

## طراحی و بهینه‌سازی سلول خورشیدی پروسکایت با به‌کارگیری دو لایه

### انتقال دهنده الکترون

الهام کریمی، سید محمد باقر قریشی\*

دانشکده فیزیک، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران

دریافت: 1396/07/22 ویرایش نهائی: 1397/02/15 پذیرش: 1397/02/17

#### چکیده

در این پژوهش عملکرد سلول خورشیدی پروسکایت با به‌کارگیری دو لایه انتقال دهنده الکترون نظیر:  $\text{SnO}_2$  و  $\text{ZnO}$ . مورد شبیه‌سازی و مقایسه قرار گرفته است. بدین منظور از نرم افزار شبیه‌سازی AMPS-1D که دارای قابلیت تعیین مشخصه جریان-ولتاژ، بازده کوآنتومی و تعیین ضخامت لایه‌ها است استفاده شد. تأثیر ضخامت لایه جاذب پروسکایت، لایه‌های انتقال دهنده الکترون، غلظت ناخالصی لایه‌های انتقال دهنده الکترون و دما بر عملکرد سلول‌های خورشیدی پروسکایت بررسی گردید با کمک نتایج شبیه‌سازی لایه روی اکسید یک جایگزین مناسب برای لایه انتقال دهنده الکترون به‌منظور کاهش هزینه و افزایش بازده سلول خورشیدی پیشنهاد گردید.

**کلیدواژگان:** سلول خورشیدی پروسکایت، نرم افزار AMPS-1D، مواد انتقال دهنده الکترون، شبیه‌سازی سلول خورشیدی

#### مقدمه

نوع سلول‌ها از پایداری کمی برخوردار بودند [11]. پارک و همکاران با روش تغییر لایه‌نشانی پروسکایت توانستند بازده این نوع سلول‌ها را بهبود ببخشند [12]. همچنین استفاده از الکترولیت‌های جامد مانند Spiro-OMeTAD به‌جای الکتروکود مایع، عملکرد و پایداری این سلول‌ها را نیز بهبود بخشید [13-15]. در سلول‌های مزوپروس پروسکایتی ETM و HTM به‌ترتیب، وظیفه انتقال الکترون و حفره را بر عهده دارند. اسنیس و همکاران با جایگزین کردن لایه  $\text{TiO}_2$  با لایه متخلخل و عایق  $\text{Al}_2\text{O}_3$  متوجه شدند که پروسکایت می‌تواند علاوه بر جذب نور، وظیفه انتقال الکترون را نیز برعهده بگیرد [16]. از طرف دیگر تحقیقات صورت گرفته، نشان داد که  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  می‌تواند به‌جای انتقال دهنده حفره نیز به‌کار رود. اگر

پروسکایت‌های آلی-معدنی به‌عنوان نسل جدیدی از مواد حساس به‌نور در سلول‌های خورشیدی به‌کار برده می‌شود [3-1]. در سال 2009 اولین سلول خورشیدی پروسکایتی، حساس شده به‌رنگ توسط میاساکا معرفی گردید [4]. بعد از آن پروسکایت، در ساخت سلول‌های خورشیدی، بسیار مورد توجه قرار گرفته است [5-7]. فرمول عمومی این مواد هیبریدی، به‌صورت  $\text{AMX}_3$  است که در آن  $\text{M}=\text{Pb}^{2+}$ ،  $\text{X}=\text{I}, \text{Br}, \text{Cl}$  و  $\text{A}=\text{CH}_3\text{NH}_3^+$  می‌باشد. میاساکا و همکاران  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$  و  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  را به‌عنوان حساس‌کننده در سلول خورشیدی حساس شده به‌رنگ (DSSCS) مورد استفاده قرار دادند [10-8]. ولی به‌دلیل خوردگی توسط الکترولیت مایع این

\*نویسنده مسئول: mghorashi@kashanu.ac.ir

## شبییه سازی

شکل 1 شماتیکی از سلول خورشیدی پروسکایت شبییه‌سازی شده را نشان می‌دهد که متشکل از یک لایه جاذب ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ )، لایه‌های انتقال دهنده الکترون ( $\text{ZnO}$  و  $\text{SnO}_2$ ) که به صورت لایه‌ای وارد نرم‌افزار شده است و لایه انتقال دهنده حفره (Spiro-MeOTAD) می‌باشد. همچنین FTO و Au به عنوان آند و کاتد مورد استفاده قرار گرفته است. برنامه AMPS-1D برنامه‌ای است برای شبییه‌سازی سلول‌های خورشیدی که در دانشگاه پنسیلوانیا توسعه پیدا کرده است. سه معادله اصلی که با حل همزمان آنها می‌توان کارکرد سلول خورشیدی را بررسی کرد عبارتند از: معادله پواسون، معادله پیوستگی برای الکترون‌ها و معادله پیوستگی برای حفره‌ها به طور کلی معادله پواسون را می‌توان به شکل زیر نوشت [25-27].

$$\frac{d}{dx}(-\varepsilon(x) \frac{d\psi}{dx}) = 1 \quad (1)$$

در رابطه 1،  $\psi$  پتانسیل الکترواستاتیک،  $n$  و  $p$  به ترتیب چگالی الکترون‌های آزاد و حفره،  $n_t$  و  $p_t$  به ترتیب چگالی الکترون و حفره به دام افتاده است.  $N_D^+$  و  $N_A^+$  چگالی دهنده‌ها و پذیرنده‌های یونیزه شده است.  $\varepsilon$  گذردهی دی‌الکتریک نیم‌رسانا و  $q$  بار الکترون می‌باشد. خصوصیات حامل‌ها در این ساختار از معادله پیوستگی برای الکترون و حفره به دست آمده است. معادلات پیوستگی در شرایط پایدار عبارتند از:

$$\frac{1}{q} \frac{dJ_n}{dx} = R_n(x) - G(x) \quad (2)$$

چه بازده اولیه سلول‌های پروسکایتی بدون لایه انتقال دهنده حفره تنها 5% بود ولی در حال حاضر بازدهی این سلول‌ها به حدود 13% رسیده است [17]. روند رشد بازدهی این سلول‌ها، در مقایسه با سایر سلول‌های نسل جدید خیرکننده است تا جایی که دستیابی به بازده 21 درصد نیز، توسط گراتسل و همکاران در دانشگاه پلی تکنیک لوزان، گزارش شده است [18]. با توجه به این که اغلب فرآیندهای ساخت سلول‌های خورشیدی بسیار هزینه‌بر است، بدیهی است که امکان آن برای تمامی گروه‌های تحقیقاتی وجود نداشته باشد. از طرف دیگر توسعه یک فرآیند آزمایشگاهی به کمک شبییه‌سازی آسان‌تر، دقیق‌تر و کم هزینه‌تر خواهد بود. نرم‌افزارهای مختلفی مانند: PC-1D, AFORS-HET, AMPS-1D, ASA and SCAPS-1D سول‌های خورشیدی توسعه یافته است [19-21] که ابتدا در سال 2015 با شبییه‌سازی سلول‌های خورشیدی پروسکایت به بازده 20 درصدی دست یافتند سپس در سال 2016 این بازدهی به 22 درصد افزایش یافت [22]. برای شروع فعالیت‌های خود در این زمینه از میان پروسکایت‌های مختلف توجه خود را بر روی متیل آمونیوم سرب یدید  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  متمرکز نموده تا در اولین گام یک سلول پروسکایتی بدون لایه انتقال دهنده الکترون را با نرم افزار AMPS-1D شبییه‌سازی و بهینه کرده سپس اثر لایه‌های انتقال دهنده الکترون را روی بازدهی بررسی می‌کنیم [23]. شبییه‌سازی در دمای 300K و توان تابشی  $100 \text{ mW/cm}^2$  انجام گرفته است [24].

## پارامترهای اصلی سلول خورشیدی

چگالی جریان سلول به‌ازای ولتاژ مشخص می‌شود در این حالت تجزیه اکسایتون و انتقال بار به‌وسیله پتانسیل داخلی سلول انجام می‌گیرد. همچنین ولتاژ به‌ازای جریان صفر را ولتاژ مدارباز می‌گویند که از رابطه 4 قابل محاسبه است.

$$V_{oc} = \frac{k_B T}{q} \ln \left( \frac{I_{sc}}{I_0} + 1 \right) \quad 4$$

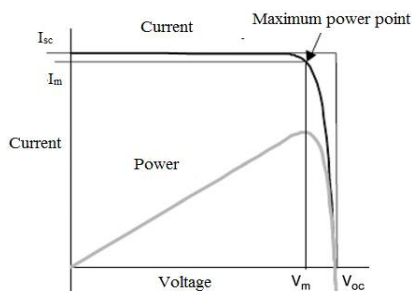
که در آن  $I_0$  جریان اشباع معکوس است. نسبت توان بیشینه به حاصلضرب چگالی جریان مدار کوتاه در ولتاژ مدارباز را ضریب پرشدگی می‌گویند که از رابطه 5 قابل محاسبه است.

$$FF = \frac{P_m}{I_{sc} V_{oc}} \quad 5$$

که در آن  $P_m$  توان بیشینه است. همچنین بازده تبدیل توان را می‌توان از رابطه 6 محاسبه نمود

$$PCE = \frac{P_m}{P_s} \quad 6$$

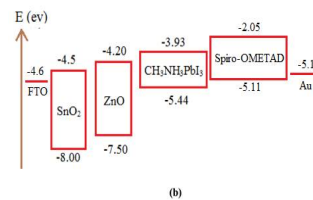
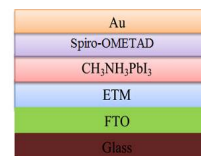
که در آن  $P_s$  توان نور فرودی بر سلول است. معمولاً این توان 1000 وات بر متر مربع و تحت تابش AM1.5 در نظر گرفته می‌شود. همان‌طور که در شکل 2 مشاهده می‌شود جهت مقایسه و تعیین پارامترهای اساسی سلول خورشیدی، از مشخصه جریان-ولتاژ استفاده می‌شود.



$$\frac{1}{q} \frac{dJ_p}{dx} = G(x) - R_p(x) \quad 3$$

در روابط 2 و 3 و  $J_p$  چگالی جریان الکترون و حفره را مشخص می‌کند.  $R_p$  و  $R_n$  آهنگ بازترکیب برای الکترون‌ها و حفره‌ها است.  $G(x)$  آهنگ تولید که به‌صورت تابعی از  $x$  بیان می‌شود [26].

AMPS-1D سه جفت معادلات دیفرانسیلی 1، 2 و 3 را با در نظر گرفتن شرایط مرزی به‌روش نیوتن-رافسون حل می‌کند، پس از آن به محاسبه پتانسیل، سطوح شبه‌فرمی برای حفره و الکترون، چگالی حامل‌ها، میدان الکتریکی، جریان و به پارامترهای کارکردی سلول می‌پردازد. این برنامه امکان شبیه‌سازی با هفت لایه ورودی وجود دارد [28]. با استفاده از نتایج این برنامه می‌توان نمودارهای جریان-ولتاژ ( $I-V$ )، بازدهی کوآنتومی (QE)، ظرفیت-ولتاژ ( $V-C$ ) ترسیم و پارامترهای فتوولتائیک: چگالی جریان اتصال کوتاه ( $J_{sc}$ )، ولتاژ مدارباز ( $V_{oc}$ )، فاکتور پرشدگی (FF) و بازدهی (PCE) را محاسبه نمود.



شکل 1. (a) طرح کلی سلول خورشیدی شبیه‌سازی شده و (b) نمودار نوار انرژی لایه‌های آن.

شکل 2. مشخصه جریان-ولتاژ و توان-ولتاژ یک سلول خورشیدی ایده‌آل.

در این مقاله به منظور بررسی نقش لایه انتقال دهنده الکترون (ETM) در رابط‌های مختلف بر روی عملکرد سلول‌های خورشیدی پروسکایت، یک شبیه‌سازی با استفاده از نرم افزار AMPS انجام می‌شود. شبیه‌سازی ساختار دستگاه از سلول خورشیدی متشکل از:

$FTO(400nm) / ETM(xnm) / CH_3NH_3PbI_3(xnm) / Spiro(400nm) / Au(100nm)$

است. قبل از شبیه‌سازی پارامترهایی که در شبیه‌سازی سلول خورشیدی پروسکایتی به کار رفته است در جدول 1 نشان داده شده است [29-31].

جدول 1. پارامترهای نیمه هادی مورد استفاده برای شبیه‌سازی.

	ZnO	SnO <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub>	OMETAD
E <sub>g</sub> (eV)	3.3	3.5	1.51	3.06
X (eV)	4.6	4.4	3.9	2.05
ε <sub>r</sub>	9	9	30	3
N <sub>c</sub> (cm <sup>-3</sup> )	2.2×10 <sup>18</sup>	2.2×10 <sup>18</sup>	2.5×10 <sup>20</sup>	2.8×10 <sup>19</sup>
N <sub>v</sub> (cm <sup>-3</sup> )	1.8×10 <sup>19</sup>	1.8×10 <sup>19</sup>	2.5×10 <sup>20</sup>	10 <sup>19</sup>
μ <sub>e</sub> (cm <sup>2</sup> /Vs)	100	20	50	10 <sup>-4</sup>
μ <sub>h</sub> (cm <sup>2</sup> /Vs)	25	10	50	2×10 <sup>-4</sup>
N <sub>D</sub> (cm <sup>-3</sup> )	10 <sup>18</sup>	2×10 <sup>19</sup>		
N <sub>A</sub> (cm <sup>-3</sup> )	--	--	10 <sup>17</sup>	10 <sup>18</sup>
V <sub>e</sub> (cm/s)	10 <sup>7</sup>	10 <sup>7</sup>	10 <sup>7</sup>	10 <sup>7</sup>
V <sub>h</sub> (cm/s)	10 <sup>7</sup>	10 <sup>7</sup>	10 <sup>7</sup>	10 <sup>7</sup>

در ادامه اثر ضخامت لایه‌های انتقال دهنده الکترون و لایه جاذب، غلظت ناخالصی لایه‌های انتقال دهنده

الکترون و لایه پروسکایت روی پارامترهای فتولتائیک رسم شده است.

### تجزیه و تحلیل نتایج شبیه‌سازی

اثر ضخامت لایه جاذب

با استفاده از داده‌های جدول 1 ضخامت لایه جاذب برای هر یک از سلول‌ها با ETM مختلف از 200 تا 600 نانومتر برحسب پارامترهای فتولتائیک در شکل 3 رسم شده است.

$FTO(400nm) / ETM(100nm) / CH_3NH_3PbI_3(xnm) / Spiro(400nm) / Au(100nm)$

با توجه به نتایج به دست آمده کاهش ضخامت لایه جاذب باعث می‌شود سطح اتصال پشتی به ناحیه تخلیه نزدیک‌تر شود بنابراین الکترون‌ها به راحتی جذب سطح اتصال پشتی می‌شوند و به دلیل شرکت آنها در پدیده بازترکیب میزان الکترون‌های تأثیرگذار بر روی بازده کم می‌شود و در نتیجه V<sub>OC</sub> و J<sub>SC</sub> کاهش می‌یابد اما FF تغییر چندانی نخواهد داشت [4]. همچنین جذب نور و تولید واقعی حامل‌های بار تنها در این لایه اتفاق می‌افتد این لایه از اهمیت بالایی برخوردار است، به همین دلیل ضخامت این لایه از یک مقدار مشخص نمی‌تواند کمتر باشد و با افزایش بیشتر ضخامت این لایه بازده افزایش محسوسی نخواهد داشت.

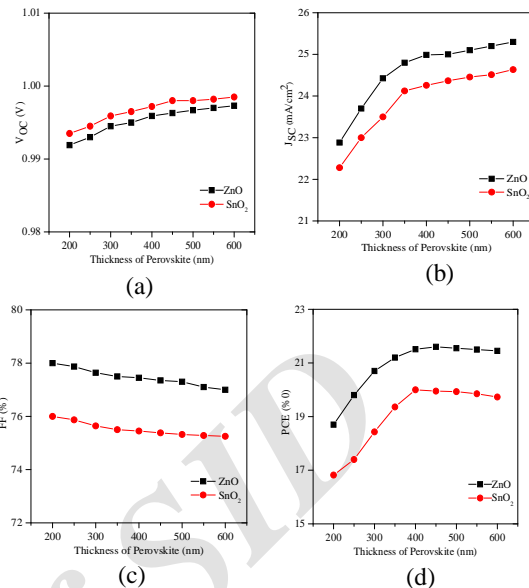
پارامترهای سلول خورشیدی ( $V_{oc}$ ،  $J_{sc}$ ،  $FF$  و  $PCE$ ) نشان داده شده است. مقادیر  $V_{oc}$ ،  $J_{sc}$  و  $PCE$  به تدریج با افزایش ضخامت لایه به دلیل کسری جذب نور، جذب بخش بیشتر از فوتون‌ها توسط ETMs و تغییر در مقاومت سری کاهش پیدا می‌کند اما مقدار  $FF$  افزایش می‌یابد [5]. در جدول 2 ضخامت بهینه لایه‌ها نشان داده شده است.

$FTO(400nm) / ETM(xnm) / CH_3NH_3PbI_3(400nm) / Spiro(400nm) / Au(100nm)$

جدول 2. ضخامت بهینه لایه‌ها.

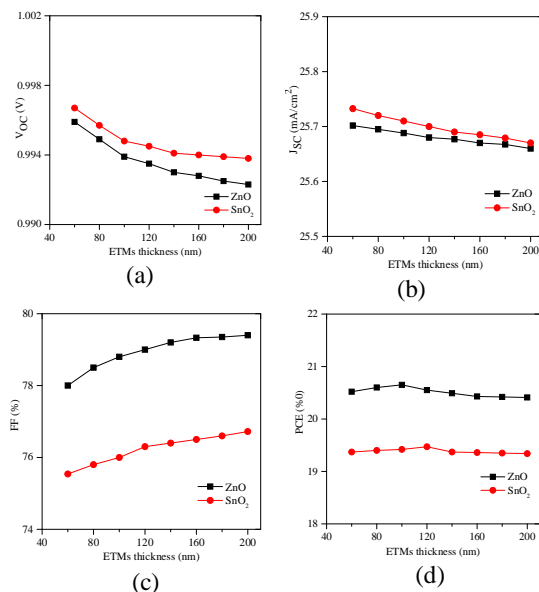
layer types	thickness(nm)
$CH_3NH_3PbI_3$	400
$SnO_2$	120
$ZnO$	100

اثر غلظت ناخالصی لایه‌های انتقال دهنده الکترون نمودار پارامترهای فتولتائیک سلول خورشیدی به‌عنوان تابعی از چگالی دهنده‌ها ( $N_D$  Donor concentration) از هر دو لایه‌های انتقال دهنده الکترون ( $ZnO$ ،  $SnO_2$ ) در شکل 5 نشان داده شده است. غلظت ناخالصی لایه‌های انتقال دهنده الکترون از  $10^{14}$  تا  $10^{21} \text{ cm}^{-3}$  تغییر کرده است. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش غلظت ناخالصی  $V_{oc}$  تقریباً ثابت است و  $FF$  افزایش می‌یابد. مقدار  $J_{sc}$  تا غلظت  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  ثابت بوده سپس کاهش می‌یابد. اما مقدار  $PCE$  با افزایش غلظت ناخالصی ابتدا تا غلظت  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  افزایش و سپس ثابت می‌ماند.



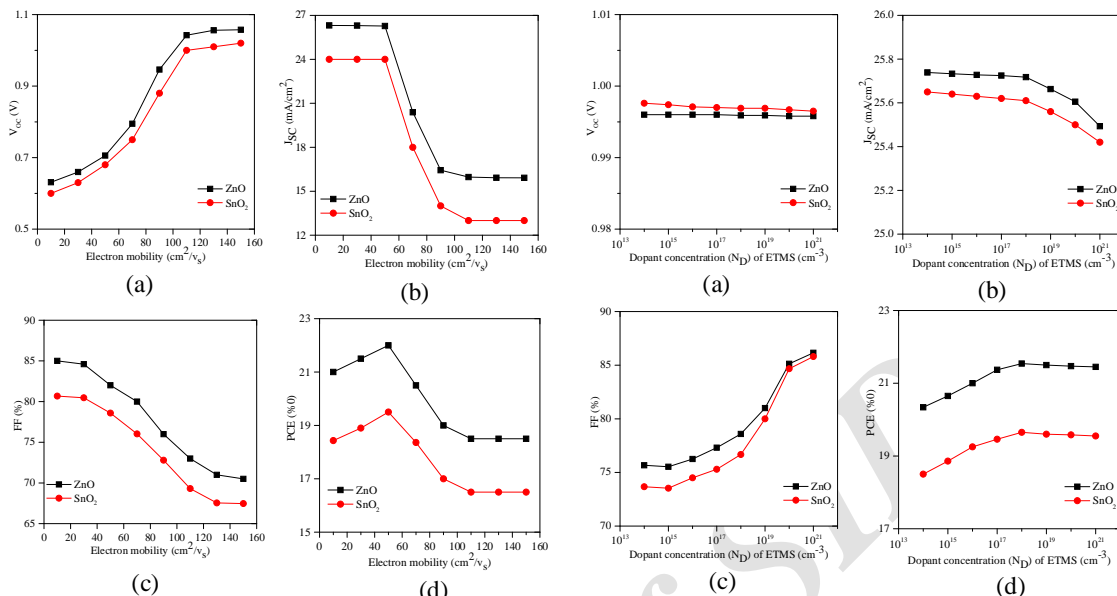
شکل 3. اثر ضخامت لایه جذب بر (a): ولتاژ مدار باز (b): چگالی جریان اتصال کوتاه (c): فاکتور پر شدگی (d): بازدهی برای سلول خورشیدی پروسکاتی با لایه‌های انتقال دهنده الکترون  $ZnO$  و  $SnO_2$ .

#### اثر ضخامت لایه‌های انتقال دهنده الکترون



شکل 4. اثر ضخامت لایه‌های انتقال دهنده الکترون  $ZnO$  و  $SnO_2$  بر (a): ولتاژ مدار باز (b): چگالی جریان اتصال کوتاه (c): فاکتور پر شدگی (d): بازدهی برای سلول خورشیدی پروسکاتی.

در شکل 4 اثر تغییر ضخامت ETM ( $SnO_2$  و  $ZnO$ ) برای هر دو لایه انتقال دهنده الکترون روی



شکل 5. اثر غلظت ناخالصی لایه‌های انتقال دهنده الکترون  $\text{SnO}_2$  و  $\text{ZnO}$  بر (a): ولتاژ مدار باز (b): چگالی جریان اتصال کوتاه (c): فاکتور پر شدگی (d): بازدهی برای سلول خورشیدی پروسکایتی

شکل 6. اثر موبیلیتی الکترون لایه‌های انتقال دهنده الکترون  $\text{SnO}_2$  و  $\text{ZnO}$  بر (a): ولتاژ مدار باز (b): چگالی جریان اتصال کوتاه (c): فاکتور پر شدگی (d): بازدهی برای سلول خورشیدی پروسکایتی

### اثر دما روی عملکرد سلول خورشیدی پروسکایت

چگونگی تأثیرات دما بر تراکم حامل‌ها در پیوندگاه‌های p-n جزء مهمترین ویژگی‌های پیوندگاه می‌باشد. انرژی جنبشی ذرات در اثر دما با رابطه 4 بیان می‌شود.

$$K.E = 3KT/2 \quad 7$$

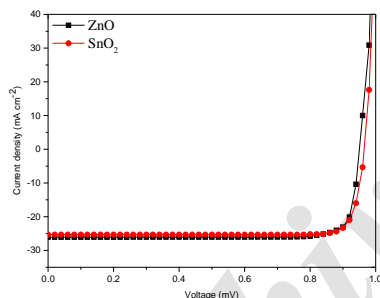
که در نتیجه انرژی که الکترون از اتم در اثر گرما دریافت می‌کند از مرتبه 25 meV می‌باشد [32]. با توجه به توزیع فرمی-دایراک با افزایش دما تعداد الکترونی‌هایی که می‌توانند از تراز فرمی بگذرند افزایش می‌یابد که در یک پیوندگاه p-n مانند سلول خورشیدی این به معنای افزایش تراکم حامل‌های ذاتی می‌باشد.

در یک نیم‌رسانای ذاتی این تغییرات در دمای پایین تأثیر چندانی بر تراکم حامل‌ها ندارد چراکه در دماهای بسیار پایین الکترون‌ها انرژی جنبشی لازم برای جدا شدن از باند ظرفیت و پیوستن به باند هدایت را ندارند

### اثر موبیلیتی الکترون‌ها در لایه‌های انتقال دهنده الکترون

نمودار پارامترهای فتوولتائیک سلول خورشیدی به‌عنوان تابعی از موبیلیتی الکترون‌ها از هر دو لایه‌های انتقال دهنده الکترون ( $\text{ZnO}$ ,  $\text{SnO}_2$ ) در شکل 6 نشان داده شده است. موبیلیتی الکترون لایه‌های انتقال دهنده الکترون از 10 تا 150  $\text{cm}^2/\text{Vs}$  تغییر کرده است. نتایج نشان می‌دهد که افزایش موبیلیتی الکترون منجر به افزایش  $V_{oc}$  می‌شود. اما این افزایش منجر به کاهش پارامترهای  $J_{sc}$ ،  $FF$  و  $PCE$  تا موبیلیتی 110  $\text{cm}^2/\text{Vs}$  شده و پس از آن ثابت می‌مانند.

تأثیر افزایش دمای بر روی عملکرد سلول خورشیدی پروسکایت با لایه‌های ETMs مختلف در شکل 7 نشان داده شده است، دما از 300 تا 440 کلین تغییر کرده است. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش دما  $FF$ ،  $V_{OC}$  و PCE کاهش می‌یابند اما مقدار  $J_{SC}$  تقریباً ثابت است. سرانجام، مقادیر بهینه شبیه‌سازی مانند: ضخامت لایه فعال و لایه‌های ETMs، غلظت ناخالصی لایه‌های ETMs و دما را در نرم افزار قرار داده و نمودار چگالی برحسب ولتاژ را که در شکل 8 نشان داده شده است برای سلول خورشیدی پروسکایت با ETMs مختلف رسم گردیده است.



شکل 8. نمودار چگالی جریان برحسب ولتاژ برای سلول خورشیدی پروسکایتی با لایه‌های انتقال دهنده الکترون ZnO و SnO<sub>2</sub>.

جدول 3. سلول‌های خورشیدی پروسکایت با لایه‌های مختلف

کد سلول	ساختار سلول
A	FTO/TiO <sub>2</sub> /CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> /P <sub>3</sub> HT/Au
B	FTO/TiO <sub>2</sub> /CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> /Spiro/Au
C	FTO/TiO <sub>2</sub> /CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> /Au
D	FTO/TiO <sub>2</sub> /CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> /CuSCN/Au
E	FTO/TiO <sub>2</sub> /CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> /CuI/Au
F	FTO/TiO <sub>2</sub> /CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> /NiO/Au
G	FTO/ZnO/CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> /Spiro/Au
H	FTO/SnO <sub>2</sub> /CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> /Spiro/Au

در جدول 3 سلول‌های خورشیدی پروسکایت با لایه‌های بافر مختلف نشان داده شده است [33-35]. که در شکل 9 و جدول 4 پارامترهای فتوولتائیک حاصل

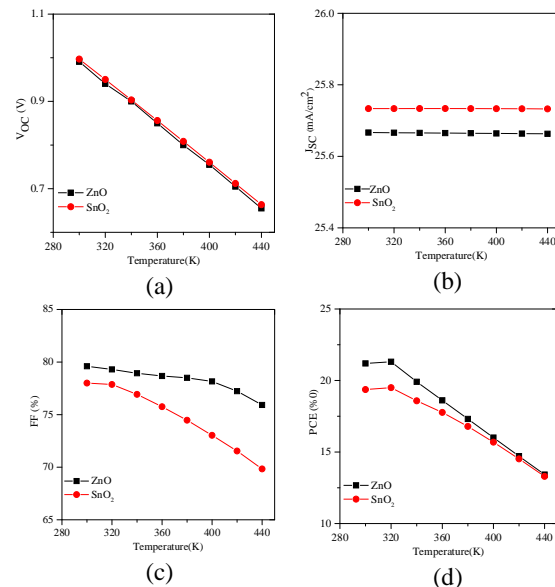
[32]. در یک نیم‌رسانای ذاتی لگاریتم تعداد حامل‌ها متناسب است با  $1/T$ :

$$n_i = \exp(-E_g/2kT) \quad 8$$

که  $E_g$  انرژی باند ممنوع،  $K$  ثابت بولتزمن و  $n_i$  تعداد حامل‌ها در متر مکعب می‌باشد [32]. اما در یک سلول خورشیدی حامل‌های ناشی از آلاینده‌ها در نیم‌رسانای غیر ذاتی  $p$  و  $n$  توجه‌گر رفتارهای پیوندگام می‌باشند. الکترون‌ها و حفره‌های ناشی از آلاینده‌ها در دماهای کمتر از صفر درجه سانتیگراد به‌طور کامل در رسانش و بازترکیب شرکت می‌کنند به‌طوری‌که می‌توان در دمای صفر درجه سانتیگراد در نظر گرفت:

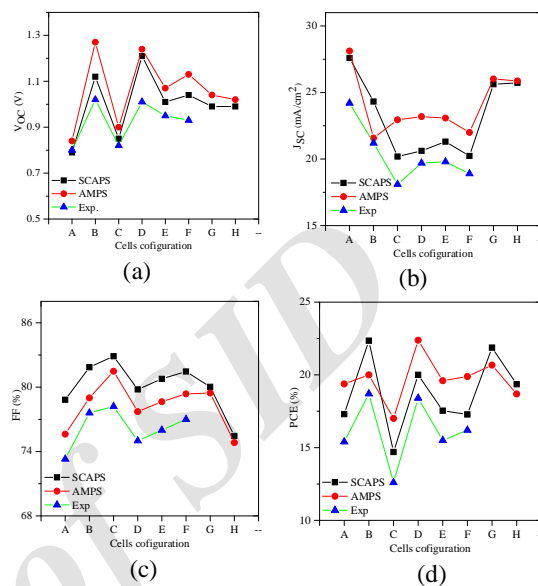
$$T=273 \text{ k: } N_d = n \text{ \& } N_p = p$$

که  $N_d$  تعداد ناخالصی‌های بخشنده،  $N_p$  تعداد ناخالصی‌های پذیرنده و  $n$  و  $p$  به‌ترتیب تعداد الکترون‌ها و حفره‌ها در نیم‌رسانا باشد [32].



شکل 7. اثر دما بر (a): ولتاژ مدار باز (b): چگالی جریان اتصال کوتاه (c): فاکتور پر شدگی (d): بازدهی برای سلول خورشیدی پروسکایتی با لایه‌های انتقال دهنده الکترون ZnO و SnO<sub>2</sub>

از آنها به‌دو روش تجربی و شبیه‌سازی با هم مقایسه می‌شوند.



شکل 9. مقایسه اثر سلول‌های خورشیدی پروسکایت با لایه‌های مختلف بر (a): ولتاژ مدار باز (b): چگالی جریان اتصال کوتاه (c): فاکتور پر شدگی (d): بازدهی با استفاده از مقادیر تجربی و نرم افزارهای شبیه‌ساز SCAPS و AMPS.

جدول 4. پارامترهای فتوولتائیک سلول‌های خورشیدی پروسکایت با لایه‌های مختلف.

Cells Code	$V_{oc}$ (v)			$J_{sc}$ (mA/cm <sup>2</sup> )			FF (%)			PCE (%)			Ref
	SCAPS	AMPS	Exp.	SCAPS	AMPS	Exp.	SCAPS	AMPS	Exp.	SCAPS	AMPS	Exp.	
A	0.79	0.84	0.80	27.59	28.12	24.20	78.83	75.62	73.30	17.30	19.38	15.40	9
B	1.12	1.27	1.02	24.32	21.58	21.20	81.86	79.00	77.60	22.35	20.00	18.70	9,16
C	0.85	0.90	0.82	20.19	22.95	18.10	82.88	81.49	78.20	14.70	17.01	12.60	9
D	1.21	1.24	1.10	20.62	23.19	19.70	79.79	77.72	75.00	20.00	22.38	18.40	16,29
E	1.01	1.07	0.95	21.31	23.08	19.80	80.77	78.64	76.00	17.54	19.60	15.50	16,29
F	1.04	1.13	0.93	20.23	22.00	18.90	81.46	79.38	77.00	17.28	19.89	16.20	16,9
G	0.95	1.01		25.78	25.99		79.98	79.04		21.78	20.55		
H	0.97	1.05		24.98	25.07		75.30	75.13		19.16	18.89		



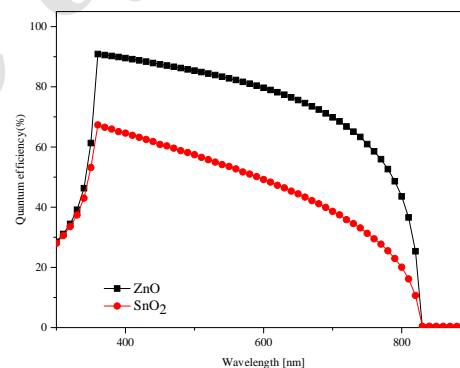
## بررسی اثر بازده کوآنتومی روی سلول خورشیدی

## پروسکایت

در شکل 10 بازده کوآنتومی برحسب طول موج نور فرودی به‌ازای مقادیر مختلف لایه انتقال دهنده الکترون رسم شده است.  $I_{ph}$  جریان فوتونی تولیدی از رابطه 9 به‌دست می‌آید.

$$I_{ph} = q \int_{\lambda} \phi(\lambda) \{1 - R(\lambda)\} QE(\lambda) d\lambda \quad 9$$

که در اینجا  $QE(\lambda)$  بازده کوآنتومی سلول خورشیدی است [36]. از رابطه 9 جریان تولید فوتونی با بازده کوآنتومی متناسب است، بدین معنی که با افزایش بازده سلول خورشیدی بازده کوآنتومی افزایش می‌یابد.



شکل 10. بازده کوآنتومی برحسب طول‌موج نور فرودی برای سلول خورشیدی پروسکایتی با لایه‌های انتقال دهنده الکترون ZnO و SnO<sub>2</sub>

نتایج به‌دست آمده از شکل 10 نشان می‌دهد که بیشترین بازده کوآنتومی 90 و 67 درصد بین طول‌موج‌های 350 تا 400 نانومتر به‌ترتیب برای سلول خورشیدی با لایه انتقال‌دهنده الکترون ZnO و SnO<sub>2</sub> می‌باشد

## نتیجه‌گیری

در این مقاله، عملکرد سلول‌های خورشیدی پروسکایتی و اثر دو لایه انتقال دهنده الکترون (SnO<sub>2</sub>, ZnO) در عملکرد سلول‌های خورشیدی پروسکایتی بررسی شد تجزیه و تحلیل تمام نتایج نشان می‌دهد که بهینه ضخامت‌های SnO<sub>2</sub>, ZnO, CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> به‌ترتیب، 120، 100 و 400 نانومتر، بهینه N<sub>D</sub> برای لایه‌های انتقال دهنده الکترون 10<sup>18</sup> بر سانتی‌متر مکعب و همچنین بهینه دما 320 کلوین می‌باشد پس از آن پارامترهای فتوولتائیک محاسبه شده توسط سلول خورشیدی با دو لایه انتقال دهنده الکترون نشان می‌دهد که لایه ZnO دارای بازده 20,55% بوده لذا لایه ZnO جایگزین مناسب به‌دلیل کاهش هزینه و افزایش تحرک الکترون برای ماده SnO<sub>2</sub> می‌باشد.

## مرجع‌ها

- [1] S. Agarwal, M. Seetharaman, N.K. Kumawat, A.S. Subbiah, S.K. Sarkar, D. Kabra, M.A. Namboothiry, P.R. Nair, On the uniqueness of ideality factor and voltage exponent of perovskite-based solar cells, *Journal of Physical Chemistry Letters* 5 (2014) 4115–4121.
- [2] V.J. Babu, S. Vempati, S. Sundarajan, M. Sireesha, S. Ramakrishna, Effective nano structured morphologies for efficient hybrid solar cells, *Solar Energy* 106 (2-14) 1–22.
- [3] J. Burschka, N. Pellet, S.J. Moon, R. Humphry, P. Gao, M.K. Nazeeruddin, M. Gratzel, Sequential deposition as a route to high-performance perovskite-sensitized solar cells, *Nature* 499 (2013) 316–319.
- [4] Q. Chen, H. Zhou, Z. Hong, S. Luo, H.S. Duan, H.H. Wang, Y. Liu, G. Li, Y. Yang, Planar heterojunction perovskite solar cells via vapor-

- Photoinduced giant dielectric constant in lead halide perovskite solar cells, *Journal of Physical Chemistry Letters* **5** (2014) 2390–2394.
- [15] L. Kavan, M. Graetzel, Highly efficient semiconducting TiO<sub>2</sub> photoelectrodes prepared by aerosol pyrolysis, *Electrochimica Acta* **40** (1995) 643–652.
- [16] M.I. Hossain, F.H. Alharbi, N. Tabet, Copper oxide as inorganic hole transport material for lead halide perovskite based solar cells, *Sol. Energy* **120** (2015) 370–380.
- [17] M.M. Lee, J. Teuscher, T. Miyasaka, T.N. Murakami, H.J. Snaith, Efficient hybrid solar cells based on meso-superstructured organometal halide perovskites, *Science* **338** (2012) 643–647.
- [18] X. Li, N.P. Hylton, V. Giannini, K.H. Lee, N.J. Daukes, S.A. Maier, Bridging electromagnetic and carrier transport calculations for three-dimensional modelling of plasmonic solar cells, *Optics Express* **19** (2011) 888–896.
- [19] D. Liu, T.L. Kelly, Perovskite solar cells with a planar heterojunction structure prepared using room-temperature solution processing techniques, *Nature Photonics* **8** (2014) 133–138.
- [20] A. Asadollahbaik, S.A. Boden, M.D.B. Charlton, D.N.R. Payne, S. Cox, D.M. Bagnall, Reflectance properties of silicon moth-eyes in response to variations in angle of incidence, polarisation and azimuth orientation, *Optics Express* **22** (2014) A402–A415.
- [21] M. Liu, M.B. Johnston, H.J. Snaith, Efficient planar heterojunction perovskite solar cells by vapour deposition, *Nature* **501** (2013) 395–398.
- [22] P. Loper, M. Stuckelberger, B. Niesen, J. Werner, M. Filipic, S.J. Moon, J.H. Yum, M. Topic, S.D. Wolf, 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* **6** (2015) 66–71.
- [23] Z. Xu, H. Huangfu, L. He, J. Wang, D. Yang, J. Guo, H. Wang, Light-trapping properties of the assisted solution process, *Journal of the American Chemical Society* **136** (2014) 622–625.
- [5] M.A. Green, A. Baillie, H.J. Snaith, The emergence of perovskite solar cells, *Nature Photonics* **8** (2014) 506–514.
- [6] Z. Yang, A. Shang, L. Qin, Y. Zhan, C. Zhang, P. Gao, J. Ye, X. Li, Broadband and wide-angle light harvesting by ultra-thin silicon solar cells with partially embedded dielectric spheres, *Optics Letters* **41** (2016) 1329–1332.
- [7] Z. Xu, H. Qiao, H. Huangfu, X. Li, J. Guo, H. Wang, Optical absorption of several nanostructures arrays for silicon solar cells, *Optics Communications* **356** (2015) 526–529.
- [8] Z. Xu, H. Huangfu, X. Li, H. Qiao, W. Guo, J. Guo, H. Wang, Role of nanocone and nanohemisphere arrays in improving light trapping of thin film solar cells, *Optics Communications* **377** (2016) 104–109.
- [9] E. Karimi, S.M.B. Ghorashi, Investigation of the Influence of Different Hole-Transporting Materials on the Performance of Perovskite Solar Cells, *Optick* **16** (2016) S0030-4026.
- [10] J. Zhang, Z. Yu, Y. Liu, H. Chai, J. Hao, H. Ye, Dual interface gratings design for absorption enhancement in thin crystalline silicon solar cells, *Optics Communications* **399** (2017) 62–67.
- [11] W.I. Nam, Y.J. Yoo, Y.M. Song, Geometrical shape design of nanophotonic surfaces for thin film solar cells, *Optics Express* **24** (2016) A1033–A1044.
- [12] X. Jia, L. Shen, Y. Liu, W. Yu, X. Gao, Y. Song, W. Guo, S. Ruan, W. Chen, Performance improvement of inverted polymer solar cells thermally evaporating CuI as an anode buffer layer, *Synthetic Metals* **198** (2014) 1–5.
- [13] Y. Jiang, M.A. Green, R. Sheng, A. Baillie, Room temperature optical properties of organic–inorganic lead halide perovskites, *Sol. Energy Mater. Solar Cells* **137** (2015) 253–257.
- [14] E.J. Juarez, R.S. Sanchez, L. Badia, G. Garcia, Y.S. Kang, L. Mora, J. Bisquert,

- [31] K. Tanaka, T. Minemoto, H. Takakura, Analysis of heterointerface recombination by  $Zn_{1-x}Mg_xO$  for window layer of Cu(In, Ga)  $Se_2$  solar cells, *Solar Energy* **83** (2009) 477–479.
- [32] S. Wenger, M. Schmid, G. Rothenberger, A. Gentsch, M. Gratzel, J.O. Schumacher, Coupled optical and electronic modeling of dye-sensitized solar cells for steady-state parameter extraction, *Journal of Physical Chemistry C* **115** (2011) 10218–10229.
- [33] Z. Xiao, Q. Dong, C. Bi, Y. Shao, Y. Yuan, J. Huang, Solvent annealing of perovskite-induced crystal growth for photovoltaic-device efficiency enhancement, *Advanced Materials* **26** (2014) 6503–6509.
- [34] Z. Xiao, C. Bi, Y. Shao, Q. Dong, Q. Wang, Y. Yuan, C. Wang, Y. Gao, J. Huang, Efficient, high yield perovskite photovoltaic devices grown by interdiffusion of solution-processed precursor stacking layers, *Energy Environmental Science* **7** (2014) 2619–2623(2014).
- [35] G.C. Xing, N. Mathews, S.Y. Sun, S.S. Lim, Y.M. Lam, M. Gratzel, S. Mhaisalkar, T.C. Sum, Long-range balanced electron- and hole-transport lengths in organic–inorganic  $CH_3NH_3PbI_3$ , *Science* **342** (2013) 344–347.
- [36] H.P. Zhou, Q. Chen, G. Li, S. Luo, T.B. Song, H.S. Duan, Z.R. Hong, J.B. You, Y.S. Liu, Y. Yang, Interface engineering of highly efficient perovskite solar cells, *Science* **345** (2014) 542–546.
- Si inclined nanowire arrays, *Optics Communications* **382** (2017) 332–336.
- [24] T. Minemoto, M. Murata, Theoretical analysis on effect of band offsets in perovskite solar cells, *Solar Energy Material Solar Cells* **133** (2015) 8–14 (2015).
- [25] A.J. Moule, H.J. Snaith, M. Kaiser, H. Klesper, D.M. Huang, M. Gratzel, K. Meerholz, Optical description of solid-state dyesensitized solar cells, *Applied Physics* **106** (2009) 073-111.
- [26] N. Yamamuro, T. Matsuo, H. Suga, Dielectric study of  $CH_3NH_3PbX_3$ , (X = Cl, Br, I), *Journal Physical Chemistry Solids* **53** (1992) 935–939.
- [27] D. Poplavskyy, J. Nelson, Nondispersive hole transport in amorphous films of methoxy-spirofluorene-arylamine organic compound, *Applied Physics* **93** (2003) 341-349.
- [28] H.J. Snaith, M. Gratzel, Electron and hole transport through mesoporous  $TiO_2$  infiltrated with spiro-MeOTAD, *Advanced Materials* **19** (2007) 3643–3647.
- [29] E. Karimi, S.M.B. Ghorashi, Simulation of perovskite solar cell with  $P_3HT$  hole-transporting materials, *Nano photonics* **11** (2017) 1-15.
- [30] T. Leijtens, L.M. Herz, A. Petrozza, H.J. Snaith, Electron–hole diffusion lengths exceeding 1 micrometer in an organometal trihalide perovskite absorber, *Science* **342** (2013) 341–344.

## Designing and optimizing perovskite solar cells using different electron-transporting materials

Elham Karimi, Seyed Mohamad Bagher Ghorashi\*

Department of Physics, University of Kashan, Khashan, Iran

Received: 14.10.2017    Final revised: 05.05.2018    Accepted: 07.05.2018

### Abstract

This paper presents a comparative study of organometal halide perovskite-based solar cells using two different transparent conducting oxides, including  $\text{SnO}_2$  and  $\text{ZnO}$ , as electron-transporting materials. Simulation is an interesting way of studying the behavior of every component of a solar cell device as well as analyzing the performance of the full device. A solar cell capacitance simulator (AMPS)-1D has been the tool used for numerical simulation of such devices. In this study, the influences of thickness of absorber and ETMs, dopant concentration of ETM, and working temperature on the performance of photovoltaic solar cells are studied. The performance of both devices indicates the replacement of  $\text{SnO}_2$  by a  $\text{ZnO}$  layer.  $\text{ZnO}$  can be a good option to reduce the cost and increase the mobility of ETM for this type of solar cells.

**Keywords:** Perovskite solar cell, AMPS-1D software, Electron-transporting material, Solar cells simulation

---

\* Corresponding Author: mghorashi@kashanu.ac.ir