بیست و ششمین کنفرانس اپتیک و
فوتونیک ایران و دوازدهمین کنفرانس
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،
دانشگاه خوارزمی،
تهران، ایران.
۱۵-۱۶ بهمن ۱۳۹۸

شبیه‌سازی اپتیکی گرافن در سلول خورشیدی آلی با استفاده از روش 3D-FDTD

مارال مصلی نژاد، غلامحسین حیدری، محسن قاسمی
دانشگاه شهرکرد

گرافن بر پایه مشخصات منحصر به فرد اپتیکی، گرمایی، مکانیکی و الکترونیکی در فناوری‌های مختلف می‌تواند مورداستفاده قرار گیرد. علاوه بر این مراحل ساخت و مواد اولیه آن ارزان می‌باشند. این تحقیق به بررسی اپتیکی کاربرد گرافن در سلول خورشیدی آلی با استفاده از روش FDTD پرداخته است. گرافن ورقه‌ای دوبعدی از اتم‌های کربن در یک پیکربندی لانه‌زنبوری است، از این رو مدل‌سازی تابع دی‌الکتریک آن با استفاده از روش‌های معمول حجمی انجام نمی‌گیرد. روش رسانندگی سطحی بر پایه مدل کوبو با امکان تعریف تعداد لایه‌های مختلف گرافن، در این تحقیق مورداستفاده قرار گرفت. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد در حالت گرافن تک لایه به‌جای ITO و ITO/PEDOT:PSS جریان‌های مدار کوتاه به ترتیب به‌اندازه ۱۷/۶ و ۱۱ درصد نسبت به سلول استاندارد افزایش پیدا کردند. همچنین با افزایش تعداد لایه‌های گرافن، از میزان جریان مدار کوتاه در هر دو حالت کاسته شد.

واژه‌های کلیدی- گرافن، مدل رسانندگی سطحی، سلول خورشیدی آلی، 3D-FDTD

Optical Simulation of Graphene in Organic Solar Cells Using the 3D-FDTD Method

Maral Mosallanejad, Gholam Hosain Haidari, Mohsen Ghasemi

Graphene can be used in a variety of technologies based on unique optical, thermal, mechanical and electronic properties. In addition, its fabrication process and raw materials are cheap. This study investigates the optical application of graphene in organic solar cells using the FDTD method. Graphene is a two-dimensional sheet of carbon atoms in a burrow configuration, so modeling of its dielectric function is not performed using conventional volumetric methods. The surface conductivity method based on the Kubo model with the possibility of defining different layers of graphene was used in this study. The simulation results show that in the monolayer graphene state instead of ITO and ITO/ PEDOT: PSS, the short-circuit currents were increased by 17.6 and 11%, respectively, compared to the standard cell. Also, as the number of graphene layers increased, the short circuit current in both cases decreased.

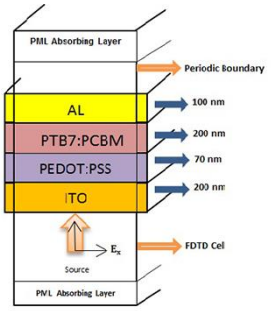
Keywords-Graphene, Surface Conductivity Model, Organic Solar Cell, 3D-FDTD

[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-06]

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

مقدمه

اهمیت استفاده از منابع انرژی تجدید پذیر مانند انرژی خورشیدی و مزایای زیست‌محیطی آن جزء الزامات قطعی فناوری در دنیای کنونی است. سلول خورشیدی آلی یکی از انواع سلول خورشیدی نسل جدید است که با مزایایی از جمله امکان تولید صنعتی، ارزانی تولید و انعطاف‌پذیری همراه است، اما هنوز در مواردی مثل بازده و طول عمر نیاز به بررسی بیشتر دارد. شکل ۱ ساختار کلی یک سلول خورشیدی آلی را نشان می‌دهد[۱].



شکل ۱: ساختار نوعی یک سلول خورشیدی آلی (استاندارد)

ITO و FTO جزء رایج‌ترین موادی هستند که در سلول‌های خورشیدی آلی و رنگ‌دانه‌ای به‌عنوان الکترود شفاف استفاده می‌شوند، اما استفاده از این مواد با مشکل کمبود منابع و هزینه بالا همراه است. به همین دلیل می‌توان از جایگزین مناسبی مانند گرافن برای حل این مشکلات استفاده کرد. علاوه بر استفاده از گرافن به‌عنوان الکترود آند-کاتد به دلیل شفافیت، انعطاف‌پذیری و هدایت الکتریکی بالا، گرافن می‌تواند در سلول‌های خورشیدی به‌عنوان لایه‌ی میانی نیز به کار رود. در کنار خواص منحصربه‌فرد، استفاده از گرافن به دلیل فراوانی منابع و هزینه‌ی پایین بسیار موردتوجه پژوهشگران قرارگرفته است[۲].

هدف از این تحقیق شبیه‌سازی اپتیکی سلول خورشیدی آلی گرافنی با استفاده از روش FDTD هست. در این تحقیق یک یا چندلایه گرافنی در نقش آند و هم‌زمان آند -لایه کمکی (انتقال‌دهنده حفره) به ترتیب جایگزین ITO و ITO/PEDOT:PSS گردید.

روش شبیه‌سازی

در این پژوهش سلول خورشیدی آلی مبتنی بر گرافن با روش تفاضل متناهی دامنه زمان(FDTD) شبیه‌سازی گردید. روش FDTD در سال ۱۹۶۶ توسط "یی" معرفی شد. روش FDTD معادلات ماکسول وابسته به زمان را با تقریب تفاضل مرکزی و با در نظر گرفتن شرایط مرزی مناسب، در فضای گسسته حل نموده و میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی را در فضای شبیه‌سازی به دست می‌آورد.

ثابت گذردهی مختلط مواد (قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک) یکی از نیازمندی‌های این روش است[۳]. اما در رابطه با گرافن که یک ساختار دوبعدی است، اندازه‌گیری و یا تقریب ضریب شکست با استفاده از مدل‌های رایج به‌سادگی امکان‌پذیر نیست.

شبیه‌سازی گرافن در محیط FDTD

گرافن لایه‌ای بسیار نازک با ضخامتی حدود یک اتم دارد و معمولاً با استفاده از رسانایی سطحی به‌جای گذردهی حجمی مشخص می‌شود.

مشخصه مرتبط با تابع دی‌الکتریک یک‌لایه گرافن می‌تواند با استفاده از مدل گذردهی حجمی و یا مدل رسانایی سطحی شبیه‌سازی شود. روش رسانایی سطحی معمولاً کارآمدتر از روش گذردهی حجمی است. اما در بعضی موارد روش گذردهی حجمی نیز می‌تواند مورداستفاده قرار گیرد. در این پژوهش رویکرد مدل رسانایی سطحی مورداستفاده قرارگرفته است.

رهیافت رسانایی سطحی

این روش به خاطر ضخامت اتمی گرافن ازنظر مدل‌سازی کاراتر به نظر می‌رسد. گرافن به‌عنوان یک مستطیل دوبعدی در نظر گرفته‌شده که هدایت سطح آن توسط فرمول کوبو مدل‌سازی می‌شود. هدایت سطح به میزان پراکندگی، پتانسیل شیمیایی، دما وابسته است. همچنین امکان مقیاس بندی ضخامت به صورتی که بیش از یک‌لایه گرافن را مدل‌سازی نماید، در این روش تا حدودی امکان‌پذیر است.

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

[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-06]

این پارامترها در هنگام مدل‌سازی گرافن در محیط FDTD می‌توانند تنظیم شوند. هدایت سطحی گرافن از دو بخش انتقال درون‌نواری و بین نواری تشکیل‌شده است که بر اساس فرمول کوبو به‌صورت زیر نوشته می‌شود (معادله‌های ۱ تا ۳):

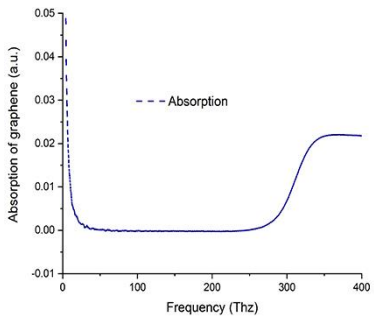
$$\sigma(\omega, \Gamma, \mu_c, T) = \sigma_{intra}(\omega, \Gamma, \mu_c, T) + \sigma_{inter}(\omega, \Gamma, \mu_c, T) \quad (۱)$$

$$\sigma_{inter}(\omega, \Gamma, \mu_c, T) = \frac{-ie^2(\omega + i2\Gamma)}{\pi\hbar^2}\int_0^\infty \left(\frac{f_d(-\xi) - f_d(\xi)}{(\omega + i2\Gamma)^2 - 4\left(\frac{\xi}{h}\right)^2}\right) d\xi \quad (۲)$$

$$\sigma_{intra}(\omega, \Gamma, \mu_c, T) = \frac{-ie^2}{\pi\hbar^2(\omega + i2\Gamma)}\int_0^\infty \xi\left(\frac{\partial f_d(\xi)}{\partial \xi} - \frac{\partial f_d(-\xi)}{\partial \xi}\right) d\xi \quad (۳)$$

درواقع مدل هدایت سطحی مواد تنها برای یک‌لایه گرافن به کار می‌رود. بااین‌حال برای استفاده از گرافن بیش از یک‌لایه یک عامل مقیاس بندی رسانایی، در پارامترهای موردنیاز گرافن در نظر گرفته می‌شود. این عامل مقیاس در هر دو معادله ۲ و ۳ ضرب می‌شود و به این صورت می‌توان با تغییر مقیاس رسانایی در برخی موارد تعداد لایه‌های گرافن را تغییر داد.

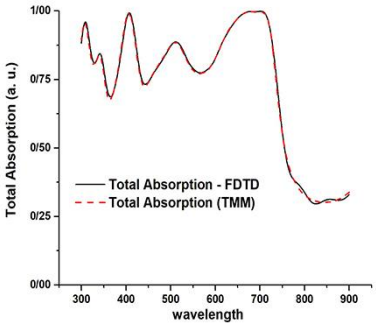
شکل ۲ میزان جذب شبیه‌سازی‌شده از یک تک لایه گرافن را که با استفاده از روش FDTD شبیه‌سازی‌شده نشان می‌دهد.(این شبیه‌سازی با نتایج این مقاله [۴] کاملاً مطابقت دارد، که می‌تواند معیاری بر درستی مدل‌سازی اپتیکی گرافن در نظر گرفته شود.)



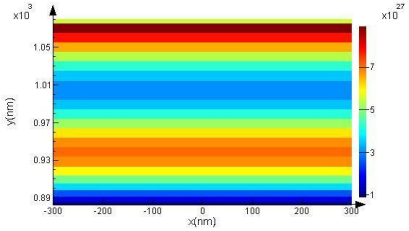
شکل۲: جذب شبیه‌سازی‌شده از تک لایه گرافن

نتایج شبیه‌سازی سلول خورشیدی

شکل ۳ الف و ب جذب کل و نرخ تولید الکترون-حفره را برای سلول آلی استاندارد که ساختار آن در شکل ۱ معرفی‌شده است را نشان می‌دهد. در شکل ۳ الف جذب کل محاسبه به روش متعارف Transfer Matrix Method(TMM) نیز آورده شده است. مطابقت جوابها نشان از درستی روند محاسبات به روش FDTD می‌تواند در نظر گرفته شود. قسمت حقیقی و موهومی ضریب شکست لایه‌های مختلف مورداستفاده از مراجع معتبر در این زمینه گرفته‌شده است.

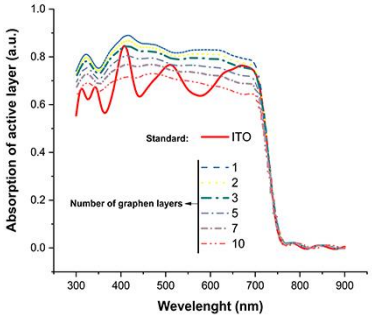


شکل۳ الف: جذب کلی سلول خورشیدی استاندارد



شکل۳ب: نرخ تولید الکترون-حفره سلول خورشیدی استاندارد

در مرحله‌ی بعد سلول خورشیدی همراه با گرافن یک یا چندلایه به‌جای الکترود آند (ITO) و آند/لایه کمکی (ITO-PEDOT:PSS) به روش FDTD شبیه‌سازی گردید. شکل ۴ ,۵ جذب جزئی لایه فعال سلول خورشیدی را به ترتیب برای هر دو حالت نشان می‌دهد.



شکل۴: جذب جزئی لایه فعال برای گرافن جایگزین ITO (آند گرافنی).

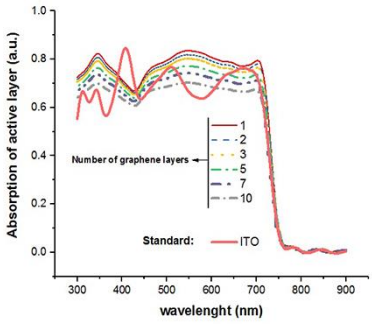
این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-06]

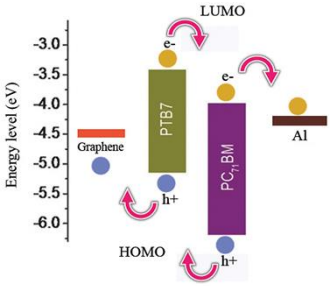
با توجه به شکل ۴ ,۵ ملاحظه می‌شود که استفاده از گرافن به میزان مناسبی بر عملکرد سلول خورشیدی می‌افزاید زیرا میزان جذب در لایه فعال بیشتر شده است.(در جدول ۱ مقادیر J_{SC} شبیه‌سازی‌شده سلول‌های مختلف آورده شده است.)

جدول ۱: مقادیر جریان مدار کوتاه شبیه‌سازی‌شده

نوع سلول	$J_{SC} - A/m^2$
استاندارد	۴۹۰/۲۵۸
گرافن تک لایه	۵۷۶/۴۷۷
گرافن دو لایه	۵۶۴/۰۹۱
گرافن سه لایه	۵۵۲/۱۱۳
گرافن پنج لایه	۵۲۹/۲۸۲
گرافن هفت لایه	۵۰۷/۸۶۴
گرافن ده لایه	۴۷۸/۱۴۵



شکل۵: جذب جزئی لایه فعال برای گرافن جای گزیده با ITO/PEDOT:PSS



شکل۶: سطح انرژی مواد در سلول خورشیدی مبتنی بر گرافن جایگزیده با ITO/PEDOT:PSS

سلول خورشیدی آلی شبیه سازی شده دارای یک فاز دهنده و گیرنده می باشد که با جذب فوتون در لایه ی فعال یک جفت الکترون حفره تولید می شود، جفت الکترون حفره تشکیل شده به سطح مشترک ماده دهنده-گیرنده نفوذ می‌کند و در آنجا الکترون و حفره از هم جدا می‌شوند. الکترون به کاتد و حفره به آند گرافنی منتقل می شود و باعث ایجاد جریان در سلول خورشیدی می شود.

جدول۲: مقادیر جریان مدارد کوتاه شبیه‌سازی‌شده برای گرافن جای گزیده با ITO/PEDOT:PSS

نوع سلول	$J_{SC} - A/m^2$
استاندارد	۴۹۰/۲۵۸
گرافن تک لایه	۵۴۳/۸۸۹
گرافن دو لایه	۵۳۴/۳۴۴
گرافن سه لایه	۵۲۵/۰۳۸
گرافن پنج لایه	۵۰۷/۱۵۷
گرافن هفت لایه	۴۹۰/۱۵۵
گرافن ده لایه	۴۶۶/۲۳۳

نتیجه‌گیری

با توجه به نتایج به‌دست‌آمده، استفاده از گرافن در افزایش کارایی و راندمان سلول خورشیدی می‌تواند بسیار مفید واقع شود. به‌عنوان نمونه نتایج شبیه‌سازی‌ها نشان داد که در جایگزینی به‌جای ITO و ITO/PEDOT:PSS در بهترین حالت موجب افزایش J_{SC} به میزان ۱۷/۶ و ۱۱ درصد گردید.

مرجع‌ها

[1] M. Rawat, E. Jayaraman, S. Balasubramanian, S-K. Iyer, “Organic Solar Cells on Paper Substrates”, Adv. Mater. Technol, vol. 4, 2019.
[2] T. Mahmoudi, Y. Wang, Y-B .Hahn, “Graphene and Its Derivatives for Solar Cells Application”, Nano Energy, vol. 47, 2018.
[3] S. Dennis, “Electromagnetic Simulation Using The FDTD Method”, pp. 1-165, 2000.
[4] S. Rakheja, P. Sengupta, “The tuning of light-matter coupling and dichroism in graphene for enhanced absorption”, J. Phys. D: Appl. Phys, 2016.

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

[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-06]