

## اثر نقاط کوانتومی PbS بر خواص اپتیکی و الکتریکی سلول خورشیدی آلی PCBM:P3HT

حسین وحید دستجردی، علی حیدری فرد، حمیدرضا فلاح و مرتضی حاجی محمودزاده

دانشگاه اصفهان، گروه فیزیک

چکیده - امروزه ساخت سلول‌های خورشیدی با استفاده از مواد آلی به دلیل خواص این مواد رو به افزایش است. به همین دلیل پژوهش‌هایی در راستای افزایش بازدهی این نوع از سلول‌ها در حال انجام است. یکی از روش‌های افزایش بازده این نوع از سلول‌ها استفاده از نقاط کوانتومی است. در این پژوهش، ابتدا سلول خورشیدی آلی با ماده‌ی فعال *PCBM:P3HT* شبیه‌سازی شد. این ماده به دلیل گاف انرژی مناسبی که برای کاربرد در دستگاه‌های فتوولتاییک دارد یکی از پرکاربردترین مواد در سلول‌های خورشیدی آلی لایه‌ی نازک می‌باشد. سپس اثر استفاده از نقاط کوانتومی *PbS* بر مشخصه‌های اپتیکی و الکتریکی این سلول با ارائه‌ی بهترین ساختار از میان ساختارهای مورد مطالعه قرار گرفته، بررسی شد. با استفاده از این نقاط کوانتومی می‌توان چگالی جریان سلول مورد نظر را بهبود بخشید و بازدهی آن را بیش از ۳۵ درصد بهبود بخشید.

کلید واژه- سلول خورشیدی آلی، نقاط کوانتومی.

## Effect of PbS Quantum Dots on Optical and Electrical Properties of Organic Solar Cells PCBM: P3HT

Hossein Vahid Dastjerdi, Ali Heidarifard, Hamidreza Fallah, Morteza Hajimahmoudzadeh

Department of Physics, University of Isfahan

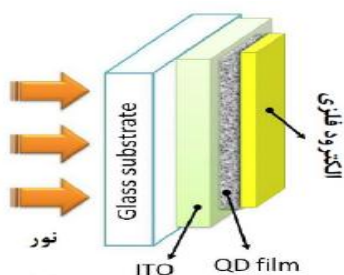
Abstract- production of organic solar cells is increasing due to the properties of organic materials. For this reason, studies are under way to increase the efficiency of this type of cells. One of the methods for increasing the efficiency of this type of cells is the use of quantum dots. In this study, the PCBM: P3HT organic solar cell was simulated and then the effect of using PbS quantum dots on cell characteristics was investigated. We show that the use of quantum dots increase efficiency and improve optical and electrical properties of solar cells.

Keywords: Organic Solar Cells, Quantum Dots.

## ۱- مقدمه

رسوب در حمام شیمیایی ساده می‌باشد [۵]. می‌توان محلول کلئیدی این مواد را به راحتی به روش لایه‌نشانی چرخشی بر روی سطح مورد نظر به صورت لایه‌ای مجزا نشانند.

در سلول‌های خورشیدی شاتکی که ساختار آن‌ها در شکل ۱ نشان داده شده است، گروه ادوارد هارگارد<sup>۵</sup> نشان دادند نقاط کوانتومی می‌توانند با تولید الکترون و حفره به عنوان ماده‌ی فعال باشند و به تنهایی ساختار یک سلول خورشیدی کامل را تشکیل دهند ولی بازدهی پایین در حدود ۱ درصد برای این سلول‌ها گزارش شده است [۶].



شکل ۱: ساختار سلول خورشیدی شاتکی

## ۲- بررسی و شبیه‌سازی

ساختار سلول‌های شبیه‌سازی شده به صورت شکل ۲ می‌باشد. و همان‌گونه که مشاهده می‌شود در یکی از ساختارها از نقاط کوانتومی PbS استفاده شده است. اندازه‌ی در نظر گرفته شده برای این نقاط بین ۱/۲ تا ۳/۵ نانومتر می‌باشد و در کنار یکدیگر بدون پیروی از الگوی خاصی به صورت تصادفی قرار گرفته‌اند. PEDOT: PSS یک ماده‌ی پلیمری می‌باشد که وقتی به عنوان لایه‌ی میانگیر بین لایه‌ی فعال و آند ITO قرار داده می‌شود کارایی و پایداری سلول را افزایش می‌دهد. مهم‌ترین ویژگی فیزیکی آن جهت استفاده در سلول‌های فتوولتائیک، تابع کار بالا و هموارسازی سطح ITO می‌باشد. در این شبیه‌سازی ضخامت این لایه ۵۰ نانومتر فرض شده است.

جهت شبیه‌سازی از نرم افزار لومریکال<sup>۶</sup> استفاده شده است که یکی از قدرتمندترین نرم‌افزارهای موجود برای تحلیل‌های اپتیکی و الکتریکی می‌باشد. روش شبیه‌سازی

سلول‌های فتوولتائیک آلی (OPV<sup>۱</sup>) تکنولوژی بسیار امیدوارکننده و کم‌هزینه‌ای برای تولید انرژی می‌باشند. ویژگی‌های اصلی این نوع سلول‌ها توانایی ساخت در ابعاد بزرگ، روش‌های ساخت ساده و ارزان و همچنین انعطاف‌پذیری بسیار بالای آن‌ها است. عیب اصلی این نوع سلول‌ها در حال حاضر بازدهی کم‌تر آن‌ها در مقایسه با سلول‌های سیلیکونی است؛ به همین علت، تحقیقات گسترده‌ای در زمینه‌ی بالابردن بازدهی سلول‌های آلی در حال انجام است [۱]. یکی از مهم‌ترین پارامترهای تاثیرگذار بر عملکرد این نوع سلول‌ها، ساختار و خواص لایه‌ی فعال سلول می‌باشد. که در این میان، سلول‌های ساخته‌شده از ترکیب ۱:۱ دو ماده‌ی آلی PCBM<sup>۲</sup> و P3HT<sup>۳</sup> یکی از بهترین و پر بازده‌ترین انواع سلول‌های آلی می‌باشد [۲].

یکی از روش‌هایی که جهت افزایش جذب و بهبود بازدهی سلول‌های خورشیدی وجود دارد استفاده از نقاط کوانتومی در آن‌ها می‌باشد. نقاط کوانتومی به دلیل تولید الکترون-حفره چندگانه در اثر جذب تک فوتون و تنظیم ناحیه‌ی جذبشان با تغییر اندازه آن‌ها، مورد استفاده‌ی گسترده قرار گرفته‌اند [۳]. در این میان نقاط کوانتومی PbS<sup>۴</sup> به دلیل جذب بالا در ناحیه‌ی طیفی مرئی و فروسرخ یکی از پرکاربردترین انواع نقاط کوانتومی در سلول‌های خورشیدی می‌باشد [۴].

هدف این پژوهش آن است که با استفاده از شبیه‌سازی، اثر استفاده از نقاط کوانتومی PbS در بر مشخصه‌های الکتریکی و اپتیکی سلول خورشیدی آلی با ماده‌ی فعال PCBM:P3HT مورد بررسی قرار گیرد. این ماده‌ی پلیمری یک ساختار پیوند ناهمگون حجمی به وجود می‌آورد و پارامترهای مختلفی از جمله ضخامت لایه و درصد وزنی ماده‌ی دهنده و پذیرنده در ترکیب با یکدیگر، تاثیر بسیار زیادی بر بازدهی سلول می‌گذارد. دلیل دیگر استفاده از نقاط کوانتومی PbS نیز این است که سنتز این مواد به روش‌های شیمیایی مانند رشد کلئیدی و یا

<sup>1</sup> Organic photovoltaic

<sup>2</sup> [6,6]-phenyl-C61-butyric acid methyl ester

<sup>3</sup> poly(3-hexylthiophene)

<sup>4</sup> Lead sulfide

<sup>5</sup> Edward H. Sargent

<sup>6</sup> lumerical

$$J_{SC} = \frac{q}{S} \int GR dV \quad (4)$$

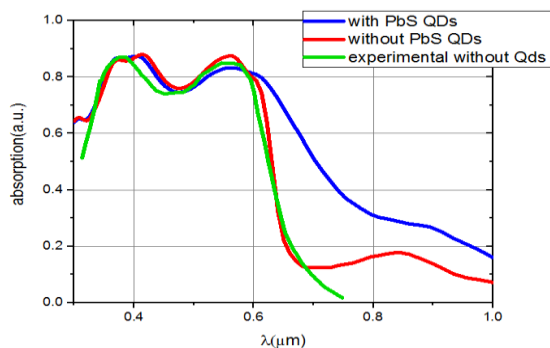
که در این رابطه  $q$  بار الکترون و  $S$  مساحت ناحیه‌ی فعال می‌باشد و انتگرال‌گیری روی حجم ناحیه‌ی فعال انجام می‌شود. بازده سلول نیز از رابطه‌ی (۵) محاسبه می‌شود [۸].

$$\eta = \frac{J_{SC} V_{OC} FF}{P_{solar}} \quad (5)$$

در این رابطه  $V_{OC}$  ولتاژ مدار-باز،  $FF$  ضریب پرشدگی و  $P_{solar}$  شدت تابش نور فرودی خورشید می‌باشد که میزان آن برابر  $100 \text{ mW/cm}^2$  برای استاندارد AM ۱/۵ در نظر گرفته شده است.

### ۳- نتایج و بحث

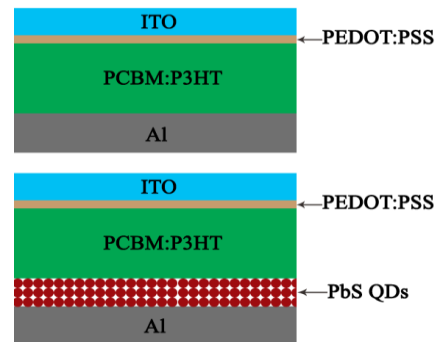
در این قسمت نتایج شبیه‌سازی شده مورد بررسی قرار می‌گیرید. شکل ۳ ضریب جذب در بازه طیفی ۰/۳ میکرومتر تا ۱ میکرومتر را برای دو سلول خورشیدی شبیه‌سازی شده نشان می‌دهد. همانطور که در شکل پیداست جذب در ناحیه مرئی و ماوراء بنفش تقریباً در دو حالت یکسان است اما در سلولی که در آن از نقاط کوانتومی PbS استفاده شده است ضریب جذب در ناحیه طیفی ۰/۶ تا ۱ میکرومتر به نسبت افزایش می‌یابد. نقاط کوانتومی PbS با افزایش باند جذب به سمت ناحیه‌ی فرورسرخ می‌توانند سبب افزایش نرخ تولید الکترون و حفره شوند.



شکل ۳: ضریب جذب بری دو سلول در ناحیه طیفی ۰/۳ میکرومتر تا ۱ میکرومتر

در شکل ۳ نتایج تجربی سلول PCBM:P3HT بدون

بر مبنای تفاضل محدود حوزه‌ی زمان (FDTD<sup>1</sup>) می‌باشد.



شکل ۲: شکل بالا ساختار سلول شبیه‌سازی شده بدون استفاده از نقاط کوانتومی و شکل پایین ساختار سلول شبیه‌سازی شده با استفاده از نقاط کوانتومی می‌باشد

در این روش ناحیه‌ی شبیه‌سازی شده شبکه‌بندی گردیده و معادلات ماکسول در فضای این شبکه‌ها حل گشته، میدان الکتریکی ( $\vec{E}$ ) و میدان مغناطیسی ( $\vec{H}$ ) و در نتیجه بردار پوئین‌تینگ سرتاسر این ناحیه توسط رابطه‌ی (۱) به دست می‌آید.

$$\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H} \quad (1)$$

میزان جذب در ناحیه‌ی فعال سلول در واحد حجم ( $A$ ) از رابطه‌ی (۲) به دست می‌آید [۷].

$$A = -\frac{1}{2} \text{Re}(\vec{\nabla} \cdot \vec{S}) \quad (2)$$

برای به دست آوردن نرخ تولید الکترون-حفره‌ها از رابطه‌ی (۳) استفاده شده است [۷].

$$GR = \int \left( \frac{\varepsilon'' |\vec{E}(\omega)|^2}{2\hbar} \right) d\omega \quad (3)$$

که در آن  $\varepsilon''$  قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک مربوط به ماده‌ی جاذب می‌باشد، و انتگرال‌گیری باید در سراسر ناحیه‌ی طیفی نور خورشید انجام شود. با استفاده از نرخ تولید  $GR$  می‌توان جریان مدار-کوتاه ( $J_{SC}$ ) را با استفاده از رابطه‌ی (۴) محاسبه نمود [۷].

<sup>1</sup> Finite-difference time-domain

کوانتومی تاثیر بسیار زیادی بر بازدهی سلول می‌گذارد.

جدول ۱: مشخصه‌های محاسبه شده سلول‌های خورشیدی

نوع سلول	$J_{sc}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	$V_{OC}$ (V)	FF	$\eta$ (%)
Without QDs	۱۳/۲۴	۰/۵۱	۰/۸۲	۵/۵۵
With QDs	۱۸/۰۷	۰/۵۲	۰/۸۱	۷/۵۸

#### ۴- نتیجه‌گیری

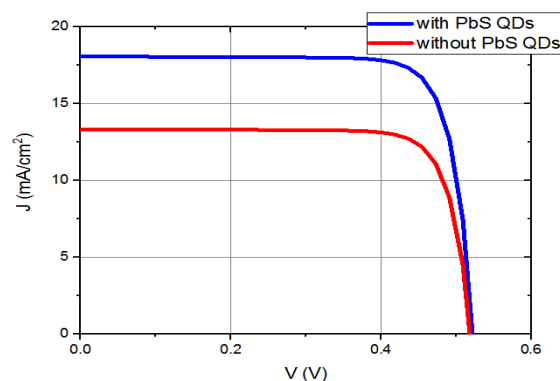
استفاده از نقاط کوانتومی PbS باعث افزایش جذب نور در ناحیه‌ی طیفی ۰/۳۵ میکرومتر تا ۰/۴۲ میکرومتر و همچنین در ناحیه‌ی طیفی ۰/۶ میکرومتر تا ۱ میکرومتر می‌شود.  $J_{sc}$  و بازده تبدیل توان برای سلول خورشیدی بدون نقاط کوانتومی به ترتیب برابر  $13/24 \text{ mA/cm}^2$  و  $5/55\%$  و برای سلول‌های خورشیدی که در آن از نقاط کوانتومی استفاده شده بود به ترتیب  $18/07 \text{ mA/cm}^2$  و  $7/58\%$  محاسبه شد. بنابراین نتیجه گرفته می‌شود که استفاده از نقاط کوانتومی PbS در سلول خورشیدی آلی با ماده‌ی جاذب PCBM:P3HT باعث افزایش چشمگیر بازده تبدیل توان به میزان  $36\%$  نسبت به سلول‌های بدون نقاط کوانتومی می‌شود.

#### مراجع

- [1] Brabec, Christoph J., and James R. Durrant. "Solution-processed organic solar cells." *Mrs Bulletin* 33.7 (2008):670-675.
- [2] Kim, K., Liu, J., Namboothiry, M. A., & Carroll, D. L. "Roles of donor and acceptor nanodomains in 6% efficient thermally annealed polymer photovoltaics." *Applied Physics Letters* 90.16 (2007):163511.
- [3] Im, J. H., Lee, C. R., Lee, J. W., Park, S. W., & Park, N. G. "6.5% efficient perovskite quantum-dot-sensitized solar cell." *Nanoscale* 3.10 (2011):4088-4093.
- [4] Supran, G. J., Song, K. W., Hwang, G. W., Correa, R. E., Scherer, J., Dauler, E. A., ... & Bulović, V. "High-performance shortwave-infrared light-emitting devices using core-shell (PbS-CdS) colloidal quantum dots." *Advanced materials* 27.8 (2015):1437-1442.
- [5] Mousa, Abdelrazek. "Synthesis and Characterization of PbS Quantum Dots." (2011).
- [6] Sargent, Edward H. "Colloidal quantum dot solar cells." *Nature photonics* 6.3 (2012): 133-135.
- [7] Xu, Yunlu, Joseph Murray, and Jeremy N. Munday. "Photonics and Plasmonics for Enhanced Photovoltaic Performance." *Quantum Dot Solar Cells*. Springer New York, 2014. 349-382.
- [8] Luque, Antonio, & Steven Hegedus, eds. *Handbook of photovoltaic science and engineering*. John Wiley & Sons, 2011.
- [9] Park, K., Oh, S., Jung, D., Chae, H., Kim, H., & Boo, J. H.. "Hafnium metallocene compounds used as cathode interfacial layers for enhanced electron transfer in organic solar cells." *Nanoscale research letters* 7.1 (2012): 74.

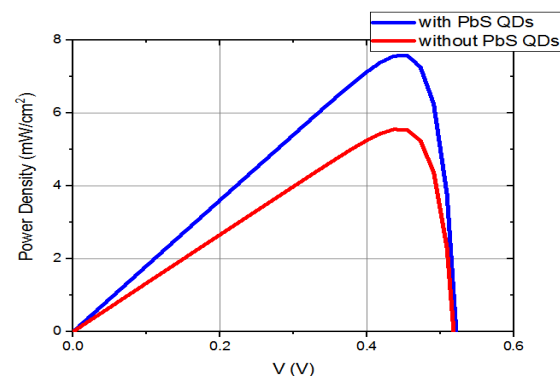
استفاده از نقاط کوانتومی نیز آورده شده است [۹]، و همان‌طور که مشاهده می‌شود این نتایج تطبیق خوبی با نتایج حاصل از شبیه‌سازی داشته است. استفاده از نقاط کوانتومی در این سلول خاص به صورت تجربی انجام نشده است ولی قابلیت انجام این کار نیز وجود دارد.

شکل ۴ نمودار جریان-ولتاژ را برار دوحالت بحث شده نشان می‌دهد. همان‌طور که ملاحظه می‌شود  $J_{sc}$  در حالتی که در آن از نقاط کوانتومی استفاده نشده است برابر  $13/24 \text{ mA/cm}^2$  بوده و حالتی که در آن از نقاط کوانتومی PbS استفاده شده است برابر  $18/07$  است. بنابراین استفاده از نقاط کوانتومی  $J_{sc}$  سلول را  $36\%$  افزایش می‌دهد.



شکل ۴: نمودار چگالی جریان-ولتاژ

شکل ۵ نمودار چگالی توان-ولتاژ را در دو سلول شبیه‌سازی شده نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود استفاده از نقاط کوانتومی PbS باعث افزایش چگالی توان سلول می‌شود.



شکل ۵: نمودار چگالی توان-ولتاژ

در جدول ۱ مشخصه‌های مربوط به این دو سلول خورشیدی آورده شده است. ضریب پخشندگی برای هر دو حالت تقریباً یکسان می‌باشد ولی استفاده از نقاط