

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه یزد  
دانشکده فیزیک

پایان نامه  
برای دریافت درجه کارشناسی ارشد  
فیزیک حالت جامد

**عنوان :**

مطالعه نظری سلول‌های فتوولتایی پلیمری هیبریدی

استاد راهنما :  
دکتر سید محمدعلی صالحی

استاد مشاور:  
دکتر حسین مختاری

پژوهش و نگارش:  
سکینه حسین زاده

اسفند ۱۳۹۰



## تقدیم به :

تقدیم به " همسر مهربانم " که پیمودن این مسیر سخت ، جز در سایه دلگرمیها و صبوری های وی ممکن نبود .

همچنین تقدیم به دو گل مهربان و با صداقت هستی ، پدر و مادر عزیزم که مرهون عواطف و تلاشهای دلسوزانه شان هستم .



## چکیده

افزایش مصرف انرژی و بالا رفتن قیمت آن در جهان، جستجوی گزینه‌های جدید انرژی را ایجاب می‌کند. انرژی خورشیدی یکی از امیدبخش‌ترین و در دسترس‌ترین منابع است. اخیراً نیم-رساناهای آلی توجه بسیاری را به دلیل کاربردشان در قطعاتی مانند سلول خورشیدی جلب کرده است. نیم‌رساناهای آلی، مزایای گوناگونی از قبیل سنتز کم‌هزینه و ساخت آسان قطعات لایه نازک دارند. یکی از گزینه‌ها، نسل جدیدی از سلول‌های فتوولتائیک بر پایه‌ی نانو ذره و پلیمرهای رسانا است که علاوه بر تولید ارزان، ویژگی‌های جذاب دیگری مثل انعطاف پذیری و قابلیت تنظیم گاف نواری اپتیکی را دارد و همچنین ضریب جذب بسیار بالای پلیمرهای هادی امکان تهیه سلول‌های خورشیدی بسیار نازک ( $100-200\text{nm}$ ) را فراهم می‌کند. در این پایان‌نامه، ابتدا پلیمرها و ویژگی‌های آن‌ها معرفی شده است؛ سپس سلول‌های خورشیدی آلی و معدنی و اساس کار آن‌ها مورد بررسی قرار گرفته است. در فصل ۳ فرآیند انتقال حامل‌ها بررسی شده است. و سپس در فصل ۴ با توجه به دو سازوکار تولید، معادله جریان بر حسب ولتاژ را با در نظر گرفتن نسبت ثابت دی-الکتریک و تحرک در لایه معدنی به آلی، به دست آورده و سپس غلظت الکترون در هر لایه را به دست آورده‌ایم. در فصل ۵ منحنی جریان بر حسب ولتاژ بر اساس دو رویداد تولید بررسی شده است و با نمونه نظری دیگر مقایسه شده است و با توجه به این دو رویداد بازده را برای دو سلول خورشیدی به دست آورده‌ایم. مشخص می‌شود در هر دو سلول با افزایش تحرک و ثابت دی-الکتریک بازده کاهش می‌یابد. سپس نمودار غلظت الکترون را بر حسب فاصله در لایه معدنی بررسی کرده و جریان پخش و سوق و اختلاف آن‌ها را بر حسب فاصله در این لایه بررسی شده- است. مشخص می‌شود که با افزایش ولتاژ اختلاف جریان پخش و سوق زیاد می‌شود و عمده جریان سلول مربوط به جریان پخش می‌باشد.





### فصل اول - معرفی سلول های خورشیدی آلی

۱-۱	مقدمه	۲
۲-۱	تشعشع خورشیدی	۲
۳-۱	پلیمر	۴
۱-۳-۱	رده بندی پلیمرها	۴
۱-۱-۳-۱	تقسیم بندی بر اساس منومر	۵
۲-۱-۳-۱	تقسیم بندی بر اساس آرایش فضایی	۵
۴-۱	فیزیک پلیمرها	۵
۱-۴-۱	انواع اوربیتالها	۶
۲-۴-۱	پلیمر های مزدوج و غیر مزدوج	۹
۵-۱	گاف انرژی	۱۱
۶-۱	سالیتونها	۱۲
۱-۶-۱	سالیتون خنثی	۱۳
۲-۶-۱	سالیتون باردار مثبت	۱۳
۳-۶-۱	سالیتون باردار منفی	۱۴
۷-۱	پلارون و بای پلارون	۱۴
۸-۱	ساختار نیم رسانای آلی	۱۵
۹-۱	ساخت سلول خورشیدی آلی	۱۶
۱۰-۱	ساختار سلول خورشیدی آلی	۱۷
۱-۱۰-۱	اساس کار سلول خورشیدی آلی	۱۸
۱-۱-۱۰-۱	جذب فوتون	۱۸
۲-۱-۱۰-۱	پخش اکسایتون	۲۱
۳-۱-۱۰-۱	تفکیک اکسایتون و تولید بار آزاد	۲۳
۴-۱-۱۰-۱	ترابرد بار	۲۵
۵-۱-۱۰-۱	انباشت بار	۲۸
۱۱-۱	مشخصه های فتوولتائیک	۲۹
ب		
۱۲-۱	مدار معادل	۳۱
۱۳-۱	سلول های خورشیدی آلی	۳۲

### فصل دوم - سلولهای خورشیدی هیبریدی

۱-۲	مقدمه	۳۸
-----	-------	----

## فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۳۹	۲-۲ ساز و کار سلول خورشیدی پیوندگاه p-n معدنی
۴۱	۳-۲ مفهوم پیوندگاه ناهمگن کپه‌ای
۴۳	۴-۲ تفاوت نیم رسانا های آلی و معدنی
۴۵	۵-۲ پلیمرهای مورد استفاده در سلول خورشیدی
۴۷	۶-۲ نیم‌رساناهای نانوبلوری
۴۷	۷-۲ سلول‌های خورشیدی هیبریدی
۴۹	۸-۲ روش های تهیه سلولهای خورشیدی هیبریدی
۵۰	۸-۲-۱-۸-۲ تهیه ترکیب نیم رسانای نانوبلوری/پلیمر
۵۱	۸-۲-۱-۸-۲ اثر هندسه نانوذره در بازده سلول فتو ولتاییک
۵۱	۸-۲-۱-۸-۲ بهبود بازده فتو ولتاییک بوسیله باز پخت حرارتی
۵۲	۸-۲-۲ سیستم های هیبریدی پلیمر/ نیم رسانای نانو منفذ
۵۳	۸-۲-۳ شکل عمودی سیستم هیبریدی
<b>فصل سوم - پدیده های انتقال حامل</b>	
۵۶	۳-۱ مقدمه
۵۶	۳-۲ چگالی حالات
۵۷	۳-۳ تراکم حامل ذاتی
۶۰	۳-۴ سوق حامل
۶۱	۳-۵ پخش حامل
۶۱	۳-۵-۱ فرایند پخش
۶۳	۳-۵-۲ رابطه انیشتین
۶۴	۳-۵-۳ معادلات چگالی جریان
<b>فصل چهارم - اثر پارامترهای مواد مربوط به ترابرد بر روی مشخصات جریان ولتاژ در سلول‌های خورشیدی هیبریدی</b>	
۶۶	۴-۱ مقدمه
۶۶	۴-۲ مدل قطعه
۶۹	۴-۳ نظریه
۷۶	۴-۴ محاسبه غلظت الکترون
<b>فصل پنجم - نتایج و شرح نتایج</b>	
۸۰	۵-۱ مقدمه
۸۰	۵-۲ مکانیسم تولید

## فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۹۲.....	۵-۲-۱ مقایسه با ماده دهنده دیگر.....
۹۴.....	۵-۲-۲ تقریب ولتاژ مدار باز.....
۹۵.....	۵-۳ نتیجه گیری.....
۹۶.....	۵-۴ پیشنهادات.....
۹۷.....	منابع و مآخذ.....

# فهرست اشکال

عنوان

صفحه

- شکل ۱-۱: منحنی درخشندگی طیفی خورشیدی ..... ۳
- شکل ۲-۱: ترکیب امواج به صورت الف) هم‌فاز ب) ناهم‌فاز ..... ۶
- شکل ۳-۱: نمودار ترازهای انرژی اوربیتال‌های مولکولی سیگما ..... ۸
- شکل ۴-۱: نحوه‌ی تشکیل اوربیتال‌های مولکولی از اوربیتال‌های اتمی  $p$  ..... ۸
- شکل ۵-۱: نمودار ترازهای انرژی مربوط به تشکیل اوربیتال‌های مولکولی ..... ۹
- شکل ۶-۱: نمایش اوربیتال‌های  $sp_2$  و  $sp_3$  ..... ۱۰
- شکل ۷-۱: ساختار اوربیتالی هیبریداسیون  $sp_2$  اتم کربن ..... ۱۰
- شکل ۸-۱: ساختار مولکولی بنزن و پلی‌پارا‌فینیلین ..... ۱۱
- شکل ۹-۱: نمایش نوارها در مواد معدنی و اوربیتال‌ها در مواد آلی ..... ۱۲
- شکل ۱۰-۱: مراحل تشکیل سالیتون و آنتی‌سالیتون و حرکت آنتی‌سالیتون در طول زنجیره ..... ۱۳
- شکل ۱۱-۱: تولید پلارون مثبت ..... ۱۴
- شکل ۱۲-۱: تولید بای‌پلارون مثبت ..... ۱۴
- شکل ۱۳-۱: مثال‌هایی از نیم‌رساناهای مورد استفاده در سلول‌های خورشیدی ..... ۱۵
- شکل ۱۴-۱: ساختار شیمیایی چند ریزمولکول ..... ۱۷
- شکل ۱۵-۱: طیف جذبی چند ماده آلی در مقایسه با طیف تابش خورشیدی ..... ۲۰
- شکل ۱۶-۱: نمودار چگالی اکسایتون ..... ۲۳
- شکل ۱۷-۱: انتقال بار و تفکیک اکسایتون ..... ۲۴
- شکل ۱۸-۱: انتقال انرژی فوارستر ..... ۲۴
- شکل ۱۹-۱: تصویری از پیوندگاه نا همگن کپه‌ای ..... ۲۵
- شکل ۲۰-۱: ساختار شیمیایی  $PSS : PEDOT$  ..... ۲۷
- شکل ۲۱-۱: تصویری از اتصالات اهمی و غیر اهمی در حالت قبل و بعد از اتصال ..... ۲۸
- شکل ۲۲-۱: نمایش اساس کار سلول خورشیدی آلی ..... ۲۸
- شکل ۲۳-۱: منحنی مشخصه دیود ..... ۳۰
- شکل ۲۴-۱: مدار معادل ..... ۳۱
- شکل ۲۵-۱: ساختار شیمیایی برخی پلیمرهای مزدوج مورد استفاده در سلول خورشیدی ..... ۳۳
- شکل ۱-۲: نمایش ساز و کار سلول خورشیدی معدنی ..... ۴۰
- شکل ۲-۲: نمایش طرح‌گونه سلول خورشیدی پیوندگاه  $p-n$  ..... ۴۱
- شکل ۳-۲: طرحی از سلول خورشیدی الکتروود/پلیمر/نیم‌رسانا/الکتروود ..... ۴۳
- شکل ۴-۲: وابستگی بازده به گاف نواری نیم‌رسانا ..... ۴۳
- شکل ۵-۲: ساختار شیمیایی چند پلیمر مورد استفاده در سلول خورشیدی هیبریدی ..... ۴۶

## فهرست اشکال و نمودارها

صفحه	عنوان
۴۹.....	شکل ۲-۶: شکلی از سلول خورشیدی نانوذره/پلیمر.....
۵۲.....	شکل ۲-۷: اثر افزایش طول نانورود CdSe بر بازده کوانتوم خارجی در سلول خورشیدی CdSe/P3HT.....
۵۴.....	شکل ۲-۸: طرحی از سیستم هیبریدی پلیمر/نیم رسانا با نانو ساختار های نیم رسانای تنظیم شده.....
۵۷.....	شکل ۳-۱: قسمتی از کره در فضای اندازه حرکت بلوری.....
۶۱.....	شکل ۳-۲: هدایت جریان در یک میله نیم رسانا با ناخالصی یکنواخت که دارای طول L و سطح مقطعی با مساحت A می باشد.....
۶۲.....	شکل ۳-۳: تراکم الکترونی بر حسب فاصله; آپویش میانگین آزاد است. راستاهای شار الکترون و جریان با پیکان مشخص شده است.....
۶۷.....	شکل ۴-۱: طرح کلی قطعه که شامل ماده آلی و معدنی با فصل مشترک مسطح می باشد.....
۶۷.....	شکل ۴-۲: طرح قطعه ای که سطح ترابری حفره هم سطح می باشد.....
۶۷.....	شکل ۴-۳: طرح قطعه ای که سطح ترابری الکترون هم سطح می باشد.....
۶۸.....	شکل ۴-۴: طرح قطعه ای که اختلاف سطح ترابری الکترون و حفره برابر می باشد.....
۸۱.....	شکل ۵-۱: نمودار جریان بر اساس ولتاژ در حد بالا برای نسبت ثابت دی الکترونیک ۱۰ و نسبت تحرک ۱۰۰.....
۸۲.....	شکل ۵-۲: نمودار جریان بر اساس ولتاژ در حد بالا بر اساس تغییر نسبت ثابت دی الکترونیک در دو لایه.....
۸۳.....	شکل ۵-۳: نمودار جریان بر اساس ولتاژ در حد بالا بر اساس تغییر نسبت ثابت دی الکترونیک.....
۸۸.....	شکل ۵-۸: نمودار جریان بر حسب ولتاژ در حد پایین برای نسبت ثابت دی الکترونیک ۱۰.....
۸۴.....	نمودار ۵-۴: نمودار جریان بر اساس ولتاژ در حد بالا بر اساس تغییر نسبت تحرک (۱/۱) در دو لایه.....
۸۴.....	نمودار ۵-۵: نمودار جریان بر اساس ولتاژ در حد بالا بر اساس تغییر نسبت تحرک (۱۰/۱) در دو لایه.....
۸۵.....	نمودار ۵-۶: نمودار جریان بر اساس ولتاژ در حد بالا بر اساس تغییر نسبت تحرک (۱۰۰۰۰/۱) در دو لایه.....
۸۵.....	نمودار ۵-۷: نمودار جریان بر اساس ولتاژ در حد بالا بر اساس تغییر نسبت تحرک در نمونه نظری [۱۰۱].....
۸۷.....	نمودار ۵-۹: نمودار جریان بر اساس ولتاژ در حد پایین بر اساس نسبت ثابت دی الکترونیک متفاوت.....
۸۸.....	نمودار ۵-۱۰: نمودار جریان بر اساس ولتاژ در حد پایین بر اساس نسبت ثابت دی الکترونیک متفاوت در نمونه نظری.....
۹۰.....	نمودار ۵-۱۱: نمودار غلظت الکترون در لایه معدنی بر حسب فاصله در ولتاژ های متفاوت.....
۹۰.....	نمودار ۵-۱۲: نمودار جریان سوق و پخش بر حسب فاصله در ولتاژ ۵، ۰ ولت.....
۹۱.....	نمودار ۵-۱۳: نمودار جریان سوق و پخش بر حسب فاصله در ولتاژ ۱/۳ ولت.....
۹۱.....	نمودار ۵-۱۴: نمودار اختلاف جریان سوق و پخش بر حسب فاصله در ولتاژ های متفاوت.....

- نمودار ۵-۱۵: نمودار جریان سوق و پخش بر حسب فاصله در ولتاژ ۰/۵ ولت با نسبت ثابت دی-الکتریک ۱۰۰۰..... ۹۲
- نمودار ۵-۱۶: نمودار جریان بر حسب ولتاژ برای سلول خورشیدی P3HT/CuInS<sub>2</sub>..... ۹۳
- نمودار ۵-۱۷: نمودار جریان بر حسب ولتاژ برای سلول خورشیدی P3HT/CuInS<sub>2</sub> در نمونه نظری..... ۹۳

# فهرست جداول

صفحه

عنوان

---

جدول ۱-۱: برخی نتایج سلول خورشیدی پلیمر- پلیمر دولایه	۳۳
جدول ۱-۲: برخی نتایج ترکیبات پلیمر و مشتقات فولرن	۳۵
جدول ۱-۲: خواص برخی از نیم‌رساناها	۴۴
جدول ۲-۲ پارامترهایی از پلیمرهای هادی مورد استفاده در سلولهای خورشیدی	۴۶
جدول ۱-۵: جریان مدار کوتاه و ولتاژ مدار باز و عامل انباشت و بازده برای سلول خورشیدی هیبریدی در مکانیسم حد بالا مطابق با CASE1 برای نسبت ثابت دی‌الکتریک در دو لایه	۸۶
جدول ۲-۵: جریان مدار کوتاه و ولتاژ مدار باز و عامل انباشت و بازده برای سلول خورشیدی هیبریدی در مکانیسم حد بالا مطابق با CASE1 برای نسبت تحرک در دو لایه	۸۶
جدول ۳-۵: جریان مدار کوتاه و ولتاژ مدار باز و عامل انباشت و بازده برای سلول خورشیدی هیبریدی در مکانیسم حد پایین مطابق با CASE1 برای نسبت ثابت دی‌الکتریک در دو لایه	۸۹
جدول ۴-۵: جریان مدار کوتاه و ولتاژ مدار باز و عامل انباشت و بازده برای سلول خورشیدی هیبریدی در مکانیسم حد پایین مطابق با CASE1 برای نسبت ثابت تحرک در دو لایه	۸۹
جدول ۵-۵: مقدار ولتاژ مدار باز در سلول های هیبریدی پلیمر/CuInS <sub>2</sub>	۹۴





# فصل اول

معرفی سلول‌های خورشیدی آلی

## ۱-۱ مقدمه

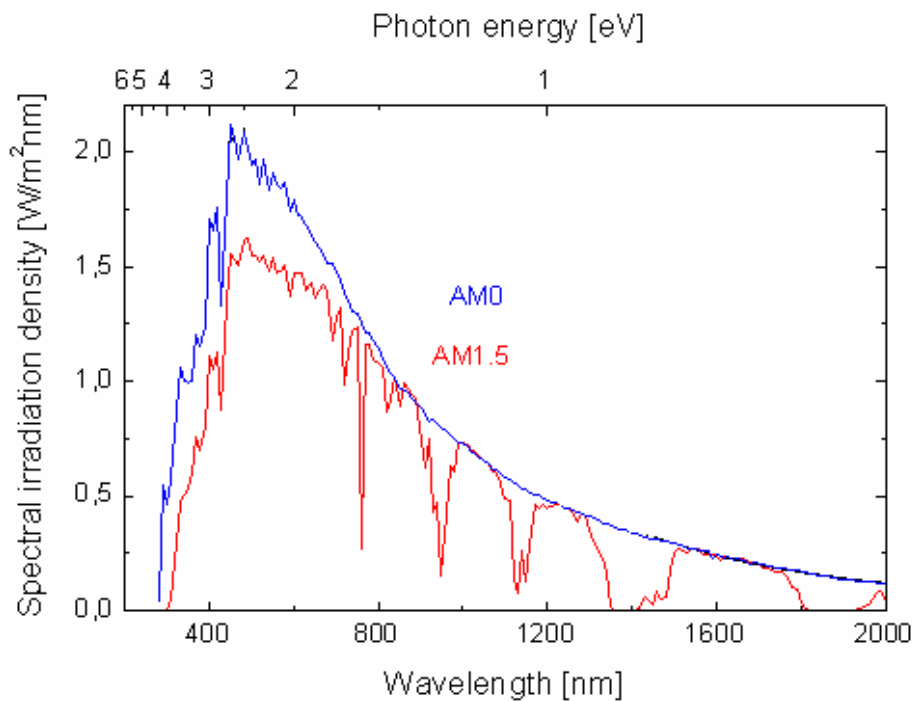
نیاز روزافزون بشر به منابع انرژی و محدود بودن سوخت‌های فسیلی، جامعه‌ی علمی را بر آن داشت تا به منابع جدید انرژی دست یابد. یکی از منابع بی‌کران انرژی، نور خورشید است. سلول خورشیدی جانشین مهمی برای جایگزینی چشمه‌ی انرژی زمینی است. زیرا می‌تواند با بازده تبدیل خوب، نور خورشید را مستقیماً به الکتریسیته تبدیل کند و آلوده کننده هم نیست. در حال حاضر بیش از ۸۵٪ سلول‌های خورشیدی مورد استفاده در جهان از نوع سلول‌های سیلیکون بلوری است [۳]. هرچند فرایندهای ساخت آن بسیار مشکل و پرهزینه است.

امروزه از نوع جدیدی از مواد به نام نیم‌رساناهای آلی استفاده می‌شود که در مقایسه با نیم‌رساناهای معدنی دارای مزایای فراوانی هستند. سلول‌های خورشیدی بر پایه‌ی نیم‌رساناهای آلی، توجه بسیاری را به خود جلب کرده است. ضخامت لایه‌ی فعال سلول‌های خورشیدی آلی نوعاً تنها ۱۰۰ نانومتر است که در حدود هزار برابر نازک‌تر از سلول‌های سیلیکون بلوری و ده برابر نازک‌تر از سلول‌های لایه نازک معدنی است. مصرف پایین ماده و پردازش آسان، پتانسیل عظیمی برای ساخت سلول‌های خورشیدی آلی در سطح بزرگ و با هزینه‌ی پایین ایجاد می‌کند. هرچند این سلول‌ها برای رقابت با نوع معدنی‌شان، باید به بازده دو تا سه برابر بازده کنونی دست یابند [۵].

## ۱-۲ تشعشع خورشیدی

انرژی تشعشعی خروجی از خورشید از برهم‌کنش گدازان هسته‌ای به دست می‌آید. در هر ثانیه حدود  $6 \times 10^{11} \text{ kg}$  هیدروژن، با کاهش جرم خالص  $4 \times 10^3 \text{ kg}$  به هلیوم تبدیل می‌شود، که از طریق رابطه انیشتین ( $E=mc^2$ ) به  $3/6 \times 10^{20} \text{ J}$  انرژی تبدیل می‌شود. این انرژی اصولاً به صورت تشعشع الکترومغناطیسی در ناحیه‌ی ماورای بنفش تا مادون قرمز گسیل می‌شود. اینک جرم کل خورشید حدود  $2 \times 10^{30} \text{ kg}$  است و عمر پایدار معقولی، بیش از ۱۰ میلیارد ( $10^{10}$ ) سال، با انرژی تابشی خروجی تقریباً ثابت، برای آن تصور می‌رود [۱].

شدت تشعشع خورشیدی در فضای آزاد در فاصله‌ی متوسط زمین از خورشید، به صورت ثابت خورشیدی تعریف می‌شود و دارای مقدار  $1353 \text{ w/m}^2$  است. درجه‌ی تأثیر جو بر نور خورشید رسیده به سطح زمین، توسط جرم هوا<sup>۱</sup> تعیین می‌شود. شکل ۱-۱ درخشندگی طیف خورشیدی (توان در واحد سطح در واحد طول موج) را نشان می‌دهد. منحنی بالایی که طیف خورشیدی خارج از جو زمین را نشان می‌دهد، شرط جرم هوای صفر (AM0) است. این طیف مربوط به کاربردهای ماهواره‌ای می‌باشد. طیف جرم هوای یک و نیم (AM1.5) نور خورشید را در سطح زمین وقتی که خورشید در زاویه‌ی ۳۷ درجه از سطح قرار دارد، نشان می‌دهد. رقیق شدن جوی نور خورشید، که عمدتاً مربوط به جذب ماورای بنفش در ازن، جذب مادون قرمز در بخار آب، پخش توسط گرد و غبار هوایی و پخش توسط ذرات است، سبب اختلاف بین AM0 و AM1.5 است.



شکل ۱-۱: منحنی درخشندگی طیفی خورشیدی [۶]

<sup>۱</sup>Air mass-

## ۱-۳- پلیمر

پلیمر از کلمات یونانی پلی به معنای بسیار و مر به معنای پاره تشکیل شده است. پلیمرها، مولکول‌هایی هستند که از به هم پیوستن عناصر کوچکتر به نام مونومر<sup>۱</sup> ساخته می‌شوند. اغلب پلیمرها، شامل ترکیبات کوالانس کربن می‌باشند. عناصر دیگر موجود در پلیمرها عبارتند از: کلر، هیدروژن، فلور، اکسیژن، فسفر و گوگرد که همگی پیوند کوالانسی با کربن دارند که این پیوندها، دارای قطبیت‌های متفاوت است [۷].

پیوندهای شیمیایی، بسته به میزان درگیری الکترون‌ها در پیوند به دو نوع اولیه و ثانویه تقسیم می‌شوند. در تشکیل پیوندهای اولیه الکترون‌های ظرفیت دخالت دارند که باعث کاهش انرژی پتانسیل می‌شود بنابراین این پیوندها نسبتاً قوی هستند. در پیوندهای ثانویه الکترون‌های ظرفیت دخیل نیستند بنابراین پیوند آن‌ها ضعیف است. پیوندهای یونی، کووالان و فلزی، زیر-مجموعه‌های پیوندهای اولیه هستند.

پیوند کووالانسی، پیوند غالب موجود در پلیمرهاست. این پیوند بسته به تعداد زوج الکترون‌های خود می‌تواند یگانه، دوگانه و یا سه‌گانه باشد [۲].

## ۱-۳-۱ رده بندی پلیمرها

پلیمرها را می‌توان به روش‌های مختلف تقسیم‌بندی کرد، که مهمترین آن‌ها تقسیم‌بندی بر اساس نوع مونومر و نحوه آرایش فضایی مولکول‌ها است.

---

<sup>۱</sup> monomer