تحسين أداء خلايا بيروفسكايت الشمسية الخالية من الرصاص باستخدام بدائل منخفضة التكلفة للذهب عبر المحاكاة العددية

محمد شرابي، موفّق رقيّة*، سعيد مندو
قسم الفيزياء، كلية العلوم، جامعة إدلب
https://orcid.org/0009-0005-4075-9745

الملخص:

تعدّ مادة البيروفسكايت الخالية من الرصاص مثل **$CsSnI_3$** من المواد الماصة الواعدة للطاقة الشمسية المستدامة، إلا أنّ أداءها يتأثر بشكل كبير بخيار طبقة الاتصال الخلفي. استعمل هذا البحث محاكاة **SCAPS-1D** (معايرة ببيانات تجريبية) لدراسة مجموعة واسعة من المواد **(Al, Cr, Mo, Cu, Ag, Fe, rGO, C, Ni, W)** بوصفها بدائل للذهب. أظهرت النتائج أن كثافة التيار القصير **(Jsc)** تبقى شبه ثابتة عند **31.8 mA/cm²** لمعظم الحالات، بينما يختلف كمون الدارة المفتوحة ومعامل الملء **(FF)** تبعًا لتابع عمل المادة**(WF)**. سجّل الذهب كفاءة تحويل طاقة**(PCE≈ 17.4%)** ، **(Voc ≈ 0.886 V)**، **(FF ≈61%)** بينما حقق التنغستن **(WF = 5.22 eV)**أعلى كفاءة **(PCE≈ 20.16%)**، **(Voc ≈ 0.91 V)**، **(FF ≈70%)** ، يليه النيكل بكفاءة تحويل طاقة **(PCE≈ 18.78%)**، **(Voc ≈ 0.90 V)** **(FF ≈65%)**، كما أظهرت الأقطاب الكربونية أداءً منافسًا بكفاءة **(14.5%)** ، مما يجعلها بديلًا منخفض التكلفة ومستقرًا. تؤكد هذه الدراسة أن اختيار طبقة الاتصال الخلفي، استنادًا إلى توافق مستويات الطاقة وخصائص الواجهة، يمثل عاملًا حاسمًا في تحسين أداء خلايا **$CsSnI_3$**الخالية من الرصاص.

الكلمات المفتاحية:

خلايا بيروفسكايت الشمسيّة، خالية من الرصاص**$CsSnI_3$**، طبقة الاتصال الخلفي، محاكاة **SCAPS-1D**، كفاءة تحويل الطاقة، بدائل منخفضة التكلفة الذهب.

---

* هيئة الطاقة الذريّة السوريّة

تاريخ إيداع البحث:2025/10/27
تاريخ قبوله للنشر:2026/01/14

Numerical Simulation of Low-Cost Gold Alternatives for Performance Improvement in Lead-Free Perovskite Solar Cells

Mohammad Sharabi, Mwaffak Rukiah*, Saeed Mando

Department of Physics Faculty of Science, Idlib University

Abstract:

Lead-free perovskites such as **$CsSnI_3$** are promising absorbers for sustainable solar energy; however, their performance is highly dependent on the choice of back contact layer. In this work**, SCAPS-1D** simulations (calibrated with experimental data) were employed to investigate a wide range of materials **(Al, Cr, Mo, Cu, Ag, Fe, rGO, C, Ni, W)** as alternatives to gold. Results indicate that the short-circuit current density **(Jsc)** remains nearly constant at **31.8 mA/cm²** for most cases, while the open-circuit voltage **(Voc)** and fill factor **(FF)** vary depending on the material work function. Gold exhibited a power conversion efficiency **(PCE ≈ 17.4%)**, **(Voc ≈ 0.886 V)**, **(FF ≈ 61%)**, whereas tungsten **(WF = 5.22 eV)** achieved the highest efficiency **(PCE ≈ 20.16%)**, **(Voc ≈ 0.91 V)**, **(FF ≈ 70%)**, followed by nickel with **(PCE ≈ 18.78%)**, **(Voc ≈ 0.90 V)**, **(FF ≈ 65%)**. Carbon-based electrodes also demonstrated competitive performance with an efficiency of **(14.5%)**, making them a stable and low-cost alternative. This study confirms that selecting of the back contact layer, based on energy level alignment and interfacial properties, is a critical factor in enhancing the performance of lead-free **$CsSnI_3$** solar cells.

Keywords:

perovskite solar cells **(PSC)**, lead-free **$CsSnI_3$**, back contact layer, **SCAPS-1D** simulation, power conversion efficiency **(PCE)**, low-cost alternatives to gold.

---

* Atomic Energy Commission of Syria.

1- المقدمة:

شهدت مجالات الطاقة الشمسية تطورًا ملحوظاً خلال العقدين الماضيين، مدفوعةً بالحاجة العالمية إلى مصادر طاقة نظيفة ومستدامة. من بين مختلف هذه المجالات، برزت خلايا بيروفسكايت الشمسيّة **(PSCs)** بوصفها أحد أكثر الحلول الواعدة، إذ ارتفعت كفاءتها من **3.8%** إلى **25.2%** خلال اثنتي عشرة سنة[1], [2].

هذا الإنجاز السريع يعكس الإمكانات الكبيرة لمواد البيروفسكايت الهاليدية، التي تتميز بخصائص ضوئية وإلكترونية استثنائية، مثل معامل امتصاص عالٍ، وانخفاض طاقة ربط الأزواج (إلكترون–ثقب)، وطول مسافات انتشار الشحنات، إضافة إلى فجوات طاقة مناسبة للتطبيقات الكهروضوئية[3].

رغم هذه المزايا، فإن معظم خلايا بيروفسكايت الشمسيّة عالية الكفاءة تعتمد على مركبات تحتوي على الرصاص، مثل **$MAPbI_3$**[1] و **$CsPbI_3$** . ما يثير المخاوف حول استدامة هذه التقنية على المدى الطويل [4] ,[5] . لذلك، توجهت الأبحاث مؤخرًا نحو تطوير بدائل خالية من الرصاص، تحافظ على الأداء العالي وتقلل الأثر البيئي.

في هذا السياق، برز **$CsSnI_3$** كأحد البدائل الواعدة لمركبات الرصاص في خلايا بيروفسكايت الشمسيّة. يمتاز هذا المركب بفجوة طاقة مباشرة تبلغ حوالي **(1.3 eV)**، وهو نطاق مثالي لامتصاص الطيف الشمسي[6]. إضافة لمعامل امتصاص مرتفع وقدرة جيدة على نقل الشحنات، ما يجعله مناسبًا للاستعمال بوصفه طبقة فعّالة ماصة للضوء. كما يمكن تصنيع **$CsSnI_3$** عند درجات حرارة منخفضة نسبيًا[7] ، وهو ما يفتح المجال لتطبيقات جديدة مثل الخلايا المرنة والخلايا المزدوجة (الترادفيّة) **(Tandem Solar Cells)**[8], [9]، هذه الخصائص تجعل من **$CsSnI_3$** خيارًا إستراتيجيًا لتطوير خلايا بيروفسكايت شمسية خالية من الرصاص، صديقة للبيئة، وقابلة للتطور الصناعي.

إلّا أنّ تحسين أداء واستقرار هذه الخلايا لا يعتمد فقط على المادة الماصة للضوء، بل يتأثر أيضًا بشكل كبير بطبقات النقل والاتصال. ومن بين هذه الطبقات، تُعد طبقة الاتصال الخلفي **(Back Contact Layer)** عنصرًا حاسمًا في تحديد كفاءة الجهاز واستقراره.

[1] MA مركب عضوي الميثيل أمونيوم CH_3NH_3

تاريخ إيداع البحث:2025/10/27
تاريخ قبوله للنشر:2026/01/14

فهي تتحكم في جمع ونقل الشحنات، وتساهم في تقليل المقاومة التسلسلية، لها أثر في تحسين التلامس عند السطح الفاصل مع الطبقة المجاورة، تقليديًا يُستعمل الذهب بوصفه طبقة اتصال خلفي نظرًا لناقليّته المرتفعة وتوافقه الجيد مع مستويات الطاقة لطبقة نقل الثقوب**(HTL)** . إلّا أنّ الاعتماد على الذهب يطرح عدة تحديات، أبرزها التكلفة المرتفعة وصعوبة التوسع الصناعي وإيجاد بديل له نفس الاستقرار الكيميائي على المدى الطويل [10], [11].

لذلك، أصبح البحث عن بدائل منخفضة التكلفة ومستدامة للذهب أمراً ضرورياً، مع الحفاظ على توافقها مع مستويات الطاقة لطبقات نقل الشحنات في البيروفسكايت، وكفاءتها العالية في استخلاص الشحنات. في هذا العمل، استعملت محاكاة-**SCAPS 1D**، بعد معايرتها بالبيانات التجريبية، لدراسة عشرة عناصر مختلفة بوصفها بدائل للذهب **(Al, Cr, Mo, Cu, Ag, Fe, rGO[2], C, Ni, W)** مع مراعاة تابع العمل لها (**WF**) **(4.41, 4.5, 4.6, 4.65, 4.71, 4.81, 4.9, 5, 5.15, 5.22) (eV)** على الترتيب [12], [13].

تهدف هذه الدراسة إلى تقديم فهم أعمق لأثر طبقة الاتصال الخلفي في تحسين أداء خلايا بيروفسكايت الشمسيّة الخالية من الرصاص، واختيار المواد الأنسب من حيث الكفاءة، والجدوى الاقتصادية، والاستدامة البيئية، ما يعزز تطوير تقنيات كهروضوئية صديقة للبيئة، قابلة للتطبيق على نطاق واسع لتلبية احتياجات المستقبل من الطاقة النظيفة.

2- المواد والطرق

2-1 المحاكاة العددية باستخدامSCAPS-1D

طوَّر قسم الإلكترونيات والمعلوماتية **(ELIS)** في جامعة جِنت – بلجيكا برنامج **SCAPS-1D**، الذي يعتمد على معادلات فيزيائية دقيقة وواقعية، ما يتيح دراسة وتصميم مجموعة واسعة من البُنى المختلفة للأجهزة الكهروضوئية. ويتميز هذا البرنامج بمرونة كبيرة في تحليل أداء خلايا البيروفسكايت الشمسية **(PSCs)** تحت ظروف متنوعة، الأمر الذي

[2] أوكسيد الغرافين المُرجَع (reduced Graphene Oxide)

يجعله أداة بحثية معتمدة على نطاق واسع في هذا المجال، وأداة فعّالة لفهم الخصائص الفيزيائية وتقدير تأثير الطبقات والمواد المكوِّنة للخلية المدروسة. كما يوفّر البرنامج إمكانية استكشاف خيارات مختلفة لتحسين الكفاءة، ما يجعله أساسًا مهمًا لدعم الدراسات النظرية والتطبيقية في مجال الطاقة الشمسية[14,15]. يعتمد البرنامج على حل **معادلة بواسون** التي تصف التوزيع الكهروستاتيكي للجهد داخل البنية[16].

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi(\mathrm{x}) = \frac{q}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}[p(x) - n(x) + N_D - N_A + \rho_p - \rho_n] \qquad (1)$$

إذ تمثل **(ψ)**الكمون الكهربي، و **(ε_r)**السماحية النسبية، و**(ε_0)** سماحية الفراغ، بينما يرمز **(N_D)**و **(N_A)**إلى تراكيز الشوائب المانحة والآخذة، و **(n)**و **(p)**إلى تراكيز الإلكترونات والثقوب، و **(ρ_p)**و **(ρ_n)**إلى كثافة الشحنة الإلكترونات والثقوب.

كما يعتمد البرنامج على **معادلات الاستمرارية** للإلكترونات والثقوب وتيارات الجرف والانتشار، والتي تصف توليد وإعادة اتحاد حوامل الشحنة[17]:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q}\frac{\partial J_n}{\partial x} + (G_n - R_n) \qquad (2)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{q}\frac{\partial J_p}{\partial x} + (G_p - R_p) \qquad (3)$$

$$J_n = q\mu_n nE + qD_n\frac{\partial n}{\partial x} \qquad (4)$$

$$J_p = q\mu_p pE - qD_p\frac{\partial p}{\partial x} \qquad (5)$$

حيث **(J_n)**، **(J_p)**تمثلان كثافة تيار الإلكترونات والثقوب، و **(G)**، **(R)**معدلات التوليد وإعادة الاتحاد، و **(μ_n)**، **(μ_p)**تمثلان حركية الإلكترونات والثقوب، و **(D_n)**، **(Dp)** معاملات الانتشار.

كما يقوم البرنامج بحساب مؤشرات الأداء الأساسية للخلية الشمسية.

ويُعرَّف **معامل الملء (FF)** بالعلاقة:

تاريخ إيداع البحث:2025/10/27
تاريخ قبوله للنشر:2026/01/14

$$FF = \frac{V_{mp} \times J_{mp}}{V_{oc} \times J_{sc}} = \frac{P_{max}}{V_{oc} \times J_{sc}} \qquad (6)$$

حيث($\mathbf{J_{mp}}$)و($\mathbf{V_{mp}}$)يمثلان كثافة التيار والجهد عند نقطة الاستطاعة العظمى، بينما يشير($\mathbf{J_{SC}}$)إلى كثافة تيار القصر و ($\mathbf{V_{OC}}$)إلى كمون الدارة المفتوحة.

أما **كفاءة الخليّة الشمسيّة (η)** فيُحسب وفق المعادلة:

$$\eta = \frac{V_{oc} \times I_{sc} \times FF}{P_{in}} = \frac{P_{max}}{P_{in}} \qquad (7)$$

حيث (**Pin**) الاستطاعة الضوئية الداخلة، والتي تعادل طيف الإشعاع القياسي **AM 1.5G** [18].

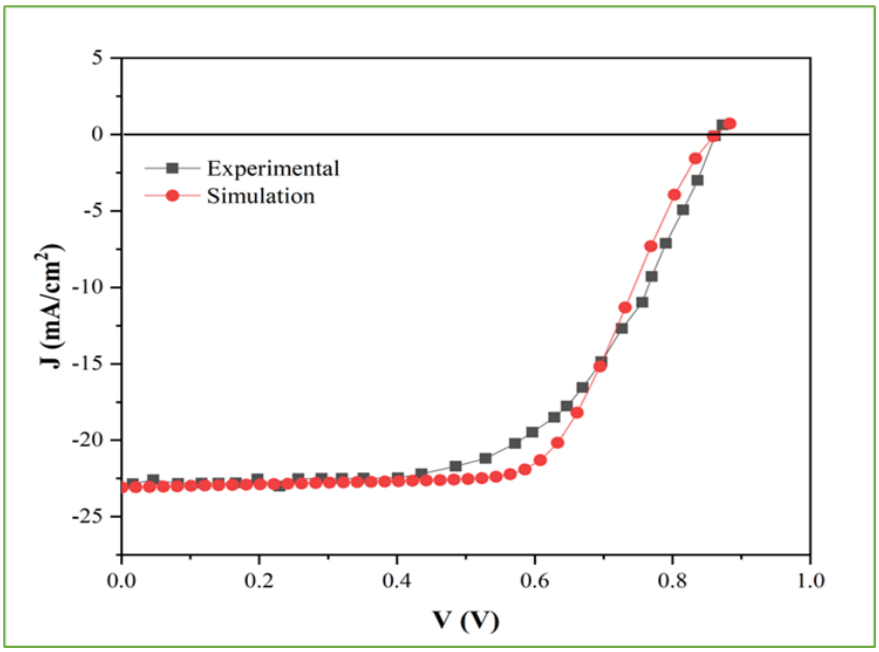
2-2 معايرة خلية شمسية مرجعية قائمة على$CsSnI_3$

أجريت نمذجة لخلية شمسية مرجعية مصنَّعة فعليًا لها بنية طبقيّة تقليديّة للاعتماد عليها في معايرة نتائج المحاكاة، إذ تتكون هذه الخلية من بيروفسكايت **$CsSnI_3$** بوصفها مادة ماصّة، بسماكة **330nm**، مدمجة بين طبقة نقل الإلكترونات من **TiO_2** بسماكة **150 nm**وطبقة نقل الثقوب من **Spiro-OMeTAD**[3] بسماكة**200 nm**، مع طبقة تلامس أمامية من **ITO** وطبقة تلامس خلفية من الذهب[19]. تهدف هذه المعايرة إلى توفير نقطة مقارنة معيارية للتصاميم التي ستختر لاحقًا وضمان دقة المحاكاة مقارنة بالنتائج التجريبيّة. أُجريت المحاكاة ببرنامج **SCAPS-1D**تحت ظروف معيارية، تشمل1) درجة حرارة محيطـة تقارب **300 K**، 2) كثافة شدة ضوئية مقدارها **100 mW/cm²**،3) تـردد **1 MHz**، وفق طيف الشمس القياسي **AM 1.5G**، وقد ضُبطت قيم مناسبة لكل من المقاومة التسلسلية **Rs** والمقاومة التفرعيّة **Rsh** ومعاملات إعادة الاتحاد، إضافة إلى اعتماد نموذج امتصاصية ملائم، وذلك بغية تحقيق تطابق جيد بين نتائج المحاكاة والنتائج التجريبية للخلية المرجعية.

الجدول (1): الخصائص الكهروضوئية للخلية الشمسية من المحاكاة والقياسات التجريبية

الخاصيّة	V_{OC} (V)	J_{SC} (mA/cm^2)	FF (%)	PCE (%)
القيم المرجعيَة	0.86	23.20	65.00	12.96
قيم المحاكاة	0.86	23.09	65.11	12.96

[3] مركب عضوي اسمه 2,2',7,7'-Tetrakis[N,N-di(4-methoxyphenyl) amino] -9,9'-spirobifluorene، وصيغته الكيميائية($C_{81}H_{68}N_4O_8$) .



الشكل (1) مقارنة بين منحنيات التيار–كمون (J–V) لنتائج المحاكاة والنتائج التجريبية

إذ يُظهر التطابق شبه التام بين خصائص الخلية التجريبية والخلية المستعملة في النمذجة، ما يؤكد صحة المحاكاة كأساس لدراسة تأثير طبقات الاتصال الخلفي البديلة للذهب على أداء خلايا ($CsSnI_3$).

يُبين المخطط **(J-V)** أيضاً التطابق في نتائج النمذجة والقيم التجريبية الفعلية لخصائص الخلية الشمسيّة المعتمدة الشكل (1).

2-3 التركيب البنيوي للخلية:

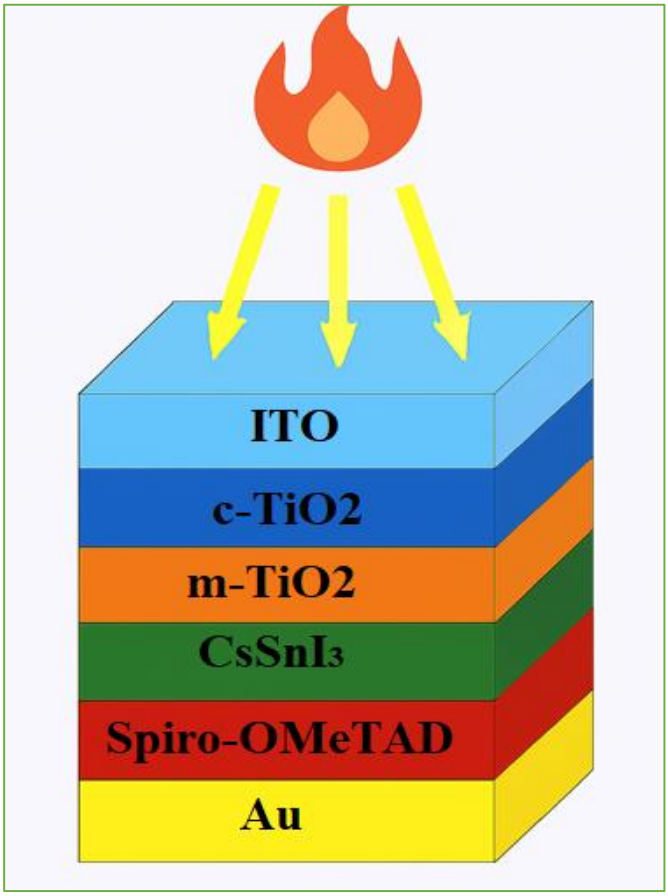
في هذه الدراسة مُثلت خلية شمسية واحدة ببنية تقليدية مستوية **n–i–p**، وقد اختير أكسيد القصدير المَشوب بالإنديوم **(ITO)** كطبقة اتصال أمامي شفافة، بينما استُعمل الذهب **(Au)** بوصفه طبقة اتصال خلفي. تتألف البنية الداخلية للخلية من طبقة ماصّة من $CsSnI_3$ في المنطقة الوسطى **(i-region)** ، محاطة بطبقتين لنقل الشحنات:

- طبقة نقل ثقوب من **Spiro-OMeTAD** في جهة **p** [20], [21].

تاريخ إيداع البحث:2025/10/27
تاريخ قبوله للنشر:2026/01/14

- طبقتان لنقل الإلكترونات في جهة **n** طبقة **$c\text{-}TiO_2$**(تقليدية) وطبقة **$m\text{-}TiO_2$** (مسامية).

مُثلت الطبقة المسامية **$m\text{-}TiO_2$** عدديًا من خلال اعتماد تدرّج خطي للخصائص الفيزيائية عبر سماكتها، يبدأ من جهة الطبقة الماصّة وصولًا إلى الطبقة التقليدية**$c\text{-}TiO_2$** ، وذلك بغية محاكاة الانتقال التدريجي في البنية وتحقيق توافق أفضل في نقل الإلكترونات عند الواجهة.



الشكل (2) بنية الخلية الشمسية المعتمدة

عند تعريض الخلية للإضاءة، تتولّد الأزواج (إلكترون–ثقب) داخل طبقة **$CsSnI_3$**، إذ تنفصل هذه الأزواج عند الوصلات بين مناطق **n** و**p**. تنتقل الثقوب إلى طبقة نقل الثقوب

(Spiro-OMeTAD)، بينما تنتقل الإلكترونات إلى طبقتي **TiO_2** ، ويسهم الحقل الكهربائي المتكوّن عند الواجهات بين الطبقات المختلفة في تسريع عملية فصل الأزواج وتحسين جمع حاملات الشحنة.

حُددت سماكة الطبقات وفق تصميم مدروس يوازن بين الامتصاص الضوئي وكفاءة النقل كما يلي:

- الطبقة الماصّة **800 nm.**
- سماكة طبقة**Spiro-OMeTAD كانت200 nm .**
- سماكة الطبقة المسامية**$m\text{-}TiO_2$ كانت 50 nm.**
- سماكة الطبقة التقليدية**$c\text{-}TiO_2$ كانت 100 nm.**

كما اعتمدت نفس القيم التي اعتمدت خلال معايرة الخلية المرجعية بما في ذلك درجة الحرارة، وشدة الإضاءة، ومعامل الامتصاص، والمقاومات التسلسليّة والتفرعيّة، ومعاملات إعادة اتحاد.

نُظمت جميع الخصائص الفيزيائية والبارامترات المتعلقة بالطبقات المكوِّنة للخلية الشمسية، بما في ذلك: السماكة، فجوة الطاقة، الألفة الإلكترونية، كثافة الشوائب، كثافة العيوب، ثابت العزل، ومعاملات حركية الإلكترونات والثقوب، وعُرضت بشكل مُفصّل في الجدول(2) . اعتمدت الدراسة على قيمة ثابتة للسرعة الحراريّة لجميع الطبقات بمقدار **(1×10^7 cm/s)** [22]،في حين حُدد تابع العمل لطبقة الاتصال الخلفي **(Au)** بقيمة **(5.1 eV)** [23] .

تناولت الدراسات السابقة تأثير طبقة الاتصال الخلفي على أداء خلايا البيروفسكايت الشمسية، على سبيل المثال إحدى المقالات[13] درست عدة طبقات اتصال خلفي **(Ag, Cr, Cu, Ni, Pt)** مع وبدون طبقة نقل ثقوب لتحديد أفضل البدائل. دراسة أخرى[24] قارنت مجموعة من طبقات الاتصال الخلفي لخلايا بيروفسكايت خالية من الرصاص**(Au, W, Ni, Pd, Pt, Se, Ag, C, Fe, Cu)** ، وأظهرت أنّ الطبقات ذات تابع العمل المرتفع مثل **(Au, Pt, Pd)** أعطت أعلى كفاءة تحويل طاقة، مع استعمال نماذج مبسطة لم تتضمن معايرة دقيقة للبيانات.

تاريخ إيداع البحث:2025/10/27
تاريخ قبوله للنشر:2026/01/14

أما المقالة[25] فهي الأقرب من حيث بنية الجهاز إلى هذا العمل، حيث اعتمدت على إدراج العيوب السطحية بين الطبقات ضمن نموذج المحاكاة ومعايرة خليّة شمسيّة تجريبيّة مرجعيّة.

الجدول (2): الخصائص الفيزيائية والبارامترات المعتمدة لطبقات خلية بيروفسكايت الشمسية المبنية على $CsSnI_3$ [25], [26]

الخاصية الفيزيائية	ITO	TiO_2	$CsSnI_3$	Spiro-OMeTAD
السماكة (nm)	500	150	800	200
$E_g\ (eV)$	3.5	3.2	1.27	3
$\chi\ (eV)$	4	4	4.47	2.45
ε_r	9	9	18	3
$N_C\ (cm^{-3})$	$2.2 \times 10^{+18}$	$1.0 \times 10^{+21}$	$1.0 \times 10^{+19}$	$2.2 \times 10^{+18}$
$N_V\ (cm^{-3})$	$2.2 \times 10^{+18}$	$2.0 \times 10^{+20}$	$1.0 \times 10^{+19}$	$1.9 \times 10^{+19}$
μ_n $(cm^2.V^{-1}.s^{-1})$	20	20	4.37	2.0×10^{-4}
μ_p $(cm^2.V^{-1}.s^{-1})$	10	10	4.37	2.0×10^{-4}
$N_A\ (cm^{-3})$	0	0	$1.8 \times 10^{+16}$	$2.0 \times 10^{+18}$
$N_D\ (cm^{-3})$	$1.0 \times 10^{+21}$	$5.0 \times 10^{+19}$	0	0

$1.0 \times 10^{+15}$	$1.0 \times 10^{+13}$	$1.0 \times 10^{+17}$	$1.0 \times 10^{+15}$	$N_t\ (cm^{-3})$

في المقابل، يقدم هذا العمل تمثيلاً أكثر واقعية للخسائر الفيزيائية، من خلال تضمين تأثيرات إعادة الاتحاد الإشعاعي وخسائر اتحاد أوجر. كما أن طبقة نقل الإلكترونات في الدراسة المرجعية مُثلت كطبقة واحدة تقليدية، بينما يعتمد هذا العمل على بنية مزدوجة تشمل طبقة **m-TiO_2** المسامية وطبقة**c-TiO_2** ، إذ مُثلت الطبقة المساميّة **m-TiO_2** على شكل تدرج للخصائص الفيزيائية بين الطبقة الماصة **$CsSnI_3$**وطبقة **c-TiO_2** لتحسين محاكات انتقال الإلكترونات. إضافة إلى ذلك، يركّز هذا العمل على تقييم بدائل منخفضة التكلفة للاتصال الخلفي تصلح للإنتاج التجاري مستقبلاً، مع إمكانيّة تطوير أدائها بحيث تقترب من كفاءة الذهب أو تتحسن عنه، ما يعزز جدوى البحث في التطبيقات الصناعيّة.

3- النتائج والمناقشة

3-1 أداء الخلية الشمسية مع (Au) كطبقة اتصال خلفيّة:

اعتماداً على النموذج الأساسي الذي يستعمل الذهب كطبقة اتصال خلفي تم الحصول على نتائج المحاكاة العدديّة ببرنامج **SCAPS-1D** كما يأتي:

- كمون الدارة المفتوحة **V_{OC}=0.886(V)**.
- كثافة التيار الدارة المقصورة **J_{SC}=31.85 mA/cm^2**.
- معامل الملء **FF= 61.67%**.
- كفاءة تحويل طاقة **η=17.42%** .

تظهر هذه النتائج أن الخلية الشمسية تحقق كفاءة مقبولة مع امتصاصيّة عاليّة ومردود كوانتي مرتفع في نطاق طول الموجة الأكبر من **400 nm**. كما تبين محاذاة ممتازة لمستويات الحزم الطاقيّة وتدرّج واضح للخصائص الفيزيائيّة خاصة في الطبقة المساميّة من أوكسيد التيتانيوم (**m-TiO_2**).

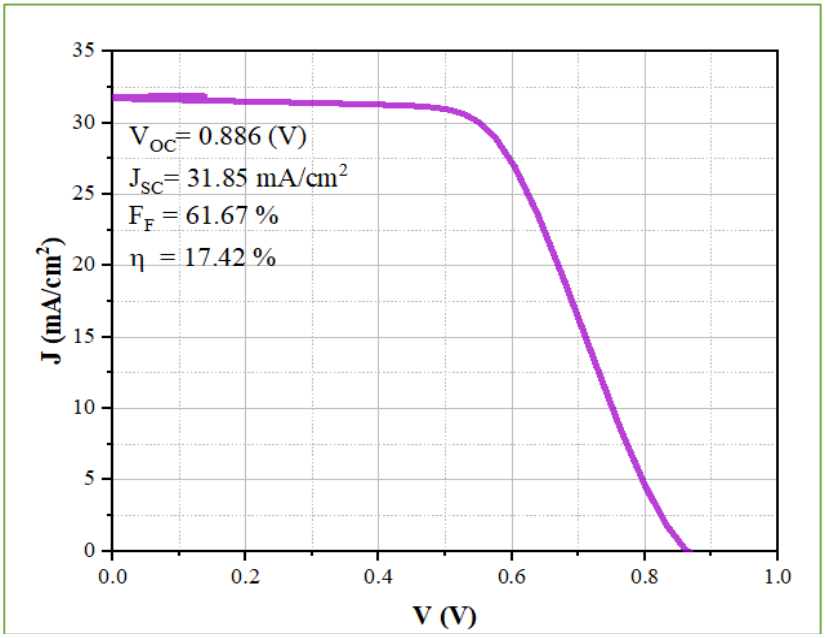
توضح الأشكال المرفقة:

-الشكل (3) منحني(**J-V**).

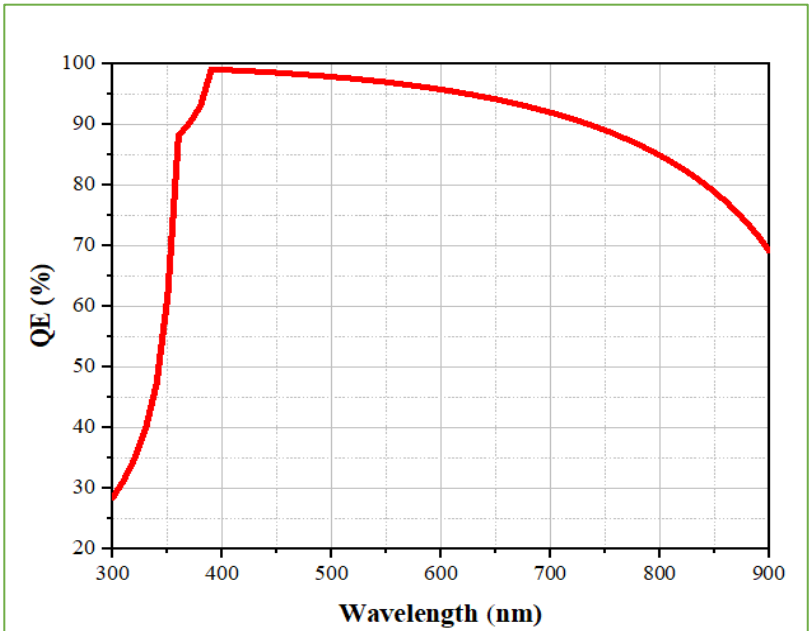
-الشكل (4) المردود الكوانتي **QE** بدلالة طول الموجة

تاريخ إيداع البحث:2025/10/27
تاريخ قبوله للنشر:2026/01/14

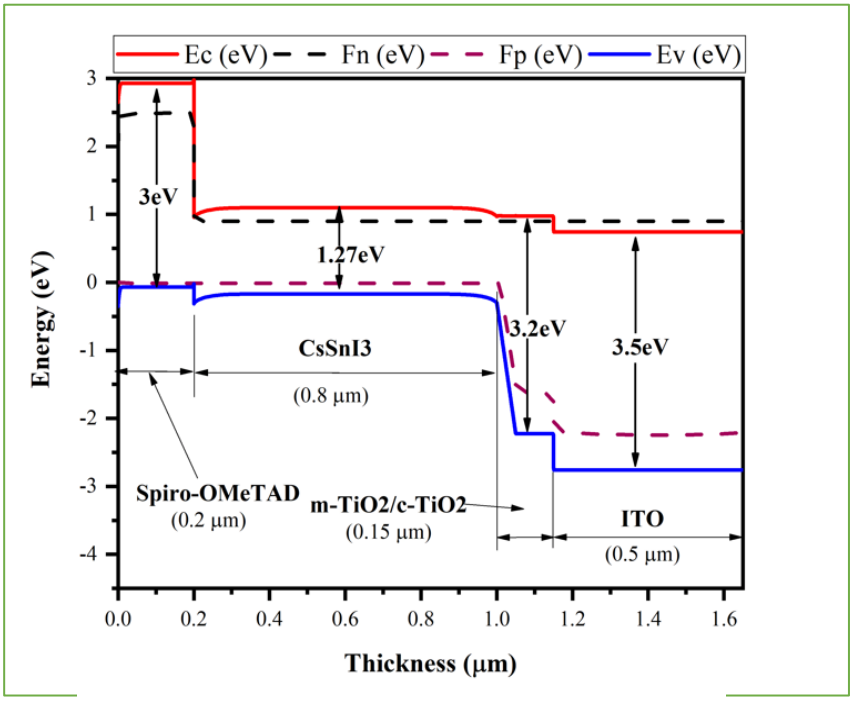
-الشكل (5) الحزم الطاقيّة لحزمتي التكافؤ والناقليّةE_v,E_c.



الشكل (3) المخطط (J-V) للخلية الشمسية الأساسيّة



الشكل (4) المردود الكوانتي QEبدلالة طول الموجة للخلية الشمسيّة الأساسيّة



الشكل (5) الحزم الطاقيّة للخلية الشمسية الأساسية

3-2 تأثير طبقة الاتصال الخلفية Back Contact

تُعد طبقة الاتصال الخلفية من العناصر الأساسية في تصميم الخلايا الشمسية، إذ تؤثر مباشرة على الخصائص الكهروضوئية للخلية وعلى كفاءة الخليّة النهائية. فهي تتحكم في جمع ونقل الشحنات، وتساهم في تقليل المقاومة التسلسلية، كما أن توافقها مع الطبقة الماصة يحدد جودة التلامس وتقليل الحواجز الطاقيّة في منطقة اتصالها مع طبقة نقل الشحنات، ما يجعل اختيارها خطوة حاسمة لتحسين الأداء العام للخلية الشمسية[27].

في هذه الدراسة استعمل الذهب **(Au)** بوصفه طبقة اتصال خلفية نظرًا لخصائصه الممتازة: تابع عمل مرتفع **(5.1 eV~)**، الاستقرار الكيميائي، تلامسه الأومي الفعّال مع طبقات نقل الشحنات [10]. ومع ذلك يشكل ارتفاع تكلفة الذهب عائقاً أمام استعماله على نطاق واسع في التطبيقات التجارية. ومن هنا تبرز الحاجة إلى البحث عن بدائل أقل تكلفة توفر أداءً مقاربًا.

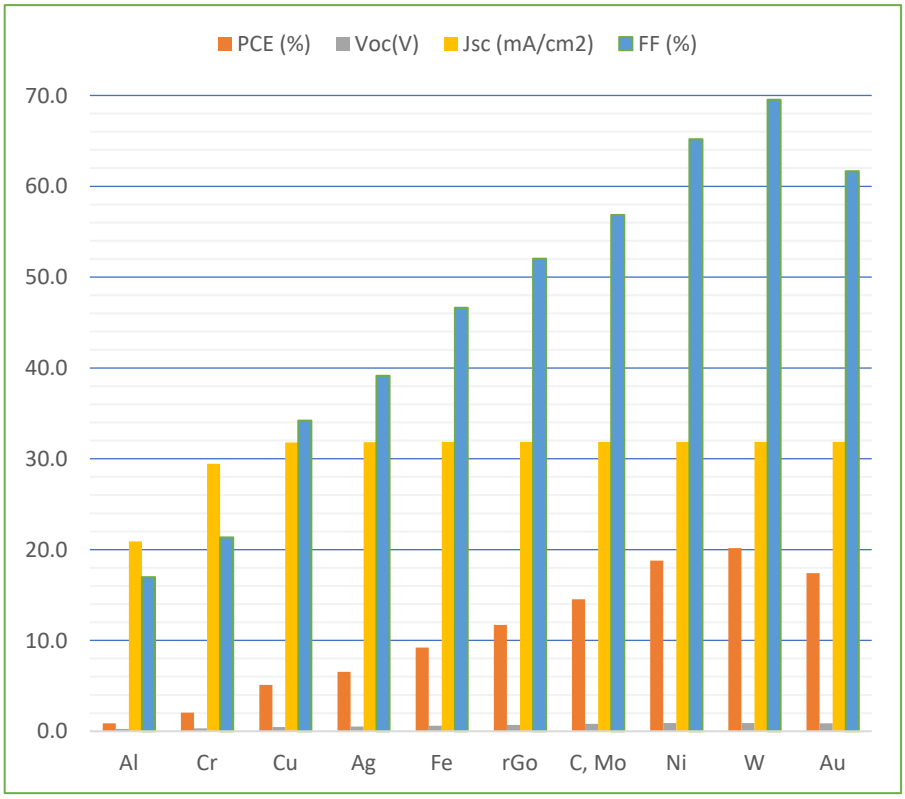
تاريخ إيداع البحث:2025/10/27
تاريخ قبوله للنشر:2026/01/14

قُيمت بدائل اقتصاديّة عدّة للذهب كما هو مبين في الجدول (3) مع التركيز الاعتبار قيم تابع العمل لكل مادة[10], [24], [27], [28]:

الجدول (3): قيم تابع العمل للمواد المدروسة

المادة	W	Ni	C, Mo	rGo	Fe	Ag	Cu	Cr	Al
تابع العمل Φ(eV)	5.22	5.15	5	4.9	4.81	4.71	4.65	4.5	4.41

يظهر المخطط المبين في الشكل (6) القيم الأساسية لأداء الخلية الشمسيّة المعتمدة لطبقات اتصال خلفية مختلفة.



الشكل (6) مخطط بياني يوضح القيم الأساسية لأداء الخلية الشمسية لطبقات اتصال خلفي مختلفة

أظهرت نتائج المحاكاة النظرية المطبقة على الخلية الشمسية المقترحة بمواد عدّة كطبقة اتصال خلفي النتائج الآتية:

الجدول (4): القيم الأساسية لأداء الخلية الشمسيّة لطبقات اتصال خلفي مختلفة

Al	Cr	Cu	Ag	Fe	rGo	C, Mo	Ni	W	Au	المادة
4.41	4.5	4.65	4.71	4.81	4.9	5	5.15	5.22	5.1	Φ (eV)
0.87	2.06	5.09	6.54	9.21	11.71	14.53	18.78	20.16	17.41	PCE%
0.25	0.33	0.47	0.52	0.62	0.71	0.80	0.90	0.91	0.89	V_{OC} V
20.1	29.46	31.81	31.83	31.84	31.85	31.85	31.86	31.86	31.86	J_{SC} mA/cm^2
16.9	21.35	34.21	39.15	46.63	52.03	56.83	65.18	69.53	61.67	FF%

تبين النتائج أنّ استعمال التنغستين **(W)** والنيكل **(Ni)** بوصفه طبقة اتصال خلفي أبدى كفاءة أعلى من استعمال الذهب، في حين أنّ الكربون **(C)** والمولبيديوم **(Mo)** حققا كفاءة تزيد عن **14%** إلّا أنّه مقبول في سياق تقليل التكلفة. أما أوكسيد الغرافين المُرجع **(rGo)** سجل كفاءة أقل **11.7%** ويمكن تحسينه بزيادة انتظام النقل. بينما الألمنيوم **(Al)** أظهر أداءً ضعيفا **0.8%** بسبب ضعف التوافق الكهربائي وارتفاع الحواجز عند الواجهة.

تُفسَّر الفروقات في الأداء بين المواد المستعملة بوصفها طبقة اتصال خلفي من خلال توافق مستويات الطاقة عند واجهة**Spiro–OMeTAD- طبقة الاتصال الخلفي**. في هذا التصميم، تُعد طبقة **Spiro-OMeTAD** هي الطبقة الملامسة لطبقة الاتصال الخلفي، ومن ثمّ فإن استخراج الثقوب يكون عبر انتقالها من **HOMO[4](Spiro-OMeTAD)** إلى طبقة الاتصال الخلفي. كلما كان الفرق بين **HOMO(Spiro-OMeTAD)** ومستوى فيرمي طبقة الاتصال الخلفي أقل، كان الحاجز الطاقي أمام خروج الثقوب أصغر، ما يُحسّن التلامس ويقلل المقاومة وخسائر الطاقة[29] .

حُسِبَ الحاجز الطاقي أمام الثقوب باستخدام العلاقة:

[4] HOMO أعلى مستوى طاقة يحتوي على إلكترونات في المادة، ويُعد المصدر الأساسي للثقوب عند انتقال الشحنات.

تاريخ إيداع البحث:2025/10/27
تاريخ قبوله للنشر:2026/01/14

الحاجز الطاقي الثقوب ≃ |HOMO(Spiro)| -WF

حيث **HOMO(Spiro) ≈ −5.45 eV** وهي نفس قيمة الألفة الإلكترونية **χ** مضافاً إليها قيمة الفجوة **E_g** للطبقة، على سبيل المثال حاجز الثقوب لطبقة الذهب **0.35=5.1-|5.45-| eV**، وتُبيّن النتائج الواردة في الجدول (4) أن كلًا من **W** و **Ni**يملكان أقل الحواجز أمام الثقوب، ما يفسّر تفوّقهما في الكفاءة النهائية مقارنةً بالذهب. أما المواد ذات الحواجز المرتفعة مثل **Al** و**Cr**، فقد أظهرت أداءً ضعيفًا نتيجة صعوبة استخراج الثقوب وارتفاع المقاومة عند الواجهة. وبما أن امتصاص **$CsSnI_3$** يحدد قيمة **Jsc** بشكل أساسي، فإن الفروقات في الكفاءة **(PCE)** تُعزى إلى اختلافات **Voc** و**FF**، المرتبطة مباشرةً بجودة التلامس الخلفي وحاجز استخراج الثقوب. بالمجمل، تشير هذه النتائج إلى أن الذهب ليس الخيار الوحيد لتحقيق أداء عالٍ، بل توجد بدائل فعالة من حيث الكفاءة والجدوى الاقتصادية، مما يفتح المجال أمام تطوير خلايا شمسية أكثر فعاليّة وقابلية للتطبيق العملي، خاصة في البيئات التي تتطلب حلولًا منخفضة التكلفة دون التضحية بالأداء.

الجدول (5): تابع العمل والحاجز الطاقي أمام الثقوب للمواد المستخدمة كاتصال خلفي

المادة	W	Ni	C, Mo	rGo	Fe	Ag	Cu	Cr	Al
Φ (eV)	5.22	5.15	5	4.9	4.81	4.71	4.65	4.5	4.41
الحاجز (eV)	0.23	0.30	0.45	0.55	0.64	0.74	0.8	0.95	1.04

والشكل (7) يعرض المخطط **(J-V)** للخلايا الشمسيّة التي تعتمد طبقات الاتصال الخلفي **(W, Ni, Au, C)** ، التي تُعد من أبرز الخيارات أداءً ضمن هذه الدراسة.

3-3 تحسين الخلية الشمسيّة التي تعتمد الكربون كطبقة اتصال خلفيّة

يعتبر الكربون خياراً واعداً بسبب انخفاض تكلفته وسهولة تصنيعه، مع تحقيقه كفاءة مقبولة مقارنةً بالمواد الأخرى.

يهدف هذا الجزء إلى دراسة تحسين أداء الخليّة الشمسية المعتمدة على الكربون من خلال تحليل عدة عوامل:

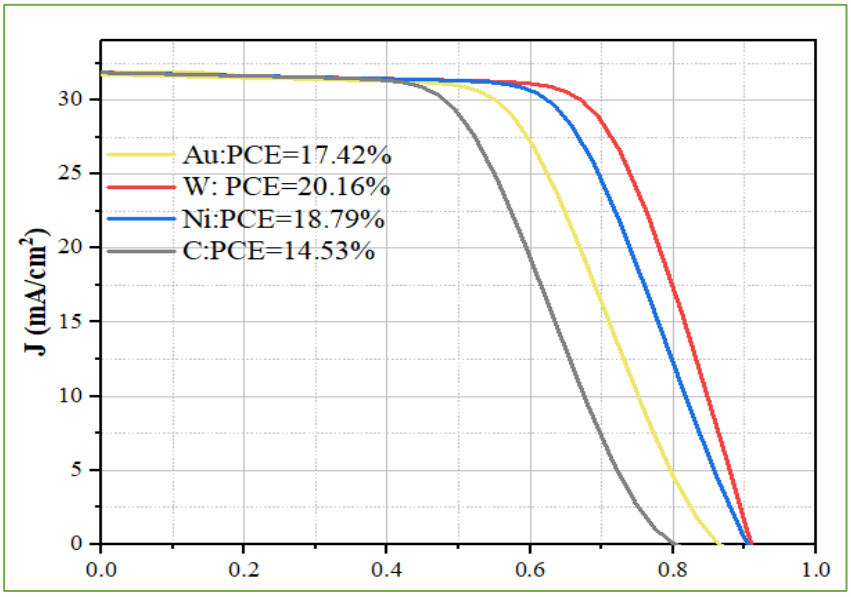
3-3-1 تأثير الطبقة العاكسة الخلفية على أداء الخلية المعتمدة على الكربون

أُضيفت طبقة عاكسة خلفية تعكس الضوء غير الممتص نحو الطبقة الماصّة بنسبة انعكاس تتراوح بين **% (10-90)**.

أظهرت النتائج:

- زيادة تدريجية في قيم V_{OC} وJ_{SC} مع ارتفاع نسبة الانعكاس.

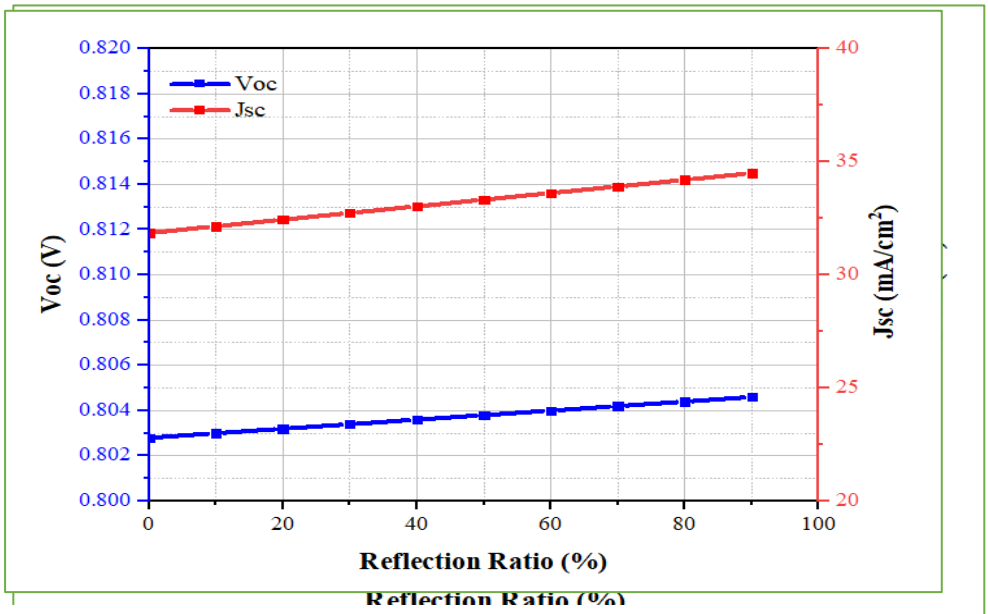
الشكل (7) المخطط (J-V) للخلايا الشمسيّة التي طبقات اتصالها الخلفية Au, W, Ni, C



تاريخ إيداع البحث:2025/10/27
تاريخ قبوله للنشر:2026/01/14

- انخفاض طفيف في قيم **(FF)**، إلّا أنّ الكفاءة الكليّة ارتفعت بشكل واضح، ما يعزز كفاءة الخلية الشمسية منخفضة التكلفة دون تعقيد إضافي في التصنيع.

هذا التحسين في الكفاءة يجعل من الطبقة العاكسة خيارًا فعّالًا لتعزيز أداء الخلايا منخفضة التكلفة، خاصة تلك التي تستعمل الكربون، دون الحاجة إلى تغيير في المواد الأساسية أو زيادة في التعقيد الصناعي، وهذه النتائج مبينة بوضوح في الشكلين (8) و (9).



الشكل (8) تغير قيمة كمون الدارة المفتوحة وكثافة تيار الدارة المقصورة بدلالة نسبة انعكاس الطبقة الخلفية
الشكل (9) تغير قيمة معامل الملء والكفاءة بدلالة نسبة انعكاس الطبقة الخلفية

3-3-2 تأثير سماكة الطبقة الماصة $CsSnI_3$

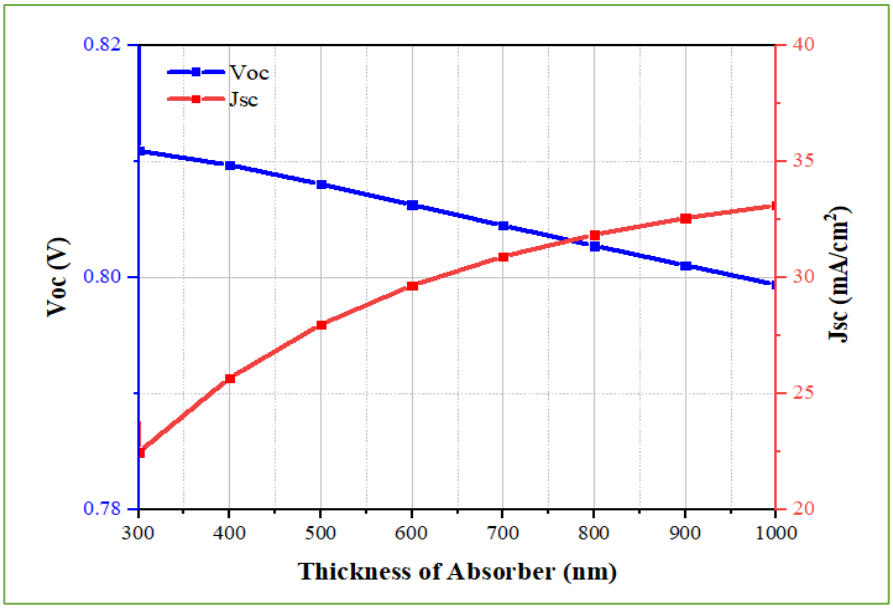
حُللت تأثير السماكة على أداء الخليّة الشمسيّة المعتمدة على الكربون:

- مع زيادة السماكة من **300 nm**إلى **1000 nm** ، ارتفعت **(Jsc)** و **(η)** بشكل تدريجي نتيجة تحسين امتصاص الضوء و توليد شحنات إضافيّة.
- رغم الانخفاض الطفيف في **(Voc)** و **(FF)** كان التأثير الإيجابي على الكفاءة واضحاً الشكل(10) و الشكل (11).

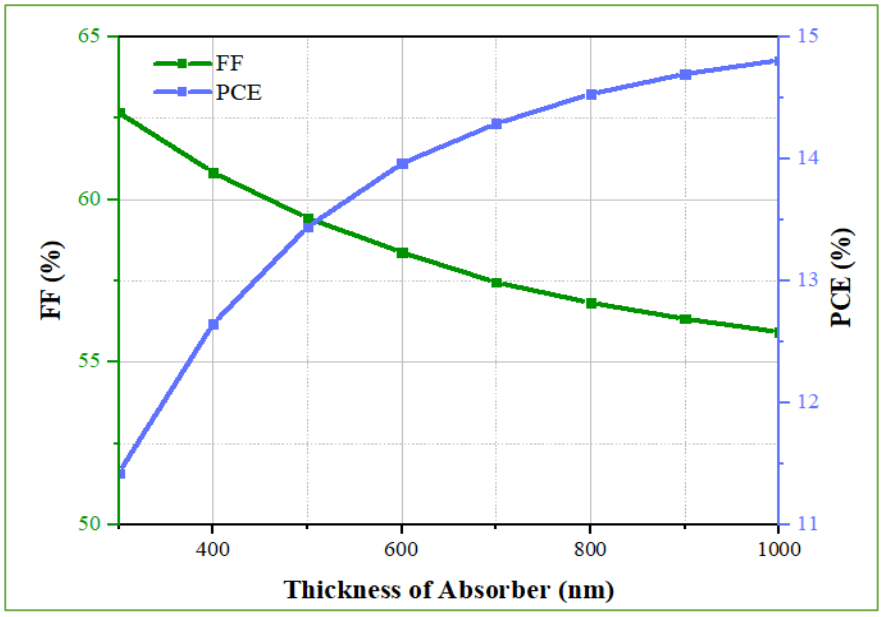
تُعد سماكة الطبقة الماصّة $CsSnI_3$ من العوامل الرئيسة التي تتحكم في أداء الخلية الشمسية. ويظهر تأثيرها بشكل أوضح في البُنى التي تعتمد الكربون طبقة اتصال خلفي،

إذ ترتبط السماكة بكفاءة الامتصاص وانتقال الشحنات. إن ضبط هذه السماكة يساهم في تحسين قيم تيار الدارة المقصورة وجهد الدارة المفتوح ومعامل الملء، ومن ثَمَّ رفع الكفاءة الكهروضوئية الكلية. وقد حُللت العلاقة بين السماكة ومجموعة من المؤشرات الكهربائية الرئيسة ضمن الدراسة. وتوضّح النتائج البيانية في الشكلين 10 و11 أثر اختلاف السماكة على أداء الخلية بصورة تفصيلية.

تاريخ إيداع البحث:2025/10/27
تاريخ قبوله للنشر:2026/01/14



الشكل (10) تغير قيمة كمون الدارة المفتوحة وكثافة تيار الدارة المقصورة بدلالة سماكة الطبقة الماصة $CsSnI_3$



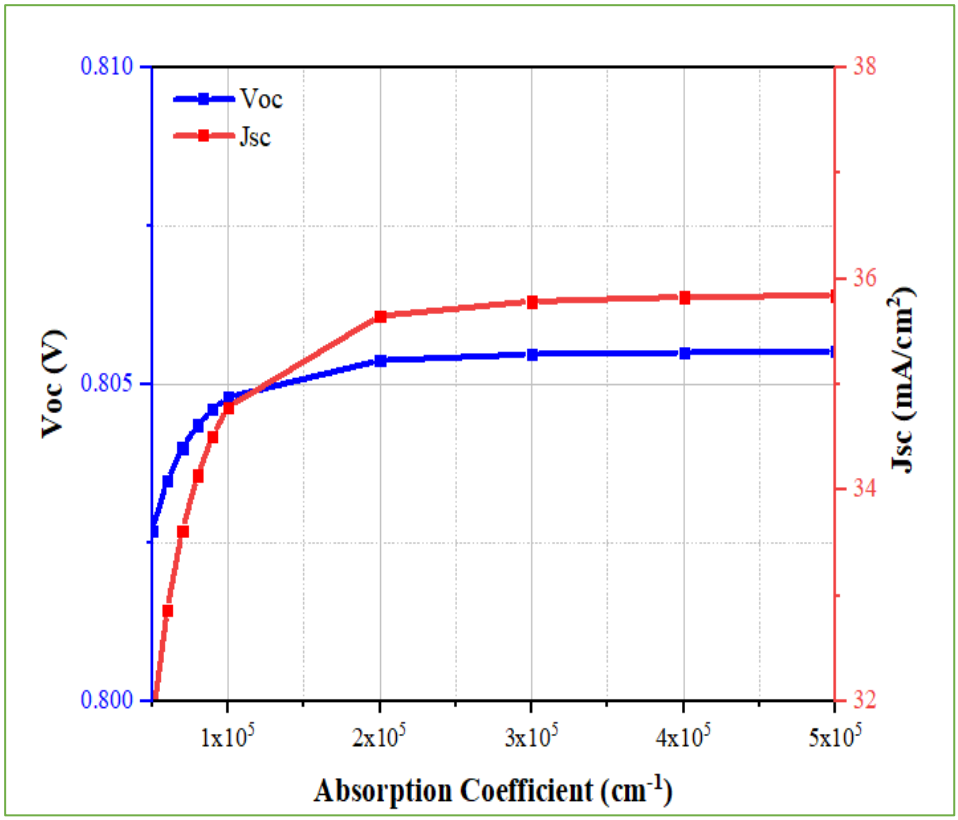
الشكل (11) تغير قيمة الكفاءة ومعامل الملء بدلالة سماكة الطبقة الماصة CsSnI3

3-3-3 تأثير معامل امتصاص الطبقة الماصة $CsSnI_3$ على أداء الخلية المعتمدة على الكربون

تعد معامل الامتصاص من أهم الخصائص الضوئيّة التي تحدد كفاءة وأداء الخلايا الشمسية إذ يعكس قدرة المادة الماصة على امتصاص الفوتونات وتحويلها إلى أزواج إلكترون–ثقب.

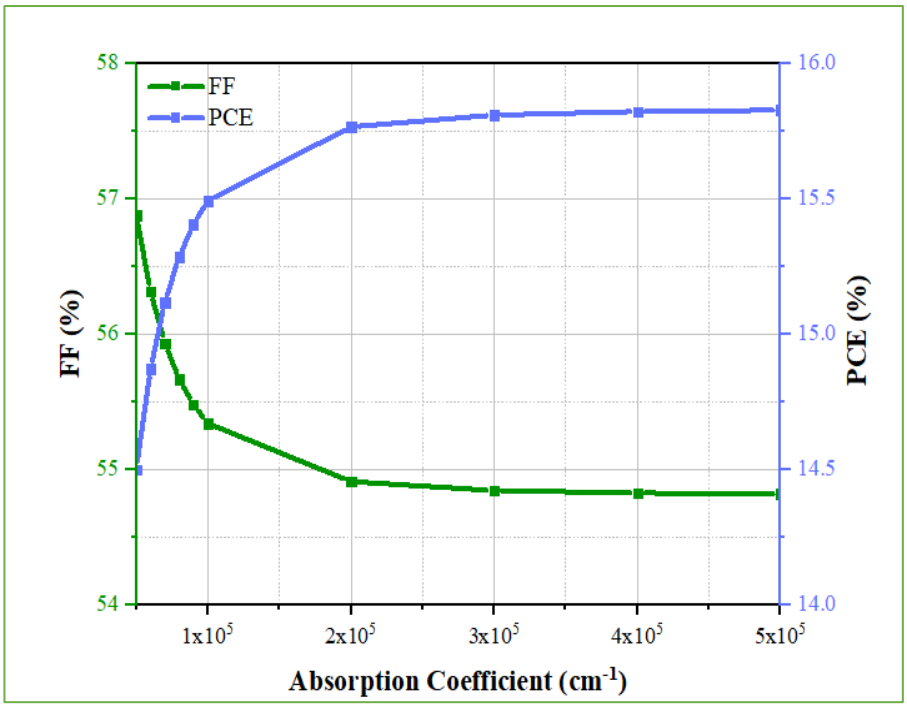
عُدّلت معامل الامتصاص القياسي في برنامج**SCAPS-1D** من($\boldsymbol{0.5 \times 10^5}$ $(\boldsymbol{cm^{-1}})$ إلى ($\boldsymbol{5 \times 10^5}$ $(\boldsymbol{cm^{-1}})$ ، لدراسة تأثيره على أداء الخلية:

إنّ ارتفاع معامل الامتصاص أدى إلى زيادة امتصاص الفوتونات وتوليد أزواج إلكترون–ثقب أكثر ما حسّن **(Jsc** و **PCE)** ، وتظهر النتائج في الشكل (12) والشكل (13).



الشكل (12) تغير قيمة كمون الدارة المفتوحة وكثافة تيار الدارة المقصورة بدلالة معامل امتصاص CsSnI3

تاريخ إيداع البحث:2025/10/27
تاريخ قبوله للنشر:2026/01/14



الشكل (13) تغير قيمة الكفاءة ومعامل الملء بدلالة معامل امتصاص CsSnI3

4- الاستنتاجات

خلصت هذه الدراسة إلى أن أداء خلايا بيروفسكايت الشمسيّة الخالية من الرصاص، المعتمدة على **$CsSnI_3$** يتأثر بشكل أساسي بنوع طبقة الاتصال الخلفي، نظراً لتوافق مستويات الطاقة عند واجهة الطبقات. أظهرت المحاكاة أن الذهب، الذي يُستعمل تقليديًا طبقة خلفية، يحقق كفاءة تحويل طاقيّة **PCE** تقارب **~17.4%** مع كمون دارة مفتوحة **($Voc \approx 0.886$ V)**، ومعـــامل مـلء **($FF \approx 61\%$)** . في المـقابل، سجـل التنغســـــتن **(WF = 5.22 eV)** أعلى كفاءةً **(20.16%)** و**($FF \approx 70\%$), ($Voc \approx 0.91$ V)**، يليه النيكل بكفاءة **(18.78%)** و **($FF \approx 74\%$), ($Voc \approx 0.90$ V)**.كما أظهرت الأقطاب الكربونية أداءً منافسًا بكفاءة **(14.5%)**، ما يجعلها خيارًا اقتصاديًا ومستدامًا رغم انخفاض أدائها مقارنة بالمواد عالية تابع العمل ، لا سيما **W** و**Ni**. تشير هذه النتائج أن اختيار

طبقة الاتصال الخلفي المناسبة لا يقل أهمية عن تصميم الطبقات الأخرى في تحسين **(Voc)**ومعامل الملء، كما يُمثل الكربون بديلًا عمليًا وواعداً للتطبيقات منخفضة التكلفة. وتُبرز الدراسة أهمية دمج الاعتبارات الاقتصادية مع الخصائص الفيزيائية عند اختيار المواد، خاصة في سياق التصنيع التجاري والتوسع الصناعي. كما أن إدراج الخسائر الفيزيائية ضمن نموذج المحاكاة يمنح نتائج أكثر واقعية ويُسهم في تحسين دقة التنبؤات. يُعد هذا النهج خطوة نحو تطوير خلايا بيروفسكايت خالية من الرصاص تجمع بين الأداء العالي والاستدامة الإنتاجية.

5- المراجع

[1] "Best Research-Cell Efficiency Chart | Photovoltaic Research | NREL." Accessed: Oct. 23, 2025. [Online]. Available: https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency

[2] P. K. P, "Design and Analysis of Lead-Free Perovskite Based Solar Cell Devices in Standalone and Tandem Configuration, Ph.D. dissertation, Selinus University of Sciences and Literature, Faculty of Engineering and Technology," 2022. [Online]. Available: www.pveducation.org

[3] C. Q. Xia *et al.*, "Limits to Electrical Mobility in Lead-Halide Perovskite Semiconductors," *Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 12, no. 14, pp. 3607–3617, Apr. 2021, doi: 10.1021/acs.jpclett.1c00619.

[4] S. Zhao, W. Cai, H. Wang, Z. Zang, and J. Chen, "All-Inorganic Lead-Free Perovskite(-Like) Single Crystals: Synthesis, Properties, and Applications," May 01, 2021, *John Wiley and Sons Inc*. doi: 10.1002/smtd.202001308.

[5] W. Li, T. Mi, T. Tian, M. Yang, and H. Pang, "Mitigating Lead Toxicity in Halide Perovskite Solar Cells: Strategies for Sustainable Development," Apr. 01, 2025, *Multidisciplinary Digital Publishing Institute (MDPI)*. doi: 10.3390/inorganics13040123.

[6] T. Ye *et al.*, "Ambient-Air-Stable Lead-Free CsSnI3Solar Cells with Greater than 7.5% Efficiency," *J Am Chem Soc*, vol. 143, no. 11, pp. 4319–4328, Mar. 2021, doi: 10.1021/jacs.0c13069.

[7] M. K. Hossain *et al.*, "Deep Insights into the Coupled Optoelectronic and Photovoltaic Analysis of Lead-Free CsSnI3

تاريخ إيداع البحث:2025/10/27
تاريخ قبوله للنشر:2026/01/14

Perovskite-Based Solar Cell Using DFT Calculations and SCAPS-1D Simulations," *ACS Omega*, vol. 8, no. 25, pp. 22466–22485, Jun. 2023, doi: 10.1021/acsomega.3c00306.

[8] M. T. Islam *et al.*, "Investigation of CsSn0.5Ge0.5I3-on-Si Tandem Solar Device Utilizing SCAPS Simulation," *IEEE Trans Electron Devices*, vol. 68, no. 2, pp. 618–625, Feb. 2021, doi: 10.1109/TED.2020.3045383.

[9] W. Tang, T. Liu, and O. Fenwick, "High thermoelectric performance based on CsSnI3 thin films with improved stability," *J Mater Chem A Mater*, vol. 10, no. 13, pp. 7020–7028, Mar. 2022, doi: 10.1039/d1ta11093d.

[10] F. Behrouznejad, S. Shahbazi, N. Taghavinia, H. P. Wu, and E. Wei-Guang Diau, "A study on utilizing different metals as the back contact of CH3NH3PbI3 perovskite solar cells," *J Mater Chem A Mater*, vol. 4, no. 35, pp. 13488–13498, 2016, doi: 10.1039/c6ta05938d.

[11] N. Sultana, O. Islam, Z. H. Mahmood, and N. Ara Sultana, "Utilization of low cost metals as back contact with Perovskite Solar Cell," 2017. [Online]. Available: https://www.researchgate.net/publication/323735275

[12] A. T. Ngoupo, S. Ouédraogo, F. Zougmoré, and J. M. B. Ndjaka, "Numerical analysis of ultrathin Sb2Se3-based solar cells by SCAPS-1D numerical simulator device," *Chinese Journal of Physics*, vol. 70, pp. 1–13, Apr. 2021, doi: 10.1016/j.cjph.2020.12.010.

[13] E. Danladi *et al.*, "Impact of hole transport material on perovskite solar cells with different metal electrode: A SCAPS-1D simulation insight," *Heliyon*, vol. 9, no. 6, Jun. 2023, doi: 10.1016/j.heliyon.2023.e16838.

[14] M. F. Rahman *et al.*, "Concurrent investigation of antimony chalcogenide (Sb2Se3 and Sb2S3)-based solar cells with a potential WS2 electron transport layer," *Heliyon*, vol. 8, no. 12, Dec. 2022, doi: 10.1016/j.heliyon.2022.e12034.

[15] M. F. Rahman *et al.*, "Design and numerical analysis of CIGS-based solar cell with V2O5as the BSF layer to enhance photovoltaic performance," *AIP Adv*, vol. 13, no. 4, Apr. 2023, doi: 10.1063/5.0138354.

[16] R. A. Jabr, M. Hamad, and Y. M. Mohanna, "Newton-Raphson solution of Poisson's equation in a pn diode."

[17] M. F. Wahid *et al.*, "Performance Enhancement of Lead-Free CsSnI3 Perovskite Solar Cell: Design and Simulation With

Different Electron Transport Layers," *IEEE Access*, vol. 12, pp. 8296–8312, 2024, doi: 10.1109/ACCESS.2024.3352444.

[18] M. K. Hossain *et al.*, "Effect of dye extracting solvents and sensitization time on photovoltaic performance of natural dye sensitized solar cells," *Results Phys*, vol. 7, pp. 1516–1523, 2017, doi: 10.1016/j.rinp.2017.04.011.

[19] L. J. Chen, C. R. Lee, Y. J. Chuang, Z. H. Wu, and C. Chen, "Synthesis and Optical Properties of Lead-Free Cesium Tin Halide Perovskite Quantum Rods with High-Performance Solar Cell Application," *Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 7, no. 24, pp. 5028–5035, Dec. 2016, doi: 10.1021/acs.jpclett.6b02344.

[20] J. H. Noh, N. J. Jeon, Y. C. Choi, M. K. Nazeeruddin, M. Grätzel, and S. Il Seok, "Nanostructured TiO2/CH3NH3PbI3 heterojunction solar cells employing spiro-OMeTAD/Co-complex as hole-transporting material," *J Mater Chem A Mater*, vol. 1, no. 38, pp. 11842–11847, Oct. 2013, doi: 10.1039/c3ta12681a.

[21] "Spiro-OMeTAD (Spiro-MeOTAD) | >99.0% | 207739-72-8 | Ossila." Accessed: Oct. 23, 2025. [Online]. Available: https://www.ossila.com/products/spiro-ometad

[22] R. Tala-Ighil Zaïr, C. Oudjehani, and K. Tighilt, "SCAPS Simulation for Perovskite Solar Cell," *Journal of Solar Energy Research Updates*, vol. 8, pp. 21–26, Oct. 2025, doi: 10.31875/2410-2199.2021.08.3.

[23] O. A. Muhammed, D. Eli, P. H. Boduku, J. Tasiu, M. S. Ahmad, and N. Usman, "Modeling and simulation of lead-free perovskite solar cell using scaps-1D," *East European Journal of Physics*, vol. 2021, no. 2, pp. 146–154, 2021, doi: 10.26565/2312-4334-2021-2-12.

[24] K. Deepthi Jayan and V. Sebastian, "Comprehensive device modelling and performance analysis of MASnI3 based perovskite solar cells with diverse ETM, HTM and back metal contacts," *Solar Energy*, vol. 217, pp. 40–48, Mar. 2021, doi: 10.1016/j.solener.2021.01.058.

[25] S. M. Seyed-Talebi, M. Mahmoudi, and C. H. Lee, "A Comprehensive Study of CsSnI3-Based Perovskite Solar Cells with Different Hole Transporting Layers and Back Contacts," *Micromachines (Basel)*, vol. 14, no. 8, Aug. 2023, doi: 10.3390/mi14081562.

[26] N. Sultana, O. Islam, Z. H. Mahmood, and N. Ara Sultana, "Utilization of low cost metals as back contact with Perovskite

تاريخ إيداع البحث:2025/10/27
تاريخ قبوله للنشر:2026/01/14

Solar Cell," 2017. [Online]. Available: https://www.researchgate.net/publication/323735275

[27] Y. Raoui, H. Ez-Zahraouy, N. Tahiri, O. El Bounagui, S. Ahmad, and S. Kazim, "Performance analysis of MAPbI3 based perovskite solar cells employing diverse charge selective contacts: Simulation study," *Solar Energy*, vol. 193, pp. 948–955, Nov. 2019, doi: 10.1016/j.solener.2019.10.009.

[28] A. K. Kang, M. H. Zandi, and N. E. Gorji, "Simulation analysis of graphene contacted perovskite solar cells using SCAPS-1D," *Opt Quantum Electron*, vol. 51, no. 4, Apr. 2019, doi: 10.1007/s11082-019-1802-3.

[29] S. Wang, T. Sakurai, W. Wen, and Y. Qi, "Energy Level Alignment at Interfaces in Metal Halide Perovskite Solar Cells," Nov. 23, 2018, *Wiley-VCH Verlag*. doi: 10.1002/admi.201800260.