



بررسی عملکرد متمرکزکننده خورشیدی نورتاب حاوی نقاط کوانتومی پروسکایت با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلو

زهرا حسینی*

دانشکده فناوری‌های نوین، دانشگاه شیراز، شیراز، ایران

چکیده: استفاده از متمرکزکننده‌های خورشیدی نورتاب رویکرد مناسبی برای کاهش هزینه‌های تولید الکتریسته از نور خورشید محسوب می‌شوند. نقاط کوانتومی پروسکایت با طیف جذب و تابش مناسب و همچنین، بازده کوانتومی نورتابی بالا، کاندیداهای مناسبی برای استفاده به عنوان ماده نورتاب در متمرکزکننده‌های خورشیدی نورتاب محسوب می‌شوند. انتخاب ماده نورتاب با طیف جذب و تابش مناسب، بازده کوانتومی نورتابی بالا، غلظت مناسب نقاط کوانتومی در متمرکزکننده خورشیدی نورتاب و همچنین ابعاد مناسب آن، از مهمترین عوامل موثر بر عملکرد متمرکزکننده خورشیدی نورتاب است. در این پژوهش، با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلو اثر تغییرات این عوامل بر بازده نوری متمرکزکننده خورشیدی نورتاب بررسی شده است. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که نقاط کوانتومی $Mn:MAPbCl_3$ با بازده کوانتومی نورتابی بالاتر و همپوشانی کمتر میان طیف جذب و تابش، عملکرد بهتری در مقایسه با نقاط کوانتومی $MAPbCl_3$ دارند. همچنین ویژگی‌های برتر نقاط کوانتومی $Mn:MAPbCl_3$ در این کاربرد، امکان ساخت متمرکزکننده خورشیدی نورتاب با طول یا مساحت بزرگتری را فراهم می‌کند.

واژگان کلیدی: متمرکزکننده خورشیدی نورتاب، نقاط کوانتومی، پروسکایت، بازده نوری، شبیه‌سازی مونت کارلو.

*zahrahosseini@shirazu.ac.ir

متمرکزکننده‌های خورشیدی نورتاب می‌توانند نور را بر یک سلول خورشیدی با مساحت کم، که در گوشه متمرکزکننده قرار گرفته است، متمرکز کنند. شکل ۱، طرحواره یک متمرکزکننده خورشیدی نورتاب را نشان می‌دهد. یک LSC بطور کلی یک موج‌بر نوری غیرکریستالی است که حاوی ذرات نورتاب با بازده کوانتومی نورتابی بالاست. با ورود نور به LSC از وجه بالایی، ذرات نورتاب نور فرودی را جذب کرده و فوتون‌هایی با طول موج بزرگتر تابش می‌کنند. برخلاف دیگر گونه‌های متمرکزکننده خورشیدی که در آنها تنها نور مستقیم خورشید متمرکز می‌شود،

۱- مقدمه

در چند دهه اخیر، بازده سلول‌های خورشیدی فوتوولتاییک افزایش چشمگیری داشته است. اما قیمت آنها در مقایسه با منابع دیگر انرژی همچنان بالا به نظر می‌رسد. یکی از راهکارهای مورد استفاده در راستای افزایش بازده و کاهش قیمت سلول‌های خورشیدی، استفاده از متمرکزکننده‌های خورشیدی است. از دهه ۱۹۷۰ تاکنون، پژوهشگران در جهت گسترش متمرکزکننده‌های خورشیدی نورتاب (LSC) تلاش بسیاری کرده‌اند [۱،۲].



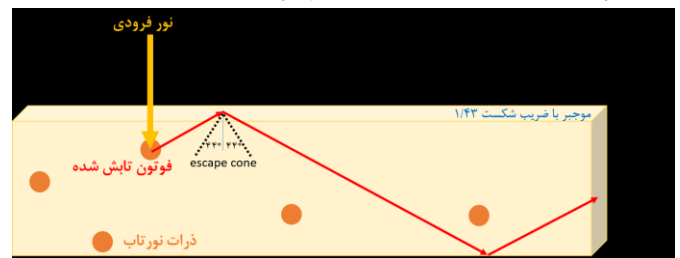
کوانتومی نورتابی بالا، و همپوشانی ناچیز میان طیف جذب و تابش این مواد، آنها را به عنوان انتخابی مناسبی برای استفاده به عنوان ماده نورتاب در LSC نیز مطرح می‌کند [۱۳]. در سال ۲۰۱۵، میرارشادی و همکارانش، برای نخستین بار از ماده پروسکایت $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ به عنوان ماده نورتاب برای بهبود بازده سلول خورشیدی استفاده کردند [۱۴]. آنها یک لایه نازک (۱۰۰ میکرومتری) از این ماده پروسکایت را بر روی یک سلول خورشیدی سیلیکونی لایه نشانی کرده و نشان دادند حضور این لایه باعث بهبود بازده سلول خورشیدی شده است. پس از آن، تاکنون مواد پروسکایت متفاوتی به عنوان ماده نورتاب در LSC مورد استفاده و بررسی قرار گرفته‌اند [۱۵]. استفاده از نقاط کوانتومی $\text{CsPb}(\text{Br}_x\text{I}_{1-x})_3$ نخستین بار توسط ژالو و همکارانش گزارش شد. آنها به بازده نوری ۲٪ برای LSC دست یافتند [۱۶].

در این پژوهش، LSC‌های حاوی دو نوع نقاط کوانتومی پروسکایت با ترکیب‌های MAPbCl_3 و Mn:MAPbCl_3 مورد بررسی قرار گرفته است. شبیه‌سازی تئوری روش موثری برای بررسی و تعیین پارامترهای LSC محسوب می‌شود. در اینجا، برای پیش‌بینی بازده نوری LSC، شبیه‌سازی مونت کارلو مورد استفاده قرار گرفته است. نقاط کوانتومی مورد استفاده در این پژوهش، دارای طیف‌های جذب و تابش متفاوت هستند. بدین ترتیب نتایج بدست آمده به خوبی اهمیت طیف جذب و تابش مواد نورتاب مورد استفاده در LSC را نشان می‌دهند. همچنین اثر QY نقاط کوانتومی بر بازده نوری LSC بررسی شده است. هندسه LSC از دیگر عوامل موثر بر بازده نوری LSC است. بنابراین LSC‌های حاوی نقاط کوانتومی MAPbCl_3 و Mn:MAPbCl_3 با ابعاد متفاوت بررسی و ساین مناسب LSC با توجه به ویژگی‌های این نقاط کوانتومی پیشنهاد شده است.

۲- شبیه‌سازی مونت کارلو

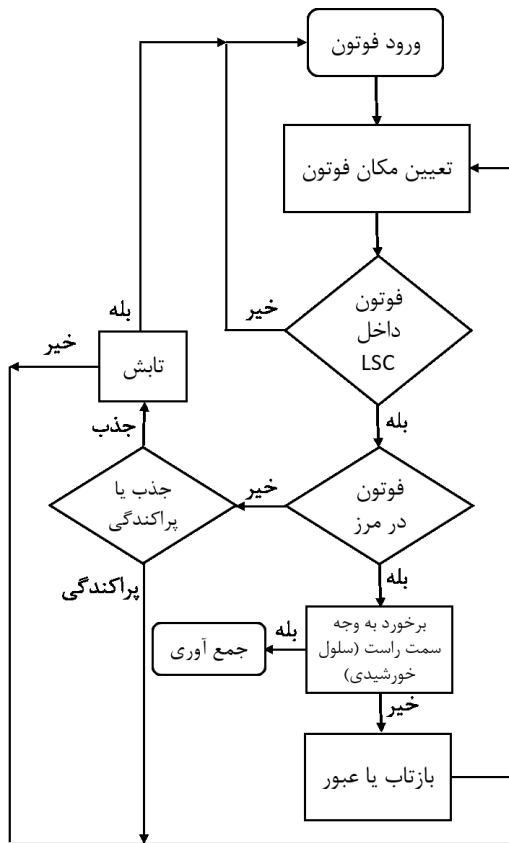
شبیه‌سازی مونت کارلو برای انتقال فوتون ابزاری مرسوم برای مطالعه انتشار تصادفی نور در یک محیط در هنگامی است که اثرات وابسته به فاز، مانند تداخل و پراش قابل توجه نباشد [۱۷]. این روش، به ویژه برای بررسی انتشار نور در LSC مناسب است. یک فوتون وارد LSC می‌شود و تا وقتی که یا به دلیل اثرات تابشی تلف شود، یا از LSC فرار کند، و یا به وجه جانبی LSC

متمرکزکننده‌های خورشیدی نورتاب می‌توانند نور پخش شده را نیز جذب و متمرکز کنند [۳]. فوتون‌های تابش شده با ذرات نورتاب در LSC، فوتون‌هایی هستند که با بازده بالاتری در سلول خورشیدی جذب و تبدیل به الکتریسیته می‌شوند. این فوتون‌ها با بازتاب داخلی کلی از مرزهای LSC/هوا، در داخل LSC به دام افتاده و بر وجه کناری LSC متمرکز می‌شوند. عملکرد LSC به ویژگی‌های ذرات نورتاب مورد استفاده بسیار وابسته است. یک ذره نورتاب ایده‌آل برای استفاده در LSC، باید بازده کوانتومی نورتابی (QY) بالا و طیف جذب پهنی داشته باشد [۴]. شدت تابش آن در طول موج‌هایی که بازده کوانتومی خارجی سلول خورشیدی ماکزیمم است، بالا باشد. همچنین، مقدار همپوشانی میان طیف جذب و تابش آن بسیار ناچیز باشد [۵]. از دهه ۱۹۷۰ تاکنون، ذرات نورتاب متنوعی جهت دستیابی به بازده نوری بالا در LSC مورد استفاده قرار گرفته‌اند. رنگدانه‌های با مولکول کوچک و یا رنگدانه‌های بسیاری آلی از جمله مواد نورتابی هستند که به دلیل داشتن ضریب جذب بالا و بازده کوانتومی نورتابی عالی بسیار مورد استفاده قرار گرفته‌اند [۶،۷]. اگرچه بازه جذب محدود، همپوشانی زیاد میان بازه جذب و تابش، و پایداری نوری ضعیف این گونه‌ها، استفاده از آنها را در ساخت LSC در مقیاس بزرگ محدود می‌کند. استفاده از نقاط کوانتومی نیم‌رسانا، مانند CdSe یا PbSe در LSC پایداری نوری بالاتری را تضمین می‌کند [۸،۹]. همچنین، طیف جذب و تابش این گونه‌ها با تغییر ساینز نقاط کوانتومی قابل تغییر است. استفاده از این نقاط کوانتومی افزایش چشمگیری در بازده نوری LSC را ممکن ساخته است. به عنوان مثال، استفاده از نقاط کوانتومی CdSe/CdS با بازده کوانتومی نورتابی ۸۶٪، بازده نوری LSC را به مقدار ۴۸٪ بهبود داده است [۱۰،۱۱].



شکل ۱. طرحواره یک متمرکزکننده خورشیدی نورتاب

در سال‌های اخیر، نیمه‌هادی‌های پروسکایت به عنوان ماده جاذب نور در سلول خورشیدی بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند [۱۲]. ویژگی‌هایی مانند ضریب شکست بالا، طیف جذب گسترده، بازده



شکل ۲. الگوریتم شبیه‌سازی مونت کارلو

که سلول خورشیدی قرار دارد برسد، رهگیری می‌شود. در اینجا، LSC به شکل یک جعبه در نظر گرفته شده است. ابعاد LSC به ترتیب در راستای x، y و z برابر ۲/۵، ۲/۸ و ۱/۴ سانتی‌متر در نظر گرفته شده است. فرض می‌شود که نور از وجه بالایی LSC بطور عمود وارد می‌شود. یک سلول خورشیدی وجه سمت راست (در راستای y-z) را پوشانده است و دیگر وجوه کناری با آینه‌هایی که نور را با احتمال ۱ بازتاب می‌کنند، پوشیده شده‌اند. همچنین وجه پایین بدون پوشش در نظر گرفته شده است. بنابراین، نور تنها از وجه بالا و وجه پایین می‌تواند فرار کند.

برای دستیابی به نتایج قابل قبول از نظر آماری، در هر شبیه‌سازی تعداد 10^5 فوتون با طول موج‌هایی که بطور تصادفی از طیف استاندارد خورشید انتخاب شده است، بطور عمود بر جمع‌آوری کننده نور خورشید فرود آمده است. مکان فرود اولیه فوتون بر وجه بالایی LSC بطور تصادفی تعیین می‌شود تا فوتون‌ها بطور شبیه‌سازی مونت کارلو مورد استفاده در این پژوهش را نشان می‌دهد. بطور خلاصه، بر اساس موقعیت فوتون در هر لحظه و پارامترهای شبیه‌سازی، اتفاقی که فوتون با آن مواجه می‌شود (جذب، پراکندگی، برخورد با مرزها، جمع‌آوری و ...) تعیین می‌شود. بر این اساس، طول مسیر حرکت فوتون و در نتیجه موقعیت جدید فوتون تعیین می‌شود. در موقعیت جدید، پارامترهای شبیه‌سازی آپدیت شده و این فرایند تا جمع‌آوری و یا از دست دادن فوتون ادامه می‌یابد.

مسافت طی شده توسط فوتون‌ها در LSC بر اساس قانون بی‌یر-لمبرت و با استفاده از طیف‌های جذب و عبور نقاط کوانتومی محاسبه شده است. بر طبق قانون بی‌یر-لمبرت، احتمال جذب یک فوتون از رابطه زیر تعیین می‌شود:

$$P(L, \lambda) = 1 - 10^{-\varepsilon(\lambda)CL} \quad (1)$$

که در آن C غلظت مولی نقاط کوانتومی، $\varepsilon(\lambda)$ ضریب جذب مولی نقاط کوانتومی و L طول عبور فوتون است. با حل معادله شماره ۱، یک طول بازتابش به صورت زیر بدست می‌آید:

$$L = -\frac{1}{\varepsilon(\lambda)C} \log_{10}(1 - p(L, \lambda)) \quad (2)$$

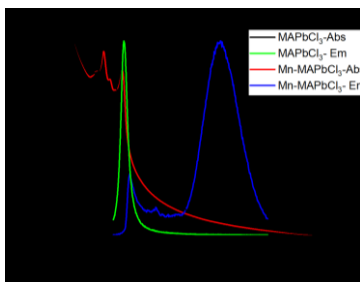
که در آن $p(L, \lambda)$ یک متغیر تصادفی است که بطور یکنواخت در بازه [۰، ۱] توزیع شده است. اگر فوتونی در یک فاصله L_0 جذب نشود، بطوریکه:

$$L_0 = 2l_z \quad (3)$$

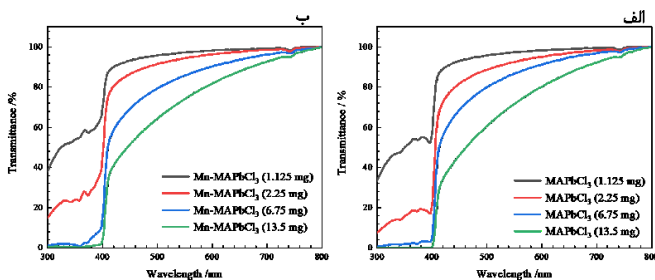
که در آن l_z ضخامت LSC است، فرض می‌شود که فوتون از LSC فرار می‌کند.

۳- نتایج و بحث

طیف جذب و تابش نقاط کوانتومی MAPbCl_3 و Mn:MAPbCl_3 که در این پژوهش مورد استفاده قرار گرفته‌اند، در شکل ۳ گزارش شده است. همانطور که ملاحظه می‌شود، بیشترین مقدار جذب توسط هر دو نوع نقاط کوانتومی در طول موج‌های کوچکتر از ۵۰۰ نانومتر اتفاق می‌افتد. نقاط کوانتومی MAPbCl_3 بازه تابش بسیار باریک در حدود ۴۰۰ نانومتر نشان داده‌اند که همپوشانی بسیاری با بازه جذب این نقاط کوانتومی دارد. با ورود ناخالصی Mn به این ترکیب پروسکایت، بازه تابش به سمت طول موج‌های بزرگتر و در محدوده ۵۵۰ تا ۷۰۰ نانومتر انتقال یافته است. بنابراین همپوشانی میان طیف جذب و تابش برای نقاط کوانتومی Mn:MAPbCl_3 بسیار ناچیز است. همچنین، طیف عبور LSC ‌های حاوی نقاط کوانتومی MAPbCl_3 و Mn:MAPbCl_3 با غلظت‌های متفاوت در شکل ۴ نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می‌شود، مقدار پراکندگی نور در این لایه‌ها قابل توجه است و با افزایش غلظت نقاط کوانتومی، این مقدار افزایش نیز می‌یابد. بنابراین در تمام محاسبات مربوط به بازده نوری LSC ، سهم پراکندگی نور در کنار سهم جابجایی طیف نور فرودی در نظر گرفته شده است و در هر بخش این مقدار بطور مستقل نیز گزارش شده است.



شکل ۳. نمودار جذب و تابش نقاط کوانتومی MAPbCl_3 و Mn:MAPbCl_3



شکل ۴. طیف عبور LSC ‌های حاوی نقاط کوانتومی (الف) MAPbCl_3 و (ب) Mn:MAPbCl_3 با غلظت‌های متفاوت

فوتون‌های جذب شده با نقاط کوانتومی در LSC بار دیگر با طول موجی جدید تابش می‌شوند. در این شبیه‌سازی تابش فوتون‌ها از نقاط کوانتومی بطور همگن در تمام جهات در نظر گرفته شده است. اگر فوتون جذب شود، در صورتی بازتابش می‌شود که:

$$\xi < QY \quad (4)$$

که در آن ξ یک متغیر تصادفی است که در بازه $[0, 1]$ توزیع شده است، و QY بازده کوانتومی نورتابی نقاط کوانتومی است. QY نسبت تعداد فوتون‌های تابش شده به تعداد فوتون‌های جذب شده توسط نقاط کوانتومی است.

احتمال عبور یا بازتاب این فوتون‌ها از مرز LSC/HWA بر اساس قانون اسنل و با در نظر گرفتن ضریب شکست LSC محاسبه شده است. در این پژوهش، محیط LSC که نقاط کوانتومی پروسکایت در آن پخش شده‌اند، از جنس پلی‌دی‌متیل‌سیلوکسان (PDMS) با ضریب شکست 1.43 در نظر گرفته شده است. این بدان معناست که فوتون‌های با زاویه تابش بزرگتر از 44° درجه بر مرز LSC/HWA بازتاب داخلی کلی خواهند داشت. همچنین قابل ذکر است در این شبیه‌سازی اثرات پراکندگی نور در LSC توسط نقاط کوانتومی نیز در نظر گرفته شده است. طول پویش آزاد (MFP) برای فوتونی که پراکنده می‌شود، با استفاده از طیف عبور LSC و از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$MFP = \frac{t}{\ln[T(\lambda)]} \quad (5)$$

که در آن t ضخامت LSC و $T(\lambda)$ مقدار عبور نور از LSC در هر طول موج را نشان می‌دهد.

بازده نوری LSC معیار مرسوم برای ارزیابی عملکرد یک LSC است. بازده نوری LSC برای هر طول موج، به صورت نسبت تعداد فوتون‌های جمع‌آوری شده به نسبت فوتون‌های فرودی بر LSC با همان طول موج است. فوتون‌های جمع‌آوری شده در واقع فوتون‌های رسیده به وجه یا وجوه پوشیده شده با سلول خورشیدی است. در ادامه اثر طیف جذب و تابش نقاط کوانتومی پروسکایت، QY نقاط کوانتومی و همچنین، اثر هندسه LSC بر بازده نوری LSC مورد بررسی قرار گرفته است.

مدل مونته کارلو توصیف شده در بخش قبل برای محاسبه بازده نوری LSC های حاوی غلظت های متفاوت از دو نوع نقاط کوانتومی MAPbCl₃ و Mn:MAPbCl₃ گرفته است. برای هر LSC، بازده نوری بر حسب غلظت نقاط کوانتومی، و با در نظر گرفتن QY متفاوت برای نقاط کوانتومی، محاسبه شده است. شکل ۵، نتایج این شبیه سازی را برای LSC های حاوی نقاط کوانتومی MAPbCl₃ و Mn:MAPbCl₃ بطور مجزا نشان می دهد. این نتایج نشان می دهند در هر دو مورد استفاده از نقاط کوانتومی MAPbCl₃ و Mn:MAPbCl₃ در LSC، بازده نوری LSC هم به غلظت و هم به QY نقاط کوانتومی وابسته است. بازده نوری کل با افزایش غلظت نقاط کوانتومی در LSC افزایش می یابد، و شیب افزایش بازده نوری LSC در مواردی که QY نقاط کوانتومی بالاتر است، بیشتر است. جذب نور در LSC با افزایش غلظت نقاط کوانتومی در آن افزایش می یابد. افزایش جذب نور توسط نقاط کوانتومی در LSC، منجر به افزایش تعداد فوتون های با طول موج جابجا شده و در نتیجه افزایش بازده نوری LSC می شود. پراکندگی نور توسط نقاط کوانتومی در LSC نیز با افزایش غلظت نقاط کوانتومی در LSC افزایش می یابد. بنابراین بطور کلی بازده نوری LSC با افزایش غلظت نقاط کوانتومی در آن افزایش می یابد. این رفتار بطور واضح در نتایج شبیه سازی بازده نوری LSC های حاوی MAPbCl₃ و Mn:MAPbCl₃ که در شکل ۵ نشان داده شده است، قابل ملاحظه است. از مقایسه شکل ۵الف و ۵ب می توان دریافت که در حالت استفاده از نقاط کوانتومی MAPbCl₃ در LSC در مقایسه با حالت استفاده از نقاط کوانتومی Mn:MAPbCl₃، تغییرات بازده نوری LSC با تغییر غلظت نقاط کوانتومی، کندتر اتفاق می افتد. همچنین، شکل ۶الف نشان می دهد که در یک QY ثابت، بازده نوری LSC حاوی نقاط کوانتومی Mn:MAPbCl₃، در مقایسه با بازده نوری همتای خود (حاوی نقاط کوانتومی MAPbCl₃) بیشتر است. دلیل این رفتار را می توان به همپوشانی بیشتر میان طیف جذب و تابش برای نقاط کوانتومی MAPbCl₃ در مقایسه با این همپوشانی برای نقاط کوانتومی Mn:MAPbCl₃ نسبت داد. همین پدیده باعث می شود که به عنوان مثال در QY=۰/۱، با افزایش غلظت نقاط کوانتومی در LSC از مقدار ۱/۱۲۵ تا مقدار

$$RO = \frac{\int PL(\lambda)[1-10^{-dC\varepsilon(\lambda)}]d\lambda}{\int PL(\lambda)d\lambda} \quad (6)$$

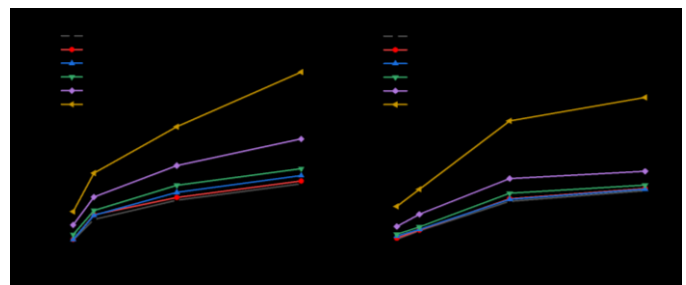
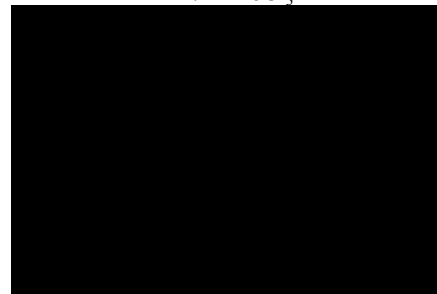
که در آن $PL(\lambda)$ طیف تابش نقاط کوانتومی، C غلظت نقاط کوانتومی، $\varepsilon(\lambda)$ ضریب جذب مولی نقاط کوانتومی و d ضخامت LSC را نشان می دهد.

مقدار این پارامتر برای غلظت های متفاوت از نقاط کوانتومی MAPbCl₃ و Mn:MAPbCl₃ در جدول ۱ گزارش شده است. در غلظت ۱۳/۵ میلی گرم، RO برای نقاط کوانتومی MAPbCl₃ و Mn:MAPbCl₃ به ترتیب ۰/۸۹ و ۰/۲۳ محاسبه شده است. وقتی مقدار RO زیاد است، اگرچه مقدار جذب نور با افزایش غلظت نقاط کوانتومی در LSC افزایش می یابد، شانس جذب دوباره فوتون های تابش شده توسط نقاط کوانتومی نیز زیاد می شود. بنابراین، با افزایش غلظت نقاط کوانتومی، بازده نوری ناشی از اثر جابجایی طول موج فوتون ها به مقدار قابل توجهی افزایش نمی یابد. این رفتار به ویژه در حالت های با QY کمتر، واضح تر است. در عمل، QY تعیین کننده مقدار اثرات منفی RO بر عملکرد LSC است. وقتی QY نقاط کوانتومی کم باشد، فوتون هایی که توسط نقاط کوانتومی جذب شده اند، شانس کمی برای تابش دوباره، دستیابی به وجوه LSC و در نتیجه مشارکت در بازده نوری دارند. در این حالت مقدار اتلاف ناشی از RO قابل ملاحظه است. در حالتی که QY نقاط کوانتومی زیاد باشد، فوتون های جذب شده توسط نقاط کوانتومی با احتمال بسیار بالا بار دیگر تابش می شوند. بنابراین، هرچه QY نقاط کوانتومی بیشتر باشد، اتلاف ناشی از RO کمتر خواهد بود. شکل ۶ب به عنوان مثال تغییرات بازده نوری LSC در اثر جابجایی طول موج فوتون ها و پراکندگی را بطور مجزا برای هر دو نوع نقاط

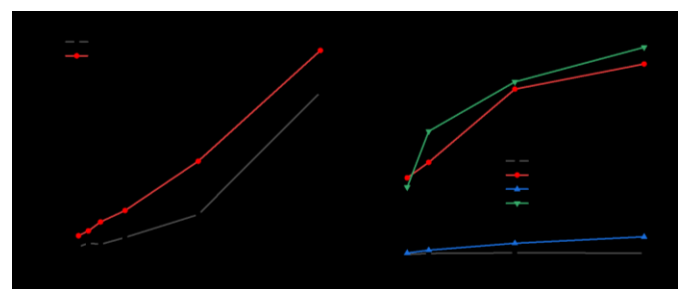
QYهای متفاوت نشان می‌دهد. همانطور که مشاهده می‌شود، تغییرات سهم فرایند جابجایی نورتاب طول موج فوتون‌ها در بازده نوری کل، بسیار متأثر از QY نقاط کوانتومی است. این در حالی است که تغییرات سهم فرایند پراکندگی نور، در حالت‌های با QY متفاوت، تقریباً یکسان است. در مورد LSC حاوی نقاط کوانتومی MAPbCl₃، مشاهده می‌شود که در مواردی که QY کم است، با افزایش غلظت نقاط کوانتومی در LSC، سهم فرایند جابجایی نورتاب طول موج فوتون‌ها در بازده نوری کل ابتدا افزایش و سپس، کاهش می‌یابد. این رفتار را می‌توان به RO بالاتر برای این نقاط کوانتومی نسبت داد. وقتی QY نقاط کوانتومی کم است، فوتون‌های جذب شده توسط نقاط کوانتومی شانس بسیار کمی برای تابش دوباره دارند. بنابراین در غلظت‌های بالاتر که احتمال جذب دوباره فوتون‌های تابش شده نیز بالاتر است، فرایند جابجایی نورتاب طول موج فوتون‌ها با بازده کمتری اتفاق می‌افتد. اما در مورد LSC حاوی نقاط کوانتومی Mn:MAPbCl₃، به دلیل جدایش مناسب میان طیف جذب و تابش نقاط کوانتومی، این رفتار مشاهده نمی‌شود و در تمام حالت‌های با QY متفاوت، با افزایش غلظت نقاط کوانتومی در LSC، بازده نوری ناشی از فرایند جابجایی نورتاب طول موج فوتون‌ها افزایش می‌یابد. هرچند بطور کلی سهم فرایند پراکندگی نور در بازده نوری کل LSC بسیار بیشتر است و با افزایش غلظت نقاط کوانتومی، مستقل از QY نقاط کوانتومی، بازده نوری کل افزایش می‌یابد. اگرچه پراکندگی نور فرودی توسط نقاط کوانتومی باعث کاهش شفافیت LSC می‌شود، این پدیده به هدایت بهتر فوتون‌های فرودی در LSC و در نتیجه افزایش تعداد فوتون‌های رسیده به سلول خورشیدی در لبه LSC کمک قابل توجهی می‌کند. در QYهای پایین، سهم پدیده جابجایی نورتاب طول موج فوتون‌ها در مقایسه با سهم پدیده پراکندگی نور بسیار کمتر است. در QYهای بالا و به ویژه در QY=1، سهم پدیده جابجایی نورتاب طول موج فوتون‌ها و سهم پدیده پراکندگی نور در ایجاد بازده نوری نهایی LSC، بسیار به هم نزدیک است.

کوانتومی و در QY=0/1 نشان می‌دهد. همانطور که مشاهده می‌شود، هرچند شیب تغییرات بازده نوری ناشی از پراکندگی با تغییر غلظت برای هر دو نوع نقاط کوانتومی مشابه است، بازده نوری ناشی از جابجایی طول موج فوتون در حالت استفاده از نقاط کوانتومی Mn:MAPbCl₃ با شیب بیشتری افزایش می‌یابد. در واقع به دلیل داشتن RO کمتر، نقاط کوانتومی Mn:MAPbCl₃ با بازده بالاتری در پدیده جابجایی طول موج فوتون‌ها مشارکت دارند.

جدول ۱. مقدار RO برای غلظت‌های متفاوت از نقاط کوانتومی MAPbCl₃ و Mn:MAPbCl₃



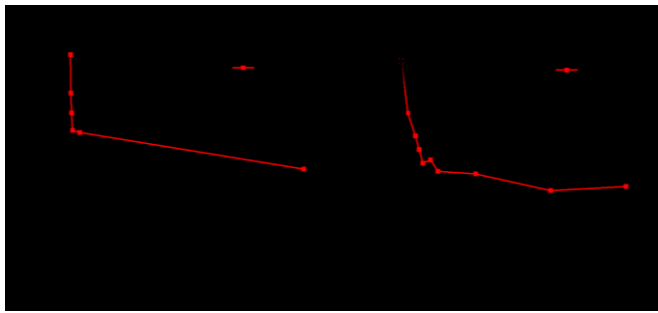
شکل ۵. بازده نوری بر حسب غلظت نقاط کوانتومی، و با در نظر گرفتن QY متفاوت برای نقاط کوانتومی (الف) MAPbCl₃ و (ب) Mn:MAPbCl₃



شکل ۶. بازده نوری بر حسب QY برای دو نوع نقاط کوانتومی و در غلظت ۱۳/۵ میلی‌گرم. (ب) سهم اثرات جابجایی طول موج فوتون‌ها (LDS) و پراکندگی در بازده نوری کل بر حسب غلظت نقاط کوانتومی، در QY برابر 0/1 برای نقاط کوانتومی MAPbCl₃ و Mn:MAPbCl₃

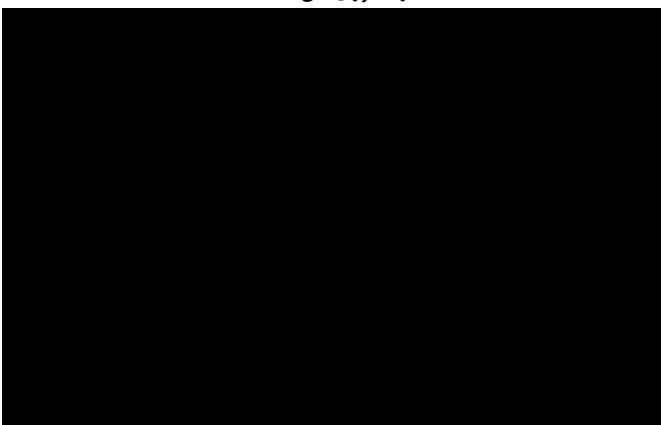
شکل ۷. تغییرات بازده نوری ناشی از جابجایی نورتاب طول موج فوتون‌ها را بر حسب غلظت برای هر دو نوع نقاط کوانتومی در

نقاط کوانتومی Mn:MAPbCl_3 کمتر از ۲۰ درصد است. با افزایش طول LSC، و در نتیجه افزایش طول مسیر حرکت فوتون‌ها، شانس جذب دوباره فوتون‌های تابش شده افزایش می‌یابد، اما در حالت RO بالا، این فوتون‌ها شانس کمی برای تابش و مشارکت در بازده نوری دارند. قابل ذکر است در یک LSC با طول زیاد، شانس فرار فوتون‌ها از وجوه متفاوت LSC به دلیل وجود پراکندگی قابل توجه در لایه زیادتر است. بنابراین، با افزایش طول LSC، بازده نوری ناشی از پدیده پراکندگی نور در LSC نیز کاهش می‌یابد. این نتایج نشان می‌دهند هرچه QY نقاط کوانتومی بیشتر باشد، ساخت LSC با طول بیشتر و بازده نوری مطلوب راحت‌تر خواهد بود.

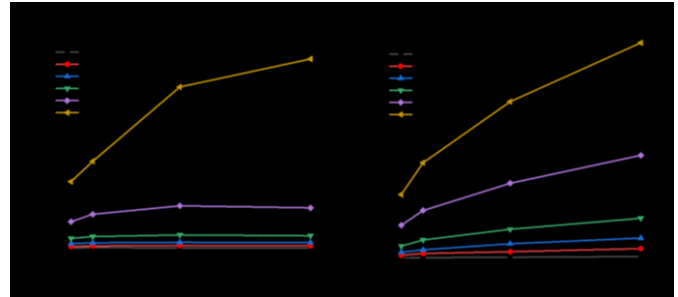


شکل ۸. (الف) تغییرات نسبی بازده نوری LSC با طول LSC، و (ب) تغییرات بازده نوری LSC با مساحت LSC

جدول ۲. سهم پدیده جابجایی طول موج فوتون‌ها (LDS) و پدیده پراکندگی نور در بازده نوری کل LSC



شکل ۹. بازده نوری محاسبه شده برای LSC‌های حاوی نقاط کوانتومی MAPbCl_3 و Mn:MAPbCl_3 با مساحت‌های متفاوت را نشان می‌دهد. بطور کلی، با افزایش مساحت وجه بالایی LSC، فوتون‌های بیشتری وارد LSC می‌شوند. همچنین، شانس از دست دادن این فوتون‌ها به دلیل جذب دوباره یا فرار از وجوه متفاوت LSC افزایش می‌یابد. بنابراین، به ازای یک ضخامت ثابت LSC، نتایج حاصل از شبیه سازی نشان می‌دهند



شکل ۷. تغییرات بازده نوری ناشی از جابجایی طول موج فوتون‌ها (LDS) برحسب غلظت در QY‌های متفاوت برای LSC‌های حاوی نقاط کوانتومی (الف) MAPbCl_3 و (ب) Mn:MAPbCl_3

برای ارزیابی بهتر LSC‌های حاوی نقاط کوانتومی MAPbCl_3 و Mn:MAPbCl_3 ، بازده نوری LSC با اندازه‌های متفاوت نیز تخمین زده شده است. در محاسباتی که در ادامه آمده است، غلظت و QY نقاط کوانتومی در LSC برای هر دو حالت استفاده از نقاط کوانتومی MAPbCl_3 و Mn:MAPbCl_3 ، به ترتیب $۱۳/۵$ میلی گرم و $۰/۱$ در نظر گرفته شده است. شکل ۸ الف منحنی تغییرات بازده نوری نسبی LSC با افزایش طول LSC، که با شبیه‌سازی مونت کارلو محاسبه شده است، را نشان می‌دهد. در این شبیه‌سازی، طول LSC از $۰/۱$ تا ۳۰ سانتی‌متر تغییر داده شده است. در بررسی رفتار بازده نوری LSC با افزایش طول LSC، عرض و ضخامت LSC در اندازه‌های پیش ثابت نگه داشته شده‌اند. طبق انتظار، بازده نوری LSC با افزایش طول LSC به طور نمایی کاهش می‌یابد. این رفتار را می‌توان به اثر جمعی اتلاف ناشی از RO و اتلاف ناشی از پراکندگی نور در LSC نسبت داد. بازده نوری کل در LSC‌های حاوی نقاط کوانتومی MAPbCl_3 و Mn:MAPbCl_3 با افزایش طول LSC از $۰/۱$ سانتی‌متر تا ۵ سانتی‌متر، به ترتیب به اندازه ۱۶% و ۲۲% کاهش می‌یابد. درحالی که با افزایش طول LSC به مقادیر بیشتر، بازده نوری LSC تقریباً ثابت می‌ماند. جدول ۲ سهم پدیده جابجایی طول موج فوتون‌ها و پدیده پراکندگی نور در بازده نوری کل LSC را بطور مجزا نشان می‌دهد. در حالت استفاده از نقاط کوانتومی MAPbCl_3 ، کاهش بازده نوری ناشی از پدیده جابجایی طول موج فوتون‌ها بسیار قابل توجه‌تر (حدود ۷۰%) از کاهش بازده نوری ناشی از پراکندگی نور در LSC (حدود ۲۰%) است. این در حالی است که هر دو این مقادیر در حالت استفاده از

- [5] C. Yang, R.R. Lunt, "Limits of Visibly Transparent Luminescent Solar Concentrators", *Adv. Opt. Mater.* 5, 1600851, 2017.
- [6] F. Mateen, S.Y. Lee, S.-K. Hong, "Luminescent solar concentrators based on thermally activated delayed fluorescence dyes", *J. Mater. Chem. A*, 8, 3708–3716, 2020.
- [7] K. Jo, S. Lee, G. Choi, B.H. Woo, Y.C. Jun, H. Song, T. Jeon, H.H. Lee, H.J. Kim, "Soft luminescent solar concentrator film with organic dye and rubbery matrix", *J. Polym. Sci.* 59, 59–69, 2021.
- [8] V.I. Klimov, T.A. Baker, J. Lim, K.A. Velizhanin, H. McDaniel, "Quality Factor of Luminescent Solar Concentrators and Practical Concentration Limits Attainable with Semiconductor Quantum Dots", *ACS Photonics*. 3, 1138–1148, 2016.
- [9] L.J. Brennan, F. Purcell-Milton, B. McKenna, T.M. Watson, Y.K. Gun'ko, R.C. Evans, "Large area quantum dot luminescent solar concentrators for use with dye-sensitized solar cells", *J. Mater. Chem. A*, 6, 2671–2680, 2018.
- [10] A. Kim, A. Hosseinmardi, P.K. Annamalai, P. Kumar, R. Patel, "Review on Colloidal Quantum Dots Luminescent Solar Concentrators", *ChemistrySelect*. 6, 4948–4967, 2021.
- [11] M.R. Mirzaei, A. Rostami, S. Matloub, H. Mirtaghizadeh, "Ultra-high-efficiency luminescent solar concentrator using superimposed colloidal quantum dots", *Opt. Quantum Electron.* 52, 327, 2020.
- [12] J. Diekmann, P. Caprioglio, M.H. Futscher, V.M. Le Corre, S. Reichert, F. Jaiser, M. Arvind, L.P. Toro, E. Gutierrez-Partida, F. Peña-Camargo, C. Deibel, B. Ehrler, T. Unold, T. Kirchartz, D. Neher, M. Stollerfoht, "Pathways toward 30% Efficient Single- Junction Perovskite Solar Cells and the Role of Mobile Ions", *Sol. RRL*. 2100219, 2021.

که با افزایش مساحت LSC از حدود $2/5 \times 2/5$ سانتی‌مترمربع تا 1×1 مترمربع، بازده نوری LSC کاهش می‌یابد و پس از آن تغییرات بسیار کمی دارد. مقدار کاهش بازده نوری LSC برای LSCهای حاوی نقاط کوانتومی MAPbCl_3 و Mn:MAPbCl_3 حدود $14\% - 15\%$ است.

۴- نتیجه گیری

در این پژوهش عملکرد LSC حاوی نقاط کوانتومی پروسکایت با ترکیبات MAPbCl_3 و Mn:MAPbCl_3 را با شبیه‌سازی مونت کارلو بررسی کردیم. با تغییر پارامترهای متفاوت از جمله ابعاد LSC، غلظت نقاط کوانتومی در LSC و همچنین، QY نقاط کوانتومی، بازده نوری LSC محاسبه شد. مدل مونت کارلو به خوبی بازده نوری LSC را پیش‌بینی می‌کند. بنابراین، این مدل به خوبی جهت طراحی LSC در کاربرد با سلول‌های خورشیدی متفاوت و همچنین، پیش‌بینی عملکرد LSC قابل استفاده است.

مراجع

- [1] W.G.J.H.M. van J.H.M. Van Sark, K.W.J. Barnham, L.H. Slooff, A.J. Chatten, A. Büchtemann, A. Meyer, S.J. McCormack, R. Koole, D.J. Farrell, R. Bose, E.E. Bende, A.R. Burgers, T. Budel, J. Quilitz, M. Kennedy, T. Meyer, C.D.M. Donegá, A. Meijerink, D. Vanmaekelbergh, "Luminescent Solar Concentrators - A review of recent results", *Opt. Express*. 16, 21773–21792, 2008.
- [2] R.A.S. Ferreira, S.F.H. Correia, A. Monguzzi, X. Liu, F. Meinardi, "Spectral converters for photovoltaics – What's ahead", *Mater. Today*. 33, 105–121, 2020.
- [3] M. Rafiee, S. Chandra, H. Ahmed, S.J. McCormack, "An overview of various configurations of Luminescent Solar Concentrators for photovoltaic applications", *Opt. Mater.* 91, 212–227, 2019.
- [4] P. Moraitis, G. Leeuwen, W. Sark, Visual "Appearance of Nanocrystal-Based Luminescent Solar Concentrators", *Materials (Basel)*. 12, 885, 2019.

- [13] A. Uddin, "Perovskite Solar Cells: Principles, Materials and devices", World Scientific, 285–367, 2018.
- [14] S. Mirershadi, S. Ahmadi-Kandjani, "Efficient thin luminescent solar concentrator based on organometal halide perovskite", Dye. Pigment. 120, 15–21, 2015.
- [15] B. Mendewala, K. Nikolaidou, C. Hoffman, S. Sarang, J. Lu, B. Ilan, S. Ghosh, "The potential of scalability in high efficiency hybrid perovskite thin film luminescent solar concentrators", Sol. Energy. 183, 392–397, 2019.
- [16] H. Zhao, Y. Zhou, D. Benetti, D. Ma, F. Rosei, "Perovskite quantum dots integrated in large-area luminescent solar concentrators", Nano Energy. 37, 214–223, 2017.
- [17] D. Şahin, B. Ilan, D.F. Kelley, "Monte-Carlo simulations of light propagation in luminescent solar concentrators based on semiconductor nanoparticles", J. Appl. Phys. 110, 033108, 2011.



Investigation on the Optical Efficiency of Luminescent Solar Concentrators Filled with Perovskite Quantum Dots by Monte Carlo Simulation

Z.Hosseini*

Assistant Professor, Shiraz University, Iran

Abstract: Luminescent solar concentrator (LSC) is a promising technology to reduce the cost of solar power conversion. Perovskite quantum dots are promising candidates as luminescent material in the LSC, due to their suitable absorption/emission spectra as well as high luminescent quantum efficiency. Absorption/emission spectra with the least overlap, luminescent quantum efficiency, concentration of quantum dots in LSC, and LSC surface area and length are the most important parameters affecting the optical efficiency of the LSC. Here, we investigated the effect of all the aforementioned parameters on the optical efficiency of the LSC by Monte Carlo simulation method. The simulation results show that Mn:MAPbCl₃ quantum dots serves better than MAPbCl₃ quantum dots in the LSC. This can be attributed to the lower overlap between the absorption and emission spectra for the Mn:MAPbCl₃ compared to MAPbCl₃ quantum dots. More suitable properties of Mn:MAPbCl₃ quantum dots let us to make longer LSC with larger surface area.

Keywords: Luminescent Solar Concentrator, Quantum Dot, Perovskite, Optical Efficiency, Monte Carlo Simulation.