مجلة الدراسات التربوية والعلمية - كلية التربية - الجامعة العراقية
العدد الثالث والعشرون - المجلد السادس - علوم الفيزياء - نيسان 2024م
doi.org/10.52866/esj.2023.06.23.03

محاكاه نظرية لدراسة تأثير طبقات الانعكاس والموائمة على اداء الخلية الشمسية CH3NH3Snl3

دينا اياد صالح[1*] ، معمر عبدالعزيز كامل[2*]
قسم الفيزياء ,كلية التربية للعلوم الصرفة , جامعة تكريت [1*]
قسم الفيزياء ,كلية التربية للعلوم الصرفة , جامعة تكريت [2*]
E-mail : Muaamar.a.kamil@tu.edu.iq E-mail : BS230035pep@st.tu.edu.iq

مستخلص:

تم في هذا البحث اختبار عدة مواد مختلفة لكل من طبقتي الموائمة والانعكاس للخلية الشمسية بيروفسكايت CH3NH3Snl3/TiO2/TCO المتكونة من اربعة طبقات بهدف الحصول على كفاءة اعلى للخلية الشمسية وتم ذلك باستخدام برنامج المحاكاة SCAPS-ID حيث تم اعتماد مادة البيروفيسكايت (CH3NHSnl3) كطبقة امتصاص للخلية الشمسية وبسمك اولي قدره (0.5 µm) وتم اختيار (TiO2) كطبقة موائمة وبسمك اولي قدره (0.05 µm) وكذلك اختيار (TCO) كطبقة نفاذ بسمك قدره (0.5 µm) و كان شكل الخلية الشمسية CH3N-H3Snl3/TiO2/TCO وكانت مخرجات الخلية الشمسية كالتالي:

. [Voc= 0.5 Volt , Jsc = 26.78 mA/cm^2 , FF = 82.09% , η= 18.7%]

و بعد تغيير طبقة الموائمة تم اختيار افضل طبقة موائمة وهي (ZnO:Al) و بسمك قدره (0.5 µm) واخيرا تم تغيير طبقات الانعكاس و كانت افضل طبقة هي (CuO) بسمك قدره (0.01 µm) واصبحت الخلية الشمسية بالشكل CuO/CH3NH3Snl3/ZnO:Al/TCO وكانت مخرجات الخلية الشمسية البيروفيسكايت (CH3NH3Snl3) النهائية بالشكل الآتي : [Voc= 1.07 volt , Jsc = 33.1 mA/cm^2 , FF= 80.35% , η= 28.6%]

الكلمات الدالة : SCAPS-ID ، خلية شمسية ، بيروفسكايت ، الموائمة ، الانعكاس الخلفي .

Theoretical Simulation to the Study the Effect of Reflective and Harmonious Layers on Solar Cell Performance CH3NH3Snl3

Dina Ayad Saleh [*1] , Muammar Abdulaziz Kamel [*2]
Department of Physics, College of Education for Pure Sciences, Tikrit University [*1]
Department of Physics, College of Education for Pure Sciences, Tikrit University [*2]
E-mail: BS230035pep@st.tu.edu.iq ، E-mail : Muaamar.a.kamil@tu.edu.iq

Abstract :

This research tested several different materials for both the harmonized and reflective layers of the perovskite solar cell CH3NH3Snl3/TiO2/TCO consisting of four layers with the aim of obtaining higher solar cell efficiency using SCAPS-ID simulation software where perovskite material was certified CH3NHSnl3) (as solar cell absorption layer with initial thickness of (0.5 µm) and selected (TiO2) as a harmonious layer and with primary thickness of (0.05 µm) as well as selection (TCO) as a permeable layer with thickness of 0.5 µm. The shape of the solar cell was CH3NH3Snl3/TiO2/TCO. The solar cell output was as follows: [Voc= 0.5 Volt, Jsc = 26.78 mA/cm2, FF = 82.09% , η= 18.7%]

After changing the alignment layer, the best harmonious layer was selected (ZnO: Al) and thickness of m) µ (0.5 and finally the reflection layers were changed, and the best layer was (CuO) with thickness of 0.01 µm). The solar cell became as CuO/CH3NH3Snl3/ZnO:Al/TCO and the perovskite solar cell output was (the final CH3NH3Snl3 as follows:

[Voc= 1.07 volt, Jsc = 33.1 mA/cm2 , FF= 80.35% , η= 28.6%]

Key Words: SCAPS-ID, Solar Cell, Perovskite, Alignment, Rear Reflection.

1 . المقدمة:

من المتوقع ان يزداد الطلب على الطاقة المعتمدة على الخلية الشمسية في المستقبل كونها تعد طاقة متجددة لا تستنفذ و طاقة نظيفة (غير ملوثة) بدلا عن طاقة الوقود الاحفوري الذي يعد نوع من انواع الطاقة الملوثة لاحتوائه على الكاربون والغازات الملوثة للبيئة، و تعد الخلايا الشمسية من اهم الاختراعات الحديثة التي لها فائدة كبيرة جدا تتمثل في تمكين الانسان من سد حاجته اليومية للطاقة الكهربائية [1]. كما تعد خلايا البيروفيسكايت الخالية من الرصاص منافس قوي للخلايا الشمسية الاخرى لامتلاكها استقرار جيد وكفاءة عالية، و تتميز خلايا البيروفيسكايت بثابت عزل كبير و كفاءة عالية في امتصاص الضوء القادم من الشمس [2]. و تعد الخلايا الشمسية بشكل عام جهاز يحول الطاقة الشمسية مباشرة الى طاقة كهربائية و تستخدم مجاميع الخلية الشمسية و طبقاتها لامتصاص الاشعة الصادرة من الشمس عن طريق تركيبها كوحدة واحدة و توجيهها و ترتيبها على سطح واحد يسمى لوح الطاقة الشمسية وتدعم هذه الخلايا باطار من الالمنيوم لحمايتها من الصدمات و زوج من الدايودات للحماية الكهربائية [3]. تتكون خلية البيروفيسكايت من عدة طبقات اولها طبقة امتصاص بفجوة طاقة عادة ما تكون قليلة، وطبقة نفاذ بفجوة طاقة عالية، وطبقة موائمة ذات فجوة طاقة متوسطة (تكون قيمتها بين فجوة طاقة طبقة الامتصاص وفجوة طاقة طبقة النفاذ[4] . تبرز اهمية الخلية الشمسية في كونها غير ملوثة و متاحة محليا ورخيصة الثمن تقريبا كما انها سهلة التركيب و لذلك اصبحت رائجة الاستخدام فهي تقوم بتحويل المباني من منشآت مستهلكة للطاقة الى مباني منتجة لها معتمدة في ذلك على الشمس باعتبارها مصدر اقتصادي للطاقة و قد تم استخدامها حتى في المناطق التي لا تتوفر فيها معدلات عالية من الاشعاع الشمسي أو المناطق التي تتميز بقصر ساعات سطوع الشمس، و من الجدير بالذكر انها تعمل بشكل جيد حتى مع وجود الغيوم او برودة الطقس[5]. في الخلايا الشمسية تقع طبقة الامتصاص بين طبقتين احداهما توصل الالكترون و الاخرى توصل الفجوات ويتم توصيلها بطبقة شفافة لكي تسمح بمرور الضوء من خلالها و تدعى هذه الطبقة بطبقة النفاذ. في هذا البحث تم دراسة تأثير تغيير (استبدال) طبقة الموائمة و تأثيرها على عمل الخلية الشمسية و كفاءتها أكذلك تأثير تغيير طبقة الانعكاس على عمل الخلية الشمسية و مساهمة كل من الطبقتين في رفع كفاءة الخلية الشمسية .

2 . الجزء العملي

أولاً : اختبار تغيير طبقة الموائمة

تم اضافة واختبار عدة مواد لطبقة الموائمة مع تثبيت كل من طبقة الانعكاس و الامتصاص و ذلك لتحسين جودة الخلية الشمسية و مقارنتها مع الخلايا الاخرى و بسمك مختلف لكل طبقة، و ان مركبات طبقة الموائمة تمتاز بفجوة طاقة تقع بين قيمتي فجوة الطاقة لكل من طبقتي الانعكاس و الامتصاص و ذلك لزيادة التجانس بين طبقات الخلية الشمسية، والطبقات التي تم استبدالها عن طبقة الموائمة هي[6] :

(ZnO , $ZnO;Al$, V_2O_5 , CdO , InS_3 , ZnS)

و الجدول (1) يبين البارامترات الاساسية لطبقة

الموائمة التي تفيدنا في اجراء المحاكاة، و الجدول (2) يبين النتائج التي حصلنا عليها من المحاكاة بعد تغيير طبقة الموائمة حيث بينت النتائج ان افضل خلية هي (CH3NH3SnI3/ZnO;Al/TCO)، حيث وصلت كفاءتها التحويلية الى 28.68 ، والخلية (CH3NH3SnI3/ZnS/TCO) بلغت كفاءتها 27.45 و الخلية (CH3NH3SnI3/V_2O_5/TCO) بلغت كفاءتها 26.74، والخلية (CH3NH3SnI3/ZnO/TCO) بلغت كفاءتها 25.02 ، والخلية (CH3NH3SnI3/CdO/TCO) بلغت كفاءتها 19.56 و اخيرا الخلية (CH3NH3SnI3/In3S3/TCO) بكفاءة مقدارها 19.52 .

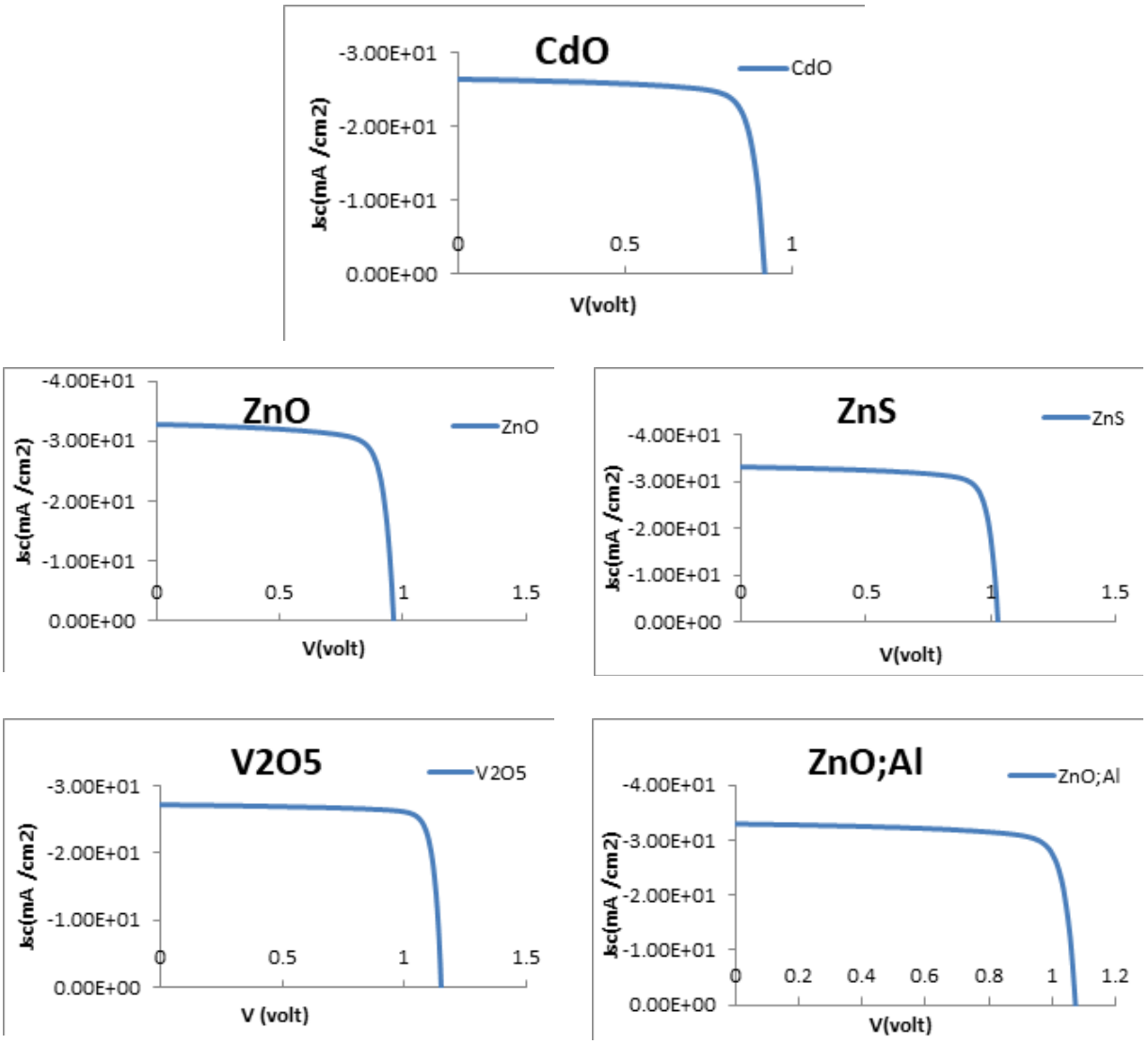
وادناه الشكل (a-b-c-d-e1-) يبين العلاقة بين التيار والفولتية لاختلاف طبقات الموائمة، اما الشكل (a-b-c-d-e2-) فيبين العلاقة بين الطول الموجي و الكفاءة الكمية لكل طبقة من طبقات الموائمة حيث تكون ادنى قيمة للكفاءة الكمية عند الصفر وتبدأ بالازدياد حتى تصل اعلى قيمة لها و مقدارها تقريبا ٪100 عند الطول الموجي 680 nm وذلك بسبب طول موجة القطع لطبقة الموائمة، ونظرا لوجود خاصيتي طول الانتشار و الانعكاسية تبدأ الكفاءة الكمية بالانخفاض تدريجيا حتى تصبح صفرا عند طول موجة القطع لطبقة الامتصاص[7]، كما يوضح الجدول (3) القيم العليا والدنيا للكفاءة الكمية لكل طبقة من طبقات الموائمة التي تم اختبارها على الخلية حيث تكون اعلى قيمة للكفاءة الكمية عند طبقة الموائمة V2O5 عند الطول الموجي 680 nm .

الجدول (1) يبين المعالم الاساسية لطبقات الموائمة

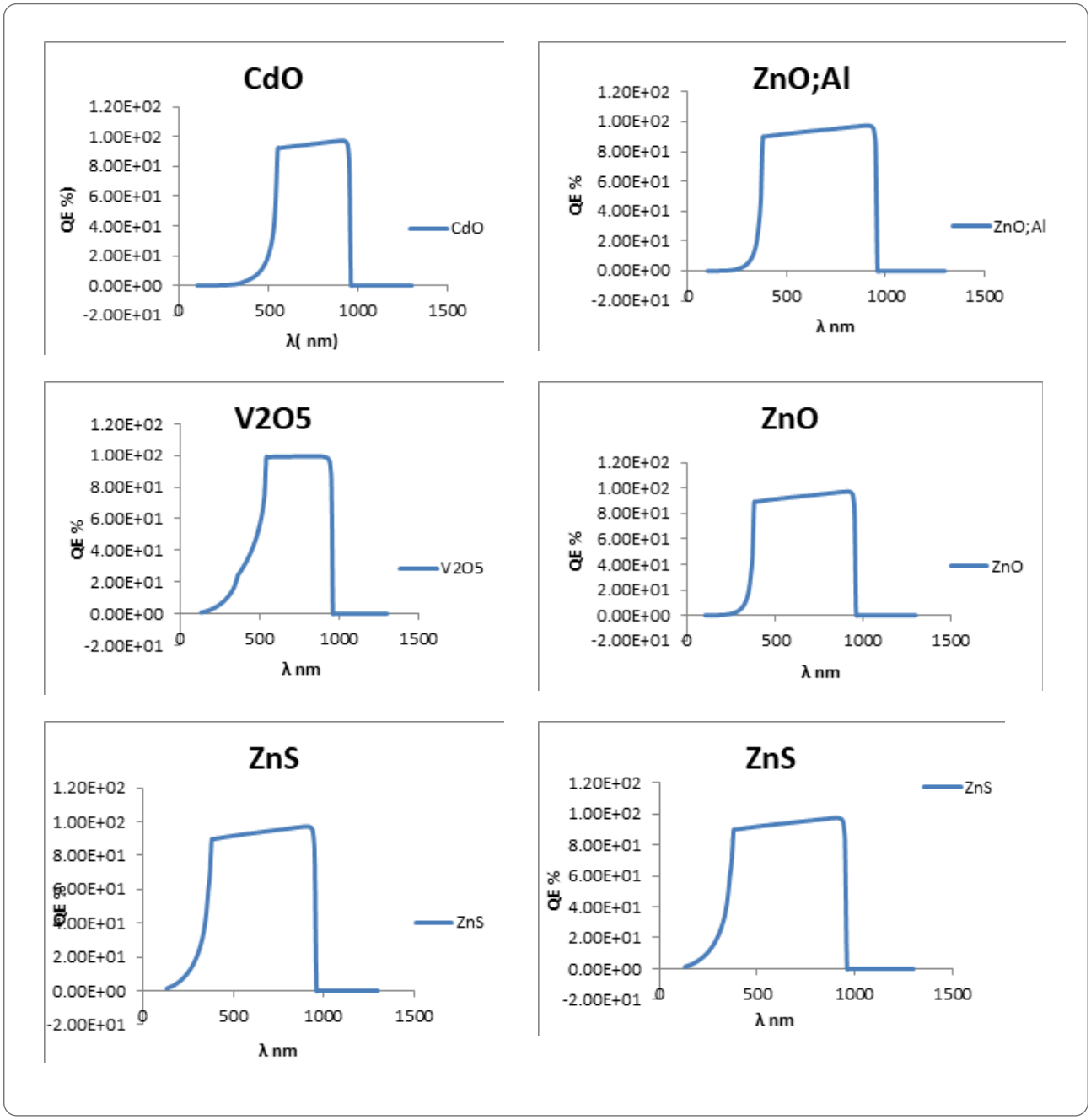
parameters	Symbol (unit)	Zno [16]	Zno;Al [17]	V_2O_5 [18]	CdO [19]	ZnS [20]
Thickness	W(µm)	0.05	0.5	0.2	0.5	0.2
Band gap	Eg(ev)	3.35	3.3	2.3	2.28	3.3
Electron affinity	χ(ev)	4.21	4.2	3.99	4.5	4.4
Dielectric permittivity	ϵ_r	9	9	4.28	5.3	10
CB effective density of states	$N_c(cm^{-3})$	2.2E18	3E18	2.2E18	2.2E18	1.8E18
VB effectiv density of states	$N_v(cm^{-3})$	1.8E19	1.8E19	1.8E19	1.8E19	1.8E19
Electron thermal velocity	$V_n(\frac{cm}{s})$	1E7	1E7	1E7	1E7	1E7
Hole thermal velocity	$V_p(\frac{cm}{s})$	1E7	1E7	1E7	1E7	1E7
Electron mobility	$\mu_n(\frac{cm2}{V.S})$	25	100	1.26	1.46E2	100
Hole mobility	$\mu_p(\frac{cm2}{V.S})$	100	30	34.5	39.5	25
Shallow uniform donor density	$N_D(\frac{1}{cm3})$	1E18	5E19	1E22	1E22	1E22
Shallow uniform accepter density	$N_A(\frac{1}{cm3})$	0	0	0	0	0

الجدول (2) يبين مخرجات الخلية الشمسية بعد تغيير طبقات الموائمة

ت	اسم الخلية	V(volt)	Jsc(mA / cm^2)	FF %	η ٪
1	CH3CN3SnI3/ZnO/TCO	0.962	32.8	79.26	25.02
2	CH3CN3SnI3/ZnO;Al/TCO	1.074	32.9	80.99	28.68
3	CH3CN3SnI3/V_2O_5/TCO	1.15	27.17	85.44	26.74
4	CH3CN3SnI3/CdO/TCO	0.91	26.47	80.40	19.56
5	CH3CN3SnI3/ZnS/TCO	1.02	33.11	80.52	27.45



الشكل (1) يوضح العلاقة بين التيار والفولتية لكل طبقة من طبقات الموائمة



ثانياً : اختبار تأثير تغيير طبقة الانعكاس

بعد اجراء تغيير لطبقة الموائمة على الخلية المدروسة ولغرض تحسين اداء الخلية و اجراء المقارنة عليها، تم اخذ افضل طبقة موائمة (ZnO:Al) و اضافة طبقة انعكاس خلفي للتحسين من اداء الخلية الشمسية وكذلك للحصول على كفاءة تحويلية كبيرة حيث تصبح الخلية ذات اربع طبقات مختلفة حيث ان الغرض من اضافة طبقة الانعكاس الخلفي هو توفير حاجز جهد عالي بين طبقة الانعكاس و طبقة الامتصاص حيث تساعد على اعادة الالكترونات النافذة من طبقة الامتصاص لغرض تحسين اداء عمل الخلية الشمسية كما انه يفضل ان تكون فجوة الطاقة لطبقة الانعكاس الخلفي اقل من فجوة الطاقة لطبقة الامتصاص[8].

حيث تم اعتماد الطبقات التالية كطبقات انعكاس خلفي : (TA , CTe , SnS , Si , MoS , CuO) ، ويبين الجدول (4) البارامترات اللازم ادخالها في برنامج المحاكاة لغرض تغيير طبقات الانعكاس الخلفي أكما يبين الجدول (5) معالم الخلايا بعد اضافة طبقات الانعكاس الخلفي .

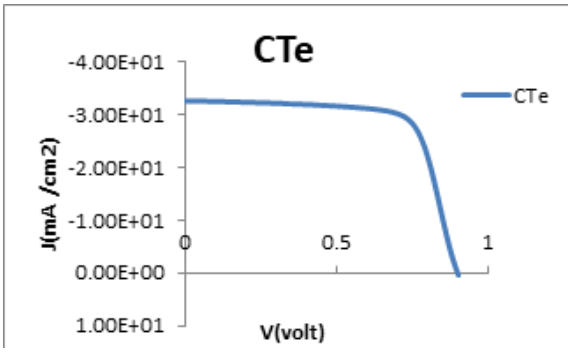
و بعد اجراء المحاكاة على كل طبقة من طبقات الانعكاس وجد ان افضل خلية كانت /CH3CN- Al/TCO : CuO 3SnI3/ZnO بكفاءة مقدارها 28.60٪ و الخلية Al/ : SnS/CH3NH3SnL3/ZnO TCO بلغت كفاءتها 21.08 ٪ والخلية -MoS/CH3N H3SnI3/ZnO : Al/TCO فقد وصلت 21.98 ٪ و الخلية CTe/CH3NH3SnI3/ZnO : Al/TCO بكفاءة قدرها 21.44 ٪ والخلية Si/CH3NH3SnI3/ZnO : Al/TCO بكفاءة قدرها 16.84 ٪ واخيراً TA/ CH3NH3SnI3/ZnO : Al/TCO بكفاءة لا تتجاوز 7.42 ٪ والشكل (a-b-c-d-e-f3-) يبين العلاقة بين التيار والفولتية لكل طبقة من طبقات الانعكاس الخلفي والشكل (4-a-b-c-d-e-f) يبين العلاقة بين الكفاءة الكمية والطول الموجي، و من ملاحظة الشكل ادناه نجد ان اقل قيمة للكفاءة الكمية كانت صفر عند الطول الموجي 1300 nm و تزداد الى 98.4٪ عند الطول الموجي 940 nm ثم تستقر حتى تهبط اخيرا الى الصفر عند طول موجة القطع لأصغر فجوة طاقة عند الطبقة (CuO)، حيث كلما زادت فجوة الطاقة قلت الاستجابة الطيفية [9،10].

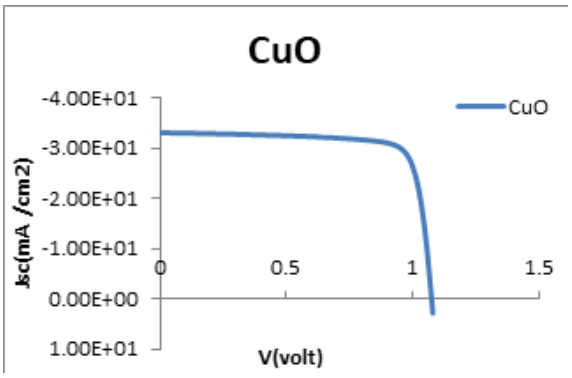
الجدول (3) يمثل البارامترات الاساسية لطبقات الانعكاس الخلفي

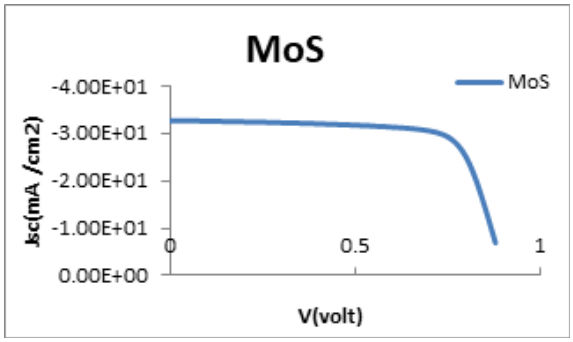
parameters	Symbol (unit)	TA [14]	CTe [15]	SnS [12]	Si [13]	MoS [13]	CuO [11]
Thickness	W(μm)	2	2	2	2	2	0.01
Band gap	Eg(ev)	0.6	1.18	1.25	1.12	1.06	2.1
Electron affinity	χ(ev)	4	4.2	4.2	4.05	4.37	3.2
Dielectric permittivity	$€_r$	20	10	10	11.9	13.6	7.11
CB effective density of states	$N_c(cm^{-3})$	7.5E17	7.8E17	2.2E18	2.8E19	2.2E18	2.2E20
VB effectiv density of states	$N_v(cm^{-3})$	1.5E19	1.6E19	1.8E19	2.6E19	1.8E19	5.5E19
Electron thermal velocity	$V_n(\frac{cm}{s})$	1E7	1E7	1E7	1E7	1E7	1E7
Hole thermal velocity	$V_p(\frac{cm}{s})$	1E7	1E7	1E7	1E7	1E7	1E7
Electron mobility	$\mu_n(\frac{cm2}{V.S})$	500	500	25	1450	100	3.4
Hole mobility	$\mu_p(\frac{cm2}{V.S})$	210	100	100	500	25	3.4
Shallow uniform donor density	$N_D(\frac{1}{cm3})$	0	0	0	0	0	0
Shallow uniform accepter density	$N_A(\frac{1}{cm3})$	1E5	1E5	1E5	1E5	1E5	1E18

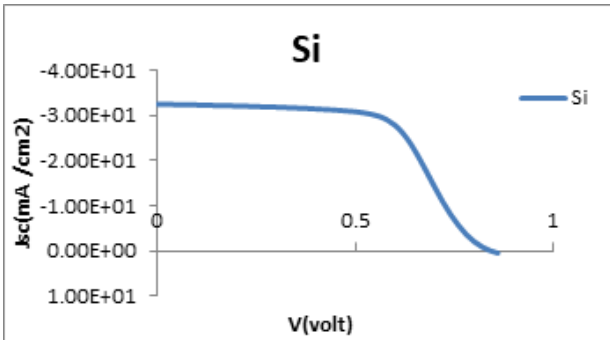
الجدول (4) . يمثل مخرجات الخلية الشمسية بعد اضافة طبقات الانعكاس

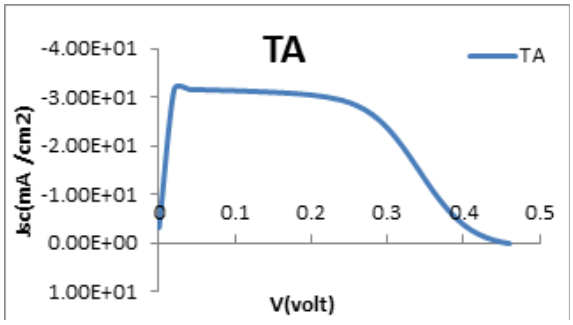
ت	اسم الخلية	V(volt)	J(mA/ cm2)	FF%	%η
1	/CH3CN3Snl3/ZnO : Al/TCO CuO	1.07	33.1	80.35	28.60
2	TA/CH3NH3Snl3/ZnO : Al/TCO	0.45	31.72	51.47	7.42
3	CTe/CH3NH3Snl3/ZnO : Al/TCO	0.8	32.70	73.05	21.44
4	SnS/CH3NH3SnL3/ZnO : Al/TCO	0.9	32.69	70.97	21.08
5	Si/CH3NH3Snl3/ZnO : Al/TCO	0.84	32.4	61.5	16.84
6	MoS/CH3NH3Snl3/ZnO : Al/TCO	0.9	32.73	74.12	21.98

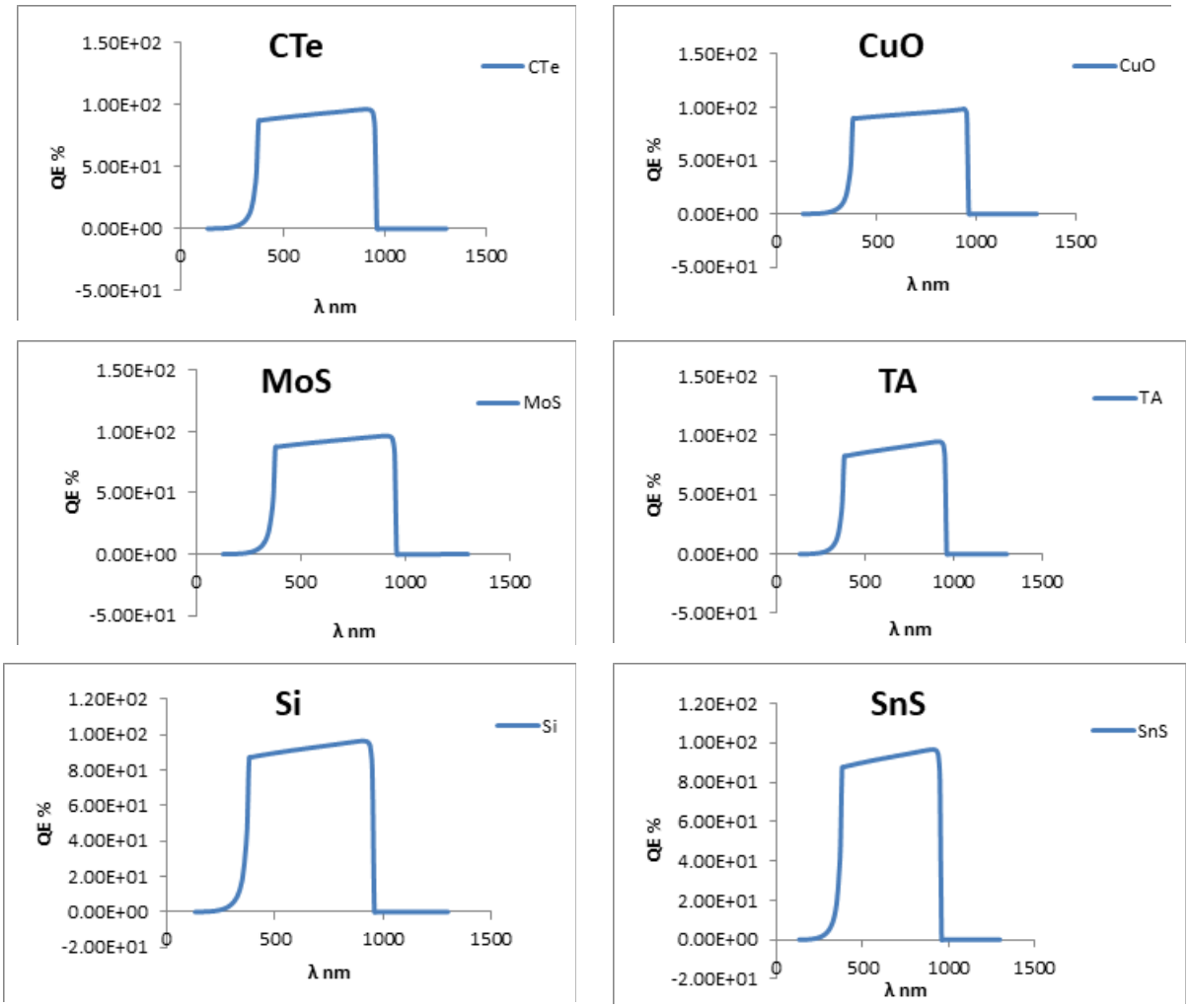












الشكل (2) يوضح العلاقة بين الطول الموجي والكفاءة الكمية لطبقات الانعكاس المستخدمة

الاستنتاجات:

تم الحصول على خلية شمسية ذات كفاءة عالية وذلك بتغيير طبقات الخلية الشمسية للخلية الاساس المتكونة من اربع طبقات (CuO , TA , CTe, SnS , Si , MoS) . ان اختلاف طبقات الانعكاس له تأثير كبير على اداء الخلية الشمسية البيروفيسكايت و كانت افضل طبقة انعكاس هي (CuO) و كانت النتائج النهائية للخلية الشمسية لهذه الطبقة التي تم الحصول عليها هي :

[V = 1.07 volt , Jsc = 33.1 mA / cm^2 , FF= 80.35 % , η = 28.60 %]

وجد ايضا ان اختلاف مادة طبقة الموائمة له تأثير على كفاءة الخلية الشمسية البيروفيسكايت حيث ان افضل طبقة كانت (ZnO;Al). طبقة الموائمة لها تأثير كبير على اداء الخلية الشمسية البيروفيسكايت (CH3NH3SnI3) و كانت النتائج النهائية لطبقة الموائمة (ZnO;Al) للخلية الشمسية التي تم الحصول عليها هي:

[V = 1.074 volt , Jsc = 32.9 mA/cm^2 , FF = 80.99 % , η = 28.68%]

Cu(In,Ga)Se2 Solar Cells. IOSR Journal of Applied Physics, 8, 1-11(2017).

[8]. Guo, Y. et al. Efects of transition metal substituents on interfacial and electronic structure of CH3NH3PbI3/TiO2 interface: A first- principles comparative study. Nanomaterials 9, 966–979 (2019).

[9]. Markose, K. K. et al. Novel boron-doped p-type Cu2O thin films as a hole-selective contact in c-Si solar cells. Appl. Mater. Interfaces 12, 12972–12981 (2020).

[10]. Shoewu, O., G. Anuforonini, and O. Duduyemi. "Simulation of the performance of CdTe/CdS/ZnO multi-junction thin film solar cell." Review of information engineering and applications 3.1:1-10. 2016.

[11]Ganvir, R. Modelling of the nanowire CdS-CdTe device design for enhanced quantum efficiency in Window-absorber type solar cells. M.Sc. Department Electrical Engineering. College of Engineering .University of Kentucky. USA(2016).

[12] M. Minbashi, M.K. Omrani, N. Memarian, D.-H. Kim, " Comparison of theoretical and experimental results for band-gap-graded CZTSSe solar cell, " Current Applied Physics , (2017).

[13]M. Minbashi, M.K. Omrani, N. Memarian, D.-H. Kim, " Comparison of theoretical and experimental results for band-gap-graded CZTSSe solar cell, " Current Applied Physics , (2017).

[14] A. Teyou Ngoupo, S.Ouédraogo, F.Zougmoré and J. M. B. Ndjaka, "New Architecture towards Ultrathin CdTe Solar Cells for High Conversion Efficiency, "Hinda-

References :

[1]. Ramprasad Chandrasekharan ," NUMERICAL MODELING OF TIN-BASED ABSORBER DEVICES FOR COST-EFFECTIVE SOLAR PHOTOVOLTAICS ." A Dissertation in Energy and Geo-Environmental Engineering, 2012.

[2]. Green, Martin & Ho-Baillie, Anita & Snaith, Henry. "The emergence of perovskite solar cells Nature Photonics". 8(7). Doi: 10.1038/NPHOTON,2014.

[3] I. Alam and M.A. Ashraf,Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects 1-17 (2020).

[4] Haider, S.Z., Anwar, H. and Wang, M.Q A Comprehensive Device Modelling of Perovskite Solar Cell with Inorganic Copper Iodide as Hole Transport Material. Semiconductor Science and Technology, 33, Article ID: 035001(2018).

[5] Kour, N., Mehra, R. and Chandni Comparative Study of Solar Cell Devices using Lead and Tin based Perovskite Material through Numerical Simulation. International Journal for Scientific Research & Development, 5, 1289-1292(2017).

[6] Stoumpos, C.C., Malliakas, C.D. and Kanatzidis, M.G. Semiconducting Tin and Lead Iodide Perovskites with Organic Cations: Phase Transitions, High Mobilities, and Near-Infrared Photoluminescent Properties. Inorganic Chemistry, 52,9019 – 9038(2013).

[7] Oyedele, S.O. and Aka, B. Numerical Simulation and Performance Optimi- zation of

wi Publishing Corporation, International Journal of Photoenergy , Vol. 9, Article ID 961812, 2015.

[15]Nowshad Amin, M. A. Matin , M. M. Aliyu , M. A. Alghoul , M. R. Karim , and K. Sopian , "Prospects of Back Surface Field Effect in Ultra-Thin High-Efficiency CdS / CdTe Solar Cells from Numerical Modeling, " Hindawi Publishing Corporation, International Journal of Photoenergy, Vol. 8, Article ID 578580, 2010.

[16] Ganvir, R. Modelling of the nanowire CdS-CdTe device design for enhanced quantum efficiency in Window-absorber type solar cells. M.Sc. Department Electrical Engineering. College of Engineering .University of Kentucky. USA(2016).

[17] Sanad, M. M. S., Elseman, A. M., Elsenety, M. M., Rashad, M. M.,& Elsayed, B. A. Facile synthesis of sulfide-based chalcogenideas hole-transporting materials for cost-effective efficient perovskite solar cells. Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 30 (7).6868-6875(2019).

[18] Najim, A. H., & Saleh, A. N. Study effect of window andBSF layers on the properties of the CZTS/CZTSe solar cell by SCAPS–1D. Tikrit Journal of Pure Science , 24 (3), 77-83. p.77-83(2019).

[19] Cherouana, A. and Labbani, R. Study of CZTS and CZTSSesolar cells for buffer layers selection. Applied Surface Science , 424 ,pp.251-255. Doi.org/10.1007/S 40243-019-0144 -1(2017).

[20] Rosly, H. N., Rahman, K. S., Harif, M. N., Yusoff, Y., Wafi, A.,Matin, M. A., ... & Amin, N.High Efficiency CdTe Thin Film SolarCells with CdSe as a Prospective Window Layer from Numerical Optimization. The Mattingley Publishing Co., Inc. ISSN : 0193-4120 Volume 81 Page No. 5647 – 5653(2019).