

بهبود عملکرد سلول خورشیدی سیلیکونی لایه نازک با بهینه سازی لایه های ضد بازتاب و تحلیل نقص های ساختاری به روش FDTD

معصومه صمدی^{۱*}، غلامحسین حیدری^{۲،۳}، حامد بحیرایی^۱

۱. گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ملایر، ملایر، ایران

۲. گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد، ایران

۳. پژوهشکده نانو تکنولوژی، دانشگاه، شهرکرد، ایران

پست الکترونیکی: samadi_masumeh@yahoo.com

(دریافت مقاله: ۱۴۰۴/۰۵/۲۹؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۴/۰۸/۱۲)

چکیده:

بازتاب نور یکی از عوامل اصلی کاهش بازدهی در سلول های خورشیدی سیلیکونی است. در سلول های متعارف ضخیم از ساختارهای ضد بازتاب مانند سطوح بافت دار استفاده می شود، اما این روش برای سلول های نسل جدید لایه نازک با ضخامت حدود ۳ میکرومتر کارایی ندارد. در این پژوهش، سلول های خورشیدی لایه نازک سیلیکونی با یک لایه ضد بازتاب Si_3N_4 و دو لایه ضد بازتاب $\text{MgF}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$ به روش عددی تفاضل محدود در حوزه زمان (FDTD) با استفاده از نرم افزار لومریکال (Lumerical) شبیه سازی شدند. در شبیه سازی اپتیکی، توزیع میدان الکترومغناطیسی و ضریب بازتاب برای طول موج های مختلف محاسبه شد و سپس داده های اپتیکی به بخش الکتریکی محیط لومریکال (Lumerical Device) منتقل گردید تا رفتار جریان-ولتاژ (J-V) سلول در دو حالت آرمانی (بدون نقص) و واقعی (با نقص های حجمی و سطحی) تحلیل شود. نقص های حجمی ناشی از باز ترکیب های غیرتابشی از نوع اوژه و شاکلی-کویسر و نقص های سطحی مربوط به ناهمگنی در فصل مشترک لایه های سلول هستند که سبب افزایش نرخ باز ترکیب و کاهش چگالی حامل های آزاد می شوند. نتایج نشان داد که در سلول با پوشش تک لایه، کمترین بازتاب زمانی حاصل می شود که ضخامت لایه Si_3N_4 برابر با ۶۲ نانومتر باشد. در ساختار دولایه $\text{MgF}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$ بهینه ترین ضخامت ها به ترتیب ۱۱۲ و ۶۲ نانومتر به دست آمد. همچنین بررسی الکتریکی سلول در دو حالت آرمانی (بدون نقص) و واقعی (با در نظر گرفتن نقص های حجمی و سطحی) انجام شد. تحلیل الکترواپتیکی نشان داد که وجود نقص ها می تواند بازده سلول را حدود ۵۰٪ نسبت به حالت آرمانی کاهش دهد.

واژه های کلیدی: سلول خورشیدی سیلیکونی لایه نازک، شبیه سازی الکترواپتیکی، لایه ضد بازتاب، نقص حجمی، نقص سطحی

۱. مقدمه

تجدید پذیر یا سبز قرار دارند که از فرایندهای طبیعی نظیر تابش خورشید، وزش باد و زمین گرمایی به دست می آیند. با توجه به مشکلات متعدد زیست محیطی که از مصرف بی رویه انرژی های فسیلی به وجود می آیند، نیاز است با سرمایه گذاری بیشتر و بهبود فن آوری های مربوط، سهم مصرف انرژی های تجدید پذیر در فعالیت های صنعتی و خانگی روز به روز گسترش یابد [۲]. از میان انرژی های تجدید پذیر، انرژی خورشید به عنوان یک منبع پایان ناپذیر، می تواند نقشی اساسی

اگرچه دستاوردهای فن آوری های نوین، افزایش رفاه و آسایش جوامع بشری را به ارمغان آورده است ولی وابستگی بالای زیرساخت های انرژی به سوخت های فسیلی و نیاز روزافزون به آنها، افزایش تولید گازهای گلخانه ای را به دنبال داشته است [۱]. در برابر انرژی حاصل از سوخت های فسیلی، انرژی های

در تأمین نیازها داشته باشد. هرچند، در حال حاضر میزان بهره‌وری از این انرژی در مقایسه با پتانسیل کاربردی آن بسیار پایین است [۳]. امروزه، انواع مختلفی از سلول‌های فتوولتائیک که توانایی تبدیل انرژی خورشیدی به انرژی الکتریکی را دارند مورد استفاده قرار می‌گیرند. در این بین، سلول‌های خورشیدی سیلیکونی در حدود ۹۰ درصد از سهم بازار سلول‌های فتوولتائیک را به خود اختصاص داده‌اند [۴]. این نوع از سلول‌ها که از موادی غیرسمی و ارزان قیمت تهیه می‌شوند، بسیار پایدار هستند و طول عمری در حدود ۲۵ سال دارند. در حال حاضر، به دلیل برخی محدودیت‌های سلول‌های خورشیدی سیلیکونی نظیر گاف انرژی الکترونیکی غیرمستقیم، جذب پایین نور و نقص‌های مربوط به شبکه بلوری، بازدهی بهترین نوع آن‌ها حدود ۳۰-۲۵ درصد است [۵]. در گذشته برای کاهش اثر محدودیت‌های ذکر شده، ضخامت سلول‌های سیلیکونی تا ۱۸۰ میکرومتر افزایش داده می‌شد. این در حالی است که افزایش ضخامت، کاهش انعطاف‌پذیری، افزایش هزینه ساخت و افزایش اتلاف بازترکیب در سلول خورشیدی را در پی دارد. این موارد سبب شد که پژوهشگران به نسل جدید سلول‌های خورشیدی لایه نازک سیلیکونی علاقه‌مند شوند. در نتیجه، استفاده از لایه‌های ضد بازتاب که سبب افزایش شفافیت نوری در ناحیه مرئی، افزایش دام اندازی فوتون‌ها و کاهش بازتاب نور در سطح سلول می‌شوند، به عنوان جزء مهمی از سلول سیلیکونی مورد توجه است [۹]. سلول‌های نسل جدید از چند لایه نازک نیمه‌رسانا با گاف نواری مناسب به همراه سیلیکون که بر روی لایه‌ای از شیشه، پلاستیک یا فلز قرار گرفته‌اند، ساخته می‌شوند. ضخامت لایه‌های مورد استفاده از چند نانومتر تا چندین میکرومتر است. در نتیجه، سلول‌های نسل جدید بسیار نازک‌تر از سلول‌های سیلیکونی نسل اول خواهند بود که به طور قابل ملاحظه‌ای هزینه و یفرهای سیلیکونی در تولید انرژی الکتریکی را کاهش می‌دهند [۶]. علاوه بر کاهش ضخامت لایه سیلیکون، کاهش میزان بازتاب نور از سطح بالایی سلول سیلیکونی که در حدود ۳۵ درصد از طیف تابشی خورشید است می‌تواند سبب افزایش بازده سلول شود. همچنین، ایجاد سطوح بافت‌دار به همراه استفاده از

لایه‌های ضد بازتاب (AR) می‌تواند موجب افزایش جذب و کاهش بازتاب نور فرودی و در نتیجه بهبود بازده سلول سیلیکونی شود [۸]. یک سلول خورشیدی آرمانی با ساختار بلوری منظم، تمام فوتون‌ها را جذب می‌کند، اما در سلول واقعی، وجود نقص‌های بلوری و بی‌نظمی‌های شبکه سبب می‌شود درصد محدودی از فوتون‌ها جذب شوند [۷]. امروزه، برای لایه‌های ضد بازتاب از مواد دی‌الکتریک تک لایه مانند اکسید سیلیسیم (SiO_2)، نیتريد سیلیکون (SiN_x) و اکسید تیتانیوم (TiO_2) و یا دولایه $\text{SiN}_x/\text{MgF}_2$ ، $\text{SiN}_x/\text{SiO}_2$ ، SiO_2 ، SiN_x/Al استفاده می‌شود. سینگ و کومار با به کارگیری روش ماتریس انتقال، به بررسی راهکارهای کاهش بازتاب و بهبود جذب نور با استفاده از لایه‌های ضد بازتاب تک لایه و دولایه پرداختند. ضخامت بهینه لایه‌های Si_3N_4 و $\text{MgF}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$ شبیه‌سازی شد. نتایج نشان داد که لایه Si_3N_4 با ضخامت ۷۰ نانومتر، بازتاب را در محدوده مرئی به کمتر از ۵ درصد کاهش می‌دهد، در حالی که پوشش دولایه $\text{MgF}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$ (به ترتیب با ضخامت‌های ۶۰ و ۱۱۰ نانومتر) بازده کوانتومی را تا ۲۰ درصد افزایش می‌دهد [۵]. باتاچاریا و جان با استفاده از شبیه‌سازی عددی مبتنی بر روش FDTD و حل معادلات انتقال حامل‌های بار، بهینه‌سازی جذب نور و کاهش تلفات ترموالکتریک را در سلول‌هایی با بازده ۳۰ درصد، بررسی کردند. برای این منظور ساختارهای نانو فوتونیک برای افزایش مسیر نور در سلول‌های نازک (۲ میکرومتر) طراحی شد. نتایج نشان داد این ساختارها جذب نور را تا ۹۵ درصد بهبود بخشیده و بازده نظری سلول‌ها به ۳۲/۱ درصد می‌رسد [۷]. مطالعه باتاچاریا و جان نشان داد که با بهینه‌سازی ساختار بلور فوتونی در سلول‌های خورشیدی نازک سیلیکونی می‌توان به بازدهی تبدیل توان ۳۱٪ دست یافت. در این پژوهش، یک سلول ۱۵ میکرومتری مجهز به آرایه‌ای از هرم‌های معکوس میکرومتری با فاصله‌گذاری شبکه‌ای معادل طول موج نور مادون قرمز طراحی شد که منجر به دام اندازی نور مبتنی بر تداخل امواج و جذب کارآمد شد [۱۱]. علیرضا جلالی و همکاران لایه نازک اکسید روی (ZnO) را به عنوان لایه ضد بازتاب به روش سل ژل و با استفاده از رهیافت پوشش‌دهی چرخشی بر روی سیلیکون

مطالعه دقیق در این زمینه را فراهم آورده است.

۲. روش و شبیه‌سازی

با استفاده از شبیه‌سازی اپتیکی توسط FDTD می‌توان تأثیر ضخامت لایه ضدبازتاب را بر میزان بازتاب سلول خورشیدی لایه نازک سیلیکونی در طول موج‌های مختلف مانند ابتدا، وسط و انتهای طیف مرئی شبیه‌سازی کرد. این روش به صورت مستقیم و بدون نیاز به تابع پتانسیل، معادلات ماکسول را در شبکه زمان-مکان حل می‌کند و از شرایط مرزی جذب‌کننده PML برای حذف بازتاب‌های مصنوعی استفاده می‌کند [۱۴]. مطابق با رابطه زیر مقدار جذب نور بر واحد حجم از طریق واگرایی بردار پوینتینگ محاسبه می‌شود [۱۴]:

$$P_{abs}(\omega) = -\frac{1}{2} \omega |E(\omega)|^2 \text{Imag}(\epsilon(\omega)) \quad (1)$$

که در آن ω بسامد، E^2 شدت میدان الکتریکی و ϵ گذردهی الکتریکی است. همچنین بازده کوانتومی سلول خورشیدی (QE) توسط رابطه (۲) تعیین می‌شود:

$$QE(\lambda) = P_{abs}(\lambda) / P_{in}(\lambda) \quad (2)$$

که $P_{abs}(\lambda)$ و $P_{in}(\lambda)$ به ترتیب شدت پرتوهای فرودی و جذب‌شده در طول موج λ هستند. در گام بعدی با کمک نرخ تبدیل فوتون به الکترون برای حامل‌های بار و با توجه به نقص‌های حجمی و سطحی، معادلات رانش-انتشار حل می‌شود. شبیه‌سازی‌ها با نرم‌افزار Lumerical FDTD Solutions انجام شد و پارامترهای اپتیکی شامل ضریب بازتاب (R)، عبور (T) و جذب (A) در بازه طول‌موج ۳۰۰ تا ۹۰۰ نانومتر استخراج شدند. داده‌های به دست آمده به نرم‌افزار Lumerical Device منتقل شد تا تحلیل الکتریکی شامل حل هم‌زمان معادلات پواسون و رانش-انتشار انجام گیرد. در این مرحله، دو نوع نقص در نظر گرفته شد:

نقص‌های حجمی: شامل بازترکیب‌های تابشی، غیرتابشی اوره^۱ و شاکلی-کوایسر^۲ که باعث کاهش طول عمر حامل‌ها در داخل بلور سیلیکون می‌شوند.

نقص‌های سطحی: در فصل مشترک لایه‌ها مثلاً بین سیلیکون و

p-n لایه‌نشانی و اثر آن به عنوان لایه ضدبازتاب در سلول خورشیدی و افزایش بازده سلول خورشیدی بررسی شد. همچنین برای بررسی خواص الکتریکی و تعیین پارامترهای قطعه سلول خورشیدی از دستگاه شبیه‌ساز خورشیدی استفاده شد. نتایج حاصل نشان دادند که نانو ساختار ZnO با ساختار شش‌گوشی با اندازه ۳۰-۵۰ نانومتر بر روی سطح سیلیکون تشکیل شده و به عنوان یک لایه ضدبازتاب باعث افزایش بازده سلول خورشیدی سیلیکونی شده است [۱۲]. الریبایی و همکاران با استفاده از روش شبیه‌سازی عددی و بهینه‌سازی پارامتری، سلول خورشیدی سیلیکونی بلوری فوق نازک به ضخامت ۱ میکرومتر حاوی نانوسیم‌های دی‌الکتریک SiO_2 را طراحی کردند. پژوهشگران با به کارگیری الگوریتم بهینه‌سازی ازدحام ذرات (PSO)، پارامترهای ساختاری را بهینه‌سازی نموده و موفق به افزایش ۸۲/۲ درصدی چگالی جریان فوتونی (از ۱۸ به ۳۲/۸ میلی‌آمپر بر سانتیمتر مربع) و دستیابی به بازده ۱۵/۹ درصدی شدند [۱۱]. امروزه، برای بررسی اپتیکی سلول‌های نسل جدید، روش‌های عددی بسیار دقیق نظیر تفاضل محدود حوزه زمان (FDTD) در دسترس است [۱۳]. اما بررسی‌ها نشان داد که تحقیق (اپتو-الکتریکی) روی سلول سیلیکونی لایه نازک به اندازه کافی صورت نگرفته است. در این پژوهش، ابتدا با استفاده از شبیه‌سازی پیشرفته اپتیکی با روش FDTD، تأثیر ضخامت لایه‌های ضدبازتاب، بر میزان بازتاب و بازده سلول لایه نازک سیلیکونی بررسی شد. بدین منظور، سلول با یک لایه ضدبازتاب Si_3N_4 ، و سلول با دولایه ضدبازتاب $\text{MgF}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$ با ضخامت‌های متفاوت بر سلول سیلیکونی قرار داده شدند. سپس، عملکرد اپتیکی سلول بدون لایه ضدبازتاب (سلول استاندارد)، سلول با یک لایه ضدبازتاب (Si_3N_4) ، و سلول با دولایه ضدبازتاب $(\text{MgF}_2/\text{Si}_3\text{N}_4)$ شبیه‌سازی و مقایسه شدند. در مرحله بعد، با استفاده از نتایج اپتیکی به دست آمده و ویژگی‌های الکتریکی سلول‌ها، شبیه‌سازی و بررسی با در نظر گرفتن نقص‌های سطحی و حجمی تحت شرایط مختلف از طریق حل معادلات دیفرانسیل مربوطه انجام شد. این بررسی جامع الکترواپتیکی، امکان

۱. Auger

۲. Shockley-Queisser

$$I_{sh} = q(t_s f_{\omega} Q_s - 2t_c Q_c) \quad (6)$$

که در آن $f_{\omega} Q_s$ تعداد فوتون‌هایی است که در واحد سطح سلول در بالای انرژی گاف نواری قرار دارند. t_s کسری از فوتون‌ها است که در تولید جفت الکترون-حفره نقش دارند. و I_{sh} نرخ تولید جریان در واحد سطح است. علاوه بر بازترکیب‌های حجمی، در سطح یک نیم‌رسانا بازترکیب سطحی نیز صورت می‌گیرد. میزان بازترکیب سطحی بسته به کیفیت زیر لایه سیلیکونی و نحوه ساخت آن متفاوت است. در نتیجه در شبیه‌سازی، ویژگی‌های بازترکیب سطحی می‌تواند برای مطابقت با نتایج تجربی یا مرجع موجود تنظیم شود. سرعت بازترکیب برای یک سطح آرمانی در بیشتر نیم‌رساناها حداقل صفر و حداکثر 10^7 سانتیمتر بر ثانیه است. نتایج نشان می‌دهد که بازترکیب سطح می‌تواند کاهش جریان اتصال کوتاه را بیشتر کند. نرخ بازترکیبی سطح برای نیم‌رساناهای نوع n و نوع p به صورت زیر است [۱۸]:

$$R_s = S_p (p - p_0) \quad (7)$$

$$R_s = S_n (n - n_0) \quad (8)$$

که در آن S_p و S_n سرعت‌های بازترکیب سطحی مؤثر هستند. برای انجام شبیه‌سازی به روش FDTD از نرم‌افزار لومریکال استفاده شد [۱۴]. در واقع در نرم‌افزار لومریکال مشخصات نوری که شامل ضریب عبور، ضریب بازتاب و ضریب جذب است، شبیه‌سازی شدند. سپس، با انتقال مشخصات اپتیکی، و میزان حامل‌های تولیدشده به داخل افزونه لومریکال، مشخصات الکتریکی بررسی شدند. در نهایت، نتایج شبیه‌سازی به صورت نمودار $J-V$ رسم شدند. شکل ۱، طرح کلی سلول شبیه‌سازی شده لایه نازک سیلیکونی با ضخامت ۳ میکرومتر را نشان می‌دهد.

۳. بحث و بررسی

در این بخش، نتایج الکترواپتیکی حاصل از شبیه‌سازی سلول‌های سیلیکونی با لایه‌های ضدبازتاب تک‌لایه و دولایه (شکل ۱)، در هر دو حالت‌های آرمانی و واقعی بررسی و مقایسه می‌شود.

لایه ضدبازتاب Si_3N_4 یا MgF_2 که با سرعت بازترکیب سطحی (S_n, S_p) الگوسازی شده‌اند.

نرم‌افزار لومریکال با ترکیب داده‌های اپتیکی و الکتریکی، منحنی‌های $J-V$ را تولید کرده و پارامترهای فتوولتائیک شامل ولتاژ مدار باز (V_{oc})، چگالی جریان مدار کوتاه (J_{sc})، ضریب پرشدگی (FF) و بازده تبدیل توان (η) را محاسبه می‌کند. این روش ترکیبی (الکترواپتیکی) امکان تحلیل جامع عملکرد سلول در حالت‌های آرمانی و دارای نقص را فراهم می‌کند، و در نهایت نمودار جریان ولتاژ به دست می‌آید [۱۵]. از این نمودار می‌توان بازده سلول خورشیدی (η) را مطابق با رابطه (۳) محاسبه کرد:

$$\eta = \frac{FF \times V_{oc} \times J_{sc}}{P_{in}} \quad (3)$$

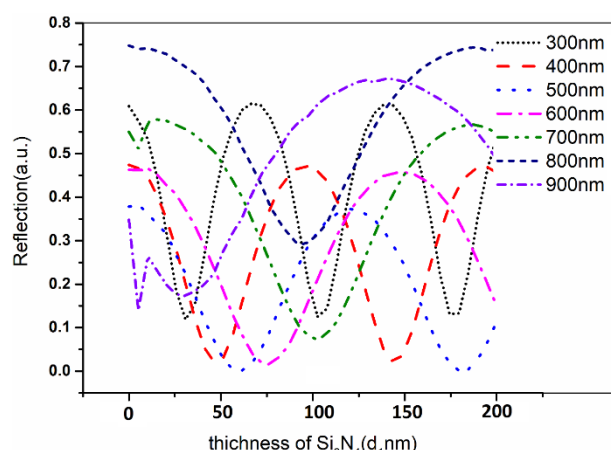
در یک سلول خورشیدی، نقص‌های حجمی و سطحی به صورت بازترکیب‌های تابشی، اوژه و شاکلی-کویسر بروز می‌کنند. نقص‌های تابشی به انتقال مستقیم الکترون از نوار رسانایی به نوار ظرفیت و گسیل یک فوتون گفته می‌شود که وارون فرایند جذب فوتون است. چگالی حامل‌های بار اضافی تولیدشده (Δn) از طریق نرخ بازترکیب (R) با طول عمر حامل‌ها (τ) مرتبط است؛ نرخ بازترکیب تعیین‌کننده طول عمر حامل‌های بار اضافی بوده و با رابطه (۴) بیان می‌شود [۱۶]:

$$\tau = \Delta n R \quad (4)$$

نقص‌های مربوط به بازترکیب‌های اوژه و شاکلی-کویسر فرآیندهایی غیر تابشی هستند که بازده سلول‌های فتوولتائیک خورشیدی را از حالت آرمانی کاهش می‌دهند. در بازترکیب اوژه، انرژی اضافی حاصل از بازترکیب الکترون-حفره به جای تولید فوتون، الکترون‌ها و حفره‌ها را به حالت‌های انرژی بالاتر در همان نوار برانگیخته می‌کند. بازترکیب اوژه ممکن است شامل نوارهای ظرفیت متفاوت و برهم‌کنش با فوتون‌ها باشد. نرخ بازترکیب اوژه (R_{Aug}) توسط رابطه زیر مشخص می‌شود [۱۷]:

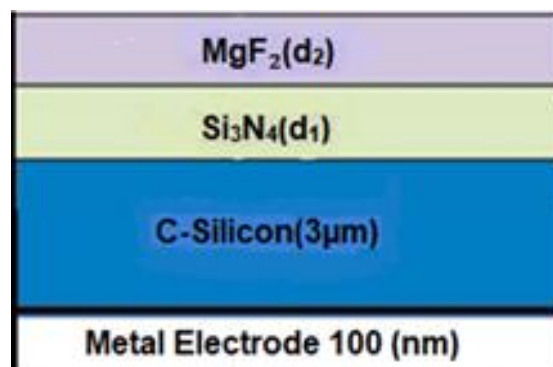
$$R_{Aug} = (C_n n + C_p p)(np - n_0 p_0) \quad (5)$$

که در آن C_n و C_p به ترتیب ضرایب اوژه الکترون و حفره هستند. محدودیت شاکلی-کویسر بیشترین بازده تبدیل انرژی خورشیدی را در حدود ۳۳٪ درصد تخمین می‌زند. نرخ تولید جریان در این حالت از رابطه (۶) به دست می‌آید [۱۸]:



شکل ۲. منحنی بازتاب کلی شامل ضخامت‌های مختلف Si_3N_4 در حضور تابش تک‌فام با طول‌موج‌های مختلف.

جدول ۱، مقادیر کمترین میزان بازتاب نور (R) را برای لایه‌های ضدبازتاب Si_3N_4 با ضخامت‌های متفاوت d_1 و طول‌موج‌های متفاوت نشان می‌دهد. شکل ۳، منحنی‌های بازتاب نور برحسب طول موج برای سلول استاندارد (بدون لایه ضدبازتاب) و سلول با لایه ضدبازتاب Si_3N_4 (در ضخامت‌های مختلف d_1) را نشان می‌دهد. در این شکل مشخص است که لایه Si_3N_4 با هر ضخامتی، بازتاب سلول را نسبت به سلول استاندارد کاهش داده است. بر این اساس، لایه با ضخامت $61/53$ نانومتر در طول موج 500 نانومتر کمترین بازتاب را داشته است. برای یافتن بیشترین بازده سلول سیلیکونی با یک لایه ضدبازتاب، علاوه بر ضخامت لایه ضدبازتاب، عوامل دیگری نظیر اثر ضریب جذبی طیفی سیلیکون و شدت طیفی $1/5$ AM خورشید بر روی عملکرد سلول سیلیکونی تأثیرگذار است. بنابراین لازم است که در محاسبات نقش عوامل ذکرشده نیز لحاظ شود. بر این اساس، برای حالت‌های مختلف، ابتدا میزان تولید زوج الکترون-حفره تحت شدت طیفی $1/5$ AM برای ضخامت‌های مختلف سلول از طریق شبیه‌سازی اپتیکی FDTD محاسبه شد. سپس، با فرض جذب کامل نور توسط الکترون-حفره‌ها در بخش الکتریکی محیط لومریکال، و به‌واسطه معادلات حاکم بر انتقال حامل‌ها، الکترون-حفره و پواسون برای لایه فعال سیلیکونی آرمانی حالت‌های با ضخامت متفاوت شبیه‌سازی شد.

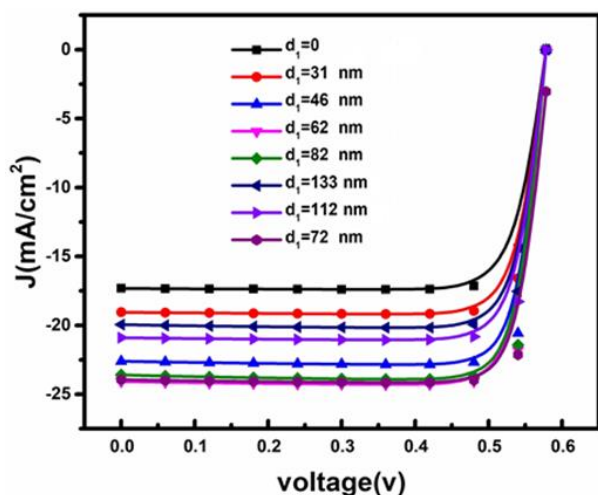


شکل ۱. طرح کلی سلول سیلیکونی شبیه‌سازی شده.

۳-۱. سلول با یک لایه ضدبازتاب

در ساده‌ترین الگوی سلول سیلیکونی متعارف (غیر لایه نازک)، در صورتی لایه نازک نشانده شده به‌عنوان یک لایه ضدبازتاب عمل می‌کند که $n_2 = \sqrt{n_1 n_3}$ باشد. n_1 ضریب شکست محیط، n_2 ضریب شکست لایه نازک دی‌الکتریک و n_3 ضریب شکست زیر لایه دی‌الکتریک نیمه‌ناهنماهی است. در این رابطه و برای زیر لایه سیلیکونی در هوا، ضریب شکست لایه ضدبازتاب نظیر نیتريد سیلیکون در حدود ۲ است. اگرچه این شرایط در ساختار سلول سیلیکونی نسل جدید (لایه نازک) برقرار نیست، اما می‌توان از آن به‌عنوان یک تخمین اولیه در انتخاب نوع لایه نازک استفاده کرد. تعیین ضخامت لایه نیز پارامتر مهم دیگری است که انتخاب دقیق آن برای سلول سیلیکونی لایه نازک نیازمند شبیه‌سازی است [۵۳]. بدین منظور، با استفاده از روش FDTD منحنی بازتاب کل از سطح بالایی یک سلول با لایه ضدبازتاب، برحسب ضخامت‌های متفاوت از لایه ضدبازتاب Si_3N_4 در حضور تابش منبع نور شبیه‌سازی شد.

شکل ۲، منحنی بازتاب کل از یک بستر سیلیکونی با ضریب شکست $n=3/4$ را که ضخامت‌های متفاوتی از لایه ضدبازتاب Si_3N_4 ($n(\lambda)=1/1-92/96$) بر روی آن قرار گرفته است، نشان می‌دهد. منحنی‌ها با استفاده از تابش فرودی تک‌فام در طول‌موج‌های $300-900$ نانومتر به‌دست آمده‌اند. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش ضخامت لایه Si_3N_4 ، بازتاب کاهش یافته است. همچنین در منحنی مربوط به طول‌موج 500 نانومتر کمترین بازتاب مشاهده می‌شود.



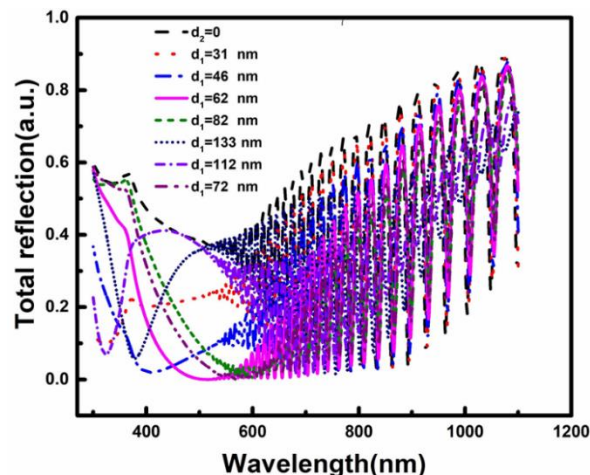
شکل ۴. منحنی J-V شبیه‌سازی‌شده سلول‌های سیلیکونی با ضخامت‌های مختلف d_1 و لایه ضدبازتاب Si_3N_4 .

به عبارت دیگر، در حالت دولایه ضدبازتاب، کمترین بازتاب از سطح سلول به ازای چه ضخامتی از لایه دوم حاصل می‌شود زمانی که چشمه تابشی تک طول موج با مقادیر مشخص در جدول ۳ استفاده شده باشد.

همچنین، عملکرد الکتریکی سلول خورشیدی با دو لایه ضدبازتاب مورد بررسی قرار گرفت. مقادیر پارامترهای اساسی سلول برای ضخامت‌های مختلف لایه ضدبازتاب دوم MgF_2 شامل بازده η ، ضریب پرتشنگی F ، ولتاژ مدارباز V_c و چگالی جریان کوتاه J_{sc} در جدول ۴ آورده شده‌اند. نتایج شبیه‌سازی نشان داد که ویژگی‌های J-V سلول‌های خورشیدی با دو لایه ضدبازتاب و ضخامت ۱۱۲ نانومتر، به طور قابل توجهی نسبت به حالت تک لایه بهبود یافته است.

۳-۳. سلول با دولایه ضدبازتاب دارای نقص‌های حجمی و سطحی

بازده تبدیل توان سلول‌های خورشیدی سیلیکونی آرمانی، به گاف انرژی و سرعت بازترکیب حامل‌های بار وابسته است. تلفات ناشی از بازتاب برای سیلیکون بسیار نازک (۲ میکرومتر) ۲۵ درصد و برای سلول‌های ضخیم‌تر (بزرگتر از ۱۰۰ میکرومتر) فقط ۱ درصد تا ۲ درصد است [۱۹]. شکل ۵. الف)، منحنی‌های بازتاب نور را در طول موج‌های مشخص به ازای مقادیر مختلفی از ضخامت لایه دوم ضدبازتاب نشان می‌دهد. در این تحلیل ضخامت لایه دوم (MgF_2) به صورت متغیر بررسی شد.



شکل ۳. منحنی‌های طیفی بازتاب کلی برای منبعی با طول موج ثابت از سطح بالایی.

در شکل ۴، بازتاب کلی برای سلول استاندارد و سلول با لایه ضدبازتاب Si_3N_4 و ضخامت‌های مختلف d_1 رسم شده است. همچنین مقادیر جریان مدار کوتاه به دست آمده از منحنی‌های J-V در جدول نتایج ثبت شده است.

بازتاب سلول استاندارد و سلول‌های دارای یک لایه ضدبازتاب با ضخامت‌های مختلف را نشان می‌دهد. با استفاده از نمودارهای این شکل، مقادیر ولتاژ مستقیم (V_{DC})، چگالی جریان (J_{sc})، ضریب پرتشنگی (FF) و بازده (η) سلول‌ها به دست آمد. نتایج در جدول ۲ ثبت شده‌اند. با توجه به مقادیر جدول، اگر ضخامت لایه ضدبازتاب ۶۲ نانومتر باشد، سلول بیشترین بازده برابر با ۱۱/۷۷۴۰ را خواهد داشت.

۳-۲. سلول با دولایه ضدبازتاب

نتایج به دست آمده نشان دادند که میزان بازتاب در سلول با یک لایه ضدبازتاب نسبت به سلول استاندارد کمتر است. به منظور بررسی کاهش بیشتر بازتاب در سلول خورشیدی سیلیکونی، لایه دوم MgF_2 به لایه ضدبازتاب بهینه شده اول (Si_3N_4) اضافه شد. در ادامه، سلول‌هایی که دارای دو لایه ضدبازتاب به صورت $\text{MgF}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$ هستند، بررسی شدند. با توجه به این که بهترین ضخامت برای لایه اول ($\text{Si}_3\text{N}_4 = 62 \text{ nm}$) به دست آمد، در این بخش با ثابت نگه داشتن ضخامت لایه اول، لایه دوم MgF_2 با ضریب شکست $n = 1/3$ و ضخامت‌های مختلف در نظر گرفته شد.

جدول ۱. ضخامت های بهینه به دست آمده از سلول با یک لایه ضد بازتاب Si_3N_4 (d_1)، MgF_2 ($d_2=0$).

λ (nm)	۳۰۰	۴۰۰	۵۰۰	۶۰۰	۷۰۰	۸۰۰	۹۰۰
d_1 (nm)	۶۱	۱۱۲	۱۷۴	۶۱	۱۱۲	۹۲/۳۰	۲۰/۵۱
R (a.u.)	۰/۱۱	۰/۲۱	۰/۰۱۷	۰/۰۱	۰/۰۷	۰/۲۸	۰/۳۵

جدول ۲. پارامترهای فتوولتائی سلول با ضخامت های بهینه لایه ضد بازتاب Si_3N_4 (d_1).

Cell	d_1 (nm)	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm ^۲)	FF	η (%)
Si	۰	۰/۵۷۱۱۲۲	۱۶/۳۸۰۱	۰/۸۲۲۷۰	۷/۶۹۷۴
	۳۱	۰/۵۷۸۱۸۵	۱۹/۰۵۶۸	۰/۸۲۶۲۱۱	۹/۱۰۳۵
	۴۶	۰/۵۹۲۳۹۹	۲۲/۶۰۵۶	۰/۸۲۹۲۰۱	۱۱/۱۰۴۳
	۶۲	۰/۵۹۲۶۷	۲۴/۰۶۶۹	۰/۸۲۵۳۳	۱۱/۷۷۴۰
	۷۷	۰/۵۹۹۲۴۵	۲۳/۷۸۶۵	۰/۸۳۸۶۸۶	۱۱/۷۰۰۵
	۱۰۳	۰/۵۶۳۶۸۱	۲۰/۰۳۴۵	۰/۸۲۶۵۱۴	۹/۴۷۱۸
	۹۲	۰/۶۰۰۵۴	۲۰/۸۹۵	۰/۸۲۵۵۳۴	۱۰/۳۴۵۱
	۷۲	۰/۶۰۰۹۲۲	۲۳/۹۴۶۱	۰/۸۳۰۶۷۷	۱۱/۹۵۴۶

جدول ۳. کمترین بازتاب در سلول با دو لایه ضد بازتاب $\text{MgF}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$ در ضخامت های مختلف از لایه MgF_2 .

λ (nm)	۳۰۰	۴۰۰	۵۰۰	۶۰۰	۷۰۰	۸۰۰	۹۰۰
d_1 (nm)	۶۱	۱۱۲	۱۷۴	۶۱	۱۱۲	۹۲/۳۰	۲۰/۵۱
R(a.u.)	۰/۳۹۹	۰/۰۶۴	۰/۰۲۲	۰/۰۱	۰/۸۰	۰/۴۲	۰/۳۶

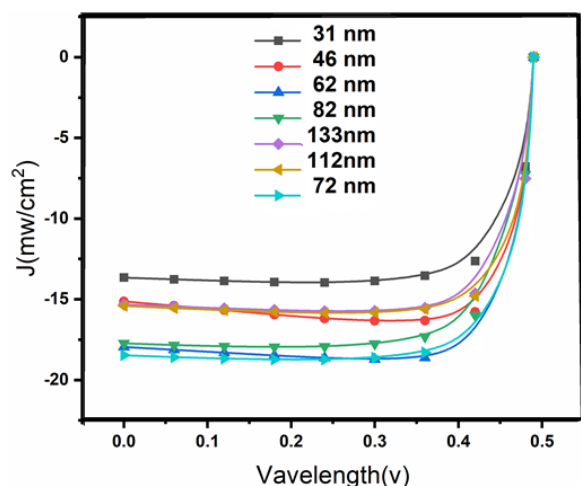
جدول ۴. پارامترهای فتوولتائی سلول با دو لایه ضد بازتاب $\text{MgF}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$ در ضخامت های مختلف از لایه دوم MgF_2 .

Cell	d_1 (nm)	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm ^۲)	FFjyvjy	η (%)
Si-ideal AR _۱ +AR _۲	۶۱	۰/۵۸۸۰۰۱	۲۳/۸۳۷۱	۰/۸۹۲۳۶۳	۱۱/۵۳۴۹
	۱۱۲	۰/۵۸۶۱۳۵	۲۴/۹۲۹۷	۰/۸۲۱۰۵۷	۱۱/۷۵۶۸
	۱۷۴	۰/۵۹۷۱۶۹	۲۱/۷۱۱۱	۰/۸۲۰۸۶۱	۱۰/۶۴۲۶
	۶۱	۰/۵۹۴۲۳۱	۲۳/۸۳۹۳	۰/۸۲۴۰۷۰	۱۱/۶۷۳۸
	۱۱۲	۰/۶۰۱۵۵۱	۲۴/۳۹۵۲	۰/۸۷۶۳۲۰	۱۲/۲۸۹۱
	۹۲	۰/۵۹۶۹۷۸	۲۴/۳۴۲۱	۰/۸۲۹۰۱۷	۱۲/۰۳۲۹
	۲۱	۰/۵۹۲۵۹	۲۴/۰۷۹۵	۰/۸۲۳۴۴۷	۱۱/۷۵۰۰

بر اساس نتایج حاصل از این نمودار، در شکل ۵. (ب)، ضخامت لایه دوم در حالتی انتخاب شده است که کمترین میزان بازتاب مشاهده شده باشد. سپس ساختار سلول لایه نازک با در نظر گرفتن این مقدار به عنوان ضخامت بهینه برای پوشش دوم طراحی و بررسی شده است. با این حال، به دلیل رفتار نوسانی شدید منحنی بازتاب در این حالت، تعیین دقیق ضخامت بهینه صرفاً بر اساس تحلیل ایتیکی دشوار است. بنابراین، برای تعیین دقیق تر بهترین ضخامت، از نتایج شبیه سازی الکتریکی که در جدول ۵ گزارش شده است، استفاده شده است. این نتایج نشان می دهد که ضخامت ۱۱۲ نانومتر برای لایه ضد بازتاب دوم،

بیشترین بازده را در ساختار سلول واقعی (با در نظر گرفتن نقص های حجمی و سطحی) ارائه می دهد. پارامترهای فتوولتائی مرتبط با این شرایط، از منحنی های به دست آمده استخراج و در جدول ۵ ارائه شد. در همین راستا، میزان تولید الکترون-حفره برای سلول های سیلیکونی آرمانی (بدون نقص) و غیر آرمانی (با نقص های حجمی-سطحی) محاسبه و به صورت منحنی J-V شبیه سازی شد (شکل ۶).

در ادامه، منحنی J-V مربوط به دولایه ضد بازتاب برای نقص های سطح مشترک شبیه سازی شد (شکل ۷).



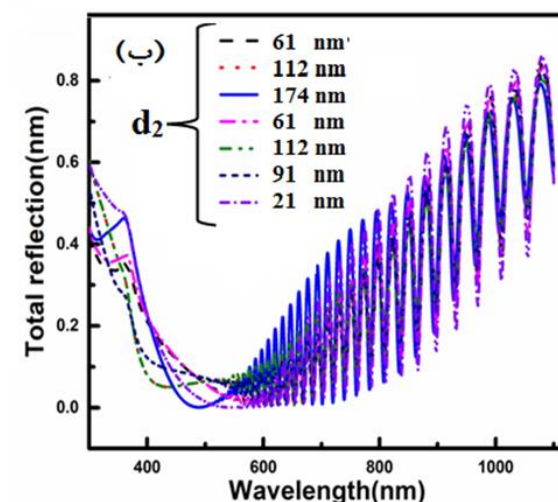
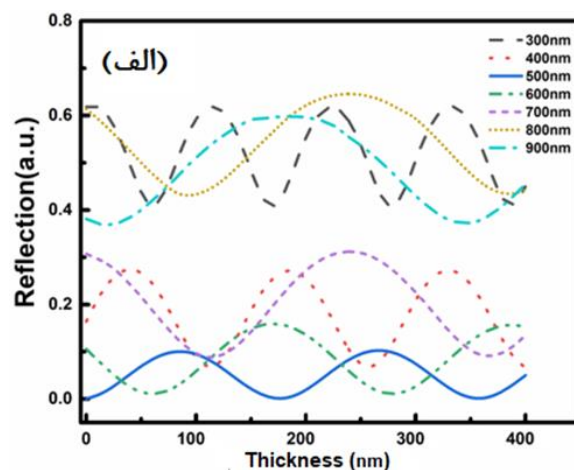
شکل ۷. منحنی J-V شبیه‌سازی شده سلول‌های سیلیکونی با نقص حجمی-سطحی با لایه ضدبازتاب Si_3N_4 و ضخامت‌های مختلف لایه ضدبازتاب دوم MgF_2 (d_2).

در این بخش از پژوهش، شبیه‌سازی‌های الکتریکی با در نظر گرفتن نقص‌های سطحی و حجمی در سلول سیلیکونی انجام شد. همانند قسمت قبل سلول‌هایی با دولایه ضدبازتاب در نظر گرفته شدند (جدول ۵). با استفاده از روش FDTD، سلول‌های با لایه اول Si_3N_4 و ضخامت بهینه شده ۶۲ نانومتر، و لایه دوم MgF_2 با ضخامت‌های مختلف شبیه‌سازی شدند.

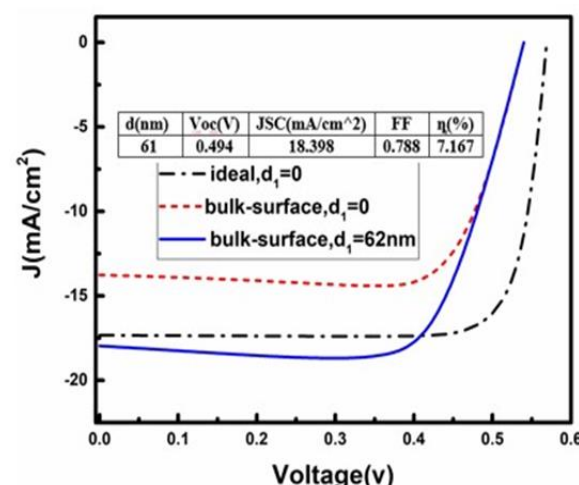
نتایج جدول‌های ۴ و ۵ نشان می‌دهد که بیشترین بازده در سلول‌های آرمانی و واقعی مربوط به سلول‌هایی است که از نظر ضخامت لایه‌های ضدبازتاب یکسانی دارند (لایه ضدبازتاب اول ۶۲ نانومتر و لایه ضدبازتاب دوم ۱۱۲ نانومتر). بیشترین بازده در سلول‌های ایده‌آل برابر ۷/۵۸۳ درصد و در سلول‌های واقعی (نقص دار) برابر ۱۲/۲۸۹ درصد است. مقایسه این دو سلول نشان می‌دهد که وجود نقص‌ها سبب کاهش تقریباً ۵۰ درصدی بازده شده است.

نتایج یک تحقیق درباره اثر لایه‌های ضدبازتاب بر عملکرد سلول خورشیدی نشان داد که لایه‌های ضدبازتاب SiN_x و $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ ، متوسط تلفات بازتاب را به ترتیب به کمتر از ۹ درصد و ۲/۳ درصد کاهش داده است [۲۱].

کازی اسالم و همکاران اثر لایه‌های مختلف ضدبازتاب ITO، Al_2O_3 و Si_3N_4 در سطح بالای سلول خورشیدی آمیخته را بررسی کردند [۲۲].



شکل ۵. (الف) منحنی‌های بازتاب نسبت به ضخامت لایه ضدبازتاب دوم MgF_2 (d_2)، و (ب) منحنی طیفی بازتاب کلی از سطح بالایی سلول برحسب طول‌موج برای ضخامت‌های مختلف لایه ضدبازتاب دوم MgF_2 (d_2).



شکل ۶. منحنی‌های J-V سلول خورشیدی سیلیکونی با نقص حجمی-سطحی در حالت‌های بدون لایه ضدبازتاب و لایه ضدبازتاب Si_3N_4 با ضخامت ۶۲ نانومتر و سلول آرمانی (بدون نقص حجمی-سطحی).

جدول ۵. پارامترهای فتوولتائی سلول سیلیکونی واقعی با دولایه ضد بازتاب $\text{MgF}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$ که ضخامت لایه ضد بازتاب اول (Si_3N_4) ۶۲ نانومتر است.

Cell	$d_f(\text{nm})$	$V_{oc}(\text{V})$	$J_{sc}(\text{mA}/\text{cm}^2)$	FF	η (%)
	۶۱	۰/۴۹۴۸۳	۱۵/۸۵۷۸	۰/۸۳۲۰۷۲	۷/۳۵۲۶۵
	۱۱۲	۰/۴۹۷۰۲	۱۸/۸۶۶۱	۰/۸۰۵۷۴۱	۷/۵۵۵۳۱
	۱۷۴	۰/۴۹۸۲۸	۱۶/۹۳۴۸	۰/۸۵۵۱۳۵	۷/۲۱۵۹۹
Si-bulk-surface	۶۱	۰/۵۰۲۹۱۵	۱۷/۹۳۷۴	۰/۸۲۶۹۴۲	۷/۴۵۹۸۸
AR _۱ +AR _۲	۱۱۲	۰/۴۹۳۷۶	۱۹/۱۹۱	۰/۸۰۰۲۵۳	۷/۵۸۳۰۱
	۹۲	۰/۴۹۹۹۵۳	۱۸/۲۴۷۶	۰/۸۲۸۹۴۹	۷/۵۵۹۷۰
	۲۱	۰/۵۰۲۶۴۵	۱۶/۷۷۱۶	۰/۸۲۰۲۲۶	۶/۹۱۴۶۲

با استفاده از تبخیر حرارتی تحت شرایط خلاء بر روی سلول های خورشیدی سیلیکونی پوشش دادند. نتایج نشان داد که بازده تبدیل برای سلول های خورشیدی چند بلوری ۱۶/۰۱ درصد و برای سلول های خورشیدی تک بلوری بهبود یافته ۱۶/۹۴ درصد است. مقایسه نشان می دهد که اگرچه بازده نهایی در پژوهش دانگل سورس بالاتر بوده، اما مقاله حاضر با استفاده از شبیه سازی دقیق الکترواپتیکی توانسته تأثیر بهینه سازی ضخامت لایه ها را در ساختارهای بسیار نازک به صورت نظامند و عددی تحلیل کرده و کاهش بازده حدود ۵۰ درصد در اثر نقص ها را نیز کمی سازی کند که در مطالعات تجربی کمتر به آن پرداخته شده است.

۴. نتیجه گیری

در این پژوهش ویژگی های الکترواپتیکی سلول خورشیدی سیلیکونی نسل جدید (ضخامت ۳ میکرون) با پوشش های یک لایه ضد بازتاب Si_3N_4 و دولایه ضد بازتاب $\text{MgF}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$ با استفاده از روش FDTD

بررسی شد. در ابتدا، با استفاده از بخش اپتیکی روش FDTD، بازده سلول سیلیکونی آرمانی با ضخامت های مختلف لایه ضد بازتاب شبیه سازی شدند. در ادامه، با استفاده از داده های بخش اپتیکی و معادلات حاکم بر دینامیک حامل های بار، بخش الکتریکی شبیه سازی شد. نتایج نشان داد که لایه با ضخامت ۶۲ نانومتر کمترین بازتاب از سطح را دارد. سپس، با ثابت نگاه داشتن ضخامت لایه ضد بازتاب اول (۶۲ نانومتر)، لایه

نتایج نشان داد لایه Si_3N_4 با ضخامت ۶۰ نانومتر بهترین لایه ضد بازتاب در بین سایر لایه ها است. در مقاله حاضر، بازتاب برای تک لایه Si_3N_4 با ضخامت بهینه ۶۲ نانومتر کمتر از ۲ درصد و برای پوشش دولایه $\text{MgF}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$ ، حتی کمتر از ۱ درصد است که نتایج آن بهتر از پوشش گزارش شده برای $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ است.

بلینی گرت و همکاران نشان دادند که خواص ضد بازتابی سیلیکون با لایه ضد بازتاب SiN_x تا ۵۴ درصد افزایش یافته و کمترین بازتاب مربوط به محدوده طول موج ۶۰۰ تا ۷۰۰ نانومتر بوده است. همچنین سلول های سیلیکونی با لایه ضد بازتاب SiN_x در مقایسه با نمونه بدون لایه ضد بازتاب در حداکثر توان خروجی و ضریب پرتشدگی، به ترتیب ۲/۲ درصد و ۲ درصد بهبود یافته اند [۲۳].

در مقاله حاضر، استفاده از لایه ضد بازتاب Si_3N_4 با ضخامت ۶۲ نانومتر باعث کاهش بازتاب به کمتر از ۲ درصد در طول موج ۵۰۰ نانومتر و افزایش بازده سلول تا ۱۱/۷۷ درصد در حالت آرمانی شده است. همچنین، با افزودن لایه دوم MgF_2 به ضخامت ۱۱۲ نانومتر در ساختار دولایه $\text{MgF}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$ ، بازده سلول در حالت آرمانی به ۱۲/۲۹ درصد و در حالت واقعی (با در نظر گرفتن نقص های حجمی و سطحی) به ۷/۵۸ درصد رسید. این نتایج نشان می دهد که عملکرد اپتیکی و الکتریکی ساختار پیشنهادی ما به ویژه در حالت دولایه، از نظر کاهش بازتاب و افزایش بازده، به مراتب بهتر بوده است.

دانگل سورس و همکاران [۱۱]، به صورت تجربی لایه های MgF_2 با ضخامت ۷۵ نانومتر و SiN_x با ضخامت ۷۲ نانومتر را

ضدبازتاب دوم با ضخامت‌های مختلف به سلول قبلی اضافه شد. نتایج نشان داد بهترین بازده مربوط به سلولی است که لایه ضدبازتاب دوم آن دارای ضخامت ۱۱۲ نانومتر است. در ادامه، با افزودن نقص‌های حجمی و سطحی (در فصل مشترک لایه‌های سلول) به سلول بهینه‌شده قسمت قبل، محاسبات الکترواپتیکی مجدداً انجام شد. در نهایت، ویژگی‌های به دست آمده از سلول‌های بهینه‌شده

آرمانی و دارای نقص مقایسه شدند. نتایج نشان داد سلولی که دارای پوشش ضد بازتاب $\text{Mg F}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$ است بازده بیشتری نسبت به سلول با پوشش ضدبازتاب Si_3N_4 و سلول بدون لایه ضدبازتاب دارد. نتایج دیگر نشان داد که بازده سلول بهینه‌شده با پوشش ضدبازتاب $\text{Mg F}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$ در حالت واقعی نسبت به سلول آرمانی آن کاهش چشم‌گیری در حدود ۵۰ درصد داشته است.

مراجع

1. K Hansen, C Breyer and H Lund, *Energy* **175** (2019) 471.
2. Y Chen, J Hong, Q Wen, W Yi and S Zheng, *Earth's Future* **12** (2024) e2024EF004535.
3. A Lorestani and M M Ardehali, *Renew Energy* **119** (2018) 490.
4. J M Hodgkiss, *JACS Au* **4** (2024) 3321.
5. C Singh and S H Kumar, *Anti-reflection Light Trapping c-Si Sol Cells* (Springer, 2018) 43.
6. H J Snaith, *J Phys Chem Lett* **4** (2013) 3623.
7. S Bhattacharya and S John, *Sci Rep* **9** (2019) 12482.
8. H Heidarzadeh, A Rostami and M Dolatyari, *Mater Sci Semicond Process* **109** (2020) 104936.
9. X Wang, J Yan, C Zeng, C Luo and C Wang, *Appl Surf Sci* **602** (2022) 154408.
10. M A Green, *IEEE Trans Electron Devices* **31** (1984) 671.
11. M A Elrabiaey, M Hussein, M F O Hameed and S S Obayya, *Sci Rep* **10** (2020) 17534.
12. A Jalali, M R Vaezi, N Naderi, F Tajabadi and A Eftekhari, *Appl Chem Today* **15** (2020) 343.
13. S Taravati, A A Kishk and G V Eleftheriades, *IEEE Antennas Propag Mag* (2025), in press.
14. J E Houle and D M Sullivan, *Electromagnetic Simulation Using the FDTD Method with Python* (Wiley, 2020).
15. J Piprek, *Semiconductor Optoelectronic Devices: Introduction to Physics and Simulation* (Elsevier, 2013).
16. L L E Black and D H Macdonald, *Sol Energy Mater Sol Cells* **234** (2022) 111428.
17. Y M Law and J C Nave, *J Sci Comput* **88** (2021) 72.
18. H K Singh, B Arunachalam, S Kumbhar, P Sharma and C Solanki, *Plasmonics* **11** (2016) 323.
19. P Pathi, A Peer and R Biswas, *Nanomaterials* **7** (2017) 17.
20. K Islam, A Alnuaimi, H Ally and A Nayfeh, *Proc Eur Model Symp* (IEEE, 2013).
21. M M Diop, A Diaw, N Mbengue, O Ba, M Diagne and O A Niasse, *Mater Sci Appl* **9** (2018) 705.
22. G J Blayney, *Investigation of Wafer Processing Technologies for the Production of Low Cost, Improved Efficiency Si PV Cells* (Swansea University, 2014).