



بررسی تاثیر طول نفوذ اکسیتون بر روی بازده کوانتومی سلول های خورشیدی آلی دو لایه

پریا ذوالفقاری^۱، هادی صوفی^۲

۱- دانشکده مهندسی برق، واحد علوم و تحقیقات، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران
 ۲- دانشکده مهندسی فناوریهای نوین، دانشگاه تبریز، تبریز، ایران

چکیده - در این مقاله یک مدل عددی جهت بررسی تاثیر طول نفوذ و ضخامت ناحیه فعال بر روی بازده کوانتومی سلول های خورشیدی آلی دو لایه ارائه شده است. یک سلول آلی با ناحیه فعال متشکل از P3HT به عنوان ماده دهنده الکترون (Donor) و C60 به عنوان ماده پذیرنده (Acceptor) و ITO و Al به عنوان الکترودهای فلزی در نظر گرفته شده است. ابتدا تحلیل نوری ساختار با استفاده از روش FDTD برای بدست آوردن توزیع میدان الکتریکی و جذب انجام گرفت و سپس مدل سازی عددی با حل معادلات نرخ جهت بدست آوردن بازده کوانتومی سلول در دو حالت مختلف صورت پذیرفت. نتایج حاصله نشان دهنده این است که علی رغم افزایش بازده جذب با افزایش ضخامت ساختار، بازده کوانتومی به علت محدودیت اعمال شده ناشی از طول نفوذ کم اکسیتونی، کاهش می یابد. در حالی که با افزایش طول نفوذ اکسیتون ها، تعداد اکسیتونهای بیشتری میتوانند در طول حیات خود به مرز ساختار دو لایه برسند و سبب افزایش حاملهای آزاد می شوند.

کلیدواژه- سلول های خورشیدی آلی، طول نفوذ اکسیتون، ماده دهنده و گیرنده، ضخامت ناحیه فعال

The investigation of the impact of the exciton diffusion length on the quantum efficiency of bilayer organic solar cells

Parya Zolfaghari¹, Hadi Soofi²

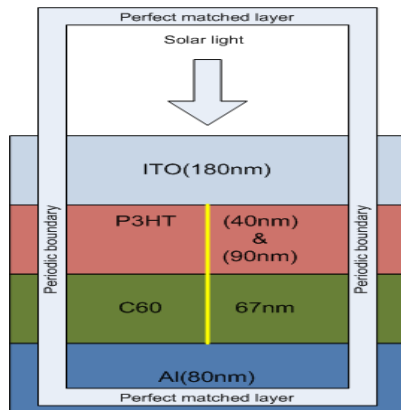
1-Department of Electrical Engineering, science and research branch, Islamic Azad university, Tabriz, Iran
 2-School of Engineering- Emerging technologies, University of Tabriz, Tabriz, Iran

Abstract- In this paper we have presented a numerical model to investigate the impact of the diffusion length of excitons and the layer thickness on the quantum efficiency of the organic bilayer solar cells. An organic solar cell composed of P3HT as the donor material and C60 as the acceptor and Al and ITO as the metallic electrodes is considered. Optical simulation is performed using FDTD method in order to obtain the electric field distribution and the absorption profile, then numerical modeling is performed by solving the exciton rate equation to calculate the quantum efficiency. Results shows that, although absorption efficiency increases with increasing thickness, quantum efficiency is decreased because of the limitation imposed by low diffusion length. Increasing the diffusion length of excitons leads more excitons to reach to the interface in their lifetime and consequently more free carriers are generated.

Keywords: Organic solar cells, Diffusion length of excitons, Donor and acceptor, active Layer Thickness,

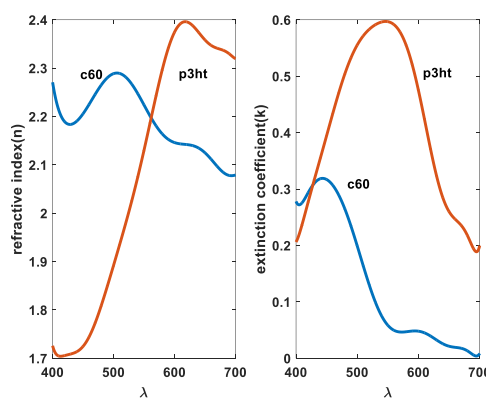
۱- مقدمه

عمودی در امتداد محور z مطابق شکل (خط زرد رنگ) توزیع میدان الکتریکی را در فواصل گسسته تعیین شده بدست میدهد. با توجه به اطلاعات ضریب شکست قابل دسترس بر حسب طول موج برای مواد، شبیه سازی در بازه ۴۰۰nm تا ۷۰۰nm صورت می گیرد. شکل ۱ ضخامت مواد، ناحیه شبیه سازی، مانیتور فرکانس، نور ورودی و شرایط مرزی را نشان میدهد.



شکل ۱. شکل سلول خورشیدی آلی دولایه در نظر گرفته شده همراه با شرایط مرزی قرار داده شده برای مدل سازی

برخلاف نیمه هادی های سیلیکونی که حاملها در باندی پیوسته در حال حرکت هستند، در مواد آلی به دلیل جاذبه ضعیف بین مولکولی باند تشکیل نمی شود و حاملها از طریق جهش بین مکان های استقرار یافته منتقل می شوند. میزان مسافتی را که اکسیتون قبل از بازترکیب شدن طی میکند، طول نفوذ اکسیتون می گویند. از آنجا که طول نفوذ اکسیتون کم است ممکن است قبل از رسیدن به مرز دو ناحیه بازترکیب شده از بین بروند [۱،۲]. در ادامه به بررسی اثر طول نفوذ اکسیتون در بازده کوانتومی می پردازیم. بدین



منظور دو سلول آلی با ضخامت های مختلف در نظر گرفته می شود، نتایج حاصله نشان دهنده کاهش بازده کوانتومی سلول با ضخامت بالاتر نسبت به سلول با ضخامت

کمتر علی رغم شکل ۲. نمودار ضریب شکست حقیقی و موهومی P3HT و C60

افزایش بازده جذب سلول ضخیم تر می باشد.

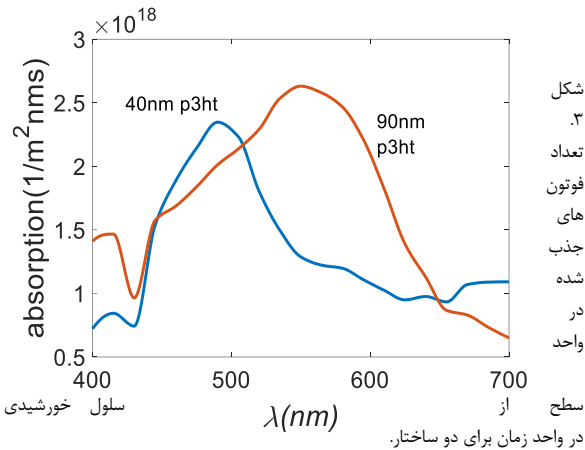
۲- شبیه سازی نوری و مدلسازی عددی

ابتدا شبیه سازی نوری را مطابق شکل ۱ با استفاده از روش FDTD و استفاده از نرم افزار لومریکال برای هر دو ساختار انجام می دهیم. ضخامت P3HT برای ساختار اول ۴۰ نانومتر و برای ساختار دوم ۹۰ نانومتر در نظر می گیریم. ضخامت های ITO، AL، C60 را برای هر دو ساختار یکسان و به ترتیب برابر با ۶۷ nm، ۸۰ nm و ۱۸۰ nm در نظر میگیریم. شرایط مرزی اعمال شده در بالا و پایین perfectly matched layer و شرایط اعمال شده در راست و چپ periodic boundary میباشد. نور ورودی از نوع plane wave با فاصله ۱۰۰ nm از بالای سطح ITO به طور عمودی به سطح می تابد. برای شبیه سازی ثابت های اپتیکی مواد، شامل ضریب شکست حقیقی و موهومی مواد مورد استفاده را از نمودارهای مربوطه استخراج کرده و در قسمت مربوط به خواص مواد وارد می کنیم. یک مانیتور فرکانس در راستای

$$Q = \frac{n_i}{n_0} \alpha I_{\text{solarlight}} \left| \frac{E}{E_0} \right|^2 \quad (1)$$

در این رابطه n_i ضریب شکست ماده مورنظر، n_0 ضریب شکست بستر، α ضریب جذب ماده مورد نظر در فرکانس متناظر که از رابطه $\frac{4\pi k}{\lambda}$ محاسبه میشود، $I_{\text{solarlight}}$ نور ورودی با استاندارد AM1.5 با توزیع توان 100 mWcm^{-2} است. واحد Q ، (انرژی توزیع شده در ساختار) $\text{Wm}^{-2}\text{nm}^{-1}$ است. انرژی بدست آمده برای هر طول موج را بر انرژی ورودی تقسیم کرده و تعداد فوتون های جذب شده را بدست می آوریم. سپس از تعداد فوتون های جذب شده در بازه ۴۰۰ تا ۷۰۰ نانومتر انتگرال میگیریم و تعداد کل فوتون های جذب شده را به دست می آوریم.

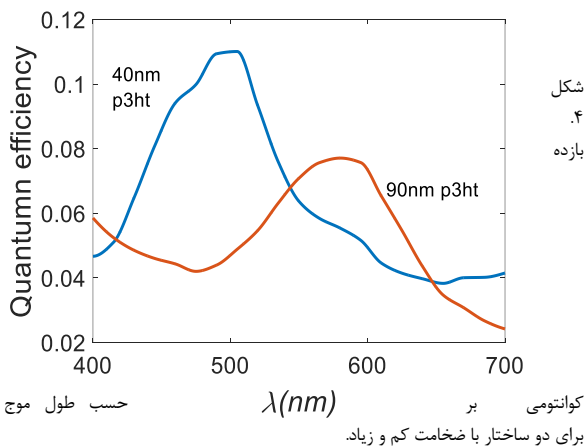
$$G(z) = \sum_{\lambda=400}^{700} \frac{Q \cdot \lambda}{h \cdot c} \quad (2)$$



شکل
۳.
تعداد
فوتون
های
جذب
شده
در
واحد
سطح
از

در واحد زمان برای دو ساختار.

بازده جذب با انتگرال گیری از میزان جذب فوق نسبت به طول موج و تقسیم آن بر کل تعداد فوتون های تابیده به دست می آید که برای ساختار اول ۴۴/۲۳٪ و برای ساختار دوم ۳۴/۷۸٪ به دست می آید که بازده جذب بیشتر ساختار اول به دلیل ضخامت بیشتر آن است. بازده کوانتومی دو ساختار در شکل ۳ رسم شده است.



شکل
۴.
بازده

کوانتومی بر
حسب طول موج
برای دو ساختار با ضخامت کم و زیاد.

بازده کوانتومی کلی نیز با انتگرال گیری از نمودارهای فوق قابل دست یابی است. این مقدار برای ساختار اولی با ضخامت ناحیه فعال کمتر با ۴۰ نانومتر P3HT ۶/۵۳٪ بدست می آید در حالی که بازده ساختار دوم با ضخامت بالاتر با ۹۰ نانومتر P3HT ۵/۳۳٪ بدست می آید. این در حالی است که بازده جذب ساختار ضخیم تر بیشتر محاسبه شده بود. این نشان دهنده این است که علی رغم جذب بالاتر ساختار دوم، به دلیل طول نفوذ کم اکسیژن ها، تعداد اکسیژن های کمتری به مرز دو ناحیه میرسند. برای روشن تر شدن بهتر تاثیر طول نفوذ در بازده و بدست آوردن دیدی روشن نسبت به پروسه ای که بعد از جذب اتفاق می افتد نسبت اکسیژن های جدا شده به فوتون های جذب شده را

این جمله تحت عنوان جمله ورودی وارد معادله پیوستگی

اکسیژن ها میشود. معادله حاکم بر اکسیژن ها به صورت زیر است.

$$\frac{ds}{dt} = G + D_s \frac{d^2s}{dx^2} - K_{diss} \cdot s - \frac{s}{\tau} \quad (3)$$

در این معادله G، نرخ تولید اکسیژن ها بر حسب $(m^3s)^{-1}$ ، D_s ضریب نفوذ اکسیژن ها که به صورت $\frac{L^2}{\tau}$ تعریف میشود، K_{diss} نرخ جدا شدن اکسیژن ها بر حسب s^{-1} و τ طول عمر اکسیژن است. معادله را با روش تفاضل محدود و در حالت ماندگار حل میکنیم ($ds/dt=0$). مقدار عددی برای طول عمر و طول نفوذ اکسیژن ها برای ماده C60 و P3HT [۴،۵] و همچنین نرخ جدا شدن اکسیژن ها [۶] در مرز ناحیه از مرجع بدست آمده و در جدول ۱ لیست شده اند.

جدول ۱: طول عمر و طول نفوذ اکسیژن های تک گانه و ضریب جدا شدن اکسیژن ها در مرز دو ماده

τ_{p3ht}, τ_{c60}	0.505ns, 600ps
L_{p3ht}, L_{c60}	20nm, 37nm
K_{diss}	$10^{13} 1/s$

مقدار K_{diss} را در همه نقاط به غیر نقاط مرزی صفر در نظر میگیریم، چون اکسیژن ها پس از تشکیل به طرف مرز حرکت کرده و در آنجا از هم جدا میشوند. اگر فرض کنیم تمام اکسیژن های رسیده به مرز دو ناحیه از هم جدا شوند، بازده کوانتومی به صورت تعداد اکسیژن های جدا شده به کل فوتون های ورودی به ساختار بیان میشود.

$\eta =$ (فوتون های ورودی/تعداد اکسیژن های جدا شده)

۳- نتایج

تعداد فوتون های جذب شده در واحد سطح از سلول خورشیدی در واحد زمان بر حسب طول موج برای دو سلول خورشیدی با ضخامت های P3HT و C60 به ترتیب برابر ۴۰nm و ۶۷nm برای ساختار اول و ۹۰nm و ۶۷nm برای ساختار دوم در شکل ۲ رسم شده است. همان طور که از این شکل مشخص است، بازده جذب سلول دوم بیشتر از سلول اول می باشد که این موضوع به دلیل ضخامت بیشتر سلول خورشیدی دوم است.

افزایش ضخامت سلولهای آلی خورشیدی باعث افزایش جذب این سلولها میشود ولی از آنجایی که اکسیتونها در مواد آلی طول نفوذ کمتری دارند تعداد اکسیتونها کمتری در طول عمر خود به مرز ناحیه دولایه می رسند و در نتیجه افزایش ضخامت و ماحصل آن افزایش مقدار کمی از جذب الزاما سبب افزایش بازده کوانتومی نمی شود بالعکس افزایش طول نفوذ اکسیتونها سبب میشود که اکسیتونها بیشتری بتوانند در طول حیات خود به مرز دو ناحیه برسند و سبب افزایش حاملهای آزاد شوند.

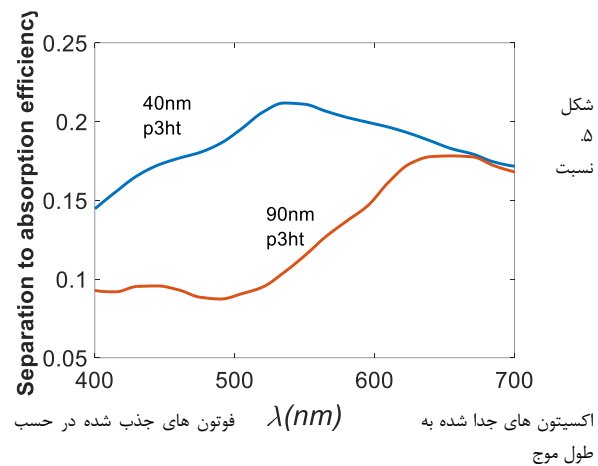
مراجع:

- [1] Serap Günes, Helmut Neugebauer and Niyazi Serdar Sariciftci, "Conjugated Polymer-Based Organic Solar Cells", Chemical Reviews, vol.107, no. 4, pp.1324-1338, 2007
- [2] Bernede, J.C. "organic photovoltaic cells: history, principle and techniques", J. Chil. Chem. Soc., vol.53, n.3, p. 1549-1564, sept.2008
- [3] Florent Monestier, Jean-Jacques Simon, Philippe Torchio, Ludovic Escoubas, Francois Flory, Sandrine Bailly, Remi de Bettignies, Stephane Guillerez, Christophe Defranoux, "Modeling the short-circuit current density of polymer solar cells based on P3HT:PCBM blend", Solar Energy Materials & Solar Cells, vol.91, pp 405-410, 2007
- [4] Yasunari Tamai, Hideo Ohkita, Hiroaki Benten, and Shinzaburo Ito, "Exciton Diffusion in Conjugated Polymers: From Fundamental Understanding to Improvement in Photovoltaic Conversion Efficiency", J. Phys. Chem. Lett., vol.6, pp 3417-3428, 2015
- [5] Kevin J. Bergemann, Xiao Liu, Anurag Panda, and Stephen R. Forrest, "Singlets lead to photogeneration in C60-based organic heterojunctions", Phys. Rev. B, vol.92, 2015
- [6] Feng Gao, Olle Inganäs, "Charge generation in polymer-fullerene bulk heterojunction solar cells", Phys. Chem. Chem. Phys., vol.16, pp. 20291-20304, 2014
- [7] J. S. Moon, J. Jo, and A. J. Heeger, "Nanomorphology of PCDTBT:PC70BM bulk heterojunction solar cells," Adv. Energy Mater., vol. 2, no. 3, pp. 304-308, Mar. 2012

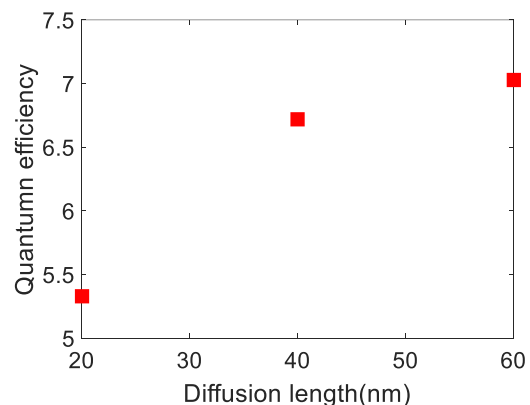
بدست می آوریم. و آن را با η^* نشان می دهیم.

(فوتونهاى جذب شده/تعداد اکسیتون های جدا شده) = η^*

این نسبت برای هر دو ساختار برای طول موجهای مختلف در شکل ۴ نشان داده شده است. همانطور که مشاهده میشود نسبت اکسیتون های جدا شده به کل فوتون های جذب شده برای ساختار با ضخامت کمتر، بیشتر است. در واقع تعداد اکسیتون های بیشتری به مرز ناحیه رسیده اند.



نمودار شکل ۵ بازده کوانتومی را برای طول نفوذهای مختلف برای ساختار با ضخامت بیشتر نشان میدهد. با افزایش طول نفوذ از ۲۰ nm به ۴۰ nm و ۶۰ nm بازده کوانتومی به ترتیب از ۵,۳۳٪ به ۶,۷۲٪ و ۷,۰۳٪ افزایش می یابد. نتایج تجربی نیز نشان میدهد که افزایش ضخامت ناحیه فعال هم باعث کاهش جریان اتصال کوتاه و هم باعث کاهش بازده تبدیل توان ساختار PCDTBT:PCBM می گردد. [۷]



شکل ۶: تاثیر طول نفوذهای مختلف بر روی بازده کوانتومی سلول آلی با ضخامت ۹۰ نانومتر P3HT و ۶۷ نانومتر C60

۴- نتیجه گیری: