



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



بهینه سازی عملکرد سلول خورشیدی پلیمری پیوند سه تایی نیمه شفاف با گیرنده غیر فولرنی : اثر ضخامت

المیرا میلانی^۱، مینا پیرعلائی^۲ و اصغر عسگری^۲.

۱. دانشکده فیزیک - دانشگاه تبریز

۲. گروه پژوهشی ادوات فوتونیک - پژوهشکده فیزیک کاربردی و ستاره شناسی - دانشگاه تبریز

Elmira.milaani@gmail.com

چکیده- سلول های خورشیدی پلیمری بدلیل هزینه ی ساخت ارزان و دسترسی به بهره تبدیل توان بالا، مورد توجه بسیاری قرار گرفته اند. یکی از ویژگی های بارز سلول های خورشیدی آلی، کاربرد آن ها در ساختارهای شفاف است که منجر به ظهور چشم اندازی نوین در کاربردهایی مانند پنجره، پرده و پوشش های سقف جهت تولید برق ساختمان ها و اتومبیل ها و کاربردهای معماری بسیاری می شود. اخیراً، گیرنده های مولکول کوچک غیر فولرنی، جایگزین خوبی برای گیرنده های معمولی فولرنی شناخته شده اند. ما در این مقاله به شبیه سازی یک سلول خورشیدی پلیمری پیوند سه تایی با گیرنده غیر فولرنی با خاصیت نیمه شفاف پرداخته ایم. نتایج نشان می دهد که با افزایش ضخامت لایه فعال، جریان اتصال کوتاه به تدریج افزایش می یابد اما فاکتور پرشدگی به دلیل افزایش باز ترکیب ها کاهش می باید که این امر منجر به افزایش بهره تبدیل تا یک مقدار مشخص و پس از آن کاهش بهره تبدیل می شود. ضخامت بهینه ناحیه فعال در این مقاله ۱۰۰ نانومتر بدست آمده است. همچنین بهره کوانتومی ساختار مورد مطالعه در طول موج های کوتاه تر از ۵۰۰ نانومتر با افزایش ضخامت افزایش یافته و برای طول موج های بالاتر به دلیل افزایش باز ترکیب در لایه فعال که منجر به کاهش جمع آوری حامل ها می شود، با کاهش مواجه می شود.

کلید واژه- مواد آلی، مواد غیر فولرنی، سلول خورشیدی پلیمری پیوند سه گانه، پلیمر نیمه شفاف.

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

Elmira Milani^{1,2}, Mina Piralaee², 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.

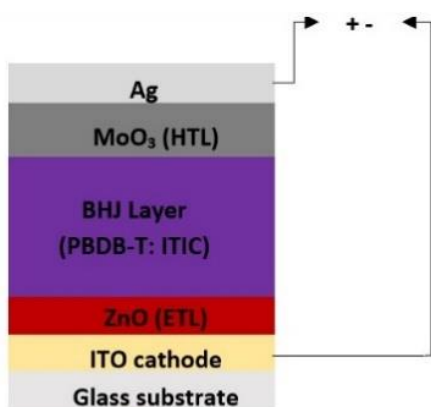
Keywords: organic materials, non-fullerene materials, ternary solar cell, semi-transparent polymer.

مقدمه

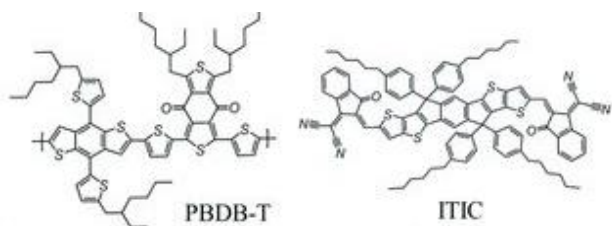
گزارش شده در یک ساختار نیمه شفاف است. نکته مهم این است که این راندمان بالا در کار تجربی انجام شده با 25 AVT درصد به دست آمده است که برای کاربردهای سلول خورشیدی شفاف بسیار مهم است [۱۰].

ساختار مورد استفاده برای این مطالعه در شکل ۱الف نشان داده شده است که در آن، Ag به عنوان الکترود بالای شفاف عمل می کند، MoO_3 نیز به عنوان لایه انتقال دهنده حفره عمل می کند. لایه ZnO به عنوان لایه انتقال دهنده الکترون استفاده شده است و ITO الکترود زیرین شفاف است. پلیمر جدید، PBDB-T و مولکول کوچک غیر فولرنی، ITIC، به عنوان لایه فعال، همانطور که در شکل ۱ب نشان داده شده است، به ترتیب به عنوان دهنده و پذیرنده انتخاب شدند. بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده و پایین ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده مواد مورد استفاده در شکل ۱ج نشان داده شده است. به منظور بهینه سازی ساختار مورد نظر، طیف وسیعی از ساختار با ضخامت های لایه فعال مختلف، از ۶۰ نانومتر تا ۱۲۰ نانومتر مورد بررسی قرار گرفته است. تحرک پذیری الکترون و حفره توسط داده های تجربی با توجه به ضخامت مورد نظر از کارهای تجربی بدست آمده است [۱۰]. محاسبات با استفاده از نرم افزار اسکپس شبیه سازی شده است.

الف



ب

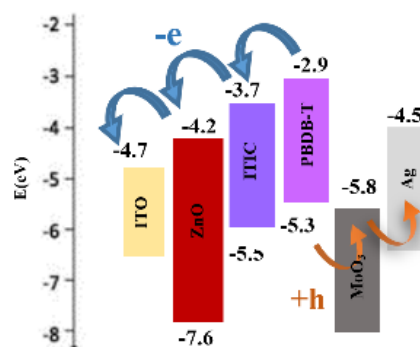


سلول های خورشیدی آلی به دلیل کم بودن هزینه ساخت، سبک وزنی، انعطاف پذیری و ماهیت نیمه شفاف، به عنوان یک منبع انرژی تجدید پذیر توسط محققین بسیار مورد توجه قرار گرفته است. اخیراً بازده تبدیل توان سلول های خورشیدی (PCE) به دلیل مواد فتوولتائیک پیشرفته از ۱۲ درصد فراتر رفته است. یکی از ویژگی های قابل توجه سلول های خورشیدی آلی نیمه شفاف بودن آنها است که منجر به چشم اندازی نوین در ساخت پنجره ها و پرده های تولید برق برای ساختمان ها و اتومبیل ها و کاربردهای معماری و مد می شود [۵-۱]. برای ساخت یک سلول خورشیدی نیمه شفاف، جذب نور در داخل لایه فعال باید دقیقاً تنظیم شود تا اجازه عبور نور کافی را بدهد. علاوه بر این، هر دو الکترود باید شفاف باشند. روش های مختلفی برای ساخت الکترود های شفاف وجود دارد [۶-۷]. نانولوله های کربنی کاندیدای مناسبی هستند، زیرا می توانند ارزان تر تولید شوند و انعطاف پذیری 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 می توانند از دیگر گزینه ها باشند [۸-۹]. اخیراً، گیرنده های مولکول کوچک غیر فولرنی، جایگزین های بسیار خوبی برای گیرنده های معمولی فولرنی مورد استفاده در سلول های خورشیدی آلی به عنوان جمع کننده الکترون هستند. عملکرد برتر سلول های بدون فولرنی ناشی از بهبود خواص نوری و الکترونیکی گیرنده های غیر فولرنی از جمله سطوح انرژی مولکولی به راحتی قابل تنظیم، خواص جذب نوری برتر و هزینه های مصنوعی کم تر در مقایسه با گیرنده های فولرنی است. این ویژگی های سودمند عملکرد بهبود یافته ای را که توسط سلول های خورشیدی آلی در چند سال گذشته نشان داده شده است، سرعت بخشیده است. پذیرنده غیر فولرنی (ITIC) نتایج بسیار امیدوار کننده ای 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} می شود.

روش کار

در این پژوهش، ما استفاده از مواد غیر فولرنی را در یک سلول خورشیدی نیمه شفاف نشان داده ایم. با انتخاب ضخامت های مختلف برای لایه فعال نیمه شفاف PBDB-T:ITIC بازدهی بیش از ۷ درصد را به دست می آید که یکی از بالاترین مقادیر

ج



شکل ۱. 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.

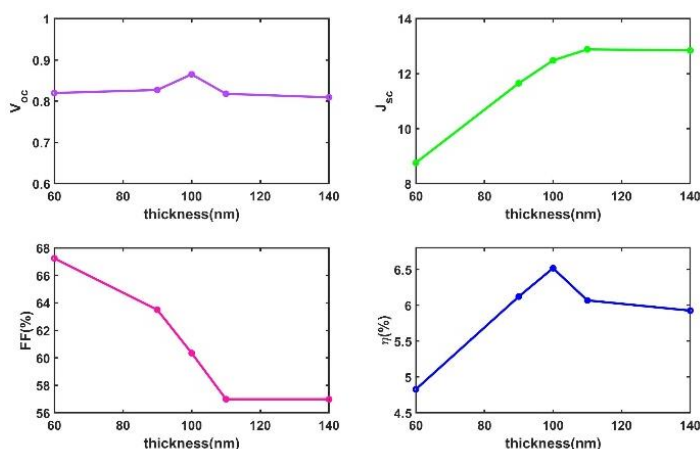
بحث و نتایج

مشخصه‌های عملکردی سلول خورشیدی مورد مطالعه، در شکل ۲ 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 تقریباً 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 8.75 mA/cm^2 به 12.84 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 (> 500 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 می‌دهد. برای طول موج‌های کوتاه روند منحنی بهره‌ی 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

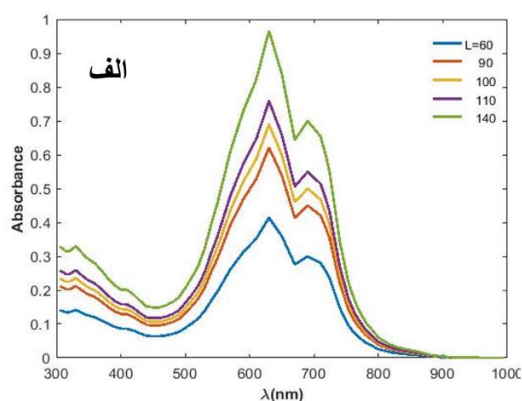
جریان نوری در این ناحیه نقش بسیار کمی دارد. کاهش بهره کوانتومی خارجی در این ناحیه تا حد زیادی به کاهش جریان نوری تولید شده در فاز PBDB-T مربوط می‌شود. مکانیسم دقیق این امر مشخص نیست. به‌نظر می‌رسد این اتفاق به‌دلیل افزایش باز ترکیب در لایه ضخیم باشد، که منجر به کاهش جمع‌آوری حامل‌ها می‌شود. درمقابل ضریب‌پرش‌دگی با افزایش ضخامت همان‌طور که در جدول ۱ مشاهده می‌کنیم، افزایش می‌یابد.

جدول ۱. پارامترهای عملکرد سلول خورشیدی نیمه‌شفاف مورد بررسی با ضخامت‌های لایه فعال مختلف تحت نور AM1.5G.

Active layer thickness (nm)	J_{sc} (mA/c m ²)	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

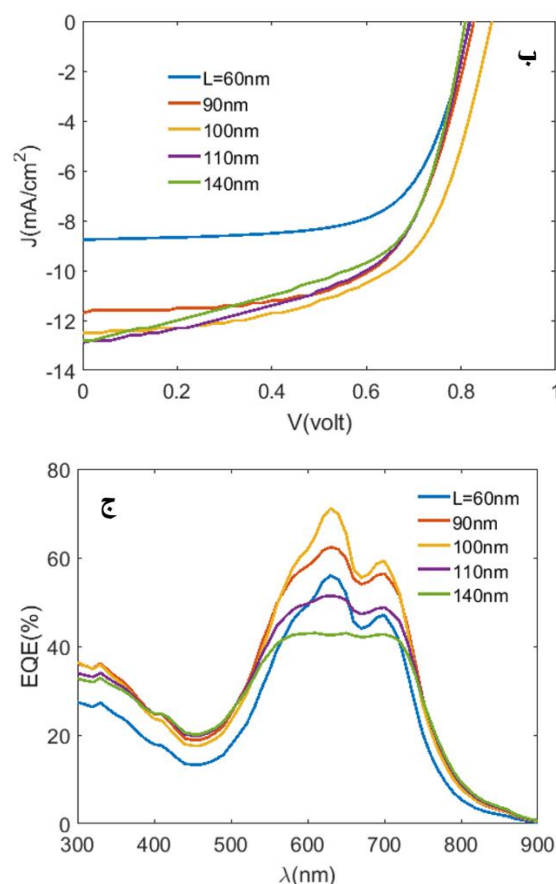


شکل ۲. مشخصه‌های عملکردی سلول خورشیدی مورد مطالعه به‌ازای ضخامت‌های مختلف بر حسب نانومتر.



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] Colmann, 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**, *29*, 1700144.
- [8] Tai, Q.; Yan, F., Emerging Semitransparent Solar Cells: Materials and Device Design. *Adv. Mater.* **2017**, *29*, 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.



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 غیر فولرنی با خاصیت نیمه‌شفاف پرداخته‌ایم. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش ضخامت لایه فعال، جریان اتصال کوتاه به تدریج افزایش می‌یابد اما فاکتور پرشدگی به دلیل افزایش بازترکیب‌ها کاهش می‌یابد که این امر منجر به 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 به دلیل افزایش بازترکیب در لایه فعال که منجر به کاهش جمع‌آوری حامل‌ها می‌شود، با کاهش مواجه می‌شود.