

## عنوان مقاله: بررسی سلول‌های خورشیدی پروسکایتی و اثر هالوژنهای کلر و برم بر آنها

مجتبی محمدی<sup>۱</sup>

EMAIL:sorena1377@aut.ac.ir

### یافته‌ها

وجود کلر در پروسکایت باعث افزایش یکنواختی لایه‌ی آن می‌شود و منجر به افزایش طول انتشار حاملها از حدود ۱۰۰۰۰ نانومتر به بیش از ۱ میکرومتر می‌شود. گزارشات نشان می‌دهند که کلر به طور عمده حمل و نقل حاملها در رابطهای پروسکایت کریستالهای پروسکایت همچون طول انتشار الکترون  $\text{MAPbI}_{3-x}\text{Cl}_x$  تقریباً ۱۰ برابر بیشتر از  $\text{MAPbI}_3$  است و طول عمر حاملها تا ۱ میکروثانیه افزایش یافته است. در منطقه‌ی با غلظت کلر بالا نوترکیبی کمتری مشاهده شده است. بنابراین، اثر غلظت بالای کلر بر روی مورفولوژیها و خصوصیات الکترونیکی پروسکایت را نمیتوان نادیده گرفت. همچنین، اینکه آیا کلر عمدتاً به عنوان یک جایگزین برای ید حضور داشته باشد، درون و به جای ید، یا در سطح کریستال، هنوز نامشخص است و این ارزش تحقیق بیشتر دارد. نشان داده شده است که با افزودن برم به  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  از ۰ به ۱، در  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_x\text{Br}_{1-x})_3$  بهترین حالت با راندمان و ثبات مناسب برای  $(\text{Br} = 0.2)$  حاصل میشود. همچنین، نتایج شبیه سازی نشان میدهد که افزایش چگالی جریان قابل توجهی تا ۲۲ درصد توسط یک آرایه‌ی بهینه از نانوذرات پلاتین حاصل میشود که قابل توجه است. این طرح می‌تواند مقدمه‌ای برای دستیابی به سلول‌های خورشیدی با بازده تبدیل انرژی بالاتر باشد.

### بحث و نتیجه‌گیری

افزودن هالوژن‌ها در پروسکایت باندگپ را جابجا خواهد کرد و باعث افزایش بازده سلولهای خورشیدی میشود. البته افزایش باند گپ برای ترکیبات کلر و برم بیشتر و قابل توجه تر از ید است. همچنین پایداری سلولهای خورشیدی پروسکایتی عموماً با افزایش هالوژن‌ها افزایش پیدا می‌کند. استفاده از هالوژن‌ها خواص نوری پروسکایت را بهبود می‌بخشد. بیشتر تحلیل‌ها در این زمینه را باید در نقش غلظت‌های متفاوت هالوژن‌ها معطوف کرد. یک پروسکایت ممکن است شامل چند ترکیب هالوژن‌دار باشد. لذا باید توجه کرد که بهترین ترکیبات چه ترکیباتی هستند. عموماً می‌توان گفت که کلر تاثیر بیشتری در سلول‌های خورشیدی دارد از آنجا که باندگپ را بیشتر جابجا کرده و در خواص نوری عموماً بیشتر از برم و ید تاثیر گذارتر می‌باشد. همچنین شکل امورف آن نیز تاثیرات زیادی بر ساختار کریستالی و دانه‌ها دارد. و باعث می‌شود طیف وسیعی از مشکلات سلول خورشیدی را تعدیل کند. همچنین به جز ترکیبات کامل برم و کلر دیگر ترکیبات تقریباً ضریب جذب یکسانی دارند لذا ترکیبات که شامل فقط برم و ید هستند برای استفاده توصیه نمی‌شوند. در انتها نیز باید ذکر کرد تغییرات در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی در بخش‌های تاثیرات زیاد و متنوعی را بر پارامترهایی چون چگالی جریان و ضریب جذب و بازده و ... می‌گذارد.

### مراجع

- [1] Ling Jin Kiong and Jose Rajan, Effect of Halogen Substitution on the Absorption and Emission Profile of Organometallic Perovskites, MATEC Web Conf. Volume 131, 2017.
- [2] Mohammad Ali Mohebbpour, Mohaddeseh Saffari, Hamid Rahimpour Soleimani, Meysam Bagheri Tagani, High performance of mixed halide perovskite solar cells: Role of halogen atom and plasmonic nanoparticles on the ideal current density of cell, Physics E: Low-dimensional Systems and Nanostructures Volume 97, March 2018.
- [3] César Tablero Crespo, The effect of the halide anion on the optical properties of lead halide perovskites, Solar Energy Materials and Solar Cells Volume 195, 15 June 2019, Pages 269-273.
- [4] Lin Fan, Yi Ding, Jingshan Luo, Biao Shi, Xin Yao, Changchun Wei, Dekun Zhang, Guangcai Wang, Yun Sheng, Yifeng Chen, Anders Hagfeldt, Ying Zhao and Xiaodan Zhang, Elucidating the role of chlorine in perovskite solar cells, Journal of Materials Chemistry A 2017.
- [5] Shiqiang LUO, Perovskite Solar Cells: The Role of Halogen, City University of Hong Kong, 3 Oct 2016.

### مواد و روش‌ها

اگرچه سلول‌های خورشیدی پروسکایت راندمان بالا، انعطاف پذیری بالا و هزینه‌ی تولید پایینی دارند، اما از پایداری مطلوبی برخوردار نیستند و یک مشکل ناپایداری برای آنها وجود دارد. یکی از راه‌های بهبود پایداری، ترکیب آن با سایر اتم‌ها است. افزودن قلع به سرب در ترکیب  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  یا ترکیب با هالوژن‌های برم و کلر می‌تواند راه مؤثری در افزایش میزان پایداری باشد. اگر چه دید مناسبی بر عوامل مؤثر بر پایداری سلولهای خورشیدی پروسکایت بدست آمده است اما هنوز راههای بهبود پایداری بدون تأثیرگذاری بر عملکرد PSC مشخص نشده است. نتایج محاسبات DFT نشان می‌دهد که افزودن هالوژن برم به ترکیب  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  باعث جابجایی باندهای انرژی می‌شود که پیامد آن افزایش باندگپ است. ترکیبات با  $(X = \text{I})$  از پهنای باند کوچکتر و انتشار نور در طول موجهای طولانی‌تر برخوردار هستند در حالی که برمیدها  $(X = \text{Br})$  در طول موج کوتاه‌تر از پهنای باند و درخشندگی بالاتری برخوردار هستند.

اصلاح آنیون هالید فاصله‌ی پیوند و یا زاویه‌ی  $(X-\text{Pb}-X)$  را تغییر می‌دهد. این یکی از روشهای تنظیم انرژی پهنای باند است. نتایج DFT نشان می‌دهد که با افزایش نسبت برم در ترکیب  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ ، گاف انرژی افزایش می‌یابد و ثابت‌های شبکه کاهش می‌یابد.

همچنین، در بررسی‌های انجام شده روی ترکیبات ترکیب شده با کلر  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ ، همان نتایج به دست آمده است، یعنی با افزایش کلر در پروسکایت شاهد افزایش پهنای باند و کاهش ثابت‌های شبکه هستیم. می‌دانیم که شعاع یونی کلر و برم از ید کمتر است، اما کلر نسبت به برم کوچکتر است و اختلاف بیشتری با ید دارد. بنابراین، تغییرات در ترکیبات مخلوط هالید با  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$  بیشتر است. به عبارت دیگر، افزایش باند و کاهش ثابتهای شبکه در ترکیبات  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$  مشهودتر است. همچنین وجود کلر به طور قابل توجهی تبلور و خاصیت انتقال بار پروسکایت را بهبود می‌بخشد.

با ورود آنیون کلر به ماده پروسکایت  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  می‌توان به طور قابل ملاحظه‌ای خواص مواد و همچنین عملکرد سلول خورشیدی را بهبود بخشید. علاوه بر این، تشکیل یک داربست متخلخل  $\text{PbI}_2$  در فیلم پیش ساز نقش اصلی در تحقق فیلم پروسکایت با کیفیت بالا را بازی می‌کند؛ پیشنهاد شده است که باقی مانده آمورف  $\text{PbCl}_2$  می‌تواند به طور مؤثری نقایص در فیلم پروسکایت را منفعل کند و خواص الکتریکی فیلم و عملکرد سلول خورشیدی را به طرز چشمگیری بهبود بخشد. علاوه بر این، توسط Snaith و همکاران ذکر شده است که مقدار کمی از کلر می‌تواند به طرز چشمگیری باعث بهبود خواص الکتریکی مواد پروسکایتی شود. نتایج محاسبات DFT نشان میدهد که افزودن هالوژن برم به ترکیب  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  نیز باعث جابجایی باندهای انرژی میشود که پیامد آن افزایش باند است. علاوه بر این، اثر افزایش برم در این ساختار را میتوان به عنوان کاهش در ثابت شبکه، ضریب شکست، تابش و جذب مشاهده کرد.

### چکیده

سلول‌های خورشیدی پروسکایتی جانشین‌های خوبی برای سلول‌های خورشیدی فعلی هستند و راندمان آنها تا ۲۲ درصد نیز رسیده است. افزودن هالوژن‌ها به پروسکایت باعث افزایش پایداری سلول خورشیدی خواهد شد. همچنین افزایش کلر در فیلم باعث بهبود خواص الکتریکی فیلم خواهد شد و افزودن آن به شکل آمورف نیز باعث کاهش نقایص فیلم خواهد شد. همچنین وجود کلر به طور قابل توجهی تبلور و خاصیت انتقال بار پروسکایت را بهبود می‌بخشد و باعث افزایش یکنواختی لایه‌ی آن می‌شود. همچنین افزایش برم در سلولهای پروسکایتی منجر به افزایش راندمان سلول خورشیدی خواهد شد. در این پژوهش ابتدا سلول‌های خورشیدی پروسکایتی معرفی و سپس تاثیرات هالوژن‌های کلر و برم بر روی سلول‌های خورشیدی از جمله جابجایی گاف انرژی در سلول خورشیدی، افزایش بازده سلول خورشیدی، بهبود کارایی و افزایش پایداری سلول خورشیدی مورد بررسی قرار گرفته است.

### مقدمه

سلول‌های پروسکایتی PSC به عنوان کاندیدای مناسبی جهت جایگزینی سلولهای خورشیدی سیلیکونی غیر اقتصادی SSC که امروزه در صنعت فتوولتائیک انحصار دارند، معرفی شده است بزرگترین امتیاز PSC پایداری آن است.

افزایش کارایی سلولهای خورشیدی پروسکایتی در بازه‌ی زمانی کوتاه در سالهای اخیر مورد توجه محققان و دانشمندان صنعت فتوولتائیک قرار گرفته و به نظر می‌رسد ماده‌ای فوق العاده و کاربردی برای مطالعه باشد. افزایش راندمان این ماده از حدود ۳/۸ درصد در سال ۲۰۰۹ به ۲۲/۱ درصد در سال ۲۰۱۶ گزارش شده است که در بین نسل‌های دیگر سلولهای خورشیدی بی نظیر است و پتانسیل بالایی را برای کاربردهای نوری و الکترونیکی از خود نشان می‌دهد. محققان اثر پروسکایت را بر خصوصیات الکترونیکی و ساختاری ترکیبات مطالعه کرده اند و دریافته‌اند که سازه‌هایی با تقارن بیشتر مانند فاز مکعب مطلوبتر هستند. پهنای باند پروسکایت در مراحل و ساختارهای مختلف یکسان نیست. ساختار کلی پروسکایت  $\text{ABX}_3$  است که کاتیون A نقش اساسی و تعیین کننده‌ای بر روی خواص پروسکایت‌ها و کارایی سلولهای خورشیدی پروسکایت دارد. همچنین A می‌تواند یک فلز یکنواخت یا یک مولکول آلی باشد. یکی از کارآمدترین سلولهای خورشیدی مربوط به یدید سرب متیل آمونیوم  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  است که در آن A یک مولکول آلی است.

از ویژگیهای منحصر به فرد پروسکایت‌ها که مورد توجه محققان قرار گرفته است عبارت‌اند از پهنای باند مناسب در حدود ۱/۵ الکترون ولت و جذب قابل توجه نور، جداسازی حاملها در پروسکایت و توانایی انتقال حاملهای بار در غیاب HTL، طول انتشار اگزیتونیک بلند و تحرک زیاد حاملهای بار است. یکی دیگر از ویژگی‌های این ماده، خواص حرارتی مناسب از جمله هدایت حرارتی بسیار کم است. پروسکایت‌ها همچنین برای ساخت وسایل الکترونیکی مانند دیودها به کار می‌رود.