

## علمی- پژوهشی

## بررسی و تحلیل عددی اثر اندازه، فاصله، موقعیت و ترکیب نانوساختارهای پلاسمونی بر روی

## جذب سلول‌های خورشیدی پروسکایت

شکوفه متوسل<sup>۱</sup>، سعید علیانی<sup>۲\*</sup>، محمود صیفوری<sup>۳</sup>

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد، ۲- استاد، ۳- دانشیار، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی

(دریافت: ۱۳۹۸/۱۱/۱۵، پذیرش: ۱۳۹۹/۰۵/۰۴)

## چکیده

یکی از ویژگی‌های اصلی سلول خورشیدی پروسکایت، قابلیت جذب بالا در ناحیه مرئی است. با این حال می‌توان به جذب پایین آن‌ها در ناحیه فرورسرخ که قسمت بزرگی از طیف خورشیدی در این ناحیه است و همچنین سعی بودن ترکیبات پروسکایت اشاره کرد. برای غلبه بر این مشکل نانوذرات فلزی معرفی شده‌اند. در این مقاله با قرار دادن نانوذرات در لایه جذب پروسکایت به بررسی اثر اندازه، فاصله، موقعیت و ترکیب نانوساختارهای پلاسمونی بر روی جذب نور، جریان نوری، چگالی جریان اتصال کوتاه و بیشینه نرخ تولید در سلول خورشیدی پروسکایت پرداخته شده است. نتایج نشان می‌دهد که با استفاده از نانوذرات نقره با شعاع ۵۰ nm و فاصله ۲۰ nm، خصوصیات نوری ذکر شده نسبت به حالت مرجع که بدون حضور نانوذرات است، ۱/۳۳ برابر افزایش می‌یابد. همچنین ضخامت‌های مختلف لایه جذب که رابطه مستقیمی با میزان سعی بودن آن دارد نیز مورد بررسی قرار داده می‌شود.

**کلید واژه‌ها:** سلول خورشیدی، پروسکایت، نانوذرات فلزی، نرخ تولید، تحلیل FDTD.

## ۱. مقدمه

کره‌های توخالی در مرکز لایه پروسکایت برای افزایش جذب ساختار استفاده کرده و با مدل بدون حضور نانوذرات مقایسه شده است. همچنین نانوذرات کروی با شعاع‌های مختلف ۲۵، ۵۰ و ۷۰ نانومتر در فواصل منظم ۵، ۱۰ و ۲۰ نانومتری از یکدیگر قرار داده شده است تا تأثیر شعاع و فاصله نانوذرات از یکدیگر در جذب لایه پروسکایت و هم‌خوانی شبیه‌سازی انجام شده با تئوری Mie بررسی شود. بهترین وضعیت در حالتی اتفاق می‌افتد که نانوذرات نقره با شعاع ۵۰ nm در فاصله ۲۰ nm از هم قرار دارند که به افزایش ۱/۳۳ برابری خصوصیات نوری همچون جریان نوری، چگالی جریان اتصال کوتاه و بیشینه نرخ تولید نسبت به حالت بدون نانوذرات منجر می‌شود. مرحله بعد موقعیت نانوذرات از مرکز لایه جذب پروسکایت جابه‌جا شده و در جلو و پشت لایه قرار داده می‌شود. در این حالت به بررسی تغییرات ایجاد شده در طیف جذب پرداخته می‌شود. یکی دیگر از مسائل مهم برای سلول‌های خورشیدی پروسکایت، میزان سعی بودن نیم‌رساناهای پروسکایت به علت حضور سرب خالص (Pb) در ساختار بلوری ABX<sub>3</sub> به‌عنوان کاتیون B است که موجب نگرانی برای تجاری شدن بیشتر آن‌ها می‌شود. تلاش زیادی در جایگزین کردن عنصر Pb با قلع (Sn) با درجه سعی بودن کمتر در حال انجام است. با این حال، سلول خورشیدی پروسکایت با استفاده از Sn به‌عنوان کاتیون B یا مخلوط Pb و Sn، عملکرد پایین‌تری نسبت به نمونه‌های Pb را نشان می‌دهند [۳۶]. در اینجا ضخامت لایه

سلول خورشیدی فیلم نازک مبتنی بر پروسکایت به‌عنوان یک فناوری نویدبخش به‌منظور دریافت و تبدیل نور خورشید به الکتروسیسته مؤثر توجه زیادی را به خود جلب کرده است [۶-۱]. پیشرفت سریع بازده سلول خورشیدی از ۳/۸٪ در سال ۲۰۰۹ [۷] به ۲۵/۲٪ [۸] در حال حاضر انگیزه‌ای قوی برای محققین ایجاد کرده است. اگرچه سلول خورشیدی پروسکایت به‌دلیل بازده بالا در ساختارهای فوتولتائیک مورد توجه قرار گرفته است ولی از مشکلات آن می‌توان به جذب نور پایین آن‌ها در محدوده فرورسرخ نزدیک اشاره کرد. نانوساختارها و نانوذرات پلاسمونی به‌منظور بهبود جذب لایه فعال پروسکایت و ایجاد طیف جذب وسیع‌تر مورد بررسی قرار گرفته‌اند. با جایگذاری نانوذرات فلزی در ساختار، جذب نور به‌دلیل غلظت نور میدان نزدیک نانوذرات از طریق پلاسمون‌های سطح موضعی قابل افزایش است [۹-۱۱]. همچنین اثر پراکندگی نور ذره در اندازه‌های بزرگ منجر به هدایت دوباره نور تصادفی به سلول خورشیدی با افزایش طول مسیر است [۱۶-۱۲].

در این مقاله از نانوذرات پلاسمونی مختلف طلا، نقره، مس و

جاذب و HTL به ترتیب  $\text{TiO}_2$ ،  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  و P3HT است. سلول خورشیدی پروسکایت توسط نرم افزار لومریکال طراحی شده و در محیط FDTD شبیه سازی شده است. سلول خورشیدی مورد نظر در این مقاله بر اساس هندسه سلول خورشیدی پروسکایت متداول طراحی شده است. ضخامت هر لایه عبارت است از:  $\text{TiO}_2/\text{compact}$ : ۴۰ nm /ITO: ۴۰ nm /glass: ۴۰۰ nm /perovskite: ۴۰۰ nm /P3HT: ۴۰ nm /Ag: ۴۰ nm. خواص الکترونیکی سه لایه اصلی در جدول (۱) و همچنین منحنی ضریب شکست و ضریب خاموشی ماده  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  در شکل (۲) اشاره شده است. از شرایط مرزی متناوب در امتداد محور X و Y و از شرایط مرزی PML در جهت Z استفاده شده است. تابش در افزاره در جهت Z- و با زاویه عمود تحت طیف قطبیده نشده AM1.5G صورت می پذیرد.

در عمل، پنل های خورشیدی تحت یک ضخامت اتمسفر عمل نمی کنند و با توجه به زاویه خورشید با سطح زمین ضخامت مؤثر متفاوت است. از این رو تأسیسات و صنایع خورشیدی در بسیاری از مراکز مهم جمعیت جهان از جمله سراسر اروپا، چین، ژاپن، ایالات متحده آمریکا و جاهای دیگر (شمال هند، آفریقای جنوبی، استرالیا و ...) در عرض های جغرافیایی معتدل قرار دارند. بنابراین، استفاده از یک عدد AM که نمایانگر طیف در عرض های میانی است، بسیار متداول است. مطابق آنچه در شکل (۳) نشان داده شده است، طیف های استاندارد شامل AM0، AM1.5G و AM1.5D (تابش مستقیم بدون پراکندگی) است. امروزه در بیشتر شبیه سازی های خورشیدی موجود و تحقیقات علمی از طیف AM1.5G استفاده می شود.

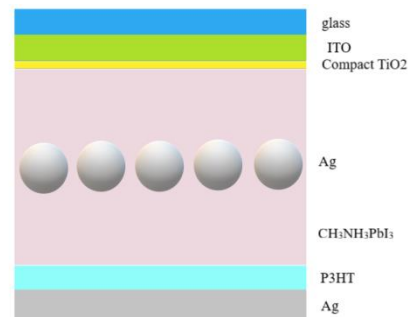
### ۳. نتایج و بحث

همان طور که پیش تر بیان شد، برای افزایش جذب لایه پروسکایت و همچنین افزایش محدوده طیف جذب می توان از نانوذرات پلاسمونی در ساختار استفاده کرد. در این مقاله چند نوع فلز Ag، Au و Cu و همچنین حالتی که ذره توخالی (با ضریب شکست ۱) است به عنوان نانوذرات در نظر گرفته و با ساختار بدون نانوذرات مقایسه می شود. همان طور که در شکل (۴) مشاهده می شود نانوذرات Ag و Au جذب بیشتری را در طول طیف سلول و در طول موج های بلندتر عملکرد بهتری را نتیجه می دهند. این امر معمولاً به علت غلظت نور میدان نزدیک نانوذرات Ag و Au است. همچنین مقدار جریان نوری، چگالی جریان اتصال کوتاه و بیشینه نرخ تولید نانوذرات مختلف نیز در جدول (۲) محاسبه شده است.

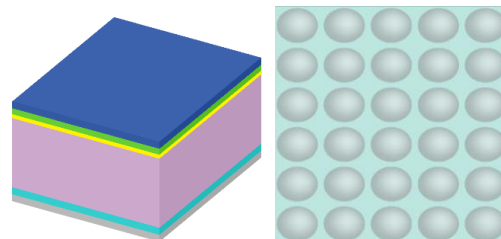
پروسکایت به منظور کاهش میزان سمی بودن کاهش داده شده و تغییرات به وجود آمده در طیف جذب بررسی می شود. همچنین به مقایسه مقدار جریان نوری، چگالی جریان اتصال کوتاه و بیشینه نرخ تولید مدل های ارائه شده پرداخته می شود.

### ۲. ساختار سلول خورشیدی

ساختار ارائه شده در شکل (۱) نشان داده شده است. شکل (۱-الف) و (۱-ب) شمای دوبعدی از روبه رو و بالای ساختار با حضور نانوذرات و شکل (۱-ج) شمای سه بعدی سلول خورشیدی بدون حضور نانوذرات را نشان می دهد. ساختار سلول خورشیدی پروسکایت معمولاً دارای سه لایه اصلی است: لایه انتقال دهنده الکترون ( $\text{ETL}^1$ )، لایه جاذب پروسکایت و لایه انتقال دهنده حفره ( $\text{HTL}^2$ ). از متداول ترین مواد قابل استفاده برای ETL می توان به  $\text{TiO}_2$  [۱۷]،  $\text{ZnO}$  [۱۸-۱۹] و  $\text{PCBM}$  [۲۰-۲۱] و برای لایه جاذب پروسکایت ترکیب  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$  که در آن X نمایانگر Br، Cl یا I است [۲۲-۲۳] و برای HTL نیز Spiro-MeTAD،  $\text{CuI}$  [۲۱]،  $\text{CuSCN}$  [۲۴]،  $\text{Cu}_2\text{O}$  [۲۵]،  $\text{NiO}_x$  [۲۶-۲۷] و P3HT [۲۳-۲۵] اشاره کرد.



(الف)



(ب)

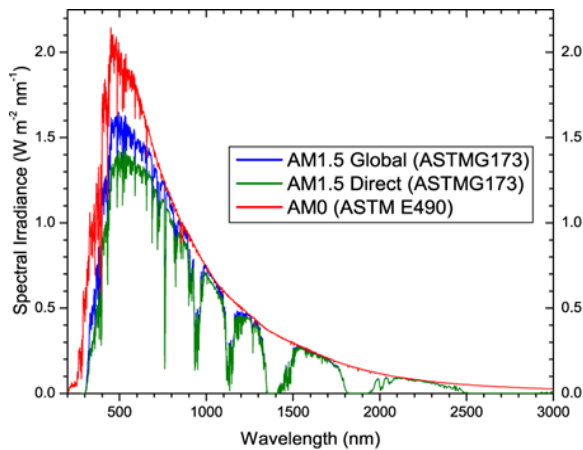
(ج)

شکل (۱): ساختار سلول خورشیدی پروسکایت (الف) شمای دوبعدی با حضور نانوذرات پلاسمونی از روبه رو، (ب) شمای دوبعدی از بالا و (ج) شمای سه بعدی ساختار شبیه سازی شده بدون حضور نانوذرات.

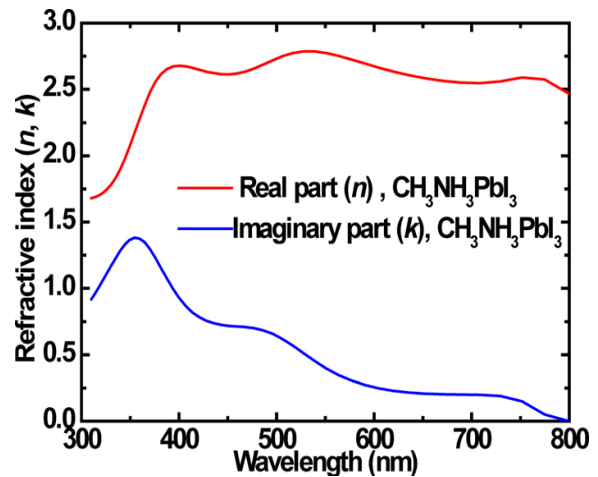
مطابق شکل (۱)، ساختار ارائه شده در این مقاله به ترتیب شامل لایه های glass/ITO/compact TiO<sub>2</sub>/CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub>/P3HT/Ag است که لایه های اصلی ETL،

<sup>1</sup> Electron Transport Layer

<sup>2</sup> Hole Transport Layer



شکل (۳): طیف‌های استاندارد شامل AM0، AM1.5G و AM1.5D [۴۱].

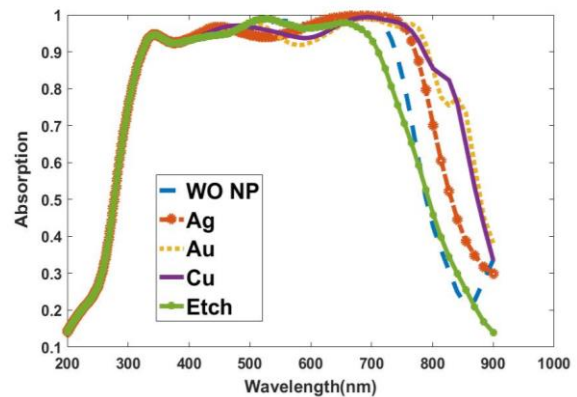


شکل (۲): منحنی ضریب شکست و ضریب خاموشی ماده  $CH_3NH_3PbI_3$  [۴۰].

جدول (۱): پارامترهای الکتریکی سه لایه اصلی سلول خورشیدی پروسکایت.

پارامتر	توصیف	[۳۷] $TiO_2$	[۳۸] $CH_3NH_3PbI_3$	[۳۹] P3HT
$\epsilon_r$	نفوذپذیری دی‌الکتریک نسبی	۸۰	۳۰	۳/۸
$E_g$	شکاف باند	۳ eV	۱/۵ eV	۱/۸۵ eV
$\mu_n$	قابلیت حرکت الکترون	$2 \text{ cm}^2/\text{V.s}$	$14 \text{ cm}^2/\text{V.s}$	$10^{-4} \text{ cm}^2/\text{V.s}$
$\mu_p$	قابلیت حرکت حفره	$1 \text{ cm}^2/\text{V.s}$	$2 \text{ cm}^2/\text{V.s}$	$10^{-3} \text{ cm}^2/\text{V.s}$
$N_A$	تراکم ناخالصی پذیرنده	$0 \text{ cm}^{-3}$	$6 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$	$10^{22} \text{ cm}^{-3}$
$N_D$	تراکم ناخالصی بخشنده	$10^{18} \text{ cm}^{-3}$	$0 \text{ cm}^{-3}$	$10^{22} \text{ cm}^{-3}$

می‌شود. در اینجا نانوذرات کرومی از جنس Ag در شعاع‌های مختلف ۲۵، ۵۰ و ۷۰ نانومتر و در فواصل ۵، ۱۰ و ۲۰ نانومتر از یکدیگر قرار داده و با یکدیگر مقایسه شده است. شکل (۵) تأثیر فواصل مختلف را در نانوذرات با شعاع‌های مختلف ۲۵، ۵۰ و ۷۰ نانومتر نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود در سلول‌های با نانوذرات  $R=70 \text{ nm}$  که اندازه ذرات بزرگ‌تر است جذب بالاتری در طول موج‌های بلندتر نیز اتفاق افتاده است که به دلیل افزایش پراکندگی نور است و با تئوری Mie مطابقت دارد. با این حال از نظر خصوصیات نوری با توجه به  $R=50$  دارای جریان نوری، چگالی جریان اتصال کوتاه و بیشینه نرخ تولید بیش‌تری نسبت به  $R=70 \text{ nm}$  و  $R=20 \text{ nm}$  است و بهترین حالت هنگامی است که نانوذرات نقره با شعاع ۵۰ nm در



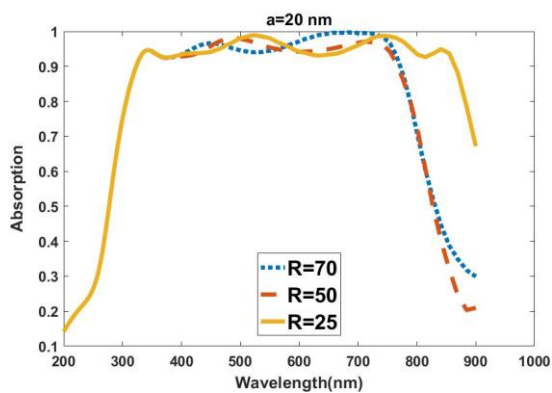
شکل (۴): طیف‌های جذب سلول خورشیدی پروسکایت مبتنی بر نانوذرات پلاسمونی متفاوت در مقایسه با حالت بدون نانوذرات.

برای تحلیل بهتر اثر نانوذرات، به بررسی تأثیر اندازه و فاصله بین نانوذرات در عملکرد سلول خورشیدی پروسکایت پرداخته

**جدول (۲):** مقدار جریان نوری، چگالی جریان اتصال کوتاه و بیشینه نرخ تولید نانوذرات مختلف در شعاع‌ها و اندازه‌ها و موقعیت‌های مختلف و ضخامت لایه جاذب متفاوت.

بیشینه نرخ تولید $\text{V/m}^2/\text{s} \times 10^{28}$	چگالی جریان اتصال کوتاه $\text{mA/cm}^2$	جریان نوری $\text{A} \times 10^{-5}$	نانوذرات	ردیف
۰/۸۱۸۹۱۷	۱۳/۱۲۰۵	۶/۷۱۷۷	بدون حضور نانوذرات	۱
۱/۰۲۴۵۸	۱۶/۴۰۰۹	۸/۳۹۷۲۶	Ag/R=۷۰/a=۲۰	۲
۱/۰۴۰۰۲	۱۶/۶۶۱۰	۸/۵۳۰۴۳	Au/R=۷۰/a=۲۰	۳
۱/۰۳۲۶۷	۱۶/۵۳۴۹	۸/۴۶۵۸۹	Cu/R=۷۰/a=۲۰	۴
۰/۹۷۶۰۷۳	۱۵/۶۳۸۲	۸/۰۰۶۷۵	etch/R=۷۰/a=۲۰	۵
۱/۰۳۳۵۸	۱۶/۳۸۹۶	۸/۳۹۱۴۶	Ag/R=۷۰/a=۱۰	۶
۰/۹۸۷۳۵۷	۱۵/۵۶۰۳	۷/۹۶۶۸۶	Ag/R=۷۰/a=۵	۷
۱/۰۹۲۷۸	۱۷/۴۱۹۳	۸/۹۱۸۶۷	Ag/R=۵۰/a=۲۰	۸
۱/۰۸۸۱۱	۱۷/۴۰۵۷	۸/۹۱۱۷۴	Ag/R=۵۰/a=۱۰	۹
۱/۰۷۸۱۴	۱۷/۲۵۳۶	۸/۸۳۲۸۵	Ag/R=۵۰/a=۵	۱۰
۰/۹۲۰۲۲۸	۱۴/۶۶۷۷	۷/۵۰۹۸۵	Ag/R=۲۵/a=۲۰	۱۱
۱/۰۱۱۷۵	۱۶/۲۰۵۶	۸/۲۹۷۲۴	Ag/R=۲۵/a=۱۰	۱۲
۱/۰۷۰۳۲	۱۷/۱۰۶۲	۸/۷۵۸۴	Ag/R=۲۵/a=۵	۱۳
۰/۸۰۴۳۹۶	۱۲/۸۷۶۲	۶/۵۹۲۶۳	Ag/R=۷۰/a=۲۰ (جلو)	۱۴
۰/۹۹۳۲۲۵	۱۵/۴۳۳۶	۷/۹۰۱۹۸	Ag/R=۷۰/a=۲۰ (عقب)	۱۵
۰/۸۱۱۹۷۳	۱۲/۹۹۴۸	۶/۶۵۳۳۴	Ag/R=۷۰/a=۲۰/pk=۳۰۰	۱۶
۰/۵۹۷۹۲	۹/۵۱۹۶۲	۴/۸۷۴۰۵	Ag/R=۷۰/a=۲۰/pk=۲۰۰	۱۷
۰/۸۰۵۹۹۲	۱۲/۷۴۴۵	۶/۵۲۵۱۸	Ag/R=۷۰/a=۲۰/pk=۱۵۰	۱۸

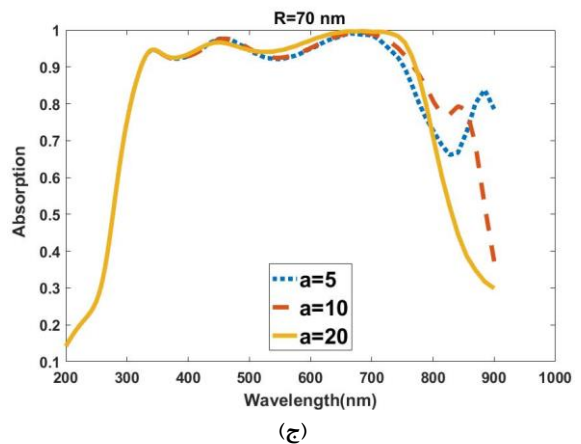
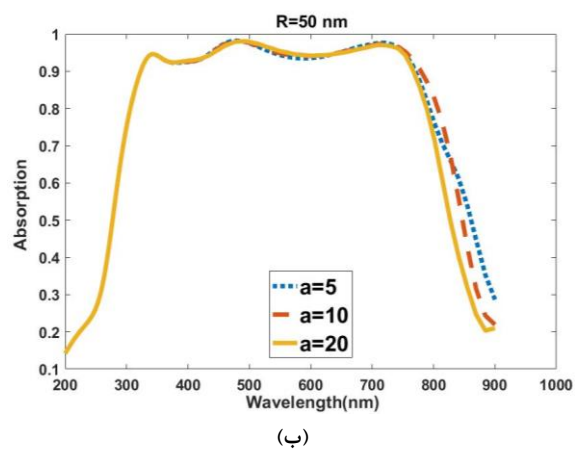
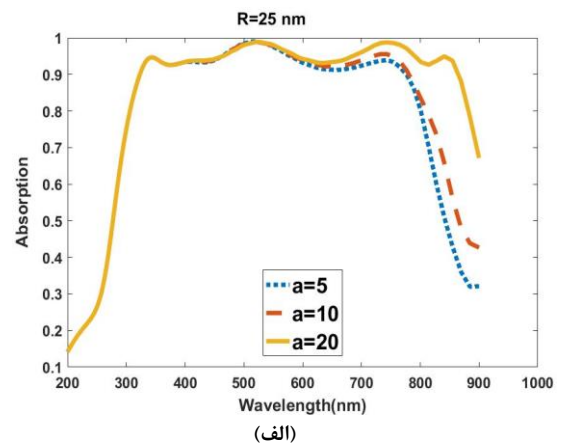
در مرحله بعد تأثیر شعاع‌های مختلف نانوذرات در لایه جاذب در فاصله ثابت ۲۰ nm از یکدیگر بررسی می‌شود. همان‌طور که در شکل (۶) نشان داده شده است با کاهش شعاع، جذب کاهش یافته که دلیل آن کاهش پراکندگی نور هنگام برخورد با نانوذرات است.



شکل (۶): منحنی جذب به ازای شعاع‌های مختلف ۲۵، ۵۰ و ۷۰ نانومتر در فاصله ۲۰ nm از هم نانوذرات.

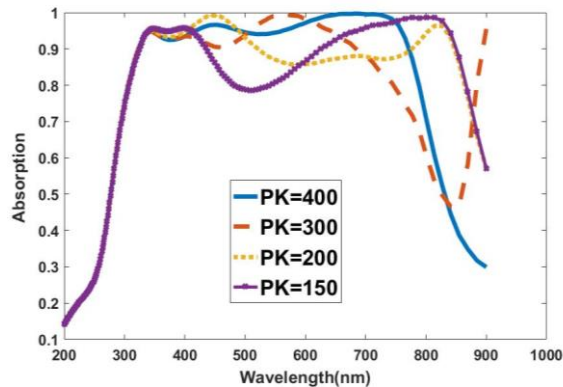
در مدل‌های قبل نانوذرات در وسط لایه پروسکایت قرار گرفته‌اند. برای بررسی تأثیر موقعیت نانوذرات در لایه پروسکایت

فاصله ۲۰ nm از هم قرار دارند که به افزایش ۱/۳۳ برابری خصوصیات نوری همچون جریان نوری، چگالی جریان اتصال کوتاه و بیشینه نرخ تولید منجر می‌شود. مطابق داده‌های جدول (۲)، در ردیف ۱ مقادیر جریان نوری، چگالی جریان اتصال کوتاه و بیشینه نرخ تولید بدون حضور نانوذرات بیان شده است. با مقایسه ردیف ۸ این جدول نسبت به حالتی که فاقد نانوذرات است (ردیف ۱)، بهبود ۱/۳۳ برابری در این پارامترها مشاهده می‌شود.

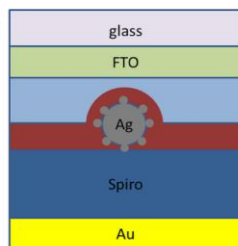


شکل (۵): منحنی جذب به ازای فواصل ۵، ۱۰ و ۲۰ نانومتر نانوذرات از هم در شعاع نانوذرات (الف) ۲۵ nm، (ب) ۵۰ nm و (ج) ۷۰ nm.

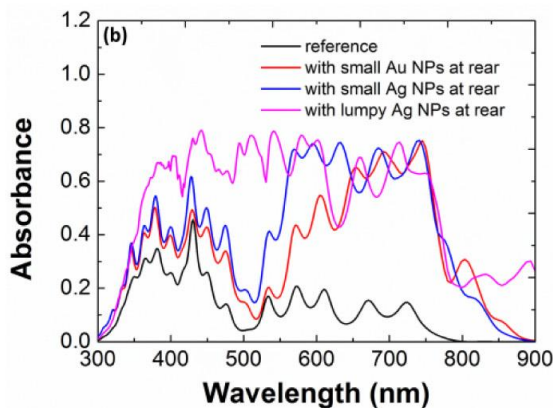
مشاهده می‌شود طیف جذبی که این مدل برای نانوذرات طلا، نقره و حالت بدون نانوذره دارد نسبت به طیف جذب ساختار شبیه‌سازی شده در این مقاله دارای جذب پایین‌تری است. ما در این مقاله با تغییر مواد و ضخامت لایه‌های ساختار و تغییر موقعیت، اندازه و فاصله نانوذرات به طیف جذب بالاتری دست یافتیم.



شکل (۸): منحنی جذب به ازای ضخامت‌های مختلف ۱۵۰، ۲۰۰، ۳۰۰ و ۴۰۰ نانومتر لایه پروسکایت.



(الف)

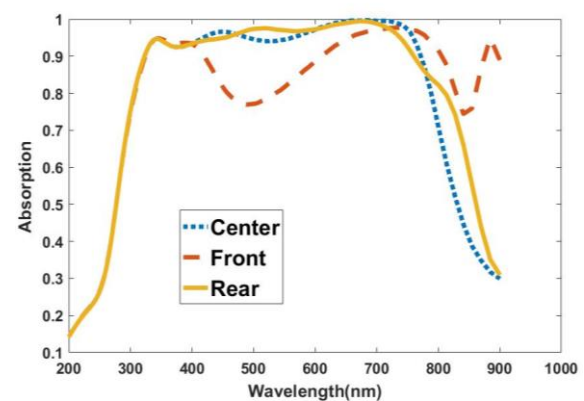


(ب)

شکل (۹): (الف) شمای دو بعدی با حضور نانوذرات (ب) طیف جذب سلول خورشیدی [۴۲].

بر جذب دو حالت دیگر را نیز که نانوذرات در جلو و عقب لایه پروسکایت قرار دارند نیز در نظر گرفته می‌شود. همان‌طور که از شکل (۷) و جدول (۲) مشخص است هنگامی که ذرات در وسط لایه پروسکایت قرار دارند مقدار جذب، جریان نوری، چگالی جریان اتصال کوتاه و بیشینه نرخ تولید بیش‌تر از دو حالت دیگر است که دلیل آن وجود فضای کافی برای حرکت و گردش شار توان نوری در اطراف نانوذرات پلاسمونی است.

اگرچه سلول‌های خورشیدی پروسکایت به دلیل پتانسیل بازده بالا مورد توجه قرار گرفته‌اند اما وجود سرب در لایه جذب آن یک چالش جدی برای کاربرد گسترده آن در صنعت است. به همین دلیل با کاهش ضخامت لایه پروسکایت سعی در کاهش اثرات مضر آن در محیط‌زیست می‌شود. در همین راستا در ادامه به تأثیر ضخامت لایه پروسکایت بر جذب سلول خورشیدی پروسکایت پرداخته می‌شود. در شکل (۸) مقدار جذب برای لایه جذب با ضخامت‌های مختلف ۱۵۰، ۲۰۰، ۳۰۰ و ۴۰۰ نانومتر اندازه‌گیری شده و همان‌طور که در شکل (۸) و جدول (۲) مشاهده می‌شود در ضخامت بالا مقدار جذب، جریان نوری، چگالی جریان اتصال کوتاه و بیشینه نرخ تولید به دلیل جذب کافی نور افزایش پیدا می‌کند. در این‌جا بهترین وضعیت برای پروسکایت با ضخامت ۴۰۰ nm ایجاد شده است. به همین علت مدل‌هایی که در قسمت‌های قبل اثر اندازه و فاصله نانوذرات در آن‌ها بررسی شده‌است در بهترین موقعیت یعنی وسط لایه پروسکایت و با بهترین ضخامت یعنی ۴۰۰ nm شبیه‌سازی شده است.



شکل (۷): منحنی جذب به ازای موقعیت‌های مختلف نانوذرات در جلو، عقب و وسط لایه پروسکایت.

در ادامه به مقایسه ساختار شبیه‌سازی شده با مرجع [۴۲] می‌پردازیم. در این مدل نانوذرات به صورت توده‌ای و در پشت لایه پروسکایت استفاده شده است. همان‌طور که در شکل (۹)

- [11] H. Afkham, S. Olyaei, and E. Sharifkazemi, "Analysis and simulation of influence of the silver ribbon nanoparticle's dimensions and refractive index on the efficiency of plasmonic amorphous silicon solar cell," *Journal of Applied Electromagnetics*, vol. 7, no. 1, pp. 9-16, (In Persian), 2019.
- [12] A. Dabirian and N. Taghavinia, "Theoretical study of light trapping in nanostructured thin film solar cells using wavelength-scale silver particles," *ACS Applied Materials and Interfaces*, vol. 7, no. 27, pp.14926-14932, 2015.
- [13] H. A. Atwater and A. Polman, "Plasmonics for improved photovoltaic devices," In *Materials for Sustainable Energy: A Collection of Peer-Reviewed Research and Review Articles from Nature Publishing Group* (pp. 1-11), 2011.
- [14] M. Hedayati, S. Olyaei, and S. M. B. Ghorashi, "The effect of adsorbent layer thickness and gallium concentration on the efficiency of a dual-junction copper indium gallium diselenide solar cell," *Journal of Electronic Materials*, vol. 49, no. 2, pp. 1454-1461, 2020.
- [15] S. Olyaei and F. Farhadipour, "Investigation of hybrid Ge QDs/ Si Nanowires solar cell with improvement in cell efficiency," *Optica Applicata*, vol. 48, no. 4, pp. 633-645, 2018.
- [16] F. Adibzadeh and S. Olyaei, "Optical absorption enhancement in vertical InP nanowire random structures for photovoltaic applications," *Optical and Quantum Electronics*, vol. 52, no. 1, pp. 1-14, 2020.
- [17] H. S. Kim, J. W. Lee, N. Yantara, P. P. Boix, S. A. Kulkarni, S. Mhaisalkar, M. Grätzel, and N. G. Park, "High efficiency solid-state sensitized solar cell-based on submicrometer rutile TiO<sub>2</sub> nanorod and CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> perovskite sensitizer," *Nano Letters*, vol. 13, no. 6, pp.2412-2417, 2013.
- [18] D. Liu, and T. L. Kelly, "Perovskite solar cells with a planar heterojunction structure prepared using room-temperature solution processing techniques," *Nature Photonics*, vol. 8, no. 2, p.133, 2014.
- [19] Y. Xu, Y. Wang, J. Yu, B. Feng, H. Zhou, J. Zhang, J. Duan, X. Fan, P. A. Aken, P. D. Lund, and H. Wang, "Performance improvement of perovskite solar cells based on pcbm-modified ZnO-nanorod arrays," *IEEE J. Photovoltaics*, vol. 6, no. 6, pp.1530-1536, 2016.
- [20] K. C. Wang, J. Y. Jeng, P. S. Shen, Y. C. Chang, E. W. G. Diau, C. H. Tsai, T. Y. Chao, H. C. Hsu, P. Y. Lin, P. Chen, and T. F. Guo, "P-type mesoscopic nickel oxide/organometallic perovskite heterojunction solar cells," *Scientific Reports*, 4, p.4756, 2014.
- [21] P. Docampo, J. M. Ball, M. Darwich, G. E. Eperon, and H. J. Snaith, "Efficient organometal trihalide perovskite planar-heterojunction solar cells on flexible polymer substrates," *Nature Communications*, vol. 4, p.2761, 2013.
- [22] J. Burschka, N. Pellet, S. J. Moon, R. Humphry-Baker, P. Gao, M. K. Nazeeruddin, and M. Grätzel, "Sequential deposition as a route to high-performance perovskite-sensitized solar cells," *Nature*, vol. 499, no. 7458, p.316, 2013.
- [23] M. Liu, M. B. Johnston, and H. J. Snaith, "Efficient planar heterojunction perovskite solar cells by vapour deposition," *Nature*, vol. 501, no. 7467, p.395, 2013.
- [24] J. A. Christians, R. C. Fung, and P. V. Kamat, "An inorganic hole conductor for organo-lead halide perovskite solar cells. Improved hole conductivity with copper iodide," *Journal of American Chemical Society*, vol. 136, no. 2, pp.758-764, 2013.
- [25] P. Qin, S. Tanaka, S. Ito, N. Tetreault, K. Manabe, H. Nishino, M. K. Nazeeruddin, and M. Grätzel, "Inorganic hole conductor-based lead halide perovskite solar cells with

#### ۴. نتیجه گیری

در این مقاله پیشرفت‌های جذب نور در سلول خورشیدی پروسکایت با حضور نانوذرات پلاسمونی از طریق شبیه‌سازی FDTD بررسی شد. از میان ترکیبات مختلف Ag و Au مواد مناسب‌تری برای نانوذرات پلاسمونی بودند. همچنین هرچه شعاع نانوذرات بیش‌تر بود به‌دلیل پراکندگی نور، جذب سلول خورشیدی نیز بیش‌تر افزایش پیدا می‌کند. در میان حالت‌ها، با استفاده از نانوذرات Ag با شعاع ۵۰ nm و فاصله ۲۰ nm از هم و همچنین قرار گرفتن نانوذرات در وسط لایه پروسکایت با ضخامت لایه پروسکایت ۴۰۰ nm افزایش ۱/۳۳ برابری مشخصات نوری مانند جریان نوری و نرخ تولید نسبت به حالت مرجع حاصل می‌شود. همچنین اگرچه ضخامت کمتر لایه جاذب پروسکایت موجب کاهش کمی بودن آن می‌شود اما به‌دلیل جذب ناکافی نور باعث کاهش جذب، جریان نوری، چگالی جریان اتصال کوتاه و بیشینه نرخ تولید می‌شود.

#### ۵. مراجع

- [1] M. A. Green, A. Ho-Baillie, H. J. and Snaith, "The emergence of perovskite solar cells," *Nature Photonics*, vol. 8, no. 7, p.506, 2014.
- [2] H. J. Snaith, "Perovskites: the emergence of a new era for low-cost, high-efficiency solar cells," *Journal of Physical Chemistry Letter*, vol. 4, no. 21, pp.3623-3630, 2013.
- [3] E. Ghahremanirad, S. Olyaei, and M. Hedayati, "The influence of embedded plasmonic nanostructures on optical absorption of perovskite solar cells," *Photonics*, vol. 6, no. 37, pp. 1-8, 2019.
- [4] E. Ghahremanirad, S. Olyaei, A. Abdollahi Nejad P. Nazari, V. Ahmadi, and K. Abedi, "Improving the performance of perovskite solar cells using kesterite mesostructure and plasmonic network," *Solar Energy*, vol. 169, pp. 498-504, 2018.
- [5] E. Ghahremanirad, S. Olyaei, A. Abdollahi Nejad, V. Ahmadi, and K. Abedi, "Hexagonal array of mesoscopic HTM based perovskite solar cell with embedded plasmonic nanoparticles," *Physica Status Solidi B: Basic Solid State Physics*, vol. 255, no. 3, pp. 1-8, 2018.
- [6] E. Ghahremanirad, A. Bou, S. Olyaei, and J. Bisquert, "Inductive loop in the impedance response of perovskite solar cells explained by surface polarization model," *Journal of Physical Chemistry Letter*, vol. 8, no. 7, pp. 1402-1406, 2017.
- [7] A. Kojima, K. Teshima, Y. Shirai, and T. Miyasaka, "Organometal halide perovskites as visible-light sensitizers for photovoltaic cells," *Journal of American Chemistry Society*, vol. 131, no. 17, pp.6050-6051, 2009.
- [8] "NREL efficiency chart"; <https://www.pinterest.es/pin/126311964526950184>, 2020.
- [9] S. K. Cushing and N. Wu, "Plasmon-enhanced solar energy harvesting," *Electrochemical Society Interface*, vol. 22, no. 2, pp.63-67, 2013.
- [10] J. A. Schuller, E. S. Barnard, W. Cai, Y. C. Jun, J. S. White, and M. L. Brongersma, "Plasmonics for extreme light concentration and manipulation," *Nature Materials*, vol. 9, no. 3, p.193, 2013.

- organized, high-mobility conjugated polymers,” *Nature*, vol. 401, no. 6754, p.685, 1999.
- [35] Y. Kim, S. Cook, S.M. Tuladhar, S.A. Choulis, J. Nelson, J. R. Durrant, D. D. Bradley, M. Giles, I. McCulloch, C. S. Ha, and M. Ree, “A strong regioregularity effect in self-organizing conjugated polymer films and high-efficiency polythiophene: fullerene solar cells. In *Materials for Sustainable Energy*,” A Collection of Peer-Reviewed Research and Review Articles from Nature Publishing Group (pp. 63-69), 2011.
- [36] M. Konstantakou and T. Stergiopoulos, “A critical review on tin halide perovskite solar cells,” *Journal of Material Chemistry A*, vol. 5, no. 23, pp.11518-11549, 2017.
- [37] S. Bansal and P. Aryal, “Evaluation of new materials for electron and hole transport layers in perovskite-based solar cells through SCAPS-1D simulations,” In 2016 IEEE 43rd Photovoltaic Specialists Conference (PVSC) (pp. 0747-0750) IEEE, 2016.
- [38] Y. Wang, Z. Xia, J. Liang, X. Wang, Y. Liu, C. Liu, S. Zhang, and H. Zhou, “Towards printed perovskite solar cells with cuprous oxide hole transporting layers: a theoretical design,” *Semiconductor Science and Technology*, vol. 30, no. 5, p.054004, 2015.
- [39] A. Chen, K. Zhu, Q. Shao, and Z. Ji, “Understanding the effects of TCO work function on the performance of organic solar cells by numerical simulation,” *Semiconductor Science and Technology*, vol. 31, no. 6, p.065025, 2016.
- [40] P. Löper, M. Stuckelberger, B. Niesen, J. Werner, M. Filipič, S. J. Moon, J. H. Yum, M. Topič, S. De Wolf, and C. Ballif, “Complex refractive index spectra of CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> perovskite thin films determined by spectroscopic ellipsometry and spectrophotometry,” *Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 6, no. 1, pp.66-71, 2015.
- [41] <https://www.pveducation.org/pvcdrom/appendices/standard-solar-spectra>, 2020.
- [42] B. Cai, Y. Peng, Y. B. Cheng, and M. Gu, “4-fold photocurrent enhancement in ultrathin nanoplasmonic perovskite solar cells,” *Optics Express*, vol. 23, no. 24, pp. A1700-A1706, 2015.
- 12.4% conversion efficiency,” *Nature Communication*, vol. 5, p.3834, 2014.
- [26] B. Abdollahi Nejand, V. Ahmadi, S. Gharibzadeh, and H. R. Shahverdi, “Cuprous oxide as a potential low- cost hole- transport material for stable perovskite solar cells,” *ChemSusChem*, vol. 9, no. 3, pp.302-313, 2016.
- [27] Y. Wang, Z. Xia, J. Liang, X. Wang, Y. Liu, C. Liu, S. Zhang, and H. Zhou, “Towards printed perovskite solar cells with cuprous oxide hole transporting layers: a theoretical design,” *Semiconductor Science and Technology*, vol. 30, no. 5, p.054004, 2015.
- [28] B. Abdollahi Nejand, V. Ahmadi, and H. R. Shahverdi, “New physical deposition approach for low cost inorganic hole transport layer in normal architecture of durable perovskite solar cells,” *ACS Applied Materials and Interfaces*, vol. 7, no. 39, pp.21807-21818, 2015.
- [29] A. Corani, M. H. Li, P. S. Shen, P. Chen, T. F. Guo, A. El Nahhas, K. Zheng, A. Yartsev, V. Sundström, and C. S. Ponseca, “Ultrafast dynamics of hole injection and recombination in organometal halide perovskite using nickel oxide as p-type contact electrode,” *Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 7, no.7, pp.1096-1101, 2016.
- [30] W. Chen, Y. Wu, J. Liu, C. Qin, X. Yang, A. Islam, Y. B. Cheng, and L. Han, “Hybrid interfacial layer leads to solid performance improvement of inverted perovskite solar cells,” *Energy and Environmental Science*, vol. 8, no. 2, pp.629-640, 2015.
- [31] X. Xu, Z. Liu, Z. Zuo, M. Zhang, Z. Zhao, Y. Shen, H. Zhou, Q. Chen, Y. Yang, and M. Wang, “Hole selective NiO contact for efficient perovskite solar cells with carbon electrode,” *Nano Letters*, vol. 15, no. 4, pp.2402-2408, 2015.
- [32] W. C. Lai, K. W. Lin, T. F. Guo, and J. Lee, “Perovskite-based solar cells with nickel-oxidized nickel oxide hole transfer layer,” *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 62, no. 5, pp.1590-1595, 2015.
- [33] S. Ludwigs, “P3HT Revisited-From Molecular Scale to Solar Cell Devices”, vol. 265, Berlin: Springer, 2014.
- [34] H. Sirringhaus, P. J. Brown, R. H. Friend, M. M. Nielsen, K. Bechgaard, B. M. W. Langeveld-Voss, A. J. H. Spiering, R. A. Janssen, E. W. Meijer, P. Herwig, and D. M. De Leeuw, “Two-dimensional charge transport in self-

## **Investigation and Numerical Analysis of the Effect of Size, Distance, Position, and Composition of Plasmonic Nanostructures on the Absorption of Perovskite Solar Cells**

**Sh. Motevasel<sup>1</sup>, S. Olyae<sup>\*2</sup>, M. Seifouri<sup>3</sup>**

Nano-phonic and Optoelectronic Research Laboratory, Faculty of Electrical Engineering, Shahid Rajae Teacher Training University, Tehran, Iran

(Received: 04/02/2020; Accepted: 25/07/2020)

### **Abstract**

*One of the main capabilities of the perovskite solar cell is their high absorbability in the visible range. However, they have low absorption coefficient in the infrared region, which is a large part of the solar spectrum in this area, as well as the toxicity of perovskite compounds. Metal nanoparticles have been introduced to overcome this problem. In this research, we studied the effect of size, distance, position, and composition of plasmonic nanostructures on light absorption, optical current, short-circuit current density, and maximum generation rate in perovskite solar cells. The results revealed that the optical properties mentioned above will be enhanced up to 1.33 times, compared to the reference state in which no nanoparticles are present, by using silver nanoparticles with 50 nm radius and 20 nm distance. In the following, different thicknesses of the absorbent layer were examined, as thickness has a direct relationship with the absorbent layer toxicity.*

**Keywords:** Solar Cell, Perovskite, Metal Nanoparticles, Generation Rate, FDTD Analysis

---

\* Corresponding author E-mail: s\_olyae@sru.ac.ir