



Research Article

Simulation of Inverted Planar Perovskite Solar Cell Using SCAPS-1D Software

Fatih Ongül¹ *

¹ Department of Electricity and Energy, Ardahan Vocational School of Technical Sciences, Ardahan University, 75002, Ardahan, Türkiye

* Correspondence: fatihongul@ardahan.edu.tr

Received: 15 May 2024; Accepted: 4 June 2024; Published: 30 June 2024

Abstract: Solar energy stands out as one of the most preferred renewable sources in electricity production. Harnessing photovoltaic technology not only meets increasing energy needs but also plays a vital role in combating global climate change by reducing dependence on fossil fuels. Perovskite solar cells have garnered immense interest in recent years due to their optoelectronics properties, high efficiency and low production costs. Numerical simulation is a powerful tool used to model complex systems and predict their behavior in various fields of science and engineering. Solar cell capacitance simulator in one dimension (SCAPS-1D) is used in the modeling and simulation of photovoltaic devices. The simulation performed by SCAPS-1D plays an important role in evaluating and improving the performance of various types of perovskite solar cells. In this study, the perovskite solar cell was designed in the inverted planar p-i-n structure containing $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ as the absorber perovskite layer, NiO_x as the hole conduction layer and PCBM as the electron conduction layer. The photovoltaic parameters of the designed inverted planar perovskite solar cells were obtained through current-voltage characteristics under illumination (AM-1.5G 100 mW/cm^2) using SCAPS-1D software. Optimization of the thickness of all layers in the structure was performed, and the impact of varying operating temperatures on the power conversion efficiency and other photovoltaic parameters of inverted planar perovskite solar cells was investigated through simulation.

Keywords: SCAPS-1D, perovskite solar cell, p-i-n structure.

Araştırma Makalesi

SCAPS-1D Yazılımını Kullanarak Tersine Çevrilmiş Düzlemsel Perovskit Güneş Hücresinin Simülasyonu

Öz: Güneş enerjisi, elektrik üretiminde en çok tercih edilen yenilenebilir kaynaklardan biri olarak öne çıkmaktadır. Fotovoltaik teknolojiden yararlanmak, artan enerji ihtiyacını karşılamaya yanı sıra, fosil yakıtlara olan bağımlılığı azaltarak küresel iklim değişikliğiyle mücadelede de hayati bir rol oynamaktadır. Perovskit güneş hücreleri, optoelektronik özellikleri, yüksek verimleri ve düşük üretim maliyetleri nedeniyle son yıllarda büyük ilgi toplamıştır. Sayısal simülasyon, karmaşık sistemleri modellemek ve bilim ve mühendisliğin çeşitli alanlarındaki davranışlarını tahmin etmek için kullanılan güçlü bir araçtır. Fotovoltaik cihazların modellenmesinde ve simülasyonunda genellikle tek boyutlu güneş hücresi kapasitans simülatörü (SCAPS-1D) kullanılmaktadır. SCAPS-1D tarafından gerçekleştirilen simülasyon, çeşitli perovskit güneş hücrelerinin performansının değerlendirilmesinde ve iyileştirilmesinde önemli bir rol oynamaktadır. Bu çalışmada, perovskit güneş hücresinde soğurucu perovskit katmanı olarak $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$, deşik iletim katmanı olarak NiO_x ve elektron iletim katmanı olarak PCBM içeren tersine çevrilmiş düzlemsel (p-i-n) yapısında tasarlandı. Tasarlanan tersine çevrilmiş düzlemsel perovskit güneş hücresinin fotovoltaik parametreleri, SCAPS-1D yazılımı kullanılarak aydınlatma altındaki (AM 1.5G 100 mW/cm^2) akım-gerilim karakteristiklerinden elde edilmiştir. Perovskit güneş hücresindeki tüm katmanların kalınlığı simülasyon programı kullanılarak optimize edilmiştir ve değişen çalışma sıcaklıklarının ters düzlemsel perovskit güneş hücrelerinin güç dönüşüm verimliliği ve diğer fotovoltaik parametreleri üzerindeki etkisi simülasyon yoluyla araştırılmıştır.

Anahtar Kelimeler: SCAPS-1D, perovskit güneş hücresi, p-i-n yapısı.

Citation: F. Ongül, "Simulation of Inverted Planar Perovskite Solar Cell Using SCAPS-1D Software", *Journal of Studies in Advanced Technologies*, vol. 2, no. 1, pp. 64-73, Jun 2024, doi: 10.63063/jsat.1484940

1. Giriş

Mevcut fosil yakıt rezervlerinin yakın gelecekte tükenecek olması ve fosil yakıta dayalı enerji üretimi ile artan çevresel riskler, temiz ve sürdürülebilir enerji kaynaklarına olan ilginin artmasında etken olmuştur. Bu nedenle alternatif enerji kaynağı olarak uzun ömürlü doğal kaynak olan güneşten yararlanılmaktadır. Güneş ışığının kullanılmasında ve elektriğe dönüştürülmesinde güneş hücrelerinin kullanılması en etkili yöntemlerden biridir [1], [2]. Sayısal simülasyon, karmaşık sistemleri modellemek, bilim ve mühendisliğin çeşitli alanlarındaki davranışlarını tahmin etmek için kullanılan güçlü bir araçtır. SCAPS (Güneş Hücre Kapasite Simülatörü), Belçika Gent Üniversitesi Elektronik ve Bilgi Sistemleri Bölümü'nde (ELIS) geliştirilen tek boyutlu bir güneş hücresi simülasyon programıdır. Güneş hücrelerinin modellenmesinde ve simülasyonunda genellikle SCAPS-1D programı kullanılmaktadır. SCAPS-1D programı tarafından gerçekleştirilen simülasyon, çeşitli güneş hücrelerinin performansının değerlendirilmesinde ve iyileştirilmesinde önemli bir rol oynamaktadır. SCAPS 1D simülasyonu, Poisson denklemi, elektronlar ve deşikler için süreklilik denklemi ve yük taşıma denklemi gibi temel yarıiletken denklemlerin çözümüne dayanmaktadır. Bir fotovoltaiik hücredeki tabakaların, kalınlık, elektron ilgisi, enerji bant genişliği, optik soğurma, kusur yoğunluğu, arayüz kusur yoğunluğu, katkı konsantrasyonları (N_D ve N_A), yük taşıyıcı hareketliliği, rekombinasyon gibi çeşitli parametrelerin etkisini incelemek ve optimize etmek için kullanılır. SCAPS-1D simülatörü, fotovoltaiik hücredeki tabakaların çeşitli parametrelerinin ve çalışma sıcaklığı gibi çeşitli değişkenlerin etkisinin akım-voltaj, kuantum verimliliği, kapasitans-frekansı ve kapasitans-voltaj gibi farklı karakterizasyonlarının analiz edilmesine olanak sağlar [3], [4], [5].

Perovskitler, kalsiyum titanyum oksit minerali ($CaTiO_3$) ile aynı kristal yapıya sahip, tipik olarak organik-inorganik hibrit kurşun veya kalay halojenür bazı malzemelerden oluşan bir malzeme sınıfını tanımlamaktadır. Perovskitlerin, ayarlanabilir bant aralığı, yüksek soğurma katsayısı, uzun elektron ve deşik difüzyon uzunlukları, yük taşıyıcı hareketliliği ve düşük rekombinasyon oranları gibi optik ve elektriksel özelliklerinden dolayı güneş hücre üretiminde büyük ilgi görmüştür [6], [7]. Perovskit güneş hücresinin temel yapısı elektron iletim katmanı (ETL), ışık soğurucu perovskit katmanı, deşik iletim katmanı (HTL), anot ve katottan oluşmaktadır. Perovskit güneş hücreleri genel olarak aygıt yapısına göre mezoskopik ve düzlemsel olmak üzere ikiye ayrılır, ayrıca elektron ve deşiklerin elektrotlara iletim yönüne bağlı olarak kendi içerisinde de geleneksel (n-i-p) ve tersine çevrilmiş (p-i-n) yapı olarak ikiye ayrılır. Geleneksel n-i-p yapısında ışığın geldiği ilk katman elektron iletim tabakası iken, tersine çevrilmiş p-i-n yapısında ise ilk katman deşik iletim tabakasıdır. Mezoskopik yapı yüksek verimli perovskit güneş hücrelerin üretilebilmesine olanak sağlar fakat mezoskopik tabakanın kristalleşmesi için yüksek sıcaklık gerektirmesi ve esnek altlıklarda kullanılamaması gibi dezavantajlara sahiptir. Perovskit güneş hücrelerinin p-i-n yapısı, yüksek verimlilik, daha düşük sıcaklıkta işleme, esneklik ve ayrıca ihmal edilebilir histerezis gibi avantajlar sunmaktadır [8]. Perovskitler ilk olarak boya duyarlı güneş hücrelerinde (DSSC) 2009 yılında Miyasaka vd. tarafından kullanıldı ve nanokristal TiO_2 yüzeyine metilamonyum kurşun iyodür ($MAPbI_3$) perovskitin kaplanmasıyla oluşturulan yapıyla %3.8 verim elde edilmiştir [9]. Perovskitler ile yapılan yoğun araştırma ve geliştirme sonucunda 2024 yılına gelindiğinde bu alanda verim %26,1'e ulaşmış durumdadır [10]. Metal oksit malzemeler geniş bant aralıkları, yüksek optik geçirgenlikleri, yüksek iş fonksiyonları, yüksek mobiliteleri ve stabiliteleri nedeniyle perovskit bazı güneş hücrelerinde deşik taşıma katmanları olarak kullanılmaktadır. Perovskit bazı güneş hücrelerinde metal oksit olarak en yaygın nikeloksit (NiO_x) deşik taşıma tabakası olarak kullanılmıştır [11]. Hibrit perovskit malzemeler, özellikle $CH_3NH_3PbX_3$ ($X=Cl, Br, I$), solar spektrumdan ideal optik soğurmaya uygun ve ayarlanabilir bant aralığı, yüksek soğurma katsayısı, yük taşıyıcı difüzyon uzunluğu ve kimyasal kusurlara karşı yüksek tolerans avantajlarına sahiptir. Karışık halojenür perovskitlerin $CH_3NH_3PbI_{3-x}Cl_x$ yük taşıyıcı difüzyon uzunluğu ve yük taşıyıcı ömrü $CH_3NH_3PbI_3$ perovskitlerden daha iyidir, verim değerleri daha yüksek ve daha stabildir [12], [13]. PCBM ([6,6]-fenil C61 bütirik asit metil ester) gibi fulleren türevi, tersine çevrilmiş perovskit güneş hücrelerinde elektron taşıma tabakası (ETL) olarak yaygın şekilde kullanılmaktadır [14]. Bu çalışmada p-i-n yapıda deşik iletim tabakası olarak NiO_x , perovskit tabakası olarak $CH_3NH_3PbI_{3-x}Cl_x$ ve elektron iletim tabakası olarak PCBM katmanlarından oluşan tersine çevrilmiş güneş hücresi tasarlanmış ve SCAPS 1D programıyla fotovoltaiik parametreleri analiz edilmiştir.

2. Teori ve Yöntemler

SCAPS-1D simülasyon programı, Poisson denklemi, elektronlar ve deşikler için süreklilik denklemi ve yük taşınım denklemi gibi temel yarıiletken denklemlerin çözümüne dayanmaktadır. Poisson denklemi hücre içindeki iç elektrik alan ve potansiyel dağılımını elde etmek için kullanılır. Süreklilik denklemi, taşıyıcıların (elektronlar ve deşikler) konsantrasyonundaki değişim oranını tanımlar. Yük taşınım denklemi, elektronların ve deşiğin hücre yapısında sürüklenme ve difüzyon akımı hakkında bilgi sağlar.

Poisson denklemi,

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{\partial E}{\partial x} = -\frac{q}{\epsilon}(p - n + N_D^+ - N_A^-) \quad (1)$$

süreklilik denklemleri,

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \frac{\partial J_n}{\partial x} + G - R \quad (2)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{q} \frac{\partial J_p}{\partial x} + G - R \quad (3)$$

elektron ve deşikler için akım yoğunluğu denklemleri;

$$J_n = qn\mu_n E + qD_n \frac{\partial n}{\partial x} \quad (4)$$

$$J_p = qp\mu_p E - qD_p \frac{\partial p}{\partial x} \quad (5)$$

Poisson, süreklilik ve akım yoğunluğu denklemlerindeki, ψ elektrostatik potansiyel, E elektrik alan, q elektron yükü, ϵ elektriksel geçirgenliği, n elektronların yoğunluğudur, p deşiklerin yoğunluğu, N_D iyonize donör konsantrasyonu ve N_A iyonize akseptör konsantrasyonu, J_n elektron akım yoğunluğu, J_p deşik akım yoğunluğu, R net rekombinasyon oranı, G taşıyıcı yük üretim oranı, μ_n elektronların mobilitesi, μ_p deşiklerin mobilitesi, D_n elektron difüzyon katsayısı ve D_p deşik difüzyon katsayısı olarak tanımlanır [15].

SCAPS-1D yazılımı ile güneş hücre yapılarının bant diyagramı, üretim ve rekombinasyon oranları, dış kuantum verimliliği, hücre akım yoğunlukları, J-V karakteristiği ile de açık devre voltajı, dolum faktörü ve güç dönüşüm verimliliği gibi temel özellikleri belirlenebilir.

$$J = J_o \exp\left(\frac{qV}{nkT}\right) - J_{ph} \quad (6)$$

$$FF = \frac{V_{mpp} \cdot J_{mpp}}{V_{oc} \cdot J_{sc}} \quad (7)$$

$$PCE (\%) = \frac{P_{out}}{P_{in}} \times 100 = \frac{FF \cdot V_{oc} \cdot J_{sc}}{P_{in}} \times 100 \quad (8)$$

$$V_{oc} = \frac{nkT}{q} \ln\left(1 + \frac{J_{sc}}{J_o}\right) \quad (9)$$

J_o diyot doyma akım yoğunluğudur, A kalite faktörüdür, J_{ph} fotoakım yoğunluğudur, k Boltzmann sabitidir ve T sıcaklıktır. (kT/q) termal voltaj, J_o doyma akım yoğunluğu ve J_{sc} kısa devre akım yoğunluğudur [16]. Güneş hücresinin kuantum verimliliği (QE), üretilen serbest yük taşıyıcı sayısının gelen foton sayısına oranıdır. QE, güneş hücresinin güneş spektrumunun belirli dalgaboylarına verdiği tepkiyle ilgilidir ve enerji veya dalgaboyu fonksiyonu olarak ifade edilebilir. Perovskit güneş hücresinin güneş spektrumuna tepkisini incelemek için kuantum verimlilik ölçümleri kullanıldı; QE aşağıdaki denklem ile tanımlanır,

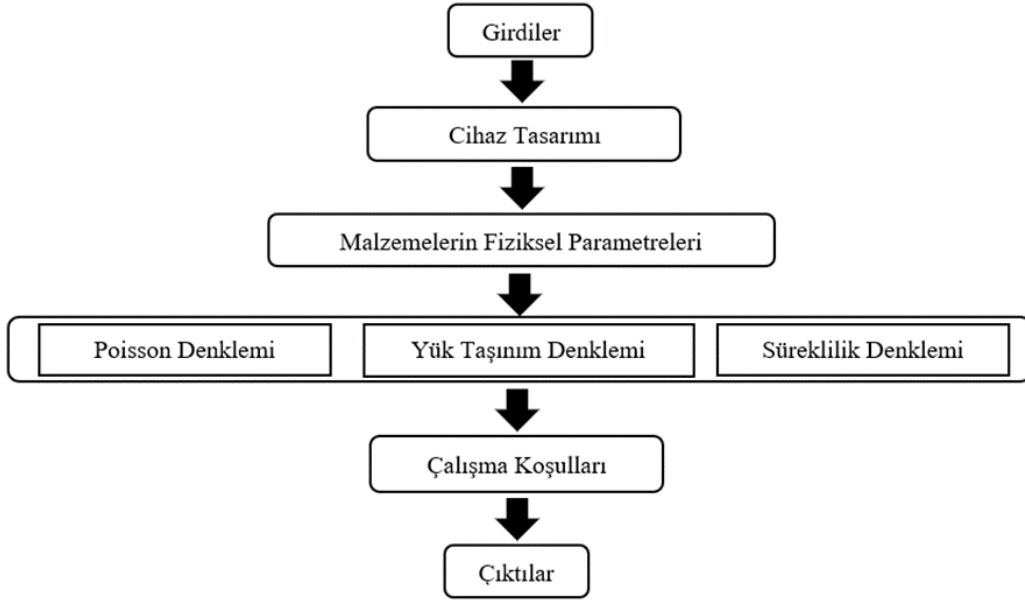
$$QE(\lambda) = \frac{I(\lambda)}{q\varphi_{p(\lambda)}} \quad (10)$$

burada q temel elektrik yükünü temsil eder, $I(\lambda)$ üretilen foto akımı temsil eder ve $\varphi_{p(\lambda)}$ foton akısını temsil eder [17]. Optik absorpsiyon sabiti α , denklemde gösterilen optik absorpsiyon modeli denkleminde hesaplanır,

$$\alpha(\lambda) = \left(A + \frac{B}{h\nu}\right) (h\nu - E_g)^{\frac{1}{2}} \quad (11)$$

A ve B model parametreleri olmak üzere, h Planck sabiti, ν frekans ve E_g malzemenin yasak bant aralığıdır [18].

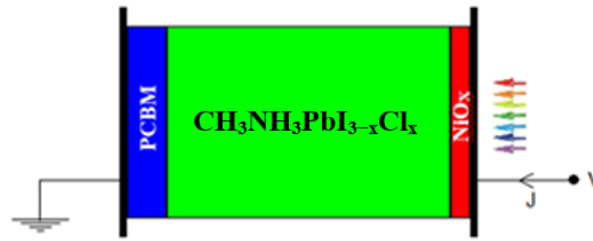
SCAPS 1D simülasyon programı Poisson, süreklilik ve yük taşınım gibi yarıiletkenlerdeki temel denklemlerin çözümüne dayanmaktadır, tasarlanan güneş hücre yapısındaki tabakaların kalınlığı, bant aralığı, elektron ilgisi, dielektrik geçirgenliği, iletkenlik bandın etkin durum yoğunluğu, değerlik bandın etkin durum yoğunluğu, elektron mobilitesi, deşik mobilitesi, sığ donör yoğunluğu, sığ akseptör yoğunluğu ve kusur yoğunluğu gibi fiziksel parametre değerleri ile bu denklemler çözümlenerek çeşitli çalışma şartlarında simülasyonları yapılabilmektedir. SCAPS-1D simülatörünün basitleştirilmiş akış şeması Şekil 1'de gösterilmiştir.



Şekil 1. SCAPS-1D simülatörünün basitleştirilmiş akış şeması

SCAPS-1D programında güneş hücrelerinin güç dönüşüm verimi hesaplamalarında Shockley ve Quiser limitine uygun sonuçlar için kusur yoğunluğu ve rekombinasyon mekanizmalarının seçimi önem arz etmektedir. William Shockley ve Hans-Joachim Queisser tarafından p-n eklemenden oluşan tek kristal silisyum güneş hücresinde teorik olarak ulaşılabilecek verim ilk kez 1961 yılında hesaplanmıştır. Güneş hücrelerinde ulaşılabilecek potansiyel maksimum verim Shockley ve Quiser (SQ) limiti olarak tanımlanır. SQ limitinin temel konsepti, güneş hücrelerinde yarıiletkenin bant aralığı enerjisinden daha düşük enerjiye sahip fotonlar prensipte soğurulmaz ve elektron-deşik çiftleri oluşturamaz ancak yarıiletkenin bant aralığı enerjisinden daha büyük enerjilere sahip fotonlar elektron-deşik çiftleri oluşturabilir, elektron-deşik çiftlerinin fotonlardan aldığı ekstra enerji, yarıiletkene ısı olarak salınır. Güneş spektrumundaki fotonların enerji dağılımı ile yarıiletken malzemenin bant aralığı arasındaki spektral uyumsuzlukla ilgilidir. Güneş hücresinin çevresi ile termal dengede olacağı için oda sıcaklığında (300 K) kara cisim ışınlamından radyasyon yayacaktır, bu nedenle yarıiletkeninde elektron-deşik çiftlerinin rekombinasyon olasılığı artacak, ters doyma akımının artmasıyla açık devre gerilimi ve dolayısıyla hücre verimi de düşecektir. SCAPS-1D simülasyonunda Shockley ve Quiser limiti göz önünde bulundurulmaktadır [19], [20].

Bu çalışmada p-i-n yapıda deşik iletim tabakası olarak NiO_x , perovskit tabaka olarak $CH_3NH_3PbI_{3-x}Cl_x$ ve elektron iletim tabakası olarak PCBM katmanlarının oluşan tersine çevrilmiş düzlemsel perovskit güneş hücresi tasarlanmıştır. Tersine çevrilmiş düzlemsel perovskit güneş hücresinin şematik gösterimi Şekil 2'de verilmiştir. SCAP 1D simülasyonu için tasarlanan tersine çevrilmiş düzlemsel perovskit güneş hücresindeki katmanların fiziksel parametreleri Tablo 1'de verilmiştir [21], [22], [23], [24], [25], [26]. Perovskit güneş hücre yapısındaki değişen katman kalınlıklarının ve değişen çalışma sıcaklıklarının hücre verimliliğine etkisi incelenmiştir.



Şekil 2. p-i-n yapısının şematik gösterimi.

Tablo 1. p-i-n yapısındaki perovskit güneş hücresinde kullanılan malzemelerin fiziksel parametreleri

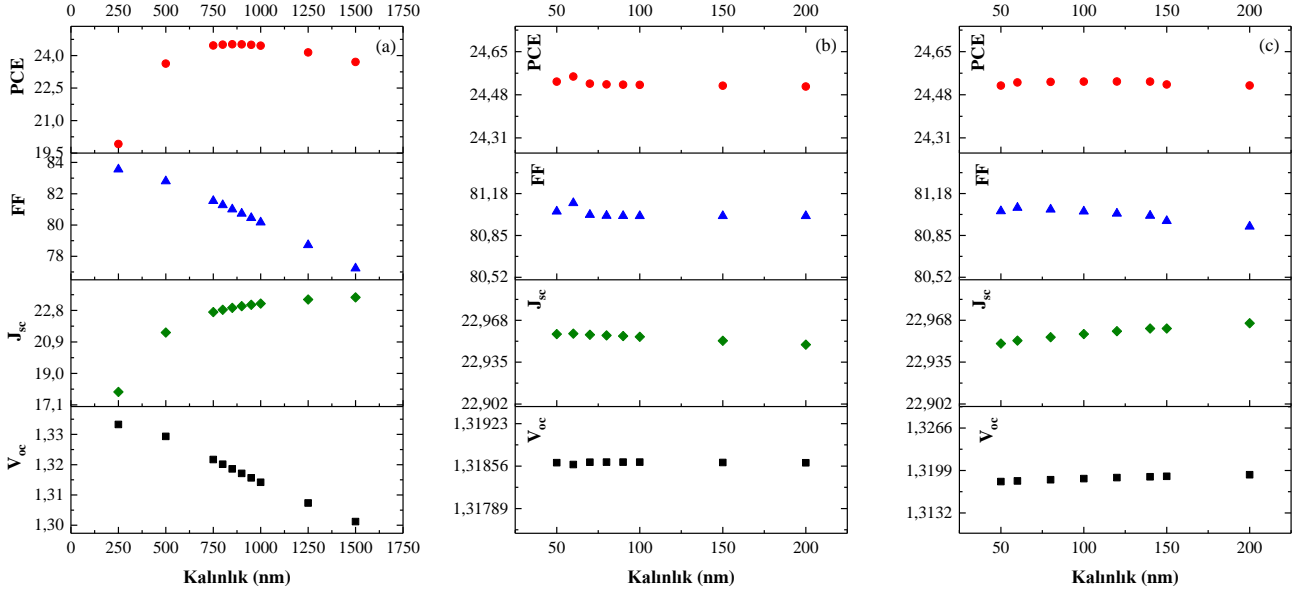
Parametreler	NiO _x	Perovskite	PCBM
Kalınlık (nm)	50-200	750-1500	50-200
Bant aralığı (eV)	3.7	1.55	1.8
Elektron ilgisi (eV)	2.1	3.9	4.2
Dielektrik geçirgenlik	10.7	6.5	4
CB etkin durum yoğunluğu (1/cm ³)	2.8 10 ¹⁹	2.2 10 ¹⁷	1.0 10 ²¹
VB etkin durum yoğunluğu (1/cm ³)	1.0 10 ¹⁹	1.8 10 ¹⁹	2.0 10 ²⁰
Elektron mobilitesi (cm ² /Vs)	12	2	1.0 10 ⁻³
Deşik mobilitesi (cm ² /Vs)	2.8	2	2.0 10 ⁻³
N _D siğ donör yoğunluğu (1/cm ³)	0	1.0 10 ¹⁷	1.0 10 ¹⁷
N _A siğ akseptör yoğunluğu (1/cm ³)	1.0 10 ¹⁷	1.0 10 ¹⁷	0
N _t toplam kusur yoğunluğu (1/cm ³)	1.0 10 ¹⁴	1.0 10 ¹³	1.0 10 ¹⁴

3. Bulgular ve Tartışma

Perovskit katmanı olarak CH₃NH₃PbI_{3-x}Cl_x, deşik iletim katmanı olarak NiO_x ve elektron iletim katmanı olarak PCBM katmanlarını içeren p-i-n yapısında perovskit güneş hücresi tasarlandı ve SCAPS-1D yazılımında simüle edildi. Tasarlanan perovskit güneş hücresinin fotovoltaiik parametreleri, açık devre gerilimi (V_{oc}), kısa devre akım yoğunluğu (J_{sc}), dolum faktörü (FF) ve güç dönüşüm verimi (PCE), aydınlatma altında (AM 1.5G 100 mW/cm²) akım-gerilim karakteristikleri kullanılarak elde edilmiştir. SCAPS-1D yazılımı kullanılarak yapıdaki tüm katmanların kalınlığının optimizasyonu gerçekleştirilmiş ve farklı çalışma sıcaklıklarında ters düzlemsel perovskit güneş hücrelerinin güç dönüşüm verimliliği ve diğer fotovoltaiik parametreleri üzerindeki etkisi simülasyon yoluyla araştırılmıştır.

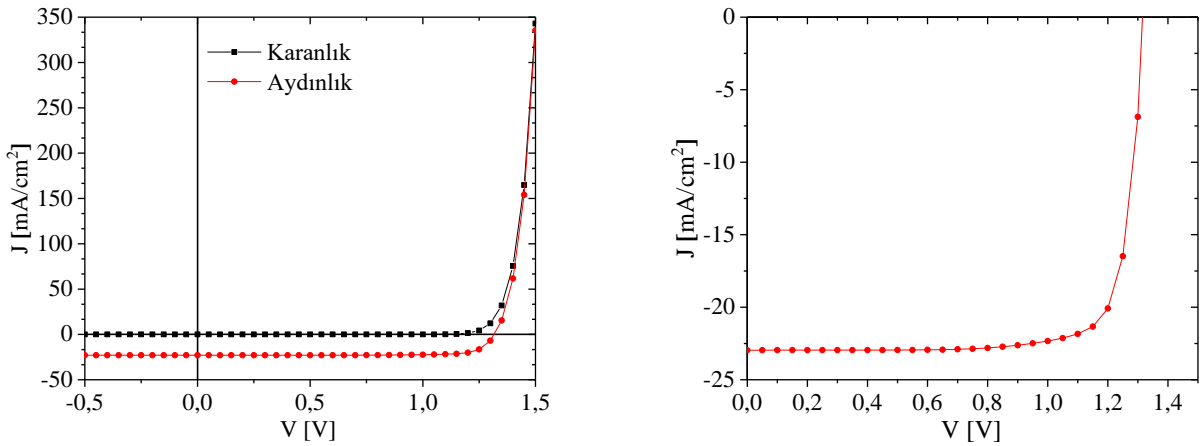
SCAPS-1D yazılımı kullanılarak tasarlanan p-i-n yapısındaki NiO_x kalınlığı, CH₃NH₃PbI_{3-x}Cl_x perovskit kalınlığı ve PCBM kalınlığı değiştirilerek simülasyonları yapıldı ve hücrenin fotovoltaiik parametrelerindeki değişim incelendi. Perovskit foton soğurucu katman, geniş bir dalgaboyu aralığında gelen fotonları verimli bir şekilde soğurmasına ve yük taşıyıcıları oluşturmasına olanak tanıyan yüksek soğurma katsayısına sahiptir. Perovskit katmanının ince olması durumunda foton absorpsiyonu düşük olmasından dolayı taşıyıcı yük üretimi de düşük olur, kalınlığın artması daha fazla fotonun soğrulmasına ve yük taşıyıcı üretiminin artmasına dolayısıyla kısa devre akımının artmasına neden olur fakat kalınlığın çok arttırılması durumunda difüzyon uzunluğundan dolayı üretilen yüklerin rekombinasyon olasılığı artar ve kısa devre akım yoğunluğu azalmaya başlar, ayrıca seri dirençteki artış dolum faktörünü azaltmaktadır. Perovskit katman kalınlığının artmasıyla birlikte rekombinasyon olasılığının artması ters doyma akımının artışına dolayısıyla açık devre geriliminin düşüşüne neden olmaktadır. Perovskit güneş hücresinde elektron iletim tabakası elektronların ve deşik iletim tabakası ise deşiklerin taşınmasında malzemelerin elektriksel özellikleriyle yakından ilişkilidir ve iletim tabakalarının kalınlığının artması direnci artırmaktadır. Perovskit güneş hücresinde soğurucu perovskit tabakası ve elektrotlar arasında yer alan elektron ve deşik iletim tabakalarının kalınlığının çok arttırılması, ara yüzeylerinde seri direncin artmasına ve dolum faktörünün azalmasına neden olmaktadır [27], [28]. Hücre mimarisinde NiO_x deşik iletim tabakasının kalınlığı 50-200 nm aralığında, perovskit tabakasının kalınlığı 750-

1500 nm ve PCBM elektron iletim tabakasının kalınlığı 50-200 nm aralığında değiştirilerek aydınlatma altında akım-gerilim simülasyonu ile elde edilen fotovoltaik parametrelerinden güç dönüşüm verimleri karşılaştırılmıştır ve Şekil 3'de gösterilmiştir. Perovskit tabanlı güneş hücresinde NiO_x deşik iletim tabakasının kalınlığı 60 nm, perovskit tabakasının kalınlığı 850 nm ve PCBM elektron iletim tabakasının kalınlığı 120 nm optimum kalınlık değerleri elde edilen fotovoltaik parametrelerin karşılaştırılması sonucu belirlenmiştir.

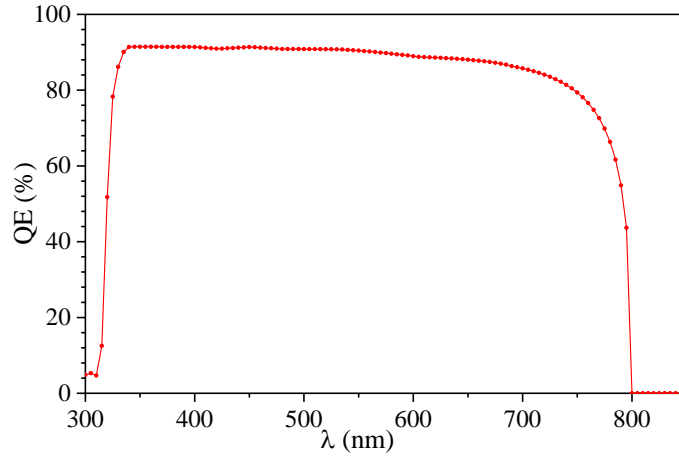


Şekil 3. Perovskit güneş hücresinin fotovoltaik parametrelerinin, p-i-n yapısındaki katmanların a) perovskit CH₃NH₃PbI_{3-x}Cl_x, b) NiO_x ve c) PCBM kalınlıklarına göre değişimi

Perovskit tabanlı güneş hücresindeki katman kalınlıkları optimize edildikten sonra karanlık ve aydınlatma altında (AM 1.5G 100 mW/cm²) akım-voltaj karakterizasyonları yapıldı ve Şekil 4'de gösterildi. Tersine çevrilmiş (p-i-n) düzlemsel yapıdaki perovskit güneş hücresinin fotovoltaik parametreleri V_{oc}=1.32 mV, J_{sc}=22.96 mA/cm², FF=0.81 ve PCE=%24.6 olarak akım-voltaj karakterizasyonlarından belirlenmiştir. Perovskit tabanlı güneş hücrelerinin kuantum verimlik (QE) spektrumu Şekil 5'de gösterilmektedir. Kuantum verimliliği spektrumundan p-i-n yapısında tasarlanan güneş hücresinin 310-800 nm dalgaboyu aralığında spektral duyarlılığa sahip olduğu gözlenmiştir.

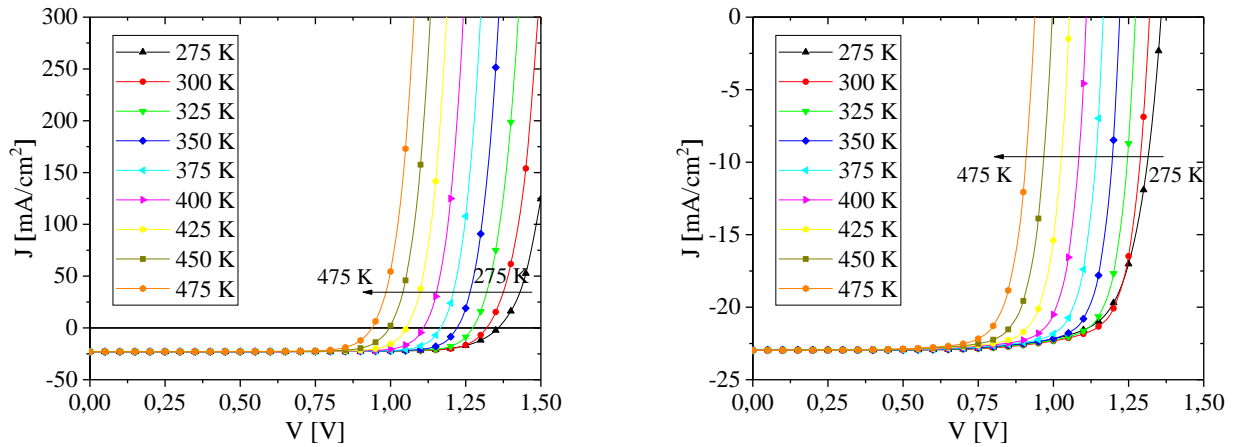


Şekil 4. Optimize edilen perovskit güneş hücresinin karanlıkta ve aydınlatma altında (AM-1.5G-100 mW/cm²) akım yoğunluğu-voltaj karakteristiği

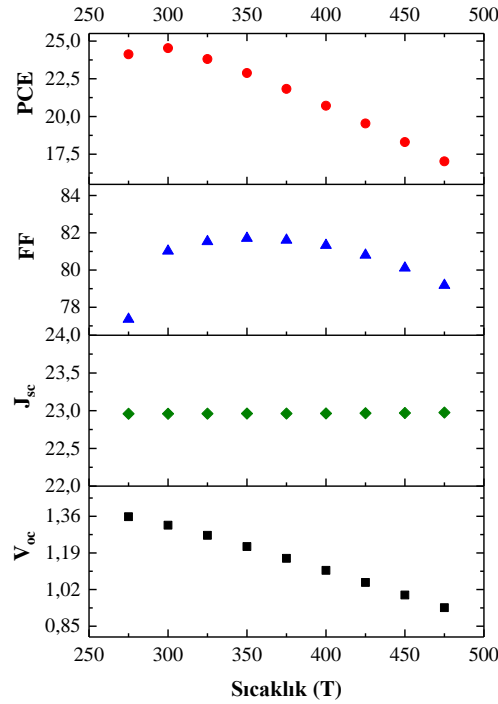


Şekil 5. Optimize edilen perovskit güneş hücresinin kuantum verimliliği spektrumu

Tersine çevrilmiş (p-i-n) düzlemsel yapıdaki perovskit güneş hücresi 275-475 K sıcaklık aralığında akım-voltaj karakterizasyonları aydınlatma altında (AM 1.5G 100 mW/cm²) yapıldı ve Şekil 6'da gösterildi. Tasarlanan perovskit hücresinin 275-475 K sıcaklık aralığındaki akım-voltaj grafiklerinden fotovoltaj parametreleri belirlendi ve Şekil 7'de gösterildi.



Şekil 6. p-i-n yapısında tasarlanan perovskit güneş hücresinin değişen (275-475 K) çalışma sıcaklıklarında aydınlatma altındaki (AM-1.5G-100 mW/cm²) akım yoğunluğu-voltaj karakteristikleri



Şekil 7. Perovskit güneş hücresinin fotovoltaiik parametrelerinin 275-475 K çalışma sıcaklığı aralığındaki değişimi

Sıcaklık arttıkça yarıiletken malzemelerin yasak enerji aralığı azalmaktadır, güneş hücresindeki enerji bant hizalanmasındaki bu değişim sıcaklıkla beraber ters doyma akım yoğunluğunu arttırmaktadır, ters doyma akım yoğunluğunun artışı özellikle güneş hücresindeki açık devre gerilimi üzerinde etkili olmaktadır ve açık devre gerilimini düşürmektedir. Ayrıca sıcaklık artışı, kusur yoğunluğunun artmasına sebebiyet vermekte ve rekombinasyon mekanizmaları daha etkin olmaktadır [29], [30]. Sıcaklığın artışıyla birlikte p-i-n yapıdaki güneş hücresinin fotovoltaiik parametrelerinden özellikle açık devre gerilimi (V_{oc}) keskin azalmıştır, kısa devre akım yoğunluğu (J_{sc}) kısmen sabit kalmıştır, hücrenin dolum faktörü (FF) 350 K sıcaklığına kadar artış göstermiş sonrasında ise sıcaklık artışıyla birlikte azalmıştır. p-i-n yapıdaki güneş hücresinde sıcaklık özellikle açık devre gerilimi ve dolum faktörü üzerinde etkili olmuştur. Sıcaklığın artışı cihazın fotovoltaiik parametrelerden açık devre gerilimini ve dolum faktörünü azalttığından dolayı güç dönüşüm verimini de sıcaklığa bağlı olarak azalmıştır. Tasalanan perovskit güneş hücresinde maksimum verim 300 K'de %24.6 gözlenirken 475 K'de %17.0 olarak gözlenmiştir.

4. Sonuçlar

SCAPS-1D tarafından gerçekleştirilen simülasyon, çeşitli perovskit güneş hücrelerinin performansının değerlendirilmesinde ve iyileştirilmesinde önemli bir rol oynamaktadır. Bu çalışmada, tersine çevrilmiş düzlemsel (p-i-n) yapısında, deşik iletim katmanı olarak NiO_x , soğurucu perovskit katmanı olarak $CH_3NH_3PbI_{3-x}Cl_x$ ve elektron iletim katmanı olarak PCBM malzemeleri içeren perovskit tabanlı güneş hücresi tasarlandı. SCAPS-1D yazılımı ile malzemelerin fiziksel parametreleri kullanılarak yapının çeşitli şartlar altındaki simülasyonları yapıldı. Perovskit tabanlı güneş hücresinde katman kalınlıkları değiştirilerek fotovoltaiik parametreleri simülasyon ile elde edilmiş ve karşılaştırılmıştır. Perovskit tabanlı güneş hücresinde NiO_x deşik iletim tabakasının kalınlığı 60 nm, perovskit tabakasının kalınlığı 850 nm ve PCBM elektron iletim tabakasının kalınlığı 120 nm olduğunda en iyi fotovoltaiik performans gözlenmiştir. Tersine çevrilmiş (p-i-n) düzlemsel yapıdaki perovskit güneş hücresinde, optimize edilen katman kalınlıkları ile yapılan simülasyon sonucunda hücrenin fotovoltaiik parametreleri $V_{oc}=1.32$ mV, $J_{sc}=22.96$ mA/cm², FF=0.81 ve PCE=%24.6 olarak belirlenmiştir. Perovskit güneş hücresinin kuantum verimliliği spektrumundan 310-800 nm dalgaboyu aralığında spektral duyarlılığa sahip olduğu ve güneş spektrumuna duyarlı olduğu bölgeden yaklaşık %90 oranında dönüşüm sağlayabildiği gözlenmiştir. SCAPS-1D yazılımı kullanılarak tasarlanan tersine çevrilmiş düzlemsel perovskit güneş hücrelerinin sıcaklık altındaki fotovoltaiik parametrelerindeki değişimi

incelenmiştir ve p-i-n yapıdaki güneş hücresinin güç dönüşüm verimliliği sıcaklığın artmasıyla beraber özellikle açık devre geriliminin keskin düşmesine bağlı olarak azaldığı belirlenmiştir. Perovskit güneş hücresinde maksimum verim 300 K'de %24.6 olarak gözlenirken 475 K'de %17.0 olarak gözlenmiştir. SCAPS-1D yazılımı kullanılarak ters düzlemsel perovskit güneş hücresinin katman kalınlıklarının optimizasyonu gerçekleştirilmiş ve farklı çalışma sıcaklıklarının hücrenin güç dönüşüm verimliliğine ve diğer fotovoltaiik parametrelerine etkisi incelenmiştir.

Kaynakça

- [1] S. Lin, T. Zhang, H. Yang, and Y. Li, "Progress and Perspectives of Solar Cells: A Critical Review", *Energy & Fuels* vol. 38 no.2, pp. 761-788, 2024.
- [2] N. Kant, P. Singh, "Review of next generation photovoltaic solar cell technology and comparative materialistic development", *Materials Today: Proceedings*, vol. 56 no. 6, pp. 3460-3470, 2022.
- [3] M. Burgelman, P. Nollet and S. Degraeve, "Modelling polycrystalline semiconductor solar cells", *Thin Solid Films*, vol. 361-362, pp. 527-532, 2000.
- [4] K. Decock, P. Zabierowski and M. Burgelman, "Modeling metastabilities in chalopyrite-based thin film solar cells", *Journal of Applied Physics*, vol. 111 pp. 043703, 2012.
- [5] K. Decock, S. Khelifi and M. Burgelman, "Modelling multivalent defects in thin film solar cells", *Thin Solid Films*, 519, pp. 7481-7484, 2011.
- [6] M. Grätzel, "The light and shade of perovskite solar cells" *Nature Materials*, vol. 13, no.9, pp. 838-842, 2014.
- [7] F. Cao, L. Bian, L. Li, "Perovskite solar cells with high-efficiency exceeding 25%: A review", *Energy Mater. Devices*, vol. 2, pp. 9370018, 2024.
- [8] Z. Song, S.C. Watthage, A.B. Phillips, & M. J. Heben, "Pathways toward high-performance perovskite solar cells: review of recent advances in organo-metal halide perovskites for photovoltaic applications", *Journal of Photonics for Energy*, vol. 6-2, pp. 22001, 2016.
- [9] A. Kojima, K. Teshima, Y. Shirai and T. Miyasaka, "Organometal halide perovskites as visible-light sensitizers for photovoltaic cells", *Journal of the American Chemical Society*, vol. 131, no. 17, pp. 6050-6051, 2009.
- [10] National Renewable Energy Laboratory (NREL), 2024.
- [11] P. K. Kung, M.H. Li, P. Y. Lin, Y. H. Chiang, C. R. Chan, T. F. Guo and P. Chen., "A Review of Inorganic Hole Transport Materials for Perovskite Solar Cells", *Adv. Mater. Interfaces.*, vol. 5, pp. 1800882, 2018.
- [12] M. Liu, M.B. Johnston, H. Snaith, "Efficient planar heterojunction perovskite solar cells by vapour deposition", *Nature*, vol. 501, pp. 395-398, 2013.
- [13] Q. Zhou, Z. Jin, H. Li, et al., "Enhancing performance and uniformity of $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ perovskite solar cells by air-heated-oven assisted annealing under various humidities", *Sci. Rep.*, vol. 6, pp. 21257, 2016.
- [14] D. Yang, X. Zhang, K. Wang, C. Wu, R. Yang, Y. Hou, Y. Jiang, S. Liu, and S. Priya, "Stable Efficiency Exceeding 20.6% for Inverted Perovskite Solar Cells through Polymer-Optimized PCBM Electron-Transport Layers", *Nano Letters*, vol. 19 no. 5, pp. 3313-3320, 2019.
- [15] P. Calado, I. Gelmetti, B. Hilton, et al., "Driftfusion: an open source code for simulating ordered semiconductor devices with mixed ionic-electronic conducting materials in one dimension", *J Comput Electron*, vol. 21, pp. 960-991, 2022.
- [16] M. A. Green, "Solar cell fill factors: General graph and empirical expressions", *Solid-State Electronics*, vol. 24, pp. 788-789, 1981.
- [17] H.J. Park, H. Son, B.S. Jeong, "SCAPS-1D Simulation for Device Optimization to Improve Efficiency in Lead-Free CsSnI_3 Perovskite Solar Cells", *Inorganics*, vol. 12, pp. 123, 2024.
- [18] M. Burgelman, "Models for the optical absorption $\alpha(\lambda)$ of materials in SCAPS", University of Gent, 2018, Belgium.
- [19] W. Shockley and H. J. Queisser, "Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells", *J. Appl. Phys.*, vol. 32, pp. 510-519, 1961.
- [20] T. Markvart, "Shockley: Queisser detailed balance limit after 60 years", *Wiley Interdisciplinary Reviews: Energy and Environment*, vol. 11(4), pp. 430, 2022.

- [21] E. Raza, Z. Ahmad, F. Aziz, M. Asif, A. Ahmed, K. Riaz, J. Bhadra, N. J. Al-Thani, "Numerical simulation analysis towards the effect of charge transport layers electrical properties on cesium based ternary cation perovskite solar cells performance", *Solar Energy*, vol. 225, pp. 842-850, 2021.
- [22] S. Mehmood, Y. Xia, F. Qu, M. He, "Investigating the Performance of Efficient and Stable Planer Perovskite Solar Cell with an Effective Inorganic Carrier Transport Layer Using SCAPS-1D Simulation", *Energies*, vol. 16, no. 21, pp. 7438, 2023.
- [23] M. Alla, V. Manjunath, N. Chawki, D. Singh, S. C. Yadav, M. Rouchdi, F. Boubker, "Optimized $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ based perovskite solar cell with theoretical efficiency exceeding 30%", *Optical Materials*, vol. 124, pp. 112044, 2022.
- [24] M. Ayad, M. Fathi, A. Mellit, "Study and performance analysis of Perovskite solar cell structure based on organic and inorganic thin films", *Optik*, vol. 233, pp. 166619, 2021.
- [25] S.Z. Haider, H. Anwar, S. Manzoor, A.G. Ismail, M. Wang, "A theoretical study for high-performance inverted p-i-n architecture perovskite solar cells with cuprous iodide as hole transport material", *Current Applied Physics*, vol. 20, no. 9, pp. 1080-1089, 2020.
- [26] D.Araújo, V. Helene and Nogueira, A.F. Tristão, J.C. Santos, L José, "Fullerene-C60 and PCBM as interlayers in regular and inverted lead-free PSCs using $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$: an analysis of device performance and defect density dependence by SCAPS-1D", *RSC Adv.*, vol. 14, no. 16, pp. 10930-10941, 2024.
- [27] T. Kirchartz, L. Krückemeier, E.L. Unger, "Research Update: Recombination and open-circuit voltage in lead-halide perovskites", *APL Mater.*, vol. 6(10), pp. 100702, 2018.
- [28] E.A Nyiekaa, T.A. Aika, E. Danladi, et al. "Simulation and optimization of 30.17% high performance N-type TCO-free inverted perovskite solar cell using inorganic transport materials", *Sci Rep*, vol. 14, pp. 12024, 2024.
- [29] S. Valizadeh, A. Shokri, A. S.-Dodaran, N. Fough, F. M.-Sukki, "Investigation of efficiency and temperature dependence in RbGeBr_3 -based perovskite solar cell structures", *Results in Physics*, vol. 57, pp. 107351, 2024.
- [30] G. Siefer and A.W. Bett, "Analysis of temperature coefficients for III–V multi junction concentrator cells" *Prog. Photovolt: Res. Appl.*, vol. 22, pp. 515–524, 2014.