



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



افزایش جذب و چگالی جریان اپتیکی در سلول خورشیدی آلی TTF:TCNQ توسط پلاسمون های سطحی موضعی

محمد فلاح خرد، پگاه اسلامی، حمیدرضا قمی

p.eslami.sbu@gmail.com

چکیده - در این مقاله به صورت نظری با استفاده از روش تفاضل محدود در حوزه زمانی، افزایش جذب و چگالی جریان در لایه فعال سلول خورشیدی آلی، ناشی از پلاسمون پلاریتون های سطحی موضعی، بررسی شده است. نشان داده می شود که از طریق نانومیله های نقره درون ناحیه فعال TTF:TCNQ با دوره تناوب و ارتفاع و سطح مقطع مشخص، به علت پراکندگی نور و گذارهای زیرباندی بین سطح فرمی و LUMO ماده فعال، افزایش جذب و چگالی جریان را خواهیم داشت. نشان داده خواهد شد که با توجه به نمودار سه بعدی جذب میدان های فرودی جفت شده با نانوذررات، با مدهای موجود در ناحیه فعال کوپل شده و موجب افزایش جذب می شود.

کلید واژه- افزایش جذب، افزایش چگالی جریان، پلاسمون سطحی موضعی، سلول خورشیدی آلی

Optical Absorption and current density enhancement in TTF: TCNQ organic solar cell by Localized surface Plasmon

Mohammad Fallahkherad, Pegah Eslami, Hamidreza Ghomi

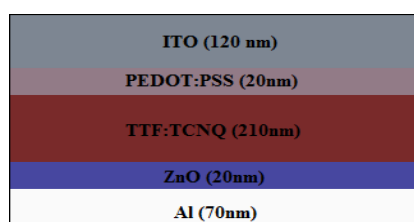
p.eslami.sbu@gmail.com

Abstract- In this paper we investigated theoretically enhancement in optical absorption and current density in organic solar cell with finite different time domain(FDTD) method, due to the localized surface plasmons. **we show that absorption and current density will increase due to scattering and sub bandgap passage between metal fermi level and LUMO of active layer with silver Nano rods inside TTF: TCNQ active layer.**

Keywords: Optical absorbtion enhancement, Current density enhancement, Localized surface plasmon, Organic solar cell

مقدمه

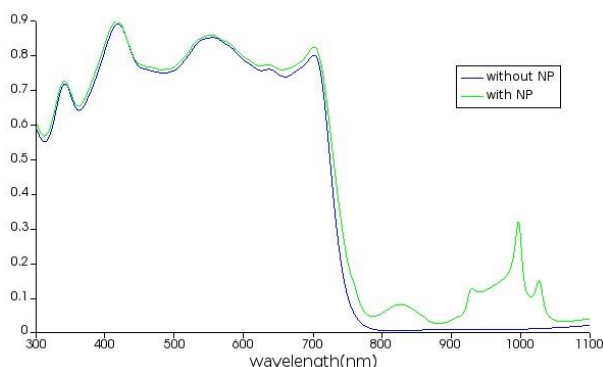
ظرفیت و رسانش انتقال حفره و الکترون در سلول خورشیدی را راحت تر می کند. یک چشمه مانند نور خورشید از نوع امواج تخت در طول موج ۳۰۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر شبیه سازی شده است و ناحیه شبیه سازی به صورت سه بعدی و به طول ۶۰۰ نانومتر می باشد که شرایط مرزی در آن در جهت X و Y به صورت متناوب و در جهت Z به صورت لایه های ایده آل هماهنگ انتخاب شده است.



شکل (۱)- نمای کلی سلول خورشیدی آلی طراحی شده.

ماده فعالی که در این پژوهش استفاده شده است، پلیمر TTF:TCNQ می باشد، که محدوده جذب آن تا طول موج های ۷۵۰ نانومتر خوب می باشد (مطابق شکل ۲)، اما برای جذب در طول موج های بالاتر، از خواص نانوذرات پلاسمونیک نانومیله های نقره استفاده شده است.

نانوساختارهای طراحی شده در این پژوهش به صورت استوانه (نانو میله) و در مرز مشترک بین لایه فعال و ZnO درون لایه فعال قرار گرفته اند. در ابتدا اثر یک نانوساختار استوانه ای در این لایه فعال مورد بررسی قرار گرفته است.



شکل (۲)- نمودار جذب سلول خورشیدی در حالت بدون نانوذره و با یک نانومیله نقره.

همانطور که در نمودار جذبی هم ملاحظه می شود با وارد کردن نانوساختار استوانه ای در مرکز صفحه XY درون لایه

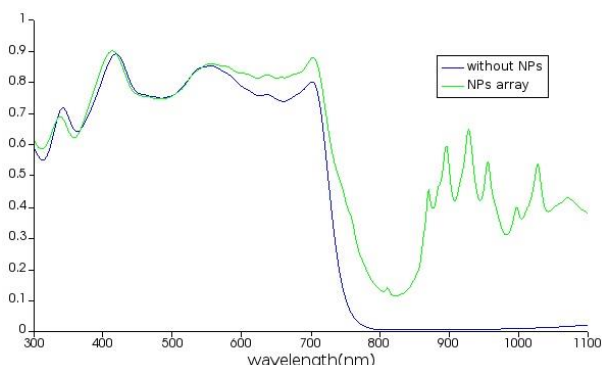
سلول های خورشیدی ارگانیکی به علت مزیت هایی نظیر، کم هزینه بودن، ساخت آسان، قابل انعطاف بودن و... مورد توجه بسیار قرار گرفته است [۱]. اما به دلایلی نظیر کوچک بودن طول اکسایتون ها و تحرک پذیری کم حامل های تولید شده، این نوع از سلول های خورشیدی دارای بازده کمی می باشند [۲]. برای افزایش بازده این نوع سلول خورشیدی از روش های متعددی تا کنون استفاده شده است که از بین آن ها می توان به ساختار تاندم [۳]، تغییر ماده الکترودها [۴]، استفاده از ساختار های توری [۵] و استفاده از نانو ذرات پلاسمونیک [۶] اشاره کرد.

نانوذرات فلزی نظیر طلا و نقره، دارای الکترون های آزاد بر روی سطح خود می باشند. این الکترون های آزاد، در حضور میدان الکترومغناطیسی، بر روی سطح اتم فلز نوسان می کنند. زمانی که فرکانس نوسانات الکترون های آزاد فلز، با فرکانس نور فرودی، در فرکانس رزونانس پلاسمون، جفت می شود، موجب (۱) افزایش میدان نزدیک در اطراف نانو ذره و (۲) افزایش میدان دور به علت پراکندگی شدید از سطح نانو ذرات فلز، می شود. که در نتیجه آن، با افزایش طول مسیر اپتیکی نور و گیراندازی نور در داخل ناحیه فعال، جذب در این ناحیه افزایش می یابد. فرکانس رزونانس، به تابع دی الکترونیک، شکل و اندازه نانوذرات وابسته می باشد [۷ و ۸].

روش شبیه سازی و تحلیل داده ها

در این شبیه سازی از روش تفاضل محدود در حوزه زمانی از مجموعه نرم افزار لومریکال استفاده شده است. در الکتروده بالایی از ITO به ضخامت ۱۲۰ نانومتر استفاده شده است که هم در محدوده طیفی مورد نیاز ما شفافیت خوبی دارد، هم به علت قرارگرفتن تراز های آن به خوبی حفره ها را جمع آوری می کند. همچنین در بالا و پایین لایه فعال به ترتیب از لایه های نازک PEDOT:PSS و ZnO به ضخامت ۲۰ نانومتر استفاده شده است، به این علت که هم شفافیت بالایی دارند و هم به علت قرار گرفتن تراز های

دوره تناوب فاصله بین مرکز یک نانومیله تا مرکز نانو میل
دیگر در نظر گرفته شده است.



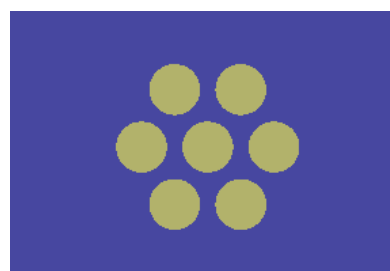
شکل (۴)- نمودار جذب برای حالت بدون نانوذره و حالت آرایه ای از نانومیله های نقره.

همانطور که از نمودار شکل (۴) مشاهده می شود، شدت پیک های جذبی برای طول موج های بالای ۷۵۰ نانومتر افزایش یافته است. به طوری که در طول موج ۹۲۶ نانومتر جذب تا ۶۴ درصد افزایش یافته است. و همچنین در طول موج ۷۵۸ نانومتر تا ۳۵ درصد جذب افزایش یافته است در حالی که با یک نانوذره در این طول موج ۱۵ درصد جذب داشتیم. همچنین چگالی جریان از 17.9 mA/cm^2 به 25.4 mA/cm^2

mA/cm^2 افزایش یافته است. در واقع علت این امر تداخل میدان های اطراف نانومیله ها با هم و به وجود آوردن یک میدان قوی تر در اطراف آن ها است، که این میدان قوی و نور جفت شده با چند قطبی های نانومیله ها با رفت و آمد در طول ناحیه فعال باعث گذار های زیر بانندی بین سطح فرمی نانوفلز و سطح LUMO پلیمر لایه فعال شده و جذب نور فرودی در ناحیه فعال را افزایش میدهد. در واقع مکانیسمی که در اینجا اتفاق می افتد کوپل شدن میدان فرودی با چند قطبی های موجود در هر نانومیله، اثر میدان های تشدید شده در اطراف نانوذرات بر تحریک مجدد چند قطبی ها، و تداخل آن ها با نور های عبوری و بازتاب شده از سطح فصل مشترک بین لایه فعال و لایه های PEDOT:PSS و ZnO می باشد.

فعال در طول موج های بالاتر از ۸۰۰ نانومتر، چهار پیک جذبی خواهیم داشت که حتی تا ۳۰ درصد جذب درون لایه فعال در این محدوده افزایش می یابد. این پیک های جذبی نمایانگر برهمکنش های بین دو قطبی های موجود در فلز و نور فرودی می باشد. البته در طول موج های ۸۲۰ و ۹۹۰ نانومتر نمایانگر برهمکنش چند قطبی ها با میدان فرودی می باشد، و پیک های دیگری که دیده می شود، بیانگر گذارهای زیرباندی می باشد که بین لایه های رسانش نانوساختار و ماده فعال صورت می گیرد.

هدف اصلی این پژوهش طراحی یک آرایه ای از نانو میله های نقره می باشد که با آرایشی مانند یک شش وجهی درون لایه فعال، کنار هم قرار گرفته اند (مطابق شکل ۳).



شکل (۳)- نمای نانوذرات وارد شده درون لایه فعال از بالا.

قرار دادن نانوذرات پلاسمونیک در کنار هم، درون ماده فعال، علاوه بر اعمال خواص پلاسمونیک درون ساختار، موجب بر هم کنش بین میدان های پراکنده شده از سطح هر نانوذره می باشد. این تداخل می تواند هم سازنده و هم مخرب باشد. در اینجا هدف ما این است تا با انتخاب و تغییر مناسب پارامترهایی نظیر، قطر سطح مقطع استوانه ها و ارتفاع آن ها، به ساختاری برسیم که موجب افزایش میدان و جذب بهینه در ماده فعال شود.

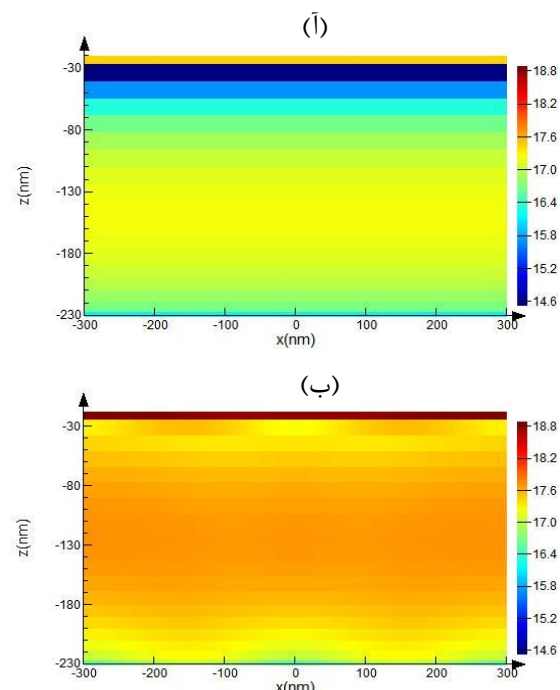
مطابق شکل (۳) نانومیله های نقره به صورت عمودی و در جهت محور Z درون لایه فعال سلول خورشیدی وارد شده اند. ارتفاع هر نانوذره ۱۲۰ نانومتر، قطر سطح مقطع آن ۱۰۰ نانومتر و دوره تناوب بین نانومیله ها ۱۳۰ نانومتر می باشد.

نتیجه گیری

با توجه به اهمیت گسترش سلول های خورشیدی آلی، ما در این پژوهش با وارد کردن آرایه ای از نانومیل ها از جنس نقره، توانستیم در لایه فعال TTF:TCNQ میزان جذب برای طول موج های بالاتر از ۸۰۰ نانومتر، تا ۶۵ درصد و چگالی جریان از ۱۷،۹ تا ۲۵،۴ mA/cm^2 افزایش دهیم. مکانیسم این افزایش کوپل شدگی میدان پراکنده شده با مد هایی که در طول ناحیه حرکت می کنند، گذار های زیرباندی و افزایش بازتاب و عبور از سطح مشترک ماده فعال با ماده های دیگر می باشد.

مراجع

- [1] Hoth, C.N., Schilinsky, P., Choulis, S.A. and Brabec, C.J. Printing highly efficient organic solar cells. *Nano letters*, 8(9), pp.2806-2813.2008.
- [2] Bartelt, J.A., Bailey, Z.M., Hoke, E.T., Mateker, W.R., Douglas, J.D., Collins, B.A., Tumbleston, J.R., Graham, K.R., Amassian, A., Ade, H. and Fréchet, J.M.,. The importance of fullerene percolation in the mixed regions of polymer-fullerene bulk heterojunction solar cells. *Advanced Energy Materials*, 3(3), pp.364-374.2013.
- [3] Dennler, G., Prall, H.J.R., Koeppe, R., Egginger, M., Autengruber, R. and Sariciftci, N.S. Enhanced spectral coverage in tandem organic solar cells. *Applied Physics Letters*, 89(7), pp.73502-73502.2006.
- [4] O'Connor, B., Haughn, C., An, K.H., Pipe, K.P. and Shtein, M. Transparent and conductive electrodes based on unpatterned, thin metal films. *Applied Physics Letters*, 93(22), p.223304.2008.
- [5] Niggemann, M., Glatthaar, M., Gombert, A., Hinsch, A. and Wittwer, V. Diffraction gratings and buried nano-electrodes—architectures for organic solar cells. *Thin Solid Films*, 451, pp.619-623.2004.



شکل (۵)- نمودار سه بعدی جذب در صفحه XZ برای آ (بدون نانوذره ب) آرایه ای از نانوذرات با ارتفاع ۱۲۰ nm، قطر ۱۰۰ nm و دوره تناوب ۱۳۰ nm در فاصله ۱۰۰ nm از آرایه.

در شکل (۵) نمودار سه بعدی جذب درون ناحیه فعال نشان داده شده است. محور عمودی سمت راست بیانگر جذب می باشد که برای ساده سازی مقدار آن لوگاریتم جذب در مبنای ۱۰ می باشد. این نمودار سه بعدی در فاصله ۱۰۰ نانومتری در جهت Y از آرایه نانوذرات در صفحه XZ محاسبه شده است، تا تنها میزان افزایش جذب درون خود لایه فعال بررسی شود. همانطور که مشاهده می شود در راستای نانوذرات جذب به طور چشم گیری افزایش یافته است و این نکته بیانگر آن است که میدان پراکنده شده از چند قطبی ها به خوبی با مدهایی که در طول ناحیه فعال در حرکتند کوپل شده است. و همچنین به علت افزایش میدان های پراکنده شده، سطح مشترک بین ناحیه فعال و PEDOT:PSS به علت افزایش فوتون های عبوری و بازتابی نشان دهنده حضور میدان های شدید می باشد.