

نوع مقاله: پژوهشی

تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۱۱/۱۲ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۸/۲۶

افزایش بازدهی سلول خورشیدی CIGS با ترکیب مناسب لایه‌های بافر Cds و CdSe: شبیه‌سازی به وسیله نرم‌افزار Silvaco

طیبه قربانی آرانی^۱، مصطفی زاهدی‌فر^{۲*}، مهرداد مرادی^۳، احسان قنبری^۴

^۱ دانشجوی دکتری پژوهشکده علوم و فناوری نانو، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران

ghorbani.tayebbeh@gmail.com

^۲ استاد دانشکده فیزیک، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران

zhdf@kashanu.ac.ir

^۳ دانشیار پژوهشکده علوم و فناوری نانو، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران

m.moradi@kashanu.ac.ir

^۴ دانش‌آموخته دکتری علوم و فناوری نانو، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران

e.ghanbari87@gmail.com

چکیده: یکی از لایه‌های اصلی در ساخت سلول‌های خورشیدی لایه‌نازک سلنید گالیوم ایندیوم مس (CIGS)، لایه بافر است. لایه بافر باعث افزایش مقدار جذب و کاهش بازترکیب‌های سطحی می‌شود. لذا سلول خورشیدی به‌میزان بیشتری حامل‌های بار تولید شده را جذب می‌کند و موجب افزایش بازدهی در آن می‌شود. در این پژوهش با استفاده از نرم‌افزار شبیه‌ساز سیلواکو، لایه‌های کادمیوم سولفید (CdS) و کادمیوم سلنید (CdSe) به‌عنوان لایه بافر در ساختار مدل‌سازی شده و تأثیر ترکیب‌های مختلف از این دو لایه بر روی پارامترهای J_{sc} , V_{oc} , FF , η بررسی شده است. نتایج اولیه نشان داد که افزایش ضخامت در لایه بافر می‌تواند بازدهی سلول را کاهش دهد. ادامه شبیه‌سازی‌ها نشان داد در شرایطی که لایه کادمیوم سلنید نزدیک به لایه جاذب (CIGS) باشد، حالت بهینه برای لایه بافر، متشکل از ۴۰ نانومتر از کادمیوم سولفید و ۱۰ نانومتر از کادمیوم سلنید است و می‌تواند بازدهی را به ۲۵/۱۹٪ افزایش دهد. همچنین نمودار انرژی نشان داد که در حالت بهینه، حرکت الکترون‌ها و حفره‌ها به‌صورت فرایند آبشاری و بدون سد اتفاق می‌افتد که موجب افزایش قابل توجه بازدهی شده است.

واژه‌های کلیدی: لایه بافر، سلول خورشیدی CIGS، شبیه‌ساز سیلواکو، کادمیوم سولفید، کادمیوم سلنید.

جاذب (CIGS)، انواع لایه بافر مانند (CdS) یا (CdSe) و اتصال رویی (ZnO) می‌باشد که در شکل (۱) نشان داده شده است. عناصر به کاررفته در لایه بافر این سلول متشکل از مس (Cu)، ایندیوم (In)، گالیوم (Ga) و سلیوم (Se) هستند. این ترکیبات انعطاف زیادی در خواص ساختاری و الکتریکی دارند و به همین دلیل جایگاه وسیعی در ساخت سلول‌های خورشیدی دارند. بیشترین بازدهی تجربی گزارش شده از این ساختار حدود ۲۳٪ است [۸]. شکاف نوار انرژی CIGS را می‌توان با جایگزینی ایندیوم با گالیوم تنظیم کرد تا با طیف خورشیدی مطابقت بهتری داشته باشد.

در ترکیب $Cu_{1-x}Ga_xS$ ، پارامتر x نشان‌دهنده میزان گالیوم در لایه بافر است که مقدار آن می‌تواند بین ۰ تا ۱ باشد و اغلب با استفاده از دو نسبت غلظت $([Ga] + [In]) / [Cu]$ و $[Ga]$ استفاده می‌شود. در این ساختار شکاف نوار انرژی با مقدار Ga افزایش می‌یابد. $CuInSe_2$ خالص (CIS) دارای شکاف نوار انرژی یک الکترونولت است در حالی که $CuGaSe_2$ خالص (CGS) دارای شکاف نوار انرژی حدود ۱/۷ الکترونولت است [۹]. در این نوع سلول‌ها، اغلب از لایه ZnO با شکاف نوار انرژی ۳/۳ الکترونولت به عنوان نیم‌رسانای نوع n استفاده می‌شود. جذب تابش خورشید و تشکیل جفت الکترون-حفره در لایه نوع p صورت می‌گیرد. از آنجا که در محل اتصال n-p مقدار زیادی نقص وجود دارد، اتصال ناهمگن ZnO/CIGS باعث افزایش بازترکیب الکترون-حفره می‌شود. از طرفی یون‌های برخوردی هنگام لایه‌نشانی ZnO می‌توانند به سطح لایه بافر آسیب وارد کنند و احتمال بازترکیب را در آن افزایش دهند؛ به همین دلیل یک لایه بافر بسیار نازک بین لایه‌های ZnO و CIGS قرار داده می‌شود. نقش لایه بافر ایجاد اتصال با لایه بافر برای به حداکثر رساندن میزان نور ورودی به لایه بافر است. بر این اساس، لایه بافر باید برای افزایش میزان جریان تولیدشده در سلول، بازترکیب سطحی بسیار کمی داشته باشد تا سلول بتواند به حداکثر میزان جمع شدن حامل‌های بار تولیدشده توسط نور در اتصال‌های پستی و رویی دست یابد. برای برآورده ساختن چنین ویژگی‌هایی، لایه بافر باید تا حد ممکن نازک باشد و در مقایسه با لایه بافر CIGS باید شکاف نوار انرژی بزرگ‌تری داشته باشد [۱۰]. همچنین لایه بافر می‌تواند سطح ناهموار فیلم CIGS را کاملاً بپوشاند و از تشکیل مسیرهای اتصال کوتاه جلوگیری کند [۱۱]. معمولاً لایه بافر CdS بین لایه بافر CIGS و لایه شفاف

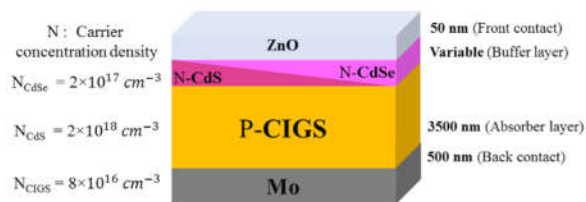
سیستم‌های فتوولتائیک یا به عبارت دیگر سلول‌های خورشیدی، سیستم‌هایی هستند که انرژی خورشیدی را به انرژی الکتریکی تبدیل می‌کنند. لایه بافر در این سلول‌ها می‌تواند یک نیم‌رسانای بلوری، چندبلوری یا آمورف باشد. سلول‌های خورشیدی سیلیکونی و سلول‌های GaAs از جمله کارآمدترین دستگاه‌های تک‌اتصال هستند [۱]. مواد دیگری مانند CdTe و $Cu(In,Ga)Se_2$ (CIGS) طی سال‌های اخیر به سبب مقدار جذب بالا و در دسترس تر بودن مورد توجه محققان قرار گرفته‌اند [۲]. این مواد عمدتاً به صورت فیلم‌های نازک بس بلور رسوب می‌کنند. یکی از مزایای این مواد در مقایسه با سیلیکون بلوری یا بس بلور، خاصیت جذب نور بیشتر است که ضخامت لایه مورد نیاز را از حدود ۱۰۰ میکرومتر به تنها چند میکرومتر کاهش می‌دهد و در صورت استفاده از روش ساخت کارآمد، تولید آن‌ها به طور بالقوه ارزان‌تر می‌شود.

یکی از امیدوارکننده‌ترین سلول‌ها، سلول خورشیدی CIGS است که ساختاری مس‌گونه دارد. دلایل محبوبیت آن‌ها عملکرد بالا، ضریب جذب نوری بالا در طیف مرئی نور خورشید، شکاف نوار انرژی قابل تنظیم، هزینه کم، پایداری طولانی مدت در فضای باز و خصوصیات متمایز الکترونیکی است. این نوع سلول‌ها در برابر تابش نور خورشید تخریب نمی‌شوند و به سبب گاف نواری مناسب می‌توانند نور بیشتری جذب کنند [۳ و ۴]. بنا بر دلایل ذکر شده ساخت این سلول‌ها در سال‌های اخیر مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفته و بررسی‌های تجربی در راستای بهبود ساختار سلول خورشیدی از قبیل تغییر شرایط لایه‌نشانی، تغییر روش لایه‌نشانی، تغییر نوع مواد در لایه‌های مختلف، تغییر دمای بازپخت انجام شده است. این نوع از سلول‌ها پایداری بالا و جذب بسیار خوبی دارند و در حال حاضر یکی از تجاری‌ترین سلول‌های خورشیدی لایه‌نازک هستند [۵]. در سال ۲۰۱۰ مؤسسه AIST با لایه‌نشانی CIGS به روش تبخیر همزمان سه مرحله‌ای روی بستر مولیبدن به بازدهی ۱۴/۶ رسید [۶]. در سال ۲۰۱۲ مؤسسه EMPA با ساخت این نوع از سلول روی بستر فویل پلیمری بازدهی را به ۲۰/۴٪ افزایش داد. در ادامه تحقیقات برای افزایش بازدهی این نوع از سلول‌ها در سال ۲۰۱۹ مؤسسه FRONTIER SOLAR با استفاده از فناوری رسوب در خلأ، بازدهی این نوع از سلول‌ها را به حدود ۲۳/۴٪ افزایش داد [۷]. لایه‌های این سلول شامل اتصال پستی مولیبدن (Mo)، لایه

در این مقاله از نرم‌افزار سیلوکو برای شبیه‌سازی سلول CIGS و بهینه‌سازی لایه بافر استفاده شده است. لذا با اضافه شدن لایه CdSe به لایه بافر CdS و طراحی یک لایه بافر دوگانه، تغییرات بازدهی سلول خورشیدی CIGS بررسی شده است. در ابتدا تغییر ضخامت لایه بافر در شرایط استاندارد (AM 1.5G, 100 mW/cm^2 , 300 K)، برای پارامترهای فتولتائیک شامل ولتاژ مدار باز Voc، چگالی جریان J_{sc} ، فاکتور پرشدگی FF و بازدهی η برای دو لایه CdSe و CdS به صورت مجزا محاسبه شد و در گام دوم، ترکیب‌های مختلف از این دو لایه به عنوان لایه بافر در نظر گرفته شد و ساختار بهینه به دست آمد. در انتها نیز با رسم نمودار انرژی، به تفسیر دلیل افزایش بازدهی پرداخته شد.

۲. شبیه‌سازی سلول خورشیدی CIGS

سلول‌های خورشیدی مبتنی بر CIGS با لایه‌های بافر مختلف تحت شرایط استاندارد AM 1.5 شبیه‌سازی شدند. در این حالت میزان تابش خورشید استاندارد و زاویه تابش خورشید با محور عمودی زمین حدود $41/8^\circ$ درجه است. طرح‌واره‌ای از ساختار سلول CIGS و ضخامت‌های در نظر گرفته شده برای این پژوهش در شکل (۱) آمده است.



شکل (۱): ساختار سلول خورشیدی CIGS و ضخامت هر لایه به همراه چگالی حامل‌ها

طبق نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی در ساختاری با بازدهی بالا، ضخامت لایه‌های مولیبدن، لایه جاذب CIGS، لایه بافر CdSe یا CdS و لایه رویی شفاف ZnO به ترتیب برابر با ۵۰۰ نانومتر، ۳۵۰۰ نانومتر، ضخامت متغیر و ۵۰ نانومتر در نظر گرفته شد [۹].

در این ساختار، لایه اتصال جلویی ZnO به عنوان اکسید رسانای شفاف (TCO) در نظر گرفته شده است که ضخامت این لایه می‌تواند تا حدود ۳۰۰ نانومتر نیز افزایش پیدا کند. در یک سلول خورشیدی $CI_{1-x}G_xS$ ، پارامتر x میزان گالیوم ساختار را تعیین می‌کند که طبق رابطه $x = \frac{Ga}{Ga+In}$ تعریف می‌شود. بالاترین بازدهی به دست آمده از این ساختار CIGS در شکاف نوار انرژی $1/3$ الکترون ولت به ازای $x=0/5$ به دست آمد. لذا در ادامه تحقیق

ZnO قرار می‌گیرد تا از اتصال بین این دو جلوگیری کند و بازدهی را افزایش دهد. در سلول‌های با کارایی بالا، از روش حمام شیمیایی برای رسوب لایه بافر CdS استفاده می‌شود. لایه بافر CdS به دلیل ماهیت سمی بودن، می‌تواند با نیم‌رساناهای دیگر مانند ZnO, InS, ZnS و CdSe جایگزین شود [۱۲ و ۱۳]. لایه‌های نازک کادمیوم سلنید (CdSe) به عنوان نیم‌رسانای نوع n از گروه II-VI به دلیل شفافیت بالا، شکاف نوار انرژی مستقیم و الکترون‌خواهی بالا دارای کاربردهای گسترده در زمینه‌های فتولتائیک هستند. شکاف نوار انرژی قابل تنظیم آن‌ها موجب شده که در سلول‌های خورشیدی لایه‌نازک نیز به کار گرفته شوند. شایان ذکر است سادگی، قیمت مناسب و راحتی روش‌های ساخت نیز این لایه نیز در محبوبیت آن مؤثر بوده است.

در سال‌های اخیر همزمان با تحقیقات تجربی برای ساخت سلول‌های CIGS شبیه‌سازی این نوع از سلول‌ها با نرم‌افزارهایی از جمله SCAPS و SILVACO در حال انجام است که بهینه‌سازی ساختار از قبیل ضخامت، شکاف نوار انرژی، نوع مواد در هر لایه می‌تواند باعث صرفه‌جویی مالی و زمان در ساخت سلول‌ها شود. برای مثال در یک شبیه‌سازی سلول خورشیدی CIGS با نرم‌افزار SCAPS که در سال ۲۰۲۱ به چاپ رسیده، با اضافه شدن لایه میانی PbS بین لایه پشتی Mo و لایه جاذب CIGS با کاهش بازترکیب الکترون-حفره بازدهی به حدود $24/22\%$ افزایش یافته است [۱۴]. همچنین یکی دیگر از نرم‌افزارهای پرکاربرد، نرم‌افزار شبیه‌ساز SILVACO است که به دلیل وارد شدن اکثر پارامترهای مورد نظر یک لایه به برنامه، نتایج آن مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفته و حتی با نتایج تجربی قابل مقایسه است. برای مثال با بهینه‌سازی ضخامت و تراکم دوپینگ، بازدهی سلول CIGS حدود $22/94\%$ به دست آمده که با نتایج تجربی که بازدهی $22/92\%$ را گزارش داده است [۱۵]، مشابهت خوبی دارد. نتایج این شبیه‌سازی در سال ۲۰۲۰ به چاپ رسیده است [۱۶]. یکی دیگر از بررسی‌هایی که به کمک شبیه‌سازی بر روی سلول CIGS انجام شده، بهینه‌سازی لایه بافر سلول است. لایه بافر CdS یکی از پرکاربردترین مواد برای استفاده در این سلول است اما چون بسیار سمی است، محققان همواره به دنبال جایگزین مناسبی برای آن هستند تا هم سمیت کمتری داشته باشد و هم اینکه بتواند با هدایت بهتر الکترون‌ها، بازدهی سلول را افزایش دهد. برای مثال با جایگزینی لایه بافر ZnS به جای CdS، بازدهی سلول به حدود $27/33\%$ افزایش یافته است [۱۷].

باز سلول (V_{OC}) با تغییرات ضخامت تقریباً ثابت و حدود ۸۰۰ میلی‌ولت به دست آمده است. ولتاژ مدار باز سلول مطابق با رابطه (۳) بیان می‌شود [۱۹].

$$V_{OC} = \frac{KT}{q} \ln \frac{J_{SC}}{J_0} \quad (3)$$

طبق این رابطه کاهش میزان J_{SC} می‌تواند ولتاژ مدار باز سلول را نیز کاهش دهد. از آنجا که با افزایش ضخامت لایه بافر میزان چگالی جریان در لایه CdS نسبت به لایه CdSe با شیب کمتری کاهش می‌یابد، تغییر در V_{OC} نیز کاهش کمتری خواهد داشت و می‌توان آن را تقریباً ثابت در نظر گرفت.

ضریب پرشدگی (FF) در این سلول‌ها برای لایه‌های بافر کادمیوم سولفید و کادمیوم سلنید به ترتیب ۶۸/۸ و ۷۴-۷۵ است. طبق نتایج به دست آمده، به ازای ضخامت ۱۰۰ نانومتر از لایه بافر برای هر دو سلول، بازدهی ۲۰/۶۷ به دست آمد که با کاهش ضخامت به ۳۰ نانومتر به ترتیب برای کادمیوم سولفید و کادمیوم سلنید این میزان به ۲۱/۷۶ و ۲۴٪ افزایش پیدا کرد. کاهش بازدهی با افزایش ضخامت لایه بافر را می‌توان به کاهش J_{SC} به دلیل میزان جذب حامل‌های بار نسبت داد. با کاهش ضخامت لایه بافر از ۱۰۰ به ۳۰ نانومتر، چگالی جریان کوتاه از ۳۵ به ۴۰ میلی‌آمپر بر سانتی‌متر مربع در کادمیوم سلنید (CdSe) و از ۳۷/۵ به ۳۹/۵ میلی‌آمپر بر سانتی‌متر مربع در سلول با کادمیوم سولفید (CdS) افزایش می‌یابد. به علاوه با افزایش ضخامت، نقص‌های موجود در لایه زیادتر شده و احتمال بازترکیب حامل‌ها افزایش می‌یابد که می‌تواند بازدهی سلول را کاهش دهند [۲۰]. از آنجا که لایه‌های بافر بسیار نازک نمی‌توانند وظیفه حفاظت از لایه‌های زیری را به خوبی انجام دهند، ضخامت ۵۰ نانومتر برای هر یک از لایه‌های بافر انتخاب شد.

۲.۳. ترکیب لایه‌های کادمیوم سولفید و کادمیوم سلنید در لایه بافر

به منظور بهبود ضریب جذب و کارایی سلول CIGS، یک ساختار لایه بافر دوتایی کادمیوم سولفید و کادمیوم سلنید شبیه‌سازی و پارامترهای مربوط به بازدهی در ضخامت‌های مختلف بررسی شد. به زبان ساده، ترکیب دو لایه کادمیوم سولفید و کادمیوم سلنید به عنوان لایه بافر با مجموع ضخامت ۵۰ نانومتر در نظر گرفته شد. از آنجا که روش مناسب برای نشان دادن لایه‌های کادمیوم سولفید و کادمیوم سلنید به روش حمام شیمیایی است، با آماده‌سازی دو ظرف حاوی محلول پیش‌ماده برای هر دو لایه بافر و کنترل زمان لایه‌نشانی مناسب، می‌توان ضخامت و ترتیب لایه‌نشانی‌ها را کنترل کرد.

میزان x برابر با ۰/۵ در نظر گرفته شده است. پارامترهایی که در این مقاله برای شبیه‌سازی یک سلول خورشیدی CIGS استفاده شده، در جدول (۱) گزارش شده است.

جدول (۱): پارامترهای فیزیکی مورد استفاده برای شبیه‌سازی

	Units	CdS	CdSe	CIGS
Band gap (E_g)	eV	2.4	1.75	1.3
Electron affinity (χ_e)	eV	4.5	4.1	4.02
Relative permittivity (ϵ_r)	F cm ⁻¹	10	10	13.6
Electron mobility (μ_n)	cm ² /Vs	100	800	100
Hole mobility (μ_p)	cm ² /Vs	25	25	25
Conduction band DOS (N_C)	cm ⁻³	2.2×10^{18}	1.8×10^{18}	2.2×10^{18}
Valence band DOS (N_V)	cm ⁻³	1.8×10^{19}	7.6×10^{19}	1.8×10^{19}

این پارامترها عبارت‌اند از: گذردهی نسبی ϵ_r ، الکترون‌گاتیوی χ_e ، تحرک‌پذیری باند الکترون μ_n ، تحرک‌پذیری باند حفره μ_p ، چگالی مؤثر حالات در باند هدایت N_C ، چگالی مؤثر حالات در باند ظرفیت N_V و شکاف نوار انرژی E_g . با توجه به نتایج تجربی به دست آمده برای چند سلول خورشیدی CIGS، می‌توان روابط تجربی برای E_g و χ_e را برحسب x به صورت زیر نوشت [۹]:

$$E_g = 1.04 + 0.391x + 0.262x^2 \quad (1)$$

$$\chi_e = 4.61 - 1.162x + 0.034x^2 \quad (2)$$

در رابطه (۲)، الکترون‌گاتیوی الکترون (χ_e)، حداقل انرژی مورد نیاز برای آزادسازی الکترون از پایین باند هدایت و رساندن آن به سطح خلأ است [۱۸].

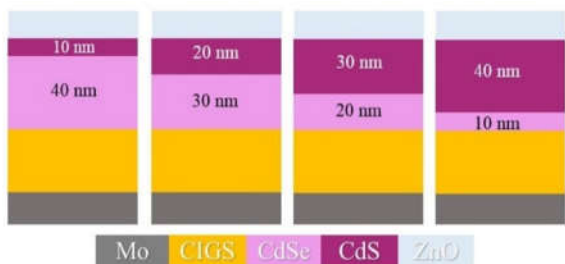
۳. نتایج و بحث

۱.۳. استفاده از لایه‌های کادمیوم سولفید و کادمیوم سلنید به صورت مجزا در لایه بافر

در اولین قسمت شبیه‌سازی، ضخامت همه لایه‌ها ثابت در نظر گرفته شد و بازدهی سلول با تغییر ضخامت لایه بافر از ۳۰ تا ۱۰۰ نانومتر با گام‌های ۱۰ نانومتر بررسی شد. در شکل (۲)، نتایج حاصل از شبیه‌سازی برای سلول با لایه‌های بافر کادمیوم سولفید و کادمیوم سلنید نشان داده شده است. همان گونه که نتایج نشان می‌دهد، در دو سلول با لایه‌های بافر CdS و CdSe، ولتاژ مدار

1. Relative Permittivity
2. Electron Affinity
3. Electron Mobility
4. Hole Mobility
5. Conduction Band DOS
6. Valance Band DOS

از آنجا که شکاف نوار انرژی (E_g) و الکترون خواهی (χ_e) لایه‌های کادمیوم سولفید و کادمیوم سلنید متفاوت است، ترتیب قرارگیری لایه‌ها و نحوه اتصال به لایه جلویی (ZnO) و لایه جذب ($CIGS$) برای انتقال الکترون از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. لذا شبیه‌سازی برای جابه‌جایی لایه‌ها نیز انجام شده و نتایج آن‌ها در جدول‌های (۲) و (۳) آمده است. طرح‌واره‌ای از ترتیب ضخامت لایه‌ها برای حالتی که کادمیوم سولفید به اتصال جلویی متصل است، در شکل (۳) آمده است.



شکل (۳): طرح‌واره ساختار برای ضخامت‌های مختلف کادمیوم سولفید و کادمیوم سلنید از لایه بافر برای حالتی که کادمیوم سولفید به اتصال جلویی متصل شده است.

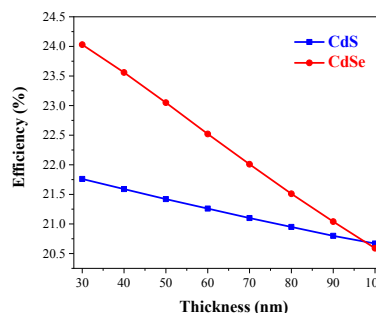
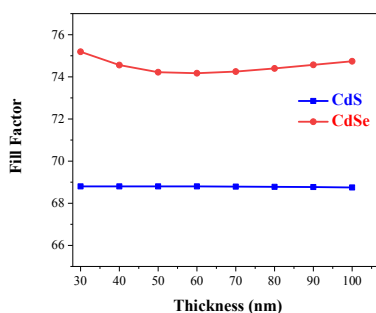
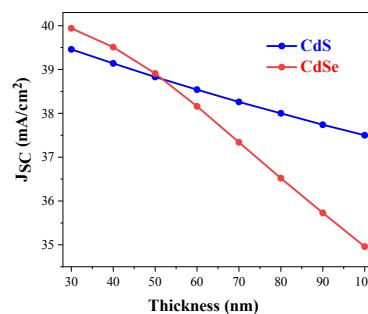
حال اگر ضخامت لایه کادمیوم سولفید افزایش و ضخامت لایه کادمیوم سلنید کاهش یابد، هنگام رسیدن به ضخامت ۴۰ نانومتر از کادمیوم سولفید و ۱۰ نانومتر از کادمیوم سلنید، بیشترین بازدهی یعنی ۲۵/۱۹٪ حاصل می‌شود.

جدول (۲): پارامترهای J_{sc} , V_{oc} , FF و بازدهی η برای ساختار Mo/CIGS/CdS/CdSe/ZnO

Thicknesses of CdS-CdSe (nm)	10 - 40	20 - 30	30 - 20	40 - 10
$(mA/cm^2) J_{sc}$	31.56	32.92	34.44	36.18
V_{oc} (v)	0.8	0.8	0.8	0.8
FF	67.83	67.98	68.25	68.58
η (%)	17.14	17.92	18.83	19.88

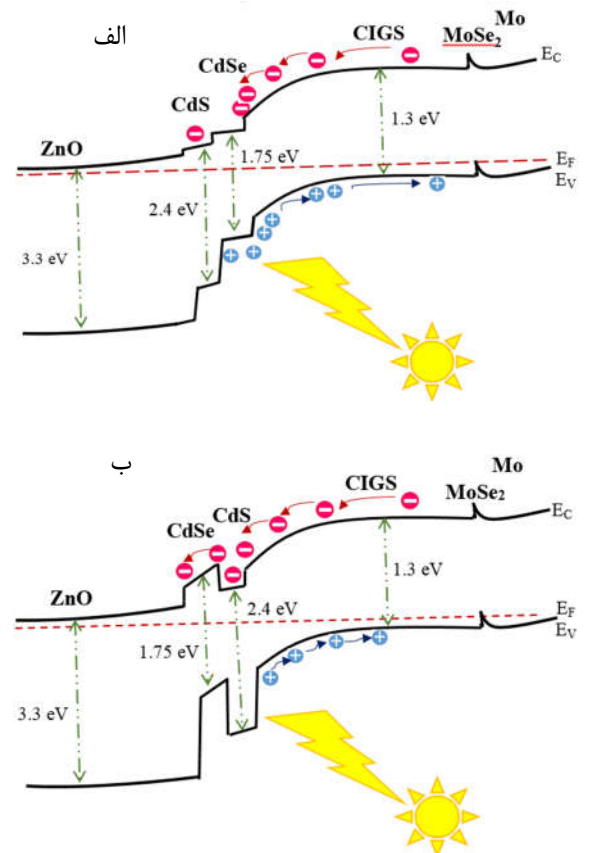
همان گونه که مشاهده می‌شود، تغییر ضخامت لایه‌ها، تأثیری در میزان ولتاژ مدار باز سلول نداشته و این میزان برای تمام ضخامت‌ها ۰.۸ میلی‌ولت است. اما در ساختاری که کادمیوم سلنید نزدیک به اتصال رویی است، با افزایش ضخامت کادمیوم سولفید و کاهش ضخامت کادمیوم سلنید، بازدهی از ۱۷/۴۴ به ۱۹/۸۸٪ افزایش یافت. با مقایسه ستون اول و ستون آخر در جدول (۱) مشاهده می‌شود که فاکتور پرشدگی فقط کمتر از یک واحد افزایش داشته، ولی تغییر اساسی در مقدار جریان کوتاه اتفاق افتاده که از ۳۱/۵۶ میلی‌آمپر بر سانتی‌متر مربع به ۳۶/۱۸

به دلیل سختی و مشکلات لایه‌نشانی در روش حمام شیمیایی برای ضخامت خیلی کم، کمینه ضخامت برای یکی از لایه‌ها در حالت دوتایی ۱۰ نانومتر در نظر گرفته شد. ترکیب لایه‌ها از ۱۰ نانومتر برای لایه اول و ۴۰ نانومتر از لایه دوم شروع شد و به ترتیب ۱۰ نانومتر از لایه ضخیم‌تر (لایه دوم) کاسته شد و به لایه نازک‌تر (لایه اول) اضافه شد تا در نهایت به ضخامت ۴۰ نانومتر از لایه اول و ۱۰ نانومتر برای لایه دوم رسید.



شکل (۲): وابستگی پارامترهای J_{sc} , V_{oc} , FF و بازدهی η به ضخامت در سلول CIGS برای دو لایه بافر CdS و CdSe به صورت مجزا

نحوه انتقال الکترون‌ها و حفره‌ها برای هر دو حالت در شکل (۴) آورده شده است.



شکل (۴): طرح‌واره نوارهای انرژی و نحوه انتقال الکترون‌ها و حفره‌ها در ساختار برای حالتی که کادمیوم سولنید به اتصال جلویی متصل شده است (ابعاد تقریبی ترسیم شده است).

شکل (۴) ترازهای انرژی مربوط به یک ساختار CIGS را نشان می‌دهد. بعد از اتصال یک نیم‌رسانای نوع n به نیم‌رسانای نوع p در محل اتصال آن‌ها نوارهای انرژی کمی خمیده می‌شوند تا تراز فرمی E_f در این دو لایه هم‌تراز باشد. لذا در این مرز مشترک n-p به دلیل خمیدگی نوازی، انتقال الکترون و تبادل بار راحت‌تر صورت گرفته و یک میدان الکتریکی ایجاد می‌شود. برای رسم دقیق این ترازها باید شکاف نوار انرژی و میزان الکترون‌خواهی هر لایه به صورت دقیق رسم شود. مقدار الکترون‌خواهی لایه CdS نسبت به لایه CdSe بیشتر است که نسبت به خط خالص رسم می‌شوند لذا همان طور که از شکل ب پیداست، اختلاف الکترون‌خواهی لایه‌های CIGS و CdS مانند سدی برای انتقال الکترون است. بنابراین جریان J_{sc} و V_{oc} در این حالت نسبت به قسمت الف کاهش می‌یابد و می‌توان گفت بازدهی سلول در ساختار Mo/CIGS/CdSe/CdS/ZnO نسبت

میلی‌آمپر بر سانتی‌متر مربع رسیده است. اما در ساختار دوم مشاهده می‌شود که فقط جابه‌جا کردن کادمیوم سولنید (با ضخامت ۱۰ نانومتر) با کادمیوم سولنید (با ضخامت ۴۰ نانومتر) و قرار دادن کادمیوم سولنید نزدیک لایه اتصال رویی، بازدهی از ۱۹/۸۸ به ۲/۶۸٪ می‌رسد.

جدول (۳): پارامترهای V_{oc} , J_{sc} , FF و بازدهی η برای ساختار Mo/CIGS/CdSe/CdS/ZnO

Thicknesses of CdSe-CdS (nm)	10 - 40	20 - 30	30 - 20	40 - 10
J_{sc} (mA/cm ²)	40	39.52	39.19	39.04
V_{oc} (v)	0.8	0.8	0.8	0.8
FF	78.64	77.35	75.29	72.51
η (%)	25.19	24.49	23.64	22.68

با بررسی پارامترهای جدول (۳) مشاهده می‌شود که مقدار جریان اتصال کوتاه کمتر از یک میلی‌آمپر بر سانتی‌متر مربع افزایش داشته و لذا افزایش مهم بازدهی به سبب افزایش ۶/۱۳ واحدی فاکتور پرشدگی سلول از ۷۲/۵۱ به ۷۸/۶۴ بوده است. نتایج نشان می‌دهد که اگر ترتیب لایه‌ها با توجه به شکاف نوار انرژی و الکترون‌خواهی آن‌ها درست انتخاب شود، بهترین حالت آبخاری انرژی به وجود خواهد آمد.

لایه بافر CdSe از نظر ساختاری، بسیار شبیه به لایه CdS است. اما شکاف نوار انرژی کمتری نسبت به CdS دارد که این امر باعث می‌شود الکترون‌ها در ساختار نوازی راحت‌تر به سمت اتصال‌های رویی و پشتی و رویی حرکت کنند. لایه بافر CdSe در دو سلول خورشیدی نقطه کوانتومی PbS و CdTe باعث افزایش بازدهی سلول‌ها شده است [۲۱ و ۲۲]. در تحقیق تجربی گزارش شده درباره سلول CdTe وجود لایه بافر دوتایی CdSe/CdS باعث بهبود عملکرد سلول شده و چگالی جریان سلول را حدود ۱۰٪ افزایش داده است که می‌توان گفت به دلیل الحاق سلنیوم به لایه CdTe شکاف نوار انرژی این لایه کمتر شده و لذا حرکت الکترون‌ها با سهولت بیشتری انجام می‌شود.

بنابراین طبق نتایج به دست آمده مشابه در سلول CIGS می‌توان به طور کلی گفت: ساختار بهینه در سلول شبیه‌سازی شده، به گونه‌ای است که کادمیوم سولنید نزدیک اکسید روی و کادمیوم سولنید نزدیک به لایه جاذب باشد. در این حالت پله‌های انرژی به درستی عمل می‌کند و الکترون‌ها به راحتی به سمت اتصال جلویی و حفره‌ها راحت‌تر به سمت مولیبدن (اتصال پشتی) حرکت می‌کنند. به منظور درک بهتر این موضوع، نوارهای انرژی و

با ضخامت‌های مختلف رسم شد. نتایج نشان داد که با افزایش ضخامت، میزان بازدهی سلول کم می‌شود که آن را می‌توان به کاهش J_{sc} و افزایش بازترکیب حامل‌ها در سلول نسبت داد.

در ادامه، بازدهی ساختار سلول با لایه بافر $CdS/CdSe$ بررسی شد. بررسی‌های حاصل از شبیه‌سازی نشان داد که ساختار بهینه سلول هنگامی به دست می‌آید که به ترتیب ضخامت‌های ۱۰ و ۴۰ نانومتر برای CdS و $CdSe$ باشد، به شرطی که کادمیوم سولفید به لایه اکسید روی و کادمیوم سلنید به لایه جاذب نزدیک باشد. در این حالت، مقدار بازتاب کم و جذب در ساختار افزایش می‌یابد که این امر موجب افزایش بیش از ۶ واحدی در فاکتور پرشدگی و لذا موجب افزایش بازدهی شده است.

به ساختار $Mo/CIGS/CdS/CdSe/ZnO$ بیشتر است. از سوی دیگر باید اشاره شود که یک عامل مهم در افزایش فاکتور پرشدگی، کاهش مقدار بازتاب و افزایش جذب نور خورشید در ساختار است.

۴. نتیجه‌گیری

در این پژوهش ابتدا لایه $CdSe$ به جای CdS به عنوان لایه بافر در ساختار $CIGS$ قرار گرفت. نتایج شبیه‌سازی نشان داد که میزان بازدهی سلول در لایه بافر $CdSe$ به میزان ۷/۶٪ نسبت به CdS افزایش می‌یابد. در قسمت بعد، تغییرات ضخامت لایه بافر بر روی پارامترهای اصلی سلول خورشیدی از قبیل V_{oc} ، J_{sc} و Efficiency بررسی شد و نمودارهای حاصل از شبیه‌سازی مرتبط

مراجع

- [1] Pettersson, J., *Modelling band gap gradients and Cd-free buffer layers in Cu (In, Ga) Se₂ solar cells*, Ph.D. Thesis, Acta Universitatis Upsaliensis, 2012.
- [2] Camacho-Espinosa, E., López-Sánchez, A., Rimmaudo, I., Mis-Fernández, R. and Peña, J. L., *All-sputtered CdTe solar cell activated with a novel method*, Solar Energy Vol. 193, pp. 31-36, 2019.
- [3] Ahmad, F., Anderson, T. H., Monk, P. B. and Lakhtakia, A. *"Efficiency enhancement of ultrathin CIGS solar cells by optimal bandgap grading: erratum"*, Applied optics, Vol. 59, pp. 2615-2615, 2020.
- [4] Li, W., Li, W., Feng, Y. and Yang, C., *"Numerical analysis of the back interface for high efficiency wide band gap chalcopyrite solar cells"*, Solar Energy, Vol. 180, pp. 207-215, 2019.
- [5] Regmi, G., Ashok, A., Chawla, P., Semalti, P., Velumani, S., Sharma, S. N. and Castaneda, H., *"Perspectives of chalcopyrite-based CIGSe thin-film solar cell"*, a review. Journal of Materials Science: Materials in Electronics, Vol. 31, pp. 7286-7314, 2020.
- [6] Niki, S., Contreras, M., Repins, I., Powalla, M., Kushiya, K., Ishizuka, S. and Matsubara, K., *"CIGS absorbers and processes Progress in Photovoltaics"*, Research and Applications, Vol. 18, pp. 453-466, 2010.
- [7] Nakamura, M., Yamaguchi, K., Kimoto, Y., Yasaki, Y., Kato, T., Sugimoto, H. *"Cd-free Cu (In, Ga)(Se, S)₂ thin-film solar cell with record efficiency of 23.35%"*, IEEE Journal of Photovoltaics, Vol. 9, pp. 1863-1867, 2019.
- [8] Kumar, A., Goyal, A. K., Gupta, U., Gupta, N. and Chaujar, R., *"Increased efficiency of 23% for CIGS solar cell by using ITO as front contact"*, Materials Today, Proceedings, Vol. 28, pp. 361-365, 2020.
- [9] Ghorbani, T., Zahedifar, M., Moradi, M. and Ghanbari, E., *"Influence of affinity, band gap and ambient temperature on the efficiency of CIGS solar cells"*, Optik, Vol. 223, pp. 165541, 2020.
- [10] AlZoubi, T. and M. Moustafa, *"Numerical optimization of absorber and CdS buffer layers in CIGS solar cells using SCAPS"*, Int. J. Smart Grid Clean Energy, Vol. 8, pp. 291-298, 2019.
- [11] Bagul, B. Y., *"Growth and characterization of cadmium sulphide films synthesized by low cost technique for photovoltaic device applications"*, Journal of Engineering Sciences, Vol. 11, PP. 356-362, 2020.
- [12] Tobbeche, S., Kalache, S., Elbar, M., Kateb, M. N. and Serdouk, M. R., *"Improvement of the CIGS solar cell performance: structure based on a ZnS buffer layer"*, Optical and Quantum Electronics, Vol. 51, PP. 1-13, 2019.
- [13] Moradi, M., Teimouri, R., Saadat, M. and Zahedifar, M., *"Buffer layer replacement: a method for increasing the conversion efficiency of CIGS thin film solar cells"*, Optik, Vol. 136, PP. 222-227, 2017.
- [14] Barman, B. and Kalita, P. K., *"Influence of back surface field layer on enhancing the efficiency of CIGS solar cell"*, Solar Energy, Vol. 216, PP. 329-337, 2021.
- [15] Kato, T. Wu, J. Hirai, Y. Sugimoto, H. and Bermudez, V., *"Record efficiency for thin-film polycrystalline solar cells up to 22.9% achieved by Cs-treated Cu (In, Ga)(Se, S)₂"*, IEEE Journal of Photovoltaics, Vol. 9, pp. 325-330, 2018.
- [16] Bouabdelli, M. W., Rogti, F., Maache, M. and Rabehi, A., *"Performance enhancement of CIGS thin-film solar cell"*, Optik, Vol. 216, pp. 164948, 2020.

- [17] Tobbeche, S., Kalache, S., Elbar, M., Kateb, M. N. and Serdouk, M. R., "Improvement of the CIGS solar cell performance: structure based on a ZnS buffer layer", *Optical and Quantum Electronics*, Vol. 51, PP. 1-13, 2019.
- [18] Gray, J. L., *The physics of the solar cell*. Handbook of photovoltaic science and engineering, Vol. 2, pp. 82-128, 2003.
- [19] Zhou, W., *Nanoimprint lithography: an enabling process for nanofabrication*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [20] Hayat, M., Babaji, G., Said, M. and Ahmed, A. B., "Determination of the effect of layer thickness on the efficiency of cigs-based solar cells using Scaps-1d", *ACTA Scientific Applied Physics*, Vol. 1, PP. 10-15, 2020.
- [21] Reyes-Banda, M. G., Regalado-Perez, E., Pintor-Monroy, M. I., Hernández-Gutierrez, C. A., Quevedo-López, M. A. and Mathew, X., "Effect of Se diffusion and the role of a thin CdS buffer layer in the performance of a CdSe/CdTe solar cell", *Superlattices and Microstructures*, Vol. 133, PP. 106219, 2019.
- [22] Tan, F., Wang, Z., Qu, S., Cao, D., Liu, K., Jiang, Q. and Wang, Z., "A CdSe thin film: a versatile buffer layer for improving the performance of TiO₂ nanorod array: PbS quantum dot solar cells", *Nanoscale*, Vol. 8, PP. 10198-10204, 2016.