

محاسبه مولفه‌های اتلاف ذاتی در سلول خورشیدی سیم کوانتومی InGaAs توسط مدل بندی تحلیلی و شبیه‌سازی عددی

زهرا عارفی‌نیا

استادیار پژوهشکده فیزیک کاربردی و ستاره‌شناسی، دانشگاه تبریز، arefinia@tabrizu.ac.ir

چکیده

در این مقاله، معادلاتی برای محاسبه مولفه‌های اتلاف ذاتی، شامل اتلاف زیرگاف، گرمایی، بولترمن، کرنر، و گسیلی، در سلول‌های خورشیدی سیم کوانتومی با باند میانی (QWR-IBSC) ارائه گردیده است. این معادلات از روش تعادلی ایده آل و با توجه به تغییراتی که در جذب و گسیل فوتون‌ها به علت باند میانی ایجاد می‌شود، به دست می‌آیند. سپس، با روابط ارائه شده در این مقاله، مولفه‌های اتلاف ذاتی برای نمونه تجربی گزارش شده QWR-IBSC، که در آن آرایه‌ای منظم از سیم‌های کوانتومی از جنس $In_xGa_{1-x}As$ در ناحیه ذاتی سلول خورشیدی نوع p-ذاتی-نوع n از جنس GaAs قرار گرفته است، محاسبه می‌شوند. انجام محاسبات مربوط به اتلاف ذاتی QWR-IBSC نیازمند محاسبه موقعیت و پهنای باند میانی در گاف انرژی GaAs است. موقعیت باند میانی که معادل اولین ویژه مقدار سیم کوانتومی است، با حل معادله شرودینگر به روش المان محدود و پهنای باند میانی با مدل تنگ‌بست به دست می‌آیند. در نهایت، اثر غلظت مولی ایندیوم بر هر یک از مولفه‌های اتلاف ذاتی QWR-IBSC $GaAs/In_xGa_{1-x}As$ بررسی می‌شود.

کلیدواژه

اتلاف ذاتی، باند میانی، سلول خورشیدی، سیم کوانتومی، غلظت مولی ایندیوم.

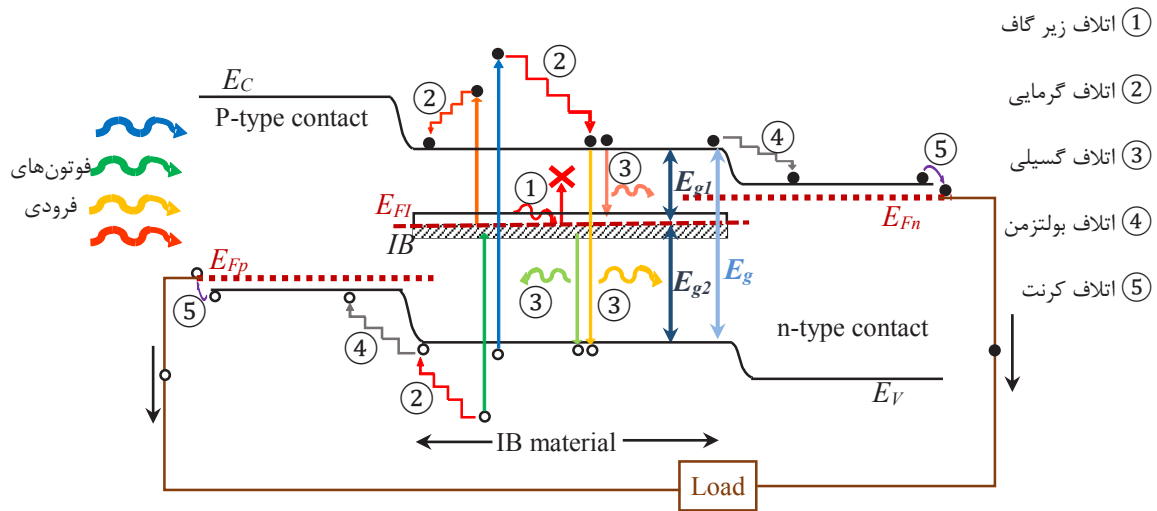
مقدمه

همچنین، با توجه به اینکه تابع موج الکترونی در سیم‌های کوانتومی در دو جهت و در نقاط کوانتومی در هر سه جهت دارای محدودشدگی است، الکترون‌ها در سیم‌های کوانتومی نسبت به نقاط کوانتومی، بهتر می‌توانند به باند هدایت برانگیخته شوند. به علاوه، سیم‌های کوانتومی میزان وسیع‌تری از طیف خورشیدی را به دلیل طیف جذبی گسترده‌تر ناشی از بالاتر بودن چگالی حالت‌های آن [۳، ۲۷]، در مقایسه با نقاط کوانتومی می‌توانند جذب کنند. از این رو، کانتز و همکارانش [۲۲] افزایش ۱۶٪ را در میزان بازدهی سلول خورشیدی p-i-n با جنس GaAs به علت اضافه کردن سیم‌های کوانتومی از جنس $In_xGa_{(1-x)}As$ در ناحیه ذاتی سلول خورشیدی مذکور گزارش داده‌اند. اما خاطرنشان می‌شود که به دلیل وجود یک بعد غیر کوانتیزه در سلول‌های خورشیدی با باند میانی سیم‌های کوانتومی (QWR-IBSCs)، مکانیزم باند میانی در این دسته از سلول‌های خورشیدی از جمله نقش آن در مولفه‌های اتلاف ذاتی، همانگونه که در بخش‌های آتی توضیح داده خواهد شد، با سلول‌های خورشیدی که در آنها باند میانی به صورت کامل تشکیل می‌شود؛ مانند سلول‌های خورشیدی نقطه کوانتومی [۲۸-۳۰] یا سلول‌های خورشیدی مبتنی بر مواد نیم‌رسانایی که به صورت ذاتی در آنها باند میانی وجود دارد [۳۱-۳۳]؛ اندکی متفاوت است.

در سالهای اخیر تحقیقات گسترده بر روی انواع سلول‌های خورشیدی مانند سلول‌های خورشیدی مبتنی بر گرافن [۱-۶]، سلول‌های خورشیدی پروسکایت [۷-۱۱]، سلول‌های خورشیدی با باند میانی [۱۲-۱۴] و سلول‌های خورشیدی با حامل‌های داغ [۱۵، ۱۶] به منظور بهبود تکنولوژی سلول‌های خورشیدی موجود از لحاظ کاهش هزینه‌های ساخت و افزایش بازدهی صورت گرفته است. از میان سلول‌های خورشیدی فوق‌الذکر، سلول‌های خورشیدی با باند میانی به دلیل دارا بودن بازدهی بیشتر از حد شاکلی-کوئیزر [۱۷] از لحاظ تئوری، مورد توجه ویژه پژوهشگران قرار گرفته است. اگر چه، باند میانی در سلول خورشیدی در اکثر موارد با قرار دادن آرایه‌ای منظم از نقاط کوانتومی در ناحیه ذاتی سلول خورشیدی متشکل از نیم‌رسانای نوع n-نیم‌رسانای ذاتی-نیم‌رسانای نوع p (p-i-n) ایجاد می‌شود [۱۳، ۱۸، ۱۹]؛ اما، استفاده از سیم‌های کوانتومی به جای نقاط کوانتومی برای ایجاد باند میانی نیز مورد بررسی قرار گرفته است [۲۳-۲۰]. از مزیت‌های استفاده از سیم‌های کوانتومی به جای نقاط کوانتومی، می‌توان به طول عمر بالای حامل‌های نوری ایجاد شده [۲۴] و افزایش جریان نوری [۲۵، ۲۶] اشاره کرد.

در این پژوهش، سعی شده است مکانیزم اتلاف های ذاتی در QWR-IBSCs بررسی شود و مقادیر هر یک از مولفه های اتلاف ذاتی برای نمونه گزارش شده آن، In_xGa_{1-x}As QWR-IBSC، محاسبه شود. بنابراین، ابتدا چگونگی فرمول بندی مولفه های اتلاف ذاتی در QWR-IBSCs بررسی می شود. سپس، یک ساختار خاص از QWR-IBSC که متشکل از آرایه ای منظم از سیم های کوانتومی از جنس In_xGa_{1-x}As در ناحیه ذاتی سلول خورشیدی p-i-n از جنس GaAs است، معرفی می شود و نحوه تشکیل باند میانی در ساختار مذکور توضیح داده می شود. بعد از آن، اثر غلظت مولی ایندیوم بر هر یک از مولفه های اتلاف ذاتی بررسی می شود.

اتلاف توان در یک سلول خورشیدی ناشی از اتلاف های ذاتی و غیر ذاتی است که قسمت عمده اتلاف توان را اتلاف های ذاتی تشکیل می دهند. اگر چه، اتلاف های غیر ذاتی مانند مقاومت های سری ناشی از لایه های مختلف سلول خورشیدی، مقاومت موازی یا باز ترکیب های پارازیتی و اتلاف ناشی از الکترودهای فلزی باعث اتلاف توان می شوند اما با بهبود کیفیت قطعه از لحاظ تئوری می توان از بروز آن ها جلوگیری کرد [۳۴]. اما اتلاف های ذاتی در یک سلول خورشیدی غیر قابل اجتناب و غیر قابل کنترل هستند. در پژوهش پیشین، اتلاف های ذاتی در سلول های خورشیدی که در آنها باند میانی به صورت کامل تشکیل می شود، به تفصیل بررسی و فرمول بندی گردیده است [۳۵].



شکل ۱: طرح نمادین پروفایل انرژی یک سلول خورشیدی p-i-n با باند میانی (IB) در ناحیه ذاتی آن را نشان می دهد. مکانیزم انواع اتلاف ذاتی؛ اتلاف زیرگاف، گرمایی، گسیلی، بولتزمن، گرمایی؛ نیز نشان داده شده است. سه شبه تراز فرمی مربوط به باند رسانش، باند ظرفیت و باند میانی به ترتیب با E_{Fn} ، E_{Fi} و E_{Fp} نشان داده شده اند. E_C و E_V به ترتیب انرژی لبه باند هدایت و ظرفیت هستند.

۲- شار فوتونی با انرژی E از قانون تعمیم یافته پلانک به صورت زیر محاسبه می شود:

$$N(E, T, \Omega, \mu) = \frac{2n^2 \xi}{c^2 h^3} \frac{E^2}{\exp\left(\frac{E - \mu}{kT}\right) - 1} \quad (1)$$

که در آن n ضریب شکست محیط اطراف، c سرعت نور، h ثابت پلانک، k ثابت بولتزمن، T دمای مطلق، و μ پتانسیل شیمیایی است.

۳- سلول خورشیدی به عنوان یک ماشین فوتونی فرض شده است که بین دو مخزن خورشید و محیط اطراف، کار می کند.

۴- در هر گذاری، جذب کامل فوتون ها فرض شده است.

۵- هر فوتون تنها می تواند یک زوج الکترون-حفره ایجاد کند.

اتلاف زیرگاف ($L_{belowEg}$)

اگر سلول خورشیدی مورد مطالعه فاقد سیم کوانتومی باشد، در آن صورت، فوتون هایی که انرژی آن ها کمتر از گاف انرژی GaAs

انواع اتلاف ذاتی در سلول خورشیدی با باند میانی

شکل ۱ پروفایل انرژی یک سلول خورشیدی p-i-n را که در ناحیه ذاتی آن باند میانی وجود دارد، به صورت نمادین نشان می دهد. باند میانی باعث تقسیم گاف باندی سلول خورشیدی (E_g) به دو زیر گاف E_{g1} و E_{g2} می شود.

شکل ۱ مولفه های اتلاف ذاتی در سلول های خورشیدی با باند میانی را نیز به صورت نمادین نشان می دهد. در ادامه توضیح و چگونگی فرمول بندی هر یک از اتلاف های نشان داده شده، آورده شده است. برای فرمول بندی اتلاف ها در QWR-IBSCs از روش تعادلی ایده آل استفاده شده است [۱۷]. برای به دست آوردن معادلات اتلاف فرض های زیر در نظر گرفته شده است:

۱- چشمه فوتون فرودی به سلول خورشیدی، خورشید، توسط جسم سیاه در دمای $T_{sun} = 6000K$ که با زاویه فضایی ξ توسط سلول خورشیدی دیده می شود، مدل بندی شده است.

می‌شود. بخش دوم که ناشی از دو راستای کوانتیزه است با ضریب ۲/۳ به صورت زیر محاسبه می‌شود:

از آنجا که الکترون‌های تولید شده در باند رسانش QW-IBSC توسط دو نوع گذار که یکی گذار الکترون‌ها از باند ظرفیت به باند رسانش و دیگری گذار الکترون‌ها از باند ظرفیت به باند میانی و از باند میانی به باند رسانش است، تولید شده‌اند، باید سهم هر دو گذار در این بخش از اتلاف گرمایی محاسبه شود. در واقع، بخش دوم اتلاف گرمایی QW-IBSC از سه نوع اتلاف گرمایی به شرح زیر تشکیل می‌شود:

(۱) فوتونهای با انرژی $E_{g1} \leq \hbar\omega < E_{g2}$ باعث برانگیختگی الکترون‌ها از باند میانی به باند رسانش می‌شوند. الکترون‌های تولید شده مقدار انرژی اضافی تا لبه باند رسانش را به صورت فونون (اتلاف گرمایی) به سیستم می‌دهند تا به لبه باند رسانش برسند. بنابراین سهم یک فوتون جذب شده با انرژی $E_{g1} \leq \hbar\omega < E_{g2}$ در جریان نوری همانند سهم فوتون جذب شده با انرژی $\hbar\omega = E_{g1}$ است.

(۲) فوتونهای با انرژی $E_{g2} \leq \hbar\omega < E_g$ باعث برانگیختگی الکترون‌ها از باند ظرفیت به باند میانی می‌شوند. الکترون‌های تولید شده مقدار انرژی اضافی تا لبه باند میانی را به صورت فونون (اتلاف گرمایی) به سیستم می‌دهند. بنابراین سهم یک فوتون جذب شده با انرژی $E_{g2} \leq \hbar\omega < E_g$ در جریان نوری همانند سهم فوتون جذب شده با انرژی $\hbar\omega = E_{g2}$ است.

(۳) فوتونهای با انرژی $\hbar\omega \geq E_g$ باعث برانگیختگی الکترون‌ها از باند ظرفیت به باند رسانش می‌شوند. الکترون‌های تولید شده مقدار انرژی اضافی تا لبه باند رسانش را به صورت اتلاف گرمایی از دست می‌دهند. بنابراین سهم یک فوتون جذب شده با انرژی $\hbar\omega \geq E_g$ در جریان نوری همانند سهم فوتون جذب شده با انرژی $\hbar\omega = E_g$ است.

بنابراین، اتلاف گرمایی در QW-IBSC را می‌توان به صورت زیر بیان کرد:

$$L_{th} = \frac{1}{P_{in}} \left\{ \frac{1}{3} \times \left(\int_{E_{g2}}^{\infty} (E - E_{g2}) \cdot N(E, T_{sun}, \xi_{abs}, \mu = 0) dE \right) + \frac{2}{3} \times \left(\int_{E_{g1}}^{E_{g2}} (E - E_{g1}) \cdot N(E, T_{sun}, \xi_{abs}, \mu = 0) dE \right) + \int_{E_{g2}}^{E_g} (E - E_{g2}) \cdot N(E, T_{sun}, \xi_{abs}, \mu = 0) dE + \int_{E_g}^{\infty} (E - (E_{g1} + E_{g2})) \cdot N(E, T_{sun}, \xi_{abs}, \mu = 0) dE \right\} \quad (5)$$

اتلاف گسیلی (L_{em})

ناشی از بازترکیب الکترون-حفره تولید شده از فوتون‌های جذب شده است. این بازترکیب همراه با گسیل فوتون خواهد بود. بنابراین، در QW-IBSC اتلاف گسیلی توسط زیرگاف E_{g2} و تعداد فوتون‌های گسیل شده به صورت زیر محاسبه می‌شود:

باشند جذب نخواهند شد و در فرآیند تشکیل زوج حفره-الکترون و بالتبع آن جریان نوری شرکت نخواهند کرد. از دست دادن این فوتون‌ها موسوم به اتلاف زیر گاف ($L_{belowEg}$) است. اما در سلول خورشیدی دارای سیم کوانتومی و در نتیجه دارای باند میانی، فوتون‌هایی که انرژی آنها کمتر از گاف انرژی GaAs باشند، در صورتی که انرژی آنها بیشتر از کوچکترین زیرگاف باشد جذب سلول خورشیدی خواهند شد و در نتیجه $L_{belowEg}$ کاهش می‌یابد. مقدار $L_{belowEg}$ برای $GaAs/In_xGa_{1-x}As$ QW-IBSC متناسب با تعداد فوتون‌هایی است که انرژی آنها کمتر از زیر گاف E_{g1} باشد و توسط رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$L_{belowEg} = \frac{1}{P_{in}} \int_0^{E_{g1}} E \cdot N(E, T_{sun}, \xi_{abs}, \mu = 0) dE \quad (2)$$

که در آن ξ_{abs} زاویه فضایی جذب نور خورشید توسط سلول خورشیدی و P_{in} توانی است که از خورشید دریافت می‌شود و به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$(3)$$

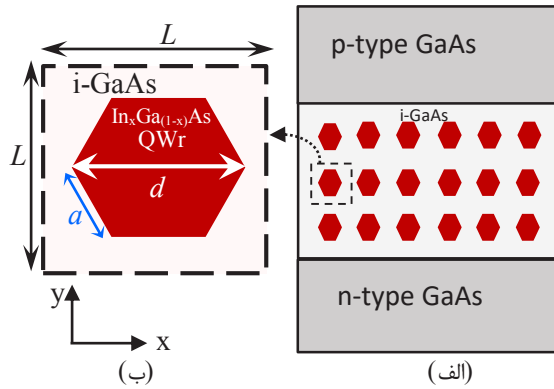
اتلاف گرمایی (L_{th})

در مورد سلول‌های خورشیدی تک‌گافی، الکترون‌های تولید شده در باند رسانش که دارای انرژی بیشتر از لبه باند رسانش هستند، مقدار انرژی اضافی تا لبه باند رسانش را به صورت فونون به سیستم می‌دهند تا به لبه باند رسانش برسند و در فرآیند تولید جریان نوری شرکت کنند. این مقدار انرژی اضافی موسوم به اتلاف گرمایی یا اتلاف بالای گاف است و به صورت زیر تعریف می‌شود [۳۶]:

$$L_{th} = \frac{1}{P_{in}} \int_{E_g}^{\infty} (E - E_g) \cdot N(E, T_{sun}, \xi_{abs}, \mu = 0) dE \quad (4)$$

اما در مورد QW-IBSC، اتلاف گرمایی را نمی‌توان از این معادله محاسبه کرد. در سیم‌های کوانتومی در دو راستای عرضی x و y محدودشدگی وجود دارد (شکل ۲ را ببینید)، در نتیجه برای این دو راستا می‌توان در نظر گرفت که تراز فرمی به سه شبه تراز فرمی مربوط به باند رسانش، باند ظرفیت و باند میانی که به ترتیب با E_{Fn} ، E_{Fp} ، و E_{F1} در شکل ۱ نشان داده شده‌اند، تبدیل می‌شود. اما، در راستای طولی z الکترون‌ها مانند الکترون آزاد عمل می‌کنند. بنابراین، بین باند هدایت و باند میانی ایجاد شده IB. به علت راستای آزاد سیم کوانتومی، چگالی حالت $\hbar^2 k_z^2 / 2m^*$ وجود دارد. در نتیجه، الکترون‌های باند رسانش و باند میانی با دو شبه تراز فرمی E_{F1} و E_{Fn} توصیف نمی‌شوند، بلکه تنها با یک شبه تراز فرمی توصیف می‌شوند.

بنابراین اتلاف گرمایی در QW-IBSC دو بخش دارد: بخش اول که ناشی از الکترون‌های آزاد راستای طولی هستند با ضریب ۱/۳ همانند معادله (۴) اما با گاف باندی E_{g2} به جای E_g محاسبه



شکل ۲: (الف) سطح مقطع ساختار GaAs/ In_xGa_{1-x}As QWR-IBSC (ب) یک سلول واحد از سیم کوانتومی را نشان می دهد.

بررسی باند میانی در GaAs/ In_xGa_{1-x}As QWR-IBSC

در GaAs/In_xGa_{1-x}As QWR-IBSC اختلاف انرژی لبه باند هدایت GaAs و In_xGa_{1-x}As باعث ایجاد چاه دوبعدی با عمق V_C می شود که در شکل ۳ به صورت شماتیک برای GaAs/In_{0.6}Ga_{0.4}As QWR-IBSC با $L=16$ nm و $d=10$ nm در یک بعد نشان داده شده است. توابع ویژه مربوط به ویژه انرژی چاه های دوبعدی V_C مجاور، که دارای انرژی کمتر از لبه باند هدایت GaAs است، با یکدیگر همپوشانی کرده و در نتیجه انرژی E_{11e} تبدیل به مینی باند IB می شود. IB به عنوان باند میانی گاف انرژی GaAs عمل می کند. این امکان نیز وجود دارد که بیشتر از یک باند میانی در گاف انرژی GaAs وجود داشته باشد. زیرا با افزایش عرض چاه، d ، تعداد مقادیر ویژه الکترونی در چاه V_C افزایش می یابد. البته در صورتی که مینی باند تشکیل شده از ترازهای انرژی بالاتر با باند هدایت همپوشانی نکند، مینی باند همانند باند میانی عمل می کند. برای مثال برای GaAs/In_{0.6}Ga_{0.4}As QWR-IBSC با $L=16$ nm و $d=14$ nm مقدار V_C برابر 0.15 الکترون ولت است و سه ویژه مقدار انرژی با مقادیر $E_{21e}=0.436$ eV و $E_{12e}=0.435$ eV، $E_{11e}=0.128$ eV برای سلول واحد شکل ۲(ب) وجود خواهد داشت. اما، مینی باند ناشی از E_{21e} و E_{12e} با یکدیگر و با باند هدایت همپوشانی می کنند و فقط مینی باند ناشی از E_{11e} ، باند میانی ساختار QWR-IBSC خواهد بود (نحوه محاسبه ترازهای انرژی سلول واحد و پهنای باند میانی در بخش بعد بررسی خواهد شد). به طور مشابه، اختلاف انرژی لبه باند ظرفیت GaAs و In_xGa_{1-x}As باعث ایجاد چاه دوبعدی با عمق V_V می شود. همان طور که در شکل ۳ نشان داده شده است، ترازهای انرژی زیادی در چاه دوبعدی V_V وجود دارند که اکثریت آنها مربوط به حفره های سنگین هستند. مینی باندهای ناشی از این مقادیر ویژه

$$L_{em} = \frac{1}{P_{in}} \left\{ \frac{1}{3} \times \left(E_{g_2} \cdot \int_{E_{g_2}}^{\infty} N(E, T_{cell}, \xi_{emit}, \mu = E_{F1} - E_{FV}) dE \right) + \frac{2}{3} \times \left(E_{g_1} \cdot \int_{E_{g_1}}^{E_{g_2}} N(E, T_{cell}, \xi_{emit}, \mu = E_{FC} - E_{F1}) dE \right) + E_{g_2} \cdot \int_{E_{g_2}}^{E_g} N(E, T_{cell}, \xi_{emit}, \mu = E_{F1} - E_{FV}) dE + E_g \cdot \int_{E_g}^{\infty} N(E, T_{cell}, \xi_{emit}, \mu = qV_M) dE \right\} \quad (6)$$

که در آن T_{cell} دمای سلول خورشیدی، ξ_{emit} مربوط به زاویه فضایی گسیل فوتون ها از سلول خورشیدی و پتانسیل شیمیایی μ برابر qV_M است که ولتاژ سلول خورشیدی در توان پیشینه آن است.

اتلاف بولتزمن ($L_{Boltzmann}$) و کرنر (L_{Carnot})

اتلاف بولتزمن ناشی از عدم برابری زاویه فضایی فوتون های جذب شده توسط سلول خورشیدی و فوتون های گسیل شده از سلول خورشیدی است و به صورت زیر محاسبه می شود:

$$L_{Boltzmann} = \frac{1}{P_{in}} \cdot \frac{kT_{cell}}{q} \cdot \ln \left(\frac{\xi_{emit}}{\xi_{abs}} \right) \cdot J_M \quad (7)$$

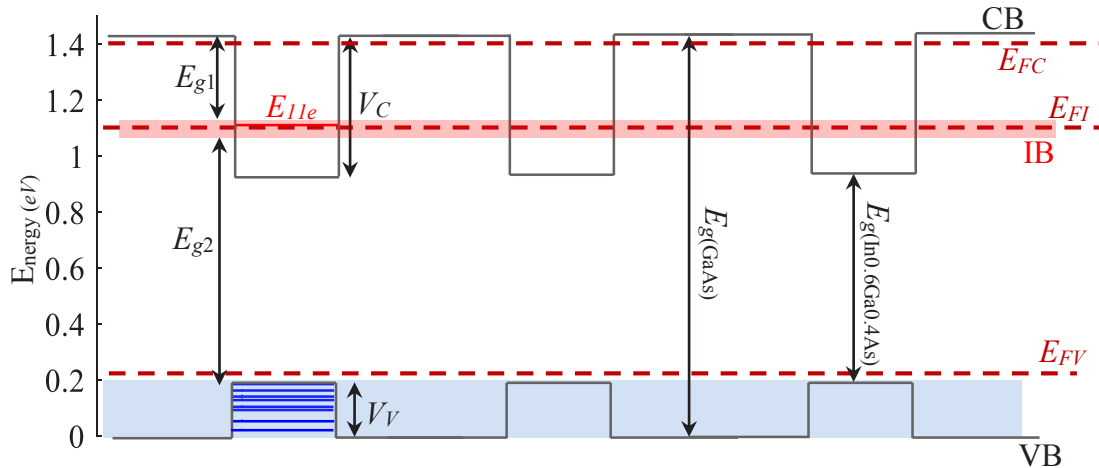
که در آن J_M جریان سلول خورشیدی در توان پیشینه آن است. هنگامی که تبدیل کار الکتریکی به کار گرمایی نیاز به انرژی داشته باشد، فاکتور کرنر ظاهر می شود. در سلول خورشیدی اتلاف کرنر، همان طور که در شکل ۱ نشان داده شده است، ناشی از کاهش انرژی الکترون ها در انتقال از لبه باند هدایت به تراز فرمی برای تولید جریان خروجی است و برای QWR-IBSC به صورت زیر خواهد بود:

$$L_{Carnot} = \frac{1}{P_{in}} \cdot E_g \cdot \frac{T_{cell}}{T_{sun}} \cdot J_M \quad (8)$$

معرفی یک ساختار خاص از QWR-IBSC

سطح مقطع ساختار GaAs/ In_xGa_{1-x}As QWR-IBSC به طور شماتیک در شکل ۲ نشان داده شده است. آرایه ای منظم از سیم های کوانتومی In_xGa_(1-x)As با سطح مقطع شش ضلعی و فاصله L از یکدیگر در ناحیه ذاتی سلول خورشیدی p-i-n با جنس GaAs قرار گرفته است. میزان آرایش لایه GaAs نوع p و نوع n برابر $N_D = N_A = 5.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ در نظر گرفته شده است. شکل ۱، سطح مقطع یک سلول واحد متشکل از سطح مقطع شش ضلعی سیم کوانتومی In_xGa_(1-x)As با طول قطری d و اضلاع برابر با $a = d/2$ و مساحت $A = (1.5\sqrt{3})a^2$ و سد GaAs ذاتی با طول L در جهت های x و y را نیز نشان می دهد.

باند ظرفیت به باند هدایت است و دیگری گذار الکترون‌ها از باند ظرفیت به باند میانی و از باند میانی به باند هدایت است. باید توجه داشت برای اینکه گذار الکترونی از باند انرژی پایین‌تر به IB و از IB به باند انرژی بالاتر صورت گیرد، باند IB باید نیمه‌پر باشد [۳۷].



شکل ۳: طرح شماتیکی از سیم‌های کوانتومی $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{As}$ با گاف انرژی $E_g(\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{As})$ و سد GaAs با گاف انرژی $E_g(\text{GaAs})$ را نشان می‌دهد. اختلاف انرژی لبه باند هدایت (CB) سیم کوانتومی و سد GaAs باعث ایجاد چاه دوبعدی V_C می‌شود. به طور مشابه، اختلاف انرژی لبه باند ظرفیت (VB) سیم کوانتومی و سد GaAs باعث ایجاد چاه دوبعدی V_V می‌شود. IB ناشی از هم‌پوشانی تابع‌های موج مربوط به اولین ویژه مقدار چاه V_C (E_{I1e}) سیم‌های کوانتومی مجاور است. E_{FC} ، E_{FI} و E_{FV} به ترتیب مربوط به ترازهای فرمی نوارهای رسانش، ظرفیت، و میانی هستند. خطوط آبی رنگ، ترازهای انرژی حفره‌ها را در چاه دوبعدی V_V نشان می‌دهد.

محاسبه موقعیت و پهنای باند میانی

$$\sum_{\alpha=1}^N \iint_{A_x} \frac{\hbar^2}{2m^*(x,y)} \nabla \Psi_{\alpha}^*(x,y) \nabla \Psi_{\alpha}(x,y) dA + \sum_{\alpha=1}^N \iint_{A_x} \Psi_{\alpha}^*(x,y) V(x,y) \Psi_{\alpha}(x,y) dA = E \sum_{\alpha=1}^N \iint_{A_x} \Psi_{\alpha}^*(x,y) \Psi_{\alpha}(x,y) dA \quad (9)$$

که در آن E انرژی، N تعداد المان‌ها در سلول واحد، A_x مساحت هر المان، Ψ_{α} تابع موج و $V(x,y)$ انرژی پتانسیل مربوط به حامل‌ها در سلول واحد است. برای الکترون‌ها، انرژی پتانسیل در سلول واحد به صورت زیر می‌شود:

$$V(x,y) = \begin{cases} V_C = \chi_{\text{GaAs}} - \chi_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}} & \text{inside the QWR} \\ 0 & \text{outside the QWR} \end{cases} \quad (10)$$

که در آن χ_{GaAs} و $\chi_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}}$ به ترتیب برابر الکترون‌خواهی سیم کوانتومی و سد است. مقدار الکترون‌خواهی و دیگر پارامترهای $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ در جدول ۱ نشان داده شده است. انرژی پتانسیل حفره‌ها هم مشابه معادله (۱۰) محاسبه می‌شود با این تفاوت که به جای V_C ، V_V که از رابطه زیر محاسبه می‌شود، قرار می‌گیرد.

$$V_V = (\chi_{\text{GaAs}} + E_{g_{\text{GaAs}}}) - (\chi_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}} + E_{g_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}}}) \quad (11)$$

با یکدیگر و با باند ظرفیت هم‌پوشانی می‌کنند و این هم‌پوشانی باعث می‌شود که در چاه پتانسیل V_V باند میانی تشکیل نشود. شایان ذکر است که IB کوپل‌شدگی نوری با باندهای ظرفیت و هدایت دارد اما از نظر الکتریکی نسبت به آنها ایزوله است. این خاصیت IB باعث می‌شود دو نوع گذار در جریان نوری سلول خورشیدی با باند میانی سهمیم باشند که اولی، گذار الکترون‌ها از

برای محاسبه موقعیت باند میانی، مقادیر ویژه انرژی برای چاه‌های دوبعدی V_C و V_V محاسبه می‌شوند. اولین مقدار ویژه چاه V_C موقعیت باند میانی را مشخص می‌کند. پهنای باند میانی با مدل تنگ‌بست مشابه آنچه که در مرجع [۳۸] برای محاسبه A_S بیان شده، محاسبه می‌گردد.

مقادیر ویژه انرژی مربوط به الکترون‌ها، حفره‌های سبک و سنگین با حل معادله شرودینگر به روش المان محدود [۳۹] به شرح زیر محاسبه خواهد شد.

حل معادله شرودینگر با روش المان محدود

برای حل معادله شرودینگر، سلول واحد نشان داده شده در شکل ۲ (ب) توسط المان‌ها و گره‌ها بر اساس تکنیک مثلث‌بندی Delaunay گسسته‌سازی می‌شود و سپس محل گره‌ها به طور تکراری بهبود می‌یابد [۴۰]. همچنین تعداد المان‌ها در نزدیکی فصل مشترک به منظور در نظر گرفتن دقیق‌تر تغییر خواص فیزیکی ناشی از تغییر ماده در فصل مشترک، افزایش می‌یابد. برای حل معادله شرودینگر دوبعدی به روش المان محدود، انتگرال کنش به صورت زیر گسسته‌سازی می‌شود:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \Psi_1(x, y, z)}{\partial x} \\ \frac{\partial \Psi_1(x, y, z)}{\partial y} \end{bmatrix} = \mathbf{J}^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial \Psi_1(x, y, z)}{\partial \mu} \\ \frac{\partial \Psi_1(x, y, z)}{\partial \nu} \end{bmatrix} \quad (18)$$

$$= \mathbf{J}^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial \varphi_1(\mu, \nu)}{\partial \mu} & \frac{\partial \varphi_2(\mu, \nu)}{\partial \mu} & \frac{\partial \varphi_3(\mu, \nu)}{\partial \mu} \\ \frac{\partial \varphi_1(\mu, \nu)}{\partial \nu} & \frac{\partial \varphi_2(\mu, \nu)}{\partial \nu} & \frac{\partial \varphi_3(\mu, \nu)}{\partial \nu} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{bmatrix}$$

اگر ماتریس 2×3 بالا که مشتقات جزئی توابع پایه را در مختصات تعمیم یافته نشان می دهد، \mathbf{D} بنامیم، آنگاه مشتقات جزئی معادله (9) به صورت زیر محاسبه خواهد شد:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \Psi_1(x, y)}{\partial x} & \frac{\partial \Psi_1(x, y)}{\partial y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \Psi_1(x, y)}{\partial x} \\ \frac{\partial \Psi_1(x, y)}{\partial y} \end{bmatrix} = \quad (19)$$

$$[\psi_1 \ \psi_2 \ \psi_3] \mathbf{D}' \cdot (\mathbf{J}^{-1})' \cdot \mathbf{J}^{-1} \cdot \mathbf{D} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{bmatrix}$$

در نهایت، انتگرال طرف راست معادله (17) به صورت زیر خواهد شد:

$$[\psi_1 \ \psi_2 \ \psi_3] \int_0^1 \int_0^{1-\nu} \mathbf{D}' \cdot (\mathbf{J} \cdot \mathbf{J}')^{-1} \cdot \mathbf{D} |\mathbf{J}| d\mu d\nu \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{bmatrix} \quad (20)$$

انتگرال بالا بر روی المان مثلثی مبنا گرفته شده است و حدود انتگرال هم بر اساس مختصات رئوس المان مثلثی مبنا نوشته شده است.

برای نوشتن جمله دوم از معادله (9) در مختصات تعمیم یافته ابتدا باید $V(x, y)$ را در این مختصات تعریف کنیم. اگر V_1, V_2 و V_3 مقادیر پتانسیل در رئوس المان مثلثی (گرهها) باشند، آنگاه انرژی پتانسیل $V(x, y)$ به صورت ترکیب خطی از توابع پایه به صورت زیر خواهد شد:

$$V(x, y) \rightarrow V_1 \varphi_1(\mu, \nu) + V_2 \varphi_2(\mu, \nu) + V_3 \varphi_3(\mu, \nu) \quad (21)$$

و جمله دوم از معادله (9) به صورت زیر خواهد شد:

$$\int_0^1 \int_0^{1-\nu} (V_1 \varphi_1(\mu, \nu) + V_2 \varphi_2(\mu, \nu) + V_3 \varphi_3(\mu, \nu)) \cdot \quad (22)$$

$$(\psi_1 \varphi_1(\mu, \nu) + \psi_2 \varphi_2(\mu, \nu) + \psi_3 \varphi_3(\mu, \nu))^2 |\mathbf{J}| d\mu d\nu$$

جمله سوم از معادله (9) شبیه انتگرال بالا خواهد بود که پتانسیل اول مربوط به انرژی پتانسیل در آن حذف می شود. در نهایت، با استفاده از معادله های (19) تا (22)، معادله شرودینگر در مختصات تعمیم یافته که به صورت زیر بیان می شود، حل می گردد و ویژه مقادیر انرژی به دست می آید.

$$\sum_{\alpha=1}^N \sum_{i,j} \psi_i^{\alpha*} \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} (\mu, \nu) \right) \iint_{x_0} (\nabla \varphi_i^{\alpha}(\mu, \nu))^* (\nabla \varphi_j^{\alpha}(\mu, \nu)) dA \psi_j^{\alpha} + \quad (23)$$

$$\sum_{\alpha=1}^N \sum_{i,j} \psi_i^{\alpha*} \left(\iint_{x_0} \varphi_i^{\alpha*}(\mu, \nu) V(\mu, \nu) \varphi_j^{\alpha}(\mu, \nu) dA \right) \psi_j^{\alpha} =$$

$$E \sum_{\alpha=1}^N \sum_{i,j} \psi_i^{\alpha*} \left(\iint_{x_0} \varphi_i^{\alpha*}(\mu, \nu) \varphi_j^{\alpha}(\mu, \nu) dA \right) \psi_j^{\alpha}$$

که در آن $E_{g_{InGaAs}}$ و $E_{g_{GaAs}}$ به ترتیب برابر انرژی گاف سد و سیم کوانتومی هستند.

در معادله (9)، m^* جرم موثر حامل ها (الکترون یا حفرهها) است که در داخل و خارج سیم کوانتومی به صورت زیر تغییر می کند:

$$m^*(x, y) = \begin{cases} m_{InGaAs}^* & \text{inside the QWr} \\ m_{GaAs}^* & \text{outside the QWr} \end{cases} \quad (12)$$

حال برای حل معادله (9)، المان مثلثی مبنا که رئوس آن در $(0;0;0)$ ، $(1;0)$ و $(0;1)$ در مختصات تعمیم یافته $(\mu; \nu)$ قرار گرفته اند، تعریف می شود. هر المان مثلثی شکل در مختصات اولیه $(x; y)$ به این مثلث مبنا در مختصات $(\mu; \nu)$ نگاشته می شود. برای این نگاشت، توابع پایه $\varphi_i^{\alpha}(\mu, \nu)$ که چندجمله ای خطی در مختصات $(\mu; \nu)$ هستند، تعریف می شود. از آنجا که در سیستم دوبعدی، هر المان مثلثی شکل بین سه نقطه محدود است، برای سیستم سه درجه آزادی تعریف می شود و تعداد توابع پایه به ازای درجه آزادی سیستم خواهد بود. بنابراین، سه تابع پایه با 9 ضریب ثابت (a_i, b_i, c_i) به صورت زیر خواهیم داشت:

$$\varphi_i = a_i + b_i \mu + c_i \nu \quad i = 1, 2, 3 \quad (13)$$

که این توابع پایه باید شرط زیر را نیز برآورده کنند:

$$\varphi_i^{\alpha}(\mu_j, \nu_j) = \delta_{ij} \quad (14)$$

که در آن δ_{ij} تابع دلتای کرونگر است.

اکنون، با مشخص شدن توابع پایه می توان معادله (9) را در مختصات تعمیم یافته $(\mu; \nu)$ به دست آورد. بنابراین، تابع موج در هر المان، Ψ_{α} ، و مختصات $(x; y)$ به صورت ترکیب خطی از توابع پایه به صورت زیر تعریف می شوند:

$$\Psi_{\alpha}(x, y) = \sum_{i=1}^3 \psi_i^{\alpha} \varphi_i^{\alpha}(\mu, \nu) \quad (15)$$

$$x = \sum_{i=1}^3 x_i \varphi_i(\mu, \nu); y = \sum_{i=1}^3 y_i \varphi_i(\mu, \nu) \quad (16)$$

به همین ترتیب تمام جملات معادله (9) باید در مختصات تعمیم یافته نوشته شد. در اینجا، به علت رعایت اختصار طرز نوشتن یک جمله از معادله (9) در مختصات تعمیم یافته توضیح داده می شود. جمله اول از معادله (9) با در نظر گرفتن $\alpha=1$ به صورت زیر خواهد شد:

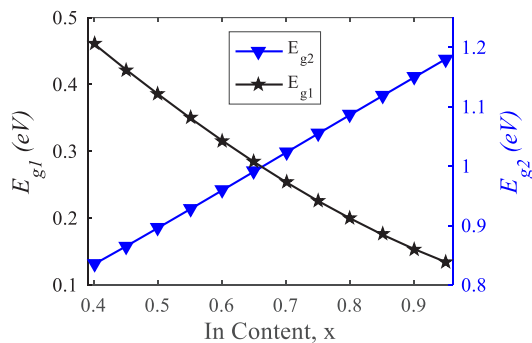
$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \iiint \nabla \Psi_1^*(x, y) \nabla \Psi_1(x, y) dA \rightarrow \quad (17)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \iiint \left(\frac{\partial \Psi_1(x, y)}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \Psi_1(x, y)}{\partial y} \right)^2 dx dy$$

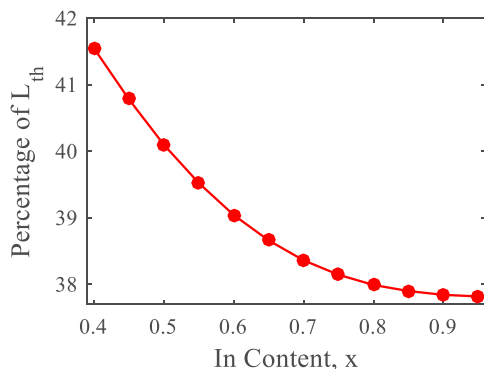
مشتقات جزئی معادله بالا توسط ژاکوبین معکوس 2×2 ، \mathbf{J}^{-1} در نگاشت به مختصات تعمیم یافته به صورت زیر محاسبه می شوند:

ویژه انرژی چاه VC و لبه باند هدایت کمتر از ۱۰۰ میلی ولت است. در نتیجه، مینی‌باند ناشی از مقدار ویژه سیم‌های کوانتومی مجاور، با باند هدایت همپوشانی می‌کند و باند میانی تشکیل نمی‌شود و سلول خورشیدی مانند سلول خورشیدی تک گافی عمل می‌کند.

شکل ۴ اتلاف زیرگاف $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ QWR-IBSC را برحسب غلظت ایندیوم سیم‌های کوانتومی نشان می‌دهد. همان‌طور که در شکل ۴ دیده می‌شود با افزایش غلظت ایندیوم، اتلاف زیرگاف افزایش می‌یابد. زیرا با افزایش غلظت ایندیوم سیم‌های کوانتومی، انرژی گاف $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ کاهش می‌یابد. کاهش گاف سیم کوانتومی باعث افزایش عمق چاه VC می‌شود و در نتیجه فاصله اولین ویژه مقدار چاه از لبه چاه افزایش می‌یابد، که این افزایش، معادل افزایش زیرگاف انرژی E_{g1} و کاهش زیرگاف انرژی E_{g2} است (شکل ۵ را ببینید). با افزایش زیرگاف E_{g1} اتلاف زیرگاف نیز افزایش می‌یابد چون $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ QWR-IBSC گستره وسیعتری از طول موج‌ها را نمی‌تواند جذب کند.



شکل ۵: مقادیر زیرگاف‌های انرژی E_{g1} و E_{g2} مربوط به ساختار $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ QWR-IBSC را برحسب غلظت مولی ایندیوم نشان می‌دهد.



شکل ۶: اتلاف گرمایی $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ QWR-IBSC را برحسب غلظت مولی ایندیوم نشان می‌دهد.

اثر افزایش غلظت ایندیوم سیم‌های کوانتومی بر اتلاف گرمایی در شکل ۶ نشان داده شده است. دلیل اصلی کاهش اتلاف گرمایی با افزایش غلظت ایندیوم، افزایش زیرگاف انرژی E_{g1} است.

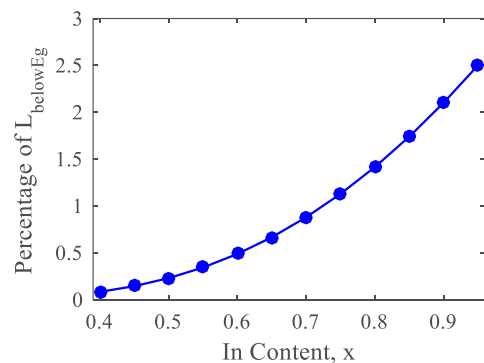
جدول ۱. مقادیر مربوط به پارامترهای $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ را نشان می‌دهد.

پارامتر	مقدار	مرجع
الکترون خواهی χ (eV)	$4.9-0.83x$	[۴۱]
گاف انرژی، E_g (eV)	$0.4105+0.6337x+0.475x^2$	[۴۲]
جرم موثر الکترون، m_e^*	$(0.023-0.037x+0.03x^2).m_e$	[۴۱]
جرم موثر حفره سنگین، m_{hh}^*	$(0.41-0.1x).m_e$	[۴۱]
جرم موثر حفره سبک، m_{lh}^*	$(0.026-0.056x).m_e$	[۴۱]

محاسبه زیرگاف‌های E_{g1} و E_{g2}

با حل معادله (۲۳) و به دست آوردن ویژه مقادیر انرژی مربوط به الکترون‌ها و حفره‌ها و پهنای مینی‌باند تشکیل شده از هر ویژه مقدار می‌توان مقادیر زیرگاف‌های E_{g1} و E_{g2} که در شکل ۳ نشان داده شده است را به دست آورد. E_{g2} برابر تفاضل انرژی بین لبه پایینی مینی‌باند تشکیل شده از اولین ویژه مقدار الکترون و لبه بالایی مینی‌باند تشکیل شده از اولین ویژه مقدار حفره سنگین است.

در صورتی که چاه VC فقط شامل یک ویژه مقدار باشد، E_{g1} برابر تفاضل انرژی بین لبه بالایی مینی‌باند تشکیل شده از این ویژه مقدار و لبه پایینی باند هدایت است. اما، اگر درون چاه VC بیشتر از یک ویژه مقدار انرژی وجود داشته باشد، E_{g1} برابر تفاضل انرژی بین لبه بالایی مینی‌باند تشکیل شده از اولین ویژه مقدار VC و لبه پایینی مینی‌باند تشکیل شده از دومین ویژه مقدار VC خواهد بود.

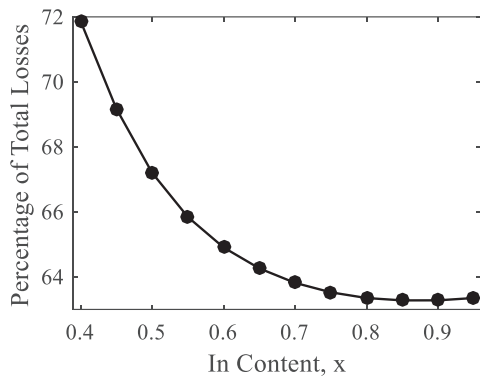


شکل ۴: اتلاف زیرگاف $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ QWR-IBSC را برحسب غلظت مولی ایندیوم نشان می‌دهد.

بررسی تاثیر غلظت مولی ایندیوم بر اتلاف‌های ذاتی

در این بخش تاثیر غلظت مولی ایندیوم بر هر یک از مولفه‌های اتلاف ذاتی بررسی می‌شود. در همه محاسبات $L=16$ nm و $d=6$ nm در نظر گرفته شده است. غلظت ایندیوم کمتر از ۰/۴ نظر گرفته نشده است. زیرا برای $x < 0.4$ ، تفاضل انرژی بین مقدار

تعداد الکترون های برانگیخته شده و کاهش جریان J_M می شود. ذکر این نکته خالی از لطف نیست که با توجه معادله (۷)، مینیمم اتلاف بولتزمن با ایجاد شرایط $\xi_{abs} = \xi_{emit}$ حاصل می شود. با توجه به اینکه زاویه فضایی گسیل همیشه از زاویه فضایی جذب فوتون ها بزرگتر است، شرایط فوق الذکر را می توان با افزایش زاویه فضایی جذب فوتون ها از نور خورشید توسط طراحی مناسب با آینه ها و عدسی ها یا کاهش زاویه فضایی گسیل فوتون ها از سلول خورشیدی فراهم کرد. همچنین، به جای استفاده از سیستم اپتیکی خارجی، با مهندسی ساختار نواری مواد به کار رفته در سلول خورشیدی نیز می توان اتلاف بولتزمن را کاهش داد [۴۳]. اثر افزایش غلظت ایندیوم سیم های کوانتومی بر اتلاف گسیلی GaAs/In_xGa_{1-x}As QWr-IBSC در شکل ۹ ترسیم شده است. افزایش گف انرژی E_{gl} با افزایش غلظت ایندیوم سیم های کوانتومی باعث کاهش اتلاف گسیلی می شود.



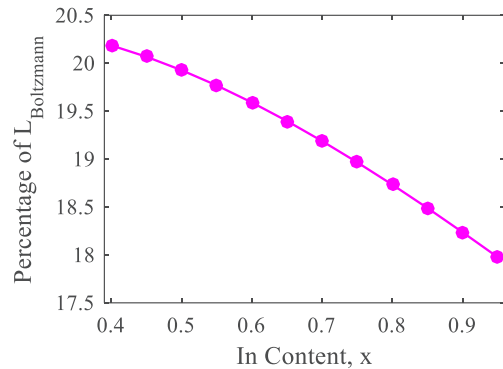
شکل ۱۰: مجموع ۵ اتلاف ذاتی را برای GaAs/In_xGa_{1-x}As QWr-IBSC برحسب غلظت مولی ایندیوم نشان می دهد.

اتلاف ذاتی کلی GaAs/In_xGa_{1-x}As QWr-IBSC که مجموع ۵ نوع اتلاف فوق الذکر است در شکل ۱۰ نشان داده شده است. اتلاف کل با افزایش غلظت ایندیوم سیم های کوانتومی کاهش می یابد و برای غلظت مولی ۰/۸۵-۰/۹ کمترین میزان اتلاف ذاتی را خواهیم داشت. با توجه به اشکال ۴ تا ۹ می توان گفت که اتلاف گرمایی بیشترین سهم و اتلاف گسیلی سهم ناچیزی در اتلاف کل دارند.

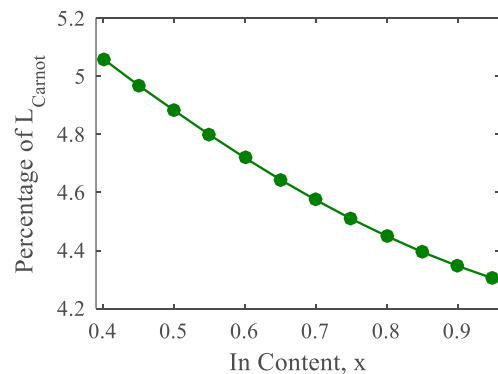
نتیجه گیری

اتلاف های ذاتی سلول خورشیدی باند میانی که متشکل از سلول خورشیدی p-i-n با جنس GaAs و آرایه ای منظم از سیم های کوانتومی In_xGa_(1-x)As با سطح مقطع شش ضلعی در ناحیه ذاتی آن است، محاسبه و بررسی شد. موقعیت باند میانی با حل معادله شرودینگر به کمک روش المان محدود و پهنای باند میانی با مدل تنگ بست به دست آمد. با به دست آمدن موقعیت و پهنای باند میانی، مقادیر زیرگاف های انرژی E_{g1} و E_{g2} که زیربنای

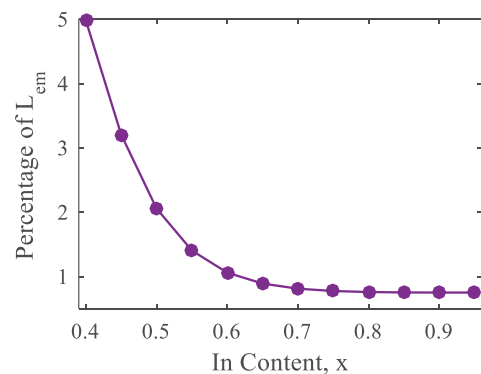
افزایش زیرگاف انرژی E_{gl} باعث کاهش میزان جذب GaAs/In_xGa_{1-x}As QWr-IBSC می شود، در نتیجه، محدوده انرژی ای که در آن برهم کنش بین الکترون های برانگیخته شده و فونون های شبکه صورت می گیرد، کاهش می یابد و کاهش این محدوده انرژی، معادل کاهش اتلاف گرمایی است.



شکل ۷: اتلاف بولتزمن GaAs/In_xGa_{1-x}As QWr-IBSC را برحسب غلظت مولی ایندیوم نشان می دهد.



شکل ۸: اتلاف کرنر GaAs/In_xGa_{1-x}As QWr-IBSC را برحسب غلظت مولی ایندیوم نشان می دهد.



شکل ۹: اتلاف گسیلی GaAs/In_xGa_{1-x}As QWr-IBSC را برحسب غلظت مولی ایندیوم نشان می دهد.

کاهش اتلاف بولتزمن و کرنر با افزایش غلظت ایندیوم سیم های کوانتومی GaAs/In_xGa_{1-x}As QWr-IBS به ترتیب در شکل ۷ و شکل ۸ دیده می شود. دلیل کاهش اتلاف، افزایش زیرگاف انرژی E_{gl} است که باعث کاهش جذب سلول خورشیدی و کم شدن

افزایش اتلاف زیرگاف و کاهش اتلاف‌های گرمایی، گسیلی، بولتزمان و کرنر می‌شود.

- InGaAs quantum wire intermediate-band solar cells using deep-level transient spectroscopy technique," *Nanotechnology*, vol. 28, 2017.
- [13] W. S. Liu, H. C. Lin, and R. Y. Liu, "Capping vertically aligned InGaAs/GaAs(Sb) quantum dots with a AlGaAsSb spacer layer in intermediate-band solar cell devices," *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, vol. 25, pp. 76-86, 2017.
- [14] P. Yu, J. Wu, L. Gao, H. Liu, and Z. Wang, "InGaAs and GaAs quantum dot solar cells grown by droplet epitaxy," *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 161, pp. 377-381, 2017.
- [15] S. Lin, Y. Feng, X. Wen, T. Harada, T. W. Kee, S. Huang, *et al.*, "Observation of Hot Carriers Existing in Ag₂S Nanoparticles and Its Implication on Solar Cell Application," *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 120, pp. 10199-10205, 2016.
- [16] Y. Zhang, C. Yam, and G. C. Schatz, "Fundamental Limitations to Plasmonic Hot-Carrier Solar Cells," *The Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 7, pp. 1852-1858, 2016.
- [17] W. Shockley and H. J. Queisser, "Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells," *Journal of applied physics*, vol. 32, pp. 510-519, 1961.
- [18] H. Boustanji, S. Jaziri, and J.-L. Lazzari, "Contribution of a single quantum dots layer in intermediate band solar cells: A capacitance analysis," *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 159, pp. 633-639, 2017.
- [19] Y. Cheng, M. Fukuda, V. R. Whiteside, M. C. Debnath, P. J. Valley, T. D. Mishima, *et al.*, "Investigation of InAs/GaAs_{1-x}Sb_x quantum dots for applications in intermediate band solar cells," *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 147, pp. 94-100, 2016.
- [20] M. Kovalova, S. Kondratenko, A. Yakovlev, C. Furrow, V. P. Kunets, M. E. Ware, *et al.*, "Generation-recombination processes in InGaAs/GaAs heterostructures with one-dimensional nanostructures," in *Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering*, 2015.
- [21] M. S. Kovalova, S. V. Kondratenko, C. S. Furrow, V. P. Kunets, M. E. Ware, and G. J. Salamo, "Photo-voltage in InGaAs/GaAs heterostructures with one-dimensional nanostructures," in *Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering*, 2014.
- [22] V. P. Kunets, C. S. Furrow, T. A. Morgan, Y. Hirono, M. E. Ware, V. G. Dorogan, *et al.*, "InGaAs quantum wire intermediate band solar cell," *Applied Physics Letters*, vol. 101, p. 041106, 2012.
- [23] V. P. Kunets, C. S. Furrow, M. E. Ware, L. D. De Souza, M. Benamara, M. Mortazavi, *et al.*, "Band filling effects on temperature performance of intermediate band quantum wire solar cells," *Journal of Applied Physics*, vol. 116, 2014.

فرمول‌های اتلاف‌های ذاتی است، محاسبه شد. محاسبات نشان داد که افزایش غلظت مولی ایندیوم سیسم‌های کوانتومی باعث

مراجع

- [1] Z. Arefinia and A. Asgari, "A new graphene-on-silicon solar cells by introducing an interlayer of silicon quantum dots," in *23rd Iranian Conference on Electrical Engineering (ICEE)*, , 2015, pp. 1415-1418.
- [2] Z. Arefinia and A. Asgari, "An analytical model for optimizing the performance of graphene based silicon Schottky barrier solar cells," *Materials Science in Semiconductor Processing*, vol. 35, pp. 181-188, 2015.
- [3] Z. Arefinia and A. Asgari, "Optical and electrical modeling of solar cells based on graphene/Si nanowires with radial p-i-n junctions," *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 137, pp. 146-153, 2015.
- [4] Z. Arefinia and A. Asgari, "Modeling of the graphene based Schottky barrier solar cells on InGaN substrate," in *22nd Iranian Conference on Electrical Engineering (ICEE)*, 2014, pp. 53-56.
- [5] Z. Arefinia and A. Asgari, "Novel attributes in modeling and optimizing of the new graphene based In_xGa_{1-x}N Schottky barrier solar cells," *Journal of Applied Physics*, vol. 115, p. 194506, 2014.
- [6] Z. Arefinia and A. Asgari, "Simulation and Optimization Study of Graphene/silicon Schottky Barrier Solar Cells," presented at the The 3rd Iranian Conference on Optics and Laser Engineering, Iran, 2013.
- [7] Z. L. Zhang, J. F. Li, X. L. Wang, J. Q. Qin, W. J. Shi, Y. F. Liu, *et al.*, "Enhancement of Perovskite Solar Cells Efficiency using N-Doped TiO₂ Nanorod Arrays as Electron Transfer Layer," *Nanoscale Research Letters*, vol. 12, 2017.
- [8] X. Yan, C. Zhang, J. Wang, X. Zhang, and X. Ren, "A High-Efficiency Si Nanowire Array/Perovskite Hybrid Solar Cell," *Nanoscale Research Letters*, vol. 12, 2017.
- [9] W. Wang, J. He, Y. Cao, L. Kong, X. Zheng, Y. Wu, *et al.*, "Nonuniform Effect of Carrier Separation Efficiency and Light Absorption in Type-II Perovskite Nanowire Solar Cells," *Nanoscale Research Letters*, vol. 12, 2017.
- [10] S. Kim, S. Bae, S. W. Lee, K. Cho, K. D. Lee, H. Kim, *et al.*, "Relationship between ion migration and interfacial degradation of CH₃NH₃PbI₃ perovskite solar cells under thermal conditions," *Scientific Reports*, vol. 7, 2017.
- [11] T. Ibn-Mohammed, S. C. L. Koh, I. M. Reaney, A. Acquaye, G. Schileo, K. B. Mustapha, *et al.*, "Perovskite solar cells: An integrated hybrid lifecycle assessment and review in comparison with other photovoltaic technologies," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 80, pp. 1321-1344, 2017.
- [12] N. A. Al Saqri, J. F. Felix, M. Aziz, V. P. Kunets, D. Jameel, D. Taylor, *et al.*, "Investigation of electrically active defects in

- [33] Q. Liu, Z. Cai, D. Han, and S. Chen, "Natural Intermediate Band in I2 -II-IV-VI4 Quaternary Chalcogenide Semiconductors," *Scientific Reports*, vol. 8, p. 1604, 2018.
- [34] M. Bokalic and M. Topic, *Spatially Resolved Characterization in Thin-Film Photovoltaics*: Springer International Publishing, 2015.
- [35] Z. Arefinia, "Modelling of Intrinsic Loss Processes in the Intermediate Band Solar Cells," in *Zeitschrift für Naturforschung A* vol. 0, ed, 2018.
- [36] L. C. Hirst and N. J. Ekins-Daukes, "Fundamental losses in solar cells," *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, vol. 19, pp. 286-293, 2011.
- [37] A. Martí, L. Cuadra, and A. Luque, "Partial filling of a quantum dot intermediate band for solar cells," *IEEE Trans Electron Devices*, vol. 48, pp. 2394 - 2399, 2001.
- [38] J. C. Slater and G. F. Koster, "Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem," *Physical Review*, vol. 94, pp. 1498-1524, 06/15/ 1954.
- [39] S. S. Rao, *The Finite Element Method in Engineering*: Elsevier Butterworth Heinemann, 2005.
- [40] P.-O. Persson and G. Strang, "A Simple Mesh Generator in MATLAB," *SIAM Review*, vol. 46, pp. 329-345, 2004.
- [41] Y. A. Goldberg, M. P. Mikhailova, and S. Rumyantsev, *Handbook Series on Semiconductor Parameters - Volume 2: Ternary and Quaternary III-V Compounds*: World Scientific, 1999.
- [42] C. P. Kuo, S. K. Vong, R. M. Cohen, and G. B. Stringfellow, "Effect of mismatch strain on band gap in III-V semiconductors," *Journal of Applied Physics*, vol. 57, pp. 5428-5432, 1985.
- [43] F. H. Alharbi and S. Kais, "Theoretical limits of photovoltaics efficiency and possible improvements by intuitive approaches learned from photosynthesis and quantum coherence," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 43, pp. 1073-1089, 2015.
- [24] S. Saravanan, A. John Peter, and C. W. Lee, "Phonon effects on interband optical transitions in InAs_{0.8}P_{0.2}/InP quantum wire," *Journal of Luminescence*, vol. 169, Part A, pp. 86-92, 2016.
- [25] V. P. Kunets, S. Prosandeev, Y. I. Mazur, M. E. Ware, M. D. Teodoro, V. G. Dorogan, *et al.*, "Isotropic Hall effect and "freeze-in" of carriers in the InGaAs self-assembled quantum wires," *Journal of Applied Physics*, vol. 110, p. 083714, 2011.
- [26] V. P. Kunets, M. D. Teodoro, V. G. Dorogan, P. M. Lytvyn, G. G. Tarasov, R. Slezzer, *et al.*, "Interface roughness scattering in laterally coupled InGaAs quantum wires," *Applied Physics Letters*, vol. 97, p. 262103, 2010.
- [27] 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.
- [28] T. Aihara, T. Tayagaki, Y. Nagato, Y. Okano, and T. Sugaya, "Design and characterization of InGaP-based InP quantum dot solar cells," *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 57, 2018.
- [29] A. Delamarre, D. Suchet, N. Cavassilas, Y. Okada, M. Sugiyama, and J. Guillemoles, "An Electronic Ratchet Is Required in Nanostructured Intermediate-Band Solar Cells," *IEEE Journal of Photovoltaics*, 2018.
- [30] A. Imran, J. Jiang, D. Eric, M. N. Zahid, M. Yousaf, M. Ahmad, *et al.*, "Efficiency enhancement through flat intermediate band in Quantum dot solar cell," *Results in Physics*, vol. 10, pp. 241-247, 2018.
- [31] G. Liao, J. Duan, Y. Zhao, and Q. Tang, "Toward fast charge extraction in all-inorganic CsPbBr₃perovskite solar cells by setting intermediate energy levels," *Solar Energy*, vol. 171, pp. 279-285, 2018.
- [32] L. Debbichi, S. Lee, H. Cho, A. M. Rappe, K. H. Hong, M. S. Jang, *et al.*, "Mixed Valence Perovskite Cs₂Au₂I₆: A Potential Material for Thin-Film Pb-Free Photovoltaic Cells with Ultrahigh Efficiency," *Advanced Materials*, vol. 30, p. 1707001, 2018.