بیست و سومین کنفرانس اپتیک و فوتونیک و نهمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
دانشگاه تربیت مدرس
۱۲-۱۴ بهمن ۱۳۹۵
23rd Iranian Conference on Optics and Photonics and 9th Conference on Photonics Engineering and Technology
Tarbiat Modares University, Tehran, Iran
January 31- February 2, 2017

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 تاثیرطول 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.

کلید واژه- 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 Zolfaghari[1], Hadi Soofi[2]

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.

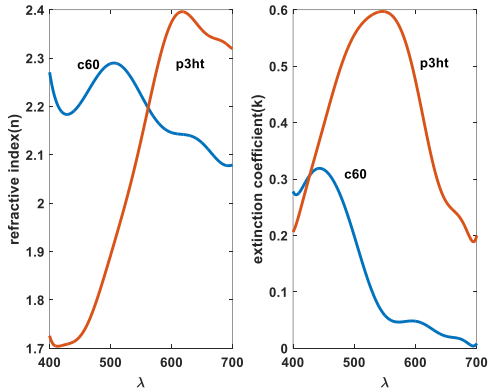
Keywords: Organic solar cells,Diffusion length of excitons, Donor and acceptor,active Layer Thickness,

این مقاله به شرط در دسترس بودن در وبگاه www.opsi.ir معتبر است.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-12-08]

۱- مقدمه

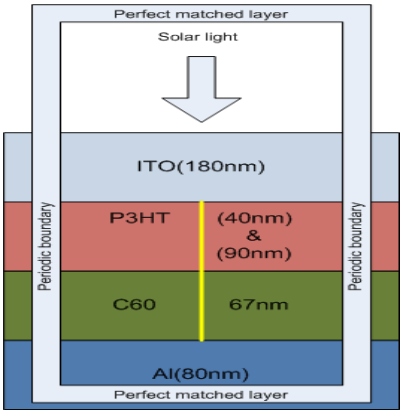
برخلاف نیمه هادی های سیلیکونی که حاملها در باندی پیوسته در حال حرکت هستند، در مواد آلی به دلیل جاذبه ضعیف بین مولکولی باند تشکیل نمی شود و حاملها از طریق جهش بین مکان های استقرار یافته منتقل می شوند. میزان مسافتی را که اکسیتون قبل از بازترکیب شدن طی میکند ، طول نفوذ اکسیتون می گویند . از آنجا که طول 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 افزایش بازده جذب سلول ضخیم تر می باشد.



شکل ۲.نمودار ضریب شکست حقیقی و موهومی P3HT و C60

۲- شبیه سازی نوری و مدلسازی عددی

ابتدا شبیه سازی نوری را مطابق شکل۱ با استفاده از روش FDTD و استفاده از نرم افزار لومریکال برای هر دو ساختار انجام می دهیم. ضخامت P3HT برای ساختار اول ۴۰نانومتر و برای ساختار دوم ۹۰ نانومتر در نظر می گیریم. ضخامت های C60 ، AL ،ITO را برای هر دو ساختار یکسان و به ترتیب برابر با ۶۷ nm ، ۸۰ nm و۱۸۰ nm درنظر 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 عمودی در امتداد محور z مطابق شکل (خط زرد رنگ) توزیع میدان الکتریکی را درفواصل 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.شکل۱ 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

سپس با استفاده از رابطه بیان شده در [۳] انرژی توزیع شده را در راستای محور z بدست می آوریم.

$$Q = \frac{n_i}{n_0}\alpha I_{\text{solarlight}}\left|\frac{E}{E_0}\right|^2 \qquad (۱)$$

در این رابطه n_i ضریب شکست ماده مورنظر، n_0 ضریب شکست بستر، α ضریب جذب ماده مورد نظر در فرکانس متناظرکه از رابطه $\frac{4\pi K}{\lambda}$ محاسبه میشود ، $I_{\text{solarlight}}$ نور ورودی با استاندارد AM1.5 با توزیع توان $100\,\text{mwcm}^{-2}$ 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.

$$G(z) = \sum_{\lambda=400}^{700}\frac{Q.\lambda}{h.c} \qquad (۲)$$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در وبگاه www.opsi.ir معتبر است.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-12-08]

این جمله تحت عنوان جمله ورودی وارد معادله پیوستگی اکسیتونها میشود.معادله حاکم بر اکسیتونها به صورت زیر است.

$$\frac{ds}{dt} = G + Ds\frac{d^2s}{dx^2} - K_{diss}.S - \frac{S}{\tau} \qquad (۳)$$

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

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

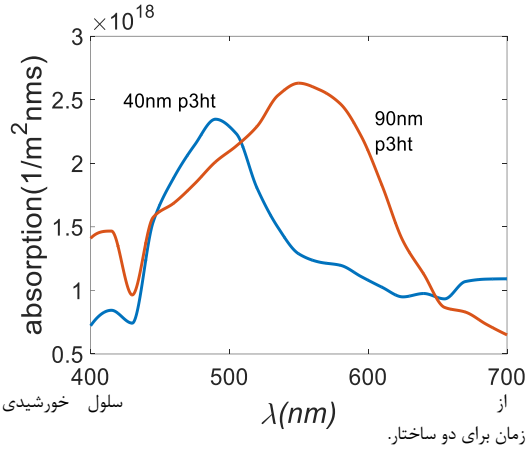
τ_{p3ht}, τ_{c60}	0.505ns,600ps
L_{p3ht}, L_{c60}	20nm,37nm
k_{diss}	10^{13}1/s

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

η =(فوتون های ورودی/تعداد اکسیتون های جدا شده)

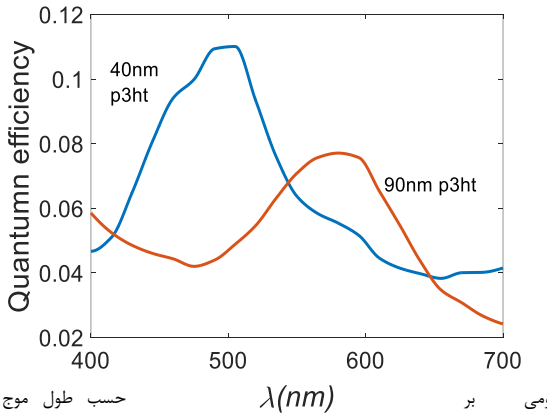
۳- نتایج

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.



شکل ۳. تعداد فوتون های جذب شده در واحد سطح از سلول خورشیدی 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 اکسیتون ها، تعداد اکسیتون 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 اکسیتون های جدا شده به فوتون های جذب شده را

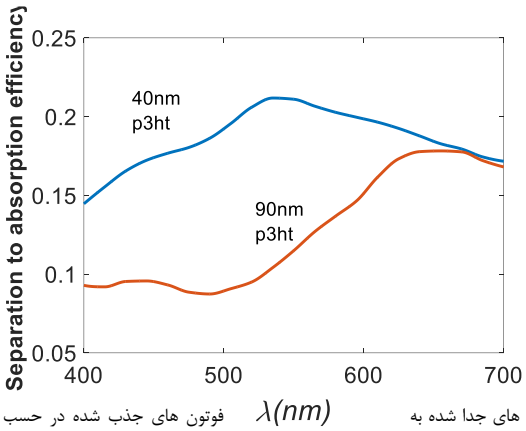
این مقاله به شرط در دسترس بودن در وبگاه www.opsi.ir معتبر است.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-12-08]

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

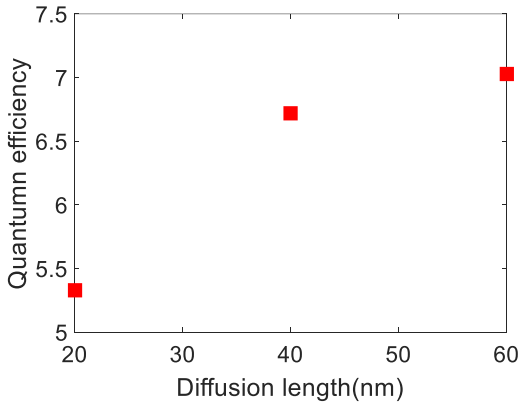
η^* = (فوتونهای جذب شده/تعداد اکسیتون های جدا شده)

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.



شکل ۵. نسبت اکسیتون های جدا شده به فوتون های جذب شده در حسب طول موج

نمودار شکل ۵ بازده کوانتومی را برای طول نفوذهای مختلف برای ساختار با ضخامت بیشتر نشان میدهد.با افزایش طول نفوذ از ۲۰nm به ۴۰nm و۶۰nm بازده کوانتومی به ترتیب از ۵,۳۳٪ به ۶,۷۲٪ و۷,۰۳٪ 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 ساختارPCDTBT: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:

افزایش ضخامت سلولهای آلی خورشیدی باعث افزایش جذب این سلولها میشود ولی از آنجایی که اکسیتونها در مواد آلی طول نفوذ کمتری دارند تعداد اکسیتونهای 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 اکسیتونهای 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] KevinJ.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

این مقاله به شرط در دسترس بودن در وبگاه www.opsi.ir معتبر است.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-12-08]