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

بررسی اثر تغییر ضخامت لایه‌ی فعال بر مشخصه های عملکردی سلول های خورشیدی آلی P3HT:PCBM

زینب شکراللهی[۱]، 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

zeinab.shokrollahi95@gmail.com

چکیده –امروزه سلول های خورشیدی آلی به دلیل فناوری ساخت ارزان و ساختارهای متنوع آنها و همچنین بهره ی تبدیل توان بالا مورد توجه بیشتری قرار گرفته اند. در این مقاله، مشخصه های عملکردی یک سلول خورشیدی آلی ناهمگن توده ای با لایه ی فعال از جنس P3HT:PCBM به ازای ضخامت های مختلف لایه ی فعال، بررسی شده است که برای شبیه سازی آن از نرم افزار اسکپس استفاده شده است. تاثیرات ناشی از افزایش و کاهش ضخامت را بر تمام مشخصه های عملکردی سلول خورشیدی شامل: جریان اتصال کوتاه، ولتاژمدار باز، فاکتور پرشدگی و بهره ی تبدیل توان بررسی کرده ایم. نتایج نشان می دهد که با افزایش ضخامت تا یک مقدار معین، افزایش بهره ملاحظه می شود ولی از یک مقدار معین به بعد، به دلیل اتلافات ناشی از بازترکیب در داخل لایه ها و همچنین سطوح مریوط به آن، کاهش بازدهی، اتفاق می افتد.

کلید واژه- سلول خورشیدی آلی، فرآیند های بازترکیب، شبیه سازی اسکپس، بهره ی تبدیل توان.

The role of active layer thickness on performance parameters of P3HT: PCBM organic solar cell

Zeinab Shokrollahi[1], 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- Recently, organic solar cells have attracted wide attention due to their low-cost manufacturing technology and varied structures, as well as their high power conversion efficiency. In this paper, the characteristic performance parameters of a bulk heterogeneous organic solar cell with active layer of P3HT: PCBM with different thicknesses of the active layer is investigated. Simulations are done using the 1-dimensional Scaps simulation software. We have investigated the effects of altering the thickness of active layer, on performance parameters of the solar cell, including: short-circuit current, open circuit voltage, fill factor and power conversion efficiency. The results show that with increasing the thickness up to a certain value, an increase in efficiency is observed, but at higher thicknesses, due to losses mechanisms such as recombination within the layers and bounaries, a decrease in efficiency occurs. The results of this simulation are also has been compared with the results of similar experimental papers.

Keywords: organic solar cell, recombination processes, Scaps simulation, power conversion efficiency.

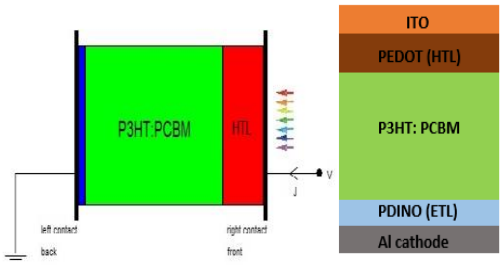
[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-12-17]

مقدمه

فناوری فتوولتائیک می تواند در حوزه‌ی وسیعی از کاربردها در مکان های جغرافیایی و شرایط آب و هوایی مختلف به تامین انرژی کمک کند. سلول های خورشیدی براساس نوع ساختار و مواد بکاربرده شده به دو گروه اصلی معدنی و آلی و یا ترکیب این دو، تقسیم بندی میشوند. ترکیب مواد دهنده و پذیرنده در یک مخلوط آلی باعث افزایش محدوده میان سطحی دهنده: پذیرنده در سلول خورشیدی می شود که این امر باعث افزایش تفکیک بار و بازده جمع آوری حاملین می شود. بااین وجود، توسعه ی عملکرد سلول خورشیدی آلی ناهمگن توده ای،به شدت به شرایط پردازش مانند نسبت مخلوط کردن، افزودنی حلال و بازپخت پس از تولید، وابسته است[۱و۲]. علاوه براین، کنترل مورفولوژی پیوند ناهمگن توده ای و کاهش حجم تله های سطح/رابط برای بهبود مسیرهای ترابرد حامل به الکترودهای مربوطه و دستیابی به عملکرد بالا ضروری هستند[۳]. ضخامت لایه فعال، عامل مهمی در تغییر عملکرد سلول خورشیدی بشمار می آید. کاهش ضخامت لایه ی جاذب(فعال) باعث می شود که سطح اتصال پشتی به ناحیه ی تهی نزدیکتر شود. بنابراین الکترون ها براحتی جذب سطح اتصال پشتی می شوند و بدلیل شرکت آنها در پدیده ی بازترکیب، میزان الکترون های تاثیرگذار بر روی بازده کم میشود و درنتیجه چگالی جریان اتصال کوتاه، ولتاژ مدارباز و ضریب پرشدگی کاهش می یابد. با افزایش ضخامت لایه فعال، تعداد فوتون های جذب شده افزایش می یابد در نتیجه تعداد حاملین بیشتری تولید شده و بازده کوانتومی افزایش می یابد. البته این نکته هم باید مدنظر باشد که بعد از ضخامت بهینه که بیشترین عملکرد را در اختیار ما می گذارد، بدلیل افزایش مقاومت های موجود در سلول و افزایش تلفات ناشی از بازترکیب های موجود در رابط هاو لایه ها، عملکرد سلول شروع به کاهش می کند.

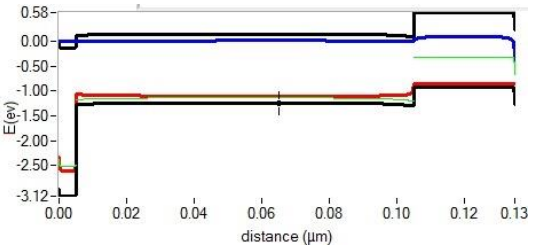
طراحی و مدل بندی ساختار

شکل۱ ساختار سلول خورشیدی آلی ناهمگن توده ای مورد مطالعه را به دوصورت شماتیک و ساختار شبیه سازی شده با نرم افزار اسکپس ، نشان میدهد.



شکل ۱. ساختارشماتیک سلول خورشیدی آلی ناهمگن توده ای مورد مطالعه.

همانطور که در شکل۱ مشخص است ساختار سلول خورشیدی مورد مطالعه از سه لایه ی اصلی شامل: لایه های انتقال دهنده ی الکترون(پریلن دی‌ایمید عامل دار با آمینو نیتروژن-اکسید) PDINO و حفره (پلی (۳،۴-اتیلن دی اکسی تیوفن) پلی استیرن سولفونات) PEDOT:PSS و لایه مخلوط پیوند توده ای P3HT:PCBM ساخته شده است که توسط دو الکترود آند (ITO) و کاتد (Al) با تابع کار های به ترتیب ۴،۵ و ۴،۱ الکترون ولت ساندویچ شده است[۴و۵] . شکل ۲ شماتیکی از ترازهای باندی لایه ها را با مقدار گاف باندی نشان میدهد.



شکل ۲. نمودار ساختار باندی لایه های مختلف سلول خورشیدی آلی مورد مطالعه.

با توجه به نمودار شکل۲، ملاحظه می شود که در نمودار ترازهای باندی، پتانسیل داخلی در مناطق ذاتی (به عنوان مثال لایه فعال) در جهتی ایجاد می شود، که الکترون ها می توانند به سمت لایه انتقال الکترون و حفره ها به سمت لایه انتقال حفره منتقل شوند. جدول۱ تمامی پارامترهای مورد استفاده مربوط به لایه های مورد استفاده در این شبیه سازی را ارائه می دهد.

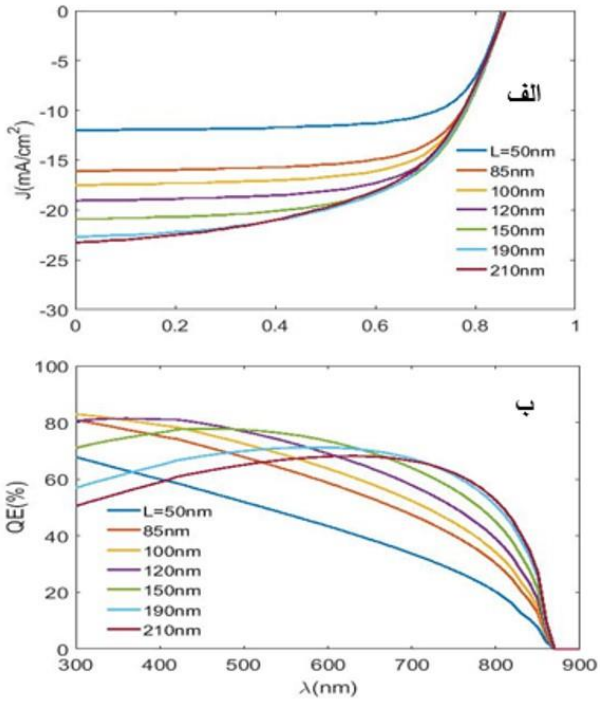
[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-12-17]

جدول ۱. پارامترهای مورد استفاده در شبیه سازی [۵]

پارامترها	PEDOT:PSS (HTL)	P3HT:PCBM	PDINO (ETL)
ضخامت (nm)	۳۰	۱۰۰	۵
E_g(ev)	۱,۵	۱,۴	۲,۹۸
$\chi(ev)$	۳,۴	۳,۸۹	۴,۱
ε_r	۳	۳,۶۵	۵
$\mu_n(cm^2/V,S)$	$۴,۵ * ۱۰^{-۳}$	$۱,۵ * ۱۰^{-۴}$	$۲ * ۱۰^{-۶}$
$\mu_p(cm^2/V,S)$	$۹,۹ * ۱۰^{-۵}$	$۱,۶۲ * ۱۰^{-۴}$	$۱ * ۱۰^{-۳}$
$N_A(cm^{-3})$	$۱ * ۱۰^{۲۱}$	۰	۰
$N_D(cm^{-3})$	۰	۰	$۲ * ۱۰^{۲۱}$
$N_C(cm^{-3})$	$۱۰^{۲۲}$	$۱۰^{۱۹}$	$۱۰^{۱۹}$
$N_V(cm^{-3})$	$۱۰^{۲۲}$	$۱۰^{۱۹}$	$۱۰^{۱۹}$
$N_t(cm^{-3})$	$۱۰^{۹}$	$۵ * ۱۰^{۱۱}$	$۱۰^{۹}$

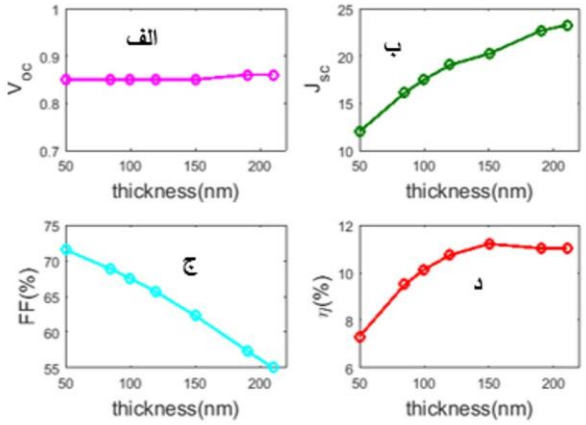
بحث و نتایج

شکل۳.الف و ۳.ب به ترتیب نمودارهای جریان-ولتاژ و بهره-ی کوانتومی ساختار مورد مطالعه را برای ضخامت های مختلف لایه ی فعال نشان میدهد.



شکل ۳.الف. نمودار جریان ولتاژ و **ب.** بهره ی کوانتومی ساختار مورد مطالعه به ازای ضخامت های مختلف لایه‌ی فعال.

با توجه به شکل۳.الف و ب می توان ملاحظه کرد که با افزایش ضخامت لایه‌ی فعال، جریان اتصال کوتاه به تدریج افزایش می یابد اما فاکتور پر شدگی به دلیل افزایش بازترکیب ها کاهش می باید که این امر منجر به افزایش بهره‌ی تبدیل تا یک مقدار مشخص و پس از آن کاهش بهره‌ی تبدیل می شود. تغییرات مشخصه های عملکردی در شکل ۴ بر حسب تغییرات ضخامت لایه فعال نشان داده شده است.



شکل ۴. تغییرات مشخصه های عملکردی ساختار مورد مطالعه بر حسب تغییرات ضخامت لایه فعال.

طبق نمودارهای شکل ۴.الف تا د، با افزایش ضخامت لایه فعال، جریان اتصال کوتاه افزایش می یابد. با افزایش ضخامت لایه فعال از۵۰ نانومتر به ۲۱۰ نانومتر، جریان اتصال کوتاه تقریبا دو برابر شد و از ۱۱,۵۳ mA/cm^2 به ۲۲,۹۸ mA/cm^2 افزایش یافته است. مقدار ولتاژمدار باز تقریبا ثابت بوده و فاکتور پرشدگی به دلیل افزایش بازترکیب ها در حال کاهش است. بهره ی تبدیل توان تا حدود۱۵۰نانومتر با افزایش ضخامت افزایش یافته و بعد از آن رو به کاهش است. جدول ۲ مقایسه ی نتایج شبیه سازی انجام شده در این مقاله را با نتایج تجربی مقالات مشابه نشان می‌دهد.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-12-17]

جدول ۲. مقایسه ی نتایج شبیه سازی انجام شده در این مقاله با نتایج تجربی [۶]

	نتایج تجربی	نتایج شبیه سازی
$Voc(v)$	۰/۸۴۷	۰/۸۵
$Jsc(mA/cm^2)$	۱۸/۶۴	۱۷/۰۴
$FF(\%)$	۶۴/۶	۷۰/۲۷
$\eta\ (\%)$	۱۰/۱۹	۱۰/۲۸

همانطور که از نتایج جدول۲ ملاحظه می شود نتایج شبیه سازی انجام شده در این مقاله با تقریب نسبتا خوبی با نتایج تجربی مطابقت دارد. با توجه به تکرار پذیری و سریع تر بودن شبیه سازی انجام شده، میتوان از نتایج آن برای طراحی ساختارهایی با بهره‌ی تبدیل بالا استفاده کرد.

نتیجه‌گیری

ما در این مقاله به شبیه سازی یک سلول خورشیدی ساختار نامتجانس توده ای آلی P3HT: PCBM پرداخته ایم. هدف اصلی، بررسی نقش ضخامت لایه ی فعال بر پارمترهای عملکردی سلول خورشیدی است. نتایج نشان می دهد که جریان اتصال کوتاه با افزایش ضخامت لایه‌ی فعال، به تدریج افزایش می یابد. از طرفی فاکتور پر شدگی به دلیل افزایش ناشی از مقاومت ها و افزایش بازترکیب ها کاهش می باید که این امر منجر به افزایش بهره‌ی تبدیل تا یک مقدار مشخص و پس از آن کاهش بهره‌ی تبدیل می شود. در نتیجه یک مقدار بهینه ای برای ضخامت سلول خورشیدی بدست آمده است. همچنین نتایج با نتایج مقالات تجربی مشابه مقایسه و تطابق مناسبی بین نتایج ملاحظه گردیده است.

مرجع‌ها

[1] Bahrami, Zahra, Alireza Salehi, and Alireza Mahdlu Eyvaraghi. "AMPS-1D Modelling of P3HT/PCBM Bilayer and BHJ Organic Solar Cell." *2019 27th Iranian Conference on Electrical Engineering (ICEE)*. IEEE, 2019.

[2] Campoy-Quiles, Mariano, et al. "Morphology evolution via self-organization and lateral and vertical diffusion in polymer: fullerene solar cell blends." *Nature materials* 7.2 (2008): 158-164

[3] Hedley, Gordon J., et al. "Determining the optimum morphology in high-performance polymer-fullerene organic photovoltaic cells." *Nature communications* 4.1 (2013): 1-10.

[4]] Dennler, Gilles, Markus C. Scharber, and Christoph J. Brabec. "Polymer-fullerene bulk-heterojunction solar cells." *Advanced materials* 21.13 (2009): 1323-1338.

[5] Abdelaziz, W., et al. "Numerical study of organic graded bulk heterojunction solar cell using SCAPS simulation." *Solar Energy* 211 (2020): 375-382.

[6] Zhang, J., Futscher, M.H., Lami, V., Kosasih, F.U., Cho, C., Gu, Q., Sadhanala, A., Pearson, A.J., Kan, B., Divitini, G., Wan, X., Credgington, D., Greenham, N.C., Chen, Y., Ducati, C., Ehrler, B., Vaynzof, Y., Friend, R.H., Bakulin, A.A., 2019. Sequentially deposited versus conventional nonfullerene organic solar cells: interfacial trap states, vertical stratification, and exciton dissociation. Adv. Energy Mater. 9, 1902145.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-12-17]