شبیه‌سازی سلول‌های فتوولتاییک پلیمری بر پایه‌ی گرافین به کمک مدل اپتیکی ماتریسی

زهرا حبیبی ینگجه[۱و۲]، یاشار عزیزیان کلاندرق[۳]
[۱] گروه فیزیک، پردیس علوم و تحقیقات اردبیل، دانشگاه آزاد اسلامی، اردبیل، ایران
[۲] گروه فیزیک، واحد اردبیل، دانشگاه آزاد اسلامی، اردبیل، ایران
[۳] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه محقق اردبیلی، ایران

چکیده: برای بررسی فرآیندهای اپتیکی که در سلول‌های فتوولتاییک رخ می‌دهد مدل‌های الکتریکی و اپتیکی زیادی وجود دارد. در این پژوهش، به کمک مدل اپتیکی ماتریسی پدیده جذب اپتیکی در سلول‌های فتوولتاییک بررسی شده و مدل اشاره شده برای ساختار سلول فتوولتاییک پلیمری بر پایه گرافین به کار رفته است. خواص اپتیکی ساختار پیشنهادی بررسی شده و در نهایت کارایی کوانتومی خارجی و چگالی جریان برای این ساختار بدست آمده است. نتایج نشان می‌دهدکه ضخامت یکی از عوامل موثر در کارایی کوانتومی است، در این پژوهش بهینه کارایی کوانتومی برای ساختار بدست آمده است.

کلید واژه - چگالی جریان، سلولهای فتوولتاییک پلیمری، کارایی کوانتومی خارجی و داخلی.

Simulation of graphene based polymer photovoltaic cells using optical matrix model

Zahra Habibi-Yengejeh[1,2], Yashar Azizian-Kalandaragh[3]

[1] Department of Physics, Ardabil science and Research Branch, Islamic Azad University, Ardabil, Iran
[2] Department of Physics, Ardabil Branch, Islamic Azad University, Ardabil, Iran
[3] Department of Physics, Faculty of Science, University of Mohaghegh Ardabili, P.O. Box 179, Ardabil, Iran

Abstract- There are many optical and electrical models for investigation of occured optical processes in photovoltaic cells. In this research, using an optical matrix model optical absorbtion in photovoltaic cells are investigated and this model for polymeric photovoltaic cells on the base of graphene have been utilized. The optical properties of the proposed structure have been investigated and finally the external quantum efficiency and current density have been obtained. The results show that, the thickness is an effective parameter in quantum efficiency, which in this research optimum quantum efficiency have been determind.

Keywords: Current density, Polymer photovoltaic cells, External and internal quantum efficiency.

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت **www.opsi.ir** قابل دسترسی باشد.

فناوری فتوولتاییک روشی مستقیم به منظور تبدیل انرژی خورشیدی به انرژی الکتریکی می‌باشد. طراحی و ساخت سلولهای فتوولتاییک در سالهای اخیر بسیار مورد توجه بوده و تلاشهای زیادی برای بهبود کارایی سلول، بهبود طول عمر و هزینه نهایی ساخت آن صورت گرفته است. سلولهای فتوولتاییک به سه نسل تقسیم می‌شوند. به دلیل برخی معایب نسل اول و دوم از جمله: هزینه بالای ساخت، احتمال زیاد بازترکیب جفت الکترون – حفره و ... نسل سوم سلولهای فتوولتاییک از جمله سلولهای فتوولتاییک پلیمری بوجود آمدند. سلولهای فتوولتاییک بر پایه مواد پلیمری مزایای منحصر به فردی دارند. برخی از مزایای این سلولها عبارتند از : ارزان بودن، انعطاف پذیری، شفافیت ، سبک بودن و ... .

در این پژوهش با استفاده ازمدل اپتیکی(ماتریسی)به بررسی اثر جذب در لایه‌های مختلف سلول فتوولتاییک پلیمری بر پایه گرافین پرداخته شده است. نمودارهای جذب، کارایی جذب، مربع میدان و جذب انرژی برای ساختار فتوولتاییک پیشنهادی رسم شده و در نهایت کارایی جذب و کارایی کوانتومی داخلی و خارجی ساختار بدست آمده است. با تحلیل و بررسی این نمودارها ساختار مناسب برای سلول‌های فتوولتاییک پلیمری با بازدهی و کارایی بالا ارائه شده است. روشی که در این پژوهش به کار برده شده است روشی ماتریسی مبتنی بر اپتیک لایه‌های نازک می‌باشد.

۲ – ملاحظات نظری

سلول فتوولتاییک پلیمری از چند لایه تشکیل شده است که روی زیر لایه شیشه‌ای لایه نشانی می‌شوند. این لایه‌ها عبارتند از : لایه عبور دهنده نور که دارای ویژگی حداقل جذب نور است و به عنوان اتصال آند می‌باشد. لایه فعال که بصورت یک لایه، دو لایه یا ترکیبی می‌باشد و جذب نور و تولید بار در این لایه صورت می‌گیرد. لایه پشتی و ضد بازتاب که دارای قدرت جذب بالا می‌باشد و به عنوان اتصال کاتد استفاده می‌شود.

در این پژوهش، سلول فتوولتاییک پلیمری بر پایه گرافین بررسی شده که لایه‌های آن بصورت زیر می‌باشد:

SiO_2	ITO	Graphene	P_3HT	Al

هدف اول مدلسازی، محاسبه میدان الکتریکی بهینه E در هر نقطه از سلول فتوولتاییک است. E تابعی پیچیده از ضرایب دی الکتریک (n) و ضخامت لایه‌ها (d) می‌باشد. با تغییر ضخامت لایه‌ها میزان جذب نیز تغییر می‌کند.

اگر M'_j ماتریس پخش لایه‌های بالایی لایه jام و M''_j ماتریس پخش لایه‌های پایینی لایه jام و L_j ماتریس لایه jام باشد با استفاده ازاین ماتریس‌ها مربع میدان الکتریکی و Q را که معیاری از انرژی جذب شده توسط ساختار می‌باشد، می‌توان بدست آورد.

ضخامت لایه‌ها را طوری انتخاب می‌کنیم که جذب در لایه فعال بیشینه باشد.

$$E_j(z)=E_0^+\frac{M''_{j,11}e^{i\xi_j(z-d_j)}+M''_{j,21}e^{i\xi_j(d_j-z)}}{M'_{j,11}M''_{j,11}e^{-i\xi_j d_j}+M'_{j,12}M''_{j,21}e^{i\xi_j d_j}} \quad (1)$$

$$Q(z)=\frac{1}{2}c\varepsilon_0\alpha n|E(z)|^2 \quad (2)$$

که $\alpha=\frac{4\pi k}{\lambda}$ ضریب جذب، d ضخامت و n ضریب شکست لایه می‌باشد[1].

در بعضی طول موجها، جذب و یا بازتاب بیشینه است با استفاده از این مدل، نمودار جذب و بازتاب را برای کل دستگاه می‌توان رسم نمود. در این صورت همخوانی خوبی بین Q، جذب و بازتاب در کل دستگاه در طول موج مشخص وجود دارد.

کارایی کوانتومی داخلی یک سلول فتوولتاییک برابر با نسبت تعداد الکترونهای تولید شده به تعداد فوتونهای جذب شده است و از رابطه زیر بدست می‌آید:

$$\eta_{IQE}=\eta_A\eta_{ED}\eta_{CT}\eta_{CC} \quad (3)$$

که η_A کارایی جذب فوتون است، برابر با نسبت تعداد اکسیتون‌های تولید شده از فوتون به تعداد فوتون‌های تابشی می‌باشد و از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$\eta_A=1-e^{-\alpha d} \quad (4)$$

α ضریب جذب و d ضخامت لایه فعال می‌باشد. η_{ED} کارایی پخش اکسیتون، برابر با نسبت تعداد اکسیتون‌های پخش شده به فصل مشترک دهنده- پذیرنده به تعداد اکسیتون‌های تولید شده از فوتون است و از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$\eta_{ED}=e^{-d/L_D} \quad (5)$$

که L_D طول پخش اکسیتون و در محدوده ۲۰–۱۰نانومتر می‌باشد. η_{CT} کارایی جداسازی الکترون – حفره و برابر با نسبت تعداد اکسیتون‌های جدا شده به الکترون- حفره به تعداد اکسیتون‌های پخش شده به فصل مشترک می‌باشد. η_{CT} در مرز برابر یک است یعنی اگر اکسیتون به مرز برسد حتماً جداسازی انجام می‌شود. η_{CC} کارایی تجمع بار در الکترودها و برابر با نسبت تعداد حاملهای بار آزاد در الکترودها به تعداد اکسیتون‌های جدا شده در فصل مشترک می‌باشد. درصورتی که تابع کار کاتد کمتر از LUMO در گیرنده باشد و تابع کار آند بیشتر از HOMO در دهنده باشد $\eta_{CC}\approx 1$ خواهد بود. با جاگذاری η_{IQE} در رابطه زیر کارایی کوانتومی خارجی بدست می‌آید:

$$\eta_{EQE}=(1-R)\times\eta_{IQE}=(1-R)\eta_A\,\eta_{ED}\eta_{CT}\eta_{CC} \quad (6)$$

که برابر با نسبت تعداد الکترونهای تولید شده به تعداد فوتونهای فرود آمده به ساختار می‌باشد. در رابطه بالا R توان بازتاب از فصل مشترک شیشه- هوا است[2]. با رسم نمودارهای کارایی کوانتومی داخلی و

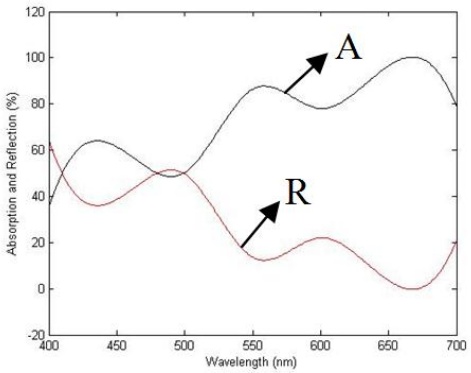
کارایی کوانتومی خارجی بر حسب ضخامت لایه گرافین می‌توان چگالی جریان مدار کوتاه را بدست آورد.

۳- بررسی ساختار پیشنهادی

در این ساختار لایه فعال شامل یک لایه گرافین به عنوان دهنده و یک لایه نازک پلیمرP_3HT به عنوان پذیرنده می‌باشد. نورپس از عبور از شیشه و ITO به لایه دهنده تابیده می‌شود و توسط این لایه جذب می‌شود. پس از جذب نور الکترون از تراز HOMO گرافین به ترازLUMO آن برانگیخته می‌شود(فرآیند تولید اکسیتون). سپس اکسیتون در فاصله طول پخش معینی در این لایه پخش می‌شود تا به فصل مشترک دهنده – پذیرنده برسد. در این هنگام الکترون از ترازLUMO دهنده به ترازLUMO پذیرنده و حفره در جهت مخالف انتقال می‌یابد(فرایند تفکیک اکسیتون). در مرحله بعد الکترون از ترازLUMO پذیرنده به سمت کاتد و حفره از ترازHOMO دهنده به سمت آند می‌رود و جریان برقرار می‌شود[3].

با انتخاب ضخامت لایه‌ها می‌توان نمودار جذب و بازتاب در کل ساختار را در گستره طیف مرئی خورشید برای ضخامتهای زیر رسم کرد:

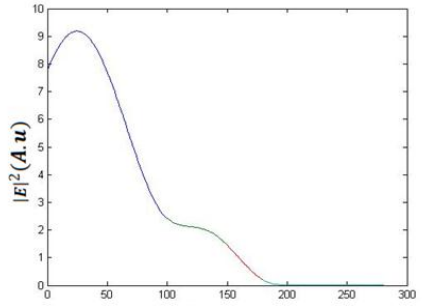
d_{SiO2} =۱ mm / d_{ITO} =۱۰۰nm / $d_{Graphene}$ = ۵۰nm / d_{P3HT} = ۳۰nm / d_{Al} =۱۰۰nm



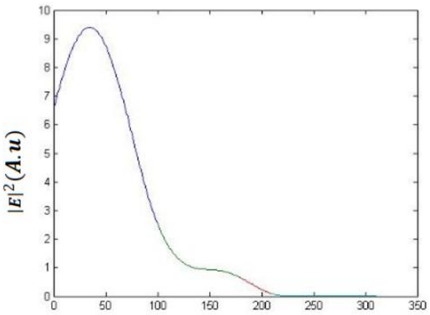
نمودار ۱: بازتاب و جذب برای کل ساختار سلول فتوولتاییک پیشنهادی

با توجه به نمودار ۱ در طول موج ۶۰۰ نانومتر جذب در کل ساختار تقریبا ۸۰٪ می‌باشد و ۲۰٪ نور تابشی بازتاب می‌شود.

نمودار ۲ مربع میدان الکتریکی $|E|^2$در طول موج۶۰۰ نانومتر در سلول برای ضخامت ۵۰nm و ۸۰nm گرافین را نشان می‌دهد. این نمودارها برحسب فاصله از فصل مشترک SiO_2/ITO رسم شده‌اند. ضخامت۱۰۰nm–۰ برای لایه ITO و ضخامت ۱۵۰-۱۰۰برای گرافین و ضخامت۱۸۰-۱۵۰برایP_3HT می‌باشد. $|E|^2$در فصل مشترک لایه‌ها پیوسته است. درضخامت ۵۰nmگرافین قله $|E|^2$ بالاتر است.



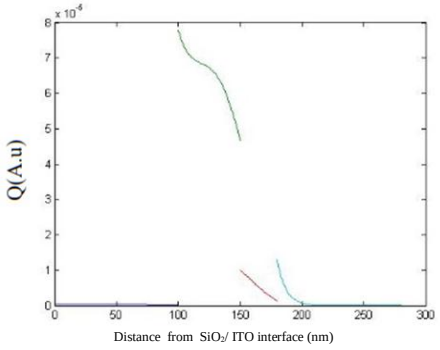
(a)



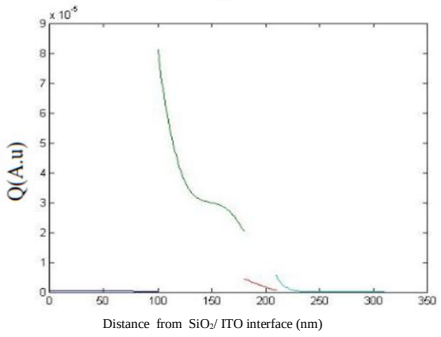
(b)

نمودار ۲: نمودار (a) برای ضخامت ۵۰nm و (b) ضخامت ۸۰nmگرافین

نمودار ۳ جذب انرژی Q برای ضخامت ۵۰nm و ۸۰nm برحسب فاصله از فصل مشترک SiO_2/ITO می‌باشد.



(a)



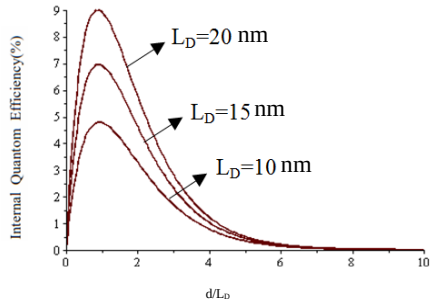
(b)

نمودار۳: نمودار(a) برای ضخامت ۵۰nm (b)برای ضخامت ۸۰nm گرافین

نمودار۳ نشان می‌دهد که جذب در ITO حداقل و در لایه جاذب (گرافین) ماکزیمم است.

در ضخامت۵۰nm گرافین مقدار Q بیشتر است. Q در فصل مشترکها پیوسته نیست چون با انتقال موج الکترومغناطیسی از یک لایه به لایه

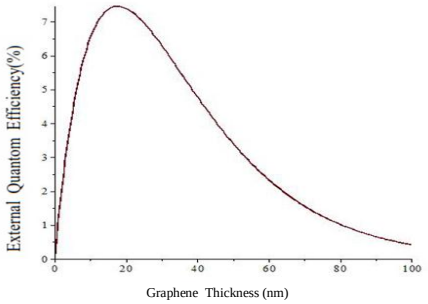
دیگر ساختار ماده عوض می‌شود و تغییر شدید در ضریب جذب (α) و ضریب شکست (n) در سطح مشترک بین لایه‌ها رخ می‌دهد. نمودارهای $|E|^2$ و Q برای ضخامت ۵۰nm نشان می‌دهند که در این ضخامت جذب در لایه گرافین ماکزیمم می‌باشد، پس این ضخامت برای ساختار ما بهینه می‌باشد. با در نظر گرفتن طول پخشهای مختلف اکسیتون نمودار کارایی کوانتومی داخلی برحسب $\frac{d}{L_D}$ (d ضخامت لایه فعال و L_D طول پخش اکسیتون) طبق رابطه (۳) ضخامت۵۰nm گرافین رسم شده است.



نمودار ۴: کارایی کوانتومی داخلی در طول پخشهای مختلف

مشاهده می‌شود که با افزایش طول پخش اکسیتون قله نمودار افزایش می‌یابد. در طول پخش L_D=۲۰nm و $\frac{d}{L_D}$=۰/۸۸۲ کارایی کوانتومی داخلی ماکزیمم است که عملی نیست چون طول پخش همواره بزرگتر از ضخامت لایه است. در$\frac{d}{L_D}$=۲/۵ داریم: η_{IQE}=۵/۲۲۸ ٪. از مقایسه نمودارها با طول پخش‌های مختلف مشاهده می‌شود که بیشترین کارایی در d ~ L_D اتفاق می‌افتد.

کارایی کوانتومی خارجی ساختار طبق رابطه (۶) با جاگذاری η_{IQE}=۵/۲۲۸ ٪ بدست می‌آید. نمودار۵ کارایی کوانتومی خارجی بر حسب ضخامت گرافین را نشان می‌دهد.

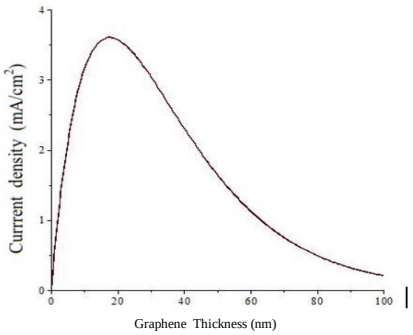


نمودار ۵: کارایی کوانتومی خارجی بر حسب ضخامت گرافین

در ضخامت۲۰nm گرافین کارایی ماکزیمم است. در ضخامت۵۰nm کارایی برابر با η_{EQE}=۳/۴۵٪ است. با جاگذاری η_{EQE} در رابطه زیر چگالی جریان بدست می‌آید:

$$\eta_{EQE} = \frac{hc}{q}.\frac{J_{sc}}{I_\circ \lambda} = ۱/۲۴ \frac{J_{sc}}{I_\circ \lambda} \qquad (۷)$$

با جایگذاریI_0 =1000w/m2 توان نور تابشی، q بار الکترون، h ثابت پلانک، c سرعت نور در خلا، طول موج۶۰۰nm و η_{EQE}=۳/۴۵٪ در رابطه (۷) چگالی جریان مدار کوتاه J_{sc} را برحسب ضخامت گرافین رسم می‌کنیم. نمودار۶ نشان می‌دهد که با افزایش ضخامت لایه گرافین J_{sc} کاهش می‌یابد. در ضخامت ۵۰ نانومتر ۱/۷ mA/cm^2 = J_{sc} می‌باشد.



نمودار ۶: چگالی جریان مدار کوتاه بر حسب ضخامت لایه گرافین

با بررسی نمودارها نتیجه می‌گیریم که ضخامت یکی از عوامل موثر در کارایی کوانتومی است. با تنظیم ضخامت لایه‌ها می‌توان بهینه کارایی کوانتومی برای سلول‌های فتوولتاییک بدست آورد.

۴- مروری بر پژوهش‌های مشابه

مطالعه مروری بر روی پژوهش‌های انجام شده نشان می‌دهد که شبیه‌سازی سلول‌های فتوولتاییک به روش ماتریسی انجام شده است، به طور مثال لیپووشک و همکارانش [4] با استفاده از این روش اثر ضخامت بر میزان جذب سلول فتوولتاییک را بررسی کردند، فلیپیچ و همکارانش [5] با استفاده از شبیه‌سازی ماتریسی اثر تغییر زاویه بر میزان جذب سلول فتوولتاییک را محاسبه کردند. این در حالی است که در پژوهش ارائه شده محاسبات مربوط به کارایی کوانتومی داخلی و خارجی انجام شده و نمودار چگالی جریان مدار کوتاه بر حسب ضخامت لایه گرافین رسم شده است.

۵- نتیجه‌گیری

با استفاده از مدل اپتیکی به بررسی اثر جذب در لایه‌های سلول فتوولتاییک پرداختیم و توانستیم ویژگی‌های اپتیکی و الکتریکی ساختار پیشنهادی را بدست آوریم و با توجه به فرضیاتی که در مورد طول پخش اکسیتون و ضخامت گرافین (لایه دهنده) داشتیم به مقدار ماکزیمم کارآیی دست یابیم. نتایج تحلیل‌ها نشان می‌دهد که پدیده جذب اپتیکی در لایه‌های مختلف که بصورت لایه نازک در نظر گرفته شده‌اند تابع بعضی پارامترها مانند ثوابت اپتیکی لایه‌ها، ضخامت لایه‌ها و طول موج نور فرودی است. [6, 7].

مراجع

[1] L. A. Pettersson, L. S. Roman, O. Inganäs, *Modeling photocurrent action spectra of photovoltaic devices based on organic thin films*, Journal of Applied Physics,Vol. 86, No. 1, 1999.

[2] S. R. Forrest, *The limits to organic photovoltaic cell efficiency*, MRS bulletin, Vol. 30, No. 1, pp. 28-32, 2005.

[3] H.Hoppe, N. S. Sariciftci, *Organic solar cells: An overview*, Journal of Materials Research, Vol. 19, No. 7, pp.1924-1945, 2004.

[4] B. Lipovsek, J. Krc, M. Topic. *Optical model for thin-films photovoltaic devices with large surface textures at the front side*,Informacije MIDEM, Vol. 41, No. 4, pp. 264-271, 2011.

[5] M. Filipič, P. Löper, B. Niesen, S. D. Wolf, J. Krč, C. Ballif, M. Topič. *$CH_3NH_3PbI_3$ perovskite / silicon tandem solar cells:characterization based optical* simulations, Optics Express, Vol. 23, No. 7, pp. 153-160, 2015.

[6] X. Wan, G.Long, L.Huang, Y. Chen, *Graphene–a promising material for organic photovoltaic cells*, Advanced Materials,Vol. 23, No. 45, pp.5342-5358, 2011.

[7] J.Weber, V.Calado, M.Van de Sanden, *Optical constants of graphene measured by spectroscopic ellipsometry*, Applied Physics Letters, Vol. 97, No. 9, 2010.