

# آموزش مطالعه تاثیر چگالی حاملین بار در مشخصه های سلولهای فوتوولتائیک نانوساختار پلیمری

حورا سودی<sup>۱\*</sup>، علی محمودلو<sup>۲</sup>

<sup>۱</sup> گروه علوم تربیتی، دانشگاه فرهنگیان، صندوق پستی ۸۸۹-۱۴۶۶۵ تهران، ایران  
<sup>۲</sup> گروه آموزش فیزیک، دانشگاه فرهنگیان، صندوق پستی ۸۸۹-۱۴۶۶۵ تهران، ایران

## چکیده

## اطلاعات مقاله

در این مقاله نحوه کارکرد فوتوولتائیک با استفاده از اثرات پارامترهای اساسی بر عملکرد سلول های خورشیدی آلی نامتجانس و همچنین انتقال بار مورد بررسی قرار گرفته است. برای شبیه سازی این فرآیندها، در این بخش با استفاده از حل خودسازگار معادلات سوق-پخش و معادله پواسون و همچنین استفاده از مدل های مختلف باز ترکیب از طریق روش اجزاء محدود، پارامترهای اساسی سلول های خورشیدی آلی توده ای با ساختار PEDOT-PSS مورد مطالعه قرار گرفته است [۲]. در بیشتر مدل ها و مطالعات نظری ارائه شده، ناحیه فعال در سلول های خورشیدی آلی را به صورت ذاتی فرض می نمایند. حال آنکه این فرض برای مطالعه و بهینه سازی آنها دارای اشکالاتی می باشد و می بایست سهم آلائیده کردن پلیمرها برای مطالعه بهتر، در نظر گرفته شود. ساختار مورد مطالعه نشان داده شده است. این ساختار شامل ناحیه فعال با ساختار توده ای PEDOT-PSS به ضخامت ۱۲۰ نانومتر می باشد.

تاریخ دریافت: ۱۴۰۵/۰۲/۲۵

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۵/۰۵/۲۲

تاریخ چاپ: ۱۴۰۵/۰۶/۰۴

شاپای چاپی: 2588-493x

شاپای الکترونیکی: 2588-4921

\* نویسنده مسئول

h.soodi@cfu.ac.ir

**واژگان کلیدی:** سلول خورشیدی نانوساختار پلیمری، مدل سوق و پخش، ترابرد بار، باز ترکیب حاملین بار

## مقدمه

فوتوولتائیک سیستمی است که قادر به تبدیل مستقیم انرژی خورشیدی به انرژی الکتریسیته می باشد. استفاده از سیستم های فوتوولتائیک به ما این قابلیت را می دهد که محیط زیست پاکیزه ای داشته باشیم. چرا که سیستم تولید الکتریسیته فوتوولتائیک اثرات جانبی بسیار ناچیزی بر طبیعت دارد. به پدیده ای که در اثر تابش نور بدون استفاده از مکانیزم های محرک، الکتریسیته تولید کند پدیده فوتوولتائیک گفته می شود و به هر سیستمی که از این پدیده استفاده کند سیستم فوتوولتائیک گویند. سلول های خورشیدی پلیمری دارای تفاوت

های بسیاری با سلول های خورشیدی معدنی و یا غیر آلی می باشند. در این نوع سلول ها جهت بررسی و بهینه سازی، شبیه سازی الکتریکی و اپتیکی توسط گروه های تحقیقاتی در سراسر جهان صورت گرفته و می گیرد. مطالعه نظری و شبیه سازی فرایندها به پژوهشگران کمک می کند تا بتوانند فیزیک و عملکرد سلول ها را به طور اساسی بررسی کرده و با مطالعه عوامل موثر بر بازده و عملکرد، مواد پلیمری با ویژگی های مناسبی را انتخاب نمایند. برای مثال با استفاده از این یافته ها می توان با ترکیب کردن پلیمرها به عنوان یک روش مناسب برای تنظیم خواص فیزیکی پلیمرها در سلول های آلی استفاده نمود. اغلب ترکیب

فوتون های نوری در حدود ۱۰۰ نانومتر خواهد که بعدها توسط نتایج تجربی نیز اثبات شدند. در سلول های خورشیدی آلی بازترکیب حاملین بار تولید شده توسط نور، یکی از عوامل مهم کاهش جریان نوری، ولتاژ و در نتیجه بازده می باشد. مدل های مختلفی برای بازترکیب حاملین ارائه شده است که یکی از مدل های دقیق، مدل سوق و پخش می باشد.

### تئوری

برای بدست آوردن معادلات پیوستگی و سوقی - پخشی از معادله بولتزمن، از روش تکانه استفاده می شود. یعنی معادله بولتزمن در توانهای  $\alpha$  سرعت ضرب شده و در نهایت برروی سرعت انتگرال گیری می شود:

$$\int v^\alpha \left( \frac{\partial f}{\partial t} + v \nabla_r f + a \nabla_v f \right) dv = \int v^\alpha \frac{\partial f}{\partial t} dv \quad (۱)$$

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

$$\int \frac{\partial f(r, v, t)}{\partial t} dv = \frac{\partial}{\partial t} n(r) \quad (۲)$$

عبارت دوم با در نظر گرفتن اینکه  $v$  و  $r$  مستقل از یکدیگرند، بصورت زیر نوشته می شود [۴]:

(۳)

$$\int v \nabla_r f(r, v, t) dv = \int \nabla_r (f(r, v, t) v) dv = \nabla_r \int v f(r, v, t) dv \quad (۴)$$

$$\nabla_r \int v f(r, v, t) dv = \nabla_r (n(r) \langle n(r) \rangle) = \nabla_r j(r)$$

کردن پلیمرها می تواند منجر به ترکیب شدن ویژگی های هر دو مولفه ترکیب شونده شود و گاهی اوقات ساختار ترکیب دارای خواصی است که هیچیک از مولفه ها چنین خواصی را دارا نیستند. در زمینه الکترونیک آلی که در آن لایه های پلیمری با تهیه محلول از پلیمرهای مزدوج و سپس لایه نشانی محلول حاصل - برای کاربرد در دیودهای نورگسیل و یا سلول های خورشیدی آلی - ساخته می شوند، ترکیب کردن یک روش جالب به منظور بهینه سازی عملکرد این ادوات محسوب می شود. در واقع برای سلول های خورشیدی آلی حضور پیوندهای نامتجانس<sup>۱</sup> بین دو نیم رسانای متفاوت (دهنده و پذیرنده) برای تجزیه اکسایتون تولید شده (بر اثر تابش نور) حیاتی است. در یک دیود نورگسیل پلیمری دو ماده ترکیب شونده می توانند طوری انتخاب شوند که تزریق الکترون ها و حفره ها از الکترودها بصورت بسیار کاراتری انجام شود و نیز بازترکیب حاملین بار در نزدیکی پیوند نامتجانس صورت پذیرد. در هر دو مورد ادوات مذکور نکته حایز اهمیت این است که الکترون ها و حفره ها می توانند در مولفه های متناظر ترکیب (یعنی الکترون ها در دهنده و حفره ها در پذیرنده) انتقال یابند، این انتقال از پیوند نامتجانس به الکترودها یا برعکس می باشد. این امر محدودیت های قابل ملاحظه ای را بر میکروساختارهایی که در چنین ادواتی مورد نیاز هستند ایجاد می کند.

مدل های مختلفی برای بررسی عملکرد سلول های خورشیدی مطرح شده است و این در حالیهست که محققان در حال مطالعه و تکمیل مدل های نظری می باشند. این مدل های نظری تا کنون کمک های شایانی به یافته های تجربی و توجیه این یافته ها کرده اند. برای نمونه، نتایج یافته های نظری با شبیه سازی اپتوالکترونیکی اثبات نموده اند که ضخامت موثر برای جذب

<sup>۱</sup>. Heterojunction

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F \nabla_v f dv$$

که این انتگرال برابر با صفر می باشد زیرا مقدار  $f$  بی نهایت کوچک می باشد و بطور تقریبی صفر در نظر گرفته می شود و چهارمین عبارت نیز که انتگرال برخورد است، برابر با صفر می باشد پس:

$$\frac{\partial}{\partial t} n(r) + \nabla_r j(r) = 0 \quad (5)$$

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

$$n \mu F - D \nabla_r n = J \quad (6)$$

که در رابطه فوق  $\mu = \frac{e\tau}{m}$  تحرک پذیری حامل بار و  $\tau$  زمان پراکندگی (میانگین زمانی بین برخوردها) و  $m$  جرم ذره است [6].

وقتی که الکترون در روی تک مولکول جایگزیده باشد و از یک سایت به سایت دیگری پرش نماید، زمان پرش خیلی کوچکتر از زمان جایگزیدگی بار در روی مولکول خواهد بود. در مجموع لایه های خیلی نازک شامل چند ده مولکول پیچیده بصورت تابع  $f(r, v, t)$  تعریف می شود.

به هر حال الکترون ها و حفره ها بر روی مولکول ها قرار گرفته و شامل چگالی حامل بار  $n$  و  $p$  می باشند. ابعاد قطعه خیلی بزرگتر از طول پرش و طول عمر حاملین بار در محدوده ای هستند که بتوانند قبل از باز ترکیب چندین پرش را داشته باشند.

بنابر این تراورد بار توسط پرش چند مرحله ای حاملین بار رخ خواهد داد. این جریان را علیرغم جایگزیدگی بارها می توان توسط پدیده های سوق و پخشی توصیف نمود. در حالت خاص در حالت مانا، میانگین چگالی ها در سایت های مربوط به چندین پرش را می توان توسط یک DOS و آمار فرمی دیراک بیان کرد [۷ و ۹].

### مدلسازی

در بررسی چگالی های حاملین بار، نرخ تغییر معمولاً بصورت

$$\frac{\partial}{\partial t} \approx \frac{\Delta}{\Delta t}$$

حفره ها می تواند باشد. نرخ گذار چگالی حفره  $\frac{\Delta p^{i \rightarrow i+1}}{\Delta t}$  از موقعیت  $i$  به موقعیت  $i+1$  متناسب با چگالی خود حامل بار و تقسیم سرعت بر فاصله بین مسیر حرکتی است که حامل بار طی می کند. به عبارت دیگر مقدار حفره های  $\Delta p^{i \rightarrow i+1}$  عبوری از موقعیت  $i$  به  $i+1$  در زمان  $\Delta t$  توسط حاصل ضرب سرعت در زمان و تقسیم بر فاصله  $i$  و  $i+1$  خواهد بود [۱۰ و ۱۱].

$$\frac{\Delta p^{i \rightarrow i+1}}{\Delta t} \approx \frac{\partial p^{i \rightarrow i+1}}{\partial t} = \frac{v^i}{\Delta r} p^i \quad (7)$$

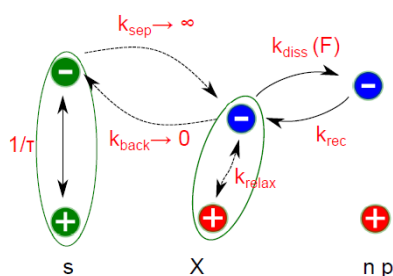
با در نظر گرفتن سرعت سوق به جای  $v$  :

$$\frac{\partial p^{i \rightarrow i+1}}{\partial t} = \frac{\mu_p^i F^i}{\Delta r} p^i \quad (8)$$

با در نظر گرفتن سرعت پخش به جای  $v$ :

$$\frac{\partial p^{i \rightarrow i+1}}{\partial t} = \frac{D_p}{\Delta r} = \frac{\mu_p k_B T}{e \Delta r} \quad (9)$$

که شامل معادله کلاسیکی اینشتین نیز می باشد. نتیجه نرخ گذار حفره به علت پخش بصورت زیر است:



شکل ۱: نرخ برهمکنش اکسایتون ها (S)، حالت های CT (X)،

و حاملین بار (n, P) در اتصال دهنده-پذیرنده. باز ترکیب جفت

توسط  $K_{relax}$  بیان می شود. تفکیک X می تواند وابسته میدان

باشد. (F)

بطور خاص در توده با پیوند ناهمگون، توصیف افزایش میدان تفکیکی به آسانی نمی تواند باشد، زیرا اتصال دهنده و پذیرنده هردو بطور تصادفی جهت گیری می شوند و در یک بعد بر میدان الکتریکی عمود نیستند. مدل اونساگر-بران برای بیان کیفیت تاثیر فرایند باز ترکیب جفت بر روی منحنی مشخصه  $J-V$  نیز به کار می رود [۱۴ و ۱۵].

نرخ تولید حامل بار در یک توده با اتصال ناهمگون (G) توسط معادله p و باز ترکیب R با عامل  $(1-p)$  تصحیح می گردد:

$$G = G_0 p, R = R_0 (1 - p) \quad (14)$$

که  $G_0$  نرخ تولید حالت های انتقال بار (CT) و  $R_0$  نرخ باز ترکیب دومولکولی (مستقیم) است [۱۶].

در این فرایند ها فاصله بین حاملین بار بطور بی نظم بوده و هم بصورت تابع توزیع  $f(a, x)$  حول فاصله نرمال a بیان می شود که احتمال کلی تفکیک به صورت رابطه زیر خواهد بود:

$$\frac{\partial p_{diff}^{i \rightarrow i+1}}{\partial t} = \frac{\mu_p k_B T}{ed \Delta r^2} p_i \quad (10)$$

در حالت کلی وقتی معادله عمومی اینیشتین به کار می رود، جهت پخش حاملین بار اهمیت زیادی نخواهد داشت. بنابر این:

$$\frac{\partial p_{diff}^{i \rightarrow i+1}}{\partial t} = \frac{\partial p_{diff}^{i \rightarrow i-1}}{\partial t} \quad (11)$$

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

$$(12)$$

$$J^i = J_n^i + J_p^i = e \left( \frac{\partial p^{i \rightarrow i+1}}{\partial t^i} - \frac{\partial p^{i+1 \rightarrow i}}{\partial t^i} - \frac{\partial n^{i \rightarrow i+1}}{\partial t^i} + \frac{\partial n^{i+1 \rightarrow i}}{\partial t^i} \right) \Delta r$$

باز ترکیب جفت، همان باز ترکیب یک الکترون با یک حفره که از برانگیزش نوری ایجاد شده اند، است (شکل ۲). این فرایند معادل با واهلش یک حالت انتقال بار در اتصال ناهمگون دهنده و پذیرنده می باشد. در شکل زیر واهلش ( $K_{relax}$ ) در رقابت با تفکیک ( $K_{diss}$ ) احتمال تولید حامل بار را نتیجه می دهد:

$$p = \frac{K_{diss}}{K_{diss} + K_{relax}} \quad (13)$$

پس عمدتاً مدل اونساگر-بران<sup>۲</sup> برای توصیف وابستگی نرخ تفکیک به دما و میدان حالت انتقال بار به کار می رود. اونساگر این تئوری را برای باز ترکیب یون ها تحت شرایط مرزی، باز ترکیب در فاصله صفر یون ها بسط داد. بران این مدل را برای حالت انتقال بار با طول عمر محدود به کار برد [۱۳ و ۱۲].

پلیمری باعث به وجود آمدن ناکاملی ها و نواحی باردار در ساختار پلیمر نیز می شوند. با اضافه نمودن برخی ناخالصی ها می توان باعث انتقال الکترون به نواحی رسانای الکترون (آلایش نوع n) و یا حذف الکترون در ناحیه رسانایی حفره جهت تولید حفره (آلایش نوع p) گردید. با وجود اینکه بیشتر نیمرساناهای معدنی را می توان به هر دو صورت نوع n و p آلایده کرد (GaN) را نمی توان به راحتی به صورت نوع p آلایده نمود، در حال حاضر ماده مناسبی جهت آلایش نوع n در نیم رساناهای آلی یافته نشده است [۱۸].

میدان الکتریکی از طریق اعمال معادله پواسون در معادلات مدل سوق و پخش بدست می آید. نتایج جداسازی در معادلات برای میدان الکتریکی  $F^i$  بین دونقطه از سیستم  $i$  و  $i+1$  عبارت است از:

$$F^i = \frac{\Delta r}{2\epsilon_0} \left( \sum_{j=1}^i \frac{\rho^j}{\epsilon_r^j} - \sum_{j=i+1}^N \frac{\rho^j}{\epsilon_r^j} \right) + \frac{\rho^{anode}}{\epsilon_0 \epsilon_r^i} \quad (۱۸)$$

که  $\epsilon_r$  ثابت دی الکتریک و  $\Delta r$  فاصله بین دو موقعیت مجاور هم و  $\rho^i$  بار فضایی موضعی شامل انواع بارها در موقعیت  $i$  می باشد که:

$$\rho^i = p^i - n^i + N_D^{+i} - N_A^{-i} + p_t^i - n_t^i + \dots \quad (۱۹)$$

میدان الکتریکی  $F^i$  در هر نقطه  $i$  بطور خیلی ساده بصورت زیر محاسبه خواهد شد:

$$F^i = \frac{F^{i-1} + F^i}{2} \quad (۲۰)$$

در انتگرالگیری، که همان مجموع فضاهای گسسته می باشد، بر روی میدان الکتریکی همان اختلاف پتانسیل الکتریکی بین آندوکاتد خواهد بود. این اختلاف پتانسیل توسط برهم نهی

$$P(a, T, F) = \int_0^\infty p(x, T, F) f(a, x) dx \quad (۱۵)$$

که تابع توزیع  $f(a, x)$  بصورت زیر بیان می شوند:

$$f(a, x) = \frac{4}{\sqrt{\pi} a^3} x^2 e^{-x^2/a^2} \quad (۱۶)$$

با در نظر گرفتن شرایط فوق، معادله پیوستگی برای اکسایتون های انتقال بار ( $X$ ) بصورت رابطه زیر بیان می گردد:

$$\frac{dX}{dt} = R_{sep} - \kappa_{relax} X - \kappa_{diss} X + R \quad (۱۷)$$

(۱۷) شامل قسمتهای جدایی اکسایتون ها  $R_{sep} \propto \kappa_{sep}$  و بازترکیب حاملین بار آزاد  $R \propto \kappa_{rec}$  برای حالت های انتقال بار و واهلش و تفکیک می باشد. معادله فوق به راحتی می تواند با

$$\text{جاگذاری } \frac{\Delta X}{\Delta t} \text{ به جای } \frac{dX}{dt} \text{ مورد ارزیابی قرار گیرد [۱۷].}$$

عملکرد سلول های خورشیدی آلی توده ای به طور مستقیم به روش ساخت، ویژگی های مواد و مشخصات فیزیکی و جغرافیایی مانند شدت تابش نور خورشید، دمای محیط و ... مورد استفاده وابسته می باشد. یکی از عوامل مهم در ویژگی های مواد مورد استفاده در سلول های خورشیدی آلایش نیمرساناهای نوع n و p می باشد. برخلاف سلول های خورشیدی معدنی، پلیمرهای نیمرسانای مورد استفاده در سلول های خورشیدی آلی به صورت ذاتی غیر آلایده سنتز می شوند. با این حال یافته های تجربی نشان می دهد که آلایده کردن مواد مورد استفاده در سلول های خورشیدی آلی باعث بهبود عملکرد آن می شود. برای آلایده کردن نیمرساناهای پلیمری روش های مختلفی مانند اضافه نمودن مواد فعال کننده سطحی، نمک ها و ... در حین سنتز وجود دارد، ولی اضافه کردن این مواد جهت آلایده کردن مواد

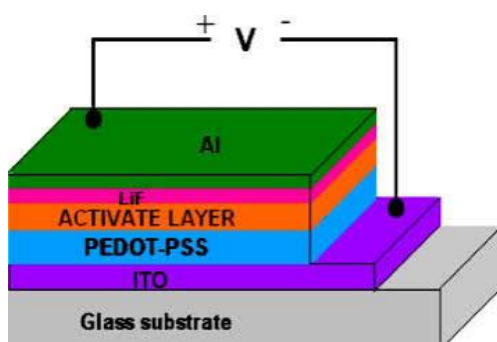
که شامل معادله کلاسیکی اینیشتین نیز می باشد. نتیجه نرخ گذار حفره به علت پخش بصورت زیر است:

$$\frac{\partial p_{diff}^{i \rightarrow i+1}}{\partial t} = \frac{\mu_p k_B T}{ed \Delta r^2} p_i \quad (25)$$

در حالت کلی وقتی معادله عمومی اینیشتین به کار می رود، جهت پخش حاملین بار اهمیت زیادی نخواهد داشت. بنابر این:

$$\frac{\partial p_{diff}^{i \rightarrow i+1}}{\partial t} = \frac{\partial p_{diff}^{i \rightarrow i-1}}{\partial t} \quad (26)$$

در بیشتر مدل ها و مطالعات نظری ارائه شده، ناحیه فعال در سلول های خورشیدی آلی را به صورت ذاتی فرض می نمایند حال آنکه این فرض برای مطالعه و بهینه سازی آنها دارای اشکالاتی می باشد و می بایست سهم آلائیده کردن پلیمرها برای مطالعه بهتر، در نظر گرفته می شود. ساختار مورد مطالعه در شکل (۲) نشان داده شده است. این ساختار شامل ناحیه فعال با ساختار توده ای PEDOT-PSS به ضخامت ۱۰۰ نانومتر می باشد.



شکل ۲: شکل طرحواره ساختار مورد استفاده در شبیه سازی و فرایند

انتقال بار در پلیمر PEDOT-PSS

بایاس اعمالی  $V$  و ولتاژ داخلی (ولتاژ توکار)  $V_{bi}$  که توسط فلزات دارای اختلاف توابع کار ایجاد می شود [59].

$$\sum_{i=1}^N F^i \Delta r = V - V_{bi} \quad (21)$$

این شرایط مرزی، چگالی بار سطحی آند ( $\rho^{anode}$ ) در معادله (۱۹-۲) را تعیین می کند. آند بطور اختیاری تعیین می شود و  $\rho^{anode}$  با معکوس بار کاتد یکسان است.

در بررسی چگالی های حاملین بار، نرخ تغییر معمولاً بصورت

$$\frac{\partial}{\partial t} \approx \frac{\Delta}{\Delta t}$$

حفره ها می تواند باشد. نرخ گذار چگالی حفره  $\frac{\Delta p^{i \rightarrow i+1}}{\Delta t}$  از موقعیت  $i$  به موقعیت  $i+1$  متناسب با چگالی خود حامل بار و تقسیم سرعت بر فاصله بین مسیر حرکتی است که حامل بار طی می کند. به عبارت دیگر مقدار حفره های  $\Delta p^{i \rightarrow i+1}$  عبوری از موقعیت  $i$  به  $i+1$  در زمان  $\Delta t$  توسط حاصلضرب سرعت در زمان و تقسیم بر فاصله  $i$  و  $i+1$  خواهد بود [6].

$$\frac{\Delta p^{i \rightarrow i+1}}{\Delta t} \approx \frac{\partial p^{i \rightarrow i+1}}{\partial t} = \frac{v^i}{\Delta r} p^i \quad (22)$$

با در نظر گرفتن سرعت سوق به جای  $v$  :

$$\frac{\partial p_{drift}^{i \rightarrow i+1}}{\partial t} = \frac{\mu_p^i F^i}{\Delta r} p^i \quad (23)$$

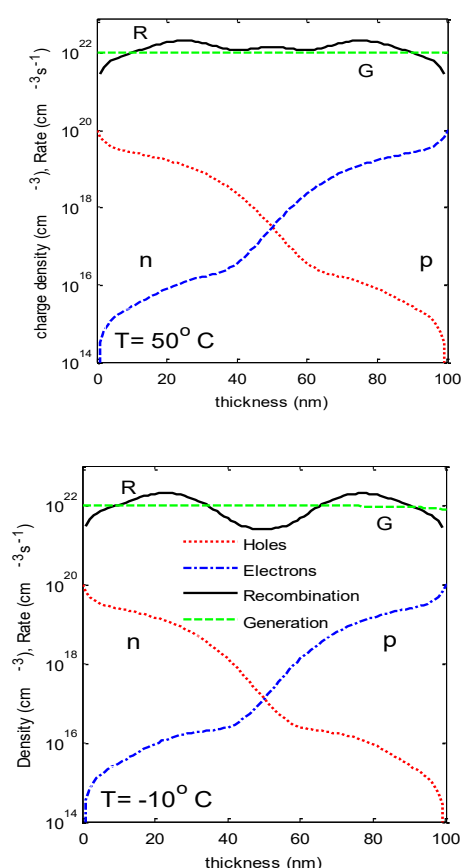
با در نظر گرفتن سرعت پخش به جای  $v$  :

$$\frac{\partial p_{diff}^{i \rightarrow i+1}}{\partial t} = \frac{D_p}{\Delta r} = \frac{\mu_p k_B T}{e \Delta r} \quad (24)$$

جدول ۱: پارامترهای فیزیکی مورد استفاده در شبیه سازی

| پارامتر          | نماد         | مقدار                    | واحد                                          |
|------------------|--------------|--------------------------|-----------------------------------------------|
| تحرك حفره        | $\mu_p$      | $2 \times 10^{-5}$       | $\text{cm}^2/\text{Vs}$                       |
| تحرك الكترون     | $\mu_n$      | $2 \times 10^{-4}$       | $\text{cm}^2/\text{Vs}$                       |
| بار الكتريكي     | $e$          | $1/60.2 \times 10^{-19}$ | C                                             |
| ضريب گذردي خلا   | $\epsilon_0$ | $8.85 \times 10^{-14}$   | $\text{C}^2/\text{Nm}^2$                      |
| ضريب گذردي نسبي  | $\epsilon$   | 5                        | -                                             |
| ثابت بولتزمن     | $k$          | $1/38 \times 10^{-23}$   | $\text{m}^2 \text{ kg s}^{-2} \text{ K}^{-1}$ |
| دما              | $T$          | 300                      | K                                             |
| ضخامت            | $x$          | 100                      | nm                                            |
| ضريب لانگوين     | $r$          | $1/95 \times 10^{-12}$   | -                                             |
| شدت تابشي خورشيد | $P_{in}$     | 840                      | $\text{Wm}^{-2}$                              |

در شکل (۴) تغییرات چگالی حاملین بار، نرخ تولید و باز ترکیب حاملین در دو دمای مختلف (۱۰- و ۵۰°C) نسبت به ضخامت ناحیه فعال نشان داده شده است. همانطور که در این شکل دیده می شود، کاهش حاملین بار در نزدیکی آند و کاتد در نتیجه ی میدان الکتریکی قوی در آنجا می باشد که این میدان قوی باعث انتقال حاملین شده و نرخ باز ترکیب کاهش می یابد. با کاهش دما چگالی حاملین بار در ناحیه فعال سلول کاهش یافته و در نتیجه انتظار می رود با کاهش باز ترکیب حاملین، بازده سلول افزایش یابد.

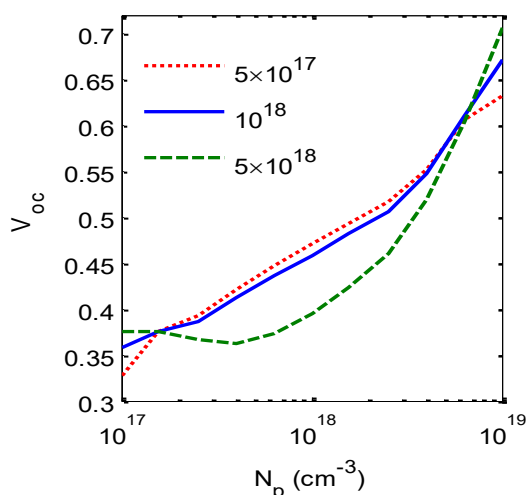


شکل ۵: تغییرات چگالی، نرخ تولید و باز ترکیب حاملین بار در دو دمای مختلف (۱۰- و ۵۰ °C) نسبت به ضخامت ناحیه فعال

به علاوه همانطور که در شکل (۵) دیده می شود، با افزایش دما حاملین بار بیشتری به ناحیه فعال انتقال می یابند که این انتقال

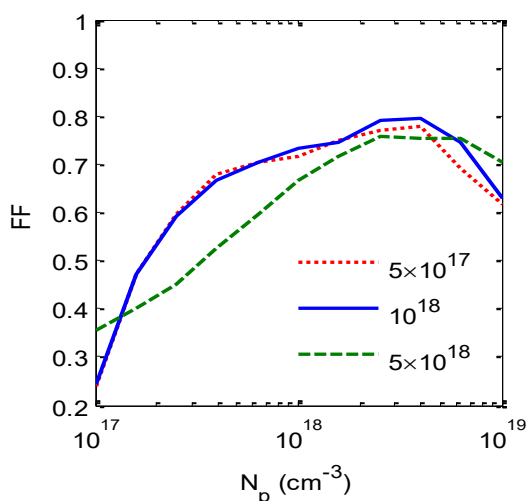
در این بخش چگالی حاملین را در بازه ای انتخاب می نماییم که از نظر تجربی نیز قابل حصول باشند. بدین منظور چگالی حاملین نوع  $p$  ( $N_p$ )  $10^{17}$  تا  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$  و چگالی حاملین نوع  $n$  ( $N_d$ ) در سه مقدار  $5 \times 10^{17}$ ،  $10^{18}$  و  $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  انتخاب می نماییم. در شکل (۳) تاثیر افزایش  $N_p$  را  $N_d = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  بر چگالی حاملین الکترون و حفره نسبت به ضخامت ناحیه فعال (نقطه ۰ به عنوان آند تا ۱۰۰ نانومتر به عنوان کاتد) نشان داده شده است.

حال با استفاده از روابط معادلات سوق و پخش می توان پارامترهای اساسی سلول خورشیدی نظیر جریان مدار کوتاه ( $J_{sc}$ )، ولتاژ مدار باز ( $V_{oc}$ )، فاکتور پرشوندگی ( $FF$ )، و بازده ( $\eta$ ) را محاسبه نمود.



شکل ۶: منحنی تغییرات  $V_{oc}$  نسبت به افزایش چگالی حاملین  $N_p$  در سلول خورشیدی آلی توده ای در سه  $N_d$  مختلف.

با محاسبه  $J_{sc}$  و  $V_{oc}$  می توان ضریب پرشوندگی یا همان FF را محاسبه نمود. شکل (۷) منحنی تغییرات FF را نسبت به افزایش چگالی حاملین  $N_p$  نشان می دهد.



شکل ۷: منحنی تغییرات FF نسبت به افزایش چگالی حاملین  $N_p$  در سلول خورشیدی آلی توده ای. در سه  $N_d$  مختلف.

باعث افزایش نرخ بازترکیب شده و حاملین بار بیشتری در ناحیه فعال سلول از دست رفته و در نتیجه آنها در تولید فوتوولتاژ شرکت نمی کنند.

به طور نظری  $V_{oc}$  به صورت زیر با پارامترهای فیزیکی ماده مورد استفاده متناسب است:

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

همانطور که دیده می شود،  $V_{oc}$  رابطه مستقیمی با باند انرژی ماده داشته و همچنین با افزایش دما انتظار می رود که کاهش داشته باشد. ولی با این وجود تغییرات آن نسبت به  $N_p$  و  $N_d$  مستقیم نمی باشد و به مدل های بازترکیب مورد استفاده در محاسبات وابسته است که می بایست به صورت خودسازگار محاسبه گردد.

در شکل (۶)، تغییرات ولتاژ مدار باز را در سه حالت  $N_d$ ، برای تغییرات چگالی آلایش نوع p نشان داده شده است. همانطور که در این شکل دیده می شود، در حالت کلی با افزایش  $N_p$  در  $N_d$  های متفاوت،  $V_{oc}$  افزایش می یابد ولی در قسمت اعظم بازه  $N_p$ ،  $N_d$  در چگالی بیشتر حاملین دهنده یا نوع n  $cm^{-3}$   $10^{17}$  تا  $10^{19}$   $cm^{-3}$ ، کمتر از دو حالت دیگر می باشد. با افزایش  $N_p$  از  $10^{17}$  تا  $10^{19}$   $cm^{-3}$ ،  $V_{oc}$  به میزان دوبرابر افزایش می یابد که نشان می دهد برای افزایش میزان  $V_{oc}$  می بایست نیم رساناهای پلیمری مورد استفاده در ناحیه فعال را به صورت آلاییده شده استفاده نمود.

در حدود بازه ی  $N_p = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  می باشد. همانطور که دیده می شود که همواره کمتر از دو حالت دیگر می باشد.

این برابری به سمت آند تغییر می نماید. در واقع افزایش حاملین نوع p، باعث افزایش حاملین حفره شده در نتیجه به علت فزونی، این حاملین می توانند به کاتد نزدیک تر شوند.

در ساختار مورد نظر با افزایش  $N_p$  منحنی FF به صورت سهمی وار تغییر پیدا می کند که این منحنی ها دارای یک مقدار بیشینه

## نتیجه گیری

با افزایش چگالی حاملین آلایش نوع p، چگالی الکترون ها در آندافزایش می یابد و به بیشینه مقدار آن در بیشترین مقدار  $N_p$  می رسد. با افزایش تدریجی  $N_p$  برابری چگالی حاملین بار الکترون و حفره که در ابتدا به طور تقریبی در نقطه میانی ناحیه فعال است، به سمت آند حرکت می نماید ولی با افزایش بیشتر،

## منابع

electrical modeling of polymer:fullerene bulk heterojunction solar cells, *J. Appl. Phys.* 103, 084502 (2008).

[7] A. H. Fallahpour, A. Gagliardi, F. Santoni, D. Gentilini, A. Zampetti, M. Auf der Maur, and A. Di Carlo Modeling and simulation of energetically disordered organic solar cells, *J. Appl. Phys.*, 184502 (2023).

[8] R. Yahyazadeh, Z. Hashempour, Effect of Hyrostatic pressure on optical Absorption coeffivient of InGaN/GaN of Multiple Quantum well solar cells, *Journal of optoelectronical Nano structures*, 6, 2, 1-22 (2021)

[9] L. J. A. Koster, E. C. P. Smits, V. D. Mihailetschi, P. W. M. Blom, Device model for the operation of polymer/fullerene bulk heterojunction solar cells, *Phys. Rev. B*, 72, 085205 (2005).

[10] J. Nelson, J. J. Kwiatkowski, J. Kirkpatrick, and J. M. Frost, Modeling charge transport in organic photovoltaic materials, *Acc. Chem. Res.*, 42, 1768 (2019).

[11] F. F. Stelzl, Uli Wurfel, Modeling the influence of doping on the performance of bulk heterojunction organic solar cells: One-dimensional effective semiconductor versus two-dimensional onor/acceptor model, *Phys. Rev. B.*, 86, 075315 (2012).

[1] C. Liang, Y. Wang, D. Li, X. Ji, F. Zhang, Z. He, Modeling and simulation of bulk heterojunction polymer solar cells, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 127, 67–86. (2014)

[2] T. Tromholt, M. Manceau, M. Helgesen, J. E. Carle, F. C. Krebs, Degradation of semiconducting polymers by concentrated sunlight, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 95, 1308–1320 (2011)

[3] Y. Zhou, J. Pei, Q. Dong, X. Sun, Y. Liu, W. Tian, Donor- Acceptor Molecule as the Acceptor for Polymer-Based Bulk Heterojunction Solar Cells, *J. Phys. Chem. C*, 113, 7882- 78809 (2019)

[4] A. Mahmoudloo , S. Ahmadi , Influence of the temperature on the charge transport and recombination profile in organic bulk heterojunction solar cells: a drift-diffusion study, *J. Applide Physics A*, 119(4), 1523-1529, (2015).

[5] D. Rezzonico, B. Perucco, E. Knapp, R. Hausermann, N. A. Reinke, F. Muller, B. Ruhstaller, Numerical analysis of exciton dynamics in organic light-emitting devices and solar cells, *J. of Photonics for Energy*, 1, 011005-1 (2011).

[6] J. D. Kotlarski, L. J. A. Koster, P. W. M. Blom, M. Lenes, and L. H. Slooff, Combined optical and

dianhydride (NTCDA) doped with bis (ethylenedithio)- tetrathiafulvalene (BEDT-TTF), *J. Appl. Phys.*, 87, 4340-4343 (2020).

[17] A. Veysel Tunc, A. De Sio, D. Riedel, F. Deschler, E. Da Como, J. Parisi, E. von Hauff, Molecular doping of low-bandgap-polymer: fullerene solar cells: Effects on transport and solar cells, *Org. Electron.*, 13, 290 (2012).

[18] B. Maennig, M. Pfeiffer, A. Nollau, X. Zhou, K. Leo, P. Simon, Controlled p-type doping of polycrystalline and amorphous organic layers: Self-consistent description of conductivity and field-effect mobility by a microscopic percolation model, *Phys. Rev. B*, 64, 195208 (2021).

[12] B. Ray and M. A. Alam, Random vs regularized OPV: Limits of performance gain of organic bulk heterojunction solar cells by morphology engineering, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 204 (2021).

[13] M. Pfeiffer, K. Leo, X. Zhou, J.S. Huang, M. Hofmann, A. Werner, J. Blochwitz-Nimoth, Doped organic semiconductors: Physics and application in light emitting diodes, *Organic Elec.* 4, 89103 (2003).

[14] B. A. Gregg, Transport in Charged Defect-Rich p-Conjugated Polymers, *J. Phys. Chem. C*, 113, 5899 (2009).

[15] B. A. Gregg, Charged defects in soft semiconductors and their influence on organic photovoltaics, *Soft Matter.*, 5, 2985 (2009).

[16] A. Nollau, M. Pfeiffer, T. Fritz, K. Leo, Controlled n-type doping of a molecular Organic semiconductor: naphthalenetetracarboxylic

## The Effect Charge Carrier Density on the Characteristics of Nanostructured Organic Solar Cells

Houra Soudi <sup>\*1</sup>, Ali Mahmoudloo <sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Educational Science, Farhangian University, P.O.Box 144665- 889, Tehran, Iran

<sup>2</sup> Department of physics education, Farhangian University, P.O.Box 144665- 889, Tehran, Iran

### Article details

Received: 2026/05/15

Accepted: 2026/08/13

Published: 2026/08/26

ISSN: 2588-493x

eISSN: 2588-4821

Correspondence email:

h.soudi@cfu.ac.ir

### Abstract

In this article, the operating mechanism of photovoltaic devices is investigated by examining the effects of fundamental parameters on the performance of organic heterojunction solar cells, as well as charge transport. To simulate these processes, the fundamental parameters of bulk organic solar cells with a PEDOT-PSS structure are studied in this section by employing a self-consistent solution of the drift-diffusion and Poisson equations, together with various recombination models, using the finite element method [2].

In most of the proposed models and theoretical studies, the active layer in organic solar cells is assumed to be intrinsic. However, this assumption has certain limitations for the comprehensive study and optimization of these devices. Therefore, the contribution of polymer doping should be taken into account to achieve a more accurate understanding of their behavior. The structure under investigation is shown in the figure. This structure consists of an active layer with a bulk heterojunction PEDOT-PSS structure and a thickness of 120 nm.

**Keywords:** Polymer Nanostructure solar cell, Drift - Diffusion model, Charge transport, Charge carrier recombination