بررسی نقش ضخامت و نوع لایه میانی MoS_2 در عملکرد سلول خورشیدی مبتنی بر لایه‌نازک CZTS به‌وسیله شبیه‌سازی SCAPS-1D

طالبی، بهنام؛ مرادی، مهرداد؛ قربانی؛ سجاد

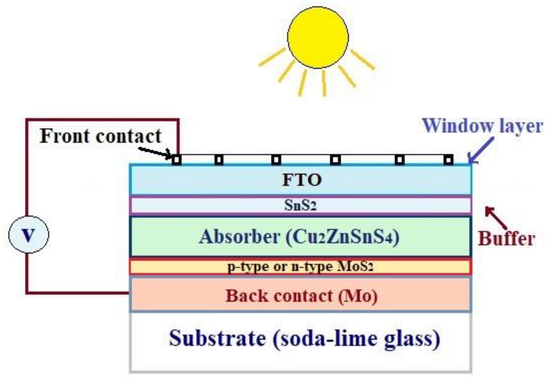
گروه نانوفیزیک، پژوهشکده علوم و فناوری نانو، دانشگاه کاشان

مقدمه

برخی از چالش‌های اصلی مانند ترازبندی نواری نامطلوب در خط اتصال لایه‌های جاذب CZTS و بافر، فازهای اضافی ناخواسته در لایه جاذب و وجود یک لایه میانی MoS_2 در خط اتصال Mo/CZTS، مدت زیادی است که به‌عنوان عوامل محدودکننده بازدهی سلول خورشیدی CZTS به‌شمار می‌آید. تشکیل ناخواسته لایه میانی MoS_2 معمولاً در سلول‌های خورشیدی CZTS به‌دلیل واکنش خود به خودی بین اتصال پشتی Mo و عنصر گوگرد (S) مشاهده می‌شود. گزارش‌ها نشان می‌دهد که لایه‌نازک MoS_2 هر دو نوع نیم‌رسانایی p و n را از خود نشان می‌دهد. با این حال، MoS_2 به‌دلیل وجود نقایص ذاتی جای‌خالی گوگرد (S) که به‌عنوان یک دهنده عمل می‌کند، تمایل طبیعی به داشتن ویژگی‌های نیم‌رسانای نوع n را دارد.[۱]

روش

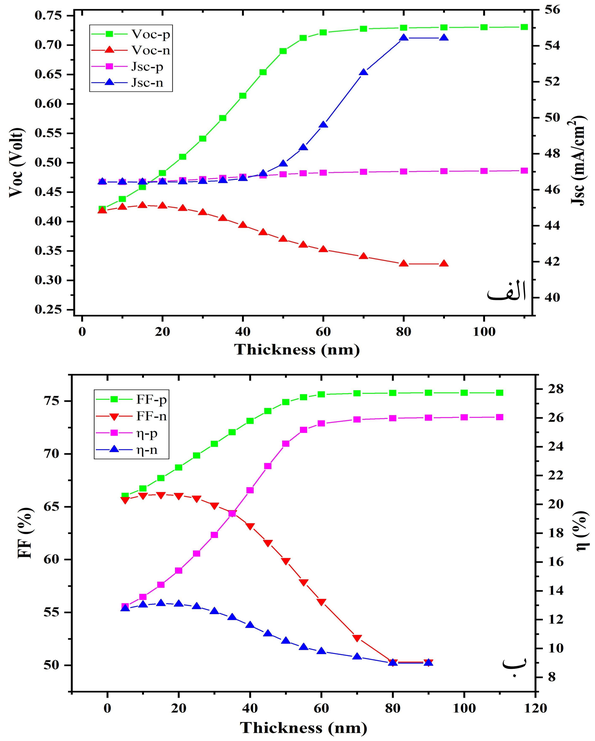
در این شبیه سازی، از نرم‌افزار SCAPS برای آنالیز عددی اثرات لایه میانی MoS_2 در ساختار کلی سلول خورشیدی استفاده شده است. شکل ۱ طرح‌واره‌ای از ساختار شبیه‌سازی شده را نشان می‌دهد. شرایط اولیه شبیه‌سازی به‌صورت تابش استاندارد AM ۱/۵، دمای ۳۰۰ کلوین، مقاومت سری ۱ Ω/cm^2 و مقاومت موازی 4×10^3 Ω/cm^2 انتخاب شد.



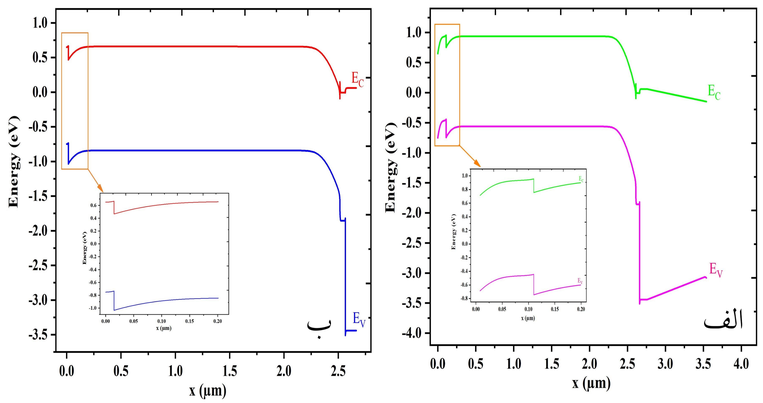
شکل ۱: طرح‌واره سلول شبیه‌سازی شده

نتایج

نتایج حاصل از نقش نوع لایه MoS_2 و ضخامت آن بر V_{oc} و J_{sc}، میزان فاکتور ایده‌آل و بازدهی به‌ترتیب در شکل‌های (۲- الف و ب) ارائه شده است. همچنین نمودار ترازهای انرژی سلول شبیه‌سازی شده با $p–MoS_2$ و $n–MoS_2$ به‌ترتیب در شکل‌های (۳- الف و ب) نشان داده شده است.



شکل ۲: (الف) نمودار تغییرات ولتاژ و جریان ، (ب) نمودار تغییرات فاکتور ایده‌آل و بازدهی.



شکل ۳: (الف) نمودار ترازهای انرژی سلول شبیه‌سازی شده با $p–MoS_2$ (ب) نمودار ترازهای انرژی سلول شبیه‌سازی شده با $n–MoS_2$

تحلیل نتایج

در لایه $p–MoS_2$، میزان V_{oc} با افزایش ضخامت بهبود می‌یابد ولی میزان تغییرات J_{sc} محسوس نیست. در حالی که برای $n–MoS_2$، افت جریان با افزایش ضخامت شدید است. نقش این افت جریان در کاهش میزان عامل ایده‌ال مشهود است (شکل ۲–ب). با بررسی نتایج حاصله از نمودار عامل ایده‌آل و بازدهی براساس ضخامت مشخص شد که عملکرد سلول در $p–MoS_2$ با ضخامت ۶۰ نانومتر و $n–MoS_2$ با ضخامت ۱۵ نانومتر بهینه است.

با در نظر گرفتن تابع کار فلز (Mo) و الکترون‌خواهی و تابع‌کار نیم‌رسانای $p–MoS_2$، میزان تابع کار نیم‌رسانا از فلز بیشتر بوده و اتصال مابین این دو لایه از نوع شاتکی است. (شکل۳–الف). بررسی‌ها مشخص می‌کند که نقش لایه $p – MoS_2$ بیشتر به اتصال لایه MoS_2 با اتصال فلزی پشتی مربوط می‌شود. در خصوص اتصال MoS_2 نوع p با لایه جاذب CZTS، با توجه به ماهیت اتصال (p-p-n)، افزایش ضخامت حتی تا محدوده ۱۰۰ نانومتر، تأثیر مخربی بر عملکرد سلول ایجاد نمی‌کند. با بررسی تابع‌کار و میزان الکترون‌خواهی لایه n–MoS2 و تابع‌کار فلز اتصال پشتی ($\Phi_n>\Phi_M$) ، ایجاد یک اتصال اهمی در ناحیه اتصال پشتی مشهود است (شکل ۳–ب). .با توجه به ماهیت اتصال لایه MoS_2 نوع n با لایه جاذب CZTS و تشکیل پیوند (n-p-n) در سلول، ضخامت محدود این لایه نقش اساسی را در عملکرد سلول بازی می‌کند. لذا وجود لایه MoS_2 نوع n در ضخامت‌های محدود (در حدود ۱۵ نانومتر) با توجه به ایجاد اتصال اهمی می‌تواند مفید باشد، ولی در ضخامت‌های بالاتر به‌دلیل تشکیل دیود در اتصال پشتی و ایجاد ناحیه بازترکیب، نقش این لایه در بازدهی سلول بسیار مضر است. در نتیجه لایه میانی $n–MoS_2$ با چگالی دهندگی پایین، به‌عنوان یک جزء اضافی خوش‌خیم عمل می‌کند، در حالی که لایه میانی $p–MoS_2$، به‌طور کلی باعث بهبود مؤثر خواص الکتریکی و تسهیل ترابرد حامل‌های بار به‌سمت اتصال پشتی می‌شود و متعاقباً بازدهی نهایی سلول را بهبود می‌بخشد.

مراجع

[1] Aydin, Remzi and Idris Akyuz;"Two-stage production and characterization of Cu-poor kesterite CZTS absorber layers"; Optik 200, (2020)