

## بررسی تاثیر درجه بندی شکاف نواری و ضخامت لایه جاذب بر خواص الکتریکی و نوری در سلول های خورشیدی CIGS

رضا کیانی<sup>۱</sup>، مجید فولادیان<sup>۲</sup>، محمد جلال رستگار فاطمی<sup>۳</sup>

### چکیده

در این پژوهش، ما به شبیه سازی دقیق سلول های خور شیدی CIGS با استفاده از درجه بندی شکاف نواری band-gap می پردازیم. هدف اصلی ما این است که خواص الکتریکی و نوری این سلول ها را بهبود بخشیم. به منظور بررسی عملکرد، تغییر ضخامت لایه جاذب را نیز به عنوان یک عامل کلیدی مورد ارزیابی قرار می دهیم. به ویژه، ما به تحلیل تأثیر این تغییرات بر راندمان و ضریب پرتدادگی سلول ها می پردازیم. در سلول های خورشیدی معمولی CIGS، راندمان حدود ۲۰٫۸٪ است که تا به حال دست یافته ایم. اما با بهره گیری از درجه بندی شکاف نواری بر روی لایه جاذب و با بهره گیری از تکنیک های مهندسی در لایه های جاذب و بافر، ما به تحسین برانگیزترین راندمان تا به حال برابر با ۳۳٫۷٪ دست یافته ایم. این افزایش نتیجه دستاوردهای موفق در بهینه سازی ساختار و خواص سلول ها است. به طور خلاصه، مقادیر پارامترهای مهم خروجی برای این سلول های پیشرفته شامل بازده ۳۳٫۷٪، ضریب پرتدادگی ۷۹٪، ولتاژ مدار باز ۱ میلی ولت و جریان کوتاه مدار ۴۰٫۹۶ میلی آمپر بر سانتی متر مربع می باشد.

### تاریخ دریافت:

۱۴۰۲ / ۰۶ / ۱۵

### تاریخ پذیرش:

۱۴۰۲ / ۰۸ / ۱۴

### کلمات کلیدی:

سلول های خورشیدی  
CIGS  
درجه بندی شکاف نواری  
راندمان سلول های خورشیدی  
ضخامت لایه جاذب

rezak1290@yahoo.com

۱. دکتری، دانشگاه آزاد اسلامی واحد ساوه
۲. استادیار، دانشگاه آزاد اسلامی واحد ساوه
۳. استادیار، دانشگاه آزاد اسلامی واحد ساوه

## ۱ مقدمه

سلول‌های خورشیدی (CIGS)<sup>۱</sup> از جمله نمونه‌های واعده در دستگاه‌های فتوولتائیک لایه نازک به شمار می‌روند. در فناوری سلول‌های خورشیدی فیلم نازک، تمرکز بر جذب بالای نور در ماده فعال به منظور کاهش ضخامت لایه فعال انجام می‌شود. ضخامت لایه جذب در سلول‌های CIGS (۱ تا ۳ میکرومتر)، دو برابر کوچکتر از سلول‌های سیلیکون کریستالی تک بلوری و چند بلوری است. این کاهش ضخامت منجر به کاهش هزینه کلی سلول می‌شود. این کاهش در ضخامت لایه جذب به دلیل خاصیت شکاف نواری مستقیم CIGS رخ می‌دهد.

### ۱-۱ پیشینه تحقیق

برای دستیابی به کاهش هزینه بیشتر، افزایش راندمان تبدیل توان ( $PCE^2$ ) به عنوان یک راهکار مؤثر شناخته شده است. تاکنون، PCE برای سلول‌های خورشیدی سیلیکونی کریستالی تک پیوندی (c-Si) و همچنین لایه‌نازک‌های مانند  $Cu(In, Ga)Se_2$  (CIGS) و CdTe به ترتیب به میزان حدود ۲۷٪ و ۲۳٪ رسیده است [۱]. نیمه هادی‌های مرکب III-V دارای شکاف‌های باند قابل تنظیم هستند و راندمان بسیار بالایی را در سلول‌های خورشیدی چند اتصالی ارائه می‌دهند. با این حال، هزینه‌های بالای ساخت مانع از کاربرد گسترده آن‌ها می‌شود [۲]. با بهره‌گیری از دانش روز تا کنون، راندمان ثبت شده برای سلول‌های خورشیدی CIGS خالص  $20.3 \pm 0.6$  درصد است [۳]. از طرفی، ایزوپروپانول دوپینگ شده از نوع n و نانوکریستال کالکوپریت  $CuIn_{0.4}Ga_{0.6}Se_2$  از نوع p به عنوان ماده سلول خورشیدی فیلم نازک، در نظر گرفته شده و امیدوارکننده است که بازدهی آن به ۴۰ درصد می‌رسد [۴]. سلول CIGS ترکیبی از نیمه هادی I-III-VI چهارتایی با ساختار کریستالی کالکوپریت است. این ماده به دلیل عیوب طبیعی اش به عنوان CIGS نوع P در نظر گرفته می‌شود که معمولاً در شرایط In-rich و Se-rich رشد می‌کند [۵]. برخی مزایای مواد CIGS به عنوان یک لایه جذب برای یک سلول خورشیدی لایه در [۶] آمده است که به شرح زیر می‌باشد:

- ۱- شکاف باند CIGS را می‌توان از ۱.۰۱ eV تا ۱.۶۸ eV با تغییر میزان Ga تغییر داد تا band-gap مورد نیاز حاصل شود تا حداکثر جذب را در محدوده طول موج نوری مورد نظر داشته باشد.
  - ۲- ماده نیمه هادی CIGS دارای شکاف نواری band gap مستقیم است، یعنی اینکه برای فوتونی با انرژی بالاتر از انرژی شکاف نواری، احتمال بسیار بالایی جهت ایجاد یک جفت الکترون - حفره، حتی برای لایه‌های بسیار نازک دارد.
  - ۳- ضریب جذب CIGS بسیار بالا است.
- لایه جذب CIGS با ضخامت بسیار کمتری در مقایسه با سیلیکون تک کریستالی نور را جذب می‌کند. به طور تجربی مشاهده شد که نمودار شکاف انرژی  $E_g$  نیمه هادی  $Cu(In_{1-x}Ga_x)Se_2$  به ازای نسبت اتمی  $(x=Ga/(Ga+In))$  رفتاری خم شدگی دارد [۷]، از نظر ریاضی شکاف انرژی را می‌توان به صورت زیر توصیف کرد:

$$E_g(x) = (1-x)E_g(CIS) + xE_g(CGS) - bx(1-x) \quad (1)$$

$b$  ضریب انحناست با مقادیری بین ۰.۱۱ و ۰.۲۴ که برای ضریب خمشی نوری گزارش شده است [۸]. شکاف نواری افزایش یافته محلی، دو اثر بر روی الکترون‌های تولید شده توسط نور دارد. اول، احتمال نوترکیبی کل در مناطقی که افزایش شکاف باند وجود دارد کاهش می‌یابد که نشان می‌دهد این احتمال با شکاف باند، نسبت معکوس دارد [۹]. دوم اینکه یک میدان الکتریکی اضافی،  $A_{\text{eff}}$ ، به وجود می‌آید و می‌توان آن را با رابطه (۲) توصیف کرد [۱۰]:

$$\xi_A = \frac{d\Delta E_g}{dx} \quad (2)$$

برای افزایش کارایی سلول‌های خورشیدی هم از طریق آزمایشی و هم شبیه‌سازی، تحقیقاتی انجام شده است. در اواسط دهه ۸۰، بوئینگ روش تیخیر همزمان دو مرحله‌ای را برای ساخت فیلم‌های CIS پلی کریستالی با راندمان بیش از ۱۰ درصد در سلول‌های خورشیدی یکپارچه معرفی کرد [۱۱]. تا سال ۲۰۱۲، سلول‌های خورشیدی CIGS ساخته شده توسط فرآیند تیخیر همزمان سه مرحله‌ای، دارای ۲۰ درصد راندمان تبدیل انرژی هستند که بالاترین رکورد برای سلول‌های خورشیدی پلی کریستالی لایه نازک می‌باشد. پس از مدتی، با استفاده از فناوری سلول‌های خورشیدی سیلیکونی برای سلول‌های خورشیدی لایه نازک CIGS، راندمان ۲۰٫۸ درصد گزارش شده است. در مطالعه پیشنهادی از دوپینگ (تزیق) پتاسیم پس از بهبود، برای افزایش کارایی سلول لایه نازک CIGS استفاده شد و استفاده از پتاسیم به عنوان یک ماده ناخالص برای اولین بار در سال ۲۰۱۴ اثری مثبت بر کارایی سلول خورشیدی CIGS داشته است [۱۲]. بسیاری از محققین سعی کرده‌اند کارایی سلول‌های خورشیدی لایه نازک CIGS را از طریق شبیه‌سازی به روش‌های مختلف از جمله تغییرمیزان  $x$ ، comp، تاثیر تغییرات در طول عمر حامل‌های اقلیت، دما، غلظت دوپینگ و آلاینده‌گی، ضخامت لایه جاذب، ضخامت لایه بافر، بهبود بخشند. اخیراً در [۱۳] که در سال ۲۰۲۲ به ثبت رسیده است شبیه‌سازی جدیدی از سلول خورشیدی  $\text{Cu(In,Ga)Se}_2$  با استفاده از شبیه‌ساز دو بعدی Silvaco-Atlas تحت تابش نور AM1.5 بر روی مواد لایه بافر و درجه‌بندی باند گپ صورت گرفته است که نتایج به دست آمده نشان داد با افزودن لایه میدان سطح پشتی BSF<sup>۳</sup> بر پایه لایه سیلیکونی میکروکریستالی هیدروژنه  $\mu\text{c-Si:H(p+)}$ ، راندمان سلول‌های خورشیدی CIGS را با ایجاد لایه جاذبی به ضخامت ۱/۵ میکرومتر و یک لایه پشتی با ضخامت ۱۰ نانومتر حداکثر به مقدار ۲۳/۴۲٪ افزایش داده است. میدان سطح پشتی  $\mu\text{c-Si:H(p)}$  (BSF) بین سطح تماس پشتی (Mo) و لایه جاذب CIGS قرار دارد. علاوه بر این، در مقاله [۱۴] نوع جدیدی از شیب‌بندی باند گپ CIGS، بنام باند گپ تترارادیان<sup>۴</sup> (TGB)، پیشنهاد شده است. حداکثر بازده سلول‌های خورشیدی CIGS بر اساس TGB حدود ۲۳/۳۵٪ شبیه‌سازی شده است. گرادیان باند جدید پیشنهاد شده در این کار را می‌توان به صورت تجربی با تنظیم گرادیان (نسبت) Ga به دست آورد. در این مقاله سعی شده است با استفاده از درجه بندی شکاف نواری لایه جاذب، کارایی سلول خورشیدی CIGS افزایش یابد. معمولاً سه نوع کار پژوهشی بر روی سلول‌های خورشیدی مبتنی بر CIGS انجام می‌شود:

۱. افزایش سطح نوار هدایت به سمت سطح پشتی جاذب که به آن درجه‌بندی برگشتی می‌گویند [۱۵].
  ۲. درجه‌بندی جلو، جهت افزایش سطح باند هدایت جاذب در نزدیکی محل اتصال [۱۶].
  ۳. درجه‌بندی مضاعف، ترکیبی از روش ۱ و ۲ می‌باشد که منجر به افزایش فاصله باند به دو سمت سطح پشتی و جلو می‌شود.
- بسیاری از فعالیت‌ها تأثیر مفید درجه‌بندی لایه جاذب را بر عملکرد سلول‌های خورشیدی تأیید می‌کنند. با این حال، اثر درجه‌بندی Ga بر روی پارامترهای الکتریکی و نوری سلول خورشیدی به خوبی درک نشده است. با نگاه به چندین پروفایل درجه‌بندی برگشتی، نتیجه گرفته‌اند که درجه‌بندی برگشتی، هم چگالی جریان اتصال کوتاه (Jsc) و هم ولتاژ مدار باز (Voc) را بهبود می‌بخشد [۱۵]. اما برخی تحقیقات [۱۳] نشان می‌دهند که هیچ افزایش قابل توجهی در Voc برای دستگاه‌هایی با لایه استاندارد CIGS ضخیم (۲-۱٫۵ میکرومتر) به دست نمی‌آید. قابل توجه است که بازده گزارش شده از نتایج شبیه‌سازی، بالاتر از مقادیر تجربی است و دلایل شرایط موجود در شبیه‌سازی هاست که سطح ایده‌آلی دارند. همچنین عواملی خارج از دایره دسترسی و تاثیر انسان در مدل‌های تجربی سلول‌ها دخیل هستند که در مدل‌های شبیه‌سازی وجود ندارند.

شکاف باند کارآمد در این مقاله حدود 1.2 eV است در حالی که برخی از محققان شکاف باند بهینه دیگری (1.4-1.5 eV) را گزارش کرده‌اند. ممکن است این موضوع به دلیل عدم گنجاندن برخی مدل‌ها در شبیه‌سازی‌ها مانند وجود یک لایه وارونگی بین CIGS و CdS باشد که منجر به شکاف باند کوچکتر می‌شود.

## ۱-۲ خلاء مطالعاتی

با توجه به مواردی که بیان شد، مطالعات متعددی در زمینه سلول‌های خورشیدی CIGS صورت گرفته است که به بهبود و بهره‌برداری از خواص این نوع سلول‌ها در راستای افزایش کارایی و کاهش هزینه‌ها اشاره دارند.

۱. تغییر درجه‌بندی شکاف باند: یکی از راهکارهای مورد مطالعه برای بهبود کارایی سلول‌های CIGS، تغییر درجه‌بندی شکاف باند می‌باشد. این مطالعات تاکید دارند که با تغییر نسبت اجزاء مختلف (In و Ga) در CIGS، می‌توان شکاف باند را تغییر داد و جذب نور بهینه را در محدوده طول موج مورد نظر داشت.

۲. افزایش کارایی با استفاده از پتا سیم: تحقیقات اخیر نشان می‌دهد که افزودن پتا سیم به ساختار CIGS می‌تواند بهبود قابل توجهی در کارایی سلول‌های خورشیدی ایجاد کند. این مواد اغلب به عنوان ناخالصی در دستگاه‌های سلول‌های خورشیدی به کار می‌روند و اثر مثبتی بر راندمان دارند.

۳. شیب‌بندی باند گپ: مطالعات نشان می‌دهد که شیب‌بندی باند گپ (TGB) می‌تواند بهبود چشم‌گیری در کارایی سلول‌های CIGS ایجاد کند. این شیب‌بندی با تغییر نسبت اجزاء مختلف در ساختار CIGS ایجاد می‌شود و منجر به کاهش شکاف باند و افزایش جذب نور می‌شود.

۴. مدل‌سازی و شبیه‌سازی: استفاده از شبیه‌سازی‌ها و مدل‌سازی‌ها جهت تجزیه و تحلیل رفتار سلول‌های CIGS نیز مورد توجه قرار گرفته است. این روش‌ها به ما امکان می‌دهند تا تأثیر تغییرات در پارامترهای مختلف مانند ضخامت لایه‌ها، ترکیب اجزاء و... را روی کارایی سلول‌ها بررسی کنیم.

۵. مطالعات تجربی و ساخت نمونه‌ها: علاوه بر مدل‌سازی، مطالعات تجربی و ساخت نمونه‌های واقعی از سلول‌های CIGS نیز انجام می‌شود. تحقیقات در زمینه مواد جدید، فرآیندهای بهبودیافته تولید و بهینه‌سازی ساختارهای لایه‌نازک برای افزایش بازده سلول‌ها انجام می‌شود.

در کل، این مقاله با تمرکز بر روی دو موضوع کلیدی یعنی تغییرات درجه‌بندی شکاف نواری و تغییر ضخامت لایه جذب، به پر کردن شکاف‌های مطالعاتی موجود در تحقیقات اخیر در زمینه سلول‌های خورشیدی CIGS پرداخته و تلاش می‌کند تا بهبودهای جدیدی را در عملکرد این سلول‌ها ارائه دهد.

## ۱-۳ انگیزه اصلی تحقیق

انگیزه اصلی این تحقیق در جهت بهبود کارایی و کاهش هزینه‌های سلول‌های خورشیدی CIGS قرار دارد. سلول‌های خورشیدی CIGS به دلیل خواص خوب الکتریکی و نوری که دارند، به عنوان یکی از فرصت‌های اساسی در حوزه انرژی خورشیدی شناخته می‌شوند. با این حال، هزینه‌های تولید بالا می‌تواند به مانع از بهره‌برداری بهینه از این تکنولوژی برای تولید انرژی در مقیاس گسترده شوند. مهمترین هدف این تحقیق ارتقاء بازده تبدیل توان (PCE<sup>۵</sup>) سلول‌های CIGS است. افزایش PCE در سلول‌های خورشیدی به معنای بهره‌برداری بهتر از انرژی نور خورشید و تبدیل آن به برق با بازدهی بالاتر است. افزایش PCE به منظور افزایش تولید انرژی و کاهش هزینه‌های تولید اهمیت بسیاری دارد و به عنوان هدف اساسی در تحقیقات سلول‌های خورشیدی مطرح می‌شود. با توجه به پتانسیل این سلول‌ها و امکاناتی که ارائه می‌دهند، تحقیقات در جهت بهبود کارایی و کاهش هزینه تولید آن‌ها می‌تواند به توسعه انرژی‌های تجدیدپذیر و پایدار کمک کند.

به علاوه، با پیشرفت در تحقیقات و اعمال نتایج به شیوه‌های تولید صنعتی، می‌توان بازار سلول‌های خورشیدی CIGS را گسترش داده و انرژی‌های تجدیدپذیر را به‌طور موثرتر در جوامع مختلف مورد استفاده قرار داد. به این ترتیب، اصلی‌ترین انگیزه این تحقیق در بهبود کارایی و کاهش هزینه‌های سلول‌های خورشیدی CIGS قرار دارد تا از این پتانسیل‌ها بهره‌برداری بهتری صورت گیرد و از انرژی‌های نیروی خورشید به شکلی کارآمد و اقتصادی استفاده شود.

## ۱-۴ نوآوری تحقیق

نوآوری و مشارکت اصلی این تحقیق در دو زمینه مهم به شرح زیر می‌باشد:

۱. تغییرات درجه‌بندی شکاف نواری؟ یکی از نوآوری‌های اصلی این تحقیق در بررسی و ارزیابی تاثیرات تغییرات درجه‌بندی شکاف نواری بر روی خواص سلول‌های خورشیدی CIGS است. این تحقیق بهبودها و محدودیت‌های این روش را به‌طور دقیق بررسی می‌کند و تاثیرات آن را بر راندمان و خصوصیات الکتریکی و نوری سلول‌ها ارزیابی می‌کند. این نوآوری به افزایش دقت در طراحی و بهینه‌سازی سلول‌های CIGS و بهبود عملکرد آنها کمک می‌کند.

۲. تغییر ضخامت لایه جذب: مشارکت اصلی دیگر این تحقیق در تجزیه و تحلیل تاثیر تغییرات در ضخامت لایه جذب بر روی عملکرد سلول‌های خورشیدی CIGS قرار دارد. این تحقیق به ارزیابی میزان افزایش راندمان و خصوصیات دیگر سلول‌ها با تغییر ضخامت لایه جذب می‌پردازد و این امکان را فراهم می‌کند تا بهینه‌ترین ضخامت لایه جذب برای کسب حداکثر بازده را شناسایی کند.

در کل، این دو نوآوری به تحقیقات اخیر در زمینه سلول‌های خورشیدی CIGS ارتقاء می‌بخشند و به مهندسان و پژوهشگران این امکان را می‌دهند که با بهبود طراحی و عملکرد این سلول‌ها، به دستاوردهای بزرگتر در زمینه تولید انرژی خورشیدی برسند.

## ۱-۵ سازماندهی مقاله

در بخش دوم به مواد و ساختار پیشنهادی می‌پردازیم و سپس خواص الکتریکی و نوری سلول خورشیدی CIGS پیشنهادی ارائه خواهد شد. در بخش سوم نتایج شبیه‌سازی ارائه و تجزیه و تحلیل می‌شود و در بخش چهارم نتیجه‌گیری و پیشنهاداتی برای پژوهش‌های آینده ذکر خواهد شد.

## ۲. مواد و سازه سلول خورشیدی پیشنهادی

سلول خورشیدی پیشنهادی شبیه‌سازی شده CIGS شامل چندین لایه است که در شکل (۱) نشان داده شده است.

(۱) یک لایه اکسید رسانای شفاف ZnO آلتیپه یا دوپ شده با آلومینیوم به عنوان اکسید رسانای شفاف برای جمع‌آوری و حرکت الکترون‌ها از سلول عمل می‌کند و در عین حال کمترین نور ممکن را جذب می‌کند و بیشترین نور را از خود عبور می‌دهد.

(۲) لایه پنجره از ZnO.

(۳) یک لایه بافر CdS نوع n که پیوند ناهمگن را کامل می‌کند

(۴) چهار لایه فعال CIGS نوع p.

(۵) سطح پشتی مولیبدنیوم ( $^{60}\text{Mo}$ ).

ZnO:Al
ZnO
CdS
CuIn <sub>1-x</sub> Ga <sub>x</sub> Se <sub>2</sub> (x=0)
CuIn <sub>1-x</sub> Ga <sub>x</sub> Se <sub>2</sub> (x=0.38)
CuIn <sub>1-x</sub> Ga <sub>x</sub> Se <sub>2</sub> (x=0.63)
CuIn <sub>1-x</sub> Ga <sub>x</sub> Se <sub>2</sub> (x=1)
Mo

شکل ۱: ساختار سلول خورشیدی پیشنهادی شبیه سازی شده CIGS

چهار لایه CIGS در نسبت‌های  $x = \text{Ga}/(\text{Ga} + \text{In})$  متفاوت هستند و مقدار  $x$  از ۰ تا ۱ از لایه بالایی تا پایینی متفاوت است. پیکربندی لایه‌ها به این صورت است که لایه‌ای با قرابت بیشتر (نزدیکی، پیوستگی و وابستگی) به لایه بافر CdS در بالا قرار دارد و میل ترکیبی از لایه بالایی به لایه پایینی کاهش می‌یابد تا مشکل ناپیوستگی‌های باند گپ برطرف شود و قرابت‌ها هم تراز شوند. برای شبیه‌سازی عملکرد سلول خورشیدی، سلول را با طیف خورشیدی استاندارد AM 1.5 روشن کرده‌ایم. محدوده طول موج مورد استفاده در شبیه‌سازی  $0.3 \mu\text{m} \leq \lambda \leq 1.7 \mu\text{m}$  است. مرز و محدوده جذب برای مواد CIGS تقریباً از ۰/۷ میکرومتر برای CGS تا ۱/۳۷ میکرومتر بطور تقریبی برای CIS متغیر است. گنجاندن این واقعیت با آرایش ۴ لایه به کار رفته در سازه منجر به افزایش قابل توجهی در کارایی سلول می‌شود که طبق دانش ما، ساختار پیشنهادی را به کارآمدترین سلول خورشیدی CIGS تاکنون تبدیل کرده است. پارامترهای الکتریکی لازم برای شبیه‌سازی ساختار سلول خورشیدی در (جدول ۱) درج شده است. شکاف باند و میل ترکیبی لایه CIGS با  $x$  متفاوت است. معادله ۳ و ۴ وابستگی  $E_g$  و  $\chi$  را به  $x$  نشان می‌دهد [۵].

$$E_g(x) = (1 - x)E_g(\text{CIS}) + xE_g(\text{CGS}) - bx(1 - x) \quad (۳)$$

$$\chi(\text{CIGS}) = \chi(\text{CIS}) - [E_g(\text{CIGS}) - E_g(\text{CIS})] \quad (۴)$$

لایه ZnO:Al با دوپینگ یکنواخت Al با غلظت  $1e20\text{cm}^{-3}$  در یک لایه ZnO به ضخامت ۱۰۰ نانومتر شکل می‌گیرد. یک پارامتر مهم در شبیه‌سازی نوری، ضریب شکست مواد است.

### ۳. نتایج شبیه‌سازی

به منظور دستیابی به مقایسه‌های بهتر با یک مبنا و مرجع، ابتدا یک سلول خورشیدی CIGS با لایه جاذب شکاف نواری یکنواخت eV ۱/۱۶ را در نظر می‌گیریم. نتایج شبیه‌سازی در جدول (۲) نشان داده شده است.

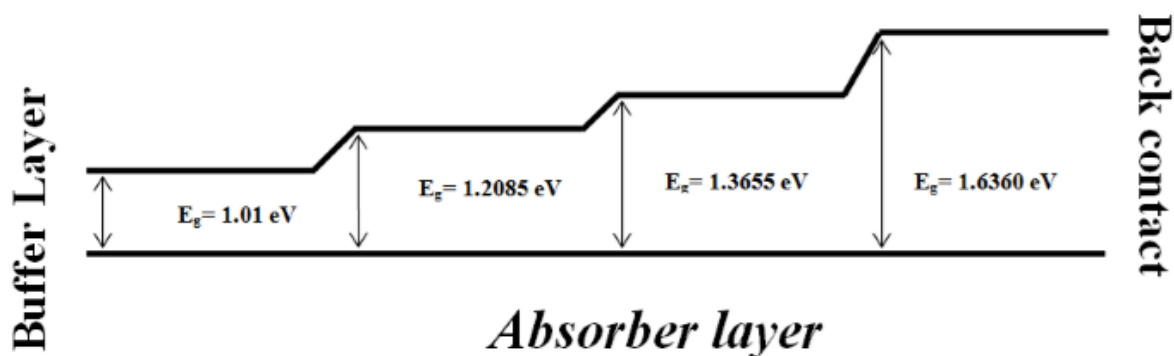
جدول ۱: پارامترهای الکتریکی سلول خورشیدی شبیه‌سازی شده

properties materials	$\mu_n$ (cm <sup>2</sup> /Vs)	$\mu_p$ (cm <sup>2</sup> /Vs)	NA (1/cm <sup>3</sup> )	ND (1/cm <sup>3</sup> )	NC (1/cm <sup>3</sup> )	NV (1/cm <sup>3</sup> )	E <sub>g</sub> (eV)	$\chi$	Thickness (nm)
ZnO	۱۰۰	۲۵	۰	۵e۱۷	۲,۲e۱۸	۱,۸e۱۹	۳,۳	۴	۵۵
CdS	۱۰۰	۲۵	۰	۵e۱۷	۲,۲e۱۸	۱,۸e۱۹	۲,۴	۴,۲	۵۵
CIGS X=0	۱۰۰	۲۵	۲e۱۶	۱۰۱۷*۵	۱۰۱۸*۲,۲	۱۰۱۹*۱,۸	۱,۰۱	۳,۲۰۷	۳۰۰-۲۳۰۰
CIGS X=0.38	۱۰۰	۲۵	۲e۱۶	۱۰۱۷*۵	۱۰۱۸*۲,۲	۱۰۱۸*۲,۲	۱,۲۰۸۵	۴,۰۰۸	۳۰۰-۲۳۰۰
CIGS X=0.63	۱۰۰	۲۵	۲e۱۶	۱۰۱۷*۵	۱۰۱۸*۲,۲	۱۰۱۸*۲,۲	۱,۳۶۵۵	۳,۸۵۱	۳۰۰-۲۳۰۰
CIGS X=1	۱۰۰	۲۵	۲e۱۶	۱۰۱۷*۵	۱۰۱۸*۲,۲	۱۰۱۸*۲,۲	۱,۶۳۶۰	۳,۵۸۰	۳۰۰-۲۳۰۰
Mo	-	-	-	-	-	-	-	-	۴۰۰

جدول ۲: نتایج شبیه‌سازی شده برای پارامترهای خروجی سلول خورشیدی CIGS با نمایه شکاف باند جاذب یکنواخت

سلول مبنا	x	E <sub>g</sub> (eV)	Eff (%)	FF (%)	V <sub>oc</sub> (V)	I <sub>sc</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )
CIGS	۰/۳	۱/۱۶	۲۲/۸۱	۸۳/۴۴	۰/۷۲۱	۳۶/۴۳

سپس، مطالعه شبیه‌سازی را با تأثیر میدان سطح پشتی (BSF) آغاز می‌کنیم. در حالت BSF فاصله باند به طور خطی (به عبارت دیگر درجه بندی برگشتی) به سمت تماس پشتی افزایش می‌یابد. ما تأثیر BSF را بر پارامترهای خروجی سلول خورشیدی کالکوپیریت Cu(In<sub>1-x</sub>Gax)Se<sub>2</sub> مورد بحث قرار داده‌ایم. این نوع پروفیل درجه بندی باند شکاف در شکل (۲) نشان داده شده است.



شکل ۲: پروفیل‌های باند شکاف جاذب سلول خورشیدی CIGS

چنین ترتیبی از لایه‌های جاذب نتایج زیر را دربرداشت:

- کاهش پدیده نوترکیبی در سطح پشت منجر به افزایش ولتاژ مدار باز و جریان اتصال کوتاه می‌شود. بنابراین بازده سلول خورشیدی شبیه‌سازی شده افزایش می‌یابد.
- کاهش در نوترکیب سطح پشتی و افزایش طول انتشار اقلیت حامل، منجر به جمع‌آوری موثر در سلول خورشیدی CIGS می‌شود.

همانطور که در بخش قبلی گفته شد، افزایش فاصله باند لایه جاذب با افزایش تدریجی محتوای Ga در نزدیکی سطح پشتی سلول خورشیدی CIGS یک میدان شبه الکتریکی ایجاد می کند که با معادله (۲) توضیح داده شده است. الکترون برانگیخته شده از باند ظرفیت به نوار رسانایی (هدایت) به سمت لبه یا مرز با پتانسیل پایین تر می چرخد که به معنای رفتن به سمت ناحیه بار فضایی است. بنابراین از ترکیب مجدد در سطح پشتی به طور بالقوه اجتناب می شود و جریان تو سط حامل های اقلیت در سلول خورشیدی افزایش می یابد. توجه شود که میدان سطح پشتی (BSF) به دلیل درجه بندی Ga به آرامی جریان اشباع معکوس را کاهش می دهد. این اتفاقات در کنار هم منجر به افزایش کارایی سلول می شود. نتیجه این بخش از بررسی در جدول (۳) نشان داده شده است.

جدول ۳: نتایج شبیه سازی شده برای پارامترهای خروجی سلول خورشیدی CIGS با درجه بندی باند شکاف

سلول پیشنهادی	x	Eg(eV)	Eff(%)	FF(%)	VOC (V)	ISC (mA/cm2)
CIGS	متغیر	متغیر	۳۳/۷	۷۹	۱	۴۰/۹۶

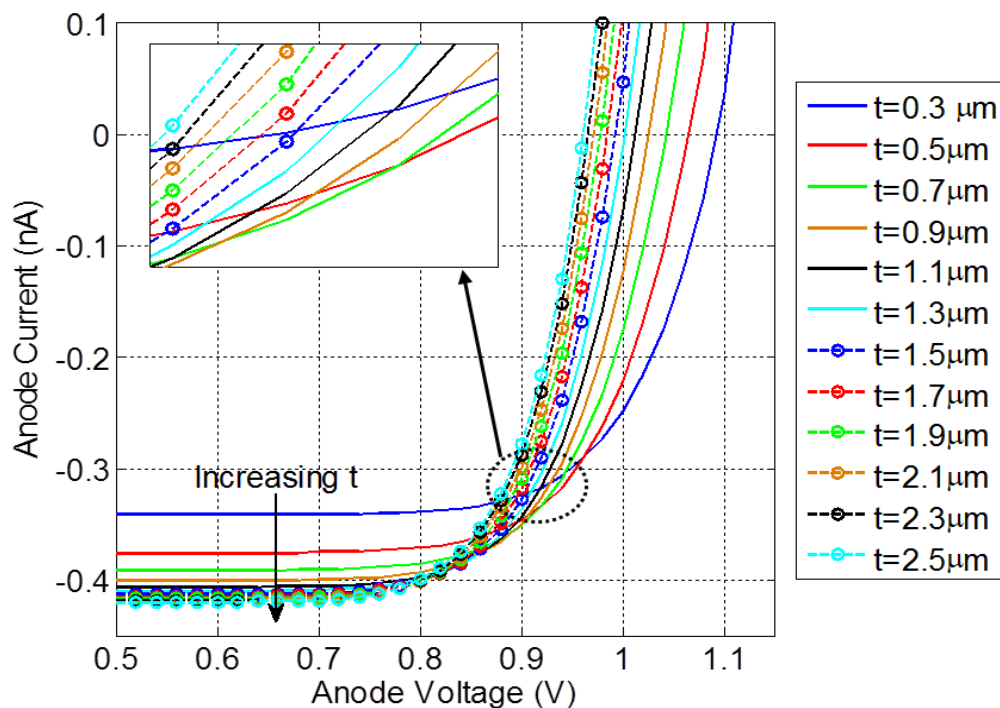
نتایج سلول تحقیقی یا شبیه سازی شده با سلول مینا (یک سلول خورشیدی CIGS معمولی) که در جدول (۲) نشان داده شده است قابل مقایسه است و در جدول (۴) نشان داده شده است.

جدول ۴: نتایج سلول خورشیدی CIGS معمولی و درجه بندی باند شکاف

سلول خورشیدی CIGS	x	Eg (eV)	Eff (%)	FF (%)	Voc (V)	Isc (mA/cm2)
معمولی	۰/۳	۱/۱۶	۲۲/۸۱	۸۳/۴۴	۰/۷۲۱	۳۶/۴۳
با درجه بندی باند شکاف	متغیر	متغیر	۳۳/۷	۷۹	۱	۴۰/۹۶

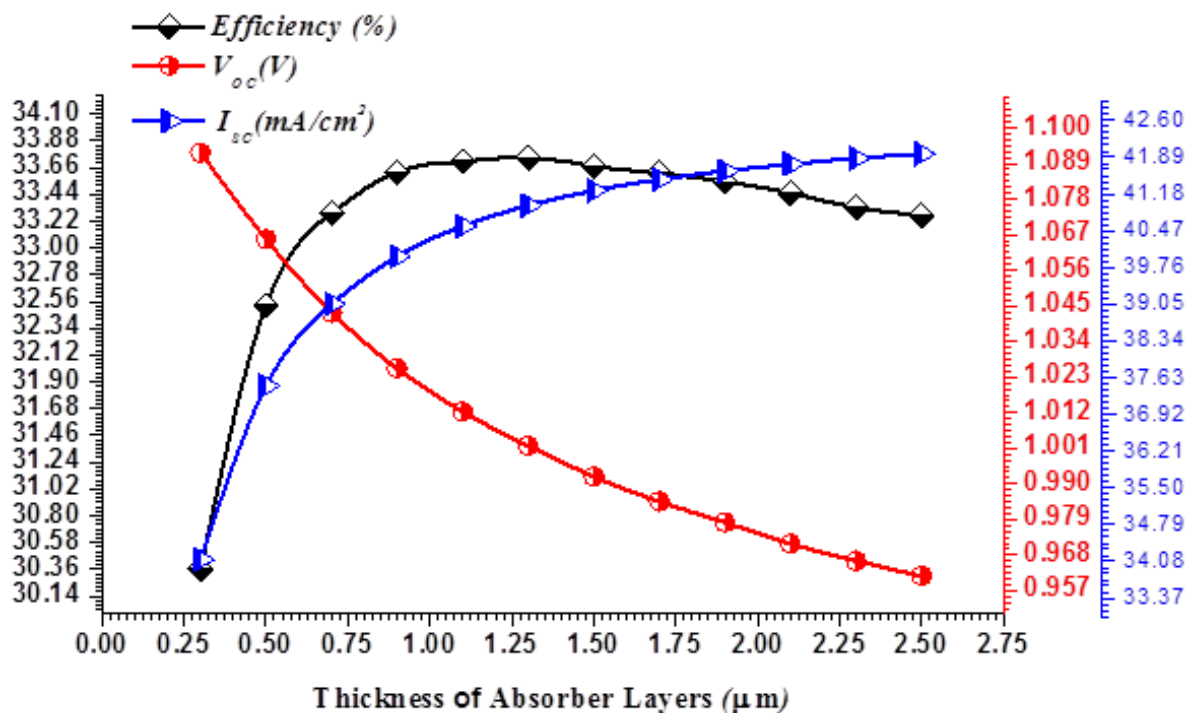
با تغییر ضخامت چهار لایه جاذب نشان داده شده در شکل (۱)، به ضخامت بهینه دست یافتیم. مطابق شکل (۳) و (۴)، نتایج شبیه سازی نشان می دهد که ضخامت لایه  $\approx 1/3$  CIGS میکرومتر، برای سازه پیشنهادی، از نظر بازده و ضریب پرتابگی بهترین است. همانطور که در شکل (۴) مشاهده می شود، با افزایش ضخامت لایه های جاذب، حداکثر توان سلول افزایش می یابد و این افزایش در ضخامت  $1/3$  میکرومتر به حداکثر مقدار می رسد. این امر منجر به افزایش ضریب پرتاب شدن سلول و رسیدن به مقدار بهینه برای آن در ضخامت  $1/3$  میکرومتر می شود.





شکل ۳: ضخامت‌های مختلف لایه های جاذب درجه بندی شکاف نواری (قسمت Pmax در نمودار بزرگنمایی شده است)

همانطور که در شکل (۴) مشاهده می شود، با افزایش ضخامت لایه های جاذب،  $V_{oc}$  در حال کاهش است، به نظر می رسد که این امر به دلیل افزایش نرخ نوترکیبی با افزایش ضخامت باشد که بر جریان اشباع تاریک تاثیر گذاشته و باعث افت ولتاژ مدار باز سلول شده است. همچنین با افزایش ضخامت لایه های جاذب، سرعت تولید در لایه های جاذب افزایش می یابد و منجر به افزایش جریان اشباع اتصال کوتاه سلول می شود (همانطور که در شکل (۴) نشان داده شده است). همه این اتفاقات که در سلول رخ می دهد همراه با دلایل افزایش ضریب پر شدگی سلول منجر به افزایش کارایی سلول گردیده و در  $1/3$  میکرومتر به مقدار بهینه رسیده است



شکل ۴: راندمان، Voc و Isc به ازای افزایش ضخامت لایه‌های جاذب

#### ۴. نتیجه‌گیری و پیشنهادات

در این مقاله، شبیه‌سازی سلول‌های خورشیدی CIGS با درجه‌بندی باندگپ برای بررسی خواص الکتریکی و نوری انجام شده است. علاوه بر این، تأثیر تغییر ضخامت لایه جاذب بر این پارامترها و به ویژه بر بازده و ضریب پر شدگی سلول مورد بررسی قرار گرفته است. در سلول‌های خورشیدی معمولی CIGS، راندمان ۲۲/۸۱ درصد است که با افزایش ضخامت لایه‌های جاذب، سرعت تولید در لایه‌های جاذب افزایش یافته و منجر به افزایش جریان اشباع کوتاه سلول می‌شود. در این مقاله به بازدهی بالاتر از راندمان سلول خورشیدی معمولی دست یافته‌ایم. مقادیر پارامترهای خروجی سلول خورشیدی CIGS شبیه‌سازی شده ما عبارتند از:

$$\text{Efficiency} = 33.7\%, \text{Fill Factor} = 79\%, V_{OC} = 1 \text{ mV and } I_{SC} = 40.96 \text{ mA/cm}^2$$

چندین پیشنهاد برای ادامه‌ی این تحقیق به شرح زیر مطرح می‌شود:

۱. بررسی تأثیرات طیف گسترده‌تر نور: برای بهبود دقت شبیه‌سازی و تعیین دقیق‌تر عملکرد سلول‌های خورشیدی CIGS، می‌توان این تحقیق را به طیف گسترده‌تری از نور (مانند طیف نور خورشید) گسترش داد. این تغییر می‌تواند تأثیرات تغییرات درجه‌بندی شکاف نواری را در دامنه وسیع‌تری از طول موج‌ها بررسی کند و نتایج دقیق‌تری ارائه دهد.
۲. تأثیر متغیرهای دیگر بر عملکرد سلول‌ها: بررسی تأثیر متغیرهای دیگر مانند دما، غلظت دوپینگ، و ویژگی‌های لایه‌های بافر بر راندمان و خصوصیات سلول‌های CIGS می‌تواند اطلاعاتی ارزشمندتر ارائه دهد و به بهبود عملکرد سلول‌ها کمک کند.
۳. تجربیات عملی و تطابق با نتایج شبیه‌سازی: این تحقیق می‌تواند با تجربیات عملی ترکیب شود تا نتایج شبیه‌سازی با داده‌های واقعی مقایسه شوند. این کار می‌تواند صحت و قابلیت انتقال نتایج شبیه‌سازی را تأیید کند.

۴. مقایسه با سایر تکنولوژی‌ها: می‌توان مقایسه‌ای میان سلول‌های CIGS و تکنولوژی‌های سلول‌های خورشیدی دیگر مانند سیلیکون کریستالی انجام داد. این مقایسه می‌تواند مزایا و معایب هر تکنولوژی را به وضوح نمایش دهد و به مهندسان در انتخاب مناسب‌ترین راه حل کمک کند.

۵. بهبود مدل‌های شبیه‌سازی: توسعه و بهبود مدل‌های شبیه‌سازی با استفاده از داده‌های تجربی و نتایج این تحقیق می‌تواند به دقت و قدرت پیش‌بینی این تکنولوژی‌ها کمک کند.

۶. تحقیق در زمینه افزایش دسترسی به مواد و فناوری‌های تولید: تحقیق در زمینه بهینه‌سازی تولید مواد مورد نیاز برای ساخت سلول‌های CIGS و همچنین تحقیق در زمینه بهبود روش‌های تولید و فرآیندهای اجرایی می‌تواند به افزایش کارایی و کاهش هزینه‌های تولید کمک کند.

۷. کاربردهای عملی‌تر و انتقال به صنعت: می‌توان با توسعه کاربردهای عملی‌تر از این تحقیق و انجام آزمایش‌های واقعی به سمت انتقال تکنولوژی به صنعت پیش رفت و اثربخشی اقتصادی و عملکرد عملی‌تر سلول‌های CIGS را مورد ارزیابی قرار داد.

## منابع

- [1] NREL Best Research-Cell Efficiency Chart, <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>, Accessed September 2020.
- [2] Leijtens T, Bush KA, Prasanna R, et al. Opportunities and challenges for tandem solar cells using metal halide perovskite semiconductors. *Nat Energy* 2018; 3: 828-838.
- [3] W. Zhang, et al., Isopropanol-treated PEDOT:PSS as electron transport layer in polymer solar cells, *Org. Electron.* 15 (12) (2014) 3445-3451.
- [4] Sami, M., S. Elkun, Mohsen Ghali, M. M. Mosaad, and M. R. Eraky. "Hybrid solar cell made of an electron transport layer of n-PEDOT: PSS and p-CuInGaSe<sub>2</sub> nanocrystals film." *Materials Letters* 300 (2021): 130155.
- [5] Raghuvanshi, Mohit, Manjusha Chugh, Giovanna Sozzi, Ana Kanevce, Thomas D. Kühne, Hossein Mirhosseini, Roland Wuerz, and Oana Cojocaru-Mirédin. "Fingerprints Indicating Superior Properties of Internal Interfaces in Cu (In, Ga) Se<sub>2</sub> Thin-Film Solar Cells." *Advanced Materials* 34, no. 37 (2022): 2203954.
- [6] Kong, Hui, Zhufeng Yu, Jun Zhang, Yijie Han, Lin Wu, Hongsheng Wang, and Jian Wang. "Perspective of CIGS-BIPV's product competitiveness in china." *International Journal of Photoenergy* 2020 (2020): 1-10.
- [7] Li, Jia, Zhengguo Jin, Tong Liu, Jian Wang, Dalong Wang, Junyun Lai, Haiyan Du, and Lan Cui. "Ternary and quaternary chalcopyrite Cu (In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>) Se<sub>2</sub> nanocrystals: Organoalkali-assisted diethylene glycol solution synthesis and band-gap tuning." *CrystEngComm* 15, no. 36 (2013): 7327-7338.
- [8] Lundberg, Olle, Marika Edoff, and Lars Stolt. "The effect of Ga-grading in CIGS thin film solar cells." *Thin Solid Films* 480 (2005): 520-525.
- [9] M.A. Green, *Solar Cells; Operating Principles, Technology and System Applications*, The University of New South Wales, Kensington, 1992, p. 50 (142).
- [10] O. Lundberg, Ph.D. thesis, Uppsala University, (2003), ISBN 91-544- 5790-8, <http://publications.uu.se/thesis/abstract.xsql?dbid=3757>.
- [11] Chen, Wen S., and Reid A. Mickelsen. "Thin-film CdS/CuInSe<sub>2</sub> heterojunction solar cell." In *Role of electro-optics in photovoltaic energy conversion*, vol. 248, pp. 62-69. SPIE, 1980.
- [12] Jackson, Philip, Dimitrios Hariskos, Roland Wuerz, Wiltraud Wischmann, and Michael Powalla. "Compositional investigation of potassium doped Cu (In, Ga) Se<sub>2</sub> solar cells with efficiencies up to 20.8%." *physica status solidi (RRL)–Rapid Research Letters* 8, no. 3 (2014): 219-222.
- [13] Zouache, Rafik, Idris Bouchama, Okba Saidani, Layachi Djedoui, and Elyazid Zaidi. "Numerical study of high-efficiency CIGS solar cells by inserting a BSF  $\mu$ -Si: H layer." *Journal of Computational Electronics* 21, no. 6 (2022): 1386-1395.
- [14] Liu, Wu, Haotian Li, Bo Qiao, Suling Zhao, Zheng Xu, and Dandan Song. "Highly efficient CIGS solar cells based on a new CIGS bandgap gradient design characterized by numerical simulation." *Solar Energy* 233 (2022): 337-344.

- [15] Ouedraogo, Soumaila, Raguilignaba Sam, François Ouedraogo, Marcel Bawindsom Kebre, François Zougmore, and Jean-Marie Ndjaka. "Optimization of Copper Indium Gallium Di-Selenide (CIGS) based solar cells by back grading." In 2013 Africon, pp. 1-6. IEEE, 2013. [10.1016/j.opelre.2019.02.001](https://doi.org/10.1016/j.opelre.2019.02.001)
- [16] Bothwell, Alexandra M., Siming Li, Rouin Farshchi, Michael F. Miller, Jake Wands, Craig L. Perkins, Angus Rockett, Aaron R. Arehart, and Darius Kuciauskas. "Large-Area (Ag, Cu)(In, Ga) Se<sub>2</sub> Thin-Film Solar Cells with Increased Bandgap and Reduced Voltage Losses Realized with Bulk Defect Reduction and Front-Grading of the Absorber Bandgap." *Solar RRL* 6, no. 8 (2022): 2200230.
- [17] Lafuente-Sampietro, Alban, Katsuhisa Yoshida, Shenghao Wang, Shogo Ishizuka, Hajime Shibata, Nobuyuki Sano, Katsuhiko Akimoto, and Takeaki Sakurai. "Effect of the double grading on the internal electric field and on the carrier collection in CIGS solar cells." *Solar Energy Materials and Solar Cells* 223 (2021): 110948.

---

<sup>1</sup> CuIn<sub>1-x</sub>GaxSe<sub>2</sub>

<sup>2</sup> Power Conversion Efficiency

<sup>3</sup> Back Surface Field

<sup>4</sup> tetra-gradient bandgap

<sup>5</sup> Power Conversion Efficiency

<sup>6</sup> band-gap grading

<sup>7</sup> Molybdenum