

شبیه‌سازی تأثیر سطح مشترک لایه‌ها بر کارایی سلول خورشیدی پروسکایتی مسطح

غلامحسین حیدری^{۱*}، فروغ هدایی^۱

۱ گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ملایر، ملایر

Email: moh1135@gmail.com
frghodaei@gmail.com

چکیده - در این مقاله، اثر مهندسی سطح مشترک در ساخت سلول خورشیدی پروسکایتی مسطح شبیه‌سازی گردید. برای این منظور در مرز مشترک لایه فعال سلول خورشیدی با لایه‌های مجاور، بواسطه ناهمواری‌های سطحی که در حین ساخت ایجاد می‌گردند، دو لایه $IL1$ و $IL2$ در نظر گرفته و به ساختار متعارف سلول پروسکایتی اضافه گردید. بعنوان مهم‌ترین مشخصه در بررسی‌های اپتیکی، تابع دی الکتریک دو لایه، توسط تئوری مؤثر بروگمن تخمین زده شد. در ادامه تأثیر ضخامت لایه‌های $IL1$ و $IL2$ بر کارایی سلول خورشیدی پروسکایتی با استفاده از روش تئوری TMM و روش شبیه‌سازی $FDTD$ جهت مدل توسعه داده شده، بررسی گردید. نتایج نشان می‌دهند که ضخامت لایه‌های $IL1$ و $IL2$ تأثیر شدیدی بر جذب جزئی لایه فعال دارا می‌باشند که باید در ساخت سلول پروسکایتی مسطح در نظر گرفته شوند.

کلید واژه - سلول خورشیدی پروسکایتی، مهندسی سطح مشترک، روش TMM و $FDTD$ ، تئوری محیط مؤثر بروگمن.

Simulation of the interface layers effect on the efficiency of planar perovskite solar cell

Gholamhosain Haidari^{1*}, Forough Hodaei¹

1 Department of Physics, Faculty of Sciences, Malayer University, Malayer, Iran

Abstract - In this paper, the effect of interface engineering in the construction of a planar perovskite solar cell was simulated. For considering the interface between active layer and adjacent layers, the two layers $IL1$ and $IL2$ were added to the conventional structure of the solar cell, due to the surface roughness created during the fabrication. As the most important property in optical investigations, the dielectric function of two interface layers, were estimated by the Bruggeman effective medium theory. The effect of the thickness of $IL1$ and $IL2$ layers on the efficiency of perovskite solar cell was investigated by using TMM theory and $FDTD$ simulation for this developed model. The results show that the thickness of the $IL1$ and the $IL2$ layers have a severe effect on the parasitic absorption of the active layer, which should be considered in the formation of planar perovskite solar cell.

Keywords: Perovskite solar cell, Interface engineering, TMM and $FDTD$ method, Bruggeman effective medium theory.

۱- مقدمه

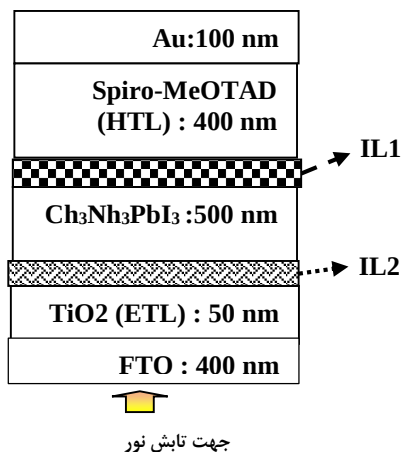
ساختار پروسکایتی به ساختار بلورین مشابه با ساختار نمونه اولیه CaTiO_3 برمی گردد. ساختارهای پروسکایتی فرم کلی ABX_3 را دارا می باشند که برای سلول خورشیدی $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ ، کاتیون A یون متیل آمونیوم، B سرب و X هالید می باشد. متیل آمونیوم سرب یدید ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$) یک نیمه رسانا با باندگپ مستقیم $\sim 1.55 \text{ eV}$ می باشد و آن را بعنوان یک جذاب خوب برای طیف مرئی تابش خورشیدی در ساختار سلول خورشیدی معرفی می کند که برای اولین بار نیز در سال ۲۰۰۹ معرفی شد. میاساکا و همکارانش پروسکایت های ارگانومتالیک را در سلول های خورشیدی حساس به رنگینه (DSSC) به کار بردند و بازدهی در حدود ۳.۸٪ را به دست آوردند [۱]. در ادامه محققان متعددی به بررسی سلول های خورشیدی پروسکایتی پرداخته و نتایج جالب توجهی را درباره ی بازدهی بالا با روش های مختلف ساخت به دست آوردند. اخیراً محققان بازدهی ۲۲٪ را گزارش کرده اند [۲]. جدای همه موارد مثبت ذکر شده، هنوز انواع سلول های خورشیدی (از جمله سلول های پروسکایتی) نیاز به بازدهی و طول عمر بیشتری دارند تا در رقابت با منابع انرژی فسیلی، اقتصادی تر شوند. برای ساخت سلول خورشیدی مسطح روش های لایه نشانی چرخشی تک و دو مرحله ای وجود دارد. در این میان مهندسی سطح لایه های نازک یکی از گزینه های بسیار مهم در غلبه یافتن بر نقاط ضعف سلول های خورشیدی می باشد [۳ و ۴]. در این تحقیق جهت بررسی اثرات وابسته به سطح تماس مشترک لایه ها، دو لایه مؤثر بین "لایه پروسکایتی/لایه عبور دهنده حفره" و "لایه پروسکایتی/لایه عبور دهنده الکترون" نسبت می دهیم (این لایه ها به ترتیب IL_1 و IL_2 نام گذاری گردیدند). درواقع به واسطه ناهمواری (roughness) دو لایه در محل تماس، می توان محل تماس را یک لایه کامپوزیتی دانست که ترکیبی از لایه های بالایی و پایینی است (شکل ۱). در این تحقیق به شبیه سازی اثرهای اپتیکی تداخلی منتج از در نظر گرفتن این دو لایه IL_1 و IL_2 بر طیف جذبی لایه فعال سلول خورشیدی (شامل اثرات تداخلی و طیف جذبی جزئی) پرداخته شده است.

برای این منظور از روش تفاضل محدود در حوزه زمان (FDTD) استفاده گردید.

۲- روش های مورد استفاده در شبیه سازی

۲-۱ روش شبیه سازی FDTD

روش FDTD یکی از روش های عددی حل معادلات ماکسول می باشد. مزیت اولیه روش FDTD سراسر بودن آن در کار با سلول مکعبی "بی" بوده بطوریکه مؤلفه های میدان الکترومغناطیسی در نقاط مختلف فضای شبیه سازی به طور مستقیم و بدون نیاز به معکوس کردن ماتریس محاسبه می گردند. بمنظور در نظر گرفتن پاشندگی محیط در بررسی های اپتیکی نیاز به دانستن تابع دی الکتریک حقیقی-موهومی (یا معادل آن ضریب شکست حقیقی-موهومی) می باشد که برای مواد سلول پروسکایتی توسط محققان بواسطه روش های تجربی مرتبط، اندازه گیری شده است (شکل ۲) [۵]. برای انجام شبیه سازی FDTD از محیط نرم افزاری لومریکال استفاده گردید.



شکل ۱: نمایش نوعی سلول پروسکایتی مسطح. از آنجایی که سطح مشترک لایه ها در یکدیگر فرو رفتگی هایی دارند، لایه های مجاور MAPbI_3 با دو لایه HTL و ETL با دو لایه مؤثر جایگزین گردیدند به این ترتیب که با در نظر گرفتن IL_1 و IL_2 ، مدل مورد استفاده در شبیه سازی، توسعه داده شد. از این سلول جهت شبیه سازی FDTD استفاده شده است.

۲-۲ روش محیط مؤثر بروگمن (Bruggeman)

در نظر گرفتن تابع دی الکتریک حقیقی-موهومی بر حسب طول موج برای لایه IL_1 و IL_2 کار ساده ای نیست. این دو

جواب‌های شبیه‌سازی سلول پایه بدست آمده از روش FDTD با روش تئوری TMM استفاده گردید. جهت روش TMM از کدی در محیط متلب استفاده شد.

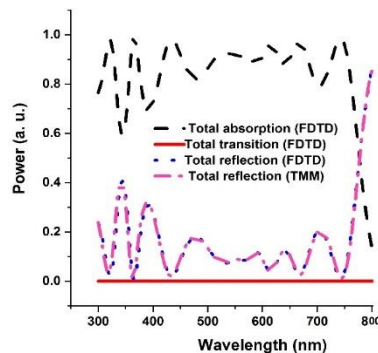
۳- بحث و نتایج

در ابتدا برای سلول پایه بدون IL1 و IL2 توان بازتاب، توان جذبی و توان عبوری مربوط به کل ساختار سلول پایه شبیه‌سازی گردید. همانگونه که در شکل ۲ ذکر گردید، از مرجع [۵]، جهت ضریب شکست مواد مورد استفاده در طول موج های مختلف استفاده گردید.

ساختار و ضخامت سلول پایه عبارت است از :
Au/Spiro/Perovskite/TiO2/FTO

100 nm/400 nm/500 nm/50 nm/400nm

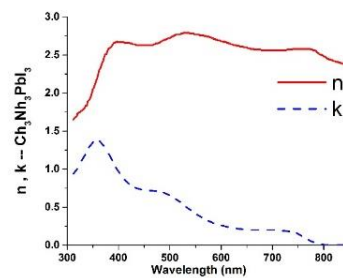
مطابقت خوب توان بازتاب کل محاسبه‌شده با روش TMM و روش FDTD (شکل ۳)، نمایشی از صحت شبیه‌سازی انجام‌گرفته بر اساس روش FDTD می‌تواند در نظر گرفته شود. به علت لایه فلزی طلا در انتهای ساختار، توان کل عبوری نزدیک به صفر است.



شکل ۳: منحنی‌های توان کل بازتاب، عبور و جذب مربوط به سلول پروسکایتی پایه شبیه‌سازی‌شده توسط FDTD. توان کل بازتابیده شده به روش TMM نیز جهت مقایسه دو روش، نشان داده شده است.

همان‌گونه که شکل ۳ نشان می‌دهد جذب خوبی برای کل ساختار وجود دارد. این جذب در محدوده مادون‌قرمز به‌شدت کاهش پیدا می‌کند که با توجه به گاف پروسکایت که نزدیک ۱.۵ eV می‌باشد (حدود ۸۰۰ nm) معقول به نظر می‌رسد. در ادامه ساختار سلول پروسکایتی متعارف را توسعه داده و دو لایه ی مفروض IL1 و IL2 را به ساختار اضافه کردیم. در نمونه های مختلف، برای این دو لایه به صورت همزمان ضخامت‌های ۱۰ nm، ۲۰ nm، ۳۰ nm، ۴۰ nm، ۵۰ nm را در نظر گرفتیم. به عبارت دیگر، در هر

لایه حدس زده شده درواقع ساختاری دارند که ترکیبی از جنس دو لایه مجاور سطح مشترک می‌باشند.



شکل ۲: نمایش مقدارهای ضریب شکست حقیقی (n) و موهومی (k) بر حسب طول موج مربوط به ماده پروسکایتی. تمامی ضریب شکست های مورد استفاده از مرجع [۵] اقتباس گردیده اند.

برای غلبه بر این مشکل یک راه استفاده از روش محیط مؤثر می‌باشد. در این تحقیق از روش محیط مؤثر بروگمن جهت محاسبه تابع دی الکتریک لایه‌های IL1 و IL2 استفاده شد [۶]:

$$f \frac{\epsilon_1 - \epsilon_{eff}}{\epsilon_1 + 2\epsilon_{eff}} + (1-f) \frac{\epsilon_2 - \epsilon_{eff}}{\epsilon_2 + 2\epsilon_{eff}} = 0 \quad (1)$$

که در آن f کسر حجمی، ϵ_1 و ϵ_2 تابع دی الکتریک دو محیط مجاور و ϵ_{eff} تابع دی الکتریک لایه مؤثر می‌باشند. در این بررسی f برابر ۰/۵ انتخاب گردید. برای تعیین ϵ_{eff} بر اساس روش بروگمن، کدی در محیط متلب برنامه‌نویسی گردید.

۲-۳ روش ماتریس انتقال (TMM)

تئوری حاکم بر این روش به فراوانی در دسترس می باشد. در این روش، ماتریس کلی سیستم چندلایه‌ای به صورت زیر تعریف می‌شود :

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \left\{ \prod_{r=1}^K \begin{bmatrix} \cos \delta_r & \frac{i \sin \delta_r}{\eta_r} \\ i \eta_r \sin \delta_r & \cos \delta_r \end{bmatrix} \right\} \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_{K+1} \end{bmatrix} \quad (2)$$

که K تعداد لایه‌ها، δ_r فاز ضخامت هر لایه، η_r هدایت ظاهری نوری برای هر لایه که برای قطبش p و s متفاوت می‌باشد. درنهایت، توان عبور (T) و بازتابش (R)، نسبت شدت ورودی $|E_0|^2$ به شدت بازتاب شده یا عبور کرده، تعریف می‌گردد و جذب عبارت است از: $A=1-T-R$.

در این تحقیق برای بررسی صحت انجام شبیه‌سازی سلول خورشیدی به‌وسیله روش شبیه‌سازی FDTD، از مطابقت

از اهمیت زیادی برخوردار می‌شود به نحوی که روش ساخت تجربی باید به گونه‌ای انتخاب گردد که مرز تیزی در فصل مشترک دو لایه ایجاد گردد و یا به عبارت دیگر لایه‌ها دارای کمترین ناهمواری (Roughness) باشند.

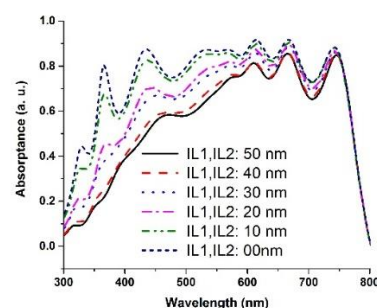
۴- نتیجه‌گیری

تأثیر ناهمواری در سطح مشترک لایه‌های MAPbI₃/HTL و MAPbI₃/ETL بر عملکرد سلول خورشیدی پروسکایتی شبیه‌سازی و بررسی گردید. برای این منظور دولایه‌ی مفروض IL1 و IL2 معرفی و به ساختار متعارف سلول پروسکایتی اضافه گردیدند. به واسطه ناهمواری دولایه در مرز، درواقع لایه‌های فوق به نوعی کامپوزیتی است که از دو ماده مجاور آن تشکیل شده است. برای تخمین تابع دی الکتریک (حقیقی-موهومی) دو لایه مفروض از روش محیط مؤثر بروگمن استفاده گردید. در ادامه با استفاده از سلول پروسکایتی توسعه داده شده و روش FDTD، طیف جذبی جزئی لایه فعال سلول خورشیدی شبیه‌سازی گردید. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهند که به ویژه در ناحیه مهم نزدیک به ماورا بنفش تا نزدیک به انتهای طیف مرئی، جذب جزئی لایه فعال به شدت به ضخامت لایه‌های IL1 و IL2 وابسته است و با افزایش ضخامت لایه‌های مفروض، از میزان جذب کاسته می‌گردد. بنابراین مهندسی سطح مشترک در ساخت سلول‌های پروسکایتی مسطح باید بسیار مورد توجه قرار گیرد.

مراجع

- [1] Yusoff, A.R. and M.K. Nazeeruddin, Perovskite Solar Cells - Fabrication and Characterization. Wiley-VCH Verlag GmbH, 2019 (The initial version is usable, now).
- [2] Ulsan National Institute of Science and Technology (UNIST). "New world efficiency record with perovskite solar cells." ScienceDaily. ScienceDaily, 25 July 2017.
- [3] Zhou, H., et al., Interface engineering of highly efficient perovskite solar cells. Science, 345(6196), pp. 542-546, 2014.
- [4] Yang, G., et al., Interface engineering in planar perovskite solar cells: energy level alignment, perovskite morphology control and high performance achievement. Journal of Materials Chemistry A, 5(4), pp. 1658-1666, 2017.
- [5] Ball, James M., et al., Optical properties and limiting photocurrent of thin-film perovskite solar cells. Energy & Environmental Science, 8, pp. 602-609, 2015.
- [6] Choy, T.C., Effective Medium Theory: Principles and Applications. 2016: Oxford University Press, 2016.

نمونه ضخامت IL1 و IL2 یکسان می‌باشند و به این ترتیب اضافه می‌گردند که در مرز مشترک دو لایه، با سهم یکسان از ضخامت لایه‌های مجاور کسر می‌گردد تا لایه‌های مفروض IL1 و IL2 با ضخامت مورد نظر به دست آیند. جهت انجام کلیه محاسبات روش TMM و یا FDTD، تابع دی الکتریک حقیقی-موهومی لایه‌های IL1 و IL2 با استفاده از تئوری محیط مؤثر بروگمن محاسبه گردیدند. با توجه به اینکه مرتبه ضخامت لایه‌های فصل مشترکی بسیار کوچک و از مرتبه چند ده نانومتر انتخاب گردیده است، استفاده از روش شبیه‌سازی FDTD در مقایسه با روش تئوری TMM می‌تواند دقیق‌تر باشد. از این رو در شبیه‌سازی جذب جزئی لایه پروسکایتی (Ch₃Nh₃PbI₃=MAPbI₃) سلول توسعه داده شده، تنها از روش FDTD استفاده گردید. این جذبی است که در لایه فعال سلول خورشیدی اتفاق می‌افتد و به تولید اکسیژن منجر می‌گردد. با در نظر گرفتن بازده کوانتومی داخلی ۱۰۰ درصد، تمام این اکسیژن‌ها می‌توانند در فرآیند جریانی سلول خورشیدی وارد شوند. بنابراین این طیف جذبی جزئی لایه فعال می‌تواند نمایشی از بازده سلول خورشیدی نیز در نظر گرفته شود.



شکل ۴: طیف جذبی جزئی لایه MAPbI₃ سلول خورشیدی پروسکایتی توسعه داده شده، برای ضخامت‌های مختلف لایه‌های IL1 و IL2. ضخامت صفر به معنی عدم در نظر گرفتن لایه‌های سطح مشترکی می‌باشد. ضخامت کل سلول خورشیدی در همه‌ی نمونه‌ها مقدار ثابت ۱۴۵۰ nm انتخاب شده است.

همان‌گونه که از شکل ۴ در مقایسه با شکل ۳ آشکار می‌گردد جذب جزئی لایه فعال نزدیک به قسمت ماوراءبنفش طیف (بیشترین شدت طیف خورشیدی مربوط به این ناحیه است) به شدت تحت تأثیر ضخامت لایه IL1 و IL2 قرار می‌گیرد و کاهش شدیدی را نشان می‌دهد. از این رو مهندسی سطح در ساخت سلول پروسکایتی مسطح