

Efficiency Enhancement in a Perovskite Solar Cell with Carbon Electrodes by Plasmonic Coupled Nanoparticles

Ali Haghighat,¹ Abbas Ghadimi,^{2*} Abdollah Eskandarian³

¹ Department of Electrical Engineering, Ra.C., Islamic Azad University, Rasht, Iran, al.haghighat@iau.ac.ir

² Department of Electrical Engineering, La.C., Islamic Azad University, Lahijan, Iran, abbas.ghadimi@iau.ac.ir

³ Department of Electrical Engineering, Ra.C., Islamic Azad University, Rasht, Iran, dr.eskandarian@iau.ac.ir

Keywords:

thin-film perovskite solar cells,
high-efficiency photovoltaic devices,
plasmonic core-shell nanoparticles
performance enhancement,
toxicity reduction.

Original Research Article

Paper History:

Received: 10/06/2025

Revise: 30/08/2025

Accepted: 05/10/2025

Abstract: This research investigates the improvement of power conversion efficiency in thin-film organic-inorganic halide perovskite solar cells by incorporating plasmon-enhanced, coupled spherical core-shell nanoparticles into the absorber layer. To address the limitations of traditional metallic nanoparticles, core-shell structures were employed to improve both chemical and thermal stability. Electromagnetic field distributions and optical characteristics were analyzed by solving Maxwell's equations, while the electrical performance parameters were obtained through numerical simulations of the Poisson and continuity equations. Under optimized conditions, the perovskite solar cell demonstrated a notable performance, achieving an open-circuit voltage (Voc) of 1.056 V, short-circuit current density (Jsc) of 22.885 mA/cm², fill factor (FF) of 85.70%, and a power conversion efficiency (PCE) of approximately 21%. Moreover, the use of a thinner perovskite absorber layer contributed to a reduction in lead-related toxicity. This study provides a comprehensive framework for incorporating plasmonic coupled core-shell nanoparticles into high-efficiency thin-film perovskite solar cells. It highlights the dual benefits of improved photovoltaic performance and a reduced environmental impact, paving the way for more sustainable solar technologies.

How to cite this article: Haghighat, A., Ghadimi, A., Eskandarian, A., " Efficiency Enhancement in a Perovskite Solar Cell with Carbon Electrodes by Plasmonic Coupled Nanoparticles ", Energy Engineering and Management, Vol. 15, No. 1, PP. 20-33, 2025. <https://doi.org/10.22052/EEM.2025.257016.1125>

© 2023 University of Kashan Press.

This is an open access article under the CC BY license.(<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)



Extended Abstract

Introduction

Perovskite solar cells (PSCs) have attracted tremendous attention over the past decade as highly promising photovoltaic devices owing to their rapidly increasing power conversion efficiencies (PCEs), low-temperature processability, and potential compatibility with low-cost fabrication techniques. Despite impressive achievements, further performance improvements and long-term stability remain critical challenges. Thin perovskite films inherently suffer from incomplete light absorption, while interfacial instabilities and environmental degradation limit device lifetime. Moreover, the quest for scalable, carbon-based architectures introduces additional restrictions on optical management and carrier extraction. To overcome these limitations, plasmonic nanostructures have been proposed as effective light-trapping elements. Metallic nanoparticles (NPs), especially gold (Au) and silver (Ag), can sustain localized surface plasmon resonances (LSPRs) that concentrate electromagnetic fields into subwavelength volumes. When properly engineered, these resonances enhance light absorption, promote hot-carrier generation, and modify carrier dynamics. In particular, strong plasmonic coupling between closely spaced nanoparticles or between plasmonic and excitonic modes can lead to the formation of hybrid states, enhanced absorption spectra, and improved photocurrent generation. The present work aims to numerically investigate the role of metallic nanoparticles in carbon-based PSC architectures by embedding Au and Ag

Materials and Methods

All numerical simulations were performed using COMSOL. Multiphysics Optical modeling was conducted with the *Wave Optics* module, which solves the full three-dimensional Maxwell's equations by the finite element method (FEM). This approach yields spatial distributions of electromagnetic fields and absorption spectra for the perovskite active layer in the presence or absence of nanoparticles. The calculated optical generation rates were subsequently imported into the *Semiconductor* module, where the coupled Poisson and continuity equations for electrons and holes were solved self-consistently to extract key photovoltaic parameters including short-circuit current density (J_{sc}), open-circuit voltage (V_{oc}), fill factor (FF), and overall PCE.

The device structure considered is a planar perovskite solar cell with a transparent conductive oxide front contact, a PEDOT: PSS hole transport layer, the perovskite absorber, a carbon back electrode, and embedded metallic nanoparticles positioned near the perovskite layer. Au and Ag nanospheres with radii, ranging from 30 to 45 nm, were modeled. In addition to bare metallic nanoparticles, core-shell structures with a thin SiO_2

coating (~ 5 nm) were included to evaluate the impact of dielectric separation on optical and chemical stability. Material parameters such as refractive indices, dielectric constants, and charge transport properties were obtained from well-established literature databases to ensure realistic input values. Periodic boundary conditions were applied laterally to simulate ordered arrays, while perfectly matched layers were used at the top and bottom to absorb outgoing radiation.

Results

The optical simulations revealed that embedding plasmonic nanoparticles significantly modified the absorption profile of the perovskite layer. Both Au and Ag nanoparticles exhibited strong near-field enhancement and scattering, leading to increased light harvesting, particularly in the visible spectrum. However, Ag nanoparticles consistently outperformed Au in terms of field confinement and resonance alignment with the perovskite absorption band. Figure analyses showed that decreasing the interparticle spacing enhances the coupling strength. When nanoparticles were placed in close contact (gap ≈ 0 nm), the local fields strongly overlapped, producing plasmonic dimer coupling that resulted in red-shifted and broadened absorption peaks. This effect directly was translated into higher photogeneration rates, improved J_{sc} , and increased PCE. In contrast, when the spacing exceeded ~ 20 nm, the coupling weakened, and the enhancement became marginal.

Quantitatively, reference devices without nanoparticles exhibited modest optical absorption and limited J_{sc} . Introducing Ag nanoparticles (radius 40 nm, closely packed) led to an increase in J_{sc} by more than 20% and a PCE enhancement of approximately 15%. Au nanoparticles produced smaller gains under similar conditions. The addition of a SiO_2 dielectric shell further improved performance by preventing quenching effects at the metal-perovskite interface and mitigating possible chemical reactions between the nanoparticles and adjacent layers such as PEDOT:PSS. As a result, SiO_2 -coated Ag nanoparticles delivered the best overall performance, achieving the highest simulated PCE among all studied configurations.

Discussion and Conclusion

The findings clearly demonstrated that plasmonic coupling in metallic nanoparticle ensembles could significantly enhance the optical and electrical performance of carbon-based PSCs. Strong coupling between adjacent nanoparticles provided additional channels for light-matter interaction, manifested as hybrid plasmon-exciton states and improved carrier generation. While both Au and Ag nanoparticles exhibited plasmonic benefits, Ag emerged as the more practical choice due to its stronger resonance in the visible spectrum and substantially lower cost. Importantly, at the nanoscale, the total material

consumption was extremely small, rendering the use of Ag economically viable. Moreover, the observed superiority of Ag in both optical enhancement and techno-economic aspects highlighted its potential as the preferred plasmonic additive.

The use of SiO₂ shells played a dual role: optically, the dielectric coating modified the local refractive environment and fine-tuned resonance conditions; chemically, it acted as a barrier preventing direct interaction between the metal surface and sensitive perovskite or transport layers. This barrier was expected to prolong device stability by suppressing interfacial degradation pathways. Hence, the adoption of core-shell Ag@SiO₂ nanoparticles represented a practical route toward stable and efficient plasmonic PSCs. From a broader perspective, the study confirmed that plasmonic enhancement was not merely a theoretical curiosity but a viable strategy to tackle light-management and stability challenges in PSCs. Nevertheless, several hurdles remained. The intrinsic losses of metals,

potential parasitic absorption, thermal effects, and difficulties in reproducibly controlling nanoscale gaps all need careful consideration. Furthermore, translating these enhancements from simulation to experimental devices requires scalable and low-cost nanoparticle synthesis and integration methods.

Future research directions include the development of hybrid plasmonic–photonic cavities with optimized field distributions, the exploration of low-loss alternative materials or dielectric–metal hybrids, and engineering selective hot-carrier extraction interfaces. Industrially, the feasibility of large-area fabrication and long-term operational stability must be rigorously evaluated. Despite these challenges, the present work provides compelling evidence that incorporating core-shell plasmonic nanoparticles into PSCs is a promising pathway to achieve higher efficiencies while maintaining cost-effectiveness and stability.

افزایش بهره‌وری سلول خورشیدی پروسکایتی با الکتروود کربن به وسیله نانوذرات جفت‌شده پلاسمونیک

علی حقیقت^۱، عباس قدیمی^{۲*}، عبدالله اسکندریان^۳

^۱ دانشجوی دکتری، گروه مهندسی برق، واحد رشت، دانشگاه آزاد اسلامی، رشت، ایران، al.haghighat@iau.ac.ir

^۲ دانشیار، گروه مهندسی برق، واحد لاهیجان، دانشگاه آزاد اسلامی، لاهیجان، ایران، abbas.ghadimi@iau.ac.ir

^۳ استادیار، گروه مهندسی برق، واحد رشت، دانشگاه آزاد اسلامی، رشت، ایران، dr.eskandarian@iau.ac.ir

واژه‌های کلیدی:

سلول‌های خورشیدی پروسکایت لایه‌نازک،
سلول‌های خورشیدی پروسکایت بازدهی بالا،
نانوذرات جفت‌شده،
کاهش سمیت.

چکیده: این مطالعه، بهبود بازدهی تبدیل توان سلول خورشیدی پروسکایت هالید آلئ-معدنی لایه‌نازک را با تعبیه نانوذرات پلاسمونیک کروی جفت‌شده دارای ساختار پوسته-هسته در لایه جاذب بررسی می‌کند. به منظور افزایش پایداری شیمیایی و حرارتی، به جای استفاده از نانوذرات فلزی سنتی، از نانوذرات پوسته-هسته در لایه جاذب استفاده شده است. معادلات ماکسول برای تجزیه و تحلیل عملکرد میدان الکتریکی و تحلیل اپتیکی حل شده‌اند. درعین حال، پارامترهای الکتریکی این سلول‌های خورشیدی پروسکایت از طریق شبیه‌سازی عددی معادلات پواسون و پیوستگی به دست آمده است. در حالت بهینه‌سازی شده سلول خورشیدی پروسکایت، پارامترهای کلیدی از جمله ولتاژ مدار باز V_{oc} ۱/۰۵۶، چگالی جریان اتصال کوتاه (mA/cm^2) ۲۲/۸۵، ضریب پرشدگی ۸۵/۷۰٪ و بازدهی تبدیل توان حدود ۲۱٪ به دست آمده‌اند. همچنین، استفاده از لایه جاذب نازک پروسکایت موجب کاهش سمیت سرب شده است. این مطالعه یک نقشه راه جامع برای به کارگیری نانوذرات جفت‌شده پوسته-هسته در سلول‌های خورشیدی پروسکایت لایه‌نازک با بازدهی بالا ارائه می‌دهد و بر مزیت‌های استفاده از این نانوذرات برای بهبود عملکرد و کاهش سمیت تأکید دارد.

مقاله علمی پژوهشی

تاریخ دریافت: ۱۴۰۴/۰۳/۲۰

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۴/۰۶/۰۸

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۴/۰۷/۱۳

۱. مقدمه

سلول‌های خورشیدی به‌عنوان یک راه‌حل حیاتی برای مقابله با چالش‌های زیست محیطی ناشی از گرمایش جهانی و کاهش منابع سوخت‌های فسیلی شناخته شده‌اند. در این میان، سلول‌های خورشیدی مبتنی بر سیلیکون طی دو دهه گذشته با تسلط بر تولید برق جهانی، موفق به دستیابی به ظرفیت چشمگیر ۱۶۸ گیگاوات در سال ۲۰۲۱ شده‌اند. با این حال، برای رسیدن به هدف جهانی تولید ۱ تراوات انرژی تا سال ۲۰۳۰، نیاز به توسعه فناوری‌های نوین سلول‌های خورشیدی با کارایی بالاتر و مقرون به صرفه‌تر وجود دارد [۳-۱]. در سال‌های اخیر، سلول‌های خورشیدی پروسکایتی هیبریدی آل-معدنی^۱ (PSCs) تحولی بزرگ را تجربه کرده‌اند؛ به طوری که بازده تبدیل توان آن‌ها از ۳/۸٪ در سال ۲۰۰۹ به حدود ۲۶٪ در سال ۲۰۲۴ افزایش یافته است [۴ و ۵].

این پیشرفت چشمگیر، همراه با ویژگی‌هایی نظیر هزینه پایین تولید و قابلیت کوچک‌سازی در روش‌های ساخت محلول‌محور، موجب شده تا سلول‌های پروسکایتی به رقیبی جدی برای سلول‌های سیلیکونی در بازار انرژی تبدیل شوند. این سلول‌ها می‌توانند تسلط طولانی مدت سیلیکون را به چالش بکشند و به دلیل انعطاف‌پذیری و پتانسیل کاربرد در سازه‌های متنوع، آینده‌ای درخشان برای تجاری‌سازی دارند.

سلول‌های خورشیدی پروسکایتی در ساختارهای مختلفی طراحی و تولید می‌شوند. این ساختارها شامل انواع مزو متخلخل، مسطح (n-i-p) سستی، معکوس (p-i-n)، و همچنین ساختارهای بدون لایه انتقال‌دهنده حفره^۲ و بدون لایه انتقال‌دهنده الکترون^۳ هستند [۶].

در بسیاری از طراحی‌های PSC با کارایی بالا، از مواد گران‌قیمتی مانند اسپایروامتد^۴ برای لایه انتقال‌دهنده حفره^۵ و فلزات گران‌بهایی چون طلا (Au) یا نقره (Ag) برای الکترودها استفاده می‌شود. این مواد به ویژه در سطح تجاری، هزینه تولید سلول‌ها را به شدت افزایش می‌دهند. علاوه بر این، محدودیت‌های پایداری اسپایروامتد و مشکلات ناشی از رفتار حرکتی فلزات مانند طلا یا نقره در دماهای بالاتر از ۷۰ درجه سانتی‌گراد، منجر به چالش‌های پایداری و عملکردی PSC می‌شود [۷]. با توجه به این چالش‌ها، پژوهش‌های اخیر بر روی سلول‌های خورشیدی پروسکایتی مبتنی بر کربن متمرکز شده است. در

این رویکرد، اتصالات فلزی با مواد کربنی جایگزین می‌شود. این جایگزینی نه تنها هزینه‌های تولید را به طور چشمگیری کاهش می‌دهد بلکه با استفاده از مواد پایدارتر، مشکلات پایداری نیز برطرف می‌شود. این فناوری گامی مؤثر در مسیر تجاری‌سازی سلول‌های خورشیدی پروسکایتی به شمار می‌رود [۸].

پروسکایت فلز-آلی متیل آمونیوم سرب یدید با فرمول شیمیایی $(\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3)$ به‌عنوان یکی از مواد اصلی مورد استفاده در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی شناخته می‌شود. این ماده به دلیل فرایند ساده سنتز، هزینه پایین و عملکرد بالای خود توجه زیادی را به خود جلب کرده است. با این حال، ناپایداری و تجزیه سریع آن در برابر شرایط محیطی، همچنان موانعی جدی برای تجاری‌سازی این فناوری محسوب می‌شود [۹]. متیل آمونیوم سرب یدید دارای ویژگی‌های برجسته‌ای از جمله ضریب جذب بالا، قابلیت تنظیم شکاف انرژی، تحرک بالای حامل‌های بار، چگالی کم تله‌ها، زمان طولانی بازترکیب حامل‌ها و انرژی اتصال پایین اکسیتون است [۱۰]. لایه‌های نازک متیل آمونیوم به منظور کاهش سمیت دستگاه و کاهش محتوای سرب در دستگاه‌های سازگار با محیط‌زیست مورد استفاده قرار می‌گیرند. علاوه بر این، استفاده از مواد کمتر در مقیاس بزرگ می‌تواند هزینه‌ها را کاهش دهد [۱۱].

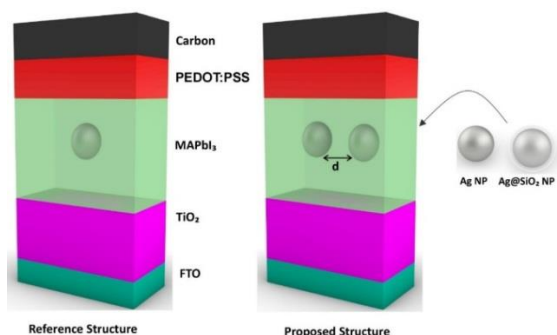
درعین حال، وجود ماده جاذب لایه‌نازک در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی باعث ایجاد چالش می‌شود. همان‌طور که از مطالعات قبل مشخص است، متیل آمونیوم سرب یدید به طور ذاتی در طول موج‌های بالاتر از ۶۰۰ نانومتر دارد، این ضعف در سلول‌های خورشیدی لایه‌نازک دوچندان می‌شود [۱۲].

برای مقابله با این محدودیت، روش‌های به دام انداختن نور^۶ (LT) در سلول‌های پروسکایتی نازک به کار گرفته می‌شود تا کارایی جذب نور در ناحیه‌های هدفمند افزایش یابد. از جمله روش‌های متداول به دام انداختن نور می‌توان به لایه‌های ضدانعکاس، آرایه‌های نانومخروط‌ها، ساختارهای فوتونیک، الگوهای توری و نانوذرات پلاسمونیک اشاره کرد [۱۳-۱۵].

نانوذرات پلاسمونیک به دلیل توانایی بالایی خود در حبس نور درون مواد نازک جذب‌کننده، به عنوان یکی از مؤثرترین روش‌ها برای افزایش کارایی سلول‌های خورشیدی نازک شناخته می‌شوند. نانوذرات پلاسمونیک با ایجاد برهم‌کنش‌های قوی بین نور و الکترون‌های سطحی، می‌توانند نور خورشید را به طور مؤثرتری در سلول‌های خورشیدی متمرکز کنند. این ویژگی نه تنها موجب افزایش

1. Perovskite Solar Cells
2. Free HTL Perovskite Solar Cells
3. Free ETL Perovskite Solar Cells
4. Spiro-OMeTAD
5. Hole Transport Layer

ساختارها، ساختار دوم و سوم طراحی شده‌اند که به ترتیب شامل نانوذرات کروی طلا و نقره هستند. سپس نقش فاصله نانوذرات و اثر جفت شدن آن‌ها بررسی شد؛ در نهایت برای بهترین حالت از مدل پوسته-هسته استفاده شد. همان‌طور که در شکل (۱) نشان داده شده، لایه نازک (PSC) با استفاده از نانوذرات کروی طلا و نقره به صورت خالص و پوسته-هسته در لایه جذب کننده بهبود یافته است. ساختار پیشنهادی این سلول خورشیدی شامل شش لایه به صورت شکل (۱)، طرح‌واره سه بعدی از ساختار سلول نمایش داده شده است.



شکل (۱): طرح‌واره سه بعدی از ساختار سلول پروسکایتی با نانوذرات پیشنهادی

لایه کربن به عنوان الکتروکربن پشتی سلول خورشیدی عمل می‌کند. کربن به دلیل هزینه کم، پایداری بالا و توانایی تولید در دماهای پایین، جایگزینی مناسب برای فلزات گران‌بهای مانند طلا و نقره است. همچنین، الکترودهای کربنی دارای انعطاف پذیری مکانیکی هستند که امکان تولید سلول‌های خورشیدی منعطف را فراهم می‌کنند. ضخامت لایه کربن ۵۰ نانومتر در نظر گرفته شده است. لایه بعدی PEDOT:PSS با ضخامت ۱۵۰ نانومتر است که به عنوان لایه انتقال‌دهنده حفره عمل می‌کند و وظیفه استخراج و انتقال حفره‌ها از لایه پروسکایت را بر عهده دارد. این لایه در برابر بسیاری از مواد شیمیایی و رطوبت محیطی مقاوم است. این پایداری شیمیایی به افزایش طول عمر سلول‌های خورشیدی کمک می‌کند. برخی مواد مانند Spiro-OMeTAD به دلیل حساسیت به رطوبت نیازمند بسته‌بندی‌های پیچیده‌تری هستند که هزینه و پیچیدگی فرایند تولید را افزایش می‌دهد. علاوه بر این، تحقیقات نشان داده‌اند که لایه‌های PEDOT:PSS در مقایسه با سایر مواد HTL می‌توانند به کاهش پدیده پسماند در سلول‌های خورشیدی کمک کنند. این ویژگی به معنای عملکرد پایدارتر و نتایج تکرارپذیرتر در آزمایش‌ها و کاربردهای واقعی است [۱۹].

بهره‌وری سلول‌های خورشیدی می‌شود، بلکه امکان کاهش ضخامت لایه‌های جذب کننده و در نتیجه کاهش هزینه‌های تولید را فراهم می‌کند. علاوه بر این، به کارگیری روش‌های پیشرفته به دام انداختن نور همراه با مواد پروسکایتی پایدارتر، می‌تواند به بهبود پایداری، بازده و قابلیت تجاری سازی این فناوری کمک کند. این ترکیب از بهبودهای فناورانه، می‌تواند راهی برای توسعه سلول‌های خورشیدی با کارایی بالاتر و هزینه کمتر باز کند، که در نهایت به تحقق اهداف جهانی انرژی‌های پاک و تجدیدپذیر کمک خواهد کرد [۱۵].

نانوذرات پلاسمونیک در بخش‌های مختلف PSC، از جمله لایه جذب، HTL و لایه انتقال‌دهنده الکترون^۱ (ETL) مورد استفاده قرار می‌گیرند. این نانوذرات به ویژه درون لایه جذب به کار گرفته می‌شوند تا از مزایای رزونانس پلاسمون سطحی موضعی^۲ (LSPR) بهره‌مند شوند [۱۲]. نانوذرات پلاسمونیک با اشکال متنوعی مانند کروی، نانومیله‌ای، مکعبی، هرمی و ستاره‌ای طراحی می‌شوند. در فرایند ساخت، نانوذرات پلاسمونیک کروی و نانومیله‌ای به دلیل سادگی نسبی در تولید، معمولاً در اولویت قرار می‌گیرند [۱۶-۱۸].

در این مطالعه، با استفاده از تحلیل اپتیکی-الکتریکی و به کارگیری نانوذرات پلاسمونیک کروی، به بررسی بهبود عملکرد در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی با الکتروکربن پرداخته شده است. در گام نخست، با تعبیه نانوذرات کروی طلا و نقره در لایه جذب کننده ۲۵۰ نانومتری، جذب نور در این سلول‌ها افزایش یافته، سپس، به بررسی تلفات نوری ایجاد شده توسط این نانوذرات پرداخته و ابعاد مختلف این پدیده تحلیل شده است. در مرحله بعد، فاصله بین نانوذرات و اثرات آن‌ها بر کارایی سلول بررسی شده است و در نهایت برای جلوگیری از فرایند اکسیداسیون نانوذرات و بهبود عملکرد آن‌ها از پوسته دی‌الکتریک استفاده شده است. این تحلیل کمک می‌کند تا با در نظر گرفتن همه عوامل مؤثر، بهینه‌سازی کارایی سلول‌های خورشیدی پروسکایتی با الکتروکربن محقق گردد. با ترکیب نوآورانه نانوذرات پلاسمونیک و مواد جدید، این پژوهش می‌تواند به بهبود قابل توجهی در کارایی و پایداری سلول‌های خورشیدی پروسکایتی منجر شود.

۲. طراحی سلول خورشیدی پروسکایتی پیشنهادی

در این مطالعه، چهار ساختار مختلف از سلول‌های خورشیدی پروسکایتی با الکتروکربن به طور جامع بررسی شده‌اند. ساختار اول به عنوان مرجع در نظر گرفته شده است. به منظور بهبود عملکرد این

1. Electron Transport Layer
2. Localized Surface Plasmon Resonance

همچنین، این ماده را می‌توان در دماهای پایین (کمتر از ۱۵۰ درجه سانتی‌گراد) پردازش کرد، که آن را برای تولید سلول‌های خورشیدی روی بسترهای انعطاف‌پذیر مانند پلاستیک مناسب می‌سازد. بسیاری از لایه‌های HTL دیگر نیازمند دماهای بالاتر برای ساخت و پایداری هستند که این موضوع می‌تواند باعث محدودیت در انتخاب بسترهای سلول شود [۲۰].

لایه بعدی Mapbi_3 است که به‌عنوان لایه جاذب نور عمل می‌کند و فوتون‌ها را جذب کرده و زوج‌های الکترون-حفره تولید می‌کند. این ماده همچنین امکان تولید در دماهای پایین را دارد که هزینه‌های ساخت را کاهش می‌دهد. ضخامت لایه جاذب ۲۵۰ نانومتر است. ضخامت کم این لایه در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی دو مزیت اصلی دارد: نخست، با کاهش ضخامت، میزان سرب مورد استفاده کمتر شده و به‌تبع آن سمیت ناشی از کاتیون‌های سرب کاهش می‌یابد که منجر به کاهش آلودگی‌های محیطی می‌شود [۱۱]. دوم، این کاهش ضخامت، بهبود پایداری حرارتی سلول خورشیدی را به دنبال دارد و همزمان باعث افزایش نرخ استخراج بارهای الکتریکی می‌شود، که در نهایت به بهبود عملکرد و بهره‌وری کلی سلول کمک می‌کند [۲۱].

TiO_2 به‌عنوان لایه انتقال الکترون (ETL) عمل می‌کند و وظیفه استخراج الکترون‌ها از لایه پروسکایت و جلوگیری از عبور حفره‌ها را بر عهده دارد. این ماده به‌دلیل پایداری شیمیایی بالا، باند گپ مناسب و سازگاری خوب با پروسکایت‌ها، انتخابی مناسب به‌عنوان لایه انتقال الکترون است. این لایه همچنین از بازترکیب الکترون‌ها جلوگیری کرده و بازده سلول را بهبود می‌بخشد. مطالعات پیشین نشان داده‌اند که استفاده از فرم‌های متراکم و مزومخلخل TiO_2 می‌تواند اثرات نامطلوبی بر رفتار پسماند ولتاژ-جریان، PCE و پایداری سلول به‌دلیل مهاجرت یون‌ها داشته باشد [۲۲].

پس از این لایه، FTO با ضخامت ۶۵ نانومتر قرار دارد. این الکتروود شفاف می‌تواند به‌عنوان هدایت‌کننده مسیر جریان الکتریکی عمل کند. این ماده به‌دلیل شفافیت بالا، پایداری شیمیایی و حرارتی، و قابلیت انتقال الکتریسیته، انتخابی بهتر نسبت به مواد دیگری مانند ITO (اکسید قلع ایندیوم) است. همچنین، FTO به دلیل پایداری بیشتر و فراوانی بیشتر فلورین در مقایسه با ایندیوم، ترجیح داده می‌شود. ماده FTO بر روی بستر سیلیکا بسیار نازک قرار دارد که عموماً از ورود آلودگی‌های محیطی به ساختار جلوگیری می‌کند [۲۳]. به‌طور کلی، جاذب‌های پروسکایتی می‌توانند نور خورشید را در محدوده ۳۰۰ تا ۸۰۰ نانومتر براساس باندگپ خود جذب کنند، اما

جذب آن‌ها از حدود ۶۰۰ نانومتر کاهش می‌یابد و باعث کاهش جذب در ناحیه نزدیک به مادون قرمز می‌شود. برای حل این مشکل، نانوذرات پلاسمونیک را می‌توان در لایه جاذب تعبیه کرد تا خواص پلاسمونیک ایجاد شود.

این نانوذرات می‌توانند در ناحیه فعال نوری قرار گیرند تا توانایی جذب سلول‌های خورشیدی پروسکایت در ناحیه نزدیک به مادون قرمز تقویت شود. برای بهره‌برداری بهینه از اثر رزونانس پلاسمون سطحی محلی (LSPR)، نانوذرات فلزی با اشکال مختلف در ناحیه فعال سلول خورشیدی پروسکایت هالید لایه نازک تعبیه می‌شوند. همچنین، به‌منظور جلوگیری از تجزیه نانوذرات فلزی به واسطه خواص خوردنده پروسکایت، یک لایه نازک دی‌الکتریک به‌عنوان ساختار پوسته-هسته به کار گرفته می‌شود که موجب افزایش پایداری شیمیایی و حرارتی نانوذرات درون لایه جاذب پروسکایت می‌شود.

هنگامی که نور ورودی به لایه جاذب وارد می‌شود، توسط نانوذرات فلزی پراکنده شده و سپس این نور پراکنده‌شده توسط پروسکایت اطراف نانوذرات جذب می‌شود که به‌عنوان پراکندگی در میدان دور شناخته می‌شود. این فرایند باعث افزایش شدت میدان الکترومغناطیسی در نزدیکی سطح نانوذرات نسبت به نور اولیه می‌شود که به آن کوپلینگ میدان نزدیک گفته می‌شود. این فرایند باعث افزایش شدت میدان الکترومغناطیسی در نزدیکی سطح نانوذرات نسبت به نور اولیه می‌شود. این افزایش میدان محلی باعث تولید الکترون‌های داغ می‌شود که می‌توانند به نوار رسانش پروسکایت تزریق شوند؛ البته به‌شرطی که ضخامت پوسته کمتر از طول تونل‌زنی الکترون باشد که به آن انتقال الکترون داغ^۱ (HET) گفته می‌شود. علاوه بر این، نور جذب‌شده توسط نانوذرات فلزی می‌تواند از طریق تولید اکسایتون‌ها در پروسکایت منتقل شود که نتیجه کوپلینگ دوقطبی-دوقطبی است (انتقال انرژی رزونانس پلاسمونی^۲ یا PRET).

۳. روش‌های مدل‌سازی و شبیه‌سازی

در این تحقیق، از روش المان محدود (FEM) سه‌بعدی برای مدل‌سازی اپتیکی و الکتریکی سلول خورشیدی پروسکایتی استفاده شده است. در ابتدا معادلات ماکسول حل شد و شدت میدان الکتریکی که معمولاً به‌صورت $|E(r, \lambda)|$ نمایش داده می‌شود، به دست آمد؛ سپس طیف جذب سلول خورشیدی پروسکایتی با استفاده از معادله (۱) محاسبه گردید.

1. Hot Electron Transfer

2. Plasmon resonance energy transfer

در این معادلات، G نرخ تولید جفت الکترون-حفره است. J_n و J_p به‌ترتیب چگالی جریان حامل‌های الکترون و حفره هستند و U_p و U_n نرخ‌های بازترکیب خالص برای حفره‌ها و الکترون‌ها را نشان می‌دهند. این پارامترها نقش کلیدی در تعیین میزان بازترکیب حامل‌های بار در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی دارند که بهره‌وری نهایی دستگاه را تحت‌تأثیر قرار می‌دهند. معادلات فیزیکی حاکم بر سلول خورشیدی پروسکایتی با معادلات نفوذ (۹ و ۱۰) به پایان می‌رسند. در این معادلات، μ_n و D_n به‌ترتیب نشان‌دهنده تحرک‌پذیری و ضریب نفوذ حامل‌های الکترونی و μ_p و D_p به‌ترتیب نشان‌دهنده تحرک‌پذیری و ضریب نفوذ حامل‌های حفره‌ای هستند. همچنین q بار الکتریکی اولیه را نشان می‌دهد که نقش اساسی در مدل‌سازی انتقال حامل‌های بار در سلول خورشیدی پروسکایتی دارد و شامل رانش تحت میدان الکتریکی و نفوذ به دلیل گرادیان غلظت می‌شود.

$$J_n = qp\mu_n E + qD_n \frac{\partial n}{\partial x} \quad (9)$$

$$J_p = qp\mu_p E + qD_p \frac{\partial n}{\partial x} \quad (10)$$

در این تحقیق، از روش المان محدود (FEM) سه بعدی برای مدل‌سازی اپتیکی و الکتریکی سلول خورشیدی پروسکایتی استفاده شده و همه مراحل شبیه‌سازی با استفاده از نرم‌افزار COMSOL Multiphysics انجام شده است. برای تحلیل اپتیکی، ماژول Wave Optics به کار گرفته شده است تا معادلات ماکسول سه‌بعدی حل شده و توزیع میدان الکترومغناطیسی و طیف جذب محاسبه شود؛ سپس نتایج جذب و نرخ تولید جفت الکترون-حفره به ماژول Semiconductor منتقل شده تا معادلات پواسون و پیوستگی حامل‌ها حل شود و پارامترهای کلیدی سلول خورشیدی شامل استخراج شوند.

۴. نتایج و بحث

تحلیل‌های صورت‌گرفته برای بررسی سلول خورشیدی پروسکایتی به دو دسته اپتیکی و الکتریکی تقسیم می‌گردد. در ابتدا برای صحت‌سنجی شبیه‌سازی انجام‌شده، نتایج با یکی از مطالعات آزمایشگاهی سلول خورشیدی پروسکایت با نانوذرات پلاسمونیک مقایسه شده است. در جدول (۱) پارامترهای خروجی شبیه‌سازی و مطالعه آزمایشگاهی قبلی نشان داده شده است.

$$A(r, \omega) = \frac{1}{2} \frac{\omega \epsilon_0 \operatorname{Im}(\epsilon(r, \omega)) |E(r, \omega)|^2}{P_{in}} \quad (1)$$

در معادله (۱)، A نشان‌دهنده شرایط استاندارد نور خورشید با توان ۱۰۰۰ وات بر متر مربع است. نمادهای ω و r به‌ترتیب نشان‌دهنده مکان خاص و فرکانس زاویه‌ای هستند. ثابت دی‌الکتریک محیط با ϵ و گذردهی الکتریکی خلا با ϵ_0 نمایش داده شده است. علاوه بر این، از معادله (۱) برای محاسبه تلفات نوری نانوذرات استفاده می‌شود. جذب خالص با کم کردن تلفات نوری از جذب کل به دست می‌آید؛ همان‌طور که در معادله (۲) نشان داده شده است.

$$A_{net}(\lambda) = \int_{V_{absorber}} A(r, \lambda) dV - \int_{V_{nanoparticles}} A(r, \lambda) dV \quad (2)$$

براساس معادله (۳)، از انتگرال‌گیری بر روی بازه جذب ماده پروسکایت استفاده کرده و مقدار عددی جریان نوری یا چگالی جریان اتصال کوتاه تعیین شده است.

$$J_{SC} = \int_{300nm}^{800nm} A(\lambda).AM1.5D(\lambda) d\lambda \quad (3)$$

نرخ تولید الکترون-حفره در سلول خورشیدی پروسکایت به‌وسیله معادله (۴) محاسبه شده است.

$$G(x, y, z, \lambda) = \frac{\epsilon_0}{2\hbar} \frac{\operatorname{Im}(\epsilon(r, \lambda)) |E(r, \lambda)|^2}{P_{in}} \quad (4)$$

معادله (۵) تعداد جفت‌های الکترون-حفره تولیدشده در هر نقطه را محاسبه می‌کند. این معادله، میزان تولید حامل‌های بار در ماده جاذب بر اثر جذب نور را تعیین می‌کند.

$$G(x, y, z, \lambda) = \int G(x, y, z, \lambda) d\lambda \quad (5)$$

پس از تکمیل تحلیل اپتیکی، به تحلیل الکتریکی پرداخته می‌شود. در معادله (۶)، E ، ϕ ، ψ و به‌ترتیب میدان الکتریکی، گذردهی مواد، چگالی بار فضایی و پتانسیل الکترواستاتیک را نشان می‌دهند. همچنین N_D و N_A به‌ترتیب بار الکتریکی، چگالی‌دهنده‌ها و پذیرنده‌های یونیزه‌شده هستند. این نمادها به ما در فهم رفتار الکتریکی سلول خورشیدی پروسکایت کمک می‌کنند و فرایند انتقال بار و دینامیک حامل‌های بار را توضیح می‌دهند.

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial^2 x} = -\frac{\partial E}{\partial x} = -\frac{\rho}{\epsilon_s} = \frac{q}{\epsilon_s} [p - n + N_D(x) - N_A(x) \pm N_{def}(x)] \quad (6)$$

معادله (۷) معادله پیوستگی حامل برای الکترون‌ها و معادله (۸) برای حفره‌ها را نشان می‌دهد.

$$\frac{\partial J_n}{\partial x} + G - U_n(n, p) = 0 \quad (7)$$

$$-\frac{\partial J_p}{\partial x} + G - U_p(n, p) = 0 \quad (8)$$

جدول (۱): مقایسه نتیجه شبیه سازی و مطالعه آزمایشگاهی در مرجع [۲۶]

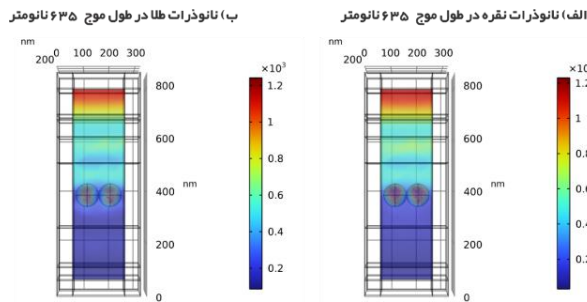
بازدهی (%)	FF (%)	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm ²)	ساختار [۲۶]
۱۲/۵۹	۷۳/۸۳	۰/۹۸	۱۷/۴۰	مرجع
۱۳/۷۱	۷۶/۸۶	۱/۰۱	۱۷/۶۶	شبیه سازی
۱۶/۸۸	۷۴/۸۶	۱/۰۴	۲۱/۶۸	مرجع با استفاده از نانوذره [۲۶]
۱۶/۸۷	۷۹/۱۴	۱/۰۵	۲۰/۳۰	شبیه سازی

همان طور که جدول (۱) نشان می دهد، نتایج به دست آمده دقت خوبی نسبت به نتایج آزمایشگاهی و ساخت دارد. در این مطالعه، بازده تبدیل توان^۱ (PCE) سلول خورشیدی پروسکایتی لایه نازک (PSC) با استفاده از نانوذرات کروی طلا و نقره به صورت خالص و هسته-پوسته در لایه جذب کننده بهبود یافته است. مشخصات و ضخامت تمامی مواد مورد استفاده در سلول خورشیدی پروسکایتی در جدول (۲) ذکر شده است. تمامی مشخصات اپتیکی و الکتریکی مورد استفاده در این پژوهش از کارهای معتبر قبلی استخراج شده است [۵، ۱۲ و ۲۵-۲۹].

جدول (۲): پارامترهای الکتریکی ساختار سلول پروسکایتی

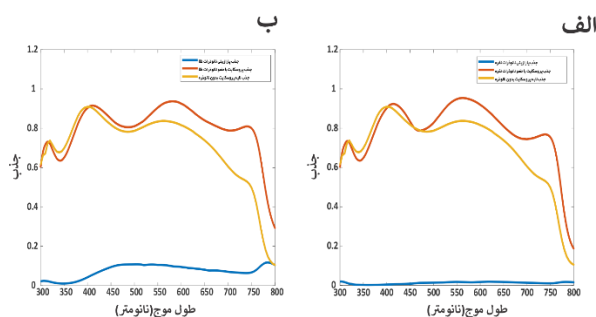
پارامتر	PEDOT: PSS	MAPbI ₃	TiO ₂
ضخامت (nm)	۱۵۰	۲۵۰	۱۰۰
شکاف باند (eV)	۱/۶	۱/۵	۳/۶
الکترون خواهی (eV)	۳/۳۵	۳/۹۳	۴/۱
گذردهی دی الکتریک	۳	۲۴/۱	۹
چگالی مؤثر حالت ها CB (cm ⁻³)	$2/2 \times 10^{18}$	$8/1 \times 10^{18}$	$2/2 \times 10^{18}$
چگالی مؤثر حالت ها VB (cm ⁻³)	1×10^{19}	$8/1 \times 10^{18}$	1×10^{19}
تحرك پذیری الكترون (cm ² .V ⁻¹ .s ⁻¹)	۰/۰۴۵	۱	۱۰۰
تحرك پذیری حفره (cm ² .V ⁻¹ .s ⁻¹)	۰/۰۴۵	۲۰	۲۵
غلظت دو پیوند دهنده (cm ⁻³)	-	1×10^9	1×10^{17}
غلظت دو پیوند پذیرنده (cm ⁻³)	9×10^{15}	1×10^9	-
ضریب باز ترکیب تشعشعی	-	$3/27 \times 10^{-11}$	-
ضریب باز ترکیب اوزه	-	$0/88 \times 10^{-29}$	-

برای شروع، در ابتدا برای محاسبه شدت میدان الکتریکی در درون ساختار و محاسبه جذب از آن، معادلات ماکسول برای ساختار مربوطه یک بار بدون وجود نانوذرات و بار دیگر با تعبیه نانوذرات طلا و نقره در لایه جذب پروسکایتی با استفاده از روش المان محدود (FEM)^۲ حل گردید. شکل (۲) شدت میدان الکتریکی را در طول موج ۶۳۵ نانومتر برای نانوذرات طلا و نقره نشان می دهد.



شکل (۲): شدت میدان الکتریکی در طول موج ۶۳۵ نانومتر برای نانوذرات: الف) نقره؛ ب) طلا

همان طور که در شکل (۲) نشان داده شده است، نانوذرات نقره عملکرد بهتری را در بهبود میدان الکتریکی از خود نشان می دهند که این امر موجب جذب بهتر و بازدهی بالای سلول خورشیدی پروسکایتی با استفاده از این نوع از نانوذرات می شود. این بهبود جذب در شکل (۳) به وضوح نشان داده شده است.



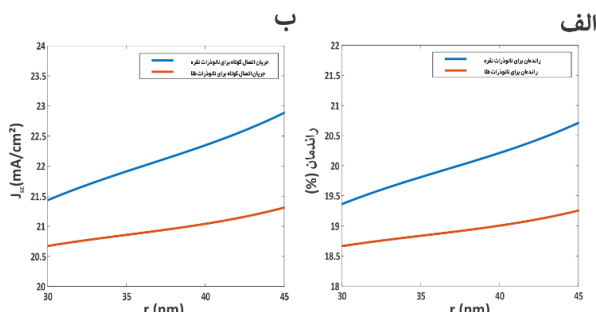
شکل (۳): مقایسه جذب لایه پروسکایت با تعبیه نانوذرات مختلف: الف) نقره ب) طلا

همان طور که در شکل (۳) مشاهده می شود، جذب لایه پروسکایت به هنگام تعبیه نانوذرات نقره بهتر از نانوذرات طلاست. همچنین نانوذرات نقره جذب پارازیتی کمتری را در مقایسه با نانوذرات با جنس طلا از خود نشان می دهند. این عملکرد بالا در بهبود جذب لایه جاذب MAPbI₃ موجب افزایش نرخ تولید الکترون-حفره می گردد. طبیعتاً با افزایش نرخ تولید الکترون-حفره شاهد افزایش جریان اتصال کوتاه (J_{sc}) به هنگام بررسی الکتریکی ساختار مربوطه خواهیم بود.

نانوذرات فلزی پلاسمونی زمانی رخ می‌دهد که نرخ برهم‌کنش میان رزونانس پلاسمونی و یک مود نوری یا اکسیتونی از مجموع نرخ‌های اتلاف بیشتر باشد و حالت‌های هیبریدی پلاسمون-اکسیتون (یا پلاسمون-فوتون) همراه با شکاف رابی در طیف به وجود آید. این پدیده در ساختارهای نانومتری با هم‌پوشانی قوی میدان نزدیک و گذردهی بالای مود اکسیتونی یا فوتونی حاصل می‌شود و در طیف بازتاب یا جذب مشاهده می‌گردد. مکانیسم‌های اصلی شامل هیبریداسیون پلاسمون-اکسیتون، جفت‌شدگی چندمودی میان رزونانس‌های مختلف مانند LSPR و مدهای شکاف، تولید و انتقال حامل‌های داغ ناشی از واپاشی پلاسمون است که هریک مسیرهای جدیدی برای بهبود جذب و دینامیک بار فراهم می‌کنند و در نهایت، منجر به بهبود جذب و افزایش کارایی سلول خورشیدی می‌شود [۳۰-۳۲].

در مرحله بعدی، برای بررسی تأثیر افزایش اندازه نانوذرات بر عملکرد سلول خورشیدی پروسکایتی، شعاع نانوذرات فلزی از ۳۰ نانومتر به ۴۵ نانومتر افزایش یافت. تأثیر افزایش شعاع نانوذرات کروی فلزی بر عملکرد ساختار در شکل (۵) نشان داده شده است. همچنین پارامترهای نهایی در جدول (۴) برای نانوذرات با شعاع ۴۵ نانومتر آورده شده است.

پارامتر (واحد)	J_{sc} (mA/cm ²)	V_{oc} (V)	FF (%)	بازدهی (%)
بدون نانوذره	۱۸/۸۵۳	۱/۰۵۳	۸۵/۵۳	۱۶/۹۸۰
با استفاده از نانوذرات طلا	۲۱/۳۱	۱/۰۵۶	۸۵/۵۶	۱۹/۲۵۴
با استفاده از نانوذرات نقره	۲۲/۸۸۵	۱/۰۵۶	۸۵/۷۰	۲۰/۷۱۱

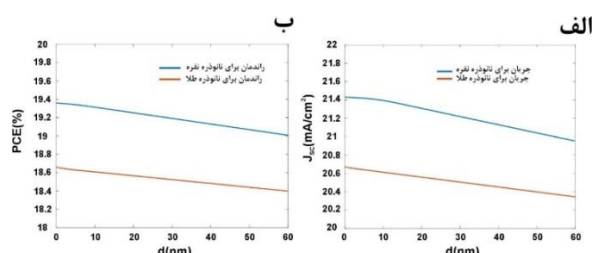


شکل (۵): الف) تأثیر افزایش شعاع نانوذرات بر روی بازدهی ساختار خورشیدی پروسکایتی؛ ب) تأثیر افزایش شعاع نانوذرات بر روی پارامتر جریان اتصال کوتاه ساختار خورشیدی پروسکایتی

پس از تحلیل ایتیکی ساختار مربوطه، تحلیل الکتریکی با استفاده از روش المان محدود برای ساختار خورشیدی پروسکایتی با حضور و بدون حضور نانوذرات فلزی انجام گرفت و معادلات پواسون و همچنین معادلات پیوستگی بار با استفاده از نرخ جذب و تولید الکترون-حفره که از محاسبات ایتیکی به دست آمده بود، محاسبه گردید. پارامترهای جریان اتصال کوتاه-ولتاژ مدار باز، ضریب پرشدگی و بازدهی برای ساختار مورد نظر با استفاده از نانوذرات مختلف در جدول (۳) ارائه شده است.

پارامتر (واحد)	J_{sc} (mA/cm ²)	V_{oc} (V)	FF (%)	بازدهی (%)
بدون نانوذره	۱۸/۸۵۳	۱/۰۵۳	۸۵/۵۳	۱۶/۹۸
با استفاده از نانوذرات طلا	۲۰/۶۷۲	۱/۰۵۵	۸۵/۵۷	۱۸/۶۶۳
با استفاده از نانوذرات نقره	۲۱/۴۳۲	۱/۰۵۵	۸۵/۶۲	۱۹/۳۶

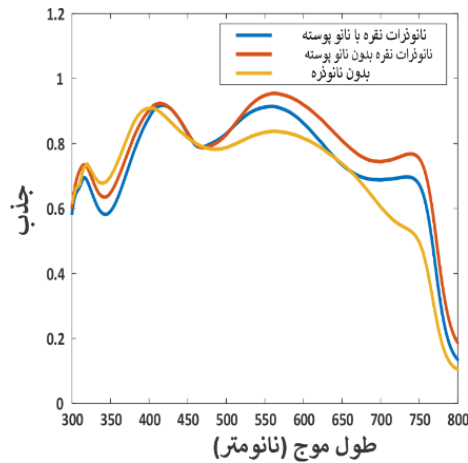
همان‌طور که جدول (۳) نشان داده شده است، تعبیه نانوذرات نقره موجب افزایش ۱۳/۶۷٪ در جریان و افزایش ۱۴٪ در بازدهی سلول خورشیدی پروسکایتی می‌گردد. برای بررسی بیشتر ساختار خورشیدی پروسکایتی مورد نظر و به دست آوردن حالت‌های بهتر در تعبیه نانوذرات، ابتدا فاصله دو نانوذره کروی از هم به‌مرور افزایش داده شد تا تأثیر آن در عملکرد سلول خورشیدی پروسکایتی مورد بررسی قرار گیرد. تغییرات چگالی جریان الکتریکی اتصال کوتاه و بازدهی سلول خورشیدی پروسکایتی به‌هنگام افزایش فاصله نانوذرات از هم برای دو نوع نقره و طلا در شکل (۴) نشان داده شده است.



شکل (۴): الف) تأثیر افزایش فاصله نانوذرات از هم دیگر بر روی پارامتر جریان اتصال کوتاه؛ ب) تأثیر افزایش فاصله نانوذرات از هم دیگر بر روی بازدهی سلول خورشیدی پروسکایتی

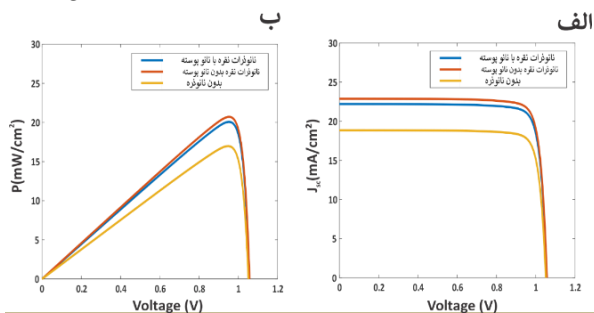
همان‌طور که در شکل (۴) الف مشاهده می‌شود، با افزایش فاصله میان نانوذرات، جریان اتصال کوتاه و به تبع آن، بازدهی ساختار (شکل ۴ ب) اندکی کاهش می‌یابد. بنابراین بهترین حالت زمانی است که نانوذرات در تماس مستقیم و بدون فاصله قرار گیرند. این رفتار ناشی از پدیده جفت‌شدگی پلاسمونی است. جفت‌شدگی قوی در

ساختار مربوطه می‌کند که بالاتر ذکر گردید. با تعبیه نانوپوسته دی‌الکتریک بر روی نانوذرات نقره، پارامتر جذب برای لایه پروسکایت بار دیگر محاسبه گردید که در شکل (۷) نشان داده شده است.



شکل (۷): جذب لایه پروسکایت برای حالت‌های مختلف نانوذرات بدون نانوپوسته، با نانوپوسته و برای لایه پروسکایت بدون وجود نانوذره

همچنین پارامترهای الکتریکی نیز بار دیگر محاسبه شد. در این حالت، با تعبیه نانوپوسته دی‌الکتریک بر سطح نانوذرات فلزی، بازدهی ساختار خورشیدی کمی کاهش می‌یابد، ولی با ملاحظه سایر عوامل حاکم بر عملکرد ساختار خورشیدی مانند زیست‌محیطی، تلفات حرارتی و سایر پارامترها استفاده از نانوپوسته‌ها گزینه مناسب‌تری خواهد بود. علاوه بر این، استفاده از پوسته دی‌الکتریک SiO_2 نقش مهمی در جداسازی نانوذرات فلزی از لایه‌های مجاور مانند پروسکایت و لایه انتقال‌دهنده حفره دارد و از بروز واکنش‌های شیمیایی ناخواسته جلوگیری می‌کند. شکل (۸) تأثیر تعبیه نانوپوسته دی‌الکتریک را بر نمودار J-V و P-V ساختار مربوطه نشان می‌دهد.

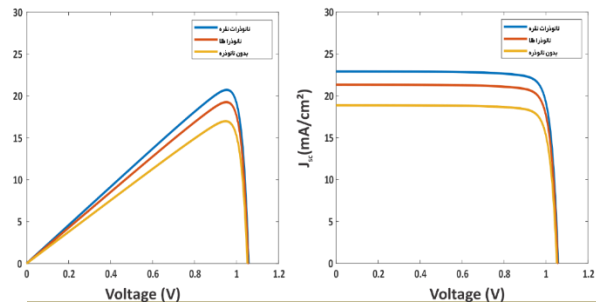


شکل (۸): (الف) نمودار J-V برای تعبیه نانوپوسته دی‌الکتریک؛ (ب) نمودار P-V برای تعبیه نانوپوسته دی‌الکتریک

شایان ذکر است که هرچند طلا و نقره فلزاتی گران‌قیمت محسوب می‌شوند، در این پژوهش در مقیاس بسیار کوچک (نانوذرات با ابعاد نانومتری) به کار گرفته شده‌اند و میزان مصرف آن‌ها ناچیز است. علاوه بر این، نتایج نشان داد که نقره با ارائه عملکرد

با افزایش اندازه نانوذرات فلزی، عملکرد سلول خورشیدی پروسکایتی بهبود می‌یابد. در این حالت، بازدهی ساختار مربوطه با تعبیه نانوذرات کروم نقره با شعاع ۴۵ نانومتر برابر ۲۰/۷۱۱ می‌باشد که این رقم ۷٪ بالاتر از نانوذرات طلاست. بنابراین استفاده از نانوذرات نقره در درون ساختار خورشیدی گزینه مناسب‌تری خواهد بود. همچنین استفاده از نانوذرات نقره از لحاظ اقتصادی مقرون به صرفه است. در نهایت، منحنی‌های P-V و J-V برای ساختار مربوطه در شکل (۶) نشان داده شده است.

الف ب



شکل (۶): (الف) نمودار J-V برای سلول خورشیدی پروسکایتی برای حالت‌های بدون وجود نانوذره، با حضور نانوذرات طلا و نانوذرات نقره؛ (ب) نمودار P-V برای سلول خورشیدی پروسکایتی برای حالت‌های بدون وجود نانوذره، با حضور نانوذرات طلا و نانوذرات نقره

باین‌حال، هنگامی که فوتون‌ها با الکترون‌های آزاد در نانوذرات برهم‌کنش می‌کنند، برخی از این الکترون‌ها به‌طور قابل توجهی به افزایش جذب در مواد جاذب کمک نمی‌کنند؛ در عوض، آن‌ها در سطح نانوذرات باقی می‌مانند. این پدیده منجر به گرمایش سطحی نانوذرات پلاسמוنی فلزی در طی تابش فونون می‌شود و در حضور این نانوذرات فلزی باعث تشدید نوترکیبی می‌شود. علاوه بر این، تجزیه نانوذرات می‌تواند بر کارایی کلی تأثیر منفی بگذارد. برای کاهش این چالش، یک راه‌حل مؤثر شامل ترکیب یک ماده دی‌الکتریک با پایداری بالا در سطح نانوذرات فلزی است. دی‌اکسید سیلیکون (SiO_2) رایج‌ترین ماده دی‌الکتریک مورد استفاده برای این منظور است. با پوشاندن نانوذرات فلزی با پوسته دی‌الکتریک، از تماس مستقیم بین مواد جاذب پروسکایت و نانوذرات فلزی جلوگیری می‌شود و در نتیجه پایداری نانوذرات افزایش می‌یابد [۱۲، ۲۵ و ۲۶]. بنابراین برای کاهش تلفات گرمایی، اکسیداسیون نانوذرات فلزی به‌هنگام تماس با ماده پروسکایت و سایر چالش‌های ذکر شده، یک نانوپوسته دی‌الکتریک در سطح نانوذرات فلزی با ضخامت ۲ نانومتر استفاده گردید. با وجود اینکه با تعبیه نانوپوسته دی‌الکتریک در سطح نانوذرات فلزی، بازدهی کلی ساختار کاهش یافت، ولی استفاده از این نانوپوسته‌ها کمک شایانی به پایداری کلی

نشان داد که جذب پرازیتی نانوذرات نقره به‌مراتب کمتر از نانوذرات طلاست. در ادامه تحقیق، نانوذرات تکی با نانوذرات جفت‌شده جایگزین شدند و نتایج بررسی فاصله بین نانوذرات کروی نقره و طلا نشان داد که اتصال دو نانوذره به یکدیگر می‌تواند بهبود عملکرد سلول خورشیدی پروسکایت را به همراه داشته باشد. برای افزایش پایداری شیمیایی و حرارتی و مقابله با خاصیت خوردندگی پروسکایت، از پوسته سیلیکا در نانوذرات استفاده شد. در نهایت، در شرایط بهینه سازی‌شده، پارامترهای کلیدی از جمله ولتاژ مدار باز V_{oc} ۱/۰۵۶، چگالی جریان اتصال کوتاه (mA/cm^2) ۲۲/۸۸۵، ضریب پرشدگی ۸۵/۷۰ و بازدهی تبدیل توان حدود ۲۱٪ به دست آمد. همچنین، کاهش ضخامت لایه جاذب پروسکایت منجر به کاهش سمیت سرب شده است. این تحقیق، نه تنها گامی مهم در بهبود بازدهی و پایداری سلول‌های خورشیدی پروسکایت به شمار می‌رود، بلکه به‌صورت جامع یک نقشه راه برای بهینه‌سازی استفاده از نانوذرات پوسته‌هسته در این نوع سلول‌ها ارائه می‌دهد. نتایج حاکی از آن است که این روش می‌تواند به عنوان یک راهکار عملی و مؤثر در بهبود عملکرد و کاهش اثرات زیست‌محیطی، نقشی حیاتی در توسعه سلول‌های خورشیدی نسل آینده ایفا کند.

بهتر و هزینه کمتر نسبت به طلا، گزینه‌ای کارآمدتر محسوب می‌شود و می‌تواند توجه پژوهشگران را به‌عنوان انتخابی عملی‌تر جلب نماید. بااین‌حال، باید توجه داشت که پیاده‌سازی این ساختار در مقیاس صنعتی با چالش‌هایی همچون کنترل یکنواختی توزیع نانوذرات، تضمین پایداری لایه‌ها در فرایند تولید انبوه و مدیریت هزینه تجهیزات همراه خواهد بود. ازاین‌رو، مطالعات آینده می‌توانند با تمرکز بر امکان‌سنجی فنی و اقتصادی، مسیر تحقق تولید انبوه این ساختارها را هموارتر سازند.

نتیجه‌گیری

در این مطالعه، با بهره‌گیری از روش المان محدود، بهبود عملکرد سلول‌های خورشیدی پروسکایت لایه‌نازک مبتنی بر کربن مورد بررسی قرار گرفت. استفاده از نانوذرات پلاسمونیک به‌صورت تکی و جفت‌شده در لایه جاذب، موجب افزایش چشمگیر بازدهی دستگاه شد. نتایج نشان داد که نانوذرات کروی نقره نسبت به نانوذرات کروی طلا با افزایش ۷٪ بازدهی همراه بوده است که این افزایش به‌دلیل پیک‌های جذبی بهتری است که نانوذره نقره ایجاد می‌کند. نانوذرات کروی نقره از طریق تقویت میدان‌های الکتریکی موضعی در سطح سلول، جذب فوتون‌ها را افزایش داده و باعث بهبود جمع‌آوری حامل‌های بار می‌شوند. همچنین، محاسبات مربوط به تلفات اپتیکی

مراجع

- [1] Alkhalayfeh, M. A., Aziz, A. A., Pakhuruddin, M. Z., Katubi, K. M. M., "Recent advances of perovskite solar cells embedded with plasmonic nanoparticles", *Physica Status Solidi (a)*, Vol. 218, No. 17, p. 2100310, 2021, <https://doi.org/10.1002/pssa.202100310>.
- [2] Green, M. A., Ho-Baillie, A., Snaith, H. J., "The emergence of perovskite solar cells", *Nature Photonics*, Vol. 8, No. 7, pp. 506-514, 2014, <https://doi.org/10.1038/nphoton.2014.134>.
- [3] Jangjoy, A., Bahador, H., Heidarzadeh, H., "Design of an ultra-thin silicon solar cell using localized surface plasmonic effects of embedded paired nanoparticles", *Optics Communications*, Vol. 450, pp. 216-221, 2019, <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2019.06.007>.
- [4] Kojima, A., Teshima, K., Shirai, Y., Miyasaka, T., "Organometal halide perovskites as visible-light sensitizers for photovoltaic cells", *Journal of the American Chemical Society*, Vol. 131, No. 17, pp. 6050-6051, 2009, <https://doi.org/10.1021/ja809598r>.
- [5] Jangjoy, A., Matloub, S., "Optimizing carbon-based perovskite solar cells with pyramidal core-shell nanoparticles for high efficiency", *Plasmonics*, Vol. 20, No. 1, pp. 265-275, 2025, <https://doi.org/10.1007/s11468-024-02277-6>.
- [6] Wang, F., et al., "Materials toward the upscaling of perovskite solar cells: progress, challenges, and strategies", *Advanced Functional Materials*, Vol. 28, No. 52, p. 1803753, 2018, <https://doi.org/10.1002/adfm.201803753>.
- [7] Domanski, K., et al., "Not all that glitters is gold: metal-migration-induced degradation in perovskite solar cells", *ACS Nano*, Vol. 10, No. 6, pp. 6306-6314, 2016, <https://doi.org/10.1021/acsnano.6b02613>.
- [8] Cai, Y., Liang, L., Gao, P., "Promise of commercialization: Carbon materials for low-cost perovskite solar cells", *Chinese Physics B*, Vol. 27, No. 1, p. 018805, 2018, <https://doi.org/10.1088/1674-1056/27/1/018805>.
- [9] Mazumdar, S., Zhao, Y., Zhang, X., "Stability of perovskite solar cells: Degradation mechanisms and remedies", *Frontiers in Electronics*, Vol. 2, p. 712785, 2021, <https://doi.org/10.3389/felec.2021.712785>.
- [10] Mohanty, I., Mangal, S., Jana, S., Singh, U. P., "Stability factors of perovskite ($CH_3NH_3PbI_3$) thinfilms for solar cell applications: A study",

- Materials Today: Proceedings, Vol. 39, pp. 1829-1832, 2021, <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.06.183>.
- [11] Schileo, G., Grancini, G., "Lead or no lead? Availability, toxicity, sustainability and environmental impact of lead-free perovskite solar cells", Journal of Materials Chemistry C, Vol. 9, No. 1, pp. 67-76, 2021, <https://doi.org/10.1039/D0TC04552G>.
- [12] Jangjoy, A., Matloub, S., "Optical simulation and design of high-absorption thin-film perovskite halide solar cells based on embedded quadrilateral cluster nanoparticles", Solar Energy, Vol. 242, pp. 10-19, 2022, <https://doi.org/10.1016/j.solener.2022.07.004>.
- [13] Deng, K., Liu, Z., Wang, M., Li, L., "Nanoimprinted grating-embedded perovskite solar cells with improved light management", Advanced Functional Materials, Vol. 29, No. 19, p. 1900830, 2019, <https://doi.org/10.1002/adfm.201900830>.
- [14] Tai, M., et al., "Ultrathin Zn₂SnO₄ (ZTO) passivated ZnO nanocone arrays for efficient and stable perovskite solar cells", Chemical Engineering Journal, Vol. 361, pp. 60-66, 2019, <https://doi.org/10.1016/j.cej.2018.12.056>.
- [15] Siavash Moakhar, R., et al., "Recent advances in plasmonic perovskite solar cells", Advanced Science, Vol. 7, No. 13, p. 1902448, 2020, <https://doi.org/10.1002/advs.201902448>.
- [16] Krajczewski, J., Kędziora, M., Kołataj, K., Kudelski, A., "Improved synthesis of concave cubic gold nanoparticles and their applications for Raman analysis of surfaces", RSC Advances, Vol. 9, No. 32, pp. 18609-18618, 2019, <https://doi.org/10.1039/C9RA03012C>.
- [17] Shao, L., Susha, A. S., Cheung, L. S., Sau, T. K., Rogach, A. L., Wang, J., "Plasmonic properties of single multispired gold nanostars: correlating modeling with experiments", Langmuir, Vol. 28, No. 24, pp. 8979-8984, 2012, <https://doi.org/10.1021/la2048097>.
- [18] Hanske, C., et al., "Large-scale plasmonic pyramidal supercrystals via templated self-assembly of monodisperse gold nanospheres", The Journal of Physical Chemistry C, Vol. 121, No. 20, pp. 10899-10906, 2017, <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b12161>.
- [19] Wu, F., et al., "Reduced hysteresis in perovskite solar cells using metal oxide/organic hybrid hole transport layer with generated interfacial dipoles", Electrochimica Acta, Vol. 354, p. 136660, 2020, (in Persian) <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2020.136660>.
- [20] Li, S., Cao, Y.-L., Li, W.-H., Bo, Z.-S., "A brief review of hole transporting materials commonly used in perovskite solar cells", Rare Metals, Vol. 40, No. 10, pp. 2712-2729, 2021, (in Persian) <https://doi.org/10.1007/s12598-020-01691-z>.
- [21] Roose, B., Dey, K., Chiang, Y.-H., Friend, R. H., Stranks, S. D., "Critical assessment of the use of excess lead iodide in lead halide perovskite solar cells", The Journal of Physical Chemistry Letters, Vol. 11, No. 16, pp. 6505-6512, 2020, <https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.0c01820>.
- [22] Kim, T., Lim, J., Song, S., "Recent progress and challenges of electron transport layers in organic-inorganic perovskite solar cells", Energies, Vol. 13, No. 21, p. 5572, 2020, <https://doi.org/10.3390/en13215572>.
- [23] Latif, H., et al., "Effect of target morphology on morphological, optical and electrical properties of FTO thin film deposited by pulsed laser deposition for MAPbBr₃ perovskite solar cell", Surfaces and Interfaces, Vol. 24, p. 101117, 2021, <https://doi.org/10.1016/j.surfin.2021.101117>.
- [24] Luo, Q., et al., "Plasmonic effects of metallic nanoparticles on enhancing performance of perovskite solar cells", ACS Applied Materials & Interfaces, Vol. 9, No. 40, pp. 34821-34832, 2017, <https://doi.org/10.1021/acsami.7b08489>.
- [25] Jangjoy, A., Matloub, S., "Theoretical study of Ag and Au triple core-shell spherical plasmonic nanoparticles in ultra-thin film perovskite solar cells", Optics Express, Vol. 31, No. 12, pp. 19102-19115, 2023, <https://doi.org/10.1364/OE.491461>.
- [26] Fard, A. H. M., Matloub, S., "Design and simulation of bifacial perovskite solar cell with high efficiency using cubic plasmonic nanoparticles", Solar Energy, Vol. 280, p. 112871, 2024, <https://doi.org/10.1016/j.solener.2024.112871>.
- [27] Chen, C.-W., Hsiao, S.-Y., Chen, C.-Y., Kang, H.-W., Huang, Z.-Y., Lin, H.-W., "Optical properties of organometal halide perovskite thin films and general device structure design rules for perovskite single and tandem solar cells", Journal of Materials Chemistry A, Vol. 3, No. 17, pp. 9152-9159, 2015, <https://doi.org/10.1039/C4TA05237D>.
- [28] Haghighat, A., Ghadimi, A., Eskandarian, A., "Novel design of multi-layer cubic nanoparticles for achieving efficient thin-film perovskite solar cells", Plasmonics, Vol. 20, No. 3, pp. 1539-1549, 2025, <https://doi.org/10.1007/s11468-024-02394-2>.
- [29] Jangjoy, A., Matloub, S., "Design of novel cubic nanoparticle for boosting performance of carbon-based perovskite solar cells", Solar Energy, Vol. 286, p. 113155, 2025, <https://doi.org/10.1016/j.solener.2024.113155>.
- [30] Lee, Y.-M., Kim, S.-E., Park, J.-E., "Strong coupling in plasmonic metal nanoparticles", Nano Convergence, Vol. 10, No. 1, p. 34, 2023, <https://doi.org/10.1186/s40580-023-00383-5>.
- [31] Li, Y.-F., Kou, Z.-L., Feng, J., Sun, H.-B., "Plasmon-enhanced organic and perovskite solar cells with metal nanoparticles", Nanophotonics, Vol. 12, No. 1, p. 21, 2023, <https://doi.org/10.1515/nanoph-2022-0111>.

- Vol. 9, No. 10, pp. 3111-3133, 2020,
<https://doi.org/10.1515/nanoph-2020-0099>.
- [32] Wong, Y. L., Jia, H., Jian, A., Lei, D., El Abed, A. I., Zhang, X., "*Enhancing plasmonic hot-carrier generation by strong coupling of multiple resonant modes*", *Nanoscale*, Vol. 13, No. 5, pp. 2792-2800, 2021,
<https://doi.org/10.1039/D0NR07643K>.