بیست و سومین کنفرانس اپتیک و فوتونیک و نهمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
دانشگاه تربیت مدرس
۱۲-۱۴ بهمن ۱۳۹۵
23rd Iranian Conference on Optics and Photonics and 9th Conference on Photonics Engineering and Technology
Tarbiat Modares University, Tehran, Iran
January 31- February 2, 2017

افزایش جذب و چگالی جریان در سلول خورشیدی آلی P3HT:PCBM توسط ساختار توریTiO_2 در الکترود بالایی

محمدرضا فلاح خرد ; حمید رحیم پور سلیمانی

آزمایشگاه نانوفیزیک محاسباتی،گروه فیزیک

دانشکده علوم پایه، دانشگاه گیلان

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 گیر اندازی نوردر ساختار توری ، بررسی شده است. نشان داده می شود که از طریق ساختار توریTiO_2 با دوره تناوب و ضخامت خاص، در الکترود بالایی، به علت پراکندگی نور و افزایش طول مسیر اپتیکی در داخل سلول خورشیدی، افزایش جذب و چگالی جریان را خواهیم داشت.همچنین میزان افزایش جذب و چگالی جریان، بر اساس ضخامت لایه و دوه تناوب توری، در این مقاله مورد بررسی قرار گرفته و همچنین یک ضخامت و دوره تناوب که به ازای آن جذب و چگالی جریان ماکزیمم می شود ، معین شده است.

کلید واژه- افزایش جذب،افزایش چگالی جریان،سلول خورشیدی آلی،ساختار توری

Absorption and current density enhancement in organic solar cell P3HT:PCBM with TiO2 grating structure in front electrode

Mohammadrezafallahkherad; H. Rahimpoursoleimani

Computational Nanophysics Laboratory (CNL), Department of Physics,

University of Guilan, Rasht, Iran

Abstract- In this paper we investigated theoretically an enhancement in optical absorption and current density in organic solar cell with finite different time domain(FDTD) method, due to the light trapping in grating structure .we show that there is an optical absorption and current density enhancement ,with TiO2 grating structure, with a special thickness and period, in top electrode, due to the diffraction and light path enhancement within solar cell. We show also optical absorption and current density enhancement according to the thickness and period, and we will determine an optimum thickness and period for absorption and current density enhancement.

Keywords: absorption enhancement, current density enhancement, grating structure, organic solar cell.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-03]

این مقاله به شرط در دسترس بودن در وبگاه www.opsi.ir معتبر است.

۱- مقدمه

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،۲].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[3].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 تاندن[4]، تغییر ماده الکترود ها[5]، استتفاده از ساختار های توری [6] و.....اشاره کرد.

یکی از روش های افزایش جذب اپتیکی در سلول خورشیدی گیراندازی نور با استفاده از ساختار های توری می باشد. در سلول های خورشیدی با لایه نازک، بیشترین میزان جذب نور $4n^2$می باشد که در آنn ضریب شکست لایه جذب کننده نور می باشد[7].در سلول های خورشیدی ارگانیکی که تحرک پذیری حامل ها بسیار اندک است می توان با طراحی نانوساختارها در الکترود این نوع از سلول های خورشیدی، با گیر اندازی نور در داخل ساختار موجب افزایش جذب و همین طور افزایش تولید حامل ها شد [8,9].

به طور کلی ساختار توری، یک ساختار متناوب اپتیکی می باشد که متشکل از یک زیرلایه و شیار های موازی روی آن می باشد، که نور فرودی را با پراکنده کردن به چندین پرتو مجزا تبدیل می کند. مسیر پرتو های پراکنده شده به طول موج نور فرودی و فضای توری بستگی دارد. هر کدام این شیار ها خود، به عنوان یک چشمه نور پراکنده کننده عمل می کند و مجموعه ای از آن ها یک آرایش منظم از چشمه های خطی را ایجاد میکند. هنگامی که توری کاملاً شفاف باشد، به طوری که مدولاسیون دامنه چشم‌پوشیدنی باشد، تغییرات منظم در ضخامت توری در عرض آن، یک مدولاسیون فاز ایجاد می‌کند و در این صورت یک توری تراگسیل فاز خواهیم داشت.

رابطه بین فضای توری و زاویه نور های فرودی و پراکنده شده، به رابطه پراکندگی معروف است. اگر فرض کنیم پرتوهای AوBبه ترتیب با زوایای L و Dبه ساختار توری برخورد می کنند، میتوان معادله پراش را به صورت معادله(۱) نوشت:

$$a (\sin L + \sin D) = m \lambda \quad (1)$$

که در آن a فاصله ی بین دو شیار، λ طول موج و m مرتبه پراش می باشد. وقتی نور به ساختار توری برخورد میکند، در مسیر های متناظر با مرتبه های پراش mپراکنده می شود.

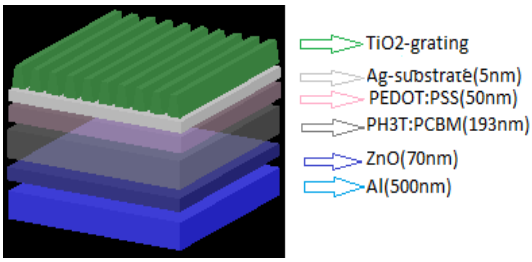
۲- روش شبیه سازی و تحلیل داده ها

در این شبیه سازی از روش تفاضل محدود در حوزه زمانی[۱]از مجموعه نرم افزار لومریکال استفاده شده است. در الکترود بالایی مطابق شکل(۱)، از ساختار توریTiO2 با زیرلایه نقره استفاده شده است. تیتانیوم اکساید به دلیل ساختار باندی که نسبت به لایه فعال دارد، نقش موثری به عنوان جمع کننده حفره ها ایفا خواهد کرد.و زیر لایه نقره به علت رسانایی خوبی که دارد، وظیفه انتقال نور های پراکنده شده از ساختارتوری تیتانیوم اکساید، به سایر لایه ها را دارد. بعد از الکترود تیتانیوم اکساید از یک لایه ۵۰ نانومتری پلیمر PEDOT:PSS استفاده شده است، که هم یک پلیمر شفاف برای انتقال نور به لایه فعال می باشد، و هم به علت این که باند رسانش آن بالاتر از لایه فعال استفاده شده در این شبیه سازی است، انتقال دهنده حفره خوبی به الکترود تیتانیوم اکساید است.لایه فعال سلول خورشیدی آلی طراحی شده در این شبیه سازی، پلیمر P3HT:PCBM به ضخامت ۱۹۳ نانومتر می باشد، که بر روی آن یک لایه اکسید روی(ZnO)، به ضخامت ۷۰ نانومتر لایه نشانی شده است، که به این علت که باند ظرفیت اکسید روی پایین تر از باند ظرفیت لایه فعال است، بنابر این انتقال دهنده خوب الکترون به شمار می رود و در نهایت یک لایه ۵۰۰ نانومتری فلز آلومینیوم به عنوان جمع کننده الکترونها استفاده شده است(شکل ۱).

[۱] Finite different time domain(FDTD)

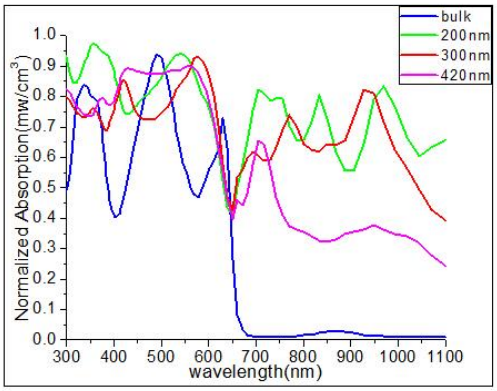
این مقاله به شرط در دسترس بودن در وبگاه www.opsi.ir معتبر است.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-03]



شکل(۱)نمای کلی سلول خورشیدی پلیمری شبیه سازی شده.

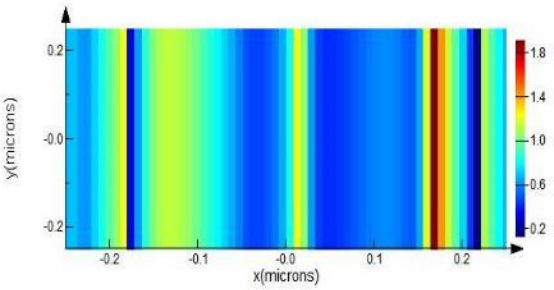
یک چشمه مانند نور خورشید از نوع امواج تخت[۲]در طول موج ۳۰۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر، شبیه سازی شده است. ناحیه شبیه سازی به صورت 3D و به طول ۵۰۰ نانومتر می باشد که در آن شرایط مرزی را در جهت x و y به صورت دوره ای [۳] و در جهت z به صورت لایه های ایده ال هماهنگ[۴] انتخاب شده است.



شکل(۲)نمودار جذب برای حالت صاف(bulk) و حالت توری با دوره تناوب های ۴۲۰، ۳۰۰و ۲۰۰ نانومتر.

ابتدا شبیه سازی برای حالت ساختار صاف در الکترود بالا با ضخامت ۲۰۰ نانومتر انجام شده است. چگالی جریان در این حالت برابر با $11.42\ {mA}/{cm^2}$ بدست می آید. سپس در الکترود بالایی ساختار توری تیتانیوم اکساید به ضخامت ۲۰۰ نانومتر را اعمال و تاثیر آن بر جذب و چگالی جریان مورد بررسی قرار داده شده است.ساختار توری مورد نظر با سه دوره تناوب ۴۲۰، ۳۰۰ و ۲۰۰ نانومتر در نظر گرفته شده است و به ترتیب به چگالی جریان ۲۷ ، ۳۳,۲ ، ۳۱,۷ میلی آمپر بر سانتی متر مربع بدست آمده است. نمودار جذب برای حالت های صاف، و توری با دوره تناوب های اعمال شده در شکل(۲)ترسیم شده است.

پلیمر ناحیه فعال، به علت گاف انرژی که دارد، دارای محدوده جذب ۳۰۰ تا ۷۰۰ نانومتر می باشد، و پاسخ گویی مناسبی در انرژی های کم تر و طول موج های بالاتر از ۷۰۰ نانو متر ندارد. همانطور که در شکل(۲) پیداست برای طول موج های بالای ۷۰۰ نانومتر، برای ساختار های توری، افزایش جذب خواهیم داشت. به این علت که نور پس از برخورد به ساختار توری و عبور از آن، با زاویه های مختلف به شیار های ساختار توری برخورد می کند و با مرتبه های پراشm پراکنده می شود. مد های پراکنده شده نور، با مد هایی که در طول ناحیه فعال در حرکت هستند کوپل می شود. علاوه بر این نور های پراکنده شده به چندین طول موج تقسیم می شوند که متناظر با مرتبه پراش است، که این طول موج های جدید مشکل جذب نور در انرژی های کم تر از گاف ناحیه فعال را حل می کند و با، افزایش طول مسیر اپتیکی نور در ناحیه فعال، منجر به گیراندازی نور و افزایش میدان در ناحیه فعال مطابق شکل(۳) شده و در نتیجه جذب و تولید حامل ها در ناحیه فعال و همین طور چگالی جریان افزایش پیدا می کند.



شکل(۳) افزایش میدان در زیر لایه توری که با استفاده از مانیتور در پایین زیرلایه نقره گرفته شده است.

با توجه به این که برای ساختار توری در یک ضخامت و دوره تناوب خاص، تداخل های سازنده خواهیم داشت که موجب افزایش بیشتر جذب می شود، لذا میزان جذب و چگالی جریان برای سه دوره تناوب ۴۲۰، ۳۰۰ و ۲۰۰ نانومتر، با ضخامت های ۵۰ تا ۲۰۰ نانومتر با ۱۵۰ نقطه محاسبه گردید که در این سه دوره تناوب مقدار جذب و چگالی جریان ماکزیمم به ازای یک ضخامت خاص محاسبه گردید که به ترتیب در شکل های(۴) و (۵) نمودار های اپتیمم

---

[۲] Plane wave

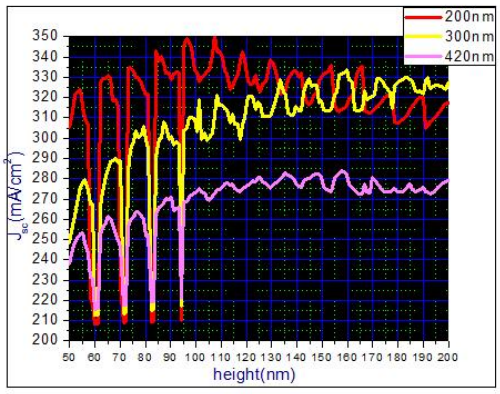
[۳] Periodic

[۴] Perfect Matched Layer(PML)

این مقاله به شرط در دسترس بودن در وبگاه www.opsi.ir معتبر است.

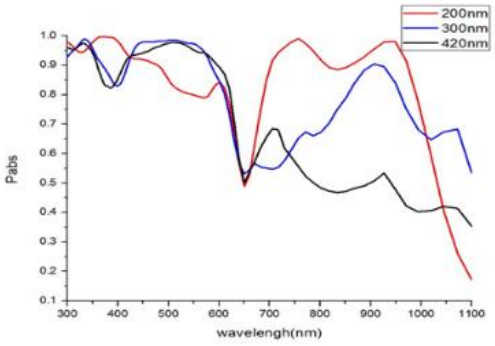
[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-03]

برای چگالی جریان و جذب آورده شده است.



شکل(۴) نمودار چپالی جریان ماکزیمم برای ضخامت های ۵۰ تا ۲۰۰ نانومتر در دوره تناوب های ۴۲۰، ۳۰۰ و ۲۰۰ نانومتر.

با توجه به نمودار های جذب و چگالی جریان شکل های(۴) و(۵) برای دوره تناوب های ۲۰۰، ۳۰۰ و ۴۲۰ نانومتر به ترتیب ماکزیمم چگالی جریان و جذب در ضخامت های ۱۰۷، ۱۶۰و ۱۵۷ نانومتر ملاحضه می شود. همانطور که دیده می شود برای دوره تناوب ۲۰۰ نانومتر بیشترین جذب و بیشترین چگالی جریان وجود دارد، به طوری که چگالی جریان ۳۵ میلی آمپر بر سانتی متر مربع خواهد شد. دلیل این پدیده، نزدیک بودن شیار ها و پراکندگی بیشتر در داخل سلول می باشد که منجر به افزایش جذب و چگالی جریان می شود.



شکل(۵) نمودار جذب ماکریمم نرمالیز شده بر حسب mw/cm^3 برای دوره تناوب های ۲۰۰، ۳۰۰، ۴۲۰ نانومتر که به ازای ضخامت بهینه شده، محاسبه شده است.

۳-نتیجه گیری

در این پژوهش با بررسی نقش ساختار توری در سلول خورشیدی آلی، گامی به سوی افزایش جذب و چگالی جریان در این نوع سلول خورشیدی که به علت مزیت های ان بسیار مورد توجه است، برداشته شده است .بعد از بررسی نمودار ها و داده ها در ساختار توری، برای دوره تناوب های ۲۰۰، ۳۰۰، ۴۲۰ نانومتر مقدار جذب محاسبه شد و برای طول موج های بالای ۷۰۰ نانومتر که خارج پاسخ ناحیه فعال به نور است، افزایش جذب داشتیم. همچنین یک مقدار بهینه برای ضخامت مشخص شد که به ازای دوره تناوب ۲۰۰ نانومتر وضخامت ۱۰۷ نانومتر برای الکترود توری به چگالی جریان ۳۵ میلی آمپر بر سانتی متر مربع رسیدیم که نسبت به حالت بالکی با چگالی جریان $11.42\ mA/cm^2$، افزایش چشگیری یافته است، که در نتیجه ی پراکنرگی نور از سطح ساختار توری و افزایش میدان در داخل سلول می باشد.

۴-مراجع

[1] Krebs, F.C., Gevorgyan, S.A. and Alstrup, J.,. *A roll-to-roll process to flexible polymer solar cells: model studies, manufacture and operational stability studies*. *Journal of Materials Chemistry*, *19*(30), pp.5442-5451.2009.

[2] 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.

[3] Bartelt, J.A., Beiley, 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.

[4] 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.

[5] 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.

[6] 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.

[7] Yablonovitch, E.,. *Statistical ray optics*. *JOSA*, *72*(7), pp.899-907.1982.

[8] Ferry, V.E., Verschuuren, M.A., Li, H.B., Verhagen, E., Walters, R.J., Schropp, R.E., Atwater, H.A. and Polman, A.. *Light trapping in ultrathin plasmonic solar cells*. *Optics express*, *18*(102), pp.A237-A245.2010.

[9] Pala, R.A., White, J., Barnard, E., Liu, J. and Brongersma, M.L. *Design of plasmonic thin-film solar cellswith broadband absorption enhancements*. *Advanced Materials*, *21*(34), pp.3504-3509.2009.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در وبگاه www.opsi.ir معتبر است.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-03]