بیست و ششمین کنفرانس اپتیک و
فوتونیک ایران و دوازدهمین کنفرانس
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،
دانشگاه خوارزمی،
تهران، ایران.
15-16 بهمن ۱۳۹۸

تجزیه و تحلیل انتقال بار الکتریکی و بازده کوانتومی خارجی در یک لایه‌ی نازک نیمه رسانای آلی در سلول‌های خورشیدی آلی

نسرین سپه وند[۱]، محسن بهرامی[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه لرستان، خرم آباد (nasrinsepah62@gmail.com)

[۲] استادیار، گروه فیزیک، دانشگاه لرستان، خرم آباد (Bahrami.m@lu.ac.ir)

چکیده- در این کار پژوهشی ترابرد حامل‌های بار الکتریکی و تعداد حامل‌های بار جمع آوری شده بر روی الکترودهای سلول خورشیدی آلی با ساختار شطرنجی تحت تاثیر عوامل حاکم بر آن مورد بررسی و محاسبه واقع شده است. در همین راستا با استفاده از شبیه‌سازی عددی مونت کارلو- الگوریتم بورتز، کالوس و لبوویتز- دو لایه‌ی متشکل از مواد آلی PCBM و P3HT با ابعاد nm ۶۰×۱۵×۵، nm ۶۰×30×۵ مورد بررسی قرار گرفته است. در نهایت مقدار بازده کوانتومی خارجی با در نظر گرفتن شرایط حاکم بر لایه‌های نازک محاسبه شد و این نتیجه حاصل شد که با افزایش پهنای لایه مقدار بازده کوانتومی خارجی کاهش می یابد.

کلمات کلیدی: بازده کوانتومی خارجی، سلول خورشیدی، لایه نازک نیمه رسانای آلی، مونت کارلو.

Analysis the electrical charge transition and external quantum efficiency in a thin layer of an organic semiconductor in organic solar cells

Nasrin sepahvand , Mohsen bahrami

Department of Physics, University of Lorestan, Khorramabad

Abstract - In this research, the electrical charge transition and the number of charge carriers collected on organic solar cell electrodes with a checkered structure under the influence of its governing factors have been investigated and calculated. In this regard, using the Monte Carlo numerical simulation with Porter, Callus and Lebowitz algorithms, the paper has investigated the two layers consisting of PCBM and P3HT organic materials with thickness of 60×15×5 nm and 60×30×5 nm. Finally, considering the conditions of thin layer the external quantum efficiency (EQE) was calculated and it was concluded that as the layer width increased, the amount of external quantum efficiency decreased.

Keywords: External quantum efficiency, Monte Carlo, organic semiconductor thin layer, solar cell.

این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-14]

۱- مقدمه

سلول‌های خورشیدی با تبدیل مستقیم انرژی خورشیدی به انرژی الکتریکی راه حلی عملی برای مشکلات مربوط به سوخت‌های فسیلی و آلودگی‌های زیست محیطی ناشی از آن‌ها و استفاده از انرژی‌های پاک و تجدیدپذیر ارائه می‌دهند [۱و۲]. در این میان، در طی دو دهه گذشته سلول‌های خورشید آلی با داشتن مزایایی چون انعطاف‌پذیری بالا، هزینه ساخت پایین و ... مورد توجه واقع شده‌اند که این نشان از اهمیّت بالای آنهاست [۳و۴]. مدل‌سازی و شبیه‌سازی عددی روشی مؤثر برای پیش‌بینی بهینه‌سازی و ارائه بهتر عملکرد سلول‌های خورشیدی حتی بدون نیاز به ساخت اولیه آنهاست [۵]. در مطالعه حاضر تلاش شده است تا با استفاده از روش‌های عددی رابطه‌ای بین ساختار داخلی سلول خورشیدی آلی، انتقال بار الکتریکی و بازده کوانتومی خارجی ارائه شود.

۲- مدل و روش محاسبه

شکل ۱، ساختار سلول‌های خورشیدی لایهٔ نازک آلی تشکیل شده از ماده P3HT به عنوان نیمه رسانای نوع -p و PCBM به عنوان نیمه رسانای نوع-n ، را نشان می‌دهد. الکترودهای آنود (ITO) و کاتد (Al) برای جمع‌آوری حامل‌های بار الکتریکی استفاده می‌شود.

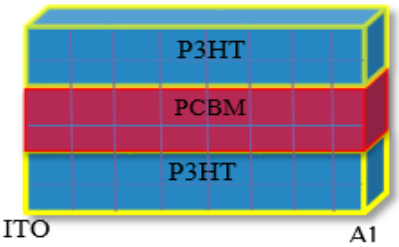
جهت انجام محاسبات عددی در ساختارهای فوق، از مراحل و شرایط زیر پیروی می‌کنیم:

۱- ابتدا اکسایتونی را در یک مکان تصادفی به نشانهٔ تابش فوتون بر روی لایهٔ فعال در نظر می‌گیریم.

۲- انرژی ترازهای HOMO و LUMO هر جایگاه از تابع توزیع گاوسی زیر محاسبه می‌شود [۶]:

$$g(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\left(-\frac{(E-E_0)^2}{2\sigma^2}\right) \qquad (۱)$$

که E انرژی و σ پهنای تابع توزیع گاوسی است.



شکل ۱- ساختار شطرنجی سلول خورشیدی آلی

۳- آهنگ پرش اکسایتون‌ها (W_{ij}) بین نقاط مختلف شبکه از طریق رابطهٔ زیر محاسبه می‌گردد:

$$W_{ij} = W_e\left(\frac{R_0}{R_{ij}}\right)^6 F(\Delta E_{ij}) \qquad (۲)$$

$$F(\Delta E_{ij}) = \begin{cases}\exp(-\frac{\Delta E_{ij}}{K_B T}) & , \Delta E_{ij} > 0 \\ 1 & , \Delta E_{ij} < 0\end{cases} \qquad (۳)$$

$$w_{e(n)} = \frac{6k_B T\mu_{e,h}}{qa_0^2}\exp(2\gamma a) \qquad (۴)$$

E_j, E_i انرژی حامل‌های بار دو جایگاه i و j، K_B ثابت بولتزمن، T دما، γ، W_e و R_0 به ترتیب میزان جایگزیدگی، فرکانس پرش، شعاع جایگزیدگی حامل‌های بارالکتریکی است. R_{ij} فاصلهٔ میان جایگاه‌های پرش و $\mu_{e,h}$ تحرک‌پذیری حامل‌های بار الکتریکی است [۷].

۴- محاسبهٔ آهنگ پرش حامل‌های بارالکتریکی با روش آبراهام - میلر انجام می‌شود[۱]:

$$w_{ij} = \begin{cases} W_e\exp(-2\gamma R_{ij})F(\Delta E_{ij}), & \Delta E_{ij} > 0 \\ W_e\exp\exp(-2\gamma R_{ij}), & \Delta E_{ij} \le 0 \end{cases} \qquad (۵)$$

۵- محاسبهٔ احتمال پرش حامل های بار الکتریکی:

$$P_K = \frac{W_{ij}}{W_{total}} \qquad (۶)$$

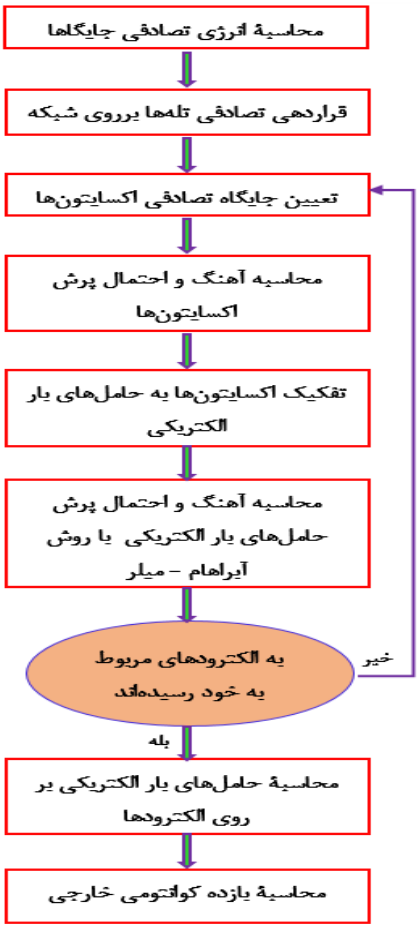
W_{total}، مجموع آهنگ‌های پرش به جایگاه‌های اطراف است.

۶- محاسبه بازده کوانتومی خارجی (EQE) یعنی نسبت تعداد الکترون‌ها یا حفره‌های جمع‌آوری شده در الکترود مربوطه به تعداد اکسایتون‌های تزریق شده [۷و۸].

این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-14]

برای انجام شبیه‌سازی، از روش مونت کارلو با در نظر گرفتن یک شبکه دو بعدی، مطابق با فلوچارت زیر عمل می‌کنیم.



شکل۲- فلوچارت شبیه سازی به روش مونت کارلو.

۳- نتایج و بحث

برای انجام شبیه‌سازی، محیطی با ابعاد ۶۰×۱۵×۵ nm، با ساختار شطرنجی (متشکل از سه لایه) طول هر لایه ۶۰nm و پهنای ۱۵ nm و ضخامت آن ۵ nm است و محیط دیگری نیز مشابه فوق ولی با ابعاد ۶۰×30×۵ nm، در نظر گرفته می‌شود. فرض می‌کنیم که مولکول‌های P3HT و PCBM بر روی نقاط (گره‌های) این شبکه با ثابت ۱nm قرار دارند. در محاسبات عددی γ میزان جایگزیدگی بارها برابر با $2nm^{-1}$، K_BT برابر با ۰٫۰۲۵ ev، R_0 شعاع جایگزیدگی اکسایتون‌ها و R_{ij} فاصلهٔ میان جایگاه‌های پرش i و j نیز ۱nm در نظر گرفته می‌شود. در جدول (۱) نیز ویژگی‌های مواد P3HT و PCBM آورده شده است [۸]. محاسبات عددی در دو مرحله به صورتی که در زیر خواهد آمد انجام می‌گیرد. در هر مرحله نمودار بازده کوانتومی خارجی بر حسب اکسایتون‌های فرودی در هر دو لایه رسم و با یکدیگر مقایسه می‌شود.

جدول۱: ویژگی‌های مواد P3HT و PCBM [۸].

ویژگی‌ها	P3HT	PCBM
پهنای انرژی چگالی حالت‌ها	۰٫۰۶۳	۰٫۰۶۳
تحرک‌پذیری‌حامل‌ها $cm^2v^{-1}s^{-1}$	2×10^{-4}	3×10^{-3}
انرژی تراز انتقال دهنده حامل‌ها (ev)	$E_{LUMO}=3$ $E_{HOMO}=5.1$	$E_{LUMO}=3.73$ $E_{HOMO}=6.1$

الف- تزریق هم زمان اکسایتون‌ها بر روی لایه

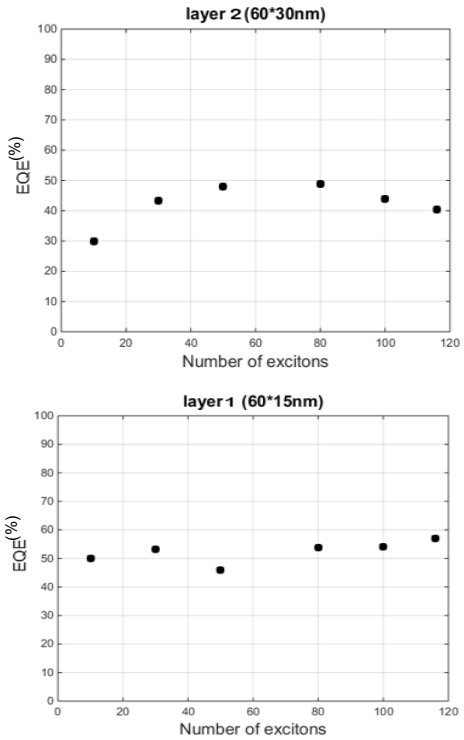
در قدم اول فرآیند شبیه‌سازی، تعداد محدودی از اکسایتون‌ها (۱۰،۳۰،۵۰،۸۰،۱۰۰،۱۱۶) در شرایطی که هر جایگاه (مولکول) فقط می‌تواند یک اکسایتون یا حامل بار الکتریکی را دریافت کند بدون در نظر گرفتن هرگونه عامل اتلافی به لایه تزریق کردیم. در این شرایط میانگین بازده کوانتومی لایهٔ nm ۶۰×۱۵×۵ برابر با ۵۲٫۳٪ و لایهٔ nm ۶۰×30×۵، ۴۲٫۴۳ ٪ حاصل شد (شکل ۳).

ب- اعمال تله‌های عمیق و گیراندازی حامل‌های بار الکتریکی

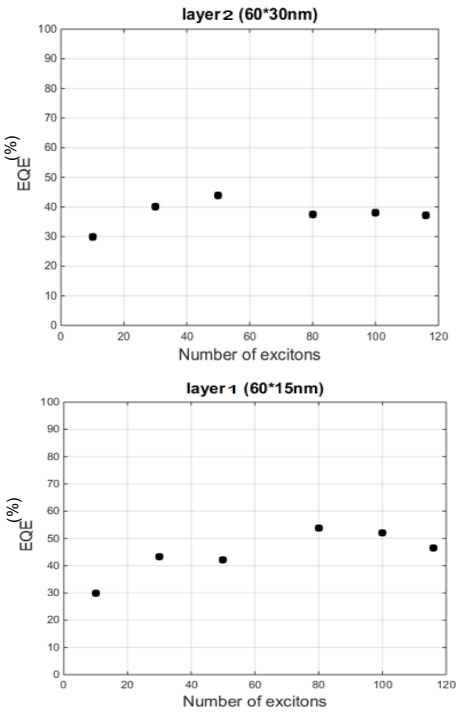
در گام دوم شبیه‌سازی، مکان تله‌ها و انرژی جایگاه‌هایی که تله‌ها در آن قرار دارند به طور تصادفی با مرکزیت انرژی تله‌های عمیق و پهنای گأوسی σ=۰٫۰۶ در نظر گرفته شد. در این کار تعداد تله‌ها ۰٫۱ تعداد کل نقاط هر لایه، در نظر گرفته می‌شود. همان‌گونه که از شکل ۴ مشاهده می‌گردد بازده کوانتومی خارجی هر دو لایه با وجود عامل اتلافی (تله‌های عمیق)، افزایش ابعاد، تحرک‌پذیری متفاوت حامل‌های بار الکتریکی، توزیع انرژی تله‌ها و حامل‌های بار الکتریکی، نسبت به مرحله

این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-14]



شکل۳- بازده کوانتومی خارجی بر حسب تعداد اکسایتون‌های فرودی.



شکل ۴- بازده کوانتومی خارجی بر حسب تعداد اکسایتون‌های فرودی.

قبل کاهش یافته است. لایه nm ۵×۱۵×۶۰ با مقدار ۴۲٫۶۳ درصد، بازده کوانتومی خارجی بالاتری نسبت به لایه nm ۵×30×۶۰ با ۳۷٫۹ درصد دارد (شکل ۴).

نتیجه گیری

در این کار تأثیر تغییر ابعاد لایه (پهنای لایه) بر بازده کوانتومی خارجی سلول‌های خورشیدی آلی مورد بررسی قرار گرفت و این نتیجه حاصل شد که با افزایش پهنای لایه، بازده کوانتومی خارجی سلول خورشیدی آلی مورد نظر، به علت افزایش فاصله اکسایتون‌ها تا رسیدن به مرز تفکیک‌کننده بین لایه‌ها و کاهش تعداد حامل‌های بار الکتریکی- که رابطهٔ مستقیم با بازده کوانتومی خارجی دارد -کاهش می‌یابد.

مرجع‌ها

[1] J. Bisquert; *The physics of solar cells: perovskites, organics, and photovoltaic fundamentals* , CRC Press 2017.

[2] L. Xu; C-L. Ho; L. Liu; W-Y. Wong; *"Molecular/polymeric metallaynes and related molecules: Solar cell materials and devices";* Coordination Chemistry Reviews Vol. 373, pp. 233- 257. 2018.

[3] H. Huang; J. Huang; "*Organic and hybrid solar cells";* Springer Series in Materials Science., Vol 1, 2014.

[4] W .Farooq; A. Daud Khan; A. Daud Khan; M. Noman; "*Enhancing the Power Conversion Efficiency of Organic Solar Cells";* Optik 2019.

[5] M. C. Heiber; A. Wagenpfahl; C. Deibel; "*Advances in modeling the physics of disordered organic electronic devices";* Handbook of Organic Materials for Electronic and Photonic Devices; pp. 309–347, 2019.

[6] J. P. G Vazquez; *"Random walk numerical simulation of electron Dynamics in solar cells based on disordered material"*; Universidad Pablo de Olavide 2012.

[7] P. K. Watkins; A. B. Walker; *G. L. Verschoor; "Dynamical Monte Carlo modelling of organic solar cells: The dependence of internal quantum efficiency on morphology*"; Nano letters Vol. 5, pp. 1814-1818, 2005.

[8] X. Xu; "*Monte Carlo simulation of charge transport in organic solar cells*"; Thesis Duke University 2012.

این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-14]