

بهبود سازی و مقایسه عملکرد سلول‌های خورشیدی لایه نازک CZTSe و CZTS

سمانه امیری^۱، سجاد دهقانی^{۲*}

^۱دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی نانو فناوری گرایش نانو الکترونیک، دانشگاه شیراز
^۲استادیار دانشکده فناوریهای نوین، دانشگاه شیراز، sdehghani@shirazu.ac.ir

چکیده

در این مقاله سلول‌های خورشیدی لایه نازک CZTSe و CZTS با ساختار $FTO / CdS / CZTS (CZTSe) / Mo$ با در نظر گرفتن اثرات باز ترکیب و نقص شبیه سازی شده‌اند. تاثیر دما، گاف انرژی، ضخامت و چگالی ناخالصی لایه جاذب و همچنین ضخامت و چگالی ناخالصی لایه بافر بر عملکرد این سلول‌ها مورد بررسی قرار گرفتند و دو سلول با هم مقایسه شدند. نتایج نشان داد که سلول خورشیدی CZTS دارای ولتاژ مدار باز بزرگتر $V_{oc} = 0.95 V$ و سلول خورشیدی CZTSe دارای چگالی جریان اتصال کوتاه بزرگتر $J_{sc} = 31 \text{ mA/cm}^2$ می‌باشند. برای سلول‌های خورشیدی CZTSe و CZTS در دمای اتاق و در حالت بهینه، به ترتیب بازده $17/44\%$ و $14/28\%$ حاصل شد، که نسبت به سلول‌های خورشیدی لایه نازک CZTS و CZTSe متداول بهبود چشمگیری حاصل گردیده است. ضمناً نشان داده شد که وابستگی بازده سلول CZTS به دما در مقایسه با سلول CZTSe کمتر است. در کلیه شبیه سازی‌ها، سلول تحت تابش استاندارد $AM 1/5$ قرار داشته است.

کلیدواژه

سلول خورشیدی لایه نازک، CZTSe، CZTS، بازده

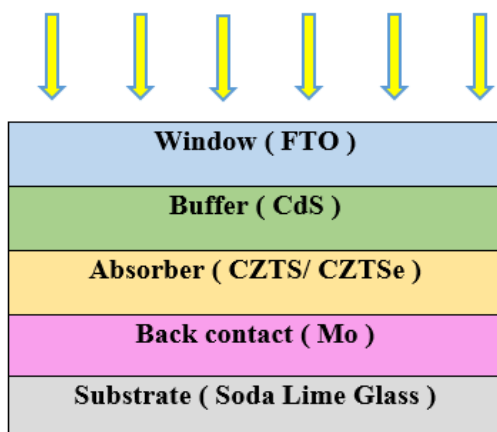
مقدمه

کادمیوم (Cd) سمی می‌باشد. در حالی که عناصر تشکیل دهنده نیمه هادی‌های چهارتایی CZTSe و CZTS متعلق به عناصر گروه‌های VI، IV، II، I می‌باشند به وفور در زمین یافت می‌شوند و ارزان قیمت و غیر سمی هستند [۳ و ۴]، همچنین این دو نیمه هادی دارای گاف انرژی مستقیم در بازه $1.56 \text{ eV} - 1.4 \text{ eV}$ و $1.2 \text{ eV} - 0.9 \text{ eV}$ هستند و ضریب جذب نوری آنها بالای 10^4 cm^{-1} می‌باشد پس گزینه بسیار مناسبی برای جایگزینی CIGS هستند [۳ و ۴].

ضخامت متداول لایه‌های جاذب CZTSe و CZTS حدود $2-3 \mu\text{m}$ است و بازده به دست آمده از این نوع سلول‌های خورشیدی در نمونه‌های ساخته شده با مقیاس آزمایشگاهی به ترتیب حدود $8/4\%$ و $10/21\%$ گزارش شده است. سلول‌های خورشیدی پلی کریستال CZTS دارای مقاومت سری بالا $R_{sh} = 3/7 \Omega\text{cm}^2$ و مقاومت موازی کوچک $R_s = 4/25 \Omega\text{cm}^2$ هستند [۵ و ۶].

آلودگی‌های زیست محیطی ناشی از سوزاندن سوخت‌های فسیلی و کمبود منابع آن‌ها و از طرف دیگر تقاضای روز افزون برای انرژی ارزان موجب شد تا به منظور تولید الکتریسیته از منابع انرژی تجدید پذیر از جمله انرژی نور خورشید بهره برداری شود. از این رو طراحی سلول‌های خورشیدی با هزینه کم و بازده بالا دارای اهمیت می‌باشد [۱ و ۲]. از مواد $CdTe$ ، CIS ، $CIGS$ ، $CZTS$ و $CZTSe$ در ساخت سلول‌های خورشیدی لایه نازک استفاده می‌شود که هزینه ساخت بسیار کمتری نسبت به سلول‌های خورشیدی سلیکونی دارند؛ زیرا تولید سریع و پر بازده آن‌ها با به کارگیری کمترین مواد اولیه صورت می‌پذیرد همچنین این نوع سلول‌ها انعطاف پذیر می‌باشند و بر روی سطوح غیر مسطح قابل نصب هستند. از بین مواد ذکر شده، نیمه هادی‌های CZTS و CZTSe مطلوب‌تر هستند، زیرا در CIS ، $CIGS$ و $CdTe$ منابع ایندیم (In) و گالیوم (Ga) و تلوریم (Te) محدود است و

$Cu_2 Zn Sn S_4$



شکل ۱. ساختار سلول خورشیدی CZTS/CZTSe

شبیه سازی سلول خورشیدی لایه نازک CZTS و CZTSe

برای شبیه سازی سلول خورشیدی باید محاسبات نوری و الکتریکی مربوطه انجام شود. در قسمت نوری، نرخ photo generation با استفاده از ضریب شکست مختلط مطابق رابطه (۱) محاسبه می شود [۷]:

$$G = \frac{\eta_0 P \lambda}{hc} \alpha e^{-\alpha z} \quad (1)$$

در این رابطه، P ثابت شدت پرتو است که شامل اثرات بازتاب، عبور و باز ترکیب است. η_0 بازده کوانتومی داخلی است که بیانگر تعداد حامل های تولید شده در هر فوتون تابشی است. Z مسافت طی شده توسط پرتو، h ثابت پلانک، C سرعت نور، λ طول موج و α ضریب جذب است که طبق رابطه زیر به دست می آید [۷]:

$$\alpha = \frac{4\pi}{\lambda} k \quad (2)$$

در این رابطه، k قسمت موهومی ضریب شکست مختلط است. برای قسمت الکتریکی معادلات پواسون و پیوستگی به صورت خودسازگار حل می شوند و نرخ حامل تولید شده در اثر نور به عنوان ورودی معادلات پیوستگی استفاده می شود. در نهایت پتانسیل و بار در هر نقطه محاسبه شده و با جایگذاری در معادله رانش- نفوذ، مشخصه $I-V$ سلول خورشیدی به دست می آید [۷].

هدف از این تحقیق ارائه و شبیه سازی یک سلول خورشیدی لایه نازک CZTS و CZTSe با بازده بالا می باشد. بدین منظور ابتدا سلول خورشیدی لایه نازک CZTS و CZTSe ارائه شده در مرجع [۵] که در شکل (۱) نشان داده شده است را با نرم افزار Silvaco شبیه سازی می نماییم. جدول ۱ مقادیر

هدف کلی از این تحقیق ارائه یک ساختار بهینه جهت بهبود عملکرد سلول های خورشیدی لایه نازک CZTS و CZTSe و مقایسه آنها می باشد. بدین منظور طبق شکل ۱ ابتدا یک سلول خورشیدی لایه نازک CZTS و CZTSe با ساختار FTO / CdS / CZTS(CZTSe) / Mo که در مراجع [۱۱ و ۵] معرفی شده را مورد شبیه سازی قرار می دهیم. سپس تأثیر تغییر دما، ضخامت، گاف انرژی، و چگالی ناخالصی پذیرنده لایه جاذب و همچنین تأثیر افزایش ضخامت و چگالی ناخالصی بخشنده لایه بافر را بر عملکرد سلول ها با استفاده از نرم افزار Silvaco-Atlas بررسی می نماییم، درحالی که بیشتر شبیه سازی های سلول خورشیدی CZTS و CZTSe با استفاده از نرم افزارهای SCAPS-1D, AMPS-1D انجام شده اند. در نهایت با بهینه سازی های انجام شده در مقایسه با کارهای قبلی بازده سلول ها به میزان قابل توجهی افزایش یافته است. کلیه شبیه سازی ها تحت تابش استاندارد Am 1/5 G با توان تابشی بر واحد سطح 1000 w/m^2 انجام گردیده است.

ساختار سلول

ساختار سلول مورد بررسی در شکل ۱ نشان داده شده است. در این ساختار از اکسید قلع آلاییده شده با فلونور^۲ (FTO) که در واقع یک اکسید رسانای شفاف^۳ (TCO) است به عنوان لایه پنجره به جای اکسید روی آلاییده شده با آلومینیوم^۴ (AZO)، که به طور متداول در این سلول ها به کار می رود، استفاده شده است. زیرا FTO نسبت به AZO ارزان تر است و به همین دلیل به تولید سلول خورشیدی CZTS ارزان تر کمک می کند. مقاومت ورقه ای FTO $8 \Omega/\text{sq}$ است در حالی که مقاومت ورقه ای^۵ AZO $3/8 \Omega/\text{sq}$ است. بنابراین رسانایی الکتریکی FTO کمتر است که می توان با افزایش چگالی ناخالصی FTO رسانایی الکتریکی آن را بهبود بخشید [۵].

Fluorine doped tin oxide²
Transparent conductivity oxide³
Aluminum doped zinc oxide⁴
Sheet resistivity⁵

گاف انرژی لایه جاذب را در محدوده مجاز تغییر می‌دهیم و تاثیر آنها بر بازده سلول‌ها را بررسی می‌کنیم.

پارامترهای فیزیکی اولیه مواد به کار رفته در شبیه سازی سلولهای خورشیدی لایه نازک ارائه شده در این مقاله را نشان می‌دهد [۸-۱۰ و ۵]. در ادامه برای بهینه سازی سلول‌ها پارامترهایی که بر عملکرد سلول تاثیر می‌گذارند از قبیل ضخامت لایه بافر و جاذب، چگالی ناخالصی لایه بافر و جاذب،

جدول ۱. پارامترهای اولیه به کار رفته در شبیه سازی سلول خورشیدی لایه نازک CZTS/CZTSe [۸-۱۰ و ۵]

Material Properties	Window Layer	Buffer Layer	Absorber Layer	Absorber Layer
	FTO	CdS	CZTS	CZTSe
Thickness (μm)	0.1	0.15	1.2	1.2
Bandgap (eV)	3.6	2.4	1.5	1.04
Electron Affinity (eV)	4.0	4.2	4.5	4.05
Dielectric Permittivity (1/m)	9	10	10	7
Conduction Band Density (cm^{-3})	2.4×10^{18}	2.2×10^{18}	2.2×10^{18}	2.2×10^{18}
Valence Band Density (cm^{-3})	1.8×10^{19}	1.8×10^{19}	1.8×10^{19}	1.8×10^{19}
Electron Mobility (cm^2/Vs)	100	100	100	145
Hole Mobility (cm^2/Vs)	25	25	25	35
Donor Density (cm^{-3})	2.4×10^{18}	5×10^{16}
Acceptor Density (cm^{-3})	1×10^5	7×10^{16}	5×10^{15}
SRH life time (S)		7.5×10^{-10}		1.5×10^{-9}
Radiative recombination (cm^3/S)		1.02×10^{-10}		1.04×10^{-10}
Defect type		acceptor	donor	
Defect density (cm^{-3})		10^{16}	10^{15}	
Electron capture cross section (cm^2)		10^{-16}	10^{-14}	
Hole capture cross section (cm^2)		10^{-14}	10^{-16}	

همین دلیل مقداری تفاوت جزئی در نتایج وجود دارد که کاملاً طبیعی و مورد انتظار است. نتایج کامل شبیه سازی اولیه سلول‌های خورشیدی CZTS و CZTSe در جدول ۲ ذکر شده است.

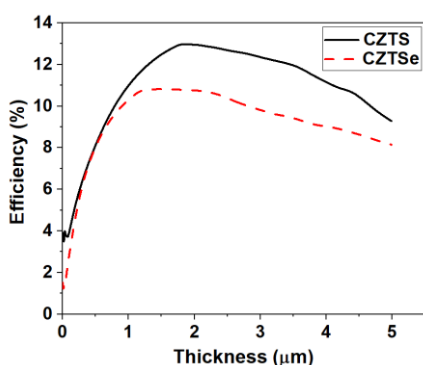
جدول ۲. نتایج شبیه سازی ساختار اولیه بدون بهینه سازی

نتایج	η (%)	V_{oc} (v)	J_{sc} (mA/cm^2)	$F.F$ (%)
CZTS	11.69	1.02	18.42	62.23
CZTSe	10.76	0.45	35.2	67.83

جهت اطمینان از صحت کار، ابتدا نتایج به دست آمده از شبیه سازی‌های ساختار اولیه را با کارهای تجربی قبلی [۱۱ و ۶] مقایسه نمودیم به طوری که در کارهای پیشین برای سلول CZTS و CZTSe به ترتیب بازده $11/01\%$ و $10/21\%$ گزارش شده و ما با شبیه سازی به بازده $11/69\%$ و $10/76\%$ دست پیدا کردیم. که نتایج تقریباً مشابه‌ای حاصل گردید. با توجه به اینکه CZTS و CZTSe پلی کریستال هستند و پارامترهای مربوط به مواد مورد استفاده در کار تجربی ذکر نشده بود به

ضخامت لایه جاذب

تغییر ضخامت لایه جاذب به دلیل تغییرات میزان جذب و بازترکیب روی بازده تاثیر می گذارد پس ضخامت مناسب باید پیدا شود. ضخامت لایه جاذب CZTS و CZTSe را از ۱۰ نانومتر تا ۵ میکرومتر تغییر می دهیم و خصوصیات فوتولتائیک سلول ها را مورد بررسی قرار دادیم. نتایج حاصل در شکل ۳ نشان داده شده است. با افزایش ضخامت لایه جاذب، بازده سلول خورشیدی افزایش می یابد زیرا تعداد فوتون های بیشتری در لایه جاذب CZTS و CZTSe جذب می شوند که می توانند منجر به تولید زوج الکترون-حفره بیشتری شوند [۱۳ و ۱۴]، در نتیجه J_{sc} و V_{oc} افزایش می یابد و در جهت افزایش بازده عمل می کند. از طرف دیگر افزایش ضخامت به دلیل افزایش بازترکیب در جهت کاهش بازده عمل می کند به طوری که از یک ضخامت خاص به بعد اثر افزایشی فوق را خنثی کرده و بازده کاهش می یابد [۱۵]. در سلول CZTS با ضخامت بهینه $1/8 \mu m$ به بازده $12/98\%$ و چگالی جریان اتصال کوتاه $J_{sc}=20/20 \text{ A/cm}^2$ و ولتاژ مدار باز $V_{oc}=1/02 \text{ V}$ و $F.F=62/78$ دست پیدا کردیم و در سلول CZTSe با ضخامت بهینه $1/2 \mu m$ پارامترهای حاصل شده به صورت $10/76\%$ و $\eta=10/76\%$ و $V_{oc}=0/45 \text{ V}$ و $J_{sc}=35/20 \text{ mA/cm}^2$ و $F.F=67/83\%$ بودند. با توجه به شکل ۳ برای هر دو سلول های CZTS در ضخامت های بالای لایه جاذب، به دلیل افزایش بازترکیب بازده کاهش می یابد.



شکل ۳. منحنی بازده بر حسب ضخامت لایه جاذب CZTS و CZTSe

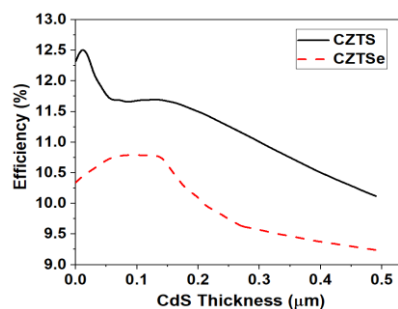
همانطور که می دانیم در عملکرد یک سلول خورشیدی پارامترهای مختلفی تأثیر گذارند از جمله ضخامت، چگالی ناخالصی و گاف انرژی لایه های جاذب و بافر، دمای کاری و ... که ما در این مقاله اثر این پارامترها را بر عملکرد سلول های خورشیدی CZTS و CZTSe بررسی و با هم مقایسه می نماییم. در هنگام بررسی اثر هر پارامتر، مقادیر سایر پارامترها مطابق جدول ۱ بدون تغییر باقی می ماندند.

بررسی تاثیر پارامترهای مختلف بر عملکرد سلول

خورشیدی لایه نازک CZTS و CZTSe

ضخامت لایه بافر

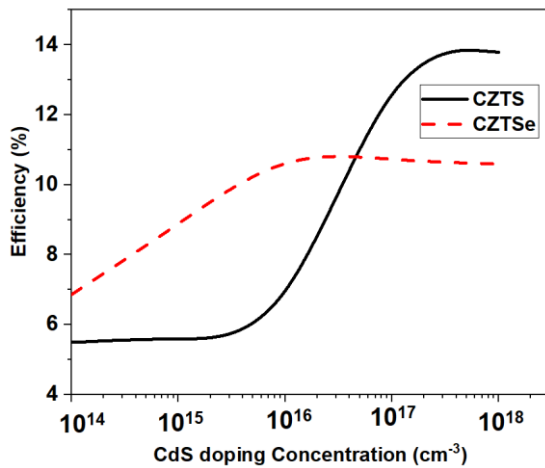
ضخامت لایه بافر را در بازه $500 - 10 \text{ nm}$ تغییر می دهیم، که طبق شکل ۲ در سلول CZTS با ضخامت لایه بافر 20 nm به بیشینه بازده $12/56\%$ و در سلول CZTSe با ضخامت لایه بافر 90 nm به بیشینه بازده $10/79\%$ می رسیم. بنابراین در سلول CZTS بیشترین بازده در ضخامت کمتری از لایه بافر حاصل شده است. افزایش بازده با ضخامت CdS در ضخامت های خیلی کم این لایه را می توان به افزایش میزان جذب فوتون های پرنرژی با افزایش ضخامت نسبت داد. با توجه به اینکه گاف انرژی CdS برابر 2.4 eV است، پس این لایه می تواند تعدادی از فوتون های پرنرژی از طیف خورشید را جذب کند. ضمناً با توجه به اینکه اختلاف گاف CdS با CZTSe زیاد است (1.36 eV) پس افزایش بازده با زیاد شدن ضخامت لایه بافر در این سلول نسبت به سلول CZTS بیشتر بوده است. به خاطر چگالی نقص زیاد در لایه CdS هر چه ضخامت بیشتر شود احتمال رسیدن زوج الکترون-حفره تولید شده به اتصال کمتر شده و احتمال بازترکیب زیاد می شود، در نتیجه بازده در ضخامت های زیاد CdS کاهش می یابد [۱۲].



شکل ۲. منحنی بازده بر حسب ضخامت لایه بافر CdS

چگالی ناخالصی لایه جاذب

جمع آوری بیشتر زوج الکترون و حفره‌های تولید شده کمک می‌کند، در نتیجه جریان زیاد می‌شود و بازده سلول افزایش می‌یابد [۱۳]. مطابق شکل ۵ در سلول CZTS با چگالی ناخالصی بهینه لایه بافر 10^{17} cm^{-3} به $\eta=14/03\%$ و در سلول CZTSe با چگالی ناخالصی بهینه لایه بافر 10^{17} cm^{-3} به $\eta=10/69\%$ دست یافتیم.



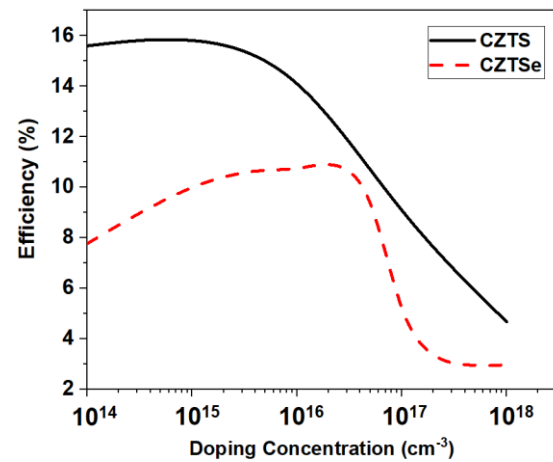
شکل ۵. منحنی بازده برحسب چگالی ناخالصی لایه بافر CdS

گاف انرژی لایه جاذب

بر اساس مراجع [۸ و ۱۶] گاف انرژی CZTS و CZTSe به ترتیب در بازه $1/4 - 1/56 \text{ eV}$ و $1/2 - 0/9 \text{ eV}$ تغییر می‌کنند که تغییرات گاف انرژی وابسته به روش ساخت و ساختار کریستالی است که می‌تواند کسپریت^۹ و یا استانیت^{۱۰} باشد. هرچند که هر کدام از این دو ماده با گافهای متفاوت در محدوده ذکر شده ساخته شده‌اند اما کنترل پذیری گاف در عمل راحت نیست.

در این قسمت وابستگی بازده سلول خورشیدی به گاف انرژی لایه جاذب بررسی خواهد شد. طبق شکل ۶ با افزایش گاف انرژی بازده افزایش می‌یابد زیرا در ساختار سلول به دلیل وجود پیوند p-n نامتجانس مطابق رابطه (۳)، با افزایش گاف انرژی، پتانسیل داخلی سلول افزایش می‌یابد که این موجب افزایش V_{oc} می‌شود، از طرفی دیگر با افزایش پتانسیل داخلی احتمال تجمع الکترون‌ها و حفره‌ها در سلول افزایش می‌یابد که این هم موجب افزایش J_{sc} می‌شود، در نتیجه افزایش V_{oc} و J_{sc}

با توجه به اینکه محدوده تغییر چگالی ناخالصی نوع P برای CZTS و CZTSe بر اساس کارهای قبل در بازه $10^{14} - 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ گزارش شده است [۱۰]، اثر چگالی ناخالصی را در این بازه بررسی می‌کنیم که نتایج حاصل در شکل ۴ نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می‌شود با افزایش چگالی ناخالصی لایه جاذب، ابتدا بازده سلول افزایش و سپس کاهش می‌یابد زیرا با افزایش چگالی ناخالصی CZTS و CZTSe، عرض ناحیه تخلیه^۷ در قسمت P-type کاهش می‌یابد که باعث افزایش میدان الکتریکی می‌شود و این منجر به افزایش بازده می‌شود، از طرفی دیگر افزایش ناخالصی باعث افزایش بازترکیب حامل‌های آزاد می‌شود و این منجر به کاهش بازده می‌شود [۱۰]. در سلول CZTS با چگالی ناخالصی بهینه لایه جاذب 10^{15} cm^{-3} بازده $16/08\%$ و در سلول CZTSe با چگالی ناخالصی بهینه لایه جاذب $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ بازده $11/47\%$ حاصل شد.



شکل ۴. منحنی بازده بر حسب چگالی ناخالصی لایه جاذب CZTS و CZTSe

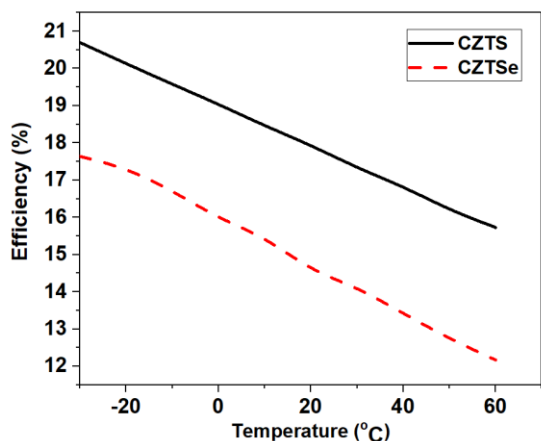
چگالی ناخالصی لایه بافر

با توجه به اینکه محدوده تغییرات چگالی ناخالصی نوع n برای CdS در بازه $10^{14} - 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ گزارش شده است [۱۰]، اثر چگالی ناخالصی بافر در این بازه بررسی شده و نتایج حاصل در شکل ۵ نشان داده شده است. با افزایش میزان ناخالصی لایه بافر، میدان الکتریکی در پیوند نامتجانس^۸ افزایش می‌یابد که به

^۹ kestrite
^{۱۰} stannite

^۷ depletion width
^۸ Hetro-junction

10^{17} cm^{-3} بررسی می کنیم که نتایج آنها در شکل ۷ نشان داده شده است. مطابق شکل ۷ افزایش دما موجب کاهش بازده می شود، زیرا وقتی دما زیاد می شود احتمال بازترکیب حامل ها افزایش می یابد، که این منجر به کاهش J_{sc} می شود. از طرفی با توجه به معادله (۳) افزایش دما منجر به کاهش V_{oc} هم می شود. در نهایت کاهش J_{sc} ، V_{oc} باعث کاهش بازده می شود [۱۳]



شکل ۷. منحنی بازده برحسب تغییرات دما

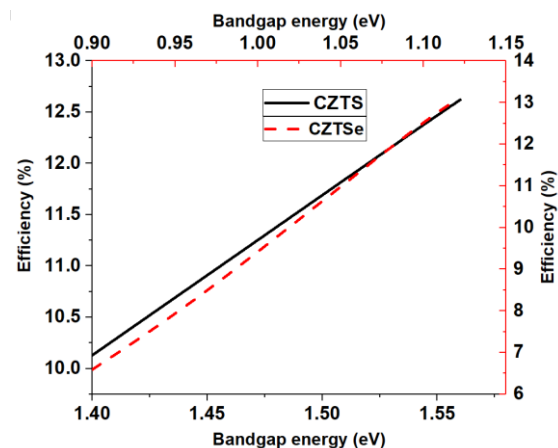
با توجه به شکل ۷ مشاهده می کنیم که در سلول CZTS در دمای 30°C بازده سلول 20.7% و در دمای 60°C بازده سلول 15.73% است بنابراین نسبت بازده ماکزیمم به مینیمم با توجه به تغییرات دما در فصل ها و مناطق جغرافیایی مختلف برای این سلول $1/32$ می باشد، در حالی که این نسبت برای سلول CZTSe $1/45$ می باشد. بنابراین اثر تغییرات دما بر روی بازده سلول CZTSe بیشتر است. پارامترهای سلول خورشیدی CZTS و CZTSe معمولاً در دمای اتاق گزارش می شوند هرچندکه در دماهای پایین تر وضعیت بهتر می شود.

پارامترهای ساختاری بهینه بدست آمده برای هر سلول در جدول ۳ ذکر شده اند.

سبب افزایش بازده می شود [۸]. مطابق شکل ۶ در سلول CZTS با گاف انرژی 1.56 eV به بیشترین بازده $12/62\%$ η و در سلول CZTSe با گاف انرژی 1.12 eV به بیشترین بازده $13/07\%$ دست می یابیم. ضمناً وابستگی بازده سلول CZTSe به تغییرات گاف انرژی بیشتر است.

$$V_{oc} = \frac{E_g}{q} - \frac{KT}{q} \ln \left(\frac{qD_n N_C N_V}{J_{SC} N_A L_D} \right) \quad (3)$$

در رابطه (۳) E_g گاف انرژی، q بار الکترون، K ثابت بولتزمن، T دما برحسب کلوین، D_n ثابت نفوذ الکترون، J_{sc} چگالی جریان اتصال کوتاه، N_C و N_V به ترتیب چگالی حالتها در باند هدایت و باند ظرفیت می باشند. همچنین N_A چگالی پذیرنده لایه جاذب و L_D طول نفوذ الکترون ها در لایه جاذب است [۱۷].



شکل ۶. منحنی بازده برحسب گاف انرژی لایه جاذب CZTS و CZTSe

دما

با توجه به تغییر فصل ها و تغییر مناطق جغرافیایی، دمای کاری سلول خورشیدی می تواند تغییرات زیادی داشته باشد. به همین دلیل اثر تغییرات دمایی در بازه 30°C تا 60°C درجه سانتی گراد را بر عملکرد سلول خورشیدی CZTS در حالت بهینه با ضخامت لایه جاذب $1/8 \mu\text{m}$ ، چگالی ناخالصی لایه جاذب 10^{15} cm^{-3} ، گاف انرژی لایه جاذب 1.56 eV و ضخامت لایه بافر 20 nm ، و چگالی ناخالصی بافر 10^{17} cm^{-3} بررسی می کنیم. همچنین اثر این تغییرات دمایی را بر عملکرد سلول خورشیدی CZTSe در حالت بهینه با ضخامت لایه جاذب $1/2 \mu\text{m}$ ، چگالی ناخالصی لایه جاذب $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ، گاف انرژی لایه جاذب 1.12 eV و با ضخامت لایه بافر 90 nm و چگالی ناخالصی بافر

جدول ۳. پارامترهای ساختاری سلول‌های بهینه CZTS و CZTSe

پارامترها	سلول CZTS	سلول CZTSe
ضخامت لایه بافر	20 nm	90 nm
ضخامت لایه جاذب	1.8 μm	1.2 μm
چگالی ناخالصی لایه بافر	10^{17}cm^{-3}	10^{17}cm^{-3}
چگالی ناخالصی لایه جاذب	10^{15}cm^{-3}	$5 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$
گاف انرژی لایه جاذب	1.56 eV	1.12 eV

جدول ۴. پارامترهای فوتولتائیک سلول CZTS و CZTSe در حالت بهینه

نوع لایه جاذب	η (%)	V_{oc} (v)	J_{sc} (mA/cm ²)	$F.F$ (%)
CZTS	17.44	0.95	24.43	74.95
CZTSe	14.28	0.6	31	76.38

با توجه به مقادیر جدول ۴، سلول CZTS دارای V_{oc} بزرگتر و سلول CZTSe دارای J_{sc} بزرگتر می‌باشد.

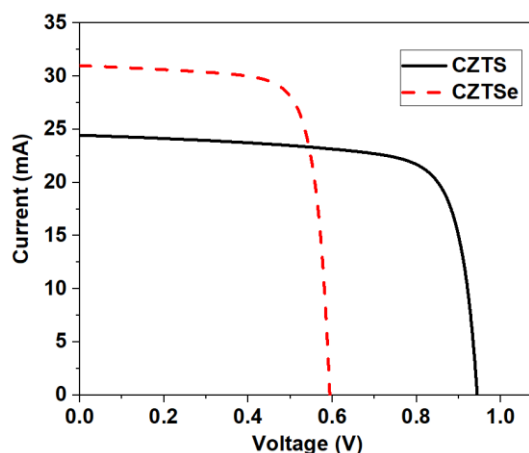
مقایسه نتایج به دست آمده در این مقاله با مطالعات

پیشین

برای اینکه نتایج کار انجام شده بهتر بررسی گردد در جدول ۵ نتایجی که در این مقاله در دمای اتاق و با توجه به مقادیر بهینه برای پارامترهای مختلف به دست آورده شده با مقادیر به دست آمده توسط محققان قبلی مقایسه گردید. همان طور که مشاهده می‌گردد بازده‌های به دست آمده در این مقاله به طور قابل توجهی نسبت به کارهای پیشین افزایش داشته است و عملکرد کلی سلول‌ها بهبود یافته است.

منحنی مشخصه $I-V$ سلول خورشیدی در حالت بهینه

با در نظر گرفتن کلیه مقادیر بهینه به دست آمده از قسمت‌های قبل برای گاف انرژی، ضخامت و چگالی ناخالصی لایه جاذب، ضخامت و چگالی ناخالصی لایه بافر، سلول‌ها را شبیه سازی کردیم که منحنی مشخصه $I-V$ سلول‌ها در این حالت مطابق شکل ۸ می‌باشند. ضمناً پارامترهای فوتولتائیک سلول CZTS و CZTSe در حالت بهینه در جدول ۴ ذکر شده اند. در دمای اتاق برای سلول بهینه CZTS به بازده $17/44\%$ و در سلول بهینه CZTSe به بازده $14/28\%$ دست پیدا کردیم.



شکل ۸. منحنی مشخصه $I-V$ سلول خورشیدی CZTS و CZTSe در حالت بهینه

جدول ۵. مقایسه نتایج به دست آمده با نتایج دو نمونه از مطالعات پیشین (الف) سلول CZTS (ب) سلول CZTSe

(الف)

پارامترهای سلول خورشیدی	طرح پیشنهادی این مقاله	مرجع [5]	مرجع [18]
ضخامت لایه جاذب (μm)	1.8	3	2
η (%)	17.44	8.33	6.44
$F.F$ (%)	74.95	65.80	62.89
J_{sc} (mA/cm^2)	24.43	19.5	17.59
V_{oc} (V)	0.95	0.66	0.58

(ب)

پارامترهای سلول خورشیدی	طرح پیشنهادی این مقاله	مرجع [6]	مرجع [19]
ضخامت لایه جاذب (μm)	1.2	1.2	2.7
η (%)	14.28	10.21	9.47
$F.F$ (%)	76.38	66.4	57.20
J_{sc} (mA/cm^2)	31	36.1	26.95
V_{oc} (V)	0.6	0.43	0.61

نتیجه گیری

مقاله علاوه بر استفاده از لایه های جاذب CZTS و CZTSe، از FTO هم به جای AZO برای لایه پنجره استفاده شده که موجب کاهش قیمت ساخت سلول خورشیدی می گردد و عملکرد کلی سلول ها را بهبود داده است.

مراجع

- [1] X. Liu, Y. Feng, H. Cui, F. Liu, X. Hao, G. Conibeer, D. Mitzi and M. Green, "The current status and future prospects of kesterite solar cells: a brief review", *progress in photovoltaics: research and applications*, Vol. 24, PP. 879–898, 2016.
- [2] P. Moghadam and M. Hayat, "A novel optimized double junction CZTS/CIGS solar cell with improved performance: A numerical simulation", *optik*, Vol. 154, PP. 676-684, 2017.
- [3] H. Arbouz, A. Aissat and J. Vilcot, "Simulation and optimization of CdS-n/Cu₂ZnSnS₄ structure for solar cell applications", *International journal of hydrogen energy*, Vol. 42, PP. 8827-8832, 2017.
- [4] A. Reshak, K. Nouneh and I. Kityk, "Structural, Electronic and Optical Properties in Earth-Abundant Photovoltaic Absorber of Cu₂ZnSnS₄ and Cu₂ZnSnSe₄ from DFT calculations", *International Journal of Electrochemical Science*, Vol. 9, PP. 955 – 974, 2014.
- [5] D. Adeyinka, A. Muteu, A. Olopade and M. Chendo, "Prediction and optimization of the performance characteristics of CZTS thin film solar cell using band gap grading", *Optical Quantum Electronic*, Vol. 49, PP. 336-349, 2017.

این مقاله با هدف کلی بهبود عملکرد سلول خورشیدی لایه نازک CZTS و CZTSe و مقایسه آنها برای به دست آوردن بینشی تئوری بر عملکرد این سلول ها جهت استفاده در فرآیند ساخت تجربی با توجه به توانایی تکنولوژی های ساخت موجود انجام گردید. برای اطمینان از صحت عملکرد، ابتدا سلول های خورشیدی لایه نازک CZTS و CZTSe که معرفی شده در مراجع [۱۱ و ۶] با ساختار FTO / CdS/ CZTS (CZTSe)/ Mo ساخته شدند. مورد شبیه سازی واقع شد. سپس تاثیر ضخامت و چگالی ناخالصی لایه های جاذب و بافر، تاثیر گاف انرژی لایه جاذب و همچنین تاثیر دما بر عملکرد این دو سلول مورد بررسی قرار گرفت. در سلول CZTS بهینه با ضخامت لایه جاذب $0.18 \mu\text{m}$ ، چگالی ناخالصی لایه جاذب 10^{15}cm^{-3} ، گاف انرژی لایه جاذب 1.56eV ، ضخامت لایه بافر 20nm ، چگالی ناخالصی لایه بافر 10^{17}cm^{-3} ، در دمای اتاق به بازده $\eta = 17/44\%$ دست یافتیم. همچنین در سلول CZTSe بهینه با ضخامت لایه جاذب $1.2 \mu\text{m}$ ، چگالی ناخالصی لایه جاذب $5 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ ، گاف انرژی لایه جاذب 1.12eV ، ضخامت لایه بافر 90nm ، چگالی ناخالصی لایه بافر 10^{17}cm^{-3} ، در دمای اتاق به بازده $\eta = 14/28\%$ دست یافتیم. بنابراین سلول CZTS دارای بازده و ولتاژ مدار باز بیشتری می باشد و سلول CZTSe دارای جریان اتصال کوتاه بزرگتری است. ضمناً از نظر وابستگی بازده به دما عملکرد سلول CZTS بهتر از CZTSe می باشد. ضمناً در این

- layer for $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ thin-film solar cells from numerical simulation”, *Micro & Nano Letters*, Vol. 11, pp. 386–390, 2016.
- [14] W. Zhao, W. Zhou and X. Mial, “Numerical Simulation of CZTS Thin Film Solar Cell”, *7th IEEE International Conference on Nano/Micro Engineered and Molecular Systems (NEMS)*, 2012.
- [15] S. Vallisree, R. Thangave and T. Lenka, “Theoretical investigations on enhancement of photovoltaic efficiency of nanostructured CZTS/ZnS/ZnO based solar cell device”, *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, Vol. 29, PP. 7262–7272, 2018.
- [16] S. Bag, O. Gunawan and D. Mitzi, “Low band gap liquid-processed CZTSe solar cell with 10.1% efficiency”, *Energy Environmental Science*, Vol. 5, PP. 7060-7065, 2012.
- [17] U. Rau and H. Schock, “Electronic properties of Cu (In,Ga)Se₂ heterojunction solar cells—recent achievements, current understanding, and future challenges”, *Applied Physics A: Materials Science & Processing*, Vol.69, PP. 131-147, 1999.
- [18] M. Patel and A. Ray, “Enhancement of output performance of $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ thin film solar cells- A numerical simulation approach and comparison to experiments”, *Physica B*, Vol. 407, PP. 4391–4397, 2012.
- [19] A. Cherouana and R. Labbani, “Study of CZTS and CZTSSe solar cells for buffer layers selection”, *Applied Surface Science*, Vol. 424, PP. 251-255, 2017.
- [6] J. Lia, S. Kim and Y. Zhang, “Tailoring the defects and carrier density for beyond 10% efficient CZTSe thin film solar cells”, *Solar Energy Materials & Solar Cells*, Vol. 159, PP. 447-455, 2017.
- [7] P. H. Drive, “Atlas User’s Manual device simulation software”, 2016.
- [8] U. Saha and M. Alam, “Proposition and computational analysis of a kesterite/kesterite tandem solar cell with enhanced efficiency”, *RSC Advances*, Vol. 7, PP. 4806-4814, 2017.
- [9] K. ITO, “Copper Zinc Tin Sulfide-Based Thin-Film Solar Cells”, *wiley*, PP. 172-173, 2015.
- [10] S. Meher, L. Balakrishnan and Z. Ale, “Analysis of $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4/\text{CdS}$ based photovoltaic cell: A numerical simulation approach,” *Superlattices and Microstructures*, Vol. 100, PP. 703-722, 2016.
- [11] C. Yan, J. Huang, K. Sun, S. Johnston, Y. Zhang, H. Sun, A. Pu, M. He, F. Liu, K. Eder, L. Yang, J. Cairney, N. Daukes, Z. Hameiri, John. Stride, S. Chen, M. Green and X. Hao, “ $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ solar cells with over 10% power conversion efficiency enabled by heterojunction heat treatment”, *Nature energy*, Vol. 3, PP. 764–772, 2018.
- [12] M. Doriani, H. Jahromi, M. H. Sheikhi, “A Highly Efficient Thin Film CuInGaSe_2 Solar Cell”, *Journal of Solar Energy Engineering*, Vol. 137, PP. 064501-5, 2015.
- [13] H. Zhang, S. Cheng, J. Yu, H. Zhou and H. Jia., “Prospects of Zn (O, S) as an alternative buffer

