

# مدل سازی چگالی حامل های بار در سلول خورشیدی نانوساختاری حالت جامد حساس شده با رنگدانه

تهمینه جلالی<sup>۱\*</sup>، مرتضی صادقی<sup>۱</sup> و شهریار عصفوری<sup>۲</sup>

<sup>۱</sup>گروه فیزیک دانشگاه خلیج فارس، بوشهر

<sup>۲</sup>گروه مهندسی شیمی، دانشکده نفت، گاز و پتروشیمی، دانشگاه خلیج فارس، بوشهر

**چکیده:** سلول های خورشیدی حساس شده با رنگدانه نسل جدیدتری از سلول های خورشیدی هستند که اگرچه بازده پایین تری نسبت به سلول های سیلیکونی دارند، اما پتانسیل بالایی برای بازده بیشتر دارند و چون از نظر اقتصادی صرفه بهتری دارند، اگر بازده و پایداری آنها افزایش یابد می توانند جایگزین سلول های خورشیدی سیلیکونی در بازار شوند. طراحی و توسعه روزافزون سلول های خورشیدی تنها محدود به کارهای تجربی و آزمایشگاهی نبوده، بلکه مدلسازی های عددی نیز در این امر دخیل بوده است. هدف از انجام این تحقیق طراحی و مدل سازی عددی سلول های خورشیدی حالت جامد حساس شده با رنگدانه بر پایه لایه نانوساختار نیم رسانا با گاف نواری عریض (دی-اکسیدتیتانیوم) و همچنین اکسید روی به عنوان انتقال دهنده الکترون و رنگدانه N719 به عنوان لایه جاذب و همچنین PEDOT:PSS و P3HT به عنوان ماده انتقال دهنده حفره است. در این پژوهش از نرم افزار کامسول برای طراحی سلول خورشیدی استفاده و مشخصه های جریان-ولتاژ و همچنین جذب اپتیکی سلول محاسبه شده است که با داده های تجربی مطابقت خوبی دارد.

**واژگان کلیدی:** چگالی حامل بار، نانوساختار، سلول خورشیدی حساس شده با رنگدانه، سلول خورشیدی حالت جامد حساس شده با رنگدانه

[jalali@pgu.ac.ir](mailto:jalali@pgu.ac.ir)

بکرل فیزیکدان فرانسوی در سال ۱۸۳۹ میلادی نسبت داده شده است [۴]. اما در سال ۱۸۸۳ اولین سلول خورشیدی نیم رسانا، توسط فریتس از نیم رسانای سلنیوم ساخته شد که با بازدهی ۱٪، نور را به جریان الکتریکی تبدیل می کرد. در سال ۱۹۴۶ راسل اهل سلول خورشیدی سیلیکونی را اختراع کرد و در سال ۱۹۵۴ نخستین سلول خورشیدی با استفاده از سیلیکون بلوری با قابلیت تبدیل واقعی انرژی خورشید به الکتریسیته با بازده ۵/۴٪ در آزمایشگاه بل ساخته شد. سلول های خورشیدی با فناوری لایه های نازک یا همان نسل دوم سلول های خورشیدی، بر اساس لایه نشانی نیم رساناها بر روی زیر لایه شیشه ای، فلزی یا پلیمری

## ۱- مقدمه

یکی از منابع انرژی تجدیدپذیر که مزایای بسیاری همچون ارزان بودن و سازگاری با محیط زیست دارد، استفاده از انرژی خورشید از طریق سلول های خورشیدی می باشد. برای درک بهتر مزایای انرژی خورشید، می توان این را در نظر داشت که با هر ساعت تابش خورشید بر زمین، انرژی مورد نیاز بشر به مدت یکسال فراهم می شود [۱-۳]. سلول های خورشیدی طبق فرآیند اثر فوتوولتائیک، تابش نور خورشید را به طور مستقیم به انرژی الکتریکی تبدیل می کنند. کشف پدیده فوتوولتائیک به ادموند

با ضخامت‌های در حدود نانومتر می‌باشند [۵-۷]. نسل دوم سلول‌های خورشیدی یکی از دستاوردهای بشر در سال‌های ۱۹۸۰ تا ۱۹۸۲ بوده است که اولین بار توسط بویینگ معرفی شدند. بازدهی سلول‌های خورشیدی لایه نازک طی این دو سال از ۷/۵٪ به ۱۰٪ رسید. سرانجام اولین سلول خورشیدی لایه نازک با نام تجاری  $\text{Cu (In, Ga)Se}_2$  در سال ۱۹۹۸ تولید شد [۸-۱۰]. سلول‌های خورشیدی مبتنی بر مواد آلی اولین بار در سال ۱۹۵۹ با ساختاری از یک ماده آلی ساندویچ شده بین دو الکتروود، توسط کالمن کشف شدند. در سال ۱۹۸۸ اولین سلول خورشیدی حساس شده با رنگدانه توسط مایکل گراتزل و همکاران ساخته شد. این سلول از یک نوع رنگدانه آلی طبیعی یا صنعتی در داخل استفاده می‌کند [۱۱-۱۳]. این نوع سلول‌ها نسل سوم سلول‌های خورشیدی نامیده شدند و شامل سلول‌های خورشیدی حساس شده به رنگدانه‌های طبیعی، سلول‌های خورشیدی پلیمری، سلول‌های خورشیدی نانو بلوری و سلول‌های خورشیدی هیبریدی می‌باشند. سلول‌های خورشیدی بر پایه‌ی پروسکایت هالید آلی-معدنی، به این دسته تعلق دارند. بازده سلول‌های خورشیدی این مواد در شرایط آزمایشگاهی از ۸٪ در سال ۲۰۰۹ به ۹٪ در سال ۲۰۱۴ و سپس به ۲۲/۱٪ در سال ۲۰۱۶ رسید [۱۴-۱۷]. اگر چه سلول‌های خورشیدی حساس شده با رنگدانه هزینه کمتر و روش ساخت آسان‌تری نسبت به سلول‌های سیلیکونی داشتند ولی با توجه به برخی از موانع قابلیت استفاده در بازار را نداشتند. در سال ۱۹۹۱ گرتزل و همکاران این مشکل را با به کار بردن فوتو الکتروود  $\text{TiO}_2$  نانو ساختاری متخلخل حل کردند. تحقیقات اولیه در سال‌های ۱۹۷۰ تا ۱۹۹۰ بر روی نیم‌رساناهای تک بلوری یا چندبلوری بود که جذب رنگدانه زیادی نداشته و میزان جمع‌آوری نور پایینی داشتند [۱۸]. در نتیجه بازده تبدیل فوتون به جریان در این سلولها بسیار کم بود. به منظور افزایش بازده جمع‌آوری نور در سلول‌های خورشیدی فوتو الکتروشیمیایی (LHE) دو رهیافت به کار گرفته شد. این رهیافت‌ها مبتنی بر افزایش سطح مؤثر الکتروود  $\text{TiO}_2$  و همچنین استفاده از رنگدانه‌های با بازده جذب نور وسیع تر بود. بنابراین بیشترین بهبود در عملکرد سلول خورشیدی حساس شده با رنگدانه با ساخت فوتوالکتروود، شامل لایه متخلخل نانو

ساختاری  $\text{TiO}_2$  که سطح زیادی را برای جذب مولکول‌های رنگدانه فراهم می‌کند و همین طور استفاده از رنگدانه حاوی کمپلکس‌های فلز روتنیوم که ناحیه نور مرئی و نزدیک مادون قرمز (۸۰۰-۴۰۰nm) را جذب می‌کند به وجود آمد [۱۹]. در سال ۲۰۱۴ روری ارگونگ<sup>۲</sup> و همکاران یک مدل‌سازی عددی از سلول‌های خورشیدی حساس شده با رنگدانه بر پایه  $\text{TiO}_2$  طراحی کردند که اجازه می‌دهد تا تئوری مشخصه‌ی جریان-ولتاژ ساخته شده، پارامترهای فوتوولتاییک آن تعیین شده و اطلاعات مهمی در خصوص عوامل اصلی مؤثر بر عملکرد سلول بدست آید. برای مدل‌سازی سلول خورشیدی یک معادله دیفرانسیل پیوستگی یک بعدی مطرح شده است که انتقال بار را در این ساختار توضیح می‌دهد. نتایج شبیه‌سازی اجازه می‌دهد تا قطر بهینه  $\text{TiO}_2$  مشخص شود [۲۰]. منگ نی<sup>۳</sup> و همکاران در سال ۲۰۰۶ یک مدل تئوری بر پایه اجماع دو مدل سد شوتکی<sup>۴</sup> و مدل پخش الکترون<sup>۵</sup> بسط داده شده را برای مشخص شدن تأثیر فصل مشترک  $\text{TCO/TiO}_2$  بر روی نمودار مشخصه جریان-ولتاژ در سلول‌های خورشیدی حساس شده با رنگدانه بررسی کردند. تئوری انتشار حرارتی<sup>۶</sup> به طور مناسب برای توجیه انتقال الکترون از فصل مشترک  $\text{TCO/TiO}_2$  به کار برده شده است. اگر ارتفاع سد شوتکی به کمترین مقدار خود کاهش یابد تغییرات بیشینه توان خروجی در سلول ناچیز خواهد بود. این مدل تئوری می‌تواند برای تسهیل در انتخاب ماده TCO مناسب در طراحی سلول برای پرهیز از مضرات تأثیر فصل مشترک  $\text{TCO/TiO}_2$  به کار برده شود [۲۱]. در سال ۲۰۱۱ یک مدل‌سازی ناپایا از سلول‌های خورشیدی که واکنش‌های الکتروشیمیایی درون سلول را توصیف می‌کند ارائه شد. متغیرهای بدست آمده، پتانسیل و غلظت یون‌های مختلف هستند که می‌توانند برای تعیین نمودار مشخصه جریان-ولتاژ سلول استفاده شوند. این معادلات در قالب دو بعدی با استفاده از نرم افزار کامسول<sup>۸</sup> حل شده‌اند. این مدل تأثیرات لبه در جایی که الکتروود مقابل از فوتو الکتروود بزرگتر است را مورد

<sup>2</sup> Ruri Agung

<sup>3</sup> Meng Ni

<sup>4</sup> Schottky barrier model

<sup>5</sup> Electron diffusion model

<sup>6</sup> Thermionic-emission

<sup>7</sup> Transparent Conductive Oxide

<sup>8</sup> Comsol software

<sup>1</sup> Light Harvesting Efficiency

بررسی قرار داده است. نشان داده شده است که هندسه سلول تأثیرات معناداری بر روی غلظت یون های مختلف در ناحیه فعال و زمان رسیدن به حالت پایا دارد [۲۲].

در سال ۲۰۲۰ بنجامین کی کوریر<sup>۱</sup> و همکاران شبیه سازی عددی یک مدل جدید سلول خورشیدی حالت جامد حساس شده با رنگدانه را ارائه کردند. سلول متشکل از لایه های حالت جامد با پیکربندی FTO/PC61BM/N719/CuSCN/Au با استفاده از نرم افزار شبیه ساز ظرفیت سلول خورشیدی یک بعدی (SCAPS-1D) مدل شد [۲۳]. سپس مطالعه عددی سلول خورشیدی حالت جامد حساس شده با رنگدانه (DSSC) با دید مس (I) به عنوان لایه انتقال حفره با استفاده از این نرم افزار شبیه سازی شد و چندین پارامتر کلیدی از قبیل ضخامت لایه، غلظت آلیش، دمای کار، و نقص رابط برای بدست آوردن بالاترین بازده مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت [۲۴].

در این تحقیق به بررسی عملکرد سلول خورشیدی نانوساختاری حالت جامد حساس شده با رنگدانه پرداخته می شود. در مرحله بعد، عملکرد این سلول ها و اجزای آنها مورد بررسی قرار می گیرد. سپس، معادلات حاکم بر مسئله مورد بررسی قرار می گیرد و چیدمان شبیه سازی در کامپوس معرفی می شود. در نهایت بحث و بررسی ساختارهای مورد مطالعه و مقایسه آنها ارائه می شوند. در انتها نتیجه گیری نهایی ارائه می شود.

بنابراین در ابتدا لازم است توضیحاتی در رابطه با نحوه عملکرد سلول خورشیدی حالت جامد حساس شده با رنگدانه آورده شود. در سلول های خورشیدی حالت جامد حساس شده با رنگدانه به جای استفاده از الکترولیت های مایع از مواد هادی حفره استفاده می شود. ماده هادی حفره از مولکول های کوچک با گاف انرژی بزرگ مانند اسپایرو-امتاد تشکیل شده است [۲۵]. از آنجایی که p3ht و pedot پلیمرهای نیمه هادی مانند در این نوع سلول های خورشیدی از الکترولیت های مایع خورنده استفاده نمی شود، فرایندهای بستن سلول ساده تر است و انتظار می رود این نوع سلول های خورشیدی از لحاظ تجاری گزینه مناسب تری باشند. تاکنون بیشترین مقدار ولتاژ مدار باز (بیشتر از ۱ ولت) از

سلول های خورشیدی حالت جامد حساس شده با رنگدانه با الکترولیت های بر پایه مولکول های کوچک حاصل شده است. در یک سلول خورشیدی حالت جامد حساس شده با رنگدانه انتقال حفره مستقیماً از رنگدانه اکسید شده صورت می گیرد. حفره از بالاترین تراز اشغال شده الکترولیت جامد عبور کرده و به الکترو د شمارنده منتقل می شود. احیای مجدد رنگدانه به طور معمول از مرتبه ۱۰ تا چند صد پیکو ثانیه است. این مقدار چندین برابر سریع تر از احیای مجدد رنگدانه در الکترولیت های بر پایه یدید-تری دید است. نرخ بالای باز ترکیب الکترون ها و نیز دشواری نفوذ الکترولیت جامد در الکترود های ضخیم سبب شده است که سلول خورشیدی حساس شده با رنگدانه بر پایه الکترولیت های جامد در ضخامت های چند میکرونی و نازک تر از حد معمول بهتر کار کنند. چالش بزرگتری که این نوع سلول ها با آن روبرو هستند این است که ضخامت کمتر فوتون در این سلول ها سبب می شود تا نور به طور کامل جذب نشود و این امر منجر به کاهش بازده کوانتومی داخلی و نیز چگالی جریان کمتر در مقایسه با سلول های خورشیدی حساس شده با رنگدانه با الکترولیت مایع می شود. عوامل زیادی وجود دارند که می توانند بر باز ترکیب الکترون های تراز هدایت اکسید تیتانیوم و حفره های موجود در الکترولیت های حفره تأثیر گذار باشند. نرخ باز ترکیب الکترون ها در الکترولیت های جامد معمولاً چند مرتبه سریع تر از الکترولیت های مایع بر پایه یدید-تری دید است. باز ترکیب در سلول های خورشیدی جامد با مهندسی سطح اکسید تیتانیوم و مخلوط کردن الکترولیت با افزودن به الکترولیت عموماً p های یونی اصلاح می شود. افزودن ناخالصی ها می تواند سبب افزایش ولتاژ مدار باز و ضریب پخشندگی الکترولیت شود. الکترولیت های جامد انتقال دهنده حفره معمولاً با روش های بر پایه حلال لایه نشانی می شوند. لایه های مورد استفاده در ساخت سلول های خورشیدی حالت جامد حساس شده با رنگدانه را می توان به پنج گروه شیشه رسانای شفاف، لایه انتقال دهنده الکترون، لایه جاذب نور، لایه انتقال دهنده حفره و الکترو د فلزی تقسیم بندی نمود که نحوه قرار گیری هر یک از آنها در شکل ۱ نشان داده شده است [۲۶-۲۹].

در سلول های خورشیدی پروسکایتی، معمولاً از شیشه پوشش داده شده با یک لایه نازک اکسیدی شفاف و رسانا (TCO) به عنوان زیر لایه استفاده می شود. این لایه دارای انرژی گاف نواری پهنی

<sup>1</sup> Benjamin K. Korir

<sup>2</sup> Spiro-OMeTAD



شکل ۱. لایه‌های سلول خورشیدی حالت جامد حساس شده با رنگدانه

می‌باشد تا فوتون‌های تابیده بدون جذب در این لایه به داخل سلول خورشیدی وارد شوند و به لایه فعال برسند [۳۱]. لایه انتقال دهنده الکترون یا ETL<sup>۱</sup> باید دارای تابع کار مناسب، هدایت بالا و نرخ بازترکیب پایین بر روی سطح باشد. ETL شامل لایه فشرده (سدی) و لایه مزومتخلخل  $TiO_2$  است. وظیفه لایه فشرده، پوشش دهی سطح  $FTO^2$  است تا مانع از بازگشت الکترون از  $FTO$  به لایه انتقال دهنده حفره و بازترکیب الکترون و حفره موجود در  $HTL^3$  شود. لایه مزومتخلخل  $TiO_2$  حاوی نانوذرات ۲۰ نانومتری است که مسیری برای ترابرد الکترون به TCO است. این لایه به دلیل سطح ویژه بالایی که دارد سبب می‌شود که ماده جذب کننده نور به میزان قابل توجهی روی این لایه قرار بگیرد [۳۲]. لایه جاذب نور متشکل از ماده آلی یا معدنی یا ترکیبی از آلی-معدنی است که باید انرژی گاف نواری مناسب داشته باشد تا فوتون‌های گسترده وسیعی از طیف خورشید را جذب کند. ضریب جذب نوری بالا، بازده کوانتومی بالا برای حامل‌های برانگیخته شده، طول نفوذ بیشتر حامل‌های بار و سرعت بازترکیب پایین از دیگر ویژگی‌های این لایه است. لایه بعدی، لایه انتقال دهنده حفره یا HTL است که بایستی تراز انرژی بالاترین اوربیتال مولکولی دارای الکترون مربوط به ماده انتقال دهنده حفره، با انرژی نوار ظرفیت پروسکایت تطابق داشته باشد. تحرک‌پذیری مناسب برای حفره و پایداری حرارتی و فوتوشیمیایی نیز از دیگر ویژگی‌های HTL است. ضخامت HTL را ۱۰۰-۲۰۰ نانومتر انتخاب می‌کنند تا مانع تماس مستقیم پروسکایت و الکتروود فلزی شود و در نتیجه بازترکیب بار را به حداقل برساند [۲۹].

بهترین و متداول‌ترین ماده مورد استفاده به عنوان HTL، اسپایرو-امتاد است. حلالیت، پتانسیل یونیزاسیون و شفاف بودن در محدوده طیف مرئی از ویژگی‌های این ترکیب پلیمری است که باعث می‌شود گزینه مناسبی باشد. از پلی‌تری‌آریل‌آمین<sup>۴</sup> و کمپلکس پلیمر پلی (۳ و ۴-اتیلن‌دی‌اکسی‌تیوفن) با پلی (استایرن سولفونات)<sup>۵</sup> نیز می‌توان به عنوان HTL استفاده کرد [۳۳]. پلی‌تری‌آریل‌آمین همچنین به عنوان الکتروولیت جامد در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی استفاده می‌شود. این ترکیب قابلیت انحلال در حلال‌های آلی از جمله کلروبنزن و تولوئن را دارد. امروزه ایده‌های جدید و روش‌های متنوعی به منظور ساخت سلول‌های خورشیدی با بازدهی بالا به کار گرفته شده و مورد توجه بسیاری از محققین است. کیفیت و خلوص مواد اولیه، روش‌های لایه نشانی مناسب، ضخامت لایه‌ها و استفاده از حلال‌های بدون آب از جمله مواردی هستند که در بدست آوردن بازده بالا و سایر نتایج مطلوب سلول‌های ساخته شده تأثیر بسزایی دارند [۳۴-۳۶]. آخرین لایه، معمولاً یک لایه فلزی با هدایت بالا و از جنس طلا یا نقره است. ضخامت این لایه معمولاً بیشتر از ۵۰ نانومتر است و گاهی اوقات برای دستیابی به اتصال بهتر یک لایه نقره بر روی طلا نشاند می‌شود [۳۲].

## ۲- معادلات حاکم و چیدمان شبیه‌سازی سلول خورشیدی حالت جامد حساس شده با رنگدانه

### ۲-۱- معادلات حاکم بر مسئله

هنگامی که برای تشکیل ساختار بلوری، الکترون‌ها به هم نزدیک می‌شوند، سطوح انرژی به صورت مجزا شکافته می‌شوند. بین این دو نوار یک فاصله‌ی انرژی به نام گاف نواری  $E_g$  وجود دارد، که پارامتری مهم در سلول‌های خورشیدی است. تعداد الکترون‌های نوار هدایت در واحد حجم را با  $n$  و تعداد حفره‌های نوار ظرفیت در واحد حجم را با  $p$  نمایش می‌دهند (معادلات ۱ و ۲).

$$n = N_c e^{\left(\frac{E_c - E_F}{kT}\right)} \quad (1)$$

$$p = N_v e^{\left(\frac{E_c - E_F}{kT}\right)} \quad (2)$$

<sup>۴</sup> PTTA

<sup>۵</sup> PSS:PEDOT

<sup>۱</sup> Electron Transport Layers

<sup>۲</sup> Fluorine-doped Tin Oxide

<sup>۳</sup> Hole Transport Layer

پدیده‌های جریان سوق، جریان پخش، تولید و بازترکیب به صورت همزمان صورت می‌گیرند. برای ارتباط بین این پدیده‌ها در یک بعد، افزایش خالص الکترون‌ها در واحد زمان در این حجم از جمع روی جریان خالص ورودی به آن و تولید حامل بدست می‌آید:

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} Adx = \left[ \frac{J_n(x)A}{-q} - \frac{J_n(x+dx)A}{-q} \right] + (G_n - R_n)Adx \quad (8)$$

که  $G_n$  و  $R_n$  به ترتیب آهنگ‌های تولید و بازترکیب در نظر گرفته شده‌اند. معادله پیوستگی برای الکترون‌ها در نیمرسانای نوع p عبارت است از:

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} = \frac{1}{q} \frac{\partial J_n}{\partial x} + (G_n - R_n) \quad (9)$$

که  $I_p$  چگالی جریان حفره و  $G_p$  و  $R_p$  به ترتیب سرعت تولید و بازترکیب حفره‌ها هستند. با جایگذاری عبارت جریان با معادله‌های مربوط به جریان سوق و جریان پخش، معادله پیوستگی به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} = n_p \mu_n \frac{\partial E}{\partial x} + \mu_n E \frac{\partial n_p}{\partial x} + D_n \frac{\partial^2 n_p}{\partial x^2} + G_n - \frac{n_p - n_{p0}}{\tau_n} \quad (10)$$

علاوه بر معادله پیوستگی، معادله‌ی پواسون نیز باید برقرار باشد، که به صورت زیر است:

$$\frac{d\varepsilon}{dx} = \frac{\rho_s}{\varepsilon_s} \quad (11)$$

که در آن  $\varepsilon_s$  ضریب گذردهی نارسانایی نیمرسانا و  $\rho_s$  چگالی بار فضایی است که از حاصل جمع جبری چگالی‌های حامل بار و تراکم ناخالصی یونیده به صورت زیر بدست می‌آید:

$$\rho_s = q(p - n + N_D^+ + N_A^-) \quad (12)$$

به ترتیب چگالی الکترون‌های تعادلی در طرف n و p می‌باشند. اختلاف پتانسیل کل الکترواستاتیکی بین طرف p و n مناطق خنثی در تعادل گرمایی را سد پتانسیل،  $V_{bi}$  می‌گویند و برابر است با:

$$V_{bi} = \psi_n - \psi_p = \frac{KT}{q} \ln \frac{N_A N_D}{n_i^2} = \frac{KT}{q} \ln \frac{n_{no} p_{po}}{n_i^2} = \frac{KT}{q} \ln \frac{n_{no}}{p_{po}} \quad (13)$$

که  $E_F$  انرژی سطح فرمی،  $K$  ثابت بولتزمن،  $T$  دمای مطلق و  $N_D$  و  $N_A$  چگالی مؤثر حالت‌های الکترون و حفره در نوار هدایت و ظرفیت هستند. زمانی که یک ولتاژ بایاس  $V_F$  با پایانه‌ی مثبت p و پایانه منفی n اعمال شده باشد، ولتاژ اعمالی پتانسیل الکترواستاتیکی را در سراسر ناحیه تهی کاهش می‌دهد. جریان سوق کاهش می‌یابد و انتشار الکترون‌ها و حفره‌ها به ترتیب از n به p و از p به n افزایش می‌یابد. وقتی یک ولتاژ بایاس معکوس  $V_R$  به پیوندگاه p-n اعمال شود، ولتاژ اعمال شده پتانسیل الکترواستاتیکی را در سراسر ناحیه تهی افزایش می‌دهد. بنابراین، جریان انتشار از بین می‌رود. مشخصه جریان ولتاژ اتصال p-n بدین صورت است:

$$I = J_0 e^{qV/KT} \quad (3)$$

جریان فوتوالکترون بستگی به کارایی نور خورشیدی فرودی، حمل و نقل حاملان بار و بازده مجموعه دارد. مجموع چگالی جریان ایجاد شده توسط میدان چگالی جریان سوق شناخته می‌شود که  $\sigma$  رسانندگی است و جریان سوق از رابطه‌ی زیر بدست می‌آید:

$$I = J_n + J_p = (nq\mu_n + pq\mu_p)E = \sigma E \quad (4)$$

زمانی که اختلاف فضایی میان غلظت الکترون‌ها در نمونه نیمرسانا وجود دارد، الکترون‌ها از ناحیه‌ای با غلظت بالاتر به ناحیه‌ای با غلظت پایین‌تر حرکت می‌کنند. این جریان، جریان پخش نامیده می‌شود. در صورتی که غلظت الکترون با شیب یک بعدی در نظر گرفته شود، الکترون‌ها از راست به چپ شارش می‌یابند و سرعت انتشار الکترون در واحد سطح عبارت است از:

$$F = -D_n \frac{dn}{dx} \quad (5)$$

که  $D_n$  ضریب پخش الکترون نامیده می‌شود. بنابراین جریان پخش الکترون از رابطه زیر بدست می‌آید:

$$I_n = qD_n \frac{dn}{dx} \quad (6)$$

زمانی که میدان الکتریکی و شیب غلظت معلوم باشند مجموع چگالی جریان الکترون به صورت زیر بدست می‌آید:

$$I_n = nq\mu_n E + qD_n \frac{dn}{dx} \quad (7)$$

<sup>1</sup> Built-in

جریان اتصال کوتاه قابل محاسبه می‌باشد و با رابطه (۲۰) بیان می‌شود و برای سلول ایده‌آل، ۱ می‌باشد:

$$FF = \frac{I_{mpp} \times V_{mpp}}{I_{sc} \times V_{oc}} \quad (20)$$

در رابطه بالا  $P_{MP} = I_{MP} \times V_{MP}$  است.

برای محاسبه بازدهی سلول خورشیدی از تعریف زیر استفاده می‌شود که  $P_{in}$  توان نور فرودی بر سلول است و در شرایط استاندارد تابش نور خورشید مقدار آن ۱۰۰ میلی وات بر سانتی متر مربع است:

$$PCE(\%) = \frac{P_{Max}}{P_{in}} = \frac{I_{MP} \times V_{MP}}{P_{in}} = FF \frac{I_{sc} \times V_{oc}}{P_{in}} \quad (21)$$

## ۲-۲- چیدمان شبیه‌سازی

کامسول برای شبیه‌سازی یک مدل جفت شده نوری-نیم‌رسانا دو مرحله‌ای استفاده می‌شود و نمودار جریان ولتاژ را ارائه می‌کند. مزیت شبیه‌سازی جفت شده این است که طراحی ۲ بعدی فوتوآند می‌تواند به طور مستقیم در مدل و اثرات تله گذاری نور گنجانده شود. علاوه بر این، شبکه‌های بدون ساختار در کامسول امکان مطالعه دامنه نسبتاً بزرگ (بیش از ۱۰ میکرومتر) در طول موج‌های مرئی را فراهم می‌کند. با توجه به دوره تناوب نانو ساختار، فضای شبیه‌سازی یک سلول واحد حاوی یک نانومیله واحد است. در مرحله اول، ماژول RF (حوزه فرکانس) برای مدل‌سازی پاسخ نوری در هر طول موج طیف خورشیدی (AM 1.5)، با تفکیک طیفی ۵ نانومتر استفاده می‌شود. پارامترهای ورودی برای مدل نوری، هندسه DSSC شامل ضخامت لایه  $TiO_2$ ، طول نانومیله ITO و فاصله و همچنین ضریب شکست اجزای مختلف است (شکل ۲).

ضخامت و ضریب شکست لایه  $TiO_2$  و لایه‌های دیگر، در جدول ۱ نشان داده شده است. از نتایج شبیه‌سازی نوری، می‌توان اثر فوتونیکی، حداکثر بازده و جذب لایه  $TiO_2$  فعال را مطالعه کرد. یک شرط مرزی پورت تعریف شده توسط کاربر برای راه اندازی یک موج صفحه با زاویه برخورد دلخواه، استفاده می‌شود.

که در آن از قانون بقای جرم استفاده می‌شود. از باز آرایش معادله بالا می‌توان دریافت:

$$n_{no} = n_{po} e^{\frac{qV_{bi}}{KT}} \quad (14)$$

وقتی بایاس مستقیم اعمال می‌شود، اختلاف پتانسیل الکترواستاتیکی به  $V_{bi} - V_F$  کاهش می‌یابد. اما وقتی بایاس وارون اعمال می‌شود، اختلاف پتانسیل الکترواستاتیکی به  $V_{bi} + V_F$  افزایش می‌یابد. بدین ترتیب معادله قبل به صورت زیر نشان داده می‌شود:

$$n_n = n_p e^{\frac{q(V_{bi}-V)}{KT}} \quad (15)$$

که در آن  $n_p$  و  $n_n$  به ترتیب چگالی‌های الکترون‌های غیرتعادلی در مرزهای ناحیه تهی در طرف n و p هستند. V برای بایاس مستقیم مثبت و برای بایاس وارون منفی می‌باشد. برای حالت تزریق پایین چگالی حامل اقلیت تزریق شده خیلی کوچک تر از چگالی حامل اکثریت است، بنابراین:  $n_n \cong n_{no}$ .

$$n_p = n_{po} e^{\frac{qV}{KT}} \quad (16)$$

این معادله چگالی حامل اقلیت در مرزها را نشان می‌دهد. این معادلات برای مشخصه‌های جریان-ولتاژ ایده‌آل مهمترین شرایط مرزی می‌باشند. بنابراین، جریان پخش عبارت خواهد بود از:

$$J_p(x_n) = -qD_p \frac{dp_n}{dx} = \frac{qD_p p_{no}}{L_p} (e^{\frac{qV}{KT}} - 1) \quad (17)$$

در معادله ۱۷  $L_p$  برابر با  $\sqrt{D_p \tau_p}$  و نشان دهنده طول پخش حفره‌ها در ناحیه n است. جریان کل در سرتاسر قطعه ثابت است و برای ناحیه p خنثی روابط زیر حاکم خواهند بود:

$$n_p - n_{po} = n_{po} (e^{\frac{qV}{KT}} - 1) e^{-\frac{(x+x_n)}{L_p}} \quad (18)$$

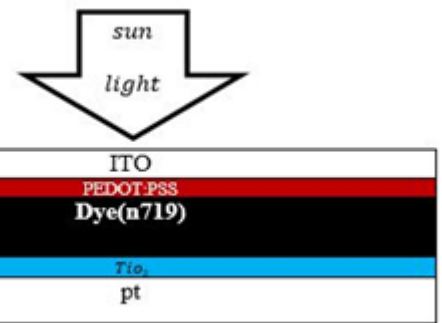
$$J = J_p(x_n) + J_n(-x_p) = J_s (e^{\frac{qV}{KT}} - 1) \quad (19)$$

فاکتور پرشدگی، معیاری از رفتار مستطیل گونه نمودار جریان-ولتاژ است. هر چقدر این فاکتور به یک نزدیک تر باشد نشان دهنده عملکرد بهتر سلول است. فاکتور پرشدگی به صورت نسبت توان خروجی بیشینه سلول به حاصل ضرب ولتاژ مدار باز و

لایه‌های ITO/PEDOT:PSS/N719/TiO<sub>2</sub>/Pt سلول ۲، لایه‌ی انتقال دهنده‌ی حفره از PEDOT:PSS به P3HT تغییر داده شد و لایه‌های کلی به صورت ITO/P3HT/N719/TiO<sub>2</sub>/Pt است. در سلول ۳ لایه‌ی انتقال دهنده‌ی الکترون از TiO<sub>2</sub> به ZnO تغییر داده شد و لایه‌های کلی به صورت ITO/PEDOT:PSS/N719/ZnO/Pt طراحی شد. در سلول ۴ نیز برای بررسی تأثیر تغییر ضخامت لایه‌ها بر عملکرد سلول ضخامت لایه‌ی رنگدانه به نصف کاهش یافته است.

### ۳- نتایج و بحث

در شکل ۲ مدل سلول‌های خورشیدی نمایش داده شده است. شبیه سازی در d مساوی ۲۰۰nm و ۳۰۰nm اجرا شد. مقادیر  $V$  و توان خروجی برای هر ضخامت فوتوآند و همچنین برای ضرایب جذب مختلف محاسبه شد. نمودارهای مربوطه رسم شد و کارایی سلول‌ها تعیین شد. شکل‌های ۳ و ۴ به ترتیب منحنی‌های توان و جریان-ولتاژ سلول‌های مدل شده از فوتوآند‌های ۲ بعدی ITO را نشان می‌دهند. مشاهده می‌شود که نانوساختار دو بعدی جریان نوری را در حدود ۲۰٪ افزایش می‌دهد. در سلول ۱ ولتاژ مدار باز ۱/۸۷ ولت و جریان اتصال کوتاه ۱۷/۳ میلی‌آمپر بر سانتی‌مترمربع گزارش شده که بیشترین جریان و ولتاژ را در بین هر چهار سلول دارد. در سلول ۲، لایه انتقال دهنده حفره از PEDOT:PSS به P3HT تغییر داده شد که ولتاژ مدار باز ۱/۰۵ ولت و جریان اتصال کوتاه ۱۲/۷۵ میلی‌آمپر بر سانتی‌مترمربع



شکل ۲. لایه‌های سلول طراحی شده و نور فرودی

جدول ۱. داده های ورودی برای هندسه مدل و ضریب شکست هر لایه

ماده	ضخامت [μm]	ضریب شکست
TiO <sub>2</sub>	۰/۰۵	۲/۶۱۴۲
ITO	۰/۳	۱/۸۲۷۱
Pt	۰/۳	۱/۳۴
PEDOT:PSS	۰/۰۵	۱/۵۸۰۶
TiO <sub>2</sub> +Dye(N719)	۰/۵	۲/۱۳

شرایط مرزی به صورت  $kF_x = emw.k0 * Nk_x$  در صفحات  $x$  و  $kF_y = emw.k0 * Nk_y$  در صفحات  $y$  تعریف می‌شوند. توان ورودی در هر طول موج با طیف خورشیدی AM 1.5 مطابقت دارد. برای جذب تمام امواج منعکس شده و ارسالی با جهات مختلف، از فرمول زمینه و میدان پراکنده استفاده می‌شود. به‌طور خاص، میدان‌های نوری چندلایه‌های بی‌نهایت گسترش‌یافته ابتدا برای ارائه میدان‌های پس‌زمینه محاسبه می‌شوند و فرمول‌بندی میدان پراکنده در نظر گرفته می‌شوند. در جدول ۲ داده‌های ورودی ماژول نیم‌رسانا نشان داده شده است.

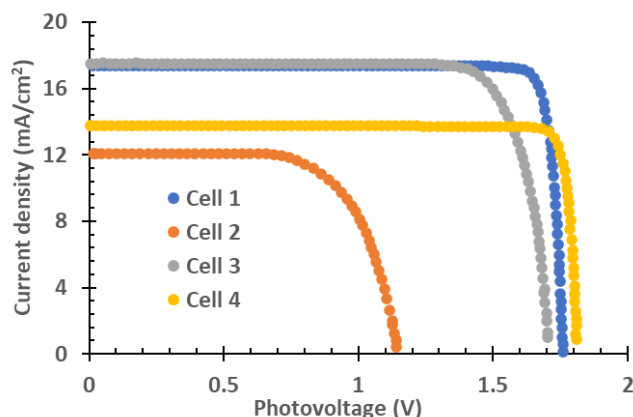
در این تحقیق چهار سلول مطابق شکل ۲ با ضخامت لایه‌های یکسان و جنس متفاوت مدل‌سازی شده است. سلول ۱ شامل

جدول ۲. پارامترهای مورد نیاز مواد TiO<sub>2</sub> و Dye(N719) و PEDOT

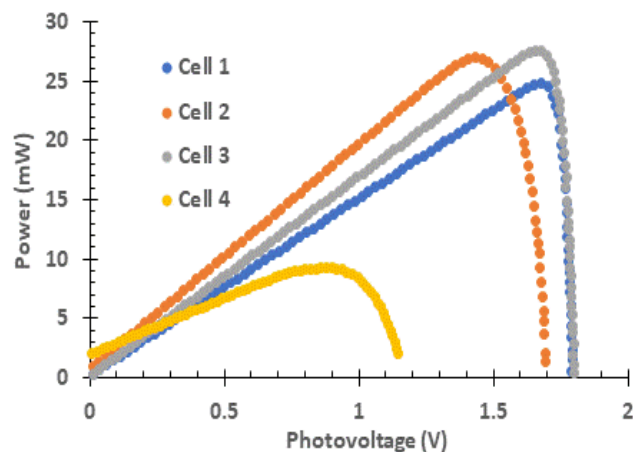
PEDOT:PSS	Dye(N719)	TiO <sub>2</sub>	پارامترها
100[cm <sup>2</sup> /(V*s)]	5[cm <sup>2</sup> /(V*s)]	30[cm <sup>2</sup> /(V*s)]	تحرك الکترون $\mu_n$
0.4[cm <sup>2</sup> /(V*s)]	5[cm <sup>2</sup> /(V*s)]	10[cm <sup>2</sup> /(V*s)]	تحرك حفره $\mu_p$
3.6	3.9	4	الکترون خواهی $\chi$
10	30	5	گذردهی نسبی $\epsilon_r$
$10^{19}[1/cm^3]$	$2.5 \times 10^{20}[1/cm^3]$	$10^{19}[1/cm^3]$	چگالی موثر حالت ها در نوار ظرفیت $N_V$
$10^{19}[1/cm^3]$	$2.4 \times 10^{20}[1/cm^3]$	$10^{19}[1/cm^3]$	چگالی موثر حالت ها در نوار رسانش $N_C$
2.2	2.37	3.2	$E_g$

حدود ۴/۸ الی ۵/۲ الکترون ولت گزارش شده (عامل برقراری تماس اهمی مطلوب با اکثر مواد پلیمری الکترون دهنده در لایه فعال) و پایداری نسبتاً زیاد آن است. از طرفی لایه‌ی P3HT با دارا بودن گاف نواری کوچکتر در حدود ۱ الکترون ولت، بیشتر برای لایه‌ی فعال و جذب فوتون‌ها مناسب است و با دارا بودن تابع کار پایین‌تر نمی‌تواند به صورت ترکیب پلیمری PEDOT:PSS مانع از نفوذ الکترون‌ها به سمت آند شود و در نتیجه درصد کمتری از نور جذب شده به جریان تبدیل می‌شود. در واقع می‌توان از این ترکیب به تنهایی به عنوان لایه جاذب و لایه‌ی انتقال دهنده حفره نیز استفاده کرد، زیرا از جذب بالایی نیز برخوردار است. در سلول ۳ لایه انتقال دهنده الکترون به ZnO تغییر داده شد. مشاهده می‌شود که ولتاژ مدار باز ۱/۸۶ ولت و جریان اتصال کوتاه ۱۷/۲۸ میلی‌آمپر بر سانتی‌متر مربع بدست آمد که نسبت به سلول ۱ تفاوت چندانی ندارد و عملکرد ZnO نسبت به  $TiO_2$  قابل قبول است. در سلول ۴ نشان داده شد که تغییر ضخامت لایه بر عملکرد سلول تأثیر مستقیم دارد و با کاهش ضخامت لایه رنگدانه، افت جذب و در نتیجه، افت جریان اتصال کوتاه و ولتاژ مدار مشاهده می‌شود. در مدل‌های آزمایشی این نکته حاصل شد که افزایش بیش از حد ضخامت لایه‌ها باعث افزایش بازترکیب حامل‌ها و در نتیجه کاهش بازده سلول می‌شود. پارامترهای کلیدی محاسبه شده سلول‌های ۱ تا ۴ در جدول ۳ نشان داده شده است.

با این وجود شکل ۴ نشان می‌دهد که توان سلول شماره ۳ از بقیه سلول‌ها بیشتر است و سلول ۴ ضعیف‌ترین سلول می‌باشد. همان‌گونه که از جدول ۳ مشاهده می‌شود در سلول اول بیشترین جریان خروجی و در نتیجه بیشترین بازده تبدیل حاصل شد. در سلول دوم با تغییر لایه انتقال دهنده حفره آلی به P3HT، افت قابل ملاحظه‌ای در جریان اتصال کوتاه و ولتاژ مدار باز مشاهده می‌شود. در لایه سوم با تغییر لایه انتقال دهنده الکترون از  $TiO_2$



شکل ۳. منحنی جریان ولتاژ سلول‌های طراحی شده



شکل ۴. منحنی توان ولتاژ سلول‌های طراحی شده

بدست آمد.

همان‌طور که مشخص است، لایه انتقال دهنده حفره P3HT دارای عملکرد به مراتب ضعیف‌تری است. دلیل ضعف P3HT نسبت به PEDOT:PSS این است که ترکیب PEDOT:PSS از اغلب قابلیت‌های مورد نیاز برای انتقال دادن حفره مناسب در سلول خورشیدی برخوردار است. این قابلیت‌ها شامل عبوردهی بسیار زیاد نور در ناحیه مرئی، جمع‌آوری حفره از لایه فعال و انتقال مؤثر آن به سمت آند و مانع شدن از نفوذ الکترون از ناحیه‌ی فعال به سمت آند است. تابع کار بسیار بزرگ معمولاً در

جدول ۳. مقایسه‌ی پارامترهای محاسبه شده سلول‌ها

شماره سلول	ساختار	$I_{sc}$ (mA)	$V_{oc}$ (V)	$P_M$ (mW)	$I_{mp}$ (mA)	$V_{MP}$ (V)	FF	$\eta$ (%)
۱	ITO-PEDOT-Dye- $TiO_2$ -Pt	۱۷/۳	۱/۸۷	۲۹/۲	۱۶/۸۷	۱/۷۳	۰/۹	۲۹/۲
۲	ITO-P3HT-Dye- $TiO_2$ -Pt	۱۲/۷۵	۱/۰۵	۹/۱	۱۱/۳۷	۰/۸	۰/۶۸	۹/۱
۳	ITO-PEDOT-Dye-ZnO-Pt	۱۷/۲۹	۱/۸۶	۲۶/۴	۱۶/۷	۱/۵۸	۰/۸۲	۲۶/۴
۴	تغییر ضخامت Dye در سلول ۱	۱۳/۷۸	۱/۸۵	۲۳/۳	۱۳/۳۹	۱/۷۴	۰/۹۱	۲۳/۳



1. J. Conti, P. Holtberg, J. Diefenderfer, A. LaRose, J. T. Turnure, L. estfall. Int.energy outlook 2016 with projections to 2040. No. DOE/EIA-0484 (2016).
2. B. Li, W. Liduo, K. Bona, P. Wang, Y. Qiu. Sol. Energy Mater. Sol. Cells. 90, 549(2006).
3. V. Kamat, J. Phys. Chem. C 111, 2834 (2007).
4. J. Correa-Baena, A. Abate, M. Saliba, W. Tress, T. Jacobsson, M. Grätzel, A. Hagfeldt., Energy & Env. Sci. 10, 710(2017).
5. C. Li, M. Liu, N. G. Pschirer, M. Baumgarten, K. Mullen. Chem. Rev. 110, 6817 (2010).
6. M. Golshan, S. Osfour, R. Azin, and T. Jalali. J. Photochem. & Photobio. A: Chem. 388 112191 (2020).
7. S. Tatsuo. NPG Asia Mater. 2, 96(2010).
8. K. Wongcharee, V. Meeyoo, S. Chavadej, Solar Energy Mat.& Solar Cells, 91, 566(2007).
9. A. Gregg, Brian A., MRS bulletin 30, 20 (2005).
10. P. Procel, X. Haiyuan, C. Aurora Saez, C. Ruiz-Tobon, L. Mazzarella, Y. Zhao, C. Han, G. Yang, M. Zeman, O. Isabella., Prog. Photovolt. Res.& applic. 28, 935(2020).
11. A. Rosencwaig, A. Gersho. J. Appl. Phys. 47, 64 (1976).
12. M. Becquerel, sciences 9, 561 (1839).
14. M. Chapin, Daryl, C. Fuller, and G. Pearson, J. appl. Phys. 25, 676 (1954).
15. C. Fritts, Am. J. Sci. 3, 465 (1883).

به ZnO، نسبت به سلول اول افت محسوسی در جریان اتصال کوتاه و ولتاژ مدار باز و همچنین بازده تبدیل نسبت به سلول اول ملاحظه نشد. با کاهش ضخامت رنگدانه به عنوان لایه جاذب (سلول ۴) ملاحظه می‌شود که جریان اتصال کوتاه افت محسوسی داشته است؛ اما ولتاژ مدار باز تقریباً ثابت مانده است. در این سلول فاکتور پرشدگی ۰/۹۱ محاسبه شد که مقداری قابل ملاحظه است. پس طبق این شبیه‌سازی، واضح است که PEDOT:PSS نسبت به P3HT به مراتب انتقال دهنده‌ی حفره‌ی بهتری است و همچنین نسبت به ZnO با اختلاف اندک، انتقال دهنده‌ی الکترون بهتری است.

#### ۴- نتیجه گیری

هدف از انجام این مقاله، بررسی بهبود عملکرد سلول‌های خورشیدی حساس شده با رنگدانه حالت جامد شامل رنگدانه مصنوعی N719 است. برای این منظور با ساخت این مدل سلول‌ها در نرم افزار شبیه‌سازی کامسول، عملکرد آن‌ها مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت. سلول ۱ به شکل لایه‌های ITO/PEDOT:PSS/N719/TiO<sub>2</sub>/Pt طراحی شد. در این سلول ولتاژ مدار باز ۱/۸۷ ولت و جریان اتصال کوتاه ۱۷/۳ میلی‌آمپر بر سانتیمتر مربع بدست آمد، که بیشترین جریان و ولتاژ را در بین ۴ سلول دارد. استفاده از P3HT به عنوان لایه‌ی انتقال دهنده‌ی حفره در سلول ۲، عملکرد ضعیف‌تری را در مقایسه با سلول ۱ نشان داد. بررسی پیک جذب سلول‌ها نشان داد که سلول ۱، بیشترین جذب را در بین سلول‌ها دارد. نتایج این شبیه‌سازی عددی نشان می‌دهد که با تغییر مواد لایه‌ی انتقال دهنده‌ی حفره و الکترون و همچنین تغییر ضخامت لایه فعال، می‌توان به بهبود جذب و بهینه‌سازی سلول‌های خورشیدی حالت جامد حساس شده با رنگدانه دست یافت. در نتیجه شبیه‌سازی عددی نشان‌دهنده‌ی امکان بهبود جذب و بهینه‌سازی سلول‌های خورشیدی با تغییر ساختار و مواد آن‌ها است. نتایج این مطالعه می‌تواند در طراحی و ساخت سلول‌های خورشیدی حالت جامد حساس شده با رنگدانه با راندمان بالاتر مورد استفاده قرار گیرد.

#### مراجع

29. A. Marchioro, J. Teuscher, D. Friedrich, Ma. Kunst, R. Van De Krol, T. Moehl, M.Grätzel, J.E. Moser., Nature Phot. 8, 250(2014).
30. P. Singh, A. Raman, N. Kumar, Silicon, 12, 1769(2020).
31. Rombach, Florine M., Saif A. Haque, Thomas J. Macdonald, Energy Environ. Sci.,14, 5161(2021).
32. Green, Martin A., Anita Ho-Baillie, Henry J. Snaith, Nat. Photonics 8, 506(2014).
33. M. Grätzel, Acc. Chem. Res., 42, 1788(2009).
34. A. Hagfeldt, G. Boschloo L. Sun, L. Kloo, H. Pettersson, Chem. Rev., 110, 6595(2010).
35. M. Grätzel, Nature, 414, 338(2001).
36. T. Jalali, P. Arkian, Z. Solati, M. Jalali, M ECS J. Solid State Sci. Technol. 9, 065022.(2020).
16. H. Kallmann, M. Pope, J. Chem. Phys. 30, 2, 585(1959).
17. EPIA-European Photovoltaic Industry Association. "Global market outlook for photovoltaics 2013-2017." EPIA report. Disponible em: <http://www.epia.org/home> (2013).
18. F. Jahantigh, M. Safikhani., Appl. Phys. A 125, 1(2019).
19. A. Kojima, K.Teshima, Y. Shirai, T. Miyasaka. J. Am. Chem. Soc. 131, 6050 (2009).
20. T. Jalali, P. Arkian, Z. solati. M. Jalali, M. Golshan. S. Osfouri, Opt. Mater. 110, 110441 (2020).
21. T. Jalali, Appl. Phys. A 124, 1(2018).
22. T. Helmut., Coordination Chem.Rev. 248, 1511 (2004).
23. B. Askari M. Mirzaei, M. Abadi Vahid, M. Mirhabibi, Am. J. Optom. Physiol. Opt. 3, 94 (2015).
24. V. Kamat, Acc. Chem. Res. 45, 1906 (2012).
25. A., Dechan, F. C. Krebs., J. Appl. Polym. Sci. 129, 1 (2013).
26. D. Prochowicz, M. Tavakoli, M. Wolska-Pietkiewicz, M. Jędrzejewska, S. Trivedi, M.Kumar, Shaik M. Zakeeruddin, J. Lewiński, M. Graetzel, P. Yadav. Sol. Energy 197, 50(2020).
27. T. Mahmoudi, Y. Wang, Y. Hahn. Adv. Energy Mat., 10, 1903369 (2020).
28. B. Yu, M. Liao, Y. Zhu, X. Zhang, Z. Du, Liu et al. Adv. Functional Mat. 30, 2002230 (2020).

# Modeling charge carrier densities in solid-state nanostructured dye-sensitized solar cells

T. Jalali<sup>1\*</sup>, M. Sadeghi<sup>1</sup>, Sh. Osfouri<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Physics, Faculty of Nano and Bio Sciences and Technology, Persian Gulf University, Bushehr7516913718, Iran

<sup>2</sup>Department of Chemical Engineering, Faculty of Petroleum, Gas, and Petrochemical Engineering, Persian Gulf University, Bushehr, 7516913718, Iran

**Abstract:** Dye-sensitized solar cells (DSSCs) are a newer generation of solar cells that, although they have lower efficiency compared to silicon-based solar cells, have a high potential for improved efficiency. Due to their better cost-effectiveness, they can replace silicon-based solar cells in the market if their efficiency and stability increase. The design and development of DSSCs have involved not only experimental and laboratory work but also numerical modeling. The aim of this work is to design and numerically model dye-sensitized solar cells based on a nanostructured semiconductor layer with a wide bandgap (titanium dioxide) and zinc oxide as the electron transporter, N719 dye as the absorber layer, and PEDOT:PSS and P3HT as hole transport materials. In this research, the advanced software CAMSOL with extensive capabilities is used for the design of dye-sensitized solar cells, and the current-voltage characteristics and optical absorption of the cell are calculated, which are in agreement with experimental data.

**Keywords:** Charge carrier density, Nanostructure, Dye sensitized solar cells, Solid state dye sensitized solar cells, Solid state electrolyte.