

بهینه سازی سلول خورشیدی پلیمری با تزریق نانوذرات اکسید روی در لایه فعال

رقیه خلیلی چوپانلو^۱، کامبیز عابدی^۲

۱ دانشگاه آزاد اسلامی واحد اهر

۲ دانشکده برق، دانشگاه شهید بهشتی تهران k_abedi@sbu.ac.ir

چکیده — در این مقاله پارامترهای سلول‌های خورشیدی پلیمری در طیف جذبی لایه فعال بصورت عددی محاسبه شده، ضخامت بهینه لایه فعال برای افزایش جذب و راندمان تعیین می‌شود. تزریق نانوذرات اکسید روی درون لایه فعال، باعث تفکیک موثرتر بارها در سطح مشترک پذیرنده و دهنده الکترون شده، میزان باز ترکیب را کاهش می‌دهد و در نتیجه پارامترهای سلول خورشیدی را بهبود می‌بخشد. از طرفی، اکسید روی بعنوان ماده ناقل الکترون، انتقال الکترون را به کاتد آسان‌تر می‌کند. نتایج محاسبات نشان می‌دهند که با تزریق این نانوذرات، JSC و PCE به ترتیب ۲۲.۶٪ و ۱۲.۴۳٪ افزایش می‌یابند.

کلیدواژه‌ها: بازده کوانتومی خارجی، راندمان، طیف جذبی، لایه فعال، نانوذرات اکسید روی

Optimization of organic solar cells with ZnO NPS insertion in active layer

Roghayyeh khalili choopanloo, Kambiz abedi

Abstract- In this paper, a numerical method has been used for calculation OSC parameters in absorption spectra of active layer, optimum thickness value is determined for increasing light absorption and efficiency. On the other hand, insertion of ZnO NPS in active layer causes effective dissociation of carriers in common interface of acceptor and donor, decreases recombination. This improves the parameters of OSC. Also ZnO is an electron transferring material and facilitates electron transferring to cathode. The results of calculation show that with ZnO NPS insertion, JSC and PCE values increase 22.6% and 12.43%.

Keywords: QE, Efficiency, ZnO NPS, Absorption Spectra, active layer, OSC

۱- مقدمه

سلول خورشیدی ایزاری است که براساس پدیده فوتوولتائیک برای بهره برداری از انرژی خورشیدی طراحی و ساخته شده است [۱]. نسل سوم این سلولها که سلول های خورشیدی پلیمری، سلولهای نانوکریستالی و سلولهای حساس به رنگ را شامل می شود، دارای ابداعات نوینی همچون انعطاف پذیری بالا و استفاده در سطوح ناصاف، مواد اولیه فراوان و ارزان قیمت، وزن کم و تکنولوژی ساخت آسان می باشد [۲]. عیب این سلولها بازده کم آنها می باشد. در این مقاله سلول خورشیدی پلیمری مورد مطالعه قرار گرفته است. بطور کلی سلول خورشیدی پلیمری از یک پلیمر بعنوان بخشنده الکترون و فلورن بعنوان پذیرنده الکترون تشکیل شده است. پارامترهای مهم در

سلول های خورشیدی بازده تبدیل توان^۱، بازده کوانتومی خارجی^۲، جریان اتصال کوتاه^۳، ولتاژ مدار باز^۴ و ضریب کارایی یا پرشدگی^۵ می باشد. ماکزیمم جذب نور در لایه فعال و در ماده پلیمر انجام میشود. یک روش افزایش بازده، افزایش جذب نور و در نتیجه افزایش ضخامت لایه فعال پلیمری می باشد [۳]. برای رفع مشکل طول نفوذ محدود اکسایتونها، از ساختار ناهمگن استفاده می شود [۳، ۴]. در عین حال بدلیل فرایند باز ترکیب حامل ها و افزایش مقاومت سری و تلفات توان در سلول، ضخیم تر نمودن زیاده از حد لایه فعال ممکن نیست. مقاومت سری در مدار معادل

¹ PCE

² QE

³ JSC

⁴ VOC

⁵ FF or Fill Factor

از معادلات پواسون و پیوستگی، مشخصه جریان-ولتاژ و ترازهای انرژی سلول خورشیدی را شبیه سازی و محاسبه می‌کند. شکل کلی معادله پواسون بدین شکل است [۸].

$$\frac{d}{dx}(\epsilon(x) \frac{d\Psi}{dx}) = q[p(x) - n(x) + N_D^+(x) - N_A^-(x) + P_t(x) - n_t(x)] \quad (1)$$

$$\xi = \frac{d\Psi}{dx}$$

در معادله (۱)، $N_D(x)$ ناخالصی بخشنده یونیده شده واقع در باند ممنوعه و $N_A^-(x)$ ناخالصی الکترون گیرنده یونیده شده واقع در باند ممنوعه $n_t(x)$ الکترون های واقع در تله های انرژی موجود در گاف انرژی و ناشی از نقائص ساختار بوده و $p_t(x)$ حفره های واقع در تله های انرژی ناشی از نقائص ناخواسته در ساختار و $\xi(x)$ شدت میدان الکتریکی ساختار می باشد.

معادلات پیوستگی برای الکترون ها بدین صورت است :

$$\frac{1}{q} \left(\frac{dJ_n}{dx} \right) = -G_{op}(x) + R(x) \quad (2)$$

و معادلات پیوستگی برای حفره ها بدین صورت است [۸]:

$$\frac{1}{q} \left(\frac{dJ_p}{dx} \right) = -G_{op}(x) + R(x) \quad (3)$$

که $R(x)$ نرخ بازترکیب خالص حامل ها و $G_{op}(x)$ نرخ تولید نوری حامل ها را نشان می‌دهد. $J_n(x)$ چگالی جریان ناشی از الکترون ها و $J_p(x)$ چگالی جریان ناشی از حفره ها می باشد.

$$J_n(x) = q\mu_n n \left(\frac{dE_{fn}}{dx} \right)$$

$$J_p(x) = q\mu_p p \left(\frac{dE_{fp}}{dx} \right) \quad (4) \text{ و } (5)$$

$$n(0) = p(0) = N_{CV} \quad (6)$$

$$p(0) = N_{CV} \exp\left(-\frac{E_g}{qV_t}\right) \quad (7)$$

$$n(L) = N_{CV} \exp\left(-\frac{E_g}{qV_t}\right) \quad (8)$$

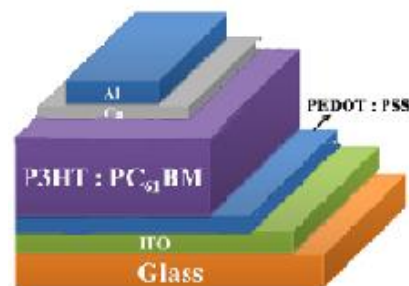
جواب معادلات فوق در شرایط پایدار و حالت تک بعدی با استفاده از شرایط مرزی مناسب توسط نرم افزار محاسبه می‌شود. فرایند بازترکیب مستقیم و غیرمستقیم توسط معادلات بازترکیب مستقیم و بازترکیب شاکلی-رید - هال لحاظ می‌شوند. شبیه سازی ها برای طیف تابشی

الکتریکی سلول^۶، به شکل مقاومت درمدار ظاهر میشود و نشان دهنده تلفات توان در سلول خورشیدی می باشد. مقاومت شنت نیز با ایجاد یک مسیر موازی با دیود، جریان تولیدی OSC را هدر می‌دهد. ساختار OSC در شکل (۱) نشان داده شده است. در این مقاله تغییرات پارامترهای سلول نسبت به تغییر ضخامت لایه فعال بررسی شده، ضخامت بهینه لایه فعال با شبیه سازی تعیین می‌شود. سپس برای افزایش بهینه راندمان از نانو ذرات اکسیدروی در لایه فعال استفاده می‌شود [۵]. در ادامه شبیه سازی عددی ساختار و نتایج شبیه سازی بیان می‌شود.

۲- شبیه سازی و نتایج

ساختار ارائه شده در این مقاله بدین شکل است:

Glass/ITO/PEOT : PSS(40nm)/
P3HT : PCBM(Xnm)/Ca(15nm)/Al(100nm)
P3HT : PCBM لایه فعال و P3HT پلیمر بخشنده می باشد. PCBM یک فلورن و پذیرنده الکترون است. طیف جذبی لایه فعال در بازه ۳۵۰ تا ۹۰۰ نانومتر قرار دارد. PEDOT : PSS بعنوان لایه ناقل حفره بین لایه فعال و الکتروند آند قرار می گیرد.



شکل ۱: ساختار سلول خورشیدی ارائه شده

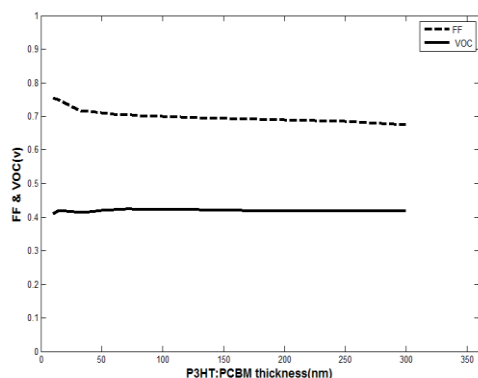
ITO نیمه هادی شفاف، بعنوان الکتروند آند و Al/Ca بعنوان کاتد استفاده می‌شود. ماده کلسیم باعث کاهش wf کاتد Al شده، مسیر انتقال الکترون به کاتد را هموارتر می‌سازد. از طرفی Ca بعنوان لایه بافر مانع تماس لایه فعال با کاتد شده، اکسیداسیون لایه فعال را کاهش می‌دهد (شکل ۱). در این مقاله از بسته نرم افزاری WXAMPS برای شبیه سازی استفاده شده است. این نرم افزار تک بعدی برپایه روش دیفرانسیل محدود با استفاده

⁶ ECL

جدول ۱: مقایسه نتایج شبیه‌سازی و تجربی Voroshaziet al در ضخامت ۸۰ nm

نتایج	Voc (V)	Jsc (A/m ²)	FF (%)	Eff (%)
شبیه‌سازی	0.423	129.9	70.13	3.86
آزمایشگاهی	0.603	100	63.7	3.85

تغییرات FF و VOC در شکل ۴ نشان داده شده است. مقدار FF در ضخامت‌های کم به یک میل می‌کند. در OSC ایده‌آل مشخصه I-V مربعی می‌باشد. با افزایش ضخامت، مقدار FF کاهش یافته و سرانجام در مقدار ثابت ۰.۷ ثابت می‌ماند. روند تغییرات FF با نتایج بدست آمده توسط Bandara et al [۷] مطابقت دارد.

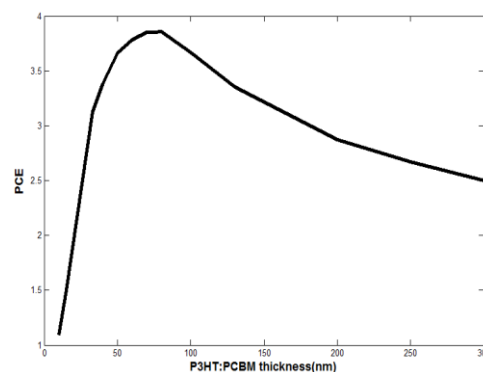


شکل ۴: منحنی VOC و FF سلول خورشیدی بر حسب ضخامت لایه فعال

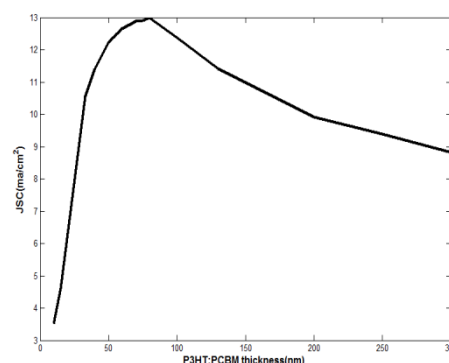
یکی از روشهای افزایش جذب نور و راندمان سلول‌های خورشیدی قراردادن ماده مناسب در لایه فعال می‌باشد. یک ماده مناسب برای این کار اکسید روی می‌باشد که در این مقاله بدان پرداخته شده است. این ماده به شکل نانو ذرات به درون لایه فعال تزریق می‌شود. این کار منجر به تفکیک موثرتر اکسایتونها در اینترفیس پلیمر و فلورن شده، چگالی حامل‌ها را افزایش و میزان بازترکیب را کاهش می‌دهد. از طرفی اکسیدروی بعنوان ماده ناقل الکترون، انتقال الکترون‌ها را به کاتد آسان می‌کند. همینطور باند ممنوعه ZnO تقریباً ۳.۳ eV می‌باشد، لذا اکثر نور تابیده به این ماده جذب نشده، دچار شکست می‌شود. افزایش جریان اتصال کوتاه منجر به افزایش راندمان می‌شود. جدول ۲ پارامترهای دو ساختار را در ضخامت بهینه نشان می‌دهد.

AM1.5G^۷ و توان تابشی ۱۰۰ میلی وات انجام شده است.

شکل ۲ تغییرات بازده تبدیل توان سلول خورشیدی را نسبت به ضخامت لایه فعال نشان می‌دهد. دامنه تغییرات نشان می‌دهد که عملکرد سلول به ضخامت لایه فعال بسیار وابسته می‌باشد زیرا بخش عمده جذب نور در لایه فعال انجام می‌شود. مطابق شکل با افزایش ضخامت تا اندازه مشخصی، جذب نور بهتر صورت می‌گیرد.



شکل ۲: منحنی بازده بر حسب تغییرات ضخامت لایه فعال



شکل ۳: منحنی چگالی جریان بر حسب ضخامت لایه فعال

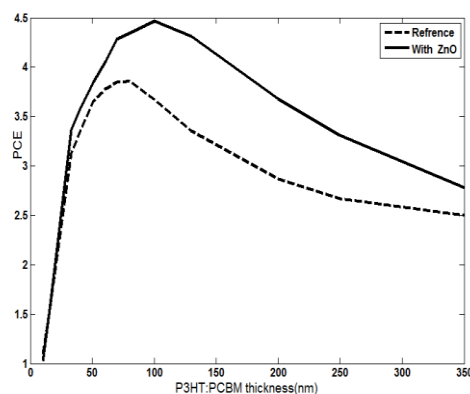
مطابق اشکال ۲ و ۳، منحنی‌های بازده و جریان اتصال کوتاه سیر صعودی دارند. در ضخامت‌های بیشتر بدلیل بازترکیب و نابودی اکسایتون‌ها، منحنی روند نزولی دارد. مقدار بهینه ضخامت برای لایه فعال ۸۰ نانومتر است. پارامترهای حاصل از شبیه‌سازی با نتایج تجربی Voroshaziet al [۶] مقادیر در جدول خلاصه شده اند. منحنی VOC نسبت به تغییر ضخامت لایه فعال، نسبتاً ثابت است. چرا که ولتاژ مدار باز به جنس لایه فعال و باند ممنوعه و نیز به تابع کار الکترودها بستگی دارد.

^۷ Air-Mass

جدول ۲: پارامترهای دو سلول خورشیدی در ضخامت ۸۰ نانومتر لایه فعال

ساختار	FF%	η	VOC (volt)	JSC (ma/cm ²)
OSC Without NPS	70.13	3.86	0.4236	13
OSC +ZnO NPS	66.63	4.34	0.41	15.94

شکل ۵ منحنی بازده دو ساختار را برحسب ضخامت لایه فعال نشان می‌دهد. منحنی خط چین راندمان سلول خورشیدی اصلی و فاقد نانو- ذره را نشان می‌دهد.



شکل ۵: منحنی بازده دو OSC برحسب ضخامت لایه فعال

در ساختار ۲ بدلیل غلبه بیشتر تولید به بازترکیب اکسایتون، در ضخامت بهینه ۱۰۰ نانومتر، بیشینه منحنی بازده رخ می‌دهد. در این مقاله چگالی نانوذرات ZnO برای لایه فعال (3.3e17(1/cm در نظر گرفته شده است. در جدول ۲ پارامترهای دو سلول خورشیدی ارائه شده است. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که در ساختار دوم، مقدار Jsc ۲۲.۶٪ و PCE ۱۲.۴۳٪ افزایش داشته است. درمقایسه با تحقیقات قبلی در این زمینه مقدار افزایش راندمان ۱.۷٪ و جریان اتصال کوتاه ۱۳.۲۹٪ بهبود می‌یابد [۷]. نتایج نشان می‌دهد که افزایش جریان اتصال کوتاه بدلیل افزایش تولید اکسایتون‌ها و سهولت تفکیک و انتقال الکترون‌ها به کاتد می‌باشد.

۳- نتیجه گیری :

در این مقاله سلول خورشیدی پلیمری مورد بررسی قرار گرفت. ابتدا تغییرات پارامترهای آن با ضخامت بررسی شده و ضخامت بهینه لایه فعال با شبیه سازی مشخص شد. در ضخامت بهینه مقدار بازده تبدیل توان سلول خورشیدی ماکزیمم می شود. در این ضخامت Jsc و QE نیزافزایش می یابد. سپس تاثیر تزریق نانوذرات اکسید روی درون لایه فعال با شبیه سازی بررسی شد. مقایسه پارامترها نشان داد که جریان اتصال کوتاه، PCE و QE و FF نسبت به ساختار اول افزایش می یابد. دلیل آن بهینه سازی انکسار و حبس نور در لایه فعال، سهولت تفکیک اکسایتونها، کاهش بازترکیب و انتقال بهتر الکترون‌ها به کاتد می‌باشد که توسط نانوذرات اکسیدروی انجام می‌شود.

مراجع

- [1] Imahori, H., Umeyama, T., Ito, S. "Large π -Aromatic Molecules as Potential Sensitizers for Highly Efficient Dye-Sensitized Solar Cells", *Accounts of Chemical Research*, Vol. 42, pp. 1809-1818, (2009).
- [2] Wang, Yanqi, "Arrays of ZnO Nanowire for Photovoltaic Devices", Dissertation Submitted for PhD Degree, City University of Hong Cong, (2009)
- [3] Guangdong Li, Liming Liu, Fanasn Wei, Songtao Xia, and Xiaoping Qian "Recent progress in Modeling, simulation, and optimization of polymer solar cells", *IEEE JOURNAL OF PHOTOVOLTAICS*, VOL. 2, NO. 3, (JULY 2012)
- [4] Mims III, Forrest M. , "Solar Cell Projects", Radio Shack Engineer's Mini Notebook, First Printing, USA, (1999).
- [5] Kangmin Kim¹, Buyoung Jung¹, Jungwon Kim¹ and Woochul Kim, Mechanical Engineering, Yonsei University, Seoul, Korea "ORGANIC SOLAR CELLS EMBEDDED WITH ZNO NANOPARTICLES", *PowerMEMS*, 2009, Washington DC, USA, December 1-4.
- [6] E.Voroshazi et al. *J. of Materials Chemistry*, submitted (May 2011) .
- [7] J. Bandara, K. S, "Efficient and table, structurally inverted poly(3-hexylthiopen):[6,6]-phenyl-c61-butyric acid methyl este heterojunction Solar Cells with fibrous like poly(3-hexylthiopen). *Thin Solid Films*", vol.520,no.1, 582-590. (2011).
- [8] Professor Stephen J. Fonash and John Arch, Joe Cuiffi, Jingya Hou, William Howland, Peter McElheny, Anthony Moquin, Michael Rogosky, Thi Tran, Hong Zhu, and Francisco Rubinelli , "AMPS-1D; A MANUAL FOR A One Dimensional Device Simulation Program for the Analysis of Microelectronic and Photonic Structures", The Pennsylvania State University Park, PA 16802.