

## بهینه‌سازی اتلاف گرمایی در سلول‌های خورشیدی نقطه کوانتومی با روش المان محدود

زهرا عارفی‌نیا\*

پژوهشکده فیزیک کاربردی و ستاره‌شناسی، دانشگاه تبریز

(دریافت مقاله: ۱۳۹۷/۶/۲۰ - دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۷/۸/۲۶)

**چکیده** - از آنجا که قسمت عمده اتلاف اساسی در سلول خورشیدی با نوار میانی، اتلاف گرمایی است، این مقاله به مطالعه و بررسی آن پرداخته است. ساختار مورد مطالعه، سلول خورشیدی **p-i-n** با جنس  $AIP_ySb_{(1-y)}$  است که آرایه‌ای منظم از نقاط کوانتومی هرمی مربع‌القاعده از جنس  $InAs_{(1-x)}N_x$  در ناحیه ذاتی آن به منظور تشکیل نوار میانی قرار گرفته است. نوار میانی ایجاد شده که از نظر الکتریکی ایزوله است، باعث تقسیم گاف انرژی سلول خورشیدی به دو زیرگاف انرژی می‌شود. محاسبه اتلاف گرمایی منوط به دانستن مقدار انرژی این زیرگاف‌ها است. بنابراین، برای محاسبه آنها، ابتدا موقعیت انرژی مینی‌نوار با حل معادله شرودینگر سه‌بعدی برای سلول واحد متشکل از یک نقطه کوانتومی به روش المان محدود محاسبه می‌شود. سپس، پهنای مینی‌نوار با محاسبه ضریب جذب به دست می‌آید. در نهایت، با بررسی اثر غلظت مولی نیتروژن و فسفر، اندازه نقاط کوانتومی و فاصله بین آنها، مقدار کمیته اتلاف گرمایی برای ساختار بهینه سلول خورشیدی گفته شده به دست می‌آید.

واژه‌های کلیدی: اتلاف گرمایی، سلول خورشیدی، نقطه کوانتومی، نوار میانی.

## Optimization of Thermalisation Loss in the Quantum Dot Solar Cells using a Finite Element Method

Z. Arefinia\*

Research Institute for Applied Physics and Astronomy (RIAPA), University of Tabriz, Tabriz, Iran.

**Abstract:** As thermalisation loss is the dominant loss process in the quantum dot intermediate band solar cells (QD-IBSCs), it has been investigated and calculated for a QD-IBSC, where IB is created by embedding a stack of  $InAs_{(1-x)}N_x$  QDs with a square pyramid shape in the intrinsic layer of the  $AIP_ySb_{(1-y)}$  p-i-n structure. IB, which is an optically coupled but electrically isolated mini-band, divides the total band gap of  $AIP_ySb_{(1-y)}$  into two sub-band gaps. To obtain the thermalisation loss of  $AIP_ySb_{(1-y)}/InAs_{(1-x)}N_x$  QD-IBSCs, the position and width of IB in the band gap of  $AIP_ySb_{(1-y)}$  should be calculated. The position of IB, which is equal to the first eigen-energy of a unit cell of QD, is obtained by solving the 3D Schrödinger equation with a finite-element method and the width of IB is obtained by the absorption characteristics. Then, with the investigation of the effect of

\*: مسئول مکاتبات، پست الکترونیکی: arefinia@tabrizu.ac.ir

nitrogen and phosphorous molar fraction, QDs size and the distance between the QDs on the thermalisation loss, the minimized loss for the optimized structure of  $AlP_ySb_{(1-y)}/InAs_{(1-x)}N_x$  QD-IBSCs is obtained.

**Keywords:** Intermediate band, Thermalization loss, Quantum dot, Solar cell.

## فهرست علائم

ضریب شکست نیم‌رسانا	$n_r$	نوار رسانش	CB
سلول خورشیدی نقاط کوانتومی با نوار میانی	QD-IBSC	زیرگاف ۱	$E_{g1}$
دمای خورشید	$T_{sun}$	زیرگاف ۲	$E_{g2}$
نوار ظرفیت	VB	ثابت پلانک	$h$
چاه کوانتومی رسانش	$V_c$	نوار میانی	IB
چاه کوانتومی ظرفیت	$V_v$	ثابت بولتزمن	$k$
انرژی پتانسیل استرین	$V_s$	جرم الکترون	$m_0$
ثابت گذردهی فضای آزاد	$\epsilon_0$	جرم مؤثر الکترون	$m_e^*$
الکترون خواهی	$\chi$	ضریب شکست محیط	$n$

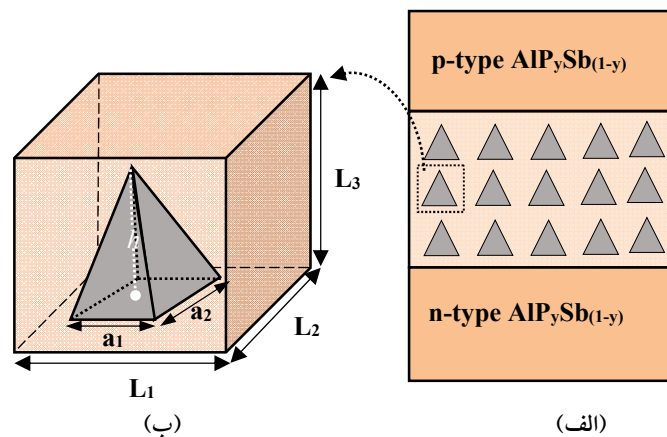
## ۱- مقدمه

مناسب برای نقاط کوانتومی و ماده میزبان انتخاب شوند به طوری که دارای گاف انرژی مناسب باشند و سد پتانسیل ناشی از لبه نوار ظرفیت نقاط کوانتومی و ماده میزبان به اندازه کافی کوچک باشد که نوار میانی در آن تشکیل نشود. شرط دیگر این است که فاصله نوار میانی ایجاد شده در سد پتانسیل ناشی از لبه نوار رسانش نقاط کوانتومی و ماده میزبان به اندازه‌ای باشد که از نظر گرمایی ایزوله باشد. با در نظر گرفتن تمام این موارد،  $InAs_{(1-x)}N_x$  برای نقاط کوانتومی و  $AlP_ySb_{(1-y)}$  برای ماده میزبان انتخاب شدند.

مطالعات تئوری مختلفی روی QD-IBSCs صورت گرفته است [۱۸-۱۳]، از جمله اتلاف‌های اساسی در سلول‌های خورشیدی با نوار میانی فرمول‌بندی شده [۱۹] و نشان داده شده است که از میان اتلاف‌های اساسی، اتلاف گرمایی بیشترین سهم را دارد. گفتنی است که تحقیقات انجام شده روی سلول‌های خورشیدی تک‌گافی [۲۲-۲۰] و پروسکایتی [۲۳] نشان داده‌اند که بیشترین سهم اتلاف در این نوع از سلول‌های خورشیدی نیز مربوط به اتلاف گرمایی است. بنابراین، در این مقاله با فرمول ارائه شده در مرجع [۱۹] برای اتلاف گرمایی در سلول‌های خورشیدی با نوار میانی، این اتلاف برای ساختار

امروزه، سلول‌های خورشیدی مبتنی بر ساختارهای کوانتومی مورد توجه ویژه محققان قرار گرفته است [۶-۱]. مزیت این سلول‌های خورشیدی، جذب بهتر فوتون‌های نوری از خورشید است. یکی از مصداق‌های استفاده از ساختارهای کوانتومی در سلول‌های خورشیدی، به‌کارگیری آرایه‌ای منظم از نقاط کوانتومی در ناحیه ذاتی سلول خورشیدی نوع p-ذاتی - نوع n (p-i-n) به‌منظور تشکیل نوار میانی در ناحیه گاف انرژی سلول خورشیدی پایه است، که موسوم به سلول‌های خورشیدی نقاط کوانتومی با نوار میانی (QD-IBSCs) هستند.

بیشترین تحقیقات صورت گرفته بر QD-IBSCs با نقاط کوانتومی  $InAs$  در ماده میزبان  $GaAs$  انجام شده است [۱۰-۶]. اما، بازدهی این نوع سلول خورشیدی (InAs/GaAs QD-IBSCs) از بازدهی سلول خورشیدی بدون نقاط کوانتومی (یعنی سلول خورشیدی p-i-n از جنس GaAs) کمتر است. زیرا، اندازه گاف انرژی نقاط کوانتومی و ماده میزبان بهینه نیست [۱۱] و چندین نوار میانی در ناحیه گاف انرژی ماده میزبان وجود دارد [۱۲]. بنابراین، با توجه به ساختار نواری نیم‌رساناهای مختلف، باید نیم‌رساناهای



شکل ۱- الف) سطح مقطع ساختار QD-IBSC  $\text{InAs}_{(1-x)}\text{N}_x/\text{AlP}_y\text{Sb}_{(1-y)}$  و ب) یک سلول واحد متشکل از نقطه کوانتومی هرمی با قاعده مربع  $\text{InAs}_{(1-x)}\text{N}_x$  و ماده میزبان  $\text{AlP}_y\text{Sb}_{(1-y)}$  را نشان می‌دهد.

در شکل (۱-ب) با غلظت مولی نیتروژن ۰/۰۲ و غلظت مولی فسفر ۰/۵،  $a_1 = a_2 = 4 \text{ nm}$ ،  $h = 5 \text{ nm}$  و  $L_1 = L_2 = L_3 = 9 \text{ nm}$  در یک بعد رسم شده است. اختلاف انرژی لبه نوار رسانش<sup>۲</sup> (CB) مربوط به  $\text{InAs}_{(1-x)}\text{N}_x$  و  $\text{AlP}_y\text{Sb}_{(1-y)}$  باعث ایجاد چاه سه بعدی با عمق  $V_C$  می‌شود و اختلاف انرژی لبه نوار ظرفیت<sup>۳</sup> (VB) مربوط به  $\text{InAs}_{(1-x)}\text{N}_x$  و  $\text{AlP}_y\text{Sb}_{(1-y)}$  باعث ایجاد چاه سه‌بعدی با عمق  $V_V$  می‌شود.

برای چاه سه‌بعدی  $V_C$ ، که در شکل (۲) به صورت یک بعدی نشان داده شده است، با حل معادله شرودینگر سه‌بعدی به روش المان محدود که در بخش بعد توضیح داده خواهد شد، مقادیر ویژه انرژی به دست می‌آید. در شکل (۲) چهار مقدار ویژه انرژی به دست آمده برای سلول واحد ترزاز  $\text{InAs}_{0.98}\text{N}_{0.02}/\text{AlP}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}$  ترسیم شده است که اولین ترزاز انرژی با  $E_{111e}$  نامگذاری شده است. حال، اگر معادله شرودینگر برای آرایه‌ای منظم از نقاط کوانتومی، همانند شکل (۱-الف)، حل شود، تبهگنی<sup>۴</sup> در هر ترزاز انرژی از بین می‌رود و به‌ازای هر ترزاز انرژی، به تعداد نقاط کوانتومی ترزاز انرژی نزدیک به هم خواهیم داشت. به عبارت دیگر می‌توان گفت که ترزاز انرژی  $E_{111e}$  تبدیل به مینی‌نوار<sup>۵</sup> IB می‌شود. همان‌طور که در شکل (۲) دیده می‌شود مینی‌نوار ناشی از ترزازهای انرژی بالاتر با یکدیگر

پیشنهادی،  $\text{InAs}_{(1-x)}\text{N}_x/\text{AlP}_y\text{Sb}_{(1-y)}$  QD-IBSC، محاسبه خواهد شد. سپس، اثر غلظت یونی نیتروژن و فسفر بر میزان اتلاف گرمایی بررسی می‌شود تا مقدار بهینه غلظت یونی نیتروژن و فسفر برای دستیابی به مقدار کمینه اتلاف گرمایی به دست آید.

## ۲- ساختار سلول خورشیدی با نوار میانی

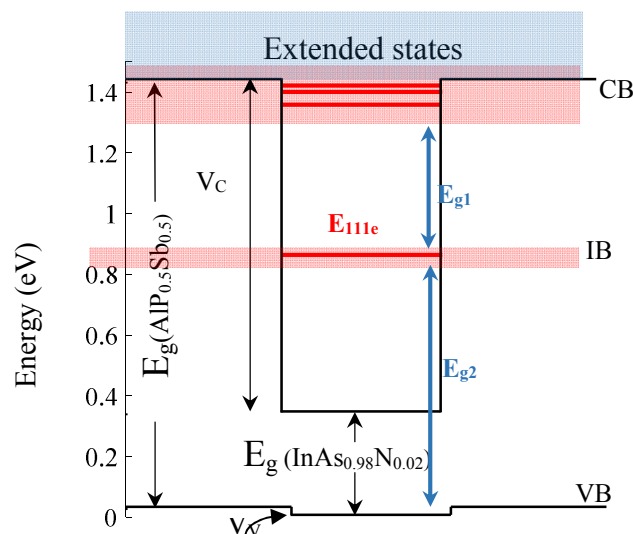
### $\text{InAs}_{(1-x)}\text{N}_x/\text{AlP}_y\text{Sb}_{(1-y)}$

شکل (۱-الف) طرح نمادینی از سطح مقطع ساختار QD-IBSC  $\text{InAs}_{(1-x)}\text{N}_x/\text{AlP}_y\text{Sb}_{(1-y)}$  را نشان می‌دهد. در این ساختار، آرایه‌ای منظم از نقاط کوانتومی  $\text{InAs}_{(1-x)}\text{N}_x$  در ناحیه ذاتی سلول خورشیدی p-i-n با جنس  $\text{AlP}_y\text{Sb}_{(1-y)}$  قرار گرفته است. شکل (۱-ب) یک سلول واحد به طول اضلاع  $L_1$ ،  $L_2$  و  $L_3$  در جهت‌های  $x$ ،  $y$  و  $z$ ، متشکل از نقطه کوانتومی و ماده میزبان را نشان می‌دهد. نقاط کوانتومی هرمی با قاعده مربع هستند که ارتفاع آنها  $h$  و طول اضلاع قاعده آنها برابر  $a_1$  و  $a_2$  است.

## ۳- دیاگرام انرژی سلول واحد متشکل از نقطه

### کوانتومی $\text{InAs}_{(1-x)}\text{N}_x$ و سد $\text{AlP}_y\text{Sb}_{(1-y)}$

شکل (۲) دیاگرام انرژی مربوط به سلول واحد نشان داده شده



شکل ۲- طرح یک‌بعدی از دیاگرام انرژی نقطه کوانتومی  $\text{InAs}_{0.98}\text{N}_{0.02}$  با گاف انرژی  $E_g(\text{InAs}_{0.98}\text{N}_{0.02})$  و سد  $E_g(\text{AIP}_{0.5}\text{Sb}_{0.5})$  با گاف انرژی  $E_g(\text{AIP}_{0.5}\text{Sb}_{0.5})$  را نشان می‌دهد. اختلاف انرژی لبه نوار رسانش (CB) نقطه کوانتومی و سد باعث ایجاد چاه سه‌بعدی  $V_C$  و اختلاف انرژی لبه نوار ظرفیت (VB) نقطه کوانتومی و سد باعث ایجاد چاه سه‌بعدی  $V_V$  می‌شود. IB ناشی از همپوشانی تابع‌های موج مربوط به اولین ویژه مقدار چاه  $V_C$  ( $E_{111e}$ ) نقاط کوانتومی مجاور است.

#### ۴- نحوه محاسبه مقدار انرژی زیرگاف‌های $E_{g1}$ و $E_{g2}$

برای محاسبه مقدار انرژی زیرگاف‌های  $E_{g1}$  و  $E_{g2}$  ابتدا ترازهای انرژی الکترونی نقطه کوانتومی سلول واحد با معادله شرودینگر محاسبه می‌شود. سپس، پهنای هر مینی‌نوار ناشی از هر تراز انرژی با محاسبه ضریب جذب به دست می‌آید. در نهایت، مقدار انرژی زیرگاف  $E_{g1}$  برابر اختلاف انرژی بین لبه بالایی مینی‌نوار ناشی از اولین تراز انرژی و لبه پایینی مینی‌نوار ناشی از دومین تراز انرژی خواهد شد (شکل ۲) و مقدار انرژی زیرگاف  $E_{g2}$  برابر اختلاف انرژی بین لبه پایینی مینی‌نوار ناشی از اولین تراز انرژی و لبه نوار ظرفیت خواهد شد.

#### ۴-۱- محاسبه ترازهای انرژی یک نقطه کوانتومی با روش

##### المان محدود

برای محاسبه ترازهای انرژی نقطه کوانتومی  $\text{InAs}_{(1-x)}\text{N}_x$  و سد  $\text{AIP}_y\text{Sb}_{(1-y)}$ ، سلول واحد نشان داده شده در شکل (۱-ب) توسط المان‌ها و گره‌ها بر اساس تکنیک مثلث‌بندی Delaunay

و با نوار رسانش همپوشانی می‌کنند. بنابراین، فقط مینی‌نوار ناشی از تراز انرژی  $E_{111e}$  به عنوان نوار میانی (IB) گاف انرژی  $\text{AIP}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}$  عمل می‌کند و گاف آن را به دو زیرگاف  $E_{g1}$  و  $E_{g2}$  تقسیم می‌کند.

گفتنی است که IB جفت‌شدگی نوری با نوارهای ظرفیت و رسانش دارد اما از نظر الکتریکی نسبت به آنها ایزوله است. این خاصیت IB باعث می‌شود دو نوع گذار در جریان نوری سلول خورشیدی با نوار میانی سهمیم باشند که اولی، گذار الکترون‌ها از نوار ظرفیت به نوار رسانش است و دیگری گذار الکترون‌ها از نوار ظرفیت به نوار میانی و از نوار میانی به نوار رسانش است. باید توجه داشت برای اینکه گذار الکترونی از نوار انرژی پایین‌تر به IB و از IB به نوار انرژی بالاتر صورت گیرد، نوار IB باید نیمه‌پر باشد [۲۴].

همان‌طور که در شکل (۲) دیده می‌شود، چون عمق چاه  $V_V$  بسیار کم است ترازهای انرژی و مینی‌نوارهای ناشی از آنها در نظر گرفته نشده است.

که در آن  $a_{c1}$  و  $a_{c2}$  و  $(\epsilon_{xx1}, \epsilon_{yy1}, \epsilon_{zz1}, \epsilon_{xx2}, \epsilon_{yy2}, \epsilon_{zz2})$  به ترتیب برابر ثابت پتانسیل دگرشکلی و عناصر قطری تانسور استرین مربوط به نقطه کوانتومی (ماده میزبان) هستند.

در رابطه (۱)،  $m_e^*(x,y,z)$  جرم مؤثر الکترون است که در داخل و خارج نقطه کوانتومی به صورت زیر تغییر می کند:

$$m_e^*(x, y, z) = \begin{cases} m_{InAs(1-x)N_x}^* & \text{inside the pyramid QD} \\ m_{AlP_ySb(1-y)}^* & \text{outside the pyramid QD} \end{cases} \quad (5)$$

حال برای حل رابطه (۱)، المان چهاروجهی مبنا که رئوس آن در  $(0;0;0)$ ،  $(1;0;0)$ ،  $(0;1;0)$  و  $(0;0;1)$  در مختصات تعمیم یافته  $(\mu; \nu; \xi)$  قرار گرفته اند، تعریف می شود. سپس، هر المان چهاروجهی در مختصات اولیه  $(x,y,z)$  به این چهاروجهی مبنا در مختصات  $(\mu; \nu; \xi)$  نگاشته می شود. برای این نگاشت، توابع پایه  $\phi_i^\alpha(\mu, \nu, \xi)$  که چندجمله ای خطی در مختصات  $(\mu; \nu; \xi)$  هستند، تعریف می شود. از آنجا که در سیستم سه بعدی، هر المان چهاروجهی بین چهار نقطه محدود است، برای سیستم چهار درجه آزادی تعریف می شود و تعداد توابع پایه به ازای درجه آزادی سیستم خواهد بود. بنابراین، چهار تابع پایه با ۱۶ ضریب ثابت  $a_i, b_i, c_i, d_i$  به صورت زیر خواهیم داشت:

$$\phi_i(\mu, \nu, \xi) = a_i + b_i\mu + c_i\nu + d_i\xi \quad i = 1; 2; 3; 4 \quad (6)$$

که این توابع پایه باید شرط زیر را نیز برآورده کنند:

$$\phi_i^\alpha(\mu_j, \nu_j, \xi_j) = \delta_{ij} \quad (7)$$

که در آن  $\delta_{ij}$  تابع دلتای کرونکر است.

اکنون، با مشخص شدن توابع پایه می توان معادله (۱) را در مختصات تعمیم یافته  $(\mu; \nu; \xi)$  به دست آورد. بنابراین، تابع موج در هر المان،  $\Psi_\alpha$  و مختصات  $(x,y,z)$  به صورت ترکیب خطی از توابع پایه به صورت زیر تعریف می شوند:

$$\Psi_\alpha(x, y, z) = \sum_{i=1}^4 \psi_i^\alpha \phi_i^\alpha(\mu, \nu, \xi) \quad (8)$$

$$x = \sum_{i=1}^4 x_i \phi_i(\mu, \nu, \xi); y = \sum_{i=1}^4 y_i \phi_i(\mu, \nu, \xi); z = \sum_{i=1}^4 z_i \phi_i(\mu, \nu, \xi) \quad (9)$$

گسسته سازی می شود و سپس محل گره ها به طور تکراری بهبود می یابد [۲۵]. همچنین تعداد المان ها در نزدیکی فصل مشترک به منظور در نظر گرفتن دقیق تر تغییر خواص فیزیکی ناشی از تغییر ماده در فصل مشترک، افزایش می یابد. سپس، برای حل معادله شرودینگر سه بعدی به روش المان محدود، انتگرال کنش به صورت زیر گسسته سازی می شود:

$$\sum_{\alpha=1}^N \iiint_{\Omega_\alpha} \frac{\hbar^2}{2m_e^*(x, y, z)} \nabla \Psi_\alpha^*(x, y, z) \nabla \Psi_\alpha(x, y, z) d\Omega + \sum_{\alpha=1}^N \iiint_{\Omega_\alpha} \Psi_\alpha^*(x, y, z) V(x, y, z) \Psi_\alpha(x, y, z) d\Omega = E \sum_{\alpha=1}^N \iiint_{\Omega_\alpha} \Psi_\alpha^*(x, y, z) \Psi_\alpha(x, y, z) d\Omega \quad (1)$$

که در آن  $E$  انرژی،  $N$  تعداد المان ها در سلول واحد،  $\Omega_\alpha$  مساحت هر المان،  $\hbar$  ثابت پلانک است که تقسیم بر  $\pi^2$  شده است،  $\Psi_\alpha$  تابع موج و  $V(x,y,z)$  انرژی پتانسیل مربوط به حامل ها در سلول واحد است. برای الکترون ها، انرژی پتانسیل در سلول واحد به صورت زیر می شود:

$$V(x, y, z) = V_C(x, y, z) + V_S(x, y, z) \quad (2)$$

که در آن  $V_C(x,y,z)$  انرژی پتانسیل الکترون ها در چاه کوانتومی سه بعدی ایجاد شده در نوار رسانش توسط نقطه کوانتومی است و به صورت زیر تعریف می شود:

$$V_C(x, y, z) = \begin{cases} \chi_{AlP_ySb(1-y)} - \chi_{InAs(1-x)N_x} & \text{inside the pyramid QD} \\ 0 & \text{outside the pyramid QD} \end{cases} \quad (3)$$

که در آن  $\chi_{AlP_ySb(1-y)}$  و  $\chi_{InAs(1-x)N_x}$  به ترتیب برابر الکترون خواهی نقطه کوانتومی و ماده میزبان است.

در رابطه (۲) انرژی پتانسیل استرین ناشی از عدم جورشدگی بین ثابت شبکه ماده نقطه کوانتومی و ماده میزبان است و به صورت زیر تعریف می شود:

$$V_S(x, y, z) = \begin{cases} -a_{c1}(\epsilon_{xx1} + \epsilon_{yy1} + \epsilon_{zz1}) & \text{inside the pyramid QD} \\ -a_{c2}(\epsilon_{xx2} + \epsilon_{yy2} + \epsilon_{zz2}) & \text{outside the pyramid QD} \end{cases} \quad (4)$$

روش های عددی در مهندسی، سال ۳۸، شماره ۲، زمستان ۱۳۹۸

$$\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \iiint \left( \frac{\partial \Psi_1(x, y, z)}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi_1(x, y, z)}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi_1(x, y, z)}{\partial z} \right)^2 dx dy dz \quad (10)$$

مشتقات جزئی معادله بالا توسط ژاکوبین معکوس  $3 \times 3$ ،  $J^{-1}$  در نگاشت به مختصات تعمیم یافته به صورت زیر محاسبه می شوند:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \Psi_1(x, y, z)}{\partial x} \\ \frac{\partial \Psi_1(x, y, z)}{\partial y} \\ \frac{\partial \Psi_1(x, y, z)}{\partial z} \end{bmatrix} = J^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial \Psi_1(x, y, z)}{\partial \mu} \\ \frac{\partial \Psi_1(x, y, z)}{\partial v} \\ \frac{\partial \Psi_1(x, y, z)}{\partial \xi} \end{bmatrix} = J^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial \varphi_1(\mu, v, \xi)}{\partial \mu} & \frac{\partial \varphi_2(\mu, v, \xi)}{\partial \mu} & \frac{\partial \varphi_3(\mu, v, \xi)}{\partial \mu} & \frac{\partial \varphi_4(\mu, v, \xi)}{\partial \mu} \\ \frac{\partial \varphi_1(\mu, v, \xi)}{\partial v} & \frac{\partial \varphi_2(\mu, v, \xi)}{\partial v} & \frac{\partial \varphi_3(\mu, v, \xi)}{\partial v} & \frac{\partial \varphi_4(\mu, v, \xi)}{\partial v} \\ \frac{\partial \varphi_1(\mu, v, \xi)}{\partial \xi} & \frac{\partial \varphi_2(\mu, v, \xi)}{\partial \xi} & \frac{\partial \varphi_3(\mu, v, \xi)}{\partial \xi} & \frac{\partial \varphi_4(\mu, v, \xi)}{\partial \xi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1' \\ \psi_2' \\ \psi_3' \\ \psi_4' \end{bmatrix} \quad (11)$$

حدود انتگرال هم بر اساس مختصات رئوس المان چهاروجهی مبنا نوشته شده است.

برای نوشتن جمله دوم از رابطه (1) در مختصات تعمیم یافته ابتدا باید  $V(x, y, z)$  را در این مختصات تعریف کنیم. اگر  $V_1, V_2, V_3$  و  $V_4$  مقادیر پتانسیل در رئوس المان چهاروجهی (گره‌ها) باشند، آنگاه انرژی پتانسیل  $V(x, y, z)$  به صورت ترکیب خطی از توابع پایه به صورت زیر خواهد شد:

$$V(x, y, z) \rightarrow V_1 \varphi_1(\mu, v, \xi) + V_2 \varphi_2(\mu, v, \xi) + V_3 \varphi_3(\mu, v, \xi) + V_4 \varphi_4(\mu, v, \xi) \quad (14)$$

و جمله دوم از معادله (1) به صورت رابطه (15) خواهد شد:

$$\int_0^1 \int_0^{1-v} \int_0^{1-v-\xi} \left( V_1 \varphi_1(\mu, v, \xi) + V_2 \varphi_2(\mu, v, \xi) + V_3 \varphi_3(\mu, v, \xi) + V_4 \varphi_4(\mu, v, \xi) \right)^2 |J| d\mu dv d\xi \quad (15)$$

جمله سوم از رابطه (1) شبیه انتگرال بالا خواهد بود که پراتنز اول مربوط به انرژی پتانسیل در آن حذف می شود. در نهایت، با استفاده از رابطه های (12) و (14)، معادله شرودینگر در مختصات تعمیم یافته که به صورت رابطه (16) بیان می شود، حل می شود و ویژه مقادیر انرژی به دست می آید:

به همین ترتیب تمام جملات رابطه (1) باید در مختصات تعمیم یافته نوشته شود. در اینجا، به علت رعایت اختصار طرز نوشتن یک جمله از رابطه (1) در مختصات تعمیم یافته توضیح داده می شود. جمله اول از رابطه (1) با در نظر گرفتن  $\alpha=1$  به صورت زیر خواهد شد:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \iiint \nabla \Psi_1^*(x, y, z) \nabla \Psi_1(x, y, z) d\Omega \rightarrow$$

اگر ماتریس  $4 \times 3$  بالا که مشتقات جزئی توابع پایه را در مختصات تعمیم یافته نشان می دهد،  $D$  بنامیم، آنگاه مشتقات جزئی معادله (9) به صورت زیر محاسبه خواهد شد:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \Psi_1(x, y, z)}{\partial x} \\ \frac{\partial \Psi_1(x, y, z)}{\partial y} \\ \frac{\partial \Psi_1(x, y, z)}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \Psi_1(x, y, z)}{\partial x} \\ \frac{\partial \Psi_1(x, y, z)}{\partial y} \\ \frac{\partial \Psi_1(x, y, z)}{\partial z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1' \\ \psi_2' \\ \psi_3' \\ \psi_4' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi_1' & \psi_2' & \psi_3' & \psi_4' \end{bmatrix} D^t \cdot (J^{-1})^t \cdot J^{-1} \cdot D \begin{bmatrix} \psi_1' \\ \psi_2' \\ \psi_3' \\ \psi_4' \end{bmatrix} \quad (12)$$

در نهایت، انتگرال طرف راست رابطه (10) به صورت زیر خواهد شد:

$$\begin{bmatrix} \psi_1' \\ \psi_2' \\ \psi_3' \\ \psi_4' \end{bmatrix} \int_0^1 \int_0^{1-v} \int_0^{1-v-\xi} D^t \cdot (J \cdot J^t)^{-1} \cdot D \cdot |J| d\mu dv d\xi \begin{bmatrix} \psi_1' \\ \psi_2' \\ \psi_3' \\ \psi_4' \end{bmatrix} \quad (13)$$

انتگرال بالا روی المان چهاروجهی مبنا گرفته شده است و

$$\sum_{\alpha=1}^N \sum_{i,j} \psi_i^{\alpha*} \left( \frac{\hbar^{\gamma}}{\gamma m_{\alpha}^* (\mu, \nu, \xi)} \iint_{\Omega_{\alpha}} (\nabla \varphi_i^{\alpha} (\mu, \nu, \xi))^* (\nabla \varphi_j^{\alpha} (\mu, \nu, \xi)) d\Omega \right) \psi_j^{\alpha} + \sum_{\alpha=1}^N \sum_{i,j} \psi_i^{\alpha*} \left( \iint_{\Omega_{\alpha}} \varphi_i^{\alpha*} (\mu, \nu, \xi) V (\mu, \nu, \xi) \varphi_j^{\alpha} (\mu, \nu, \xi) d\Omega \right) \psi_j^{\alpha} = E \sum_{\alpha=1}^N \sum_{i,j} \psi_i^{\alpha*} \left( \iint_{\Omega_{\alpha}} \varphi_i^{\alpha*} (\mu, \nu, \xi) \varphi_j^{\alpha} (\mu, \nu, \xi) d\Omega \right) \psi_j^{\alpha} \quad (16)$$

زیر تعریف می شود [۲۰]:

$$\text{Thermalization Loss} = \frac{1}{P_{in}} \left( \frac{\gamma n^{\gamma} \epsilon_{abs}}{c^{\gamma} h^{\gamma}} \right) \times \int_{E_g}^{\infty} \frac{E^{\gamma} - E_g \cdot E^{\gamma}}{\exp\left(\frac{E - \mu_{abs}}{kT_{sun}}\right) - 1} dE \quad (18)$$

که در آن  $P_{in}$  توان ورودی،  $c$  سرعت نور،  $h$  ثابت پلانک،  $k$  ثابت بولتزمن،  $T_{sun}$  دمای خورشید،  $n$  ضریب شکست محیط اطراف سلول خورشیدی،  $\mu_{abs} = 0$  پتانسیل شیمیایی و  $\epsilon_{abs}$  زاویه فضایی جذب نور خورشید توسط سلول خورشیدی است. اما در مورد سلول‌های خورشیدی با نوار میانی، اتلاف گرمایی را نمی‌توان از رابطه (۱۸) محاسبه کرد. زیرا الکترون‌های تولید شده در نوار رسانش QD-IBSCs توسط دو نوع گذار که یکی گذار الکترون‌ها از نوار ظرفیت به نوار رسانش و دیگری گذار الکترون‌ها از نوار ظرفیت به نوار میانی و از نوار میانی به نوار رسانش است، تولید شده‌اند که باید سهم هر دو گذار در اتلاف گرمایی محاسبه شود. در واقع، در QD-IBSCs اتلاف گرمایی سه‌گانه به شرح زیر وجود دارد:

۱) فوتون‌های با انرژی  $E_{g1} \leq \hbar\omega < E_{g2}$  باعث برانگیختگی الکترون‌ها از نوار میانی به نوار رسانش می‌شوند. الکترون‌های تولید شده مقدار انرژی اضافی تا لبه نوار رسانش را به صورت فونون (اتلاف گرمایی) به سیستم می‌دهند تا به لبه نوار رسانش برسند. بنابراین سهم یک فوتون جذب شده با انرژی  $E_{g1} \leq \hbar\omega < E_{g2}$  در جریان نوری همانند سهم فوتون جذب شده با انرژی  $\hbar\omega = E_{g1}$  است.

۲) فوتون‌های با انرژی  $E_g \leq \hbar\omega < E_{g2}$  باعث برانگیختگی نیم‌رسانای میزبان است که در مورد  $InAs_{(1-x)}N_x/AlP_ySb_{(1-y)}$  QD-IBSC برابر  $E_g(AlP_ySb_{(1-y)})$  است) باعث برانگیختگی

#### ۴-۲- محاسبه پهنای مینی‌نوارهای انرژی

پهنای مینی‌نوارهای انرژی ناشی از ترازهای انرژی تابع فاصله بین نقاط کوانتومی است [۲۶-۲۸]. هر چه فاصله بین نقاط کوانتومی کمتر شود همپوشانی توابع موج مربوط به نقطه‌های کوانتومی مجاور بیشتر می‌شود و مینی‌نوار نیز پهن‌تر می‌شود. پهنای مینی‌نوارهای انرژی از جمله نوار میانی IB را می‌توان با استفاده از ضریب جذب به دست آورد [۲۹]:

$$\alpha(\omega) = \frac{\gamma \pi q^{\gamma}}{n_f c \epsilon_0 m_0^{\gamma} \omega (L_1 \times L_2 \times L_3)} \times \sum_{i,f} \left\{ \left| \langle \psi_i | \vec{e} \cdot \vec{p} | \psi_f \rangle \right|^{\gamma} \frac{\Gamma / \pi}{(E_f - E_i - \hbar\omega)^{\gamma} + \Gamma^{\gamma}} (f_i - f_f) \right\} \quad (17)$$

که  $q$  مقدار بار الکترون،  $n_f$  ضریب شکست نیم‌رسانا،  $m_0$  جرم الکترون،  $\epsilon_0$  ثابت گذردهی فضای آزاد،  $\vec{e}$  بردار واحد،  $\vec{p}$  اپراتور تکانه،  $E_i$  و  $E_f$  به ترتیب مربوط به مقادیر ویژه انرژی اولیه و نهایی که گذار در آنها صورت می‌گیرد،  $\psi_i$  و  $\psi_f$  به ترتیب توابع موج اولیه و نهایی،  $\Gamma$  پهنای گستردهی لورنتزی در نصف مقدار ماکزیمم آن،  $\hbar\omega$  انرژی فوتون،  $f_i$  و  $f_f$  به ترتیب مربوط به تابع توزیع فرمی-دیراک حالت اولیه و نهایی هستند.

#### ۵- روش محاسبه اتلاف گرمایی در QD-IBSCs

در مورد سلول‌های خورشیدی تک‌گافی، الکترون‌های تولید شده در نوار رسانش که دارای انرژی بیشتر از لبه نوار رسانش هستند، مقدار انرژی اضافی تا لبه نوار رسانش را به صورت فونون به سیستم می‌دهند تا به لبه نوار رسانش برسند و در فرایند تولید جریان نوری شرکت کنند. این مقدار انرژی اضافی موسوم به اتلاف گرمایی یا اتلاف بالای گاف است و به صورت

روش‌های عددی در مهندسی، سال ۳۸، شماره ۲، زمستان ۱۳۹۸

الکترون‌ها از نوار ظرفیت به نوار میانی می‌شوند. الکترون‌های تولید شده مقدار انرژی اضافی تا لبه نوار میانی را به صورت فونون (اتلاف گرمایی) به سیستم می‌دهند. بنابراین سهم یک فوتون جذب شده با انرژی  $E_g < \hbar\omega \leq E_{g2}$  در جریان نوری همانند سهم فوتون جذب شده با انرژی  $\hbar\omega = E_{g2}$  است.

(۳) فوتون‌های با انرژی  $\hbar\omega \geq E_g$  باعث برانگیختگی الکترون‌ها از نوار ظرفیت به نوار رسانش می‌شوند. الکترون‌های تولید شده مقدار انرژی اضافی تا لبه نوار رسانش را به صورت اتلاف گرمایی از دست می‌دهند. بنابراین سهم یک فوتون جذب شده با انرژی  $\hbar\omega \geq E_g$  در جریان نوری همانند سهم فوتون جذب شده با انرژی  $\hbar\omega = E_g$  است.

با توضیحات سه‌گانه داده شده برای اتلاف گرمایی، فرمول آن را در QD-IBSCs می‌توان به صورت زیر بیان کرد:

$$\text{Thermalization Loss} = \frac{1}{P_{in}} \left( \frac{\epsilon_{abs}^2 \eta^2}{c^2 h^3} \right) \times \left[ \int_{E_{g1}}^{E_{g2}} \frac{E^\gamma - E_{g1} \cdot E^\gamma}{\exp\left(\frac{E - \mu_{abs}}{kT_{sun}}\right) - 1} dE + \int_{E_{g2}}^{E_g} \frac{E^\gamma - E_{g2} \cdot E^\gamma}{\exp\left(\frac{E - \mu_{abs}}{kT_{sun}}\right) - 1} dE + \int_{E_g}^{\infty} \frac{E^\gamma - E_g \cdot E^\gamma}{\exp\left(\frac{E - \mu_{abs}}{kT_{sun}}\right) - 1} dE \right] \quad (19)$$

## ۶- بررسی و بهینه‌سازی اتلاف گرمایی در $\text{InAs}_{(1-x)}\text{N}_x/\text{AlP}_y\text{Sb}_{(1-y)} \text{ QD-IBSC}$

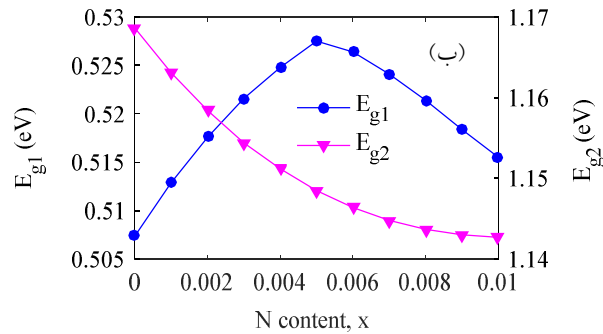
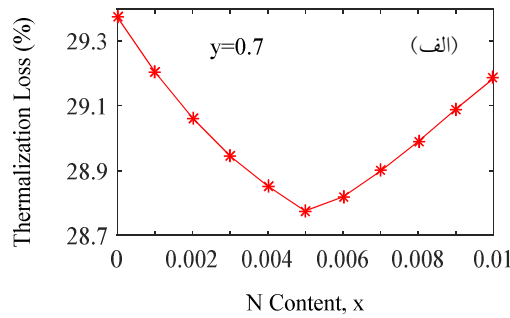
در این بخش اثر غلظت مولی نیتروژن و فسفر، اندازه نقاط کوانتومی و فاصله بین آنها روی اتلاف گرمایی محاسبه و بررسی می‌شود. مقادیر  $a_1 = a_2 = a = 4 \text{ nm}$  و  $h = 4 \text{ nm}$  در محاسبات در نظر گرفته شده است. با در نظر گرفتن غلظت مولی ۰/۷ برای فسفر، اثر تغییر غلظت مولی نیتروژن بر اتلاف گرمایی QD-IBSCs  $\text{AlP}_{0.7}\text{Sb}_{0.3}/\text{InAs}_{(1-x)}\text{N}_x$  در شکل (۳-الف) رسم شده است. مقادیر مولی بسیار کم برای

نیتروژن بررسی می‌شود چون مقادیر کم نیتروژن باعث کاهش بازترکیب اوژه می‌شود [۳۰]. به علاوه، محاسبات نشان دادند که در غلظت‌های نیتروژن بیشتر از ۰/۱ اتلاف گرمایی افزایش می‌یابد. با افزایش غلظت مولی نیتروژن، همان‌طور که در شکل (۳-ب) دیده می‌شود، مقادیر  $E_{g2}$  به‌طور پیوسته کاهش می‌یابد اما مقادیر  $E_{g1}$  تا مقدار مولی نیتروژن ۰/۰۵ افزایش و بعد از آن کاهش می‌یابد. مقدار اتلاف گرمایی به‌اندازه زیرگاف  $E_{g1}$  بیشتر از اندازه زیرگاف  $E_{g2}$  وابسته است. افزایش مقدار زیرگاف  $E_{g1}$  باعث می‌شود تعداد الکترون‌های برانگیخته شده به نوار رسانش و همچنین میزان انرژی اضافی الکترون‌های برانگیخته تا لبه نوار رسانش کاهش یابد که این کاهش به‌نوبه خود باعث کاهش اتلاف گرمایی می‌شود. بنابراین با افزایش مقدار نیتروژن تا ۰/۰۵ اتلاف گرمایی به دلیل افزایش مقدار زیرگاف  $E_{g1}$  کاهش و بعد از آن به دلیل کاهش مقدار زیرگاف  $E_{g2}$  افزایش می‌یابد. همان‌طور که در شکل (۳-الف) دیده می‌شود، افزودن نیتروژن به InAs باعث کاهش چشمگیر اتلاف گرمایی نمی‌شود. اما به دلیل اینکه افزودن نیتروژن به InAs موجب افزایش جذب نقاط کوانتومی [۳۱] و تلورانس بیشتر نسبت به نقص‌های ساختاری می‌شود [۳۲]، استفاده از InAsN به‌عنوان نقاط کوانتومی پیشنهاد شده است.

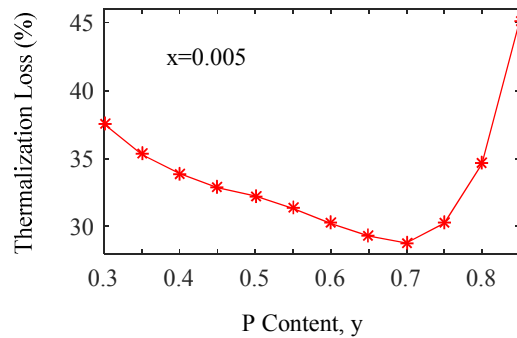
از آنجا که مشخصه‌های نیم‌رسانای میزبان مانند گاف نواری و جرم مؤثر آن تأثیر زیادی بر عملکرد سلول‌های خورشیدی با نوار میانی دارد، با انتخاب غلظت مولی بهینه برای نیتروژن ( $x=0.05$ )، اثر غلظت مولی فسفر بر اتلاف گرمایی QD-IBSCs  $\text{AlP}_y\text{Sb}_{(1-y)}/\text{InAs}_{0.95}\text{N}_{0.05}$  در شکل (۴) ترسیم شده است. تغییر غلظت مولی فسفر باعث تغییر اندازه گاف انرژی نیم‌رسانای میزبان و در نتیجه، تغییر سد پتانسیل  $V_c$  و تغییر اندازه زیرگاف‌های انرژی  $E_{g1}$  و  $E_{g2}$  خواهد شد. بنابراین، همان‌طور که در شکل (۴) دیده می‌شود در غلظت مولی فسفر برابر ۰/۷، مقدار زیرگاف‌های انرژی  $E_{g1}$  و  $E_{g2}$  طوری است که کمترین میزان اتلاف گرمایی را خواهیم داشت.

با ثابت در نظر گرفتن فاصله بین نقاط کوانتومی (فاصله بین مرکز یک نقطه کوانتومی تا مرکز نقطه کوانتومی مجاور)،





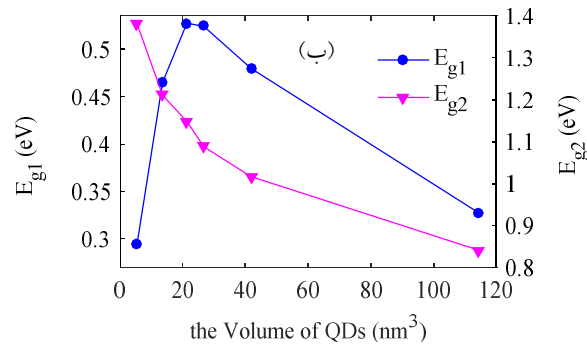
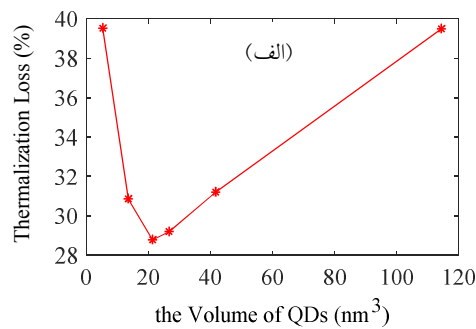
شکل ۳- الف) اتلاف گرمایی و ب) مقادیر زیرگاف‌های انرژی  $E_{g1}$  و  $E_{g2}$  مربوط به  $\text{InAs}_{(1-x)}\text{N}_x/\text{AlP}_{0.7}\text{Sb}_{0.3}\text{QD-IBSC}$  برحسب غلظت مولی نیتروژن،  $x$



شکل ۴- اتلاف گرمایی مربوط به  $\text{InAs}_{0.995}\text{N}_{0.005}/\text{AlP}_y\text{Sb}_{(1-y)}\text{QD-IBSC}$  برحسب غلظت مولی فسفر،  $y$

هرمی با قاعده مربع که به صورت  $V_{\text{QD}}=a^2 \times h$  تعریف می‌شود از مقدار  $5/3 \text{ nm}^3$  ( $a=2 \text{ nm}$  و  $h=4 \text{ nm}$ ) تا  $114/3 \text{ nm}^3$  ( $a=7 \text{ nm}$ ) و  $h=7 \text{ nm}$ ) تغییر می‌کند. مقدار کمینه اتلاف گرمایی در مقادیر بهینه از انرژی‌های زیرگاف  $E_{g1}$  و  $E_{g2}$  خواهد بود. بنابراین، مقادیر  $E_{g1}$  و  $E_{g2}$  برحسب حجم نقاط کوانتومی در شکل (۵-ب) رسم شده است. با افزایش حجم نقاط کوانتومی از مقدار  $5/3 \text{ nm}^3$  ( $a=2 \text{ nm}$ ) و  $h=4 \text{ nm}$ ) تا مقدار  $21/3 \text{ nm}^3$  ( $h=a=4 \text{ nm}$ )، موقعیت اولین

و با در نظر گرفتن مقادیر بهینه برای غلظت مولی نیتروژن و فسفر، شکل (۵-الف) اثر اندازه نقاط کوانتومی بر اتلاف گرمایی  $\text{InAs}_{0.995}\text{N}_{0.005}/\text{AlP}_{0.7}\text{Sb}_{0.3}\text{QD-IBSCs}$  را نشان می‌دهد. تغییر در اندازه نقاط کوانتومی را می‌توان با تغییر در اندازه قاعده، ارتفاع، و یا حجم آنها بررسی کرد [۳۳] که در این مقاله تغییر در حجم نقاط کوانتومی مدنظر قرار گرفته است. درحالی که حجم سلول واحد برابر  $L^3=729 \text{ nm}^3$  است، حجم نقطه کوانتومی



شکل ۵- الف) اتلاف گرمایی و ب) مقادیر زیرگاف‌های انرژی  $E_{g1}$  و  $E_{g2}$  مربوط به  $\text{InAs}_{0.9995}\text{N}_{0.0005}/\text{AlP}_{0.7}\text{Sb}_{0.3}$  QD-IBSC برحسب حجم نقاط کوانتومی

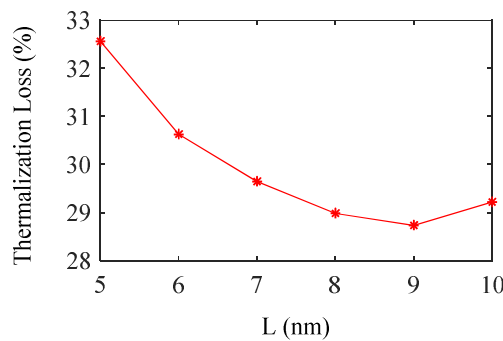
تراز انرژی نقطه کوانتومی،  $E_{111c}$ ، به دلیل کاهش محدودشدگی کوانتومی، پایین می‌یابد. در نتیجه، مینی‌نوار IB پایین‌تر می‌آید و در پی آن، همان‌طور که در شکل (۵-ب) دیده می‌شود، مقدار زیرگاف  $E_{g1}$  که برابر تفاوت انرژی لبه بالایی نوار میانی و لبه پایینی نوار رسانش است، افزایش و زیرگاف  $E_{g2}$  کاهش می‌یابد. اما برای سلول‌های خورشیدی با حجم نقاط کوانتومی بیشتر از  $21/3 \text{ nm}^3$  مقدار  $E_{g1}$  کاهش می‌یابد. دلیل این کاهش، ظاهر شدن ترازهای انرژی برانگیخته در چاه  $V_C$  است. زیرا در این حالت مقدار  $E_{g1}$  برابر تفاوت انرژی لبه بالایی نوار میانی و لبه پایینی مینی‌نوار ناشی از ویژه انرژی حالت برانگیخته خواهد بود. بنابراین بیشینه مقدار  $E_{g1}$  برای نقاط کوانتومی با حجم  $21/3 \text{ nm}^3$  ( $h=a=4 \text{ nm}$ ) منجر به کمینه اتلاف گرمایی، همان‌طور که در شکل (۵-الف) دیده می‌شود، خواهد شد.

## ۷- نتیجه‌گیری

اتلاف گرمایی سلول خورشیدی نوار میانی، که متشکل از سلول خورشیدی p-i-n با جنس  $\text{AlP}_{0.7}\text{Sb}_{0.3}$  و آرایه‌ای منظم از نقاط

تراز انرژی نقطه کوانتومی،  $E_{111c}$ ، به دلیل کاهش محدودشدگی کوانتومی، پایین می‌یابد. در نتیجه، مینی‌نوار IB پایین‌تر می‌آید و در پی آن، همان‌طور که در شکل (۵-ب) دیده می‌شود، مقدار زیرگاف  $E_{g1}$  که برابر تفاوت انرژی لبه بالایی نوار میانی و لبه پایینی نوار رسانش است، افزایش و زیرگاف  $E_{g2}$  کاهش می‌یابد. اما برای سلول‌های خورشیدی با حجم نقاط کوانتومی بیشتر از  $21/3 \text{ nm}^3$  مقدار  $E_{g1}$  کاهش می‌یابد. دلیل این کاهش، ظاهر شدن ترازهای انرژی برانگیخته در چاه  $V_C$  است. زیرا در این حالت مقدار  $E_{g1}$  برابر تفاوت انرژی لبه بالایی نوار میانی و لبه پایینی مینی‌نوار ناشی از ویژه انرژی حالت برانگیخته خواهد بود. بنابراین بیشینه مقدار  $E_{g1}$  برای نقاط کوانتومی با حجم  $21/3 \text{ nm}^3$  ( $h=a=4 \text{ nm}$ ) منجر به کمینه اتلاف گرمایی، همان‌طور که در شکل (۵-الف) دیده می‌شود، خواهد شد.

در شکل (۶) اثر فاصله بین نقاط کوانتومی،  $L_1=L_2=L_3=L$ ، در حالی که اندازه نقاط کوانتومی در  $a=4 \text{ nm}$  و  $h=4 \text{ nm}$  ثابت نگه داشته شده است، بر اتلاف گرمایی  $\text{AlP}_{0.7}\text{Sb}_{0.3}/\text{InAs}_{0.9995}\text{N}_{0.0005}$



شکل ۶- اتلاف گرمایی مربوط به  $\text{InAs}_{0.995}\text{N}_{0.005}/\text{AlP}_{0.97}\text{Sb}_{0.03}$  QD-IBSC برحسب فاصله بین نقاط کوانتومی

نیتروزن ۰/۵ درصد و فسفر ۷۰ درصد است. با در نظر گرفتن این غلظت‌های مولی و با محاسبات مربوط به اثر اندازه نقاط کوانتومی و فاصله بین آنها، کمترین مقدار اتلاف گرمایی برای سلول خورشیدی QD-IBSCs  $\text{InAs}_{0.995}\text{N}_{0.005}/\text{AlP}_{0.97}\text{Sb}_{0.03}$  با  $\text{nm}$   $L=L_1=L_2=L_3=8$  و  $h=4$  به دست آمد.

کوانتومی هرمی با قاعده مربع از جنس  $\text{InAs}_{(1-x)}\text{N}_x$  در ناحیه ذاتی آن است، محاسبه و بررسی شد. موقعیت نوار میانی با حل معادله شرودینگر به کمک روش المان محدود و پهنای آن با محاسبه ضریب جذب به دست آمد. سپس، اثر غلظت مولی نیتروزن و فسفر بر اتلاف گرمایی بررسی شد. محاسبات نشان داد که کمترین مقدار اتلاف گرمایی سلول خورشیدی گفته شده برای غلظت

## واژه‌نامه

- |                         |                  |
|-------------------------|------------------|
| 1. energy gap           | 4. degeneracy    |
| 2. Conduction Band (CB) | 5. mini-band     |
| 3. Valence Band (VB)    | 6. sub-band gaps |

## مراجع

- Arefinia, Z., and Asgari, A., "Optical and Electrical Modeling of Solar Cells Based on Graphene/Si Nanowires with Radial p-i-n Junctions", *Solar Energy Materials and Solar Cells*, Vol. 137, pp. 146-153, 2015.
- Arefinia, Z., and Asgari, A., "A New Modeling Approach for Graphene Based Silicon Nanowire Schottky Junction Solar Cells", *Journal of Renewable and Sustainable Energy*, Vol. 6, p. 043132, 2014.
- Arefinia, Z., and Asgari, A., "A New Graphene-on-Silicon Solar Cells by Introducing an Interlayer of Silicon Quantum Dots", *In 23rd Iranian Conference on Electrical Engineering (ICEE)*, pp. 1415-1418, 2015.
- Dai, Y., Polly, S. J., Hellstroem, S., Slocum, M. A., Bittner, Z. S., Forbes, D. V., Roland, P. J., Ellingson, R. J., and Hubbard, S. M "Effect of Electric Field on Carrier Escape Mechanisms in Quantum Dot Intermediate Band Solar Cells", *Journal of Applied Physics*, Vol. 121, p. 013101 2017.
- Li T., and Dagenais, M., "High Saturation Intensity in InAs/GaAs Quantum Dot Solar Cells and Impact on the Realization of the Intermediate Band Concept at Room-Temperature", *Applied Physics Letters*, Vol. 110, p. 061107, 2017.
- Utrilla, A. D., Reyes, D. F., Llorens, J. M., Artacho, I., Ben, T., González, D., Gačević, Ž., Kurtz, A., Guzman, A., Hierro, A., and Ulloa, J. M., "Thin GaAsSb Capping Layers for Improved Performance of InAs/GaAs Quantum Dot Solar Cells", *Solar Energy Materials and Solar Cells*, Vol. 159, pp. 282-289, 2017.
- Cappelluti, F., Giannini, M., and Khalili, A., "Impact of Doping on InAs/GaAs Quantum-Dot Solar Cells: A Numerical Study on Photovoltaic

- and Photoluminescence Behavior”, *Solar Energy Materials and Solar Cells*, Vol. 157, pp. 209-220, 2016.
8. Grundmann, M., Stier, O., and Bimberg, D., “InAs/GaAs Pyramidal Quantum Dots: Strain Distribution, Optical Phonons, and Electronic Structure”, *Physical Review B*, Vol. 52, pp. 11969-11981, 1995.
  9. Kalyuzhnyy, N. A., Mintairov, S. A., Sali, R. A., Nadochiy, A. M., Payusov, A. S., Brunkov, P. N., Nevedomsky, V. N., Shvarts, M. Z., Martí, A., Andreev, V. M., and Luque, A., “Increasing the Quantum Efficiency of InAs/GaAs QD Arrays for Solar Cells Grown by MOVPE Without using Strain-Balance Technology”, *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, Vol. 24, pp. 1261-1271, 2016.
  10. Utrilla, A. D., Ulloa, J. M., Gačević, Ž., Reyes, D. F., Artacho, I., Ben, T., González, D., Hierro, A., and Guzman, A., “Impact of Alloyed Capping Layers on the Performance of InAs Quantum Dot Solar Cells”, *Solar Energy Materials and Solar Cells*, Vol. 144, pp. 128-135, 2016.
  11. Hubbard, S., Cress, C., Bailey, C., Raffaele, R., Bailey, S., and Wilt, D., “Effect of Strain Compensation on Quantum Dot Enhanced GaAs Solar Cells”, *Applied Physics Letters*, Vol. 92, p. 123512, 2008.
  12. Luque, A., Linares, P. G., Antolín, E., Cánovas, E., Farmer, C. D., Stanley, C. R., and Martí, A., “Multiple Levels in Intermediate Band Solar Cells”, *Applied Physics Letters*, Vol. 96, p. 013501, 2010.
  13. Cedola, A., Cappelluti, F., and Giovannini, M., “Dependence of Quantum Dot Photocurrent on the Carrier Escape Nature in InAs/GaAs Quantum Dot Solar Cells”, *Semiconductor Science and Technology*, Vol. 31, p. 025018, 2016.
  14. Cuadra, L., Martí, A., and Luque, A., “Influence of the Overlap Between the Absorption Coefficients on the Efficiency of the Intermediate Band Solar Cell”, *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 51, pp. 1002-1007, 2004.
  15. Klimov, V. I., “Detailed-Balance Power Conversion Limits of Nanocrystal-Quantum-Dot Solar Cells in the Presence of Carrier Multiplication”, *Applied Physics Letters*, Vol. 89, p. 123118, 2006.
  16. Luque, A., Martí, A., and Cuadra, L., “Thermodynamic Consistency of Sub-Bandgap Absorbing Solar Cell Proposals”, *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 48, pp. 2118-2124, 2001.
  17. Mellor, A., Luque, A., Tobias, I., and Martí, A., “Realistic Detailed Balance Study of the Quantum Efficiency of Quantum Dot Solar Cells”, *Advanced Functional Materials*, Vol. 24, pp. 339-345, 2014.
  18. Sabeur, A., Jiang, J., and Imran, A., “Numerical Modeling of Shape and Size Dependent Intermediate Band Quantum Dot Solar Cell”, *In Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering*, 2015.
  19. Arefinia, Z., “Modelling of Intrinsic Loss Processes in the Intermediate Band Solar Cells”, *Zeitschrift fur Naturforschung - Section A Journal of Physical Sciences*, Vol. 74, pp. 51-58, 2019.
  20. Hirst, L. C., and Ekins-Daukes, N. J., “Fundamental Losses in Solar Cells”, *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, Vol. 19, pp. 286-293, 2011.
  21. Dupré, O., Vaillon, R., and Green, M. A., “Physics of the Temperature Coefficients of Solar Cells”, *Solar Energy Materials and Solar Cells*, Vol. 140, pp. 92-100, 2015.
  22. Alharbi F. H., and Kais, S., “Theoretical Limits of Photovoltaics Efficiency and Possible Improvements by Intuitive Approaches Learned from Photosynthesis and Quantum Coherence”, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Vol. 43, pp. 1073-1089, 2015.
  23. Da, Y., Xuan, Y., and Li, Q., “Quantifying Energy Losses in Planar Perovskite Solar Cells”, *Solar Energy Materials and Solar Cells*, Vol. 174, pp. 206-213, 2018.
  24. Martí, A., Cuadra, L., and Luque, A., “Partial Filling of a Quantum Dot Intermediate Band for Solar Cells”, *IEEE Trans Electron Devices*, Vol. 48, pp. 2394-2399, 2001.
  25. Persson P. -O., and Strang, G., “A Simple Mesh Generator in MATLAB”, *SIAM Review*, Vol. 46, pp. 329-345, 2004.
  26. Tomić, S., Jones, T. S., and Harrison, N. M., “Absorption Characteristics of a Quantum Dot Array Induced Intermediate Band: Implications for Solar Cell Design”, *Applied Physics Letters*, Vol. 93, p. 263105, 2008.
  27. Berbezier, A., and Aeberhard, U., “Impact of Nanostructure Configuration on the

- Photovoltaic Performance of Quantum-Dot Arrays”, *Physical Review Applied*, Vol. 4, p. 044008, 2015.
28. Tomic, S., Sogabe, T., and Okada, Y., “In-plane Coupling Effect on Absorption Coefficients of InAs/GaAs Quantum Dots Arrays for Intermediate Band Solar Cell”, *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, Vol. 23, pp. 546-558, 2015.
  29. Arefinia Z., and Asgari, A., “Optimization Study of a Novel Few-Layer Graphene/Silicon Quantum Dots/Silicon Heterojunction Solar Cell Through Opto-Electrical Modeling”, *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Vol. 54, pp. 1-6, 2018.
  30. Murdin, B. N., Kamal-Saadi, M., Lindsay, A., O’Reilly, E. P., Adams, A. R., Nott, G. J., Crowder, J. G., Pidgeon, C. R., Bradley, I. V., Wells, J. -P. R., Burke, T., Johnson, A. D., and Ashley, T., “Auger Recombination in Long-Wavelength Infrared InN<sub>x</sub>Sb<sub>1-x</sub> Alloys”, *Applied Physics Letters*, Vol. 78, pp. 1568-1570, 2001.
  31. Ding-Kang, S., Hao-Hsiung, L., Li-Wei, S., Tso-Yu, C., and Yang, T. R., “Band Gap Reduction in InAsN Alloys”, *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol. 42, p. 375, 2003.
  32. Zakutayev, A., “Design of Nitride Semiconductors for Solar Energy Conversion”, *Journal of Materials Chemistry A*, Vol. 4, pp. 6742-6754, 2016.
  33. Ngo, C. Y., Yoon, S. F., Fan, W. J., and Chua, S. J., “Effects of Size and Shape on Electronic States of Quantum Dots”, *Physical Review B*, Vol. 74, p. 245331, 2006.