

«مقاله پژوهشی»

تأثیر باز ترکیب ناشی از آلاینش بر مشخصه‌های سلول خورشیدی توده‌های آلی نانوساختار

علی محمودلو*

استادیار، گروه علوم پایه، دانشگاه فرهنگیان، تهران، ایران

تاریخ دریافت: 1400/05/31 تاریخ پذیرش: 1400/07/10

Effect of Contamination-Induced Recombination on Organic Bulk Solar Cell Characteristics

A. Mahmoudloo*

Assistant Professor, Department of Science, Farhangian University, Tehran. Iran

Received: 2021/08/22 Accepted: 2021/10/02

Abstract

The transport properties of cargo carriers for organic semiconductors depend on the presence and distribution of trap sites. As we know, traps are the result of irregularities in polymer molecules and chains caused by physical or chemical impurities in the structure of organic semiconductors. From the point of view of crystal defects that cause changes in energy levels and create energy gaps in band theory, the transport properties of cargo carriers in this type of systems will also undergo changes, the most important parameter of which is being replaced or trapped. Will be in the delivery process? Of course, defects can play a role in the distribution centers in the system.

In this paper, using different combinatorial models of carriers, the effects of basic parameters on the performance of heterogeneous organic solar cells as well as charge transfer are investigated. In order to simulate these processes, in this section, the basic parameters of P3HT:PCBM-structured organic solar cells have been studied by using the self-consistent solution of momentum-diffusion equations and Poisson equation, as well as using different recombination models by finite element method.

Keywords

Polymer Nanostructure Solar Cell, Charge Transport, Charge Carrier Recombination

چکیده

در این مقاله با استفاده از مدل‌های مختلف باز ترکیب حاملین، اثرات پارامترهای اساسی بر عملکرد سلول‌های خورشیدی آلی نامتجانس توده‌ای بررسی شده است. برای شبیه‌سازی این فرآیندها، با استفاده از حل خودسازگار معادلات سوق-پخش و همچنین استفاده از مدل‌های مختلف باز ترکیب از طریق روش اجزاء محدود، پارامترهای اساسی سلول‌های خورشیدی آلی توده‌ای با ساختار P3HT:PCBM مورد مطالعه قرار گرفته است.

همچنین در این مقاله تأثیر باز ترکیب ناشی از آلاینش، روی ویژگی‌های ساختار P3HT:PCBM با استفاده از مدل سوق و پخش بررسی شد و در آلاینش‌های بالا و پایین ترابرد بار مورد مطالعه قرار گرفت که بهترین حالت برای آلاینش P مربوط به تراکم $N_p = 6 \times 10^8 \text{ cm}^{-3}$ و برای آلاینش N مربوط به تراکم $N_n = 10^8 \text{ cm}^{-3}$ است. نتایج شبیه‌سازی نشان داد که در سلول‌های خورشیدی آلی با ساختار توده‌ای همواره باز ترکیب ناشی از آلاینش مواد نیم رسانای پلیمری باعث افزایش مشخصات اساسی سلول می‌شود؛ به طوری که بازده سلول با افزایش میزان آلاینش تا 6 افزایش می‌یابد که این نتایج به خوبی با نتایج گزارش شده، در توافق است.

واژه‌های کلیدی

سلول خورشیدی نانوساختار پلیمری، مدل سوق و پخش، ترابرد بار، باز ترکیب حاملین بار

مقدمه

در ده سال گذشته، گرایش عمومی به استفاده از مواد الکترونیک آلی با ترکیب p در هر دو بخش علم و صنعت، افزایش بسیار زیادی داشته است. به طور کلی این گرایش بر اساس دو عامل ایجاد شده است: ضرورت دستیابی به منابع الکتریسته ارزان و با کربن کم و پیشرفت قابل ملاحظه در حوزه الکترونیک مواد آلی یا پلیمری. انگیزه استفاده از نیم رساناهای آلی یا پلیمری در سلول‌های خورشیدی آلی، دیودهای نور گسیل آلی و ترانزیستورهای اثر میدانی دور نمای عملیاتی تولید بالای آنها با استفاده از چاپ یا لایه نشانی از محلول، طی یک فرایند پیوسته، است. این روش‌های تولید ارزان، در کنار حجم کم نیم رساناهای آلی مورد نیاز، می‌تواند هزینه تولید را به کمتر از یک یورو به ازای هر وات تولید انرژی کاهش دهد و در نتیجه، با کاهش استفاده از منابع کربنی، میزان استخراج الکتریسته نوری تولید شده را افزایش دهد.

در تلاش‌های اولیه برای استفاده از مواد آلی الکترونیکی در سلول‌های خورشیدی آلی از یک نیم رسانای آلی به عنوان جایگزین مستقیم نیم رساناهای غیر آلی در سلول‌های خورشیدی معمول استفاده شد و نتایج آن عملکرد ضعیف بود. این دستاورد اولیه امیدوار کننده یک ماده چند پیوندی² دارای دو لایه متفاوت نیم رسانای آلی است. یکی از این لایه‌ها تمایل قوی به گرفتن الکترون‌ها و دیگری تمایل به دریافت حفره‌ها دارد. در این ساختارها، ساختارهایی با اتصالات توده‌ای نامتجانس لازم است تا حامل‌های نور پس از تولید شدن در مرز این اتصالات از یکدیگر جدا شوند و فرایند ترابرد حاملین انجام گیرد.

مدل‌های مختلفی برای بررسی عملکرد سلول‌های خورشیدی مطرح شده است و این در حالی است که محققان در حال مطالعه و تکمیل مدل‌های نظری هستند. این مدل‌های نظری تاکنون کمک‌های شایانی به یافته‌های تجربی و توجیه این یافته‌ها کرده است. برای نمونه، نتایج یافته‌های نظری با شبیه‌سازی اپتوالکترونیکی اثبات کرده‌اند که ضخامت مؤثر برای جذب فوتون‌های نوری در حدود 100 نانومتر خواهد بود که بعدها توسط نتایج تجربی نیز اثبات شدند. در سلول‌های خورشیدی آلی باز ترکیب حاملین بار تولید شده توسط نور، یکی از عوامل مهم کاهش جریان

سلول‌های خورشیدی پلیمری با سلول‌های خورشیدی معدنی و یا غیر آلی تفاوت‌های بسیاری دارند. در این نوع سلول‌ها جهت بررسی و بهینه‌سازی، شبیه‌سازی الکترونیکی و اپتیکی توسط گروه‌های تحقیقاتی در سراسر جهان صورت گرفته و می‌گیرد. مطالعه نظری و شبیه‌سازی فرایندها به پژوهشگران کمک می‌کند تا بتوانند فیزیک و عملکرد سلول‌ها را به طور اساسی بررسی کرده و با مطالعه عوامل مؤثر بر بازده و عملکرد، مواد پلیمری با ویژگی‌های مناسبی را انتخاب کنند. برای مثال با استفاده از این یافته‌ها می‌توان با ترکیب کردن پلیمرها به عنوان یک روش مناسب برای تنظیم خواص فیزیکی پلیمرها در سلول‌های آلی استفاده کرد. غالباً ترکیب کردن پلیمرها می‌تواند منجر به ترکیب شدن ویژگی‌های هر دو مؤلفه ترکیب شونده شود و گاهی اوقات ساختار ترکیب دارای خواصی است که هیچ یک از مؤلفه‌ها چنین خواصی را دارا نیستند. در زمینه الکترونیک آلی که در آن لایه‌های پلیمری با تهیه محلول از پلیمرهای مزدوج و سپس لایه نشانی محلول حاصل که برای کاربرد در دیودهای نورگسیل و یا سلول‌های خورشیدی آلی ساخته می‌شوند، ترکیب کردن یک روش جالب به منظور بهینه‌سازی عملکرد این ادوات محسوب می‌شود. در واقع برای سلول‌های خورشیدی آلی حضور پیوندهای نامتجانس¹ بین دو نیم‌رسانای متفاوت (دهنده و پذیرنده) برای تجزیه اکسایتون تولید شده (بر اثر تابش نور) حیاتی است. در یک دیود نورگسیل پلیمری دو ماده ترکیب شونده می‌توانند طوری انتخاب شوند که تزریق الکترون‌ها و حفره‌ها از الکترودها به صورت بسیار کاراتری انجام شود و نیز باز ترکیب حاملین بار در نزدیکی پیوند نامتجانس صورت پذیرد. در هر دو مورد ادوات مذکور نکته حایز اهمیت این است که الکترون‌ها و حفره‌ها می‌توانند در مؤلفه‌های متناظر ترکیب (یعنی الکترون‌ها در دهنده و حفره‌ها در پذیرنده) انتقال یابند، این انتقال از پیوند نامتجانس به الکترودها یا برعکس است. این امر محدودیت‌های قابل ملاحظه‌ای را بر میکروساختارهایی که در چنین ادواتی مورد نیاز هستند، ایجاد می‌کند.

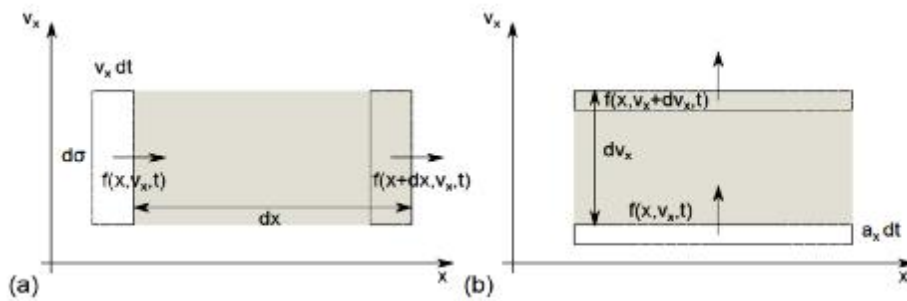
1. Heterojunction**2. Multi Junction**

که ما عبارت طرف راست معادله فوق را بر حسب $\frac{dx}{dt}$ بسط داده‌ایم که نرخ تغییرات f به علت حرکت ذرات در جهت X به صورت $\frac{\partial f}{\partial X} v_x = - \frac{\partial f}{\partial t}$ است. به همین صورت برای ذراتی که خطوط افقی را در داخل متوازی‌السطوح قطع می‌کنند، تغییراتی را در سرعت نسبت به مکان ایجاد می‌کنند که شتابی را متحمل خواهند شد.

نوری، ولتاژ و در نتیجه بازده است. مدل‌های مختلفی برای باز ترکیب حاملین ارائه شده که یکی از مدل‌های دقیق، مدل سوق و پخش است.

مبانی نظری

معادلات پیوستگی و سوق-پخش از معادله بولتزمن نتیجه‌گیری می‌شوند. ایده اساسی تابع توزیع به صورت $f(r, v, t)$ می‌باشد که حالت یک ذره را به صورت یک



شکل 1. فضای $X - V_x$: تغییرات موقعیت dx : تغییرات سرعت dv در توزیع بولتزمن [2]

تغییرات سرعت ذرات به صورت $\frac{\partial f}{\partial v_x} a_x = - \frac{\partial f}{\partial t}$ خواهد شد.

برای به دست آوردن معادلات پیوستگی و سوقی - پخشی از معادله بولتزمن، از روش تکانه استفاده می‌شود. یعنی معادله بولتزمن در توان‌های a سرعت ضرب شده و در نهایت روی سرعت انتگرال‌گیری می‌شود [4]:

$$(2)$$

رابطه فوق از چهار عبارت تشکیل یافته است که با مساوی قرار دادن $a = 0$: عبارت اولی انتگرال‌گیری از همه سرعت‌ها که همان تغییرات چگالی ذرات $n(r)$ بر حسب زمان خواهد بود:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int f(r, v, t) dv = \int \frac{\partial f}{\partial t} n(r) dv \quad (3)$$

عبارت دوم با در نظر گرفتن اینکه V و r مستقل از یکدیگرند، به صورت زیر نوشته می‌شود [4]:

مدل نیمه کلاسیکی در نظر می‌گیرد. عبارت $f(r, v, t) dr dv$ بیانگر تعداد ذرات در موقعیت r و سرعت v در لحظه t است. بنابر این با انتگرال‌گیری روی r و v چگالی حامل بار $n(r, t)$ در فاصله r به دست می‌آید [1].

برای بررسی تغییرات f با زمان، این مسئله را یک بعدی در نظر می‌گیریم. متوازی‌السطوحی را مطابق شکل (1) در صفحه $X - V_x$ را در نظر می‌گیریم که X موقعیت

در فضا و V_x سرعت در جهت X و ds گسترش متوازی‌السطوح در جهت V باشد. تعداد ذرات ورودی (یا خروجی) به سطح قطعه بی‌نهایت کوچک از طرف چپ برابر $f(x, v_x) v_x dt ds$ و تعداد ذرات خروجی (یا ورودی) از سطح مورد نظر در موقعیت dx برابر با $f(x + dx, v_x) v_x dt ds$ است. در نتیجه تغییر ذرات در جهت X به صورت تفاضل دو حالت فوق خواهد بود [3]:

$$\left(\frac{\partial N}{\partial t} \right)_x = \left(\int f(x, v_x) ds dx \right)_x = \int \frac{f(x + dx, v_x) - f(x, v_x)}{dx} dv_x dt ds \quad (1)$$

توصیف کرد. در حالت خاص در حالت مانا، میانگین چگالی‌ها در سایت‌های مربوط به چندین پرش را می‌توان توسط یک DOS و آمار فرمی دیراک بیان کرد [7 و 8 و 9].

محاسبه و شبیه‌سازی

در بررسی چگالی‌های حاملین بار، نرخ تغییر معمولاً به صورت $\frac{D}{Dt} \gg \frac{D}{Dt}$ محاسبه می‌شود. که این روش، روش خوبی برای حفره‌ها می‌تواند باشد. نرخ گذار چگالی حفره از موقعیت i به موقعیت $i+1$ متناسب با چگالی خود حامل بار و تقسیم سرعت بر فاصله بین مسیر حرکتی است که حامل بار طی می‌کند. به عبارت دیگر مقدار حفره‌های $Dp^{i \oplus i+1}$ عبوری از موقعیت i به $i+1$ در زمان Dt توسط حاصلضرب سرعت در زمان و تقسیم بر فاصله i و $i+1$ خواهد بود [10 و 11].

$$\frac{Dp^{i \oplus i+1}}{Dt} \gg \frac{Dp^{i \oplus i+1}}{Dt} = \frac{v^i}{Dr} p^i \quad (8)$$

با در نظر گرفتن سرعت سوق به جای v :

$$\frac{Dp_{drift}^{i \oplus i+1}}{Dt} = \frac{m_p^i F^i}{Dr} p^i \quad (9)$$

با در نظر گرفتن سرعت پخش به جای v :

$$\frac{Dp_{diff}^{i \oplus i+1}}{Dt} = \frac{D_p}{Dr} = \frac{m_p k_B T}{eDr} \quad (10)$$

که شامل معادله کلاسیکی اینیشتین نیز است. نتیجه نرخ گذار حفره به علت پخش به صورت زیر است:

$$\frac{Dp_{diff}^{i \oplus i+1}}{Dt} = \frac{m_p k_B T}{eDr^2} p^i \quad (11)$$

در حالت کلی وقتی معادله عمومی اینیشتین به کار می‌رود، جهت پخش حاملین بار اهمیت زیادی نخواهد داشت. بنابراین:

$$\frac{Dp_{diff}^{i \oplus i+1}}{Dt} = \frac{Dp_{diff}^{i \oplus i-1}}{Dt} \quad (12)$$

چگالی جریان کلی ذره J به راحتی از معادله زیر قابل محاسبه خواهد شد:

$$\begin{aligned} \nabla_r \cdot \tilde{N}_r f(r, v, t) dv &= \nabla_r \cdot (f(r, v, t) v) dv = \\ \tilde{N}_r \nabla_r \cdot f(r, v, t) dv & \quad (4) \end{aligned}$$

$$\tilde{N}_r \nabla_r \cdot f(r, v, t) dv = \tilde{N}_r (n(r) \nabla_r \cdot \tilde{n}) = \tilde{N}_r j(r) \quad (5)$$

که $j(r)$ چگالی جریان ذره است. سومین عبارت تحت یک میدان الکتریکی اعمالی F متناسب است با:

$$\nabla_r \cdot \tilde{N}_r f dv \quad (6)$$

که این انتگرال برابر با صفر است؛ زیرا مقدار f بی‌نهایت کوچک است و به طور تقریبی صفر در نظر گرفته می‌شود و چهارمین عبارت نیز که انتگرال برخورد است، برابر با صفر است. پس:

$$\frac{Dn(r)}{Dt} + \tilde{N}_r j(r) = 0 \quad (6)$$

که این معادله، معادله پیوستگی نامگذاری شده است. با ارزیابی مرتبه اول معادله تکانه ($a = 1$) معادله سوق و پخشی حاصل می‌شود [5]:

$$nmF - D \tilde{N}_r n = J \quad (7)$$

که در رابطه فوق $m = \frac{et}{m}$ تحرک پذیری حامل بار و

t زمان پراکندگی (میانگین زمانی بین برخوردها) و m جرم ذره است [6].

وقتی که الکترون در روی تک مولکول جای گزیده باشد و از یک سایت به سایت دیگری پرش نماید، زمان پرش خیلی کوچک‌تر از زمان جای گزیدگی بار در روی مولکول خواهد بود. در مجموع لایه‌های خیلی نازک شامل چند ده مولکول پیچیده به صورت تابع $f(r, v, t)$ تعریف می‌شود.

به هر حال الکترون‌ها و حفره‌ها بر روی مولکول‌ها قرار گرفته و شامل چگالی حامل بار n و p هستند. ابعاد قطعه خیلی بزرگ‌تر از طول پرش و طول عمر حاملین بار در محدوده‌ای هستند که بتوانند قبل از بازترکیب چندین پرش را داشته باشند. بنابراین تراپرد بار توسط پرش چند مرحله‌ای حاملین بار رخ خواهد داد. این جریان را علی‌رغم جای‌گزیدگی بارها می‌توان توسط پدیده‌های سوق و پخش

طور ساده نسبت مستقیم با مجموع تحرک پذیری‌ها و نسبت معکوس با ثابت دی‌الکتریک مواد با توانایی استتار دارد [16].

مزیت تئوری لانگوین در شبیه‌سازی‌ها کاهش پارامترهای مواد است. مانند b که توسط تحرک پذیری و ثابت دی‌الکتریک بیان می‌شود. فعل و انفعالات بین ایجاد حاملین بار و باز ترکیب، بر بازده مجموعه حاملین بار و در نتیجه بر منحنی $J - V$ غلبه می‌کنند.

در این فرایندها فاصله بین حاملین بار به طور بی‌نظم بوده و P هم به صورت تابع توزیع $f(a, x)$ حول فاصله نرمال a بیان می‌شود که احتمال کلی تفکیک به صورت رابطه زیر خواهد بود: [17]

$$P(a, T, F) = \int_0^{\infty} p(x, T, F) f(a, x) dx \quad (15)$$

که تابع توزیع $f(a, x)$ به صورت زیر بیان می‌شود:

$$f(a, x) = \frac{4}{\sqrt{\pi} a^3} x^2 e^{-x^2/a^2} \quad (16)$$

با در نظر گرفتن شرایط فوق، معادله پیوستگی برای اکسایتون‌های انتقال بار (X) به صورت رابطه زیر بیان می‌گردد [17]:

$$\frac{dX}{dt} = R_{sep} - k_{relax} X - k_{diss} X + R \quad (17)$$

این معادله شامل قسمت‌های جدایی اکسایتون‌ها R_{sep} و k_{relax} و باز ترکیب حاملین بار آزاد R و k_{diss} برای حالت‌های انتقال بار و واهلش و تفکیک است. معادله فوق به راحتی می‌تواند با جاگذاری $\frac{dX}{dt}$ به جای $\frac{dX}{dt}$ مورد ارزیابی قرار گیرد.

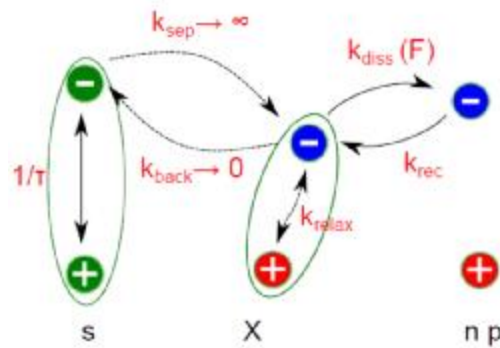
اخیراً اهمیت تله‌ها در قطعات نیم‌رساناهای آلی موضوع تحقیقات زیادی شده است که در این تحقیقات باز ترکیب به کمک تله‌ها نقش مهمی را در تراپرد حاملین بار دارد. معادله زیر از رابطه باز ترکیب شاکلی-رید-هال نتیجه‌گیری شده است که برحسب نرخ تسخیر حاملین توسط تله‌ها $C_{n/p}$ برای الکترون‌ها و حفره‌ها بیان شده است [16]:

$$R = C_n C_p N_t \frac{np - n_i^2}{C_n(n + n_i) + C_p(p + p_i)} \quad (18)$$

(13)

$$J^i = J_n^i + J_p^i = e \left[\frac{q_p^{i+1}}{t^i} - \frac{q_p^{i+1}}{t^i} - \frac{q_n^{i+1}}{t^i} + \frac{q_n^{i+1}}{t^i} \right] \frac{Dr}{\epsilon}$$

پس عمدتاً مدل اونساگر-بران¹ برای توصیف وابستگی نرخ تفکیک به دما و میدان حالت انتقال بار به کار می‌رود. اونساگر این تئوری را برای باز ترکیب یون‌ها تحت شرایط مرزی، باز ترکیب در فاصله صفر یون‌ها بسط داد. بران این مدل را برای حالت انتقال بار با طول عمر محدود به کار برد [12 و 13].



شکل 2. نرخ برهمکنش اکسایتون‌ها (s), حالت‌های $(x)_{CT}$ و حاملین بار (n, p) در اتصال دهنده-پذیرنده، باز ترکیب جفت توسط k_{relax} بیان می‌شود. تفکیک X می‌تواند وابسته میدان باشد (F).

مکانیزم خیلی ساده در فرایند باز ترکیب، باز ترکیب مستقیم یا دومولکولی است که الکترون و حفره متحرک به طور مستقیم با هم باز ترکیب می‌شوند. احتمال باز ترکیب متناسب با چگالی‌های حاملین بار است. ثابت باز ترکیب b به طور معمول توسط تئوری لانگوین² بیان می‌شود (b_L) [14 و 15].

$$R = b(np - n_i^2), b_L = \frac{e(m_h + m_p)}{e_0 e_r} \quad (14)$$

تئوری لانگوین باز ترکیب الکترون‌ها با حفره‌ها را در مواد با تحرک پذیری کم توصیف می‌کند. بنابراین b به

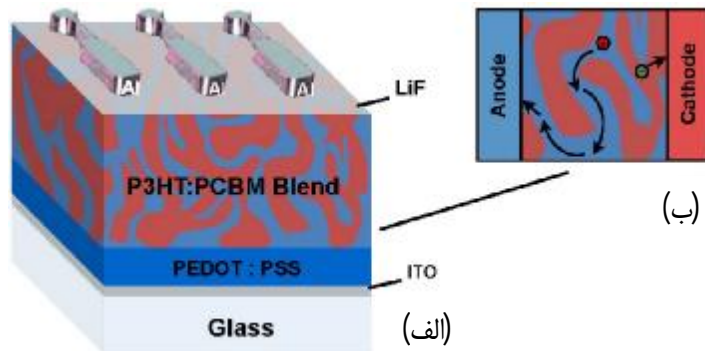
1. Onsager-Braun-Model
2. Langevin Theory

جدول 1. پارامترهای فیزیکی مورد استفاده در شبیه‌سازی

پارامتر	نماد	مقدار	واحد
تحرك حفره	μ_p	2×10^{-5}	cm^2/Vs
تحرك الكترون	μ_n	2×10^{-4}	cm^2/Vs
بار الكتريكي	e	$1/602 \times 10^{-19}$	C
ضريب گذرديهي خلا	ϵ_0	$8/85 \times 10^{-14}$	C^2/Nm^2
ضريب گذرديهي نسبي	ϵ	5	-
ثابت بولتزمن	k	$1/38 \times 10^{-23}$	$\text{m}^2 \text{kg s}^{-2} \text{K}^{-1}$
دما	T	300	K
ضخامت	x	100	nm
ضريب لانگوين	r	$1/95 \times 10^{-12}$	-
شدت تابشي خورشيد	P_{in}	840	Wm^{-2}

برای مطالعه بهتر، در نظر گرفته می‌شود. ساختار مورد مطالعه در شکل (3) نشان داده شده است. این ساختار شامل ناحیه فعال با ساختار توده‌های P3HT:PCBM به ضخامت 100 نانومتر است.

در این بخش چگالی حاملین را در بازه‌ای انتخاب می‌کنیم که از نظر تجربی نیز قابل حصول باشند. بدین منظور چگالی حاملین نوع p (N_p) تا 10^{17} تا $5 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$ و چگالی حاملین نوع n (N_n) در سه مقدار 5×10^{17} ، 10^{18} و



شکل 3. الف) شکل طرحواره ساختار مورد استفاده در شبیه‌سازی و ب) فرایند انتقال بار در پلیمر P3HT:PCBM

$5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ انتخاب می‌کنیم. در شکل (3) تأثیر افزایش N_p را $N_d = 5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ بر چگالی حاملین الکترون و حفره نسبت به ضخامت ناحیه فعال (نقطه 0 به عنوان اند تا 100 نانومتر به عنوان کاتد) نشان داده شده است.

که n_1 و p_1 موقعیت انرژی حالت‌های تله است که به صورت کسر u از گاف انرژی E_g بیان می‌شود:

$$p_1 = N_v \exp\left\{-\frac{u E_g}{k_B T}\right\} \quad (19)$$

$$n_1 = N_c \exp\left\{-\frac{(1-u) E_g}{k_B T}\right\}$$

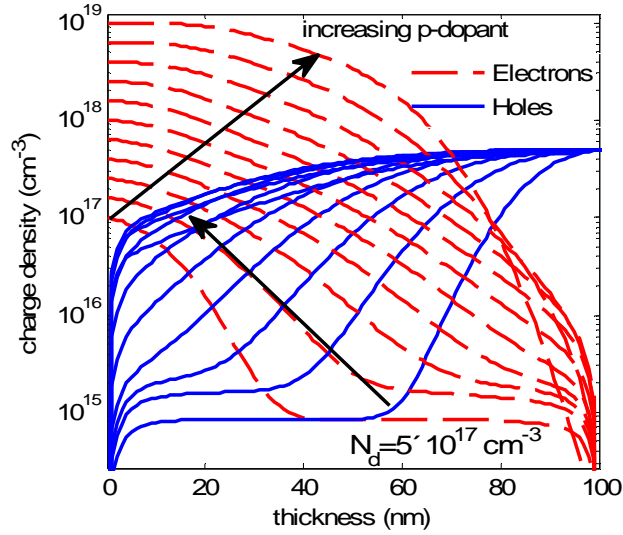
که در رابطه فوق مقدار u بین صفر و یک است. با در نظر گرفتن تله‌های بین گافی و ضرایب تسخیر ثابت برای الکترون‌ها و حفره‌ها، چهار پارامتر در معادله از ترکیب بالا به یک پارامتر کاهش می‌یابد که حاصل ضرب چگالی تله N_T و C است [17].

باز ترکیب جفت، همان باز ترکیب یک الکترون با یک حفره که از برانگیزش نوری ایجاد شده‌اند، است (شکل 2). این فرایند معادل با واهلش یک حالت انتقال بار در اتصال ناهمگون دهنده و پذیرنده است. در شکل زیر واهلش (k_{relax}) در رقابت با تفکیک (k_{diss}) احتمال تولید حامل بار را نتیجه می‌دهد [18]:

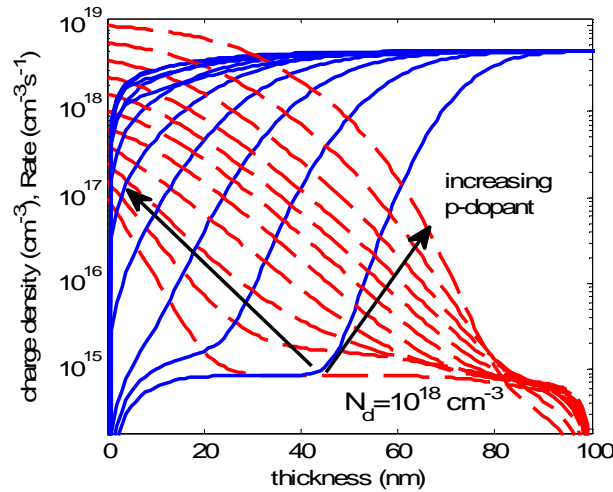
$$p = \frac{k_{diss}}{k_{diss} + k_{relax}} \quad (20)$$

بحث و نتیجه‌گیری

در بیشتر مدل‌ها و مطالعات نظری ارائه شده، ناحیه فعال در سلول‌های خورشیدی آلی را به صورت ذاتی فرض می‌کنند. حال آنکه این فرض برای مطالعه و بهینه‌سازی آنها دارای اشکالاتی است و می‌بایست سهم آلاینده کردن پلیمرها



شکل 4. تغییرات چگالی حاملین الکترون (خط چین) و حفره (خط ممتد) نسبت به افزایش N_p در ضخامت ناحیه فعال در سلول خورشیدی آلای توده‌ای. جهت فلش‌ها افزایش N_p را نشان می‌دهد.



شکل 5. تغییرات چگالی حاملین الکترون و حفره نسبت به افزایش N_p در $N_d=10^{18} \text{ cm}^{-3}$ در ضخامت ناحیه فعال در سلول خورشیدی آلای توده‌ای. جهت فلش‌ها افزایش N_p را نشان می‌دهد.

حاملین نوع p، باعث افزایش حاملین حفره شده و در نتیجه به علت فزونی، این حاملین می‌توانند به کاتد نزدیک‌تر شوند. برای حالتی که چگالی حاملین نوع n را افزایش می‌دهیم، نمودار تغییرات چگالی حاملین بار را نسبت به ناحیه فعال به دست می‌آوریم. شکل (6) این نمودار را در حالتی که $N_d=10^{18} \text{ cm}^{-3}$ است، نشان می‌دهد. مانند شکل (5) نیز حاملین حفره با افزایش N_p افزایش می‌یابد.

همان‌طور که در شکل فوق دیده می‌شود، با افزایش چگالی حاملین آلاینش نوع p، چگالی الکترون‌ها در آن افزایش می‌یابد و به بیشینه مقدار آن در بیشترین مقدار N_p می‌رسد. با افزایش تدریجی N_p برابری چگالی حاملین بار الکترون و حفره که در ابتدا به طور تقریبی در نقطه میانی ناحیه فعال است، به سمت اند حرکت می‌کند ولی با افزایش بیشتر، این برابری به سمت اند تغییر می‌یابد. در واقع افزایش

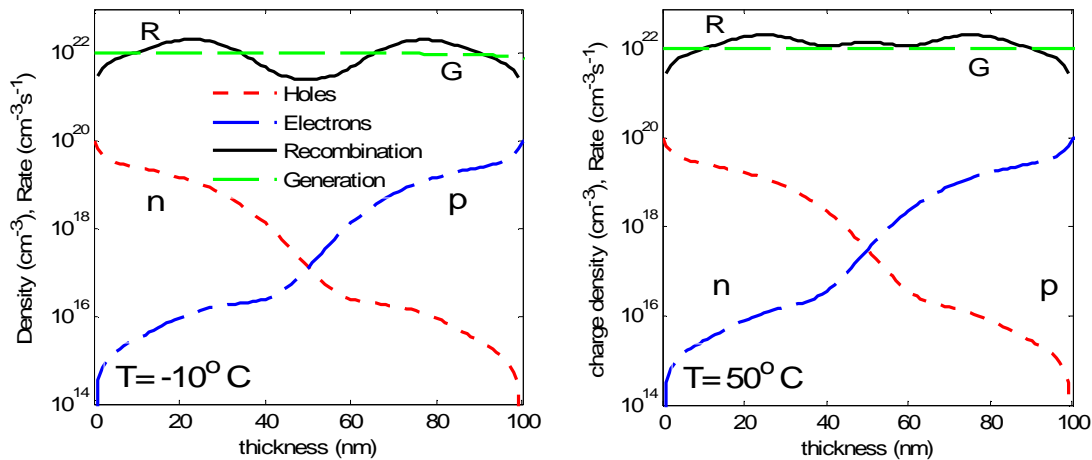
حاملین بار بیشتری در ناحیه فعال سلول از دست رفته و در نتیجه آنها در تولید فوتولتاژ شرکت نمی‌کنند. به طور نظری V_{oc} به صورت زیر با پارامترهای فیزیکی ماده مورد استفاده متناسب است:

$$qV_{oc} = \mu E_g - k_B T \ln\left(\frac{N_p N_d}{np}\right) \quad (18)$$

همان طور که دیده می‌شود، V_{oc} رابطه مستقیمی با باند انرژی ماده داشته و همچنین با افزایش دما انتظار می‌رود

حال با استفاده از روابط معادلات سوق و پخش می‌توان پارامترهای اساسی سلول خورشیدی نظیر جریان مدار کوتاه (J_{sc})، ولتاژ مدار باز (V_{oc})، فاکتور پرشوندگی (FF) و بازده (η) را محاسبه کرد.

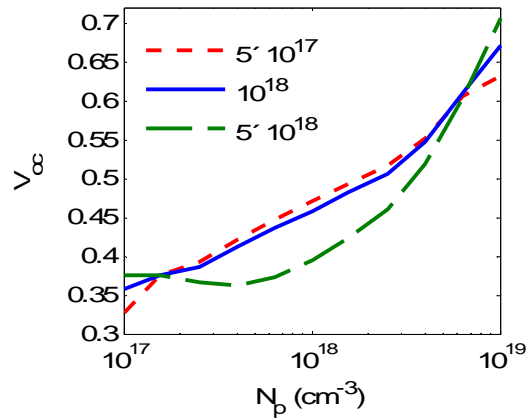
در شکل (6) تغییرات چگالی حاملین بار، نرخ تولید و بازترکیب حاملین در دو دمای مختلف (10- و 50°C) نسبت به ضخامت ناحیه فعال نشان داده شده است. همان طور که در این شکل دیده می‌شود، کاهش حاملین بار در نزدیکی اند و کاند در نتیجه میدان الکتریکی قوی در آنجا است که این میدان قوی باعث انتقال حاملین شده و نرخ بازترکیب کاهش می‌یابد. با کاهش دما چگالی حاملین بار در



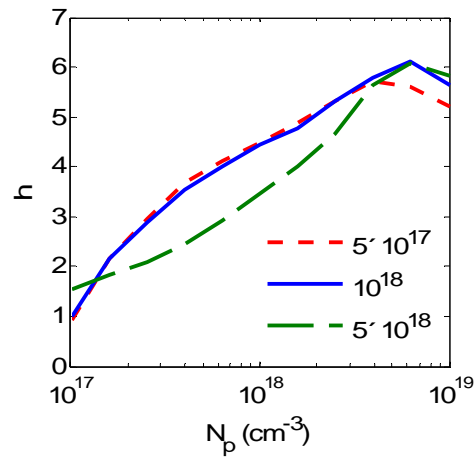
شکل 6. تغییرات چگالی، نرخ تولید و بازترکیب حاملین بار در دو دمای مختلف (10- و 50°C) نسبت به ضخامت ناحیه فعال

که کاهش داشته باشد. ولی با این وجود تغییرات آن نسبت به N_d و N_p مستقیم نیست و به مدل‌های بازترکیب مورد استفاده در محاسبات وابسته است که باید به صورت خودسازگار محاسبه گردد.

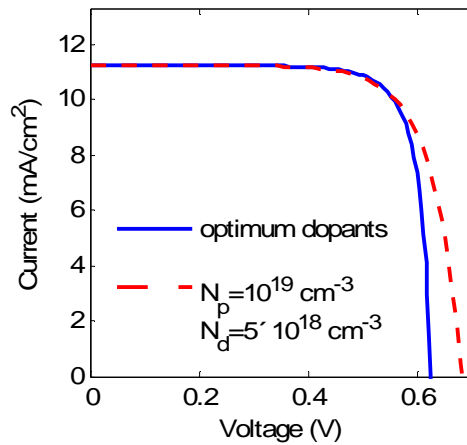
ناحیه فعال سلول کاهش یافته و در نتیجه انتظار می‌رود با کاهش بازترکیب حاملین، بازده سلول افزایش یابد. به علاوه همان طور که در شکل (6) دیده می‌شود، با افزایش دما حاملین بار بیشتری به ناحیه فعال انتقال می‌یابند که این انتقال باعث افزایش نرخ بازترکیب شده و



شکل 7. منحنی تغییرات V_{oc} نسبت به افزایش چگالی حاملین N_p در سلول خورشیدی آلی توده های در سه N_d مختلف



شکل 8. منحنی تغییرات η نسبت به افزایش چگالی حاملین N_p در سلول خورشیدی آلی توده های بر پایه P3HT : PCBM. در سه N_d مختلف.



شکل 9. نمودار جریان ولتاژ ساختار بهینه در مقایسه با بیشترین میزان آلاینش نوع n ($N_p=5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$)

بیشترین بازده را به دست آورد. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد در ساختار مورد مطالعه، بهینه‌ترین حالت زمانی است که $N_p = 5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ و $N_d = 10^{18} \text{cm}^{-3}$ باشد. نمودار جریان ولتاژ ساختار بهینه در مقایسه با بیشترین میزان آرایش نوع n در شکل (9) نشان داده شده است. همان طور که دیده می‌شود با افزایش N_d نمودار جریان ولتاژ S مانند می‌شود.

خواص ترابرد حاملین بار برای نیم رساناهای آلی بستگی به حضور و نحوه توزیع سایت‌های تله دارد. به طوری که می‌دانیم تله‌ها نتیجه بی‌نظمی در مولکول‌ها و زنجیره‌های پلیمری که ناشی از ناخالصی‌های فیزیکی یا شیمیایی موجود در ساختار نیم رساناهای آلی است. از نقطه نظر نقص‌های بلوری که باعث تغییر در ترازهای انرژی می‌شوند و ایجاد گاف انرژی در نظریه نواری می‌شوند، خواص ترابرد حاملین بار در این نوع سیستم‌ها نیز دستخوش تغییراتی خواهد شد که مهم‌ترین پارامتر در این موضوع جایگزیده شدن و یا دچار تله شدن در فرایند رسانش خواهد بود. البته نقص‌ها می‌توانند در نقش مراکز پراکننده در سیستم باشند. تأثیر باز ترکیب ناشی از آرایش، روی ویژگی‌های ساختار P3HT:PCBM با استفاده از مدل سوق و پخش بررسی شد و در آرایش‌های بالا و پایین ترابرد بار مورد مطالعه قرار گرفت که بهترین حالت برای آرایش P مربوط به تراکم $N_p = 6 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ و برای آرایش N مربوط به تراکم $N_n = 10^{18} \text{cm}^{-3}$ است. نتایج شبیه‌سازی نشان داد که در سلول‌های خورشیدی آلی با ساختار توده‌ای همواره باز ترکیب ناشی از آرایش مواد نیم رسانای پلیمری باعث افزایش مشخصات اساسی سلول می‌شود به طوری که بازده سلول با افزایش میزان آرایش تا 6 افزایش می‌یابد که این نتایج در توافق خوبی با نتایج گزارش شده است.

در شکل (7)، تغییرات ولتاژ مدار باز در سه حالت N_d ، برای تغییرات چگالی آرایش نوع p نشان داده شده است. همان طور که در این شکل دیده می‌شود، در حالت کلی با افزایش N_p در N_d ‌های متفاوت، V_{oc} افزایش می‌یابد ولی در قسمت اعظم بازه N_p ، N_p ، V_{oc} در چگالی بیشتر حاملین دهنده یا نوع n ($5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$)، کمتر از دو حالت دیگر است. با افزایش N_p از 10^{17} تا 10^{19}cm^{-3} ، V_{oc} به میزان دوبرابر افزایش می‌یابد که نشان می‌دهد برای افزایش میزان V_{oc} باید نیم رساناهای پلیمری مورد استفاده در ناحیه فعال را به صورت آلیپیده شده استفاده نمود.

برای بررسی بهتر، نمودار بازده سلول در سه حالت N_p ، برای تغییرات چگالی آرایش نوع p نشان داده شده است شکل (8).

همان طور که دیده می‌شود، با افزایش نمایی N_p ، بازده سلول به صورت خطی تا مقدار بیشین‌های افزایش یافته و سپس کاهش می‌یابد. الگوی افزایشی و کاهش η تحت تأثیر FF و با آن همانند است. در این حالت نیز بازده در چگالی $N_p = 5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ کمتر از دو مقدار دیگر است.

نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که در سلول‌های خورشیدی آلی با ساختار توده‌ای همواره آرایش مواد نیم رسانای پلیمری باعث افزایش مشخصات اساسی سلول می‌شود به طوری که بازده سلول با افزایش میزان آرایش تا 6 افزایش می‌یابد که این نتایج در توافق خوبی با نتایج گزارش شده است.

آرایش نوع n در پلیمرهای نیم رسانا همواره دارای مشکلات عدیده‌ای است. لذا تعیین میزان مناسب آرایش می‌تواند باعث کاهش بهبود ساختار و صرفه‌جویی در زمان و هزینه ساخت سلول نیز گردد. نتایج این شبیه‌سازی نشان می‌دهد که با تعیین دقیق پارامترهای فیزیکی و یافتن حالت بهینه برای آرایش نوع p، ساختار بهینه با

References

- [1] C. Liang, Y. Wang, D. Li, X. Ji, F. Zhang, Z. He, Modeling and simulation of bulk heterojunction polymer solar cells, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 127 (2014) 67–86.
- [2] T. Tromholt, M. Manceau, M. Helgesen, J. E. Carle, F. C. Krebs, Degradation of semiconducting polymers by concentrated sunlight, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 95 (2011) 1308-1320
- [3] Y. Zhou, J. Pei, Q. Dong, X. Sun, Y. Liu, W. Tian, Donor- Acceptor Molecule as the Acceptor for Polymer-Based Bulk Heterojunction Solar Cells, *J. Phys. Chem. C*, 113 (2009) 7882-78809
- [4] A. Mahmoudloo , S. Ahmadi , Influence of the temperature on the charge transport and recombination profile in organic bulk heterojunction solar cells: a drift-diffusion study, *J. Applide Physics A*,119(4), (2015) 1523-1529.
- [5] D. Rezzonico, B. Perucco, E. Knapp, R. Hausermann, N. A. Reinke, F. Müller, B. Ruhstaller, Numerical analysis of exciton dynamics in organic light-emitting devices and solar cells, *J. of Photonics for Energy*, 1 (2011) 011005-1.
- [6] J. D. Kotlarski, L. J. A. Koster, P. W. M. Blom, M. Lenes, and L. H. Slooff, Combined optical and electrical modeling of polymer:fullerene bulk heterojunction solar cells, *J. Appl. Phys.* 103 (2008) 084502.
- [7] A. H. Fallahpour, A. Gagliardi, F. Santoni, D. Gentilini, A. Zampetti, M. Auf der Maur, and A. Di Carlo Modeling and simulation of energetically disordered organic solar cells, *J. Appl. Phys.*, 103(2014) 184502.
- [8] R. Yahyazadeh, Z. Hashempour, Effect of Hyrostatic pressure on optical Absorption coeffivient of InGaN/GaN of Multiple Quantum well solar cells, *Journal of optoelectrical Nano structures*,6.2 (2021) 1-22
- [9] L. J. A. Koster, E. C. P. Smits, V. D. Mihailetchi, P. W. M. Blom, Device model for the operation of polymer/fullerene bulk heterojunction solar cells, *Phys. Rev. B*, 72 (2005) 085205.
- [10] J. Nelson, J. J. Kwiatkowski, J. Kirkpatrick, and J. M. Frost, Modeling charge transport in organic photovoltaic materials, *Acc. Chem. Res.*, 42 (2009) 1768.
- [11] F. F. Stelzl, Uli Wurfel, Modeling the influence of doping on the performance of bulk heterojunction organic solar cells: One-dimensional effective semiconductor versus two-dimensional donor/acceptor model, *Phys. Rev. B.*, 86 (2012) 075315.
- [12] B. Ray and M. A. Alam, Random vs regularized OPV: Limits of performance gain of organic bulk heterojunction solar cells by morphology engineering, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 99 (2012) 204.
- [13] M. Pfeiffer , K. Leo, X. Zhou, J.S. Huang, M. Hofmann, A. Werner, J. Blochwitz-Nimoth, Doped organic semiconductors: Physics and application in light emitting diodes, *Organic Elec.* 4 (2003) 89103.
- [14] B. A. Gregg, Transport in Charged Defect-Rich p-Conjugated Polymers, *J. Phys. Chem. C*, 113 (2009) 5899.
- [15] B. A. Gregg, Charged defects in soft semiconductors and their influence on organic photovoltaics, *Soft Matter.*, 5 (2009) 2985
- [16] A. Nollau, M. Pfeiffer, T. Fritz, K. Leo, Controlled n-type doping of a molecular Organic semiconductor: naphthalenetetracarboxylic dianhydride (NTCDA) doped with bis (ethylenedithio)- tetrathiafulvalene (BEDT-TTF), *J. Appl. Phys.*, 87 (2000) 4340-4343.
- [17] A. Veysel Tunc, A. De Sio, D. Riedel, F. Deschler, E. Da Como, J. Pa-

- risi, E. von Hauff, Molecular doping of low-bandgap-polymer: fullerene solar cells: Effects on transport and solar cells, *Org. Electron.*, 13 (2012) 290.
- [18] B. Maennig, M. Pfeiffer, A. Nollau, X. Zhou, K. Leo, P. Simon, Controlled p-type doping of polycrystalline and amorphous organic layers: Self-consistent description of conductivity and field-effect mobility by a microscopic percolation model, *Phys. Rev. B*, 64 (2001) 195208.