

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده فیزیک

گرایش حالت جامد

مطالعه نیمرساناهای آلی و فولرین (C<sub>60</sub>) به منظور استفاده از آنها در  
سلولهای خورشیدی

دانشجو :

کمیل الهی نسب

اساتید راهنما :

دکتر حمید هراتی زاده

دکتر محمد ابراهیم قاضی

پایان نامه ارشد جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

تیر ۱۳۸۸

## تقدیم به

پدر بزرگوار و مادر عزیزم به جهت مهربانی ها، زحمات، دلگرمی ها و دعاهایشان. و تقدیم به برادرم که در تمامی مراحل انجام این اثر یاریم نمود.

## تشکر و قدردانی

بعد از سپاس پروردگار، بر خود وظیفه می دانم تا از تلاشها و رهنمودهای اساتید گرامی، جناب آقای دکتر هراتی زاده و جناب آقای دکتر قاضی صمیمانه تشکر نمایم. همچنین از زحمات بی دریغ استاد گرانقدر جناب آقای دکتر ازئیان صمیمانه سپاسگزارم. در ضمن از اساتید محترم جناب آقای دکتر حسامی و جناب آقای دکتر ابویی که زحمت داوری این پایان نامه را تقبل نمودند متشکرم.

در پایان از زحمات بی منت جناب آقای رضا مسکنی مسئول محترم آزمایشگاه حالت جامد دانشگاه صنعتی شاهرود ممنون و سپاسگزارم. همچنین از زحمات بی شائبه دوستان عزیزم، آقایان علیرضا بی آرام، موسی نخعی، سعید صالح و محمد توکلی و همه عزیزانی که به هر طریق ممکن، در انجام این کار یاریم کردند کمال تشکر را دارم.

## تعهد نامه

اینجانب کمیل الهی نسب دانشجوی دوره کارشناسی ارشد فیزیک - حالت جامد دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه مطالعه نیمرساناهای آلی و فولرین (C<sub>60</sub>) به منظور استفاده از آنها در سلولهای خورشیدی تحت راهنمایی دکتر حمید هراتی زاده و دکتر محمد ابراهیم قاضی متعهد می شوم:

- 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 درج در پایان نامه تا کنون 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 می باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه صنعتی شاهرود » و یا « **Shahrood University of Technology** » به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در بدست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تاثیر گذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می گردد.
- 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 رایانه ای، نرم افزارها و تجهیزات ساخته شده) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد. 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 نمی باشد.

## چکیده

امروزه بیشتر از هفتاد درصد انرژی مصرفی جهان، از سوخت های فسیلی تأمین می شود. این سوخت ها نه تنها باعث تولید مقادیر زیادی از آلودگی می شوند، بلکه تا ۵۰ سال آینده نیز به اتمام خواهند رسید. بنابراین ما به گسترش منابع انرژی تجدید پذیر، از قبیل انرژی خورشیدی، نیازمندیم. انرژی خورشیدی یکی از کاندید های انرژی پایدار و پاک می باشد. سلول های خورشیدی قطعات نیم رسانایی هستند که مستقیماً انرژی تابشی خورشید را به انرژی الکتریکی تبدیل می کنند. در حال حاضر، سلول های خورشیدی معدنی به صورت صنعتی و با بازدهی بالا تولید می گردند، اما هزینه تولید آن ها بسیار بالاست. بنابراین در دو دهه اخیر انواع جدید مواد از قبیل نیم رساناهای آلی توجه بسیاری را به خود جلب کرده اند. هزینه تولید پایین، انعطاف پذیری، وزن پایین و امکان ساخت در مساحت بزرگ از جمله مزایای سلولهای خورشیدی آلی می باشد.

از اینرو ما در این تحقیق، فیزیک و خواص نیم رساناهای آلی را به منظور استفاده در سلول های خورشیدی مورد مطالعه قرار داده ایم. در این پایان نامه چند نمونه سلول خورشیدی آلی دولایه ای متشکل از فتالوسیانین مس (CuPc)، به عنوان پذیرنده حفره، و فولرین (C<sub>60</sub>)، به عنوان پذیرنده الکترون، با ساختار های ناهمگون ITO/CuPc(20nm)/C<sub>60</sub>(40nm)/BCP(8nm)/Al(80nm) و ITO/CuPc(20nm)/C<sub>60</sub>(40nm)/Al(80nm) با استفاده از روش تبخیر حرارتی در خلاء بالا، ساخته شدند. نمودار های جریان-ولتاژ سلول ها با استفاده از شبیه ساز خورشیدی تحت تابش استاندارد AM1.5 اندازه گیری شد. با استفاده از BCP به عنوان یک لایه سد کننده اکسیتون (EBL) در فصل مشترک ماده آلی/فلز، چگالی جریان مدار کوتاه سلول افزایش و در نتیجه عملکرد سلول بهبود یافت. در نهایت، طیف جذب لایه های نازک به کار رفته در سلول ها و همچنین طیف جذب خود سلول اندازه گیری شده و مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفتند. مشاهده کردیم که در سیستم های دو لایه ای CuPc/C<sub>60</sub>، در تمام محدوده طیف مرئی، CuPc و C<sub>60</sub> دارای طیف های جذب مکمل می باشند. همچنین دریافتیم که با افزایش ضخامت لایه و خلوص ماده، مقدار جذب افزایش می یابد. با استفاده از پراش پرتوی X، ساختار لایه ها مورد بررسی قرار گرفت.

**واژگان کلیدی:** نیم رساناهای آلی، فتالوسیانین مس (CuPc)، فولرین (C<sub>60</sub>)، سلول های خورشیدی آلی، لایه های

نازک، تبخیر حرارتی، پیوندگاه p-n آلی

## لیست مقالات مستخرج از پایان نامه

- ۱- کمیل الهی نسب، رسول اژئیان، حمید هراتی زاده، محمد ابراهیم قاضی، موسی نخعی بدر آبادی، محمد توکلی، سعید صالح اردستانی " نقش لایه سد کننده اکسایتون *BCP* در بهبود عملکرد سلول های خورشیدی آلی با پیوند ناهمگون *CuPc/C60* " کنفرانس فیزیک ایران، دانشگاه صنعتی اصفهان (۱۳۸۸)

## فهرست مطالب

---

۱	فصل اول: مقدمه
۲	۱-۱ انرژی
۳	۲-۱ اثرات مخرب سوخت های فسیلی
۳	۳-۱ محدودیت های موجود در منابع انرژی متداول (تجدید ناپذیر)
۴	۴-۱ انرژی های تجدید پذیر
۶	۱-۴-۱ انرژی خورشیدی
۷	۵-۱ انرژی خورشیدی و مزیت های آن بر سایر انرژی ها
۸	۱-۵-۱ نحوه توزیع تابش خورشید بر سطح زمین
۹	۲-۵-۱ تابش انرژی خورشید در ایران
۹	۶-۱ کاربرد های انرژی خورشیدی
۱۰	۱-۶-۱ استفاده از انرژی حرارتی خورشید
۱۰	۲-۶-۱ فوتولتائیک
۱۰	۷-۱ سلول های خورشیدی
۱۱	۱-۷-۱ ویژگی های سلول های خورشیدی
۱۱	۲-۷-۱ کاربرد های سلول های خورشیدی
۱۲	۸-۱ توجه اقتصادی در ساخت سلول های خورشیدی
۱۳	۹-۱ هدف از انجام پایان نامه
۱۵	فصل دوم: مطالعه نیمرساناهای آلی
۱۶	۱-۲ مقدمه
۱۶	۲-۲ نیمرسانا
۱۸	۳-۲ تعادل گرمایی در نیمرسانا
۱۹	۴-۲ تراز فرمی



- ۲۰.....۵-نیمرسانای تحت تابش
- ۲۱.....۶-نیمرسانای آلی
- ۲۲.....۱-۶-۲ منشأ خاصیت رسانندگی در نیمرساناهای آلی
- ۲۵.....۲-۶-۲ تولید اکسیتون در نیمرساناهای آلی
- ۲۶.....۳-۶-۲ طبقه بندی کلی نیمرساناهای آلی
- ۲۷.....۷-۲ ویژگی های نیمرساناهای آلی و تفاوت آن با نیمرساناهای معدنی
- ۲۷.....۱-۷-۲ نیروهای بین مولکولی ضعیف
- ۲۷.....۲-۷-۲ انرژی بستگی اکسیتون بالا
- ۲۸.....۳-۷-۲ ضریب جذب بالا در نیمرساناهای آلی
- ۲۹.....۴-۷-۲ طول پخش (انتشار) اکسیتون کوتاه
- ۳۰.....۵-۷-۲ تحرک پذیری پایین حامل های بار
- ۳۰.....۶-۷-۲ شباهت نیمرساناهای آلی به مولکول های گاز
- ۳۱.....۸-۲ مکانیزم انتقال بار در نیمرساناهای آلی (پلیمرهای مضاعف)
- ۳۳.....۹-۲ آرایش در نیمرساناهای آلی
- ۳۵..... فصل سوم: سلول های خورشیدی آلی**
- ۳۶.....۱-۳ تاریخچه سلول های خورشیدی
- ۳۸.....۲-۳ سلول های خورشیدی معدنی
- ۳۸.....۳-۳ سلول های خورشیدی آلی
- ۴۰.....۴-۳ مراحل تولید انرژی در سلول های فوتوولتائیک آلی
- ۴۰.....۱-۴-۳ جذب نور و تشکیل اکسیتون
- ۴۲.....۲-۴-۳ انتشار اکسیتون به طرف پیوندگاه
- ۴۳.....۳-۴-۳ تجزیه اکسیتون و تولید حامل های بار آزاد
- ۴۶.....۴-۴-۳ انتقال حامل ها به سمت الکتروود ها و جمع آوری آن ها
- ۴۶.....۵-۳ ساختار های مختلف سلول های خورشیدی آلی
- ۴۷.....۱-۵-۳ سلول های تک لایه ای

۴۷	..... ۲-۵-۳ سلول های دو لایه ای
۴۹	..... ۳-۵-۳ سلول های مخلوطی
۵۰	..... ۴-۵-۳ سلول های لایه در لایه
۵۱	..... ۵-۵-۳ سلول های پی در پی
۵۳	..... ۶-۵-۳ سلول های p-i-n
۵۳	..... ۶-۳ تعیین ضخامت بهینه برای لایه های آلی
۵۴	..... ۷-۳ معادلات اساسی حاکم بر سلول های خورشیدی آلی
۵۵	..... ۸-۳ مشخصه های نمودار جریان - ولتاژ
۵۷	..... ۹-۳ پارامتر های مهم در سلول های خورشیدی آلی
۵۷	..... ۱-۹-۳ بازدهی تبدیل توان
۵۷	..... ۲-۹-۳ بازدهی کوانتومی
۵۸	..... ۳-۹-۳ چگالی جریان مدار کوتاه
۵۹	..... ۴-۹-۳ ولتاژ مدار باز
۵۹	..... ۵-۹-۳ مقاومت سری
۶۰	..... ۱۰-۳ الکترودها
۶۰	..... ۱-۱۰-۳ انتخاب الکترودها
۶۰	..... ۲-۱۰-۳ اتصال الکترودها - نیمرسانا
۶۴	..... ۱۱-۳ بهینه سازی و افزایش بازدهی سلول های خورشیدی
۶۵	..... ۱۲-۳ لایه سد کننده اکسیتون
۶۶	..... ۱۳-۳ استاندارد های تابش خورشید
۶۷	..... فصل چهارم: فصل مشترک، آنالیز سطح و لایه های نازک
۶۸	..... ۱-۴ تعریف و اهمیت فصل مشترک و فیزیک سطح
۶۹	..... ۲-۴ روش های تحلیل سطح
۷۰	..... ۱-۲-۴ میکروسکوپ الکترون روبشی (SEM) و روش های میکرو پراب

۷۲	.....۳-۴ فناوری خلاء در علم سطح کاربردی
۷۳	.....۱-۳-۴ پمپ های چرخشی
۷۵	.....۲-۳-۴ پمپ های پخشی (دیفیوژن)
۷۶	.....۴-۴ لایه های نازک
۷۷	.....۱-۴-۴ بررسی نحوه تشکیل لایه های نازک
۷۸	.....۲-۴-۴ روش های مختلف تولید (لایه نشانی) لایه های نازک
۷۹	.....۳-۴-۴ روش فیزیکی انباشت بخار (PVD)
۸۱	.....۴-۴-۴ تحلیل و بررسی مکانیزم تبخیر و تصعید
۸۳	.....۵-۴-۴ روش های اندازه گیری و بازرسی ضخامت لایه های نازک
۸۴	.....۱-۵-۴-۴ روش نوسانگر بلور کوارتز
۸۸	<b>..... فصل پنجم: آزمایشات و یافته ها</b>
۸۹	.....۱-۵ مقدمه
۸۹	.....۲-۵ دستگاه های استفاده شده در انجام آزمایشات
۸۹	.....۱-۲-۵ دستگاه لایه نشانی تبخیر حرارتی
۹۱	.....۲-۲-۵ دستگاه لرزشی فراصوت
۹۲	.....۳-۵ مواد استفاده شده در ساخت سلول های خورشیدی
۹۲	.....۱-۳-۵ نیم رساناهای آلی بخشنده و پذیرنده
۹۲	.....۱-۱-۳-۵ فتالوسیانین مس
۹۴	.....۲-۱-۳-۵ فولرین C <sub>60</sub>
۹۵	.....۲-۳-۵ ماده استفاده شده در لایه EBL
۹۵	.....۳-۳-۵ الکتروود ها
۹۶	.....۱-۳-۳-۵ الکتروود شفاف ITO
۹۷	.....۲-۳-۳-۵ الکتروود کاتد
۹۷	.....۴-۵ انجام آزمایش
۹۷	.....۱-۴-۵ برش و سونش شیمیایی زیر لایه های پوشش داده شده با ITO

۹۸	.....۲-۴-۵ تمیز کردن و خشک کردن زیر لایه ها
۹۸	.....۳-۴-۵ لایه نشانی توسط دستگاه PVD
۹۹	.....۱-۳-۴-۵ سلول سری اول
۱۰۳	.....۲-۳-۴-۵ سلول سری دوم
۱۰۴	.....۳-۳-۴-۵ ساخت دو سلول به منظور بررسی تأثیر لایه EBL
۱۱۱	.....۴-۴-۵ اندازه گیری طیف جذب اپتیکی لایه ها در ناحیه ماوراء بنفش مرئی
۱۱۲	.....۱-۴-۴-۵ طیف سنجی لایه ها به کمک دستگاه طیف سنج UV-Vis
۱۱۴	.....۲-۴-۴-۵ تجزیه و تحلیل طیف جذب لایه ها به کمک طیف خورشید
۱۱۵	.....۵-۴-۵ اندازه گیری طیف جذب اپتیکی سلول خورشیدی ساخته شده
۱۱۶	.....۶-۴-۵ وابستگی میزان جذب یک لایه آلی به ضخامت آن و خلوص ماده
۱۱۸	.....۷-۴-۵ اندازه گیری پراش پرتوی X (XRD) لایه ها
۱۲۳	..... <b>فصل ششم: نتیجه گیری و پیشنهادات</b>
۱۲۴	.....۱-۶ مقدمه
۱۲۵	.....۲-۶ نتایج به دست آمده از ساخت سلول ها
۱۲۵	.....۱-۲-۶ لایه نشانی C <sub>60</sub>
۱۲۵	.....۲-۲-۶ لایه نشانی آلومینیوم
۱۲۶	.....۳-۲-۶ شدت نور تابشی
۱۲۶	.....۴-۲-۶ بهینه سازی سلول ساخته شده
۱۲۷	.....۳-۶ نتایج حاصل از اندازه گیری طیف جذب لایه ها
۱۲۷	.....۴-۶ اندازه گیری نقش پراش پرتوی X
۱۲۸	.....۵-۶ پیشنهادات
۱۳۰	..... <b>مراجع</b>

## فهرست اشکال

- شکل ۱-۱: مصرف سالیانه انرژی در جهان بر حسب زمان (بین سالهای ۲۰۰۰-۱۷۶۵)..... ۲
- شکل ۱-۲: مقدار تابش سالیانه انرژی خورشید بر هر متر مربع از سطح زمین..... ۸
- شکل ۱-۳: توزیع تابش سالیانه انرژی خورشید بر هر متر مربع از سطح زمین در ایران..... ۹
- شکل ۱-۲: طرحی شماتیک از نوارهای انرژی..... ۱۷
- شکل ۲-۲: طرحی شماتیک از پیوند های سیگما و پی..... ۲۲
- شکل ۳-۲: ساختار شیمیایی ترانس پلی استیلن (سمت چپ) و تشکیل پیوند های  $\pi$  ناجایگزیده از اوربیتال های  $P_z$  در امتداد زنجیر پلیمر (سمت راست)..... ۲۳
- شکل ۲-۴: طول مضاعف شدگی، که در این محدوده الکترون در اوربیتال  $\pi$  غیر جایگزیده بوده و باعث تولید یک ابر الکترونی بسیار متحرک می شود..... ۲۹
- شکل ۱-۳: فرآیند های لازم برای تولید انرژی در سلول های فوتوولتائیک آلی دو لایه ای..... ۴۰
- شکل ۲-۳: طرح شماتیک از جذب نور و تشکیل الکترون و حفره..... ۴۱
- شکل ۳-۳: نمایی از یک سلول آلی با ساختار دو لایه ای..... ۴۸
- شکل ۳-۴: یک سلول مخلوطی، مشاهده می شود که نواحی پیوندگاه در حجم این سلول پخش شده است..... ۴۹
- شکل ۳-۵: سلول لایه در لایه، نفوذ نواحی بخشنده و پذیرنده باعث افزایش نواحی تجزیه اکسیژن شده است..... ۵۱
- شکل ۳-۶: روش ساخت یک سلول لایه در لایه..... ۵۱
- شکل ۳-۷: ساختار یک سلول پی در پی با بازدهی ۵/۷٪..... ۵۲
- شکل ۳-۸: یک نمونه سلول خورشیدی p-i-n..... ۵۳
- شکل ۳-۹: مشخصه های نمودار جریان-ولتاژ یک سلول خورشیدی نوعی..... ۵۶
- شکل ۳-۱۰: چهار مرحله اساسی در تولید فوتوجریان در اثر تابش نور..... ۵۸
- شکل ۳-۱۱: نمودار ساده شده نوارهای انرژی قبل و بعد از تماس در پیوندگاه نیمرسانا / فلز برای یک سلول دو لایه ای (الف) قبل از تماس و (ب) بعد از تماس..... ۶۱

شکل ۳-۱۲: نمودار های وسایل D/A با اتصال الکترودها (a) موقعیت قبل از تماس، بعد از اتصال سطوح فرمی (خطوط نقطه چین) یکی می شوند و خمیدگی نوار ها رخ می دهد. (b) شکل گیری یک تماس مسدود کننده برای حفره ها (ITO/D) و برای الکترون ها (A/Al). (c) شکل گیری یک تماس غیر مسدود کننده (اهمی) برای حفره ها (Au/D) و برای الکترون ها (A/Ca)..... ۶۳

شکل ۳-۱۳: نمایی از استاندارد های تابش خورشید..... ۶۶

شکل ۴-۱: نمایی از سطح مقطع پمپ چرخشی بازو دار لغزنده تک مرحله ای ..... ۷۴

شکل ۴-۲: طرحی از چگونگی عملکرد پمپ پخشی ..... ۷۶

شکل ۴-۳: الف) تعیین جهت برش AT در کوارتز ب) نگهدارنده بلور : I- بوش ورودی، S- نشت بند، Cr- بلور، C- خنک کننده..... ۸۵

شکل ۴-۴: نمایی از یک سرد کن آبی برای نوسانگر بلوری ..... ۸۶

شکل ۵-۱: نمای کلی از دستگاه لایه نشانی PVD..... ۹۰

شکل ۵-۲: دو نمونه بوته تنگستنی و مولیبدنی (از راست به چپ) ..... ۹۱

شکل ۵-۳: دو نمونه دستگاه لرزشی فرا صوت ..... ۹۱

شکل ۵-۴: ساختار مولکولی CuPc..... ۹۳

شکل ۵-۵: ساختار مولکولی فولرین C<sub>۶۰</sub>..... ۹۴

شکل ۵-۶: ساختار مولکولی BCP..... ۹۵

شکل ۵-۷: طرحی از ساختار لایه ای سلول ساخته شده ..... ۱۰۰

شکل ۵-۸: تصویری از سلول خورشیدی ساخته شده که از طریق چسب نقره به مدار متصل شده است..... ۱۰۱

شکل ۵-۹: نمودار جریان - ولتاژ سلول سری اول تحت تابش لامپ تنگستنی ..... ۱۰۱

شکل ۵-۱۰: تصویر میکروسکوپ الکترونی که نشان دهنده تغییر رنگ و اندازه ذرات C<sub>۶۰</sub> پس از تبخیر شدن می باشد..... ۱۰۲

شکل ۵-۱۱: نمونه ای از بوته سبدی (تنگستنی) ساخته شده ..... ۱۰۴

شکل ۵-۱۲: تصویری از دو سلول الف (سمت چپ) و ب (سمت راست)..... ۱۰۵

شکل ۵-۱۳: مقایسه توزیع طیف انرژی لامپ های هالوژن و Metal Halide با خورشید ..... ۱۰۶

- شکل ۵-۱۴: شبیه ساز خورشیدی ساخته شده از لامپ Metal Halide ..... ۱۰۶
- شکل ۵-۱۵: نمودار جریان-ولتاژ برای سلول الف (بدون BCP) ..... ۱۰۷
- شکل ۵-۱۶: نمودار جریان-ولتاژ برای سلول ب (با استفاده از BCP) ..... ۱۰۷
- شکل ۵-۱۷: نمودار تراز های انرژی سلول و تشکیل حالت های نقص در گاف انرژی BCP ..... ۱۰۹
- شکل ۵-۱۸: نمودار I-V سلول «ب» تحت روشنایی پس از گذشت سه روز ..... ۱۱۱
- شکل ۵-۱۹: طیف جذب لایه CuPc با ضخامت ۲۰ nm ..... ۱۱۲
- شکل ۵-۲۰: طیف جذب لایه C<sub>60</sub> (خلوص ۹۸٪) با ضخامت ۴۰ nm ..... ۱۱۳
- شکل ۵-۲۱: منحنی های جذب اندازه گیری شده برای سه لایه CuPc، C<sub>60</sub> و BCP توسط چان و همکارانش ..... ۱۱۳
- شکل ۵-۲۲: توزیع شدت طیف خورشید تحت شرایط تابش استاندارد AM1/5 ..... ۱۱۴
- شکل ۵-۲۳: طیف جذب سلول بدون الکتروود آلومینیوم با ساختار  
ITO/CuPc(20nm)/C60(40nm)/BCP(8nm) ..... ۱۱۶
- شکل ۵-۲۴: طیف جذب لایه CuPc با ضخامت ۱۱۰ nm ..... ۱۱۷
- شکل ۵-۲۵: طیف جذب لایه C<sub>60</sub> (خلوص ۹۹/۵٪) با ضخامت ۴۰ nm ..... ۱۱۸
- شکل ۵-۲۶: طرحی ساده از (a) ساختار مولکولی CuPc، (b) مدلی از CuPc در حالت روی هم چیده شده، (c) CuPc نوع  $\alpha$ ، (d) CuPc نوع  $\beta$  ..... ۱۱۹
- شکل ۵-۲۷: نقش پراش پرتوی X برای لایه CuPc (۱۱۰ nm) ..... ۱۲۰
- شکل ۵-۲۸: نقش پراش پرتوی X برای لایه ITO پوشش داده شده بر روی لایه شیشه ای ..... ۱۲۱
- شکل ۵-۲۹: نقش پراش پرتوی X برای سلول بدون الکتروود آلومینیوم با ساختار  
ITO/CuPc(20nm)/C60(40nm)/BCP(8nm) ..... ۱۲۱

## فهرست جداول

---

جدول ۱-۳: چند نمونه از الکتروود های شفاف استفاده شده در سلول های خورشیدی آلی ..... ۶۲



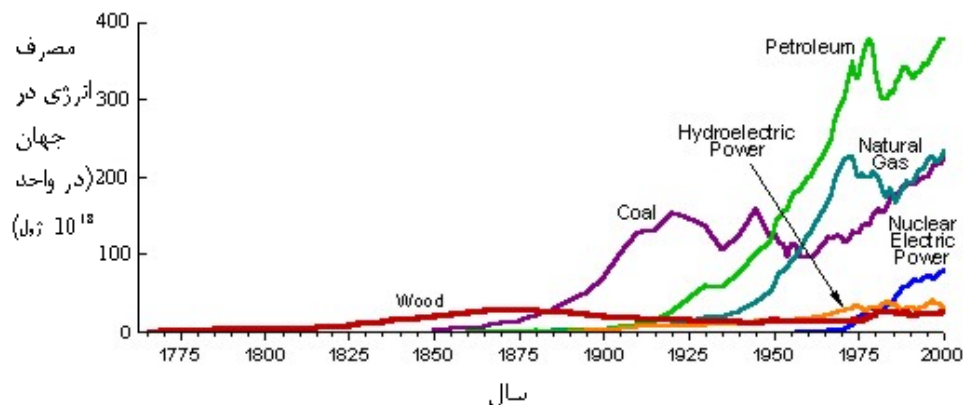
فصل اول

مقدمه

## ۱-۱ انرژی

با افزایش جمعیت جهان در ۱۵۰ سال اخیر و تقاضای بیشتر انرژی برای زندگی راحتتر، مصرف انرژی نیز روز به روز در حال افزایش است. به گونه ای که بر اساس پیش بینی های انجام شده تقاضای جهانی انرژی تا سال ۲۰۵۰ به بیش از دو برابر مصرف فعلی خواهد رسید (یعنی از  $10^{12} \times 13$  وات به  $10^{12} \times 30$  وات افزایش خواهد یافت)، و تا اواخر قرن اخیر نرخ مصرف سه برابر نیز خواهد شد ( $10^{12} \times 50$  وات) [۱]. بنابراین با توجه به رشد نجومی نرخ مصرف انرژی و محدود بودن منابع متداول انرژی در آینده ای نزدیک با بحران کمبود انرژی مواجه خواهیم شد، به گونه ای که بر اساس تحقیقات انجام شده این ذخایر تا ۵۰ سال آینده تمام خواهد شد.

در جهان کنونی منابع فراوان انرژی وجود دارد که متداول ترین آنها زغال سنگ، نفت، گاز طبیعی و انرژی هسته ای (در ۵۰ سال اخیر) می باشند. که بیش از ۸۰ درصد از کل مصرف جهانی انرژی از سوختهای فسیلی (نفت، گاز و زغال سنگ) تأمین می شود. سوخت های فسیلی علاوه بر مزایای فراوانشان، گاز های آلوده کننده ای را (در اثر سوختن) وارد محیط زیست می کنند که اثرات مخربی را بر روی پدیده های زیست محیطی می گذارد. در شکل ۱-۱ نمودار مصرف انرژی جهان در بازه زمانی ۱۷۶۵-۲۰۰۰ میلادی نشان داده شده است.



شکل (۱-۱): مصرف سالیانه انرژی در جهان بر حسب زمان (بین سالهای ۱۷۶۵-۲۰۰۰) [۲]

## ۱-۲ اثرات مخرب سوخت های فسیلی

عمده نیاز بشر به انرژی با سوختن سوخت های فسیلی مانند زغال سنگ، نفت و گاز تأمین می گردد. به دنبال افزایش مصرف سوخت های فسیلی به ویژه در جوامع صنعتی و شهرهای بزرگ، گازهای سمی و پسماند های حاصل از احتراق این سوخت ها به طور محسوسی افزایش یافته، که اثرات مخرب زیادی را بر محیط زیست گذاشته است. از مهمترین این آثار می توان به مواردی چون انتشار CO<sub>2</sub> و آلودگی هوا، باران های اسیدی، اثر گلخانه ای و گرم شدن زمین اشاره نمود. تغییرات آب و هوایی در جو به علت ترکیبات حاصله از CO<sub>2</sub>، در سال ۱۸۹۶ توسط شیمیدان سوئدی اسونت آرنهوس<sup>۱</sup> کشف شد [۳]. همچنین او به درستی پیش بینی کرد که با دو برابر شدن میزان CO<sub>2</sub>، اثرات گلخانه ای باعث افزایش ۵ درجه ای دمای زمین خواهد شد.

## ۱-۳ محدودیت های موجود در منابع انرژی متداول (تجدید نا پذیر)

در این بخش، منابع فسیلی انرژی (نفت، گاز و زغال سنگ) و انرژی هسته ای جزء منابع متداول انرژی<sup>۲</sup> دسته بندی شده اند.

سوخت های فسیلی نتیجه فرآیند فتوسنتز بوده و در طول سالیان دراز تولید می شوند، بنابراین شکل گیری اینگونه سوخت ها از نظر زمین شناسی رویدادی است، که تنها یک بار رخ می دهد. مثلاً بیشتر از ۱۰۰ میلیون سال زمان لازم است تا سوخت های فسیلی موجود دوباره تولید شوند، پس باید به آنها به عنوان ذخایر محدود نگریست و مفهوم تجدیدپذیر<sup>۳</sup> را نمی توان به آنها اطلاق کرد.

استفاده از انرژی هسته ای تفاوت های بنیادینی با دیگر انرژی ها دارد. پسماندهای هسته ای با رادیواکتیویته بالا نیمه عمری در حدود چندین هزار سال دارند (برای مثال نیمه عمر پلوتونیوم

---

<sup>۱</sup>Svante Arrhenius

<sup>۲</sup> Conventional sources of energy

<sup>۳</sup> Renewable

۱۲۵۰۰ سال است) و حداقل باید در طول این مدت بطور کامل محافظت شوند. بنابراین، برپایی نیروگاه های هسته ای به دلیل موارد امنیتی (به منظور جلوگیری از نشت مواد رادیواکتیو) بسیار پرهزینه اند. بنابراین رآکتورهای هسته ای به سیستم های ایمنی بسیار قوی برای جلوگیری از شرایط فوق بحرانی نیازمندند. در غیر این صورت امکان فاجعه زیست محیطی مانند آنچه در چرنوبیل شوروی سابق روی داد دور از انتظار نیست [۴]. همچنین سوخت های هسته ای منابع تجدید پذیری نیستند (محدود بودن منابع اورانیوم جهان).

علاوه بر فاجعه های زیست محیطی در اثر استفاده از سوخت های فسیلی، این منابع محدود بوده و دیر یا زود به اتمام می رسند. طبق برآوردهای انجام شده میزان استخراج نفت طی ۱۰ الی ۲۰ سال آینده رو به کاهش می گذارد [۵]. بنابراین به دلیل حساسیت هایی که در زمینه مسائل زیست محیطی و کاهش وابستگی به انرژی سوخته های فسیلی وجود دارد، و همچنین نیاز جدی آینده به انرژی های پایان ناپذیر، جهت گیری مصرف انرژی جهان به سمت انرژی های تجدید پذیر خواهد بود.

## ۱-۴ انرژی های تجدید پذیر

بشر از دیرباز با بکارگیری انرژی های فراوان و در دسترس طبیعت، در پی گشودن دریچه ای تازه به روی خویش بود تا از این رهگذر، بتواند افزون بر آسانتر کردن کارها، فعالیت های خود را با کمترین هزینه و بالاترین سرعت به انجام رساند و گامی برای آسایش بیشتر بردارد. نخستین انرژی بکاررفته توسط بشر، انرژی خورشید بود. انسان از نور و گرمای آفتاب بهره های فراوان می برد؛ تا آنجا که این انرژی جزئی جدایی ناپذیر از فرآیند برخی صنایع گشت و حتی امروزه نیز جایگاه خود را از دست نداده است. مردمانی که به جریان های آزاد آب دسترسی داشتند یا در سرزمین های بادخیز می زیستند، از این انرژی حرکتی استفاده می کردند و با تبدیل و مهار آن، بر توان خویش جهت انجام کارهای بزرگتر و دشوارتر، می افزودند. انرژی دیگری که در گذشته با آن آشنا بوده و از آن باری

می‌جستند، انرژی گرمایی زمین بود. انسان‌های ساکن نواحی آتشفشانی، آگاهانه یا ناخودآگاه، با بهره‌بردن از ویژگی‌های درمانی-گرمایی چشمه‌های آبگرم، به نوعی این انرژی را به کار می‌بستند.

با افزایش جمعیت و گسترش و پراکندگی آن و نیز همگام با نیاز روزافزون به انرژی‌های جدید و با بازدهی بیشتر، کم‌کم بشر سوخت‌های فسیلی را کشف کرد و آن را منبعی پایان‌ناپذیر یافت که نوید بخش آینده‌ای روشن بود. وابستگی انسان به سوخت‌های فسیلی، روزه‌به‌روز بیشتر می‌شد و با پیشرفت علم و فناوری و ساخت ماشین‌ها و ابزارهای گوناگون و به ویژه با رخ دادن انقلاب صنعتی، بکارگیری سوخت‌های فسیلی به اوج خود رسید. اما در کنار این پیشرفت‌ها، رفته‌رفته بشر دریافت که گذشته از محدود بودن انرژی فسیلی، بهره‌گیری از این انرژی نیز چندان بدون هزینه نخواهد بود و دیری نپایید که پیامدهای ناشی از سوزاندن سوخت‌های فسیلی، خود به چالشی تازه برای جوامع انجامید.

امروزه عوامل بسیاری از جمله گسترش فزاینده‌ی نیاز به انرژی، محدودیت منابع فسیلی، فاجعه‌ی آلودگی زیست‌محیطی ناشی از سوخت‌مواد فسیلی، گرم‌شدن هوا و اثر گلخانه‌ای، لزوم تعادل پخش گازهای آلاینده و بسیاری از دیگر عوامل، سبب رویکرد دوباره‌ی علم به انرژی‌های تجدیدپذیر طبیعی شد. با این تفاوت که پیشرفت علم و فناوری، فصلی تازه در بکارگیری و تبدیل و مهار این انرژی‌ها گشوده است. منابع انرژی تجدیدپذیر، منابع طبیعی هستند که نه تمام می‌شوند و نه اثرات زیان‌آور زیست‌محیطی دارند. ویژگی اصلی انرژی‌های تجدیدپذیر این است، که همیشه در دسترس بوده و دارای ضایعات مضر نیز نمی‌باشد. اغلب انرژی‌های تجدیدپذیر در عین تمیز بودن دارای کاستی‌های مخصوص به خود نیز می‌باشند. به عنوان مثال توربین‌های بادی مساحت زیادی را اشغال می‌نمایند (به طور متوسط مساحتی برابر با ۷ هکتار) و همچنین توربین‌های آبی به مکان‌های خاصی که دارای جریان‌های آب سطحی مانند رودخانه‌های مرتفع و آبشارها می‌باشند، نیاز دارند. انرژی‌های

تجدید پذیر به طور کلی شامل انرژی باد، انرژی آب، انرژی زمین گرمایی<sup>۱</sup> (ژئو ترمال)، انرژی زیست توده<sup>۲</sup> (سوخت های گیاهی) و از همه مهمتر انرژی خورشیدی می باشد.

## ۱-۴-۱ انرژی خورشیدی

خورشید عامل و منشأ انرژی های گوناگونی است که در طبیعت موجود است. سوخت های فسیلی که در اعماق زمین ذخیره شده اند، انرژی آبشارها و باد، رشد و نمو گیاهان، کلیه مواد آلی که قابل تبدیل به انرژی حرارتی و مکانیکی هستند، امواج دریا ها، قدرت جذر و مد که بر اساس جاذبه و حرکت زمین به دور خورشید و ماه حاصل می شود و . . . این ها همه نماد هایی از انرژی خورشیدی هستند. خورشید یک رآکتور هسته ای طبیعی بسیار عظیم است، که در آن بر اثر همجوشی هسته ای ماده به انرژی تبدیل می شود. در هر روز حدود ۳۵۰ میلیارد تن از جرم خورشید به تابش تبدیل می شود. میزان دما در مرکز خورشید حدود ۱۰ تا ۱۴ میلیون درجه سانتیگراد می باشد که از سطح آن با حرارتی نزدیک به ۵۶۰۰ درجه و به صورت امواج الکترو مغناطیسی در فضا منتشر می شود. در طول مسیر طولانی بین خورشید و زمین، مقدار زیادی از نور و گرمای خورشید از دست می رود، اما همان مقداری که به زمین می رسد، کافی است تا شرایط مناسبی را برای موجودات زنده فراهم آورد. خورشید به عنوان یک منبع بی پایان انرژی می تواند حلال مشکلات موجود در زمینه ی تولید انرژی و حفظ محیط زیست باشد. این انرژی که به زمین می تابد هزاران بار بیشتر از آنچه که ما نیاز داریم و مصرف می کنیم، می باشد.

شناخت انرژی خورشیدی و استفاده از آن برای منظوره های مختلف به زمان ماقبل تاریخ باز می گردد (شاید به دوران سفالگری). با وجود آن که انرژی خورشیدی و مزایای آن از قرون گذشته به خوبی شناخته شده بود، ولی بالا بودن هزینه ساخت سیستم ها برای تبدیل انرژی خورشید به سایر انرژی ها از یک طرف و عرضه نفت و گاز ارزان از طرف دیگر باعث شد که تا قبل از سال ۱۹۷۳ (افزایش

<sup>۱</sup> Geothermal

<sup>۲</sup> Biomass

ناگهانی قیمت نفت)، انرژی خورشیدی چندان مورد استقبال قرار نگیرد. اما پس از آن کشور های صنعتی و پیشرفته مجبور شدند به مسئله تولید انرژی از راه های دیگر توجه بیشتری نمایند.

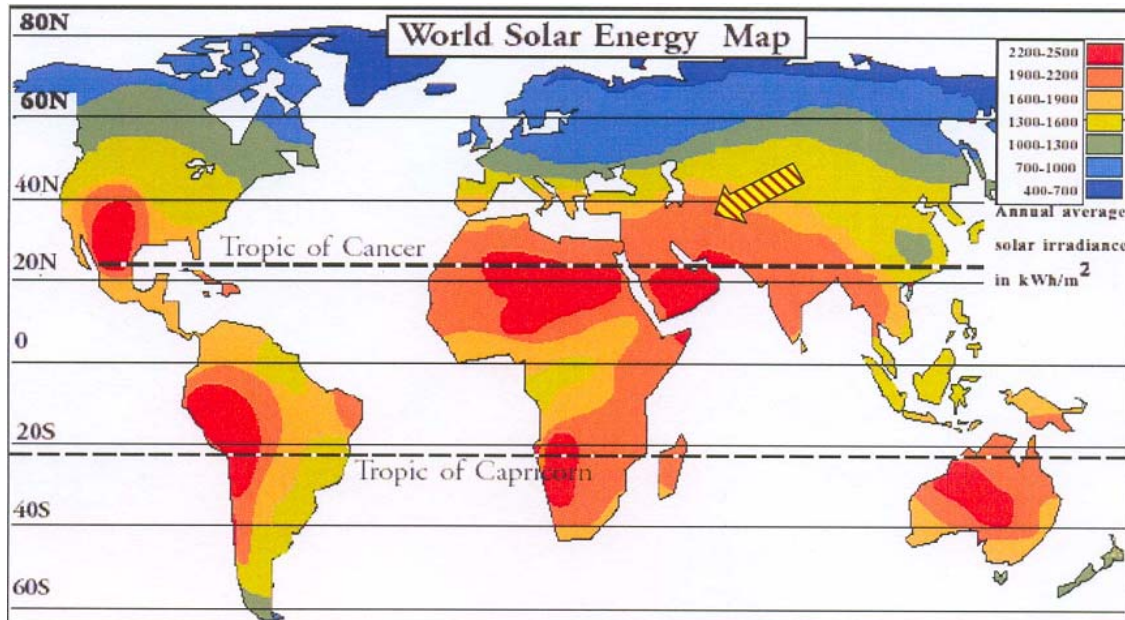
امروزه بهره برداری از انرژی خورشیدی در بسیاری از کشورهای جهان به خصوص مناطق با آفتاب زیاد، مرسوم و در حال پیشرفت است. به عنوان مثال، در حال حاضر ۰/۱۵ درصد انرژی مورد مصرف آمریکا از خورشید تأمین می شود. کشورهای اروپایی و سایر کشورهای صنعتی نیز مقدار کمی از انرژی مورد نیاز خود را از خورشید تأمین می کنند. در ۲۰ سال گذشته کارهای تحقیقاتی گسترده ای در زمینه استفاده از انرژی خورشید صورت گرفته و پیشرفت های فراوانی در زمینه توجیه اقتصادی و مقرون به صرفه کردن این انرژی انجام گرفته است. در ادامه این پایان نامه، از بین انرژی های تجدید پذیری که نام بردیم، به بحث و بررسی گسترده در مورد انرژی خورشیدی می پردازیم.

## ۱-۵ انرژی خورشیدی و مزیت های آن بر سایر انرژی ها

از انرژی خورشید می توان به عنوان یک انرژی پاک و بدون آلودگی (در مقایسه با سوخت های فسیلی) و رایگان و قابل دسترس در همه جا استفاده کرد. همچنین خورشید منبع اولیه تمام انرژی های شناخته شده در سیاره زمین است. علاوه بر موارد فوق برخلاف سوخت های فسیلی، انرژی خورشید به عنوان یک منبع بی پایان انرژی تا پنج میلیارد سال آینده حلال مشکلات ما باشد. انرژی و حرارتی که در هر ثانیه از خورشید به زمین می رسد، میلیون میلیون برابر قدرت بمب اتمی منفجر شده در هیروشیما و ناگازاکی است. به عنوان یک مثال برای مقایسه انرژی خورشید با سوخت های فسیلی، اگر همه ی سوخت های فسیلی را جمع کرده و بسوزانیم، این انرژی معادل تابش خورشید به زمین تنها برای ۴ روز می باشد. عدم پرداخت هزینه حمل و نقل و نداشتن تلفات به هنگام توزیع، از دیگر مزایای استفاده از انرژی خورشید می باشند.

## ۱-۵-۱ نحوه توزیع تابش خورشید بر سطح زمین

انرژی خورشید که به صورت تابش الکترو مغناطیسی به زمین می رسد، شامل محدوده وسیع طیفی  $2100\text{ nm} - 300\text{ nm}$  است. از این انرژی، حدود ۵ درصد نور فرا بنفش، ۴۶ درصد نور مرئی و ۴۹ درصد نور مادون قرمز می باشد. انرژی سالانه تابیده شده به زمین به میزان  $3 \times 10^{24}$  بوده که بیش از ۱۴۰۰۰ برابر مصرف رایج می باشد [۶]. چگالی انرژی تابشی در سطح زمین بسیار متغیر است و به عواملی نظیر عرض جغرافیایی محل، ارتفاع محل از سطح دریا، فصل و اوقات مختلف، ابری یا غیر ابری بودن آسمان و . . . بستگی دارد. ترکیبات موجود در جو (گرد و غبار، ازن، بخار آب، دی اکسید کربن، اکسیژن و نیتروژن) هر یک طیف جذب مخصوص خود را دارا می باشند و آن چه به زمین می رسد، توزیع اصلاح شده طیف تابشی می باشد. مقدار تابش سالیانه انرژی خورشید بر هر متر مربع از سطح زمین در شکل ۱-۲ نشان داده شده است.

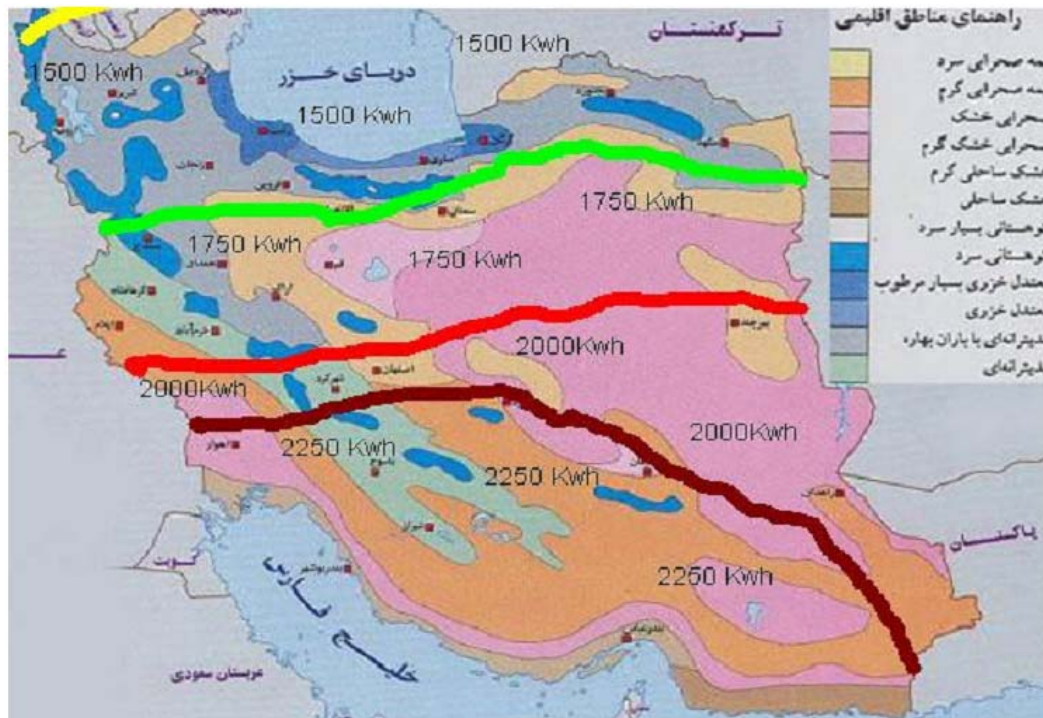


شکل (۱-۲) : مقدار تابش سالیانه انرژی خورشید بر هر متر مربع از سطح زمین



## ۱-۵-۲ تابش انرژی خورشید در ایران

تابش روزانه ی نور خورشید در ایران حاوی انرژی ای بیش از دو برابر مقداری است که ما سالیانه در کشور مصرف می کنیم. مقدار تابش انرژی از خورشید بر هر متر مربع از سطح زمین در سال، در نقاط مختلف متفاوت است. هر متر مربع از سطح کشور ایران، واقع بین مدار های ۲۵ تا ۴۰ درجه عرض شمالی، به طور متوسط ۲۰۰۰ کیلو وات ساعت در سال انرژی از خورشید دریافت می کند. در شکل ۳-۱ توزیع تابش سالیانه انرژی خورشیدی بر هر متر مربع از سطح زمین در ایران مشاهده می شود. همانطور که از شکل پیداست میزان تابش برای نواحی گرم و خشک از سایر نواحی بیشتر است.



شکل (۳-۱): توزیع تابش سالیانه انرژی خورشید بر هر متر مربع از سطح زمین در ایران

## ۱-۶ کاربرد های انرژی خورشید

در عصر حاضر از انرژی خورشیدی توسط سیستم های مختلف و برای مقاصد متفاوت استفاده و بهره گیری می شود که عبارتند از : ۱- استفاده از انرژی حرارتی خورشید برای مصارف خانگی، صنعتی و

نیروگاهی ۲- تبدیل مستقیم پرتوهای خورشید به الکتریسیته توسط تجهیزاتی به نام فتوولتائیک.

## ۱-۶-۱ استفاده از انرژی حرارتی خورشید

این بخش از کاربرد های انرژی خورشیدی شامل دو گروه نیروگاهی و غیر نیرو گاهی می شود. در نیروگاه های خورشیدی، توربین ها توسط بخار حاصل از انرژی حرارتی خورشید، انرژی جنبشی لازم جهت چرخاندن ژنراتور ها را فراهم می کنند. با چرخیدن این ژنراتور ها برق تولید می شود. این تأسیسات بر اساس انواع متمرکز کننده های موجود و بر حسب اشکال هندسی متمرکز کننده ها به سه دسته تقسیم می شوند، نیروگاه های خورشیدی از نوع : ۱- سهموی خطی ۲- دریافت کننده ی مرکزی ۳- شلجمی بشقابی. کاربرد های غیر نیروگاهی شامل مواردی مانند : آب گرمکن های خورشیدی و حمام خورشیدی، گرمایش و سرمایش ساختمان و تهویه مطبوع خورشیدی، آب سرد کن خورشیدی، خشک کن خورشیدی، کوره خورشیدی و خانه های خورشیدی می شود.

## ۱-۶-۲ فتوولتائیک

سلول های خورشیدی وسایلی هستند که انرژی تابشی نور خورشید را به انرژی الکتریکی تبدیل می کنند. پدیده ی تولید ولتاژ و جریان با این روش پدیده ی فتوولتائیک نامیده می شود. وقتی نور به سطح این وسایل که از قطعات نیمرسانا تشکیل شده اند، می تابد، باعث آزاد شدن بارهای الکتریکی در آن ها شده و در نتیجه این بارها می توانند آزادانه در داخل این نیمرسانا ها حرکت کرده و توسط الکترودهایی که دو طرف سلول تعبیه شده است، جمع آوری و وارد مدار شوند.

## ۱-۷ سلول های خورشیدی

در سلول های خورشیدی فتوولتائیک، انرژی خورشیدی بدون بهره گیری از مکانیزم های متحرک، به انرژی الکتریکی تبدیل می شود. استفاده از این سلول ها با بکارگیری آن ها به عنوان مولد الکتریکی

در سفینه های فضایی آغاز گشت. در سی سال اخیر محققین سعی دارند با بالا بردن بازدهی و کاهش هزینه ساخت این سلول ها، استفاده از آن ها را در زمین نیز مقرون به صرفه سازند. مقایسه ی هزینه تولید یک واحد الکتریسیته توسط سیستم های فتوولتائیک با سایر منابع قدرت، با احتساب هزینه تأمین وسایل، نصب و راه اندازی، عامل موثری در استفاده از این سلول هاست.

## ۱-۷-۱ ویژگی های سلول های خورشیدی

از ویژگی های سلول های خورشیدی می توانیم به موارد زیر اشاره کنیم.

۱- در مقایسه با توربین های بادی و آبی که مساحت زیادی را اشغال می کنند، سلول های خورشیدی مکان زیادی را اشغال نمی کنند. ۲- بازدهی آن ها با تغییرات دمایی زیاد تغییر نمی کند. ۳- به سادگی قابل نصب هستند. ۴- تولید وسیع این قطعات، به عنوان یک منبع انرژی پایدار بوده و انرژی زیادی را در اختیار ما قرار می دهد. به عنوان مثال با پوشاندن ۱/۰ درصد از سطح زمین توسط سلول های خورشیدی با راندمان ۱۰ درصد نیاز های کنونی ما به انرژی تأمین می شود. به عنوان مثالی دیگر، اگر تمام ایالت آریزونا در آمریکا را با سلول های خورشیدی بپوشانیم، انرژی مورد نیاز آمریکا تأمین می شود، در حالی که پوشاندن تمام آمریکا توسط توربین های بادی این نیاز را بر طرف نمی کند [۷]. ۵- بدون آلودگی صوتی بوده و با نصب بر روی دیوار ها و پشت بام ها مزاحمتی برای دید مناظر ایجاد نمی کنند. ۶- این قطعات هیچ گونه آثار مخربی بر روی محیط زیست ندارند.

## ۱-۷-۲ کاربرد های سلول های خورشیدی

از سلول های خورشیدی می توان در تأمین نیروی حرکتی ماهواره ها، تأمین انرژی دستگاه هایی که نیاز به ولتاژ های کم دارند ( ماشین حساب و ساعت )، تأمین الکتریسیته در مناطقی که دور از شبکه انرژی بوده و به مقدار انرژی کم اما مستمر نیازمندند، تهیه برق شهر توسط نیروگاه های فتوولتائیکی، تأمین نیروی لازم برای حرکت خودرو ها و قایق های کوچک و . . . استفاده نمود.

## ۸-۱ توجیه اقتصادی در ساخت سلول های خورشیدی

برای ساخت سلول های خورشیدی تجهیزات مختلفی از جمله، مواد مناسب، ضروری می باشد. سیلیکون کاندیدای اولیه برای تولید سلول های فوتوولتائیک بود. علی رغم اینکه در حال حاضر به طور غالب، حدود ۸۵ درصد بازار فوتوولتائیک جهان در انحصار بلور های سیلیکونی می باشد، اما با عامل محدود کننده هزینه تولید بالارو به رو هستند. برای تولید تک بلور سیلیکون به دما های خیلی زیاد و تجهیزات گران قیمت برای رشد بلور خالص نیاز است، در نتیجه هزینه تولید بسیار بالا خواهد بود. این نوع سلول ها، باید حدود ۵ سال کار کنند تا سرمایه هزینه شده جبران شود. به عنوان مثال، بازدهی بیشتر پنل<sup>۱</sup> های رایج در حدود ۱۰ درصد و قیمت آن  $350 \$/m^2$  می باشد ( به عبارت دیگر  $3/50 \$/W$  در پیک نور خورشید). وقتی که قیمت نصب، نگهداری پنل، سیم کشی، مبدل های DC به AC و... را نیز محاسبه کنیم این مبلغ به  $6 \$/W$  افزایش پیدا می کند. از طرفی طول عمر یک پنل تقریباً ۳۰ سال می باشد. بنابراین قیمت الکتریسیته تولید شده  $\$/ KW\_hr$   $0/3$  می باشد. در حالی که، در بیشتر نواحی آمریکا بهای الکتریسیته در حدود  $\$/ KW\_hr$   $0/6$  می باشد، بنابراین قیمت الکتریسیته حاصل از سلول های خورشیدی ۵ برابر این مقدار است. سلول های خورشیدی برای این که بتوانند با سوخت های فسیلی رقابت نمایند به کاهش عظیمی در قیمت نیاز دارند ( ۲۵ تا ۵۰ برابر کاهش در قیمت). همچنین برای رقابت برای الکتریسیته حاصل از سوخت های هسته ای، هزینه تولید آن ها باید به مقدار ۵ تا ۱۰ برابر کاهش یابد [۱]. هر چند که این سلول ها به دلیل بازدهی نسبتاً بالایشان برای کاربرد های خاص دارای اهمیت می باشند، اما در آینده بازار سلول های خورشیدی بیشتر توسط قیمتشان کنترل می شود. در نتیجه سلول های معدنی، به ویژه سیلیکونی، با محدودیت اقتصادی روبرو هستند، که به همین دلیل در سال های اخیر توجه زیادی به سلول های خورشیدی آلی (که هزینه ساخت پایینی دارند) در صنعت فوتوولتائیک صورت

---

Panel<sup>۱</sup>

گرفته است. ارزانی تهیه فراورده های آلی و پلیمری، علاوه بر مزایای دیگر که در فصل های بعد به طور مفصل مورد بحث قرار خواهند گرفت، جذابیت اصلی این مواد برای استفاده در سلول های خورشیدی می باشد. اما بازدهی کم سلول های آلی نسبت به نمونه های معدنی سبب عدم ورود تکنولوژی سلول های آلی به طور گسترده به بازار تجارت شده است. یکی دیگر از محدودیت های اساسی سلول های خورشیدی آلی علاوه بر بازدهی پایین آن ها در مقایسه با سلول های معدنی، آسیب پذیری آنها در برابر رطوبت و هوا می باشد که یکی از اهداف اصلی تحقیقات در زمینه سلول های خورشیدی آلی، غلبه بر این مشکلات است. در حال حاضر تحقیقات گسترده ای در نقاط مختلف جهان (آمریکا، کانادا، آلمان، اسپانیا، استرالیا، ژاپن و سایر کشور ها) برای افزایش بازدهی این سلول ها صورت گرفته است.

## ۹-۱ هدف از انجام پایان نامه

با توجه به نیاز روز افزون به انرژی در کشور، محدود بودن منابع فسیلی و آلودگی های زیست محیطی ناشی از آن ها و همچنین حرکت سریع و اشتیاق فراوان دیگر کشور ها به سوی تولید انرژی های پاک و تجدید پذیر، در آینده ای نزدیک به وارد کننده ی صرف صفحات خورشیدی تبدیل خواهیم شد، مگر آن که خود آستین همت را بالا زده و به ساخت این سلول ها اقدام نماییم.

اهمیت دلایل فوق الذکر سبب شده تا در این پایان نامه، به توصیف خواص و ویژگی های نیم رساناهای آلی و تفاوت آن ها با همتای معدنیشان، بررسی نحوه عملکرد انواع مختلف سلول های خورشیدی آلی و پارامتر های مهم در آن ها، آشنایی با خواص لایه های نازک و فصل مشترک، آنالیز سطح و روش های مختلف لایه نشانی، ساخت چند نمونه سلول خورشیدی با استفاده از نیم رساناهای مختلف آلی، بهینه سازی سلول های ساخته شده به منظور بهبود در عملکرد آن ها در مقیاس آزمایشگاهی و در نهایت اندازه گیری و تحلیل طیف های جذب لایه های نازک به کار رفته در ساخت سلول ها بپردازیم.

بدیهی است که دستیابی به روش های ساده و ارزان قیمت و روش های با قابلیت صنعتی، جهت ساخت سلول های خورشیدی (که همگی از اهداف این پایان نامه است) به نحو قابل ملاحظه ای بر پایین بودن بازدهی این سلول ها نسبت به سلول های معدنی غلبه می کند و در مراحل بعدی (پروژه های بعدی) بایستی به دنبال افزایش بازدهی این سلول ها بود. امید است که با گسترش تحقیقات این چینی در زمینه ساخت و بهینه سازی سلول های خورشیدی در آینده ای نزدیک به رقیبی جدی برای کشور هایی که در این زمینه فعالیت دارند تبدیل شویم.

فصل دوم

مطالعه  
نیمرسان‌های  
آلی

## ۲-۱ مقدمه

در سلول‌های خورشیدی، به موادی نیاز داریم که با جذب فوتون و گذار الکترون به تراز انرژی بالاتر، حامل‌های بار (الکترون و حفره) تولید نمایند. لذا هر چند فلزات دارای چگالی بار بالایی هستند، ولی از این جهت که دارای تراز نیمه پر بوده و همه الکترون‌های آزاد آن در نوار هدایت قرار دارند، جذب فوتون نمی‌تواند به عنوان منشاء تولید الکترون اضافی در نوار هدایت، محسوب شود. مواد عایق هم که دارای انرژی شکاف بسیار بالایی هستند، به علت ناچیز بودن چگالی فوتو حامل‌ها، برای این منظور قابل استفاده نخواهند بود. به همین دلیل برای تکنولوژی فوتولتائیک دنبال موادی هستیم که دارای خاصیت نیمرسانایی باشند. بنابراین پیش از هر چیز، به توضیح در مورد خاصیت نیمرسانایی مواد (اعم از معدنی و آلی) می‌پردازیم.

## ۲-۲ نیمرسانا

نیمرساناها دارای رسانندگی بین رسانندگی مواد عایق و رسانا می‌باشند. رسانندگی یک نیمرسانا بطور کلی نسبت به دما، روشنایی، میدان مغناطیسی و مقدار دقیق ناخالصی اتم‌ها حساسیت دارد. این حساسیت در رسانندگی، نیمرسانا را به یکی از مهمترین مواد برای کاربرد های الکترونیکی تبدیل می‌کند. تمامی نیمرساناها، چه آلی و چه معدنی، از دو نوار<sup>۱</sup> انرژی شبه پیوسته که دربرگیرنده ترازهای انتقال دهنده حامل‌های بار هستند تشکیل شده‌اند. اختلاف انرژی این دو نوار خیلی بیشتر از انرژی  $K_B T$  در دماهای معمولی می‌باشد. از لحاظ انرژی نوار پایینی تقریباً به طور کامل از الکترون پر می‌شود در حالی که نوار بالایی تقریباً خالی می‌باشد. اسم شبه پیوسته به این علت برای آنها انتخاب شده است که، اختلاف انرژی ترازهای داخلی آنها خیلی از  $K_B T$  کمتر می‌باشد.

---

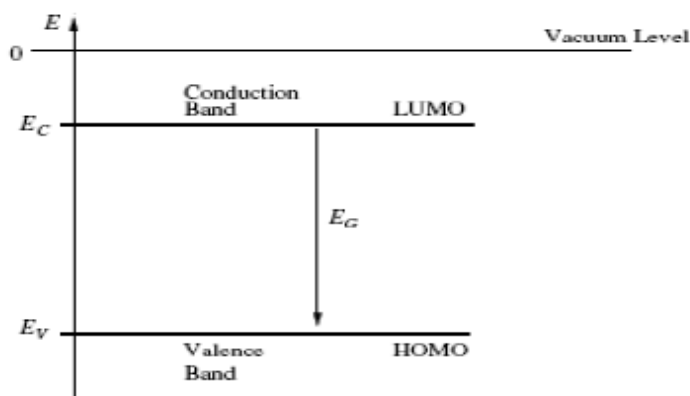
<sup>۱</sup> Band



ناحیه بین این دو نوار به ناحیه ممنوع یا گاف انرژی معروف می باشد، چون هیچ تراز انرژی مجاز الکترون درون آن وجود ندارد. در نیمرساناهای معدنی به نوار پایینی، نوار ظرفیت و نوار بالایی را نوار هدایت می گویند.

در نیمرساناهای آلی بر خلاف نیمرساناهای معدنی که جوهره اصلی آنها اتم هستند، مولکول ها نقش اصلی را ایفا می کنند و نیروهای ضعیف واندروالس نقش بسیار ناچیزی در رفتار نیمرسانا دارند. اینجا به نوار های ظرفیت و هدایت به ترتیب HOMO<sup>۱</sup> و LUMO<sup>۲</sup> گفته می شود (شکل ۱-۲) که از ترازهای مولکولی تک مولکول ها تشکیل می شوند [۸]. اختلاف بین HOMO و LUMO برابر با گاف انرژی می باشد، که در نیمرساناهای آلی اختلاف انرژی این تراز پایه HOMO و تراز برانگیخته LUMO بین ۱ تا ۴ الکترون ولت می باشد که تمام فرکانس های امواج الکترومغناطیس از مادون قرمز تا ماوراء بنفش را می پوشاند.

هر چند که فیزیک نیمرسانای معدنی فقط تا حدی می تواند در مورد نیمرساناهای آلی بکار گرفته شود اما اصول پایه ای سلول های خورشیدی را با کمک مدل دو نوری می توان شرح داد.



شکل (۱-۲): طرحی شماتیک از نوار های انرژی

<sup>۱</sup> Highest occupied molecular orbitals (HOMO)

<sup>۲</sup> Lowest unoccupied molecular orbitals (LUMO)

## ۲-۳ تعادل گرمایی در نیمرسانا

در تعادل گرمایی و در تاریکی احتمال اشغال یک جایگاه با انرژی  $E$  بوسیله آمار فرمی دیراک داده می شود:

$$F(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{K_B T}\right) + 1} \quad (1-2)$$

احتمال اشغال ترازهای الکترونی با انرژی برابر چند  $K_B T$  پایینتر از  $E_F$  تقریباً ۱ می باشد. در حالی که احتمال اشغال برای ترازهای الکترونی با انرژی چند  $K_B T$  بالاتر از  $E_F$  تقریباً برابر صفر می باشد. احتمال اشغال تراز فرمی  $E_F$  برابر  $\frac{1}{2}$  است.

به منظور بدست آوردن تعداد الکترون ها در واحد حجم  $n$  در محدوده انرژی  $E$  ،  $E+dE$  باید احتمال اشغال  $F(E)$  را در چگالی حالت ها  $D(E)$  ضرب کنیم. در نتیجه برای چگالی الکترون ها در محدوده  $E$  ،  $E+dE$  داریم:

$$dn(E) = D(E)F(E)dE \quad (2-2)$$

چون اختلاف انرژی تراز فرمی با لبه باند هدایت خیلی بیشتر از  $K_B T$  است می توانیم برای

$$E_c - E_F > \frac{3}{2} K_B T$$

تابع توزیع بولتزمن را جایگزین تابع توزیع فرمی دیراک کنیم:

$$F(E) \approx \exp\left(\frac{-E + E_F}{K_B T}\right) \quad (3-2)$$

در نتیجه چگالی الکترونی در باند هدایت از رابطه زیر بدست می آید:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} D(E) F(E) dE \approx N_c \exp\left(\frac{-E_c + E_F}{K_B T}\right) \quad (4-2)$$

$E_c$  انرژی لبه نوار هدایت و  $N_c$  چگالی موثر حالت ها در نوار هدایت می باشند.

در مورد نوار ظرفیت به جای بررسی ترازهای پر شده از الکترون ها، ترازهای پر نشده از الکترون ها را بررسی می کنیم. جای خالی الکترون را حفره می نامیم. در نتیجه حفره ها همان چگالی حالت های الکترون ها را دارا می باشند. چگالی حفره ها در نوار ظرفیت به صورت زیر بدست می آید:

$$P = \int_{-\infty}^{E_v} D(E) [1 - F(E)] dE \approx N_v \exp\left(\frac{-E_F + E_v}{K_B T}\right) \quad (5-2)$$

$E_v$  انرژی لبه نوار ظرفیت و  $N_v$  چگالی موثر حالت ها در نوار ظرفیت می باشند. رابطه بسیار مهمی از ترکیب روابط ۴-۲ و ۵-۲ بدست می آید:

$$n_i^2 = np = N_c N_v \exp\left(\frac{-E_G}{K_B T}\right) \quad (6-2)$$

که  $n_i$  چگالی حامل های بار ذاتی می باشد که از ویژگی های نیمرسانای مورد استفاده می باشد.  $E_G = E_c - E_v$  انرژی نوار ممنوعه می باشد. برای نیمرسانای ذاتی تمام الکترون های نوار هدایت از نوار ظرفیت برانگیخته شده اند پس  $p=n$  می باشد. حاصلضرب  $np$  به موقعیت  $E_F$  بستگی ندارد. یعنی با افزایش ناخالصی درون نیمرسانا ثابت می ماند. موقعیت تراز فرمی در نیمرسانای ذاتی با استفاده از  $p=n$  و روابط ۴-۲ و ۵-۲ بدست می آید:

$$E_F = \frac{1}{2}(E_v + E_c) + \frac{1}{2} K_B T \ln \frac{N_v}{N_c} \quad (7-2)$$

در دمای پایین  $N_v \approx N_c$  و تراز فرمی در نیمرسانای ذاتی درست در وسط گاف انرژی قرار می گیرد. در نیمرسانای نوع P تراز فرمی پایین می آید و به باند ظرفیت نزدیک می شود و در نیمرسانای نوع n بالا می رود و به باند هدایت نزدیک می شود.

## ۴-۲ تراز فرمی

موقعیت تراز فرمی در نیمرساناها از دو جهت حائز اهمیت می باشد:

۱- موقعیت تراز فرمی نیمرسانا همراه با تابع کار فلز تعیین کننده این است که در مرز فلز و نیمرسانا تماس اهمی<sup>۱</sup> یا تماس سد کننده<sup>۲</sup> شکل می گیرد.

۲- موقعیت نسبی تراز فرمی تعیین کننده این است که آیا نیمرسانا انتقال دهنده حفره (p-type) در نوار ظرفیت یا الکترون (n-type) در نوار هدایت می باشد. اگر تراز فرمی به نوار هدایت نزدیک تر باشد نیمرسانا را نوع n می نامند چون الکترونها برای هدایت موجودند و اگر تراز فرمی به نوار ظرفیت نزدیک تر باشد نیمرسانا را نوع p می نامند [۵].  
موقعیت تراز فرمی از روابط زیر بدست می آید:

$$n\text{-type} : E_F = E_C - K_B T \quad \text{Ln} \left( \frac{N_C}{N_D} \right) \quad (۸-۲)$$

$$P\text{-type} : E_F = E_V + K_B T \quad \text{Ln} \left( \frac{N_V}{N_A} \right)$$

$N_C$  چگالی مؤثر حالت ها در نوار هدایت،  $N_V$  چگالی مؤثر حالت ها در نوار ظرفیت،  $N_D$  غلظت اتم های بخشنده  $N_A$  غلظت اتم های پذیرنده،  $E_C$  لبه پایینی نوار هدایت و  $E_V$  لبه بالایی نوار ظرفیت می باشند. وقتی به دو سر نیمرسانا اختلاف پتانسیل وصل کنیم و یا تحت تابش قرار دهیم مفهوم تراز فرمی به صورت بالا کاربرد ندارد. تابش غلظت الکترون ها در نوار هدایت و غلظت حفره ها در نوار ظرفیت را افزایش می دهد که به ترتیب باعث بالا بردن و پایین آوردن تراز فرمی می گردد. یعنی تراز فرمی به دو تراز شکافته می شود که به آن ها تراز های شبه فرمی می گویند.

## ۲-۵ نیمرسانای تحت تابش

بر اثر تابش نور با فوتون هایی با انرژی بیشتر از  $E_G$  حامل های بار اضافی در سیستم تولید می شوند. سیستم به حالت تعادل جدید می رسد. در این حالت دیگر رابطه  $Pn = n_i^2$  برقرار نمی باشد و

<sup>۱</sup> -ohmic contact

<sup>۲</sup> -blocking contact

می شود. وقتی فوتون ها با انرژی بیشتر از  $E_G$  به نیمرسانا می تابند  $h\omega > E_G$ ، الکترون های نوار ظرفیت این فوتون ها را جذب می کنند و می توانند برانگیخته شده به نوار هدایت منتقل شوند. با انتقال یک الکترون به نوار هدایت در جای خالی آن در نوار ظرفیت یک حفره آفریده می شود. تعداد الکترون ها و حفره ها به یک نسبت افزایش می یابد که با نرخ تولید حامل های بار  $g$  تعریف می شود. بر اثر تولید حامل های بار اضافی تراز فرمی به دو تراز شکافته می شود. یک تراز برای الکترون های باند هدایت و دیگری برای حفره های باند ظرفیت، معادلات ۲-۴ و ۲-۵ به صورت زیر تغییر می کنند:

$$n = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_{Fc}}{K_B T}\right)$$

$$p = N_v \exp\left(-\frac{E_{Fv} - E_v}{K_B T}\right) \quad (9-2)$$

به ترتیب تراز شبه فرمی الکترون و تراز شبه فرمی حفره نامیده می شوند. با افزایش شدت نور و در نتیجه افزایش حامل های بار فاصله جدایی ترازهای شبه فرمی افزایش می یابد. اختلاف انرژی بین دو تراز شبه فرمی همیشه از  $E_G$  کوچکتر می باشد. زیرا میزان جذب همیشه با دو اثر یعنی گسیل خودبخودی و گسیل واداشته رقابت می کند [۸]. این دو اثر با افزایش حامل های بار بیشتر می شوند.

## ۶-۲ نیمرساناهای آلی

در ابتدا پلیمر ها به عنوان عایق های الکتریکی مورد بررسی قرار می گرفتند. در سال ۱۹۷۷، گروه هیگر<sup>۱</sup>، شیراکاوا<sup>۲</sup> و مک دیارمید<sup>۳</sup> متوجه شدند که پلی استیلن آغشته شده با ناخالصی (آلاییده) می تواند رسانندگی فلزی داشته باشد و این آغازی شد برای تحقیقات پیگیر در مورد پلیمر های ترکیبی<sup>۴</sup> (پلیمر با پیوند های همجوار) [۹]. کشف این سه محقق بعد ها در سال ۲۰۰۰ برنده جایزه نوبل شیمی

<sup>۱</sup> Heeger

<sup>۲</sup> Shirakawa

<sup>۳</sup> Macdiarmid

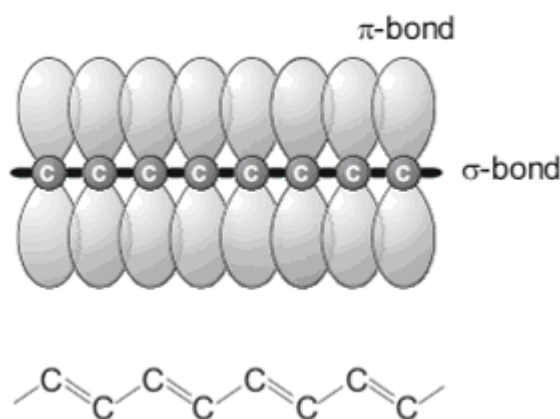
<sup>۴</sup> Conjugated polymer

شد [۱۰]. این خاصیت به ترتیب در بقیه پلیمرها نیز به خوبی شناسایی شد و ساخت مواد جدید رسانا و نیمرسانا را ممکن ساخت.

## ۲-۶-۱ منشأ خاصیت رسانندگی در نیمرساناهای آلی

پیوند بین اتم ها در یک نیمرسانای آلی از نوع کووالانسی می باشد و بین مولکول ها برهمکنش های ضعیف واندروالس وجود دارد. پیوندهای کووالانسی از نظر هم پوشانی یا در هم رفتن اوربیتال ها با یکدیگر بر دو نوعند: پیوند سیگما  $\delta$  و پیوند پی  $\pi$  که به طور شماتیک در شکل ۲-۲ نشان داده شده است.

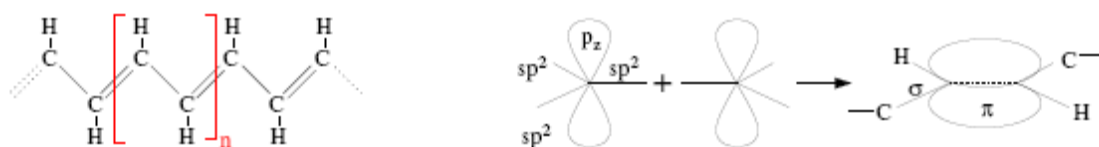
پیوندی که از هم پوشانی محوری دو اوربیتال نتیجه شود را پیوند سیگما و پیوندی که از هم پوشانی جانبی فقط دو اوربیتال P با P حاصل شود را پیوند پی می نامند. پیوند سیگما از پی محکمتر است. یک دلیل آن نزدیک بودن بیش از حد هسته های دو اتم و اثر نیروی دافعه هسته ها می باشد. به طور کلی اگر بین دو اتم چند پیوند باشد یکی از آن ها سیگما و بقیه پی می باشند.



شکل (۲-۲) : طرحی شماتیک از پیوند های سیگما و پی

اتم های کربن هسته اصلی مواد آلی را تشکیل می دهند. یک اتم کربن از اوربیتال های پر شده  $s$  و

۲S و اوربیتال غیر پر ۲P که مجموعاً شش الکترون را شامل می شود، تشکیل شده است (ساختار الکترونی کربن به صورت  $1s^2 2s^2 2p^2$  می باشد). چهار الکترون ۲S،  $2p_x$  و  $2p_y$  الکترون های ظرفیت هستند. برای سادگی پلی استیلن که ساده ترین ساختار شیمیایی را در این گروه از مواد داراست، مورد بررسی قرار می دهیم (شکل ۲-۳). در پلی استیلن که ساختار شبه یک بعدی دارد سه تا از این الکترون ها تشکیل یک اوربیتال جدید به نام  $sp^2$  می دهند. دو تا از این سه الکترون با کربن های مجاور پیوند سیگما تشکیل می دهند و سومی نیز با اتم هیدروژن پیوند سیگما تشکیل می دهد. از الکترون های ظرفیت تنها یک الکترون که در اوربیتال  $P_z$  قرار دارد باقی می ماند. اوربیتال  $P_z$  بر صفحه ای که شامل پیوند های سیگما می شود عمود است. اوربیتال های  $P_z$  کربن های مجاور به صورت جانبی همپوشانی کرده و تشکیل یک پیوند پی می دهند.



شکل (۲-۳): ساختار شیمیایی ترانس پلی استیلن (سمت چپ) و تشکیل پیوند های  $\pi$  ناجایگزیده از اوربیتال های  $P_z$  در امتداد زنجیر پلیمر (سمت راست)

در مدل نوار انرژی این مترادف است با اینکه پیوندهای  $\delta$  تشکیل نوار انرژی پائینی کاملاً پر و پیوند پی تشکیل یک نوار نیم پر که منشأ ویژگی های مهم الکترونیکی می باشد را می دهند.

مواد آلی دارای پیوند های یگانه و دوگانه پشت سر هم می باشند. پیوند دوگانه شامل یک پیوند سیگما و یک پیوند  $\pi$  می شود. نوارهای  $\pi$  اگر پر باشد، بالاترین ترازهای اشغال شده HOMO و اگر خالی باشند، پایین ترین ترازهای اشغال نشده LUMO نامیده می شود. پیوند الکترون در پیوند نوع  $\pi$ ، پیوندی ضعیف بوده و به سادگی شکسته و یا برانگیخته می شود. این سیستم الکترونی  $\pi$  (که در امتداد زنجیر کربن ناجایگزیده هستند)، همه ویژگی های مواد آلی از جمله جذب، گسیل نور، تولید و انتقال بار را حمل می کند. از جمله اینکه می تواند منشأ رسانایی الکتریکی در پلیمرها شوند. به عنوان

مثال وقتی هر یک از بخش‌ها را شامل یک اتم در نظر بگیریم. اگر هر واحد را که شامل دو کربن و دو الکترون است (یک پیوند یگانه و یک پیوند دوگانه کنار هم)، در نظر بگیریم، نسبت به جابجایی پیوند دوگانه دارای حالت پایه تبهگن خواهند بود. زیرا پیوند دوگانه و یگانه، بدون تغییر می‌تواند جابجا شود. در واقع دارای اوربیتال نیمه‌پر بوده و انتظار داریم همانند فلز، رسانا باشد [۷۱و۷۰].

همان طور که پیش از این گفتیم پیوند  $\pi$ ، پیوندی ضعیف می‌باشد، به طوری که در اثر تابش تراز  $\pi$  شکسته شده و به دو تراز  $\pi$  و  $\pi^*$  شکافته می‌شود. تراز  $\pi$  معادل نوار ظرفیت و تراز  $\pi^*$  معادل نوار هدایت خواهد بود. سو<sup>۱</sup>، شریف<sup>۲</sup> و هیگر زنجیرهای ترانس پلی استیلن (ایزومر) بی نهایت را به صورت تئوری مدل کردند (مدل SSH)، که این کار در سال ۱۹۷۹ به چاپ رسید. این مدل برای ترکیبات کربن-هیدروژن یک بعدی با انرژی‌های حالت پایه تبهگن (مانند پلی استیلن) کاربرد دارد. در این مدل جفت شدگی‌های الکترون - فونون در نظر گرفته می‌شود، اما از بر همکنش الکترون - الکترون صرف نظر می‌شود [۱۱]. در مدل SSH، گاف نواری  $E_G$  نیم‌رسانای آلی با عبارت :

$$E_G = 8\alpha u_0 \quad (۱۰-۲)$$

داده می‌شود، که در این رابطه  $\alpha$  نمایش دهنده جفت شدگی الکترون - فونون و  $u_0$  فاصله دیمریزاسیون<sup>۳</sup> (اختلاف بین طول پیوند یگانه و دوگانه که پس از دیمریزاسیون ایجاد می‌شود) می‌باشند.

محاسبات تئوری نشان می‌دهد که، اگر پیوند‌های یگانه و دوگانه هم طول بودند، نوار الکترون  $\pi$  به واسطه اصل پائولی، توسط الکترون‌ها نیمه‌پر خواهد شد و پلیمر فلز خواهد بود. پیرلز<sup>۴</sup> پیش‌بینی کرد که این حالت، به دلیل ناپایداری این ساختار، نمی‌تواند وجود داشته باشد و پیکر بندی پلیمر به پیوند‌های یگانه بلندتر و دوگانه کوتاه‌تر دیمر می‌شود. این یک واکنش خود به خودی است و تقارن

<sup>۱</sup> Su

<sup>۲</sup> Schrieffer

<sup>۳</sup> Dimerisation distance

<sup>۴</sup> Peierls



بلوری را کاهش می دهد، به طوری که انرژی حالت پایه نوار اشغال شده را مینیمم می کند. در حین این مینیمم سازی، انرژی ریسمان پتانسیلی زنجیر پلیمری دیمر شده افزایش یافته و پلیمر به حالت تعادل می رسد ( انرژی کل زنجیر پلیمری پایین می آید). منطقه بریلوئن به نصف طول اصلی خود کاهش می یابد و محدوده  $\langle k \rangle \pi/2a - \pi/2a$  را اشغال می کند. به طور کلی در اثر دیمریزاسین یک گذار از فلز به نیمرسانا رخ می دهد [۱۱].

## ۲-۶-۲ تولید اکسیتون در نیمرساناهای آلی

برانگیختگی در نیمرساناهای معدنی باعث می شود که یک الکترون از حالت زمینه اش، از نوار ظرفیت به نوار رسانش برود. معادل آن برای مواد آلی این است، که در برانگیزش توسط نور، هنگامی که انرژی فوتون فرودی بیش از فاصله بین سطوح HOMO و LUMO باشد، یک الکترون از HOMO به LUMO (یا  $\pi \rightarrow \pi^*$ ) می رود و یک حفره در تراز پایین تر باقی می ماند. مطابق با قانون کولن بین دو ذره (الکترون-حفره) حالت های مقید تشکیل می شود، این حالت های مقید به اکسیتون معروف است (فاصله بین الکترون و حفره در حدود چند آنگستروم می باشد). اکسیتون ها اولین بار توسط فرنکل<sup>۱</sup> توصیف شدند. سپس توسط پیرلز و بعدها توسط وانیر<sup>۲</sup> توسعه یافتند. دو نوع مجزا از اکسیتون ها در مواد آلی وجود دارد (اکسیتون فرنکل و وانیر). اولین حالت وقتی اتفاق می افتد که طول اکسیتون کوتاه بوده و تعداد کمی از واحد های پیوند های همجوار به شعاع تقریبی کمتر از  $5^\circ A$  را در بر می گیرد، که به اکسیتون فرنکل معروف است. اکسیتون فرنکل یک اکسیتون جایگزیده است. حالت دوم اکسیتون های بزرگتر می باشند، جایی که اکسیتون می تواند تعداد زیادی از پیوند ها را شامل شود و در آن فاصله غیر جایگزیده باشد، معمولاً در یک شعاع بین ۴ nm تا ۱۰ nm ناشی می شود، که به اکسیتون مت - وانیر<sup>۳</sup> معروف است [۱۱].

<sup>1</sup> Frenkel

<sup>2</sup> Wannier

<sup>3</sup> Mott-Wannier

اکسیتون ها بر اساس نوع اسپینی که الکترون و حفره تشکیل دهنده ی آن ها دارند، به دو دسته یگانه<sup>۱</sup> و سه گانه<sup>۲</sup> تقسیم می شوند. اگر الکترون و حفره دارای اسپین های متفاوت باشند، اکسیتون را یگانه، و اگر دارای اسپین یکسان باشند، سه گانه می گویند. در نیمرساناهای آلی اکسیتون تولید شده در اثر تابش فوتون، از نوع یگانه می باشد.

## ۲-۶-۳ طبقه بندی کلی نیمرساناهای آلی

به طور کلی نیمرساناهای آلی به دو گروه عمده تقسیم می شوند. دسته اول، مواد با وزن مولکولی پایین و دسته دوم، پلیمرهای ترکیبی. این دو دسته از مواد در وزن های مولکولیشان با هم متفاوت هستند. معمولاً، مولکول های بزرگ<sup>۳</sup> با یک وزن مولکولی بزرگتر از ۱۰۰۰۰ amu پلیمر نامیده می شوند، در حالی که مولکول های سبک تر، به مولکول های کوچک<sup>۴</sup> یا اولیگومرها<sup>۵</sup> اشاره دارند [۹].

هر دو نوع فوق به طور معمول یک سیستم الکترونی  $\pi$  همجوار دارند، که به وسیله اوربیتال های  $P_z$  اتم های کربن هیبرید شده  $SP^2$  در مولکول ها تشکیل می شود. تفاوت مهم این دو گروه در نوع فرایندی است که از آن ها لایه های نازک<sup>۶</sup> تهیه می کنیم. مولکول های کوچک مانند پرین، مشتقات پرین، فتالوسیانین ها و ... را می توان از طریق تصعید یا تبخیر، از فاز گاز لایه نشانی کرد. اما در مورد پلیمر های ترکیبی، لایه نشانی تنها از طریق انحلال به وسیله روش هایی چون پوشش چرخشی<sup>۷</sup>، پوشش از طریق اسپری<sup>۸</sup>، جوهر افشان<sup>۹</sup>، دکتر بلید<sup>۱۰</sup> و ... امکان پذیر می باشد [۱۲] و [۱۰].

---

<sup>۱</sup> Singlet  
<sup>۲</sup> Triplet  
<sup>۳</sup> Macro molecules  
<sup>۴</sup> Small molecules  
<sup>۵</sup> Oligomers  
<sup>۶</sup> Thin films  
<sup>۷</sup> Spin - coating  
<sup>۸</sup> Spray coating  
<sup>۹</sup> Ink jet printing  
<sup>۱۰</sup> Doctor Blade

## ۷-۲ ویژگی های نیمرساناهای آلی و تفاوت آن با نیمرساناهای معدنی

از مهمترین ویژگی های نیمرساناهای آلی استفاده شده در سلول های خورشیدی و تفاوت آن ها نسبت به مشابه معدنی شان، می توان به موارد زیر اشاره کرد:

### ۱-۷-۲ نیروهای بین مولکولی ضعیف

نیروی بین مولکولی در نیمرساناهای آلی از نوع برهمکنش های ضعیف و اندروالس می باشد. این نیروی بین مولکولی خیلی ضعیف تر از پیوند های کووالانسی موجود در مواد معدنی مانند Ga، Si و As بوده و در نتیجه خواص مکانیکی، حرارتی و الکترونیکی متفاوتی نسبت به مواد معدنی خواهند داشت. همچنین تابع موج در اطراف مولکول، ناجایگزیدگی بسیار کمتری داشته، که در ویژگی های اپتیکی و انتقال در مواد آلی، تأثیر زیادی خواهد داشت.

در بلور های نیمرساناهای معدنی، نزدیک شدن اتم ها به یکدیگر، باعث همپوشانی توابع موج اوربیتال های مجاور هم خواهد شد، و در نتیجه نوار های مجزای هدایت و ظرفیت تشکیل می دهند. اما در نیمرساناهای آلی به دلیل نیروی بین مولکولی ضعیف، به علت ساختار و عدم نزدیک شدن اوربیتال اتم ها در یک مولکول برای همپوشانی توابع موج، فرصت لازم برای همپوشانی اوربیتال ها برای تشکیل نوارهای هدایت و ظرفیت فراهم نمی شود و نوار پیوسته نداریم. به جای آن ها ترازهای HOMO و LUMO داریم. در نتیجه تئوری نوار ظرفیت و هدایت برای این نوع نیمرسانا، قابل کاربرد نیست [۱۱ و ۱۰ و ۷].

### ۲-۷-۲ انرژی بستگی اکسیتون بالا

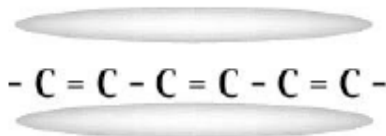
به علت همپوشانی ضعیف توابع موج در نیمرساناهای آلی، که از ضعیف بودن نیروهای بین مولکولی ناشی شده است، ضریب دی الکترونیک این مواد، از مشابه معدنی خود کمتر است (در مواد آلی حدود ۳

و در مواد معدنی حدود ۱۰ می باشد). از آنجایی که انرژی بستگی اکسیتون (هیدروژن گونه) با عکس مجذور ثابت دی الکتریک رابطه مستقیم دارد [۱۳]، انرژی بستگی در نیمرساناهای آلی بزرگتر از نیمرساناهای معدنی می باشد. در نتیجه اکسیتون ها در نیمرساناهای آلی بسیار جایگزیده، یعنی از نوع فرنکل می باشند (انرژی بستگی با شعاع بور رابطه عکس دارد). مقدار دقیق انرژی بستگی اکسیتون در نیمرساناهای آلی هنوز مورد بحث است، اما انتظار می رود که این مقدار در محدوده ۵۰۰-۲۰۰ meV باشد [۹]. در نیمرساناهای معدنی انرژی بستگی اکسیتون (جاذبه کولونی بین زوج الکترون و حفره) خیلی کمتر از انرژی گرمایی  $k_B T$  است (۲۵ meV در دمای اتاق). بنابراین اکسیتون در اثر برانگیختگی نوری، در دمای اتاق، در اثر انرژی گرمایی مستقیماً به حامل های بار آزاد (الکترون و حفره) تبدیل می شوند. اما در نیمرساناهای آلی، انرژی گرمایی در دمای اتاق برای غلبه بر انرژی بستگی اکسیتون و تولید حامل های بار آزاد کافی نیست. برای مثال اگر انرژی بستگی اکسیتون در حدود  $0.2 \text{ eV}$  باشد، با توجه به رابطه بین انرژی و میدان الکتریکی  $eEz = 0.2 \text{ eV}$ ، برای فاصله  $10 \text{ \AA}$   $z$  میدانی به شدت  $E = 2 \times 10^6 \text{ V/cm}$  نیاز است. لذا اکسیتون ها برای تبدیل شدن به حامل های بار آزاد، باید از محل تولید به نقاطی که دارای میدان الکتریکی در این حدود باشند مهاجرت نمایند. به عنوان یک نتیجه می توان گفت که در نیمرساناهای معدنی، جذب نور و تولید فوتو حامل به طور همزمان صورت می گیرد (حتی در دمای اتاق)، اما در نیمرساناهای آلی این گونه نیست و در دمای اتاق اکسیتون های مقید داریم.

## ۲-۷-۳ ضریب جذب بالا در نیمرساناهای آلی

به طور کلی نیمرساناهای آلی، چه مولکول های کوچک و چه پلیمر ها، دارای ضریب جذب بالایی در محدوده UV-Vis می باشند. که این مزیت امکان ساخت لایه های بسیار نازک را به منظور استفاده در کاربرد های فتوولتائیک فراهم می کند، به طوری که ضخامتی در حدود ۱۰۰ nm برای جذب تمام طیف رسیده به زمین کافی است [۹]. به عنوان مثال، ضریب جذب مولکول های کوچک آلی در حدود

$10^5 \text{ cm}^{-1}$  می باشد [۱۴]. بالا بودن ضریب جذب در مواد آلی را می توان به تنوع تراز های انرژی در این مواد نسبت داد. چون مولکول های آلی عموماً دارای دو قطبی الکتریکی هستند و این دو قطبی ها می توانند هم با فوتون ها و هم با مولکول های منفرد بر همکنش نمایند. لذا بسته به این که این مولکول ها نسبت به یکدیگر، چیدمان های مختلف دوقطبی-دوقطبی موازی، پاد موازی و با زاویه های مختلف داشته باشند، شکافتگی انرژی متفاوت خواهد بود و ترازهای انرژی متنوع خواهیم داشت [۷]. همچنین تأثیر مدهای ارتعاشی، خمشی و پیچشی، متغیر بودن طول مضاعف شدگی<sup>۱</sup> (شکل ۲-۴) در پلیمر های مضاعف و وجود ناخالصی نیز عواملی هستند که می توانند سبب ظهور سطوح مختلف انرژی شوند.



شکل (۲-۴): طول مضاعف شدگی، که در این محدوده الکترون در اوربیتال  $\pi$  غیر جایگزیده بوده و باعث تولید یک ابر الکترونی بسیار متحرک می شود.

## ۲-۷-۴ طول پخش (انتشار) اکسیتون کوتاه

مقدار مسافتی را که اکسیتون ها قبل از بازترکیب شدن طی می نمایند، طول پخش<sup>۲</sup> (انتشار) اکسیتون می گویند. چون در نیمرساناهای آلی، اکسیتون ها از نوع فرنکل بوده و الکترون و حفره در فاصله بسیار نزدیکی نسبت به هم قرار دارند، نرخ بازترکیب بالا بوده و در نتیجه طول پخش اکسیتون کوتاه می باشد. به عنوان مثال برای  $\text{CuPc}$ ،  $\text{ZnPc}$  و  $\text{C60}$  طول پخش اکسیتون به ترتیب برابر با ۱۰، ۳۰ و ۴۰ nm گزارش شده است [۱۵].

<sup>۱</sup> Conjugation length  
<sup>۲</sup> Diffusion length

## ۲-۷-۵ تحرک پذیری<sup>۱</sup> پایین حامل های بار

تحرک پذیری یکی از عوامل مهم در انتقال حامل های بار می باشد، زیرا این کمیت میزان تأثیر میدان الکتریکی بر حرکت حامل ها را بیان می کند. مقدار این کمیت در نیمرساناهای آلی نسبت به همتای معدنی خود بسیار پایین است (چند مرتبه از بزرگی). در نیمرساناهای آلی این کمیت تا حد زیادی به درجه نظم، روش تهیه و شرایط رشد لایه وابسته می باشد. به عنوان مثال برای نیمرساناهای آلی بلوری، تحرک پذیری به مقدار  $10^{-1} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ S}^{-1}$  می رسد، در حالیکه برای نیمرساناهای آلی بی ریخت تا مقادیر  $10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ S}^{-1}$  نیز غیر معمول نمی باشد. حداکثر تحرک پذیری قابل دستیابی در لایه های نازک آلی، با تحرک پذیری سیلیکون بی ریخت، قابل مقایسه می باشد، که مقدار آن از تحرک پذیری سیلیکون بلوری به مراتب کمتر است [۱۰]. بالاترین مقداری که اخیراً برای تحرک پذیری پذیرنده حفره ها در نیمرساناهای آلی بلوری کوچک مولکول گزارش شده است در حدود  $15 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ S}^{-1}$  می باشد در حالی که برای الکترون ها در بالاترین مقدار  $0.1 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ S}^{-1}$  است [۹]. در نیمرساناهای آلی همانطور که اندازه مولکول افزایش می یابد، بر میزان بی نظمی، در بهم پکیدگی مولکولی حالت جامد این مواد نیز افزوده می شود. بنابراین به عنوان یک نتیجه، تحرک پذیری حامل ها در پلیمرهای بلند زنجیر، پایین تر از مولکول های کوچک آلی است [۱۰].

## ۲-۷-۶ شباهت نیمرساناهای آلی به مولکول های گاز

به علت ضعیف بودن نیروی بین مولکولی، جذب اپتیکی و طیف های لومینسانس جامد های مولکولی آلی مشابه با طیف های موجود در فاز گازی می باشد. به طوری که همانند مولکول های منزوی دارای حالات اسپینی مشخص بوده و در نتیجه گذار بین تراز های سیستم توسط قواعد انتخاب محدود می شود. این محدودیت های قوانین گذار خود در کاهش تحرک پذیری این مواد مؤثر است و این امر

---

<sup>۱</sup> Mobility

سبب شده که یک حد بالای بازده کوانتومی به وجود آید. گاهی اصطلاح گاز جهت دار<sup>۱</sup> را برای بلور های آلی به کار می برند [۱۰].

## ۸-۲ مکانیزم انتقال بار در نیمرساناهای آلی (پلیمر های مضاعف)

بر خلاف نیمرساناهای معدنی که اکثراً ساختار شبکه ای متناوب سه بعدی دارند، پلیمرها ساختاری شبه یک بعدی دارند. بنابراین انتقال بار در پلیمرها را با مدل های استاندارد نیمرساناها نمی توان شرح داد. در نیمرساناهای معدنی سه بعدی، برانگیختگی های اولیه معمولاً الکترون ها و حفره ها (و اکسیتون ها در دماهای خیلی پایین) می باشند، اما در پلیمر های مضاعف، به واسطه ی پایین بودن ذاتی بعد سیستم، حامل های بار تمایل دارند که یک جفت شدگی قوی به شبکه داشته باشند، که این سبب به هم بستگی شدید الکترون و حفره می گردد. به طور کلی، طول مضاعف شدگی (گسترده گی الکترون های  $\pi$  ناجایگزیده در استخوان بندی پلیمر)، بر همکنش های بین زنجیری، چگالی حامل و از همه مهمتر درجه بی نظمی، پارامتر هایی هستند که نقش زیادی را در مکانیزم انتقال حامل در پلیمرهای مضاعف بازی می کنند. از آنجایی که در این سیستم ها تا حدود زیادی بی نظمی دیده می شود، مفهوم رسانایی نواری حامل های بار دارای کاربرد نمی باشد (بر خلاف همتای معدنی). نوارهای انتقالی در بلورهای آلی خیلی نازک تر از نوار های انتقال در بلور های معدنی هستند، و به جهت وجود بی نظمی در ساختار این نوع از مواد، ساختار نواری به جهت وجود بی نظمی به آسانی از هم گسیخته می شود. این بی نظمی سبب تشکیل حالت های جایگزیده در گاف انرژی می شود. انتقال بار در مواد آلی، با پرش بین حالت های جایگزیده اتفاق می افتد، که به این نوع انتقال، انتقال جهشی<sup>۲</sup> می گویند. این تئوری در ابتدا توسط کانول<sup>۳</sup> و مات مطرح شد. بعد ها مات این تئوری را به صورت اصولی تر، تحت عنوان تئوری VRH<sup>۴</sup> بیان نمود، به طوریکه انتقال بار در نیمرساناهای آلی می تواند توسط این

---

<sup>۱</sup> Oriented gas

<sup>۲</sup> Hopping transport

<sup>۳</sup> Conwell

<sup>۴</sup> Variable Range Hopping

تئوری توضیح داده شود. با وجود این هنوز برخی از خصوصیات انتقال بار در این مواد به خوبی شناخته شده نیست [۱۶].

در نتیجه، به علت این نوع از انتقال می توان انتظار داشت که تحرک پذیری این نوع لایه های نازک آلی چندین مرتبه از تحرک پذیری مواد غیر آلی و آلی بسیار منظم، کمتر می باشد. تحقیقات نشان داده با بهبود خاصیت بلوری نیم رساناهای آلی، تحرک پذیری در آن ها به شدت افزایش خواهد یافت و به انتقال نواری نیز دست خواهیم یافت. در واقع، بسته به درجه نظم، پدیده انتقال حامل بار در مواد آلی در محدوده بین انتقال نواری و انتقال پرشی اتفاق می افتد [۱۷].

به طور کلی، مکانیزم انتقال حامل بستگی به پهنای نواری ( $B$ ) دارد که در آن حرکت می کند. پهنای نوار  $B$  به طور عمده به وسیله همپوشانی توابع موج حامل در حالت های اولیه و نهایی تعیین می شود. در سیستم های به خوبی منظم، هنگامی که پهنای نواری از  $K_B T$  خیلی بزرگتر باشد، انتقال نواری بر انتقال پرشی غلبه می کند. علاوه بر اینکه افزایش خاصیت بلوری نیم رساناهای آلی (تشکیل بلورهای کامل) باعث افزایش تحرک پذیری می شود، با افزایش طول مضاعف شدگی و برهمکنش های بین زنجیری / مولکولی نیز می توان تحرک پذیری را در این مواد افزایش داد [۱۷].

حامل های بار برای این که بتوانند از حالتی به حالت دیگر (حالت های جایگزیده) جهش نمایند، باید از طریق جذب یا گسیل فونون بر اختلاف انرژی بین این حالت ها فائق آیند. میلر<sup>۱</sup> و آبراهامز<sup>۲</sup> نرخ گذار  $W_{ij}$  برای جهش از یک حالت اشغال شده  $i$  با انرژی  $E_i$  به یک حالت اشغال نشده  $j$  با انرژی  $E_j$  را به صورت زیر محاسبه نمودند [۱۸].

$$W_{ij} = \nu_0 \exp(-2\gamma R_{ij}) \begin{cases} \exp(-\frac{E_j - E_i}{K_B T}) & E_i < E_j \\ 1 & E_i \geq E_j \end{cases} \quad (11-2)$$

<sup>۱</sup> Miller  
<sup>۲</sup> Abrahams



که در آن  $v_0$  فرکانس جهش،  $R_{ij}$  فاصله بین حالت  $i$  و  $j$ ،  $\gamma$  عکس طول جایگزیدگی،  $K_B$  ثابت بولتزمن و  $T$  دما می باشند. تابع موج همپوشانی حالت  $i$  و  $j$  با اولین جمله نمایی شرح داده می شود و دومین جمله نمایی برای بستگی دمایی چگالی فونونی به کار می رود.

## ۹-۲ آرایش<sup>۱</sup> در نیمرساناهای آلی

چگالی حامل های ذاتی در نیمرساناهای آلی در مقایسه با نیمرساناهای معدنی، مانند سیلیکون، چندین مرتبه توانی کوچکتر می باشد (چگالی حامل های ذاتی را با استفاده از رابطه ۲-۶ می توان محاسبه کرد). علاوه بر چگالی حامل های ذاتی مقدار تحرک پذیری نیز در این نوع از نیمرساناها به مراتب کوچکتر از همتای معدنی خود است. این دو عامل سبب می شود که نیمرساناهای آلی زمانی که خالص هستند، رسانایی بسیار کمتری را در مقایسه با نیمرساناهای معدنی داشته باشند. برای این که بتوانیم چگالی حامل های ذاتی و در نتیجه رسانندگی را بالا ببریم، چندین راه حل ارائه شده است. که از این میان می توان به، آرایش الکترو شیمیایی، آرایش بار از سطح تماس، آرایش در اثر میدان و تولید حامل در اثر تابش نور اشاره کرد [۱۰].

آرایش شیمیایی پلیمر های مضاعف، رسانندگی آن ها را تا چندین مرتبه از بزرگی (حتی تا ۱۵ مرتبه) افزایش می دهد (تقریباً به اندازه رسانندگی مس). همچنین پیشرفت های اخیر در زمینه خصوصیات انتقال این نوع از مواد، آشکار کرده است که مولکول های مضاعف هیدروکربنی کوچک ممکن است که حتی خواص ابررسانایی نیز از خود نشان دهند [۱۷]. در پلیمر های مضاعف، حامل هایی که در اثر تابش نور و میدان القا شده اند، حامل هایی زود گذر و با طول عمر کوتاه می باشند، در حالی که حامل هایی که از آرایش شیمیایی سیستم ها به وجود آمده اند، حامل هایی پایدار می باشند [۱۷].

---

<sup>۱</sup> Doping

رابطه رسانندگی  $\sigma = ne\mu$  ، که در مورد مواد معدنی کاربرد دارد، به این شکل ساده برای پلیمر های رسانا کاربرد ندارد. این بیشتر به خاطر این حقیقت است که بی نظمی یک جنبه ی ذاتی در پلیمر هاست، که اغلب ریخت های<sup>۱</sup> پیچیده ای را نمایش می دهند (بخشی به صورت بلوری و بخشی به صورت بی ریخت). فرایند آلاینش در سیستم های مضاعف نسبتاً متفاوت از نیمرساناهای معدنی می باشد. برای مثال، در سیلیکون آلاینده، آلاینده هایی مانند فسفر، آرسنیک و بور در جایگاه های اتمی اتم میزبان (سیلیکون) جانشین می شوند و در نتیجه الکترون ها و حفره های آزاد در شبکه بلوری سه بعدی کاملاً متحرک هستند. اما در سیستم های مضاعف، آلاینده ها جانشین نمی شوند بلکه در بین جایگاه های اتمی قرار می گیرند. مطالعات اشعه X نشان می دهد که آلاینده ها در مجاورت زنجیر ها ی مضاعف واقع می شوند (در فاصله ۲ یا  $3A^\circ$  از زنجیر). این حامل های بار اضافی، که به وسیله آلاینش تولید شده اند، در امتداد زنجیر پلیمر حرکت کرده و سبب بروز رسانایی در ماده می شوند. در سیستم های آلاینده با کیفیت بالا، توابع موج حالت های گسترده شده شدیداً ناجایگزیده هستند و برای تشکیل دریای الکترونی همپوشانی می کنند. در پلیمر های رسانای فلزی کاملاً آلاینده شده،  $n$  از مرتبه  $10^{21} \text{ cm}^{-3}$  می باشد [۱۷]. علاوه بر مورد فوق در فرایند آلاینش نیمرساناهای آلی، هنوز مشخص نیست که آیا آلاینده ها به طور همگن در ماده توزیع می شوند یا خیر. در نتیجه پیدا کردن یک مدل استاندارد آلاینش برای مواد آلی، هنوز به صورت یک چالش باقی است [۱۶].

علاوه بر اینکه آلاینش سبب بالا رفتن رسانایی در نیمرساناهای آلی می شود، می توان با اضافه کردن یک آلاینده مناسب با مقدار مطلوب، ضریب جذب مواد آلی کوچک مولکول مانند CuPc را نیز بالا برد ( به عنوان مثال آلاینش CuPc توسط روبرن<sup>۲</sup>). این نوع از آلاینش، به عنوان فرایندی مفید در ساخت برخی از سلول های خورشیدی آلی فوتوولتائیک کاربرد دارد [۱۹].

---

<sup>۱</sup> Morphology  
<sup>۲</sup> Rubrene

فصل سوم

# سلول های خورشیدی آلی

## ۳-۱ تاریخچه ی سلول های خورشیدی

با استفاده از سلول های خورشیدی، تابش نور خورشید به طور مستقیم به انرژی الکتریکی تبدیل می شود. این فرایند اثر فوتولتائیک نامیده می شود. در نیروگاه های فوتولتائیک، می توان بدون استفاده از تجهیزات اضافی، انرژی حاصل از نور خورشید را مستقیماً به انرژی الکتریکی تبدیل نمود. یک سلول خورشیدی را می توانیم مانند یک باطری کوچک در نظر بگیریم که بر اثر تابش نور خورشید به این سلول، انرژی حاصل از نور خورشید به انرژی الکتریکی تبدیل می شود.

اثرات فوتولتائیک نخستین بار در سال ۱۸۳۹ توسط فیزیکدان فرانسوی ادmond بکورل<sup>۱</sup>، هنگامی که نور خورشید را به یکی از دو الکترود قرار داده شده در یک محلول الکترولیت تاباند و یک ولتاژ کوچک تولید شده از نور را اندازه گیری کرد، مشاهده شد [۲۰]. چارلز فریتز<sup>۲</sup> در سال ۱۸۸۳ یک سلول خورشیدی از سلنیم با راندمان کمتر از ۱ درصد ساخت که به عنوان سنسور نوری برای دوربین های عکاسی مورد استفاده قرار گرفت [۲۱]. در سال ۱۹۵۴، نخستین سلول خورشیدی با قابلیت تبدیل واقعی انرژی خورشید به الکتریسیته با بازدهی ۴/۵٪، توسط چاپین<sup>۳</sup> و همکارانش در آزمایشگاه بل<sup>۴</sup> و با استفاده از سیلیکون بلوری، ساخته شد [۲۰]. نخستین استفاده عملی از این سلول ها در قمر مصنوعی با استفاده از سلول p-n سیلیکونی با بازدهی ۶٪ در اوایل دهه ۱۹۷۰ گزارش شده است [۲۱]. در سی سال اخیر محققین سعی دارند با بالا بردن بازدهی، استفاده از آنها را در زمین نیز مقرون به صرفه سازند، که نتیجه این تلاش ها ساخت سلولی با بازدهی حدود ۵۰٪ در سال ۲۰۰۷ میلادی توسط گروه پروفیسور آلن بارنت<sup>۵</sup> در دانشگاه دلوار<sup>۶</sup> است [۲۲]. این سلول ها بعد از نصب به مراقبت و نگهداری خاصی نیاز ندارند، به همین علت در نقاطی مانند ایستگاه های رله امواج رادیو

---

<sup>۱</sup> Edmund Bequerel

<sup>۲</sup> Charels Fritts

<sup>۳</sup> Chapin

<sup>۴</sup> Bell laboratory

<sup>۵</sup> Allen Barnett

<sup>۶</sup> Delaware

وتلوژیون، ایستگاه های زلزله نگاری، چراغ های دریایی و همچنین چراغ های راهنمای هوایی که بازدید و مراقبت از سیستم به سختی امکان پذیر است، بکار می روند. بطور کلی، در مناطقی که دور از شبکه انرژی بوده و به مقدار انرژی کم اما مستمر نیاز است، استفاده از سلول های خورشیدی بسیار مناسب خواهد بود [۲۲]. در حال حاضر بازار سلول های خورشیدی در اختیار سلول های سیلیکونی می باشد، که به واسطه بازدهی و استحکام خوبشان است. از بزرگترین معایب این نوع سلول ها می توان به هزینه ی تولید بسیار بالا و شکننده بودن آن ها اشاره کرد. همچنین عناصر گروه سه و پنج جدول تناوبی برای ساخت سلول های خورشیدی مورد استفاده قرار می گیرند اما هزینه ی تولید این نوع سلول ها هم خیلی زیاد است. ولی بازدهی ۳۰ درصدی آن ها می تواند این نقیصه را تحت تأثیر قرار دهد [۲۳]. نوع دیگری از سلول های خورشیدی، سلول های لایه نازک<sup>۱</sup> می باشند. تکنولوژی لایه های نازک یکی از دستاوردهای بشر در سال های ۱۹۸۰ تا ۱۹۸۲ بوده است که نخستین بار توسط بویینگ<sup>۲</sup> معرفی شدند. بازدهی سلول های خورشیدی لایه نازک، طی سال های ۱۹۸۰ تا ۱۹۸۲، از ۵/۷ درصد به ۱۰ درصد رسید. مایکل<sup>۳</sup> و همکارانش با استفاده از نتایج تحقیقات بویینگ در سال ۱۹۸۷، بازدهی سلول های خورشیدی لایه نازک را به ۱۴/۱ درصد رساندند. در آن زمان به علت عدم وجود تکنولوژی های مناسب برای ساخت این گونه سلول ها، تحقیقات در این زمینه متوقف شد، که این توقف ۱۰ سال به طول انجامید، سرانجام در سال ۱۹۹۸ اولین سلول خورشیدی لایه نازک تجاری بنام  $Cu(In,Ga)Se_2$  تولید شد [۲۴]. امروزه بازدهی بهترین سلول های خورشیدی لایه نازک به حدود ۲۰ درصد رسیده است.

مهمترین مسائل برای سلول های خورشیدی، هزینه ی تولید، میزان انرژی تولید شده، بازدهی و طول عمر آنهاست. سلول های سیلیکونی بالاترین بازدهی را دارا می باشند ولی مشکل این نوع سلول ها هزینه ی بالای ساخت و شکننده بودن آن ها است. بنابراین پیدا نمودن یک گزینه مناسب، با هزینه

---

<sup>1</sup> Thin film

<sup>2</sup> Bowing

<sup>3</sup> Michel

تولید پایین همواره مورد توجه محققان قرار داشته، به طوری که با کشف رسانایی در مواد آلی، این مواد برای استفاده در سلول های خورشیدی مورد استفاده قرار گرفتند. در حال حاضر سلول های خورشیدی براساس نوع مواد به کار رفته در آن ها به دو دسته معدنی و آلی تقسیم می شوند.

## ۲-۳ سلول های خورشیدی معدنی

نیمرساناهای معدنی مانند سیلیکون و ژرمانیوم و ترکیبات آن ها پایه اکثریت قطعات فوتولتائیک تجاری می باشند. این مواد نسبتاً مقاوم و دارای بازدهی بالایی هستند. در حال حاضر حدود ۸۵٪ بازار فوتولتائیک جهان در انحصار بلور های سیلیکون می باشد، اما این سلول ها با عامل محدود کننده هزینه بالا روبرو می باشند. برای تولید تک بلورهای سیلیکونی، به دماهای خیلی بالا و تجهیزات گران قیمت برای رشد بلور خالص نیاز است، که در نتیجه هزینه بسیار بالای تولید را سبب می شود. علاوه بر بلور های سیلیکونی، ساختار های دیگری نیز برای سلول های خورشیدی معدنی پیشنهاد شده است که می توان به مواردی چون، سیلیکون چند بلوری و آمورف، لایه های نازک سیلیکون و سایر نیمرساناهای معدنی، ترکیب نیمرساناهای گروه II-VI، III-V و I-III-VI اشاره کرد [۲۵]. البته محدودیت دیگر برای سلول های خورشیدی معدنی انعطاف ناپذیری و شکننده بودن این نوع سلول هاست.

## ۳-۳ سلول های خورشیدی آلی

با کشف پلیمرهای رسانا و نیمرسانا، دریچه‌ای بر روی تحقیق در زمینه‌ی مواد آلی و کاربرد کلاسیکی نیمرساناها، مثلاً در ترانزیستورها، دیودهای نوری آلی (OLED)<sup>۱</sup> و سلول‌های خورشیدی باز شد. مواد آلی مانند پلیمرها، رنگ ها<sup>۲</sup>، رنگدانه ها<sup>۳</sup> و بلور های آلی مولکولی می‌توانند خواص نیمرسانایی نوع n

---

<sup>۱</sup> Organic Light Emitting Diode

<sup>۲</sup> Dyes

<sup>۳</sup> Pigments

یا p از خود نشان دهند. این مواد دارای ضرایب جذب اپتیکی بالایی هستند که این امکان تولید سلول‌های خورشیدی خیلی نازک را فراهم می‌سازد و بنابراین به مقدار خیلی کمی از ماده برای تولید این گونه سلول‌ها نیاز است. همچنین مواد آلی در ترکیبات خیلی زیادی یافت می‌شوند. سلول‌های خورشیدی بر پایه لایه‌های نازک مواد آلی به خاطر مزایایی چون سهولت ساخت، روش‌های متنوع ساخت، انعطاف پذیری مکانیکی، قیمت پایین، وزن کم و تولید در مساحت‌های بزرگ دارای جذابیت می‌باشند [۲۶-۲۹]. به علاوه با اصلاح ساختار شیمیایی آن‌ها می‌توان حساسیت آن‌ها به طول موج‌های مختلف را بیشتر کرد [۳۰]. مواد آلی پلیمری را می‌توان به راحتی و با هزینه کم، توسط روش‌های محلول، لایه‌نشانی کرد. همچنین از آنجایی که تغییر ساختار مونومر این مواد سبب تغییر خصوصیات الکترواپتیکی آن‌ها از جمله انرژی شکاف می‌شود، شیمی‌دانان قادرند برای دست‌یابی به حداکثر بازدهی، ساختار آن‌ها در سطح اتمی تغییر داده تا طیف‌های مختلف نور خورشید را به طور مؤثرتری جذب نمایند. سلول‌های خورشیدی آلی علاوه بر مزایای فوق‌الذکر دارای معایبی نیز هستند، که مهم‌ترین آن بازدهی پایین و آسیب‌پذیری این قطعات در برابر رطوبت و هوا می‌باشد. این بازدهی پایین از ویژگی‌های نیم‌رساناهای آلی مانند، انرژی بستگی اکسیتون بالا، تحرک‌پذیری حامل پایین و طول پخش اکسیتون کوتاه در نیم‌رساناهای آلی ناشی می‌شود.

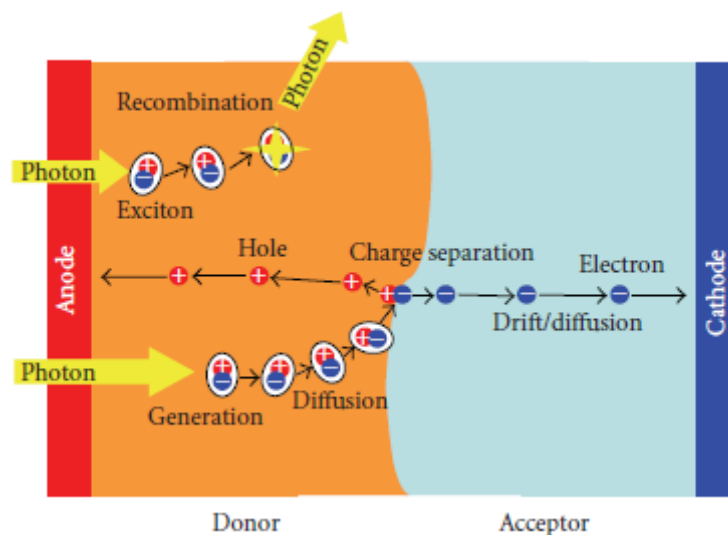
کشف اثر فوتوولتائیک در قطعات لایه نازک آلی به دهه هفتاد میلادی باز می‌گردد، که در آن زمان بازدهی این قطعات در حدود ۰/۰۰۱٪ گزارش شده است. در سال ۱۹۸۶ نخستین سلول خورشیدی آلی با بازدهی ۱٪ به وسیله تنگ<sup>۱</sup> ساخته شد [۲۶]. مزیت‌های سلول‌های آلی نسبت به همتای معدنی خود، سبب شد که تلاش‌های بسیاری در زمینه بالا بردن بازدهی این قطعات صورت گیرد، به طوری که در سال ۲۰۰۶ بازدهی این سلول‌ها به مقدار ۵/۵٪ نیز رسید [۳۲ و ۳۱ و ۲۹ و ۹].

---

<sup>۱</sup> Tang

### ۳-۴ مراحل تولید انرژی در سلول های فوتوولتائیک آلی

سلول های فوتوولتائیک آلی همانند سلول های معدنی از محیط های (نیمرساناهای) p و n برخوردار می باشند. به طور کلی فرایند تولید انرژی در قطعات فوتوولتائیک آلی به چهار مرحله اساسی تقسیم می شود که شامل، جذب نور و تشکیل اکسیتون، انتشار اکسیتون به طرف پیوند گاه، تجزیه<sup>۱</sup> اکسیتون به حامل های بار و انتقال حامل ها به طرف الکتروود ها و جمع آوری آن ها می باشد. این چهار مرحله به طور شماتیک در شکل ۳-۱ نشان داده شده است.



شکل (۳-۱): فرآیند های لازم برای تولید انرژی در سلول های فوتوولتائیک آلی دو لایه ای [۹]

### ۳-۴-۱ جذب نور و تشکیل اکسیتون

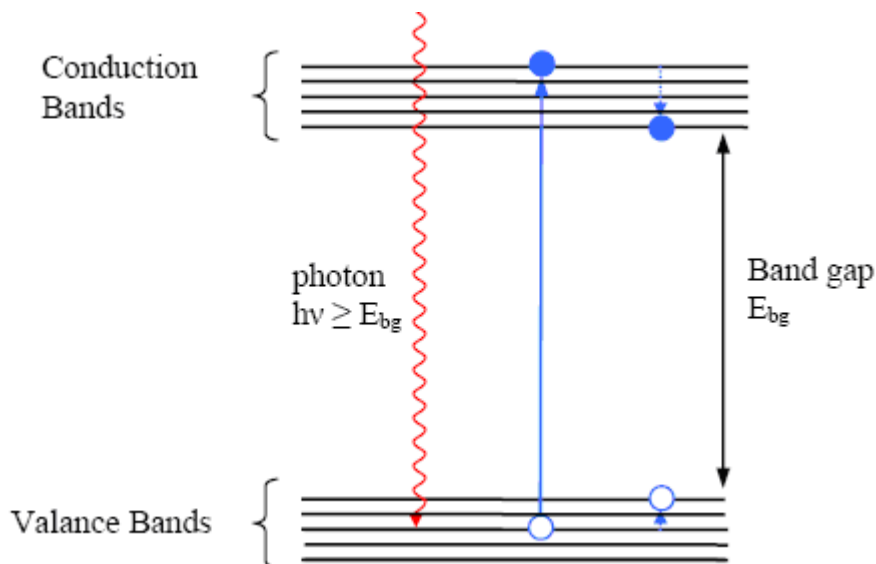
همان طور که قبلاً اشاره کردیم، هر نیمرسانایی با انرژی گاف  $E_G$  مشخص می شود و آن، مقدار انرژی ای می باشد که برای آزاد ساختن یک الکترون از هسته لازم است تا بدین طریق یک جفت الکترون-حفره تولید شود. این انرژی را می توان از نور تهیه کرد. هر فوتون نور دارای انرژی  $h\nu$  است که  $h$  ثابت پلانک و  $\nu$  فرکانس نور مورد نظر می باشد. انرژی  $h\nu$  را می توان به شکل زیر بیان کرد:

<sup>۱</sup> Dissociation



$$h\nu = h \frac{c}{\lambda} = \frac{1.24}{\lambda(\mu m)} \quad (1-3)$$

که در آن  $c$  سرعت نور و  $\lambda$  طول موج نور است. فوتون هایی با انرژی بیشتر از گاف انرژی ( $E_G$ ) می توانند الکترون های ترازهای پایینی نوار ظرفیت را برانگیخته کنند و یا اینکه انرژی جنبشی الکترون را افزایش دهند، که در نهایت به گرما تبدیل می شود. اگر انرژی فوتون ها از  $E_G$  بیشتر باشد احتمال جدایی بارها وجود دارد. الکترون های برانگیخته سریعاً به پائین ترین تراز مولکولی اشغال نشده نوارباند هدایت و حفره ها به بالاترین تراز مولکولی اشغال شده نوار ظرفیت مهاجرت می کنند [۳۳].



شکل (۲-۳) : طرح شماتیک از جذب نور و تشکیل الکترون و حفره [۳۳]

الکترون و حفره تشکیل شده در اثر برهمکنش های کولنی به یکدیگر مقید شده و تشکیل یک زوج الکترون-حفره مقید می دهند که اکسیتون نام دارد. مرحله جذب نور در بین سلول های خورشیدی معدنی و آلی مشترک می باشد. در سلول های معدنی جذب نور و تولید فوتو حامل به طور همزمان صورت می گیرد، اما در نیمرساناهای آلی این گونه نیست.

نرخ تولید اکسیتون به وسیله فوتون ها را می توان از رابطه زیر به دست آورد:

$$G_{exc}(z) = g\alpha N_0(t) \exp(-\alpha z) \quad (2-3)$$

در این رابطه،  $z$  فاصله از الکتروود اول تا محل تولید اکسیتون در حجم لایه،  $g$  بازدهی تبدیل فوتون به اکسیتون داخلی،  $\alpha$  ضریب جذب لایه،  $N_0(t)$  تعداد فوتون های فرودی که تابعی از زمان است، می باشند [۳۴].

### ۳-۴-۲ انتشار اکسیتون به طرف پیوندگاه

اکسیتون های به وجود آمده در اثر جذب فوتون، با فونون های موجود در لایه برهمکنش می کنند. اگر انرژی بستگی اکسیتون ها، قابل مقایسه با انرژی فونون ها ( در حدود  $k_B T$ ) باشد، به راحتی به حامل های بار مثبت و منفی تجزیه می شوند. به همین دلیل در نیمرساناهای معدنی، فوتون فرودی قادر است بلافاصله حامل های بار آزاد از اکسیتون تولید شده، تولید نماید. اما در نیمرساناهای آلی، انرژی فونون ها قادر به تجزیه اکسیتون ها نیستند. به عبارت دیگر، به علت بالا بودن انرژی بستگی اکسیتون ها در مواد آلی، در دمای اتاق، فوتون فرودی به جای تولید حامل بار آزاد، اکسیتون تولید می نماید. تجزیه اکسیتون های تولید شده در اثر جذب نور، جزء فرایندهای اصلی سلول های خورشیدی آلی بوده، که در بازدهی کل تأثیر بسزایی دارد. برای تولید حامل های بار آزاد، ابتدا باید بر انرژی بستگی آن ها فائق آییم. برای غلبه بر این انرژی، به میدان هایی با شدت  $E = 2 \times 10^6 V/cm$  نیاز می باشد. میدانی در این مرتبه بزرگی در ناحیه فصل مشترک دو نیمرسانای  $n$  و  $p$  به وجود می آید. لذا اکسیتون ها باید از محل تولید به سمت پیوندگاه انتشار یابند. فرایند پخش اکسیتون، برای سلول های خورشیدی آلی، فرایندی بسیار مهم است.

اکسیتون پس از تولید شدن می تواند به طور آزادانه درون لایه حرکت نماید، مشروط بر این که جهت حرکت آن از لحاظ انرژی مناسب باشد (به طرف انرژی گیبس کمتر). انتقال اکسیتون ها در پلیمر ها می تواند از طریق انتقال در درون یک زنجیره و یا پرش بین زنجیره ها صورت گیرد. اکسیتون ها اگر چه از لحاظ بار خنثی بوده و تحت تأثیر میدان حاصل از اختلاف توابع کار دو الکتروود شتاب نمی گیرند، ولی می توانند از انرژی بیشتر به سمت انرژی کمتر و یا از بی نظمی کمتر به بی نظمی بیشتر

حرکت نمایند (پخش شدن در اثر حرکت از چگالی اکسیژن بیشتر به سمت چگالی اکسیژن کمتر). این فرایند پخش هم چنان ادامه می یابد تا اینکه اکسیژن تجزیه شده و یا بازترکیب شود (یعنی به دام افتد). فرایند بازترکیب به دو صورت تابشی (آزاد سازی فوتون) و یا غیر تابشی (تولید گرما به صورت فوتون) اتفاق می افتد. در مورد سلول های خورشیدی، هیچ کدام از این فرایندها مفید نمی باشد و باید قبل از نابود شدن اکسیژن ها آن ها را مهار کنیم.

با استفاده از معادله پیوستگی برای چگالی اکسیژن ها و اضافه کردن جملات اضافی (به خاطر تولید و باز ترکیب اکسیژن ها) به آن می توانیم معادله پخش اکسیژن وابسته به زمان را به صورت رابطه ۳-۳ بیان کنیم [۳۵-۳۷].

$$\frac{\partial n_{exc}(z,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n_{exc}(z,t)}{\partial z^2} + G_{exc}(z,t) - \frac{n_{exc}(z,t)}{\tau_{exc}} \quad (3-3)$$

در سمت راست رابطه فوق، جمله اول مربوط به پخش اکسیژن بوده که در آن،  $n_{exc}$  چگالی اکسیژن و  $D$  ثابت پخش اکسیژن می باشد. جمله دوم تولید اکسیژن و جمله سوم، بازترکیب اکسیژن ها را بیان می کند. در ضمن در این رابطه  $\tau_{exc}$ ، طول عمر اکسیژن می باشد. با در نظر گرفتن حالت تابش ایستا<sup>۱</sup> ( $\partial n_{exc} / \partial t = 0$ ) و شرایط مرزی مناسب می توان معادله دیفرانسیلی فوق را به راحتی حل کرد [۳۷-۳۴ و ۱۵].

### ۳-۴-۳ تجزیه اکسیژن و تولید حامل های بار آزاد

تجزیه اکسیژن هایی که در اثر جذب نور تولید شده اند، جزء فرایندهای اصلی سلول های خورشیدی آلی بوده که در بازدهی کل، اثر بسزایی دارد که ابتدا باید بر انرژی بستگی آنها فائق آییم. در یک سیستم دوگانه شامل دو مولکول متفاوت با سطوح انرژی متفاوت، تبدیل اکسیژن به حامل های بار آزاد توسط مکانیزم های ذاتی رفتن به انرژی پائین تر توصیف می شوند. انرژی لازم برای جداسازی بارها

<sup>۱</sup> Stationary illumination

با رابطه ۳-۴ محاسبه می‌شود [۳۸ و ۶].

$$\Delta G_{cs} = e(E_{ox}(D) - E_{red}(A)) - E_{oo} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_s R_{cc}} - \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{r^+} + \frac{1}{r^-} \right) \left( \frac{1}{\epsilon_{ref}} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \quad (۳-۴)$$

در رابطه فوق  $E_{00}$  انرژی حالت برانگیخته (که الکترون از آنجا انتقال می‌یابد)  $R_{cc}$  فاصله مرکز تا مرکز بارها در حالت جدا شده،  $r^+$  و  $r^-$  به ترتیب شعاع یون‌های مثبت و منفی و  $\epsilon_s$  ضریب گذردهی نسبی ماده است. بنابراین تراز انرژی حالت برانگیخته  $E_{00}$  که الکترون از آن به سطح انرژی حالت بار جدا شده  $G_{cs}$  می‌رود نیز بسیار مهم می‌باشد. در تقریب اول میزان تمایل ماده بخشنده به از دست دادن الکترون (انرژی اکسید شدن  $(E_{oc}(D))$  و میزان تمایل پذیرنده به جذب الکترون  $(E_{red}(A))$  انرژی احیاء) مقدار انرژی اضافی مورد نیاز برای جدایی بارها را از لحاظ انرژی ( $\Delta G_{cs} < 0$ ) تعیین می‌نماید.

برای بهره برداری از سلول‌های فوتوولتائیک آلی به تجزیه اکسیتون‌ها قبل از باز ترکیب و تبدیل به حامل‌های بار در فاصله‌ای حدود  $10\text{ nm}$  از محل جذب نور، نیازمندیم (چون طول پخش اکسیتون در نیمرساناهای آلی نوعاً در حدود  $10\text{ nm}$  می‌باشد). تجزیه اکسیتون‌ها در فصل مشترک دو نیمرسانای بخشنده و پذیرنده، اتصال فلز/نیمرسانا و در محل ناخالصی‌هایی مانند اکسیژن اتفاق می‌افتد.

چنین فرایندی در سلول‌های خورشیدی آلی، می‌تواند به وسیله میدان الکتریکی داخلی<sup>۱</sup> انجام پذیرد. اما بازدهی این فرایند در چنین میدان‌هایی، در قطعات الکترونیکی آلی، پایین است ( $\eta_D \approx 10\%$ ). اما با این وجود تصدیق شده است که بیشترین تجزیه اکسیتون در مواد آلی، در فصل مشترک یک نیمرسانای بخشنده با یک پتانسیل یونیزاسیون پایین<sup>۲</sup> (IP) و یک نیمرسانای پذیرنده

<sup>۱</sup> Built-in electric field

<sup>۲</sup> Ionization Potential

با یک انرژی الکترون خواهی<sup>۱</sup> بالا (EA) روی می دهد. بسته به سطوح انرژی مواد پذیرنده و بخشنده، اکسیتون های شدیداً مقید می توانند در چنین فصل مشترکی به پولارون<sup>۲</sup> الکترونی آزاد در ماده پذیرنده و پولارون حفره ای آزاد در بخشنده تجزیه شوند [۱۵]. به این پولارون های منفی و مثبت ( $P^+$  و  $P^-$ ) که هنوز توسط برهم کنش های کولنی با یکدیگر پیوند دارند، جفت های پولارونی<sup>۳</sup> می گویند. در واقع جفت های پولارونی حالت های واسط میان برانگیختگی های مولکولی الکترونی و حامل های بار آزاد هستند. اثر متقابل بین باز ترکیب و تجزیه طول عمر زوج (جفت) را تعیین می کند [۱۷].

به طور کلی فرایند تجزیه اکسیتون و تولید حامل های آزاد در محل پیوندگاه پذیرنده - بخشنده مولکولی را می توان به دو مرحله تقسیم کرد:

۱- مرحله اکسیتونی<sup>۴</sup> که در آن اکسیتون به صورت یک الکترون در قسمت پذیرنده و یک حفره در طرف بخشنده پیوندگاه قرار می گیرد.

۲- مرحله الکترونی<sup>۵</sup> که الکترون و حفره به وسیله تجزیه گرمایی<sup>۶</sup> و یا یونیزاسیون در یک میدان الکتریکی از هم جدا می شوند [۳۹].

بازدهی تجزیه اکسیتون را به عنوان تابعی از میدان الکتریکی E می توان به وسیله رابطه زیر بیان کرد [۱۲].

$$\eta_D = \eta_0 \exp\left(-\frac{r_c}{r_0}\right) \left[1 + \frac{r_c e E}{2! K_B T} + \dots\right] \quad (5-3)$$

در رابطه فوق  $r_c = \frac{e^2}{4\pi\epsilon k_B T}$  فاصله بحرانی است که در آن انرژی کولنی بیشتر از انرژی جنبشی بوده

<sup>۱</sup> Electron Affinity

<sup>۲</sup> Polaron

<sup>۳</sup> Polaron pairs

<sup>۴</sup> Exciton step

<sup>۵</sup> electronic step

<sup>۶</sup> thermal dissociation

و  $r_0$  فاصله حرارتی است.

با در نظر گرفتن تجزیه اکسیتون ها در معادله پخش اکسیتون، می توان رابطه ۳-۳ را به صورت زیر اصلاح کرد. بنابراین معادله پیوستگی اکسیتون اصلاح شده<sup>۱</sup> برابر خواهد بود با:

$$\frac{\partial n_{exc}(z,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n_{exc}(z,t)}{\partial z^2} + G_{exc}(z,t) - \frac{n_{exc}(z,t)}{\tau_{exc}} - F(z - z_{int}) n_{exc}(z,t) \quad (۳-۶)$$

در این رابطه جمله چهارم در سمت راست، تجزیه اکسیتون را در فصل مشترک بخشنده- پذیرنده ( $z_{int}$ ) با نرخ تجزیه  $F(z - z_{int})$  نشان می دهد [۳۴ و ۳۵].

### ۳-۴-۴ انتقال حامل ها به سمت الکتروود ها و جمع آوری آن ها

حامل های بار آزاد تولید شده که همان الکترون و حفره می باشند، می توانند در اثر میدان حاصل از اختلاف توابع کار الکتروود ها به سمت الکتروود مربوطه حرکت کرده و توسط آن ها جمع آوری شوند. ذرات بار دار مثبت (حفره ها) در آند (تابع کار بالا) و ذرات بار منفی (الکترون) در کاتد (تابع کار پایین) جمع می شوند. البته باید توجه داشت که علاوه بر اینکه میدان الکتریکی باعث حرکت حامل ها به سمت الکتروود ها می شود (جریان سوق یا رانشی<sup>۲</sup>)، اختلاف چگالی حامل ها نیز در ایجاد جریان (جریان پخشی<sup>۳</sup>) مؤثر خواهد بود.

### ۳-۵ ساختار های مختلف سلول های خورشیدی آلی

سلول های خورشیدی آلی را بر اساس نوع معماری به کار گرفته شده در ساختشان، می توان به انواع زیر تقسیم بندی نمود:

<sup>۱</sup> Modified exciton continuity equation

<sup>۲</sup> Drift current

<sup>۳</sup> Diffusion current

### ۳-۵-۱ سلول های تک لایه ای<sup>۱</sup>

سلول های خورشیدی در ابتدا، تنها به صورت تک لایه ای ساخته می شدند. این ساختار ها فقط شامل یک ماده نیمرسانا (پلیمر) بوده و جدایی بارها در محل اتصال نیمرسانا- فلز، در مرز تماس با الکتروود صورت می گیرد. عامل جدا کننده، میدان حاصل از اختلاف تابع کار دو الکتروود، در مرز شاتکی<sup>۲</sup> می باشد [۵]. تماس الکتروود دیگر به صورت اهمی در نظر گرفته می شود. در حالت اتصال مدار کوتاه الکترونها از الکتروود با تابع کار پایینتر (Al) به سمت الکتروود با تابع کار بالاتر (ITO) حرکت کرده و یک میدان الکتریکی در لایه پلیمری برقرار می شود. این رفتار را تا حدی می توان با مدل دیود تونلی فلز - عایق - فلز (MIM) شرح داد. میدان الکتریکی خارجی موجود وظیفه جدایی اکسیتونها و انتقال حاملهای بار آزاد به سمت الکتروودهای مخالف و تولید جریان را برعهده دارد.

این نوع سلول ها ساختاری ساده دارند، اما به علت به کار بردن یک نوع ماده، دامنه وسیعی از طیف خورشید، جذب و مهار نمی شود و ناحیه فعال نوری بسیار نازک بوده و همچنین، هر دو حامل مثبت و منفی در یک ماده حرکت کرده، در نتیجه احتمال بازترکیب افزایش و یا اتلاف انرژی بالا خواهد بود. به عنوان مثال، مشخص شده است که در آزمایشاتی که از پلیمر MEH-PPV استفاده شده، تنها ۱۰٪ از اکسیتون ها به حامل های بار آزاد تجزیه می شوند، در نتیجه بازدهی قطعات پلیمری تک لایه ای زیر ۰/۱٪ باقی می ماند [۹].

### ۳-۵-۲ سلول های دو لایه ای<sup>۳</sup>

مهمترین کشف در مسیر بالا بردن بازدهی سلول های آلی، ساخت سلول های خورشیدی شامل یک پیوند ناهمگن<sup>۴</sup> بین مواد بخشنده و پذیرنده بود، که عملکرد کاملاً بهتری را نسبت به قطعات تک لایه

---

<sup>۱</sup> Single layer cells

<sup>۲</sup> Schottky

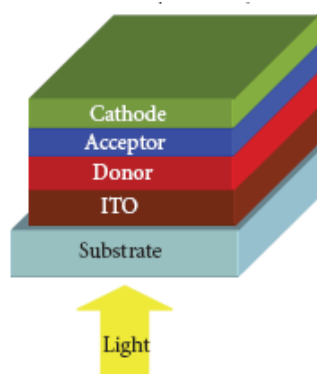
<sup>۳</sup> Bilayer cells

<sup>۴</sup> Heterojunction

ای دارا بودند. این نوع از سلول های آلی نخستین بار در سال ۱۹۸۶، توسط تنگ و با استفاده از فتالوسیانین مس (CuPc) و یکی از مشتقات پریلن به نام PTCBI ساخته شد. بازدهی تبدیل توان این سلول ۰.۱٪، بازدهی کوانتومی متناظر ۰.۳۰٪، ولتاژ مدار باز ( $V_{oc}$ ) ۰.۴۵ V و ضریب پرشدگی (FF) آن ۰.۶۵٪ گزارش شده است [۹و۲۶].

در این سلول های دو لایه ای اکسیتون ها می توانند در محل پیوندگاه، به علت تفاوت تراز انرژی نسبی مولکول های بخشنده و پذیرنده به حامل های بار تجزیه شوند. مولکول های بخشنده و پذیرنده می توانند مولکول های کوچک آلی، پلیمر ها و یا ترکیبی از این دو باشند. این ساختار به چند دلیل سودمندتر از سلول های تک لایه ای می باشد. جدا سازی اکسیتون به دلیل تشکیل سطح پیوندگاه بخشنده- پذیرنده افزایش می یابد؛ ناحیه فعال سلول در دو طرف پیوندگاه پخش شده و به موجب آن، پهنای این ناحیه دو برابر می شود (در حدود ۲۰ nm). ثانیاً، میزان نور جذب شده افزایش می یابد. ثالثاً، الکترون و حفره تولید شده در مرز دو ماده، به طور مجزا و در دو ماده جداگانه به سمت الکتروود مناسب حرکت می کنند، در نتیجه، احتمال بازترکیب آن ها کاهش می یابد.

البته در این نوع سلول ها به دلیل نازک بودن ناحیه تهی در مرز مشترک، تنها اکسیتون های تشکیل شده در نزدیکی پیوندگاه، یعنی فاصله ای کمتر از طول پخش اکسیتون، می توانند تجزیه شوند. در شکل زیر ساختار یک سلول دو لایه ای مشاهده می شود.



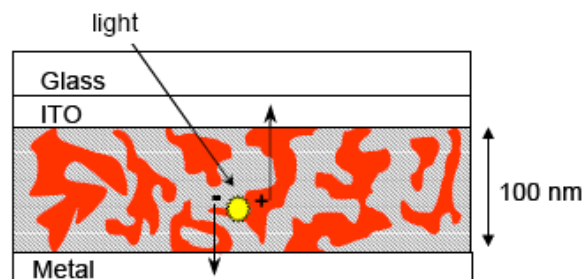
شکل (۳-۳) : نمایی از یک سلول آلی با ساختار دو لایه ای [۹]



با استفاده از مواد مناسب و مطالعه در زمینه روش های بهینه سازی ساخت (مانند استفاده از لایه سد کننده اکسیتون)، بازدهی این سلول ها روز به روز در حال افزایش است، به طوریکه در سال ۲۰۰۴ بازدهی این سلول ها، به مقدار ۴/۲٪ نیز رسید [۴۰].

### ۳-۵-۳ سلول های مخلوطی<sup>۱</sup>

در سال ۲۰۰۳ ساختار اصلی سلول دو لایه ای تنگ با استفاده از تصعید همزمان<sup>۲</sup> دو ماده CuPC و PTCBI، که منجر به یک ساختار مخلوطی شد، به مقدار قابل توجهی بهبود یافت. به طوری که در اثر افزایش مساحت فصل مشترک دو ماده، بازدهی بالاتری (۱/۵٪) به دست آمد [۹]. در سلول های مخلوطی، دو ماده آلی بخشنده و پذیرنده با یکدیگر مخلوط شده و در واقع از طریق ایجاد پیوند ناهمگن حجمی BHJ<sup>۳</sup>، تشکیل یک لایه را می دهند (شکل ۳-۴). در این سلول ها، از طریق پخش شدن محل پیوندگاه در حجم سلول، جداسازی بارها در همه ی حجم سلول صورت می گیرد. نقطه قوت این ساختار در این است که با ایجاد یک سطح تماس بزرگ بین دو نیمرسانا، باعث می شود که اکسیتون های تولید شده، مسیر کوتاهتری را از محل تولید تا پیوندگاه طی کنند و در نتیجه بازترکیب کاهش می یابد. این ساختار به ما اجازه می دهد که لایه هایی با ضخامت بزرگتر (چند برابر طول پخش اکسیتون ها) تولید نماییم. بنابراین قادریم میزان جذب را بالا برده و فوتون های بیشتری را دریافت کنیم.



شکل (۳-۴): یک سلول مخلوطی، مشاهده می شود که نواحی پیوندگاه در حجم این سلول پخش شده است [۶].

<sup>۱</sup> Blend cells  
<sup>۲</sup> Cosublimation  
<sup>۳</sup> Bulk heterojunction

مشکل سلول های مخلوطی در این است که حامل های بار برای رسیدن به الکترودها، باید از دو ماده مختلف عبورکنند، در نتیجه دائماً تغییر فاز می دهند که این موضوع باعث کاهش تحرک پذیری حامل (به علت افزایش یافتن مقاومت سری سلول) و به دنبال آن کاهش طول پخش خواهد شد [۳۳]. علاوه بر این، نقص دیگر این سلول ها در این است که هر دو نوع ماده بخشنده و پذیرنده، به هر دو الکتروود متصل می باشند. در نتیجه احتمال بازترکیب در مرز الکتروودها بالا می رود و بازدهی کاهش خواهد یافت.

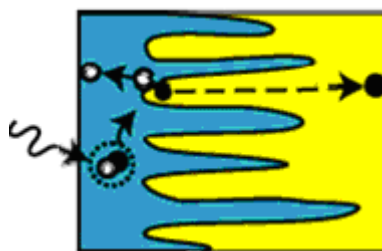
در تهیه سلول های مخلوطی، برای لایه نشانی مولکول های کوچک آلی از روش تبخیر همزمان<sup>۱</sup>، و برای پلیمرها از روش پوشش چرخی می توان استفاده نمود. بازدهی سلول های مخلوطی نیز به طور مداوم در حال افزایش می باشد، به طوری که با ساخت یک سلول BHJ از CuPc:C60، مقدار بازدهی به ۵٪ نیز رسیده است [۴۱ و ۴۰ و ۳۲].

### ۳-۵-۴ سلول های لایه در لایه<sup>۲</sup>

به منظور بر طرف کردن نواقص گفته شده در مورد سلول های مخلوطی، ساختارهای جدیدی تحت عنوان لایه در لایه گسترش یافتند. این نوع ساختار جدید مزایای دو ساختار دولایه ای و مخلوطی را داراست. یعنی علاوه بر این که سطح مرزی بخشنده-پذیرنده در حجم پخش شده، نیمرسانای پذیرنده به کاتد و نیمرسانای بخشنده به آند متصل می شود. ساختار این سلول ها را می توان در شکل ۳-۵ مشاهده نمود. جدا سازی بارها در مرز بین لایه ها که ساختار مخلوطی داشته واز در هم تنیدگی دو لایه با هم به دست آمده اتفاق می افتد. انتقال بار در لایه مناسب رخ می دهد، و به علت این که حامل های بار بعد از جدا شدن می توانند به طور جداگانه در دو ماده مجزا انتقال یابند، از باز ترکیب آن ها جلوگیری می شود، به طوری که سبب تقویت بازدهی خواهد شد.

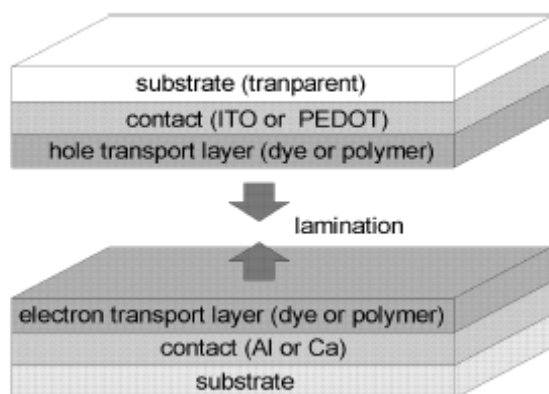
---

<sup>۱</sup> Codeposition  
<sup>۲</sup> Laminated cells



شکل (۳-۵): سلول لایه در لایه، نفوذ نواحی بخشنده و پذیرنده باعث افزایش نواحی تجزیه اکسیتون شده است.

روش آماده سازی این سلولها بدین صورت است که لایه ای از ماده بخشنده و لایه ای از ماده پذیرنده را جداگانه، یکی روی زیر لایه فلزی و دیگری را روی زیر لایه ITO می نشانند. سپس این دو لایه را روی هم و در درجه حرارت بالا پرس می کنند. با این کار حدوداً ۲۰-۳۰ nm ضخامت از دو لایه درون یکدیگر رخنه می کنند [۳۹]. در حالی که بقیه آنها دست نخورده باقی می ماند و مانع در تماس بودن هر ماده با هر دو الکتروود می گردد. روش ساخت یک سلول لایه در لایه در شکل ۳-۶ نمایش داده شده است.



شکل (۳-۶): روش ساخت یک سلول لایه در لایه [۵]

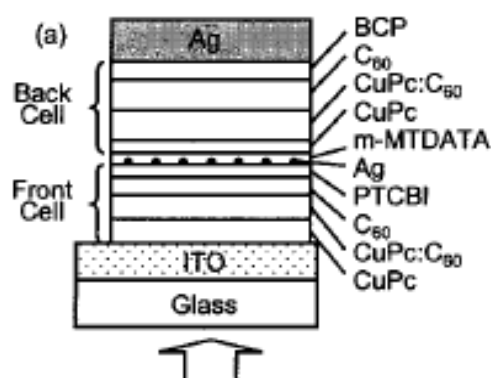
### ۳-۵-۵ سلول های پی در پی<sup>۱</sup>

یکی از روش های افزایش بازدهی سلول های آلی قرار دادن سلولهای مختلف روی هم<sup>۲</sup> و بدست آوردن ساختار چند لایه ای<sup>۳</sup> می باشد. استفاده از مواد با ضریب جذب های مختلف این امکان را

<sup>۱</sup> Tandem cells  
<sup>۲</sup> Stacking  
<sup>۳</sup> Multilayer

فراهم می کند که طیف بیشتری از نور خورشید جذب گردد و در نتیجه بازدهی سلول بالاتر رود. این سلول ها می توانند از روی هم چیدن سلول های دو لایه ای با پیوند ناهمگن ساده، سلول های مخلوطی با پیوند ناهمگن حجمی و یا ترکیبی از این دو، ساخته شوند. به عنوان یک نمونه، فارست<sup>۱</sup> و پیومنز<sup>۲</sup> توانستند در سال ۲۰۰۳، با روی هم چیدن دو سلول دو لایه ای ساده با بازدهی ۱٪ به یک سلول پی در پی با بازدهی ۲/۵٪ دست پیدا کنند [۱۵]. معمولاً بین دو سلول لایه ای بسیار نازک نقره لایه نشانی می شود. در سلول های پی در پی، ولتاژ مدار باز  $V_{oc}$  سلول نهایی،  $n$  برابر  $V_{oc}$  هر یک از سلول های مجزا خواهد بود، که  $n$  تعداد سلول های مجزا می باشد. در ضمن بایستی بین سلول های مختلف، اتصال های اهمی برقرار شود [۱۵].

این نوع از سلول ها نسبت به سایر ساختار ها بازدهی بیشتری را دارا می باشند، به طوری که بیشترین بازدهی برای یک سلول آلی، که تاکنون به دست آمده، مربوط به یک سلول پی در پی بوده ( با بازدهی ۵/۷٪) که توسط ژو<sup>۳</sup> و فارست و همکارانشان ساخته شد. ساختار این سلول را می توانیم در شکل ۳-۷ مشاهده کنیم [۲۹ و ۴۰].

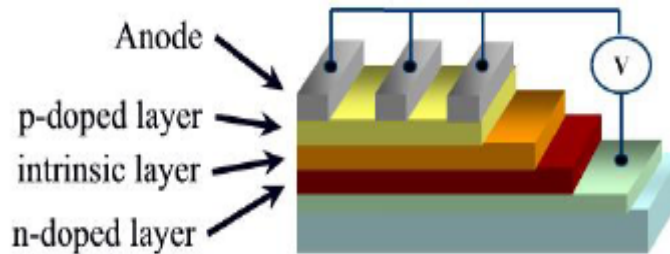


شکل (۳-۷): ساختار یک سلول پی در پی با بازدهی ۵/۷٪ [۲۹]

<sup>۱</sup> Forrest  
<sup>۲</sup> Peumans  
<sup>۳</sup> Xue

### ۳-۵-۶ سلول های p-i-n

در این نوع از سلول ها ناحیه فعال، که یک لایه نیمرسانای ذاتی می باشد، بین دو لایه نیمرسانای آلیایده شده قرار دارد. این نوع ساختار، باعث جلوگیری از تماس مستقیم ناحیه فعال با فلز می شود. به علت بزرگی گاف انرژی لایه های کناری، تولید اکسیتون منحصر به لایه وسطی می باشد. لایه های کناری به واسطه رسانایی خوب، حامل های بار تولید شده را به سمت الکترودها انتقال می دهند و از بازترکیب آن ها جلوگیری می کنند [۴۲]. شکل ۳-۸ یک نمونه از این سلول ها را نشان می دهد.



شکل (۳-۸) : یک نمونه سلول خورشیدی p-i-n

### ۳-۶ تعیین ضخامت بهینه برای لایه های آلی

در سلول های خورشیدی آلی، رقابتی بین طول جذب نور فرودی (مقدار مسافتی است، که شدت نور فرودی به  $\frac{1}{e}$  شدت آن روی سطح می رسد و با  $L_a$  نمایش داده می شود) و طول پخش اکسیتون ( $L_D$ ) وجود دارد. با افزایش ضخامت لایه ها، از یک طرف میزان نور جذب شده و در نتیجه تعداد اکسیتون های تولید شده بیشتر می شود، اما از آن جا که در مواد آلی طول پخش اکسیتون کوتاه می باشد، با انجام این کار، اکسیتون ها قبل از رسیدن به فصل مشترک دو نیمرسانا و تشکیل حامل های بار، بازترکیب می شوند. از طرف دیگر، اگر ضخامت لایه ها را کاهش دهیم، بازترکیب اکسیتون ها کم

شده، اما به همراه آن میزان جذب و تولید اکسیژن نیز کاهش خواهد یافت. پس باید یک ضخامت بهینه، که در آن ضخامت سلول بیشترین بازدهی را دارد، پیدا کنیم.

برای مواد آلی معمولاً  $L_a \approx 2L_D$ ،  $L_h \approx L_D$  و  $L_e \approx L_D$  می باشند. بنابراین  $L_D$  مهمترین پارامتر، برای تخمین زدن ضخامت بهینه ی لایه ها می باشد [۴۳ و ۴۴].

### ۳-۷ معادلات اساسی حاکم بر سلول های خورشیدی آلی

با استفاده از مدل رانش-پخش<sup>۱</sup> می توانیم معادلات مربوط به انتقال الکترون ها، حفره ها و اکسیژن ها را به خوبی بیان کنیم. این مدل شامل معادلات پیوستگی برای چگالی الکترون ( $n$ )، چگالی حفره ( $p$ ) و چگالی اکسیژن ( $x$ ) خواهد بود. علاوه بر معادلات پیوستگی، معادله پواسون برای پتانسیل الکترواستاتیک ( $\psi$ ) نیز یکی از معادلات اساسی، در این مدل است [۴۵]. بنابراین با به کارگیری معادله پواسون خواهیم داشت:

$$\nabla \cdot (\epsilon \nabla \psi) = -q(p - n) \quad (۷-۳)$$

در این رابطه، که طبق آن پتانسیل الکترواستاتیکی و چگالی حامل های بار به یکدیگر مرتبط می شوند،  $\epsilon$  ضریب گذردهی و  $q$  بار بنیادی<sup>۲</sup> می باشند. همچنین با به کارگیری معادله پیوستگی برای چگالی الکترون و حفره داریم:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D(E, x) - R(n, p) - \frac{1}{q} \nabla [qn\mu_n \nabla \psi - k_B T \mu_n \nabla n] \quad (۸-۳)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D(E, x) - R(n, p) - \frac{1}{q} \nabla [-qp\mu_p \nabla \psi - k_B T \mu_p \nabla p] \quad (۹-۳)$$

<sup>۱</sup> Drift-Diffusion Model  
<sup>۲</sup> Elementary charge

در روابط فوق،  $D(E, x)$  به تجزیه اکسیتون اشاره دارد که تابعی از میدان الکتریکی  $E$  و چگالی اکسیتون  $x$  می باشد. از آنجایی که تجزیه اکسیتون باعث تولید حامل های بار می شود، این جمله با علامت مثبت ظاهر می شود.  $R(n, p)$  باز ترکیب الکترون و حفره را نشان داده و در نتیجه با علامت منفی نشان داده می شود.  $\mu_p$  و  $\mu_n$ ، به ترتیب، تحرک پذیری الکترون و حفره می باشند. باید توجه کرد که در جمله سوم روابط فوق، قسمتی که شامل گرادیان پتانسیل الکترواستاتیکی می باشد، مربوط به رانش حامل ها در اثر میدان الکتریکی بوده و قسمت دیگر پخش حامل های بار را از منطقه ای با چگالی زیاد به منطقه ای با چگالی کم، نشان می دهد. با تکرار معادله پیوستگی برای چگالی اکسیتون به رابطه ۳-۱۰ خواهیم رسید:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = G(r) + \frac{1}{4} R(n, p) - R(x) - D(E, x) - \frac{1}{q} \nabla [-k_B T \mu_x \nabla x] \quad (10-3)$$

در رابطه ۳-۱۰،  $R(x)$  باز ترکیب اکسیتون و  $\mu_x$  تحرک پذیری اکسیتون را نشان می دهند. باید توجه کرد که در این رابطه جمله مربوط به باز ترکیب حامل ها با علامت مثبت و جمله مربوط به باز ترکیب اکسیتون با علامت منفی آمده است.

با استفاده از ۴ رابطه فوق می توانیم سلول های خورشیدی را شبیه سازی<sup>۱</sup> کنیم، که این مسئله به طور کامل در مرجع [۴۵] بیان شده است.

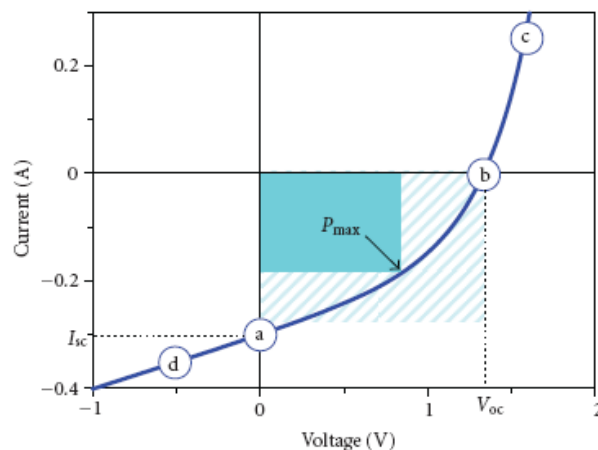
### ۳-۸ مشخصه های نمودار جریان - ولتاژ

سلول های خورشیدی به وسیله اندازه گیری منحنی جریان - ولتاژ  $I(V)$  تحت تابش یک منبع نور، که نقش طیف خورشید را ایفا می کند، مشخصه یابی می شوند. یک منحنی جریان - ولتاژ نوعی برای سلول های خورشیدی آلی در شکل ۳-۹ نشان داده شده است. نقاط مشخصه ای که برای مشخصه یابی سلول های خورشیدی به کار می روند، در شکل مشخص شده اند. در این شکل نقطه  $a$  نشان

<sup>۱</sup> Simulation

دهنده جریان حاصل از یک سلول خورشیدی تحت بایاس صفر<sup>۱</sup> (ولتاژ صفر) می باشد، که به آن جریان مدار کوتاه ( $I_{sc}$ ) گفته می شود. در این حالت، تجزیه اکسیتون و انتقال بار توسط پتانسیل داخلی سلول انجام می گیرد. که در مدل MIM، این پتانسیل برابر با اختلاف توابع کار دو الکتروود می باشد.

نقطه b، مقدار ولتاژ در جریان صفر را نشان می دهد، که ولتاژ مدار باز ( $V_{oc}$ ) نامیده می شود. نقطه c، به ازای ولتاژهای  $V > V_{oc}$  دیود در جهت موافق<sup>۲</sup> بایاس می شود و بالاخره در نقطه d، به ازای ولتاژهای  $V < 0$  دیود تحت بایاس معکوس<sup>۳</sup> قرار می گیرد.



شکل (۹-۳): مشخصه های نمودار جریان-ولتاژ یک سلول خورشیدی نوعی [۹]

در ضمن مساحت مستطیل تو پر ( $P_{max}$ )، مقدار بیشینه توان را نشان می دهد. در این نقطه حاصلضرب جریان و ولتاژ ( $P = I \times V$ ) ماکزیمم می گردد.  $V_{mpp}$  و  $I_{mpp}$  مقادیر جریان و ولتاژ در نقطه بیشینه توان<sup>۴</sup> می باشند [۹].

<sup>۱</sup> Zero bias  
<sup>۲</sup> Forward direction  
<sup>۳</sup> Reverse bias  
<sup>۴</sup> Maximum power point



## ۹-۳ پارامتر های مهم در سلول های خورشیدی آلی

### ۱-۹-۳ بازدهی تبدیل توان

بازدهی تبدیل توان در یک سلول فوتوولتائیک را می توان از رابطه زیر به دست آورد:

$$\eta = \frac{I_{sc} \times V_{oc} \times FF}{P_{light}} \quad (11-3)$$

در این رابطه  $P_{light}$  توان نور فرودی و  $FF$  ضریب پرشدگی<sup>۱</sup> می باشد که با توجه به شکل ۳-۸ از نسبت مساحت مستطیل تو پر به مساحت مستطیل هاشور خورده به دست می آید، که در واقع برابر است با:

$$FF = \frac{P_{max}}{I_{sc} \times V_{oc}} \quad (12-3)$$

در حالت ایده آل، مقدار  $FF$  برابر با یک می باشد، اما در عمل قطعات فوتوولتائیک آلی به دلیل اتلاف ناشی از انتقال و بازترکیب، این مقدار بین ۰/۷-۰/۲ می باشد [۹].

### ۲-۹-۳ بازدهی کوانتومی

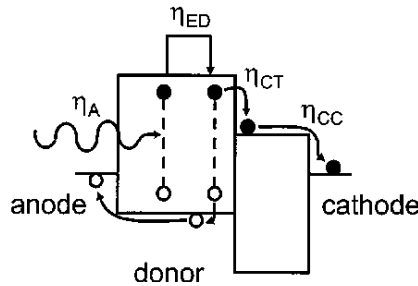
یکی از پارامتر های مهم برای تعیین کیفیت سلول های خورشیدی آلی بازدهی کوانتومی خارجی<sup>۲</sup> ( $\eta_{EQE}$ ) است، که نسبت تعداد حامل های تولید شده به تعداد فوتون های فرودی می باشد.  $\eta_{EQE}$  در واقع حاصلضرب بازدهی های چهار مرحله اساسی (شکل ۳-۱۰) در سلول های فوتوولتائیک آلی می باشد ( به طور کامل در بخش ۳-۴ بیان شد) و با رابطه زیر بیان می شود [۱۵و۴۶].

$$\eta_{EQE} = \eta_A \eta_{ED} \eta_{CT} \eta_{CC} = \eta_A \eta_{IQE} \quad (13-3)$$

<sup>۱</sup> Fill Factor

<sup>۲</sup> External Quantum Efficiency

در رابطه ۳-۱۳،  $\eta_A$  بازدهی جذب فوتون و تبدیل آن به اکسیتون،  $\eta_{ED}$  بازدهی پخش اکسیتون به پیوندگاه،  $\eta_{CT}$  بازدهی تجزیه اکسیتون توسط انتقال بار در پیوندگاه و  $\eta_{CC}$  بازدهی جمع آوری حامل ها می باشد.  $\eta_{IQE}$  بازدهی کوانتومی داخلی سلول، یا به عبارتی، نسبت تعداد حامل های جمع آوری شده به تعداد فوتون های فرودی می باشد.



شکل (۳-۱۰): چهار مرحله اساسی در تولید فوتوجریان در اثر تابش نور [۱۵]

از آنجایی که تمامی اکسیتون هایی که به پیوندگاه می رسند توسط انتقال الکترون به تراز LUMO پذیرنده و انتقال حفره به HOMO بخشنده، به حامل های بار تجزیه می شوند (چون کمتر از چند فمتو ثانیه اتفاق می افتد)، در نتیجه  $\eta_{CT} = 100\%$  می باشد. همچنین برای ساختارهای فوتوولتائیک نیز، فرض می کنیم که تحت شرایط مدار کوتاه، بازدهی جمع آوری بار  $\eta_{CC} = 100\%$  است. بنابراین رابطه ۳-۱۳ به صورت ساده زیر درخواهد آمد [۱۹]:

$$\eta_{EQE} \approx \eta_A \eta_{ED} \quad (۳-۱۴)$$

### ۳-۹-۳ چگالی جریان مدار کوتاه

از آنجا که سلول های خورشیدی، مساحت های متفاوتی دارند، جریان مدار کوتاه  $I_{sc}$  نمی تواند مقیاس مناسبی برای مقایسه عملکرد سلول های خورشیدی باشد. می توان به جای جریان مدار کوتاه از چگالی جریان مدار کوتاه ( $J_{sc}$ )، که از نسبت  $I_{sc}$  به مساحت قسمت فعال سلول به دست می آید، استفاده نمود.  $J_{sc}$  توسط عوامل مختلفی، چون: ضریب جذب لایه های آلی، مساحت مؤثر پیوند p-n،

توزیع شدت نور جذب شده در داخل سلول، بازدهی پخش اکسیتون ها، بازدهی انتقال حامل های بار و بازدهی جمع آوری حامل های بار، تعیین می شود [۳۶]. چگالی جریان مدار کوتاه در یک سلول خورشیدی، را می توان از مجموع چگالی جریان الکترون ( $J_e$ ) و چگالی جریان حفره ( $J_h$ )، طبق رابطه زیر به دست آورد [۳۶].

$$J_{sc} = J_e + J_h = (n\mu_n \nabla U + k_B T \mu_n \nabla n) + (p\mu_p \nabla U + k_B T \mu_p \nabla p) \quad (۱۵-۳)$$

در این رابطه U پتانسیل الکتریکی می باشد. با توجه به این رابطه مشاهده می کنیم، چگالی جریان مدار کوتاه با تحرک پذیری حامل های بار متناسب است. برای یک سلول خورشیدی معدنی ایده آل، سلولی با مقاومت سری صفر،  $J_{sc}$  به طور خطی به چگالی توان نور فرودی ( $P_0$ ) بستگی دارد. برای سلول های فوتوولتائیک آلی نیز این وابستگی خطی همچنان دیده می شود [۴۰].

### ۳-۹-۴ ولتاژ مدار باز

ولتاژ مدار  $V_{oc}$  در یک سلول خورشیدی، به طور کلی به اختلاف انرژی بین تراز HOMO ماده بخشنده و تراز LUMO ماده پذیرنده وابسته است و به مراحل تولید و کیفیت لایه ها بستگی ندارد [۴۷]. همچنین باید در نظر داشت که بنابر گزارشات داده شده در مرجع [۴۷] ولتاژ مدار باز به صورت خطی به تابع کار آندی وابسته است. البته این وابستگی خطی تنها برای یک اتصال غیر اهمی مانند، ITO/CuPc معتبر است. نکته دیگری که در مورد  $V_{oc}$  حائز اهمیت می باشد، این است که  $V_{oc}$  به صورت لگاریتمی با شدت نور فرودی تغییر می کند [۴۰]. در اثر افزایش دما،  $V_{oc}$  برای مدل دو لایه ای تخت تقریباً به طور خطی کاهش خواهد یافت [۴۸].

### ۳-۹-۵ مقاومت سری

مقاومت سری  $R_s$  در یک سلول خورشیدی شامل سهم های مقاومت حجمی مواد آلی ( $R_0$ )، مقاومت

های تماس<sup>۱</sup> میان الکترودها و لایه های آلی ( $R_C$ )، مقاومت حجمی الکترودها ( $R_E$ ) و مقاومت مربوط به Parasitic Probe ( $R_P$ ) می باشد. از بین مقاومت های فوق  $R_O$  و  $R_C$  به طور معکوس با مساحت سلول A متناسب بوده و  $R_E$  و  $R_P$  تا حد زیادی مستقل از A می باشند [۴۰]. با افزایش یافتن مقاومت سری در یک سلول، چگالی جریان مدار کوتاه کاهش یافته و به دنبال آن بازدهی سلول نیز کاهش می یابد. بنابراین این مقاومت باید حداقل گردد تا بازدهی سلول خورشیدی حداکثر گردد. این مقاومت را می توان با کاهش ضخامت، افزایش دما و افزایش شدت نور کاهش داد.

### ۳-۱۰ الکترودها

#### ۳-۱۰-۱ انتخاب الکترودها

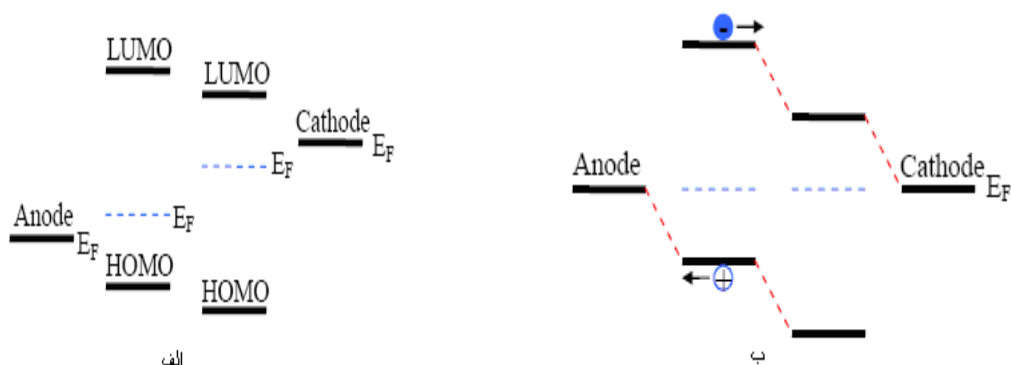
یکی از قسمت های اصلی سلول های خورشیدی الکترودها می باشند که وظیفه جمع آوری حامل های بار را بر عهده دارند. در انتخاب الکترودها باید به چندین مورد توجه داشت که مهمترین آنها عبارتند از:

الف- ماده رسانایی که به عنوان کاتد انتخاب می گردد باید تابع کار نسبتاً پایینی داشته باشد یعنی نوار هدایت آن به نوار هدایت نیمرسانا (LUMO) نزدیک باشد.

ب- ماده رسانایی که به عنوان آند انتخاب می گردد باید نوار هدایت آن نزدیک نوار ظرفیت (HOMO) نیمرسانا باشد.

نمودار تراز انرژی ساده شده برای سلول دو لایه ای قبل و بعد از اتصال در شکل ۳-۱۱ نمایش داده شده است. با توجه به شکل مشاهده می شود که پس از اتصال، تراز فرمی همه مواد یکی می شود، نوار های انرژی در محل اتصال نیمرسانا / فلز خم می شوند تا الکترون ها و حفره ها به ترتیب به سمت کاتد و آند حرکت کنند. پیوند نیمرسانا / نیمرسانا موجب کمتر شدن ارتفاع برای حرکت بار ها می گردد.

<sup>۱</sup> Contact Resistance



شکل (۳-۱۱) : نمودار ساده شده نوار های انرژی قبل و بعد از تماس در پیوندگاه نیمرسانا / فلز برای یک سلول دو لایه ای (الف) قبل از تماس و (ب) بعد از تماس. [۳۳]

در سلول های خورشیدی و دیود های نور گسیل، باید توجه داشت که یکی از الکترودها باید نسبتاً شفاف باشد، تا بتواند نور را عبور دهد. اگر از فلزاتی مانند طلا به عنوان الکترودها استفاده کنیم، در صورتی که ضخامت آن در حدود  $50-100$  nm باشد کاملاً کدر خواهد بود و با ضخامت  $15-20$  nm نیمه شفاف می باشد. در واقع وقتی ضخامت آن زیاد گردد شفافیت آن کمتر شده و در عوض رسانایی آن بیشتر می گردد. بنابراین راه بهتر استفاده از شیشه های لایه نشانی شده با مواد شفاف و رسانا می باشد. به خصوص ITO که یک نیمرسانای تبهگن (شامل  $90\% \text{In}_2\text{O}_3$  و  $10\% \text{SnO}_2$ ) و با گاف انرژی  $3.7$  eV و تراز فرمی بین  $4.5$  eV تا  $4.9$  eV می باشد. این باند انرژی بزرگ اجازه جذب طول موج هایی بلندتر از  $350$  nm را نمی دهد. در نتیجه این الکترودها دارای شفافیت بالایی هستند. علاوه بر ITO، از پلیمر های مضاعف، مانند PEDOT و PITV نیز می توان به عنوان الکترودها شفاف استفاده کرد. مزیت این پلیمرها، محلول بودن در آب و در نتیجه امکان لایه نشانی آسان آن ها، به وسیله پوشش چرخشی یا اسپری می باشد. تعدادی از الکترودهای شفاف، به همراه توابع کارشان در جدول ۱-۳ لیست شده اند.

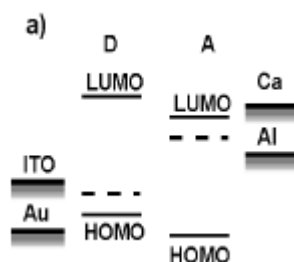
جدول (۳-۱): چند نمونه از الکترودهای شفاف استفاده شده در سلول‌های خورشیدی آلی [۵]

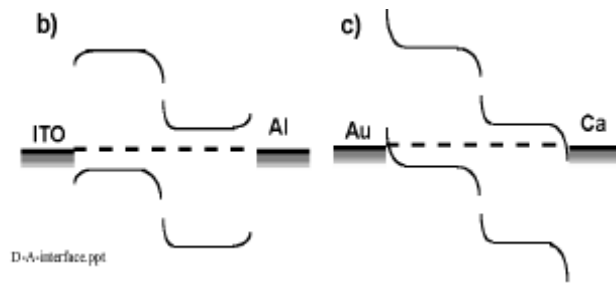
material	$W_f$ (eV)	comment
PANI	5.2-5.3eV	sol. polymer
PEDOT		sol. polymer transp.
ITO	4.4-4.9	transp.
FTO	4.84eV	transp.
TO		transp.

### ۳-۱۰-۲ اتصال الکتروده - نیم‌رسانا

مشخص نیست که مدل‌های پیشرفته تا چه حدی می‌توانند در مورد نیم‌رساناهای آلی کاربرد داشته باشند. ما فقط مفاهیم پایه‌ای را که معمولاً برای درک و پیش‌بینی رفتار در محل اتصال نیم‌رسانا - الکتروده استفاده می‌شوند شرح می‌دهیم. در شکل ۳-۱۲ نمودار نوار انرژی در دو حالت قبل و بعد از اتصال رسم شده است [۵].

مشاهده می‌شود که بعد از اتصال در تمام محل‌های اتصال خم شدن نوار اتفاق می‌افتد و ترازهای فرمی و تابع کار یکی می‌شوند. تجسم نوار خم شده به صورت کیفی را می‌توان اینگونه تفسیر کرد که لبه‌های LUMO و HUMO در مقدار انرژی مطلق که قبل از تماس داشته‌اند گیر افتاده‌اند. البته پتانسیل یونی‌زاسیون و الکترون‌خواهی نیم‌رسانا حتی در نقطه‌ای که نوار انرژی خم می‌شود تغییر نمی‌کند. چون تراز خلأ از خمیدگی نوار انرژی و انتقال عمودی آن تبعیت می‌کند. سمت خم شدن باند انرژی بستگی به این دارد که تابع کار ( $W_f$ ) الکتروده بالا یا پایین تراز فرمی نیم‌رسانا باشد.





شکل (۳-۱۲): نمودارهای وسایل D/A با اتصال الکترودها (a) موقعیت قبل از تماس، بعد از اتصال سطوح فرمی (خطوط نقطه چین) یکی می شوند و خمیدگی نوارها رخ می دهد. (b) شکل گیری یک تماس مسدود کننده برای حفره ها (ITO/D) و برای الکترون ها (A/Al). (c) شکل گیری یک تماس غیر مسدود کننده (اهمی) برای حفره ها (Au/D) و برای الکترون ها (A/Ca) [۵]

در موردی که فاصله توابع کار هر دو الکترودها از وسط گاف انرژی از فاصله ترازهای فرمی نیم رساناهایی که با آنها در تماس هستند کمتر باشد خمیدگی نوار انرژی همانند شکل (b) ۳-۹ اتفاق می افتد. در این حالت الکترون های تولید شده از نوار هدایت نیم رسانای پذیرنده الکترون (A) قبل از رسیدن به الکترودها آلومینیوم با یک سد مواجه می شوند. همین اتفاق برای حفره های در باند ظرفیت نزدیک تماس نیم رسانا با ITO می افتد.

این نوع تماس ها به تماس های مسدود کننده مشهورند. چون این تماس ها را می توان با تغییر پتانسیل الکترودها به تماس غیر مسدود کننده تغییر داد، به آنها تماس شاتکی<sup>۱</sup> یا یکسو کننده<sup>۲</sup> نیز گفته می شود [۵]. قابل توجه است که آلومینیوم تنها با نوار هدایت نیم رسانای n شکل تماس مسدود کننده می گیرد ولی با نوار ظرفیت شکل یک تماس اهمی را می گیرد. دلیل اینکه چرا این نوع اتصال را یکسو کننده می نامند این است که فرض می شود نیم رسانای n الکترون ها را در نوار هدایت منتقل می کند پس این تماس برای الکترون ها مسدود کننده است. در سطح تماس نیم رسانا و ITO نیز شبیه این اتفاق برای حفره ها می افتد. چون جدایی بار در محل پیوندگاه A/D افزایش الکترون ها در نوار هدایت (n-type) و افزایش حفره ها در نوار ظرفیت (p-type) را به دنبال دارد این حامل های بار برای خارج شدن از نیم رسانا با موانعی رو به رو می شوند. در نتیجه جریان این نوع وسایل به وسیله

<sup>1</sup> Schottky  
<sup>2</sup> Rectifying

سدهای تماسی کاهش می یابد. شکل ۳-۱۲ نشان می دهد که اگر Au, Ca به عنوان الکتروود بکار گرفته شوند، شرایط بهتر می شود. توابع کار هر دوی این الکتروودها از وسط گاف انرژی نسبت به ترازهای فرمی نیمرساناها دورتر می باشد. بعد از تماس خمیدگی نوار انرژی به طرف دیگر رخ می دهد. در نتیجه الکترون های برانگیخته به الکتروود Ca و حفره های برانگیخته به الکتروود Au بدون مواجه شدن با هیچ سدی می رسند. آزمایش ها تأیید می کنند که سلول های خورشیدی آلی با الکتروودهای Au, Ca به طور قابل ملاحظه ای ولتاژ مدار باز و همچنین جریان و بازده کوانتومی بیشتری نسبت به سلول های با الکتروود از جنس آلومینیوم و ITO را نشان می دهند. البته نقیصه Ca این است که به علت پایین بودن تابع کار آن نسبت به آلومینیوم، Ca تمایل بیشتری برای اکسید شدن دارد. الکتروودهای از جنس طلا نیز بسیار گران قیمت می باشند. به دلایل فوق ITO و Al در عمل برای تحقیق وسایل فوتوولتائیک به علت تولید آسان مناسب تر می باشند.

### ۳-۱۱ بهینه سازی و افزایش بازدهی سلول های خورشیدی

نخستین گام اساسی در بهبود عملکرد یک سلول خورشیدی انتخاب مواد مناسب می باشد. مواد بخشنده و پذیرنده ای که در یک سلول خورشیدی به کار می روند، بایستی علاوه بر داشتن جذب بالا، تحرک پذیری حامل بالایی نیز داشته باشند. به عنوان مثال، پنتاسن و تتراسن در بین مواد بخشنده و C<sub>60</sub> در بین مواد پذیرنده، دارای تحرک پذیری حامل بالا می باشند. افزایش تحرک پذیری باعث افزایش  $J_{sc}$  و در نتیجه افزایش بازدهی سلول می شود. همچنین مواد به کار گرفته شده باید از درجه خلوص بالایی برخوردار باشند، زیرا وجود ناخالصی سبب افزایش باز ترکیب و در نتیجه کاهش بازدهی می شود. عامل مهم دیگر در انتخاب مواد این است که طول پخش اکسیتون در آن ها بالا باشد. نکته دومی که باید در نظر داشت، استفاده از یک ضخامت بهینه و کنترل شده برای لایه های استفاده شده در سلول است که در بخش ۳-۶ توضیح داده شد.

عامل دیگری که نقش کاملاً اساسی در افزایش بازدهی دارا می باشد، استفاده از یک هندسه و ساختار



مناسب برای سلول است. با استفاده از ساختار های مخلوطی، لایه در لایه و پی در پی می توانیم بازدهی را تا حد زیادی افزایش دهیم [۱۵ و ۴۷]. همچنین می توان با استفاده از ساختار های جمع کننده نور از طریق به دام اندازی آن<sup>۱</sup>، بازدهی را افزایش داد [۱۵ و ۴۹].

یکی دیگر از روش هایی که برای بهبود عملکرد و افزایش بازدهی سلول های خورشیدی (سلول های دولایه ای) به کار می رود، استفاده از لایه سد کننده اکسیتون<sup>۲</sup> (EBL) در بین ماده بخشنده و کاتد فلزی می باشد. از آنجایی که در این پایان نامه از چنین روشی جهت بهبود عملکرد سلول های خورشیدی استفاده شده است، بخش ۳-۱۲ را به آن اختصاص خواهیم داد.

### ۳-۱۲ لایه سد کننده اکسیتون

در سلول های خورشیدی، در اثر تابش نور، فوتون از طریق مولکول های آلی جذب شده که سبب تولید اکسیتون های مولکولی در لایه فعال می گردد. برخی از این اکسیتون ها در فصل مشترک دو ماده بخشنده و پذیرنده به حامل های بار آزاد الکترون و حفره تجزیه شده و در تولید فوتوجریان شرکت می کنند. اما اکسیتون هایی که تجزیه نشده اند، ممکن است به سمت کاتد فلزی حرکت کرده و در محل پیوند فلز و نیمرسانا، از طریق باز ترکیب غیر تابشی واپاشیده شوند که این امر باعث پایین آمدن عملکرد سلول می شود [۵۰ و ۵۱]. یک راه ممکن برای فائق آمدن بر این مشکل، منحرف کردن اکسیتون ها از طریق یک لایه سد کننده اکسیتون می باشد. لایه های EBL نخستین بار در سال ۲۰۰۰ توسط گروه فارست و با استفاده از ماده BCP<sup>۳</sup> در سلول های خورشیدی آلی مطرح شدند [۴۹]. اما پس از آن مواد دیگری نیز به عنوان لایه EBL مورد استفاده قرار گرفتند که از آن میان می توان به موادی چون، BPhen<sup>۴</sup> و TPBi<sup>۵</sup> اشاره کرد [۵۲-۵۴ و ۴۷]. محدود شدن اکسیتون ها توسط

---

<sup>۱</sup> Light-Trapping

<sup>۲</sup> Exciton Blocking Layer

<sup>۳</sup> Bathocuproine

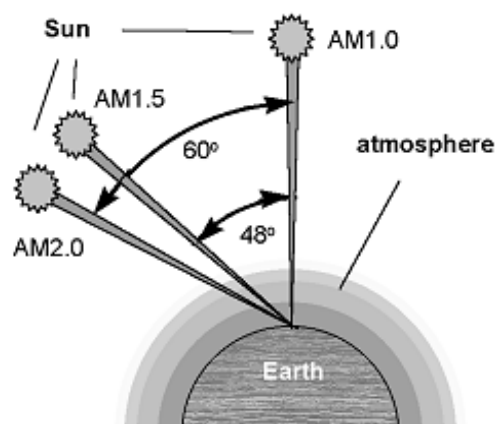
<sup>۴</sup> Bathophenanthroline

<sup>۵</sup> 1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazol-2-yl)benzene

لایه EBL احتمال تجزیه اکسیتون را در فصل مشترک بخشنده- پذیرنده (D-A) افزایش می دهد که نتیجه ی آن بهبود عملکرد سلول و رفتار دیودی تر آن می باشد. لایه های EBL علاوه بر سد کردن اکسیتون ها در فصل مشترک الکتروود فلزی و نیمرسانای بخشنده، حفره ها را نیز سد کرده و همچنین از آسیب رسیدن به لایه آلی در حین لایه نشانی الکتروود فلزی محافظت می نماید. علاوه بر این، به عنوان یک لایه انتقال دهنده ی الکترون<sup>۱</sup> (ETL) خوب عمل کرده و همچنین باعث یکنواختی سطح لایه آلی نیز می گردد [۵۵-۵۳ و ۴۷ و ۱۵].

### ۳-۱۳ استاندارد های تابش خورشید

استاندارد های تابش خورشید را می توان به چهار نوع تابش AM<sup>۲</sup>، AM<sup>۱</sup>، AM<sup>۱/۵</sup> و AM<sup>۲</sup> تقسیم بندی نمود. AM<sup>۰</sup> معادل تابش خورشید در بالای جو زمین، AM<sup>۱</sup> معادل تابش خورشید در سطح زمین به صورت عمود، AM<sup>۱/۵</sup> معادل تابش خورشید در سطح زمین و با زاویه ۴۸° و در نهایت AM<sup>۲</sup> معادل تابش خورشید در سطح زمین و با زاویه ۶۰° از راستای عمود می باشد. باید توجه داشت که بازدهی سلول های خورشیدی تحت شرایط تابش استاندارد AM<sup>۱/۵</sup> اندازه گیری می شود [۵۶ و ۵].



شکل (۳-۱۳): نمایی از استاندارد های تابش خورشید

<sup>۱</sup> Electron Transport Layer  
<sup>۲</sup> Air-Mass-Zero

فصل چهارم

**فصل مشترک،  
آنالیز سطح و  
لایه های نازک**

## ۴-۱ تعریف و اهمیت فصل مشترک و فیزیک سطح

فصل مشترک دو محیط در مواد جامد با تعداد کمی از لایه‌های اتمی دو جسم که با هم در تماس نزدیکند، تعریف می‌شود. خواص فصل مشترک به طور چشمگیری با مواد کپه‌ای که در فصل مشترک از یکدیگر جدا شده‌اند، متفاوت است. برای مثال، وقتی یک لایه نازک فلزی که روی بلور نیمرسانا انباشت می‌شود، به وسیله فصل مشترک نیمرسانا-فلز از مواد کپه‌ای جسم نیمرسانا جدا شده است. سطح یک جسم جامد، نمونه بسیار ساده‌ای از فصل مشترک است، که در آن، جسم جامد در تماس با محیط اطرافش است. بنابراین، پیشرفت فیزیک فصل مشترک جدید، اصولاً با مفاهیم نظری و وسائل تجربی، که در زمینه فیزیک سطح پایه‌ریزی و ساخته می‌شوند، تعیین می‌گردد. در عین حال خود فیزیک سطح نیز شاخه بسیار مهمی از فیزیک میکروسکوپی حالت جامد است.

بیشتر مدل‌های نظری در نظریه کلاسیکی حالت جامد بر اساس این فرض که جسم جامد، نامتناهی است، بنا شده‌اند. در این مدل‌ها، از خواص تعداد نسبتاً کمی از اتم‌ها که سطح جسم میکروسکوپی را تشکیل می‌دهند، صرف نظر شده است. این موجب تسهیل چشمگیری در توصیف ریاضی مسأله می‌شود (همانند تقارن نامتناهی انتقالی بلور ایده آل). این روش توصیف جسم جامد که از خواص چند لایه اتمی در سطح صرف نظر می‌کند، برای به دست آوردن خواص میکروسکوپی که به تعداد کل اتم‌ها در جسم جامد بستگی دارند، تقریب خوبی است. علاوه بر این برای همه انواع آزمایش‌های میکروسکوپی، که در آن پروب دستگاه اندازه‌گیری در عمق ماده جامد نفوذ می‌کند (پرتو  $x$ ، نوترون‌ها، الکترون‌های سریع و ...)، که می‌توان از اثر اتم‌های سطحی ( $10^{15} \text{ cm}^{-2}$ ) صرف نظر کرد، نیز صادق است. اما وقتی از پروب‌هایی که می‌توانند به شدت با ماده برهم‌کنش کنند و در نتیجه فقط تا عمق حدود دو آنگستروم ( $2 \text{ \AA}$ ) در ماده نفوذ می‌کنند (الکترون‌های کم‌انرژی، باریکه‌های اتمی و مولکولی) استفاده شود، روش فیزیک کلاسیک حالت جامد که مربوط به جسم جامد نامتناهی است، مورد سؤال قرار می‌گیرد و دیگر صحیح نخواهد بود. در این حالت، خواص اتم‌های سطح که با

خواص اتم های جسم کپه ای متفاوت اند، اهمیت پیدا می کند (برای مثال آزمایش های گسیل فوتونی، که الکترون های برانگیخته شده از طریق سطح به خلأ گسیل می شوند و نمی توان از اثر بالاترین لایه های اتمی صرف نظر کرد).

مفاهیم فیزیک سطح و فصل مشترک در فیزیک حالت جامد نه تنها در ارتباط با ابزارهای خاص آزمایشی، بلکه به علت سیستم های مشخص فیزیکی، بسیار مهم اند. لایه جامد نازکی که روی یک زیر لایه انباشت می شود، به وسیله فصل مشترک جامد- جامد و با سطحش (فصل مشترک لایه- خلأ) مقید می شوند. بنابراین، اساساً خواص چنین لایه نازکی با خواص دو فصل مشترکش تعیین می شود. بنابراین فیزیک سطح و فصل مشترک، به عنوان شاخه زیرین شناخته شده ای از فیزیک عمومی ماده چگال، به طریق پیچیده ای با تعدادی از شاخه های تحقیقاتی دیگر ( فیزیک مولکولی، تکنولوژی خلأ، نانو فناوری، محافظت سطح و خوردگی، تکنولوژی قطعات نیم رسانا و ... ) ارتباط پیدا می کند. از لحاظ کاربردی، فیزیک سطح و فصل مشترک را می توان به عنوان علم پایه برای تعدادی از شاخه های مهندسی و فناوری های پیشرفته در نظر گرفت. مهمتر از همه شاخه جدید نانو فناوری، یعنی مهندسی در مقیاس نانو متری، مفاهیمی را که به طور عمده در علوم سطح توسعه یافته اند، به کار می گیرد. همچنین فناوری ساخت قطعات نیم رسانای جدید بدون پژوهش روی فصل مشترک ها و سطوح نیم رسانا غیر قابل تصور است. علاوه بر این، تکنیک های تهیه برای ساختارهای پیچیده قطعات چند لایه ای به طور عمده از روشهای علم سطح نتیجه شده اند. در این زمینه، پژوهش در علم سطح منجر به پیشرفت و توسعه فناوری های جدید برای تهیه لایه های نیم رسانا شده است [۵۷].

## ۲-۴ روش های تحلیل سطح

سطح یک جسم جامد با محیط اطرافش بر هم کنش می کند و ممکن است به وسیله محیط اطرافش به طور ناخواسته (برای مثال، خوردگی) یا خواسته به علت تقاضای فناوری تغییر کند. تغییرات حاصل از خواست ما، معمولاً به علت حفاظت یا پالایش نانو ساختار سطح صورت می گیرد (برای

مثال، تولید خواص سطحی جدید). این تغییرات نانو ساختاری ممکن است به روش های مختلف و از طریق فرایندهای متفاوت مانند کاشت یون، انباشت لایه های نازک یا لایه های برآراستی صورت گیرد. در تمام این موارد، لازم است که بتوانیم سطح حاصل، لایه یا سیستم های لایه ای، مرز دانه ها، یا فصل مشترک های دیگر را آنالیز کنیم، تا فرایندهایی را که تغییرات نانو ساختاری لازم را با شرایط و خواسته های ما موجب می شوند، کنترل نماییم. در طول ده ها سال اخیر، روش های متعدد آنالیز، برای بررسی جنبه های مختلف فیزیکی و شیمیایی سطوح، فصل مشترک ها و لایه های نازک، توسعه و بوجود آمده اند، که انتخاب مناسب هر کدام از این روش ها، بر حسب نیاز، می تواند اطلاعاتی را در خور حل مشکل تکنیکی یا بنیادی، به دست دهد. شاید قدیمی ترین این روش ها، پراش باریکه الکترون کم انرژی LEED (۱۹۲۷) و گسیل میدانی (۱۹۳۶) و جدید ترین آن ها با استفاده از اثرات کوانتومی، مانند میکروسکوپ تونل زنی روبشی STM، یا با استفاده از پرتو سینکروترون برای مطالعه ساختار ظریف سطح از بازه تعمیر یافته انرژی طیف جذبی پرتو X، SEXAFS است [۵۸]. روش های آنالیز سطح را می توان بر اساس نوع روش به کار رفته در آنالیز، به چند دسته تقسیم نمود. مهمترین این روش ها شامل روش های یون فرودی (بر همکنش های یون با سطح)، روش میدان بزرگ، روش تداخلی (الکترونی یا فوتونی) تعیین ساختار سطح، روش فوتونی (طیف نمایی گسیل فوتونی) و روش طیف نمایی ارتعاشی از سطح می باشند. از بین روش های فوق، به توضیح روش های آنالیز میدان بزرگ به وسیله میکروسکوپ الکترون روبشی می پردازیم.

#### ۴-۲-۱ میکروسکوپ الکترون روبشی (SEM) و روش های میکرو پراب

روش های روبشی ویژگی مشترکی دارند که در آن ها کمیت فیزیکی مشخصی با قدرت تفکیک فضایی اندازه گیری شده، و بر حسب موقعیت سطح ثبت می شود. توزیع محلی این کمیت به روش الکترونیکی به دست می آید و روی صفحه نمایشگر اپتیکی مشاهده می شود. میکروسکوپ الکترون روبشی (SEM) و میکروپراب ها در تعیین مشخصه ساختار ها در مقیاس به کوچکی  $10^{\circ} A$  اهمیت

بسیاری دارند. علاوه بر پرتو گرافی ساده سطح با میکروسکوپ الکترون روبشی می توان به وسیله آن ترکیب شیمیایی سطح را به صورت محلی تحلیل کرد. این روش بر اساس روبیدن یک باریکه الکترونی کانونی شده (با انرژی اولیه ۲ تا ۱۰ کیلو الکترون ولت) روی سطح مورد نظر و آشکار سازی هم زمان الکترون های گسیل شده از سطح بنا شده است. شدت این سیگنال گسیل شده، روشنایی نقطه را روی لامپ صفحه نمایش تعیین می کند. شکل گیری تصویر توپوگرافی به علت تغییرات محلی گسیلندگی الکترون از سطح است. باریکه الکترونی برای عمل روبش در یک ستون در میکروسکوپ الکترونی تولید می شود. الکترون ها از یک کاتد گسیل میدانی گسیل می شوند و به وسیله استوانه وهنلت<sup>۱</sup> و روزنه آند در نقطه ای موسوم به تقاطع<sup>۲</sup> کانونی می شوند. تصویر این نقطه به وسیله اولین عدسی مغناطیسی در یک نقطه تصویری کوچکتر، که مجدداً به وسیله دومین عدسی مغناطیسی روی سطح نمونه اندازه اش کوچکتر می شود، انتقال می یابد. این تصویر روی نمونه تا ۱۰۰۰ بار کوچکتر از نقطه (لکه) اولیه است. بهترین نوع ستون های SEM می توانند باریکه الکترونی را روی سطح نمونه به اندازه ای در حدود  $10 \text{ \AA}$  کانونی کنند. این اندازه نقطه عامل اصلی تعیین قدرت تفکیک فضایی است. در SEM از عدسی های مغناطیسی به علت آن که از عدسی های الکترواستاتیکی روی الکترون های پر انرژی مؤثرترند و خطای ابیراهی کوچکتری دارند، استفاده می شود. روبش در صفحه ی X-Y معمولاً به وسیله دو پیچه مغناطیسی که عمود بر یکدیگر بین دو عدسی مغناطیسی قرار می گیرند، انجام می شود. بزرگنمایی در SEM با تغییر الکترونیکی زاویه انحراف باریکه الکترونی روبنده حاصل می شود.

اگر چه اصولاً تصویر های SEM استریواسکوپیک (سه بعدی- فضایی) نیستند، می توان با استفاده از آشکارساز های مختلف و هندسه پرتو دهی گوناگون، به بینش خوبی از هندسه جسم یا سطح دست یافت [۵۸].

---

<sup>۱</sup> Wehnelt  
<sup>۲</sup> Cross-over

## ۳-۴ فناوری خلاء در علم سطح کاربردی

پیش نیاز اکثر روش های تحلیل سطح، محیط خلاء است، که در آن محیط می توان روش خاص تحلیل سطح را به کار برد. دلائل نیاز به محیط خلاء، کاربردی می باشند. بنیادی ترین دلیل، نیاز به مسیر آزاد متوسط طولانی برای ذره هایی است، که در مطالعه سطح به کار می روند. شرایط خلاء بالا به این معنی است، که مسیر ذره هایی چون یون ها و الکترون ها که در تحلیل سطح به کار می روند، دچار اختلال (تغییر) نشود. همچنین بیشتر لازم است که در طول زمان آزمایش تحلیل سطح، سطح عاری از گازهای جذب شده، نگه داشته شود. این موضوع نیاز به محدودیت های خلاء بیشتری دارد تا زمان موسوم به زمان « تک لایه» برای جمع آوری داده های سطحی به قدر کافی طولانی باشد. نیاز با حفظ ولتاژهای زیاد در سیستم تحلیل سطح بدون فروپاشی یا اینکه تخلیه تابان ایجاد شود، نیز محدودیت خلاء را اعمال می کند. بنابراین، در بخش مهمی از درک تحلیل سطحی و کاربردهای آن، با درک فناوری خلاء با گازها و بخارها سروکار داریم. درک مفهوم مسیر آزاد میانگین مرحله مهمی است از این که در مقیاس مولکولی چه اتفاقی در داخل سیستم خلاء به وقوع می پیوندد، و غالباً نیاز به محیط خلاء با نیاز به افزایش مسیر آزاد میانگین مولکول در سیستم درک و اداره می شود. هدف اصلی در فناوری خلاء این است، که بتوان چگالی تعداد اتم ها یا مولکول ها را در حجم معین کاهش داد. برای کم کردن چگالی تعداد ذرات گاز، و در نتیجه فشار محفظه، باید ذرات گاز را از محفظه خارج کرد. پمپ خلاء به شکل ها و اندازه های مختلف و با مکانیزم های کارکرد متفاوت وجود دارد، اما اساساً می توان پمپ ها را در دو گروه متمایز طبقه بندی کرد: دسته اول پمپ هایی که ذرات گاز را از حجم پمپ شده جدا می کنند و آنها را در یک یا چند مرحله از حالت متراکم به اتمسفر انتقال می دهند. این پمپ ها به پمپ های انتقال گاز یا تراکمی معروفند. دسته دوم پمپ هایی که ذراتی که باید خارج شوند از طریق پیوند شیمیایی یا چگالش روی یک دیوار جامد، که غالباً بخشی از محفظه پمپ شونده است، مقید می کنند. این پمپ ها موسوم به پمپ های به دام اندازنده (تله ای) می باشند.



در ادامه به توضیح دو نوع پمپ که در این پایان نامه از آن ها استفاده شده می پردازیم.

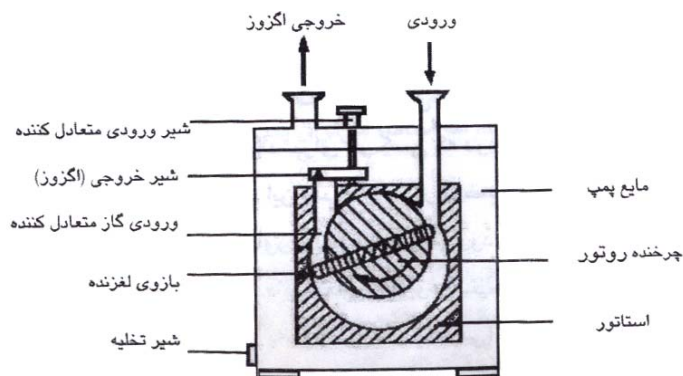
#### ۴-۳-۱ پمپ های چرخشی

یکی از معمول ترین پمپ ها که در فناوری خلاء به کار می رود، پمپ چرخشی<sup>۱</sup> است. این پمپ ها از نوع مکانیکی بوده و متعلق به گروه پمپ های تراکمی اند که با ایجاد افزایش و کاهش حجم محفظه به طور دوره ای (تناوبی) کار می کنند. خود این پمپ ها در چندین طرح مختلف وجود دارند که معمول ترین آن ها در علم سطح، پمپ چرخشی بازو دار<sup>۲</sup> است (شکل ۴-۱). این پمپ ها شامل یک بدنه استوانه ای شکل یا استاتور<sup>۳</sup> است که در داخل آن یک روتور شکاف دار به صورت غیر هم مرکز با استاتور می چرخد. روتور شامل بازو هایی است که یا به وسیله نیروی گریز از مرکز یا در بعضی مدل ها به وسیله فنرهایی از هم دور می شوند. این بازوها در امتداد دیوارهای بدنه (استاتور) می لغزند، و در نتیجه گاز با فشار کم را که از ورودی پمپ به داخل کشیده شده، به جلو می رانند و در نهایت با فشار افزایش یافته از طریق خروجی پمپ یا شیر تخلیه به بیرون از پمپ می رانند. روغنی که در پمپ چرخشی بازو دار به کار می رود نه تنها عمل روان کردن (روغن کاری) و سرد کردن را انجام می دهد، بلکه به عنوان محیط مهر و موم کننده که فضای مرده (پرت) و هر شکاف دیگری در پمپ را پر می کند، نیز عمل می کند.

پمپ های چرخشی بازو دار در مدل های تک مرحله ای و دو مرحله ای ساخته می شوند. با پمپ های دو مرحله ای می توان به فشار های نهایی کمتر رسید. یک نمونه پمپ چرخشی بازو دار تک مرحله ای در شکل ۴-۱ نشان داده شده است.

---

<sup>۱</sup> Rotary  
<sup>۲</sup> Rotary vane pump  
<sup>۳</sup> Stator



شکل (۴-۱): نمایی از سطح مقطع پمپ چرخشی بازو دار لغزنده تک مرحله ای [۵۷]

چندین نوع از پمپ های چرخشی دیگر نیز وجود دارند که در فناوری خلاء استفاده می شوند، برای مثال پمپ چرخشی پیستونی، پمپ هایی که دارای چرخه ای با حرکت چرخشی روی یک محور می باشند، پمپ های با سرعت زیاد و پمپ هایی که فشار نهایی کمتری را تولید می کنند.

بخش مهم پمپ های چرخشی جدید، گاز متعادل کننده<sup>۱</sup> آن است. اگر پمپ چرخشی بخار ها را پمپ کند، این بخار ها فقط می توانند تا فشار بخار اشباعشان در دمای پمپ متراکم شوند. در تراکم بیشتر بخار آب بدون افزایش فشار چگال می شود. این مسئله باعث می شود که فشار برای باز کردن شیر خروجی پمپ کافی نباشد و آب (در شکل مایع) در پمپ باقی بماند و با روغن پمپ مخلوط شود. در نتیجه این فرایند، خواص روان کردن (روغن کاری) پمپ به سرعت کاهش می یابد و روی عملکرد کلی پمپ اثر می گذارد. برای غلبه بر این مشکل، در سال ۱۹۳۵ گیئد وسیله ای را به نام گاز متعادل کننده طراحی کرد که از چگالش بخار آب در پمپ جلوگیری می کند. قبل از آن که عمل تراکم بتواند شروع شود، مقداری هوا، یعنی گاز متعادل کننده که به دقت تنظیم می شود، در مرحله تراکم وارد پمپ می شود. در این حالت بخار ها پیش از آن که به نقطه چگالش خود برسند با گاز متعادل کننده متراکم می شوند و در نتیجه می توانند به خارج از پمپ رانده شوند.

کاربرد عمده این پمپ های چرخشی در دستیابی به فشار های ناحیه های خلاء پایین و متوسط (تا

<sup>۱</sup> Gas ballast

$10^{-3}$  mbar است، یا این که به عنوان پمپ های پشتیبانی کننده، که گاز فشرده شده به وسیله پمپ های خلاء زیاد را خارج کنند، که در نتیجه آن می توان به فشار های ناحیه های خلاء زیاد و فرا زیاد رسید [۵۷].

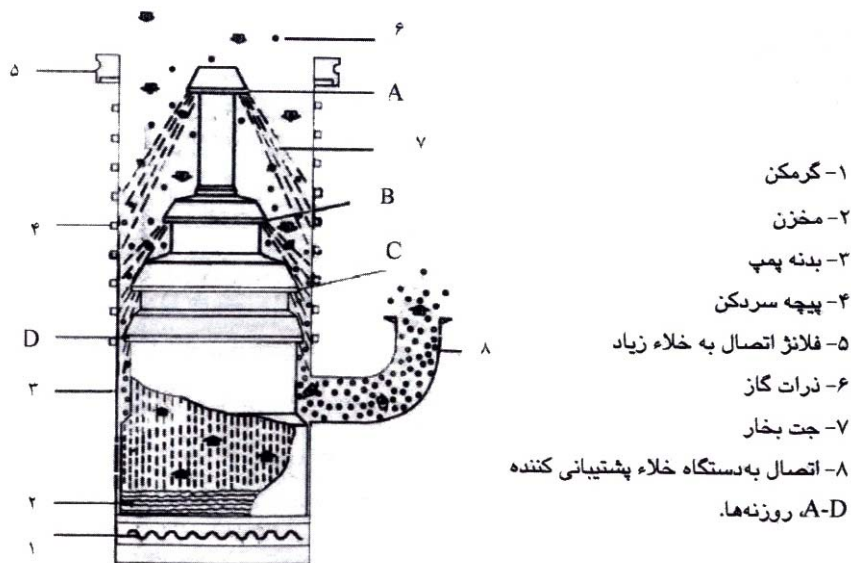
#### ۲-۳-۴ پمپ های پخشی (دیفیوژن<sup>۱</sup>)

یکی از پمپ هایی که برای دستیابی به خلاء زیاد و فرا زیاد در فیزیک سطح به کار می رود، پمپ پخشی است. در این پمپ ها، عملکرد پمپ در اثر پخش گاز ها در جریانی از ذرات با سرعت زیاد انجام می شود. در این پمپ ها مولکول های گاز پمپ شده از محفظه خلاء بیرون کشیده می شوند و داخل جریانی با سرعت زیاد از مایع پمپ، که اغلب به صورت بخار در آمده، قرار می گیرند. این ذرات متحرک سریع مایع پمپ، مولکول های گاز را در اثر فرایند برخورد در جهت پمپاژ انتقال می دهند، در نتیجه گاز پمپ شده به داخل فضایی با فشار بیشتر انتقال می یابد. خود مایع پمپ پس از ترک روزنه که به صورت بخار در آمده، روی دیواره های خارج پمپ چگالیده می شود.

شکل (۲-۴) طرحی را که عملکرد پمپ پخشی را توصیف می کند، نشان می دهد. این نوع پمپ اساساً شامل بدنه پمپ است که دیواره آن معمولاً با جریان آب سرد می شود، و سیستمی از روزنه ها در سه یا چهار مرحله. روغنی با چگالی بخار کم در مخزنی قرار دارد که به وسیله گرمکن الکتریکی بخار می شود، بخار روغن در دودکش ها جریان می یابد و با سرعت ابرصوتی از روزنه های مختلف خارج می شود. این بخار روغن که به صورت جت شکل می گیرد مانند چتری باز می شود تا به دیواره های سرد پمپ می رسد و در آنجا چگال شده و به شکل مایع به مخزن بر می گردد. پمپ های پخشی، سرعت پمپاژ زیادی در بازه گسترده ای از فشار دارند، که در عمل روی کل بازه فشار های کمتر از  $10^{-3}$  mbar ثابت است.

---

<sup>۱</sup> diffusion



شکل (۴-۲) : طرحی از چگونگی عملکرد پمپ پخشی [۵۷]

سرد کردن دیواره های پمپ های پخشی نقش حیاتی در عملکرد آن ها دارد و تقریباً همه پمپ های پخشی بزرگ با آب سرد می شوند، به غیر از بعضی از پمپ های کوچکتر که با هوا سرد می شوند. غالباً سوئیچ های حفاظتی که به طریق حرارتی کار می کنند، یا سوئیچ های جریان آب به پمپ های پخشی اتصال دارند و در موقع عدم عملکرد سیستم سرد کننده، گرمکن پمپ را خاموش می کنند. از آنجا که در این پمپ ها پیش از آن که بخار تشکیل شود، به فشار مشخصی نیاز است، پمپی که به عنوان پشتیبانی کننده (عموماً پمپ چرخشی) به کار می رود، باید پیش از آن که گرمکن روشن شود فشار تا حدود  $10^{-2}$  -  $10^{-3}$  mbar پایین بیاورد. بسیار اهمیت دارد که این پمپ ها در فشارهای مرحله پشتیبانی بالا به کار انداخته نشوند. برای دستیابی به پایین ترین فشار ممکن با استفاده از این پمپ ها، باید پس جریان روغن پمپ به داخل محفظه خلاء به حداقل ممکن برسد. بنابراین، برای این منظور از تله های سرمایی در بالای پمپ استفاده می شود که با ازت مایع سرد می شوند.

## ۴-۴ لایه های نازک

ساختمان لایه های نازک به طور معمول متشکل از یک زیر لایه و یک لایه نازک است، که یک لایه

نازک از ماده مورد نظر توسط یک یا چند روش از روش های مختلف لایه نشانی بر روی سطح زیر لایه نشاندگی می شود. به عبارت دیگر ماده یا موادی، به صورت پوششی بر روی سطح (زیر لایه) نشاندگی خواهد شد به طوری که مجموعه این سیستم (زیر لایه + لایه نازک) سبب ایجاد خواصی می گردد که ذاتاً متفاوت از خواص لایه و زیر لایه به تنهایی است. لایه های نازک را می توان به لایه های فلزی، لایه های نیم رسانا و لایه های عایق از مواد معدنی و آلی تقسیم کرد.

#### ۴-۴-۱ بررسی نحوه تشکیل لایه های نازک

به منظور ساخت لایه نازک می بایست به گونه ای اتم ها و یا مولکول های ماده مورد نظر را از چشمه بر روی جسم دیگری که زیر لایه یا بستر نامیده می شود، فرستاد. اتم هایی که از چشمه به سمت زیر لایه حرکت می کنند و به نزدیکی آن می رسند ممکن است یا به صورت یکتا در فاز بخار و یا به صورت دو تایی و یا حلقه های چند تایی و یا خوشه<sup>۱</sup> باشند؛ هر کدام از آنها احتمال دارد به سطح نزدیک شوند و توسط آن جذب شوند. در اینجا دو حالت ممکن می تواند اتفاق بیافتد، یا بلافاصله این اتم ها و یا مولکول های افزوده شده به سطح<sup>۲</sup> از روی سطح باز تبخیر می شوند<sup>۳</sup> و یا مدتی روی سطح شروع به حرکت می کنند تا انرژی خود را به تدریج از دست داده و دامنه نوسان آن ها کم می شود. این اتم های مستقر بر روی سطح با یکدیگر برخورد کرده و مجموعه اتم ها و یا خوشه های بزرگتری را تشکیل می دهند. با افزایش حجم مجموعه اتم ها و یا مولکول ها، خوشه های بزرگتر بوجود آمده هسته های پایداری را تشکیل می دهند. این هسته ها در محل های خود شروع به رشد در دو یا سه بعد می کنند، که معمولاً در این حالت همزمان با افزایش حجم هسته نرخ ایجاد هسته های جدید به سرعت کاهش می یابد. نکته مهمی که باید به آن توجه کرد این است که پس از رسیدن به تراکم مشخصی از هسته ها، ذرات اضافی که به سطح برخورد می کنند دیگر تشکیل هسته نمی دهند، بلکه

---

<sup>1</sup> Cluster

<sup>2</sup> Ad-Atom(Ad-Cluster)

<sup>3</sup> Re-evaporation

سبب جذب هسته های قبلی شده و به رشد آن ها کمک می کنند. با بزرگتر شدن و نزدیکتر شدن هسته های مجاور به هم، این هسته ها در هم ادغام شده و جزایری بر روی سطح بوجود می آورند و نهایتاً با ادامه یافتن رشد، یک لایه پیوسته بر روی سطح زیر لایه بوجود خواهد آمد [۶۰ و ۵۹ و ۵۷]. بنابراین به طور کلی مراحل مختلف رشد یک لایه شامل: جذب فیزیکی توسط سطح زیر لایه، تشکیل خوشه، هسته سازی، رشد هسته ها و تشکیل جزایر، مرحله انعقاد (در این مرحله جزیره های کوچک به یکدیگر متصل می شوند) و مرحله آخر تشکیل حفره ها و کانال ها است. مرحله آخر در اثر رشد جزیره های بزرگتر بر روی بستر می باشد که ماحصل آن تشکیل لایه است.

همان گونه که گفته شد تنها فرایند هسته بندی نیست که در تشکیل ساختار لایه نهایی مهم است، بلکه فرایند رشد بعدی لایه نیز اهمیت دارد. علاوه بر آن باز بلوری شدن که در دما های بالا صورت می گیرد نیز ممکن است نقش مهمی را ایفا کند. ناخالصی های سطح نه تنها روی انرژی بستگی بین ماده نشانیده شده و زیر لایه و بنابراین اندازه و شرایط رشد هسته های بحرانی اثر می کند، بلکه این ناخالصی ها حتی ممکن است باعث هسته بندی ثانویه شوند، در حالی که هسته های اضافی بر روی زیر لایه تمیز تشکیل نمی شوند. علاوه بر این آلودگی ممکن است منجر به تشکیل هسته ها روی سطح جزیره های موجود شود. همچنین ممکن است ناخالصی های روی سطح به طور قابل ملاحظه ای چسبندگی لایه به زیر لایه را تغییر دهد. ناخالصی های گاز باقیمانده نیز می توانند مستقیماً در لایه وارد شده و ممکن است به مقدار زیادی روی مقاومت ویژه، خواص مغناطیسی و غیره اثر کنند. علاوه بر تمیز بودن ساختار سطح و فشار گاز باقیمانده، مهمترین عامل ها در ساختار نهایی لایه، آهنگ تبخیر (نرخ لایه نشانی) و دمای زیر لایه می باشند. آهنگ تبخیر به طور قابل ملاحظه ای بر روی فرایند هسته بندی و محتوای ناخالصی ها در لایه، اثر گذار است [۵۹].

#### ۴-۲-۴ روش های مختلف تولید (لایه نشانی) لایه های نازک

به منظور رشد و تهیه لایه های نازک از مواد گوناگون، روش های متفاوتی وجود دارد. این روش ها به

طور خلاصه عبارتند از [۶۰]:

۱- روش فیزیکی انباشت بخار (PVD)

۲- روش شیمیایی انباشت بخار (CVD)

۳- روش‌نشانی<sup>۱</sup> باریکه مولکولی (MBE)

۴- روش انباشت به کمک باریکه یونی

۵- لایه نشانی با پالس لیزری (PLD)

۶- روش حمام شیمیایی (CBD)

چون در این پایان نامه، از روش فیزیکی انباشت بخار (PVD) برای لایه نشانی مواد آلی استفاده شده است، از بین روش های فوق، تنها این روش را مورد بررسی قرار می دهیم.

#### ۳-۴-۴ روش فیزیکی انباشت بخار (PVD)

در روش (PVD) ماده یا مواد مورد نظر برای لایه نشانی به طریقی در محیط خلاء بخار یا تصعید می شوند و در همین حالت روی یک زیر لایه خاص می نشینند. به طور کلی در این روش ها مواد مورد نظر را باید به صورت اتم یا مولکول روی یک زیرلایه مناسب با شکل و ضخامت مورد نظر نشانند. البته آزمایش های طیف سنجی جرمی نشان داده اند که گاهی ماده مورد نظر تنها به صورت تک اتم یا تک مولکول نیست، بلکه به صورت خوشه های چند اتمی نیز مشاهده شده اند اصولاً ساخت لایه های نازک بایستی در خلاء یا محیط خنثی صورت گیرد، زیرا از آنجایی که اغلب مواد میل ترکیبی شدیدی با عناصر موجود در هوا خصوصاً اکسیژن دارند، موجب تغییر شیمیایی در نمونه و ایجاد ناخالصی در لایه نازک می گردد. بنابراین چشمه و منبع حرارتی و زیر لایه باید در محفظه خلاء قرار گرفته و سپس فشار محفظه تا حدود  $10^{-5}$  Torr کاهش یابد. سپس ماده ای را که قرار است لایه نشانی شود، تبخیر یا تصعید می کنند، تا بر روی زیر لایه نشانده شود.

<sup>۱</sup> Epitaxy

عوامل مؤثر متعددی در تشکیل و شکل گیری لایه ها وجود دارند، که می توان به دمای زیر لایه، دمای تبخیر یا تصعید و پویش آزاد میانگین اشاره کرد. پویش آزاد میانگین عبارت است از میانگین مسافتی که یک ذره بدون برخورد با ذرات دیگر می تواند طی کند، که با فشار درون محفظه نسبت عکس دارد .

$$\lambda \propto \frac{1}{P} \quad (1-4)$$

انباشت به روش تبخیر فیزیکی شامل مراحل زیر است :

الف) تبدیل ماده تبخیری به حالت گازی از طریق تبخیر یا تصعید، یا کندوپاش کاتدی؛

ب) انتقال اتم ها (مولکول ها) از چشمه تبخیر به زیر لایه، در فشار کاهش یافته؛

پ) انباشت این ذرات روی زیر لایه؛

ت) تعدیل پیوند اتم ها روی سطح زیر لایه؛

برای تبخیر موادی که می خواهیم به صورت لایه روی زیر لایه بنشانیم، می توان از چشمه های حرارتی مختلفی استفاده کرد، که از مهمترین آن ها می توان به موارد زیر اشاره کرد:

۱- **بوته حرارتی مقاومتی** : فلزات دیر گداز نظیر W ، Ta ، Mo ... به عنوان بوته به کار

می روند.

۲- **روش تبخیر آنی** : ماده مورد نظر به صورت پودر نرمی روی سطحی بسیار داغ می ریزد و فوراً

تبخیر می شود.

۳- **تبخیر با استفاده از قوس الکتریکی** : با قرار دادن ماده مورد نظر بین الکترودهای قوس

الکتریکی و یا بجای خود الکترودها در اثر حرارت زیاد ماده تبخیر می شود.

۴- **انفجار سیم فلزی** : با عبور جریان بسیار زیاد از یک سیم فلزی از جنس ماده مورد نظر،

سیم تبخیر می شود.



۵- تبخیر لیزری: که از انرژی یک باریکه لیزری برای تبخیر ماده استفاده می‌شود.

۶- بمباران الکترونی و یا یونی: از یک باریکه الکترون و یا یون برای تبخیر ماده استفاده می‌شود.

۷- تبخیر با استفاده از امواج رادیویی RF (کوره القایی)

۸- پلاسما - اسپری: ایجاد یک قوس الکتریکی و اسپری کردن ماده مورد نظر درون آن برای تبخیر مواد علاوه بر چشمه های حرارتی، از روش های پراکنش<sup>۱</sup> نیز می توان استفاده کرد. در این روش، با تابش پرتو یونی، الکترونی و یا فوتونی با انرژی کافی، اتم های تشکیل دهنده جسم از سطح آن آزاد شده و در فضا پراکنده می شوند. برای تبخیر ماد با روش پراکنش می توان از پراکنش مگنترون، پراکنش واکنشی، پراکنش با ستون یونی، پراکنش پلاسما، پراکنش با لیزر و پراکنش با باریکه الکترون استفاده نمود.

#### ۴-۴-۴ تحلیل و بررسی مکانیزم تبخیر و تصعید

برای آنکه مولکولی بتواند سطح ماده را ترک کند، لازم است که مؤلفه عمودی نیرو،  $F_{\perp}$ ، که حاصل از انرژی جنبشی منتج از حرکت حرارتی مولکول ها است، از نیروهای جاذبه مولکولی بزرگتر شود. بنابراین با افزایش دما تعداد ذره هایی که این نابرابری را ارضاء می کنند، افزایش می یابد. پس تبخیر در اثر انرژی داخلی جسم، صورت می گیرد. برای جلوگیری از کاهش دمای جسم باید به آن حرارت داد. علاوه بر این مقدار، در حین تبخیر در نتیجه انبساط حجمی که در موقع گذر به فاز گازی اتفاق می افتد، باید مقداری دیگری انرژی، به آن اضافه شود. در حالت تعادل (وقتی فشار بخار برابر با فشار تبخیر است) کمیت های اصلی فرایند با معادله کلاپیرون - کلاسیوس<sup>۲</sup> به یکدیگر مربوط می شوند [۵۷]:

$$\frac{dP}{dT} = \frac{F_{\perp}}{T\Delta V} \quad (۲-۴)$$

<sup>۱</sup> Sputtering

<sup>۲</sup> Clausius-Clapeyron

که در آن  $P$  فشار،  $\Delta V$  تغییر حجم و  $T$  دمای مطلق است.

تعداد اتم‌ها یا مولکول‌هایی که از سطح مایع یا جسم جامد تبخیر می‌شوند، به شدت به دما بستگی دارد. همان‌گونه که در بالا ذکر شد، عموماً فشار بخار تعادلی در یک سیستم بسته ترمودینامیکی حاصل می‌شود. هر چند در تبخیر، عملاً تعادلی از لحاظ ترمودینامیکی ایجاد نمی‌شود، زیرا محیط اطراف چشمه تبخیر به عنوان یک چاه گیرانداز برای بخار عمل می‌کند. اتم‌های تبخیری روی همه قسمت‌هایی که در دمای کمتر از چشمه تبخیر هستند، چگال می‌شوند.

در بررسی‌های سیستماتیک آهنگ تبخیر در خلأ، معلوم شده است که مایع داری قابلیت ویژه‌ای برای تبخیر است که از آهنگ تبخیر ماکزیممی در دمای معین نمی‌تواند بیشتر شود، حتی اگر منبع تغذیه دما نامحدود باشد. آهنگ تبخیر ماکزیمم نظری فقط در صورتی به دست می‌آید که تعداد مولکول‌های بخاری که سطح را ترک می‌کنند، متناظر باشد با تعدادی که برای ایجاد فشار تعادلی روی همان سطح از آن خارج می‌شوند، بدون آن که هیچ کدام به سطح برگردند. برای این نوع آزمایش‌ها و فرض‌هایی که در نظر می‌گیریم، معادله زیر را می‌توان برای آهنگ مولکولی نوشت:

$$\frac{dN}{Adt} = \alpha_e \left[ \frac{P_e - P_h}{\sqrt{2\pi nkT}} \right] \quad (3-4)$$

که در آن  $dN$  تعداد اتم‌های تبخیر شونده،  $A$  مساحت سطح،  $t$  زمان،  $\alpha_e$  ضریب تبخیر،  $P_h$  فشار هیدرو استاتیکی،  $m$  جرم اتمی،  $K$  ثابت بولتزمن و  $T$  دما می‌باشد. با فرض  $\alpha_e = 1$  و  $P_h = 0$ ، ماکزیمم آهنگ تبخیر به دست می‌آید:

$$\frac{dN}{Adt} = \frac{P_e}{\sqrt{2\pi nkT}} \quad (cm^{-2}s^{-1}) \quad (4-4)$$

لانگ موئیر نشان داد که رابطه (۴-۴) در مورد تبخیر از سطوح جامد آزاد نیز صادق است. با ضرب این رابطه در جرم یک اتم منفرد یا مولکول، آهنگ تبخیر جرمی در واحد سطح به دست می‌آید:

$$\Gamma = m \frac{dN}{Adt} = \left( \frac{m}{2\pi mkT} \right)^{\frac{1}{2}} P_e \quad (5-4)$$

$$\Gamma = 5.834 \times 10^{-2} \left( \frac{M}{T} \right)^{\frac{1}{2}} P_e \quad (gcm^{-2}s^{-1}) \quad (6-4)$$

که در آن M جرم مولی و  $P_e$  بر حسب تور (Torr) است.

مقدار کل ماده تبخیر شده را می توان از انتگرال دو گانه زیر به دست آورد:

$$m_{tot} = \int_t \int_A \Gamma dAdt \quad (g) \quad (7-4)$$

آهنگ تبخیر جرمی  $\Gamma$  برای اکثر عنصرها در فشار  $P_e = 10^{-2}$  در حدود  $10^{-4} gcm^{-2}s^{-1}$  است.

#### ۵-۴-۴ روش های اندازه گیری و بازرسی ضخامت لایه های نازک

ضخامت لایه پارامتر بسیار مهمی برای بررسی های بنیادی و کاربردهای لایه نازک است. این موضوع، به علت آن که یک بعد (ضخامت) در مقایسه با دو بعد دیگر کوچک است، منجر به خواصی در لایه نازک می شود، که متفاوت از ماده کپه ای لایه اند. اگر چه ضخامت لایه یک طول است، واضح است که اندازه گیری آن با روش های قراردادی که برای اندازه گیری طول به کار می رود، ممکن نیست. تکنیک های خاصی را باید برای این منظور طراحی و به کار برد. یکی از قدیمی ترین روش های اندازه گیری ضخامت لایه ها، روش اپتیکی است. بالاترین دقت در اندازه گیری های اپتیکی حدود  $3 A^\circ$  است. اطلاعات دقیق در مورد ضخامت لایه در پایان انباشت (لایه نشانی) در بسیاری از بررسی های بنیادی و در بسیاری از کاربردهای صنعتی الزامی است. ضخامت لایه را می توان از آهنگ و زمان انباشت محاسبه کرد. از آن جا که ساختار لایه و خواص مربوط به آن کم و بیش با آهنگ انباشت تغییر می کند، آهنگ انباشت، پارامتری است که در هر رخدادی دانستن آن ضروری است. امکان اندازه گیری همزمان ضخامت و آهنگ انباشت به وسیله روش های زیادی قابل انجام است.

علاوه بر روش های اپتیکی (روش های فوتومتری، تداخلی و قطبش سنجی) با استفاده از روش های الکتریکی نیز می توان ضخامت لایه را تعیین کرد. یکی از ساده ترین روش های الکتریکی، اندازه گیری مقاومت الکتریکی لایه است. ضخامت لایه های دی الکتریک را نیز می توان با اندازه گیری ظرفیت آنها اندازه گیری کرد. این اندازه گیری می تواند در حین تبخیر انجام شود. روش دیگری که برای تعیین ضخامت لایه های نازک به کار می رود و در این پایان نامه مورد استفاده قرار گرفته است، روش نوسانگر بلور کوارتز است، که در ادامه مورد بررسی قرار می گیرد.

#### ۴-۴-۵-۱ روش نوسانگر بلور کوارتز

این روش که برای اندازه گیری ضخامت لایه و آهنگ انباشت به کار می رود، در سال های اخیر مورد توجه بسیار قرار گرفته است. اساس این روش بصورت زیر است:

تیغه ای از کوارتز صیقل داده شده با الکترودهایی که در طرفین آن انباشت شده اند، به یک مدار نوسان کننده وصل می شود. اگر بلور کوارتز به نوسانات برشی در ضخامتش برانگیخته شود، آنگاه ضخامت تیغه متناسب با نصف طول موج بسامد اصلی خواهد بود.

$$f = \frac{v_n}{2t} = \frac{N}{t} \quad (۸-۴)$$

که در آن  $v_n$  سرعت موج عرضی کشسان در جهت ضخامت تیغه ( $t$ ) و  $N$  ثابت بسامد است. با دیفرانسل گیری از این رابطه نسبت به  $t$  و معرفی:

$$dt = \frac{1}{\rho_q S} dm \quad (۹-۴)$$

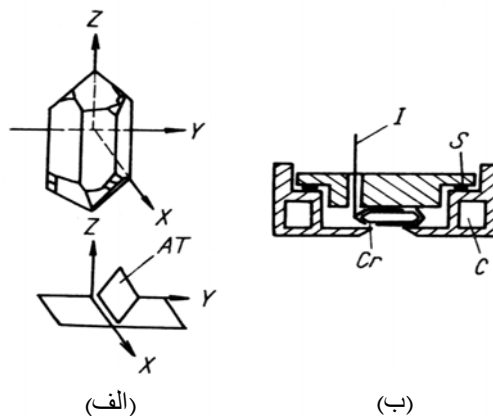
که در آن  $\rho_q$  چگالی کوارتز،  $S$  مساحت تیغه و  $dm$  جرم انباشت شده است، نتیجه می شود:

$$df = -\frac{f^2}{N\rho_q} \frac{dm}{S} \quad (۱۰-۴)$$

بنابراین تغییر بسامد با تغییر جرم بلور متناسب است. از آنجا که در نوسان های برشی در جهت ضخامت بلور روی سطح تیغه کوارتز، پادگره تشکیل می شود، فقط وزن ماده انباشت شده بسامد را تغییر می دهد (به شرط آنکه  $dm$  تقریباً کوچک باشد). این موضوع به این معنی است، که یک لایه واقعاً نازک از هر ماده ای، تغییر بسامد یکسانی با جرم معادل کوارتز ایجاد می کند. ثابت های کشسانی ماده انباشت شده در رابطه جرم-بسامد وارد نمی شود. اگر  $f_0$  فرکانس اولیه ی کریستال در شروع لایه نشانی باشد آن گاه:

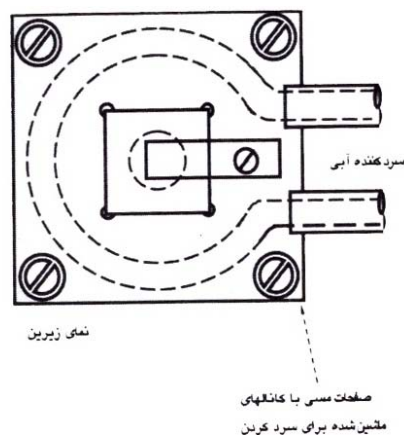
$$C_{f_0} = \frac{f_0^2}{N\rho_q} \quad (۱۱-۴)$$

$C_{f_0}$  ضریب ثابت رابطه تغییر فرکانس تشدید به ضخامت جرمی، که بصورت افزایش جرم بر واحد سطح  $\frac{dm}{s}$  تعریف می شود، یعنی به ازای هر واحد تغییر، فرکانس یک هرتز تغییر می دهد. اگر ضخامتی که باید اندازه گیری شود، خیلی نازک باشد، بهتر است از حساسیت اولیه ی بالاتری استفاده شود. لازم است که همیشه یک سازش بین حساسیت مورد نیاز و بیشترین ضخامت قابل سنجش وجود داشته باشد. نمایی از یک بلور کوارتز و نگهدارنده آن در شکل ۳-۴ نشان داده شده است.



شکل (۳-۴) : الف) تعیین جهت برش AT در کوارتز ب) نگهدارنده بلور : I- بوش ورودی، S- نشت بند، Cr- بلور، C- خنک کننده [۵۷]

ضروری است که فاکتورهای اضافی، که می‌توانند جابجایی فرکانسی را تحت تأثیر قرار داده و بنابراین باعث بروز خطا در اندازه‌گیری ضخامت گردند، مورد توجه قرار گیرند. مهم‌ترین فاکتور، دمای بلور است. چون ضخامت تیغه در اثر انبساط حرارتی، بطور محسوسی با دما افزایش می‌یابد، لذا می‌تواند منشاء خطا در اندازه‌گیری افزایش ضخامت در اثر لایه نشانی گردد. به دلیل دمای بلور که هنگام تبخیر کردن مواد، توسط تابش گرمایی چشمه حرارتی، بالا می‌رود، بایستی ثابت نگه داشته شود. هنگام چگالش بخار روی سطح بلور نیز، گرما به بلور منتقل می‌شود. گرمای چگالش دمای موضعی را بطور قابل ملاحظه‌ای تحت تأثیر قرار می‌دهد. رابطه‌ی بین دما و فرکانس برای بلورهای مختلف، متفاوت است. همیشه سعی می‌شود بلوری با کمترین بستگی دمایی انتخاب شود. یک برش تحت زاویه ۳۷ درجه با محور C از بلور کوارتز AT-Cut برای فرکانس پایه ۱۴MHz به ازای یک درجه‌ی سانتی‌گراد تغییر در دما، معادل است با  $4 \times 10^{-9} \text{ gcm}^{-2}$  تغییر در ضخامت جرمی. (یعنی ضخامت متوسط  $0.04 \text{ nm}$ ، در صورتی که چگالی  $1 \text{ gcm}^{-3}$  باشد). برای کاهش دما تا حد امکان، بلور روی یک نگهدارنده که با آب سرد خنک می‌شود، قرار گرفته و یک دیافراگم روی آن قرار می‌گیرد به طوری که مولکول‌ها فقط روی قسمت کوچکی از بلور می‌توانند بنشینند (شکل ۴-۴).



شکل (۴-۴) : نمایی از یک سرد کن آبی برای نوسانگر بلوری [۵۷]

تغییر در فرکانس معمولاً بوسیله ترکیب فرکانس بلور با یک فرکانس مرجع و سپس تعیین اختلاف آنها با یک کنتور فرکانس، اندازه‌گیری می‌شود. مشتق زمانی این اختلاف فرکانس، آهنگ تبخیر را

نشان می دهد.

یک بلور نوسان ساز که برای اندازه گیری ضخامت بکار می رود، معمولاً به  $10^{-9} \text{ gcm}^{-2}$  حساس است، که به عنوان مثال، حدود یک صدم تک لایه ی آهن می باشد. برای کیفیت بیشتر، تا حد امکان باید عوامل ایجاد خطا حذف شوند. اگر دما با خطای یک صدم درجه سانتی گراد تنظیم شود، یک حساسیت  $10^{-12} \text{ gcm}^{-2}$  می تواند بدست آید.

فصل پنجم

# آزمایشات و نتایج



## ۵-۱ مقدمه

پس از آشنایی با نیمرساناهای آلی، سلول های خورشیدی آلی و همچنین روش های لایه نشانی در فصل های گذشته، در این فصل به بررسی مراحل انجام آزمایش و تهیه ی سلول های خورشیدی لایه نازک از نیمرساناهای آلی کوچک مولکول و اندازه گیری و تجزیه و تحلیل طیف جذب لایه های آلی می پردازیم. از بین روش های مختلف لایه نشانی برای ساخت سلول های خورشیدی، به دلیل امکان مطالعه دقیق تر خواص فیزیکی و تعیین و کنترل ضخامت لایه های فعال، تولید لایه های تمیز تر با حذف ناخالصی ها، امکانات موجود و همچنین از آنجایی که از مواد آلی کوچک مولکول استفاده نمودیم، روش تبخیر حرارتی فیزیکی PVD برای انجام آزمایش در نظر گرفته شد. در این فصل دستگاه هایی که مورد استفاده قرار گرفته اند معرفی و مراحل ساخت سلول های خورشیدی به طور کامل ارائه خواهد شد. در این تحقیق، چند نمونه سلول خورشیدی دو لایه ای با استفاده از مواد و روش های مختلف بهینه سازی، مورد بررسی قرار می گیرند. همچنین نمودار طیف جذب مواد استفاده شده و نمودار مشخصه جریان- ولتاژ جهت مشخصه یابی سلول های ساخته شده، تحت شرایط تاریکی و روشنایی رسم و با یکدیگر مقایسه می شوند.

## ۵-۲ دستگاه های استفاده شده در انجام آزمایشات

### ۵-۲-۱ دستگاه لایه نشانی تبخیر حرارتی

برای لایه نشانی مواد آلی و الکتروفلزی، دستگاه لایه نشانی PVD، ساخت شرکت هندی Hindivac با نام Vacuum Coating Unit Model\_15F6 مورد استفاده قرار گرفت. نمای کلی از دستگاه PVD را می توان در شکل ۵-۱ مشاهده کرد.



شکل (۵-۱): نمای کلی از دستگاه لایه نشانی PVD

شکل فوق تصویر دستگاه لایه نشانی موجود در آزمایشگاه لایه های نازک دانشگاه علم و صنعت را نشان می دهد، که در انجام آزمایشات مورد استفاده قرار گرفت. این دستگاه شامل دو پمپ خلاء چرخشی و پخشی می باشد، که اولی برای ایجاد خلاء تا مرتبه  $10^{-3}$  mbar می باشد؛ که پس از رسیدن به این خلاء اولیه، فاز دوم ایجاد خلاء توسط پمپ دوم برای دستیابی به خلاء بالاتر، تا مرتبه  $10^{-6}$  mbar، صورت می گیرد. این دستگاه شامل یک ضخامت سنج بلور کوارتز می باشد که می توان به کمک آن نرخ لایه نشانی و ضخامت لایه نشانداده شده را در حین فرایند لایه نشانی کنترل کرد. در این دستگاه می توان مواد را به روش تبخیر حرارتی لایه نشانی نمود. در روش تبخیر حرارتی ماده تبخیر شونده از داخل بوتله ای که معمولاً قایقی شکل می باشد، از طریق عبور جریان الکتریکی تصعید شده و بر روی زیر لایه مورد نظر، لایه نشانی می شود. در این روش، می توان چهار بوتله را به طور همزمان در داخل دستگاه قرار داد، که نوع و جنس بوتله ها بسته به ماده مورد نظر مشخص می گردد. در شکل ۵-۲ دو نمونه از این بوتله ها نمایش داده شده اند.



شکل (۲-۵): دو نمونه بوته تنگستنی و مولیبدنی (از راست به چپ)

## ۲-۲-۵ دستگاه لرزشی فرا صوت<sup>۱</sup>

وجود آلودگی بر روی سطح زیر لایه، سبب عدم چسبندگی مناسب مواد لایه نشانی شده بر روی سطح زیر لایه که نتیجه آن ورقه ای شدن و در نهایت از بین رفتن لایه می باشد، خواهد شد. برای تمیز کردن زیر لایه ها از چربی ها، رسوبات و سایر آلودگی ها می توان از دستگاه لرزشی فراصوت استفاده نمود. این دستگاه با ایجاد امواج فراصوت، باعث می شود که مواد تمیز کننده (از قبیل حلال های آلی چربی و برخی از اسید ها) با شدت با سطح زیر لایه های مورد نظر برخورد کرده و سطوح آن ها را از هر گونه آلودگی پاک نماید. دو نمونه از این دستگاه را می توان در شکل ۳-۵ مشاهده نمود.



شکل (۳-۵): دو نمونه دستگاه لرزشی فرا صوت

<sup>۱</sup> Ultra sonic

## ۵-۳ مواد استفاده شده در ساخت سلول های خورشیدی

### ۵-۳-۱ نیمرساناهای آلی بخشنده و پذیرنده

برای ساخت سلول های خورشیدی، از بین نیمرساناهای آلی کوچک مولکول و نیمرساناهای آلی پلیمری، ما گزینه اول یعنی نیمرساناهای آلی کوچک مولکول را انتخاب نمودیم. همان طور که قبلاً اشاره شد نیمرساناهای پلیمری از طریق روش های محلول لایه می شوند، در نتیجه با توجه به امکانات موجود، امکان تولید لایه های با کیفیت بالا و یکنواخت وجود نداشت. همچنین ابزار های لازم برای کنترل و تعیین ضخامت لایه های تولید شده از این مواد در دسترس نبود. بنابراین ترجیح داده شده در این پایان نامه از مواد آلی کوچک مولکول استفاده شود. فتالوسیانین مس<sup>۱</sup> (CuPc) به عنوان نیمرساناهای نوع p (عبور دهنده حفره) و فولرین (C<sub>60</sub>) به عنوان نیمرسانای نوع n (عبور دهنده الکترون)، که همگی جزء مواد آلی کوچک مولکول می باشند، مورد استفاده قرار گرفتند.

### ۵-۳-۱-۱ فتالو سیانین مس

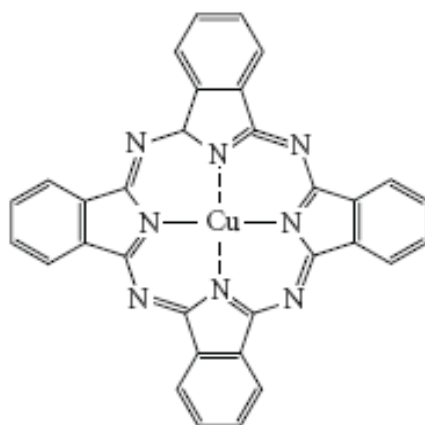
مولکول پایه فتالوسیانین ها (فتالو سیانین عاری از فلز) به صورت  $C_{32}H_{18}N_8$  می باشد. با برداشتن دو اتم هیدروژن مرکزی و جایگزینی آن ها با یک اتم فلزی، امکان ساخت فتالوسیانین های فلزی فراهم می گردد. فرمول شیمیایی یک فتالوسیانین فلزی به صورت  $C_{32}H_{16}N_8M$  که در آن M یک اتم فلزی دو ظرفیتی مانند Fe، Co، Ni، Cu، Zn و ... می باشد. فتالوسیانین ها به دلیل داشتن یک گاف نواری کوچکتر در مقایسه با دیگر نیمرساناهای آلی، از جذابیت فراوانی برای استفاده در سلول های خورشیدی برخوردار می باشند. این مولکول ها به صورت رنگدانه بوده و می توانند فوتون هایی با طول موج ۸۰۰-۶۰۰ nm را (با پیک های جذب قوی) جذب نمایند. فتالوسیانین ها از لحاظ شیمیایی

---

<sup>۱</sup> Copper Phthalocyanine

و گرمایی<sup>۱</sup> پایدار می باشند، در نتیجه برای ساخت لایه های نازک از این مواد، می توان از روش تبخیر حرارتی در خلاء استفاده نمود. از آن جایی که رنگدانه ها (پیگمنت ها)، در حلال های آلی و بیشتر حلال های غیر آلی انحلال ناپذیر می باشند، نمی توان از روش پوشش چرخشی و یا سایر روش های مشابه برای تشکیل لایه های یکنواخت از مولکول های این مواد استفاده کرد [۳۳]. فتالوسیانین ها را می توان از طریق تصعید در دمای بالا در  $450^{\circ}\text{C}$  تحت شرایط خلاء، تا حد زیادی خالص سازی کرد [۶۱].

فتالوسیانین مس یکی از انواع فتالوسیانین های فلزی است، که در این پایان نامه مورد استفاده قرار می گیرد. فتالوسیانین مس دارای تراز HOMO برابر با  $5/2\text{ eV}$  و تراز LUMO برابر با  $3/5\text{ eV}$  می باشد [۵۵]. این ماده یک جذب بیشینه در طول موج های حدود  $620\text{ nm}$  دارد [۳۶ و ۳۴]. فتالوسیانین مس به صورت پودری آبی رنگ، با چگالی  $1/6\text{ g/cm}^3$  و دمای تبخیر  $500^{\circ}\text{C}$  می باشد. در این پایان نامه، ما از فتالوسیانین مس با خلوص  $98\%$ ، خریداری شده از شرکت تجاری آلدریچ<sup>۲</sup>، استفاده نمودیم. ساختار مولکولی این ماده را می توان در شکل ۴-۵ مشاهده نمود.



شکل (۴-۵) : ساختار مولکولی CuPc

<sup>۱</sup> Thermally  
<sup>۲</sup> Aldrich

### ۵-۳-۱-۲ فولرین C<sub>۶۰</sub>

فولرین C<sub>۶۰</sub> یکی از انواع نیمرساناهای آلی کوچک مولکول می باشد که اخیراً توجه زیادی را جهت استفاده در سلول های خورشیدی آلی، به عنوان نیمرسانای پذیرنده، به خود جلب کرده است. اگر چه این ماده دارای جذب قوی در ناحیه مرئی نمی باشد، اما از آنجایی که طول پخش اکسیتون در این ماده نسبت به پرپیلن و مشتقات آن بسیار بزرگتر است (برابر با ۴۰ nm)، که این امر سبب افزایش بازدهی قطعات می شود [۱۵ و ۹]. فولرین C<sub>۶۰</sub> از لحاظ ظاهر، شکلی شبیه به یک توپ فوتبال دارد و به آن باکی بال یا باک مینستر فولرین نیز گفته می شود. فولرین C<sub>۶۰</sub> از ۶۰ اتم کربن تشکیل شده است. البته تعداد دیگری از فولرین ها با تعداد اتم کربن بیشتر نیز وجود دارند (C<sub>۷۰</sub> و C<sub>۸۴</sub> و ...). اما C<sub>۶۰</sub> از انواع دیگر پایدارتر بوده و نیز دارای بیشترین تقارن می باشد. در C<sub>۶۰</sub> اتم های کربن در رئوس یک ۳۲ وجهی قرار گرفته اند. مکان این اتم ها مشابه یکدیگر بوده و متوسط کمترین فاصله بین دو اتم کربن مجاور در این مولکول برابر با ۰/۱۴۲ nm است. در ضمن قطر این مولکول توپی شکل برابر با ۰/۷۱ nm می باشد. در این مولکول هر اتم کربن، با سه اتم کربن دیگر پیوند برقرار می کند [۶۲]. ساختار مولکولی C<sub>۶۰</sub> را می توان در شکل ۵-۵ مشاهده نمود.



شکل (۵-۵): ساختار مولکولی فولرین C<sub>۶۰</sub>

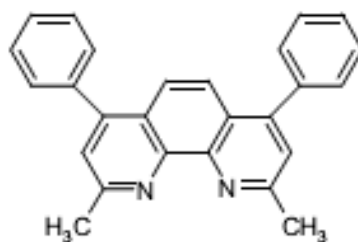
انرژی تراز LUMO آن برابر ۴/۵ eV و تراز HOMO برابر ۶/۲ eV است که طول موج های کوتاهتر از ۵۵۰ nm را جذب می کند [۵۵]. در واقع C<sub>۶۰</sub> بیشترین جذب را در ناحیه ماوراء بنفش دارا می باشد. باید متذکر شد در سلول هایی که در آن ها به جای پرپیلن و مشتقات آن، از C<sub>۶۰</sub> به عنوان نیمرسانای

گذردهنده الکترون استفاده می شود، مقدار جریان مدار کوتاه بیشتر می باشد. این را می توان به انتقال بیشتر الکترون در این ماده نسبت داد، چون  $C_6$  می تواند تا شش الکترون را به طور همزمان انتقال دهد [۶۳].  $C_6$  دارای نقطه ذوب  $550^{\circ}C$ ، چگالی  $2 \text{ g/cm}^3$  و تحرک پذیری حامل  $0.3 \text{ cm}^2/\text{vs}$  می باشد [۵۶].

برای ساخت سلول های خورشیدی در این پایان نامه، دو نوع  $C_6$  با خلوص متفاوت  $98\%$  و  $99.5\%$  از شرکت آلدریچ، به صورت پودری خاکستری رنگ (نقره ای رنگ)، خریداری گردید.

### ۵-۳-۲ ماده استفاده شده در لایه EBL

در این پایان نامه BCP به صورت پودری زرد رنگ و با خلوص  $96\%$  (تهیه شده از شرکت آلدریچ) به عنوان یک ماده آلی، برای استفاده در لایه سد کننده اکسیتون به کار گرفته شد. BCP دارای تراز HOMO برابر با  $7 \text{ eV}$  و تراز LUMO برابر با  $3/5 \text{ eV}$  و دمای تبخیر  $200^{\circ}C$  می باشد. این ماده به علت داشتن گاف انرژی بزرگ ( $3/5 \text{ eV}$ )، به عنوان یک لایه EBL مؤثر در سلول های خورشیدی آلی دو لایه ای عمل می کند. BCP نسبت به مواد  $CuPc$  و  $C_6$  از جذب پایینی برخوردار می باشد. ساختار مولکولی BCP در شکل ۵-۶ نشان داده شده است.



شکل (۵-۶) : ساختار مولکولی BCP

### ۵-۳-۳ الکترودها

برای ساخت سلول ها از دو الکترودها ITO به عنوان الکتروده شفاف (آند) و آلومینیوم به عنوان الکتروده

فلزی (کاتد) استفاده نمودیم.

### ITO شفاف ۱-۳-۳-۵

پودر زرد رنگ ITO مخلوطی از دو ماده اکسید قلع  $\text{SnO}_2$  و اکسید ایندیوم  $\text{In}_2\text{O}_3$  به نسبت ۱ به ۹ می باشد. ITO یک رسانای شفاف می باشد که کاربرد زیادی در ساخت سلول های خورشیدی دارد. در ITO، اتم قلع نسبت به اتم ایندیوم، یک الکترون اضافی دارد؛ این الکترون اضافی سبب می شود هنگامی که آن دو با هم آمیخته می شوند ترکیب حاصل، در حین شفاف بودن، رسانا نیز باشد. شفافیت اجازه عبور نور و رسانایی اجازه جمع آوری حامل های بار را به ITO می دهد. لایه های نازک ITO را می توان به روش های مختلف از قبیل: کند و پاش مغناطیسی، اسپری کردن، تبخیر شیمیایی، سل ژل و با استفاده از تفنگ الکترونی تولید نمود. لایه های نازک ITO که به روش کند و پاش مغناطیسی تولید می گردند، از کیفیت بالاتری برخوردار می باشند.

از آنجایی که تجهیزات لازم برای تولید این لایه فراهم نبوده و همچنین به دلیل زمان گیر بودن مراحل تولید، به صورتی که خود می توانست به عنوان یک پروژه کارشناسی ارشد تعریف شود، ما از لایه های ITO آماده، لایه نشانی شده بر روی شیشه، استفاده نمودیم. این زیر لایه های ITO در دو نوع و با مقاومت های سطحی متفاوت از صنایع اپتیک اصفهان و شرکت تجاری آلدریچ خریداری گردید. هر دو نوع ذکر شده، به روش کند و پاش مغناطیسی تولید شده اند. ضخامت و مقاومت سطحی لایه های ITO که از صنایع اپتیک اصفهان خریداری گردیدند، مشخص نبود. به همین دلیل، برای تعیین مقاومت سطحی، از دستگاه تعیین کننده مقاومت با پروب چهار نقطه ای<sup>۱</sup> موجود در دانشگاه صنعتی شاهرود (JANDEL, MODEL RM3-AR) استفاده نمودیم. مقاومت سطحی اندازه گیری شده برای این لایه  $75 \Omega/sq$  به دست آمد. لایه های ITO خریداری شده از شرکت آلدریچ ضخامتی برابر با ۶۰-۱۰۰ nm، مقاومت سطحی  $15-25 \Omega/sq$  و شفافیتی  $\geq 78\%$  داشتند.

---

<sup>۱</sup> Four Point Probe



## ۵-۳-۲ الکتروود کاتد

در این آزمایش از آلومینیوم به عنوان کاتد فلزی استفاده شد. آلومینیوم استفاده شده به صورت سیم در دستگاه تبخیر حرارتی قرار گرفت.

## ۵-۴ انجام آزمایش

لازم به ذکر است که نتایج گزارش شده در ذیل بهترین نتایج به دست آمده بوده و مراحل زیر برای هر کدام از روش های ساخت، مواد و ترکیبات چندین بار تکرار شده است.

### ۵-۴-۱ برش و سونش<sup>۱</sup> شیمیایی زیر لایه های پوشش داده شده با ITO

در ابتدا و قبل از شروع مراحل تمیز کاری و انجام لایه نشانی، زیر لایه های پوشش داده شده با ITO را با استفاده از یک الماس شیشه بری به قطعات کوچکتر  $3 \times 2/5 \text{ cm}^2$  (برای ITO با مقاومت بالاتر) و  $2/5 \times 1 \text{ cm}^2$  (برای ITO با مقاومت کمتر) برش دادیم. پس از برش ITO به قطعات کوچکتر، برای جلوگیری از اتصال کوتاه شدن و برقراری تماس بین دو الکتروود در حین گرفتن اتصال<sup>۲</sup> برای آزمایش کردن سلول، قسمتی از لایه ITO را توسط سونش شیمیایی بر می داریم. برای انجام این کار، محلولی از اسید کلریدریک، اسید نیتریک و آب مقطر با نسبت حجمی ۴/۶:۰/۴:۵ (به ترتیب از راست به چپ) تهیه گردید. قسمتی از لایه ITO را که به عنوان الکتروود مورد نیاز بود، برای جلوگیری از تماس با اسید و خورده شدن، توسط لاک پوشاندیم. سپس قطعات برش داده شده را به مدت یک ساعت در محلول تهیه شده قرار دادیم، تا مورد فرایند سونش قرار گیرند. بعد از گذشت این مدت زیر لایه های پوشش داده شده با ITO را از محلول بیرون آورده و به وسیله آب یون زدایی شده<sup>۳</sup> شستشو داده، تا از

---

<sup>۱</sup> Etching

<sup>۲</sup> Contacting

<sup>۳</sup> Deionized water

اسید پاک شود. برای پاک کردن لاک، از تکه ای پنبه که آغشته به حلال استون بود استفاده نمودیم.

### ۵-۴-۲ تمیز کردن و خشک کردن زیر لایه ها

زیر لایه هایی که در مرحله قبل مورد سونش قرار گرفتند، توسط آب یون زدایی شده، با استفاده از دستگاه لرزشی فرا صوت، به مدت ۲۰ دقیقه تمیز شدند. برای تمیز کردن زیر لایه ها از چربی ها، رسوبات و سایر آلودگی ها و ناخالصی ها، آن ها را به ترتیب توسط حلال های آلی استون و ایزو پروپانول<sup>۱</sup> (۲- پروپیل الکل)، به وسیله دستگاه لرزشی فرا صوت، هر کدام به مدت ۲۰ دقیقه، تمیز کردیم. پس از انجام مراحل تمیز کاری، زیر لایه ها جهت خشک شدن، به مدت یک ساعت در معرض گاز نیتروژن، در داخل دستگاه glove box قرار گرفتند.

در ضمن برای تمیز کردن زیر لایه های شیشه ای، که جهت اندازه گیری طیف جذب لایه ها و گرفتن نمونه های XRD مورد استفاده قرار گرفتند، از اتانول (اتیل الکل) و آب اسید رقیق (محلولی از اسید کلریدریک و آب مقطر) استفاده نمودیم.

### ۵-۴-۳ لایه نشانی توسط دستگاه PVD

قبل از شروع لایه نشانی، بوته هایی را که در انجام آزمایش مورد استفاده قرار گرفتند، در ابتدا به وسیله محلول رقیقی از NaOH در دستگاه فرا صوت تمیز نموده و سپس در خلاء  $10^{-5}$  mbar در دستگاه PVD حرارت داده تا از آلودگی های احتمالی، پاک گردند. برای انجام لایه نشانی، فتالوسیانین مس، C<sub>۶۰</sub> و BCP را در بوته های مولیبدنی تمیز شده و آلومینیوم را، که به صورت سیم بود، در داخل بوته مارپیچی تنگستنی قرار دادیم. زیر لایه ها را بلافاصله پس از خشک شدن، از glove box خارج کرده و در داخل دستگاه PVD قرار دادیم. برای تمیز شدن بیشتر زیر لایه ها، سطوح آن ها را توسط

---

<sup>۱</sup> Isopropanole

بمباران یونی<sup>۱</sup> در فشار بین ۰/۱-۰/۰۱ mbar مجدداً تمیز نمودیم. با بالا آمدن خلاء و رسیدن به فشار های  $10^{-5}$  -  $10^{-6}$  mbar، با اعمال جریان و تبخیر مواد، لایه نشانی را آغاز نمودیم.

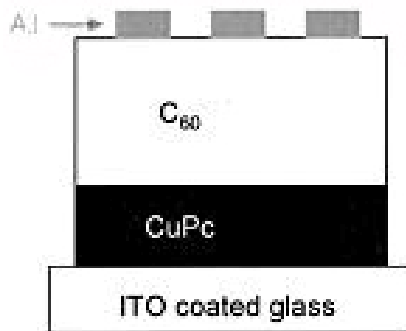
### ۵-۴-۳-۱ سلول سری اول

در نخستین مرحله، هدف ساخت سلولی با ساختار ITO/CuPc(20nm)/C60(40nm)/Al(80nm) بود. برای ساخت این سلول از بوته های مولیبدنی برای تبخیر مواد CuPc و C<sub>60</sub> (۹۸٪) استفاده شد. با رسیدن به فشار  $5 \times 10^{-6}$  mbar لایه نشانی را آغاز کردیم. در ابتدا جریان را به ۲۵ A رسانده و چند دقیقه صبر نموده، تا بوته مولیبدنی و CuPc داخل آن به تعادل گرمایی برسند. پس از گذشت این مدت، جریان را به آرامی و مرحله به مرحله تا ۵۰ A افزایش داده تا بوته قرمز رنگ شود تا به دمای تبخیر CuPc نزدیک شویم. با افزایش جریان به ۶۱ A، CuPc شروع به تبخیر شدن نمود. پس از گذشت حدود ۱ دقیقه، شاتری را که در ابتدا برای جلوگیری از نشست ناخالصی بر روی ITO، جلوی بوته قرار داده بودیم، کنار زدیم. CuPc با نرخ متوسط  $0.2 \text{ A}^\circ/\text{Sec}$  لایه نشانی شد (جریان نهایی را به ۶۵ A رساندیم). پس از رسیدن به ضخامت ۲۰ nm، جریان را به صفر رساندیم و لایه نشانی C<sub>60</sub> را، ضمن توجه به نکات گفته شده در مرحله اول، آغاز نمودیم. C<sub>60</sub> در جریان ۷۵ A شروع به تبخیر کرد. پس از رسیدن به ضخامت ۹ nm، مشاهده شد که دیگر تبخیری صورت نمی گیرد. این مشکل با زیاد کردن جریان نیز برطرف نشد. با این تصور که این مشکل از جانب بوته می باشد، تصمیم گرفتیم که نوع بوته را عوض کنیم. بنابراین به ناچار خلاء دستگاه را بر هم زده و از بوته تنگستنی استفاده نمودیم. این بار C<sub>60</sub> در جریان ۵۶ A و با نرخ متوسط  $0.2 \text{ A}^\circ/\text{Sec}$  شروع به تبخیر کرد. این بار نیز مانند بار قبل، پس از مدتی تبخیر C<sub>60</sub>، در ضخامت ۲۸ nm، متوقف شد. برای لایه نشانی آلومینیوم تصمیم گرفتیم برای جلوگیری از نفوذ آن از بین لایه های آلی و اتصال دو الکتروود با یکدیگر و همچنین از لبه های زیر لایه، فاصله بین بوته و زیر لایه را افزایش داده (۲۵ cm) و از ماسک استفاده

---

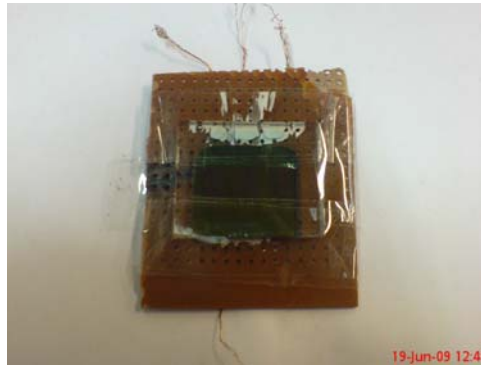
<sup>۱</sup> Ion cleaning

نماییم [۶۴]. در نتیجه برای انجام این کار مجدداً خلاء را بر هم زدیم. برای تبخیر آلومینیوم از بوتله های مارپیچی تنگستنی (فنری شکل)، ساخت کشور روسیه، استفاده شد [۶۵]. با استفاده از این بوتله، آلومینیوم در خلاء  $4 \times 10^{-6}$  mbar و جریان ۵۷A شروع به تبخیر نمود. درحین تبخیر، نرخ لایه نشانی بین  $0.4-0.7 \text{ \AA}/\text{Sec}$  متغیر بود. پس از رسیدن به ضخامت مورد نظر، مشاهده نمودیم دمای زیر لایه به  $77^\circ\text{C}$  افزایش یافته و خلاء به  $10^{-5}$  mbar افت پیدا کرد. این مرحله از لایه نشانی ۳۵ دقیقه به طول انجامید. ساختاری از لایه های به کار رفته در سلول را می توان در شکل ۷-۵ مشاهده نمود.



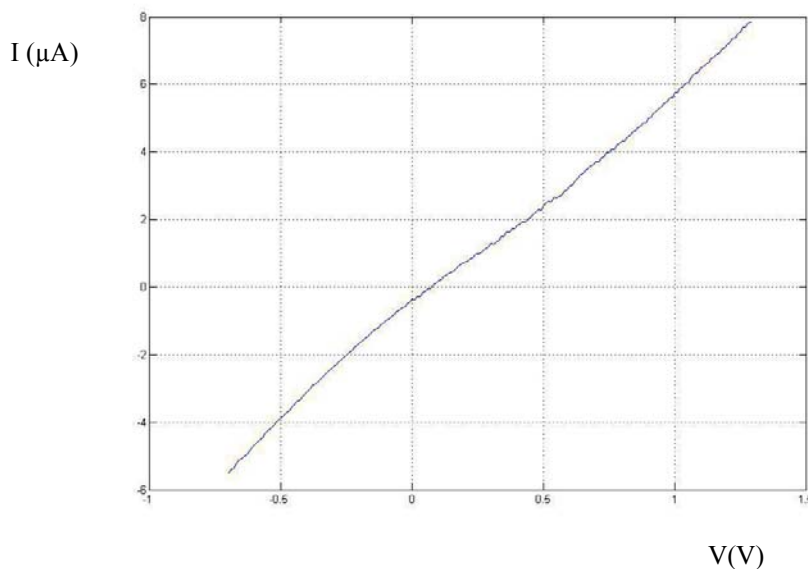
شکل (۷-۵) : طرحی از ساختار لایه ای سلول ساخته شده

پس از سرد شدن زیر لایه، سلول ساخته شده را جهت انجام اندازه گیری های الکتریکی، از دستگاه خارج نمودیم. برای اتصال الکتروود ها به مدار ساخته شده از چسب نقره استفاده شد. جهت خشک شدن چسب مجدداً سلول را در محیط خلاء، به مدت یک روز، قرار دادیم. مدار و سلول ساخته شده را می توان در شکل ۸-۵ مشاهده نمود.



شکل (۵-۸) : تصویری از سلول خورشیدی ساخته شده که از طریق چسب نقره به مدار متصل شده است

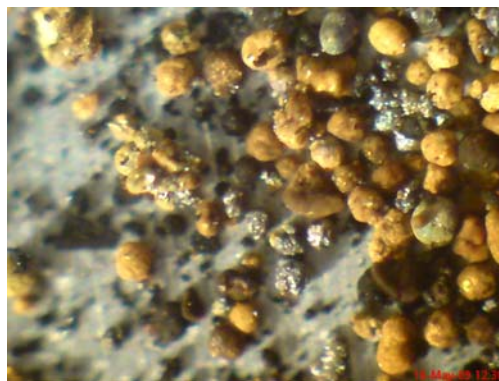
منحنی مشخصه جریان ولتاژ (I-V) سلول ساخته شده ، با استفاده از یک لامپ تنگستن معمولی به عنوان منبع تابش، و به کمک دستگاه مشخصه یاب جریان- ولتاژ data acquisition device CASSY-E ، تحت روشنایی و تاریکی، اندازه گیری شد. در ضمن اندازه گیری ها تحت شرایط تابش استاندارد AM1/5 انجام گرفت. پس از انجام اندازه گیری مشاهده شد که منحنی جریان - ولتاژ، خطی می باشد (شکل ۵-۹). این مطلب نشان دهنده آن است که، سلول رفتار دیودی نداشته و در واقع یک مقاومت است.



شکل (۵-۹) : نمودار جریان - ولتاژ سلول سری اول تحت تابش لامپ تنگستنی

## نتایج

خطی شدن نمودار جریان- ولتاژ را می توان ناشی از اتصال کوتاه شدن سلول، در اثر اتصال بین دو الکتروود دانست. از آنجایی که دمای ذوب آلومینیوم نسبت به مواد آلی به مراتب بالاتر بوده و همچنین به دلیل ضخامت کم لایه های آلی، در حدود چند ده نانومتر، ما به این نتیجه رسیدیم که لایه نشانی آلومینیوم با نرخ بالا می تواند سبب نفوذ آلومینیوم در لایه های آلی و تماس با الکتروود ITO شود، که این امر سبب ایجاد اتصال کوتاه در سلول می شود. بنابراین نرخ لایه نشانی را در آزمایش های بعد کاهش دادیم. علاوه بر نرخ بالا و ضخامت کم لایه ها، چسب نقره نیز می تواند از بین لایه های آلی نفوذ کرده و سبب اتصال دو الکتروود شود. مشکل دیگر مربوط به ضخامت کمتر از حد معمول لایه  $C_6$  بود. از آنجایی که با تعویض بوته مولیبدنی، مشکل لایه نشانی  $C_6$  حل نگردید، به این نتیجه رسیدیم که اشکال کار نباید از بوته باشد، بلکه دلیل این امر را می توان ناشی از کم بودن  $C_6$  در داخل بوته دانست. با مشاهده  $C_6$  توسط میکروسکوپ، دیدیم که رنگ ماده پس از تبخیر شدن از خاکستری به سیاه و قهوه ای تغییر کرده و همچنین اندازه ذرات نیز تغییر یافته است، یعنی به دلیل بالا بردن جریان، و در نتیجه بالا رفتن دمای بوته، ساختار شیمیایی آن تغییر پیدا کرده است (شکل ۵- ۱۰). بنابراین به این نتیجه رسیدیم که برای هر بار لایه نشانی از  $C_6$  جدید و با مقدار زیاد استفاده نماییم.



شکل (۵-۱۰) : تصویر میکروسکوپ الکترونی که نشان دهنده تغییر رنگ و اندازه ذرات  $C_6$  پس از تبخیر شدن می باشد

## ۵-۴-۳-۲ سلول سری دوم

هدف از این آزمایش، ساخت سلولی مشابه با ساختار سلول قبل بود. پس از لایه نشانی مواد آلی، ضمن رعایت نکات گفته شده در مرحله قبل، لایه نشانی آلومینیوم را آغاز نمودیم. اما در این مرحله از آزمایش، در حین لایه نشانی آلومینیوم و در حالی که ضخامت آن به ۵ nm رسیده بود، بوته ماریچی شکسته و جریان قطع شد. بنابراین به ناچار مجبور شدیم خلاء را بر هم زده و بوته را تعویض نماییم. پس از تعویض بوته مجدداً لایه نشانی را آغاز نموده و تا ضخامت ۸۰nm آلومینیوم نشانیدیم. پس از سرد شدن دستگاه و خارج نمودن سلول ها، مشاهده شد که رنگ آلومینیوم نشانده شده تیره می باشد. با اندازه گیری مقاومت بین دو الکتروود، به کمک اهم متر، دیده شده که الکتروود آلومینیوم رسانایی ندارد.

## نتایج

با توجه به وجود مقاومت بسیار بالا در بین دو الکتروود سلول، می توان نتیجه گرفت که در حین لایه نشانی، علاوه بر آلومینیوم، بوته تنگستنی نیز تبخیر شده است. علاوه بر این به علت بر هم زدن خلاء و نفوذ اکسیژن در لایه آلومینیوم، احتمالاً این لایه اکسید شده و رسانایی خود را از دست داده است، که این امر می تواند یکی از دلایل تیره شدن لایه نیز باشد. البته علاوه بر دلایل فوق الذکر، از آنجا که بوته ماریچی از خلوص بالایی برخوردار نبود، احتمال تبخیر ناخالصی در حین فرایند لایه نشانی نیز وجود دارد. برای رفع این مشکل، در آزمایش های بعد از بوته های تنگستنی خالص تر (ساخت کشور آلمان) استفاده شد. با این وجود، باز هم در حین لایه نشانی با شکستن بوته ها و قطع جریان مواجه شدیم. پس از بررسی و مطالعه، به این نتیجه رسیدیم که از بوته های تنگستنی سبدی<sup>۱</sup> شکل استفاده نماییم. این نوع بوته های سبدی را با استفاده از سیم های تنگستنی با خلوص بالا، با به کارگیری

---

<sup>۱</sup> Basket

روش های خاص به منظور جلوگیری از شکستن سیم ها (به دلیل شکننده بودن سیم ها)، ساختیم. نمونه ای از این بوته های سبیدی ساخته شده را می توان در شکل ۵-۱۱ مشاهده نمود.



شکل (۵-۱۱): نمونه ای از بوته سبیدی (تنگستنی) ساخته شده

#### ۵-۴-۳ ساخت دو سلول به منظور بررسی تأثیر لایه EBL

هدف از انجام این آزمایش، بررسی نقش لایه سد کننده اکسیتون در سلولی با ساختار مشابه با سلول های ساخته شده در مراحل قبل، و تجزیه و تحلیل نمودار های جریان-ولتاژ برای این سلول ها می باشد. ماده آلی BCP به عنوان یک لایه EBL، به منظور ایجاد بهبود در عملکرد سلول مورد استفاده قرار گرفت. در واقع دو سلول با ساختار: سلول الف - ITO/CuPc(20nm)/C60(40nm)/Al(80nm) و سلول ب - ITO/CuPc(20nm)/C60(40nm)/BCP(8nm)/AL(80nm) به طور هم زمان و تحت شرایط یکسان ساخته شدند. در این مرحله تصمیم گرفتیم تمام مراحل لایه نشانی را در یک مرحله، بدون برهم زدن خلاء، انجام دهیم. بنابراین دیگر نمی توانستیم از ماسک (برای لایه نشانی آلومینیوم) استفاده کنیم. بنابراین نحوه سونش شیمیایی را تغییر داده و الگویی را که در ساخت ماسک به کار برده بودیم، بر روی زیر لایه پوشش داده شده با ITO، در هنگام سونش شیمیایی پیاده نمودیم. با قرار دادن دو زیر لایه ITO مشابه (با مقاومت سطحی  $75 \Omega/sq$ ) داخل دستگاه، با رعایت نکات گفته شده در مراحل قبل و رسیدن به خلاء  $2 \times 10^{-6}$  mbar لایه نشانی آغاز شد. پس از لایه نشانی مواد CuPc و C<sub>60</sub> که در هر دو سلول مشترک بودند، نوبت به لایه نشانی BCP رسید. از آنجا که می خواستیم تنها یکی از سلول ها دارای لایه BCP باشد، به وسیله شاتر مانع از لایه نشانی BCP بر روی سلول الف شدیم. در نتیجه BCP تنها بر روی یکی از سلول ها لایه نشانی شد (این ماده در جریان ۳۱ A و



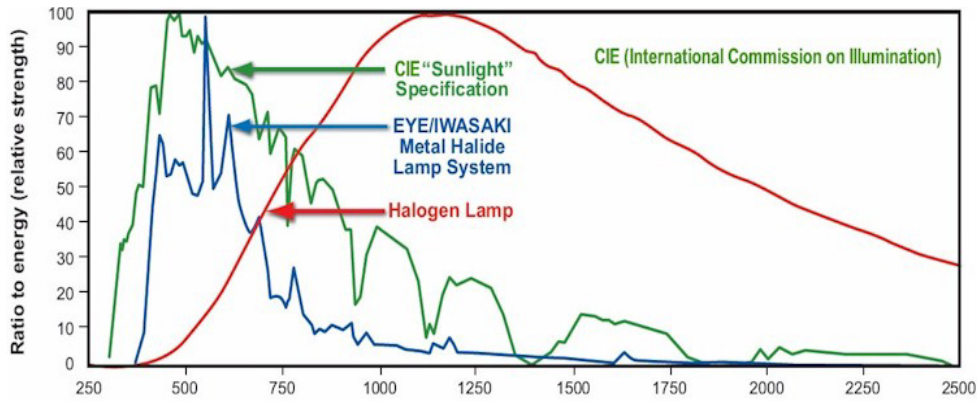
توسط بوته مولیبدنی تبخیر گردید). پس از این مرحله، شاتر را کنار زده و آلومینیوم را لایه نشانی کردیم. نرخ لایه نشانی برای تمامی مواد بین  $0.2-0.3 \text{ A}^\circ/\text{Sec}$  نگه داشته شد. تصویری از دو سلول ساخته شده در شکل ۵-۱۲ دیده می شوند.



شکل (۵-۱۲) : تصویری از دو سلول الف (سمت چپ) و ب (سمت راست)

### شبیه ساز خورشیدی

این بار برای اندازه گیری مشخصه جریان- ولتاژ، منبع تابش را تغییر دادیم. شدت نور لامپ تنگستنی معمولی پایین بوده و همچنین گرمای زیادی را تولید می کند. با توجه به وجود رابطه مستقیم بین شدت نور فرودی و عملکرد بهتر سلول، این نوع لامپ نمی توانست منبع تابش مناسبی برای اندازه گیری ها باشد. طیف این لامپ با طیف خورشید متفاوت بوده و بیشترین شدت را در ناحیه مادون قرمز دارد، به طوری که باعث تولید گرمای فراوان می شود. با جایگزینی لامپ تنگستنی با لامپ هالوژن، این مشکل همچنان وجود داشته و بر قوت خود باقی ماند. به دلیل عدم دسترسی و قیمت بالای لامپ های زنون، که بیشترین شباهت را به طیف خورشید دارا می باشند، به ناچار مجبور به پیدا کردن جایگزین مناسبی برای این نوع از لامپ ها شدیم. با مطالعه و تحقیق در این زمینه، سرانجام لامپ Metal Halide را که طیف مربوط به آن ها نیز همانند لامپ زنون شباهت زیادی به طیف خورشید دارا می باشد، به عنوان منبع تابش انتخاب نمودیم. در شکل ۵-۱۳ نمودار توزیع انرژی دو لامپ هالوژن و Metal Halide با طیف انرژی خورشید مقایسه شده است.



شکل (۵-۱۳): مقایسه توزیع طیف انرژی لامپ های هالوژن و Metal Halide با خورشید

با توجه به شکل فوق و شباهت زیاد طیف انرژی لامپ Metal Halide با طیف خورشید، اقدام به ساخت یک شبیه ساز خورشیدی با استفاده از این لامپ نمودیم. برای افزایش شدت نور تابیده شده توسط این لامپ از یک بازتاب کننده<sup>۱</sup> استفاده شد. تصویری از این شبیه ساز خورشیدی استفاده به عنوان منبع تابش، در شکل ۵-۱۴ دیده می شود.

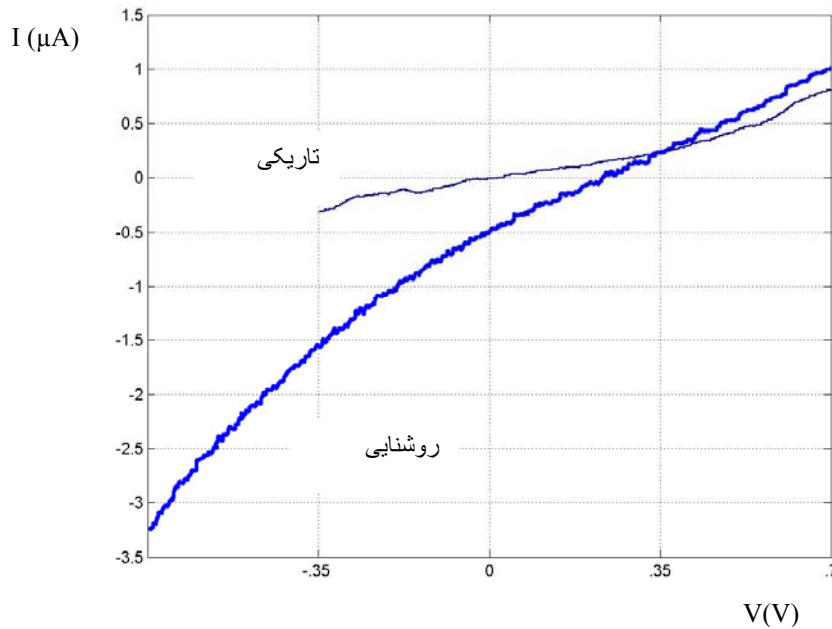


شکل (۵-۱۴): شبیه ساز خورشیدی ساخته شده از لامپ Metal Halide

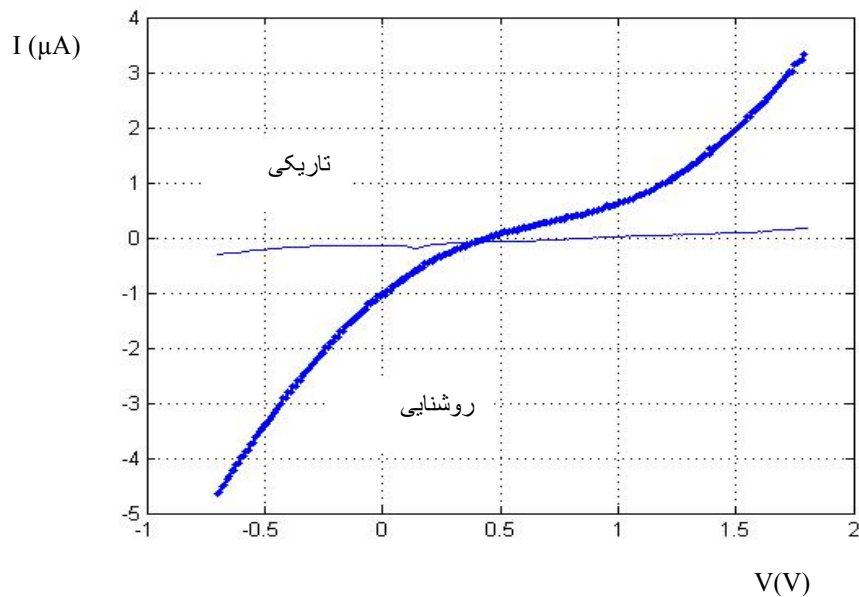
منحنی های مشخصه جریان-ولتاژ دو سلول ساخته شده، تحت تاریک و روشنایی، با استفاده از شبیه ساز خورشیدی شامل لامپ Metal Halide (با شدت  $100 \text{ mW/cm}^2$ ) و مشخصه یاب

<sup>۱</sup> Reflector

جریان-ولتاژ، تحت شرایط تابش استاندارد AM1/5 اندازه گیری شد. نمودار جریان-ولتاژ برای این دو سلول را تحت تاریکی و روشنایی می توان در دو شکل ۵-۱۵ و ۵-۱۶ مشاهده نمود.



شکل (۵-۱۵): نمودار جریان-ولتاژ برای سلول الف (بدون BCP)



شکل (۵-۱۶): نمودار جریان-ولتاژ برای سلول ب (با استفاده از BCP)

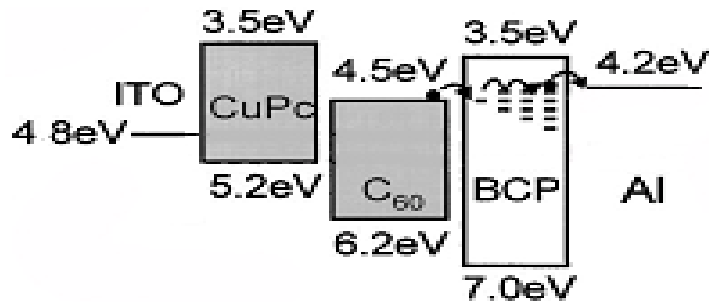
## نتایج

از نمودار های جریان-ولتاژ دو سلول، اشکال ۵-۱۵ و ۵-۱۶، مشاهده می شود که با استفاده از لایه BCP، مقدار جریان مدار کوتاه  $I_{sc}$  از  $0.5 \mu A$  (برای سلول الف) به  $1 \mu A$  (برای سلول ب) افزایش یافته و همچنین سلول رفتار دیودی تری را از خود نشان می دهد. از آن جا که دو سلول مساحت های متفاوتی دارند بهتر است که به جای جریان مدار کوتاه  $I_{sc}$ ، چگالی جریان مدار کوتاه  $J_{sc}$  دو سلول مورد بررسی قرار گیرد. به ازای  $A_1 = 0.21 \text{ cm}^2$  (مساحت سلول الف) و  $A_2 = 0.3 \text{ cm}^2$  (مساحت سلول ب) مقدار  $J_{sc}$  برای سلول الف برابر با  $1/6 \mu A/cm^2$  و برای سلول ب این مقدار  $4/7 \mu A/cm^2$  خواهد شد، که ملاحظه می شود این مقدار تقریباً سه برابر شده است. این بهبود در عملکرد سلول را می توان به نقش های مختلف لایه EBL نسبت داد. BCP علاوه بر سد کردن اکسیتون، حفره ها را نیز سد کرده و همچنین از آسیب رسیدن به لایه آلی  $C_6$  در حین لایه نشانی الکتروود فلزی (آلومینیوم) محافظت می نماید. علاوه بر این، به عنوان یک لایه انتقال دهنده ی الکترون خوب عمل کرده و باعث یکنواختی سطح  $C_6$  نیز می گردد. مقدار ولتاژ مدار باز  $V_{oc}$  برای سلول الف  $0.35V$  و برای سلول دوم  $0.44V$  می باشد. همچنین فاکتور پر شدگی FF نیز، برای دو سلول تقریباً مشابه به دست آمد ( $FF \approx 0.45$ ).

با توجه به نمودار انرژی در شکل ۵-۱۷، انتظار داریم که BCP به دلیل داشتن گاف انرژی بالا و داشتن LUMO بالاتر نسبت به  $C_6$ ، یک سد پتانسیل برای عبور الکترون ها و رسیدن به کاتد به وجود آورد، در حالی که در عمل چنین نبوده و BCP الکترون ها را به خوبی انتقال می دهد. علت این امر را می توان ایجاد حالت های نقص<sup>۱</sup> در گاف انرژی BCP دانست، که در حین لایه نشانی کاتد فلزی (از طریق اتم های داغ فلزی) در زیر تراز LUMO لایه EBL القا می شود [۵۵ و ۵۴ و ۴۹ و ۱۵]. الکترون ها می توانند از طریق این حالت های انرژی، از BCP عبور کرده و به آلومینیوم برسند.

---

<sup>۱</sup> Defect state



شکل (۵-۱۷) : نمودار تراز های انرژی سلول و تشکیل حالت های نقص در گاف انرژی BCP [۵۵]

تحرك پذیری الکترون  $\mu_e$  در لایه BCP، متناسب با چگالی حالت های نقص  $N_{defect}$  در نزدیکی فصل مشترک C<sub>60</sub>/BCP می باشد، که به طور نمایی با فاصله  $d$  از فصل مشترک BCP/Al کاهش می یابد.  $N_{defect}$  طبق رابطه (۵-۱) محاسبه می شود [۱۵].

$$N_{defect}(d) = N_0 \exp(-d/d_0) \quad (۵-۱)$$

در این رابطه  $N_0$  چگالی دام<sup>۱</sup> در فصل مشترک BCP/Al و  $d_0$  عمق آسیب دیدگی لایه، در حین لایه نشانی آلومینیوم می باشد.

نکته ای که در استفاده از لایه های EBL بایستی مورد توجه قرار گیرد ضخامت این لایه هاست، که می تواند به مقدار زیادی بر روی عملکرد آن ها تأثیر گذار باشد. ضخامت این لایه بایستی بهینه باشد، زیرا ضخامت زیاد آن مانع از تشکیل حالت های نقص در حجم لایه و مناطق دور از کاتد و در نتیجه سبب افزایش مقاومت سری سلول و به دنبال آن کاهش در مقدار  $I_{sc}$  می شود. همچنین در ضخامت های کم نیز ممکن است که لایه آلی در حین لایه نشانی Al، آسیب دیده و سلول اتصال کوتاه شود. در این پایان نامه از یک ضخامت بهینه برای لایه EBL استفاده شده است.

<sup>۱</sup> Trap

## محاسبه مقاومت سری سلول

با استفاده از نمودار جریان- ولتاژ و محاسبه معکوس شیب منحنی در قسمت انتهایی آن می توان مقاومت سری سلول را به دست آورد. حاصلضرب مقاومت سری به دست آمده برای هر سلول در مساحت آن، مقاومت سری ویژه<sup>۱</sup> سلول را خواهد داد [۴۰]. برای سلول اول  $R_{SA1} = R_{S1} \cdot A_1 = 130 \text{ K}\Omega\text{cm}^2$  و سلول دوم  $R_{SA2} = R_{S2} \cdot A_2 = 44 \text{ K}\Omega\text{cm}^2$  خواهد بود.

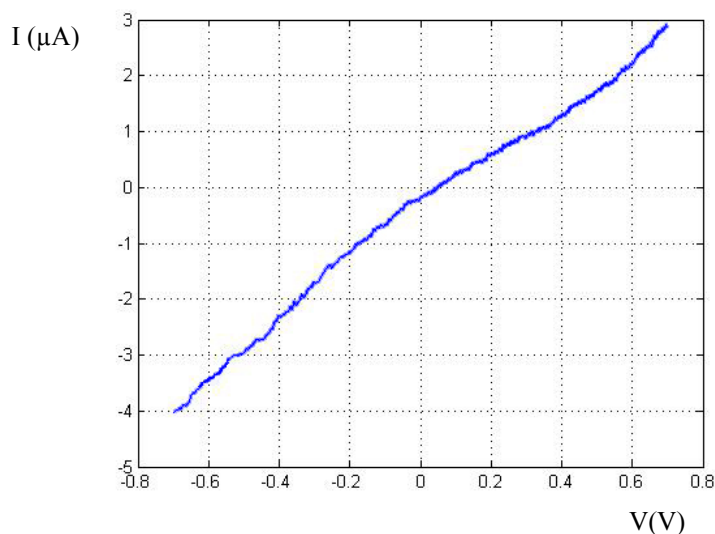
مشاهده می شود که مقدار  $R_{SA}$  به دست آمده برای این سلول ها نسبت به سلول های ساخته شده در کار های مشابه [۶۶ و ۴۰]، چندین مرتبه بالاتر است. که این امر را می توان به مقاومت سطحی بالای ITO و خلوص پایین مواد، که در اثر آن مراکز پراکندگی افزایش یافته و سبب کاهش تحرک پذیری حامل های بار و افزایش بازترکیب اکسیتون ها می شود، نسبت داد. لذا می توان کمتر بودن  $I_{sc}$  در سلول شامل BCP در این پایان نامه را نسبت به سلول های مشابه، مقاومت سری بالای این سلول دانست.

## اندازه گیری نمودار I-V پس از گذشت سه روز

با توجه به اینکه BCP در برابر رطوبت و هوا و دمای بالا از پایداری زیادی برخوردار نیست [۵۴]، انتظار می رود که قطعات ساخته شده از آن دارای پایداری ضعیفی بوده و با گذشت زمان عملکرد سلول افت نماید. برای بررسی این اثر، نمودار جریان- ولتاژ سلولی که در آن از BCP استفاده شد (سلول ب)، پس از گذشت سه روز مجدداً اندازه گیری شد. این نمودار در شکل ۵- ۱۸ نشان داده شده است.

---

<sup>۱</sup> Specific series resistance



شکل (۵-۱۸) : نمودار I-V سلول «ب» تحت روشنایی پس از گذشت سه روز

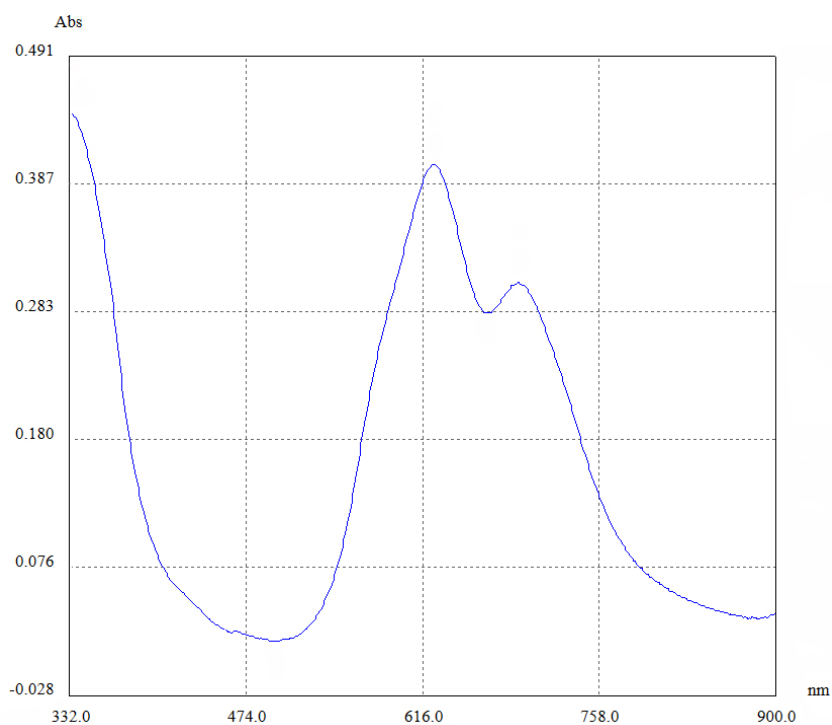
با توجه به شکل، ملاحظه می شود که نمودار تقریباً خطی شده و همچنین مقدار جریان مدار کوتاه و ولتاژ مدار باز برای این سلول به مقدار زیادی کاهش یافته است و سلول عملکرد ضعیفتری را نسبت به نمونه اولیه از خود نشان می دهد.

#### ۴-۴-۵ اندازه گیری طیف جذب اپتیکی لایه ها در ناحیه ماوراء بنفش - مرئی

چندین خاصیت کلیدی برای مفید بودن یک ماده در کاربرد فوتوولتائیک آلی وجود دارد، که شامل پهنای باند، جذب نور، انتقال مؤثر حامل و ... می باشد. همانطور که قبلاً نیز گفته شد، به طور کلی نیمرساناهای آلی، چه مولکول های کوچک و چه پلیمر ها، دارای جذب بالایی در محدوده UV-Vis می باشند. این مزیت امکان ساخت لایه های بسیار نازک را به منظور استفاده در کاربرد های فوتوولتائیک، فراهم می آورد. به طور کلی، پهنای جذب نور زیاد باعث می شود که بیشترین طیف نور خورشید را جذب نماییم. برای بررسی این خاصیت از مواد آلی، طیف جذب اپتیکی لایه ها در محدوده UV-Vis اندازه گیری شد.

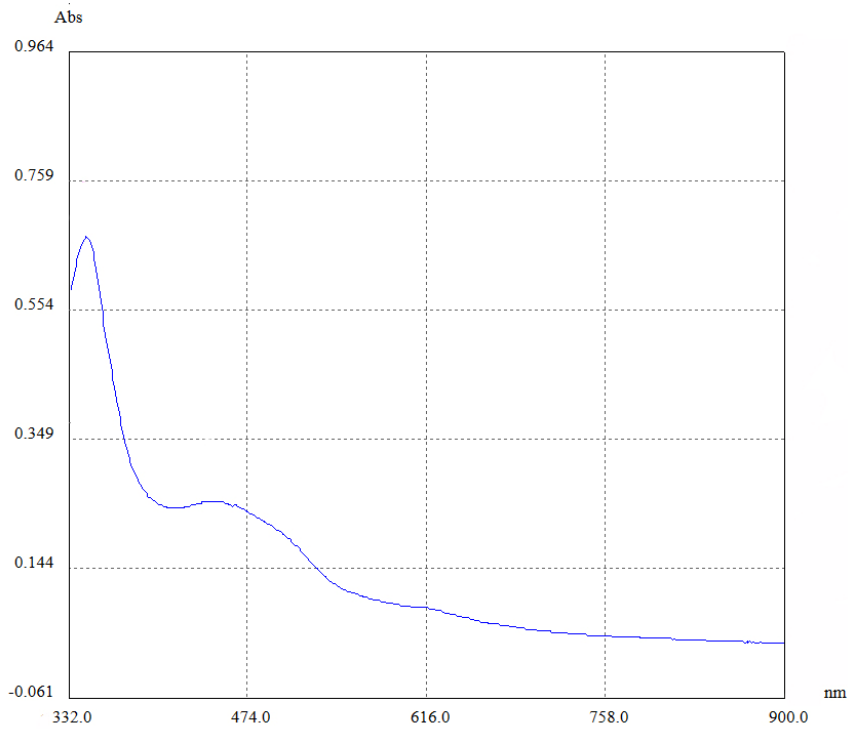
## ۵-۴-۱ طیف سنجی لایه ها به کمک دستگاه طیف سنج UV-Vis

برای اندازه گیری طیف جذب لایه های CuPc و C<sub>60</sub>، این مواد را به طور جداگانه بر روی لام های شیشه ای (زیر لایه های شیشه ای) لایه نشانی نمودیم. ضخامت های این لایه ها با ضخامت لایه های فعال در سلول ها، یکسان در نظر گرفته شد (۲۰ nm برای CuPc و ۴۰ nm برای C<sub>60</sub>). قبل از شروع انجام کار، زیر لایه ها را به روشی که قبلاً اشاره شد، تمیز نمودیم. در حین لایه نشانی، سعی شد، تا مقدار خلاء و نرخ لایه نشانی، مشابه با آزمایشات قبلی باشد. برای اندازه گیری طیف های جذب لایه ها از دستگاه طیف سنج UV-Vis موجود در آزمایشگاه اپتیک دانشگاه علم و صنعت، استفاده شد. طیف جذب لایه های CuPc و C<sub>60</sub>، به ترتیب، در اشکال ۵-۱۹ و ۵-۲۰ مشاهده می شوند.



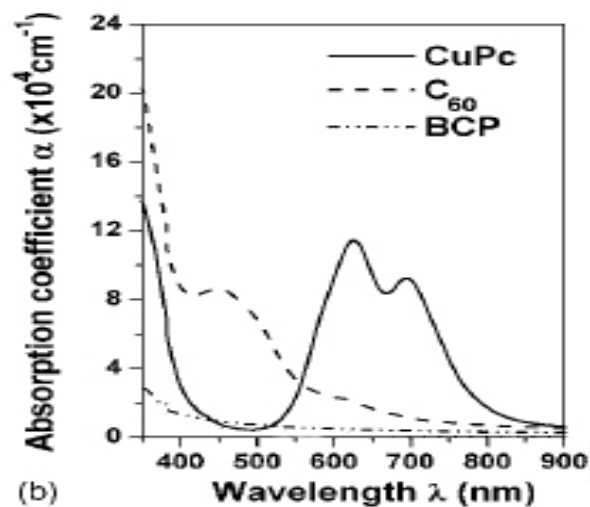
شکل (۵-۱۹): طیف جذب لایه CuPc با ضخامت ۲۰ nm





شکل (۵-۲۰): طیف جذب لایه  $C_{60}$  (خلوص ۹۸٪) با ضخامت ۴۰ nm

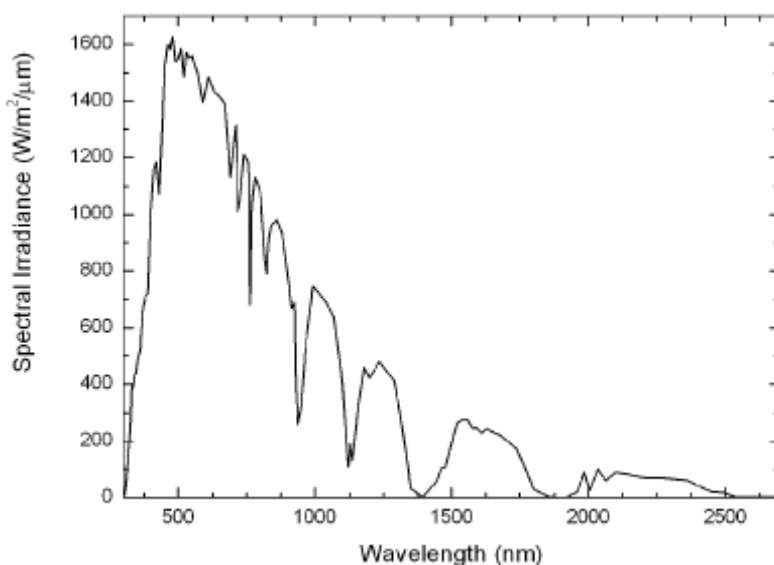
لازم به ذکر است که منحنی های طیف جذب به دست آمده در اشکال ۵-۱۹ و ۵-۲۰ با منحنی های جذب به دست آمده توسط چان و همکارانش [۴۷]، از نظر شکل منحنی و مقادیر کمینه و بیشینه، کاملاً مطابقت دارد (شکل ۵-۲۱).



شکل (۵-۲۱): منحنی جذب اندازه گیری شده توسط چان و همکارانش برای سه لایه  $CuPc$ ،  $C_{60}$  و BCP [۴۷]

#### ۵-۴-۲ تجزیه و تحلیل طیف جذب لایه ها به کمک طیف خورشید

با استفاده از طیف خورشید در می یابیم که اگر چه، این طیف تا ناحیه مادون قرمز گسترش یافته است، اما بیشتر نور خورشید یا به عبارتی ۷۰٪ آن، همانگونه که در شکل ۵-۲۲ دیده می شود، در ناحیه اپتیکی و نزدیک به مادون قرمز (۳۰۰-۹۵۰nm) می باشد. یعنی این که ما به طور ایده آل به پیک های جذب متمرکز در اطراف ۶۹۰ nm ( $1/8$  eV) نیازمندیم، که این مقدار پهنای گاف بهینه برای موادی که نور را جذب می کنند، فراهم خواهد کرد.



شکل (۵-۲۲): توزیع شدت طیف خورشید تحت شرایط تابش استاندارد AM1/5 [۷]

بنابراین CuPc با داشتن گاف نواری برابر با ۱٫۷ eV، ماده ای مناسب برای کاربرد در سلول های فوتوولتائیک است. با توجه به نمودار طیف جذب CuPc در شکل ۵-۱۹، مشاهده می شود که CuPc جذب قوی را در محدوده طول موج های بلند از خود نشان می دهد، به طوری که یک مقدار بیشینه جذب در طول موج ۶۲۶ nm (پیک دوم در این محدوده در طول موج ۶۹۴ nm واقع می باشد) دارد. همچنین مشاهده می شود که در محدوده طیف مرئی با طول موج های کوچک بین ۳۹۰-۵۰۰ nm، جذب اپتیکی ناچیزی را از خود نشان می دهد. البته بایستی توجه داشت که جذب اصلی CuPc در

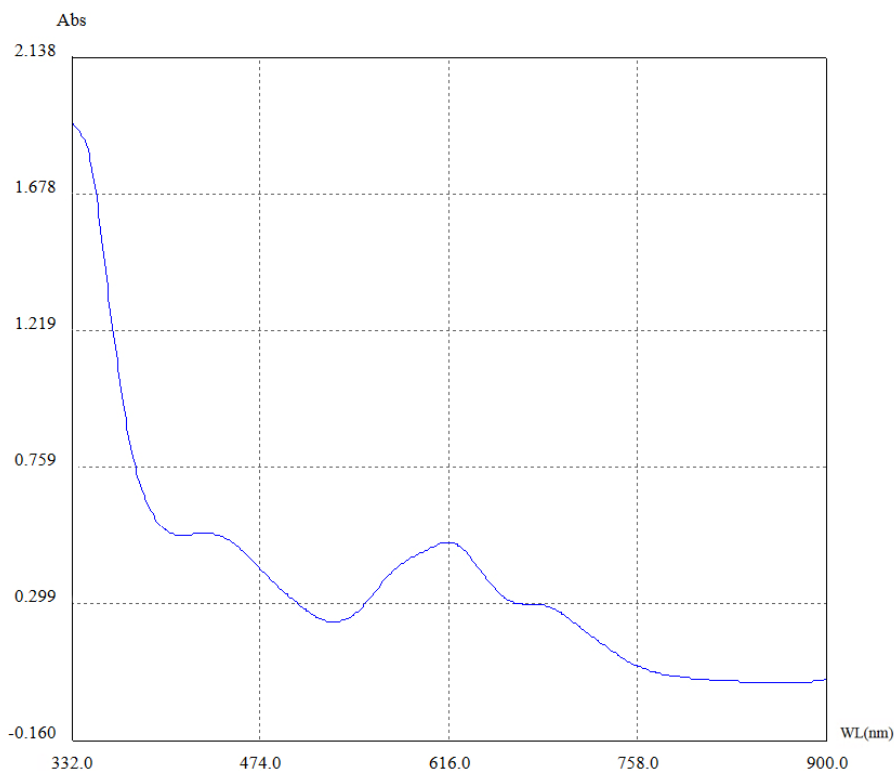
محدوده UV و در طول موج ۳۳۴ nm ظاهر می شود، که البته این مقدار برای کاربرد های نور خورشید، خیلی مفید نمی باشد.

با توجه به نمودار طیف جذب  $C_{60}$  در شکل ۵-۲۰، به خوبی دیده می شود که این ماده در محدوده طول موج های  $\lambda \geq 550$  nm تقریباً جذبی را از خود نشان نمی دهد، بلکه جذب بالای آن در محدوده UV است. در محدوده طیف مرئی با طول موج های کوتاه، یعنی محدوده ای که در آن CuPc جذب ناچیزی دارد، یک سهم قابل توجه از جذب برای  $C_{60}$ ، با یک مقدار بیشینه جذب در  $\lambda = 448$  nm، رخ خواهد داد. بنابراین می توان نتیجه گرفت که در سیستم های دو لایه ای  $C_{60} / CuPc$ ، طیف های جذب CuPc و  $C_{60}$  مکمل یکدیگر بوده و تقریباً غیر همپوشان می باشند. این امر سبب می شود تا امکان جذب حداکثری طیف خورشید، موجود در محدوده UV-Vis، تا حد زیادی فراهم گردد. البته این ویژگی، مکمل بودن طیف های جذب این دو ماده مزایای دیگری نیز دارد، مثلاً می توانیم بین جذب نور در لایه CuPc و لایه  $C_{60}$  تمایز قائل شده و در نتیجه مواردی چون، تولید اکسیژن، پخش اکسیژن در لایه جذب کننده و یا تداخل اپتیکی را به طور جداگانه بررسی کنیم.

### ۵-۴-۵ اندازه گیری طیف جذب اپتیکی سلول خورشیدی ساخته شده

برای اندازه گیری طیف جذب کل لایه های آلی به کار رفته در سلول، مواد CuPc،  $C_{60}$  و BCP (با ضخامتی مشابه با سلول های ساخته شده در آزمایشات قبل) را بر روی یک لایه پوشش داده شده با ITO لایه نشانی نمودیم. این بار برخلاف مراحل به کار گرفته شده در ساخت سلول، آلومینیوم را لایه نشانی نکردیم. طیف جذب اندازه گیری شده توسط دستگاه طیف سنج UV-Vis را می توان در شکل ۵-۲۳ مشاهده نمود. از آنجایی که BCP، به علت گاف انرژی نسبتاً بالا (۳/۵ eV) جذب نسبتاً پایینی در مقایسه با لایه های CuPc و  $C_{60}$  دارد (شکل ۵-۲۱) [۴۷]، بنابراین انتظار داریم که طیف جذب سلول (بدون آلومینیوم) برآیندی از طیف های جذب لایه های CuPc و  $C_{60}$  باشد، که نمودار طیف جذب در شکل ۵-۲۳ گویای این مطلب می باشد. علاوه بر این با توجه به شکل مشخص می

گردد که ساختار سلول از جذب قابل قبولی در ناحیه مرئی برخوردار است. برای این که بتوان جذب نور را در ناحیه نزدیک مادون قرمز (NIR) بالا برد، می توان از یک لایه نازک از فتالوسیانین قلع (SnPc) در بین لایه های CuPc و C<sub>60</sub> استفاده نمود [۳۰].



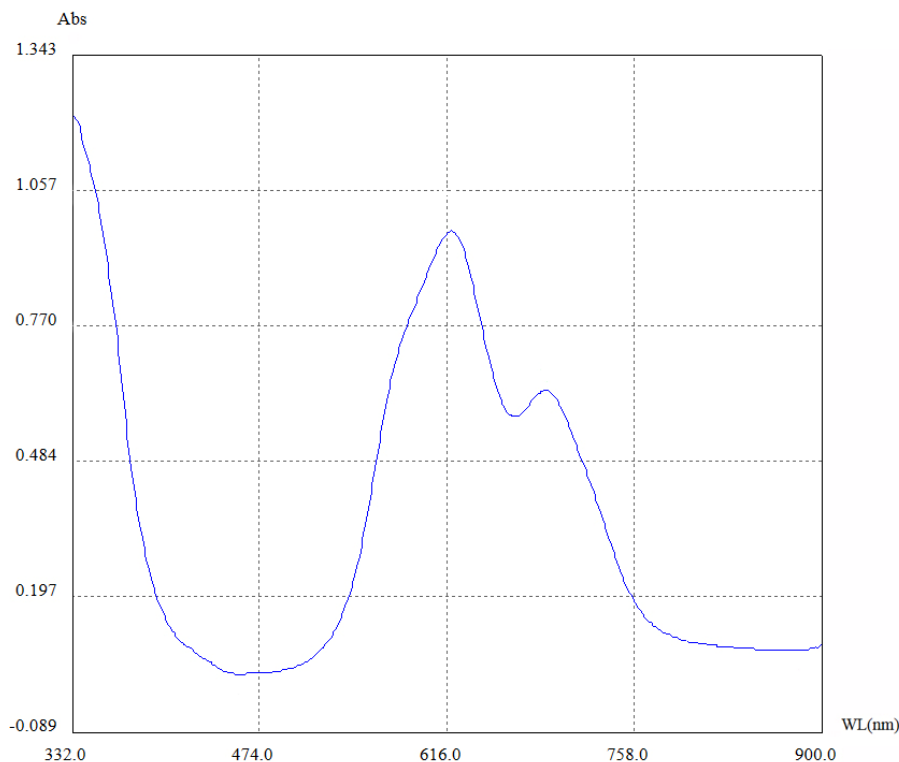
شکل (۵-۲۳): طیف جذب سلول بدون الکتروود آلومینیوم با ساختار ITO/CuPc(20nm)/C60(40nm)/BCP(8nm)

#### ۵-۴-۶ وابستگی میزان جذب یک لایه آلی به ضخامت آن و خلوص ماده

برای بررسی نقش ضخامت در میزان جذب یک لایه آلی، یک لایه CuPc با ضخامت ۱۱۰ nm را بر روی یک زیر لایه شیشه ای لایه نشانی کردیم. برای بررسی این مورد، طیف جذب این لایه را با طیف جذب یک لایه از CuPc با ضخامت ۲۰ nm، که قبلاً اندازه گیری شد، مقایسه نمودیم. لازم به ذکر است که هر دو لایه به طور همزمان و تحت شرایط یکسان لایه نشانی شدند. با مقایسه نمودار طیف

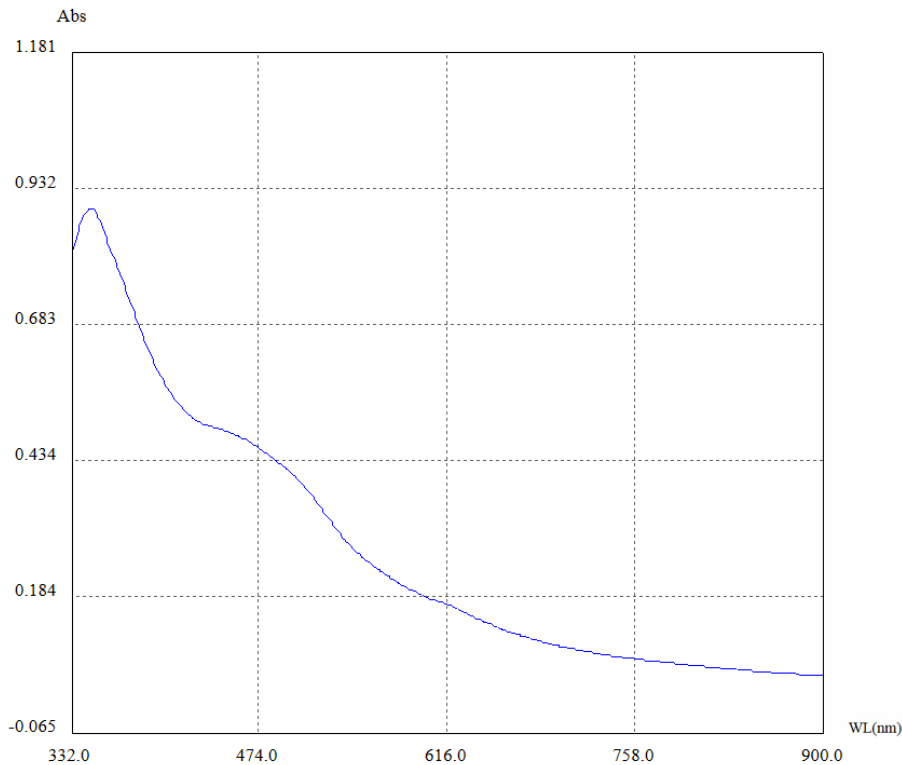
<sup>۱</sup> Near-Infrared

جذب دو لایه CuPc با ضخامت های مختلف، اشکال ۵-۲۴ و ۵-۱۹، مشاهده می شود که با تغییر ضخامت لایه، شکل نمودار تغییری نکرده به طوری که بیشینه و کمینه جذب در طول موج هایی مشابه اتفاق افتاده، اما مقادیر این بیشینه و کمینه برای دو لایه متفاوت است. همان طور که انتظار می رفت با افزایش یافتن ضخامت لایه، مقدار جذب لایه تا حدود زیادی افزایش یافت. با توجه به شکل ۵-۲۴، مقدار بیشینه جذب در محدوده طول موج های بلند در طول موج  $\lambda = 620 \text{ nm}$  رخ می دهد (پیک دوم در این محدوده در طول موج  $692 \text{ nm}$  واقع شده است).



شکل (۵-۲۴): طیف جذب لایه CuPc با ضخامت ۱۱۰ nm

برای بررسی تأثیر خلوص مواد بر طیف جذب لایه ها از دو لایه آلی C<sub>۶۰</sub> با خلوص متفاوت ۹۸٪ و ۹۹/۵٪ استفاده نمودیم. ضخامت لایه ها برای هر دو لایه برابر بوده (هر دو ۴۰ nm) و به طور همزمان و تحت شرایط یکسان اندازه گیری شدند. نمودار طیف جذب لایه C<sub>۶۰</sub> با خلوص کمتر، قبلاً در شکل ۵-۲۰ نشان داده شده، و نمودار مربوط به لایه C<sub>۶۰</sub> را می توان در شکل ۵-۲۵ مشاهده نمود.



شکل (۵-۲۵) : طیف جذب لایه C<sub>۶۰</sub> (خلوص ۹۹/۵٪) با ضخامت ۴۰ nm

با مقایسه طیف جذب دو لایه C<sub>۶۰</sub> با خلوص متفاوت، در اشکال ۵-۲۰ و ۵-۲۵، مشاهده می شود که با تغییر خلوص، طیف جذب شکل تقریباً یکسانی داشته و تغییرات ناچیزی را از خود نشان می دهد. این تغییرات ناچیز در شکل طیف جذب را می توان به تفاوت در میزان ناخاصی در دو لایه نسبت داد. خلوص بیشتر سبب می شود تا میزان جذب لایه تا حدودی بهبود یابد، که این امر را می توان به وجود تعداد مولکول های بیشتر C<sub>۶۰</sub> در حالت خالص تر نسبت داد. هر چه تعداد مولکول های C<sub>۶۰</sub> بیشتر باشد، میزان جذب نیز بیشتر خواهد بود.

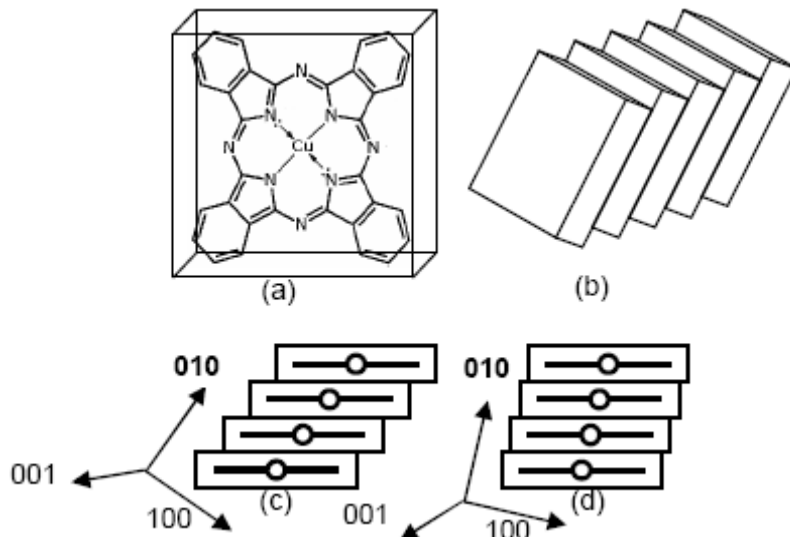
### ۷-۴-۵ اندازه گیری پراش پرتوی X (XRD) لایه ها

رابطه بین جهت مندی<sup>۱</sup> و ساختار بلوری در فصل مشترک با خواص الکتربیکی، یک فاکتور مهم در

<sup>۱</sup> Orientation

سلول های خورشیدی می باشد. CuPc جهت مندی های مولکولی و ساختار های بلوری متفاوتی دارد. از این رو تجزیه و تحلیل جهت مندی و ساختار بلوری CuPc در فصل مشترک، جهت پی بردن به تأثیر ساختار فصل مشترک بر روی خواص الکتریکی، امری مهم است.

دو نوع ساختار بلوری برای CuPc وجود دارد، این دو ساختار، ساختار نوع  $\alpha$  و  $\beta$  نامیده می شوند. مساحت همپوشانی صفحات مولکولی<sup>۱</sup> در این دو ساختار با یکدیگر متفاوت است. همپوشانی میان صفحات در ساختار نوع  $\alpha$  بیشتر از نوع  $\beta$  می باشد (شکل ۵-۲۶). ساختار های  $\alpha$  و  $\beta$  برای CuPc در حالت پودری، به صورت تک میل<sup>۲</sup>، با پارامتر های شبکه متفاوت، می باشند [۶۷].



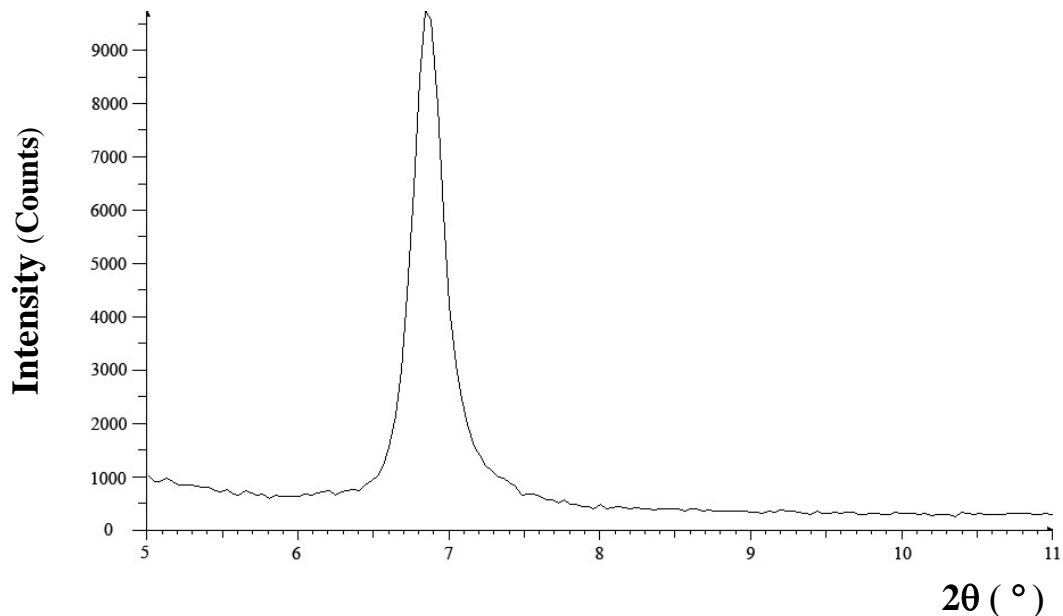
شکل (۵-۲۶): طراحی ساده از (a) ساختار مولکولی CuPc، (b) مدلی از CuPc در حالت روی هم چیده شده، (c) CuPc نوع  $\beta$ ، (d) CuPc نوع  $\alpha$  [۶۶]

برای بررسی نوع ساختار لایه نازک CuPc، این ماده را بر روی زیرلایه شیشه ای لایه نشانی نمودیم. ضخامت این لایه ۱۱۰ nm و دمای زیرلایه در حین لایه نشانی با دمای اتاق، یکسان در نظر گرفته شد. نقش پراش پرتوی X این لایه را می توان در شکل ۵-۲۷ مشاهده نمود. برای اندازه گیری نقش

<sup>۱</sup> Molecular plane  
<sup>۲</sup> Monoclinic

پراش از دستگاه XRD با عنوان Bruker, D8ADVANCE ساخت کشور آلمان، موجود در دانشگاه

اصفهان، با طول موج ( $CuK\alpha$ )  $1.5406 \text{ \AA}$  استفاده شد.



شکل (۵ - ۲۷): نقش پراش پرتوی X برای لایه CuPc (۱۱۰nm)

با توجه به نقش پراش در شکل ۵-۲۷، مقدار بیشینه پراش در زاویه  $2\theta = 6.9^\circ$  واقع خواهد شد که این مقدار با مراجع [۶۸ و ۶۹] مطابقت دارد. با توجه به محل پیک و استناد به مراجع [۶۸ و ۶۹]، می توان نتیجه گرفت که این لایه در فاز  $\alpha$  و تحت ساختار راستگوشه<sup>۱</sup> لایه نشانی شده است. در این حالت صفحات شبکه به صورت (۲۰۰) می باشند. به صورت تجربی مشخص شده است که از طریق حرارت دادن زیر لایه در حین لایه نشانی و یا از طریق فرآیند بازپخت<sup>۲</sup> لایه، به مدت چند ساعت و در دماهای بالا، گذاری از فاز  $\alpha$  به فاز  $\beta$  مشاهده خواهد شد. در فاز  $\beta$  ساختار شبکه لایه نازک CuPc مجدداً تک میل خواهد بود [۷۰ و ۷۱].

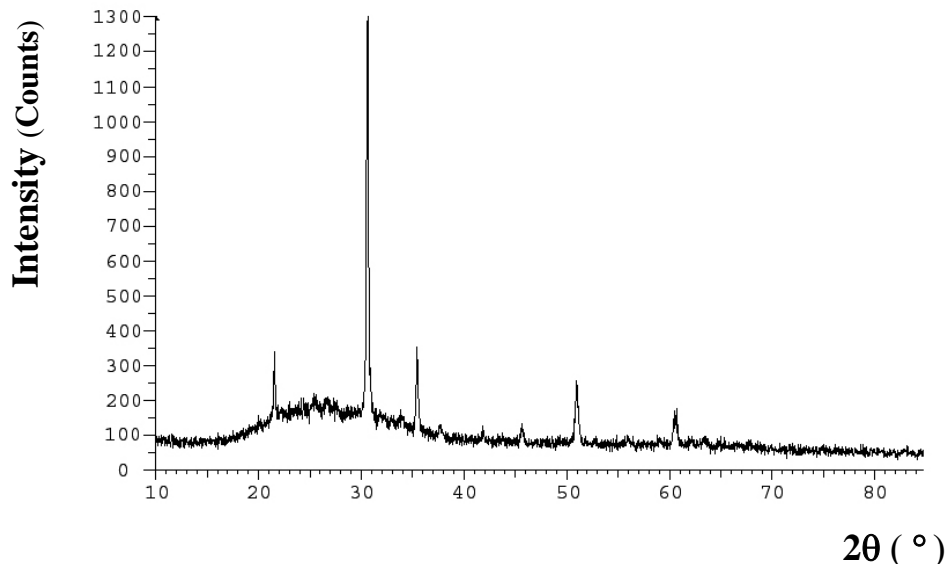
برای بررسی بیشتر ساختار بلوری لایه ITO و سلول ساخته شده، نقش پراش پرتوی X یک لایه ITO پوشش داده شده بر زیر لایه شیشه ای و یک سلول بدون الکتروود آلومینیوم با ساختار

<sup>۱</sup> Orthorhombic  
<sup>۲</sup> annealing

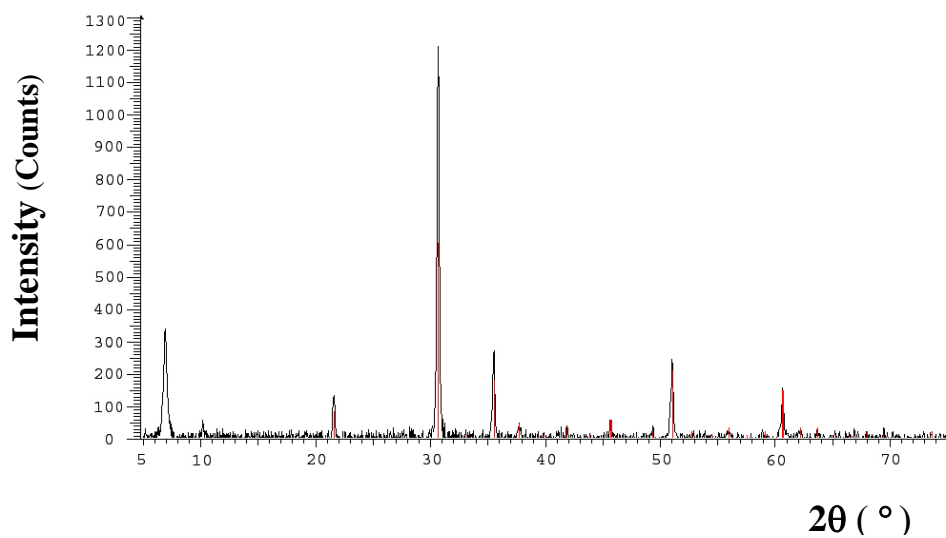


ITO/CuPc(20nm)/C60(40nm)/BCP(8nm) اندازه گیری شد. نقش پراش مربوط به آن ها را می

توان در اشکال ۲۸-۵ و ۲۹-۵ مشاهده نمود.



شکل (۲۸-۵) : نقش پراش پرتوی X برای لایه ITO پوشش داده شده بر روی یک زیر لایه شیشه ای



شکل (۲۹-۵) : نقش پراش پرتوی X برای سلول بدون الکتروود آلومینیوم با ساختار ITO/CuPc(20nm)/C60(40nm)/BCP(8nm)

با مقایسه نقش پراش سلول (شکل ۵-۲۹) با نقش های پراش برای دو لایه CuPc و ITO ( اشکال ۵-۲۷ و ۵-۲۸) که به طور مجزا گرفته شده اند، مشخص می گردد که تمامی پیک ها در نقش پراش سلول، به غیر از پیکی که در زاویه  $10^\circ = 2\theta$  واقع شده است، تکراری بوده و مربوط به دو لایه CuPc و ITO می باشند. با توجه به توضیحات فوق می توان نتیجه گرفت پیکی که در زاویه  $10^\circ = 2\theta$  واقع شده به یکی از لایه های C<sub>۶۰</sub> یا BCP تعلق دارد.

فصل ششم

# نتیجه گیری و پیشنهادات

## ۶-۱ مقدمه

باتوجه به نیاز روز افزون بشر به انرژی و رو به اتمام بودن سوخت های فسیلی و همچنین آلودگی های زیست محیطی ناشی از سوزاندن آن ها ، بشر امروز به دنبال جایگزینی مناسب برای آن می گردد. انرژی های تجدید پذیری چون انرژی خورشیدی می توانند جایگزین مناسبی برای آن ها باشند. خورشید سرچشمه عظیم و بی کران انرژی است که حیات زمین بدان بستگی داشته، و همه انواع دیگر انرژی نیز به گونه ای از آن نشأت گرفته اند. اما از نور خورشید نمی توان بطور مستقیم بهره برد، بلکه باید دستگاه هایی همانند سلول های خورشیدی برای تبدیل این انرژی به انواع دیگر انرژی همچون انرژی الکتریکی ساخته شوند. امروزه سلول های خورشیدی معدنی با بازدهی نسبتاً خوب و به صورت صنعتی تولید می گردند، اما به علت هزینه ساخت بالای این سلول ها، استفاده از آن ها تنها در برخی از کاربردهای خاص مانند تأمین نیروی حرکتی ماهواره ها، استفاده در ماشین حساب و ساعت و ... مقرون به صرفه بوده و استفاده از آن ها در ابعاد وسیع (تأمین الکتریسیته منازل و کارخانجات) بسیار پر هزینه می باشد. ایده جدید استفاده از مواد نیمرسانای آلی و نانو مواد در ساخت نسل جدید سلول های خورشیدی است. این سلول ها می توانند به دلیل ویژگی های منحصر به فردی همچون هزینه تولید کم، انعطاف پذیری، وزن پایین، امکان تولید در ابعاد وسیع و به میزان انبوه و ... جایگزین مناسبی برای نمونه های معدنی باشند.

با توجه به مزیت های فوق الذکر، خواص و ویژگی های نیمرساناهای آلی و تفاوت آن ها با نیمرسانا های معدنی و روش های لایه نشانی، با هدف ساخت چند نمونه سلول خورشیدی آلی مورد بررسی قرار گرفت. نحوه عملکرد، ساختار های مختلف و روش های بهینه سازی این سلول ها نیز به طور کامل توضیح داده شد. در حین فرایند ساخت این سلول ها، اندازه گیری طیف های جذب و نقش

پراش پرتوی X نیمرساناهای به کار رفته در آن ها، به نتایج و نکات قابل توجهی دست یافتیم. این نتایج می تواند برای کسانی که قصد تحقیق در زمینه نیمرساناها و سلول های خورشیدی آلی را دارند، بسیار مفید بوده و تجارب ارزشمندی را در اختیارشان قرار دهد.

## ۲-۶ نتایج به دست آمده از ساخت سلول ها

### ۲-۶-۱ لایه نشانی C<sub>6</sub>

در آزمایشات اولیه و در حین لایه نشانی، تبخیر نیمرسانای C<sub>6</sub> پس از مدتی متوقف شد که در ابتدا گمان می رفت اشکال از نوع بوته به کار گرفته شده باشد. از آنجایی که با تعویض بوته باز هم این مشکل برطرف نشد، مشخص شد که مقدار ماده ریخته شده در بوته کم بوده و باید مقدار ماده بیشتری در بوته ریخته شود و همچنین برای هر بار لایه نشانی از C<sub>6</sub> جدید استفاده شود. با استفاده از ماده تازه و به مقدار کافی در هر لایه نشانی، این مشکل حل گردید.

### ۲-۶-۲ لایه نشانی آلومینیوم

پس از اندازه گیری نمودار جریان-ولتاژ متوجه شدیم، که این نمودار به جای اینکه حالت دیودی داشته و نمایی باشد، خطی شده است. خطی بودن منحنی I-V بیانگر اتصال کوتاه بین الکترودها و نفوذ آلومینیوم درون لایه ها می باشد. در صورتی که نرخ لایه نشانی آلومینیوم بالا باشد، به دلیل بیشتر بودن دمای تبخیر آلومینیوم نسبت به مواد آلی، آلومینیوم می تواند با ذوب کردن لایه های آلی که ضخامتی در حد چند ده نانومتر دارند، از بین آنها نفوذ کرده و خود را به الکتروود اول ITO برساند. این مشکل با کم کردن نرخ لایه نشانی آلومینیوم برطرف شد.

برای جلوگیری از برهم زدن خلاء به منظور نصب ماسک جهت مانع شدن از اتصال آلومینیوم و ITO از لبه های سلول در حین فرایند لایه نشانی، با استفاده از محلولی از اسید ها، زیر لایه های پوشش

داده شده با ITO را به نحوه ای مطلوب، مورد فرایند سونش قرار دادیم.

برای جلوگیری از شکستن بوته های فنری در حین لایه نشانی، از بوته های سبیدی شکل استفاده کردیم. در ضمن برای اینکه لایه های تولید شده تیره نبوده (در اثر تبخیر ناخالصی) و آینه ای باشند، از تنگستن خالص استفاده شد.

### ۶-۲-۳ شدت نور تابشی

همان طور که قبلاً گفته شد، مقادیر جریان مدار کوتاه و ولتاژ مدار باز که از پارامترهای اصلی یک سلول خورشیدی می باشند، با میزان شدت نور تابشی متناسب می باشند. برای افزایش این دو پارامتر از یک منبع تابش با شدت بالا استفاده نمودیم. این منبع تابش که در واقع یک شبیه ساز خورشیدی می باشد، از یک لامپ Metal Halide و تعدادی بازتابنده نور ساخته شد.

### ۶-۲-۴ بهینه سازی سلول ساخته شده

با استفاده از BCP به عنوان یک لایه سد کننده اکسیتون در فصل مشترک ماده آلی و کاتد فلزی در سلول فوتوولتائیک آلی با ساختار استاندارد  $C_6 / CuPc$ ، چگالی جریان مدار کوتاه سلول افزایش یافته و سلول رفتاری تقریباً دیودی از خود نشان داد. این بهبود در عملکرد سلول را می توان به نقش های مختلف لایه EBL نسبت داد. BCP علاوه بر سد کردن اکسیتون، حفره ها را نیز سد کرده و همچنین از آسیب رسیدن به لایه آلی  $C_6$  در حین لایه نشانی الکتروود فلزی (آلومینیوم) محافظت می نماید. علاوه بر این، به علت تشکیل حالت های نقص در گاف انرژی BCP در حین لایه نشانی آلومینیوم، الکترون ها می توانند به خوبی از طریق این حالت های انرژی از این لایه عبور کرده و به آلومینیوم انتقال یابند. در ضمن، احتمالاً BCP باعث یکنواختی سطح لایه  $C_6$  نیز خواهد شد. سلول های ساخته شده به سبب عواملی چون، مقاومت سطحی بالای ITO و پایین بودن خلوص مواد استفاده شده، مقاومت سری بالایی داشتند. بالا بودن مقاومت سری باعث افت شدید در چگالی جریان

مدار کوتاه می شود.

با اندازه گیری نمودار جریان- ولتاژ سلول ها پس از گذشت سه روز، مشاهده شد که مقدار چگالی جریان مدار کوتاه برای سلولی که شامل BCP بود در مقایسه با سلول دیگر، کاهش بیشتری داشته است. دلیل این امر را می توان ناپایداری BCP در برابر هوا، رطوبت و دما دانست، که این منجر به پایداری ضعیف قطعه می گردد.

### ۳-۶ نتایج حاصل از اندازه گیری طیف جذب لایه ها

با اندازه گیری طیف جذب برای یک لایه از CuPc، مشخص شد که این ماده با داشتن یک جذب بیشینه در طول موج های بین ۶۰۰-۷۰۰nm، یک ماده مناسب برای استفاده در کاربردهای نور خورشید، از جمله سلول های خورشیدی آلی می باشد. با استفاده از C<sub>60</sub>، که جذب بالایی را در ناحیه مرئی با طول موج های کوتاه دارد، می توان جذب کم CuPc را در این ناحیه از طول موج ها جبران نمود. به طور کلی می توان نتیجه گرفت که در سیستم های دو لایه ای C<sub>60</sub> / CuPc، طیف های جذب CuPc و C<sub>60</sub> مکمل یکدیگر می باشند. این امر سبب می شود تا امکان جذب حداکثری طیف خورشید، موجود در محدوده UV-Vis، تا حد زیادی فراهم گردد.

با اندازه گیری طیف جذب لایه های CuPc با ضخامت های مختلف، مشخص شد که با افزایش ضخامت، شکل منحنی طیف بدون تغییر بوده و تنها مقادیر جذب افزایش می یابد. با افزایش میزان خلوص C<sub>60</sub> نیز مجدداً چنین رفتاری در طیف جذب لایه ها مشاهده شد. بنابراین می توان نتیجه گرفت که با افزایش ضخامت لایه و خلوص مواد، مقدار جذب نیز افزایش می یابد.

### ۴-۶ اندازه گیری نقش پراش پرتوی X

با اندازه گیری نقش پراش پرتوی X از لایه نازک CuPc با ضخامت ۱۱۰nm، مشاهده شد که این

لایه در فاز  $\alpha$  بوده و ساختار شبکه ای راستگوشه دارد. در این حالت صفحات شبکه به صورت (۲۰۰) می باشند. همچنین با اندازه گیری و مقایسه نقش پراش برای سلول بدون الکتروود با نقش پراش در لایه های CuPc و ITO، مشخص شد که تمامی پیک ها در نقش پراش سلول، به غیر از پیکی که در زاویه  $10^\circ = 2\theta$  واقع شده است، تکراری بوده و مربوط به دو لایه CuPc و ITO می باشند. بنابراین می توان نتیجه گرفت پیکی که در زاویه  $10^\circ = 2\theta$  واقع شده به یکی از لایه های C<sub>60</sub> یا BCP تعلق دارد.

## ۵-۶ پیشنهادات

همان طور که در فصل گذشته ملاحظه شد، ولتاژ مدار باز و خصوصاً چگالی جریان مدار کوتاه برای سلول های ساخته شده، مقادیر کمی بوده و در ضمن مقاومت سری سلول ها نیز بسیار بالا بود. پیشنهاد می شود برای افزایش جریان مدار کوتاه در سلول های فوتوولتائیک آلی، ضمن استفاده از لایه BCP، از مواد با خلوص بالا و الکتروود ITO با مقاومت سطحی پایین استفاده شود. اما از آنجایی که در این پایان نامه هدف اصلی بررسی اثر لایه EBL بر عملکرد سلول ها بود، از مواد با خلوص بالا و ITO با مقاومت سطحی پایین استفاده نکردیم، چرا که این موارد هزینه آزمایشات را به مقدار قابل ملاحظه ای افزایش می دهد.

علاوه بر این می توان با استفاده از هندسه و ساختار های مختلف در ساخت سلول ها، مانند ساختارهای مخلوطی، چند لایه و پی در پی، بازدهی این سلول ها را تا حد زیادی افزایش داد.

برای کاهش دادن نا همواری های سطح ITO می توان از لایه های واسطه ای چون PEDOT:PSS استفاده نمود. در ضمن این ماده با افزایش دادن تابع کار الکتروود ITO، سبب انتقال بهتر حفره ها می گردد. از آنجایی که این ماده را نمی توان از طریق تبخیر فیزیکی لایه نشانی نمود و برای لایه نشانی آن به دستگاه پوشش چرخشی نیازمندیم، از این ماده استفاده نکردیم. چون در صورت استفاده از



دستگاه پوشش چرخشی، امکان کنترل ضخامت لایه در حین لایه نشانی، به دلیل فقدان تجهیزات لازم، امکان پذیر نبود. همچنین پیشنهاد می شود که برای بهبود عملکرد سلول ها، سطح الکتروود ITO را با استفاده از گاز های مختلف مانند  $O_2$ ، Ar و UV ozone مورد عمل آوری<sup>۱</sup> قرار دهیم. این فرایند نیز به نوبه خود باعث افزایش یکنواختی سطح و افزایش تابع کار لایه ITO خواهد شد.

پیشنهاد دیگری که می تواند مفید واقع شود این است که می توان به جای BCP، که ماده ای ناپایدار در برابر رطوبت و گرما می باشد، از مواد دیگری مانند BPhen که پایداری بیشتری دارد، استفاده نمود. موادی می توانند جایگزین BCP شوند که تراز های HOMO و LUMO مشابه با BCP داشته و در ضمن جذب آن ها در مقایسه با CuPc و C<sub>60</sub> ناچیز باشد. شفافیت اپتیکی بالا (جذب پایین) برای لایه های EBL از این جهت مهم می باشد که این لایه نور باز تابیده شده از طریق الکتروود فلزی را جذب نکند.

در انتها لازم به ذکر است که با توجه به مصرف بالای انرژی در ایران و اهمیت اصلاح الگوی مصرف و از طرفی میزان تابش بالای خورشید در کشورمان، سلول های خورشیدی می توانند جایگزینی مناسب برای سوخت های فسیلی بوده و به عنوان یک منبع تولید انرژی پاک به کار گرفته شوند. اخیراً (سال ۲۰۰۹) تحقیقات گسترده ای در دیگر کشور های جهان، از جمله آمریکا، کانادا و اروپا، در زمینه انرژی های پاک و تجدید پذیر، خصوصاً سلول های خورشیدی آلی، صورت گرفته و در آینده ای نزدیک استفاده روزمره از این انرژی ها بسیار متداول خواهد شد. اما این امر در کشور ما بسیار نو پا بوده که سرمایه گذاری و توجه بیشتر مسئولان امر را نیاز مند می باشد. امید است در آینده ای نزدیک پیشرفت های چشمگیری را در این زمینه شاهد باشیم.

---

<sup>۱</sup> Treatment

- [1] " *Basic Research Needs for Solar Energy Utilization* " , Introduction , Report of Basic Energy , (2005)
- [2] "*Yearbook of World Energy Statistics*", published by the Statistics Division of the United Nations Secretariat, (2004)
- [3] Svante Arrhenius, "*On the influence of Carbonic Acid in the air upon the temperature of the ground* ", Philosophical Magazine, No. 41, pp. 237-276, (1896)
- [4] "*Emergency events database*", The International Emergency Disasters Database, (2002)
- [5] Klaus Petritsch "*Organic solar cell Architectures*", PHD Thesis for University of Graz, Austria, (2000)
- [6] P.G. .De Paulus Albertus Van Hal , " *Photophysics of Molecules and Materials for Polymer Solar Cells* " , Technique university of Eindhoven , (2003)
- [7] Andrw J. Lewis, " *Characterisation of Organic Materials for Photovoltaic Devices* " , PHD Thesis for University of St Andrews, (2006)
- [8] Moritz K. Riede, "*Identification and Analysis of Parameters in Organic Solar Cells*", Universitat Konstanz, (2006).
- [9] T. Kietzke "*Recent Advances in Organic solar cells*" , Advances in OptoElectronics, Article ID 40285, (2007)
- [10] W.Brutting " *physics of organic semiconductor* " Wiley-VCH, (2005)
- [11] Christoph J. Brabec, " *Organic Photovoltaic Concepts and Realization* " , Chapter 1, (2003)
- [12] Jean-Michel Nunzi, "*Organic Photovoltaic materials and devices*", C. R. Physique 3, (2002)
- [13] Martin Drees, " *Polymer/Fullerene Photovoltaic Devices -Nanoscale Control of Interface by Thermally- Controlled Interdiffusion* " , (2003)
- [14] M. Rusu, S. Wiesner, T. Mete, H. Blei, N. Meyer, M. Heuken, M. Ch. Lux-Steiner, K.Fostiropoulos, *Renewable Energy*. 33, 254-258, (2008)
- [15] P. Peumans, A. Yakimov, and S. R. Forrest, *J. Appl.Phys*, 93, 3693 (2003)
- [16] L. Li, G. Meller, and H. Kosina " *Doping Dependent Conductivity in Organic Semiconductors*" *IEEE*, 204 (2006)
- [17] Christoph J. Brabec, " *Organic Photovoltaic Concepts and Realization* " , Chapter 3, (2003)
- [18] L.J.A.koster, PhD thesis: Groningen University (2007)
- [19] M. Y. Chan, S. L. Lai, M. K. Fung, C. S. Lee, and S. T. Lee, *Appl. Phys. Lett*, 90, 023504,(2007)

- [20] S. W. Hur, H. S. Oh, Y. C. Oh, D. H. Chung, J. U. Lee, J. W. Park, and T. W. Kim, *Synthetic Metals*, 154, 49-52, (2005)
- [21] Vo Anh Quan , "*Degradation of the Solar Dye Sensitizer N719 Preliminary Building of Dye-Sensitized Solar Cell* ", Master Thesis for Roskilde University , (2006)
- [۲۲] سارا پناهیان ژند " مطالعه و بررسی مواد معدنی با قابلیت فوتوولتائیک " پایان نامه کارشناسی ارشد فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، اردیبهشت ۸۷
- [23] E. Johansson, "*Interfaces in Dye-Sensitized Oxide / Hole Conductor Heterojunctions for Solar Cell Applications*", Acta Universitatis Upsaliensis Uppsala, (2006)
- [24] Mary D. Archer, Robert Hill, "*Clean electricity from photovoltaics*", Imperial College Press, (2001)
- [25] Sam-Shajing Sun "*Organic Photovoltaics Mechanisms, Materials and Devices*" Taylor& Francis Group, (2005)
- [26] C. W. Tang, *Appl. Phys. Lett.*, 48, 183 (1986)
- [27] G. P. Kushto, W. Kim, and Z. H. Kafafi, *Appl. Phys. Lett.*, 86, 093502 (2005)
- [28] M. Vogel, S. Doka, Ch. Breyer, M. Ch. Luxsteiner, and K.F. Fostiropoulos, *Appl. Phys. Lett.*, 89, 163501 (2006)
- [29] J. Xue, S. Uchida, B. P. Rand, and S. R. Forrest, *Appl. Phys. Lett.*, 85, 5757 (2004)
- [30] B. P. Rand, J. Xue, F. Yang, and S. R. Forrest, *Appl. Phys. Lett.*, 87, 233508 (2005)
- [31] m. Reyes, K. Kim, and D. L. Carroll, *Appl. Phys. Lett.*, 87, 083506 (2005)
- [32] J. Xue, B. P. Rand, S. Uchida, and S. R. Forrest, *J. Appl. Phys.*, 98, 124903 (2005)
- [33] A. K. Jayasinghe, B.S, "*Fabrication of a Single Layer Organic Photovoltaic Device Based on an Indium-Tin-Oxide/Copper Phthalocyanine/Aluminum Heterostructure*", Master Thesis for Baylor University , (2006)
- [34] T. Stubinger and W. Brutting, *J. Appl. Phys.*, 90, 3632 (2001)
- [35] S. R. Scully and M. D. McGehee, *J. Appl. Phys.*, 100, 034907 (2006)
- [36] Y. Terao, H. Sasabe, C. Adachi, *Appl. Phys. Lett.*, 90, 103515 (2007)
- [37] M. Pope and Ch. E. Swenberg, "*Electronic Processes in Organic Crystals*" Oxford University Press, Oxford, (1982)
- [38] Christoph J. Brabec, "*Organic Photovoltaic Concepts and Realization* ", Chapter 2, (2003)
- [39] Janne Halme "*Dye-Sensitized Nanostructured and Organic Photovoltaic Cells: Technical Review and Preliminary Tests*" Master Science Thesis for Helsinki University of Technology, (2002)
- [40] J. Xue, S. Uchida, B. P. Rand, and S. R. Forrest, *Appl. Phys. Lett.*, 84, 3013 (2004)
- [41] S. Uchida, J. Xue, B. P. Rand, and S. R. Forrest, *Appl. Phys. Lett.*, 84, 4218 (2004)
- [42] B. Maening, J. Drechsel, D. Gebeyehu, *Appl. Phys. A*, 79, 2494 (2004)
- [43] R. O. Loufty and E. R. Menzel, *J. Am. Chem. Soc.*, 102, 4967 (1980)

- [44] D. Meissner, S. Siebentritt and S. Gu. nster, *SPIE*, 24, 1729 (1992)
- [45] G. A. Buxton and N. Clarke, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 15, 13-26 (2007)
- [46] Y. Kinshita, T. Hasobe, and H. Murata, *Appl. Phys. Lett*, 91, 083518 (2007)
- [47] M.Y. Chan, C. S. Lee, S. L. Lai, M. K. Fung, F. L. Wong, H. Y. Sun, K. M. Lau, and S. T. Lee, *J. Appl. Phys*, 100, 094506 (2006)
- [48] Christoph J. Brabec, " *Organic Photovoltaic Concepts and Realization* ", Chapter 5, (2003)
- [49] P. Peumans, V. Bulovic, and S. R. Forrest, *Appl. Phys. Lett*, 76, 2650 (2000)
- [50] J. M. Halls , K.Pichler, R. H. Friend, S. C. Mortti, and A. B . Holmes, *App. Phys. Lett*, 68, 3120 (1996)
- [51] L. A. A. Petterson, L.S. Roman, and O. Inganas, *J. App. Phys.* 86, 487 (1999)
- [52] B. P. Rand, J. Li, J. Xue, R. J. Holmes, M. E. Thompson, and S.R . Forrest, *Adv. Mater.* (Weinheim, Ger.) 17, 2714 (2005)
- [53] V. Tripathi, D. Datta, G. S. Smal, A. Awasthi, S. Kumar, *J. Non – Crystalline Solids*, 354, 2901 (2008)
- [54] Z. R. Hong, Z. H. Huang, X. T. Zeng, *Thin Solid Films*, 515, 3019 (2007)
- [55] P. Peumans and S. R. Forrest, *Appl. Phys. Lett*, 79, 126 (2001)
- [56] Jens Cramer " *Novel Head-to-tail Coupled Oligo(3-hexilthiophene) derivative for Photovoltaic applications* " University of Ulm , (2005)
- [۵۷] دکتر هادی سوالونی " مبانی علم سطح در نانو فناوری، فیزیک سطح، فصل مشترک و لایه های نازک، جلد اول " انتشارات دانشگاه تهران، ۱۳۸۳
- [۵۸] دکتر هادی سوالونی " مبانی علم سطح در نانو فناوری، روش های جدید آنالیز سطح، فصل مشترک و لایه های نازک، جلد دوم " انتشارات دانشگاه تهران، ۱۳۸۵
- [۵۹] دکتر هادی سوالونی، " فیزیک لایه های نازک "، مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۸۵
- [۶۰] ع. معتمد اکتسابی، " تکنولوژی ساخت لایه ها "، انتشارات سازمان انرژی اتمی، ۱۳۶۴
- [61] W. M. Ahmed Darwish " *Preparation, Characterization and X-Ray Crystal Structures of New Axially Functionalized Phthalocyanines and Phthalocyanine Modified SBA-15 Material*" PHD Thesis for University of Marburg, (2006)
- [۶۲] فتح الله کریم زاده، احسان قاسمعلی، سامان سالمی زاده " *نانو مواد، خواص، تولید و کاربرد* " جهاد دانشگاهی، واحد صنعتی اصفهان، ۱۳۸۴
- [63] K. Triyana, *Thin Solid Films*, 477,198-202 (2005)
- [۶۴] سعید صالح اردستانی " *تأثیر ضخامت لایه ها در بازدهی سلول خورشیدی آلای* " پایان نامه کارشناسی ارشد فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، دی ۸۶
- [۶۵] علی محمد احمدی " *مطالعه و بررسی سلول های خورشیدی آلای و تولید یک نمونه آزمایشگاهی* " پایان نامه کارشناسی ارشد فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، شهریور ۸۶

- [66] Z. R. Hong, C. J. Liang, X. Y. Sun, and T. Zeng, *J. Appl. Phys*, 100, 093711 (2006)
- [67] Y. Yamashita, H. Suzuki, N. Kojima " *Interface Structure Analysis Between C<sub>60</sub> and CuPc for Organic Solar Cells* " *IEEE*, 205 (2006)
- [68] J. Xue, B. P. Rand, S. Uchida, and S. R. Forrest, *Adv. Mater*, 17, 66 (2005)
- [69] S. Rajaputra, S. Vallurupalli, and V. P . Singh, *J Mater Sci : Mater Electron*, 18, 1147-1150 (2007)
- [70] R. Prabakaran, R. Kesavamoorthy, and F. P. Xavier, *Phys. Stat. Sol. (b)*, 229, 1175-1186 (2002)
- [71] D. Cha, M. Park, H. Yoo, E. Lim, and K. Lee, *Journal of the Korean Physical Society*, 46, 112-116 (2005)

## Abstract

Nowadays, more than seventy percent of the energy consumed on world comes from fossil fuels. These fuels not only produce high levels of pollution, but will expire in next 50 years. Therefore we need to develop renewable energy sources such as solar energy. Solar energy is one of best candidates for stable and clean source of energy. Solar cells are devices consist of semiconductors which convert solar radiation energy to electrical energy directly. Today inorganic solar cells are produced industrially with high efficiency, but their production cost is very high. Therefore, new types of materials such as Organic semiconductors have attracted much attention during the last two decades. Organic solar cells have several advantages, such as low production cost, flexibility, low weight and ability to fabricate in large area.

Therefore In this research, we have studied the physics and properties of organic semiconductors for using in solar cells. In this work, Some specimens of bilayer organic solar cells consists of phthalocyanine (CuPc), as a hole acceptor, and fullerene ( $C_{60}$ ), as an electron acceptor, with heterostructures of ITO/CuPc(20nm)/ $C_{60}$ (40nm)/Al(80nm) and ITO/CuPc(20nm)/ $C_{60}$ (40nm)/BCP(8nm)/Al(80nm) have been produced by thermal evaporation technique in high vacuum. Current-voltage curves of cells have been measured by solar simulator under AM1.5 standard illumination. By using exciton blocking layer (EBL) at the organic/cathode interface, short circuit current density was increased and consequently the performance of device was improved. Finally, absorption spectra of thin films used in cells and also itself cell were measured and analyzed. We observed that in CuPc/ $C_{60}$  bilayer system, CuPc and  $C_{60}$  have complementary absorption spectra in the whole visible spectral range. Also we found that with increasing layer thickness and material purity the absorption value is increased. By using X ray diffraction (XRD) the structures of layers were investigated.

**Keywords:** Organic semiconductors, Copper phthalocyanine (CuPc), Fullerene ( $C_{60}$ ), Organic solar cells, Thin films, Thermal evaporation, Organic p-n junction



Shahrood University of Technology  
Faculty of Physics

**Study of organic Semiconductors and Fullerene (C<sub>60</sub>) for  
Using in Solar Cells**

**Komeil Elahinasab**

Supervisors:

**Dr. Hamid Haratizadeh**

**Dr. Mohammad Ebrahim Ghazi**

**Master of Science Thesis**

July 2009