

Investigation of Using Anti-Reflecting Coatings in CZTS Solar Cells to Enhance the Light Absorption: Optimization by FDTD Method**Mina Mirzaei¹, Ph.D Student, Javad Hasanzadeh¹, Assistant Professor, Ali Abdolazadeh Ziabari², Assistant Professor, Mehdi Mirzaei³, Assistant Professor**¹Department of Physics- Takestan Branch, Islamic Azad University, Takestan, Iran²Nano Research Lab- Lahijan Branch, Islamic Azad University, Lahijan, Iran³Department of Basic Sciences- Miyaneh Branch- Islamic Azad University, Miyaneh, Iran
minamirzayi64@yahoo.com, javadhasanzadeh649@gmail.com, ali_abdolazadeh@liau.ac.ir,
m_mirzayi2003@yahoo.com**Abstract**

In the few past years, Solar cells based on $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ (CZTS) are very promising thin-film solar cells due to their appropriate absorption coefficient and optical band gap, low-cost, non-radioactive and environmental friendly behavior. However, CZTS devices show poor efficiency and identifying deficiencies and making improvements is necessary. In the present study, various anti-reflection coatings at the top surface of the solar cell were proposed. Minimization of the reflectance is carried out to optimize the thickness of ARC layers using Lumerical software. The density of the short-circuit photocurrent increases from $18.4 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ for solar cells without an antireflection coating to $36 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ for those with MgF_2 layer coating.

Keywords: anti-reflective coating, CZTS solar cells, external quantum efficiency, finite-difference time-domain (FDTD)**Received:** 13 January 2021**Revised:** 12 February 2021**Accepted:** 19 March 2021**Corresponding Author:** Dr. Javad Hasanzadeh

20.1001.1.23223871.1400.12.3.5.5

مقاله پژوهشی

بررسی به‌کارگیری پوشش‌های ضدبازتاب در سلول‌های خورشیدی لایه نازک CZTS برای افزایش جذب نور: بهینه‌سازی با استفاده از روش FDTD

مینا میرزایی^۱، دانشجوی دکتری، جواد حسن‌زاده^۲، استادیار، علی عبدالله‌زاده ضیابری^۲، استادیار، مهدی میرزایی^۳، استادیار

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

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

۳- دانشکده علوم پایه- واحد میانه، دانشگاه آزاد اسلامی، میانه، ایران

minamirzayi64@yahoo.com, javadhasanzadeh649@gmail.com, ali_abdolahzadeh@liau.ac.ir, m_mirzayi2003@yahoo.com

چکیده: در چند سال گذشته، سلول‌های خورشیدی مبتنی بر سولفید قلع روی مس (CZTS) به دلیل ضریب جذب و شکاف باند مناسب، کم هزینه بودن، رفتار غیر رادیواکتیو و سازگار با محیط زیست، جزو سلول‌های خورشیدی لایه نازک بسیار امیدوار کننده هستند. با این حال، سلول‌های CZTS بازدهی ضعیفی نشان می‌دهند و شناسایی کمبودها و ایجاد پیشرفت لازم است. در این مقاله، استفاده از پوشش‌های مختلف لایه‌های ضد بازتاب^۱ (ARC) در سطح بالای سلول خورشیدی پیشنهاد شده است. حداقل‌سازی بازتاب برای بهینه‌سازی ضخامت لایه‌های ضد بازتاب با استفاده از نرم افزار لومریکال انجام شده است. چگالی جریان اتصال کوتاه از ۱۸/۴۸ میلی-آمپر بر سانتیمترمربع برای سلول‌های خورشیدی بدون پوشش ضد بازتاب به ۲۰/۷۶ میلی-آمپر بر سانتیمترمربع برای سلول‌هایی که دارای پوشش لایه ضدبازتاب MgF_2 هستند افزایش می‌یابد.

کلمات کلیدی: بازده کوانتومی خارجی، پوشش لایه ضدبازتاب، سلول‌های خورشیدی CZTS، FDTD

تاریخ ارسال مقاله: ۱۳۹۹/۱۰/۲۳

تاریخ بازنگری مقاله: ۱۳۹۹/۱۱/۲۳

تاریخ پذیرش مقاله: ۱۳۹۹/۱۲/۲۸

نام نویسنده‌ی مسئول: دکتر جواد حسن‌زاده کلاشمی

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

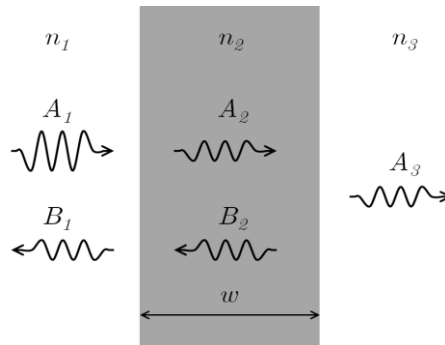
۱- مقدمه

سلول‌های خورشیدی مبتنی بر سولفید قلع روی مس ($\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$) برای اولین بار در سال ۱۹۶۶ کشف شد [۱] و در سال ۱۹۸۸ نشان داده شد که دارای اثر فتوولتائیک است [۲]. سولفید قلع روی مس یک ترکیب نیم‌رسانای چهارتایی است که از اواخر دهه ۲۰۰۰ میلادی برای ساخت سلول خورشید لایه‌ی نازک مورد توجه بیشتری قرار گرفته است. تکنیک‌های مختلف فیزیکی و شیمیایی متعددی برای ساختن این سلول‌های خورشیدی لایه نازک مبتنی بر CZTS به کار گرفته شده‌اند. از این جمله می‌توان به تبخیر حرارتی، اسپاترینگ اولیه، رسوب پالس لیزر، روش سل ژل^۲ و رسوب الکتروود و ... اشاره نمود. CZTS دارای خواص نوری مشابه CIGS است به همین خاطر ماده مناسبی به عنوان لایه جذب در سلول خورشیدی لایه نازک است. همچنین بر خلاف سایر سلول‌های خورشیدی لایه نازک مانند CIGS و CdTe از عناصری با فراوانی زیاد و غیرسمی تشکیل شده است [۳]. اما بازده سلول خورشیدی CZTS هنوز هم به طور قابل توجهی پایین تر از CIGS و CdTe است، به طوری که در سال ۲۰۱۸ به حدود ۱۰ درصد رسیده است [۴]. به همین دلیل از چالش‌های جدی در ساخت این نوع سلول خورشیدی لایه نازک استفاده از تکنیک‌های مختلف جهت افزایش جذب در لایه جذب است. یکی از روش‌های موثر برای افزایش بازده سلول خورشیدی استفاده از لایه‌ی ضد بازتاب است. مقاله‌های زیادی راجع به جزییات افزایش جذب با استفاده از این روش وجود دارد. کازی اسلام و همکاران [۵] روش‌های به حداقل رساندن بازتاب با استفاده از لایه‌ی‌های مختلف ضد بازتاب مانند ITO، ZnO:Al و Si_3N_4 در سطح بالای سلول خورشیدی a-Si:H را بررسی کرده‌اند. نتایج نشان می‌دهد که Si_3N_4 به ضخامت ۶۰ نانومتر بهترین لایه ضد بازتاب در بین سه مورد بررسی شده است. همچنین ساختار دو لایه Al_2O_3 و ZrO_2 بر روی سلول خورشیدی GaAs مطالعه شده است [۶] که ضخامت بهینه لایه بالایی (Al_2O_3) و پایینی (ZrO_2) به ترتیب ۴۵ نانومتر و ۴۹ نانومتر به دست آمده است. در سال ۲۰۱۸ اثر لایه‌های ضد بازتاب بر روی سلول خورشیدی سیلیکون بررسی شد [۷]. نتایج نشان داد که لایه‌های ضد بازتاب $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$ و SiN_x در محدوده طول موج بین ۴۰۰ و ۱۱۰۰ نانومتر، تلفات بازتاب متوسط را به ترتیب به کمتر از ۹ درصد و ۲/۳ درصد کاهش داده‌اند. نرم افزارهای متعددی برای شبیه‌سازی سلول‌های خورشیدی وجود دارد که هر کدام مزیت‌های خاص خود را دارد. در سال ۲۰۲۰ سلول خورشیدی CZTS با ضخامت ۲۵۰۰ نانومتر توسط نرم-افزار شبیه‌سازی توان سلول خورشیدی^۳ (SCAPS) شبیه‌سازی شد. نتایج نشان داد استفاده از لایه‌ی ZnS به عنوان لایه بافر موجب افزایش جذب در طول موج‌های ۴۰۰ تا ۵۰۰ نانومتر خواهد شد [۸]. اما برای اولین بار yee، در سال ۱۹۶۶ نسخه ساده‌ای با ویژگی‌های عددی بسیار جالب توجه ولی با بار محاسباتی زیاد، برای حل معادلات ماکسول در حوزه زمان ارائه داد [۹]. این روش تاکنون توسعه بسیاری یافته و به دلیل توانایی در حل مسائل پیچیده الکترومغناطیس در حوزه زمان به ویژه برهم‌کنش نور با انواع مواد خطی غیرخطی پاشنده و ... از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. هدف ما در این مطالعه بررسی اثر Al_2O_3 ، MgF_2 ، ZnO و SiN به عنوان لایه ضد بازتاب بر روی سلول‌های خورشیدی CZTS با استفاده از دو ماژول FDTD و Device است. در این مقاله، ابتدا با شبیه‌سازی سلول خورشیدی با استفاده از روش تفاضل محدود در حوزه‌ی زمان^۴ (FDTD)، جذب نور در ناحیه‌ی فعال این نوع سلول‌ها را محاسبه کرده و سپس با حل معادلات رانش-انتشار^۵ در ماژول Device با استفاده از نتایج حاصل از شبیه‌سازی اپتیکی، توانستیم مشخصه‌های الکتریکی آنها را استخراج نماییم. سپس ضخامت لایه ضد بازتاب را بهینه‌سازی کرده و در نهایت اثر لایه ضد بازتاب را در جذب نور و افزایش بازده سلول خورشیدی بررسی کرده‌ایم.

۲- تاثیر لایه ضد بازتاب در افزایش جذب نور

وقتی نور از یک محیط به محیطی با ضریب شکست مختلف وارد می‌شود درصدی از آن بازتاب و مابقی وارد محیط دوم می‌شود. ایجاد پوشش ضد بازتاب در سطح سلول، مهمترین روش برای به دام انداختن نور جهت جبران‌سازی کاهش جریان ناشی از بازتاب سطحی است. اساس کاهش بازتاب در این پوشش‌ها، پدیده داخل ویرانگر^۶ در فصل مشترک لایه‌های مختلف است. بنابراین مهمترین عوامل موثر بر کاهش بازتاب در این پوشش‌ها نوع ماده پوشش، ضریب شکست آن، هماهنگی با زیر لایه و همچنین ضخامت لایه پوشش است به طوری که با تعیین حد بهینه هر کدام از این پارامترها شرایط برای دستیابی به کم‌ترین

بازتاب و بیشترین میزان عبور فراهم می‌شود. برای بررسی ساز و کار این لایه ضریب انعکاس یک سیستم سه لایه مانند شکل (۱) را بررسی می‌کنیم.



شکل (۱): بازتاب نور از سه لایه‌ی مختلف
Figure (1): Reflection of light from three different layers

معادله‌ی بازتاب طبق رابطه‌ی زیر به دست می‌آید [۱۰]:

$$R = \left| \frac{B_1}{A_1} \right| = \left| \frac{\Gamma_{12} + \Gamma_{23} e^{2j\beta_2 w}}{1 + \Gamma_{12} \Gamma_{23} e^{2j\beta_2 w}} \right|^2 \quad (1)$$

که در آن Γ ضریب انعکاس w ضخامت لایه بازتاب و β ثابت فاز است. برای پوشش ضدبازتاب ایده‌آل ضریب انعکاس باید صفر گردد:

$$\Gamma_{12} + \Gamma_{23} e^{2j\beta_2 w} = 0 \quad (2)$$

به این منظور باید رابطه زیر برقرار باشد:

$$e^{2j\beta_2 w} = -1 \quad (3)$$

بنابراین داریم:

$$\Gamma_{12} = \Gamma_{23} \quad (4)$$

بنابراین برای نور فرودی داریم:

$$\frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} = \frac{n_2 - n_3}{n_2 + n_3} \quad (5)$$

با حل معادله برای n_2 داریم:

$$n_2 = \sqrt{n_1 n_3} \quad (6)$$

با داشتن مقدار ضریب شکست نیم‌رسانا در این طول موج و ضریب شکست هوا و جای‌گذاری در رابطه بالا مقدار ضریب شکست ایده‌آل برای پوشش ضدبازتاب به دست می‌آید. از سویی دیگر با توجه به شرط (۳) در رابطه بالا به ضخامت بهینه لایه‌ی ضدبازتاب می‌رسیم:

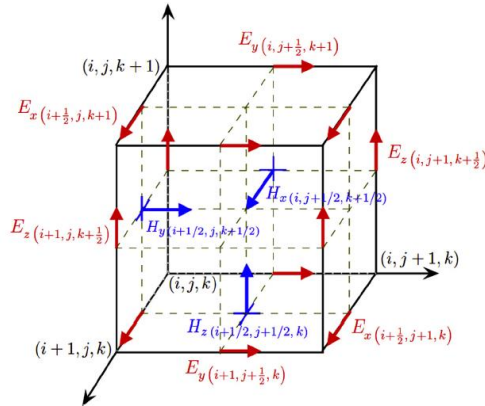
$$\beta_2 w = \frac{\pi}{4} \quad \text{or} \quad w = \frac{\lambda}{4n_2} \quad (7)$$

بنابراین در صورتی که طول لایه‌ی وسط یک چهارم اندازه‌ی طول موج فرودی در محیط لایه باشد، یک لایه‌ی بدون بازتاب خواهیم داشت.

۳- روش شبیه‌سازی

روش FDTD به‌طور مستقیم معادلات چرخشی ماکسول یعنی معادلات مربوط به قوانین آمپر و فارادی را حل می‌کند و نیازی به تعریف پتانسیل‌ها ندارد. در این روش مطابق شکل (۲) فضای شبیه‌سازی به سلول‌های مکعبی تقسیم می‌شود. الگوریتم

شبکه یک نقطه‌ای شروع محاسبات بر پایه روش تفاضل محدود در حوزه زمانی است. همان گونه که شکل نشان می‌دهد در این روش بردارهای موج میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی تولیدی گسترش یافته‌اند که مولفه‌های میدان مغناطیسی نصف واحد طول با میدان الکتریکی فاصله دارد.



شکل (۲): سلول محاسباتی Yee. هر مولفه میدان توسط چهار مولفه احاطه می‌شود [۱۱]
Figure (2): Computational cell Yee. Each field component is surrounded by four components [11]

با در نظر گرفتن تقریب تفاضل مرکزی برای هر دو مشتقات زمانی و مکانی معادلات ماکسول می‌توان مستقیماً مقادیر همه مولفه‌های میدان الکتریکی و میدان مغناطیسی را در هر سه بعد فضایی محدوده‌ی محاسباتی (i, j, k) اندازه‌گیری کرد [۱۲]:

$$D_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k + \frac{1}{2}) = D_z^{n-\frac{1}{2}}(i, j, k + \frac{1}{2}) + \frac{\Delta t}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \left(\frac{H_y^n(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2}) - H_y^n(i - \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2})}{\Delta x} - \frac{\Delta t}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \left(\frac{H_x^n(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}) - H_x^n(i, j - \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2})}{\Delta y} \right) \right) \quad (۸)$$

برای سایر مولفه‌های میدان نیز روابط مشابه‌ای داریم. بعد از محاسبه این پارامترها میزان جذب بر واحد حجم از طریق دیورژانس بردار پوینتینگ^۷ قابل محاسبه است [۱۳]:

$$p_{abs} = -0.5 \text{real}(\Delta \cdot P) \quad (۹)$$

رابطه بالا را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$p_{abs} = -0.5 \text{real}(i\omega \epsilon \cdot D) \quad (۱۰)$$

با استفاده از توان جذب شده می‌توان نرخ تولید الکترون - حفره‌ها را با استفاده از معادله‌ی زیر به دست آورد:

$$G(r) = \int \frac{P_{abs}}{h\omega} d\omega \quad (۱۱)$$

به منظور ارزیابی بازده سلول خورشیدی در جذب کمیته‌ی به نام ضریب افزایش جذب کل G^A به صورت زیر معرفی می‌شود [۱۴]:

$$G(\lambda) = \frac{IQE_{ARC}}{IQE_{Bare}} = \frac{\int \lambda P_{abs}(\lambda) I_{AMI.5}(\lambda) d\lambda}{\int \lambda P_{in}(\lambda) I_{AMI.5}(\lambda) d\lambda} \quad (۱۲)$$

که در آن $IQE(\lambda)$ بازده کوانتومی و $P_{abs}(\lambda)$ و $P_{in}(\lambda)$ به ترتیب توان نور جذب شده و فرودی در طول موج λ و $I_{AMI.5}$ توان نور فرودی خورشید در حدود ۱۰۰ میلی-وات بر سانتی مترمربع است. این پارامتر در واقع بیانگر نسبت بازده کوانتومی کل سلول خورشیدی با لایه بازتاب به سلول ساده است. در گام بعدی پارامترهای نوری شامل نرخ تبدیل فوتون به الکترون را از ماژول FDTD وارد نرم افزار DEVICE می‌نماییم و ولتاژ مورد نظر را اعمال می‌کنیم. این نرم افزار معادلات رانش-انتشار را برای

حامل‌های بار حل می‌کند و در نهایت نمودار جریان ولتاژ به دست خواهد آمد. از این نمودار می‌توان برای محاسبه بازده استفاده کرد:

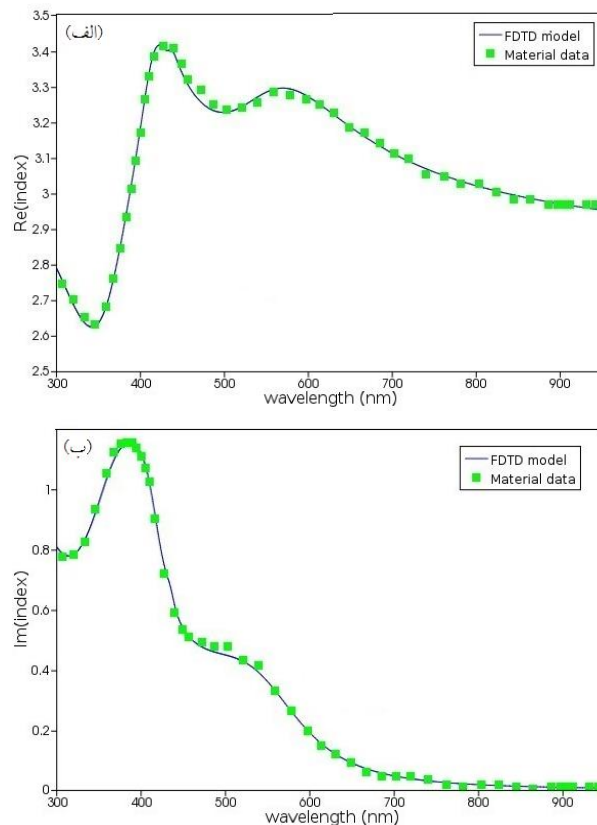
$$\eta = \frac{FF \times V_{OC} \times J_{SC}}{P_{in}} \quad (13)$$

که در آن ضریب پرشدگی^۹ پارامتری است که بیشترین مقدار توان قابل استحصال از سلول را مشخص می‌نماید، V_{OC} ولتاژ مدار باز، J_{CS} چگالی جریان مدار کوتاه است. پارامتر مهم دیگر در ارزیابی سلول بازده کوانتومی خارجی^{۱۰} (EQE) است که به صورت نسبت تعداد حامل‌های بار جمع شده توسط سلول خورشیدی به تعداد فوتون‌های یک طول موج و انرژی معین که از خارج به سلول خورشیدی می‌تابند (فوتون‌های فرودی) تعریف می‌شود. در واقع این پارامتر نشان می‌دهد که چند درصد از نور خورشید تبدیل به جریان الکتریسیته می‌شود. برای محاسبه‌ی بازده کوانتومی خارجی از رابطه‌ی زیر استفاده خواهیم کرد [۱۵]:

$$EQE = 1240 \frac{J_{sc}(\lambda) A_{cm-2}}{\lambda[nm] P_{in}(\lambda) W_{cm-2}} \quad (14)$$

۴- اعتبار سنجی شبیه‌سازی

ماژول FDTD برای شبیه‌سازی نیازمند ضریب شکست حقیقی و موهومی است که برای برخی مواد از کتاب راهنمای ثابت نوری جامدات از قبل تعریف شده است [۱۶]. اما برای مواد جدیدی مانند CZTS باید این ضرایب اپتیکی تجربی در سه ستون طول موج، ضریب شکست موهومی و حقیقی به صورت داده‌های نمونه وارد شود [۱۷]. پس از وارد کردن دیتای تجربی این ماده، ماژول FDTD یک چندجمله‌ای با بیشترین دقت و متناسب با نقاط را پیدا می‌کند که در شکل (۳) نشان داده شده است.

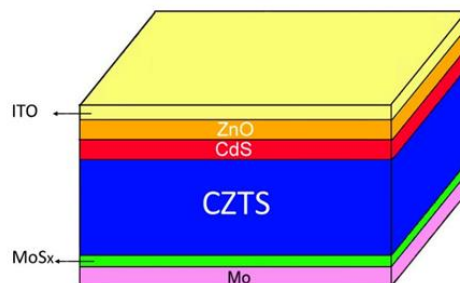


شکل (۳): الف) ضریب شکست حقیقی و ب) ضریب شکست موهومی ماده‌ی CZTS

Figure (3): Real and imaginary refractive index of CZTS material

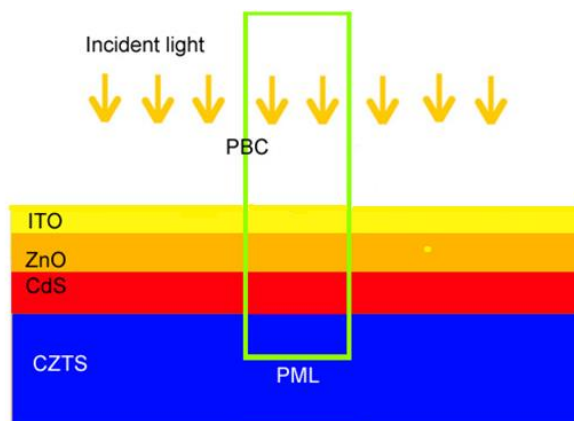
به‌منظور اعتبارسنجی و اطمینان از صحت نتایج شبیه‌سازی شده از ساختار شکل (۴) که به‌طور آزمایشگاهی بررسی شده است، استفاده کرده‌ایم [۱۸]. این ساختار شامل یک لایه ITO (این‌دیم اکسید آلیبده شده با قلع) به ضخامت ۳۵۰ نانومتر و ZnO به ضخامت ۴۰ نانومتر است که به عنوان ^{11}TCO در سلول خورشیدی به‌کار می‌رود. این لایه باید دارای دو ویژگی مهم باشد: شفافیت مورد نیاز برای رسیدن نور کافی به لایه جاذب را فراهم کند، یعنی دارای گاف نواری بالایی باشد و رسانش کافی مورد نیاز برای انتقال جریان فوتونی تولید شده به مدار خارجی بدون اتلاف مقاومتی بیش از اندازه را فراهم نماید. بعد از آن لایه‌ی Cds به ضخامت ۵۰ نانومتر قرار دارد که نیم‌رسانایی از نوع n است و به‌عنوان لایه‌ی بافر بین لایه‌های TCO و CZTS عمل می‌کند. این لایه سبب عملکرد بهتر سلول خورشیدی می‌شود. سپس لایه‌ی جاذب CZTS به ضخامت ۱۵۰۰ قرار دارد که لایه‌ی اصلی و فعال سلول خورشیدی و نوعی نیم‌رسانا از نوع p است. این لایه دارای گاف انرژی مستقیم است و با لایه‌ی بافر، یک پیوند p-n را تشکیل می‌دهد. معمولاً یک لایه MoS_x در بین دو لایه‌ی Mo/CZTS به دلیل واکنش بین CZTS و Mo در طی مراحل ساخت تشکیل می‌شود. ضخامت این لایه به دمای پخت و ضخامت لایه‌ی CZTS وابسته است [۱۹]. در پایین‌ترین قسمت سلول یک لایه ۹۰۰ نانومتری Mo به عنوان اتصال پشتی و بازگرداننده نور جذب نشده روی زیرلایه قرار دارد. اتصال پشتی یک فلز است که جذب پائینی دارد و نقش آن جمع کردن حامل‌ها از لایه جاذب و فرستادن آنها به صورت جریان بار خارجی است. همچنین لازم است که اتصال پشتی تابع کار مناسب و مقاومت ویژه پایین داشته باشد و در برابر اکسیداسیون و خوردگی و ... مقاوم باشند. پلاتینیوم، طلا، نقره، مس، و مولیبدنیوم چندین فلز مناسب برای اتصال الکتریکی پشتی هستند. در این بین، مولیبدنیوم نسبت به فلزات دیگر ترجیح داده می‌شود که دلیل آن پایداری در فرایندهای دمایی و مقاومت پایین در اتصال با CZTS است. همان‌طور که در ساختار بالا ذکر شد شبیه‌سازی ساختار اولیه بدون لایه‌ی بازتاب برای اثبات صحت درستی شبیه‌سازی انتخاب شده است.

یکی از مهم‌ترین مسائل در نرم‌افزار FDTD دستور مش‌بندی است. مش‌بندی ضعیف منجر به خطاهای شبیه‌سازی و دقیق نبودن نتایج می‌شود. برای اطمینان از درست بودن نتایج باید تعداد نقاط مش‌بندی کافی باشد. با در نظر گرفتن این نکته هرچه تعداد نقاط مش‌بندی بیشتر باشد، زمان شبیه‌سازی بیشتر خواهد شد. در این قسمت، یک منبع تخت نوری با طول موج ۳۰۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر به‌صورت عمود در راستای y قرار گرفت. همان‌طور که در شکل (۵) نشان داده شده است، شرایط مرزی در راستای x به‌صورت دوره‌ای و در راستای y به‌صورت کاملاً همسان اعمال شد تا نور به‌طور کامل جذب گردد. برای تعریف مواد جدید در ماژول Device نیاز به اطلاعاتی مانند گاف انرژی، موبیلیتی اکترون و حفره، جرم موثر اکترون و حفره و ... مواد است. مقادیر این پارامترها در جدول (۱) درج شده است. پس از وارد کردن مواد جدید باید الکترودهای جلویی و پشتی تعریف شوند. سپس فایل‌های خروجی ماژول FDTD را در این ماژول وارد می‌کنیم. نرخ تولید اکترون حفره به راحتی و بدون نیاز به اسکریپت وارد این ماژول می‌شود. با استفاده از آن می‌توان با اعمال ولتاژ نمودار چگالی جریان-ولتاژ را رسم کرد. همان‌طور که شکل (۶) نشان می‌دهد نمودار حاصل از شبیه‌سازی و نتایج تجربی [۱۸] سازگاری خوبی با هم نشان می‌دهند.



شکل (۴): شماتیک سلول خورشیدی CZTS ساده

Figure (4): Schematic of simple CZTS solar cells



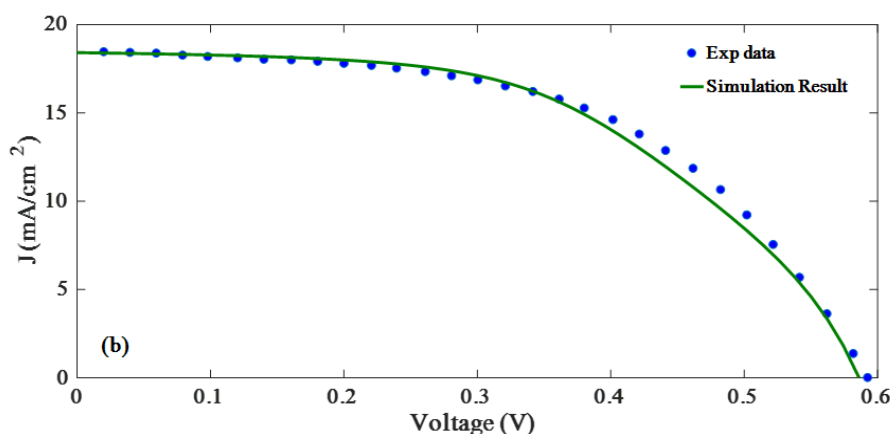
شکل (۵): شماتیک از محیط شبیه‌سازی

Figure (5): Schematic of the simulation environment

Table (1): Input parameters in Device

جدول (۱): پارامترهای ورودی در Device

پارامترها	CZTS	CdS	ZnO	ITO
ضخامت (nm)	۱۵۰۰	۵۰	۴۰	۳۵۰
گذردهی ϵ/ϵ_0	۸	۱۰	۹	۱۰
موبیلیتی الکترون (cm^2/Vs)	۱۰۰	۱۰۰	۱۰۰	۱۰۰
موبیلیتی حفره (cm^2/Vs)	۲۵	۲۵	۲۵	۲۵
جرم موثر الکترون	۰/۲	۰/۲	۰/۲	۰/۲
جرم موثر حفره	۰/۷	۰/۷	۰/۷	۰/۷
گاف انرژی (eV)	۱/۴	۲/۴	۳/۳	۳/۶
وابستگی الکترونی	۴/۵	۴/۸	۴/۸	۴/۳



شکل (۶): منحنی‌های J-V سلول خورشیدی مرجع و سلول خورشیدی شبیه‌سازی شده CZTS

Figure (6): Reference solar cell J-V curves and CZTS simulated solar cell

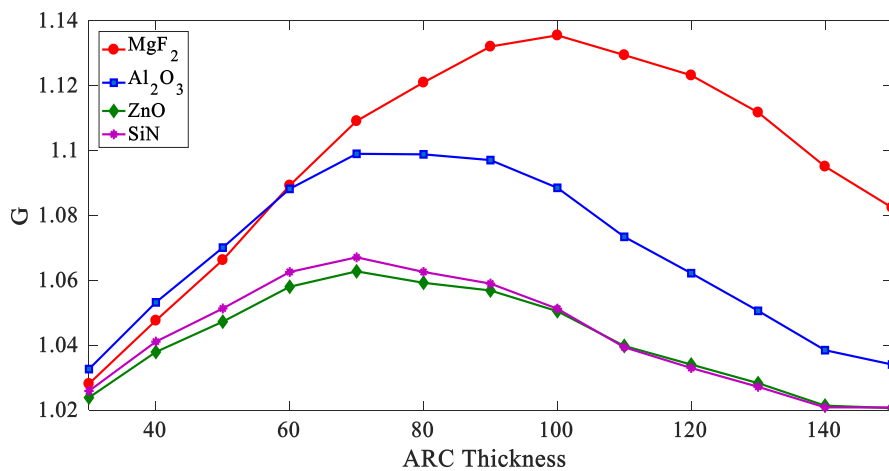
۵- نتایج شبیه‌سازی با لایه ضدبازتاب

با توجه به بازتاب نور از سطح سلول‌ها، به‌منظور افزایش به‌دام‌اندازی نور و افزایش جذب ناچار به استفاده از لایه‌ی ضدبازتاب هستیم. هدف ما در این بخش مطالعه اثر MgF_2 ، Al_2O_3 و ZnO به‌عنوان لایه ضدبازتاب بر روی سلول‌های خورشیدی CZTS

است. انتخاب صحیح ضخامت این لایه برای فرآیند به دام انداختن نور سلول های خورشیدی بسیار مهم است. لایه ی ضد بازتاب بسیار ضخیم باعث کاهش جذب نوری و راندمان سلول خورشیدی می شود. برای یافتن ضخامت مطلوب، ضریب افزایش جذب G ، برای ضخامت های ۳۰ تا ۱۵۰ نانومتر با فاصله ۲۰ نانومتر محاسبه کردیم. شکل (۷) رابطه تغییرات ضریب G و ضخامت های مختلف لایه بازتاب را نشان می دهد. همان طور که این شکل نشان داده می دهد، برای MgF_2 ، ZnO ، Al_2O_3 و SiN ضخامت به ترتیب ۱۰۰، ۷۰، ۷۰ و ۷۰ نانومتر است که لایه نازک تر یا ضخیم تر از آن باعث کاهش چگالی جریان می شود.

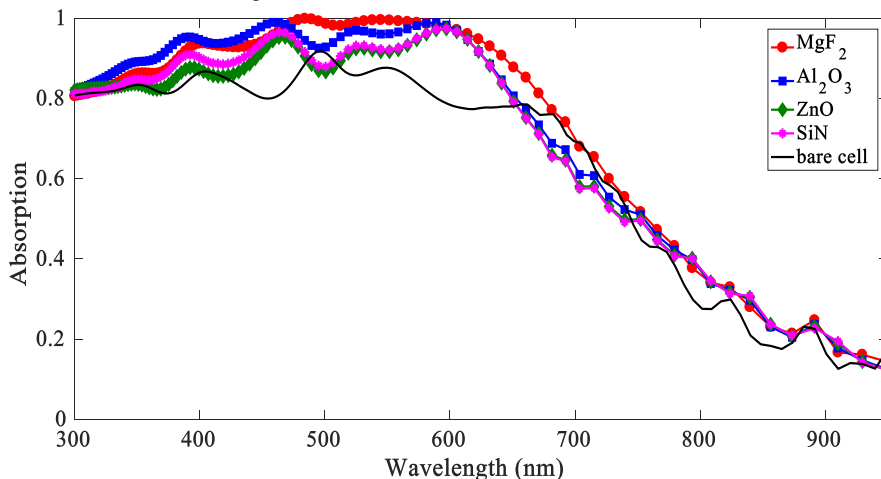
شکل (۸) طیف جذب را به عنوان تابعی از طول موج برای سلول CZTS ساده و با ضخامت های مختلف بهینه لایه بازتاب مقایسه می کند. همان طور که شکل نشان می دهد جذب در طیف گسترده ای از طول موج ها برای هر چهار لایه ARC افزایش یافته، که این امر را می توان به کاهش بازتاب نور نسبت داد. همچنین می توان مشاهده کرد، بیشترین مقادیر جذب (تقریباً ۱) در طول موج ۵۰۰-۶۰۰ نانومتر است و افزایش آن برای طول موج های بلندتر کمتر است.

مشخصات جریان-ولتاژ سلول خورشیدی با و بدون لایه ضد بازتاب در شکل (۹) نشان داده شده است. این شکل پیشرفت قابل توجهی در جریان اتصال کوتاه را با استفاده از لایه های مختلف ضد بازتاب، نشان می دهد. جریان اتصال کوتاه، ولتاژ مدار باز، ضریب پرشدگی و بازده سلول خورشیدی CZTS مربوط به لایه های ضد بازتاب مختلف در جدول (۲) ارائه شده است. سلول خورشیدی با پوشش MgF_2 بهترین دستاورد فوتوولتاییک را نشان داده است. جریان اتصال کوتاه سلول خورشیدی CZTS بدون لایه بازتاب ۱۸/۴۸ میلی آمپر بر سانتیمتر مربع است، در حالی که با پوشش MgF_2 تقریباً به مقدار ۲۰/۷۶ میلی-آمپر بر سانتیمتر مربع می رسد.



شکل (۷): تغییرات ضریب افزایش جذب (G) با ضخامت لایه ضد بازتاب

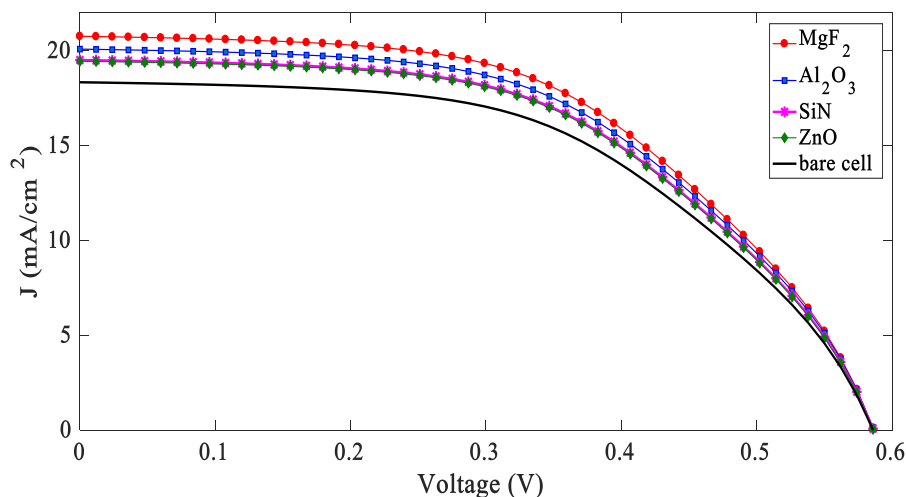
Figure (7): Variation in the absorption enhancement coefficient (G) with the thickness of the anti-reflective layer



شکل (۸): طیف جذب سلول خورشیدی CZTS با لایه های ضد بازتاب مختلف در مقایسه با سلول خورشیدی مرجع

Figure (8): Variation in the absorption enhancement coefficient (G) with the thickness of the anti-reflective layer

برای تأیید اثر لایه‌ی ضدبازتاب، نمودار بازده کوانتومی خارجی سلول خورشیدی CZTS با و بدون لایه‌های ضدبازتاب در شکل (۱۰) شبیه‌سازی شده است. افزایش این پارامتر در اغلب طول موج‌ها در سلول خورشیدی روکش شده با MgF_2 در مقایسه با Al_2O_3 ، ZnO و SiN بیشتر است که نتایج بازدهی در جدول (۲) مویده آن است. همانطور که قبلاً ذکر شد، این افزایش به دلیل کاهش بازتاب با استفاده از لایه‌ی ضدبازتاب است.

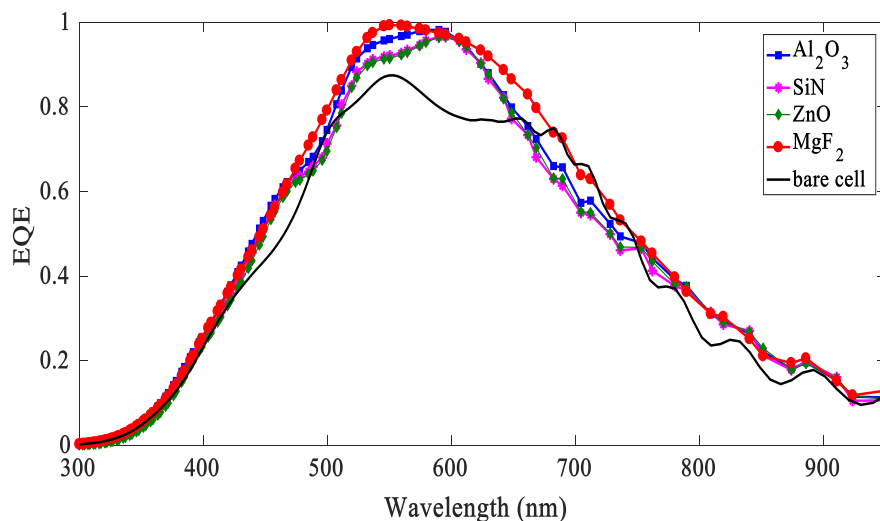


شکل (۹): منحنی J-V سلول‌های خورشیدی CZTS با و بدون لایه‌ی ضدبازتاب
Figure (9): J-V curve of CZTS solar cells with and without anti-reflective layer

Table (2): Photovoltaic characteristics of CZTS solar cells with and without different anti-reflective layers

جدول (۲): مشخصات فتوولتاییک سلول خورشیدی CZTS با و بدون لایه‌های ضدبازتاب مختلف

ARC	J_{sc} (mA/cm ²)	V_{oc} (v)	η (%)	FF
No ARC	۱۸/۴۰	۰/۵۸	۵/۶۴	۵۲/۵۶
Al_2O_3	۲۰/۰۸	۰/۵۸	۶/۲۱	۵۲/۸۰
ZnO	۱۹/۴۴	۰/۵۸	۵/۹۹	۵۲/۶۶
MgF_2	۲۰/۷۶	۰/۵۸	۶/۴۰	۵۲/۶۹
SiN	۱۹/۵	۰/۵۸	۶/۰	۵۲/۷۴



شکل (۱۰): بازده کوانتومی خارجی (EQE) سلول خورشیدی CZTS با و بدون لایه‌های ضدبازتاب مختلف
Figure (10): External Quantum Efficiency (EQE) of CZTS solar cells with and without different anti-reflective layers

۶- نتیجه گیری

به طور خلاصه، عملکرد لایه های ضد بازتاب مختلف Al_2O_3 ، MgF_2 ، ZnO و SiN از طریق ماژول های FDTD و Device برای سلول های خورشیدی لایه نازک CZTS بررسی شد. نتایج به دست آمده از بازده کوانتومی خارجی و طیف جذب نشان داد MgF_2 با ضخامت بهینه حدود ۱۰۰ نانومتر کاندیدای بهتری نسبت به ZnO ، Al_2O_3 و SiN است. به طوری که نمودار چگالی جریان-ولتاژ نشان داد که چگالی از ۱۸/۴۸ میلی-آمپر بر سانتیمتر مربع در سلول بدون لایه بازتاب به ۲۰/۷۶ میلی-آمپر بر سانتیمتر مربع با حضور لایه بازتاب افزایش می یابد. این بهبود کارایی به دلیل افزایش جذب نور در لایه CZTS است. بنابراین استفاده از پوشش ضد بازتاب با ضخامت مناسب انتخاب خوبی برای افزایش کارایی سلول خورشیدی است. در ادامه مطالعات، برای دستیابی به بازده تبدیل بالاتر می توان از نانوذرات پلاسمونی نیز در این لایه بازتاب استفاده نمود.

References

مراجع

- [1] R. Nitsche, D. F. Sargent, P. Wild, "Crystal growth of quaternary $\text{I}_2\text{246}_4$ chalcogenides by iodine vapor transport", *Journal of Crystal Growth*, vol. 1, pp. 52-53, Oct. 1966 (doi:10.1016/0022-0248(67)90009-7).
- [2] K. Ito, T. Nakazawa, "Electrical and optical properties of stannite-type quaternary", *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 27, pp. 2094-2097, Sep. 1988.
- [3] X. Song, X. Ji, M. Li, W. Lin, X. Luo, H. Zhang, "A review on development prospect of CZTS based thin film solar cells", *International Journal of Photoenergy*, vol. 2014, May. 2014 (doi:10.1155/2014/613173).
- [4] M. A. Green, E. D. Dunlop, J. Hohl-Ebinger, M. Yoshita, N. Kopikadis, X. Hao, "Solar cell efficiency tables (version 56)", *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, vol. 28, pp. 629-638, June 2020 (doi:10.1002/pip.3303).
- [5] K. Islam, A. Alnuaimi, H. Ally, Ammar Nayfeh, "ITO, Si_3N_4 and ZnO:Al - Simulation of different anti-reflection coatings (ARC) for thin film a-Si:H solar cells", *Institute of Science and Technology*, pp. 673-676, 2013 (doi: 10.1109/EMS.2013.112).
- [6] Z.I. Alexieva, Z.S. Nenova, V.S. Bakardjieva, M.M. Milanova, H.M. Dikov, "Antireflection coatings for GaAs solar cell applications", *Journal of Physics: Conference Series*, 2010 (doi:10.1088/1742-6596/223/1/0-12045).
- [7] M. Moustapha Diop, A. Diaw, N. Mbengue, O. Ba, M. Diagne, O.A. Niassé, B. Ba, J. Sarr, "Optimization and modeling of antireflective layers for silicon solar cells: In search of optimal materials", *Materials Sciences and Applications*, pp. 705-722, July 2018 (doi:10.4236/msa.2018.98051).
- [8] H. Benzetta, M. Abderrezek, M.E. Djeghlal, "Numerical analysis of potential buffer layer for $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ (CZTS) solar cells", *Optik*, vol. 204, Feb. 2020 (doi:10.1016/j.ijleo.2019.164155).
- [9] K.S. Yee, "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media", *IEEE Trans. on Antennas and Propagation*, vol. AP-14, pp. 302-307, May. 1966.
- [10] J.R. Nagel, "Advanced methods for light trapping in optically thin silicon solar cells", *Electrical and Computer Engineering*, Dec. 2011 (<https://collections.lib.utah.edu/ark:/87278/s6qc0j64>).
- [11] K. N'Konou, P. Torchio, "Optical absorption modeling of plasmonic organic solar cells embedding Ag- SiO_2 core-shell nanoparticles", *Noble Metal-Metal Oxide Hybrid Nanoparticles: Fundamentals and Applications*, pp. 265-282, 2019 (doi:10.1016/B978-0-12-814134-2.00013-9).
- [12] H. Jia, J. Li, Z. Fang, M. Li, "A new FDTD scheme for Maxwell's equations in Kerr-type nonlinear media", *Springer Science+Business Media, LLC*, Sept. 2018 (doi:10.1007/s11075-018-0602-3).
- [13] S. Royanian, A. Abdolhazadeh Ziabari, R. Yousefi, "Efficiency enhancement of ultra-thin CIGS Solar Cells using bandgap grading and embedding Au plasmonic nanoparticles", *Plasmonics*, vol. 15, pp. 1173-1182, Feb. 2020 (doi:10.1007/s11468-020-01138-2).
- [14] M. Mirzaei, J. Hasanzadeh, A. Abdolhazadeh Ziabari, "Efficiency enhancement of CZTS solar cells using Al plasmonic nanoparticles: The effect of size and period of nanoparticles", *Journal of Electronic Materials*, vol. 49, pp. 7168-7178, Oct. 2020 (doi:10.1007/s11664-020-08524-w).
- [15] B.J. Trześniewski, I.A. Digdaya, T. Nagaki, S. Ravishankar, I. Herraiz-Cardona, D.A. Vermaas, A. Longo, S. Gimenez, W.A. Smith, "Near-complete suppression of surface losses and total internal quantum efficiency in BiVO_4 photoanodes", *Energy and Environmental Science*, vol. 10, pp. 1517-1529, May. 2017 (doi:10.1039/c6ee03677e).
- [16] E.D. Palik, "In handbook of optical constants of solids", *Academic Press*, vol. 3, New York, 1998.
- [17] H. Zhao, C. Persson, "Optical properties of $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ and $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S,Se})_4$ ", *Thin Solid Films*, vol. 519, pp. 7508-7512, Jan. 2011 (doi:10.1016/j.tsf.2010.12.217).

- [18] V. Tunuguntla, W.C. Chen, P.H. Shih, I. Shown, Y.R. Lin, J.S. Hwang, C.H. Lee, L.C. Chen, K.H. Chen, "A nontoxic solvent based sol-gel $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ thin film for high efficiency and scalable low-cost photovoltaic cells", *Journal of Materials Chemistry A*, vol. 3, pp. 15324-15330, May. 2015 (doi:10.1039/c5ta02833g).
- [19] G. K. Dalapati, S. Zhuk, S. Masudy-Panah et al, "Impact of molybdenum out diffusion and interface quality on the performance of sputter grown CZTS based solar cells", *Scientific Reports*, vol. 7, pp. 1-12, May. 2017 (doi:10.1038/s41598-017-01605-7).

زیر نویس‌ها

1. Anti-reflection coatings
2. Sol-gel
3. Solar cell capacitance simulator
4. Finite-difference time-domain
5. Drift diffusion equations
6. Destructive interference
7. Poynting
8. Integrated quantum efficiency
9. Fill factor
10. External quantum efficiency styles
11. Transparent conductive oxides