





دانشکده فیزیک

گروه حالت جامد

**بررسی و تعیین ضخامت بهینه لایه فعال در سلول‌های خورشیدی  
دولایه‌ای آلی با استفاده از شبیه‌سازی کامپیوتری**

پژوهش و نگارش:

علی عسگریوکی

اساتید راهنما:

دکتر سعید حسامی پیله‌رود

دکتر عباس بهجت

پایان‌نامه ارشد جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

بهمن ۹۱

تقدیم بہ

ساحت مقدس امام زمان عجل ا. تعالی فرجہ الشریف

و پدرم

کہ عالمانہ بہ من آموخت تا چگونه در عرصہ زندگی ایستادی را تجربہ نمایم

بہ مادرم

دریای نبی کران فداکاری و عشق کہ وجودم برایش ہمہ رنج بود و وجودش برایم ہمہ مہر

بہ خواہران بزرگواری و برادر عزیزم

کہ ہموارہ باد لکرمی ہائیشان مرایاری کردہ اند.

## تقدیر و تشکر

با حمد و سپاس خداوند عزوجل که از روی لطف و کرم خویش سعادت نصیب این بنده کمترین کرد تا به وسع خود و هر چند ناچیز از دریای بی کران علمش جرعه ای را بنوشتم، زیرا اوست آفریننده هستی و عالم به آن.

اکنون که به یاری خداوند متعال این دوره از تحصیل را با موفقیت به پایان رسانده ام بر خود واجب می دانم که قدردان زحمات و محبت تمام کسانی باشم که در این مسیر مریاری رسانده اند. هر چند کلمات از بیان زحمات والدینم ناتواند اما به رسم ادب و احترام بوسه بردستان پرمهرشان می زنم و از تمام وجود بخاطر فداکاری های عاشقانه ایشان برای پیشرفت اینجانب سپاسگزارم. همچنین تشکر می کنم از اساتید راهنمایم جناب آقای دکتر سعید حسامی که دلسوزانه حامی من بوده اند و باروینی گشاده مریاری رسانده اند و جناب آقای دکتر عباس بجنبت که جز با نظرات ارزنده ایشان این موفقیت حاصل نمی شد.

بر خود لازم می دانم که از سرکار خانم ساگر که در این مدت مشوق من بوده اند و سرکار خانم ترابی که با کمک های سازنده ایشان مریاری رسانده اند و همچنین از آقای صفری تشکر ویژه نمایم.

از تمام همکلاسی ها و دوستان خوبم در دانشگاه صنعتی شاهرود و همچنین دانشگاه نیر از جمله آقایان مرادی، ظهرابی، پارسا، رضایی، عبدی و سرکار خانم ابارشی و دیگر عزیزانی که به هر نحوی در این مسیر به من کمک کرده اند کمال تشکر را دارم. با آرزوی خوشبختی و سربلندی شاعرینان

علی عسکری یوکی

## تعهد نامه

اینجانب علی عسگر بیوکی دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته فیزیک حالت جامد دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه بررسی و تعیین ضخامت بهینه لایه فعال در سلول‌های خورشیدی دولایه‌ای آلی با استفاده از شبیه‌سازی کامپیوتری تحت راهنمایی دکتر سعید حسامی پیلرود و دکتر عباس بهجت متعهد می‌شوم .

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است .
- در استفاده از نتایج پژوهش‌های محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است .
- مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است .
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می‌باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه صنعتی شاهرود » و یا « Shahrood University of Technology » به چاپ خواهد رسید .
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می‌گردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه ، در مواردی که از موجود زنده ( یا بافتهای آنها ) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است .
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری ، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است .

### تاریخ

### امضای دانشجو

### مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج ، کتاب ، برنامه های رایانه‌ای، نرم افزار ها و تجهیزات ساخته شده است ) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می‌باشد . این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود .
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی‌باشد.

## چکیده

چندین دهه است که بشر به طور جدی به فکر استفاده از منابع انرژی تجدیدپذیر و پاک از جمله انرژی خورشیدی است. در این راستا سلول‌های خورشیدی فتوولتائیک یکی از دست‌آوردهای مهم بشر محسوب می‌شوند. در تحقیقات اخیر سلول‌های خورشیدی آلی (پلیمری) نانوساختار به دلیل انعطاف پذیری، هزینه تولید کم، ساخت آسان‌تر در سطوح گسترده و آلودگی کمتر زیست‌محیطی، بیشتر از سلول‌های معدنی مورد توجه قرار گرفته‌اند. مسئله اصلی در سلول‌های خورشیدی آلی، مسئله بازدهی است که با ضخامت لایه فعال رابطه تنگاتنگی دارد. در این تحقیق ابتدا با استفاده از شبیه‌سازی اپتیکی بر اساس مدل پترسون، برنامه کامپیوتری با استفاده از نرم افزار متلب، برای بررسی انواع سلول‌های خورشیدی آلی از جمله سلول‌های دولایه‌ای<sup>۱</sup>، سلول‌های مخلوطی<sup>۲</sup> و سلول‌های پی‌درپی<sup>۳</sup> تهیه شد. در تحقیقاتی که تاکنون منتشر شده است، بررسی اپتیکی سلول‌ها فقط در مد تابشی TE صورت گرفته اما در این پژوهش، جذب در هر دو مد TE و TM بررسی شده است و بهینه‌سازی سلول بر اساس جذب میانگین رخ داده در هر دو مد تابشی و در داخل لایه فعال سلول انجام گرفته است. همچنین از آنجایی که تغییر در ضخامت هر یک از لایه‌ها در جذب داخل لایه فعال سلول تاثیر دارد، بهینه‌سازی ضخامت تمام لایه‌ها، باهم و به طور همزمان صورت گرفته و ضخامت هیچ لایه‌ای از قبل ثابت فرض نشده است. در حالی که محققین تاکنون برای بهینه‌سازی یک لایه، برای سادگی محاسبات، ضخامت دیگر لایه‌ها را ثابت در نظر می‌گیرند.

یکی از فرض‌هایی که به منظور ساده‌سازی روابط در بررسی اپتیکی سلول‌های خورشیدی آلی می‌شود این است که فقط تابش عمودی به سطح سلول را در نظر می‌گیرند. تحت تابش عمود بازتاب

---

<sup>1</sup> Bilayer solar cells

<sup>2</sup> Blend solar cells

<sup>3</sup> Tandem Solar Cells

کمتری رخ می‌دهد. از اینرو تصور می‌شود که بالاترین بازده در این زاویه تابش امکان پذیر است اما از طرفی در تابش غیر عمود، عملاً ضخامت مؤثر برای جذب نور افزایش می‌یابد. تقابل این دو اثر تعیین می‌کند که بازده سلول افزایش می‌یابد یا کاهش. از اینرو در ادامه پژوهش به بررسی عملکرد اپتیکی سه ساختار از سلول‌های خورشیدی آلی پیوندگاه ناهمگون حجمی<sup>1</sup> تحت زوایای مختلف تابش و تاثیر آن بر پروفایل جذب در لایه فعال پرداخته شده است.

---

<sup>1</sup> Bulk Heterojunction solar cells

## مقاله مستخرج از پایان نامه

عسکریوکی، علی؛ بهجت، عباس؛ حسامی پیلهرود، سعید؛ "بررسی اپتیکی سلول‌های خورشیدی آلی ناهمگون حجمی مبتنی بر ماده فعال  $PCPDTBT:PC_{60}BM$  تحت زوایای مختلف تابش"، دومین

کنفرانس تخصصی سلول‌های خورشیدی نانوساختار، دانشگاه صنعتی شریف، مهر ۱۳۹۱



فصل اول: سلول‌های خورشیدی .....	۱
۱-۱ مقدمه .....	۲
۲-۱ انرژی خورشیدی .....	۲
۳-۱ تاریخچه سلول‌های خورشیدی .....	۳
۴-۱ مقایسه مواد آلی و معدنی .....	۶
۱-۴-۱ تحرک پذیری .....	۶
۲-۴-۱ نوارهای انرژی .....	۶
۳-۴-۱ اکسیتون .....	۷
۴-۴-۱ طول پخش اکسیتون .....	۹
۵-۴-۱ ضریب جذب .....	۹
۶-۴-۱ طیف جذبی .....	۹
۵-۱ ساختارهای سلول‌های خورشیدی آلی .....	۱۰
۱-۵-۱ سلول‌های تک لایه‌ای .....	۱۰
۲-۵-۱ سلول‌های دولایه‌ای .....	۱۱
۳-۵-۱ سلول‌های مخلوطی .....	۱۳
۴-۵-۱ سلول‌های لایه‌در لایه .....	۱۴
۵-۵-۱ سلول‌های پی‌در پی .....	۱۴

- ۱-۶ ساز و کار سلول خورشیدی معدنی ..... ۱۵
- ۱-۷ نحوه کارکرد سلول‌های خورشیدی آلی ..... ۱۶
- ۱-۷-۱ جذب نور و تشکیل اکسیتون ..... ۱۷
- ۱-۷-۲ انتشار اکسیتون به طرف پیوندگاه ..... ۱۸
- ۱-۷-۳ تفکیک اکسیتون به حامل‌های بار آزاد ..... ۱۸
- ۱-۷-۴ انتقال حامل‌های بار به سمت الکترودهای مربوطه ..... ۲۰
- ۱-۷-۵ جمع‌آوری حامل‌های بار توسط الکترودها ..... ۲۰
- ۲ فصل دوم: شبیه‌سازی اپتیکی سلول‌های خورشیدی آلی ..... ۲۱**
- ۱-۲ مقدمه ..... ۲۲
- ۲-۲ فرایندهای اپتیکی و الکتریکی سلول‌های خورشیدی آلی ..... ۲۳
- ۳-۲ مدل اپتیکی ..... ۲۴
- ۱-۳-۲ چشمه نور ورودی ..... ۲۵
- ۲-۳-۲ تئوری ماتریسی ..... ۲۶
- ۳-۳-۲ اثر زیرلایه ..... ۳۱
- ۳ فصل سوم: بهینه‌سازی اپتیکی ضخامت لایه‌ها در سلول‌های خورشیدی آلی ..... ۳۴**
- ۱-۳ مقدمه ..... ۳۵
- ۲-۳ بهینه‌سازی سلول خورشیدی آلی دولایه‌ای ..... ۳۵

۴۸	..... ۳-۲ بهینه‌سازی سلول خورشیدی آلی مخلوطی
۵۱	..... ۴-۲ بهینه‌سازی سلول خورشیدی آلی پی‌درپی
۵۵	..... ۴ فصل چهارم: بررسی اپتیکی سلول‌های خورشیدی آلی در زوایای مختلف تابش
۵۶	..... ۴-۱ مقدمه
۵۷	..... ۴-۲ اصلاح روابط
۵۹	..... ۴-۳ تجزیه و تحلیل نتایج
۶۰	..... ۴-۳-۱ ساختار با ماده فعال PCPDTBT:PC60BM
۶۹	..... ۴-۳-۲ ساختار با ماده فعال PCPDTBT:PC70BM
۷۶	..... ۴-۳-۳ ساختار با ماده فعال P3HT:PC60BM
۸۲	..... ۴-۳-۴ مقایسه سه ساختار بررسی شده
۸۳	..... ۴-۳-۵ نتیجه‌گیری
۸۵	..... ۵ پیوست
۹۱	..... منابع

## فصل اول

### سلول‌های خورشیدی

## ۱-۱ مقدمه

افزایش مصرف انرژی به دلیل ازدیاد جمعیت، رشد تکنولوژی و بالا رفتن قیمت انرژی در جهان و نگرانی از اتمام سوخت‌های فسیلی و همچنین جلوگیری از تخریب محیط زیست بخاطر مواد آلاینده ناشی از بکارگیری سوخت‌های فسیلی، بشر را به فکر جایگزینی منابع انرژی موجود و جستجوی گزینه‌های جدید انرژی‌های پاک و تجدیدپذیر واداشته است. از اینرو خورشید به عنوان یکی از پاک‌ترین و در دسترس‌ترین منابع تامین انرژی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است و تلاش برای ساخت وسایلی که امکان استفاده از این انرژی بی‌کران و رایگان را فراهم کند نیز اهمیت فراوانی پیدا کرده است. در سال‌های اخیر نیم‌رساناهای آلی توجه بسیاری را به خود معطوف کرده‌اند. رشد آسان، ارزان بودن، انعطاف‌پذیری، سبک بودن و ضریب جذب بالا از جمله مزایای این مواد است. ترانزیستورها، دیودهای نور گسیل، سلول‌های خورشیدی، سنسورها و ده‌ها قطعه‌ی الکترونیکی آلی دیگر از جمله محصولات هستند که با ظهور این مواد وارد بازار شده‌اند. در این میان سلول خورشیدی آلی، به عنوان یک قطعه الکترونیکی که با جذب انرژی نورانی، انرژی الکتریکی تولید می‌کند، پتانسیل خوبی برای منبع تامین کننده انرژی در آینده از خود نشان داده است. در طی سال‌های اخیر بازده سلول‌های خورشیدی آلی به سرعت بهبود یافته و پیشرفت‌های خوبی را در نوع ساختار قطعات داشته است.

در این فصل ابتدا سیر تکامل سلول‌های خورشیدی آلی بیان می‌شود و سپس به مقایسه فیزیکی مواد آلی و معدنی پرداخته شده است.

## ۲-۱ انرژی خورشیدی

انرژی خورشید یکی از منابع انرژی بی‌کران، رایگان، پاک و عاری از اثرات مخرب زیست‌محیطی است که از دیرباز به روش‌های گوناگون مورد استفاده بشر قرار گرفته است. گرایش به سمت کاربرد

انرژی‌های تجدیدپذیر در جهان به حدی است که در سال ۲۰۹۰ شاهد چرخش کامل جهان به سمت این منابع و کاهش ۹۹ درصدی آلاینده‌های محیط زیست خواهیم بود. برآوردها نشان می‌دهد که کشورهای جهان انرژی خورشید را به عنوان یکی از منابع اصلی تامین کننده انرژی در آینده می‌دانند و بر این اساس از هم‌اکنون برنامه‌ریزی‌ها و فعالیت‌های گسترده‌ای را در جهت گسترش کاربرد این انرژی در مصارف مختلف به انجام رسانیده‌اند [۱].

انرژی تابشی خورشید از گداخت هسته‌ای به دست می‌آید. در خورشید در هر ثانیه حدود  $6 \times 10^{11} \text{kg}$  هیدروژن با کاهش جرم خالص  $4 \times 10^3 \text{kg}$  به هلیوم تبدیل می‌شود که طبق رابطه جرم-انرژی انیشتین  $4 \times 10^{20} \text{ J}$  انرژی آزاد می‌شود [۲]. هم‌اکنون جرم کل خورشید در حدود  $2 \times 10^{30} \text{kg}$  است که بیش از ۱۰ بیلیون سال انرژی تابشی خروجی تقریباً ثابت برای آن تخمین زده می‌شود [۳]. از کل انرژی منتشر شده توسط خورشید تنها در حدود ۴۷ درصد از آن به سطح زمین می‌رسد. کشور ایران در بین مدارهای ۲۵ تا ۴۰ درجه عرض شمالی قرار گرفته است و در منطقه‌ای واقع شده که به لحاظ دریافت انرژی خورشیدی در بین مناطق جهان در بالاترین رده‌ها (کمربند تابشی خورشید) قرار دارد. لذا از پتانسیل بالایی در زمینه بهره‌برداری از این موهبت خدادادی برخوردار است. میزان تابش خورشیدی در ایران بین ۱۸۰۰ تا ۲۲۰۰ کیلو وات ساعت بر مترمربع در سال تخمین زده شده است که البته بالاتر از میزان متوسط جهانی است. همچنین در ۹۰ درصد از خاک کشورمان به دلیل قرار گرفتن در کمربند تابشی خورشید بیش از ۳۰۰ روز آفتاب خیلی مؤثر در سال وجود دارد. که در بین استان‌های ایران یزد با بالاترین میزان دریافت انرژی در هر روز ( $\frac{\text{kWh}}{\text{m}^2}$  ۴.۵ - ۵.۵) در مقام نخست قرار دارد [۴].

### ۳-۱ تاریخچه سلول‌های خورشیدی

سلول‌های خورشیدی تابش نور خورشید را به طور مستقیم به انرژی الکتریکی تبدیل می‌کنند که

به این فرایند اثر فوتوولتائیک گفته می‌شود. کشف پدیده فوتوولتائیک به ادموند بکرل<sup>۱</sup> فیزیکدان فرانسوی در سال ۱۸۳۹ نسبت داده می‌شود. او مشاهده کرد هنگامی که نور خورشید به صفحات نقره‌ای قرار داده شده در یک محلول الکترولیت تابانده شود ولتاژ آن به مقدار کمی افزایش می‌یابد [۵]. چارلز فریتز<sup>۲</sup> در سال ۱۸۸۳ یک سلول خورشیدی از سلنیوم با راندومان کمتر از ۱ درصد ساخت. این سلول از یک ویفر نازک سلنیوم تشکیل شده بود که با یک توری از سیم‌های بسیار نازک طلا و یک ورق حفاظتی از شیشه پوشانده شده بود. که از آن به عنوان سنسور نوری برای دوربین‌های عکاسی مورد استفاده قرار گرفت [۶]. در سال ۱۹۴۶ راسل اهل<sup>۳</sup> سلول خورشیدی سیلیکونی را اختراع کرد و در سال ۱۹۵۴ نخستین سلول خورشیدی با قابلیت تبدیل واقعی انرژی خورشید به الکتریسیته با بازدهی ۵.۴ درصد توسط چاپین<sup>۴</sup> و همکارانش در آزمایشگاه بل و با استفاده از سیلیکون بلوری ساخته شد [۵]. این نوع باتری از سال ۱۹۵۸ در شاتل‌های فضایی به کار گرفته شد. اثر فوتوولتائیک آلی اولین بار در سال ۱۹۵۹ با ساختاری از یک ماده آلی ساندویچ شده بین دو الکتروود، توسط کالمن<sup>۵</sup> و پوپ<sup>۶</sup> کشف شد [۷]. خواص یکسوکنندگی و فوتوولتایی دیوهای پلیمری نخستین بار در سال ۱۹۸۵ توسط شیروتا<sup>۷</sup> و همکاران با استفاده از یکی از مشتقات پلی کربازول که به روش الکترو شیمیایی آلائیده شده بود مورد بررسی قرار گرفت [۸]. سپس در سال ۱۹۸۶ تانگ<sup>۸</sup> اولین ساختار فوتوولتائیک ناهمگون پلیمری را ساخت. پس از آن در سال ۱۹۹۱ هیراموتو<sup>۹</sup> اولین سلول خورشیدی رنگدانه‌ای را با استفاده از تبخیر همزمان ساخت. از این سال به بعد راه‌کارهای جدیدی در ساخت سلول‌های خورشیدی معرفی و توسعه داده شدند. این نوع سلول‌ها نسل سوم سلول‌های خورشیدی نامیده شدند و شامل سلول‌های خورشیدی حساس شده به رنگدانه‌های

---

<sup>۱</sup>Edmond Bequerel

<sup>۲</sup>Charels Fritts

<sup>۳</sup>Russell Ohl

<sup>۴</sup>Chapin

<sup>۵</sup>Kallmann

<sup>۶</sup>Pope

<sup>۷</sup>Shirota

<sup>۸</sup>Tang

<sup>۹</sup>Hiramoto

طبیعی، سلول‌های خورشیدی پلیمری و سلول‌های خورشیدی نانو کریستالی می‌باشند. اولین سلول خورشیدی آلی بر پایه پلیمر- ریزمولکول در سال ۱۹۹۳ ساخته شد [۹]. در حال حاضر تلاش‌های فراوانی برای ساخت سلول‌های پربازده با استفاده از ترکیبات پلیمرهای رسانا در جریان است. در سال ۲۰۰۷ کیم<sup>۱</sup> و همکارانش به بازده بیش از ۵/۶ درصد با استفاده از این ترکیبات دست یافتند [۱۰]. در حال حاضر بازار سلول‌های خورشیدی در اختیار سلول‌های سیلیکونی (نسل اول) می‌باشد. از بزرگترین معایب این نوع سلول‌ها می‌توان به هزینه تولید بسیار بالا، ضخامت بالا (۳۰۰-۴۰۰ میکرومتر) و شکننده بودن آن‌ها اشاره کرد [۱۱]. فناوری نسل دوم یا فناوری لایه‌های نازک بر اساس لایه‌نشانی نیم‌رساناها بر روی بستر شیشه‌ای، فلزی یا پلیمری با ضخامت‌های در حدود نانومتر است. این تکنولوژی یکی از دستاوردهای بشر در سال‌های ۱۹۸۰ تا ۱۹۸۲ بوده است که نخستین بار توسط بویینگ معرفی شدند. بازدهی سلول‌های خورشیدی لایه نازک طی این دو سال از ۷.۵ درصد به ۱۰ درصد رسانده شد. سرانجام در سال ۱۹۹۸ اولین سلول خورشیدی لایه نازک تجاری با نام  $Cu(In,Ga)Se_2$  تولید شد [۱۲].

مهمترین مسائل برای سلول‌های خورشیدی، هزینه تولید، بازدهی و طول عمر آنهاست. سلول‌های سیلیکونی بالاترین بازدهی را دارا هستند ولی مشکل این سلول‌ها هزینه بالای ساخت و شکننده بودن آن‌ها است. اما امروزه سلول‌های خورشیدی آلی و پلیمری نسبت به سلول‌های معدنی به دلیل خواصی مانند انعطاف‌پذیری، هزینه کم و روش ساخت آسان، بسیار مورد توجه محققان قرار گرفته است. در ایران نیز دانشگاه‌ها و پژوهشکده‌های مختلف از جمله دانشگاه صنعتی شریف، دانشگاه علم و صنعت ایران، دانشگاه یزد، دانشگاه اصفهان و دانشگاه شهید بهشتی در خصوص پژوهش در زمینه سلول‌های خورشیدی آلی فعالیت می‌نمایند [۱۳].

---

<sup>1</sup>Kim



## ۴-۱ مقایسه مواد آلی و معدنی

نیم‌رساناهای آلی و نیم‌رساناهای معدنی تفاوت‌های اساسی با یکدیگر دارند. از جمله مهمترین آن‌ها عبارت است از:

### ۱-۴-۱ تحرک پذیری:

یکی از معایب نیم‌رساناهای آلی تحرک‌پذیری بسیار پایین حامل‌های بار در این مواد است. تحرک حامل‌ها در نیم‌رساناهای آلی چندین مرتبه کوچک‌تر از تحرک در نیم‌رساناهای معدنی بلوری می‌باشد. بالاترین تحرکی که تاکنون برای حفره در نیم‌رساناهای آلی گزارش شده است در حدود  $15 \frac{\text{cm}^2}{\text{V.s}}$  می‌باشد. در حالی که تحرک حفره‌ها در ژرمانیم  $1900 \frac{\text{cm}^2}{\text{V.s}}$  است. تحرک الکترون‌ها در مواد آلی نوعاً پایین‌تر است به طوری که بالاترین مقدار تحرک‌پذیری الکترون در نیم‌رساناهای آلی به مقدار  $0.1 \frac{\text{cm}^2}{\text{V.s}}$  در ریزمولکول‌های بسیار منظم مربوط می‌باشد [۱۴]. در حالی که این کمیت برای ژرمانیم برابر با  $3900 \frac{\text{cm}^2}{\text{V.s}}$  است.

### ۲-۴-۱ نوارهای انرژی:

در زمان تشکیل یک بلور وقتی اتم‌های منفرد به اندازه فاصله شبکه بلور از یکدیگر قرار می‌گیرند ترازهای انرژی گسسته اتمی با هم برهمکنش کرده و ساختار نواری را شکل می‌دهند که شامل نوارهای پیوسته انرژی و نوارهای ممنوعه انرژی می‌باشند. همانطور که می‌دانیم به بالاترین نوار انرژی پر، نوار ظرفیت<sup>۱</sup> و به پایین‌ترین نوار انرژی خالی یا نیمه خالی، نوار رسانش<sup>۲</sup> و به ناحیه ممنوعه انرژی مابین آن‌ها گاف انرژی<sup>۳</sup> گفته می‌شود. گاف انرژی در مواد عایق از مرتبه  $10\text{eV}$  و در نیم‌رساناها از مرتبه  $1\text{eV}$  و برای

---

<sup>۱</sup>Valence band

<sup>۲</sup>Conduction band

<sup>۳</sup>Band gap

رساناها صفر و یا کوچکتر از صفر می‌باشد [۱۵]. در نیم‌رساناهای آلی بر خلاف نیم‌رساناهای معدنی مولکول‌ها بجای اتم‌ها نقش اساسی دارند. در نیم‌رساناهای آلی از برهم‌کنش اوربیتال‌های اتمی، اوربیتال‌های مولکولی شکل می‌گیرند که هر کدام انرژی مخصوص خود را دارند. الکترون‌ها از اوربیتال‌های با انرژی کم شروع به پر شدن می‌کنند تا به اوربیتال‌های پر انرژی‌تر برسند. به پایین‌ترین اوربیتال مولکولی پر نشده، لومو<sup>۱</sup> گفته می‌شود که معادل تراز رسانش است و به بالاترین اوربیتال مولکولی پر شده، هومو<sup>۲</sup> گفته می‌شود که معادل تراز ظرفیت می‌باشد. اختلاف انرژی تراز هومو و تراز لومو مشخص‌کننده مقدار گاف انرژی است. در نیم‌رساناهای آلی گاف انرژی بین ۱ تا ۴ الکترون‌ولت می‌باشد که تمام بسامدهای امواج الکترومغناطیس از مادون قرمز تا فرابنفش را در بر می‌گیرد [۱۶].

#### ۱-۴-۳ اکسیتون:

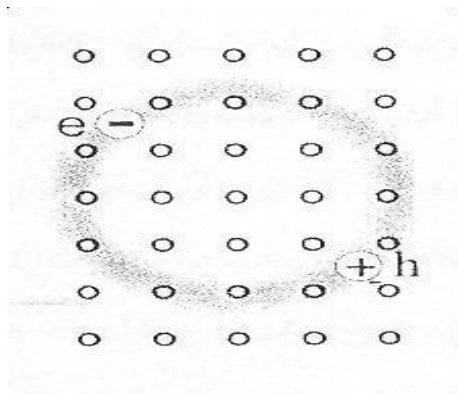
به الکترون - حفره مقید به هم که با نیروی کولنی یکدیگر را جذب می‌کنند اکسیتون گویند که به دو دسته تقسیم می‌شوند [۱۷]:

الف) اکسیتون مات - واینر: در اکسیتون‌های واینر<sup>۳</sup> انرژی بستگی بین دو ذره کم است و الکترون و حفره در فاصله دور نسبت به ثابت شبکه به دور هم می‌چرخند. این نوع اکسیتون معمولاً در نیم‌رساناهای معدنی به وجود می‌آیند. نیروی کولنی با ضریب دی‌الکتریک رابطه عکس دارد. در برخی از نیم‌رساناها ضریب دی‌الکتریک بالا است. این بدان معنی است که نیروی الکتریکی الکترون و حفره می‌تواند کوچک باشد و در نتیجه فاصله آن‌ها می‌تواند بیشتر از ثابت شبکه بلور نیم‌رسانا باشد.

<sup>1</sup>Lowest Unoccupied Molecular Orbital (LUMO)

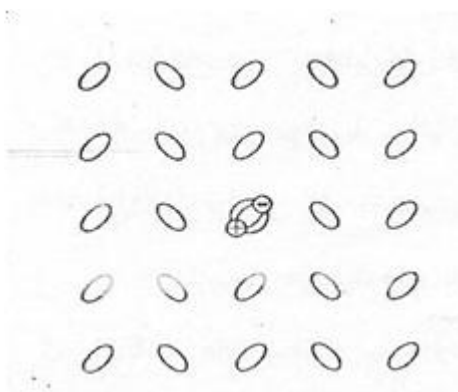
<sup>2</sup>Highest Occupied Molecular Orbital (HOMO)

<sup>3</sup>Wannier excitons



شکل ۱-۱: طرح شماتیکی از اکسیتون مات- واینر

ب) اکسیتون فرنکل: اکسیتون فرنکل<sup>۱</sup> اساساً یک حالت برانگیخته تک اتم است. در اکسیتون قویا مقید، برانگیختگی به طور موضعی بر روی یک تک اتم یا نزدیک آن قرار دارد. ولی این برانگیختگی می‌تواند در اثر جفت شدگی بین همسایه‌ها از یک اتم به اتم دیگر پرش کند و در نتیجه این موج برانگیخته درون بلور حرکت می‌کند. در مواد آلی معمولاً این نوع اکسیتون به وجود می‌آید.



شکل ۱-۲: طرح شماتیکی از اکسیتون فرنکل

اکسیتون‌های تولید شده در بلورهای معدنی از نوع اکسیتون مات - واینر می‌باشند که نوعاً انرژی

<sup>۱</sup>Frenkel excitons

بستگی آن‌ها کمتر از انرژی فونون‌های بلور در دمای اتاق می‌باشد. بنابراین در این دما اکسیتون‌های ایجاد شده در بلورهای معدنی با برهمکنش با فونون‌ها به حامل‌های بار تفکیک می‌شوند به طوری که می‌توان جذب فوتون و تولید حامل‌های بار آزاد را همزمان دانست. اما در مواد آلی اکسیتون‌ها، از نوع اکسیتون فرنکل می‌باشند که انرژی بستگی آن‌ها زیاد است و در دمای اتاق به حامل‌های بار تفکیک نمی‌شوند.

#### ۱-۴-۴ طول پخش اکسیتون:

مقدار مسافتی را که اکسیتون قبل از بازترکیب شدن درون ماده طی می‌کند را طول پخش اکسیتون گویند. از آنجایی که در مواد آلی اکسیتون از نوع فرنکل بوده و الکترون و حفره در فاصله بسیار نزدیک به دور هم می‌چرخند، بازترکیب بالا بوده و در نتیجه طول پخش اکسیتون کوتاه می‌باشد (نوعاً ۱۰ نانومتر) که چندین مرتبه از نوع معدنی کوچک‌تر است.

#### ۱-۴-۵ ضریب جذب:

نیم‌رساناهای آلی به دلیل تنوع ترازهای انرژی دارای ضریب جذب بالایی در محدوده UV-Vis می‌باشند. ضریب جذب این مواد از مرتبه  $10^5$  بر سانتیمتر است در حالی که مواد معدنی دارای ضریب جذبی از مرتبه  $10^3$  بر سانتیمتر هستند. این مزیت امکان ساخت لایه‌های بسیار نازک را از مواد آلی فراهم می‌کند به طوری که می‌توان در ضخامت کمتر از ۱۰۰ نانومتر در طول موج پیک به چگالی اپتیکی بالایی دست یافت. به دلیل همین ضریب جذب بالا، در ضخامت کم، نور با انرژی بیشتر از ۲ eV (طول موج کمتر از ۶۰۰ nm) بین ۶۰ تا ۹۰ درصد جذب می‌شود.

#### ۱-۴-۶ طیف جذبی:

در نیم‌رساناهای آلی محدوده طیف جذبی نسبت به طیف تابشی خورشید باریک است. با توجه به گاف انرژی این مواد، در ناحیه خاصی بیشترین جذب نور خورشید امکان پذیر است و این امر موجب هدر

رفتن انرژی در طول موج‌های دیگر می‌شود. بیشتر پلیمرهای رسانا، گاف نواری بیش از  $2 \text{ eV}$  دارند که موجب محدودیت جذب در حدود ۳۰ درصد از طیف تابشی خورشید می‌شود.

## ۵-۱ ساختارهای سلول‌های خورشیدی آلی

سلول‌های خورشیدی آلی را می‌توان بر اساس نوع ساختمانشان در یکی از انواع زیر دسته‌بندی

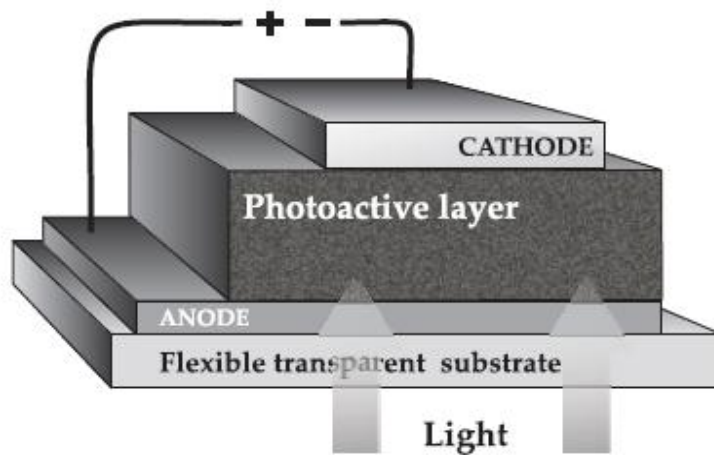
کرد [۱۸]:

### ۱-۵-۱ سلول‌های تک لایه‌ای<sup>۱</sup>

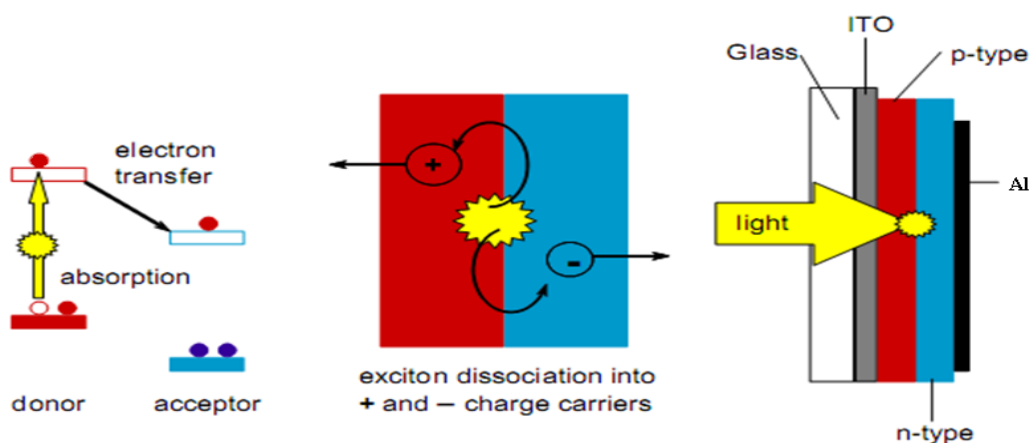
اولین سلول خورشیدی آلی که ساده‌ترین ساختار را نیز دارا بوده است از ساندویچ کردن یک ماده نیم‌رسانای پلیمری بین دو الکتروود با تابع کار متفاوت ساخته شده است (شکل ۱-۳). در این ساختار جذب فوتون و تولید اکسیتون در سراسر ماده فعال اتفاق می‌افتد اما تفکیک اکسیتون فقط در مرز پلیمر-رسانا یعنی در محل الکتروودها امکان پذیر است. بنابراین فقط به اندازه طول پخش اکسیتون از دو الکتروود به عنوان ناحیه فعال محسوب می‌شود. از آنجایی که جذب نور فقط در یک نوع ماده آلی صورت می‌گیرد و مواد آلی نیز دارای طیف جذبی باریکی هستند، این گونه سلول‌ها نمی‌توانند همه طول موج‌های تابشی را جذب کنند که این امر خود موجب کاهش تولید اکسایتون می‌شود. از طرفی در این سلول‌ها انتقال الکترون‌ها و حفره‌ها در یک ماده انجام می‌شود که این مسئله باز ترکیب حامل‌ها را شدت می‌بخشد. سلول تک لایه‌ای که از آن به عنوان دیود شاتکی نیز یاد می‌شود کمترین بازده (کمتر از ۰/۱ درصد) سلول‌های خورشیدی آلی را دارا می‌باشد [۱۹].

---

<sup>۱</sup>Single layer cells



شکل ۱-۳: طرح شماتیکی از یک سلول تک لایه‌ای



شکل ۱-۴: ساختار یک سلول خورشیدی آلی دو لایه‌ای و فرایند جذب نور و تولید حامل‌ها در آن [۱۹].

### ۱-۵-۲ سلول‌های دو لایه‌ای<sup>۱</sup>

سلول‌های دو لایه‌ای از دو نیم‌رسانای آلی n و p ساخته شده‌اند و اکسیتون‌های تولید شده می‌توانند بعد از رسیدن به محل پیوندگاه به علت تفاوت تراز انرژی همو و لومو ماده دهنده و پذیرنده به حامل‌های بار آزاد تجزیه شوند (شکل ۱-۴). سلول‌های دو لایه‌ای نسبت به سلول‌های تک لایه‌ای بازده بیشتری دارند

<sup>۱</sup>Bilayer cells

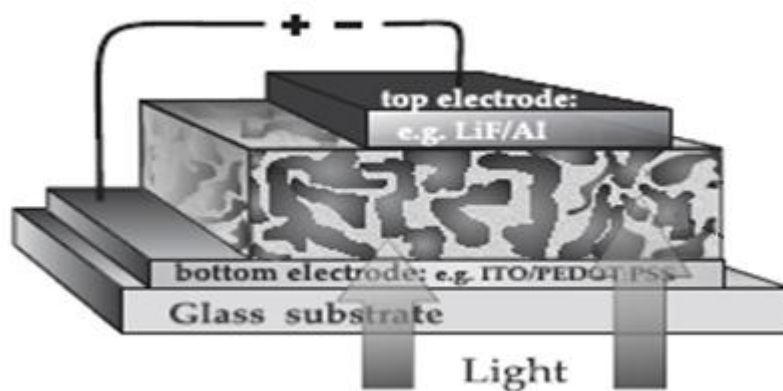
که می‌توان موارد زیر را از جمله دلایل این افزایش بازده نام برد:

(۱) به دلیل وجود پیوندگاه بخشنده- پذیرنده نرخ تفکیک اکسیتون و تولید حامل‌های بار آزاد افزایش می‌یابد.

(۲) در این سلول‌ها، ناحیه فعال، به اندازه طول پخش اکسیتون از پیوندگاه داخل هر دو ماده بخشنده و پذیرنده می‌باشد در نتیجه پهنای این ناحیه نسبت به سلول‌های تک لایه‌ای دو برابر شده است.

(۳) از آنجایی که ناحیه فعال شامل دو نوع ماده آلی نیم‌رسانا به عنوان بخشنده و پذیرنده می‌باشد و هر ماده طیف جذبی متفاوتی دارد میزان جذب نور افزایش یافته است.

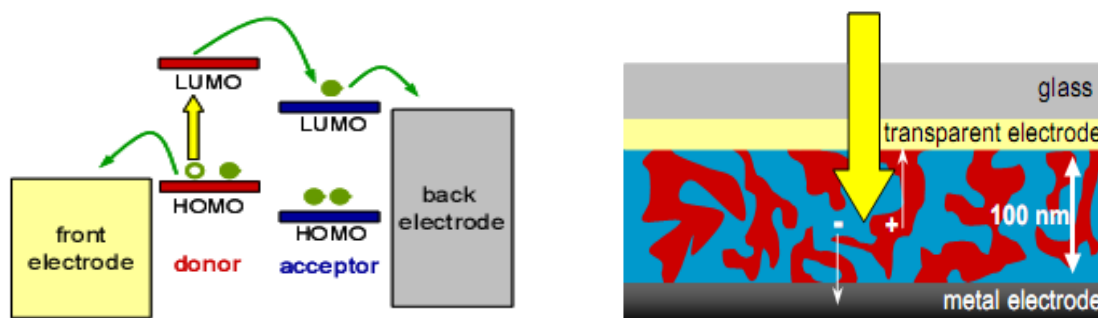
الکترون و حفره تولید شده از تفکیک اکسیتون در مرز بخشنده- پذیرنده به طور مستقل در دو ماده مجزا به سمت الکترودهای مربوطه در حرکتند در نتیجه احتمال بازترکیب حامل‌های بار کاهش چشم‌گیری می‌یابد.



شکل ۱-۵: نمایی از یک سلول مخلوطی

### ۱-۵-۳ سلول‌های مخلوطی<sup>۱</sup>

در این نوع سلول دو نیم‌رسانای آلی بخشنده و پذیرنده با یکدیگر مخلوط شده و تشکیل یک پیوندگاه ناهمگون حجمی<sup>۲</sup> را می‌دهند (شکل ۱-۵). بدین ترتیب پیوندگاه بخشنده-پذیرنده در حجم لایه فعال پخش شده و تفکیک اکسیتون در همه‌ی حجم لایه فعال امکان پذیر است. در این ساختار با داشتن یک مرز بزرگ بخشنده-پذیرنده اکسیتون‌های تولید شده مسیر کوتاه‌تری را برای رسیدن به پیوندگاه طی می‌کنند که باعث کاهش بازترکیب و نابودی اکسیتون‌ها می‌شود. همچنین ضخامت لایه فعال را می‌توان بزرگ‌تر از طول پخش اکسیتون انتخاب کرد که باعث افزایش میزان جذب نور و در نتیجه افزایش بازده سلول می‌شود (شکل ۱-۶).



شکل ۱-۶: ساختار یک سلول خورشیدی آلی مخلوطی و فرایند تولید و انتقال بار در آن [۲۰].

از جمله معایب این ساختار این است که حامل‌های بار برای رسیدن به الکترودها باید از دو ماده آلی مختلف عبور کنند در نتیجه تحرک‌پذیری حامل‌ها به دلیل افزایش مقاومت سری سلول کاهش می‌یابد. همچنین در این ساختار هر دو ماده بخشنده و پذیرنده به هر دو الکتروود متصل هستند که باعث افزایش بازترکیب در مرز الکترودها می‌شود [۲۰].

<sup>۱</sup>Blend cells

<sup>۲</sup>Bulk heterojunction

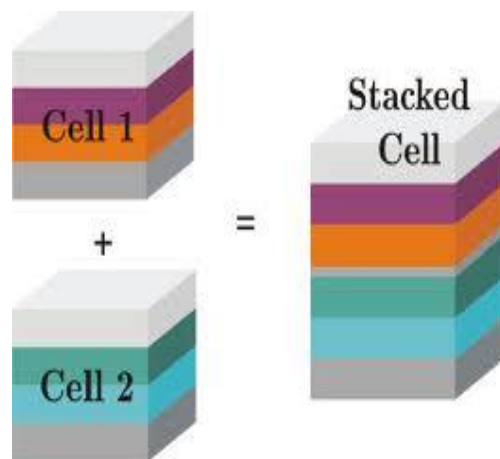


### ۱-۵-۴ سلول‌های لایه‌در لایه<sup>۱</sup>

ساختار این سلول شبیه ساختار سلول‌های مخلوطی می‌باشد و مرز بخشنده- پذیرنده در حجم لایه فعال پخش شده است اما برای برطرف کردن معایب سلول‌های مخلوطی در این ساختار ماده بخشنده را به آند و ماده پذیرنده را به کاتد متصل کرده‌اند. بدین ترتیب تفکیک اکسیتون در لایه مخلوطی از مواد بخشنده و پذیرنده اتفاق می‌افتد و انتقال بارها به سمت الکترودهای مربوطه در لایه مناسب رخ می‌دهد.

### ۱-۵-۵ سلول‌های پی‌درپی<sup>۲</sup>

سلول‌های پی‌درپی دارای دو یا چندین لایه فعال می‌باشند که از روی هم چیدن هر کدام از ساختارهای قبل ساخته می‌شوند. بین هر کدام از سلول‌ها، لایه بسیار نازکی از فلز قرار می‌گیرد. بیشترین بازده سلول‌های خورشیدی آلی مربوط به این ساختار می‌باشد [۲۱]. در شکل ۱-۷ طرح شماتیکی از این نوع سلول با دو ناحیه فعال نمایش داده شده است.



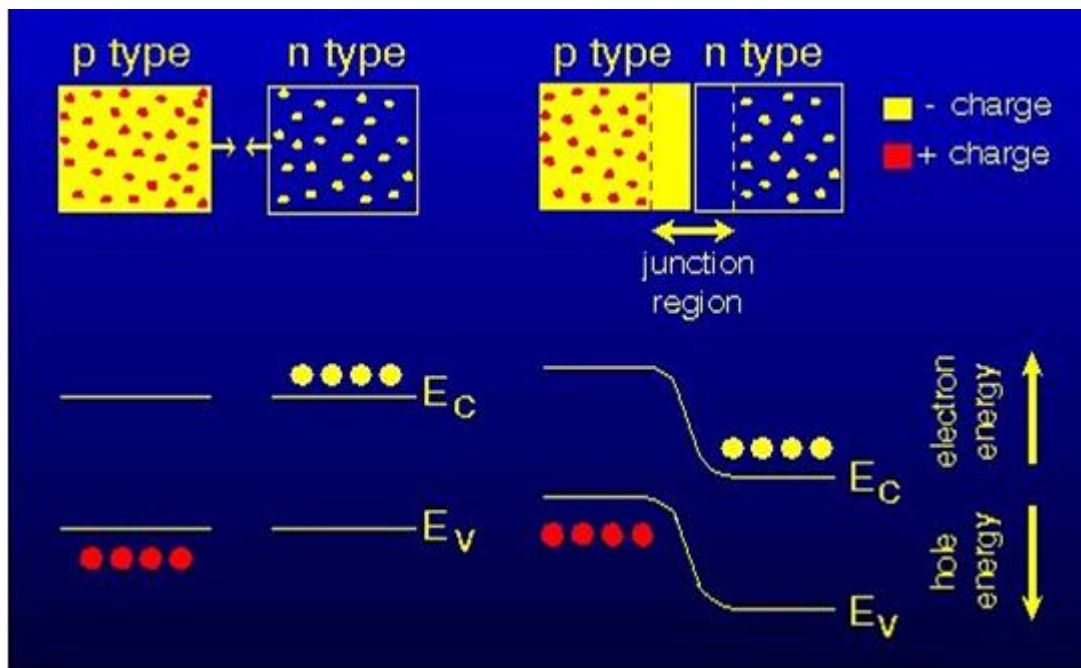
شکل ۱-۷: طرح شماتیکی از سلول پی‌درپی با دو لایه فعال

<sup>۱</sup>Laminated cells

<sup>۲</sup>Tandem cells

## ۶-۱ ساز و کار سلول خورشیدی معدنی

به طور کلی سلول‌های خورشیدی از یک پیوندگاه p-n تشکیل شده‌اند. اگر یک نیم‌رسانای نوع n را در اتصال متالورژیکی با یک نیم‌رسانای نوع p قرار دهیم الکترون‌های طرف n و در نزدیکی پیوندگاه به سمت p و حفره‌های نزدیک پیوندگاه و در طرف p به سمت n حرکت می‌کنند و با هم ترکیب می‌شوند. با انتقال هر الکترون به ناحیه p یک یون مثبت در ناحیه n و با انتقال هر حفره به ناحیه n یک یون منفی در ناحیه p باقی می‌ماند. اتم‌های یونیزه شده با بارهای مخالف یکدیگر، یک میدان الکتریکی داخلی ایجاد می‌کنند که جهت آن از ناحیه n به ناحیه p است. این میدان الکتریکی در جهت مخالف مسیر نفوذ حامل‌ها می‌باشد که از بازترکیب بیشتر الکترون‌ها و حفره‌ها جلوگیری می‌کند و نهایتاً جریان سوقی و جریان پخشی برابر می‌شوند و قطعه به تعادل می‌رسد. در این وضعیت شاهد سه ناحیه خواهیم بود. ناحیه خنثی طرف p، ناحیه خنثی طرف n و ناحیه تهی (شکل ۱-۸). اگر به پیوندگاه p-n نور تابیده شود، فوتون‌هایی که انرژی آن‌ها بیشتر یا مساوی گاف نواری نیم‌رسانا باشند، جذب شده و یک الکترون را از نوار ظرفیت به نوار رسانش برده و یک حفره را در نوار ظرفیت به جا می‌گذارند. اگر این زوج الکترون-حفره در ناحیه تهی و یا حوالی آن تولید شده باشند، شانس زیادی دارند که قبل از بازترکیب توسط میدان الکتریکی داخلی از هم جدا شوند. این میدان الکتریکی الکترون‌ها را به ناحیه n و حفره‌ها را به ناحیه p سوق می‌دهد. به این ترتیب تراکم بارهای منفی در ناحیه n و تراکم بارهای مثبت در ناحیه p زیاد می‌شود. که این تراکم بار را می‌توان به شکل ولتاژی در دو سر پیوند اندازه‌گیری کرد. که به آن ولتاژ مدار باز گویند. اگر دو سر پیوند را با یک سیم به یکدیگر متصل کنیم، اتصال کوتاه رخ می‌دهد و الکترون‌های اضافی ناحیه n از طریق سیم به ناحیه p رفته و جریان اتصال کوتاه را ایجاد می‌کنند. اگر به جای سیم از یک مصرف‌کننده استفاده شود، عبور جریان از مصرف‌کننده به آن انرژی می‌دهد.



شکل ۸-۱: نیم‌رسانای نوع n و نوع p. پیوند p-n و ترازهای ظرفیت و رسانش

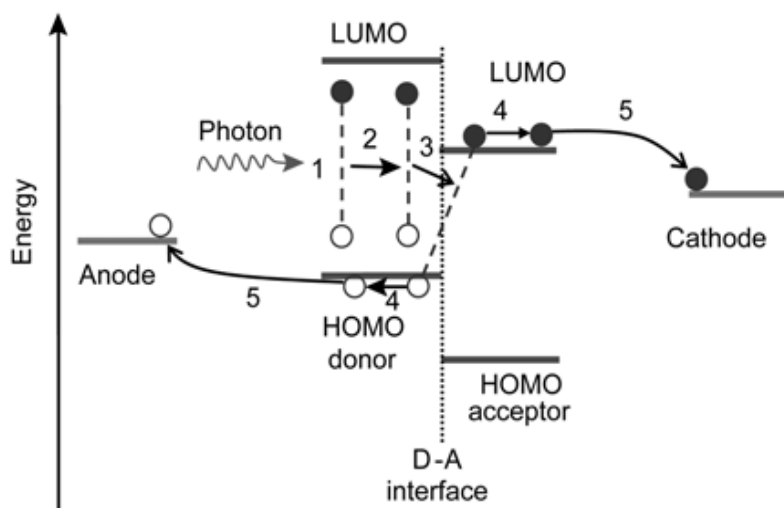
## ۷-۱ نحوه کارکرد سلول‌های خورشیدی آلی

در اینجا به طور مختصر به بررسی سلول‌های خورشیدی آلی دو لایه‌ای می‌پردازیم عملکرد سلول‌های مخلوطی نیز به طور مشابه می‌باشد. همانند سلول‌های خورشیدی معدنی سلول‌های خورشیدی آلی دو لایه‌ای نیز از دو نوع نیم‌رسانای n و p تشکیل شده‌اند. به طور کلی عملکرد این سلول‌ها را می‌توان به پنج فرایند اساسی تقسیم کرد که عبارتند از [۲۲-۲۳]:

۱. جذب نور و تولید اکسیتون
۲. انتشار اکسیتون به سمت پیوندگاه
۳. تفکیک اکسیتون به حامل‌های بار آزاد
۴. انتقال حامل‌ها به طرف الکترودهای مربوطه

## ۵. جمع آوری حامل‌ها توسط الکترودها

فرایند اول جزء سازوکار اپتیکی سلول می‌باشد و مابقی فرایندها سازوکار الکتریکی سلول را تشکیل می‌دهند. شکل ۱-۹ پنج فرایند فوق را به طور شماتیک نشان می‌دهد. به جز سلول‌های تک لایه‌ای مابقی سلول‌های خورشیدی آلی دارای این پنج فرایند اصلی می‌باشند.



شکل ۱-۹: طرح شماتیکی از پنج فرایند اصلی در سلول‌های خورشیدی آلی دولایه‌ای [۲۲].

## ۱-۷-۱ جذب نور و تشکیل اکسیتون

وقتی سلول را تحت تابش قرار دهیم، فوتون‌هایی که انرژی آن‌ها بیشتر یا مساوی گاف انرژی نیم‌رسانا باشند جذب می‌شوند. که در نتیجه آن یک الکترون با کسب انرژی این فوتون برانگیخته می‌شود، به تراز LUMO رفته و یک حفره را در تراز HOMO باقی می‌گذارد. این جفت الکترون و حفره، آزاد نمی‌باشند و با نیروی الکتروستاتیکی یکدیگر را جذب می‌کنند که به آن اکسیتون می‌گویند. همانطور که اشاره شد، گاف نواری  $1.1\text{eV}$  برای جذب ۷۷ درصد از تابش خورشیدی به زمین، مورد نیاز است، در حالی

که بیشتر پلیمرهای رسانا گاف نواری بیش از  $2\text{eV}$  دارند که موجب باریک بودن محدوده طیف جذبی آنها نسبت به طیف تابشی خورشید می‌باشد و از طرف دیگر به دلیل کوتاه بودن طول پخش اکسیتون در مواد آلی ضخامت لایه‌ها نمی‌تواند زیاد باشد اما از آنجایی که این مواد دارای ضریب جذب بالا می‌باشند در همین ضخامت کم نیز، نور با انرژی بیشتر از  $2$  الکترون ولت به خوبی جذب می‌شود.

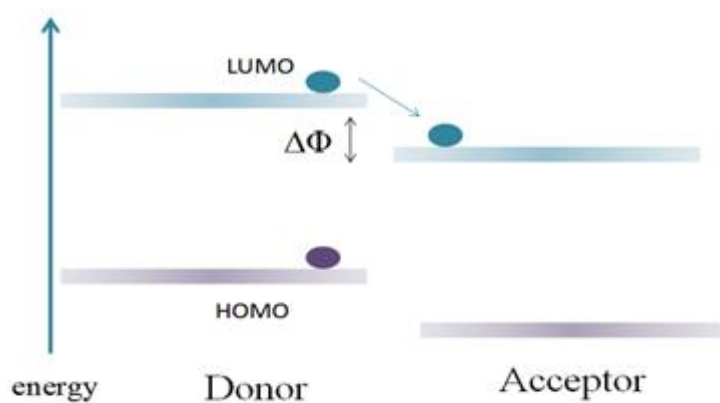
### ۱-۷-۲ انتشار اکسیتون به طرف پیوندگاه

پس از جذب نور و تولید اکسیتون باید بتوان آن را قبل از بازترکیب شدن، به حامل‌های بار آزاد تفکیک کرد. این امر در فصل مشترک ماده دهنده و پذیرنده امکان پذیر است. محل تولید اکسیتون تا فصل مشترک بخشنده-پذیرنده نباید بیشتر از طول پخش اکسیتون باشد. از آنجایی که اکسیتون‌ها در مواد آلی از نوع اکسیتون‌های فرنکل می‌باشند طول عمر آنها کم و سرعت پخش آنها نیز نسبت به مواد معدنی بسیار کوچک است. که این باعث محدودیت در ضخامت لایه فعال می‌شود.

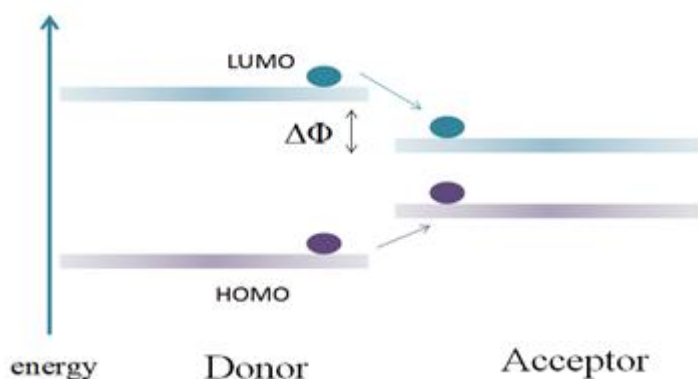
### ۱-۷-۳ تفکیک اکسیتون به حامل‌های بار آزاد

می‌توان گفت این فرایند یکی از مهمترین فرایندهای سلول‌های خورشیدی آلی است که نقش مهمی در بازده سلول دارد. تفکیک اکسیتون و تولید الکترون و حفره آزاد در مرز بین مولکول‌های دهنده و پذیرنده رخ می‌دهد. که این فرایند، توسط مکانیسم ذاتی رفتن به انرژی پایین‌تر توصیف می‌شود. اگر اکسیتون در مولکول دهنده ایجاد شده باشد الکترون آن می‌تواند از تراز لومو دهنده، به تراز لومو پذیرنده برود و حفره در تراز هومو دهنده باقی می‌ماند. و به طور مشابه اگر اکسیتون در مولکول پذیرنده تولید شده باشد حفره آن می‌تواند از تراز هومو پذیرنده، به تراز هومو دهنده برود و الکترون در تراز لومو پذیرنده باقی می‌ماند و به این ترتیب اکسیتون به بارهای آزاد تفکیک می‌شود. البته این در صورتی اتفاق می‌افتد

که اختلاف پتانسیل بین پتانسیل یونش دهنده و الکترون خواهی پذیرنده، بیش از انرژی بستگی اکسایتون باشد (شکل ۱-۱۰). اگر هومو پذیرنده بالاتر باشد، اکسایتون، با اتلاف انرژی، کاملاً به ماده با گاف نواری پایین تر منتقل می‌شود (شکل ۱-۱۱). برای جدایی مؤثر اکسایتون در پیوندگاه ناهمگن، فصل مشترک دهنده و پذیرنده باید به حد کافی بزرگ انتخاب شود. نتیجه مطلوب در این فرایند تجزیه اکسیتون و تولید یک الکترون آزاد در لومو پذیرنده و یک حفره آزاد در هومو دهنده می‌باشد.



شکل ۱-۱۰: تفکیک اکسیتون به الکترون و حفره، انتقال بار



شکل ۱-۱۱: انتقال کامل اکسیتون از ماده دهنده به پذیرنده، انتقال انرژی

## ۱-۷-۴ انتقال حامل‌های بار به سمت الکترودهای مربوطه

حامل‌های بار آزاد حاصل از جدایی اکسیتون به دلیل وجود میدان الکتریکی داخلی ناشی از اختلاف توابع کار الکترودها به سمت الکترودهای مربوطه حرکت می‌کنند (جریان سوقی). علاوه بر این میدان داخلی یک جریان پخشی به دلیل عدم یکنواختی توزیع چگالی حامل‌ها نیز می‌تواند وجود داشته باشد. حفره‌ها به سمت آند (تابع کار بزرگ) و الکترون‌ها به سمت کاتد (تابع کار کوچک) حرکت می‌کنند. بدلیل پایین بودن تحرک‌پذیری حامل‌ها در مواد آلی و به دام افتادن حامل‌ها در ناخالصی‌ها و نقص‌های شبکه، احتمال بازترکیب زیاد است که این امر باعث کاهش چگالی جریان سلول می‌شود.

## ۱-۷-۵ جمع‌آوری حامل‌های بار توسط الکترودها

وظیفه جمع‌آوری بارها به عهده الکترودها می‌باشد. در سلول‌های خورشیدی آلی، یک رسانای شفاف را به عنوان آند انتخاب می‌کنند تا نور به خوبی از آن عبور کند و سلول از همان طرف مورد تابش قرار می‌گیرد. در انتخاب آند، تابع کار آن نیز اهمیت دارد. ماده رسانایی که به عنوان آند انتخاب می‌شود باید دارای تابع کار بالایی باشد. یعنی نوار هدایت آن باید نزدیک تراز هومو نیم‌رسانای آلی باشد. معمولاً از ITO (اکسید ایندیم قلع) به عنوان آند استفاده می‌شود. در انتخاب کاتد نیز باید از ماده‌ای استفاده شود که دارای تابع کار پایینی باشد. یعنی نوار هدایت آن نزدیک تراز لومو نیم‌رسانای آلی قرار گیرد. همچنین باید دارای پایداری خوبی در مجاورت هوا باشد. معمولاً از فلزاتی مانند آلومینیوم و نقره به دلیل رسانایی و پایداری بالا به عنوان کاتد استفاده می‌شود. در اتصال نیم‌رسانا-فلز، انرژی ترازهای هومو و لومو مواد بخشنده و پذیرنده و توابع کار آند و کاتد تعیین کننده یکسوکنندگی (سد شاتکی) و یا اهمی بودن اتصال می‌باشند. در انتخاب مواد باید دقت کرد که اتصالات فلزی از نوع اتصال اهمی باشند چرا که در اتصال شاتکی حامل‌های بار در هنگام انتقال به الکترودها با یک سد پتانسیل روبرو می‌شوند. در نتیجه جریان سلول بوسیله سد شاتکی کاهش می‌یابد [۲۴].

## ۲ فصل دوم

شبیه‌سازی اپتیکی سلول‌های خورشیدی آلی



لازمه ساخت هر وسیله، آگاهی از شرایط مطلوب برای کارکرد بهینه دستگاه و نحوه تاثیر پارامترهای مختلف بر عملکرد آن می‌باشد که بهترین و کم هزینه‌ترین راه برای دستیابی به این اطلاعات، شبیه‌سازی قطعه می‌باشد. در بررسی سلول‌های خورشیدی نیز شبیه‌سازی یک ابزار قدرتمند برای بررسی و تحلیل هزاران قطعه متفاوت با هندسه‌های گوناگون در مدت زمان بسیار کوتاه می‌باشد. تغییر پارامترها و ضخامت لایه‌های مختلف، تاثیر وجود یا عدم وجود لایه‌ای با ضخامت و ضریب شکست خاص و همچنین بررسی عملکرد سلول در شرایط مختلف و انتخاب بهترین شرایط جز با شبیه‌سازی سلول تحقق نمی‌یابد. این نتایج به راحتی در تجربه و آزمایشگاه حاصل نمی‌شود. با شبیه‌سازی فرایندهای اپتیکی در وسایل فوتولتائیک، می‌توان هم به درک عمیقی از این فرایندها در داخل سلول رسید و هم وسایلی با ساختار بهینه شده را طراحی کرد. همچنین این امکان را به ما می‌دهد تا پارامترهایی که در دسترس اندازه‌گیری مستقیم نیستند (مانند دامنه میدان الکتریکی در هر نقطه و یا پروفایل‌های جذب) را ارزیابی کنیم. یکی از جنبه‌های مهم شبیه‌سازی پرهیز از دست‌کاری اجزای قطعه واقعی می‌باشد که این امر موجب صرفه جویی در زمان، کار و همچنین در موادی که اغلب خیلی کم در دسترس هستند، می‌شود. از طرف دیگر شبیه‌سازی مجال بهتری برای امتحان کردن فکر و اندیشه‌های دور از انتظار و بررسی نوآوری‌های تازه را فراهم می‌کند.

هدف از شبیه‌سازی اپتیکی سلول‌های خورشیدی آلی تعیین ضخامت بهینه لایه‌های مختلف داخل سلول است تا جذب مفید در داخل لایه فعال به بیشترین حد برسد. در لایه‌های دیگر نیز جذب نور اتفاق می‌افتد اما از آنجایی که این جذب منجر به تولید حامل‌های بار آزاد نمی‌شود، در چگالی جریان سلول نقشی ندارد و نوعی اتلاف انرژی محسوب می‌شود. فرآیندهای اپتیکی در سلول‌های خورشیدی آلی بر اساس بازتاب و عبور امواج الکترومغناطیسی از هر لایه به لایه دیگر سلول و تعدیل انرژی موج

الکترومغناطیسی ورودی در راستای عمق سلول بر اثر فرآیند جذب در هر لایه می‌باشد. ضخامت لایه‌های سلول، بسیار نازک و از مرتبه نانومتر است. در نتیجه ضخامت کل توده لایه‌های سلول، از طول همدوسی نور خورشید، کمتر است. بنابراین تداخل اپتیکی، داخل سلول نقش مهمی دارد. شبیه‌سازی، برپایه ویژگی‌های لایه‌های سلول شامل ثوابت اپتیکی و ضخامت آن‌ها می‌باشد. از مجموعه این داده‌ها، می‌توان توزیع میدان الکتریکی را در هر لایه بدست آورد و از این توزیع، دیگر پارامترهای سلول خورشیدی همچون پروفایل جذب بدست می‌آید. بدین ترتیب می‌توان انرژی جذب شده در لایه‌های مختلف سلول را بدست آورد و در نتیجه می‌توانیم با تغییر دادن ضخامت لایه‌ها مقدار بیشینه جذب را در لایه فعال محاسبه کنیم و از این طریق هندسه بهینه سلول را بدست آوریم. همچنین می‌توان با بررسی مواد با ضریب شکست مختلف، بهترین موادی را که بازده بالایی را نتیجه می‌دهند نیز مشخص کرد.

## ۲-۲ مکانیسم‌های اپتیکی و الکتریکی سلول‌های خورشیدی آلی

همانطور که در بخش ۱-۷ بیان شد، عملکرد سلول‌های خورشیدی آلی را می‌توان به پنج فرایند اصلی تقسیم کرد که عبارتند از: جذب فوتون و تولید اکسیژن، انتشار اکسیژن، جداسازی اکسیژن، انتقال حامل‌های بار و جمع‌آوری حامل‌های بار در الکترودها. مدل‌های عددی، برای توصیف این فرایندها توسعه یافته‌اند. فرایندهای بالا را می‌توان به دو مکانیسم کلی اپتیکی و الکتریکی تقسیم کرد. فرایند اول مکانیسم اپتیکی و مابقی فرایندها مکانیسم الکتریکی سلول را شکل می‌دهند. تولید اکسیژن فوتوالقایی، وابسته به میزان جذب اپتیکی و توزیع میدان الکترومغناطیسی داخل وسیله است. بنابراین توسط مدل اپتیکی توصیف می‌شود. هدف از این مدل بدست آوردن حداکثر جذب در لایه فعال می‌باشد. بهترین توصیف بر حسب مقدار مجذور میدان الکتریکی،  $E^2$ ، می‌باشد که رابطه نزدیکی با جذب دارد. در هر نقطه مقدار  $E^2$  هم به تابع دی‌الکتریک در آن نقطه و هم به خصوصیات اپتیکی و ضخامت لایه‌های مختلف سلول وابسته می‌باشد. در انتخاب مواد لایه فعال باید دقت کرد که موادی بکار گرفته شوند تا جذب قابل توجهی

در ناحیه مرئی که بیشینه شدت نور خورشید در آن قرار دارد، اتفاق بیفتد.

## ۲-۳ مدل اپتیکی

مدلی که برای شبیه‌سازی سلول‌های خورشیدی آلی به کار گرفته می‌شود مدلی است که توسط پترسون<sup>۱</sup> ارائه شده است [۲۵]. همانطور که اشاره ضخامت لایه‌ها کمتر از طول همدوسی خورشید است و بنابراین تداخل اپتیکی داخل سلول اهمیت می‌یابد. در گذشته برای بررسی اپتیکی سلول‌های خورشیدی آلی از فرض ساده جذب بیر-لامبرت<sup>۲</sup> برای توصیف جذب داخل سلول استفاده می‌شد که بر طبق آن، میدان الکتریکی به طور نمایی در عمق سلول کاهش می‌یافت. در سال ۱۹۹۹ پترسون و همکارانش اشاره کردند که سلول‌های فوتوولتائیک آلی در حوزه اپتیک لایه‌های نازک قرار دارند و اثرات تداخل اپتیکی در توزیع میدان الکتریکی داخل سلول اهمیت دارد. آن‌ها تئوری ماتریسی انتقال توصیف شده توسط هیون<sup>۳</sup> - که اثرات تداخل را برای موج نوری منتشر شده در لایه‌های نازک در نظر گرفته بود- را برای بررسی سلول‌های فوتوولتائیک آلی به کار گرفتند. سپس این تئوری به طور گسترده در شبیه‌سازی جذب اپتیکی و توزیع شدت نور داخل سلول‌های خورشیدی آلی استفاده شد. این تئوری ماتریسی بر اساس روابط فرنل (بازتاب و انتقال فرنل) می‌باشد. برای استفاده از این تئوری چندین فرض وجود دارد:

۱. لایه‌های ساخته شده (ترکیب شده) همگن و همسانگرد هستند.

۲. سطح مشترک لایه‌ها موازی و صاف می‌باشد.

۳. در فصل مشترک بین لایه‌ها از امواج الکترومغناطیسی تخت استفاده می‌شود.

مدل پترسون به صورت تابعی از زاویه فرود نور به سطح سلول بیان می‌شود اما برای ساده‌سازی روابط، نور

---

<sup>1</sup>Pettersson

<sup>2</sup>Beer-Lambert

<sup>3</sup>Heavens

فرودی را عمود به سطح سلول در نظر می‌گیرند. در فصل ۴ از این ساده‌سازی فاصله گرفته و عملکرد سلول در زوایای مختلف تابش به تفصیل شرح داده خواهد شد.

## ۲-۳-۱ چشمه نور ورودی

در مدل اپتیکی، بدست آوردن میدان الکتریکی در هر نقطه از عمق سلول اهمیت فراوانی دارد که در مدل پترسون این میدان بر حسب میدان فرودی محاسبه می‌شود. بنابراین دانستن مقدار میدان الکتریکی و همچنین شدت تابش خورشید در هر طول موج ضروری است. شدت نور فرودی در هر طول موج می‌تواند توسط اندازه‌گیری شبیه‌ساز خورشیدی در آزمایشگاه بدست آید اما مقدار تقریبی چشمه نور حاصل از محاسبات برای شبیه‌سازی مناسب‌تر است. پرسون<sup>۱</sup> و همکارانش، تابش خورشیدی تحت استاندارد AM1.5 را با استفاده از تابش جسم سیاه مدل‌سازی کردند و رابطه زیر را برای بدست آوردن شدت تابش خورشیدی در هر طول موج تحت استاندارد AM1.5 ارائه نموده‌اند [۲۶]:

$$B_0(\lambda) = \frac{2h\pi c^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp(hc/\lambda KT) - 1} \quad (1-2)$$

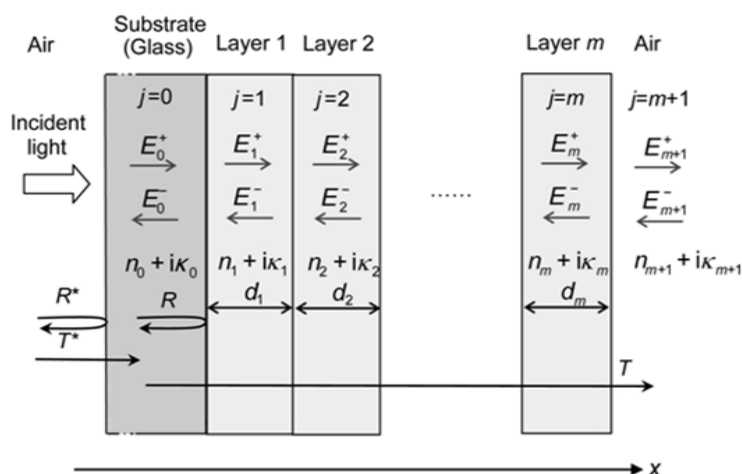
که  $h$  ثابت پلانک،  $\lambda$  طول موج،  $K$  ثابت بولتزمن،  $T=5630\text{K}$  معادل دمای جسم سیاه خورشیدی و  $c$  سرعت نور در خلا است. از سوی دیگر طبق تئوری بردار پوینتینگ برای تابندگی در خلا داریم:

$$B(\lambda) = \frac{1}{2} c \epsilon_0 |E|^2 \quad (2-2)$$

بدین ترتیب می‌توان میدان الکتریکی را در هر طول موج، متناسب با شدت تابشی خورشید بدست آورد.

---

<sup>1</sup>Persson



شکل ۱-۲: طرح شماتیکی از یک سلول چند لایه‌ای.  $m$  لایه بین دو لایه نیمه متناهی  $j=0$  و  $j=m+1$  محصور شده‌اند. لایه ۰ زیرلایه و لایه  $m+1$  هوا را مشخص می‌کند.

## ۲-۳-۲ تئوری ماتریسی

در این مدل لایه‌های سلول ( $j=1,2,\dots,m$ ) بین دو لایه نیمه متناهی ( $j=0$  و  $j=m+1$ ) در نظر گرفته می‌شوند (شکل ۱-۲). هر لایه توسط ضخامت ( $d$ ) و ضریب شکست مختلطش ( $\tilde{n} = n + ik$ ) که تابعی از طول موج است، مشخص می‌شود. همانطور که اشاره شد مدل پترسون بر اساس ضرایب بازتاب و انتقال فرنل می‌باشد و این ضرایب نیز برای دو قطبش S و P یکسان نیستند. بنابراین باید میدان فرودی را بر حسب این دو قطبش نوشت تا بتوان از این مدل استفاده کرد. روابط فرنل بر حسب زاویه تابش به صورت زیر است:

$$r_s = \frac{\cos(\theta_i) - (n_{ti}^2 - \sin^2(\theta_i))^{1/2}}{\cos(\theta_i) + (n_{ti}^2 - \sin^2(\theta_i))^{1/2}} \quad (۳-۲)$$

$$t_s = \frac{2\cos(\theta_i)}{\cos(\theta_i) + (n_{ti}^2 - \sin^2(\theta_i))^{1/2}} \quad (۴-۲)$$

$$r_p = \frac{n_{ti}^2 \cos(\theta_i) - (n_{ti}^2 - \sin^2(\theta_i))^{1/2}}{n_{ti}^2 \cos(\theta_i) + (n_{ti}^2 - \sin^2(\theta_i))^{1/2}} \quad (5-2)$$

$$t_p = \frac{2n_{ti} \cos(\theta_i)}{n_{ti}^2 \cos(\theta_i) + (n_{ti}^2 - \sin^2(\theta_i))^{1/2}} \quad (6-2)$$

$n_{ti} = \frac{n_t}{n_i}$  ضریب شکست نسبی دو لایه است که  $n_i$  و  $n_t$  به ترتیب ضرایب شکست برای لایه  $t$  و لایه  $i$  و  $\theta_i$  زاویه تابش می باشد.

نور فرودی از سمت چپ و در امتداد عمق سلول (جهت  $x$ ) وارد سلول می شود و از سطح مشترکها در داخل سلول بازتاب می یابد. بنابراین یک موج نوری برگشتی ایجاد می شود. موجهای نوری جلو رونده را با اندیس (+) و برگشتی را با اندیس (-) نشان می دهیم. میدان الکتریکی در هر لایه، از مجموع میدانهای انتشار یافته در جهت مثبت و منفی بدست می آید:

$$E(x) = E^+(x) + E^-(x) \quad (7-2)$$

برای ارتباط دادن میدان در دو نقطه نزدیک به هم  $x_1$  و  $x_2$  حالت خطی بودن را فرض می کنیم:

$$E^+(x_1) = M_{11} E^+(x_2) + M_{12} E^-(x_2) \quad (8-2)$$

$$E^-(x_1) = M_{21} E^+(x_2) + M_{22} E^-(x_2) \quad (9-2)$$

با معرفی ماتریس انتقال  $M$ ، روابط بالا به یک رابطه ماتریسی تبدیل می شود:

$$\begin{pmatrix} E^+ \\ E^- \end{pmatrix}_{x_1} = M \begin{pmatrix} E^+ \\ E^- \end{pmatrix}_{x_2} \quad (10-2)$$

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \quad (11-2)$$

اگر دو نقطه  $x_1$  و  $x_2$  در یک لایه باشند بطوریکه هیچ سطح مشترکی بین آنها نباشد ماتریس انتقال لایه

را خواهیم داشت:

$$\begin{pmatrix} E^+ \\ E^- \end{pmatrix}_{x_1} = L_j \begin{pmatrix} E^+ \\ E^- \end{pmatrix}_{x_2} \quad (12-2)$$

$$L_j = \begin{pmatrix} e^{-i\beta_j} & 0 \\ 0 & e^{i\beta_j} \end{pmatrix} \quad (13-2)$$

در رابطه فوق  $\beta_j$  اختلاف فازی است که در اثر عبور موج از لایه ایجاد می‌شود که برای لایه  $j$ ام با ضخامت  $d_j$ ، ضریب شکست مختلط  $\tilde{n}_j$  و زاویه شکست  $\theta_j$  به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\beta_j = \frac{2\pi d_j}{\lambda} \tilde{n}_j \cos(\theta_j) = \xi_j d_j \quad (14-2)$$

حال اگر دو نقطه  $x_1$  و  $x_2$  در طرف‌های مخالف سطح مشترک و درون دو لایه متفاوت  $i$  و  $j$  باشند، ماتریس انتقال سطح مشترک را خواهیم داشت:

$$I_{ij} = \frac{1}{t_{ij}} \begin{pmatrix} 1 & r_{ij} \\ r_{ij} & 1 \end{pmatrix} \quad (15-2)$$

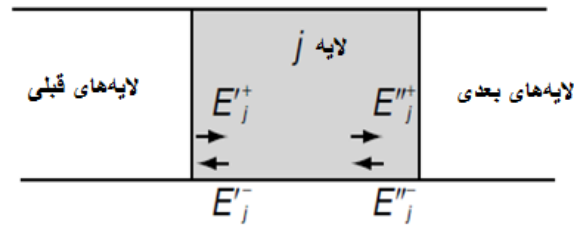
که  $r$  و  $t$  به ترتیب ضریب بازتاب و انتقال فرنیل می‌باشند که از روابط (۲-۳) الی (۲-۶) بدست می‌آیند. ماتریس انتقال کل حاصلضرب ماتریس‌های انتقال لایه و سطح مشترک تمام لایه‌های موجود می‌باشد که به ترتیبی که نور ورودی به آن‌ها می‌رسد در هم ضرب می‌شوند.

$$\begin{pmatrix} E_0^+ \\ E_0^- \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} E_{m+1}^+ \\ E_{m+1}^- \end{pmatrix} \quad (16-2)$$

$$M = I_{01} L_1 I_{12} L_2 \dots L_m I_{m,m+1} = \left( \prod_{v=1}^m I_{v-1,v} L_v \right) I_{m,m+1} \quad (17-2)$$

برای محاسبه میدان الکتریکی داخل لایه  $j$ ام، همانطور که در شکل ۲-۲ نشان داده شده است، سلول را به سه قسمت لایه‌های قبل از لایه  $j$ ام که با علامت ( ' ) نشان می‌دهیم و لایه  $j$ ام و لایه‌های بعد از لایه  $j$ ام

که با علامت ( " ) مشخص می‌شود، تقسیم می‌کنیم.



شکل ۲-۲: نمایش میدان‌های الکتریکی جلو رونده و برگشتی در لایه زام.

بدین ترتیب می‌توان ماتریس انتقال کل را به صورت زیر نوشت:

$$M = M'_j L_j M''_j \quad (18-2)$$

که ماتریس‌های  $M'_j$  و  $M''_j$  به ترتیب ماتریس‌های انتقال برای لایه‌های قبل و بعد از لایه زام می‌باشند و به صورت زیر محاسبه می‌شوند:

$$M'_j = \begin{pmatrix} M'_{j,11} & M'_{j,12} \\ M'_{j,21} & M'_{j,22} \end{pmatrix} = \left( \prod_{v=1}^{j-1} I_{v-1,v} L_v \right) I_{j-1,j} \quad (19-2)$$

$$M''_j = \begin{pmatrix} M''_{j,11} & M''_{j,12} \\ M''_{j,21} & M''_{j,22} \end{pmatrix} = \left( \prod_{v=j+1}^m I_{v-1,v} L_v \right) I_{m,m+1} \quad (20-2)$$

ضریب انتقال میدان الکتریکی به لایه زام در سطح مشترک لایه‌های ز و  $j-1$  اینگونه تعریف می‌شود:

$$t_j^+ = \frac{E_j^{'+}}{E_0^+} = \frac{\frac{1}{M'_{j,11}}}{1 + \frac{M'_{j,12} M''_{j,21}}{M'_{j,11} M_{j,11}} e^{2i\beta_j}} \quad (21-2)$$

و به همین ترتیب ضریب انتقال میدان الکتریکی به لایه زام در سطح مشترک لایه‌های ز و  $j+1$  نیز به صورت زیر بدست می‌آید:



$$t_j^- = \frac{E_j''^-}{E_0^+} = t_j^+ \frac{M_{j,21}''}{M_{j,11}''} e^{2i\beta_j} = t_j^+ r_j'' e^{2i\beta_j} \quad (22-2)$$

حال می توان میدان الکتریکی در هر نقطه داخل لایه زام را بر حسب میدان فرودی بدست آورد:

$$\begin{aligned} E_j(x) &= E_j^+(x) + E_j^-(x) = (t_j^+ e^{i\xi_j x} + t_j^- e^{-i\xi_j x}) E_0^+ \\ &= t_j^+ (e^{i\xi_j x} + r_j'' e^{i\xi_j(2d_j-x)}) \end{aligned} \quad (23-2)$$

از آنجا که تعداد اکسیتون های تولید شده در یک مکان، بطور مستقیم به انرژی جذب شده در آن مکان بستگی دارد، میانگین زمانی انرژی جذب شده به عنوان تابعی از مکان مورد نظر است که بر اساس مفهوم بردار پوئیتینگ بدست می آید. طبق بردار پوئیتینگ میانگین زمانی جذب، به صورت زیر محاسبه می شود:

$$Q(x) = \langle -\nabla \cdot S \rangle \quad (24-2)$$

که  $Q$  متوسط زمانی شار انرژی جذب شده به ازای واحد سطح و  $S$  بردار پوئیتینگ می باشد. از آنجا که موج الکترومغناطیسی فرودی، تخت در نظر گرفته شده است، داریم:

$$-\nabla \cdot S = \left( H \frac{\partial B}{\partial t} + E \frac{\partial D}{\partial t} \right) \quad (25-2)$$

با استفاده از روابط ماکسول می توان نشان داد که:

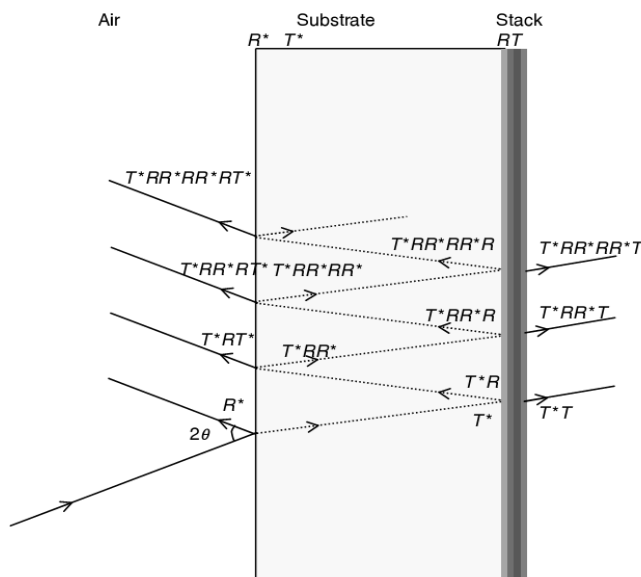
$$Q_j(x) = \frac{1}{2} c \epsilon_0 \alpha_j n_j |E_j(x)|^2 \quad (26-2)$$

که  $\epsilon_0$  ضریب گذردهی خلاء و  $n_j$  قسمت حقیقی ضریب شکست و  $\alpha_j = \frac{4\pi k_j}{\lambda}$  ضریب جذب می باشند. محاسبات قبل برای نور تکفام است ولی نور ورودی شامل تمام طیف خورشیدی می باشد. بنابراین باید میزان جذب را در تمام طول موجها محاسبه و باهم جمع کرد. از آنجایی که جذب شیشه، زیر ۳۰۰ نانومتر قوی است و مواد آلی به سختی فوتون های بالای ۹۰۰ نانومتر را جذب می کنند، بازه ی طول موجها تعیین می شود:

$$Q_j(x) = \sum_{300}^{900} Q_j(x, \lambda) \quad (27-2)$$

### ۳-۳-۲ اثر زیر لایه

سلول‌های خورشیدی آلی را به دو بخش توده و زیرلایه تفکیک می‌کنند. ضخامت زیرلایه (شیشه) بسیار بیشتر از ضخامت کل توده است. بنابراین نباید برای زیرلایه تداخل اپتیکی را در نظر گرفت بلکه اثر آن در نور فرودی توسط بازتاب‌ها و انتقال‌های پی‌درپی از سطح مشترک شیشه - توده و شیشه - هوا محاسبه می‌شود [۲۷]. بنابراین نور ورودی به توده دقیقاً همان نور ورودی به شیشه نیست و پس از عبور نور از زیرلایه شیشه‌ای شدت آن تغییر می‌کند (شکل ۳-۲).



شکل ۳-۲: بازتاب و عبور پی‌درپی نور فرودی به شیشه. R و T نشان دهنده بازتاب و عبور مرز توده لایه‌ها و شیشه و R\* و T\* نشان دهنده بازتاب و انتقال مرز شیشه و هوا

برای محاسبه عبور کل، جمع بینهایتی را از ضرایب عبور هر لایه محاسبه می‌کنیم:

$$T_{\text{total}} = T^* \left[ \sum_{i=0}^{\infty} (RR^*)^i \right] T = T^* \frac{1}{1-RR^*} T = \frac{T^*T}{1-RR^*} \quad (28-2)$$

به طور مشابه برای بازتاب کل داریم:

$$R_{\text{total}} = R^* + T^* \left[ \sum_{i=0}^{\infty} (RR^*)^i \right] RT^* = R^* + T^* \frac{1}{1-RR^*} RT^* \quad (29-2)$$

با فرض نداشتن جذب در زیرلایه شیشه‌ای ( $R^* + T^* = 1$ ) و با استفاده از روابط (28-2) و (29-2) می‌توان ضریب انتقال کل را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$T_{\text{total}} = \frac{(1 - R^*)T}{1 - RR^*} \quad (30-2)$$

تابش به توده برابر است با:

$$T \left[ \sum_{i=0}^{\infty} (RR^*)^i \right] B = T^* \frac{1}{1 - RR^*} B = \frac{(1 - R^*)}{1 - RR^*} B \quad (31-2)$$

با توجه به رابطه (2-2) داریم:

$$|E_{0g}|^2 = \frac{2(1 - R^*)B}{n_g c \epsilon_0 (1 - RR^*)} \quad (32-2)$$

رابطه (32-2) میدان الکتریکی ورودی به توده را با در نظر گرفتن اثر زیرلایه‌ی شیشه‌ای نشان می‌دهد. در مقایسه با یک توده در هوا، محاسبات با عامل زیر اصلاح می‌شود که باعث کاهش شدت نور ورودی به توده شده است:

$$\frac{(1 - R^*)}{n_g(1 - RR^*)} \quad (33-2)$$

نتایج و بررسی‌های انجام شده در فصل‌های آینده بر مبنای تئوری ارائه شده فوق، صورت گرفته است. در فصل سوم به شبیه‌سازی ساختارهای مختلف سلول‌های خورشیدی آلی پرداخته و ضخامت بهینه هر

ساختار بیان شده است. در فصل چهارم به طور گسترده عملکرد سلول‌های خورشیدی آلی مخلوطی در زوایای مختلف تابش مورد بررسی قرار گرفته است و فرض ساده تابش عمود نادیده گرفته شده است.

### ۳ فصل سوم

بهینه‌سازی اپتیکی ضخامت لایه‌ها در سلول‌های خورشیدی آلی

انتخاب ماده و ضخامت مناسب هر لایه قبل از ساخت سلول به منظور افزایش بازده و کاهش هزینه‌ها از اهمیت زیادی برخوردار است. از اینرو تلاش‌های فراوانی برای شبیه‌سازی سلول‌های خورشیدی آلی صورت گرفته است. در این فصل با استفاده از مدل ارائه شده در فصل قبل به بررسی تاثیر ضخامت هر لایه در جذب اپتیکی داخل لایه فعال در ساختارهای مختلف پرداخته‌ایم و ضخامت بهینه هر لایه را برای بدست آوردن بیشترین جذب محاسبه کرده‌ایم. بدین منظور برنامه کامپیوتری جامعی با استفاده از نرم افزار مطلب تهیه شد که امکان بهینه‌سازی تمام ساختارها اعم از سلول‌های تک لایه‌ای<sup>۱</sup>، دو لایه‌ای<sup>۲</sup>، مخلوطی<sup>۳</sup> و سلول‌های پی‌درپی<sup>۴</sup> را با هر تعداد لایه فراهم کرده است. از آنجایی که تغییر در ضخامت هر یک از لایه‌ها در جذب کل تاثیر دارد، بهینه‌سازی ضخامت تمام لایه‌ها، باهم و به طور همزمان صورت گرفته و ضخامت هیچ لایه‌ای از قبل ثابت فرض نشده است. جنبه دیگری که در تهیه این برنامه مورد توجه قرار گرفته است، قطبش نور ورودی می‌باشد. در مدل پترسون که اساس شبیه‌سازی سلول‌های خورشیدی آلی است فقط از روابط قطبش S استفاده شده است. در این تحقیق نور فرودی را به دو قطبش S و P تفکیک کردیم و جذب کل را به صورت میانگین دو قطبش محاسبه نمودیم. بدلیل اینکه شدت تابشی خورشید در ناحیه مرئی بیشینه می‌باشد، طول موج ۵۰۰ نانومتر برای بهینه‌سازی انتخاب شده است. شدت تابشی خورشید در این طول موج از رابطه ۱-۲ محاسبه شده است. در این فصل از انواع مختلف سلول‌های خورشیدی آلی، سلول‌های دولایه‌ای، مخلوطی و پی‌درپی را بررسی می‌کنیم.

## ۲-۳ بهینه‌سازی سلول خورشیدی آلی دولایه‌ای

در بررسی اپتیکی سلول‌های خورشیدی آلی دو لایه‌ای، فقط دستیابی به جذب بالا کافی نیست

<sup>1</sup>Single layer cells

<sup>2</sup>Bilayer cells

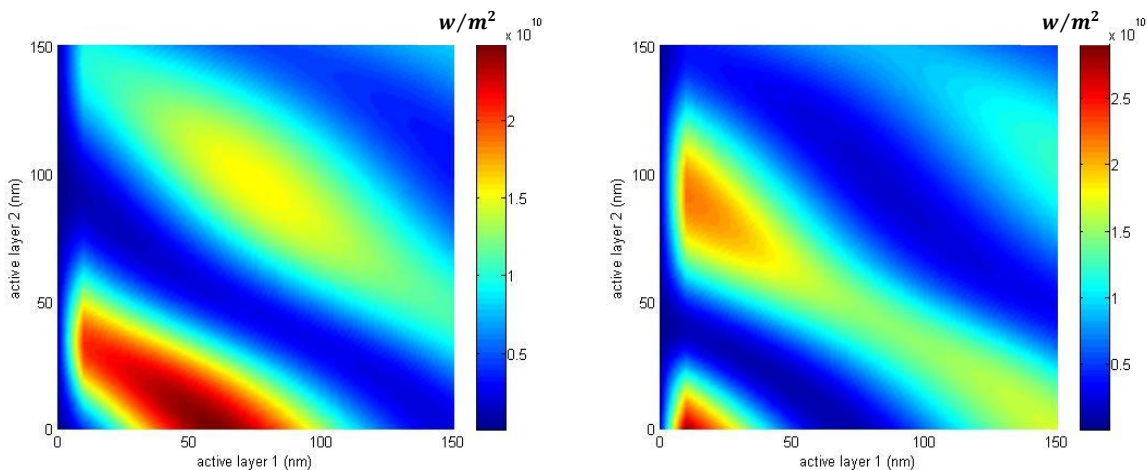
<sup>3</sup>Blend cells

<sup>4</sup>Tandem cells

بلکه مکان جذب داخل لایه فعال نیز اهمیت زیادی دارد و این مسئله‌ای است که تاکنون در شبیه‌سازی سلول‌های دولایه‌ای کمتر به آن توجه شده است. از آنجا که فوتون‌های جذب شده در فاصله بیش از طول پخش اکسیتون از پیوندگاه، نمی‌توانند قبل از بازترکیب شدن، خود را به پیوندگاه برسانند و به حامل‌های بار تفکیک شوند، در نتیجه عملاً در بازده سلول نقشی ندارند و لایه فعال فقط به اندازه طول پخش اکسیتون در دو ماده پذیرنده و بخشنده از پیوندگاه می‌باشد. بنابراین در اینگونه سلول‌ها باید سعی شود تا بیشینه جذب در مرز دو ماده بخشنده و پذیرنده (پیوندگاه بخشنده-پذیرنده) و قبل از طول پخش اکسیتون در این دو ماده فعال رخ دهد. بر این اساس در این تحقیق، برای شبیه‌سازی سلول‌های خورشیدی دولایه‌ای، با افزایش ضخامت لایه فعال، فقط جذب داخل محدوده طول پخش اکسیتون در دو طرف پیوندگاه در نظر گرفته شده است و هدف این است که به ضخامتی از هر لایه دست یابیم که این جذب بیشینه شود.

اولین سلول خورشیدی آلی دولایه‌ای مورد بررسی به صورت Glass/ITO/PEDOT:PSS/CUPC/C<sub>60</sub>/Al استفاده می‌شود و به دلیل همین شفافیت ورود نور به سلول از این سمت اتفاق می‌افتد. PEDOT:PSS به عنوان ماده انتقال دهنده خوب حفره‌ها و همچنین به منظور صاف کردن سطح ITO مورد استفاده قرار می‌گیرد. لایه فعال متشکل از دو ماده CUPC به عنوان ماده دهنده و C<sub>60</sub> به عنوان ماده پذیرنده است. طول پخش اکسیتون در CUPC و C<sub>60</sub> به ترتیب برابر ۱۰ و ۴۰ نانومتر می‌باشد [۲۸]. آلومینیوم نیز کاتد سلول است و ضخامت آن را زیاد (معمولاً ۱۰۰ نانومتر) در نظر می‌گیرند، تا هیچ نوری از سلول خارج نشود و تمام پرتوها را مجدداً به داخل سلول بازتاب کند. برای بررسی اپتیکی این ساختار، ابتدا میزان جذب را در هر یک از دو ماده فعال و در دو مد تابشی TE و TM بررسی نموده، سپس مجموع جذب را در کل لایه فعال به تفکیک دو مد تابشی در نظر گرفتیم و در انتها میانگین جذب در دو قطبش S و P محاسبه و

از آن ضخامت‌های بهینه هر یک از لایه‌ها برای دستیابی به جذب بیشینه معرفی شدند. برای رسم شکل‌های (۱-۳) میزان بیشینه جذب اتفاق افتاده در لایه فعال اول را بر حسب ضخامت‌های دو لایه فعال در نظر گرفتیم و تغییرات این بیشینه‌های جذب را بر حسب تغییرات ضخامت دو لایه فعال رسم کردیم. محور افقی ضخامت لایه فعال اول (CUPC) و محور عمودی ضخامت لایه فعال دوم ( $C_{60}$ ) را مشخص می‌کند. شکل ۱-۳-الف و ب نشان دهنده بیشترین جذب ممکن در لایه فعال اول در ضخامت‌های مختلف دو لایه فعال به ترتیب برای قطبش P و قطبش S در طول موج ۵۰۰ نانومتر می‌باشد. می‌توان گفت در ضخامت‌هایی که در قطبش S جذب بالایی رخ می‌دهد در قطبش P جذب کمی اتفاق می‌افتد و بالعکس.



شکل ۱-۳-ب: قطبش S

شکل ۱-۳-الف: قطبش P

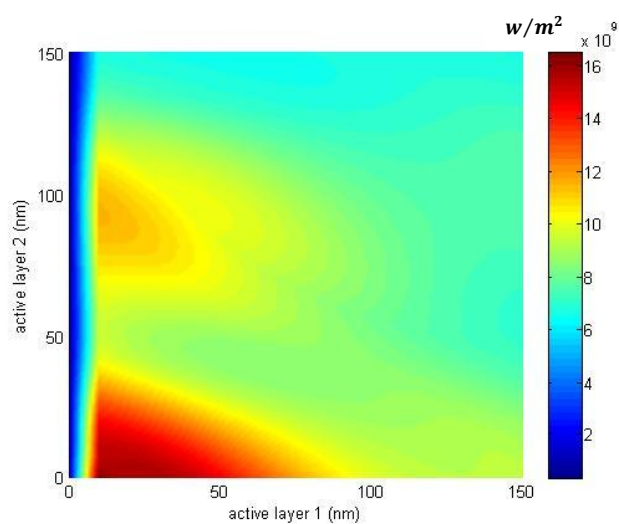
شکل ۱-۳: نمایش تغییرات بیشترین جذب در لایه فعال اول در ضخامت‌های مختلف دو لایه فعال در دو قطبش S و P

بیشینه جذب در لایه اول و برای هر دو قطبش در ضخامت تقریباً صفر از لایه فعال دوم اتفاق می‌افتد اما برای قطبش P این بیشینه به ضخامت‌های کوچکتری از لایه فعال اول مربوط می‌شود.

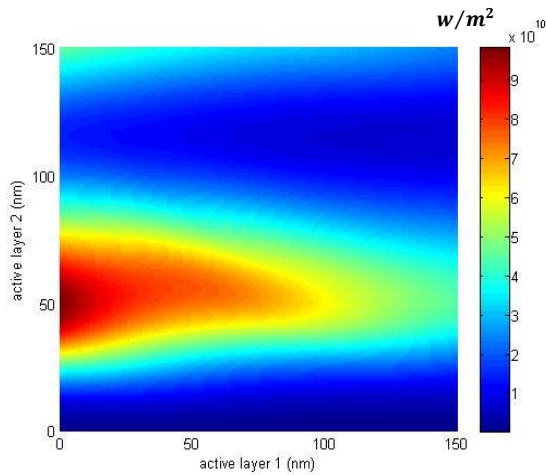
از مقدار جذب در هر دو مد تابشی که در ماده فعال اول اتفاق می‌افتد میانگین گرفته سپس



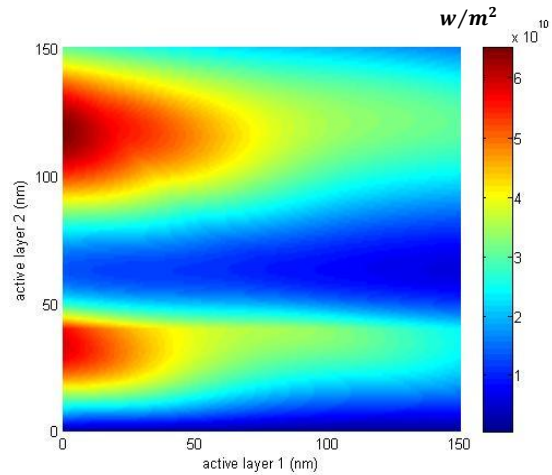
مقدار بیشترین جذب ممکن در ضخامت‌های مختلف لایه‌های فعال مشخص و تغییرات آن در شکل ۲-۳ رسم گردیده است. طبق این شکل بیشترین جذب در ماده فعال اول (CUPC) در ضخامت‌های کوچک لایه فعال دوم مشاهده می‌شود اما یک بیشینه کوچک‌تر در ضخامت‌های بزرگ لایه فعال دوم نیز وجود دارد. برای بررسی جذب در لایه فعال دوم نیز همین مراحل را طی می‌کنیم. به طور مشابه شکل‌های (۳-۳) و (۳-۴) برای تغییرات بیشینه‌های جذب در لایه فعال دوم و در دو قطبش رسم شده‌اند.



شکل ۲-۳: تغییرات بیشترین جذب میانگین در لایه فعال اول بر حسب ضخامت دو لایه فعال



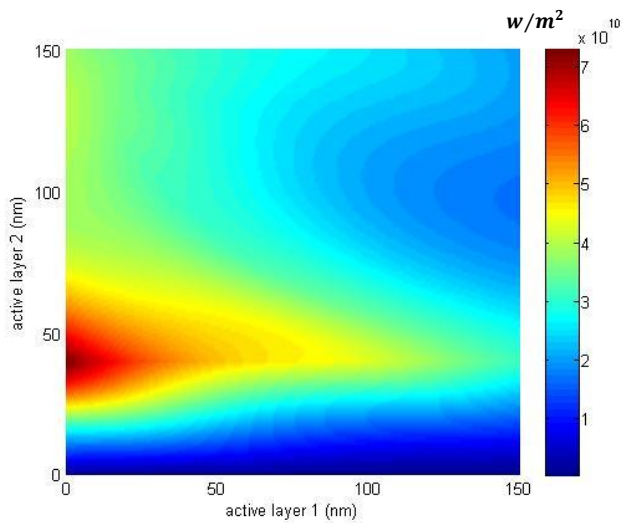
شکل ۳-۳-ب: قطبش S



شکل ۳-۳-الف: قطبش P

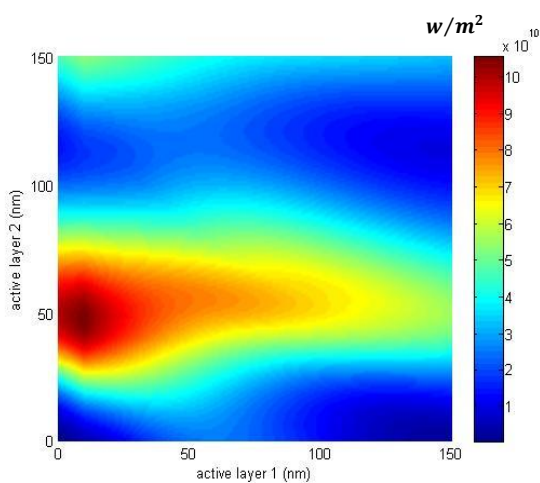
شکل ۳-۳: تغییرات بیشترین جذب در لایه فعال دوم بر حسب ضخامت دو لایه فعال در دو قطبش S و P

در لایه فعال دوم نیز مشاهده می‌شود که تقریباً در مکان‌هایی که جذب در قطبش S بیشینه است، جذب در قطبش P کمینه می‌باشد و بالعکس. در قطبش S در ضخامت ۵۰ نانومتر و در قطبش P در ضخامت ۱۱۷ نانومتر از لایه فعال دوم جذب بیشینه رخ می‌دهد. این در حالی است که فقط جذب رخ داده در طول پخش اکسیتون به عنوان جذب مفید در نظر گرفته شده است و از جذب رخ داده در ضخامت‌های بزرگ‌تر به عنوان اتلاف چشم پوشی شده است. اگر به میزان جذب در لایه فعال دوم دقت کنیم متوجه می‌شویم بیشینه جذب در این لایه بیشتر از لایه فعال اول می‌باشد.

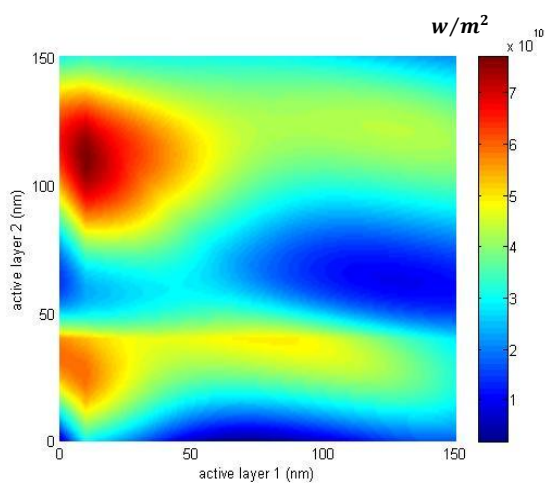


شکل ۳-۴: تغییرات میزان بیشینه‌های جذب میانگین در لایه فعال دوم بر حسب ضخامت دو لایه فعال

برای بررسی دقیق‌تر سلول، جذب در هر دو لایه فعال را باهم در نظر می‌گیریم. بدین منظور مجموع جذب در دو لایه فعال را به تفکیک دو قطبش محاسبه کرده، سپس بیشینه جذب ممکن را در تمام ضخامت دو لایه فعال تعیین و تغییرات آن را رسم نموده‌ایم.

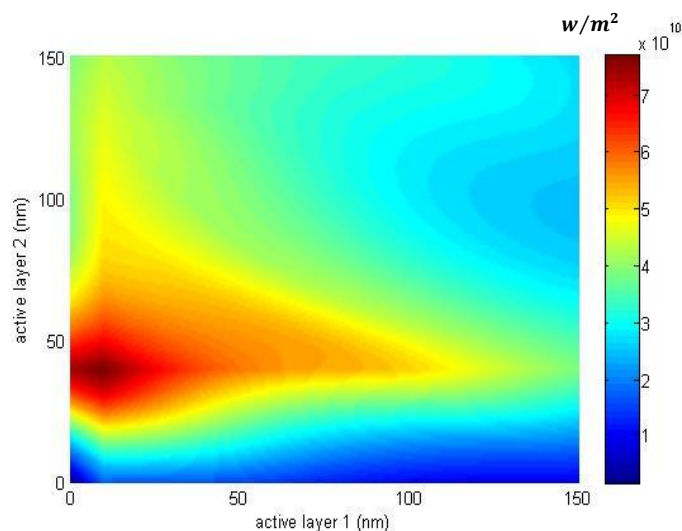


شکل ۳-۵-ب: تغییرات میزان بیشینه‌های مجموع جذب در دو لایه فعال در قطبش S



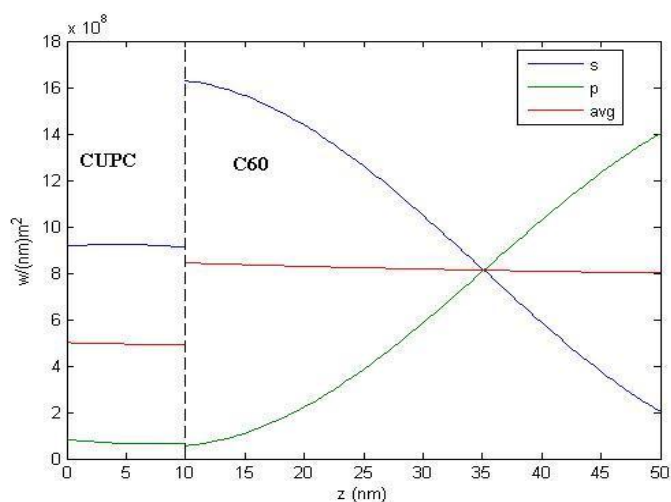
شکل ۳-۵-الف: تغییرات میزان بیشینه‌های مجموع جذب در دو لایه فعال در قطبش P

در شکل ۳-۵-ب نحوه تغییر بیشینه جذب ممکن در مجموع دو لایه فعال و در قطبش S بر حسب ضخامت دو لایه فعال و در طول موج ۵۰۰ نانومتر نشان داده شده است. در قطبش S بیشترین جذب به ترتیب در ضخامت‌های ۱۰ و ۴۸ نانومتری از لایه فعال اول (CUPC) و لایه فعال دوم ( $C_{60}$ ) رخ می‌دهد که این بیشینه جذب به ترتیب مربوط می‌شود به ضخامت‌های ۵۸ و ۶۱ نانومتر از لایه های ITO و PEDOT:PSS. در قطبش P بیشترین جذب در ضخامت‌های به ترتیب ۱۰، ۱۱۰، ۴۰ و صفر نانومتر از لایه فعال اول، دوم، ITO و PEDOT:PSS اتفاق می‌افتد. شکل ۳-۶ برآیند دو شکل (۳-۵-الف) و (۳-۵-ب) می‌باشد و میانگین جذب در دو قطبش را برای مجموع جذب دو لایه فعال نشان می‌دهد. طبق این شکل بیشترین جذب به ترتیب در ضخامت‌های ۱۰ و ۴۰ نانومتری از لایه فعال اول و دوم اتفاق می‌افتد که دقیقا برابر با طول پخش اکسیژن در این دو ماده فعال است. این بیشینه جذب مربوط می‌شود به ضخامت‌های ۶۰ و ۸۵ نانومتر از لایه‌های ITO و PEDOT:PSS. ناحیه قرمز رنگ محدوده بیشینه جذب را نشان می‌دهد که در امتداد دو خط عمود بر هم که از ضخامت‌های برابر با طول پخش اکسیژن در دو ماده فعال می‌گذرد، گسترش یافته است.



شکل ۳-۶: تغییرات میزان بیشینه‌های مجموع جذب میانگین در دو ناحیه فعال برای دو قطبش S و P

برای بررسی چگونگی تغییرات جذب در کل لایه فعال سلول و در ضخامت بهینه شده پروفایل جذب در شکل ۷-۳ رسم شده است. محور افقی عمق لایه فعال را نشان می‌دهد و محور عمودی میزان جذب به ازای طول موج ۵۰۰ نانومتر را مشخص می‌کند. پیوندگاه در مختصات ۱۰ نانومتری قرار دارد. لایه اول CUPC و لایه دوم C<sub>60</sub> می‌باشد که ضخامت هر یک به اندازه ضخامت‌های بهینه شده - که دقیقاً برابر با طول پخش اکسیتون مربوطه می‌باشد- در نظر گرفته شده است. همانطور که مشخص است تغییرات جذب در قطبش S و P عکس یکدیگر است اما در مجموع، در قطبش S جذب بیشتری اتفاق می‌افتد.



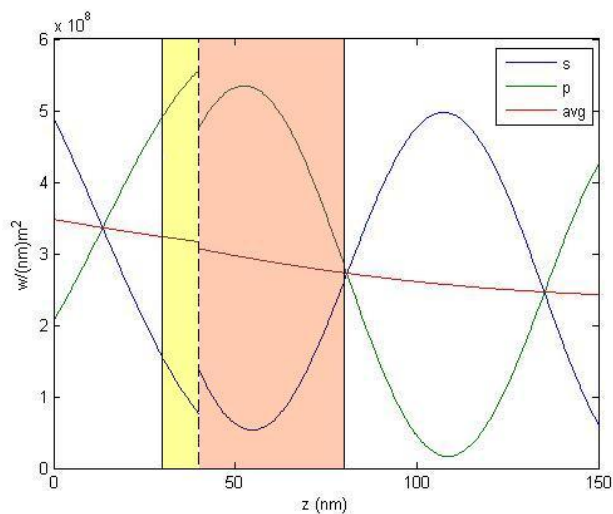
شکل ۷-۳: پروفایل جذب در لایه فعال سلول برای ساختار بهینه

برای مقایسه در شکل ۸-۳ پروفایل جذب در ساختار

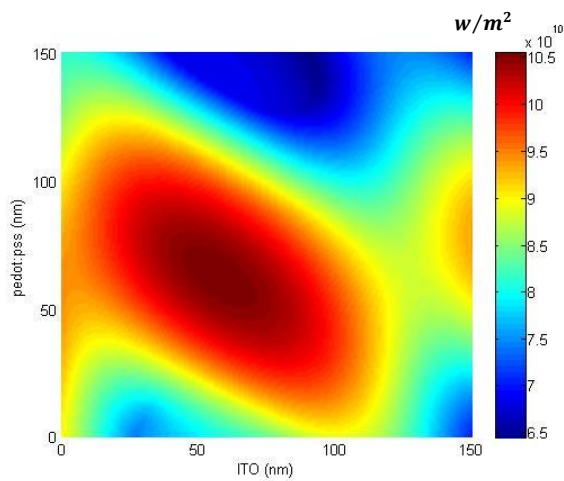
ITO (60nm) / PEDOT:PSS (85nm) / CUPC (40nm) / C60 (110nm) / Al (100nm)

که بیشینه جذب قطبش P در آن اتفاق می‌افتد، نشان داده شده است. هر چند که جذب فوتون در ضخامت‌های بیشتر از طول پخش اکسیتون در بازده سلول نقشی ندارد اما در تغییرات منحنی جذب در ناحیه مفید تاثیر مستقیمی دارد. این تاثیر بگونه صورت گرفته است که در ناحیه مفید، برای قطبش P

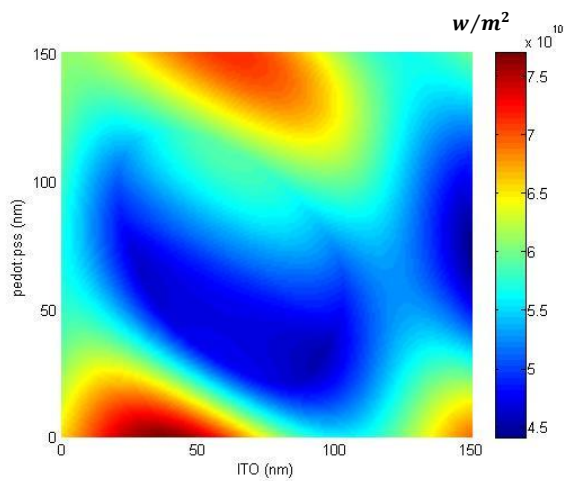
یک بیشینه و برای قطبش S یک کمینه جذب اتفاق افتاده است.



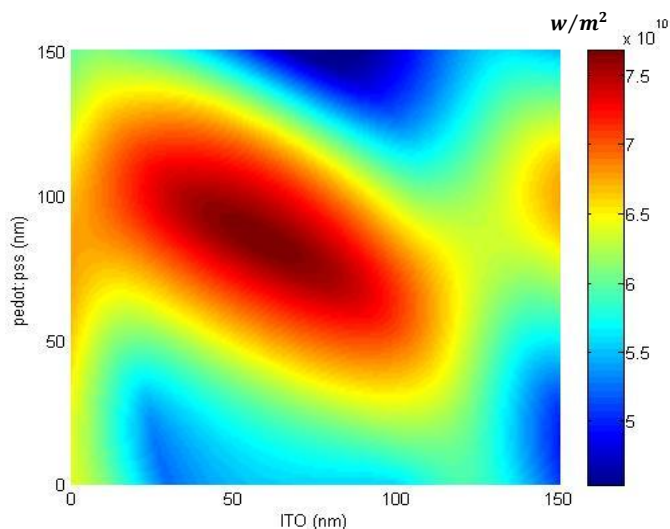
شکل ۳-۸: پروفایل جذب در لایه فعال با ضخامت کل ۱۵۰ نانومتر



شکل ۳-۹-ب: تغییرات بیشینه‌های مجموع جذب در دو لایه فعال بر حسب ضخامت‌های ITO و PEDOT:PSS در قطبش S



شکل ۳-۹-الف: تغییرات بیشینه‌های مجموع جذب در دو لایه فعال بر حسب ضخامت‌های ITO و PEDOT:PSS در قطبش P

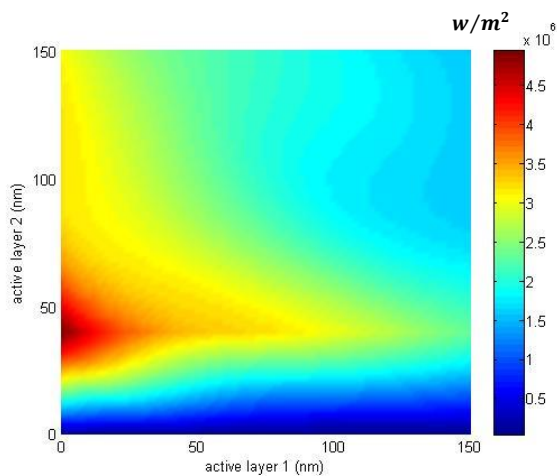


شکل ۳-۱۰: تغییرات بیشینه‌های مجموع میانگین جذب در دو لایه فعال و در دو قطبش S و P بر حسب ضخامت‌های ITO و PEDOT:PSS

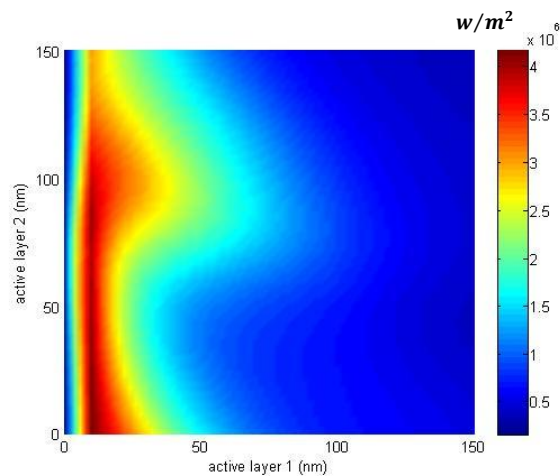
شکل‌های ۳-۹-الف و ب تغییرات میزان بیشینه‌های مجموع جذب در دو لایه فعال را برای دو قطبش، بر حسب ضخامت‌های ITO و PEDOT:PSS نشان می‌دهد. در شکل ۳-۱۰ میانگین این جذب در دو قطبش نشان داده شده است. طبق این شکل ناحیه قرمز رنگ جذب قابل قبولی را در لایه فعال نتیجه می‌دهد. ناحیه پرنگ مرکزی در محدوده ۴۵ الی ۷۰ نانومتری لایه ITO و ۷۵ الی ۹۵ نانومتری لایه PEDOT:PSS می‌باشد. اگر در این شکل به بازه تغییرات جذب توجه کنیم می‌توانیم به حساسیت سلول به تغییر ضخامت ITO و PEDOT:PSS پی ببریم.

جهت بررسی دقیق‌تر سلول، با انتگرال‌گیری از جذب در لایه فعال در محدوده طول‌موجی ۴۰۰ الی ۷۰۰ نانومتر، مجموع جذب داخل هر دو لایه فعال محاسبه شده است. شکل‌های ۳-۱۱-الف و ب به ترتیب تغییرات بیشینه‌های جذب میانگین در دو قطبش را در لایه فعال اول و دوم نشان می‌دهند. همانطور که مشخص است در لایه فعال اول که دارای طول پخش اکسیتون ۱۰ نانومتر می‌باشد، بیشترین جذب، در

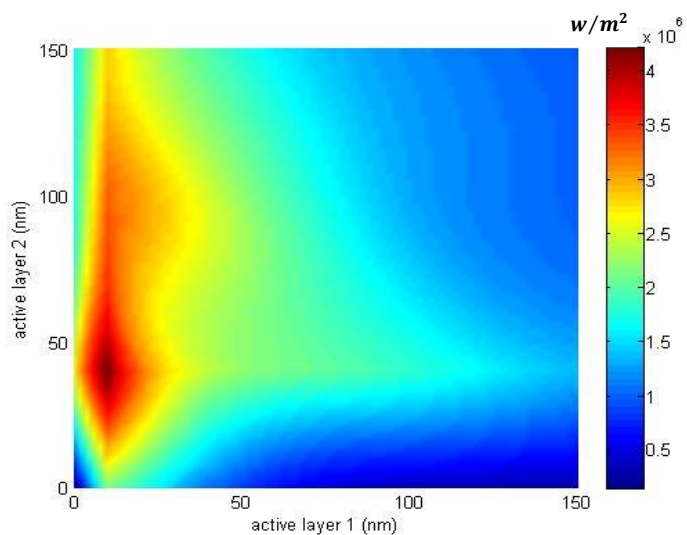
ضخامت ۱۰ نانومتری از لایه فعال اول و تقریبا برای تمام ضخامت لایه فعال دوم اتفاق می افتد. در حالی که برای لایه فعال دوم، تغییرات مجموع جذب در طول موج ۴۰۰ تا ۷۰۰ نانومتر، مشابه تغییرات جذب در طول موج ۵۰۰ نانومتر می باشد. شکل ۳-۱۲ مجموع جذب کل در دو لایه فعال را نشان می دهد. مشابه جذب در طول موج ۵۰۰ نانومتر، بیشینه جذب در ضخامت های ۱۰ و ۴۰ نانومتر از لایه فعال اول و دوم اتفاق می افتد.



شکل ۳-۱۱-ب: تغییرات بیشینه های میانگین جذب کل در لایه فعال دوم



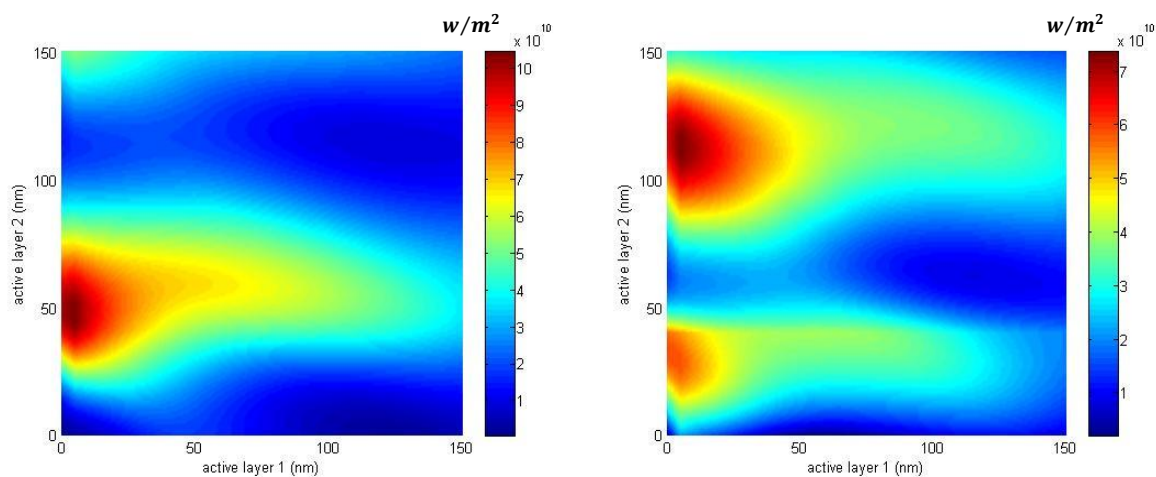
شکل ۳-۱۱-الف: تغییرات بیشینه های میانگین جذب کل در لایه فعال اول



شکل ۳-۱۲: تغییرات بیشینه های میانگین جذب کل در مجموع دو لایه فعال

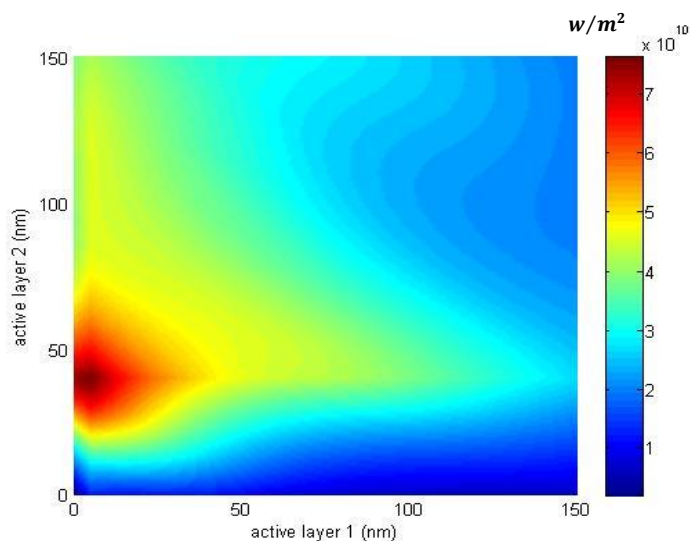


دومین ساختار سلول خورشیدی آلی دو لایه‌ای که مورد بررسی قرار گرفته است به صورت Glass/ITO/PEDOT:PSS/PEOPT/C<sub>60</sub>/Al(100nm) می‌باشد. طول پخش اکسیتون برای ماده فعال اول (PEOPT)، ۵ نانومتر و برای ماده فعال دوم (C<sub>60</sub>)، ۴۰ نانومتر می‌باشد [۲۷]. در اینجا نیز روند بررسی مانند ساختار قبل است.



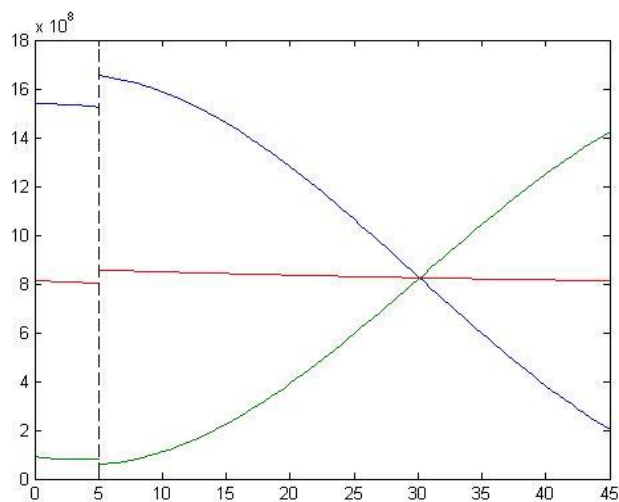
شکل ۳-۱۳-ب: تغییرات بیشینه‌های مجموع جذب در دو لایه فعال در قطبش S

شکل ۳-۱۳-الف: تغییرات بیشینه‌های مجموع جذب در دو لایه فعال در قطبش P

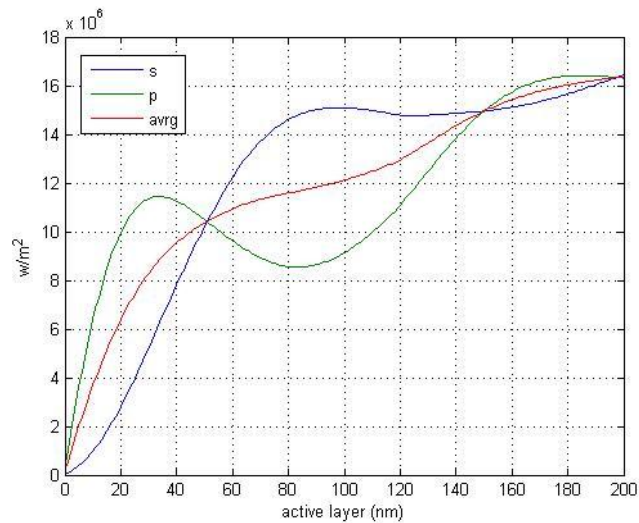


شکل ۳-۱۴: تغییرات بیشینه‌های مجموع جذب میانگین در دو ناحیه فعال برای دو قطبش S و P

در شکل ۳-۱۳-ب تغییرات میزان بیشینه‌های مجموع جذب در دو ماده فعال برای قطبش S نشان داده شده است که بالاترین جذب در ضخامت ۵ نانومتری از لایه فعال اول با طول پخش اکسیتون ۵ نانومتر و ضخامت ۴۸ نانومتری از لایه فعال دوم با طول پخش اکسیتون ۴۰ نانومتر رخ می‌دهد. برای قطبش P (شکل ۳-۱۳-الف) بیشترین جذب در ضخامت‌های ۵ و ۱۱۳ نانومتری لایه فعال اول و دوم اتفاق می‌افتد و در جذب میانگین (شکل ۳-۱۴) بیشترین جذب را در ضخامت‌های ۵ و ۴۰ نانومتری از لایه فعال اول و دوم مشاهده می‌کنیم. یعنی دقیقا در ضخامت‌هایی برابر با طول پخش اکسیتون در دو ماده فعال. بیشینه مجموع جذب میانگین دو قطبش به ترتیب به ضخامت‌های ۶۰ و ۸۹ نانومتری از لایه های ITO و PEDOT:PSS مربوط می‌شود. در شکل ۳-۱۵ پروفایل جذب در نقاط مختلف لایه فعال نشان داده شده است. لایه اول PEOPT و لایه دوم C60 می‌باشد. پیوندگاه در نقطه ۵ نانومتری از عمق لایه فعال قرار دارد. اگر دو ساختار معرفی شده که فقط در ماده فعال اول (ماده دهنده) تفاوت دارند را باهم در نظر بگیریم مشاهده می‌کنیم که با وجود اینکه طول پخش اکسیتون در CUPC دو برابر PEOPT می‌باشد - در نتیجه لایه فعال بزرگ‌تری را موجب می‌شود- اما این ساختار جذب اپتیکی بالاتری را دارا نمی‌باشد و میزان بیشینه جذب داخل لایه فعال هر دو ساختار تقریبا به یک اندازه است. از طرفی، از نظر الکتریکی، هرچه ضخامت لایه‌ها کمتر باشد بازده سلول بالاتر می‌رود، در نتیجه ساختار دوم با وجود داشتن لایه فعال کوچک‌تر نسبت به ساختار اول می‌تواند بازده بالاتری را موجب شود.



شکل ۳-۱۵: پروفایل جذب در لایه فعال سلول برای ساختار بهینه. محور افقی عمق لایه فعال (nm) و محور عمودی جذب ( $w/nm.m^2$ )



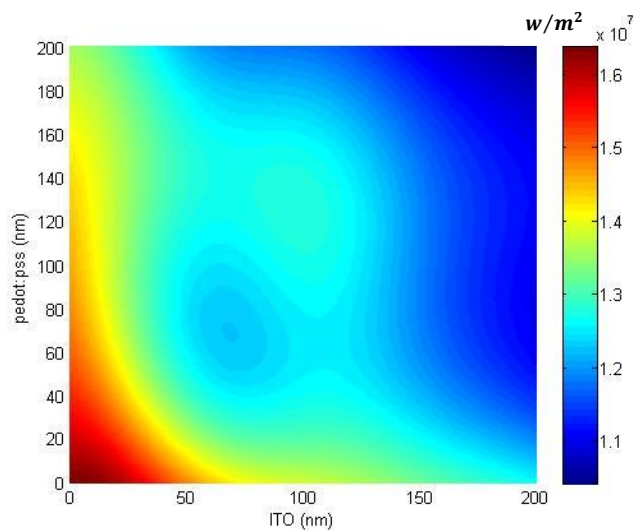
شکل ۳-۱۶: تغییرات میزان بیشینه‌های جذب در ضخامت‌های ITO و PEDOT:PSS بر حسب ضخامت لایه فعال

### ۳-۳ بهینه‌سازی سلول خورشیدی آلی مخلوطی

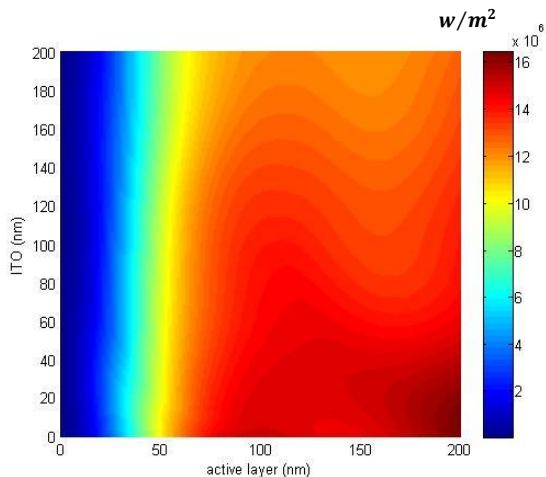
در این قسمت سلول خورشیدی مخلوطی با ساختار

Glass/ITO/PEDOT:PSS/P3HT:PC70BM/Al(100nm) بررسی شده است. میزان جذب داخل لایه

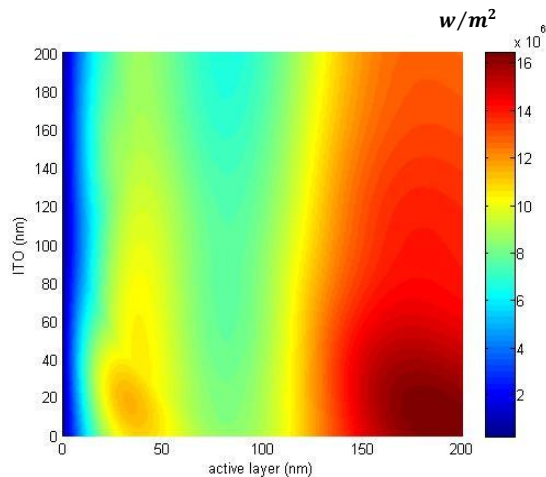
فعال سلول در طول موج ۴۰۰ تا ۷۰۰ نانومتر محاسبه شده است. شکل ۳-۱۶ تغییرات بیشینه جذب را بر حسب ضخامت لایه فعال نشان می‌دهد. طبق شکل ۳-۱۷ بیشینه جذب در ضخامت‌های کوچک ITO و PEDOT:PSS رخ می‌دهد. البته در این شکل تفاوت بین بیشینه و کمینه جذب ناچیز می‌باشد و این بدان معنی است که تغییر ضخامت دو لایه ITO و PEDOT:PSS تاثیر زیادی در میزان جذب داخل لایه فعال سلول ندارد و عملکرد اپتیکی سلول به ضخامت این دو لایه حساس نیست. شکل‌های ۳-۱۸ نیز مؤید این مطلب می‌باشند. در شکل ۳-۱۸-الف و ب تغییرات بیشینه جذب در دو قطبش S و P بر حسب ضخامت لایه‌های فعال و آند رسم شده است. طبق این شکل در قطبش S ناحیه با جذب بالا از ضخامت‌های کوچک‌تری از لایه فعال شروع می‌شود و تغییر ضخامت ITO تاثیری کمی در آن دارد.



شکل ۳-۱۷: تغییرات بیشینه میانگین جذب داخل لایه فعال بر حسب ضخامت ITO و PEDOT:PSS

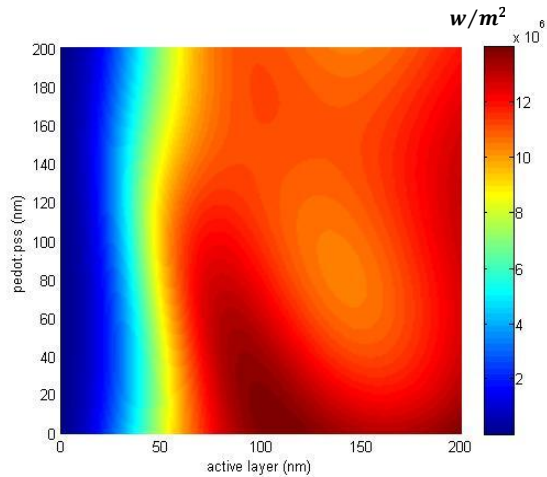


شکل ۳-۱۸-ب: تغییرات میزان بیشینه‌های جذب بر حسب ضخامت لایه فعال و ITO برای قطبش S

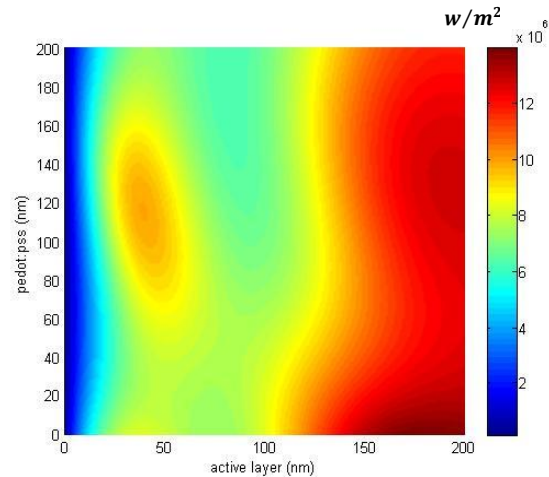


شکل ۳-۱۸-الف: تغییرات میزان بیشینه‌های جذب بر حسب ضخامت لایه فعال و ITO برای قطبش P

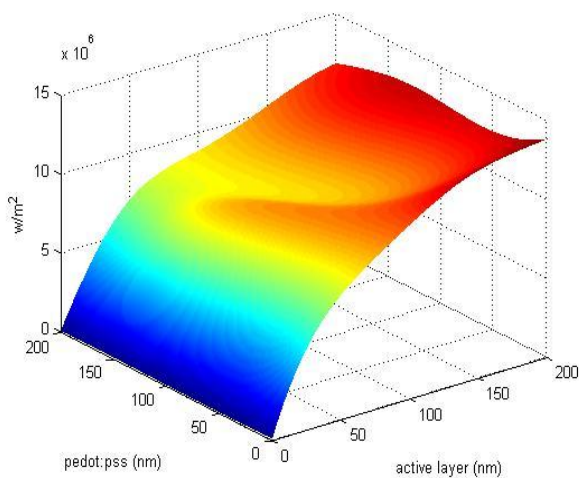
از آنجایی که ITO آند سلول می‌باشد، ضخامت آن نباید خیلی کوچک باشد. همچنین بالا بودن ضخامت آند موجب به دام‌اندازی نور داخل سلول می‌شود. بنابراین عملکرد اپتیکی سلول را با در نظر گرفتن ضخامت ۱۰۰ نانومتر برای لایه ITO بررسی می‌کنیم (شکل‌های ۳-۱۹). برای قطبش S می‌توان در ضخامت‌های ۸۰ تا ۱۵۰ نانومتر از لایه فعال و ضخامت‌های کمتر از ۶۰ نانومتر از لایه PEDOT:PSS به بیشینه جذب دست یافت. در حالی که برای قطبش P بیشینه جذب در ضخامت‌های بزرگ‌تر لایه فعال (۱۰۵ الی ۲۰۰ نانومتر) و کوچکتر PEDOT:PSS (کوچک‌تر از ۲۰ نانومتر) رخ می‌دهد. در شکل ۳-۲۰ جذب میانگین دو قطبش نشان داده شده است. نواحی دارای جذب بالا با رنگ قرمز مشخص می‌باشند.



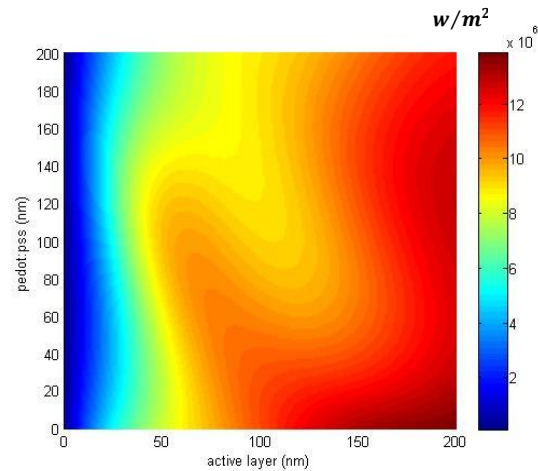
شکل ۳-۱۹-ب: تغییرات جذب بر حسب ضخامت لایه فعال و PEDOT:PSS در ضخامت ۱۰۰ نانومتری ITO برای قطبش S



شکل ۳-۱۹-الف: تغییرات جذب بر حسب ضخامت لایه فعال و PEDOT:PSS در ضخامت ۱۰۰ نانومتری ITO برای قطبش P



شکل ۳-۲۰: تغییرات جذب میانگین دو قطبش در لایه فعال سلول در ضخامت ۱۰۰ نانومتری ITO بر حسب ضخامت لایه فعال و PEDOT:PSS



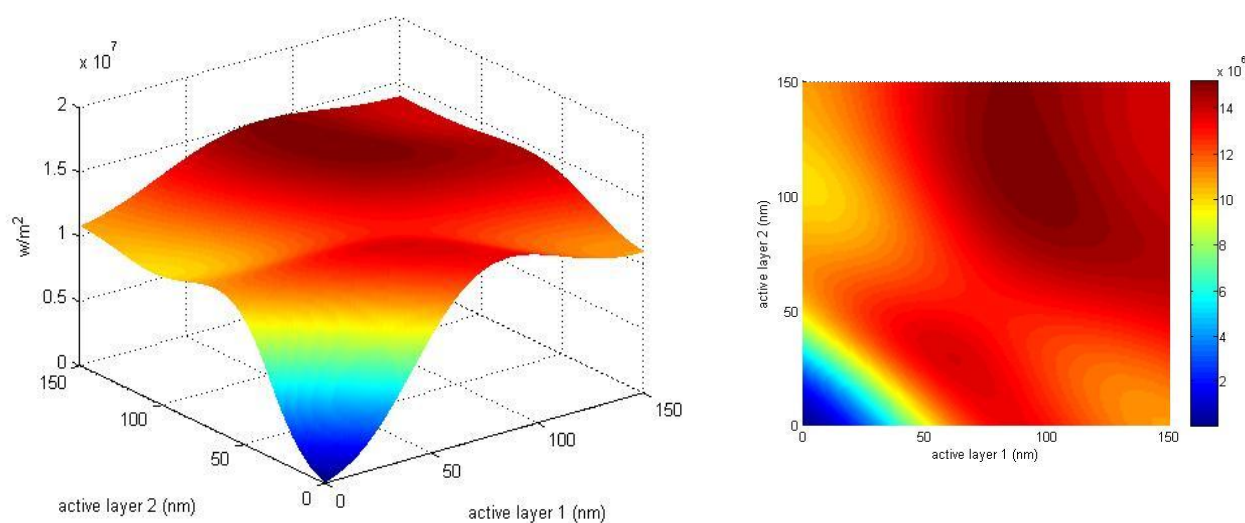
### ۴-۳ بهینه‌سازی سلول خورشیدی آلی پی‌درپی

سلول‌های خورشیدی پی‌درپی از روی هم چیدن سلول‌های دو لایه‌ای، مخلوطی و یا ترکیبی از

این دو ساخته می‌شوند. در اینجا ساختاری که مورد بررسی قرار گرفته است شامل دو سلول مخلوطی با ماده فعال متفاوت می‌باشد که بین دو سلول، لایه نازکی از آلومینیوم لایه‌نشانی شده است. ماده فعال اول و دوم را به گونه‌ای انتخاب می‌کنند تا محدوده بیشتری از طیف تابشی خورشید جذب شود، بنابراین سلول را در بازه ۴۰۰ تا ۷۰۰ نانومتری از طول موج‌ها مورد بررسی قرار دادیم. ساختار به صورت

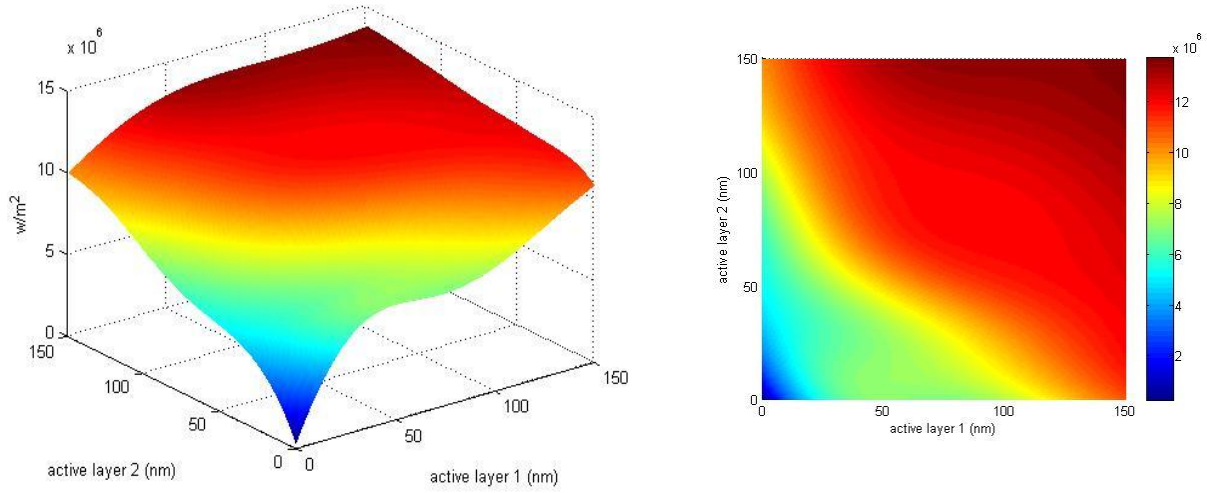
Glass/ITO(100nm)/PEDOT:PSS(45nm)/P3HT:PC70BM/LiF(.5nm)/Al(1nm)/CUPC:C60/Bphen(5nm)/Al(100nm)

می‌باشد. سلول اول با ماده فعال P3HT:PC70BM و سلول دوم با ماده فعال CUPC:C60 می‌باشد که هر دو سلول در قسمت‌های قبل به طور جداگانه بررسی شده‌اند. شکل‌های ۳-۲۱ نشان دهنده تغییرات مجموع جذب در هر دو لایه فعال و در قطبش S می‌باشد. بیشینه جذب در محدوده بین ۷۵ الی ۱۱۰ نانومتری لایه فعال اول و ۸۵ الی ۱۵۰ نانومتری لایه فعال دوم قرار دارد. به طور مشابه در شکل ۳-۲۲ تغییرات مجموع جذب در دو لایه فعال و در قطبش P رسم شده است. برای قطبش P بیشینه جذب در ضخامت‌های بزرگ هر دو لایه اتفاق می‌افتد.



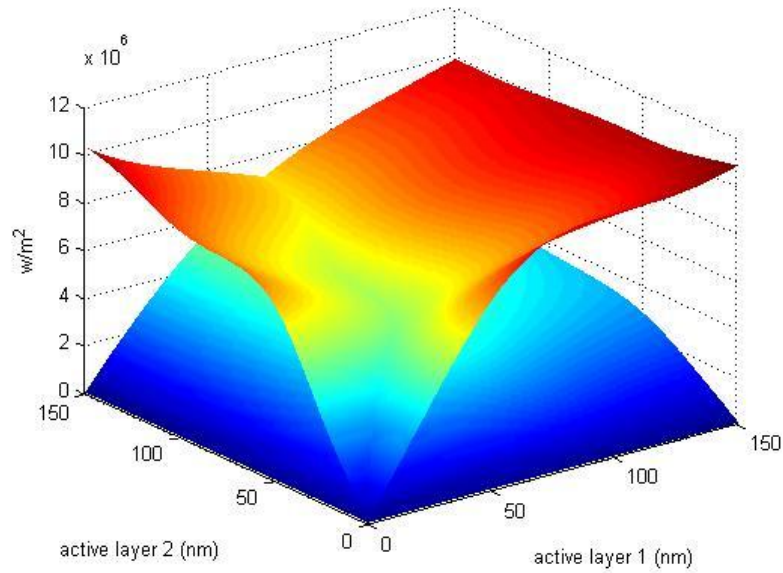
شکل ۳-۲۱: تغییرات مجموع جذب در دو لایه فعال برای قطبش S





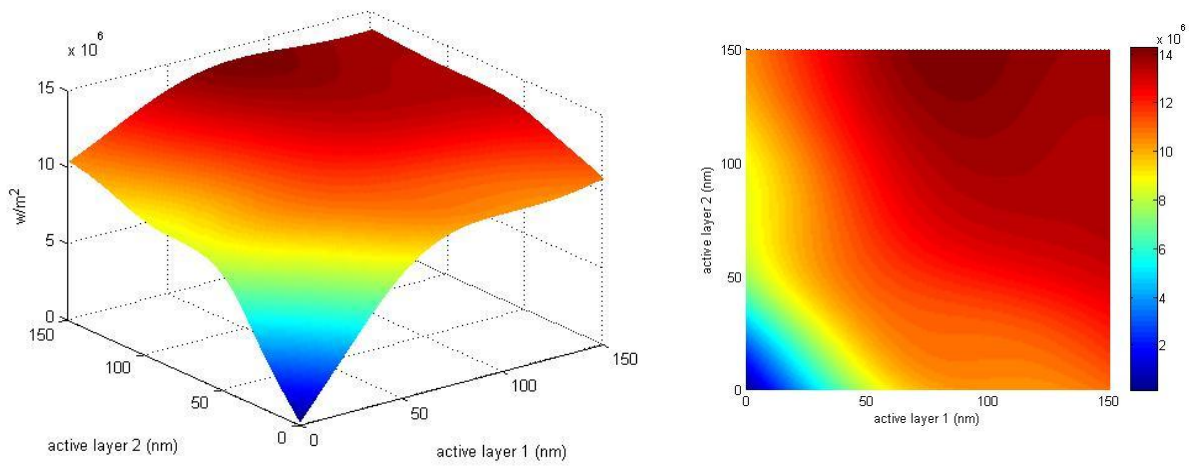
شکل ۳-۲۲: تغییرات مجموع جذب در دو لایه فعال برای قطبش P

از مجموع جذب در دو لایه فعال و در دو قطبش S و P میانگین‌گیری شده و در شکل‌های ۳-۲۳ و ۳-۲۴ رسم شده است.



شکل ۳-۲۳: تغییرات میانگین جذب در هر دو لایه فعال





شکل ۳-۲۴: تغییرات مجموع میانگین جذب در هر دو لایه

طبق شکل ۳-۲۴ بیشینه جذب در ضخامت ۸۵ نانومتری لایه فعال اول و ۱۵۰ نانومتری لایه فعال دوم اتفاق می افتد.

## ۴ فصل چهارم

بررسی اپتیکی سلول‌های خورشیدی آلی در زوایای مختلف تابش

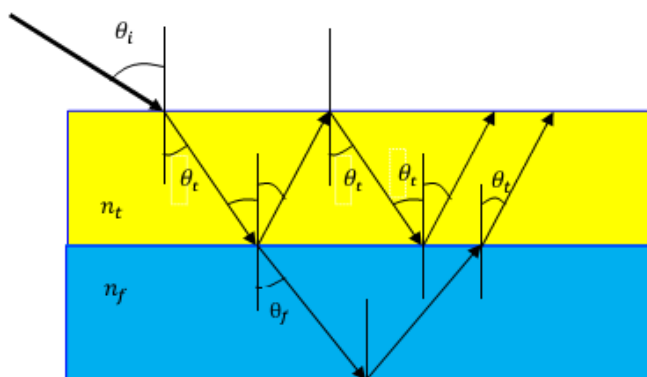
## ۱-۴ مقدمه

در کارهای گزارش شده، برای بررسی اپتیکی سلول‌های خورشیدی آلی، به منظور ساده‌سازی روابط، فقط تابش عمود به سطح سلول را در نظر می‌گیرند. تحت تابش عمود بازتاب کمتری رخ می‌دهد. از اینرو تصور می‌شود که بالاترین بازده در این زاویه امکان پذیر است. اما از طرفی در تابش غیر عمود، عملاً ضخامت مؤثر برای جذب نور افزایش می‌یابد. تقابل این دو اثر تعیین می‌کند که بازده سلول افزایش می‌یابد یا کاهش. لذا به نظر می‌رسد بررسی عملکرد سلول تحت زوایای مختلف دارای اهمیت ویژه‌ای می‌باشد.

در این فصل اثر تابش تحت زوایای مختلف را بر جذب نور در لایه فعال در سلول‌های مخلوطی بررسی کرده‌ایم. برای این منظور با استفاده از مدل پترسون، میدان الکتریکی را در هر نقطه داخل لایه فعال حساب کردیم. سپس با استفاده از بردار پویتینگ، جذب اپتیکی داخل لایه فعال را بر حسب طول موج و زاویه تابش به دست آوردیم. همانطور که قبلاً اشاره شد در مدل پترسون محاسبات بر اساس ضرایب بازتاب و عبور فرنیل انجام می‌پذیرد. نظر به اینکه این ضرایب برای دو قطبش S و P یکسان نیستند، نور فرودی را به دو قطبش S و P تفکیک کردیم و اثر هر کدام را در جذب اپتیکی داخل لایه فعال بررسی نمودیم. سپس جذب کل را به صورت میانگین جذب برای دو قطبش S و P محاسبه نمودیم. با استفاده از نرم افزار متلب برنامه‌ای برای بهینه‌سازی ضخامت لایه‌های مختلف در سلول‌های خورشیدی آلی با پیوندگاه ناهمگون حجمی (BHJ) در زوایای مختلف تابش نوشته شد. برنامه این امکان را فراهم می‌کند تا سلول‌هایی با ساختار زیرلایه (شیشه) / لایه رسانای شفاف (آند) / لایه انتقال دهنده حفره / لایه فعال / کاتد را در هر زاویه دلخواه بهینه‌سازی کنیم.

## ۲-۴ اصلاح روابط

باید توجه کرد که مدل در تابش غیر عمود، دیگر یک بعدی نیست و باید دو بعدی در نظر گرفته شود. وقتی نور با زاویه به مرز دو ناحیه بتابد می‌شکند و از خط عمود منحرف می‌شود. از آنجایی که در سلول‌های خورشیدی، بازتاب و انتقال نور بین لایه‌های مختلف، مکرر رخ می‌دهد و در هر بار زاویه تغییر می‌کند، باید مدل ماتریسی پترسون را فقط بر حسب زاویه تابش به اولین لایه فرمول‌بندی کرد. در روابط ۲-۳ الی ۲-۶ ضرایب فرنل بر حسب زاویه تابش بیان شده‌اند. برای تشکیل دو ماتریس لایه و سطح مشترک در مدل پترسون، دو حالت مختلف را در نظر می‌گیریم. در حالت اول بازتاب‌های مکرر داخل یک لایه و در حالت دوم عبور از لایه‌های مختلف را بررسی می‌کنیم. در حالت اول، همانطور که شکل ۲-۴ نشان می‌دهد، در یک زاویه تابش مشخص به لایه، تمام پرتوهایی که از داخل لایه عبور می‌کنند (چه پرتوهای جلورونده و چه پرتوهای بازگشتی) دارای زاویه ثابت یکسانی نسبت به خط عمود می‌باشند.



شکل ۲-۴: طرح شماتیکی از بازتاب‌های پی‌درپی نور در یک لایه

با استفاده از قانون اسنل می‌توان این زاویه را برای هر لایه، بر حسب زاویه تابش به اولین لایه به صورت زیر بدست آورد:

$$n_i \sin(\theta_i) = n_t \sin(\theta_t) \longrightarrow \sin(\theta_t) = \frac{n_i}{n_t} \sin(\theta_i) \quad 1-4$$

$$n_t \sin(\theta_t) = n_f \sin(\theta_f) \longrightarrow \sin(\theta_f) = \frac{n_t}{n_f} \sin(\theta_t) = \frac{n_i}{n_f} \sin(\theta_i) \quad 2-4$$

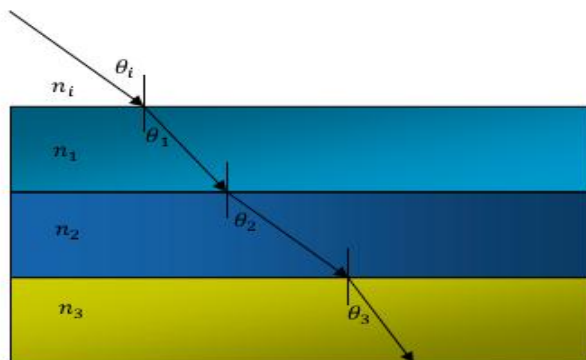
بنابراین برای لایه نوعی ژام داریم:

$$\sin(\theta_j) = \frac{n_i}{n_j} \sin(\theta_i) \quad 3-4$$

حال می‌توان ماتریس لایه را محاسبه کرد. با توجه به اینکه در تابش با زاویه معلوم  $\theta_i$  به سطح سلول، کل پرتوهای عبوری از لایه ژام دارای زاویه ثابت  $\theta_j$  هستند، به راحتی می‌توان با استفاده از رابطه (۳-۴) تغییر فاز ناشی از عبور نور از لایه را به صورت زیر بدست آورد:

$$\beta_j = \frac{2\pi d_j}{\lambda} \tilde{n}_j \cos(\theta_j) = \frac{2\pi d_j}{\lambda} \sqrt{\tilde{n}_j^2 - \tilde{n}_i^2 \sin^2(\theta_i)} \quad 4-4$$

با جایگزاری عبارت فوق در رابطه ۱-۲ ماتریس لایه بدست می‌آید. در حالت دوم، عبور نور از لایه‌های مختلف را بررسی می‌کنیم و مشابه حالت قبل، سعی داریم زاویه فرود نور به هر لایه را بر حسب زاویه تابش به سطح سلول فرمول‌بندی کنیم. در این حالت نیز (طبق شکل ۳-۴) رابطه ۳-۴ صادق است.

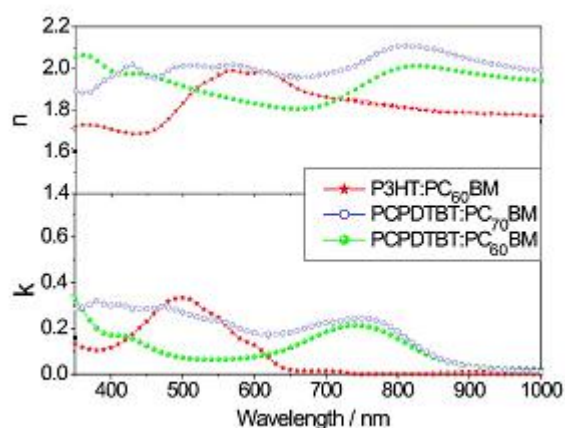


شکل ۳-۴: طرح شماتیکی از عبور نور از چند لایه مختلف

برای محاسبه ماتریس سطح مشترک برای تابش غیر عمود باید ضرایب فرنل برای هر لایه را بر حسب زاویه تابش به سطح سلول بازنویسی کرد. برای اینکار کافی است با استفاده از رابطه ۳-۴ ضرایب فرنل را اصلاح کرد. با استفاده از ماتریس‌های لایه و سطح مشترک بدست آمده، ماتریس انتقال کل را شکل می‌دهیم. مراحل قبل را باید برای هر دو قطبش S و P به طور جداگانه محاسبه کرد.

### ۳-۴ تجزیه و تحلیل نتایج

در این قسمت نتایج حاصل از برنامه کامپیوتری را برای سه ساختار مختلف سلول‌های خورشیدی آلی با پیوندگاه ناهمگون حجمی (BHJ)، در زاویای مختلف تابش و در طول موج ۵۰۰ نانومتر بررسی می‌کنیم و مقدار ضخامت بهینه هر لایه از سلول را در این زوایا بدست می‌آوریم. پروفایل جذب در ضخامت ۰ تا ۴۰۰ نانومتر از لایه فعال محاسبه شده است. اما از آنجایی که ضخامت لایه فعال از نظر الکتریکی محدودیت دارد، بهینه‌سازی در ضخامت ۱۰۰ نانومتری از لایه فعال انجام گرفته است. در شکل ۳-۴ ضریب شکست و ضریب خاموشی هر سه ماده فعال بر حسب طول موج نشان داده شده است.

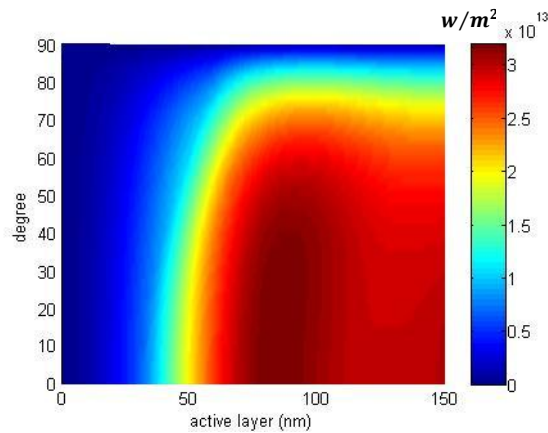


شکل ۳-۴: ضریب شکست و ضریب خاموشی سه ماده فعال آلی

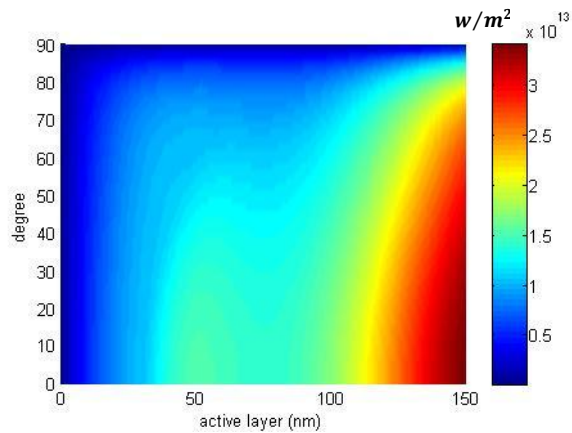
### ۴-۳-۱ ساختار با ماده فعال PC<sub>60</sub>BM:PCPDTBT

در اولین مرحله ساختار سلول به صورت Glass/ITO/PEDOT:PSS/PCPDTBT:PC<sub>60</sub>BM/Al در نظر گرفته شد. برای بررسی اپتیکی این سلول، ابتدا بیشترین جذب ممکن را در ضخامت‌های مختلف لایه فعال (۰ تا ۱۵۰ نانومتر) و در زوایای متفاوت تابش (۰ تا ۹۰ درجه) و به تفکیک برای دو قطبش S و P محاسبه می‌کنیم. شکل‌های ۴-۴ نشان دهنده تغییرات این جذب‌های بیشینه بر حسب ضخامت لایه فعال (محور افقی) و زاویه تابش (محور عمودی) هستند. طبق شکل ۴-۴-ب، بیشینه جذب برای قطبش S در ضخامت ۸۷ نانومتری از لایه فعال و در زاویه تابش ۲۰ درجه رخ می‌دهد و این بیشینه تا زاویه تابش ۵۵ درجه نیز ادامه می‌یابد. در حالی که برای قطبش P (شکل ۴-۴-الف) بیشینه جذب در ضخامت ۱۵۰ نانومتری لایه فعال و در تابش عمود اتفاق می‌افتد اما در این قطبش یک بیشینه جذب کوچکتر در ضخامت ۵۰ نانومتری لایه فعال نیز وجود دارد. شکل ۴-۵ میانگین جذب در دو قطبش S و P را نشان می‌دهد که مشابه قطبش P بیشینه جذب در ضخامت ۱۵۰ نانومتری لایه فعال و در تابش عمود رخ می‌دهد.

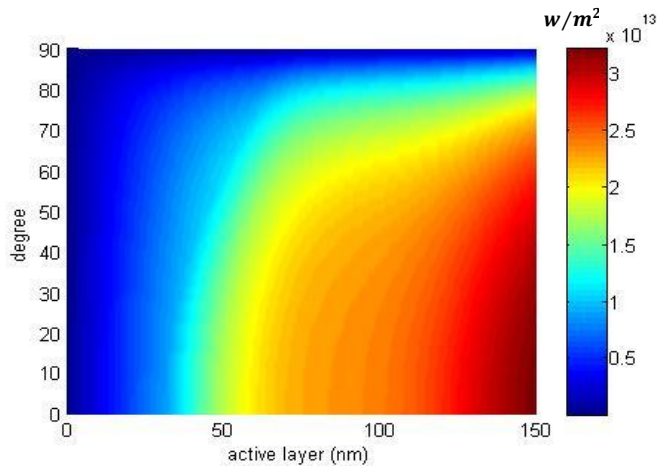
در سلول‌های مخلوطی معمولاً ضخامت لایه‌های ITO و PEDOT:PSS را به ترتیب در حدود ۱۰۰ و ۳۰ نانومتر در نظر می‌گیرند. سلول را با توجه به این ضخامت‌ها در زوایای مختلف تابش بررسی می‌کنیم تا زاویه تابش برای بیشینه جذب مشخص شود (شکل ۴-۶). بیشینه جذب برای قطبش S در ضخامت ۸۸ نانومتری از لایه فعال و در زاویه تابش ۳۸ درجه و در قطبش P در ضخامت ۱۵۰ نانومتری لایه فعال و در زاویه تابش ۵۸ درجه اتفاق می‌افتد که با ضخامت‌های بهینه در شکل ۴-۵ یکسان است اما زاویه تابش بهینه افزایش یافته است.



شکل ۴-۴-ب: تغییرات میزان جذب‌های بیشینه بر حسب ضخامت لایه فعال (محور افقی) و زاویه (محور عمودی) در قطبش S



شکل ۴-۴-الف: تغییرات میزان جذب‌های بیشینه بر حسب ضخامت لایه فعال (محور افقی) و زاویه (محور عمودی) در قطبش P

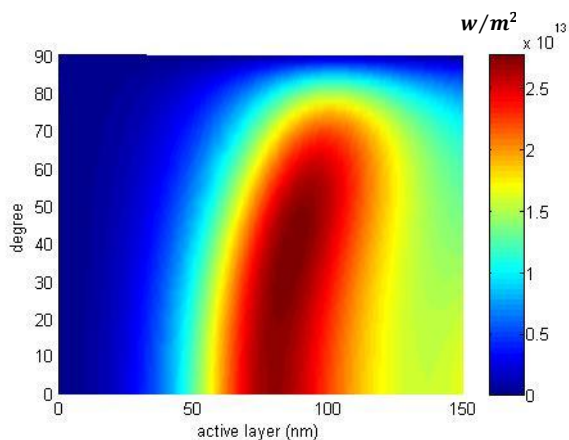


شکل ۴-۵: تغییرات بیشینه میانگین جذب برای دو قطبش بر حسب ضخامت لایه فعال (محور افقی) و زاویه (محور عمودی)

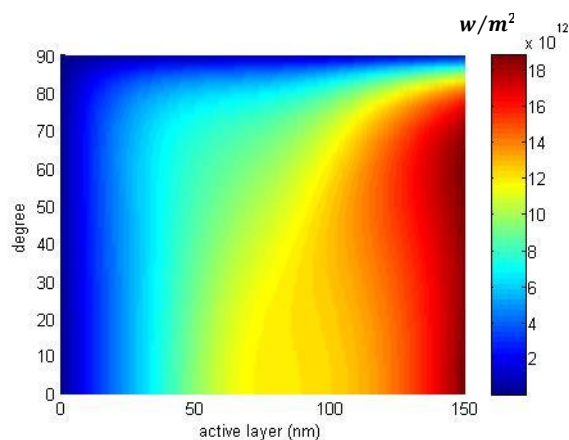
در شکل ۴-۶-ج میانگین جذب در دو قطبش S و P (شکل‌های ۴-۶-الف و ب) رسم شده است.

طبق این شکل بیشینه جذب میانگین برای دو قطبش در ضخامت ۸۸ نانومتری لایه فعال و در زاویه تابش ۳۶ درجه رخ می‌دهد و تا زاویه تقریباً ۶۵ درجه ادامه دارد.

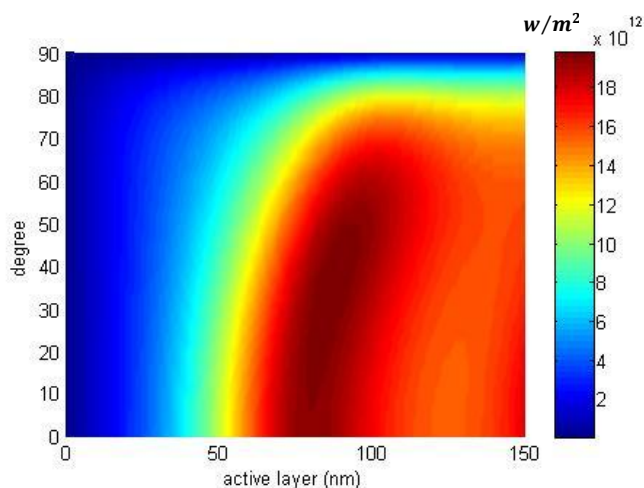




شکل ۴-۶-ب: جذب در قطبش S



شکل ۴-۶-الف: جذب در قطبش P

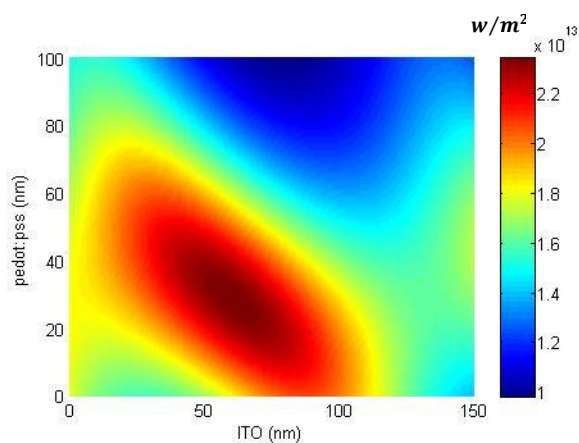


شکل ۴-۶-ج: جذب میانگین دو قطبش

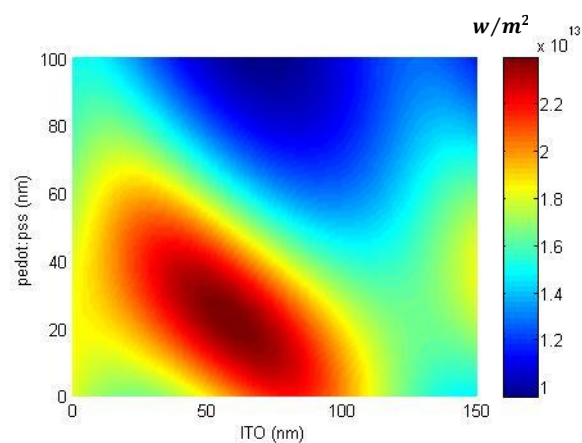
شکل ۴-۶: تغییرات جذب در لایه فعال بر حسب زاویه تابش برای ضخامت ۱۰۰ و ۳۰ نانومتری به ترتیب ITO و PEDOT:PSS

حال به بهینه‌سازی ضخامت لایه‌های سلول در زوایای مختلف تابش می‌پردازیم. بدین منظور چهار زاویه تابش ۰، ۳۰، ۴۵ و ۶۰ درجه را برای بررسی انتخاب می‌کنیم. شکل‌های ۴-۷ میزان جذب در ضخامت ۱۰۰ نانومتری از لایه فعال را به ترتیب در زوایای ۰، ۳۰، ۴۵ و ۶۰ درجه بر حسب ضخامت ITO (محور عمودی) و ضخامت PEDOT:PSS (محور عمودی) نشان می‌دهند. در زاویه تابش صفر درجه (تابش عمود)

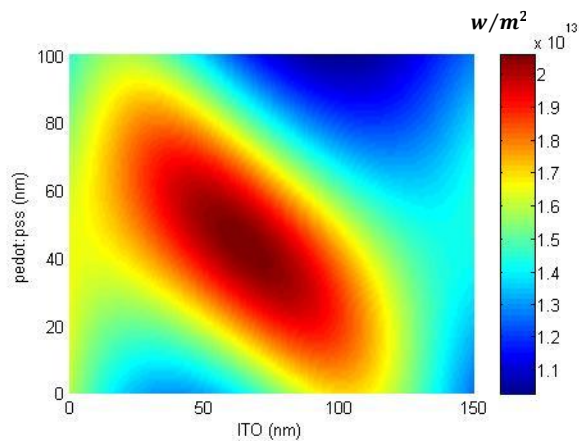
بیشترین جذب مربوط به ضخامت‌های به ترتیب ۶۵ و ۲۴ نانومتری ITO و PEDOT:PSS می‌باشد. طبق شکل نحوه تغییرات میزان جذب در هر چهار زاویه تقریباً یکسان است و بیشینه جذب به صورت یک بیضی مشخص می‌باشد که مکان آن با تغییر زاویه، تغییرات اندکی دارد و به سمت ضخامت‌های بزرگ‌تر لایه‌های ITO و PEDOT:PSS میل می‌کند. اختلاف بین بیشینه و کمینه جذب در هر نمودار مقایسه خوبی برای پی‌بردن به حساسیت سلول به تغییرات ضخامت ITO و PEDOT:PSS می‌باشد.



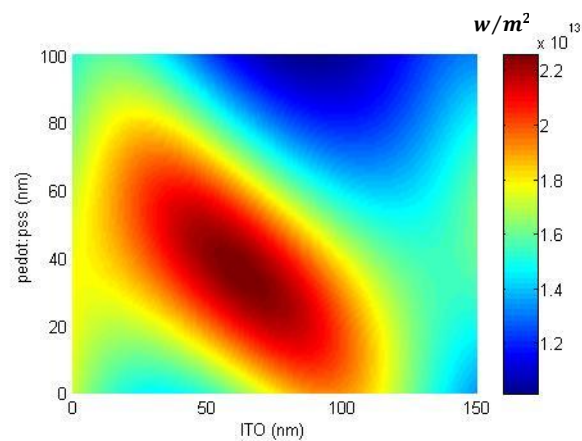
شکل ۴-۷-ب: تابش با زاویه ۳۰ درجه



شکل ۴-۷-الف: تابش عمود



شکل ۴-۷-د: تابش با زاویه ۶۰ درجه



شکل ۴-۷-ج: تابش با زاویه ۴۵ درجه

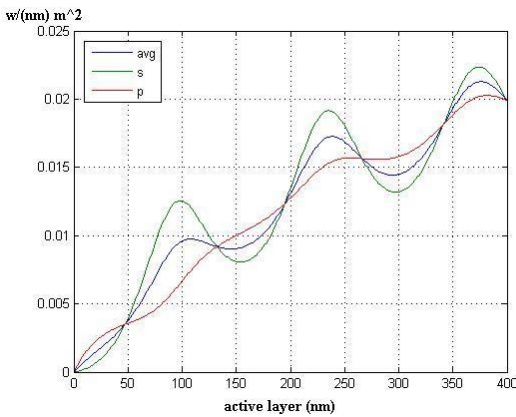
شکل ۴-۷: تغییرات جذب در ضخامت ۱۰۰ نانومتری از لایه فعال برحسب ضخامت‌های ITO و PEDOT:PSS. (الف) تابش عمود، (ب) تابش با زاویه ۳۰ درجه، (ج) تابش با زاویه ۴۵ درجه، (د) تابش با زاویه ۶۰ درجه

در جدول ۱-۴ مقدار بهینه ضخامت لایه‌ها را که برای ضخامت ۱۰۰ نانومتری لایه فعال محاسبه شده‌اند، برای هر چهار زاویه تابش آورده شده است. همانطور که از شکل‌های ۴-۷ مشخص است با افزایش زاویه مقدار بهینه ضخامت لایه‌های ITO و PEDOT:PSS نیز افزایش می‌یابد.

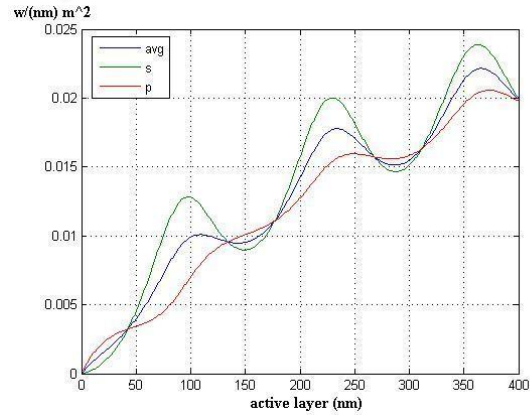
جدول ۱-۴: ضخامت بهینه لایه‌های ITO و PEDOT:PSS در چهار زاویه مختلف تابش

زاویه	۰ درجه	۳۰ درجه	۴۵ درجه	۶۰ درجه
ITO	۶۵	۶۷	۷۰	۷۳
PEDOT:PSS	۲۳	۲۹	۳۵	۴۲

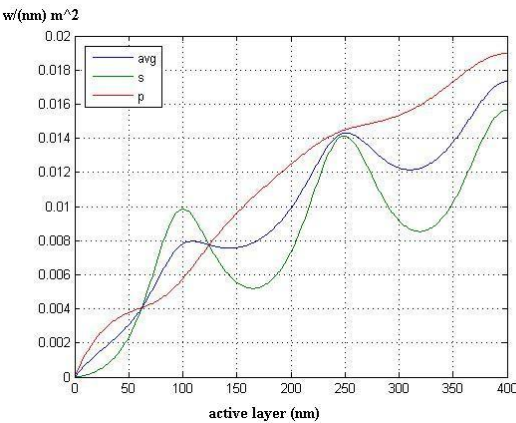
برای بررسی عملکرد سلول در ضخامت‌های بهینه جدول ۱-۴، منحنی تغییرات جذب برای چهار زاویه بالا بر حسب ضخامت لایه فعال و در ضخامت‌های بهینه شده ITO و PEDOT:PSS در شکل‌های ۴-۸ رسم گردیده است. نمودار قرمز رنگ جذب در قطبش P، سبز رنگ جذب در قطبش S و آبی رنگ میانگین جذب برای دو قطبش را نشان می‌دهد. در قطبش S افت و خیزهای بیشتری نسبت به قطبش P وجود دارد.



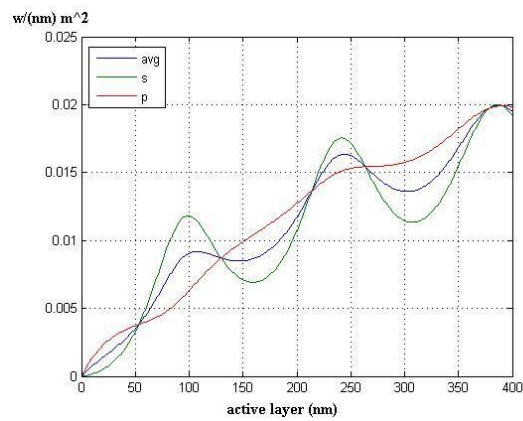
شکل ۴-۸-ب: تابش با زاویه ۳۰ درجه



شکل ۴-۸-الف: تابش عمود



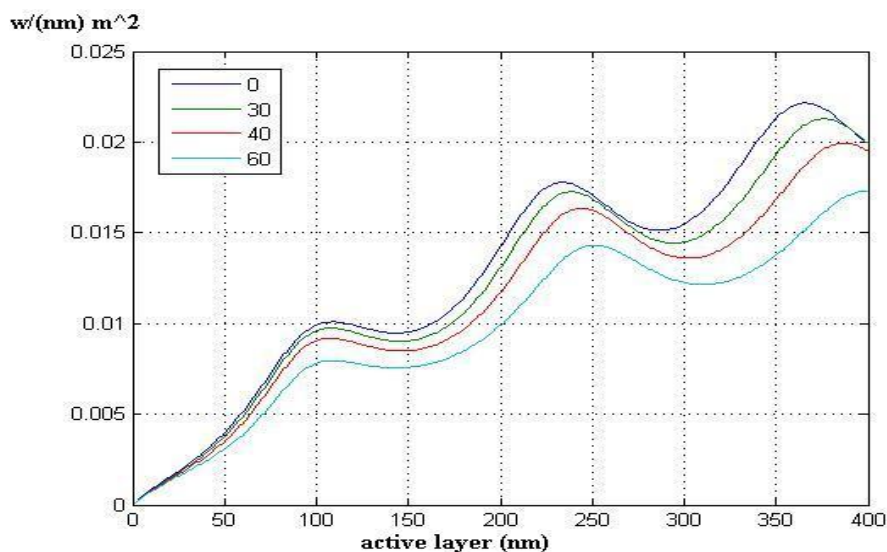
شکل ۴-۸-د: تابش با زاویه ۶۰ درجه



شکل ۴-۸-ج: تابش با زاویه ۴۵ درجه

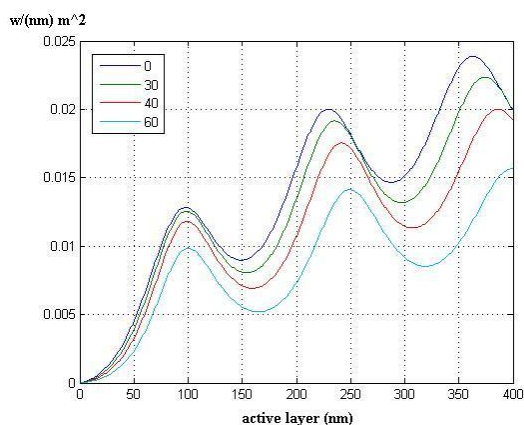
شکل ۴-۸: منحنی جذب در چهار زاویه مختلف تابش در ضخامت بهینه شده هر زاویه و بر حسب ضخامت لایه فعال

از شکل‌های ۴-۸ مشخص است که با افزایش زاویه سهم قطبش P در جذب افزایش می‌یابد به گونه‌ای که در تابش ۶۰ درجه از ضخامت ۵۰ نانومتر به بعد منحنی جذب در قطبش S به طور کامل در زیر منحنی جذب در قطبش P قرار می‌گیرد اما در کل با افزایش زاویه میزان جذب کاهش می‌یابد. برای مقایسه بهتر جذب در هر چهار زاویه، منحنی جذب میانگین دو قطبش که در شکل ۴-۸ با رنگ آبی مشخص شده بود، به طور همزمان در شکل ۴-۹ رسم گردیده است.

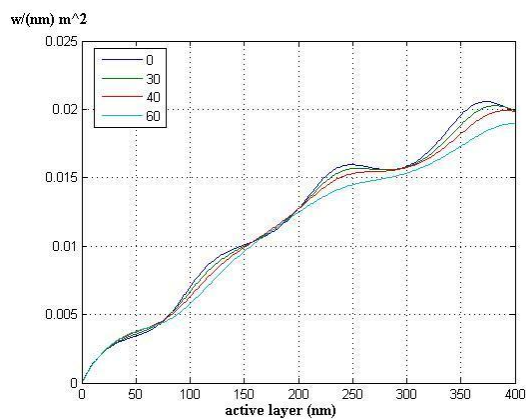


شکل ۴-۹: منحنی جذب میانگین برای چهار زاویه و در ضخامت‌های بهینه بر حسب ضخامت لایه فعال

در این ساختار، جذب میانگین در تابش عمود بالاترین مقدار را دارد. در ضخامت‌های کمتر از ۵۰ نانومتر از لایه فعال منحنی‌های جذب تقریباً بر هم منطبق هستند. برای این ماده فعال آلی، حتی تا زاویه ۳۰ درجه اختلاف فاحشی در جذب در ضخامت‌های کوچک لایه فعال وجود ندارد. به طور مشابه، شکل‌های ۴-۱۰ میزان جذب در دو مد TE و TM را نشان می‌دهد.

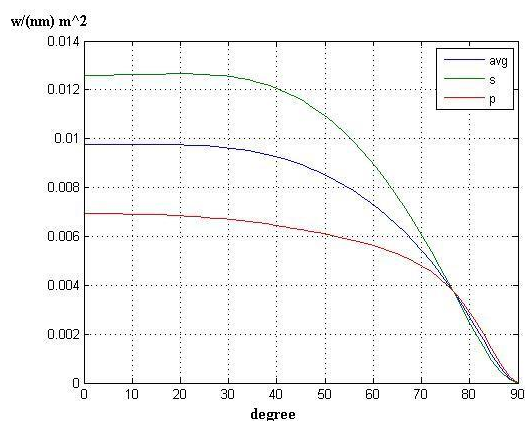


شکل ۴-۱۰-ب: منحنی جذب در قطبش S در ضخامت ۱۰۰ نانومتری از لایه فعال و برای چهار زاویه

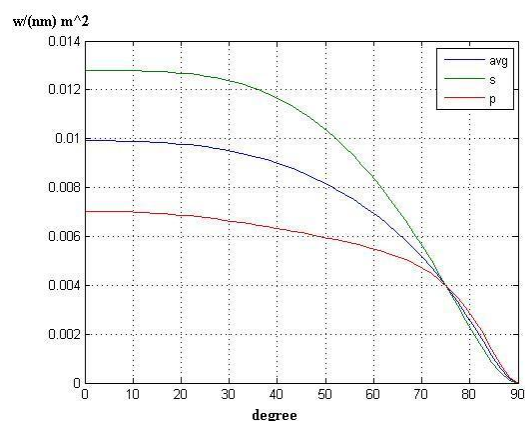


شکل ۴-۱۰-الف: منحنی جذب در قطبش P در ضخامت ۱۰۰ نانومتری از لایه فعال و برای چهار زاویه

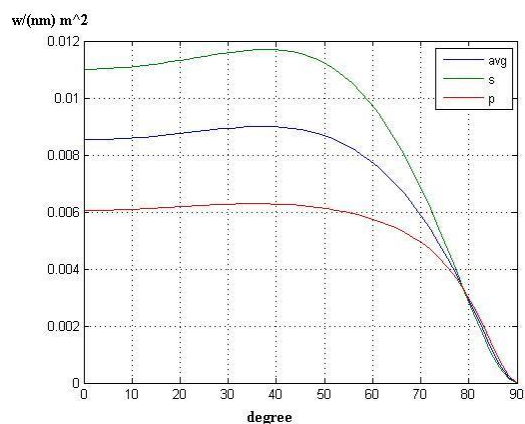
در قطبش P منحنی‌های جذب تقریباً بر هم منطبق هستند و در زوایای مختلف جذب یکسانی را نتیجه می‌دهند. اما در قطبش S فاصله منحنی‌ها از هم قابل توجه است. می‌توان نتیجه گرفت که تابش در زوایای گوناگون اثر کمتری بر قطبش P دارد. برای مشاهده چگونگی تغییرات جذب با افزایش زاویه تابش، منحنی جذب در ضخامت‌های بهینه جدول ۴-۱ و در ضخامت ۱۰۰ نانومتری لایه فعال را بر حسب زاویه تابش در شکل ۴-۱۱ رسم کرده‌ایم.



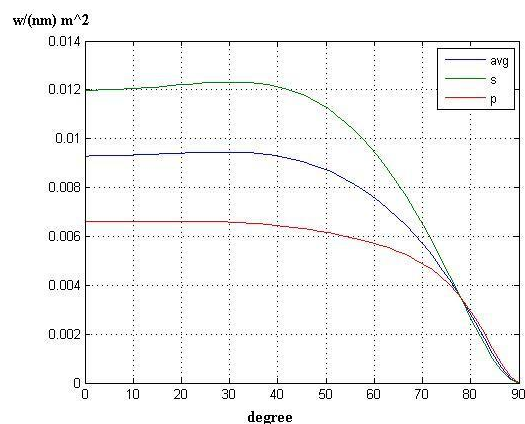
شکل ۴-۱۱-ب: منحنی جذب برحسب زاویه تابش در ضخامت ۱۰۰ نانومتری لایه فعال و در ضخامت بهینه شده تابش با زاویه ۳۰ درجه



شکل ۴-۱۱-الف: منحنی جذب برحسب زاویه تابش در ضخامت ۱۰۰ نانومتری لایه فعال و در ضخامت بهینه شده تابش عمود



شکل ۴-۱۱-د: منحنی جذب برحسب زاویه تابش در ضخامت ۱۰۰ نانومتری لایه فعال و در ضخامت بهینه شده تابش با زاویه ۶۰ درجه



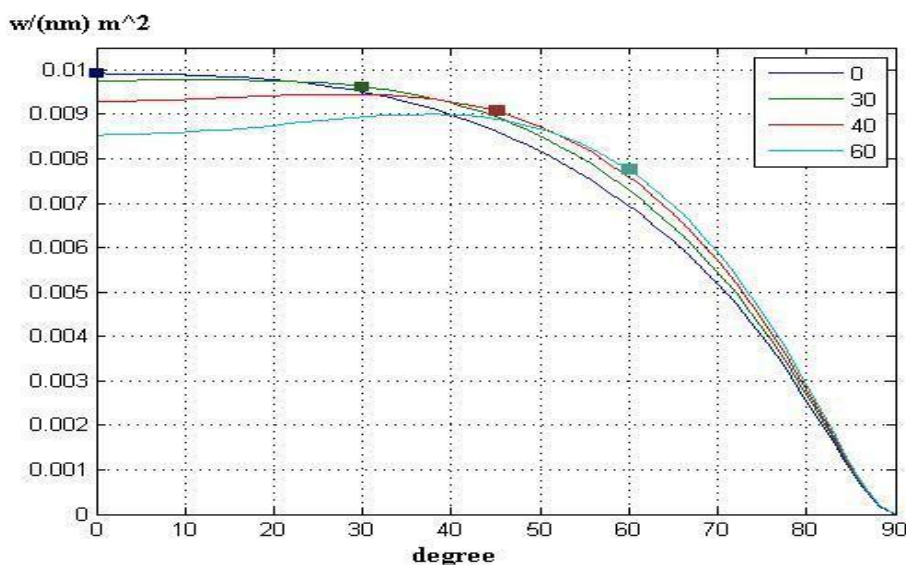
شکل ۴-۱۱-ج: منحنی جذب برحسب زاویه تابش در ضخامت ۱۰۰ نانومتری لایه فعال و در ضخامت بهینه شده تابش با زاویه ۴۵ درجه

در شکل‌های ۴-۱۱ نحوه تغییر میزان جذب در چهار ضخامت بهینه شده ITO و PEDOT:PSS نشان داده شده‌اند. نمودار سبز رنگ جذب در قطبش S، قرمز رنگ جذب در قطبش P و آبی رنگ میانگین دو قطبش را نشان می‌دهد. مشاهده می‌کنیم که در هر نمودار، جذب در قطبش S بیشتر از قطبش P می‌باشد. برای منحنی که در تابش عمود بهینه شده است (شکل ۴-۱۱-الف)، میزان جذب با



افزایش زاویه، سریع تر از سایر نمودارها کاهش می یابد. در حالی که برای نمودار بهینه شده در زاویه ۶۰ درجه جذب با افزایش زاویه کاهش قابل توجهی نمی یابد. در این نمودار بیشینه جذب در زاویه ۳۸ درجه رخ می دهد (شکل ۴-۱۱-د).

در شکل ۴-۱۲ میانگین جذب دو قطبش برای هر چهار زاویه که در شکل ۴-۱۱ با رنگ آبی نشان داده شده بود، به طور همزمان آورده شده است. میزان جذب بر حسب زاویه، در هر یک از نقاط بهینه شده مربوط به چهار زاویه (جدول ۴-۱) نشان داده شده است. زوایای بهینه شده با علامت مربع در نمودار مربوطه مشخص شده اند. طبق شکل، بیشینه جذب در هر یک از چهار زاویه مربوط به نموداری است که در ضخامت های بهینه شده در آن زاویه رسم شده است.



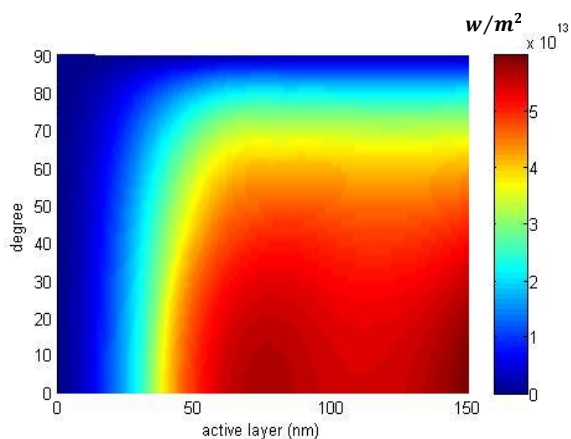
شکل ۴-۱۲: منحنی جذب میانگین بر حسب زاویه تابش در ضخامت ۱۰۰ نانومتری لایه فعال و ضخامت های بهینه شده ITO و PEDOT:PSS در چهار زاویه تابش

#### ۴-۳-۲ ساختار با ماده فعال PCPDTBT:PC<sub>70</sub>BM

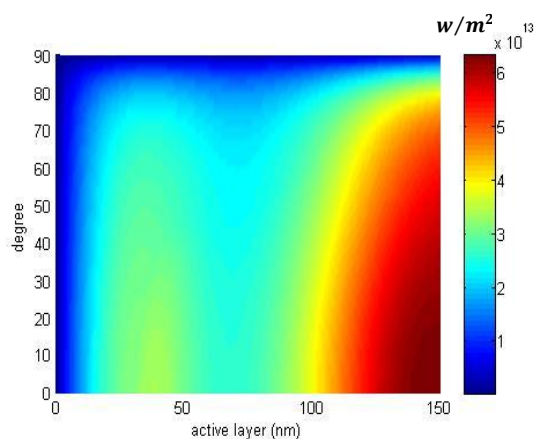
در این مرحله ساختار سلول به صورت glass/ITO/PEDOT:PSS/PCPDTBT:PC<sub>70</sub>BM/Al



نظر گرفته شده است. در شکل ۴-۱۳ بیشینه جذب ممکن، در هر ضخامت از لایه فعال و زاویه تابش، برای دو قطبش S و P رسم شده است. در قطبش S دو بیشینه جذب، یکی در ۸۰ نانومتری و دیگری در ۱۵۰ نانومتری از ضخامت لایه فعال و در تابش عمود وجود دارد و تا زاویه حدوداً ۳۰ درجه جذب بالایی را موجب می‌شوند. در ضخامت‌های کوچک‌تر از ۱۰۰ نانومتری لایه فعال برای قطبش P جذب کمتری را نسبت به قطبش S شاهد هستیم. در واقع قطبش S در ضخامت‌های کوچک‌تر لایه فعال به بیشینه خود می‌رسد. بیشینه جذب در قطبش P به ضخامت ۱۴۷ نانومتری لایه فعال و تابش عمود مربوط می‌باشد. شکل ۴-۱۴ میانگین دو قطبش را نشان می‌دهد.

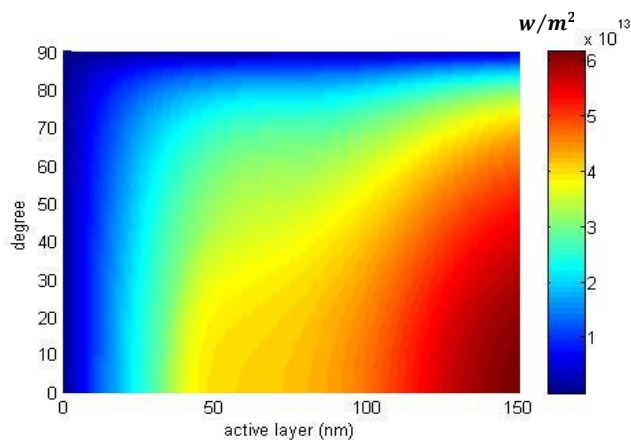


شکل ۴-۱۳- ب: جذب در قطبش S



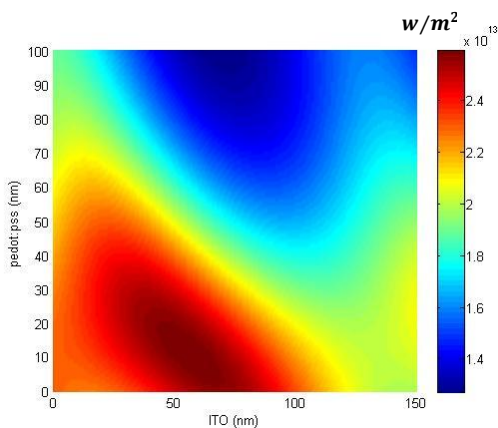
شکل ۴-۱۳- الف: جذب در قطبش P

شکل ۴-۱۳: تغییرات بیشینه جذب بر حسب ضخامت لایه فعال (محور افقی) و زاویه (محور عمودی)

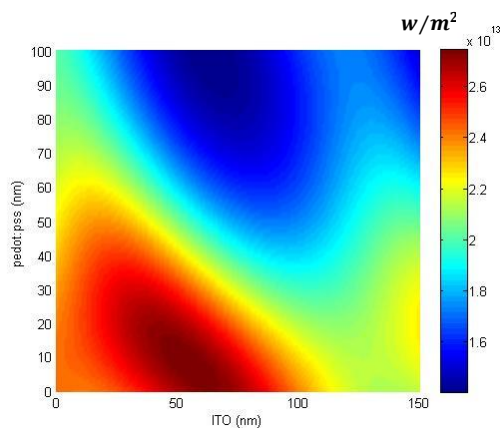


شکل ۴-۱۴: تغییرات بیشینه میانگین جذب در دو قطبش بر حسب ضخامت لایه فعال (محور افقی) و زاویه (محور عمودی)

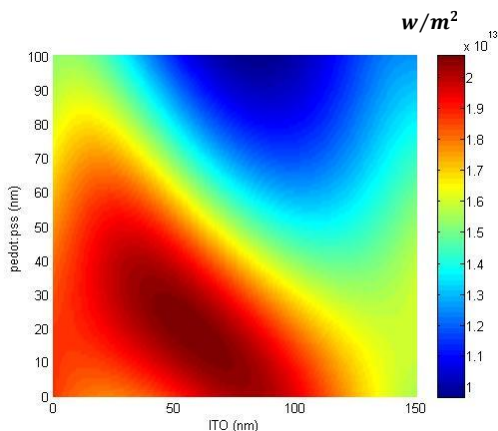
برای بهینه‌سازی سلول، مانند سلول اول، بیشینه جذب را در ضخامت ۱۰۰ نانومتری لایه فعال و در چهار زاویه ۰، ۳۰، ۴۵ و ۶۰ درجه محاسبه می‌کنیم. شکل‌های ۴-۱۵ تغییرات جذب میانگین در هر چهار زاویه تابش را بر حسب ضخامت دو ماده دیگر نشان می‌دهند. همچنین از محدوده تغییرات جذب در هر نمودار می‌توان به حساسیت سلول نسبت به تغییر ضخامت دو لایه ITO و PEDOT:PSS نیز پی برد.



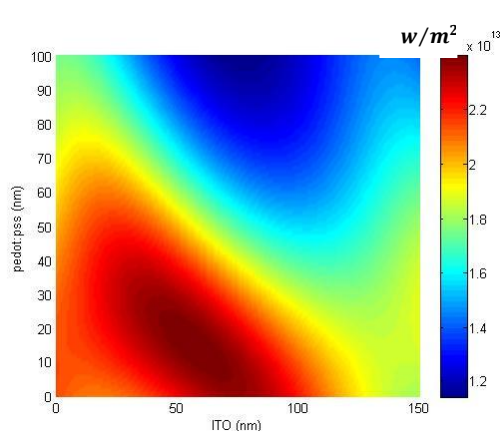
شکل ۴-۱۵-ب: تابش با زاویه ۳۰ درجه



شکل ۴-۱۵-الف: تابش عمود



شکل ۴-۱۵-د: تابش با زاویه ۶۰ درجه



شکل ۴-۱۵-ج: تابش با زاویه ۴۵ درجه

شکل ۴-۱۵: تغییرات جذب در ضخامت ۱۰۰ نانومتری از لایه فعال بر حسب ضخامت‌های ITO و PEDOT:PSS

مشخص است که با افزایش زاویه تابش، جذب میانگین کاهش می‌یابد. اما در تمام زوایا، سلول نسبت به

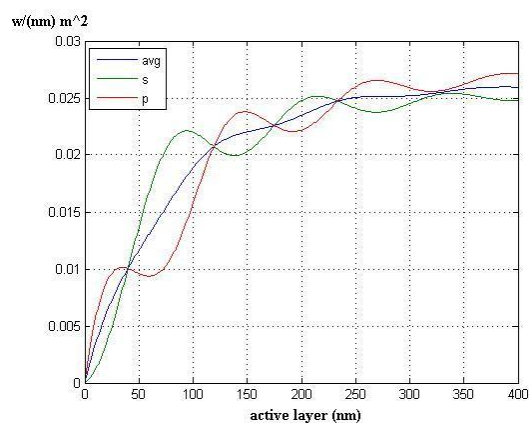
تغییرات ضخامت لایه‌های ITO و PEDOT:PSS حساسیت زیادی ندارد. نحوه تغییرات جذب میانگین در هر چهار زاویه شبیه هم می‌باشد و فقط اختلاف اندکی در مکان بیشینه جذب رخ می‌دهد. جدول ۲-۴ ضخامت بهینه دو لایه ITO و PEDOT:PSS که بیشینه جذب در آنجا اتفاق می‌افتد را نشان می‌دهد.

جدول ۲-۴: ضخامت بهینه شده لایه‌های ITO و PEDOT:PSS در ضخامت ۱۰۰ نانومتری لایه فعال و در چهار زاویه مختلف تابش

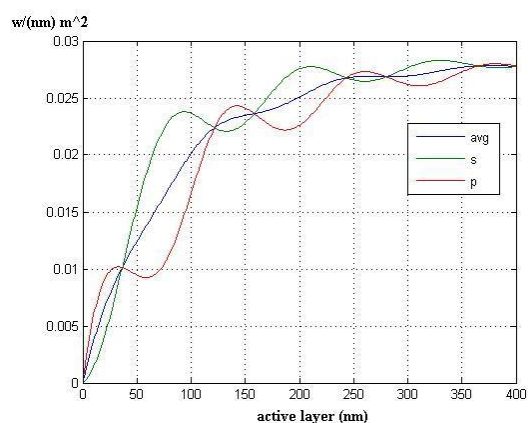
زاویه	۰ درجه	۳۰ درجه	۴۵ درجه	۶۰ درجه
ITO	۶۴	۶۶	۶۷	۶۸
PEDOT:PSS	۹	۱۲	۱۵	۱۹

همانطور که مشخص است با افزایش زاویه تابش موقعیت بیشینه جذب نیز به سمت ضخامت‌های بزرگ‌تر حرکت می‌کند.

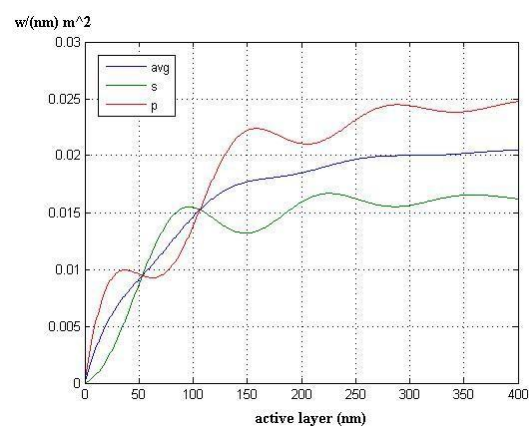
در شکل‌های ۴-۱۶ منحنی تغییرات جذب در هر یک از ضخامت‌های جدول ۲-۴ و در زاویه تابش مربوطه و به تفکیک دو قطبش رسم شده است. طبق این شکل، در هر چهار زاویه، بیشینه (کمینه) جذب در قطبش S و کمینه (بیشینه) جذب در قطبش P در ضخامت یکسانی از لایه فعال رخ می‌دهد. در زوایای تابش کم و در ضخامت‌های زیاد از لایه فعال، این اختلاف اندک می‌باشد. همچنین در زوایای کم سهم قطبش S در جذب میانگین غالب‌تر می‌باشد اما با افزایش زاویه، قطبش P جذب بیشتری را نسبت به قطبش S (بخصوص در ضخامت‌های بزرگ لایه فعال) موجب می‌شود.



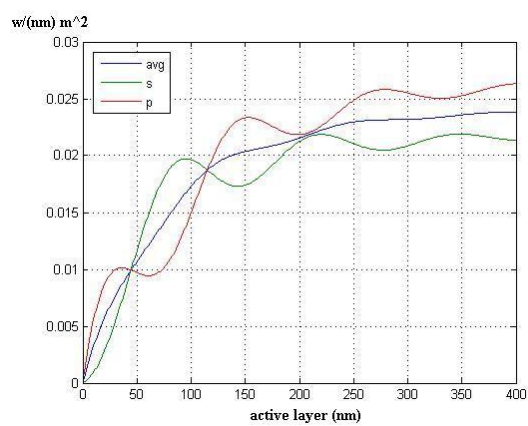
شکل ۴-۱۶-ب: تابش در زاویه ۳۰ درجه



شکل ۴-۱۶-الف: تابش عمود



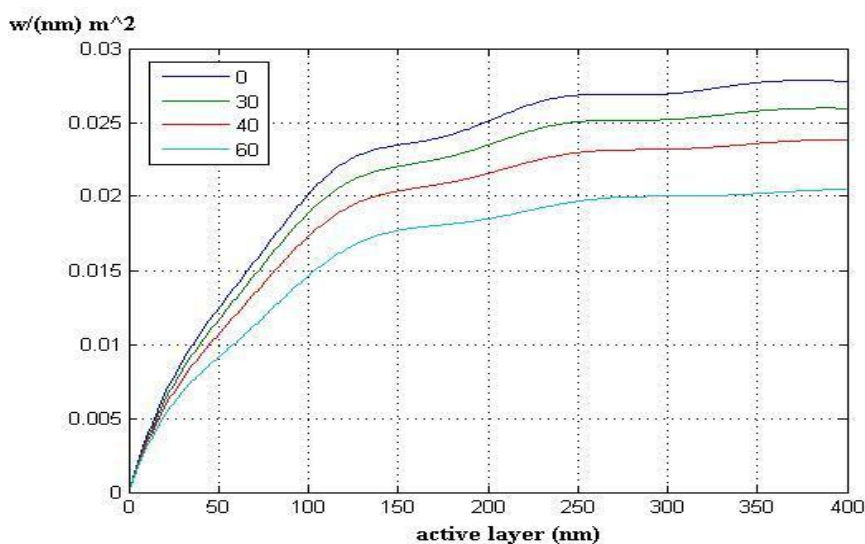
شکل ۴-۱۶-د: تابش در زاویه ۶۰ درجه



شکل ۴-۱۶-ج: تابش در زاویه ۴۵ درجه

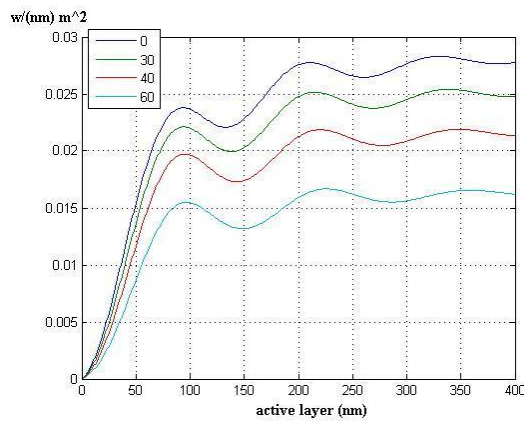
شکل ۴-۱۶: منحنی جذب در چهار زاویه مختلف تابش در ضخامت بهینه شده هر زاویه و بر حسب ضخامت لایه فعال

در شکل ۴-۱۷ میانگین جذب در هر چهار زاویه که در شکل‌های بالا با رنگ آبی مشخص شده بود، آورده شده است.

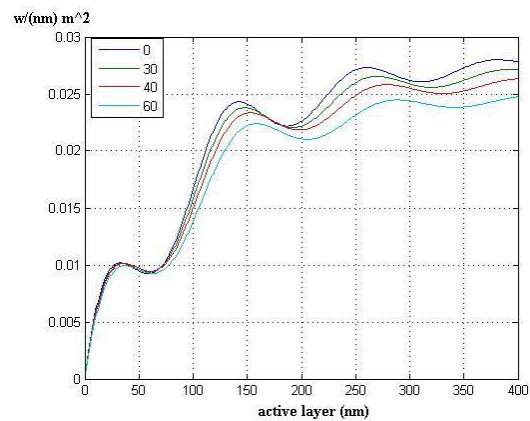


شکل ۴-۱۷: منحنی جذب میانگین در چهار زاویه تابش بر حسب ضخامت لایه فعال

جذب در این ماده فعال نسبت به افزایش زاویه تابش، بر خلاف ماده فعال ساختار قبل، کاهش بیشتری دارد اما در این ساختار نسبت به ساختار قبل جذب بیشتری در ضخامت‌های یکسان لایه فعال رخ می‌دهد. بعلاوه منحنی جذب میانگین افت و خیز اندکی دارد و تقریباً به طور پیوسته با افزایش ضخامت لایه فعال افزایش می‌یابد. اما از ضخامت ۲۵۰ نانومتری لایه فعال، با افزایش ضخامت، افزایش جذب چندانی را شاهد نیستیم. مشابه شکل قبل، در شکل ۴-۱۸ جذب در دو قطبش S و P در چهار زاویه تابش و ساختار بهینه شده هر زاویه رسم شده است. همانطور که قبلاً اشاره شد و شکل‌های ۴-۱۸ نیز نشان می‌دهند، افزایش زاویه تابش، اثر کمتری بر جذب در قطبش P دارد به گونه‌ای که می‌توان گفت در ضخامت‌های کم لایه فعال، افزایش زاویه تابش در جذب بی‌تاثیر می‌باشد، در حالی که برای قطبش S با افزایش زاویه، جذب، کاهش چشم‌گیری دارد.

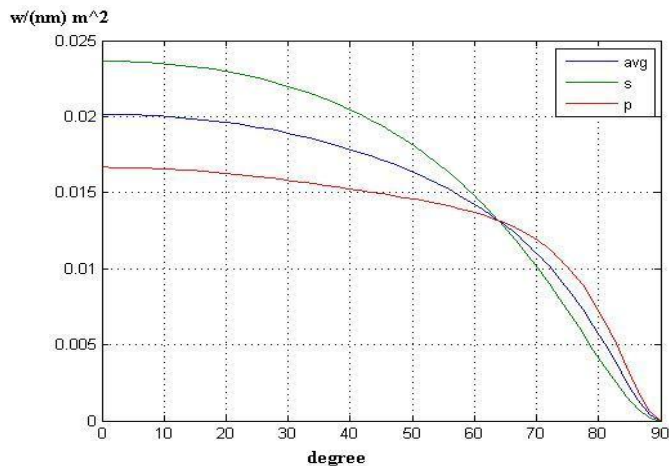


شکل ۴-۱۸- الف: جذب در قطبش S



شکل ۴-۱۸- الف: جذب در قطبش P

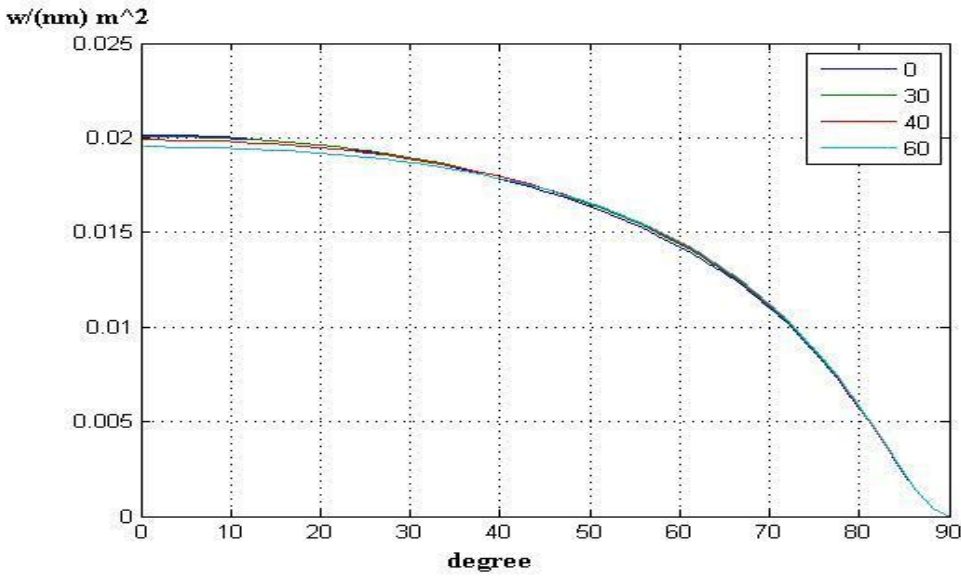
شکل ۴-۱۸: جذب در چهار زاویه مختلف تابش به تفکیک دو قطبش S و P



شکل ۴-۱۹: منحنی جذب بر حسب زاویه تابش در ضخامت‌های بهینه شده

در تابش عمود و ضخامت ۱۰۰ نانومتری لایه فعال

در شکل ۴-۱۹ چگونگی تغییرات جذب در دو قطبش S و P و همچنین در میانگین دو قطبش در ضخامت بهینه شده سلول در تابش عمود و در ضخامت ۱۰۰ نانومتری لایه فعال بر حسب زاویه تابش نمایش داده شده است. همانطور که از شکل ۴-۱۹ مشخص است تا زاویه ۶۴ درجه جذب در قطبش S بیشتر از قطبش P می‌باشد.

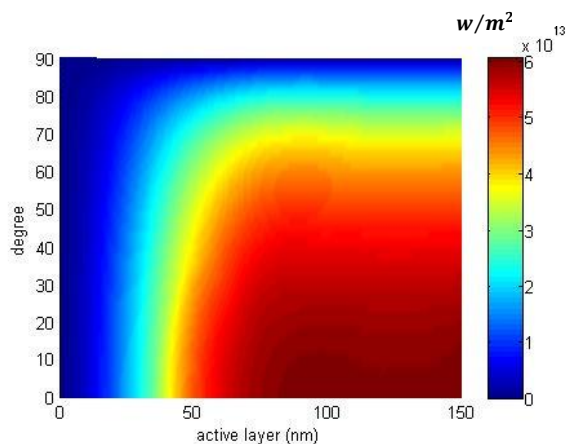


شکل ۲۰-۴: منحنی جذب میانگین بر حسب زاویه در ضخامت‌های بهینه شده جدول ۲-۴

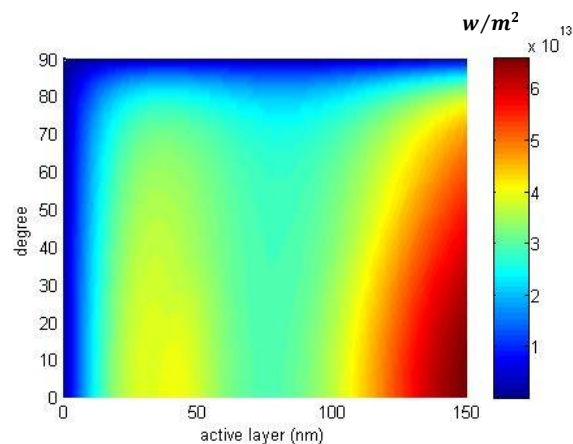
اگر میانگین جذب (نمودار آبی رنگ در شکل ۴-۱۹) در هر چهار زاویه را باهم در نظر بگیریم به شکل ۲۰-۴ می‌رسیم. در شکل ۲۰-۴ تغییرات میانگین جذب دو قطبش و در چهار ضخامت بهینه شده در جدول ۲-۴ و در ضخامت ۱۰۰ نانومتری لایه فعال بر حسب زاویه رسم شده است. در این شکل نمودارها بر هم منطبق هستند و این بدان معنی است که ساختار نسبت به تغییر ضخامت لایه‌های ITO و PEDOT:PSS حساسیت زیادی ندارد.

#### ۳-۳-۴ ساختار با ماده فعال P3HT:PC<sub>60</sub>BM

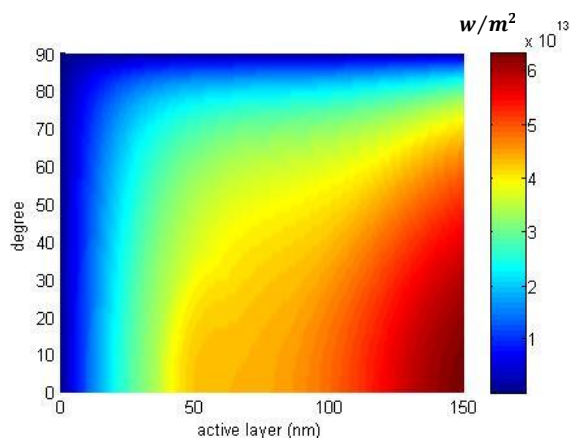
ساختار سلول مورد بررسی به صورت Glass/ITO/PEDOT:PSS/P3HT:PC<sub>60</sub>BM/Al می‌باشد. بیشینه جذب ممکن در هر یک از ضخامت صفر تا ۱۵۰ نانومتر لایه فعال و در زوایای صفر تا ۹۰ درجه تابش برای هر دو قطبش S و P و میانگین آن‌ها در شکل ۲۱-۴ رسم شده است.



شکل ۴-۲۱-ب: جذب در قطبش S



شکل ۴-۲۱-الف: جذب در قطبش P

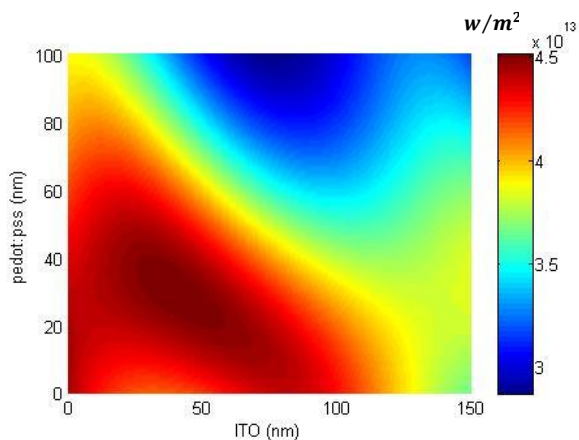


شکل ۴-۲۱-ج: میانگین جذب در دو قطبش

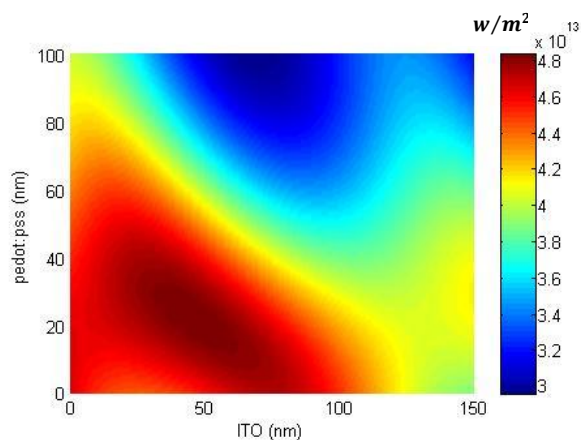
شکل ۴-۲۱: تغییرات بیشینه جذب بر حسب ضخامت لایه فعال (محور افقی) و زاویه (محور عمودی)

بیشینه جذب برای قطبش S از ضخامت ۸۵ نانومتری لایه فعال شروع می‌شود و تا زاویه تقریباً ۴۰ درجه ادامه دارد. برای قطبش P یک بیشینه نسبی در ضخامت ۴۰ نانومتری لایه فعال و یک بیشینه مطلق در ضخامت ۱۵۰ نانومتری لایه فعال مشاهده می‌شود. جذب میانگین دو قطبش نیز در ضخامت ۱۵۰ نانومتری لایه فعال و از زاویه صفر تا ۲۵ درجه دارای جذب بالایی می‌باشد. در شکل ۴-۲۲ تغییرات میانگین جذب دو قطبش در چهار زاویه بر حسب ضخامت لایه‌های ITO و PEDOT:PSS رسم شده است.

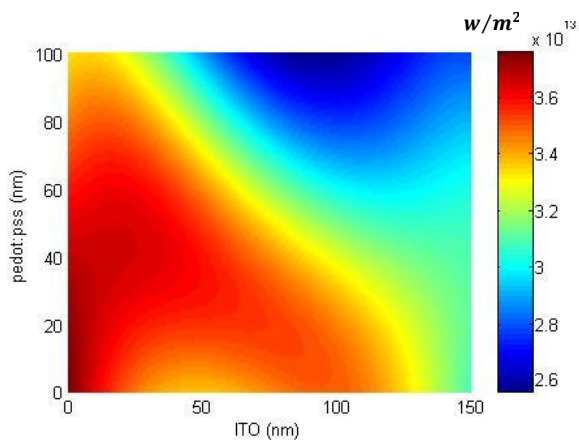




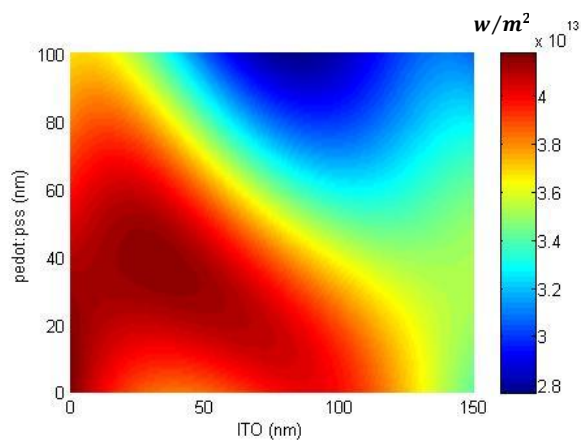
شکل ۴-۲۲-ب: تابش با زاویه ۳۰ درجه



شکل ۴-۲۲-الف: تابش عمود



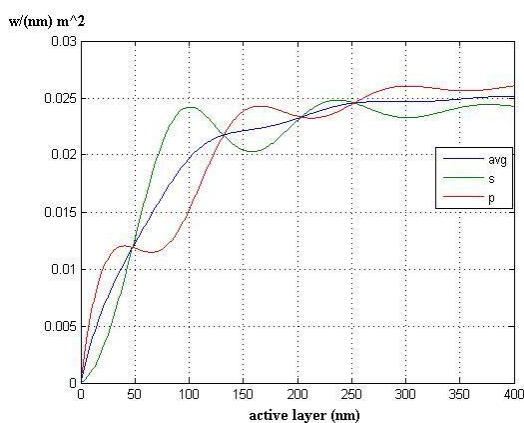
شکل ۴-۲۲-د: تابش با زاویه ۶۰ درجه



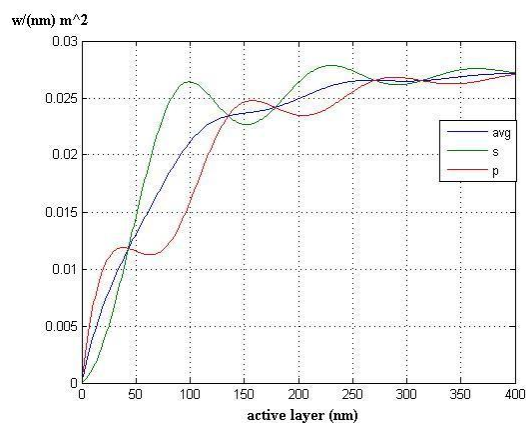
شکل ۴-۲۲-ج: تابش با زاویه ۴۵ درجه

شکل ۴-۲۲: تغییرات جذب در ضخامت ۱۰۰ نانومتری از لایه فعال بر حسب ضخامت‌های ITO و PEDOT:PSS

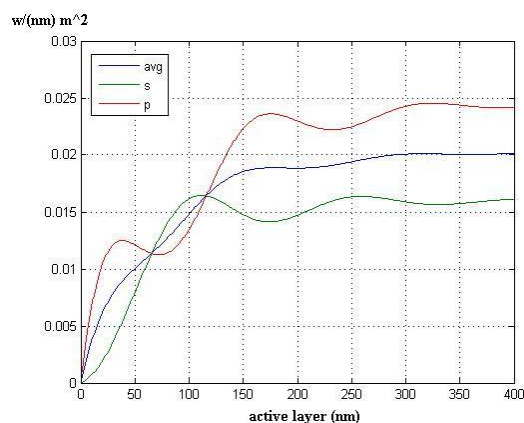
در تابش عمود بیشینه جذب به ضخامت‌های ۵۲ و ۲۱ نانومتر از لایه‌های ITO و PEDOT:PSS مربوط می‌شود. با افزایش زاویه ناحیه قرمز رنگ که جذب بالایی را نشان می‌دهد افزایش می‌یابد اما بیشینه جذب به سمت ضخامت‌های کم ITO و زیاد PEDOT:PSS میل می‌کند. برای بررسی منحنی جذب در هر یک از چهار زاویه تابش، با توجه به دو ساختار قبل، ضخامت لایه‌های ITO و PEDOT:PSS را به ترتیب ۶۰ و ۲۰ در نظر می‌گیریم. در این صورت شکل ۴-۲۳ منحنی جذب را بر حسب ضخامت لایه فعال نشان می‌دهد.



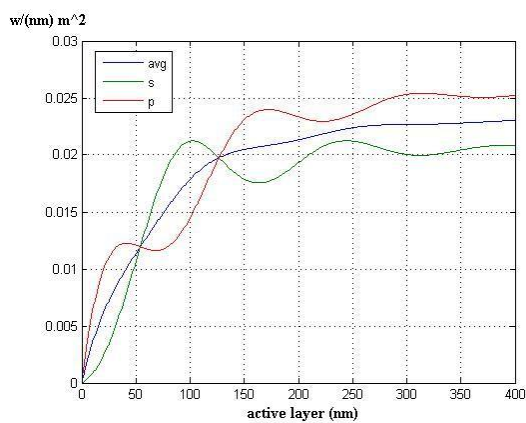
شکل ۴-۲۳-ب: تابش در زاویه ۳۰ درجه



شکل ۴-۲۳-الف: تابش عمود



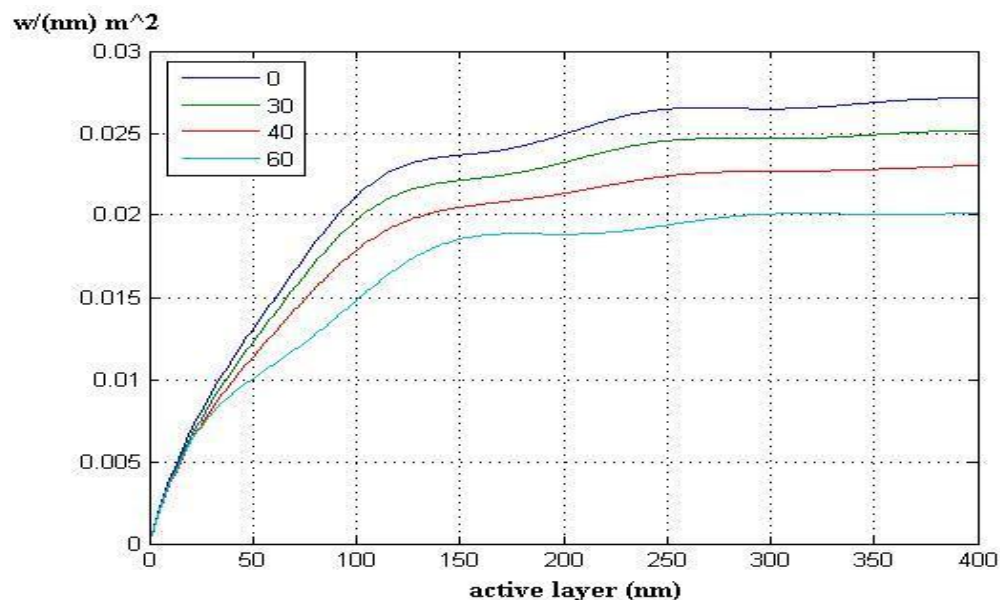
شکل ۴-۲۳-د: تابش در زاویه ۶۰ درجه



شکل ۴-۲۳-ج: تابش در زاویه ۴۵ درجه

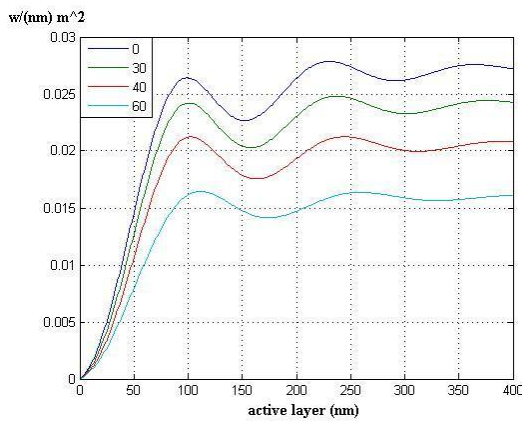
شکل ۴-۲۳: منحنی جذب در چهار زاویه مختلف تابش در ضخامت بهینه شده هر زاویه و بر حسب ضخامت لایه فعال

شکل‌های ۴-۲۳ نشان می‌دهد که افزایش زاویه تابش، باعث کاهش شدید جذب در قطبش S می‌شود اما تاثیر کمتری بر قطبش P دارد. این امر کاهش جذب در قطبش S را جبران می‌کند و موجب می‌شود که جذب میانگین دو قطبش کاهش کمتری داشته باشد. همچنین در تمام زوایای مورد بررسی بیشینه جذب در یکی از دو قطبش با کمینه جذب در دیگری باهم اتفاق می‌افتد که این امر نیز باعث می‌شود تا جذب میانگین افت و خیز کمی داشته باشد و تقریباً بطور پیوسته با افزایش ضخامت لایه فعال افزایش یابد. در شکل ۴-۲۴ میانگین جذب در هر چهار زاویه باهم رسم شده است.

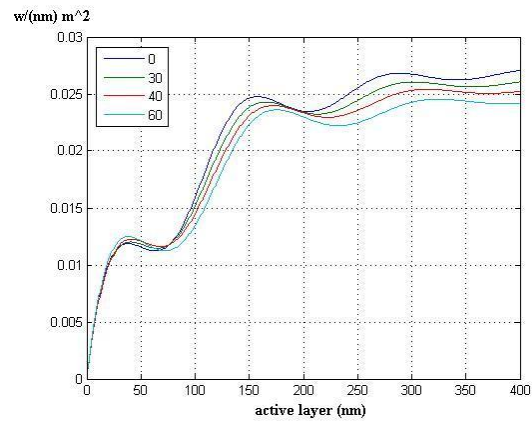


شکل ۴-۲۴: منحنی جذب میانگین در چهار زاویه تابش بر حسب ضخامت لایه فعال

با توجه به شکل ۴-۲۴ در هر چهار زاویه، از ضخامت تقریباً ۲۵۰ نانومتری لایه فعال، با افزایش ضخامت، جذب میانگین دو قطبش افزایش نمی‌یابد و به حد اشباع خود رسیده است. به طور مشابه در شکل ۴-۲۵ جذب در دو قطبش S و P نشان داده شده است. شکل ۴-۲۵ الف نشان می‌دهد که برای این ماده فعال نیز افزایش زاویه تابش، اثر کمی بر جذب نور با قطبش P دارد و کاهش جذب میانگین در زوایای تابش غیر عمود، ناشی از کاهش جذب در قطبش S می‌باشد. اما در ضخامت‌های کم لایه فعال این کاهش ناچیز می‌باشد. نکته جالب توجه این است که حتی تا زاویه ۶۰ درجه که زاویه بزرگی محسوب می‌شود، شاهد جذبی به مقدار ۵۰ درصد جذب در تابش عمود هستیم. در واقع با افزایش زاویه تابش، کاهش جذب تا زاویه ۶۰ درجه به آهستگی صورت می‌پذیرد اما بعد از این زاویه، مقدار جذب به سرعت به مقدار صفر نزدیک می‌شود.

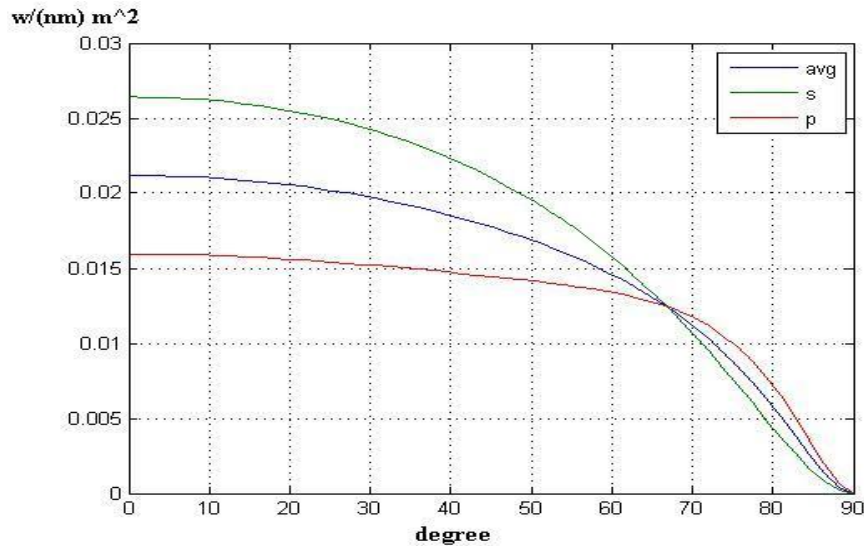


شکل ۴-۲۵- ب: جذب در قطبش S



شکل ۴-۲۵- الف: جذب در قطبش P

شکل ۴-۲۵: جذب در چهار زاویه مختلف تابش به تفکیک دو قطبش S و P



شکل ۴-۲۶: منحنی جذب بر حسب زاویه تابش در ضخامت‌های ۲۰، ۶۰ و ۱۰۰ نانومتری لایه‌های

۱۰۰ نانومتری لایه‌های PEDOT:PSS,ITO و لایه فعال

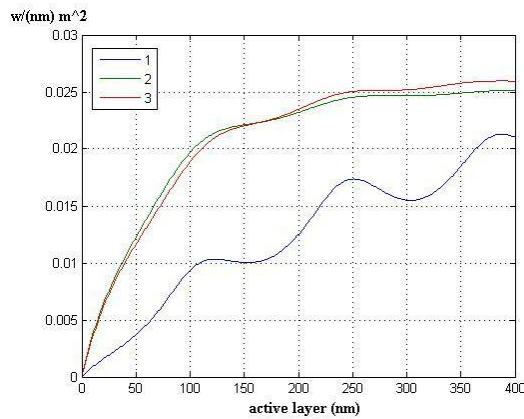
در شکل ۴-۲۶ چگونگی تغییرات جذب در ضخامت‌های ۲۰، ۶۰ و ۱۰۰ نانومتری لایه‌های

ITO PEDOT:PSS و لایه فعال بر حسب زاویه تابش رسم شده است. در زاویه تابش صفر درجه، جذب در

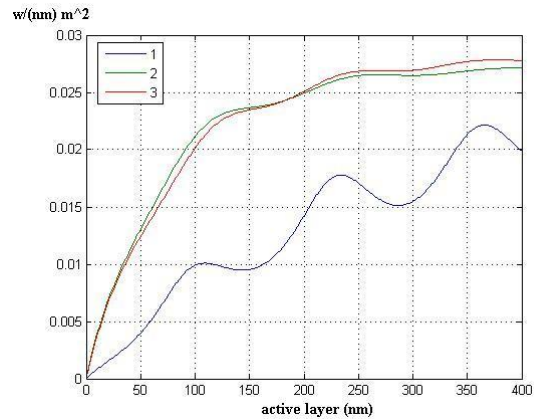
قطبش P کمتر از قطبش S می‌باشد اما با افزایش زاویه قطبش S کاهش سریع‌تری دارد.

### ۴-۳-۴ مقایسه سه ساختار بررسی شده

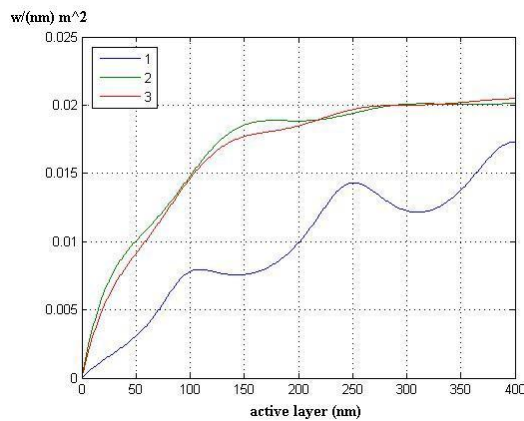
تاکنون سه ساختار مختلف سلول‌های خورشیدی آلی را که فقط در ماده فعال تفاوت داشتند بررسی کردیم. برای پی‌بردن به این که کدام ماده فعال از نظر اپتیکی گزینه بهتری برای ساخت سلول می‌باشد، جذب میانگین اتفاق افتاده در سه ساختار را باهم در نظر می‌گیریم. در شکل ۴-۲۷ این منظور برآورده شده است و جذب میانگین هر سه ساختار در ضخامت‌های بهینه شده هر کدام و در چهار زاویه مختلف تابش نشان داده شده است.



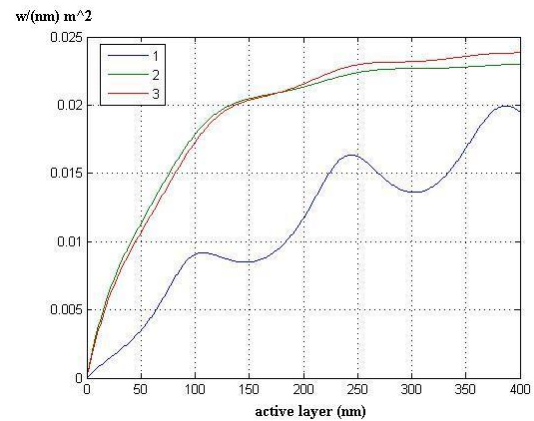
شکل ۴-۲۷-ب: تابش با زاویه ۳۰ درجه



شکل ۴-۲۷-الف: تابش عمود



شکل ۴-۲۷-د: تابش با زاویه ۶۰ درجه



شکل ۴-۲۷-ج: تابش با زاویه ۴۵ درجه

شکل ۴-۲۷: تغییرات جذب میانگین در سه ساختار مختلف سلول‌های خورشیدی آلی مخلوطی در ضخامت‌های بهینه شده هر یک

در شکل ۴-۲۷ نمودار آبی رنگ، جذب میانگین در ساختار اول با ماده فعال PCPDTBT:PC<sub>60</sub>BM، نمودار سبز رنگ جذب میانگین در ساختار دوم با ماده فعال PCPDTBT:PC<sub>70</sub>BM و نمودار قرمز رنگ جذب میانگین در ساختار سوم با ماده فعال P3HT:PC<sub>60</sub>BM را نشان می‌دهد. طبق شکل ۴-۲۷ جذب در ساختار اول کمترین میزان جذب در سه ساختار را دارا می‌باشد. تغییرات جذب میانگین در دو ساختار دیگر تقریباً شبیه هم می‌باشد و نمودار آن‌ها بر هم منطبق هستند. بنابراین از نظر اپتیکی دو ماده فعال PCPDTBT:PC<sub>70</sub>BM و P3HT:PC<sub>60</sub>BM گزینه‌های بهتری برای ساخت سلول می‌باشند.

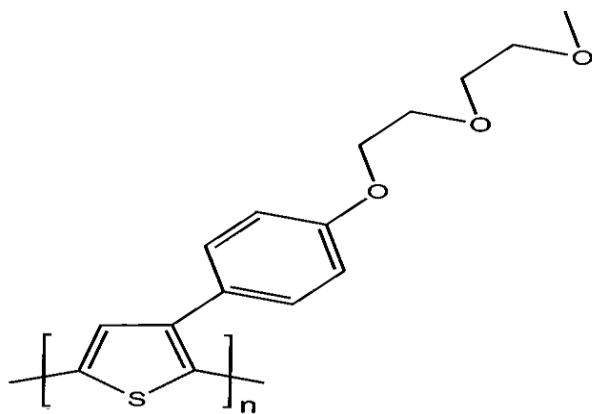
#### ۴-۳-۵ نتیجه‌گیری

در سلول‌های خورشیدی آلی افزایش ضخامت لایه‌ها دو اثر متفاوت را در پی دارد. بدین صورت که از نظر اپتیکی موجب بالا رفتن جذب و در نتیجه افزایش بازده می‌شود و از نظر الکتریکی به دلیل پایین بودن تحرک‌پذیری حامل‌ها باعث کاهش چگالی جریان و در نتیجه کاهش بازده سلول می‌گردد. در این فصل به بررسی اپتیکی سلول تحت تابش با زوایای مختلف پرداختیم. وقتی نور با زاویه به سلول بتابد، عملاً ضخامت مؤثر برای جذب نور افزایش می‌یابد، بی آنکه از نظر الکتریکی محدودیتی ایجاد کند. اما در این حالت بازتاب بیشتری رخ می‌دهد و مقدار کمتری از نور وارد سلول می‌شود. افزایش یا کاهش بازده سلول به تقابل این دو اثر و سهم هر یک در جذب بستگی دارد. هنگامی که نور با زاویه مشخص به سلول بتابد بازتاب نیز در زاویه معلومی رخ می‌دهد که می‌توان با به کارگیری لایه‌های ضدبازتاب، نور بازتابی را دوباره به سلول بازگرداند و از این طریق اثر این عامل منفی را کاهش داد و به بازده بالاتری دست یافت.

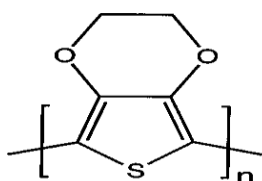
در این بررسی‌ها نشان دادیم که تابش با زاویه غیر عمود الزاماً موجب کاهش جذب در سلول نمی‌شود و به عواملی همچون قطبش نور فرودی، نوع ماده فعال، ضخامت لایه فعال و طول موج فرودی بستگی دارد. در سه ساختار بررسی شده مشاهده شد که قطبش P تغییرات ناچیزی در تابش با زوایای

مختلف دارد در حالی که این اثرات بر قطبش S قابل توجه است. همچنین روند تغییرات جذب تا زاویه تابش تقریباً ۶۰ درجه روندی آهسته می‌باشد اما بعد از این زاویه، جذب به سرعت به صفر می‌رسد.

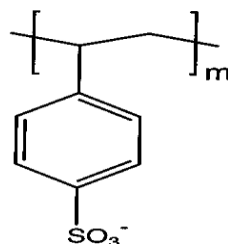
## ۵ پیوست



PEOPT

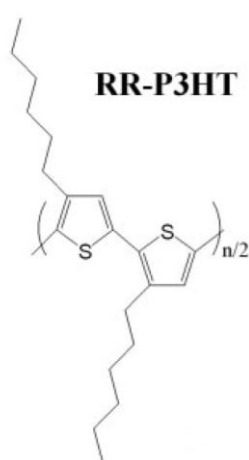


PEDOT

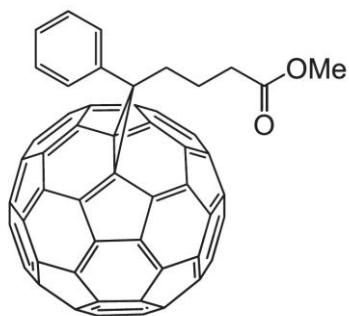


PSS<sup>-</sup>

Chemical structures of poly(3-(4'-(1'',4'',7''-trioxaocetyl)phenyl)thiophene) (PEOPT), poly(3,4-ethylenedioxythiophene) (PEDOT), and poly(styrenesulfonate) anion (PSS<sup>-</sup>) [25].



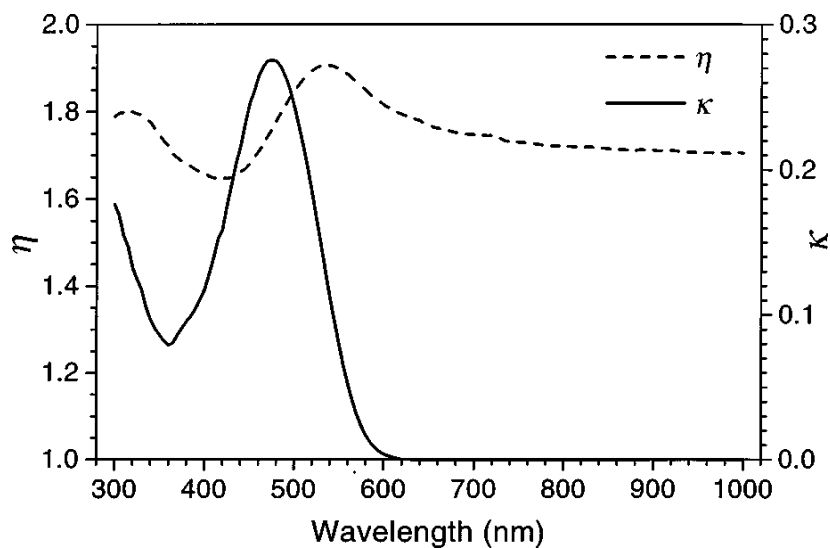
RR-P3HT



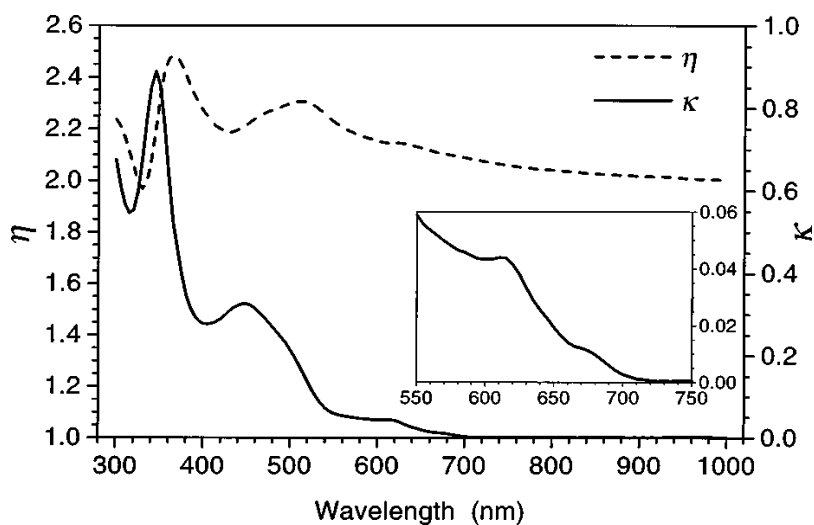
PCBM

chemical structure of PH3T and PCBM [29].

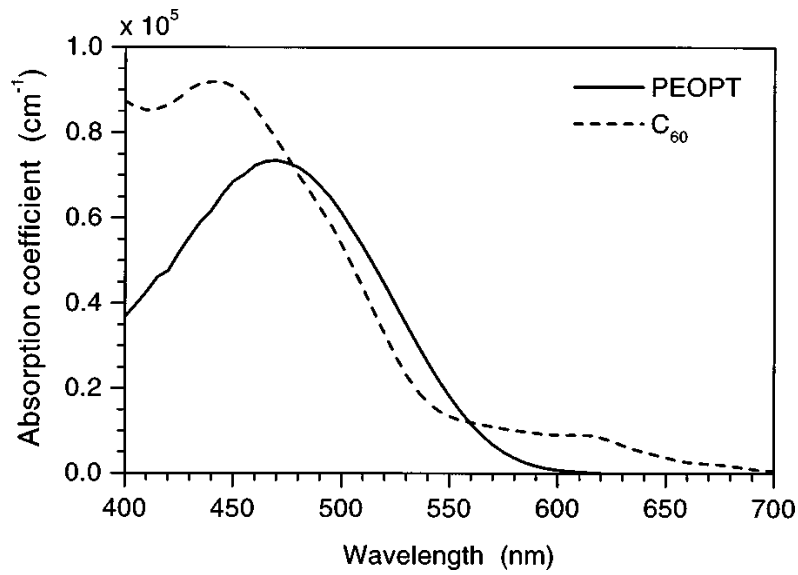




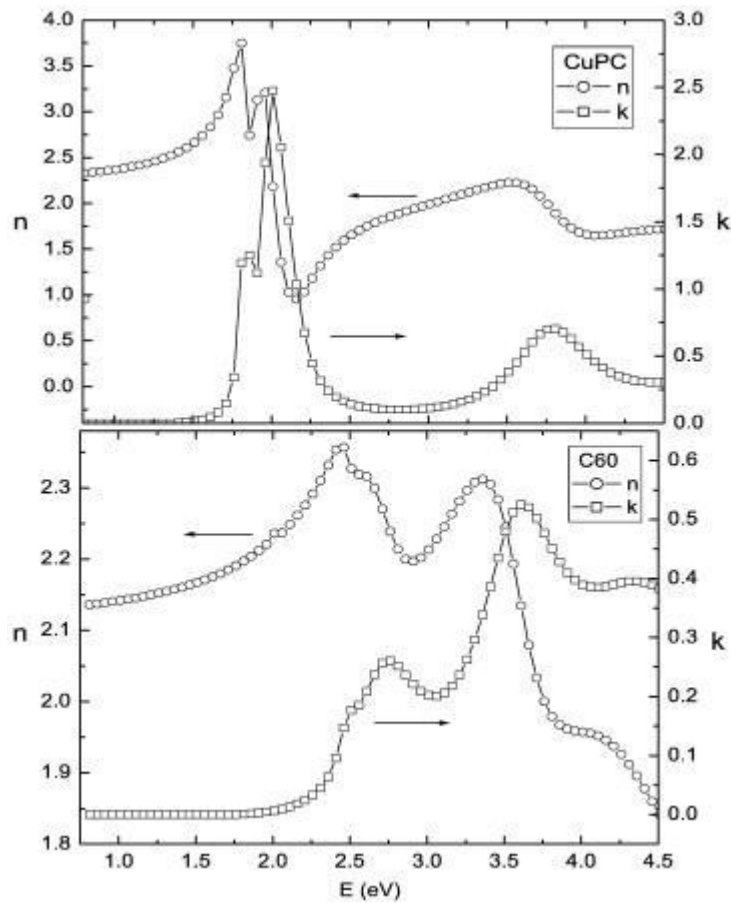
Complex index of refraction of poly(3-(4'-(1'',4'',7''-trioxaoctyl)phenyl)thiophene) (PEOPT) in the wavelength range 300–1000nm [25].



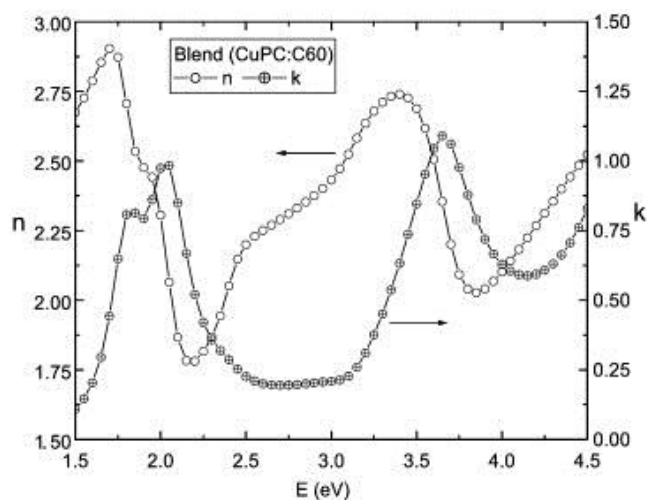
Complex index of refraction of C60 in the wavelength range 300–1000 nm. The inset shows a magnification of the extinction coefficient in the wavelength range 550–750 nm [25].



The absorption coefficient of PEOPT (solid line) and C60 (dashed line) in the wavelength range corresponding to the action spectrum of the photovoltaic devices [25].



Complex index of refraction of C60 and CuPc



Complex index of refraction of CuPc:C60[29].

نمونه‌ای از برنامه نوشته شده:

```

%5 layae(glass ITO pss act al)
n=[1 1.54 1.87+.023i 1.5+.03i 1.845+.34i .772+6.054i 1];
landa=500;
d1=eps:150;
d2=eps:100;
dact=eps:400;
dal=150; % zekhamat Al
beta=2*pi/landa;
alfa=(4*pi*imag(n(5)))/landa;
c=3*10^8;
ep=8.85*10^-12;
teta=0:pi/100:pi/2;
% mohasebeh zarayebe fernel.....
rs=zeros(size(teta,2),size(n,2)-1);
ts=rs;
rp=rs;
tp=rs;

tsin=sin(teta);
tcos=cos(teta);
for i=1:length(n)-1
rs(:,i)=(tcos-sqrt((n(i+1)/n(i))^2-
tsin.^2))./(tcos+sqrt((n(i+1)/n(i))^2-
tsin.^2));
ts(:,i)=2*tcos./(tcos+sqrt((n(i+1)/n(i))^2-
tsin.^2));
tsin=tsin.*n(i)/n(i+1);
tcos=sqrt(1-tsin.^2);
end

```

```

tsin=sin(teta);
tcos=cos(teta);
for i=1:length(n)-1
rp(:,i)=((n(i+1)/n(i))^2*tcos-sqrt((n(i+1)/n(i))^2-tsin.^2))./...
((n(i+1)/n(i))^2*tcos+sqrt((n(i+1)/n(i))^2-tsin.^2));
tp(:,i)=2*tcos*(n(i+1)/n(i))./((n(i+1)/n(i))^2*tcos+sqrt((n(i+1)/n
(i))^2-tsin.^2));
tsin=tsin.*n(i)/n(i+1);
tcos=sqrt(1-tsin.^2);
end
Rp=cell(length(teta),1);
Rs=Rp;
Rgs=Rp;
Rgp=Rp;
RS=1;
RP=1;
for l=1:length(teta)
for k=2:length(n)-1
RS=RS*abs(rs(l,k)).^2;
RP=RP*abs(rp(l,k)).^2;
end
Rs{l}=RS;
Rp{l}=RP;
Rgs{l}=abs(rs(l,1)).^2;
Rgp{l}=abs(rp(l,1)).^2;
end

[dd1,dd2]=meshgrid(d1,d2);
%.....mohasebeh matrix enteghal avaliea(m).....
ms=fa(rs(:,2:4),ts(:,2:4),d1,d2,n(3:4)); %previous transition
matrix for S polarization
mp=fa(rp(:,2:4),tp(:,2:4),d1,d2,n(3:4));
%.....mohasebeh matrix enteghal sanaviya(mm).....
mms=fa(rs(:,5:6),ts(:,5:6),dal,1,n(6));
mmp=fa(rp(:,5:6),tp(:,5:6),dal,1,n(6));
rrs=num2cell(cellfun(@(x)x(2,1)/x(1,1),cat(1,mms{:})));
rrp=num2cell(cellfun(@(x)x(2,1)/x(1,1),cat(1,mmp{:})));

tpl_s=cellfun(@(x,z,g)cellfun(@(y)(1/y(1,1))./(1+(y(1,2)*z/y(1,1))
*...
exp(2i*beta*sqrt(n(5)^2-
(n(1)*sin(g))^2)*dact)),x,'UniformOutput',false),ms,...
rrs,num2cell(teta.),'UniformOutput',false);

tpl_p=cellfun(@(x,z,g)cellfun(@(y)(1/y(1,1))./(1+(y(1,2)*z/y(1,1))
*...
exp(2i*beta*sqrt(n(5)^2-
(n(1)*sin(g))^2)*dact)),x,'UniformOutput',false),mp,...
rrp,num2cell(teta.),'UniformOutput',false);

si=size(dact,2);

```

```

Qs=cell(size(rrs,1),si);
Qp=Qs; % har satr bray 1 zaviya & har soton baray 1 zekhamat
active layer
for k=1:si
    dx=0:.5:dact(k);

Qs(:,k)=cellfun(@(x,z,h,R,g) cell2mat(cellfun(@(y) sum((1/2)*c*ep*al
fa*real(n(5))*abs(y(k)).*...
    (exp(1i*beta*sqrt(n(5)^2-(n(1)*sin(h))^2).*dx)+z.*...
    exp(1i*beta*sqrt(n(5)^2-(n(1)*sin(h))^2).* (2*dact(k)-
dx))) *2*(1-g)/(1-R*g)).^2)...
    ,x,'UniformOutput',
false)),tpl_s,rrs,num2cell(teta.'),Rs,Rgs,'UniformOutput', false);

Qp(:,k)=cellfun(@(x,z,h,R,g) cell2mat(cellfun(@(y) sum((1/2)*c*ep*al
fa*real(n(5))*abs(y(k)).*...
    (exp(1i*beta*sqrt(n(5)^2-(n(1)*sin(h))^2).*dx)+z.*...
    exp(1i*beta*sqrt(n(5)^2-(n(1)*sin(h))^2).* (2*dact(k)-
dx))) *2*(1-g)/(1-R*g)).^2)...
    ,x,'UniformOutput',
false)),tpl_p,rrp,num2cell(teta.'),Rp,Rgp,'UniformOutput', false);

end

Q=cellfun(@plus,Qs,Qp,'UniformOutput',false); % sum Qs & Qp

```

- [1] J. Poortmans, V. Arkhipov, “*Thin film solar cells fabrication, characterization and applications*”, WILEY ,(2006).
- [2] P. Würfel, “*Physics of solar cells, from principles to new concepts*”, WILEY-VCH, (2005).
- [3] F.L. Zhang, A.Gadisa, O. Inganas, M. Svensson, and M.R. Andersson, “*Influence of buffer layers on the performance of polymer solar cells*”, Appl. Phys. Lett. **84**, 3906-3908 (2004).
- [4] M. Sabetghadam, “*Energy and sustainable development in Iran* ”, Sustainable Energy Watch, 2005-2006, (2006).
- [5] S.W. Hur, H.S. Oh, Y.C.Oh, D.H. Chung, J.U. Lee, J.W. Park, and T.W. Kim, “*Organic photovoltaic effects using CuPc and C60 depending on layer thickness*”, Synthetic Metals. **154**, 49-52 (2005).
- [6] V.A. Quan, “*Degradation of the Solar Dye Sensitizer N719 Preliminary Building of Dye-Sensitized Solar Cell*”, Master Thesis for Roskilde University, (2006).
- [7] H. Kallmann, M. Pope, “*Photovoltaic effect in organic crystals*”, J. Chem. Phys, **30**, 585–586, (1959).
- [8] Y. Shirota, T. Kakuta, H. Kanega, H. Mikawa, “*Rectification end photovoltaic properties of a schottky barrier cell using electrochemically-doped poly(N vinyl carbazole)*”, J. Chem. Soc. Chem. Commun, 1201-1202 (1985).
- [9] H. Spanggaard, F.C. Krebs, “*A brief history of the development of organic and polymeric photovoltaics*”, Sol. Energy Materials & Sol. Cells, **83**, 125–146 (2004).
- [10] J.Y. Kim, K. Lee, N.E. Coates, “*Efficient tandem polymer solar cells fabricated by all-solution processing*”, Science. **317**, 222-225 (2007).
- [11] E. Johansson, “*Interfaces in Dye-Sensitized Oxide / Hole Conductor Heterojunctions for Solar Cell Applications*”, Acta Universitatis Upsaliensis Uppsala, (2006).
- [12] M.D. Archer, R. Hill, “*Clean electricity from photovoltaic*”, Imperial College Press, (2001).
- [13] S.M.B. Ghorashi, A. Behjat, R. Ajeian, “*The effect of a buffer layer on the performance and optimal encapsulation time of ITO/CuPc/C60/buffer/Cu bilayer cells*”, solar Energy Materials & solar cells, **96**, 56-57 (2012).
- [14] D.J. Gundlach, K.P. Pernstich, G. Wilckens, M. Gruter, S. Haas, and B. Batlogg, “*High mobility n-channel organic thin-film transistors and complementary inverters*”, J. Appl. Phy. **98**, 64502 (2005).
- [15] R.F. Pierret, “*Advanced Semiconductor Fundamentals*”, Prentice Hall, New Jersey, (1987).
- [16] H.J. Prall, “*Tandem Solar Cells*”, Johannes Kepler University of Linz, Austria, (2005).
- [17] N. Peyghambarian, S.W. Koch, A. Mysyrowicz, “*Introduction to semiconductor optics*”, prentice Hall College Div, (1993).
- [18] T. Soga, “*Nanostructured Materials for Solar Energy Conversion*”, Elsevier publication, Netherlands, (2006).

- [19] K. Petritsch, “*Organic solar cells Architectures*”, PHD Thesis for University of Graz, Austria, (2000).
- [20] A.K. Jayasinghe, “*Fabrication of a Single Layer Organic Photovoltaic Device Based on an Indium-Tin-Oxide/Copper Phthalocyanine/Aluminum Heterostructure*”, Thesis for Baylor University, (2006).
- [21] J. Xue, S. Uchida, B.P. Rand, and S.R. Forrest, “*Asymmetric tandem organic photovoltaic cells with hybrid planar-mixed molecular heterojunctions*”, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 5757 (2004).
- [22] X.Y. Zhao, M.B. Xiu, G. Qiang, “*Recent progress in the numerical modeling for organic thin film solar cells*”, *Science China*. **54**, 375–387 (2010).
- [23] T. Soga, “*Nanostructured Materials for Solar Energy Conversion*”, Elsevier publication, Netherlands, (2006).
- [24] L. Liu, G. Li, “*Investigation of recombination loss in organic solar cells by simulating intensity-dependent current–voltage measurements*”, *Sol. Energy Materials, Sol. Cells*. **95**, 2557–2563 (2011).
- [25] L.A.A. Pettersson, L.S. Roman, O. Inganäs, “*Modeling photocurrent action spectra of photovoltaic devices based on organic thin films*”, *J. Appl. Phys.* **86**, 487-496 (1999).
- [26] N.K. Persson, M. Schubert, O. Inganäs, “*Optical modelling of a layered photovoltaic device with a polyfluorene derivative/fullerene as the active layer*”, *Solar Energy Materials & Solar Cells*. **83**, 169–186 (2004).
- [27] D. Gebeyehu, F. Padinger, T. Fromherz, J.C. Hummelen, N.S. Sariciftci, “*Photovoltaic properties of Conjugated Polymer/Fullerene composites on large area flexible substrates*”, *Bull. Chem. Soc. Ethiop.* **14**, 57-68 (2000).
- [28] P. Peumans, A. Yakimov, and S. R. Forrest, “*Small molecular weight organic thin film photodetectors and solar cells*”, *J. Appl. Phys.* **93**, 3693 (2003).
- [29] A.W. Copeland, O.D. Black, A.B. Garrett, “*The Photovoltaic Effect*”, *Chem. Rev.* **31**, 177-226 (1942)

## Abstract

Using renewable and clean energy sources such as solar energy has been one of the main issues investigated, recently. Photovoltaic solar cells are one of the major achievements in this regards. Nano-structure organic solar cells newly has been investigated more than the inorganic cells because of the flexibility, low production cost, less environmental pollution, and large-scale surface production. The main problem in organic solar cells is their efficiency, which is much related to the thickness of the active layer. In this research at first, optical simulation was carried out based on the Petterson model, by use of MATLAB computer program. Three types of solar cells including bilayer cells, blend cells, and tandem cells are investigated. In the research work has been published so far TE radiation mode has been considered. However, here the TE and TM modes of radiation are taking into account in order to optimize the radiation absorption within the active layer. Moreover, since the absorption of light in the cell varies by changing the thickness of each layer, optimization of different layer thickness simultaneously was considered.

To simplify the relations in optical modeling in solar cells usually normal incidence of radiation is considered. Obviously, less reflection occurs by normal incidence. Therefore, it seems that the highest efficiency is obtained in this condition. However, in non-normal incidence although there is more reflection of the light, in fact longer distance of radiation into the cell results in more absorption. Therefore, two parameters including angle of incidence and the distance within the cells, are competing and must be optimized in order to obtain more absorption of light and consequently more efficiency. In next step optical performance of three structures bulk heterojunction organic solar cells under different angle of incidence considering absorption profile of the active layers is studied.





Shahrood University of Technology

Faculty of Physics

Study and determination of the optimum active layer in  
bilayer organic solar cell by computer simulation

Ali Askarbiuki

Supervisors:

D.r Saeid Hessami Pilehrood

D.r Abbas Behjat

February 2013