



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



شبیه‌سازی اپتیکی گرافن در سلول خورشیدی آلی با استفاده از روش 3D-FDTD

مارال مصلی نژاد، غلامحسین حیدری، محسن قاسمی

دانشگاه شهرکرد

گرافن بر پایه مشخصات منحصر به فرد اپتیکی، گرمایی، مکانیکی و الکترونیکی در فناوری‌های مختلف می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد. علاوه بر این مراحل ساخت و مواد اولیه آن ارزان می‌باشند. این تحقیق به بررسی اپتیکی کاربرد گرافن در سلول خورشیدی آلی با استفاده از روش FDTD پرداخته است. گرافن ورقه‌ای دوبعدی از اتم‌های کربن در یک پیکربندی لانه زنبوری است، از این رو مدل‌سازی تابع دی‌الکتریک آن با استفاده از روش‌های معمول حجمی انجام نمی‌گیرد. روش رسانندگی سطحی بر پایه مدل کوپو با امکان تعریف تعداد لایه‌های مختلف گرافن، در این تحقیق مورد استفاده قرار گرفت. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد در حالت گرافن تک لایه به جای ITO و ITO/PEDOT:PSS جریان‌های مدار کوتاه به ترتیب به اندازه ۱۷/۶ و ۱۱ درصد نسبت به سلول استاندارد افزایش پیدا کردند. همچنین با افزایش تعداد لایه‌های گرافن، از میزان جریان مدار کوتاه در هر دو حالت کاسته شد.

واژه‌های کلیدی- گرافن، مدل رسانندگی سطحی، سلول خورشیدی آلی، 3D-FDTD

Optical Simulation of Graphene in Organic Solar Cells Using the 3D-FDTD Method

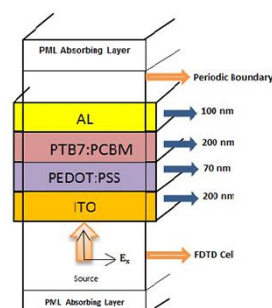
Maral Mosallanejad, Gholam Hosain Haidari, Mohsen Ghasemi

Graphene can be used in a variety of technologies based on unique optical, thermal, mechanical and electronic properties. In addition, its fabrication process and raw materials are cheap. This study investigates the optical application of graphene in organic solar cells using the FDTD method. Graphene is a two-dimensional sheet of carbon atoms in a burrow configuration, so modeling of its dielectric function is not performed using conventional volumetric methods. The surface conductivity method based on the Kubo model with the possibility of defining different layers of graphene was used in this study. The simulation results show that in the monolayer graphene state instead of ITO and ITO/ PEDOT: PSS, the short-circuit currents were increased by 17.6 and 11%, respectively, compared to the standard cell. Also, as the number of graphene layers increased, the short circuit current in both cases decreased.

Keywords-Graphene, Surface Conductivity Model, Organic Solar Cell, 3D-FDTD

مقدمه

اهمیت استفاده از منابع انرژی تجدید پذیر مانند انرژی خورشیدی و مزایای زیست محیطی آن جزء الزامات قطعی فناوری در دنیای کنونی است. سلول خورشیدی آلی یکی از انواع سلول خورشیدی نسل جدید است که با مزایایی از جمله امکان تولید صنعتی، ارزانی تولید و انعطاف پذیری همراه است، اما هنوز در مواردی مثل بازده و طول عمر نیاز به بررسی بیشتر دارد. شکل ۱ ساختار کلی یک سلول خورشیدی آلی را نشان می دهد [۱].



شکل ۱: ساختار نوعی یک سلول خورشیدی آلی (استاندارد)

ITO و FTO جزء رایج ترین موادی هستند که در سلول های خورشیدی آلی و رنگ دانه ای به عنوان الکترود شفاف استفاده می شوند، اما استفاده از این مواد با مشکل کمبود منابع و هزینه بالا همراه است. به همین دلیل می توان از جایگزین مناسبی مانند گرافن برای حل این مشکلات استفاده کرد. علاوه بر استفاده از گرافن به عنوان الکترود آند-کاتد به دلیل شفافیت، انعطاف پذیری و هدایت الکتریکی بالا، گرافن می تواند در سلول های خورشیدی به عنوان لایه میانی نیز به کار رود. در کنار خواص منحصربه فرد، استفاده از گرافن به دلیل فراوانی منابع و هزینه ی پایین بسیار مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته است [۲].

هدف از این تحقیق شبیه سازی اپتیکی سلول خورشیدی آلی گرافنی با استفاده از روش FDTD هست. در این تحقیق یک یا چند لایه گرافنی در نقش آند و هم زمان آند - لایه کمکی (انتقال دهنده حفره) به ترتیب جایگزین ITO و PEDOT:PSS/ITO گردید.

روش شبیه سازی

در این پژوهش سلول خورشیدی آلی مبتنی بر گرافن با روش تفاضل متناهی دامنه زمان (FDTD) شبیه سازی گردید. روش FDTD در سال ۱۹۶۶ توسط "یی" معرفی شد. روش FDTD معادلات ماکسول وابسته به زمان را با تقریب تفاضل مرکزی و با در نظر گرفتن شرایط مرزی مناسب، در فضای گسسته حل نموده و میدان های الکتریکی و مغناطیسی را در فضای شبیه سازی به دست می آورد. ثابت گذردهی مختلط مواد (قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک) یکی از نیازمندی های این روش است [۳]. اما در رابطه با گرافن که یک ساختار دوبعدی است، اندازه گیری و یا تقریب ضریب شکست با استفاده از مدل های رایج به سادگی امکان پذیر نیست.

شبیه سازی گرافن در محیط FDTD

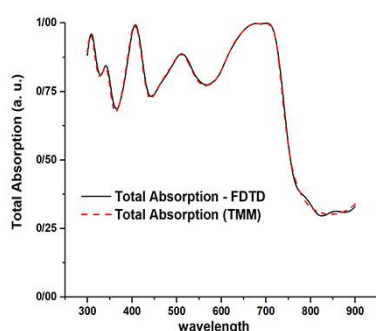
گرافن لایه ای بسیار نازک با ضخامتی حدود یک اتم دارد و معمولاً با استفاده از رسانایی سطحی به جای گذردهی حجمی مشخص می شود. مشخصه مرتبط با تابع دی الکتریک یک لایه گرافن می تواند با استفاده از مدل گذردهی حجمی و یا مدل رسانایی سطحی شبیه سازی شود. روش رسانایی سطحی معمولاً کارآمدتر از روش گذردهی حجمی است. اما در بعضی موارد روش گذردهی حجمی نیز می تواند مورد استفاده قرار گیرد. در این پژوهش رویکرد مدل رسانایی سطحی مورد استفاده قرار گرفته است.

رهیافت رسانایی سطحی

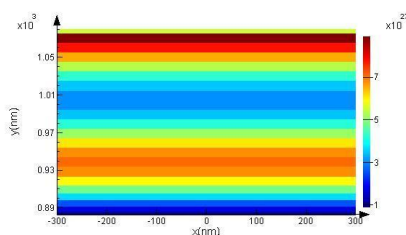
این روش به خاطر ضخامت اتمی گرافن از نظر مدل سازی کارا تر به نظر می رسد. گرافن به عنوان یک مستطیل دوبعدی در نظر گرفته شده که هدایت سطح آن توسط فرمول کوبو مدل سازی می شود. هدایت سطح به میزان پراکندگی، پتانسیل شیمیایی، دما وابسته است. همچنین امکان مقیاس بندی ضخامت به صورتی که بیش از یک لایه گرافن را مدل سازی نماید، در این روش تا حدودی امکان پذیر است.

نتایج شبیه‌سازی سلول خورشیدی

شکل ۳ الف و ب جذب کل و نرخ تولید الکترون-حفره را برای سلول آلی استاندارد که ساختار آن در شکل ۱ معرفی شده است را نشان می‌دهد. در شکل ۳ الف جذب کل محاسبه به روش متعارف (TMM) Transfer Matrix Method نیز آورده شده است. مطابقت جوابها نشان از درستی روند محاسبات به روش FDTD می‌تواند در نظر گرفته شود. قسمت حقیقی و موهومی ضریب شکست لایه‌های مختلف مورد استفاده از مراجع معتبر در این زمینه گرفته شده است.

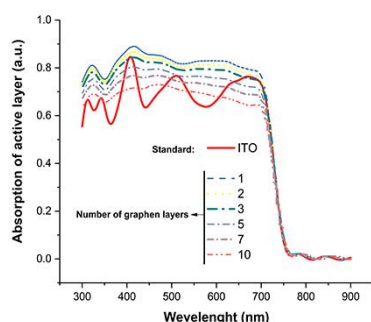


شکل ۳ الف: جذب کلی سلول خورشیدی استاندارد



شکل ۳ ب: نرخ تولید الکترون-حفره سلول خورشیدی استاندارد

در مرحله‌ی بعد سلول خورشیدی همراه با گرافن یک یا چند لایه به جای الکتروود آند (ITO) و آند/لایه کمکی (ITO-PEDOT:PSS) به روش FDTD شبیه‌سازی گردید. شکل ۴، ۵، جذب جزئی لایه فعال سلول خورشیدی را به ترتیب برای هر دو حالت نشان می‌دهد.



شکل ۴: جذب جزئی لایه فعال برای گرافن جایگزین ITO (آند گرافنی).

این پارامترها در هنگام مدل‌سازی گرافن در محیط FDTD می‌توانند تنظیم شوند. هدایت سطحی گرافن از دو بخش انتقال درون‌نواری و بین‌نواری تشکیل شده است که بر اساس فرمول کوبو به صورت زیر نوشته می‌شود (معادله‌های ۱ تا ۳):

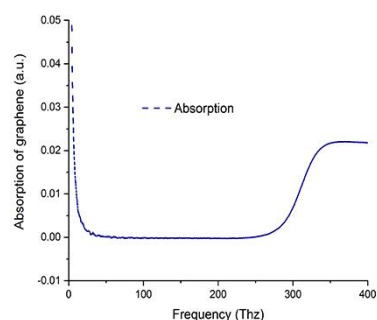
$$\sigma(\omega, \Gamma, \mu_c, T) = \sigma_{intra}(\omega, \Gamma, \mu_c, T) + \sigma_{inter}(\omega, \Gamma, \mu_c, T) \quad (1)$$

$$\sigma_{inter}(\omega, \Gamma, \mu_c, T) = \frac{-ie^2(\omega + i2\Gamma)}{\pi\hbar^2} \int_0^\infty \left(\frac{f_d(-\xi) - f_d(\xi)}{(\omega + i2\Gamma)^2 - 4\left(\frac{\xi}{h}\right)^2} \right) d\xi \quad (2)$$

$$\sigma_{intra}(\omega, \Gamma, \mu_c, T) = \frac{-ie^2}{\pi\hbar^2(\omega + i2\Gamma)} \int_0^\infty \xi \left(\frac{\partial f_d(\xi)}{\partial \xi} - \frac{\partial f_d(-\xi)}{\partial \xi} \right) d\xi \quad (3)$$

درواقع مدل هدایت سطحی مواد تنها برای یک لایه گرافن به کار می‌رود. با این حال برای استفاده از گرافن بیش از یک لایه یک عامل مقیاس بندی رسانایی، در پارامترهای مورد نیاز گرافن در نظر گرفته می‌شود. این عامل مقیاس در هر دو معادله ۲ و ۳ ضرب می‌شود و به این صورت می‌توان با تغییر مقیاس رسانایی در برخی موارد تعداد لایه‌های گرافن را تغییر داد.

شکل ۲ میزان جذب شبیه‌سازی شده از یک تک لایه گرافن را که با استفاده از روش FDTD شبیه‌سازی شده نشان می‌دهد. (این شبیه‌سازی با نتایج این مقاله [۴] کاملاً مطابقت دارد، که می‌تواند معیاری بر درستی مدل‌سازی اپتیکی گرافن در نظر گرفته شود).



شکل ۲: جذب شبیه‌سازی شده از تک لایه گرافن

می‌کند و در آنجا الکترون و حفره از هم جدا می‌شوند. الکترون به کاتد و حفره به آند گرافنی منتقل می‌شود و باعث ایجاد جریان در سلول خورشیدی می‌شود.

جدول ۲: مقادیر جریان مدار کوتاه شبیه‌سازی شده برای گرافن جای گزیده ITO/PEDOT:PSS با

نوع سلول	$J_{SC} - A/m^2$
استاندارد	۴۹۰/۲۵۸
گرافن تک لایه	۵۴۳/۸۸۹
گرافن دو لایه	۵۳۴/۳۴۴
گرافن سه لایه	۵۲۵/۰۳۸
گرافن پنج لایه	۵۰۷/۱۵۷
گرافن هفت لایه	۴۹۰/۱۵۵
گرافن ده لایه	۴۶۶/۲۳۳

نتیجه‌گیری

با توجه به نتایج به‌دست‌آمده، استفاده از گرافن در افزایش کارایی و راندمان سلول خورشیدی می‌تواند بسیار مفید واقع شود. به‌عنوان نمونه نتایج شبیه‌سازی‌ها نشان داد که در جایگزینی به جای ITO و ITO/PEDOT:PSS در بهترین حالت موجب افزایش J_{SC} به میزان ۱۷/۶ و ۱۱ درصد گردید.

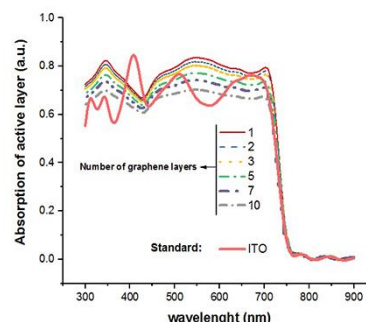
مرجع‌ها

- [1] M. Rawat, E. Jayaraman, S. Balasubramanian, S-K. Iyer, "Organic Solar Cells on Paper Substrates", Adv. Mater. Technol, vol. 4, 2019.
- [2] T. Mahmoudi, Y. Wang, Y-B. Hahn, "Graphene and Its Derivatives for Solar Cells Application", Nano Energy, vol. 47, 2018.
- [3] S. Dennis, "Electromagnetic Simulation Using The FDTD Method", pp. 1-165, 2000.
- [4] S. Rakheja, P. Sengupta, "The tuning of light-matter coupling and dichroism in graphene for enhanced absorption", J. Phys. D: Appl. Phys, 2016.

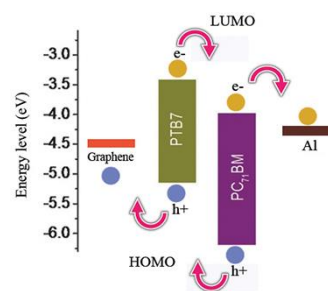
با توجه به شکل ۴، ۵، ملاحظه می‌شود که استفاده از گرافن به میزان مناسبی بر عملکرد سلول خورشیدی می‌افزاید زیرا میزان جذب در لایه فعال بیشتر شده است. (در جدول ۱ مقادیر J_{SC} شبیه‌سازی شده سلول‌های مختلف آورده شده است.)

جدول ۱: مقادیر جریان مدار کوتاه شبیه‌سازی شده

نوع سلول	$J_{SC} - A/m^2$
استاندارد	۴۹۰/۲۵۸
گرافن تک لایه	۵۷۶/۴۷۷
گرافن دو لایه	۵۶۴/۰۹۱
گرافن سه لایه	۵۵۲/۱۱۳
گرافن پنج لایه	۵۲۹/۲۸۲
گرافن هفت لایه	۵۰۷/۸۶۴
گرافن ده لایه	۴۷۸/۱۴۵



شکل ۵: جذب جزئی لایه فعال برای گرافن جای گزیده با ITO/PEDOT:PSS



شکل ۶: سطح انرژی مواد در سلول خورشیدی مبتنی بر گرافن جایگزیده با ITO/PEDOT:PSS
سلول خورشیدی آلی شبیه‌سازی شده دارای یک فاز دهنده و گیرنده می‌باشد که با جذب فوتون در لایه ی فعال یک جفت الکترون حفره تولید می‌شود، جفت الکترون حفره تشکیل شده به سطح مشترک ماده دهنده-گیرنده نفوذ