

تاثیر باز ترکیب و چگالی حاملین بار بر عملکرد سلول خورشیدی پلیمری نانوساختار

علی محمودلو* استادیار، گروه علوم پایه، دانشگاه فرهنگیان، تهران، ایران، mahmodlou_ali@yahoo.com

چکیده

در این مقاله با استفاده از مدل های مختلف باز ترکیب حاملین، اثرات پارامترهای اساسی بر عملکرد سلول های خورشیدی آلی نامتجانس و همچنین انتقال بار مورد بررسی قرار گرفته است. برای شبیه سازی این فرایندها، در این بخش با استفاده از حل خودسازگار معادلات سوق-پخش و معادله پواسون و همچنین استفاده از مدل های مختلف باز ترکیب از طریق روش اجزاء محدود، پارامترهای اساسی سلول های خورشیدی آلی توده ای با ساختار P3HT:PCBM مورد مطالعه قرار گرفته است. در بیشتر مدل ها و مطالعات نظری ارائه شده، ناحیه فعال در سلول های خورشیدی آلی را به صورت ذاتی فرض می نمایند حال آنکه این فرض برای مطالعه و بهینه سازی آنها دارای اشکالاتی می باشد و می بایست سهم آلیایده کردن پلیمرها برای مطالعه بهتر، در نظر گرفته شود. ساختار مورد مطالعه در شکل ۳ نشان داده شده است. این ساختار شامل ناحیه فعال با ساختار توده ای P3HT:PCBM به ضخامت ۱۰۰ نانومتر می باشد. **واژه های کلیدی:** سلول خورشیدی نانوساختار پلیمری، مدل سوق و پخش، ترابرد بار، باز ترکیب حاملین بار، اپتوالکترونیک، ادوات الکترونیکی نوری.

The effect of recombination and density of charge carriers on Function of nanostructured polymer solar cells

A. Mahmoudloo

Department of Basic Science, Farhangian University, Tehran, Iran

Abstract

In this paper, using different combinatorial models of carriers, the effects of basic parameters on the performance of heterogeneous organic solar cells as well as charge transfer are investigated. In order to simulate these processes, in this section, the basic parameters of P3HT: PCBM-structured organic solar cells have been studied by using the self-consistent solution of momentum-diffusion equations and Poisson equation, as well as using different recombination models by finite element method. In most of the proposed models and theoretical studies, the active region in organic solar cells is assumed to be inherent, while this assumption has drawbacks for studying and optimizing them, and the contribution of contaminating polymers should be considered for better study. To be taken. The studied structure is shown in Figure 3. This structure includes the active region with a mass structure of P3HT: PCBM with a thickness of 100 nm.

Keywords: Polymer nanostructure solar cell, Drift-Diffusion model, Charge transport, Charge carrier recombination, Optoelectronics, Optoelectronic devices.

به منظور بهینه سازی عملکرد این ادوات محسوب می شود. در واقع برای سلول های خورشیدی آلی حضور پیوندهای نامتجانس بین دو نیم رسانای متفاوت (دهنده و پذیرنده) برای تجزیه اکسایتون تولید شده (بر اثر تابش نور) حیاتی است. در یک دیود نورگسیل پلیمری دو ماده ترکیب شونده می توانند طوری انتخاب شوند که تزریق الکترون ها و حفره ها از الکترودها بصورت بسیار کارا تری انجام شود و نیز باز ترکیب حاملین بار در نزدیکی پیوند نامتجانس صورت پذیرد. در هر دو مورد ادوات مذکور نکته حایز اهمیت این است که الکترون ها و حفره ها می توانند در مولفه های متناظر ترکیب (یعنی الکترون ها در دهنده و حفره ها در پذیرنده) انتقال یابند، این انتقال از پیوند نامتجانس به الکترودها یا برعکس می باشد. این امر محدودیت های قابل ملاحظه ای را بر میکروساختارهایی که در چنین ادواتی مورد نیاز هستند ایجاد می کند.

مدل های مختلفی برای بررسی عملکرد سلول های خورشیدی مطرح شده است و این در حالیست که محققان در حال مطالعه و تکمیل مدل های نظری می باشند. این مدل های نظری تا کنون کمک های شایانی به یافته های تجربی و توجیه این یافته ها کرده اند. برای نمونه، نتایج یافته های نظری با شبیه سازی اپتوالکترونیکی اثبات نموده اند که

۱- مقدمه

سلول های خورشیدی پلیمری دارای تفاوت های بسیاری با سلول های خورشیدی معدنی و یا غیر آلی می باشند. در این نوع سلول ها جهت بررسی و بهینه سازی، شبیه سازی الکتریکی و اپتیکی توسط گروه های تحقیقاتی در سراسر جهان صورت گرفته و می گیرد. مطالعه نظری و شبیه سازی فرایندها به پژوهشگران کمک می کند تا بتوانند فیزیک و عملکرد سلول ها را به طور اساسی بررسی کرده و با مطالعه عوامل موثر بر بازده و عملکرد، مواد پلیمری با ویژگی های مناسبی را انتخاب نمایند. برای مثال با استفاده از این یافته ها می توان با ترکیب کردن پلیمرها به عنوان یک روش مناسب برای تنظیم خواص فیزیکی پلیمرها در سلول های آلی استفاده نمود. اغلب ترکیب کردن پلیمرها می تواند منجر به ترکیب شدن ویژگی های هر دو مولفه ترکیب شونده شود و گاهی اوقات ساختار ترکیب دارای خواصی است که هیچیک از مولفه ها چنین خواصی را دارا نیستند. در زمینه الکترونیک آلی که در آن لایه های پلیمری با تهیه محلول از پلیمرهای مزدوج و سپس لایه نشانی محلول حاصل- برای کاربرد در دیودهای نورگسیل و یا سلول های خورشیدی آلی- ساخته می شوند، ترکیب کردن یک روش جالب

* نویسنده مکاتبه کننده، آدرس پست الکترونیکی: mahmodlou_ali@yahoo.com

تاریخ دریافت: ۰۰/۱۲/۲۱

تاریخ پذیرش: ۰۱/۰۳/۰۲

$$\int v^\alpha \left(\frac{\partial f}{\partial t} + v \nabla_r f + a \nabla_v f \right) dv = \int v^\alpha \frac{\partial f}{\partial t} dv \quad (1)$$

رابطه فوق از چهار عبارت تشکیل یافته است که با مساوی قرار دادن $\alpha = 0$: عبارت اولی انتگرالگیری از همه سرعتها که همان تغییرات چگالی ذرات $n(r)$ بر حسب زمان خواهد بود:

$$\int \frac{\partial f(r, v, t)}{\partial t} dv = \frac{\partial}{\partial t} n(r) \quad (2)$$

عبارت دوم با در نظر گرفتن اینکه v و r مستقل از یکدیگرند، بصورت زیر نوشته می شود [۴]:

$$\int v \nabla_r f(r, v, t) dv = \int \nabla_r (f(r, v, t) v) dv = \nabla_r \int v f(r, v, t) dv \quad (3)$$

$$\nabla_r \int v f(r, v, t) dv = \nabla_r (n(r) \langle n(r) \rangle) = \nabla_r j(r) \quad (4)$$

که $j(r)$ چگالی جریان ذره است. سومین عبارت تحت یک میدان

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F \nabla_v f dv \quad \text{الکتریکی اعمالی } F \text{ متناسب است با:}$$

که این انتگرال برابر با صفر می باشد زیرا مقدار f بی نهایت کوچک می باشد و بطور تقریبی صفر در نظر گرفته می شود و چهارمین عبارت نیز که انتگرال برخورد است، برابر با صفر می باشد [4] پس:

$$\frac{\partial}{\partial t} n(r) + \nabla_r j(r) = 0 \quad (5)$$

که این معادله، معادله پیوستگی نامگذاری شده است. با ارزیابی مرتبه اول معادله تکانه ($\alpha = 1$) معادله سوق و پخشی حاصل می شود [5]:

$$n \mu F - D \nabla_r n = J \quad (6)$$

که در رابطه فوق $\mu = \frac{e \tau}{m}$ تحرک پذیری حامل بار و τ زمان

پراکندگی (میانگین زمانی بین برخوردها) و m جرم ذره است. [۶] وقتی که الکترون در روی تک مولکول جایگزیده باشد و از یک سایت به سایت دیگری پرش نماید، زمان پرش خیلی کوچکتر از زمان جایگزیدگی بار در روی مولکول خواهد بود. در مجموع لایه های خیلی نازک شامل چند ده مولکول پیچیده بصورت تابع $f(r, v, t)$ تعریف می شود.

به هر حال الکترون ها و حفره ها بر روی مولکول ها قرار گرفته و شامل چگالی حامل بار n و p می باشند. ابعاد قطعه خیلی بزرگتر از طول پرش و طول عمر حاملین بار در محدوده ای هستند که بتوانند قبل از بازترکیب چندین پرش را داشته باشند. بنابر این تراورد بار توسط پرش چند مرحله ای حاملین بار رخ خواهد داد. این جریان را علیرغم جایگزیدگی بارها می توان توسط پدیده های سوق و پخشی توصیف نمود. در حالت خاص در حالت مانا، میانگین چگالی ها در سایت های مربوط به چندین پرش را می توان توسط یک DOS و آمار فرمی دیراک بیان کرد. [۷ و ۸]

ضخامت موثر برای جذب فوتون های نوری در حدود ۱۰۰ نانومتر خواهد که بعدها توسط نتایج تجربی نیز اثبات شدند. در سلول های خورشیدی آلی بازترکیب حاملین بار تولید شده توسط نور، یکی از عوامل مهم کاهش جریان نوری، ولتاژ و در نتیجه بازده می باشد.

عملکرد سلول های خورشیدی آلی توده ای به طور مستقیم به روش ساخت، ویژگی های مواد و مشخصات فیزیکی و جغرافیایی مانند شدت تابش نور خورشید، دمای محیط و ... مورد استفاده وابسته می باشد. یکی از عوامل مهم در ویژگی های مواد مورد استفاده در سلول های خورشیدی آلایش نیم رساناهای نوع n و p می باشد. برخلاف سلول های خورشیدی معدنی، پلیمرهای نیم رسانای مورد استفاده در سلول های خورشیدی آلی به صورت ذاتی غیر آلاییده سنتز می شوند. با این حال یافته های تجربی نشان می دهد که آلاییده کردن مواد مورد استفاده در سلول های خورشیدی آلی باعث بهبود عملکرد آن می شود. برای آلاییده کردن نیم رساناهای پلیمری روش های مختلفی مانند اضافه نمودن مواد فعال کننده سطحی، نمک ها و ... در حین سنتز وجود دارد، ولی اضافه کردن این مواد جهت آلاییده کردن مواد پلیمری باعث به وجود آمدن ناکاملی ها و نواحی باردار در ساختار پلیمر نیز می شوند. با اضافه نمودن برخی ناخالصی ها می توان باعث انتقال الکترون به نواحی رسانای الکترون (آلایش نوع n) و یا حذف الکترون در ناحیه رسانایی حفره جهت تولید حفره (آلایش نوع p) گردید. با وجود اینکه بیشتر نیم رساناهای معدنی را می توان به هر دو صورت نوع n و p آلاییده کرد (GaN) را نمی توان به راحتی به صورت نوع p آلاییده نمود، در حال حاضر ماده مناسبی جهت آلایش نوع n در نیم رساناهای آلی یافته نشده است.

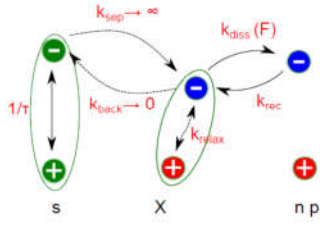
در بیشتر مدل ها و مطالعات نظری ارائه شده، ناحیه فعال در سلول های خورشیدی آلی را به صورت ذاتی فرض می نمایند حال آنکه این فرض برای مطالعه و بهینه سازی آنها دارای اشکالاتی می باشد و می بایست سهم آلاییده کردن پلیمرها برای مطالعه بهتر، در نظر گرفته شود. در این مقاله با استفاده از مدل سوق-پخشی و استفاده از مدل های مختلف ارائه شده برای بازترکیب حاملین بار، اثرات آلایش نوع n و p را در پلیمرهای مورد استفاده در یک سلول خورشید آلی توده ای با ساختار $P3HT : PCBM$ مورد بررسی قرار داده در سلول های خورشیدی آلی بازترکیب حاملین بار تولید شده توسط نور، یکی از عوامل مهم کاهش جریان نوری، ولتاژ و در نتیجه بازده می باشد که هدف اصلی این تحقیق می باشد، مدل های مختلفی برای بازترکیب حاملین ارائه شده است که یکی از مدل های دقیق، مدل سوق و پخشی می باشد که در این مقاله توسط کدنویسی در محیط نرم افزار MATLAB انجام گرفته است.

۲- نظریه

برای بدست آوردن معادلات پیوستگی و سوقی - پخشی^۱ از معادله بولتزمن، از روش تکانه استفاده می شود. یعنی معادله بولتزمن در توانهای α سرعت ضرب شده و در نهایت بر روی سرعت انتگرال گیری می شود:

¹ Drift - Diffusion

برای بازترکیب یون ها تحت شرایط مرزی، بازترکیب در فاصله صفر یون ها بسط داد. بران این مدل را برای حالت انتقال بار با طول عمر محدود به کار برد [۱۲ و ۱۳].



شکل ۱- نرخ برهمکنش اکسایتون ها (S)، حالت‌های (X) CT، و حاملین بار (n, P) در اتصال دهنده-پذیرنده. بازترکیب جفت توسط K_{relax} بیان می شود. تفکیک X می تواند وابسته میدان باشد (F).

بطور خاص در توده با پیوند ناهمگون، توصیف افزایش میدان تفکیکی به آسانی نمی تواند باشد، زیرا اتصال دهنده و پذیرنده هر دو بطور تصادفی جهت گیری می شوند و در یک بعد بر میدان الکتریکی عمود نیستند. مدل اونساگر-بران برای بیان کیفیت تاثیر فرایند بازترکیب جفت بر روی منحنی مشخصه $J-V$ نیز به کار می رود [۱۵ و ۱۴].

نرخ تولید حامل بار در یک توده با اتصال ناهمگون (G) توسط معادله p و بازترکیب R با عامل $(1-p)$ تصحیح می گردد:

$$G = G_0 p, R = R_0 (1-p) \quad (14)$$

که G_0 نرخ تولید حالت‌های انتقال بار (CT) و R_0 نرخ بازترکیب دومولکولی (مستقیم) است [۱۶].

در این فرایند ها فاصله بین حاملین بار بطور بی نظم بوده و p هم بصورت تابع توزیع $f(a, x)$ حول فاصله نرمال a بیان می شود که احتمال کلی تفکیک به صورت رابطه زیر خواهد بود:

$$P(a, T, F) = \int_0^{\infty} p(x, T, F) f(a, x) dx \quad (15)$$

که تابع توزیع $f(a, x)$ بصورت زیر بیان می شوند:

$$f(a, x) = \frac{4}{\sqrt{\pi} a^3} x^2 e^{-x^2/a^2} \quad (16)$$

با در نظر گرفتن شرایط فوق، معادله پیوستگی برای اکسایتون های انتقال بار (X) بصورت رابطه زیر بیان می گردد: [۱۴].

$$\frac{dX}{dt} = R_{sep} - \kappa_{relax} X - \kappa_{diss} X + R \quad (17)$$

این معادله شامل قسمتهای جدایی اکسایتون ها $R_{sep} \propto \kappa_{sep}$ و بازترکیب حاملین بار آزاد $R \propto \kappa_{rec}$ برای حالت‌های انتقال بار و واهلش و تفکیک می باشد. معادله فوق به راحتی می تواند با جاگذاری

$$\frac{dX}{dt} \text{ به جای } \frac{\Delta X}{\Delta t} \text{ مورد ارزیابی قرار گیرد [۱۷].}$$

۳- محاسبات و شبیه سازی

در بررسی چگالی های حاملین بار، نرخ تغییر معمولاً بصورت $\frac{\partial}{\partial t} \approx \frac{\Delta}{\Delta t}$ محاسبه می شود. که این روش، روش خوبی برای حفره

ها می تواند باشد. نرخ گذار چگالی حفره $\frac{\Delta p^{i \rightarrow i+1}}{\Delta t}$ از موقعیت i به موقعیت $i+1$ متناسب با چگالی خود حامل بار و تقسیم سرعت بر فاصله بین مسیر حرکتی است که حامل بار طی می کند. به عبارت دیگر مقدار حفره های $\Delta p^{i \rightarrow i+1}$ عبوری از موقعیت i به $i+1$ در زمان Δt توسط حاصلضرب سرعت در زمان و تقسیم بر فاصله i و $i+1$ خواهد بود [۱۰ و ۱۱].

$$\frac{\Delta p^{i \rightarrow i+1}}{\Delta t} \approx \frac{\partial p^{i \rightarrow i+1}}{\partial t} = \frac{v^i}{\Delta r} p^i \quad (7)$$

با در نظر گرفتن سرعت سوق به جای v :

$$\frac{\partial p^{i \rightarrow i+1}}{\partial t} = \frac{\mu_p^i F^i}{\Delta r} p^i \quad (8)$$

با در نظر گرفتن سرعت پخش به جای v :

$$\frac{\partial p^{i \rightarrow i+1}}{\partial t} = \frac{D_p}{\Delta r} = \frac{\mu_p k_B T}{e \Delta r} \quad (9)$$

که شامل معادله کلاسیکی اینیشتین نیز می باشد. نتیجه نرخ گذار حفره به علت پخش بصورت زیر است:

$$\frac{\partial p^{i \rightarrow i+1}}{\partial t} = \frac{\mu_p k_B T}{e d \Delta r^2} p_i \quad (10)$$

در حالت کلی وقتی معادله عمومی اینیشتین به کار می رود، جهت پخش حاملین بار اهمیت زیادی نخواهد داشت. بنابر این:

$$\frac{\partial p^{i \rightarrow i+1}}{\partial t} = \frac{\partial p^{i \rightarrow i-1}}{\partial t} \quad (11)$$

چگالی جریان کلی ذره J به راحتی از معادله زیر قابل محاسبه خواهد شد:

$$J^i = J_n^i + J_p^i = e \left(\frac{\partial p^{i \rightarrow i+1}}{\partial t} - \frac{\partial p^{i+1 \rightarrow i}}{\partial t} - \frac{\partial n^{i \rightarrow i+1}}{\partial t} + \frac{\partial n^{i+1 \rightarrow i}}{\partial t} \right) \Delta r \quad (12)$$

بازترکیب جفت، همان بازترکیب یک الکترون با یک حفره که از برانگیزش نوری ایجاد شده اند، است (شکل ۲). این فرایند معادل با واهلش یک حالت انتقال بار در اتصال ناهمگون دهنده و پذیرنده می باشد. در شکل زیر واهلش (K_{relax}) در رقابت با تفکیک (K_{diss}) احتمال تولید حامل بار را نتیجه می دهد [۱۳].

$$p = \frac{K_{diss}}{K_{diss} + K_{relax}} \quad (13)$$

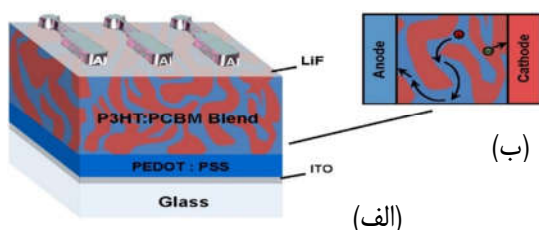
پس عمدتاً مدل اونساگر-بران^۱ برای توصیف وابستگی نرخ تفکیک به دما و میدان حالت انتقال بار به کار می رود. اونساگر این تئوری را

^۱ Onsager-Braun-Model

عملکرد سلول های خورشیدی آلی توده ای به طور مستقیم به روش ساخت، ویژگی های مواد و مشخصات فیزیکی و جغرافیایی مانند شدت تابش نور خورشید، دمای محیط و ... مورد استفاده وابسته می باشد. یکی از عوامل مهم در ویژگی های مواد مورد استفاده در سلول های خورشیدی آلایش نیم رساناهای نوع n و p می باشد. برخلاف سلول های خورشیدی معدنی، پلیمرهای نیم رسانای مورد استفاده در سلول های خورشیدی آلی به صورت ذاتی غیر آلاییده سنتز می شوند. با این حال یافته های تجربی نشان می دهد که آلاییده کردن مواد مورد استفاده در سلول های خورشیدی آلی باعث بهبود عملکرد آن می شود. برای آلاییده کردن نیم رساناهای پلیمری روش های مختلفی مانند اضافه نمودن مواد فعال کننده سطحی، نمک ها و ... در حین سنتز وجود دارد، ولی اضافه کردن این مواد جهت آلاییده کردن مواد پلیمری باعث به وجود آمدن ناکاملی ها و نواحی باردار در ساختار پلیمر نیز می شوند. با اضافه نمودن برخی ناخالصی ها می توان باعث انتقال الکترون به نواحی رسانای الکترون (آلایش نوع n) و یا حذف الکترون در ناحیه رسانایی حفره جهت تولید حفره (آلایش نوع p) گردید. با وجود اینکه بیشتر نیم رساناهای معدنی را می توان به هر دو صورت نوع n و p آلاییده کرد (GaN) را نمی توان به راحتی به صورت نوع p آلاییده نمود، در حال حاضر ماده مناسبی جهت آلایش نوع n در نیم رساناهای آلی یافته نشده است [۱۸].

البته پلیمرهای نیم رسانا می توانند با سایر مواد مانند پلیمرهای بی اثر و مولکول های کوچک ترکیب شوند. بارزترین مثال در سلول های خورشیدی، ترکیب پلیمرهای مزدوج بایکی از مشتقات فلورن که همان PCBM است، می باشد که دارای ویژگی های اپتوالکترونیکی مناسب جهت استفاده در ساختار سلول خورشیدی آلی توده ای می باشد. در این کاربرد، هر چند ترکیب کردن پلیمرهای مزدوج با دیگر سلول هایی با کارایی کمتری راه دست می دهد ولی مزایای بسیار دیگری از جمله امکان ایجاد تغییراتی در ساختار شیمیایی و الکترونیکی و نیز کنترل بهتر میکروساختارها را به ارمغان می آورد [۱۸] و [۱۷].

ساختار مورد مطالعه در شکل ۲ نشان داده شده است. این ساختار شامل ناحیه فعال با ساختار توده ای P3HT:PCBM به ضخامت ۱۰۰ نانومتر می باشد.



شکل ۲- الف) شکل طرحواره ساختار مورد استفاده در شبیه سازی P3HT:PCBM (ب) فرایند انتقال بار در پلیمر P3HT:PCBM [۱۴].

۴- نتایج شبیه سازی و بحث

در بیشتر مدل ها و مطالعات نظری ارائه شده، ناحیه فعال در سلول های خورشیدی آلی را به صورت ذاتی فرض می نمایند حال آنکه این فرض برای مطالعه و بهینه سازی آنها دارای اشکالاتی می باشد و می بایست سهم آلاییده کردن پلیمرها برای مطالعه بهتر، در نظر گرفته می شود.

اشاره به این نکته در خورتوجه است که بطور کلی دستیابی به ساختار ایده آل با آلاییده کردن مورد نظر و ساخت پیوندهای نامتجانس بدون عیب در فصل مشترک بین نیم رساناها کار بسیار دشواری است. پیوندهای نامتجانس در نیم رساناهای غیر آلی بوسیله نقص های الکترون یکی به سبب پیوندهای آماده شکار (پیوندهایی که شدیداً مهیبی واکنش با سایر عناصر می باشند) تشکیل شده در فصل مشترک مختل می شوند (یعنی ناکامل اند)، و اجتناب از این ناکاملی ها تنها از راه رشد دادن به روش روآراستی که باید بسیار با دقت صورت گیرد و نیز بسیار گران می باشد میسر است. در واقع برای بدست آوردن ویژگی هایی نظیر تحرک بالای حاملین، آلایش مناسب و رسانندگی مورد نظر برای بدست آوردن بهترین بازده می بایست از ترکیب کردن پلیمرها استفاده نمود.

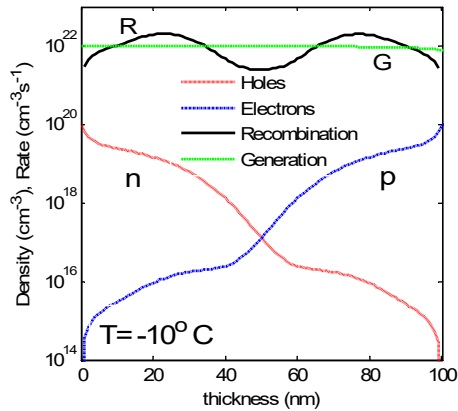
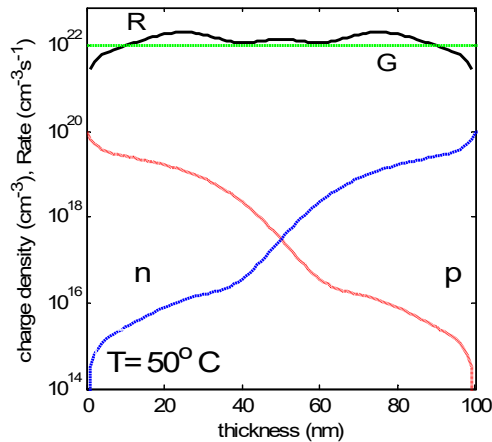
از این منظر، نیم رساناهای آلی و بویژه پلیمرهای مزدوج مزایای منحصر بفردی را دارا می باشند. هیچ پیوندی در فصل مشترک یک نیم رسانای آلی شکسته نمی شود و از اینرو ترازهای انرژی الکترونی در هر یک از وجوه پیوند نامتجانس (بوسیله حضور خود پیوند نامتجانس) بطور قابل ملاحظه ای مختل نمی شوند. چنین ویژگی ای تصویر نسبتاً ساده ای از ساختار الکترونیکی یک پیوند نامتجانس ایجاد شده در یک سیستم یک ممکن است دارای میکروساختارهای فیزیکی پیچیده ای باشد ارائه می دهد.

جدول ۱- پارامترهای فیزیکی مورد استفاده در شبیه سازی [13,14,16]

پارامتر	نماد	مقدار	واحد
تحرک حفره	μ	2×10^{-5}	cm^2/Vs
تحرک الکترون	$n\mu$	2×10^{-4}	cm^2/Vs
بار الکتریکی	e	1.6×10^{-19}	C
ضریب گذردهی خلا	σ	8.85×10^{-14}	C^2/Nm^2
ضریب گذردهی نسبی	ϵ	5	-
ثابت بولتزمن	k	1.38×10^{-23}	$\text{m}^2 \text{kg s}^{-2} \text{K}^{-1}$
دما	T	300	K
ضخامت	x	100	nm
ضریب لانگوین	r	$1/95 \times 10^{-12}$	-
شدت تابشی خورشید	P_{in}	1000	Wm^{-2}

در این بخش چگالی حاملین را در بازه ای انتخاب می نمایم که از نظر تجربی نیز قابل حصول باشند. بدین منظور چگالی حاملین نوع p (N_p) 10^{17} تا 10^{19}cm^{-3} و چگالی حاملین نوع n (N_n) در سه مقدار 5×10^{17} ، 5×10^{18} و $5 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$ انتخاب می نمایم. در شکل 3 تاثیر افزایش N_p را 10^{17}cm^{-3} تا $N_n = 5 \times 10^{17}$ بر چگالی حاملین الکترون و حفره نسبت به ضخامت ناحیه فعال (نقطه ۰ به عنوان آند تا ۱۰۰ نانومتر به عنوان کاتد) نشان داده شده است.

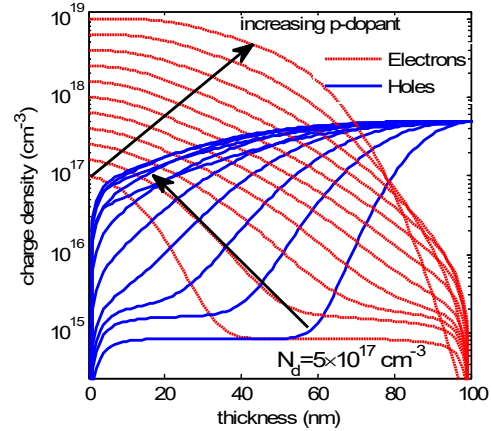
حال با استفاده از روابط معادلات سوق و پخش می توان پارامترهای اساسی سلول خورشیدی نظیر جریان مدار کوتاه (I_{sc})، ولتاژ مدار باز (V_{oc})، فاکتور پرشوندگی (FF)، و بازده (η) را محاسبه نمود. در شکل ۴ تغییرات چگالی حاملین بار، نرخ تولید و باز ترکیب حاملین در دو دمای مختلف (-10°C و 50°C) نسبت به ضخامت ناحیه فعال نشان داده شده است. همانطور که در این شکل دیده می شود، کاهش حاملین بار در نزدیکی آند و کاتد در نتیجه ی میدان الکتریکی قوی در آنجا می باشد که این میدان قوی باعث انتقال حاملین شده و نرخ باز ترکیب کاهش می یابد. با کاهش دما چگالی حاملین بار در ناحیه فعال سلول کاهش یافته و در نتیجه انتظار می رود با کاهش باز ترکیب حاملین، بازده سلول افزایش یابد.



شکل ۵- تغییرات چگالی، نرخ تولید و باز ترکیب حاملین بار در دودمای مختلف (-10°C و 50°C) نسبت به ضخامت ناحیه فعال به علاوه همانطور که در شکل ۵ ب دیده می شود، با افزایش دما حاملین بار بیشتری به ناحیه فعال انتقال می یابند که این انتقال باعث افزایش نرخ باز ترکیب شده و حاملین بار بیشتری در ناحیه فعال سلول از دست رفته و در نتیجه آنها در تولید فوتولتاژ شرکت نمی کنند.

به طور نظری V_{oc} به صورت زیر با پارامترهای فیزیکی ماده مورد استفاده متناسب است [9]

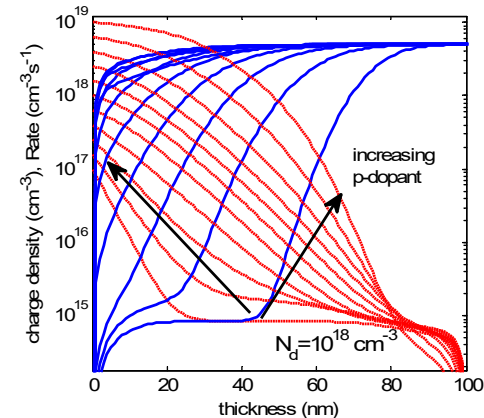
$$qV_{oc} \propto E_g - k_B T \ln\left(\frac{N_p N_d}{np}\right) \quad (18)$$



شکل ۳- تغییرات چگالی حاملین الکترون (خط چین) و حفره (خط ممتد) نسبت به افزایش N_p در $N_d = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ در ضخامت ناحیه فعال در سلول خورشیدی آلی توده ای. جهت فلش ها افزایش N_p را نشان می دهد.

همانطور که در شکل فوق دیده می شود، با افزایش چگالی حاملین آلیای نوع p، چگالی الکترون ها در آند افزایش می یابد و به بیشینه مقدار آن در بیشترین مقدار N_p می رسد. با افزایش تدریجی N_p برابری چگالی حاملین بار الکترون و حفره که در ابتدا به طور تقریبی در نقطه میانی ناحیه فعال است، به سمت آند حرکت می نماید ولی با افزایش بیشتر، این برابری به سمت آند تغییر می نماید. در واقع افزایش حاملین نوع p، باعث افزایش حاملین حفره شده در نتیجه به علت فزونی، این حاملین می توانند به کاتد نزدیک تر شوند.

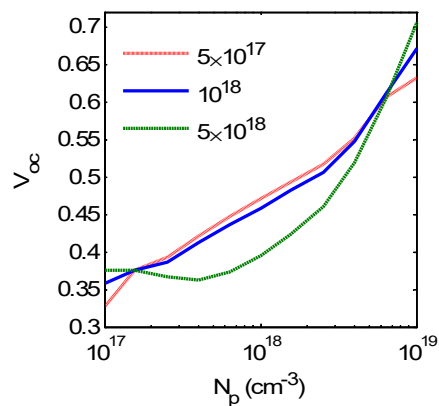
برای حالتی که چگالی حاملین نوع n را افزایش می دهیم، نمودار تغییرات چگالی حاملین بار را نسبت به ناحیه فعال بدست می آوریم. شکل 3 این نمودار را در حالتی که $N_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ می باشد، نشان می دهد. مانند شکل 2 نیز حاملین حفره با افزایش N_p افزایش می یابد.



شکل ۴- تغییرات چگالی حاملین الکترون و حفره نسبت به افزایش N_p در $N_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ در ضخامت ناحیه فعال در سلول خورشیدی آلی توده ای جهت فلش ها افزایش N_p را نشان می دهد.

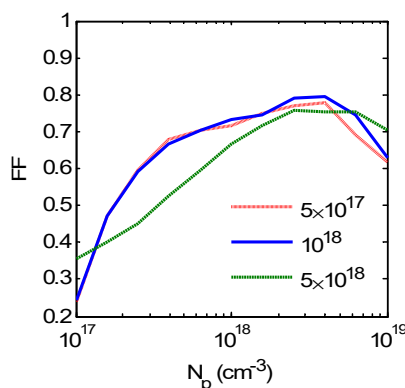
همانطور که دیده می شود، V_{oc} رابطه مستقیمی با باند انرژی ماده داشته و همچنین با افزایش دما انتظار میرود که کاهش داشته باشد. ولی با این وجود تغییرات آن نسبت به N_p و N_h مستقیم نمی باشد و به مدل های بازترکیب مورد استفاده در محاسبات وابسته است که می بایست به صورت خودسازگار محاسبه گردد.

در شکل ۶، تغییرات ولتاژ مدار باز را در سه حالت N_h ، برای تغییرات چگالی آلایش نوع p نشان داده شده است. همانطور که در این شکل دیده می شود، در حالت کلی با افزایش N_p در N_h های متفاوت، V_{oc} افزایش می یابد ولی در قسمت اعظم بازه N_p ، N_p در چگالی بیشتر حاملین دهنده با نوع n ($5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$)، کمتر از دو حالت دیگر می باشد. با افزایش N_p از 10^{17} تا 10^{19} cm^{-3} ، V_{oc} به میزان دو برابر افزایش می یابد که نشان می دهد برای افزایش میزان V_{oc} می بایست نیم رساناهای پلیمری مورد استفاده در ناحیه فعال را به صورت آلایده شده استفاده نمود.



شکل ۶- منحنی تغییرات V_{oc} نسبت به افزایش چگالی حاملین N_p در سلول خورشیدی آلی توده ای در سه N_h مختلف.

با محاسبه V_{oc} می توان ضریب پرشوندگی یا همان FF را محاسبه نمود. شکل (۷) منحنی تغییرات FF را نسبت به افزایش چگالی حاملین N_p نشان می دهد.

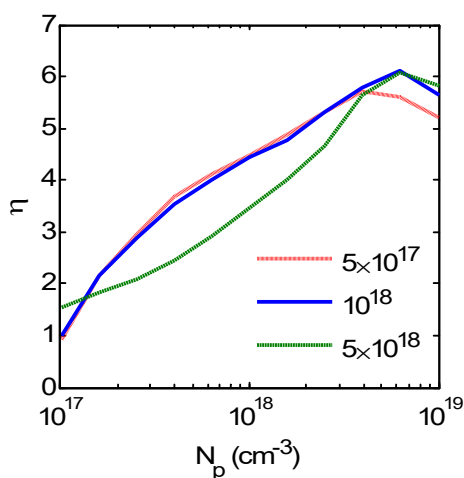


شکل ۷- منحنی تغییرات FF نسبت به افزایش چگالی حاملین N_p در سلول خورشیدی آلی توده ای. در سه N_h مختلف.

در ساختار مورد نظر با افزایش N_p منحنی FF به صورت سهمی وار تغییر پیدا می کند که این منحنی ها دارای یک مقدار بیشینه در حدود بازه $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ می باشد. همانطور که دیده می شود که همواره کمتر از دو حالت دیگر می باشد.

در ساختار مورد نظر با افزایش N_p منحنی FF به صورت سهمی وار تغییر پیدا می کند که این منحنی ها دارای یک مقدار بیشینه در حدود بازه $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ می باشد. همانطور که دیده می شود در چگالی $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ، N_p همواره کمتر از دو حالت دیگر می باشد. برای بررسی بهتر، نمودار بازده سلول در سه حالت N_p ، برای تغییرات چگالی آلایش نوع p نشان داده شده است شکل ۸.

همانطور که دیده می شود، با افزایش N_p ، بازده سلول به صورت خطی تا مقدار بیشینه ای افزایش یافته و سپس کاهش می یابد. الگوی افزایشی و کاهش η تحت تاثیر FF بوده و مانند آن می باشد. در این حالت نیز بازده در چگالی $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ کمتر از دو مقدار دیگر می باشد.



شکل ۸- منحنی تغییرات η نسبت به افزایش چگالی حاملین N_p در سلول خورشیدی آلی توده ای بر پایه $P3HT : PCBM$. سه N_h مختلف.

نتایج شبیه سازی نشان می دهد که در سلول های خورشیدی آلی با ساختار توده ای همواره آلایش مواد نیم رسانای پلیمری باعث افزایش مشخصات اساسی سلول می شود به طوری که بازده سلول با افزایش میزان آلایش تا ۶ افزایش می یابد که این نتایج در توافق خوبی با نتایج گزارش شده می باشد.

آلایش نوع n در پلیمرهای نیم رسانا همواره دارای مشکلات عدیده ای می باشد لذا تعیین میزان مناسب آلایش می تواند باعث کاهش بهبود ساختار و صرفه جویی در زمان و هزینه ساخت سلول نیز گردد. نتایج این شبیه سازی نشان می دهد که با تعیین دقیق پارامترهای فیزیکی و یافتن حالت بهینه برای آلایش نوع p، ساختار بهینه با بیشترین بازده را بدست آورد. نتایج بدست آمده نشان می دهد در ساختار مورد مطالعه، بهینه ترین حالت زمانیست که cm^{-3} 5×10^{18} N_p بوده و cm^{-3} 10^{18} N_h باشد. نمودار جریان ولتاژ ساختار بهینه در مقایسه با بیشترین میزان آلایش نوع n در شکل ۸ نشان

- [2] Tromholt T., Manceau M., Helgesen M., Carle J.E., Krebs F.C., Degradation of semiconducting polymers by concentrated sunlight, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, Vol. 95, pp. 1308-1320, 2011.
- [3] Zhou Y., Pei J., Dong Q., Sun X., Liu Y., Tian W., Donor-Acceptor Molecule as the Acceptor for Polymer-Based Bulk Heterojunction Solar Cells, *J. Phys. Chem. C*, Vol. 113, pp. 7882-78809, 2009.
- [4] Mahmoudloo A., Ahmadi S., Influence of the temperature on the charge transport and recombination profile in organic bulk heterojunction solar cells: a drift-diffusion study, *J. Appl. Phys. A*, Vol. 119(4), pp1523-1529, 2015.
- [5] Rezzonico D., Perucco B., Knapp E., Hausermann R., Reinke N.A., Muller F., Ruhstaller B., Numerical analysis of exciton dynamics in organic light-emitting devices and solar cells, *J. of Photonics for Energy*, Vol. 1, pp 11005-11009, 2011.
- [6] Kotlarski J.D., Koster L. J. A., Blom P. W. M., Lenes M., and Slooff L.H., Combined optical and electrical modeling of polymer:fullerene bulk heterojunction solar cells, *J. Appl. Phys.* Vol. 103, pp 84502-84510, 2008.
- [7] Fallahpour A.H., Gagliardi A., Santoni F., Gentilini D., Zampetti A., Auf der Maur M., and Di A. Carlo Modeling and simulation of energetically disordered organic solar cells, *J. Appl. Phys.* Vol. 103, pp 184502-184508, 2014.
- [8] Yahyazadeh R., Hashempour Z., Effect of Hydrostatic pressure on optical Absorption coefficient of InGaN/GaN of Multiple Quantum well solar cells, *Journal of optoelectronic Nano structures*, Vol.6, pp 1-22, 2021.
- [9] Koster L. J. A., Smits E. C. P., Mihailetschi V.D., Blom P.W.M., Device model for the operation of polymer/fullerene bulk heterojunction solar cells, *Phys. Rev. B*, Vol72, pp85205-85211, 2005.
- [10] Nelson J., Kwiatkowski J.J., Kirkpatrick J., and Frost J.M., Modeling charge transport in organic photovoltaic materials, *Acc. Chem. Res.*, Vol. 42, pp1768-1773, 2009.
- [11] Stelzl F.F., Wurfel, U., Modeling the influence of doping on the performance of bulk heterojunction organic solar cells: One-dimensional effective semiconductor versus two-dimensional onor/acceptor model, *Phys. Rev. B.*, Vol. 86 pp 75315-75322, 2012.
- [12] Ray. B and Alam M.A., Random vs regularized OPV: Limits of performance gain of organic bulk heterojunction solar cells by morphology engineering, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, Vol. 99, pp 204-209, 2012.
- [13] Pfeiffer M., Leo K., Zhou X., Huang J. S., Hofmann M., Werner A., Blochwitz-Nimoth J., Doped organic semiconductors: Physics and application in light emitting diodes, *Organic Elec.* Vol.4, pp 89103-89110, 2003,
- [14] Gregg B. A., Transport in Charged Defect-Rich p-Conjugated Polymers, *J. Phys. Chem. C*, Vol.113, pp. 5899-5905, 2009.
- [15] Gregg B. A., Charged defects in soft semiconductors and their influence on organic photovoltaics, *Soft Matter.*, Vol.5, pp. 2985-2994, 2009.
- [16] Nollau A., Pfeiffer M., Fritz T., Leo K., Controlled n-type doping of a molecular Organic semiconductor: naphthalenetetracarboxylic dianhydride (NTCDA) doped with bis (ethylenedithio)- tetrathiafulvalene (BEDT-TTF), *J. Appl. Phys.*, Vol. 87, pp 4340-4343, 2000.
- [17] Veysel Tunc A., De Sio A., Riedel D., Deschler F., Da Como E., Parisi J., von Hauff E., Molecular doping of low-bandgap-polymer, *J. Appl. Phys.* Vol.87, pp. 4340-4343, 2000.

[۱۸]. بدری، عالم رجعی، بتول زمانی، مدل سازی عددی و ارزیابی تجربی

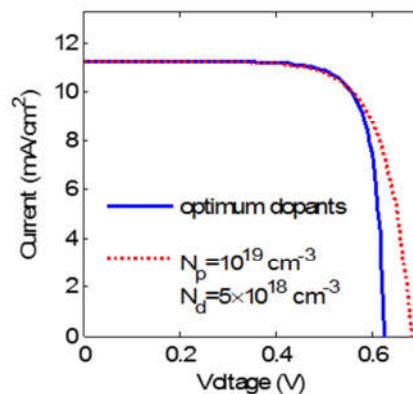
عملکرد سلول های خورشیدی تحت تمرکز نور خورشید، نشریه مهندسی

مکانیک دانشگاه تبریز، دوره ۴۸، شماره ۱، اردیبهشت ۱۳۹۷، صفحه ۴۵-

۵۴

داده شده است. همانطور که دیده می شود با افزایش N_h نمودار جریان ولتاژ S مانند می شود.

آلایش نوع n در پلیمرهای نیم رسانا همواره دارای مشکلات عدیده ای می باشد لذا تعیین میزان مناسب آلایش می تواند باعث کاهش بهبود ساختار و صرفه جویی در زمان و هزینه ساخت سلول نیز گردد. نتایج این شبیه سازی نشان می دهد که با تعیین دقیق پارامترهای فیزیکی و یافتن حالت بهینه برای آلایش نوع p ، ساختار بهینه با بیشترین بازده را بدست آورد. نتایج بدست آمده نشان می دهد در ساختار مورد مطالعه، بهینه ترین حالت زمانیست که cm^{-3} $N_p=5 \times 10^{18}$ بوده و $N_h=10^{19}$ باشد. نمودار جریان ولتاژ ساختار بهینه در مقایسه با بیشترین میزان آلایش نوع n در شکل ۹ نشان داده شده است. همانطور که دیده می شود با افزایش N_h نمودار جریان ولتاژ S مانند می شود.



شکل ۹- نمودار جریان ولتاژ ساختار بهینه در مقایسه با بیشترین میزان آلایش نوع n $N_p=5 \times 10^{18} cm^{-3}$

۵- نتیجه گیری

در مقاله ارائه شده حاضر، تاثیر تراز آلایش روی ویژگی های ساختار $PCBM : P3HT$ با استفاده از مدل سوق و پخش بررسی شد و در آلایش های بالا و پایین ترابرد بار مورد مطالعه واقع گردید که بهترین حالت برای آلایش P مربوط به تراکم $N_p = 6 \times 10^{18} cm^{-3}$ و برای آلایش N مربوط به تراکم $N_n = 10^{18} cm^{-3}$ می باشد. نتایج شبیه سازی نشان داد که در سلول های خورشیدی آلی با ساختار توده ای همواره آلایش مواد نیم رسانای پلیمری باعث افزایش مشخصات اساسی سلول می شود به طوری که بازده سلول با افزایش میزان آلایش تا ۶ افزایش می یابد که این نتایج در توافق خوبی با نتایج گزارش شده می باشد.

۶- مراجع

- [1] Liang C., Wang Y., Li D., Ji X., Zhang F., He Z., Modeling and simulation of bulk heterojunction polymer solar cells, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, Vol.127, pp. 67-86, 2014.