



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 لانه‌زنبوری است، از این رو مدل‌سازی تابع دی‌الکتریک آن با استفاده از روش‌های معمول حجمی انجام نمی‌گیرد. روش رسانندگی سطحی بر پایه مدل کوبو 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

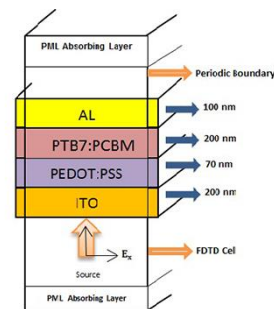
Maral Mosallanejad, Gholam Hosain Haidari, Mohsen Ghasemi

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 زیست‌محیطی 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 انعطاف‌پذیری 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 می‌دهد [۱].



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

ITO و FTO جزء رایج‌ترین موادی هستند که در سلول‌های خورشیدی آلی و رنگ‌دانه‌ای به‌عنوان الکتروود شفاف استفاده می‌شوند، اما استفاده از این مواد با مشکل کمبود منابع و هزینه بالا همراه است. به همین دلیل می‌توان از جایگزین مناسبی مانند گرافن برای حل این مشکلات استفاده کرد. علاوه بر استفاده از گرافن به‌عنوان الکتروود آند-کاتد به دلیل شفافیت، انعطاف‌پذیری و هدایت الکتریکی بالا، گرافن می‌تواند در سلول‌های خورشیدی به‌عنوان لایه‌ی میانی نیز به کار رود. در کنار خواص منحصربه‌فرد، استفاده از گرافن به دلیل فراوانی منابع و هزینه‌ی پایین بسیار مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته است [۲].

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

روش شبیه‌سازی

در این پژوهش سلول خورشیدی آلی مبتنی بر گرافن با روش تفاضل متناهی دامنه زمان (FDTD) شبیه‌سازی گردید. روش FDTD در سال ۱۹۶۶ توسط "بی" 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 میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی را در فضای شبیه‌سازی به دست می‌آورد. ثابت گذردهی مختلط مواد (قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک) یکی از نیازمندی‌های این روش است [۳]. اما در رابطه با گرافن که یک ساختار دوبعدی است، اندازه‌گیری و یا تقریب ضریب شکست با استفاده از مدل‌های رایج به‌سادگی امکان‌پذیر نیست.

شبیه‌سازی گرافن در محیط FDTD

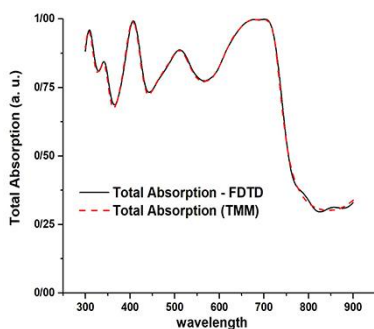
گرافن لایه‌ای بسیار نازک با ضخامتی حدود یک اتم دارد و معمولاً با استفاده از رسانایی سطحی به‌جای گذردهی حجمی مشخص می‌شود. مشخصه مرتبط با تابع دی‌الکتریک یک‌لایه گرافن می‌تواند با استفاده از مدل گذردهی حجمی و یا مدل رسانایی سطحی شبیه‌سازی شود. روش رسانایی سطحی معمولاً کارآمدتر از روش گذردهی حجمی است. اما در بعضی موارد روش گذردهی حجمی نیز می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد. در این پژوهش رویکرد مدل رسانایی سطحی مورد استفاده قرار گرفته است.

رهیافت رسانایی سطحی

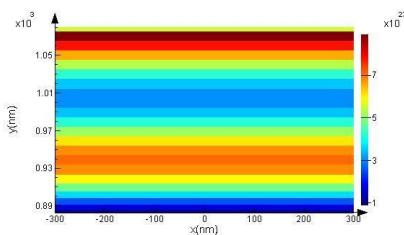
این روش به خاطر ضخامت اتمی گرافن از نظر مدل‌سازی کارتر به نظر می‌رسد. گرافن به‌عنوان یک مستطیل دوبعدی در نظر گرفته‌شده که هدایت سطح آن توسط فرمول کوبو مدل‌سازی می‌شود. هدایت سطح به میزان پراکندگی، پتانسیل شیمیایی، دما وابسته است. همچنین امکان مقیاس بندی ضخامت به صورتی که بیش از یک‌لایه گرافن را مدل‌سازی نماید، در این روش تا حدودی امکان‌پذیر 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.

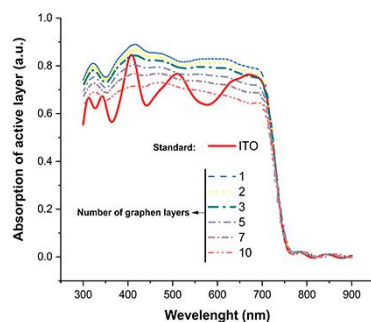


شکل ۳ الف: جذب کلی سلول خورشیدی استاندارد



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):

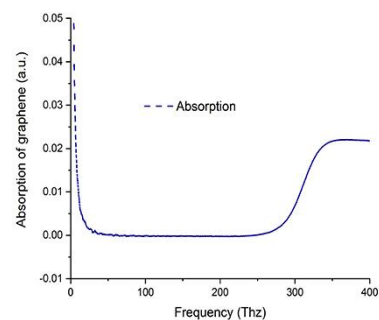
$$\sigma(\omega, \Gamma, \mu_c, T) = \sigma_{\text{intra}}(\omega, \Gamma, \mu_c, T) + \sigma_{\text{inter}}(\omega, \Gamma, \mu_c, T) \quad (1)$$

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

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

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.

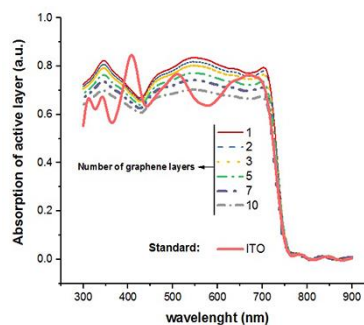
مرجع‌ها

- [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.

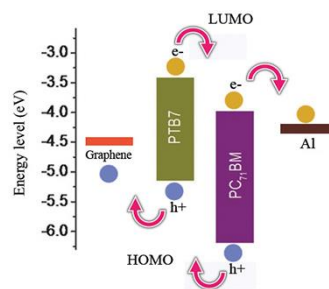
با توجه به شکل ۴، ۵، ملاحظه می‌شود که استفاده از گرافن به میزان مناسبی بر عملکرد سلول خورشیدی می‌افزاید زیرا میزان جذب در لایه فعال بیشتر شده است. (در جدول ۱ مقادیر J_{sc} شبیه‌سازی شده سلول‌های مختلف آورده شده است.)

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 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