

Research Paper

## Investigating the Factors of Increasing the Efficiency of Heterojunction Quantum Dot Solar Cell

Elham Shirdel<sup>1</sup>, Mohammad Ali Mansouri-Birjandi\*<sup>2</sup>

Received: 2019.01.31

Accepted: 2020.01.25

### Abstract

Factors affecting on heterojunction quantum dot solar cell's efficiency include thickness of wide band transparent semiconductor and quantum dot layers, doping level of quantum dots layer and the type of metal used as anode. This paper represents a simulation of a structure consisting of a layer of short ligand coated PbS quantum dots and a layer of ZnO semiconductor and gold anode using COMSOL Multiphysics v5.4 x64. The primary model had 2.62% efficiency for a cell with a Schottky contact between anode and quantum dot layer and 7.95% efficiency for a cell with an ohmic contact. A sweep in doping level of quantum dots layer for  $10^{15}$ ,  $10^{16}$  and  $10^{17}$   $\text{cm}^{-3}$  led to 7%, 7.95% and 5.2% for ohmic contact and 2.6%, 2.62% and 2.2% for schottky contact, respectively. A sweep in thickness of PbS quantum dot layer from 50nm to 100nm resulted in an advance in cell's efficiency from 2.1% to 2.91% for a cell with a schottky contact and from 7% to 8.12% for a cell with an ohmic contact, as a conclusion to increasing the depletion region's length, hence an increase in electric field in the junction area. In addition, ZnO layer's thickness from 70nm to 150nm showed a decrease in efficiency from 9.4% to 6% due to limitation of exciton's diffusion length. These excitons are recombined before being harvested by anode and cathode.

**Keywords:** *Heterojunction ; Solar Cell ; Quantum Dot ; ZnO ; PbS*

---

<sup>1</sup> M.Sc. Student. Faculty of Electrical and Computer Engineering, University of Sistan and Baluchestan, P.O. Box 9816745563, Zahedan, Iran. Email: elham.shirdel@pgs.usb.ac.ir.

<sup>2</sup> Associate Professor. Faculty of Electrical and Computer Engineering, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan, Iran. (Corresponding Author). Email: mansouri@ece.usb.ac.ir

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران، دانشگاه الزهرا

سال نهم، پیاپی ۱۶، بهار ۱۳۹۸

## مقاله پژوهشی

# بررسی عوامل افزایش بازده در سلول خورشیدی ناهمجنس با نقاط کوانتومی<sup>۱</sup>

الهام شیردل<sup>۲</sup>، محمدعلی منصوری بیرجندی<sup>۳\*</sup>

تاریخ دریافت: ۱۳۹۷/۱۱/۱۱

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۸/۱۱/۰۵

### چکیده

ضخامت لایه نقاط کوانتومی و نیمه‌رسانای شفاف با شکاف بزرگ، میزان ناخالصی لایه نقاط کوانتومی و نوع فلز آند از جمله عوامل تأثیرگذار بر بازده سلول‌های خورشیدی نقطه کوانتومی ناهمجنس (HQDSC) می‌باشند. در این مقاله با استفاده از نرم‌افزار کامسول نسخه ۵/۴، ابتدا سلولی شامل یک لایه از نقاط کوانتومی سولفید سرب (PbS) پوشیده از لیگندهای کوتاه و یک لایه نیمه‌رسانای اکسید روی (ZnO) و آندی از جنس طلا شبیه‌سازی شد و بازده تبدیل توان (PCE) ۲,۶۲ درصد برای پیوند شاتکی و ۷,۹۵ درصد برای پیوند اهمی میان لایه نقاط کوانتومی و فلز آند به دست آمد. سپس، میزان ناخالصی لایه PbS با چگالی  $10^{15}$  و  $10^{16}$  و  $10^{17}$   $\text{cm}^{-3}$  بررسی شد که بیشترین بازده به میزان ۷,۹۵ درصد با انتخاب چگالی ناخالصی  $10^{16}$   $\text{cm}^{-3}$ ، در حالت پیوند اهمی به دست آمد. بررسی تأثیر تغییر ضخامت لایه نقاط کوانتومی از ۵۰ نانومتر تا

<sup>1</sup> DOI: 10.22051/jap.2020.24397.1116

<sup>۲</sup> دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی برق و کامپیوتر، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان، ایران.

elham.shirdel@pgs.usb.ac.ir

<sup>۳</sup> دانشیار دانشکده مهندسی برق و کامپیوتر، دانشگاه سیستان و بلوچستان، (نویسنده مسئول).

mansouri@ece.usb.ac.ir

۱۰۰ نانومتر نشان داد که بهبود بازده از مقدار ۲,۱ درصد به ۲,۹۱ درصد در حالت پیوند شاتکی و از مقدار ۷ درصد به ۸,۱۲ درصد در حالت پیوند اهمی می‌شود، که به دلیل افزایش طول ناحیه تهی و در نتیجه افزایش میدان در محل پیوند است. با بررسی تأثیر تغییر ضخامت لایه نیمه‌رسانای ZnO از مقدار ۷۰ نانومتر تا ۱۵۰ نانومتر، کاهش بازده از ۹,۴ درصد به ۶ درصد رسید که ناشی از محدودیت طول نفوذ اکسیژن‌ها و جذب و باز ترکیب آن‌ها، پیش از رسیدن به اتصال‌های فلزی آند و کاتد است.

**واژگان کلیدی:** پیوند ناهمجنس، سلول خورشیدی، نقاط کوانتومی، اکسید روی، سولفید سرب.

## ۱. مقدمه

اندازه و ساختار متفاوت نقاط کوانتومی و ویژگی‌های منحصر به فردی که مختص مواد در ابعاد نانو هستند، نقش بسزایی در عملکرد افزاره‌های الکترونیک نوری دارند. موفقیت نقاط کوانتومی در دستیابی به بازده کوانتومی زیاد، ایجاد اتصال مناسب میان اجزای دهنده و پذیرنده الکترون است [۱]. نیمه‌رساناهای دارای شکاف بزرگ از اجزای اساسی افزاره‌های ساخته شده از نقاط کوانتومی هستند و نوع پیوند میان این نیمه‌رساناها و نقاط کوانتومی از عوامل مهم تعیین بازده این سلول‌هاست [۲].

پدیده برانگیختگی چندگانه یا تولید چند اکسیژن، که به معنی تولید بیش از یک زوج الکترون-حفره با برخورد یک فوتون است، از ویژگی‌های جالب توجه این ساختارهاست که می‌تواند موجب افزایش بازده این سلول‌ها شود [۱]. از دیگر ویژگی‌های منحصر به فرد نقاط کوانتومی، امکان تنظیم خواص الکتریکی و شیمیایی آن‌هاست. امکان کنترل شکاف انرژی نقاط کوانتومی با تغییر اندازه و شکل آن‌ها که موجب امکان کنترل طیف جذب آن‌ها می‌شود، علاوه بر افزایش بازده افزاره، شرایط جذب طول موج‌هایی مانند طیف فرورسرخ را، که امکان جذب آن‌ها در سایر افزاره‌ها وجود ندارد، فراهم می‌کند [۳]. همچنین به دلیل وجود اثر محبوس‌سازی کوانتومی، ضریب جذب این نقاط نیز نسبت به سایر مواد مقادیر بزرگتری دارد [۴]. ضریب جذب به معنی میزان جذب نور یک ماده در یک طول موج مشخص است.

محبوس‌سازی کوانتومی به هندسه ماده بستگی دارد و می‌تواند در یک بعد (چاه‌های کوانتومی) و دو بعد (نانوسیم‌ها) و سه بعد (نقاط کوانتومی) صورت بگیرد. این اثر در ابعادی کوچکتر از یک مقدار شاخص به نام شعاع بوهر مشاهده می‌شود [۲]. شعاع بوهر به بیشترین فاصله ممکن میان الکترون و حفره در یک اکسیژن گفته می‌شود و از رابطه ۱ به دست می‌آید،

$$a_B = \frac{\hbar^2 \varepsilon}{e^2} \left( \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right) \quad (1)$$

که در آن،  $m_e^*$  و  $m_h^*$  به ترتیب جرم مؤثر الکترون و حفره،  $e$  بار الکترون و  $\varepsilon$  ضریب دی‌الکتریک نیمه‌رسانا هستند [۵].

در افزاره‌های نقطه کوانتومی، پارامترهای عملکردی مانند ولتاژ مدار باز ( $V_{oc}$ ) و چگالی جریان اتصال کوتاه ( $J_{sc}$ ) به شکاف انرژی این نانو ساختارها وابسته است؛ به این صورت که با کاهش شکاف انرژی ماده در یک سلول خورشیدی تک پیوندی، افزایش جذب نور موجب کاهش  $V_{oc}$  و افزایش  $J_{sc}$  می‌شود. همچنین با تغییر اندازه نقاط کوانتومی کلونیدی جامد، می‌توان قابلیت تحرک پذیری حفره‌ها را افزایش داد که این اثر به دلیل کاهش انرژی کولنی ذرات رخ می‌دهد [۶]. نقاط کوانتومی ساخته شده از ترکیبات سرب به دلیل داشتن شعاع بوهر بزرگ در حدود ۲۰ نانومتر، امکان به کار برده شدن در محدوده فرکانس نور مرئی تا فروسرخ را دارند. از دیگر برتری‌های این نانو ساختارها می‌توان به قابلیت تحرک پذیری عالی آن‌ها اشاره کرد [۷].

سلول‌های نقطه کوانتومی با بهبود بازده از ۵ درصد تا حدود ۱۳ درصد بین سال‌های ۲۰۰۶ تا ۲۰۱۸، که نزدیک به سایر انواع سلول‌های خورشیدی است، با داشتن برتری فرآیند ساخت آسان و ارزان، به یکی از پرکاربردترین انواع افزاره‌های فتوولتائیک تبدیل شده‌اند [۸]. برای نمونه، در سال ۲۰۱۷ سلول خورشیدی ساخته شده از نقاط کوانتومی  $CsPbI_3$  به یکی از بالاترین بازده‌های گزارش شده از سلول‌های ساخته شده با نقاط کوانتومی، به میزان ۱۳٫۴۳ دست یافت [۹].

از جمله مهم‌ترین و متداول‌ترین انواع سلول‌های نقطه کوانتومی، می‌توان به سلول‌های نقطه کوانتومی شاتکی<sup>۱</sup> و سلول‌های نقطه کوانتومی ناهمجنس (HQDSC) اشاره نمود. سلول‌های شاتکی به دلیل قرار گرفتن نقاط کوانتومی نوع  $p$  در کنار الکتروود، میان فلز و اکسید رسانای شفاف، به این نام خوانده می‌شوند. در محل پیوند اکسید رسانای شفاف و لایه نقاط کوانتومی یک پیوند اهمی تشکیل می‌شود که وجود این پیوند در این افزاره‌ها، سبب به وجود آمدن میدان الکتریکی داخلی در داخل سلول می‌شود که به جداسازی الکترون‌ها و حفره‌ها از یکدیگر کمک می‌کند و موجب رانده شدن حفره‌های تشکیل شده در لایه نقاط کوانتومی به سمت اتصال اکسید رسانای شفاف و انتقال الکترون‌ها به سمت الکتروود می‌شود [۱۰]. در یکی از انواع سلول‌های خورشیدی نقطه کوانتومی که در سال ۲۰۰۸ ساخته شد، از نقاط کوانتومی سولفید سرب که با لیگاندهای اولئات<sup>۲</sup> پوشیده شده‌اند، به عنوان ناحیه فعال استفاده شد. در یکی از انواع این سلول،

<sup>1</sup> Quantum dot Schottky solar cell

<sup>2</sup> Oleate ligand

دارای لایه‌ی ۲۳۰ نانومتری نقاط کوانتومی PbS با اولین انتقال اکسیتون در محدوده فرسرخ یعنی در حدود ۱۶۵۰ نانومتر، بازده ۴٫۲ درصد گزارش شد. در نمونه‌ای دیگر که اولین انتقال اکسیتون در طول موج ۱۱۵۵۰ نانومتر رخ می‌دهد، بازده ۲٫۱ درصد مشاهده شد [۱۱]. ساختار سلول‌های شاتکی به گونه‌ای است که برای ایجاد جریان نوری، باید نور به سمت شیشه‌ای سلول بتابد. برخورد نور به محل پیوند اهمی میان اکسید رسانای شفاف و لایه‌ی نقاط کوانتومی و تولید الکترون در محل این پیوند که فاصله‌ی زیادی از محل جذب حامل‌ها یعنی محل قرارگیری پیوند شاتکی دارد، با افزایش احتمال بازترکیب حامل‌ها، باعث افت عملکرد افزاره می‌شود [۳].

سلول HQDSC ساخته‌شده از یک لایه‌ی از نقاط کوانتومی است که در کنار لایه‌ای نازک از یک نیمه‌رسانا قرار می‌گیرد. لایه‌ی نقاط کوانتومی به عنوان قسمت  $p$  پیوند عمل کرده و لایه‌ی نازک و شفاف نیمه‌رسانا نقش قسمت  $n$  پیوند را ایفا می‌کند.

از جمله مزیت‌های سلول‌های نقطه کوانتومی ناهمجنس به سلول‌های شاتکی، وجود لایه‌ی نیمه-رسانای ZnO در کنار لایه‌ی نقاط کوانتومی است. با قرار دادن لایه‌ی ZnO در زیر لایه‌ی نقاط کوانتومی، قطبیت حاصل از پیوند معکوس می‌شود و جذب حامل‌ها به وسیله الکترودها افزایش می‌یابد. ناحیه‌ی تخلیه‌ی حاصل از میدان در محل پیوند ناهمجنس، در لایه‌ی نقاط کوانتومی PbS تا لایه‌ی ITO، بیشترین میزان نفوذ حامل‌ها را سبب می‌شود [۱۲]. انتخاب ماده‌ی مناسب برای تشکیل پیوند ناهمجنس، که اساس عملکرد HQDSC است، تأثیر بسزایی در پارامترهای عملکردی افزاره دارد. نیمه‌رسانای ZnO که قسمت  $n$  پیوند ناهمجنس را تشکیل می‌دهد، به دلیل داشتن خواصی مانند پایداری مناسب در شرایط محیطی، فرآیند ساخت آسان و قابلیت انتقال مناسب حامل‌ها تبدیل به گزینه‌ای مناسب برای استفاده در HQDSCs شده است [۱۳]. اولین سلول خورشیدی نقطه کوانتومی ناهمجنس توسط لشکیز<sup>۱</sup> و همکارانش در سال ۲۰۰۷ ساخته شد. این سلول ساخته‌شده از نقاط کوانتومی از جنس PbSe در شرایط AM1.5<sup>۲</sup> به بازده ۱٫۶ درصد دست یافت [۳]. با ادامه‌ی توسعه سلول‌های HQDSC، اولین سلول خورشیدی نقطه کوانتومی ناهمجنس حجیم توسط بارکهوس<sup>۳</sup> و همکارانش در سال ۲۰۱۱ ساخته شد. تفاوت اصلی این سلول با سلول مسطح، ضخامت بیشتر لایه‌ی فعال نانوساختار حجیم است که موجب جذب تمامی نور برخوردی قابل جذبی می‌شود، که طول موجی متناسب با قطر نقاط کوانتومی دارند، که باعث افزایش جذب حامل‌ها در لایه‌ی فعال شده و به بازده بیشتر از سلول مسطح می‌انجامد [۱۴]. دو سلول مسطح و حجیم دارای لایه‌های یکسان به ترتیب بازده ۵٫۱ درصد و ۵٫۵ درصد داشتند [۱۴].

<sup>1</sup> Leschkies

<sup>2</sup> Air mass 1.5

<sup>3</sup> Barkhouse

انتقال حامل در سلول‌های HQDSC که در آن‌ها لایه‌های نقاط کوانتومی و نیمه‌رسانای ZnO فاقد ناخالصی هستند، تنها وابسته به نفوذ حامل‌هاست. در صورتی که سلول فاقد ناخالصی بوده، ناحیه تخلیه در لایه نقاط کوانتومی شکل نگرفته و تعداد حامل‌های تفکیک و جذب شده کاهش یافته و عملکرد سلول مناسب نخواهد بود [۱۵]. همچنین، با توجه به کوچک بودن طول نفوذ اکسیژن‌ها، بازده افزاره‌های ساخته شده از لایه‌های خالص نامناسب است. زیرا حامل‌ها پیش از رسیدن به الکترودها بازترکیب می‌شوند.

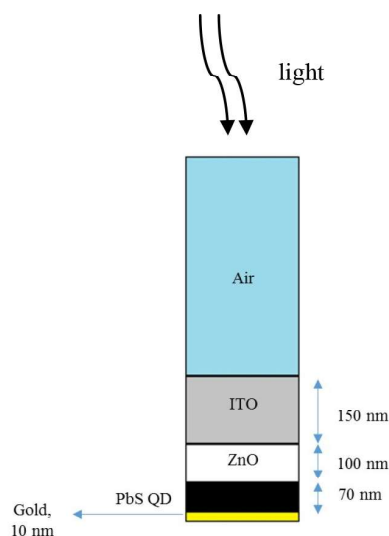
افزایش بازده این سلول‌ها مشروط به ناخالص‌سازی لایه‌های ZnO و PbS است. میزان ناخالص‌سازی این دو لایه باید به گونه‌ای باشد که ناخالصی لایه ZnO برابر یا بیشتر از ناخالصی لایه PbS باشد، تا تمامی ناحیه تخلیه یا بخش بزرگی از آن در ناحیه نقاط کوانتومی PbS قرار گرفته و موجب افزایش استخراج حامل‌ها شود [۱۵].

در سلول‌های HQDSC، ساختار سلول و نحوه قرارگیری لایه‌ها در کنار هم تأثیر فراوانی در بازده آن‌ها دارد. برای حذف موانع بهبود بازده ناشی از ساختار سلول، ضخامت هر لایه، متناسب با طول نفوذ اکسیژن‌ها انتخاب می‌شود تا جمع‌آوری حامل‌ها به بهترین حالت صورت گرفته و بازده در بیشینه مقدار ممکن قرار گیرد [۱۴]. در این ساختار برای افزایش بازده کوانتومی خارجی، لایه نقاط کوانتومی که وظیفه جذب نور را برعهده دارد، با ضخامت بیشتری ساخته می‌شود، به گونه‌ای که تمامی آن در ناحیه تخلیه قرار گیرد و به بهبود بازده و جذب نور در محدوده فروسرخ کمک کند. انتظار می‌رود در این ساختار بازده بیشتری حاصل شود، زیرا ضخامت لایه نقاط کوانتومی که وظیفه جذب نور و تولید حامل را برعهده دارد، نسبت به ساختارهای فاقد پیوند ناهمجنس بیشتر است.

در این مقاله، تأثیر تغییر میزان ناخالصی لایه نقاط کوانتومی، میزان ضخامت نقاط کوانتومی و نیمه‌رسانای شفاف با شکاف بزرگ در یک HQDSC بررسی شده است.

## ۲. معرفی ساختار سلول خورشیدی نقطه کوانتومی ناهمجنس

سلول، ساختاری متشکل از یک لایه ۱۵۰ نانومتری ITO، لایه ۱۰۰ نانومتری ZnO و لایه ۷۰ نانومتری نقاط کوانتومی PbS است که در شکل (۱) نشان داده شده است. انتقال حامل در پیوند ناهمجنس میان نقاط کوانتومی و نیمه‌رسانای ZnO وابسته به نحوه قرارگیری ترازهای انرژی این دو ماده در کنار هم است، که ناخالص‌سازی لایه ZnO، باعث ایجاد همپوشانی لازم میان ترازهای انرژی شده و زمینه انتقال مناسب حامل‌ها را فراهم می‌آورد [۱۳].



شکل ۱. مدل اولیه به کاررفته در شبیه‌سازی.

در حالت کلی، پیوند میان فلز و نیمه‌رسانا از نوع شاتکی است که موجب ایجاد سد در برابر عبور حامل‌ها شده و از عوامل محدودیت بازده HQDSCs است. از جمله روش‌های حذف این سد می‌توان به استفاده از یک لایه نیمه‌رسانای مسدودکننده الکترون، میان نقاط کوانتومی و فلز آند و افزایش میزان ناخالصی لایه نقاط کوانتومی اشاره کرد که در ادامه، تأثیرات آن ارائه می‌شود. روش دیگری که برای از میان بردن این مشکل وجود دارد، استفاده از فرآیند بازپخت در مراحل ساخت افزاره است که با نفوذ اتم‌های دو ماده مجاور در یکدیگر، سبب حذف پیوند شاتکی و ایجاد پیوند اهمی میان فلز و نیمه‌رسانا شده و نفوذ اتم‌های فلز در لایه نیمه‌رسانا را به دنبال دارد. از دیگر روش‌های کاهش تأثیر سد شاتکی جایگزینی فلز Ag با Au در اتصال آند است که با داشتن تابع کار کوچکتر و در نتیجه کاهش ارتفاع سد شاتکی، موجب افزایش انتقال حفره‌ها از لایه نقاط کوانتومی می‌شود که سبب افزایش بازده سلول می‌شود [۱۶].

### ۳. شبیه‌سازی عملکرد سلول خورشیدی نقطه کوانتومی ناهمجنس

#### ۳-۱ بررسی تأثیر چگالی ناخالصی لایه نقاط کوانتومی بر بازده سلول HQDSC

با توجه به طول عمر کوتاه اکسیژن‌ها و احتمال زیاد بازترکیب حامل‌ها، پیش از تفکیک و جذب به وسیله کاتد یا آند، تنها اکسیژن‌هایی در تولید جریان نوری نقش دارند که در نزدیکی محل پیوند ZnO و نقاط کوانتومی تولید شوند. تشکیل اکسیژن در نواحی خارج از محدوده طول نفوذ

اکسیتون، امکان تفکیک و جذب نداشته و باز ترکیب می‌شوند [۳]. برای رفع این مشکل با ناخالص سازی قسمت‌های  $n$  و  $p$  پیوند ناهمجنس، انتقال حامل‌ها تنها به طول نفوذ آن‌ها وابسته نبوده و وجود میدان در محل پیوند سبب افزایش انتقال حامل‌ها می‌شود.

ناخالصی لایه ZnO از نوع  $n$  به وسیله Sn یا Al و ناخالصی لایه نقاط کوانتومی از نوع  $p$  به وسیله Cd یا Ag است [۱۳، ۱۷]. همچنین، برای حصول اطمینان از قرارگیری تمام ناحیه تخلیه در لایه نقاط کوانتومی که موجب بهبود انتقال حامل به دلیل وجود میدان مناسب در محل تولید حامل می‌شود، باید میزان ناخالصی لایه ZnO از لایه PbS بیشتر باشد.

عملکرد سلول از طریق بررسی پارامترهای عملکردی سلول از جمله  $(V_{oc}, J_{sc})$ ، ضریب پرشدگی (Fill factor) و PCE در افزاره‌ای با ناخالصی  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$  برای لایه ZnO و ناخالصی-های  $10^{15}$ ،  $10^{16}$  و  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  برای لایه نقاط کوانتومی، در دو حالت پیوندهای اهمی و شاتکی بررسی می‌شود. در جدول شماره ۱، برخی ویژگی‌های مواد به کاررفته در شبیه‌سازی آمده‌اند. تمامی شبیه‌سازی‌ها به وسیله نرم‌افزار کامسول مولتی فیزیک نسخه ۵،۴ انجام شده است که با روش المان محدود افزاره‌ها را تحلیل می‌کند.

جدول ۱. نمایش برخی پارامترهای مربوط به شبیه‌سازی.

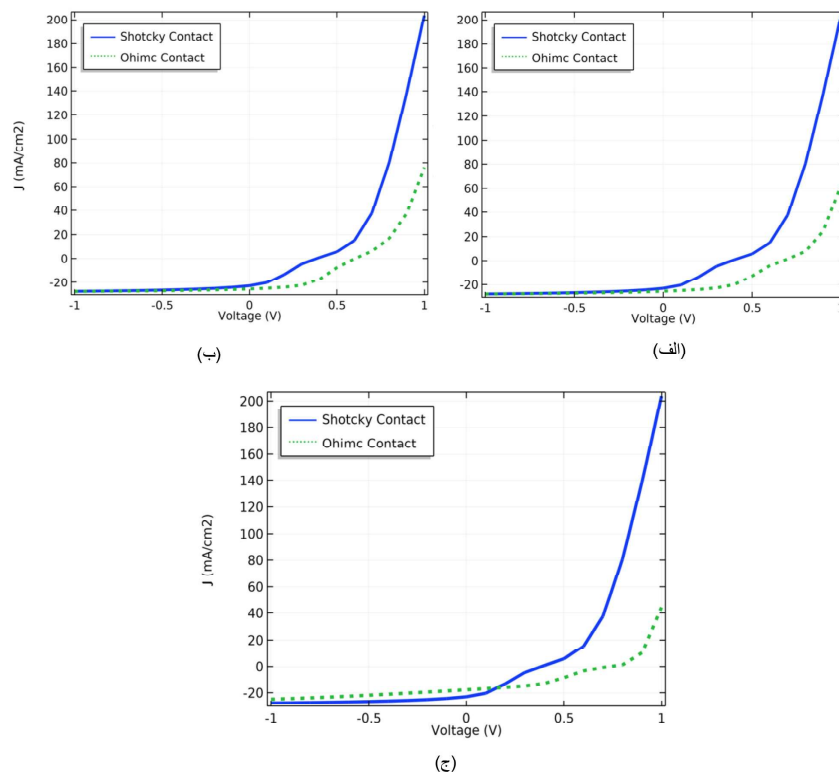
پارامتر	مقدار	واحد
الکترون‌خواهی <sup>۱</sup> PbS	۴،۰۵	eV
شکاف انرژی PbS	۱،۳	eV
شکاف انرژی ZnO	۳،۲۷	eV
شکاف انرژی ITO	۴	eV
چگالی حالات انرژی تراز ظرفیت PbS	$3,2 \times 10^{25}$	$\text{Cm}^{-3}$
چگالی حالات انرژی تراز هدایت PbS	$2 \times 10^{24}$	$\text{Cm}^{-3}$
طول عمر حامل‌ها در PbS	۸	ns
طول عمر حامل‌ها در ZnO	۹۳	ns

در نمودارهای شکل (۲) قسمت‌های الف و ب و ج منحنی‌های جریان-ولتاژ این افزاره در سه میزان مختلف ناخالصی نمایش داده شده‌اند که در جدول ۲ خلاصه مقادیر پارامترهای عملکردی سلول، حاصل از این منحنی‌ها آورده شده‌اند.

<sup>1</sup> Electron Affinity



۲۰ / بررسی عوامل افزایش بازده در سلول خورشیدی ناهمجنس با نقاط کوانتومی



شکل ۲ نمودار چگالی جریان ولتاژ در دو حالت پیوند اهمی و شاتکی تحت تابش نور AM1.5 با میزان ناخالصی (الف)  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  (ب)  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$  (ج)  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ .

جدول ۲. مقادیر پارامترهای خروجی سلول به ازای مقادیر مختلف ناخالصی لایه PbS.

PbS_doping ( $\text{cm}^{-3}$ )	contact	$J_{sc}$ ( $\text{mA}/\text{cm}^2$ )	$V_{oc}$ (V)	FF	$\% \eta$
$10^{15}$	Schottky	23	0.38	0.29	2.6
	Ohmic	25.5	0.6	0.45	7
$10^{16}$	Schottky	22.8	0.383	0.3	2.62
	Ohmic	25.2	0.672	0.47	7.9
$10^{17}$	Schottky	17.6	0.73	0.4	2.2
	Ohmic	22.81	0.385	0.4	5.2

مشاهده می شود که در ناخالصی  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ، بازده ۲,۶ درصد برای پیوند شاتکی و ۷ درصد برای پیوند اهمی به دست آمد. بهبود چشمگیر بازده افزاره با پیوند اهمی، نسبت به پیوند شاتکی ناشی از نبود سد شاتکی میان نقاط کوانتومی و فلز در حالت پیوند اهمی است. با افزایش میزان چگالی ناخالصی و رساندن آن به  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ، بازده برای پیوند شاتکی به ۲,۶۲ درصد و برای پیوند اهمی به ۷,۹۵ درصد می رسد. در نیمه رساناها با افزایش میزان ناخالصی، رسانش افزایش و

قابلیت تحرک پذیری حامل‌ها کاهش می‌یابد. برای نقاط کوانتومی پوشیده از لیگاند‌های EDT به کاررفته در این شبیه‌سازی قابلیت تحرک پذیری حامل‌ها و رسانش ماده به ترتیب از مقادیر  $1.37 \times 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{V.s}$  و  $8.2 \times 10^{-1} \text{ S.cm}^{-1}$  در ناخالصی  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$  به  $10^{-4} \text{ cm}^2/\text{V.s}$  و  $10^{-1} \text{ S.cm}^{-1}$  در ناخالصی  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  می‌رسد، که این مسئله موجب بهبود نسبی حامل‌ها با افزایش چگالی ناخالصی می‌شود.

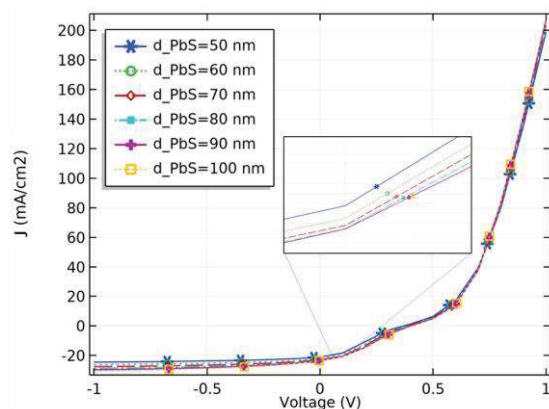
افزایش بیشتر ناخالصی به بازده ۲،۲ درصد در پیوند شاتکی و ۵،۲ درصد در پیوند اهمی در ناخالصی  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$  می‌انجامد. کاهش چشمگیر تحرک پذیری حامل‌ها با افزایش میزان ناخالصی تا مقدار  $1.65 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{V.s}$  سبب کاهش بازده در دو حالت پیوند اهمی و شاتکی می‌شود.

### ۲-۳ بررسی اثر تغییر ضخامت لایه‌های PBS بر بازده سلول HQDSC

در سلول‌هایی که به وسیله فناوری لایه نازک ساخته می‌شوند، افزایش ضخامت لایه فعال نقاط کوانتومی، به دلیل کاهش استخراج حامل‌ها، موجب کاهش بازده افزاره می‌شود. برای دستیابی به بازده مناسب در این افزاره‌ها، باید میان ضخامت لایه و استخراج حامل، تعادل برقرار کرد [۱۳]. در سلول‌هایی که با سایر روش‌های لایه‌نشانی ساخته می‌شوند، ضخامت بیشتر لایه فعال، موجب جذب تمامی نور فرودی جذب پذیر می‌شود، که طول موجی متناسب با قطر نقاط کوانتومی دارند. ضخامت بیشتر لایه فعال با افزایش میزان جذب نور، باعث افزایش جمع‌آوری بار در لایه فعال می‌شود که در نهایت به بازده بیشتر نسبت به ضخامت‌های کمتر لایه نقاط کوانتومی خواهد انجامید [۳].

در شبیه‌سازی افزاره‌ای که در شکل (۱) نمایش داده شده است، تأثیر تغییر ضخامت لایه نقاط کوانتومی در حالت پیوندهای اهمی و شاتکی میان نقاط کوانتومی در بازده سلول خورشیدی، بررسی شده است که نمودار منحنی جریان-ولتاژ تابشی در حالت شاتکی در شکل (۳) و جزئیات پارامترهای عملکردی افزاره حاصل از شبیه‌سازی در جدول ۳ آمده‌اند. مطابق نتایج، با افزایش ضخامت لایه نقاط کوانتومی از ۵۰ نانومتر به ۱۰۰ نانومتر بازده ۲،۱ درصد به ۲،۹۱ درصد افزایش می‌یابد. با توجه به این که ساختار به شکلی در نظر گرفته شده است که بخش عمده ناحیه تخلیه در لایه نقاط کوانتومی قرار گیرد، افزایش بازده ناشی از افزایش طول ناحیه تخلیه و افزایش میدان در نتیجه بهبود تفکیک حامل‌هاست. همچنین نتایج نشان می‌دهد که با افزایش هر چه بیشتر ضخامت لایه نقاط کوانتومی، از سرعت افزایش بازده کاسته می‌شود؛ به این صورت که با تغییر ضخامت از ۵۰ نانومتر به ۶۰ نانومتر بازده از ۱،۲ درصد به ۲،۴ درصد می‌رسد و با تغییر از ۹۰ نانومتر به ۱۰۰ نانومتر بازده افزایش ناچیز ۲،۸۹ درصد به ۲،۹۱ درصد را نشان می‌دهد که این کاهش سرعت افزایش بازده به دلیل محدود بودن طول نفوذ اکسیژن‌ها و افزایش میزان بازترکیب آن‌هاست.

۲۲ / بررسی عوامل افزایش بازده در سلول خورشیدی ناهمجنس با نقاط کوانتومی

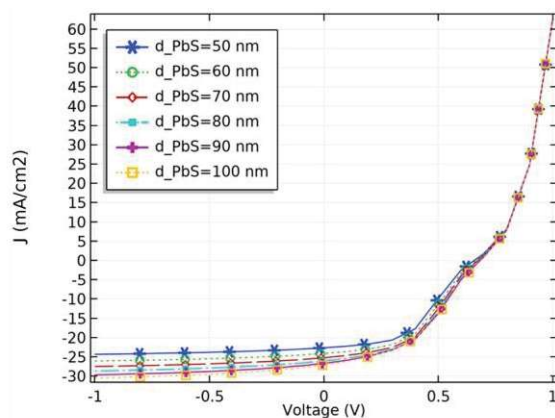


شکل ۳ تغییرات نمودار چگالی جریان-ولتاژ سلول با تغییر ضخامت لایه نقاط کوانتومی در حالت شاتکی تحت تابش نور AM1.5.

جدول ۳. مقادیر پارامترهای خروجی سلول در حالت پیوند شاتکی با تغییر ضخامت PbS.

d_PbS (nm)	J <sub>sc</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	V <sub>oc</sub> (V)	FF	%η
50	21	0.366	0.27	2.1
60	22.1	0.375	0.29	2.4
70	22.8	0.383	0.302	2.6
80	23.2	0.391	0.308	2.78
90	23.4	0.397	0.31	2.89
100	23.3	0.4	0.315	2.91

همچنین تأثیر این تغییرات در منحنی جریان-ولتاژ تابشی در حالت پیوند اهمی در نمودار شکل (۴) و جزئیات پارامترهای عملکردی در جدول ۴ نمایش داده شده است.



شکل ۴ تغییرات نمودار چگالی جریان-ولتاژ سلول با تغییر ضخامت لایه نقاط کوانتومی در حالت اهمی تحت تابش نور AM1.5.

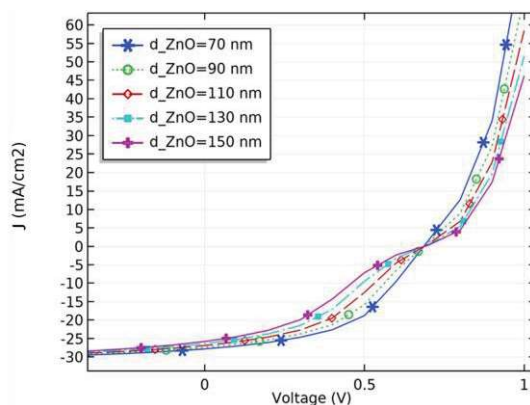
**جدول ۴.** مقادیر پارامترهای خروجی سلول در حالت پیوند اهمی با تغییر ضخامت PbS.

d_PbS (nm)	J <sub>sc</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	V <sub>oc</sub>	FF	%η
50	22.7	0.657	0.46	7
60	24.1	0.666	0.461	7.6
70	25.2	0.672	0.455	7.9
80	26	0.677	0.447	8.09
90	26.7	0.686	0.44	8.15
100	27.1	0.69	0.426	8.12

در حالت پیوند اهمی نیز مشابه با حالت پیوند شاتکی، مشاهده می شود که با افزایش ضخامت لایه نقاط کوانتومی بازده تبدیل توان نیز افزایش می یابد که علت آن افزایش طول ناحیه تخلیه و افزایش تفکیک حامل هاست. در حالتی که ضخامت لایه نقاط کوانتومی به ۱۰۰ نانومتر می رسد بازده ۸٫۱۲ درصد به دست آمده است که نسبت به بازده ۷ درصد در ضخامت ۵۰ نانومتری لایه نقاط کوانتومی، کاهش مختصری را نشان می دهد که ناشی از محدودیت طول نفوذ اکسیتون ها و افزایش مقدار باز ترکیب حامل ها (از نوع اوژه) به دلیل زیاد بودن فاصله محل تولید اکسیتون نسبت به آند و کاتد جذب کننده حامل هاست.

### ۳-۳. بررسی اثر تغییر ضخامت لایه ZnO بر بازده سلول HQDSC

در این افزاره ها، انتخاب ضخامت لایه نیمه رسانای شفاف تأثیر بسزایی در بازده تبدیل توان آن دارد. الکترون های تولید شده در لایه نقاط کوانتومی، برای رسیدن به الکتروود کاتد و تولید جریان باید از عرض لایه نیمه رسانای شفاف عبور کنند. برای بررسی این مسئله و انتخاب ضخامت مناسب برای لایه ZnO، تأثیر تغییر ضخامت این لایه در پارامترهای عملکردی سلول خورشیدی مدنظر در حالت پیوند اهمی میان نقاط کوانتومی و فلز آند، شبیه سازی و نمودار منحنی شکل (۵) به دست آمد. جزئیات پارامترهای عملکردی این سلول در جدول ۵ نمایش داده شده است.



**شکل ۵** تغییرات نمودار چگالی جریان-ولتاژ سلول با تغییر ضخامت لایه ZnO در حالت اهمی تحت تابش نور AM1.5.

**جدول ۵.** مقادیر پارامترهای خروجی با تغییر ضخامت ZnO در حالت اهمی.

d_ZnO (nm)	J <sub>sc</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	V <sub>oc</sub> (V)	FF	%η
70	27.79	0.685	0.49	9.4
90	27.32	0.686	0.45	8.5
110	26.87	0.6872	0.42	7.75
130	26.35	0.6873	0.37	6.75
150	25.8	0.6874	0.33	6

با افزایش ضخامت لایه نیمه رسانای ZnO از ۷۰ نانومتر به ۱۵۰ نانومتر بازده تبدیل توان سلول از مقدار ۹,۴ درصد به ۶ درصد کاهش می‌یابد. با افزایش ضخامت لایه ZnO و افزایش فاصله‌ای که حامل‌ها باید طی کنند تا به یکی از اتصالات فلزی برسند و با توجه به محدود بودن طول نفوذ حامل‌ها و افزایش احتمال بازترکیب اکسیژن‌ها، کاهش بازده رخ می‌دهد.

#### ۴. نتیجه‌گیری

در مدل اولیه، سلولی شامل یک لایه نقاط کوانتومی سولفید سرب (PbS) پوشیده از لیگاندهای کوتاه و یک لایه نیمه‌رسانای اکسید روی (ZnO) و آندی از جنس طلا، بازده ۲,۶۲ درصد برای پیوند شاتکی و ۷,۹۵ درصد برای پیوند اهمی میان لایه نقاط کوانتومی و فلز آند به دست آمد. سپس تأثیر تغییر میزان ناخالصی لایه PbS به ازای مقادیر  $10^{15}$  و  $10^{16}$  و  $10^{17}$  بر بازده سلول محاسبه شد و بازده مناسب ۷,۹۵ درصد در حالت پیوند اهمی در چگالی ناخالصی  $cm^{-3}$   $10^{16}$  به دست آمد و مشاهده شد که بازده با کاهش یا افزایش میزان ناخالصی این لایه، کاهش می‌یابد که این مسئله به دلیل کاهش قابلیت تحرک پذیری با افزایش چگالی ناخالصی و کاهش رسانش با کاهش چگالی ناخالصی است. پس از آن مشاهده شد که با تغییر ضخامت لایه نقاط کوانتومی از ۵۰ نانومتر تا ۱۰۰ نانومتر و افزایش طول ناحیه تهی و افزایش میدان در محل پیوند، بازده از مقدار ۲,۱ درصد به ۲,۹۱ درصد در حالت پیوند شاتکی و از ۷ درصد به ۸,۱۲ درصد در حالت پیوند اهمی می‌رسد. همچنین با تغییر ضخامت لایه نیمه‌رسانای ZnO از مقدار ۷۰ نانومتر تا ۱۵۰ نانومتر و افزایش احتمال جذب و بازترکیب آن‌ها به دلیل محدودیت طول نفوذ اکسیژن‌ها، کاهش چشمگیر از بازده اولیه ۹,۴ درصد برای ضخامت ۷۰ نانومتر به ۶ درصد در ۱۵۰ نانومتر حاصل می‌شود.

نتایج حاصل از شبیه‌سازی نشان می‌دهد که افزاره‌ای متشکل از لایه ۷۰ نانومتری ZnO و ۹۰ نانومتری PbS با ناخالصی  $cm^{-3}$   $10^{16}$  در حالت پیوند اهمی، بهترین بازده را به دست می‌دهد.

## منابع

- [1] Amoli, Salar, Hossein et al. *construction of Cds/ CdSe Quantum Dots Solar Cell and Increasing their Efficiency Using Mn<sup>2+</sup>Ions*, *Nanomeghyas*, **2**, 75-82, 2014 (in Persian).
- [2] Wu, Zhiang, Wang M., Zhiming, *Quantum Dot Solar Cells*, Springer New York Heidelberg Dordrecht London, 2014.
- [3] Mohammad Sadeghi Jahed Navid, *Heterojunction Quantum Dot Solar Cells*, PhD Thesis, University of Waterloo, 2016.
- [4] Shen, Qing, et al. Characterization of hot carrier cooling and multiple exciton generation dynamics in PbS QDs using an improved transient grating technique, *Journal of Energy Chemistry*, **24**, 712-716, 2015.
- [5] Koole, Rolf, et al. Size effects on Semiconductor Nanoparticles, *Nanoparticles*, **2**, 13-51, 2014.
- [6] Song, Jung Hoon, Jeong, Sohee, Colloidal quantum dot solar cells: from material to devices, *Nano Convergence*, **4**, 1-8, 2017.
- [7] Aqoma, Havid, et al. Simultaneous Improvement of Charge Generation and Extraction in Colloidal Quantum Dot Photovoltaics Through Optical Management, *Advanced Functional Material*, **25**, 6241-6249, 2015.
- [8] Pan, Zhenxiao, et al, Quantum dot-sensitized solar cells, *Chemical Society Reviews*, **47**, 7659-7702, 2018.
- [9] Sanehira, M. Erin, et al. Enhanced mobility CsPbI<sub>3</sub> quantum dot arrays for record-efficiency, high-voltage photovoltaic cells, *Science Advances*, **3**, eaao4204, 2017.
- [10] Carey, Graham H, Colloidal Quantum dot solar cells, *Chem. Rev.*, **115**, 12732-12763, 2015.
- [11] Johnston, K. W, et al. Schottky-quantum dot photovoltaics for efficient infrared power conversion, *Applied Physics Letters*, **92**, 151115, 2008.
- [12] Luther, M. Joseph, et al. Stability Assessment on a 3% Bilayer PbS/ZnO Quantum Dot Heterojunction Solar Cell, *Advanced Material*, **22**, 3704-3707, 2010.
- [13] Eisner, Flurin, et al. Solution-Processed In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/ZnO Heterojunction Electron Transport Layers for Efficient Organic Bulk Heterojunction and Inorganic Colloidal Quantum-Dot Solar Cells, *Solar RRL*, **2**, 1800076, 2018.
- [14] D. Aaron, et al. Depleted Bulk Heterojunction Colloidal Quantum Dot Photovoltaics, *Advanced Materials*, **23**, 3134-3139, 2011.
- [15] Wilis, Shawn M, et al. The Transitional Heterojunction Behavior of PbS/ZnO Colloidal Quantum Dot Solar Cells, *Nano Lett*, **12**, 1522-1526, 2012.
- [16] Gao, Jinbao, et al. Quantum Dot Size Dependent J-V Characteristics in Heterojunction ZnO/PbS Quantum Dot Solar Cells, *Nano Lett*, **11**, 1002-1008, 2011.
- [17] Hu, Lomg, et al. Achieving high-performance PbS quantum dot solar cells by improving hole extraction through Ag doping, *Nano Energy*, **46**, 212-219, 2018.