} \quad (2)$$



شکل ۷. الف) پروفیل میدان الکتریکی داخلی بین دو شانه مجاور با تابع کار یکسان. ب) پروفیل میدان الکتریکی داخلی بین دو شانه مجاور با تابع کار متفاوت

### نتایج شبیه‌سازی

به منظور بررسی تأثیر فلزکاری سطح بر روی عملکرد سلول خورشیدی اتصال شاتکی سیلیکن/گرافن، ساختارهای طراحی شده به کمک محیط Atlas در نرم‌افزار TCAD Silvaco شبیه‌سازی شدند.

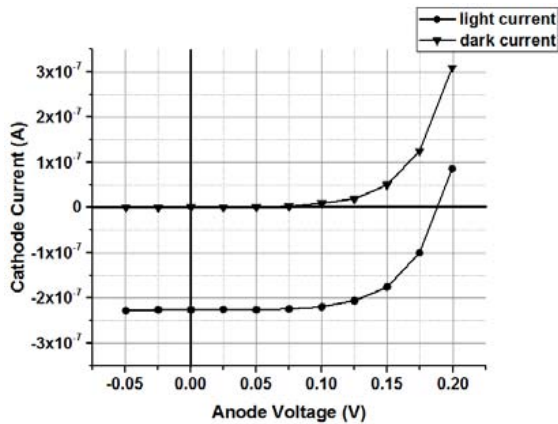
برنامه شبیه‌سازی از طریق حل معادلات پواسون، پیوستگی و چگالی جریان، با استفاده از مدل‌های تعریف شده وابستگی‌های لازم را در نظر گرفته و به ما این امکان را می‌دهد که عملکرد سلول‌های خورشیدی طراحی شده را تحت تابش و در حالت تاریکی برآورد کنیم. در این شبیه‌سازی ابتدا ماده گرافن با استفاده از دستورات مربوط به تعریف مواد جدید در محیط Atlas در سیلوکو تعریف شده است. خصوصیات این ماده در کتابخانه‌ای حاوی مشخصات فیزیکی آن، برای نرم‌افزار تعریف می‌شود. پارامترهای فیزیکی مورد استفاده در شبیه‌سازی گرافن در جدول ۱ خلاصه شده است. پارامترهای اپتیکی مستخرج از مرجع ۱۶ نیز در کتابخانه‌ای بصورت جداگانه فراهم آمده و در اختیار نرم‌افزار قرار گرفته است. به منظور تعریف دقیق‌تر گرافن و در نظر گرفتن خواص نوری آن، فایل متشکل از ضرایب شکست<sup>۲</sup> و ضرایب خاموشی<sup>۳</sup> در طول موج‌های بین  $0.5$  تا  $2 \mu\text{m}$  که از اندازه‌گیری‌های عملی بدست آمده است [۱۶]، تهیه و علاوه بر پارامترهای ذکر شده، برای شبیه‌سازی مورد استفاده قرار گرفته است. سپس با تعریف ساختارهای طراحی شده در محیط Atlas، مشخصه جریان-ولتاژ قطعات تحت تابش و در حالت تاریکی استخراج شدند.

<sup>4</sup> the input solar irradiance  
<sup>5</sup> Fill Factor

<sup>2</sup> Refractive index  
<sup>3</sup> extinction coefficient



الکتریکی در کل سطح گرافن و همچنین امکان بهره‌مندی از جریان نفوذی حامل‌ها در این ماده، نه تنها کاهش سطح مؤثر جذب نور جبران شده است بلکه جریان نوری نسبت به دو ساختار قبلی به مقدار زیادی افزایش یافته است.



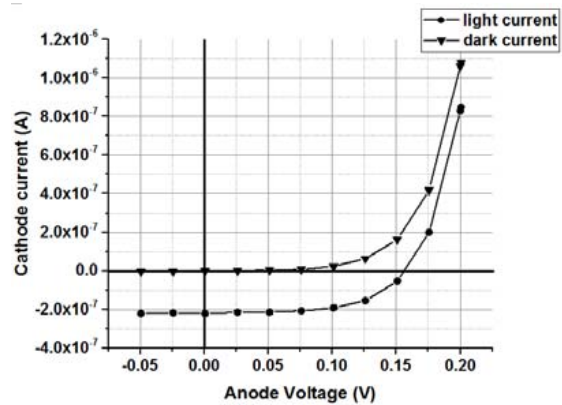
شکل ۱۰. مشخصه جریان-ولتاژ سلول خورشیدی اتصال شاتکی Gr/Si با ساختار شانه‌ای تحت تابش و در حالت تاریکی

نتایج حاصل از شبیه‌سازی دو ساختار پیشنهادی نسبت به ساختار معمول برای سلول‌های خورشیدی اتصال شاتکی Gr/Si در جدول ۲ خلاصه شده است. چنانچه مشاهده می‌شود با بهینه‌سازی فلزکاری اتصالات گرافن، می‌توان بازدهی تبدیل توان قطعه را بطور قابل توجهی افزایش داد.

جدول ۲. نتایج حاصل از شبیه‌سازی سلول‌های خورشیدی بررسی شده

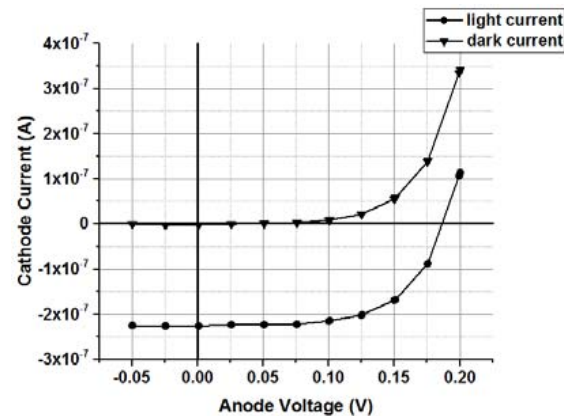
ساختار	Voc (V)	Isc (mA/cm <sup>2</sup> )	FF (%)	η (%)
ساختار معمول	0.155	305	0.57	2.7
ساختار با فلزکاری نامتقارن	0.185	312.8	0.603	3.5
ساختار با فلزکاری شانه‌ای	0.17	417.35	0.606	4.3

برای مقایسه نتایج بدست آمده در این مقاله با سایر مقالات ارائه شده در این زمینه، مقادیر بدست آمده در این مقاله در جدول ۳ با سایر مقالات مقایسه شده است. ساختار پنجره‌ای با زیر لایه سیلیکونی ساده و بدون آلاییدگی (همانند ساختار پنجره‌ای مرسوم ارائه شده در این مقاله) برای اولین بار در مرجع ۱ ساخته شده و بازدهی برابر با ۱/۵٪ برای این قطعه گزارش شده است. ساختار مشابه مذکور در مرجع ۴ در سال ۲۰۱۶ به روش مشابه ساخته و تست شده است که بازدهی به دست آمده در بازه ۰/۴٪ تا ۱/۴۸٪ بر حسب تعداد لایه‌های گرافنی از ۱ تا ۴ لایه متفاوت



شکل ۸. مشخصه جریان-ولتاژ سلول خورشیدی اتصال شاتکی Gr/Si با ساختار پنجره‌ای تحت تابش و در حالت تاریکی

مشخصه جریان-ولتاژ ساختار نامتقارن شکل ۳ که امکان ایجاد میدان الکتریکی در طول قطعه را فراهم می‌کند در شکل ۹ نشان داده شده است. با توجه به این منحنی مقادیر جریان اتصال کوتاه و ولتاژ مدار باز به ترتیب برابر با ۳۱۲/۸ mA/cm<sup>2</sup> و ۰/۱۸۵ V می‌باشند. با توجه به رابطه ۱ مقدار ضریب انباشت برای این قطعه ۰/۶ بدست خواهد آمد و بازدهی تبدیل توان آن نیز طبق رابطه ۲، ۳/۵٪ محاسبه خواهد شد. چنانچه پیش‌بینی می‌شد بازدهی قطعه با استفاده از این ساختار بهبود یافته است.



شکل ۹. مشخصه جریان-ولتاژ سلول خورشیدی اتصال شاتکی Gr/Si با ساختار نامتقارن تحت تابش و در حالت تاریکی

با توجه به نتایج حاصل از شبیه‌سازی ساختار شانه‌ای، مقادیر جریان اتصال کوتاه و ولتاژ مدار باز به ترتیب برابر با ۴۱۷/۳۵ و ۰/۱۷ V می‌باشند (شکل ۱۰). مقدار ضریب انباشت در این ساختار ۰/۶ و طبق رابطه ۲ بازدهی تبدیل توان آن نیز ۴/۳٪ محاسبه می‌شود که نسبت به دو ساختار پیشین بطور قابل ملاحظه‌ای افزایش یافته است. گرچه در این ساختار ناحیه مؤثر برای جذب نور در سطح قطعه کاهش یافته است، اما همانطور که پیش‌بینی می‌شد به دلیل افزایش قدرت میدان

هدف از مقاله ارائه شده، ارائه راهکاری به منظور افزایش بازدهی بر روی سلول گرافنی پایه بوده است به این معنی که سلول گرافنی ارائه شده در حالت پایه پنجره‌ای راندمان ۲/۷٪ داشته که با استفاده از ساختارهای پیشنهادی این مقدار حدود ۱،۵ برابر بیشتر شده و به مقدار ۴/۳٪ افزایش یافته است. وقتی بازدهی ساختار اصلی و پایه افزایش پیدا کند، در صورت استفاده از لایه-هایی که انعکاس را کمتر می‌کنند، مانند پوشش‌های کلونیدی، سیلیکن متخلخل یا اکسید گرافن [۱۴]، می‌توان بازدهی را به مراتب به مقادیری بیشتر از ۱۴/۵٪ و یا ۱۰/۵٪ [۱۴] افزایش داد.

لازم به ذکر است که بازدهی سلول‌های خورشیدی بر پایه پیوند شاتکی گرافن/سیلیکن از مقادیر تجاری کمتر است، اما با توجه به سادگی ساختار در طی سال‌های اخیر مورد توجه بوده است، به طوریکه بازدهی با ارائه راهکارهای مختلف از ۱/۵٪ به ۱۴٪ افزایش یافته است. با استفاده از افزاره پیشنهاد شده در این مقاله در کنار متخلخل نمودن سطح سیلیکن و آلاییدن لایه گرافنی، انتظار می‌رود که بازدهی تا حدود ۲۰٪ افزایش یابد.

### نتیجه‌گیری

در این مقاله نشان داده شد که می‌توان با بهینه‌سازی فلزکاری سطح، بازدهی توان سلول خورشیدی اتصال شاتکی گرافن/سیلیکن را بطور قابل توجهی افزایش داد. با توجه به ویژگی ممتاز گرافن که علاوه بر شفافیت مناسب، امکان جذب نور و تولید زوج الکترون-حفره را داراست، با رویکردهای جدید و مؤثر می‌توان عملکرد قطعات مبتنی بر این ماده را بهبود بخشید. بدین منظور دو ساختار نامتقارن و شانه‌ای برای فلزکاری سطح پیشنهاد شدند. در فلزکاری نامتقارن با استفاده از دو فلز با توابع کار مختلف، میدان الکتریکی مورد نیاز برای تفکیک حامل-ها در صفحه گرافن تأمین شد تا علاوه بر میدان الکتریکی ناشی از سد شاتکی مابین سیلیکن و گرافن که منجر به جمع‌آوری حامل‌های تولیدی در سیلیکن می‌شود، یک میدان الکتریکی سطحی نیز در صفحه گرافن تولید شود تا به کمک آن بتوان حامل‌های تولیدی در گرافن را جمع‌آوری کرد. نتیجه شبیه‌سازی چنین ساختاری افزایش ۱/۳ برابری بازدهی تبدیل توان قطعه نسبت به ساختار معمول، با عنوان ساختار پنجره‌ای بود. در ساختار پیشنهادی دیگر با عنوان فلزکاری شانه‌ای، از طریق گسترش الکترودها به کل سطح گرافن میدان الکتریکی قوی‌تری ایجاد شد که سبب افزایش ۱/۶ برابری بازدهی تبدیل توان قطعه نسبت به ساختار معمول شد.

برای ساخت قطعه مذکور استفاده از گرافن تولید شده به روش شیمیایی پیشنهاد می‌گردد. این نوع گرافن، در مقیاس انبوه قابل

است. ساختار پنجره‌ای ساده‌ی مذکور در بالا، بار دیگر به روش مشابه در مرجع ۱۴ ساخته شده و بازدهی برابر با ۳/۴٪ گزارش شده است. نتایج بدست آمده در این مقاله که بر پایه شبیه‌سازی است (بازدهی برابر با ۲/۷٪) در مقایسه با مقادیر عملی گزارش شده، در یک محدوده هستند، که البته این مقدار با استفاده از ایده ارائه شده در این مقاله به ۴/۳٪ افزایش یافته است. از سوی دیگر می‌توان با ارائه راهکارهایی مناسب، ضریب انعکاس زیر لایه سیلیکنی را کاهش داد و یا هدایت لایه گرافنی را زیاد کرد که در این صورت بازدهی سلول پایه به مقادیر بیشتری افزایش پیدا می‌کند. مراجع ۳، ۴، ۵، ۶، ۷، ۸، ۱۰، ۱۳، ۱۴ به ترتیب راهکارهایی از جمله استفاده از لایه ضد انعکاس اکسید گرافن، افزایش تعداد لایه‌های گرافن، آلاییدن زیر لایه سیلیکنی با استفاده از  $HNO_3$  و استفاده از آرایه‌های ستونی، استفاده از سیلیکن متخلخل به همراه آلاییدگی با  $NH_3$ ، آلاییدن با استفاده از  $SOCl_2$ ، استفاده از سیلیکن با حفره‌های میکرومتری و آلاییدگی به کمک  $AuCl_3$ ، آلاییدگی به کمک  $P_3HT$  و پوشش-دهی سطح با استفاده از اکسید گرافن را ارائه نموده‌اند و توانسته‌اند به بازدهی در محدوده ۱۰ تا ۱۴ درصد دست پیدا کنند.

جدول ۳: مقایسه ساختارهای ارائه شده در مقالات مرجع با ساختار

پیشنهادی

شماره مرجع	نوع ساختار	آلاینده گرافن	ماکزیم بازدهی
پیشنهاد این مقاله	فلزکاری شانه‌ای	-	4.3%
۱	پنجره‌ای ساده	-	1.9%
۳	پنجره‌ای ساده	Au NPs & $HNO_3$	10.2%
۴	پنجره‌ای ساده	-	4%
۵	پنجره‌ای با آرایه‌های ستونی سیلیکن	$HNO_3$	1.96% 3.55%
۶	پنجره‌ای با نانوسیم-های سیلیکن	-	2.15%
۷	پنجره‌ای با نانوسیم-های سیلیکن	-	1.25%
		$SOCl_2$	2.86%
۸	پنجره‌ای با آرایه‌های میکروحفره‌ای سیلیکن	$AuCl_3$	10.40%
۱۰	پنجره‌ای ساده	TFSA	8.6%
۱۳	پنجره‌ای با آرایه‌های نانوحفره‌ای سیلیکن	$P_3HT$	10.297%
۱۴	پنجره‌ای ساده	GO	10.6%

- Guo, and Dehai Wu, "Graphene/Silicon Nanowire Schottky Junction for Enhanced Light Harvesting", ACS Appl. Mater. Interfaces, 2011, 3, 721-725
- [8] Chao Xie, Xiujuan Zhang, Kaiqun Ruan, Zhibin Shao, Sunny Singh Dhaliwal, Liu Wang, Qing Zhang, Xiwei Zhang and Jiansheng Jie, "High-efficiency, air stable graphene/Si micro-hole array Schottky junction solar cells", J. Mater. Chem. A, 2013, 1, 15348
- [9] Chao Xie, Jiansheng Jie, Biao Nie, Tianxin Yan, Qiang Li, Peng Lv, Fangze Li, Mingzheng Wang, Chunyan Wu, Li Wang, and Linbao Luo, "Schottky solar cells based on graphene nanoribbon/multiple silicon nanowires junctions", Appl. Phys. Lett. , 2012, 100, 193103
- [10] Xiaochang Miao, Sefaattin Tongay, Maureen K. Petterson, Kara Berke, Andrew G. Rinzler, Bill R. Appleton and Arthur F. Hebard, "High Efficiency Graphene Solar Cells by Chemical Doping", Nano Lett. 2012, 12, 2745-2750
- [11] T. Mueller, F. Xia, M. Freitag, J. Tsang, and Ph. Avouris, "The role of contacts in graphene transistors: A scanning photocurrent study", Phys. Rev. B, 2009, 79, 245430
- [12] G. Giovannetti, P. A. Khomyakov, G. Brocks, V. M. Karpan, J. van den Brink, and P. J. Kelly, "Doping Graphene with Metal Contacts", PHYSICAL REVIEW LETTERS, 2008, 101, 026803
- [13] Xiaozhen Zhang, Chao Xie, Jiansheng Jie, Xiwei Zhang, Yiming Wu and Wenjun Zhang, "High-efficiency graphene/Si nanoarray Schottky junction solar cells via surface modification and graphene doping", J. Mater. Chem. A, 2013, 1, 6593
- [14] S. Yavuz, C. Kuru, D. Choi, A. Kargar, S. Jin, and P.R. Bandaru, "Graphene oxide as a p-dopant and anti-reflection coating layer, in graphene /silicon solar cells", Nanoscale, 2016, 8, 6473-6478
- [15] Thomas Mueller, Fengnian Xia and Phaedon Avouris, "Graphene photodetectors for high-speed optical Communications", Nature Photonics, 2010, 4, 297-301
- [16] Xiaoying HE, Min XU, Xiangchao ZHANG, Hao ZHANG, "A tutorial introduction to graphene-microfiber waveguide and its applications", Front. Optoelectron. 2016, 9: 535

تولید بوده و می توان آن را به روش لایه نَشانی دورانی، بر روی زیر لایه سیلیکنی لایه نَشانی کرد. با استفاده از روش لایه نَشانی دورانی و فعال کردن زیر لایه سیلیکنی، می توان گرافن تولید شده به روش شیمیایی را با ضخامت هایی کمتر از ۱۰۰ نانومتر بر روی بستر، لایه نَشانی نمود.

## سپاس گذاری

با تشکر از دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی که از این پژوهش طبق قرارداد شماره ۲۲۵۰۱ مورخ ۹۵/۸/۲۶ حمایت نموده اند.

## مراجع

- [1] Yu Ye and Lun Dai, "Graphene-based Schottky junction solar cells", J. Mater. Chem. ,2012, 22, 24224
- [2] R. R. Nair, P. Blake, A. N. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. R. Peres, A. K. Geim, "Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene", SCIENCE, 6 JUNE 2008 VOL 320
- [3] X. Liu, X. W. Zhang, J. H. Meng, Z. G. Yin, L. Q. Zhang, H. L. Wang, and J. L. Wu, "High efficiency Schottky junction solar cells by co-doping of graphene with gold nanoparticles and nitric acid", Applied Physics Letters, 2015, 106, 233901
- [4] Y. F. Li, W. Yang, Z. Q. Tu, Z. C. Liu, F. Yang, L. Q. Zhang, and R. Hatakeyama, "Schottky junction solar cells based on graphene with different numbers of layers", Applied Physics Letters, 2014, 104, 043903
- [5] Tingting Feng, Dan Xie, Yuxuan Lin, Yongyuan Zang, Tianling Ren, Rui Song, Haiming Zhao, He Tian, Xiao Li, Hongwei Zhu, and Litian Liu, "Graphene based Schottky junction solar cells on patterned silicon-pillar array substrate", Appl. Phys. Lett. , 2011, 99, 233505
- [6] Chao Xie, Peng Lv, Biao Nie, Jiansheng Jie, Xiwei Zhang, Zhi Wang, Peng Jiang, Zhizhong Hu, Linbao Luo, Zhifeng Zhu, Li Wang, and Chunyan Wu, "Monolayer graphene film/silicon nanowire array Schottky junction solar Cells", Appl. Phys. Lett. ,2011, 99, 133113
- [7] Guifeng Fan, Hongwei Zhu, Kunlin Wang, Jinquan Wei, Xinming Li, Qinke Shu, Ning