

# مدل سازی عملکرد سلول خورشیدی پروسکایت لیفی

شب‌نم خدمت‌بین دانا<sup>۱</sup>، وحید متقی طلب<sup>۲</sup>، لیلا میوه‌ای<sup>۱\*</sup>، اصغر ریسمان‌چی<sup>۱</sup>

<sup>۱</sup>گروه مهندسی نساجی، دانشکده فنی، دانشگاه گیلان، گیلان، رشت، ایران

<sup>۲</sup>گروه مهندسی شیمی، دانشکده فنی، دانشگاه گیلان، گیلان، رشت، ایران

leila.mivehi@gmail.com

تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۰۵/۱۵ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۰۶/۰۶

## چکیده

سلول خورشیدی پروسکایت جدیدترین نماینده‌ی مدرن نسل پیشرو در حوزه صنعت فتوولتائیک است. هدف اصلی پژوهش حاضر مدل سازی عملکرد سلول خورشیدی پروسکایت لیفی مستقیم با استفاده از مدل رانش-نفوذ کلاسیک شامل معادله‌های پواسون و پیوستگی به صورت عددی با روش حجم محدود بر اساس تابع شکل بر پایه تقریب شفرتر-گومل است. نتایج حاصل از شبیه سازی آن با نتایج تجربی یکی از کارهای اخیر اعتبار سنجی می شوند و ویژگی های فتوولتائیک آن مورد ارزیابی قرار می گیرند. نتایج بهینه سازی لایه جاذب پروسکایت نشان داد که کاهش ضریب باز ترکیب تابشی منجر به افزایش ولتاژ مدار باز می شود. علاوه بر این استنباط می شود که کاهش سطح مقطع گیر انداختن تله ای، چگالی کلی نقص و سرعت ولتاژ حرارتی باز ترکیب شاکلی-رید-هال باعث افزایش جریان اتصال کوتاه می شود. هم چنین نشان داده می شود که کاهش ضریب باز ترکیب اوژه باعث افزایش فاکتور پر شدگی می شود. ویژگی های الکتریکی سلول خورشیدی پروسکایت لیفی پس از بهینه سازی شامل جریان اتصال کوتاه  $15.188 \text{ mA/cm}^2$ ، ولتاژ مدار باز  $1.185 \text{ V}$ ، فاکتور پر شدگی  $76.198\%$  و بازده تبدیل توان  $13.715\%$  می باشد که نسبت به کار تجربی معادل آن افزایش بازده را نشان می دهد.

**واژگان کلیدی:** سلول خورشیدی پروسکایت، لیف، مدل سازی، شبیه سازی، مدل رانش-نفوذ.

## Performance Modelling of Fiber-based Perovskite Solar Cell

Shabnam Khedmatbin Dana<sup>1</sup>, Vahid Mottaghtalab<sup>2</sup>, Leila Mivehi<sup>1\*</sup>, Asghar Rismanchi<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Textile Engineering Department, Faculty of Engineering, University of Guilan, Guilan, Rasht, Iran.

<sup>2</sup> Chemical Engineering Department, Faculty of Engineering, University of Guilan, Guilan, Rasht, Iran.

leila.mivehi@gmail.com

### Abstract

Perovskite solar cell is the leading generation modern candidate in the field of photovoltaic industry. The main goal of the current research is performance modelling of direct fiber perovskite solar cell using the classic drift-diffusion model including Poisson's and continuity equations by the finite volume method (FVM) according to shape function based on the Schrafter-Gummel approximation. The results of simulation are compared with the one of recent work experimental results and its photovoltaic properties are evaluated. The results of perovskite adsorbent layer optimization showed that the decreasing of radiative recombination coefficient leads to an increase in the open circuit voltage ( $V_{OC}$ ). In addition, it is inferred that the lessening of the capture cross-section of trapping, total defect density, and thermal voltage velocity of Shockley-Reid-Hall recombination increases the short-circuit current ( $J_{SC}$ ). Also, reduction of Auger recombination coefficient caused an increase in the filling factor (FF). The electrical properties of perovskite fiber solar cell after optimization including short circuit current ( $J_{SC}$ )  $15.188 \text{ mA/cm}^2$ , open circuit voltage ( $V_{OC}$ )  $1.185 \text{ V}$ , filling factor (FF)  $76.198\%$ , and power conversion efficiency (PCE)  $13.715\%$ , which shows an increase in efficiency compared to the equivalent experimental work.

**Keywords:** Perovskite solar cell, Fiber, Modelling, Simulation, Drift-diffusion model.

## ۱- مقدمه

در چند دهه ی اخیر، پیشرفت صنایع مختلف و تکنولوژی منجر به افزایش چشم گیر تقاضا برای انرژی های تجدید پذیر شده است [۱]. سلول های خورشیدی یکی از مهم ترین منابع انرژی تجدید پذیر محسوب می شوند. به طور کلی سلول های خورشیدی ابزارهای نوری هستند که نور را به صورت مستقیم به الکتریسیته تبدیل می کنند [۲]. در میان انواع مختلف سلول های خورشیدی، سلول های خورشیدی پروسکایتی به دلیل مزایایی هم چون قیمت پایین مواد خام، فرآیند ساخت آسان و بازده تبدیل نسبتا بالا نسبت به سلول های خورشیدی با همان محدوده ی قیمت توجه بسیاری از دانشمندان را در چند سال اخیر به خود جلب کرده اند [۳]. امروزه سه نسل از تکامل تکنولوژیکی فتوولتائیک وجود دارد [۴]. اولین نسل از سلول های خورشیدی بر اساس سیلیکون کریستالی ساخته شده اند که در نیم قرن گذشته بر بازار فتوولتائیک تاثیر بسزایی داشته اند [۵]. با این حال هزینه فرایند ساخت سلول های خورشیدی بر پایه سیلیکون نسبتا بالا بود. نسل دوم فن آوری فتوولتائیک از ترکیبات غیرآلی لایه نازک استفاده می کند که اغلب به لایه نشانی در خلا با بخار برای آماده سازی فیلم نیاز دارند و نسبت به نسل اول بازده ی پایین تری دارد [۶]. نسل سوم فن آوری های فتوولتائیک با هدف بازده ی بالاتر و قیمت پایین تر در مقایسه با نسل اول و دوم طراحی شدند که می توان نقاط کوانتومی، سلول های خورشیدی نانو ساختار و سلول های خورشیدی مایع حساس

شده به رنگدانه را از این دسته نام برد. سلول های خورشیدی پروسکایت به عنوان نسل سوم از تکنولوژی سلول خورشیدی ظهور کرده اند که از نظر بازده در مدت زمان بسیار کوتاهی رشد چشمگیری داشته اند. با وجود تلاش های تحقیقاتی بسیار بر روی سلول های خورشیدی بر پایه پروسکایت، بخش بسیار کمی از آنها بازده ی بیشتر از ۲۶ درصد را گزارش داده اند. این موضوع تا حدودی ناشی از ناپایداری پروسکایت و مشکلات مربوط به تکرار پذیری ساخت دستگاهها است. نواقص ساختاری و دامنه ی محدود جذب نور لایه پروسکایت فتوولتائیک برخی از عواملی هستند که بازده ی پروسکایت را تعیین می کنند [۲].

منسوجات هوشمند، منسوجاتی هستند که با توجه به نوع هوشمندسازی، توانایی دریافت و تشخیص محرک های مکانیکی، حرارتی، شیمیایی، مغناطیسی و دیگر شرایط محیطی را داشته و در بعضی موارد می توانند به این محرک ها واکنش نشان دهند [۷]. یکی از اجزای مهم منسوجات هوشمند منبع تغذیه می باشد که وظیفه تأمین انرژی مورد نیاز برای سایر اجزاء را بر عهده دارد. منبع تغذیه ی مورد استفاده در منسوج هوشمند باید سازگاری خوبی با شرایط کاربرد منسوج داشته و هم چنین از خواصی نظیر انعطاف پذیری، بازه ی عملکرد طولانی و دوام مناسب برخوردار باشد. با توجه به این موضوع، تحقیقات به سمت جایگزینی باتری های متداول با سایر منابع تغذیه از قبیل انرژی حرارت بدن، سلول های خورشیدی انعطاف پذیر، الیاف و منسوجات

فتوولتائیک سوق پیدا کرده است [۸]. سه روش اساسی تولید سلول‌های خورشیدی بر پایه ی منسوج که به عنوان منسوج فتوولتائیک نیز شناخته می‌شوند، شامل ساخت جداگانه ی سلول خورشیدی و فیلم‌های فتوولتائیک و سپس نصب آن بر روی هر نوع ساختار منسوج [۹، ۱۰]، بافت الیاف فتوولتائیک به صورت یک پارچه ی تار ی پودی یا حلقوی بافت [۱۱] و لایه نشانی مستقیم اجزای سلول خورشیدی بر روی سطح یک منسوج هستند [۱۲]. منسوجات فتوولتائیک را می‌توان به عنوان سلول‌های خورشیدی معمولی برای تامین انرژی انواع مختلفی از دستگاه‌های الکترونیکی و الکتریکی ثابت و متحرک استفاده کرد. اما برخلاف بیشتر سلول‌های خورشیدی، منسوجات فتوولتائیک باید انعطاف پذیر و سبک باشند به طوری که بتوانند به هر شکلی مورد استفاده قرار گیرند و بر روی سطوح مختلف (صاف، استوانه ای و غیره) بدون هیچ گونه شکستگی و ترک به کار روند [۱۳]. به منظور استفاده از منسوج در ساختار یک سلول خورشیدی باید هدایت الکتریکی به طور کامل پیوسته در سرتا سر سطح منسوج ایجاد شود که این هدایت الکتریکی را می‌توان با استفاده از پوشش‌های فلزی یا اکسیدهای رسانای شفاف با استفاده از روش‌های مختلف فیزیکی و شیمیایی فراهم کرد [۱۴، ۱۵]. نانو الیاف به دلیل بهره‌مندی از خواص منحصر به فردی مانند نسبت سطح به حجم بسیار بالا، منافذ زیاد، انعطاف‌پذیری و خواص مکانیکی خوب در ساخت لایه‌های مختلف سلول‌های خورشیدی مورد استفاده قرار گرفته اند

[۱۶]. اولین چالش در ساخت هر سلول فتوولتائیک، تهیه یک بستر هادی جریان الکتریکی است که در برابر جریان بارهای الکتریکی از سلول مقاومت کمی داشته باشد. برای ساخت یک سلول با بیشترین میزان جریان حامل‌های بار، بهترین گزینه استفاده از فلزات است، در حالی که استفاده از لایه‌های نازک اکسید رسانای شفاف به دلیل داشتن هدایت الکتریکی کمتر ممکن است موجب عملکرد پایین‌تری در سلول‌های خورشیدی لایه نازک شوند. پلیمرهای هادی نیز ذاتا هدایت الکتریکی کمی دارند [۶، ۱۷].

مفاهیم اولیه ی سلول‌های خورشیدی لیف/سیم شکل از دهه ی ۱۹۸۰ در برخی از اختراعات ظاهر شد که در آن لایه‌های سیلیکونی دارای اتصالات p-i-n را بر روی بسترهای لیف رسانا تشکیل می‌دادند تا دستگاه‌های کم‌هزینه و انعطاف‌پذیر را به دست آورند. کیو و همکاران (۲۰۱۴) برای اولین بار سلول خورشیدی پروسکایت لیفی شکل هم محور با انعطاف پذیری بالا و هزینه ی کم را تولید کردند. الیاف فولادی ضدزنگ با یک لایه اکسید تیتانیوم فشرده به عنوان آند مورد استفاده قرار گرفتند و یک لایه پروسکایت متیل آمونیوم سرب یدید ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ ) روی آند لیفی پوشانده شد. سپس پروسکایت با مواد انتقال دهنده ی حفره پوشش داده شد و صفحات نانولوله کربنی شفاف (CNT) به عنوان کاتد روی این‌ها پیچانده شد. این سلول خورشیدی لیفی شکل کاملاً جامد دارای بازده تبدیل انرژی ۳/۳٪ بود و می‌توان آن را به پارچه‌های سلول خورشیدی پروسکایتی انعطاف‌پذیر تبدیل

کرد [۱۸]. وسایل الکترونیکی مدرن باید دارای ویژگی‌های ضروری نظیر وزن سبک، انعطاف‌پذیری و قابلیت حمل باشند. ساختارهای بر پایه ی لیف به دلیل دارا بودن قابلیت بافت در منسوجات الکترونیکی انعطاف‌پذیر، بسیار مطلوب هستند. لی و همکارانش (۲۰۱۵) ساختار جدیدی از سلول خورشیدی پروسکایتی بر پایه ی لیف را ارائه دادند که در آن از یک لایه فشرده جدید از اکسید تیتانیوم و نانو سیم‌های نقره به عنوان الکترودهای شفاف استفاده شده بود [۱۹]. لایه ی فشرده جدید که به عنوان الکترودهای شفاف ساخته شد از اکسید تیتانیوم و نانوسیم‌های نقره تشکیل شده بود. لایه ی فشرده نقش مهمی در لایه نشانی اضافی دی اکسید تیتانیوم متخلخل، حفظ ساختارهای الیف در طول بازپخت و انعطاف-پذیری در هنگام خم شدن دارد. لی و همکاران (۲۰۱۵) یک سلول خورشیدی پروسکایتی شامل دو لیف به هم تابیده همراه با لیف CNT را ساختند. تشکیل و چسبندگی نانو بلورهای متراکم پروسکایت بر روی لیف CNT و حفظ این چسبندگی تحت تنش برای کارایی بالای سلول پروسکایت لیفی حیاتی است. در مقایسه با پروسکایت  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ ، پروسکایت  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3\text{-xCl}_x$  دارای تحرک حامل بار بالاتر و طول انتشار اکسایتون طولانی‌تر است. سپس دو لیف نانو لوله کربنی برای تشکیل یک ساختار دوتایی به هم تابیده شدند و در نهایت سلول خورشیدی با لایه ای از پلی‌متیل متآکریلات شفاف به عنوان لایه محافظ برای افزایش پایداری در برابر هوا پوشانده شد [۱۲]. های و همکاران (۲۰۱۵)

برای ساخت سلول خورشیدی پروسکایت لیفی به جای دی اکسید تیتانیوم از اکسید روی ستونی شکل استفاده کردند. اکسید روی باعث بهبود انعطاف‌پذیری ساختار گردید به طوری که بعد از ۲۰۰ بار آزمون تغییر شکل، بازده سلول ۷٪ باقی ماند [۲۰]. کیو و همکاران (۲۰۱۶) از روش رسوب دهی کاتدی برای تهیه لایه پروسکایت با پوشش‌دهی بالا و یکنواخت روی سطوح منحنی مانند سیم‌های تیتانیوم استفاده کردند و به بازده ۷/۱٪ دست یافتند [۲۱]. هم چنین این تیم پژوهشی گروهی از سلول‌های خورشیدی پروسکایت تمام جامد بر پایه ی لیف را طراحی کردند که بازده تبدیل ۹/۴۹٪ داشتند و از لحاظ پیچشی و خمشی پایدار بودند. این افزایش بازده به دلیل استفاده از ورق نانو لوله کربنی پیوسته به عنوان الکتروود بود [۲۲]. هو و همکاران (۲۰۱۷) به منظور بهبود مورفولوژی فیلم پروسکایت بر روی بسترهای لیفی شکل و بالا بردن بازده از استات سرب به عنوان منبع سرب استفاده کردند [۲۳]. دونگ و همکاران (۲۰۱۹) از روش لایه نشانی به کمک بخار برای تهیه سلول‌های خورشیدی لیفی شکل با پایداری خمشی خوب و تکرار پذیر استفاده کردند و به بازده ۱۰/۷۹٪ رسیدند که در آن زمان بالاترین بازده تبدیل توان در زمینه سلول‌های خورشیدی لیفی شکل بود [۲۴].

خی و همکاران (۲۰۲۳) در ساخت سلول خورشیدی پروسکایت لیفی ساختار جدیدی متشکل از دو لایه ی انتقال دهنده الکترون که علاوه بر ماده رایج  $\text{TiO}_2$  حاوی ماده  $\text{SnO}_2$  نیز بود را ارائه کردند. استفاده از دو لایه انتقال دهنده ی

الکترون باعث مورفولوژی سطحی یکنواخت تر و کاهش منافذ می شود [۲۵]. ژیانگ خی و همکاران (۲۰۲۴) با تمرکز بر تقویت لایه انتقال دهنده الکترون، لایه ی پروسکایت و لایه انتقال دهنده ی حفره، سلول های خورشیدی پروسکایتی لیفی کارآمد، با دوام و پایداری با بازده ۱۰/۶۶٪ را ارائه نمودند که انعطاف پذیری مکانیکی و دوام ذخیره سازی مناسبی داشتند. استفاده از تری یدید سرب متیل آمونیوم ( $\text{MAPbI}_3$ ) در لایه انتقال دهنده ی الکترون  $\text{SnO}_2$  سبب افزایش یکپارچگی سطحی لایه انتقال الکترون/ لایه پروسکایت (ETL/PVK) شد. هم چنین آلانیدن لایه پروسکایت با پلیمر چند منظوره PJ71 به طور قابل ملاحظه ای کیفیت تبلور لایه پروسکایت را افزایش داد و باعث از بین رفتن نقص ها شد [۲۶]. طراحی، مدل سازی و شبیه سازی ابزاری هستند که به پژوهشگر امکان درک بهتر از رفتار اپتو الکترونیکی حاکم بر سلول خورشیدی پروسکایت را می دهند [۲۷-۲۹]. در سال های اخیر استفاده از نرم افزارهای شبیه سازی چند فیزیکی در تحقیقات علمی به طور چشمگیری افزایش یافته است. یکی از این نرم افزارهای قدرتمند، کامسول مولتی فیزیکس است که به طور گسترده ای در تحلیل و شبیه سازی معادلات پیچیده مورد استفاده قرار می گیرد. زاکی و همکاران (۲۰۲۳) با استفاده از نرم افزار کامسول مولتی فیزیکس، کاهش اثرات دما و افزایش عملکرد سلول خورشیدی پروسکایت را با استفاده از ساختار تناوبی لایه انتقال دهنده الکترون بررسی کردند [۳۰]. هم چنین فنگ ژو و همکاران

(۲۰۲۳) برای ساخت سلول های خورشیدی پروسکایتی فوق نازک با عملکرد عالی با بهره گیری از نرم افزار کامسول مولتی فیزیکس به بررسی ساختارهای تناوبی کروی، مستطیلی و مثلثی شکل پرداختند [۳۱]. هارون و همکاران (۲۰۲۴) نیز با استفاده از نرم افزار فوق، تاثیر انواع مواد غیر آلی انتقال دهنده ی حفره بر عملکرد سلول های خورشیدی پروسکایت را مدل سازی نمودند [۳۲]. مرادی و همکاران (۲۰۲۴) مدل سازی حرارتی سلول های خورشیدی پروسکایت را با نرم افزار مذکور انجام دادند و اثرات لایه های انتقال دهنده الکترون و حفره را مورد بررسی قرار دادند [۳۳]. کاردوزو و همکاران (۲۰۲۴) برای کاهش بازتاب و افزایش جذب نور سلول خورشیدی پروسکایتی از نانو ذرات اکسید روی استفاده کردند و سپس با بهره گیری از نرم افزار فوق نشان دادند مدل سازی نوری و الکتریکی انطباق خوبی با نتایج تجربی دارد [۳۴]. این مطالعات نشان دهنده اهمیت و کارایی کامسول مولتی فیزیکس در مدل سازی و تحلیل مسائل پیچیده فیزیکی و مهندسی است و به عنوان مرجعی ارزشمند برای پژوهش های آینده می تواند مورد استفاده قرار گیرد. فرآیند ساخت سلول خورشیدی پروسکایت علاوه بر داشتن هزینه های بالا، نیازمند به ابزار آزمایشگاهی فراوان و فناوری پیشرفته می باشد. استفاده از ابزار طراحی، مدل سازی، شبیه سازی و ساخت در کنار هم می تواند منجر به ظهور سلول خورشیدی پروسکایت پر بازده، کم هزینه و پایدار شود.

مستقل از زمان در زمان  $t=0$  با فرض شرایط مرزی ولتاژ بایاس ثابت مستقیم با در نظر گرفتن شار فوتون ثابت تحت استاندارد AM1/5G در راستای شعاع لیف در شرایط ایده آل محیط شامل دمای ۲۷ درجه سانتیگراد و فشار ثابت ۱ اتمسفر صورت می گیرد. هم چنین در کار حاضر از فرآیند مهاجرت یون در لایه های سامانه به خصوص لایه ی جاذب پروسکایت صرف نظر می شود. علاوه براین با توجه به تاثیر نیروی خارجی بر رفتار سامانه، در سرتا سر ساختار لیف با یکنواخت فرض کردن خواص مورفولوژی لایه ای مقدار تنش ثابت فرض می شود. مدل سازی با کمک خواص اپتو الکترونیکی تجربی مستخرج از مقالات آزمایشگاهی اخیر [۶، ۲۶، ۲۹، ۳۵، ۳۶] برای مواد مورد استفاده در ساختار سلول خورشیدی پروسکایت صورت می گیرد. معادله پواسون معادله (۱)، پتانسیل الکترواستاتیک را به چگالی بار فضایی مرتبط می سازد. معادله ی پیوستگی الکترون معادله ۲ شامل معادله ی رانش-نفوذ الکترون، نرخ تولید الکترون و نرخ باز ترکیب الکترون است. معادله ی پیوستگی حفره معادله (۳) شامل معادله ی رانش-نفوذ حفره، نرخ تولید حفره و نرخ باز ترکیب حفره است.  $n$  و  $p$  چگالی الکترون ها و حفره ها،  $\mu$  تحرک پذیری الکترون ها و حفره ها،  $\varphi$  پتانسیل الکتریکی،  $G_p$  و  $G_n$  سرعت تولید الکترون ها و حفره ها،  $R_p$  و  $R_n$  سرعت باز ترکیب و  $q$  اندازه بار الکترون است [۲۷-۲۹]

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = -\frac{q}{\epsilon_0 \epsilon_r} (p - n + N_D - N_A) \quad (1)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \frac{\partial}{\partial x} \left[ -qn \mu_n \frac{\partial \phi}{\partial x} + \mu_n k_B T \frac{\partial n}{\partial x} \right] + G_n - R_n \quad (2)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \frac{\partial}{\partial x} \left[ -qp \mu_p \frac{\partial \phi}{\partial x} - \mu_p k_B T \frac{\partial p}{\partial x} \right] + G_p - R_p \quad (3)$$

هدف اصلی پژوهش حاضر مدل سازی عملکرد سلول خورشیدی پروسکایت لیفی بر پایه ی مدل رانش-نفوذ کلاسیک به صورت عددی با روش حجم محدود بر اساس تابع شکل بر پایه تقریب شفرتر-گومل به صورت ثابت مستقل از زمان در زمان  $t=0$  است. بنابراین در ابتدا نتایج حاصل از کار مدل سازی حاضر با استفاده از کار تجربی خی و همکاران (۲۰۲۴) اعتبار سنجی می شود. در مرحله ی بعد به منظور افزایش بازده سیستم بر روی ضریب باز ترکیب تابشی، سطح مقطع گیر انداختن تله ای، چگالی کلی نقص، سرعت ولتاژ حرارتی و ضریب باز ترکیب اوژه لایه جاذب پروسکایت بهینه سازی صورت می گیرد. ویژگی های الکتریکی سلول خورشیدی پروسکایت لیفی پس از بهینه سازی بهبود می یابد.

## ۲- روش مدل سازی

هدف اصلی پژوهش حاضر مدل سازی عملکرد سلول خورشیدی پروسکایت لیفی بر پایه ی مدل رانش-نفوذ کلاسیک در دستگاه مختصات استوانه ای بر پایه ی روش حل عددی با روش حجم محدود با استفاده از نرم افزار کامسول مولتی فیزیکس نسخه ۶/۲ است. شبیه سازی به صورت ثابت

در ابتدا مدل سازی به منظور بررسی مقدار تولید الکترون و حفره ی لایه جاذب پروسکایت، نرخ طیفی تولید الکترون-حفره در واحد حجم و در عمق  $x$  از سطح سلول خورشیدی پروسکایت با استفاده از قانون بیر-لامبرت توسط معادله های (۴)، (۵) و (۶) به دست می آید که  $\alpha(\lambda, x)$  ضریب جذب و  $N_{\text{photon}}(\lambda, x)$  شار فوتون های فرودی است. [۲۷-۲۹]

تولید حامل های بار در سلول خورشیدی پروسکایت اکثراً توسط جذب فوتون صورت می گیرد. نرخ تولید در واحد زمان و حجم را با  $G(n, p)$  نشان می دهند که بر اساس کارهای مدل سازی، شبیه سازی و تجربی اخیر بر اساس تعریف ضریب جذب برای لایه های مختلف و نرخ باز ترکیب با  $R(n, p)$  بیان می شوند. در تعادل گرمایی این نرخ ها با هم برابرند.

$$G(\mathbf{x}) = N_{\text{ph}}(\lambda, x) \cdot \alpha(\lambda, x) \Rightarrow G(x) = \int_{\lambda_{\text{min}}}^{\lambda_{\text{max}}} G(\lambda, x) d\lambda \Rightarrow G = \int_{\lambda_{\text{min}}}^{\lambda_{\text{max}}} a(\lambda, x) \cdot N_{\text{phot}}(\lambda, x) d\lambda \quad (4)$$

$$N_{\text{ph}}(\lambda, x) = N_{\text{ph0}}(\lambda) \cdot T_{\text{front}}(\lambda) \cdot \exp(-x\alpha(\lambda)) \cdot \frac{1 + R_{\text{back}}(\lambda) \exp(-2(d-x)\alpha(\lambda))}{1 - R_{\text{back}}(\lambda) R_{\text{int}} \exp(-2d\alpha(\lambda))} \quad (5)$$

$$\alpha(\lambda) = \left( A + \frac{B}{h\nu} \right) \sqrt{h\nu - E_g} \quad (6)$$

و باز ترکیب غیرتابشی اوزه  $R_{\text{Auger}}(n, p)$  هستند [۲۷-۲۹].

در سلول خورشیدی پروسکایت فرآیندهای باز ترکیب شامل باز ترکیب تابشی  $R_{\text{rad}}(n, p)$ ، باز ترکیب غیرتابشی  $R_{\text{SRH}}(n, p)$  نوارهای تله ای یا باز ترکیب شاکلی-رید-هال

$$R(n, p) = R_{\text{SRH}}(n, p) + R_{\text{rad}}(n, p) + R_{\text{Auger}}(n, p) \quad (7)$$

$$R_{\text{SRH}} = \frac{np - n_{i,\text{eff}}^2}{\tau_p(n + n_1) + \tau_n(p + p_1)} \quad R_{\text{SRH}_{\text{Surface}}} = \frac{S_n S_p (np - n_{i,\text{eff}}^2)}{S_n(p + p_1) + S_p(n + n_1)} \quad L_D = \sqrt{D\tau} \quad (8)$$

$$n_{i,\text{eff}} = \sqrt{N_{c0} N_{v0}} \cdot \exp\left(-\frac{E_g - \Delta E_g}{2K_B T}\right) \quad \tau_n = \frac{1}{\sigma_n N_{Tn} V_{\text{tn}}} \quad \tau_p = \frac{1}{\sigma_p N_{Tp} V_{\text{tp}}} \quad (9)$$

$$n_1 = \gamma_n \cdot n_{i,\text{eff}} \cdot \exp\left(\frac{\Delta E_t}{k_B T}\right) \quad p_1 = \gamma_p \cdot n_{i,\text{eff}} \cdot \exp\left(\frac{\Delta E_t}{k_B T}\right) \quad \Delta E_t = Et - Ei \quad (10)$$

$$R_{\text{rad}}(n, p) = C (np - n_i^2) \quad (11)$$

$$R_{\text{Aug}} = \alpha_n \cdot (n^2 p - n_i^2) + \alpha_p \cdot (np^2 - n_i^2) \quad (12)$$

در معادله ی (۸)،  $\tau_p$  و  $\tau_n$  طول عمر الکترون و طول عمر حفره،  $S_p$  و  $S_n$  سرعت باز ترکیب سطحی الکترون و سرعت باز ترکیب سطحی حفره،  $N_v$  و  $N_c$  چگالی حالت های موثر برای ترازهای انرژی هدایت و ظرفیت،  $E_v$  و  $E_c$  سطح های انرژی تراز باند هدایت و ظرفیت،  $E_t$  سطح انرژی تله،  $N_{T_p}$  و  $N_{T_n}$  چگالی نوارهای تله ای الکترون با انرژی  $E_t$  و چگالی نوارهای تله ای حفره با انرژی  $E_t$ ،  $\sigma_p$  و  $\sigma_n$  سطح مقطع گیر انداختن نوار تله ای برای الکترون و حفره،  $V_{thn}$  و  $V_{thp}$  سرعت گرمایی الکترون و حفره،  $k_B$  ثابت بولتزمن

را می توان به صورت معادله ی (۱۳) بازنویسی کرد.

معادله

$$J(x, t) = J_{light}(x, t) + J_{dark}(x, t) + J_{displacement}(x, t) \quad (13)$$

آن A فاکتور ایده آل،  $R_s$  مقاومت الکتریکی سری بر حسب  $\Omega \cdot cm^2$ ،  $R_{sh}$  مقاومت شانت بر حسب  $\Omega \cdot cm^2$ ،  $n_i$  غلظت ذاتی حامل بار الکتریکی  $D_n$  ضریب نفوذ الکترون و  $D_p$  ضریب نفوذ حفره هستند.

با در نظر گرفتن جریان الکتریکی تاریک، جریان الکتریکی ناشی از تابش نور تحت ولتاژ بایاس و جریان جابجایی ناشی از میدان الکتریکی حاکم، می توان معادله ی جریان الکتریکی کل را به شکل معادله (۱۴) بازنویسی کرد که همان معادله جریان الکتریکی مدار الکتریکی معادل با یک دیود است و در

$$J = J_{sc} - J_0 \left[ \exp\left(\frac{e(V + J \times R_s)}{A k_B T}\right) - 1 \right] - \frac{V + J \times R_s}{R_{sh}} \quad (14)$$

$$J_{sc} = qG(L_n + L_p) \quad (15)$$

$$J_0 = \left( \sqrt{\frac{D_p}{\tau_p}} \cdot \frac{n_i^2}{N_D} + \sqrt{\frac{D_n}{\tau_n}} \cdot \frac{n_i^2}{N_A} \right) \quad (16)$$

هم چنین ویژگی های فتوولتائیک از معادله های (۱۷) تا (۲۰) به صورت زیر محاسبه می شوند.

$$J_{SC} = qG(L_n + L_p) \quad \text{جریان اتصال کوتاه } (I_{SC}) \quad (17)$$

$$V_{oc} = \frac{nk_B T}{q} \ln \left( \frac{J_{SC}}{J_0} + 1 \right) \quad \text{ولتاژ مدار باز } (V_{OC}) \quad (18)$$

$$FF = \frac{V_{oc} I_{sc}}{V_m I_m} \quad \text{فاکتور پر شدگی } (FF) \quad (19)$$

$$\eta = \frac{P_{out}}{P_{in}} = \frac{V_m I_m}{P_{in}} \quad \text{بازده } (\eta) \quad (20)$$

های بار الکتریکی شامل الکترون و حفره بدون مشکل از لایه انتقال دهنده ی حامل بار الکتریکی به الکترودها شارش می یابند و سرعت باز ترکیب سطحی الکترون و حفره نیز نامحدود در نظر گرفته می شود. بنابراین در این وضعیت شرایط مرزی دریکله برای پتانسیل اتصال اهمی به صورت مجموعه ولتاژ داخلی و ولتاژ بایاس در نظر گرفته می شوند. همین شرایط نیز برای حامل های بار الکتریکی الکترون و حفره در نظر گرفته می شوند [۲۷-۲۹].

معادله های مدل رانش-نفوذ در حالت پایا تحت تابش با شار فوتون ثابت  $1000 \text{ W/m}^2$  و ولتاژ بایاس مستقیم در زمان  $t=0$  حل می شوند. شرایط مرزی لازم برای حل آن ها به این صورت است که تغییرات زمان  $\Delta t=0$  فرض می شود و ولتاژ بایاس مستقیم  $V_{\text{applied potential}}$  به صورت تغییرات ولتاژ  $\Delta V$  در دو حالت اتصال اهمی و اتصال شاتکی بر روی سامانه در نظر گرفته می شوند [۲۷-۲۹].

در حالت اتصال اهمی تجمع بار الکتریکی در ناحیه تماس الکتروده و سلول خورشیدی پروسکایت وجود ندارد و حامل

$$V = \frac{k_B T}{q} \left( \ln \left( \frac{n_{eq}}{\gamma_n n_{i, \text{eff}}} \right) + \frac{1}{2} \ln \left( \frac{N_v}{N_c} \right) \right) - \frac{1}{q} \left( \Delta E_f + \frac{1}{2} E_g \right) - \chi + V_0 \quad \Rightarrow \quad V = V_{\text{eq}} + V_0 \quad (21)$$

$$n = \frac{1}{2} (N_d^+ - N_a^-) + \frac{1}{2} \sqrt{(N_d^+ - N_a^-)^2 + 4\gamma_n \gamma_p n_{i, \text{eff}}^2} \quad (22)$$

$$p = -\frac{1}{2} (N_d^+ - N_a^-) + \frac{1}{2} \sqrt{(N_d^+ - N_a^-)^2 + 4\gamma_n \gamma_p n_{i, \text{eff}}^2} \quad (23)$$

لایه انتقال دهنده ی حامل بار الکتریکی به الکترودها با سد پتانسیل شاتکی رو به رو می شوند. سرعت باز ترکیب سطحی الکترون و حفره نیز محدود در نظر گرفته می شود. بنابراین

در حالت اتصال شاتکی تجمع بار الکتریکی در ناحیه تماس الکتروده و سلول خورشیدی پروسکایت وجود دارد. حامل های بار الکتریکی شامل الکترون و حفره هنگام شارش یافتن از

برای حامل های بار الکتریکی الکترون و حفره هم قرار داده می شوند [۲۷-۲۹].

در این وضعیت شرایط مرزی نیومن برای پتانسیل اتصال شاتکی به صورت مجموعه ولتاژ داخلی و ولتاژ بایاس، الکترون خواهی و سد پتانسیل در نظر گرفته می شود که همین شرایط

$$V = V_0 - \Phi_B - \chi_0 - V_{eq,adj} \quad \Phi_B = \Phi_m - \chi_0 \quad V_{eq,adj} = \frac{\Delta E_F}{q} \quad (24)$$

$$\mathbf{J}_n \cdot \mathbf{n} = -qv_{s,n}(n - n_0) \quad n_0 = N_c \exp\left(-\frac{q\Phi_B}{k_B T}\right) \quad v_{s,n} = \frac{A_n^* T^2}{qN_c} \quad (25)$$

$$\mathbf{J}_p \cdot \mathbf{n} = qv_{s,p}(p - p_0) \quad p_0 = N_v \exp\left(-\frac{q(E_g - \Phi_B)}{k_B T}\right) \quad v_{s,p} = \frac{A_p^* T^2}{qN_v} \quad (26)$$

همکاران (۲۰۲۴) طبق شکل ۱ به عنوان ساختار مرجع انتخاب می شود [۲۶] و به صورت دو بعدی متقارن طراحی می شود که پس از دوران حول محور بتواند ساختار استوانه ای سلول خورشیدی پروسکایت لیفی را ارائه دهد. لایه های مختلف بر حسب مواد به کار رفته در ساختار به صورت افقی در راستای شعاع لیف بر روی هم قرار می گیرند و سپس برای حل با روش حجم محدود از المان مربعی به منظور مش ریزی استفاده می شود.

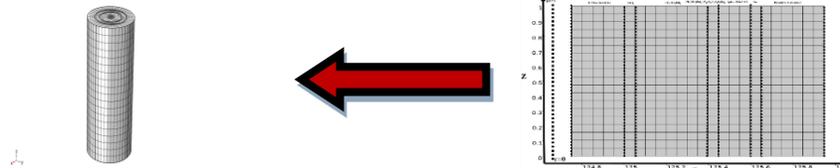
### ۳- نتایج و بحث

#### ۳-۱- اعتبار سنجی

در کار حاضر به منظور اعتبارسنجی، یک سلول خورشیدی پروسکایت لیفی شکل هسته-پوسته n-i-p با ساختار سیم تیتانیوم Ti / قلع اکسید SnO<sub>2</sub> / لایه پروسکایت سرب دار استاندارد CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> / لایه پروسکایت سرب دار استاندارد به همراه پلیمر CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub>/PJ71 اسپيرو-او ام ای تد Spiro-OMeTAD / طلا Au بر اساس مطالعه تجربی خی و

جدول ۱- جدول اطلاعات اپتو الکترونیکی مواد مورد استفاده در شبیه سازی [۶, ۲۶, ۲۹, ۳۵, ۳۶].

پارامترها	SnO <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> /PJ71	Spiro-OMeTAD
ضخامت (Thickness (μm)	0.050	0.345	0.050	0.150
گاف انرژی (E <sub>g</sub> (eV)	3.950	1.500	2.160	2.910
کشش الکترونی (χ (eV)	4.310	3.930	3.240	2.310
ثابت دی الکتریک عبوردهی نسبی (ε <sub>r</sub> (-)	9.000	6.500	6.500	3.000
چگالی حالات موثر باند هدایت (N <sub>c</sub> (1/cm <sup>3</sup> )	2.200×10 <sup>18</sup>	2.200×10 <sup>18</sup>	2.200×10 <sup>18</sup>	2.200×10 <sup>18</sup>
چگالی حالات موثر باند ظرفیت (N <sub>v</sub> (1/cm <sup>3</sup> )	1.800×10 <sup>19</sup>	1.800×10 <sup>19</sup>	1.800×10 <sup>19</sup>	1.800×10 <sup>19</sup>
تحرك پذیری الکترون (μ <sub>n</sub> (cm <sup>2</sup> /V.s)	10.000	5.000	10.000	2.000×10 <sup>-4</sup>
تحرك پذیری حفره (μ <sub>p</sub> (cm <sup>2</sup> /V. s)	10.000	5.000	10.000	2.000×10 <sup>-4</sup>
چگالی سطحی یکنواخت الکترون دهنده (N <sub>a</sub> (1/cm <sup>3</sup> )	1.000×10 <sup>19</sup>	1.000×10 <sup>19</sup>	1.000×10 <sup>13</sup>	0
چگالی سطحی یکنواخت الکترون پذیرنده (N <sub>d</sub> (1/cm <sup>3</sup> )	0	1.000×10 <sup>19</sup>	1.000×10 <sup>13</sup>	5.000×10 <sup>16</sup>
ضریب باز ترکیب تابشی (C (cm <sup>3</sup> /s)	5.300×10 <sup>-11</sup>	3.000×10 <sup>-9</sup>	5.300×10 <sup>-11</sup>	5.300×10 <sup>-11</sup>
چگالی کل نقص (N <sub>t</sub> (1/cm <sup>3</sup> )	1.000×10 <sup>10</sup>	3.000×10 <sup>14</sup>	1.000×10 <sup>10</sup>	1.000×10 <sup>10</sup>
سرعت ولتاژ حرارتی الکترون (V <sub>tn</sub> (cm/s)	1.000×10 <sup>07</sup>	1.000×10 <sup>07</sup>	1.000×10 <sup>07</sup>	1.000×10 <sup>07</sup>
سرعت ولتاژ حرارتی حفره (V <sub>tp</sub> (cm/s)	1.000×10 <sup>07</sup>	1.000×10 <sup>07</sup>	1.000×10 <sup>07</sup>	1.000×10 <sup>07</sup>
سطح مقطع گیر انداختن تله ای الکترون (σ <sub>n</sub> (cm <sup>2</sup> )	1.000×10 <sup>-15</sup>	1.000×10 <sup>-15</sup>	1.000×10 <sup>-15</sup>	1.000×10 <sup>-15</sup>
سطح مقطع گیر انداختن تله ای حفره (σ <sub>p</sub> (cm <sup>2</sup> )	1.000×10 <sup>-15</sup>	1.000×10 <sup>-15</sup>	1.000×10 <sup>-15</sup>	1.000×10 <sup>-15</sup>
ضریب باز ترکیب اوزه (α (cm <sup>6</sup> /s)	1.000×10 <sup>-30</sup>	1.000×10 <sup>-30</sup>	1.000×10 <sup>-30</sup>	1.000×10 <sup>-30</sup>



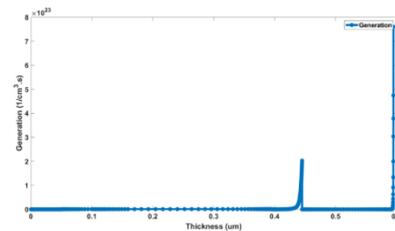
شکل ۱- تصویر طراحی شده مش زده سلول خورشیدی پروسکایت بر پایه لیف مورد نظر بر اساس کار تجربی خی و همکاران [۲۶].

ساختار هسته و پوسته با مغز تیتانیوم، تیتانیوم به عنوان یک رسانای الکترونی عمل می‌کند که می‌تواند به بهبود جمع‌آوری الکترون‌ها و کاهش باز ترکیب الکترون-حفره کمک کند. این ساختار می‌تواند به کاهش باز ترکیب‌های ناخواسته و افزایش بازدهی تولید نوری در سلول خورشیدی کمک کند. انتخاب مواد، کیفیت ساخت و تنظیم پارامترهای پروسکایت در ساختار هسته و پوسته می‌تواند تأثیر قابل توجهی در بازده سلول خورشیدی پروسکایت داشته باشد [۱۹]. نرخ تولید حامل بار الکتریکی مدل سازی شده بر اساس کار خی و همکاران در شکل ۲ نشان داده شده است [۲۶]. همان طور که در نمودار نرخ تولید الکترون و حفره قابل مشاهده است، یک توزیع طیفی از تولید حامل‌های بار الکتریکی در راستای ساختار هسته و پوسته‌ی سامانه در امتداد ضخامت لایه پروسکایت وجود دارد که احتمالاً به دلیل حالت انحنا ساختار لایه نیمه رسانا لایه پروسکایت، رفتار اپتوالکترونیکی مرتبط با شعاع و درهم تنیدگی نواحی دانه مرزی است [۷, ۱۴, ۱۸]. علاوه بر این در نمودارهای مرتبط با باز ترکیب مطابق شکل ۳ مشاهده می‌شود که بیشترین تأثیر بر روی کاهش بازده تبدیل توان مربوط به باز ترکیب تابشی است و بعد از آن به ترتیب باز ترکیب شاکلی-رید-هال و باز ترکیب اوزه موثر

در سلول‌های خورشیدی که از مواد پروسکایت لیفی شکل هسته و پوسته با مغز تیتانیوم استفاده می‌کنند، تولید و باز ترکیب الکترون‌ها و حفره‌ها فرآیندهای کلیدی هستند که کارایی سلول خورشیدی را تعیین می‌کنند. تولید الکترون و حفره در سلول‌های خورشیدی پروسکایت لیفی به این صورت است: نور خورشید توسط لایه‌ی پروسکایت جذب می‌شود که منجر به تحریک الکترون‌ها از باند ظرفیت به باند هدایت و ایجاد حفره‌ها در باند ظرفیت می‌شود. باز ترکیب تابشی زمانی رخ می‌دهد که الکترون‌ها و حفره‌ها دوباره با هم ترکیب شوند و فوتون‌های نور را منتشر می‌کنند. باز ترکیب تابشی معمولاً در موادی با پهنای باند گاف انرژی کوچک‌تر و کیفیت کریستالی پایین دیده می‌شود. باز ترکیب شاکلی-رید-هال به وجود نقص‌ها در ساختار کریستالی مربوط می‌شود. نقاط شکست، نقص‌ها یا ناخالصی‌ها می‌توانند به عنوان مراکز باز ترکیبی عمل کنند که در آن الکترون‌ها و حفره‌ها می‌توانند با یکدیگر ترکیب شوند بدون اینکه فوتون تولید کنند. باز ترکیب اوزه در مواد نیمه‌رسانا با تراکم بالای حامل‌های بار رخ می‌دهد. در این نوع باز ترکیب، یک الکترون و یک حفره با هم ترکیب می‌شوند و انرژی حاصله به جای اینکه به صورت فوتون منتشر شود، به الکترون دیگری منتقل می‌شود. در

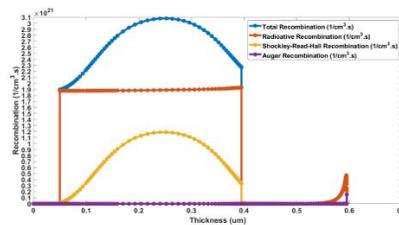
تراز انرژی فرمی حفره  $E_{Fp}$  و سطح تراز انرژی ظرفیت  $E_v$  مشخص می‌باشد. همان‌طور که از نمودارهای تراز انرژی قابل درک است در بین ناحیه‌ی سطح مشترک سیم رسانا و قلع اکسید یک ناحیه لبه مرزی بین لایه‌ها وجود دارد که با توجه به مقاومت اتصال پایین تیتانیوم به صورت اتصال شاتکی قرار داده شده است. بنابراین آند سیم تیتانیوم به عنوان یک هدایت کننده‌ی مناسب الکترون و سد حفره عمل می‌کند. در کار تجربی‌خی و همکاران در بین ناحیه سطح مشترک تیتانیوم و قلع اکسید یک ناحیه‌ی مرزی صعودی ایجاد می‌شود. علت این پدیده این است که وقتی سطح انرژی فرمی یا تابع کار الکتروند آند تیتانیوم از سطح تراز انرژی فرمی وابسته به ناخالصی لایه انتقال دهنده‌ی الکترون کوچک تر باشد و هم چنین سطح تراز انرژی فرمی وابسته به ناخالصی لایه‌ی انتقال دهنده الکترون و بیشینه تراز انرژی ظرفیت لایه انتقال دهنده‌ی الکترون بسیار به هم نزدیک باشند، یک لبه‌ی صعودی در ناحیه‌ی سطح مشترک شکل می‌گیرد. این سطوح انرژی نشان دهنده‌ی آرایش یافتگی پله‌ای نزولی به صورت برهم نهی تابع کار تیتانیوم و سطح انرژی فرمی لایه انتقال دهنده الکترون می‌باشند، لذا انباشتگی حامل‌های بار الکتریکی در ناحیه‌ی سطح مشترک قابل نظر می‌باشد. این امر با توجه به مقاومت الکتریکی ناحیه‌ی تماس تیتانیوم، موجب کاهش یافتن نرخ باز ترکیب سطحی، کاهش مقاومت سری و افزایش مقاومت موازی در ناحیه‌ی سطح مشترک می‌شود که منجر به افزایش فاکتور پر شدگی و افزایش بازده‌ی نهایی

هستند به صورتی که در حالت نهایی یک مقدار باز ترکیب کلی را ایجاد می‌کنند. هم‌چنین در نمودارهای مرتبط با جریان الکتریکی در شکل ۴ مقادیر متفاوت همه جریان‌های الکتریکی حاکم بر سلول خورشیدی پروسکایت لیفی به صورت کامل قابل مشاهده است که مجموع آن خود را به صورت جریان الکتریکی نشان می‌دهد.



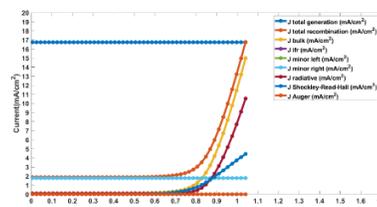
شکل ۲- نمودار نرخ تولید الکترون حفره بر حسب ضخامت

ناحیه محاسبه شده.



شکل ۳- نمودارهای باز ترکیب بر حسب ضخامت ناحیه محاسبه

شده.

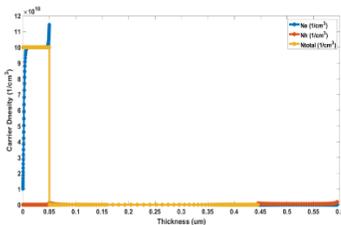


شکل ۴- نمودارهای جریان‌های حامل بار الکتریکی بر حسب

ولتاژ.

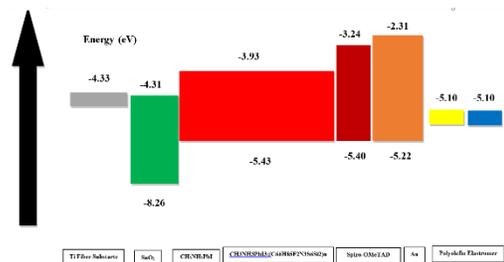
در نمودارهای تراز انرژی در شکل ۵ و شکل ۶ سطح تراز انرژی هدایت  $E_c$ ، سطح تراز انرژی فرمی الکترون  $E_{Fn}$ ، سطح

شکل ۷ و شکل ۸ به ترتیب مربوط به نمودار چگالی حامل بار الکتریکی و نمودار چگالی جریان الکتریکی بر حسب ضخامت ناحیه ی محاسبه شده هستند. همان طور که در شکل ۷، شکل ۸ و شکل ۱۲ می توان دید، با در نظر گرفتن غلظت های الکترون، حفره و کل حامل بار الکتریکی و هم چنین جریان های الکتریکی الکترون، حفره و کل در کنار یکدیگر در یک میدان الکتریکی مشخص با پتانسیل الکتریکی معین همراه با توزیع بار الکتریکی ثابت می توان مقدار جریان الکتریکی را در هر نقطه نشان داد. در سلول خورشیدی پروسکایت لیفی به دلیل کاهش وجود ساختارهای بی نظم تحت تنش پسماند -به ویژه در میان نواحی دانه مرزی لایه ی جاذب پروسکایت- معمولاً چگالی حامل بار الکتریکی و چگالی جریان الکتریکی به صورت مناسب در راستای ضخامت توزیع می شوند [۲۴].

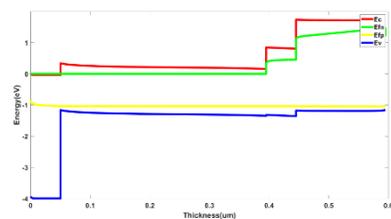


شکل ۷- نمودار چگالی حامل بار الکتریکی بر حسب ضخامت ناحیه محاسبه شده.

تبدیل سلول خورشیدی پروسکایت می گردد. با توجه به نمودار تراز انرژی، در بین ناحیه ی سطح مشترک قلع اکسید و متیل آمونیوم سرب پدید یک ناحیه ی مرزی نزولی ایجاد شده است. هم چنین در بین ناحیه ی سطح مشترک پروسکایت و پلیمر چند منظوره PJ71 نیز یک ناحیه ی مرزی نزولی ایجاد شده است. علت این پدیده این است که بزرگی اندازه تراز انرژی هدایت به صورت قلع اکسید < متیل آمونیوم سرب پدید < PJ71 هستند که باعث یک هدایت کنندگی مناسب الکترون و سد کنندگی مناسب حفره می شوند. از طرف دیگر در بین ناحیه ی سطح مشترک متیل آمونیوم سرب پدید و Spiro-OMeTAD یک ناحیه ی مرزی صعودی ایجاد شده است. این اختلاف پتانسیل باعث هدایت مناسب حامل های بار الکتریکی حفره می شود.



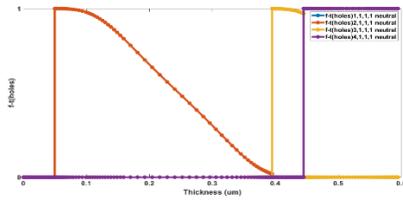
شکل ۵- طرح تراز باند گاف انرژی بر اساس کار تجربی خی و همکاران [۲۶].



شکل ۶- نمودار گاف انرژی بر حسب ضخامت ناحیه ی محاسبه شده.

شکل ۹- نمودار احتمال اشغال نقص های عمیق برای الکترون بر

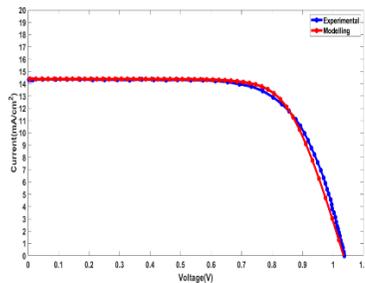
حسب ضخامت ناحیه ی محاسبه شده



شکل ۱۰- نمودار احتمال اشغال نقص های عمیق برای حفره بر

حسب ضخامت ناحیه ی محاسبه شده.

اعتبار سنجی نمودار جریان و ولتاژ کار تجربی خلی و همکاران [۲۶] و نمودار جریان و ولتاژ کار مدل سازی حاضر برای سلول خورشیدی پروسکایت لیفی در شکل ۱۱ نمایش داده شده است. همان طور که در شکل ۱۱ قابل مشاهده است، نمودار تجربی و نمودار کار مدل سازی حاضر به خوبی بر هم منطبق شده اند.

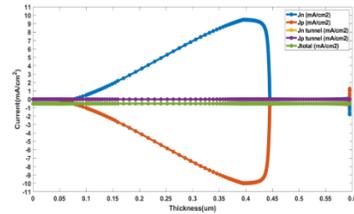


شکل ۱۱- اعتبار سنجی نمودار جریان و ولتاژ کار تجربی خلی و

همکاران [۲۶] و نمودار جریان و ولتاژ کار مدل سازی حاضر برای

سلول خورشیدی پروسکایت لیفی.

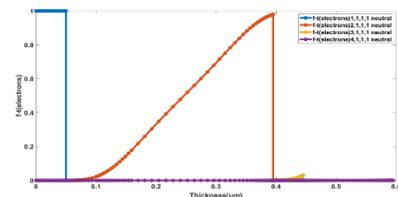
جدول ۲- مطالعه ی مقایسه ای ویژگی های فتوولتائیک سلول خورشیدی پروسکایت لیفی.



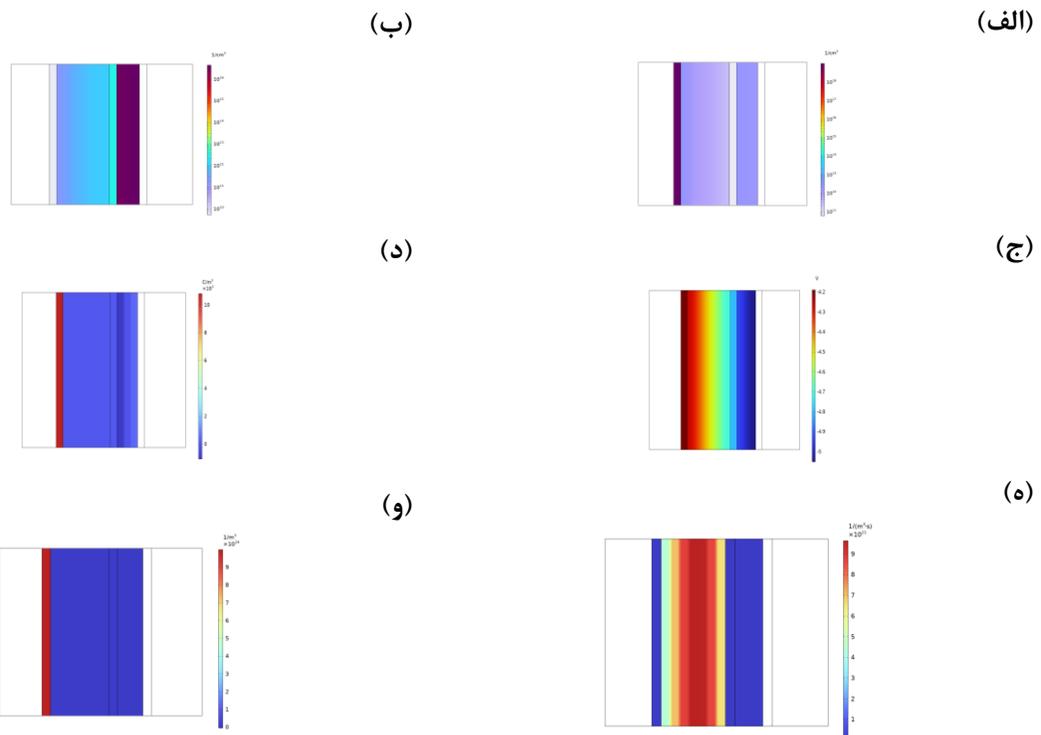
شکل ۸- نمودار چگالی جریان الکتریکی بر حسب ضخامت

ناحیه محاسبه شده.

شکل ۹ و شکل ۱۰ به ترتیب مربوط به احتمال اشغال نقص های عمیق برای الکترون و حفره هستند. همان گونه که در شکل ۹ و شکل ۱۰ مشاهده می شود، می توان مقدار احتمال اشغال نقص های عمیق برای الکترون و حفره را مشاهده کرد که به صورت واضح با مقدار تولید الکترون و حفره و باز ترکیب در ارتباط هستند. هم چنین در سلول خورشیدی پروسکایت لیفی به دلیل انحنای موجود در ساختار ماده، احتمال نقص های عمیق برای حامل بار الکتریکی افزایش می یابد. بنابراین برای بهبود انتقال بار الکتریکی در سلول خورشیدی پروسکایت لیفی به منظور افزایش بازده می توان از نمودارهای چگالی حامل بار الکتریکی، چگالی جریان الکتریکی و احتمال اشغال نقص های عمیق برای حامل بار الکتریکی استفاده کرد [۲۵].



بازده تبدیل توان PCE (%)	فاکتور پر شدگی FF (%)	ولتاژ بیشینه $V_{mpp}$ (V)	جریان بیشینه $J_{mpp}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	ولتاژ مدار باز $V_{oc}$ (V)	جریان اتصال کوتاه $J_{sc}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	
10.6600	71.4300	0.807724	13.20000	1.038000	14.38000	کار تجربی خی و همکاران [۲۶]
10.6561	71.6039	0.806792	13.20801	1.034384	14.38735	کار مدل سازی حاضر



شکل ۱۲- نتایج فتوولتائیک مدل سازی شده دو بعدی متقارن در راستای شعاع سلول خورشیدی پروسکایت لیفی بر پایه ی کار تجربی خی و همکاران [۲۶] (الف) غلظت الکترون (ب) غلظت حفره (ج) پتانسیل الکتریکی (د) توزیع بار الکتریکی (ه) باز ترکیب کلی (و) ناخالصی.

لایه پروسکایت استوانه ای، الکترون ها به نوار رسانش برانگیخته می‌شوند و حفره های متناظر در نوار ظرفیت به وجود می‌آیند که تفکیک جفت‌های الکترون- حفره نامیده می‌شود. الکترون های برانگیخته به حالت پایه ی خود برمی‌گردند که این عمل از طریق فرآیند باز ترکیب می‌تواند

### ۳-۲- مطالعه ی بررسی تغییرات باز ترکیب

#### تابشی لایه ی پروسکایت بر روی بازده

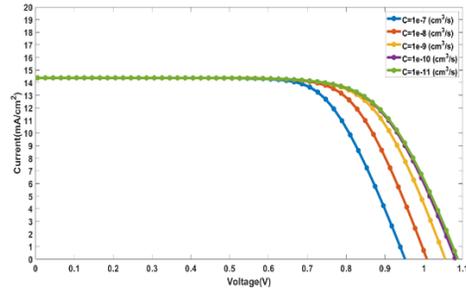
سلول خورشیدی پروسکایت لیفی هسته و پوسته نیاز به حامل‌های بار الکتریکی آزاد دارد تا بتواند کار کند. نخست با تابش امواج الکترومغناطیس بر سطح لیف و سپس نفوذ به

صورت گیرد. هنگامی که الکترون از نوار رسانش به نوار ظرفیت می رود، یک جفت الکترون-حفره نابود می شود. نقص های موجود در لایه پروسکایت منحنی شکل، اغلب ایجاد باز ترکیب می کنند که موثرترین آنها باز ترکیب تابشی مستقیم است. طول عمر حامل های بار الکتریکی مدت زمانی است که جدول ۳ و شکل ۱۳ نشان داده شده است، با فرض این که سطح مقطع گیر انداختن تله ای الکترون و حفره  $cm^2 \times 10^{-15}$ ، چگالی کلی نقص الکترون و حفره لایه پروسکایت  $1/cm^3 \times 10^{14} \times 3/000$ ، سرعت حرارتی الکترون و حفره ماده پروسکایت  $cm/s \times 10^7 \times 1/000$  و سطح مقطع گیر انداختن اوژه الکترون و حفره  $cm^2/s \times 10^{-30} \times 1/000$  باشد، مقدار ضریب مربوط به باز ترکیب تابشی مستقیم الکترون و حفره از  $cm^3/s \times 10^{-11} \times 1/000$  تا  $cm^3/s \times 10^{-7} \times 1/000$  افزایش می یابد. جریان اتصال کوتاه به تعداد حامل های بار آزاد تولید شده توسط تابش نور وابسته است و معمولاً با افزایش ضریب باز ترکیب تابشی مستقیم تغییر چندانی نمی کند، چون این پارامتر بیشتر به تعداد فوتون های جذب شده توسط سلول وابسته است. با این حال ولتاژ مدار باز که به تفاوت انرژی بین نوار رسانش و نوار ظرفیت مرتبط است، به شدت تحت تأثیر باز ترکیب حامل های بار قرار می گیرد. افزایش ضریب باز ترکیب تابشی مستقیم منجر به کاهش ولتاژ مدار باز می شود، زیرا حامل های بار قبل از جمع آوری توسط الکترودها از بین می روند. این کاهش در ولتاژ مدار باز به نوبه خود منجر به کاهش جریان بیشینه و ولتاژ بیشینه می شود

الکترون یا حفره به دام می افتد و باعث تخریب عملکرد سلول خورشیدی پروسکایت می شود. هر چه این زمان یعنی طول عمر بیش تر باشد، احتمال به دام افتادن حامل ها کمتر می شود و حامل ها این شانس را دارند که قبل از باز ترکیب توسط الکترودها جمع آوری شوند. همان طور که در که هر دو مستقیماً بر فاکتور پر شدگی تأثیر می گذارند. فاکتور پر شدگی نسبت حاصل ضرب جریان بیشینه در ولتاژ بیشینه بر حاصل ضرب جریان اتصال کوتاه در ولتاژ مدار باز و در حقیقت نسبت توان بیشینه به توان ایده آل است که نشان دهنده توانایی سلول خورشیدی پروسکایت لیفی در تبدیل توان ورودی به توان خروجی است. کاهش فاکتور پر شدگی نشان دهنده کاهش کارایی سامانه است. در نهایت بازده تبدیل توان که به عنوان معیاری از کل کارایی سلول خورشیدی پروسکایت لیفی شناخته می شود، تحت تأثیر مستقیم این پارامترها قرار دارد. بهبود بازده تبدیل توان مستلزم کاهش باز ترکیب حامل ها، افزایش ولتاژ مدار باز و بهینه سازی فاکتور پر شدگی است. بنابراین مدیریت و کاهش نقص های موجود در لایه پروسکایت و افزایش طول عمر حامل های بار، مهم ترین عامل افزایش بازده سلول های خورشیدی پروسکایت است. لذا افزایش متغیر ضریب باز ترکیب تابشی باعث کاهش مقدار ولتاژ مدار باز در عین ثابت ماندن جریان اتصال کوتاه می شود که می تواند منجر به کاهش فاکتور پر شدگی و در نتیجه کاهش بازده تبدیل توان سلول خورشیدی پروسکایت لیفی شود.

شکل ۱۳- نمودارهای جریان و ولتاژ متفاوت حاصل از تغییر

ضریب باز ترکیب تابشی مستقیم.



جدول ۳- ویژگی های فتوولتائیک سلول خورشیدی پروسکایت لیفی بر حسب تغییرات ضریب باز ترکیب تابشی.

بازده تبدیل توان PCE (%)	فاکتور پر شدگی FF (%)	ولتاژ بیشینه $V_{mpp}$ (V)	جریان بیشینه $J_{mpp}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	ولتاژ مدار باز $V_{oc}$ (V)	جریان اتصال کوتاه $J_{sc}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	ضریب باز ترکیب تابشی C(cm <sup>3</sup> /s)
9.6398	70.4121	0.706353	13.6473	0.951579	14.3872	$1.000 \times 10^{-07}$
10.3837	71.6116	0.766452	13.5478	1.007834	14.3873	$1.000 \times 10^{-08}$
10.8218	71.2852	0.806583	13.4168	1.055161	14.3874	$1.000 \times 10^{-09}$
10.9524	70.3991	0.826753	13.2475	1.081337	14.3874	$1.000 \times 10^{-10}$
10.9674	70.0922	0.826734	13.2660	1.087562	14.3874	$1.000 \times 10^{-11}$

شکل ۱۴- نمودارهای جریان و ولتاژ حاصل از تغییرات سطح مقطع

گیر انداختن تله ای حامل بار الکتریکی.

۳-۳- مطالعه ی بررسی تغییرات سطح مقطع

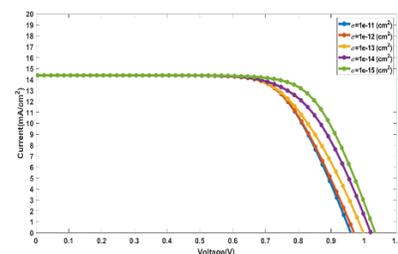
گیر انداختن تله ای حامل بار الکتریکی

لایه پروسکایت بر روی بازده

سطح مقطع گیر انداختن تله ای حامل بار الکتریکی در

ساختار لایه پروسکایت به عنوان یک متغیر تاثیرگذار در باز

ترکیب شاکلی-رید-هال است. همان طور که در



۳-۴- مطالعه ی بررسی تغییرات چگالی نقص

کلی حامل بار الکتریکی لایه پروسکایت

بر روی بازده

کیفیت لایه پروسکایت بر تعداد حامل های بار الکتریکی تولید

شده و در نتیجه عملکرد سلول خورشیدی پروسکایت تأثیر

می گذارد. نقص های موجود در لایه پروسکایت اغلب سبب

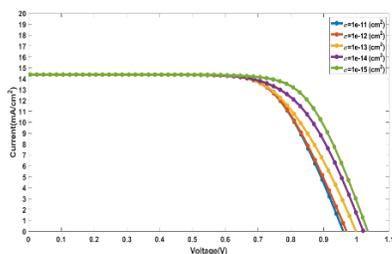
باز ترکیب می شوند که رایج ترین آنها باز ترکیب شاکلی-رید-

هال است. هرچه چگالی نقص بیشتر باشد، کیفیت لایه

پروسکایت پایین تر است و میزان باز ترکیب حامل ها بیشتر از میزان تولید آنها خواهد بود. چگالی بالای نقص ها باعث کاهش زمان نیمه عمر حامل بار الکتریکی و کاهش طول نفوذ آن، افزایش نرخ باز ترکیب و کاهش بازده سلول خورشیدی پروسکایت بر پایه ی منسوج می شود. یکی از فاکتورهای تعیین کننده کیفیت لایه پروسکایت، طول رانش حامل بار الکتریکی در این لایه است که مسافت طی شده توسط حامل های بار الکتریکی از زمان تولید تا باز ترکیب را نشان می دهد و به طول عمر حامل های بار الکتریکی وابسته است. بنابراین با افزایش طول عمر حامل های بار الکتریکی، نفوذ آنها بیشتر می شود و میزان جمع آوری حامل های بار الکتریکی توسط الکترودها افزایش می یابد که نشان دهنده کیفیت عملکرد لایه پروسکایت است و در نهایت منجر به افزایش فاکتور پر شدگی و هم چنین افزایش تبدیل توان سلول خورشیدی پروسکایت می شود. همان طور که در جدول ۵ و شکل ۱۵ نشان داده شده است، با فرض این که ضریب باز ترکیب تابشی الکترون و حفره  $3/000 \times 10^{-9} \text{ cm}^2/\text{s}$ ، سطح مقطع گیر انداختن تله ای الکترون و حفره  $15-10 \times 10^{-10} \text{ cm}^2$ ، سرعت حرارتی الکترون و حفره لایه پروسکایت  $1/000 \times 10^7 \text{ cm/s}$  و سطح مقطع گیر انداختن اوژه الکترون و حفره  $30-10 \times 10^{-10} \text{ cm}^2/\text{s}$  باشد، مقدار چگالی کلی نقص الکترون و حفره لایه پروسکایت از  $1/10^{13}$  تا  $1/10^{17} \text{ cm}^{-3}$  افزایش داده شد. در نتیجه با افزایش مقدار چگالی کلی نقص الکترون و حفره لایه

پروسکایت، زمان نیمه عمر الکترون و حفره و هم چنین طول نفوذ الکترون و حفره کاهش می یابد. افزایش چگالی کلی نقص ها در لایه پروسکایت، تأثیرات قابل توجهی بر عملکرد سلول خورشیدی دارد. نقص های بیشتر به معنای افزایش تعداد تله هایی است که می توانند الکترون ها و حفره ها را به دام بیندازند، که منجر به افزایش نرخ باز ترکیب شاکلی-رید-هال می شود. نرخ بالاتر باز ترکیب شاکلی-رید-هال باعث کاهش طول عمر حامل های بار و در نتیجه کاهش جریان اتصال کوتاه می شود زیرا تعداد کمتری از حامل ها موفق به رسیدن به الکترودها قبل از باز ترکیب می شوند. هم چنین ولتاژ مدار باز نیز کاهش می یابد زیرا افزایش باز ترکیب منجر به کاهش چگالی حامل های بار آزاد در لایه جاذب می شود که نتیجه ی آن کاهش پتانسیل ایجاد شده در حالت مدار الکتریکی آزاد است. با افزایش چگالی نقص ها، جریان بیشینه و ولتاژ بیشینه در نقطه توان بیشینه نیز کاهش می یابد، زیرا بیشتر حامل ها قبل از رسیدن به این نقاط، باز ترکیب می شوند. این کاهش ها منجر به کاهش فاکتور پر شدگی می شود. در نهایت، تمام این تغییرات منجر به کاهش بازده تبدیل توان سلول خورشیدی پروسکایت لیفی می گردد. کاهش چگالی نقص ها و به دنبال آن کاهش نرخ باز ترکیب می تواند منجر به افزایش جریان اتصال کوتاه، افزایش ولتاژ مدار باز، افزایش فاکتور پر شدگی و در نتیجه افزایش بازده تبدیل توان شود که نشان دهنده اهمیت بالای بهینه سازی ساختار مواد و کاهش نقص ها است.

ها وجود خواهد داشت که قبل از باز ترکیب توسط الکترودها جمع آوری شوند. علاوه بر این، جریان بیشینه و ولتاژ بیشینه نیز با افزایش سطح مقطع گیر انداختن تله‌ای کاهش می‌یابند. این کاهش به دلیل افزایش باز ترکیب حامل‌های بار و کاهش تعداد حامل‌های جمع‌آوری شده توسط الکترودها در شرایط بهینه کارکرد سلول خورشیدی پروسکایت لیفی است. تحت تأثیر این تغییرات و با افزایش سطح مقطع گیر انداختن تله‌ای، فاکتور پر شدگی کاهش می‌یابد. در نهایت این تغییرات منجر به کاهش بازده تبدیل می‌شود. این نتایج نشان‌دهنده اهمیت کنترل دقیق متغیرهای مرتبط با سطح مقطع گیر انداختن تله‌ای برای بهینه‌سازی عملکرد سلول خورشیدی پروسکایت لیفی است. بهینه‌سازی این پارامترها می‌تواند منجر به افزایش طول عمر حامل‌های بار و در نتیجه بهبود بازده تبدیل توان شود.



شکل ۱۴- نمودارهای جریان ولتاژ حاصل از تغییرات سطح مقطع گیر انداختن تله‌ای حامل بار الکتریکی.

جدول ۴ و شکل ۱۴ نشان داده شده است، با در نظر گرفتن این که ضریب باز ترکیب تابشی الکترون و حفره  $10^{-9} \text{ cm}^3/\text{s}$ ، چگالی کلی نقص الکترون و حفره لایه  $10 \times 10^{10} / \text{cm}^3$ ، سرعت حرارتی الکترون و حفره لایه پروسکایت  $10^{14} / \text{cm}^3$ ، سرعت حرارتی الکترون و حفره لایه پروسکایت  $10^7 \text{ cm}^3/\text{s}$  و سطح مقطع گیر انداختن اوزة الکترون و حفره  $10^{-30} \text{ cm}^6/\text{s}$  باشد، مقدار سطح مقطع گیر انداختن تله‌ای الکترون و حفره از  $10^{-15} \text{ cm}^2$  تا  $10^{-11} \text{ cm}^2$  افزایش داده شد. در مطالعه‌ی حاضر، تأثیر افزایش سطح مقطع گیر انداختن تله‌ای الکترون و حفره بر عملکرد سلول‌های خورشیدی پروسکایت لیفی مورد بررسی قرار گرفت. یکی از نتایج مهم این تحقیق نشان می‌دهد که افزایش سطح مقطع گیر انداختن تله‌ای، منجر به افزایش نرخ باز ترکیب شاکلی-رید-هال می‌شود. یکی از پیامدهای کاهش طول عمر حامل‌های بار الکتریکی، کاهش جریان اتصال کوتاه است. با افزایش سطح مقطع گیر انداختن تله‌ای، احتمال به دام افتادن حامل‌های بار افزایش می‌یابد که مستقیماً باعث کاهش جریان اتصال کوتاه می‌شود. از سوی دیگر، ولتاژ مدار باز نیز تحت تأثیر قرار می‌گیرد، زیرا کاهش طول عمر حامل‌ها به معنای افزایش نرخ باز ترکیب و کاهش ولتاژ مدار باز است. طول عمر حامل‌های بار الکتریکی یعنی مدت زمانی که الکترون یا حفره به دام می‌افتد و باعث تخریب عملکرد سلول خورشیدی پروسکایت می‌شود. هر چه این زمان یعنی طول عمر بیش تر باشد احتمال به دام افتادن حامل‌ها کمتر می‌شود و این شانس برای حامل

## ۳-۵- مطالعه ی بررسی تغییرات چگالی نقص

## کلی حامل بار الکتریکی لایه پروسکایت

## بر روی بازده

کیفیت لایه پروسکایت بر تعداد حامل های بار الکتریکی تولید شده و در نتیجه عملکرد سلول خورشیدی پروسکایت تأثیر می گذارد. نقص های موجود در لایه پروسکایت اغلب سبب باز ترکیب می شوند که رایج ترین آنها باز ترکیب شاکلی-رید-هال است. هرچه چگالی نقص بیشتر باشد، کیفیت لایه پروسکایت پایین تر است و میزان باز ترکیب حامل ها بیشتر از میزان تولید آنها خواهد بود. چگالی بالای نقص ها باعث کاهش زمان نیمه عمر حامل بار الکتریکی و کاهش طول نفوذ آن، افزایش نرخ باز ترکیب و کاهش بازده سلول خورشیدی پروسکایت بر پایه ی منسوج می شود. یکی از فاکتورهای تعیین کننده کیفیت لایه پروسکایت، طول رانش حامل بار الکتریکی در این لایه است که مسافت طی شده توسط حامل های بار الکتریکی از زمان تولید تا باز ترکیب را نشان می دهد و به طول عمر حامل های بار الکتریکی وابسته است. بنابراین با افزایش طول عمر حامل های بار الکتریکی، نفوذ آنها بیشتر می شود و میزان جمع آوری حامل های بار الکتریکی توسط الکترودها افزایش می یابد که نشان دهنده کیفیت عملکرد لایه پروسکایت است و در نهایت منجر به افزایش فاکتور پر شدگی و هم چنین افزایش تبدیل توان سلول خورشیدی پروسکایت می شود. همان طور که در جدول ۵ و شکل ۱۵

نشان داده شده است، با فرض این که ضریب باز ترکیب تابشی الکترون و حفره  $3 \times 10^{-9} \text{ cm}^3/\text{s}$ ، سطح مقطع گیر انداختن تله ای الکترون و حفره  $10^{-15} \times 10^{-15} \text{ cm}^2$ ، سرعت حرارتی الکترون و حفره لایه پروسکایت  $10^7 \times 10^7 \text{ cm/s}$  و سطح مقطع گیر انداختن اوژه الکترون و حفره  $3 \times 10^{-20} \text{ cm}^6/\text{s}$  باشد، مقدار چگالی کلی نقص الکترون و حفره لایه پروسکایت از  $1/\text{cm}^3$  تا  $10^{13} \times 10^{13}/\text{cm}^3$  افزایش داده شد. در نتیجه با افزایش مقدار چگالی کلی نقص الکترون و حفره لایه پروسکایت، زمان نیمه عمر الکترون و حفره و هم چنین طول نفوذ الکترون و حفره کاهش می یابند. افزایش چگالی کلی نقص ها در لایه پروسکایت، تأثیرات قابل توجهی بر عملکرد سلول خورشیدی دارد. نقص های بیشتر به معنای افزایش تعداد تله های است که می توانند الکترون ها و حفره ها را به دام بیندازند، که منجر به افزایش نرخ باز ترکیب شاکلی-رید-هال می شود. نرخ بالاتر باز ترکیب شاکلی-رید-هال باعث کاهش طول عمر حامل های بار و در نتیجه کاهش جریان اتصال کوتاه می شود زیرا تعداد کمتری از حامل ها موفق به رسیدن به الکترودها قبل از باز ترکیب می شوند. هم چنین ولتاژ مدار باز نیز کاهش می یابد زیرا افزایش باز ترکیب منجر به کاهش چگالی حامل های بار آزاد در لایه جاذب می شود که نتیجه ی آن کاهش پتانسیل ایجاد شده در حالت مدار الکتریکی آزاد است. با افزایش چگالی نقص ها، جریان بیشینه و ولتاژ بیشینه در نقطه توان بیشینه نیز کاهش می یابد، زیرا بیشتر حامل ها قبل از رسیدن

ترکیب می تواند منجر به افزایش جریان اتصال کوتاه، افزایش ولتاژ مدار باز، افزایش فاکتور پر شدگی و در نتیجه افزایش بازده تبدیل توان شود که نشان دهنده اهمیت بالای بهینه سازی ساختار مواد و کاهش نقص ها است.

به این نقاط، باز ترکیب می شوند. این کاهش ها منجر به کاهش فاکتور پر شدگی می شود. در نهایت، تمام این تغییرات منجر به کاهش بازده تبدیل توان سلول خورشیدی پروسکایت لیفی می گردد. کاهش چگالی نقص ها و به دنبال آن کاهش نرخ باز

جدول ۴- ویژگی های فتوولتائیک سلول خورشیدی پروسکایت لیفی بر حسب تغییرات سطح مقطع گیر انداختن تله ای حامل بار الکتریکی.

بازده تبدیل توان PCE (%)	فاکتور پر شدگی FF (%)	ولتاژ بیشینه $V_{mpp}$ (V)	جریان بیشینه $J_{mpp}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	ولتاژ مدار باز $V_{oc}$ (V)	جریان اتصال کوتاه $J_{sc}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	سطح مقطع گیر انداختن تله ای $\sigma$ (cm <sup>3</sup> /s)
9.6006	69.54	0.706409	13.59072382	0.959673	14.38660677	$1.000 \times 10^{-11}$
9.6027	68.83	0.726787	13.21254267	0.969765	14.38660768	$1.000 \times 10^{-12}$
9.6473	67.17	0.726725	13.27504233	0.998275	14.38661667	$1.000 \times 10^{-13}$
9.9671	67.88	0.767005	12.99489291	1.020665	14.3867035	$1.000 \times 10^{-14}$
10.6561	71.60	0.806792	13.20800562	1.034384	14.3873491	$1.000 \times 10^{-15}$

جدول ۵- ویژگی های فتوولتائیک سلول خورشیدی پروسکایت لیفی بر حسب تغییرات چگالی نقص کلی حامل بار الکتریکی.

بازده تبدیل توان PCE (%)	فاکتور پر شدگی FF (%)	ولتاژ بیشینه $V_{mpp}$ (V)	جریان بیشینه $J_{mpp}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	ولتاژ مدار باز $V_{oc}$ (V)	جریان اتصال کوتاه $J_{sc}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	چگالی نقص کلی $N_i$ (cm <sup>3</sup> /s)
11.208	74.66	0.8061	13.9041	1.0433	14.3898	$1.000 \times 10^{+13}$
11.026	73.65	0.8063	13.6744	1.0404	14.3891	$1.000 \times 10^{+14}$
9.8541	67.47	0.7672	12.8450	1.0156	14.3813	$1.000 \times 10^{+15}$
7.7479	59.04	0.6277	12.3442	0.9173	14.3050	$1.000 \times 10^{+16}$
5.4056	51.08	0.5094	10.6120	0.7768	13.6235	$1.000 \times 10^{+17}$

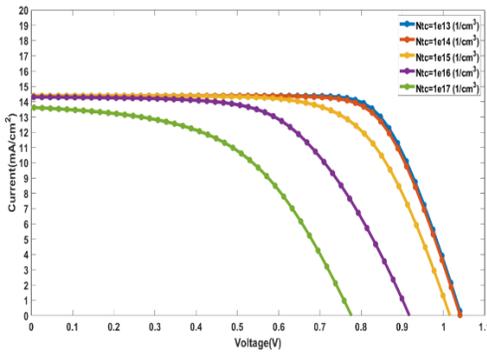
### ۳-۶- مطالعه ی بررسی تغییرات سرعت ولتاژ

#### حرارتی حامل بار الکتریکی لایه

#### پروسکایت بر روی بازده

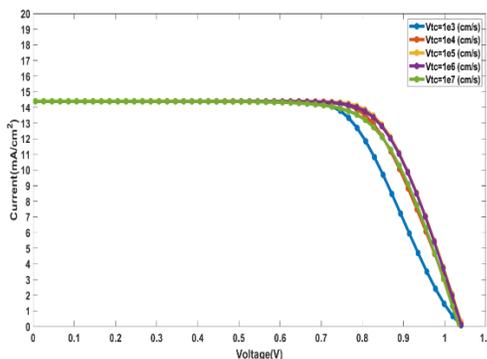
سرعت ولتاژ حرارتی حامل بار الکتریکی در لایه پروسکایت، لایه انتقال دهنده ی الکترون و لایه انتقال دهنده ی حفره یک فاکتور مهم است. با افزایش طول عمر، نفوذ حامل های بار الکتریکی بیشتر می شود و میزان جمع آوری آنها توسط الکترودها افزایش می یابد که نشان دهنده کیفیت عملکرد لایه های انتقال دهنده ی حاملها است و در نهایت منجر به افزایش فاکتور پر شدگی و افزایش بازده تبدیل توان سلول خورشیدی پروسکایت می گردد. تغییر جرم حامل های بار الکتریکی در میزان تحرک پذیری تأثیر گذار است.

جدول ۶ و شکل ۱۶ نشان داده شده است با فرض این که ضریب باز ترکیب تابشی الکترون و حفره  $9\text{cm}^3/\text{s}$ ،  $10 \times 10^3$ ، سطح مقطع گیر انداختن تله ای الکترون و حفره  $15\text{cm}^2$ ، چگالی کلی نقص الکترون و حفره لایه پروسکایت  $1/\text{cm}^3$  و  $14 \times 10^3$  و سطح مقطع گیر انداختن اوزه الکترون و حفره  $30 \times 10^3\text{cm}^6/\text{s}$  باشد، مقدار سرعت ولتاژ حرارتی الکترون و حفره ی ماده پروسکایت از  $10^3\text{cm/s}$  تا  $10^7\text{cm/s}$  افزایش داده شد.



شکل ۱۵- نمودارهای جریان ولتاژ حاصل از تغییرات چگالی نقص کلی حامل بار الکتریکی.

تحرک پذیری به شدت تابع دما است و نمی توان برای آن مقدار مشخصی تعیین کرد بلکه به صورت تجربی و در شرایط دمایی مختلف، مقادیر متفاوتی به دست می آید. همان طور که در



شکل ۱۶- نمودارهای جریان ولتاژ حاصل از تغییرات سرعت حرارتی حامل بار الکتریکی.

با افزایش مقدار سرعت ولتاژ حرارتی الکترون و حفره ی لایه پروسکایت، زمان نیمه ی عمر الکترون و حفره و هم چنین طول نفوذ الکترون و حفره کاهش یافتند. با افزایش سرعت

باز شود، اما کاهش زمان نیمه ی عمر الکترون و حفره به دلیل باز ترکیب سریع تر می تواند سبب کاهش ولتاژ مدار باز گردد. افزایش سرعت ولتاژ حرارتی سبب افزایش موقت جریان بیشینه می شود، اما همان طور که پیش تر نیز اشاره شد کاهش طول نفوذ و زمان نیمه ی عمر می تواند منجر به کاهش ولتاژ بیشینه شود. با افزایش سرعت ولتاژ حرارتی، فاکتور پر شدگی و در نتیجه بازده تبدیل توان افزایش می یابند.

ولتاژ حرارتی، جریان اتصال کوتاه روند کاهشی دارد، زیرا افزایش سرعت حرکت الکترون ها و حفره ها باعث می شود تا جمع آوری این حامل های بار الکتریکی توسط الکترودها بهتر انجام شود که سبب افزایش تعداد الکترون ها و حفره های جمع آوری شده و در نتیجه کاهش ناچیز جریان اتصال کوتاه تا یک مقدار بهینه می شود. ولتاژ مدار باز نیز می تواند تحت تأثیر افزایش سرعت ولتاژ حرارتی قرار گیرد. اگرچه انتظار می رود که افزایش سرعت حرکت حامل ها باعث بهبود ولتاژ مدار

جدول ۶- ویژگی های فتوولتائیک سلول خورشیدی پروسکایت لیفی بر حسب تغییرات سرعت ولتاژ حرارتی حامل بار الکتریکی.

سرعت ولتاژ حرارتی $V_t(\text{cm}^3/\text{s})$	جریان اتصال کوتاه $J_{sc}(\text{mA}/\text{cm}^2)$	ولتاژ مدار باز $V_{oc}(V)$	جریان بیشینه $J_{mp}(\text{mA}/\text{cm}^2)$	ولتاژ بیشینه $V_{mp}(V)$	فاکتور پر شدگی FF (%)	بازده تبدیل توان PCE (%)
$1.000 \times 10^{+3}$	14.38991255	1.043216	13.78649772	0.746214	68.5306	10.2877
$1.000 \times 10^{+4}$	14.38990203	1.043562	13.89271909	0.786107	72.7265	10.9212
$1.000 \times 10^{+5}$	14.38976778	1.043265	13.85830493	0.806142	74.4172	11.1718
$1.000 \times 10^{+6}$	14.38896595	1.041376	13.7538232	0.806246	74.0038	11.0890
$1.000 \times 10^{+7}$	14.3873491	1.034384	13.20800562	0.806792	71.6039	10.6561

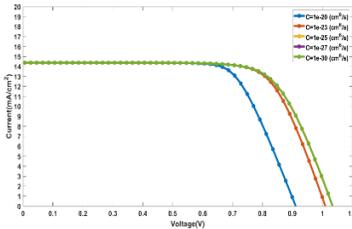
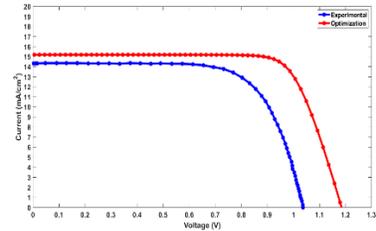
متناظر در نوار ظرفیت به وجود می آیند که تفکیک جفت های الکترون- حفره نامیده می شود. از طریق فرآیند باز ترکیب، الکترون های برانگیخته به حالت پایه ی خود برمی گردند. هنگامی که الکترون از نوار رسانش به نوار ظرفیت می رود، یک جفت الکترون- حفره نابود می شود. نقص های موجود در لایه پروسکایت منجر به باز ترکیب اوژه می شوند. همان طور که در

### ۳-۷- مطالعه ی بررسی تغییرات باز ترکیب

#### اوژه لایه پروسکایت بر روی بازده

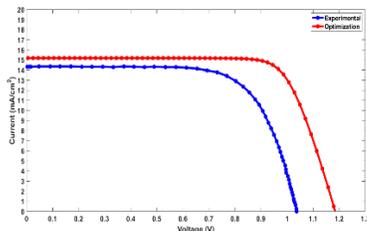
در ساختار سلول خورشیدی پروسکایت لیفی هسته و پوسته، حامل های بار الکتریکی آزاد در حال حرکت هستند. نور به سطح لیف می تابد و سپس به لایه پروسکایت نفوذ می کند، الکترون ها به نوار رسانش برانگیخته می شوند و حفره های

شکل ۱۸- مقایسه نمودارهای جریان و ولتاژ کار تجربی خی و همکاران [۲۶] و مقدار بهینه شده ی کار مدل سازی حاضر.



شکل ۱۷- نمودارهای جریان ولتاژ حاصل از تغییرات باز ترکیب اوژه.

فاکتور پر شدگی نیز تحت تأثیر افزایش ضریب باز ترکیب اوژه کاهش می‌یابد. این کاهش به دلیل افت ولتاژ مدار باز و تغییرات در نقاط بیشینه جریان و ولتاژ رخ می‌دهد. در نهایت بازده تبدیل توان سلول خورشیدی پروسکایت لیفی کاهش می‌یابد.



شکل ۱۸- مقایسه نمودارهای جریان و ولتاژ کار تجربی خی و همکاران [۲۶] و مقدار بهینه شده ی کار مدل سازی حاضر.

جدول ۷- ویژگی های فتوولتائیک سلول خورشیدی پروسکایت لیفی بر حسب تغییرات ضریب باز ترکیب اوژه.

بازده تبدیل توان	فاکتور پر شدگی	ولتاژ بیشینه	جریان بیشینه	ولتاژ مدار باز	جریان اتصال کوتاه	ضریب باز ترکیب اوژه
PCE (%)	FF (%)	$V_{mpp}$ (V)	$J_{mpp}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	$V_{oc}$ (V)	$J_{sc}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	$\alpha$ (cm <sup>3</sup> /s)

جدول ۷ و شکل ۱۷ مشاهده می شود با فرض این که ضریب باز ترکیب تابشی الکترون و حفره  $3/000 \times 10^{-9}$  cm<sup>3</sup>/s، سطح مقطع گیر انداختن تله ای الکترون و حفره  $15$  cm<sup>2</sup>،  $1/000 \times 10$ ، چگالی کلی نقص الکترون و حفره لایه پروسکایت  $1/000 \times 10^{14}$  ۱/cm<sup>3</sup> و سرعت حرارتی الکترون و حفره لایه پروسکایت  $1/000 \times 10^7$  cm/s باشد، مقدار ضریب باز ترکیب اوژه الکترون و حفره از  $20$  cm<sup>3</sup>/s تا  $1/000 \times 10^{-3}$  cm<sup>3</sup>/s افزایش داده شد. افزایش ضریب باز ترکیب اوژه بر جریان اتصال کوتاه تأثیری نمی‌گذارد اما سبب کاهش ولتاژ مدار باز می‌شود. این کاهش به دلیل افزایش باز ترکیب حامل‌های بار است که منجر به کاهش تعداد الکترون‌ها و حفره‌های موجود برای افزایش ولتاژ می‌شود. کاهش ولتاژ مدار باز تأثیر منفی بر ولتاژ بیشینه دارد، زیرا ولتاژ بیشینه مستقیماً به ولتاژ مدار باز وابسته است.

9.36	71.44	0.6864	13.6422	0.9110	14.3873	$1.000 \times 10^{-20}$
10.60	72.95	0.7865	13.4773	1.0099	14.3873	$1.000 \times 10^{-23}$
10.65	71.64	0.8068	13.2065	1.0337	14.3873	$1.000 \times 10^{-25}$
10.66	71.60	0.8068	13.2080	1.0344	14.3873	$1.000 \times 10^{-27}$
10.66	71.60	0.8068	13.2080	1.0344	14.3873	$1.000 \times 10^{-30}$

### ۳-۷-۱- مقدار بهینه شده ی بازده سلول خورشیدی

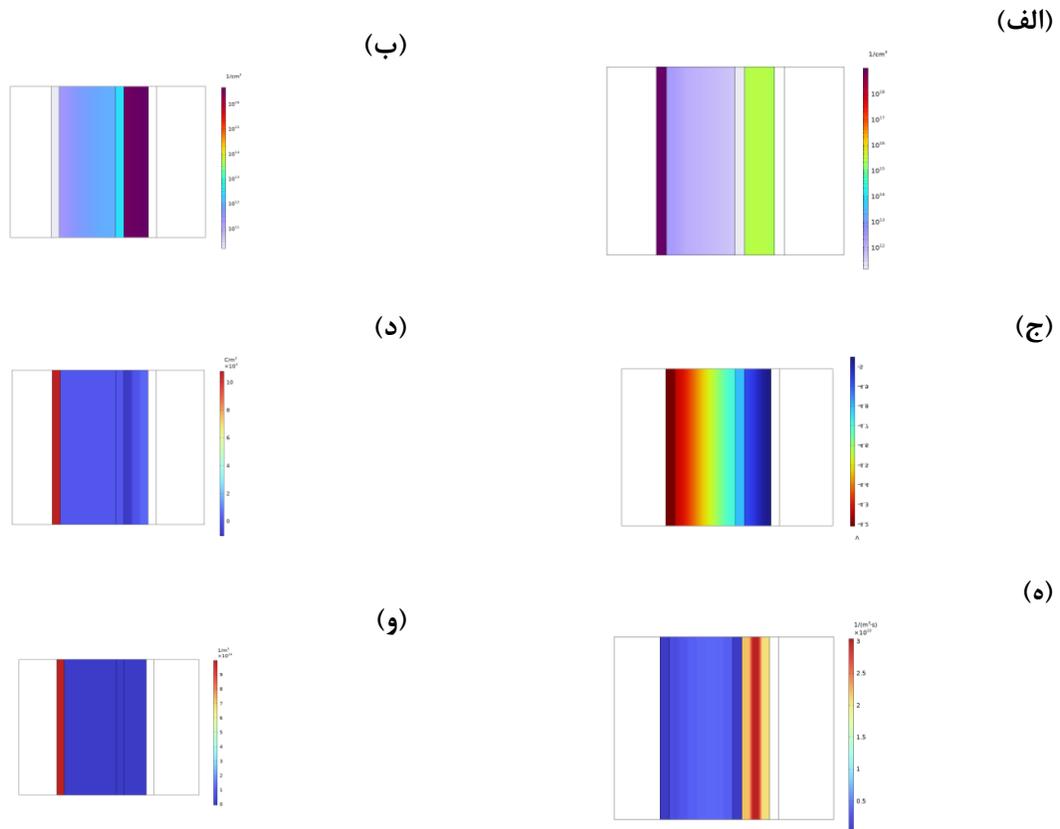
#### پروسکایت لیفی

حفره لایه پروسکایت  $10^7 \times 10^{-4} \text{ cm/s}$  و سطح مقطع گیر انداختن اوزنه الکترون و حفره  $10^{-30} \times 10^{-4} \text{ cm}^6/\text{s}$  باشد، نتیجه ی نهایی بهینه شده عملکرد سلول خورشیدی پروسکایت لیفی در

جدول ۸، شکل ۱۸ و شکل ۱۹ نشان داده شده است، با فرض این که ضریب باز ترکیب تابشی الکترون و حفره  $10^{-11} \text{ cm}^3/\text{s}$ ،  $10^{-15} \times 10^{-4} \text{ cm}^2$  چگالی کلی نقص الکترون و حفره لایه پروسکایت  $10^{-13} \times 10^{-4} \text{ cm}^3$  سرعت حرارتی الکترون و جدول ۸، شکل ۱۸ و شکل ۱۹ آمده است.

جدول ۸- پارامترهای فتوولتائیک سلول خورشیدی پروسکایت لیفی بهینه شده.

بازده تبدیل توان PCE [%]	فاکتور پر شدگی FF[%]	ولتاژ بیشینه $V_{mpp}$ (V)	جریان بیشینه $J_{mpp}$ ( $\text{mA}/\text{cm}^2$ )	ولتاژ مدار باز $V_{oc}$ [V]	جریان اتصال کوتاه $J_{sc}$ [ $\text{mA} \cdot \text{cm}^{-2}$ ]	کار مدل سازی حاضر
13.7151	76.1976	0.945494	14.5058	1.185111	15.18798	



شکل ۱۹- نتایج فتوولتائیک مدل سازی شده دو بعدی متقارن در راستای شعاع سلول خورشیدی پروسکایت لیفی بر پایه ی کار حاضر (الف) غلظت الکترون (ب) غلظت حفره (ج) پتانسیل الکتریکی (د) توزیع بار الکتریکی (ه) باز ترکیب کلی (و) ناخالصی.

#### ۴ - نتیجه گیری

سازي مشاهده شد که کاهش ضریب مربوط به فرآیند باز ترکیب تابشی مستقیم لایه پروسکایت منجر به افزایش ولتاژ مدار باز می شود. علاوه بر این مشاهده شد که کاهش سطح مقطع گیر انداختن تله ای، چگالی کلی نقص و سرعت ولتاژ حرارتی مربوط به باز ترکیب غیر تابشی شاکی-رید-هال لایه پروسکایت به دلیل افزایش زمان نیمه ی عمر الکترون و حفره و هم چنین طول نفوذ الکترون و حفره باعث افزایش جریان اتصال کوتاه شد. هم چنین نشان داده شد که کاهش ضریب مربوط به فرآیند باز ترکیب اوژه لایه پروسکایت باعث افزایش فاکتور پر شدگی شد. ویژگی های الکتریکی سلول خورشیدی

هدف اصلی پژوهش حاضر مدل سازی عملکرد سلول خورشیدی پروسکایت لیفی مستقیم دارای لایه پروسکایت سرب دار استاندارد با استفاده از مدل رانش-نفوذ کلاسیک شامل معادله های پواسون و پیوستگی به صورت عددی با روش حجم محدود بر اساس تابع شکل بر پایه تقریب شفرتر-گومل است که نتایج حاصل از شبیه سازی آن با نتایج تجربی یکی از کارهای اخیر اعتبار سنجی شدند و ویژگی های فتوولتائیک آن مورد ارزیابی قرار گرفتند. در مرحله بهینه

۷۶/۱۹۸٪ و بازده تبدیل توان ۱۳/۷۱۵٪ است که نسبت به

کار تجربی معادل آن افزایش بازده را نشان می‌دهد.

## ۵-مراجع

- [1] Yang G, Yang W, Gu H, Fu Y, Wang B, Cai H, et al. Perovskite Solar Cell Powered Integrated Fuel Conversion and Energy Storage Devices. *Adv Mater*. 2023:e2300383.
- [2] Xu Y, Lin Z, Wei W, Hao Y, Liu S, Ouyang J, et al. Recent Progress of Electrode Materials for Flexible Perovskite Solar Cells. *Nanomicro Lett*. 2022;14(1):117.
- [3] Yang D, Yang R, Priya S, Liu SF. Recent Advances in Flexible Perovskite Solar Cells: Fabrication and Applications. *Angew Chem Int Ed Engl*. 2019;58(14):4466-83.
- [4] Tonui P, Oseni SO, Sharma G, Yan Q, Tessema Mola G. Perovskites photovoltaic solar cells: An overview of current status. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2018;91:1025-44.
- [5] Wang R, Mujahid M, Duan Y, Wang ZK, Xue J, Yang Y. A Review of Perovskites Solar Cell Stability. *Advanced Functional Materials*. 2019;29(47).
- [6] Lam J-Y, Chen J-Y, Tsai P-C, Hsieh Y-T, Chueh C-C, Tung S-H, et al. A stable, efficient textile-based flexible perovskite solar cell with improved washable and deployable capabilities for wearable device applications. *RSC advances*. 2017;7(86):54361-8.
- [7] Qiu L, Deng J, Lu X, Yang Z, Peng H. Integrating perovskite solar cells into a flexible fiber. *Angew Chem Int Ed Engl*. 2014;53(39):10425-8.
- [8] Wang X, Kulkarni SA, Li Z, Xu W, Batabyal SK, Zhang S, et al. Wire-shaped perovskite solar cell based on TiO<sub>2</sub> nanotubes. *Nanotechnology*. 2016;27(20):20LT01.
- [9] Gholipour S, Correa-Baena JP, Domanski K, Matsui T, Steier L, Giordano F, et al. Highly Efficient and Stable Perovskite Solar Cells based on a Low-Cost Carbon Cloth. *Advanced Energy Materials*. 2016;6(20).
- [10] Mottaghitalab V, Skafi Z, Mivehi L, M Brown T. Perovskite Textile Solar Cells Containing Cu<sub>2</sub>ZnSnS<sub>4</sub>. *Journal of Textile Science and Technology*. 2024;13(2):46-63.
- [11] Balilonda A, Li Q, Bian X, Jose R, Ramakrishna S, Zhu M, et al. Lead-free and electron transport layer-free perovskite yarns: Designed for knitted solar fabrics. *Chemical Engineering Journal*. 2021;410.
- [12] He S, Qiu L, Fang X, Guan G, Chen P, Zhang Z, et al. Radically grown obelisk-like ZnO arrays for perovskite solar cell fibers and fabrics through a mild

پروسکایت لیفی پس از بهینه سازی شامل جریان اتصال کوتاه

$15/188 \text{ mA/cm}^2$ ، ولتاژ مدار باز  $1/185 \text{ V}$ ، فاکتور پر شدگی

solution process. *Journal of Materials Chemistry A*. 2015;3(18):9406-10.

[13] Peng M, Zou D. Flexible fiber/wire-shaped solar cells in progress: properties, materials, and designs. *Journal of Materials Chemistry A*. 2015;3(41):20435-58.

[14] Balilonda A, Li Z, Fu Y, Zabihi F, Yang S, Huang X, et al. Perovskite fiber-shaped optoelectronic devices for wearable applications. *Journal of Materials Chemistry C*. 2022;10(18):6957-91.

[15] Effect of Oxygen Plasma on the Polyester Coating with Conical Copper Nanorods. *پوشاک و نساجی فناوری و علوم*. 2015;4(4):23-9.

[16] Xu L, Fu X, Liu F, Shi X, Zhou X, Liao M, et al. A perovskite solar cell textile that works at  $-40$  to  $160$  °C. *Journal of Materials Chemistry A*. 2020;8(11):5476-83.

[17] Nazarian M, Peivandi P. Electromechanical Modeling of Woven Fabric Containing Metallic Filaments. *Journal of Textile Science and Technology*. 2012;2(3):151-9.

[18] Lee M, Ko Y, Jun Y. Efficient fiber-shaped perovskite photovoltaics using silver nanowires as top electrode. *Journal of Materials Chemistry A*. 2015;3(38):19310-3.

[19] Li R, Xiang X, Tong X, Zou J, Li Q. Wearable double-twisted fibrous perovskite solar cell. *Adv Mater*. 2015;27(25):3831-5.

[20] Qiu L, He S, Yang J, Deng J, Peng H. Fiber-Shaped Perovskite Solar Cells with High Power Conversion Efficiency. *Small*. 2016;12(18):2419-24.

[21] Wang Y, Bai S, Cheng L, Wang N, Wang J, Gao F, et al. High-Efficiency Flexible Solar Cells Based on Organometal Halide Perovskites. *Adv Mater*. 2016;28(22):4532-40.

[22] Qiu L, He S, Yang J, Jin F, Deng J, Sun H, et al. An all-solid-state fiber-type solar cell achieving 9.49% efficiency. *Journal of Materials Chemistry A*. 2016;4(26):10105-9.

[23] Hu H, Dong B, Chen B, Gao X, Zou D. High performance fiber-shaped perovskite solar cells based on lead acetate precursor. *Sustainable Energy & Fuels*. 2018;2(1):79-84.

[24] Dong B, Hu J, Xiao X, Tang S, Gao X, Peng Z, et al. High-efficiency fiber-shaped perovskite solar cell by vapor-assisted deposition with a record efficiency of 10.79%. *Advanced Materials Technologies*. 2019;4(7):1900131.

[25] Xie F, Mei D, Qiu L, Su Z, Chen L, Liu Y, et al. High-Efficiency Fiber-Shaped Perovskite Solar Cells

with TiO<sub>2</sub>/SnO<sub>2</sub> Double-Electron Transport Layer Materials. *Journal of Electronic Materials*. 2023;52(7):4626-33.

[26] Xie Z, Chen S, Zhang S, Pei Y, Li L, Wu P. Enhanced performance of fiber-based perovskite solar cell achieved by multi-functional high polymer doping strategy. *J Colloid Interface Sci*. 2024;663:309-28.

[27] Saberi Motlagh M, Mottaghitalab V, Rismanchi A, Rafieepoor Chirani M, Hasanzadeh M. Performance modelling of textile solar cell developed by carbon fabric/polypyrrole flexible counter electrode. *International Journal of Sustainable Energy*. 2022;41(8):1106-26.

[28] Rismanchi A, Mottaghitalab V, Soleimani HR. The modelling and simulation of perovskite solar cell consisting textile-based electrodes. *Results in Surfaces and Interfaces*. 2023;10:100095.

[29] Tessler N, Vaynzof Y. Insights from Device Modeling of Perovskite Solar Cells. *ACS Energy Letters*. 2020;5(4):1260-70.

[30] Zaky AA, Elewa S, Alyahya S, Al-Dhaifallah M, Rezk H, Yousif B. Mitigation of Temperature Effects and Performance Enhancement of Perovskite Solar Cells Using Nano-Pyramids Grating. *IEEE Access*. 2023;11:36399-408.

[31] Xu M-F, Wu Z, Zhang Y, Zhu P-T, Xu T, Wang C-N, et al. Construction of ultrathin perovskite solar cells by different periodic structures. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. 2023;34(2):92.

[32] Eisa A, Abdalla TA, Ahmed AA. Model the effect of different Hole Transport Inorganic materials on performance of perovskite solar cells. 2024.

[33] Moradi A, Maleki M, Hosseini SR, Bahramgour M, Delibas N, Niaei A. Thermal modeling of perovskite solar cells: Electron and hole transfer layers effects. *Optik*. 2024;302:171683.

[34] Cardozo O, Farooq S, Kiyimaz A, Farias P, Fraidenraich N, Stingl A, et al. Diffusion-enhanced efficiency of perovskite solar cells. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. 2024;35(12):1-12.

[35] Moshonas N, Stathopoulos NA, O'Connor BT, Bedeloglu AC, Savaidis SP, Vasiliadis S. Optical modeling of fiber organic photovoltaic structures using a transmission line method. *Appl Opt*. 2017;56(34):9351-8.

[36] Moshonas N, Stathopoulos NA, Pagiatakis G. Optical Modelling of Planar and Fibre Perovskite Solar Cells. *Electronics*. 2022;11(13).

## ۶- جدول فهرست نمادها

Parameter	English Description	Persian Description
Voc	Open Circuit Voltage	ولتاژ مدار باز
J <sub>mp</sub>	Maximum Current	جریان بیشینه
V <sub>mp</sub>	Maximum Voltage	ولتاژ بیشینه
FF	Fill Factor	ضریب پر شدگی
PCE	Power Conversion Efficiency	بازده تبدیل توان
G	Generation Rate	نرخ تولید
R	Recombination Rate	نرخ باز ترکیب
R <sub>rad</sub>	Radiative Recombination	باز ترکیب تابشی
R <sub>SRH</sub>	Shockley-Read-Hall Recombination	باز ترکیب SRH
R <sub>Aug</sub>	Auger Recombination	باز ترکیب اوزه
L	Diffusion Length	طول نفوذ
D	Diffusion Coefficient	ضریب نفوذ
τ	Lifetime	نیمه عمر
n	Electron Concentration	غلظت الکترون
p	Hole Concentration	غلظت حفره
α	Absorption Coefficient	ضریب جذب
φ	Electric Potential	پتانسیل الکتریکی
E <sub>g</sub>	Energy Bandgap	گاف انرژی
χ	Electron Affinity	کشش الکترونی
ε <sub>r</sub>	Relative Permittivity	ثابت گذرهای الکتریکی نسبی
N <sub>c</sub>	Conduction Band Effective Density of States	چگالی حالات موثر باند هدایت
N <sub>v</sub>	Valance Band Effective Density of Sates	چگالی حالات موثر باند ظرفیت
μ	Carrier Mobility	تحرک حامل
N <sub>d</sub>	Shallow Donor Density	چگالی سطحی یکنواخت الکترون دهنده
N <sub>a</sub>	Shallow Acceptor Density	چگالی سطحی یکنواخت الکترون پذیرنده
C	Radiative Recombination Coefficient	ضریب باز ترکیب تابشی
N <sub>t</sub>	Total Defect Density	چگالی کل نقص
V <sub>t</sub>	Thermal Voltage Velocity	سرعت ولتاژ حرارتی
σ	Capture Cross Section	سطح مقطع گیر انداختن تله ای
α	Auger Recombination Coefficient	ضریب باز ترکیب اوزه