



**ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΔΗΜΟΚΡΑΤΙΑ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΥΛΙΚΩΝ
ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ
«ΠΡΟΗΓΜΕΝΑ ΥΛΙΚΑ»**

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

Θεοδώρα Άννα

**ΟΠΤΟΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΟΡΓΑΝΙΚΩΝ
ΦΩΤΟΒΟΛΤΑΙΚΩΝ ΕΝΙΣΧΥΜΕΝΩΝ ΜΕ ΠΛΑΣΜΟΝΙΚΑ
ΝΑΝΟΣΩΜΑΤΙΔΙΑ**

ΙΩΑΝΝΙΝΑ, 2019

Η παρούσα Μεταπτυχιακή Διατριβή εκπονήθηκε στο πλαίσιο των σπουδών για την απόκτηση του Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης στην εξειδίκευση:

Υπολογιστική Επιστήμη των Υλικών

που απονέμει το Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.

Εγκρίθηκε την 12/09/2019 από την εξεταστική επιτροπή:

- 1. Ελευθέριος Λοιδωρικής**, Καθηγητής του ΤΜΕΥ της Πολυτεχνικής Σχολής του Παν/μίου Ιωαννίνων, **Επιβλέπων**.
- 2. Χριστίνα Λέκκα**, Αναπληρώτρια Καθηγήτρια του ΤΜΕΥ της Πολυτεχνικής Σχολής του Παν/μίου Ιωαννίνων.
- 3. Απόστολος Αυγερόπουλος**, Καθηγητής του ΤΜΕΥ της Πολυτεχνικής Σχολής του Παν/μίου Ιωαννίνων.

ΥΠΕΥΘΥΝΗ ΔΗΛΩΣΗ

"Δηλώνω υπεύθυνα ότι η παρούσα διατριβή εκπονήθηκε κάτω από τους διεθνείς ηθικούς και ακαδημαϊκούς κανόνες δεοντολογίας και προστασίας της πνευματικής ιδιοκτησίας. Σύμφωνα με τους κανόνες αυτούς, δεν έχω προβεί σε ιδιοποίηση ξένου επιστημονικού έργου και έχω πλήρως αναφέρει τις πηγές που χρησιμοποίησα στην εργασία αυτή."

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Η παρούσα μεταπτυχιακή διατριβή με τίτλο «Οπτοηλεκτρονική μοντελοποίηση οργανικών φωτοβολταϊκών ενισχυμένων με πλασμονικά νανοσωματίδια» εκπονήθηκε στα πλαίσια του μεταπτυχιακού προγράμματος «Προηγμένα Υλικά» στο Εργαστήριο Υπολογιστικής Επιστήμης των Υλικών του Τμήματος Μηχανικών Επιστήμης Υλικών της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.

Σε αυτό το σημείο θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή κ. Ελευθέριο Λοιδωρίκη για την ανάθεση ενός σύγχρονου και ταυτόχρονα πολύ ενδιαφέροντος θέματος, την εμπιστοσύνη, την μετάδοση των γνώσεων και την καθοδήγηση του καθ' όλη τη διάρκεια της διπλωματικής εργασίας.

Επίσης ευχαριστώ τον υποψήφιο διδάκτορα κ. Ιωάννη Βαγγελίδη για την άγογη και δημιουργική συνεργασία, για τον χρόνο που μου αφιέρωσε όλο το διάστημα της διπλωματικής εργασίας καθώς και για την πολύτιμη βοήθειά και συμπαράσταση στη συγγραφή και παρουσίαση της εργασίας.

Δεν θα μπορούσα να παραλείψω τους γονείς μου Διονύση και Ελένη, που χωρίς την αμέριστη υλική και ηθική υποστήριξη τους σε όλη τη διάρκεια των προπτυχιακών και μεταπτυχιακών μου σπουδών, θα ήταν ανέφικτη η εκπόνηση της παρούσας εργασίας. Ευχαριστώ επίσης τα αδέρφια μου και τους φίλους μου.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Οι υψηλότερες αποδόσεις οργανικών ηλιακών κυττάρων φτάνουν το 11-12% και είναι σημαντικά χαμηλότερες από αυτές των ανόργανων ηλιακών κυττάρων. Ωστόσο βελτιώνονται συνεχώς. Επιπλέον βελτιώνεται και η σταθερότητά τους με ανάπτυξη νέων οργανικών υλικών, ηλεκτροδίων, βοηθητικών στρωμάτων καθώς και με νέες μεθόδους επεξεργασίας. Οι χαμηλές αποδόσεις των οργανικών ηλιακών κυττάρων αποδίδονται στις χαμηλές ευκινήσιες αγωγιμότητας των φορέων στα οργανικά υλικά σε συνδυασμό με υψηλούς ρυθμούς επανασυνδυασμού φορέων. Οι δύο αυτοί παράγοντες περιορίζουν σημαντικά το πάχος του φωτοενεργού στρώματος και συνεπώς το ποσό της απορροφημένης ακτινοβολίας. Μια λύση σε αυτό το πρόβλημα μπορούν να δώσουν τεχνικές παγίδευσης φωτός στο φωτοενεργό στρώμα χωρίς να απαιτείται αύξηση του πάχους του. Τέτοιες τεχνικές είναι για παράδειγμα η χρήση φωτονικών δομών, ή μεταλλικών νανοδομών. Από τις προηγούμενες τεχνικές, η πιο ευρέως διαδεδομένη είναι η χρήση μεταλλικών νανοδομών, που εκμεταλλεύεται τα πλασμαονικά φαινόμενα για αύξηση της απόδοσης.

Στην παρούσα εργασία γίνεται πλήρης οπτοηλεκτρονική μελέτη της συμπεριφοράς δύο διαφορετικών μεγεθών νανοσωματιδίων σε δύο διαμορφώσεις το καθένα μέσα στο φωτοενεργό στρώμα, κρατώντας σταθερό το πάχος του ενεργού στρώματος. Σκοπός είναι η μελέτη της επίδρασης της ευκινήσιες των φορέων (ηλεκτρονίων και οπών, σε ένα εύρος από 10^{-7} έως 10^{-10} m^2/Vs για τον καθένα) στην πλασμαονική ενίσχυση που προκαλεί η κάθε πλασμαονική διαμόρφωση. Τα αποτελέσματα συγκρίνονται κάθε φορά με τη διάταξη χωρίς νανοσωματίδια. Βρίσκουμε ότι για διαφορετικές τιμές των δύο ευκινήσιων είναι διαφορετική η πλασμαονική διαμόρφωση που δίνει την μέγιστη ενίσχυση στην απόδοση. Γενικά, δεν υπάρχει συνδυασμός τιμών ευκινήσιων για τον οποίο να μην μπορούμε να βρούμε κατάλληλη πλασμαονική διαμόρφωση. Στον αντίποδα, υπάρχουν περιπτώσεις που η λάθος πλασμαονική διαμόρφωση μπορεί να οδηγήσει σε σοβαρές απώλειες απόδοσης. Στις περισσότερες περιπτώσεις τις μεγαλύτερες απώλειες προκαλεί η περίπτωση των μικρών νανοσωματιδίων κοντά στην άνοδο, το οποίο έρχεται σε συμφωνία με τα οπτικά αποτελέσματα που είχαν μελετηθεί ήδη.

ABSTRACT

The maximum organic solar cell efficiencies are about 11-12%. Meanwhile the inorganic solar cells have efficiencies of 25%. However the efficiency of organic solar cells is constantly increasing, as well as their stability, through improvements in materials (active polymers, electrodes' materials etc.) and in their production processes. The low OSCs efficiencies come from the low charge carrier mobilities in the organic semiconductors and high recombination rates. These two factors limit the thickness of the active layers and therefore the absorption. In order to increase the absorption within the active layer, we use a variety of light trapping mechanisms like the use of photonic structures, or metallic nanostructures. The most widespread technique is the usage of plasmonic nanostructures, which takes advantage of the plasmonic phenomena in order to enhance the efficiency.

In this work we perform a full optoelectronic study of the behavior of two different nanoparticle sizes under two configurations each inside the active layer, keeping the active layer thickness fixed. The target is to study the effect of carrier mobility (electrons and holes, in the range from 10^{-7} to 10^{-10} m^2/Vs for each carrier) on the plasmonic enhancement each plasmonic configuration causes. The results are always compared to a device without nanoparticles. We find that for different mobility values there is a different plasmonic configuration that yields the highest performance enhancement. In general, there is no mobility value combination for which we cannot find a proper plasmonic configuration. On the flip side, there are cases where the wrong plasmonic configuration can lead to serious performance losses. In most cases the largest losses are caused by small nanoparticles close to the anode side, a fact that is in agreement with recent optical simulations.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

| | |
|---|-----------|
| ΠΙΝΑΚΑΣ ΣΥΜΒΟΛΩΝ..... | ix |
| ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΕΙΚΟΝΩΝ | xi |
| ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΠΙΝΑΚΩΝ..... | xxiii |
| ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ | 1 |
| 1.1 ΙΣΤΟΡΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ..... | 1 |
| 1.2 ΕΞΕΛΙΞΗ ΤΗΣ ΑΠΟΔΟΣΗΣ ΦΩΤΟΒΟΛΤΑΪΚΩΝ..... | 2 |
| 1.3 ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΑ ΟΡΓΑΝΙΚΑ ΦΩΤΟΒΟΛΤΑΪΚΑ | 3 |
| 1.4 ΑΡΧΗ ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΑΣ..... | 5 |
| 1.5 ΑΡΧΙΤΕΚΤΟΝΙΚΕΣ ΕΝΕΡΓΟΥ ΣΤΡΩΜΑΤΟΣ..... | 6 |
| 1.5.1 Απλής επαφής (single layer) | 6 |
| 1.5.2 Διπλής (bilayer) ή επίπεδης ετεροεπαφής (planar donor-acceptor heterojunction) | 6 |
| 1.5.3 Bulk ετεροεπαφή (BHJ- bulk heterojunction) | 6 |
| 1.6 ΑΡΧΙΤΕΚΤΟΝΙΚΗ ΟΡΓΑΝΙΚΩΝ ΦΩΤΟΒΟΛΤΑΪΚΩΝ | 8 |
| 1.6.1 Υλικά και ιδιότητες στρωμάτων | 8 |
| 1.6.2 Επιλογή υλικών..... | 10 |
| 1.6.2 Σταθερότητα οργανικών φωτοβολταϊκών | 11 |
| 1.7 ΜΗΧΑΝΙΣΜΟΙ ΕΠΑΝΑΣΥΝΔΥΑΣΜΟΥ | 13 |
| ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2 ΠΛΑΣΜΟΝΙΚΗ ΕΝΙΣΧΥΣΗ ΟΡΓΑΝΙΚΩΝ ΦΩΤΟΒΟΛΤΑΪΚΩΝ | 14 |
| 2.1 ΠΛΑΣΜΟΝΙΚΟΣ ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΟΣ..... | 14 |
| 2.2 ΠΛΑΣΜΟΝΙΚΕΣ ΝΑΝΟΔΟΜΕΣ ΣΤΑ ΟΡΓΑΝΙΚΑ ΦΩΤΟΒΟΛΤΑΪΚΑ | 18 |
| 2.2.1 Σκέδαση | 18 |
| 2.2.2 Κοντινά πεδία | 19 |
| 2.3 ΕΝΣΩΜΑΤΩΣΗ ΝΑΝΟΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΣΤΟ ΕΝΕΡΓΟ | 20 |
| ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3 ΗΛΕΚΤΡΙΚΑ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ | 21 |
| 3.1 Η ΤΑΣΗ ΑΝΟΙΧΤΟΥ ΚΥΚΛΩΜΑΤΟΣ | 21 |
| 3.1.1 Προέλευση της V_{oc} | 21 |

| | |
|--|------------|
| 3.1.2 Παράγοντες που επηρεάζουν την V_{oc} | 22 |
| 3.2 Ο ΠΑΡΑΓΟΝΤΑΣ ΠΛΗΡΩΣΗΣ..... | 26 |
| 3.2.1 Υπολογισμός του FF..... | 27 |
| 3.2.2 Παράγοντες που επηρεάζουν τον παράγοντα πλήρωσης. | 28 |
| ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4 ΟΠΤΙΚΟ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ | 29 |
| 4.1 Η ΜΕΘΟΔΟΣ FDTD..... | 29 |
| 4.1.1 Εισαγωγή των υλικών | 30 |
| 4.1.2 Υπολογισμός της πυκνότητας ρεύματος | 33 |
| 4.2 ΤΟ ΗΛΕΚΤΡΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ | 35 |
| 4.2.1 Εσωτερικό δυναμικό | 35 |
| 4.2.2 Μεταφορά των φορέων | 37 |
| 4.2.3 Παγίδευση των φορέων | 40 |
| ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5 ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΗΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑΣ | |
| ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗΣ | 43 |
| 5.1 ΔΙΑΤΑΞΕΙΣ ΟΡΓΑΝΙΚΩΝ ΦΩΤΟΒΟΛΤΑΙΚΩΝ | 42 |
| 5.2 ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΟΠΤΙΚΩΝ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΣΤΟ ΗΛΕΚΤΡΙΚΟ | |
| ΜΟΝΤΕΛΟ..... | 46 |
| ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ | 49 |
| ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ | 64 |
| ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 1: ΚΑΜΠΥΛΕΣ J-V ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΩΝ ΖΕΥΓΩΝ | |
| ΕΥΚΙΝΗΣΙΑΣ ΤΩΝ ΦΟΡΕΩΝ ΑΓΩΓΙΜΟΤΗΤΑΣ | 65 |
| ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 2: ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΤΗΣ ΕΥΚΙΝΗΣΙΑΣ ΤΩΝ ΦΟΡΕΩΝ ΣΤΙΣ | |
| ΗΛΕΚΤΡΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΤΟΥ ΚΥΤΤΑΡΟΥ | 69 |
| ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 3: ΚΑΤΑΝΟΜΕΣ ΗΛΕΚΤΡΙΚΟΥ ΠΕΔΙΟΥ, ΣΥΝΟΛΙΚΟΥ | |
| ΦΟΡΤΙΟΥ, ΡΥΘΜΩΝ ΕΠΑΝΑΣΥΝΔΙΑΣΜΩΝ, ΠΑΓΙΔΕΥΜΕΝΩΝ | |
| ΦΟΡΕΩΝ ΣΤΟ ΕΣΩΤΕΡΙΚΟ ΤΟΥ ΕΝΕΡΓΟΥ ΣΤΡΩΜΑΤΟΣ | 79 |
| ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 4: ΠΙΝΑΚΕΣ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΗΛΕΚΤΡΙΚΩΝ | |
| ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΩΝ | 103 |
| ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ | 108 |

ΠΙΝΑΚΑΣ ΣΥΜΒΟΛΩΝ

| Σύμβολο | Ερμηνεία |
|-----------------------|---|
| E_b | Ενέργεια σύνδεσης εξιτονίου |
| e | Φορτίο ηλεκτρονίου |
| E | Ηλεκτρικό πεδίο |
| m_e^* | Ενεργός μάζα ηλεκτρονίου |
| ϵ_d | Διηλεκτρική σταθερά διηλεκτρικού υλικού |
| R | Ακτίνα σφαίρας |
| ϵ_m | Διηλεκτρική σταθερά μετάλλου |
| ϵ_1 | Πραγματικό μέρος διηλεκτρικής συνάρτησης μετάλλου |
| ϵ_2 | Φανταστικό μέρος διηλεκτρικής συνάρτησης μετάλλου |
| ϵ_0 | Ηλεκτρική επιτρεπτότητα του κενού |
| ϵ_r | Σχετική ηλεκτρική επιτρεπτότητα ημιαγωγού |
| Φ | Δυναμικό |
| r, θ, φ | Ακτίνα, πολική γωνία, αζιμούθιο |
| ρ | Πόλωση |
| N | Αριθμός σφαιρών |
| V | Όγκος σφαίρας |
| λ | Μήκος κύματος |
| q | Στοιχειώδες φορτίο |
| E_{Fn} | Ψευδο-επίπεδο Fermi ηλεκτρονίων |
| E_{Fp} | Ψευδο-επίπεδο Fermi οπών |
| R_{sh} | Αντίσταση σε σειρά |
| R_s | Παράλληλη αντίσταση |
| J | Πυκνότητα ρεύματος |
| J_{SC} | Πυκνότητα ρεύματος βραχυκυκλώσεως |
| J_0 | Πυκνότητα ρεύματος κόρου |
| J_{ph} | Πυκνότητα φωτορεύματος |
| V | Τάση |
| V_{OC} | Τάση ανοιχτού κυκλώματος |
| n | Παράγοντας ιδανικότητας διόδου |
| k_B | Σταθερά Boltzmann |
| T | Θερμοκρασία |
| n_e | Πυκνότητα ηλεκτρονίων |
| n_h | Πυκνότητα οπών |
| N_c | Ενεργή πυκνότητα καταστάσεων ζώνης αγωγιμότητας |
| N_v | Ενεργή πυκνότητα καταστάσεων ζώνης σθένους |
| Δ | Ενεργειακή μετατόπιση |
| FF | Παράγοντας πλήρωσης |
| P_m | Μέγιστη ισχύς |
| J_m | Πυκνότητα ρεύματος στο σημείο μέγιστης ισχύος |
| V_m | Τάση στο σημείο μέγιστης ισχύος |
| H | Μαγνητικό πεδίο |
| P_0 | Πόλωση ελεύθερων ηλεκτρονίων |
| P_{jN} | Πόλωση δέσμιων ηλεκτρονίων |
| ω_p | Συχνότητα πλάσματος |
| Ω_{jN} | Συχνότητα μετάβασης |
| $\Delta\epsilon_{jN}$ | Ταλαντωτική δύναμη |

| Σύμβολο | Ερμηνεία |
|---------------|--|
| A | Απορρόφηση |
| Γ_{jN} | Ρυθμός απόσβεσης |
| G | Ρυθμός παραγωγής εξιτονίων |
| S | Ηλιακή ακτινοβολία |
| n_{iqe} | Συντελεστής εσωτερικής κβαντικής απόδοσης |
| E_g | Ενεργειακό χάσμα |
| N_{HOMO} | Ενεργή πυκνότητα καταστάσεων στη HOMO |
| N_{LUMO} | Ενεργή πυκνότητα καταστάσεων στη LUMO |
| n_r | Συγκέντρωση ηλεκτρονίων δεξιάς επαφής |
| p_r | Συγκέντρωση οπών δεξιάς επαφής |
| n_l | Συγκέντρωση ηλεκτρονίων αριστερής επαφής |
| p_l | Συγκέντρωση οπών αριστερής επαφής |
| φ | Εσωτερικό δυναμικό |
| χ | Επίπεδο κενού |
| F_n | Επίπεδο Fermi ηλεκτρονίων |
| F_p | Επίπεδο Fermi οπών |
| J_n | Ρεύμα ηλεκτρονίων |
| J_p | Ρεύμα οπών |
| D_e | Συντελεστής διάχυσης ηλεκτρονίων |
| D_h | Συντελεστής διάχυσης οπών |
| R | Ρυθμός επανασυνδυασμού |
| n_f | Συγκέντρωση ελεύθερων ηλεκτρονίων |
| n_t | Συγκέντρωση παγιδευμένων ηλεκτρονίων |
| p_f | Συγκέντρωση ελεύθερων οπών |
| p_t | Συγκέντρωση παγιδευμένων οπών |
| N_{ad} | Πυκνότητα ατόμων νόθευσης ημιαγωγού |
| $N_{e,h}$ | Συνολικός αριθμός καταστάσεων στη γκαουσιανή |
| σ | Πλάτος γκαουσιανής |
| f | Συνάρτηση κατανομής Fermi-Dirac |
| μ_e | Ευκινησία ηλεκτρονίων |
| μ_h | Ευκινησία οπών |
| τ_{ec} | Ρυθμός παγίδευσης ηλεκτρονίων |
| τ_{ee} | Ρυθμός διαφυγής ηλεκτρονίων |
| τ_{hc} | Ρυθμός παγίδευσης οπών |
| τ_{he} | Ρυθμός διαφυγής οπών |
| N_t | Πυκνότητα παγίδων |
| e_n | Ρυθμός θερμικής εκπομπής για τα ηλεκτρόνια |
| e_p | Ρυθμός θερμικής εκπομπής για τις οπές |
| u_{th} | Ταχύτητα θερμικής εκπομπής φορέων |
| t_{NP} | Ισοδύναμο πάχος μετάλλου |
| d | Διάμετρος νανοσωματιδίου |
| L | Περιοδικότητα |

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΕΙΚΟΝΩΝ

Κεφάλαιο 1

Εικόνα 1.1 Εξέλιξη της απόδοσης διαφόρων φωτοβολταϊκών τεχνολογιών από το 1975 έως σήμερα. Με μωβ χρώμα σημειώνονται οι αποδόσεις φωτοβολταϊκών πολλαπλών επαφών (multijunction cells) και απλής επαφής από GaAs (single junction). Με μπλε χρώμα σημειώνονται τα φωτοβολταϊκά πυριτίου ενώ με πράσινο διάφορες κατηγορίες κυττάρων με τεχνολογία λεπτών υμενίων. Τέλος με κόκκινο χρώμα σημειώνονται οι καινοτόμες τεχνολογίες φωτοβολταϊκών.

Εικόνα 1.2 Ηλιακό φάσμα και απορρόφηση του PCDTBT:PCBM

Εικόνα 1.3 Οι βασικές διεργασίες που λαμβάνουν χώρα κατά τη λειτουργία ενός οργανικού ηλιακού κυττάρου.

Εικόνα 1.4 Διπλή ή επίπεδη ετεροεπαφή δότη-δέκτη.

Εικόνα 1.5 Bulk ετεροεπαφή δότη – δέκτη.

Εικόνα 1.6 Οι δύο βασικές δομές οργανικών φωτοβολταϊκών.

Εικόνα 1.7 Ενεργειακά επίπεδα υλικών.

Εικόνα 1.8 Ενεργειακά επίπεδα οργανικών υλικών

Εικόνα 1.9 Μηχανισμοί επανασυνδυασμού φορέων.

Κεφάλαιο 2

Εικόνα 2.1 Σχηματική αναπαράσταση εντοπισμένου επιφανειακού πλασμονικού συντονισμού σε νανοσφαίρες χρυσού.

Εικόνα 2.2 Σχηματική αναπαράσταση μεταλλικής σφαίρας και το ηλεκτρικό πεδίο της εισερχόμενη ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας.

Εικόνα 2.3 Μηχανισμοί παγίδευσης φωτός από μεταλλικά νανοςωματίδια.

Εικόνα 2.4 Νανοςωματίδια ενσωματωμένα στο ενεργό στρώμα οργανικού φωτοβολταϊκού.

Κεφάλαιο 3

Εικόνα 3.1 Παράγοντες που επηρεάζουν την V_{OC} .

Εικόνα 3.2 Επίδραση της κρυσταλλικότητας στην V_{OC} .

Εικόνα 3.3 Καθορισμός της V_{OC} στην περίπτωση ομικών επαφών (V_{OC-1}) και μη ομικών επαφών (V_{OC-2}).

Εικόνα 3.4 Πηγές απωλειών για την V_{OC} και σχετικές τιμές τους.

Εικόνα 3.5 Τυπική καμπύλη J-V.

Κεφάλαιο 4

Εικόνα 4.1 Διάγραμμα δείκτη διάθλασης συναρτήσει του μήκους κύματος για τον Άργυρο.

Εικόνα 4.2 Διάγραμμα δείκτη διάθλασης συναρτήσει του μήκους κύματος για το PCDTBT:PCBM.

Εικόνα 4.3 Διάγραμμα δείκτη διάθλασης συναρτήσει του μήκους κύματος για το ITO.

Εικόνα 4.4 Διάγραμμα δείκτη διάθλασης συναρτήσει του μήκους κύματος για το PEDOT:PSS.

Εικόνα 4.5 Αναπαράσταση ενεργειακών επιπέδων της διάταξης.

Εικόνα 4.6 Περιγραφή των ρυθμών παγίδευσης/διαφυγής για μία παγίδα (ροζ χρώμα).

Κεφάλαιο 5

Εικόνα 5.1 Down (αριστερά) και up (δεξιά) διάταξη νανοσωματιδίων.

Εικόνα 5.2 Πλασματική ενίσχυση της πυκνότητας ρεύματος για περιοδικότητες από 20 έως 400nm, πάχη μετάλλου από 1 έως 10nm και πάχος ενεργού στρώματος 80nm (αριστερά) και κατανομές πυκνότητας ρεύματος ανά nm φωτοενεργού στρώματος για την περίπτωση νανοσωματιδίων 30 και 80 nm (small, large αντίστοιχα) σε περιοδικότητες 40 και 280nm αντίστοιχα (δεξιά) για την περίπτωση εισαγωγής νανοσωματιδίων στη διεπιφάνεια ενεργού-TiO_x.

Εικόνα 5.3 Πλασματική ενίσχυση της πυκνότητας ρεύματος για περιοδικότητες από 20 έως 400nm, πάχη μετάλλου από 1 έως 10nm και πάχος ενεργού στρώματος 80nm (αριστερά) και κατανομές πυκνότητας ρεύματος ανά nm φωτοενεργού

στρώματος για την περίπτωση νανοσωματιδίων 30 και 80 nm (small, large αντίστοιχα) σε περιοδικότητες 40 και 280nm αντίστοιχα (δεξιά) για την περίπτωση εισαγωγής νανοσωματιδίων στη διεπιφάνεια ενεργού-PEDOT:PSS.

Εικόνα 5.4 Ρυθμός παραγωγής εξιτονίων για την περίπτωση κυττάρου χωρίς νανοσωματίδια.

Εικόνα 5.5 Ρυθμός παραγωγής εξιτονίων για την περίπτωση κυττάρου με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη.

Εικόνα 5.6 Ρυθμός παραγωγής εξιτονίων για την περίπτωση κυττάρου με μικρά νανοσωματίδια σε up διάταξη.

Εικόνα 5.7 Ρυθμός παραγωγής εξιτονίων για την περίπτωση κυττάρου με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη.

Εικόνα 5.8 Ρυθμός παραγωγής εξιτονίων για την περίπτωση κυττάρου με μεγάλα νανοσωματίδια σε up διάταξη.

Κεφάλαιο 6

Εικόνα 6.1 Καμπύλες J-V χαρακτηριστικών ζευγών ευκινησίας φορέων για την περίπτωση των μικρών νανοσωματιδίων σε down διάταξη.

Εικόνα 6.2 Πλασμονική ενίσχυση του παράγοντα πλήρωσης για την περίπτωση μικρών νανοσωματιδίων σε bottom διάταξη.

Εικόνα 6.3 Πλασμονική ενίσχυση της πυκνότητας ρεύματος για την περίπτωση μικρών νανοσωματιδίων σε bottom διάταξη.

Εικόνα 6.4 Πλασμονική ενίσχυση της τάσης ανοιχτού κυκλώματος για την περίπτωση μικρών νανοσωματιδίων σε bottom διάταξη.

Εικόνα 6.5 Πλασμονική ενίσχυση της απόδοσης για την περίπτωση μικρών νανοσωματιδίων σε bottom διάταξη.

Εικόνα 6.6 Πλασμονική ενίσχυση του παράγοντα πλήρωσης για την περίπτωση μικρών νανοσωματιδίων σε up διάταξη.

Εικόνα 6.7 Πλασμονική ενίσχυση της πυκνότητας ρεύματος για την περίπτωση μικρών νανοσωματιδίων σε up διάταξη.

Εικόνα 6.8 Πλασμονική ενίσχυση της τάσης ανοιχτού κυκλώματος για την περίπτωση μικρών νανοσωματιδίων σε up διάταξη.

Εικόνα 6.9 Πλασμονική ενίσχυση της απόδοσης για την περίπτωση μικρών νανοσωματιδίων σε up διάταξη.

Εικόνα 6.10 Πλασμονική ενίσχυση του παράγοντα πλήρωσης για την περίπτωση μεγάλων νανοσωματιδίων σε bottom διάταξη.

Εικόνα 6.11 Πλασμονική ενίσχυση της πυκνότητας ρεύματος για την περίπτωση μεγάλων νανοσωματιδίων σε bottom διάταξη.

Εικόνα 6.12 Πλασμονική ενίσχυση της τάσης ανοιχτού κυκλώματος για την περίπτωση μεγάλων νανοσωματιδίων σε bottom διάταξη.

Εικόνα 6.13 Πλασμονική ενίσχυση της απόδοσης για την περίπτωση μεγάλων νανοσωματιδίων σε bottom διάταξη.

Εικόνα 6.14 Πλασμονική ενίσχυση του παράγοντα πλήρωσης για την περίπτωση μεγάλων νανοσωματιδίων σε up διάταξη.

Εικόνα 6.15 Πλασμονική ενίσχυση της πυκνότητας ρεύματος για την περίπτωση μεγάλων νανοσωματιδίων σε up διάταξη.

Εικόνα 6.16 Πλασμονική ενίσχυση της τάσης ανοιχτού κυκλώματος για την περίπτωση μεγάλων νανοσωματιδίων σε up διάταξη.

Εικόνα 6.17 Πλασμονική ενίσχυση της απόδοσης για την περίπτωση μεγάλων νανοσωματιδίων σε up διάταξη.

Εικόνα 6.18 Χάρτης διατάξεων μέγιστης ενίσχυσης της απόδοσης για όλα τα ζεύγη ευκινησιών των φορέων αγωγιμότητας.

Εικόνα 6.19 Χάρτης διατάξεων ελάχιστης ενίσχυσης της απόδοσης για όλα τα ζεύγη ευκινησιών των φορέων αγωγιμότητας.

Εικόνα 6.20 Χάρτης τιμών μέγιστης πλασματικής ενίσχυσης της απόδοσης για όλα τα ζεύγη ευκινησιών των φορέων αγωγιμότητας.

Εικόνα 6.21 Χάρτης τιμών μέγιστης απόδοσης για όλα τα ζεύγη ευκινησιών των φορέων αγωγιμότητας.

Εικόνα 6.22 Χάρτης τιμών ελάχιστης πλασματικής ενίσχυσης της απόδοσης για όλα τα ζεύγη ευκινησιών των φορέων αγωγιμότητας.

Εικόνα 6.23 Χάρτης τιμών ελάχιστης απόδοσης για όλα τα ζεύγη ευκινησιών των φορέων αγωγιμότητας.

Παράρτημα 1

Εικόνα 8.1 Καμπύλες J-V χαρακτηριστικών ζευγών ευκινησίας φορέων για την περίπτωση των μικρών νανοσωματιδίων σε down διάταξη.

Εικόνα 8.2 Καμπύλες J-V χαρακτηριστικών ζευγών ευκινησίας φορέων για την περίπτωση των μικρών νανοσωματιδίων σε up διάταξη.

Εικόνα 8.3 Καμπύλες J-V χαρακτηριστικών ζευγών ευκινησίας φορέων για την περίπτωση των μεγάλων νανοσωματιδίων σε down διάταξη.

Εικόνα 8.4 Καμπύλες J-V χαρακτηριστικών ζευγών ευκινησίας φορέων για την περίπτωση των μεγάλων νανοσωματιδίων σε up διάταξη.

Παράρτημα 2

Εικόνα 8.17 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στον παράγοντα πλήρωσης για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου χωρίς νανοσωματίδια.

Εικόνα 8.18 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην πυκνότητα ρεύματος για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου χωρίς νανοσωματίδια.

Εικόνα 8.19 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην τάση ανοιχτού κυκλώματος για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου χωρίς νανοσωματίδια.

Εικόνα 8.20 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην απόδοση για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου χωρίς νανοσωματίδια.

Εικόνα 8.21 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στον παράγοντα πλήρωσης για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη.

Εικόνα 8.22 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην πυκνότητα ρεύματος για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη.

Εικόνα 8.23 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων τάση ανοιχτού κυκλώματος για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη.

Εικόνα 8.24 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην απόδοση για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη.

Εικόνα 8.25 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στον παράγοντα πλήρωσης για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μικρά νανοσωματίδια σε up διάταξη.

Εικόνα 8.26 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων πυκνότητα ρεύματος για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μικρά νανοσωματίδια σε up διάταξη.

Εικόνα 8.27 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην τάση ανοιχτού κυκλώματος για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μικρά νανοσωματίδια σε up διάταξη.

Εικόνα 8.28 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην απόδοση για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μικρά νανοσωματίδια σε up διάταξη.

Εικόνα 8.29 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στον παράγοντα πλήρωσης για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη.

Εικόνα 8.30 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην πυκνότητα ρεύματος για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη.

Εικόνα 8.31 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην τάση ανοιχτού κυκλώματος για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη.

Εικόνα 8.32 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην απόδοση για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη.

Εικόνα 8.33 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στον παράγοντα πλήρωσης για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μεγάλα νανοσωματίδια σε up διάταξη.

Εικόνα 8.34 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην πυκνότητα ρεύματος για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μεγάλα νανοσωματίδια σε up διάταξη.

Εικόνα 8.35 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην τάση ανοιχτού κυκλώματος για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μεγάλα νανοσωματίδια σε up διάταξη.

Εικόνα 8.36 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην απόδοση για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μεγάλα νανοσωματίδια σε up διάταξη.

Παράρτημα 3

Εικόνα 8.37 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ και $\mu_h=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ για τάση $V = 0\text{V}$.

Εικόνα 8.38 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με

μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ και $\mu_h=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ για τάση $V = V_m$.

Εικόνα 8.39 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ και $\mu_h=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ για τάση $V = V_{OC}$.

Εικόνα 8.40 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ και $\mu_h=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ για τάση $V = 0$.

Εικόνα 8.41 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ και $\mu_h=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ για τάση $V = V_m$.

Εικόνα 8.42 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ και $\mu_h=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ για τάση $V = V_{OC}$.

Εικόνα 8.43 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με

μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-10}$ m²/Vs και $\mu_h=10^{-7}$ m²/Vs για τάση $V = 0$.

Εικόνα 8.44 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-10}$ m²/Vs και $\mu_h=10^{-7}$ m²/Vs για τάση $V = V_m$.

Εικόνα 8.45 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-10}$ m²/Vs και $\mu_h=10^{-7}$ m²/Vs για τάση $V = V_{OC}$.

Εικόνα 8.46 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-10}$ m²/Vs και $\mu_h=10^{-10}$ m²/Vs για τάση $V = 0$.

Εικόνα 8.47 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-10}$ m²/Vs και $\mu_h=10^{-10}$ m²/Vs για τάση $V = V_m$.

Εικόνα 8.48 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με

μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ και $\mu_h=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ για τάση $V = V_{OC}$.

Εικόνα 8.49 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ και $\mu_h=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ για τάση $V = 0$.

Εικόνα 8.50 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ και $\mu_h=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ για τάση $V = V_m$.

Εικόνα 8.51 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ και $\mu_h=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ για τάση $V = V_{OC}$.

Εικόνα 8.52 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ και $\mu_h=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ για τάση $V = 0$.

Εικόνα 8.53 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με

μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ και $\mu_h=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ για τάση $V = V_m$.

Εικόνα 8.54 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ και $\mu_h=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ για τάση $V = V_{OC}$.

Εικόνα 8.55 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ και $\mu_h=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ για τάση $V = 0$.

Εικόνα 8.56 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ και $\mu_h=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ για τάση $V = V_m$.

Εικόνα 8.57 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ και $\mu_h=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ για τάση $V = V_{OC}$.

Εικόνα 8.58 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με

μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-10}$ m²/Vs και $\mu_h=10^{-10}$ m²/Vs για τάση $V = 0$.

Εικόνα 8.59 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_i) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_i) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-10}$ m²/Vs και $\mu_h=10^{-10}$ m²/Vs για τάση $V = V_m$.

Εικόνα 8.60 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_i) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_i) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-10}$ m²/Vs και $\mu_h=10^{-10}$ m²/Vs για τάση $V = V_{oc}$.

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΠΙΝΑΚΩΝ

Κεφάλαιο 1

Πίνακας 1.1 Σχετική ηλεκτρική επιτρεπτότητα και ενέργεια σύνδεσης του εξιτονίου.

Κεφάλαιο 4

Πίνακας 4.1 Λορετζιανές PCDTBT:PCBM (N=3).

Πίνακας 4.2 Λορετζιανές νανοσωματιδίων Αργύρου (N=5).

Πίνακας 4.3 Μαθηματικές εκφράσεις ρυθμών παγίδευσης/διαφυγής φορέων.

Κεφάλαιο 5

Πίνακας 5.1 Στρώματα και υλικά διατάξεων.

Πίνακας 5.2 Παράμετροι ηλεκτρικού μοντέλου

Παράρτημα 4

Πίνακας 6.1 Αποτελέσματα ηλεκτρικών προσομοιώσεων για την περίπτωση Bare.

Πίνακας 6.2 Αποτελέσματα ηλεκτρικών προσομοιώσεων για την περίπτωση Small Down.

Πίνακας 6.5 Αποτελέσματα ηλεκτρικών προσομοιώσεων για την περίπτωση Large Up.

Πίνακας 6.4 Αποτελέσματα ηλεκτρικών προσομοιώσεων για την περίπτωση Large Down.

Πίνακας 6.3 Αποτελέσματα ηλεκτρικών προσομοιώσεων για την περίπτωση Small Up.

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

1.1 ΙΣΤΟΡΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ

Η αρχή λειτουργίας των φωτοβολταϊκών (Photovoltaics - PVs) ή αλλιώς ηλιακών κυττάρων (Solar Cells - SCs) βασίζεται στο φωτοβολταϊκό φαινόμενο, το οποίο ανακαλύφθηκε το 1839 από τον Γάλλο φυσικό Edmond Becquerel.

Ο όρος 'photovoltaic' προέρχεται από την ελληνική λέξη φως και το 'volt' που είναι η μονάδα ηλεκτρικής τάσης προς τιμή του ιταλού φυσικού Alessandro Volta. Φωτοβολταϊκό ονομάζεται το φαινόμενο παραγωγής κινητών φορέων αγωγιμότητας μέσα σε κάποιο υλικό όταν αυτό απορροφά φως με κατάλληλη ενέργεια.

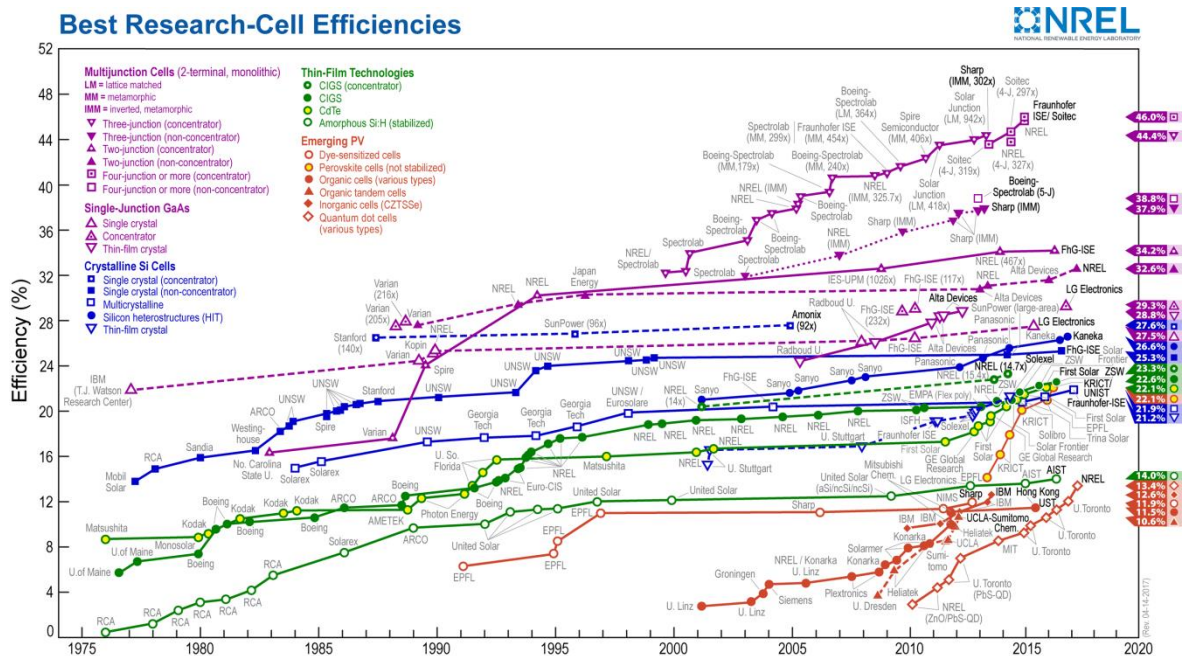
Το 1873 ο Smith ανακαλύπτει τη φωτοαγωγιμότητα του σεληνίου δηλαδή την παραγωγή ηλεκτρικού ρεύματος όταν αυτό εκτίθεται στο φως. Λίγο αργότερα, το 1883 αναπτύσσεται ηλιακό κύτταρο από σελήνιο με απόδοση λιγότερο από 1%. Το 1887 ο Hertz ανακαλύπτει το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο, το οποίο εξηγείται το 1905 από τον Einstein. Το 1918 κατασκευάζεται το πρώτο ηλιακό κύτταρο μονοκρυσταλλικού πυριτίου, το 1954 η απόδοση του φτάνει το 6%, ενώ η απόδοση του συνεχώς αυξάνει και το 1960 φτάνει το 14%.

Τη δεκαετία του 1970 δημιουργούνται κύτταρα υψηλής απόδοσης από AsGa και το 1976 εισάγονται κύτταρα άμορφου πυριτίου με απόδοση 1,1%. Έναν χρόνο αργότερα το 1977 ανακαλύπτεται από τους Heeger, MacDiarmid και Shirakawa αγωγιμότητα σε ένα οργανικό υλικό, το πολυακετυλένιο. Το 1986 αναπτύσσονται οργανικά φωτοβολταϊκά κύτταρα (OPV) πάνω στα οποία γίνεται πολύ μεγάλη έρευνα ενώ η απόδοση τους σήμερα ξεπερνά το 9-10%.

Οι φωτοβολταϊκές τεχνολογίες μπορούν να διαιρεθούν σε τρεις γενιές. Η πρώτη γενιά βασίζεται κυρίως στα υποστρώματα πυριτίου και είναι αυτά που κυριαρχούν στην αγορά. Η δεύτερη γενιά αποτελείται από κύτταρα άμορφου πυριτίου, CIGS, και τελλουριούχου καδμίου (CdTe) τα οποία χρησιμοποιούν λιγότερο υλικό μειώνοντας το κόστος παραγωγής σε σχέση με την πρώτη γενιά. Αξίζει να σημειωθεί ότι περιοριστικός παράγοντας στο κόστος των φωτοβολταϊκών στοιχείων αυτής της γενιάς είναι η χρήση σπάνιων στοιχείων. Τέλος η τρίτη γενιά αποτελείται από οργανικά φωτοβολταϊκά (Organic Photovoltaics-OPVs), με διάφορες εφαρμογές τους να είναι πλέον εμπορικά διαθέσιμες.

1.2 ΕΞΕΛΙΞΗ ΤΗΣ ΑΠΟΔΟΣΗΣ ΦΩΤΟΒΟΛΤΑΪΚΩΝ

Στην Εικόνα 1.1 παρουσιάζεται η εξέλιξη της απόδοσης των διαφόρων φωτοβολταϊκών τεχνολογιών από το 1975 έως σήμερα. Σε κάθε σημείο σημειώνεται η μέγιστη απόδοση (σε ερευνητικό επίπεδο) και το εργαστήριο στο οποίο έγινε η μέτρηση. Όλες οι μετρήσεις έχουν γίνει βάσει διεθνών προτύπων (IEC 60904-3 edition 2, ASTM G173) και σε θερμοκρασία 25°C. Επίσης στη δεξιά πλευρά του διαγράμματος δίνονται οι μέγιστες αποδόσεις κάθε τεχνολογίας σήμερα. Για την περίπτωση των οργανικών φωτοβολταϊκών (κόκκινοι συμπαγείς κύκλοι) η μέγιστη απόδοση αγγίζει το 11.5%.



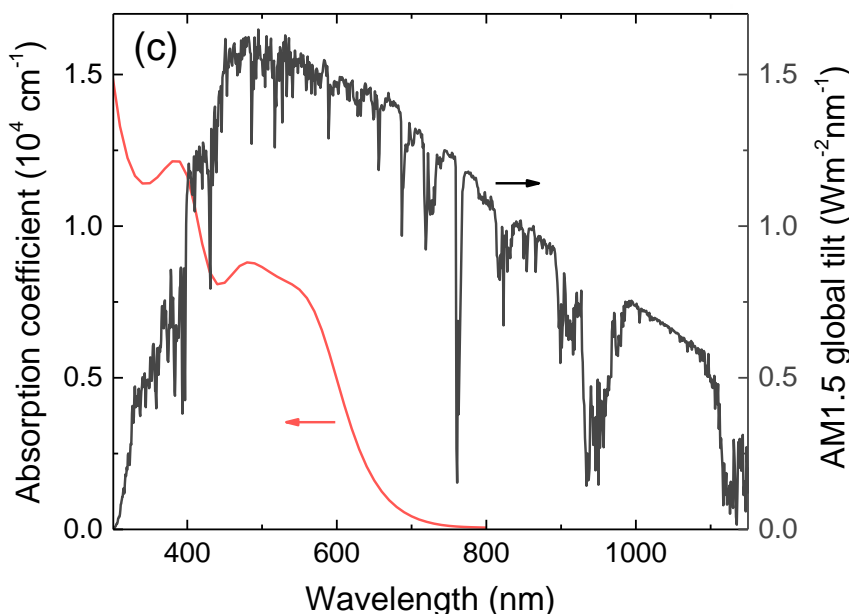
Εικόνα 1.1 Εξέλιξη της απόδοσης διαφόρων φωτοβολταϊκών τεχνολογιών από το 1975 έως σήμερα. Με μωβ χρώμα σημειώνονται οι αποδόσεις φωτοβολταϊκών πολλαπλών επαφών (multijunction cells) και απλής επαφής από GaAs (single junction). Με μπλε χρώμα σημειώνονται τα φωτοβολταϊκά πυριτίου ενώ με πράσινο διάφορες κατηγορίες κυττάρων με τεχνολογία λεπτών υμενίων. Τέλος με κόκκινο χρώμα σημειώνονται οι καινοτόμες τεχνολογίες φωτοβολταϊκών. [1]

1.3 ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΑ ΟΡΓΑΝΙΚΑ ΦΩΤΟΒΟΛΤΑΪΚΑ

Τα οργανικά φωτοβολταϊκά είναι μια κατηγορία φωτοβολταϊκών που χρησιμοποιεί οργανικά ηλεκτρονικά υλικά με σκοπό την παραγωγή ηλεκτρικής ενέργειας μετά από απορρόφηση ηλιακής ακτινοβολίας.

Όπως αναφέρθηκε οι αποδόσεις των οργανικών φωτοβολταϊκών αγγίζουν το 11,5%, την ίδια στιγμή που άλλες τεχνολογίες ξεπερνούν το 40%. Ο λόγος για τον οποίο τα οργανικά φωτοβολταϊκά μελετώνται παρά την χαμηλή απόδοσή τους, είναι το χαμηλό κόστος τόσο των υλικών, όσο και της διαδικασίας παραγωγής, η οποία γίνεται σε χαμηλές θερμοκρασίες και με μεθόδους εκτύπωσης και roll-to-roll επεξεργασίας. Άλλα πλεονεκτήματα των οργανικών φωτοβολταϊκών είναι ότι δεν χρησιμοποιούν μεγάλες ποσότητες τοξικών υλικών, είναι μηχανικά εύκαμπτα και έχουν χαμηλό βάρος. Τέλος μπορούν να είναι ημιδιάφανα (σε διάφορα χρώματα) ή διάφανα.

Σκοπός των ημιαγωγών που χρησιμοποιούνται στην κατασκευή φωτοβολταϊκών είναι να συλλέγουν όσο το δυνατό μεγαλύτερο μέρος του ηλιακού φάσματος. Στην Εικόνα 1.2 παρουσιάζεται το ηλιακό φάσμα συναρτήσει των μηκών κύματος. Το μέγιστο παρατηρούμε ότι βρίσκεται στο ορατό τμήμα της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας και αποτελεί το περίπου 40%. Επιπλέον με κόκκινη γραμμή σημειώνεται και ο συντελεστής απορρόφησης ενός ευρέως διαδεδομένου οργανικού ημιαγωγού του PCDTBT:PC₇₀BM.



Εικόνα 1.2 Ηλιακό φάσμα και απορρόφηση του PCDTBT:PCBM [2]

Μία από τις βασικότερες διαφορές των οργανικών και των ανόργανων φωτοβολταϊκών είναι η ενέργεια σύνδεσης του εξιτονίου.

$$E_b = \frac{m_e^* e^4}{8 \epsilon_r^2 \epsilon_0^2 h^2} \quad (1.1)$$

Όπου:

m_e^* : η ενεργός μάζα του ηλεκτρονίου μέσα στον ημιαγωγό

ϵ_r : η σχετική ηλεκτρική επιτρεπτότητα του ημιαγωγού

ϵ_0 : η ηλεκτρική επιτρεπτότητα του κενού

h : η σταθερά Planck

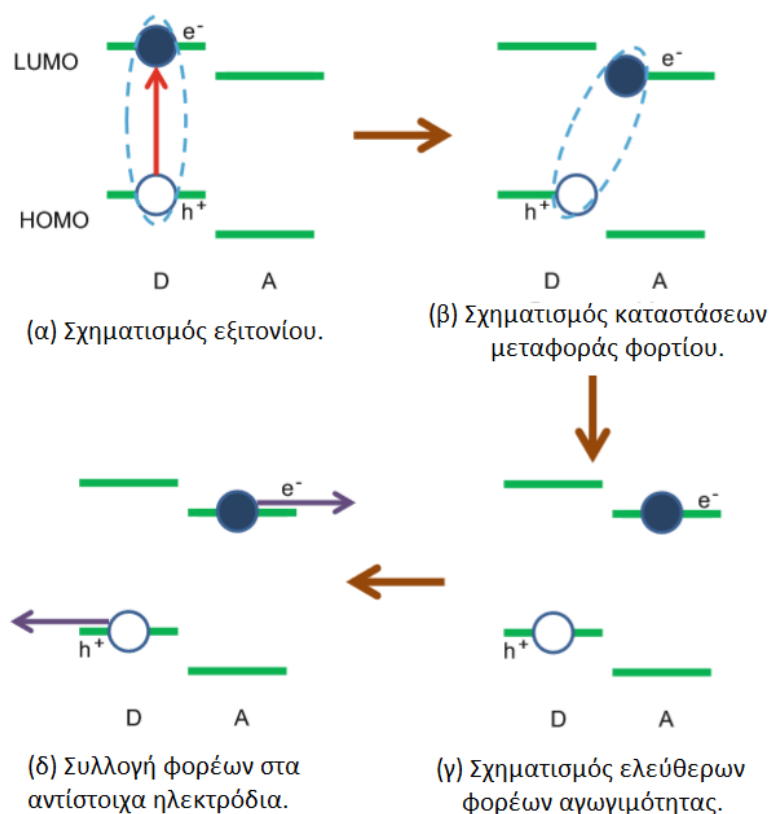
Στους ανόργανους ημιαγωγούς λόγω της υψηλής σχετικής ηλεκτρικής επιτρεπτότητας, η ενέργεια σύνδεσης είναι της τάξης των $\sim 25\text{meV}$. Αυτό το ποσό ενέργειας είναι διαθέσιμο ακόμη και σε θερμοκρασία δωματίου. Συνεπώς δεν απαιτείται κάποια τεχνική διαχωρισμού του εξιτονίου. Από την άλλη μεριά στους οργανικούς ημιαγωγούς, η ενέργεια σύνδεσης του εξιτονίου είναι πολύ μεγαλύτερη και ο διαχωρισμός του, απαιτεί τη χρήση ενός δεύτερου υλικού με κατάλληλα ενεργειακά επίπεδα έτσι ώστε να προκύψουν διαθέσιμες ενεργειακές καταστάσεις και να διαχωριστεί. Το υλικό στο οποίο έχουμε την απορρόφηση του φωτονίου και την διέγερση του ονομάζεται δότης, ενώ το δεύτερο υλικό που χρησιμεύει στο διαχωρισμό του εξιτονίου ονομάζεται δέκτης.

Πίνακας 1.1 Σχετική ηλεκτρική επιτρεπτότητα και ενέργεια σύνδεσης του εξιτονίου.

| Είδος ημιαγωγού | Σχετική ηλεκτρική επιτρεπτότητα | Ενέργεια σύνδεσης |
|-----------------|---------------------------------|----------------------|
| Ανόργανοι | 10-15 | $\sim 25\text{meV}$ |
| Οργανικοί | 2-4 | $\sim 200\text{meV}$ |

1.4 ΑΡΧΗ ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΑΣ

Η αρχή λειτουργίας των οργανικών ηλιακών κυττάρων συνοψίζεται σε τέσσερις βασικές διεργασίες όπως φαίνονται στην Εικόνα 1.3. Με πράσινο χρώμα, σημειώνονται τα ενεργειακά επίπεδα HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) και LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) του δότη (Donor) και του δέκτη (Acceptor).



Εικόνα 1.3 Οι βασικές διεργασίες που λαμβάνουν χώρα κατά τη λειτουργία ενός οργανικού ηλιακού κυττάρου. [3]

Αρχικά ένα ηλεκτρόνιο απορροφά ένα φωτόνιο και μεταβαίνει από τη HOMO του δότη, στη LUMO του δότη, αφήνοντας πίσω μια οπή. Το δέσμιο ζεύγος ηλεκτρονίου – οπής ονομάζεται εξιτόνιο. Λόγω της μεγάλης ενέργειας σύνδεσης του εξιτονίου στους οργανικούς ημιαγωγούς, για το διαχωρισμό των εξιτονίων χρησιμοποιείται ο δέκτης. Τα ενεργειακά επίπεδα του δέκτη είναι τέτοια ώστε η LUMO του να είναι χαμηλότερα από τη LUMO του δότη και το ηλεκτρόνιο να μπορεί να μεταβεί σε αυτή, ενώ η HOMO του είναι υψηλότερη από τη HOMO του δέκτη, έτσι ώστε η οπή να μην μπορεί να μετακινηθεί. Συνεπώς στη διεπιφάνεια δότη δέκτη το εξιτόνιο διαχωρίζεται και σχηματίζονται δύο ελεύθεροι φορείς.

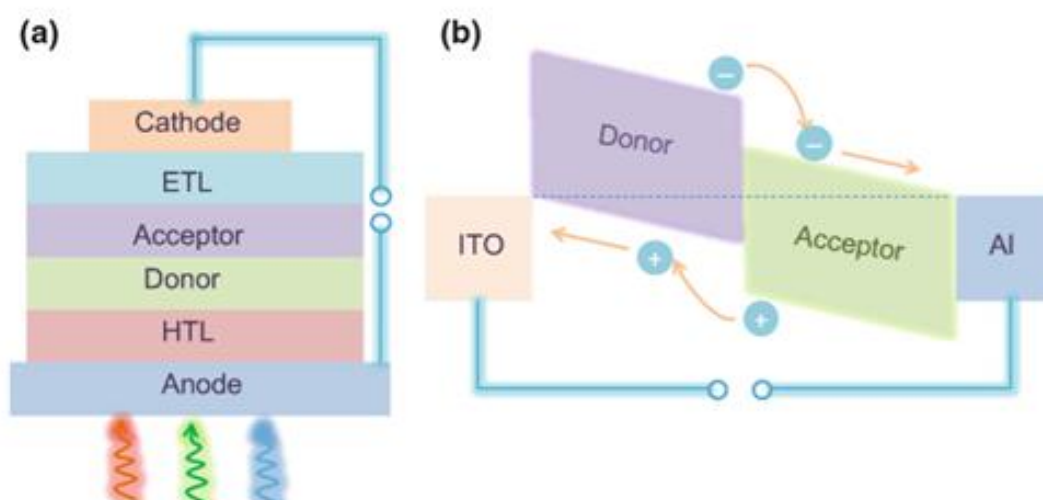
1.5 ΑΡΧΙΤΕΚΤΟΝΙΚΗ ΕΝΕΡΓΟΥ ΣΤΡΩΜΑΤΟΣ

1.5.1 Απλής επαφής (single layer)

Τα πρώτα οργανικά φωτοβολταϊκά που κατασκευάστηκαν αποτελούνταν από ένα οργανικό ενεργό στρώμα ανάμεσα σε δύο ηλεκτρόδια. Ως ενεργό στρώμα χρησιμοποιούνταν οργανικοί ημιαγωγοί τύπου-p, ενώ σαν ηλεκτρόδια ένα στρώμα οξειδίου ινδίου-ψευδαργύρου (ITO) με υψηλό έργο εξαγωγής και ένα στρώμα από μέταλλο χαμηλού έργου εξαγωγής όπως αλουμίνιο, μαγνήσιο ή ασβέστιο. Οι αποδόσεις τους ήταν εξαιρετικά χαμηλές (0.0001-0.01%) λόγω του πολύ μικρού μήκους διάχυσης των εξιτονίων στα οργανικά υλικά.

1.5.2 Διπλής (bilayer) ή επίπεδης ετεροεπαφής (planar donor-acceptor heterojunction)

Μεγαλύτερη απόδοση (γύρω στο 1%) είχαν τα ηλιακά κύτταρα με δύο στρώματα αποτελούμενα από δύο διαφορετικά ημιαγωγικά υλικά (δότης και δέκτης). Ο δότης και δέκτης επιλέγονταν προσεκτικά ώστε να έχουν κατάλληλα ενεργειακά επίπεδα που να δημιουργούν επαρκή ηλεκτρικά πεδία στην ετεροεπαφή τους, ικανά να διαχωρίζουν τα εξιτόνια.

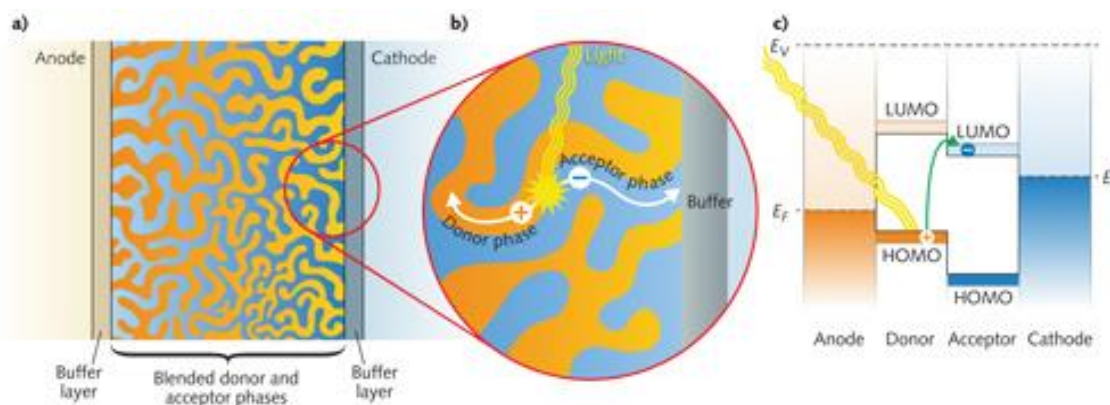


Εικόνα 1.4 Διπλή ή επίπεδη ετεροεπαφή δότη-δέκτη. [3]

1.5.3 Διασκορπισμένης ετεροεπαφής (BHJ- bulk heterojunction)

Για να υπάρχει ικανοποιητική απόδοση στα οργανικά ηλιακά κύτταρα θα πρέπει να υπάρχει αυξημένη απορρόφηση φωτός ή αλλιώς το πάχος του ενεργού στρώματος να είναι τουλάχιστον 100nm. Ωστόσο το μήκος διάχυσης των εξιτονίων είναι περίπου 10nm κάτι το οποίο σημαίνει ότι εξιτόνια που παράγονται μέχρι και 10nm μακριά από την ετεροεπαφή είναι ικανά να διαχωριστούν. Το πρόβλημα αυτό λύνει η BHJ δομή όπου ο δότης και ο δέκτης αναμιγνύονται και σχηματίζουν ένα δίκτυο. Οι περιοχές δότη και δέκτη είναι της τάξης των 10nm, όσο δηλαδή και το μήκος διάχυσης του εξιτονίου. Αυτό σημαίνει ότι σε κάθε εξιτόνιο παρέχεται μια ετεροεπαφή για το διαχωρισμό του σε ελεύθερους φορείς. Η δομή αποτελείται συνήθως από ένα συζευγμένο πολυμερές ως δότη και από ένα παράγωγο φουλερενίου ως δέκτη. Τελευταίας τεχνολογίας κύτταρα χρησιμοποιούν και ένα τρίτο υλικό δότη (D1-A-D2) ή δέκτη (D-A1-A2) (ternary solar cells) επιτυγχάνοντας ακόμα μεγαλύτερες αποδόσεις.

Ωστόσο υπάρχουν και βασικά μειονεκτήματα όπως είναι η δημιουργία αδιέξοδων διαδρομών και οι παγίδες στο εσωτερικό του ενεργού στρώματος. Το γεγονός αυτό σε συνδυασμό με το χαμηλό μήκος διάχυσης των εξιτονίων περιορίζει το πάχος του ενεργού στρώματος. Έτσι για την αύξηση της απορρόφησης σε μικρό πάχος ενεργού, χρησιμοποιούνται διάφορες μέθοδοι όπως η εισαγωγή πλασμονικών νανοσωματιδίων.

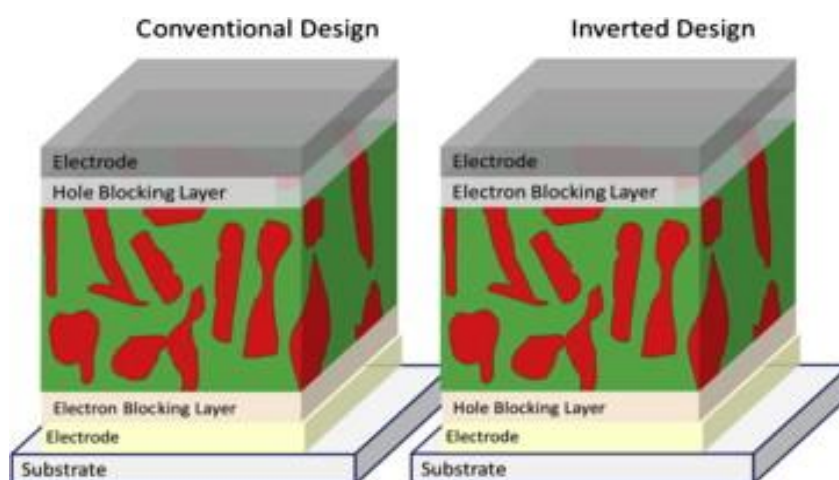


Εικόνα 1.5 Bulk ετεροεπαφή δότη – δέκτη. [4]

1.6 ΑΡΧΙΤΕΚΤΟΝΙΚΗ ΟΡΓΑΝΙΚΩΝ ΦΩΤΟΒΟΛΤΑΪΚΩΝ

1.6.1 Υλικά και ιδιότητες στρωμάτων

Ένα οργανικό φωτοβολταϊκό αποτελείται από μία σειρά διαδοχικών λεπτών υμενίων. Όπως θα αναφερθεί παρακάτω είναι αναγκαία η χρήση διαφορετικών στρωμάτων. Στην Εικόνα 1.6 φαίνεται η αλληλουχία αυτών των στρωμάτων για τις δύο τυπικές διατάξεις που χρησιμοποιούνται (συμβατική και ανεστραμμένη).



Εικόνα 1.6 Οι δύο βασικές δομές οργανικών φωτοβολταϊκών. [5]

Αρχικά όλα τα στρώματα τοποθετούνται πάνω σε ένα υπόστρωμα. Τα υποστρώματα μπορεί να είναι είτε γυάλινα είτε πολυμερικά (PET, PEN) συνήθως όμως προτιμάται το γυαλί. Τα γυάλινα υποστρώματα είναι λεία, εύκαμπτα (για μικρά πάχη) και έχουν χαμηλό συντελεστή θερμικής διαστολής. Επιπλέον έχουν καλές ιδιότητες φραγμού υγρασίας και οξυγόνου. Ωστόσο υπάρχουν δυσκολίες στην κατεργασία του λόγω της υψηλής ευθραυστότητας. Τα πολυμερικά υποστρώματα από την άλλη μεριά έχουν μεγαλύτερη ανθεκτικότητα από το γυαλί, χαμηλότερο κόστος και υψηλή διαπερατότητα σε οξυγόνο και υγρασία.

Πάνω από το υπόστρωμα τοποθετείται το ηλεκτρόδιο ανόδου, το οποίο είναι κατασκευασμένο από οξείδιο του ινδίου-κασσιτέρου ($\text{In}_2\text{O}_3/\text{SnO}_2$) ή αλλιώς ITO. Ο ρόλος της ανόδου είναι η συλλογή των οπών. Σε όλα σχεδόν τα οργανικά ηλιακά κύτταρα σήμερα χρησιμοποιείται το ITO λόγω υψηλής οπτικής διαφάνειας με ταυτόχρονα χαμηλή ανάκλαση και απορρόφηση. Επίσης μπορεί να προσαρμοστεί το έργο εξόδου του από

3.7eV έως 5.1eV μέσω ελέγχου της στοιχειομετρίας του οξυγόνου σε αυτό. Τέλος μπορεί να εναποθεθεί πάνω σε πλαστικά ή γυάλινα υποστρώματα και δεν καταστρέφεται από την υγρασία. Βασικό μειονέκτημα του όμως αποτελεί το υψηλό κόστος σε συνδυασμό με την τοξικότητα του και έτσι γίνεται προσπάθεια εύρεσης νέων υλικών για την αντικατάσταση του.

Το ηλεκτρόδιο ITO στη συνέχεια καλύπτεται από ένα στρώμα αγώγιμου πολυμερούς. Το πιο συνηθισμένο πολυμερές για αυτή τη χρήση είναι το PEDOT:PSS το οποίο δρα ως στρώμα μεταφοράς οπών που αφενός συλλέγει τις οπές από το ενεργό στρώμα αμέσως μετά από τη διάσπαση των εξιτονίων και ταυτόχρονα εμποδίζει τη διέλευση των ηλεκτρονίων ώστε να περιορίζεται η πιθανότητα επανασύνδεσης των ελεύθερων φορέων. Το PEDOT είναι ένα αγώγιμο και διαφανές συζυγές πολυμερές που όμως δεν είναι διαλυτό στους κοινούς διαλύτες με αποτέλεσμα να είναι δύσκολό να γίνει διάλυμα και να αναπτυχθεί σε λεπτά υμένα. Για να γίνει διαλυτό πρέπει να πολυμεριστεί με ένα υλικό με καλή διασπορά στο νερό όπως είναι το PSS. Το PEDOT είναι εμπλουτισμένο με θετικούς φορείς ενώ το PSS σταθεροποιεί αυτά τα θετικά φορτία και διαλύει τα συσσωματώματα του PEDOT στο νερό. Με το διάλυμα PEDOT:PSS μπορούν να δημιουργηθούν λεπτά υμένα με την διάφορες υγρές τεχνικές όπως printing και spin coating που να είναι αρκετά διαφανή και με μια καλή αγωγιμότητα. Ένα άλλο πλεονέκτημά του συγκριτικά με τα μέταλλα ή οξείδια είναι ότι μπορεί να διαμορφωθεί σε διάφορες γεωμετρίες στην μικροκλίμακα ή στην νανοκλίμακα με λιθογραφία. Πολλές ιδιότητες των διαλυμάτων PEDOT:PSS εξαρτώνται από το λόγο PEDOT προς PSS. Για υψηλή αγωγιμότητα πρέπει να υπάρχει μικρή περιεκτικότητα σε PSS. Επιπλέον το στρώμα αυτό μειώνει την τραχύτητα της επιφάνειας του ηλεκτροδίου ITO, είναι υδατοδιαλυτό, εύκολα εκτυπώσιμο και επικαλύπτεται εύκολα. Όμως είναι υγροσκοπικό υλικό (δηλαδή συγκρατεί υγρασία 10-15 wt% και ενσωμάτωση του περιορίζει τη σταθερότητα ολόκληρου του κυττάρου. Τέλος εμποδίζει τη διάχυση του υλικού της ανόδου μέσα στο φωτοενεργό στρώμα.

Μετά το στρώμα μεταφοράς οπών τοποθετείται το φωτοενεργό στρώμα. Ο ρόλος του φωτοενεργού στρώματος είναι η δημιουργία ζευγών ηλεκτρονίου-οπής. Τα πιο συνηθισμένα υλικά που χρησιμοποιούνται στο φωτοενεργό στρώμα είναι τα συζευγμένα πολυμερή, τα οποία είναι ημιαγωγοί ευθέως ενεργειακού χάσματος. Το βασικό τους πλεονέκτημα είναι ότι είναι διαλυτά στους κοινούς οργανικούς διαλύτες λόγω της ύπαρξης πλευρικών αλυσίδων. Η ιδιότητα αυτή καθιστά εφικτή τη χρήση τεχνικών υγρής επεξεργασίας (spin-casting, dip-coating, ink jet printing, screen printing, micromolding) με

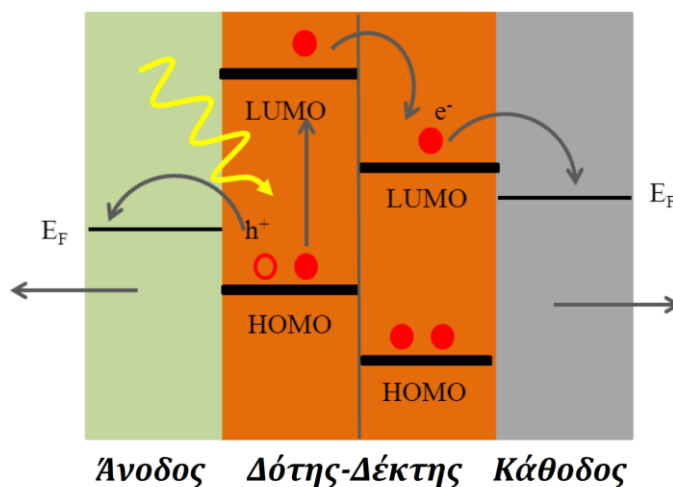
χαμηλό κόστος, παραγωγή σε θερμοκρασία-πίεση περιβάλλοντος, μικρή απώλεια υλικών επέκταση σε μεγάλη κλίμακα για βιομηχανική παραγωγή.

Στη συνέχεια υπάρχει ένα στρώμα μεταφοράς ηλεκτρονίων. Δύο από τα πιο συνηθισμένα υλικά που χρησιμοποιούνται είναι το οξείδιο του τιτανίου (TiO_x) και το οξείδιο του ψευδαργύρου (ZnO) λόγω της υψηλής ευκινησίας των ηλεκτρονίων μέσα σε αυτό. Το στρώμα αυτό αυξάνει το χρόνο ζωής του κελιού συνολικά.

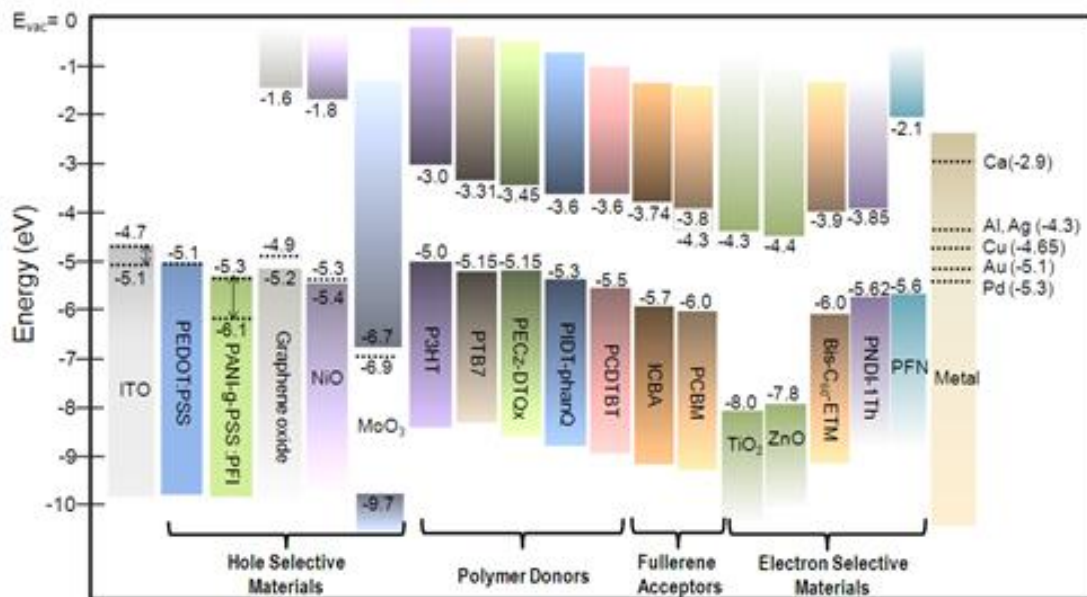
Τέλος τοποθετείται το ηλεκτρόδιο καθόδου. Ο ρόλος της καθόδου είναι η συλλογή των ηλεκτρονίων και είναι κατασκευασμένη από μέταλλα με χαμηλό έργο εξαγωγής όπως το αλουμίνιο ή το ασβέστιο. Τα δύο ηλεκτρόδια είναι επιλεγμένα έτσι ώστε να έχουν διαφορετικά έργα εξαγωγής και συνεπώς να δημιουργούνται εσωτερικά ηλεκτρικά πεδία στο κύτταρο, τα οποία θα οδηγήσουν τους ελεύθερους φορείς έξω από το ενεργό στρώμα ώστε να συλλεχθούν.

1.6.2 Επιλογή υλικών

Η επιλογή των υλικών του κάθε στρώματος γίνεται βάσει μιας σειράς απαιτούμενων ιδιοτήτων. Αρχικά θα πρέπει τα υλικά να έχουν κατάλληλα ενεργειακά επίπεδα, έτσι ώστε να μπορεί να γίνει η συλλογή των φορέων, όπως φαίνεται στην Εικόνα 1.4. Τα ηλεκτρόνια που βρίσκονται στη LUMO του δότη θα πρέπει να μεταφερθούν στην κάθοδο για συλλογή. Έτσι ο δέκτης και η κάθοδος θα πρέπει να βρίσκονται χαμηλότερα από τη LUMO του δότη. Όμοια οι οπές που βρίσκονται στη HOMO του δότη προκειμένου να συλλεχθούν στην άνοδο θα πρέπει αυτή να βρίσκεται υψηλότερά.



Εικόνα 1.7 Ενεργειακά επίπεδα υλικών. [6]



Εικόνα 1.8 Ενεργειακά επίπεδα οργανικών υλικών [7]

Στην Εικόνα 1.5 παρουσιάζονται τα ενεργειακά επίπεδα των βασικότερων υλικών που χρησιμοποιούνται στην κατασκευή οργανικών φωτοβολταϊκών. Από αριστερά προς δεξιά παρουσιάζονται τα υλικά που χρησιμοποιούνται ως στρώματα μεταφοράς οπών, στη συνέχεια οι δότες και δέκτες και τέλος τα υλικά που χρησιμοποιούνται ως στρώματα μεταφοράς ηλεκτρονίων. Στις δύο άκρες έχουμε το ηλεκτρόδιο ανόδου ITO και τα διάφορα μέταλλα που χρησιμοποιούνται ως ηλεκτρόδια καθόδου. Στους δότες και δέκτες η άνω τιμή αναφέρεται στις LUMO και η κάτω στις HOMO.

Εκτός από τα κατάλληλα ενεργειακά επίπεδα τα στρώματα θα πρέπει να σχηματίζουν ωμικές επαφές και να έχουν υψηλή αγωγιμότητα έτσι ώστε να μην υπάρχουν απώλειες λόγω αντίστασης. Τέλος κάποιες ιδιότητες που αφορούν την κατασκευή είναι να έχουν φυσική και χημική σταθερότητα για αποφυγή διεπιφανειακών αντιδράσεων, να επεξεργάζονται από διαλύματα σε χαμηλές θερμοκρασίες, να έχουν καλές ιδιότητες σχηματισμού υμενίων και να παράγονται με χαμηλό κόστος.

1.6.3 Σταθερότητα οργανικών φωτοβολταϊκών

Μία από τις κύριες δυσκολίες για την εμπορευματοποίηση των εύκαμπτων ηλεκτρονικών οργανικών διατάξεων είναι ο χρόνος ζωής τους. Τυπικός χρόνος ζωής είναι τα 1-2 χρόνια. Τα οργανικά μόρια είναι δυνατό να αλλοιωθούν σε διάστημα μερικών ωρών

σε συνθήκες περιβάλλοντος. Κύρια αιτία για την αποικοδόμηση των ενεργών στρωμάτων είναι οι χαμηλές ιδιότητες φραγμού που εμφανίζουν τα οργανικά υποστρώματα.

Υπάρχουν πολλοί διαφορετικοί μηχανισμοί υποβάθμισης των οργανικών ηλιακών κυττάρων οι οποίοι είναι υπεύθυνοι για τη συνολική απόδοση τους. Η ακριβής φύση αυτών των μηχανισμών εξαρτάται από τα υλικά που χρησιμοποιούνται για την κατασκευή του κάθε κυττάρου.

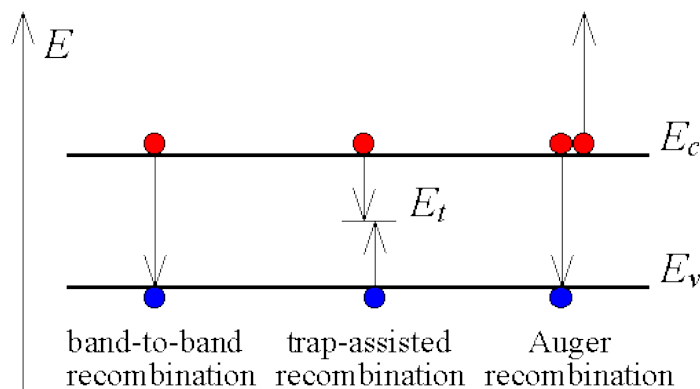
Όσον αφορά τη χημική υποβάθμιση, τα οργανικά υλικά δεν είναι αδρανή υλικά αντίθετα είναι επιρρεπή σε χημική υποβάθμιση. Σε αυτό συμβάλλει σε μεγάλο βαθμό το οξυγόνο, το νερό και οι αντιδράσεις των ηλεκτροδίων με το ενεργό στρώμα του κυττάρου. Οξυγόνο και νερό μπορούν να εισαχθούν στο εσωτερικό του οργανικού κυττάρου κατά την παραγωγή του ή αργότερα λόγω διάχυσης τους από το περιβάλλον. Η χημική υποβάθμιση λόγω οξυγόνου και νερού οφείλεται στον συνδυασμό τους με υπεριώδη ακτινοβολία η οποία τα ενεργοποιεί με αποτέλεσμα να έχουν πολύ μεγάλη δραστηριότητα και να υποβαθμίζουν τα γειτονικά οργανικά μόρια. Η χημική υποβάθμιση αφορά και τα ηλεκτρόδια του κυττάρου όπου μπορεί να λαμβάνουν χώρα οξειδοαναγωγικές αντιδράσεις ανάμεσα στα μεταλλικά ηλεκτρόδια χαμηλού έργου εξαγωγής (Al, Ca) και τα οργανικά μόρια. Σε πολλές διατάξεις παρατηρείται διάβρωση του ηλεκτροδίου ITO λόγω της ευαισθησίας της διεπιφάνειας ITO-PEDOT:PSS στον αέρα και της απορρόφησης υγρασίας από το PSS. Επιπλέον έχει παρατηρηθεί διάχυση ινδίου από το ITO σε όλο το ηλιακό κύτταρο χωρίς όμως να είναι γνωστό το αν συνεισφέρει ή όχι στην υποβάθμιση του κυττάρου. Για την πρόληψη της χημικής υποβάθμισης μπορούν να χρησιμοποιηθούν φίλτρα UV και φράγματα οξυγόνου και νερού.

Όσον αφορά τη θερμική υποβάθμιση, όταν εκτίθεται σε ακτινοβολία ένα ηλιακό κύτταρο θερμαίνεται. Τα οργανικά υλικά δεν είναι θερμικά σταθερά με αποτέλεσμα να αλλάζει η μορφολογία τους όταν θερμαίνονται, γεγονός το οποίο οδηγεί σε υποβάθμιση τους. Σε υψηλές θερμοκρασίες τα πολυμερή είναι δυνατό να διαχυθούν και να σχηματίσουν μικρούς κρυστάλλους μέσα στο κύτταρο. Όλα αυτά συμβαίνουν σε θερμοκρασίες μικρότερες της θερμοκρασίας υαλώδους μετάπτωσης (T_g) για αυτόν το λόγο πολυμερή με υψηλή T_g (δότες - δέκτες) έχει παρατηρηθεί ότι αυξάνουν τη σταθερότητα του κυττάρου.

1.7 ΜΗΧΑΝΙΣΜΟΙ ΕΠΑΝΑΣΥΝΔΥΑΣΜΟΥ ΦΟΡΕΩΝ

Η διαδικασία επανασυνδυασμού των φορέων αγωγιμότητας περιλαμβάνει δύο αντίθετους φορείς δηλαδή ένα ηλεκτρόνιο και μια οπή. Συγκεκριμένα το ελεύθερο ηλεκτρόνιο καταλήγει να καταλάβει την διαθέσιμη ενεργειακή κατάσταση (οπή). Η ενεργειακή διαφορά που προκύπτει απελευθερώνεται κατά τη διαδικασία. Έτσι προκύπτουν τα δύο βασικά είδη του επανασυνδυασμού φορέων που είναι ο ακτινοβολούμενος (η ενέργεια απελευθερώνεται με τη μορφή ενός φωτονίου) και ο μη ακτινοβολούμενος επανασυνδυασμός.

Στην Εικόνα 1.9 παρουσιάζεται μια κατηγοριοποίηση ανάλογα με τα ενεργειακά επίπεδα. Στον band-to-band επανασυνδυασμό (αριστερά) ένα ηλεκτρόνιο μεταπίπτει από τη ζώνη αγωγιμότητας πίσω στη ζώνη σθένους, καταλαμβάνοντας μια οπή. Σε αυτό το είδος επανασυνδυασμού στους ημιαγωγούς ευθέως χάσματος, η ενέργεια απελευθερώνεται με τη μορφή ενός φωτονίου. Το δεύτερο είδος επανασυνδυασμού εμπεριέχει εκτός από τις ζώνες σθένους και αγωγιμότητας, και μια ενδιάμεση ενεργειακή κατάσταση που ονομάζεται παγίδα. Οι παγίδες προκαλούνται συνήθως από την παρουσία ατελειών. Έτσι ένα ηλεκτρόνιο μπορεί να παγιδευτεί σε μία παγίδα και από εκεί να μεταπέσει στη ζώνη σθένους. Αυτό το είδος αναφέρεται σαν επανασυνδυασμός τύπου Shockley-Read-Hall (SRH). Τέλος το τρίτο είδος επανασυνδυασμού, ο επανασυνδυασμός Auger, περιλαμβάνει μια band-to-band ηλεκτρονιακή μετάβαση, όπως το πρώτο είδος, με τη διαφορά ότι δεν εκπέμπεται φωτόνιο. Η επιπλέον ενέργεια μεταβιβάζεται σε κάποιον άλλον ελεύθερο φορέα αγωγιμότητας.



Εικόνα 1.9 Μηχανισμοί επανασυνδυασμού φορέων. [9]

2. ΠΛΑΣΜΟΝΙΚΗ ΕΝΙΣΧΥΣΗ ΟΡΓΑΝΙΚΩΝ ΦΩΤΟΒΟΛΤΑΪΚΩΝ

Η χρήση πλασμονικών νανοσωματιδίων στα οργανικά φωτοβολταϊκά έχει ως στόχο την παγίδευση του φωτός μέσα στο φωτοενεργό στρώμα. Έτσι αυξάνεται η απορρόφηση του από αυτό. Επιπλέον η διέγερση επιφανειακών πλασμονίων στις μεταλλικές νανοδομές μπορεί να παράγει ισχυρά τοπικά ηλεκτρομαγνητικά πεδία τα οποία αυξάνουν την απορρόφηση από το φωτοενεργό στρώμα.

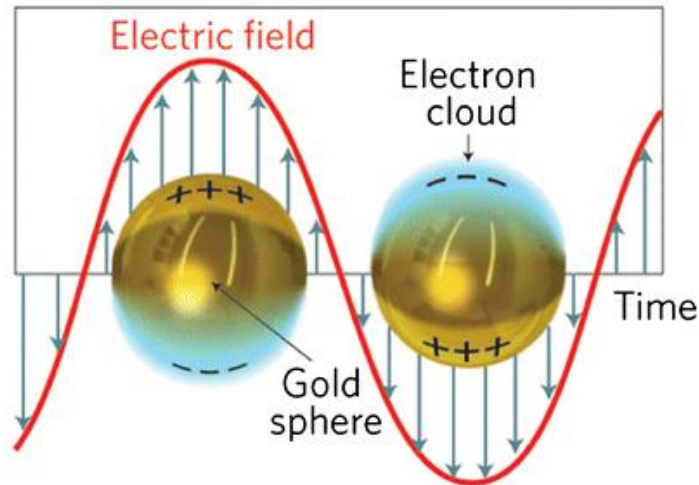
Ένα σημείο που πρέπει να τονιστεί είναι ότι οι πλασμονικές ιδιότητες είναι πολύ ευαίσθητες σε αλλαγές του διηλεκτρικού περιβάλλοντος, του μεγέθους και του σχήματος της μεταλλικής νανοδομής καθώς και της απόστασης μεταξύ των νανοδομών. [8]

2.1 ΠΛΑΣΜΟΝΙΚΟΣ ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΟΣ

Η αλληλεπίδραση του μετάλλου με την ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία είναι μια ξεχωριστή περίπτωση αλληλεπίδρασης ύλης – ακτινοβολίας λόγω της φύσης του μεταλλικού δεσμού. Σε ένα μέταλλο είναι γνωστό ότι τα εξωτερικά ηλεκτρόνια είναι χαλαρά συνδεδεμένα με τους αντίστοιχους πυρήνες. Έτσι μπορεί να γίνει η υπόθεση ότι αυτά τα ηλεκτρόνια κινούνται ελεύθερα σχηματίζοντας μια «θάλασσα ηλεκτρονίων» γύρω από τα ακίνητα ιόντα (πυρήνες με τα εσωτερικά ηλεκτρόνια). Αυτή η «θάλασσα ηλεκτρονίων» (πλάσμα) υπό την επίδραση ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας αναγκάζει τα ηλεκτρόνια να εκτελέσουν ταλάντωση.

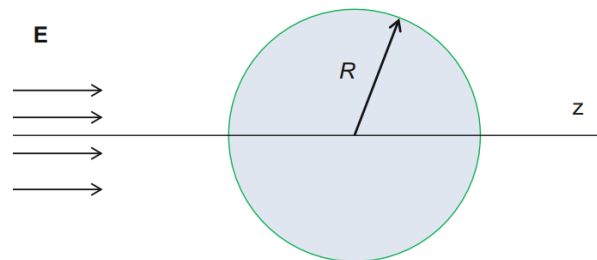
Οι ταλαντώσεις των ηλεκτρονίων του μετάλλου είναι κβαντωμένες, δηλαδή αποτελούνται από κβάντα που ονομάζονται πλασμόνια. Υπάρχουν δύο ειδών πλασμόνια. Το πρώτο είδος είναι τα πλασμόνια όγκου (Bulk Plasmons) που υπάρχουν στον όγκο του υλικού ενώ το δεύτερο είδος είναι τα επιφανειακά πλασμόνια (Surface Plasmons) τα οποία είναι παγιδευμένα στη διεπιφάνεια ενός μετάλλου με ένα διηλεκτικό.

Μια ειδική περίπτωση επιφανειακών πλασμονίων είναι τα πλασμόνια που δημιουργούνται σε μικρά μεταλλικά νανοσωματίδια (μέγεθος συγκρίσιμο με το βάθος διείσδυσης της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας σε ένα μέταλλο) και ονομάζονται εντοπισμένα επιφανειακά πλασμόνια. Ο συντονισμός του ηλεκτρικού πεδίου με την ταλάντωση του νέφους ηλεκτρονίων ονομάζεται εντοπισμένος επιφανειακός πλασμονικός συντονισμός (Localized Surface Plasmon Resonance).



Εικόνα 2.1 Σχηματική αναπαράσταση εντοπισμένου επιφανειακού πλασματικού συντονισμού σε νανοσφαίρες χρυσού. [10]

Ας θεωρήσουμε μία μεταλλική σφαίρα με διάμετρο R , διηλεκτρική σταθερά ϵ_m , η οποία βρίσκεται σε ένα ομοιόμορφο διηλεκτρικό περιβάλλον με διηλεκτρική σταθερά ϵ_d και ένα ηλεκτρικό πεδίο $\mathbf{E} = E_0 \mathbf{z}$ [1].



Εικόνα 2.2 Σχηματική αναπαράσταση μεταλλικής σφαίρας και το ηλεκτρικό πεδίο της εισερχόμενη ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας. [3]

Η εξίσωση Laplace για το δυναμικό $\nabla^2 \Phi = 0$ σε σφαιρικές συντεταγμένες που προκύπτει είναι:

$$\Phi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} [A_l r^l + B_l r^{-(l+1)}] P_l(\cos \theta) \quad (2.1)$$

Το δυναμικό είναι άπειρο για $r = 0$ και για $r \rightarrow \infty$:

$$\Phi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l r^l P_l(\cos \theta) \quad (r \leq R) \quad (2.2)$$

$$\Phi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} B_l r^l + C_l r^{-(l+1)} P_l(\cos\theta) \quad (r \geq R) \quad (2.3)$$

Ακολούθως εφαρμόζονται συνοριακές συνθήκες στο $r = R$

$$-\frac{1}{R} \frac{\partial \Phi(r, \theta)}{\partial \theta} \Big|_{r \rightarrow R^-} = -\frac{1}{R} \frac{\partial \Phi(r, \theta)}{\partial \theta} \Big|_{r \rightarrow R^+} \quad (2.4)$$

$$-\varepsilon_m \varepsilon_0 \frac{\partial \Phi(r, \theta)}{\partial r} \Big|_{r \rightarrow R^-} = -\varepsilon_d \varepsilon_0 \frac{\partial \Phi(r, \theta)}{\partial r} \Big|_{r \rightarrow R^+} \quad (2.5)$$

Ενώ για $r \rightarrow \infty$

$$\Phi|_{r \rightarrow \infty} = -E_0 r \cos\theta \quad (2.6)$$

Τελικά η κατανομή του δυναμικού που προκύπτει είναι η εξής:

$$\Phi = -\frac{3\varepsilon_d}{\varepsilon_m + 2\varepsilon_d} E_0 r \cos\theta \quad (r \leq R) \quad (2.7)$$

$$\Phi = -E_0 r \cos\theta + \frac{\varepsilon_m - \varepsilon_d}{\varepsilon_m + 2\varepsilon_d} E_0 R^3 \frac{\cos\theta}{r^2} \quad (r \geq R) \quad (2.8)$$

Το ηλεκτρικό δυναμικό έξω από τη σφαίρα μαζί με το εφαρμοζόμενο ηλεκτρικό πεδίο σχηματίζουν ένα δίπολο στη σφαίρα:

$$\mathbf{p} = 4\pi\varepsilon_0\varepsilon_d \frac{\varepsilon_m - \varepsilon_d}{\varepsilon_m + 2\varepsilon_d} \mathbf{E} \quad (2.9)$$

Το δίπολο βρίσκεται σε συντονισμό όταν το άθροισμα $\varepsilon_m + 2\varepsilon_d$ είναι το ελάχιστο. Αυτή η περίπτωση αναφέρεται σαν εντοπισμένος επιφανειακός πλασματικός συντονισμός (LSPR). Η συχνότητα του πλασματικού συντονισμού είναι ευαίσθητη στη διηλεκτρική σταθερά του περιβάλλοντος του νανοσωματιδίου, όπως και στην απόκριση του μετάλλου στην ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία.

Το 1908, ο καθηγητής Gustav Mie έδωσε μια ακριβή αναλυτική περιγραφή της οπτικής απόκρισης μεταλλικών νανοσωματιδίων (με μέγεθος τάξης $< \mu\text{m}$) [11]. Για νανοσφαίρες η θεωρία συνοψίζεται στις ακόλουθες σχέσεις:

$$\gamma_{abs} = NV \frac{18\pi\epsilon_d^{3/2}}{\lambda} \frac{\epsilon_2}{(\epsilon_1 + 2\epsilon_d)^2 + \epsilon_2^2} \quad (2.10)$$

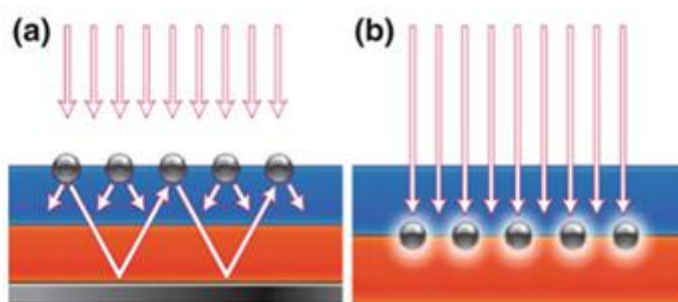
$$\gamma_{sca} = NV \frac{4\pi\alpha^3\epsilon_d^{1/2}}{\lambda} \frac{(\epsilon_1 - \epsilon_d)^2 + \epsilon_2^2}{(\epsilon_1 + 2\epsilon_d)^2 + \epsilon_2^2} \quad (2.11)$$

Όπου N ο αριθμός των σφαιρών ανά μονάδα όγκου, V ο όγκος της κάθε σφαίρας, λ το μήκος κύματος της εισερχόμενης ακτινοβολίας, ϵ_1 και ϵ_2 το πραγματικό και το φανταστικό μέρος της διηλεκτρικής συνάρτησης του μετάλλου ($\epsilon_m = \epsilon_1 + i\epsilon_2$). Όταν το άθροισμα $\epsilon_1 + 2\epsilon_d$ ισούται με μηδέν η απορρόφηση και η σκέδαση φτάνουν στο μέγιστο. Αυτό αντιστοιχεί στον πλασμαονικό συντονισμό (LSPR).

2.2 ΠΛΑΣΜΟΝΙΚΕΣ ΝΑΝΟΔΟΜΕΣ ΣΤΑ ΟΡΓΑΝΙΚΑ ΦΩΤΟΒΟΛΤΑΪΚΑ

Οι Atwater και Polman Atwater [12], περιγράφουν τρεις βασικούς μηχανισμούς με τους οποίους αυξάνεται η απορρόφηση φωτός από το ηλιακό κύτταρο λόγω της ενσωμάτωσης μεταλλικών νανοδομών. Τα πλασμόνια μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να παράγουν ζεύγη ηλεκτρονίων-οπών που μπορούν να διαχωριστούν σε ελεύθερους φορείς.

1. Οι μεταλλικές νανοδομές προκαλούν σκέδαση του φωτός σε μεγάλες γωνίες και παγίδευση του φωτός στο ενεργό στρώμα. (Εικόνα 2.2 a)
2. Δημιουργούν ισχυρά κοντινά πεδία στη γύρω περιοχή τα οποία αυξάνουν τοπικά την απορρόφηση από το ενεργό στρώμα. (Εικόνα 2.2 b)
3. Το φως μπορεί να παγιδευτεί σαν επιφανειακό πλασμόνιο στην διεπιφάνεια μετάλλου-ενεργού στρώματος.



Εικόνα 2.3 Μηχανισμοί παγίδευσης φωτός από μεταλλικά νανοσωματίδια. [12]

2.2.1 Σκέδαση

Πιο αναλυτικά η ηλιακή ακτινοβολία εισέρχεται στο ενεργό στρώμα και κάποιο μέρος της απορροφάται από αυτό. Όση δεν απορροφηθεί ανακλάται πάλι πίσω από το μεταλλικό ηλεκτρόδιο. Στην περίπτωση που στο ενεργό στρώμα έχει γίνει εισαγωγή κάποιας μεταλλικής νανοδομής, και ακτινοβολία προσπίπτει στη νανοδομή, σκεδάζεται από αυτή και κατά συνέπεια μένει περισσότερο χρόνο μέσα στο ενεργό. Επιπλέον ακτινοβολία που έχει ανακλαστεί από το μεταλλικό ηλεκτρόδιο είναι δυνατόν να προσπέσει σε νανοδομή και να σκεδαστεί ξανά μέσα στο ενεργό στρώμα. Υπάρχει δηλαδή πολλαπλή σκέδαση της ακτινοβολίας με συνέπεια να παγιδεύεται και να παραμένει περισσότερο στο ενεργό στρώμα αυξάνοντας εντέλει την απορρόφηση.

Οι μεταλλικές νανοδομές συνήθως τοποθετούνται πάνω σε μία διεπιφάνεια. Έτσι η οι διηλεκτρικές σταθερές των εκατέρωθεν στρωμάτων παίζουν σημαντικό ρόλο γιατί το φως σκεδάζεται προς το στρώμα υψηλότερης διηλεκτρικής σταθεράς. Σε τυπικά οργανικά ηλιακά κύτταρα τοποθετούνται στη διεπιφάνεια ενεργού στρώματος και στρώματος μεταφοράς οπών (PEDOT:PSS). Το PEDOT:PSS έχει χαμηλότερη διηλεκτρική σταθερά από το ενεργό στρώμα στο μεγαλύτερο φάσμα μηκών κύματος και έτσι το φως αναγκάζεται να σκεδαστεί προς το ενεργό.

Επιπρόσθετα η σκέδαση επηρεάζεται σε μεγάλο βαθμό από το μέγεθος και το σχήμα της νανοδομής. Εάν η νανοδομή έχει μέγεθος πολύ μικρότερο του μήκους κύματος της εισερχόμενης ακτινοβολίας η σκέδαση θα είναι πολύ μικρή και ουσιαστικά θα προκαλέσει μόνο απώλειες στην απορρόφηση του ενεργού, κάτι που θα οδηγήσει σε μειωμένη απόδοση ολόκληρου του κυττάρου. Για να υπάρχει σημαντική σκέδαση ικανή να βελτιώσει την απόδοση του κυττάρου οι νανοδομές θα πρέπει να έχουν μέγεθος μεγαλύτερο των 20nm.

2.2.2 Κοντινά πεδία

Τα πλασμαονικά νανοσωματίδια δημιουργούν ένα πολύ ισχυρό ηλεκτρικό πεδίο γύρω τους, το τετράγωνο του οποίου είναι ανάλογο της απορρόφησης (near-field effects).

2.3 ΕΝΣΩΜΑΤΩΣΗ ΝΑΝΟΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΣΤΟ ΕΝΕΡΓΟ ΣΤΡΩΜΑ

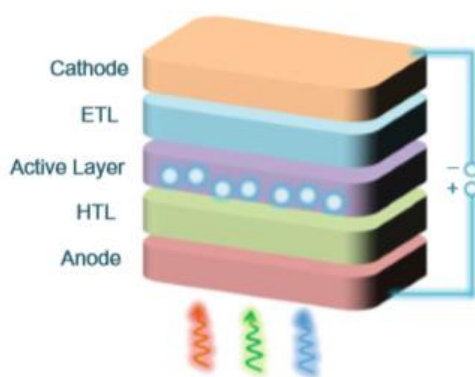
Η ενσωμάτωση νανοσωματιδίων μέσα στο ενεργό στρώμα εκμεταλλεύεται πλήρως τα ισχυρά ηλεκτρομαγνητικά πεδία που δημιουργούνται λόγω πλασματικού συντονισμού. Τα πεδία αυτά φθίνουν καθώς μεγαλώνει η απόσταση από τα νανοσωματίδια, οπότε η ενσωμάτωση νανοσωματιδίων σε στρώματα όπως το PEDOT:PSS έχει ως αποτέλεσμα να μην αξιοποιείται πλήρως ο συγκεκριμένος μηχανισμός ενίσχυσης.

Ειδικότερα στην περίπτωση των μικρών νανοσωματιδίων (<20nm) όπου η σκέδαση φωτός είναι μικρή, αν τοποθετηθούν εκτός ενεργού στρώματος η ενίσχυση της απορρόφησης συνολικά είναι αμελητέα.

Στην περίπτωση των μεγάλων νανοσωματιδίων η σκέδαση θα είναι μεγαλύτερη όμως αν και αυτά τοποθετηθούν εκτός ενεργού στρώματος θα μειώσουν την απορρόφηση του ενεργού. Ωστόσο πρέπει να τονιστεί ότι και η ενσωμάτωση νανοσωματιδίων στο ενεργό στρώμα έχει προβλήματα.

Βασικό πρόβλημα μπορεί να αποτελέσει η διαταραχή της μορφολογίας του ενεργού κάτι που μπορεί να οδηγήσει σε χαμηλές αποδόσεις. Επιπλέον τα νανοσωματίδια παρόλο που αυξάνουν την παραγωγή εξιτονίων λόγω της ισχυρής απορρόφησης του μετάλλου, εισάγουν παράλληλα καταστάσεις παγίδευσης φορέων (trap states) στη διεπιφάνεια μετάλλου-ενεργού στρώματος.

Συμπερασματικά η ενσωμάτωση νανοσωματιδίων στο ενεργό στρώμα μπορεί να έχει θετική ή αρνητική επίπτωση στην απόδοση του ηλιακού κυττάρου.



Εικόνα 2.4 Νανοσωματίδια ενσωματωμένα στο ενεργό στρώμα οργανικού φωτοβολταϊκού. [3]

3 ΗΛΕΚΤΡΙΚΑ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ

3.1 Η ΤΑΣΗ ΑΝΟΙΧΤΟΥ ΚΥΚΛΩΜΑΤΟΣ

Από τους πιο σημαντικούς παράγοντες που καθορίζουν την απόδοση ενός οργανικού ηλιακού κυττάρου είναι η τάση ανοιχτού κυκλώματος (V_{OC} – open circuit voltage) η οποία εκφράζει τη μέγιστη τάση που μπορεί να δώσει το ηλιακό κύτταρο σε ένα εξωτερικό κύκλωμα. Οι τιμές της τάσης ανοιχτού κυκλώματος στα οργανικά ηλιακά κύτταρα σπάνια υπερβαίνουν το 1.0V. [13]

3.1.1 Προέλευση της V_{OC}

Κάτω από συνθήκες ανοιχτού κυκλώματος και μόνιμης ροής ακτινοβολίας οι φωτο-παραγόμενοι φορείς αγωγιμότητας είναι συσσωρευμένοι στην άνοδο και στην κάθοδο. Αυτή η συσσώρευση δημιουργεί ένα ηλεκτρικό πεδίο (λόγω αντίθετων φορτίων των φορέων) το οποίο εξουδετερώνει το εσωτερικό δυναμικό του κυττάρου.

Επιπλέον σε αυτές τις συνθήκες η γένεση φορέων αγωγιμότητας εξουδετερώνεται από το μηχανισμό της επανασύνδεσης φορέων. Πρακτικά όσοι φορείς δημιουργούνται, τόσο ακριβώς χάνονται μέσω επανασυνδυασμού. Αυτή η κατάσταση ονομάζεται κατάσταση ψευδο-ισορροπίας και η τάση στα άκρα του κυττάρου είναι η V_{OC} .

Σε γενικές γραμμές η V_{OC} προέρχεται από το διαχωρισμό των ψευδο-επιπέδων Fermi των ηλεκτρονίων και των οπών που προκαλείται από την ακτινοβολήση του ημιαγωγού με φως [14].

$$V_{OC} = \frac{1}{e} (E_{Fn} - E_{Fp}) \quad (3.1)$$

Όπου:

e : το στοιχειώδες φορτίο

E_{Fn} : το ψευδο-επίπεδο Fermi για τα ηλεκτρόνια

E_{Fp} : το ψευδο-επίπεδο Fermi για τις οπές

Οι αντιστάσεις σε σειρά και παράλληλα θα πρέπει να λαμβάνονται υπόψη κάθε φορά. Η αντίσταση σε σειρά (R_s) έχει να κάνει με την αντίσταση του ενεργού στρώματος, των ηλεκτροδίων καθώς και των διεπιφανειακών αντιστάσεων λόγω της επαφής των στρωμάτων. Η παράλληλη αντίσταση (R_{sh}) προέρχεται από ρεύματα διαρροής όπως αυτά

της p-n επαφής. Επομένως η πυκνότητα ρεύματος λαμβάνοντας υπόψη τις δυο αντιστάσεις είναι:

$$J = \frac{R_{sh}}{R_{sh}+R_s} \left\{ J_0 \left[\exp \left(\frac{e(V-JR_s)}{nk_B T} \right) - 1 \right] + \frac{V}{R_{sh}} \right\} - J_{ph} \quad (3.2)$$

Όπου:

R_{sh} : η παράλληλη αντίσταση

R_s : η αντίσταση σε σειρά

J_0 : το ρεύμα κόρου

e : το στοιχειώδες φορτίο

V : η τάση

n : ο παράγοντας ιδανικότητας της διόδου

k_B : η σταθερά Boltzmann

T : η θερμοκρασία

J_{ph} : η πυκνότητα φωτορεύματος

Σε συνθήκες ανοιχτού κυκλώματος η παραπάνω σχέση μπορεί να απλοποιηθεί. Τότε έχουμε $V = V_{OC}$, $J = 0$, και υποθέτοντας $R_{sh} \gg R_s$:

$$V_{OC} = \frac{nk_B T}{e} \ln \left(\frac{J_{ph}}{J_0} + 1 \right) \quad (3.3)$$

Ο παράγοντας ιδανικότητας της διόδου είναι μια παράμετρος που κυμαίνεται στην περιοχή μεταξύ 1 και 2. Όταν παίρνει την τιμή 1 σημαίνει ότι ο επανασυνδυασμός φορέων στην περιοχή απογύμνωσης μηδενίζεται και σε ολόκληρη τη συσκευή πρακτικά υπάρχει μόνο το ρεύμα λόγω διάχυσης. Όταν παίρνει την τιμή 2 ισχύει ακριβώς το αντίθετο. [15]

3.1.2 Παράγοντες που επηρεάζουν την V_{OC}

Στο παρακάτω σχήμα φαίνονται οι παράγοντες που επηρεάζουν την V_{OC} και στη συνέχεια παρουσιάζονται αναλυτικά. [13]



Εικόνα 3.1 Παράγοντες που επηρεάζουν την V_{OC} . [14]

1. Ανάστροφο ρεύμα κόρου: Η V_{OC} είναι αντιστρόφως ανάλογη του αναστροφικού ρεύματος κόρου (J_0), οπότε μειώνοντας το J_0 αυξάνεται η V_{OC} . Στα ηλιακά κύτταρα p-n επαφής το J_0 εκφράζει την πυκνότητα ρεύματος που προέρχεται από τους φορείς μειονότητας δηλαδή το άθροισμα του ρεύματος που οφείλεται στις οπές στην n περιοχή και του ρεύματος που οφείλεται στα ηλεκτρόνια στην p περιοχή.

2. Επανασυνδυασμός: Προκειμένου να προσδιορίσουμε το ρυθμό επανασυνδυασμού φορέων σε ένα οργανικό κύτταρο είναι απαραίτητο να προσδιοριστεί ο τύπος του επανασυνδυασμού. Να καθορίσουμε δηλαδή αν είναι μονομοριακός (οι φορείς επανασυνδέονται σε κάποιο κέντρο επανασυνδυασμού π.χ. μια παγίδα), διμοριακός (επανασυνδέεται ένα ηλεκτρόνιο με μια οπή) η συνδυασμός των δύο.

Μελέτες έχουν δείξει ότι μπορεί να γίνει αλλαγή του μηχανισμού επανασυνδυασμού από μονομοριακό σε διμοριακό καθώς αλλάζουν οι συνθήκες από συνθήκες κλειστού κυκλώματος σε συνθήκες ανοιχτού κυκλώματος. [15] Αυτό γίνεται γιατί σε συνθήκες κλειστού κυκλώματος ο βασικός μηχανισμός επανασυνδυασμού είναι ο μονομοριακός επειδή τα ηλεκτρόνια και οι οπές κινούνται γρήγορα από το εσωτερικό δυναμικό του κυττάρου. Από την άλλη μεριά σε συνθήκες ανοιχτού κυκλώματος δεν υπάρχει το

εσωτερικό δυναμικό οπότε ευνοείται η συσσώρευση ηλεκτρονίων και οπών στο εσωτερικό του κύτταρου και συνεπώς αυξάνει και ο διμοριακός επανασυνδυασμός. Όταν το κύτταρο λειτουργεί κανονικά δηλαδή καθώς η τάση μεταβάλλεται από $0-V_{OC}$ έχουμε σταδιακή μετάβαση από την περιοχή του μονομοριακού επανασυνδυασμού σε μια ενδιάμεση περιοχή μονομοριακού/διμοριακού επανασυνδυασμού και τέλος σε περιοχή διμοριακού επανασυνδυασμού.

3. Θερμοκρασία: Η V_{OC} έχει βρεθεί ότι μειώνεται γραμμικά με αύξηση της θερμοκρασίας λόγω της θερμοκρασιακά εξαρτώμενης ευκινησίας των φορέων. [16]

4. Πυκνότητα φορέων: Η πυκνότητα των φορέων είναι άμεσα συνδεδεμένη με το ρυθμό επανασυνδυασμού τους και συνεπώς επηρεάζει άμεσα την V_{OC} . Όσο μεγαλύτερη η πυκνότητα τόσο μεγαλύτερος είναι και ο ρυθμός επανασυνδυασμού.

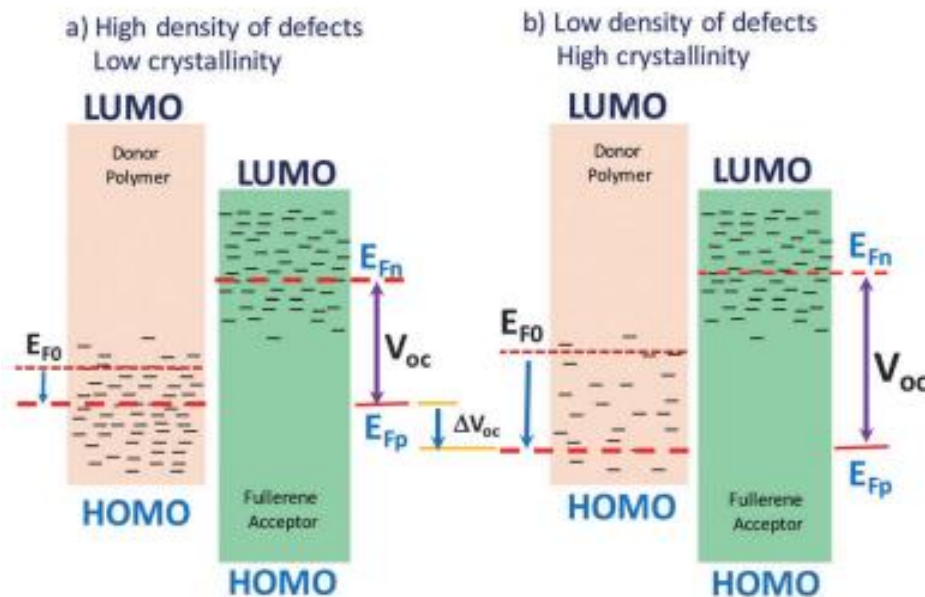
5. Πυκνότητα καταστάσεων (DoS) και ενεργειακές διαταραχές: Οι Blakesley *et al.* Παρατήρησαν ότι καθώς αυξάνει η διαταραχή του ενεργού στρώματος (disorder) η τάση V_{OC} όπως είναι αναμενόμενο μειώνει. Επίσης μειώθηκε και το ρεύμα βραχυκυκλώσεως και ο παράγοντας πλήρωσης του κύτταρου. Αυτό μπορεί να αποδοθεί στο γεγονός ότι οι ενεργειακές διαταραχές εισάγουν παγίδες (traps) που παγιδεύουν φορείς. Έτσι μειώνεται η ευκινησία των φορέων. Αξίζει να τονιστεί ότι οι ενεργειακές διαταραχές του ενεργού στρώματος σχετίζονται άμεσα από την κατασκευή του. [17]

6. Ατέλειες και κρυσταλλικότητα: Η αυξημένη κρυσταλλικότητα του ενεργού στρώματος μειώνει την πυκνότητα των ατελειών και συνεπώς τις ενεργειακές διαταραχές. Έτσι επιτυγχάνεται η μέγιστη δυνατή V_{OC} . [18, 19]

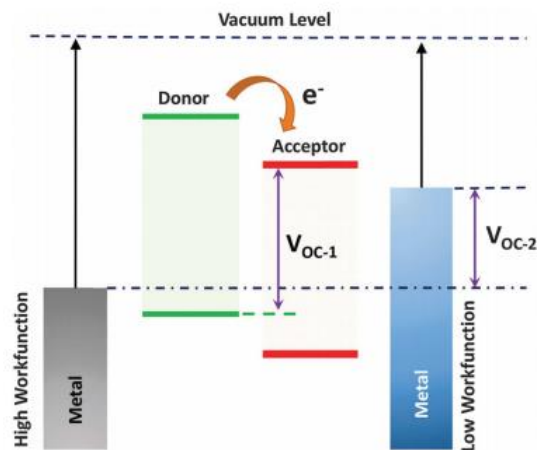
7. Έργο εξαγωγής των ηλεκτροδίων: Η V_{OC} καθορίζεται από την διεπιφάνεια δότη δέκτη στην περίπτωση που οι επαφές είναι ομικές. Στην αντίθετη περίπτωση καθορίζεται από τη διαφορά των έργων εξαγωγής των ηλεκτροδίων.

8. Καταστάσεις μεταφοράς φορτίου: Οι CT καταστάσεις είναι ζεύγη ηλεκτρονίων και οπών που βρίσκονται στην ετεροεπαφή δότη-δέκτη. Οι CT καταστάσεις δεν επηρεάζουν την V_{OC} όταν το ενεργειακό επίπεδο της singlet κατάστασης του δέκτη είναι χαμηλότερο από το ενεργειακό επίπεδο της CT κατάστασης. Επηρεάζεται όμως όταν συμβαίνει το αντίθετο δηλαδή η CT κατάσταση έχει χαμηλότερη ενέργεια από τη singlet γιατί το CT εξιτόνιο που θα δημιουργηθεί (η CT έχει χαμηλότερη ενέργεια άρα ευνοείται) θα διαχωριστεί είτε σε ζεύγη πολaronίων είτε θα αποσβέσει πίσω στην θεμελιώδη

κατάσταση. [22] Μειώνοντας την ενέργεια σύνδεσης της CT κατάστασης και ταυτόχρονα την ενεργειακή διαταραχή της διεπιφάνειας δότη – δέκτη πιθανόν να αυξάνεται και η V_{oc} . [23]

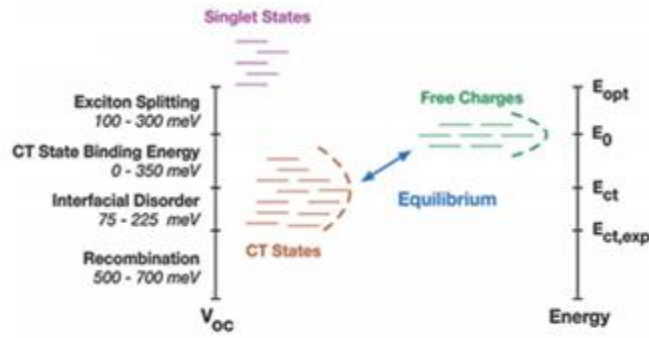


Εικόνα 3.2 Επίδραση της κρυσταλλικότητας στην V_{oc} . [20]



Εικόνα 3.3 Καθορισμός της V_{oc} στην περίπτωση ομικών επαφών (V_{oc-1}) και μη ομικών επαφών (V_{oc-2}). [21]

9. Μικροδομή: Η μικροδομή του ενεργού στρώματος αφορά το μέγεθος των περιοχών δότη και δέκτη, την ύπαρξη ενεργειακών φραγμάτων, την καθαρότητα, την χωρική κατανομή παγίδων κ.α. [24] Βελτίωση της μικροδομής οδηγεί σε υψηλότερες V_{oc} .



Εικόνα 3.4 Πηγές απωλειών για την V_{OC} και σχετικές τιμές τους. [14]

10. Μορφολογία: Παρά το γεγονός ότι η BHJ αυξάνει το ρεύμα βραχυκυκλώσεως δεν φαίνεται να ισχύει το ίδιο και για την V_{OC} . Συγκεκριμένα η V_{OC} μιας BHJ είναι μικρότερη ή ίση της αντίστοιχης V_{OC} μια επίπεδης ετεροεπαφής. Επιπλέον ο λόγος του κλάσματος όγκου του δότη προς την ειδική διεπιφάνεια είναι αυτό που καθορίζει την τελική τιμή της V_{OC} .

11. Εμβαδό διεπιφάνειας δότη-δέκτη: Η V_{OC} αυξάνει με μείωση της διεπιφάνειας το οποίο μπορεί να επιτευχθεί με αύξηση της συγκέντρωσης του δότη στο ενεργό στρώμα.

12. Ενεργειακό χάσμα: Βάσει πειραματικών αποτελεσμάτων έχει προταθεί η ακόλουθη εξίσωση για την τάση ανοιχτού κυκλώματος συναρτήσει του ενεργού ενεργειακού χάσματος. [16]. Τα περισσότερα υλικά που χρησιμοποιούνται στα οργανικά ηλιακά κύτταρα έχουν οπτικό ενεργειακό χάσμα στην περιοχή 1,7-2,1eV και έτσι η V_{OC} σπάνια ξεπερνά το 1V.

$$V_{OC} = \frac{1}{e} (E_{LUMO}^{Fullerene} - E_{HOMO}^{Polymer} - \Delta) - \frac{k_B T}{e} \ln \left(\frac{n_e n_h}{N_c^2} \right) \quad (3.4)$$

n_e : πυκνότητα ηλεκτρονίων στις περιοχές του φουλλερενίου (δέκτης) σε συνθήκες ανοιχτού κυκλώματος.

n_h : πυκνότητα οπών στις περιοχές του πολυμερούς (δότης) σε συνθήκες ανοιχτού κυκλώματος.

N_c : πυκνότητα καταστάσεων στην άκρη της ζώνης αγωγιμότητας του πολυμερούς και του φουλλερενίου.

Δ : ενεργειακή μετατόπιση που προέρχεται από την αταξία των περιοχών διαφορετικών φάσεων πολυμερούς και φουλλερενίου.

3.2 Ο ΠΑΡΑΓΟΝΤΑΣ ΠΛΗΡΩΣΗΣ

3.1.1 Υπολογισμός του FF

Ο παράγοντας πλήρωσης δείχνει πόσο τετράγωνη είναι η καμπύλη J-V εκφράζεται ως :

$$FF = \frac{P_m}{V_{oc} J_{sc}} = \frac{J_m V_m}{V_{oc} J_{sc}} \quad (3.5)$$

Όπου:

P_m : η μέγιστη ισχύς

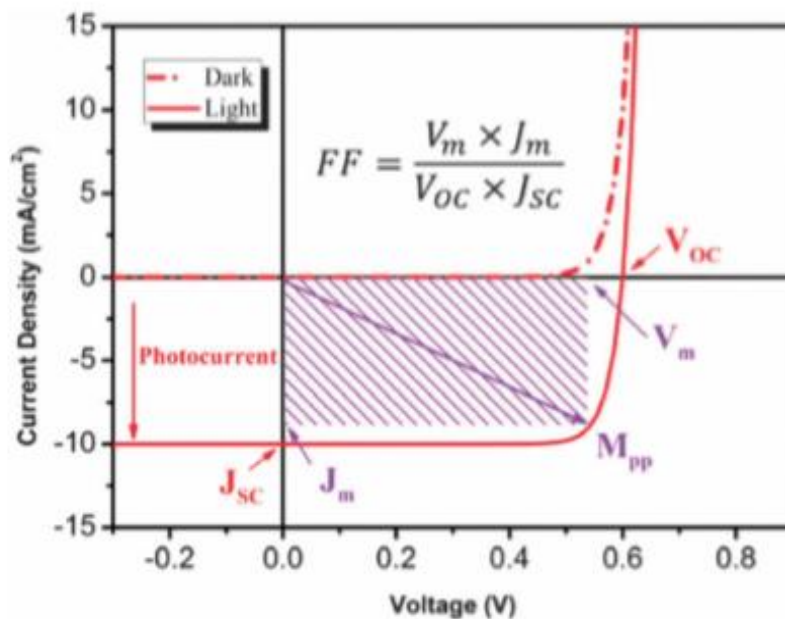
J_m : πυκνότητα ρεύματος στο σημείο μέγιστης ισχύος

V_m : τάση στο σημείο μέγιστης ισχύος

J_{sc} : πυκνότητα ρεύματος βραχυκυκλώσεως

V_{oc} : τάση ανοιχτού κυκλώματος

Ο FF επιπλέον είναι ένας δείκτης του πόσο εύκολα ή δύσκολα μπορούν να εξαχθούν από τη συσκευή οι φωτοπαράγόμενοι φορείς. Η ιδανική τιμή για τον FF θα ήταν 100%. Τότε η καμπύλη J-V θα ήταν απλώς ένα ορθογώνιο. Στα ανόργανα ηλιακά κύτταρα μπορεί να φτάσει έως το 90% ενώ στα οργανικά τυπικές τιμές είναι από 50 έως 70%. Στο ακόλουθο σχήμα φαίνεται μια τυπική καμπύλη J-V. Πάνω της σημειώνονται τα μεγέθη που εισέρχονται στη σχέση που δίνει το FF. [23]



Εικόνα 3.5 Τυπική καμπύλη J-V. [23]

3.2.2 Παράγοντες που επηρεάζουν τον παράγοντα πλήρωσης.

Παρακάτω παρουσιάζονται οι βασικές παράμετροι που επηρεάζουν τον FF.

- 1. Αντίσταση σε σειρά:** Όσο μεγαλύτερη είναι η αντίσταση R_s τόσο μικρότερη είναι η πτώση τάσης στη δίοδο. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα η πυκνότητα ρεύματος να αυξάνει αργά με την τάση. Έτσι η καμπύλη J-V γίνεται πιο τετράγωνη και ο FF μεγαλώνει.
- 2. Παράλληλη αντίσταση:** Η παράλληλη αντίσταση δείχνει τις απώλειες του ρεύματος στα ηλιακά κύτταρα. Στην ιδανική περίπτωση η παράλληλη αντίσταση θα πρέπει να είναι άπειρη ώστε να μην την διαρρέει καθόλου ρεύμα.

4. ΟΠΤΙΚΟ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ

Η μοντελοποίηση των διατάξεων αφορά δύο διαφορετικά μέρη: τους οπτικούς και τους ηλεκτρικούς υπολογισμούς. Αρχικά οι οπτικοί υπολογισμοί έγιναν με χρήση κώδικα που βασίζεται στη μέθοδο FDTD και στη συνέχεια τα αποτελέσματα εισάχθηκαν στο πρόγραμμα Grndm για να γίνουν οι ηλεκτρικοί υπολογισμοί. Στη συνέχεια γίνεται μια σύντομη αναφορά σε κάθε μια μέθοδο.

4.1 Η ΜΕΘΟΔΟΣ FDTD

Η μέθοδος FDTD (Finite-Difference Time-Domain) η αλλιώς μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών στο πεδίο του χρόνου αποτελεί μια μέθοδο αριθμητικής ανάλυσης για τη μοντελοποίηση προβλημάτων υπολογιστικής ηλεκτροδυναμικής. Η μέθοδος λύνει τις εξισώσεις Maxwell:

$$\nabla \times E = -\mu \partial_t H \quad (4.1)$$

$$\nabla \times H = \varepsilon_0 \varepsilon_\infty \partial_t E + \partial_t P_0 + \sum_{jN=1}^N \partial_t P_{jN} \quad (4.2)$$

Όπου P_0 η πόλωση των ελεύθερων ηλεκτρονίων σύμφωνα με το μοντέλο Drude και P_{jN} η πόλωση των δέσμιων ηλεκτρονίων σύμφωνα με το μοντέλο Lorentz. Για την επίλυση των εξισώσεων Maxwell θα πρέπει να είναι γνωστή η πόλωση του υλικού, η οποία εκφράζει την αλληλεπίδραση της ύλης με το φως. Οι δύο πολώσεις P_0 και P_{jN} υπολογίζονται από τις ακόλουθες σχέσεις:

$$\partial_t^2 P_0 + \gamma \partial_t P_0 = \omega_p^2 \varepsilon_0 E \quad (4.3)$$

$$\partial_t^2 P_{jN} + \Gamma_{jN} \partial_t P_{jN} + \Omega_{jN}^2 P_{jN} = \Delta \varepsilon_{jN} \Omega_{jN}^2 \varepsilon_0 E \quad (4.4)$$

Στις δύο σχέσεις εισέρχονται οι ακόλουθες παράμετροι:

ω_p : συχνότητα πλάσματος

$1/\gamma$: χρόνος χαλάρωσης

Ω_{jN} : συχνότητα μετάβασης

$\Delta \varepsilon_{jN}$: ταλαντωτική δύναμη

Γ_{jN} : ρυθμός απόσβεσης

4.1.1 Εισαγωγή των υλικών

Οι παράμετροι υπολογίζονται από το μοντέλο Drude-Lorentz:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{\infty} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma} + \sum_{j=1}^N \frac{\Delta\varepsilon_{jN} \Omega_{jN}^2}{\Omega_{jN}^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_{jN}} \quad (4.5)$$

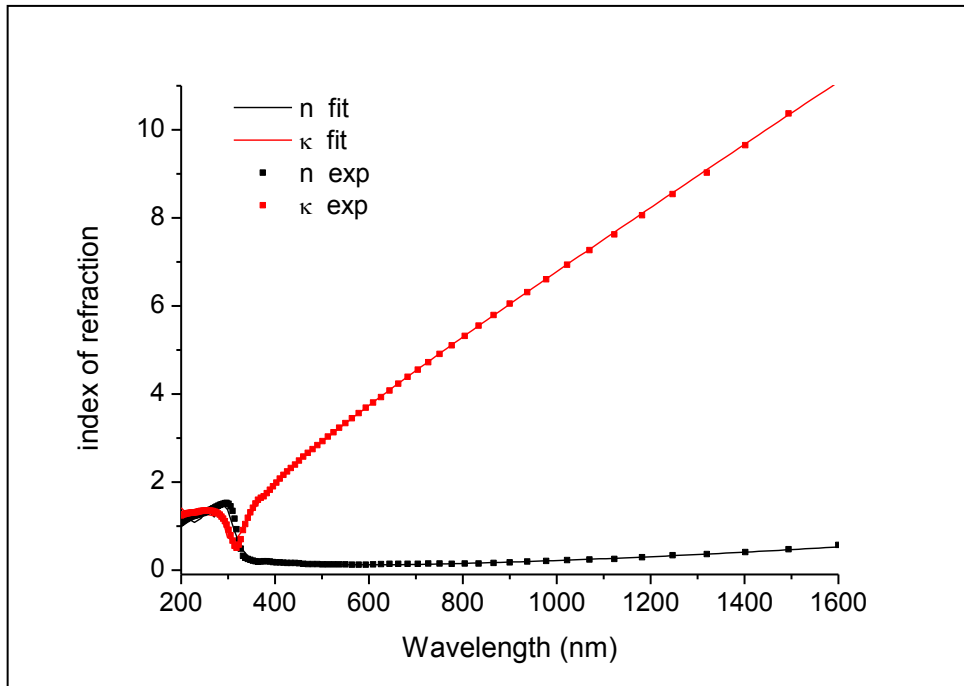
Ο πρώτος όρος αντιστοιχεί στη συνεισφορά των ελεύθερων ηλεκτρονίων (όρος Drude) και ο δεύτερος στη συνεισφορά των δέσμιων ηλεκτρονίων (όρος Lorentz).

Οι παράμετροι του μοντέλου Drude-Lorentz υπολογίζονται βάσει πειραματικών δεδομένων. Στα παρακάτω διαγράμματα του δείκτη διάθλασης ($n = \sqrt{\varepsilon} = n + ki$) συναρτήσει του μήκος κύματος σημειώνονται με τετράγωνα οι πειραματικές τιμές και με συνεχείς γραμμές η προσαρμογή που έχει γίνει στις σταθερές του μοντέλου Drude-Lorentz.

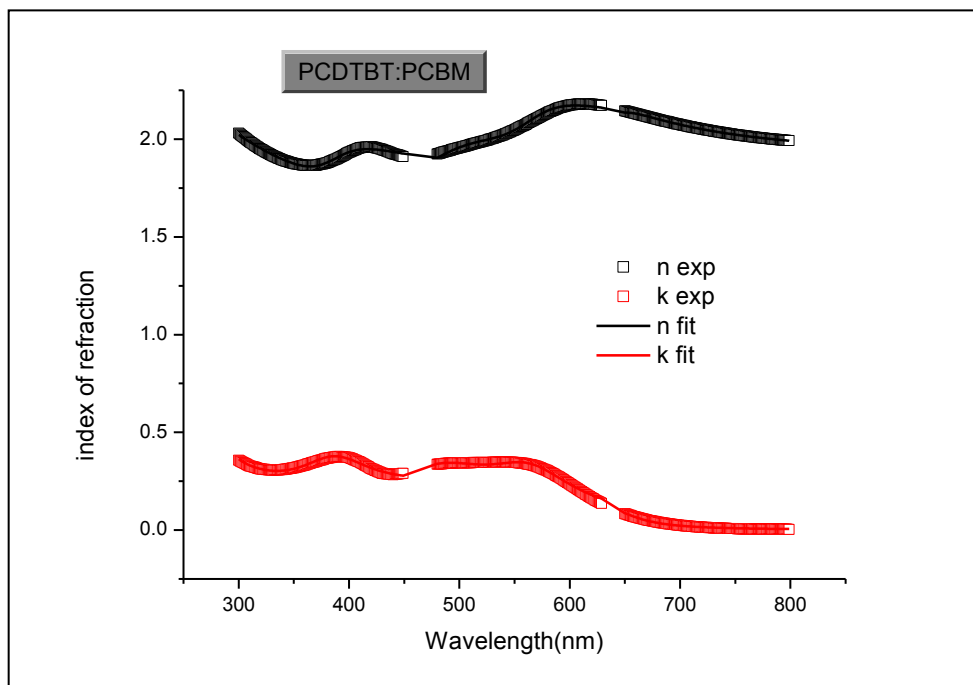
Βάσει της προσαρμογής των μεταβλητών του μοντέλου με τα πειραματικά δεδομένα προκύπτει μια σειρά αριθμών που ονομάζονται Λορετζιανές του υλικού. Όπως είναι λογικό κάθε υλικό περιγράφεται από διαφορετικό αριθμό Λορετζιανών.

Οι οπτικές σταθερές για το ITO [5], PEDOT:PSS [5], Ag [6] που χρησιμοποιήθηκαν αντλήθηκαν από τη βιβλιογραφία. Για το γυαλί (SiO_2) και το TiO_x το n θεωρήθηκε σταθερό και ίσο με 1.46 και 2.5 αντίστοιχα. Για το ενεργό PCDTBT:PC₇₀BM χρησιμοποιήθηκαν ελλειψομετρικά δεδομένα που παρήχθησαν στο πανεπιστήμιο του Surrey (εσωτερική επικοινωνία).

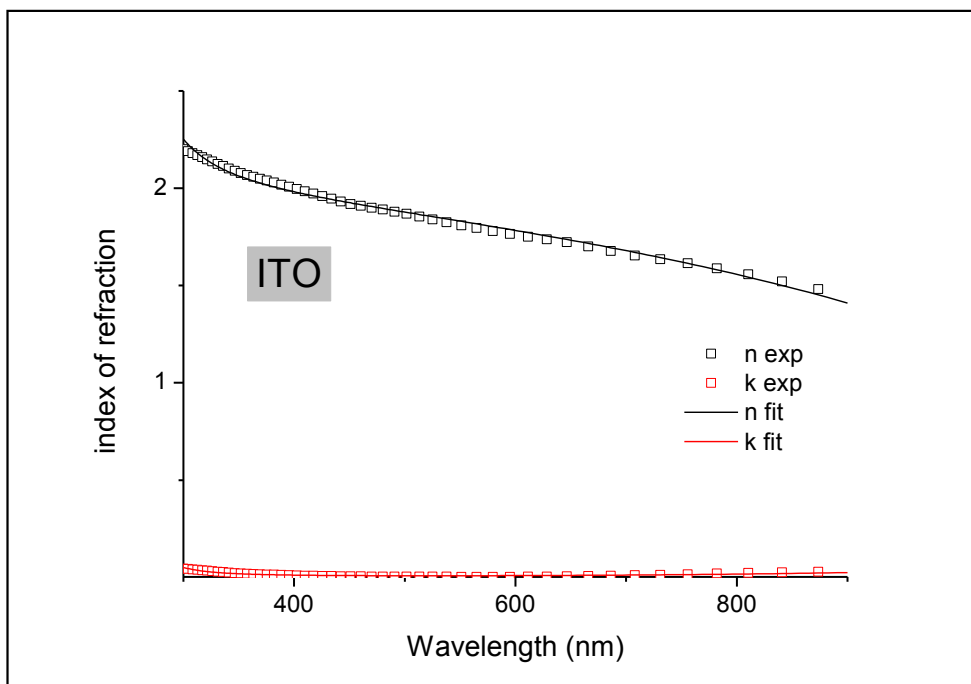
Για κάθε πολυμερές γίνεται η θεώρηση ότι είναι ισότροπο και ομοιογενές. Τέλος όλες οι σταθερές των υλικών προσαρμόστηκαν σε ένα εύρος μηκών κύματος 300-1800nm και στη συνέχεια εισήχθησαν στον κώδικα FDTD.



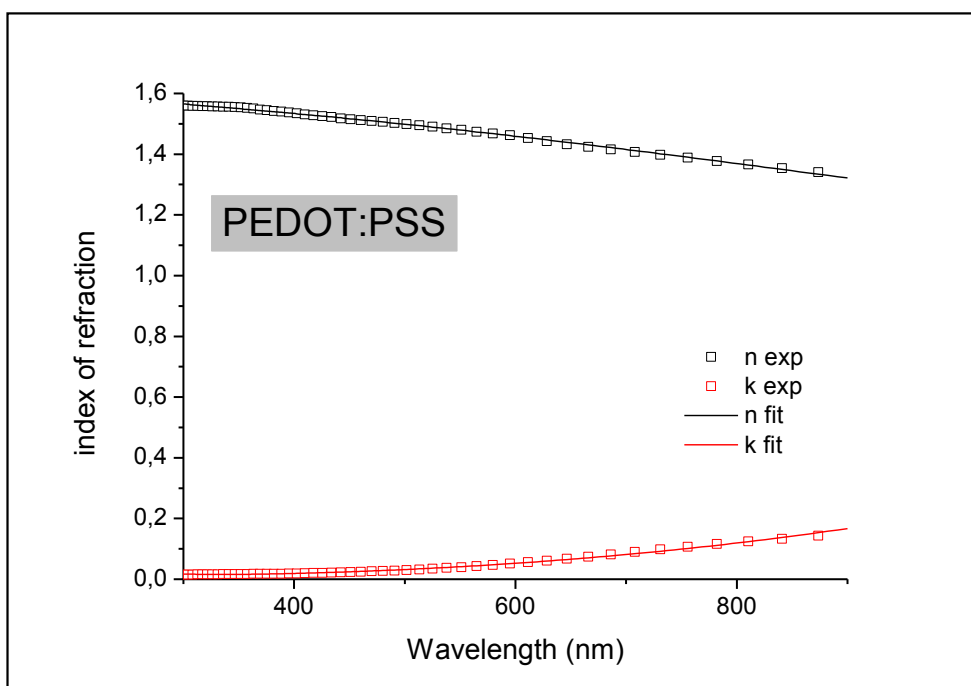
Εικόνα 4.1 Διάγραμμα δείκτη διάθλασης συναρτήσει του μήκους κύματος για τον Άργυρο.



Εικόνα 4.2 Διάγραμμα δείκτη διάθλασης συναρτήσει του μήκους κύματος για το PCDTBT:PCBM.



Εικόνα 4.3 Διάγραμμα δείκτη διάθλασης συναρτήσει του μήκους κύματος για το ITO.



Εικόνα 4.4 Διάγραμμα δείκτη διάθλασης συναρτήσει του μήκους κύματος για το PEDOT:PSS.

Στους πίνακες που ακολουθούν δίνονται οι Λορετζιανές που χρησιμοποιήσαμε για το ενεργό στρώμα και για τα νανοσωματίδια αργύρου. Ειδικά στην περίπτωση των νανοσωματιδίων αργύρου (μέταλλο) στον πίνακα των Λορετζιανών η πρώτη γραμμή αναφέρεται στα ελεύθερα ηλεκτρόνια και προκύπτει από το μοντέλο Drude. Οι υπόλοιπες τέσσερις γραμμές αναφέρονται στα δέσμια ηλεκτρόνια των οποίων η συνεισφορά δίνεται από το μοντέλο Lorentz.

Πίνακας 4.1 Λορετζιανές PCDTBT:PCBM (N=3)

| | $\Delta\varepsilon_j$ | $\hbar\Omega_j$ | $\hbar\Gamma_j$ |
|----------|-----------------------|-----------------|-----------------|
| 0,000000 | 0,080495 | 0,003057 | 0,002877 |
| 0,000000 | 0,010244 | 0,051395 | 0,000315 |
| 2,400440 | 0,020507 | 0,083156 | 0,006363 |

Πίνακας 4.2 Λορετζιανές νανοσωματιδίων Αργύρου (N=5)

| | $\Delta\varepsilon_j$ | $\hbar\Omega_j$ | $\hbar\Gamma_j$ |
|----------|-----------------------|-----------------|-----------------|
| 0,000000 | 0,004378 | 0,000000 | 0,019936 |
| 0,000000 | 0,018406 | 0,042860 | 0,000232 |
| 0,000000 | 0,005788 | 0,070364 | 0,001103 |
| 0,000000 | 0,012079 | 0,079930 | 0,002392 |
| 2,313000 | 0,022987 | 0,097464 | 0,006015 |

4.1.2 Υπολογισμός της πυκνότητας ρεύματος

Αφού επιλυθούν οι εξισώσεις Maxwell υπολογίζουμε για κάθε σημείο του ενεργού στρώματος και για κάθε μήκος κύματος που χρησιμοποιούμε (300-800nm) το πραγματικό και το φανταστικό μέρος του ηλεκτρικού πεδίου και της πυκνότητας ρεύματος. Βάσει αυτών στη συνέχεια υπολογίζουμε το ρυθμό απορρόφησης για κάθε σημείο και για κάθε μήκος κύματος.

$$A(\mathbf{r}, \lambda)d\mathbf{r} = \frac{1/2 \operatorname{Re}\{\mathbf{J}^*(\mathbf{r}, \lambda) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, \lambda)\}}{S_0} \quad (4.6)$$

Από την απορρόφηση σε συνδυασμό με την κατανομή της ηλιακής ακτινοβολίας $S(\lambda)$ υπολογίζουμε το ρυθμό παραγωγής εξιτονίων σύμφωνα με τη σχέση:

$$G(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \int \frac{\lambda}{hc} A(\mathbf{r}, \lambda) S(\lambda) d\lambda \quad (4.7)$$

Έτσι ολοκληρώνοντας για όλα τα σημεία του ενεργού στρώματος υπολογίζεται η πυκνότητα ρεύματος.

$$J_{sc} = e \int_{V'} \eta_{iqe}(\mathbf{r}) G(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (4.8)$$

Στην παραπάνω σχέση εισέρχεται ο συντελεστής εσωτερικής κβαντικής απόδοσης η_{iqe} . Στο οπτικό μοντέλο ο συντελεστής θεωρείται ίσος με τη μονάδα δηλαδή αγνοούνται όλοι οι μηχανισμοί επανασυνδυασμού φορέων. Οπότε όσα φωτόνια απορροφούνται, τόσα εξιτόνια θεωρούμε ότι σχηματίζονται και τόσοι φορείς παράγονται και συλλέγονται στα αντίστοιχα ηλεκτρόδια.

$$J_{sc}^{\max} = \int_{V'} G(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (4.9)$$

Τελικά υπολογίζουμε το ιδανικό ρεύμα που μας δίνει η κάθε διάταξη.

4.2 ΤΟ ΗΛΕΚΤΡΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ

Στη συνέχεια για τη μελέτη της επίδρασης του επανασυνδυασμού φορέων χρησιμοποιήθηκε το πρόγραμμα Grndm –General purpose Photovoltaic Device Model. Το πρόγραμμα χρησιμοποιεί την προσέγγιση πεπερασμένων διαφορών για να λύσει τις εξισώσεις διάχυσης-ολίσθησης για τα ηλεκτρόνια και τις οπές στον χώρο των θέσεων έτσι ώστε να μπορέσει να περιγράψει την κίνηση των φορέων στο εσωτερικό του κυττάρου. Παρακάτω περιγράφεται αναλυτικά το φυσικό μοντέλο στο οποίο στηρίζεται το πρόγραμμα.

Στο συγκεκριμένο πρόγραμμα υπάρχει η δυνατότητα και οπτικών υπολογισμών, ωστόσο δεν χρησιμοποιήθηκε γιατί δεν μπορεί να γίνει ενσωμάτωση νανοσωματιδίων. Έτσι έγινε εισαγωγή του EGR που προέκυψε μετά την εισαγωγή νανοσωματιδίων Ag με τη μέθοδο FDTD στο Grndm, ώστε να υπολογιστούν τα ηλεκτρικά χαρακτηριστικά του κυττάρου.

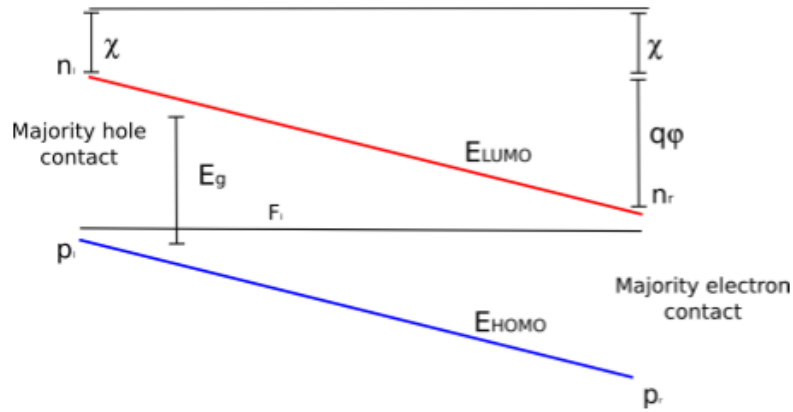
Το ηλεκτρικό μοντέλο αντιμετωπίζει την διάταξη σαν ένα στρώμα bulk heterojunction (BHJ). Τα ηλεκτρονικά επίπεδα ορίζονται σαν ενέργειες HOMO και LUMO. Στις επαφές του ενεργού στρώματος ορίζονται τα επίπεδα στα $x=0$, $x=d$ πάνω στα οποία εφαρμόζονται οι συνοριακές συνθήκες. Το μοντέλο λύνει την εξίσωση Poisson βρίσκοντας το ηλεκτρικό δυναμικό σε κάθε σημείο της διάταξης.

4.2.1 Εσωτερικό δυναμικό

Το πρόγραμμα αρχικά θα πρέπει να υπολογίσει το εσωτερικό δυναμικό της διάταξης. Θα πρέπει να γνωρίζουμε τα εξής:

- Τις συγκεντρώσεις φορέων πλειονότητας στις επαφές p,n.
- Τις ενεργές πυκνότητες καταστάσεων N_{HOMO} , N_{LUMO} .
- Το ενεργό ενεργειακό χάσμα E_g .

Στο ακόλουθο σχήμα φαίνονται τα ενεργειακά επίπεδα HOMO και LUMO καθώς και το επίπεδο Fermi. Στο αριστερό μέρος θεωρούμε την επαφή με πλειονότητα οπών και αντίστοιχα στα δεξιά την επαφή πλειονότητας ηλεκτρονίων. Ορίζουμε επίσης συγκεντρώσεις ηλεκτρονίων και οπών στην αριστερή επαφή n_l , p_l και στη δεξιά n_r , p_r . Το εσωτερικό δυναμικό της διάταξης στο αριστερό μέρος τίθεται μηδενικό, ενώ στο δεξί συμβολίζεται με ϕ . Το επίπεδο του κενού συμβολίζεται τέλος με χ .



Εικόνα 4.5 Αναπαράσταση ενεργειακών επιπέδων της διάταξης.

Οι ενέργειες HOMO και LUMO μπορούν να γραφούν ως:

$$E_{LUMO} = -\chi \quad (4.10)$$

$$E_{HOMO} = -\chi - E_g \quad (4.11)$$

Για το αριστερό μέρος (επαφή πλειονότητας οπών) το επίπεδο Fermi υπολογίζεται βάσει στατιστικής Maxwell-Boltzmann:

$$p_l = N_v \exp\left(\frac{E_{HOMO} - F_p}{kT}\right) \quad (4.12)$$

Υπολογίζοντας το επίπεδο Fermi μπορεί ακολούθως να υπολογιστεί η συγκέντρωση των φορέων μειονότητας (ηλεκτρόνια) του αριστερού τμήματος της διάταξης.

$$n_l = N_c \exp\left(\frac{F_n - E_{LUMO}}{kT}\right) \quad (4.13)$$

Επειδή η διάταξη βρίσκεται σε ισορροπία το επίπεδο Fermi αναγκαστικά πρέπει να είναι ισόπεδο σε όλη τη διάταξη. Ωστόσο δεν πρέπει να αγνοηθεί η παρουσία του εσωτερικού δυναμικού που είναι ο λόγος που τα ενεργειακά επίπεδα HOMO και LUMO εμφανίζονται κεκλιμένα. Έτσι στο δεξί μέρος της διάταξης λαμβάνουμε υπόψη αυτήν την κλίση.

$$E_{LUMO} = -\chi - q\phi \quad (4.14)$$

$$E_{HOMO} = -\chi - E_g - q\phi \quad (4.15)$$

Οι συγκεντρώσεις των φορέων πλειονότητας (ηλεκτρόνια) και μειονότητας (οπές) φορέων στο δεξί μέρος υπολογίζονται ανάλογα:

$$n_r = N_c \exp\left(\frac{F_n - E_{LUMO}}{kT}\right) \quad (4.16)$$

$$p_r = N_v \exp\left(\frac{E_{HOMO} - F_p}{kT}\right)$$

(4.17)

Αφού γίνουν οι παραπάνω υπολογισμοί για τα άκρα της διάταξης, γίνεται μια εκτίμηση για το προφίλ του δυναμικού στο εσωτερικό της διάταξης χρησιμοποιώντας μια γραμμική προσέγγιση. Από αυτή τη προσέγγιση στη συνέχεια υπολογίζονται οι πυκνότητες των φορέων και με επαναληπτική μέθοδο εξάγονται οι ακριβείς τιμές.

4.2.2 Μεταφορά των φορέων

Η συνολική πυκνότητα ρεύματος στη διάταξη μας οφείλεται στην ολίσθηση και στη διάχυση των φορέων. Η μεν ολίσθηση των φορέων οφείλεται στην ηλεκτρική δύναμη που δέχονται οι φορείς λόγω της παρουσίας εσωτερικού ηλεκτρικού πεδίου (που δημιουργείται με κατάλληλη επιλογή ηλεκτροδίων). Η δε διάχυση των φορέων είναι αποτέλεσμα της ύπαρξης βαθμίδων συγκέντρωσης (dn/dx , dp/dx) στο εσωτερικό του ημιαγωγού. Έτσι υπάρχει μια συνολική ροή των φορέων από περιοχές υψηλότερης συγκέντρωσης προς περιοχές χαμηλότερης. Παρακάτω δίνονται οι αντίστοιχες εκφράσεις των συνολικών πυκνοτήτων ρεύματος οφειλόμενων στα ηλεκτρόνια και τις οπές (εξισώσεις ολίσθησης-διάχυσης/drift-diffusion equations).

$$J_n = en\mu_e E_x + eD_e \frac{dn}{dx} \quad (4.18)$$

$$J_p = ep\mu_p E_x - eD_p \frac{dp}{dx}$$

(4.19)

Στην περίπτωση των ηλεκτρονίων το ρεύμα ολίσθησης και το ρεύμα διάχυσης έχουν αντίθετη φορά ενώ στην περίπτωση των οπών τα δύο ρεύματα έχουν την ίδια φορά. Οι ποσότητες D_e , D_h ονομάζονται συντελεστές διάχυσης και όπως οι ευκινήσιες των φορέων μ_e , μ_h δείχνουν το πόσο εύκολα ένας φορέας μπορεί να μετακινηθεί στο εσωτερικό ενός ημιαγωγού. Οι δύο ποσότητες συνδέονται με τη σχέση Einstein:

$$\frac{D_e}{\mu_e} = \frac{kT}{e} \quad \text{και} \quad \frac{D_h}{\mu_h} = \frac{kT}{e} \quad (4.19)$$

Για να υπολογίσουμε τις συγκεντρώσεις των φορέων σε κάθε χρονική στιγμή και για κάθε σημείο του ημιαγωγού θα πρέπει να λύσουμε τις εξισώσεις συνέχειας για τα ηλεκτρόνια και τις οπές.

$$\frac{\partial J_n}{\partial x} = q(R - G) \quad (4.20)$$

$$\frac{\partial J_p}{\partial x} = -q(R - G) \quad (4.21)$$

Όπου R, G είναι οι ρυθμοί επανασυνδυασμού φορέων και παραγωγής φορέων αντίστοιχα. Πιο συγκεκριμένα ο ρυθμός επανασυνδυασμού δίνεται από τη σχέση:

$$R = k(n, p)(np - n_{eq}p_{eq}) \quad (4.22)$$

Όπου ο δείκτης eq δείχνει την εξάρτηση της συγκέντρωσης των φορέων από τη θέση στο σκοτάδι και σε συνθήκες ισορροπίας. Ο παράγοντας k δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$k(n, p) = \frac{q(\alpha\mu_e(n) + \beta\mu_h(p))}{2\varepsilon_0\varepsilon_r} \quad (4.23)$$

Όπου α, β οι παράγοντες μείωσης Langevin (προκύπτουν βάσει πειραματικών δεδομένων και ο αριθμός τους (π.χ. εδώ δύο) εξαρτάται από το πόσο ακριβής είναι η προσαρμογή της θεωρίας στα πειραματικά δεδομένα), ε₀, ε_r η ηλεκτρική επιτρεπτότητα κενού (ε₀ = 8.854187817...×10⁻¹² F·m⁻¹) και η σχετική ηλεκτρική επιτρεπτότητα του υλικού. Η σχετική ηλεκτρική επιτρεπτότητα ενός υλικού είναι μιγαδικός αριθμός που εξαρτάται από τη συχνότητα και δίνεται από τη σχέση:

$$\varepsilon_r(\omega) = \frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_0} \quad (4.24)$$

Όπου ε(ω) η διηλεκτρική σταθερά ή διηλεκτρική συνάρτηση του υλικού (είναι μιγαδικός αριθμός και εξαρτάται από τη συχνότητα).

Τέλος για να βρεθεί η κατανομή του εσωτερικού δυναμικού της συσκευής λύνεται η εξίσωση Poisson σε κάθε σημείο της διάταξης.

$$\frac{d}{dx} \epsilon_0 \epsilon_r \frac{d\phi}{dx} = q(n_f + n_t - p_f - p_t - N_{ad}) \quad (4.25)$$

Όπου n_f και n_t , οι συγκεντρώσεις των ελεύθερων και παγιδευμένων ηλεκτρονίων αντίστοιχα, p_f και p_t , οι συγκεντρώσεις των ελεύθερων και παγιδευμένων οπών αντίστοιχα και τέλος N_{ad} η πυκνότητα των ατόμων νόθευσης του ημιαγωγού.

Οι πυκνότητα καταστάσεων (DoS) όταν χρησιμοποιείται η στατιστική Maxwell-Boltzmann συχνά περιγράφονται σαν μία παραβολική ζώνη. Για την περίπτωση των οργανικών ημιαγωγών όμως αποτελεί καλύτερη προσέγγιση η χρήση μίας γκαουσιανής συνάρτησης πυκνότητας καταστάσεων με χρήσης της κατανομής Fermi-Dirac.

$$\rho^{Gauss}(E, E_{e,h}) = \frac{N_{e,h}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\left(\frac{E-E_{e,h}}{2\sigma_{e,h}^2}\right)^2\right] \quad (4.26)$$

Όπου $N_{e,h}$ ο συνολικός αριθμός καταστάσεων μέσα στη γκαουσιανή, σ το πλάτος της γκαουσιανής, $E_{e,h}$ είναι η LUMO στην περίπτωση των ηλεκτρονίων και η HOMO στην περίπτωση των οπών. Η διαφορά της LUMO και της HOMO ορίζεται ως το ενεργειακό χάσμα.

Γενικά το σχήμα της πυκνότητας καταστάσεων είναι βασικός παράγοντας ο οποίος καθορίζει το διαχωρισμό των ψευδοεπιπέδων Fermi, την πυκνότητα των φορέων, τον επανασυνδυασμό φορέων και τον τρόπο που μεταφέρονται μέσα στον ημιαγωγό.

Παρόλο που η γκαουσιανή πυκνότητα καταστάσεων χρησιμοποιείται για την προσέγγιση της πυκνότητας καταστάσεων των οργανικών ημιαγωγών δεν μπορεί να εξηγήσει ικανοποιητικά τη δυναμική του επανασυνδυασμού των πολaronίων όπως μπορεί μία εκθετική πυκνότητα καταστάσεων. Μια αμιγώς εκθετική μορφή είναι η ακόλουθη:

$$\rho^{exponential}(E) = N^{exp} \exp(E/E^u) \quad (4.27)$$

Μια υπέρθεση της γκαουσιανής και της εκθετικής πυκνότητας καταστάσεων θα ταίριαζε καλύτερα με τα πειραματικά αποτελέσματα (καμπύλη J-V κ.ά.) όσον αφορά οργανικούς ημιαγωγούς όπως το P3HT:PCBM.

$$\rho^{ge}(E, E_{e,h}) = \rho^{Gauss}(E, E_{e,h}) + \rho^{exponential}(E) \quad (4.28)$$

Με χρήση της πυκνότητας καταστάσεων υπολογίζονται οι πυκνότητες των φορέων και οι ευκινησίες τους με βάση τις παρακάτω σχέσεις (f η συνάρτηση κατανομής Fermi-Dirac) :

$$n(T_e, E_{fn}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_n(E) f(T_e, E, E_{fn}) dE \quad (4.29)$$

$$p(T_h, E_{fh}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_h(E) (1 - f(T_h, E, E_{fh})) dE \quad (4.30)$$

Για να μπορέσουν να συμπεριληφθούν και καταστάσεις παγίδευσης φορέων πρέπει να οριστεί ένα ενεργειακό άκρο (E_e^{edge}) το οποίο να διαχωρίζει ελεύθερους και παγιδευμένους φορείς. Φυσικά θα υπάρχει ένα άκρο για τα ηλεκτρόνια και ένα για τις οπές, όπως φαίνεται στην Εικόνα 4.6.

Η ευκινησία των φορέων αγωγιμότητας είναι συνάρτηση της πυκνότητας των φορέων n, p . Οι πυκνότητες φορέων είναι αθροίσματα των ελεύθερων και παγιδευμένων φορέων. Φυσικά οι ευκινησίες παγιδευμένων και ελεύθερων φορέων διαφέρουν.

$$\mu_n(T_e, E_{fn}) = \mu_e^0 \frac{n_{\text{free}}}{n_{\text{trap}} + n_{\text{free}}} + \mu_e \frac{n_{\text{trap}}}{n_{\text{trap}} + n_{\text{free}}} = \mu_e^0 \frac{n_{\text{free}}}{n_{\text{trap}} + n_{\text{free}}} \quad (4.31)$$

Στους ελεύθερους φορείς δίνονται οι τιμές μ_e^0 , μ_h^0 (ηλεκτρόνια και οπές αντίστοιχα) ενώ στους παγιδευμένους η ευκινησία είναι μηδέν (για ηλεκτρόνια και οπές).

Αντικαθιστώντας τις σχέσεις για τις πυκνότητες φορέων έχουμε:

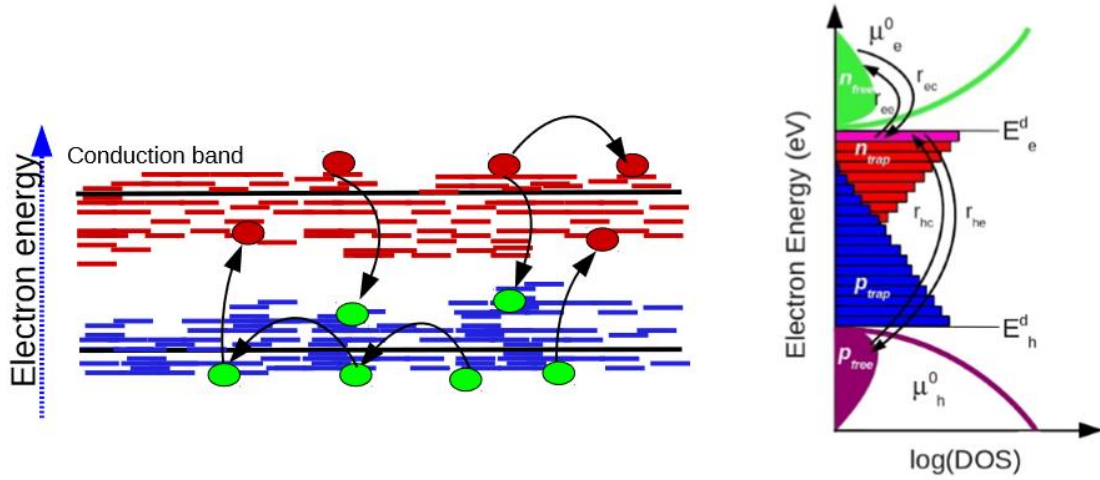
$$\mu_n(T_e, E_{fn}) = \frac{\int_{E_e^{\text{edge}}}^{\infty} \mu_e^0 \rho_e(E) f(T_e, E, E_{fn}) dE}{\int_{-\infty}^{\infty} \rho_e(E) f(T_e, E, E_{fn}) dE} \quad (4.32)$$

$$\mu_h(T_h, E_{fp}) = \frac{\int_{E_h^{\text{edge}}}^{\infty} \mu_h^0 \rho_h(E) f(T_h, E, E_{fp}) dE}{\int_{-\infty}^{\infty} \rho_h(E) f(T_h, E, E_{fp}) dE} \quad (4.33)$$

4.2.3 Παγίδευση των φορέων

Η αλληλεπίδραση των ελεύθερων φορέων με μια κατανομή παγίδων βάσει της θεωρίας Shockley-Read-Hall (SRH) περιγράφεται στο χώρο των ενεργειών στο παρακάτω σχήμα. Οι κατανομές των ελεύθερων ηλεκτρονίων και ελεύθερων οπών συμβολίζονται με n_{free} , p_{free} . Οι πληθυσμοί των παγιδευμένων ηλεκτρονίων και οπών σημειώνονται με n_{trap} , p_{trap} . Οι ρυθμοί με τους οποίους ηλεκτρόνια και οπές παγιδεύονται σε παγίδες ή διαφεύγουν από

αυτές δίνεται από τέσσερις διαφορετικούς ρυθμούς που περιγράφονται με βέλη. Στον πίνακα δίνονται οι μαθηματικές τους εκφράσεις που προκύπτουν από τη θεωρία SRH.



Εικόνα 4.6 Περιγραφή των ρυθμών παγίδευσης/διαφυγής για μία παγίδα (ροζ χρώμα).

Για κάθε παγίδα λύνεται η ακόλουθη εξίσωση ισορροπίας δίνοντας στην κάθε παγίδα ένα ανεξάρτητο ψευδο-επίπεδο Fermi. Το κάθε σημείο στο χώρο των θέσεων βρίσκεται μεταξύ 10 και 160 ανεξάρτητων καταστάσεων παγίδων.

$$\frac{\delta n_t}{\delta t} = r_{ec} - r_{ee} - r_{hc} + r_{he} \quad (4.34)$$

Όπου n_t η πυκνότητα των παγιδευμένων ηλεκτρονίων.

Πίνακας 4.3 Μαθηματικές εκφράσεις ρυθμών παγίδευσης/διαφυγής φορέων

| Μηχανισμός | Σύμβολο | Περιγραφή |
|-------------------------------|----------|-------------------------------|
| Ρυθμός παγίδευσης ηλεκτρονίων | r_{ec} | $n u_{th} \sigma_n N_t (1-f)$ |
| Ρυθμός διαφυγής ηλεκτρονίων | r_{ee} | $e_n N_t f$ |
| Ρυθμός παγίδευσης οπών | r_{hc} | $p u_{th} \sigma_p N_t f$ |
| Ρυθμός διαφυγής οπών | r_{he} | $e_p N_t (1-f)$ |

Όπου N_t η πυκνότητα παγίδων που δίνεται από τον μέσο όρο της συνάρτησης πυκνότητας καταστάσεων για όλες τις ενέργειες:

$$N_t(E) = \frac{\int_{E-\Delta E/2}^{E+\Delta E/2} \rho^e E dE}{\Delta E} \quad (4.35)$$

Όπου ρ_e η κατανομή των καταστάσεων παγίδων:

$$\rho^{e,h}(E) = N^{e,h} e^{\left(\frac{E}{E_u^{e,h}}\right)} \quad (4.36)$$

Όπου $N_{e,h}$ η πυκνότητα των καταστάσεων των παγίδων στη ζώνη HOMO ή τη ζώνη LUMO.

Η πιθανότητα κατάληψης μιας παγίδας δίνεται από μια συνάρτηση κατανομής Fermi-Dirac όπου E_t το ενεργειακό επίπεδο της παγίδας και F_t το επίπεδο Fermi της παγίδας.

$$f(E_t, F_t) = \frac{1}{e^{\frac{E_t - F_t}{kT}} + 1} \quad (4.37)$$

Τέλος τα e_n , e_p εκφράζουν τους ρυθμούς θερμικής εκπομπής για τα ηλεκτρόνια και τις οπές αντίστοιχα.

$$e_n = u_{th} \sigma_n N_c \exp\left(\frac{E_t - E_c}{kT}\right) \quad (4.38)$$

$$e_p = u_{th} \sigma_p N_v \exp\left(\frac{E_v - E_t}{kT}\right) \quad (4.39)$$

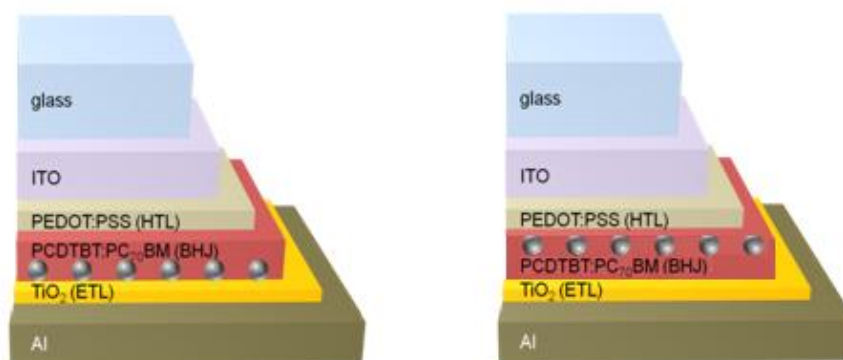
Όπου u_{th} η ταχύτητα θερμικής εκπομπής των φορέων και τα σ_n , σ_p τα cross sections παγίδευσης ηλεκτρονίων και οπών αντίστοιχα.

Το οπτικό και το ηλεκτρικό μοντέλο συνδέονται μέσω του ρυθμού παραγωγής εξιτονίων $G(r)$ το οποίο μπορεί να εξαχθεί ξεχωριστά και στη συνέχεια να εισαχθεί στο ηλεκτρικό μοντέλο.

5. ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΗΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑΣ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗΣ

5.1 ΔΙΑΤΑΞΕΙΣ ΟΡΓΑΝΙΚΩΝ ΦΩΤΟΒΟΛΤΑΪΚΩΝ

Μοντελοποιούνται συνολικά πέντε διατάξεις οργανικών φωτοβολταϊκών. Η πρώτη αφορά την περίπτωση χωρίς νανοσωματίδια (bare), η δεύτερη και η τρίτη αφορούν μικρά νανοσωματίδια (small NPs) ενώ η τέταρτη και πέμπτη μεγάλα νανοσωματίδια (large NPs), σε δύο διαφορετικές διατάξεις. Στην μία διάταξη τα νανοσωματίδια ακουμπούν στη διεπιφάνεια ενεργού στρώματος – στρώματος μεταφοράς ηλεκτρονίων (down), ενώ στην άλλη είναι τοποθετημένα στη διεπιφάνεια ενεργού στρώματος - στρώματος μεταφοράς οπών (up). Και στις δυο διαφορετικές περιπτώσεις τα νανοσωματίδια βρίσκονται εξ' ολοκλήρου μέσα στο ενεργό στρώμα. Στην Εικόνα 5.1 φαίνεται η σχηματική αναπαράσταση των δύο διατάξεων νανοσωματιδίων, ενώ στον Πίνακα 5.1 δίνονται τα πάχη των στρωμάτων που χρησιμοποιήθηκαν.



Εικόνα 5.1 Down (αριστερά) και up (δεξιά) διάταξη νανοσωματιδίων [2].

Πίνακας 5.1 Στρώματα και υλικά διατάξεων.

| Στρώμα | Πάχος (nm) | Ρόλος στρώματος |
|----------------------------|------------|------------------------------|
| Γυαλί | 100 | Υπόστρωμα |
| ITO | 140 | Ηλεκτρόδιο ανόδου |
| PEDOT:PSS | 40 | Στρώμα μεταφοράς οπών |
| PCDTBT:PC ₇₀ BM | 80 | Ενεργό στρώμα |
| TiO _x | 10 | Στρώμα μεταφοράς ηλεκτρονίων |
| Al | 70 | Ηλεκτρόδιο καθόδου |

Αλλάζοντας την περιοδικότητα και το μέγεθος των νανοδομημάτων μπορεί να γίνει διαχωρισμός των φαινομένων κοντινών και μακρινών πεδίων [2]. Ως πάχος μετάλλου t_{NP} θεωρείται το πάχος ενός υποθετικού μεταλλικού υμενίου που θα είχε τον ίδιο όγκο με τον όγκο των νανοδομημάτων.

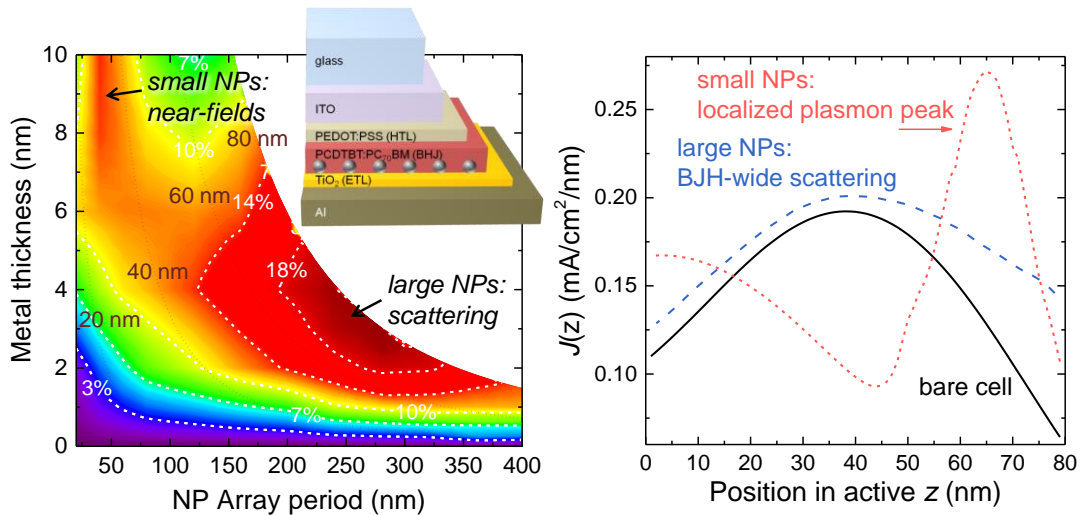
$$t_{NP} = \frac{\pi d^3}{6L^2} \quad (5.1)$$

Όπου d η διάμετρος του νανοδομημάτων και L η περιοδικότητα των νανοδομημάτων.

Η πλασματική ενίσχυση της πυκνότητας ρεύματος υπολογίζεται βάση της ακόλουθης σχέσης:

$$Plasmonic\ enhancement = \frac{J_{SC} - J_{SC}^0}{J_{SC}^0} \times 100 \quad (5.2)$$

Όπου J_{SC} η πυκνότητα ρεύματος που προκύπτει από την ενσωμάτωση των πλασματικών νανοδομημάτων και J_{SC}^0 η αντίστοιχη πυκνότητα ρεύματος που προκύπτει χωρίς χρήση πλασματικών νανοδομημάτων.

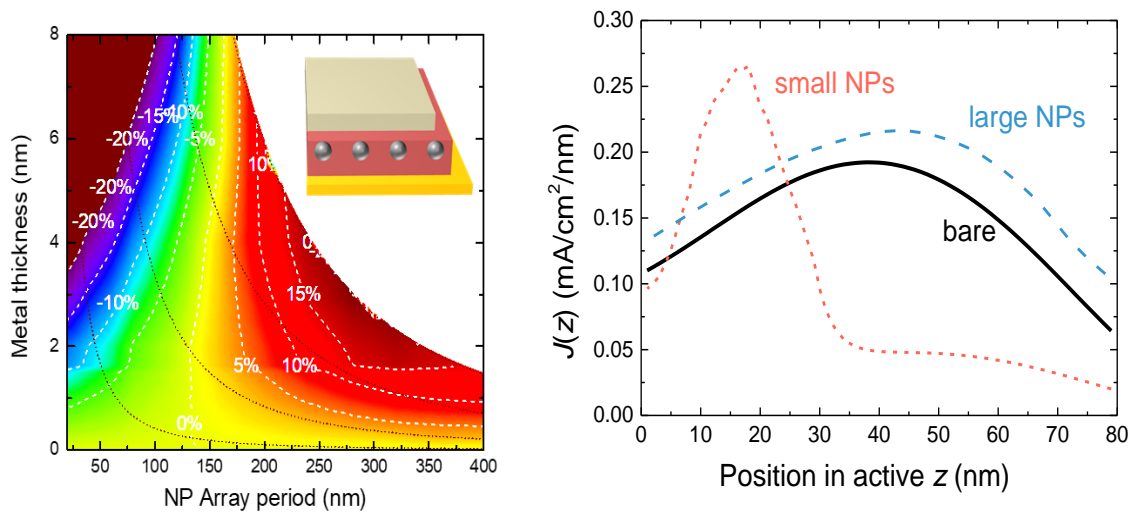


Εικόνα 5.2 Πλασματική ενίσχυση της πυκνότητας ρεύματος για περιοδικότητες από 20 έως 400nm, πάχη μετάλλου από 1 έως 10nm και πάχος ενεργού στρώματος 80nm (αριστερά) και κατανομές πυκνότητας ρεύματος ανά nm φωτοενεργού στρώματος για την περίπτωση νανοδομημάτων 30 και 80 nm (small, large αντίστοιχα) σε περιοδικότητες 40 και 280nm αντίστοιχα (δεξιά) για την περίπτωση εισαγωγής νανοδομημάτων στη διεπιφάνεια ενεργού-TiO_x. [2]

Στην περίπτωση της down διάταξης νανοδομημάτων διακρίνονται δύο βασικές περιοχές ενίσχυσης της πυκνότητας ρεύματος (Εικόνα 5.2). Η πρώτη περιοχή εντοπίζεται σε περιοδικότητες ~40nm και πάχη μετάλλου $t_{NP} > 8nm$ (το οποίο αντιστοιχεί σε

διαμέτρους νανοσωματιδίων $d=30\text{nm}$). Σε αυτή την περιοχή η ενίσχυση είναι της τάξης του $\sim 15\%$. Επιπλέον η διάταξη των νανοσωματιδίων είναι πυκνή συνεπώς δημιουργούνται ισχυρά κοντινά πεδία στην περιοχή ενδιάμεσα των νανοσωματιδίων.

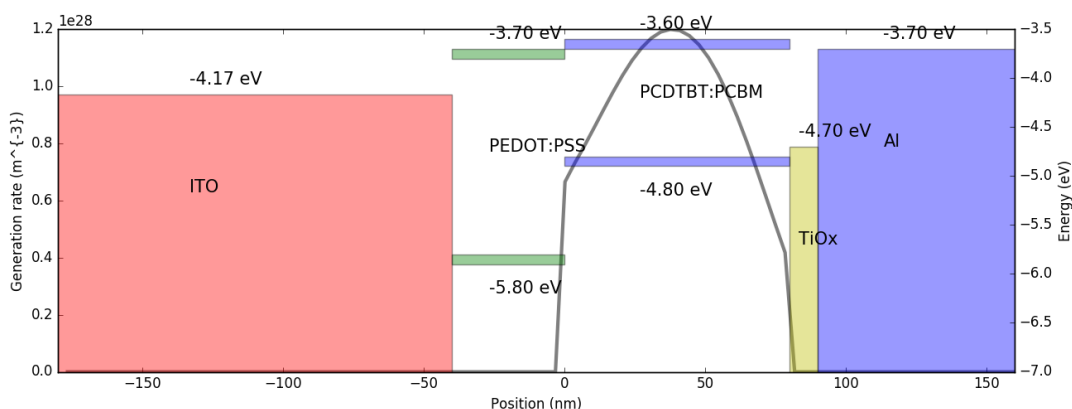
Η δεύτερη περιοχή εντοπίζεται σε περιοδικότητες $\sim 280\text{nm}$ και πάχη μετάλλου $t_{\text{NP}} \sim 4\text{nm}$ (το οποίο αντιστοιχεί σε διαμέτρους νανοσωματιδίων $d=80\text{nm}$). Η ενίσχυση είναι της τάξης του $\sim 20\%$. Σε αυτή την περιοχή έχει ενεργοποιηθεί η σκέδαση (Συνθήκη σκέδασης: $L > \lambda_{\text{min}} / n_{\text{ενεργού}} \approx 300/2=150\text{nm}$). Συνεπώς υπάρχει συνδυασμός των μηχανισμών ενίσχυσης κοντινών πεδίων και σκέδασης. Στην περίπτωση της up διάταξης παρατηρούμε ότι υπάρχει μία μόνο περιοχή ενίσχυσης λόγω της σκίασης που δημιουργείται από τα νανοσωματίδια.



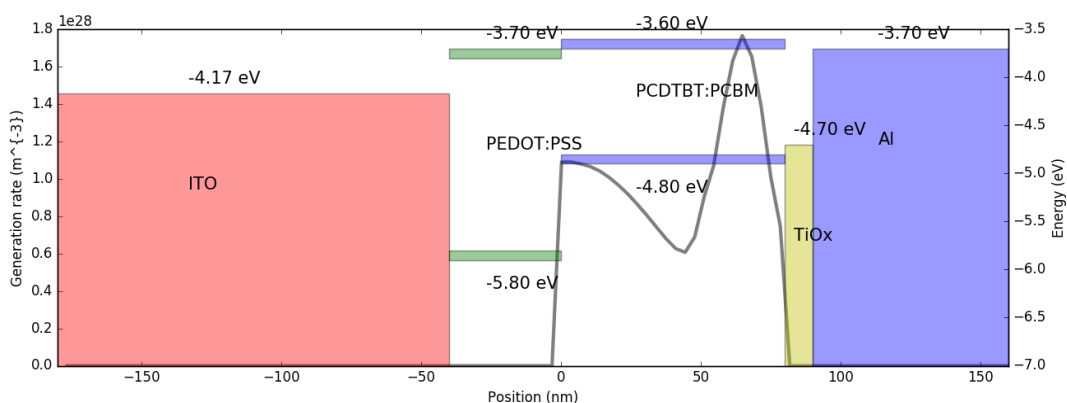
Εικόνα 5.3 Πλασμονική ενίσχυση της πυκνότητας ρεύματος για περιοδικότητες από 20 έως 400nm, πάχη μετάλλου από 1 έως 10nm και πάχος ενεργού στρώματος 80nm (αριστερά) και κατανομές πυκνότητας ρεύματος ανά nm φωτοενεργού στρώματος για την περίπτωση νανοσωματιδίων 30 και 80 nm (small, large αντίστοιχα) σε περιοδικότητες 40 και 280nm αντίστοιχα (δεξιά) για την περίπτωση εισαγωγής νανοσωματιδίων στη διεπιφάνεια ενεργού-PEDOT:PSS. [2]

5.2 ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΟΠΤΙΚΩΝ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΣΤΟ ΗΛΕΚΤΡΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ

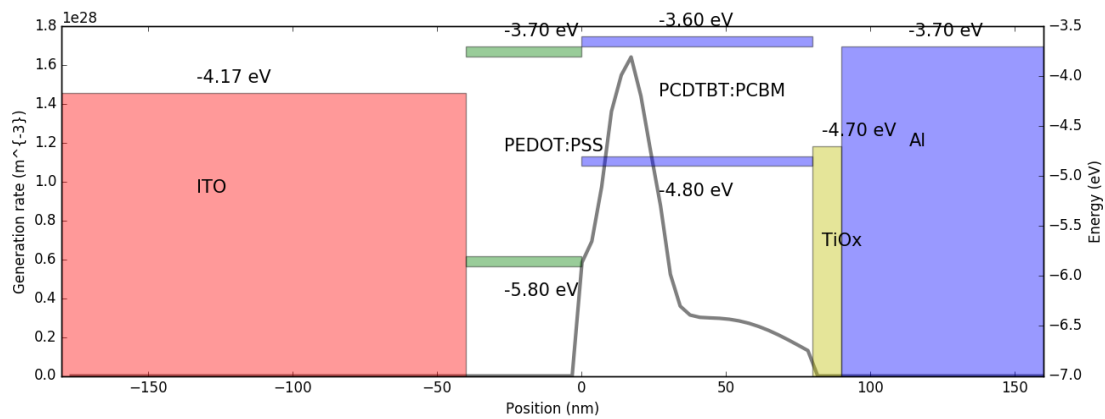
Το οπτικό και το ηλεκτρικό μοντέλο συνδέονται μέσω του ρυθμού παραγωγής εξιτονίων $G(x)$ (EGR) το οποίο μπορεί να εξαχθεί ξεχωριστά και στη συνέχεια να εισαχθεί στο ηλεκτρικό μοντέλο. Αρχικά εισάγεται η διάταξη, στη συνέχεια τα υλικά και τα πάχη των στρωμάτων. Στις Εικόνες που ακολουθούν φαίνεται η εισαγωγή των πέντε διαφορετικών EGR. Επιπλέον θα πρέπει να εισαχθούν οι ηλεκτρικές παράμετροι (οι οποίες αναφέρονται μόνο στο ενεργό στρώμα μιας και εκεί λύνονται οι εξισώσεις ολίσθησης-διάχυσης). Αναλυτικά όλες οι παράμετροι που χρησιμοποιήθηκαν δίνονται στον Πίνακα 5.2.



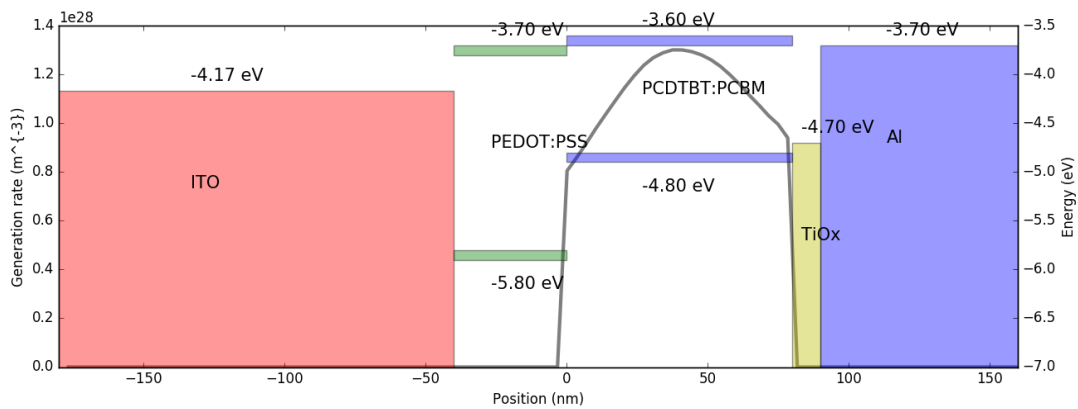
Εικόνα 5.4 Ρυθμός παραγωγής εξιτονίων για την περίπτωση κυττάρου χωρίς νανοσωματίδια.



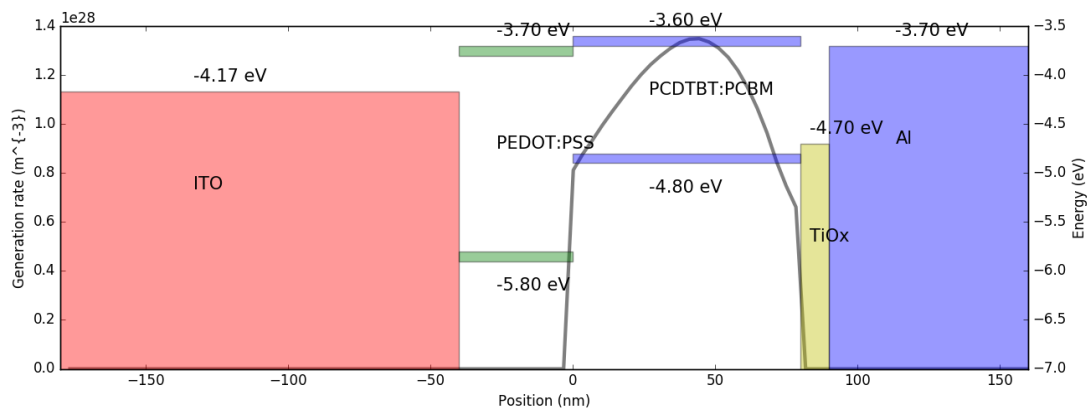
Εικόνα 5.5 Ρυθμός παραγωγής εξιτονίων για την περίπτωση κυττάρου με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη.



Εικόνα 5.6 Ρυθμός παραγωγής εξιτονίων για την περίπτωση κυττάρου με μικρά νανωσωματίδια σε up διάταξη.



Εικόνα 5.7 Ρυθμός παραγωγής εξιτονίων για την περίπτωση κυττάρου με μεγάλα νανωσωματίδια σε down διάταξη.



Εικόνα 5.8 Ρυθμός παραγωγής εξιτονίων για την περίπτωση κυττάρου με μεγάλα νανωσωματίδια σε up διάταξη.

Πίνακας 5.2 Παράμετροι ηλεκτρικού μοντέλου

| DoS Distribution | Exponential | |
|--|-------------|--|
| Electron Trap Density | 4,0E+26 | $\text{m}^{-3} \text{eV}^{-1}$ |
| Hole Trap Density | 4,0E+26 | $\text{m}^{-3} \text{eV}^{-1}$ |
| Electron Tail Slope | 4,0E-02 | eV |
| Hole Tail Slope | 4,0E-02 | eV |
| Electron Mobility | 1,0E-05 | $\text{m}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ |
| Hole Mobility | 1,0E-07 | $\text{m}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ |
| Relative Permittivity | 3.4 | au |
| Number of Traps | 10 | bands |
| Free Electron to Trapped Electron | 1,0E-20 | m^{-2} |
| Trapped Electron to Free Hole | 1,0E-22 | m^{-2} |
| Trapped Hole to Free Electron | 1,0E-22 | m^{-2} |
| Free Hole to Trapped Hole | 1,0E-20 | m^{-2} |
| Effective Density of Free Electron States | 5,0E+26 | m^{-3} |
| Effective Density of Free Hole States | 5,0E-26 | m^{-3} |
| X_i | 3.6 | eV |
| E_g | 1.2 | eV |
| n_{free} to p_{free} Recombination Rate Constant | 0 | $\text{m}^3 \text{s}^{-1}$ |
| Hole Majority Contact on Left/Right of Device | Left | |
| Charge on Right Contact | 1,0E+26 | m^{-3} |
| Charge on Left Contact | 1,0E+26 | m^{-3} |
| Series Resistance | 19.50 | Ohms |
| Shunt Resistance | 1.9E+05 | Ohms |

6. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Οι ρυθμοί παραγωγής εξιτονίων για τα μεγάλα νανοσωματίδια όπου έχουμε ενίσχυση κυρίως λόγω σκέδασης είναι ομοιόμορφα κατανεμημένα γύρω από το κέντρο του ενεργού στρώματος. Όμως για τα μικρά νανοσωματίδια όπου η ενίσχυση προκύπτει κυρίως λόγω των κοντινών πεδίων, ο ρυθμός παραγωγής εξιτονίων είναι ανομοιόμορφος και παρουσιάζει αύξηση γύρω από το νανοσωματίδιο.

Το γεγονός της ανομοιόμορφης κατανομής του ρυθμού παραγωγής εξιτονίων μέσα στο ενεργό στρώμα μας οδήγησε να εξετάσουμε τι θα γινόταν με μεταβολή της ευκινησίας των φορέων αγωγιμότητας. Έτσι μελετήθηκαν τα ηλεκτρικά χαρακτηριστικά των πέντε διατάξεων για όλους τους δυνατούς συνδυασμούς ευκινησίας ηλεκτρονίων και οπών στο εύρος από $\mu_e, \mu_h = 10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ έως $10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$.

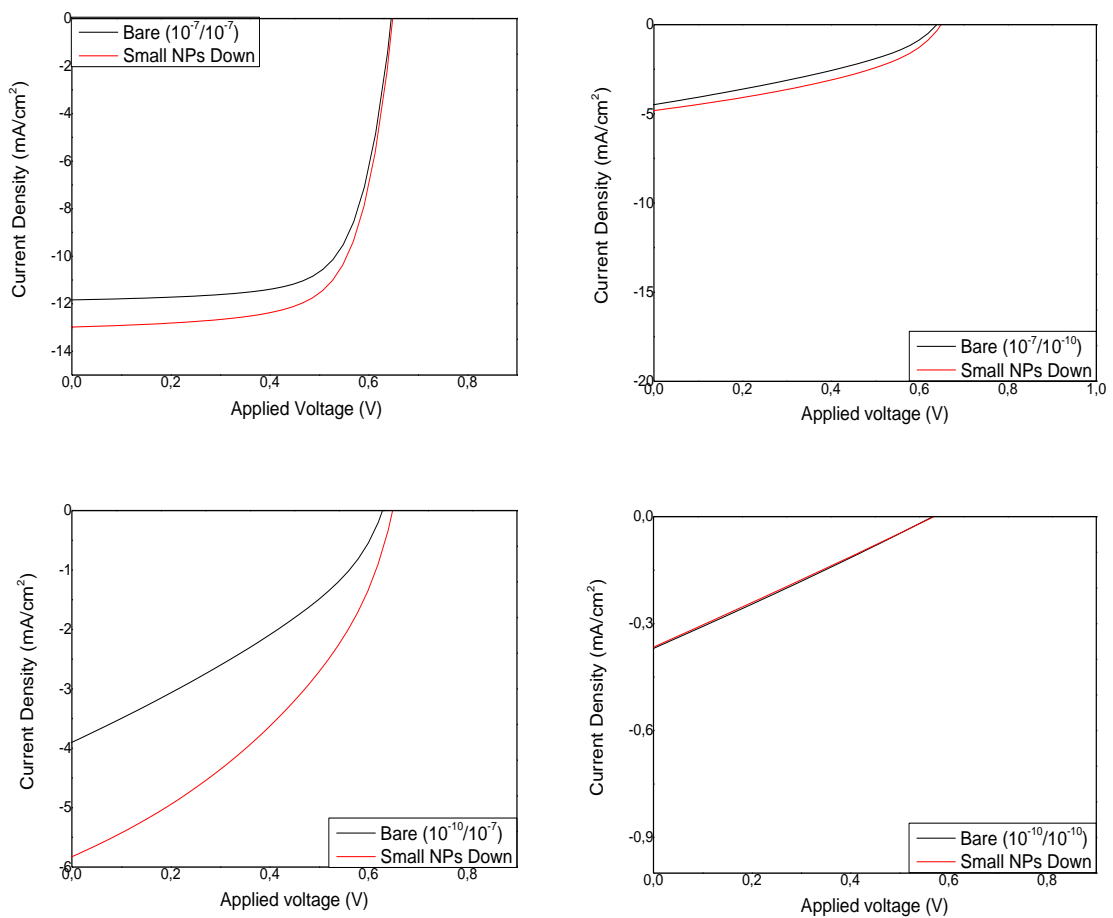
Επιπλέον για τέσσερις χαρακτηριστικές περιπτώσεις ζευγών ευκινησίας $\mu_e, \mu_h = 10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ (1^ο ζεύγος), $\mu_e = 10^{-7} / \mu_h = 10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ (2^ο ζεύγος), $\mu_e = 10^{-10} / \mu_h = 10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ (3^ο ζεύγος), $\mu_e, \mu_h = 10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ (4^ο ζεύγος) έγινε πλήρης ανάλυση των καμπυλών J-V, της κατανομής ηλεκτρικού πεδίου, συνολικού φορτίου, SRH ρυθμών επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων και οπών, πυκνότητας παγιδευμένων φορέων, ανά nm ενεργού στρώματος. Όλα τα διαγράμματα δίνονται στα παραρτήματα.

Στην Εικόνα 6.1 παρουσιάζονται οι καμπύλες J-V για την περίπτωση των μικρών NPs σε down διάταξη. Στο πάνω αριστερά διάγραμμα όπου οι ευκινησίες των φορέων είναι μεγάλες, το ρεύμα βραχυκυκλώσεως είναι μεγαλύτερο και οι καμπύλες είναι πιο τετράγωνες δηλαδή έχουν καλύτερο παράγοντα πλήρωσης οδηγώντας σε υψηλότερη απόδοση. Στο κάτω δεξιά διάγραμμα οι ευκινησίες είναι πολύ μικρές, οδηγώντας σε χαμηλή απόδοση.

Ενδιαφέρον παρουσιάζουν τα άλλα δύο διαγράμματα, όπου οι ευκινησίες των φορέων διαφέρουν σημαντικά. Δηλαδή ο ένας φορέας είναι πολύ γρήγορος και ο άλλος πολύ αργός. Βλέπουμε ότι στην μία περίπτωση όπου οι οπές είναι πιο γρήγορες (κάτω αριστερά διάγραμμα) έχουμε καλύτερο ρεύμα βραχυκυκλώσεως, ενώ στην περίπτωση όπου τα ηλεκτρόνια είναι πιο γρήγορα (πάνω δεξιά διάγραμμα) το ρεύμα βραχυκυκλώσεως είναι χαμηλότερο.

Αυτό εξηγείται βάση του ρυθμού παραγωγής εξιτονίων που δόθηκε στην Εικόνα 5.2. Η καμπύλη που περιγράφει το ρυθμό δεν είναι ομοιόμορφη γύρω από το κέντρο, αλλά αντίθετα παρουσιάζει το μέγιστο στα περίπου 65-75nm. Αυτή η περιοχή βρίσκεται κοντά

στην περιοχή συλλογής των ηλεκτρονίων. Συνεπώς η περιοχή όπου δημιουργούνται οι περισσότεροι φορείς είναι πιο κοντά στο στρώμα μεταφοράς ηλεκτρονίων και πιο μακριά στο στρώμα μεταφοράς οπών. Έτσι οι οπές έχουν να διασχίσουν μεγαλύτερη διαδρομή από τα ηλεκτρόνια. Οπότε όταν οι οπές είναι γρήγορες, θα επανασυνδεθούν πιο δύσκολα και θα φτάσουν στο αντίστοιχο ηλεκτρόδιο. Όμως όταν οι οπές είναι αργές, σε συνδυασμό με τη μεγαλύτερη διαδρομή που έχουν να διασχίσουν, θα επανασυνδεθούν πιο εύκολα και θα δώσουν χαμηλότερο ρεύμα.



Εικόνα 6.1 Καμπύλες J-V χαρακτηριστικών ζευγών ευκινησίας φορέων για την περίπτωση των μικρών νανοσωματιδίων σε down διάταξη.

Εν συνεχεία έγινε μελέτη της επίδρασης των ευκινησιών των φορέων στις ηλεκτρικές ιδιότητες του κυττάρου. Οι χάρτες που προέκυψαν παρουσιάζονται στο Παράρτημα 2. Σε κάθε περίπτωση είχαμε καλύτερα ηλεκτρικά χαρακτηριστικά με αύξηση τις ευκινησίας των φορέων.

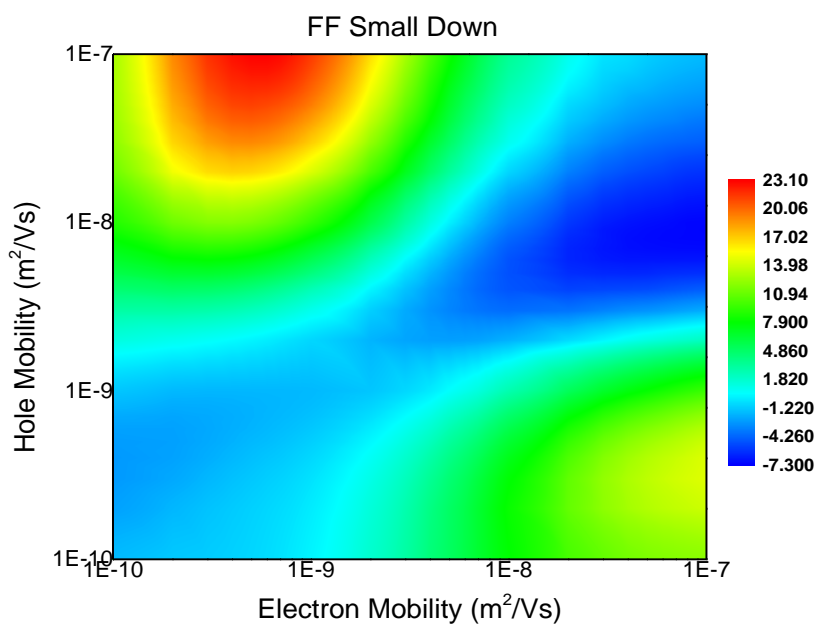
Επιπλέον έγινε η σύγκριση μεταξύ των διατάξεων με NPs και χωρίς NPs. Έτσι στους χάρτες που ακολουθούν παρουσιάζεται η επί τοις εκατό πλασματική ενίσχυση σε κάθε ηλεκτρική ιδιότητα.

Όσον αφορά τα μικρά NPs σε down διάταξη παρατηρείται ότι υπάρχει μια ενίσχυση της απόδοσης της τάξης του 74% στην περιοχή των μεγάλων ευκινησιών οπών και μικρών ευκινησιών ηλεκτρονίων, ακριβώς σε αναλογία με τις προηγούμενες καμπύλες ρεύματος – τάσης. Στην περιοχή της μέγιστης ενίσχυσης της απόδοσης οι τιμές των τεσσάρων βασικών ηλεκτρικών ιδιοτήτων και οι αντίστοιχες πλασματικές ενισχύσεις (οι οποίες δίνονται στις παρενθέσεις) είναι οι εξής: PCE = 1.456 % (74%), FF = 38.49 (11 %), $V_{oc} = 0.648V$ (3.5%) και $J_{sc} = 0.5831 \text{ mA/cm}^2$ (49%).

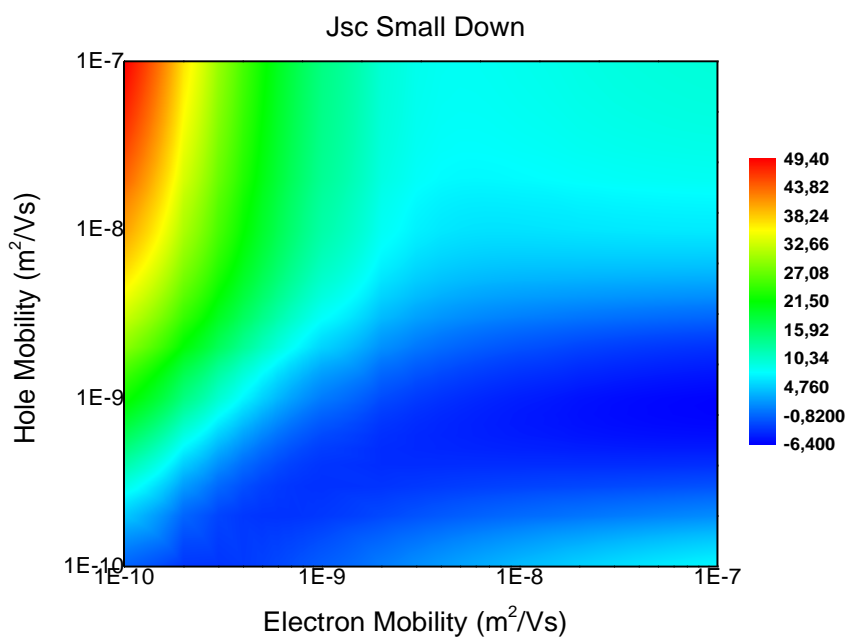
Στην περίπτωση των μικρών NPs σε up διάταξη παρατηρείται ότι η μέγιστη ενίσχυση της απόδοσης είναι της τάξης του 25% στην περιοχή των μεγάλων ευκινησιών ηλεκτρονίων και των μικρών ευκινησιών οπών. Σε σύγκριση με τα μικρά NPs σε down διάταξη τα up έχουν μεγαλύτερη περιοχή αρνητικής ενίσχυσης και αυτό οφείλεται στα φαινόμενα σκίασης που δημιουργούνται λόγω της πυκνής διάταξης των NPs. Στην περιοχή της μέγιστης ενίσχυσης της απόδοσης οι τιμές των τεσσάρων βασικών ηλεκτρικών είναι οι εξής: PCE = 1.293 % (26 %), FF = 38.52 (14 %), $V_{oc} = 0.643V$ (1.1 %) και $J_{sc} = 0.5218 \text{ mA/cm}^2$ (16 %).

Στα μεγάλα NPs σε down διάταξη παρατηρείται μέγιστη ενίσχυση της απόδοσης ~48% στην των μεγάλων ευκινησιών οπών και των μικρών ευκινησιών ηλεκτρονίων. Σε κάθε ζεύγος ευκινησιών επιπλέον παρατηρείται θετική ενίσχυση. Στην περιοχή της μέγιστης ενίσχυσης της απόδοσης οι τιμές των τεσσάρων βασικών ηλεκτρικών είναι οι εξής: PCE = 1.237 % (48%), FF = 36.98 (8.4 %), $V_{oc} = 0.647V$ (3 %) και $J_{sc} = 0.5173 \text{ mA/cm}^2$ (33 %).

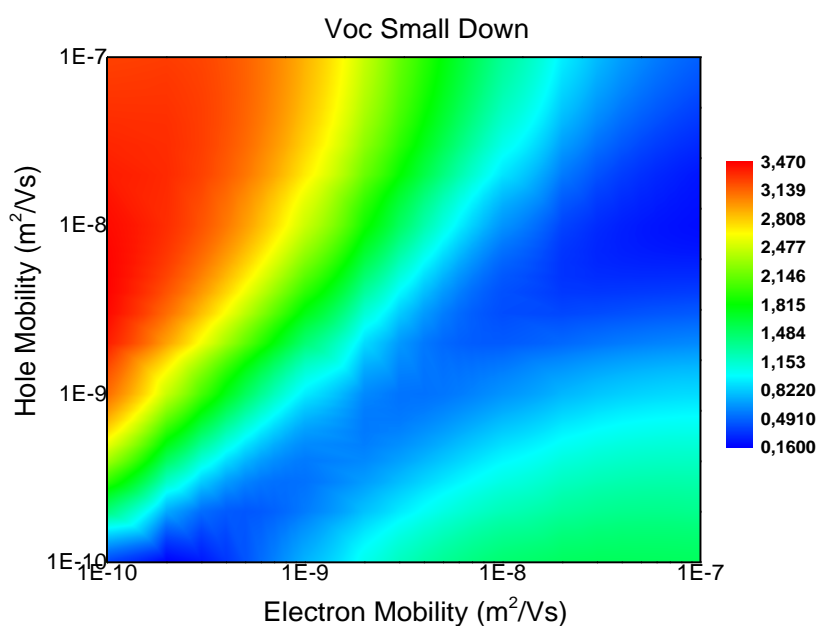
Στα μεγάλα NPs σε up διάταξη παρατηρείται μέγιστη ενίσχυση της απόδοσης ~28% στην των μεγάλων ευκινησιών οπών και των μικρών ευκινησιών ηλεκτρονίων. Όμοια σε κάθε ζεύγος ευκινησιών παρατηρείται θετική ενίσχυση. Στην περιοχή της μέγιστης ενίσχυσης της απόδοσης οι τιμές των τεσσάρων βασικών ηλεκτρικών είναι οι εξής: PCE = 1.076 % (28.7 %), FF = 35.13 (3.8 %), $V_{oc} = 0.640V$ (1.9 %) και $J_{sc} = 0.479 \text{ mA/cm}^2$ (22.7 %). Στο Παράρτημα 4 δίνονται αναλυτικά οι Πίνακες με τα ηλεκτρικά χαρακτηριστικά για κάθε ζεύγος ευκινησιών φορέων.



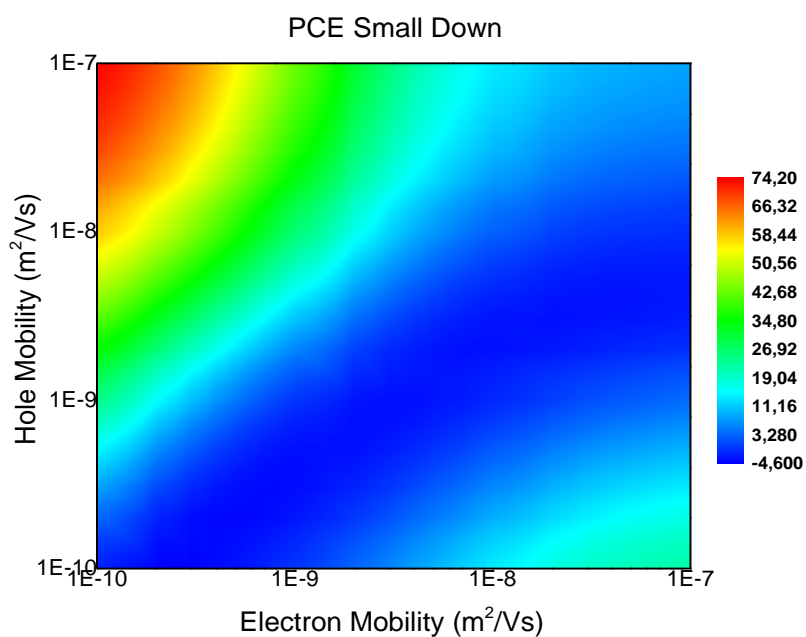
Εικόνα 6.2 Πλασμονική ενίσχυση του παράγοντα πλήρωσης για την περίπτωση μικρών νανοσωματιδίων σε down διάταξη.



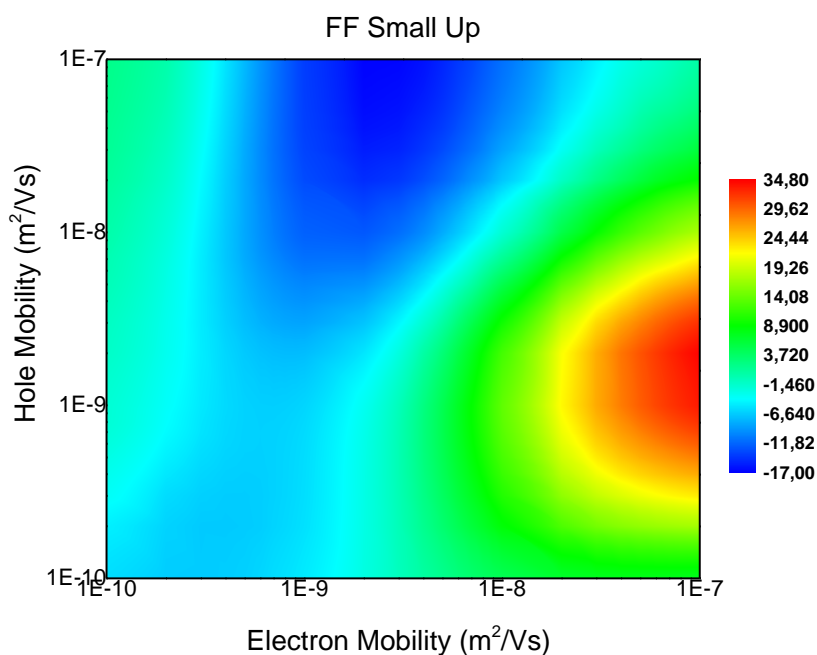
Εικόνα 6.3 Πλασμονική ενίσχυση της πυκνότητας ρεύματος για την περίπτωση μικρών νανοσωματιδίων σε down διάταξη.



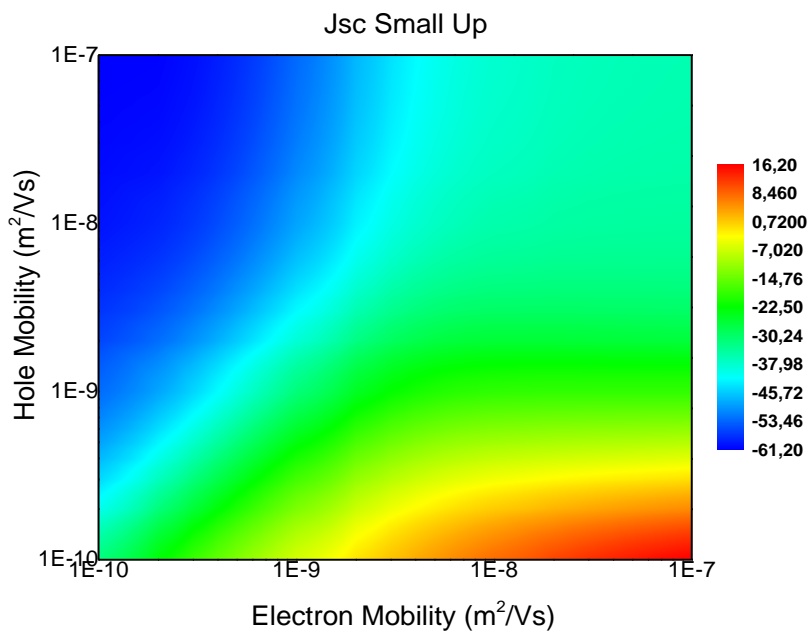
Εικόνα 6.4 Πλασμονική ενίσχυση της τάσης ανοιχτού κυκλώματος για την περίπτωση μικρών νανοδομημάτων σε down διάταξη.



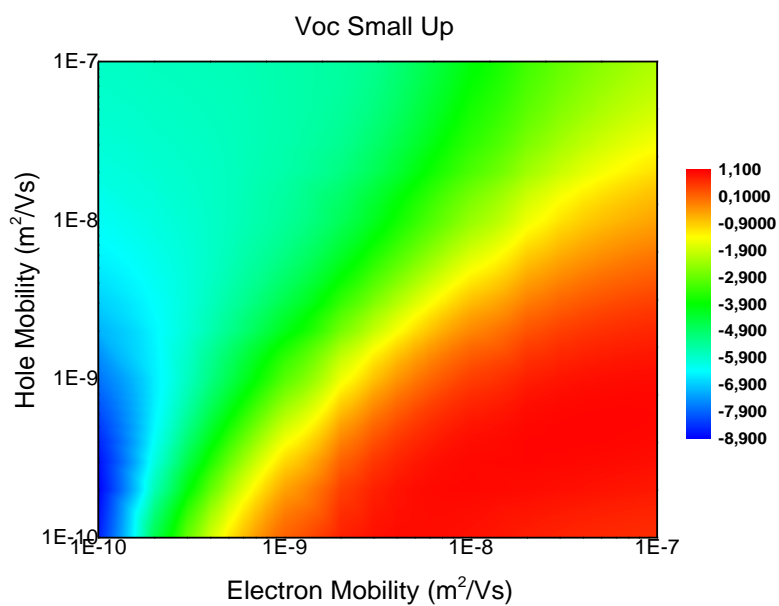
Εικόνα 6.5 Πλασμονική ενίσχυση της απόδοσης για την περίπτωση μικρών νανοδομημάτων σε down διάταξη.



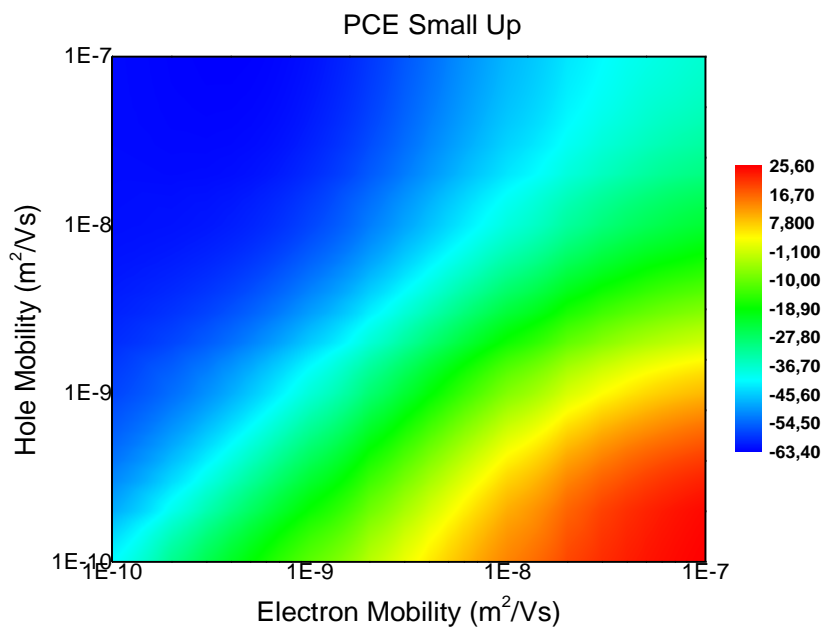
Εικόνα 6.6 Πλασμονική ενίσχυση του παράγοντα πλήρωσης για την περίπτωση μικρών νανοσωματιδίων σε up διάταξη.



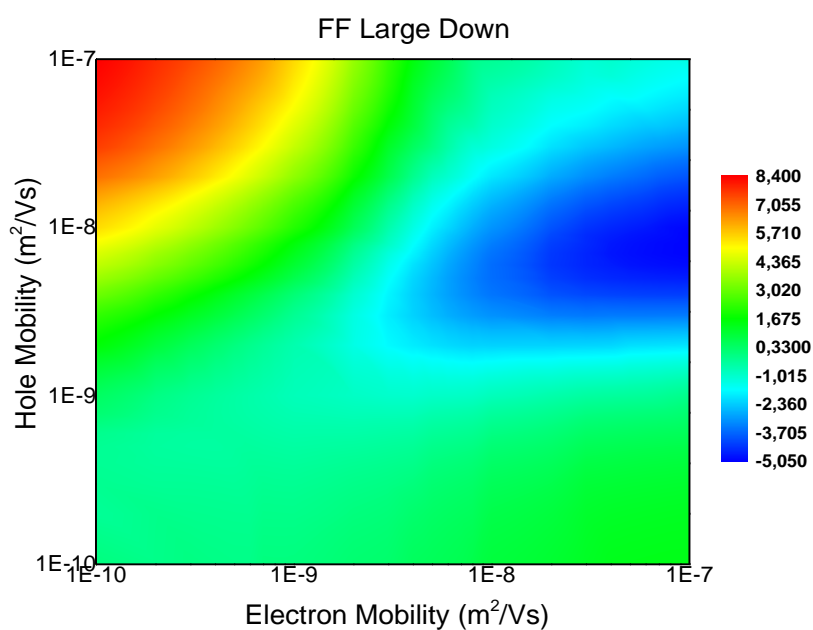
Εικόνα 6.7 Πλασμονική ενίσχυση της πυκνότητας ρεύματος για την περίπτωση μικρών νανοσωματιδίων σε up διάταξη.



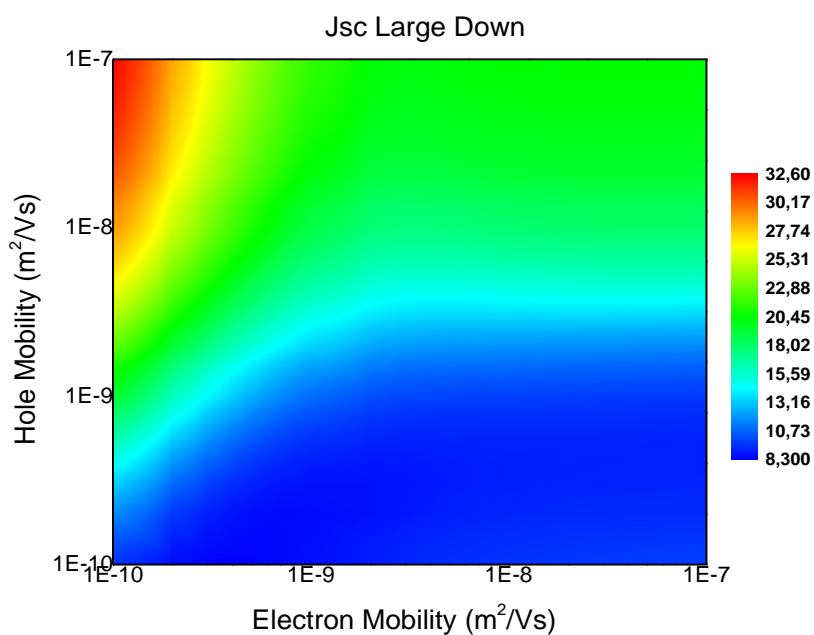
Εικόνα 6.8 Πλασμονική ενίσχυση της τάσης ανοιχτού κυκλώματος για την περίπτωση μικρών νανοσωματιδίων σε up διάταξη.



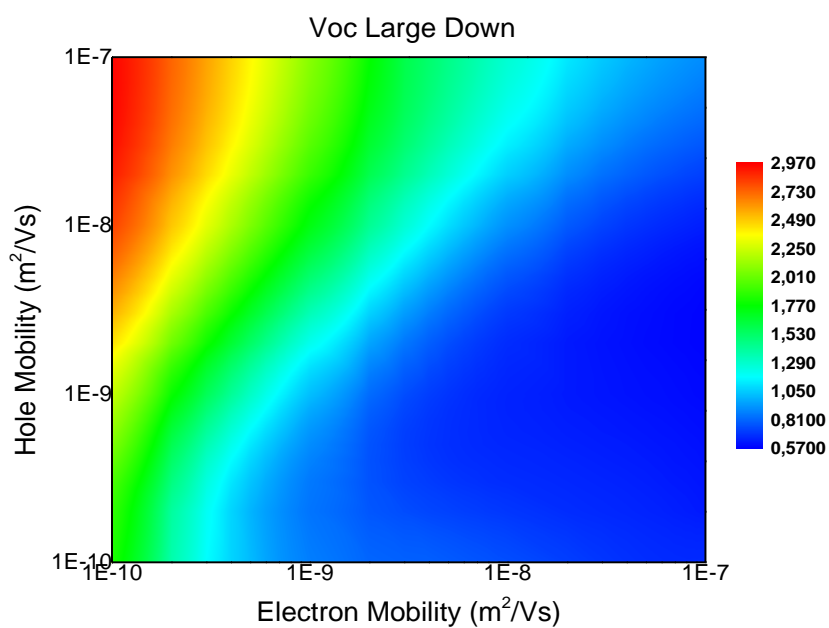
Εικόνα 6.9 Πλασμονική ενίσχυση της απόδοσης για την περίπτωση μικρών νανοσωματιδίων σε up διάταξη.



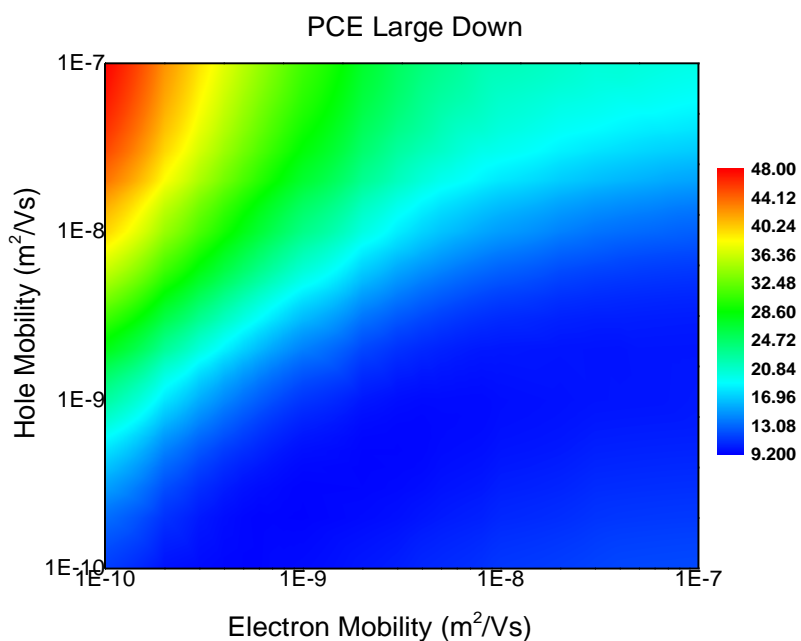
Εικόνα 6.10 Πλασμονική ενίσχυση του παράγοντα πλήρωσης για την περίπτωση μεγάλων νανοσωματιδίων σε down διάταξη.



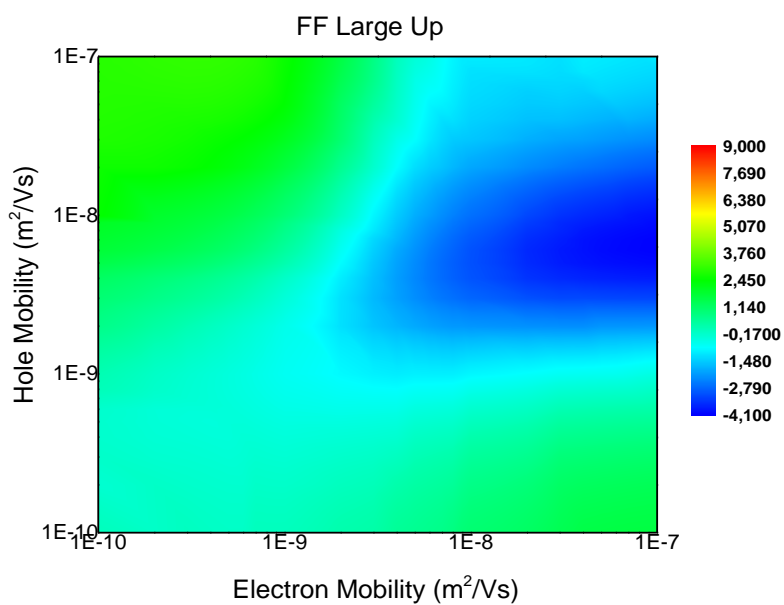
Εικόνα 6.11 Πλασμονική ενίσχυση της πυκνότητας ρεύματος για την περίπτωση μεγάλων νανοσωματιδίων σε down διάταξη.



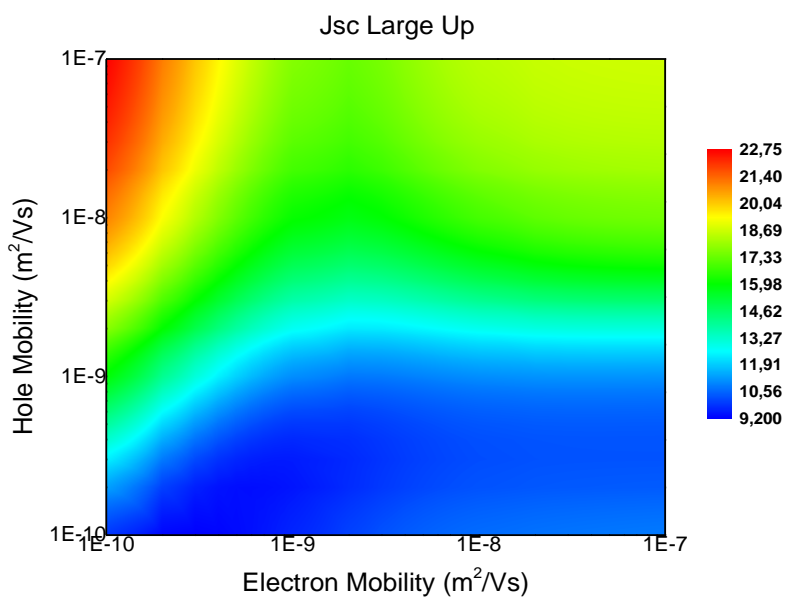
Εικόνα 6.12 Πλασμονική ενίσχυση της τάσης ανοιχτού κυκλώματος για την περίπτωση μεγάλων νανοδομημάτων σε down διάταξη.



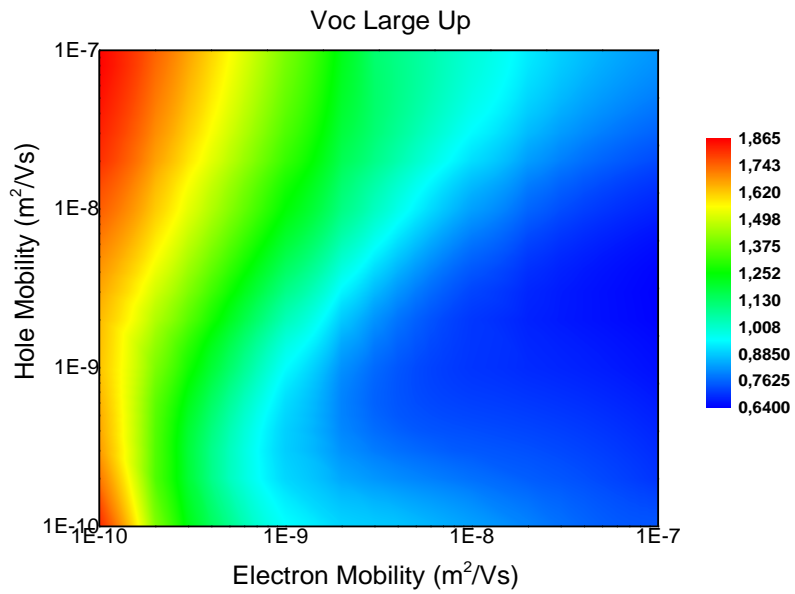
Εικόνα 6.13 Πλασμονική ενίσχυση της απόδοσης για την περίπτωση μεγάλων νανοδομημάτων σε down διάταξη.



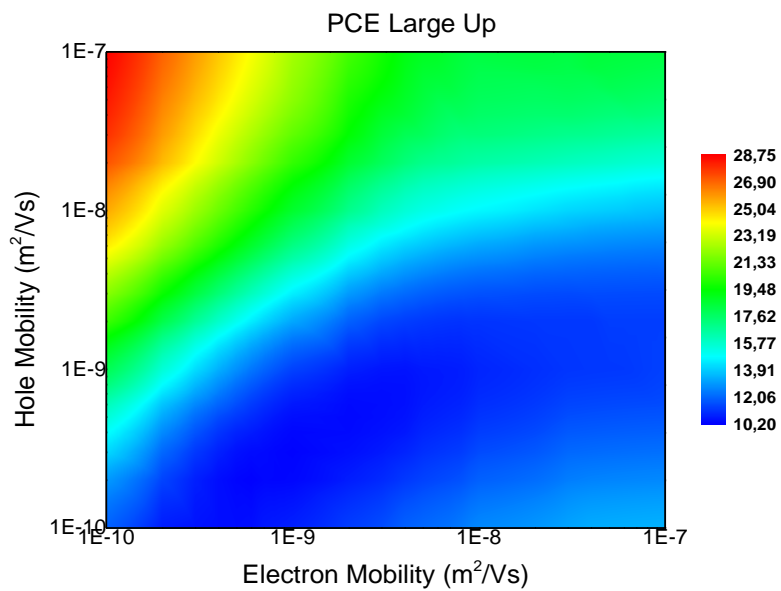
Εικόνα 6.14 Πλασμονική ενίσχυση του παράγοντα πλήρωσης για την περίπτωση μεγάλων νανοσωματιδίων σε up διάταξη.



Εικόνα 6.15 Πλασμονική ενίσχυση της πυκνότητας ρεύματος για την περίπτωση μεγάλων νανοσωματιδίων σε up διάταξη.



Εικόνα 6.16 Πλασμονική ενίσχυση της τάσης ανοιχτού κυκλώματος για την περίπτωση μεγάλων νανοδοματιδίων σε up διάταξη.



Εικόνα 6.17 Πλασμονική ενίσχυση της απόδοσης για την περίπτωση μεγάλων νανοδοματιδίων σε up διάταξη.

Συγκεντρωτικά από όλους τους χάρτες της πλασμονικής ενίσχυσης της απόδοσης για όλες τις περιπτώσεις (μεγάλα και μικρά NPs down/up) εντοπίστηκε η περίπτωση με τη μεγαλύτερη ενίσχυση και αντίστοιχα με τη μικρότερη για κάθε ζεύγος ευκινησίας των φορέων. Οι νέοι χάρτες που προέκυψαν παρουσιάζονται στις Εικόνες 6.18 και 6.19.

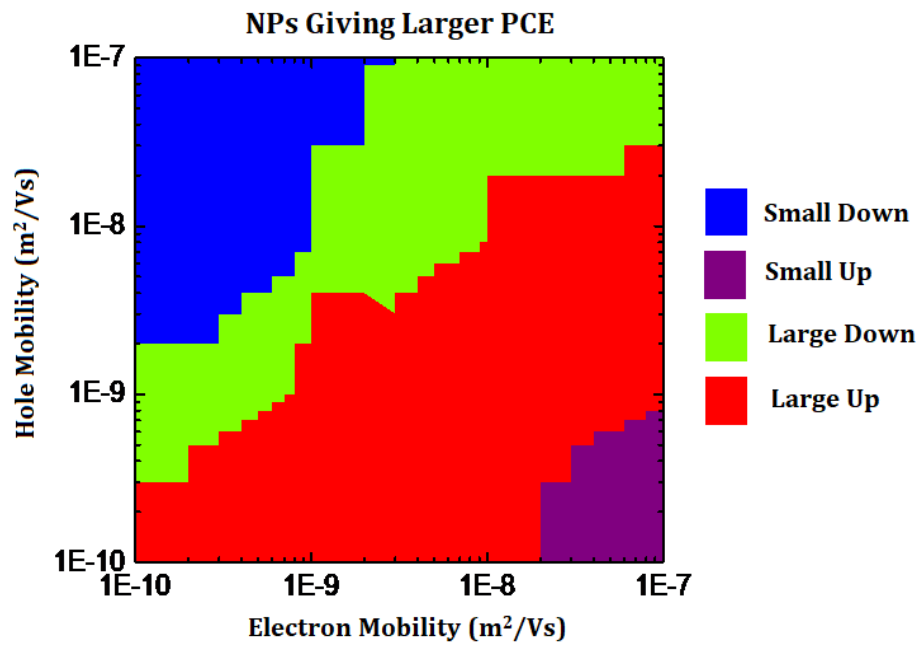
Εξετάζοντας προσεκτικά τον χάρτη της Εικόνας 6.18, βρέθηκε ότι για κάθε περίπτωση ζευγών ευκινησίας τα πλασμονικά NPs ενισχύουν τη διάταξη. Η χρησιμότητα ενός τέτοιου χάρτη έγκειται στο γεγονός ότι για συγκεκριμένο ζεύγος ευκινησίας φορέων (όπου η ευκινησίες των φορέων είναι ιδιότητες του υλικού που δεν μπορούν να μεταβληθούν) προβλέπεται ποιο είδος NPs θα βελτιώσει στο μεγαλύτερο βαθμό την απόδοση, καθώς και σε ποια ακριβώς θέση θα πρέπει να τοποθετηθεί μέσα στο ενεργό στρώμα (down/up).

Επιπλέον στους χάρτες των Εικόνων 6.3 και 6.4 παρουσιάζεται το μέγεθος της πλασμονικής ενίσχυσης της απόδοσης για τις καλύτερες περιπτώσεις καθώς και το μέγεθος της απόδοσης αντίστοιχα. Εδώ παρατηρείται ότι η μέγιστη ενίσχυση της απόδοσης φτάνει το 74% στην περίπτωση των πολύ μικρών ευκινησιών των ηλεκτρονίων σε συνδυασμό με πολύ μεγάλες ευκινησίες οπών. Για αυτό το συνδυασμό η απόδοση του κυττάρου είναι 1.5% συνεπώς ακόμα και μια τόσο μεγάλη πλασμονική ενίσχυση δεν θα βελτιώσει σημαντικά την απόδοση, γιατί είναι ήδη πάρα πολύ μικρή. Στην περίπτωση της μέγιστης απόδοσης, η οποία προκύπτει για τις μεγαλύτερες ευκινησίες και είναι 6.4% η πλασμονική ενίσχυση είναι της τάξης του 23%.

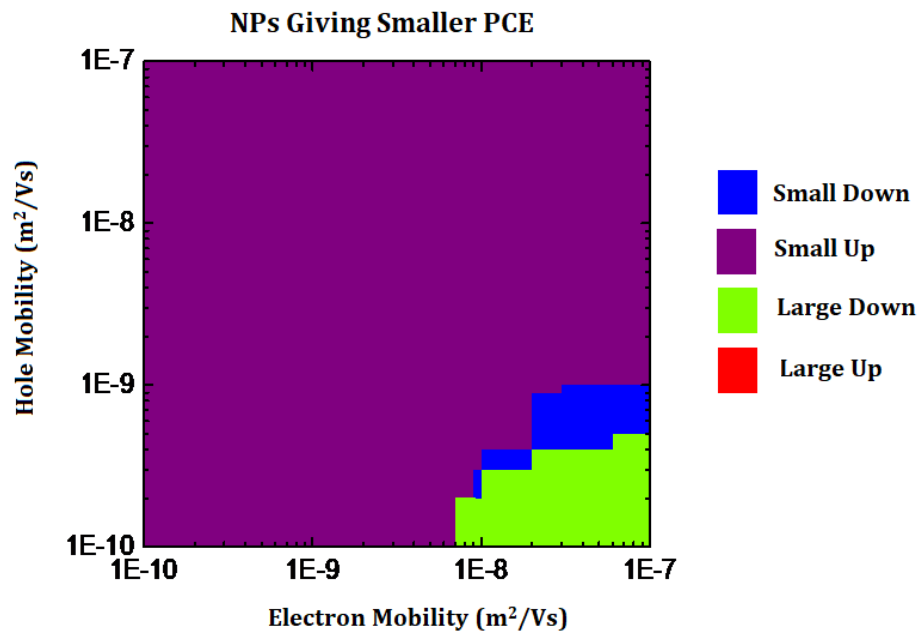
Οι χειρότερες περιπτώσεις στο μεγαλύτερο μέρος του χάρτη της Εικόνας 6.19 δίνονται τοποθετώντας τα μικρά NPs σε up διάταξη, και αν ανατρέξουμε στον αντίστοιχο οπτικό χάρτη, αυτή είναι η περίπτωση με τη χειρότερη ενίσχυση, που έχει αποδοθεί τα φαινόμενα σκίασης που δημιουργούνται λόγω της πυκνής διάταξης των NPs. Στην Εικόνα 6.5 βλέπουμε ότι η χειρότερη ενίσχυση φτάνει το -63% στην περίπτωση των μικρών ευκινησιών των ηλεκτρονίων και των μεγάλων ευκινησιών των οπών.

Αξίζει να σημειωθεί ότι σε αυτές τις ευκινησίες (πάνω αριστερή γωνία των χαρτών) η καλύτερη ενίσχυση χρησιμοποιεί μικρά NPs σε down διάταξη (προσφέροντας 74% ενίσχυση) ενώ η χειρότερη χρησιμοποιεί πάλι τα ίδια μικρά NPs, τοποθετημένα σε up διάταξη καταστρέφοντας την απόδοση (με -63% ενίσχυση).

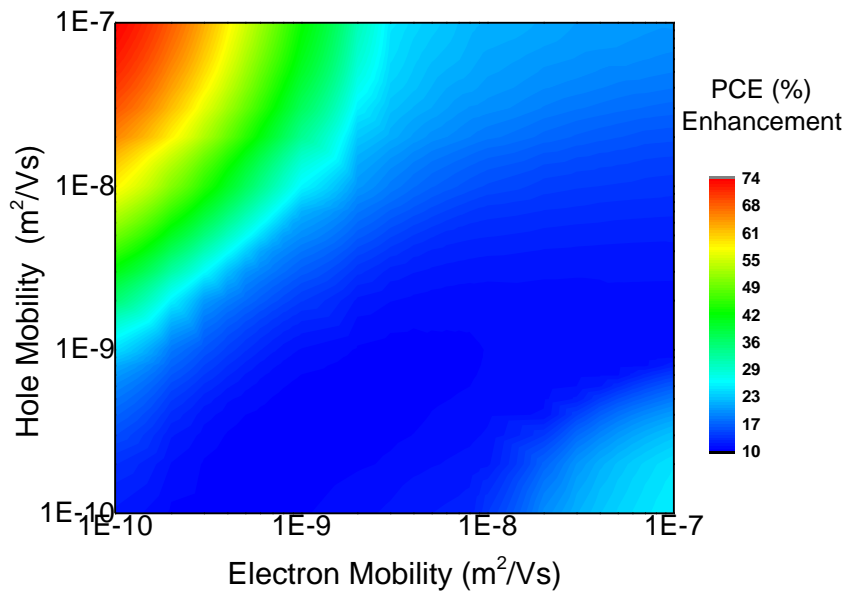
Συνεπώς η χρήση NPs σε λάθος θέση ή λάθος μέγεθος μπορεί να καταστρέψει την απόδοση του κυττάρου, την ίδια στιγμή που ο σωστός συνδυασμός μπορεί να προσφέρει τη μέγιστη (και πάντα θετική) ενίσχυση.



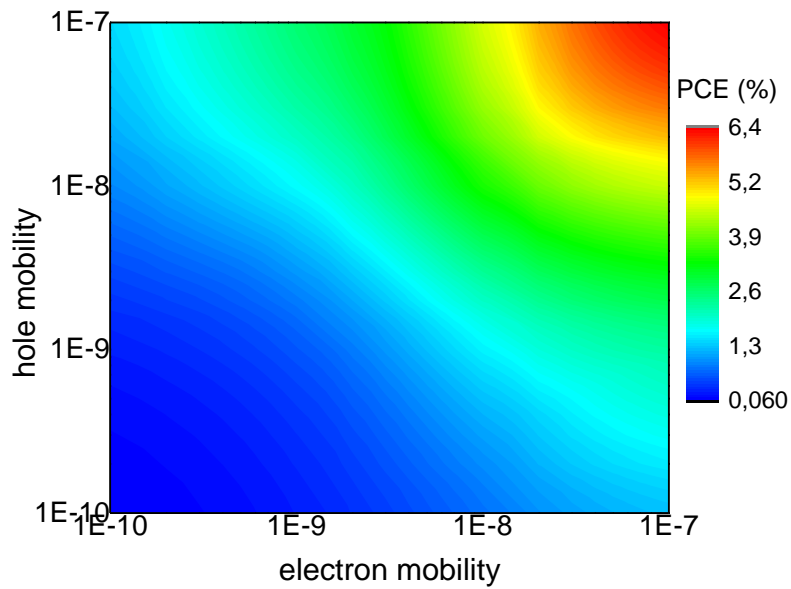
Εικόνα 6.18 Χάρτης διατάξεων μέγιστης ενίσχυσης της απόδοσης για όλα τα ζεύγη ευκινησιών των φορέων αγωγιμότητας.



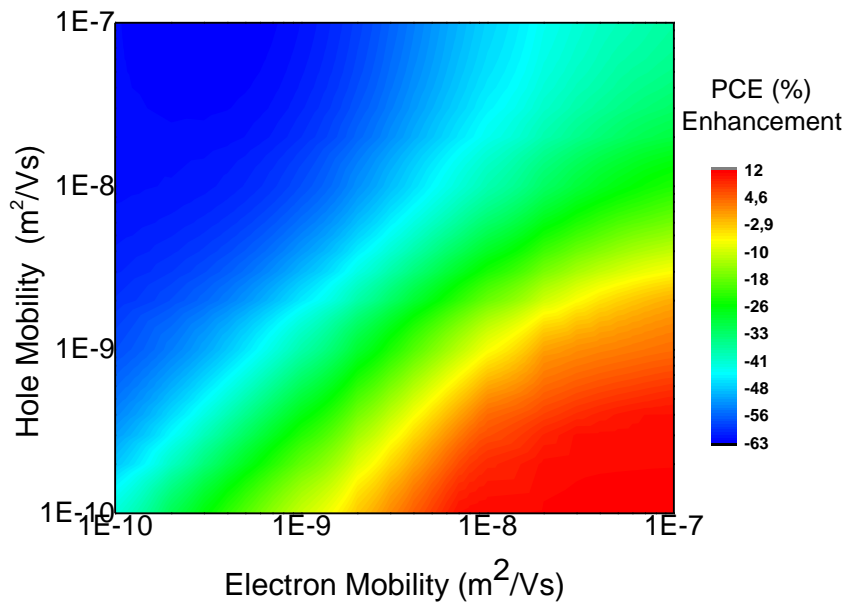
Εικόνα 6.19 Χάρτης διατάξεων ελάχιστης ενίσχυσης της απόδοσης για όλα τα ζεύγη ευκινησιών των φορέων αγωγιμότητας.



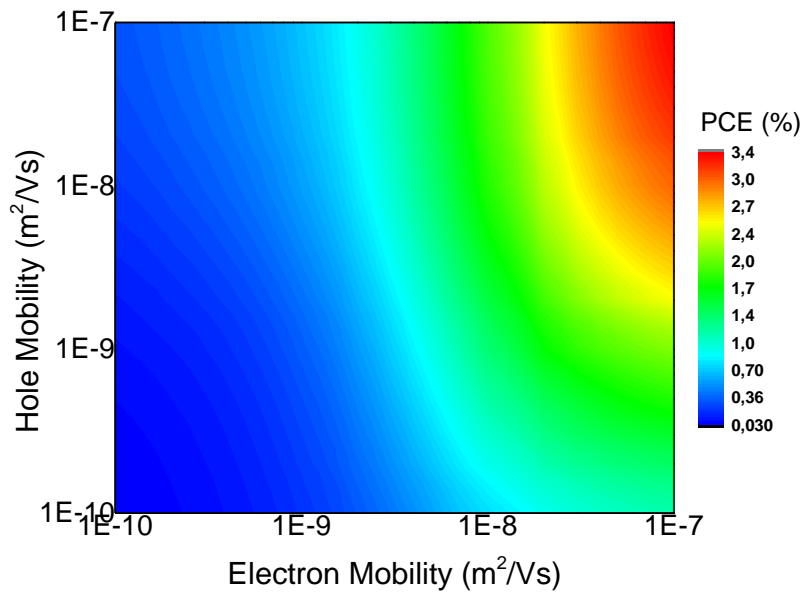
Εικόνα 6.20 Χάρτης τιμών μέγιστης πλασματικής ενίσχυσης της απόδοσης για όλα τα ζεύγη ευκινησιών των φορέων αγωγιμότητας.



Εικόνα 6.21 Χάρτης τιμών μέγιστης απόδοσης για όλα τα ζεύγη ευκινησιών των φορέων αγωγιμότητας.



Εικόνα 6.22 Χάρτης τιμών ελάχιστης πλασματικής ενίσχυσης της απόδοσης για όλα τα ζεύγη ευκινησιών των φορέων αγωγιμότητας.



Εικόνα 6.23 Χάρτης τιμών ελάχιστης απόδοσης για όλα τα ζεύγη ευκινησιών των φορέων αγωγιμότητας.

7. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Στην παρούσα εργασία έγινε πλήρης οπτοηλεκτρονική μελέτη της συμπεριφοράς δύο διατάξεων νανοσωματιδίων μέσα στο φωτοενεργό στρώμα (up / down), δύο διαφορετικών μεγεθών νανοσωματιδίων (small / large) κρατώντας σταθερό το πάχος του ενεργού στρώματος στα 80nm. Τα αποτελέσματα συγκρίθηκαν κάθε φορά με τη διάταξη χωρίς νανοσωματίδιο και μελετήθηκαν όλες οι περιπτώσεις διαφορετικών ευκινήσιων των φορέων που υπάρχουν στη βιβλιογραφία, σε ένα εύρος από 10^{-7} έως 10^{-10} m^2/Vs . Για όλα τα δυνατά ζεύγη σε αυτό το εύρος έγινε πλήρης ηλεκτρική μελέτη και τα αποτελέσματα παρουσιάστηκαν στους αντίστοιχους χάρτες.

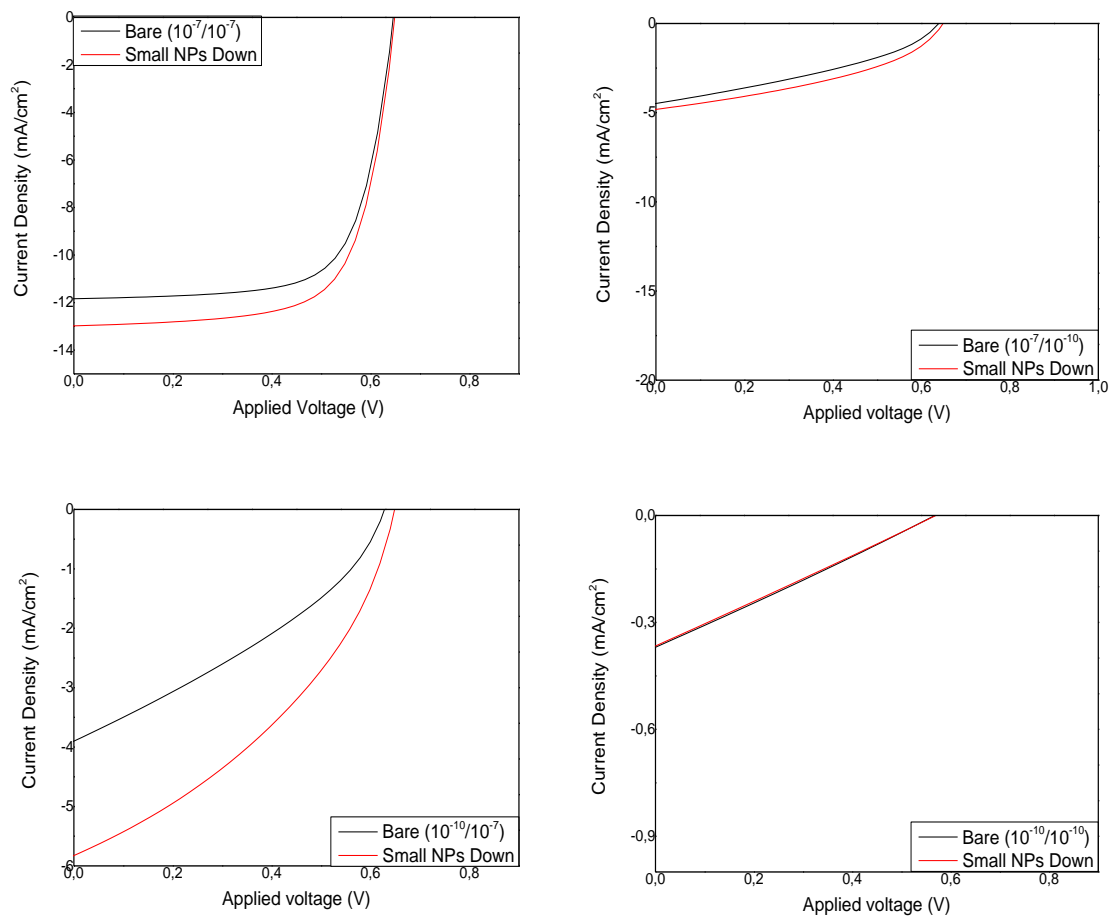
Κατασκευάστηκαν επιπλέον οι αντίστοιχοι χάρτες για την πλασμαονική ενίσχυση του κάθε βασικού ηλεκτρικού χαρακτηριστικού. Επίσης για τέσσερις χαρακτηριστικές περιπτώσεις ζευγών ευκινήσιων $\mu_e, \mu_h = 10^{-7} m^2/Vs$ (1^ο ζεύγος), $\mu_e = 10^{-7} / \mu_h = 10^{-10} m^2/Vs$ (2^ο ζεύγος), $\mu_e = 10^{-10} / \mu_h = 10^{-7} m^2/Vs$ (3^ο ζεύγος), $\mu_e, \mu_h = 10^{-10} m^2/Vs$ (4^ο ζεύγος) έγινε πλήρης ανάλυση των καμπυλών J-V. Ακολούθως κατασκευάστηκαν συγκεντρωτικοί χάρτες όπου σε κάθε ζεύγος ευκινήσιων των φορέων φαίνεται η καλύτερη και η χειρότερη επιλογή διάταξης και μεγέθους νανοσωματιδίων καθώς και οι αντίστοιχες τιμές της πλασμαονικής ενίσχυσης της απόδοσης και της απόδοσης.

Στον χάρτη με την καλύτερη ενίσχυση είδαμε και τις τέσσερις διατάξεις που μελετήσαμε ενώ στο χάρτη με την χειρότερη ενίσχυση κυριαρχεί η περίπτωση των μικρών νανοσωματιδίων σε up διάταξη, το οποίο έρχεται σε συμφωνία με τα οπτικά αποτελέσματα που είχαν μελετηθεί ήδη.

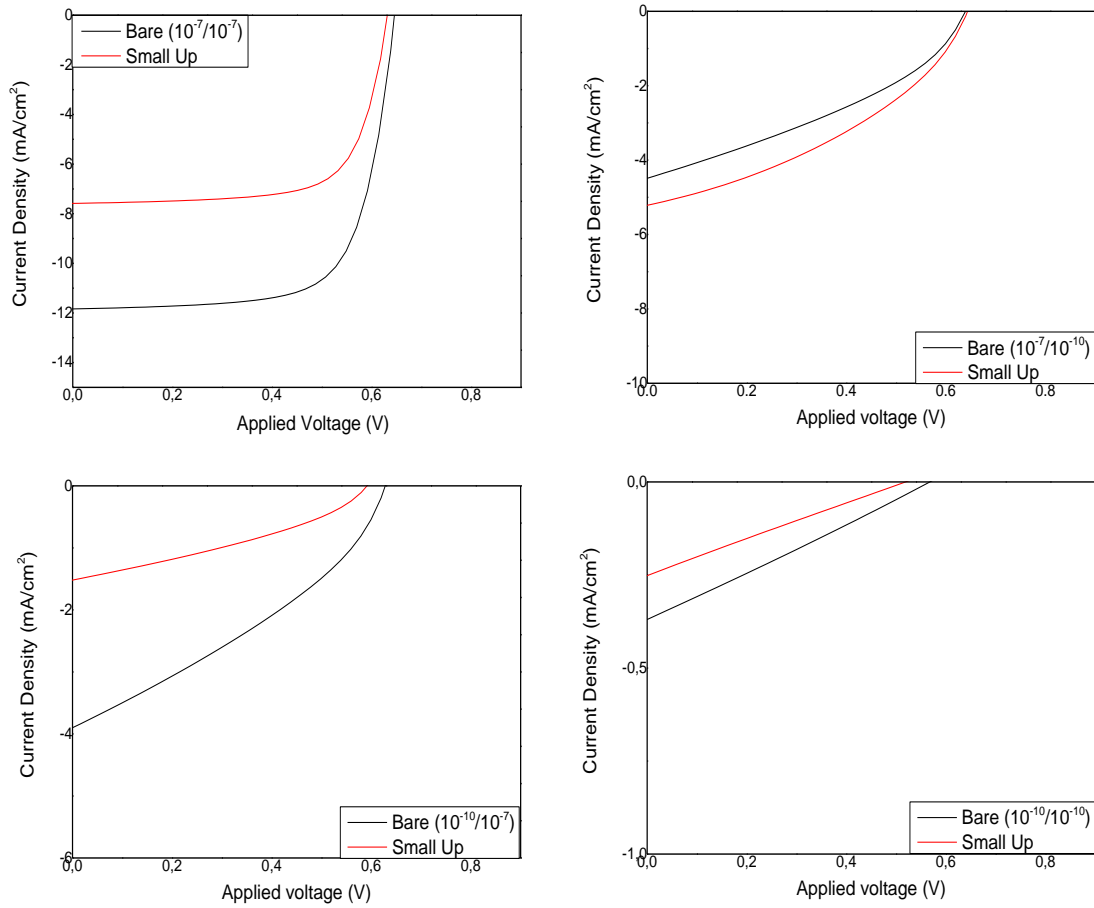
Επιπλέον είδαμε ότι οι περιοχές όπου η πλασμαονική ενίσχυση είναι πολύ μεγάλη (74 %), η τιμή της απόδοσης είναι πολύ μικρή (1.5%) συνεπώς δεν θα βελτιωθεί σημαντικά το ηλιακό κύτταρο. Αντίθετα στη μεγαλύτερη τιμή της απόδοσης (6.4 %) η αντίστοιχη πλασμαονική ενίσχυση είναι πολύ μικρή (24 %).

Τέλος στη περίπτωση όπου οι ευκινήσιες των ηλεκτρονίων ισούται με την ευκινήσια των οπών η πλασμαονική ενίσχυση είναι περίπου 18 % και αυτή η τιμή ισούται με την πλασμαονική ενίσχυση που προέκυψε από την οπτική μοντελοποίηση.

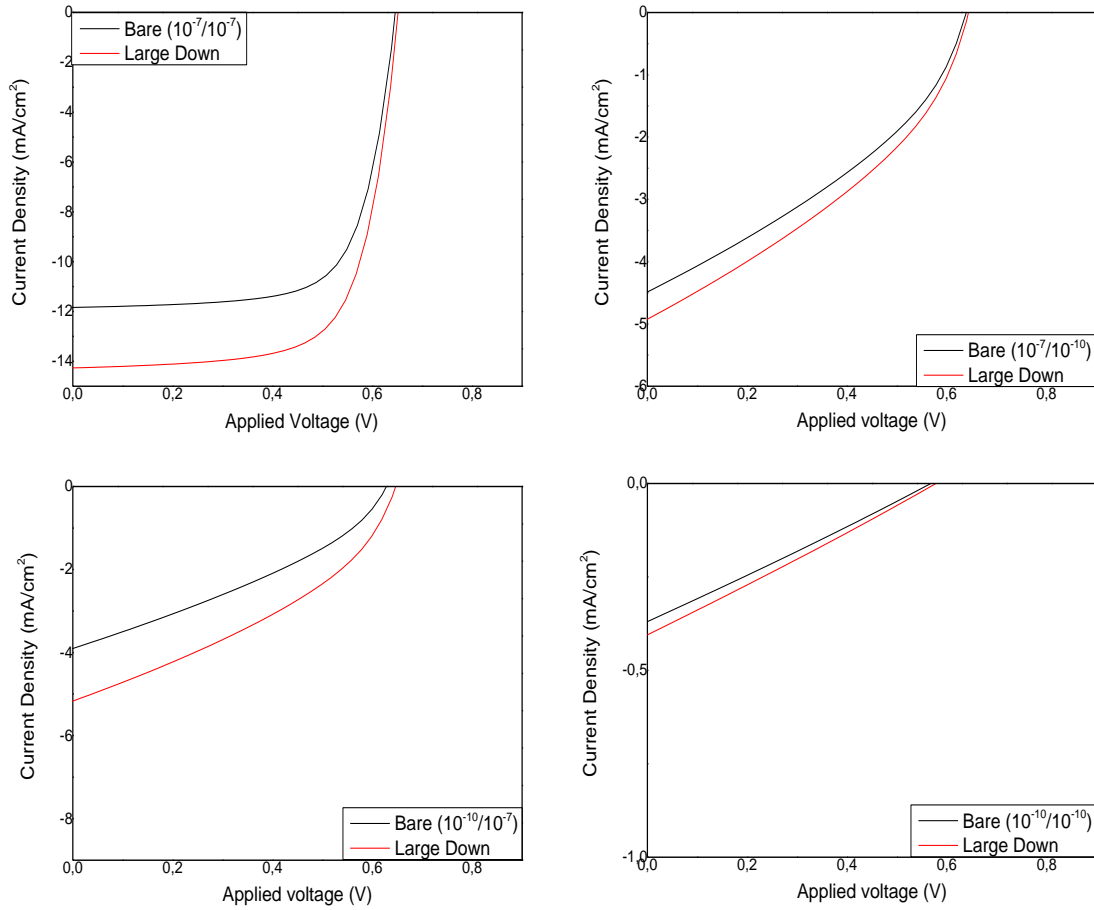
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 1: ΚΑΜΠΥΛΕΣ J-V ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΩΝ ΖΕΥΓΩΝ ΕΥΚΙΝΗΣΙΑΣ ΤΩΝ ΦΟΡΕΩΝ ΑΓΩΓΙΜΟΤΗΤΑΣ



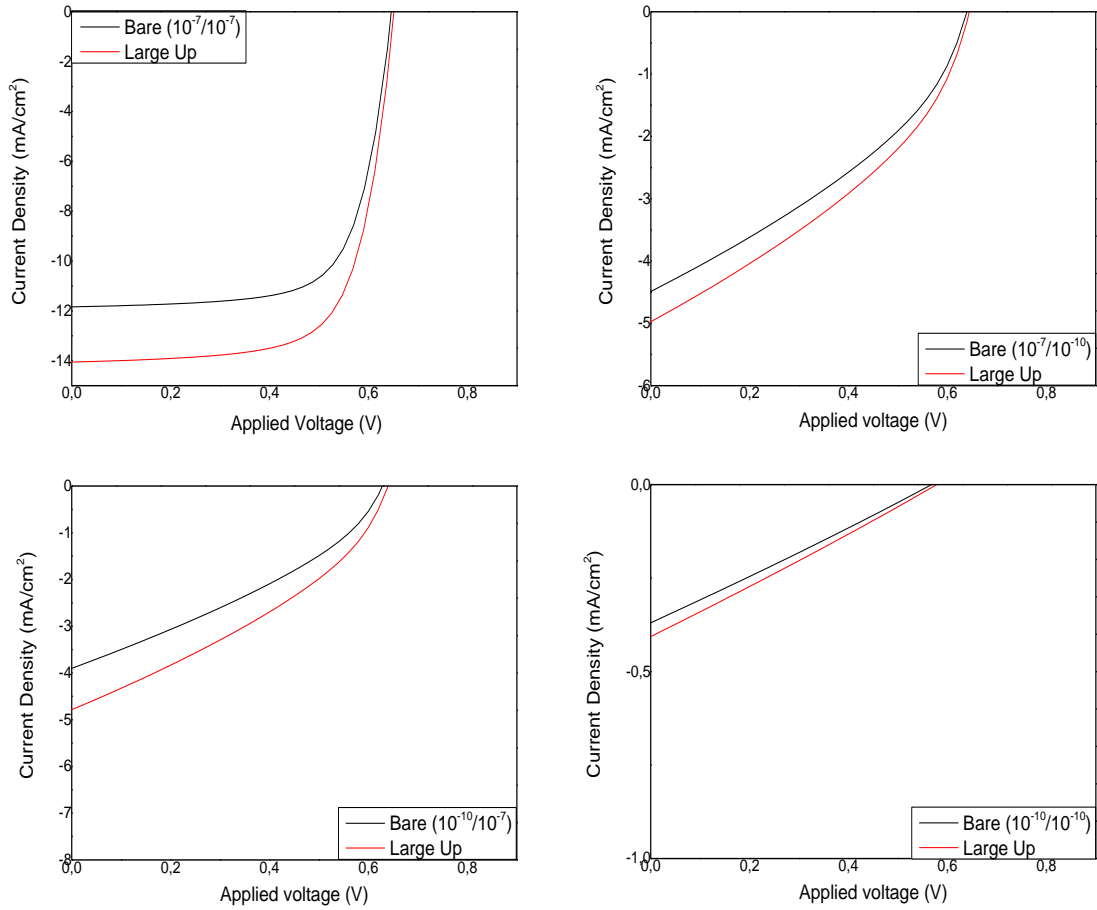
Εικόνα 8.1 Καμπύλες J-V χαρακτηριστικών ζευγών ευκινησίας φορέων για την περίπτωση των μικρών νανοσωματιδίων σε down διάταξη.



Εικόνα 8.2 Καμπύλες J-V χαρακτηριστικών ζευγών ευκινησίας φορέων για την περίπτωση των μικρών νανοσωματιδίων σε up διάταξη.

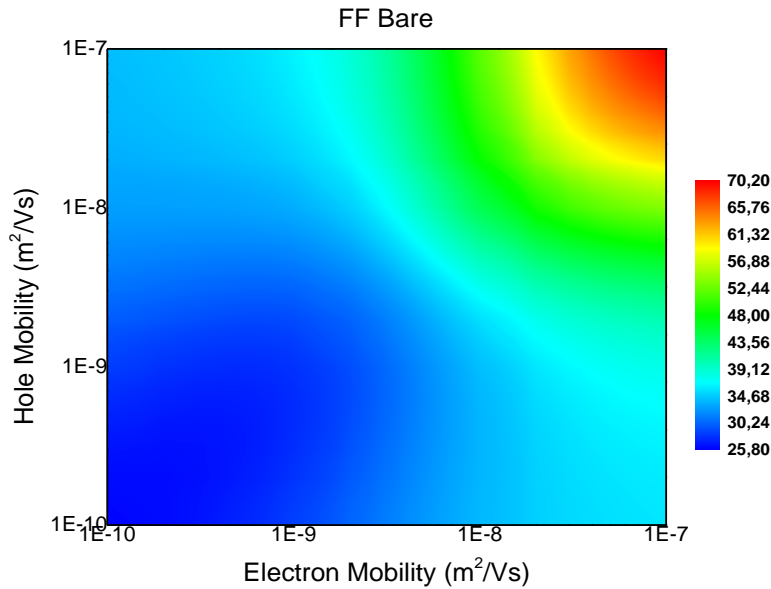


Εικόνα 8.3 Καμπύλες J-V χαρακτηριστικών ζευγών ευκινησίας φορέων για την περίπτωση των μεγάλων νανοσωματιδίων σε down διάταξη.

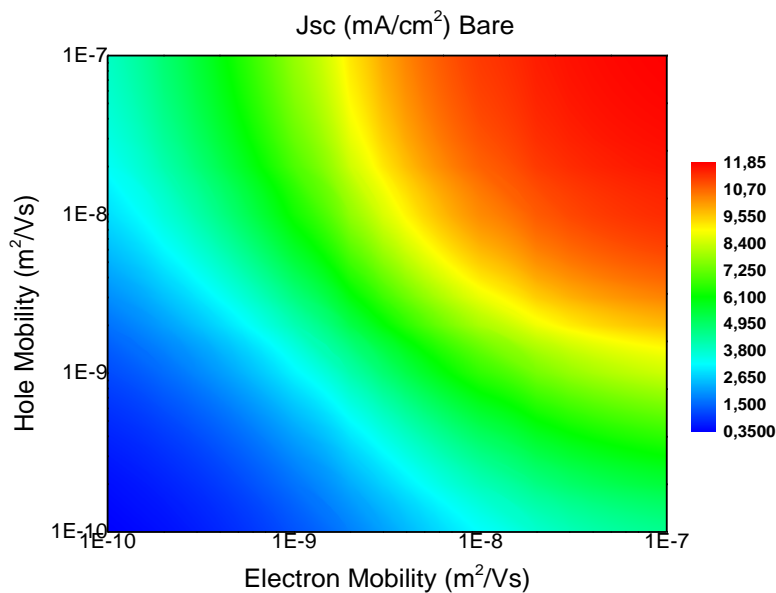


Εικόνα 8.4 Καμπύλες J-V χαρακτηριστικών ζευγών ευκινησίας φορέων για την περίπτωση των μεγάλων νανοσωματιδίων σε up διάταξη.

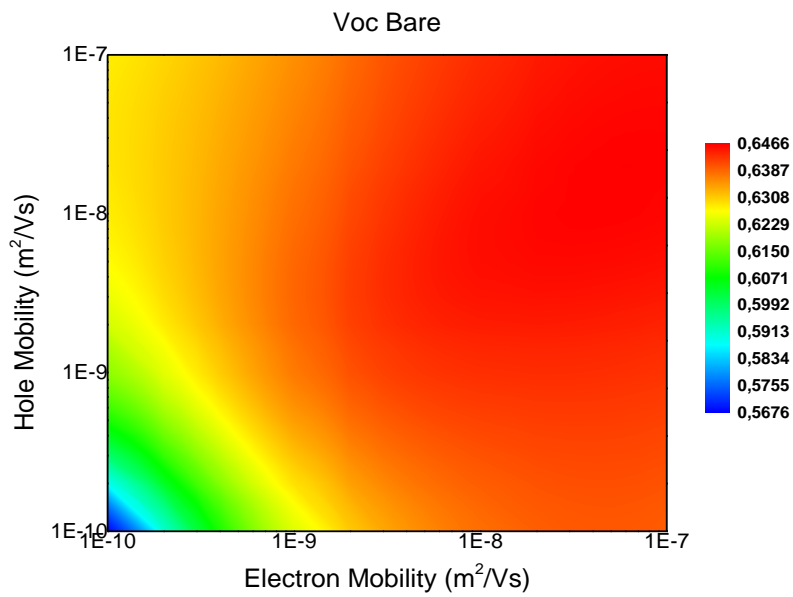
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 2: ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΤΗΣ ΕΥΚΙΝΗΣΙΑΣ ΤΩΝ ΦΟΡΕΩΝ ΣΤΙΣ ΗΛΕΚΤΡΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΤΟΥ ΚΥΤΤΑΡΟΥ



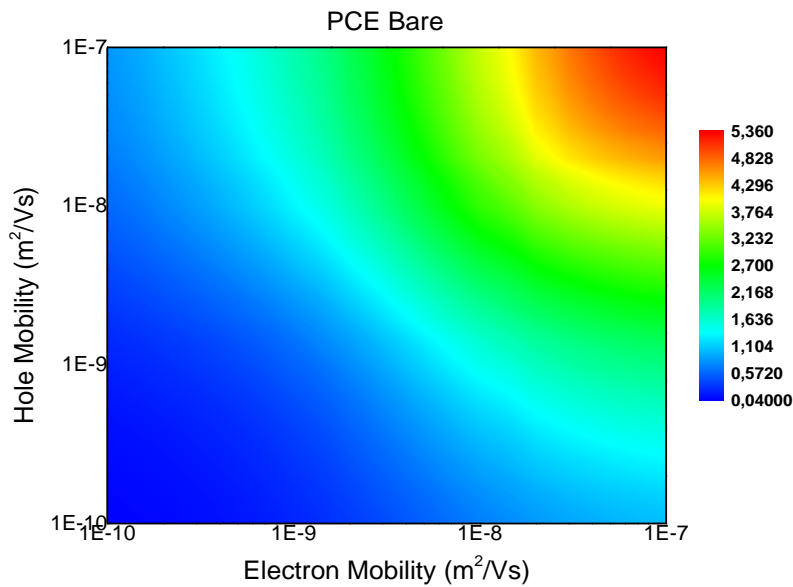
Εικόνα 8.5 Επίδραση της ευκινήσιας αγωγιμότητας των φορέων στον παράγοντα πλήρωσης για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου χωρίς νανοσωματίδια.



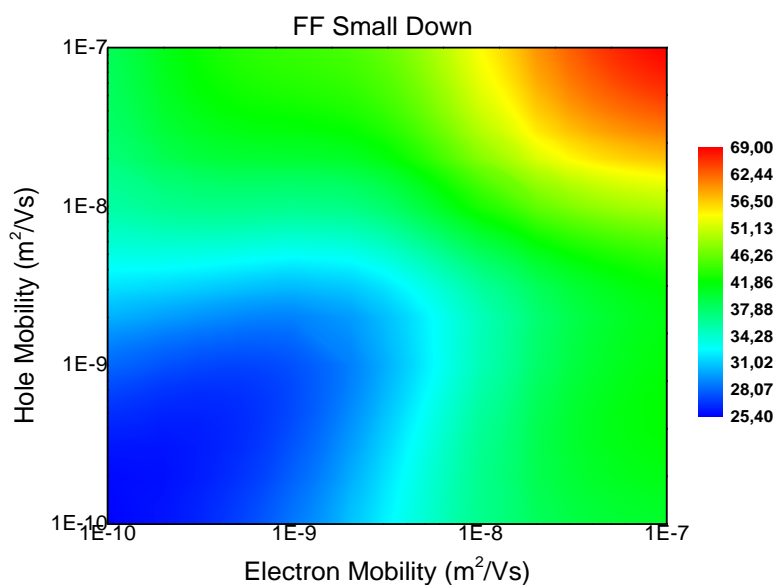
Εικόνα 8.6 Επίδραση της ευκινήσιας αγωγιμότητας των φορέων στην πυκνότητα ρεύματος για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου χωρίς νανοσωματίδια.



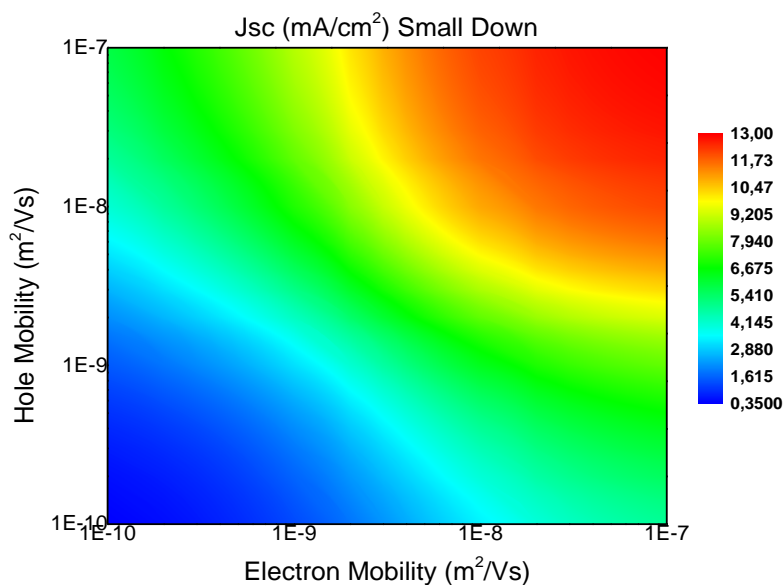
Εικόνα 8.7 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην τάση ανοιχτού κυκλώματος για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου χωρίς νανοσωματίδια.



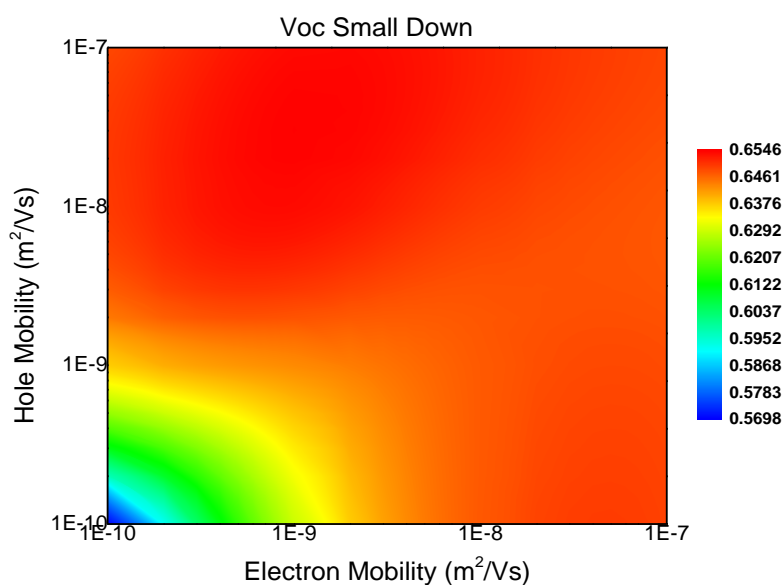
Εικόνα 8.8 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην απόδοση για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου χωρίς νανοσωματίδια.



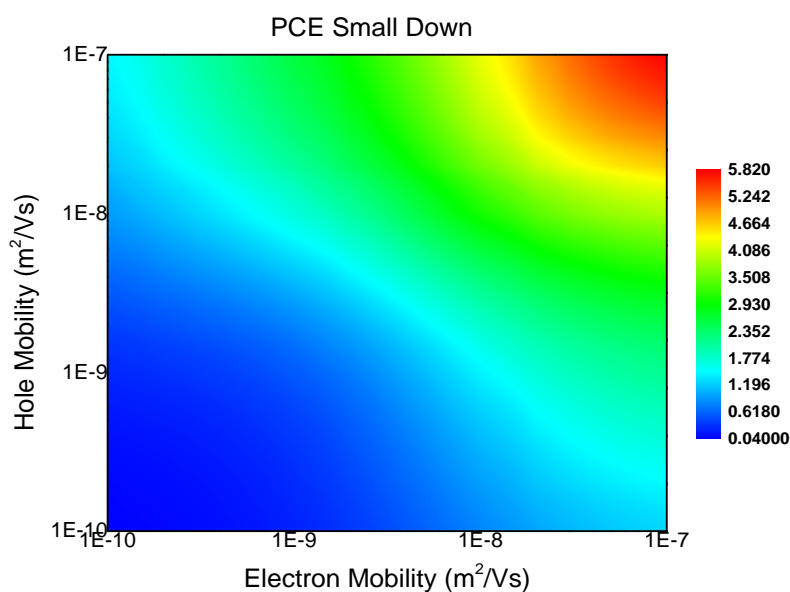
Εικόνα 8.9 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στον παράγοντα πλήρωσης για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη.



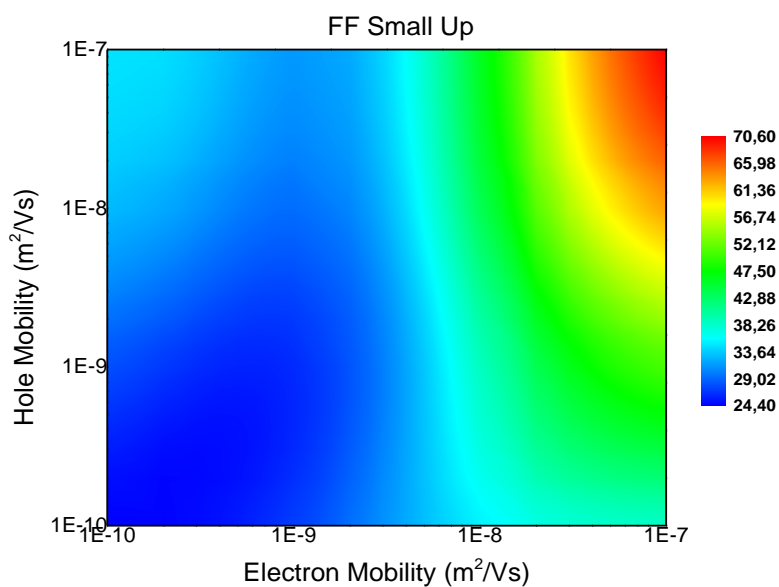
Εικόνα 8.10 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην πυκνότητα ρεύματος για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη.



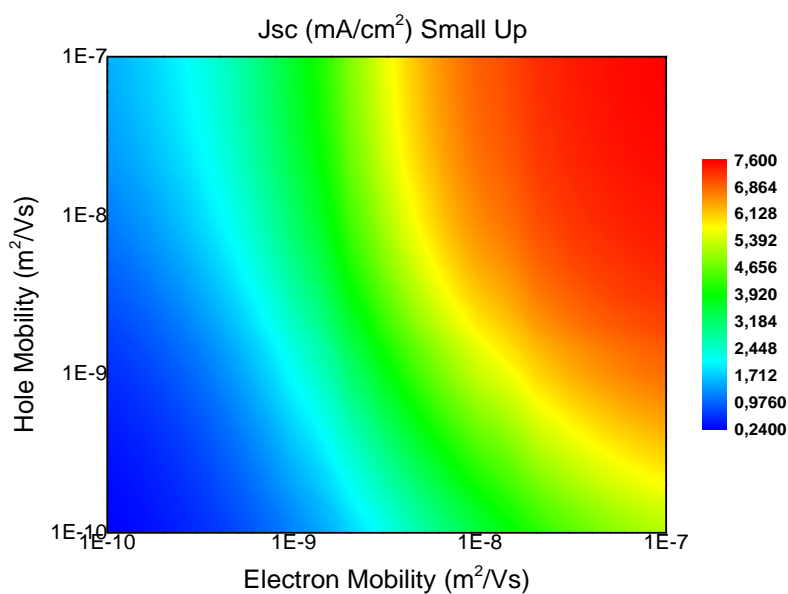
Εικόνα 8.11 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων τάση ανοιχτού κυκλώματος για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη.



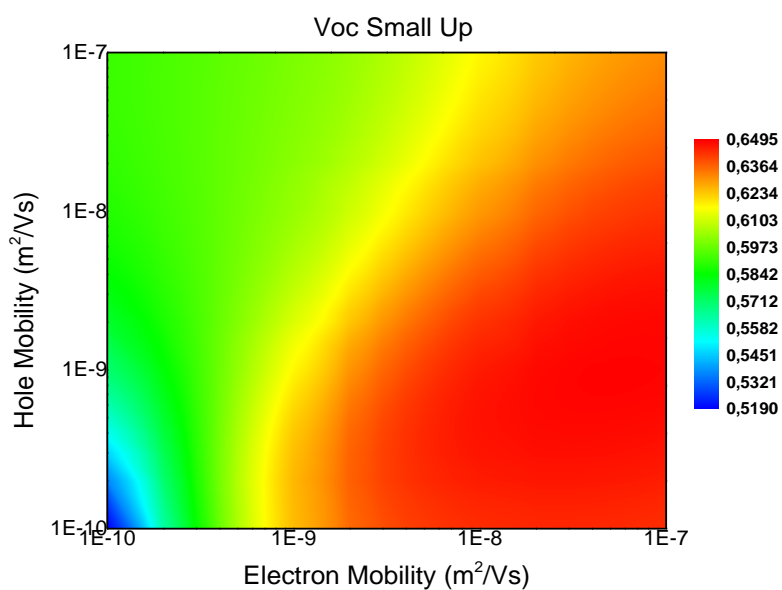
Εικόνα 8.12 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην απόδοση για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη.



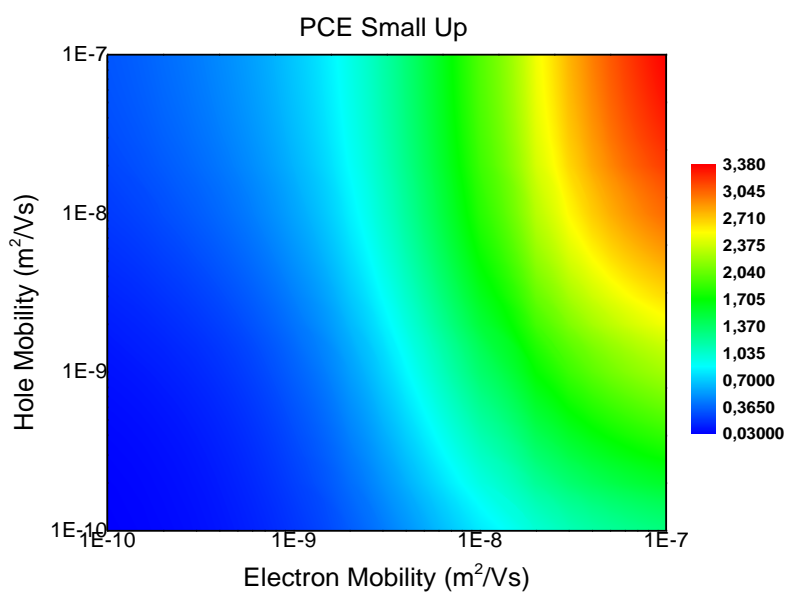
Εικόνα 8.13 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στον παράγοντα πλήρωσης για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μικρά νανοσωματίδια σε up διάταξη.



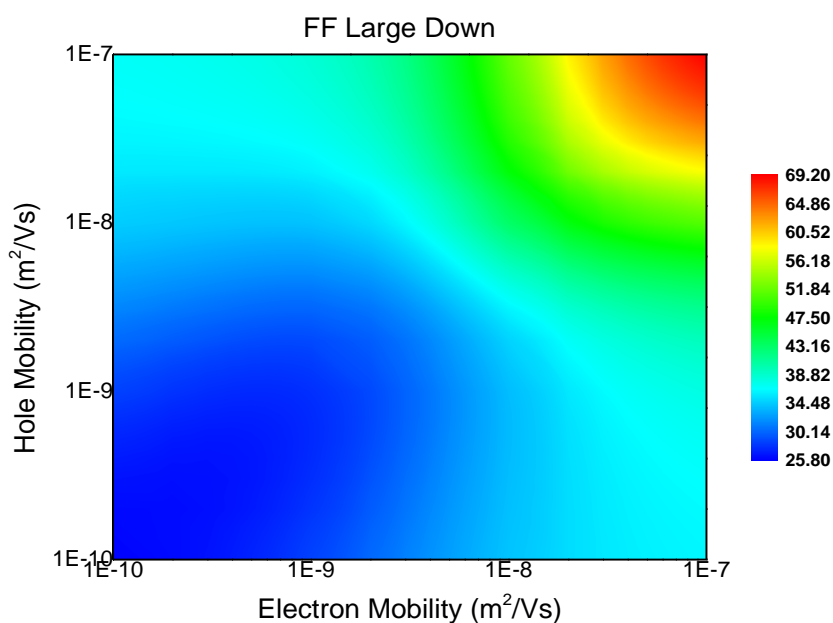
Εικόνα 8.14 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων πυκνότητα ρεύματος για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μικρά νανοσωματίδια σε up διάταξη.



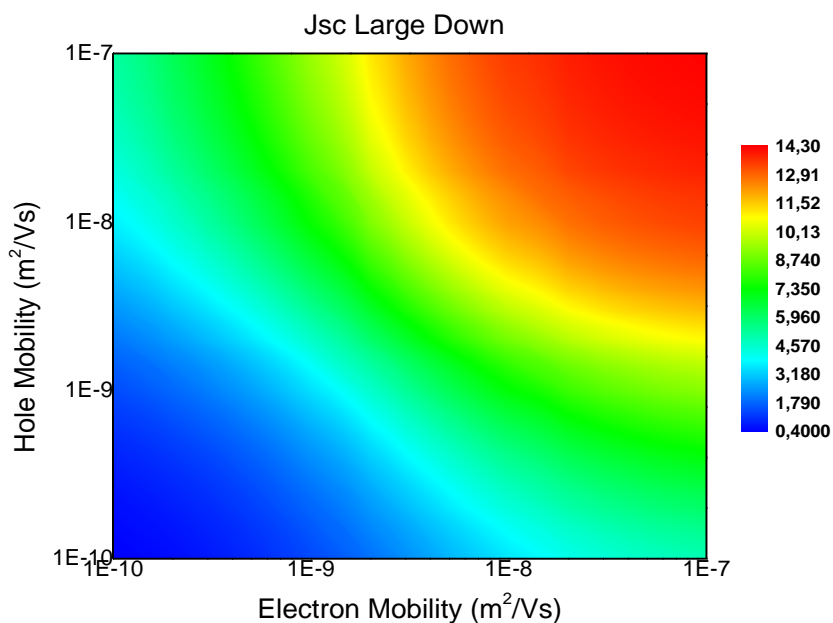
Εικόνα 8.15 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην τάση ανοιχτού κυκλώματος για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μικρά νανοδομημένα σε up διάταξη.



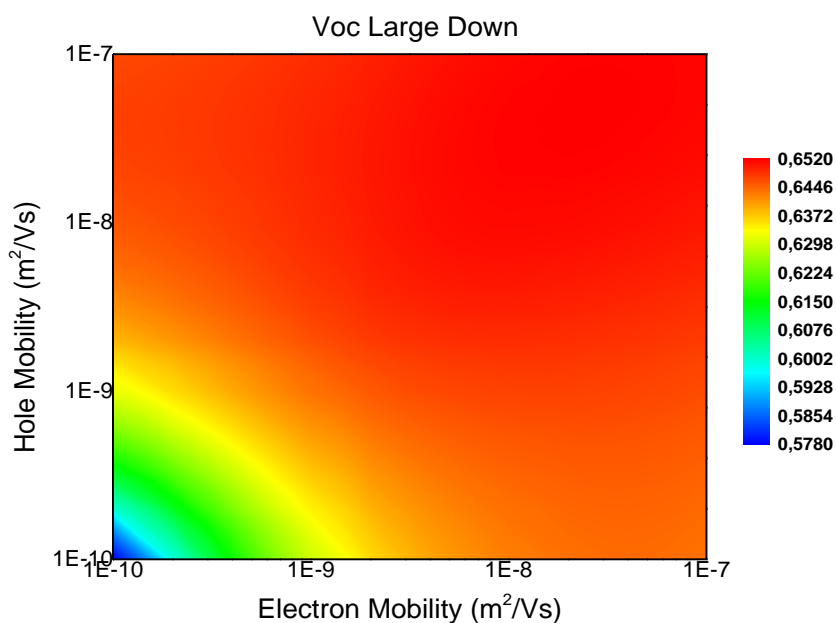
Εικόνα 8.16 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην απόδοση για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μικρά νανοδομημένα σε up διάταξη.



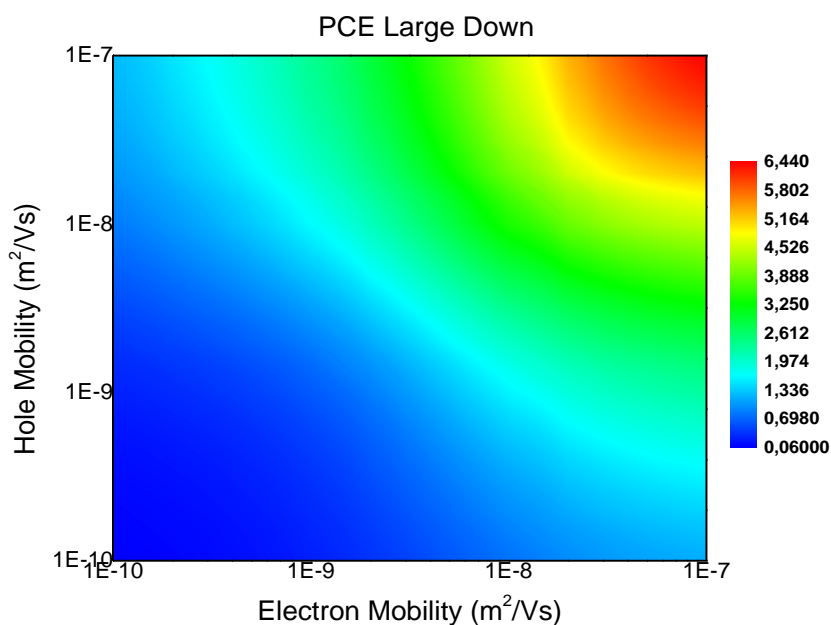
Εικόνα 8.17 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στον παράγοντα πλήρωσης για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μεγάλα νανοδομημένα σε down διάταξη.



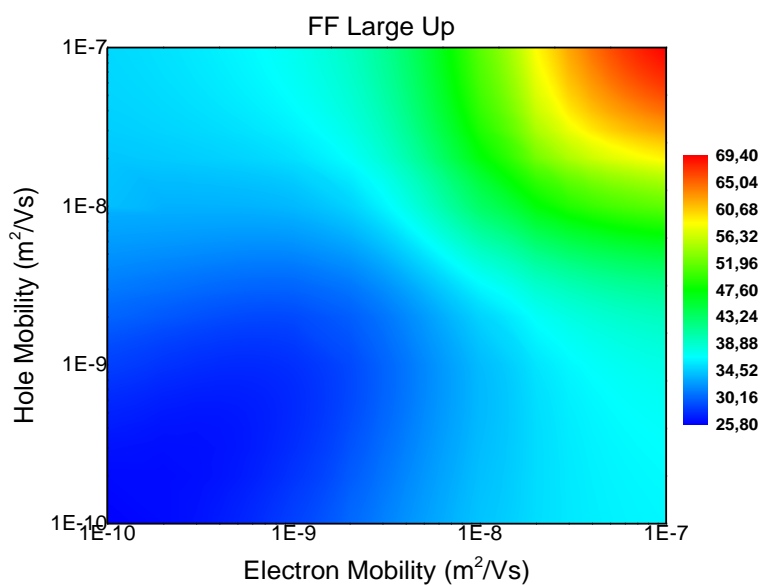
Εικόνα 8.18 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην πυκνότητα ρεύματος για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μεγάλα νανοδομημένα σε down διάταξη.



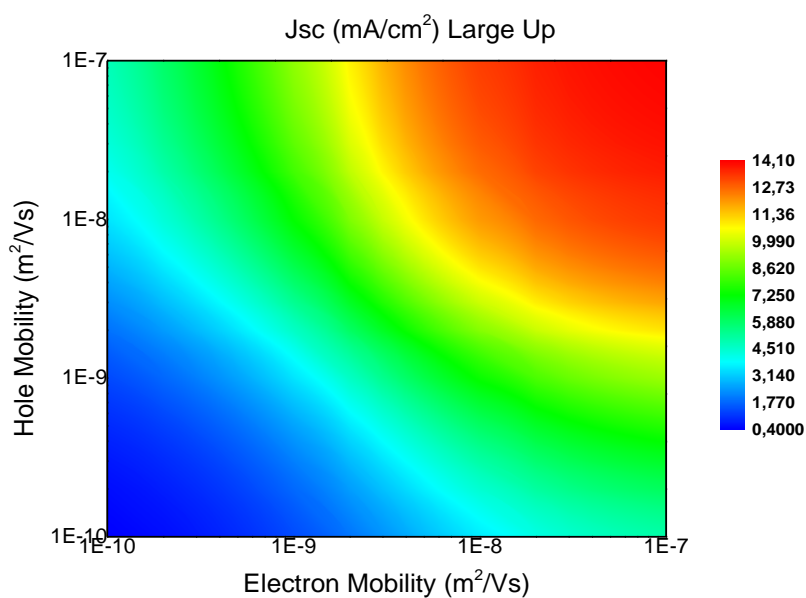
Εικόνα 8.19 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην τάση ανοιχτού κυκλώματος για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη.



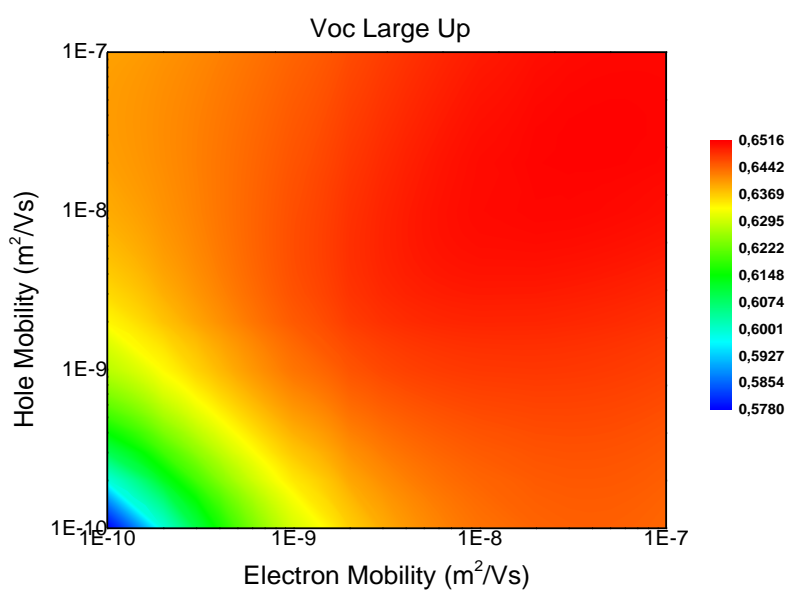
Εικόνα 8.20 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην απόδοση για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη.



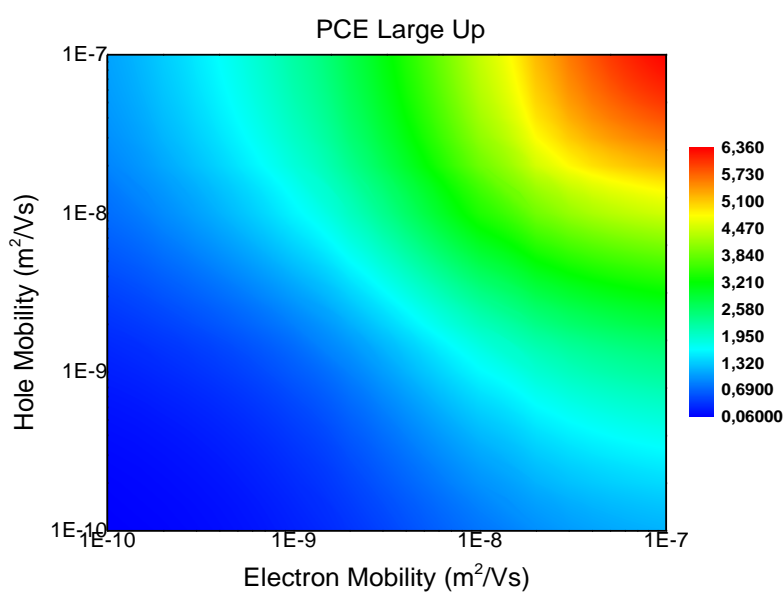
Εικόνα 8.21 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στον παράγοντα πλήρωσης για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μεγάλα νανοσωματίδια σε up διάταξη.



Εικόνα 8.22 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην πυκνότητα ρεύματος για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μεγάλα νανοσωματίδια σε up διάταξη.

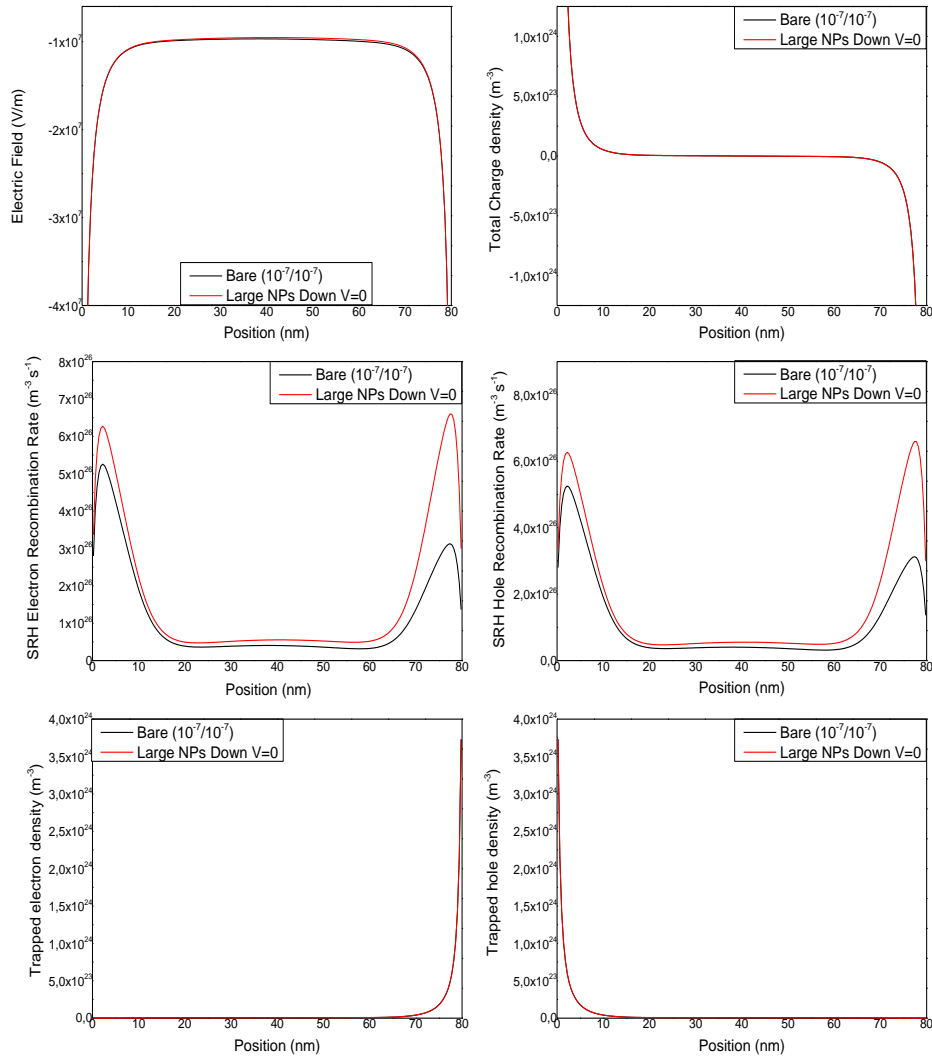


Εικόνα 8.23 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην τάση ανοιχτού κυκλώματος για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μεγάλα νανοδομημένα σε υρ διάταξη.

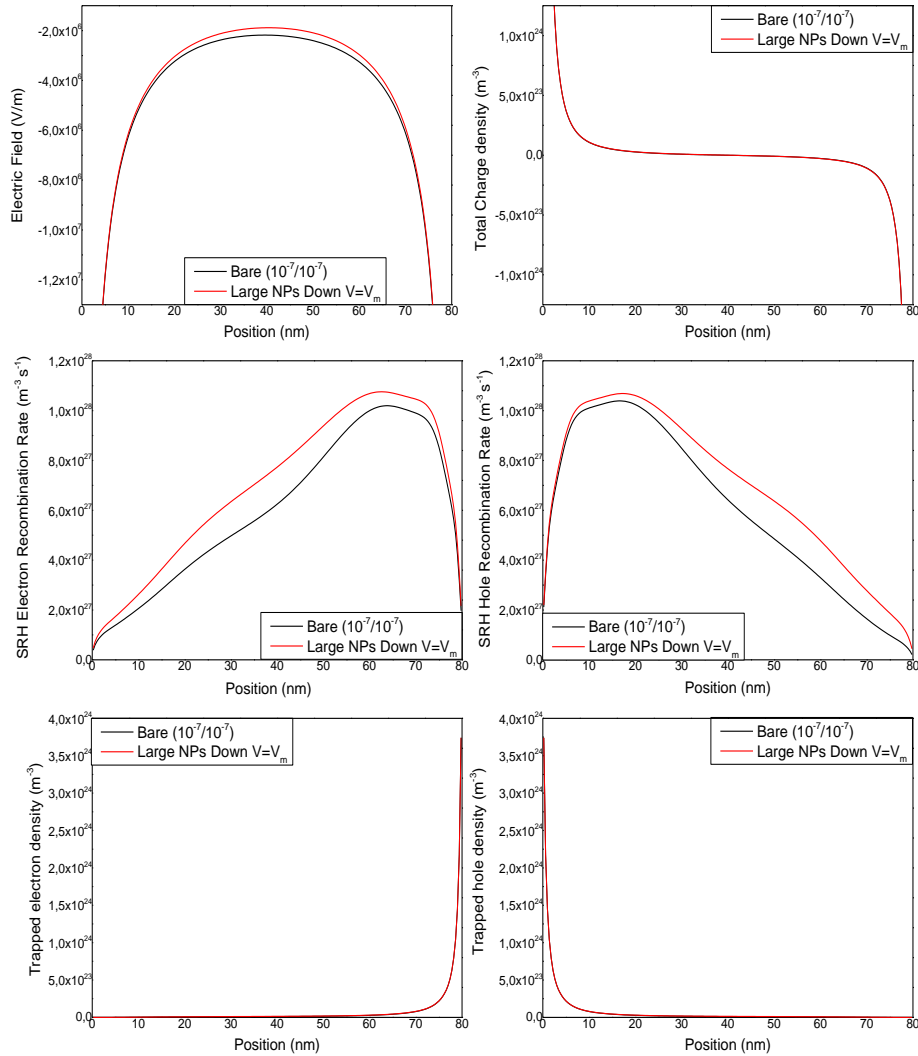


Εικόνα 8.24 Επίδραση της ευκινησίας αγωγιμότητας των φορέων στην απόδοση για την περίπτωση ηλιακού κυττάρου με μεγάλα νανοδομημένα σε υρ διάταξη.

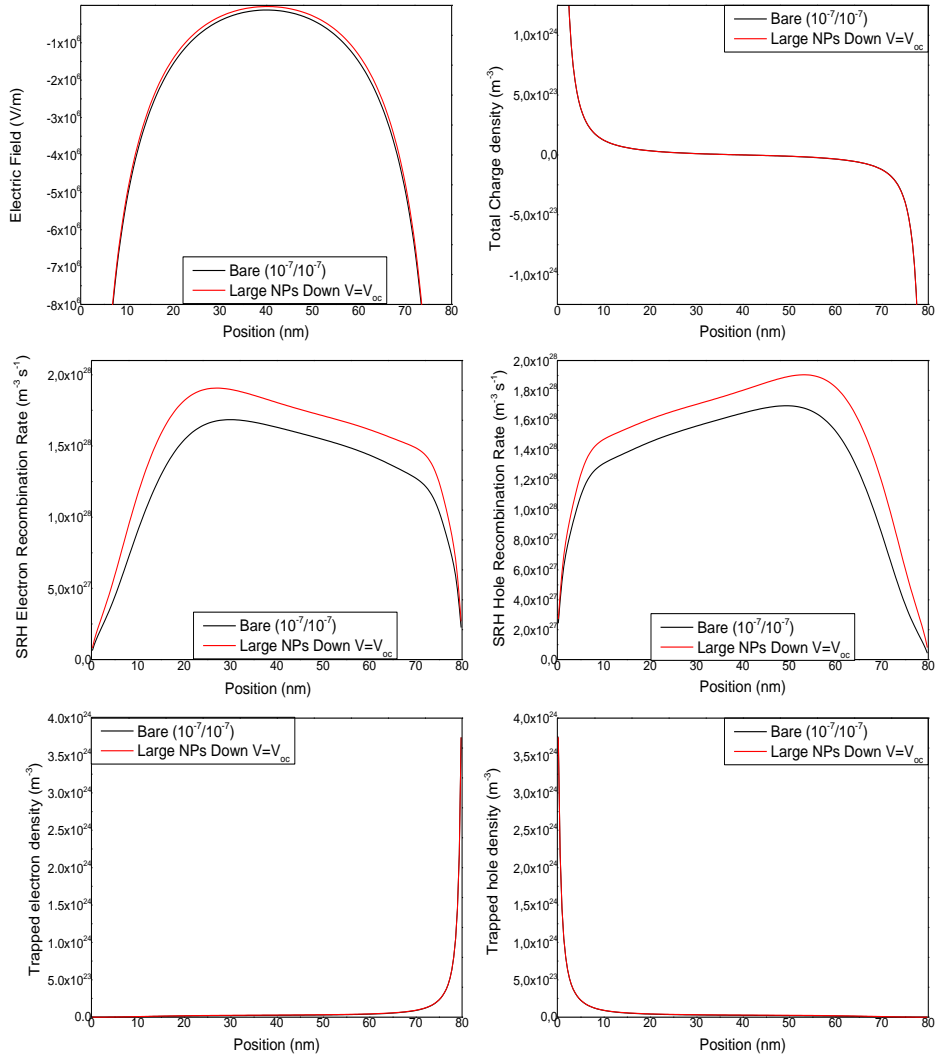
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 3: ΚΑΤΑΝΟΜΕΣ ΗΛΕΚΤΡΙΚΟΥ ΠΕΔΙΟΥ, ΣΥΝΟΛΙΚΟΥ ΦΟΡΤΙΟΥ, ΡΥΘΜΩΝ ΕΠΑΝΑΣΥΝΔΙΑΣΜΩΝ, ΠΑΓΙΔΕΥΜΕΝΩΝ ΦΟΡΕΩΝ ΣΤΟ ΕΣΩΤΕΡΙΚΟ ΤΟΥ ΕΝΕΡΓΟΥ ΣΤΡΩΜΑΤΟΣ



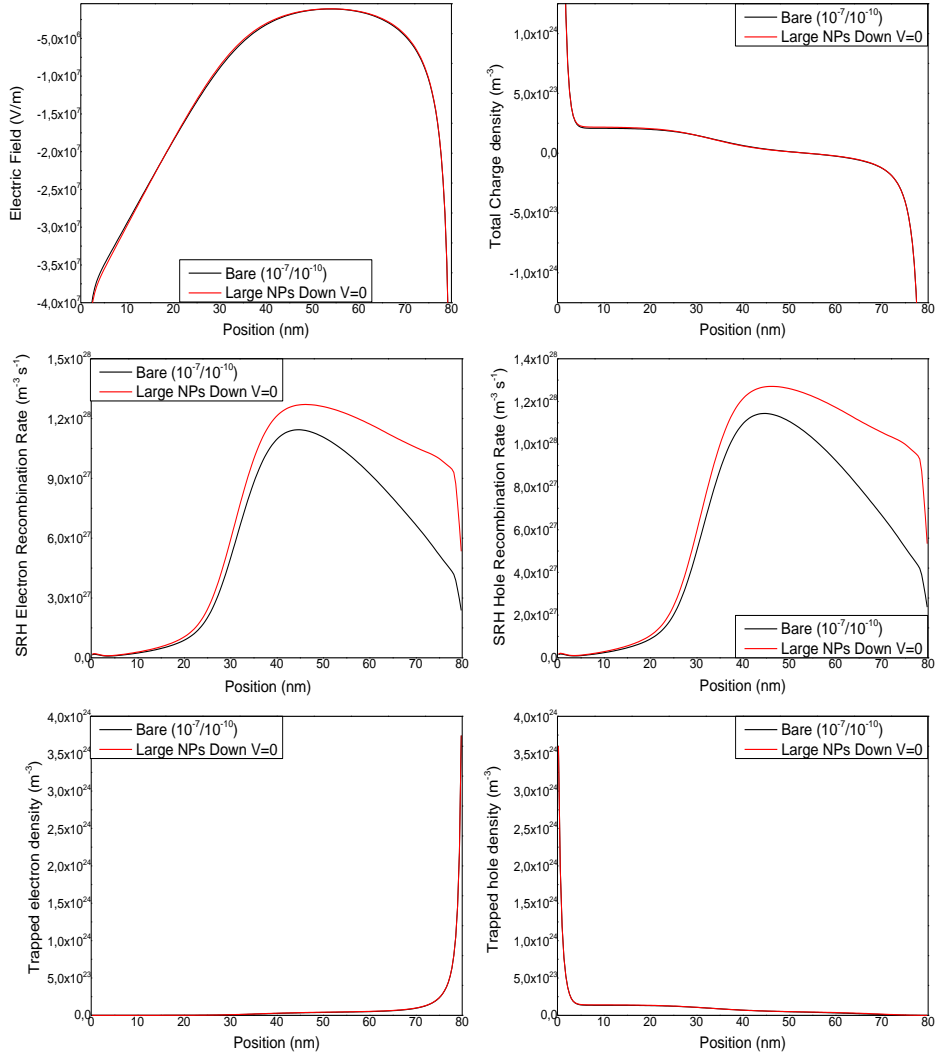
Εικόνα 8.25 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7}$ m^2/Vs και $\mu_h=10^{-7}$ m^2/Vs για τάση $V = 0V$.



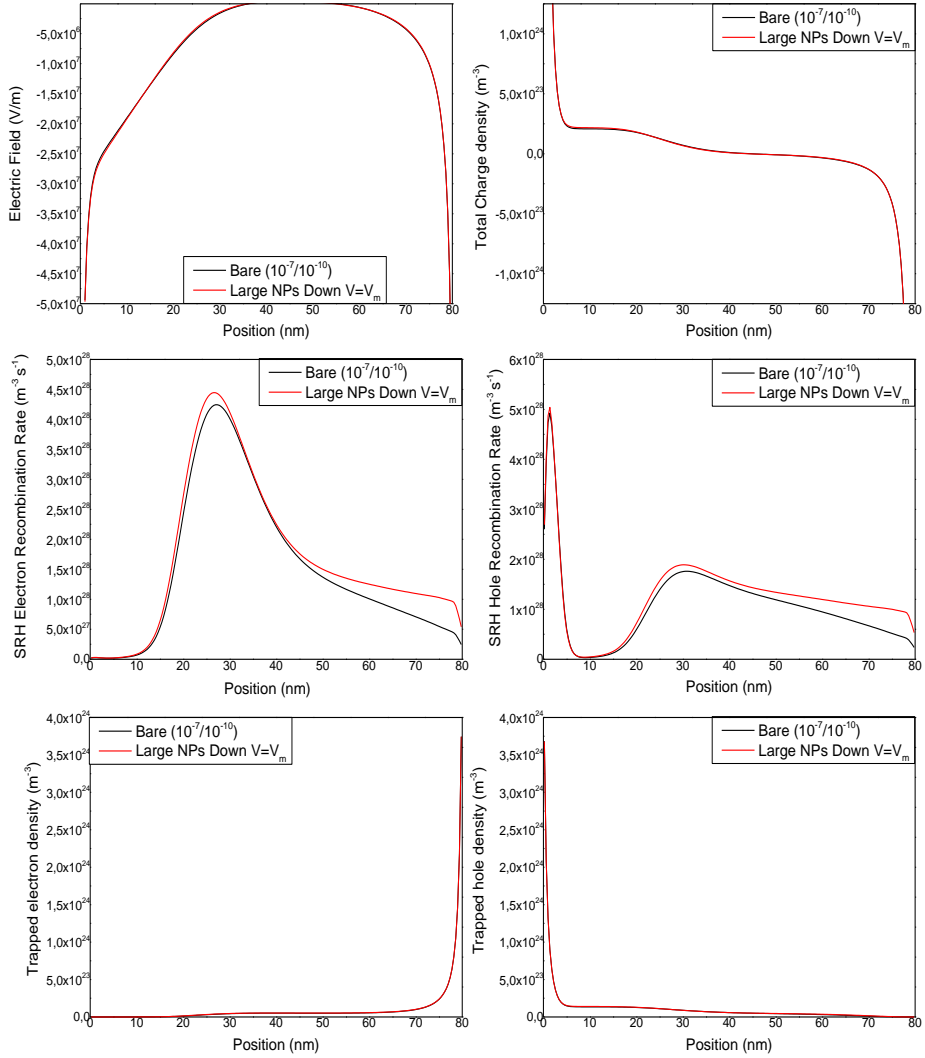
Εικόνα 8.26 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7} m^2/Vs$ και $\mu_h=10^{-7} m^2/Vs$ για τάση $V = V_m$.



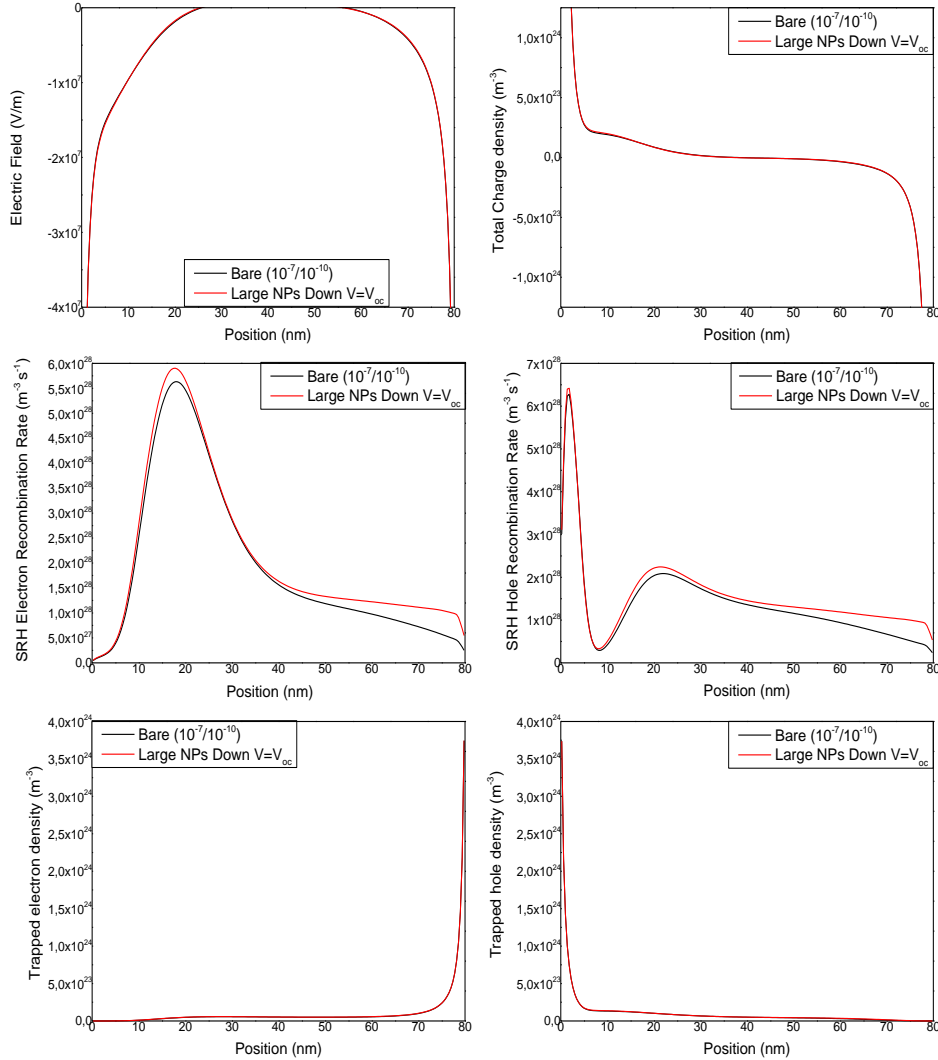
Εικόνα 8.27 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7}$ m^2/Vs και $\mu_h=10^{-7}$ m^2/Vs για τάση $V = V_{oc}$.



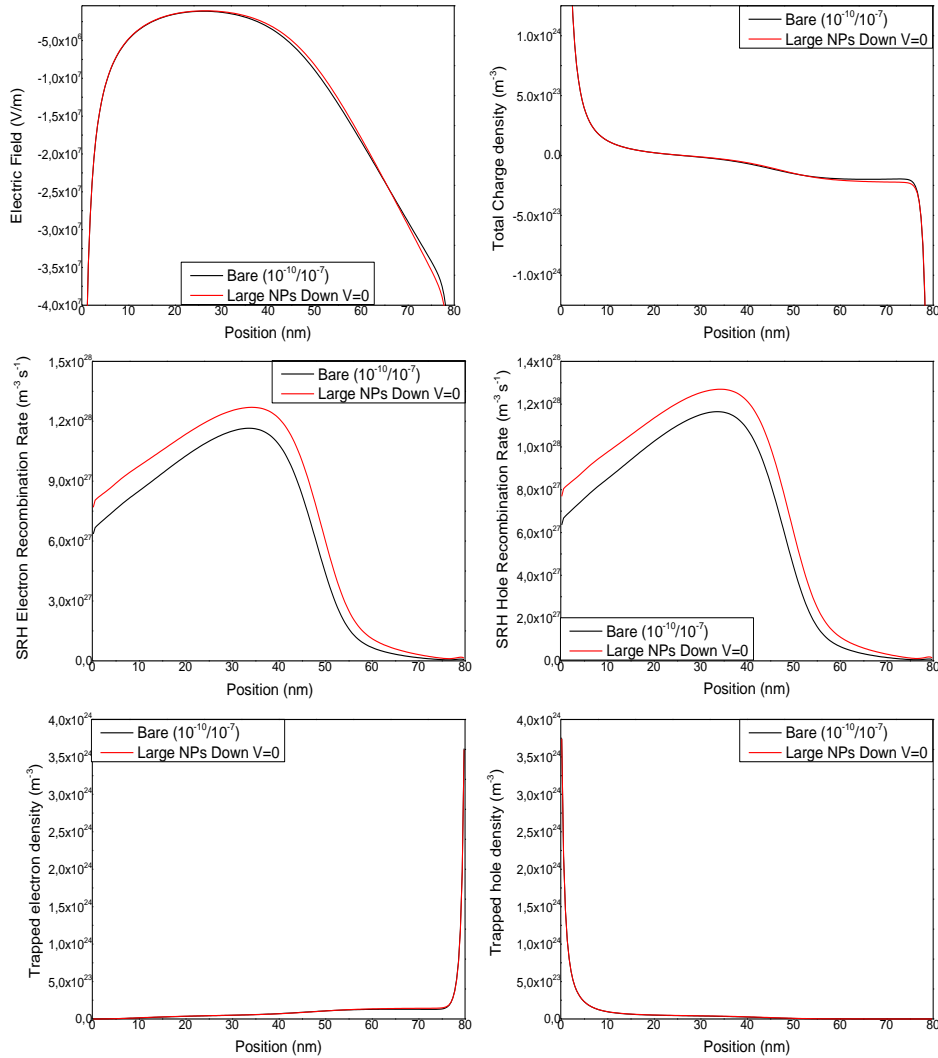
Εικόνα 8.28 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7}$ m^2/Vs και $\mu_h=10^{-10}$ m^2/Vs για τάση $V = 0$.



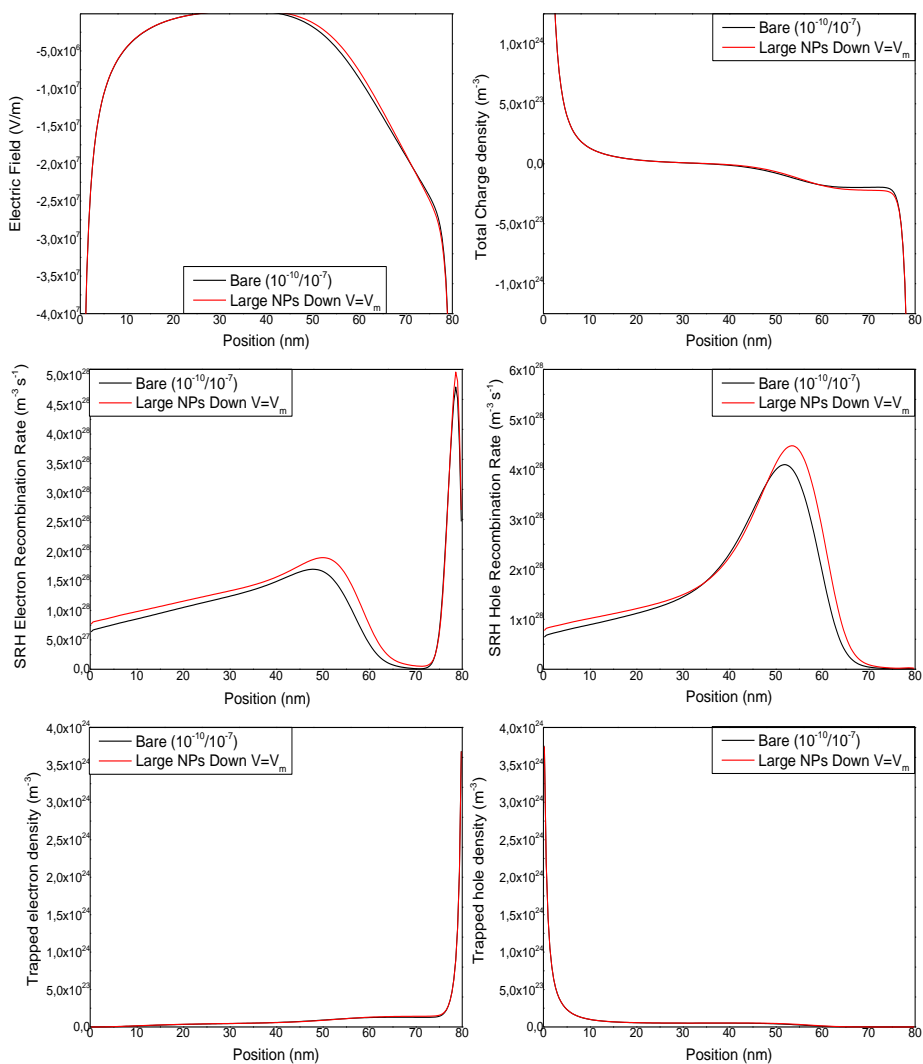
Εικόνα 8.29 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7}$ m^2/Vs και $\mu_h=10^{-10}$ m^2/Vs για τάση $V = V_m$.



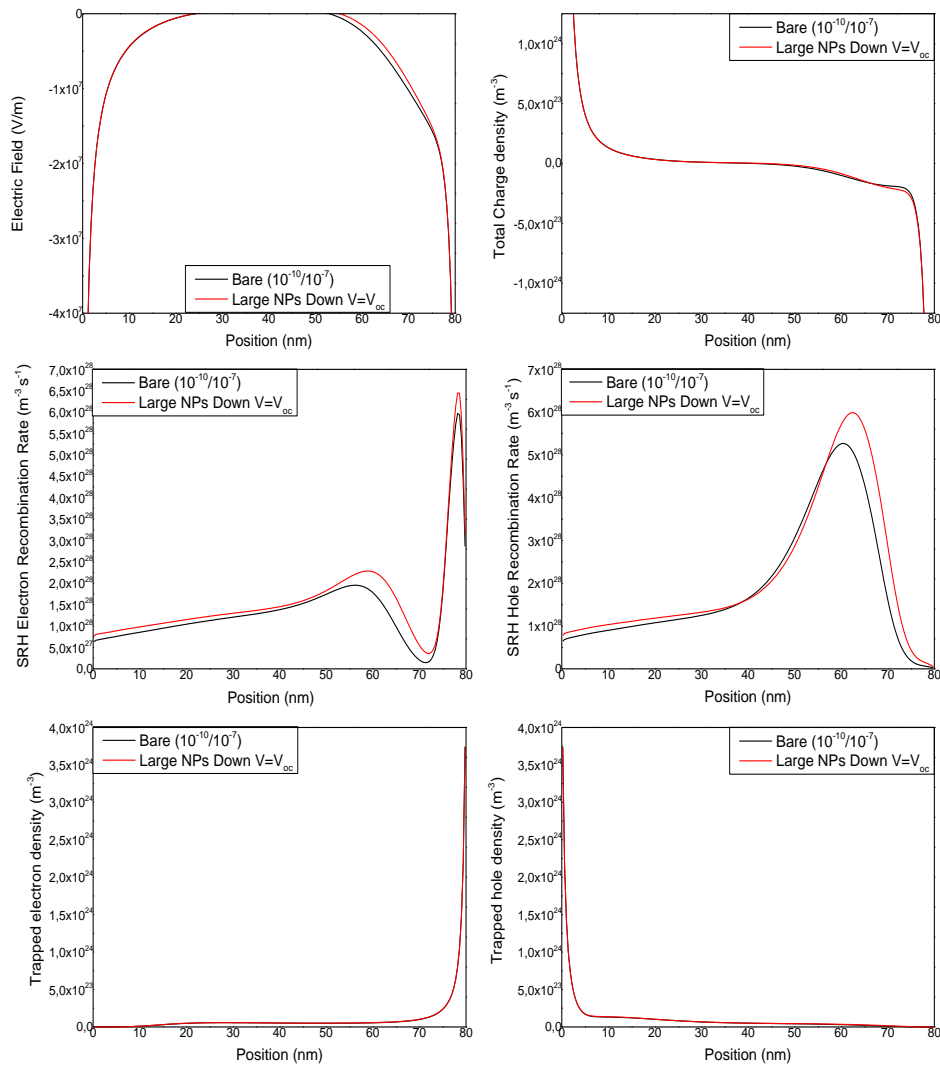
Εικόνα 8.30 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7}$ m^2/Vs και $\mu_h=10^{-10}$ m^2/Vs για τάση $V = V_{oc}$.



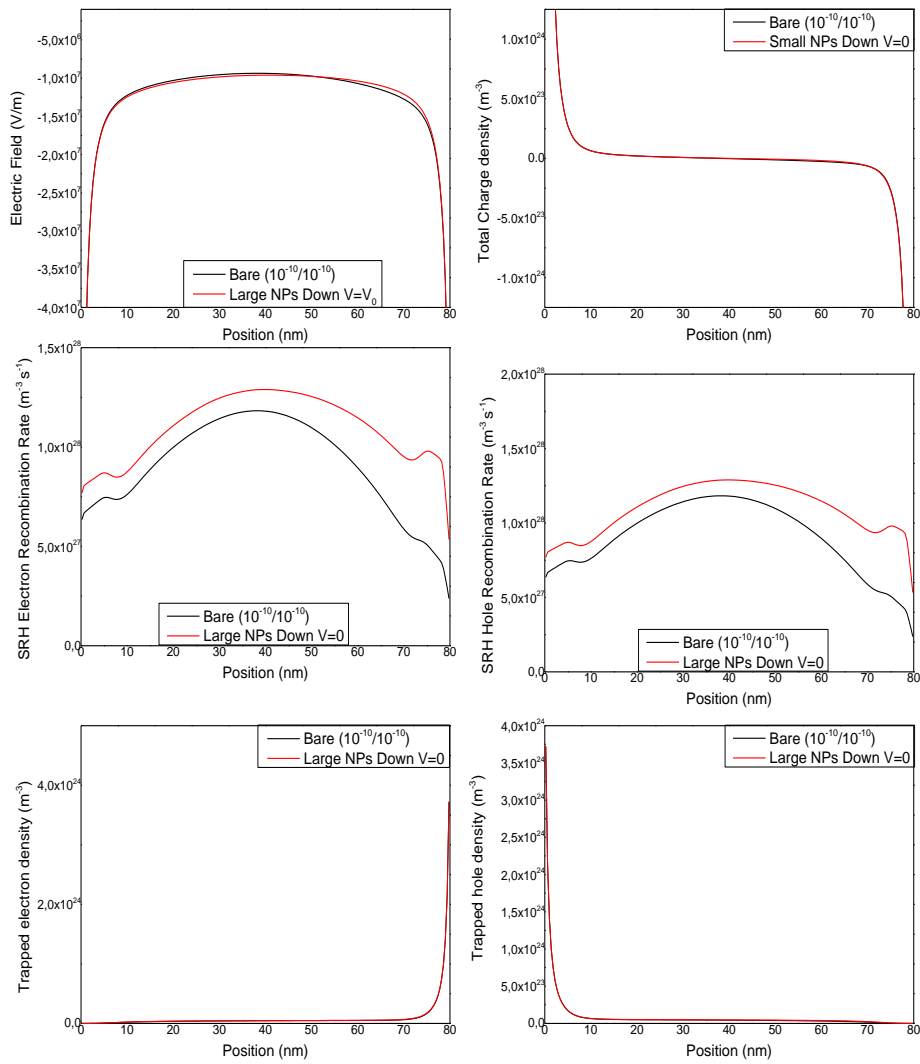
Εικόνα 8.31 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e = 10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ και $\mu_h = 10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ για τάση $V = 0$.



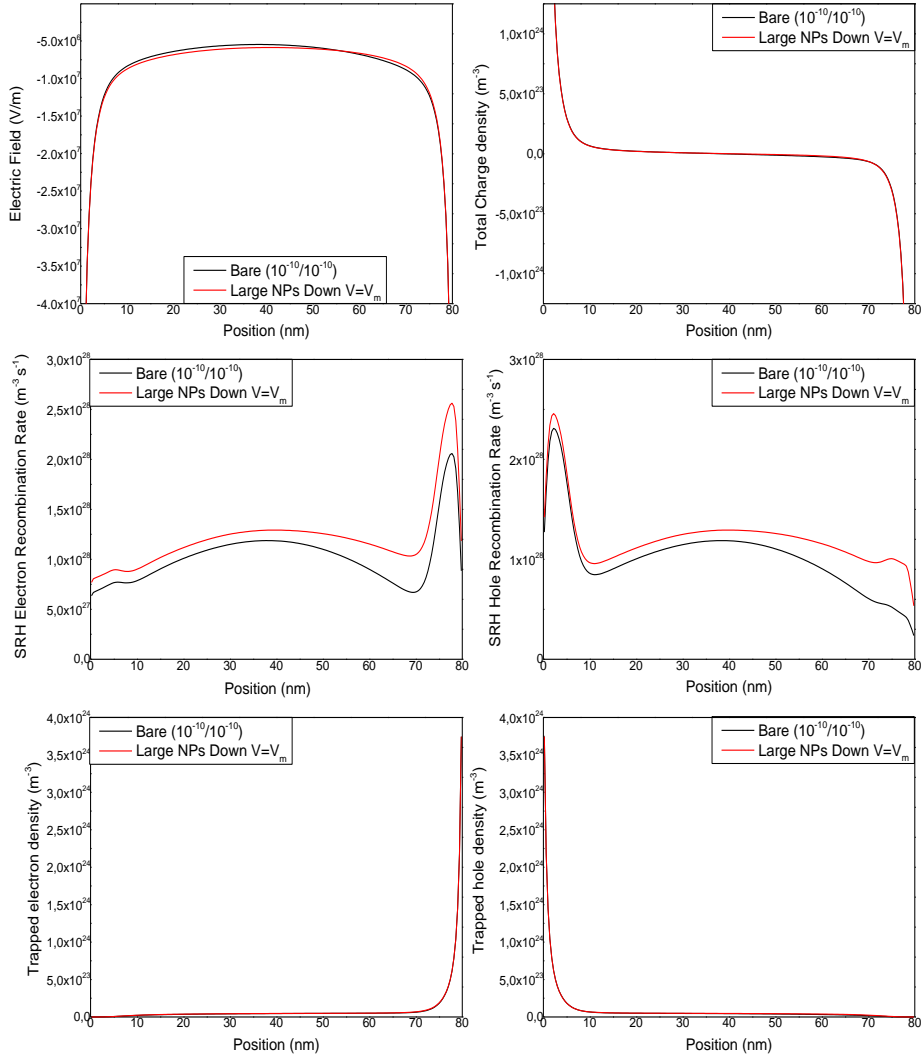
Εικόνα 8.32 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-10}$ m^2/Vs και $\mu_h=10^{-7}$ m^2/Vs για τάση $V = V_m$.



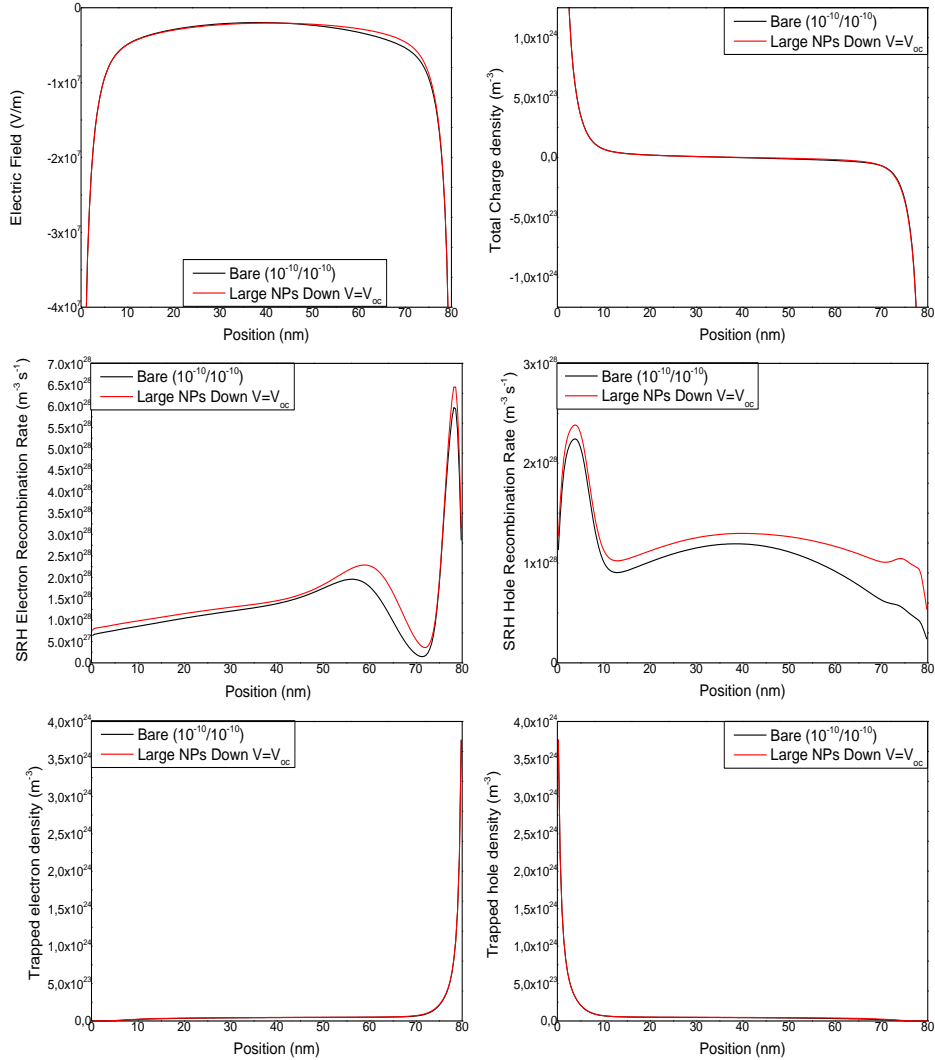
Εικόνα 8.33 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-10} \text{ m}^2/Vs$ και $\mu_h=10^{-7} \text{ m}^2/Vs$ για τάση $V = V_{oc}$.



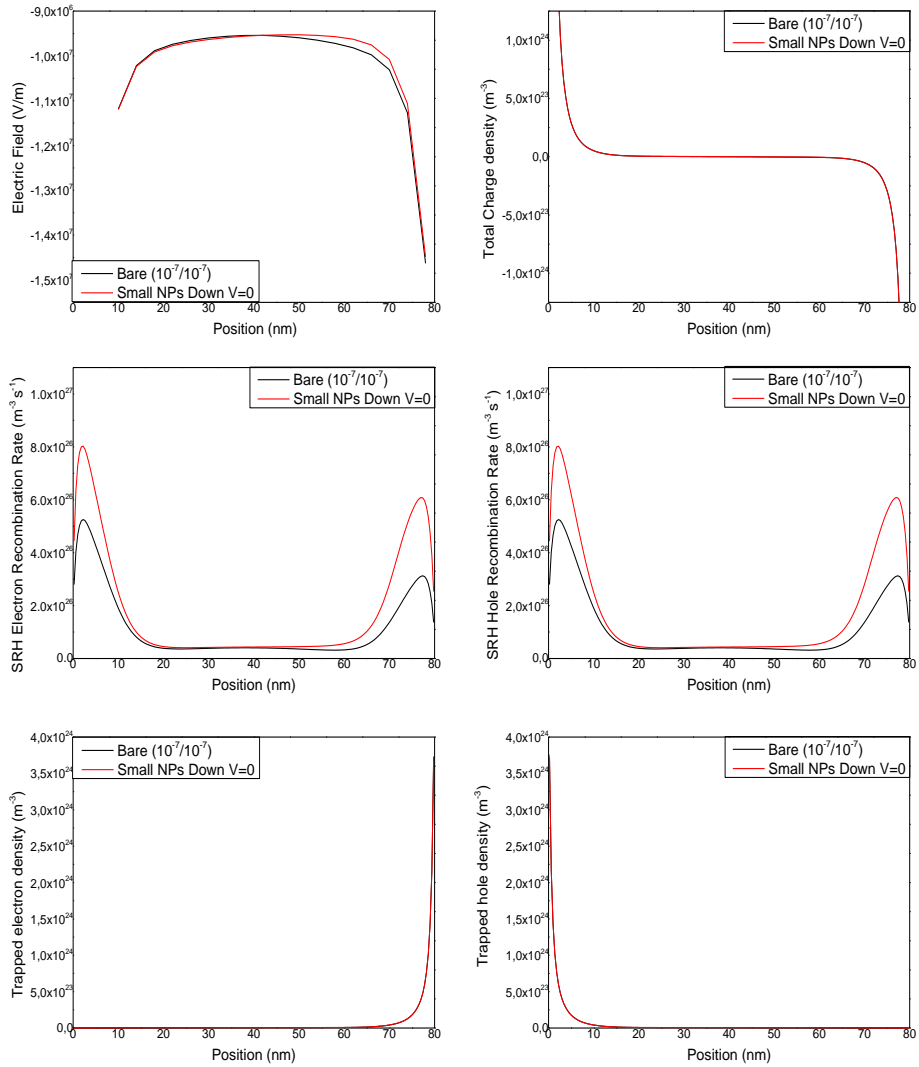
Εικόνα 8.34 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-10}$ m^2/Vs και $\mu_h=10^{-10}$ m^2/Vs για τάση $V = 0$.



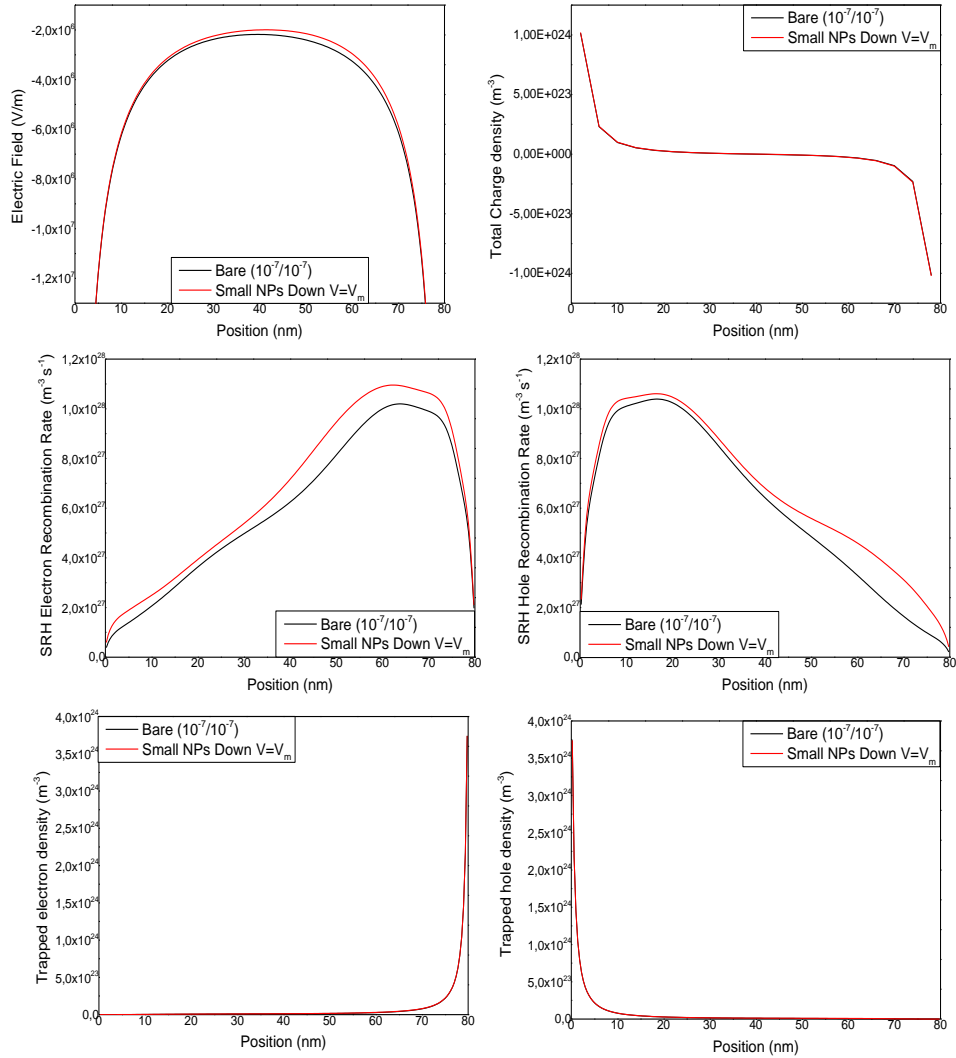
Εικόνα 8.35 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-10}$ m^2/Vs και $\mu_h=10^{-10}$ m^2/Vs για τάση $V = V_m$.



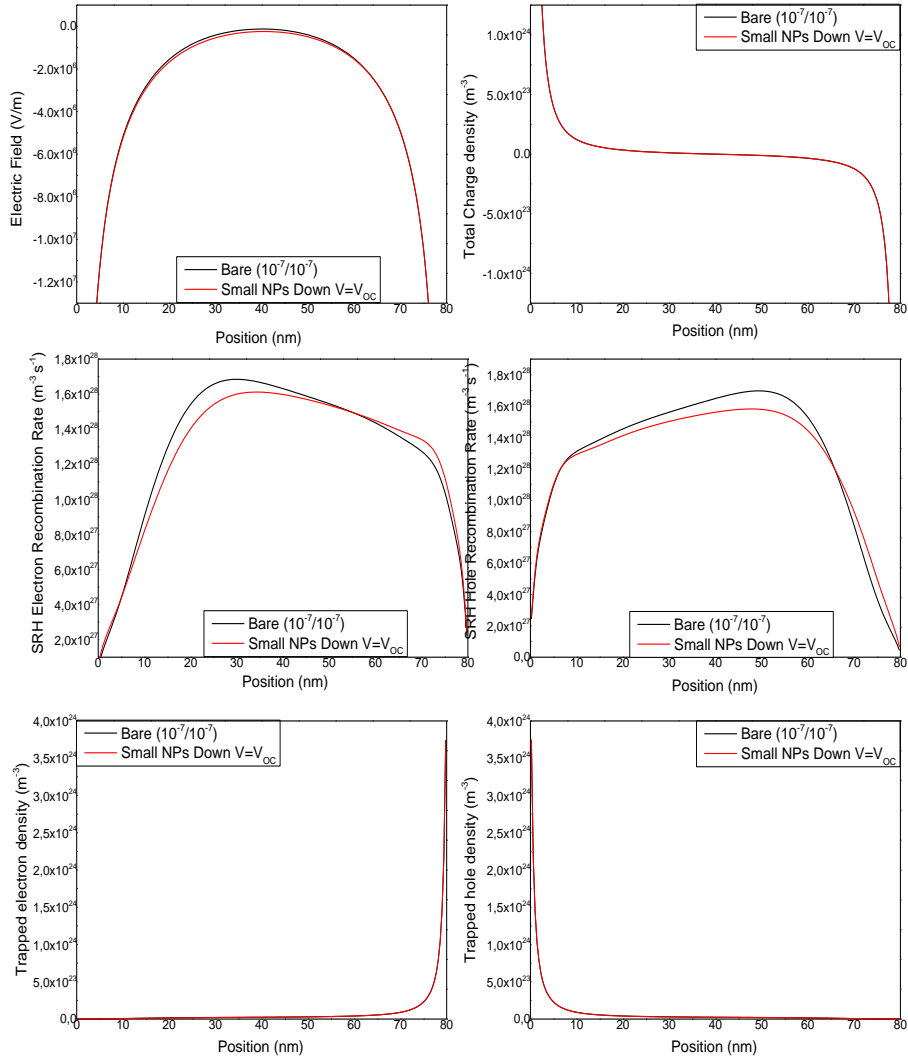
Εικόνα 8.36 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μεγάλα νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-10} m^2/Vs$ και $\mu_h=10^{-10} m^2/Vs$ για τάση $V = V_{oc}$.



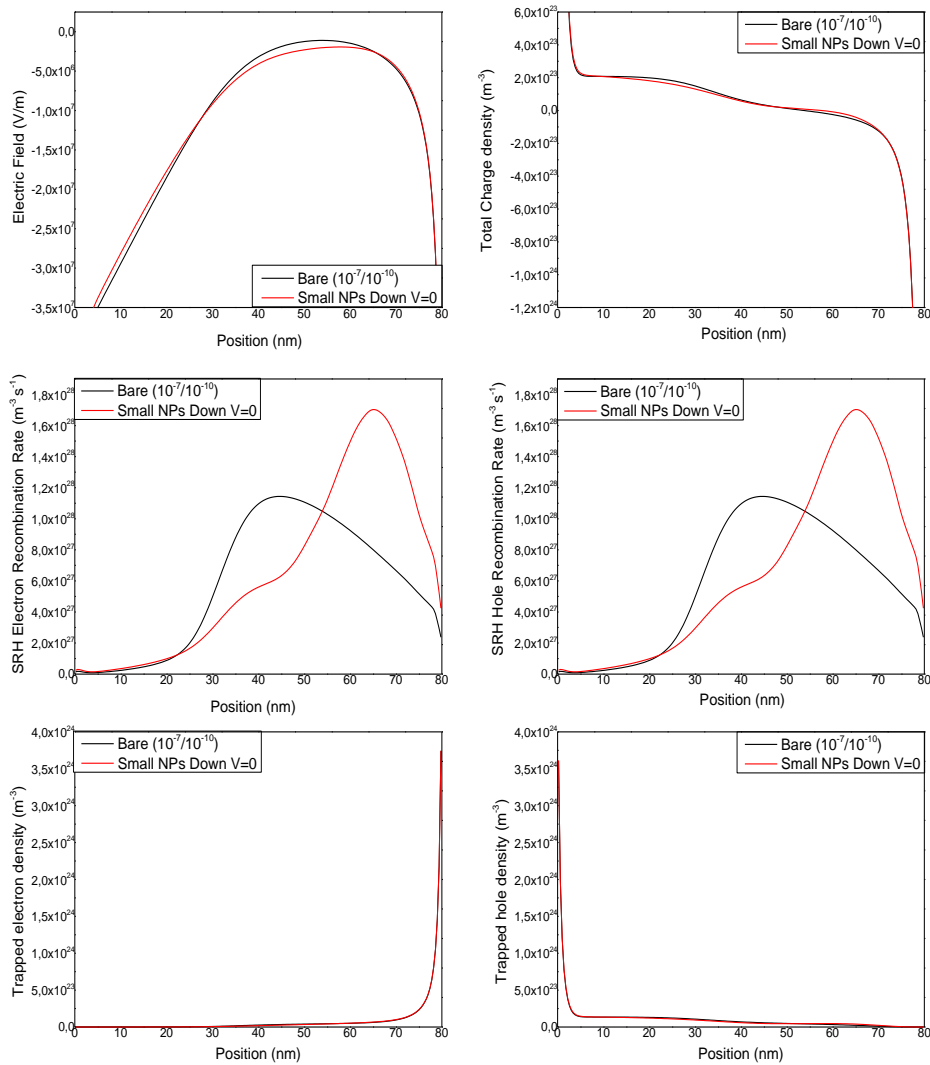
Εικόνα 8.37 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ και $\mu_h=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ για τάση $V = 0$.



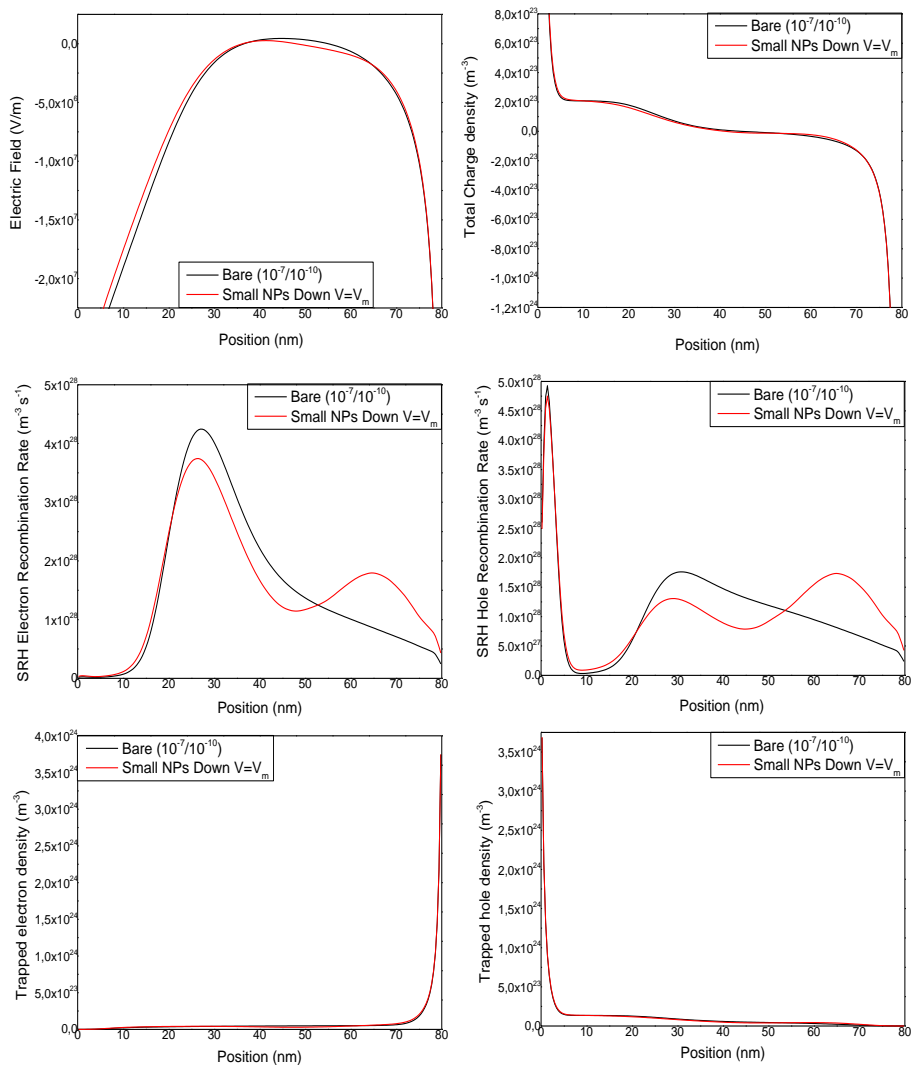
Εικόνα 8.38 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7}$ m^2/Vs και $\mu_h=10^{-7}$ m^2/Vs για τάση $V = V_m$.



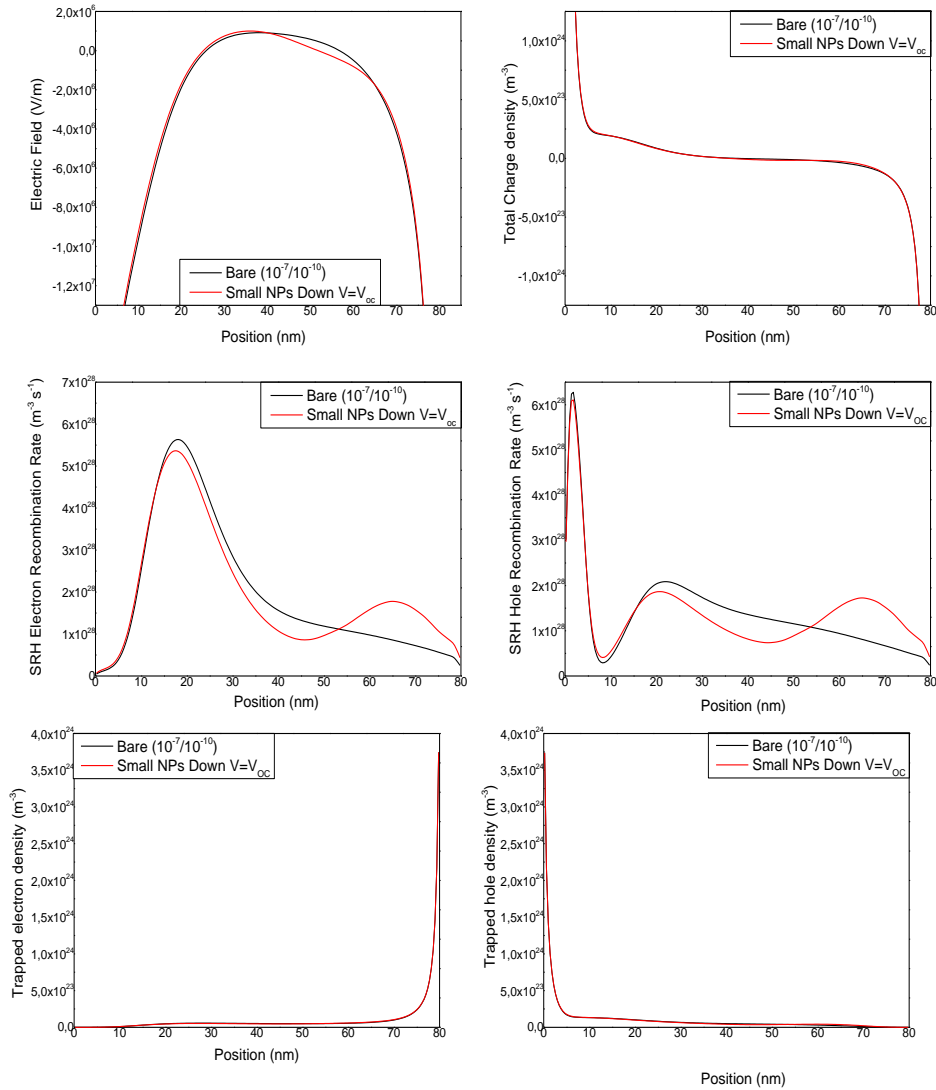
Εικόνα 8.39 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7}$ m^2/Vs και $\mu_h=10^{-7}$ m^2/Vs για τάση $V = V_{OC}$.



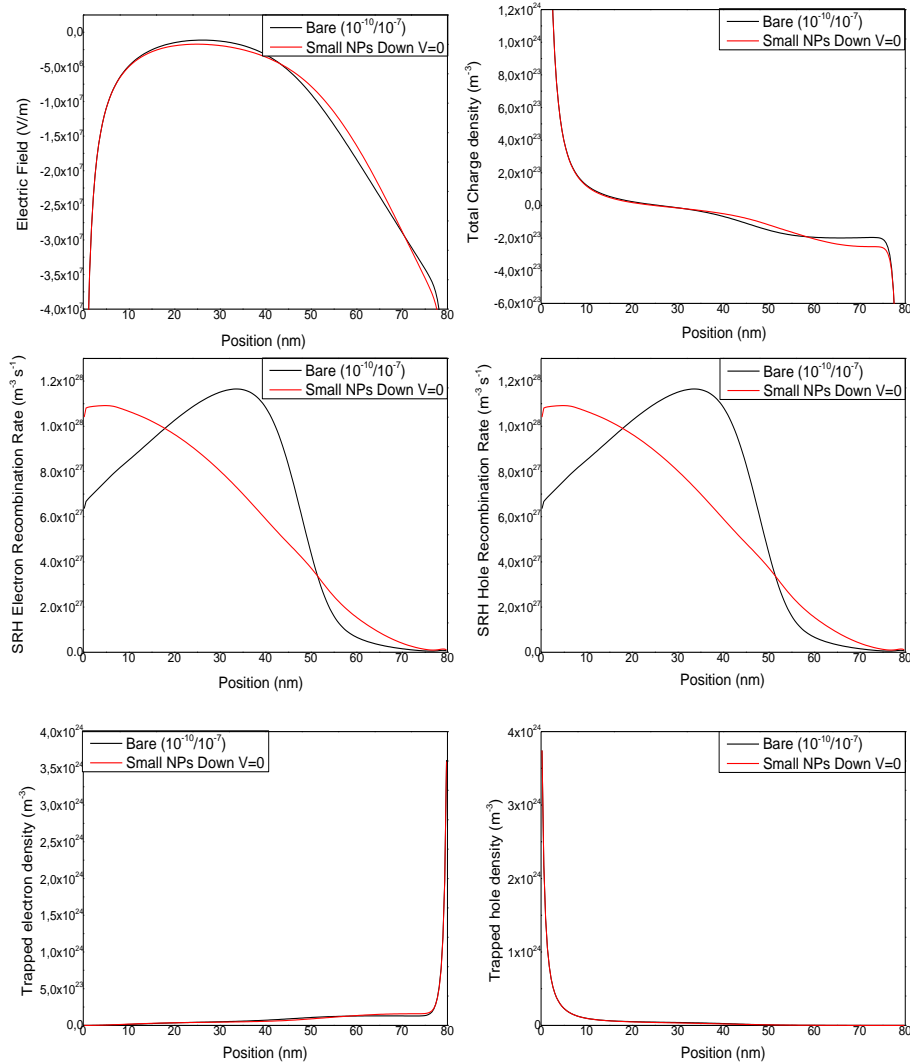
Εικόνα 8.40 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7}$ m²/Vs και $\mu_h=10^{-10}$ m²/Vs για τάση $V = 0$.



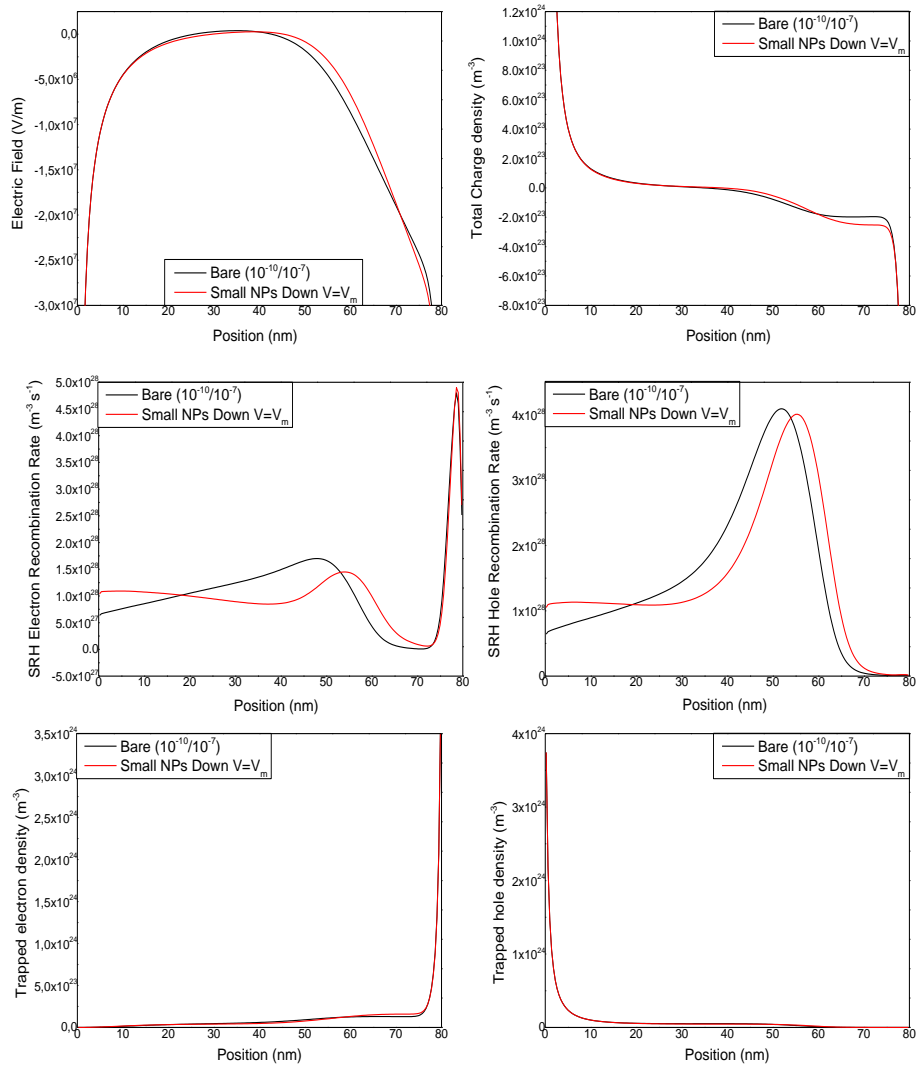
Εικόνα 8.41 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7}$ m²/Vs και $\mu_h=10^{-10}$ m²/Vs για τάση $V = V_m$.



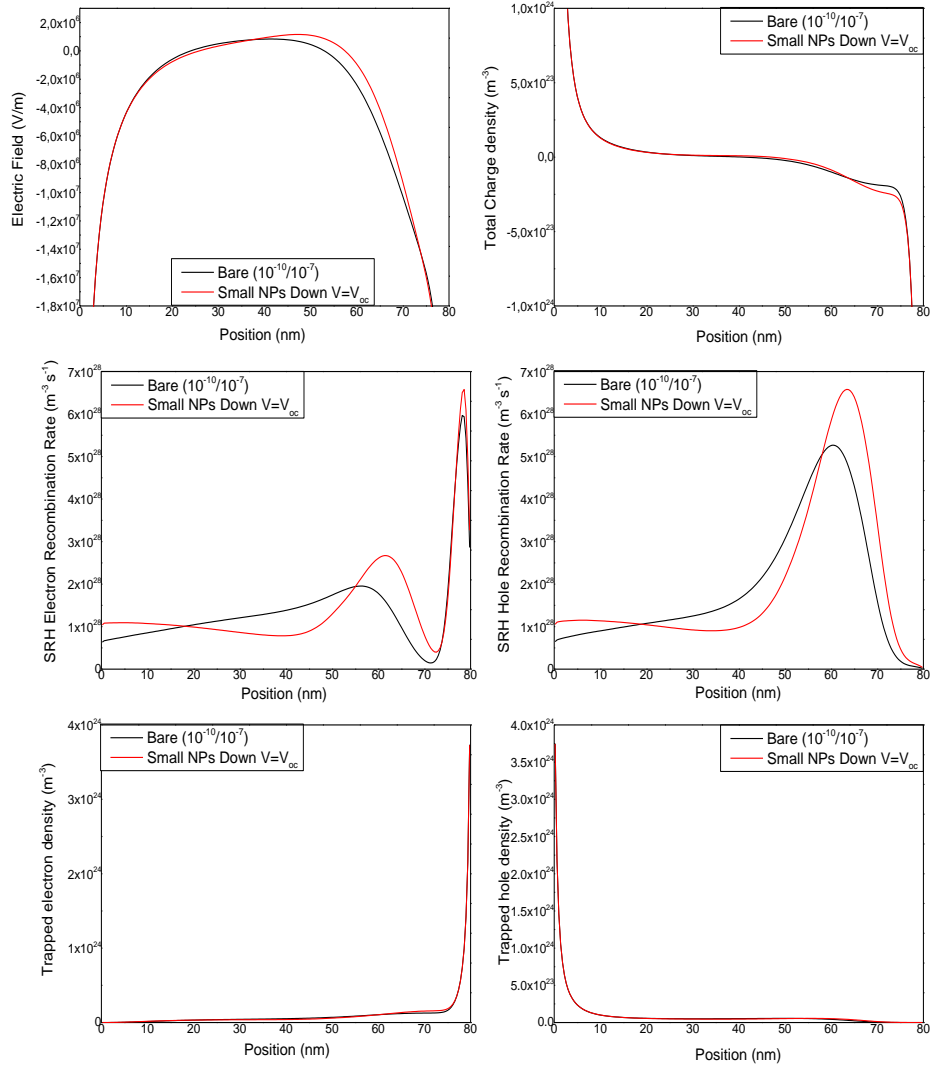
Εικόνα 8.42 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-7}$ m²/Vs και $\mu_h=10^{-10}$ m²/Vs για τάση $V = V_{oc}$.



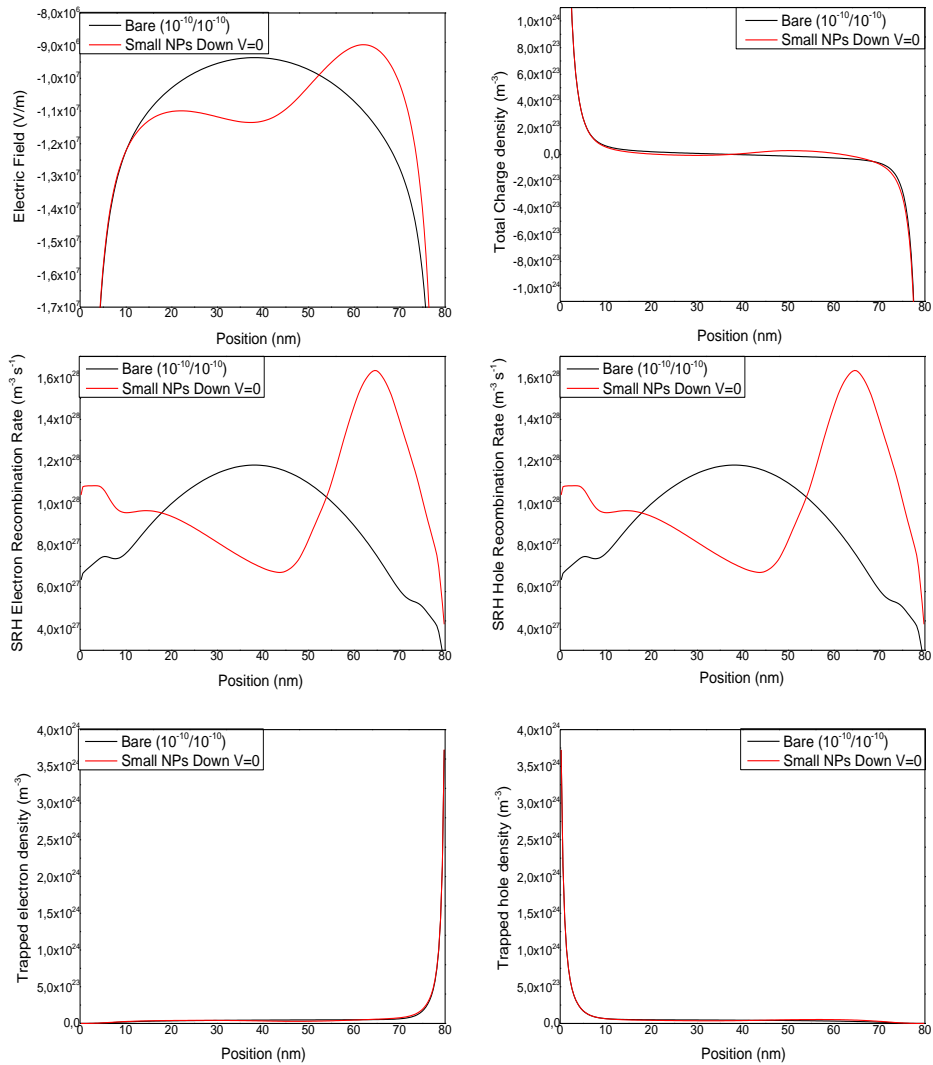
Εικόνα 8.43 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e = 10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ και $\mu_h = 10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ για τάση $V = 0$.



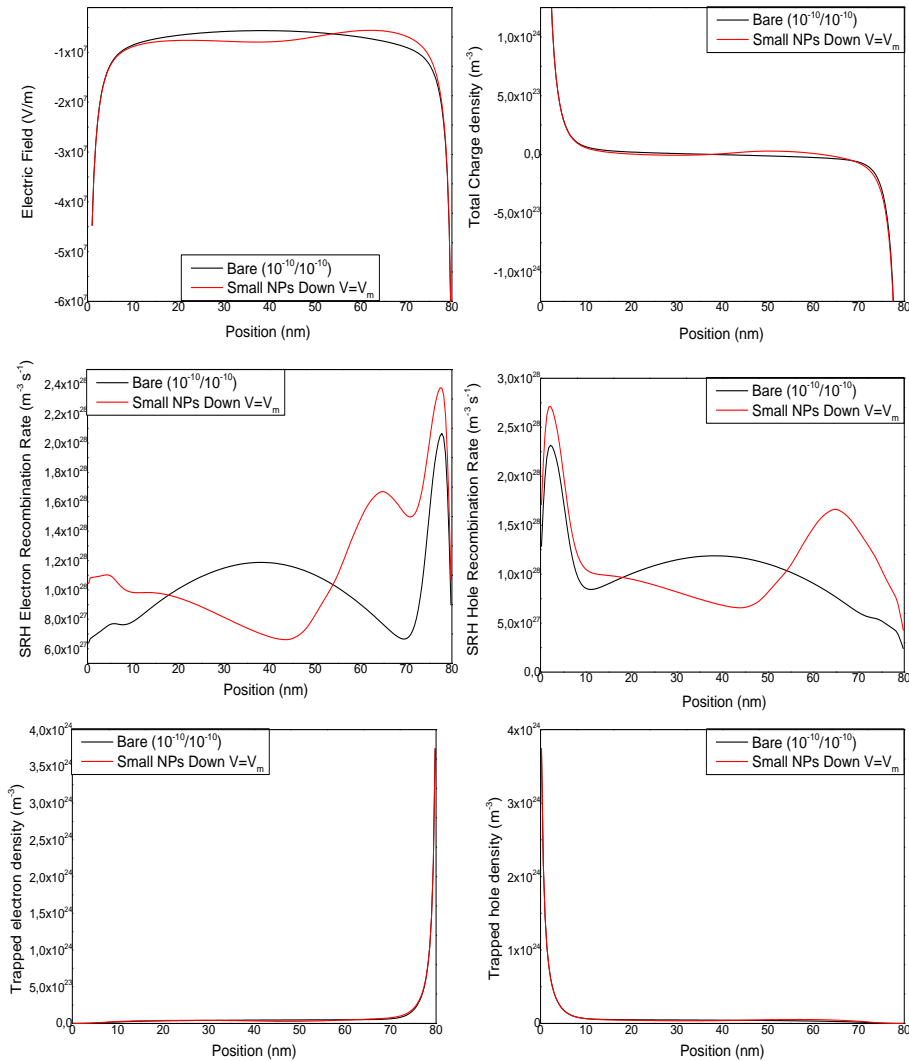
Εικόνα 8.44 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-10} m^2/Vs$ και $\mu_h=10^{-7} m^2/Vs$ για τάση $V = V_m$.



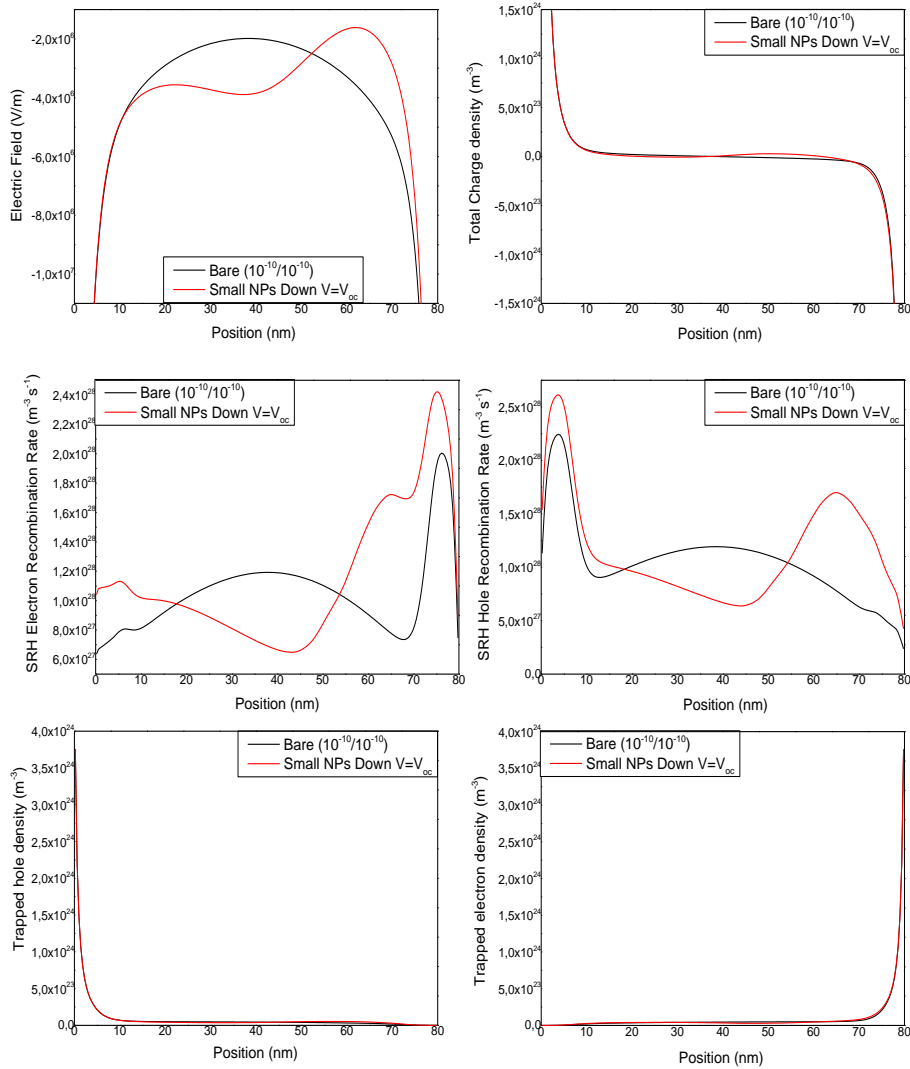
Εικόνα 8.45 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μικρά νανοσωματίδια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-10}$ m²/Vs και $\mu_h=10^{-7}$ m²/Vs για τάση $V = V_{oc}$.



Εικόνα 8.46 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μικρά νανοδομάτια σε down διάταξη, για $\mu_e = 10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ και $\mu_h = 10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ για τάση $V = 0$.



Εικόνα 8.47 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδυασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδυασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μικρά νανοδομάτια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-10}$ m^2/Vs και $\mu_h=10^{-10}$ m^2/Vs για τάση $V = V_m$.



Εικόνα 8.48 Κατανομή του ηλεκτρικού πεδίου (E), του συνολικού φορτίου (Q), του ρυθμού επανασυνδασμού ηλεκτρονίων (R_n), του ρυθμού επανασυνδασμού των οπών (R_p), της πυκνότητας παγιδευμένων ηλεκτρονίων (n_t) και της πυκνότητας παγιδευμένων οπών (p_t) μέσα στο ενεργό στρώμα (0 - 80 nm) με μικρά νανοδομάτια σε down διάταξη, για $\mu_e=10^{-10}$ m^2/Vs και $\mu_h=10^{-10}$ m^2/Vs για τάση $V = V_{oc}$.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 4: ΠΙΝΑΚΕΣ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΗΛΕΚΤΡΙΚΩΝ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΩΝ

Πίνακας 6.1 Bare

| Μέγεθος | Μονάδες | $\mu_e=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs} -$ $\mu_h=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ | $\mu_e=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs} -$ $\mu_h=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ | $\mu_e=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs} -$ $\mu_h=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ | $\mu_e=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs} -$ $\mu_h=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ |
|---|--------------------------------|--|---|---|--|
| FF | a.u. | 0,70075 | 0,358648 | 0,341165 | 0,259405 |
| PCE | % | 5,358088 | 1,029920 | 0,836453 | 0,05444 |
| Μέγιστη ισχύς | W | 53,58088 | 10,299200 | 8,364525 | 0,544403 |
| V_{oc} | V | 0,645706 | 0,639374 | 0,628097 | 0,567759 |
| Χρονική σταθερά επανασυνδασμού στη V_{oc} | s | 4,100440E-06 | 4,882080E-06 | 4,760426E-06 | 4,684389E-06 |
| Ρυθμός επανασυνδασμού στη V_{oc} | $\text{m}^{-3} \text{ s}^{-1}$ | 1,199576E+28 | 9,289919E+27 | 9,504869E+27 | 9,330148E+27 |
| Μέση πυκνότητα φορέων στο P_{max} | m^{-3} | 2,252991E+22 | 4,304410E+22 | 3,610675E+22 | 3,626075E+22 |
| Χρονική σταθερά επανασυνδασμού | m^{-1} | 2,094115E-05 | 5,812164E-06 | 4,693542E-06 | 3,941038E-06 |
| Παγιδευμένα ηλεκτρόνια στη V_{oc} | m^{-3} | 7,180381E+22 | 6,876632E+22 | 6,894437E+22 | 6,826163E+22 |
| Παγιδευμένες οπές στη V_{oc} | m^{-3} | 7,175294E+22 | 6,891539E+22 | 6,873528E+22 | 6,802528E+22 |
| Ελεύθερα ηλεκτρόνια στη V_{oc} | m^{-3} | 4,568228E+22 | 4,409107E+22 | 4,398329E+22 | 4,322663E+22 |
| Ελεύθερες οπές στη V_{oc} | m^{-3} | 4,571982E+22 | 4,407225E+22 | 4,425411E+22 | 4,339507E+22 |
| J_{sc} | Am^{-2} | 11,84164 | 0,4491382 | 0,3903465 | 0,03696394 |
| Συνολικοί φορείς (n+p)/2 στη V_{oc} | m^{-3} | 9,138333E+22 | 8,817272E+22 | 8,810198E+22 | 8,653747E+22 |

Πίνακας 6.2 Small Down

| Μέγεθος | Μονάδες | $\mu_e=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs} - \mu_h=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ | $\mu_e=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs} - \mu_h=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ | $\mu_e=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs} - \mu_h=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ | $\mu_e=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs} - \mu_h=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ |
|--|--------------------------------|---|--|--|---|
| FF | a.u. | 0,689274 | 0,401715 | 0,3849 | 0,255049 |
| PCE | % | 5,805502 | 1,256632 | 1,455697 | 0,053218 |
| Μέγιστη ισχύς | W | 58,05502 | 12,566315 | 14,556966 | 0,532184 |
| V_{oc} | V | 0,648746 | 0,649083 | 0,648538 | 0,56992 |
| Χρονική σταθερά επανασυνδρασμού στη V_{oc} | s | 4,012627E-06 | 4,395640E-06 | 4,369113E-06 | 4,308394E-06 |
| Ρυθμός επανασυνδρασμού στη V_{oc} | $\text{m}^{-3} \text{ s}^{-1}$ | 1,235417E+28 | 1,051409E+28 | 1,054469E+28 | 1,028983E+28 |
| Μέση πυκνότητα φορέων στο P_{max} | m^{-3} | 2,502424E+22 | 4,359651E+22 | 3,705655E+22 | 3,777493E+22 |
| Χρονική σταθερά επανασυνδρασμού | m^{-1} | 1,502858E-05 | 5,418808E-06 | 4,899778E-06 | 3,719244E-06 |
| Παγιδευμένα ηλεκτρόνια στη V_{oc} | m^{-3} | 7,199747E+22 | 6,927324E+22 | 6,869185E+22 | 6,791439E+22 |
| Παγιδευμένες οπές στη V_{oc} | m^{-3} | 7,207238E+22 | 6,886368E+22 | 6,921268E+22 | 6,834655E+22 |
| Ελεύθερα ηλεκτρόνια στη V_{oc} | m^{-3} | 4,586385E+22 | 4,467410E+22 | 4,456250E+22 | 4,370168E+22 |
| Ελεύθερες οπές στη V_{oc} | m^{-3} | 4,580694E+22 | 4,468198E+22 | 4,426573E+22 | 4,337689E+22 |
| J_{sc} | Am^{-2} | 12,98295 | 0,4819361 | 0,5831595 | 0,03661205 |
| Συνολικοί φορείς (n+p)/2 στη V_{oc} | m^{-3} | 9,169925E+22 | 8,935214E+22 | 8,897662E+22 | 8,724097E+22 |

Πίνακας 6.3 Small Up

| Μέγεθος | Μονάδες | $\mu_e=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs} - \mu_h=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ | $\mu_e=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs} - \mu_h=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ | $\mu_e=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs} - \mu_h=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ | $\mu_e=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs} - \mu_h=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ |
|---|--------------------------------|---|--|--|---|
| FF | a.u. | 0,70452 | 0,385169 | 0,347922 | 0,244783 |
| PCE | % | 3,374919 | 1,293440 | 0,312801 | 0,031979 |
| Μέγιστη ισχύς | W | 33,749192 | 12,934403 | 3,128023 | 0,319794 |
| V_{oc} | V | 0,631513 | 0,643591 | 0,591552 | 0,528999 |
| Χρονική σταθερά επανασυνδασμού στη V_{oc} | s | 5,841371E-06 | 5,864331E-06 | 6,012184E-06 | 5,661904E-06 |
| Ρυθμός επανασυνδασμού στη V_{oc} | $\text{m}^{-3} \text{ s}^{-1}$ | 6,904035E+27 | 6,349308E+27 | 6,020028E+27 | 5,973144E+27 |
| Μέση πυκνότητα φορέων στο P_{max} | m^{-3} | 2,094482E+22 | 3,507777E+22 | 2,803368E+22 | 2,707996E+22 |
| Χρονική σταθερά επανασυνδασμού | m^{-1} | 2,555776E-05 | 9,868985E-06 | 5,251784E-06 | 4,594068E-06 |
| Παγιδευμένα ηλεκτρόνια στη V_{oc} | m^{-3} | 6,474147E+22 | 6,301820E+22 | 6,214680E+22 | 6,134843E+22 |
| Παγιδευμένες οπές στη V_{oc} | m^{-3} | 6,439237E+22 | 6,100165E+22 | 6,052632E+22 | 5,921680E+22 |
| Ελεύθερα ηλεκτρόνια στη V_{oc} | m^{-3} | 4,215334E+22 | 4,085684E+22 | 4,035851E+22 | 3,910983E+22 |
| Ελεύθερες οπές στη V_{oc} | m^{-3} | 4,242053E+22 | 4,221506E+22 | 4,160520E+22 | 4,066380E+22 |
| J_{sc} | Am^{-2} | 0,7585576 | 0,5217774 | 0,1519833 | 0,02517226 |
| Συνολικοί φορείς (n+p)/2 στη V_{oc} | m^{-3} | 8,444027E+22 | 8,239279E+22 | 8,134037E+22 | 7,899664E+22 |

Πίνακας 6.4 Large Down

| Μέγεθος | Μονάδες | $\mu_e=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs} -$ $\mu_h=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ | $\mu_e=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs} -$ $\mu_h=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ | $\mu_e=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs} -$ $\mu_h=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ | $\mu_e=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs} -$ $\mu_h=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ |
|---|--------------------------------|--|---|---|--|
| FF | a.u. | 0,691928 | 0,363635 | 0,369816 | 0,259468 |
| PCE | % | 6,433014 | 1,153832 | 1,237042 | 0,060744 |
| Μέγιστη ισχύς | W | 64,330136 | 11,538322 | 12,370418 | 0,607438 |
| V_{oc} | V | 0,651531 | 0,643650 | 0,646665 | 0,578179 |
| Χρονική σταθερά επανασυνδασμού στη V_{oc} | s | 3,920474E-06 | 4,158393E-06 | 4,215848E-06 | 4,118848E-06 |
| Ρυθμός επανασυνδασμού στη V_{oc} | $\text{m}^{-3} \text{ s}^{-1}$ | 1,284234E+28 | 1,166246E+28 | 1,158090E+28 | 1,127742E+28 |
| Μέση πυκνότητα φορέων στο P_{max} | m^{-3} | 2,535725E+22 | 4,580127E+22 | 3,916586E+22 | 3,930627E+22 |
| Χρονική σταθερά επανασυνδασμού | m^{-1} | 1,487881E-05 | 5,019300E-06 | 4,367430E-06 | 3,529115E-06 |
| Παγιδευμένα ηλεκτρόνια στη V_{oc} | m^{-3} | 7,268628E+22 | 7,153692E+22 | 7,093959E+22 | 7,024501E+22 |
| Παγιδευμένες οπές στη V_{oc} | m^{-3} | 7,270690E+22 | 7,095588E+22 | 7,154982E+22 | 7,033426E+22 |
| Ελεύθερα ηλεκτρόνια στη V_{oc} | m^{-3} | 4,615527E+22 | 4,548353E+22 | 4,556710E+22 | 4,436322E+22 |
| Ελεύθερες οπές στη V_{oc} | m^{-3} | 4,614015E+22 | 4,553277E+22 | 4,542412E+22 | 4,430074E+22 |
| J_{sc} | Am^{-2} | 14,26979 | 0,4929776 | 0,5172719 | 0,04049076 |
| Συνολικοί φορείς (n+p)/2 στη V_{oc} | m^{-3} | 9,230298E+22 | 9,099168E+22 | 9,106272E+22 | 8,869520E+22 |

Πίνακας 6.5 Large Up

| Μέγεθος | Μονάδες | $\mu_e=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs} -$ $\mu_h=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ | $\mu_e=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs} -$ $\mu_h=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ | $\mu_e=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs} -$ $\mu_h=10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ | $\mu_e=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs} -$ $\mu_h=10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ |
|---|---------------------------------|--|---|---|--|
| FF | a.u. | 0,693758 | 0,364448 | 0,351277 | 0,259539 |
| PCE | % | 6,348314 | 1,168662 | 1,076521 | 0,060966 |
| Μέγιστη ισχύς | W | 63,483137 | 11,686617 | 10,765213 | 0,609656 |
| V_{oc} | V | 0,651009 | 0,644131 | 0,639766 | 0,578061 |
| Χρονική σταθερά επανασυνδρασμού στη V_{oc} | s | 3,937816E-06 | 4,228891E-06 | 4,305541E-06 | 4,180957E-06 |
| Ρυθμός επανασυνδρασμού στη V_{oc} | m ⁻³ s ⁻¹ | 1,276353E+28 | 1,146355E+28 | 1,104871E+28 | 1,109086E+28 |
| Μέση πυκνότητα φορέων στο P_{max} | m ⁻³ | 2,524123E+22 | 4,578498E+22 | 3,869245E+22 | 3,911219E+22 |
| Χρονική σταθερά επανασυνδρασμού | m ⁻¹ | 1,530229E-05 | 5,138382E-06 | 4,306901E-06 | 3,571829E-06 |
| Παγιδευμένα ηλεκτρόνια στη V_{oc} | m ⁻³ | 7,264906E+22 | 7,161005E+22 | 7,120559E+22 | 7,033187E+22 |
| Παγιδευμένες οπές στη V_{oc} | m ⁻³ | 7,263207E+22 | 7,093676E+22 | 7,065385E+22 | 7,026180E+22 |
| Ελεύθερα ηλεκτρόνια στη V_{oc} | m ⁻³ | 4,611271E+22 | 4,545020E+22 | 4,489329E+22 | 4,429808E+22 |
| Ελεύθερες οπές στη V_{oc} | m ⁻³ | 4,612488E+22 | 4,558054E+22 | 4,516242E+22 | 4,434434E+22 |
| J_{sc} | Am ⁻² | 14,05604 | 0,4978272 | 0,4790180 | 0,04063581 |
| Συνολικοί φορείς (n+p)/2 στη V_{oc} | m ⁻³ | 9,223151E+22 | 9,096557E+22 | 8,992114E+22 | 8,861928E+22 |

BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>
- [2] Vangelidis, Ioannis et al. "Plasmonic Organic Photovoltaics: Unraveling Plasmonic Enhancement For Realistic Cell Geometries". *ACS Photonics*, vol 5, no. 4, 2018, pp. 1440-1452. American Chemical Society (ACS).
- [3] Wu, Bo et al. *Plasmonic Organic Solar Cells*. Springer Singapore, 2017.
- [4] <http://ssabury.utk.edu>
- [5] Udum, Yasemin et al. "Inverted Bulk-Heterojunction Solar Cell With Cross-Linked Hole-Blocking Layer". *Organic Electronics*, vol 15, no. 5, 2014, pp. 997-1001. *Elsevier BV*, doi:10.1016/j.orgel.2014.02.009.
- [6] Calnan, Sonya. "Applications Of Oxide Coatings In Photovoltaic Devices". *Coatings*, vol 4, no. 1, 2014, pp. 162-202. MDPI AG, doi:10.3390/coatings4010162. Accessed 3 Sept 2019.
- [7] Elumalai, Naveen et al. "Perovskite Solar Cells: Progress And Advancements". *Energies*, vol 9, no. 11, 2016, p. 861. *MDPI AG*, doi:10.3390/en9110861.
- [8] Liang, Zhiqiang et al. "Plasmonic Enhanced Optoelectronic Devices". *Plasmonics*, vol 9, no. 4, 2014, pp. 859-866.
- [9] https://ecee.colorado.edu/~bart/book/book/chapter2/ch2_8.htm
- [10] Juan, M. L., Righini, M., & Quidant, R. (2011). "Plasmon nano-optical tweezers". *Nature Photonics*, 5(6), 349–356.
- [11] Mie, G. (1908). Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen. *Annalen Der Physik*, 330(3), 377–445.
- [12] Harry A., and Albert Polman. "Plasmonics For Improved Photovoltaic Devices". *Nature Materials*, vol 9, no. 3, 2010, pp. 205-213.
- [13] Elumalai, Naveen Kumar, and Ashraf Uddin. "Open Circuit Voltage Of Organic Solar Cells: An In-Depth Review". *Energy & Environmental Science*, vol 9, no. 2, 2016, pp. 391-410.
- [14] Vandewal, Koen et al. "On The Origin Of The Open-Circuit Voltage Of Polymer–Fullerene Solar Cells". *Nature Materials*, vol 8, no. 11, 2009, pp. 904-909.
- [15] Cowan, Sarah R. et al. "Recombination In Polymer-Fullerene Bulk Heterojunction Solar Cells". *Physical Review B*, vol 82, no. 24, 2010.

- [16] Riedel, I. et al. "Effect Of Temperature And Illumination On The Electrical Characteristics Of Polymer–Fullerene Bulk-Heterojunction Solar Cells". *Advanced Functional Materials*, vol 14, no. 1, 2004, pp. 38-44.
- [17] Blakesley, James C., and Dieter Neher. "Relationship Between Energetic Disorder And Open-Circuit Voltage In Bulk Heterojunction Organic Solar Cells". *Physical Review B*, vol 84, no. 7, 2011.
- [18] Hulea, I. N. et al. "Wide Energy-Window View On The Density Of States And Hole Mobility In Poly(P-Phenylene Vinylene)". *Physical Review Letters*, vol 93, no. 16, 2004.
- [19] Ripolles, Teresa S. et al. "Polymer Defect States Modulate Open-Circuit Voltage In Bulk-Heterojunction Solar Cells". *Applied Physics Letters*, vol 103, no. 24, 2013, p. 243306.
- [20] Mihailetschi, V. D. et al. "Cathode Dependence Of The Open-Circuit Voltage Of Polymer:Fullerene Bulk Heterojunction Solar Cells". *Journal Of Applied Physics*, vol 94, no. 10, 2003, pp. 6849-6854.
- [21] Mihailetschi, V. D. et al. "Cathode Dependence Of The Open-Circuit Voltage Of Polymer:Fullerene Bulk Heterojunction Solar Cells". *Journal Of Applied Physics*, vol 94, no. 10, 2003, pp. 6849-6854.
- [22] Shockley, William, and Hans J. Queisser. "Detailed Balance Limit Of Efficiency Of P- N Junction Solar Cells". *Journal Of Applied Physics*, vol 32, no. 3, 1961, pp. 510-519.
- [23] Qi, Boyuan, and Jizheng Wang. "Fill Factor In Organic Solar Cells". *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol 15, no. 23, 2013, p. 8972.