



بیست و یکمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران  
و هفتمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران  
۲۳ تا ۲۵ دی ماه ۱۳۹۳، دانشگاه شهید بهشتی



## بررسی تاثیر ساختار پلیمر بر عملکرد سلول های خورشیدی آلی

پریسا زادامیری<sup>۱</sup>، حبیب تجلی<sup>۱،۲</sup> و سهراب احمدی<sup>۲</sup>

۱- گروه فیزیک، واحد تبریز، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران

۱- گروه فیزیک، واحد خسروشاه، دانشگاه آزاد اسلامی، خسروشاه، ایران

۲- گروه فوتونیک، پژوهشکده فیزیک کاربردی و ستاره شناسی، دانشگاه تبریز

چکیده: ساختار سلول خورشیدی آلی شامل یک لایه فعال از جنس مولکولهای آلی است که بین دو الکترود قرار گرفته است. برای تسهیل در جدا سازی بارها و افزایش راندمان آن از دو ماده دهنده و گیرنده الکترون استفاده می شود. در این مقاله سه پلیمر *BT* - *PCPDT*، *PCPDT-DFBT*، *PDTP-DFBT* به عنوان کوپلیمرهای آلترناتیو در لایه فعال، به صورت تک لایه و چند لایه بررسی شده اند. همچنین پارامترهای میکروسکوپی موثر در بهره سلول خورشیدی محاسبه شده و با استفاده از تابع *CC*، منحنی های سه بعدی آنها رسم گردیده است.

کلمات کلیدی: سلول خورشیدی آلی، پلیمرهای با گاف باند کوچک، سلول خورشیدی چند لایه

## Effect of polymer structure on the performance of organic solar cells

P. Zad-Amiri<sup>1</sup>, H. Tajalli<sup>1,2</sup>, S. Ahmadi-Kandjani<sup>2</sup>

1- Department of Physics, East Azerbaijan Science and Research Branch, Islamic Azad University, Tabriz, Iran

1- Department of Physics, Khosrowshah Branch, Islamic Azad University, Khosrowshah, Iran

2- Photonics group, Research Institute for Applied Physics, University of Tabriz

Abstract- Polymer solar cells structure contains an active layer of organic molecules placed between two electrodes. To facilitate the separated charges and increase the efficiency, the active layer includes two layers of donor and acceptor. In this paper three alternative copolymers of *PCPDT-BT*, *PCPDT - DFBT*, *PDTP - DFBT* have been investigated as active layers. Also, the microscopic affecting the efficiency of solar cells is calculated. Finally comparison between polymer solar cells in a single layer and multi-layer structures has been presented.

Keywords: polymer solar cell, Tandem structure, Multi-junction solar cel

## ۱- مقدمه

شکل ۱- مدار معادل تک دیودی سلول خورشیدی

در مدار شکل (۱) جریان خروجی از رابطه (۱) محاسبه می شود [۴].

$$I = I_0 \left( e^{\frac{q(V-IR_s)}{nkT}} - 1 \right) + \frac{V-IR_s}{R_{sh}} - I_{ph} \quad (1)$$

در رابطه (۱)  $I_0$  جریان اشباع معکوس،  $q$  بار الکترونیکی،  $n$  فاکتور ایده‌ال دیود،  $k$  ثابت بولتزمن،  $T$  دمای سلول،  $V$  ولتاژ اعمال شده،  $R_s$  مقاومت سری و  $R_{sh}$  مقاومت موازی می‌باشد. فرآیند تولید جریان در سلول‌های خورشیدی آلی شامل جذب نور، تشکیل اکساتیون ( جفت الکترون - حفره مقید)، انتقال اکساتیون ها به فصل مشترک دهنده - گیرنده و تجزیه آن ها و در نهایت انتقال بار ها به سمت الکتروود ها می‌باشد. برای تعیین مشخصه‌های سلول از انتگرال گیری تابع  $CC$  (رابطه ۲) استفاده شده است [۴].

$$CC(I, V) = \int_0^V (I - I_{sc}) dV \quad (2)$$

در رابطه (۲) حد پایین انتگرال نقطه  $I=I_{sc}$  می‌باشد. به این ترتیب پارامترهای سلول خورشیدی به شرح زیر بدست آمده است:

$$G_p = 2C_{V_2} \quad (3)$$

$$R_s = \frac{\sqrt{4+16C_{I_2}C_{V_2}} - 1}{4C_{V_2}} \quad (4)$$

$$n = \frac{C_{V_1} \left( \sqrt{1+16C_{I_2}C_{V_2}} - 1 \right) + 4C_{I_1}C_{V_2}}{C_{V_2} 4C_{V_2}} \quad (5)$$

$$I_{ph} = -\frac{(1+\sqrt{1+16C_{I_2}C_{V_2}})(C_{V_1}+I_{sc})}{2} - 2C_{I_1}C_{V_2} \quad (6)$$

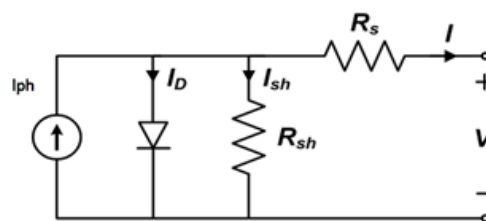
$$I_0 = \frac{I_{ph} + I - (V - IR_s)G_p}{\exp\left(\frac{(V - IR_s)}{nV_{th}}\right) - 1} \quad (7)$$

این پارامترها به ترتیب شامل رسانندگی ( $G_p$ )، مقاومت

امروزه انرژی های نو و تجدید پذیر نقش تعیین کننده ای در کاهش هزینه های انرژی یک کشور ایفا می کنند. یکی از بهترین منابع انرژی های تجدید پذیر، انرژی حاصل از نور خورشید است که به دو صورت می تواند مورد استفاده قرار گیرد. در حالت اول می توان از گرمای حاصل از تابش خورشید استفاده کرد. در حالت دوم می توان نور خورشید را مستقیماً به الکتریسته تبدیل کرد. این تبدیل انرژی بواسطه سلول های خورشیدی صورت می گیرد. سلول های خورشیدی پلیمری یکی از انواع سلول های خورشیدی هستند که دارای مزایایی از قبیل انعطاف پذیر بودن، وزن کم و امکان ساخت در مقیاس بزرگ می باشند [۱،۲].

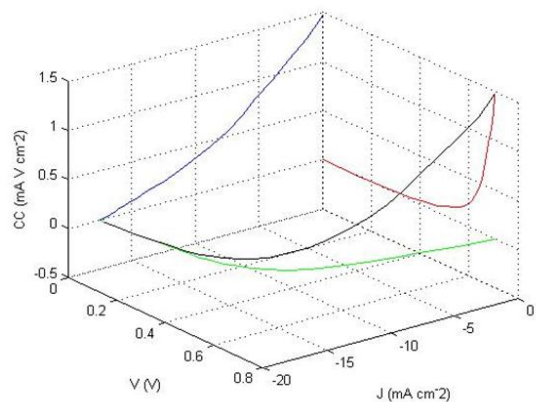
## ۲- مشخصه یابی سلول های خورشیدی

همانطور که میدانیم مهم ترین مشخصه های الکتریکی سلول های خورشیدی پلیمری برای اندازه گیری بازده آنها عبارت هستند از ولتاژ مدار باز ( $V_{oc}$ ) یا ولتاژ عبوری به ازای جریان صفر، جریان مدار کوتاه ( $I_{sc}$ ) یا جریان تولید شده به ازای ولتاژ صفر، عامل پرشدگی (Fill Factor) و بازده تبدیل توان. عموماً برای شبیه سازی رفتار سلول های خورشیدی از مدار معادل تک دیودی استفاده می کنند (شکل ۱). این مدار شامل یک منبع جریان، یک دیود، یک مقاومت موازی و یک مقاومت سری است. اتلافات را در این مدارها مقاومت های سری ( $R_s$ ) و موازی ( $R_{sh}$ ) نشان می دهند. این اتلافات ممکن است، ناشی از جذب فوتون ها، بدون ایجاد جفت الکترون - حفره، باز ترکیب بارها و یا ناشی از مقاومت مواد سازنده سلول و بسیاری از عوامل دیگر باشد. بعبارتی  $R_s$  نشان دهنده باز ترکیب بارهاست و هر چه میزان  $R_s$  افزایش یابد، باز ترکیب بارها قبل از رسیدن به الکتروود ها افزایش یافته است. همچنین تحرک پذیری حاملین بار به عامل رسانندگی بستگی دارد که آن را با  $G_p$  نشان می دهند [۳].



polymer	$I_0$ n A	$I_{ph}$ mA	$R_s$ $\Omega cm^2$	$I_x$ mA	$V_{oc}$ V	$G_p$ $1/cm^2 ohm$
PCPDT-BT:PC71BM(الف)	6.02	10.77	0.0035	10.77	0.62	0.711
PCPDT-DFBT:PC71BM(ب)	4.98	12.22	0.0014	12.22	0.87	0.74
PDTP-DFBT:PC71BM(ج)	2.004	17.775	0.0093	17.49	0.70	0.93

با مقایسه سه پلیمر (الف)، (ب) و (ج) می‌توان در یافت، اگر چه میزان  $R_s$ ، که نشان دهنده باز ترکیب بار هاست در پلیمر (ج) نسبت به دو پلیمر دیگر کمی افزایش داشته، اما به دلیل اینکه جریان نوری، رسانندگی و جریان مدار کوتاه افزایش قابل ملاحظه‌ای داشته اند، این پلیمر در کل نتیجه بهتری نسبت به پلیمر (الف) و (ب) داشته است. شکل (۲) منحنی ولتاژ-جریان پلیمر (ج) را نشان می‌دهد.



شکل ۲- منحنی استخراج شده از برنامه با استفاده از روش تابع CC برای پلیمر PCPDT-DFBT در ترکیب با PC71BM.

(ب) ساختارهای چند لایه:

محاسبات فوق برای دو سلول چند لایه با مولکول دهنده یکسان و مولکول‌های گیرنده الکترون متفاوت تکرار شده و نتایج آن در جدول (۳) آمده است.

جدول (۳) نتایج بدست آمده از تابع CC برای ساختار چند لایه :

POLYMER	$I_0$ n A	$I_{ph}$ mA	$R_s$ $\Omega cm^2$	$I_x$ mA	$V_{oc}$ v	$G_p$ $1/cm^2 ohm$
P3HT:ICBM/PDTP-DFBT:PC <sub>61</sub> BM (پنیر ۱)	1.26	10.29	0.006	10.1	1.53	0.40
P3HT:ICBM/PDTP-DFBT:PC <sub>71</sub> BM (پنیر ۲)	1.61	10.30	0.008	9.90	1.52	0.29

بررسی‌ها نشان می‌دهند در ساختارهای تک لایه، کارایی سلول پایین است. ولی با اضافه کردن اتم‌های ناخالصی فلور و اکسیژن کارایی سلول افزایش قابل ملاحظه‌ای می-

سری ( $R_s$ )، فاکتور ایده آل دیود ( $n$ )، جریان نوری ( $I_{ph}$ ) و جریان اشباع معکوس ( $I_0$ ) می‌باشند [۲،۵].

با استفاده از این روابط و استخراج داده‌های تجربی و نوشتن برنامه در محیط مطلب، منحنی سه بعدی ولتاژ-جریان را رسم کرده و به بحث و بررسی داده‌های حاصل از برنامه در مقیاس میکروسکوپی می‌پردازیم. مشخصات پلیمرهای انتخابی بعنوان لایه فعال در جدول (۱) آورده شده است. این پلیمرها از نوع کوپلیمرهای آلترناتیو هستند.

جدول (۱) مشخصات پلیمرهای انتخابی [۶]

فرمول شیمیایی	انرژی باند ممنوعه (e v)	ناحیه طول موجی جذب (nm)	شکل
poly[2,6-(4,4-bis-(2-ethylhexyl)-4H-cyclopenta[2,1-b;3,4-b]-dithiophene)-alt-4,7-(2,1,3-benzothiadiazole)] (PCPDT-BT)	1/1.73	۵۵۰-۸۵۰	
poly[2,6-(4,4-bis-(2-ethylhexyl)-4H-cyclopenta[2,1-b;3,4-b0]-dithiophene)-alt-4,7-(2,1,3-difluorobenzothiadiazole)] (PCPDTD-FBT)	1/۱.۰۱	۵۵۰-۷۵۰	
poly[2,7-(5,5-bis-(3,7-dimethyl octyl)-5H-dithieno[3,2-b;2,3-d]pyran)-alt-4,7-(5,6-difluoro-2,1,3-benzothiadiazole)] (PDTP-DFBT)	1/۳.۸	۶۰۰-۸۵۰	

۳-

#### ۴- نتایج

الف) ساختارهای تک لایه :

در این قسمت از محاسبات از نتایج تجربی مربوط به سلول‌های خورشیدی پلیمری تک لایه استفاده شده و پارامترهای پنجگانه برای آنها محاسبه و در جدول (۲) آورده شده است.

جدول (۲): اعداد بدست آمده از تابع CC برای سه پلیمر در ترکیب با PC<sub>71</sub>BM :

از ساختار چند لایه می‌تواند در افزایش بازده سلول خورشیدی موثر باشد.

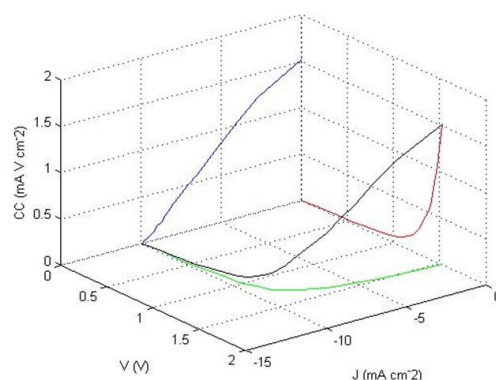
استفاده از ساختار چند لایه نسبت به ساختار تک لایه می‌تواند طیف وسیعتری از تابش خورشید را مورد استفاده قرار دهد، و اتلاف حرارتی فوتون‌ها را به حداقل برساند. در نتیجه جریان اشباع معکوس کاهش و رسانندگی و همچنین عامل پر شدگی و تحرک پذیری حاملین بار افزایش می‌یابد.

### مراجع

- [1] Jingbi You, Letian Dou, Ziruo Hong, Gang Li, Yang Yang, *Recent Trends in Polymer Tandem Solar Cells Research*, Progress in Polymer Science, 38, 1-20, 2013.
- [2] Tao Xu and Luping Yu., *How to Design Low Band gap Polymers for Highly Efficient Organic Solar Cells*, Materials today, 17, 11-15, 2014.
- [3] Andrew J. Lewis, *Characterization of Organic Materials for Photovoltaic Devices*, Ph.D. Thesis, University of St Andrews (Scotland), 2006.
- [4] Eva Bundgaard, Frederik C. Krebs, *Low Band Gap Polymers for Organic Photovoltaics*, Solar Energy Materials & Solar Cells, 91, 954-985, 2007.
- [5] Ali Cheknan, Hikmat S. Hilal., Faycal Djeflal, Boumediene Benyoucef, Jean-Pierre Charles, *An Equivalent Circuit Approach to Organic Solar Cell Modelling*, Microelectronics Journal, 39, 1173-1180, 2008.
- [6] Klaus Petritsch, *Organic Solar Cells Architectures*, Ph.D. Thesis, University of Graz (Austria), 2000.
- [7] Jingbi You, Letian Dou, Ken Yoshimura, Takehito Kato, Kenichiro Ohya, Tom Moriarty, Keith Emery, Chun-Chao Chen, Jing Gao, Gang Li, Yang Yang, *A Polymer Tandem solar Cell with 10.6% Power Conversion Efficiency*, Nature Communications, 4:1446, 2013.

یابد. در واقع افزودن اتم‌های فلور می‌تواند موجب عمیق‌تر شدن باند HOMO (بالاترین اوربیتال مولکولی پر شده) در ساختار (د) و (ر) شود و ولتاژ مدار باز را افزایش داده، در نتیجه عامل پرشدگی، چگالی جریان مدار کوتاه، و تحرک پذیری حاملین بار افزایش یابد. همچنین افزودن اتم اکسیژن می‌تواند بعنوان تله‌ای برای الکترون‌ها در مواد آلی عمل کند و در نتیجه منجر به افزایش تعداد اکسایتون‌ها شود. نتایج حاصل در جدول (۲) نشان می‌دهند، جریان نوری در هر دو سلول خورشیدی چند لایه تقریباً یکسان است. اما میزان رسانندگی در ساختار (د) بسیار بیشتر از ساختار (ر) است که بیانگر کاهش باز ترکیب اکسایتون‌ها در ساختار (د) است. همچنین میزان تحرک پذیری بارها در ساختار (د) از ساختار (ر) بیشتر است. بنابراین می‌توان گفت ساختار (د) که در آن از مولکول گیرنده الکترون PC<sub>61</sub>BM استفاده شده است، کارایی بالاتری دارد.

با مقایسه ساختار تک لایه و چند لایه می‌توان گفت ساختار چند لایه به دلیل استفاده از چندین ماده مختلف که هریک بخشی از طیف خورشید را جذب می‌کنند، می‌تواند کارایی بالاتری داشته باشد. همانطور که از نتایج برمی‌آید در این بررسی سلول با ساختار چند لایه P3HT:ICBA/PDTP-DFBT/ PC<sub>61</sub>BM کارایی بالاتری را ارائه داده است. شکل (۳) منحنی ولتاژ-جریان ساختار (د) می‌باشد.



شکل ۳- منحنی استخراج شده از برنامه با استفاده از روش تابع CC برای پلیمر (د).

### ۵- نتیجه گیری

معمولاً در ساختارهای تک لایه بازده سلول پایین است. اضافه کردن اتمهای ناخالصی به پلیمر، همچنین استفاده