

حاشا  
الرحمن الرحيم



دانشکده مهندسی برق و رباتیک

رشته مهندسی برق، گرایش مدار و افزاره‌های میکرو و  
نانوالکترونیک

پایان نامه کارشناسی ارشد

شبیه‌سازی و بهبود عملکرد سلول خورشیدی  
به کمک اتصال گرافن/گالیم آرسناید

نگارنده: فرزانه شاه‌نوشی

استاد راهنما

دکتر علی فتاح

تیر ۱۳۹۷



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 خانم / آقای فرزانه شاه نوشی با شماره

دانشجویی ۹۴۱۰۰۵۴ رشته مهندسی برق- الکترونیک گرایش افزاره تحت عنوان: شبه سازی و بهبود

عملکردسلول خورشیدی به کمک اتصال گرافن/گالیم آرسناید که در تاریخ ۱۳۹۷/۰۴/۲۷ 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	علی قانع	استادیار	
۲- استاد راهنمای دوم	-	-	-
۳- استاد مشاور	-	-	-
۴- نماینده تحصیلات تکمیلی	محمد رضا ارت	استادیار	
۵- استاد ممتحن اول	عمار ابراهیمی	استادیار	
۶- استاد ممتحن دوم	احسان صبی	استادیار	

نام و نام خانوادگی رئیس دانشکده: محمد رضا ارت  
تاریخ و امضاء و مهر دانشکده: ۱۳۹۷/۰۴/۲۷

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 مهربان فرشتگانم  
آنان که مهر آسمانی‌شان آرام‌بخش آلام زمینی‌ام است...  
آنان که ناتوان شدند تا به توانایی برسند...  
موهایشان سپید شد تا روسفید شوم...  
و عاشقانه سوختند تا گرمابخش وجودم و روشن‌گر راهم باشند...  
به استوارترین تکیه‌گاهم، دستان پر مهر پدرم  
به سبزترین نگاه زندگی‌ام، چشمان سبز مادرم  
به دلیل بودنم، همسر مهربانم که نشان لطف الهی در زندگی من  
است...

در این راه خود را مدیون اساتید بزرگواری می‌دانم که علم و اخلاق را به من آموختند. بر خود لازم می‌دانم از استاد با کمالات و شایسته، جناب آقای دکتر علی فتاح که در کمال سعه صدر، با حسن خلق و فروتنی، از هیچ‌گونه کمک علمی در این عرصه بر من دریغ ننمودند و زحمت راهنمایی این رساله را بر عهده گرفتند.

فرزانه شاه‌نوشی

تیر ۱۳۹۷

## تعهد نامه

اینجانب فرزانه شاه‌نوشی دانشجوی کارشناسی ارشد رشته مهندسی برق مهندسی برق و رباتیک دانشگاه شاهرود، نویسنده پایان‌نامه با عنوان شبیه‌سازی و بهبود عملکرد سلول خورشیدی به کمک اتصال گرافن/گالیم‌آرسناید، تحت راهنمایی دکتر علی فتاح 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.

فرزانه شاه‌نوشی

تیر ۱۳۹۷

### 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

رشد مصرف جهانی انرژی و همراه با آن افزایش انتشار گازهای گلخانه‌ای، با آلودگی بیش از پیش محیط زیست و خسارات جبران ناپذیر برای منابع حیاتی همراه بوده است. به منظور کاهش اتکای جهانی به منابع طبیعی پایان‌پذیر و سوخت‌های مخرب محیط زیست، تلاش‌های علمی فراوانی برای کاهش هزینه‌های تولید انرژی از منابع تجدیدپذیر صورت گرفته است. از جمله، تلاش برای تولید انرژی الکتریکی با استفاده از نور خورشید که توسط نیمه‌هادی‌ها انجام شده است.

در این پژوهش به بررسی و بهبود عملکرد سلول خورشیدی اتصال شاتکی مبتنی بر گرافن/گالیم‌آرسناید پرداخته شده است. این سلول خورشیدی به ترتیب متشکل از سه لایه، بستر گالیم‌آرسناید، اکسید سیلیکون و گرافن می‌باشد. سلول خورشیدی با استفاده از نرم‌افزار Silvaco شبیه‌سازی شده و پارامترهای عملکردی سلول محاسبه شده‌اند. پارامترهای مهم سلول خورشیدی مورد بحث شامل ولتاژ مدار باز ( $V_{oc}$ )، جریان اتصال کوتاه ( $I_{sc}$ )، فاکتور پرکنندگی (FF) و بازده تبدیل توان (PCE) می‌باشند.

نتایج شبیه‌سازی با بررسی اثرهای ضخامت بستر، شفافیت و تعداد لایه‌های گرافن نشان می‌دهد، بهترین بازده تبدیل توان برای سلول خورشیدی با گرافن ۳ لایه و بستر گالیم‌آرسناید با ضخامت ۴ میکرومتر حدود ۱/۱۹۶٪ حاصل می‌شود.

به منظور بهبود بازده سلول خورشیدی نانوگرایتینگ‌های مستطیلی و دوزنقه‌ای را روی سلول شبیه‌سازی کردیم و توانستیم بازده سلول را تا حدود ۲/۰۵٪ افزایش دهیم. سپس ارتفاع گرایتینگ را کاهش دادیم تا گرافن و گالیم‌آرسناید کاملاً بر هم منطبق شوند و گرایتینگ مستطیلی و دوزنقه‌ای را اعمال کردیم. در این حالت بازده در نانوگرایتینگ مستطیلی حدود ۱/۸٪ و در دوزنقه‌ای حدود ۱/۹٪ حاصل شد.

کلمات کلیدی: سلول خورشیدی، اتصال شاتکی، گالیم‌آرسناید، گرافن، بازده

# فهرست مطالب

س	فهرست تصاویر
ق	فهرست جداول
۱	۱ مقدمه
۱	۱.۱ مقدمه
۲	۲.۱ ضرورت انجام تحقیق
۳	۳.۱ وضعیت فعلی سلول‌های خورشیدی
۴	۱.۳.۱ سلول‌های خورشیدی مبتنی بر سیلیکون بلورین
۴	۲.۳.۱ سلول‌های خورشیدی لایه نازک
۵	۳.۳.۱ سلول‌های خورشیدی نقطه کوانتومی
۵	۴.۳.۱ سلول‌های خورشیدی مبتنی بر پلیمر آلی
۶	۴.۱ سلول‌های خورشیدی اتصال شاتکی
۷	۵.۱ روش تحقیق
۹	۲ مروری بر اتصال شاتکی و سلول‌های خورشیدی گرافن/گالیم‌آرسناید
۹	۱.۲ مقدمه
۱۰	۲.۲ گرافن
۱۱	۱.۲.۲ خواص الکترونیکی و انتقالی
۱۲	۲.۲.۲ خواص نوری
۱۳	۳.۲.۲ خواص فتوالکتروشیمیایی و فرآیندهای مواد مبتنی بر گرافن
۱۴	۴.۲.۲ کاربرد فتوالکتروشیمیایی گرافن در سلول‌های خورشیدی آلی
۱۶	۵.۲.۲ روش‌های تولید
۱۶	۳.۲ خواص اساسی نیم‌رساناها
۱۶	۱.۳.۲ ساختار نوارهای انرژی
۱۷	۲.۳.۲ شکاف باند انرژی مستقیم و غیرمستقیم در نیم‌رساناها



۱۸	.....	گالیم آرسناید	۳.۳.۲
۱۸	.....	اتصال شاتکی	۴.۲
۱۹	.....	سد شاتکی	۱.۴.۲
۲۳	.....	انتشار گرمایونی و ویژگی I-V	۲.۴.۲
۲۷	.....	کاربردی های دیوده های شاتکی	۵.۲
۲۷	.....	آشکارسازهای نوری	۱.۵.۲
۲۷	.....	سلول های خورشیدی	۲.۵.۲
۳۰	.....	سلول های خورشیدی گرافن / گالیم آرسناید	۶.۲
<b>۳۳</b>		<b>مروری بر منابع و روش تحقیق</b>	<b>۳</b>
۳۳	.....	مقدمه	۱.۳
۳۴	.....	سابقه موضوع	۲.۳
۴۴	.....	پوشش ضد بازتاب و ساختارهای نانوگریتینگ	۳.۳
۴۴	.....	پوشش ضد بازتاب	۱.۳.۳
۴۵	.....	قاعده کلی چشم حشرات	۲.۳.۳
۴۶	.....	ساختارهای نانوگریتینگ	۳.۳.۳
<b>۵۱</b>		<b>نتیجه های شبیه سازی و تحلیل ها</b>	<b>۴</b>
۵۱	.....	مقدمه	۱.۴
۵۲	.....	شبیه سازی سلول خورشیدی گرافن / گالیم آرسناید	۲.۴
۵۴	.....	بررسی اثرات ضخامت بستر گالیم آرسناید، شفافیت و تعداد لایه های گرافن	۳.۴
۵۴	.....	اثر ضخامت بستر گالیم آرسناید	۱.۳.۴
۵۸	.....	اثر شفافیت و تابع کار گرافن	۲.۳.۴
۶۱	.....	اعمال ساختارهای نانوگریتینگ بر سلول خورشیدی گرافن / گالیم آرسناید	۴.۴
۶۲	.....	نانوگریتینگ مستطیلی	۱.۴.۴
۶۴	.....	نانوگریتینگ دوزنقه ای	۲.۴.۴
<b>۶۷</b>		<b>جمع بندی و پیشنهادها</b>	<b>۵</b>
۶۷	.....	جمع بندی	۱.۵
۶۸	.....	پیشنهادها	۲.۵
۶۹		مراجع	

# فهرست تصاویر

- ۱.۲ (الف) شبکه لانه زنبوری شش ضلعی گرافن. دایره های آبی و قرمز نشان دهنده اتم های متعلق به زیر شبکه های A و B هستند؛ خطوط بین حلقه ها نشان دهنده پیوند شیمیایی است. (ب) ساختار باند گرافن نشان دهنده شکاف انرژی صفر در نقاط دیراک  $K$  و  $K'$  است. (ج) سطوح فرمی بالاتر (زیر)  $E_D$  به گرافن نوع  $n$  ( $p$ ) مربوط می شود. [۲۱]. . . . . ۱۲
- ۲.۲ باندهای انرژی در نیمرساناهای (الف) غیرمستقیم و (ب) مستقیم [۴۲]. . . . . ۱۷
- ۳.۲ سد شاتکی که توسط یک فلز با تابع کار زیاد با یک نیمرسانا نوع  $n$  شکل گرفته است. (الف) تابع کار فلز  $\Phi_M$  و انرژی فرمی  $E_{FM}$ . (ب) تابع کار نیمرسانا  $\Phi_S$ ، وابستگی الکترون  $\chi$ . (ج) بار در محل اتصال فلز/نیمرسانا ( $M/S$ ). (د) نمودار باند در حالت تعادل برای اتصال  $M/S$ .  $\Phi_i$  سد پتانسیلی است که مانع جریان الکترون ها (نقاط سیاه) از نیمرسانا به فلز می باشد، در حالی که  $\Phi_B$  ارتفاع سد شاتکی SBH برای جریان الکتریکی در جهت مخالف است.  $w$  عرض ناحیه تخلیه و مربوط به بخش خم شده از باندهای انرژی است. (ه) نمودار باند در حالت تعادل از یک فلز با یک نیمرسانا نوع  $p$  با شرط  $\Phi_M < \Phi_S$  (حلقه های خالی نشان دهنده حفره ها) است [۱۸]. . . . . ۲۰
- ۴.۲ (الف) فرآیندهای اصلی انتقال در یک اتصال شاتکی  $M/S$ : TE، TFE، FE. (ب) نحوه اعمال ولتاژ به MSJ. (ج) مشخصه نمودار I-V ایده آل یک اتصال شاتکی یکسوکننده. (د) نمودارهای باند انرژی در اتصال شاتکی ایده آل فلز/نیمرسانا نوع  $n$  در بایاس مستقیم ( $V > 0$ ). (ه) نمودارهای باند در بایاس معکوس ( $V < 0$ ). فلش های مرتبط با جریان در (د) و (ه) جهت جریان الکتریکی را نشان می دهد [۱۸]. ۲۵

۵.۲	بررسی حالات دیود نوری سد شاتکی (فلز/ نیمه هادی). (الف) وقتی $\Phi_B \leq h\nu$ و $E_g$ و $ V  \ll  V_B $ ، الکترون‌ها بر روی SB برانگیخته می‌شوند. (ب) هنگامی که $h\nu > E_g$ و $ V  \ll  V_B $ ، جفت الکترون-حفره‌ها در ناحیه تخلیه نیم‌رسانا ایجاد می‌شوند. (ج) در $h\nu > E_g$ و $ V  \approx  V_B $ جفت الکترون-حفره‌های تولید شده، انرژی کافی برای تولید شکست بهمنی را دریافت می‌کنند. (د) مشخصه I-V یک دیود شاتکی بدون تابش و تحت تابش نور است. (ه) مدار معادل یک سلول خورشیدی دیود شاتکی [۱۸]. . . . .	۲۸
۶.۲	مدلی از یک سلول خورشیدی اتصال شاتکی گرافن/ گالیوم‌آرسناید [۵۶]. . . . .	۳۰
۱.۳	ساختار سلول خورشیدی و جهت حرکت الکترون‌ها و حفره‌ها [۶۹]. . . . .	۳۴
۲.۳	تصویر سلول خورشیدی اتصال شاتکی CdS NW با یک الکتروود ترکیبی [۹]. . . . .	۳۶
۳.۳	تصویر سلول خورشیدی اتصال شاتکی CdSe NB [۹]. . . . .	۳۷
۴.۳	تصویر پیکربندی افزاره [۷۷]. . . . .	۳۸
۵.۳	تغییرات مشخصه‌های عملکردی سلول خورشیدی به ازای تغییر تعداد لایه‌های گرافن. (الف) بازده تبدیل توان، (ب) ولتاژ مدار باز، (ج) جریان اتصال کوتاه، (د) فاکتور پرکنندگی [۵۶]. . . . .	۴۲
۶.۳	ساختار سلول خورشیدی GaAs-Gr-P3HT پس از اعمال ناخالصی و لایه ضدبازتاب [۸]. . . . .	۴۳
۷.۳	بازتاب نور از یک بستر شیشه‌ای (قسمت بالا) و از یک پوشش لایه نازک بر روی بستر شیشه‌ای (قسمت پایین) [۳]. . . . .	۴۴
۸.۳	چشم حشرات که توسط لایه‌ی نانو ساختار پوشیده شده است [۳]. . . . .	۴۵
۹.۳	الگوی هندسی از ساختارهای مختلف نانوگرتینگ. (الف) مثلثی شکل، (ب) دوزنقه‌ای شکل با نسبت سطوح مختلف، (ج) مستطیلی شکل [۳]. . . . .	۴۶
۱۰.۳	شکل سلول خورشیدی گرافن/ SPA [۹]. . . . .	۴۷
۱۱.۳	بازتاب نور در شکل‌های مختلف نانوگرتینگ مانند: (الف) مستطیل شکل (بالا)، (ب) دوزنقه ای (وسط) و (ج) ساختار مثلثی شکل (پایین) [۳]. . . . .	۴۸
۱۲.۳	درصد بهبود جذب نور برحسب دوره تناوب‌های متفاوت نانوگرتینگ [۶۸]. . . . .	۴۹
۱۳.۳	(الف) طیف جذب نور برای ساختار نانوگرتینگ مثلثی با تناوب ۸۳۰ نانومتر. (ب) طیف بازتاب نور برای ساختار نانوگرتینگ مثلثی با تناوب ۸۳۰ نانومتر [۹۸]. . . . .	۴۹
۱.۴	(الف) برش عرضی سلول خورشیدی اتصال شاتکی گرافن/ گالیوم‌آرسناید. (ب) مدل مش بندی طراحی شده برای ساختار. . . . .	۵۲
۲.۴	نمودارهای جریان-ولتاژ سلول خورشیدی گرافن/ گالیوم‌آرسناید برای ضخامت‌های مختلف گالیوم‌آرسناید. . . . .	۵۴

۳.۴	نرخ تولید حامل در سلول خورشیدی گرافن / گالیم آرسناید تحت تابش توده هوای ۱/۵ برای ضخامت بستر. (الف) ۱ میکرومتر، (ب) ۲ میکرومتر، (ج) ۴ میکرومتر، (د) ۱۰ میکرومتر. . . . .
۵۵	
۴.۴	منحنی تغییرات جریان اتصال کوتاه برحسب تغییرات ضخامت بستر گالیم آرسناید. . . . .
۵۶	
۵.۴	منحنی تغییرات ولتاژ مدار باز برحسب تغییرات ضخامت بستر گالیم آرسناید. . . . .
۵۶	
۶.۴	منحنی تغییرات فاکتور پرکنندگی برحسب تغییرات ضخامت بستر گالیم آرسناید. . . . .
۵۷	
۷.۴	منحنی تغییرات بازده تبدیل توان برحسب تغییرات ضخامت بستر گالیم آرسناید. . . . .
۵۷	
۸.۴	نمودار جریان-ولتاژ سلول خورشیدی گرافن / گالیم آرسناید برای سه تابع کار متفاوت گرافن. . . . .
۵۹	
۹.۴	ارتفاع سد شاتکی در گرافن. (الف) گرافن دولایه. (ب) گرافن سه لایه . . . . .
۶۰	
۱۰.۴	مدل دوبعدی از ساختارهای نانوگرایتینگ مستطیلی روی سلول خورشیدی. . . . .
۶۲	
۱۱.۴	منحنی تغییرات جریان اتصال کوتاه به ازای تغییرات تناوب نانوگرایتینگ مستطیلی. . . . .
۶۳	
۱۲.۴	منحنی تغییرات فاکتور پرکنندگی به ازای تغییرات تناوب نانوگرایتینگ مستطیلی. . . . .
۶۳	
۱۳.۴	منحنی تغییرات بازده تبدیل توان به ازای تغییرات تناوب نانوگرایتینگ مستطیلی. . . . .
۶۴	
۱۴.۴	مدل دوبعدی از ساختارهای نانوگرایتینگ دوزنقه‌ای روی سلول خورشیدی. . . . .
۶۴	
۱۵.۴	نمودار جریان-ولتاژ سلول خورشیدی گرافن / گالیم آرسناید با اعمال نانوگرایتینگ دوزنقه‌ای. . . . .
۶۵	
۱۶.۴	ساختارهای نانوگرایتینگ. (الف) مستطیلی. (ب) دوزنقه‌ای . . . . .
۶۶	

# فهرست جداول

۵۳	.....	مشخصات بستر گالیم آرسناید [۵۸].	۱.۴
۵۸	.	جدول مقایسه اثر ضخامت بستر گالیم آرسناید بر پارامترهای عملکردی سلول.	۲.۴
۶۱	.....	جدول مقایسه اثر تعداد لایه‌های گرافن بر پارامترهای عملکردی سلول	۳.۴

# فصل ۱

## مقدمه

### ۱.۱ مقدمه

زندگی مدرن امروزی کاملاً به مصرف انرژی وابسته است، زیرا زندگی روزمره ما در چند دهه گذشته به طور قابل توجهی تغییر کرده است. با این حال، منابع انرژی محدودی برای تحقق تقاضای جهانی برای انرژی وجود دارد [۱]. در حقیقت یک بحران جدی برای زمانی که منابع انرژی فسیلی تمام می شوند پیش بینی شده است. افزایش جمعیت بشر به شدت بر مصرف انرژی روزانه تاثیر می گذارد. آژانس بین المللی انرژی<sup>۱</sup> (IEA) استفاده انرژی مصرفی را در سال ۲۰۱۰ حدود ۵۳۵ اگزاژول<sup>۲</sup> ( $1\text{ej} = 10^{18}\text{j}$ ) ثبت کرد و این رقم با گذشت زمان افزایش می یابد [۲]. به هر حال، بیش از ۸۰ درصد از این انرژی از منابع محدود مانند زغال سنگ، نفت طبیعی و گاز طبیعی استخراج شده است. اگر این امر ادامه یابد، ممکن است در کوتاه مدت با اتمام برخی از منابع مواجه شویم.

برای رفع نیازهای انرژی جهان، بایستی فن آوری های نوین را برای تولید، ذخیره و استفاده از انرژی به طور موثرتری بررسی کنیم. با توجه به تحقیقات، در میان انواع مختلف انرژی های تجدیدپذیر مانند انرژی های خورشیدی، باد، حرارتی، جزر و مد، و غیره، انرژی خورشیدی بهترین جانشین است که به عنوان منبع انرژی پاک نسل آینده انتخاب شده است. برای

<sup>۱</sup>International Energy Agency

<sup>۲</sup>ExaJoule

چندین دهه جذب انرژی خورشیدی با استفاده از مواد نیم‌رسانا برای تولید انرژی پاک مورد بررسی قرار گرفته است. مواد فتوولتائیک تبدیل نور خورشید به الکتریسیته را به طور مستقیم با استفاده از اثر فتوولتائیک امکان‌پذیر می‌کنند. خورشید یک منبع پاک انرژی است، نور خورشید بدون اینکه هیچ گونه آلودگی برای محیط زیست یا تاثیری بر سلامتی انسان داشته باشد، می‌تواند به طور مستقیم به الکتریسیته تبدیل شود. انرژی خورشیدی همچنین یکی از ارزان‌ترین، امن‌ترین و پاک‌ترین منابع انرژی تجدیدپذیر در جهان است. امروزه بیش از ۵۰ درصد از کشورها در سراسر جهان از انرژی خورشیدی استفاده می‌کنند [۱، ۳].

یک سلول خورشیدی (که همچنین به عنوان سیستم فتوولتائیک<sup>۳</sup> (PV) شناخته می‌شود) می‌تواند نور خورشید را به انرژی الکتریکی تبدیل کند و به عنوان یکی از راه‌حل‌های صنعتی مربوط به انرژی در نظر گرفته شده است [۴]. فناوری نانو می‌تواند با استفاده از فرآیندهای نانوفناوری و مواد نانوساختار با اندازه ذرات ۱ تا ۱۰۰ نانومتر، بازده سلول‌های خورشیدی را افزایش دهد [۵]. مواد بر پایه گرافن، به عنوان مواد نانوساختار، در پیشرفت‌های اخیر سلول‌های خورشیدی اتصال شاتکی، با توجه به هدایت الکتریکی عالی، شفافیت بالا، توانایی در پذیرش الکترون‌ها، قابلیت تنظیم پهنای باند و همچنین انعطاف‌پذیری، نقش مهمی داشته‌اند [۴].

## ۲.۱ ضرورت انجام تحقیق

نگرانی‌های گسترده در مورد منابع انرژی محدود، باعث تلاش برای بهبود عملکرد سلول‌های خورشیدی بوده است [۶]. سلول‌های خورشیدی که به طور مستقیم انرژی خورشید را به الکتریسیته تبدیل می‌کنند یکی از امیدوارکننده‌ترین روش‌ها برای حمایت از تقاضای انسان برای انرژی‌های تجدیدپذیر می‌باشند که برای توسعه پایدار جامعه بشری بسیار مطلوب هستند و این امر منجر به تحقیقات گسترده‌ای بر روی انواع مختلفی از سلول‌های خورشیدی شده است [۷]. ترکیبی از گرافن و نیم‌رسانا برای شکل دادن یک سلول خورشیدی اتصال شاتکی به دلیل فرآیند ساده و کم هزینه مورد توجه قرار گرفته است [۸]. اگرچه پیشرفت‌های مختلفی در این زمینه صورت گرفته است ولی چالش‌های زیادی در این زمینه باقی مانده و تلاش مداوم برای بهبود بازده تبدیل توان در سلول‌های خورشیدی مبتنی بر اتصالات شاتکی گرافن با توسعه مفاهیم جدید و فن‌آوری‌های تازه هنوز هم ضروری به نظر می‌رسد [۹].

<sup>۳</sup> Photovoltaic

## ۳.۱ وضعیت فعلی سلول‌های خورشیدی

زمین، سیاره‌ای که انسان‌ها در آن زندگی می‌کنند، ۸۹ پتاوات<sup>۴</sup> تابش خورشید را از طریق جو دریافت می‌کند. در مجموع، بیشتر از ۳,۸۵۰,۰۰۰ اگزاژول گرمای خورشید توسط ابرها، اقیانوس‌ها و خشکی‌ها در هر سال جذب می‌شود. این تابش در مقایسه با مصرف انرژی جهانی بسیار بزرگ است [۱۰]. بنابراین، خورشید یکی از بهترین منابع انرژی تجدیدپذیر به دلیل دسترسی آسان و نامحدود بودن آن است. انرژی خورشیدی کاربردهای فوق‌العاده‌ای برای سلول‌های خورشیدی، ماهواره‌ها، فضاپیماها، باتری‌های قابل شارژ، نیروگاه‌ها، اتومبیل‌ها، اجاق‌های خورشیدی، ساعت‌ها، برق خانگی، ابررایانه‌ها و دیگر چیزها دارد [۱۱، ۱۲].

با افزایش تقاضای مردم برای الکتریسیته، فن‌آوری‌های مدرن باید قابلیت استفاده از انرژی‌های تجدیدپذیر را به حداکثر برساند. سیستم فتوولتائیک (PV) افزاره‌ای است که می‌تواند نور خورشید را به عنوان انرژی تجدیدپذیر، تبدیل به ولتاژ DC کند. سپس این افزاره به یک اینورتر متصل می‌شود، بنابراین برق DC تولید شده به یک منبع AC تبدیل می‌شود و برای کاربردهای خانگی قابل استفاده است. به احتمال زیاد با کمک سلول‌های خورشیدی، تقاضا برای سوخت‌های فسیلی به عنوان منابع انرژی کاهش می‌یابد.

در حال حاضر عملکرد سلول‌های خورشیدی هنوز رضایت‌بخش نیست. علاوه بر هزینه اولیه بالا، تولید انرژی الکتریکی به شدت به شرایط محیطی وابسته است. به عنوان مثال یکی از متداول‌ترین شرایط، روزهای ابری سال است، که سلول توان کمتری نسبت به روزهای آفتابی تولید می‌کند. مکان نصب ماژول PV نیز با توجه به وجود چهار فصل در یک کشور و تغییرات دمایی در این فصول، در نظر گرفته می‌شود. این تغییرات دما می‌تواند کمتر از ۰ درجه سانتیگراد در زمستان و بیشتر از ۳۵ درجه سانتیگراد در تابستان باشد. تغییر فصل‌ها در یک کشور ناحیه‌ی گرمسیری با دمای متوسط ۳۰ درجه سانتیگراد در طول سال، ممکن است بازده سلول را کاهش دهد، زیرا سلول نمی‌تواند به حداکثر توان خود برسد.

چندین مشکل نیز در خود سلول PV وجود دارد. به این منظور که نیم‌رسانا به عنوان یکی از بخش‌های اصلی سلول خورشیدی استفاده می‌شود، مواد مختلفی را می‌توان انتخاب کرد. امروزه سیلیکون به علت دسترسی وسیع به آن و ساخت و تولید ارزان‌تر یکی از محبوب‌ترین نیم‌رساناها است. با این حال، بازده سلول‌های خورشیدی سیلیکونی در مقایسه با گالیم آرسناید (GaAs) و دیگران پایین است. فرآیند ساخت سلول نیز می‌تواند عملکرد آن را تحت تأثیر قرار دهد. هرگونه نقص در طی فرآیند ساخت، منجر به اتلاف انرژی می‌شود. از این رو نیاز است که عملکرد سلول‌های خورشیدی از نظر بازده تبدیل آن برای استفاده از منبع وسیع انرژی خورشیدی بهبود یابد [۳].

تقاضای انرژی خورشیدی، طی ۲۰ سال گذشته، حدود ۲۰ تا ۲۵ درصد افزایش یافته است

<sup>۴</sup> PetaWatts



[۲]. این افزاره در بین افزاره‌های تبدیل انرژی محبوب است، زیرا در طول فرآیند تبدیل هیچگونه صدایی ایجاد نمی‌کند. همچنین سیستم PV در مکان‌های مسکونی و عمومی فضای کمی اشغال می‌کند و می‌توان آن را روی بام به راحتی نصب کرد. امروزه قیمت مبدل‌ها نیز در مقایسه با هزینه اولیه کاهش یافته است. با این حال، در بازده تبدیل سلول‌های PV موجود ضعف‌هایی وجود دارد [۳].

سلول‌های خورشیدی به طور عمده به سه دسته طبقه‌بندی می‌شوند، دسته‌ی اول، سلول‌های خورشیدی غیرآلی، دسته‌ی دوم، سلول‌های خورشیدی آلی و سلول‌های خورشیدی حساس به رنگ و دسته‌ی سوم، سلول‌های خورشیدی ترکیبی [۱۳]، که در اینجا سلول خورشیدی مورد بررسی از دسته‌ی سوم می‌باشد. همچنین سلول‌های خورشیدی را می‌توان بر اساس ماهیت مواد، پروسه و نوع مواد مورد استفاده در ساخت افزاره‌ها به چند دسته طبقه‌بندی کرد:

### ۱.۳.۱ سلول‌های خورشیدی مبتنی بر سیلیکون بلورین

سلول‌های خورشیدی مبتنی بر بلور سیلیکون، اولین نسل از سلول‌های خورشیدی قدیمی هستند. این سلول‌ها از ویفرهای بلور سیلیکونی، تک بلوری یا پلی کریستالی ساخته شده‌اند که بر اساس اتصال p-n کار می‌کنند [۱].

### ۲.۳.۱ سلول‌های خورشیدی لایه نازک

سلول‌های خورشیدی لایه نازک، سلول‌های نسل دوم می‌باشند که از لایه‌های نازک کادمیوم تلورید (CdTe)، مس ایندیم گالیم سلنید (CuInGaSe)، گالیوم آرسناید (GaAs)، سیلیکون آمورف (a-Si) و نانوبلورهای سیلیکون (nc-Si) ساخته شده است. سلول‌های خورشیدی حساس به رنگ<sup>۵</sup> (DSSCs) نیز به این دسته تعلق دارند. آن‌ها کاملاً متفاوت از سلول‌های خورشیدی لایه نازک معمولی که در آن نور خورشید توسط لایه نازک نیم‌رسانا جذب می‌شود، عمل می‌کنند. در DSSCها، جذب در مولکول‌های رنگ اتفاق می‌افتد. البته، DSSCها از طریق یک مکانیزم فتوولتائیک متفاوت از سلول‌های خورشیدی استاندارد اتصال p-n استفاده می‌کنند [۱]. سلول‌های خورشیدی حساس به رنگ، به دلیل بازده نسبتاً بالا و هزینه ساخت کم، توجه پژوهشگران را به خود جلب کرده‌اند. پس از تابش، رنگ‌های برانگیخته شده و در پی آن، الکترون‌ها با سرعت بالایی به باند هدایت نیم‌رسانا تزریق می‌شوند [۴].

<sup>۵</sup>Dye sensitized solar cells

### ۳.۳.۱ سلول‌های خورشیدی نقطه کوانتومی

سلول‌های خورشیدی نقطه کوانتومی، سلول‌های خورشیدی چند اتصاله (۲، ۳، و ۴ اتصاله) مبتنی بر نقاط کوانتومی<sup>۶</sup> (QDs) هستند، که در آن‌ها از اتصالات متعدد p-n متشکل از مواد مختلف، استفاده شده است. QD ها به عنوان جذب کننده نور خورشید استفاده می‌شوند [۱]. سلول‌های خورشیدی حساس به نقطه کوانتومی<sup>۷</sup> (QDSSCs)، یک طرح مشابه به DSSC ها دارند، با این تفاوت که نقاط کوانتومی غیرمعدنی مانند CdS، CdSe، PbS، InAs و غیره جایگزین رنگ‌های آلی شده‌اند [۱۴]. هرچند در حال حاضر، بازده آن‌ها (۳ الی ۴٪) از DSSC ها کمتر است [۱۵]. برای غلبه بر مشکلات QDSSC ها، مواد مبتنی بر گرافن در آن‌ها ترکیب شده که نقش مهمی را به عنوان الکتروود و یا انتقال‌دهنده‌های الکترون ایفا می‌کند [۴].

### ۴.۳.۱ سلول‌های خورشیدی مبتنی بر پلیمر آلی

سلول‌های خورشیدی پلیمر، یا سلول‌های خورشیدی آلی (که به عنوان فتوولتائیک‌های آلی<sup>۸</sup> (OPV) نیز شناخته می‌شوند) به واسطه‌ی وزن سبک، سهولت تولید، سازگاری با زیرلایه‌های قابل انعطاف، و هزینه کم، جایگزین مناسبی برای سلول‌های خورشیدی قدیمی هستند [۱۶]. هرچند، بازده تبدیل توان OPV ها هنوز هم پایین تر از PV های قدیمی سیلیکونی یا مبتنی بر نقطه کوانتومی (QD) است [۴].

سلول‌های خورشیدی قدیمی مبتنی بر ویفرهای سیلیکون، از فلزات سنگین که مواد سمی از قبیل کادمیم (Cd) و سرب (Pb) هستند، استفاده می‌کنند. پیشنهاد جایگزینی مواد آلی یک ایده‌ی فوق‌العاده است. پیکربندی ساختار سلول‌های خورشیدی مبتنی بر ویفر سیلیکون و سلول‌های خورشیدی مبتنی بر مواد آلی متفاوت است. مولکول آلی و مواد پلیمری مزایایی زیادی نسبت مواد غیر آلی دارند، زیرا خواص فیزیکی آنها می‌تواند متناسب با نیاز تغییر کند. آن‌ها می‌توانند به راحتی به شکل لایه‌ها یا ورق‌های بسیار نازک ساخته شوند و برای تولید انبوه، موادی کم هزینه هستند. گرافن به راحتی تمام این معیارها را برآورده کرده و جزو این دسته از مواد آلی قرار می‌گیرد [۱۷]. مواد مبتنی بر گرافن در OPV ها به عنوان الکترودهای شفاف، گیرنده‌های الکترونی و یا انتقال‌دهنده‌های حفره و غیره، به منظور دستیابی به بازده بالا مورد استفاده قرار می‌گیرند [۴].

<sup>۶</sup>Quantum dots

<sup>۷</sup>Quantum dot sensitized solar cells

<sup>۸</sup>Organic photovoltaics

## ۴.۱ سلول‌های خورشیدی اتصال شاتکی

دیودهای شاتکی نسبت به اتصال‌های نیم‌رسانا/نیم‌رسانا (p-n) معمولی توانایی عبور جریان بالاتر و بسته به ارتفاع سد شاتکی آن‌ها، جریان اشباع معکوس بزرگتری دارند. به همین دلیل، دیودهای شاتکی، افزاره‌های یکسوکننده‌ای هستند که در کاربردهایی که نیاز به جریان بالا و ولتاژ پایین است، ترجیح داده می‌شوند. مزیت مهم دیودهای شاتکی این است که شامل حامل‌های اقلیت نیستند و محدودیت‌های مربوط به زمان بازترکیب حامل‌های اقلیت را ندارند. این باعث شده است که دیودهای شاتکی به طور قابل توجهی سریع‌تر از اتصال p-n باشند و در مدارهای منطقی دیجیتال به عنوان سوئیچ‌های سریع، عمل کنند. دیودهای نوری شاتکی با سرعت بالا در ارتباطات یا اندازه‌گیری‌های نوری دیده شده‌اند. اتصال‌های شاتکی همچنین به عنوان سلول‌های فتوولتائیک کم هزینه مورد استفاده قرار می‌گیرند [۱۸].

با این حال، در یک سلول خورشیدی اتصال شاتکی، لایه فلزی باید به اندازه کافی ضخیم باشد تا یک پوشش پیوسته تشکیل شود، که این لایه فلزی بیشتر تابش خورشید را جذب می‌کند و بنابراین بازده تبدیل توان را محدود می‌کند.

به منظور غلبه بر این، محققان از لایه اکسید قلع ایندیم (ITO) به عنوان جایگزینی برای لایه فلزی در سلول خورشیدی اتصال شاتکی استفاده کرده‌اند. اما منابع محدود ایندیم منجر به هزینه تولید بالا بوده است. علاوه بر این، انتشار یون‌های ایندیم موجب کاهش بازده افزاره خواهد شد و طبیعت شکننده ITO کاربرد آن را برای افزاره‌های انعطاف‌پذیر محدود خواهد کرد. گرافن، یک ماده جدید با ساختار دوبعدی از کربن است که در سلول خورشیدی اتصال شاتکی مورد استفاده قرار گرفته است [۹].

سلول‌های خورشیدی با اتصال شاتکی مبتنی بر گرافن در مقایسه با اتصال‌های اکسید قلع ایندیم/سیلیکون متداول به دلایلی به صرفه تر هستند: (۱) تابع کار گرافن و در نتیجه آن خواص افزاره برای بهینه‌سازی و بازده بیشتر سلول خورشیدی، قابل تنظیم است. (۲) الکترودهای گرافن نویدبخش اتصال‌های شاتکی مناسب و ارزان قیمت هستند. (۳) انتظار می‌رود که گرافن از نظر الکتریکی و نوری از اتصالات اکسید قلع بهتر باشد. (۴) روش‌هایی که برای گرافن ارائه می‌شود را می‌توان برای اتصال آن به انواع نیم‌رساناها استفاده کرد [۱۹].

اتصال گرافن/نیم‌رسانا<sup>۹</sup> (G/S) نقش مهمی در فهم فرآیندهای فیزیکی در حال وقوع در محل تماس، بین یک ماده دو بعدی و سه بعدی و همچنین یک ماده با شکاف انرژی صفر و شکاف انرژی محدود ایفا می‌کند که می‌تواند یک افزاره‌ی مناسب برای بررسی خواص الکترونیکی و مکانیزم‌های انتقال باشد. ترانزیستورهای گرافنی برای مدت طولانی مورد مطالعه قرار گرفته‌اند، اما درک فیزیک و تکنیک‌های ایجاد اتصال G/S هنوز در مرحله اولیه خود می‌باشد. با این وجود، اتصال G/S در حال حاضر به عنوان یک افزاره یکسوکننده با سد

<sup>۹</sup>Graphene-semiconductor

متغیر، یک سلول فتوولتائیک، یک آشکارساز با بایاس قابل تنظیم، یک سنسور شیمیایی عمل می‌کند. این افزارها می‌توانند به عنوان قسمتی از افزاره‌های الکترونیکی پیچیده‌تر مانند ترانزیستورهای اثر میدان<sup>۱۰</sup> (FETs) مبتنی بر سد شاتکی یا ترانزیستورهای با تحرک الکترون بالا<sup>۱۱</sup> (HEMT) استفاده شوند.

در دیودهای فلز/نیم‌رسانا، کیفیت محل اتصال به طور چشمگیری بر خواص اتصال تاثیر می‌گذارد. ناخالصی‌ها و نقص‌ها می‌توانند منحنی جریان-ولتاژ را به طور قابل توجهی تغییر دهند. علاوه بر این، اثرات مهمی نیز وجود دارد که ناشی از ساختار باند خاص و چگالی حالات گرافن و طبیعت دو بعدی آن است. چگالی حالات کم نزدیک به صفر باعث می‌شود سطح فرمی گرافن به شدت به مقدار حامل‌های تزریق شده به نیم‌رسانا یا از نیم‌رسانا حساس باشد. موقعیت سطح فرمی بر ارتفاع سد شاتکی<sup>۱۲</sup> (SBH) تاثیر می‌گذارد که به نوبه خود ارتباط ولتاژ-جریان را کنترل می‌کند. این ویژگی‌ها جریان اتصال G/S را در چندین حالت، قابل تنظیم می‌کند و می‌تواند به راحتی در کاربردهای عملی مورد استفاده قرار گیرد [۱۸]. علاوه بر مقاومت ورقه‌های گرافنی، مقاومت حاصل از اتصال شاتکی، میزان ناخالصی لایه‌ی بستر و ارتفاع سد شاتکی نیز در بازده سلول‌های خورشیدی موثر است به گونه‌ای که هرچه مقاومت سری کمتر و ارتفاع سد شاتکی بیشتر باشد، جریان اتصال کوتاه بیشتر خواهد بود و در نتیجه‌ی آن بازده بالاتری خواهیم داشت [۲۰].

با استفاده از ساختار منحصر به فرد گرافن و ویژگی‌های عالی، کاربرد گرافن در ترکیب با مواد نیم‌رسانا، امکان به طور همزمان داشتن جذب، شفافیت، هدایت‌پذیری و کنترل‌پذیری عالی را فراهم می‌کند که می‌تواند عملکرد الکتروشیمیایی آن‌ها را تسهیل کند. در طول چند سال گذشته، تلاش زیادی برای طراحی و آماده‌سازی مواد جدید مبتنی بر گرافن انجام شده و برنامه‌های کاربردی آن در زمینه الکترودهای الکتروشیمیایی مورد بررسی قرار گرفته است. نمونه‌هایی شامل استفاده از مواد گرافن به عنوان الکترودهای هدایتی شفاف یا مواد فعال در سلول‌های خورشیدی می‌باشد [۴].

## ۵.۱ روش تحقیق

با مروری بر مراجع و منابع قبلی، تحقیقات لازم بر عوامل موثر بر افزایش بازده انواع اتصالات از نوع فلز/نیم‌رسانا انجام گرفت و سپس بر روی مواد تشکیل دهنده‌ی اتصال یعنی گرافن که ماده‌ای با ویژگی‌های منحصر به فرد و گالیم‌آرسناید که به ترتیب به عنوان فلز و نیم‌رساناهای تشکیل دهنده‌ی اتصال مورد نظر به کار می‌روند مطالعاتی صورت گرفت. با استفاده از نرم‌افزار شبیه‌ساز (Silvaco) ساختار اتصال گرافن/گالیم‌آرسناید را برای بهبود بازده این اتصال شاتکی

<sup>۱۰</sup> Field-effect transistors

<sup>۱۱</sup> High-electron-mobility transistors

<sup>۱۲</sup> Schottky barrier height

---

و در نتیجه‌ی آن بهبود بازده سلول‌های خورشیدی شبیه‌سازی کردیم. تحقیقات شامل بررسی تاثیر میزان ضخامت بستر، شفافیت و تعداد لایه‌های گرافن درگیر در اتصال و روشی برای بهبود جذب نور تابشی می‌باشد تا بتوانیم جریان اتصال کوتاه و ولتاژ مدار باز بهتر و در نتیجه‌ی آن بازده بالاتر در مقایسه با کارهای قبلی بدست آوریم.

## فصل ۲

# مروری بر اتصال شاتکی و سلول‌های خورشیدی گرافن/گالیم‌آرسناید

### ۱.۲ مقدمه

گرافن در دهه گذشته به دلیل ویژگی‌های عالی و منحصر به فرد، یکی از مورد مطالعه‌ترین مواد بوده است [۱۸]. بخصوص، کشف گرافن و ترکیبات آن توجه بسیار زیادی را برای کاربردهای فتوالکتروشیمیایی به خود جلب کرده است، که با استفاده از خواص عالی گرافن به دست‌آوردهای جدیدی در افزاره‌های فتوالکتروشیمیایی نسل آینده دست‌یابیم. در طول چند سال گذشته، تلاش برای طراحی و آماده‌سازی مواد جدید مبتنی بر گرافن برای طیف وسیعی از کاربردهای فتوالکتروشیمیایی، برای مثال تنظیم سلول‌های خورشیدی فتوالکتروشیمیایی، انجام شده است [۴]. با توجه به ماهیت دو بعدی، خواص فیزیکی و شیمیایی و سهولت استفاده، گرافن قابلیت پیوستن به تکنولوژی نیم‌رساناهای موجود برای افزاره‌های الکترونیکی نسل بعدی را ارائه می‌دهد. در این زمینه، درک اتصال گرافن/نیم‌رسانا از اهمیت زیادی برخوردار است، زیرا این اتصال می‌تواند یک افزاره مستقل چند منظوره و یا جزئی از ساختار افزاره‌های پیشرفته‌تر الکترونیکی باشد. از زمانی که گرافن در سال ۲۰۰۴ توجه جامعه علمی را به خود جلب کرد، تحقیقات بر ترانزیستورهای گرافنی پیچیده‌تر متمرکز شد، بطوری که اتصال گرافن/نیم‌رسانا با وجود اهمیتی که دارد، اخیراً مورد بررسی قرار گرفته است. در نتیجه، درک

کاملی از فیزیک و قابلیت‌های این افزاره هنوز مشخص نیست. مطالعات چند سال گذشته نشان داده است که گرافن می‌تواند اتصال‌هایی با مواد نیم‌رسانا دو بعدی یا سه بعدی داشته باشد، که ویژگی یکسوکنندگی داشته و به عنوان دیودهای شاتکی عالی عمل می‌کنند. نوآوری اصلی این افزاره‌ها ارتفاع سد شاتکی قابل تنظیم است، که این ویژگی اتصال گرافن / نیم‌رسانا را به عنوان افزاره‌ای مناسب برای مطالعه مکانیزم‌های انتقال سطح و همچنین برای کاربردهای آشکارسازی، ارتباطات با سرعت بالا، سلول‌های خورشیدی، سنسورهای زیستی و شیمیایی و غیره می‌سازد [۱۸].

گرافن به عنوان ماده مهم فتوولتائیک آلی برای تبدیل انرژی تابشی پدیدار شده است، که می‌تواند به عنوان یک الکتروود شفاف، یک لایه میانی فعال، لایه انتقال الکترون، لایه انتقال حفره، یا لایه جداساز الکترون / حفره در ساخت افزاره‌های خورشیدی استفاده شود.

علاوه بر دستیابی به بازده تبدیل توان بالا، عواملی مانند ثبات و پایداری محیطی طولانی مدت، و هزینه بهره‌وری از سلول‌های خورشیدی مبتنی بر گرافن، برای تولید صنعتی در مقیاس زیاد، وظیفه‌ای چالش برانگیز است. اثر فتوولتائیک تولید شده توسط اتصال های  $p-n$ ، برای سلول‌های خورشیدی اتصال شاتکی که در آن دو ماده معدنی و آلی نقش مهمی را ایفا می‌کنند، استفاده شده است. مواد معدنی (مانند گالیم‌آرسناید و سیلیکون) و مواد آلی دارای مزایا و معایب مربوط به خود هستند. یکی از مهمترین نگرانی‌ها پایداری محیطی سلول‌های خورشیدی است، که مواد آلی مانند پلیمرهای تزویج شده (به عنوان مثال پلی (الکلیتیوفن ها) <sup>۱</sup>)، مواد مبتنی بر کربن (به عنوان مثال، نانولوله‌های کربن، فولرین‌ها و گرافن) کمک به ایجاد ثبات در برابر درجه حرارت، رطوبت و تخریب شیمیایی در افزاره‌های خورشیدی می‌کنند. مواد معدنی مورد استفاده در سلول‌های خورشیدی، بازده تبدیل توان <sup>۲</sup>(PCE)، پایداری محیطی و مقاومت مکانیکی بالاتر نسبت به هم‌تایان آلی خود ارائه می‌دهند. سلول‌های خورشیدی، بر اساس ترکیبات مواد مانند غیر آلی / آلی، کامپوزیت‌ها و مواد ترکیبی، می‌توانند نامزد خوبی برای ترکیب خواص برتر هر دو نوع ماده در یک افزاره واحد باشند [۱].

## ۲.۲ گرافن

گرافن ماده‌ای با ضخامت یک اتم و یک لایه مسطح از اتم‌های کربن است که در یک شبکه لانه زنبوری شش ضلعی دو بعدی قرار دارد، به طوری که هر اتم با نزدیک‌ترین همسایه‌های خود که در فاصله  $1/42 \text{ \AA}$  هستند، پیوند کووالانسی دارد. الکترون باقی مانده‌ی هر اتم، که در پیوند کووالانسی شرکت نمی‌کند، در طول شبکه گرافن آزادانه حرکت کرده و نقش هدایت الکتریکی را بر عهده دارد.

<sup>۱</sup> Poly(alkylthiophenes)

<sup>۲</sup> Power conversion efficiency

گرافن در سال ۲۰۰۴ توسط گیم<sup>۳</sup> و نووسلو<sup>۴</sup> کشف شد، که گرافن را با تکنیک ساده‌ای مانند لایه‌برداری مکانیکی در دسترس قرار داد. گرافن با توجه به پیوندهای قوی کووالانسی، دارای استحکام مکانیکی فوق‌العاده‌ای است.

گرافن به علت قابلیت تحرک الکترون بالا، قابلیت انتقال جریان الکتریکی عالی (حدود  $10^8$  آمپر بر سانتی‌متر مربع بر روی بستر  $Si/SiO_2$ )، هدایت گرمایی بالا، ضریب مقاومت مکانیکی بالا، انعطاف‌پذیری در برابر درجه حرارت (دمای ذوب  $4510^\circ$  کلین) و رطوبت بالا و پایداری شیمیایی ماده‌ای عالی برای افزاره‌های الکترونیکی است [۱۸]. ساختاری با ضخامت یک اتم، گرافن را ماده‌ای با شفافیت بالا و یک مساحت سطح تماس فوق‌العاده حدود  $2600\text{m}^2\text{g}^{-1}$  می‌سازد. بخصوص، رنج بالای تزویج در گرافن اجازه انتقال بالستیک می‌دهد، به این معنی که الکترون‌ها در گرافن می‌توانند مانند ذرات نسبتاً بی‌جرم حرکت کنند و بدون پراکندگی، با تحرک حامل بیش از  $15000\text{cm}^2\text{v}^{-1}\text{s}^{-1}$  در دمای اتاق در حرکت باشند. این باعث می‌شود گرافن خواص الکترونیکی بسیار جالب با توجه به روابط فرمی دیراک داشته باشد.

صرف نظر از این خواص الکترونیکی منحصر به فرد، گرافن می‌تواند با تنظیم مناسب فرآیند اکسیداسیون یا فرآیند کاهش، برای کنترل نظم ساختاری آن، عایق، نیمه رسانا یا رسانا شود [۴]. علاوه بر این، خواص سطح گرافن نیز می‌تواند از طریق تغییر شکل بلور شیمیایی تنظیم شود، که فرصت‌های زیادی برای مواد مبتنی بر گرافن فراهم می‌کند [۱۸]. بنابراین، این خواص فیزیکی و شیمیایی منحصر به فرد گرافن، پتانسیل ارائه روش‌های جدید و پیشرفت‌های حیاتی برای بسیاری از برنامه‌های کاربردی مانند ذخیره انرژی، کاتالیزورها، بیوسنسورها و غیره را ارائه می‌دهد [۴]. گرافن یک ماده ایده‌آل برای کاربردهای آشکارسازی است و در مقایسه با هر ماده‌ی دیگر، بیشترین طیف آشکارسازی سازگار با محیط را ارائه می‌دهد [۱۸].

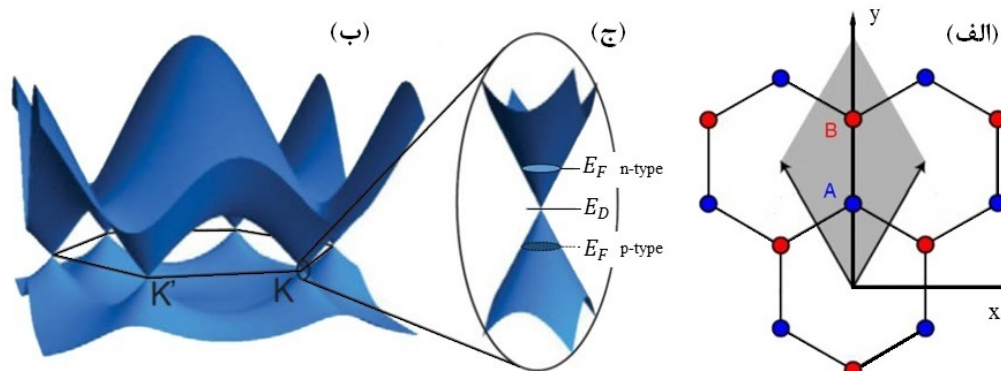
## ۱.۲.۲ خواص الکترونیکی و انتقالی

شبکه‌ی شش ضلعی گرافن را می‌توان متشکل از دو مثلث در هم نفوذ کرده، از زیرشبکه‌های A و B در نظر گرفت (شکل ۱.۲ الف)) که گرافن با یک ساختار باند الکترونی منحصر به فرد، ایجاد می‌شود. نوارهای هدایت و ظرفیت در شش نقطه برهم منطبق می‌شوند که این نقاط گوشه‌های  $K$  و  $K'$  در منطقه شش ضلعی نابرابر بریلوئین هستند (شکل ۱.۲ ب)). این نقاط گرافن را یک نیم‌رسانا با شکاف انرژی صفر (شبه فلز) می‌سازد. گرافن می‌تواند زمانی که سطح فرمی به بالاتر یا پایین‌تر از نقطه دیراک شیف‌ت پیدا می‌کند به نیم‌رسانا نوع n یا p تبدیل شود (شکل ۱.۲ ج)). گرافن به عنوان یک ماده مهم برای کاربردهای الکترونیکی با سرعت بالا استفاده می‌شود.

<sup>۳</sup> Geim

<sup>۴</sup> Novoselov





شکل ۱.۲: (الف) شبکه لانه زنبوری شش ضلعی گرافن. دایره‌های آبی و قرمز نشان دهنده اتم‌های متعلق به زیر شبکه‌های A و B هستند؛ خطوط بین حلقه‌ها نشان دهنده پیوند شیمیایی است. (ب) ساختار باند گرافن نشان دهنده شکاف انرژی صفر در نقاط دیراک  $K$  و  $K'$  است. (ج) سطوح فرمی بالاتر ( $E_D$ ) به گرافن نوع  $n$  (p) مربوط می‌شود. [۲۱].

قابلیت کنترل موقعیت  $E_F$ ، یکی از ویژگی‌های قابل توجه گرافن است و ظهور نوع جدیدی از افزاره‌های الکترونیکی را امکان‌پذیر می‌کند. این ویژگی نقش بسیار مهمی در اتصال شاتکی گرافن/نیمه‌هادی ایفا می‌کند، به طوری که تغییر در  $E_F$  می‌تواند برای تنظیم ارتفاع سد شاتکی ( $\Phi_B$ ) و اصلاح ویژگی‌های اتصال فلز/نیمه‌رسانا استفاده شود.

گرافن حتی در دماهای بحرانی، زمانی که مقدار هدایت باید به صفر میل کند، هدایت محدودی دارد که این یک نتیجه از ویژگی‌های ذاتی فرمیون‌های دیراک دو بعدی است [۲۲]. در گرافن اغلب دو روش انتقال در نظر گرفته می‌شود که به طول متوسط مسیر آزاد، با توجه به طول گرافن بستگی دارد. اگر طول مسیر آزاد را  $l$  و طول گرافن  $L$  در نظر بگیریم، هنگامی که  $l > L$  باشد، انتقال بالستیک است، زیرا حامل‌ها می‌توانند در گرافن در سرعت فرمی  $v_F$  بدون پراکندگی حرکت کنند. از سوی دیگر، هنگامی که  $l < L$ ، انتقال نفوذی است زیرا حامل‌ها در معرض برخورد الاستیک و غیرالاستیک قرار می‌گیرند [۲۳].

## ۲.۲.۲ خواص نوری

گرافن دارای خواص نوری قابل توجهی است. شکاف باند انرژی کوچک، با جذب نور در یک طیف گسترده‌ی انرژی که با هیچ ماده‌ی دیگری سازگار نیست، شامل ماورای بنفش، مرئی، مادون قرمز (IR) و تراهرتز (THz)، قادر به تولید حامل‌های بار است [۱۸].

با توجه به ضخامت  $0.334$  نانومتر برای یک تک لایه‌ی گرافن، جذب نور حدود  $2.3\%$  است که مربوط به ضریب جذب حدود  $10^{+5} \text{ cm}^{-1} \times 7$  می‌باشد. برای مثال این مقدار حدود  $5^\circ$  برابر بیشتر از جذب گالیم‌آرسناید در طول موج  $1/55$  میکرومتر است و این سازگاری بالای نور و گرافن را نشان می‌دهد که می‌تواند با تبدیل فوتون‌ها به جریان الکتریکی یا ولتاژ، مورد بهره‌برداری قرار گیرد [۲۴، ۲۵]. جذب ورق‌های گرافن چند لایه تقریباً متناسب با تعداد لایه‌ها

است [۲۶]. بازده تبدیل توان سلول‌های خورشیدی مبتنی بر گرافن نیز به تعداد لایه‌های گرافن بستگی دارد [۱]. علاوه بر این، بازتاب گرافن بسیار پایین است،  $R = \alpha^2 / 25\pi^2 (1 - \alpha^2)$ ، هر چند برای  $10^{-6}$  لایه حدود ۲ درصد افزایش می‌یابد [۲۷].

### ۳.۲.۲ خواص فتوالکتروشیمیایی و فرآیندهای مواد مبتنی بر گرافن

همانطور که می‌دانیم، فرآیندهای فتوالکترونیک (مانند جذب فوتون، جداسازی/بازترکیب الکترون‌ها و حفره‌ها و غیره) و انتقال حامل بار (مانند جذب<sup>۵</sup>/بازجذب<sup>۶</sup>، انتشار و غیره) گام‌های کلیدی موثر بر فعالیت‌های فتوالکتروشیمیایی هستند [۲۸، ۲۹]. بنابراین، روشن شدن نقش گرافن در فرآیندهای فتوالکترونیک و انتقال جرم طی فرآیندهای فتوالکتروشیمیایی، به منظور بهبود خواص فتوالکتروشیمیایی مواد مبتنی بر گرافن و تسهیل کاربردهای آن در این فعالیت‌ها مهم است. تا به امروز، اثبات شده است که مواد مبتنی بر گرافن فعالیت‌های فتوالکتروشیمیایی را بهبود داده‌اند. با این حال، نقش گرافن در بهبود این فعالیت‌ها هنوز به وضوح قابل درک نیست و توضیح نقش گرافن در فرآیند فتوالکتروشیمیایی باید بیشتر مورد بررسی قرار گیرد.

یک فرآیند فتوالکتروشیمیایی شامل تبدیل نور به دیگر اشکال انرژی بر اساس مواد نیم‌رسانا است. در یک افزاره فتوالکتروشیمیایی مبتنی بر نیم‌رسانا تحت تابش، سه فرآیند کلیدی معمولاً به ترتیب انجام می‌شوند [۳۰].

فرآیند کلیدی اول جذب فوتون‌ها برای ایجاد جفت الکترون-حفره است. توانایی نیم‌رسانا برای جذب نور در طول موج‌های مختلف منحصر بر اساس ساختار الکترونیکی آن، یعنی موقعیت نوارهای هدایت و ظرفیت ( $E_V, E_C$ ) تعیین می‌شود. برای جذب فوتون، آن‌ها باید به اندازه کافی پر انرژی باشند تا الکترون‌ها را از نوار ظرفیت به نوار هدایت بفرستند ( $h\nu \geq E_C - E_V$ ).

فرآیند کلیدی دوم، جداسازی و انتقال الکترون‌ها و حفره‌های تولید شده با نور، به مکان‌های واکنش سطحی است. پارامترهایی که به طور عمده برای توصیف این نوع انتقال استفاده می‌شوند، طول انتشار حفره‌ها و الکترون‌ها و نرخ بازترکیب می‌باشند. با مطالعات طیف‌سنجی انجام شده، مشخص شده است که میزان به دام اندازی الکترون-حفره و یا نرخ‌های بازترکیب، بسیار سریع هستند (حدود  $10^{-6}$  الی  $10^{-15}$  ثانیه) که می‌تواند فعالیت فتوالکتروشیمیایی را به طور قابل توجهی کاهش دهد [۳۱، ۳۲]. با این حال، هنگامی که اندازه ذرات کاهش می‌یابد، طول انتشار حفره‌ها و الکترون‌های تولید شده به مکان‌های واکنش سطحی هم کاهش می‌یابد، در نتیجه باعث کاهش احتمال بازترکیب می‌شود [۳۳].

فرآیند کلیدی نهایی شامل واکنش‌های شیمیایی سطح می‌شود که معمولاً شامل حداقل

<sup>۵</sup> Adsorption

<sup>۶</sup> Desorption

دو واکنش است، یعنی اکسایش بوسیله حفره‌ها و کاهش توسط الکترون‌های تولید شده با نور، که در آن معمولاً چندین جز با تمایل به واکنش بالا (مانند  $O_2$  و  $H_2O_2$ ) را شامل می‌شود. برای واکنش‌های شیمیایی سطح، ویژگی سطح (مناطق فعال) و مساحت (بزرگی سطح تماس) اهمیت دارد. استفاده از کاتالیزورهایی مانند  $Pt$ ،  $NiO$  و  $RuO_2$ ، برای معرفی مناطق فعال مناسب و افزایش میزان واکنش‌های سطحی بسیار متداول است [۴]. بنابراین، از نظر سه فرایند کلیدی، سه روش اساسی برای تقویت فعالیت‌های فتوالکتروشیمیایی وجود دارد [۳۰]:

۱. تنظیم شکاف باند انرژی و یا گسترش طول موج تحریک با استفاده از حسگر نوری.

۲. به حداقل رساندن بازترکیب حامل‌های بار.

۳. بهبود واکنش‌های شیمیایی در سطح بواسطه‌ی ایجاد کیفیت مناسب و بزرگ مناطق فعال.

بر اساس خصوصیات فیزیکی و شیمیایی ذاتی گرافن، کاربرد گرافن در ترکیب با نانوذرات نیم‌رسانا این امکان را فراهم می‌کند که به مانند آنچه در بالا توضیح داده شد به طور همزمان تمام سه مکانیزم افزایش فرایند فتوالکتروشیمیایی را پوشش دهد [۳۴].

درک کامل نقش گرافن در خواص فتوالکتروشیمیایی و مکانیزم‌های مواد مبتنی بر گرافن در فرایند فتوالکتروشیمیایی هنوز نیازمند تحقیقات بیشتری است. با این حال، لازم به ذکر است که گرافن دارای تعدادی ویژگی‌های ذاتی منحصر به فرد است که امکان برتری گرافن را به مواد دیگر مبتنی بر کربن در کاربردهای فتوالکتروشیمیایی می‌دهد. به عنوان مثال، صفحه‌های گرافن تک لایه یا دولایه با کیفیت بالا، خود پاسخ نوری ذاتی نشان داده‌اند و منشا پاسخ نوری در گرافن به اثرات ترموالکتریک یا فتوولتائیک وابسته است. این نوع پاسخ نوری ذاتی ممکن است مسیری را برای فناوری‌های فتوالکتریک پشتیبانی شده با حامل‌های برانگیخته برای جذب کارآمد انرژی خورشیدی فراهم کند. علاوه بر این، گرافن می‌تواند مقادیر زیادی از واکنش‌های سطحی را به علت مساحت بسیار بزرگ آن می‌باشد، فراهم کند. همچنین اتصال‌های شاتکی نانو سائز در ارتباط بین نیم‌رسانا و گرافن می‌تواند باند انرژی ذرات نیم‌رسانا را تضعیف کرده و دامنه‌ی پاسخ نوری را افزایش دهد و به این ترتیب باعث افزایش فعالیت‌های فتوالکتروشیمیایی شود [۴].

### ۴.۲.۲ کاربرد فتوالکتروشیمیایی گرافن در سلول‌های خورشیدی آلی

تا به امروز، مواد مبتنی بر گرافن در OPVها به عنوان الکترودهای شفاف، گیرنده‌های الکترونی و یا انتقال‌دهنده‌های حفره و غیره، به منظور دستیابی به عملکرد پیشرفته مورد

استفاده قرار می‌گیرند [۴].

### ۱) مواد بر پایه گرافن به عنوان الکترودهای شفاف

یک الکتروده شفاف ایده آل برای کاربرد در ساختار سلول‌های خورشیدی باید الزامات شفافیت بالای ۸۰ درصد در یک پنجره وسیع از طول موج‌ها، مقاومت ورق کم ( $R_s <$ ) و همچنین تابع کار مناسب ( $5/2 \sim 4/5$  eV) داشته باشد. در حال حاضر، الکتروده شفاف در سلول‌های خورشیدی آلی، ایندیم قلع اکسید (ITO) است که دارای شفافیت بیش از ۹۰٪ در طول موج ۵۵۰ نانومتر،  $R_s$  از ۱۰ تا ۳۰ اهم بر مربع و یک تابع کار مطلوب می‌باشد [۳۵]. با این حال، استفاده از ITO به دلیل کمبود منبع ایندیوم، حساسیت نسبت به اسید/باز، قابلیت انتشار یون به لایه‌های پلیمری و همچنین ماهیت شکننده اکسیدها، به طور فزاینده‌ای مشکل ساز است.

برخلاف هزینه‌ی بالا و شکنندگی ITO، هزینه کم، خواص منحصر به فرد نوری و الکترونیکی، پایداری شیمیایی و همچنین انعطاف پذیری بالای گرافن به عنوان یک الکتروده شفاف امید بخش نسل جدید می‌باشد. اخیراً گرافن و مشتقات آن به عنوان الکترودهای شفاف جایگزینی برای OPV ها مورد استفاده قرار گرفته‌اند و OPV های متناظر کارایی امید بخشی را نشان داده‌اند [۴].

### ۲) مواد بر پایه گرافن به عنوان گیرنده‌های الکترون

بر خلاف سلول‌های خورشیدی قدیمی غیرآلی که به محض تابش الکترون‌ها و حفره‌های تولید شده آزادانه حرکت می‌کنند، جذب نور در سلول‌های خورشیدی آلی منجر به شکل‌گیری اکسایتون‌ها، یا جفت الکترون-حفره‌های نزدیک به هم می‌شود، که برای جدا کردن این جفت الکترون حفره‌های نزدیک، یک پذیرنده‌ی الکترون، که وابستگی الکترون<sup>۷</sup> (EA) در آن بزرگتر از وابستگی الکترون در پلیمر اهدا کننده است، ولی پتانسیل یونیزاسیون<sup>۸</sup> (IP) کوچکتر دارد، ضروری است [۳۶].

گرافن، با موبیلیتی ( $7 \times 10^4 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ )، به عنوان یک پذیرنده الکترون بسیار عالی در OPV ها در نظر گرفته شده است [۳۵]. علاوه بر این، به سبب سطح تماس عالی برای یک سطح اتصال بزرگ، تحرک بالا و شکاف باند قابل تنظیم، نقاط کوانتومی گرافن (GQDs) برای استفاده به عنوان مواد پذیرنده الکترون در افزاره‌های فتوولتائیک قابلیت بالایی دارند [۳۷].

### ۳) مواد مبتنی بر گرافن به عنوان لایه انتقال حفره

لایه انتقال حفره که معمولاً در OPV ها استفاده می‌شود، نیم‌رسانا آلی PEDOT:PSS<sup>۹</sup> است. مزایای استفاده از PEDOT:PSS به حداقل رساندن تاثیر مخرب زبری و همچنین تنظیم سد انرژی ITO و لایه فعال برای جمع‌آوری کارآمد حفره می‌باشد. با این حال، در PEDOT:PSS همچنان چندین نقص وجود دارد، از جمله اسیدیته بالا (PH=1 در طول فرآیند لایه نشانی)

<sup>۷</sup>Electron affinity

<sup>۸</sup>Ionization potential

<sup>۹</sup>Poly(3,4- ethylenedioxythiophene)-poly(styrenesulfonate)

و در نتیجه خوردگی الکتروود ITO در دمای بالا، خواص ناهمگن و خواص الکتریکی غیرمجاز، منجر به ضعف دراز مدت در استحکام افزاره می‌شود [۳۸].

به تازگی، فیلم‌های نازک GO به عنوان مواد لایه انتقال حفره جایگزینی برای OPVها با بازده بالا شده‌اند. درمقایسه با PEDOT:PSS، GO می‌تواند با کمک محلول معلق در آب لایه نشانی شود، و از خوردگی به الکتروود جلوگیری کند. علاوه بر این، شکاف باند نوری GO و ساختارهای باند انرژی آن می‌توانند به صورت شیمیایی یا گرمایی برای تنظیم بهتر تابع کار ITO و لایه فعال تنظیم شوند. علاوه بر این، GO رسانایی قابل توجهی نسبت به PEDOT:PSS ارائه می‌دهد [۳۹].

### ۵.۲.۲ روش‌های تولید

گرافن می‌تواند به چهار روش اصلی تولید شود: لایه برداری میکرومکانیکی از گرافیت خالص مرتب شده<sup>۱۰</sup>، رسوب بخار شیمیایی<sup>۱۱</sup> (CVD)، رشد اپیتاکسیال روی سیلیکون کاربید (SiC) و فرآیند کاهش گرافن اکساید [۱۸].

### ۳.۲ خواص اساسی نیم‌رساناها

نیم‌رساناها بخش اصلی سازنده‌ی سلول‌های خورشیدی می‌باشند، از این رو درک برخی مفاهیم و خواص اساسی آن‌ها اهمیت دارد.

### ۱.۳.۲ ساختار نوارهای انرژی

ساختار الکترونیکی منحصر به فرد یک نیم‌رسانا، شامل یک باند ظرفیت<sup>۱۲</sup> (VB) پر و یک باند هدایت<sup>۱۳</sup> (CB) خالی، نقش کلیدی در فرآیندهای فتوالکتروشیمیایی دارد. اختلاف انرژی دو باند ظرفیت و هدایت، شکاف باند انرژی ( $E_g$ ) نامیده می‌شود، که ناحیه‌ی ممنوع انرژی است. هنگامی که نیم‌رسانا با فوتونی با انرژی برابر و یا بالاتر از شکاف باند انرژی خود برانگیخته می‌شود، یک الکترون از باند ظرفیت به باند هدایت منتقل می‌شود و یک حفره با بار مثبت در باند ظرفیت به وجود می‌آید. این انتقال الکترون بسته به نوع نیم‌رسانا با شکاف باند مستقیم و غیرمستقیم، به دو صورت امکان‌پذیر است [۴، ۴۰].

<sup>۱۰</sup> Micro-mechanical exfoliation of highly ordered pyrolytic graphite

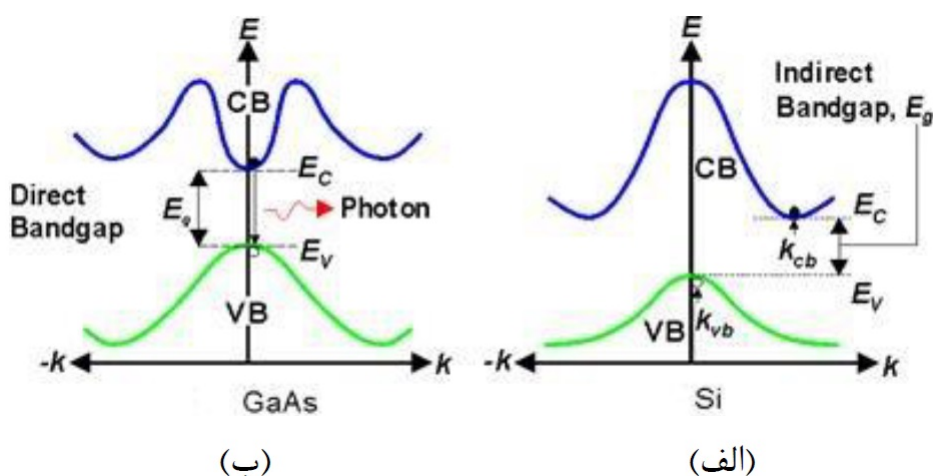
<sup>۱۱</sup> Chemical Vapor Deposition

<sup>۱۲</sup> Valence Band

<sup>۱۳</sup> Conduction Band

## ۲.۳.۲ شکاف باند انرژی مستقیم و غیرمستقیم در نیم‌رساناها

نمودارهای شکل باندهای انرژی نیم‌رسانا در مقابل اندازه حرکت نشان می‌دهند که، مینیمم نوار هدایت و ماکزیمم نوار ظرفیت نسبت به هم به دو صورت قرار می‌گیرند. در حالت اول مینیمم نوار هدایت و ماکسیمم نوار ظرفیت، مطابق شکل ۲.۲ (الف)، در اندازه حرکت یکسانی قرار نمی‌گیرند، بنابراین برانگیختگی یک الکترون از نوار ظرفیت به نوار هدایت، نه تنها نیاز به صرف انرژی زیادی دارد، بلکه، تغییری در اندازه حرکت آن به وجود خواهد آورد. در سیلیکون با چنین موقعیتی رو به رو هستیم. این مواد را نیم‌رسانا غیرمستقیم می‌نامیم. در حالت دوم مینیمم نوار هدایت و ماکسیمم نوار ظرفیت، مطابق شکل ۲.۲ (ب)، در اندازه حرکت یکسانی قرار دارند و هنگامی که الکترون از نوار ظرفیت به نوار هدایت جهش می‌کند، تغییری در اندازه حرکت آن ایجاد نمی‌شود. گالیم‌آرسناید و اکسید روی مثال‌هایی از این مورد می‌باشند. این مواد را نیم‌رسانا مستقیم می‌نامیم [۴۱].



شکل ۲.۲: باندهای انرژی در نیم‌رساناهای (الف) غیرمستقیم و (ب) مستقیم [۴۲].

به طور مشابه هنگامی که نیم‌رسانا در معرض تابش نور قرار می‌گیرد با تولید جفت الکترون-حفره، خاصیت رسانایی آن افزایش می‌یابد. این پدیده اثر فوتورسانایی<sup>۱۴</sup> نامیده می‌شود. حامل‌های بار اضافی تولید شده در نیمه‌هادی، پس از خاموش شدن منبع نور، نابود می‌شوند، این فرآیند بازترکیب نامیده می‌شود. در جامدهای بلوری، پدیده بازترکیب نیز به صورت بازترکیب مستقیم، غیرمستقیم (از طریق ترازهای انرژی قرار گرفته در شکاف باند انرژی ممنوع) و بازترکیب اوزه انجام می‌شود. بازترکیب مستقیم معمولاً در نیم‌رسانا با شکاف باند انرژی مستقیم پدیده غالب است [۴۰].

در یک نیم‌رسانا با شکاف باند انرژی مستقیم، هنگامی که یک الکترون از نوار هدایت سقوط می‌کند تا یک جای خالی در نوار ظرفیت را پر کند، انرژی به صورت یک فوتون نوری باز پس

<sup>۱۴</sup>Photoconductive Effect

داده می‌شود. در حالی که در مورد نیم‌رسانا با باند انرژی غیرمستقیم، این نوع عبور، علاوه بر تغییر در انرژی، شامل تغییری در اندازه حرکت می‌باشد و اختلاف انرژی، به جای یک فوتون نوری، معمولاً به صورت گرما به شبکه بلوری داده می‌شود. بنابراین افزاره‌های گسیل نوری عموماً از نیم‌رساناهای با شکاف انرژی مستقیم ساخته می‌شوند [۴۳].

تا به امروز، ثابت شده است که تعدادی از نیم‌رساناها (به عنوان مثال  $ZnO$ ،  $TiO_2$ ،  $CdS$ ،  $WO_3$ ،  $Fe_2O_3$  و  $NaTaO_3$  و غیره) به عنوان فتوکاتالیزورهای عالی برای کاربردهای فتوالکتروشیمیایی بوده و پیش‌بینی‌های قابل توجهی در این زمینه صورت گرفته است. با این وجود، چالش‌های زیادی، از جمله افزایش تبدیل انرژی خورشیدی، از بین بردن بازترکیب جفت الکترون-حفره تولید شده و استفاده موثر از نور مرئی وجود دارد که باید به هم پیوندند تا پروسه‌های فتوالکتروشیمیایی امکان‌پذیر شوند [۴].

### ۳.۳.۲ گالیم‌آرسناید

مواد با شکاف انرژی مستقیم نشان داده‌اند که استفاده از پیکربندی مطلوب منجر به تولید سلول‌های خورشیدی تک و یا چند اتصالی بسیار کارآمد می‌شود. گرایش به سلول‌های خورشیدی گالیم‌آرسناید به دلیل شکاف انرژی ( $1/42 eV$ ) نزدیک به طیف استاندارد، در سال‌های اخیر زیاد شده است [۴۴]. در مقایسه با Si که در حال حاضر به طور گسترده مورد استفاده است، گالیم‌آرسناید دارای مزایایی از جمله تحرک الکترون زیاد و شکاف باند مستقیم است. علاوه بر این، گالیم‌آرسناید در برابر آسیب تابشی بسیار مقاوم است که سلول‌های خورشیدی گالیم‌آرسناید را جانشین سیلیکونی که به عنوان نوع سلول‌های متعارف هستند، می‌کند. تکنیک موجود همچنین می‌تواند امکان به هم پیوستن گرافن با سطح بزرگ با گالیم‌آرسناید را فراهم کند [۴۵]. همچنین، شبیه‌سازی تئوری نشان می‌دهد که اتصال هترو گرافن/گالیم‌آرسناید پتانسیل رفتارهای فتوولتائیک برتری نسبت به اتصال‌های گرافن/سیلیکون دارد [۴۶].

تنها استفاده از اتصال گالیم‌آرسناید برای اینکه سلول‌های خورشیدی با بازده بالاتر داشته باشیم کافی نیست. در حقیقت، بهبود بازده آن قطعاً با افزودن لایه‌های دیگر مواد در بالا و پایین اتصال، انجام می‌شود [۴۷].

## ۴.۲ اتصال شاتکی

تماس ساده بین یک فلز و یک نیم‌رسانا می‌تواند به دو افزاره ایده‌آل منجر شود: اتصال‌های اهمی و اتصال‌های یکسوکننده (که اتصال شاتکی نامیده می‌شود). اتصال‌های اهمی معمولاً با نیم‌رساناهایی با ناخالصی بسیار بالا تشکیل می‌شوند. در یک اتصال اهمی ایده‌آل، جریان I به صورت خطی با ولتاژ اعمال شده  $V$  تغییر می‌کند و نسبت  $V/I$  ترکیبی از مقاومت اتصال ( $R_c$ )

(و مقاومت سری ( $R_s$ ) است:

$$\frac{V}{I} = R_c + R_s \quad (1.2)$$

که  $R_s$  مقاومت متقابل دو ماده مربوط به اتصال است. مقاومت اتصال کمتر باعث اتصال اهمی بهتر است. اتصال‌های اهمی با  $R_c$  کم برای عملکرد افزاره‌های نیم‌رسانا با سرعت بالا مهم هستند. در مقابل، اتصال‌های شاتکی ایده‌آل به عنوان یک دیود بی‌نقص با جریان زیاد و مقاومت اتصال بسیار کم (جهت به اصطلاح مستقیم که مطابق با حالت "روشن" دیود است) و جریان ناچیز با مقاومت بی‌نهایت در جهت مخالف (جهت معکوس یا حالت "خاموش" است)، در یک جهت عمل می‌کنند. اتصال‌های شاتکی معمولاً با نیم‌رساناهای با ناخالصی کم به خوبی شکل می‌گیرند.

در عمل اتصال‌های فلز/نیم‌رسانا<sup>۱۵</sup> ( $M/S$ ) بوسیله رشد فلز روی سطح تمیز یک ویفر نیم‌رسانا ساخته می‌شوند. اتصال‌های واقعی  $M/S$  نه کاملاً اهمی و نه کاملاً شاتکی هستند. یک اتصال تقریباً خوب از دو مورد ایده‌آل تنها با انتخاب مناسب مواد فلزی و نیم‌رسانا و با احتیاط در فرآیند ساخت می‌تواند به دست آید.

دیودهای شاتکی اجزای مهم الکترونیکی هستند که در بسیاری از کاربردها مانند سلول‌های خورشیدی، آشکارسازها، ترانزیستورهای تزویج، MESFETها، HEMTها، مخلوط‌کننده‌های مایکروویو<sup>۱۶</sup>، تضعیف‌کننده‌های RF، یکسوکننده‌ها، دیودهای زبر، مدارهای مجتمع مختلف و غیره استفاده می‌شوند [۱۸].

## ۱.۴.۲ سد شاتکی

شکل ۳.۲ مدل شاتکی اتصال  $M/S$  و برخی مقادیر مربوطه را معرفی می‌کند. در اینجا فرض می‌کنیم که یک اتصال ساده بین فلز و نیم‌رسانا بدون هیچ لایه‌ی میانی ایجاد شده است. در این جا به عنوان مثال بستر را نوع  $n$  می‌گیریم. برای نیم‌رساناهای نوع  $p$  همه چیز به شیوه‌ای مشابه کار می‌کند و الکترون‌ها با حفره‌ها و محور انرژی معکوس، جایگزین می‌شوند.

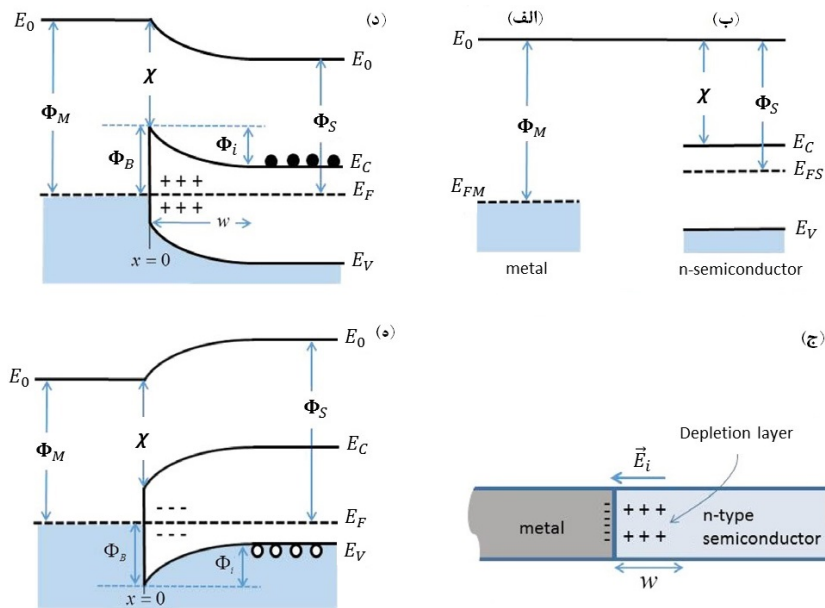
با توجه به شکل ۳.۲، سطح خلاء یا انرژی الکترون آزاد ( $E_0$ )، که یک سطح مرجع مناسب برای انرژی است، سطح انرژی الکترون‌ها با انرژی جنبشی صفر در خارج از ماده چه برای فلز و چه برای نیم‌رسانا می‌باشد.  $E_0$ ، با واحد الکترون‌ولت (eV) بیان می‌شود.

انرژی فرمی  $E_F$  نشان دهنده بالاترین سطح انرژی اشغال شده در دمای  $T = 0K$  در یک فلز است؛ همانطور که در فلزات، سطح‌های اشغال شده را از اشغال نشده در  $T = 0K$  مجزا می‌کند و در یک نیم‌رسانا غیرتبهگن، در فاصله بین باند ظرفیت و باند هدایت قرار می‌گیرد (شکل ۳.۲ (ب)).  $E_F$  پارامتری است که در توابع توزیع فرمی-دیراک ظاهر می‌شود و بیانگر آن است که یک الکترون سطح با انرژی  $E$  را در دمای مطلق ( $kT = 8/62 \times 10^{-5} eV/k$ )، ثابت

<sup>۱۵</sup> Metal/Semiconductor

<sup>۱۶</sup> Microwave mixers





شکل ۳.۲: سد شاتکی که توسط یک فلز با تابع کار زیاد با یک نیم‌رسانا نوع n شکل گرفته است. (الف) تابع کار فلز  $\Phi_M$  و انرژی فرمی  $E_{FM}$ . (ب) تابع کار نیم‌رسانا  $\Phi_S$ ، وابستگی الکترون  $\chi$ . (ج) بار در محل اتصال فلز/نیم‌رسانا (M/S). (د) نمودار باند در حالت تعادل برای اتصال M/S.  $\Phi_i$  پتانسیلی است که مانع جریان الکترون‌ها (نقاط سیاه) از نیم‌رسانا به فلز می‌باشد، در حالی که  $\Phi_B$  ارتفاع سد شاتکی SBH برای جریان الکتریکی در جهت مخالف است.  $w$  عرض ناحیه تخلیه و مربوط به بخش خم شده از باندهای انرژی است. (ه) نمودار باند در حالت تعادل از یک فلز با یک نیم‌رسانا نوع p با شرط  $\Phi_M < \Phi_S$  (حلقه‌های خالی نشان‌دهنده حفره‌ها) است [۱۸].

بولتزمن است) با احتمال  $\frac{1}{p}$  اشغال کرده باشد:

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E - E_F)/kT}} \quad (2.2)$$

بر طبق معادله (۲.۲)، برای  $T \gg 0K$ ، الکترون‌ها می‌توانند سطوح بالاتر از سطح فرمی را اشغال کنند. برای فلزات، تابع کار  $\Phi_M = E_0 - E_{FM}$ ، انرژی مورد نیاز برای جابه‌جایی یک الکترون از سطح فرمی  $E_{FM}$  به سطح خلأ است و مقدار آن فقط به نوع فلز بستگی دارد (تابع کار فلزها بین ۲ تا ۶ الکترون‌ولت است). در نیم‌رساناها، موقعیت  $E_{FS}$  به مقدار و نوع ناخالصی بستگی دارد. همانطور که در شکل ۳.۲ (ج) و (ه) نشان داده شده است برای یک نیم‌رسانا نوع n،  $E_{FS}$  به  $E_C$  نزدیکتر (پایین‌ترین سطح انرژی مجاز برای باند هدایت حدود  $4/05$  الکترون‌ولت برای سیلیکون (Si) می‌باشد) و یا برای یک نیمه هادی با ناخالصی نوع p،  $E_{FS}$  به  $E_V$  نزدیکتر (بالاترین سطح انرژی مجاز برای باند ظرفیت حدود  $5/17$  الکترون‌ولت برای سیلیکون است). است. چگالی الکترون و حفره در یک نیم‌رسانا که به ترتیب با n و p مشخص می‌شود، در واقع با این روابط با انرژی فرمی مرتبط است:

$$n = N_c e^{-(E_c - E_{FS})/KT} \quad (3.2)$$

$$p = N_v e^{-(E_{FS} - E_v)/KT} \quad (۴.۲)$$

به طوری که  $N_c = 2(2\pi m_e^* KT/h^2)^{3/2}$  و  $N_v = 2(2\pi m_p^* KT/h^2)^{3/2}$  چگالی حالات موثر در باند هدایت و ظرفیت هستند و  $m_e^*$  و  $m_p^*$  به ترتیب جرم موثر الکترون ها و حفره ها هستند  $(h = 4/136 \times 10^{-15} eVs)$ . از آنجا که در نیمرساناها سطح فرمی ثابت نیست و با تغییر ناخالصی تغییر می کند، تابع کار نیمرسانا  $(\Phi_S = E_o - E_{FS})$ ، پارامتر خوبی برای توصیف آن نیست. مانند  $\Phi_M$  برای فلزات، یک کمیت ثابت که بتواند برای توصیف یک ماده نیمرسانا مورد استفاده قرار گیرد، تفاوت بین سطح خلاء و باند هدایت است و به عنوان وابستگی الکترون به ماده شناخته می شود که به صورت  $\chi$ <sup>۱۷</sup> بیان می شود:

$$\chi = E_o - E_c \quad (۵.۲)$$

(نمونه هایی از وابستگی الکترونی برای برخی مواد عبارتند از:  $4/05 eV$  برای Si،  $4/07 eV$  برای گالیم آرسناید (GaAs)،  $4/0 eV$  برای ژرمانیوم (Ge).)

هنگامی که یک اتصال بین فلز با تابع کار  $\Phi_M$  و نیمرسانا با تابع کار متفاوت  $\Phi_S$  شکل می گیرد (در مثال شکل ۳.۲ الف-د)،  $\Phi_M > \Phi_S$  است، انتقال بار اتفاق می افتد تا زمانی که سطوح فرمی به تعادل رسیده و باهم برابر شوند. در مثال شکل ۳.۲ الف) و ب)، موقعیت های مختلف سطح فرمی نشان می دهد که الکترون ها در نیمرسانا نوع n دارای مقدار متوسط انرژی بالاتری نسبت به فلز هستند؛ هنگامی که تماس برقرار می شود، اختلاف در انرژی متوسط باعث انتقال الکترون ها از نیمرسانا به فلز می شود. انتقال بار موجب تشکیل یک ناحیه در محل تماس نیمرسانا می شود که خالی از حامل های بار است و ناحیه ی تخلیه نامیده می شود.

هنگامی که الکترون ها انتقال می یابند (و به طور مشابه حفره ها برای بستر نوع p)، یون ها در آنجا باقی می مانند. در شکل ۳.۲ د) چنین ناحیه ای از یون های مثبت در فاصله w از اتصال نشان داده شده است و در نمودار باند شکل ۳.۲ ج) به منطقه با نوارهای خم شده به سمت بالا مربوط است. در ناحیه تخلیه با نوارهای خم شده به بالا شکل ۳.۲ ج)، سطح فرمی نزدیک به  $E_C$  و  $E_V$  نیست، زیرا باید براساس معادلات (۳.۲) و (۴.۲) در این ناحیه با مقادیر p و n کاهش یافته باشد. شکل گیری ناحیه تخلیه در نیمرسانا شرط لازم برای دستیابی به اتصال های شاتکی است.

تماس بین یک نیمرسانا نوع n با فلز زمانی که  $\Phi_M < \Phi_S$  باشد منجر به تزریق الکترون از فلز به نیمرسانا می شود. در این مورد هیچ ناحیه تخلیه ای شکل نمی گیرد، زیرا فلز می تواند یک منبع نامتناهی از الکترون باشد و اتصال اهمی می شود. هنگامی که یک ناحیه تخلیه در نیمرسانا ایجاد می شود، موجب تشکیل یک ناحیه بسیار باریک از بار با علامت مخالف در سطح

<sup>۱۷</sup>Electron Affinity

فلز (شکل ۳.۲ (د)) می‌شود. این دو لایه با بار مخالف، که اتصال فلز/ نیم‌رسانا را شبیه به یک خازن با صفحات موازی می‌کنند، موجب ایجاد یک میدان الکتریکی  $\vec{E}_i$  و پتانسیل  $\varphi_i = \Phi_i/q$  در محل اتصال می‌شود (که در آن  $q = 1/6 \times 10^{-19} C$  نشان دهنده مقدار بار الکترون است) (شکل ۳.۲ (ج)) و مانع نفوذ بیشتر بار خالص بین نیم‌رسانا و فلز می‌شود.

$$\Phi_i = \Phi_M - \Phi_S \quad (۶.۲)$$

میدان الکتریکی  $\vec{E}_i = -\vec{\nabla}\Phi_i$  که در مثال شکل ۳.۲ جهتی از بار مثبت ناحیه تخلیه نیم‌رسانا نوع n به سمت بار منفی در سطح فلز دارد، میدان الکتریکی داخلی ساخته شده است که با حرکت الکترون‌ها از نیم‌رسانا به فلز مخالف است. این میدان حداکثر مقدار خود را در محل تماس  $M/S$  ( $x = 0$  در شکل ۳.۲) دارد و با فاصله از سطح کاهش می‌یابد، به طوری که در لبه‌ی ناحیه تخلیه (به عنوان مثال در  $x = w$ ) ناپدید می‌شود. مهمترین ویژگی دیاگرام انرژی در  $M/S$  در حالت تعادل، همان‌طور که در شکل ۳.۲ (ج) برای نیم‌رسانا نوع n نشان داده شده است، یک ناپیوستگی در حالات انرژی مجاز است که منجر به شکل‌گیری یک سد انرژی در محل تماس فلز/ نیم‌رسانا،  $\Phi_B$ ، که به عنوان سد شاتکی<sup>۱۸</sup> (SB) شناخته شده است، می‌شود.  $\Phi_B$  مانع حرکت الکترون‌ها از فلز به نیم‌رسانا نوع n است و نقش مشابه با  $\Phi_i$  ولی با تفاوتی مهم دارد که در حالی که  $\Phi_i$  را می‌توان با استفاده از یک ولتاژ اعمالی خارجی تغییر داد،  $\Phi_B$  توسط ولتاژ اعمالی تحت تاثیر قرار نمی‌گیرد (مگر برای اثرات مرتبه دوم).  $\Phi_B$  ارتفاع سد شاتکی (SHB) نامیده می‌شود و با توجه به تابع کار فلز و وابستگی الکترون به نیم‌رسانا تعیین می‌شود (در شکل ۳.۲ (ج) نشان داده شده است):

$$\Phi_B = |\Phi_M - \chi| \quad (۷.۲)$$

رابطه ی (۷.۲) به عنوان رابطه شاتکی-موت شناخته می‌شود.  $\Phi_M$  و  $\chi$  هر دو مقادیری ثابت هستند و توسط سطح نرمالی از ناخالصی و یا تغییر ولتاژ اعمالی تغییر نمی‌کنند و در نتیجه ارتفاع سد شاتکی نیز ثابت خواهد بود.

همان‌طور که در شکل ۳.۲ (ه) نشان داده شده یک سد مشابه، برای جریان حفره‌ها از فلز به نیم‌رسانا در محل اتصال فلز/ نیمه هادی نوع n شکل گرفته است. رابطه شاتکی-موت برای یک اتصال  $M/S$  بر روی یک بستر نوع p می‌تواند به این صورت نوشته شود:

$$\Phi_B = E_g - |E_F - \chi| \quad (۸.۲)$$

به طوری که

$$E_g = E_c - E_v. \quad (۹.۲)$$

شکاف انرژی نیم‌رسانا است. بر طبق معادله‌های (۷.۲) و (۸.۲) انتظار می‌رود مجموع SBH‌ها برای الکترون‌ها و حفره‌های یک اتصال فلز/ نیم‌رسانا با ناخالصی نوع n و p برابر با شکاف انرژی

<sup>۱۸</sup>Schottky barrier

باشد:

$$\Phi_{B,n} + \Phi_{B,p} = E_g \quad (10.2)$$

سد شاتکی یکی از مهم‌ترین ویژگی‌های اتصال‌های یکسوکننده‌ی  $M/S$  است و SBH بر طبق رابطه‌ی شاتکی-موت و روابط (۷.۲) و (۸.۲) با انتخاب مواد قابل کنترل می‌شود و مستقل از میزان ناخالصی نیم‌رسانا است. یک SBH بزرگتر، معمولاً با فلزات با تابع کاربرگ در نیم‌رسانا‌های نوع  $n$  یا فلزات با تابع کار کوچک در نیم‌رسانا‌های نوع  $p$  به دست می‌آید [۴۸، ۴۹، ۵۰، ۵۱].

در هر اتصال واقعی، یک شکاف نازک از چند لایه اتم، بین فلز و نیم‌رسانا وجود دارد. در حقیقت، این لایه در طراحی نمودارهای باند اتصال شاتکی فلز/نیمه هادی حذف می‌شود؛ با این وجود این لایه برای پیوستگی سطح خلاء در محل تماس ضروری است و موجب کاهش SBH می‌شود ( $E_0$  باید یک تابع پیوسته و یکنواخت در فضا باشد، در غیر این صورت قانون پایستگی انرژی نقض خواهد شد [۴۸]). بنابراین، بهبود مناسب اتصال  $M/S$  نیاز به بررسی یک شکاف فیزیکی در محل تماس دارد (که در این پژوهش از بحث در مورد آن صرف نظر کرده ایم).

اثر دیگری که موجب کاهش SBH نسبت به پیش‌بینی رابطه شاتکی-موت می‌شود اثر شاتکی است. در اینجا ذکر می‌کنیم که وقتی یک الکترون در فاصله‌ای نزدیک  $x$  به یک فلز قرار می‌گیرد، یک بار مثبت در سطح فلز ایجاد می‌شود. این بار نیرویی تولید می‌کند که معادل آن یک بار مثبت برابر (بار فرضی) در فاصله  $-x$  در داخل فلز حاصل می‌شود. تعامل بین الکترون و بار فرضی آن منجر به یک انرژی پتانسیل  $(-q^2 / (16\pi\epsilon_0 x^2))$  می‌شود. این انرژی با انرژی پتانسیل الکترون در یک میدان الکتریکی خارجی  $\vec{E}$  در سطح فلز ترکیب شده و منجر به کشیدن الکترون از فلز به سمت خود می‌شود،  $-q|\vec{E}|x$ ، و در نتیجه باعث می‌شود که ارتفاع سد اندکی کاهش یابد [۵۲].

## ۲.۴.۲ انتشار گرمایونی و ویژگی I-V

به طور کاملاً متفاوت با اتصال‌های نیم‌رسانا/نیم‌رسانا (p-n)، انتقال جریان در یک اتصال  $M/S$  به صورت عمده از طریق حامل‌های اکثریت، یعنی الکترون‌ها برای نیم‌رسانا نوع  $n$  و حفره‌ها برای نیم‌رسانا‌های نوع  $p$ ، می‌باشد. با اعمال ناخالصی متعادل به نیم‌رساناها که به منظور ساخت دیودهای شاتکی به کار می‌روند (غلظت ناخالصی معمولاً  $10^{17} \text{ cm}^{-3} \times 5 \leq N$  است)، انتشار به صورت گرمایی، الکترون‌ها (حفره‌ها) را برای عبور از روی سد پتانسیل  $\Phi_i$  و رفتن از نیم‌رسانا به فلز برانگیخته می‌کند (انتشار گرمایونی<sup>۱۹</sup> TE) که فرآیند غالب در تولید جریان این اتصال است (شکل ۴.۲ الف)). بر این اساس، ویژگی‌های I-V اتصال‌های شاتکی

<sup>۱۹</sup>Thermionic Emission

$M/S$  (شکل ۴.۲ ج)) با استفاده از تئوری انتشار گرمایونی به صورت دقیق بیان می‌شوند. دیگر مکانیزم‌های انتقال عبارتند از انتشار میدان گرمایونی<sup>۲۰</sup> (TFE) و انتشار میدان<sup>۲۱</sup> (FE)، که تونل‌زنی از میان سد را شامل می‌شوند (شکل ۴.۲ الف).

طبقه‌بندی مکانیزم‌های غالب به ترتیب TE، TFE و FE است. در دمای اتاق، بسترهای سیلیکونی نوع n با ناخالصی  $3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3} \leq N$  در دسته‌ی اول قرار دارند، در حالی که TFE در رنج ناخالصی  $2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3} \leq N < 3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  و FE در ناخالصی‌های سنگین‌تر، تاثیرگذار می‌شوند.

بسیاری از افزاره‌هایی که رفتارشان مشابه با اتصال‌های گرافن/نیم‌رسانا است و  $N \leq 3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  دارند در دسته‌ی اول جای دارند. از این رو، در اینجا تنها انتشار گرمایونی را در نظر می‌گیریم. شکل ۴.۲ (د) و (ه) نمودارهای باند انرژی را، هنگامی که یک ولتاژ بایاس  $V$ ، مثبت (مستقیم) یا منفی (معکوس) به فلز (با توجه به نیم‌رسانا نوع n اعمال می‌شود) نشان می‌دهند (شکل ۴.۲ ب).  $V$  بر عرض ناحیه تخلیه که در بایاس مستقیم (معکوس) باریک (عریض) شده است به صورت زیر تاثیر می‌گذارد:

$$w = \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0}{qN}(\varphi_i - V - KT/q)} \quad (11.2)$$

که  $\varphi_i$  پتانسیل داخلی پیوند است ( $KT/q \approx 26 \text{ mV}$ ) که در دمای اتاق اغلب نادیده گرفته می‌شود) [۵۲]. در بایاس معکوس (مستقیم)، انرژی فرمی نیم‌رسانا،  $E_{FM}$ ، با توجه به  $E_{FM}$  فلز، به پایین (بالا) جابه‌جا می‌شود و باعث افزایش (کاهش) سد پتانسیل  $\varphi_{i-V}$ ، که منجر به یکسوکندگی است می‌شود، اما باید توجه داشت که ارتفاع سد شاتکی تحت تاثیر بایاس قرار نمی‌گیرد.

همان‌طور که می‌دانیم، تابع کار فلز به علت چگالی حالات بالای فلز در سطح فرمی، مستقل از ولتاژ بایاس است.  $E_{FM}$  نیز که به فاصله  $\Phi_M$  از سطح انرژی  $E_0$  بستگی دارد، عملاً توسط بایاس تحت تاثیر قرار نمی‌گیرد [۱۸]. تغییرات در چگالی الکترون ( $\delta n$ ) در باند هدایت نیم‌رسانا نیازمند تغییر بزرگی در انرژی فرمی  $\delta E_{FS}$ ، با توجه به  $E_C$  است. بنابراین موقعیت سطح فرمی نیم‌رسانا توسط ولتاژ بایاس تغییر می‌کند.

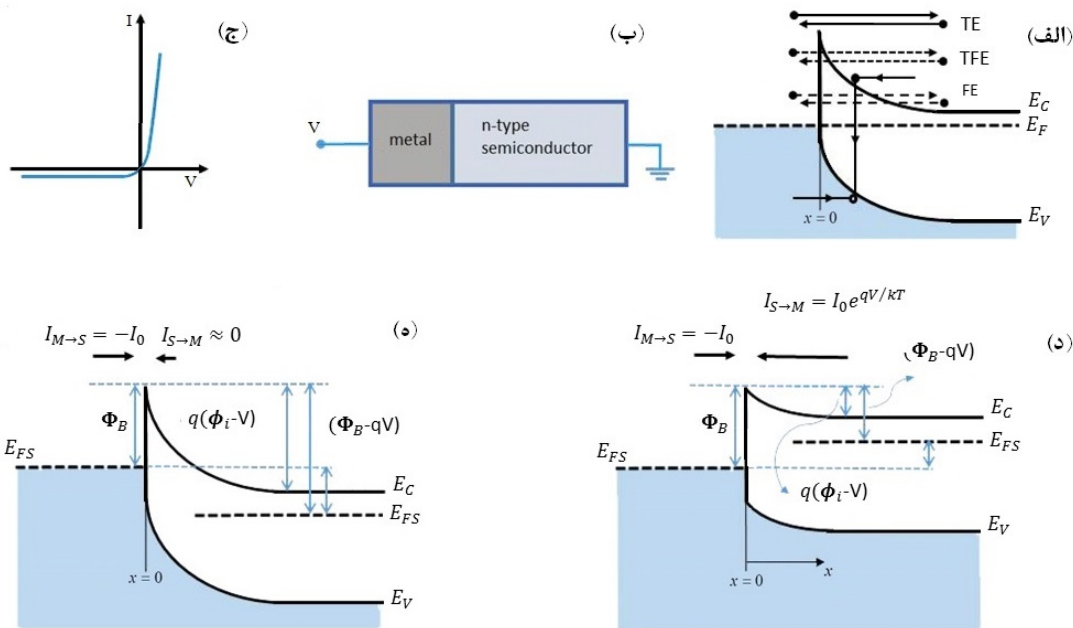
با توجه به شکل ۴.۲ (د)، نظریه انتشار گرمایونی فرض می‌کند که انرژی فرمی در نیم‌رسانا، در تمام مسیر تا  $x = 0$  مسطح است. سپس بر اساس معادله (۳.۲)، چگالی الکترون در  $x = 0$  می‌تواند به این صورت بیان شود:

$$n = N_C e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}} = N_C e^{-\frac{\Phi_B - qV}{kT}} \quad (12.2)$$

جریان  $I_{S \rightarrow M}$ ، که جریان حاصل از جاری شدن الکترون‌ها از نیم‌رسانا به فلز است، می‌تواند با ضرب چگالی بار  $-qn$  در محل تماس برای منطقه  $A$  از اتصال و میانگین مقدار ثابت  $x$ ،

<sup>۲۰</sup> Thermionic Field Emission

<sup>۲۱</sup> Field Emission



شکل ۴.۲: (الف) فرآیندهای اصلی انتقال در یک اتصال شاتکی  $M/S$ : TE، TFE، FE. (ب) نحوه اعمال ولتاژ به MSJ. (ج) مشخصه نمودار I-V ایده آل یک اتصال شاتکی یکسوکننده. (د) نمودارهای باند انرژی در اتصال شاتکی ایده آل فلز/نیم‌رسانا نوع n در بایاس مستقیم ( $V > 0$ ). (ه) نمودارهای باند در بایاس معکوس ( $V < 0$ ). فلش‌های مرتبط با جریان در (د) و (ه) جهت جریان الکتریکی را نشان می‌دهد [۱۸].

از سرعت گرمایی الکترون‌ها  $\bar{v}_{th,x}$  (با استفاده از توزیع سرعت ماکسول-بولتزمن  $\bar{v}_{th,x} = \int |v_x| \left(\frac{m^*}{\sqrt{\pi}kT}\right)^{3/2} e^{-\frac{m^*v^2}{2kT}} d^3v = \sqrt{\frac{2kT}{\pi m^*}}$ ) به این صورت به دست آید:

$$I_{S \rightarrow M} = \frac{1}{4} A (-qn) (-\bar{v}_{th,x}) = A \frac{4\pi q m^* k^2}{h^3} T^2 e^{-\frac{\Phi_B - qV}{kT}} \quad (13.2)$$

(ضریب  $1/4$  تنها شامل الکترون‌هایی است که در جهت منفی  $x$  با توجه به شکل ۴.۲ (الف) در نظر گرفته شده‌اند). بر طبق معادله (۱۳.۲)،  $I_{S \rightarrow M}$  وابسته به SBH است، اما مستقل از شکل سد است. با این حال، به شدت به ولتاژ بایاس اعمال شده بستگی دارد و به طور نمایی نسبت به ولتاژ مثبت (منفی) افزایش (کاهش) می‌یابد.

جریان کل اتصال می‌تواند با اضافه کردن جریان  $I_{M \rightarrow S}$  (مربوط به جریان الکترون‌ها از فلز به نیم‌رسانا است) به  $I_{S \rightarrow M}$  بدست آید (حفره‌ها، که برای نیم‌رسانا نوع n حامل‌های اقلیت هستند، سهم ناچیزی در جریان اتصال دارند. همچنین ما جریان حاصل از تولید/بازترکیب الکترون-حفره در لایه تخلیه نیم‌رسانا را در نظر نمی‌گیریم). در بایاس صفر، هیچ جریان خالصی وجود ندارد و جریان الکترون از نیم‌رسانا به فلز با جریان در جهت مخالف به تعادل رسیده است:

$$I_{S \rightarrow M} + I_{M \rightarrow S} = 0 \quad (14.2)$$

یا

$$I_{S \rightarrow M} = -I_{M \rightarrow S} = A \frac{4\pi q m^* k^2}{h^3} T^2 e^{-\frac{\Phi_B}{kT}}, \quad (15.2)$$

به طوری که

$$A^* = 4\pi q m^* k / h^3 \quad (16.2)$$

به عنوان ثابت ریچاردسون (حدود  $112 \text{ Acm}^{-2} \text{ K}^{-2}$  برای n-Si و  $32 \text{ Acm}^{-2} \text{ K}^{-2}$  برای p-Si) شناخته می‌شود. اگرچه ثابت ریچاردسون فقط به خواص نیم‌رسانا بستگی داشته باشد، نشان داده شده است که فلز ممکن است تغییراتی در مقدار آن ایجاد کند [۵۳].

از آنجا که استفاده از بایاس، سطح فرمی فلز را تغییر نمی‌دهد،  $\Phi_B$ ، و همچنین جریان الکترون‌ها از فلز به نیم‌رسانا  $I_{M \rightarrow S}$  تحت تاثیر قرار نمی‌گیرند. در نهایت، با اضافه کردن روابط (۱۳.۲) و (۱۵.۲) جریان کلی اتصال را با اعمال ولتاژ  $V$  بدست می‌آید:

$$I = I_{S \rightarrow M} + I_{M \rightarrow S} = I_0 (e^{\frac{qV}{kT}} - 1). \quad (17.2)$$

$I_0$  را در اصطلاح جریان اشباع معکوس یا جریان نشتی دیود، به این صورت تعریف می‌شود:

$$I_0 = AA^* T^2 e^{-\frac{\Phi_B}{kT}}. \quad (18.2)$$

هرچه  $I_0$  کمتر باشد بهتر است و مقدار آن به شدت به درجه حرارت و SBH بستگی دارد. حتی تغییر کوچک  $\delta\Phi_B$  می‌تواند اثر قابل توجهی روی آن داشته باشد.

معادله (۱۷.۲) معادله دیود ایده آل است که در هر دو جهت بایاس مستقیم و معکوس معتبر است و رفتار کیفی منحنی I-V یک اتصال  $M/S$  یکسوکننده را توصیف می‌کند (شکل ۴.۲ ج). بر این اساس، در بایاس مستقیم، جریان غالب  $I_{M \rightarrow S}$  است و با ولتاژ  $V$  به صورت نمایی افزایش می‌یابد، در حالی که در بایاس معکوس جریان تقریباً ثابت است و به صورت  $I_{S \rightarrow M} = -I_0$  می‌باشد (در بایاس معکوس  $I_{S \rightarrow M}$  به شدت تضعیف شده و تقریباً صفر است زیرا سد پتانسیل برای جریان الکترون‌ها از نیم‌رسانا به فلز  $\Phi_i - qV > \Phi_B$  است).

انحراف از رفتار ایده‌آل در افزاره‌های واقعی اغلب مشاهده می‌شود. در بایاس مستقیم، جریان می‌تواند با قرار دادن یک پارامتر  $\eta$  در معادله‌ی نمایی (۱۷.۲) بهبود یابد. همچنین در جریان‌های بالاتر، یک مقاومت سری  $R_S$  که شامل مقاومت زیاد نیم‌رسانا، فلز و اتصال‌های می‌شود، اهمیت می‌یابد زیرا باعث کاهش ولتاژ موثر اعمالی به اتصال می‌شود:

$$V_{eff} = V - R_S I \quad (19.2)$$

سپس معادله‌ی (۱۷.۲) می‌تواند به صورت زیر بازنویسی شود

$$I = I_0 (e^{\frac{e(V - R_S I)}{\eta k T}} - 1) \quad (20.2)$$

که در آن  $\eta$  فاکتور ایده‌آل نامیده می‌شود و یکی دیگر از معیارهای مهم اتصال  $M/S$  است (برای یک اتصال واقعی با کیفیت خوب  $\eta \approx 1 \sim 0.5$  است)، که انحراف از انتشار گرمایونی را با در نظر گرفتن درجه‌ای از نقص‌ها و دیگر اثرات اضافی غیر گرمایونی انتقال، اندازه‌گیری می‌کند [۵۴، ۵۵].

## ۵.۲ کاربردی‌های دیوده‌های شاتکی

### ۱.۵.۲ آشکارسازهای نوری

آشکارسازهای نوری، نور را جذب و به سیگنال الکتریکی تبدیل می‌کنند. الکترودهای شفاف، مانند گرافن، که می‌توانند یک اتصال یکسوسوده را تشکیل دهند، در این زمینه مناسب هستند. آشکارسازها معمولاً در بایاس معکوس کار می‌کنند. شکل ۵.۲ (الف-ج) سه روش اصلی تولید جریان نوری در آشکارسازها را نشان می‌دهد که بسته به انرژی نور تابشی و ارتفاع سد شاتکی ممکن است هر کدام اتفاق بیفتند.

ویژگی اساسی آشکارسازهای نوری بازده کوانتومی خارجی (EQE) است (گاهی بازده تبدیل فوتون تصادفی<sup>۲۲</sup> (IPCE) نیز نامیده می‌شود)، که به صورت تعداد حامل تولید شده از هر فوتون تعریف می‌شود:

$$EQE = \frac{I_{ph}/q}{\Phi_{in}} = \frac{I_{ph}}{q} \frac{hv}{P_{in}}. \quad (21.2)$$

در این معادله  $I_{ph} = I_{light} - I_{dark}$ ، جریان تولید شده با نور است،  $\Phi_{in} = P_{in}/hv$ ، جریان فوتون وارد شونده است و  $P_{in}$ ، توان نور تابشی است. بازده کوانتومی در حالت ایده‌آل، یک است. کم بودن مقدار بازده کوانتومی به دلیل جریان از دست رفته در اثر بازترکیب، جذب ناقص، بازتاب و غیره می‌باشد. بازده کوانتومی داخلی IQE نیز با روشی مشابه محاسبه شده است به غیر از اینکه جریان ناشی از فوتون جذب شده را در نظر می‌گیرد ( $\Phi_{abs} = \Phi_{in} A_{abs}$ ) که  $A_{abs}$  شکاف جذب است [۱۸]:

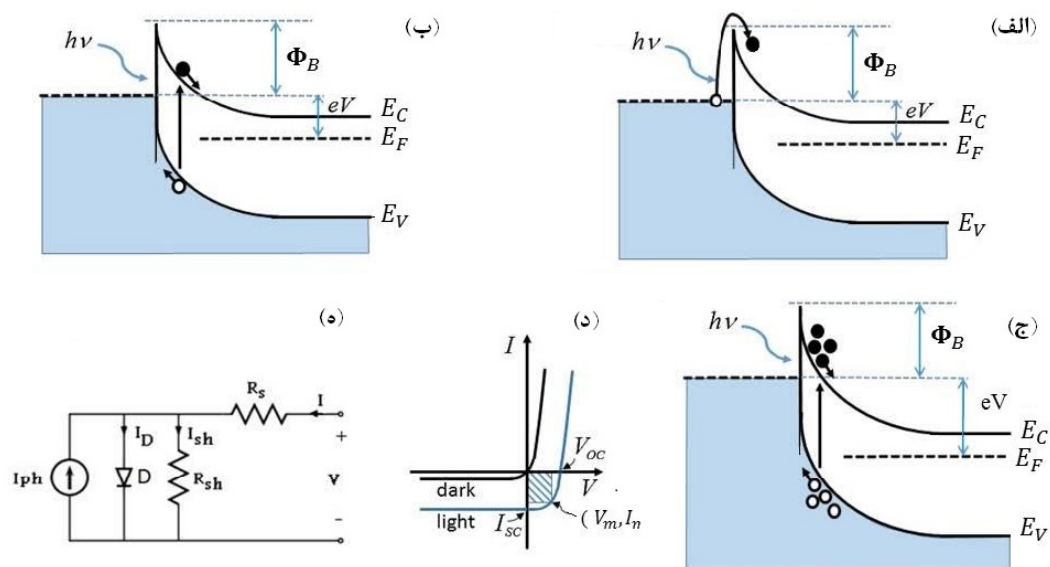
$$IQE = \frac{I_{ph}/q}{\Phi_{abs}}. \quad (22.2)$$

### ۲.۵.۲ سلول‌های خورشیدی

میدان الکتریکی ایجاد شده در ناحیه تخلیه اتصال شاتکی، آن را به یک افزاره فتوولتائیک تبدیل می‌کند. شبیه به آشکارسازها، سلول فتوولتائیک شاتکی به نور با  $hv > \Phi_B$  واکنش نشان

<sup>۲۲</sup> Incident Photon Conversion Efficiency





شکل ۵.۲: بررسی حالات دیود نوری سد شاتکی (فلز/ نیمه هادی). (الف) وقتی  $\Phi_B \leq h\nu < E_g$  (ب) هنگامی که  $h\nu > E_g$  و  $|V| \ll |V_B|$ ، الکترون‌ها بر روی SB برانگیخته می‌شوند. (ج) در  $h\nu > E_g$  و  $|V| \approx |V_B|$  جفت الکترون-حفره‌ها در ناحیه تخلیه نیم‌رسانا ایجاد می‌شوند. (د) جفت الکترون-حفره‌های تولید شده، انرژی کافی برای تولید شکست بهمنی را دریافت می‌کنند. (ه) مشخصه I-V یک دیود شاتکی بدون تابش و تحت تابش نور است. مدار معادل یک سلول خورشیدی دیود شاتکی [۱۸].

می‌دهد و به طیف وسیعی از طول موج‌ها حساس است. ساخت سلول خورشیدی سد شاتکی آسان است و این قابلیت را دارد که به عنوان یک افزاره تبدیل انرژی ارزان قیمت فتوولتائیک برای تولید الکتروسیته در مقیاس بزرگ استفاده شود.

جفت الکترون-حفره تولید شده در ناحیه تخلیه نیم‌رسانا، توسط میدان الکتریکی داخلی از هم جدا می‌شوند. در اتصال‌های شاتکی فلز/ نیم‌رسانا نوع n، الکترون‌ها به طرف نیم‌رسانا حرکت می‌کنند و سطح ولتاژ آن را منفی‌تر می‌کنند، در حالی که حفره‌ها به سوی فلز حرکت می‌کنند و آن را مثبت‌تر می‌کنند. به دلیل این جداسازی بار، هنگامی که افزاره تحت تابش قرار می‌گیرد، در حالت مدار باز، یک ولتاژ مدار باز ( $V_{oc}$ ) در کل افزاره با پایانه‌ی فلزی مثبت و پایانه‌ی نیم‌رسانا منفی ظاهر می‌شود. در حالت اتصال کوتاه نیز یک جریان اتصال کوتاه ( $I_{sc}$ ) ایجاد می‌شود. مشخصه I-V اتصال شاتکی تحت تابش در شکل ۵.۲ (د) نشان داده شده است.

محدودیت سلول‌های خورشیدی اتصال شاتکی، ولتاژ مدار باز کوچک است. ولتاژ مدار باز اغلب حدود چند ده‌م الکترون‌ولت است که به SBH مربوط می‌شود و کوچکتر از مقداری است که برای اتصال‌های p-n به دست می‌آید. مدار معادل کلی سلول خورشیدی شاتکی در شکل ۵.۲ (ه) نشان داده شده است. این مدار شامل پارامترهای زیر است: (۱) مقاومت موازی  $R_{sh}$  که شامل تمام تلفات موازی در طول افزاره فتوولتائیک، شامل جریان نشتی، می‌باشد؛

(۲) مقاومت سری  $R_S$ ، که مدل مقاومت بدنه و اتصال است و مشابه مفهومی است که در معادله (۲۰.۲) ظاهر شد؛ (۳) جریان مستقیم  $I_D$  در اتصال  $M/S$ ؛ و (۴) جریان تولید شده با نور  $I_{ph}$  در کل افزاره. با استفاده از این مدل ساده معادله I-V سلول فوتولتائیک به دست می‌آید:

$$I = I_0 \left( e^{\frac{qV - R_S I}{\eta k T}} - 1 \right) + \frac{V - R_S I}{R_{sh}} - I_{ph}. \quad (23.2)$$

می‌توان  $I_{sc}$  و  $V_{oc}$  را به ترتیب برای  $V = 0$  و  $I = 0$  با استفاده از رابطه‌ی (۲۳.۲) به دست آورد. هنگامی که  $R_S \rightarrow 0$  و  $R_{sh} \rightarrow \infty$

$$I_{sc} \approx -I_{ph} \quad (24.2)$$

و

$$V_{oc} \approx \frac{\eta K T}{e} \ln \left( \frac{I_{ph}}{I_0} + 1 \right) \approx \frac{\eta K T}{e} \ln \left( \frac{I_{ph}}{I_0} \right). \quad (25.2)$$

در نهایت، با جایگزاری  $I_0$  از معادل (۱۸.۲)، رابطه زیر را داریم که نشان می‌دهد  $V_{oc}$  متناسب با  $\Phi_B$  افزایش می‌یابد:

$$V_{oc} \approx \frac{\eta K T}{e} \ln \left( \frac{I_{ph}}{A A^* T^{-2}} \right) + \frac{\eta}{e} \Phi_B \quad (26.2)$$

حداکثر توان تحویلی توسط سلول خورشیدی  $P = I_m V_m$  مربوط به حداکثر مساحت مستطیل شکل منحنی I-V، با محورهای I و V در ربع چهارم است که در شکل ۵.۲ (د) سایه زده شده است. یکی از پارامترهای شایستگی یک سلول خورشیدی، فاکتور پرکنندگی است:

$$FF = \frac{I_m V_m}{I_{sc} V_{oc}} \quad (27.2)$$

که نشان‌دهنده چگونگی نزدیک شدن منحنی I-V به شکل مستطیلی ایده‌آل  $FF = 100\%$  است. بازده کوانتومی خارجی EQE در سلول‌های خورشیدی همانند افزاره‌های آشکارساز تعریف می‌شود. بازده تبدیل توان (PCE)، شاخص کلیدی یک سلول خورشیدی، به عنوان نسبت حداکثر توان خروجی به انرژی ورودی خورشید تعریف شده است:

$$PCE = \frac{I_m V_m}{P_{in}} = \frac{I_{sc} V_{oc} FF}{P_{in}} \quad (28.2)$$

شرایط استاندارد متداول، تابش تحت توده هوای ۱/۵<sup>۲۳</sup> (AM1.5) نامیده می‌شود که نور خورشید را در سطح زمین (در طول تمام طول موج‌های یکپارچه شده) هنگامی که خورشید در یک زاویه حدود ۴۸ درجه عمودی قرار دارد نشان می‌دهد. شرایط توده هوای صفر<sup>۲۴</sup> (AM0)، نشان‌دهنده نور خورشید در خارج از جو زمین است. گرافن بخاطر شفافیت بالا، بازتاب کم، قابلیت انتقال جریان بالا و SBH قابل تنظیم می‌تواند به طور همزمان به عنوان

<sup>۲۳</sup> Air mass 1.5

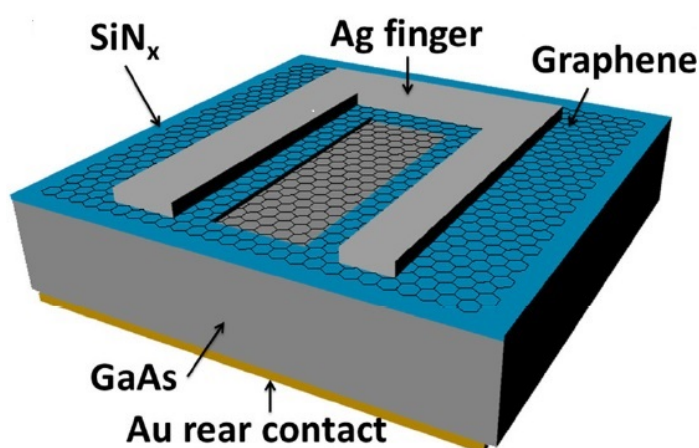
<sup>۲۴</sup> Air mass 0

الکتروود شفاف و پوشش ضد انعکاس و همچنین لایه فعال برای جداسازی و انتقال الکترون-حفره استفاده شود. الکترودهای فلزی لایه نازک مانند  $Cu$ ،  $Ag$ ،  $Pd$  و  $Au$ ، به طور معمول الکترودهای بالایی در سلول‌های خورشیدی  $M/S$  هستند. با این حال، در مقایسه با گرافن، این فلزات دارای خواص نوری کمتر و مقاومت صفحه بیشتر هستند و نیازمند فرآیندهای پیچیده‌تر لایه‌نشانی هستند.

اتصال‌های فلزی ارزان قیمت می‌توانند بر روی سلول‌های خورشیدی  $p-n$  سیلیکونی نیز مورد استفاده قرار گیرند و این یکی از دلایل اصلی است که سلول‌های  $p-n$  همچنان در برابر همتایان شاتکی خود که نیاز به دمای بالا برای تبخیر فلز دارند غالب هستند. با این حال، جایگزینی فلزات با گرافن  $CVD$ ، که به راحتی روی نیم‌رساناها منتقل می‌شود، می‌تواند عملکرد سلول‌های خورشیدی شاتکی را در دمای اتاق بهبود بخشد [۱۸].

## ۶.۲ سلول‌های خورشیدی گرافن/گالیم‌آرسناید

ساختار کلی یک سلول خورشیدی گرافن / گالیم‌آرسناید، از بستر نیم‌رسانا گالیم‌آرسناید که گرافن بر روی آن لایه‌نشانی شده، تشکیل شده است (شکل ۶.۲). یک لایه  $SiN_x$  نیز به عنوان لایه‌ی عایق بین گرافن و گالیم‌آرسناید قرار گرفته است. در اصل، هر نیم‌رسانا با چگالی حامل مناسب می‌تواند با یک فلز مشخص، در صورتی که تفاوت تابع کار آن‌ها به اندازه کافی بزرگ باشد یک اتصال شاتکی تشکیل دهد. گرافن به عنوان یک شبه‌فلز، می‌تواند به عنوان لایه فعال (فلز) به منظور تشکیل دیود شاتکی فلز/نیم‌رسانا با بعضی از نیم‌رساناها، مانند  $Si$ ،  $SiC$ ،  $GaN$ ،  $GaAs$  و اکسید گرافن به کار برده شود [۴۵].



شکل ۶.۲: مدلی از یک سلول خورشیدی اتصال شاتکی گرافن / گالیم‌آرسناید [۵۶].

گالیم‌آرسناید، با شکاف باند مستقیم  $1/42$  الکترون‌ولت، یک انتخاب مناسب برای استفاده در افزاره‌های اپتوالکترونیک است [۵۷]. از لحاظ تئوری،  $GaAs$  نوع  $n$  با وابستگی الکترون

( $\chi = 4.7\text{eV}$ ) کمتر از تابع کار گرافن ( $\Phi_G$ )، یک دیود  $M/S$  با ارتفاع سد شاتکی برابر با  $\Phi_B = \Phi_G - \chi$  ایجاد می‌کند. در نتیجه، پتانسیل داخلی در گالیم‌آرسناید نزدیک به سطح تماس به دلیل اختلاف بین تابع کار گرافن و گالیم‌آرسناید نوع  $n$  تولید می‌شود [۴۵]. تحت نور تابشی، الکترون‌ها و حفره‌هایی که توسط فوتون تابشی برانگیخته شده‌اند، در بستر گالیم‌آرسناید تولید شده و سپس توسط میدان الکتریکی اتصال شاتکی جدا شده و سپس توسط الکترودهای پایین و لایه‌ی گرافن جمع‌آوری می‌شوند [۵۸].

در حقیقت، لایه گرافن نه تنها به عنوان الکتروود شفاف برای اتصال سلول‌های خورشیدی به کار می‌رود بلکه به جداسازی و انتقال حامل کمک می‌کند. علاوه بر این، ارتفاع سد شاتکی می‌تواند برای افزایش بازده سلول‌های خورشیدی مفید باشد. هنگامی که سد شاتکی بزرگتر است، باز ترکیب الکترون و حفره تولید شده در محل اتصال گرافن / گالیم‌آرسناید سخت تر اتفاق می‌افتد. به همین علت گرافن دو لایه که ارتفاع سد شاتکی بزرگ تر دارد بازده تبدیل بهتری را در مقایسه با هم‌تای تک لایه‌ی خود نشان می‌دهد [۴۵]. با توجه به کاهش ضخامت منطقه جذب، سلول‌های خورشیدی لایه نازک دارای جذب ضعیفی از نور تابشی هستند و از این رو بازده تبدیل کم دارند [۵۹] از این رو باید مورد بررسی بیشتر قرار گیرند.



## فصل ۳

# مروری بر منابع و روش تحقیق

### ۱.۳ مقدمه

سلول خورشیدی در قرن نوزدهم کشف شد و از آن زمان دانشمندان و محققان تلاش کرده‌اند تا بازده تبدیل آن را بهبود دهند [۳]. سلول‌های خورشیدی تک اتصالی ساده‌ترین نوع سلول‌های خورشیدی از لحاظ ساخت و فهم ساختار، نسبت به سایر افزاره‌های خورشیدی هستند. با این حال، این سلول‌های خورشیدی برای بازده تبدیل بالاتر نیاز به توسعه و بهینه‌سازی بیشتر دارند. علاوه بر غلظت ناخالصی، ساخت بدون نقص، سازش بین لایه‌های مختلف و بهترین ضخامت برای هر ماده، انتخاب ماده‌ی مناسب نیز یکی از عوامل مهم در بهبود بازده است [۶۰].

سلول‌های خورشیدی مبتنی بر گرافن، روی بسترهای مختلف مانند Si، GaAs و CdS ساخته شده‌اند [۶۰]، و در طی چند سال گذشته پیشرفت‌های زیادی حاصل شده است. همچنین، افزاره‌های فوتوالکتریک اتصال نامتجانس نانوسیم گرافن / نیم‌رسانا نیز ساخته شده‌اند [۶۱]، که ویژگی‌های منحصر به فرد ساختار یک بعدی و خواص فیزیکی مختلف نانوسیم‌های یک بعدی با هم ترکیب شده است [۶۲، ۶۳، ۶۴، ۶۵]. عوامل بسیاری برای بهبود عملکرد سلول‌های خورشیدی توسط تغییر تابع کار گرافن [۶۶]، ناخالصی شیمیایی گرافن [۶۷] و غیره اعمال شده‌اند.

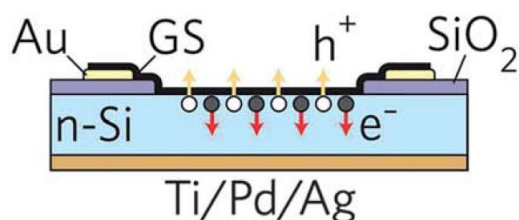
سلول‌های خورشیدی مبتنی بر لایه‌های نازک گالیم‌آرسناید به دلیل بازده نسبتاً بالا و

هزینه ساخت کم مورد توجه پژوهشگران می‌باشند. با این حال، یکی از معایب این سلول‌ها ضریب جذب کم است. با توجه به کاهش ضخامت منطقه جذب، سلول‌های خورشیدی لایه نازک دارای جذب ضعیفی از نور تابشی هستند که موجب کاهش بازده تبدیل سلول می‌شود [۵۹]. روش‌های بسیاری برای افزایش بازده، با به دام‌اندازی نور پیشنهاد شده است [۶۸]. محبوب‌ترین تکنیک نسبت به بقیه، تکنیک لایه نازک است. تکنیک لایه نازک، استفاده از یک پوشش ضد بازتاب<sup>۱</sup> (AR) موثر برای بهبود بازده سلول خورشیدی است. پوشش AR باعث کاهش تلفات بازتابی سلول‌ها می‌شود و از این رو بازده تبدیل سلول خورشیدی افزایش می‌یابد [۳].

## ۲.۳ سابقه موضوع

لی<sup>۲</sup> و همکاران [۶۹]، سلول‌های خورشیدی اتصال شاتکی گرافن/سیلیکون را براساس دیودهای اتصال فلز/نیم‌رسانا با قرار دادن صفحه‌های گرافن بر روی سیلیکون نوع n معرفی کردند.

صفحه گرافن (GS) بوسیله یک روش لایه‌نشانی بخار شیمیایی<sup>۳</sup> (CVD) بر روی لایه‌های نیکل یا فویل که به عنوان بستر مورد استفاده قرار گرفته‌اند، ساخته شده است. ویفرهای سیلیکون نوع n (n-Si) (با غلظت ناخالصی:  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$  الی  $10^{15} \text{ cm}^{-3} \times 3$ ) با یک لایه اکسید سیلیکون با ضخامت  $300 \text{ nm}$  توسط فوتولیتوگرافی و لایه‌برداری مرطوب جهت تهیه پنجره‌های مربعی ( $1 \text{ cm} \times 5 \text{ cm}$  تا  $5 \text{ cm} \times 5 \text{ cm}$ ) مورد استفاده قرار گرفته‌اند که در آن n-Si در معرض اشعه قرار گرفته است. اتصال‌های جلو و پشت توسط اسپری Au روی  $\text{SiO}_2$  و Ti / Pd / Ag بر روی قسمت پشتی n-Si تولید شده‌اند. سپس صفحه گرافن ساخته شده بر روی نیکل یا فویل به بالای ویفر ایجاد شده انتقال داده می‌شود و برای حاصل شدن یک پوشش مناسب از لایه Au و n-Si در زیر آن، به طور طبیعی خشک می‌شود (شکل ۱.۳).



شکل ۱.۳: ساختار سلول خورشیدی و جهت حرکت الکترون‌ها و حفره‌ها [۶۹].

<sup>۱</sup> antireflective

<sup>۲</sup> Li

<sup>۳</sup> Chemical vapor deposition

در این ساختار، صفحه گرافن به عنوان الکتروود بالایی نیمه شفاف و لایه ضد بازتاب عمل می کند که بازتاب آن در حدود ۷۰ درصد در ناحیه مرئی و حدود ۸۰ درصد در ناحیه نزدیک به IR کاهش می یابد. افزاره تحت تابش توده هوای  $1/5$  ( $100\text{ mW/cm}^2$ )، میانگین بازده تبدیل توان (PCE) حدود  $1/65$  و ولتاژ مدار باز را حدود  $0/42$  الی  $0/48$  ولت نشان می دهد.

سیلیکون که دارای مزایای فراوانی از جمله طیف جذب وسیع از تابش نور خورشید، منابع فراوان و تکنیک های پیشرفته پردازش است، مواد اصلی برای پنل های خورشیدی تجاری فعلی می باشد. اما سلول های خورشیدی مبتنی بر سیلیکون مرسوم با اتصال p-n، مواد با هزینه بالا و دقت پردازش پایینی دارند [۹].

به دنبال این، سلول های خورشیدی اتصال نامتجانس گرافن/سیلیکون به طور گسترده مورد مطالعه قرار گرفتند [۷۰، ۷۱]. بر این اساس، تلاش های زیادی برای بهبود بازده سلول خورشیدی اتصال شاتکی مبتنی بر گرافن با استفاده از روش های ضد بازتاب، تغییر تابع کار گرافن [۷۲]، اعمال ناخالصی به گرافن [۱۹، ۷۳] و یا استفاده از یک لایه  $TiO_2$  ضد بازتاب بر روی اتصال گرافن/سیلیکون، انجام شده است [۷۴]. در نتیجه، مقدار PCE تا حد زیادی، حتی بیشتر از  $14/5\%$ ، بهبود یافته است. علاوه بر این، سلول های خورشیدی اتصال شاتکی می توانند با ترکیب گرافن با دیگر نانوساختارهای نیم رسانا از قبیل نانوسیم CdS و نانولوله CdSe ساخته شوند که PCE تقریباً  $1/5\%$  را نشان می دهند [۴۵].

بازده سلول های خورشیدی اتصال شاتکی گرافن/سیلیکون می تواند با اعمال ناخالصی نوع p به گرافن، که باعث کاهش مقاومت سری و افزایش پتانسیل داخلی می شود، بهبود یابد. شی<sup>۴</sup> و همکاران نشان داده اند، لایه های گرافن که با روش لایه نشانی بخار شیمیایی (CVD) ساخته شده است، می توانند به عنوان الکترودهای شفاف نازک با تابع کار قابل تنظیم استفاده شوند. آن ها با غوطه ور کردن لایه های گرافن در محلول  $AuCl_3$ ، ذرات Au را با فرآیند کاهش خود به خودی یون های فلزی روی سطح لایه های گرافن شکل داده اند. حداکثر بازده تبدیل توان افزاره های فتوولتائیک مبتنی بر سیلیکون نوع n با صفحه های گرافن ناخالص شده، حدود  $0/08\%$  می باشد که بیش از  $40$  برابر افزاره های بدون ناخالصی است [۷۵].

فنگ<sup>۵</sup> و همکاران نیز، با استفاده از یک لایه ضد بازتاب و تزریق اسید نیتریک  $HNO_3$  به لایه گرافن، بازده تبدیل توان (PCE) سلول را از  $1/96\%$  به  $3/55\%$  بهبود دادند [۷۶].

یو<sup>۶</sup> و همکارش معتقدند که پیشرفت علم نانو در گرو ادغام نانوساختارهای چند منظوره با یک نانوسیم است که در این استراتژی منابع تغذیه نانومقیاس ضروری هستند. نانوسیم های تک بلوری نیمه رسانا (NWs) یا نانوبلت ها (NBs) توسط روش پایین به بالا (از مقیاس بسیار کوچک تا مقیاس بسیار بزرگ) بر روی هر نوع بستری، از جمله بسترهای انعطاف پذیر، رشد و ساخته شده اند و کاندید خوبی برای ساخت منابع تغذیه نانومقیاس جدید هستند. آن ها

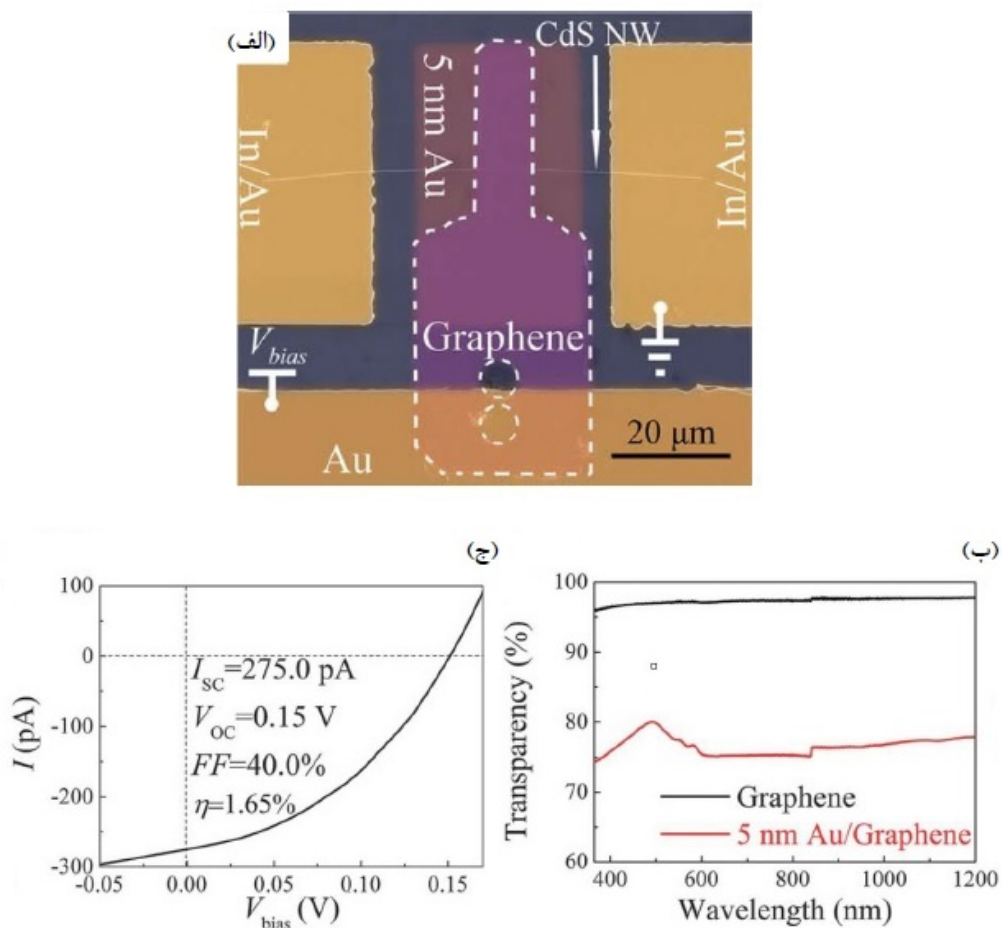
<sup>۴</sup> Shi

<sup>۵</sup> Feng

<sup>۶</sup> Yu

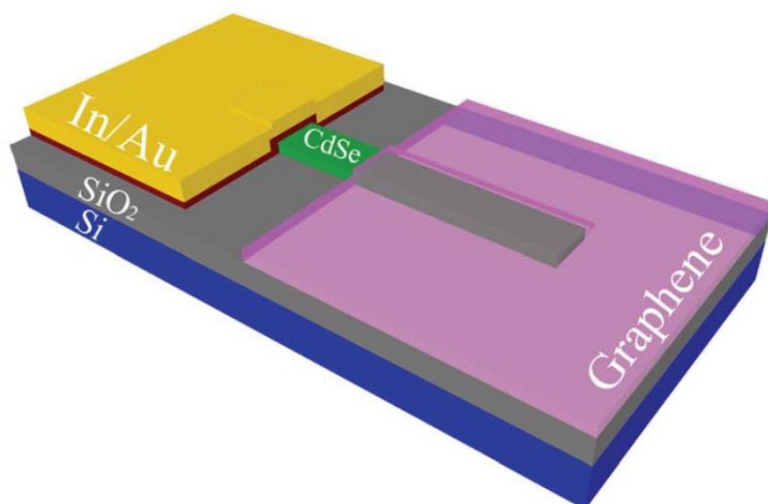


دو نوع از ساختارهای سلول خورشیدی اتصال شاتکی گرافن / تک نانوسیم (NW) را طراحی و مطالعه کرده‌اند. ابتدا با موفقیت یک سلول خورشیدی اتصال شاتکی گرافن / تک نانوسیم CdS را با PCE حدود ۱/۶۵٪ ساخته‌اند. همچنین مفهوم ترکیب الکتروود شاتکی را که شامل یک لایه طلا ۵ نانومتری و یک لایه گرافن است، توسعه داده‌اند (شکل ۴.۳ الف)). در الکتروود شاتکی ترکیب شده، تابع کار نسبتا بالای لایه طلا به ایجاد سد شاتکی با نانوسیم CdS کمک می‌کند و گرافن نیز به افزایش شفافیت و هدایت الکتروود کمک می‌کند. شفافیت ترکیب طلا / گرافن در محدوده طول موج ۴۰۰ تا ۱۲۰۰ نانومتر، بیش از ۷۴٪ است (شکل ۴.۳ ب)). مقاومت صفحه اندازه‌گیری شده از الکتروود ترکیبی حدود ۴۱۰ اهم بر مربع است. سلول‌های خورشیدی ساخته شده پس از ۶ ماه نگهداری در هوا، پایداری محیطی عالی با عملکرد تقریبا بدون تغییر را نشان دادند.



شکل ۴.۳: تصویر سلول خورشیدی اتصال شاتکی CdS NW با یک الکتروود ترکیبی [۹].

سپس آن‌ها با استفاده از مزیت اختلاف بزرگ تابع کار بین CdSe و گرافن، موفق به ساخت سلول‌های خورشیدی اتصال شاتکی گرافن / تک نانوبلت (NB) CdSe شدند (شکل ۳.۳). تحت تابش  $AM1.5G$ ، سلول‌های خورشیدی ساخته شده  $V_{oc}$  را حدود ۵۱٪ ولت،  $J_{sc}$  حدود ۵/۷۵  $mA/cm^2$  و PCE را حدود ۱/۲۵٪ نشان داده‌اند.



شکل ۳.۳: تصویر سلول خورشیدی اتصال شاتکی CdSe NB [۹].

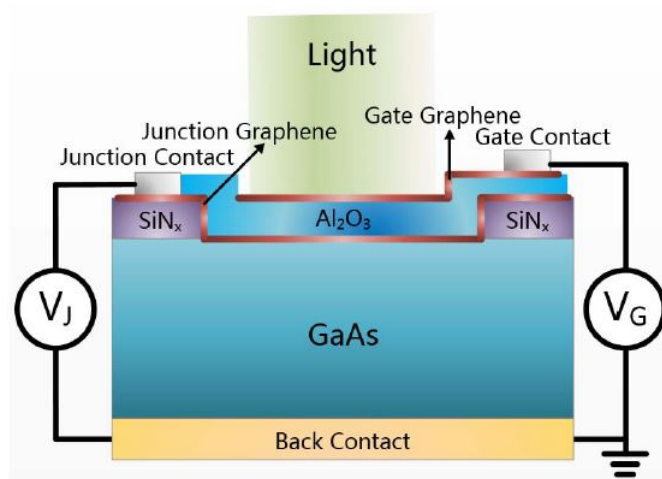
به طور کلی، تعداد زیاد حالات سطح در محل تماس فلز/ نیم‌رسانا در یک سلول خورشیدی اتصال شاتکی منجر به افزایش احتمال بازترکیب در سطح خواهد شد، که به موجب آن، بازده تبدیل توان کاهش می‌یابد. این امر نشان دهنده این است که حالات سطح محل تماس می‌تواند با قرار دادن یک لایه عبور دهنده مناسب بر روی سطح نیم‌رسانا به طور قابل ملاحظه‌ای کاهش یابد [۹].

چن<sup>۷</sup> و همکاران، مدل‌سازی و شبیه‌سازی سلول خورشیدی اثر میدان اتصال شاتکی گرافن- گیت گرافن/ گالیم‌آرسناید را با استفاده از یک الگوریتم توسعه یافته که مبتنی بر روش دیفرانسیلی محدود<sup>۸</sup> (FDM) می‌باشد، انجام داده‌اند و در آن معادلات نفوذ-رانس و پواسون حل شده است. این الگوریتم توسط مقایسه منحنی J-V شبیه‌سازی شده از سلول خورشیدی با یک نمونه‌ی تجربی قبلی، تایید شده است. جذب نور با یک روش ساده به جای حل معادلات ماکسول مورد بررسی قرار گرفته است. نرخ تولید حامل با چشم پوشی از بازتاب در سلول خورشیدی محاسبه شده است که منجر به ضریب جذب بالای گالیم‌آرسناید شده و بازترکیب در گالیم‌آرسناید، منجر به از دست دادن تقریباً ۵٪ از حامل‌های تولید شده با نور در یک لایه گالیم‌آرسناید به ضخامت ۳۵۰ میکرومتر می‌شود.

ولتاژ مدار باز ( $V_{oc}$ ) با افزایش اثر انتقال بار که ناشی از افزایش غلظت ناخالصی گالیم‌آرسناید است، کاهش می‌یابد. اکسید نازک تر منجر به بازده بهتری شده است. از سوی دیگر، این افزاره نشان داده است که گرافن چند لایه، بازده کمتر، اما مقاومت سری بهتری دارد. آن‌ها معتقدند این مقاله تکنیکی برای طراحی و بهینه‌سازی سلول خورشیدی اتصال شاتکی اثر میدان گرافن- گیت گرافن/ گالیم‌آرسناید با عملکرد بهتر ارائه کرده است [۷۷].

<sup>۷</sup>Chen

<sup>۸</sup>Finite-difference method



شکل ۴.۳: تصویر پیکربندی افزاره [۷۷].

گروه میائو<sup>۹</sup>، با اعمال ناخالصی به گرافن توسط مایع یونی بیس (تری فلورو متیل سولفونیل) امید<sup>۱۰</sup> در سلول‌های خورشیدی اتصال شاتکی گرافن تک لایه / سیلیکون نوع n که تحت تابش  $AM1/5$  قرار گرفته است، توانستند به بازده تبدیل توان ۸/۶٪ دست یابند، که بالاترین بازده برای این نوع سلول تا سال ۲۰۱۲ بوده است [۱۹].

کاربرد گرافن در سلول‌های خورشیدی به تحقیق بیشتر در ساختار و پارامترهای بهینه‌سازی افزاره نیاز دارد [۵۸]. به عنوان مثال، چن<sup>۱۱</sup> و همکاران، [۷۸، ۷۹] امکان استفاده از اکسید گرافن کاهش یافته<sup>۱۲</sup> (rGO) را با روش‌های شیمیایی و گرمایی به عنوان الکتروود شفاف برای سلول‌های خورشیدی آلی بررسی کردند. مشخص شد میزان شفافیت rGO تولید شده در محدوده طول موج ۱۸۰۰ – ۴۰۰ نانومتر بیش از ۸۰٪ است، اما مقاومت صفحه بسیار بالاتر از الکتروودهای ITO است. همچنین نشان دادند که رسانایی و شفافیت به ضخامت لایه‌ی گرافن وابسته است. با قرار دادن لایه‌های بیشتری از نانوساختارهای گرافن، رسانایی الکتریکی افزایش پیدا کرد در حالی که شفافیت کاهش یافته است.

ژانگ<sup>۱۳</sup> و همکاران [۸۰]، rGO را بر روی بسترهای قابل انعطاف مانند پلی اتیلن ترفتالات<sup>۱۴</sup> (PET) انتقال دادند و سپس به عنوان الکتروودهای شفاف و رسانا در سلول‌های خورشیدی استفاده کردند. بالاترین PCE در سلول‌های خورشیدی آلی مبتنی بر rGO/PET، ۰/۸۸٪ بدست آمد که هنوز هم پایین‌تر از سلول‌های خورشیدی آلی مبتنی بر ITO است. از طرفی با اعمال یک نیروی خم‌شدگی (حدود ۲/۹٪)، سلول‌های آلی مبتنی بر rGO/PET قادر به

<sup>۹</sup>Miao

<sup>۱۰</sup>bis(trifluoromethylsulfonyl)amide

<sup>۱۱</sup>Chen

<sup>۱۲</sup>reduced graphene oxide

<sup>۱۳</sup>Zhang

<sup>۱۴</sup>Poly(ethylene terephthalate)

تحمل هزار چرخه خم شدن بودند، در حالی که سلول‌های آلی مبتنی بر ITO ترک‌های آشکار در خم شدن نشان دادند.

همچنین نشان داده شده است که گرافن تک لایه به طور قابل ملاحظه‌ای پایداری گالیم‌آرسناید را نسبت به فرآیندهای غیرفعال‌سازی در محلول‌های غیرآبی افزایش می‌دهد [۸۱].

در مقایسه با سلول‌های خورشیدی قدیمی غیر آلی، یکی از محدودیت‌های کلیدی OPVها، پنجره جذب کوچک است. یک استراتژی برای جذب کامل طیف نور خورشید، قرار دادن مواد با شکاف انرژی‌های متفاوت است. با اتصال دو سلول به صورت سری یا موازی، سلول خورشیدی دو طرفه بدست می‌آید، که باید ولتاژ مدار باز ( $V_{oc}$ ) و چگالی جریان اتصال کوتاه ( $J_{sc}$ ) دو برابر نشان دهد [۸۲].

با این حال، پیشرفت سلول‌های خورشیدی آلی دوطرفه، محدود شده است. به عنوان یک بخش کلیدی در OPVهای دو طرفه، لایه اتصال (که لایه واسط هم نامیده می‌شود) لازم است هدایت بالا، جذب نور کم، زبری سطح کم، پوشش متراکم، و ثبات مکانیکی و شیمیایی بالایی داشته باشد. مهم‌تر از همه، مواد بین لایه‌ای باید دارای توانایی برقراری تعامل برای حفظ انطباق کامل و جلوگیری از در هم آمیختن لایه‌های مختلف در افزاره باشد [۸۲، ۸۳]. به تازگی، هوانگ<sup>۱۵</sup> و همکاران [۸۳] یک لایه  $GO/PEDOT : PSS$  را به عنوان لایه اتصال دهنده چسبنده برای OPVهای دو طرفه معرفی کردند.

به طور کلی، هرچقدر تعداد لایه‌های گرافن درگیر در اتصال بیشتر باشد انتظار می‌رود مقاومت لایه کمتر شده و جریان اتصال کوتاه زیادتر و در پی آن بازده بالاتری داشته باشیم. در سلول‌های با چندین لایه گرافن که مقاومت بیشتر است، کاهش انتقال حامل باعث کاهش جریان اتصال کوتاه می‌شود که در این صورت بازده تبدیل توان کمتری در مقایسه با سلول‌های با گرافن تک لایه خواهند داشت [۸۴]. علاوه بر مقاومت ورقه‌های گرافنی، مقاومت حاصل از اتصال شاتکی، میزان ناخالصی لایه‌ی بستر و ارتفاع سد شاتکی نیز در بازده سلول خورشیدی موثر هستند به گونه‌ای که هرچه مقاومت سری کمتر و ارتفاع سد شاتکی بیشتر باشد، جریان اتصال کوتاه بیشتر خواهد بود و در نتیجه بازده بالاتری خواهیم داشت [۴۵].

گروه پاتل<sup>۱۶</sup>، ساختار سلول خورشیدی اتصال هترو گرافن/سیلیکون را تحت شرایط شبیه‌سازی مورد مطالعه قرار داده و پارامترهای مربوط به لایه‌های سلول را توسط نرم افزار AFORS-HET بهینه کرده‌اند. با بهینه‌سازی پارامترهای مختلف گرافن چند لایه نوع n، بهترین نتیجه را با بازده تبدیل توان (۷/۶۲٪) در دمای اتاق بدست آوردند. اما با افزایش تعداد لایه‌های گرافن نوع n تا ۴۰ لایه، بازده تقریباً ثابت و به ۷/۶۲۳٪ افزایش یافته است. پس از بهینه‌سازی بیشتر پارامترهای ویفر سیلیکونی نوع p، حداکثر بازده در حدود ۱۱/۲۳٪ حاصل شده است. آن‌ها نشان دادند که گرافن چند لایه نوع n، می‌تواند به عنوان یک الکتروود هدایتگر عالی عمل کند.

<sup>۱۵</sup>Huang

<sup>۱۶</sup>Patel

سپس با تغییر ضخامت لایه بستر، بازده سلول‌های بهینه‌سازی شده به ترتیب ۱۱/۲۳٪ و ۱۱/۲۷٪ در ویفر سیلیکونی نوع p با ضخامت ۱۰۰ میکرومتر و ۲۶۰ میکرومتر در دمای ۳۰۰K بدست آمده است. با افزایش ضخامت سیلیکون از ۱۰۰ میکرومتر تا ۲۶۰ میکرومتر، بازده فقط ۰/۰۴٪ افزایش می‌یابد.

در نهایت، اثر وابستگی دما به عملکرد سلول نیز مورد بررسی قرار گرفته است و بازده ۱۱/۳۸٪ در دمای ۲۷۰K بدست آمده است [۸۵].

بهورا<sup>۱۷</sup> و همکاران، پاسخ فتوولتائیک اتصال‌های گرافن/نیم‌رسانا به ولتاژ و جریان را توسط مدل‌های اصلی محاسبه کردند. آن‌ها ولتاژ مدار باز ( $V_{oc}$ ) و چگالی جریان اتصال کوتاه ( $J_{sc}$ ) را برای ساختارهای گرافن/سیلیکون نوع n (n-Si) و گرافن/گالیم‌آرسناید نوع n (n-GaAs) تحت شرایط ناخالصی کم و زیاد مورد مطالعه قرار داده‌اند. اثرات چگالی ناخالصی نیم‌رسانا و سرعت بازترکیب سطح بر روی  $V_{oc}$  هر دو سیستم بررسی شده است. برای گرافن/n-Si تحت شرایط ناخالصی کم و زیاد به ترتیب ۰/۳۵۳V و ۰/۴۵۱V است، در حالی که  $V_{oc}$  برای گرافن/n-GaAs تحت شرایط ناخالصی کم و زیاد به ترتیب ۰/۴۴۱V و ۰/۴۷۱V بدست آمده است.  $J_{sc}$  برای گرافن/n-Si تحت شرایط ناخالصی کم و زیاد به ترتیب  $3\text{mA}/\text{cm}^2$  و  $4/78\text{mA}/\text{cm}^2$  محاسبه شده است، در حالی که  $J_{sc}$  برای گرافن/n-GaAs تحت شرایط ناخالصی کم و زیاد به ترتیب  $5/2\text{mA}/\text{cm}^2$  و  $6/68\text{mA}/\text{cm}^2$  محاسبه شده است.

این نتایج با گزارش‌های تجربی در توافق خوب بوده است، بنابراین آن‌ها بیان کردند که اتصال نامتجانس گرافن/گالیم‌آرسناید دارای رفتار فتوولتائیک برتر نسبت به اتصال‌های گرافن/سیلیکون است [۸۶].

گروه جی<sup>۱۸</sup> صفحه‌های تک‌لایه و دولایه گرافن را به روش لایه‌نشانی بخار شیمیایی بر روی بسترهای گالیم‌آرسناید نوع n قرار دادند. آن‌ها ویژگی‌های یکسوکندگی و رفتار فتوولتائیک اتصال گرافن/گالیم‌آرسناید را مورد بررسی قرار دادند. غلظت ناخالصی گالیم‌آرسناید نزدیک به  $3 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$  و تابع کار گالیم‌آرسناید نوع n ( $\Phi_{GaAs}$ ) نزدیک به ۴/۱۱ الکترون‌ولت می‌باشد. برای منحنی J-V سلول خورشیدی مبتنی بر گرافن تک‌لایه، چگالی جریان اتصال کوتاه ( $J_{sc}$ ) و ولتاژ مدار باز ( $V_{oc}$ ) به ترتیب  $6/43\text{mA}/\text{cm}^2$  و ۰/۶۲V به دست آمد است، که PCE حدود ۱/۰۹٪ و FF حدود ۰/۲۷ دارد. از سوی دیگر، اتصال شاتکی با گرافن دو لایه، ولتاژ مدار باز حدود ۰/۶۵V و چگالی جریان اتصال کوتاه حدود  $10/3\text{mA}/\text{cm}^2$  نشان داده است. همچنین بازده تبدیل توان بیش از ۱/۹۵٪ و FF حدود ۰/۳۰ بدست آمده است، که بیشتر از اتصال تک‌لایه مشابه آن می‌باشد. دیگر پارامترهای عملکردی با دیگر ساختارهای اولیه مبتنی بر اتصال گرافن/نیمه هادی قابل مقایسه بود. بر این اساس، اتصال شاتکی مبتنی بر گرافن دو لایه اثرات فتوولتائیک برتری را نسبت به گرافن تک‌لایه نشان می‌دهد [۴۵].

در اینجا، سلول خورشیدی گرافن دولایه/گالیم‌آرسناید عملکرد مشابهی ( $J_{sc}, V_{oc}, PCE$ )

<sup>۱۷</sup>Behura

<sup>۱۸</sup>Jie

را در مقایسه با دیگر افزاره‌های مبتنی بر اتصال گرافن / نیم‌رسانا گزارش شده قبلی (مانند Si، CdS و CdSe)، نشان می‌دهد. به طور ویژه، سلول‌های خورشیدی گرافن / گالیم‌آرسناید نوع n مبتنی بر گرافن تک‌لایه و دولایه، قادر به ارائه  $V_{OC}$  بزرگ‌تری نسبت به دیگر همتایان خود هستند، به طوری که  $V_{OC}$  معمولاً کمتر از ۰/۶۷ نیست [۸۸، ۸۷، ۶۹]. علاوه بر این، مقدار بازده افزاره در طی مدت بیش از چهار ماه در محیط هوا حفظ می‌شود، که به معنای ثبات عالی افزاره می‌باشد.

سپس ارتفاع سد شاتکی به ترتیب برابر ۰/۶۸ و ۰/۷۵ الکترون‌ولت برای اتصال‌های گرافن تک‌لایه و دولایه محاسبه شده است. هنگامی که ارتفاع سد شاتکی بزرگ‌تر شود، باز ترکیب الکترون و حفره تولید شده در محل اتصال گرافن / گالیم‌آرسناید سخت‌تر رخ می‌دهد. علاوه بر این، پژوهشگران معتقدند که گرافن تک‌لایه، با توجه به ضخامت یک اتمی گرافن، برای ایجاد ناحیه‌ی تخلیه در اتصال شاتکی سهم اندکی دارد. در نتیجه، بارهای تولید شده می‌توانند به راحتی باز ترکیب شوند، که منجر به کاهش مقدار FF و کاهش شدید بازده اتصال گرافن تک‌لایه / گالیم‌آرسناید در بررسی‌های تجربی، می‌شود. یکی دیگر از دلایل بالقوه این است که در حین فرآیند رشد یا انتقال، برخی از حفره‌هایی که در گرافن تک‌لایه وجود دارند، موجب کاهش سطح تماس می‌شوند و امکان قرارگیری هوا و آب از محیط در ساختار را افزایش می‌دهند. اما، احتمال وجود حفره در گرافن دولایه به طور چشم‌گیری کاهش می‌یابد و در پی آن بازده افزایش می‌یابد.

بررسی مشخصه‌ها و محاسبات از ویژگی‌های یکسوسازی دیودها، نشان دهنده‌ی این است که اتصال گرافن دولایه / گالیم‌آرسناید، ارتفاع سد شاتکی بزرگ‌تر (۰/۷۵ eV) و مقاومت سری کمتر در مقایسه با همتای گرافن تک‌لایه خود دارد. این امر می‌تواند موجب بهبود رفتارهای فتوولتائیک سلول‌های خورشیدی مبتنی بر اتصال گرافن دولایه شود [۴۵].

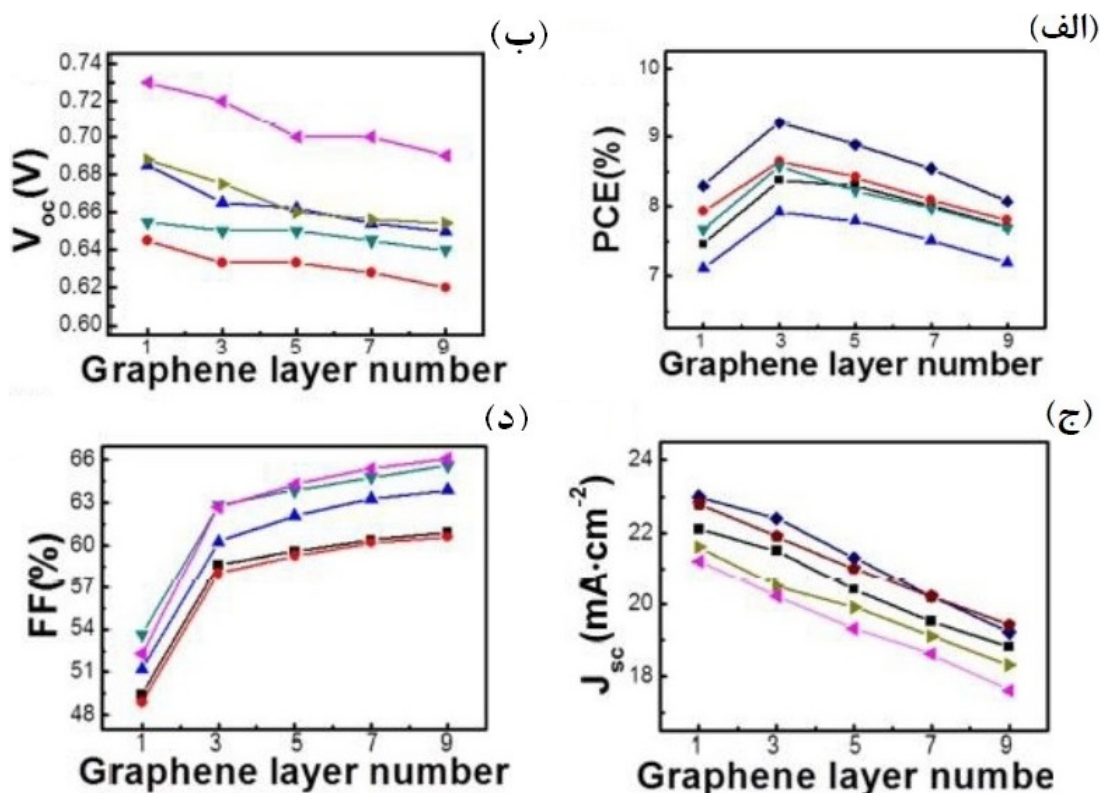
کونگ<sup>۱۹</sup> و همکاران، سلول‌های خورشیدی مبتنی بر اتصال گرافن / گالیم‌آرسناید را توسط نرم‌افزار Silvaco TCAD شبیه‌سازی کرده و منحنی‌های جریان-ولتاژ اتصال را مورد بررسی قرار داده‌اند. رفتارهای فتوولتائیک با توجه به ساختار و پارامترهای افزاره از قبیل ضخامت بستر، وابستگی به تابع کار و شفافیت گرافن و غلظت ناخالصی در گالیم‌آرسناید نوع n مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که اکثر حامل‌های تولید شده توسط نور تابشی، در ناحیه‌ای نزدیک به محل اتصال قرار دارند.

مقایسه بین تابع کار بیشتر و شفافیت کمتر گرافن نشان می‌دهد که تابع کار در افزایش بازده، تاثیر بیشتری دارد. اعمال ناخالصی نوع n یکنواخت در گالیم‌آرسناید منجر به افزایش قابل توجه بازده تبدیل توان می‌شود، در حالی که ولتاژ مدار باز بسیار حساس‌تر از جریان اتصال کوتاه در این نوع افزاره است. بررسی‌های جامع اتصال، بهبود قابل توجه برای بازده تبدیل توان از ۰/۷۷۲ به ۲/۲۱۸ برای گرافن شش لایه و بستر گالیم‌آرسناید با ضخامت ۵ میکرومتر و ناخالصی  $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  را نشان می‌دهد. این نتایج با نتایج تجربی مطابقت دارد [۵۸].

<sup>۱۹</sup>Kuang

گروه لی ۲۰، گرافن تک لایه را به روش CVD بر روی بستر مسی تولید کردند. طلا با ضخامت ۶۰ نانومتر، در قسمت پشتی گالیم‌آرسناید به عنوان الکتروود لایه نشانی شده است. لایه دی‌الکتریک  $SiN_x$  با ضخامت ۸۰nm بر روی سطح جلو گالیم‌آرسناید رشد داده شد که به عنوان لایه عایق در محل تماس گرافن/فلز مورد استفاده قرار گرفته است. با استفاده از ماسک لیتوگرافی پنجره‌ای در دی‌الکتریک  $SiN_x$  باز کردند و گرافن تولید شده را بر روی آن انتقال دادند. پنجره باز شده در دی‌الکتریک  $SiN_x$  منطقه‌ی فعال سلول خورشیدی گرافن/گالیم‌آرسناید را تعریف می‌کند.

آن‌ها تعداد لایه‌های مختلف گرافن را بر روی بستر گالیم‌آرسناید انتقال داده و پارامترهای عملکردی سلول خورشیدی را بدست آوردند. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد (شکل ۵.۳) که افزاره مبتنی بر گرافن سه لایه بیشترین بازده تبدیل توان را دارد. دیگر پارامترهای عملکردی از جمله جریان اتصال کوتاه و ولتاژ مدار باز نیز با افزایش بیش از سه لایه گرافن، کاهش پیدا کرده‌اند. با توجه به این که فاکتور پرکنندگی در این سلول‌ها تحت تاثیر مقاومت سری می‌باشد، افزایش تعداد لایه‌های گرافن منجر به کاهش مقاومت سری می‌شود و طبق انتظار فاکتور پرکنندگی افزایش می‌یابد [۵۶].

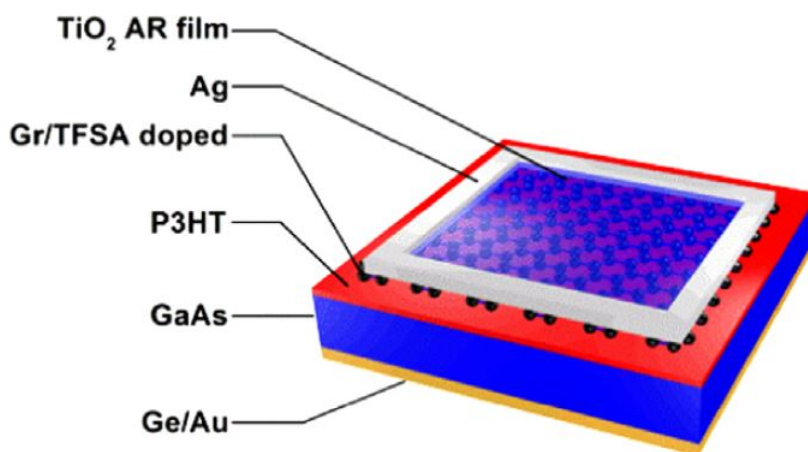


شکل ۵.۳: تغییرات مشخصه‌های عملکردی سلول خورشیدی به ازای تغییر تعداد لایه‌های گرافن. (الف) بازده تبدیل توان، (ب) ولتاژ مدار باز، (ج) جریان اتصال کوتاه، (د) فاکتور پرکنندگی [۵۶].

سپس توسط مایع یونی بیس (تری فلورو متیل سولفونیل) آمید به گرافن ناخالصی نوع p اعمال کردند. همچنین با استفاده از لایه‌نشانی  $Al_2O_3$  با ضخامت ۶۸ نانومتر بر روی سلول خورشیدی و استفاده از یک لایه گرافن دیگر بر روی آن و ایجاد سلول خورشیدی گرافن-گیت گرافن / گالیم‌آرسناید توانستند به بازده تبدیل توان حدود ۱۵/۵٪ دست یابند. پس از آن با استفاده از یک ساختار گرافن / دی‌الکترونیک / گرافن برای اتصال شاتکی گرافن / گالیم‌آرسناید بازده تبدیل توان سلول خورشیدی را به بیشتر از ۱۸/۵٪ ارتقا دادند [۵۶].

لانسوتی<sup>۲۱</sup> و همکاران یک مطالعه نظری در مورد عملکرد گرافن در سلول‌های خورشیدی سد شاتکی / نیم‌رسانا با هدف نشان دادن توانایی این نوع افزاره با استفاده از شبیه‌ساز PSPICE انجام دادند. آن‌ها نشان دادند، نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌ها برای ژرمانیوم نوع n بهتر بوده است اما تکنولوژی سیلیکون شایع‌تر است. آن‌ها همچنین وابستگی تابع کار و شفافیت گرافن به تعداد لایه‌های گرافن را با انجام آزمایشات تجربی تایید کرده‌اند [۸۹].

یو<sup>۲۲</sup> و همکاران، یک ساختار جدید برای سلول‌های خورشیدی اتصال شاتکی مبتنی بر گرافن / گالیم‌آرسناید را با یک لایه  $P_3HT$  (نوعی آلیاژ پلیمری) که به عنوان لایه‌ی انتقال دهنده‌ی حفره مورد استفاده قرار گرفته است، طراحی کردند (شکل ۶.۳). آن‌ها توانستند ولتاژ مدار باز، جریان اتصال کوتاه و بازده تبدیل توان سلول خورشیدی را بطور قابل ملاحظه‌ای افزایش دهند. سپس با اعمال ناخالصی به گرافن توسط مایع یونی بیس (تری فلورو متیل سولفونیل) آمید و استفاده از  $TiO_2$  به عنوان یک لایه‌ی ضدبازتاب توانستند به حداکثر بازده تبدیل توان حدود ۱۳/۷٪ برای سلول‌های خورشیدی گرافن / گالیم‌آرسناید با یک لایه  $P_3HT$  تا سال ۲۰۱۵ دست یابند [۸].



شکل ۶.۳: ساختار سلول خورشیدی GaAs-Gr-P3HT پس از اعمال ناخالصی و لایه ضدبازتاب [۸].

<sup>۲۱</sup> Lancellotti

<sup>۲۲</sup> Yu



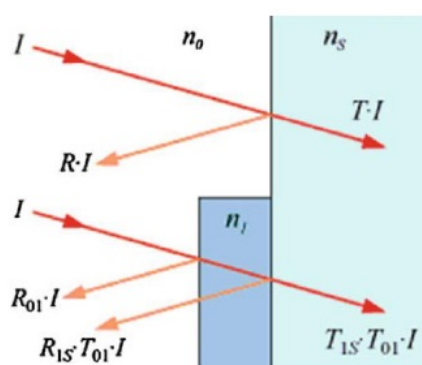
## ۳.۳ پوشش ضد بازتاب و ساختارهای نانوگریتنینگ

### ۱.۳.۳ پوشش ضد بازتاب

انواع مختلفی از تلفات در سلول‌های خورشیدی وجود دارد که موجب کاهش بازده تبدیل سلول‌های خورشیدی می‌شوند. از میان آن‌ها، تلفات بازتاب یکی از مهم‌ترین عواملی است که به طور قابل ملاحظه‌ای بازده تبدیل توان را در سلول‌های خورشیدی کاهش می‌دهد.

بازده یک سلول خورشیدی می‌تواند با استفاده از یک پوشش ضد بازتاب افزایش یابد، اما این کاهش تلفات بازتاب نور فقط در طول موج‌های خاص (مانند مادون قرمز، مرئی، ماوراء بنفش) رخ می‌دهد. هنگامی که ضریب شکست برابر با ریشه‌ی دوم ضریب شکست دو ماده است حداقل بازتاب حاصل می‌شود. مقدار بازتاب نور به ضریب شکست هر دو ماده و زاویه‌ی سطح با پرتو نور، وابسته است.

پوشش AR یک پوشش نوری است که برای کاهش بازتاب و افزایش بازده در لنزها یا سایر افزاره‌های نوری استفاده می‌شود [۹۰]. شکل ۷.۳ بازتاب و عبور نور از یک بستر شیشه‌ای لایه نازک نشان می‌دهد. در شکل، نور از هوا به یک بستر شیشه‌ای معمولی (قسمت بالا) تابیده شده است. شدت نور تابشی  $I$ ، نور بازتابی  $R \cdot I$ ، و نور عبوری  $T \cdot I$  است. اما هنگامی که یک لایه نازک روی بستر شیشه‌ای را می‌پوشاند (قسمت پایین)، بازتاب نور کاهش می‌یابد. در این مورد،  $I$  نور تابشی روی پوشش،  $R_{01} \cdot I$  نور بازتابی در محل تماس هوا و پوشش لایه نازک و  $T_{01} \cdot I$  نور عبوری است. نور تابشی بر محل تماس پوشش لایه نازک و بستر شیشه‌ای  $T_{1s} \cdot T_{01} \cdot I$ ، نور عبوری  $T_{1s} \cdot T_{01} \cdot I$  و نور بازتابی  $R_{1s} \cdot T_{01} \cdot I$  است.



شکل ۷.۳: بازتاب نور از یک بستر شیشه‌ای (قسمت بالا) و از یک پوشش لایه نازک بر روی بستر شیشه‌ای (قسمت پایین) [۳].

مقدار بازتاب نور می‌تواند با استفاده از معادلات فرنل، به صورت زیر محاسبه شود:

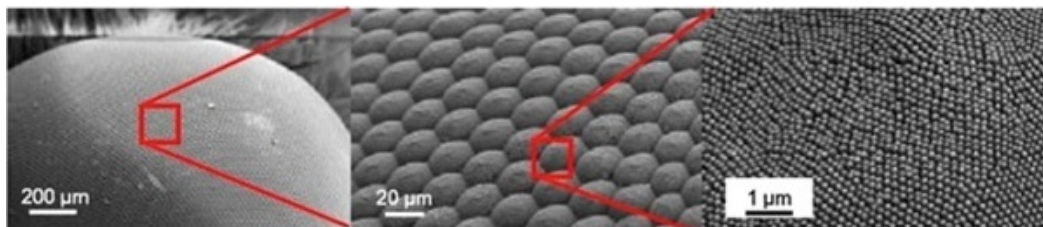
$$R = \left( \frac{n_o - n_s}{n_o + n_s} \right)^2 \quad (1.3)$$

که  $R$  ضریب بازتاب یا قابلیت بازتاب،  $n_o$  ضریب شکست اولین محیط (هوا) و  $n_s$  ضریب شکست محیط دوم (بستر شیشه‌ای) است. در چنین موردی، با عبور نور مرئی از محیط اول (یعنی هوا،  $n_o = 1/0$ ) به محیط دوم (یعنی یک بستر شیشه‌ای معمولی،  $n_s = 1/5$ )، مقدار  $R$  (یعنی بازتاب نور) ۴٪ می‌شود. هنگامی که یک پوشش لایه نازک روی شیشه اضافه می‌شود، ضریب شکست جدید به مقدار مطلوب،  $n_1 = \sqrt{(n_o n_s)} = \sqrt{1/0 \times 1/5} = 1/225$ ، تغییر می‌یابد. در این صورت تلفات بازتاب هر سطح تماس برابر با ۱٪ است و بازتاب کل ۲٪ به دست می‌آید. پس نشان داده شد که با قرار دادن یک پوشش لایه نازک بین هوا و شیشه می‌توان تلفات بازتاب را به نصف (حدود ۵۰ درصد) کاهش داد [۲].

با این وجود پوشش لایه نازک ضدبازتاب می‌تواند باعث کاهش تلفات بازتاب تنها در طول موج‌های خاص شود و ایجاد لایه‌ی پوشش یک فرآیند پیچیده بوده و در عین حال دارای معایب دیگر از قبیل چسبندگی (کشش سطحی) و عدم هماهنگی حرارتی و غیره باشد. با توجه به معایب پوشش‌های لایه نازک، می‌توان ساختارهای نانوگرتینگ<sup>۲۳</sup> (به خصوص مثلثی یا مخروطی شکل) که باعث تغییر تدریجی ضریب شکست و کمتر شدن تلفات بازتاب در طیف گسترده‌ای از طول موج‌ها و زوایای انتشار می‌شوند را جایگزین مناسبی برای آن‌ها در نظر گرفت [۹۰].

### ۲.۳.۳ قاعده کلی چشم حشرات

سطح چشم حشرات<sup>۲۴</sup> با لایه نانوساختار پوشیده شده است که نور را به جای بازتاب آن، جذب می‌کند (که در شکل ۸.۳ نشان داده شده است). لایه نانوساختار متشکل از یک الگوی شش ضلعی با برآمدگی‌هایی کوچکتر از طول موج نور مرئی و ضخامت ۲۰۰ نانومتر است که می‌تواند به عنوان یک پوشش ضدبازتاب عالی عمل کند. ضریب شکست بین هوا و سطح به تدریج تغییر می‌کند و این تغییر تدریجی در ضریب شکست منجر به کاهش بازتاب نور می‌شود. این مدل در سلول‌های خورشیدی به منظور کاهش ضریب بازتاب و افزایش بازده تبدیل توان، مناسب است [۳].



شکل ۸.۳: چشم حشرات که توسط لایه‌ی نانوساختار پوشیده شده است [۲].

<sup>۲۳</sup>Nano-grating

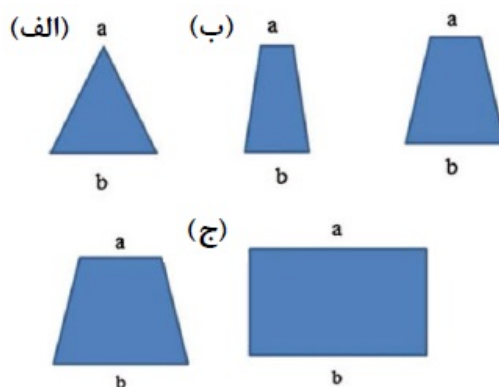
<sup>۲۴</sup>Moth's-Eye

### ۳.۳.۳ ساختارهای نانوگریتینگ

ساختارهای نانوگریتینگ به دلیل بهبود بازده، هزینه کم، فرآیند ساخت ساده و درعین حال پرکاربرد، یکی از ساختارهای مورد توجه می باشند. یکی از محبوب ترین روش های ساخت نانوگریتینگ ها، لایه برداری یا لیزر پراکنده کننده است [۹۲، ۹۱]. آن ها بواسطه ی کاهش تلفات بازتاب به عنوان گزینه ای مناسب برای افزایش بازده تبدیل توان در سلول های خورشیدی معرفی شده اند. با توجه به توانایی آن ها در کاهش تلفات بازتاب به سلول های خورشیدی گالیم آرسناید اعمال شده و به عنوان پوشش متناوب ضد بازتاب (AR)، عملکرد فوق العاده ای داشته اند.

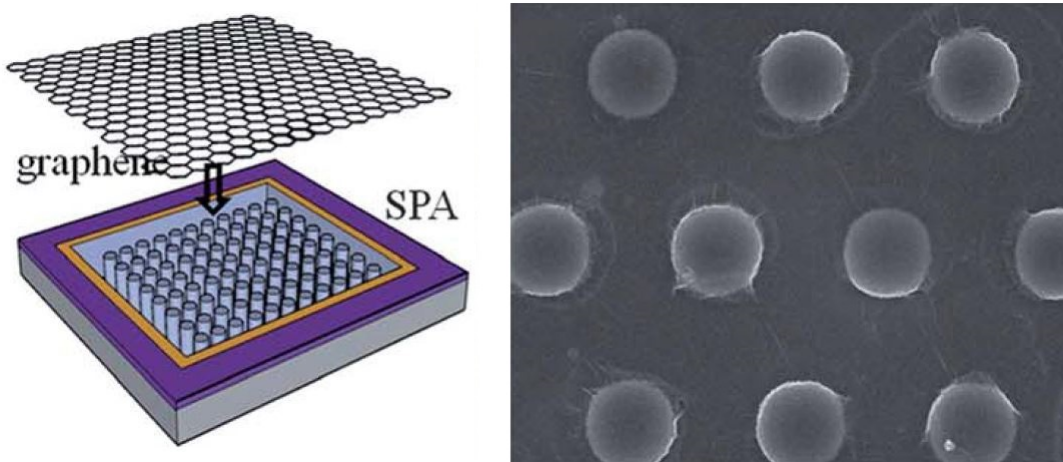
زمانی که گام (یا دوره تناوب) یک ساختار نانوگریتینگ کمتر از طول موج نور تابشی باشد، مانند یک محیط همگن با یک ضریب شکست موثر عمل می کند. بنابراین، ساختار نانوگریتینگ تغییرات تدریجی در ضریب شکست ایجاد می کند که خواص و به دام اندازی نور را در مقایسه با یک لایه نازک مسطح یا تخت بهبود می دهد [۹۳، ۹۰]. ساختار نانوگریتینگ با شکل نانومیله به عنوان یک پوشش تک لایه ضد بازتاب عمل می کند، در حالی که ساختار نانوگریتینگ با شکل مثلثی (مثلثی یا مخروطی کامل) و دوزنقه ای (دوزنقه ای یا مخروطی کوتاه) به عنوان پوشش چند لایه ای ضد بازتاب عمل می کند.

شکل ۹.۳ انواع مختلفی از ساختارهای نانوگریتینگ را که برای مدل سازی استفاده می شوند، نشان می دهد که عمدتاً به صورت (الف) نانوگریتینگ مثلثی، (ب) نانوگریتینگ دوزنقه ای با نسبت ابعاد مختلف و (ج) نانوگریتینگ مستطیلی هستند. نسبت ابعاد با در نظر گرفتن نسبت طول بالا به طول پایه مشخص می شود و بر طبق آن نوع نانوگریتینگ (دوزنقه، مثلث یا مستطیل) شکل می گیرد. در ساختار نانوگریتینگ مثلثی، نسبت ابعاد  $a/b = 0$  است. در ساختار نانوگریتینگ دوزنقه ای، نسبت ابعاد  $0 < a/b < 1$  و معمولاً از ۱/۹ تا ۹/۹ است و برای یک ساختار نانوگریتینگ مستطیلی، نسبت ابعاد  $a/b = 1$  است، زیرا 'a' برابر با 'b' می باشد [۳].



شکل ۹.۳: الگوی هندسی از ساختارهای مختلف نانوگریتینگ. (الف) مثلثی شکل، (ب) دوزنقه ای شکل با نسبت سطوح مختلف، (ج) مستطیلی شکل [۳].

افزایش جذب نور در سلول‌های خورشیدی لایه نازک سیلیکونی به منظور بهبود بازده و کاهش هزینه‌ها از اهمیت زیادی برخوردار است. به این منظور فنگ<sup>۲۵</sup> و همکاران از آرایش ستونی سیلیکون<sup>۲۶</sup> (SPA) بجای سیلیکون مسطح در سلول خورشیدی اتصال شاتکی سیلیکون/گرافن استفاده کردند. این آرایش با استفاده از فوتولیتوگرافی و پس از آن یک فرآیند لایه‌برداری خشک ساخته شده است. در مقایسه با سیلیکون مسطح، SPA می‌تواند جذب را بهبود بخشد که موجب بهبود در تبدیل انرژی می‌شود. سلول خورشیدی اتصال شاتکی گرافن/SPA، دارای  $V_{oc}$  حدود ۰/۴۶۵ ولت،  $J_{sc}$  حدود  $15/19 \text{ mA/cm}^2$  و PCE حدود ۲/۹۰ درصد است (شکل ۱۰.۳) [۹۴].



شکل ۱۰.۳: شکل سلول خورشیدی گرافن/SPA [۹].

وانگ<sup>۲۷</sup> و همکاران یک نانوگریتینگ دو طرفه را در سطوح بالا و پایین سلول، که به منظور ضدبازتاب و به دام‌انداز نور اعمال شده است، شبیه‌سازی کرده‌اند. نتایج شبیه‌سازی این ساختار، جریان تولید شده توسط نور را برابر با  $34/6 \text{ mA/cm}^2$  برای ضخامت بستر ۲ میکرومتر نشان می‌دهد، که این روش برای ضخامت‌های مختلف قابل استفاده است [۹۵]. گروه ناروتام<sup>۲۸</sup> نشان دادند که تلفات بازتاب ساختار نانوگریتینگ مثلثی با ارتفاع گریتینگ ۳۰۰ نانومتر و تناوب ۸۳۰ نانومتر در حدود ۲٪ است که تقریباً ۲۸٪ کمتر از بسترهای مسطح است. آن‌ها همچنین بازتاب نور یک ساختار نانوگریتینگ مستطیلی را حدود ۳۰٪ بدست آوردند، که از بازتاب نور در یک ساختار نانوگریتینگ مثلثی بیشتر است، زیرا ضریب شکست در ساختار نانوگریتینگ مثلثی به تدریج و در چندین مرحله تغییر می‌کند و موجب کاهش تلفات بازتاب می‌شود. نتایج شبیه‌سازی، کاهش تلفات بازتاب و افزایش بازده تبدیل توان در سلول‌های خورشیدی گالیم‌آرسناید را تایید می‌کند. شکل ۱۱.۳ تغییرات تدریجی ساختار

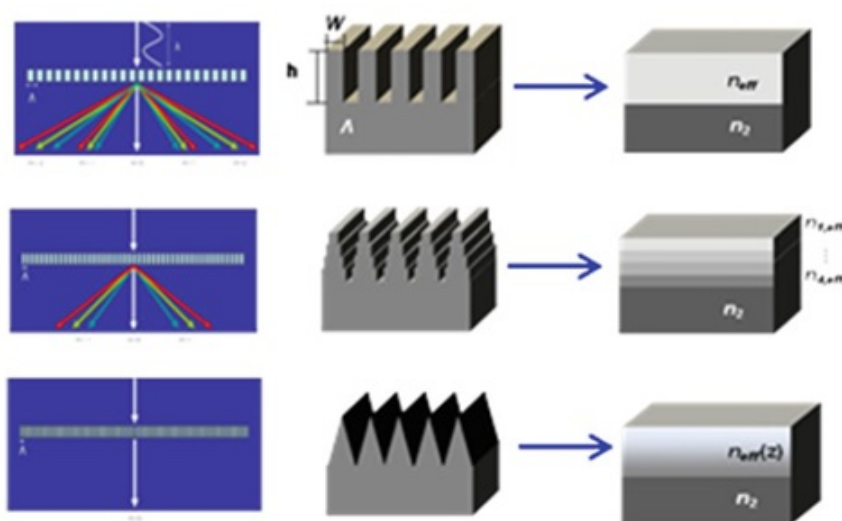
<sup>۲۵</sup>Feng

<sup>۲۶</sup>Silicon-pillar-array

<sup>۲۷</sup>Wang

<sup>۲۸</sup>Narottam

نانوگریٹینگ و همچنین ضریب شکست را که منجر به کاهش بازتاب شده است را نشان می‌دهد [۹۶].



شکل ۱۱.۳: بازتاب نور در شکل‌های مختلف نانوگریٹینگ مانند: (الف) مستطیل شکل (بالا)، (ب) دوزنقه ای (وسط) و (ج) ساختار مثلثی شکل (پایین) [۳].

گریٹینگ در سطح بالا می‌تواند با استفاده از اثرات پراش نور بیشتری در سلول خورشیدی جذب کند و بازده تبدیل توان کل را با دام‌اندازی نور بهبود بخشد. گریٹینگ‌ها می‌توانند به شیوه‌هایی متفاوت باشند [۹۷]:

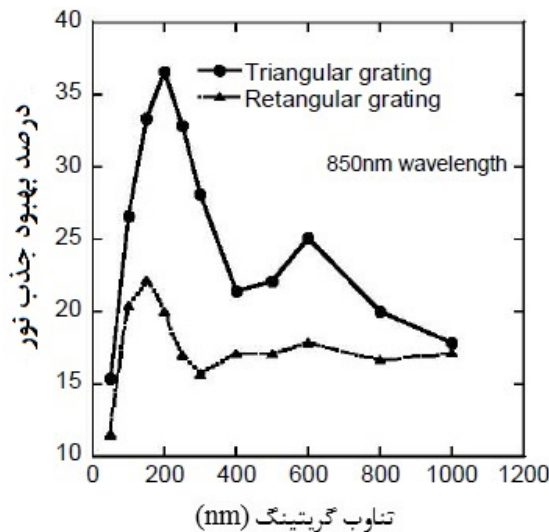
۱. با قرار دادن نانوگریٹینگ در لایه‌های مختلف سلول‌های خورشیدی.
۲. با تغییر تناوب نانوگریٹینگ.
۳. با تغییر شکل نانوگریٹینگ.

جین<sup>۲۹</sup> و همکارانش با تغییر تناوب گریٹینگ از ۱۰۰ نانومتر تا ۸۰۰ نانومتر بهترین گریٹینگ برای سطح بالا را در تناوب ۲۰۰ نانومتر و ارتفاع گریٹینگ ۱۰۰ نانومتر بدست آوردند. بهبود حاصل شده در حدود ۳۷٪ برای گریٹینگ مثلثی و ۲۳٪ برای گریٹینگ مستطیلی در مقایسه با حالات بدون گریٹینگ است (شکل ۱۲.۳). ابتدا گریٹینگ تک (گریٹینگ سطح بالا) را اعمال کرده و سپس گریٹینگ مثلثی- مثلثی (سطوح بالا و پایین) و مثلثی- مستطیلی (سطوح بالا و پایین) را شبیه‌سازی کردند و بازده سلول خورشیدی را تا حدود ۴۲/۴ درصد ارتقا دادند. طول موج شبیه‌سازی شده می‌تواند از ۳۰۰nm تا ۱۱۰۰nm قابل تنظیم باشد [۶۸].

دواند<sup>۳۰</sup> و همکاران نیز به منظور بهبود بازده سلول خورشیدی مبتنی بر گالیم‌آرسناید از ساختارهای نانوگریٹینگ استفاده کردند. آن‌ها جذب نور ساختارهای نانوگریٹینگ با ارتفاع

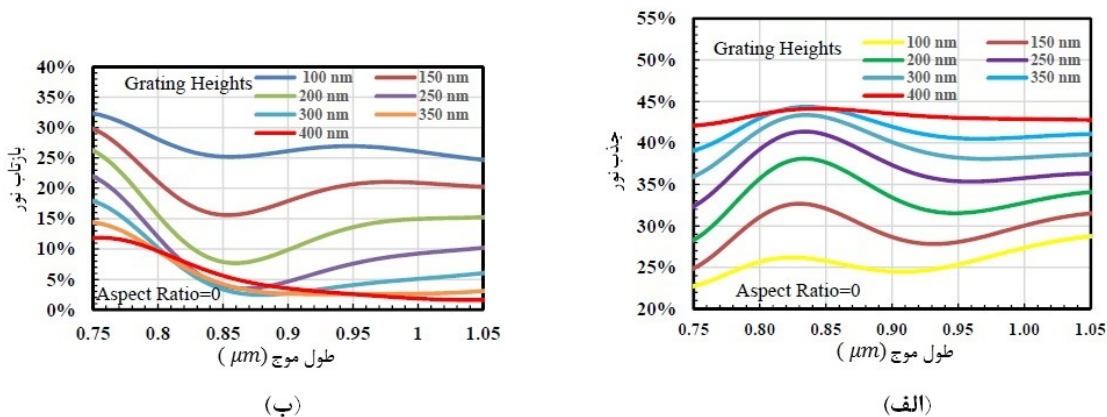
<sup>۲۹</sup>Jin

<sup>۳۰</sup>Devanandh



شکل ۱۲.۳: درصد بهبود جذب نور برحسب دوره تناوب‌های متفاوت نانوگریتینگ [۶۸].

گریتینگ مختلف را شبیه‌سازی کرده و آن را تحلیل کرده‌اند (شکل ۱۳.۳) که نشان دادند با تغییر ارتفاع نانوگریتینگ‌ها مطلوب‌ترین جذب و کم‌ترین بازتاب نور را در گریتینگ با ارتفاع  $400\text{ nm}$  دارند. همچنین نشان می‌دهند که تلفات بازتاب، با استفاده از ساختار نانوگریتینگ در مقایسه با یک سلول خورشیدی با سطح صاف، حدود ۲۷٪ کاهش می‌یابد. سپس بیان کردند که نانوگریتینگ مثلی نور بیشتری را به بستر گالیم‌آرسناید جذب می‌کند [۹۸].



شکل ۱۳.۳: (الف) طیف جذب نور برای ساختار نانوگریتینگ مثلی با تناوب  $830\text{ nm}$  نانومتر. (ب) طیف بازتاب نور برای ساختار نانوگریتینگ مثلی با تناوب  $830\text{ nm}$  نانومتر [۹۸].



# فصل ۴

## نتیجه‌های شبیه‌سازی و تحلیل‌ها

### ۱.۴ مقدمه

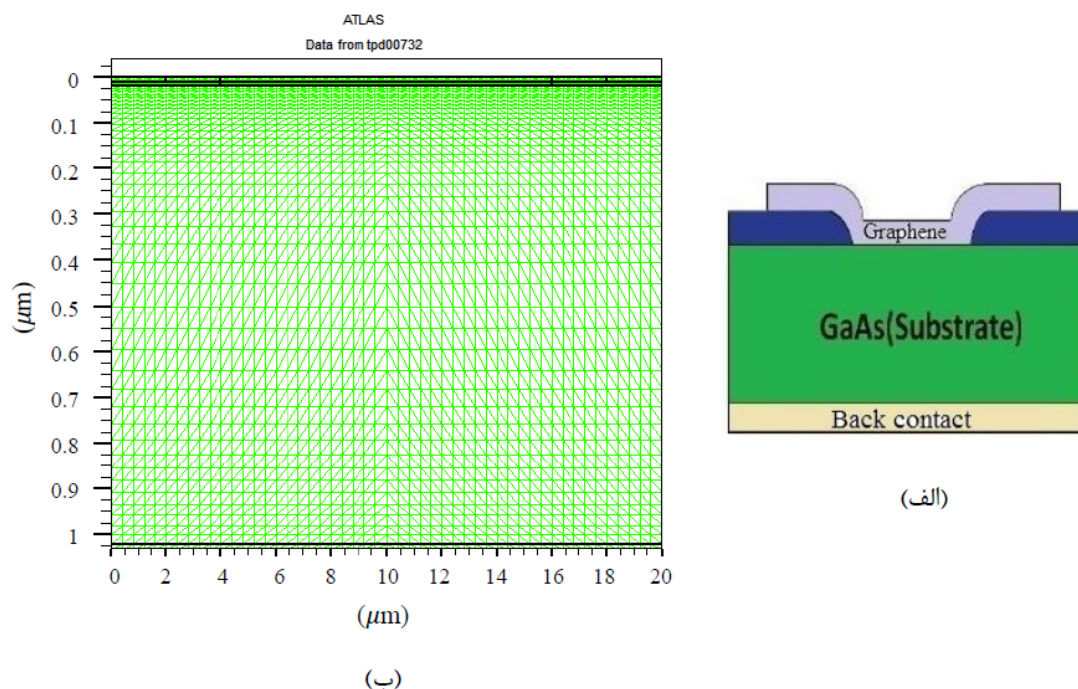
در این بخش، یک مدل سلول خورشیدی گرافن / گالیم‌آرسناید با نرم‌افزار Silvaco(TCAD) شبیه‌سازی شده و اثرات ضخامت بستر، شفافیت و تعداد لایه‌های گرافن بررسی شده است. همچنین سایر پارامترهای عملکردی مانند جریان اتصال کوتاه ( $I_{sc}$ )، ولتاژ مدار باز ( $V_{oc}$ )، فاکتور پرکنندگی (FF)، بازده تبدیل توان (PCE)، با در نظر گرفتن مدل‌های مورد نیاز بدست آمده‌اند. بهترین بازده تبدیل توان برای سلول خورشیدی را با گرافن سه‌لایه و بستر گالیم‌آرسناید با ضخامت چهار میکرومتر بدست آوردیم.

در این پژوهش، به دلیل وابستگی جذب نور تابشی به شکل و ابعاد نانوگریتینگ‌ها، اثرات نانوگریتینگ با تناوب متغیر و دو نوع متفاوت از نانوگریتینگ‌ها را در سلول خورشیدی به منظور بهبود بازده بررسی می‌کنیم. سپس یک گریتینگ دو طرفه را در سطوح بالا و پایین سلول، که به ترتیب نقش لایه‌های ضد بازتاب و به‌دام‌انداز نور را ایفا می‌کنند، شبیه‌سازی می‌کنیم. ابتدا، نانوگریتینگ یک طرفه را در سطح بالای سلول قرار داده و سپس با تغییر تناوب گریتینگ، بهترین تناوب را بدست آوردیم و با استفاده از آن تناوب بهینه برای گریتینگ دو طرفه (بالا و پایین) را شبیه‌سازی کردیم. همچنین با تغییر شکل نانوگریتینگ‌ها از مستطیلی به دوزنقه‌ای که مانند چند لایه‌ی ضد بازتاب عمل می‌کند، توانستیم بازده سلول خورشید را از طریق جذب بالای نور تابشی افزایش دهیم.



## ۲.۴ شبیه‌سازی سلول خورشیدی گرافن/گالیم‌آرسناید

شکل ۱.۴ (الف) برش عرضی از یک سلول خورشیدی گرافن/گالیم‌آرسناید را نشان می‌دهد. این سلول از سه ناحیه، شامل بستر گالیم‌آرسناید (GaAs)، لایه اکسید سیلیکون ( $SiO_2$ ) و لایه گرافن، از پایین به بالا تشکیل شده است. در اینجا لایه گرافنی با ضخامت  $10$  نانومتر روی بستر گالیم‌آرسناید با پنجره‌ی اکسید  $12\mu m \times 1\mu m$  قرار گرفته است. لایه‌ی  $SiO_2$  برای جلوگیری از تماس بین الکتروود بالا و نیم‌رسانا (GaAs)، در طرفین ساختار به عنوان یک لایه عایق عمل می‌کند.



شکل ۱.۴: (الف) برش عرضی سلول خورشیدی اتصال شاتکی گرافن/گالیم‌آرسناید. (ب) مدل مش بندی طراحی شده برای ساختار.

شکل ۱.۴ (ب)، سلول خورشیدی که با استفاده از ابزار TCAD شبیه‌سازی کردیم، نشان می‌دهد. اولین گام در مدل‌سازی هر افزاره در TCAD تعریف مش است. مش باید به گونه‌ای تعریف شود که زمان شبیه‌سازی را بیش از حد لازم بالا نبرد و در عین حال باید دقت کافی را داشته باشد. تراکم مش‌ها در قسمت بالای افزاره، که مربوط به محلی اتصال گالیم‌آرسناید و گرافن و همچنین اتصال گرافن و اکسید می‌باشد بیشتر است. نتایج نشان می‌دهد که تماس لایه‌های گرافن با گالیم‌آرسناید یک اتصال شاتکی را ایجاد می‌کنند، که برای تولید یک میدان داخلی بزرگ مناسب است. زمانی که نور خورشید بر سلول خورشیدی گرافن/گالیم‌آرسناید

می‌تابد، جفت الکترون-حفره تشکیل می‌شوند که این جفت الکترون-حفره با استفاده از میدان الکتریکی ایجاد شده در اتصال شاتکی از هم جدا می‌شوند و در الکترودها تجمع می‌کند. از آنجایی که گرافن یک ماده جدید است و در حال حاضر در کتابخانه مواد Silvaco Atlas تعریف نشده است، شبهه‌سازی سلول‌های خورشیدی مبتنی بر گرافن با استفاده از TCAD، به منظور بررسی عملکرد سلول در دو مرحله انجام می‌شود. در مرحله اول، یک ماده که در سیلواکو تعریف شده باشد، به عنوان لایه‌ی گرافن برای ایجاد ساختار افزاره لایه‌نشانی می‌شود. سپس در مرحله دوم: مشخصات ماده‌ی لایه‌نشانی شده به عنوان لایه گرافن توسط ابزار Atlas مجدداً تعریف می‌شود. اما در این پژوهش، گرافن را به عنوان ماده‌ای جدید در سیلواکو معرفی کرده و ضریب جذب آن را توسط یک فایل n.k تعریف کرده‌ایم تا نتایج شبهه‌سازی به نتایج تجربی نزدیک‌تر باشد. گرافن به عنوان یک شبه‌فلز با تحرک حامل  $15000 \text{ cm}^2 / V_s$  مدل شده است.

با استفاده از تابش توده هوای  $1/5$  (AM1.5) که مجموعه‌ای کامل از طول موج‌های نور خورشید را در بردارد و شدت  $1000 \text{ mW/cm}^2$  سلول خورشیدی شبهه‌سازی شده را تحت تابش قرار دادیم. مدل انتشار گرمایونی (TE) در برنامه فعال شده است. مدل‌های مختلف فیزیکی مربوط به تحرک حامل نیز برای ساختار سلول خورشیدی مورد استفاده قرار گرفته‌اند. همچنین برای در نظر گرفتن سرعت باز ترکیب بدنه و سطح، مدل‌های آیوگر (Auger) مورد استفاده قرار گرفته است. روش حل در این برنامه نیوتن می‌باشد.

مهم‌ترین پارامترها برای تعیین بازده سلول خورشیدی، پارامترهای جریان اتصال کوتاه ( $I_{sc}$ )، ولتاژ مدار باز ( $V_{oc}$ )، فاکتور پرکنندگی (FF) می‌باشد، که از کد شبهه‌سازی Atlas استخراج می‌کنیم. پارامترهای مورد نیاز برای شبهه‌سازی که مربوط به مشخصات بستر گالیم‌آرسناید است در جدول ۱.۴ بیان شده است.

جدول ۱.۴: مشخصات بستر گالیم‌آرسناید [۵۸].

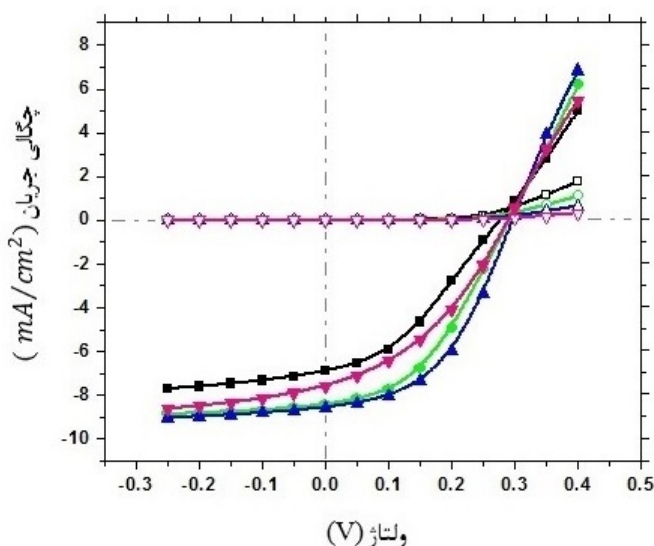
پارامتر	تعریف	مقدار
$E_g$	باند انرژی گالیم‌آرسناید	$1.42 \text{ eV}$
$N_c$	چگالی حالات موثر در باند هدایت	$4.35 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
$N_v$	چگالی حالات موثر در باند ظرفیت	$8.16 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
$\chi$	وابستگی الکترون به گالیم‌آرسناید	$4.07 \text{ eV}$
$\mu_e$	تحرک الکترون در گالیم‌آرسناید، $300 \text{ K}$	$8000 \text{ cm}^2 / V_s$
$\mu_h$	تحرک حفره در گالیم‌آرسناید، $300 \text{ K}$	$400 \text{ cm}^2 / V_s$

## ۳.۴ بررسی اثرات ضخامت بستر گالیم‌آرسناید، شفافیت و تعداد لایه‌های گرافن

### ۱.۳.۴ اثر ضخامت بستر گالیم‌آرسناید

هنگامی که نور به سطح ساختار یک سلول خورشیدی برخورد می‌کند، ممکن است سه حالت، بازتاب از سطح، جذب و یا عبور برای آن رخ دهد. نور تابشی بر سلول در ناحیه سد و بستر نیم‌رسانا جذب می‌شود. در این سلول خورشیدی، بلور گالیم‌آرسناید به عنوان منطقه جذب انتخاب شده است. لایه گرافن که نقش الکتروود شفاف را ایفا کرده است، موجب افزایش تابش نور به بلور گالیم‌آرسناید و افزایش تولید حامل‌ها توسط نور می‌شود.

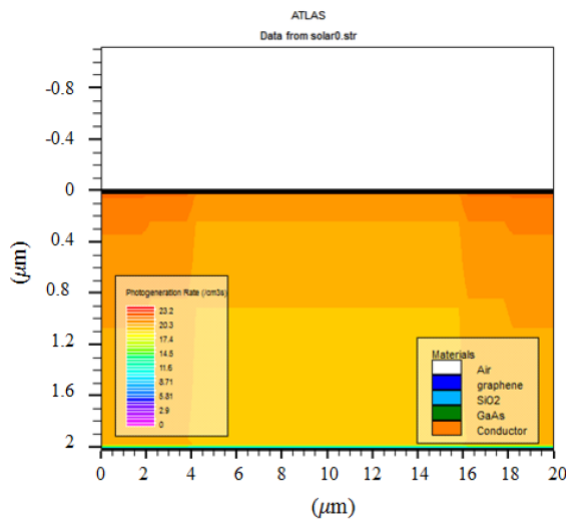
برای بررسی اثر ضخامت گالیم‌آرسناید بر بازده سلول خورشیدی، منحنی جریان-ولتاژ را، که در شکل ۲.۴ نشان داده شده است، بدست آوردیم. اکثر حامل‌های تولید شده توسط نور تابشی، در اطراف سطح تماس گرافن/ گالیم‌آرسناید درون بستر، ایجاد می‌شوند. در ضخامت کمتر از ۴ میکرومتر، جذب نور با افزایش ضخامت بیشتر شده و موجب بهبود بازده می‌شود. در حالی که برخلاف انتظار بازده برای ضخامت ۵ میکرومتر تا ۱۰ میکرومتر، کاهش یافته است. در نتیجه، جریان تولید شده توسط نور تابشی، یک مقدار حداکثر را به ازای ضخامت‌های مختلف بستر نشان می‌دهد، که منجر به بزرگترین بازده تبدیل توان در حدود ۱/۱۹۶٪ شده است.



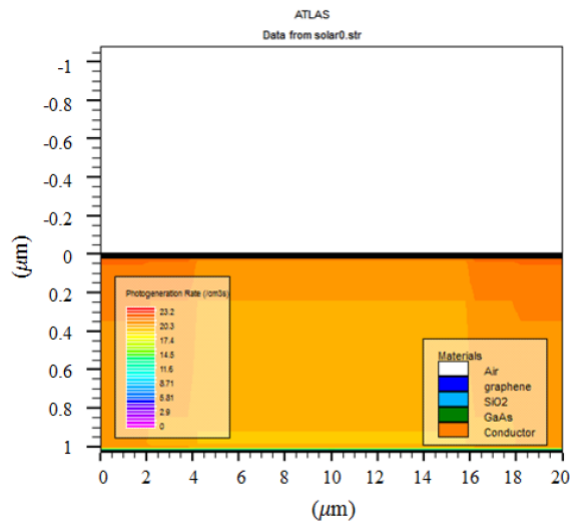
- |  |                                       |
|--|---------------------------------------|
| ۴(um) - - - - - جریان عدم تابش، ضخامت  | ۱(um) - - - - - جریان عدم تابش، ضخامت |
| ۴(um) - - - - - جریان تحت تابش، ضخامت  | ۱(um) - - - - - جریان تحت تابش، ضخامت |
| ۱۰(um) - - - - - جریان عدم تابش، ضخامت | ۲(um) - - - - - جریان عدم تابش، ضخامت |
| ۱۰(um) - - - - - جریان تحت تابش، ضخامت | ۲(um) - - - - - جریان تحت تابش، ضخامت |

شکل ۲.۴: نمودارهای جریان-ولتاژ سلول خورشیدی گرافن/ گالیم‌آرسناید برای ضخامت‌های مختلف گالیم‌آرسناید.

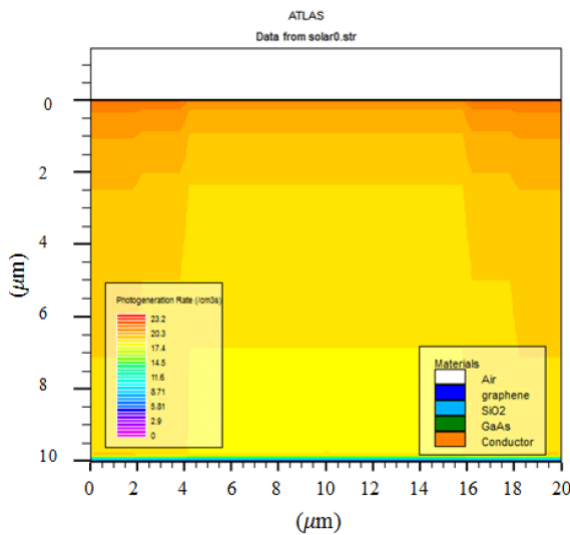
شکل ۳.۴ (الف-د) نشان‌دهنده نرخ تولید حامل در سلول خورشیدی گرافن / گالیم آرسناید، تحت تابش توده هوای ۱/۵، با عمق لایه جذب‌های مختلف ۱ میکرومتر، ۲ میکرومتر، ۴ میکرومتر و ۱۰ میکرومتر است. همانطور که دیده می‌شود، موثرترین منطقه جذب تقریباً تا عمق ۱/۰ میکرومتر محل اتصال است. در ضمن، شکل ۳.۴ (ج) نشان می‌دهد که ضخامت ۴ میکرومتر برای جذب کامل طیف کافی است، زیرا مقدار حامل‌های تولید شده توسط نور به طور چشم‌گیری در مناطق عمیق‌تر از بستر گالیم آرسناید کاهش می‌یابد.



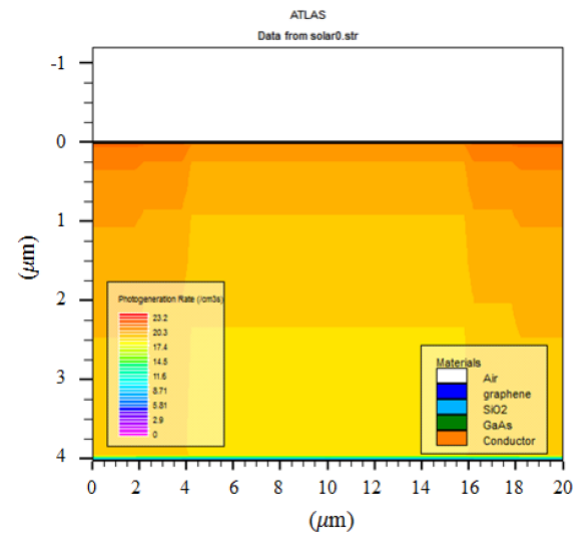
(ب)



(الف)



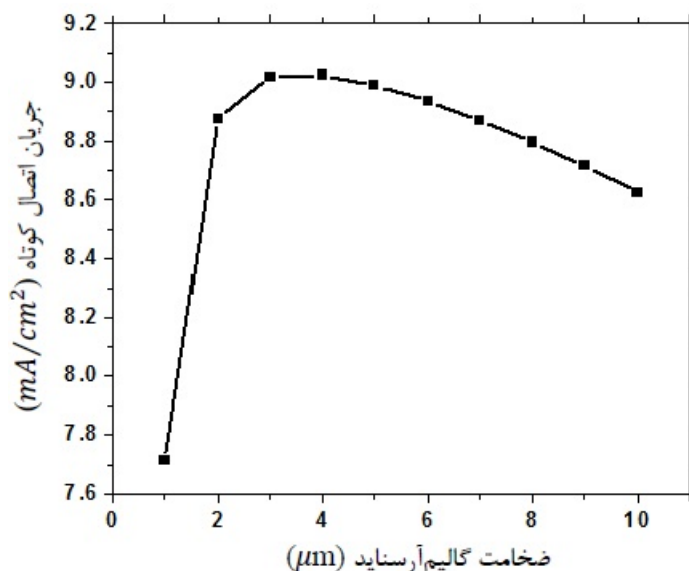
(د)



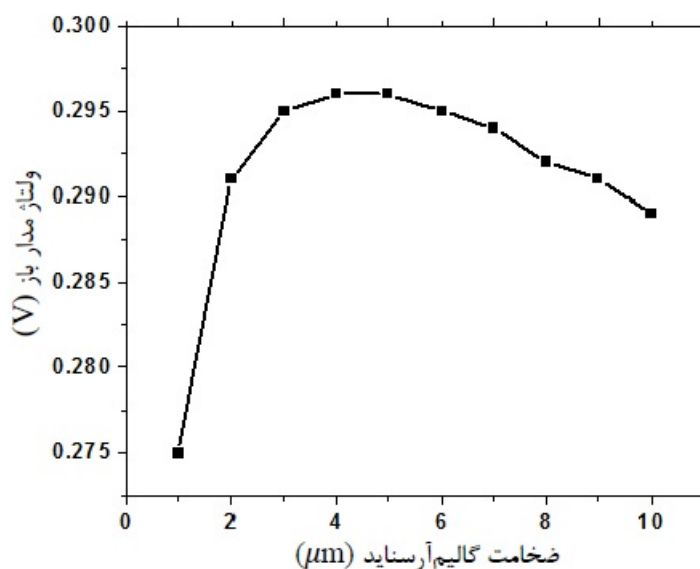
(ج)

شکل ۳.۴: نرخ تولید حامل در سلول خورشیدی گرافن / گالیم آرسناید تحت تابش توده هوای ۱/۵ برای ضخامت بستر. (الف) ۱ میکرومتر، (ب) ۲ میکرومتر، (ج) ۴ میکرومتر، (د) ۱۰ میکرومتر.

همچنین پارامترهای عملکردی سلول خورشیدی گرافن / گالیوم آرسناید، تحت تابش توده هوای ۱/۵ با عمق لایه جذب ۱ میکرومتر تا ۱۰ میکرومتر شبیه‌سازی کردیم و نتایج به صورت منحنی‌های ۴.۴ تا ۷.۴ نمایش داده شده است.

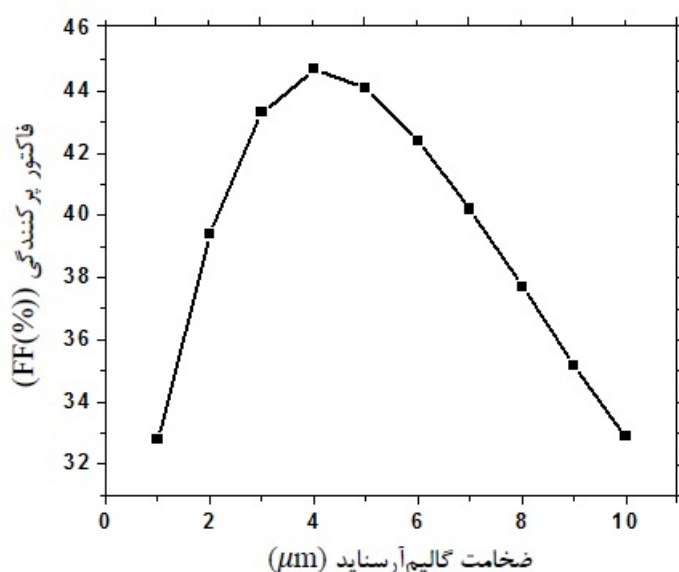


شکل ۴.۴: منحنی تغییرات جریان اتصال کوتاه برحسب تغییرات ضخامت بستر گالیوم آرسناید.

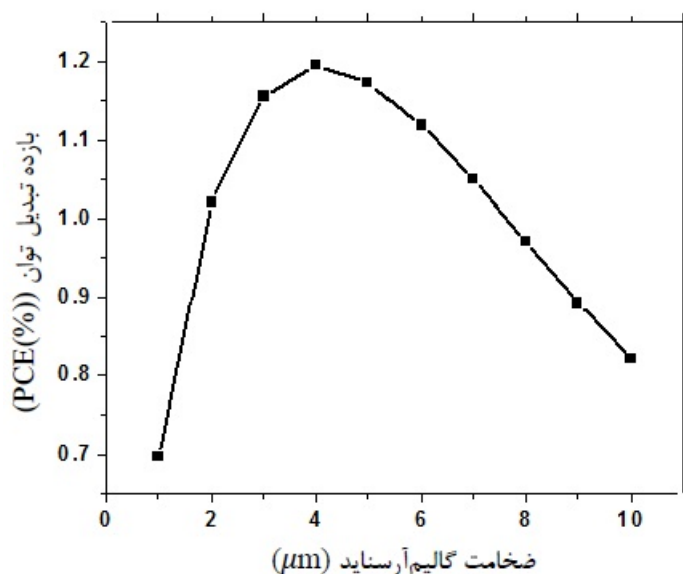


شکل ۵.۴: منحنی تغییرات ولتاژ مدار باز برحسب تغییرات ضخامت بستر گالیوم آرسناید.

همان‌طور که در منحنی‌ها دیده می‌شود، جریان اتصال کوتاه، ولتاژ مدار باز، فاکتور پرکنندگی و بازده تبدیل توان، با افزایش ضخامت بیش از ۴ میکرومتر، کاهش پیدا می‌کنند. میزان بازترکیب حامل‌ها به ارتفاع سد و ضخامت بستر وابسته است. در این شبیه‌سازی با ثابت بودن ارتفاع سد و افزایش ضخامت بستر و با توجه به اینکه الکترون‌ها و حفره‌ها باید



شکل ۶.۴: منحنی تغییرات فاکتور پرکنندگی برحسب تغییرات ضخامت بستر گالیم آرسناید.



شکل ۷.۴: منحنی تغییرات بازده تبدیل توان برحسب تغییرات ضخامت بستر گالیم آرسناید.

مسیر طولانی‌تری را طی کنند تا به الکترودها برسند احتمال بازترکیب افزایش پیدا می‌کند. در نتیجه مشخصه‌های سلول خورشیدی با افزایش زیاد ضخامت بستر کاهش پیدا می‌کنند.

در مرجع [۵۸]، اثر تغییر ضخامت بستر بر پارامترهای سلول خورشیدی گرافن / گالیم آرسناید در چهار ضخامت مختلف شبیه‌سازی شده و مورد بررسی قرار گرفته است (جدول ۲.۴). همانطور که ملاحظه می‌شود، افزایش ضخامت تا ۵ میکرومتر موجب افزایش بازده و بیش از ۵ میکرومتر موجب کاهش بازده شده است.

جدول ۲.۴: جدول مقایسه اثر ضخامت بستر گالیم‌آرسناید بر پارامترهای عملکردی سلول.

سلول	ضخامت GaAs ( $\mu m$ )	$J_{sc}$ ( $mA/cm^2$ )	$V_{oc}$ (V)	FF	$\eta$ (%)
این پژوهش	۱	۷/۷۱۳	۰/۲۷۵	۰/۳۲۸	۰/۶۹۷
	۲	۸/۸۷۶	۰/۲۹۱	۰/۳۹۴	۱/۰۲۱
	۵	۸/۹۹۱	۰/۲۹۶	۰/۴۴۱	۱/۱۷۳
	۱۰	۸/۶۲۳	۰/۲۸۹	۰/۳۲۹	۰/۸۲۱
کونگ و همکاران [۵۸]	۱	۷/۰۸۲	۰/۲۵۵	۰/۳۴۴	۰/۷۷۲
	۲	۸/۴۸۳	۰/۲۶۸	۰/۴۰۶	۱/۱۷۴
	۵	۸/۲۶۱	۰/۲۸۱	۰/۴۷۳	۱/۳۹۲
	۱۰	۷/۵۱۹	۰/۲۸۹	۰/۴۳۳	۱/۱۹۶

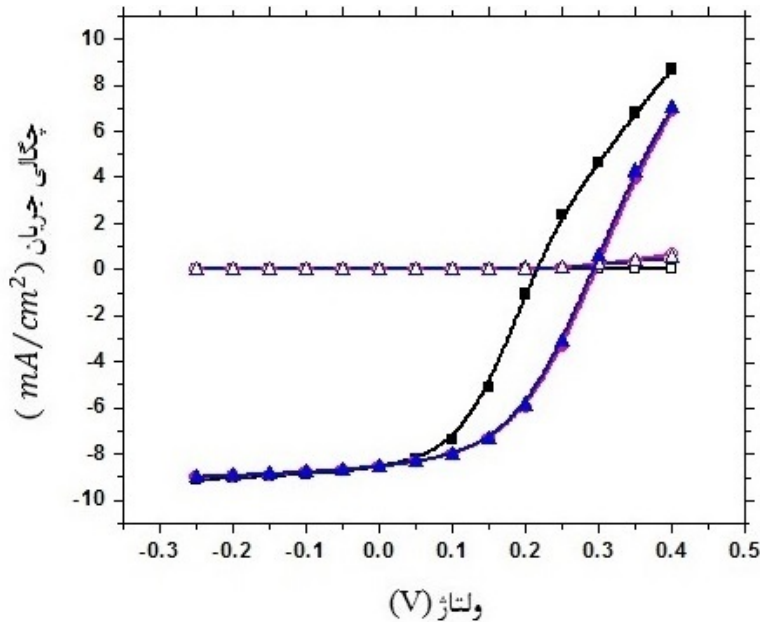
### ۲.۳.۴ اثر شفافیت و تابع کار گرافن

ارتفاع سد شاتکی به اختلاف تابع کار گرافن و وابستگی الکترون به گالیم‌آرسناید وابسته است. هرچه تابع کار گرافن بزرگتر شود، ارتفاع سد شاتکی افزایش می‌یابد و به تبع آن پتانسیل داخلی بدست آمده که توسط معادله (۶.۲) بیان شده است، افزایش می‌یابد.

برای بررسی اثر شفافیت و تابع کار گرافن بر بازده سلول خورشیدی، منحنی جریان-ولتاژ را، که در شکل ۸.۴ نشان داده شده است، به ازای یک ضخامت ثابت از بستر، برای گرافن دو لایه، سه لایه و شش لایه به ترتیب با تابع کار ۴/۴، ۴/۵۵ و ۴/۸ الکترون‌ولت و شفافیت ۹۵/۴٪، ۹۳/۱٪ و ۸۵/۳٪، بدست آوردیم.

شفافیت بیشتر بیانگر تابع کار کمتر است که منجر به ایجاد تعادل بین جریان اتصال کوتاه و ولتاژ مدار باز می‌شود که در شکل ۸.۴ نشان داده شده است. افزایش تعداد لایه‌های گرافن موجب کاهش شفافیت، افزایش رسانایی و افزایش تابع کار آن می‌شود. با کاهش شفافیت، گرافن مورد استفاده به عنوان الکتروود شفاف، نور کمتری را به بستر گالیم‌آرسناید انتقال می‌دهد و در نتیجه موجب کاهش جریان اتصال کوتاه و ولتاژ مدار باز می‌شود.

ولتاژ مدار باز در سلول خورشیدی گرافن / گالیم‌آرسناید، عمدتاً تحت تاثیر نرخ بازترکیب در محل اتصال گرافن و گالیم‌آرسناید قرار می‌گیرد. نرخ بازترکیب برای تمام افزاره‌ها با بستر گالیم‌آرسناید مشابه است. اما طی فرآیند انتقال صفحات گرافن در افزاره‌هایی با تعداد لایه‌های متفاوت، ممکن است در محل تماس لایه‌های مختلف، نقاط بازترکیب غیرمنتظره ظاهر شوند. این امر منجر به افزایش نرخ بازترکیب در محل تماس می‌شود. بنابراین، افزاره‌هایی با تعداد



شکل ۸.۴: نمودار جریان-ولتاژ سلول خورشیدی گرافن / گالیم آرسناید برای سه تابع کار متفاوت گرافن.

- - □ - - : جریان عدم تابش، تابع کار گرافن: ۴/۴ (eV)      - - ○ - - : جریان عدم تابش، تابع کار گرافن: ۴/۵۵ (eV)  
 - - △ - - : جریان عدم تابش، تابع کار گرافن: ۴/۸ (eV)      - - ▲ - - : جریان تحت تابش، تابع کار گرافن: ۴/۸ (eV)  
 - - ● - - : جریان تحت تابش، تابع کار گرافن: ۴/۵۵ (eV)

شکل ۸.۴: نمودار جریان-ولتاژ سلول خورشیدی گرافن / گالیم آرسناید برای سه تابع کار متفاوت گرافن.

لایه گرافن بیشتر، ولتاژ مدار باز پایین‌تری دارند.

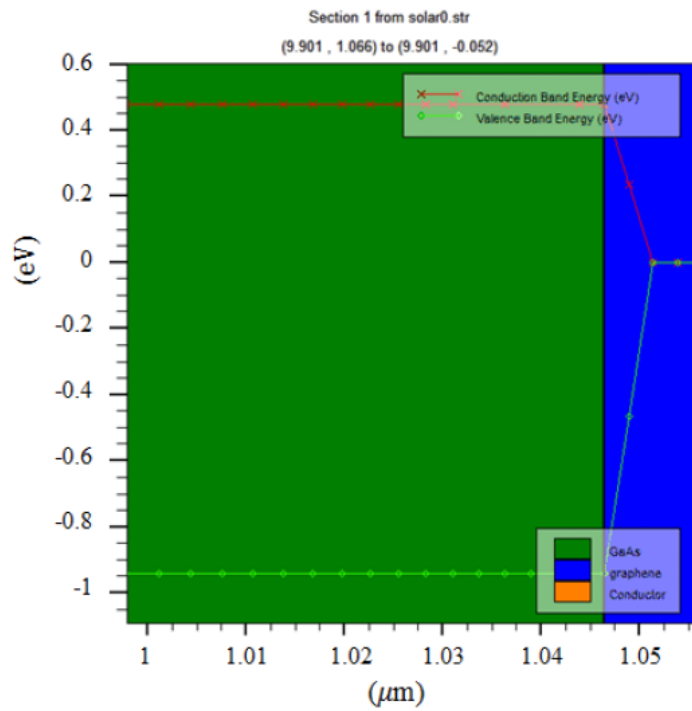
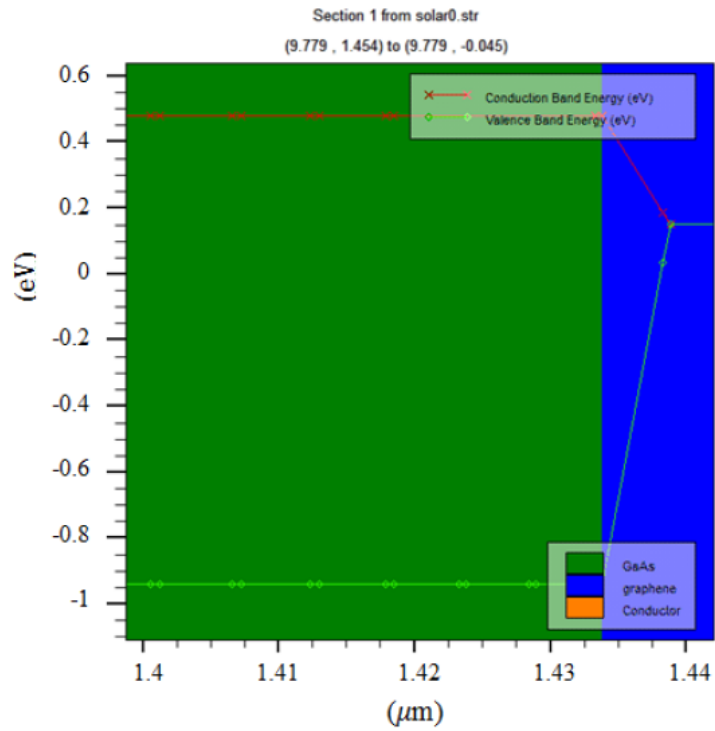
از آنجایی که شکاف باند انرژی گرافن تقریباً صفر در نظر گرفته می‌شود، نور تابیده شده به گرافن نمی‌تواند به طور کامل به الکتروسیسته تبدیل شود. گرافن تک‌لایه ۲/۳٪ از نور خورشید را جذب می‌کند. بنابراین، به ازای اضافه شدن هر لایه گرافن، شاهد کاهش ۲/۳٪ از جریان اتصال کوتاه خواهیم بود. بنابراین افزایش تعداد لایه‌های گرافن موجب کاهش بیشتر جریان اتصال کوتاه می‌شود.

فاکتور پرکنندگی یک سلول خورشیدی گرافن / گالیم آرسناید، عمدتاً توسط مقاومت سری افزارها که با تعداد لایه‌های گرافن متناسب است، تحت تاثیر قرار می‌گیرد. افزایش لایه‌های گرافن در افزاره، موجب مقاومت سری پایین‌تر می‌شود و از این رو طبق انتظار فاکتور پرکنندگی افزایش می‌یابد، اما کاهش شفافیت نیز در کاهش فاکتور پرکنندگی اثر دارد.

از سوی دیگر، شکل ۹.۴، ارتفاع سد شاتکی شبیه‌سازی شده برای اتصال گرافن سه‌لایه و گرافن دولایه با گالیم آرسناید را به ترتیب ۴۸٪ و ۳۳٪ نشان می‌دهد که با مقادیر بدست آمده از رابطه (۷.۲) (برای گرافن سه‌لایه / گالیم آرسناید  $\Phi_B = 4/55 - 4/07 = 0/48$  و برای گرافن دولایه / گالیم آرسناید  $\Phi_B = 4/4 - 4/07 = 0/33$ ) مطابقت دارد. ارتفاع سد شاتکی برای اتصال گرافن سه‌لایه بیشتر از اتصال گرافن دولایه است.

هنگامی که ارتفاع سد شاتکی افزایش می‌یابد، باز ترکیب الکترون و حفره تولید شده در محل





شکل ۹.۴: ارتفاع سد شاتکی در گرافن. (الف) گرافن دولایه. (ب) گرافن سه‌لایه

اتصال گرافن/ گالیم آرسناید سخت تر رخ می دهد. پس می توان نتیجه گرفت، زمانی که ارتفاع سد شاتکی کاهش می یابد، بارهای تولید شده به راحتی می توانند با یکدیگر ترکیب شوند، که منجر به کاهش مقدار FF و بازده می شود.

در مرجع [۵۸] اثر تعداد لایه های گرافن روی پارامترهای عملکردی سلول خورشیدی توسط نرم افزار Silvaco مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج حاصل از این پژوهش با نتایج مرجع را در جدول ۳.۴ لیست کرده ایم. همانطور که دیده می شود، نتایج حاصل از شبیه سازی برای گرافن شش لایه با شبیه سازی های مرجع [۵۸] مطابقت ندارد، اما با مرجع [۵۶] که اثر تعداد لایه های گرافن بر پارامترهای عملکردی سلول خورشیدی را به صورت تجربی مورد بررسی قرار داده است، مطابقت دارد، که افزایش تعداد لایه های گرافن تا سه لایه باعث افزایش بازده و بیشتر از سه لایه کاهش بازده را به همراه دارد.

جدول ۳.۴: جدول مقایسه اثر تعداد لایه های گرافن بر پارامترهای عملکردی سلول

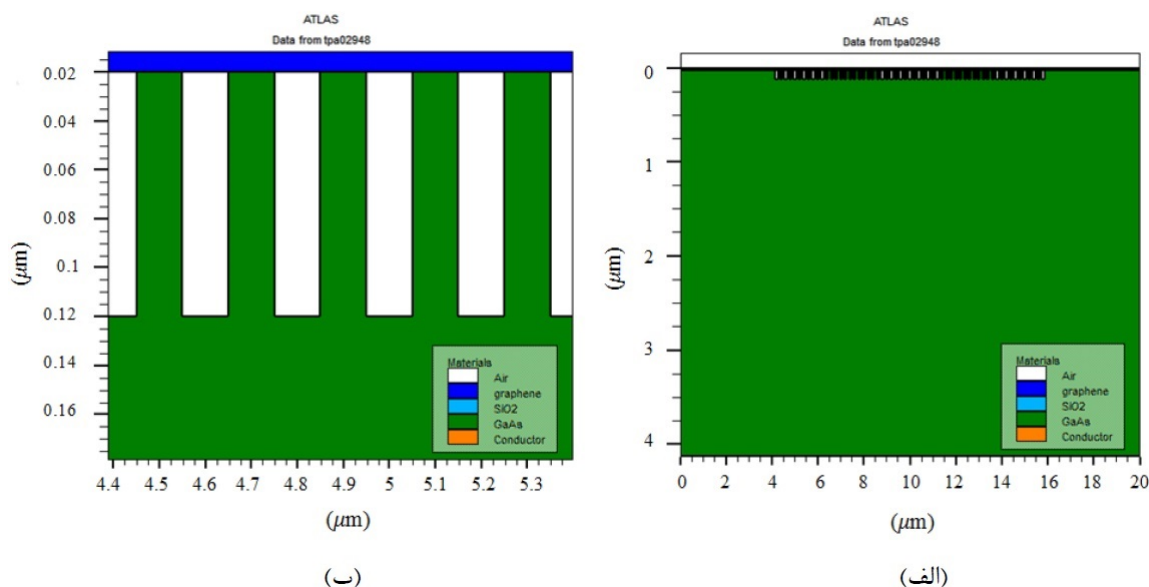
سلول	تابع کار گرافن (eV)	$J_{sc}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	$V_{oc}$ (V)	FF	$\eta$ (%)
این پژوهش	۴/۴	۹/۱۲۵	۰/۲۱۵	۰/۳۹	۰/۷۶۷
	۴/۵۵	۹/۰۲۶	۰/۲۹۶	۰/۴۴۷	۱/۱۹۶
	۴/۸	۸/۰۲۴	۰/۲۹۲	۰/۴۴۶	۱/۱۷۷
کونگ و همکاران [۵۸]	۴/۴	۸/۶۱۳	۰/۲۶۳	۰/۴۵۱	۱/۲۹۸
	۴/۵۵	۸/۲۶۱	۰/۲۸۱	۰/۴۷۳	۱/۳۹۲
	۴/۸	۷/۹۵۱	۰/۲۹۶	۰/۴۹۶	۱/۴۸۱

## ۴.۴ اعمال ساختارهای نانوگریتینگ بر سلول خورشیدی گرافن/ گالیم آرسناید

به منظور بهبود عملکرد سلول خورشیدی گرافن/ گالیم آرسناید، از گریتینگ مقیاس نانو در محل اتصال فلز/ نیم رسانا به منظور بهبود جذب نور استفاده کردیم. مدل فیزیکی drift-diffusion برای سلول خورشیدی مورد استفاده قرار گرفته و ساختار تحت تابش توده هوای ۱/۵ مورد بررسی قرار می گیرد.

## ۱.۴.۴ نانوگریتینگ مستطیلی

شکل ۱۰.۴ یک مدل دو بعدی از ساختارهای نانوگریتینگ مستطیلی که روی سلول خورشیدی گرافن / گالیم‌آرسناید اعمال شده را نشان داده است.

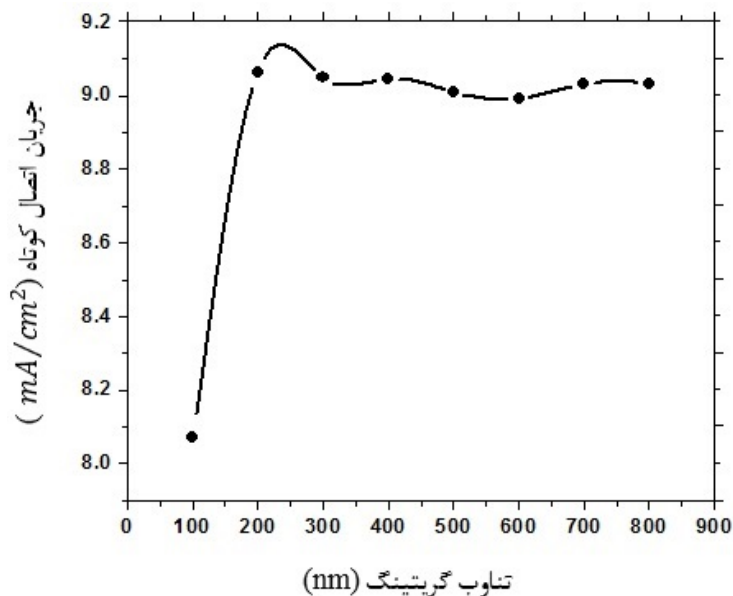


شکل ۱۰.۴: مدل دو بعدی از ساختارهای نانوگریتینگ مستطیلی روی سلول خورشیدی.

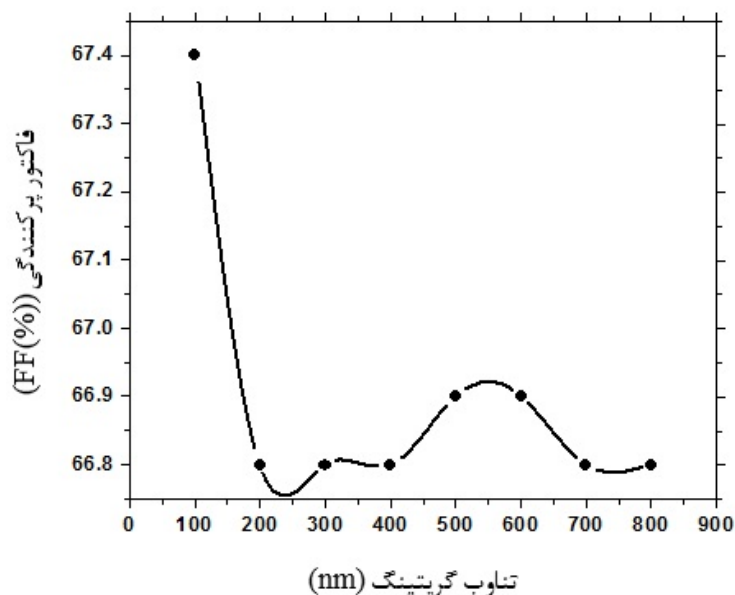
با توجه به وابستگی جذب نور به شکل و ابعاد گریتینگ، مشخصه‌های سلول را برای ساختارهای نانوگریتینگ با دوره تناوب‌های مختلف تعیین کرده‌ایم (شکل ۱۲.۴ تا ۱۳.۴) (ولتاژ مدار باز تغییرات چشمگیری نداشته است). ابتدای امر با ایجاد ساختار نانوگریتینگ مستطیلی در بستر گالیم‌آرسناید که به عنوان منطقه‌ی جذب در سلول خورشیدی ایفای نقش کرده است، ارتفاع را ثابت و برابر  $100\text{nm}$  و تناوب گریتینگ را  $100\text{nm}$  در نظر گرفته‌ایم. سپس با هر افزایش  $100$  نانومتری به تناوب، پارامترهای عملکردی سلول را برای گریتینگ‌های  $200$ ،  $300$ ، تا  $800$  محاسبه کردیم.

همان‌طور که در منحنی‌ها دیده می‌شود، تغییر در پارامترهای عملکردی سلول به ازای تغییرات تناوب نانوگریتینگ، خطی نمی‌باشد. مناسب‌ترین نانوگریتینگ برای سطح بالا، بمانند آنچه در مرجع [۶۸] بیان شده، نانوگریتینگ با تناوب  $200$  نانومتر و ارتفاع گریتینگ  $100$  نانومتر می‌باشد. با اعمال این گریتینگ فاکتور پرکنندگی و بازده حدود  $66/82\%$  و  $2/005\%$  حاصل شد، که پارامترها در مقایسه با حالت بدون گریتینگ بهبود قابل توجهی یافته‌اند. در این حالت نانوگریتینگ با تناوب  $200$  نانومتر نانوگریتینگ مستطیل شکل، در واقع یک نانوگریتینگ مربعی است.

نتایج شبیه‌سازی به صراحت نشان می‌دهد که نانوگریتینگ با ساختار مستطیلی، نور بیشتری را به بستر گالیم‌آرسناید جذب می‌کند و بنابراین می‌تواند بازده تبدیل توان سلول



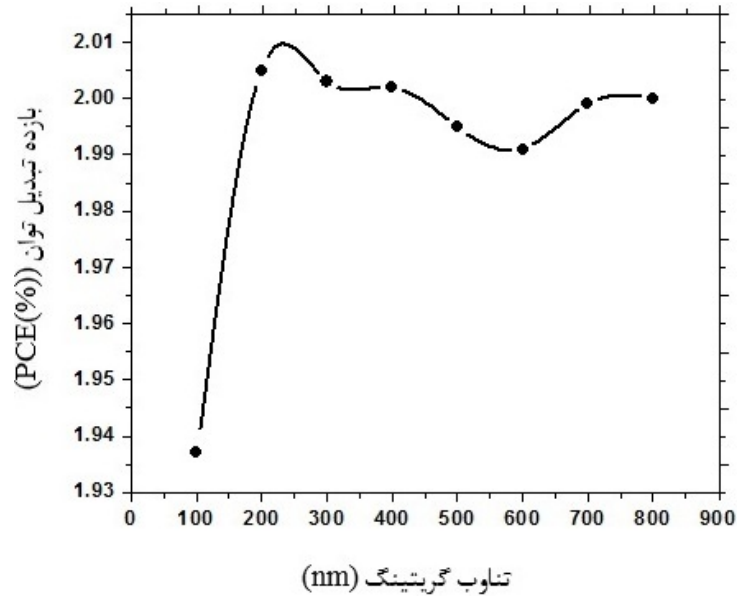
شکل ۱۱.۴: منحنی تغییرات جریان اتصال کوتاه به ازای تغییرات تناوب نانوگریتینگ مستطیلی.



شکل ۱۲.۴: منحنی تغییرات فاکتور پرکنندگی به ازای تغییرات تناوب نانوگریتینگ مستطیلی.

خورشیدی گرافن / گالیم آرسناید را افزایش دهد.

پس از آن نانوگریتینگ مستطیل-مستطیل (سطوح بالا و پایین) را شبیه سازی کرده ایم. گریتینگ سطح بالا برای جذب نور بیشتر در سلول از اثرات پراش استفاده می کند تا اجازه دهد نور بیشتری به سلول خورشیدی وارد شود و بتواند بازده کلی جذب را بهبود بخشد. از گریتینگ بازتاب کننده در سطح پایین نیز برای جذب نوری که در طول مسیر اول توسط سلول خورشیدی جذب نشده است، استفاده می شود. در این حالت نیز بازده تبدیل توان افزایش

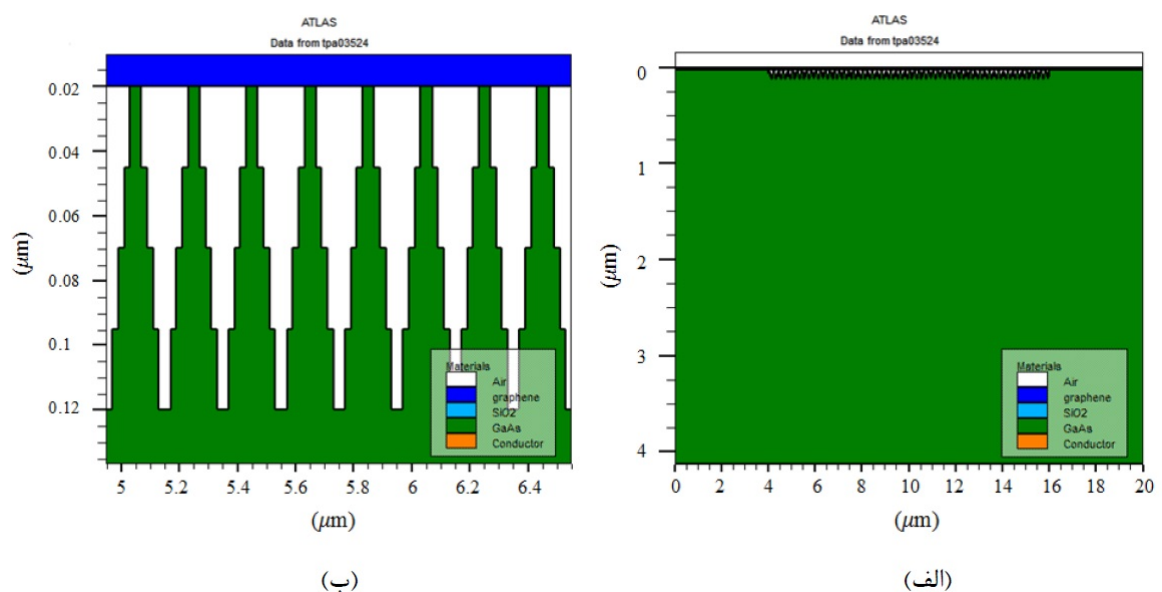


شکل ۱۳.۴: منحنی تغییرات بازده تبدیل توان به ازای تغییرات تناوب نانوگریتینگ مستطیلی.

یافته و به  $2/01\%$  می‌رسد، اما به اندازه نانوگریتینگ بالا موثر نبوده و تنها مقدار کمی بازده را افزایش داده است.

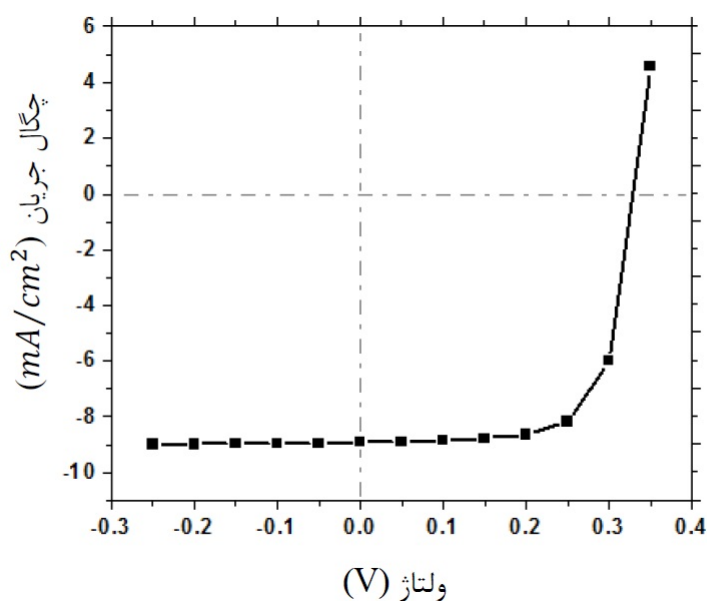
## ۲.۴.۴ نانوگریتینگ دوزنقه‌ای

شکل ۱۴.۴ یک مدل دو بعدی از ساختارهای نانوگریتینگ دوزنقه‌ای که روی سلول خورشیدی گرافن / گالیوم آرسناید اعمال شده را نشان داده است.



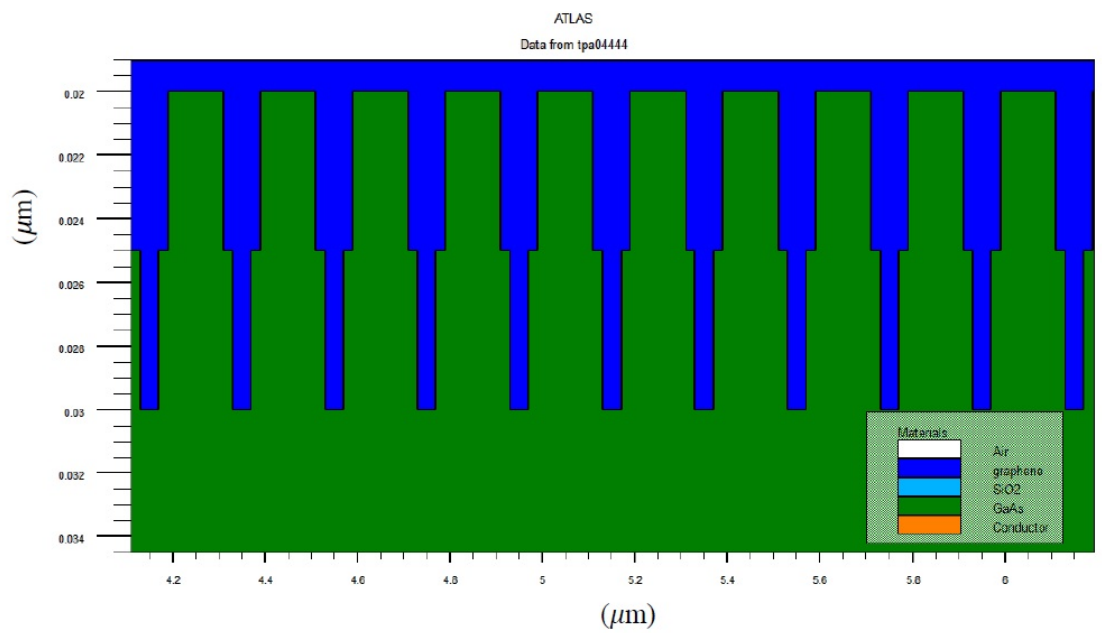
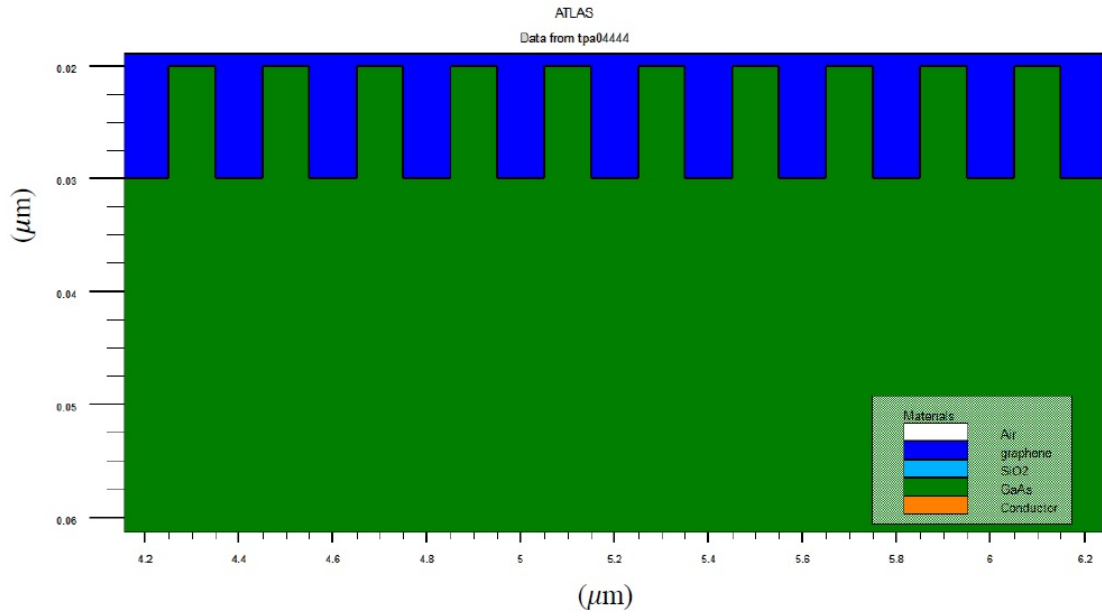
شکل ۱۴.۴: مدل دوبعدی از ساختارهای نانوگریتینگ دوزنقه‌ای روی سلول خورشیدی.

نانوگریتینگ دوزنقه‌ای می‌تواند جذب نور بیشتری نسبت به گریتینگ مستطیلی داشته باشد. در این شبیه‌سازی نانوگریتینگ دوزنقه‌ای برای پایین‌ترین تناوب دارای دوره تناوب ۲۰۰ نانومتر می‌باشد و ارتفاع کل تناوب دوزنقه‌ای ۱۰۰ نانومتر است. در نتیجه مقادیر جریان اتصال کوتاه، ولتاژ مدار باز، فاکتور پرکنندگی و بازده تبدیل توان به ترتیب  $۸/۹۹۶ \text{ mA/cm}^2$ ، ۰/۳۲۸۷، ۶۹/۲۴٪ و ۲/۰۵٪ بدست آمده است که در مقایسه با نانوگریتینگ مستطیلی بازده بهبود یافته است. شکل ۱۵.۴ نمودار چگالی جریان بر حسب ولتاژ این سلول را نشان می‌دهد. ضریب شکست در ساختار نانوگریتینگ دوزنقه‌ای به تدریج در چندین مرحله تغییر می‌کند و تلفات بازتاب را کاهش می‌دهد. نتایج شبیه‌سازی بیان‌کننده‌ی کاهش تلفات بازتاب در سلول‌های خورشیدی گالیم‌آرسناید است که منجر به افزایش بازده تبدیل توان می‌شود. بنابراین، این تجزیه و تحلیل تأیید می‌کند که ساختارهای نانوگریتینگ دوزنقه‌ای که یک پوشش عالی ضدبازتاب هستند، منجر به بازده تبدیل توان مطلوب‌تری در سلول‌های خورشیدی گرافن / گالیم‌آرسناید شده است.



شکل ۱۵.۴: نمودار جریان-ولتاژ سلول خورشیدی گرافن / گالیم آرسناید با اعمال نانوگریتینگ دوزنقه‌ای.

با اعمال نانوگریتینگ‌ها توانستیم بازده سلول خورشیدی را افزایش دهیم. اما از آنجایی که ارتفاع نانوگریتینگ‌ها زیاد است، هنگام لایه‌نشانی گرافن روی سطح گالیم‌آرسناید، گرافن پیوسته نخواهد بود و در نتیجه ما گرافن را در بالا به صورت یک ناحیه تعریف کردیم که این باعث شده است محل تماس گرافن و گالیم‌آرسناید تا حدود نصف کاهش یافته و موجب کاهش بازده شود. در نتیجه ارتفاع گریتینگ را کاهش دادیم تا گرافن و گالیم آرسناید کاملاً بر هم منطبق شوند و گریتینگ مستطیلی و دوزنقه‌ای را اعمال کردیم (شکل ۱۶.۴). در این حالت بازده در نانوگریتینگ مستطیلی حدود ۱/۸٪ و در دوزنقه‌ای حدود ۱/۹٪ حاصل شد.



شکل ۱۶.۴: ساختارهای نانوگریتینگ. (الف) مستطیلی. (ب) دوزنقه‌ای

# فصل ۵

## جمع بندی و پیشنهادها

### ۱.۵ جمع بندی

در این پژوهش یک سلول خورشیدی اتصال شاتکی گرافن / گالییم آرسناید با استفاده از نرم افزار شبیه ساز (TCAD) Silvaco شبیه سازی و مورد بررسی قرار گرفت. به منظور بررسی عملکرد سلول خورشیدی، تمام مدل های فیزیکی مورد نیاز برای افزاره در برنامه فعال شده و ساختار تحت تابش شدت نور  $1000 \text{ mW/cm}^2$  و توده هوای ۱/۵ که مجموعه ای از تمام طول موج های نور خورشید می باشد قرار گرفت و منحنی تغییرات جریان-ولتاژ و سایر پارامترهای عملکردی سلول خورشیدی بدست آمد.

در این شبیه سازی، گرافن که در حال حاضر در کتابخانه ی مواد (Atlas) Silvaco موجود نیست، به عنوان ماده ای جدید معرفی شده و شفافیت آن توسط ایجاد یک فایل n.k تعریف شده است.

با تغییر در شفافیت و تعداد لایه های گرافن و همچنین ضخامت بستر گالییم آرسناید، بهترین بازده را برای گرافن ۳ لایه و ضخامت بستر ۴ میکرومتر حدود ۱/۱۹۶٪ بدست آوردیم. سپس نانوگریتینگ های مستطیلی و دوزنقه ای را بر روی ساختار سلول خورشیدی اعمال کردیم. ابتدا ساختار نانوگریتینگ مستطیلی با ارتفاع گریتینگ ۱۰۰ نانومتر و تناوب گریتینگ ۱۰۰ نانومتر را شبیه سازی کرده و با افزایش تناوب گریتینگ تا ۸۰۰ نانومتر بهترین گریتینگ را برای سطح بالا گریتینگ با ارتفاع ۱۰۰ نانومتر و تناوب گریتینگ ۲۰۰ نانومتر بدست آوردیم.



پس از آن، ما نانوگریتهینگ دوزنقه‌ای با ارتفاع گریتهینگ ۱۰۰ نانومتر و تناوب ۲۰۰ نانومتر را پیاده‌سازی کردیم و بازده سلول خورشیدی را تا حدود ۲/۵٪ افزایش دادیم. سپس ارتفاع گریتهینگ را کاهش دادیم تا گرافن و گالیم آرسناید کاملاً بر هم منطبق شوند و گریتهینگ مستطیلی و دوزنقه‌ای را اعمال کردیم. در این حالت بازده در نانوگریتهینگ مستطیلی حدود ۱/۸٪ و در دوزنقه‌ای حدود ۱/۹٪ حاصل شد. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که نانوگریتهینگ‌های دوزنقه‌ای جذب نور بیشتری در مقایسه با ساختارهای نانوگریتهینگ مستطیلی دارند.

## ۲.۵ پیشنهادها

پیشنهاد می‌شود برای بهبود بیشتر بازده سلول خورشیدی ارتفاع نانوگریتهینگ‌ها نیز مورد بررسی قرار گیرد تا بهترین ارتفاع نانوگریتهینگ نیز برای سلول بدست آید. همچنین پیش بینی می‌شود، که بتوان با نزدیک کردن نانوگریتهینگ دوزنقه‌ای به ساختار نانوگریتهینگ مثلثی بازده سلول را بالا برد.

# مراجع

- [1] E. Singh and H. S. Nalwa, "Graphene-based bulk-heterojunction solar cells: a review," *Journal of nanoscience and nanotechnology*, vol. 15, pp. 6237-6278, 2015.
- [2] N. A. Owen, O. R. Inderwildi, and D. A. King, "The status of conventional world oil reserves—Hype or cause for concern?," *Energy policy*, vol. 38, pp. 4743-4749, 2010.
- [3] N. K. Das and S. M. Islam, "Conversion efficiency improvement in GaAs solar cells," in *Large Scale Renewable Power Generation*, ed: Springer, 2014, pp. 53-75.
- [4] D. Chen, H. Zhang, Y. Liu, and J. Li, "Graphene and its derivatives for the development of solar cells, photoelectrochemical, and photocatalytic applications," *Energy and Environmental Science*, vol. 6, pp. 1362-1387, 2013.
- [5] X. Wan, G. Long, L. Huang, and Y. Chen, "Graphene—a promising material for organic photovoltaic cells," *Advanced Materials*, vol. 23, pp. 5342-5358, 2011.
- [6] Y.-J. Cheng, S.-H. Yang, and C.-S. Hsu, "Synthesis of conjugated polymers for organic solar cell applications," *Chemical reviews*, vol. 109, pp. 5868-5923, 2009.
- [7] M. Grätzel, "Solar energy conversion by dye-sensitized photovoltaic cells," *Inorganic chemistry*, vol. 44, pp. 6841-6851, 2005.
- [8] H. He, X. Yu, Y. Wu, X. Mu, H. Zhu, S. Yuan, et al., "13.7% Efficiency graphene–gallium arsenide Schottky junction solar cells with a P3HT hole transport layer," *Nano Energy*, vol. 16, pp. 91-98, 2015.
- [9] Y. Ye and L. Dai, "Graphene-based Schottky junction solar cells," *Journal of Materials Chemistry*, vol. 22, pp. 24224-24229, 2012.
- [10] H. Cotal, C. Fetzer, J. Boisvert, G. Kinsey, R. King, P. Hebert, et al., "III–V multijunction solar cells for concentrating photovoltaics," *Energy and Environmental Science*, vol. 2, pp. 174-192, 2009.

- 
- [11] W. Wei, Z. Wang, Z. Liu, Y. Liu, L. He, D. Chen, et al., "Metal oxide hollow nanostructures: Fabrication and Li storage performance," *Journal of Power Sources*, vol. 238, pp. 376-387, 2013.
- [12] Q. Zhang, E. Uchaker, S. L. Candelaria, and G. Cao, "Nanomaterials for energy conversion and storage," *Chemical Society Reviews*, vol. 42, pp. 3127-3171, 2013.
- [13] V. J. Babu, S. Vempati, S. Sundarrajan, M. Sireesha, and S. Ramakrishna, "Effective nanostructured morphologies for efficient hybrid solar cells," *Solar Energy*, vol. 106, pp. 1-22, 2014.
- [14] J. G. Radich, R. Dwyer, and P. V. Kamat, "Cu<sub>2</sub>S reduced graphene oxide composite for high-efficiency quantum dot solar cells. Overcoming the redox limitations of S<sup>2-</sup>/S<sup>n-2-</sup> at the counter electrode," *The Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 2, pp. 2453-2460, 2011.
- [15] S. Sun, L. Gao, Y. Liu, and J. Sun, "Assembly of CdSe nanoparticles on graphene for low-temperature fabrication of quantum dot sensitized solar cell," *Applied Physics Letters*, vol. 98, p. 093112, 2011.
- [16] N. G. Sahoo, Y. Pan, L. Li, and S. H. Chan, "Graphene-based materials for energy conversion," *Advanced Materials*, vol. 24, pp. 4203-4210, 2012.
- [17] G. Li, R. Zhu, and Y. Yang, "Polymer solar cells," *Nature photonics*, vol. 6, p. 153, 2012.
- [18] A. Di Bartolomeo, "Graphene Schottky diodes: An experimental review of the rectifying graphene/semiconductor heterojunction," *Physics Reports*, vol. 606, pp. 1-58, 2016.
- [19] X. Miao, S. Tongay, M. K. Petterson, K. Berke, A. G. Rinzler, B. R. Appleton, et al., "High efficiency graphene solar cells by chemical doping," *Nano letters*, vol. 12, pp. 2745-2750, 2012.
- [20] W. Jie, F. Zheng, and J. Hao, "Graphene/gallium arsenide-based Schottky junction solar cells," *Applied physics letters*, vol. 103, p. 233111, 2013.
- [21] F. Molitor, J. Güttinger, C. Stampfer, S. Dröscher, A. Jacobsen, T. Ihn, et al., "Electronic properties of graphene nanostructures," *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 23, p. 243201, 2011.
- [22] J. Tworzydło, B. Trauzettel, M. Titov, A. Rycerz, and C. W. Beenakker, "Sub-Poissonian shot noise in graphene," *Physical Review Letters*, vol. 96, p. 246802, 2006.

- [23] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, and S. Pinhas, "Generalized many-channel conductance formula with application to small rings," *Physical Review B*, vol. 31, p. 6207, 1985.
- [24] F. Xia, T. Mueller, Y.-m. Lin, A. Valdes-Garcia, and P. Avouris, "Ultrafast graphene photodetector," *Nature nanotechnology*, vol. 4, p. 839, 2009.
- [25] T. Mueller, F. Xia, and P. Avouris, "Graphene photodetectors for high-speed optical communications," *Nature photonics*, vol. 4, p. 297, 2010.
- [26] X. Wang, L. Zhi, and K. Müllen, "Transparent, conductive graphene electrodes for dye-sensitized solar cells," *Nano letters*, vol. 8, pp. 323-327, 2008.
- [27] C. Casiraghi, S. Pisana, K. Novoselov, A. Geim, and A. Ferrari, "Raman fingerprint of charged impurities in graphene," *Applied Physics Letters*, vol. 91, p. 233108, 2007.
- [28] T. Maschmeyer and M. Che, "Catalytic Aspects of Light-Induced Hydrogen Generation in Water with TiO<sub>2</sub> and Other Photocatalysts: A Simple and Practical Way Towards a Normalization?," *Angewandte Chemie International Edition*, vol. 49, pp. 1536-1539, 2010.
- [29] X. Chen, L. Liu, Y. Y. Peter, and S. S. Mao, "Increasing solar absorption for photocatalysis with black hydrogenated titanium dioxide nanocrystals," *Science*, vol. 331, pp. 746-750, 2011.
- [30] R. Leary and A. Westwood, "Carbonaceous nanomaterials for the enhancement of TiO<sub>2</sub> photocatalysis," *Carbon*, vol. 49, pp. 741-772, 2011.
- [31] M. R. Hoffmann, S. T. Martin, W. Choi, and D. W. Bahnemann, "Environmental applications of semiconductor photocatalysis," *Chemical reviews*, vol. 95, pp. 69-96, 1995.
- [32] O. Carp, C. L. Huisman, and A. Reller, "Photoinduced reactivity of titanium dioxide," *Progress in solid state chemistry*, vol. 32, pp. 33-177, 2004.
- [33] A. Kudo and Y. Miseki, "Heterogeneous photocatalyst materials for water splitting," *Chemical Society Reviews*, vol. 38, pp. 253-278, 2009.
- [34] S. Min and G. Lu, "Dye-sensitized reduced graphene oxide photocatalysts for highly efficient visible-light-driven water reduction," *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 115, pp. 13938-13945, 2011.
- [35] X. Wan, G. Long, L. Huang, and Y. Chen, "Graphene—a promising material for organic photovoltaic cells," *Advanced Materials*, vol. 23, pp. 5342-5358, 2011.

- 
- [36] J. Xue, B. P. Rand, S. Uchida, and S. R. Forrest, "A hybrid planar-mixed molecular hetero-junction photovoltaic cell," *Advanced Materials*, vol. 17, pp. 66-71, 2005.
- [37] Z. Wang, Q. Shi, Q. Li, X. Wang, J. Hou, H. Zheng, et al., "Z-shaped graphene nanoribbon quantum dot device," *Applied Physics Letters*, vol. 91, p. 053109, 2007.
- [38] M. Jørgensen, K. Norrman, and F. C. Krebs, "Stability/degradation of polymer solar cells," *Solar energy materials and solar cells*, vol. 92, pp. 686-714, 2008.
- [39] S.-S. Li, K.-H. Tu, C.-C. Lin, C.-W. Chen, and M. Chhowalla, "Solution-processable graphene oxide as an efficient hole transport layer in polymer solar cells," *ACS nano*, vol. 4, pp. 3169-3174, 2010.
- [40] T. Soga, *Nanostructured materials for solar energy conversion*: Elsevier, 2006.
- [41] N. Dasgupta and A. Dasgupta, *Semiconductor devices: modelling and technology*: PHI Learning Pvt. Ltd., 2004.
- [42] M. Barnoski, *Fundamentals of optical fiber communications*: Elsevier, 2012.
- [43] P. Würfel, *Physics of solar cells vol. 1*: Wiley-vch Weinheim, 2005.
- [44] J. Nelson, "Imperial College Press," *The physics of solar cells*, 2003.
- [45] W. Jie, F. Zheng, and J. Hao, "Graphene/gallium arsenide-based Schottky junction solar cells," *Applied physics letters*, vol. 103, p. 233111, 2013.
- [46] S. K. Behura, P. Mahala, A. Ray, I. Mukhopadhyay, and O. Jani, "Theoretical simulation of photovoltaic response of graphene-on-semiconductors," *Applied Physics A*, vol. 111, pp. 1159-1163, 2013.
- [47] K. Barnham, J. Barnes, G. Haarpaintner, J. Nelson, M. Paxman, T. Foxon, et al., "Quantum-well solar cells," *MRS Bulletin*, vol. 18, pp. 51-55, 1993.
- [48] A. Cowley and S. Sze, "Surface states and barrier height of metal-semiconductor systems," *Journal of Applied Physics*, vol. 36, pp. 3212-3220, 1965.
- [49] E. Hökelek and G. Robinson, "A study of Schottky contacts on indium phosphide," *Journal of applied physics*, vol. 54, pp. 5199-5205, 1983.
- [50] K. Rickert, A. Ellis, J. K. Kim, J.-L. Lee, F. J. Himpsel, F. Dwikusuma, et al., "X-ray photoemission determination of the Schottky barrier height of metal contacts to n-GaN and p-GaN," *Journal of applied physics*, vol. 92, pp. 6671-6678, 2002.

- [51] W. Monch, "On the physics of metal-semiconductor interfaces," *Reports on Progress in Physics*, vol. 53, p. 221, 1990.
- [52] S. M. Sze and K. K. Ng, *Physics of semiconductor devices: John wiley and sons*, 2006.
- [53] A. Modinos, "Secondary electron emission spectroscopy," in *Field, Thermionic, and Secondary Electron Emission Spectroscopy*, ed: Springer, pp. 327-345, 1984.
- [54] R. T. Tung, "Recent advances in Schottky barrier concepts," *Materials Science and Engineering: R: Reports*, vol. 35, pp. 1-138, 2001.
- [55] R. T. Tung, "The physics and chemistry of the Schottky barrier height," *Applied Physics Reviews*, vol. 1, p. 011304, 2014.
- [56] X. Li, W. Chen, S. Zhang, Z. Wu, P. Wang, Z. Xu, et al., "18.5% efficient graphene/GaAs van der Waals heterostructure solar cell," *Nano Energy*, vol. 16, pp. 310-319, 2015.
- [57] Z. Arefinia and A. Asgari, "A new modeling approach for graphene based silicon nanowire Schottky junction solar cells," *Journal of Renewable and Sustainable Energy*, vol. 6, p. 043132, 2014.
- [58] Y. Kuang, Y. Liu, Y. Ma, J. Xu, X. Yang, X. Hong, et al., "Modeling and design of graphene GaAs junction solar cell," *Advances in Condensed Matter Physics*, vol. 2015, 2015.
- [59] S. Saravanan, T. K. Teja, R. Dubey, and S. Kalainathan, "Design and analysis of GaAs thin film solar cell using an efficient light trapping bottom structure," *Materials Today: Proceedings*, vol. 3, pp. 2463-2467, 2016.
- [60] K. Attari, L. Amhaimar, A. Asselman, and M. Bassou, "The Design and Optimization of GaAs Single Solar Cells Using the Genetic Algorithm and Silvaco ATLAS," *International Journal of Photoenergy*, vol. 2017, 2017.
- [61] J. Miao, W. Hu, N. Guo, Z. Lu, X. Liu, L. Liao, et al., "High-Responsivity Graphene/InAs Nanowire Heterojunction Near-Infrared Photodetectors with Distinct Photocurrent On/Off Ratios," *small*, vol. 11, pp. 936-942, 2015.
- [62] Z. Liu, T. Luo, B. Liang, G. Chen, G. Yu, X. Xie, et al., "High-detectivity InAs nanowire photodetectors with spectral response from ultraviolet to near-infrared," *Nano Research*, vol. 6, pp. 775-783, 2013.

- 
- [63] Z. Liu, J. Xu, D. Chen, and G. Shen, "Flexible electronics based on inorganic nanowires," *Chemical Society Reviews*, vol. 44, pp. 161-192, 2015.
- [64] N. Guo, W. Hu, L. Liao, S. Yip, J. C. Ho, J. Miao, et al., "Anomalous and highly efficient InAs nanowire phototransistors based on majority carrier transport at room temperature," *Advanced Materials*, vol. 26, pp. 8203-8209, 2014.
- [65] J. Miao, W. Hu, N. Guo, Z. Lu, X. Zou, L. Liao, et al., "Single InAs nanowire room-temperature near-infrared photodetectors," *ACS nano*, vol. 8, pp. 3628-3635, 2014.
- [66] T. Feng, D. Xie, Y. Lin, Y. Zang, T. Ren, R. Song, et al., "Graphene based Schottky junction solar cells on patterned silicon-pillar-array substrate," *Applied physics letters*, vol. 99, p. 233505, 2011.
- [67] C. Xie, J. Jie, B. Nie, T. Yan, Q. Li, P. Lv, et al., "Schottky solar cells based on graphene nanoribbon/multiple silicon nanowires junctions," *Applied Physics Letters*, vol. 100, p. 193103, 2012.
- [68] X. Jin, A. Ellaboudy, and G. Chavoort, "Improvement of solar cell efficiency using nano-scale top and bottom grating," in *Next Generation (Nano) Photonic and Cell Technologies for Solar Energy Conversion II*, Vol. 8111 , p. 811111 , 2011.
- [69] X. Li, H. Zhu, K. Wang, A. Cao, J. Wei, C. Li, et al., "Graphene-on-silicon Schottky junction solar cells," *Advanced materials*, vol. 22, pp. 2743-2748, 2010.
- [70] Y. Shi, K. K. Kim, A. Reina, M. Hofmann, L.-J. Li, and J. Kong, "Work function engineering of graphene electrode via chemical doping," *ACS nano*, vol. 4, pp. 2689-2694, 2010.
- [71] X. Li, D. Xie, H. Park, M. Zhu, T. H. Zeng, K. Wang, et al., "Ion doping of graphene for high-efficiency heterojunction solar cells," *Nanoscale*, vol. 5, pp. 1945-1948, 2013.
- [72] Y. Lin, X. Li, D. Xie, T. Feng, Y. Chen, R. Song, et al., "Graphene/semiconductor heterojunction solar cells with modulated antireflection and graphene work function," *Energy and Environmental Science*, vol. 6, pp. 108-115, 2013.
- [73] X. Li, L. Fan, Z. Li, K. Wang, M. Zhong, J. Wei, et al., "Boron doping of graphene for graphene-silicon p-n junction solar cells," *Advanced Energy Materials*, vol. 2, pp. 425-429, 2012.
- [74] E. Shi, H. Li, L. Yang, L. Zhang, Z. Li, P. Li, et al., "Colloidal antireflection coating improves graphene-silicon solar cells," *Nano letters*, vol. 13, pp. 1776-1781, 2013.

- [75] Y. Shi, K. K. Kim, A. Reina, M. Hofmann, L.-J. Li, and J. Kong, "Work function engineering of graphene electrode via chemical doping," *ACS nano*, vol. 4, pp. 2689-2694, 2010.
- [76] T. Feng, D. Xie, Y. Lin, Y. Zang, T. Ren, R. Song, et al., "Graphene based Schottky junction solar cells on patterned silicon-pillar-array substrate," *Applied physics letters*, vol. 99, p. 233505, 2011.
- [77] W. Chen, X. Li, W.-Y. Yin, S. Lin, Z. Zhao, E. Li, et al., "Modeling and simulation of graphene-gated graphene-gaas schottky junction field-effect solar cell for its performance enhancement," *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 62, pp. 3760-3766, 2015.
- [78] Z. Yin, S. Sun, T. Salim, S. Wu, X. Huang, Q. He, et al., "Organic photovoltaic devices using highly flexible reduced graphene oxide films as transparent electrodes," *ACS nano*, vol. 4, pp. 5263-5268, 2010.
- [79] J. Wu, H. A. Becerril, Z. Bao, Z. Liu, Y. Chen, and P. Peumans, "Organic solar cells with solution-processed graphene transparent electrodes," *Applied Physics Letters*, vol. 92, p. 237, 2008.
- [80] Q. He, S. Wu, Z. Yin, and H. Zhang, "Graphene-based electronic sensors," *Chemical Science*, vol. 3, pp. 1764-1772, 2012.
- [81] F. Yang, A. C. Nielander, R. L. Grimm, and N. S. Lewis, "Photoelectrochemical behavior of n-type GaAs (100) electrodes coated by a single layer of graphene," *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 120, pp. 6989-6995, 2016.
- [82] S. W. Tong, Y. Wang, Y. Zheng, M. F. Ng, and K. P. Loh, "Graphene intermediate layer in tandem organic photovoltaic cells," *Advanced Functional Materials*, vol. 21, pp. 4430-4435, 2011.
- [83] V. C. Tung, J. Kim, L. J. Cote, and J. Huang, "Sticky interconnect for solution-processed tandem solar cells," *Journal of the American Chemical Society*, vol. 133, pp. 9262-9265, 2011.
- [84] C.-H. Huang, S.-C. Yu, Y.-C. Lai, G.-C. Chi, and P. Yu, "Efficiency enhancement of Organic/GaAs hybrid photovoltaic cells using transparent graphene as front electrode," *IEEE Journal of Photovoltaics*, vol. 6, pp. 480-485, 2016.
- [85] K. Patel and P. K. Tyagi, "Multilayer graphene as a transparent conducting electrode in silicon heterojunction solar cells," *AIP Advances*, vol. 5, p. 077165, 2015.



- 
- [86] S. K. Behura, P. Mahala, A. Ray, I. Mukhopadhyay, and O. Jani, "Theoretical simulation of photovoltaic response of graphene-on-semiconductors," *Applied Physics A*, vol. 111, pp. 1159-1163, 2013.
- [87] E. Shi, H. Li, L. Yang, L. Zhang, Z. Li, P. Li, et al., "Colloidal antireflection coating improves graphene-silicon solar cells," *Nano letters*, vol. 13, pp. 1776-1781, 2013.
- [88] Y. Ye, L. Gan, L. Dai, Y. Dai, X. Guo, H. Meng, et al., "A simple and scalable graphene patterning method and its application in CdSe nanobelt/graphene Schottky junction solar cells," *Nanoscale*, vol. 3, pp. 1477-1481, 2011.
- [89] L. Lancellotti, T. Polichetti, F. Ricciardella, O. Tari, S. Gnanapragasam, S. Daliento, et al., "Graphene applications in Schottky barrier solar cells," *Thin Solid Films*, vol. 522, pp. 390-394, 2012.
- [90] J. H. Schmid, P. Cheben, S. Janz, J. Lapointe, E. Post, A. Delâge, et al., "Subwavelength grating structures in planar waveguide facets for modified reflectivity," in *Photonics North 2007*, vol. 6796, pp. 67963E1-10, 2007.
- [91] J. Springer, A. Poruba, L. Müllerova, M. Vanecek, O. Kluth, and B. Rech, "Absorption loss at nanorough silver back reflector of thin-film silicon solar cells," *Journal of Applied Physics*, vol. 95, pp. 1427-1429, 2004.
- [92] O. Isabella, J. Krč, and M. Zeman, "Modulated surface textures for enhanced light trapping in thin-film silicon solar cells," *Applied Physics Letters*, vol. 97, p. 101106, 2010.
- [93] Y. Song and Y. Lee, "Simulation of antireflective subwavelength grating structures for optical device applications," in *Numerical Simulation of Optoelectronic Devices, 2009. NUSOD 2009. 9th International Conference on*, pp. 103-104, 2009.
- [94] T. Feng, D. Xie, Y. Lin, H. Zhao, Y. Chen, H. Tian, et al., "Efficiency enhancement of graphene/silicon-pillar-array solar cells by HNO<sub>3</sub> and PEDOT-PSS," *Nanoscale*, vol. 4, pp. 2130-2133, 2012.
- [95] K. X. Wang, Z. Yu, V. Liu, Y. Cui, and S. Fan, "Absorption enhancement in ultrathin crystalline silicon solar cells with antireflection and light-trapping nanocone gratings," *Nano letters*, vol. 12, pp. 1616-1619, 2012.
- [96] N. Das, A. Karar, M. Vasiliev, C. L. Tan, K. Alameh, and Y. T. Lee, "Analysis of nano-grating-assisted light absorption enhancement in metal-semiconductor-metal photodetec-

tors patterned using focused ion-beam lithography,” *Optics Communications*, vol. 284, pp. 1694-1700, 2011.

[97] S. Mokkaḩati, F. Beck, A. Polman, and K. Catchpole, ”Designing periodic arrays of metal nanoparticles for light-trapping applications in solar cells,” *Applied Physics Letters*, vol. 95, p. 053115, 2009.

[98] D. Chandrasekar and N. Das, ”Modeling and analysis of GaAs solar cells for conversion efficiency improvement by reducing reflection losses,” in *Proceedings of the 16th International Conference on Numerical Simulation of Optoelectronic Devices (NUSOD 2016)*, 2016.

## Abstract

Increased global energy consumption and the subsequent increase in greenhouse gases have resulted in irreversible environmental pollution and damages. There has been a surge in scientific efforts to reduce global dependence on exhaustible resources and environmentally destructive fuels and move towards affordable renewable energies. Among them are the efforts focused on producing electrical energy from sunlight with semiconductors.

The present investigation is an attempt to study and improve the performance of solar cells with Graphene/ Gallium Arsenide based Schottky junctions. This solar cell is composed of three layers, the Gallium Arsenide substrate, Silicon Oxide and Graphene. In order to obtain cell performance parameters, the solar cell is simulated with Silvaco software. The important cell parameters include open-circuit voltage ( $V_{oc}$ ), short-circuit current ( $J_{sc}$ ), fill factor (FF) and power conversion efficiency (PCE).

Simulation results By examining the effects of substrate thickness, transparency and number of graphene layers show that the best power conversion efficiency for the solar cell with 3- layers graphene and 4 micrometer Gallium Arsenide substrate is approximately 1.196% .

To improve the efficiency of the solar cell, We simulated rectangular and trapezoid nano-grating on the cell and we were able to increase the cell's efficiency by about 2.05% . Then reduced the height of the grating to match the graphene and GaAs, and applied rectangular and trapezoid grating. In this case, the efficiency in a rectangular nanotubes was estimated to be 1.8% and in a trapezoid about 1.9%.

Keywords: Solar Cell, Schottky Junction, Graphene, Gallium Arsenide, Power Conversion Efficiency (PCE).



**Shahrood University of Technology**

**School of Electrical and Robotic Engineering**

**MSc Thesis in: Submitted in Partial Fulfillment of the Requirement  
for the Degree of Master of Science in Micro and Nano Electronic  
Devices Engineering**

**Simulation and improvement of the  
performance of solar cells using  
graphene/gallium arsenide contact.**

**By: Farzaneh Shahnooshi**

**Supervisor**

**Dr. Ali Fattah**

**July 2018**