بیست و ششمین کنفرانس اپتیک و
فوتونیک ایران و دوازدهمین
کنفرانس مهندسی و فناوری
فوتونیک ایران،
دانشگاه خوارزمی،
تهران، ایران.
۱۶-۱۵ بهمن ۱۳۹۸

شبیه‌سازی منحنی جریان- ولتاژ سلول خورشیدی نانوساختاری پروسکایت با نرم افزار کامسول و تعیین ضخامت لایه جاذب بهینه

مرضیه بنی اسدی، مجتبی رحیمی، حمیدرضا باغشاهی، محمدرضا فروزش‌فرد

دانشگاه ولی عصر(عج) رفسنجان، marziebaniasadi1394@gmail.com

دانشگاه ولی عصر(عج) رفسنجان، m_rahimi@vru.ac.ir

دانشگاه ولی عصر(عج) رفسنجان، baghshahi@vru.ac.ir

دانشگاه ولی عصر(عج) رفسنجان، m.forouzeshfard@yahoo.com

در بررسی سلول‌های خورشیدی شبیه‌سازی از اهمیت زیادی برخوردار است زیرا باعث صرفه‌جویی قابل توجه در هزینه‌ها و زمان انجام تحقیقات و تخمینی از شرایط بهینه سلول می‌گردد. در این مقاله یک سلول خورشیدی نانوساختار پروسکایت با استفاده از نرم افزار کامسول شبیه‌سازی کردیم و در ادامه برای رسیدن به بیشترین بازده تبدیل توان، ضخامت لایه پروسکایت بهینه‌سازی شده است. بیشترین مقدار بازده بدست آمده در بهینه‌سازی ضخامت پروسکایت، مقدار ٪۶/۶ در ضخامت ۳۰۰ نانومتر به‌دست آمد.

کلید واژه- پروسکایت، سلول خورشیدی، شبیه‌سازی، کامسول.

Simulation of I-V Curve of Perovskite Nano-structured Solar Cell by COMSOL Software and Determination of Optimum Thickness of Absorber Layer

Marzie Baniasadi, Mojtaba Rahimi, **Hamidreza Baghshahi**, Mohammadreza Forouzeshfard

Vali-e-Asr University of Rafsanjan, marziebaniasadi1394@gmail.com

Vali-e-Asr University of Rafsanjan, m_rahimi@vru.ac.ir

Vali-e-Asr University of Rafsanjan, baghshahi@vru.ac.ir

Vali-e-Asr University of Rafsanjan, m.frouzeshfard@yahoo.com

Abstract- Simulation is dramatically important for investigation of solar cells, because it noticeably makes the research more efficiently done. Additionally, it makes possible the estimation of optimal conditions for solar cells. In this paper, we have simulated a nano-structured Perovskite solar cell using Comsol software. Next, thickness of Perovskite layer was optimized to achieve the highest power efficiency which was 6.6% in 300 nm thickness.

Keywords: Solar Cell, Perovskite, Simulation, COMSOL.

این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت *www.opsi.ir* قابل دسترسی باشد.

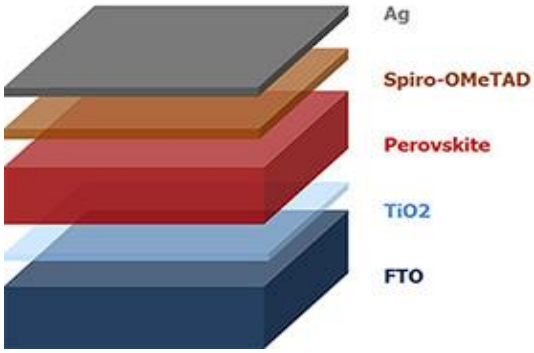
[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-06-10]

مقدمه

دو عامل اصلی که در عملکرد هر سلول خورشیدی بررسی می‌شود، افزایش بازده تبدیل توان وکاهش هزینه‌های تولید آن است. سلول‌های خورشیدی پروسکایتی به دلیل قابلیت ساخت آن‌ها بر پایه مواد محلول و کاهش هزینه تولید و همچنین بازده بالاتری که نسبت به سایر سلول‌ها از خود نشان دادند، بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند [۴-۱]. پژوهش‌های تجربی زیادی برای بهبود کارایی این نوع سلول‌ها انجام شده است، اما در زمینه شبیه‌سازی سلول‌های پروسکایتی گزارش‌های کمتری ارائه شده است. شبیه‌سازی رایانه‌ای می‌تواند به عنوان یک ابزار قدرتمند برای تجزیه و تحلیل عملکرد سلول‌خورشیدی استفاده شود. سیلواکو و کامسول از جمله نرم افزارهایی هستند که امکان شبیه سازی سلول خورشیدی در آن‌ها وجود دارد [۷-۵]. ما قصد داریم در این مقاله به کمک نرم افزار کامسول یک سلول خورشیدی پروسکایتی تک کاتیونه را شبیه سازی کنیم و مشخصه‌های آن از جمله ولتاژ مدار باز، جریان اتصال کوتاه، ضریب پرکنندگی و بازده را محاسبه کنیم و با تغییر ضخامت لایه پروسکایت به ضخامت بهینه پروسکایت برای افزایش بازده سلول دست یابیم.

ساختار سلول خورشیدی و معادلات حاکم

در شکل۱ ساختار لایه‌ای سلول خورشیدی پروسکایتی تک کاتیونه مشاهده می‌شود. اولین لایه یک الکترود شفاف است که برروی شیشه لایه نشانی شده است. این الکترود به منظور جلوگیری از خروج بارهای الکتریکی تولید شده در اثر جذب نور، به خارج از سلول به‌کار می‌رود. *FTO* ساختاری است که در این لایه استفاده می‌شود. لایه بعدی، Tio_2 (تیتانیم اکسید) است که نیم‌رسانای نوع n می‌باشد و به‌عنوان لایه انتقال دهنده الکترون عمل می‌کند. لایه بعدی جاذب پروسکایت است که در این لایه از $CH_3NH_3PbI_3$ (متیل آمونیوم سرب یدید) استفاده شده است. سپس لایه انتقال‌دهنده حفره که نیم‌رسانا نوع p است بر روی لایه جاذب قرار می‌گیرد. ترکیب استفاده شده برای این لایه، اسپایروامتاد (*Spiro-OMeTAD*) است. لایه آخر لایه‌ای فلزی از جنس طلا یا نقره است که به‌عنوان اتصال خارجی روی لایه انتقال دهنده حفره قرار می‌گیرد [۲]. همان‌طورکه می‌دانیم انتقال بار در مواد نیم‌رسانا توسط الکترون‌ها و حفره‌ها انجام می‌شود. معادلات اصلی انتقال حامل‌ها در نیم‌رساناها بدون توجه به ساختار پیوند آن‌ها، همواره معادله پواسون و معادلات پیوستگی جریان الکترون و حفره هستند. معادله (۱)، معادله پواسون است که توزیع میدان درون سلول و معادلات (۲) و (۳) معادلات پیوستگی هستند که جریان حامل‌های بار را در سلول توضیح می‌دهند.



شکل ۱ ساختار لایه‌ای سلول خورشیدی پروسکایتی

$$\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \phi) = -\rho \quad (۱)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q}\nabla J_n + G_n - U_n \quad (۲)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{q}\nabla J_p + G_p - U_p \quad (۳)$$

که ϕ پتانسیل الکتریکی، q بار الکتریکی، ε ثابت دی الکتریک نیم‌رسانا، G_n و G_p به‌ترتیب نرخ کل تولید الکترون و حفره هستند. U_n و U_p به ترتیب نرخ بازترکیب الکترون و حفره‌اند و ρ چگالی بار هستند. همچنین J_n و J_p چگالی جریان الکترون و حفره می‌باشند [۳].

شبیه‌سازی سلول خورشیدی توسط نرم افزار کامسول

یکی از مشخصه‌های مهم سلول خورشیدی نمودار جریان ولتاژ است. ما برای رسیدن به این منحنی، یک سلول

این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت *www.opsi.ir* قابل دسترسی باشد.

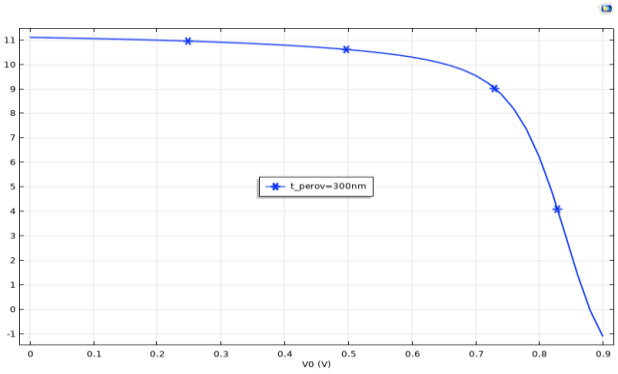
[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-06-10]

خورشیدی پروسکایتی را در نسخه ۵/۴ نرم افزار کامسول شبیه‌سازی کردیم. فیزیک مورد استفاده در نرم افزار، *semiconductor* است. در قسمت *Geometry*، هندسه سلول تعریف می‌شود. سلول تحت تابش طیف استاندارد نور خورشید (*AM1.5*) قرار می‌گیرد و با حل معادلات ۱، ۲ و ۳ که به صورت غیر وابسته به زمان حل می‌شوند، نمودار جریان-ولتاژ سلول حاصل می‌شود [۶]. در شبیه‌سازی انجام شده پارامترهای زیادی استفاده شده است که در جدول ۱ به برخی از آن‌ها اشاره شده است.

جدول ۱ برخی پارامترهای استفاده شده در شبیه‌سازی.

پارامتر	*Tio2*	$CH_3NH_3PbI_3$	*Spiro*
t (nm)	۵۰	۳۰۰	۵۰
E_g *(eV)*	۳/۲	۱/۵	۲
ε	۹	۶/۵	۳
χ *(eV)*	۴	۳/۹۳	۲/۴
N_D (cm^{-1})	$۱۰^{۱۹}$	۰	۰
N_A (cm^{-1})	۰	$۱۰^{۱۳}$	$۱۰^{۱۸}$

نمودار جریان-ولتاژ حاصل از پارامترهای بالا در شکل زیر قابل مشاهده است.



شکل۲ نمودار جریان-ولتاژ سلول شبیه‌سازی شده.

نتایج حاصل از شبیه‌سازی در جدول ۲ مشاهده می‌شوند:

جدول ۲ نتایج شبیه‌سازی سلول خورشیدی.

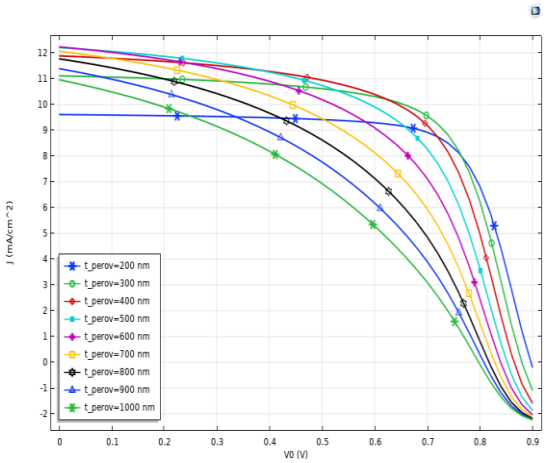
پارامتر	نتایج شبیه‌سازی
J_{sc} (mA/cm^2)	۱۱/۱۱
V_{oc} (V)	۰/۸۷
I_{mp} (mA/cm^2)	۹/۵۴۳
V_{mp} (V)	۰/۶۹۴
P_{mpp} (mW/cm^2)	۶/۶۹۱
FF $(\%)$	۶۸
η $(\%)$	۶/۶

I_{mp} و V_{mp} حداکثر جریان و ولتاژ در نقطه‌ای است که بیشترین توان در سلول تولید می‌شود (قسمت زانویی نمودار). V_{oc} حداکثر ولتاژ در نقطه‌ای که در آن جریان صفر است و J_{sc} نیز حداکثر چگالی جریان در نقطه‌ای است که ولتاژ صفر است. ولتاژ مدار باز و جریان اتصال کوتاه به‌طور مستقیم از نمودار جریان-ولتاژ استخراج می‌شوند و برای محاسبه‌ی فاکتورگنجایش (FF) و بازده تبدیل توان (η) به ترتیب از روابط زیر استفاده می‌شود:

$$FF = \frac{I_{mp}V_{mp}}{J_{sc}V_{oc}} \quad (۴)$$

$$\eta = \frac{I_{mp}V_{mp}}{P_{in}} \quad (۵)$$

P_{in}=100 mw/cm^2 توان طیف استاندارد تابش نور خورشید است [۴].



شکل ۳ نمودار جریان-ولتاژ ضخامت‌های مختلف پروسکایت.

این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت *www.opsi.ir* قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-06-10]

در ادامه برای رسیدن به ضخامت بهینه لایه پروسکایت به منظور دستیابی به بیشترین بازده، ضخامت پروسکایت را از ۲۰۰ نانومتر تا ۱۰۰۰ نانومتر تغییر می‌دهیم. شکل ۳ نمودار جریان-ولتاژ سلول خورشیدی را به‌ازای ضخامت‌های ذکر شده نشان می‌دهد.

نتایج حاصل از شبیه‌سازی در جدول زیر مشاهده می‌شوند:

جدول ۳ نتایج شبیه‌سازی با تغییر ضخامت لایه پروسکایت.

t (nm)	J_{sc} (mA/cm^2)	V_{oc} (V)	FF (%)	η (%)
۲۰۰	۹/۶۱۱	۰/۸۹۶	۷۳	۶/۳
۳۰۰	۱۱/۱۱	۰/۸۷۹	۶۸	۶/۶
۴۰۰	۱۱/۸۹	۰/۸۶۴	۶۳	۶/۴
۵۰۰	۱۲/۲۱	۰/۸۵۱	۵۷	۶
۶۰۰	۱۲/۲۳	۰/۸۲	۴۸	۴/۸
۷۰۰	۱۲/۰۷	۰/۸۲۷	۴۹	۴/۸
۸۰۰	۱۱/۷۷	۰/۸۱۷	۴۵	۴/۳
۹۰۰	۱۱/۳۹	۰/۸۰۷	۴۲	۳/۸
۱۰۰۰	۱۰/۹۶	۰/۷۹۷	۴۲	۳/۴

نتیجه‌گیری:

در این پژوهش یک سلول خورشیدی پروسکایت به‌طور کامل در نسخه ۵/۴ نرم افزار کامسول شبیه‌سازی شد. برای دستیابی به یک سلول خورشیدی با عملکرد بهینه، می‌توان پارامترهای مختلف از جمله ضخامت لایه‌ها، جنس مواد لایه‌ها از جمله لایه‌ی مزومتخلخل و لایه جاذب را تغییر داد. همچنین اضافه کردن بعضی عناصر مانند گرافن به بهبود عملکرد سلول کمک می‌کند. در اینجا ما فقط ضخامت لایه جاذب که حاوی پروسکایت تک‌کاتیونه $CH_3NH_3PbI_3$ است را تغییر دادیم. نتایج بدست آمده از منحنی جریان- ولتاژ (شکل۳) نشان می‌دهد که بهترین بازده تبدیل توان مقدار ٪۶/۶ برای ضخامت ۳۰۰ نانومتر است. اما با آنکه انتظار داریم با افزایش ضخامت لایه جاذب، ناحیه جذب فوتونی افزایش پیدا کند و بازده بالا رود، اما به علت سایر فرآیندهای فیزیکی از جمله بازترکیب بازده سلول کاهش پیدا می‌کند. شکل ۳ به وضوح نشان می‌دهد تغییر ضخامت لایه‌ی جاذب تأثیر چندانی در ولتاژ مدار باز ندارد، اما به‌طور قابل ملاحظه‌ای جریان مدار کوتاه و در حقیقت کیفیت سلول را تغییر می‌دهد. مهم‌ترین پیشنهادات برای بهبود کیفیت سلول به شرح زیر پیشنهاد می‌گردند:

الف) کاهش ضخامت لایه *Spiro-OMeTAD*.

ب) جایگزینی Cl به جای I با توجه به گاف انرژی آن.

ج) تغییر N_c و N_v بسته به ساختار مورد نظر.

د) تغییر ساختار پروسکایت تک‌کاتیونه به سه کاتیونه

مراجع:

[1] National Renewable Energy Laboratory (NREL), Best Research-Cell Efficiency Chart, 2019.

[2] Zh. Singling, D. Zhao, Ch.Ch. Chua, X. Shi, Hz. Li, “Highly efficient and stable perovskite solar cells enabled by all-cross-linked charge-transporting layers” Joul., Vol. 2, pp. 168-183, 2017.

[3] M. Grätzel, “The rise of highly efficient and stable perovskite solar cells”, Acc. Chem., Vol. 50, pp. 487-491, 2017.

[4] S. H. Turren-Cruz, M. Saliba, “Enhanced charge carrier mobility and lifetime suppress hysteresis and improve efficiency in planar perovskite solar cells”, Energ. Environ. Sci. Vol. 11, No. 1, pp. 78-86, 2018.

[5] K. R. Adhikari, S. Gurung, “Comparative study on MAPbI3 based solar cells using different electron transporting materials”, phys status solidi (c)., Vol. 13, No. 1, pp. 13-17, 2016.

[6] H. Gill Sang, J. Sun Yoo, and et al “Highly stable perovskite solar cells in humid and hot environment”, J. Mat. Chem. Vol. 5, No. 28, pp. 14733-14740, 2017.

[7] Kang, A. Kafi, M. H. Zandi, and et al. “Simulation analysis of graphene contacted perovskite solar cells using SCAPS-1D”, Opt. and Quantum Electron. Vol. 51, No. 4,pp. 91, 2019.

این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت *www.opsi.ir* قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-06-10]