یدید مس بعنوان یک لایه انتقال‌دهندهٔ حفره معدنی در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی برپایه $CH_3NH_3PbI_3$

سیدطالبی ، سیده مژگان[۱] ؛ کاظمی نژاد ، ایرج[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه شهید چمران، اهواز

چکیده

در این پژوهش، شبیه سازی سلول‌های خورشیدی پروسکایتی بر پایهٔ $CH_3NH_3PbI_3$ با استفاده از نرم افزار SCAPS-1D انجام شد. مشخصه‌های فتوولتائیک سلول خورشیدی پروسکایتی با یک لایهٔ انتقال دهندهٔ حفره ساخته شده از جنس یدیدمس با مشخصه‌های سلول خورشیدی دارای ساختار مشابه و با لایه انتقال‌دهندهٔ حفره Spiro-OMETAD مقایسه شده است. بدین منظور چگالی جریان اتصال کوتاه، ولتاژ مدار باز، فاکتور پُری و بازده سلول ها بطور عددی محاسبه شد. نتایج محاسبات عددی انجام شده، یدیدمس را به عنوان یک مادهٔ انتقال دهندهٔ حفره معدنی ارزانقیمت و در دسترس جایگزین مناسبی برای ماده گرانقیمت آلی پیشنهاد می‌کند. لذا با تکیه بر این نتایج می توان سلول های خورشیدی با لایه انتقال دهندهٔ حفره پایدار یدید مس با بازده قابل مقایسه با سلول خورشیدی با لایهٔ انتقال دهندهٔ حفره از جنس مادهٔ آلی Spiro-OMETAD طراحی نمود.

Copper iodide as an inorganic hole transport material in $CH_3NH_3PbI_3$ based perovskite solar cells

Seyed-Talebi, Seyedeh Mozhgan[1]; Kazeminezhad, Iraj[1]

[1] *Department of Physics, Shahid Chamran University, Ahvaz*

Abstract

In this study, the device modeling of $CH_3NH_3PbI_3$ provskite-based solar cells was performed using SCAPS-1D software. The photovoltaic characteristics of perovskite solar cells with a hole transport material (HTM) fabricated from CuI compared with a similar solar cell with Spiro-OMETAD as hole transport material. For this goal, the short-circuit current density(J_{sc}), open-circuit voltage (V_{oc}), fill factor and efficiency of solar cells calculated.These results propose the possibility to design hybride perovskite solar cells using cost effective and stable CuI HTM. We analyze numerically a potential inorganic hole transporting material to replace expensive organic Spiro- OMETAD. So a good replacement is found for the expensive and moisture-sensitive Spiro-OMETAD HTM of perovskite solar cells.

PACS No.

مقدمه

تاکنون بالاترین بازدهٔ بدست آمده از سلول‌های خورشیدی با لایه جاذب پروسکایتی از سلول‌های دارای لایهٔ انتفال دهندهٔ حفره آلی از جنس Spiro-OMETAD حاصل شده است[1-5]. علی‌رغم اینکه سلول‌های خورشیدی پروسکایتی دارای لایهٔ انتقال‌دهندهٔ حفره آلی بازده بالایی دارند، وقتی این مواد در شکل خالصشان استفاده می‌شوند، رسانندگی کمی از خود نشان می‌دهند[6]. که برای بهبود رسانندگی این مواد از نمک‌های بر پایه لیتیم و کبالت به‌عنوان افزودنی به مادهٔ انتقال‌دهندهٔ حفره استفاده می کنند. لذا هزینهٔ ساخت لایه مذکور بسیار بالاست. امروزه استفاده از مواد معدنی به‌عنوان لایهٔ انتقال دهندهٔ حفره در سلول های خورشیدی به دلیل هزینهٔ پایین ساخت مورد استقبال قرار گرفته است. مواد معدنی محدودی در رسیدن سلول به بازدهٔ قابل‌مقایسه با مقدار بدست آمده از Spiro-OMETAD

به‌عنوان لایهٔ انتقال‌دهندهٔ حفره موفق بوده‌اند. در این میان مواد معدنی برپایه مس مانند یدید مس به دلیل رسانندگی خوب و روش‌های ساده لایه نشانی مورد توجه قرار گرفته اند[7,8].

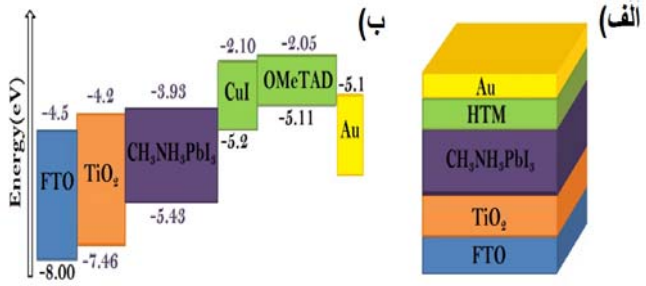
یدیدمس با یک شکاف نواری نسبتا بزرگ حدود ۳ الکترون ولت که سبب شفافیت خوب نور می‌شود و همچنین تحرک حفره بالا که پنج برابر بزرگ‌تر از تحرک حفره ها در اسپایرو می‌باشد و قیمت پایین و غیرسمی بودن آن کاندیدای مناسبی برای جایگزینی بجای اسپایرو می باشد[7]. اولین استفاده از یدید مس به‌عنوان یک مادهٔ انتقال دهندهٔ حفرهٔ معدنی با لایه‌نشانی شیمیایی آن برروی پروسکایت انجام شد. که به بازدهٔ ۶٪ در سلول با الکترود طلا و بازدهٔ ۷٫۵٪ برای سلول با الکترود گرافیتی منجر شد[8,9].

روش انجام محاسبات:

برای داشتن یک سلول خورشیدی با بازدهٔ بالا نیازست که تحرک حامل‌های الکترون- حفره بالا باشد و نرخ بازترکیب کمینه و حدفاصل لایه‌های مختلف بدون نقص باشد. بر این اساس شبیه سازی کامپیوتری یک ابزار ارزانقیمت و ارزشمند برای بدست آوردن اطلاعات مفید درخصوص بکارگیری مواد مختلف پیش از انجام آزمایش می‌باشد. شبیه‌سازی و محاسبات ارائه شده در این پژوهش با نرم افزار SCAPS-1D انجام شده است. این نرم افزار که عمدتا برای بررسی لایه های نازک با سطوح کاملا تخت درنظر گرفته می‌شود، از معادلهٔ پواسون و معادلهٔ پیوستگی برای بدست‌آوردن اطلاعات مورد نیاز در اثرگذاری پارامترهای مختلف بر روی مشخصه‌های سلول خورشیدی استفاده می‌کند.

بحث و نتیجه گیری

سلول‌های خورشیدی هیبریدی پروسکایتی مورد بررسی، مطابق شکل ۱، از سه ناحیه اصلی لایهٔ انتقال دهنده TiO_2، لایه جاذب پروسکایت از نوع $CH_3NH_3PbI_3$ و لایه انتقال دهندهٔ حفره تشکیل شده است. ضخامت لایه‌های مختلف در این پژوهش مطابق داده های سطر آخر جدول۱ در نظر گرفته شد.



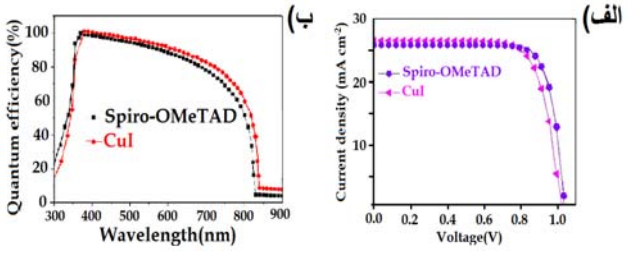
شکل۱: الف) ساختار شماتیک سلول خورشیدی بـر پایـه جـاذب پروسـکایت ب) نمودار سطوح انرژی لایه های مختلف سلول مورد مطالعه

پارامترهای مربوط به مواد استفاده شده در شبیه‌سازی مطابق داده‌های جدول۱ و از مقالات تجربی مختلف وارد شده است[10].

جدول۱ : پارامترهای مربوط به مواد مورد استفاده در سلول خورشیدی

	TiO_2	$MAPbI_3$	Spiro	CuI
ε_r	۱۰۰	۱۰	۳٫۰	۶٫۵
χ(eV)	۴٫۰	۳٫۹	۲٫۲	۲٫۱
E_g	۳٫۲	۱٫۵	۲٫۹۱	۳٫۱
Doping level	$۵\times۱۰^{+۱۹}$	$۱۰^{+۱۹}$	$۱۰^{+۱۸}$	$۱۰^{+۱۸}$
Thickness(nm)	۱۴۵	۴۰۰	۲۰۰	۱۵۰

نتایج بدست آمده از شبیه سازی مطابق جدول ۲ با تجربه مقایسه شده اند.



شکل۲ : الف) مقایسه نمودار J-V سلول خورشیدی پروسکایت با لایه انتقال دهنده حفره Spiro-OMeTAD و CuI ب) بازدهی کوانتومی (QE) سلول های خورشیدی با دولایه انتقال دهنده حفره متفاوت

دلیل بالاتر بودن مقادیر FF و V_{oc} و بازده نسبت به مقادیر تجربی اینست که مقاومت‌های سری مانند مقاومت لایهٔاکسید رسانای شفاف و مقاومت‌های تماسی در محاسبات وارد نشده اند

و همچنین نواقص ناشی از عدم همپوشانی کامل لایه ها در نظر گرفته نشده است.

جدول۲: مقایسه نتایج حاصل از شبیه سازی با نرم افزار SCAPS-1D و نتایج تجربی [۱۱و۱۲]

HTM		Spiro-OMETAD	CuI
V_{oc}(V)	SCAPS	۱٫۱۳	۱٫۱۲۳
	Exp	۰٫۹۹۳	۰٫۵۵
J_{SC}(mA/cm^2)	SCAPS	۲۵٫۳۸	۲۵٫۳۹
	Exp	۲۰٫۰	۱۷٫۸
FF(%)	SCAPS	۸۶٫۶۵	۸۱٫۸۷
	Exp	۷۳	۶۰
Efficiency(%)	SCAPS	۲۴٫۸۲	۲۵٫۰۶
	Exp	۱۵٫۰	۶٫۰

نتیجه‌گیری

با کمک شبیه سازی، بازده نسبتاً خوب بالای ۲۵٪ برای سلول خورشیدی پروسکایتی دارای لایه عبوردهندهٔ حفره معدنی از جنس یدید سرب بدست آمد. مقایسهٔ نتایج به‌دست آمده یدید سرب را یک جایگزین مناسب و ارزان‌قیمتی بجای مادهٔ آلی اسپایرو به‌عنوان مادهٔ عبور دهندهٔحفره پیشنهاد می‌دهد.

سپاسگزاری

نویسندگان از آقای مارک بورگلمن از دانشگاه جنت بلژیک به خاطر در اختیار نهادن برنامه SCAPS-1D صمیمانه تشکر می‌نمایند.

مرجع‌ها:

[۱] H. -S. Kim, C. –R. Lee, J. –H. Im, K. –B. Lee, T. Moehl, A. Marchioro, S.-J. Moon, R. Humphry-Baker, J.-H. Yum, J. E. Moser, M. Gratzel, N. –G. Park, *Sci. Rep.* 2 (2012) 591

[۲] J. Burschka, N. Pellet, S.-J. Moom, R. Humphry- Baker, P.Gao,M. K. Nazeeruddin, M. Gratzel, *Nature* 499 (2013) 316-319.

[۳] D. Liu, T. L. Kelly, *Nat. Photonics* 8 (2014) 133-138.

[۴] M. Liu, M. B. Johnston, H. J. Snaith, *Nature* 501 (2013) 395-398.

[۵] J. –H. Im, I. –H. Jang, N. Pellet, M. Gartzel, N. –G. Park, *Nat. Nanotechnol*. 9 (2014) 927-932.

[۶] J. Liu, Y. Wu, C. Qin, X. Yang, T. Yasuda, A. Islam, K. Zhang, W. Peng, W. Chen, L. Han, *Energy Environ. Sci.* 7 (2014)

[۷] S. Gharibzadeh, B. Abdollahi Nejand, A. Moshaii, N. Mohammadian, A. H. Alizadeh, R. Mohammadpour, V. Ahmadi, and A. Alizadeh, *ChemSusChem* 9 (2016) 1-10.

[۸] J. A. Christians, R. C. M. Fung, P. V. Kamat, *J. AM. Chem. Soc.* 136 (2014) 758-764.

[۹] G. A. Sepalage, S. Meyer, A. Pascoe, A. D. Scully, F. Huang, U. Bach, Y.- B. Cheng, L. Spiccia, *Adv. Funct. Mater*. 25 (2015) 5650-5661

[۱۰] A. Baktash, O. Amiri, and A. Sasani, *Super latt* (2016).

[۱۱] J. Burschka, N. Pellet, S. J. Moon, R. Humphry-Baker, P. Gao, M. K. Nazeeruddin and M. Gratzel,Sequential deposition as a route to high-performance perovskite-sensitized solar cells, *Nature* 499 (2013) 316-319

[۱۲] J. A. Christian, R. C. M. Fung, P. V. Kamat, An Inorganic Hole Conductor for Organo-Lead Halide Perovskite Solar Cells. Improved Hole Conductivity with Copper Iodide, J. Am. Chem. Soc. 136 (2014) 758-764.