بیست و هشتمین کنفرانس اپتیک و
فوتونیک ایران و چهاردهمین کنفرانس
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،
دانشگاه شهید چمران اهواز،
خوزستان، ایران.
۱۲-۱۴ بهمن ۱۴۰۰

بهینه سازی عملکرد سلول خورشیدی پلیمری پیوند سه تایی نیمه‌شفاف با گیرنده غیرِ فولرنی : اثر ضخامت

المیرا میلانی[۱و۲]، مینا پیرعلائی[۲] و اصغر عسگری[۱و۲].

۱. **دانشکده فیزیک- دانشگاه تبریز**
۲. **گروه پژوهشی ادوات فوتونیکی- پژوهشکده فیزیک کاربردی و ستاره شناسی- دانشگاه تبریز**

Elmira.milaani@gmail.com

چکیده- سلول‌های خورشیدی پلیمری بدلیل هزینه‌ی ساخت ارزان و دسترسی به بهره تبدیل توان بالا، مورد توجه بسیاری قرار گرفته‌اند. یکی‌از ویژگی‌های بارز سلول‌های خورشیدی آلی، کاربرد آن‌ها در ساختارهای شفاف است که منجربه ظهور چشم‌اندازی نوین در کاربردهایی مانند پنجره، پرده و پوشش‌های سقف جهت تولید برق ساختمان‌ها و اتومبیل‌ها و کاربردهای معماری بسیاری می‌شود. اخیراً،گیرنده‌های مولکول کوچک غیرفولرنی، جایگزین خوبی برای گیرنده‌های معمولی فولرنی شناخته شده‌اند. ما در این مقاله به شبیه‌سازی یک سلول خورشیدی پلیمری پیوند سه تایی با گیرنده غیرِ فولرنی با خاصیت نیمه‌شفاف پرداخته‌ایم. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش ضخامت لایه فعال، جریان اتصال‌کوتاه به تدریج افزایش می‌یابد اما فاکتور پرشدگی به‌دلیل افزایش بازترکیب‌ها کاهش می‌یابد که این امر منجربه افزایش بهره تبدیل تا یک مقدار مشخص و پس‌ازآن کاهش بهره تبدیل می‌شود. ضخامت بهینه ناحیه فعال در این مقاله ۱۰۰ نانومتر بدست آمده است. همچنین بهره‌کوانتومی ساختار مورد مطالعه در طول موج‌های کوتاه‌تر از ۵۰۰ نانومتر با افزایش ضخامت افزایش یافته و برای طول موج‌های بالاتر به‌دلیل افزایش بازترکیب در لایه فعال که منجربه کاهش جمع‌آوری حامل‌ها می‌شود، با کاهش مواجه می‌شود.

کلید واژه- مواد آلی، مواد غیرفلورنی، سلول خورشیدی پلیمری پیوند سه گانه، پلیمر نیمه‌شفاف.

Optimization of Semi-transparent Organic Ternary Solar Cells with Non-Fullerene Acceptor: The Thickness Effects

Elmira Milani[1, 2], Mina Piralaee[2], and Asghar Asgari[1, 2]

1. **Faculty of Physics- University of Tabriz.**
2. **Photonic Devices Research Group, Research Institute for Applied Physics and Astronomy, University of Tabriz.**

Abstract- Polymer solar cells attracted a lot of attention due to their low cost and ability of high power conversion efficiency. One of the important features of organic solar cells is their application in transparent devices, leads to the emergence of novel perspectives in applications such as windows, curtains and roof coverings to generate electricity for buildings and cars and many architectural applications. Recently, non-fullerene small molecule acceptors known as good alternative to conventional fullerene acceptors. In this paper, we simulate ternary polymer solar cell with a non-fullerene acceptor with semi-transparent properties. The results show that with increasing the thickness of the active layer, the short-circuit current gradually increases, but the filling factor decreases due to the increase in recombination, which leads to an increment in the conversion efficiency up to a certain value, and then decreases. In this work, the optimal thickness of the active layer is 100 nm. Also, the quantum efficiency of the structure increases with thickness at wavelengths shorter than 500 nm and decreases for higher wavelengths due to increased recombination in the active layer, which leads to reduced carrier shrinkage.

Keywords: organic materials, non-fullerene materials, ternary solar cell, semi-transparent polymer.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-12-14]

مقدمه

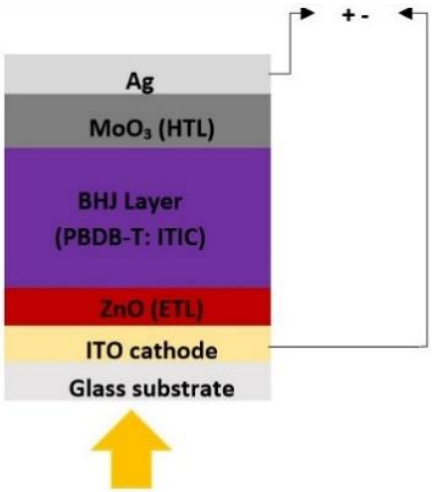
سلول‌های خورشیدی آلی به‌دلیل کم بودن هزینه ساخت، سبک‌وزنی، انعطاف‌پذیری و ماهیت نیمه‌شفاف، به‌عنوان یک منبع انرژی تجدیدپذیر توسط محققین بسیار مورد توجه قرار گرفته است. اخیراً بازده تبدیل توان سلول‌های خورشیدی (PCE) به‌دلیل مواد فتوولتائیک پیشرفته از ۱۲ درصد فراتر رفته است. یکی‌از ویژگی‌های قابل توجه سلولهای خورشیدی آلی نیمه‌شفاف بودن آن‌ها است که منجربه چشم‌اندازی نوین در ساخت پنجره‌ها و پرده‌های تولید برق برای ساختمان‌ها و اتومبیل‌ها و کاربردهای معماری و مد می‌شود[۱-۵]. برای ساخت یک سلول خورشیدی نیمه‌شفاف، جذب نور در داخل لایه فعال باید دقیقا تنظیم شود تا اجازه عبور نور کافی را بدهد. علاوه‌براین، هر دو الکترود باید شفاف باشند. روش‌های مختلفی برای ساخت الکترودهای شفاف وجود دارد[۶و۷]. نانولوله‌های کربنی کاندیدای مناسبی هستند، زیرا می‌توانند ارزان‌تر تولید شوند و انعطاف‌پذیری مکانیکی خوبی از خود نشان دهند. محلول دیگر مبتنی بر کربن، گرافیک و یا چند جفت کریستال فوتونیک به عنوان الکترود بالا و پایین نیز می‌توانند از دیگر گزینه‌ها باشند[۸و۹]. اخیراً، گیرنده‌های مولکول کوچک غیرفولرنی، جایگزین‌های بسیار خوبی برای گیرنده‌های معمولی فولرنی مورد استفاده در سلول‌های خورشیدی آلی به‌عنوان جمع‌کننده الکترون هستند. عملکرد برترسلول‌های بدون فولرنی ناشی از بهبود خواص نوری و الکترونیکی گیرنده‌های غیرفولرنی از جمله سطوح انرژی مولکولی به راحتی قابل تنظیم، خواص جذب نوری برتر و هزینه‌های مصنوعی کم‌تر درمقایسه‌با گیرنده‌های فولرنی است. این ویژگی‌های سودمند عملکرد بهبود یافته‌ای را که توسط سلول‌های خورشیدی آلی در چند سال گذشته نشان داده شده است، سرعت بخشیده است. پذیرنده غیرفولرنی (ITIC) نتایج بسیار امیدوارکننده‌ای را نشان داده است. این ماده مولکولی کوچک جدید دارای آخرین اوربیتال مولکولی اشغال نشده - 3.78 eV است که منجر به ولتاژ بالای مدار باز V_{oc} می‌شود .

روش کار

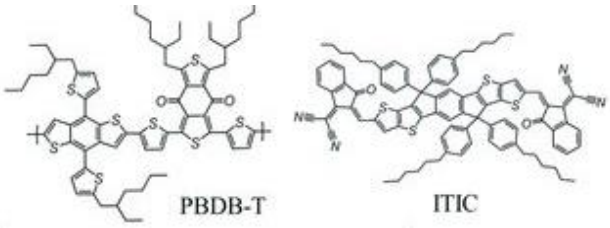
در این پژوهش، ما استفاده از مواد غیرفولرنی را در یک سلول خورشیدی نیمه‌شفاف نشان داده‌ایم. با انتخاب ضخامت‌های مختلف برای لایه فعال نیمه‌شفافPBDB-T:ITIC بازدهی بیش از ۷ درصد را به دست می‌آید که یکی‌از بالاترین مقادیر گزارش شده در یک ساختار نیمه‌شفاف است. نکته مهم این است که این راندمان بالا در کار تجربی انجام شده با AVT 25 درصد به دست آمده است که برای کاربردهای سلول خورشیدی شفاف بسیار مهم است[۱۰].

ساختار مورد استفاده برای این مطالعه در شکل ۱.الف نشان داده شده است که در آن، Ag به‌عنوان الکترود بالای شفاف عمل می‌کند، MoO_3 نیز به‌عنوان لایه انتقال دهنده حفره عمل می‌کند. لایه ZnO به‌عنوان لایه انتقال دهنده الکترون استفاده شده است و ITO الکترود زیرین شفاف است. پلیمر جدید، PBDB-T و مولکول کوچک غیرفولرنی، ITIC، به‌عنوان لایه فعال، همانطورکه در شکل ۱.ب نشان داده شده است، به‌ترتیب به‌عنوان دهنده و پذیرنده انتخاب شدند. بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده و پایین‌ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده مواد مورد استفاده در شکل ۱.ج نشان داده شده است. به‌منظور بهینه‌سازی ساختار مورد نظر، طیف وسیعی از ساختار با ضخامت‌های لایه فعال مختلف، از ۶۰ نانومتر تا ۱۲۰ نانومتر مورد بررسی قرار گرفته است. تحرک‌پذیری الکترون و حفره توسط داده‌های تجربی باتوجه‌به ضخامت مورد نظر از کارهای تجربی بدست آمده است[۱۰]. محاسبات با استفاده از نرم‌افزار اسکپس شبیه‌سازی شده است.

الف

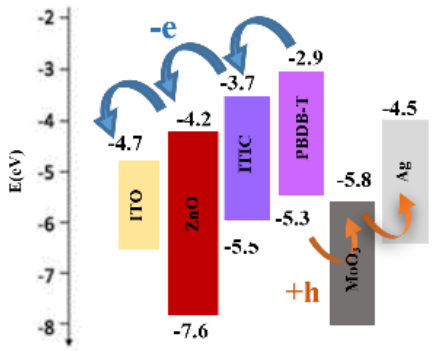


ب



[Downloaded from opsi.ir on 2025-12-14]

ج



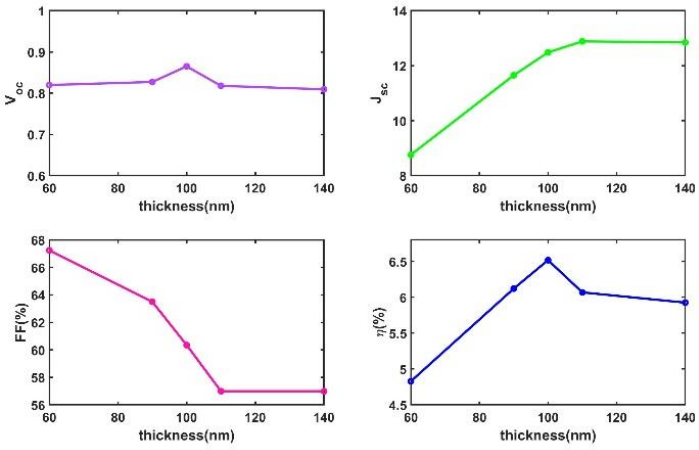
شکل۱. الف) نمودار شماتیک سلول‌های خورشیدی آلی نیمه‌شفاف. **ب)** ساختارهای شیمیایی مواد لایه فعال (پلیمر دهنده:PBDB-T و پذیرنده غیرفولرنی: ITIC. **ج)** نمودار سطح انرژی مواد مورد استفاده در ساختار.

بحث و نتایج

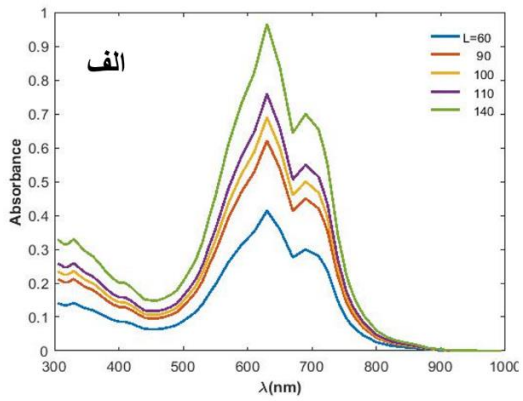
مشخصه های عملکردی سلول خورشیدی مورد مطالعه، در شکل۲ نشان داده شده است. این شکل به‌وضوح نشان می‌دهد که تمام ساختارهای نیمه- شفاف، یک ولتاژمدار باز مشابه دارند که نزدیک به ۰,۸ ولت است. این مقدار تقریبا ۰,۲ ولت بیش‌تر از ساختارهای حاوی گیرنده‌های سنتی فولرنی، به‌دلیل وجود اوربیتال مولوکولی اشغال نشده بالای گیرنده‌های غیرفولرنی است[۱۱] ، لذا مواد انتخابی یک عامل بسیار مهم است که به بهبود عملکرد ساختارهای فتوولتائیک کمک می‌کند. باتوجه‌به نمودارهای بدست آمده، با افزایش ضخامت لایه فعال، جریان اتصال کوتاه نیز افزایش یافت. با افزایش ضخامت لایه فعال از ۶۰ نانومتر به ۱۴۰ نانومتر، جریان اتصال کوتاه از ۸,۷۵ mA/cm^2 به ۱۲,۸۴ mA/cm^2 افزایش یافته است. این مقادیر در جدول ۱ نشان داده شده است. جذب لایه فعال، برای ضخامت‌های مختلف لایه‌ی فعال، در شکل ۳.الف نشان داده شده است. این یک روند واضح را نشان می‌دهد، با افزایش ضخامت لایه، جذب در کل محدوده طول موج افزایش می‌یابد. این روند در طول موج‌های بلند (<۵۰۰ نانومتر) مستقیماً با افزایش ضخامت باعث افزایش بهره کوانتومی خارجی می‌شود که با افزایش جذب فوتون مرتبط است. شکل ۳.ب و ۳.ج به ترتیب منحنی جریان ولتاژ و بهره‌ی کوانتومی سلول خورشیدی مورد مطالعه را نشان می دهد. برای طول موج های کوتاه روند منحنی بهری کوانتومی با روند نمایش داده شده در منحنی‌های جذب شکل ۳.الف مطابقت دارد. بهره‌ی کوانتومی خارجی با افزایش ضخامت افزایش می‌یابد. با افزایش ضخامت بیش از ۱۰۰ نانومتر، بهره کوانتومی خارجی به شدت کاهش می‌یابد .باتوجه‌به جذب اجزای منفرد، ITIC در تولید جریان نوری در این ناحیه نقش بسیار کمی دارد. کاهش بهره کوانتومی خارجی در این ناحیه تا حد زیادی به کاهش جریان نوری تولید شده در فاز PBDB-T مربوط می‌شود. مکانیسم دقیق این امر مشخص نیست. به‌نظر می‌رسد این اتفاق به‌دلیل افزایش بازترکیب در لایه ضخیم باشد، که منجربه کاهش جمع آوری حامل‌ها می‌شود. درمقابل ضریب‌پرشدگی با افزایش ضخامت همانطورکه در جدول۱مشاهده می‌کنیم، افزایش می یابد.

جدول ۱. پارامترهای عملکرد سلول‌خورشیدی نیمه‌شفاف مورد بررسی با ضخامت‌های لایه فعال مختلف تحت نورAM1.5G.

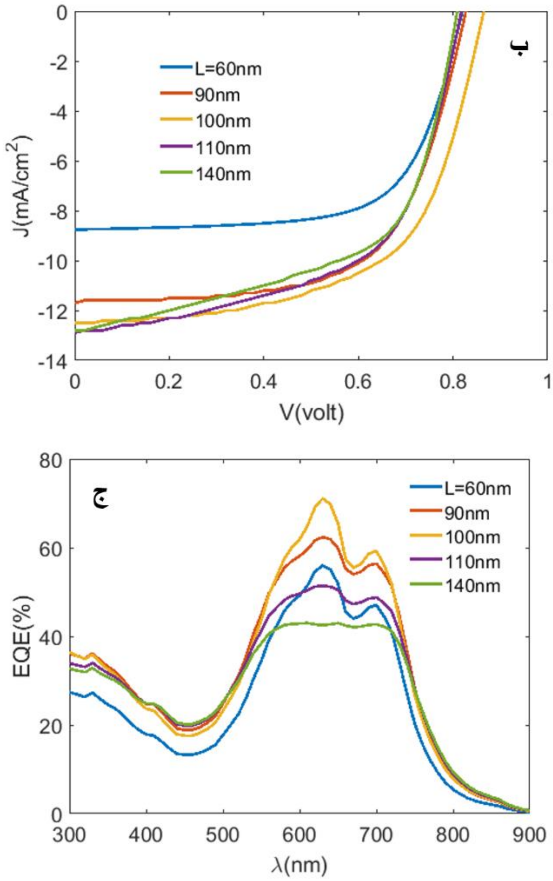
Active layer thickness (nm)	J_{sc} (mA/c m²)	V_{oc} (V)	FF (%)	η (%)
۶۰	۸.۷۵	۰.۸۱۹	۶۷.۲۴	۴.۸۲
۹۰	۱۱.۶۵	۰.۸۲۷	۶۳.۴۹	۶.۱۲
۱۰۰	۱۲.۴۸	۰.۸۶۱	۶۰.۳۴	۶.۵۱
۱۱۰	۱۲.۸۸	۰.۸۱۷	۵۶.۹۸	۶.۰۶
۱۴۰	۱۲.۸۴	۰.۸۰۹	۵۶.۹۷	۵.۹۲



شکل۲. مشخصه‌های عملکردی سلول خورشیدی مورد مطالعه به‌ازای ضخامت‌های مختلف بر حسب نانومتر.



[Downloaded from opsi.ir on 2025-12-14]



شکل ۳. الف) منحنی‌های J-V ساختار مورد مطالعه ، **ب)** طیف بهره کوانتومی خارجی و **ج)** طیف جذبی لایه فعال به‌ازای ضخامت‌های مختلف تحت نور AM1.5G.

نتیجه‌گیری

ما در این مقاله به شبیه‌سازی یک سلول خورشیدی پلیمری پیوند سه‌تایی با گیرنده غیرِ فولرنی با خاصیت نیمه‌شفاف پرداخته‌ایم. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش ضخامت لایه فعال، جریان اتصال‌کوتاه به تدریج افزایش می‌یابد اما فاکتور پرشدگی به‌دلیل افزایش بازترکیب‌ها کاهش می‌یابد که این امر منجربه افزایش بهره تبدیل تا یک مقدار مشخص و پس از آن کاهش بهره تبدیل می‌شود. ضخامت بهینه ناحیه فعال در این مقاله ۱۰۰ نانومتر بدست آمده است. همچنین بهره کوانتومی ساختار مورد مطالعه در طول موج‌های کوتاه تر از ۵۰۰ نانومتر با افزایش ضخامت افزایش یافته و برای طول موج‌های بالاتر به‌دلیل افزایش بازترکیب در لایه فعال که منجربه کاهش جمع‌آوری حامل‌ها می‌شود، با کاهش مواجه می‌شود.

مرجع‌ها

[1] Guo, W.; Xu, Z.; Zhang, F.; Xie, S.; Xu, H.; Liu, X. Y., Recent Development of Transparent Conducting Oxide-Free Flexible Thin-Film Solar Cells. *Adv. Funct. Mater.* **2016,** *26*, 8855-8884.

[2] Ma, H.; Yip, H.-L.; Huang, F.; Jen, A. K. Y., Interface Engineering for Organic Electronics. *Adv. Funct. Mater.* **2010,** *20*, 1371-1388.

[3] Forrest, S. R., The path to ubiquitous and low-cost organic electronic appliances on plastic. *Nature* **2004,** *428*, 911-918.

[4] Kaltenbrunner, M.; White, M. S.; Głowacki, E. D.; Sekitani, T.; Someya, T.; Sariciftci, N. S.; Bauer, S., Ultrathin and lightweight organic solar cells with high flexibility. Nat. Commun. **2012,** *3*, 770.

[5] Colsmann, A.; Puetz, A.; Bauer, A.; Hanisch, J.; Ahlswede, E.; Lemmer, U., Efficient Semi- Transparent Organic Solar Cells with Good Transparency Color Perception and Rendering Properties. *Adv. Energy Mater.* **2011,** *1*, 599-603.

[6] Li, S.; Ye, L.; Zhao, W.; Zhang, S.; Mukherjee, S.; Ade, H.; Hou, J., Energy-Level Modulation of Small Molecule Electron Acceptors to Achieve over 12% Efficiency in Polymer Solar Cells. *Adv. Mater.* **2016,** *28*, 9423-9429.

[7] Zhao, F.; Dai, S.; Wu, Y.; Zhang, Q.; Wang, J.; Jiang, L.; Ling, Q.; Wei, Z.; Ma, W.; You, W.; Wang, C.; Zhan, X., Single-Junction Binary-Blend Nonfullerene Polymer Solar Cells with 12.1% Efficiency. Adv. Mater. 2017, 1700144.

[8] Tai, Q.; Yan, F., Emerging Semitransparent Solar Cells: Materials and Device Design. *Adv. Mater.* **2017**, 1700192.

[9] Jeon, I.; Delacou, C.; Kaskela, A.; Kauppinen, E. I.; Maruyama, S.; Matsuo, Y., Metalelectrode- free Window-like Organic Solar Cells with p-Doped Carbon Nanotube Thin-film Electrodes. *Sci. Rep.* **2016,** *6*, 31348.

[10] Upama MB, Wright M, Elumalai NK, Mahmud MA, Wang D, Xu C, Uddin A. High-efficiency semitransparent organic solar cells with non-fullerene acceptor for window application. ACS Photonics. **2017** Sep 20;4(9):2327-34.

[11] Zhao, W.; Qian, D.; Zhang, S.; Li, S.; Inganäs, O.; Gao, F.; Hou, J., Fullerene-Free Polymer Solar Cells with over 11% Efficiency and Excellent Thermal Stability. *Adv. Mater.* **2016,** *28*, 4734-4739.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-12-14]