

Study Gallium Arsenide Solar Cell based on SCAPS software

Shahin Atashbar Tehrani^{1,2*}, Nader Morshedian³

¹ School of Particles and Accelerators, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM), P. O. Box 19395-5531, Tehran, Iran

² Department of Physics, Faculty of Nano and Bio Science and Technology, Persian Gulf University, P. O. Box: 75169, Bushehr, Iran

³ Plasma and Nuclear Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran, Iran

Received: 11.05.2026 Final revised: 15.06.2026 Accepted: 01.07.2026 Published On-Line: 12.07.2026

Doi: [10.22055/jrmb.2026.20763](https://doi.org/10.22055/jrmb.2026.20763)

Abstract

Gallium arsenide (GaAs) solar cells are among the most widely used technologies for converting solar energy into electricity. These cells are made from compound semiconductor materials that generate an electric current by absorbing photons from sunlight. Gallium arsenide solar cells are generally divided into two main categories: single-crystalline and polycrystalline, each having its own advantages and disadvantages. The efficiency of these cells typically ranges from about 27% to 40%. Despite their relatively high cost, their important performance under very low light conditions, as well as their applications in military and space industries, has led to their extensive use in the solar energy sector. Recent research has focused on improving the efficiency and reducing the production costs of these cells. In this paper, the simulation of a GaAs p-i-n solar cell has been carried out using the SCAPS software. Input parameters were provided to the program, and important physical parameters such as the gain coefficient were obtained. The findings show that if this solar cell is produced experimentally, it could achieve significantly higher efficiency compared to the cells.

Keywords: Solar cell, SCAPS software, efficiency of solar cell

*Corresponding Author: atashbar@iran.ir

بررسی سلول خورشیدی گالیم‌آرسنید بر مبنای برنامه SCAPS

شاهین آتشبار تهرانی^{۱،*}، نادر مرشدیان^۳

^۱ پژوهشگاه دانش‌های بنیادی پژوهشکده ذرات و شتابگرها، تهران، ایران

^۲ گروه فیزیک دانشکده علوم و فناوری نانو و زیستی، دانشگاه خلیج فارس، بوشهر، ایران

^۳ پژوهشکده پلاسما و گداخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتم ایران، صندوق پستی: ۱۴۳۹۹-

۵۱۱۱۳، تهران، ایران

دریافت: ۱۴۰۵/۰۲/۲۱ ویرایش نهایی: ۱۴۰۵/۰۳/۲۵ پذیرش: ۱۴۰۵/۰۴/۱۰ انتشار بر خط: ۱۴۰۵/۰۴/۲۱

Doi: 10.22055/jrmb.2026.20763

چکیده

سلول‌های خورشیدی گالیم‌آرسنید از پرکاربردترین روش طراحی در تبدیل انرژی خورشیدی به الکتریسته هستند. این سلول‌ها از مواد نیمه‌هادی ترکیبی ساخته شده‌اند که با جذب فوتون‌های نور خورشید جریان الکتریکی تولید می‌کنند. سلول‌های گالیم‌آرسنید به دو دسته اصلی تک‌کریستالی و چندکریستالی تقسیم می‌شوند که هرکدام مزایا و معایب خاص خود را دارند. بازده این سلول‌ها معمولاً بین ۲۷ تا ۴۰ درصد است. اگرچه این سلول‌ها هزینه نسبتاً بالایی دارند، کاربرد گسترده‌ای در نور بسیار کم، صنایع نظامی و فضایی، و صنعت انرژی خورشیدی دارند. در تحقیقات اخیر به بهبود بازده و کاهش هزینه‌های تولید این سلول‌ها پرداخته شده است. در این مقاله، سلول خورشیدی گالیم‌آرسنید p-i-n براساس برنامه SCAPS شبیه‌سازی شده است و پارامترهای ورودی به برنامه داده شده و پارامترهای مهم فیزیکی همانند ضریب بهره به دست آمده است. نتایج این مقایسه نشان می‌دهد، اگر این سلول‌های خورشیدی عملاً تولید شوند، راندمان بسیار بالایی دارند.

کلیدواژگان: سلول خورشیدی، برنامه SCAPS، راندمان سلول خورشیدی

مقدمه

گالیم‌آرسنید نیمه‌هادی به دلیل راندمان بالاتر و عملکرد

اتریشی سلول خورشیدی گالیم‌آرسنید با راندمان بالا در سال‌های اخیر توجه بسیاری را به خود جلب کرده و تأثیر بسیاری در توسعه تحقیقات سلول خورشیدی مدرن در سراسر جهان برای آینده سبز و پایدار داشته است. برخلاف سلول‌های خورشیدی سیلیکونی سنتی، سلول‌های خورشیدی گالیم‌آرسنید می‌توانند از یک ماده نیمه‌هادی پیچیده تشکیل شوند که می‌تواند مزایای متعددی از جمله راندمان تبدیل انرژی بالاتر و عملکرد بهتر در شرایط نور کم داشته باشد. گالیم‌آرسنید با توجه به باند شکاف عالی برای توسعه سلول خورشیدی بسیار مناسب است [۶-۱].

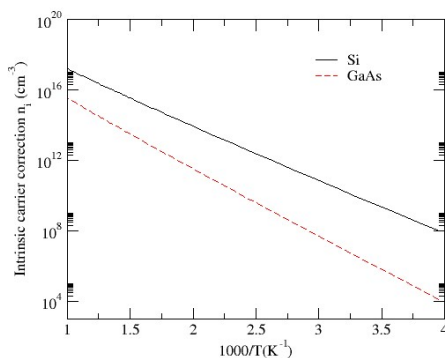
بهتر در نور کم دارای کاربردهای فضایی و سیستم‌های نظارت از راه دور و کاربردهای نظامی است [۷-۱۱]. باید توجه داشت، علی‌رغم مزایای سلول خورشیدی گالیم‌آرسنید، استفاده از آن به دلیل هزینه تولیدش در مقایسه با سلول‌های خورشیدی سنتی سیلیکونی محدود است [۱۲]. تاریخچه تحقیقات سلول خورشیدی گالیم‌آرسنید روند تمرکز بر طراحی، بهینه‌سازی، توسعه و ترکیب نانوساختارها مانند نانوذرات و نانوفیلیم‌ها را برای افزایش راندمان تأیید کرده است. یکی از اهداف این مقاله استفاده از برنامه Solar cell capacitance) SCAPS3.3.11

$$n_i = 4.9 \times 10^{15} \left(\frac{m_{de} m_{dh}}{m_o^2} \right)^{3/4} M_C^{1/2} T^{3/2} \exp \left(\frac{-E_g}{kT} \right)$$

$$m_{dh} = (m_{lh}^{*2/3} + m_{hh}^{*2/3})^{3/2}$$

$$m_{de} = (m_l^* m_r^*)^{1/2}$$

در رابطه ۱، m_{de} سیلیکون الکترون است و k ثابت بولتزمن است و M_C تعداد مینیم‌های معادل در باند هدایت را نشان می‌دهد. در شکل ۱، نمایی از وابستگی دمایی سیلیکون و گالیم آرسنید برای چگالی ذاتی ذرات در نیمه‌های رسم شده است.



شکل ۱. تغییرات حامل‌های بار ذاتی نیمه‌های سیلیکون و گالیم آرسنید نسبت به دما.

شکل ۱ تغییرات غلظت ذاتی حامل‌های n_i را برای سیلیکون و گالیم آرسنید برحسب کمیت $1000/T (K^{-1})$ نمایش می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، با افزایش مقدار $1000/T$ (که معادل کاهش دما است)، غلظت حامل‌های ذاتی در هر دو ماده به‌طور نمایی کاهش می‌یابد. مقدار n_i در GaAs، به‌دلیل گاف انرژی بزرگ‌تر آن، به‌طور قابل‌توجهی کمتر از سیلیکون است. این اختلاف بیانگر پایداری حرارتی بهتر GaAs و کاهش جریان نشتی در دماهای بالا است که به بهبود رفتار دیود و عملکرد مطلوب‌تر سلول خورشیدی منجر می‌شود. روند نزولی منظم نشان‌دهنده کاملاً با مدل نظری غلظت ذاتی حامل‌ها در نیم‌رساناهایی با گاف

(simulator) برای بررسی مشخصات فیزیکی یک سلول خورشیدی گالیم آرسنید از نوع p-i-n است. در این زمینه منابع متفاوتی درخصوص برنامه وجود دارد که در بخش منابع [۲۱-۱۳] به آن‌ها اشاره شده است.

بررسی اولیه بر روی Si و GaAs

در این قسمت، خواص نیمه‌های سیلیکون و گالیم آرسنید را بررسی و خواص این دو را با هم مقایسه خواهیم کرد. در جدول ۱، بعضی از خواص بسیار مهم این دو نیمه‌های، که در محاسبات استفاده می‌شوند، آمده و این خواص با هم مقایسه شده‌اند [۲۲].

جدول ۱. بعضی از خواص نیمه‌های Si و GaAs.

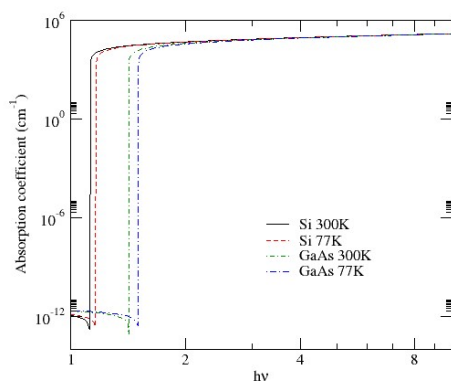
GaAs	Si	خاصیت
۱/۴۲	۱/۱۲	$E_g(eV)$
۴/۰۷	۴/۰۵	$\chi(V)$
4.7×10^{17}	2.8×10^{19}	$N_c(cm^{-3})$
7.0×10^{18}	2.65×10^{19}	$N_v(cm^{-3})$
2.1×10^6	9.65×10^9	$n_i(cm^{-3})$
۰/۰۶۳	$m_l^* = 0.098$	$m^*/m_0(electron)$
	$m_t^* = 0.19$	
۰/۰۷۶	$m_{lh}^* = 0.16$	$m^*/m_0(Holes)$
۰/۵۰	$m_{hh}^* = 0.49$	
۸۰۰۰	۱۴۵۰	$\mu_n(cm^2/V-s)$
۴۰۰	۵۰۰	$\mu_p(cm^2/V-s)$
زینک بلند	الماسی	ساختار کریستالی
7×10^6	1×10^7	سرعت اشباع
		cm/s

رابطه زیر حامل‌های ذاتی را مشخص می‌کند:

داده شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، با افزایش دما در هر دو ماده، مقدار E_g به تدریج کاهش می‌یابد که این رفتار مطابق با مدل استاندارد وارشنی - هاوارتز^۱ برای نیم‌رساناها است. در تمامی دماها، گاف انرژی GaAs به‌طور قابل‌توجهی بزرگ‌تر از Si باقی می‌ماند که این امر ناشی از ماهیت گاف مستقیم GaAs در مقایسه با گاف غیرمستقیم Si است. کاهش گاف انرژی با افزایش دما به افزایش نرخ تولید حامل‌های ذاتی و اثرگذاری مستقیم بر جذب و عملکرد الکترونیکی سلول خورشیدی منجر می‌شود. روند ارائه‌شده تأثیر مهم دما در تعیین ویژگی‌های نوری و الکتریکی مواد نیم‌رسانا را به‌خوبی منعکس می‌کند. رابطه زیر محاسبه ضریب جذب را نشان می‌دهد:

$$\alpha \propto (h\nu - E_g)^\gamma \quad (3)$$

با مشخص بودن وابستگی انرژی نوار غدقن به دما می‌توان ضریب جذب در دماهای متفاوت را با توجه به تغییرات فرکانس‌های متفاوت رسم کرد. در شکل ۳، این تغییرات مشاهده می‌شود.



شکل ۳. تغییرات ضریب جذب برای دو نیمه‌هادی متفاوت نسبت به فرکانس در دو دمای متفاوت.

شکل ۳ ضرایب جذب سیلیکون و گالیم‌آرسنید را در دماهای ۳۰۰ و ۷۷ کلوین برحسب انرژی فوتون نشان

انرژی مستقیم و غیرمستقیم سازگار است.

رابطه زیر تغییرات انرژی نوار غدقن دو نیمه‌هادی سیلیکون و گالیم‌آرسنید را نسبت به دما محاسبه می‌کند:

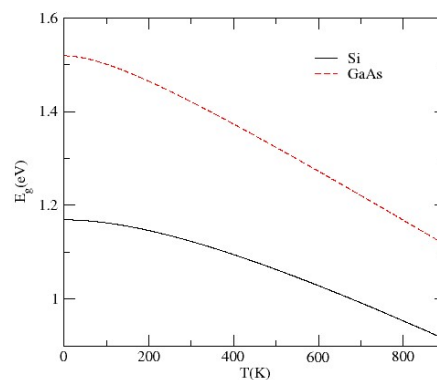
$$E_g(T) \approx E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta}, \quad (2)$$

مقادیر ضرایب برای دو نیمه‌هادی در جدول ۲ مشخص شده‌اند [۲۲]:

جدول ۲. مقادیر ضرایب رابطه ۱.

	$E_g(0)(\text{eV})$	$\alpha(\text{eV/K})$	$\beta(\text{K})$
GaAs	۱/۵۱۹	$5/4 \times 10^{-4}$	۲۰۴
Si	۱/۱۶۹	$4/9 \times 10^{-4}$	۶۵۵

در شکل ۲، تغییرات دمایی انرژی نوار غدقن دو نیمه‌هادی سیلیکون و گالیم‌آرسنید مشخص شده است.



شکل ۲. تغییرات انرژی نوار غدقن برای دو نیمه‌هادی سیلیکون و گالیم‌آرسنید نسبت به دما.

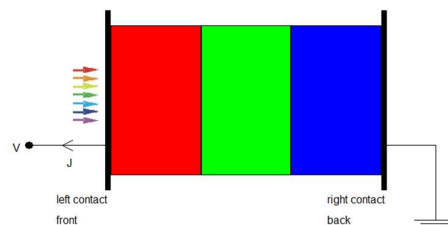
در شکل ۲، وابستگی گاف انرژی E_g سیلیکون و گالیم‌آرسنید نسبت به دما در بازه ۰ تا ۹۰۰ کلوین نشان

^۱ Warschni-Wartz

می‌دهد. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، GaAs افزایش ناگهانی و بسیار تندی را در ضریب جذب در نزدیکی لبه گاف انرژی به دلیل گاف انرژی مستقیم خود نشان می‌دهد، درحالی‌که Si با داشتن گاف انرژی غیرمستقیم دارای لبه جذب ملایم‌تر و گسترده‌تری است. همچنین، کاهش دما از ۳۰۰ به ۷۷ کلوین سبب جابه‌جایی اندک لبه جذب و کاهش جزئی ضریب جذب در هر دو ماده می‌شود. رفتار طیفی ارائه‌شده بیانگر مزیت ذاتی GaAs در جذب فوتون‌های با انرژی نزدیک به لبه باند و در نتیجه کارایی بالاتر آن در سلول‌های خورشیدی با ساختارهای نازک است.

نتایج محاسبات نرم‌افزار SCAPS

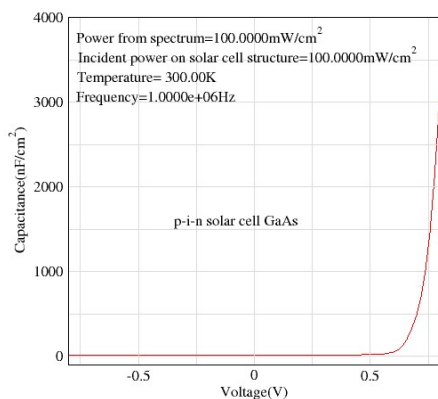
برای طراحی سلول خورشیدی باید توجه داشت که امروزه حتی سلول خورشیدی پیشرفته تا ۱۴ لایه را به‌صورت تجربی می‌سازند [۲۳] که بازده ۴۰ درصد هم دارد از گروه III-V را می‌سازند، ولی با توجه به محدودیت برنامه SCAPS برای بررسی سلول خورشیدی گالیم آرسنید ما از یک نمونه p-i-n سه‌لایه‌ای استفاده شده که در شکل ۴ مشخص شده است.



شکل ۴. شکل سلول خورشیدی و تابش نور بر سلول.

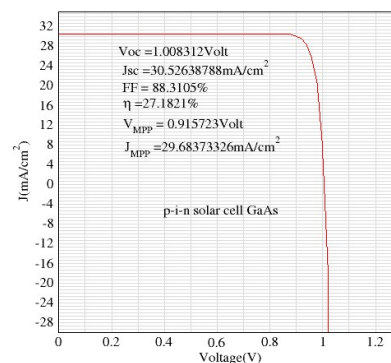
ضخامت هر سه $2\mu\text{m}$ لایه است و باید توجه داشت که تابش نور از سمت چپ به لایه p می‌تابد. انتخاب

ناخالصی برای نیمه‌هادی گالیم آرسنید برای گروه دهنده می‌تواند لیتیم باشد و برای گروه پذیرنده سدیم یا مس [۲۴]. مقدار $N_A = 0$, $N_D = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ برای لایه p، $N_A = 0$, $N_D = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ برای لایه n و $N_A = 0$, $N_D = 0$ برای لایه i انتخاب شده است. برای انتخاب کنتاکت‌گذاری برای نوع n این سلول خورشیدی می‌توان از آلیاژهایی همانند طلا ژرمانیم و نیکل استفاده کرد و برای نوع p از آلیاژهایی همانند طلا و روی [۲۵]. لایه ضدنوری که برای محاسبات انتخاب شده مخصوص خود نیمه‌هادی گالیم آرسنید است. در این محاسبات، تغییرات چگالی جریان برحسب ولتاژ در شکل ۵ مشخص شده است که $V_{oc} = 1/0.087$ ، $J_{sc} = 30/53 \text{ mA/cm}^2$ و همچنین مقدار $\eta = 27/1821\%$ و $FF = 88/310.5\%$ است. مقادیر به‌دست‌آمده برای چگالی جریان اتصال کوتاه، ولتاژ مدار باز، ضریب پرشدگی و بازده تبدیل انرژی نشان‌دهنده عملکرد مطلوب ساختار پیشنهادی هستند. مقدار نسبتاً بالای V_{oc} بیانگر کاهش بازترکیب و اختلاف مناسب شبه‌ترازهای فرمی در دو سوی پیوند است. همچنین، مقدار مناسب J_{sc} نشان‌دهنده جذب مؤثر فوتون‌ها، تولید کارآمد حامل‌های بار و جمع‌آوری مناسب آن‌ها در ناحیه فعال است. ضریب پرشدگی بالای FF نیز حکایت از مقاومت سری پایین و کیفیت خوب جدایش و استخراج حامل‌ها دارد. در نتیجه، بازده η به‌دست‌آمده نشان می‌دهد که ساختار پیشنهادی از نظر اپتوالکترونیکی عملکرد قابل‌توجهی دارد و می‌تواند برای کاربردهای فتوولتائیک مناسب باشد.



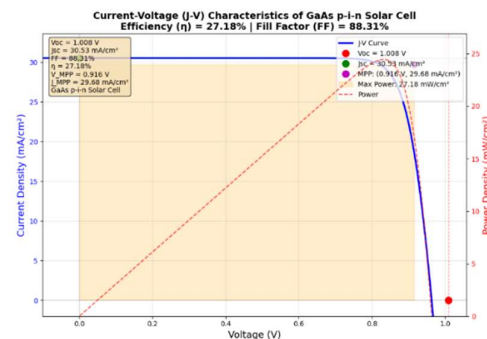
شکل ۷. تغییرات ظرفیتی خازنی سلول خورشیدی نسبت به ولتاژ در دمای اطاق.

همان‌طور که در نمودار ۷ مشاهده می‌شود، در ناحیه بایاس معکوس (ولتاژهای منفی)، ظرفیت ساختار **p-i-n** تقریباً مقدار کمی دارد و تغییرات آن بسیار محدود است. این رفتار ناشی از پهن شدن ناحیه تخلیه بر اثر اعمال بایاس معکوس است. با افزایش ولتاژ منفی، عرض ناحیه تخلیه بزرگ‌تر می‌شود و در نتیجه ظرفیت دیودی که رابطه معکوس با عرض ناحیه تخلیه دارد کاهش می‌یابد. تخت بودن منحنی در این ناحیه کیفیت مناسب ساختار و نبود تله‌های سطحی مؤثر را نشان می‌دهد. در ناحیه بایاس مستقیم (ولتاژهای مثبت نزدیک به ۰/۸ تا ۱ ولت)، منحنی ظرفیت افزایش چشمگیری را نشان می‌دهد. این افزایش ناشی از کاهش عرض ناحیه تخلیه و غالب شدن مکانیسم ظرفیت انتشار^۱ است. در این شرایط، تزریق حامل‌ها از دو سوی اتصال افزایش می‌یابد و پاسخ دیود از حالت ظرفیت تخلیه به ظرفیت انتشار تغییر می‌کند که ذاتاً مقدار بسیار



شکل ۵. تغییرات جریان نسبت به ولتاژ برای سلول خورشیدی گالیم‌آرسنید.

در شکل ۶، به صورت تئوری با برنامه پایتون مقدار قدرت سلول خورشیدی محاسبه شده است. فایل پایتون برنامه در [GitHub](#) موجود است [۲۶-۲۷].

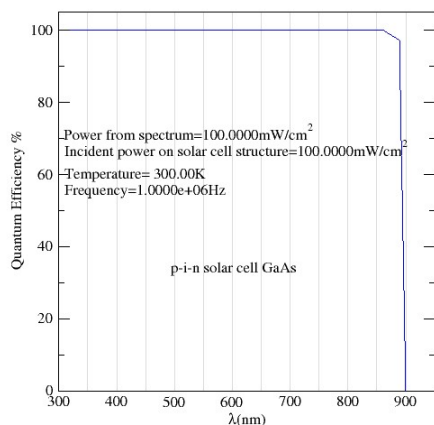


شکل ۶. محاسبه دانسیته قدرت سلول خورشیدی با توجه به داده‌های برنامه SCAPS با زبان پایتون.

همچنین، تغییرات ظرفیت خازنی سلول خورشیدی نسبت به ولتاژ در شکل ۷ برای دمای ۳۰۰ کلوین مشخص شده است.

^۱ Diffusion capacitance

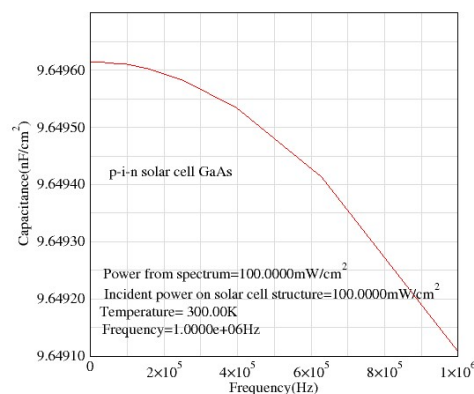
در شکل ۸، تغییرات ظرفیتی خازنی سلول خورشیدی نسبت به فرکانس مشخص شده است. یکی از دلایلی که هرچه فرکانس زیاد می‌شود، ظرفیت خازنی کم می‌شود به‌خاطر لایه ضخیم i و ظرفیت تخلیه کم در این ساختار است. بخش زیادی از ظرفیت نیز از ناحیه انتشار ناشی می‌شود. بنابراین، با افزایش فرکانس، کاهش شدیدتر فرکانس نسبت به ساختار $p-n$ معمولی مشاهده خواهد شد. با افزایش سیگنال AC، حامل‌های اقلیت در لایه‌های p و n سلول خورشیدی GaAs قادر نیستند به‌سرعت تغییرات را دنبال کنند. در نتیجه، ظرفیت انتشار کاهش می‌یابد و فقط ظرفیت ناحیه تخلیه باقی می‌ماند. این موضوع باعث کاهش تدریجی ظرفیت اندازه‌گیری شده با افزایش فرکانس خواهد شد. همچنین، در آخرین شکل، شکل بهره کوانتومی سلول خورشیدی رسم و محاسبه شده است.



شکل ۹. بهره کوانتومی و تغییرات آن نسبت به طول موج برای دمای اطاق.

مطابق نمودار شکل ۹، بازده کوانتومی سلول در محدوده طول موجی ۳۰۰ تا حدود ۸۷۰ نانومتر به مقدار بهینه (نزدیک به ۱۰۰ درصد) رسیده است. این سطح بالا از بازده نشان‌دهنده کیفیت عالی جدایش حامل‌های بار و بازترکیب بسیار کم در ناحیه فعال (لایه i) است که

بزرگ‌تری دارد. این رفتار با مدل فیزیکی یک دیود $p-i-n$ مبتنی بر GaAs کاملاً سازگار است؛ زیرا لایه i با ضخامت قابل توجه در شرایط بایاس معکوس ناحیه تخلیه را گسترش و ظرفیت را کاهش می‌دهد، درحالی‌که این لایه در بایاس مستقیم از حالت تخلیه خارج و ظرفیت انتشار ناشی از حامل‌های تزریق شده غالب می‌شود. شبیه‌سازی انجام شده با SCAPS این روند را به‌درستی بازتولید کرده است. منحنی ظرفیت-ولتاژ سلول خورشیدی $p-i-n$ مبتنی بر GaAs نشان می‌دهد که در ناحیه بایاس معکوس ظرفیت مقدار بسیار کمی دارد و تقریباً مستقل از ولتاژ است که این موضوع ناشی از پهن شدن ناحیه تخلیه و کیفیت مناسب ساختار نیمه‌رسانا است. با ورود به ناحیه بایاس مستقیم، ظرفیت ناگهان افزایش می‌یابد و رفتار آن تحت تأثیر ظرفیت انتشار قرار می‌گیرد که در نتیجه تزریق شدید حامل‌ها در اتصال $p-i-n$ رخ می‌دهد. این ویژگی‌ها کاملاً با مدل فیزیکی دیودهای GaAs و نتایج شبیه‌سازی SCAPS سازگار است.



شکل ۸. تغییرات ظرفیتی سلول خورشیدی نسبت به فرکانس در دمای اطاق.

حداقل رساندن اتلاف‌های نوری است که این سلول را به گزینه‌ای بسیار کارآمد برای کاربردهای فتوولتائیک تبدیل می‌کند.

جزئیات شبیه‌سازی و مدل‌های فیزیکی

در این پژوهش، شبیه‌سازی عددی با استفاده از نرم‌افزار SCAPS انجام شده است. برای دستیابی به نتایج منطبق بر واقعیت فیزیکی، پارامترهای ورودی و مدل‌های انتقال به شرح زیر تنظیم شده‌اند:

مدل انتقال حامل‌های بار: انتقال حامل‌ها براساس معادلات پیوستگی و معادله پواسون در حالت پایدار مدل‌سازی شده است. از مدل Drift-Diffusion برای بررسی جریان استفاده شده که برای سلول‌های خورشیدی مبتنی بر GaAs، به دلیل ماهیت نیمه‌هادی کلاسیک آن‌ها، دقیق‌ترین رویکرد است.

مدل‌های بازترکیب: برای لحاظ کردن اتلاف‌های غیرایده‌آل، سه سازوکار بازترکیب اصلی در نظر گرفته شد:

- بازترکیب (Radiative): با توجه به گاف مستقیم (Direct Bandgap) بودن GaAs، ضریب بازترکیب استخراج شده است.
- بازترکیب Shockley-Read-Hall (SRH): برای مدل‌سازی عیوب شبکه‌ای و ترازهای تله (Trap levels)، طول عمر حامل‌ها (τ) و سطح مقطع جذب براساس کیفیت کریستالی مرجع تنظیم شده است.
- بازترکیب اوژه: در لایه‌های با غلظت ناخالصی بالا (لایه‌های p و n)، بازترکیب

طراحی بهینه ضخامت و پارامترهای فیزیکی لایه میانی در ساختار p-i-n را نشان می‌دهد. نمودار نشان‌دهنده «لَبه برش»^۱ بسیار تیز در حدود ۸۷۰ تا ۹۰۰ نانومتر است. این رفتار منطبق بر مقدار گاف انرژی^۲ گالیم‌آرسنید (GaAs) است که تقریباً ۱/۴۲ الکترون‌ولت است. کاهش ناگهانی بازده پس از این طول موج ناشی از این واقعیت فیزیکی است که فوتون‌های با انرژی کمتر از گاف انرژی (طول موج‌های بلندتر) انرژی کافی برای برانگیختن الکترون از نوار ظرفیت به نوار هدایت را ندارند و در نتیجه عبور می‌کنند و جذب نمی‌شوند. تحت بودن نمودار در محدوده طیف مرئی و نزدیک به مادون قرمز نشان می‌دهد که سلول در تمامی طول موج‌های جذبی قادر است، به‌طور یکنواخت و با حداکثر کارایی، فوتون‌ها را به حامل‌های الکتریکی تبدیل کند. نبود افت در بازده کوآنتومی (به دلیل بازترکیب سطحی یا حجمی) در این محدوده نشان‌دهنده بهبود قابل‌توجه در پارامترهای مربوط به طول نفوذ حامل‌ها در شبیه‌سازی در مقایسه با نمونه‌های قبلی مورد مطالعه در این مرکز است. همان‌طور که در نمودار بازده کوآنتومی مشاهده می‌شود، سلول خورشیدی p-i-n طراحی شده عملکردی در سطح ایده‌آل (نزدیک به ۱۰۰ درصد) را در گستره وسیعی از طول موج‌ها (۳۰۰ تا ۸۷۰ نانومتر) نشان می‌دهد. افت شدید منحنی در نزدیکی ۹۰۰ نانومتر تأییدکننده مقدار گاف انرژی GaAs در شبیه‌سازی است. این پاسخ طیفی مطلوب مؤید کارایی بالای ساختار پیشنهادی در جمع‌آوری حامل‌ها و به

² Bandgap

¹ Cutoff edge

در این تحقیق، عملکرد اپتوالکترونیکی سلول خورشیدی GaAs با ساختار p-i-n به صورت عددی شبیه سازی و تحلیل شد. نتایج نشان داد که سلول طراحی شده بازده کوآنتومی بسیار بالایی در بازه طول موجی ۳۰۰ تا ۸۷۰ نانومتر دارد و لبه برش تیز آن در نزدیکی ۹۰۰ نانومتر انطباق کاملی با گاف انرژی ماده GaAs دارد. این ویژگی طیفی بیانگر جذب مؤثر فوتون ها، تولید کارآمد زوج های الکترون - حفره و جمع آوری بهینه حامل ها در لایه ذاتی (i) است که خود نشان دهنده کیفیت ساختاری مناسب، کاهش باز ترکیب و طول نفوذ مطلوب حامل ها در ساختار پیشنهادی است.

همچنین، بررسی مشخصه ظرفیت-ولتاژ (C-V) نشان داد که در بایاس معکوس، ظرفیت ساختار مقدار کمی دارد و تقریباً مستقل از ولتاژ است که این رفتار با گسترش ناحیه تهی در دیود p-i-n سازگار است. در مقابل، در بایاس مستقیم افزایش قابل توجهی در ظرفیت مشاهده شد که ناشی از غالب شدن ظرفیت نفوذی و تزریق شدید حامل ها به ناحیه ذاتی است. این نتایج تطابق کاملی با مدل فیزیکی دیود p-i-n دارد و صحت طراحی و اعتبار شبیه سازی های انجام شده را تأیید می کند.

در مجموع، یافته های این پژوهش نشان می دهد که ساختار پیشنهادی p-i-n مبتنی بر GaAs می تواند به عنوان گزینه ای بسیار مناسب و کارآمد برای کاربردهای فتوولتائیک با بازده بالا مطرح شود و زمینه ای برای توسعه عملی و مطالعات تجربی آینده فراهم آورد.

سپاسگزاری

نویسنده این مقاله از همه کارکنان محترم کتابخانه پژوهشگاه مواد انرژی، که در به روز رسانی این مقاله

اوژه برای پیش بینی دقیق افت ولتاژ لحاظ شد.

- مدل جذب نوری: به جای استفاده از ضریبی ثابت، داده های تجربی مربوط به ضریب جذب (α) به صورت فایلی (Absorption file) به نرم افزار داده شدند. این داده ها براساس وابستگی α به انرژی فوتون ($h\nu$) هستند که اجازه می دهد بازده کوآنتومی (QE) در تمام طول موج های طیف AM1.5G به درستی محاسبه شود.

شرایط مرزی و اتصالات:

- اتصالات فلزی: برای اتصال جلویی و پشتی، تابع کار (Work Function) فلزات به گونه ای انتخاب شد که سد پتانسیل شائکی یا اتصال اهمی مطابق با واقعیت ایجاد شود.
- سرعت باز ترکیب سطحی: برای مدل سازی غیرایده آل بودن سطوح تماس، سرعت باز ترکیب برای الکترون ها و حفره ها در حدود 10^{10} cm/s (یا مقدار دقیق خودتان) در نظر گرفته شد تا اتلاف های سطحی لحاظ شوند.

بحث و نتیجه گیری

هدف این پژوهش ارائه راهکاری ساده و کارآمد برای طراحی سلولی خورشیدی با بازده بالا و مقایسه عملکرد آن با نتایج تجربی گزارش شده در مقالات داخلی بود [۶-۲۸]. مقایسه ها نشان می دهد که بازدهی ساختار پیشنهادی در این مطالعه به طور قابل توجهی بالاتر از مقادیر تجربی گزارش شده در پژوهش های پیشین است که بیانگر بهینه سازی موفق پارامترهای ساختاری و الکترونیکی در طراحی حاضر است.

[8] S. Moon, K. Kim, Y. Kim, J. Heo, J. Lee, Highly efficient single-junction GaAs thin-film solar cell on flexible substrate, *Sci. Rep.* 6 (1) (2016) 30107. <https://doi.org/10.1038/srep30107>

[9] C. Signorini, I. Duvaux-Bechon, L. Summerer, Iac-12. C3. 1.1 Space and D Energy-Current Status And Outlook, in 63rd International Astronautica Congress (2012).

[10] S. Kumar, N. Sharma, Emerging military applications of free space optical communication technology: A detailed review, in *J. of Phys.: Con. Ser.* 2161 (1) (2022) IOP Publishing 012011. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2161/1/012011>.

[11] P. A. Iles, Future of photovoltaics for space applications, *Progress in Photovoltaics: Res. and Apps.* 8 (1) (2000) 39-51. [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1099-159X\(200001/02\)8:1<39::AID-PIP304>3.0.CO;2-D](https://doi.org/10.1002/(SICI)1099-159X(200001/02)8:1<39::AID-PIP304>3.0.CO;2-D)

[12] Q. Li, K. Shen, R. Yang, Y. Zhao, S. Lu, R. Wang, J. Dong, D. Wang, Comparative study of GaAs and CdTe solar cell performance under low-intensity light irradiance, *Sol. Ener.* 157 (2017) 216-226. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2017.08.023>

[13] M. Burgelman, P. Nollet, S. Degraeve, Modelling polycrystalline semiconductor solar cells, *Thin Sol. Films* 361 (2000) 527-532. [https://doi.org/10.1016/S0040-6090\(99\)00825-1](https://doi.org/10.1016/S0040-6090(99)00825-1)

[14] K. Decock, S. Khelifi, M. Burgelman, Modelling multivalent defects in thin film solar cells, *Thin Sol. Films* 519 (21) (2011) 7481-7484. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2010.12.039>

[15] M. Burgelman, K. Decock, S. Khelifi, A. Abass, Advanced electrical simulation of thin film solar cells, *Thin Sol. Films* 535 (2013)

همکاری کردند سپاسگزاری می‌کند. این پژوهش با پشتیبانی مرکز فیزیک نظری انجام شده است و بدین‌وسیله از این مرکز تشکر و سپاسگزاری می‌شود.

مرجع‌ها

[1] Z. Li, H. H. Tan, C. Jagadish, L. Fu, III-V semiconductor single nanowire solar cells: a review, *Adv. Mat. Techno.* 3 (9) (2018) 1800005.

<https://doi.org/10.1002/admt.201800005>

[2] J. A. Luceño-Sánchez, A. M. Díez-Pascual, R. Peña Capilla, Materials for photovoltaics: State of art and recent developments, *int. J. of mol. Sci.* 20 (4) (2019) 976.

<https://doi.org/10.3390/ijms20040976>

[3] H. Ding, X. Sheng, Thin-Film III-V Single Junction and Multijunction Solar Cells and Their Integration onto Heterogeneous Substrates, in *Inorganic Flexible Optoelectronics* Wiley (2019) 177-207.

[4] K. Tanabe, A review of ultrahigh efficiency III-V semiconductor compound solar cells: multijunction tandem, lower dimensional, photonic up/down conversion and plasmonic nanometallic structures, *Ener.* 2 (3) (2009) 504-530.

<https://doi.org/10.3390/en20300504>

[5] M. Yamaguchi, High-Efficiency GaAs-Based Solar Cells, in *Post-Tran. Met.*, 10 (2021).

[6] N. Papež, R. Dallaev, S. Tălu, J. Kaštyl, Overview of the current state of gallium arsenide-based solar cells, *Mat.* 14 (11) (2021) 3075.

<https://doi.org/10.3390/ma14113075>

[7] Y. Yun, S. Moon, S. Kim, J. Lee, Flexible fabric-based GaAs thin-film solar cell for wearable energy harvesting applications, *Sol. Ener. Mat. and Sol. Cell.* 246 (2022) 111930.

<https://doi.org/10.1016/j.solmat.2022.111930>

<https://doi.org/10.30473/jphys.2025.73662.1235>

[22] S. M. Sze, Y. Li, K. k. Ng, *Physics of Semiconductor Deves*, Fourth Edition Wiley & Sons (2021) ISBN 9781119429135.

[23] R. R. King, D. C. Law, K. M. Edmondson, C. M. Fetzer, G. S. Kinsey, H. Yoon, R. A. Sherif, N. H. Karam, 40% efficient metamorphic GaInP/ GaInAs/ Ge multijunction solar cells, *Aped. Phys. Lets.* 90 (18) (2007) 183516.
<https://doi.org/10.1063/1.2734507>

[24] H. K. Henissch, *Semiconducting Iii-V Compounds*, Pergamon Press Ltd 1961.

[25] R. H. Cox, H. Strack, Ohmic contacts for GaAs devices, *Solid-State Electronics* 10 (12) (1967) 1213-1218.
<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/0038110167900639>

[26] M. Kazemzadeh Otoufi, M. Ranjbar, A. Kermanpur, N. Taghavinia, M. Heidari, Fabrication and Optimization of Planar Perovskite Solar Cells Using TiO₂/SnO₂, TiO₂/WO₃, and SnO₂/WO₃ Bilayer Electron Transport Structures, *J. of Adv. of Mat. and Ener.*, 10 (1) (2021) 1-12.
<https://doi.org/10.30501/jamt.2021.225445.1084>

[27] GitHub:
<https://github.com/atashbart/GaAs/tree/main>

[28] S. Mashhoun, A. H. Cheshmeh-Khavar, M. Dehghani, F. Tajabadi, N. Taghavinia, Enhancement of the Performance of Solution-Processed CuInS₂ Solar Cells Through Optimization of the Absorber Layer Deposition Conditions, *J. of Adv. of Mat. and Ener.* 10 (1) (2021) 45-52.
<https://doi.org/10.30501/jamt.2021.212974.1068>

296-301.

<https://doi.org/10.1016/j.tsf.2012.10.032>

[16] J. Verschraegen, M. Burgelman, Simulation Study of CuO-Based Solar Cell with Different Buffer Layers Using SCAPS-1D, *Energy and Power Engin.* 15 (9) (2023) 6276–6279.

<https://doi.org/10.4236/epe.2023.159016>

[17] K. Decock, P. Zabierowski, M. Burgelman, Modeling metastabilities in chalcopyrite-based thin film solar cells, *J. of Aped. Phys.* 111 (4) (2012) 043703.
<http://dx.doi.org/10.1063/1.3686651>

[18] V. Rafee, A. Razeghizadeh, N. Rashidi, S. Kamalinahad, Refining dye-sensitized solar cells: molecular insights into organic dye adsorption and band gap engineering on TiO₂ substrates, *Opt. and Qua. Elects.* 58 (2) (2026) 112. <https://doi.org/10.1007/s11082-026-08674-x>

[19] V. Rafee, E. Rahimi, H. Tavallali, R. Maleki, Design a New Molecule by Application of Functionalizing CTF-0 with DBT Units to Enhance the Performance of the Acceptor Layer in Organic Solar Cells, *Iranian J. of Chemistry and Chemical Engineering* (2026) e735092.
<https://doi.org/10.30492/ijcce.2026.2085273.7475>

[20] V. Rafee, E. Rahimi, H. Tavallali, R. Rajabi, Improvement of efficiency and stability of perovskite solar cells using CTF-0 and combination with anthracene: A computational study, *J. of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 465 (2025) 116337.

<https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2025.116337>

[21] V. Rafee, A. Razeghizadeh, P. Farhadi Birgani, Enhancing the Performance of Natural Dye-Sensitized Solar Cells: Synthesis and Characterization of Zinc Oxide Nanoparticles Using the Sol–Gel Method, *Quarterly J. of Optoelectronic* 7 (4) (2025) 27-38.