

بررسی نظری ویژگی‌های اپتیکی و الکتریکی سلول‌های خورشیدی آلی بر اساس لایه‌های نازک CuPc/C_{60}

دورنما، مؤگان^۱ عزیزیان کلاندرق، یاشار^۲

۱- دانشگاه پیام نور مرکز ارومیه، ارومیه

۲- بخش فیزیک، دانشگاه محقق اردبیلی، اردبیل

چکیده

مدل‌های اپتیکی و الکتریکی زیادی وجود دارند که با آنها می‌توان پدیده جذب اپتیکی و ویژگی‌های ولتاژ-جریان را در سلول‌های خورشیدی آلی بررسی نمود، اما اینکه بتوان با بررسی پدیده جذب به کمک یک مدل اپتیکی به ویژگی‌های ولتاژ-جریان دست یافت، شیوه نوینی برای محاسبه کارایی تبدیل توان محسوب می‌شود که در این مقاله به آن پرداخته شده است. در این پژوهش با این شیوه، ساختارهای دو اتصاله (p-n) پایه CuPc/C_{60} بررسی شده و کارایی تبدیل توان در این ساختارها با یکدیگر مقایسه شده است.

واژه‌های کلیدی: جریان مدار کوتاه، سلول‌های خورشیدی دو لایه‌ای، کارایی تبدیل توان.

yashar.a.k@gmail.com

۱- مقدمه

جذب تغییر می‌کند. ضخامت لایه‌ها را طوری تعیین کنیم که جذب در لایه فعال بیشینه باشد.

$$E(z) = \frac{M''_{j,11} e^{i\tilde{\zeta}_j(z-dj)} + M''_{j,21} e^{i\tilde{\zeta}_j(dj-z)}}{M'_{j,11} M''_{j,11} e^{i\tilde{\zeta}_j(dj)} + M'_{j,12} M''_{j,21} e^{i\tilde{\zeta}_j(dj)}}$$

و

$$Q(z) = \frac{1}{2} c \varepsilon_0 \omega n |E(z)|^2$$

که n ضریب شکست لایه است. [۱]

در بعضی طول موجها جذب و یا بازتاب بیشینه است. با استفاده از این مدل، جذب و بازتاب را برای کل وسیله می‌توان رسم نمود. در این صورت همخوانی خوبی بین Q و جذب و بازتاب در کل وسیله در طول موج مشخص وجود دارد. کارایی کوانتومی خارجی η_{EQE} یک سلول خورشیدی به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\eta_{EQE} = (1-R) \times \eta_{IQE} = (1-R) \times \eta_{ED} \times \eta_{EQE} \times \eta_{CT} \times \eta_{CC}$$

$$\eta_{IQE} = \eta_A \times \eta_{ED} \times \eta_{CT} \times \eta_{CC}$$

که R بازتاب از فصل مشترک شیشه- هوا، η_A کارایی جذب نور در لایه فعال سلول خورشیدی، η_{ED} کارایی پخش اکسیژن، η_{CT} کارایی انتقال بار (کارایی جدایی اکسیژن به جفت الکترون و حفره آزاد در آن محل)، η_{CC} کارایی گردآوری بار و η_{IQE} کارایی کوانتومی داخلی است. هر مقدار به صورت زیر محاسبه شده است:

$$\eta_A = (1 - e^{-\alpha l})$$

η_A نسبت تعداد اکسیژن‌های تولید شده از فوتون به تعداد فوتون‌ها تابشی می‌باشد و d ضخامت لایه فعال، ضریب جذب است. η_{ED} نسبت

تبدیل فوتولتائیک (تبدیل نور خورشید به الکتریسیته) جهت تولید برق مورد نیاز بشر از اهمیت خاصی برخوردار است. سلول‌های خورشیدی به سه نسل تقسیم می‌شوند که نسل اول و دوم علیرغم بازدهی بالا، به خاطر معایبی که دارند از جمله قیمت بالای تولید و... امروزه جای خود را به سلول‌های خورشیدی نسل جدید از جمله سلول‌های خورشیدی آلی داده‌اند. با استفاده از یک مدل اپتیکی به بررسی اثر جذب در لایه‌های مختلف یک سلول خورشیدی دولایه‌ای بر پایه پلیمر/فلورین می‌پردازیم. با توجه به بیشترین طول پخش اکسیژن‌ها در سلول‌های خورشیدی دو لایه‌ای، نمودارهای کارایی کوانتومی داخلی و خارجی و چگالی جریان مدار کوتاه نسبت به ضخامت لایه جاذب در سلول‌های دو لایه‌ای رسم و در نهایت کارایی تبدیل توان را برای این ساختارها بدست آمده است. بررسی این نمودارها، بیشترین بازدهی مربوط به این ساختارها را پیشنهاد می‌کنند. با تحلیل این نمودارها می‌توان ساختار مناسبی برای سلول‌های خورشیدی آلی ترکیبی انتخاب نمود که بیشترین بازدهی را داشته باشد.

۲- ملاحظات نظری

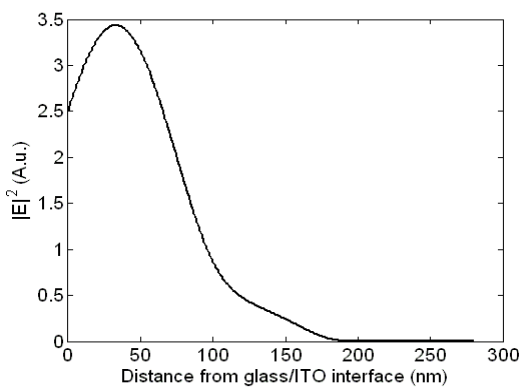
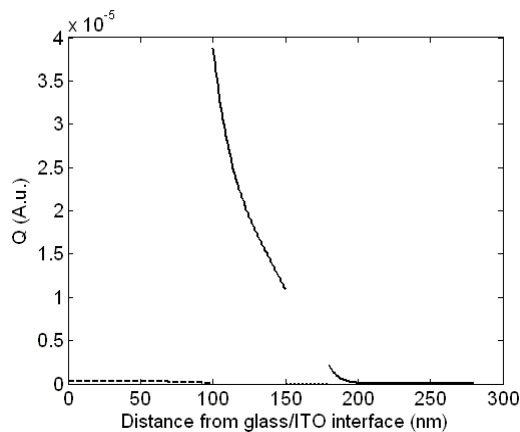
سلول فوتولتائیک آلی شامل چند لایه است که در ساده‌ترین حالت، لایه‌ها مانند ساندویچ روی هم چیده می‌شوند. این لایه‌ها عبارتند از یک زیر لایه شیشه‌ای، یک لایه عبور دهنده نور که دارای ویژگی حداقل جذب نور می‌باشد (به عنوان اتصال آند)، لایه‌های فعال آلی که می‌توانند از یک یا دو لایه آلی یا به صورت ترکیبی تشکیل شده باشد (جذب نور و تولید بار در این لایه‌ها صورت می‌گیرد)، لایه پشتی به عنوان اتصال کاتد که از موادی با قدرت جذب بالا تشکیل می‌شود. در این پژوهش دو ساختار دولایه‌ای فعال (اتصال p-n) مورد بررسی قرار گرفته و با هم مقایسه شده‌اند.

ساختار دو لایه‌ای ۱: $\text{SiO}_2/\text{ITO}/\text{CuPc}/\text{C}_{60}/\text{Al}$

ساختار دو لایه‌ای ۲: $\text{SiO}_2/\text{ITO}/\text{Pedot}/\text{CuPc}/\text{C}_{60}/\text{Al}$

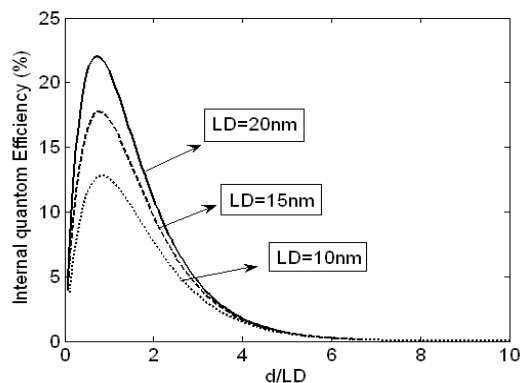
با استفاده از مدل ماتریسی در هر لایه مربع میدان الکتریکی و Q که معیاری از جذب است را بدست می‌آوریم. با تغییر ضخامت لایه‌ها میزان

نمودارهای $|E|^2$ بر حسب فاصله از فصل مشترک SiO_2/ITO رسم شده اند. ضخامت 1000 nm ، مربع میدان الکتریکی در لایه ITO می‌باشد. در ضخامت $d=50 \text{ nm}$ برای CuPc قله $|E|^2$ بالاتر است. $|E|^2$ در فصل مشترک لایه‌ها پیوسته است. در نمودار Q نیز در این ضخامت، جذب در لایه فعال بیشینه است.



نمودار ۲. نمودارهای $|E|^2$ و Q در طول موج 600 nm برای سلول‌های خورشیدی دولایه‌ای،

طول پخش اکسیتون در محدوده $20-100 \text{ nm}$ و ضخامت لایه فعال 60 nm می‌باشد. با در نظر گرفتن طول پخشهای مختلف اکسیتون، نمودار کارایی کوانتومی داخلی بر حسب d/L_D که ضخامت لایه فعال و L_D طول پخش اکسیتون است را رسم می‌کنیم.



نمودار ۳. کارایی کوانتومی داخلی بر حسب d/L_d در طول پخشهای مختلف.

تعداد اکسیتون‌های پخش شده به فصل مشترک دهنده-پذیرنده به تعداد اکسیتون‌های تولید شده از فوتون است.

$$\eta_{ED} = e^{-d/L_d}$$

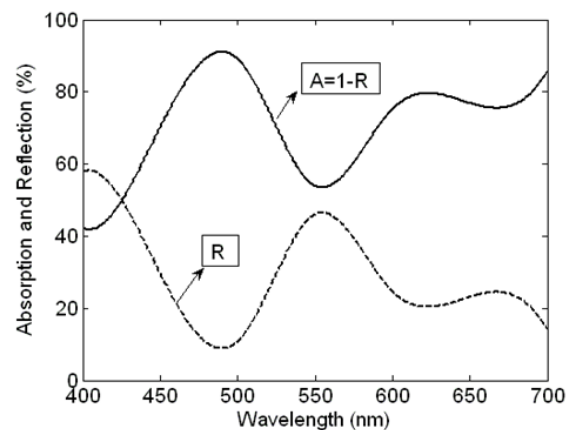
L_D طول پخش اکسیتون می‌باشد. نسبت تعداد اکسیتون‌های پراکنده شده در فصل مشترک به تعداد اکسیتون‌های پخش شده به فصل مشترک و η_{CT} نسبت تعداد حاملان بار آزاد در الکترودها به تعداد اکسیتون‌های پراکنده شده در فصل مشترک می‌باشد. [۲،۳] با رسم نمودار کارایی کوانتومی داخلی در طول پخش اکسیتون و نیز کارایی کوانتومی خارجی بر حسب ضخامت لایه فعال می‌توان چگالی جریان مدار کوتاه را در ضخامت‌های مختلف بدست آورده و رسم نمود. محاسبه چگالی جریان مدار کوتاه، بدست آوردن ویژگیهای جریان-ولتاژ و کارایی تبدیل توان را میسر می‌سازد.

۳- بررسی ساختارهای پیشنهادی

۳-۱ ساختار دولایه‌ای ۱:

این ساختار شبیه یک فتودیود است که لایه فعال آن شامل یک لایه پلیمری CuPc به عنوان دهنده و یک لایه نازک C_{60} به عنوان گیرنده می‌باشد که به یک طرف لایه فعال افزوده می‌شود. نور از طرف لایه دهنده تابش می‌شود و در این لایه جذب می‌گردد. الکترون پس از جذب نور از تراز HOMO دهنده به تراز LUMO اش برانگیخته می‌شود (فرآیند تولید اکسیتون)، سپس اکسیتون در فاصله طول پخش معینی در این لایه پخش می‌شود تا به فصل مشترک برسد. در این هنگام الکترون از تراز LUMO پذیرنده به LUMO دهنده و حفره در جهت مخالف انتقال می‌یابد. این فرآیند تراپرد بار، جدایی اکسیتون نام دارد. در مرحله بعدی الکترون از تراز LUMO پذیرنده به سوی کاتد و حفره از تراز HOMO دهنده به سوی آند می‌رود و به این ترتیب جریان برقرار می‌شود. نمودار ۱ جذب و بازتاب در این لایه جاذب را در طیف مرئی خورشید $400-700 \text{ nm}$ نشان می‌دهد. در طول موج 600 nm جذب در کل وسیله 80% درصد می‌باشد.

$$d_{\text{SiO}_2} = 1 \text{ mm} / d_{\text{ITO}} = 100 \text{ nm} / d_{\text{CuPc}} = 50 \text{ nm} / d_{\text{C}_{60}} = 30 \text{ nm} / d_{\text{Al}} = 100 \text{ nm}$$



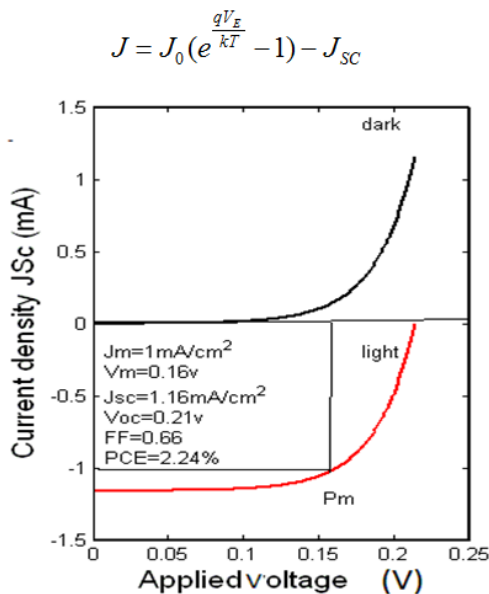
نمودار ۱. جذب و بازتاب در لایه جاذب در گستره طیف مرئی

است. جمله اول تحت تاریکی و جمله کامل تحت روشنایی می‌باشد. با رسم نمودار $J-V$ می‌خواهیم کارایی تبدیل توان یعنی نسبت توان بیشینه تولید شده به توان اپتیکی تابشی را بدست آوریم. نمودار زیر چگالی جریان بر حسب ولتاژ را تحت تاریکی و تابش نور نشان می‌دهد. نقطه مشخص شده روی نمودار تحت تابش نقطه توان بیشینه است. زیرا حاصل ضرب $J \times V$ در آن نقطه بیشینه است. در این نقطه:

$$j = j_{sc} = 1.16 \text{ mA/cm}^2 \quad V = 0 \text{ و در } V_m = 0.16 \text{ V و } j_m = 1 \text{ mA/cm}^2$$

$$\text{و در } J = 0, V = V_{OC} = 0.16 \text{ V (ولتاژ مدار باز)}$$

می‌باشد. فاکتور پرکنندگی از روی نمودار بدست می‌آید که برای این ساختار برابر ۶۶،۰ محاسبه می‌شود. کارایی تبدیل توان ۲۴٪ بدست می‌آید.



نمودار ۶. ویژگی‌های جریان-ولتاژ برای ساختار مورد نظر

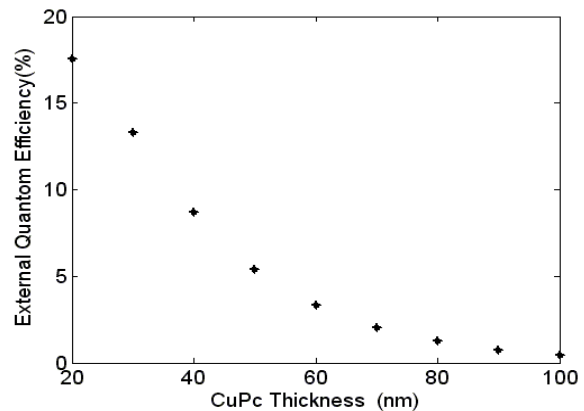
۳-۲. ساختار دولایه ای ۲:

این ساختار نیز شبیه ساختار قبلی است با این تفاوت از PEDOT:PSS در یک طرف ITO استفاده شده است. PEDOT:PSS ماده‌ای است که سبب افزایش میدان الکتریکی داخلی و در نتیجه بهبود عملکرد سلول خورشیدی می‌شود.

$$\begin{aligned} d_{SiO_2} &= 1 \text{ mm} / d_{ITO} = 110 \text{ nm} / \\ d_{PEDOT} &= 100 \text{ nm} / d_{CuPc} = 50 \text{ nm} \\ / d_{C60} &= 30 \text{ nm} / d_{Al} = 100 \text{ nm} \end{aligned}$$

در این ساختار نیز طول پخش اکسیتون را ۲۰ nm در نظر می‌گیریم و ماکزیمم کارایی را بدست می‌آوریم. در این ضخامت بهینه، ۵/۸٪ و چگالی جریان مدار کوتاه ۱/۲۳ mA/cm^۲ می‌باشد. با توجه به نقطه توان بیشینه، پس فاکتور پرکنندگی برابر ۰،۷ خواهد بود. کارایی تبدیل توان نیز برای این ساختار ۲،۸۶٪ بدست می‌آید. با مقایسه دو ساختار مطالعه شده نتیجه می‌گیریم که افزودن لایه PEDOT:PSS باعث افزایش کارایی تبدیل توان به اندازه ۶۲،۰٪ می‌شود.

ملاحظه می‌شود که قله کارایی با افزایش طول پخش اکسیتون افزایش می‌یابد. در طول پخش ۲۰ nm و ضخامت ۵۰ nm برای لایه CuPc $d/L_d = 2/5$ و $\eta_{IQE} = 7\%$ می‌باشد. قله کارایی در ۰/۷۵ است که عملی نیست زیرا ضخامت لایه همواره بزرگتر از طول پخش است. ماکزیمم کارایی در ۲۰ nm می‌تواند اتفاق بیفتد که در این حالت نیز فوتوجریان و کارایی تبدیل توان بسیار کم می‌شود. کارایی کوانتومی خارجی در وسیله که نسبت تعداد الکترونهای تولید شده در وسیله به تعداد فوتونهای فرود آمده به ساختار است طبق رابطه بدست می‌آید. نمودار زیر کارایی کوانتومی خارجی را بر حسب ضخامت CuPc نشان می‌دهد.

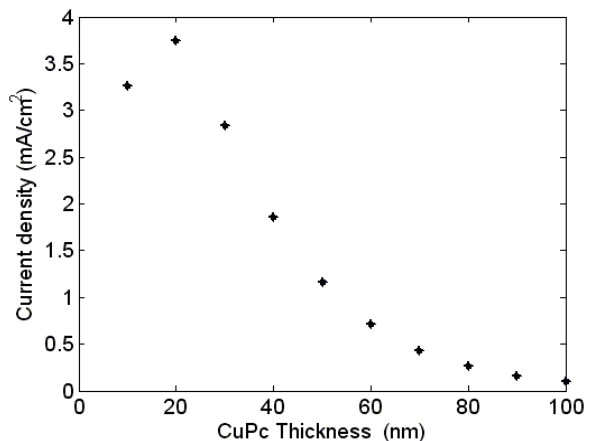


نمودار ۴. کارایی کوانتومی خارجی بر حسب ضخامت لایه جاذب.

در طول موج $\lambda = 600 \text{ nm}$ و با در نظر گرفتن کارایی کوانتومی خارجی j_{sc} بر حسب ضخامت CuPc رسم می‌کنیم.

$$\eta_{EQE} = \frac{hc j_{sc}}{\lambda e P_0}$$

در این فرمول P_0 توان نور تابشی e ، بار الکترون، h ثابت پلانک و c سرعت نور در خلأ می‌باشد. نمودار زیر نشان می‌دهد که با افزایش ضخامت لایه فعال چگالی جریان مدار کوتاه کاهش می‌یابد. در ضخامت ۵۰ nm $j_{sc} = 1.16 \text{ mA/cm}^2$ می‌باشد



نمودار ۵. چگالی جریان مدار کوتاه بر حسب ضخامت لایه جاذب.

با اتصال وسیله به مولتی متر می‌توان نمودار چگالی جریان بر حسب ولتاژ بکار برده شده را رسم کرد. j_0 چگالی جریان اشباع و j_{sc} جریان مدار کوتاه

۴- مقایسه با نتایج تجربی دیگران

4. M. Morsli, L. Cattin, J.C. Bernede, P. Kumar, j-v characteristics of dark and illuminated classical and inverted organic solar cells based on the CuPc/C60 heterojunction
5. W.J. Potscavage, Jr., S. Yoo, B. Kippelen, origin of the open-circuit voltage in multilayer heterojunction organic solar cells, *Applied Physics Letters* 93, 193308 (2008).
6. C-W. Chu, V. Shrotriya, G. Li, Y. Yang, Tuning acceptor energy level for efficient charge collection in copper-phthalocyanine-based organic solar cells, Department of Materials Science and Engineering, University of California at Los Angeles, Los Angeles, California 90095.
7. X. Gong, M-H. Tong, S. Park, M. Liu, A. Jen, A. Heeger, *Semiconducting Polymer Photodetectors with Electron and Hole Blocking Layers: High Detectivity in the Near-Infrared*, Sensors 2010, Published: 1 July 2010.
8. A. Gadisa, *Studies of Charge Transport and Energy Level in solar Cells Based on Polymer/Fullerene Bulk Heterojunction*, Linköping Studies in Science and Technology Dissertation No. 1056.
9. H. Hoppe, N. Arnold, N.S. Sariciftci, D. Meissner, Modeling the optical absorption within conjugated polymer/fullerene-based bulk-heterojunction organic solar cells, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 80, 2003, pp. 105–113.
10. W. Brütting, M. Bronner, M. Gotzenbrunner, A. Optiz, *Ambipolar Blends of Cu-Phthalocyanine and Fullerene: Charge Carrier Mobility, Electronic Structures and their Implication for Solar Cells Applications*, *Macromol. Symp.* 2008, 268, 38-42.
11. D. Datta, V. Tripathi, P. Gogoi, S. Banerjee, S. Kumar, Ellipsometric studies on thin film CuPc: C60 blends for solar cell applications, Indian Institute of Technology Kanpur, Kanpur 208016, India.

گروهی از محققان با روش تجربی برای ساختار زیر بر پایه CuPc و C60 کارایی تبدیل توان ۱/۵۳٪ بدست آوردند: [۴]

glass / anod / CuPc (35 nm) / C60 (40 nm) / Alq3 (9 nm) / Al (100 nm)

این ساختار توسط گروه دیگری با تغییر ضخامت لایه‌ها بررسی شده که کارایی تبدیل توان ۱/۹٪ بدست آمده است. [۵]
البته در ساختار پیشنهادی ما Alq3 وجود ندارد. در ساختار دیگری که توسط گروهی دیگر پیشنهاد شده با افزودن PEDOT:PSS به CuPc و BCP به Al کارایی تبدیل توان با روش اسپین-کوآت تحت تابش ۱۳۰ mw/m² از ۷۴٪ به ۱/۱۸٪ افزایش یافته است. [۶]

۵- نتیجه گیری

با استفاده از مدل‌های اپتیکی توانستیم ویژگی‌های اپتیکی و الکتریکی وسیله‌های فتوولتائیک با ساختارهای پیشنهادی را بدست آوریم. با توجه به فرضیاتی که در مورد طول پخش اکسیتون و در نظر گرفتن لایه‌ها به صورت فیلم نازک و نحوه جذب نور و تولید اکسیتون در دو لایه‌ها انجام دادیم به مقدار ماکزیمم کارایی تبدیل توان دست یافتیم. ویژگی‌های اپتیکی و الکتریکی وسیله‌ها کاملاً به یکدیگر وابسته اند. [۷-۱۱]

۶- مراجع

1. N. Krister, O. Inganas, *Simulation of Optical Processes in Organic Photovoltaic Devices*, Bimolecular and Organic Electronics, Department of Physics and Measurement Technology, Linköping University, Sweden.
2. S. R. Forrest, *The Limits to organic Photovoltaic Cell Efficiency*, MRS BULLETIN, VOLUME 30, JANUARY 2005.
3. T. Soga, *Nanostructured Materials for Solar Energy Conversion*, Department of Environmental Technology and Urban Planning, Nagoya Institute of Technology, Nagoya, Japan