

# Design and Simulation of Perovskite-silicon Tandem Solar Cell with High Efficiency

Akram Akbari<sup>\*1</sup>, Sayyed-Hossein Keshmiri<sup>2</sup>, Seyyed Amir Gohari<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Department of Electrical Engineering, Bojnourd Branch, Islamic Azad University, Bojnourd, Iran

<sup>2</sup> Electrical Engineering Department, Faculty of Engineering, Ferdowsi University, Mashhad, Iran

<sup>3</sup> Department of Electrical Engineering, Bojnourd branch, Islamic Azad University, Iran

Received: 16.05.2023    Final revised: 17.02.2024    Accepted: 04.03.2024

DOI: [10.22055/jrmb.2024.18981](https://doi.org/10.22055/jrmb.2024.18981)

## Abstract

The subject of this research is the design and simulation of a perovskite-silicon tandem solar cell. The purpose of this research is to reduce heat loss and increase cell efficiency. In this work, we designed a tandem device consisting of two cells using the SCAPS simulator (Solar Cell Capacitor Simulator); The front cell comprised of  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  absorber layer (with a bandgap of 1.55 eV), and a C-Si cell (with 1.12 eV bandgap) was selected as the bottom cell. Each of the two cells was simulated and optimized separately, and then, the tandem structure consisting of two cells was simulated and the optimal thickness of the perovskite absorber layer was determined for the current matching conditions in the two-terminal (2T) monolithic structure. The transmission spectrum of the perovskite cell to radiate to the lower cell was obtained using MATLAB software. Finally, the simulation of this structure led to an efficiency of 33.27%.

**Keywords:** Tandem Solar Cells, Perovskite, PCE Enhancement

---

\* AkramAkbari1366@gmail.com

## طراحی و شبیه‌سازی سلول خورشیدی پشت‌سره‌م پرواسکایت-سیلیکون با بازدهی بالا

اکرم اکبری<sup>۱\*</sup>، سید حسین کشمیری<sup>۲</sup>، سید امیر گوهری<sup>۱</sup>

<sup>۱</sup>دانشکده مهندسی برق، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد بجنورد، بجنورد، ایران

<sup>۲</sup>مؤسسه آموزش عالی بهار، مشهد، ایران

دریافت: ۱۴۰۲/۰۲/۲۶ ویرایش نهائی: ۱۴۰۲/۱۱/۲۸ پذیرش: ۱۴۰۲/۱۲/۱۴

DOI: [10.22055/jrmb.2024.18981](https://doi.org/10.22055/jrmb.2024.18981)

### چکیده

در این مقاله یک سلول خورشیدی پشت‌سره‌م مبتنی بر پرواسکایت-سیلیکون طراحی و شبیه‌سازی شده است. هدف، کاهش تلفات حرارتی و افزایش بازدهی سلول است. در این کار، ما یک سلول پشت‌سره‌م تشکیل شده از دو تک‌سلول را با استفاده از شبیه‌ساز SCAPS طراحی کردیم؛ که سلول جلویی شامل لایه جاذب  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  با شکاف انرژی  $1.55\text{eV}$  و سلول C-Si با شکاف انرژی  $1.12\text{eV}$  به‌عنوان سلول پشتی می‌باشد. هر یک از این سلول‌ها به‌طور جداگانه شبیه‌سازی و بهینه‌سازی شده و سپس، ساختار پشت‌سره‌م تشکیل شده از دو سلول را شبیه‌سازی کرده و ضخامت بهینه لایه جاذب پرواسکایت را برای شرایط تطبیق جریان در ساختار پشت‌سره‌م یکپارچه دو ترمیناله (۲T) به‌دست آوردیم. طیف عبوری از سلول پرواسکایت جهت تابیدن به سلول پایینی با استفاده از نرم‌افزار MATLAB به‌دست آمد. در نهایت، شبیه‌سازی این ساختار به بازدهی  $33.27\%$  منتهی گردید.

**کلیدواژگان:** سلول خورشیدی پشت‌سره‌م، پرواسکایت، بازدهی بالا

### مقدمه

افزایش اثر گلخانه‌ای می‌باشد. پیش‌بینی می‌شود که میزان نیاز جهان به انرژی در سال ۲۰۵۰ به‌حدود ۱۳ تراوات برسد [۱]. از میان منابع انرژی تجدیدپذیر، انرژی خورشیدی بیشترین پتانسیل برای تأمین انرژی مورد نیاز جهان را دارد [۲]. این انرژی منبعی تمام‌نشده، پاک و ارزان در دهه اخیر بوده و به‌عنوان مناسب‌ترین جایگزین

منابع انرژی‌های فسیلی در دهه‌های آینده، حداقل به دو دلیل عمده، جوابگوی تأمین نیاز انرژی جهان برای بقا، تکامل و توسعه نخواهند بود که عبارتند از محدودیت انرژی‌های فسیلی و همچنین، مسائل و مشکلات زیست‌محیطی (از قبیل انتشار گاز دی‌اکسید کربن و

\*نویسنده مسئول: [AkramAkbari1366@gmail.com](mailto:AkramAkbari1366@gmail.com)



باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد

این مقاله تحت مجوز کپی‌رایت کامنز تخریب ۴.۰ بین‌المللی می‌باشد.

سوخت‌های فسیلی شناخته می‌شود. انرژی خورشیدی را می‌توان به دو روش فوتوترمال (تبدیل به انرژی حرارتی) و فوتولتایی (تولید مستقیم انرژی الکتریکی به کمک سلول‌های خورشیدی فوتولتایی) استفاده کرد.

برای افزایش بازدهی سلول‌های خورشیدی فوتولتایی فراتر از حد شاکلی-کوایسر<sup>۱</sup> (بازدهی ۳۱٪ در سلول‌های تک‌پیوندی)، ترکیب جاذب‌های مختلف با شکاف انرژی‌های مکمل در یک سلول خورشیدی چند پیوندی (پشت‌سره‌م) برای استفاده بیشتر از نور خورشید به کار برده می‌شود [۳]. برای کاهش تلفات حرارتی حامل‌ها در یک قطعه چند پیوندی، سلول جلویی (با لایه فعال با شکاف انرژی بزرگ) فوتون‌های انرژی بالا را جذب می‌کند (تا ولتاژ مدار باز افزایش و تلفات حرارتی کاهش داده شود)، در حالی که سلول پشتی (با لایه فعال با شکاف انرژی پایین)، فوتون‌های انرژی پایین را گرفته و پاسخ نوری را گسترش می‌دهد.

لایه‌های جاذب پراوسکایت خصوصیات اپتوالکترونیکی خوبی از خود نشان داده‌اند، که شامل شکاف انرژی قابل تنظیم، ضریب جذب بالا، تحرک الکترون و حفره بالا، طول عمر زیاد حامل‌ها و انرژی بستگی اکسایتون کوچک می‌باشد [۳]. سلول‌های پشت‌سره‌م پراوسکایت روی سیلیکون، یک راه حل خوب از هر دو منظر هزینه و بازدهی تبدیل انرژی هستند. پراوسکایت‌های آلی و غیرآلی گستره نسبتاً وسیعی از شکاف انرژی (از ۱٫۳ تا ۲٫۱ eV) را دارا می‌باشند [۴].

یک سلول خورشیدی فوتولتایی هم می‌تواند به صورت یکپارچه<sup>۲</sup> که دو ترمیناله (2T) نامیده می‌شود و هم به صورت پشته مکانیکی<sup>۳</sup> که چهار ترمیناله (4T) نامیده می‌شود طراحی شود. معماری 2T هزینه ساخت کمتری دارد، به خاطر اینکه فقط یک الکتروود رسانای شفاف برای داخل قطعه لازم دارد؛ بنابراین، سیم‌کشی ساده‌تر و ماده کمتر لازم داشته و در آن، تلفات نوری لایه رابط بین تک سلول‌ها در مقایسه با سلول‌های 4T کمتر است. مزیت دیگر آن، نیاز به پردازش با دمای کمتری می‌باشد. از این‌رو در این پژوهش، معماری پشت‌سره‌م دو ترمیناله در نظر گرفته شده است.

در سال‌های اخیر تحقیقات زیادی در زمینه افزایش بازدهی و پایداری سلول‌های خورشیدی پراوسکایت انجام شده است. بازدهی سلول‌های تک‌پیوندی پراوسکایت تا ۲۵٪ افزایش یافته [۵]، و هزینه ساخت آنها (با تولید سلول‌های پراوسکایت مبنی بر کربن) کاهش پیدا کرده است. اخیراً بازدهی بالا و پایداری اتمی مطلوب سلول‌های خورشیدی بر اساس  $\text{MAPbI}_3$  نشان داده شده است [۶].

در سال ۲۰۱۵ اولین سلول پشت‌سره‌م یک‌پارچه پراوسکایت-سیلیکونی با بازدهی ۱۳٫۷٪ ساخته شد [۷]. یک سال بعد، آلبرخت<sup>۴</sup> و همکاران یک لایه  $\text{SnO}_2$  را به‌عنوان لایه انتقال الکترون در سلول پراوسکایت قرار داده و به بازدهی ۱۸٫۱٪ در سلول پشت‌سره‌م 2T دست یافتند [۸]. ورنر<sup>۵</sup> و همکاران یک سلول خورشیدی پشت‌سره‌م یکپارچه پراوسکایت-سیلیکون را با استفاده

<sup>4</sup> Albrecht et. al.

<sup>5</sup> Werner et. al.

<sup>1</sup> Shockley-Queisser limit

<sup>2</sup> Monolotic

<sup>3</sup> Mechanical stack

ناخالصی CI در پراوسکایت باعث افزایش طول عمر و تحرک حامل‌ها و افزایش بازدهی به ۲۷٪ می‌شود [۱۵]. نامور و همکاران با اضافه کردن کاتیون ترکیبی روبیدیوم-سزیم ( $RbCsI_2$ ) به محلول اصلی پراوسکایت نشان دادند که بازده سلول ۴٪ بیشتر از سلولی شد که فقط کاتیون سزیم به محلول پراوسکایت تزریق شده است [۱۶]. نژادزنگنه و همکاران الکتروود سه لایه‌ای ( $V_2O_5/Ag/WO_3$ ) (VAW) را به‌عنوان یک ساختار رسانای شفاف طراحی و شبیه‌سازی کردند و در یک سلول خورشیدی پراوسکایتی به‌کار گرفتند؛ بعد از بهینه کردن ضخامت، نتایج نشان داد که این سلول خورشیدی کارایی بهتری نسبت به سلول خورشیدی بر پایه الکتروود تجاری ITO دارد [۱۷]. سارکر<sup>۹</sup> و همکاران در سال ۲۰۲۱ با استفاده از لایه جاذب  $MAGeI_3$  بر روی Si و بهینه‌سازی ضخامت لایه جاذب و تابع کار و ناکاملی‌های حجم و فصل مشترک، به بازدهی ۲۸٫۷۱٪ رسیدند [۴]. اسلام<sup>۱۱</sup> و همکاران در سال ۲۰۲۱ با ترکیب بدون سرب  $CsSn_{0.5}Ge_{0.5}I_3$  بر روی Si به بازده ۲۸٫۵۳٪ رسیده و با ساختار  $MAPbI_3$  بر روی Si (با  $Cu_2O$ ) به‌عنوان HTL<sup>۱۲</sup> و  $TiO_2$  به‌عنوان ETL<sup>۱۳</sup> به بازدهی ۳۲٫۲۹٪ رسیدند [۳].

از IZO<sup>۱</sup> (به‌عنوان لایه بازترکیب وسط) ارائه کردند. آن‌ها (پس از بهینه‌سازی ضخامت لایه انتقال حفره) به بازدهی ۱۹٫۲٪ رسیدند [۹]. شن<sup>۲</sup> و همکاران یک سلول پشت‌سره 2T را با استفاده از لایه  $TiO_2$  (به‌عنوان لایه انتقال الکترون و لایه بازترکیب) ارائه کردند. آن‌ها به بازدهی ۲۲٫۹٪ و ۲۴٫۱٪ به ترتیب برای سلول‌های پشت‌سره پیوند همگون و پیوند ناهمگون رسیدند [۱۰]. بوش<sup>۳</sup> و همکاران یک سلول پشت‌سره با بازدهی ۲۳٫۶٪ گزارش کردند [۱۱]. آن‌ها از یک مجموعه دولایه<sup>۴</sup> شامل  $ZnO$  و  $SnO_2$  (هر کدام به ضخامت ۲ nm) استفاده کردند (برای جلوگیری از آسیب دیدن لایه پراوسکایت در ضمن اسپاترینگ لایه ITO و همچنین افزایش پایداری حرارتی و محیطی کل قطعه) و ضخامت ITO جلویی را کاهش دادند (تا جذب پارازیتی و بازتاب کاهش یابد). همچنین از یک لایه پراوسکایت با شکاف انرژی ۱٫۶۸ eV در سلول جلویی و از PTAA<sup>۵</sup> به‌عنوان لایه انتقال حفره (به جای  $NiO_x$ ) استفاده کردند، و بازدهی را به ۲۵٪ افزایش دادند [۱۲]. سهلی<sup>۶</sup> و همکاران برای کاهش دادن تلفات، یک لایه بازترکیب نانوکریستال Si را به جای لایه  $TCO$ <sup>۷</sup> جایگزین کردند. آن‌ها تلفات بازترکیب را کاهش داده و گیراندازی نور را افزایش دادند، و به بازدهی ۲۵٫۲٪ دست یافتند [۱۳ و ۱۴]. زو<sup>۸</sup> و همکاران در سال ۲۰۲۰ از آلیاژهای Cl، Br، I برای به‌دست آوردن شکاف انرژی ۱٫۶۷ eV در لایه پراوسکایت استفاده کردند و نشان دادند

<sup>7</sup> Transparent-Conducting Oxide

<sup>8</sup> Xu et. al.

<sup>9</sup> Sarker et. al.

<sup>10</sup> Methyl-ammonium germanium iodide

<sup>11</sup> Islam et.al.\*/

<sup>12</sup> Hole Transport Layer

<sup>13</sup> Electron Transport Layer

<sup>1</sup> Indium-Zinc Oxide

<sup>2</sup> Shen et. al.

<sup>3</sup> Bush et. al.

<sup>4</sup> bilayer

<sup>5</sup> Poly(triaryl amine), poly[bis(4-phenyl)(2,4,6-trimethylphenyl)amine]

<sup>6</sup> Sahli et. al.

## فرایند شبیه‌سازی

در این کار، یک ساختار پراوسکایت-سیلیکون به صورت ساختار یک پارچه (2T) طراحی و شبیه‌سازی شد. شبیه‌سازی‌های عددی با استفاده از نرم‌افزار SCAPS-1D تحت شرایط استاندارد AM 1,5 در دمای 300 K انجام شد. SCAPS یک نرم‌افزار استاندارد جهانی برای شبیه‌سازی سلول‌های خورشیدی است و توسط دپارتمان سیستم‌های الکترونیکی و اطلاعات دانشگاه جنت<sup>1</sup> بلژیک توسعه یافته و مبتنی بر سه معادله کلیدی انتقال، پواسون و پیوستگی می‌باشد. در شبیه‌سازی‌های این مقاله، پارامترهای ورودی از داده‌های اولیه گزارش شده در مقالات معتبر گرفته و جداول 1 و 2 استفاده شده است. برای شبیه‌سازی سلول‌های پشت‌سره، از آنجایی که نرم‌افزار SCAPS به دلیل تفاوت در انرژی نوارها قابلیت اتصال دو سلول در یک ساختار و مدل‌سازی جریان و ولتاژ آن‌ها را ندارد، فرایند شبیه‌سازی چند مرحله‌ای انجام گرفت؛ به این ترتیب که سلول بالایی که یک سلول فوتوولتایی پراوسکایتی است در معرض نور اصلی (همان AM 1,5) قرار گرفته و خروجی‌های آن به طور مستقل بررسی می‌شود. سپس، با استفاده از فرمول زیر، طیف نور عبوری از سلول بالایی (که به عنوان منبع نور سلول پایینی در نظر گرفته می‌شود)، محاسبه می‌شود.

$$S(\lambda) = I_0(\lambda) \cdot \exp\left(\sum_{i=1}^4 -\alpha_{mat_i}(\lambda) d_{mat_i}\right)$$

در این فرمول،  $S_0$  طیف AM 1,5 و  $S$  طیف خروجی فیلترشده از چهار لایه سلول بالایی است، که با جای‌گذاری پارامترهای ضریب جذب ( $\alpha_{mat_i}$ ) و ضخامت ( $d_{mat_i}$ ) لایه‌های بالا، به دست می‌آید. در نرم‌افزار SCAPS، طیف فیلترشده توسط سلول بالایی به عنوان منبع نور تعریف شده و سپس به سلول پایینی (سلول سیلیکونی) تابیده می‌شود. دو سلول را می‌توان مانند دو دیود مستقل که به صورت سری به هم وصل شده‌اند، در نظر گرفت. این روش به طور گسترده در شبیه‌سازی سلول‌های پشت‌سره با استفاده از ID-SCAPS انجام می‌شود [18]. بنابراین سلول خورشیدی پشت‌سره دارای اتصال تونلی ایده‌آل بدون تلفات الکتریکی و نوری فرض می‌شود [3, 18]. در این تحقیق، ابتدا خروجی‌های هر دو سلول به صورت مستقل و سپس در شرایط مجموعه پشت‌سره دو ترمیناله مورد بررسی قرار گرفتند و در جدول 4 نتایج گزارش شده با نتایج سایر مقالات معتبر مقایسه شدند.

جدول ۱. پارامترهای استفاده شده در شبیه‌سازی‌ها (داده‌ها از مقالات چاپ شده گرفته شده است [۳،۱۹])

پارامتر	Cu <sub>2</sub> O	CuSCN	MAPbI <sub>3</sub>	TiO <sub>2</sub>	SnO <sub>2</sub>	Si
شکاف انرژی ممنوع (eV)	۲٫۱۷	۳٫۷	۱٫۵۵	۳٫۲۶	۳٫۵	۱٫۱۲
نمودپذیری نسبی	۷٫۱۱	۱۰	۱۰	۱۰	۹	۱۱٫۹
الکترون‌خواهی (eV)	۳٫۲	۱٫۷	۳٫۹۳	۴٫۲	۴	۴٫۰۵
تحرک الکترون (eV)	۲۰۰	۱۰۰	۱	۱۰۰	۱۰۰	۱۴۰۰
تحرک حفره (eV)	۸۰	۲۵	۱	۲۵	۲۵	۴۵۰
چگالی حالات نوار هدایت N <sub>c</sub> (cm <sup>-3</sup> )	۲٫۰۲ × ۱۰ <sup>۱۸</sup>	۲٫۰۲ × ۱۰ <sup>۱۹</sup>	۲٫۷۵ × ۱۰ <sup>۱۸</sup>	۲ × ۱۰ <sup>۱۷</sup>	۲٫۲ × ۱۰ <sup>۱۸</sup>	۲٫۸۹ × ۱۰ <sup>۱۹</sup>
چگالی حالات نوار والانس N <sub>v</sub> (cm <sup>-3</sup> )	۱٫۱ × ۱۰ <sup>۱۹</sup>	۱٫۸ × ۱۰ <sup>۱۸</sup>	۳٫۹ × ۱۰ <sup>۱۸</sup>	۶ × ۱۰ <sup>۱۷</sup>	۱٫۸ × ۱۰ <sup>۱۹</sup>	۱٫۰۴ × ۱۰ <sup>۱۹</sup>

جدول ۲. مشخصات ناکاملی‌ها در لایه‌های سلول خورشیدی (داده‌ها از مقالات چاپ شده گرفته شده است [۳،۱۹]).

موقعیت ناکاملی	چگالی کل (cm <sup>-3</sup> )	سطح انرژی ناکاملی بالای E <sub>v</sub> (eV)	نوع ناکاملی	سطح مقطع گیراندازی الکترون (cm <sup>-2</sup> )	سطح مقطع گیراندازی حفره (cm <sup>-2</sup> )
حجمی MAPbI <sub>3</sub>	۱×۱۰ <sup>۱۵</sup>	۰٫۶	خستگی	۱×۱۰ <sup>-۱۵</sup>	۱×۱۰ <sup>-۱۲</sup>
فصل مشترک CuSCN/MAPbI <sub>3</sub>	۱×۱۰ <sup>۹</sup>	۰٫۶	گیرنده	۱×۱۰ <sup>-۱۸</sup>	۱×۱۰ <sup>-۱۹</sup>
فصل مشترک Cu <sub>2</sub> O/MAPbI <sub>3</sub>	۱×۱۰ <sup>۱۵</sup>	۰٫۶	خستگی	۱×۱۰ <sup>-۱۹</sup>	۱×۱۰ <sup>-۱۹</sup>
فصل مشترک MAPbI <sub>3</sub> /TiO <sub>2</sub>	۱×۱۰ <sup>۱۵</sup>	۰٫۶	خستگی	۱×۱۰ <sup>-۱۹</sup>	۱×۱۰ <sup>-۱۹</sup>

جدول ۳. مشخصات بهینه لایه‌ها در ساختار سلول خورشیدی پشت‌سرم.

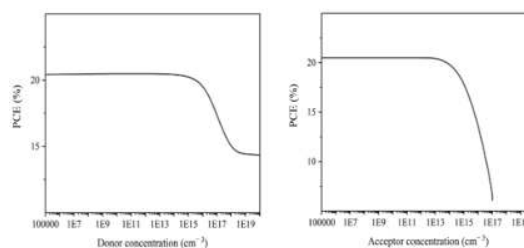
پارامتر	Cu <sub>2</sub> O	CuSCN	MAPbI <sub>3</sub>	TiO <sub>2</sub>	SnO <sub>2</sub>	Si(p <sup>+</sup> )	Si(p)	Si(n <sup>+</sup> )
ضخامت لایه (μm)	۰٫۱۵	۰٫۱۵	۰٫۳	۰٫۱۴	۰٫۰۵	۱۰	۱۰۰	۰٫۵
چگالی دهنده (cm <sup>-3</sup> )	-	-	۱×۱۰ <sup>۱۷</sup>	۱×۱۰ <sup>۱۷</sup>	۱×۱۰ <sup>۱۵</sup>	-	-	۱×۱۰ <sup>۲۰</sup>
چگالی گیرنده (cm <sup>-3</sup> )	۱×۱۰ <sup>۱۸</sup>	۱×۱۰ <sup>۱۸</sup>	۱×۱۰ <sup>۹</sup>	-	-	۲٫۲×۱۰ <sup>۱۶</sup>	۲٫۲×۱۰ <sup>۱۶</sup>	-

### تأثیر ناخالصی لایه‌ها

اثر ناخالصی لایه فعال پروسکایت بر بازده سلول، با تغییر غلظت ناخالصی از ۱۰<sup>۵</sup> cm<sup>-3</sup> تا ۱۰<sup>۱۷</sup> cm<sup>-3</sup> در شکل ۱ ارائه شده است. مقدار بهینه چگالی ناخالصی‌های

الکترون-حفره و تلفات بیشتر می‌شود که منجر به کاهش استخراج حامل‌ها و در نتیجه کاهش عملکرد سلول خورشیدی می‌شود. در شکل ۲b تأثیر ناکاملی‌ها را در حجم MAPbI<sub>3</sub> نشان دادیم. ملاحظه می‌شود که تراکم ناکاملی تأثیر فزاینده‌ای بر عملکرد دستگاه دارد. برای ناکاملی در سطح عمیق (۰٫۶eV بالای نوار ظرفیت)، با افزایش چگالی ناکاملی در حجم، ۱۰<sup>۱۵</sup> cm<sup>-3</sup> تا ۱۰<sup>۱۸</sup> cm<sup>-3</sup> کاهش چشمگیری در بازدهی سلول مشاهده می‌شود. عملکرد سلول تحت تأثیر ناکاملی در فصل مشترک‌ها (مابین لایه جاذب و لایه انتقال دهنده حامل) بررسی شد و نتایج آن در شکل ۲c و ۲d ارائه شد.

دهنده و پذیرنده ماده پروسکایت و ETL و HTL طی شبیه‌سازی به دست آمد و در جدول ۳ گزارش شده است.



شکل ۱. اثر تغییرات چگالی ناخالصی‌های دهنده و گیرنده بر بازدهی سلول خورشیدی پروسکایت.

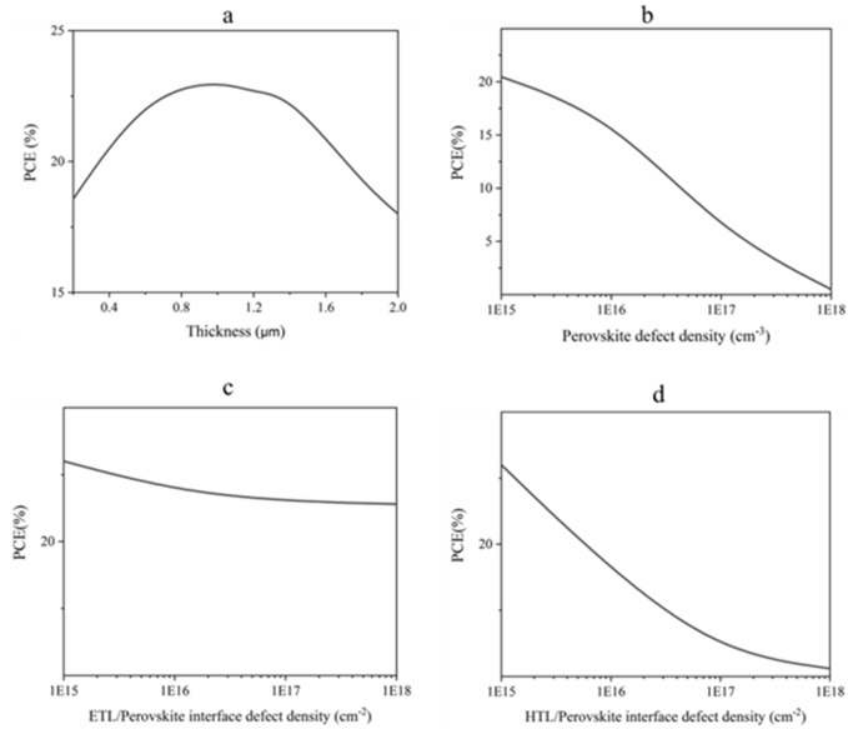
### اثر ضخامت لایه فعال پروسکایت

در شکل ۲a تأثیر ضخامت لایه جاذب بر بازدهی سلول پروسکایت نشان داده شده است. مطابق شکل افزایش ضخامت لایه جاذب منجر به افزایش PCE می‌شود که به دلیل جذب بیشتر فوتون‌های ورودی و در نتیجه افزایش تولید جفت الکترون-حفره و افزایش مقدار J<sub>sc</sub> می‌باشد. پس از یک مقدار ضخامت معین، PCE با افزایش بیشتر ضخامت کاهش می‌یابد، بدیهی است که این کاهش، به علت افزایش بازترکیب (تابشی، شاکلی‌ریدحال<sup>۱</sup> و بازترکیب اوژر) در لایه پروسکایت و در نتیجه کاهش V<sub>oc</sub> است. در این شبیه‌سازی، با ضخامت ۰٫۸ μm از جاذب MAPbI<sub>3</sub>، به بیشینه بازدهی (۲۳٫۱٪) دست یافتیم.

### اثر چگالی ناکاملی لایه فعال پروسکایت

مواد پروسکایتی دارای مقدار قابل توجهی ناکاملی هستند. با افزایش چگالی ناکاملی، احتمال بازترکیب جفت

<sup>1</sup> Shockley-Read-Hall (SRH)



شکل ۲. بازدهی سلول خورشیدی تحت تغییرات (a) ضخامت جاذب پراوسکایت، (b) چگالی ناکاملی در حجم جاذب، (c) چگالی ناکاملی فصل مشترک  $\text{Cu}_2\text{O}/\text{MAPbI}_3$  و (d) چگالی ناکاملی فصل مشترک  $\text{MAPbI}_3/\text{TiO}_2$ .

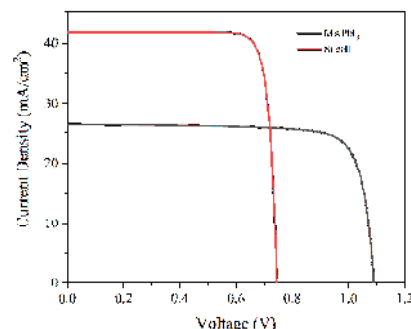


## نتایج و بحث

جدول ۴. پارامترهای خروجی سلول‌های پراوسکایت و سیلیکون.

سلول فوتولتایی	$V_{oc}$ (V)	$J_{sc}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	FF (%)	بازدهی تبدیل توان (PCE)
MAPbI <sub>3</sub> (نتایج شبیه‌سازی در این کار)	۱,۰۹	۲۶,۳۵	۸۰,۴۳	۲۳,۱۱
MAPbI <sub>3</sub> (نتایج شبیه‌سازی [۱۹])	۱,۱۲	۲۴,۹۸	۸۱,۶۸	۲۳,۰۴
MAPbI <sub>3</sub> (نتایج تجربی [۲۰])	۱,۰۱۶	۲۲,۸۳	۷۶,۸	۲۰,۴۷
Si (نتایج شبیه‌سازی)	۰,۷۵	۴۱,۷۳	۸۵,۲۹	۲۶,۵۱
Si (نتایج تجربی [۲۱])	۰,۷۲۴	۴۲,۳	۸۳,۸	۲۶,۳۷

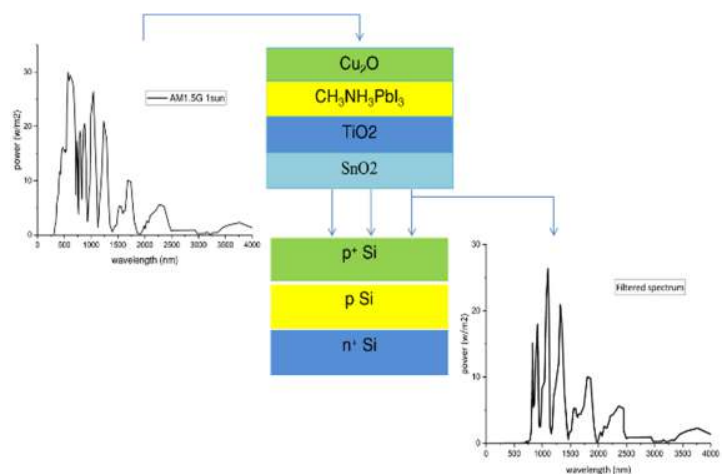
ابتدا سلول‌های MAPbI<sub>3</sub> و Si به‌طور جداگانه و بر اساس پارامترهای داده‌شده در جداول ۱، ۲، و ۳ شبیه‌سازی شدند. در سلول پراوسکایتی شبیه‌سازی شده، Cu<sub>2</sub>O، حفره (HTL)، لایه جاذب و لایه انتقال دهنده الکترون (ETL) می‌باشند. نمودار J-V آنها تحت شرایط ۱,۵AM در شکل ۳ نشان داده شده است. نتایج حاصل از شبیه‌سازی هر دو سلول در این کار با نتایج تجربی گزارش‌شده در مقالات دیگر مقایسه شده و در جدول ۴ نشان داده شده است.



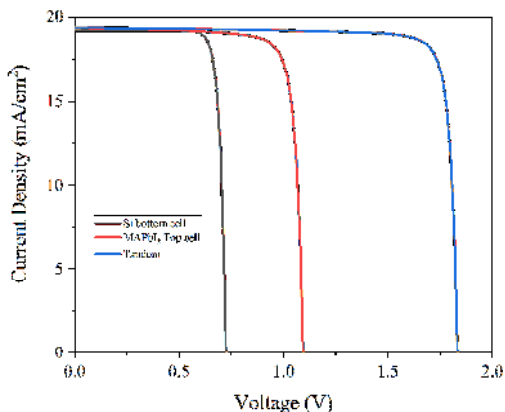
شکل ۳. نمودار جریان-ولتاژ سلول‌های پراوسکایت و سیلیکون

در این مقاله برای جذب حداکثری فوتون‌ها و همچنین کاهش تلفات حرارتی از یک ساختار پشت‌سرهم استفاده شده است. ساختار پشت‌سرهم از دو سلول مختلف تشکیل شده، که سلول جلویی از پراوسکایت با شکاف انرژی ۱,۵۵ eV و سلول پشتی از سیلیکون (با شکاف انرژی ۱,۱۲ eV) می‌باشد. فوتون‌های با انرژی کمتر از شکاف انرژی، از سلول جلویی عبور کرده و بخشی از آنها توسط سلول سیلیکونی زیرین جذب می‌شوند. شکل ۴ ساختار پشت‌سرهم طراحی شده را نشان می‌دهد. در ساختار پشت‌سرهم دو ترمیناله، از آنجا که دو سلول بالایی و پایینی به‌طور سری در نظر گرفته می‌شوند، شرایط تطبیق جریان بین آنها باید برقرار باشد. جریان این دو سلول در حالت پشت‌سرهم باید مساوی هم گرفته شده و ولتاژهای آنها با هم جمع شود. ضخامت جاذب

باید به نحوی تنظیم شود که هر دو سلول جریان‌های بهینه یکسانی را تولید کنند. در ضخامت  $300\text{ nm}$  لایه جاذب سلول بالا، میزان جریان تطبیق دو سلول به مقدار بیشینه رسید. در ضخامت‌های بیشتر (برای لایه جاذب در سلول بالایی)، بخش بیشتری از طیف خورشید توسط سلول بالا جذب شده و میزان طیف رسیده به سلول پایینی کمتر می‌شود (و در نتیجه، جریان ایجاد شده توسط آن نیز کاهش می‌یابد). در ضخامت‌های کمتر از مقدار فوق هم، جریان سلول بالایی کمتر می‌شود. ضخامت لایه جاذب در سلول پایینی برای تولید جریان بیشینه، مقدار بهینه ( $100\ \mu\text{m}$ ) در نظر گرفته شد.



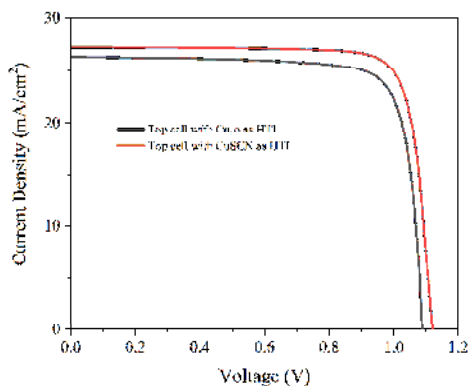
شکل ۴. ساختار شمایی سلول پشت‌سره‌م به همراه طیف AM ۱٫۵ و طیف فیلترشده.



شکل ۵. نمودار جریان-ولتاژ سلول‌های پراوسکایت و سیلیکون (در حالت مجزا) و در حالت پشت‌سرهم.

### بهینه‌سازی سلول با تغییر HTL

در این قسمت، برای بهینه‌سازی سلول پراوسکایت  $\text{MAPbI}_3$ ، لایه انتقال حفره از  $\text{Cu}_2\text{O}$  به  $\text{CuSCN}$  تغییر داده شده است. نتایج نشان می‌دهد که با این کار، فرایند انتقال حفره بهبود پیدا کرد (به‌علت رسانایی بیشتر  $\text{CuSCN}$ )؛ و در نتیجه، جریان اتصال کوتاه و ولتاژ مدار باز (و در نهایت، بازدهی سلول) افزایش داده شد. نمودار J-V سلول پراوسکایتی  $\text{MAPbI}_3$  با دو لایه انتقال حفره  $\text{Cu}_2\text{O}$  و  $\text{CuSCN}$  در شکل ۶ نشان داده شده، و نتایج شبیه‌سازی در جدول ۶ مورد مقایسه قرار گرفته است.



شکل ۶. مقایسه نمودار J-V سلول‌های  $\text{MAPbI}_3$  اولیه (با  $\text{Cu}_2\text{O}$  به‌عنوان HTL) و  $\text{MAPbI}_3$  بهینه‌شده (با  $\text{CuSCN}$  به‌عنوان HTL)

در جدول ۵، نتایج به‌دست‌آمده برای سلول پشت‌سرهم پیشنهادی با نتایج گزارش‌شده در مرجع ۳ مقایسه شده و در شکل ۵، نمودار جریان-ولتاژ آنها برای دو سلول بالا و پایین (به‌صورت مجزا) و سلول پشت‌سرهم نشان داده شده است.

ضریب پرشدگی که مبین کیفیت سلول خورشیدی و نسبت بیشینه توان به توان تئوری است، به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$FF = \frac{V_{MP} \times I_{MP}}{V_{OC} \times I_{SC}} \quad 2$$

که در آن  $V_{MP}$  و  $I_{MP}$  به‌ترتیب چگالی جریان و ولتاژ در نقطه ماکزیمم توان،  $I_{SC}$  جریان مشترک دو سلول و  $V_{OC}$  جمع ولتاژهای دو سلول می‌باشد. بازده تبدیل توان از رابطه زیر به‌دست می‌آید:

$$PCE = \frac{FF \times V_{OC} \times I_{SC}}{P_{in}} \quad 3$$

جدول ۵. نتایج شبیه‌سازی سلول پشت‌سرهم

نتایج شبیه‌سازی	$V_{oc}$ (v)	$J_{sc}$ ( $\text{mA}/\text{cm}^2$ )	FF (%)	بازدهی تبدیل توان (PCE)
در این کار	۱٫۸۳	۱۹٫۲۱	۸۹٫۵	۳۱٫۴۶
در مقاله [۳]	۱٫۸۸	۱۹٫۹۷	۸۵٫۹۹	۳۲٫۲۹

### نتیجه‌گیری

در این مقاله، سلول خورشیدی پشت‌سرهیم پراوسکایت-سیلیکون شبیه‌سازی شده و ویژگی‌های آن به‌دست آمد. لایه جاذب نور در سلول بالایی  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  (با شکاف انرژی ممنوع  $1.55 \text{ eV}$ ) و در سلول پایینی C-Si (با شکاف انرژی ممنوع  $1.12 \text{ eV}$ ) بود. نرم‌افزار SCAPS-1D برای شبیه‌سازی مورد استفاده قرار گرفت. ابتدا هر یک از تک‌سلول‌ها به‌طور جداگانه شبیه‌سازی شده و ضخامت بهینه برای لایه جاذب نور در آنها به‌دست آمد، سپس حالت تندم شبیه‌سازی شد. به این‌گونه که طیف فیلترشده و عبوری از سلول بالایی ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  با شکاف انرژی ممنوع پهن‌تر) محاسبه و به‌عنوان منبع نور برای سلول زیرین C-Si با شکاف انرژی کوچک‌تر در نظر گرفته شد. شرایط تطبیق جریان بین دو سلول بالا و پایین از طریق تغییر ضخامت لایه جاذب در سلول بالایی ایجاد شد. مقادیر بهینه ضخامت لایه‌های جاذب در حالت تندم (در شرایط تطبیق جریان) در سلول  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ ،  $300 \text{ nm}$  و برای سلول C-Si،  $100 \mu\text{m}$  به‌دست آمد. در سلول تندم، مقدار جریان اتصال کوتاه  $21 \text{ mA/cm}^2$ ، ولتاژ مدار باز  $1.82 \text{ V}$ ، پارامتر عامل پری (FF) مساوی  $87.04\%$  و مقدار بازدهی تبدیل توان (PCE)  $33.27\%$  به‌دست آمد؛ که با توجه به کارهای موجود دیگر، رشد قابل ملاحظه‌ای را نشان می‌دهد.

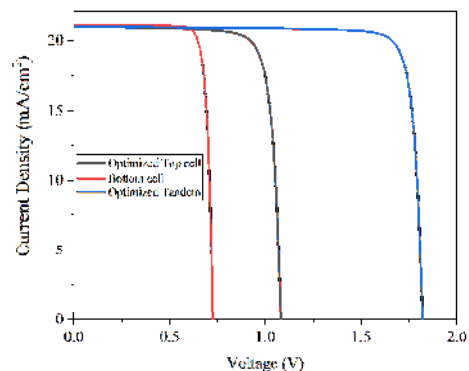
### مرجع‌ها

[1] P.V. Kamat, Meeting the Clean Energy Demand: Nanostructure Architectures for Solar Energy Conversion, Journal of Physical

جدول ۶. مقایسه نتایج سلول‌های  $\text{MAPbI}_3$  اولیه و بهینه‌شده.

نتایج شبیه‌سازی	$V_{oc}$ (V)	$J_{sc}$ ( $\text{mA/cm}^2$ )	FF (%)	بازدهی تبدیل توان PCE (%)
با $\text{Cu}_2\text{O}$ به‌عنوان HTL	۱,۰۹	۲۶,۳۵	۸۰,۴۳	۲۳,۱۱
با $\text{CuSCN}$ به‌عنوان HTL	۱,۱۵	۲۷,۳۰	۸۰,۱۲	۲۵,۱۳

در ساختار پشت‌سرهیم جدید (با سلول پراوسکایت بهینه‌شده)، شرایط تطبیق جریان ایجاد و شبیه‌سازی انجام شد. نمودار جریان-ولتاژ و نتایج شبیه‌سازی به‌ترتیب در شکل ۷ و جدول ۷ آورده شده است.



شکل ۷. مقایسه نمودار جریان-ولتاژ سلول پشت‌سرهیم بهینه‌شده با سلول‌های پراوسکایت و سیلیکون مجزا.

جدول ۷. نتایج شبیه‌سازی سلول پشت‌سرهیم بهینه‌شده

$V_{oc}$ (V)	$J_{sc}$ ( $\text{mA/cm}^2$ )	FF%	PCE%
۱,۸۲	۲۱	۸۷,۰۴	۳۳,۲۷

- [8] S. Albrecht, M. Saliba, J.P.C. Baena, F. Lang, L. Kegelmann, M. Mews, L. Steier, A. Abate, J. Rappich, L. Korte, Monolithic perovskite/silicon-heterojunction tandem solar cells processed at low temperature, *Energy & Environmental Science*, 9 (2016) 81-88.  
<https://doi.org/10.1039/C5EE02965A>
- [9] J. Werner, C.-H. Weng, A. Walter, L. Fesquet, J.P. Seif, S. De Wolf, B. Niesen, C. Ballif, Efficient monolithic perovskite/silicon tandem solar cell with cell area > 1 cm<sup>2</sup>, *The journal of physical chemistry letters*, 7 (2016) 161-166.  
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcelett.5b02686>
- [10] H. Shen, S.T. Omelchenko, D.A. Jacobs, S. Yalamanchili, Y. Wan, D. Yan, P. Phang, T. Duong, Y. Wu, Y. Yin, In situ recombination junction between p-Si and TiO<sub>2</sub> enables high-efficiency monolithic perovskite/Si tandem cells, *Science advances*, 4 (2018) eaau9711.  
<https://doi.org/10.1126/sciadv.aau9711>
- [11] K.A. Bush, A.F. Palmstrom, Z.J. Yu, M. Boccard, R. Cheacharoen, J.P. Mailoa, D.P. McMeekin, R.L. Hoyer, C.D. Bailie, T. Leijtens, 23.6%-efficient monolithic perovskite/silicon tandem solar cells with improved stability, *Nature Energy*, 2 (2017) 1-7.  
<https://doi.org/10.1038/nenergy.2017.9>
- [12] K.A. Bush, S. Manzoor, K. Frohna, Z.J. Yu, J.A. Raiford, A.F. Palmstrom, H.-P. Wang, R. Prasanna, S.F. Bent, Z.C. Holman, Minimizing current and voltage losses to reach 25% efficient monolithic two-terminal perovskite-silicon tandem solar cells, *ACS Energy Letters*, 3 (2018) 2173-2180.  
<https://doi.org/10.1021/acseenergylett.8b01201>
- [13] F. Sahli, B.A. Kamino, J. Werner, M. Bräuninger, B. Paviet-Salomon, L. Barraud, R. Monnard, J.P. Seif, A. Tomasi, Q. Jeangros, Improved optics in monolithic perovskite/silicon tandem solar cells with a nanocrystalline silicon recombination junction, *Advanced Energy Materials*, 8 (2018) 1701609.  
<https://doi.org/10.1002/aenm.201701609>
- Chemistry C, 111 (2007) 2834-2860.  
<https://doi.org/10.1021/jp066952u>
- [2] C. Li, M. Liu, N.G. Pschirer, M. Baumgarten, K. Müllen, Polyphenylene-based materials for organic photovoltaics, *Chemical Reviews*, 110 (2010) 6817-6855.  
<https://doi.org/10.1021/cr100052z>
- [3] M.T. Islam, M.R. Jani, A.F. Islam, K.M. Shorowordi, S. Chowdhury, S.S. Nishat, S. Ahmed, Investigation of CsSn<sub>0.5</sub>Ge<sub>0.5</sub>I<sub>3</sub>-on-Si tandem solar device utilizing SCAPS simulation, *IEEE Transactions on Electron Devices*, 68 (2021) 618-625.  
<https://doi.org/10.1109/TED.2020.3045383>
- [4] S. Sarker, T. Islam, A. Rauf, H.A. Jame, M.R. Jani, S. Ahsan, M. Islam, S.S. Nishat, K.M. Shorowordi, S. Ahmed, A SCAPS simulation investigation of non-toxic MAgel<sub>3</sub>-on-Si tandem solar device utilizing monolithically integrated (2-T) and mechanically stacked (4-T) configurations, *Solar Energy*, 225 (2021) 471-485.  
<https://doi.org/10.1016/j.solener.2021.07.057>
- [5] L. Lin, P. Li, L. Jiang, Z. Kang, Q. Yan, H. Xiong, S. Lien, P. Zhang, Y. Qiu, Boosting efficiency up to 25% for HTL-free carbon-based perovskite solar cells by gradient doping using SCAPS simulation, *Solar Energy*, 215 (2021) 328-334.  
<https://doi.org/10.1016/j.solener.2020.12.059>
- [6] L.A. Frolova, A.I. Davlethanov, N.N. Dremova, I. Zhidkov, A.F. Akbulatov, E.Z. Kurmaev, S.M. Aldoshin, K.J. Stevenson, P.A. Troshin, Efficient and Stable MAPbI<sub>3</sub>-Based Perovskite Solar Cells Using Polyvinylcarbazole Passivation, *J Phys Chem Lett*, 11 (2020) 6772-6778. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcelett.0c01776>
- [7] J.P. Mailoa, C.D. Bailie, E.C. Johlin, E.T. Hoke, A.J. Akey, W.H. Nguyen, M.D. McGehee, T. Buonassisi, A 2-terminal perovskite/silicon multijunction solar cell enabled by a silicon tunnel junction, *Applied Physics Letters*, 106 (2015).  
<https://doi.org/10.1063/1.4914179>

- [20] Y. Zou, Y. Liang, C. Mu, J.P. Zhang, Enhancement of open-circuit voltage of perovskite solar cells by interfacial modification with p-aminobenzoic acid, *Advanced Materials Interfaces*, 7 (2020) 1901584. <https://doi.org/10.1002/admi.201901584>
- [21] K. Yoshikawa, H. Kawasaki, W. Yoshida, T. Irie, K. Konishi, K. Nakano, T. Uto, D. Adachi, M. Kanematsu, H. Uzu, Silicon heterojunction solar cell with interdigitated back contacts for a photoconversion efficiency over 26%, *Nature energy*, 2 (2017) 1-8. <https://doi.org/10.1038/nenergy.2017>
- [14] F. Sahli, J. Werner, B.A. Kamino, M. Bräuninger, R. Monnard, B. Paviet-Salomon, L. Barraud, L. Ding, J.J. Diaz Leon, D. Sacchetto, Fully textured monolithic perovskite/silicon tandem solar cells with 25.2% power conversion efficiency, *Nature materials*, 17 (2018) 820-826. <https://doi.org/10.1038/s41563-018-0115-4>
- [15] J. Xu, C.C. Boyd, Z.J. Yu, A.F. Palmstrom, D.J. Witter, B.W. Larson, R.M. France, J. Werner, S.P. Harvey, E.J. Wolf, Triple-halide wide-band gap perovskites with suppressed phase segregation for efficient tandems, *Science*, 367 (2020) 1097-1104. <https://doi.org/10.1126/science.aaz5074>
- [16] M.J. Namvar, M.H. Abbaspour-Fard, M. Rezaei Roknabadi, A. Behjat, M. Mirzaei, The effect of inserting combined Rubidium-Cesium cation on performance of perovskite solar cell FAMAPb (IBr) 3, *Journal of Research on Many-body Systems*, 8 (2019) 125-138. <https://doi.org/10.22055/jrmbms.2018.13963>
- [17] M. Nejadzangeneh, M. Ghasemi, S.M.B. Ghorashi, Design, simulation and fabrication of perovskite solar cell based on  $V_2O_5/Ag/WO_3$  transparent electrode, *Journal of Research on Many-body Systems*, 13 (2023) 17-33. <https://doi.org/10.22055/JRMBS.2023.18129>
- [18] J. Madan, R. Pandey, R. Sharma, Device simulation of 17.3% efficient lead-free all-perovskite tandem solar cell, *Solar energy*, 197 (2020) 212-221. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2020.01.006>
- [19] Y. Raoui, H. Ez-Zahraouy, N. Tahiri, O. El Bounagui, S. Ahmad, S. Kazim, Performance analysis of MAPbI<sub>3</sub> based perovskite solar cells employing diverse charge selective contacts: Simulation study, *Solar Energy*, 193 (2019) 948-955. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2019.10.009>