

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: 16.10.2017

Final revised: 02.10.2018

Accepted: 07.07.2019

[Doi Hyperlink:](#)

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 برنامه‌ی SCAPS

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

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

^۲ گروه فیزیک دانشکده‌ی علوم و فناوری نانو و زیستی، دانشگاه خلیج‌فارس، بوشهر، ایران

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

۱۴۳۹۹-۵۱۱۱۳، تهران، ایران

دریافت: ۱۳۹۶/۰۶/۱۳

ویرایش نهایی: ۱۳۹۶/۱۰/۰۹

پذیرش: ۱۳۹۶/۱۱/۰۷

Doi Hyperlink:

چکیده

سلول‌های خورشیدی گالیم‌آرسنید از پرکاربردترین روش طراحی در تبدیل انرژی خورشیدی به الکتریسیته هستند. این سلول‌ها از مواد نیمه‌هادی ترکیبی ساخته شده‌اند که با جذب فوتون‌های نور خورشید جریان الکتریکی تولید می‌کنند. سلول‌های گالیم‌آرسنید به دو دسته‌ی 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 و به دلیل هزینه‌ی نسبتاً بالا، با این حال کاربرد بسیار مهم آن در نور بسیار کم و صنایع نظامی و فضایی، کاربرد گسترده‌ای در صنعت انرژی خورشیدی دارد. در تحقیقات اخیر به بهبود بازده و کاهش هزینه‌های تولید این سلول‌ها پرداخته شده است. در این مقاله، سلول خورشیدی گالیم‌آرسنید p-i-n بر اساس برنامه‌ی 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 سلول خورشیدی به صورت عملی تولید شود، راندمان بسیار بالایی دارد.

کلیدواژه‌گان: سلول خورشیدی، برنامه‌ی SCAPS، راندمان سلول خورشیدی

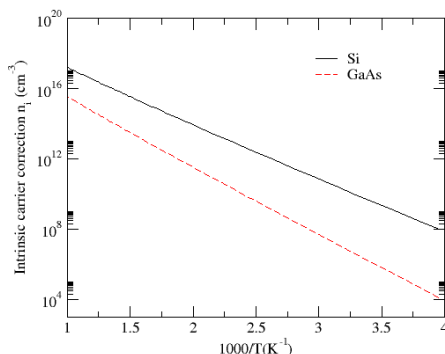
۱- مقدمه

اثر بخشی سلول خورشیدی گالیم‌آرسنید با راندمان بالا در سال‌های اخیر توجه بسیاری را به خود جلب کرده و تأثیر مهمی در توسعه‌ی تحقیقات سلول خورشیدی مدرن در سراسر جهان برای آینده‌ی سبز و پایدار داشته است. برخلاف سلول‌های خورشیدی سیلیکونی سنتی، سلول‌های خورشیدی گالیم‌آرسنید می‌توانند از یک ماده‌ی نیمه‌هادی پیچیده تشکیل شده باشند 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 توسعه‌ی سلول خورشیدی بسیار مناسب است [۱-۶]. نیمه‌هادی گالیم‌آرسنید به دلیل راندمان بهتر و عملکرد 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 هزینه‌ی تولیدشان در مقایسه با

سلول‌های خورشیدی سنتی سیلیکونی محدود است [۱۲]. تاریخچه‌ی 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 برنامه‌ی SCAPS3.3.11 (Solar cell capacitance simulator) برای بررسی مشخصات فیزیکی یک سلول خورشیدی گالیم‌آرسنید از نوع p-i-n است. در این زمینه منابع متفاوتی درخصوص برنامه وجود دارد که در بخش منابع [۱۳-۲۱] به آن‌ها اشاره شده است.

۲- بررسی اولیه بر روی GaAs و Si

در این قسمت، خواص نیمه‌هادی سیلیکون و گالیم‌آرسنید را بررسی و خواص این دو را با هم مقایسه خواهیم کرد. در جدول ۱، بعضی از خواص بسیار مهم این دو نیمه‌هادی که در محاسبات استفاده خواهند شد آمده‌اند و این خواص با هم مقایسه



شکل ۱. تغییرات حامل‌های بار ذاتی نیمه‌هادی

سیلیکون و گالیوم‌آرسنید نسبت به دما

شکل ۱ تغییرات غلظت ذاتی حامل‌های n_i برای سیلیکون و گالیوم‌آرسنید برحسب کمیت $1000/T (K^{-1})$ نمایش داده می‌شود. 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 به دلیل 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 نیمه‌رساناهایی با گاف انرژی مستقیم و غیرمستقیم سازگار است. رابطه‌ی زیر تغییرات انرژی نوار غنقن دو نیمه‌هادی سیلیکون و گالیوم‌آرسنید را نسبت به دما محاسبه می‌کند:

(۲)

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

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

جدول ۲. مقادیر ضرایب رابطه‌ی (۱)

	$E_g(\cdot)(\text{eV})$	$\alpha(\text{eV/K})$	$\beta(\text{K})$
GaAs	۱.۵۱۹	۵.۴×۱۰^{-۴}	۲۰۴
Si	۱.۱۶۹	۴.۹×۱۰^{-۴}	۶۵۵

در شکل ۲، تغییرات دمایی انرژی نوار غنقن دو

جدول ۱. بعضی از خواص نیمه‌هادی Si و GaAs

خاصیت	Si	GaAs
$E_g(\text{eV})$	۱/۱۲	۱/۴۲
$\chi(\text{V})$	۴/۰۵	۴/۰۷
$N_c(\text{cm}^{-3})$	۲.۸×۱۰^{۱۹}	۴.۷×۱۰^{۱۷}
$N_v(\text{cm}^{-3})$	۲.۶۵×۱۰^{۱۹}	۷.۰×۱۰^{۱۸}
$n_i(\text{cm}^{-3})$	۹.۶۵×۱۰^۹	۲.۱×۱۰^۶
$m^* / m_0(\text{electron})$	$m_l^* = ۰.۹۸$ $m_t^* = ۰.۱۹$	۰.۰۶۳
$m^* / m_0(\text{Holes})$	$m_{lh}^* = ۰.۱۶$ $m_{hh}^* = ۰.۴۹$	۰.۰۷۶ ۰.۵۰
$\mu_n(\text{cm}^2/\text{V-s})$	۱۴۵۰	۸۰۰۰
$\mu_p(\text{cm}^2/\text{V-s})$	۵۰۰	۴۰۰
ساختار کریستالی	الماسی	زینک بلند
سرعت اشباع cm/s	۱×۱۰^۷	۷×۱۰^۶

رابطه‌ی زیر حامل‌های ذاتی را مشخص می‌کند:

(۱)

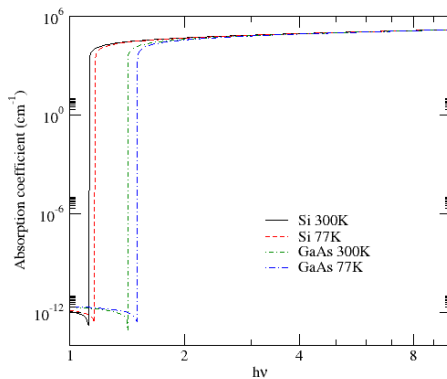
$$n_i = ۴.۹ \times ۱۰^{۱۵} \left(\frac{m_{de} m_{dh}}{m_0^2} \right)^{3/4} M_c^{1/2} T^{3/2} \exp \left(\frac{-E_g}{kT} \right)$$

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

$$m_{de} = (m_l^* m_t^* m_p^*)^{1/3}$$

در رابطه‌ی (۱)، m_{de} سیلیکون الکترون است و k ثابت بولتزمن و M_c تعداد مینیم‌های معادل در باند هدایت را نشان می‌دهند. در شکل ۱، نمایی از وابستگی دمایی سیلیکون و گالیوم‌آرسنید برای چگالی ذاتی ذرات در نیمه‌هادی رسم شده است.

نیمه‌هادی سیلیکون و گالیوم‌آرسنید مشخص شده است.

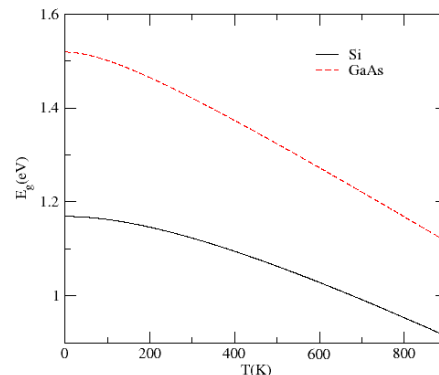


شکل ۳. تغییرات ضریب جذب برای دو نیمه‌هادی متفاوت نسبت به فرکانس در دو دمای متفاوت

شکل ۳ ضرایب جذب سیلیکون و گالیوم‌آرسنید را در دماهای ۳۰۰ و ۷۷ کلوین برحسب انرژی فوتون نشان می‌دهد. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، GaAs افزایش ناگهانی و بسیار تندی را در ضریب جذب در نزدیکی لبه‌ی گاف انرژی به دلیل گاف انرژی مستقیم خود نشان می‌دهد، درحالی‌که Si با داشتن گاف انرژی غیرمستقیم دارای لبه‌ی جذب ملایم‌تر و گسترده‌تری است. همچنین، کاهش دما از ۳۰۰ به ۷۷ کلوین سبب جابه‌جایی اندک لبه‌ی 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 لبه‌ی باند و در نتیجه کارایی بالاتر آن در سلول‌های خورشیدی با ساختارهای نازک است.

۳- نتایج محاسبات نرم‌افزار SCAPS

برای طراحی سلول خورشیدی باید توجه داشت که امروزه حتی سلول خورشیدی پیشرفته تا ۱۴ لایه را به صورت 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 گالیوم‌آرسنید ما از یک نمونه p-i-n که سه لایه هست استفاده نموده که شکل آن در در شکل ۴ مشخص شده است.



شکل ۴. تغییرات انرژی نوار غدقن برای دو نیمه‌هادی سیلیکون و گالیوم‌آرسنید نسبت به دما

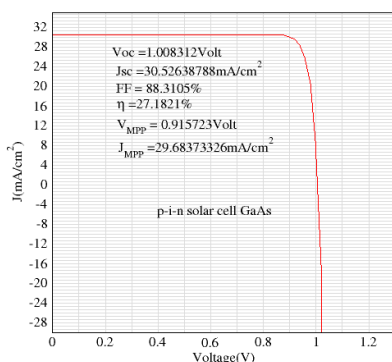
در شکل ۴، وابستگی گاف انرژی E_g سیلیکون و گالیوم‌آرسنید نسبت به دما در بازه‌ی ۰ تا ۹۰۰ کلوین نشان داده شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، با افزایش دما در هر دو ماده، مقدار E_g به‌تدریج کاهش می‌یابد که این رفتار مطابق با مدل استاندارد وارشنی‌ها-وارتز^۱ برای نیمه‌رساناها است. در تمامی دماها، گاف انرژی 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 نیمه‌رسانا را به‌خوبی منعکس می‌کند.

رابطه‌ی زیر محاسبه‌ی ضریب جذب را نشان می‌دهد:

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

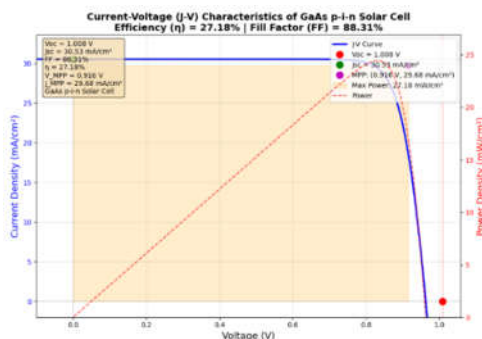
با مشخص بودن وابستگی انرژی نوار غدقن به دما می‌توان ضریب جذب در دماهای متفاوت را با توجه به تغییرات فرکانس‌های متفاوت رسم کرد. در شکل ۳، این تغییرات مشاهده می‌شود.

کاربردهای فتوولتائیک مناسب باشد.



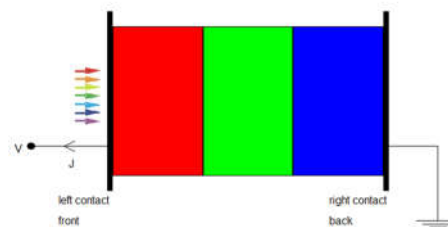
شکل ۴. شکل سلول خورشیدی و تابش نور بر سلول خورشیدی گالیوم آرسنید

در شکل ۵، به صورت تئوری با برنامه‌ی پایتون مقدار قدرت سلول خورشیدی محاسبه شده است. فایل پایتون برنامه در GitHub موجود است [۲۸].



شکل ۵. محاسبه‌ی دانسیته‌ی قدرت سلول خورشیدی با توجه به داده‌های برنامه‌ی SCAPS با زبان پایتون

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



شکل ۶. شکل سلول خورشیدی و تابش نور بر سلول ضخامت هر سه لایه $2\mu m$ است و باید توجه داشت که تابش نور از سمت چپ به لایه‌ی p می‌تابد. انتخاب ناخالصی برای نیمه‌هادی گالیوم آرسنید برای گروه دهنده می‌تواند لیتیم باشد و برای گروه پذیرنده سدیم یا مس [۲۴].

$N_A = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $N_d = 0$ برای لایه‌ی p، $N_A = 0$, $N_d = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ برای لایه‌ی n و $N_A = 0$, $N_d = 0$ برای لایه‌ی i انتخاب شده است.

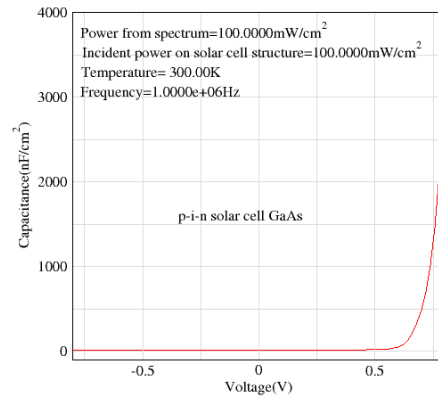
برای انتخاب کنتاکت‌گذاری برای نوع n این سلول خورشیدی می‌توان از آلیاژهایی همانند طلا ژرمانیم و نیکل استفاده کرد و برای نوع p از آلیاژهایی همانند طلا و روی [۲۵]. لایه‌ی ضدنوری که برای محاسبات انتخاب شده مخصوص خود نیمه‌هادی گالیوم آرسنید است. در این محاسبات، تغییرات چگالی جریان برحسب ولتاژ مشخص شده و در شکل ۵ مشخص شده است که $V_{oc} = 1.008 \text{ V}$ ،

$J_{sc} = 30.53 \text{ mA/cm}^2$ و همچنین مقدار $\eta = 27.1821\%$ و $FF = 88.3105\%$ است.

مقادیر به‌دست‌آمده برای چگالی جریان اتصال کوتاه، ولتاژ مدار باز، ضریب پرشدگی و بازده تبدیل انرژی نشان‌دهنده‌ی عملکرد مطلوب ساختار پیشنهادی هستند.

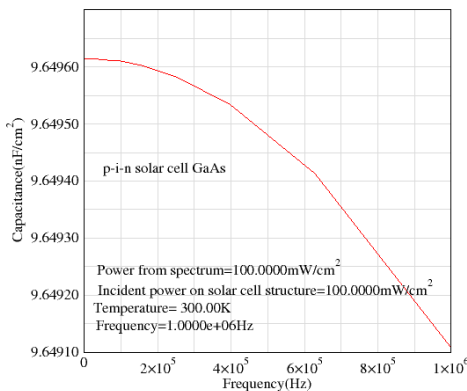
مقدار نسبتاً بالای V_{oc} بیانگر کاهش بازترکیب و اختلاف مناسب شبه‌ترازهای فرمی در دو سوی پیوند است. همچنین، مقدار مناسب J_{sc} نشان‌دهنده‌ی جذب مؤثر فوتون‌ها، تولید کارآمد حامل‌های بار و جمع‌آوری مناسب آن‌ها در ناحیه فعال می‌باشد. ضریب پرشدگی بالای FF نیز حکایت از مقاومت سری پایین و کیفیت خوب جدایش و استخراج حامل‌ها دارد. در نتیجه، بازده η به‌دست‌آمده نشان می‌دهد که ساختار پیشنهادی از نظر اپتوالکترونیکی عملکرد قابل‌توجهی داشته و می‌تواند برای

انجام‌شده با SCAPS این روند را به‌درستی بازتولید کرده است. منحنی ظرفیت - ولتاژ سلول خورشیدی p-i-n مبتنی بر GaAs نشان می‌دهد که در ناحیهی بایاس معکوس ظرفیت مقدار بسیار کمی دارد و تقریباً مستقل از ولتاژ است که این موضوع ناشی از پهن شدن ناحیهی تخلیه و کیفیت مناسب ساختار نیمه‌رسانا است. با ورود به ناحیهی بایاس مستقیم، ظرفیت ناگهان افزایش می‌یابد و رفتار آن تحت‌تأثیر ظرفیت انتشار قرار می‌گیرد که در نتیجه تزریق شدید حامل‌ها در اتصال p-i-n رخ می‌دهد. این ویژگی‌ها کاملاً با مدل فیزیکی دیوهای GaAs و نتایج شبیه‌سازی SCAPS سازگار است.



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

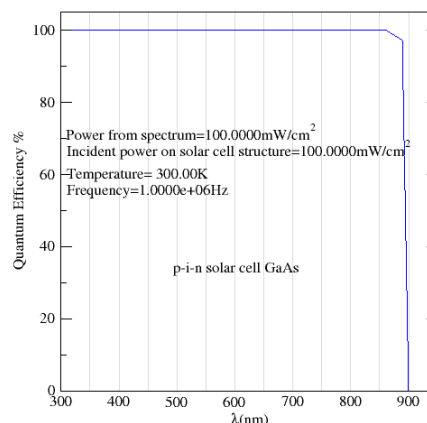
همان‌طور که در نمودار ۷ مشاهده می‌شود، در ناحیهی بایاس معکوس (ولتاژهای منفی)، ظرفیت ساختار p-i-n تقریباً مقدار کمی دارد و تغییرات آن بسیار محدود است. این رفتار ناشی از پهن شدن ناحیهی تخلیه بر اثر اعمال بایاس معکوس است. با افزایش ولتاژ منفی، عرض ناحیهی تخلیه بزرگتر می‌شود و در نتیجه ظرفیت دیودی که رابطه‌ی معکوس با عرض ناحیهی تخلیه دارد کاهش می‌یابد. تخت بودن منحنی در این ناحیه کیفیت مناسب ساختار و نبود تله‌های سطحی مؤثر را نشان می‌دهد. در ناحیهی بایاس مستقیم (ولتاژهای مثبت نزدیک به ۰/۸ تا ۱ ولت)، منحنی ظرفیت افزایش چشمگیری را نشان می‌دهد. این افزایش ناشی از کاهش عرض ناحیهی تخلیه و غالب شدن مکانیسم ظرفیت انتشار^۲ 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 بزرگتری دارد. این رفتار با مدل فیزیکی یک دیود p-i-n مبتنی بر GaAs کاملاً سازگار است؛ زیرا لایه‌ی i با ضخامت قابل‌توجه در شرایط بایاس معکوس ناحیهی تخلیه را گسترش و ظرفیت را کاهش می‌دهد، درحالی‌که این لایه در بایاس مستقیم از حالت تخلیه خارج و ظرفیت انتشار ناشی از حامل‌های تزریق‌شده غالب می‌شود. شبیه‌سازی



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

در شکل ۸، تغییرات ظرفیتی خازنی سلول خورشیدی نسبت به فرکانس مشخص شده است. یکی از دلایل‌هایی که هرچه فرکانس زیاد می‌شود و ظرفیت خازنی کم می‌شود دلیل آن به خاطر لایه‌ی ضخیم i است و ظرفیت تخلیه در این ساختار کم است و بخش زیادی ظرفیت از ناحیهی 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 به دنبال کردن سریع تغییرات نیستند. در نتیجه، ظرفیت انتشار کاهش می‌یابد و تنها ظرفیت ناحیهی تخلیه باقی می‌ماند. این موضوع باعث کاهش تدریجی ظرفیت اندازه‌گیری‌شده با افزایش فرکانس خواهد

شد. همچنین، در آخرین شکل، شکل بهره‌ی کوانتومی سلول خورشیدی را رسم و محاسبه شده است.



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

مطابق نمودار شکل ۹، بازده کوانتومی سلول در محدوده‌ی طول موجی ۳۰۰ تا حدود ۸۷۰ نانومتر به مقدار بهینه (نزدیک به ۱۰۰ درصد) رسیده است. این سطح بالا از بازده نشان‌دهنده‌ی کیفیت عالی جدایش حامل‌های بار و بازترکیب بسیار کم در ناحیه‌ی فعال (لایه‌ی i) است که بیانگر طراحی بهینه‌ی ضخامت و پارامترهای فیزیکی لایه‌ی میانی در ساختار p-i-n است. نمودار نشان‌دهنده‌ی «لایه‌ی برش»^۳ بسیار تیزی در حدود ۸۷۰ تا ۹۰۰ نانومتر است. این رفتار منطبق بر مقدار گاف انرژی^۴ 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. تخت بودن نمودار در محدوده‌ی 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 کوانتومی (به دلیل بازترکیب سطحی یا حجمی) در این محدوده

نشان‌دهنده‌ی 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 کوانتومی مشاهده می‌شود، سلول خورشیدی p-i-n طراحی‌شده عملکردی در سطح ایدئال (نزدیک به ۱۰۰ درصد) را در گستره‌ی وسیعی از طول موج‌ها (۳۰۰ تا ۸۷۰ نانومتر) نشان می‌دهد. افت شدید منحنی در نزدیکی ۹۰۰ نانومتر تأییدکننده‌ی مقدار گاف انرژی GaAs در شبیه‌سازی است. این پاسخ طیفی مطلوب مؤید کارایی بالای ساختار پیشنهادی در جمع‌آوری حامل‌ها و به حداقل رساندن اتلاف‌های نوری است که این سلول را به گزینه‌ای بسیار کارآمد برای کاربردهای فتوولتائیک تبدیل می‌کند.

۵- 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:

۵-۱. مدل انتقال حامل‌های بار

انتقال حامل‌ها بر اساس 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 به‌دلیل ماهیت نیمه‌هادی کلاسیک آن‌ها، دقیق‌ترین رویکرد است.

۵-۲. 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 شد است.
- بازترکیب Shockley-Read-Hall (SRH): برای مدل‌سازی عیوب شبکه‌ای و ترازهای تله (Trap levels)، طول

پارامترهای ساختاری و الکترونیکی در طراحی حاضر می‌باشد.

در این تحقیق، عملکرد اپتوالکترونیکی سلول خورشیدی GaAs با ساختار p-i-n به صورت عددی شبیه‌سازی و تحلیل شد. نتایج نشان داد که سلول طراحی شده از بازده کوانتومی بسیار بالایی در بازه‌ی طول موجی ۳۰۰ تا ۸۷۰ نانومتر برخوردار است و لایه‌ی برش تیز آن در نزدیکی ۹۰۰ نانومتر انطباق کاملی با گاف انرژی ماده‌ی GaAs دارد. این ویژگی طیفی بیانگر جذب مؤثر فوتون‌ها، تولید کارآمد زوج‌های الکترون-حفره و جمع‌آوری بهینه‌ی حامل‌ها در لایه‌ی ذاتی (i) است که خود نشان‌دهنده‌ی کیفیت ساختاری مناسب، کاهش بازترکیب و طول نفوذ مطلوب حامل‌ها در ساختار پیشنهادی می‌باشد.

همچنین بررسی مشخصه‌ی ظرفیت-ولتاژ (C-V) نشان داد که در بایاس معکوس، ظرفیت ساختار مقدار کمی داشته 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 قابل‌توجهی در ظرفیت مشاهده شد که ناشی از غالب شدن ظرفیت نفوذی و تزریق شدید حامل‌ها به ناحیه ذاتی است. این نتایج تطابق کاملی با مدل فیزیکی دیود p-i-n داشته و صحت طراحی و اعتبار شبیه‌سازی‌های انجام‌شده را تأیید می‌کند.

در مجموع، یافته‌های این پژوهش نشان می‌دهد که ساختار پیشنهادی p-i-n مبتنی بر GaAs می‌تواند به عنوان گزینه‌ی بسیار مناسب و کارآمد برای کاربردهای فتوولتائیک با بازده بالا مطرح شود و زمینه‌ای برای توسعه‌ی عملی و مطالعات تجربی آینده فراهم آورد.

۷- سپاسگزاری

نویسنده‌ی این مقاله از همه‌ی کارکنان محترم کتابخانه پژوهشگاه مواد انرژی، که در به‌روزرسانی این مقاله همکاری کردند سپاسگزاری می‌کند. این پژوهش با پشتیبانی مرکز فیزیک نظری انجام شده است و بدین‌وسیله از این مرکز تشکر و سپاسگزاری می‌شود.

منابع

Reference:

عمر حامل‌ها (τ) و سطح مقطع جذب بر اساس کیفیت کریستالی مرجع تنظیم شده است.

- بازترکیب اوزنه: در لایه‌های با غلظت ناخالصی بالا (لایه‌های p و n)، بازترکیب اوزنه برای پیش‌بینی دقیق افت ولتاژ لحاظ گردید.

۳-۵. مدل جذب نوری

به‌جای استفاده از یک ضریب ثابت، داده‌های تجربی مربوط به ضریب جذب (α) به صورت فایلی (Absorption file) به نرم‌افزار داده شد. این داده‌ها بر اساس وابستگی α به انرژی فوتون ($h\nu$) هستند که اجازه می‌دهد بازده کوانتومی (QE) در تمام طول‌موج‌های طیف AM1.5G به‌درستی محاسبه شود.

۴-۵. شرایط مرزی و اتصالات

- اتصالات فلزی: برای اتصال جلویی و پشتی، تابع کار (Work Function) فلزات به‌گونه‌ای انتخاب شد که سد پتانسیل شاتکی یا اتصال اهمی مطابق با واقعیت ایجاد شود.
- سرعت بازترکیب سطحی: برای مدل‌سازی غیرایده‌آل بودن سطوح تماس، سرعت بازترکیب برای الکترون‌ها و حفره‌ها در حدود 10^5 cm/s (یا مقدار دقیق‌تر خودتان) در نظر گرفته شد تا اتلاف‌های سطحی لحاظ شوند.

۶- بحث و نتیجه‌گیری

هدف این پژوهش ارائه‌ی راهکاری ساده و کارآمد برای طراحی یک سلول خورشیدی با بازده بالا و مقایسه‌ی عملکرد آن با نتایج تجربی گزارش‌شده در مقالات داخلی [۶-۲۷] بود. مقایسه‌ها نشان می‌دهد که بازدهی ساختار پیشنهادی در این مطالعه به‌طور قابل‌توجهی بالاتر از مقادیر تجربی گزارش‌شده در پژوهش‌های پیشین است که بیانگر بهینه‌سازی موفق

- [11] P.A. Iles, (Jan. 2000) *Prog. Photovolt. Res.Appl.* 8 (1) 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, et al, (Nov. 2017) *Sol. Energy* 157 216, <https://doi.org/10.1016/j.solener.2017.08.023>.
- [13] M. Burgelman, P. Nollet, and S. Degraeve, (2000) *Thin Solid Films*, vol. 361-362, pp. 527 [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, and M. Burgelman, (2011) *Thin Solid Films*, vol. 519, pp. 7481–7484. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2010.12.039>
- [15] M. Burgelman, K. Decock, S. Khelifi, and A. Abass, (2013) *Thin Solid Films*, vol. 535, pp. 296 <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2012.10.032>
- [16] J. Verschraegen and M. Burgelman, (2007) *Thin Solid Films*, vol. 515, pp. 6276–6279. <https://doi.org/10.4236/epe.2023.159016>
- [17] K. Decock, P. Zabierowski, and M. Burgelman, (2012) *Journal of Applied Physics*, vol. 111, 043703. <http://dx.doi.org/10.1063/1.3686651>
- [18] Rafee, V., Razeghizadeh, A., Rashidi, N. et al. *Opt Quant Electron* (2026) 58, 112. <https://doi.org/10.1007/s11082-026-08674-x>
- [19] Vahdat Rafee ,eisa rahimi ,hossien tavallali ,razieh maleki, *Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering*, (2026) e735092. <https://doi.org/10.30492/ijcce.2026.2085273.7475>
- [1] Z. Li, H.H. Tan, C. Jagadish, L. Fu, A (Sep.2018) *Review, Adv. Mater. Technol.* 3 (9) 1800005, <https://doi.org/10.1002/admt.201800005>
- [2] J. Luceno-Sánchez, A. Díez-Pascual, and R. Pena Capilla, (Feb. 2019) *Int. J. Mol. Sci.*, vol. 20, no.4, p. 976, <https://doi.org/10.3390/ijms20040976>
- [3] H. Ding and X. Sheng, “Thin-Film III–V Single Junction and Multijunction Solar Cells and Their Integration onto Heterogeneous Substrates,” in *Inorganic Flexible Optoelectronics*, Wiley, 2019, pp. 177–207
- [4] K. Tanabe, (Jul. 2009) *Energies* 2 (3) 504–530, <https://doi.org/10.3390/en20300504>
- [5] M. Yamaguchi, “High-Efficiency GaAs-Based Solar Cells,” in *Post-Transition Metals*, IntechOpen, 2021.
- [6] N. Papež, R. Dallaev, S. Tălu, J. Kaštyl, (Jun. 2021) *Materials* 14 (11) 3075, <https://doi.org/10.3390/ma14113075>
- [7] Y. Yun, S. Moon, S. Kim, J. Lee, (Oct.2022) *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 246 111930. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2022.111930>
- [8] S. Moon, K. Kim, Y. Kim, J. Heo, J. Lee, (Jul. 2016) *Sci. Rep.* 6 (1) 30107. <https://doi.org/10.1038/srep30107>.
- [9] C. Signorini, I. Duvaux-Béchon, L. Summerer, IAC-12.C3.1.1 SPACE AND ENERGY-CURRENT STATUS AND OUTLOOK, 63rd International Astronautical Congress (2012).
- [10] S. Kumar, N. Sharma, (Jan.2022) *J. Phys. Conf. Ser.* 2161 (1) 012011. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2161/1/012011>.

- [28] GitHub:
<https://github.com/atashbart/GaAs/tree/main>
- [20] Vahdat Rafee , Eisa Rahimi , Hossein Tavall ali , Rahmatollah Rajabi, Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry, (2025) Volume 18 , 102867 <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2025.116337>
- [21] Vahdat Rafee ,Alireza Razeghizadeh,Parisa Farhadi Birgani *Quarterly Journal of Optoelectronic*, 7(4), 27-38(2025) <https://doi.org/10.30473/jphys.2025.73662.1235>
- [22] S.M.SZE,YIMING LI, KWOK k. NG, "PHYSICS OF SEMICONDUCTOR DEVICES " FOURTH EDITION WILEY ISBN 9781119429135
- [23] R. R. King, D.C.Law, K.M.Edmondson , et.al (2007) Appl. Phys. Lett. 90 , 183516 <https://doi.org/10.1063/1.2734507>
- [24] HENIN K. HENISSCH, SEMICONDUCTING III-V COMPOUNDS ,PERGAMON PRESS LTD 1961
- [25] R.H.Cox, H. Strack, (1967) Solid State Electron 10, 1213 [http://dx.doi.org/10.1016/00381101\(67\)90063-9](http://dx.doi.org/10.1016/00381101(67)90063-9)
- [26] Mozhgan Kazemzadeh Otoufi; Mehdi Ranjbar; Ahmad Kermanpur; Nima Taghavinia; Mahsa Heidari, (Spring 2021)Journal of Advance of Material and Energy,Volume 10, Issue 1, Pages 1-12. <https://doi.org/10.30501/jamt.2021.225445.1084>
- [27] Sara Mashhoun; Amir Hossein Cheshmeh-Khavar; Mehdi Dehghani; Fariba Tajabadi; Nima Taghavinia, (Spring 2021) Journal of Advance of Material and Energy, Volume 10, Issue 1, , Pages 45-52 <https://doi.org/10.30501/jamt.2021.212974.1068>