

## Improving the Performance of Cadmium Telluride-Based Solar Cells Using ZnCdS/NiO and ZnO Compounds for ETL/HTL and TCO Layers

Ebrahim Amoupour<sup>1</sup>, *Ph.D Student*, Javad Hasanzadeh<sup>1</sup>, *Assistant Professor*, Ali Abdolazadeh Ziabari<sup>2</sup>, *Assistant Professor*, Peyman Azimi Anaraki<sup>1</sup>, *Assistant Professor*

<sup>1</sup>Department of Physics- Takestan Branch, Islamic Azad University, Takestan, Iran

<sup>2</sup>Nano Research Lab- Lahijan Branch, Islamic Azad University, Lahijan, Iran

ebiamoupour@yahoo.com, javadhasanzadeh649@gmail.com, peyphysics2004@yahoo.co.uk,  
ali\_abdolazadeh@liau.ac.ir

### Abstract

Cadmium telluride (CdTe) solar cell is known for its high efficiency, low cost and high stability. In this paper, simulation of CdTe based solar cell (ZnO/ZnCdS/CdTe/NiO/Al) has been presented. ZnCdS, NiO and ZnO layers have been used as electron/hole transport layer (ETL/HTL) and transparent conductive oxide (TCO) layer, respectively. SCAPS-1D simulation software was used to evaluate the performance of the modelled multijunction CdTe solar cell. This software is capable of analyzing the efficiency with different parameters of cadmium telluride solar cell. The impact of thickness, carrier concentration, defect density of the CdTe, and ZnCdS/ CdTe interface defect density on the solar cell performance was also investigated. The optimized solar cell demonstrated a maximum power conversion efficiency (PCE) of 26.3 % with open circuit voltage ( $V_{OC}$ ) of 1.095 V, short circuit current density ( $J_{SC}$ ) of 27.22 mA/cm<sup>2</sup> and FF of 88.14 % that shows huge promise in low-cost solar energy harvesting.

**Keywords:** electron/hole transport layer, transparent conductive oxide, SCAPS-1D, solar cell

**Received:** 16 February 2021

**Revised:** 25 February 2021

**Accepted:** 19 April 2021

**Corresponding Author:** Dr. Javad Hasanzadeh

**Citation:** E. Amoupour, J. Hasanzadeh, A. Abdolazadeh-Ziabari, P. Azimi-Anaraki, "Improving the performance of cadmium telluride-based solar cells using ZnCdS/NiO and ZnO compounds for ETL/HTL and TCO layers", Journal of Intelligent Procedures in Electrical Technology, vol. 12, no. 48, pp. 61-70, March 2022 (in Persian).

20.1001.1.23223871.1400.12.48.4.4

مقاله پژوهشی

## ارتقاء عملکرد سلول خورشیدی مبتنی بر کادمیوم تلوراید با استفاده از ترکیبات ZnO و ZnCdS/NiO برای لایه‌های ETL/HTL و TCO

ابراهیم عموپور<sup>۱</sup>، دانشجوی دکتری، جواد حسن‌زاده<sup>۱</sup>، استادیار، علی عبدالله‌زاده ضیابری<sup>۲</sup>، استادیار، پیمان عظیمی انارکی<sup>۱</sup>، استادیار

۱- گروه فیزیک- واحد تاکستان، دانشگاه آزاد اسلامی، تاکستان، ایران

۲- آزمایشگاه تحقیقاتی نانو- واحد لاهیجان، دانشگاه آزاد اسلامی، لاهیجان، ایران

ebiamoupour@yahoo.com, javadhasanzadeh649@gmail.com, peyphysics2004@yahoo.co.uk, ali\_abdolahzadeh@liau.ac.ir

**چکیده:** سلول خورشیدی کادمیوم تلوراید (CdTe) به دلیل کارایی بالا، هزینه کم و پایداری بالا شناخته شده است. در این مقاله، شبیه‌سازی سلول خورشیدی مبتنی بر کادمیوم تلوراید (ZnO/ZnCdS/CdTe/NiO/Al) ارائه شده است. لایه‌های ZnCdS، NiO و ZnO به ترتیب به عنوان لایه‌های ترابردکننده الکترون/حفره (ETL/HTL) و اکسید رسانای شفاف (TCO) استفاده شده‌اند. برای ارزیابی عملکرد سلول خورشیدی چند پیوندی کادمیوم تلوراید از نرم‌افزار شبیه‌سازی SCAPS-1D استفاده شد. این نرم‌افزار قادر به تجزیه و تحلیل کارایی با پارامترهای مختلف سلول خورشیدی کادمیوم تلوراید است. تأثیر ضخامت لایه‌ها، چگالی حامل‌ها، چگالی نقایص و چگالی نقایص پیوندگاه ZnCdS/CdTe بر عملکرد سلول خورشیدی نیز بررسی شد. سلول خورشیدی بهینه‌سازی شده با ولتاژ مدار باز (Voc) ۱/۰۹۵ ولت، چگالی جریان اتصال کوتاه (Jsc) ۲۷/۲۲ میلی-آمپر بر سانتی‌متر مربع و ضریب پری (FF) ۸۸/۱۴ درصد و بیشینه بازده تبدیل انرژی (PCE) ۲۶/۳ درصد را نشان داد که امیدواری بسیار بالایی را در استحصال انرژی خورشیدی نشان می‌دهد.

**کلمات کلیدی:** اکسید رسانای شفاف، سلول خورشیدی کادمیوم تلوراید، سلول خورشیدی، لایه‌های ترابردکننده الکترون/حفره

تاریخ ارسال مقاله: ۱۳۹۹/۱۱/۲۷

تاریخ بازنگری مقاله: ۱۳۹۹/۱۲/۶

تاریخ پذیرش مقاله: ۱۴۰۰/۱/۳۰

نام نویسنده‌ی مسئول: دکتر جواد حسن‌زاده کلاشمی

نشانی نویسنده‌ی مسئول: تاکستان- کیلومتر ۵ جاده همدان- دانشکده علوم- دانشگاه آزاد اسلامی واحد تاکستان

## ۱- مقدمه

امروزه، به دلیل افزایش جمعیت، صنعتی شدن و استفاده گسترده از ابزار دیجیتال تقریباً در هر بخش از زندگی روزمره، تقاضای جهانی انرژی به طرز چشم‌گیری در حال رشد است. سوخت‌های فسیلی منبع اصلی انرژی هستند. مقدار زیادی گاز دی‌اکسید کربن به دلیل احتراق سوخت‌های فسیلی تولید می‌شود. علاوه بر این، این سوخت‌ها منبع پایدار انرژی نیستند و به زودی به اتمام خواهند رسید. بهترین راه حل این چالش روی آوری به‌سوی چشمه‌های انرژی تجدیدپذیر سبز است. سلول‌های خورشیدی می‌توانند جایگزین مناسب سوخت‌های فسیلی باشند. سلول‌های خورشیدی بسیار کارآمد مبتنی بر سیلیکون هستند که با استفاده از تکنیک‌های بسیار پیچیده و پرهزینه ساخته می‌شوند. اخیراً، بسیاری از محققان توجه خود را به سلول‌های خورشیدی پروسکایت و پلیمر بسیار کارآمد معطوف کرده‌اند [۲،۱]. با این حال، سلول‌های خورشیدی پروسکایت<sup>۱</sup> و پلیمر<sup>۲</sup> از مشکل بی‌ثباتی رنج می‌برند که به‌کارگیری طولانی مدت آنها را محدود می‌کند [۳]. از این‌رو، سلول‌های خورشیدی پیوند نامتجانس غیرآلی لایه نازک پایدار<sup>۳</sup> می‌توانند گزینه مناسبی برای سلول‌های خورشیدی پروسکایت و پلیمر باشند. سلول‌های خورشیدی بر پایه کادمیوم تلوراید، مس، ایندیوم، گالیوم، سلناید (CIGS) و سلول‌های خورشیدی مبتنی بر سیلیکون آمورف موفق‌ترین سلول‌های خورشیدی لایه نازک هستند. هزینه فناوری CdTe ۴۰ درصد کمتر از سیلیکون آمورف و ۳۰٪ کمتر از CIGS است [۴]. بنابراین، با سلول‌های خورشیدی لایه نازک بر پایه CdTe، بیشینه نسبت، "بازدهی/هزینه"<sup>۴</sup> را می‌توان به‌دست آورد. برای یک سلول خورشیدی آزمایشگاهی CdS/CdTe بازدهی بالای ۲۲/۱ درصد گزارش شده است [۵]. CdTe یک نیمه‌رسانای نوع p با شکاف نواری مستقیم eV ۱/۴۹ است که به‌خوبی با طیف انرژی خورشیدی سازگاری دارد [۶]. ضریب جذب CdTe بسیار بالاست (نزدیک  $10^5 \text{ cm}^{-1}$ ) و می‌تواند بیش از ۹۹ درصد فوتون‌ها (با انرژی بالاتر از شکاف نواری) را جذب کند [۶]. از اتصال CdTe با CdS یک ساختار نامتجانس شکل می‌گیرد. سولفید کادمیوم CdS یک نیمه‌رسانای نوع n با شکاف نواری eV ۲/۴ است و می‌تواند به‌عنوان یک لایه پنجره در سلول‌های خورشیدی مبتنی بر CdTe استفاده شود [۷]. اگرچه شکاف نواری نسبتاً باریک CdS مانع از جذب بخش عمده‌ای از فوتون‌های با طول موج کوتاه می‌شود. در این مقاله، یکی از راه‌حل‌های ممکن شامل به‌کارگیری ترکیبی از سولفید روی ZnS با شکاف نواری پهن eV ۳/۷ همراه با CdS به‌صورت ZnCdS بررسی می‌شود. همچنین، عملکرد سلول وابستگی بسیاری به سد پتانسیل در فصل مشترک لایه جاذب و اتصال پشتی<sup>۵</sup> دارد. استفاده از لایه بافر اتصال پشتی با مقاومت کم و تابع کار<sup>۶</sup> بالا می‌تواند این سد انرژی را کاهش دهد. اخیراً، پژوهشگران بسیاری روی لایه بافر اتصال پشتی کار کرده‌اند [۴،۸]. اکسیدهای فلزات واسطه<sup>۷</sup> (TMO) با تابع کار بالا مانند NiO، MoO<sub>x</sub>، WO<sub>3</sub> و V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> در بسیاری از سلول‌های خورشیدی مبتنی بر CdTe به‌عنوان لایه تراپد کننده حفره<sup>۸</sup> HTL (لایه بافر اتصال پشتی) برای افزایش کارایی نتایج امید بخشی را نشان داده‌اند [۴]. از بین همه TMOها، NiO به دلیل تابع کار بالای حدود eV ۵ و شکاف نواری پهن eV ۳/۸-۳/۵ یک HTL بسیار امیدوار کننده است [۷]. از الکتروود شفاف نوری در قسمت جلوی سلول خورشیدی برای انتقال الکترون‌های تولید شده به وسیله نور به بار خارجی بهره برده می‌شود. به‌طور کلی، از اکسید ایندیوم آلاییده با قلع (ITO) یا از اکسید قلع آلاییده با فلور (FTO) به‌عنوان اکسید رسانای شفاف<sup>۹</sup> (TCO) در سلول خورشیدی استفاده می‌شود. ITO و FTO بسیار گران هستند و ITO از نبود پایداری رنج می‌برد. اکسید روی (ZnO) به دلیل شکاف نواری پهن eV ۳/۳۷، ویژگی‌های اپتیکی و الکتریکی ممتاز می‌تواند به‌عنوان گزینه مناسبی برای FTO و ITO استفاده شود [۴]. علاوه بر این، پارامترهای گوناگون فیزیکی مانند چگالی حامل‌ها، ضخامت و نقایص تراز عمیق لایه جاذب، لایه پنجره و HTL نقش مهمی در عملکرد سلول خورشیدی دارند ضخامت لایه جاذب بزرگ‌تر از طول انتشار حامل می‌تواند نرخ باز ترکیب را افزایش دهد، و ضخامت ناکافی باعث کاهش چگالی جریان نوری<sup>۱۰</sup> می‌شود. علاوه بر این، ولتاژ مدار باز سلول خورشیدی را می‌توان با چگالی حامل مناسب لایه جاذب افزایش داد. انتقال موثر الکترون‌ها از طریق لایه پنجره و حفره‌ها از طریق HTL به هم‌راستا شدن نواری<sup>۱۱</sup> مناسب این لایه‌ها با لایه جاذب ربط دارد. هم‌راستایی نواری لایه پنجره و HTL با لایه جاذب را می‌توان با چگالی آرایش<sup>۱۲</sup> کنترل کرد. در یک سلول خورشیدی واقعی، باز ترکیب غیر-تابشی به‌دلیل افزایش نقص عمیق در لایه جاذب افزایش می‌یابد. بنابراین، پارامترهای فیزیکی یاد شده برای توسعه سلول‌های خورشیدی با کارایی بالا باید بهینه شوند [۵]. در این تحقیق، یک ساختار ناهمگن جدید ZnO/ZnCdS/CdTe/NiO/Al سلول خورشیدی طراحی شده است.

تجزیه و تحلیل عددی سلول خورشیدی طراحی شده با استفاده از نرم افزار شبیه‌سازی رایانه ای SCAPS-1D انجام شده است. برای دستیابی به عملکرد مطلوب سلول خورشیدی، اثر پارامترهای مختلف فیزیکی ZnO، CdTe و NiO بررسی شده است.

## ۲- شبیه‌سازی

در این مقاله، از نرم افزار SCAPS-1D برای مدل‌سازی و شبیه‌سازی عددی سلول خورشیدی پیوند نامتجانس ZnO/ZnCdS /CdTe/NiO/Al استفاده می‌شود. مشخصه های C-f، C-V، J-V و بازدهی کوانتومی سلول خورشیدی را می‌توان به کمک این نرم‌افزار محاسبه نمود. این محاسبات بر پایه معادله‌های زیر صورت می‌گیرد:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{q}{\epsilon} [p(x) - n(x) + N_D - N_A + \rho_p - \rho_n] = 0 \quad (1)$$

$$\frac{1}{q} \frac{\partial J_p}{\partial x} = G_{op} - R(x) \quad (2)$$

$$\frac{1}{q} \frac{\partial J_n}{\partial x} = -G_{op} + R(x) \quad (3)$$

که  $\epsilon$  ثابت دی الکتریک،  $q$  بار الکترون،  $N_D$  و  $N_A$  چگالی یون‌های پذیرنده و بخشنده،  $\Psi$  پتانسیل الکترو استاتیکی،  $J_p$  چگالی جریان حفره‌ای،  $J_n$  چگالی جریان الکترونی،  $G_{op}$  آهنگ تولید حامل،  $R$  آهنگ باز ترکیب،  $p$  چگالی حفره،  $n$  چگالی الکترون آزاد،  $\rho_p$  و  $\rho_n$  نیز به ترتیب چگالی توزیع بار الکترون و حفره هستند. معادله‌های رانش-پخش<sup>۱۳</sup> [رابطه‌های (۴) و (۵)] مشخصه‌های تراپردی الکترون‌ها و حفره‌ها در ماده نیمه رسانا هستند.

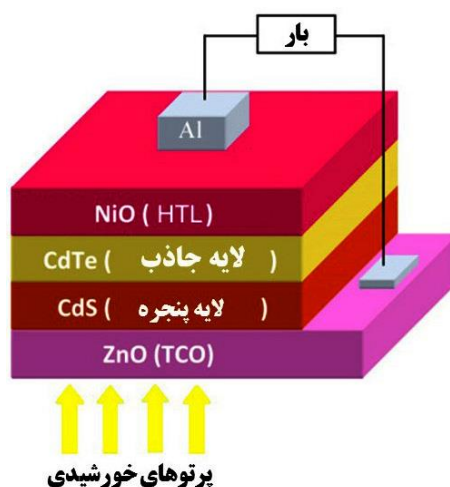
$$J_p = -\frac{\mu_p p}{q} \frac{\partial E_{Fp}}{\partial x} \quad (4)$$

$$J_n = -\frac{\mu_n n}{q} \frac{\partial E_{Fn}}{\partial x} \quad (5)$$

که  $\mu_p$  و  $\mu_n$  تحرک پذیری<sup>۱۴</sup> حفره و الکترون و  $E_{Fp}$  و  $E_{Fn}$  تراز فرمی حامل‌های  $p$  و  $n$  هستند.

## ۳- ساختار سلول خورشیدی و ویژگی های مواد

در شکل (۱) طرحی از سلول خورشیدی توصیف شده نشان داده شده است. همچنین پارامترهای فیزیکی مورد استفاده برای هر لایه در جدول (۱) آمده است. این مقادیر از منابع معتبر برداشت گردیده‌اند [۱۰-۱۲].



شکل (۱): نمای طرحوار سلول خورشیدی شبیه‌سازی شده.

Figure (1): Schematic view of the simulated solar cell

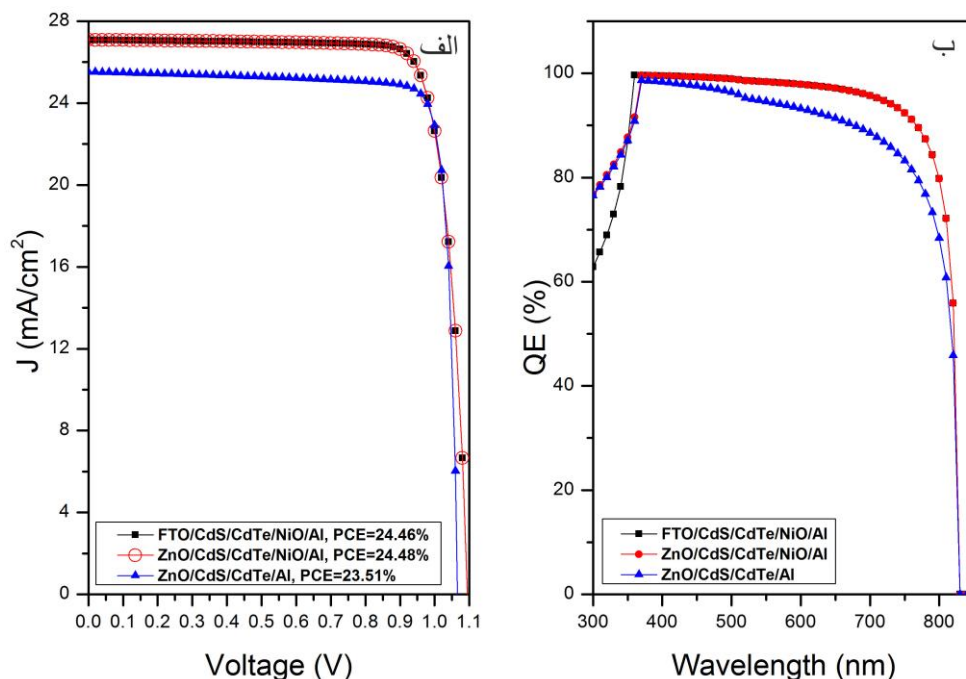
Table (1): Physical parameters used in the simulation of ZnO/CdS/CdTe/NiO/Al solar cell.

جدول (۱): پارامترهای فیزیکی استفاده شده در شبیه‌سازی سلول خورشیدی ZnO/CdS/CdTe/NiO/Al

NiO	CdTe	CdS	ZnO	FTO	پارامتر
۱۰۰	۱۰۰۰	۱۰۰	۱۰۰	۳۰۰	ضخامت (nm)
۳/۸	۱/۵	۲/۴	۳/۳۷	۳/۵	شکاف نواری (eV)
۱/۴۶	۴/۲۸	۴/۵	۴/۵	۴/۵	الکترون خواهی <sup>۱۵</sup> (eV)
۱۰	۱۰/۳	۱۰	۹	۱۰	ثابت دی الکتریک
$۲/۸ \times ۱۰^{۱۹}$	$۹/۲ \times ۱۰^{۱۷}$	$۲/۲ \times ۱۰^{۱۸}$	$۲/۲ \times ۱۰^{۱۸}$	$۲ \times ۱۰^{۱۸}$	$N_c$ (cm <sup>-3</sup> )
$۱ \times ۱۰^{۱۹}$	$۵/۲ \times ۱۰^{۱۸}$	$۱/۹ \times ۱۰^{۱۹}$	$۱/۸ \times ۱۰^{۱۹}$	$۱/۸ \times ۱۰^{۱۹}$	$N_v$ (cm <sup>-3</sup> )
۱۲/۲/۸	۳۲۰/۴۰	۳۵۰/۲۵	۱۰۰/۲۵	۱۰۰/۲۰	$\mu_n / \mu_p$ (cm <sup>2</sup> / Vs)
.	.	$۱۰^{۲۷}$	$۱۰^{۱۹}$	$۱۰^{۱۷}$	$N_D$ (cm <sup>-3</sup> )
$۱۰^{۱۸}$	$۱۰^{۱۷}$	.	.	.	$N_A$ (cm <sup>-3</sup> )
$۱۰^۷$	$۱۰^۷$	$۱۰^۷$	$۱۰^۷$	$۱۰^۷$	سرعت گرمایی الکترون/حفره (cm/s)
$۱۰^{۱۴}$	$۱۰^{۱۴}$	$۱۰^{۱۴}$	$۱۰^{۱۴}$	.	چگالی نقایص (cm <sup>-3</sup> )

#### ۴- نتایج و بحث

مشخصه J-V و بازدهی کوانتومی<sup>۱۶</sup> (QE) سلول‌های خورشیدی با ساختار ZnO/CdS/CdTe/Al و FTO/CdS/CdTe/NiO/Al در شکل (۲) نشان داده شده است.



شکل (۲): (الف) مشخصه J-V و (ب) بازدهی کوانتومی سلول‌های خورشیدی شبیه‌سازی شده

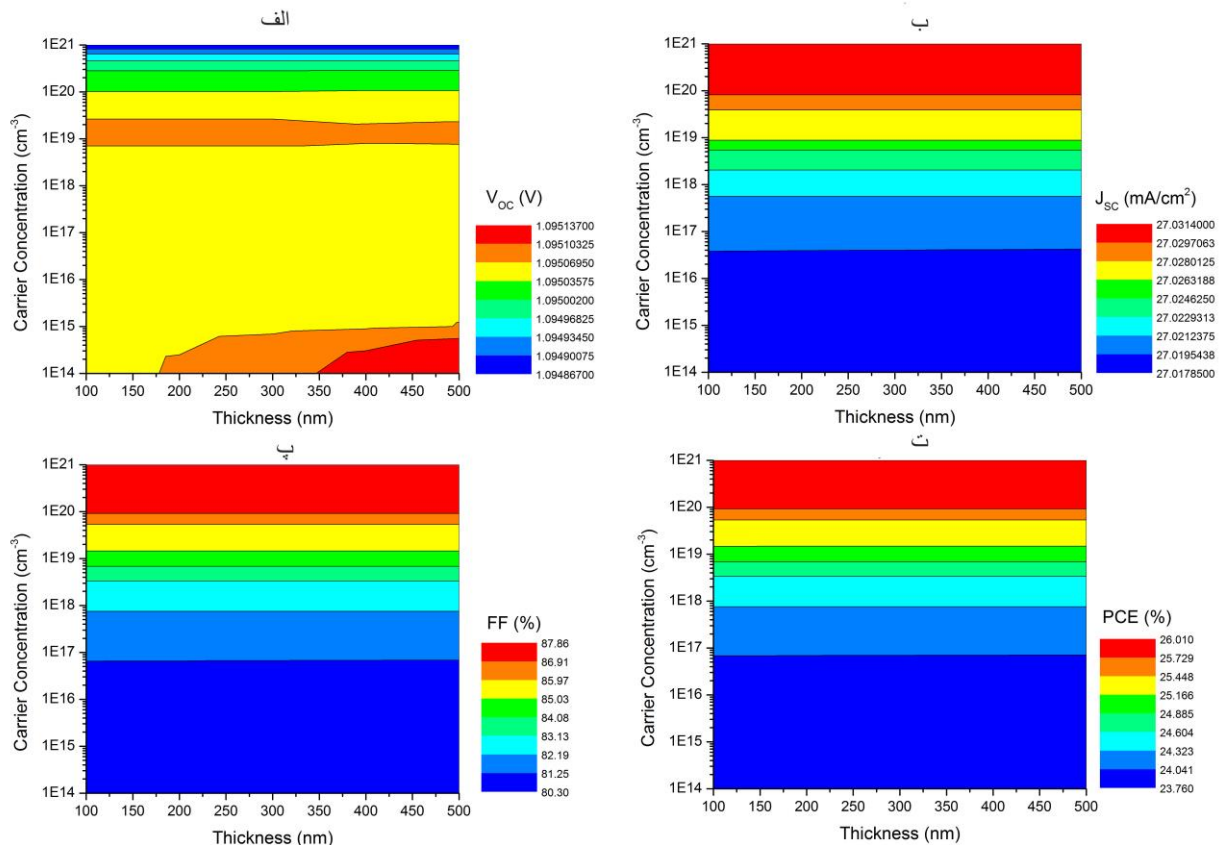
Figure (2): (a) J-V characteristic and (b) quantum efficiency of the simulated solar cells

مقادیر  $V_{oc}$ ,  $J_{sc}$ , FF و PCE به ترتیب برابر ۱/۰۹ ولت، ۲۷/۰۹ میلی-آمپر بر سانتیمتر مربع، ۸۲/۵۱ درصد و ۲۴/۴۸ درصد برای سلول خورشیدی با آرایش ZnO/CdS/CdTe/NiO/Al محاسبه گردید. این مقادیر برای سلول FTO/CdS/CdTe/NiO/Al برابر ۱/۰۹ ولت، ۲۷/۰۷ میلی-آمپر بر سانتیمتر مربع، ۸۲/۵۱ درصد و ۲۴/۴۶ درصد و برای سلول ZnO/CdS/CdTe/Al ۱/۰۶

ولت، ۲۵/۵۱ میلی-آمپر بر سانتیمتر مربع، ۸۶/۳۷ درصد و ۲۳/۵۱ درصد برآورد گردیدند. همان‌گونه که دیده می‌شود، پس از به‌کارگیری NiO به‌عنوان HTL در سلول‌های خورشیدی پایه CdS/CdTe، عملکرد قطعه بهبود یافت و این بهبود در سلول خورشیدی با TCO اکسید روی ZnO اندکی بیشتر بود. همچنین، از شکل (۲-ب) آشکار است که بازدهی کوانتومی با به-کارگیری ZnO در بازه ۳۰۰-۴۰۰ نانومتر به‌عنوان TCO افزایش یافته است. همچنین استفاده از NiO در بازه ۴۰۰-۸۵۰ نانومتر به‌عنوان HTL سبب افزایش قابل توجه بازدهی کوانتومی گردیده است که می‌تواند به کاهش بازترکیب سطحی در CdTe پس از به‌کارگیری NiO به‌عنوان HTL نسبت داده شود [۴].

#### ۴-۱- بررسی تاثیر چگالی حامل‌ها و ضخامت لایه NiO

با در نظر گرفتن نتایج امیدوارکننده سلول خورشیدی با چینش ZnO/CdS/CdTe/NiO/Al، فرآیند بهینه‌سازی این پیکربندی را با در نظر گرفتن پارامترهای تاثیرگذار پی می‌گیریم. شکل (۳) وابستگی عملکرد سلول خورشیدی شبیه‌سازی شده را به چگالی حامل‌ها و ضخامت لایه NiO به‌عنوان HTL نشان می‌دهد. همان‌گونه که از شکل (۳-الف) دیده می‌شود، بازه تغییرات  $V_{oc}$  نسبت به چگالی حامل‌ها و ضخامت لایه NiO بسیار اندک و در محدوده ۰/۰۱ ولت است. اگر چه در همین محدوده، در ضخامت ۳۵۰-۵۰۰ نانومتر و چگالی حامل  $10^{14}$ - $10^{15} \text{ cm}^{-3}$  بیشترین مقادارهای ولتاژ مدار باز دیده می‌شود.



شکل (۳): وابستگی (الف)  $V_{oc}$ ، (ب)  $J_{sc}$ ، (پ) FF و (ت) PCE سلول‌های خورشیدی شبیه‌سازی شده به چگالی حامل‌ها و ضخامت لایه NiO به‌عنوان HTL

Figure (3): The dependency of (a)  $V_{oc}$ , (b)  $J_{sc}$ , (c) FF and (d) PCE of the simulated solar cells on the carriers concentration and thickness of NiO layer as HTL.

همچنین، شکل (۳-ب)، جریان اتصال کوتاه وابستگی محسوسی به ضخامت لایه NiO نشان نمی‌دهد و بازه تغییرات آن نسبت به چگالی حامل‌ها در حد ۰/۰۱ میلی-آمپر بر سانتی‌متر مربع است و با بیشتر شدن چگالی حامل‌ها افزایش می‌یابد. از شکل (۳-پ) دیده می‌شود که ضریب پری FF با افزایش چگالی حامل‌ها افزایش می‌یابد در حالی که به تغییرات ضخامت حساس

نیست. کاهش مقاومت سری با افزایش چگالی حامل‌ها می‌تواند دلیل این رفتار باشد. رابطه میان ضریب پری و مقاومت سری در سلول خورشیدی با رابطه زیر داده می‌شود [۱۳]:

$$FF = FF_{ref} \left( 1 - R_s \frac{I_{sc}}{V_{oc}} \right) \quad (6)$$

که در آن  $FF_{ref}$  ضریب پری مرجع سلول خورشیدی در مقاومت سری معین  $R_s$  است. همان‌گونه که از این رابطه آشکار است، با کاهش مقاومت سری، ضریب پری افزایش می‌یابد. بازدهی PCE رفتاری مشابه با FF نشان می‌دهد [شکل (۳-ت)]. بیشینه بازدهی ۲۶/۰۱ درصد به‌زای چگالی حامل‌های  $10^{21} \text{ cm}^{-3}$  مشاهده گردید.

#### ۲-۴- بررسی تاثیر چگالی حامل‌ها و ضخامت لایه ZnO به عنوان TCO

شکل (۴) وابستگی عملکرد سلول خورشیدی شبیه‌سازی شده را به چگالی حامل‌ها و ضخامت لایه ZnO به‌عنوان TCO نشان می‌دهد. از شکل (۴-الف) دیده می‌شود که ولتاژ مدار باز تغییرات ناچیزی را به تغییرات چگالی حامل‌ها و ضخامت لایه ZnO نشان می‌دهد. دامنه این تغییرات ۰/۰۰۰۱ ولت است و در این محدوده بیشترین مقدار  $V_{oc}$  به ضخامت بین ۱۰۰ نانومتر و  $150 \text{ nm}$  چگالی حامل‌های بین  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  تا  $10^{21} \text{ cm}^{-3}$  مربوط می‌شود. تغییرات  $J_{sc}$  با چگالی حامل‌ها و ضخامت لایه ZnO مشهودتر است. بیشینه مقادیر  $J_{sc}$  مربوط به ضخامت بین ۱۰۰ نانومتر و  $150 \text{ nm}$  چگالی حامل‌های بین  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  تا  $10^{21} \text{ cm}^{-3}$  است. افزایش چگالی حامل‌ها در ZnO می‌تواند سبب افزایش خمش نواری در پیوند ZnO/CdS گردد، که این امر می‌تواند سبب افزایش  $J_{sc}$  شود [۱۴]. رابطه میان تغییرات خمش نواری ( $\Delta V$ ) با چگالی حامل‌های برانگیخته شده با نور ( $n$ ) به صورت زیر داده می‌شود [۱۵]:

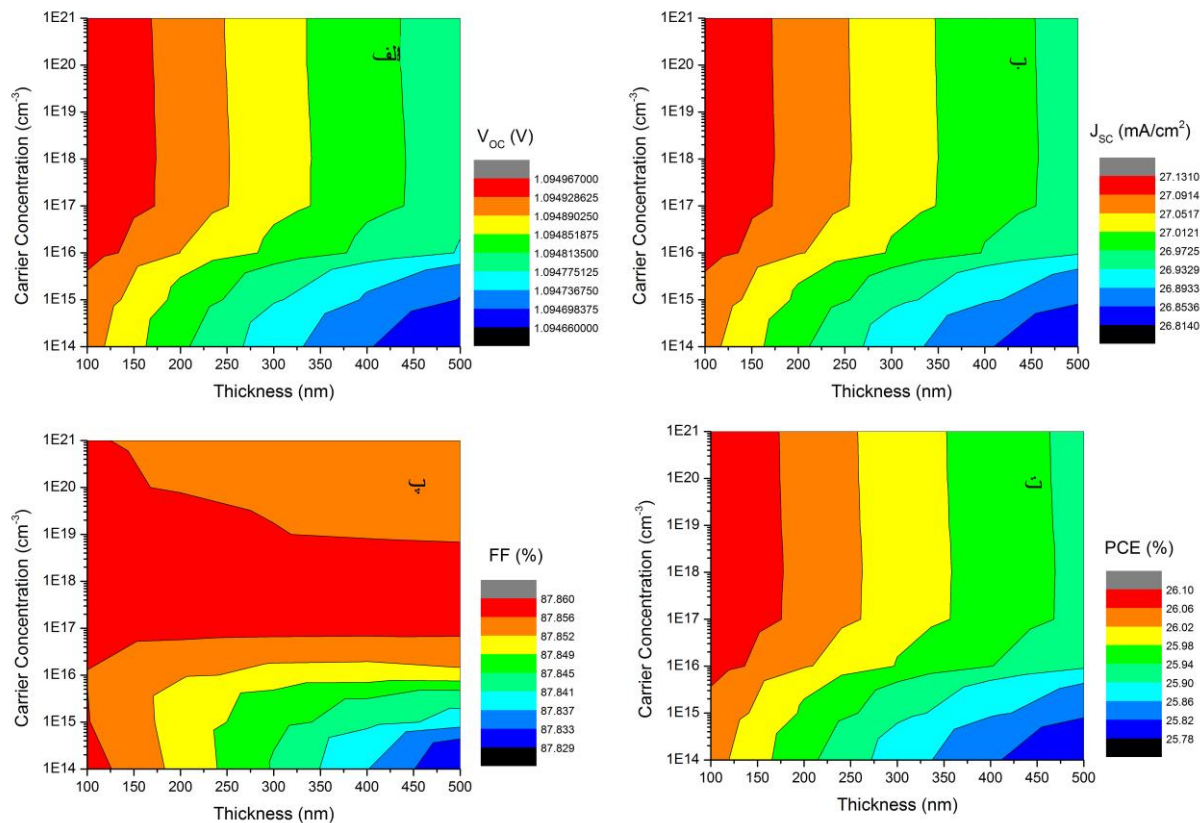
$$\Delta V \exp\left(\frac{\Delta V}{kT}\right) = n \frac{kT}{n_0} \exp\left(\frac{V_0}{kT}\right) \quad (7)$$

در رابطه بالا  $k$  ثابت بولتزمن،  $T$  دما،  $V_0$  خمش نواری تعادلی<sup>۱۷</sup> و  $n_0$  چگالی حامل‌های ناشی از آرایش هستند. همان‌گونه که از رابطه (۷) روشن است، تغییرات خمش نواری به‌طور سرراست با چگالی حامل‌های برانگیخته شده با فوتون متناسب است. شکل (۴-پ) تغییرات FF را با چگالی حامل‌ها و ضخامت لایه ZnO نمایش می‌دهد. ضخامت‌های پایین‌تر از ۲۰۰ نانومتر و چگالی حامل‌های بالاتر از  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  بالاترین مقدار FF را نشان می‌دهند. ضخامت‌های پایین‌تر هم ارز با مقاومت سری کوچک‌تر در قطعه و در نتیجه بالاتر بودن ضریب پری هستند. در نهایت سلول خورشیدی با ضخامت ۱۰۰ نانومتر و چگالی حامل  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  بالاترین بازدهی برابر ۲۶/۱ درصد را نشان داد.

#### ۳-۴- بررسی استفاده از لایه $Zn_xCd_{1-x}S$ با مقادیر گوناگون $x$ به‌عنوان ETL

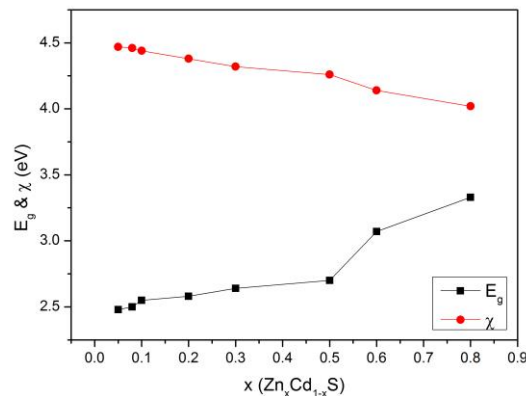
شکل (۵) تغییرات گاف نواری  $E_g$  و الکترون خواهی  $\chi$  ترکیب  $Zn_xCd_{1-x}S$  را نسبت به  $x$  نشان می‌دهد. مقادیر مربوطه از منابع معتبر برداشت شده‌اند [۱۶-۱۸]. همان‌گونه که دیده می‌شود گاف نواری با افزایش درصد Zn پهن تر می‌شود و الکترون خواهی کاهش می‌یابد. در ادامه به منظور بررسی تغییرات پارامترهای خروجی سلول خورشیدی، شبیه‌سازی‌ها با ثابت نگه داشتن دیگر پارامترهای بخش قبل با تغییر مقادیر  $x$  انجام شد و نتایج آن در شکل (۶) نشان داده شد. آن‌گونه که مشاهده می‌شود بازه تغییرات  $V_{oc}$ ،  $J_{sc}$  و FF به ترتیب ۰/۰۰۱ V،  $0.1 \text{ mA/cm}^2$  و ۰/۱ درصد هستند. بهینه بازدهی ۲۴/۵۳ درصد به‌زای  $x = 0.6$  به دست آمد. این مقدار نسبت به حالتی که از CdS به عنوان ETL استفاده شده بود ۰/۱۲ درصد افزایش نشان می‌دهد. در گام بعدی با در نظر گرفتن مقادیر بهینه به دست آمده از بخش‌های پیشین، اثر تغییر چگالی حامل‌ها و ضخامت لایه  $Zn_xCd_{1-x}S$  به عنوان ETL را بررسی می‌کنیم.

شکل (۶) مقادیر محاسبه شده پارامترهای خروجی سلول خورشیدی شبیه‌سازی شده را بر حسب  $x$  نمایش می‌دهد.



شکل (۴): وابستگی (الف)  $V_{oc}$ ، (ب)  $J_{sc}$ ، (پ) FF و (ت) PCE سلول‌های خورشیدی شبیه‌سازی شده به چگالی حامل‌ها و ضخامت لایه ZnO به عنوان TCO.

Figure (4): The dependency of (a)  $V_{oc}$ , (b)  $J_{sc}$ , (c) FF and (d) PCE of the simulated solar cells on the carriers concentration and thickness of ZnO layer as TCO.

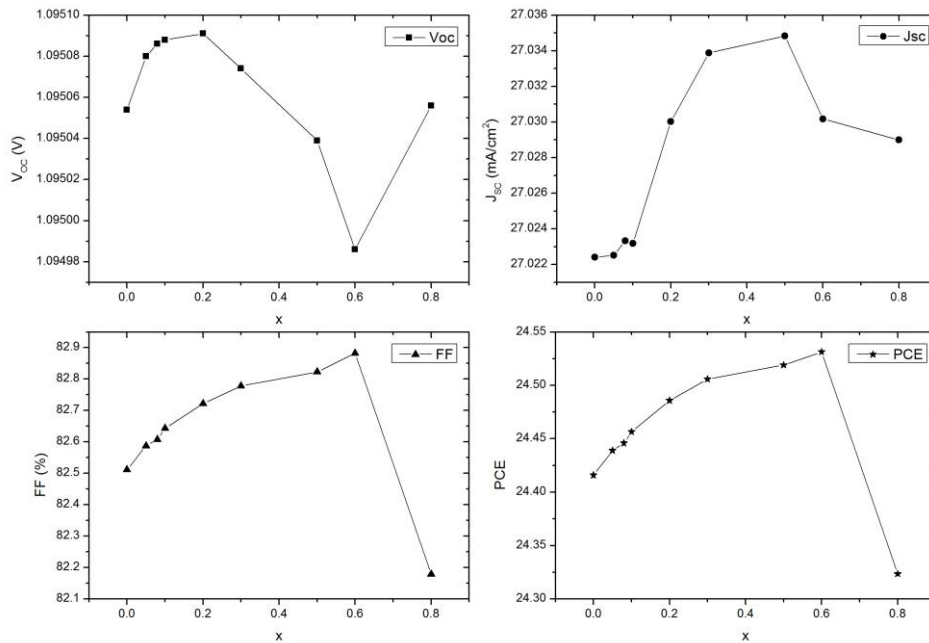


شکل (۵): تغییرات گاف نواری و الکترون خواهی  $Zn_xCd_{1-x}S$  بر حسب  $x$ .  
 Figure (5): Variation of bandgap and electron affinity of  $Zn_xCd_{1-x}S$  as a function of  $x$ .

#### ۴-۴- بررسی تاثیر چگالی حامل‌ها و ضخامت لایه $Zn_xCd_{1-x}S$ به عنوان ETL

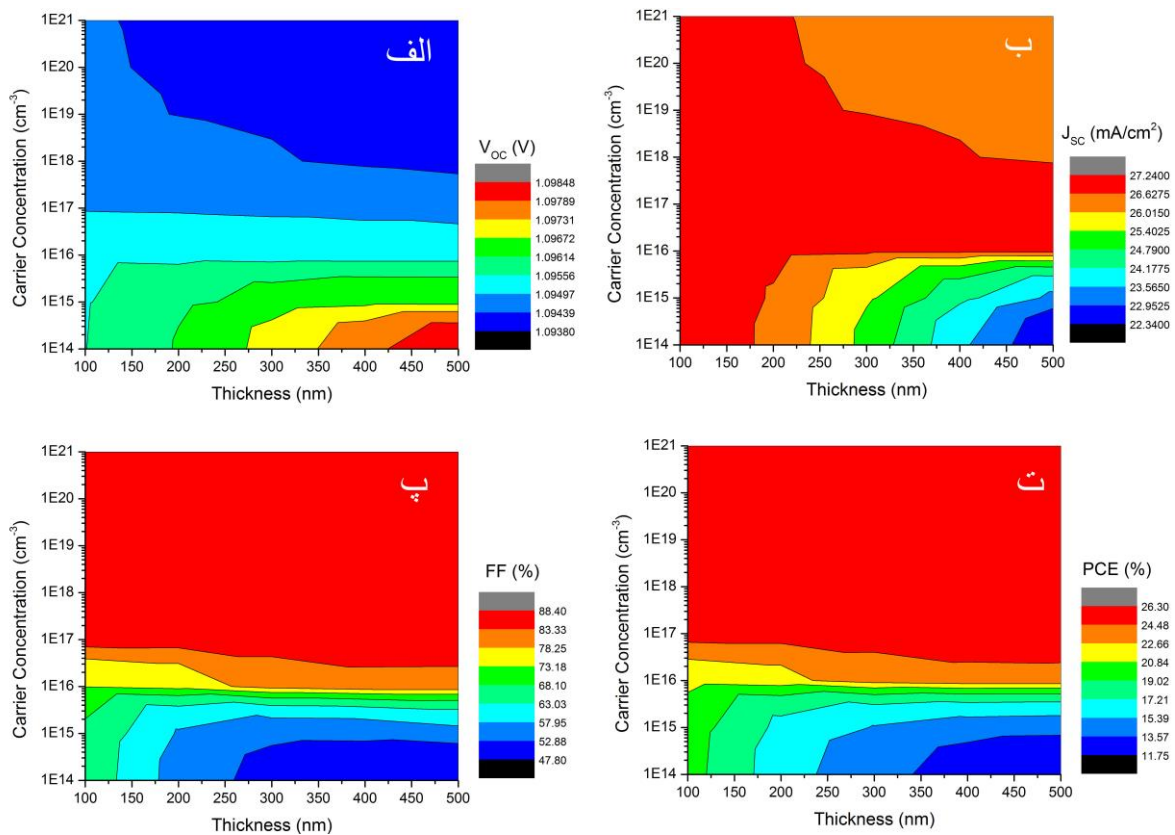
در این بخش با در نظر گرفتن نتایج امیدوارکننده استفاده از  $Zn_{0.6}Cd_{0.4}S$  به عنوان ETL، با انجام محاسبات، مقادیر بهینه ضخامت و چگالی حامل‌ها را برای این لایه به دست می‌آوریم.





شکل (۶): تغییرات ولتاژ مدارباز، چگالی جریان اتصال کوتاه، ضریب پری و بازدهی سلول خورشیدی با جاذب CdTe و لایه  $Zn_xCd_{1-x}S$  به عنوان ETM بر حسب  $x$ .

Figure (6): Variation of open circuit voltage, short circuit current density, fill factor and efficiency of the solar cell with CdTe as the absorber and  $Zn_xCd_{1-x}S$  as ETM as a function of  $x$ .



شکل (۷): تغییرات (الف) ولتاژ مدارباز، (ب) چگالی جریان اتصال کوتاه، (پ) ضریب پری و (ت) بازدهی سلول خورشیدی با جاذب CdTe و لایه  $Zn_xCd_{1-x}S$  به عنوان ETM به ازای  $x=0.6$  به صورت تابعی از ضخامت لایه و چگالی حامل ها

Figure (7): Variation of open circuit voltage, short circuit current density, fill factor and efficiency of the solar cell with CdTe as the absorber and  $Zn_xCd_{1-x}S$  as ETM for  $x=0.6$  as a function of thickness and carrier's concentrations of the layers

از شکل (۷-الف) آشکارا روشن است که محدوده تغییرات  $V_{oc}$  در حد  $0.01$  ولت بوده و قابل توجه نیست اگرچه در همین محدوده باریک بیشترین مقادیر به چگالی حامل‌های بین  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$  و  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$  و ضخامت بین  $425$  نانومتر تا  $500$  نانومتر مربوط می‌شود. از شکل (۷-ب) دیده می‌شود که برای چگالی حامل‌های پایین‌تر از  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  با افزایش ضخامت،  $J_{sc}$  به شدت کاهش می‌یابد. علت این امر می‌تواند به افزایش بازترکیب حامل‌ها در نتیجه افزایش مسافت آزاد میانگین نسبت داده شود [۱۷]. بیشینه  $J_{sc}$  برای ضخامت  $100$  نانومتر و در چگالی حامل‌های  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  به دست آمد. تغییرات FF را می‌توان به دو ناحیه پایین‌تر از چگالی حامل‌های  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  و بالاتر از آن بخش نمود. در ناحیه اول دیده می‌شود با افزایش ضخامت ضریب پری کاهش قابل توجهی را به‌ویژه برای چگالی حامل‌های پایین‌تر تجربه می‌کند و به محدوده  $47$  درصد نزدیک می‌شود. این کاهش شدید ارتباط تنگاتنگی با افزایش مقاومت سری قطعه در نتیجه افزایش طول لایه تراپردکننده الکترون دارد. هرچند که این نقیصه با تزریق فراوان حامل‌های بار در ناحیه دوم تا حد بسیاری برطرف گردیده و ضریب پری مستقل از تغییر ضخامت به نزدیک  $89$  درصد هم رسیده است. در روندی همسان با ضریب پری، بازدهی قطعه نیز برای نواحی بالاتر از  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  چگالی حامل‌ها، مستقل از ضخامت مقادیر نسبتاً بالایی را نشان می‌دهد. بیشینه PCE محاسبه شده برابر  $26/3$  درصد که بیشترین مقدار بدست آمده در این پژوهش به‌شمار می‌رود، به‌ازای ضخامت  $100$  نانومتر و در چگالی حامل‌های  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  به دست آمد.

### ۵- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، با انجام محاسبه‌ها و شبیه‌سازی، نشان داده شد که اکسید نیکل NiO گزینه‌ای امیدبخش برای لایه تراپرد کننده حفره در سلول‌های خورشیدی با جاذب CdTe است. همچنین اکسید روی ZnO می‌تواند جایگزینی مناسب و ارزان و غیر-سمی برای لایه‌های ITO و FTO که به‌طور معمول برای تراپرد الکترون در سلول‌های یاد شده مورد استفاده قرار می‌گیرند باشد. در هر مورد از شبیه‌سازی‌های انجام شده، بهینه مقدار ضخامت و چگالی حامل‌های مربوط به هر لایه محاسبه گردید. همچنین، برای حل مشکل پهنای گاف نواری باریک سولفید کادمیوم که به‌طور سنتی به‌عنوان لایه تراپردکننده الکترون در این گونه از سلول‌های خورشیدی مورد استفاده قرار می‌گیرد، از لایه ترکیب سه گانه  $Zn_xCd_{1-x}S$  استفاده شد. برای این کار، نخست مقدار بهینه نسبت  $x$  به دست آمد و در گام بعدی دو پارامتر ضخامت و چگالی حامل‌های این لایه بهینه‌سازی گردید. در نهایت برای سلول خورشیدی CdTe شبیه‌سازی شده بازدهی  $26/3$  درصد به‌عنوان بیشینه مقدار محاسبه شد.

### References

#### مراجع

- [1] J. Huang, S. Xiang, J. Yu, C.-Zhi Li, "Highly efficient prismatic perovskite solar cells", *Energy and Environmental Science*, vol. 12, no. 3, pp. 929-937, Nov. 2019 (doi: 10.1039/C8EE02575D).
- [2] Y. Wang, Q. Fan, X. Guo, W. Li, B. Guo, W. Su, X. Ou, M. Zhang, "High-performance nonfullerene polymer solar cells based on a fluorinated wide bandgap copolymer with a high open-circuit voltage of 1.04 V", *Journal of Materials Chemistry A*, vol. 5, no. 42, pp. 22180-22185, Sept. 2017 (doi: 10.1039/C7TA07785H).
- [3] Z. Yi, N.H. Ladi, X. Shai, H. Li, Y. Shen, M. Wang, "Will organic-inorganic hybrid halide lead perovskites be eliminated from optoelectronic applications?" *Nanoscale Advances*, vol. 1, pp. 1276-1289, Jan. 2019 (doi: 10.1039/C8NA00416A).
- [4] S. Ahmmed, A. Aktar, M.F. Rahman, J. Hossain, A.B.M. Ismail, "A numerical simulation of high efficiency CdS/CdTe solar cell using NiO HTL and ZnO TCO", *Optik*, vol. 223, Article Number: 165625, Dec. 2020 (doi: 10.1016/j.ijleo.2020.165625).
- [5] L.I. Nykyruy, R.S. Yavorskyi, Z.R. Zapukhlyak, G. Wisz, P. Potera, "Evaluation of CdS/CdTe thin film solar cells: SCAPS thickness simulation and analysis of optical properties", *Optical Materials (Amst)*, vol. 92, pp. 319-329, June 2019 (doi: 10.1016/j.optmat.2019.04.029).
- [6] S. Du, L. Zhu, W. Li, J. Zhang, L. Wu, W. Wang, "Bilayered ZnTe/Cu<sub>1.4</sub>Te alloy thin films as a back contact for CdTe solar cells", *Solar Energy*, vol. 185, pp. 262-269, June 2019 (doi: 10.1016/j.solener.2019.04.052).
- [7] J. Qi, W. Liu, C. Biswas, G. Zhang, L. Sun, Z. Wang, X. Hu, Y. Zhang, "Enhanced power conversion efficiency of CdS quantum dot sensitized solar cells with ZnO nanowire arrays as the photoanodes", *Optics Communications*, vol. 349, pp. 198-202, Aug. 2015 (doi: 10.1016/j.optcom.2015.03.060).

- [8] J. Liu, X. Liu, K. Yang, S. He, H. Lu, B. Li, G. Zeng, J. Zhang, W. Li, L. Wu, L. Feng, "Preparation and characterization of pulsed laser deposited  $Sb_2Te_3$  back contact for CdTe thin film solar cell", *Applied Surface Science*, vol. 453, pp. 126–131, Sept. 2018 (doi: 10.1016/j.apsusc.2018.05.075).
- [9] S. Ahmmed, A. Aktar, J. Hossain, A.B.M. Ismail, "Enhancing the open circuit voltage of the SnS based heterojunction solar cell using NiO HTL", *Solar Energy*, vol. 207, pp. 693–702, Sept. 2020 (doi: 10.1016/j.solener.2020.07.003).
- [10] A. Kuddus, M.F. Rahman, S. Ahmmed, J. Hossain, A.B.M. Ismail, "Role of facile synthesized  $V_2O_5$  as hole transport layer for CdS/CdTe heterojunction solar cell: validation of simulation using experimental data", *Superlattices Microstruct.*, vol. 132, Article Number: 106168, Aug. 2019 (doi: 10.1016/j.spmi.2019.106168).
- [11] S. Boudour, I. Bouchama, M. Hadjab, S. Laidoudi, "Optimization of defected ZnO/Si/Cu<sub>2</sub>O heterostructure solar cell", *Optical Materials (Amst)*, vol. 98, Article Number: 109433, Dec. 2019 (doi: 10.1016/j.optmat.2019.109433).
- [12] M.I. Hossain, F.H. Alharbi, N. Tabet, "Copper oxide as inorganic hole transport material for lead halide perovskite based solar cells", *Solar Energy*, vol. 120, pp. 370–380, Oct. 2015. (doi: 10.1016/j.solener.2015.07.040).
- [13] F.F. Muhammad, K. Sulaiman, "Photovoltaic performance of organic solar cells based on DH6T/PCBM thin film active layers", *Thin Solid Films*, vol. 519, pp. 5230–5233, May 2011. (doi: 10.1016/j.tsf.2011.01.1-65).
- [14] M. Yue, J. Su, P. Zhao, Z. Lin, J. Zhang, J. Chang, Y. Hao, "Optimizing the performance of CsPbI<sub>3</sub>-based perovskite solar cells via doping a ZnO electron transport layer coupled with interface engineering", *Nano-Micro Letters*, vol. 11, Article Number: 91, Oct. 2019 (doi: 10.1007/s40820-019-0320-y).
- [15] J.P. Long, V.M. Bermudez, "Band bending and photoemission-induced surface photovoltages on clean n- and p-GaN (0001) surfaces", *Physical Review B*, vol. 66, no. 12, pp. 121308, Sept. 2002 (doi: 10.1103/PhysRevB.66.121308).
- [16] O.M. Hussain, P.S. Reddy, B.S. Naidu, S. Uthanna, P.J. Reddy, "Characterization of thin film ZnCdS/CdTe Solar cells", *Semiconductor Science and Technology*, vol. 6, no. 7, Article Number: 690, 1991 (doi: 10.1088/0268-1242/6/7/023).
- [17] M.S. Hossain, K.S. Rahman, M.R. Karim, M.O. Aijaz, M.A. Dar, M.A. Shar, H. Misran, N. Amin, "Impact of CdTe thin film thickness in Zn<sub>x</sub>Cd<sub>1-x</sub>S/CdTe solar cell by RF sputtering", *Solar Energy*, vol. 180, pp. 559–566, 2019 (doi: 10.1016/j.solener.2019.01.019).
- [18] M. S. Hossain, N. Amin, T. Razykov, "Prospects of back contacts with back surface fields in high efficiency Zn<sub>x</sub>Cd<sub>1-x</sub>S/CdTe solar cells from numerical modelling", *Chalcogenide Letters*, vol. 8, no. 3, pp. 187–197, 2011.
- [19] S.M.S. Hasheminassab, M. Imanieh, A. Kamali, S.A. Emamghorashi, S. Hassanhasseini, "Increased light absorption in CIGS solar cells with plasmonic Ag nanostructures to increase efficiency", *Journal of Intelligent Procedures in Electrical Technology*, vol. 12, no. 45, pp. 35-49, Spring 2021 (in Persian).

زیر نویس ها

1. Perovskite solar cell
2. Polymer solar cell
3. Stable inorganic thin-film heterojunction solar cell
4. Efficiency/cost
5. Back contact
6. Work function
7. Transition metal oxides
8. Hole transport layer
9. Transparent conductive oxide
10. Photocurrent
11. Band alignment
12. Doping
13. Drift-diffusion
14. Mobility
15. Electron affinity
16. Quantum efficiency
17. Equilibrium band bending