پژوهشکده فیزیک کاربردی و ستاره‌شناسی
گروه فوتونیک- الکترونیک

پایان‌نامه جهت اخذ درجه دکترا در رشته فوتونیک

مدل‌بندی سلول خورشیدی گرافنی و بهینه‌سازی بهره تبدیل مربوط به آن

استاد راهنما:
دکتر اصغر عسگری

استاد مشاور:
دکتر منوچهر کلافی

پژوهشگر:
زهرا عارفی‌نیا

بهمن ۱۳۹۳

بسم الله الرحمن الرحيم

نام خانوادگی: عارفی‌نیا **نام:** زهرا

عنوان پایان‌نامه: مدل بندی سلول خورشیدی گرافنی و بهینه سازی بهره تبدیل مربوط به آن

استاد راهنما: دکتر اصغر عسگری **استاد مشاور:** دکتر منوچهر کلافی

مقطع تحصیلی: دکتری **رشته:** فوتونیک **گرایش:** الکترونیک

دانشگاه: تبریز **دانشکده:** پژوهشکده فیزیک کاربردی و ستاره‌شناسی

تعداد صفحه: ۱۲۶ **تاریخ دفاع:** ۱۳۹۳/۱۱/۸

کلیدواژگان: گرافن- سلول خورشیدی-سد شاتکی- نانوسیم- نیمرساناهای نیتریدی- شبیه‌سازی

چکیده: سلول‌های خورشیدی گرافنی به علت هزینه ساخت پایین و خواص منحصر به فرد گرافن مانند شفافیت نوری، تحرک پذیری بالای حامل‌ها، مقاومت کم، پایداری شیمیایی و مکانیکی، انعطاف پذیری و مساحت سطحی ویژه بزرگ اخیراً مورد توجه محققان قرار گرفته است. در سالهای اخیر چند گروه تحقیقاتی مطالعاتی در زمینه سلول خورشیدی سد شاتکی گرافن-سیلیکون انجام داده‌اند اما بهره تبدیل (بازدهی) آنها هنوز برای کاربردهای تجاری کم است و نیاز به پژوهش‌های زیادی در این زمینه حس می‌شود. ما در این پایان‌نامه ابتدا ساختار سلول خورشیدی سد شاتکی گرافن-سیلیکون را شبیه‌سازی کرده‌ایم. برای شبیه‌سازی، خواص الکتریکی و نوری گرافن که در سلولهای خورشیدی استفاده می شوند را به دست آورده‌ایم. همچنین نحوه عمل هر یک از بازترکیب‌ها از جمله تشعشعی، شاکلی-رید-هال، اوژه و... را نیزمحاسبه کرده‌ایم و بعد از محاسبه جریان نوری، ولتاژ مدار باز، جریان اتصال کوتاه و بهره تبدیل توان (بازدهی)، اثر عوامل مختلف از جمله نوع گرافن به کار رفته، ، چگالی اتم‌های ناخالصی و دما و ... را روی این پارامترها بررسی نموده‌ایم. سپس راهکارهایی برای بالا بردن بازدهی سلول خورشیدی سدشاتکی گرافنی ارائه داده‌ایم. برای بالا بردن بازدهی باید ضریب جذب ماده افزایش یابد. به عنوان مثال با توجه به اینکه ضریب جذب نانوسیم سیلیکونی با ضریب پر شدگی متوسط بیشتر از سیلیکون است و سطح برخورد برای گیراندازی نور در آنها افزایش می‌یابد و ترابرد الکترون نیز بهتر صورت می‌گیرد انتظار داریم با استفاده از نانوسیم سیلیکونی به جای سیلیکون در سلول خورشیدی گرافنی، بازدهی افزایش یابد. از طرف دیگر، کیفیت سیلیکون تحت تابش با گذشت زمان تنزل پیدا می‌کند و با توجه به پهنای گاف نواری آن، حدود ۳۲ درصد طیف خورشیدی را جذب می‌کند، بنابراین استفاده از ماده‌ای با گاف نواری پهن به جای سیلیکون، که بتواند قسمت عمده طیف خورشیدی را جذب کند بازدهی سلول خورشیدی گرافنی را افزایش خواهد داد. پیشنهاد ما در این زمینه استفاده از ترکیبات $In_xGa_{1-x}N$ به دلیل پهنای باند وسیع، ضریب جذب بالا، تحرک‌پذیری زیاد حاملها و آسیب‌پذیری بسیار کم آن‌ها در برابر تابش نور خورشید است.

تقدیم به:

محضر مبارک حضرت فاطمه زهرا سلام الله علیها

که با بذل جان خود و اولاد پاکش قلم آموز بشریت شد و مشق عشق آموخت و راه تعالی را نمایان ساخت و برای نجات بشریت از منجلاب جهالت و منیت دمی نیاسود و خود را به زحمت انداخت تا درهای رحمت و مغفرت الهی را به روی انسان‌ها بگشاید.

پروردگارا!

من که در دانش خود جاهلم؛ چگونه در جهل خود، نادان نباشم!

معبودا!

پناه می برم به تو از نفسی که سیر نشود، از قلبی که خاشع نشود و از دانشی که بهره ندهد؛ و عاجزانه از تو توفیق تلاش در شکست، صبر در نومیدی، رفتن بی همراه، جهاد بی سلاح، کار بی پاداش، فداکاری در سکوت، دین بی دنیا، عظمت بی نام، خدمت بی نان، ایمان بی ریا، خوبی بی نمود و مناعت بی غرور را طلب می کنم.

بار خدایا!

تو را شکرگزارم بابت وجودت که آرامش بخش همه دل هاست و بابت وجود پدر و مادری که مهر آسمانی شان آرام بخش آلام زمینی ام است و هرچه آموختم در مکتب عشق آنها آموختم و هرچه بکوشم نمی توانم سپاسگزار قطره ای از دریای بی کران مهربانیشان باشم. و تو را سپاسگزارم از این که توفیق بهره مندی از محضر استادانی چون جناب آقای دکتر اصغر عسگری و جناب آقای دکتر منوچهر کلافی را به من عطا کردی. استادان عزیز و ارجمندی که در کمال سعه صدر، با حسن خلق و فروتنی، از هیچ کمکی بر من دریغ نمودند و زحمت راهنمایی و مشاوره این رساله را بر عهده گرفتند.

فهرست مطالب

فصل اول: مقدمه **۱**

۱-۱- سلول‌های خورشیدی ۱

۱-۱-۱- سلول‌های خورشیدی نسل اول ۲

۱-۱-۲- سلول‌های خورشیدی نسل دوم ۲

۱-۱-۳- سلول‌های خورشیدی نسل سوم ۲

۱-۱-۴- سلول‌های خورشیدی نسل چهارم ۴

۱-۲- گرافن ۵

۱-۲-۱- خصوصیات گرافن ۵

۱-۲-۲- روش‌های تولید گرافن ۶

۱-۲-۳- برخی مشخصه‌ها و کاربردهای گرافن ۶

۱-۳- رئوس مطالب پایان‌نامه ۹

فصل دوم: مشخصات نوری گرافن **۱۱**

۲-۱- ساختار نواری گرافن تک‌لایه ۱۱

۲-۲- رسانندگی نوری گرافن تک‌لایه ۱۵

۲-۳- گرافن کم‌لایه ۱۸

۲-۳-۱- حالت‌های متفاوت روی‌هم قرارگیری صفحات گرافن در گرافن کم‌لایه ... ۱۹

۲-۳-۲- ساختار نواری گرافن کم‌لایه ۲۰

۲-۳-۳- رسانندگی الکتریکی گرافن کم‌لایه ۲۴

۲-۳-۴- رسانندگی نوری گرافن کم‌لایه ۲۹

۲-۴- ضرایب عبور و بازتاب گرافن ۳۱

فصل سوم: سلول خورشیدی سد شاتکی گرافن-سیلیکون **۳۵**

۳-۱- طیف خورشیدی ۳۵

۳-۲- خواص اساسی نیمرسانا ۳۶

۳-۲-۱ نیمرسانای ذاتی ۳۷

۳-۲-۲ نیمرسانای غیرذاتی ۳۸

۳-۲-۳ تحرک‌پذیری در نیمرسانا ۳۹
۳-۲-۴ انتقال حامل در نیمرسانا ۳۹
۳-۲-۵ فرآیندهای جذب اپتیکی در نیمرسانا ۴۰
۳-۳- اتصال فلز با نیمرسانا ۴۲
۳-۳-۱ اتصال شاتکی ۴۲
۳-۳-۲- اتصال اهمی ۴۳
۳-۴- سلول خورشیدی ۴۴
۳-۵- پارامترهای مهم سلول خورشیدی ۴۵
۳-۶- سلول خورشیدی سد شاتکی گرافن- سیلیکون ۴۶
۳-۷- مدل‌بندی سلول خورشیدی سد شاتکی گرافن- سیلیکون ۴۷
۳-۷-۱- محاسبه جریان ناشی از تولید زوج الکترون-حفره ۴۹
۳-۷-۲- محاسبه جریان ناشی از بازترکیب ۵۱
۳-۸- پارامترهای مربوط به سیلیکون ۵۴
۳-۹- بحث و بررسی نتایج ۵۵

فصل چهارم: راهکارهایی برای افزایش بازدهی سلول خورشیدی سد شاتکی گرافنی ۶۱

۴-۱- استفاده از نانوسیم سیلیکونی به‌جای سیلیکون حجیم ۶۱
۴-۱-۱- ساختار سلول خورشیدی سد شاتکی گرافن-نانوسیم سیلیکونی ۶۳
۴-۱-۲- روش شبیه‌سازی ۶۴
۴-۱-۳- بحث و بررسی نتایج ۶۹
۴-۲- استفاده از نانوسیم هم‌محور شعاعی سیلیکونی نوع‌p/ذاتی/نوع‌n به‌جای سیلیکون حجیم ۷۷
۴-۲-۱- ساختار سلول خورشیدی گرافن-نانوسیم‌های هم‌محور شعاعی سیلیکونی ۷۸
۴-۲-۲- پارامترهای نانوسیم‌های هم‌محور شعاعی سیلیکونی ۷۹
۴-۲-۳- روش شبیه‌سازی ۸۱
۴-۲-۴- بحث و بررسی نتایج ۸۴
۴-۳- استفاده از ترکیبات $In_xGa_{1-x}N$ به‌جای سیلیکون ۹۱
۴-۳-۱- ساختار سلول خورشیدی سد شاتکی گرافن- ترکیبات $In_xGa_{1-x}N$ ۹۱
۴-۳-۲- پارامترهای $p\text{-}In_xGa_{1-x}N$ ۹۲
۴-۳-۳- روش شبیه‌سازی ۹۳
۴-۳-۴- بحث و بررسی نتایج ۹۴

فصل پنجم: نتیجه‌گیری و پیشنهاد برای کارهای آینده **۱۰۲**

مراجع **۱۰۶**

فهرست شکل‌ها

شکل۱-۱: شکل بالایی: نمای شماتیک از سلول خورشیدی گرافنی. شکل پایین سمت راست: عکس سلول خورشیدی سدشاتکی G/n-Si سمت چپ: سطح مقطع سلول خورشیدی و الکترون و حفره‌های تولید شده ناشی از تابش نور [۱۱۲]. ۹

شکل ۲-۱: (الف): ساختار شش‌گوشه گرافن که مجموعی از دو زیر شبکه مثلثی A و B است. بردارهای پایه a_1 و a_2 برای زیر شبکه A و بردارهای δ_1، δ_2 و δ_3 زیر شبکه A و B را به هم متصل می‌کند. (ب) شبکه وارون گرافن با بردارهای پایه b_1 و b_2 و نقاط دیراک K و K- را نشان می‌دهد. شش‌ضلعی سبزرنگ ناحیه بریلوئن و لوزی صورتی ناحیه بریلوئن بسط‌داده‌شده است [۱۴۸]. ۱۲

شکل ۲-۲: بردار موقعیت نزدیک‌ترین اتم‌های همسایه δ_1، δ_2 و δ_3 و بردار موقعیت دومین اتم‌های همسایه نزدیک δ_4،δ_5 ، δ_6، δ_7، δ_8 و δ_9 برای اتم کربن نوع A را نشان می‌دهد [۱۴۹]. ۱۲

شکل ۲-۳: ساختار نواری گرافن بر حسب بردار موج با استفاده از تقریب بستگی قوی (الف):با در نظر گرفتن اثر نزدیک‌ترین اتم همسایه. (ب): با در نظر گرفتن اثر اولین و دومین اتم‌های همسایه..... ۱۴

شکل ۲-۴: قسمت حقیقی رسانندگی نوری گرافن بر حسب فرکانس. ۱۸

شکل ۲-۵: (الف) طرز قرارگیری سه صفحه متمایز گرافن که از نقطه نظر انرژی دارای پایداری باشد [۲۰۴]. (ب) طرح شماتیک حالت برنال(سمت راست) و رومبوهدرال (سمت چپ) گرافن سه‌لایه را نشان می‌دهد [۱۹۲]. ۱۹

شکل ۲-۶: حالت‌های متفاوت روی‌هم قرارگیری صفحات گرافن در گرافن (الف) سه‌لایه (ب) چهارلایه (ج) پنج‌لایه. بیضی‌های رنگی نیروی بین‌صفحه‌ای نزدیکترین اتم همسایه بین اتم نوع α یک صفحه با اتم نوع β صفحه بعد را نشان می‌دهد [۱۸۹]. ۲۰

شکل ۲-۷: ساختار نواری گرافن (الف) دولایه (ب) سه‌لایه (ج) چهارلایه (د) پنج‌لایه (هـ) شش‌لایه با آرایش برنال در نزدیکی نقاط دیراک، K..... ۲۴

شکل۲-۸: نمای طرح‌وار اثر نزدیکترین همسایه در صفحه، t و نزدیکترین همسایه بین دو صفحه مجاور، $t_\perp$، برای گرافن سه‌لایه AAA و ABA نشان می‌دهد [۲۱۲]. ۲۶

شکل۲-۹: قسمت حقیقی رسانندگی نوری گرافن ۲ تا ۶لایه بر حسب فرکانس. ۳۱

شکل۲-۱۰: پراکندگی نور با قطبش p بین دو محیط با ضرائب گذردهی $\varepsilon_0\varepsilon_i\,(i=1,2)$ که با صفحه گرافن از هم جدا شده‌اند [۱۴۹]. ۳۲

شکل۲-۱۱: ضریب عبور گرافن ۱ تا ۶لایه بر حسب فرکانس. ۳۴

شکل۳-۱: نمایش Air Mass (AM) مختلف. ۳۶

شکل۳-۲: طیف‌های خورشیدی AM1.5D، AM1.5G و AM0. ۳۶

شکل۳-۳: نمودار انرژی (الف) نیمرسانای ذاتی، (ب) نیمرسانای غیرذاتی با اتم‌های دهنده، (ج) نیمرسانای غیرذاتی با اتم‌های پذیرنده [۲۳۰]. ۳۹

شکل۳-۴: نمودار طرح‌وار از فرآیندهای مختلف جذب تابش الکترومغناطیس در جامدات و محدوده اثر آن‌ها بر حسب ضریب جذب ماده و فرکانس نور [۲۳۱]. ۴۱

شکل۳-۵: نمودار گذار الکترون بین حالت‌های تک الکترونی در نتیجه جذب نور (الف) گذار درون نواری در نوار رسانش، (ب) گذار درون نواری در نوار ظرفیت، (ج) گذار بین دو نوار، (د) گذار بین ترازهای موجود در گاف و یک نوار (هـ) گذار بین ترازهای موجود در گاف نواری [۲۳۱]. ۴۱

شکل۳-۶: نمودار انرژی فلز و نیمرسانای نوع p قبل و بعد اتصال شاتکی. E_g، φ_s و χ_S و به‌ترتیب مربوط به گاف نواری، تابع کار و الکترون‌خواهی نیمرسانا و φ_m تابع کار فلز است. CB و VB به‌ترتیب نشان‌دهنده نوار رسانش و ظرفیت هستند. ۴۳

شکل۳-۷: نمودار انرژی فلز و نیمرسانای نوع p قبل و بعد اتصال اهمی. ۴۴

شکل۳-۸: تغییر اتصال شاتکی به اتصال اهمی با افزایش چگالی اتم‌های ناخالصی در نیمرسانا. ۴۴

شکل۳-۹: منحنی ولتاژ – جریان یک سلول خورشیدی [۳۸]. ۴۵

شکل۳-۱۰: نمای طرح‌وار سطح مقطع سلول خورشیدی سد شاتکی گرافن- سیلیکون نوع n. ۴۷

شکل۳-۱۱: نمودار انرژی سلول خورشیدی سد شاتکی (الف) گرافن- سیلیکون نوع n و (ب) گرافن- سیلیکون نوع p با بایاس مستقیم و تحت تابش نور را نشان می‌دهد. φ_G $\varphi_{n\text{-}Si}$ ($\varphi_{p\text{-}Si}$)و E_{FG} / E_{Fn} (E_{Fp}) به ترتیب مربوط به تابع کار و تراز انرژی گرافن/ سیلیکون نوع n (سیلیکون نوع p) است. qV_i انرژی پتانسیل داخلی، V ولتاژ اعمال شده، E_0 تراز انرژی خلأ، χ، E_C و E_V به ترتیب مربوط به الکترون‌خواهی،تراز رسانش و تراز ظرفیت سیلیکون است. ۴۸

شکل۳-۱۲: نمای طرح‌وار بازترکیب‌های مختلف در نیمرسانا را نشان می‌دهد [۲۳۶]. ۵۲

شکل۳-۱۳: جریان نوری شبیه‌سازی شده با ضرایب جذب مختلف سیلیکون و جریان تاریک سلول خورشیدی سد شاتکی گرافن- سیلیکون نوع n را نشان می‌دهد. ۵۵

شکل۳-۱۴: J_{sc}، V_{oc}، FF و η سلول خورشیدی سد شاتکی گرافن- سیلیکون نوع n بر حسب دما نشان می‌دهد. ۵۶

شکل۳-۱۵: J_{sc}، V_{oc}، FF و η سلول خورشیدی سد شاتکی گرافن- سیلیکون نوع n بر حسب ضخامت سیلیکون نشان می‌دهد. ۵۷

شکل۳-۱۶: مقدار J_p سلول خورشیدی سد شاتکی گرافن- سیلیکون نوع n بر حسب طول موج نور فرودی به ازای t_{Si}=۵۰ nm و t_{Si}=۲۰۰ nm نشان می‌دهد. ۵۷

شکل۳-۱۷: J_{sc}، V_{oc}، FF و η سلول خورشیدی سد شاتکی گرافن- سیلیکون نوع n بر حسب چگالی اتم‌های ناخالصی در سیلیکون را نشان می‌دهد. ۵۸

شکل۳-۱۸: (الف) اندازه ناحیه بار فضایی (ب) مقدار J_d (ج) مقدار J_p سلول خورشیدی سد شاتکی گرافن- سیلیکون نوع n بر حسب حسب طول موج نور فرودی نشان می‌دهد. ۵۹

شکل۳-۱۹: J_{sc}، V_{oc}، FF و η سلول خورشیدی سد شاتکی گرافن- سیلیکون نوع n بر حسب تابع کار گرافن نشان می‌دهد. ۶۰

شکل۴-۱: نمای طرح‌وار (الف) سطح مقطع سلول خورشیدی سد شاتکی گرافن-نانوسیم سیلیکونی (ب) سطح مقطع سلول واحد آرایه‌ای از نانوسیم‌های عمودی. ۶۳

شکل۴-۲: ضریب جذب آرایه‌ای از نانوسیم‌های عمودی بر حسب طول موج نور فرودی به ازای چگالی‌های مختلف نانوسیم‌ها نشان داده شده است. ۶۹

شکل۴-۳: ضریب جذب آرایه‌ای از نانوسیم‌های عمودی بر حسب طول موج نور فرودی به ازای ضرایب پرشدگی مختلف نانوسیم‌ها نشان داده شده است. ۷۰

شکل۴-۴: ضریب جذب آرایه‌ای از نانوسیم‌های عمودی بر حسب طول موج نور فرودی به ازای دماهای مختلف نانوسیم‌ها نشان داده شده است. ۷۰

شکل۴-۵: مشخصه ولتاژ- جگالی جریان تاریک و نوری (الف) p-SiNW/G و p-Si/G (ب) n-SiNW/G و n-Si/G با گرافن ۶لایه نشان داده شده است. ۷۱

شکل۴-۶: (الف) J_{sc} و V_{oc} (ب) FF و η مربوط به p-SiNW/G بر حسب تعداد لایه‌های گرافن. ۷۳

شکل۴-۷: (الف) J_{sc} و V_{oc} (ب) FF و η مربوط به n-SiNW/G بر حسب تعداد لایه‌های گرافن. ۷۴

شکل۴-۸: (الف) J_{sc} و V_{oc} (ب) FF و η مربوط به p-SiNW/G با گرافن تک‌لایه بر حسب دما. ۷۵

شکل۴-۹: (الف) J_{sc} و V_{oc} (ب) FF و η مربوط به p-SiNW/G با گرافن تک‌لایه بر حسب چگالی اتم‌های ناخالصی در نانوسیم‌ها. ۷۶

شکل۴-۱۰: J_{sc} و η مربوط به p-SiNW/G با گرافن تک‌لایه بر حسب چگالی نانوسیم‌ها. ۷۷

شکل۴-۱۱: J_{sc} و η مربوط به p-SiNW/G با گرافن تک‌لایه بر حسب ضریب پرشدگی نانوسیم‌ها. ۷۷

شکل۴-۱۲: نمای طرح‌وار (الف) نانوسیم هم‌محور شعاعی سیلیکونی (p-i-n) (ب) سطح مقطع نانوسیم و چگونگی جدایی حامل‌های بار ناشی از برانگیختگی نوری را نشان می‌دهد [۲۶۷]. ۷۸

شکل۴-۱۳: نمای طرح‌وار (الف) ساختار G/(p-i-n)SiNWs (ب) سطح مقطع یک نانوسیم با شعاع $R=d_p+d_i+d_n$ ۷۹

شکل۴-۱۴: مقایسه نمودارهای $J-V$ شبیه‌سازی شده و داده‌های تجربی مربوط به سلول خورشیدی نانوسیمی گزارش شده در مرجع [۲۸۹]. مقادیر $S_n = S_p = ۱۰^{۴} cm/s$ و $\tau_n = \tau_p = ۱۰ns$ در محاسبه نمودار $J-V$ به‌کار رفته است. ۸۴

شکل۴-۱۵: مقادیر J_{sc}، V_{oc} و η سلول خورشیدی G/(p-i-n)SiNWs بر حسب سرعت بازترکیب سطحی..... ۸۵

شکل۴-۱۶: مقادیر J_{sc} و η سلول خورشیدی G/(p-i-n)SiNWs بر حسب تعداد لایه‌های گرافن..... ۸۶

شکل۴-۱۷: مقادیر J_{sc} و η سلول خورشیدی G/(p-i-n)SiNWs بر حسب طول نانوسیم‌ها..... ۸۶

شکل۴-۱۸: مقادیر J_{sc}، V_{oc} و η سلول خورشیدی G/(p-i-n)SiNWs بر حسب چگالی ناخالصی‌های هسته نوعp و پوسته نوعn ۸۷

شکل۴-۱۹: (الف) مقادیر J_{sc} و η سلول خورشیدی G/(p-i-n)SiNWs بر حسب چگالی نانوسیم‌ها (ب) ضریب جذب SiNWs بر حسب طول موج برای سه مقدار متفاوت N_{wr}. ۸۸

شکل۴-۲۰: (الف) مقادیر J_{sc}، FF و η سلول خورشیدی G/(p-i-n)SiNWs بر حسب ضریب پرشدگی نانوسیم‌ها (ب) ضریب جذب SiNWs بر حسب طول موج برای سه مقدار متفاوت F_{wr}..... ۸۹

شکل۴-۲۱: (الف) مقادیر J_{sc}، V_{oc} و η سلول خورشیدی G/(p-i-n)SiNWs بر حسب دما (ب) ضریب جذب SiNWs بر حسب طول موج در چهار دمای متفاوت..... ۹۰

شکل۴-۲۲: نمای طرح‌وار سطح مقطع سلول خورشیدی سد شاتکی گرافن و $In_xGa_{1-x}N$ نوع p..... ۹۲

شکل۴-۲۳: میزان عبور نور از فصل مشترک گرافن و $p-In_xGa_{1-x}N$ بر حسب ضرائب مولی متفاوت ایندیوم در طول موج‌های مختلف را نشان می‌دهد. ۹۴

شکل۴-۲۴: تحرک‌پذیری الکترون در $In_xGa_{1-x}N$ نوع p بر حسب ضرائب مولی متفاوت ایندیوم (الف) در دماهای متفاوت (ب) در غلظتهای متفاوت ناخالصی نوع p را نشان می‌دهد..... ۹۵

شکل۴-۲۵: مشخصه ولتاژ-چگالی جریان تاریک و نوری سلول‌های خورشیدی G/p-$In_{0.05}Ga_{0.95}N$، G/p-$In_{0.3}Ga_{0.7}N$ و G/p-Si..... ۹۶

شکل۴-۲۶: مقادیر J_{sc}، V_{oc} ، FF و η مربوط به G/p-$In_xGa_{1-x}N$ بر حسب ضرائب مولی متفاوت ایندیوم. ۹۷

شکل۴-۲۷: جریان اشباع معکوس G/p-$In_xGa_{1-x}N$ بر حسب ضرائب مولی متفاوت ایندیوم. ۹۷

شکل۴-۲۸: مقادیر J_{sc}، V_{oc} ، FF و η مربوط به G/p-$In_xGa_{1-x}N$ بر حسب دما. ۹۸

شکل۴-۲۹: مقادیر J_{sc}، V_{oc} ، FF و η مربوط به G/p-$In_xGa_{1-x}N$ بر حسب ضخامت p-$In_xGa_{1-x}N$..... ۹۹

شکل۴-۳۰: مقادیر J_{sc}، V_{oc} ، FF و η مربوط به G/p-$In_xGa_{1-x}N$ بر حسب چگالی اتم‌های ناخالصی p-$In_xGa_{1-x}N$ ۱۰۰

شکل۴-۳۱: مقادیر J_{sc}، V_{oc} ، FF و η مربوط به G/p-$In_xGa_{1-x}N$ بر حسب تابع کار گرافن. ۱۰۰

شکل۴-۳۲: نمای طرح‌وار نمودار انرژی سلول خورشیدی سد شاتکی گرافن و p-$In_xGa_{1-x}N$ با تابع کار گرافن (φ_G) (الف) کوچکتر (ب) بزرگتر. ۱۰۱

فهرست جدول‌ها

جدول ۱-۱: مشخصات گرافن..... ۷

جدول ۳-۱: پارامترهای مربوط به سیلیکون. ۵۳

جدول ۳-۲: پارامترهای تجربی و شبیه‌سازی شده سلول خورشیدی سد شاتکی گرافن- سیلیکون نوع n. ۵۶

جدول ۴-۱: پارامترهای شبیه‌سازی شده سلول‌های خورشیدی p-Si/G، p-SiNW/G، n-Si/G و n-SiNW/G.....۷۲

جدول ۴-۲: پارامترهای مربوط به $In_xGa_{1-x}N$. ۹۲

جدول ۴-۳: پارامترهای شبیه‌سازی شده سلول‌های خورشیدی $p\text{-}In_{0.05}Ga_{0.95}N/G$، $p\text{-}In_{0.3}Ga_{0.7}N/G$، p-Si/G.....۹۶

فصل اول: مقدمه

رشد مصرف جهانی انرژی در قرن اخیر و همراه با آن افزایش انتشار گازهای گلخانه‌ای، با آلودگی بیش از پیش محیط زیست و خسارات جبران ناپذیر برای منابع حیاتی همراه بوده است. به منظور کاهش اتکاء جهانی به منابع طبیعی پایان‌پذیر و سوخت‌های مخرب محیط زیست، تلاش‌های علمی فراوانی برای کاهش هزینه‌های تولید انرژی از منابع تجدیدپذیر صورت گرفته است. از جمله، می‌توان تلاش برای تولید انرژی الکتریکی با استفاده از خورشید که یکی از منابع تأمین انرژی رایگان، پاک و عاری از اثرات مخرب زیست محیطی است، را نام برد. بسیاری از نیمرساناها می‌توانند الکتریسیته را از نور خورشید تولید کنند. سلول‌های فوتوولتایی، که اغلب سلول‌های خورشیدی نامیده می‌شوند، از جمله قطعات حالت جامد هستند که بر اساس تبدیل انرژی خورشید به الکتریسیته، کار می‌کنند [۱]. از مزایای این روش تبدیل انرژی این است که، مواد غیر دوستدار محیط زیست تولید نمی‌کند و منبع نامحدودی از انرژی در اختیار ما قرار می‌دهد. متداول‌ترین سلول‌های خورشیدی توسعه یافته، از سیلیکون ساخته می‌شوند. از آنجا که سیلیکون ۲۷/۷٪ پوسته زمین را تشکیل می‌دهد، به نظر می‌رسد سلول‌های خورشیدی سیلیکونی به طور بالقوه ارزان باشند، اما تبدیل سیلیکون به سلول خورشیدی، فرآیندی پرهزینه است که به الکتریسیته قابل توجهی نیاز دارد.

۱-۱- سلول‌های خورشیدی

مواد گوناگونی تاکنون در ساخت سلول‌های خورشیدی استفاده شده‌اند که بازده و هزینه‌های ساخت متفاوتی دارند. در واقع این سلول‌ها باید طوری طراحی شوند که بتوانند طول موج‌های نور خورشید را که به

سطح زمین می‌رسد با بازده بالا به انرژی مفید تبدیل کنند. موادی که برای ساخت سلول های خورشیدی استفاده می‌شوند در چهار نسل قرار می‌گیرند:

۱-۱-۱- سلول‌های خورشیدی نسل اول

سلول‌های خورشیدی نسل اول پیوند p-n از ویفرهای سیلیکونی تک‌بلوری[1] هستند. بالاترین میزان بازدهی این نوع سلول‌ها ۲۴/۴٪ گزارش شده‌است [۲] که نزدیک به بازدهی تئوری محاسبه شده، ۳۱٪، توسط حد شاکلی ــ کوئیزر[2] برای پیوند p-n است [۳]. البته نوع تجاری سلول‌های خورشیدی نسل اول دارای بازدهی ۱۸-۱۵٪ است [۴].

با وجود این‌که، این نوع سلول‌ها دارای دامنه طیف جذبی گسترده (~۱/۱۲ eV) هستند؛ اما، بیشترین مقدار فوتون‌های پرانرژی در انتهای طول موج آبی و بنفش به صورت حرارت هدر می‌رود. از دیگر معایب سلول‌های خورشیدی نسل اول این است که ساخت آنها بسیار پرهزینه است.

۱-۱-۲- سلول‌های خورشیدی نسل دوم

به منظور پائین آوردن هزینه‌های تولید و آسان کردن فرآیند ساخت، نسل دوم سلول‌های خورشیدی که عمدتاً مربوط به سلول‌های خورشیدی لایه نازک می‌شود [۵]، گسترش یافتند. از سلول‌های خورشیدی این نسل می‌توان به سلول‌های خورشیدی آلیاژهای مس ایندیوم گالیوم دی‌سلناید[3] (CIGS) با بازدهی بیشتر از ۷٪ [۶]، کادمیوم تلوراید[4] (CdTe) با بازدهی بیشتر از ۱۰٪ [۷]، سیلیکون بی‌شکل[5] (a-Si) با بازدهی ۰/۳ ± ۹/۱٪ [۸]، و سیلیکون چندبلوری[6] (poly-Si) با بازدهی ۹/۵٪ [۹] اشاره کرد.

از مزایای این سلول‌ها هزینه پائین تولید به دلیل نیاز به مواد کمتر، انعطاف‌پذیری و تأثیر آن در تطبیق پنل‌ها روی سطوح منحنی‌شکل یا مواد انعطاف‌پذیر و سبک و همچنین قابلیت لوله‌شدن این سلول‌ها است. البته، بازدهی پائین‌تر نسبت به سلول‌های خورشیدی نسل اول، عدم پایداری سیلیکون بی‌شکل و وجود نقص‌های ذاتی به دلیل کیفیت پائین‌تر روش کنترل از معایب این نسل از سلول‌ها به شمار می‌رود.

۱-۱-۳- سلول‌های خورشیدی نسل سوم

به منظور دستیابی به سلول‌های خورشیدی با بازدهی قابل‌قبول و در عین حال هزینه تولید پائین‌تر نسبت به سلول‌های خورشیدی نسل اول و دوم، سلول‌های خورشیدی نسل سوم با ساختارهای متفاوت روی کار آمدند.

---

[1] monocrystalline silicon wafer
[2] Shockley-Queisser limit
[3] Copper Indium Gallium Selenide $Cu(In_xGa_{1-x})Se_2$
[4] Cadmium Telluride
[5] amorphous silicon
[6] polycrystalline silicon

مهم‌ترین این ساختارها عبارتند از:

۱-۱-۳-۱- سلول‌های فوتوالکتروشیمیایی[۷]

تبدیل انرژی نور به الکتریسیته در این سلول‌ها به‌وسیله دو الکترود (آند و کاتد) انجام می‌شود [۱۰]. تیتانیا (TiO_2) ماده اصلی مورد کاربرد در این سلول‌ها است. سه نوع چیدمان برای ساختار این سلول‌ها وجود دارد[۱۱]:

- فوتوآند نیمرسانای نوع n و کاتد فلزی
- فوتوآند نیمرسانای نوع n و فوتوکاتد نیمرسانای نوعp
- آند فلزی و فوتوکاتد نیمرسانای نوع p

تخریب الکترودها توسط الکترولیت سلول‌های فوتوالکتروشیمیایی از معایب این نوع سلول‌ها به شمار می‌رود.

۱-۱-۳-۲- سلول‌های خورشیدی مبتنی بر مواد آلی

سلول‌های خورشیدی ساخته شده از مواد آلی در مقایسه با همتایان دیگر خود بازدهی بسیار کمتر و تخریب‌پذیری بیشتر دارند. همچنین کارآیی آن‌ها در طول زمان به دلیل اثرات محیطی کاهش می‌یابد. اما به دلیل هزینه ساخت پایین، فرآیند تولید آسان و انعطاف‌پذیری آنها، برای مصارف غیرصنعتی مناسب هستند. سلول‌های خورشیدی مبتنی بر مواد آلی شامل سلول‌های خورشیدی پلیمری [۱۲-۱۷]، سلول‌های خورشیدی حساس به رنگ[۸] (DSSC) [۱۸-۲۱] و سلول‌های خورشیدی مبتنی بر کریستال‌های مایع [۲۲, ۲۳] هستند.

۱-۱-۳-۳- سلول‌های خورشیدی مبتنی بر مواد کریستالی نانوساختار (نانوکریستال)

یک عامل محدود کننده بازدهی در سلول‌های خورشیدی دارای گاف نواری معین، این است که فوتون جذب شده با انرژی بیشتر از گاف نواری نیمرسانا در اثر اندرکنش الکترون – فونون به صورت گرما تلف می‌شود و حامل‌ها در لبه گاف نواری، به اصطلاح به آرامش می‌رسند.

در سال‌های اخیر روش‌هایی برای کاهش این تلفات با استفاده از ساختارهای کوانتومی از جمله چاه‌های کوانتومی[۹] [۲۴, ۲۵] و نقاط کوانتومی[۱۰] [۲۶-۲۸] ارائه شده است.

در این ساختارها هنگامی که حامل‌ها در نیمرسانا به وسیله سدهای پتانسیل به نواحی خاصی که کوچکتر

---

[7] Photoelectrochemical cells
[8] dye-sensitized solar cells
[9] quantum wells
[10] quantum dots

یا قابل مقایسه با طول موج دوبروی آنها یا شعاع بوهر اکسایتون‌ها در نیمرسانای حجیم است محدود می‌شوند، دینامیک آرامش کاملاً متفاوت خواهد بود

۱-۱-۳-۴- سلول‌های خورشیدی پشت‌سرهم و یا چند رنگ[11]

یک روش برای کاهش اتلاف انرژی ناشی از برگشت حامل‌ها به سطح انرژی پائین، اتصال نیمرساناهای مختلف با گاف‌های نواری متفاوت است که ترتیب قرارگیری نیمرساناها بر اساس گاف نواری آنها، از بزرگ به کوچک است به‌طوری‌که نیمرسانا با بیشترین گاف انرژی در معرض تابش قرار می‌گیرد [۲۹]. البته محدودیت‌هایی نیز در اتصال تعداد لایه‌ها وجود دارد. بالاترین بازده مشاهده شده برای این نوع اتصالات سلول‌های فوتوولتائیک، اتصال سه‌تایی است [۳۰].

۱-۱-۴- سلول‌های خورشیدی نسل چهارم

به منظور بهبود کارآیی سلول‌های خورشیدی نسل سوم در کنار هزینه پایین تولید این نوع سلول‌ها، سلول‌های خورشیدی نسل چهارم که هیبریدی از لایه‌های نازک پلیمری و نانوساختارهای معدنی جدید هستند [۳۱]، تولید شده‌اند. در واقع، سلول‌های خورشیدی نسل چهارم ترکیبی از قیمت پائین و انعطاف‌پذیری لایه‌های نازک پلیمری و پایداری و طول عمر بالای ناشی از نانوساختارها را به ارمغان آورده‌اند. نانوساختارها همچنین باعث جذب بیشتر نور خورشید ودرنتیجه افزایش حامل‌های بار و بازدهی در این سلول‌های خورشیدی می‌شوند. نانوساختارهای استفاده شده بیشتر شامل نانولوله‌های کربنی [۳۲]، نانوذرات فلزی [۳۳, ۳۴]، نقاط کوانتومی [۳۵-۳۸]، و نانوسیم‌های نقره [۳۹] می‌شوند.

دسته دوم سلول‌های خورشیدی نسل چهارم، سلول‌های خورشیدی مبتنی بر مواد آلی هستند که اکسیدهای فلزی با گاف نواری عریض مانند تیتانیوم اکسید[12] (TiO_2 یا TiO_x)[۴۰, ۴۱] ، روی اکسید[13] (ZnO) [۴۲-۴۴]، وانادیوم اکسید[14] (V_2O_5) [۴۵-۴۸] و مولیبدینیوم اکسید[15] (MoO_3 یا MoO_x) [۴۹-۵۲] در آنها به‌کار رفته‌است. تراز فرمی در این اکسیدهای فلزی به گونه‌ای است که می‌توانند منبع خوبی برای الکترون‌ها یا حفره‌ها باشند. همچنین رطوبت‌پذیری این مواد زیاد است درنتیجه باعث بالا بردن عمر قطعه می‌شوند [۵۳].

دسته سوم سلول‌های خورشیدی نسل چهارم، سلول‌های خورشیدی هستند که در آنها موادی با ساختار دوبعدی مانند تک‌لایه مولیبدینیوم دی‌سولفاید[16] (MoS_2) [۵۴-۵۶]، تک‌لایه مولیبدینیوم دی‌سلناید [17]

[11] tandem or multicolor solar cells
[12] titanium oxide
[13] zinc oxide
[14] Vanadium oxide
[15] molybdenum oxide
[16] Molybdenum disulfide
[17] Molybdenum diselenide

($MoSe_2$) [۵۷-۵۹]، تک‌لایه تنگستن دی‌سولفاید[۱۸] (WS_2) [۶۰-۶۲] و گرافن [۶۳] استفاده شده است. هر کدام از این ساختارهای دوبعدی خصوصیات منحصربه‌فرد خود را دارند که بنا به اقتضای این پایان‌نامه که در مورد سلول‌های خورشیدی مبتنی بر گرافن است، بحث مختصری در مورد گرافن در ذیل آورده شده‌است.

۱-۲- گرافن

اصطلاح گرافن برای اولین بار در سال ۱۹۸۶ معرفی شد که از ترکیب کلمه‌ی گرافیت و یک پسوند (ان) که به هیدروکربن‌های آروماتیک چندحلقه‌ای[۱۹] اشاره دارد ایجاد شد [۶۴]. هر چند که این مفهوم به طور تئوری نخستین بار در سال ۱۹۴۷ توسط فیلیپ والاس به عنوان یک نقطه شروع برای درک خواص الکترونیکی گرافیت سه‌بعدی مطرح شد[۶۵]، پس از آن زمان تلاش‌های زیادی برای ساخت آن صورت گرفت اما قضیه‌ای به نام قضیه مرمین-واگنر در مکانیک آماری و نظریه میدان‌های کوانتومی (بر اساس علم فیزیک) وجود داشت که ساخت یک ماده ی‌دوبعدی را غیرممکن و چنین ماده‌ای را غیرپایدار و صرفا یک ماده نظری می‌دانست [۶۶]. تا آنکه در سال ۲۰۰۴، یک گروه از فیزیکدانان از دانشگاه منچستر بریتانیا با سرپرستی آندره گیم و کنستانتین نووسلف تغییری در مورد فرضیه‌ی بی‌ثباتی گرافن ایجاد کردند و نشان دادند که قضیه مرمین-واگنر نمی‌تواند کاملاً درست باشد. آنها یک روش متفاوت برای به‌دست آوردن گرافن ارائه دادند که منجر به تحولی عظیم در این زمینه شدند [۶۷]. آنها با استفاده از چسب نواری یک تک‌لایه گرافن (یک تک‌لایه از اتمهای کربن) را از گرافیت با روش ورقه کردن میکرومکانیکی[۲۰] جدا کردند و سپس آن را به یک بستر سیلیکونی که با ورقه نازکی از SiO_2 پوشیده شده بود منتقل کردند. جایزه نوبل فیزیک ۲۰۱۰ نیز به خاطر ساخت ماده‌ای دوبعدی به این دو دانشمند تعلق گرفت.

۱-۲-۱- خصوصیات گرافن

گرافن، صفحه‌ای دو بعدی (۲D) از اتم‌های کربن در یک پیکربندی شش‌ضلعی (لانه زنبوری) است که اتم‌ها با هیبرید SP^2 به هم متصل شده‌اند [۶۶, ۶۸, ۶۹]. در یک صفحه گرافن، هر اتم کربن با ۳ اتم کربن دیگر سه پیوند قوی کووالانسی (σ) داده است. و زوایای بین آن‌ها با یکدیگر مساوی و برابر با ۱۲۰° است. البته این ایده‌آل‌ترین حالت یک صفحه گرافن است. در برخی مواقع، شکل این صفحه به گونه‌ای تغییر می‌کند که در آن پنج‌ضلعی‌ها و هفت‌ضلعی‌هایی نیز ایجاد می‌شود. اتم‌های کربن همچنین دارای یک اوربیتال عمود بر صفحه هستند که تشکیل پیوندهای π خارج از صفحه را می‌دهند. این پیوندها می‌توانند برهمکنش بین لایه‌های

[18] Molybdenum disulfide
[19] Polycyclic aromatic hydrocarbons
[20] Scotch tape technique

مختلف گرافن را در گرافن چندلایه کنترل کنند [۷۰]. طول پیوند کربن ـ کربن در گرافن در حدود ۰/۱۴۲ نانومتر است [۲۶،۲۷]. غیر از گرافن تک‌لایه و دولایه، لایه‌های گرافنی از ۳ تا ۱۰ لایه را به نام گرافن کم‌لایه[۲۱] و بین ۱۰ تا ۳۰ لایه را به نام گرافن چند لایه، نانو بلورهای نازک گرافیتی و یا گرافن ضخیم[۲۲] می‌نامند. گرافن تک‌لایه ساختار زیربنایی برای ساخت ساختارهای کربنی است که اگر بر روی هم قرار بگیرند گرافیت سه‌بعدی حجیم را تشکیل می‌دهند. برهم‌کنش بین این صفحات از نوع واندروالسی با فاصله‌ی بین صفحه‌ای ۰/۳۳۵ نانومتر می‌باشد. اگر تک‌لایه گرافنی حول محوری لوله شود نانو لوله کربنی شبه یک‌بعدی و اگر به صورت کروی پیچانده شود فولرین شبه صفربعدی را شکل می‌دهد [۷۱, ۷۲].

تجزیه و تحلیل ساختار باند گرافن، نشان می‌دهد که این ماده یک شبه فلز یا یک نیمرسانا با گاف نواری صفر است و به طور فزاینده‌ای با افزایش تعداد لایه‌ها فلزی می شود [۷۳].

۱-۲-۲- روش‌های تولید گرافن

تاکنون روش‌های متعدد شیمیایی و فیزیکی برای تولید انواع مختلف گرافن (از تک‌لایه تا کم‌لایه و چندلایه) مطرح شده است که به برخی از این روش‌ها در ذیل اشاره شده است:

- لایه برداری مکانیکی با استفاده از چسب نواری [۶۷]
- رسوب دهی بخار شیمیایی[۲۳] و رشد همبافته[۲۴] [۷۴, ۷۵]
- رشد همبافته بر روی بستر عایق الکتریکی [۷۶, ۷۷]
- سنتز شیمیایی [۷۸]
- روش الکتروشیمیایی [۷۹, ۸۰]
- تبدیل نانوالماس [۸۱, ۸۲]

۱-۲-۳- برخی مشخصه‌ها و کاربردهای گرافن

گرافن بسیار سبک و انعطاف‌پذیر است و پیش‌بینی می‌شود که این ماده در آینده انقلابی را در صنعت الکترونیک پدید آورد و جایگزین سیلیکون در محصولات الکترونیکی محسوب شود. گرافن دارای ویژگی‌های منحصربه‌فردی است که آن‌را برای کاربردهای الکترونیک مطلوب می‌سازد. از آن جمله می‌توان به قابلیت تحرک‌پذیری بسیار بالای حاملهای بار [۸۳, ۸۴]، ترابرد بالیستیک [۸۵-۸۷]، هدایت حرارتی[۸۸-۹۱] و الکتریکی بالا [۸۴, ۹۲] اشاره کرد. برخی مشخصه‌های مهم گرافن در جدول ۱-۱ جمع‌آوری شده است.

---

[21] Few Layer Graphene (FLG)
[22] Thick Graphene
[23] Chemical Vapor Deposition (CVD)
[24] Epitaxial growth