



بیست و پنجمین کنفرانس اپتیک و  
فوتونیک ایران و یازدهمین کنفرانس  
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،  
دانشگاه شیراز،  
شیراز، ایران.  
۱۳۹۷ بهمن ۹-۱۱



## شبیه‌سازی و بهبود عملکرد سلول خورشیدی لایه نازک CZTSe با الکتروود شفاف گرافن

سمانه امیری، دکتر سجاد دهقانی، دکتر رزا صفایی

دانشگاه شیراز، دانشکده فناوری‌های نوین

چکیده - در این مقاله عملکرد سلول خورشیدی لایه نازک CZTSe با ساختار graphene/CdS/CZTSe/Al با در نظر گرفتن اثر باز ترکیب با استفاده از نرم‌افزار Silvaco شبیه سازی شده است. تاثیر گاف انرژی، ضخامت و چگالی ناخالصی لایه جاذب و همچنین ضخامت و چگالی ناخالصی لایه بافر بر عملکرد این سلول مورد بررسی قرار گرفتند. به طوری که در حالت بهینه ساختار سلول خورشیدی با لایه پنجره گرافن به ضخامت 10 nm، لایه بافر CdS با ضخامت 90 nm و چگالی ناخالصی  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ، لایه جاذب CZTSe با ضخامت  $1.2 \mu\text{m}$  و چگالی ناخالصی  $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  و گاف انرژی 1.12 eV به بازده  $\eta = 14.28\%$ ، چگالی جریان اتصال کوتاه  $J_{sc} = 31 \text{ mA/cm}^2$ ، ولتاژ مدار باز  $V_{oc} = 0.6 \text{ V}$  و ضریب پرشدگی  $F.F = 76.38\%$  دست می‌یابیم که نسبت به سلول خورشیدی CZTSe متداول بهبود قابل توجهی داشته است.

کلید واژه - بازده، سلول خورشیدی لایه نازک، سیلواکو، CZTSe

## Simulation and performance improvement of CZTSe thin film solar cell with graphene transparent electrode

Samaneh Amiri, Sajjad Dehghani, Rosa Safaiee

school of Advanced Technologies, Shiraz University, Shiraz

**Abstract-** In this paper we simulate the performance of CZTSe thin film solar cells with graphene/CdS/CZTSe/Al structure including recombination effects. Effects of bandgap energy, thickness and doping of absorber layer, thickness and doping of buffer layer on the performance of the solar cell is investigated. In the optimum structure with 10 nm graphene as window layer, 90 nm thick CdS with doping concentration  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  as buffer layer and CZTSe with  $1.2 \mu\text{m}$  thickness and 1.12 eV bandgap energy and doping concentration of  $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  as absorber layer, Efficiency  $\eta = 14.28\%$ ,  $J_{sc} = 31 \text{ mA/cm}^2$ ,  $V_{oc} = 0.6 \text{ V}$ ,  $F.F = 76.38\%$  was obtained. The efficiency is improved significantly in comparison to the common CZTSe solar cells.

Keywords: CZTSe, efficiency, Silvaco, thin film solar cell

جدول ۱- پارامترهای به کاررفته در شبیه سازی سلول خورشیدی CZTSe [3, 5, 6, 7].

parameters	CZTSe	CdS	Graphene
Thickness ( $\mu\text{m}$ )	1.2	0.15	0.01
Permittivity	7	10	25
Bandgap	1.04	2.42	0
Affinity	4.05	3.75	5.25
Electron effective mass	0.07	0.25	-----
Hole effective mass	0.2	5	-----
Electron mobility	145	160	$10^4$
Hole mobility	35	15	$10^4$
Donor density	-----	$5 \times 10^{16}$	-----
Acceptor density	$5 \times 10^{15}$	-----	-----
SRH life time	$1.5 \times 10^{-9}$	$7.5 \times 10^{-10}$	-----
Radiative recombination	$1.04 \times 10^{-10}$	$1.02 \times 10^{-10}$	-----

با توجه به مقادیر ذکرشده در جدول ۲، خطای نتایج شبیه سازی با نتایج تجربی تقریباً بین ۲ تا ۵ درصد است که این میزان اختلاف خیلی ناچیز است، چون CZTSe پلی کریستال است و با توجه به اینکه جدول مربوط به پارامترهای مواد در کار تجربی ذکر نشده است به همین دلیل مقداری تفاوت وجود دارد.

Graphene	10 nm
CdS	150 nm
CZTSe	1200 nm
Aluminum	100 nm

شکل ۱- ساختار سلول خورشیدی CZTSe

## مقدمه

از CZTSe برای ساخت سلول خورشیدی لایه نازک با هزینه کم و بازده بالا استفاده می شود زیرا این نیمه هادی دارای ضریب جذب زیاد  $10^4$ ، گاف انرژی مستقیم در بازه 0.9-1.12 eV است. منابع آن به وفور در کره زمین یافت می شوند، انعطاف پذیر است و به راحتی بر روی سطوح غیرمسطح قابل نصب هستند [1].

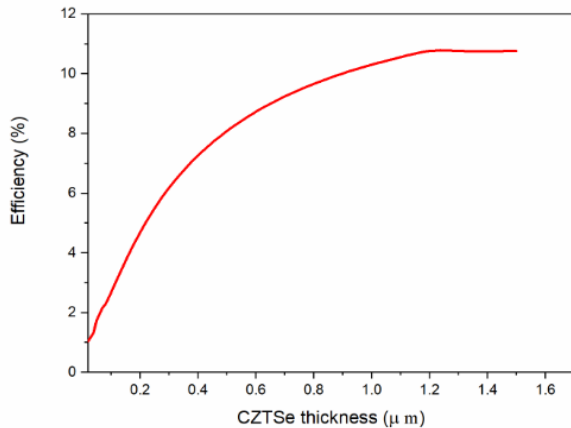
در سلول های متداول از الکتروود شفاف اکسید قلع ایندیم (ITO) استفاده شده است اما چون این ماده شکننده بوده و قیمت آن به دلیل محدود بودن منابع آن زیاد است از گرافن که انعطاف پذیرتر و از آن تر از ITO است به جای آن استفاده می شود. مقاومت صفحه ای گرافن کمتر از ITO است و ۹۷ درصد نور خورشید را از خود عبور می دهد که این باعث می شود نور بیشتری به لایه جاذب برسد و بازده سلول افزایش می یابد [2].

هدف کلی از این مقاله ارائه یک ساختار بهینه برای بهبود عملکرد سلول خورشیدی لایه نازک CZTSe می باشد. که در حالت بهینه به  $\eta = 14.28\%$  رسیده ایم.

## شبیه سازی سلول خورشیدی CZTSe

ابتدا سلول خورشیدی CZTSe را مطابق شکل ۱ و با داده های جدول ۱ با نرم افزار Silvaco شبیه سازی می کنیم.

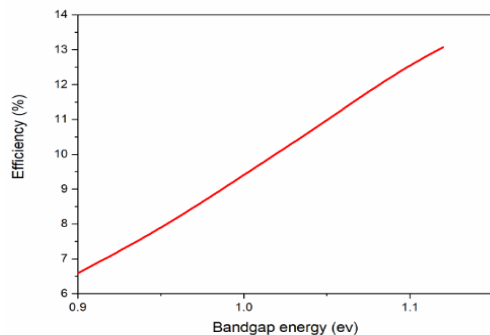
بر اساس گزارش مقاله‌ها، چگالی ناخالصی لایه جاذب و بافر در بازه  $10^{14}$ - $10^{18}$   $\text{cm}^{-3}$  تغییر می‌کنند بر این اساس ما هم چگالی ناخالصی را در این بازه تغییر می‌دهیم. طبق نتایج شبیه سازی در حالت بهینه برای CdS با چگالی ناخالصی  $10^{17}$   $\text{cm}^{-3}$  به  $\eta=10.69\%$  و برای CZTSe با چگالی ناخالصی  $5 \times 10^{16}$   $\text{cm}^{-3}$  به  $\eta=11.47\%$  دست می‌یابیم.



شکل ۳- منحنی بازده بر حسب ضخامت لایه جاذب CZTSe

#### ۴- گاف انرژی لایه جاذب

بر اساس مرجع [9] گاف انرژی CZTSe در بازه 0.9-1.12 eV تغییر می‌کند، از این رو ما اثر تغییر گاف انرژی بر بازده سلول خورشیدی را بررسی می‌کنیم. مطابق شکل ۴ با افزایش گاف انرژی بازده افزایش می‌یابد زیرا در ساختار سلول به دلیل وجود پیوند pn ناهمگن با افزایش گاف انرژی، پتانسیل داخلی سلول افزایش می‌یابد که این موجب افزایش  $V_{oc}$  می‌شود؛ از طرفی دیگر با افزایش پتانسیل داخلی احتمال تجمع الکترون‌ها و حفره‌ها در سلول افزایش می‌یابد که این هم موجب افزایش  $J_{sc}$  می‌شود، در نتیجه افزایش  $V_{oc}$  و  $J_{sc}$  سبب افزایش بازده می‌شود [3]. مطابق شکل ۴ در گاف انرژی 1.12 eV بیشترین بازده  $\eta=13.07\%$  را به دست می‌آوریم.



شکل ۴- منحنی بازده بر حسب گاف انرژی لایه جاذب CZTSe

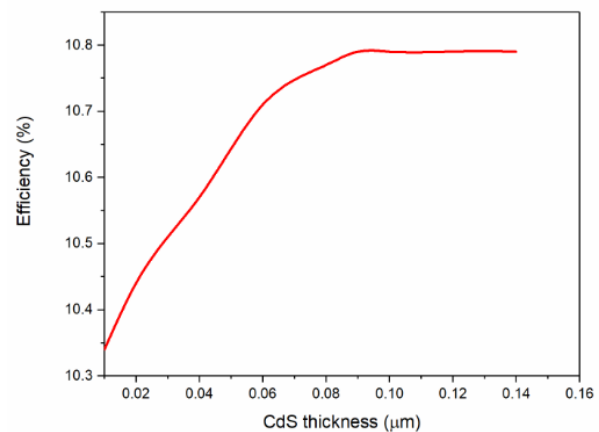
جدول ۲- مقایسه نتایج شبیه سازی ساختار اولیه با نتایج تجربی [8].

نتایج	$\eta$ (%)	$V_{oc}$ (v)	$J_{sc}$ ( $\text{mA}/\text{cm}^2$ )	$F.F$ (%)
تجربی	10.21	0.426	36.1	66.4
شبیه سازی	10.76	0.45	35.20	67.83

### بررسی تاثیر پارامترهای مختلف بر عملکرد سلول خورشیدی CZTSe

#### ۱- ضخامت لایه بافر

ضخامت لایه بافر را در بازه 10-150 nm تغییر می‌دهیم که طبق شکل ۲ در ضخامت 90 nm به بیشینه بازده  $\eta=10.79\%$  می‌رسیم.



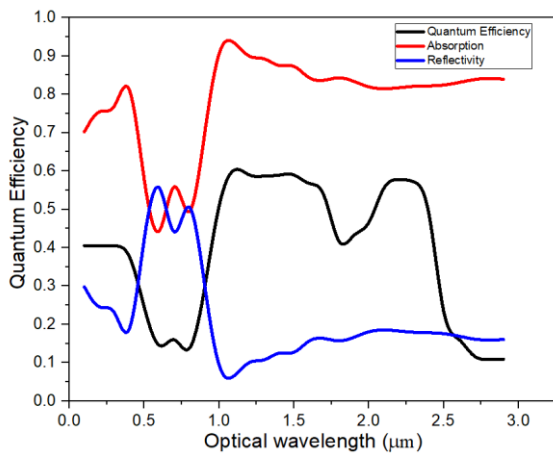
شکل ۲- منحنی بازده بر حسب ضخامت لایه بافر CdS

#### ۲- ضخامت لایه جاذب

ضخامت CZTSe را در بازه  $2 \mu\text{m} - 10 \text{ nm}$  تغییر می‌دهیم

که مطابق شکل ۳ در ضخامت  $1.2 \mu\text{m}$  به بیشینه بازده  $\eta=10.76\%$  می‌رسیم. با افزایش ضخامت بازده افزایش می‌یابد زیرا تعداد فوتون‌های بیشتری در لایه جاذب جذب می‌شوند که می‌توانند در تولید زوج الکترون - حفره بیشتری شرکت کنند و حامل‌های اضافی بیشتری تولید می‌کنند که باعث افزایش  $V_{oc}$  و  $J_{sc}$  می‌شود که در جهت افزایش بازده عمل می‌کند، از طرفی دیگر افزایش ضخامت به دلیل افزایش بازترکیب در جهت کاهش بازده عمل می‌کند و در جایی این دو اثر همدیگر را خنثی می‌کنند و ثابت می‌شوند و بازده به اشباع می‌رسد [4].

#### ۳- چگالی ناخالصی لایه جاذب و لایه بافر



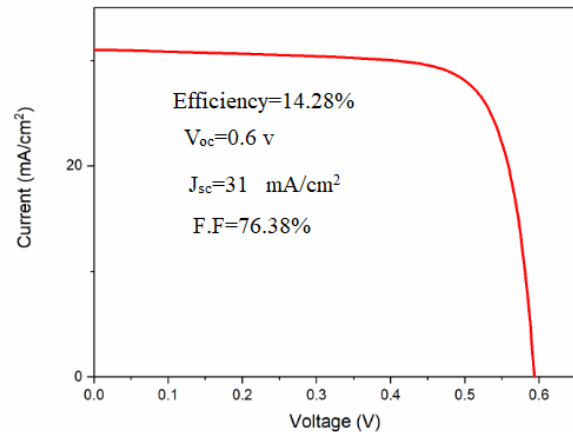
شکل ۶- منحنی بازده کوانتومی، جذب و بازتاب بر حسب طول موج

### مرجع ها

- [1] A. Reshak, K. Nouneh and I. Kityk, "Structural, Electronic and Optical Properties in Earth-Abundant Photovoltaic Absorber of  $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$  and  $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$  from DFT calculations", *Int. J. Electrochem. Sci*, Vol. 9, pp. 955 – 974, 2014.
- [2] Y. Xu and J. Liu, "Graphene as Transparent Electrodes: Fabrication and New Emerging Applications", *materials views*, Vol. 12, No. 11, PP. 1400-1419, 2016.
- [3] U. Saha and M. Alam, "Proposition an computational analysis of a kesterite/kesterite tandem solar cell with enhanced efficiency", *RSC Advances*, Vol. 7, PP. 4806-4814, 2017.
- [4] A. Cherouana and R. Labbani, "Study of CZTS and CZTSSe solar cells for buffer layers selection", *Applied Surface Science*, Vol. 424, PP. 251-255, 2017.
- [5] K. ITO, *Copper Zinc Tin Sulfide-Based Thin-Film Solar Cells*, Wiley, PP. 172-173, 2015.
- [6] K. Patel and P. Tyagi, "Multilayer graphene as a transparent conducting electrode in silico heterojunction solar cells", *AIP advances*, Vol. 5, PP. 077165-11, 2015.
- [7] J. Weber, V. Calado and M. Sanden, "Optical constants of graphene measured by spectroscopic ellipsometry", *Applied physics letters*, Vol. 97, PP. 091904-3, 2010.
- [8] J. Lia, S. Kim and Y. Zhang, "Tailoring the defects and carrier density for beyond 10% efficient CZTSe thin film solar cells", *Solar Energy Materials & Solar Cells*, Vol. 159, PP. 447-455, 2017.
- [9] S. Bag, O. Gunawan and D. Mitzi, "Low band gap liquid-processed CZTSe solar cell with 10.1% efficiency", *Energy Environ. Sci*, Vol. 5, PP. 7060-7065, 2012.

### منحنی مشخصه I-V سلول خورشیدی در حالت بهینه

با در نظر گرفتن کیله مقادیر بهینه به دست آمده از قسمت‌های قبل برای گاف انرژی، ضخامت و چگالی ناخالصی لایه جذب، ضخامت و چگالی ناخالصی لایه بافر سلول را شبیه سازی کردیم که منحنی مشخصه I-V سلول در حالت بهینه مطابق شکل ۵ می‌باشد.



شکل ۵- منحنی مشخصه I-V سلول خورشیدی CZTSe در حالت بهینه

بنابراین در ساختار بهینه  $\eta=14.28\%$  شد، که نسبت به بازده تجربی  $\eta=10.21\%$  گزارش شده در [8] و همچنین نسبت به نتایج شبیه سازی‌های پیشین با بازده  $\eta=6.45\%$  و  $\eta=9.47\%$  که به ترتیب در [3] و [4] گزارش شده اند، بازده افزایش یافته است.

### منحنی بازده کوانتومی، جذب و بازتاب بر حسب طول

#### موج

نتایج اپتیکی حاصل از شبیه سازی، که شامل منحنی بازده کوانتومی سلول، جذب و بازتاب بر حسب طول موج می‌باشد در شکل ۶ نشان داده شده است.

### نتیجه گیری

در این مقاله سلول خورشیدی لایه نازک CZTSe با الکترون گرافن شبیه سازی گردید و تاثیر پارامترهای ضخامت، چگالی ناخالصی و گاف انرژی لایه جذب، ضخامت و چگالی ناخالصی لایه بافر بر عملکرد سلول بررسی شدند. که با توجه به مقادیر بهینه به دست آمده برای این سلول به بازده  $\eta=14.28\%$  دست یافتیم و به این طریق عملکرد کلی سلول CZTSe بهبود یافت.