

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ  
الْحَمْدُ لِلَّهِ الَّذِي  
خَلَقَ السَّمَوَاتِ وَالْأَرْضَ  
وَالَّذِي يُضَوِّبُ الْمَوْتَى  
إِنَّ رَبَّهُ لَسَدِيدٌ  
إِلَىٰ عَرْشِهِ الرَّحِيمُ  
الَّذِي يُرْسِلُ الرِّيَّاحَ  
تُحْمَلُهُ السُّحُبُ وَيَنْزِلُ  
بِالْمَاءِ الْغَازِقِ يُحْيِي  
بِهِ الشَّجَرَةَ إِنَّ اللَّهَ  
لَهُ الْحَمْدُ عِندَ حُكْمِهِ  
الرَّحِيمِ



دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده فیزیک و مهندسی هسته‌ای  
پایان نامه کارشناسی ارشد حالت جامد

# بررسی و مدلسازی پدیده بازیابی فوتون در لایه‌های نیمرسانا جهت کاربرد در سلول‌های خورشیدی پروسکائیتی

نگارنده: علی غلام‌پور

استاد راهنما  
دکتر مهدی انصاری‌راد

استاد مشاور  
دکتر سعید حسامی پیلهرود

تیر ۱۳۹۸

شماره:  
تاریخ:

باسمه تعالی



مدیریت تحصیلات تکمیلی

### فرم شماره (۳) صورتجلسه نهایی دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد

با نام و یاد خداوند متعال، ارزیابی جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد آقای علی غلام پور با شماره دانشجویی ۹۵۳۴۸۴۴ رشته فیزیک گرایش حالت جامد تحت عنوان بررسی و مدلسازی پدیده ی بازیابی فوتون در لایه های نیمرسانا جهت کاربرد در سلول های خورشیدی پروسکابیتی که در تاریخ ۱۳۹۸/۰۴/۲۵ با حضور هیأت محترم داوران در دانشگاه صنعتی شاهرود برگزار گردید به شرح ذیل اعلام می گردد:

<input type="checkbox"/> مردود	<input checked="" type="checkbox"/> قبول (با درجه: .....)
<input type="checkbox"/> عملی	<input checked="" type="checkbox"/> نظری

عضو هیأت داوران	نام و نام خانوادگی	مرتبه علمی	امضاء
۱- استاد راهنمای اول	دکتر مهدی انصاری راد	استادیار	
۲- استاد راهنمای دوم			
۳- استاد مشاور	دکتر سعید حسامی پيله رود	استادیار	
۴- نماینده تحصیلات تکمیلی	دکتر محمد باقر رحمانی	استادیار	
۵- استاد ممتحن اول	دکتر محمد ابراهیم قاضی	دانشیار	
۶- استاد ممتحن دوم	دکتر مرتضی ایزدی فرد	دانشیار	

نام و نام خانوادگی رئیس دانشکده: دکتر سعید حسامی پيله رود

تاریخ و امضاء و مهر دانشکده:

تبصره: در صورتی که کسی مردود شود حداکثر یکبار دیگر (در مدت مجاز تحصیل) می تواند از پایان نامه خود دفاع نماید (دفاع مجدد نباید زودتر از ۴ ماه برگزار شود).



تقدیم به:

خدایی که هستی را، جهان را، انسان را،  
عقل را، علم را، معرفت را و عشق را آفرید.

آسمان ابر بود  
و خورشید پنهانِ کوه و دشت در سکوت  
سنگی تنها  
در هجوم باد و محاط خار  
طوفانی آمد سخت  
و غبار بر فراز و هیچ در پیرامون  
سنگ چشم گشود از پس طوفان  
قاصدکی بر دلش نشسته بود  
و این  
آغازی دوباره بود

## سپاس‌گزاری

سپاس به درگاه ایزد نهران و آشکار که نعمت سلامتی ارزانی داشت و توفیق عنایت فرمود تا این پروژه را زیر نظر استادان گرانقدر و فرهیخته و دوستان صمیمی‌ام به انجام رسانم.

سپاسگذار کسانی هستم که برایم سختی را به آسانی، ناتوانی را به توانایی، نادانی را به دانایی و نفرت را به عشق مبدل کرده‌اند.

از پدر و مادر عزیزتر از جانم و یگانه خواهر مهربانم و خانواده بزرگم که در طی مسیر حامی و پشتیبان من بودند

از جناب آقای دکتر مهدی انصاری راد که برای اتمام این پروژه با پیگیری‌ها، پشتیبانی‌ها، تشویق‌ها، دل‌گرمی‌ها، راهنمایی‌ها و یادآوری‌های سودمند و با ارزش خود مرا هدایت و بر کیفیت آن افزودند

و از رفیق خوبم که مهر و معرفت را با نفس‌های گرمش به من آموخت  
صمیمانه تشکر می‌کنم.

و نزد او است کلیدهای ناپیدا که نداند آن‌ها را جز او و می‌داند آنچه را در دشت و دریا است و نیفتد برگی جز آنکه بداندش و نه دانه‌ای در تاریکی‌های زمین و نه تری و نه خشکی مگر در کتابی است آشکار (آیه ۵۹ سوره انعام).

علی غلام‌پور

تیر ۱۳۹۸

## تعهد نامه

اینجانب علی غلامپور دانشجوی کارشناسی ارشد رشته فیزیک دانشکده فیزیک و مهندسی هسته‌ای دانشگاه شاهرود، نویسنده پایان‌نامه با عنوان بررسی و مدلسازی پدیده بازیابی فوتون در لایه‌های نیمرسانا جهت کاربرد در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی، تحت راهنمایی مهدی انصاری‌راد متعهد می‌شوم:

- تحقیقات در این پایان‌نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهش‌های دیگر پژوهش‌گران، به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب این پایان‌نامه، تا کنون توسط خود، یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ‌جا ارایه نشده است.
- حقوق معنوی این اثر، به دانشگاه صنعتی شاهرود تعلق دارد، و مقالات مستخرج با نام “دانشگاه صنعتی شاهرود” یا “Shahrood University of Technology” به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به‌دست آوردن نتایج اصلی پایان‌نامه تاثیرگذار بوده‌اند، در مقالات مستخرج از پایان‌نامه رعایت می‌گردد.
- در تمام مراحل انجام این پایان‌نامه، در مواردی که از موجود زنده (یا بافت‌های آنها) استفاده شده است، ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در تمام مراحل انجام این پایان‌نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته (یا استفاده شده است)، اصل رازداری و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است.

علی غلامپور

تیر ۱۳۹۸

### مالکیت نتایج و حق نشر

- تمام حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه‌های رایانه‌ای، نرم‌افزارها و تجهیزات ساخته شده) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می‌باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی، در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در این پایان‌نامه بدون ذکر منبع مجاز نمی‌باشد.

## چکیده

با توجه به مشکلات ناشی از گرم شدن کره زمین، منابع انرژی تجدید پذیر مانند انرژی آبی، زمین گرمایی و انرژی خورشیدی در دهه‌های اخیر مورد توجه قرار گرفته‌اند. با توجه به بهره‌برداری از انرژی خورشیدی، یکی از امیدوار کننده‌ترین روش‌ها استفاده از فناوری سلول خورشیدی است که می‌تواند انرژی فوتون خورشید را به طور مستقیم به انرژی الکتریکی تبدیل کند. در میان سلول‌های خورشیدی در حال ظهور، سلول‌های خورشیدی پروسکایتی در سال‌های اخیر هم در عرصه علوم و هم در فناوری توجهات بسیاری را به خود جلب کرده‌اند. فرایندهای فیزیکی مختلف، از جمله جذب فوتون، ترابرد بار و بازترکیب بار (غیر تابشی، تابشی و اوژه) در شرایط کاری یک سلول خورشیدی رخ می‌دهند. یکی از فرآیندهایی که اخیراً توسط محققان این حوزه مورد مطالعه قرار گرفته است، پدیده بازیابی فوتون، یا به عبارتی دیگر فرآیند بازجذب فوتون ناشی از بازترکیب تابشی الکترون-حفره در جاذب‌های پروسکایتی است.

در پایان‌نامه حاضر، ما اثر بازیابی فوتون بر روی ولتاژ مدار باز ( $V_{oc}$ ) سلول‌های خورشیدی پروسکایتی بررسی کرده‌ایم. برای این منظور، ابتدا چگالی حامل‌های بار (الکترون‌ها و حفره‌ها) را از حل سه معادله پیوستگی جفت شده غیرخطی برای الکترون‌ها، حفره‌ها و فوتون‌ها در یک لایه جاذب بدست آوردیم. با استفاده از این چگالی‌ها،  $V_{oc}$  سلول را محاسبه کردیم. سپس وابستگی ولتاژ به پارامترهای مختلف سلول همانند ضخامت جاذب، شدت تابش و طول عمر غیرتابشی را بررسی کردیم. به منظور ارزیابی اثر بازیابی فوتون، نتایج را نیز با سلول مربوطه، بدون در نظر گرفتن ویژگی بازیابی فوتون، مقایسه کردیم. طبق نتایج ما، با افزایش ضخامت، به دلیل رقابت بین کاهش (اتلاف) بازترکیب و افزایش بازیابی فوتون، بیشینه‌ای در وابستگی ولتاژ به ضخامت وجود دارد. همچنین مشخص شد که بازیابی فوتون بیشترین تأثیر را روی ولتاژ در شدت تابش‌های بالاتر از  $1Sun$  دارد که در آن اتلاف ناشی از بازترکیب تابشی، اتلاف غالب در لایه جاذب است. علاوه بر این، از آنجا که برای طول عمر غیرتابشی بزرگ، رژیم بازترکیب تابشی است، تأثیر بازیابی فوتون افزایش می‌یابد و منجر به یک مقدار اشباع برای ولتاژ مدار باز سلول می‌شود که به عنوان حد شاکلی-کوییزر شناخته می‌شود. در نهایت، با بررسی رابطه بین اثرات مختلف، نتیجه گرفتیم که بازیابی فوتون می‌تواند ولتاژ مدار باز را چند ده میلی‌ولت افزایش دهد، که این به نوبه خود باعث افزایش یک درصدی راندمان سلول‌های خورشیدی پروسکایتی می‌شود.

کلمات کلیدی: سلول خورشیدی پروسکایتی، جذب فوتون، ترابرد بار، بازترکیب بار، بازیابی فوتون، معادلات پیوستگی، ولتاژ مدار باز، حد شاکلی-کوییزر، مشخصه‌یابی IMVS.

# فهرست مطالب

س	فهرست تصاویر
ش	فهرست جداول
۱	۱ مقدمه
۱	۱.۱ انرژی خورشیدی
۲	۱.۱.۱ بیناب خورشید و استانداردهای تابش
۵	۲.۱ سلول خورشیدی
۵	۱.۲.۱ تاریخچه سلول‌های خورشیدی
۶	۲.۲.۱ انواع سلول‌های خورشیدی
۷	۳.۲.۱ سلول‌های خورشیدی پروسکایتی
۹	۳.۱ روش‌های مشخصه‌یابی
۱۳	۴.۱ نیمرساناها
۱۳	۱.۴.۱ نظریه نواری
۱۴	۲.۴.۱ انواع نیمرسانا
۱۷	۲ تئوری
۱۷	۱.۲ فیزیک نیمرساناها
۲۰	۲.۲ سطح فرمی
۲۲	۱.۲.۲ توزیع شبه فرمی
۲۳	۲.۲.۲ پتانسیل الکتروشیمیایی
۲۶	۳.۲ تولید و بازترکیب حامل‌های بار
۲۶	۱.۳.۲ جذب فوتون و تولید زوج الکترون حفره
۲۷	۲.۳.۲ بازترکیب الکترون حفره
۲۹	۴.۲ معادلات پیوستگی الکترون‌ها و حفره‌ها
۳۰	۱.۴.۲ جریان سوق



۳۱	.....	جریان پخش	۲.۴.۲
۳۱	.....	جریان بار کل	۳.۴.۲
۳۲	.....	بازیابی فوتون	۵.۲
<b>۳۵</b>		<b>مروری بر مقالات</b>	<b>۳</b>
۳۵	.....	محاسبه ولتاژ مدار باز در حضور بازیابی فوتون	۱.۳
۴۰	.....	مشاهده تجربی اثر بازیابی فوتون در سلول‌های خورشیدی پروسکائیتی	۲.۳
۴۳	.....	شرایط گذرا و احتمال فرار وابسته به زمان	۳.۳
۴۷	.....	طیف‌سنجی امپدانس در حضور بازیابی فوتون	۴.۳
۴۹	.....	مدل‌سازی معادلات امپدانس در حالت کلی	۵.۳
<b>۵۳</b>		<b>مدل‌سازی بازیابی فوتون</b>	<b>۴</b>
۵۴	.....	معادلات پیوستگی در حضور بازیابی فوتون در شرایط پایا	۱.۴
۵۶	.....	محاسبه ولتاژ مدار باز بر اساس تغییرات ضخامت	۱.۱.۴
۶۰	.....	محاسبه ولتاژ مدار باز بر اثر تابش‌های مختلف	۲.۱.۴
		محاسبه ولتاژ مدار باز بر اساس تغییرات نرخ بازترکیب شاکی-رید-هال	۳.۱.۴
۶۴	.....	رید-هال	
۶۹	.....	معادلات پیوستگی در حضور بازیابی فوتون در شرایط گذرا	۲.۴
۷۰	.....	امپدانس الکتریکی	۱.۲.۴
۷۱	.....	اختلالات کوچک	۲.۲.۴
۷۳	.....	تبدیل لاپلاس	۳.۲.۴
۷۴	.....	تحلیل طیف IMVS در تابش‌های اختلالی متفاوت	۴.۲.۴
۷۷	.....	تحلیل طیف IMVS در ضخامت‌های متفاوت	۵.۲.۴
۷۹	.....	نتیجه‌گیری	۳.۴
<b>۸۱</b>		<b>مدل‌سازی معادلات پیوستگی الکترون‌ها، حفره‌ها و فوتون‌ها در حالت پایا و گذرا</b>	<b>آ</b>
<b>۸۵</b>		<b>مراجع</b>	

# فهرست تصاویر

۱.۱	ظرفیت تولید برق (گیگاوات) در طی سال‌های گذشته و پیش‌رو. انرژی‌های آبی (Hydro)، هسته‌ای (Nuclear)، خورشیدی (Solar)، بادی (Wind)، زیست توده (Biomass and waste) و زمین‌گرمایی (Geotherm). به عنوان مثال در سال ۲۰۱۳ تولید برق از انرژی پاک نسبت به سوخت‌های فسیلی پیشی گرفته است (به ترتیب برابر با ۱۴۳ گیگاوات در مقابل ۱۴۱ گیگاوات)
۲	[۱]. . . . .
۲.۱	میزان تابش عمودی سالانه خورشید بر روی کره زمین [۶]. . . . .
۳.۱	استانداردهای تابش خورشید و زاویه تابش آن‌ها. عبارتهای $AM^{\circ}$ و $AM_1$
۴	و $AM_{1.5}$ در متن توضیح داده شده است [۸]. . . . .
۴.۱	بیناب خورشید برای استانداردهای مختلف (طیف‌ها از بالا به پایین به ترتیب مربوط به تابش جسم سیاه و $AM^{\circ}$ و $AM_{1.5}$ هستند) و پیکان‌ها محل افت در طیف به واسطه جذب گازهای ذکر شده را نشان می‌دهند [۸].
۵.۱	سلول واحد پروسکایت [۲۱]. . . . .
۶.۱	ضریب جذب لایه فعال پروسکایت را نشان می‌دهد. [۲۲]. . . . .
۷.۱	تصویر سمت چپ ساختار تخت $(n - i - p)$ و تصویر سمت راست سطوح انرژی و ضخامت این لایه‌ها و همچنین چگونگی ترابرد الکترون و حفره را نشان می‌دهد [۲۳]. . . . .
۸.۱	نمودار جریان-ولتاژ سلول خورشیدی . . . . .
۹.۱	انواع گاف نواری نیم‌رساناها . . . . .
۱۰.۱	نمایش حرکت حفره . . . . .
۱۱.۱	تصویر الف آلیش اتم‌های شبکه با اتم‌های ناخالصی پذیرنده (D) و دهنده (A) را نشان می‌دهد. پارامترهای نشان داده شده در شکل در فصل آینده بررسی می‌شوند [۳۶]. . . . .
۱۶	برانگیخته شدن الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش در نتیجه جذب فوتونی با انرژی $\hbar\omega$ . شکل بازتولید شده از [۷]. . . . .
۱۸	. . . . .

- ۲.۲ نحوه توزیع الکترون‌ها و حفره‌ها و موقعیت سطح فرمی. که در آن  $\varepsilon_{fi}$  سطح فرمی ذاتی است. در تصویر الف، چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها با یکدیگر برابر است. تصویر ب، چگالی الکترون‌ها بیش‌تر از چگالی حفره‌هاست (مثلاً بر اثر آلایش نوع  $n$ ). شکل بازتولید شده از [۳۶]. . . . . ۲۱
- ۳.۲ مقیاس انرژی برای الکترون‌ها و حفره‌ها در نیمرسانا که در آن انرژی بستگی الکترون در مرز پایینی نوار رسانش، الکترون خواهی ( $\chi_e$ ) تلقی می‌شود. شکل باز تولید شده از [۷]. . . . . ۲۲
- ۴.۲ سطوح شبه فرمی ( $\varepsilon_{fv}$  و  $\varepsilon_{fe}$ ) [۷]. . . . . ۲۳
- ۵.۲ انواع بازترکیب‌های فعال در فلز هالید پروسکایت آلی و معدنی. تصویر سمت چپ، بازترکیب تابشی (دو ذره‌ای) که بین زوج الکترون-حفره رخ داده و باعث تولید فوتون می‌شود. تصویر وسط، بازترکیب غیرتابشی (یا شاکلی-رید-هال) فرآیندی تک ذره‌ای است که بازترکیب بین یک حامل آزاد و یک حامل به‌دام افتاده رخ می‌دهد. تصویر سمت راست، نشان دهنده بازترکیب اوزه است حداقل بین سه ذره رخ می‌دهد. شکل بازتولید شده از [۲۱]. . . . . ۲۹
- ۶.۲ نمایش از پدیده بازیابی فوتون. در مرحله اول نور توسط پروسکایت جذب شده و زوج‌های الکترون-حفره تولید می‌شوند. در مرحله دوم، بازترکیب بین زوج‌های الکترون-حفره صورت می‌گیرد که ممکن است به سه صورت تابشی، غیرتابشی و یا اوزه رخ دهد. برای فوتون گسیل شده از بازترکیب تابشی در مرحله سوم، ممکن است حالاتی از قبیل جذب دوباره فوتون (بازیابی فوتون) و تولید مجدد زوج الکترون-حفره، یا جذب غیر مفید (به‌عنوان مثال جذب در دیواره‌ها) و یا خروج از سلول رخ دهد. توجه داشته باشید که الکترون‌ها و حفره‌ها به ترتیب توسط دایره‌های توپر و خالی نشان داده شده‌اند. . . . . ۳۳
- ۱.۳ سه مدل نوری مورد استفاده در سلول خورشیدی پروسکایتی را نشان می‌دهد. در مدل نوری سمت چپ پراکندگی سطحی وجود ندارد و نور به صورت مستقیم وارد سیستم شده و پس از بازتاب کامل از سیستم خارج می‌شود. جذب برای تابش مستقیم، توسط معادله بیر-لمبرت داده می‌شود. در مدل نوری وسط، نور تابیده شده به سلول، توسط لایه پراکنده می‌شود و فوتون‌های درون سلول توسط تله‌های انرژی جذب می‌شوند. در مدل نوری سمت راست به جای پراکندگی، تداخل نور از لایه‌هایی با ضریب شکست مختلف در نظر گرفته شده است [۴۰]. . . . . ۳۷
- ۲.۳ تغییرات ولتاژ مدار باز با ضخامت ماده جاذب . . . . . ۳۸
- ۳.۳ تغییرات ولتاژ مدار باز با ضریب بازترکیب شاکلی-رید-هال . . . . . ۳۹

- ۴.۳ طرح گرافیکی میکروسکوپ نوری و اندازه‌گیری هندسی آن [۴۱] . . . . . ۴۱
- ۵.۳ تصویر سمت راست طیف گسیل نور پیش‌بینی شده از قانون بیر-لمبرت و تصویر سمت چپ طیف گسیل اندازه‌گیری شده برای واپاشی را نشان می‌دهد [۴۱] . . . . . ۴۲
- ۶.۳ ضریب جذب فوتون. همان‌طور که مشاهده می‌شود در طول موج‌های  $75^\circ$  نانومتر به بعد ضریب جذب افت شدید پیدا می‌کند [۴۱] . . . . . ۴۳
- ۷.۳ تصویر سمت چپ، احتمال فرار را به‌صورت تابعی از زمان برای ضخامت  $35^\circ$  نانومتر و در پاسخ به  $10^{14} \frac{\text{Photon}}{\text{cm}^2}$ ، و تصاویر سمت راست احتمال فرار از سطح جلو ( $f$ ) و سطح عقب ( $r$ ) برای دو ضریب جذب متفاوت نشان می‌دهد [۴۲] . . . . . ۴۵
- ۸.۳ نمایشی ساده برای طول پخش موثر [۴۲] . . . . . ۴۶
- ۹.۳ طول ترابرد (طول پخش ذاتی  $L_d$  و طول پخش موثر  $L_{eff}$ ) به‌صورت تابعی از شدت تابش ( $I_0$ ) تحت شرایط پایا در ضخامت‌های  $35^\circ$  نانومتر و ۱ میکرومتر [۴۲] . . . . . ۴۷
- ۱۰.۳ منحنی  $J-V$  قبل و بعد از اندازه‌گیری IS تحت تابش (نمودار سمت چپ)  $1\text{Sun}$  (نمودار سمت راست)  $1\text{Sun}$  [۴۴] . . . . . ۴۸
- ۱۱.۳ بررسی سلول در دو شرط مرزی بازتاب (تصویر بالا) و شرط مرزی جذب (تصویر پایین). در مرز  $x = 0$  الکترون‌ها با توزیع بولتزمن تزریق می‌شوند. پس از پخش الکترون‌ها به مرز  $x = d$  رسیده و جذب یا بازتاب می‌شوند. برای منحنی ۱ ضریب پخش  $L_n = 2L$  و منحنی ۲ ضریب پخش برابر  $L_n = L$  است [۳۰] . . . . . ۵۰
- ۱۲.۳ تصویر بالا طیف امپدانس را برای دو مکانیسم پخش و بازترکیب در سلول نشان می‌دهد. هر قله زمان مشخصه مکانیسم‌های موجود در سلول را مشخص می‌کند. تصویر پایین طیف امپدانس را فقط در حضور پخش نشان می‌دهد [۳۰] . . . . . ۵۲
- ۱.۴ نمایشی از لایه جاذب پروسکایت با ضخامت  $d$  . . . . . ۵۴
- ۲.۴ تغییرات چگالی الکترون‌ها (خط‌چین) و حفره‌ها (توپر) در تابش  $1\text{Sun}$  برای عمق‌های مختلف لایه جاذب (پروسکایت) در حضور بازتابی فوتون (منحنی سمت چپ) و عدم حضور آن (منحنی سمت راست) نشان می‌دهد. ضخامت لایه  $1/5$  میکرومتر بوده است. . . . . ۵۷



۱۳.۴	تغییرات ولتاژ مدار باز در ضریب شاکی-رید-هال $s^{-4}$ ، برای ضخامت‌های مختلف. قله مشاهده شده در این نمودار از اثر بازیابی فوتون نشأت گرفته
۶۷	است. . . . .
۱۴.۴	تغییرات ولتاژ مدار باز (ولت) نسبت به تغییرات شدت تابش فرودی (بر
۶۸	واحد ثانیه در سانتی متر مربع) در ضریب شاکی-رید-هال‌های مختلف .
۱۵.۴	تغییرات ولتاژ مدار باز (ولت) نسبت به تغییرات ضخامت (میکرومتر) در
۶۸	ضریب شاکی-رید-هال‌های مختلف . . . . .
۱۶.۴	تغییرات ولتاژ مدار باز (ولت) نسبت به تغییرات ضریب شاکی-رید-هال
۶۹	(ثانیه) در ضخامت‌های مختلف . . . . .
۱۷.۴	مدار RLC که شامل مقاومت، خازن و سلف است [۴۷]. . . . .
۱۸.۴	چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها به‌دست آمده از شبیه‌سازی در حضور بازیابی
۷۵	فوتون و عدم حضور آن. . . . .
۱۹.۴	طیف IMVS ولتاژ مدار باز سلول خورشیدی پروسکایت در تابش‌های اختلالی
۷۶	مختلف را نشان می‌دهد. . . . .
۲۰.۴	بیشینه بسامد زاویه‌ای در تابش‌های متفاوت را نشان می‌دهد. . . . .
۲۱.۴	طیف IMVS ولتاژ مدار باز سلول خورشیدی پروسکایت در ضخامت‌های
	مختلف را نشان می‌دهد. ضخامت در گام‌های ۱٪ بین ۵۰۰ نانومتر ( $O-$ )
۷۷	تا ۱/۵ میکرومتر ( $\times-$ ) تغییر می‌کنند. . . . .
۲۲.۴	قسمت حقیقی اختلال ولتاژ بر اساس تغییرات ضخامت را نشان می‌دهد.
۷۸	پیکان مشخص شده در نمودار روند افزایش ضخامت را نشان می‌دهد. . . . .
۲۳.۴	بیشینه بسامد زاویه‌ای در ضخامت‌های مختلف را نشان می‌دهد. . . . .
۲۴.۴	اختلاف ولتاژ مدار باز (در حضور بازیابی فوتون و عدم حضور آن) نسبت به
	تغییرات ضخامت (تصویر سمت چپ)، تغییرات شدت تابش (تصویر وسط)
۷۹	و تغییرات ضریب شاکی-رید-هال (تصویر سمت راست) را نشان می‌دهد.

# فهرست جداول

۱۲	۱.۱	روش‌های اندازه‌گیری برای مشخصه‌یابی سلول‌های خورشیدی . . . . .
	۱.۴	پارامترهای استفاده شده در حل معادلات پیوستگی برای الکترون‌ها، حفره‌ها و فوتون‌ها [۴۲]. . . . .
۵۶		

# فصل ۱

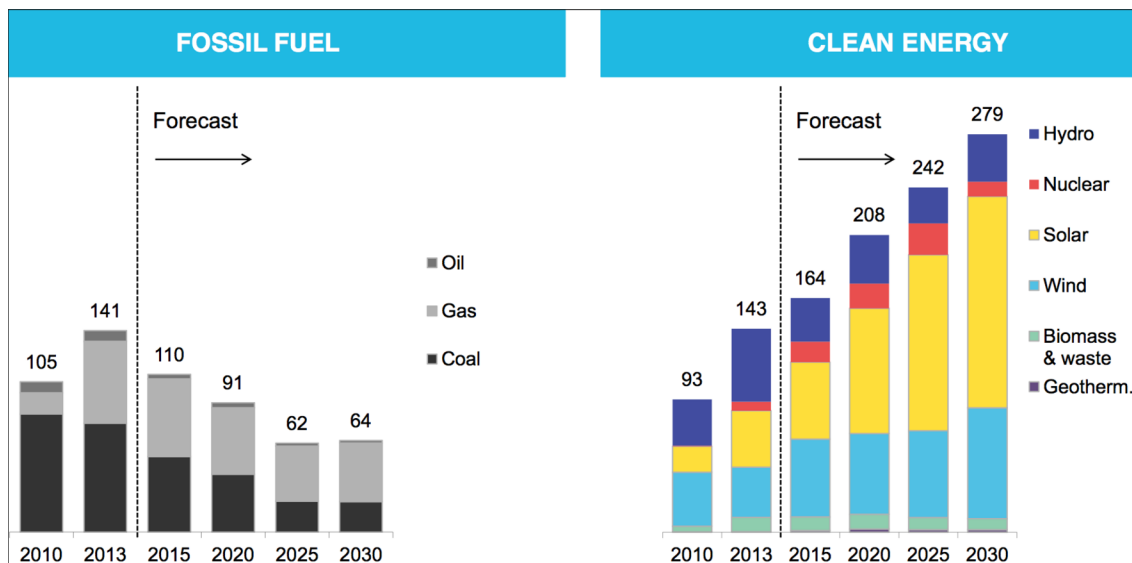
## مقدمه

امروزه گرمایش جهانی ناشی از انتشار گازهای گلخانه‌ای، یعنی دی‌اکسید کربن، بدون تردید یکی از جدی‌ترین مشکلات در جهان است. سالانه حدود  $10^{12} \times 20$  کیلوگرم، دی‌اکسید کربن در اثر احتراق سوخت‌های فسیلی وارد اتمسفر می‌شود و گیاهان از جذب این مقدار کربن دی‌اکسید عاجزند. در مواجهه با مشکلات رو به رشد ناشی از تغییرات آب و هوایی، بشر به دنبال منابع انرژی به غیر از سوخت‌های فسیلی است. پس از تلاش برای دستیابی به انواع مختلف انرژی، به دلیل حساسیت‌ها در زمینه‌ی مسائل زیست محیطی و کاهش وابستگی به سوخت‌های فسیلی، همچنین خطر حوادث هسته‌ای و مشکلات نگهداری ضایعات آن و محدود بودن این منابع، توجه جهانی به سمت استفاده از انرژی‌های تجدیدپذیر مانند انرژی آبی، انرژی زمین‌گرمایی و به ویژه انرژی خورشیدی معطوف شده است. به عنوان مثال شکل ۱.۱ ظرفیت تولید برق را با استفاده از منابع تجدیدپذیر و سوخت‌های فسیلی نشان می‌دهد.

### ۱.۱ انرژی خورشیدی

انرژی خورشیدی در مقایسه با سایر انواع انرژی‌های تجدیدپذیر مانند انرژی باد، انرژی زمین‌گرمایی و ... در بسیاری از نقاط جهان (از جمله اکثر مناطق ایران) قابل بهره‌برداری است. عمده نور خورشید که به صورت تابش الکترومغناطیسی به زمین می‌رسد، شامل محدوده وسیع بینابینی ۳۰۰ تا ۲۱۰۰ نانومتر است. انرژی خورشید سالانه به میزان  $10^{24} \times 3$



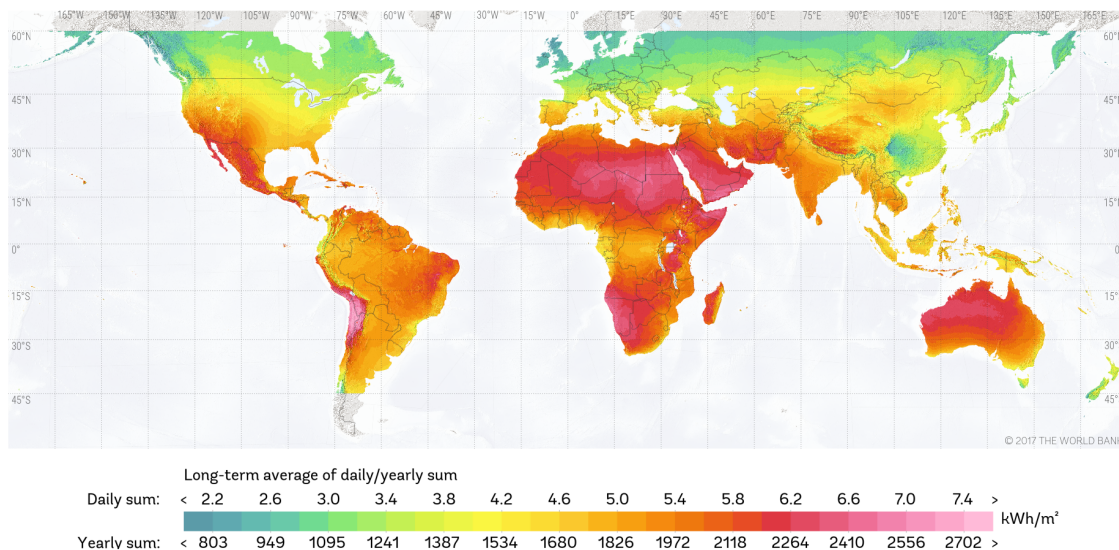


شکل ۱.۱: ظرفیت تولید برق (گیگا وات) در طی سال‌های گذشته و پیش رو. انرژی‌های آبی (Hydro)، هسته‌ای (Nuclear)، خورشیدی (Solar)، بادی (Wind)، زیست توده (Biomass and waste) و زمین گرمایی (Geotherm). به عنوان مثال در سال ۲۰۱۳ تولید برق از انرژی پاک نسبت به سوخت‌های فسیلی پیشی گرفته است (به ترتیب برابر با ۱۴۳ گیگا وات در مقابل ۱۴۱ گیگاوات) [۱].

ژول به زمین می‌تابد (حدود ۶ درصد نور فرابنفش، ۴۶ درصد نور مرئی و ۴۸ درصد نور فروسرخ) که بیش از چهارده هزار برابر بیشتر از انرژی مصرف سالانه جهان است [۲]. به عبارتی خورشید به عنوان منبع اولیه تمام انرژی‌های شناخته در سیاره زمین، در یک ساعت  $10^{20} \times 4/3$  ژول انرژی فراهم می‌آورد و این از میزان مصرف جهانی در یک سال  $10^{20} \times 4/1$  ژول، بیشتر است [۳]. در حالی که تابش خورشیدی در جو زمین نسبتاً ثابت، اما تابش در سطح زمین به طور گسترده‌ای به علت اثرات اتمسفر (از جمله جذب و پراکندگی)، تغییرات محلی در جو (مانند بخار آب، ابرها و آلودگی)، عرض جغرافیایی و فصل سال و زمان روز، متفاوت است. میزان تابش عمودی سالانه خورشید بر روی زمین توسط شکل ۲.۱ داده شده است [۴]. کشور ایران در بین مدارهای ۲۵ تا ۴۵ درجه عرض شمالی (در کمربند تابشی خورشید) قرار گرفته است. میزان تابش خورشیدی در ایران بین ۱۸۰۰ تا ۲۲۰۰ کیلووات ساعت بر مترمربع در سال تخمین زده شده که بالاتر از میزان متوسط جهانی است [۵].

### ۱.۱.۱ بیناب خورشید و استانداردهای تابش

قسمتی از انرژی تابشی خورشید هنگام عبور از جو زمین جذب می‌شود. بطور کلی این جذب تابش توسط گازهای با غلظت پایین موجود در جو انجام می‌شود. جذب طیف فروسرخ توسط بخار آب، دی‌اکسید کربن، متان و... همچنین جذب طیف فرابنفش توسط اکسیژن و اوزون



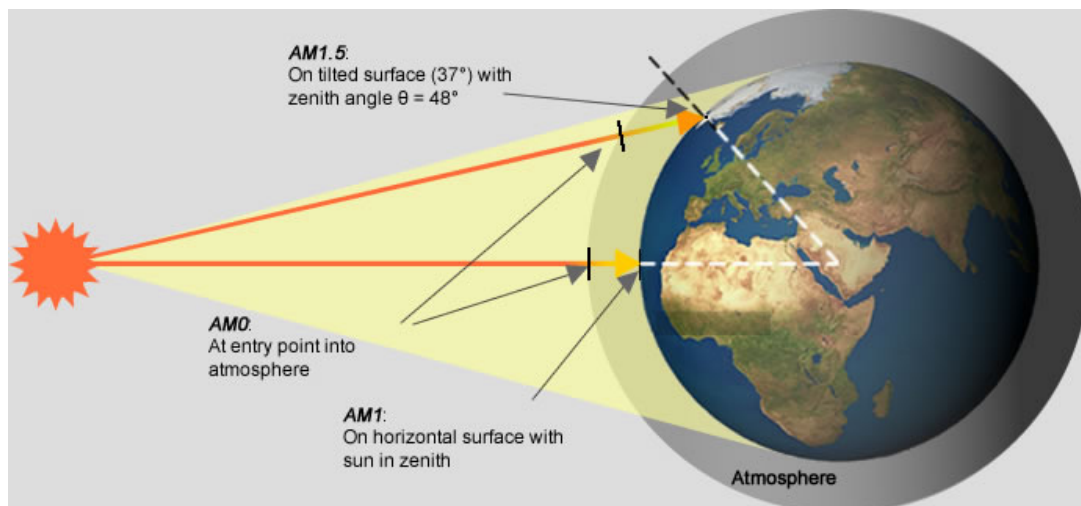
شکل ۲.۱: میزان تابش عمودی سالانه خورشید بر روی کره زمین [۶].

صورت می‌گیرد. هرچه مسیر عبور نور از درون اتمسفر طولانی‌تر باشد (یعنی توده هوایی که نور از درون آن عبور می‌کند بیشتر باشد) جذب بیشتری رخ می‌دهد. اگر ضخامت جو را  $l_0$  در نظر بگیریم طول عبور  $l$  از میان اتمسفر برای تابش خورشید با زاویه  $\alpha$  نسبت به خط عمود بر سطح زمین توسط رابطه زیر داده می‌شود:

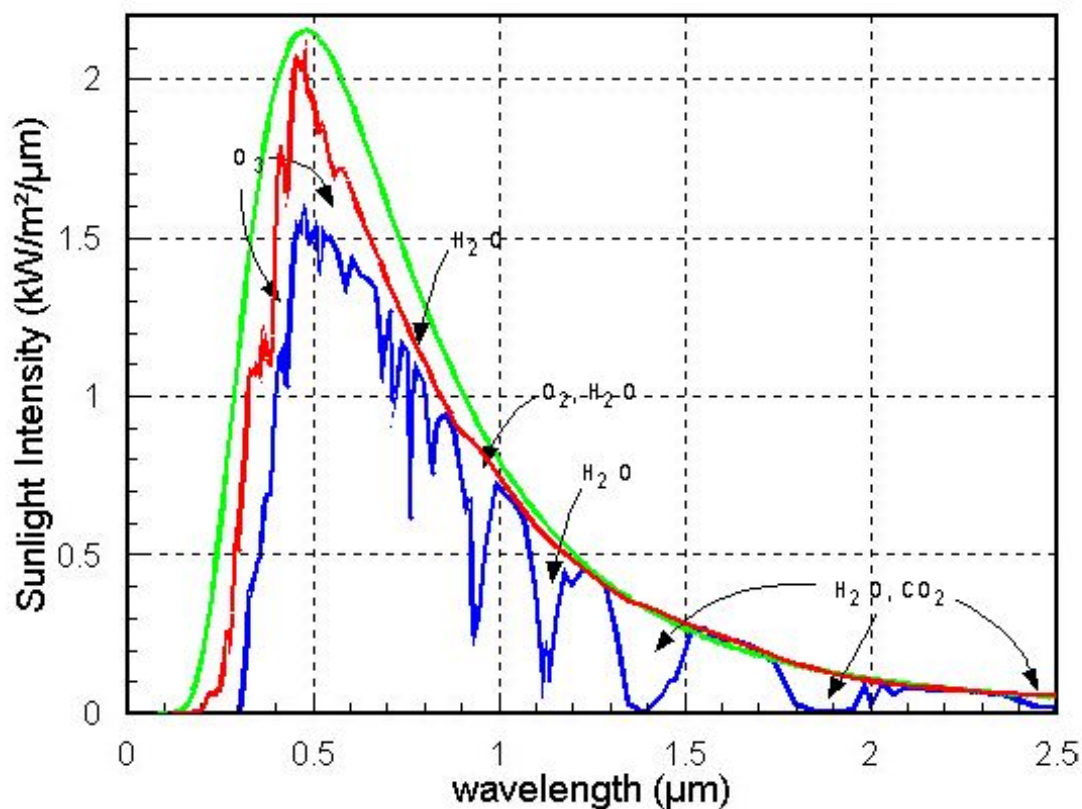
$$l = \frac{l_0}{\cos \alpha} \quad (1.1)$$

نسبت  $(\frac{l}{l_0})$  ضریب توده-هوا<sup>۱</sup> نامیده می‌شود. این نسبت بیناب واقعی خورشید که پس از جذب از یک لایه هوا با ضخامت  $l$  بدست می‌آید را مشخص می‌کند. بیناب خورشید خارج از جو زمین با  $AM_0$  و روی سطح زمین برای تابش عمودی با  $AM_1$  نشان داده می‌شود. بیناب نوعی برای آب و هوای معتدل  $AM_{1.5}$  است که متناظر با زاویه تابش ۴۸ درجه نسبت به خط عمود می‌باشد (شکل ۳.۱) [۷]. عموماً خورشید بصورت جسم سیاه در دمای ۵۸۰۰ کلوین تقریب زده می‌شود. بیناب جسم سیاه در این دما نیز در شکل ۴.۱ نشان داده شده، همانطور که مشاهده می‌شود این بیناب با طیف مربوط به خورشید خارج از جو اختلاف ناچیزی دارد بنابراین تقریب در نظر گرفته شده تقریب مناسبی است. چگالی توان تابشی برای هریک از استانداردهای ذکر شده با انتگرال‌گیری بر روی این بیناب بدست می‌آید (به عنوان مثال برای  $AM_0$  برابر  $1353 \frac{KW}{m^2}$  می‌باشد) [۴].

<sup>۱</sup>Air-Mass



شکل ۳.۱: استانداردهای تابش خورشید و زاویه تابش آن‌ها. عبارتهای  $AM^\circ$  و  $AM1$  و  $AM1.5$  در متن توضیح داده شده است [۸].



شکل ۴.۱: بیناب خورشید برای استانداردهای مختلف (طیف‌ها از بالا به پایین به ترتیب مربوط به تابش جسم سیاه و  $AM^\circ$  و  $AM1.5$  هستند) و پیکان‌ها محل افت در طیف به واسطه جذب گازهای ذکر شده را نشان می‌دهند [۸].

## ۲.۱ سلول خورشیدی

تا به اینجا در ارتباط با اهمیت نور خورشید و انرژی دریافت شده از آن بحث شد. با توجه به اینکه از نور خورشید نمی‌توان به طور مستقیم به جای سوخت‌های فسیلی بهره برد پس باید ابزاری (یا مبدل‌هایی) طراحی کرد تا این انرژی را به انرژی‌های قابل استفاده نظیر انرژی مکانیکی، حرارتی و الکتریکی تبدیل کنند.

سلول خورشیدی (یا سلول فوتوولتائی) ابزاری است که انرژی فوتون (حاصل از تابش خورشید) را مستقیماً به توان الکتریکی تبدیل می‌کند. پدیده‌ی تولید ولتاژ و جریان توسط جذب نور را پدیده فوتوولتائی گویند. در بخش‌های بعدی در ارتباط با تاریخچه سلول‌های خورشیدی، نحوه تبدیل انرژی و انواع آن بحث می‌شود.

### ۱.۲.۱ تاریخچه سلول‌های خورشیدی

ادموند بکورل<sup>۲</sup> در سال ۱۸۳۹ برای اولین بار اثر فوتوولتائی<sup>۳</sup> را هنگامی که نور خورشید، به یکی از دو الکترود قرار داده شده در یک محلول الکترولیت تاباند و ولتاژ کوچک تولید شده از نور را اندازه‌گیری کرد، شرح داد [۹]. چارلز فریتز<sup>۴</sup> در سال ۱۸۸۳ سلول خورشیدی از جنس سلنیم با بازدهی کم‌تر از ۱ درصدی ساخت که به عنوان حسگر نوری برای دوربین‌های عکاسی قرار گرفت [۱۰]. در سال ۱۹۵۴ تحقیقات آزمایشگاه بل اولین تبدیل نور خورشید از طریق سلول خورشیدی p-n با بازدهی ۴/۵ درصدی را به ثبت رساند. در این زمان، سلول‌ها در ماهواره‌های فضایی مورد استفاده قرار گرفت [۱۱]. در سال ۱۹۷۰ میلادی به علت بحران انرژی در جهان غرب، استفاده از منابع جدید انرژی مورد توجه قرار گرفت. همین امر موجب پیشرفت چشمگیری در ساخت سلول‌های خورشیدی و رسیدن به بازدهی بالاتر شد. خواص یکسوکنندگی و فوتوولتائی دیویدهای پلیمری نخستین بار در سال ۱۹۸۵ میلادی توسط شیروتا و همکارانش با استفاده از مشتقات پلی‌کربازول مورد بررسی قرار گرفت. سپس در سال ۱۹۸۶ میلادی تانگ اولین ساختار فوتوولتائی ناهمگون پلیمری را ساخت [۱۲]. در سال ۱۹۹۱ میلادی گرتزل ساخت سلول خورشیدی جدیدی را بر اساس فوتوسنتز گیاهان گزارش کرد (سلول‌های رنگدانه‌ای) [۱۳]. اولین سلول‌های خورشیدی آلی بر پایه پلیمر ریزمولکول در سال ۱۹۹۳ میلادی ساخته شد و سپس تلاش‌های فراوانی برای ساخت سلول‌های پربازده با استفاده از ترکیبات پلیمری رسانا صورت گرفت [۱۴]. در سال ۲۰۰۷ کیم و همکارانش به بازده بیش از ۵/۶ درصدی با استفاده از این ترکیبات دست یافتند [۱۵]. در سال ۲۰۰۹ میلادی توسط میاساکا سلول‌های خورشیدی پروسکایت مایع با بازدهی حدود ۳/۴ درصدی ساخته شد

<sup>۲</sup>Edmund Bequerel

<sup>۳</sup>Photovoltaic effect

<sup>۴</sup>Charels Fritts

[۱۶]. در اواسط سال ۲۰۱۲ میلادی توسط اسنیت و همکاران، سلول‌های پروسکایتی جامد به جای الکترولیت‌های مایع معرفی شدند و در اواخر سال ۲۰۱۳ میلادی بازده ۱۶/۲ درصدی از این سلول‌ها گزارش شد و همچنین گزارشات رسیده مبنی بر بازده ۲۱ درصدی است [۱۷]. امروزه مهم‌ترین مسائل در ساخت سلول‌های خورشیدی، هزینه تولید، بازدهی بالا و طول عمر آنهاست.

## ۲.۲.۱ انواع سلول‌های خورشیدی

همان‌طور که در بالا ذکر شد سلول‌های خورشیدی مبدل انرژی‌اند. در تمامی آنها سه مرحله برای تبدیل انرژی خورشیدی به انرژی الکتریکی رخ می‌دهد؛ جذب فوتون و تولید الکترون و حفره، جدایی فضایی الکترون از حفره و در آخر تراپد الکترون و حفره به سمت مدار خارجی. سلول‌های خورشیدی را می‌توان به روش‌های متعددی طبقه‌بندی کرد:

سلول‌های خورشیدی نسل اول (سیلیکونی<sup>۵</sup>) با سهم ۸۵ درصدی بیشترین میزان استفاده در بازار را به دلیل بازدهی و استحکام بالا داراست. در این نوع سلول، عمل فوتولتائی از طریق اتصال دو نیم‌رسانای  $p$  و  $n$  (ایجاد پیوندگاه  $p-n$ ) انجام می‌شود. از بزرگترین معایب آنها می‌توان به ضخامت بالا سلول (زیرا سیلیکون نیم‌رسانایی با گاف نواری غیرمستقیم<sup>۶</sup> است و جذب نوری پایینی دارد در نتیجه برای جذب تمام طیف خورشید باید سلول‌ها را در ضخامت بالایی ساخت) و هزینه گران تولید اشاره کرد [۱۸]. با وجود هزینه‌ی بالای تولید این نوع سلول‌ها، بازده میانگین ۲۵ درصدی آن می‌تواند کمی معایب ذکر شده را جبران کند [۱۹].

در سلول‌های خورشیدی نسل دوم سازوکار عملکرد همانند نسل اول، بر پایه ایجاد پیوندگاه  $p-n$  در سیستم است. اما در این سلول‌ها با به‌کارگیری نیم‌رسانایی با گاف نواری مستقیم، نیازی به استفاده از ضخامت‌های بالا وجود ندارد. از این رو این سلول‌ها را سلول خورشیدی لایه نازک نیز می‌نامند که بیشینه راندمان این سلول‌ها ۲۷/۸ درصد است (بر اساس گزارش‌های NREL) [۱۴].

از جدیدترین انواع سلول‌های خورشیدی می‌توان به سلول‌های خورشیدی رنگدانه‌ای، نقطه کوانتومی، چاه کوانتومی و سلول‌های خورشیدی پروسکایتی اشاره کرد که از جمله سلول‌های خورشیدی نسل سوم‌اند. سلول‌های خورشیدی آلی و پلیمری نسبت به سلول‌های معدنی (نسل ۱ و ۲) به دلیل خواصی مانند انعطاف‌پذیری، هزینه کم و روش ساخت آسان‌تر بسیار مورد توجه محققان قرار گرفته است [۲۰].

<sup>۵</sup>Si

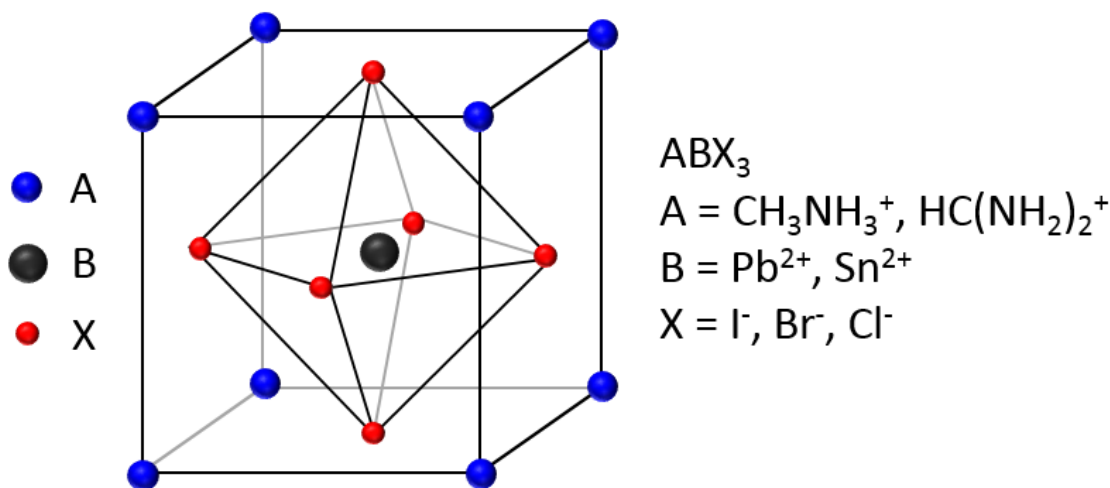
<sup>۶</sup>Indirect band gap

## ۳.۲.۱ سلول‌های خورشیدی پروسکایتی

در سال‌های اخیر شاهد گسترش سریع سلول‌های خورشیدی نو ظهور، که اغلب نسل سوم نامیده می‌شوند، هستیم. سلول‌های خورشیدی بر پایه پروسکایت هالید آلی-معدنی، به این دسته تعلق دارند. بازده سلول‌های خورشیدی با استفاده از این مواد از ۳/۸ درصد در سال ۲۰۰۹ به بازده تایید شده ۱۶/۲ درصد در پایان سال ۲۰۱۳، ۱۷/۹ درصد در سال ۲۰۱۴ و در حال حاضر، طبق گزارش رسمی NREL به بازده ۲۲/۱ درصد رسیده است که این بازده بسیار نزدیک به بازده سلول‌های خورشیدی سیلیکونی و CIGS می‌باشد.

لایه جذب نور در این نوع سلول‌های خورشیدی شامل یک ترکیب با ساختار پروسکایت است که معمول‌ترین آن هیبرید آلی-معدنی سرب<sup>۷</sup> ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ ) می‌باشد. خصوصیات اپتیکی بسیار خوب از جمله ضریب جذب بالا و گاف انرژی مناسب، باعث شده تا این ترکیبات برای کاربردهای جذب نور در زمینه فوتوولتائی بسیار مناسب باشند.

اولین نمونه از پروسکایت‌ها، کلسیم تیتانیوم اکسید معدنی ( $\text{CaTiO}_3$ ) بود که به افتخار زمین شناس روس، لوئی پروسکایت<sup>۸</sup>، پروسکایت نامگذاری شده است. زمانی که ساختار اصلی ترکیبات پروسکایت در سال ۱۹۵۷ میلادی کشف و ارائه شد، کم‌تر کسی می‌توانست پیش‌بینی کند که پروسکایت‌ها بتوانند دارای چنین محدوده وسیعی از خواص مغناطیسی، الکتریکی و نوری باشند. پروسکایت‌ها در واقع گروهی از ترکیبات با فرمول ساختاری  $\text{ABX}_3$  می‌باشد (شکل ۵.۱).



شکل ۵.۱: سلول واحد پروسکایت [۲۱]

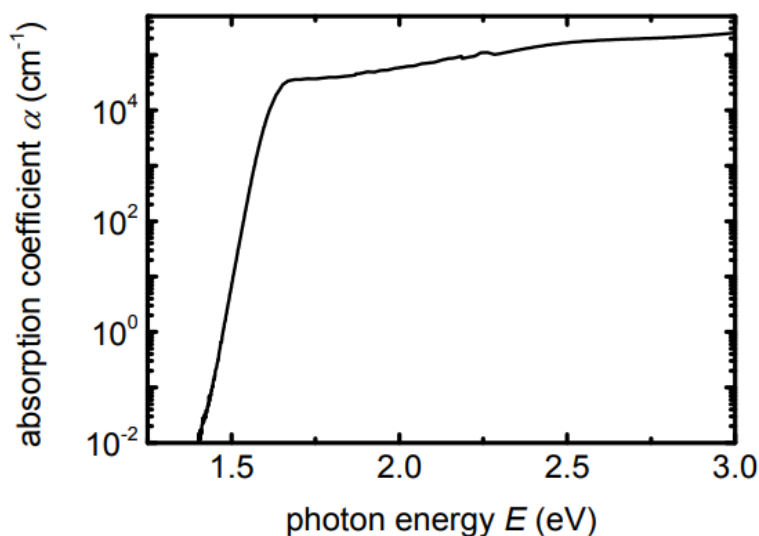
در این ساختار کاتیون‌های آلی A (مانند  $\text{CH}_3\text{NH}_3^+$ ) در گوشه مکعب، کاتیون‌های فلزی B (مانند  $\text{Pb}^{2+}$ ) در مرکز مکعب و آنیون هالوژن (مانند  $\text{I}^-$ ) در مراکز وجوه مکعب قرار دارند.

<sup>۷</sup>Methylammonium Lead Iodide Perovskite

<sup>۸</sup>Lev Perovski.

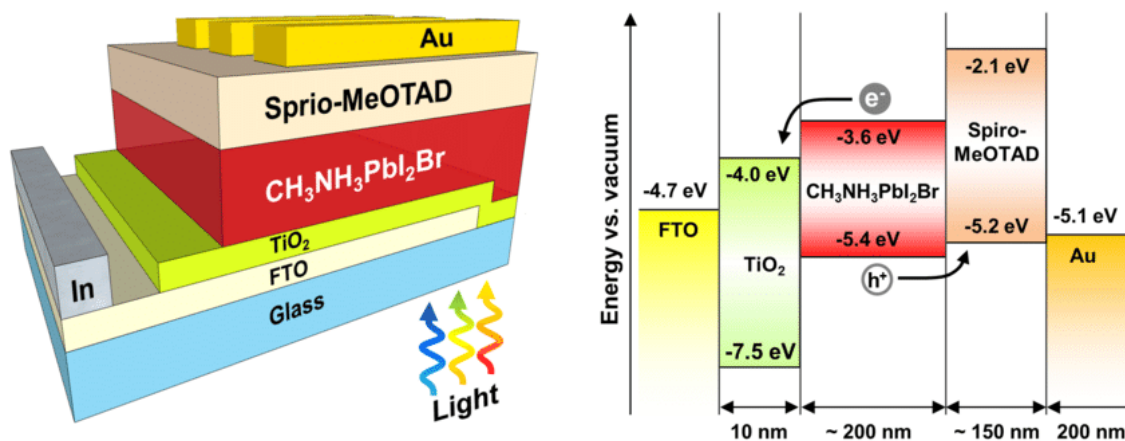


ساختارهای پروسکایت گاف نواری بین ۱/۵ تا ۲/۳ الکترون ولت را با توجه به محتوای هالید، دارا هستند. پروسکایت‌های هالید فلزی دارای ویژگی‌های منحصر به فرد اند که آن‌ها را برای کاربردهای سلول خورشیدی مفید می‌سازند. مواد خام استفاده شده و نیز روش‌های ساخت این مواد، هر دو در مقایسه با سلول‌های نسل اول و دوم، ارزان و کم هزینه هستند و از سوی دیگر ضریب جذب بالای آن‌ها (شکل ۶.۱) موجب می‌شود تا حتی فیلم‌هایی با ضخامت‌های کم، جذب کامل طیف مرئی خورشید را به همراه داشته باشند. ترکیب این ویژگی‌ها امکان ساخت ماژول‌های خورشیدی ارزان، پربازده، نازک، سبک و انعطاف‌پذیر را فراهم می‌سازد [۲۱].



شکل ۶.۱: ضریب جذب لایه فعال پروسکایت را نشان می‌دهد. [۲۲].

سلول‌های خورشیدی پروسکایتی در ساختارهای مختلفی مورد تحقیق و بررسی قرار می‌گیرند. این سلول‌ها از چند جزء کلی تشکیل شده‌اند: شیشه رسانا، نیمرسانای نوع  $n$  به عنوان لایه انتقال دهنده الکترون، ماده جاذب پروسکایتی، نیمرسانای نوع  $p$  به عنوان لایه انتقال دهنده حفره و یک کاتد فلزی. شکل ۷.۱ یک نمونه از ساختار سلول خورشیدی پروسکایتی را نشان می‌دهد. در تصویر سمت چپ، چگونگی انتقال بار در این ساختار را نمایش می‌دهد. به طور خلاصه می‌توان گفت نور با عبور از نیمرسانای نوع  $n$  ( $\text{TiO}_2$ ) به ماده پروسکایت می‌رسد و در این لایه الکترون با جذب نور ورودی از نوار ظرفیت به نوار رسانش می‌رود و زوج الکترون-حفره تولید می‌شود. الکترون‌ها به سمت لایه انتقال دهنده الکترون و حفره‌ها به سمت لایه انتقال دهنده حفره می‌روند.



شکل ۷.۱: تصویر سمت چپ ساختار تخت  $(n-i-p)$  و تصویر سمت راست سطوح انرژی و ضخامت این لایه‌ها و هم‌چنین چگونگی تراپد الکترون و حفره را نشان می‌دهد [۲۳].

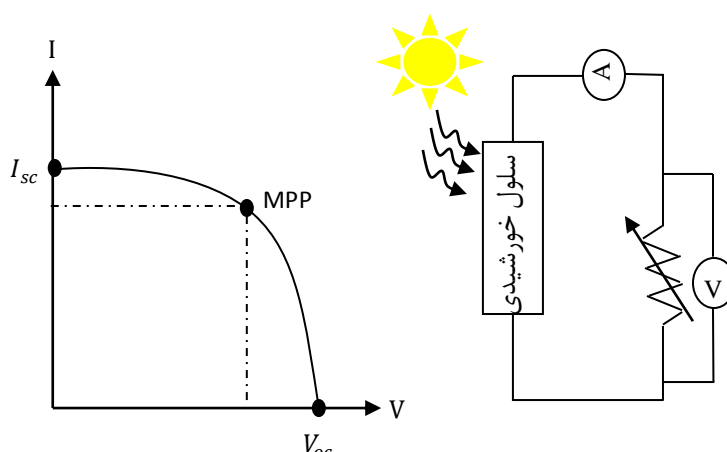
## ۳.۱ روش‌های مشخصه‌یابی

برای تعیین فیزیک حاکم بر فرایندهای درونی سلول، تعیین کیفیت هر یک از فرایندها و بهینه‌سازی عملکرد سلول باید اندازه‌گیری‌هایی بر روی سلول انجام داد. اندازه‌گیری‌ها به‌طور کلی در دو حالت پایا و دینامیک انجام می‌شوند. در حالت پایا وضعیت سلول با زمان تغییر نمی‌کند، اما در حالت دینامیک با تغییر ولتاژ و یا تابش فرودی، سلول به مقدار کم یا زیاد از حالت پایا خارج می‌شود و پاسخ سلول به این اختلال ثبت می‌گردد. روشی که سلول به مقدار کم از حالت پایا خارج می‌شود (اختلالات کوچک<sup>۹</sup>) حائز اهمیت است زیرا پاسخ سلول به یک اختلال، به شدت به وضعیت سلول در حالت پایای قبل از اختلال وابسته است. از این رو لازم است که اختلال تغییر چندانی در وضعیت سلول ایجاد نکند [۲۴]. روش‌های مشخصه‌یابی متنوعی وجود دارد که به شرح برخی از آن‌ها به‌طور خلاصه خواهیم پرداخت. در جدول ۱.۱ توصیفی از روش‌های مشخصه‌یابی مختلفی برای سلول‌های خورشیدی آمده است.

اندازه‌گیری جریان-ولتاژ ( $I-V$ ) از مهم‌ترین و متداول‌ترین روش برای عملکرد فوتوولتائی (میزان راندمان یا بهره‌وری) در سلول‌های خورشیدی است. معمولاً مشخصه‌یابی ( $I-V$ ) برای سلول تحت تابش (تابش استاندارد) با نمودار جریان-ولتاژ نشان داده می‌شود (شکل ۸.۱). این نمودار در حقیقت ولتاژ دو سر و جریان گذرنده از یک مقاومت متغییر متصل به دو سر سلول را نشان می‌دهد. توضیح مختصری در مورد پارامترهای که می‌توان از نمودار جریان-ولتاژ به‌دست آورد، در ادامه خواهد آمد.

<sup>۹</sup>Small perturbation





شکل ۸.۱: نمودار جریان-ولتاژ سلول خورشیدی

بیشینه ولتاژ قابل استخراج از سلول را تحت عنوان ولتاژ مدار باز<sup>۱۰</sup> ( $V_{oc}$ ) سلول می‌نامند (مدار باز؛ جریان در سلول صفر است) و همچنین بیشینه جریان، زمانی حاصل می‌شود که ولتاژ سلول صفر ولت باشد که این جریان را، جریان اتصال کوتاه<sup>۱۱</sup> ( $I_{sc}$ ) گویند [۲۵]. توان خروجی یک سلول از طریق حاصل ضرب جریان در ولتاژ به دست می‌آید:

$$P = I \times V \quad (۲.۱)$$

با توجه به نمودار  $I - V$  بیشینه توان خروجی ( $P_{Max}$ ) سلول خورشیدی، برابر است با مساحت بزرگترین مستطیلی که در داخل نمودار رسم می‌شود. ضریب پُرشدگی<sup>۱۲</sup> ( $FF$ )، نسبت بیشینه توان خروجی به حاصل ضرب  $V_{oc}$  در  $I_{sc}$ ، و در حقیقت معیاری از حداکثر توان خروجی از سلول خورشیدی است:

$$FF = \frac{V_m \times I_m}{V_{oc} \times I_{sc}} \quad (۳.۱)$$

که  $V_m$  و  $I_m$  ولتاژ و جریان در نقطه‌ی بیشینه توان می‌باشند [۲۶]. بازده<sup>۱۳</sup> سلول خورشیدی به صورت نسبت بیشینه توان الکتریکی خروجی ( $P_{Max}$ ) به توان تابشی فرودی ( $P_{in}$ ) تعریف می‌شود [۲۷]:

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_{in}} \quad (۴.۱)$$

<sup>۱۰</sup> Open-Circuit potential

<sup>۱۱</sup> Short-Circuit current

<sup>۱۲</sup> Fill factor

<sup>۱۳</sup> Efficiency

طیف‌سنجی، شدت تابش-ولتاژ<sup>۱۴</sup> (IMVS) که اساس آن تغییرات شدت تابش فرودی و در نتیجه اندازه‌گیری ولتاژ سلول در حالت مدار باز است به این صورت که ابتدا اختلال کوچکی ( $\delta I$ ) به سیستم وارد کرده و پاسخ به این اختلال وارد شده اندازه‌گیری می‌شود. این تابش اختلالی وارد شده، به صورت تابش سینوسی (یا به طور کلی متناوب) مدوله شده است. زمانی که تابش فرودی متناوب است انتظار می‌رود پاسخ سلول به آن نیز به صورت متناوب باشد.

جدول ۱.۱: روش‌های اندازه‌گیری برای مشخصه‌یابی سلول‌های خورشیدی

مرجع	پاسخ سلول به اختلال	اختلال اعمالی	شدت اختلال	وضعیت سلول	حوزه‌ی روش	کمیت قابل دستیابی	روش
[۲۸]	-	-	-	-	-	راندمان کل	I - V
[۲۹]	-	-	-	SC	-	$\eta_{abs} \times \eta_{inj} \times \eta_{col}$	IPCE
[۳۰]	جریان سینوسی	ولتاژ سینوسی	کوچک	-	فرکانسی	امپدانس مدار معادل سلول	IS
[۳۱]	ولتاژ سینوسی	تابش سینوسی	کوچک	OC	فرکانسی	طول عمر الکترون	IMVS
[۲۸]	جریان سینوسی	تابش سینوسی	کوچک	SC	فرکانسی	زمان ترابرد	IMPS
	جریان گوسی با زمان	تابش پالسی	کوچک	SC	زمانی	زمان ترابرد	TOF

## ۴.۱ نیمرساناها

از آن جا که مواد نیمرسانا، قسمت اصلی سلول های خورشیدی را تشکیل می دهند، بررسی فیزیک حاکم بر آنها از اهمیت فراوان برخوردار است که در این بخش به طور خلاصه به آن پرداخته می شود و در فصل بعد فیزیک نیمرساناها با جزئیات بیشتری بررسی خواهد شد.

هنگامی که پژوهشگران برای اولین بار با نیمرساناها<sup>۱۵</sup> مواجه شدند، تقسیم بندی کاملا مشخصی وجود داشت که مبنای آن تمام جامدها به دو گروه بزرگ رساناها (شامل تمام فلزات) و عایق ها (یا دی الکتریک ها) تقسیم می شدند. این دو گروه در اصل از نظر خواصشان با یکدیگر متفاوت بودند. مواد نیمرسانای جدید را نمی توانستند در هیچ کدام از این دو گروه جای دهند. از یک طرف آنها جریان الکتریکی را هدایت می کردند، ولی به مراتب کم تر از رساناهای فلزی و از طرف دیگر همیشه هدایت نمی کردند، بنابراین آنها را نیمرسانا نامیدند.

در ادامه کشف شد که نیمرساناها از لحاظ نحوه هدایت و نحوه تاثیر عوامل خارجی بر هدایتشان با فلزات فرق دارند. برای مثال، اثر دما روی رسانندگی رساناهای فلزی کاملا برعکس اثر آن بر رسانندگی نیمرساناهاست. به این صورت که در فلزات افزایش دما باعث کاهش تدریجی رسانندگی، در حالی که در نیمرساناها باعث افزایش ناگهانی رسانندگی می شود. برای تشریح رفتار نیمرساناها در شرایط مختلف، توجیه خواص آنها و پیش بینی اثرهای جدید، باید خصوصیت الکترونیکی آنها را بررسی کرد.

### ۱.۴.۱ نظریه نواری

در یک اتم تنها، الکترون ها در سطوح (حالت ها) انرژی مجزا و کوانتیده قرار دارند که از پایین ترین سطح انرژی، سطوح را بنابر اصل طرد پائولی اشغال می کنند. وقتی اتم ها برای تشکیل جامد (یا بلور) به یکدیگر نزدیک می شوند، تاثیر همسایگانیشان، که مشابه با اثر میدان الکتریکی خارجی است، بر روی آنها آغاز می شود. هرچه فاصله بین اتم ها کم تر باشد برهم کنش بین آنها قوی تر است، یا به عبارتی دیگر سطوح مجاز انرژی به سطح های نزدیک به هم تقسیم می شوند و اوربیتال اتمی آنها همپوشانی می کند. این سطوح تقسیم شده به صورت پیوسته درمی آیند (زیرا تعداد سطوح انرژی در هر نوار از مرتبه  $10^{23}$  است) و نوارهای پهنی از انرژی را تشکیل می دهند. با توجه به این مطلب، گذار الکترون در جسم جامد به دو صورت انجام می شود؛ گذار الکترون از یک سطح به سطح دیگر در همان نوار (گذار درون نواری)، گذار الکترون از سطح به سطح خالی دیگر در نوار انرژی بالاتر (گذار بین نواری) [۲۲]. بالاترین نوار اشغال شده ی انرژی در دمای صفر مطلق، در یک نیمرسانا را نوار ظرفیت

<sup>۱۶</sup> گویند. پایین‌ترین نوار اشغال نشده انرژی را نوار رسانش<sup>۱۷</sup> می‌نامند. اختلاف بین این دو نوار (ظرفیت-رسانش)، که منطقه‌ی ممنوعه انرژی است (هیچ سطوح انرژی در آن بین وجود ندارد)، گاف نوری<sup>۱۸</sup> نامیده می‌شود. در دمای بالاتر از صفر مطلق، بعضی از الکترون‌های نوار ظرفیت در انرژی گرمایی بلور سهیم شده و در اثر تحریک به نوار رسانش می‌روند. تعداد الکترون‌هایی که در اثر تحریک به نوار رسانش می‌روند تابعی از دماست. الکترون‌هایی که به نوار رسانش نیمرسانا می‌روند، جاهای خالی در نوار ظرفیت باقی می‌گذارند. این جاهای خالی الکترون‌ها را کمبود الکترون یا حفره می‌نامند. الکترون‌های نوار رسانش و حفره‌های نوار ظرفیت، حامل‌های بار نیز نامیده می‌شوند.

با توجه به ساختار نوری، دو نوع گاف نوری برای نیمرسانا وجود دارد؛ گاف نوری مستقیم و گاف نوری غیرمستقیم. در گاف نوری مستقیم، انتقال الکترون به حالت برانگیخته از بیشینه سطح انرژی نوار ظرفیت به کمینه سطح انرژی نوار رسانش در تکانه بلوری<sup>۱۹</sup> یکسانی رخ می‌دهد و پس از گذر زمانی الکترون می‌تواند به حالت پایه بازگردد و مستقیماً باعث گسیل فوتونی شود (سازوکار تک مرحله‌ای) [۳۴]. در گاف نوری غیرمستقیم، بیشینه سطح انرژی نوار ظرفیت و کمینه سطح انرژی نوار رسانش در تکانه بلوری متفاوتی رخ می‌دهد (سازوکار دو مرحله‌ای مشاهده شده در شکل ۹.۱).

## ۲.۴.۱ انواع نیمرسانا

نیمرساناها به دو دسته ذاتی<sup>۲۰</sup> و غیر ذاتی<sup>۲۱</sup> تقسیم می‌شوند. نیمرساناهای ذاتی، بسیار خالص‌اند، در نتیجه خواص تمام بلور توسط اتم‌های خود ماده نیمرسانا تعیین می‌شود و در آن رسانش توسط تعدادی از الکترون‌های ظرفیتی انجام می‌گیرد که تحریک شده و به نوار رسانش رفته‌اند. با توجه به مباحث قبلی در صفر مطلق، نوار رسانش یک نیمرسانای کاملاً خالص (ذاتی) تماماً پُر شده و نوار ظرفیت آن کاملاً خالی است. در بالای صفر مطلق، به ازای هر الکترون در نوار رسانش، یک حفره در نوار ظرفیت وجود دارد و در نتیجه چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها برابر است. تحت تاثیر میدان الکتریکی خارجی یا انرژی گرمایی تصادفی، ممکن است یک الکترون ظرفیت از یک اتم جای حفره دیگر را بگیرد، در این صورت اگرچه حفره اول دیگر وجود ندارد ولی به جای آن حفره دیگری، در جایی دیگر به وجود می‌آید و به همین ترتیب در مورد اتم‌های دیگر [۳۵]. شکل ۱۰.۱ تشبیهی برای نمایش حرکت حفره را نشان می‌دهد. در یک روز شلوغ، پمپ بنزینی را که فقط یک نازل بنزین دارد را در نظر بگیرید. (الف) چهار

<sup>۱۶</sup>Valence bands

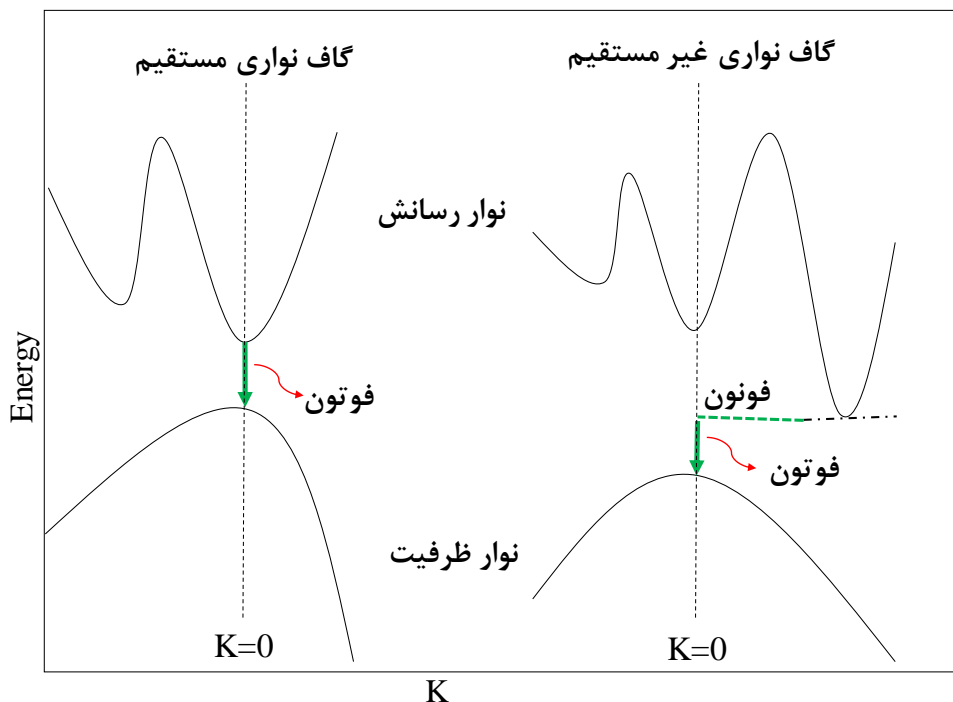
<sup>۱۷</sup>Conduction bands

<sup>۱۸</sup>Band gap

<sup>۱۹</sup>Crystal momentum

<sup>۲۰</sup>Intrinsic Semiconductor

<sup>۲۱</sup>Extrinsic Semiconductor

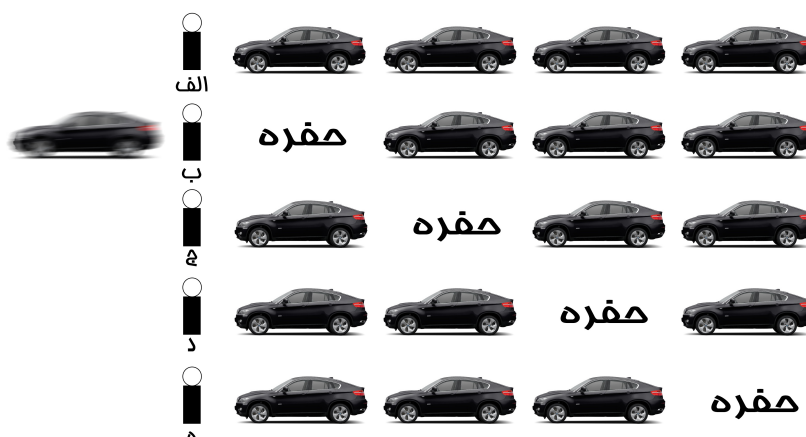


شکل ۹.۱: انواع گاف نواری نیمرساناها

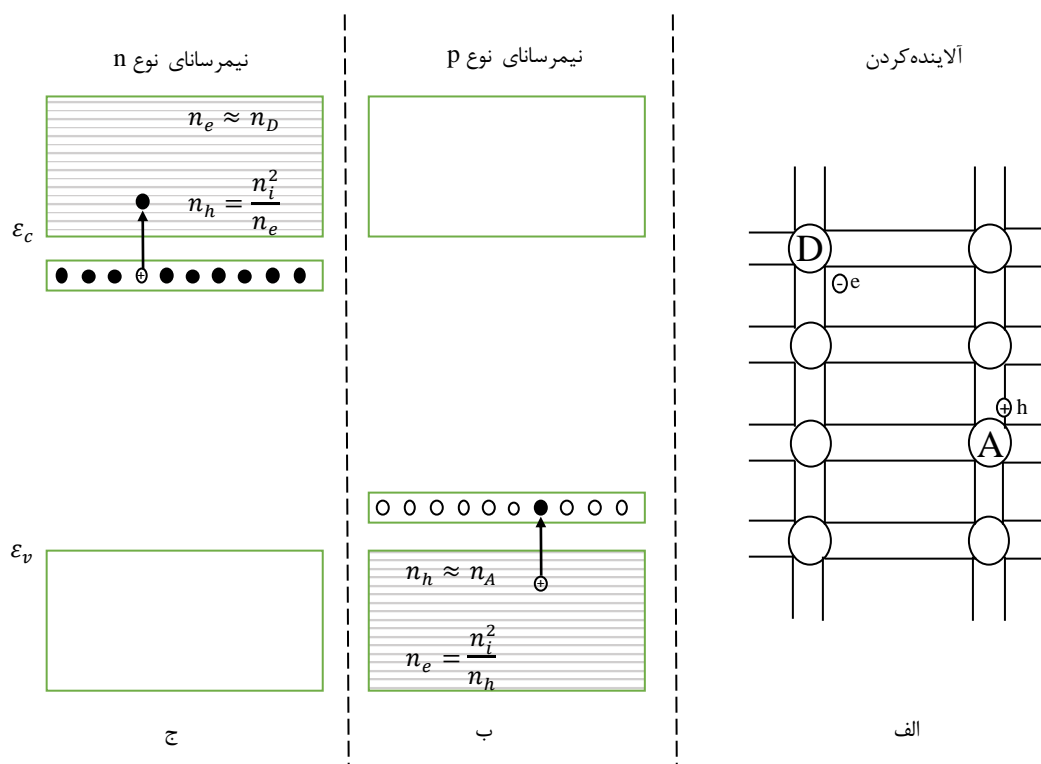
اتومبیل برای بنزین زدن در یک خط قرار دارند. اتومبیل اول بنزین زده، حرکت می کند و یک جای خالی در جلو پمپ بنزین ایجاد می کند (ب) راننده اتومبیل دوم حرکت کرده، جای خالی باقی مانده از اتومبیل اول پُر می کند (ج) و در همان محل اصلی خود جای خالی باقی می گذارد. راننده های اتومبیل های سوم و چهارم نیز به نوبه خود حرکت کرده، هر کدام جای خالی برای پُر شدن باقی می گذارند. هر چند که هر اتومبیل به اندازه یک محل به طرف جلو حرکت می کند، به نظر می رسد که جای خالی اتومبیل به اندازه چهار محل به طرف عقب کشیده شده است؛ پس فقط حفره است که به نظر می رسد به طور پیوسته حرکت می کند. به همین طریق، الکترون های ظرفیت نیز یک قدم به طرف جلو حرکت کرده، می ایستند، درحالی که به نظر می رسد حفره ها به طور پیوسته به عقب حرکت می کنند.

نیمرسانای غیرذاتی بر اثر آرایش نیمرسانا یعنی وارد کردن اتم های ناخالصی در آن ها ایجاد می شود. ناخالصی های به کار رفته معمولاً سه یا پنج الکترون در نوارهای ظرفیت دارند. شکل ۱۱.۱ دو نمونه از نیمرسانای غیرذاتی، نیمرسانای نوع  $n$  و  $p$  را نشان می دهد [۳۶].

بخشنده ها (D)، اتم های ناخالصی اند که معمولاً یک الکترون ظرفیت بیش از حد لازم برای پیوند شیمیایی با اتم های مجاور دارند. پذیرنده ها (A)، اتم های ناخالصی اند که معمولاً یک الکترون ظرفیت کمتر دارند. این که ماده ناخالصی در عمل چقدر چگالی الکترون ها و حفره ها را تغییر می دهد به انرژی الکترون ها در اتم های آلاینده و همچنین به دما بستگی دارد [۳۷].



شکل ۱۰.۱: نمایش حرکت حفره



شکل ۱۱.۱: تصویر الف آلیش اتمهای شبکه با اتمهای ناخالصی پذیرنده (D) و دهنده (A) را نشان می‌دهد. پارامترهای نشان داده شده در شکل در فصل آینده بررسی می‌شوند [۳۶].

# فصل ۲

## تئوری

در این فصل، فیزیک نیمرساناها، معادلات پیوستگی و ترابرد حامل‌های بار (الکترون و حفره) و مفاهیمی در رابطه با جملات این معادلات از قبیل پخش، تحرک، بازترکیب و تولید حامل‌ها، مورد بحث قرار گرفته شده است.

### ۱.۲ فیزیک نیمرساناها

سازوکار برانگیخته شدن<sup>۱</sup> در نیمرساناها متفاوت است. نیمرساناها موادی اند که بازه انرژی‌های برانگیختگی در آن‌ها بر اثر گاف انرژی با پهنای  $\varepsilon_g$  منقطع شده است. این مسئله به صورت طرحواره در شکل ۱.۲ نشان داده شده است. به منظور برانگیختن الکترون با جذب فوتون، انرژی فوتون حداقل باید برابر با گاف انرژی باشد ( $\hbar\omega = \varepsilon_g$ ). فوتون‌هایی با انرژی کمتر نمی‌توانند الکترون‌ها را برانگیخته کنند، بنابراین جذب نمی‌شوند و یا از نیمرسانا گذار پیدا کرده یا از آن بازتاب می‌شوند. برانگیختگی به صورت خلق یک الکترون (در نوار رسانش) و یک حفره (در نوار ظرفیت) دیده می‌شود، این فرآیند با واکنش طرحواره زیر بیان می‌شود:

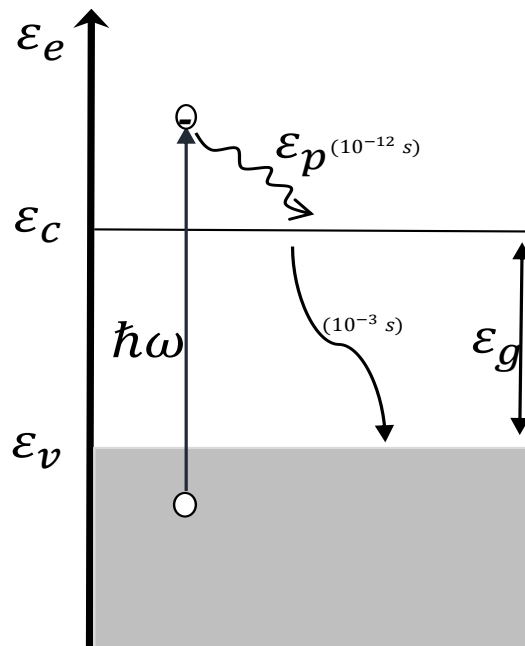
$$\Gamma \rightarrow e + h \quad (1.2)$$

الکترون‌هایی که به نوار رسانش برانگیخته شده‌اند، انرژی‌هایشان را با تولید تدریجی فونون‌ها (ارتعاشات شبکه با انرژی گرمایی  $\varepsilon_p$  از مرتبه  $kT$ ) از دست می‌دهند. این فرآیند معمولاً از مرتبه

<sup>۱</sup>Excitation



۱۰-۱۲ ثانیه طول می کشد. با وجود این، زمانی که الکترون‌ها به لبه پایین نوار رسانش می‌رسند، از دست دادن انرژی در بخش‌های کوچک بر اثر تولید فونون‌ها، دیگر ممکن نیست، زیرا دیگر سطوحی با انرژی کم وجود نخواهد داشت. بازگشت به یک سطح انرژی در نوار ظرفیت مستلزم کاهشی به اندازه گاف انرژی  $\epsilon_g$  طی یک مرحله است. الکترون‌ها می‌توانند طول عمری تا مرتبه ۱۰-۳ ثانیه در نوار رسانش را داشته باشند که این زمان طولانی نسبت به فرایند واهلش<sup>۲</sup> (از دست دادن انرژی الکترون توسط تولید فونون که در بالا ذکر شد)، باعث تجمع الکترون‌ها در نوار رسانش خواهد شد.



شکل ۱.۲: برانگیخته شدن الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش در نتیجه جذب فوتونی با انرژی  $\hbar\omega$ . شکل بازتولید شده از [۷].

چگالی الکترون‌ها<sup>۳</sup>  $dn_e$  با انرژی  $\epsilon_e$  که حول بازه انرژی  $d\epsilon_e$  توزیع شده باشند، شامل چگالی حالت‌ها<sup>۴</sup>  $D_e(\epsilon_e)$  و تابع توزیع<sup>۵</sup>  $f_e(\epsilon_e)$  است که میزان اشغال حالت‌های الکترونی را تعیین می‌کند [۷]:

$$dn_e(\epsilon_e) = D_e(\epsilon_e)f_e(\epsilon_e)d\epsilon_e \quad (۲.۲)$$

توزیع الکترون‌ها در حالت‌های انرژی باید دو شرط را برقرار سازد:

۱. الکترون‌ها بر اساس اصل طرد پائولی در حالت‌ها قرار گیرند
۲. اشغال حالت‌ها فقط به انرژی بستگی دارد.

<sup>۲</sup>Relaxation

<sup>۳</sup>Density of the Electrons

<sup>۴</sup>Density of States

<sup>۵</sup>Distribution Function

تابع توزیع که تمام این شرایط را برقرار کند، تابع توزیع فرمی است [۷]:

$$f_e(\varepsilon_e) = \frac{1}{\exp\left[\left(\frac{\varepsilon_e - \varepsilon_f}{kT}\right)\right] + 1} \quad (۳.۲)$$

که در آن  $\varepsilon_f$  سطح فرمی است. همچنین با توجه به تعریف حفره‌ها، تابع توزیعی برابر  $1 - f_e(\varepsilon_e)$  خواهند داشت.

به منظور تعیین چگالی حالت‌ها الکترونی ابتدا با استفاده از اصل عدم قطعیت<sup>۶</sup>، حجم هر سطح و چگالی حالت‌ها را در فضای تکانه بدست آورده و سپس با توجه به این که تابع توزیع فقط به انرژی بستگی دارد، باید چگالی در فضای تکانه را با استفاده از رابطه بین انرژی و تکانه الکترون‌ها به چگالی حالت‌ها به ازای هر بازه انرژی تبدیل کرد. با توجه به این نکات چگالی حالت‌های الکترونی (شکل ۲.۲) برابر است با [۷]:

$$D_e(\varepsilon_e) = 4\pi \left(\frac{2m_e^*}{h^2}\right)^{3/2} (\varepsilon_e - \varepsilon_c)^{1/2} \quad (۴.۲)$$

که در آن  $m_e^*$  جرم موثر<sup>۷</sup> الکترون‌ها است. دوباره باید متذکر شد که احتمال اشغال حالت‌ها فقط به انرژی آن‌ها بستگی دارد. انرژی الکترون‌ها و حفره‌ها با رابطه زیر داده می‌شود [۷]:

$$\varepsilon_e = \varepsilon_c + \frac{p^2}{2m_e^*} \quad (۵.۲)$$

$$\varepsilon_h = \varepsilon_v + \frac{p^2}{2m_h^*} \quad (۶.۲)$$

با انتگرال‌گیری بر روی کل انرژی‌های نوار رسانش از رابطه (۲.۲) چگالی الکترون‌های آزاد (یا به عبارت ساده‌تر چگالی الکترون‌ها) برابر با [۷]:

$$n_o = N_c \exp\left(-\frac{\varepsilon_c - \varepsilon_f}{kT}\right) \quad (۷.۲)$$

با

$$N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_e^* kT}{h^2}\right)^{3/2} \quad (۸.۲)$$

$N_c$  چگالی حالت‌های موثر نوار رسانش نام دارد و به ازای  $m_e^* = m_e$  و  $T = 300\text{K}$  دارای مقدار،  $2/51 \times 10^{19}$  بر سانتی‌متر مکعب است.

به‌طور مشابه، چگالی حفره‌ها برابر می‌شود با

$$p_o = N_v \exp\left(-\frac{\varepsilon_f - \varepsilon_v}{kT}\right) \quad (۹.۲)$$

که  $N_v = 2 \left(\frac{2\pi m_h^* kT}{h^2}\right)^{3/2}$ ، چگالی حالت‌های موثر در نوار ظرفیت، شامل جرم موثر حفره‌ها  $m_h^*$  در  $\varepsilon_e = \varepsilon_v$  است. حاصل ضرب چگالی الکترون‌ها در حفره‌ها برابر است با:

<sup>۶</sup>Uncertainty Principle

<sup>۷</sup>Effective Mass

$$n_0 p_0 = N_c \exp\left(-\frac{\varepsilon_c - \varepsilon_f}{kT}\right) N_v \exp\left(-\frac{\varepsilon_f - \varepsilon_v}{kT}\right) \quad (10.2)$$

$$= N_c N_v \exp\left(-\frac{\varepsilon_c - \varepsilon_v}{kT}\right) \quad (11.2)$$

$$= N_c N_v \exp\left(-\frac{\varepsilon_g}{kT}\right) \quad (12.2)$$

همان طور که ملاحظه می‌کنید این حاصل ضرب چگالی الکترون‌ها در چگالی حفره‌ها به موقعیت انرژی فرمی و همچنین به چگالی الکترون‌ها و یا حفره‌ها بستگی ندارد، در نتیجه نمی‌توان با آرایش بر آن تاثیر گذاشت.

با داشتن چگالی حالت‌ها و چگونگی توزیع بر روی حالت‌ها، می‌توان انرژی میانگین را محاسبه کرد [۷]:

$$\langle \varepsilon_e \rangle = \frac{1}{n_e} \int_{\varepsilon_c}^{\infty} \varepsilon_e D_e(\varepsilon_e) f_e(\varepsilon_e) d\varepsilon_e \quad (13.2)$$

$$= \varepsilon_c + \frac{3}{4} kT \quad (14.2)$$

که  $\varepsilon_c$  انرژی پتانسیل الکترون‌هاست. متوسط انرژی حفره‌ها برابر با:

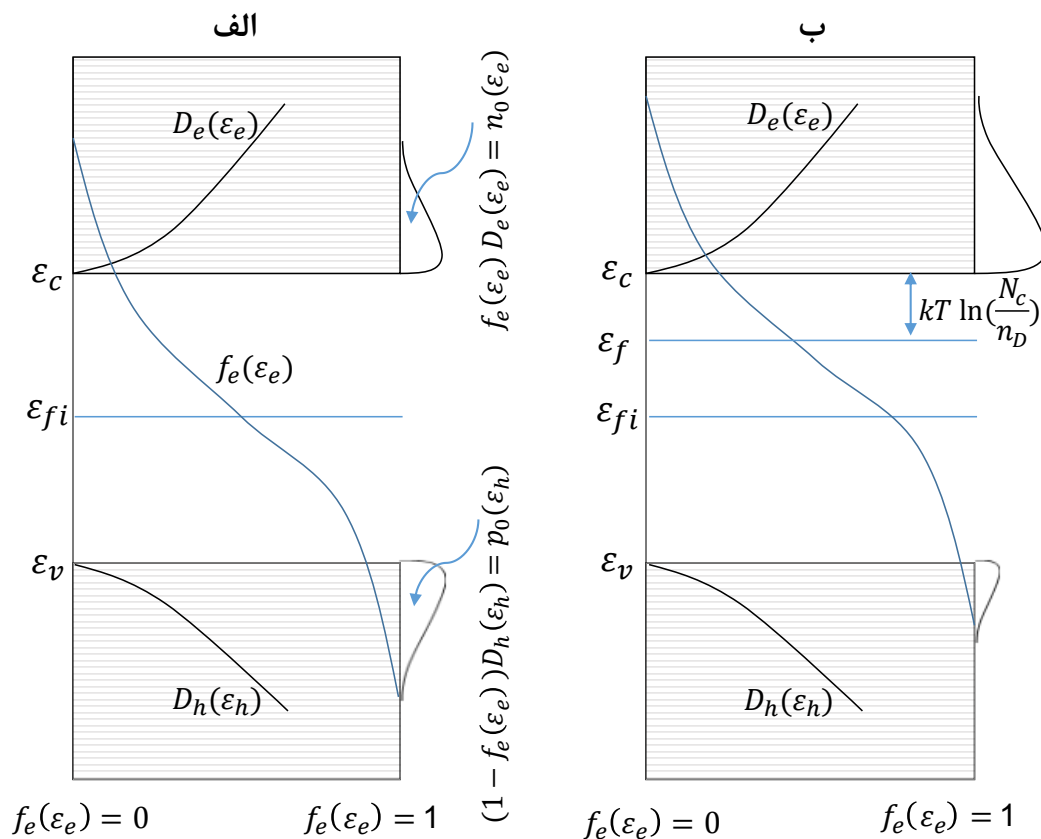
$$\langle \varepsilon_h \rangle = -\varepsilon_v + \frac{3}{4} kT \quad (15.2)$$

با توجه به انرژی جنبشی به‌دست آمده برای الکترون‌ها (و یا حفره‌ها)، مشاهده می‌شود که رفتاری مشابه گاز کلاسیکی را دارند پس با تقریب خوبی می‌توان حامل‌های بار در سلول خورشیدی را همانند گاز کلاسیکی در نظر گرفت. شکل ۳.۲ مقیاس انرژی برای الکترون‌ها و حفره‌ها در نیمرسانا را نشان می‌دهد که نقطه صفر انرژی در آن، با توجه به انرژی الکترون آزاد در خلأ با پتانسیل الکتریکی ( $e\phi$ ) و انرژی جنبشی ( $\varepsilon_{e,kin} = \frac{3}{4} kT$ ) صفر تعریف شده است. در این انرژی الکترون‌های مقید با توجه به نقطه صفر، منفی و انرژی حفره‌ها مثبت است. در این شکل، بزرگی انرژی را براساس طول و جهت پیکان مشخص می‌شود. پیکان‌های روبه‌بالا نشان‌دهنده انرژی‌های مثبت‌اند (یعنی نمایش انرژی حفره‌ها) [۷].

## ۲.۲ سطح فرمی

آن مقدار انرژی که به هنگام افزودن ذره‌ای به سیستم (نیمرسانا) افزایش می‌یابد را سطح فرمی گویند. برای مثال در فلزات، بالاترین سطحی که در دمای صفر مطلق اشغال می‌شود را سطح فرمی گویند که در همین دما، احتمال حضور الکترون در حالت بالاتر از سطح فرمی صفر است.

موقعیت سطح فرمی می‌تواند نقش مهمی در راندمان دستگاهی متشکل از مواد نیمرسانا (همانند دیود و ...) ایجاد کند. این تغییر سطح فرمی در سلول خورشیدی از طریق آرایش یا افزایش دما سلول و... رخ می‌دهد.



شکل ۲.۲: نحوه توزیع الکترون‌ها و حفره‌ها و موقعیت سطح فرمی. که در آن سطح فرمی ذاتی است. در تصویر الف، چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها با یکدیگر برابر است. تصویر ب، چگالی الکترون‌ها بیشتر از چگالی حفره‌هاست (مثلا بر اثر آلیش نوع  $n$ ). شکل بازتولید شده از [۳۶].

موقعیت سطح فرمی در نیمرسانای ذاتی با توجه به روابط (۷.۲) و (۹.۲) به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\varepsilon_f = \frac{1}{2}(\varepsilon_v + \varepsilon_c) + \frac{1}{2}kT \ln\left(\frac{N_v}{N_c}\right) \quad (۱۶.۲)$$

همان طور که ملاحظه می‌کنید سطح فرمی به علت اختلاف چگالی‌های موثر در نوار رسانش و ظرفیت (که خود ناشی از اختلاف در جرم موثر الکترون و حفره است) دقیقا در میانه گاف نواری نیست. اگر در این رابطه  $N_c = N_v$  باشد،  $\varepsilon_f = \frac{1}{2}(\varepsilon_c + \varepsilon_v)$ . در پروسکایت‌ها، جرم موثر حفره و الکترون تقریبا برابر با هم ( $m_e^* \approx m_h^*$ ) و در نتیجه سطح فرمی آن‌ها در وسط گاف نواری است.

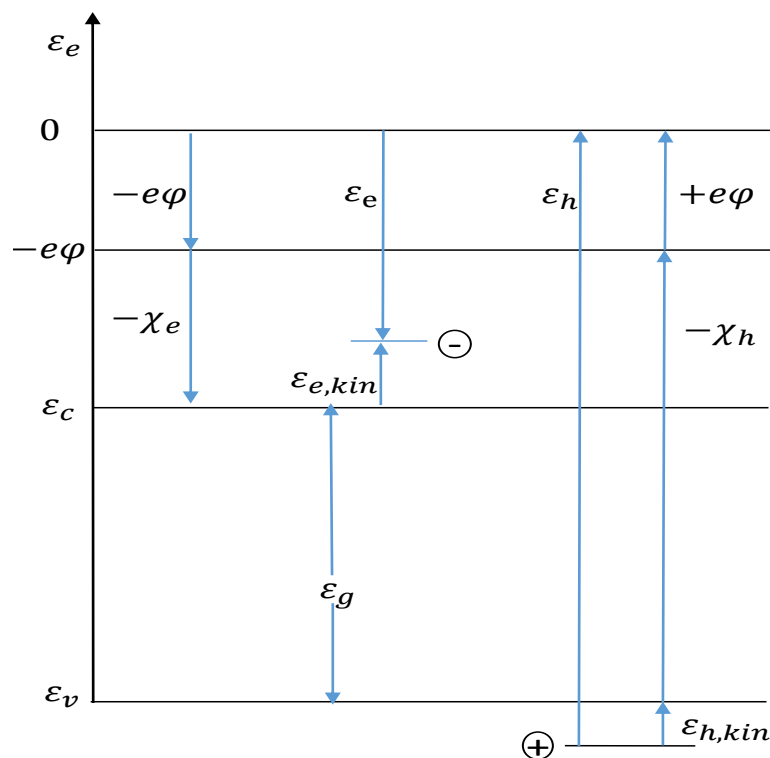
در نیمرسانای غیرذاتی، حضور اتم‌های ناخالص تغییرهای معینی در طیف انرژی بلور ایجاد می‌کند. انرژی الکترون‌های بعضی از اتم‌های ناخالصی ممکن است در داخل گاف نواری قرار گیرد. بنابراین، حالت‌های ناخالصی مجاز اضافی در گاف نواری طیف انرژی بین سر نوار ظرفیت و زیر نوار رسانش ظاهر شود. به عنوان مثال (با نظر به شکل ۱۱.۱)، موقعیت سطوح

فرمی برای نیمرسانای نوع  $n$  و  $p$  به ترتیب زیر است [۳۶]:

$$\varepsilon_f = \varepsilon_c - kT \ln \left( \frac{N_c}{n_D} \right) \quad (17.2)$$

$$\varepsilon_f = \varepsilon_v + kT \ln \left( \frac{N_v}{n_A} \right) \quad (18.2)$$

در نیمرسانا نوع  $n$  سطح فرمی به نوار رسانش و در نیمرسانا نوع  $p$  سطح فرمی به نوار ظرفیت نزدیکتر خواهد شد (شکل ۲.۲).



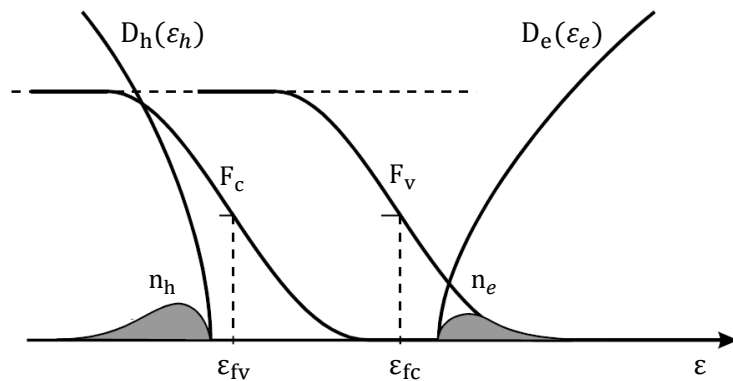
شکل ۳.۲: مقیاس انرژی برای الکترون‌ها و حفره‌ها در نیمرسانا که در آن انرژی بستگی الکترون در مرز پایینی نوار رسانش، الکترون‌خواهی ( $\chi_e$ ) تلقی می‌شود. شکل باز تولید شده از [۷].

## ۱.۲.۲ توزیع شبه فرمی

هنگامی که بر اثر جذب فوتون‌ها، زوج‌های الکترون-حفره ایجاد می‌شوند، نحوه توزیع انرژی این زوج‌های الکترون-حفره، بی‌درنگ طیف انرژی گسترده فوتون‌های جذب‌شده را بازتاب می‌کنند. در اثر برخوردهای که این الکترون‌ها و حفره‌ها با شبکه دارند فونون‌ها گسیل و جذب می‌شوند و به همین علت توزیع انرژی به سرعت تغییر خواهد کرد، و پس از گذشت زمان (در حدود  $10^{-12}$  ثانیه) شرایط تاریکی تثبیت می‌شود؛ یعنی الکترون‌ها و حفره‌ها هر یک با فونون‌ها (شبکه) در تعادل حرارتی و شیمیایی قرار می‌گیرند. به هنگام تابیدن نور به سیستم (سلول خورشیدی)، چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها نسبت به محیط تاریک بیش‌تر می‌شود در نتیجه

چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها ایجاد شده نسبت به چگالی ذاتی‌شان بیش‌تر خواهد شد ( $n_e > n_o$ ) و  $p_h > p_o$  که  $p_h n_e$  نیز از  $n_i^2$  بزرگ‌تر است). توجه داشته باشید که نمی‌توان این شرایط را با آرایش ایجاد کرد.

افزایش چگالی الکترون‌ها (و هم‌چنین حفره‌ها)، باعث جابه‌جایی از حالت تعادل سیستم می‌شود و دیگر نمی‌توان توزیع حامل‌ها را با یک سطح فرمی توصیف کرد. لذا از سطوح شبه فرمی برای توزیع الکترون‌ها و حفره‌ها در هر نوار (رسانش و ظرفیت)، استفاده می‌شود (شکل ۴.۲).



شکل ۴.۲: سطوح شبه فرمی ( $\varepsilon_{fv}$  و  $\varepsilon_{fc}$ ) [۷]

به عبارت دیگر انرژی که بیان‌کننده توزیع الکترون‌ها در نوار رسانش است باید در مقایسه با شرایط تاریکی به نوار رسانش نزدیک‌تر باشد ( $\varepsilon_{fc}$ ). هم‌چنین در اثر افزایش چگالی حفره‌ها، انرژی فرمی که بیان‌کننده توزیع آن‌ها در نوار ظرفیت است در مقایسه با شرایط تاریکی به نوار ظرفیت نزدیک‌تر باشد ( $\varepsilon_{fv}$ ) [۳۸].

بنابراین با در نظر گرفتن سطوح شبه فرمی برای چگالی الکترون‌ها (در نوار رسانش) و چگالی حفره‌ها (در نوار ظرفیت) می‌توان نوشت [۷]:

$$n_e = N_c \exp\left(-\frac{\varepsilon_c - \varepsilon_{fc}}{kT}\right) \quad (۱۹.۲)$$

$$p_h = N_v \exp\left(-\frac{\varepsilon_{fv} - \varepsilon_v}{kT}\right) \quad (۲۰.۲)$$

و هم‌چنین:

$$n_e p_h = n_i^2 \exp\left(-\frac{\varepsilon_{fc} - \varepsilon_{fv}}{kT}\right) \quad (۲۱.۲)$$

## ۲.۲.۲ پتانسیل الکتروشیمیایی

هنگام خروج الکترون از نیم‌رسانا (مشابه حالتی که جریان بار در سلول خورشیدی شارش می‌یابد)، انرژی درونی آن به واسطه کاهش کل انرژی الکترون‌ها، کاهش می‌یابد. حال باید

بدانیم چه مقدار انرژی الکتریکی از خروج زوج الکترون - حفره‌ای به دست می‌آید. در سلول‌های خورشیدی، این انرژی به صورت  $\varphi dQ$  نیست، زیرا هنگام انتقال الکترون‌ها و حفره‌ها بار  $Q$  آن تغییر نمی‌کند (به عبارتی تعداد الکترون‌های شارش یافته از میان یک اتصال با تعداد الکترون‌های خارج شده از اتصال دیگر برابر است). با توجه به تبادل انرژی کل در رابطه (۲۲.۲)، برای انرژی آزاد هلهولتز رابطه (۲۳.۲) و با حذف  $dN_e$  الکترون از نیم‌رسانا، می‌توان داشت [۷]:

$$dE_e = TdS_e - p_e dV + \mu_e dN_e + \varphi dQ \quad (22.2)$$

$$dF_e(T, V, N_e, Q) = dE_e - d(TS_e) \quad (23.2)$$

$$= -S_e dT - p_e dV + \mu_e dN_e + \varphi dQ \quad (24.2)$$

که در این روابط،  $-pdV$  انرژی تراکمی،  $\mu_e dN_e$  انرژی شیمیایی و  $\varphi dQ$  انرژی الکتریکی است. همچنین به صورت مشابه برای حفره‌ها، می‌توان روابط را نوشت. کل تغییرات انرژی آزاد، را می‌توان از جمع انرژی آزاد برای الکترون‌ها و حفره‌ها بدست آورد:

$$dF_t = dF_e + dF_h \quad (25.2)$$

اگر  $dQ = qdN$  بنابراین انتظار می‌رود [۷]:

$$\mu_i dN_i + \varphi dQ = (\mu_i + q\varphi) dN_i \quad (26.2)$$

$$= \eta_i dN_i \quad (27.2)$$

که  $\eta_i$  را پتانسیل الکتروشیمیایی ذره نوع  $i$  گویند.

برای عملکرد سلول خورشیدی در حالت پایا، دمای  $T$  و حجم  $V$  اشغال شده توسط الکترون‌ها و حفره‌ها ثابت است ( $dT = dV = 0$ ). همچنین همیشه شمار یکسانی از الکترون‌ها و حفره‌ها با شارش جریان الکتریکی حذف و یا اضافه می‌شود ( $dN_e = dN_h = dN$ ). بنابراین انرژی که سلول خورشیدی به باری با  $dN$  الکترون و حفره می‌دهد برابر است با:

$$dF_t = dF_e + dF_h \quad (28.2)$$

$$= (\eta_e + \eta_h) dN \quad (29.2)$$

طبق تعریف انرژی کل رابطه (۲۲.۲) و معادله حاکم بر گازهای ایده‌آل ( $pV = NkT$ )، انرژی میانگین الکترون‌ها به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\langle \varepsilon_e \rangle = \frac{E_e}{N_e} \quad (30.2)$$

$$= T \frac{S_e}{N_e} - kT + \eta_e \quad (31.2)$$

اکنون با توجه به برابری رابطه بالا و رابطه (۱۴.۲) می توان نوشت:

$$\varepsilon_c - \eta_e = T \frac{S_e}{N_e} - \frac{5}{2} kT \quad (۳۲.۲)$$

با توجه به رابطه‌ی بین آنروپی و چگالی ذرات (۳۳.۲)، که توسط ساکور-تترود برای گازهای ایده‌آل محاسبه شده است [۷]:

$$\frac{S_e}{N_e} = k \left( \frac{5}{2} + \ln \frac{N_c}{n_e} \right) \quad (۳۳.۲)$$

و با جایگزینی آن در رابطه (۳۲.۲)، پتانسیل الکتروشیمیایی به دست آمده برای الکترون‌ها، برابر با انرژی فرمی آن‌ها می‌شود:

$$\varepsilon_c - \eta_e = kT \ln \left( \frac{N_c}{n_e} \right) \quad (۳۴.۲)$$

و در آخر برای چگالی الکترون‌ها می‌توان نوشت [۷]:

$$n_e = N_c \exp \left[ -\frac{\varepsilon_c - \eta_e}{kT} \right] \quad (۳۵.۲)$$

با مقایسه این رابطه با معادله (۱۹.۲):

$$\eta_e = \varepsilon_{fc} \quad (۳۶.۲)$$

و برای حفره‌ها  $\eta_h = -\varepsilon_{fv}$  است.

هنگامی که ولتاژ سلول خورشیدی با ولت‌متر اندازه‌گیری می‌شود در حقیقت اختلاف پتانسیل الکتروشیمیایی سلول را نشان می‌دهد نه اختلاف پتانسیل الکتریکی آن و همان‌طور که مشاهده شد اختلاف پتانسیل الکتروشیمیایی همان اختلاف بین سطوح شبه فرمی است در نتیجه ولتاژ برابر است با:

$$qV = \varepsilon_{fc} - \varepsilon_{fv} \quad (۳۷.۲)$$

از این جهت توزیع شبه فرمی از اهمیت بالایی برخوردار است.

هم‌چنین با استفاده از رابطه (۲۱.۲) و ولتاژ (۳۷.۲) رابطه زیر به دست می‌آید:

$$n_e p_h = n_i^2 \exp \left( -\frac{qV}{kT} \right) \quad (۳۸.۲)$$

با لگاریتم گرفتن از طرفین معادله برای ولتاژ این چنین به دست می‌آید:

$$qV = \varepsilon_g + kT \ln \frac{n_e p_h}{N_c N_v} \quad (۳۹.۲)$$

از این رابطه به دست آمده برای ولتاژ، در فصل ۴ مورد استفاده قرار خواهد گرفت.



## ۳.۲ تولید و بازترکیب حامل‌های بار

الکترون‌ها و حفره‌ها بر اثر فرایندهایی تولید می‌شوند که حداقل انرژی کمینه لازم  $\varepsilon_g$  برای تولید زوج الکترون-حفره را تأمین کنند. همانند یونش؛ برخوردی که در آن الکترونی (یا حفره) با انرژی جنبشی کافی به الکترون مقید در خارج از سطح انرژی اش (در نوار ظرفیت)، ضربه‌ای وارد کرده و آن را به سطحی در نوار رسانش منتقل می‌کند و بدین ترتیب الکترون و حفره‌ای خلق می‌شود. در فرایند مشابه، برانگیختگی الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش توسط کسب انرژی ارتعاشی از شبکه یا از طریق جذب فوتون می‌تواند رخ دهد. در حضور ناخالصی‌ها با ایجاد شدن سطوحی با انرژی در محدوده گاف نواری، چه بسا برانگیختگی در چند مرحله رخ دهد [۷]. در بخش بعدی چگونگی جذب فوتون‌ها و تولید الکترون-حفره به‌طور خلاصه‌وار بررسی می‌شود.

### ۱.۳.۲ جذب فوتون و تولید زوج الکترون حفره

در سلول‌های خورشیدی تولید الکترون‌ها و حفره‌ها در اثر جذب فوتون‌ها فرایند مهمی است. احتمال جذب فوتون با انرژی  $\hbar\omega$  با ضریب جذب<sup>۸</sup>  $\alpha(\hbar\omega)$  داده می‌شود که یکی از ویژگی‌های مواد و مستقل از شکل هندسی آن‌هاست. از آن‌جا که در فرآیند جذب الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش برانگیخته می‌شود، بنابراین ضریب جذب متناسب با اشغال‌شده در نوار ظرفیت و حالت اشغال‌نشده در نوار رسانش است. تغییر اشغال حالت‌ها در نتیجه جذب فوتون، با بقای انرژی و تکانه همراه است.

در گذارهای مستقیم (همانطور که در بخش ۲.۴.۱ گفته شد) بقای تکانه و انرژی به‌صورت زیر است:

$$p_{\Gamma} = p_e + p_h \approx 0 \rightarrow p_e = -p_h \quad (40.2)$$

$$\hbar\omega = \varepsilon_e + \varepsilon_h$$

با توجه به روابط (۵.۲) و (۶.۲) برای بقای انرژی می‌توان نوشت:

$$\hbar\omega = \varepsilon_c - \varepsilon_v + \frac{p^2}{2m_e^*} + \frac{p^2}{2m_h^*} \quad (41.2)$$

$$= \varepsilon_g + \frac{p^2}{2m_{\mu}} \quad (42.2)$$

که  $m_{\mu} = (m_e^*)^{-1} + (m_h^*)^{-1}$  جرم کاهش‌یافته<sup>۹</sup> نامیده می‌شود. حال مشابه آن‌چه که در بخش قبلی برای به‌دست آوردن چگالی حالت‌ها گفته شد، چگالی کاهش‌یافته حالت‌ها برای گذارهای

<sup>۸</sup>Absorption Coefficient

<sup>۹</sup>Reduced Mass.

مستقیم به صورت زیر خواهد بود [۷]:

$$D_{\mu}(\hbar\omega) = 4\pi \left( \frac{2m_{\mu}}{\hbar^2} \right)^{3/2} (\hbar\omega - \varepsilon_g)^{1/2} \quad (43.2)$$

می‌توان انتظار داشت [۷]:

$$\alpha(\hbar\omega) \propto D_{\mu}(\hbar\omega) \propto (\hbar\omega - \varepsilon_g)^{1/2} \quad (44.2)$$

برای گذارهای غیرمستقیم می‌توان ارتباط بین ضریب جذب و انرژی را به صورت زیر به دست آورد [۷]:

$$\alpha(\hbar\omega) \propto (\hbar\omega - \varepsilon_g \pm \hbar\Omega)^2 \quad (45.2)$$

$\hbar\Omega$  انرژی فونون‌هاست. در رابطه (۴۵.۲) علامت مثبت برای جذب همزمان فوتون و فونون و علامت منفی برای گسیل فونون همراه با جذب فوتون است. از آنجا که احتمال جذب فوتون‌ها (= یعنی تغییر در چگالی جریان فوتون‌ها  $dj_{\Gamma}$  در فاصله  $dx$  توسط جذب)، با ضریب جذب و چگالی جریان فوتونی ( $j_{\Gamma}$ ) متناسب است، وابستگی جریان فوتونی به فاصله  $x$  از سطح ماده جاذب به صورت زیر به دست می‌آید [۷]:

$$\frac{dj_{\Gamma}(\hbar\omega)}{dx} = -\alpha(\hbar\omega)j_{\Gamma}(\hbar\omega) \quad (46.2)$$

با انتگرال گیری از معادله بالا داریم:

$$j_{\Gamma}(x) = j_{\Gamma}(0) \exp(-\alpha x) \quad (47.2)$$

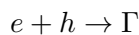
در فاصله  $1/\alpha$  از سطح، جریان فوتونی به  $1/e$  مقدار اولیه آن می‌رسد. همچنین اگر ضریب جذب بزرگ باشد، فوتون‌ها در فاصله کمی جذب می‌شوند. توجه داشته باشید با جذب فوتون، چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها افزایش می‌یابد و در نتیجه اختلاف بین سطوح شبه فرمی ( $\varepsilon_{fv}$  و  $\varepsilon_{fc}$ ) زیاد شده و ولتاژ ( $V$ ) افزایش می‌یابد. همچنین اگر حامل‌های بار اجازه خروج از سلول را داشته باشند جریان ( $I$ ) هم افزایش می‌یابد.

### ۲.۳.۲ بازترکیب الکترون حفره

حامل‌های باری که در یک نیمرسانا وجود دارند (که ممکن است این حامل‌ها توسط جذب فوتون‌ها ایجاد شده باشند)، طی واکنشی به نام بازترکیب از بین می‌روند. انرژی آزادشده از این واکنش، باعث تولید فوتون‌ها یا فونون‌ها یا هر دو به طور هم‌زمان، می‌شوند. همچنین بازترکیب باعث کاهش چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها شده و از آنجا که ولتاژ و جریان کمیت‌هایی وابسته به چگالی حامل‌ها هستند در نتیجه کاهش چگالی حامل‌ها، ولتاژ و جریان سلول نیز کاهش می‌یابند.

در تعادل گرمایی و شیمیایی با تابش محیط، آهنگ تولید و نابودی برای هر دو سازوکار کاملاً در تعادل است، که این نیز به اصل تعادل اجزا (یا تعادل دقیق) معروف است. فرایند بازترکیب معمولاً به سه دسته: بازترکیب تابشی<sup>۱۰</sup>، غیرتابشی<sup>۱۱</sup> و اوژه<sup>۱۲</sup> تقسیم بندی می‌شود. شکل ۵.۲ نمایشی از انواع بازترکیب در نیمرسانا را نشان می‌دهد.

بازترکیب تابشی (بازترکیب دو ذره‌ای<sup>۱۳</sup>) (تصویر سمت چپ شکل ۵.۲)، یعنی واکنش یک حفره با یک الکترون و تولید یک فوتون ( $\Gamma$ )، دقیقاً عکس جذب است (یا به عبارتی گذار خودبه‌خودی یک الکترون از نوار رسانش به سطح خالی در نوار ظرفیت است):



با توجه به این‌که، در این واکنش، یک الکترون-حفره آزاد باید یکدیگر را پیدا کنند، آهنگ بازترکیب تابشی (که در آن الکترون‌ها و حفره‌ها از بین می‌روند و فوتون‌ها تولید می‌شوند) با افزایش چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها افزایش می‌یابد [۷]:

$$R_e = R_h = G_\Gamma = B_r np \quad (48.2)$$

$B_r$  نرخ بازترکیب تابشی است. هم‌چنین در تعادل حرارتی و شیمیایی با تابش محیط آهنگ تمام فرایندهای تولید و بازترکیب، با یکدیگر برابر است.

در سلول‌های خورشیدی، بازترکیب از طریق ناخالصی‌ها فرآیند غالب است. حالت‌های انرژی الکترونی ناخالصی‌ها تقریباً در میانه گاف نواری قرار دارد. این ناخالصی‌ها الکترون‌ها و حفره‌ها را روی یک سری از حالت‌های برانگیخته همراه با اتلاف پیوسته انرژی به دام می‌اندازند (تصویر وسط در شکل ۵.۲) پس بازترکیب غیر تابشی را می‌توان بازترکیب یک حامل آزاد (الکترون یا حفره) با یک حامل به تله‌افتاده تعریف کرد. هرگاه یک الکترون آزاد با سرعت گرمایی  $v_e$  از سطح مقطع ( $\sigma_e$ ) به دام‌اندازی مربوط به ناخالصی که با حفره اشغال شده است عبور کند، به دام خواهد افتاد. نرخ به دام افتادن الکترون‌ها برابر است با [۷]:

$$R_{e,imp} = \sigma_e v_e n_e p_{h,imp} \quad (49.2)$$

که  $p_{h,imp}$  چگالی ناخالصی‌هایی است که با حفره اشغال شده‌اند. مقدار  $\frac{1}{\sigma_e v_e p_{h,imp}}$  به عنوان نرخ ضریب بازترکیب غیر تابشی یا ضریب شاکلی-رید-هال ( $\tau_{SRH}$ ) معرفی می‌شود که بیانگر طول عمر حامل‌های بار است.

در بازترکیب اوژه سه ذره (به عنوان مثال؛ دو الکترون و یک حفره و یا بالعکس) نقش دارند؛ الکترون یا حفره با انرژی جنبشی بالا به الکترون دیگری برخورد می‌کند و آن را از پیوندش خارج می‌سازد، بدین ترتیب یک الکترون و یک حفره آزاد تولید می‌شود. در فرایند معکوس،

<sup>۱۰</sup> Radiative Recombination

<sup>۱۱</sup> Non-Radiative Recombination

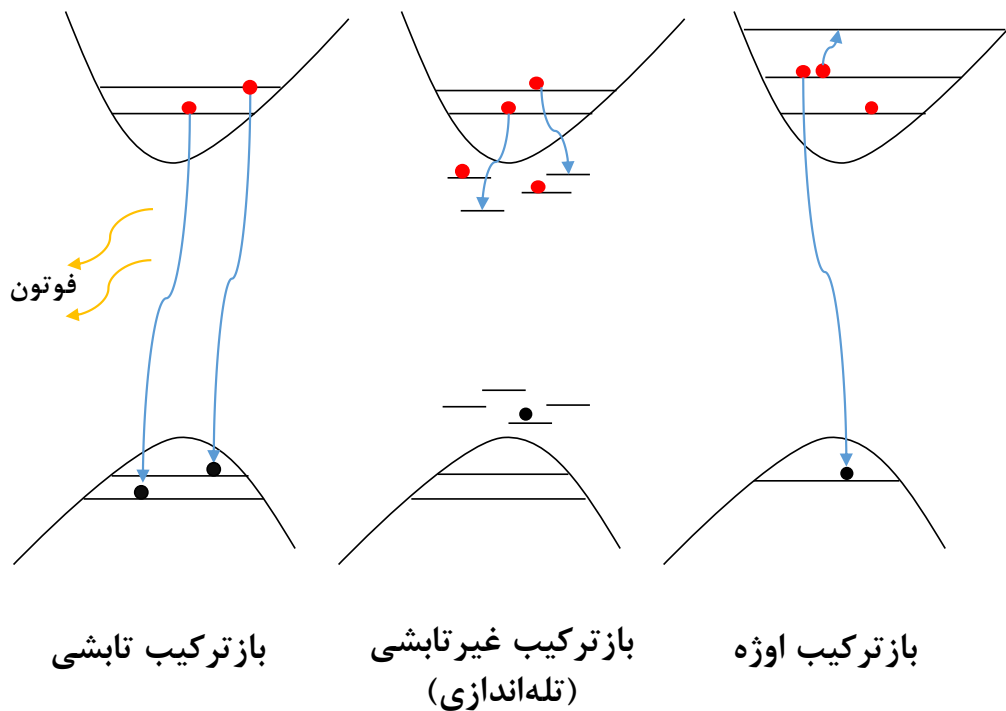
<sup>۱۲</sup> Auger

<sup>۱۳</sup> Bimolecular Recombination

انرژی آزاد شده طی بازترکیب به صورت انرژی جنبشی به الکترون یا حفره منتقل می‌شود و در ادامه توسط برخورد به صورت فونون به شبکه منتقل می‌گردد. در آخر تغییر چگالی الکترون‌ها (و یا حفره‌ها) به صورت آهنگی از فرایند بازترکیب، را می‌توان به صورت زیر نشان داد [۲۱]:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -B_{SRH} n - B_r np - B_{Aug} n^2 p \quad (۵۰.۲)$$

که  $B_{SRH} = \frac{1}{\tau_{SRH}}$  است.



شکل ۵.۲: انواع بازترکیب‌های فعال در فلز هالید پروسکایت آلی و معدنی. تصویر سمت چپ، بازترکیب تابشی (دو ذره‌ای) که بین زوج الکترون-حفره رخ داده و باعث تولید فوتون می‌شود. تصویر وسط، بازترکیب غیرتابشی (یا شاکلی-رید-هال) فرآیندی تک ذره‌ای است که بازترکیب بین یک حامل آزاد و یک حامل به دام افتاده رخ می‌دهد. تصویر سمت راست، نشان دهنده بازترکیب اوژه است حداقل بین سه ذره رخ می‌دهد. شکل بازتولید شده از [۲۱].

## ۴.۲ معادلات پیوستگی الکترون‌ها و حفره‌ها

چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها در یک نیم‌رسانا همانند سلول خورشیدی، بر اثر فرایندهای موجود در آن، با افزایش و کاهش همراه است. تغییرات چگالی حامل‌ها در سلول خورشیدی، بر موقعیت سطح فرمی تاثیرگذار است و باعث تغییر در ولتاژ مدار باز سلول می‌شود. در حالت

کلی معادله پیوستگی شامل جملات چشمه و چاه است (یعنی به عبارتی قانون پایستگی را می‌رساند):

$$\frac{\partial n_i(x)}{\partial t} = G_i(x) - R_i(x) - \nabla \cdot J_i(x) \quad (51.2)$$

در این رابطه  $G_i$  نرخ تولید ذره  $i$ ام (اندیس  $i$ ، الکترون، حفره و یا فوتون است)،  $R_i$  نرخ نابودی (بازترکیب) ذره و  $J_i$  چگالی جریان است. در بخش‌های قبل در ارتباط با تولید و نابودی حامل‌های بار بحث شد. حال این پرسش مطرح می‌شود جریان موجود ناشی از چه چیزی است؟ جریان، شارش حامل‌های بار، می‌تواند ناشی از سه فرایند سوق<sup>۱۴</sup>، پخش<sup>۱۵</sup> و یا گرادیان دمایی باشد. در این پژوهش جریان ناشی از گرادیان دمایی، مورد بررسی قرار نمی‌گیرد.

## ۱.۴.۲ جریان سوق

جریان سوق، جریان حاصل از حرکت حامل‌های بار به علت وجود یک میدان الکتریکی در نیمرسانا است. در نتیجه چگالی جریان متأثر از میدان بار برای ذرات نوع  $i$  به ازای هر ذره برابر با [۷]:

$$J_{dr,i} = qn_i \langle v_i \rangle \quad (52.2)$$

ذرات دارای چگالی  $n_i$  با سرعت متوسط  $\langle v_i \rangle$  (مقدار میانگین سرعت در حضور میدان الکتریکی یا سرعت سوق) حرکت و بار  $q$  را حمل می‌کنند. در نتیجه حرکت ذرات، حامل‌های بار برخورد هایی با ناخالصی‌ها یا فونون‌ها درون بلور نیمرسانا دارند که میانگین فاصله میان برخوردها، مسیر آزاد متوسط نامیده می‌شود. همچنین فاصله زمانی متوسط بین دو برخورد متوالی را زمان برخورد ( $\tau$ ) گویند.

اگر تنها نیروی موثر بر بار، نیروی الکتریکی باشد ( $F = qE$ )، با توجه به قانون دوم نیوتن ( $\sum F = ma$ ) می‌توان نوشت:

$$qE = ma \quad (53.2)$$

$$= m_i^* \langle v_i \rangle \quad (54.2)$$

و در نتیجه سرعت سوق برابر است با:

$$\langle v_i \rangle = u_i E \quad (55.2)$$

که  $u_i = \frac{q\tau_i}{m_i^*}$  تحرک<sup>۱۶</sup> ذرات نوع  $i$  است. در نتیجه چگالی جریان متأثر از میدان این چنین است:

$$J_{dr,i} = \sigma_i E \quad (56.2)$$

<sup>۱۴</sup> Drift

<sup>۱۵</sup> Diffusion

<sup>۱۶</sup> Mobility

که  $\sigma_i = qn_i b_i$  رسانندگی<sup>۱۷</sup> ذرات نوع  $i$  است. با استفاده از رابطه  $E = -\nabla\varphi$ ، رابطه بین چگالی بار بر حسب گرادیان انرژی الکتریکی برای الکترون‌ها و حفره‌ها به صورت زیر است:

$$J_{dr,e} = \frac{\sigma_e}{e} \nabla(-e\varphi) \quad (۵۷.۲)$$

$$J_{dr,h} = -\frac{\sigma_h}{e} \nabla(e\varphi) \quad (۵۸.۲)$$

## ۲.۴.۲ جریان پخش

جریان پخش ناشی از عدم یکنواختی چگالی ذرات است (یا به عبارتی گرادیان چگالی ذرات). مطابق قانون فیک، جریان بار ناشی از غیریکنواختی چگالی ذرات نوع  $i$  با رابطه زیر داده می‌شود:

$$J_{di,i} = q(-d_i \nabla n_i) \quad (۵۹.۲)$$

که  $D_i$  ضریب پخش است. رابطه بالا را می‌توان به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$J_{di,i} = qn_i D_i \frac{\nabla n_i}{n_i} \quad (۶۰.۲)$$

$$\begin{aligned} \frac{\nabla n_i}{n_i} &= \nabla \ln \left( \frac{n_i}{N_i} \right) \\ &= \frac{qn_i D_i}{kT} \nabla \mu_i \end{aligned} \quad (۶۱.۲)$$

که در آن  $\mu_i$  پتانسیل شیمیایی است.

با استفاده از رابطه بین ضریب پخش و تحرک  $۶۲.۲$  که به رابطه اینشتین ( $۶۲.۲$ ) معروف است در نهایت چگالی جریان ناشی از پخش الکترون‌ها و حفره‌ها به صورت زیر بدست می‌آیند:

$$\frac{u_i}{D_i} = \frac{e}{kT} \quad (۶۲.۲)$$

$$J_{di,e} = \frac{\sigma_e}{e} \nabla \mu_e \quad (۶۳.۲)$$

$$J_{di,h} = \frac{\sigma_h}{e} \nabla \mu_h \quad (۶۴.۲)$$

## ۳.۴.۲ جریان بار کل

جریان کل را می‌توان با جمع جریان سوق و پخش به دست آورد. با جمع کردن روابط ( $۵۸.۲$ ) ( $۶۱.۲$ ):

$$J_{t,i} = -\frac{\sigma_i}{q} [\nabla \mu_i + \nabla(e\varphi)] \quad (۶۵.۲)$$

<sup>۱۷</sup> Conductivity

با یادآوری این نکته که  $\eta_i = \mu_i + e\varphi$ ، جریان کل برای ذره نوع  $i$  اُم برابر است با:

$$J_{t,i} = \frac{\sigma_i}{q} \nabla \eta_i \quad (۶۶.۲)$$

از آنجا که الکترون‌ها و حفره‌ها، ذرات باردار متحرک در نیمرسانا هستند لذا جریان کل به صورت زیر است:

$$J_t = \frac{\sigma_e}{e} \nabla \eta_e - \frac{\sigma_h}{e} \nabla \eta_h \quad (۶۷.۲)$$

با استفاده از رابطه (۳۶.۲) برای جریان کل خواهید داشت:

$$J_t = \frac{\sigma_e}{e} \nabla \varepsilon_{fc} + \frac{\sigma_h}{e} \nabla \varepsilon_{fv} \quad (۶۸.۲)$$

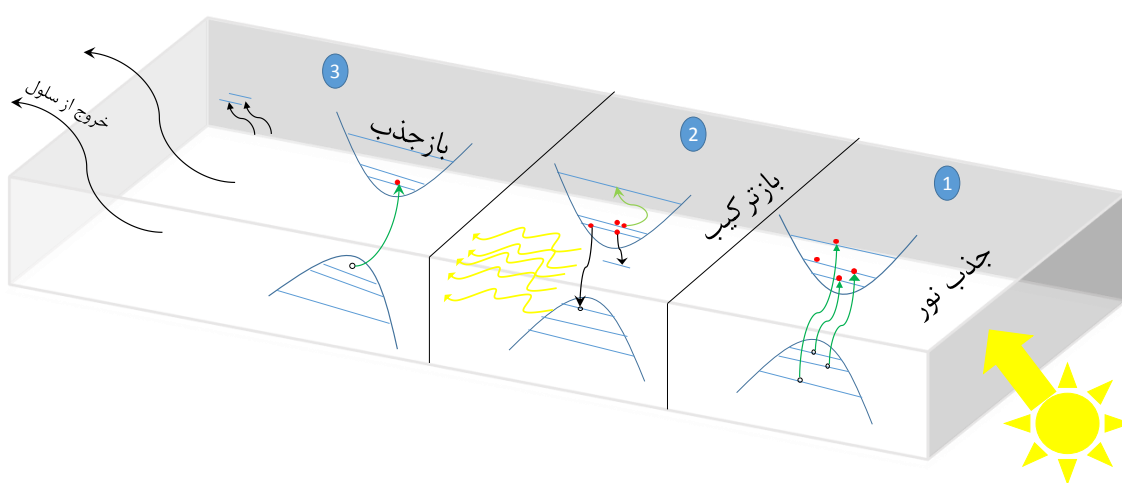
در سلول خورشیدی پروسکایتی هر دو جریان پخش و سوق، وجود دارد اما بر اساس گزارش‌های رسیده از پژوهشی در زمینه اندازه‌گیری جریان‌های سوق و پخش [۳۹] نشان می‌دهد که جریان سوق در سلول‌های خورشیدی پروسکایت بسیار ناچیز است.

## ۵.۲ بازیابی فوتون

یکی از پدیده‌های فیزیکی مهم در سلول خورشیدی پروسکایتی فرآیند بازیابی فوتون<sup>۱۸</sup> شکل ۶.۲، که عبارت است از جذب دوباره فوتونی که از بازترکیب تابشی الکترون و حفره ناشی شده است.

این پدیده باعث بهبود (افزایش) طول عمر موثر حامل‌های بار شده که به نوبه خود باعث افزایش چگالی الکترونی در نمونه می‌شود. از آنجا که افزایش چگالی الکترون‌ها، افزایش ولتاژ مدار باز یک سلول خورشیدی را به همراه دارد، پدیده بازیابی فوتون توجه بسیاری از محققان فعال در حوزه سلول‌های خورشیدی پروسکایتی را به خود جلب کرده است. در فصل آینده با مرور مقالاتی در این زمینه به بررسی دقیق‌تر بازیابی فوتون می‌پردازیم.

<sup>۱۸</sup>Photon Recycling



شکل ۶.۲: نمایش از پدیده بازیابی فوتون. در مرحله اول نور توسط پروسکایت جذب شده و زوج‌های الکترون-حفره تولید می‌شوند. در مرحله دوم، بازترکیب بین زوج‌های الکترون-حفره صورت می‌گیرد که ممکن است به سه صورت تابشی، غیرتابشی و یا اوزه رخ دهد. برای فوتون گسیل شده از بازترکیب تابشی در مرحله سوم، ممکن است حالتی از قبیل جذب دوباره فوتون (بازیابی فوتون) و تولید مجدد زوج الکترون-حفره، یا جذب غیر مفید (به‌عنوان مثال جذب در دیواره‌ها) و یا خروج از سلول رخ دهد. توجه داشته باشید که الکترون‌ها و حفره‌ها به ترتیب توسط دایره‌های توپُر و خالی نشان داده شده‌اند.





# فصل ۳

## مروری بر مقالات

### ۱.۳ محاسبه ولتاژ مدار باز در حضور بازیابی فوتون

با توجه به اهمیت بازیابی فوتون در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی و تاثیر آن بر ولتاژ مدار باز، پژوهشی در همین راستا، تحت عنوان تاثیر بازیابی فوتون بر روی ولتاژ مدار باز سلول خورشیدی فلز هالید پروسکایت توسط کیچارتز<sup>۱</sup> و همکاران، صورت گرفته است [۴۰]. پس از حذف فوتون توسط ماده، انواع بازترکیب‌های گفته شده در فصل‌های قبل (تابشی، غیرتابشی و اوژه) ممکن است رخ دهد. در این پژوهش تنها بازترکیب تابشی در نظر گرفته شده و سپس با استفاده از اصل تعادل جزء به جزء<sup>۲</sup> به محاسبه ولتاژ سلول در حالت مدار باز پرداخته شده است. مطابق یافته‌های این مقاله، از آن‌جا که سلول در حالت مدار باز است (تمام تابش فرودی در سیستم بازترکیب و یا جذب می‌شود) با فرض این‌که جذب غیر مفید (به‌عنوان مثال جذب توسط دیواره‌ها) وجود ندارد، تنها دو گزینه برای فوتون ایجاد شده توسط بازترکیب تابشی وجود دارد: ۱. باز جذب فوتون با احتمال  $p_r$ . ۲. گسیل با احتمال  $p_e$ ، و  $p_r + p_e = 1$ . توجه داشته باشید که برای بازیابی فوتون باید احتمال بالایی از بازجذب نور وجود داشته باشد (به‌عنوان مثال  $p_r$  خیلی بزرگ و  $p_e$  کوچک).

احتمال گسیل به‌صورت، نسبت چگالی جریان اشباع خارجی به چگالی جریان اشباع داخلی

<sup>۱</sup>Thomas Kirchartz

<sup>۲</sup>Principle of Detailed Balance

تعریف می‌شود:

$$p_e = \frac{J_o^{ext}}{J_o^{int}} \quad (1.3)$$

چگالی جریان اشباع خارجی، بر پایه مشاهدات خارجی، شاخص جذب<sup>۳</sup> سلول خورشیدی است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$J_o^{rad,ext} = q \int_0^\infty a(E) \phi_{bb}(E) dE \quad (2.3)$$

این در حالی است که جریان اشباع داخلی، بر پایه نرخ بازترکیب تابشی در حجم ماده جاذب سلول خورشیدی است نه مقدار نور گسیلی که در خارج از سیستم اندازه‌گیری می‌شود:

$$J_o^{rad,int} = q \int_0^\infty \alpha d n_r \phi_{bb}(E) dE \quad (3.3)$$

که در آن  $\alpha$  ضریب جذب ماده جاذب،  $d$  ضخامت ماده جاذب،  $n_r$  ضریب شکست،  $a(E)$  شاخص جذب و  $\phi_{bb}(E)$  طیف جسم سیاه است. لازم به ذکر است، معادله (۳.۳) زمانی استفاده می‌شود که فوتون‌های تولید شده توسط بازترکیب تابشی امکان بازجذب و تولید زوج الکترون-حفره و به دنبال آن افزایش فتوولتایی را به همراه نداشته باشد.

با توجه به روابط بالا، احتمال گسیل (۱.۳) برابر است با:

$$p_e = \frac{\int_0^\infty a \phi_{bb} dE}{\int_0^\infty \alpha d n_r \phi_{bb} dE} \quad (4.3)$$

باید توجه داشت که در محدوده تابشی (به عنوان مثال در غیاب بازترکیب غیرتابشی و اوژه)، معادله (۴.۳) درکی از اثر بازیابی فوتون را می‌دهد زیرا اساساً میزان نور در دسترس، برای بازیابی فوتون و میزان گسیل را مشخص می‌کند.

ولتاژ مدار باز در محدوده تابشی توسط رابطه زیر بیان می‌شود:

$$V_{oc}^{rad} = \frac{kT}{q} \ln \left( \frac{J_{sc}}{J_o^{rad}} \right) \quad (5.3)$$

که در آن  $J_{sc}$  چگالی جریان اتصال کوتاه است. اساساً بازیابی فوتون تأثیری در  $J_{sc}$  ندارد زیرا جریان اتصال کوتاه، توسط راندمان استخراج حامل‌های بار داده می‌شود (یعنی فرض می‌شود حامل‌های بار بلافاصله بعد از جذب و قبل از هر گونه بازترکیبی توسط مدار خارجی جذب می‌شوند). بنابراین اختلاف ولتاژ مدار باز در حضور بازیابی فوتون ( $J_o^{rad} = J_o^{rad,ext}$ ) و عدم حضور آن ( $J_o^{rad} = J_o^{rad,int}$ )، توسط لگاریتم طبیعی نسبت چگالی جریان‌های اشباع در ولتاژ گرمایی است:

$$\Delta V_{oc}^{rad} = V_{oc}^{rad,Pr=\lambda} - V_{oc}^{rad,Pr=\circ} \quad (6.3)$$

$$= \frac{kT}{q} \ln \left( \frac{J_o^{rad,int}}{J_o^{rad,ext}} \right) \quad (7.3)$$

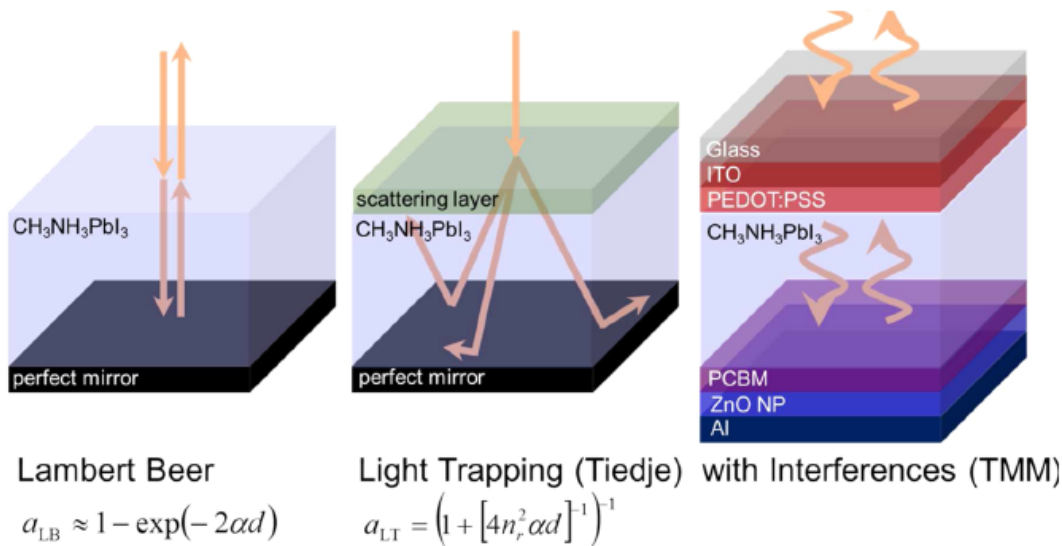
<sup>۳</sup> Absorptance

و یا با جایگزینی روابط (۱.۳) و (۴.۳):

$$\Delta V_{oc}^{rad} = -\frac{kT}{q} \ln(p_e) \quad (۸.۳)$$

$$= \frac{kT}{q} \ln \left( \frac{\int_0^\infty \mathcal{F} d\alpha n_r \phi_{bb} dE}{\int_0^\infty a \phi_{bb} dE} \right) \quad (۹.۳)$$

به منظور اندازه‌گیری اثر بازتابی فوتون در محدوده تابشی، باید نسبت  $a\phi_{bb}$  به  $\mathcal{F}d\alpha n_r \phi_{bb}$  در معادله بالا، را مطالعه کرد. برای درک بیشتر مفهوم احتمال گسیل و اختلاف ولتاژ داده شده در معادله (۹.۳) باید تعریفی از  $a$  بر اساس  $\alpha$  و  $d$  بدست آورد. شکل ۱.۳ پل ارتباطی بین ضریب جذب و ضخامت با شاخص جذب را برای سه ساختار متفاوت نشان می‌دهد.



شکل ۱.۳: سه مدل نوری مورد استفاده در سلول خورشیدی پروسکایتی را نشان می‌دهد. در مدل نوری سمت چپ پراکندگی سطحی وجود ندارد و نور به صورت مستقیم وارد سیستم شده و پس از بازتاب کامل از سیستم خارج می‌شود. جذب برای تابش مستقیم، توسط معادله بیر-لمبرت داده می‌شود. در مدل نوری وسط، نور تابیده شده به سلول، توسط لایه پراکنده می‌شود و فوتون‌های درون سلول توسط تله‌های انرژی جذب می‌شوند. در مدل نوری سمت راست به جای پراکندگی، تداخل نور از لایه‌هایی با ضریب شکست مختلف در نظر گرفته شده است [۴۰].

کیچارتز ابتدا حالتی را در نظر گرفت که در آن از سطح جلویی (سطحی که نور از آن جا وارد ماده جذب می‌شود) هیچ بازتاب نوری وجود نداشته باشد و از سطح پشت نور کاملاً بازتاب شود: نور به طور عادی وارد ساختار پروسکایت شده و سپس بازتاب شده و از سیستم خارج می‌شود. در این حالت رابطه بین ضریب جذب و ضخامت با جذب، توسط قانون لمبرت بیرت داده می‌شود:

$$a_{LB} = 1 - \exp(-2\alpha d) \quad (۱۰.۳)$$

برای فوتون‌های با انرژی کم‌تر از گاف نواری، جذب کوچک و در برخی موارد در حد  $ad \ll 1$  است. با توجه به کوچک بودن جذب، فقط جمله اول از بسط تیلور رابطه (۱۰.۳) را در نظر گرفته:

$$a_{LB}(E) = 1 - \exp(-2\alpha d) \quad (11.3)$$

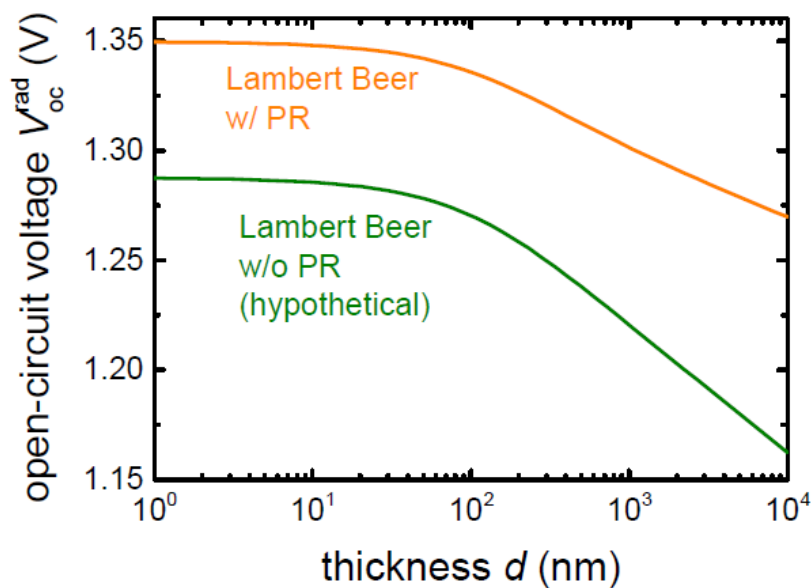
$$= 1 - 1 + 2\alpha d - \frac{(2\alpha d)^2}{2} + \dots \quad (12.3)$$

$$\approx 2\alpha d \quad (13.3)$$

در نتیجه برای احتمال گسیل رابطه زیر برقرار می‌شود:

$$p_e = (2n_r^2)^{-1} \quad (14.3)$$

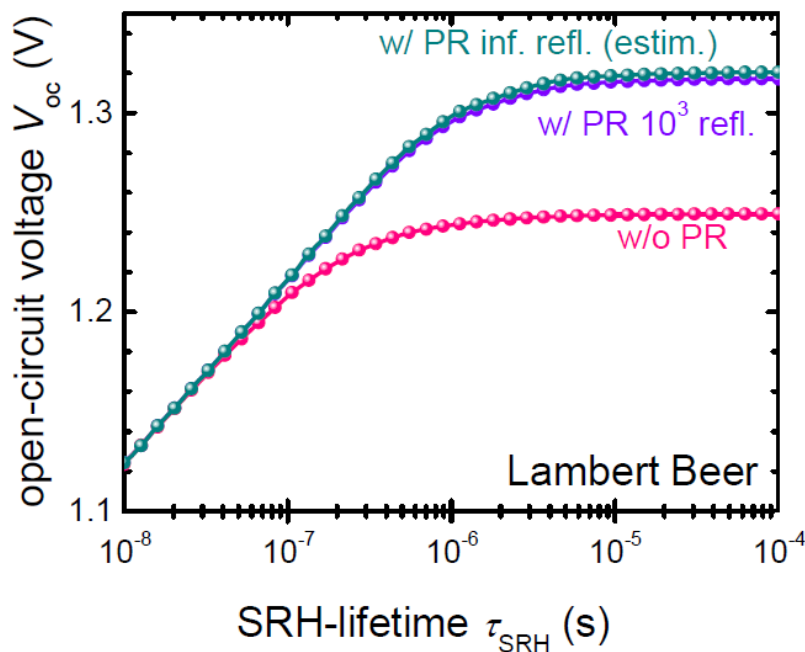
شکل ۲.۳ تاثیر بازیابی فوتون بر روی ولتاژ مدار باز برای ماده جاذب که در محدوده تابشی به عنوان یک تابع وابسته به ضخامت ماده جاذب را محاسبه می‌کند، نشان می‌دهد. برای ضخامت‌های پایین، احتمال بازجذب کم‌تر است. همچنین توجه داشته باشید در حالی که اثر بازیابی فوتون با ضخامت افزایش می‌یابد زیرا فوتون‌های بیشتری، بازجذب می‌شوند، ولتاژ کل مدار باز به دلیل افزایش حجمی که در آن بازترکیب صورت می‌گیرد، کاهش می‌یابد.



شکل ۲.۳: تغییرات ولتاژ باز با ضخامت ماده جاذب [۴۰].

با اضافه شدن جمله بازترکیب غیرتابشی برای سطح و حجم پروسکایت، ولتاژ مدار باز و اثر بازیابی فوتون کاهش پیدا می‌کند. برای سادگی کار فقط بازترکیب شاکلی-رید-هال در حجم پروسکایت در نظر گرفته شده و همچنین سرعت بازترکیب سطحی برای حامل‌های اقلیت، برای هر دو سطح (جلو و پشت)

صفر است. پارامترهای ثابت استفاده شده در شبیه‌سازی عبارت‌اند از گاف نواری  $1/6$  الکترون‌ولت، چگالی ذاتی حامل‌های بار  $8 \times 10^4$  بر سانتی‌متر مکعب، ضریب بازترکیب تابشی  $8 \times 10^{-10}$  بر سانتی‌متر مکعب بر ثانیه و چگالی حالات موثر  $2 \times 10^{18}$  بر سانتی‌متر مکعب. در نتیجه این شبیه‌سازی، شکل به‌دست آمده ۳.۳ نشان می‌دهد که بازه بین  $10^0$  نانوثانیه تا  $1$  میکروثانیه، به اثر بازیابی فوتون مرتبط می‌شود و برای طول عمرهای  $10^0$  میکروثانیه اشباع شده است. همچنین باید توجه داشت که ولتاژ مدار باز بدست آمده اندکی بالاتر از مقادیر تجربی است.



شکل ۳.۳: تغییرات ولتاژ مدار باز با ضریب بازترکیب شاکلی-رید-هال [۴۰].

اخیرا معادله تحلیلی برای ولتاژ مدار باز سلول در حضور بازیابی فوتون و عدم حضور آن به‌دست آمده، به ترتیب برابر است با:

$$qV_{oc}^{PrOn} = qV_{oc}^{rad} + kT \ln(Q_e^{lum}) \quad (15.3)$$

$$= qV_{oc}^{rad} + kT \ln\left(\frac{p_e Q_i^{lum}}{1 - p_r Q_i^{lum}}\right) \quad (16.3)$$

$$qV_{oc}^{PrOff} = qV_{oc}^{rad} + kT \ln(Q_i^{lum}) \quad (17.3)$$

که در آن  $Q_e^{lum}$  (بازده کوانتومی خارجی LED) نسبت چگالی جریان بازترکیب تابشی و گسیل فوتون ( $J_{em}$ ) به چگالی جریان کل بازترکیب ( $J_{rec}$ ) است:

$$Q_e^{lum} = \frac{J_{em}}{J_{rec}} \quad (18.3)$$

و  $Q_i^{lum}$  (بازده کوانتومی داخلی LED) نسبت چگالی جریان بازترکیب تابشی ( $J_{rad}$ ) به چگالی جریان کل بازترکیب است:

$$Q_i^{lum} = \frac{J_{rad}}{J_{rec}} \quad (19.3)$$

رابطه (۱۸.۳) به بررسی اثرات بازجذب، گسیل و جذب غیر مفید بر روی ولتاژ مدار باز سلول خورشیدی در حضور بازیابی فوتون می‌پردازد.

در نتیجه برای به دست آوردن اختلاف ولتاژ مدار باز (در حضور و عدم حضور بازیابی فوتون) از تفاضل رابطه (۱۶.۳) و (۱۷.۳) استفاده کرده‌اند [۴۰]:

$$q\Delta V_{oc} = qV_{oc}^{rad} - qV_{oc}^{rad} kT \ln \frac{(1 - p_r)}{1 - p_r Q_i^{lum}} \quad (20.3)$$

لازم به ذکر است که در تحلیل نتایج فصل آینده نیز از این روابط استفاده خواهد شد.

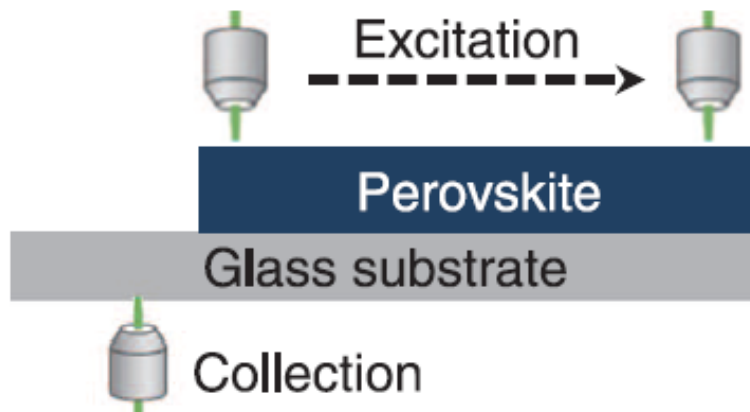
## ۲.۳ مشاهده تجربی اثر بازیابی فوتون در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی

بر اساس گزارش‌های انجام شده، سلول‌های خورشیدی پروسکایت هالید سرب هیبریدی، بازدهی قابل توجهی را در مقایسه با سلول‌های خورشیدی سیلیکونی از خود نشان داده‌اند. این بهبود بازدهی در نتیجه خواص خوب پروسکایت از قبیل مقاطع جذب بالا و طول عمر بالا حامل‌های بار حاصل شده است. نرخ بالای بازترکیب تابشی و طول عمر بالا حامل‌ها، مساله‌ای را مطرح کرده که آیا جذب و گسیل حامل‌های برانگیخته دوباره می‌تواند در طول ترابرد رخ دهد؟ به همین منظور، پژوهشی از پازوس<sup>۴</sup> و همکارانش که به بررسی نقش بازیابی فوتون بر طول ترابرد بار و انرژی پرداخته‌اند [۴۱] بررسی می‌کنیم.

در این پژوهش، نشان داده شده که بازیابی فوتون منجر به افزایش جمعیت حالت برانگیخته در بخش عمده‌ای از پروسکایت می‌شود. علاوه بر این، در حضور بازیابی فوتون، طول ترابرد (یا پخش) حامل‌های بار (یا انرژی) طول پخش ذاتی بار ( $L_D$ ) نیست، بلکه می‌تواند از طریق رویدادهای متعدد بازترکیب-گسیل، به‌طور چشمگیری افزایش یابد که در این صورت به آن طول پخش موثر گویند ( $L_{eff}$ ).

پازوس و همکاران، فیلم‌های نازک پروسکایت را (با ضخامت در حدود ۱۰۰ نانومتر) روی زیرلایه‌های شیشه‌ای مورد بررسی قرار دادند که در این شرایط، تنها ۱۰ تا ۱۵ درصد از گسیل فوتولومینسانس (PL) داخلی تولید شده به هوا و یا به شیشه زیر رفته و گسیل باقی‌مانده به درون فیلم هدایت شدند. برای اندازه‌گیری توزیع فضایی گسیل نور تولید شده، از یک میکروسکوپ نوری هم‌کانون، که با هدف برانگیختگی و جمع‌آوری که به‌طور جداگانه کنترل

<sup>۴</sup>Luis M. Pazos-Outón



شکل ۴.۳: طرح گرافیکی میکروسکوپ نوری و اندازه‌گیری هندسی آن [۴۱]

می‌شود و روشنایی مکانی حدود  $1/5$  میکرومتر استفاده کردند (شکل ۴.۳). آزمایش انجام شده به این صورت است که نور را به یک بخش پروسکایت تابنده و به سمت بخش‌های دیگر آن پیش می‌رود و در همین حال نور گسیل شده از پروسکایت توسط آشکارساز جمع‌آوری می‌شود. انتظار داشتند که با جابه‌جایی منبع نور بر روی پروسکایت، مطابق قانون بیر-لامبرت، فقط طول موج‌های بلندتر را آشکارسازی کنند (تصویر سمت راست شکل ۵.۳). با این دید که فوتون‌های با انرژی بالا همان ابتدا جذب پروسکایت می‌شود (به دلیل گاف نواری بالا پروسکایت) و فوتون‌های با انرژی کم‌تر (طول موج بزرگ‌تر) در لایه حرکت کرده و در آشکارساز مشاهده شود (یا همان جابه‌جایی طیف اندازه‌گیری به سمت طول موج قرمز). اما نتایج تجربی‌شان بر خلاف انتظار بود (تصویر سمت چپ شکل ۵.۳). این نتایج نشان می‌داد که فوتون‌های با انرژی بالا هم می‌توانند در لایه حرکت کرده و جذب آشکارساز شوند. که این اختلاف در روند مشاهدات خود را با پدیده بازیابی فوتون توجیه کردند.

ضریب جذب  $\alpha_\lambda$  (که در آن  $\lambda$  طول موج است) فیلم‌ها را با استفاده از طیف‌سنجی تغییرات فوتوگرمایی، اندازه‌گیری کرده و با طیف برانگیختگی فوتولومینسانس مقایسه کردند. تحت شرایطی که فوتون‌ها عمدتاً در داخل یک قطعه<sup>۵</sup> محدود می‌شوند (که در اینجا با ساختار شیشه-پروسکایت-هوا تشکیل شده‌اند)، قانون بیر-لامبرت یک واپاشی را در طیف جمعیت فوتون  $I_\lambda$  به فاصله  $r$  از نقطه برانگیختگی با شعاع  $r_0$  نشان می‌دهد:

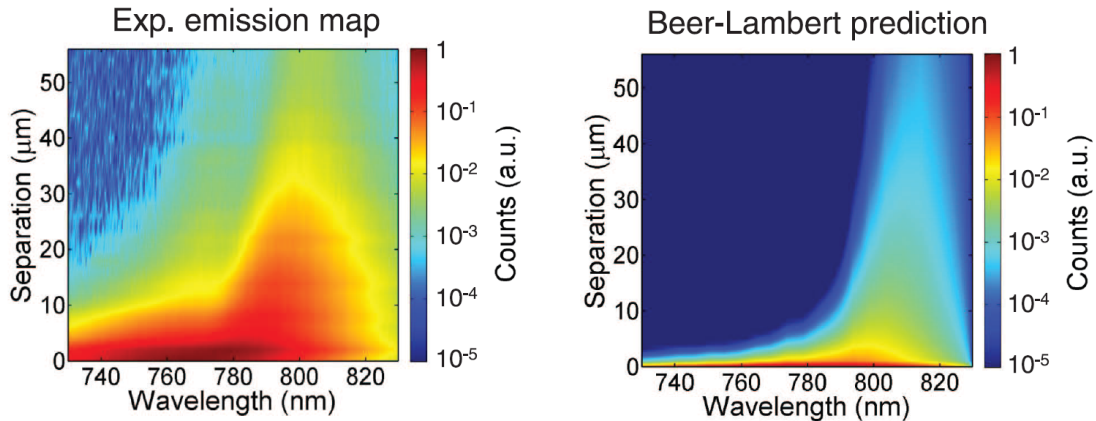
$$I_\lambda(r) = \frac{r_0}{r} I_{\lambda_0} \exp(-\alpha_\lambda r) \quad (21.3)$$

این رابطه، واپاشی را به صورت تابع نمایی همراه با یک ضریب شعاعی برای هر طول موجی نشان می‌دهد. با استفاده از معادله بالا، طرح پیش‌بینی شده طیف واپاشی (که از قانون بیر-لامبرت پیروی می‌کند) در تصویر سمت راست شکل ۵.۳ ترسیم شده است. واپاشی اندازه‌گیری شده در مناطق طیفی مختلف به‌طور قابل توجهی آهسته‌تر از پیش‌بینی قانون بیر-لامبرت است

<sup>۵</sup>Slab



(تصویر سمت چپ شکل ۵.۳).



شکل ۵.۳: تصویر سمت راست طیف گسیل نور پیش‌بینی شده از قانون بیر-لمبرت و تصویر سمت چپ طیف گسیل اندازه‌گیری شده برای واپاشی را نشان می‌دهد [۴۱].

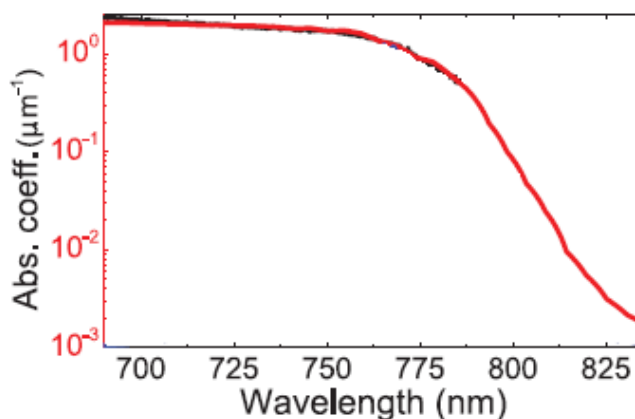
همچنین برای توجیه داده‌های تجربی و اثر بازیابی فوتون، مدل خود را بر پایه معادلات پیوستگی پخش-بازترکیب الکترون و فوتون به صورت زیر بازبینی کردند:

$$\frac{dn}{dt} = D\nabla^2 n + G + \frac{c}{n_s} \sum_{\lambda} \alpha_{\lambda} - k_1 n - k_2 n^2 \quad (22.3)$$

$$\frac{d\gamma_{\lambda}}{dt} = D_{\lambda} \nabla^2 \gamma_{\lambda} - \frac{c}{n_s} \alpha_{\lambda} \gamma_{\lambda} + (k_2 n^2 P_{esc}) P_{\lambda} \quad (23.3)$$

که در آن غلظت حامل‌های بار ( $n$ ) و چگالی فوتون‌ها ( $\gamma$ ) برای طول موج‌های مختلف، به عنوان تابعی از فاصله تا نقطه برانگیختگی در نظر گرفته شد. پارامترهای ورودی عبارت‌اند از مقادیر تجربی گزارش شده برای ضریب پخش حامل  $D = 0.5 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ ، نرخ بازترکیب‌های تک ذره‌ای (بازترکیب غیرتابشی) و دو ذره‌ای (بازترکیب تابشی) به ترتیب برابر با  $k_1 = 10^6 \text{ s}^{-1}$  و  $k_2 = 10^{-1} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$  و ضریب جذب‌های وابسته به طول موج اندازه‌گیری شده  $\alpha_{\lambda}$  در شکل ۶.۳. علاوه بر این  $G$  نرخ تولید،  $c$  سرعت نور،  $n_s$  ضریب شکست،  $P_{esc}$  احتمال فرار فوتون (کمیتی ثابت در نظر گرفته شده است) و  $P_{\lambda}$  احتمال این‌که نور با یک طول موج مشخص گسیل شود.

در این مدل فرض شده است که تنها مکانیسم بازترکیب، بازترکیب تابشی با احتمال  $1 - P_{esc}$  است (یعنی تمام فوتون‌های جذب شده باعث ایجاد زوج الکترون-حفره می‌شوند). از نظر ترابرد الکترون-حفره، نتایج نشان می‌دهد که فاصله متوسطی که یک حامل بار می‌تواند در پروسکایت سیر کند با طول پخش ذاتی حامل‌های بار محدود نمی‌شود و تا زمانی که مکانیسم بازترکیب، تابشی است و فوتون‌ها در فیلم حضور دارند، زوج الکترون-حفره می‌تواند باز تولید شود و در عمق‌های بزرگ‌تر گسیل شوند. این فرآیند تمایزی را بین استخراج و طول



شکل ۶.۳: ضریب جذب فوتون. همان طور که مشاهده می‌شود در طول موج‌های  $750^\circ$  نانومتر به بعد ضریب جذب افت شدید پیدا می‌کند [۴۱].

پخش ذاتی بار ایجاد می‌کند و این امکان را می‌دهد تا تناقض موجود در نرخ بالای بازترکیب گزارش شده و طول پخش ذاتی بلند برطرف شود.

طبق نتایج گزارش شده از مدل‌سازی معادلات پیوستگی بر پایه بازیابی فوتون، تحت شرایط مدار باز و در دستگامی با ضخامت  $350^\circ$  نانومتر که توسط پازوس مورد بررسی قرار گرفته شد: در تابش‌های  $1Sun$  افزایش دو برابری چگالی فوتون داخلی را، در اثر بازیابی فوتون نشان دادند. همچنین چگالی بالاتر فوتون‌ها منجر به افزایش لومینسانس داخلی و بارهای برانگیخته می‌شود که افزایش جدایی سطح شبه‌فرمی را در پی دارد و در نتیجه باعث افزایش ولتاژ مدار باز قابل دستیابی در سلول خورشیدی می‌شود [۴۱].

مدیریت فوتون، روش‌های امیدوار کننده‌ای را برای استفاده از بازیابی فوتون ارائه می‌دهد تا بازدهی تبدیل فوتون سلول‌های خورشیدی پروسکایت در محدوده شاکلی-کوییزر بهبود بخشد.

### ۳.۳ شرایط گذرا و احتمال فرار وابسته به زمان

همان طور که تاکنون مشاهده کردید، بازیابی فوتون پدیده‌ای مهم در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی است و از آنجا که بازیابی فوتون باعث افزایش طول عمر حامل‌های بار می‌شود و به طبع آن افزایش ولتاژ مدار باز را در پی دارد، پژوهشی مشابه با مشاهدات تجربی از پازوس (که در قبل بررسی شد)، توسط انصاری‌راد و بیسکرت با استفاده از مدل‌سازی پخش، اثر بازیابی فوتون را در حالت گذرا برای طیف لومینسانس پروسکایت مورد بررسی قرار داده‌اند [۴۲].

تفاوت این پژوهش با کار تجربی پازوس در شرایط مرزی استفاده شده و احتمال فرار است. در مقاله پازوس تنها شرط مرزی استفاده شده برای فوتون‌ها، شرط بازتاب از مرز بود که در

این جا شرایط مرزی را به صورت زیر در نظر گرفته اند:

$$j_{\Gamma, x=0} = -S_f \Gamma_{x=0} \quad (24.3)$$

$$j_{\Gamma, x=d} = -S_r \Gamma_{x=d} \quad (25.3)$$

که در آن  $S_f$  قدرت گسیل از سطح جلویی لایه<sup>۶</sup> ( $x = 0$ ) و  $S_r$  قدرت گسیل از سطح عقبی لایه<sup>۷</sup> ( $x = d$ ) است. توجه داشته باشید که رویکرد اصلی این پژوهش محاسبه احتمال فرار فوتون است.

احتمال فرار فوتون در معادلات پیوستگی استفاده شده را نباید به صورت ثابت در نظر گرفت زیرا فوتون های گسیل شده امکان جذب دوباره را دارند و نیز می توانند دوباره گسیل شوند. به دلیل ناهمسانگردی دینامیکی در چگالی فوتون های ثانویه، احتمال فرار، رفتاری گذرای را قبل از رسیدن به حالت پایا در زمان طولانی نشان می دهد.

در این پژوهش پیشنهاد شده که راه اساسی تری را برای به دست آوردن احتمال فرار در حالت گذرا، توسط محاسبه نسبت فوتون های گسیل شده از لایه به کل فوتون های تولید شده در درون لایه، در زمان های  $t > 0$  می توان برگزید که توسط معادله زیر محاسبه شده است:

$$P_{esc}(t) = \frac{\int_{t_0}^t PL(t')}{\int_{t_0}^t \int_0^d U_{rad}(x, t') dx dt'} \quad (26.3)$$

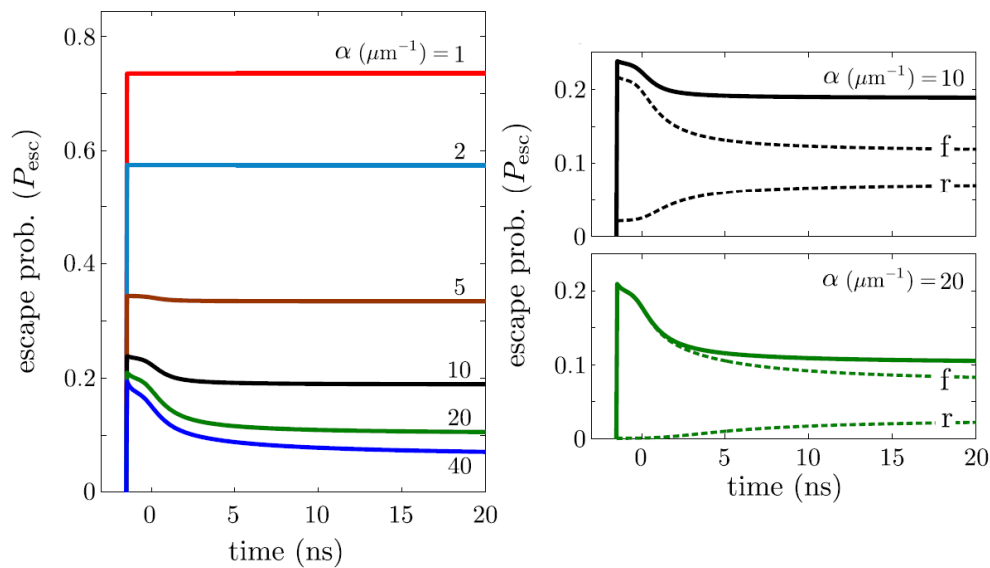
که در آن  $PL(t')$  گسیل فوتولومینسانس از سطح جلو و عقب لایه و  $U(x, t')$  نرخ بازترکیب تابشی لایه در زمان  $t'$  و موقعیت  $x$  و  $t_0$  زمانی است که منبع روشن می شود (یا به عبارت دقیق تر پالس لیزر به سلول می تابد). بدین ترتیب معادله (۲۶.۳) رفتار  $P_{esc}$  وابسته به زمان را نشان می دهد.

شکل ۷.۳ احتمال فرار را به صورت تابعی از زمان برای ضخامت  $35^\circ$  نانومتر در پاسخ به شار برانگیختگی  $I_{pul} = 10^{14} \left(\frac{\text{Photon}}{\text{cm}^2}\right)$ <sup>۸</sup> که از معادله (۲۶.۳) محاسبه شده را نشان می دهد. در تصویر سمت چپ،  $P_{esc}$  برای لایه هایی با ضریب جذب متفاوت نشان داده است. اولاً در همه موارد، احتمال فرار در زمان های به اندازه کافی بزرگ، ثابت می شود (در حقیقت این مقادیر همانند وضعیتی که در حالت پایا به دست می آیند ثابت اند)، از سوی دیگر برای زمان های کوتاه، رفتار احتمال فرار به مقادیر جذب وابسته است. برای  $\alpha$  کوچک ( $1 > \alpha d$ )  $P_{esc}$  مستقل از زمان و برای  $\alpha$  بزرگ ( $1 < \alpha d$ ) احتمال فرار رفتار گذار به وضوح دیده می شود. از آن جا که بیشتر فوتون های ثانویه در نزدیکی سطح جلویی لایه گسیل می شوند احتمالی که فوتون ها از همین سطح از لایه خارج شوند بالاست، بدین منظور رفتار  $P_{esc}$  را عمدتاً توسط سطح جلو مورد بررسی قرار دادند زیرا فوتون ها در نزدیکی این سطح متمرکزند و احتمال فرار از سطح عقب

<sup>۶</sup> Front Surface

<sup>۷</sup> Rear Surface

<sup>۸</sup> Excitation Fluence



شکل ۷.۳: تصویر سمت چپ، احتمال فرار را به صورت تابعی از زمان برای ضخامت  $350$  نانومتر و در پاسخ به  $I_{pul} = 10^{14} \left(\frac{\text{Photon}}{\text{cm}^2}\right)$ ، و تصاویر سمت راست احتمال فرار از سطح جلو ( $f$ ) و سطح عقب ( $r$ ) برای دو ضریب جذب متفاوت نشان می‌دهد [۴۲].

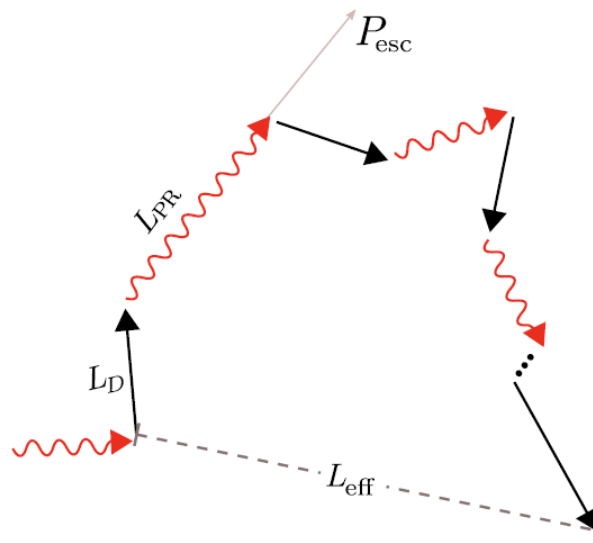
کم است. در تصاویر سمت راست، احتمال فرار از سطح جلو و عقب در ضریب جذب‌های  $\alpha = 10 \mu\text{m}^{-1}$  و  $\alpha = 20 \mu\text{m}^{-1}$  را نشان می‌دهد. با گذر زمان، فوتون‌ها در لایه به‌عنوان یک نتیجه از بازیابی فوتون، توزیع می‌شوند (یعنی فوتونی که گسیل شده امکان جذب دوباره را دارد و در پی آن دوباره می‌تواند در عمق بیش‌تر گسیل شود و به این معنا که فوتون از همان ابتدا در آن‌جا حضور داشته است) و در نتیجه منجر به کاهش احتمال فرار می‌شود. بنابراین از نتایج ارائه شده در شکل ۷.۳، نتیجه می‌شود که توصیف یک لایه با احتمال فرار ثابت برای بررسی مسائل وابسته به زمان اشتباه است.

در این پژوهش طول پخش ذاتی حامل‌های بار را به صورت طول پخش موثر (مسافتی که حامل‌های بار قبل از نابودی توسط بازترکیب غیرتابشی در سلول طی می‌کنند) در نظر گرفته است (شکل ۸.۳).

در این‌جا طول پخش موثر  $L_{eff}$ <sup>۹</sup>، طولی است که حامل‌های بار قبل از نابود شدن (به تله افتادن) توسط بازترکیب غیرتابشی، در لایه سیر می‌کنند. بازترکیب تابشی حامل‌های بار، فرصتی دوباره برای بازیابی فوتون در اختیار قرار می‌دهد، از این رو طول پخش موثر حامل‌های بار نسبت به طول پخش ذاتی ( $L_D = \sqrt{D\tau}$ ) بزرگ‌تر می‌شود. می‌توان برای جابه‌جایی کل، حامل‌ها این چنین نوشت:

$$L = L_D + \wedge L_{PR} + \wedge L'_D + \wedge^2 L'_{PR} + \wedge^2 L''_D + \dots \quad (27.3)$$

<sup>۹</sup>Effective Diffusion Length



شکل ۸.۳: نمایشی ساده برای طول پخش موثر [۴۲].

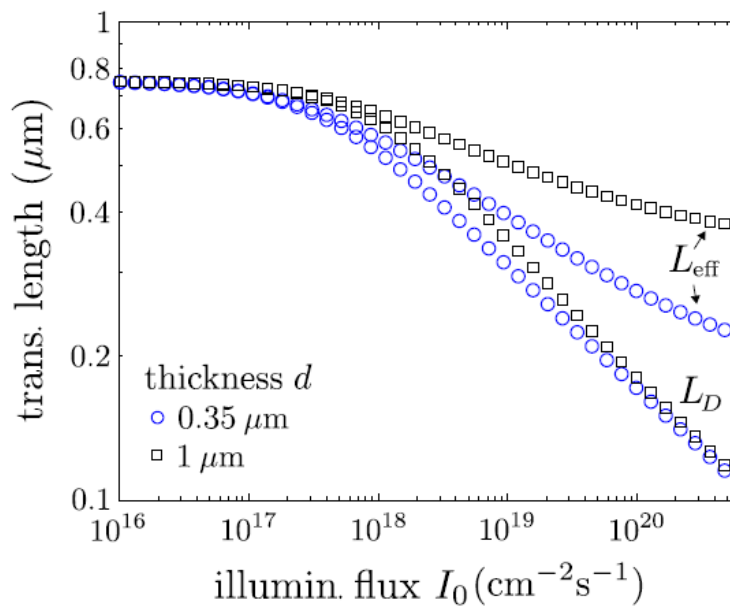
که  $\Lambda = (1 - P_{esc})\eta_{int}$  و  $L_{PR} \propto \alpha^{-1}$  و نسبت نرخ بازترکیب تابشی به بازترکیب کل است. در هر رویداد بازیابی فوتون (که با احتمال  $\Lambda$  رخ می‌دهد) حامل‌های بار مسافتی تا حدود  $\alpha^{-1}$  در لایه طی می‌کنند. برای لایه‌های ضخیم احتمال فرار تقریباً صفر (در نتیجه  $\Lambda \approx \eta_{int}$ ) و برای لایه‌های نازک احتمال فرار تقریباً یک (در نتیجه  $\Lambda \approx 0$ ) است. با توجه به معادله (۲۷.۳) برای طول پخش موثر می‌توان نوشت:

$$L_{eff} = \sqrt{\frac{D\tau + \Lambda^2/\alpha^2}{1 - \Lambda^2}} \quad (28.3)$$

این رابطه، تاثیر بازده بازترکیب تابشی و طراحی نوری سیستم بر روی طول پخش موثر و این‌که حامل‌ها در لایه سیر می‌کنند را نشان می‌دهد. طول پخش موثر را نمی‌توان به‌طور  $\sqrt{D\tau}$  بیان کرد، به این دلیل که اثر بازیابی فوتون فقط طول عمر ظاهری ( $\tau'$ ) را تغییر نمی‌دهد بلکه با هر رویداد بازیابی فوتون، حامل‌ها بیش از  $\alpha^{-1}$  جابه‌جا می‌شوند.

شکل ۹.۳ طول پخش موثر که توسط معادله (۲۸.۳) محاسبه شده را به‌عنوان تابعی از شدت تابش برای دو ضخامت متفاوت نشان می‌دهد.

در تابش‌های پایین، صرف نظر از ضخامت، به این دلیل که  $\eta_{int} \approx 0$  و  $\tau \approx \tau_{SRH}$  (یعنی در تابش‌های پایین بازترکیب غالب، بازترکیب غیرتابشی است) طول پخش موثر با طول پخش ذاتی برابر است ( $L_{eff} = L_D \approx 0.8 \mu m$ ). این نتایج با داده‌های تجربی محاسبه شده توسط فانگ [۴۳] مطابقت دارد و باینگر این موضوع است که در شدت تابش‌های پایین، طول پخش ذاتی بزرگ از  $\tau_{SRH}$  طولانی، و نه از اثر بازیابی فوتون، سرچشمه می‌گیرد. با افزایش شدت تابش اگرچه حامل‌های بار در لایه افزایش می‌یابد ولی طول عمر حامل‌های بار کاهش پیدا می‌کند که منجر به کاهش طول ترابرد می‌شود. علاوه بر این با افزایش چگالی بار، نرخ



شکل ۹.۳: طول ترابرد (طول پخش ذاتی  $L_d$  و طول پخش موثر  $L_{eff}$ ) به صورت تابعی از شدت تابش ( $I_0$ ) تحت شرایط پایا در ضخامت‌های  $35^\circ$  نانومتر و  $1$  میکرومتر [۴۲].

بازترکیب تابشی افزایش یافته و از این رو اثر احتمال بازیابی فوتون دیده می‌شود. به‌عنوان یک نتیجه در تابش‌های متوسط و بالا،  $L_{eff} > L_D$  خواهد بود [۴۲].

## ۴.۳ طیف‌سنجی امپدانس در حضور بازیابی فوتون

از آن‌جا نتایج فصل بعد بر پایه ریاضیات طیف امپدانس در فضای لاپلاس صورت گرفته است، در این بخش مفاهیم امپدانس مورد بررسی قرار می‌گیرد. در مقاله‌ای از گروه ایوان مورا<sup>۱۰</sup>، در مورد سلول‌های خورشیدی پروسکایتی (PSCs)، گزارش شده، به دلیل پسماند<sup>۱۱</sup>، به‌طور مستقیم نمی‌توان محاسبات بهره‌وری تبدیل فوتون را از طریق نمودار (I-V) به‌دست آورد. به همین منظور به بررسی طیف امپدانس پرداخته‌اند [۴۴].

طیف‌سنجی امپدانس<sup>۱۲</sup> (IS)، روش مشخصه‌یابی الکتریکی غیرمخربی است که از طریق آن زمان مشخصه‌های سیستم (سلول خورشیدی) از قبیل بازترکیب، پخش، تحرک و ... را می‌توان محاسبه کرد. معمولاً در این روش، سلول را در معرض اختلالات کوچک متناوب (متغیر با زمان) قرار می‌دهند و پاسخ سلول به این اختلال ثبت و بررسی می‌شود. به‌عنوان ویژگی قابل توجه IS، با یک بار اندازه‌گیری طیف امپدانس، تمام زمان مشخصه فرآیندهای فیزیکی سلول محاسبه می‌شود.

<sup>۱۰</sup> Iván Mora-Seró

<sup>۱۱</sup> Hysteresis

<sup>۱۲</sup> Impedance Spectroscopy (IS)

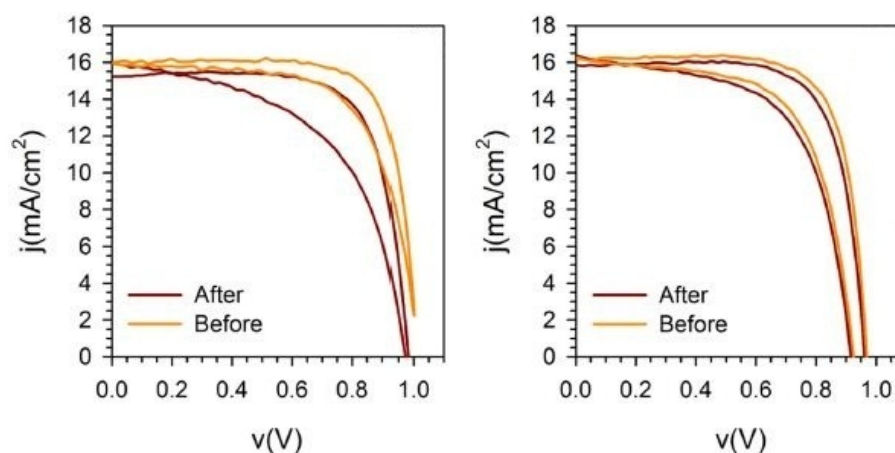
در حقیقت سازوکار حامل‌های بار (مثل تراپرد، بازترکیب، پخش، تحرک و...) در سلول خورشیدی را به مدار الکتریکی معادلی نسبت می‌دهند که هر قسمت از آن کاری مشابه قطعه‌ی الکترونیکی آن مدار را انجام می‌دهد.

اندازه‌گیری IS نیازمند سه شرط اساسی است: ۱. علیت؛ پاسخ اندازه‌گیری شده مشخصاً به‌خاطر اعمال تحریک (اختلال) است.

۲. خطی بودن؛

۳. پایداری؛ اختلال وارد شده، نباید خطی بودن سیستم را مختل کند. به همین منظور، اولاً اختلال وارد شده باید آن‌قدر بزرگ باشد که پاسخ سلول به آن اندازه‌گیری شود و آن‌قدر کوچک که موجب تغییرات خطی در سلول شود.

با توجه به نتایج گزارش شده، اندازه‌گیری طیف امپدانس برای سلول‌های خورشیدی پروسکایتی تحت تابش نور از اهمیت زیادی برخوردار است زیرا خواص پروسکایت تحت تابش تغییرات چشم‌گیری دارد. پایداری سلول‌های خورشیدی پروسکایتی را می‌توان با مقایسه منحنی  $I - V$  قبل و بعد از اندازه‌گیری IS به‌سرعت تایید کرد. همان‌طور که در نمودار سمت چپ شکل ۱۰.۳ تحت تابش  $1Sun$  تفاوت منحنی قبل و بعد از اندازه‌گیری IS بسیار قابل توجه‌تر نسبت به تابش‌های  $1Sun$  است (نمودار سمت راست شکل ۱۰.۳). هم‌چنین محدوده فرکانسی (بسامد زاویه‌ای اختلال وارد شده) اعمال شده، به ماهیت دقیق هر نمونه بستگی داشته باشد. در بیش‌تر موارد این محدوده به‌صورت توزیع لگاریتمی بین فرکانس‌های  $1Hz$  تا  $1MHz$  است.



شکل ۱۰.۳: منحنی  $J - V$  قبل و بعد از اندازه‌گیری IS تحت تابش (نمودار سمت چپ)  $1Sun$  (نمودار سمت راست)  $1Sun$  [۴۴]

به‌عنوان آخرین مطلب گزارش شده در این پژوهش، از مقایسه طیف امپدانس نمونه‌های مختلف در شرایط واحد بپرهیزید زیرا جدایی سطح فرمی در اکثر موارد یکسان نیست و از آن‌جا که چگالی حامل‌ها تابعیتی نمایی با سطح فرمی دارند و در عین حال، پارامترهای مهم



سلول مانند نرخ بازترکیب، ظرفیت شیمیایی یا رسانش به چگالی حامل‌ها وابسته‌اند، نتایج به‌دست آمده از طیف‌سنجی امیدانس قابل اعتماد نیست [۴۴].

## ۵.۳ مدل‌سازی معادلات امیدانس در حالت کلی

همان‌طور که در بخش قبل در ارتباط با امیدانس و ویژگی‌های آن بحث شد در این بخش به فرمول‌بندی کلی امیدانس در حالت پایا و گذرا تحت شرایط مرزی مختلف پرداخته شده است. در پژوهشی از بیسکرت<sup>۱۳</sup>، مدل‌سازی پخش-بازترکیب را در حالت پایا (با قرار دادن منبع مستقیم<sup>۱۴</sup>: نرخ ثابت با گذشت زمان) و گذرا (با قرار دادن منبع متناوب<sup>۱۵</sup>: متغییر با زمان) مورد بررسی قرار داده و پاسخ سلول را در شرایط مرزی بازتاب و جذب به‌دست آورده است. در این پژوهش، معادله پخش-بازترکیب برای الکترون‌ها در شرایط پایا را به‌صورت زیر بیان می‌کند:

$$D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - k(n - n_0) = 0 \quad (29.3)$$

که در آن  $n_0$  چگالی الکترون‌ها در حالت تعادل است. ضریب ثابت این معادله، طول پخش الکترون‌هاست که به صورت  $L_n = (\frac{D}{k})^{1/2}$  تعریف می‌شود. شرایط مرزی که بیسکرت برگزید به‌صورت زیر است:

۱. شرط مرزی بازتاب؛ که حامل‌های بار پس از رسیدن به مرزها ( $x = d$  و  $x = 0$ ) بازتاب می‌شوند یا به‌عبارتی هیچ الکترونی از مرزهای سلول خارج نمی‌شود و در نتیجه چگالی جریانی وجود ندارد ( $J = 0$ )، تصویر بالا در شکل ۱۱.۳.

۲. شرط مرزی جذب؛ که حامل‌های بار پس از رسیدن به مرزها، با نرخی، از مرزها عبور خواهند کرد، تصویر پایین در شکل ۱۱.۳.

شرط مرزی اول، در حقیقت همان روش محاسبه ولتاژ مدار باز سلول و شرط مرزی دوم محاسبه جریان عبوری از سلول را بازگو می‌کند.

شکل ۱۱.۳ پیکربندی الکتروشیمیایی را نشان می‌دهد که در آن الکترون‌ها با غلظت  $n$  در تماس بین شبکه متخلخل نیم‌رسانا و بستر رسانایی تزریق می‌شوند. الکترون‌ها در حجم لایه، پخش و بازترکیب شده و عبور از لبه بیرونی فیلم مسدود (یا باز) است. با توجه به معادله جریان که در این پژوهش آمده است:

$$i = -qAD \frac{\partial n}{\partial x} \quad (x = 0) \quad (30.3)$$

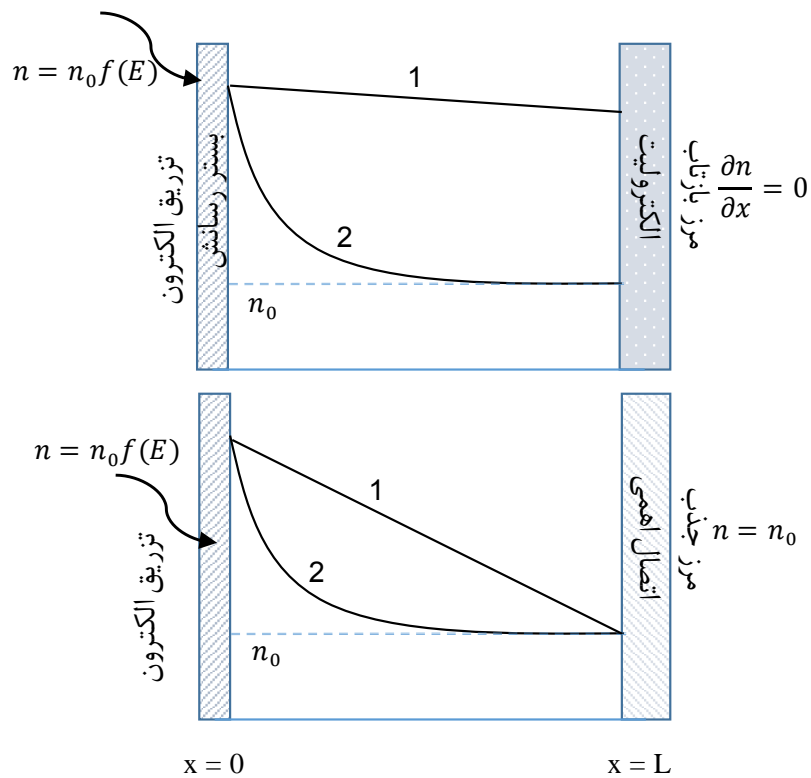
که در آن  $q$  بار و  $A$  سطح الکتروود است، و با فرض این که توزیع حامل‌های تزریق شده ( $f(E)$ )، توزیع بولتزمن باشد ( $n = n_0 \exp(\frac{qE}{k_b T})$ )، چگالی الکترون‌های درون لایه با شرط مرزی بازتاب

<sup>۱۳</sup> Juan Bisquert

<sup>۱۴</sup> dc

<sup>۱۵</sup> ac





شکل ۱۱.۳: بررسی سلول در دو شرط مرزی بازتاب (تصویر بالا) و شرط مرزی جذب (تصویر پایین). در مرز  $x = 0$  الکترون‌ها با توزیع بولتزمن تزریق می‌شوند. پس از پخش الکترون‌ها به مرز  $x = d$  رسیده و جذب یا بازتاب می‌شوند. برای منحنی ۱ ضریب پخش  $L_n = 2L$  و منحنی ۲ ضریب پخش برابر است  $L_n = 0.1L$  [۳۰].

از حل معادله (۲۹.۳) به صورت زیر گزارش شده است:

$$n = n_0 + [f(E) - 1] \left[ \cosh\left(\frac{x}{L_n}\right) - \coth\left(\frac{L}{L_n}\right) \sinh\left(\frac{x}{L_n}\right) \right] \quad (31.3)$$

جریان حاصل با توجه به معادله (۳۰.۳) برابر است با:

$$i = \frac{qADn_0}{L_n} [f(E) - 1] \tanh\left(\frac{L}{L_n}\right) \quad (32.3)$$

و همچنین مقاومت به دست آمده طبق رابطه  $R_{dc} = \frac{dE}{di}$  عبارت‌اند از:

$$R_{dc} = \frac{L_n \coth(L/L_n)}{qADn_0 f(E)} \quad (33.3)$$

به صورت مشابه، جریان و مقاومت به دست آمده برای شرط مرزی جذب برابر است با:

$$i = \frac{qADn_0}{L_n} [f(E) - 1] \coth\left(\frac{L}{L_n}\right) \quad (34.3)$$

$$R_{dc} = \frac{L_n \tanh(L/L_n)}{qADn_0 f(E)} \quad (35.3)$$

به یاد داشته باشید که جریان و ولتاژ محاسبه شده در بالا برای شرایط پایا گزارش شده است.

حال برای محاسبه امپدانس خطی (شرایط گذرا) در غیاب بازترکیب، از نوسانات دامنه کوچک ( $\delta n = \tilde{n}$ ) استفاده و معادله پخش را به صورت زیر بازنویسی کردند:

$$\frac{\partial \tilde{n}}{\partial t} = -\frac{\partial \tilde{J}}{\partial x} \quad (36.3)$$

$$\tilde{J} = -D \frac{\partial \tilde{n}}{\partial x} \quad (37.3)$$

این معادلات را در فضای لاپلاس نوشته ( $\tilde{n} \rightarrow C(s)$ ) و تغییرات چگالی الکترون ها را مطابق زیر به دست آوردند:

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{1}{\lambda^2} C = 0 \quad (38.3)$$

که در آن  $\lambda(s) = \left(\frac{\omega_d}{s}\right)^{1/2} L$  و  $\omega_d = \left(\frac{D}{L^2}\right)$  فرکانس مشخصه پخش در یک لایه محدود است. در مرز تزریق ( $x = 0$ )، پتانسیل و جریان متناوب هر دو وابسته به چگالی الکترون هستند. امپدانس خطی به صورت زیر محاسبه می شود:

$$Z(s) = \frac{U(s)}{I(s)} \quad (39.3)$$

که  $U(s)$  و  $I(s)$  به ترتیب تبدیل لاپلاس  $E$  و  $i$  هستند. در نتیجه با توجه به معادله (30.3) و  $\tilde{E} = \frac{dE}{dn} \tilde{n}$  می توان برای امپدانس این چنین نوشت:

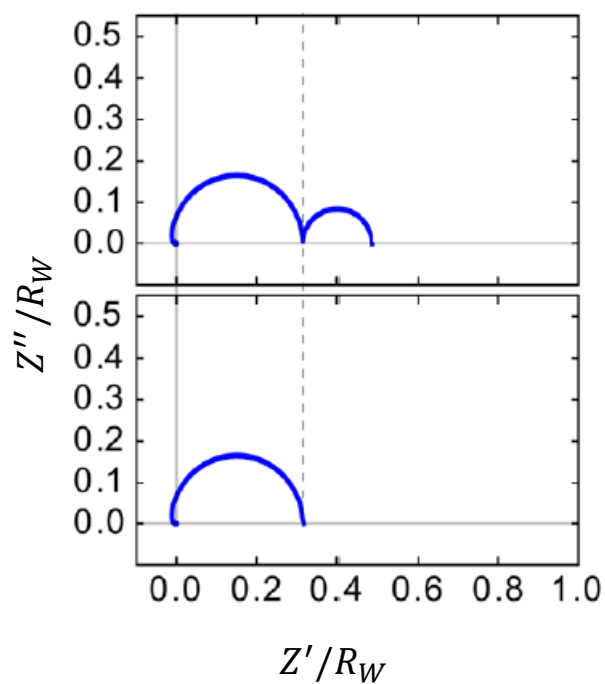
$$Z(s) = R_W \frac{D}{L} \frac{C(s)}{j(s)} \quad (x = 0) \quad (40.3)$$

که  $R_W$  مقاومت پخش است:

$$R_W = \frac{L}{qADn_0 f(E)} \quad (41.3)$$

زمانی که طیف امپدانس برای مدل پخش (در غیاب بازترکیب) رسم می شود تنها یک قله مربوط به مقاومت پخش در آن وجود دارد یا به عبارتی سیستم فقط یک زمان مشخصه مربوط به مقاومت پخش را در طیف امپدانس دارد، تصویر پایین در شکل ۱۲.۳. این در حالی است که زمانی که جمله بازترکیب به مدل قبلی افزوده می شود در طیف امپدانس آن دو پیک وجود خواهد داشت، تصویر بالا در شکل ۱۲.۳. بنابراین طیف امپدانس، زمان مشخصه فرآیندهای فیزیکی سلول را به دست می آورد [۳۰].

برای مثال می توان به سلول مدار معادلی نسبت داد که هر کدام از عناصر مدار، مربوط به یک پیک در طیف امپدانس باشد. پس به سادگی از روی طیف امپدانس مقادیر مقاومت، ظرفیت خازن و... به دست آورده و مشخص شود هر مکان از سلول نقش چه قطعه ای الکترونیکی از مدار را بازی می کند.



شکل ۱۲.۳: تصویر بالا طیف امپدانس را برای دو مکانیسم پخش و بازترکیب در سلول نشان می‌دهد. هر قله زمان مشخصه مکانیسم‌های موجود در سلول را مشخص می‌کند. تصویر پایین طیف امپدانس را فقط در حضور پخش نشان می‌دهد [۳۰].

## فصل ۴

# مدل سازی بازیابی فوتون

در این فصل با مدل سازی معادلات پیوستگی برای الکترون ها و حفره ها و نیز با تعریف معادله پیوستگی برای فوتون های حاصل از بازترکیب تابشی چگالی حامل های بار در لایه جاذب (پروسکایت) در شرایط مرزی متفاوت به بررسی نقش اثر بازیابی فوتون بر روی ولتاژ مدار باز سلول های خورشیدی در شدت های تابشی، ضخامت های مختلف و زمان های شاکلی-رید-هال متفاوت پرداخته شده است. هم چنین در ادامه با بررسی دقیق مشخصه یابی IMVS در حضور بازیابی فوتون، زمان مشخصه های سیستم در شرایط مختلف مورد بررسی قرار می گیرد و به دنبال جوابی برای این پرسش که آیا بازیابی فوتون تاثیری در طیف IMVS و به طبع آن زمان مشخصه های سیستم، ایجاد می کند یا خیر؟ هستیم.

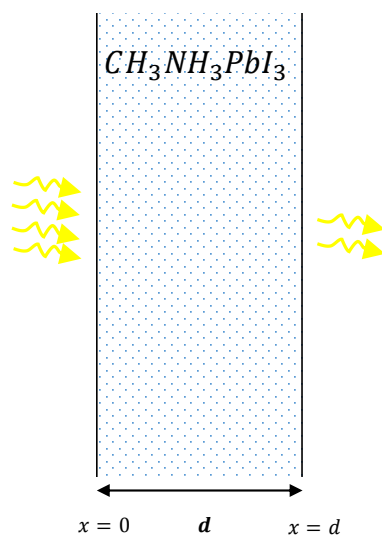
این شبیه سازی ها و داده های بدست آمده از آن توسط نرم افزار متلب و بسته چب فان<sup>۱</sup> [۴۵] صورت گرفته است.

---

<sup>۱</sup>Chebfun

## ۱.۴ معادلات پیوستگی در حضور بازیابی فوتون در شرایط پایا

همان طور که گفته شد سیستم مورد نظر، لایه جاذب سلول خورشیدی پروسکایتی (پروسکایت) با ضخامت  $d$  و ضریب جذب  $5 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$  است. نور از سمت چپ به لایه (در مرز  $x = 0$ ) می رسد (شکل ۱.۴) و بعد از جذب نور، زوج الکترون-حفره تولید می شود. الکترون ها و حفره ها در لایه پخش و بازترکیب (با توجه به بخش ۴.۲ و ۲.۳.۲) می شوند.



شکل ۱.۴: نمایشی از لایه جاذب پروسکایت با ضخامت  $d$ .

حال معادلات پیوستگی برای الکترون ها، حفره ها و فوتون ها را در یک بُعد نوشته و سپس نقش بازیابی فوتون در این معادلات به صورت ضریب  $P_r$  در جمله تولید فوتون وارد می کنیم. معادلات پیوستگی برای الکترون ها و حفره ها و فوتون ها در حضور بازیابی فوتون به ترتیب زیر است:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + P_r \beta \Gamma - B_{SRH} n - B_{RN} p - B_{Aug} n^2 p + I \alpha \exp(-\alpha x) \quad (1.4)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + P_r \beta \Gamma - B_{SRH} p - B_{RN} n - B_{Aug} p^2 n + I \alpha \exp(-\alpha x) \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} = D_\Gamma \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial x^2} - P_r \beta \Gamma + B_{RN} np \quad (3.4)$$

در این روابط،  $n$  چگالی الکترون‌ها،  $p$  چگالی حفره‌ها و  $\Gamma$  چگالی فوتون‌هاست. جملات اول سمت راست معادلات پیوستگی، پخش ذره  $i$ ام (الکترون، حفره و فوتون) با ضریب پخش  $D_{i=n,p,\Gamma}$  را در لایه نشان می‌دهد و جمله  $\beta\Gamma$  بیانگر تولید فوتون با ضریب ثابت جذب فوتون  $\beta$  که معکوس طول عمر فوتون است. نرخ انواع بازترکیب غیر تابشی، تابشی و اوزه در معادلات پیوستگی الکترون‌ها به ترتیب با  $B_{SRH}n$ ،  $B_{Rnp}$  و  $B_{Aug}n^2p$  داده شده است. توجه شود که از میان این سه نوع بازترکیب ذکر شده، تنها بازترکیب تابشی ( $B_{Rnp}$ ) که در معادله پیوستگی فوتون‌ها به صورت جمله چشمه وارد می‌شود. جمله  $I\alpha \exp(-\alpha d)$  نرخ تولید الکترون-حفره بر اثر جذب فوتون‌های فرودی را نشان می‌دهد.

در حالت مدار باز، الکترون‌ها و حفره‌ها از مدار استخراج نمی‌شوند و بنابراین جریانی وجود نخواهد داشت. به همین خاطر شرایط مرزی استفاده شده برای حل معادلات پیوستگی، شرایط مرزی بازتاب (رجوع کنید به بخش ۵.۳) مطابق زیر است:

در  $x = 0$ :

$$\left. \frac{\partial n}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial p}{\partial x} \right|_{x=0} = 0 \quad (4.4)$$

در  $x = d$ :

$$\left. \frac{\partial n}{\partial x} \right|_{x=d} = \left. \frac{\partial p}{\partial x} \right|_{x=d} = 0 \quad (5.4)$$

فوتون‌ها بر خلاف الکترون‌ها و حفره‌ها، علاوه بر بازتاب، می‌توانند از مرزها خارج شوند. به همین علت شرط مرزی مورد استفاده برای فوتون‌ها به شرط مرزی نیمه‌بازتاب معروف است. هم‌چنین نرخ چگالی فوتون‌های خروجی از مرزها با جمعیت فوتون‌ها  $\Gamma$  موجود با سرعت  $S_f$  در مرز متناسب است. شرط مرزی نیمه‌بازتاب در  $x = d$  و  $x = 0$  به ترتیب برابر است با:

$$D_{\Gamma} \left. \frac{\partial \Gamma}{\partial x} \right|_{x=0} = S_f \Gamma \quad (6.4)$$

$$D_{\Gamma} \left. \frac{\partial \Gamma}{\partial x} \right|_{x=d} = -S_r \Gamma \quad (7.4)$$

از حل سه معادله پیوستگی جفت شده در حالت پایا ( $\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial \Gamma}{\partial t} = 0$ ) تحت شرایط مرزی ذکر شده و ثابت‌های مورد نیاز (جدول ۱.۴)، چگالی الکترون‌ها، حفره‌ها و فوتون‌ها در لایه پروسکایت به دست می‌آیند. با توجه به رابطه (۳۹.۲) که در زیر آمده است

$$qV^{oc} = \varepsilon_g + kT \ln \frac{n(x=0)p(x=d)}{N_c N_v} \quad (8.4)$$

از جواب‌های به دست آمده برای چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها در  $x = d$  و  $x = 0$  استفاده کرده و ولتاژ مدار باز را با استفاده از رابطه (۸.۴) محاسبه می‌کنیم. شکل ۲.۴ یک نمونه از جواب حل معادلات پیوستگی برای الکترون‌ها و حفره‌ها را برای لایه جاذبی به ضخامت‌های

جدول ۱.۴: پارامترهای استفاده شده در حل معادلات پیوستگی برای الکترون‌ها، حفره‌ها و فوتون‌ها [۴۲].

$D_p$	$1/7 \times 10^{-2} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$
$D_n$	$1/1 \times 10^{-2} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$
$D_\Gamma$	$2 \times 10^5 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$
$N_c$	$10^{19} \text{ cm}^{-3}$
$N_v$	$10^{19} \text{ cm}^{-3}$
$kT$	$0.026 \text{ eV}$
$\varepsilon_g$	$1.61 \text{ eV}$
$c$	$3 \times 10^{10} \text{ cm s}^{-1}$
$\alpha$	$5 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$
$\beta$	$5 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$
$n_r$	$2/5$
$B_{SRH}$	$3 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$
$B_R$	$5 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$
$B_{Aug}$	$10^{-29} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$
$S_f$	$1/5 \times 10^{10} \text{ cm s}^{-1}$
$S_r$	$1/5 \times 10^{10} \text{ cm s}^{-1}$

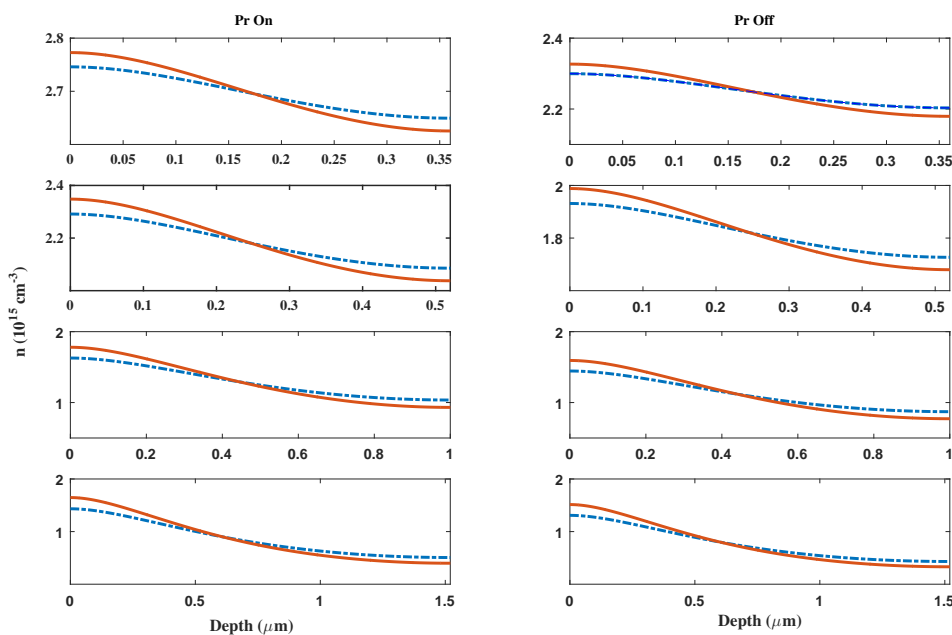
مختلف در دو حالت حضور بازیابی فوتون ( $P_r = 1$ ) و عدم حضور ( $P_r = 0$ ) آن، تحت تابش  $1 \text{ Sun}$  ( $1 \text{ Sun} = 4 \times 10^{17} (1/\text{cm}^2 \cdot \text{s})$ ) نشان می‌دهد.

برای درک اثر بازیابی فوتون بر روی ولتاژ مدار باز، معادلات پیوستگی را در برای حضور و عدم حضور بازیابی فوتون در سه حالت زیر محاسبه و بررسی شده است:

۱. محاسبه ولتاژ مدار باز بر اساس تغییرات ضخامت
۲. محاسبه ولتاژ مدار باز بر اساس تغییرات شدت تابشی
۳. محاسبه ولتاژ مدار باز بر اساس تغییرات نرخ بازترکیب غیرتابشی (بازترکیب شاکی-رید-هال). نتایج حاصله در بخش‌های بعدی آمده است.

#### ۱.۱.۴ محاسبه ولتاژ مدار باز بر اساس تغییرات ضخامت

آیا پدیده بازیابی فوتون، تغییری در ولتاژ مدار باز در ضخامت‌های بالاتر ایجاد می‌کند یا خیر؟ یا به عبارتی دیگر آیا می‌توان از نمودار تغییرات ولتاژ مدار باز بر اساس ضخامت، نشانه‌ای از

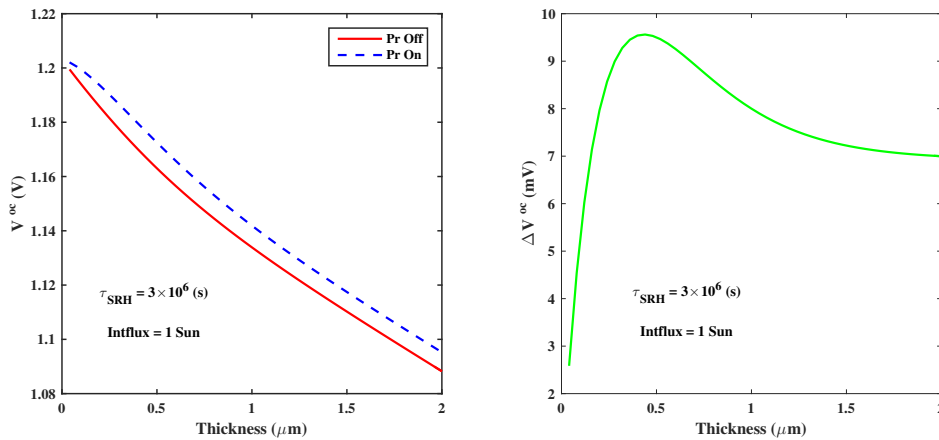


شکل ۲.۴: تغییرات چگالی الکترون‌ها (خط‌چین) و حفره‌ها (توپر) در تابش  $1Sun$  برای عمق‌های مختلف لایه جاذب (پروسکایت) در حضور بازیابی فوتون (منحنی سمت چپ) و عدم حضور آن (منحنی سمت راست) نشان می‌دهد. ضخامت لایه  $1/5$  میکرومتر بوده است.

اثر بازیابی فوتون دید؟ برای پاسخ به این سوالات می‌بایست معادلات پیوستگی بالا را برای شرایط استاندارد (تابش  $1Sun$  و ضریب شکلی-رید-هال  $10^{-6} s$ ) در ضخامت‌های مختلف مورد بررسی قرار داد. داده‌های بدست آمده از انجام این شبیه‌سازی، در شکل ۳.۴ نمایش داده شده است.

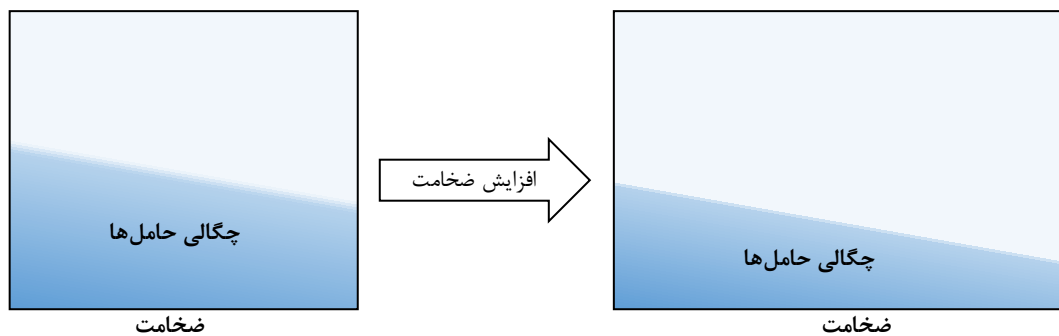
همان‌طور که در شکل مشاهده می‌شود، بازیابی فوتون باعث افزایش ولتاژ مدار باز در حدود ۲ تا  $10$  میلی‌ولت شده است. اختلاف ولتاژ مدار باز بین دو حالت با بازیابی فوتون ( $Pr = 1$ ) و بدون بازیابی فوتون ( $Pr = 0$ ) که در شکل سمت راست به نمایش درآمده است، تا محدوده ضخامت  $500$  نانومتر در حال افزایش است و در ضخامت‌های بالاتر کاهش می‌یابد زیرا با توجه به جذب بالای پروسکایت، اکثریت فوتون‌ها در همان ضخامت‌های کم جذب می‌شوند. هنگامی که فوتون‌ها در لایه جذب می‌شوند و زوج‌های الکترون-حفره را ایجاد می‌کنند اگر رژیم بازترکیب تابشی باشد فوتون‌ها در لایه حرکت کرده و احتمال بازجذب را افزایش می‌دهند که منجر به افزایش چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها شده و در نتیجه ولتاژ مدار باز سلول افزایش پیدا می‌کند. از یک‌سو با افزایش ضخامت، بازیابی فوتون بیشتر شده و باعث افزایش چگالی حامل‌ها و در نتیجه افزایش ولتاژ مدار باز می‌شود از سوی دیگر با افزایش ضخامت چگالی میانگین حامل‌ها به دلیل این‌که دیگر فوتونی برای جذب در لایه موجود نیست و رژیم بازترکیب به سمت بازترکیب غیرتابشی حرکت کرده است، کاهش پیدا می‌کند (شکل ۴.۴). با توجه به افزایش بازیابی فوتون با افزایش ضخامت از یک‌سو و کاهش چگالی میانگین





شکل ۳.۴: شکل سمت چپ، نمودار تغییرات ولتاژ مدار باز سلول خورشیدی پروسکایتی (ولت) نسبت به تغییرات ضخامت سلول (میکرومتر) را نشان می‌دهد. منحنی خط‌چین، مربوط به حضور بازیابی فوتون و توپُر عدم حضور آن در معادلات پیوستگی است. شکل سمت راست، نمودار اختلاف ولتاژ مدار باز در دو حالت بازیابی فوتون و عدم حضور آن، نسبت به تغییرات ضخامت سلول نمایش می‌دهد.

حامل‌های بار با افزایش ضخامت، انتظار یک قله در تغییرات اختلاف ولتاژ مدار باز نسبت به ضخامت داریم (شکل ۳.۴). در نتیجه قله منحنی نمودار اختلاف ولتاژ مدار باز بر اساس تغییرات ضخامت نشان‌دهنده تاثیر بازیابی فوتون است.



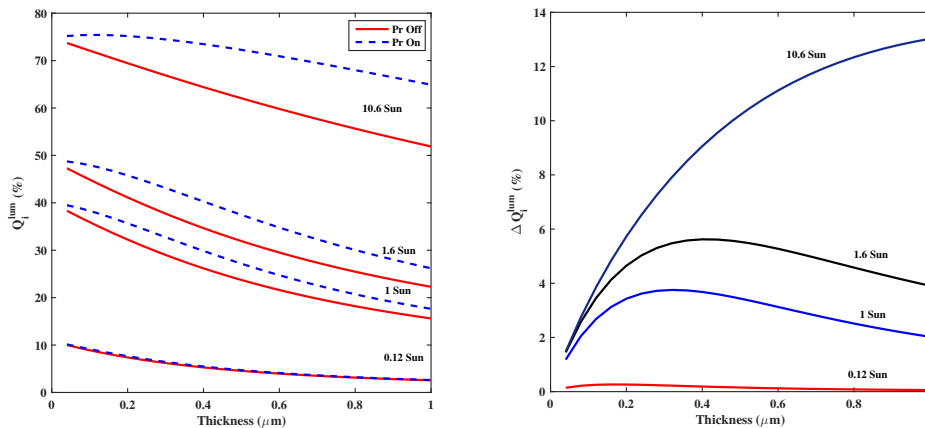
شکل ۴.۴: نمایشی از افزایش ضخامت سلول و کاهش نرخ تولید به‌طور میانگین.

هم‌چنین  $Q_i^{lum}$  (نسبت نرخ بازترکیب تابشی به کل بازترکیب) که توسط رابطه زیر به‌دست

می‌آید [۴۰]:

$$Q_i^{lum} = \frac{B_{Rnp}}{n/\tau_{SRH} + B_{Rnp} + B_{Aug}n^2p} \quad (9.4)$$

برای ضخامت‌های مختلف در حضور بازیابی فوتون (منحنی خط‌چین سمت چپ شکل ۵.۴) و عدم حضور آن (منحنی توپُر سمت چپ شکل ۵.۴) محاسبه شده است.

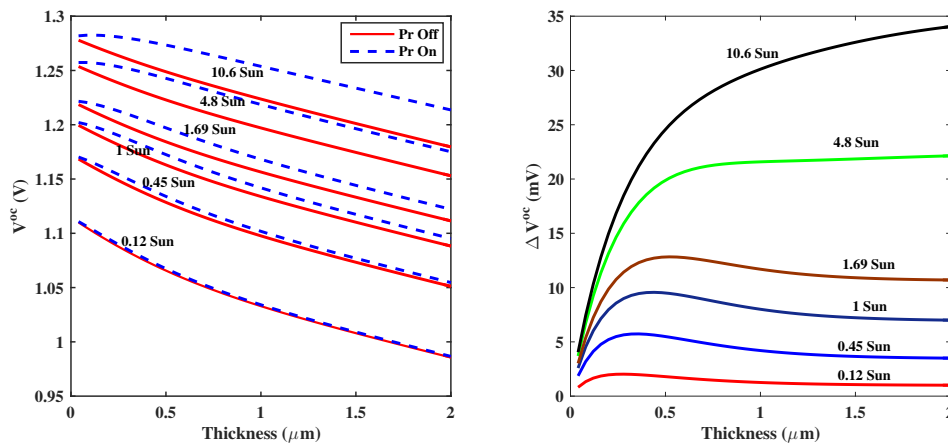


شکل ۵.۴: نمودار سمت چپ، تغییرات نرخ بازترکیب تابشی نسبت به بازترکیب کل  $Q_i^{lum}$  در ضخامت‌های مختلف تحت تابش‌های متفاوت در حضور بازیابی فوتون (منحنی خط‌چین) و بدون بازیابی فوتون (منحنی توپُر) نشان می‌دهد. نمودار سمت راست اختلاف  $Q_i^{lum}$  برای دو حالت بازیابی فوتون و بدون آن در ضخامت‌های مختلف نشان می‌دهد.

شکل ۵.۴ تاییدی بر کل نکات قبلی ذکر شده است.

برای درک کامل روند تغییرات ولتاژ مدار باز بر اثر تغییرات ضخامت، نتایج زیر ارائه شده است (شکل ۶.۴). توجه داشته باشید که تمام نتایجی که در این جا مورد بررسی قرار گرفته شد بر اساس معادلات پخش حامل‌های بار و فوتون‌ها بود. لازم به ذکر است در نظر گرفتن معادلات پخش برای فوتون‌ها امری غیربديهی است اما نتایج سازگاری خوبی با مدل‌سازی دیگران [۴۰] و [۴۱] دارد.

منحنی سمت چپ شکل ۶.۴ نشان می‌دهد که در تابش‌های پایین چگالی حامل‌ها کم و نرخ بازترکیب غیرتابشی است در این صورت بازیابی فوتونی ناچیز و در نتیجه تفاوتی در اختلاف ولتاژ مدار باز برای دو حالت بازیابی فوتون و بدون بازیابی فوتون وجود ندارد. با افزایش شدت تابش رژیم بازترکیب به سمت بازترکیب تابشی پیش می‌رود و در نتیجه اثر بازیابی فوتون بیشتر شده که این باعث افزایش چگالی حامل‌های بار می‌شود. قله‌های مشاهده شده در شکل بیانگر این موضوع بود که با افزایش ضخامت از سویی بازیابی فوتون باعث افزایش چگالی شده و از سویی دیگر با افزایش ضخامت از میانگین چگالی حامل‌ها کاسته می‌شود. در تابش‌های خیلی



شکل ۶.۴: تغییرات ولتاژ مدار باز (ولت) نسبت به تغییرات ضخامت (میکرومتر) در شدت تابش‌های مختلف

بالا به این دلیل که نرخ افزایش چگالی حامل‌ها توسط بازیابی فوتون بر روند کاهش میانگین چگالی غلبه کرده است قله‌ای مشاهده نمی‌شود.

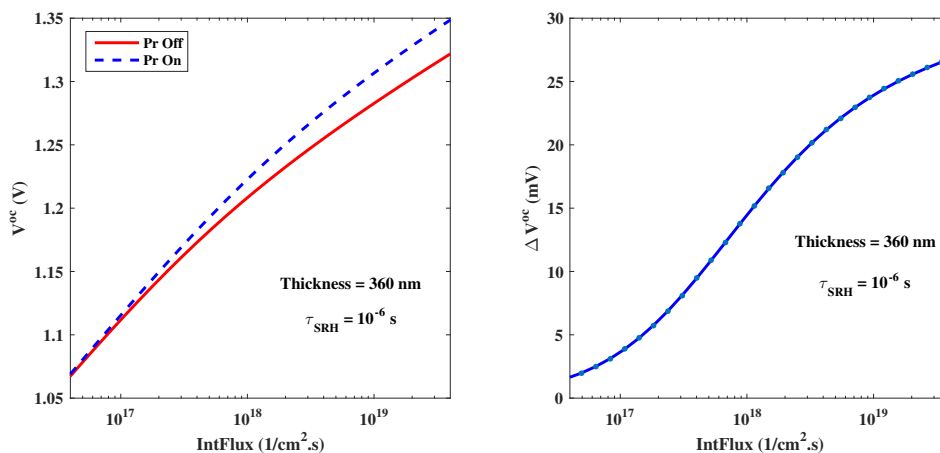
## ۲.۱.۴ محاسبه ولتاژ مدار باز بر اثر تابش‌های مختلف

می‌توان برای این بخش هم، پرسشی مشابه طرح کرد که اثر بازیابی فوتون بر روی ولتاژ مدار باز، در تابش‌های مختلف خودش را چگونه نشان می‌دهد؟ در این جا شبیه‌سازی معادلات پیوستگی را با توجه به تغییرات تابش‌های فرودی انجام داده و نتایج آن در ادامه مورد بحث و تحلیل قرار می‌گیرد. شکل ۷.۴ نمودار تغییرات ولتاژ مدار باز بر اساس تابش‌های فرودی مختلف را نشان می‌دهد.

با افزایش شدت تابش فرودی، چگالی حامل‌های بار افزایش می‌یابد. این افزایش حامل‌های بار، نرخ بازترکیب تابشی یا به عبارتی  $Q_i^{lum}$  (نسبت بازترکیب تابشی به بازترکیب کل) را افزایش داده (شکل ۸.۴) که به صورت زیر است:

$$Q_i^{lum} = \frac{B_{Rnp}}{n/\tau_{SRH} + B_{Rnp} + B_{Aug}n^2p} \quad (10.4)$$

و خود باعث افزایش بازجذب حامل‌ها و پدیدار شدن بازیابی فوتون در لایه جذب می‌شود. در محدوده تابشی زیر  $1\text{Sun}$  اکثر بازترکیب از نوع غیرتابشی است. با رسیدن به تابش‌های  $1\text{Sun}$  و بالاتر، اثر بازیابی فوتون خودش را به دلیل افزایش نرخ بازترکیب تابشی، نشان می‌دهد



شکل ۷.۴: نمودار تغییرات ولتاژ مدار باز سلول خورشیدی پروسکایتی (ولت) در تابش‌های متفاوت فرودی بر سلول (بر ثانیه بر سانتی‌متر مربع). منحنی خط‌چین، مربوط به حضور بازیابی فوتون و خط پُر عدم حضور آن در معادلات پیوستگی است.

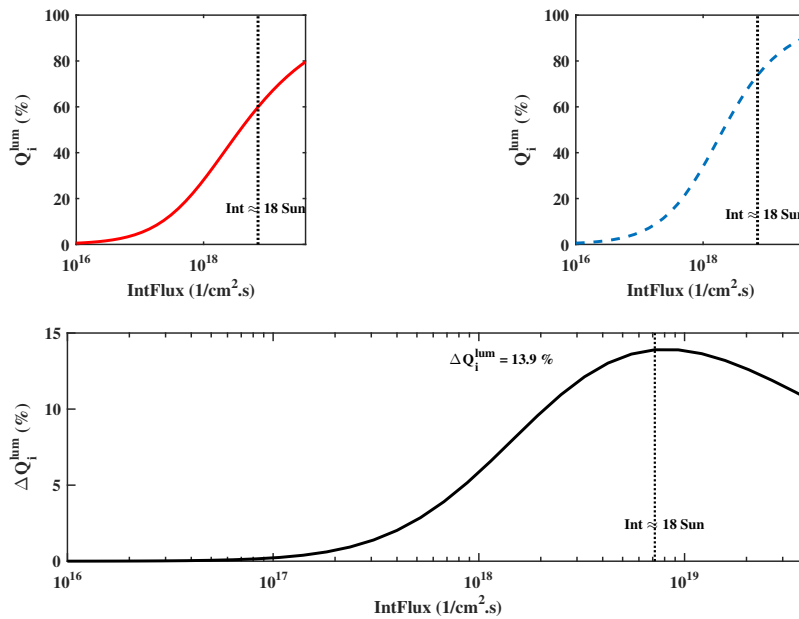
(منحنی خط‌چین سمت چپ شکل ۷.۴ ولتاژ مدار باز در حضور بازیابی فوتون را نشان می‌دهد). منحنی سمت راست شکل ۷.۴ اختلاف ولتاژ مدار باز بر اساس تغییرات شدت تابش فرودی را در حدود چند ده میلی‌ولت گزارش می‌دهد. انتظار داریم در تابش‌های خیلی بالا (که در شکل مشخص نمی‌شود)، چگالی حامل‌های بار افزایش یافته و در نتیجه نرخ بازترکیب به سمت بازترکیب سه ذره‌ای، اوژه پیش می‌رود و موجب کاهش اختلاف ولتاژ مدار باز شود.

این پرسش مطرح می‌شود که اولاً چرا با افزایش شدت تابش شیب منحنی سمت چپ شکل ۷.۴ کم می‌شود و این شیب بیانگر چه چیزی است؟ در حالت مدار باز به دلیل این که ذره‌ای از سیستم خارج نمی‌شود، کل تابش فرودی ( $I$ ) به لایه، بازترکیب می‌شود یعنی:

$$U_R \propto I \quad (11.4)$$

که  $U_R$ ، نرخ بازترکیب کل است. شیب منحنی نمودار تغییرات ولتاژ مدار باز در تابش‌های مختلف با توجه به رابطه (۸.۴) و نوع رژیم بازترکیب غالب در لایه تعیین می‌شود.

در تابش‌های پایین، رژیم بازترکیب، خطی است به عبارتی بازترکیب غالب بازترکیب غیرتابشی است ( $n/\tau_{SRH}$ ) و در این صورت نرخ بازترکیب برابر است با چگالی الکترون‌ها (یا حفره‌ها)  $U_R \propto n$  یا  $U_R^2 \propto np$ ، در نتیجه با توجه به رابطه (۱۱.۴)  $I^2 \propto np$  است. با قرار دادن  $I^2$



شکل ۸.۴: نمودار سمت چپ بازده  $Q_i^{lum}$  در عدم حضور بازیابی فوتون، نمودار سمت راست در حضور بازیابی فوتون و نمودار پایین اختلاف  $Q_i^{lum}$  برای دو حالت بالا نشان می دهد. ضخامت لایه میکرومتر در نظر گرفته شده است.

به جای  $np$  در رابطه (۸.۴)، خواهیم داشت:

$$qV^{oc} \propto \varepsilon_g + kT \ln \frac{I^2}{N_c N_v} \quad (۱۲.۴)$$

$$\propto 2kT \ln(I) + \varepsilon_g - kT \ln N_c N_v \quad (۱۳.۴)$$

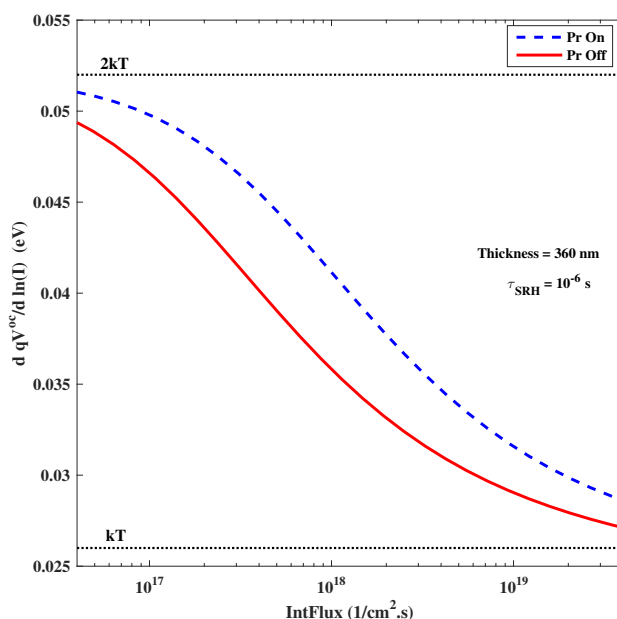
بنابراین شیب منحنی  $(V^{oc} - \ln I)$  در تابش های پایین متناسب با  $2kT$  است. با افزایش شدت تابش رژیم بازترکیب در لایه به سمت رژیم بازترکیب تابشی  $B_r np$  پیش می رود، در این صورت نرخ بازترکیب به صورت  $U_R \propto np$  خواهد شد و در نتیجه با توجه به رابطه (۱۱.۴)،  $I \propto np$  است. با جایگزینی  $I$  در رابطه (۸.۴) ولتاژ مدار باز برابر است با:

$$qV^{oc} \propto \varepsilon_g + kT \ln \frac{I}{N_c N_v} \quad (۱۴.۴)$$

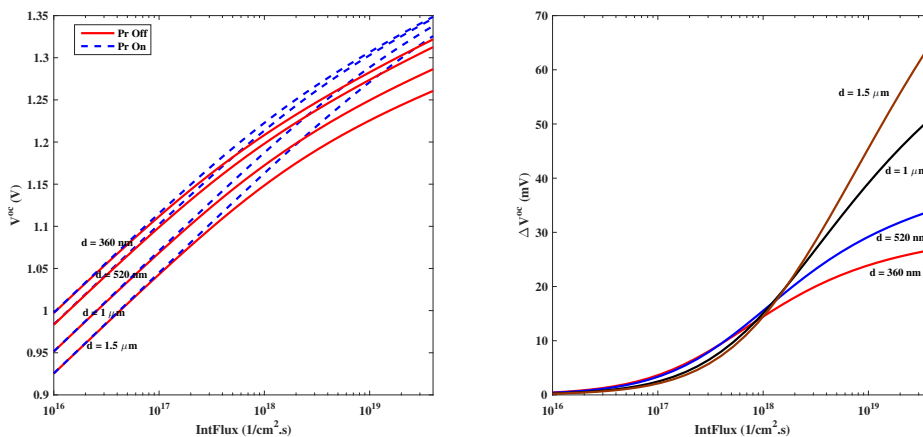
$$\propto kT \ln(I) + \varepsilon_g - kT \ln N_c N_v \quad (۱۵.۴)$$

در نتیجه شیب منحنی در تابش های بالا، به سمت  $kT$  پیش می رود.

همچنین ملاحظه می شود که بازیابی فوتون باعث تغییر در شیب منحنی نمی شود زیرا بازیابی فوتون درجه بازترکیب (یا رژیم بازترکیب) را تغییر نمی دهد بلکه نرخ ظاهری بازترکیب را افزایش داده که این باعث افزایش چند میلی ولتی ولتاژ مدار باز می شود. برای درک کامل روند تغییرات ولتاژ مدار باز تحت تابش های مختلف نتایج زیر ارائه شده است (شکل ۱۰.۴).



شکل ۹.۴: شیب منحنی نمودار ولتاژ مدار باز- شدت تابش. در تابش‌های کم‌تر از  $1\text{Sun}$  با توجه به رژیم بازترکیب خطی، مقدار شیب برابر  $2kT$  است. با افزایش شدت تابش، رژیم بازترکیب از خطی بودن خارج شده و به سوی رژیم بازترکیب تابشی پیش می‌رود که در این صورت مقدار شیب برابر  $kT$  خواهد شد.



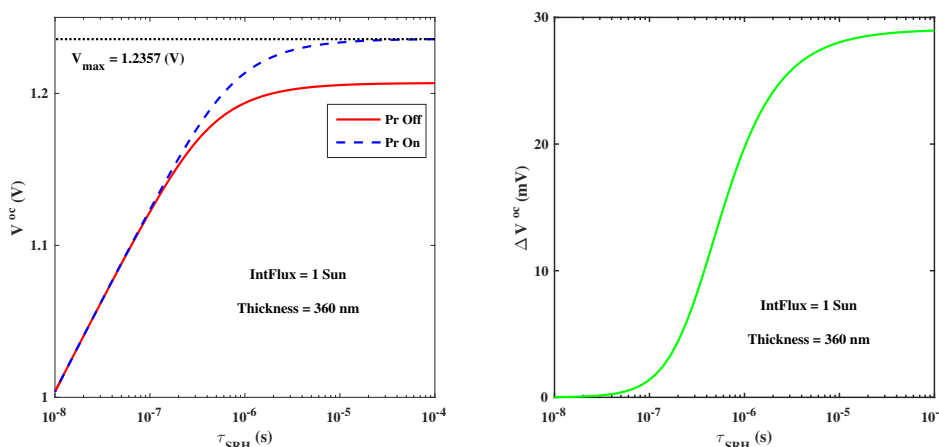
شکل ۱۰.۴: تغییرات ولتاژ مدار باز (ولت) نسبت به تغییرات شدت تابش فرودی (بر واحد ثانیه در سانتی‌متر مربع) در ضخامت‌های مختلف

همان‌طور که در منحنی سمت راست شکل (۱۰.۴) مشاهده می‌کنید اختلاف ولتاژ مدار باز در دو حالت بازیابی فوتون و بدون بازیابی فوتون با افزایش تابش افزایش می‌یابد. در تابش‌های بالا، چگالی حامل‌ها افزایش یافته و رژیم بازترکیب به سوی رژیم بازترکیب تابشی می‌رود. با

افزایش ضخامت احتمال بازجذب فوتون افزایش پیدا می کند یا به عبارتی در ضخامت های بیشتر می توان فوتون های درون لایه را دوباره جذب کرد. بنابراین در ضخامت های زیاد می توان از افزایش چگالی و بازترکیب تابشی استفاده کرد.

### ۳.۱.۴ محاسبه ولتاژ مدار باز بر اساس تغییرات نرخ بازترکیب شاکی-رید-هال

افزایش و یا کاهش نرخ بازترکیب غیر تابشی (شاکی-رید-هال) چه تاثیری در ولتاژ مدار باز دارد؟ منحنی سمت چپ شکل ۱۱.۴ تغییرات ولتاژ مدار باز بر اساس تغییرات ضریب شاکی-رید-هال ( $\tau_{SRH}$ ) نشان می دهد. در  $\tau_{SRH}$  پایین، طول عمر حامل های بار بسیار کم است و فرصتی برای انجام بازترکیب تابشی ندارند و در نتیجه رژیم بازترکیب، خطی است. با افزایش  $\tau_{SRH}$ ، طول عمر حامل های بار افزایش پیدا کرده و در نتیجه موجب کوچک شدن جمله بازترکیب غیر تابشی در معادلات (۱.۴) و (۲.۴) می شود. همان طور که در بخش (۱.۳) گفته شد، هنگامی که طول عمر حامل های بار افزایش می یابد رژیم بازترکیب به سمت رژیم بازترکیب تابشی پیش رفته و در نتیجه باعث افزایش چگالی حامل ها و هم چنین افزایش بازیابی فوتون خواهد شد.



شکل ۱۱.۴: نمودار سمت چپ تغییرات ولتاژ مدار باز سلول خورشیدی پروسکایتی (ولت) بر اساس نرخ بازترکیب شاکی-رید-هال متفاوت (ثانیه). منحنی خط چین، مربوط به حضور بازیابی فوتون و خط پر عدم حضور آن در معادلات پیوستگی است. نمودار سمت راست اختلاف ولتاژ مدار باز بر اساس تغییرات ضریب شاکی-رید-هال نشان می دهد.

در  $\tau_{SRH}$  پایین، دو منحنی ولتاژ مدار باز در حضور بازیابی فوتون (منحنی خطچین سمت چپ شکل ۱۱.۴) و عدم حضور آن (منحنی توپُر سمت چپ شکل ۱۱.۴) تفاوتی ندارند به این دلیل که احتمال بازجذب فوتون ( $p_r$ ) تقریباً صفر و  $Q_i^{lum}$  کم است (زیرا چگالی حامل‌ها پایین و بازترکیب غالب در لایه، بازترکیب غیر تابشی است).

مقدار ولتاژ مدار باز در حالت کلی (در حضور بازیابی فوتون و عدم حضور آن و هم‌چنین با در نظر گرفتن نرخ بازترکیب تابشی و غیر تابشی) از طریق رابطه (۱۶.۳) که در زیر آمده است:

$$qV^{oc} = qV^{oc,rad} + kT \ln \left( \frac{(1-p_r)Q_i^{lum}}{1-p_rQ_i^{lum}} \right) \quad (16.4)$$

محاسبه می‌شود. اگر احتمال بازیابی فوتون در لایه را صفر در نظر بگیریم؛  $p_r = 0$ ، برای ولتاژ مدار باز خواهیم داشت:

$$qV^{oc,PrOff} = qV^{oc,rad} + kT \ln Q_i^{lum} \quad (17.4)$$

که در آن  $qV^{oc,rad}$  ولتاژ مدار باز در محدوده تابشی و در عدم حضور بازیابی فوتون است. می‌توانیم رابطه (۱۶.۴) را در حضور بازیابی فوتون، بازنویسی کنیم که به صورت زیر است:

$$qV^{oc,On} = qV^{oc,rad} + kT \ln \left( \frac{(1-p_r)Q_i^{lum}}{1-p_rQ_i^{lum}} \right) \quad (18.4)$$

که در آن  $qV^{oc,rad}$  ولتاژ مدار باز در محدوده تابشی و در حضور بازیابی فوتون است. برای محاسبه اختلاف ولتاژ مدار باز برای دو حالت حضور بازیابی فوتون و عدم حضور آن کافی است رابطه (۱۸.۴) را از (۱۷.۴) کم کرد:

$$qV^{oc} = qV^{oc,rad} - qV^{oc,rad} + kT \ln \left( \frac{(1-p_r)}{1-p_rQ_i^{lum}} \right) \quad (19.4)$$

اگر رژیم بازترکیب به سمت بازترکیب تابشی پیش برود (یا به عبارتی  $\tau_{SRH}$  افزایش یابد) در این صورت  $Q_i^{lum}$  به مقدار یک میل می‌کند. با جایگزینی  $Q_i^{lum} = 1$  در رابطه (۱۶.۴) خواهیم داشت:

$$qV^{oc} = qV^{oc,rad} \quad (20.4)$$

که این رابطه نشان می‌دهد که ولتاژ مدار باز در  $\tau_{SRH}$  بالا حتی در حضور یا عدم حضور بازیابی فوتون اشباع می‌شود (رجوع کنید به منحنی سمت چپ شکل ۱۱.۴ در محدوده  $\tau_{SRH}$  بالا). منظور از اشباع، نزدیک شدن ولتاژ مدار باز به حد شاکلی کوپیزر، یعنی محدوده‌ای که بازده سلول خورشیدی با ضخامتی خاص تحت تابش  $1Sun$  بیشینه است. می‌توانیم با توجه به نتایج به دست آمده برای ولتاژ مدار باز سلول خورشیدی پروسکائیتی مد نظر خود در محدوده شاکلی کوپیزر، بهره‌ورری سلول را محاسبه کنیم.



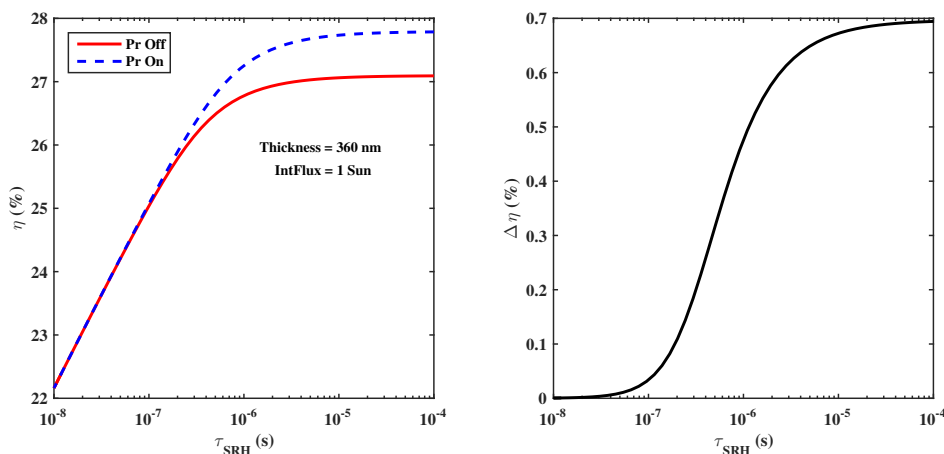
ضریب پُرشدهگی سلول را مطابق رابطه زیر به دست می آوریم [۴۶]:

$$FF \approx \frac{qV^{oc}/kT - \ln(\eta + qV^{oc}/kT)}{1 + qV^{oc}/kT} \quad (21.4)$$

با جایگزینی  $FF$  و  $I_{sc} = 25 \text{ mA/cm}^2$  (گزارش شده در [۳۳]) و تابش  $1 \text{ Sun}$  ( $100 \text{ mW/cm}^2$ ) در رابطه (۴.۱) که مطابق زیر است:

$$\eta = \frac{V^{oc} I_{sc}}{\varphi_{sun}} \quad (22.4)$$

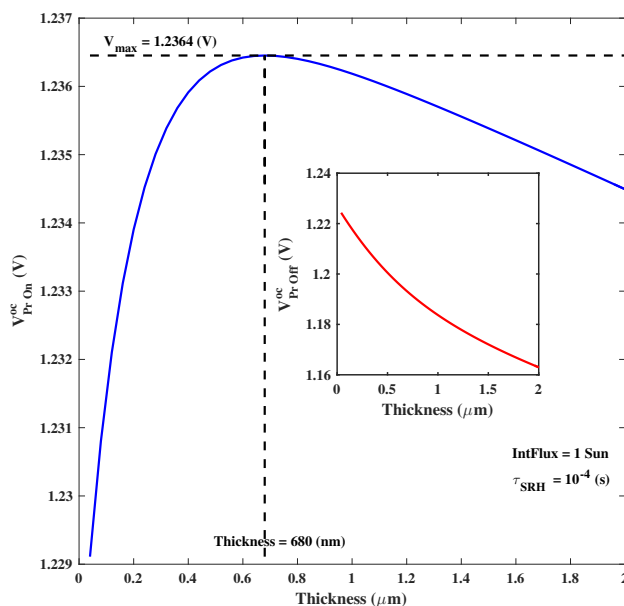
بازده سلول خورشیدی پروسکایتی برای دو حالت بازیابی فوتون (منحنی خطچین سمت چپ شکل ۱۲.۴) و عدم حضور آن (منحنی توپُر سمت چپ شکل ۱۲.۴) محاسبه شده است. همان طور که در منحنی سمت راست شکل ۱۲.۴ مشاهده می کنید سهم بازیابی فوتون در بازده سلول خورشیدی به ضخامت  $360 \text{ nm}$  نانومتر،  $7\%$  درصد است.



شکل ۱۲.۴: بازده سلول خورشیدی پروسکایتی

همان طور که ملاحظه شد، بازیابی فوتون تاثیر خودش را با افزایش چند ده میلی ولتی در ولتاژ مدار باز که خود منجر به افزایش  $7\%$  درصدی بازده سلول خورشیدی می شود، نشان داد. با در نظر گرفتن حالتی خاص می توانیم تاثیر بازیابی فوتون را در لایه جاذب ملاحظه کنیم (شکل ۱۳.۴).

تغییرات ولتاژ مدار باز را تحت تابش  $1 \text{ Sun}$  و  $\tau_{SRH} = 10^{-4} \text{ s}$  برای ضخامت های متفاوت در دو حالت حضور بازیابی فوتون و عدم حضور آن (منحنی کوچک داخل شکل) رسم کرده و از مقایسه این دو منحنی با یکدیگر دریافتیم که قله ی مشاهده شده در شکل ۱۳.۴ از بازیابی



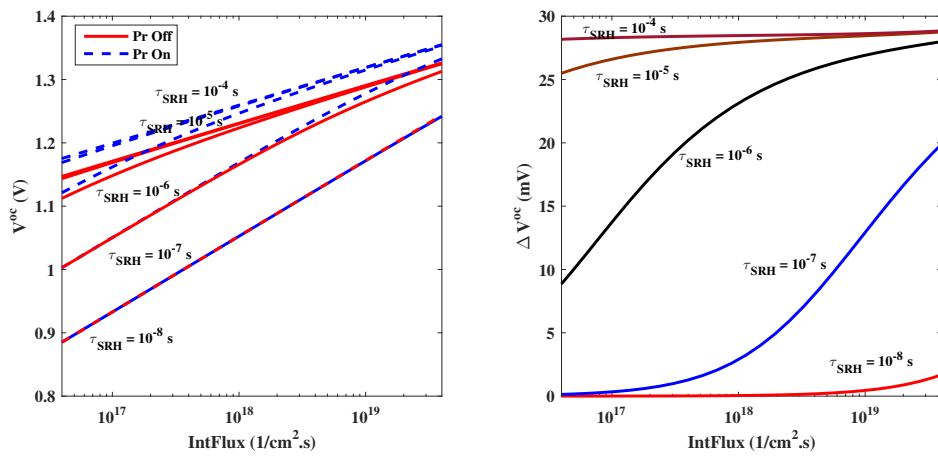
شکل ۱۳.۴: تغییرات ولتاژ مدار باز در ضریب شاکی-رید-هال  $10^{-4}$  s، برای ضخامت‌های مختلف. قله مشاهده شده در این نمودار از اثر بازیابی فوتون نشأت گرفته است.

فوتون نشأت می‌گیرد البته تغییرات ولتاژ مدار باز در حضور بازیابی فوتون بسیار ناچیز است (در حد ۵ میلی‌ولت). که برای درک روند تغییرات ولتاژ مدار باز در  $\tau_{SRH}$  مختلف نتایج زیر ارائه شده اند (شکل ۱۴.۴ و ۱۵.۴ و ۱۶.۴).

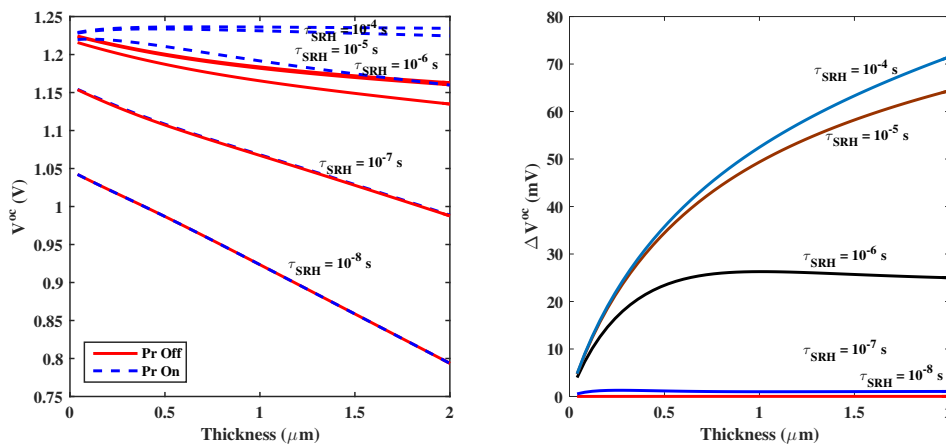
با توجه به منحنی سمت چپ شکل ۱۴.۴، در  $\tau_{SRH}$  پایین به دلیل این که رژیم بازترکیب، بازترکیب غیر تابشی است، اولاً تفاوتی بین ولتاژ مدار باز در حضور بازیابی فوتون و عدم حضور آن وجود ندارد و ثانیاً شیب منحنی ( $2kT$ ) با افزایش شدت تابش تغییر نمی‌کند. و همچنین در  $\tau_{SRH}$  خیلی زیاد رژیم بازترکیب تابشی است و شیب منحنی ( $kT$ ) با افزایش شدت تابش تغییری ندارد. منحنی سمت راست شکل ۱۴.۴ اختلاف ولتاژ مدار باز در حضور بازیابی فوتون و عدم حضور آن نشان می‌دهد. برای  $\tau_{SRH}$  خیلی زیاد، با افزایش شدت تابش این منحنی نرخ ثابتی دارد و به عبارتی در شدت تابش‌های خیلی زیاد ولتاژ مدار باز در دو حالت بازیابی فوتون و بدون بازیابی فوتون به مقدار اشباع خود رسیده‌اند و تفاضل آن‌ها عملاً مقدار ثابتی است زیرا رژیم بازترکیب تابشی است و  $Q_i^{lum} = 1$ . مقدار اختلاف ولتاژ مدار باز اشباع شده با جایگذاری  $Q_i^{lum} = 1$  در رابطه (۱۹.۴) مطابق زیر محاسبه می‌شود:

$$q\Delta V_{oc} = qV_{oc,rad} - qV_{oc,rad} \quad (23.4)$$

منحنی سمت چپ شکل ۱۴.۴ نشان می‌دهد که در  $\tau_{SRH}$  پایین رژیم بازترکیب غیر تابشی است در نتیجه تفاوتی بین ولتاژ در حضور بازیابی فوتون و بدون بازیابی فوتون نیست. در تابش‌های بالا رژیم بازترکیب به سوی بازترکیب تابشی پیش می‌رود ( $Q_i^{lum} = 1$ ). در نتیجه با



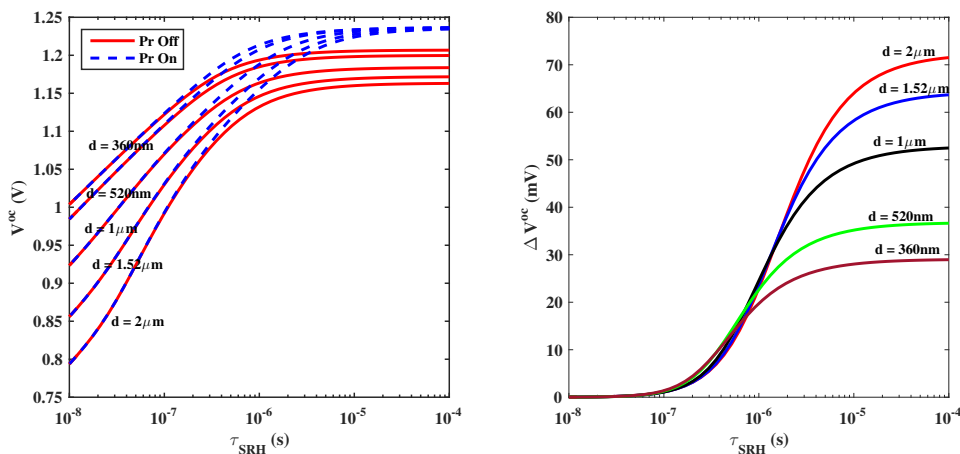
شکل ۱۴.۴: تغییرات ولتاژ مدار باز (ولت) نسبت به تغییرات شدت تابش فرودی (بر واحد ثانیه در سانتی متر مربع) در ضریب شاکلی-رید. حال های مختلف



شکل ۱۵.۴: تغییرات ولتاژ مدار باز (ولت) نسبت به تغییرات ضخامت (میکرومتر) در ضریب شاکلی-رید. حال های مختلف

توجه به آنچه که در گذشته گفته شد  $qV^{oc} = qV^{oc,rad}$ . این رابطه نشان می دهد که حتی با افت چگالی میانگین در رژیم باز ترکیب تابشی در ضخامت های مختلف تغییر چندانی در ولتاژ

مدار باز حاصل نمی‌شود.



شکل ۱۶.۴: تغییرات ولتاژ مدار باز (ولت) نسبت به تغییرات ضریب شکلی-رید-هال (ثانیه) در ضخامت‌های مختلف

منحنی سمت چپ شکل ۱۶.۴، ولتاژ مدار باز در دو حالت بازیابی فوتون (منحنی‌های خط‌چین) و بدون بازیابی فوتون (منحنی‌های توپر) بر اساس تغییرات  $\tau_{SRH}$  را در چند ضخامت مختلف نشان می‌دهد. مقادیر شکلی کوپیزر ولتاژ مدار باز در عدم حضور بازیابی فوتون در  $\tau_{SRH}$ ‌های مختلف برای چندین ضخامت، به یک مقدار خاص نمی‌رسند به این دلیل که با افزایش ضخامت چگالی میانگین کاهش یافته و در نتیجه ولتاژ مدار باز کاهش پیدا می‌کند در صورتی که در حضور بازیابی فوتون مقادیر شکلی کوپیزر به سمت یک نقطه حرکت می‌کنند زیرا جذب و بازجذب فوتون به یکدیگر مرتبطاند و از طرفی رژیم بازترکیب تابشی است به ازای هر افت تابش، در بازتابش توسط بازیابی فوتون جبران داریم.

## ۲.۴ معادلات پیوستگی در حضور بازیابی فوتون در شرایط گذرا

در بخش‌های قبل، سلول در حالت پایا مورد بررسی قرار گرفته شد و پاسخ‌هایی برای شبیه‌سازی معادلات مربوطه به دست آمد. در این بخش با مدل‌سازی معادلات پیوستگی در حالت گذرا به دنبال تاثیر بازیابی فوتون بر طیف امپدانس در شدت تابش‌های فرودی، بسامدهای زاویه‌ای

و ضخامت های متفاوت سلول هستیم. بدین منظور می توان از روش مشخصه یابی IMVS (که در بخش ۳.۱ به طور خلاصه تشریح شد) استفاده کرد.

## ۱.۲.۴ امپدانس الکتریکی

امپدانس الکتریکی، مفهوم کلی تر مقاومت الکتریکی، مقدار مقاومتی است که تحت اعمال یک اختلاف پتانسیل متناوب در برابر جریان الکتریکی متناوب ظاهر می شود. مقدار امپدانس، عددی حقیقی یا مختلط است که بنا بر قانون اهم از نسبت ولتاژ به جریان به دست می آید. فرض کنید در یک مدار الکتریکی، ولتاژ اعمالی برابر است با:

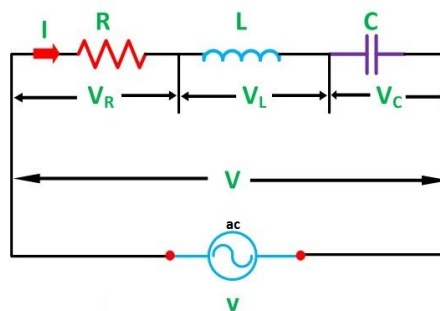
$$v(t) = v_0 \exp(i\omega t) \quad (24.4)$$

یا  $v(t) = v_1 + iv_2$ . بعد از گذشت مدت زمان به اندازه کافی، ملاحظه خواهد شد که جریان نیز نسبت به زمان تغییرات تناوبی دارد:

$$i \rightarrow I_0 \exp(i\omega t) \quad (25.4)$$

پس می توان نتیجه گرفت که پاسخ سیستم به منابع متناوب و متغییر با زمان، خود نیز متناوب می شود.

حال برای محاسبه امپدانس، مدار  $RLC$  (مداری که شامل یک مقاومت، یک خازن و یک سلف است) را در نظر گرفته و ولتاژ ورودی را به صورت تابعی متناوب و متغییر با زمان، معادله (۲۴.۴) به مدار اعمال می کنیم (توجه داشته باشید جریان نیز به صورت متناوب تغییر می کند)، ولتاژ کل از جمع ولتاژهای عبوری از هر قطعه الکترونیکی مدار ( $v(t) = v_R + v_L + v_C$ ) به صورت زیر محاسبه می شود:



شکل ۱۷.۴: مدار  $RLC$  که شامل مقاومت، خازن و سلف است [۴۷].

$$v(t) = Ri(t) + L \frac{di(t)}{dt} + \frac{1}{C} \int i(t) dt \quad (26.4)$$

با جایگزینی روابط (۲۴.۴) و (۲۵.۴) خواهیم داشت:

$$v_o \exp(i\omega t) = RI_o \exp(i\omega t) + L \frac{d}{dt}(I_o \exp(i\omega t)) + \frac{1}{C} \int I_o \exp(i\omega t) dt \quad (27.4)$$

با حل این معاله امپدانس مدار به صورت زیر به دست می آید:

$$v_o \exp(i\omega t) = RI_o \exp(i\omega t) + i\omega L \exp(i\omega t) + \frac{1}{i\omega C} \exp(i\omega t) \quad (28.4)$$

$$\frac{v_o}{I_o} = R + i(\omega L - \frac{1}{\omega C}) \quad (29.4)$$

$$= Z \quad (30.4)$$

که در این روابط  $R$  مقاومت،  $C$  ظرفیت خازن و  $L$  ضریب خودالقایی است [۴۸]. در حقیقت، رفتار الکتریکی قطعات نیمرسانای پیچیده (همانند سلول خورشیدی) با استفاده از مداری شامل قطعات الکتریکی ایده آل هم چون دیودها، منابع جریان-ولتاژ، خازن ها و مقاومت ها توصیف می شود. از این رو می توان برای سلول خورشیدی پیرو سکایت هم مداری معادل در نظر گرفت. بر فرض مثال قطعه مقاومت، نشان دهنده تحرک پذیری حامل های بار را در محیط های انتقال دهنده متناظرشان (الکترون در ماده نوع  $n$  و حفره در ماده نوع  $p$ ) است و می توان گفت که با افزایش ضخامت لایه انتقال دهنده مقاومت افزایش پیدا می کند [۴۹].

## ۲.۲.۴ اختلالات کوچک

هنگامی که شدت تابش فرودی به صورت تابعی متناوب و متغییر با زمان در نظر گرفته شود، انتظار می رود پاسخ سلول به این تابش، نیز به صورت تابعی از زمان باشد. در روش IMVS، تابش اختلالی کوچکی (به این دلیل کوچک که پاسخ سلول به یک اختلال، به شدت به وضعیت سلول در حالت پایای قبل از اختلال وابسته است، از این رو لازم است که اختلال تغییر چندانی در وضعیت سلول ایجاد نکند) به سلول وارد می شود و در نتیجه پاسخ سلول به این تابش مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

اگر اختلال کوچک وابسته به زمان را به صورت  $\delta I$  در نظر بگیریم که بر شدت پایای  $I$  اضافه می شود آن گاه پاسخ سلول به این اختلال کوچک این چنین است:

$$n \rightarrow n + \delta n \quad (31.4)$$

$$p \rightarrow p + \delta p \quad (32.4)$$

$$\Gamma \rightarrow \Gamma + \delta \Gamma \quad (33.4)$$

که  $\delta n$  چگالی الکترون‌ها،  $\delta p$  چگالی حفره‌ها و  $\delta\Gamma$  در حالت اختلالی است. برای سادگی فرض می‌کنیم  $\delta n = \hat{n}$  و  $\delta p = \hat{p}$  و  $\delta\Gamma = \hat{\Gamma}$  و  $\delta I = I_s$  باشد. در این صورت معادلات پیوستگی (۱.۴) و (۲.۴) و (۳.۴) در حضور اختلال برابر است با:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(n + \hat{n})}{\partial t} = & D_n \frac{\partial^2(n + \hat{n})}{\partial x^2} + P_r \beta (\Gamma + \hat{\Gamma}) + (I + \delta I) \alpha \exp(-\alpha x) \\ & - B_{SRH}(n + \hat{n}) - B_R(n + \hat{n})(p + \hat{p}) - B_{Aug}(n + \hat{n})^2(p + \hat{p}) \end{aligned} \quad (۳۴.۴)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(p + \hat{p})}{\partial t} = & D_p \frac{\partial^2(p + \hat{p})}{\partial x^2} + P_r \beta (\Gamma + \hat{\Gamma}) + (I + \delta I) \alpha \exp(-\alpha x) \\ & - B_{SRH}(p + \hat{p}) - B_R(n + \hat{n})(p + \hat{p}) - B_{Aug}(p + \hat{p})^2(n + \hat{n}) \end{aligned} \quad (۳۵.۴)$$

$$\frac{\partial(\Gamma + \hat{\Gamma})}{\partial t} = D_\Gamma \frac{\partial^2(\Gamma + \hat{\Gamma})}{\partial x^2} - P_r \beta (\Gamma + \hat{\Gamma}) + B_R(n + \hat{n})(p + \hat{p}) \quad (۳۶.۴)$$

با تفریق روابط بالا از معادلات پیوستگی (۱.۴) و (۲.۴) و (۳.۴) و با صرف نظر کردن از جملات مرتبه دوم و بالاتر اختلال (به علت کوچک بودن) خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{n}}{\partial t} = & D_n \frac{\partial^2 \hat{n}}{\partial x^2} + P_r \beta \hat{\Gamma} + I_s \alpha \exp(-\alpha x) \\ & - \hat{n}(B_{SRH} + B_{Rp} + 2B_{Aug}np) - \hat{p}(B_R n + B_{Aug}n^2) \end{aligned} \quad (۳۷.۴)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{p}}{\partial t} = & D_p \frac{\partial^2 \hat{p}}{\partial x^2} + P_r \beta \hat{\Gamma} + I_s \alpha \exp(-\alpha x) \\ & - \hat{p}(B_{SRH} + B_R n + 2B_{Aug}np) - \hat{n}(B_{Rp} + B_{Aug}p^2) \end{aligned} \quad (۳۸.۴)$$

$$\frac{\partial \hat{\Gamma}}{\partial t} = D_\Gamma \frac{\partial^2 \hat{\Gamma}}{\partial x^2} - P_r \beta \hat{\Gamma} + B_R(n\hat{p} + p\hat{n}) \quad (۳۹.۴)$$

در حالت اختلالی برای حاصل ضرب چگالی الکترون‌ها در حفره‌ها می‌توان از معادله (۳۸.۲) که در زیر آمده است:

$$np = N_c N_v \exp\left(\frac{qV - E_g}{kT}\right) \quad (۴۰.۴)$$

دیفرانسیل کامل گرفت، در نتیجه خواهیم داشت:

$$\delta n p + n \delta p = N_c N_v \exp\left(\frac{qV - E_g}{kT}\right) \frac{dV}{dT} \quad (۴۱.۴)$$

و از آن جا که  $np = N_c N_v \exp\left(\frac{qV - E_g}{kT}\right)$  و لنتاژ در حالت اختلالی برابر است با:

$$qV = kT \left( \frac{\delta n p + n \delta p}{np} \right) \quad (۴۲.۴)$$

### ۳.۲.۴ تبدیل لاپلاس

گاهی اوقات حل مسایل در حوزه زمان دشوار و پیچیده است اما همین مسایل می‌توانند در حوزه دیگری همانند فرکانس بسیار ساده حل و بررسی شوند (و بالعکس). تبدیل لاپلاس<sup>۲</sup> ( $\mathcal{L}$ ) در ریاضیات یک تبدیل انتگرالی است که دو حوزه زمان و فرکانس را به هم مرتبط می‌کند. هر تابع در حوزه زمان  $f(t)$  با آرگومان حقیقی  $t$  (زمان)، با یک تابع در حوزه فرکانس  $F(s)$  با آرگومان مختلط  $s$  (فرکانس) متناظر می‌شود. این تبدیل به صورت زیر است:

$$\mathcal{L}\{f(t)\} = F(s) = \int_0^{\infty} f(t) \exp(-st) dt \quad (۴۳.۴)$$

روش تبدیل لاپلاس، در حقیقت روش عملیاتی است که می‌تواند در حل معادلات دیفرانسیل خطی سودمند باشد. به کمک تبدیل‌های لاپلاس می‌توان بسیاری از توابع متداول نظیر توابع سینوسی و توابع نمایی را به توابع جبری با یک متغیر مختلط تبدیل کرد [۵۰]. چون در این پخش معادلات پیوستگی حامل‌های بار و فوتون‌ها را در حالت گذرا (وابسته به زمان) بررسی می‌کنیم و از طرفی علاقه‌مندیم خطی بودن این معادلات حفظ شود از تبدیل لاپلاس استفاده خواهیم کرد. برای اعمال تبدیل لاپلاس به معادلات پیوستگی در حالت اختلالی کافی است که تبدیلات زیر صورت گیرد:

$$\hat{n} \rightarrow \hat{n}_r + i\hat{n}_i \quad (۴۴.۴)$$

$$\hat{p} \rightarrow \hat{p}_r + i\hat{p}_i \quad (۴۵.۴)$$

$$\hat{\Gamma} \rightarrow \hat{\Gamma}_r + i\hat{\Gamma}_i \quad (۴۶.۴)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -i\omega \quad (۴۷.۴)$$

که اندیس‌های  $r$  و  $i$  به ترتیب نشان‌دهنده بخش حقیقی و موهومی است. بعد از انجام تبدیل لاپلاس در معادلات پیوستگی اختلالی مربوط به الکترون‌ها، حفره‌ها و فوتون‌ها و هم‌چنین جداسازی جملات موهومی از حقیقی به روابط زیر دست می‌یابیم:

$$D_n \frac{\partial^2 \hat{n}_r}{\partial x^2} + P_r \beta \hat{\Gamma}_r - \hat{n}_r (B_{SRH} + B_{RP} + \mathcal{V} B_{Augnp}) - \hat{p}_r (B_{RN} + B_{Augn}^{\mathcal{V}}) + I_s \alpha \exp(-\alpha x) + \omega n_i = 0 \quad (۴۸.۴)$$

$$D_n \frac{\partial^2 \hat{n}_i}{\partial x^2} + P_r \beta \hat{\Gamma}_i - \hat{n}_i (B_{SRH} + B_{RP} + \mathcal{V} B_{Augnp}) - \hat{p}_i (B_{RN} + B_{Augn}^{\mathcal{V}}) - \omega n_r = 0 \quad (۴۹.۴)$$

<sup>۲</sup>Laplace Transform



$$D_p \frac{\partial^2 \hat{p}_r}{\partial x^2} + P_r \beta \hat{\Gamma}_r - \hat{p}_r (B_{SRH} + B_{RN} + \gamma B_{Aug} n p) - \hat{n}_r (B_{RP} + B_{Aug} p^2) + I_s \alpha \exp(-\alpha x) + \omega p_i = 0 \quad (50.4)$$

$$D_p \frac{\partial^2 \hat{p}_i}{\partial x^2} + P_r \beta \hat{\Gamma}_i - \hat{p}_i (B_{SRH} + B_{RN} + \gamma B_{Aug} n p) - \hat{n}_i (B_{RP} + B_{Aug} p^2) - \omega p_r = 0 \quad (51.4)$$

$$D_\Gamma \frac{\partial^2 \hat{\Gamma}_r}{\partial x^2} - P_r \beta \hat{\Gamma}_r + B_R (n \hat{p}_r + p \hat{n}_r) + \omega \hat{\Gamma}_i = 0 \quad (52.4)$$

$$D_\Gamma \frac{\partial^2 \hat{\Gamma}_i}{\partial x^2} - P_r \beta \hat{\Gamma}_i + B_R (n \hat{p}_i + p \hat{n}_i) - \omega \hat{\Gamma}_r = 0 \quad (53.4)$$

$n$  و  $p$  و  $\Gamma$  به ترتیب چگالی الکترون‌ها، حفره‌ها و فوتون‌ها در حالت پایا است (که در پخش قبلی از حل معادلات پیوستگی در حالت پایا به دست آمد). این سه معادله جفت شده خطی در حالت گذرا و تابش اختلالی  $I_s$  را تحت شرایط مرزی بازتاب (۴.۴) و (۶.۴) و (۵.۴) و (۷.۴) (توجه داشته باشید در این جا برای عناصر حقیقی و موهومی به صورت مشابه شرط مرزی وجود دارد، یعنی شش شرط مرزی برای حالت حقیقی و شش شرط مرزی برای حالت موهومی) حل کرده و چگالی الکترون‌ها، حفره‌ها و فوتون‌ها به دست آمده است (شکل ۱۸.۴). همان طور که مشاهده می کنید پاسخ سلول به این اختلال به صورت متناوب تغییر می کند. با توجه به تبدیل لاپلاس صورت گرفته در روابط (۴۴.۴) و (۴۵.۴) و (۴۶.۴)، ولتاژ مدار باز سلول از رابطه زیر به دست می آید:

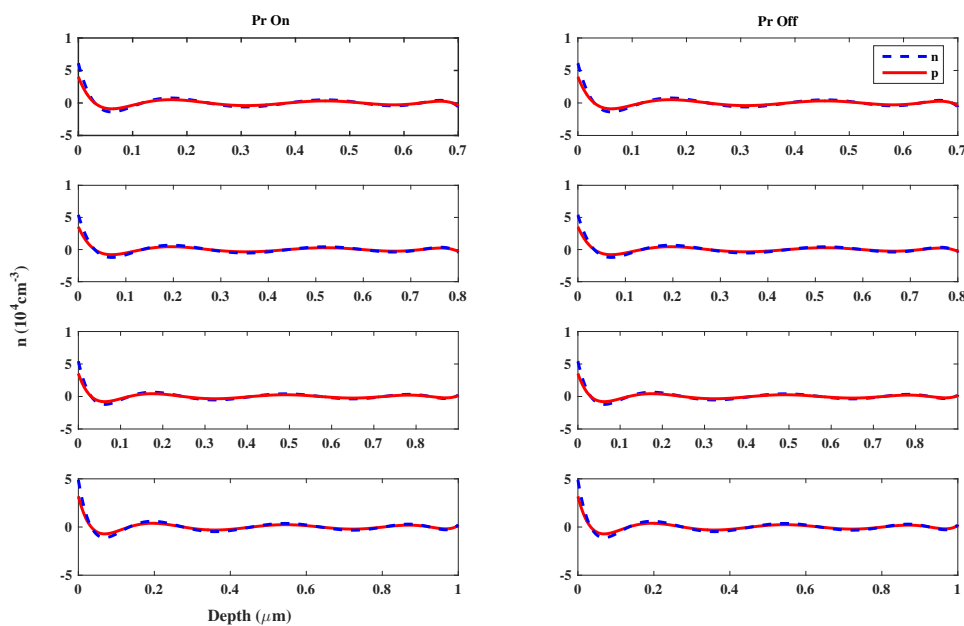
$$qV = kT \left( \frac{p(\hat{n}_r + i\hat{n}_i) + n(\hat{p}_r + i\hat{p}_i)}{np} \right) \quad (54.4)$$

با توجه به جواب‌های به دست آمده برای چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها در  $x = 0$  و  $x = d$  طیف IMVS سلول در شدت تابش‌های متفاوت و بسامدهای زاویه‌ای مختلف و ضریب پخش‌های متفاوت حفره محاسبه شده است که در بخش‌های بعدی به بررسی آن می پردازیم.

#### ۴.۲.۴ تحلیل طیف IMVS در تابش‌های اختلالی متفاوت

همان طور که گفته شد طیف IMVS یا طیف امیدانس، زمان مشخصه‌های سیستم (در این جا سلول خورشیدی پروسکایتی) را مشخص می کند. طبق مدل سازی صورت گرفته تنها زمان مشخصه سلول، زمان مشخصه مربوط به جمله باز ترکیب ( $\omega_R$ ) که به صورت زیر محاسبه می شود:

$$\omega_R = \frac{1}{\tau_{SRH}} + B_{RN} + \gamma B_{Aug} n p \quad (55.4)$$



شکل ۱۸.۴: چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها به‌دست آمده از شبیه‌سازی در حضور بازیابی فوتون و عدم حضور آن.

است. لذا انتظار داریم در طیف IMVS فقط یک قله وجود داشته باشد. در این‌جا با توجه به تغییرات شدت تابش به‌دنبال ظاهر شدن شانه‌ای در طیف IMVS برای تشخیص بازیابی فوتون هستیم.

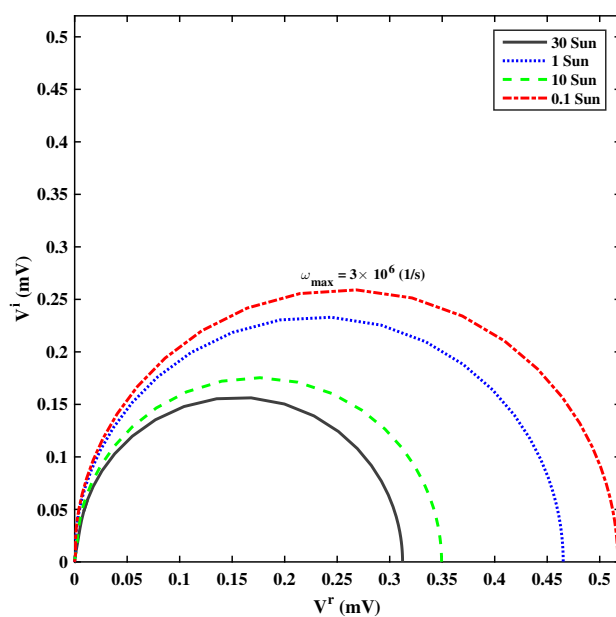
شکل ۱۹.۴ طیف IMVS را برای شدت تابش‌های مختلف نشان می‌دهد. در تابش‌های پایین (تابش‌های پایین‌تر از  $1\text{Sun}$ ) رژیم بازترکیب غیر تابشی است لذا از جمله بازترکیب تابشی و اوزه در رابطه (۵۵.۴) صرف نظر کرده و در نتیجه  $\omega_R = 1/\tau_{SRH}$  خواهد شد. یعنی به‌عبارتی قله نشان داده شده در طیف IMVS برای تابش‌های پایین بیانگر  $\tau_{SRH}$  است (شکل ۱۹.۴). هم‌چنین در تابش‌های پایین، اختلاف  $\omega_R$  در حضور بازیابی فوتون (منحنی خط‌چین شکل ۲۰.۴) و عدم حضور آن (منحنی توپُر شکل ۲۰.۴) بسیار ناچیز است.

با افزایش شدت تابش رژیم بازترکیب به سوی بازترکیب تابشی پیش می‌رود و باعث افزایش چگالی در نتیجه افزایش  $\omega_R$  می‌شود. از طرفی در تابش‌های بالا احتمال بازیابی فوتون بیشتر شده و باعث افزایش چگالی حامل‌ها می‌شود که این منجر به افزایش  $\omega_R$  خواهد شد. همان‌طور که در گذشته بررسی شد در رژیم بازترکیب تابشی  $I \propto np$  (یا  $n \propto \sqrt{I}$ )، در این صورت با جایگزینی در رابطه (۵۵.۴) و با صرف نظر کردن از جمله مربوط به بازترکیب اوزه خواهیم داشت:

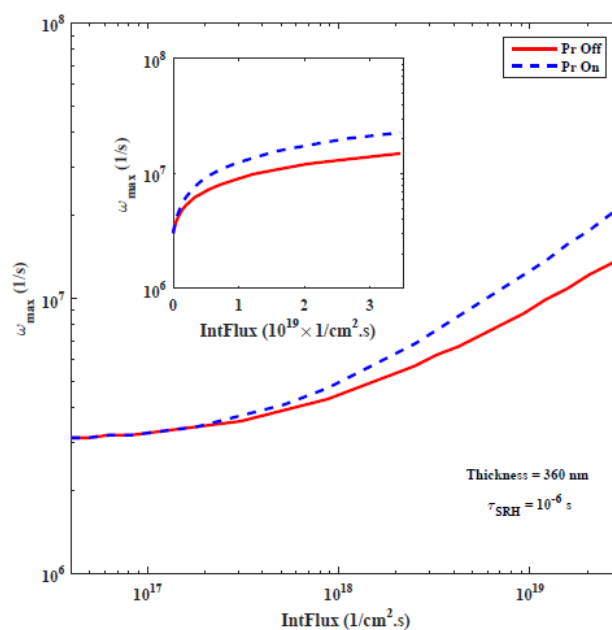
$$\omega_R = 1/\tau_{SRH} + C\sqrt{I} \quad (۵۶.۴)$$

که در آن  $C$  ثابت تناسب است. این رابطه بیان می‌کند تغییرات  $\omega_R \propto \sqrt{I}$  است (منحنی داخل

شکل ۲۰.۴).



شکل ۱۹.۴: طیف IMVS ولتاژ مدار باز سلول خورشیدی پروسکایت در تابش‌های مختلفی را نشان می‌دهد.

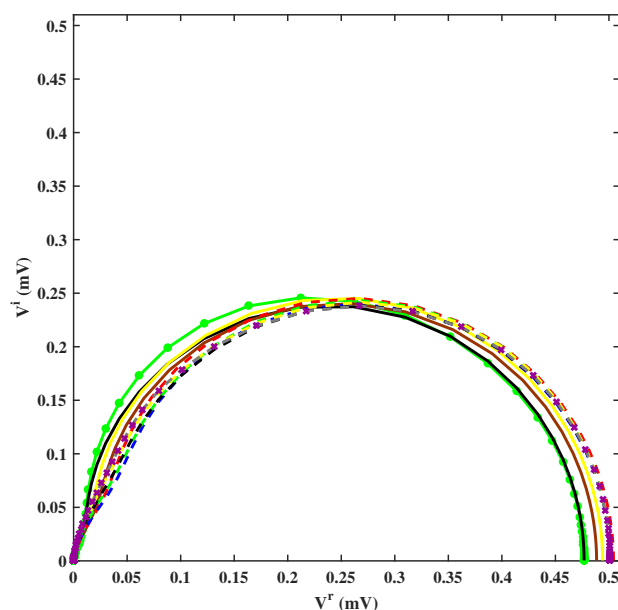


شکل ۲۰.۴: بیشینه بسامد زاویه‌ای در تابش‌های متفاوت را نشان می‌دهد.

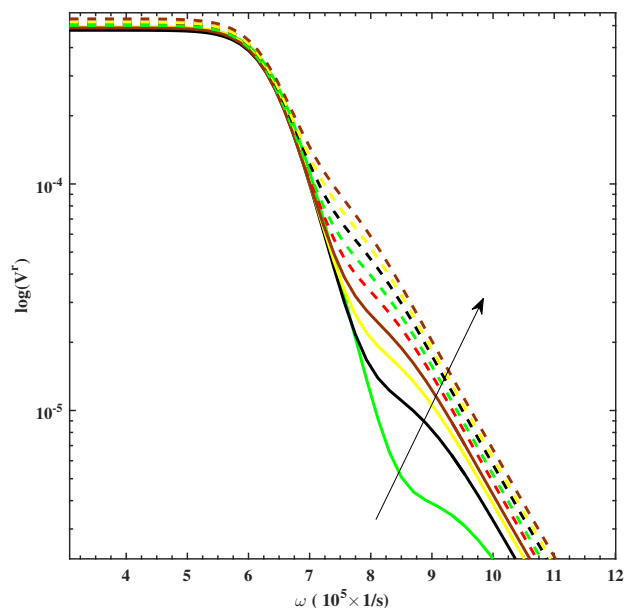
## ۵.۲.۴ تحلیل طیف IMVS در ضخامت‌های متفاوت

همان‌طور که می‌دانیم در ضخامت‌های بالا احتمال بازیابی فوتون افزایش می‌یابد. در این‌جا بر اساس تغییرات ضخامت سیستم به دنبال مشاهده شانه‌ای برای اثر بازیابی فوتون در طیف IMVS هستیم. شکل ۲۱.۴ طیف IMVS در ضخامت‌های مختلف را نشان می‌دهد. در ضخامت‌های پایین، طیف IMVS علاوه بر قله اصلی نیز دارای شانه‌ای است که این شانه با افزایش ضخامت ناپدید می‌شود (شکل ۲۲.۴) و توجیه این رفتار به‌صورت مسئله‌ای باز مطرح است.

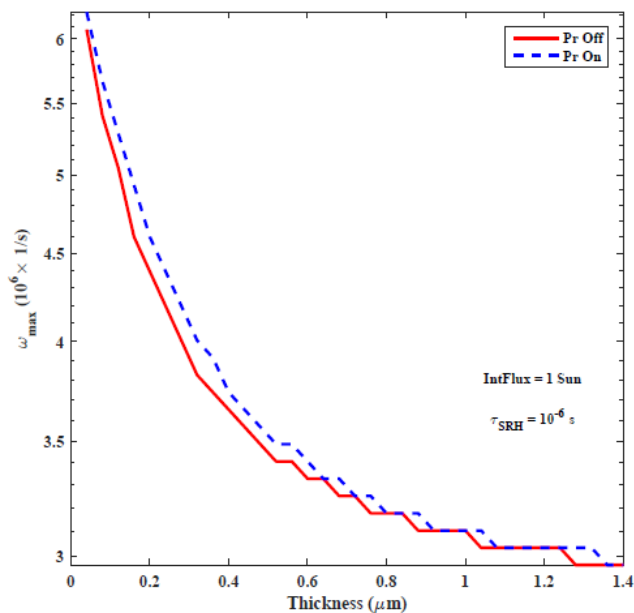
همان‌طور که در شکل ۲۳.۴ مشاهده می‌کنید با افزایش ضخامت رژیم بازترکیب در لایه جاذب از رژیم بازترکیب تابشی به سوی رژیم بازترکیب غیر تابشی پیش می‌رود در نتیجه با کاهش چگالی در اثر افزایش ضخامت،  $\omega_R$  برای هر دو حالت بازیابی فوتون و بدون بازیابی فوتون کاهش پیدا می‌کند. از طرفی تغییر چندانی در  $\omega_R$  برای بازیابی فوتون و بدون آن وجود ندارد زیرا احتمال بازیابی فوتون در تابش  $1Sun$  ناچیز است. لذا شانه‌ای مبنی بر تایید اثر حضور بازیابی فوتون در طیف IMVS وجود ندارد.



شکل ۲۱.۴: طیف IMVS ولتاژ مدار باز سلول خورشیدی پروسکایت در ضخامت‌های مختلف را نشان می‌دهد. ضخامت در گام‌های ۱/۵ بین ۵۰ نانومتر (O-) تا ۱/۵ میکرومتر (x-) تغییر می‌کنند.



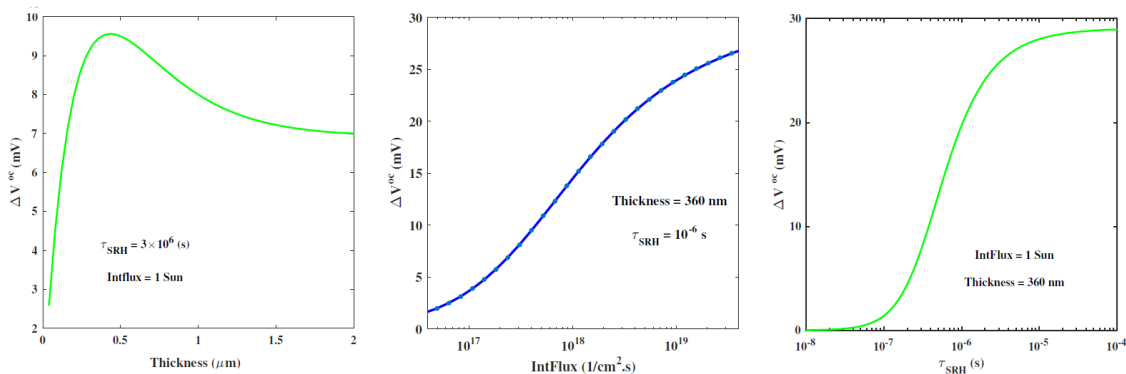
شکل ۲۲.۴: قسمت حقیقی اختلال ولتاژ بر اساس تغییرات ضخامت را نشان می دهد. پیکان مشخص شده در نمودار روند افزایش ضخامت را نشان می دهد.



شکل ۲۳.۴: بیشینه بسامد زاویه ای در ضخامت های مختلف را نشان می دهد.

## ۳.۴ نتیجه‌گیری

در این پژوهش ما با مدل‌سازی پدیده بازبایی فوتون (حل سه معادله پیوستگی جفت شده غیرخطی) چگالی حامل‌های بار (الکترون و حفره) را بدست آوردیم و سپس اثر بازبایی فوتون بر روی ولتاژ مدار باز در پارامترهای مختلف سلول همانند ضخامت جاذب، شدت تابش و طول عمر غیرتابشی بررسی کردیم. با توجه به تغییر پارامترهای مربوطه، اثر بازبایی فوتون منجر به افزایش حامل‌های بار و در نتیجه افزایش چند ده میلی ولتی ولتاژ مدار باز شد ۲۴.۴.



شکل ۲۴.۴: اختلاف ولتاژ مدار باز (در حضور بازبایی فوتون و عدم حضور آن) نسبت به تغییرات ضخامت (تصویر سمت چپ)، تغییرات شدت تابش (تصویر وسط) و تغییرات ضریب شکلی-رید-هال (تصویر سمت راست) را نشان می‌دهد.

این افزایش چند ده میلی ولتاژ مدار باز منجر به افزایش راندمان سلول خورشیدی پروسکایتی تا ۱ درصد شد ۱۲.۴.

همچنین با محاسبه طیف‌سنجی IMVS دریافتیم، از آن جا که بازبایی فوتون چگالی حامل‌های بار را افزایش داده، منجر به افزایش تنها زمان مشخصه سیستم، زمان مشخصه بازترکیب ( $\omega_R$ ) شد. ولی در طیف IMVS شانه‌ای (همانند شانه‌ای که برای  $\omega_R$  وجود دارد) مبنی بر حضور بازبایی فوتون حتی در بهترین شرایط پیدا نشد.



# پیوست آ

## مدل سازی معادلات پیوستگی الکترون ها، حفره ها و فوتون ها در حالت پایا و گذرا

کدنویسی معادلات پیوستگی برای الکترون ها و حفره ها و فوتون ها در حالت پایا و گذرا تحت شرایط مرزی بازتاب و نیمه بازتاب در نرم افزار متلب توسط بسته چبفان به ترتیب مشاهده می کنید.



```

%% Variables
PR = 0; % photon recycling
kT = 0.026; % eV
%% %
alpp = 5.0; % 1/micrometer (0.01 == 10^4 1/m)
alp = 5.0; % (1.0 == 10^6 1/m)
nr = 2.5; % refractive index
c = 3*1.0e14/nr; % micrometer/s
bta = c*alpp;
%% %
Dg = c/alp;
De = 1.7*(1.0e6); % micrometer^2/s
Dp = 1.1*(1.0e6);
%% %
Nc = 1e7; % 1/micrometer^3
Nv = 1e7;
%
Br = alpp*1e2; % micrometer^3/s (alpp*1e2) (100 == 10^4-10 cm^3/s)
Bnr = 3e6; % 1/s (3e6)
BAgr = 1e-5; % micrometer^6/s
%% %
Eg = 1.61; % eV
ni = Nc*exp(-Eg/(2*kT));
%% %
oc = 1;
%% %
speedF = c/2;
speedR = c/2;
%% %
VltgSlungp = zeros(50,50);
nSlu = zeros(50,50);
pSlu = zeros(50,50);
PLoutF = zeros(50,50);
PLoutR = zeros(50,50);
%% % % %
for ii = 1:50
    d = (1/25.0)*ii; % (1.0 micrometer)
    dom = [0 d];

    g0 = 1e-3;
    n0 = 1e2;
    p0 = 1e2;

    for jj = 1:50
        intFlx = (1.3^(jj-18))*(4e9); % 1/s 1/micrometer^2 (1 sun == 4.0*1e9)

% Assign the differential equation to a chebop on that domain.
N = chebop(@(x,u,v,w) [
    Dg.*diff(u,2) -PR.* bta.*u + Br.*(v.*w - ni*ni)
    De.*diff(v,2) +PR.* bta.*u
    - Br.*(v.*w - ni*ni) - Bnr.*(v-ni) - BAgr.*(v.*v.*w - ni*ni*ni)
    + intFlx*alpp.*exp(-alpp.*x)
    Dp.*diff(w,2)+PR.* bta.*u - Br.*(v.*w - ni*ni)
    - Bnr.*(w-ni) - BAgr.*(v.*w.*w - ni*ni*ni)
    + intFlx*alpp.*exp(-alpp.*x)
    ], dom);

% Set up the rhs of the differential equation so that N(u, v) = rhs.
rhs = [0;0;0];

% Assign boundary conditions to the chebop.
if oc
    N.bc = @(x,u,v,w) [Dg.*feval(diff(u),0) - speedF.*u(0)
        feval(diff(v),0)
        feval(diff(w),0)
        Dg.*feval(diff(u),d) + speedR.*u(d)
        feval(diff(v),d)
        feval(diff(w),d)];
end

% Construct a linear chebfun on the domain,
x = chebfun(@(x) x, dom);
% and assign an initial guess to the chebop.
u_init = g0;
v_init = n0;
w_init = p0;
N.init = [u_init; v_init; w_init];

%% Setup preferences for solving the problem.
options = cheboppref();
% Print information to the command window while solving:
options.display = 'iter';
% Option for tolerance.
options.bvpTol = 5e-13;
% Option for damping.
options.damping = false;
% Specify the discretization to use. Possible options are:
options.discretization = 'values';
% Option for determining how long each Newton step is shown.
% options.plotting = 0.4;

%% Solve!
% Call solvebvp to solve the problem.
[u, v, w] = solvebvp(N, rhs, options);
g0 = u;
n0 = v;
p0 = w;
%% Plot the solution.
g = u * (1e12); % photon density cm^-3
n = v * (1e12); % electron density
p = w * (1e12); % hole density
%% %
VltgSlungp(ii,jj) = Eg + kT*log(v(0)*w(d)/(Nc*Nv));
nSlu(ii,jj) = sum(n) / d;
pSlu(ii,jj) = sum(p) / d;
end
end

```

```

%% Variables
PR = 1; % photon recycling (Pr = 0 or 1)

kT = 0.026; % eV
Eg = 1.61; % eV
%% % % %
alpp = 5.0; % 1/micrometer (0.01 == 10^4 1/m)
alp = 5.0; % (1.0 == 10^6 1/m)
Nr = 2.5;
c = 3*1.0e14/Nr; % micrometer/s
bta = c*alpp;
%% % % %
Dg = c/alp;
Dn = 1.7*(1.0e6); % micrometer^2/s [3.0*(1.0e7) ==
3.0*(1.0e-1) cm^2/s]
Dp = 1.1*(1.0e6);
%% % % %
Br = alpp*1e2; % micrometer^3/s (alpp*1e2) (100 == 10^
10 cm^3/s)
Bsrh = 3e6; % 1/s (3e6)
BAgr = 1e-5; % micrometer^6/s (1e-5 == 10^-29 cm^6/s)
%% % % %
oc = 1;
%% % % %
speedF = c/2;
speedR = c/2;
%% % % %
vomgnp = 100;
Voltage = zeros(45,vomgnp);
omg = Bsrh.*logspace(-3,6,vomgnp);
omgMAX = zeros(1,vomgnp);
%% % % %

d = 0.35;
dom = [0 d];

for ii = 1:45
intFlx = (1.3^(ii-18))*(4e9);
Is = intFlx/100;
ii
nSS = nslu(ii);
pSS = pslu(ii);

for jj = 1:vomgnp

omega = omg(jj)

% Assign the differential equation to a chebop on that domain.
N = chebop(@(x,gr,gi,nr,ni,pr,pi) [

Dg*diff(gr,2)-bta*gr+Br*(nSS*pr+pSS*nr)+omega*gi

Dg*diff(gi,2)-bta*gi+Br*(nSS*pi+pSS*ni)-omega*gr

Dn*diff(nr,2)+bta*gr-(Bsrh+Br*pSS+2*BAgr*nSS*pSS)*nr
-(Br*nSS+BAgr*nSS^2)*pr+Is*alp*exp(-alp*x)+omega*ni

Dn*diff(ni,2)+bta*gi-(Bsrh+Br*pSS+2*BAgr*nSS*pSS)*ni
-(Br*nSS+BAgr*nSS^2)*pi-omega*nr

Dp*diff(pr,2)+bta*gr-(Bsrh+Br*nSS+2*BAgr*nSS*pSS)*pr
-(Br*pSS+BAgr*pSS^2)*nr+Is*alp*exp(-alp*x)+omega*pi

Dp*diff(pi,2)+bta*gi-(Bsrh+Br*nSS+2*BAgr*nSS*pSS)*pi
-(Br*pSS+BAgr*pSS^2)*ni-omega*pr

],dom);
rhs = [0;0;0;0;0;0];
% Assign boundary conditions to the chebop.
if oc
N.bc = @(x,gr,gi,nr,ni,pr,pi)[
Dg.*feval(diff(gr),0) - speedF.*gr(0)
Dg.*feval(diff(gi),0) - speedF.*gi(0)
feval(diff(nr),0)
feval(diff(ni),0)
feval(diff(pr),0)
feval(diff(pi),0)
Dg.*feval(diff(gr),d) + speedR.*gr(d)
Dg.*feval(diff(gi),d) + speedR.*gi(d)
feval(diff(nr),d)
feval(diff(ni),d)
feval(diff(pr),d)
feval(diff(pi),d)];
end
% Construct a linear chebfun on the domain,
x = chebfun(@(x) x, dom);
% and assign an initial guess to the chebop.
gr0 = 0.01;
gi0 = 0.01;
nr0 = 10;
ni0 = 10;
pr0 = 10;
pi0 = 10;
%% Options
options = chebopref();
options.display = 'iter';
options.bvpTol = 5e-13;
options.damping = false;
options.discretization = 'values';

%% Solve!
% Call solvebvp to solve the problem.
N.init = [gr0; gi0; nr0; ni0; pr0; pi0];
[gr,gi,nr,ni,pr,pi] = solvebvp(N, rhs, options);

Voltage(ii,jj) =
(kT/(nSS.*pSS)).*(pSS.*(nr(0)+ ni(0)*1i) + (pr(d) + pi(d)*1i).*nSS));

```



# مراجع

- [1] Randall, T., (2015), "Fossil fuels just lost the race against renewables" **Bloomberg Business**.
- [2] Van Hal, P.A. (2003), "Photophysics of molecules and materials for polymer solar cells", Technische Universiteit Eindhoven.
- [3] Lewis, N.S. and Crabtree, G., (2005), " Basic research needs for solar energy utilization: the basic energy sciences workshop on solar energy utilization" **US Department of Energy, Office of Basic Energy Science , Washington, DC**, April 18-21.
- [4] <https://www.pveducation.org>
- [5] Sabetghadam, M., (2006), " Energy and sustainable development in Iran" **Sustainable Energy Watch .**
- [6] <https://globalsolaratlas.info>
- [7] Wurfel P. (2005), "Physics Solar Cell", Vol. 1, University Press, UK. 1, pp. 273.
- [8] <http://www.greenrhinoenergy.com/solar/radiation/geometry.php>
- [9] Becquerel, M.E., (1839), " Mémoire sur les effets électriques produits sous l'influence des rayons solaires. Comptes rendus hebdomadaires des séances de l' **Académie des sciences**, 9, pp.561-567.
- [10] Fritts, C.E., (1883), "ART. LII.–On a New Form of Selenium Cell, and some Electrical Discoveries made by its use" **American Journal of Science** (1880-1910), 26(156), p.465.
- [11] Smits, F.M., (1976), "History of silicon solar cells" **IEEE Transactions on Electron Devices**, 23(7), pp.640-643.

- 
- [12] Shirota, Y., Kakuta, T., Kanega, H. and Mikawa, H., (1985), "Rectification and photovoltaic properties of a Schottky barrier cell using electrochemically-doped poly (N-vinylcarbazole)" **Journal of the Chemical Society, Chemical Communications**, (17), pp.1201-1202.
- [13] Li, P., Wu, J., Lin, J., Huang, M., Huang, Y. and Li, Q., (2009), "High-performance and low platinum loading Pt/Carbon black counter electrode for dye-sensitized solar cells" **Solar Energy**, 83(6), pp.845-849.
- [14] Nilsing, M., (2007), PhD thesis, " Computational Investigation of Dye-Sensitized Solar Cells",Quantum Chemistry. Universitatis Upsaliensis.
- [15] Chang, H., Chen, T.L., Huang, K.D., Chien, S.H. and Hung, K.C., (2010), "Fabrication of highly efficient flexible dye-sensitized solar cells" **Journal of Alloys and Compounds**, 504, pp.S435-S438.
- [16] Kojima, A., Teshima, K., Shirai, Y. and Miyasaka, T., (2009), "Organometal halide perovskites as visible-light sensitizers for photovoltaic cells" **Journal of the American Chemical Society**, 131(17), pp.6050-6051.
- [17] Gong, J., Liang, J. and Sumathy, K., (2012), "Review on dye-sensitized solar cells (DSSCs): fundamental concepts and novel materials" **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, 16(8), pp.5848-5860.
- [18] Perlin, J., (2004), "Silicon solar cell turns 50 (No. NREL/BR-520-33947)" **National Renewable Energy Lab**, Golden, CO.(US).
- [19] Keis, K., Magnusson, E., Lindström, H., Lindquist, S.E. and Hagfeldt, A., (2002), "A 5 efficient photoelectrochemical solar cell based on nanostructured ZnO electrodes" **Solar energy materials and solar cells**, 73(1), pp.51-58.
- [20] Im, J.H., Lee, C.R., Lee, J.W., Park, S.W. and Park, N.G., (2011), "6.5 efficient perovskite quantum-dot-sensitized solar cell" **Nanoscale**, 3(10), pp.4088-4093.
- [21] Herz, L.M., (2016), "Charge-carrier dynamics in organic-inorganic metal halide perovskites" **Annual review of physical chemistry**, 67, pp.65-89.
- [22] Dong, H.P., Li, Y., Wang, S.F., Li, W.Z., Li, N., Guo, X.D. and Wang, L.D., (2015), "Interface engineering of perovskite solar cells with PEO for improved performance" **Journal of Materials Chemistry A**, 3(18), pp.9999-10004.

[23] Bae, D., Palmstrom, A., Roelofs, K., Mei, B., Chorkendorff, I., Bent, S.F. and Vesborg, P.C., (2016), "Tailoring mixed-halide, wide-gap perovskites via multistep conversion process" **ACS applied materials, interfaces**, 8(23), pp.14301-14306.

[۲۴] انصاری‌راد م، (۱۳۹۲)، پایان‌نامه دکتری: "بررسی ترابرد و بازترکیب الکترونی در نانو ساختارهای نیم‌رسانا جهت استفاده در سلول‌های خورشیدی رنگدانه‌ای" دانشکده فیزیک، دانشگاه تهران.

[25] Terao, Y., Sasabe, H. and Adachi, C., (2007), "Correlation of hole mobility, exciton diffusion length, and solar cell characteristics in phthalocyanine/fullerene organic solar cells" **Applied Physics Letters**, 90(10), p.103515.

[26] Kietzke, T., (2007), "Recent advances in organic solar cells" **Advances in Opto-Electronics**.

[27] Yamanari, T., Taima, T., Sakai, J. and Saito, K., (2009), "Origin of the open-circuit voltage of organic thin-film solar cells based on conjugated polymers" **Solar Energy Materials and Solar Cells**, 93(6-7), pp.759-761.

[28] Peter, L., (2016), "Studying Solar Cells with the ModuLab XM PhotoEchem Optical and Electrical Measurement System"

[29] Contreras-Bernal, L., Ramos-Terrón, S., Riquelme, A., Boix, P.P., Idígoras, J., Mora-Seró, I. and Anta, J.A., (2019), "Impedance analysis of perovskite solar cells: a case study" **Journal of Materials Chemistry A**, 7(19), pp.12191-12200.

[30] Bisquert, J., (2002), "Theory of the impedance of electron diffusion and recombination in a thin layer" **The Journal of Physical Chemistry B**, 106(2), pp.325-333.

[31] Pockett, A., Eperon, G.E., Peltola, T., Snaith, H.J., Walker, A., Peter, L.M. and Cameron, P.J., (2015), "Characterization of planar lead halide perovskite solar cells by impedance spectroscopy, open-circuit photovoltage decay, and intensity-modulated photovoltage/photocurrent spectroscopy" **The Journal of Physical Chemistry C**, 119(7), pp.3456-3465.

[32] Kittel, C., McEuen, P. and McEuen, P., (1976), "Introduction to solid state physics Wiley, New York. Vol. 8, pp. 323-324.

[33] Bisquert, J., (2017), "The physics of solar cells: perovskites, organics, and photovoltaic fundamentals, CRC Press.

- 
- [34] Fox, M., (2002), "Optical properties of solids" Oxford University Press.
- [۳۵] بهلکه م، (۱۳۶۷)، "مبانی فیزیک نیمرسانا" این کتاب ترجمه جزوه شماره ۱۵ از سری سی آر آی آئی CREI است، انتشارات مرکز نشر دانشگاهی.
- [36] Donald A.. Neamen, (1992) "Semiconductor Physics and Devices: Basic Principles ", Irwin.
- [37] Fonash, S. (2012). **Solar cell device physics**, Elsevier.
- [38] Nelson, J., (2003), "The physics of solar cells World Scientific Publishing Company.
- [39] Maynard, B., Long, Q., Schiff, E.A., Yang, M., Zhu, K., Kottokkaran, R., Abbas, H. and Dalal, V.L., (2016), "Electron and hole drift mobility measurements on methylammonium lead iodide perovskite solar cells", **Applied Physics Letters**, 108(17), p.173505.
- [40] Kirchartz, T., Staub, F. and Rau, U., (2016), "Impact of photon recycling on the open-circuit voltage of metal halide perovskite solar cells" **ACS Energy Letters**, 1(4), pp.731-739.
- [41] Luis M. Pazos-Outón, T. Patrick Xiao and Eli Yablonovitch, (2018), "Fundamental efficiency limit of lead iodide perovskite solar cells" **The Journal of Physical Chemistry Letters**
- [42] Ansari-Rad, M. and Bisquert, J., (2018), " Insight into Photon Recycling in Perovskite Semiconductors from the Concept of Photon Diffusion" **Physical Review Applied**, 10(3), p.034062.
- [43] Fang, Y., Wei, H., Dong, Q. and Huang, J., (2017), "Quantification of re-absorption and re-emission processes to determine photon recycling efficiency in perovskite single crystals" **Nature communications**, 8, p.14417.
- [44] Pitarch-Tena, D., Ngo, T.T., Vallés-Pelarda, M., Pauporté, T. and Mora-Seró, I., (2018), "Impedance Spectroscopy Measurements in Perovskite Solar Cells: Device Stability and Noise Reduction" **ACS Energy Letters**, 3(4), pp.1044-1048.
- [45] Driscoll, T.A., Hale, N. and Trefethen, L.N., (2014), **Chebfun guide**, Chebfun.org

[46] Kirchartz, T. (2019), "High Open-Circuit Voltages in Lead-Halide Perovskite Solar Cells-Experiment, Theory and Open Questions", **arXiv preprint**, arXiv:1904.08752.

[47] <https://circuitglobe.com/what-is-rlc-series-circuit.html>

[۴۸] میر عشقی ع، (۱۳۷۸)، "مبانی الکترونیک" جلد اول و دوم، چاپ اول، انتشارات شیخ

[49] Yang, E.S. and Yang, E.S., (1978), "**Fundamentals of semiconductor devices**" (pp. 241-243). New York: McGraw-Hill.

[50] Korn, G.A. and Korn, T.M., (2000), "**Mathematical handbook for scientists and engineers: definitions, theorems, and formulas for reference and review**, Courier Corporation.







## **Aabstract**

Owing to global warming problems, renewable energy resources such as hydropower, geothermal, and solar energy have attracted considerable attention in recent decades. Regarding exploiting solar energy, one of the most promising ways is to use the solar cell technology that can convert the photon energy of the sun directly into electrical power. Among the emerging solar cells, Perovskite solar cells have received many attentions in recent years both in science and technology. Different physical processes, including photon absorption, charge transport and charge recombination (nonradiative, radiative, and Auger) occur in working conditions of a solar cell. One of the processes recently studied by researchers in the field is the phenomenon of photon recycling, which is the process of reabsorption of the photon resulted from the radiative recombination of electron-hole, in the Perovskite absorbers. In the present dissertation, we have investigated the effect of photon recycling on the open-circuit voltage ( $V_{oc}$ ) of the Perovskite solar cells. To this end, first, by solving a set of three coupled nonlinear continuity equations for electrons, holes, and photons, we obtained the charge carriers density (electrons and holes) in an absorber layer. The densities were used to calculate the  $V_{oc}$  of the cell. We then examined the dependence of the voltage to the various parameters of the cell as the absorber thickness, the illumination influx intensity, and the nonradiative lifetime. To assess the photon recycling effect, the results were also compared with the corresponding cell without the photon recycling feature. According to our results, as the thickness increases, due to the competition between the recombination loss and the photon recycling gain, there is a maximum in the dependency of the voltage on the thickness. It was also found that the photon recycling has its most impact on the voltage at illumination fluxes higher than 1Sun where the radiative recombination loss becomes the dominant loss pathway in the absorber layer. Furthermore, since for the large nonradiative lifetime, the recombination regime is radiative, the photon recycling influence increases, leading to a saturated value for the open-circuit voltage of the cell which is known as the Shockley-Queisser limit. By examining the interplay between the various effects, it was finally concluded that the photon recycling can increase the open-circuit voltage several tens of mV, which in turn enhances the efficiency of the Perovskite solar cells by about 1 .

Keywords: Perovskite Solar Cells, Photon Absorption, Charge transport, Charge Recombination, Photon Recycling, Continuity Equations, Open-Circuit Voltage, Shockley-Queisser limit, IMVS Spectroscopy.





Faculty Of Physics

MSc Thesis in Solid State Physics

# **Investigation and Modeling of Photon Recycling Effect in Semiconductor Layers for Application in Perovskite Solar Cells**

By: Ali Gholampour

Supervisor:

**Mahdi Ansari Rad**

Advisor:

**Saeid Hessami Pilehrood**

April 2019