بررسی اثرات آلایش و بازترکیب حاملین بار در سلول خورشیدی آلی توده ای نامتجانس با ساختار P3HT:PCBM

على محمودلو'

گروه آموزش فیزیک ، دانشگاه فرهنگیان، صندوق پستی ۸۸۹– ۱۴۶۶۵ تهران ، ایران

دریافت: ۱۴۰۰/۱۰/۲۱ پذیرش: ۱۴۰۰/۱۰/۳

چکیدہ:

خواص ترابرد حاملین بار برای نیم رساناهای آلی بستگی به حضور و نحوه توزیع سایتهای تله دارد. بطوریکه می دانیم تله ها نتیجه بی نظمی در مولکول ها و زنجیره های پلیمری که ناشی از ناخالصی های فیزیکی یا شیمیایی موجود در ساختار نیم رساناهای آلی می باشد. از نقطه نظر نقص های بلوری که باعث تغییر در ترازهای انرژی می شوند و ایجاد گاف انرژی در نظریه نواری می شوند، خواص ترابردحاملین بار در این نوع سیستم ها نیز دستخوش تغییراتی خواهد شد که مهمترین پارامتر در این موضوع جایگزیده شدن و یا دچار تله شدن در فرایند رسانش خواهد بود. البته نقص ها می توانند در نقش مراکز پراکننده در سیستم باشند.

در این مقاله با استفاده از مدل های مختلف بازتر کیب حاملین، اثرات پارامترهای اساسی بر عملکرد سلول های خورشیدی آلی نامتجانس و همچنین انتقال بار مورد بررسی قرار گرفته است. برای شبیه سازی این فرآیندها، دراین بخش بااستفاده از حل خودساز گارمعادلات سوق-پخش و معادله پواسون و همچنین استفاده ازمدلهای مختلف بازتر کیب از طریق روش اجزاء محدود، پارامترهای اساسی سلولهای خورشیدی آلی توده ای باساختار P3HT:PCBM موردمطالعه قرار گرفته است. همچنین با استفاده از مدل سوق-پخش و استفاده از مدل های مختلف ارائه شده برای بازتر کیب حاملین بار، اثرات آلایش نوع n و p را در پلیمرهای مورد استفاده در یک سلول خورشیدی آلی توده ای با ساختار P3HT:PCBM مورد بررسی قرار داده ایم. 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

نويسنده مسئول ¹

Mahmodlou_ali@yahoo.com

می بایست سهم آلاییده کردن پلیمرها برای مطالعه بهتر، در نظر گرفته شود. ساختار مورد مطالعه در شکل(3) نشان داده شده است. این

ساختار شامل ناحیه فعال با ساختار توده ای P3HT:PCBM به ضخامت ۱۰۰ نانومتر می باشد.

کلید واژه ها: سلول خورشیدی پلیمری، مدل سوق و پخش، ترابرد بار، بازترکیب حاملین بار، بازترکیب دوتایی

مقدمه:

سلول های خورشیدی الی دارای تفاوت های بسیاری با سلول های خورشیدی معدنی و یا غیر الی 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 کردن پلیمرها میتواند منجر به ترکیب شدن ویژگیهای 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 الی که در ان لایههای 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 میشوند، ترکیب کردن یک روش جالب به منظور بهینهسازی عملکرد این ادوات محسوب میشود. در واقع برای سلولهای خورشیدی آلی حضور پیوندهای نامتجانس ٰ بین دو نیمرسانای متفاوت (دهنده و پذیرنده) برای تجزیه اکسایتون تولید شده (بر اثر تابش نور) حیاتی است. در این سلول ها ، اکسایتون ها در لایه ی فعال سلول تشکیل می شوند و در فصل مشترک دهنده – گیرنده توسط میدان الکتریکی جدا می شوند. . با توجه به این که طول پخش اکسایتون ها کم است اکسایتون ها به سرعت بازترکیب می شوند. در حالی که تنها اکسایتون هایی که جدا می مانند، در جریان خروجی تاثیر می گذارند. بنابراین اکسایتونها باید قبل از بازترکیب خود ر ا به مرز مشترک برسانند. با در نظر گرفتن این شرایط، افزایش ضخامت لایه فعال موجب هدر رفتن اکسایتون ها می شود و از طرفی کاهش ضخامت موجب کاهش تعداد اکسایتون ها می شود. از این رو بهینه سازی ضخامت لایه فعال امری ضروری است.

در یک دیود نورگسیل پلیمری دو ماده ترکیب شونده میتوانند طوری انتخاب شوند که تزریق الکترونها و حفرهها از الکترودها بصورت بسیار مفیدتر و موثر انجام شود ونیز بازترکیب حاملین بار در نزدیکی پیوند نامتجانس صورت پذیرد. در هر دو مورد ادوات مذکور نکته حایز اهمیت این است که الکترونها و حفرهها میتوانند در مولفههای متناظر ترکیب (یعنی الکترونها در دهنده و حفرهها در پذیرنده) انتقال یابند، این انتقال از پیوند نامتجانس به الکترودها یا برعکس میباشد. این امر محدودیتهای قابل ملاحظهای را بر میکروساختارهایی که در چنین ادواتی مورد نیاز هستند ایجاد میکند.

²Heterojunction



شکل(۱): مکانیسم کار سلول های خورشیدی آلی با اتصالات نامتقارن دهنده – گیرنده

مدل های مختلفی برای بررسی عملکرد سلول های خورشیدی مطرح شده است و این در حالیست 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 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.

مدل سوق و پخش

معادلات پیوستگی و سوق-پخش از معادله بولتزمن نتیجه گیری می شوند. ایده اساسی تابع توزیع بصورت f(r, v, t) می باشد که حالت یک ذره را بصورت یک مدل نیمه کلاسیکی در نظر می گیرد. عبارت f(r, v, t) dr dv بیانگر تعداد ذرات در موقعیت r و سرعت v در لحظه t می باشد. بنابر این با انتگرال گیری روی r و v چگالی حامل بار n(r, t) در فاصله r بدست می آید[۱].



شکلdx: تغییرات موقعیت b dx: تغییرات سرعت dv در توزیع بولتزمن a شکلdx: شکلdy

برای بررسی تغییرات f با زمان، این مسئله را یک بعدی در نظر می گیریم. متوازی السطوحی را مطابق شکل (۱) در صفحه $v_x - v_x$ را در نظر می گیریم که xموقعیت در فضا و v_x سرعت در جهت xو $d\sigma$ گسترش متوازی السطوح در جهت v می باشد. تعداد ذرات ورودی (یا خروجی) به سطح قطعه بینهایت کوچک از طرف چپ برابر با $f(x,v_x)v_x dt d\sigma$ و تعداد ذرات خروجی(یا ورودی) از سطح مورد نظر در موقعیت dx برابر با dx براdx می باشد. در نتیجه تغییر ذرات در جهت x بصورت تفاضل دو حالت فوق خواهد بود[7]:

$$(\partial N)_x = (\partial f(x, v_x) d\sigma dx)_x = -\frac{f(x + dx, v_x) - f(x, v_x)}{dx} dx v_x dt d\sigma$$
(1)

که ما عبارت طرف راست معادله فوق را برحسب $\frac{dx}{dt}$ بسط داده ایم که نرخ تغییرات f بعلت حرکت ذرات در جهت x بصورت که ما عبارت طرف راست معادله فوق را برحسب $\frac{dx}{dt}$ بسط داده ایم که نرخ تغییرات f بعلت حرکت ذرات در جهت x بصورت را $\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial f}{\partial x}v_x$ $\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial f}{\partial v_x}a_x$ می باشد. به همین صورت برای ذراتی که خطوط افقی را در داخل متوازی السطوح قطع می کنند، تغییراتی را $\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial f}{\partial x}v_x$

خواهد شد[۳].

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v\nabla_r f + a\nabla_v f = 0 \tag{7}$$

که توصیف فوق معادله بولتزمن می باشد، که یک معادله عمومی در فیزیک به شمار می رود. برای ترابرد بار در یک بلور، ۷ باید برحسب تکانه بلور جایگزین شود.

اگر اختلالی به علت برخوردها وجود داشته باشد، در طرف راست معادله فوق، فرایندهای مربوط به تغییرات سرعت اضافه شود.

برای بدست آوردن معادلات پیوستگی و سوقی – پخشی از معادله بولتزمن، از روش تکانه استفاده می شود. یعنی معادله بولتزمن در توانهای ۵ سرعت ضرب شده ودر نهایت برروی سرعت انتگرال گیری می شود:

$$\int v^{\alpha} \left(\frac{\partial f}{\partial t} + v\nabla_{r}f + a\nabla_{v}f\right)dv = \int v^{\alpha}\frac{\partial f}{\partial t}dv \tag{(7)}$$

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:

$$\int \frac{\partial f(r, v, t)}{\partial t} dv = \frac{\partial}{\partial t} n(r)$$
(6)

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

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

$$\nabla_r \int v f(r, v, t) dv = \nabla_r (n(r) \langle n(r) \rangle) = \nabla_r j(r)$$
(7)

که
$$j(r)$$
 چگالی جریان ذره است. سومین عبارت تحت یک میدان الکتریکی اعمالی F متناسب است با: $\int\limits_{-\infty}^{+\infty}F
abla _v fdv$

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:

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

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

$$n\mu F - D\nabla_r n = J \tag{A}$$

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

در این قسمت؛ ما شرایط ارائه شده در بالا را برای استفاده در نیم رساناهای آلی تقریب می زنیم [۶]:

- چگالی ذرات را کوچک در نظر گرفته و برهم کنش های متقابل را ناچیز فرض می کنیم
- میانگین زمانی برخوردهایی که پراکندگی شبکه را توصیف می کنند خیلی کوچکتر از زمان پراکندگی بین ذرات فرض می کنیم.
 - مقیاس های مربوط به توصیف حرکت ذرات را بطور ماکروسکوپیک فرض می کنیم.
 - تابع f(r,v,t) بیانگر موقعیت ماکروسکوپیک سیستم خواهد بود.

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 تابعf(r,v,t) تعریف می شود.

به هر حال الکترون ها و حفره ها بر روی مولکول ها قرار گرفته وشامل 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 بازترکیب چندین پرش را داشته باشند. بنابر این ترابرد بار توسط پرش چند مرحله ای حاملین بار رخ خواهد داد. این جریان را علیرغم جایگزیدگی بارها می توان توسط پدیده های سوق وپخش 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.

در نتیجه، رهیافت مدل سوق وپخش یک مدل ماکروسکوپیک خوبی در نیم رساناهای آلی به شمار می رود. معادلات دیفرانسیل زیر برای شبیه سازی یک بعدی مدل سوق و پخش که شامل بار فضایی است در نظر گرفته می شوند[۷]:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G - R - \frac{1}{-e} \frac{\partial J_n}{\partial x} \tag{9}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = G - R - \frac{1}{e} \frac{\partial J_p}{\partial x} \tag{(1)}$$

$$J_n = en\mu_n F - (-e)D\frac{\partial n}{\partial x} \tag{11}$$

پژوهشهای نوین فیزیک

$$J_{p} = en\mu_{p}F - (e)D\frac{\partial p}{\partial x} \tag{11}$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = -\frac{e}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} (p - n + N_D^+ - N_A^- + \dots)$$
(17)

x متغیر فضا بوده و عمود بر صفحه نمونه می باشد ودر توجیه رفتار یک بعدی، ابعاد جانبی قطعه باید ¹⁰⁵ برابر بزرگتر از ضخامت قطعه باشد[۸].

معادلات (۹) و (۱۰) معادلات پیوستگی برای الکترون ها و حفره ها که شامل قسمتهای تولید حامل بار(
$$G$$
) و بازترکیب(R)
حاملین بار می باشد که هر دو معادله در ارتباط با بازترکیب مستقیم است. چگالیهای جریان $I_p e_J$ و توسط معادلات (۱۱) و
(۱۲) بصورت جریانهای سوقی و پخشی با تحرک پذیری حاملین بار μ و میدان الکتریکی F و ثابت پخش D بیان می شوند.
مقدار D نیز در آمار بولتزمن با استفاده از معادله اینشتین بصورت $P = \mu k_B T / e$ قابل محاسبه است. معادله (۱۳) همان معادله
پواسون است که بار فضایی توسط چگالی های حامل بار و چگالیهای آلایش یافته یونیزه شده جایگزیده با N_a^- و N_a^- نمایش داده

محاسبه و شبیه سازی

در بررسی چگالی های حاملین بار، نرخ تغییرمعمولا بصورت
$$\frac{\Delta}{\Delta t} \approx \frac{\Delta}{\Delta t}$$
 محاسبه می شود. *که* این روش، روش خوبی برای 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 $\frac{\Delta p^{i\rightarrow i+1}}{\Delta t}$ عبوری از موقعیت *i* به i مواله بین مسیر حرکتی است که حامل بار طی می کند. به عبارت دیگر مقدار حفره های $\frac{\Delta p^{i\rightarrow i+1}}{\Delta t}$ عبوری از موقعیت *i* به i به $i + i$ 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 $1+i+i$ متناسب ا

$$\frac{\Delta p^{i \to i+1}}{\Delta t} \approx \frac{\partial p^{i \to i+1}}{\partial t} = \frac{v^i}{\Delta r} p^i \tag{14}$$

با در نظر گرفتن سرعت سوق به جای *۷* :

بررسی اثرات آلایش و بازترکیب...

$$\frac{\partial p_{drift}^{i \to i+1}}{\partial t} = \frac{\mu_p^i F^i}{\Delta r} p^i \tag{10}$$

با در نظر گرفتن سرعت پخش به جای ۷:

$$\frac{\partial p_{diff}^{i\to i+1}}{\partial t} = \frac{D_p}{\Delta r} = \frac{\mu_p k_B T}{e\Delta r}$$
(19)

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

$$\frac{\partial p_{diff}^{i \to i+1}}{\partial t} = \frac{\mu_p k_B T}{e d \Delta r^2} p_i \tag{1Y}$$

در حالت كلي وقتى معادله عمومي اينيشتين به كار مي رود، جهت پخش حاملين بار اهميت زيادي نخواهد داشت. بنابر اين:

$$\frac{\partial p_{diff}^{i \to i+1}}{\partial t} = \frac{\partial p_{diff}^{i \to i-1}}{\partial t} \tag{1A}$$

رهیافت ارائه شده در معادلات مدل سوق وپخش، براساس میدان الکتریکی خطی بین دو اتصال نقاط مربوط به دو سایت، برای محاسبه میدان الکتریکی می باشد:

$$\frac{\partial p_{drift+diff}^{i \to i+1}}{\partial t} = \frac{1}{\Delta r} \frac{F^{i} \mu_{p}}{1 - \exp(-eF^{i} \Delta r / k_{B}T)} p_{i}$$
(19)

بنابراین معادله پیوستگی هم با افزودن قسمت های مربوط به تله اندازی، بازترکیب و تولید حامل بصورت زیر تغییر خواهد یافت:

$$\begin{split} \Delta p^{i} &= -\Delta p_{drift}^{i \to i+1} - \Delta p_{drift}^{i \to i-1} - \Delta p_{diff}^{i \to i+1} - \Delta p_{diff}^{i \to i-1} \\ &+ \Delta p_{drit}^{i-1 \to i} + \Delta p_{drift}^{i+1 \to i} + \Delta p_{diff}^{i-1 \to i} + \Delta p_{diff}^{i+1 \to i} \end{split}$$

$$(\Upsilon \cdot)$$

$$- \Delta p_{rec}^{i} + \Delta p_{gen}^{i} - \Delta p_{trap}^{i} + \Delta p_{detrap}^{i}$$

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

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

پژوهشهای نوین فیزیک

باز ترکیب دوتایی^۳ و باز ترکیب از طریق حالتهای انتقال بار[†]

بازترکیب جفت، همان بازترکیب یک الکترون با یک حفره که از برانگیزش نوری ایجاد شده اند، است(شکل۲). این فرایند معادل با واهلش یک حالت انتقال باردر 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:

$$p = \frac{\kappa_{diss}}{\kappa_{diss} + \kappa_{relax}} \tag{(TT)}$$

پس عمدتا مدل اونساگر- بران⁴ برای توصیف وابستگی نرخ تفکیک به دما و میدان حالت انتقال بار به کار می رود. اونساگر این تئوری را برای بازترکیب یون ها تحت شرایط مرزی، بازترکیب در فاصله صفر یون ها بسط داد. بران ایـن مـدل را بـرای حالـت انتقال بار با طول عمر محدود به کار برد[۱۳و۱۲].



شکل(۳) :نرخ برهمکنش اکسایتون ها(s)، حالتهای CT (X)، وحاملین بار (n, P) در اتصال دهنده-پذیرنده. بازترکیب

(F).جفت توسط κ_{relax} بیان می شود. تفکیک X می تواند وابسته میدان باشد. (F

³ Geminate recombination

⁴ Charge transfer state(CT)

⁵ Onsager-Braun-Model

بطور خاص در توده با پیوند ناهمگون، توصیف افزایش میدان تفکیکی به آسانی نمی تواند باشد، زیرا اتصال دهنده و پذیرنده هـردو بطور تصادفی جهت گیری می شوند ودر یک بعد بر میدان الکتریکی عمود نیستند. مدل اونسـاگر-بـران بـرای بیـان کیفیـت تـاثیر فرایند بازترکیب جفت بر روی منحنی مشخصه J-Vنیز به کار می رود. معادله نرخ تفکیک بصورت زیر بیان می شود[۱۴].

$$\kappa_{diss} = \frac{3\beta}{4\pi a^3} e^{-E_B/k_B T} \frac{J_1(2\sqrt{-2b})}{\sqrt{-2b}}$$
(YY)

$$b = e^3 F / (8\pi \varepsilon_0 \varepsilon_r k_B^2 T^2)$$
 تابع بسل مرتبه اول و $J_1 = 1 + b + \frac{b^2}{3} + \frac{b^3}{18} + \frac{b^4}{180} + \dots$ و β

انرژی پیوندی کولنی
$$B=rac{e^2}{4\piarepsilon_{diss}}$$
 (که a فاصله داخلی بین بار مثبت ومنفی) است. تناسب κ_{diss} با eta بطور مستقیم از

شرط تعادل $X_0 = \beta n_i^2$ با چگالیهای تعادلی برای حالتهای انتقال بار X_0 و چگالی حاملین بار آزاد n_i ناشی می شود که توسط دینامیک بازترکیب و یا تفکیک در یک نمونه ودر یک دمای خاص تعریف می شود[۱۵].

نرخ تولید حامل بار در یک توده با اتصال نا همگون(G) توسط معادله p و بازترکیب R با عامل (1-p) تصحیح می گردد:

$$G = G_0 p, R = R_0 (1 - p) \tag{(16)}$$

که
$$G_0$$
 نرخ تولید حالتهای انتقال بار(CT) و R_0 نرخ بازترکیب دومولکولی(مستقیم) است[۱۶].
در این فرایند ها فاصله بین حاملین بار بطور بی نظم بوده و p هم بصورت تابع توزیع $f(a,x)$ حول فاصله نرمال a بیان می
شود که احتمال کلی تفکیک به صورت رابطه زیر خواهد بود:

$$P(a,T,F) = \int_{0}^{\infty} p(x,T,F)f(a,x)dx$$
 (Y Δ)

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

$$f(a,x) = \frac{4}{\sqrt{\pi}a^3} x^2 e^{-x^2/a^2}$$
(79)

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

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

این معادله شامل قسمتهای جدایی اکسایتون ها $R_{sep} \propto \kappa_{sep} \propto \kappa_{sep}$ و بازترکیب حاملین بار آزاد $R \propto \kappa_{rec}$ برای حالتهای انتقال بار و $\frac{dX}{dt}$ واهلش و تفکیک می باشد. معادله فوق به راحتی می تواند با جاگذاری $\frac{\Delta X}{\Delta t}$ به جای $\frac{dX}{dt}$ مورد ارزیابی قرار گیرد[۱۸ و ۱۷].

نتايج و بحث :

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 باشدو می بایست سهم آلاییده کردن پلیمرها برای مطالعه بهتر، در نظر گرفته می شود شود. ساختار مورد مطالعه در شکل(3) نشان داده شده است. این ساختار شامل ناحیه فعال با ساختار توده ای P3HT:PCBM به ضخامت ۱۰۰ نانومتر می باشد.



شکل (۴) : الف) شکل طرحواره ساختار مورد استفاده در شبیه سازی و ب و ج) فرایند انتقال بار در پلیمر P3HT:PCBM

واحد	مقدار	نماد	پارامتر
cm ² /Vs	۲×۱۰ ^{-۵}	μ_{p}	تحرک حفرہ
cm ² /Vs	۲×۱۰ ^{-۴}	μ_{n}	تحرك الكترون
С	۱/۶۰۲× ۱۰ ^{-۱۹}	e	بار الکتریکی
C ² /Nm ²	$\lambda/\lambda\Delta \times 1 \cdot - 1^{+1}$	ϵ_0	ضریب گذردهی خلا
-	۵	3	ضریب گذردهی نسبی
$m^2 kg s^{-2} K^{-1}$	۱/۳۸×۱۰ ^{-۳۳}	k	ثابت بولتزمن
К	۳	Т	دما
nm	١	Х	ضخامت
-	۱/۹۵× ۱۰ ^{-۱۲}	r	ضريب لانگوين
Wm^{-2}	۸۴۰	\mathbf{P}_{in}	شدت تابشی خورشید
	ļ		

جدول۱: پارامترهای فیزیکی مورد استفاده در شبیهسازی

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 $(N_d) n$ نوع $(N_d) n$ در سه مقدار $(N_p) p$ م $(N_p) n$ نوع $(N_p) p$ و چگالی حاملین نوع $(N_d) n$ در سه مقدار $(N_p) p$ م $(N_p) n$ انتخاب می نماییم. در شکل (۴) تاثیر افزایش $(N_p n)$ د $(N_d) n$ 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.



شکل (۵) : تغییرات چگالی حاملین الکترون (خط چین) و حفره (خط ممتد)نسبت به افزایش N_pدر^{T-3} در ضخامت ناحیه فعال در سلول خورشیدی آلی توده ای .جهت فلش ها افزایش N_pرا نشان می دهد.

همانظور که در شکل فوق دیده می شود، با افزایش چگالی حاملین آلایش نوع p، چگالی الکترون ها در آندافزایش می یابد و به بیشینه مقدار آن در بیشترین مقدار Np می رسد. با افزایش تدریجی Np 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، 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.

برای حالتی که چگالی حاملین نوع n را افزایش می دهیم، نمودار تغییرات چگالی حاملین بار را نسبت به ناحیه فعال بدست می آوریم. شکل(۴) این نمودار را در حالتی که Nd=۱۰^{۱۸} cm⁻³ می باشد، نشان می دهد. مانند شکل(۳) نیز حاملین حفره با افزایش Np افزایش می یابد.



شکل (۶): تغییرات چگالی حاملین الکترون و حفره نسبت به افزایش N_Pدر N_d=۱۰^{۱۸} cm⁻³در ضخامت ناحیه فعال در سلول خورشیدی آلی توده ای جهت فلش ها افزایش N_pرا نشان می دهد.



شکل (۷): منحنی تغییرات J_{sc} نسبت به افزایش چگالی حاملین ${
m N}_{
m p}$ در سلول خورشیدی آلی توده ای

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

$$qV_{oc} \propto E_g - k_B T \ln(\frac{N_p N_d}{np}) \tag{7A}$$

همانطور که دیده می شود، V_{oc} رابطه مستقیمی با باند انرژی ماده داشته و همچنین با افزایش دما انتظار میرود 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 (۷)، تغییرات ولتاژ مدار باز را در سه حالت N_d ، برای تغییرات چگالی آلایش نوع p نشان داده شده است. همانطور که در N_p 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 ی N_p ، 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 ی V_o ، این شکل دیده می شود، در حالت کلی با افزایش N_p در N_d در N_c های متفاوت، V_{oc} افزایش می یابد ولی در قسمت اعظم بازه N_p ، این N_{oc} در چگالی بیشتر حاملین دهنده یا نوع n ($^{-3}N_c$)، کمتر از دو حالت دیگر می باشد. با افزایش N_p از N_{oc} از N_{oc} در V_{oc} در V_{oc} به میزان دوبرابر افزایش می یابد که نشان می دهد برای افزایش میزان N_{oc} می بایست نیم رساناهای پلیمری مورد استفاده در ناحیه فعال را به صورت آلاییده شده استفاده نمود.



شکل (۸) : منحنی تغییرات V_{oc} نسبت به افزایش چگالی حاملین ${
m N_p}$ در سلول خورشیدی آلی توده ای در سه ${
m N_d}$ مختلف.

با محاسبه ی J_{sc} و V_{oc} می توان ضریب پرشوندگی یا همان FF را محاسبه نمود. شکل(۸) منحنی تغیییرات FF را نسبت به افزایش چگالی حاملین N_p نشان می دهد.



شکل (۹): منحنی تغییرات FFنسبت به افزایش چگالی حاملین ${
m N}_{
m p}$ در سلول خورشیدی آلی توده ای. در سه ${
m N}_{
m d}$ مختلف.

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 در حدود بازه ی N_p =0×1۰¹⁰cm⁻³ می باشد. همانظور که دیده می شود که همواره کمتر از دو حالت دیگر می باشد.

نتيجه گيرى

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 دمای محیط و ... مورد استفاده وابسته می باشد. یکی از عوامل مهم در ویژگی های مواد مورد نیمرسانای مورد استفاده در سلول های خورشیدی آلایش نیمرساناهای نوع n و می باشد. برخلاف سلول های خورشیدی معدنی، پلیمرهای نیمرسانای مورد استفاده در سلول های خورشیدی معدنی، پلیمرهای نیمرسانای مورد استفاده در سلول های خورشیدی آلایش نیمرسانای مورد استفاده در سلول های خورشیدی آلی به صورت ذاتی غیر آلاییده سنتز می شوند. با این حال یافته های تجربی نشان می دهد که آلاییده کردن مواد مورد استفاده در سلول های خورشیدی آلی به صورت ذاتی غیر آلاییده سنتز می شوند. با این حال یافته های تجربی نشان می دهد که آلاییده کردن مواد مورد استفاده در سلول های خورشیدی آلی باعث بهبود عملکرد آن می شود. برای آلاییده دران می دهد که آلاییده کردن مواد مورد استفاده در سلول های خورشیدی آلی باعث بهبود عملکرد آن می شود. برای آلاییده کردن نیمرساناهای پلیمری روش های مخاند اضافه نمودن مواد فعال کننده سطحی، نمک ها و ... در حین سنتز وجود دارد، ولی اضافه کردن این مواد جهت آلاییده کردن مواد پلیمری باعث به وجود آمدن ناکاملی ها و نواحی باردار در ساختار پلیمر این می شوند. با اضافه نمودن برخی ناخالصی ها می توان باعث انتقال الکترون به نواحی رسانای الکترون (آلایش نوع n) و یا حذف نیز می شوند. با ضافه نمودن برخی ناخالصی ها می توان باعث انتقال الکترون به نواحی رسانای الکترون (آلایش نوع n) و یا حذف مورت نوع n و p آلاییده کرد (Gan را نمی توان به راحتی به صورت نوع p آلاییده نمود، در حلی می موان می موان به مورت نوع p آلاییده نود مول می مول های مول های مود، در حلی موان به مورت نوع p آلایی نو n و مراناهای آلی یافته نشده است.

منابع

- [1] C. Liang, Y. Wang, D. Li, X. Ji, F. Zhang, Z. He, Modeling and simulation of bulk heterojunction polymer solar cells, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 127 (2014) 67–86.
- [2] T. Tromholt, M. Manceau, M. Helgesen, J. E. Carle, F. C. Krebs, Degradation of semiconducting polymers by concentrated sunlight, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 95 (2011) 1308-1320
- [3] Y. Zhou, J. Pei, Q. Dong, X. Sun, Y. Liu, W. Tian, Donor- Acceptor Molecule as the Acceptor for Polymer-Based Bulk Heterojunction Solar Cells, J. Phys. Chem. C, 113 (2009) 7882- 78809
- [4] A. Mahmoudloo, S. Ahmadi, Influence of the temperature on the charge transport and recombination profile in organic bulk heterojunction solar cells: a drift-diffusion study, *J. Applide Physics A*,119(4), (2015) 1523-1529.

- [5] D. Rezzonico, B. Perucco, E. Knapp, R. Hausermann, N. A. Reinke, F. Muller, B. Ruhstaller, Numerical analysis of exciton dynamics in organic light-emitting devices and solar cells, *J. of Photonics for Energy*, 1 (2011) 011005-1.
- [6] J. D. Kotlarski, L. J. A. Koster, P. W. M. Blom, M. Lenes, and L. H. Slooff, Combined optical and electrical modeling of polymer:fullerene bulk heterojunction solar cells, *J. Appl. Phys.* 103 (2008) 084502.
- [7] A. H. Fallahpour, A. Gagliardi, F. Santoni, D. Gentilini, A. Zampetti, M. Auf der Maur, and A. Di Carlo Modeling and simulation of energetically disordered organic solar cells, *J. Appl. Phys*, 103(2014) 184502.
- [8] R. Yahyazadeh, Z. Hashempour, Effect of Hyrostatic pressure on optical Absorption coefficient of InGaN/GaN of Multiple Quantum well solar cells, *Journal of optoelectronical Nano structures*,6.2 (2021) 1-22
- [9] L. J. A. Koster, E. C. P. Smits, V. D. Mihailetchi, P. W. M. Blom, Device model for the operation of polymer/fullerene bulk heterojunction solar cells, *Phys. Rev. B*, 72 (2005) 085205.
- [10] J. Nelson, J. J. Kwiatkowski, J. Kirkpatrick, and J. M. Frost, Modeling charge transport in organic photovoltaic materials, Acc. Chem. Res., 42 (2009) 1768.
- [11] F. F. Stelzl, Uli Wurfel, Modeling the influence of doping on the performance of bulk heterojunction organic solar cells: One-dimensional effective semiconductor versus two-dimensional onor/acceptor model, *Phys. Rev. B.*, 86 (2012) 075315.
- [12] B. Ray and M. A. Alam, Random vs regularized OPV: Limits of performance gain of organic bulk heterojunction solar cells by morphology engineering, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 99 (2012) 204.
- [13] M. Pfeiffer , K. Leo, X. Zhou, J.S. Huang, M. Hofmann, A. Werner, J. Blochwitz-Nimoth, Doped organic semiconductors: Physics and application in light emitting diodes, *Organic Elec.* 4 (2003) 89103.
- [14] B. A. Gregg, Transport in Charged Defect-Rich p-Conjugated Polymers, J. Phys. Chem. C, 113 (2009) 5899.
- [15] B. A. Gregg, Charged defects in soft semiconductors and their influence on organic photovoltaics, Soft Matter., 5 (2009) 2985

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

- Organic semiconductor: naphthalenetetracarboxylic dianhydride (NTCDA) doped with bis (ethylenedithio)- tetrathiafulvalene (BEDT-TTF), *J. Appl. Phys.*, 87 (2000) 4340-4343.
- [17] A. Veysel Tunc, A. De Sio, D. Riedel, F. Deschler, E. Da Como, J. Parisi, E. von Hauff, Molecular doping of low-bandgap-polymer: fullerene solar cells: Effects on transport and solar cells, *Org. Electron.*, 13 (2012) 290.
- [18] B. Maennig, M. Pfeiffer, A. Nollau, X. Zhou, K. Leo, P. Simon, Controlled p-type doping of polycrystalline and amorphous organic layers: Self-consistent description of conductivity and fieldeffect mobility by a microscopic percolation model, *Phys. Rev. B*, 64 (2001) 195208.

Investigation of the Effects of Doping and Recombination of Charge Carriers in Polymer Bulk Heterojunction P3HT:PCBM Solar Cells

Ali Mahmoudloo

Department of Physics Education, Farhangian University, P.O. Box 14665-889, Tehran, Iran

Abstract

Properties of charge carriers transport in organic semiconductors depend on the presence and distribution of trap sites. As we know, traps are the result of disorder in polymer molecules and chains caused by physical or chemical impurities in the structure of organic semiconductors. From the point of view of crystal defects that cause changes in energy levels and create an energy gap in the band theory, The transport properties of the charge carriers in these types of systems will also undergo changes, and the most important parameter will be localized or getting trapped in the conduction process. In this paper, we have investigated the effects of basic parameters on the performance of heterojunction organic solar cells as well as charge transfer using different carrier recombination models. In order to simulate these processes, we have studied the basic parameters of bulk organic solar cells with P3HT:PCBM structure by using the self-consistent solution of drift- diffusion equations and Poisson's equation, as well as using different recombination models through the finite element method. We have also investigated the effects of n-type and p-type impurity in the polymers used in a bulk organic solar cell with P3HT:PCBM structure by using the drift-diffusion model and the use of different models presented for the recombination of charge carriers. In most of the presented theoretical models and studies, the active area in organic solar cells is assumed to be intrinsic, while this assumption has some problems for their study and optimization, and the contribution of doping

polymers. The studied structure is shown in figure (3). This structure includes the active area with a P3HT:PCBM bulk structure with a thickness of 100 nm.

Key words: Polymer Solar Cell, drift – diffusion Model, charges Transport, charge Carrier Recombination, geminate Combination