



## بهبود بازده سلول خورشیدی پلیمری با نوآرایی الکتروکترود نانو ساختار ایندیم تین اکساید (ITO)

اسماء رضایی<sup>۱</sup>، سید جمال الدین پیغمبر دوست<sup>۱</sup>، حسن اقدسی نیا<sup>۱</sup>، سعید اصغری زاده<sup>۲</sup>

<sup>۱</sup> گروه مهندسی پلیمر، دانشکده مهندسی شیمی و نفت، دانشگاه تبریز

<sup>۲</sup> گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی شیمی و نفت، دانشگاه تبریز

چکیده: در این مقاله تغییرات بازده سلول خورشیدی پلیمری با تغییر ساختار الکتروکترود ایندیم تین اکساید (ITO) بررسی شده است. در این پژوهش الکتروکترود نانو ساختار ITO در سلول خورشیدی پلیمری به چهار نوع فیلم نازک، آرایه‌ای از استوانه‌های صاف، آرایه‌ای از استوانه‌های زبر و آرایه‌ای از مارپیچ‌ها طراحی و شبیه‌سازی شده و سپس میزان جذب توسط لایه فعال پلیمری P3HT:PCBM سلول خورشیدی مورد بررسی قرار گرفت و در نهایت بهترین ساختار الکتروکترود ITO برای این سلول خورشیدی پلیمری توسط روش تفاضل محدود در حوزه زمان (FDTD) تعیین شد. بهترین ساختار سلول خورشیدی پلیمری بدست آمده مربوط به ساختاری است که الکتروکترود ITO به صورت آرایه‌ای از مارپیچ‌ها در کنار هم قرار گرفته‌اند، زیرا در این حالت میزان جذب نسبت به حالتی که ITO به صورت فیلم نازک بود، حدود ۴۳/۲۷ درصد افزایش یافته است.

کلید واژه- سلول خورشیدی پلیمری، روش FDTD، الکتروکترود ایندیم تین اکساید، نانو ساختار

### Efficiency improvement in polymeric solar cells with nano-structured Indium tin oxide electrodes

Asma Rezaei<sup>1</sup>, Seyed Jamaledin Peighambaroust<sup>1</sup>, Hassan Aghdasinia<sup>1</sup>, Saeed Asgharizadeh<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Polymer Engineering Department, Faculty of Chemical and Petroleum Engineering, University of Tabriz, Tabriz, Iran

<sup>2</sup> Photonics and Electronics Department, Research Institute of Applied Physics and Astronomy, University of Tabriz, Tabriz, Iran

Abstract- In this paper, we show that the efficiency of polymeric solar cell with varying indium tin oxide electrode structure (ITO) improved. Nano-ITO electrodes in polymer solar cells into four shapes like thin film, array of smooth Nanorods, array of rough Nanorods and array of spiral design and simulated. Then absorptance by the active layer (P3HT: PCBM) of the solar cell was evaluated and finally the best structure ITO electrode for polymer solar cells was determined. For this purpose, finite difference time domain (FDTD) method was used. The best nano-structure of polymeric solar cell is related to array of helix ITO electrodes because a maximum increase in the number of photon absorbed of 43.27% was achieved with this structure.

Keywords: polymer solar cells, FDTD methods, ITO electrodes, nano-structure

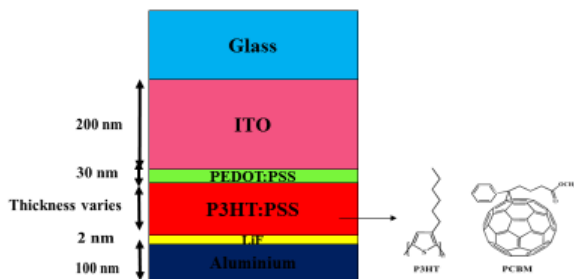
## مقدمه

ساختارها شبیه‌سازی سیستم سلول خورشیدی مورد نظر با روش تفاضل محدود در حوزه زمان (FDTD) و با استفاده از نرم افزار لومریکال انجام شد و در نهایت به تفسیر نتایج حاصل از شبیه‌سازی انجام شده پرداخته شده است.

## مواد و بررسی ساختار

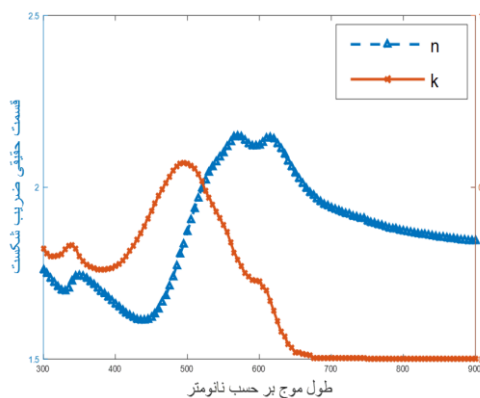
## مواد و ابعاد ساختار سلول خورشیدی پلیمری

شکل ۱ نشان دهنده ساختار سلول خورشیدی مورد مطالعه است. این ساختار استاندارد سلول خورشیدی پلیمری از پلی(۳-هگزیل تیوفن) (P3HT) و فیلی-۶۱-C61-بوتریک اسید متیل استر (PCBM) به عنوان دهنده و پذیرنده در لایه فعال استفاده می‌کند. آلومینیوم AL و ITO به عنوان الکترود و لیتیم فولوراید (LiF) و PEDOT:PSS به عنوان لایه بافر هستند. ضخامت تمامی مواد در شکل مشخص شده است که همگی از منابع استخراج شده‌اند [۲].



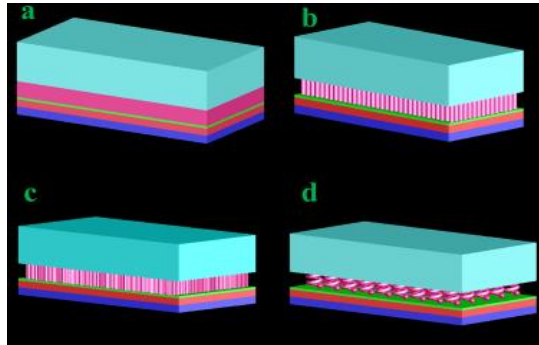
شکل شماره ۱) ساختار عمومی سلول خورشیدی پلیمری

تمرکز اصلی ما در این مقاله به ضخامت و ساختار ITO و جذب نور در لایه فعال است. ضریب شکست لایه فعال که در شکل ۲ نشان داده شده‌اند، از مقاله [۲] استخراج شده است. قسمت موهومی ضریب شکست (K) بر حسب طول موج نشان دهنده میزان جذب نور است. از این نمودار این حقیقت را در می‌یابیم که در طول موج‌های ۴۰۰ تا ۶۰۰ نانومتر، بیشترین میزان جذب نور را شاهد هستیم.

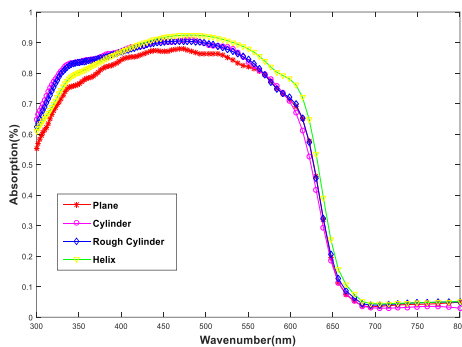


امروزه به دلیل اهمیت انرژی‌های نو ساخت موادی که توانایی تولید توان الکتریکی از منابع طبیعی را دارا باشند، از اهمیت به سزایی برخوردار است. یکی از این منابع نور خورشید است که با استفاده از سلول‌های فوتوولتائیک به انرژی الکتریکی تبدیل می‌شود. لذا در سال‌های اخیر، مواد حساس به نور که در این سلول‌ها به کار رفته، موضوع تحقیقات بسیاری را به خود اختصاص داده است. سلول‌های خورشیدی اولیه بر پایه مواد نیمه‌رسانا شکل گرفتند ولی با گذشت زمان محققان به سمت طراحی سلول‌های خورشیدی نوین متمایل شدند. یافته‌ها نشان داد که مواد پلیمری نیمه‌هادی، توانایی جذب انرژی نورانی خورشید و تبدیل آن به الکتریسیته را دارند و از طرف دیگر مزایایی چون انعطاف‌پذیری، ارزانی و قابلیت ساخت در ابعاد بزرگ را دارا هستند [۱]. با این حال سلول‌های خورشیدی پلیمری دارای معایبی از قبیل کم بودن طول عمر، کوچک بودن پهنای باند، کم بودن طول نفوذ اکسیژن‌ها و انتقال ضعیف‌تر بار نسبت به سلول‌های خورشیدی سیلیکونی تک‌بلوری و چندبلوری هستند. تحقیقات اخیر روی سلول‌های خورشیدی به کاهش قیمت و افزایش بازدهی تاکید دارند [۲-۴]. عموماً بازده سلول‌های خورشیدی پلیمری در حدود ۵ درصد است که این مقدار در سال‌های اخیر به ۱۱ درصد هم رسیده است [۵-۸]. یکی از روش‌های بهبود بازده سلول‌های خورشیدی، بهبود فرآیند ساخت و دستکاری نانو ساختار سلول‌های خورشیدی است. سلول‌های خورشیدی نانو ساختار با افزایش جذب در ماده فعال و بهبود انتقال بار بعد از تشکیل اکسیژن‌ها، باعث افزایش بازده می‌شوند. در تحقیقات اخیر برای بهبود انتقال بار از فوتونیک کریستال‌ها، اثرات پلاسمونیک، نانولوله‌ها، نانوذرات و نانوالیاف استفاده شده است [۹-۱۴]. استفاده از پدیده رزونانس پلاسمون سطحی هم جذب نوری را افزایش می‌دهد [۱۵]. ایندیم تین اکساید (ITO) در اکثر سلول‌های خورشیدی پلیمری استفاده می‌شود و دارای ضریب شکست ما بین ۲٫۳-۱٫۸ در محدوده طول موج مرئی طیف است. در نتیجه هدف ما از طراحی ساختارهای مختلف ITO، افزایش ضریب شکست و به تبع آن افزایش پراکندگی و به دام انداختن نور در ساختار و در نتیجه افزایش جذب نور و فوتون در سلول خورشیدی پلیمری می‌باشد. در پژوهشی که در دانشگاه بریستون توسط آقایان وانگ و کریان انجام شده، با استفاده از شبیه سازی با نرم افزار لومریکال نشان دادند که میتوان با ایجاد حفراتی در ITO و پر کردن حفرات با موادی نظیر هوا و پلی متیل متاکریلات و پلی(۳-اتیلن دی اکساید تیوفن) (PEDOT:PSS)، میزان جذب نور را مورد بررسی قرار داد و نتیجه گرفتند که وقتی که حفره‌های ITO را با هوا پر می‌کنند، بیشترین میزان جذب در لایه فعال را شاهد هستند، به طوریکه میزان جذب فوتون به میزان ۲۴/۸ درصد و میزان جذب به میزان ۲۲/۱ درصد افزایش یافته است [۲]. ما در این پژوهش الکترود ایندیم تین اکساید (ITO) را در ساختارهای مختلف طراحی کردیم و میزان جذب توسط لایه فعال بعد از تغییر ساختار ایندیم تین اکساید را مورد بررسی قرار دادیم تا به بهترین ساختار برای سلول خورشیدی پلیمری خود دست یابیم. ساختارهای گوناگون ITO برای مقایسه شامل ساختار فیلم نازک، آرایه از نانو سازه‌های صاف، آرایه‌ای از نانو سازه‌های زیر و آرایه‌ای از مارپیچ‌ها می‌باشد. با استفاده از این

شکل شماره ۲) نمودار ضریب شکست لایه فعال P3HT: PCBM [۲]



شکل (۳): ساختار سلول خورشیدی پلیمری با ITO مسطح و لایه نازک، (b) استوانه‌های صاف و توپر، (c) استوانه‌های زیر و (d) آرایه‌ای از مارپیچ‌ها.



شکل شماره ۴) نمودار درصد جذب فوتون‌ها در لایه فعال بر حسب طول موج در ساختارهای متفاوت ITO

شکل شماره ۴ نحوه جذب فوتون‌ها در لایه فعال در ساختارهای متفاوت ITO را نشان می‌دهد و بیانگر این موضوع است که بهترین ساختار سلول خورشیدی پلیمری مربوط به ساختاری است که در آن الکترون ITO به صورت آرایه‌ای از مارپیچ‌ها است زیرا در این حالت مساحت زیر سطح نمودار بیشترین است پس بیشترین جذب مربوط به این ساختار است.

## روش شبیه‌سازی

شبیه‌سازی ما به افزایش جذب فوتون در لایه فعال تأکید دارد و از روش FDTD و نرم افزار لومریکال (Lumerical) برای این منظور استفاده شده است. در این شبیه‌سازی فرض شده است که نور با طول موج ۳۰۰-۸۰۰ نانومتر به سطح سلول خورشیدی می‌رسد. سپس منبع نوری با طیف توان خورشید AM 1.5G نرمالایز شده است. همه شبیه‌سازی‌ها در سه بعد و مش‌بندی ۵ نانومتر در جهت x و y و مش‌بندی ۲ نانومتر در جهت z (برای اطمینان از اینکه LiF در شبیه‌سازی منظور شود)، انجام گرفته است. فرض شده است که منبع نوری از دو منبع پلاریزه عمود بر هم تشکیل یافته است. ضخامت ITO نیز ۲۰۰ نانومتر در نظر گرفته شده تا میزان شفافیت حداکثر و مقاومت حداقل را همزمان اعمال کرده باشیم [۲]. برای اندازه‌گیری میزان جذب فوتون در در ناحیه فعال از بردار پوینتینگ S که نشان دهنده چگالی فلاکس انرژی میدان الکترومغناطیسی است، استفاده شده است. در واقع این پارامتر نشان دهنده میزان انرژی انتقال یافته از واحد سطح است. در نتیجه توان جذب P با بردار پوینتینگ با رابطه ۱ با هم ارتباط دارند. با جایگذاری فرمول ۳ در فرمول ۲، میزان توان جذب محاسبه می‌شود. در روابط زیر، n و k قسمت موهومی ضریب شکست، ε میزان گذردهی و E نشان‌دهنده میدان الکتریکی و H\* نشان دهنده میدان مغناطیسی است. [۲]

$$P = -\nabla \cdot S \quad (1)$$

$$S = \frac{1}{2} \text{Re}(E \times H^*) \quad (2)$$

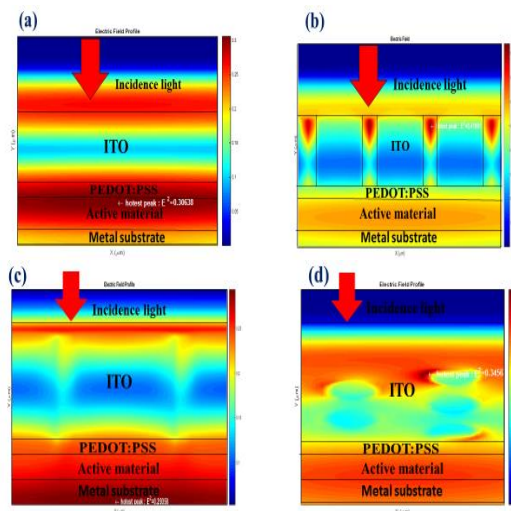
$$P = -\frac{1}{2} \cdot \omega \cdot E^2 \cdot \text{Im} \text{ag}(\epsilon)$$

$$\text{Re} \text{al}(\epsilon) = n^2 - k^2 \quad (3)$$

$$\text{Im} \text{ag}(\epsilon) = 2 \cdot n \cdot k$$

## نتیجه شبیه‌سازی و بحث

مهمترین قسمت هر سلول خورشیدی، لایه فعال آن است. لایه فعال ضخیم‌تر نور بیشتری را جذب می‌کند، ولی از آنجاییکه طول نفوذ اکسیژتون در لایه دهنده کمتر از ۱۰-۱۵ نانومتر است؛ در سلول خورشیدی که لایه فعال ضخیم است، باز ترکیب مجدد اکسیژتون‌ها بالاست [۵]. در نتیجه اکسیژتون‌ها به مرز جدایش نمی‌رسند و بازده سلول خورشیدی پایین می‌آید. پس ضخامت لایه فعال نباید از ۱۰۰ نانومتر بیشتر باشد [۱۳]. مقدار بهینه ضخامت لایه فعال با بهینه‌سازی توسط روش FDTD برابر ۹۰ نانومتر شد. در ادامه شبیه‌سازی، ساختار سلول خورشیدی مطابق شکل ۳، به چهار صورت متفاوت درآورده شد تا تفاوت میزان جذب در آنها مورد بررسی قرار گیرد. در نهایت بعد از شبیه‌سازی ساختارهای مختلف، پروفایل میدان الکتریکی ساختارها به صورت شکل ۵ نشان داده شده است.



silane-gas-free process using aluminum-induced-crystallization," *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 83, no. 1, pp. 91–99, 2004.

- [2] C. D. Wang and M. J. Cryan, "Efficiency improvement in organic solar cells with nano-structured ITO electrodes," *J. Opt.*, vol. 17, no. 6, p. 65901, 2015.
- [3] S. H. Park, "Bulk heterojunction solar cells with internal quantum efficiency approaching 100%," *Nat. Photonics*, vol. 3, no. 5, pp. 297–303, 2009.
- [4] S. M. Menke and R. J. Holmes, "Exciton diffusion in organic photovoltaic cells," *Energy Environ. Sci.*, vol. 7, no. 2, pp. 499–512, 2014.
- [5] M. T. Dang, L. Hirsch, and G. Wantz, "P3HT:PCBM, best seller in polymer photovoltaic research," *Adv. Mater.*, vol. 23, no. 31, pp. 3597–3602, 2011.
- [6] B. Kippelen, J.-L. Brédas, and J.-L. Br Edas, "Organic photovoltaics," *Energy Environ. Sci.*, vol. 2, no. 3, p. 251, 2009.
- [7] C. C. Chen, "An efficient triple-junction polymer solar cell having a power conversion efficiency exceeding 11%," *Adv. Mater.*, vol. 26, no. 32, pp. 5670–5677, 2014.
- [8] A. Raman, Z. Yu, and S. Fan, "Dielectric nanostructures for broadband light trapping in organic solar cells," *CLEO 2011 - Laser Sci. to Photonic Appl.*, vol. 19, no. 20, pp. 1–2, 2011.
- [9] D. Ko, "Photonic Crystal Geometry for Organic Solar Cells 2009," 2009.
- [10] B. Zeng, Q. Gan, Z. H. Kafafi, and F. J. Bartoli, "Polymeric photovoltaics with various metallic plasmonic nanostructures," *J. Appl. Phys.*, vol. 113, no. 6, 2013.
- [11] N. M. Bedford, "Nanofiber-based bulk-heterojunction organic solar cells using coaxial electrospinning," *Adv. Energy Mater.*, vol. 2, no. 9, pp. 1136–1144, 2012.
- [12] P. Ruankham, L. MacAraig, T. Sagawa, H. Nakazumi, and S. Yoshikawa, "Surface modification of ZnO nanorods with small organic molecular dyes for polymer-inorganic hybrid solar cells," *J. Phys. Chem. C*, vol. 115, no. 48, pp. 23809–23816, 2011.
- [13] P. Ruankham, S. Yoshikawa, and T. Sagawa, "Effects of the morphology of nanostructured ZnO and interface modification on the device configuration and charge transport of ZnO/polymer hybrid solar cells," *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 15, no. 24, pp. 9516–22, 2013.
- [14] W. L. Barnes, A. Dereux, and T. W. Ebbesen, "Surface plasmon subwavelength optics," *Nature*, vol. 424, no. 6950, pp. 824–30, 2003.
- [15] C. Poh, L. Rosa, S. Juodkazis, and P. Dastoor, "FDTD modeling to enhance the performance of an organic solar cell embedded with gold nanoparticles," vol. 1, no. 7, pp. 1326–1331, 2011.
- [16] S. Van Bavel, E. Sourty, G. De With, K. Frolic, and J. Loos, "Relation between photoactive layer thickness, 3D morphology, and device performance in P3HT/PCBM bulk-heterojunction solar cells," *Macromolecules*, vol. 42, no. 19, pp. 7396–7403, 2009.

شکل (۵): پروفایل میدان الکتریکی سلول خورشیدی پلیمری با (a) ساختار مسطح و لایه نازک ITO, (b) ITO به صورت آرایه‌ای از استوانه‌های صاف, (c) ITO به صورت آرایه‌ای از استوانه‌های زبر و (d) ITO به صورت آرایه‌ای از مارپیچ‌ها.

در جدول (۱) میزان درصد جذب فوتون در لایه فعال و ماکزیمم میدان الکتریکی در سلول خورشیدی پلیمری و در طول موج ۶۶۵ نانومتر محاسبه شده است. بر طبق محاسبات، بهترین ساختار، مربوط به سلول خورشیدی پلیمری با ساختار الکتروود ITO به صورت آرایه‌ای از مارپیچ‌هاست زیرا بیشترین میزان جذب در لایه فعال که برابر ۱۰/۵۶ درصد است، مربوط به این ساختار است و بدترین ساختار مربوط به سلول خورشیدی پلیمری با ساختار الکتروود ساده ITO است، زیرا کمترین میزان جذب در لایه فعال را دارد.

جدول (۱): محاسبه درصد جذب فوتون در لایه فعال  $P_{an}(\%)$  و ماکزیمم میدان الکتریکی  $E_{max}$  در سلول خورشیدی پلیمری و در ساختارهای متفاوت ITO و در طول موج ۶۶۵ نانومتر

ITO مارپیچی	ITO استوانه‌ای	ITO استوانه‌ای صاف	ITO ساده	پارامتر
۱۰/۵۶	۸/۶۰	۷/۵۹	۷/۳۷	$P_{an}(\%)$
۰/۳۴۶	۰/۲۹۴	۰/۴۱۹	۰/۳۰۶	$E_{max}$

## نتیجه‌گیری

بازده سلول خورشیدی پلیمری با تغییر ساختار الکتروود ایندیم تین اکساید (ITO) بهبود میابد زیرا که میزان جذب فوتون در لایه فعال بهبود داده شد. در این مقاله، الکتروود نانوساختار ITO در سلول خورشیدی پلیمری به چهار صورت فیلم نازک، آرایه‌ای از استوانه‌های صاف، آرایه‌ای از استوانه‌های زبر و آرایه‌ای از مارپیچ‌ها توسط نرم افزار لومریکال و روش FDTD طراحی و شبیه‌سازی شد و سپس میزان جذب توسط لایه فعال P3HT:PCBM سلول خورشیدی مورد بررسی قرار گرفت و در نهایت بهترین ساختار الکتروود ITO برای این سلول خورشیدی پلیمری تعیین شد. برای این منظور از روش تفاضل محدود در حوزه زمان (FDTD) استفاده شد. در نهایت این مشخص شد که بهترین ساختار سلول خورشیدی پلیمری مربوط به ساختاری است که الکتروود ITO به صورت آرایه‌ای مارپیچ‌ها در کنار هم قرار گرفته است، زیرا در این حالت میزان جذب فوتون نسبت به حالتی که ITO به صورت فیلم نازک بود، ۴۳/۲۷ درصد افزایش یافته است. دلیل این افزایش این است که در این حالت ضریب شکست ITO و به تبع آن پراکندگی و به دام انداختن نور در ساختار افزایش یافته و همین امر باعث افزایش جذب نور و فوتون در سلول خورشیدی پلیمری شده است. کمترین میزان جذب نیز مربوط به زمانی است که الکتروود ITO به صورت آرایه‌ای از استوانه‌های صاف در کنار هم قرار گرفته است، زیرا در این حالت، میزان افزایش جذب فوتون در لایه فعال نسبت به زمانی که ITO به صورت فیلم نازک بود، فقط ۳/۰۲ درصد بوده است.

## مراجع

- [1] T. Ito, H. Fukushima, and M. Yamaguchi, "Efficiency potential of thin film polycrystalline silicon solar cells by