



Numerical Study of Short-circuit Current Density and Absorption in the Active Layer of Organic Solar Cells in the Presence of Cylindrical Nanoparticles

Mohsen Bahrami^{1*}, Nasrin Sepahvand², Zahra Moradpour³

¹Assistant Professor, Department of Physics, Science Faculty, University of Lorestan, Khorramabad, Iran.

²PhD Student, Department of Physics, Science Faculty, University of Shahid Chamran, Ahvaz, Iran.

³MSc, Department of Physics, Science Faculty, University of Lorestan, Khorramabad, Iran.

ARTICLE INFO

Received: 08.31.2022

Revised: 10.23.2022

Accepted: 11.19.2022

Keyword:

Finite Difference Time Domain (FDTD)
Plasmonics, Absorption
Short-circuit Current Density Organic
Solar Cell

*Corresponding Author:

Mohsen Bahrami

Email: bahrami.m@lu.ac.ir

ABSTRACT

In the present reaserch, using the finite difference time domain method (FDTD), the effect of the presence of solid aluminum nanocylinders containing elliptical holes (cores) on the quantities of short-circuit current density and absorption was investigated in the ITO/PEDOT:PSS/P3HT:PCBM/ZnO/Al organic solar cell. The nanoparticles are located in a hexagonal pattern inside the P3HT:PCBM layer and on the border with the ZnO layer. For simulation, the standard spectral pattern of the sun AM1.5 was used in the spectral range of 300-1200 nm. Calculations showed that the presence of different nanocylinders caused a significant improvement in the values of high quantities. This was particularly noticeable in the range of high wavelengths. In addition, the presence of nanocylinders created an optimal thickness of 150 nm for the active layer of P3HT:PCBM solar cell, so the mentioned quantities had the highest values. This optimal thickness was independent of the presence of dielectric cores in nanocylinders. Comparing the calculation results under different conditions showed that when the thickness of the active layer was 150 nm, the height and radius of the nanocylinders were 50 nm and 15 nm, and the elliptical holes had small and large radii of 1 nm and 15 nm, respectively. The short-circuit current density and absorption of the intended solar cell had their optimal values.



EXTENDED ABSTRACT

Introduction

Organic solar cells are an important category of solar cells that have attracted the attention of a large number of researchers over the past few years. One of the important issues is increasing the short-current density and absorption in these cells. In the present study, using the FDTD numerical method, the effect of the presence of aluminum nanocylinders located in the active layer of ITO/PEDOT:PSS/P3HT:PCBM/ZnO/Al solar cell was investigated on the aforementioned quantities.

Methodology

The solar cell used in this study has a structure as shown in Figure 1. In this structure, aluminum nanocylinders are located in a hexagonal pattern at the border between P3HT:PCBM and ZnO layers. Two kinds of nanocylinders were used in the research (Figure 2).

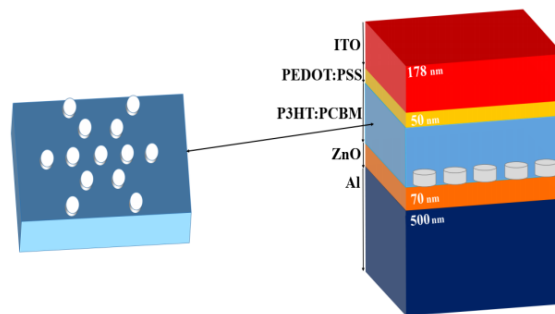


Figure 1. Schematic structure of the organic solar cell.

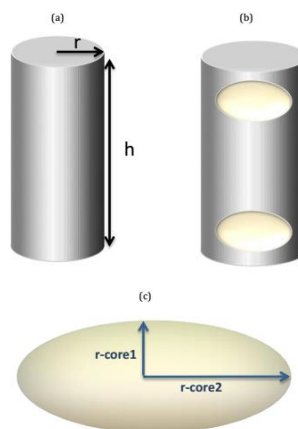


Figure 2. a, b) Schematic structure the nanocylinders c) structure of the core.

The quantities of the absorption and the short-circuit current density were calculated using the following equations. The FDTD numerical method was used to simulate these quantities.

$$P_{abs}(\vec{r}, \lambda) = -\frac{1}{2} \text{real}[i\omega\epsilon(\vec{r}, \lambda)(E(\vec{r}, \lambda))^2] = -\frac{1}{2} \omega |E(\vec{r}, \lambda)|^2 \text{Im}[\epsilon(\vec{r}, \lambda)] \quad (1)$$

$$J_{sc} = q \int_{0.3}^{1.2} \frac{I_{Am1.5}(\lambda)}{\lambda} \cdot L(\lambda) d(\lambda) \quad (2)$$

Results and discussion

In the first step, to understand the role and effect of the presence of metal nanoparticles, the values of short-circuit current density were examined in terms of the thickness of P3HT:PCBM and absorption in terms of wavelength in the presence of solid nanocylinders (Figure 2a). The results of the present study calculations showed that when the solid aluminum nanocylinders were arranged in a hexagonal pattern and their height (length) and radius were 50 nm and 15 nm, the short-circuit current density was at its highest value, 36.64 mA/cm^2 . In addition, the presence of these nanocylinders caused the short-circuit current density to be the highest in the 150 nm thickness of the P3HT:PCBM active layer (Figure 3a), meaning the optimal thickness for the active layer for better solar cell performance was available. In Figure 3b, the absorption curve of P3HT:PCBM active layer with and without the presence of nanoparticles is also shown. This diagram shows that the presence of nanoparticles caused a significant change in the absorption of the solar cell. Therefore, the placement of nanocylinders in the active layer increased light absorption and, in parallel, increased the short-circuit current density through the resonance of substituted surface plasmon (near field) or scattering (far field).

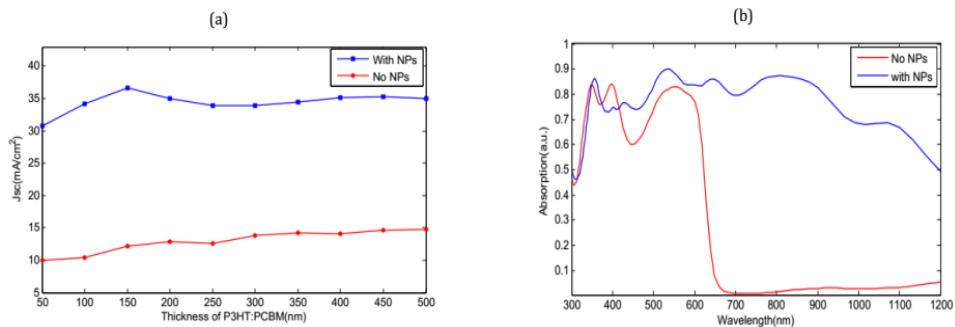


Figure 3. a) Short-circuit current density diagram in terms of the small radius of the core of nanocylinders for a thickness of 150 nm of P3HT:PCBM, b) Short-circuit current density diagram in terms of the large radius of the core of nanocylinders for a thickness of 150 nm of P3HT:PCBM.

In the next step, the short-circuit current density and the absorption for core-shell nanocylinders (Figure 4 a, b) were obtained by changing the small and large radii of the ellipsoidal cores to achieve an optimal value for these radii (Figure 2c). When the sizes of the small and large radii of the cores were equal to 1 nm and 15 nm, respectively, the value

of the short-circuit current density increased compared to the previous state and was equal to 37.7 A/cm^2 . The presence of nuclei (holes) led to the creation of dipoles in the metal-dielectric (air) interface inside the nanocylinders, they strengthened the exchange fields near the surface of the nanoparticles in interaction with the incident light.

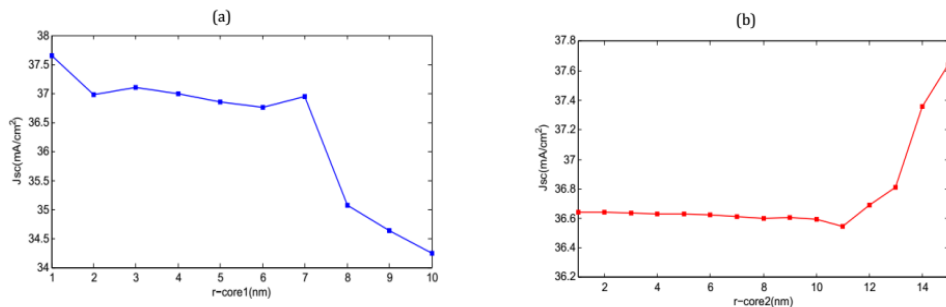


Figure 4. a, b) Short-circuit current density diagram in terms of the small and large radii of the core of nanocylinders for a thickness of 150 nm of P3HT:PCBM.

In the final stage of calculations, the effect of changing the radius and height of nanocylinder shells (r, h) when the active layer had an optimal thickness of 150 nm and the cores had radii of 1 nm and 15 nm were investigated (Figure 5 a, b). Finally, at a height of 50 nm and a radius of 15 nm, the short-circuit current density achieved a significant improvement compared to the situations without and with solid nanocylinders (Figure 5b), whose maximum value was 38.9 mA/cm^2 . The presence of nanoparticles with a height of 10-50 nm increased the optical length and reduced the electron-hole recombination, which can in turn have a significant effect to increase the junction current.

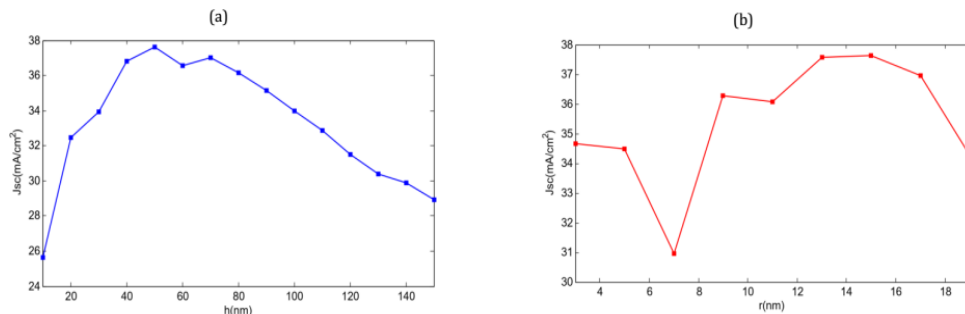


Figure 5. a, b) Short-circuit current density diagrams according to the height and the radius of nanocylinders for the optimal thickness of 150 nm of the P3HT:PCBM layer.

Therefore, the presence of nanocylinders and their structure change caused absorption peaks in $\lambda_1 = 347 \text{ nm}$, $\lambda_2 = 528 \text{ nm}$, $\lambda_3 = 808 \text{ nm}$. As it is clear in the diagram, in the wavelength range of 700-1200 nm (infrared region), an increase in absorption was observed.

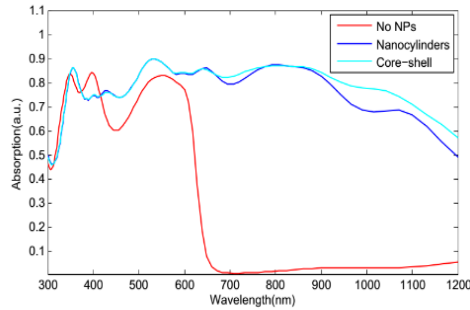


Figure 6. Absorption curves for three states, without the presence of nanoparticles, with the presence of solid nanotubes and core-shell nanotubes.

Conclusion

The present study calculations showed that the presence of nanocylinders created an optimal thickness of 150 nm for the active layer P3HT:PCBM of the solar cell. Moreover, comparing the calculation results under different conditions revealed that when the thickness of the active layer is 150 nm, the height and radius of the nanocylinders are 50 nm and 15 nm, and the elliptical holes have small and large radii of 1 nm and 15 nm, the short-circuit current density and absorption of the intended solar cell are at optimal values.



مطالعه عددی چگالی جریان اتصال - کوتاه و جذب در لایه فعال سلول‌های خورشیدی آلی در حضور نانوذرات استوانه‌ای

محسن بهرامی^{۱*}، نسرين سپه‌وند^۲، زهرا مرادپور^۳

- ۱- استادیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه لرستان، خرم‌آباد، ایران.
- ۲- دانشجوی دکتری، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران، اهواز، ایران.
- ۳- کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه لرستان، خرم‌آباد، ایران.

چکیده

اطلاعات مقاله

در این پژوهش، با استفاده از روش تفاضلات متناهی حوزه زمان، تأثیر حضور نانواستوانه‌های آلومینیومی توپر و شامل حفره‌هایی به شکل بیضی‌وار (هسته‌ها) بر روی کمیت‌های چگالی جریان اتصال-کوتاه و جذب در سلول خورشیدی آلی بررسی شده است. نانوذرات در ITO/PEDOT:PSS/P3HT:PCBM/ZnO/Al لایه‌های همگراگوناالی شکل در داخل لایه P3HT:PCBM و در مرز با لایه ZnO واقع شده‌اند. برای شبیه‌سازی از الگوی طیفی استاندارد خورشید AM_{1.5} در محدوده طیفی ۱۲۰۰-۳۰۰ nm استفاده شده است. محاسبات نشان داده است که حضور نانواستوانه‌های مختلف باعث بهبود چشم‌گیر در مقادیر کمیت‌های بالا می‌شود. این افزایش به‌ویژه در محدوده طول موج‌های بالا چشم‌گیرتر است. علاوه بر این، وجود نانواستوانه‌ها ضخامت بهینه ۱۵۰ nm را برای لایه فعال P3HT:PCBM، سلول خورشیدی ایجاد می‌کند، به طوری که کمیت‌های بیان‌شده، بالاترین مقادیر را دارند. این ضخامت بهینه مستقل از وجود هسته‌های دی‌الکتریک در نانواستوانه‌ها می‌باشد. مقایسه نتایج محاسبات در شرایط مختلف نشان می‌دهد که وقتی ضخامت لایه فعال ۱۵۰ nm، ارتفاع و شعاع نانواستوانه‌ها ۵۰ nm و ۱۵ nm و حفره‌های بیضی‌وار شکل دارای شعاع‌های کوچک و بزرگ ۱ nm و ۱۵ nm باشند، چگالی جریان اتصال - کوتاه و جذب سلول خورشیدی مورد نظر دارای بهینه‌ترین مقادیر خود می‌باشند.

دریافت مقاله: ۱۴۰۱/۰۶/۰۹

بازنگری مقاله: ۱۴۰۱/۰۸/۰۱

پذیرش مقاله: ۱۴۰۱/۰۸/۲۸

کلید واژگان:

تفاضلات متناهی حوزه زمان
پلاسمونیک
جذب
چگالی جریان اتصال - کوتاه
سلول خورشیدی آلی

*نویسنده مسئول: محسن بهرامی

پست الکترونیکی:

bahrami.m@lu.ac.ir



مقدمه

سلول‌های خورشیدی با تبدیل مستقیم انرژی خورشیدی به انرژی الکتریکی، راه‌حلی عملی برای مشکلات مربوط به سوخت‌های فسیلی و آلودگی‌های زیست محیطی ناشی از آن‌ها و استفاده از انرژی‌های پاک و تجدیدپذیر ارائه می‌دهند [۱]. مواد نیمه‌هادی آلی به دلیل گاف تنظیم‌پذیر، ساخت آسان، ضریب جذب بالا و رسانایی حامل‌های بار الکتریکی به‌طور گسترده‌ای در سلول‌های خورشیدی به‌کار می‌روند [۲؛ ۳]. سلول‌های خورشیدی آلی با داشتن مزایایی چون انعطاف‌پذیری بالا، هزینه ساخت پایین و وزن کم، نسبت به سلول‌های خورشیدی سیلیکونی بسیار مورد توجه واقع شده‌اند که این نشان از اهمیت بالای آن‌هاست [۴]. مسئله اصلی در استفاده از مواد آلی به‌عنوان لایه‌های فعال سلول خورشیدی، جذب نوری بسیار ضعیف آن‌هاست که باعث کاهش بازدهی کلی سلول خورشیدی می‌گردد [۵]. در واقع به دلیل تحرک‌پذیری کم حامل‌های بار الکتریکی (در حدود $10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ v}^{-1} \text{ s}^{-1}$) و طول انتشار کم اکسایتون ($20\text{--}50 \text{ nm}$)، ضخامت لایه فعال این سلول‌ها غالباً به 100 nm یا کمتر محدود می‌شود [۴]. در ضخامت‌های بیشتر، باز ترکیب حامل‌های بارهای آزاد منجر به کاهش بازده تبدیل توان می‌شود و کاهش ضخامت نیز جذب فوتون‌ها را محدود می‌کند و در نتیجه جریان‌های نوری را پایین می‌آورد [۴؛ ۶]. بنابراین معضل اصلی در استفاده از این سلول‌ها برقراری توازن بین ضخامت بهینه لایه فعال و میزان جذب نوری در این سلول‌ها می‌باشد. مطالعات مختلفی نشان داده است که با افزایش برهم‌کنش نور- ماده و طول راه مؤثر نوری در لایه فعال، بازده تبدیل توان به‌طور چشم‌گیری افزایش می‌یابد [۷]. برای غلبه بر مسئله جذب ضعیف در سلول‌های خورشیدی آلی تاکنون کارهای زیادی (مواد جدید برای لایه فعال، میکروولنژها، طراحی سلول‌های پشت سرهم، توری‌های پراش و نانوساختارها) انجام گرفته است [۸]. یکی از رایج‌ترین روش‌ها برای به‌دام‌اندازی نور درون لایه فعال، استفاده از نانوذرات فلزی با اندازه‌هایی مساوی یا کوچک‌تر از طول موج نور فرودی است [۶؛ ۹]. نانوذرات فلزی در سلول‌های خورشیدی می‌توانند با ایجاد میدان نزدیک قوی ناشی از تحریک تشدیدهای پلاسمون سطح جایگزیده (LSPR^1)، افزایش طول مسیر از طریق پراکندگی میدان دور و برانگیختگی پلاسمون پلاریتون سطحی (SPP^2) کارایی سلول را بهبود بخشند [۶؛ ۱۰]. پلاسمون سطحی، یک نوسان جمعی از الکترون‌های نوار رسانش سطح یک فلز است که با تحریک نور به‌واسطه تولید دو قطبی‌ها در سطح مشترک فلز-نیمه‌هادی (دی‌الکتریک) ایجاد می‌شود [۱۱]. شرط تشدید پلاسمون سطحی این است که فرکانس فوتون‌های تابشی با فرکانس طبیعی الکترون‌های آزاد برابر باشد [۱۲]. فرکانس و پهنای جذب پلاسمون‌ها نیز وابسته به شکل، اندازه و محیط دی‌الکتریک نانوذرات فلزی وابسته است [۴؛ ۱۰]. از آن‌جایی که تشدیدهای سطحی نانوذرات فلزات عمدتاً در ناحیه مرئی یا فروسرخ طیف الکترومغناطیسی قرار دارند از این‌رو استفاده از آن‌ها در سلول‌های خورشیدی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار شده است [۱۳؛ ۱۴].

نانوذرات هسته- پوسته، متشکل از یک هسته (مواد داخلی) و یک پوسته (مواد پوشش‌دهنده بیرونی) هستند که تاکنون نانوساختارهای مختلفی از آن‌ها برای افزایش جذب و بازده سلول‌های خورشیدی به‌کار گرفته شده است [۱۵-۱۹]. ونگ^۳ و همکارانش (۲۰۱۶) و هم‌چنین هائو^۴ و همکارانش (۲۰۱۵) نشان دادند که قرار دادن نانوذرات نقره با پوشش سیلیکا ($\text{Ag}@ \text{SiO}_2$) در لایه‌های نازک آلی باعث افزایش جذب نور و افزایش طول عمر سلول خورشیدی آلی می‌شود [۲۰؛ ۲۱]. لیو^۵ و همکارانش نانومکعب‌های هسته- پوسته Au/Ag را برای افزایش بازدهی سلول‌های خورشیدی آلی

¹ Localized surface plasmon resonance

² Surface plasmon polariton

³ Wang

⁴ Hao

⁵ Liu

به کار گرفتند [۲۲]. زارعی و امامی (۲۰۲۰)، جذب نور را با استفاده از نانوذرات هسته-پوسته Au@ITO، در سلول‌های خورشیدی آلی افزایش دادند [۲۳].

با وجود این که طی سالیان گذشته، پژوهش‌های مختلفی در زمینه به کارگیری نانوذرات فلزی با شکل‌ها و سازوکارهای متفاوت برای افزایش بازدهی (جذب) سلول‌های خورشیدی انجام گرفته است که به تعدادی از آنها در بالا اشاره شد ولی هنوز به کارگیری این نانو ساختارها و تأثیر آنها بر عملکرد سلول‌های خورشیدی آلی نیاز به پژوهش بیشتری دارد. آلومینیوم، به دلیل هزینه کم، فراوانی در زمین، پراکندگی مؤثر با موقعیت پیک پلاسمون قابل تنظیم خود، توجه زیادی را در پژوهش‌های علمی به خود جلب کرده است [۲۴]. خواص نانوذرات آلومینیوم با تغییر شکل و اندازه آنها تغییر می‌کند و پتانسیل چشم‌گیری در طول موج‌های مرئی الکترومغناطیسی دارند [۲۵]. علاوه بر این، طول موج تشدید پلاسمونی آنها، به اندازه و شکل نیز بستگی دارد [۲۴].

در پژوهش کنونی با به کارگیری روش عددی تفاضلات متناهی حوزه زمان (FDTD)^۱ حضور یک ساختار متناوب هگزاگونالی شکل از نانو استوانه‌های آلومینیومی در داخل لایه P3HT:PCBM^۲ با هدف بهبود جذب در لایه فعال سلول خورشیدی و به موازات آن یافتن یک مقدار بهینه برای چگالی جریان اتصال - کوتاه مطالعه شده است. علاوه بر این، تلاش شده است تا به یک ضخامت بهینه از لایه فعال P3HT:PCBM در حضور نانوذرات، با اندازه و ابعاد مناسب در راستای بهبود کمیت‌های بالا دست یابیم.

تئوری و روش

طرح‌واره‌ی سلول خورشیدی مورد پژوهش در شکل (۱-الف) نشان داده شده است. در این ساختار، الکتروود (جمع‌کننده حفره‌ها) از اکسید قلع ایندیم (ITO)^۳ و الکتروود کاتد (جمع‌کننده الکترون‌ها) از فلز آلومینیوم تشکیل شده است. [۶؛ ۲۶]. در این ساختار، لایه فعال از ترکیب P3HT:PCBM، تشکیل شده است. P3HT، یک پلی‌مردهنده الکترون و PCBM، از مشتقات فولرن، یک ماده گیرنده الکترون است [۶؛ ۱۲]. اکسید روی (ZnO^۴) به عنوان لایه مسدودکننده حفره و انتقال‌دهنده الکترون با ضخامت ۷۰ nm است و PEDOT:PSS^۵، به عنوان یک لایه انتقال‌دهنده حفره با رسانایی بالا و تحرک‌پذیری حامل‌های بار الکتریکی ($1.8 \times 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ v}^{-1} \text{ s}^{-1}$)، با ضخامت ۵۰ nm بخش‌های دیگر ساختار را تشکیل می‌دهند [۱۲؛ ۲۶]. مطابق با شکل (۱-ب)، نانو استوانه‌های آلومینیومی در الگویی هگزاگونالی شکل در مرز بین لایه فعال P3HT:PCBM و لایه ZnO قرار گرفته‌اند.

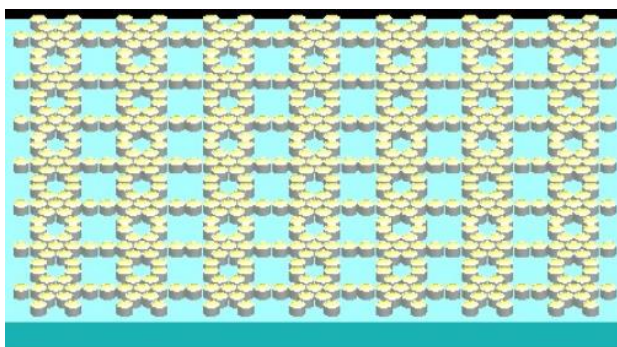
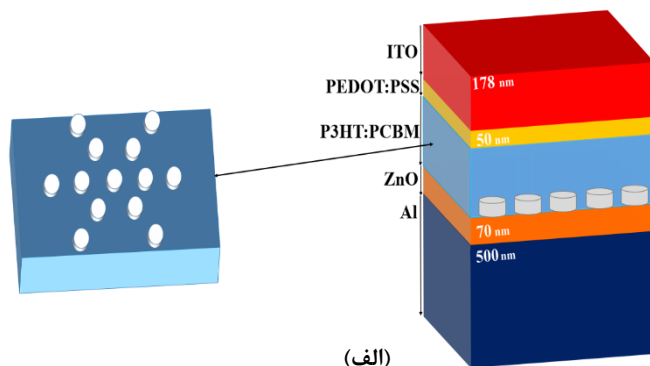
¹ Finite-Difference Time-Domain

² Poly(3-hexylthiophene): Phenyl-C61-butyric acid methyl ester

³ Indium tin oxide

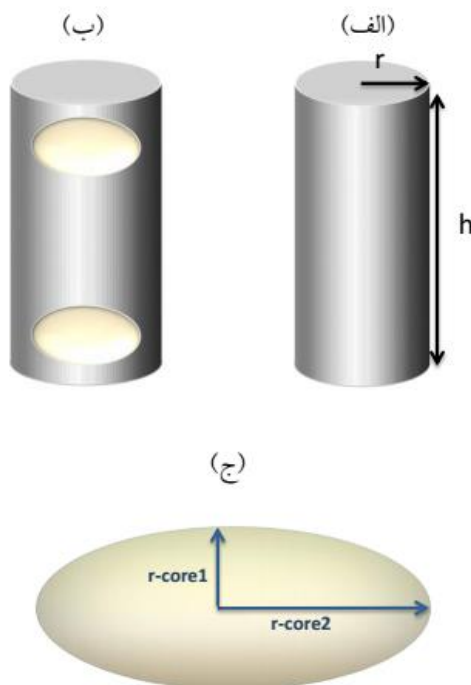
⁴ Zinc oxide

⁵ Poly (3,4-ethylenedioxythiophene) polystyrene sulfonate



شکل ۱. الف) ساختار طرح‌وار یک سلول خورشیدی آلی (ITO/PEDOT:PSS/P3HT:PCBM/ZnO/Al)، ب) الگوی قرارگیری آرایه نانوذرات در داخل لایه فعال P3HT:PCBM سلول خورشیدی.

در این پژوهش، از دو نوع نانواستوانه به صورت شکل‌های (۲-الف و ب) استفاده می‌شود. نانواستوانه‌های شکل (۲-الف) توپر ولی در نانواستوانه‌های شکل (۲-ب)، حفره‌هایی (هسته‌هایی) به شکل بیضی‌وار (شکل ۲-ج) در بالا و پایین استوانه‌ها قرار دارند. این حفره‌ها کاملاً در داخل نانواستوانه‌ها محاط شده‌اند. در مباحث بعدی این کار، ما این نانواستوانه‌ها را با عنوان نانواستوانه‌های هسته-پوسته معرفی می‌کنیم تا آن‌ها را از نانواستوانه‌های توپر متمایز کنیم. در شکل (۲-ج)، ساختار و مشخصات هسته‌ها نشان داده است.



شکل ۲. الف و ب) طرحی از نانواستوانه‌های مورد استفاده با ساختارهای مختلف، ج) هسته‌های مورد استفاده در نانواستوانه‌ها.

برای بررسی تأثیر نور خورشید بر روی لایه‌های مختلف سلول خورشیدی از معادلات ماکسول استفاده می‌شود. از طریق محاسبه توزیع میدان الکتریکی در دستگاه، توان جذب شده در واحد حجم و در واحد طول موج را می‌توان به صورت زیر بیان کرد [۲۷؛ ۲۸]:

$$P_{abs}(\vec{r}, \lambda) = -\frac{1}{2} \text{real}[i\omega \varepsilon(\vec{r}, \lambda) (E(\vec{r}, \lambda))^2] = -\frac{1}{2} \omega |E(\vec{r}, \lambda)|^2 \text{Im}[\varepsilon(\vec{r}, \lambda)] \quad (1)$$

که در آن $|E(r, \lambda)|^2$ مجذور بزرگی میدان الکتریکی درون ماده است و یکای آن $\frac{V^2}{m^2 Hz}$ است که وابسته به فرکانس است. λ و r به ترتیب طول موج و بردار مکان هستند. $\text{Im}(\varepsilon(r, \lambda))$ بخش موهومی تابع دی‌الکتریک برای هر لایه و ω فرکانس زاویه‌ای میدان الکتریکی فرودی است. جذب نوری ($L(\lambda)$) را می‌توان با نرمالیزه کردن توان جذب شده توسط ماده به توان منبع محاسبه کرد [۲۸]:

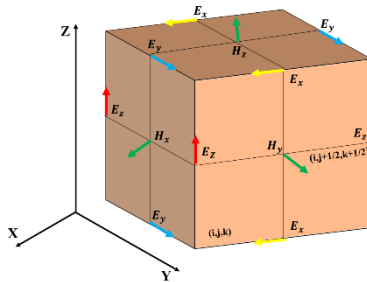
$$L(\lambda) = \frac{P_{abs}}{P_{source}} = \frac{1}{P_{source}} \int \frac{1}{2} \omega |E(\vec{r}, \lambda)|^2 \text{Im}[\varepsilon(\vec{r}, \lambda)] dV \quad (2)$$

چگالی جریان اتصال - کوتاه (J_{sc}) کمیت مهم دیگری است که برای ارزیابی سلول خورشیدی استفاده می‌شود و به صورت زیر به دست می‌آید:

$$J_{sc} = q \int_{0.3}^{1.2} \frac{I_{Am1.5}(\lambda)}{\lambda} \cdot L(\lambda) d(\lambda) \quad (3)$$

که $L(\lambda)$ توان جذب نرمال شده است، $I(\lambda)$ شارش گرمای تابشی خورشید در $AM1.5$ ، q بار اولیه است. این معادله به ما نشان می‌دهد که چگونه نانوذرات الکترون‌های اطراف خود را تحریک می‌کنند [۲۹]. حدود انتگرال، با توجه به محدوده تشدید پلاسمونی نانوذرات فلزی (مرئی - فرورسرخ) و هم‌چنین طیف تابشی خورشید، استاندارد در $AM1.5$ (شکل ۵)، در محدوده طول موجی ۳۰۰ تا ۱۲۰۰ nm (فرابنفش - مرئی - فرورسرخ) انتخاب شده است.

در این پژوهش ما برای محاسبه کمیت‌های بالا از روش عددی تفاضلات متناهی حوزه زمان استفاده می‌کنیم. این روش به طور مستقیم معادلات چرخشی ماکسول یعنی معادلات مربوط به قوانین آمپر و فارادی را حل می‌کند و نیازی به تعریف پتانسیل‌ها ندارد. در این روش مطابق شکل ۳ فضای شبیه‌سازی به سلول‌های مکعبی (سلول یی^۱) تقسیم می‌شود. الگوریتم شبکه یک نقطه‌ی شروع محاسبات بر پایه روش تفاضل متناهی حوزه زمانی است. همان‌گونه که شکل نشان می‌دهد در این روش بردارهای موج میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی تولیدی گسترش یافته‌اند که مؤلفه‌های میدان مغناطیسی نصف واحد طول با میدان الکتریکی فاصله دارند. با در نظر گرفتن تقریب تفاضل مرکزی برای هر دو مشتقات زمانی و مکانی معادلات ماکسول می‌توان مستقیماً مقادیر همه مؤلفه‌های میدان الکتریکی و میدان مغناطیسی را در هر سه بعد فضایی محدوده محاسباتی (x, y, z) محاسبه کرد [۳۰; ۳۱].

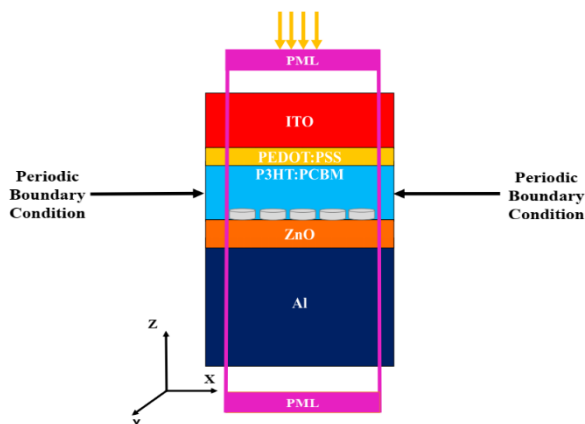


شکل ۳. سلول محاسباتی یی.

به هنگام استفاده از روش FDTD، برای انجام محاسبات، مطابق با شکل ۴ در مرزهای بالا و پایین ناحیه شبیه‌سازی یعنی راستای z ، به منظور جلوگیری از ایجاد بازتاب‌های غیرواقعی از مرزها، شرط مرزی لایه انطباق کامل (PML^2) و در مرزهای طرفین (جهت‌های x و y)، چون ساختار شبیه‌سازی مورد نظر در این راستاها متناوب است و از طرف دیگر شبیه‌سازی کل یک سلول خورشیدی به طور مستقیم بسیار زمان‌بر و نیاز به حافظه رایانه‌ای بسیار زیادی دارد از این رو برای انجام شبیه‌سازی، یک سلول واحد با شرایط مرزی تناوبی به کار گرفته می‌شود تا بتوانیم کل ساختار را راحت‌تر شبیه‌سازی کنیم.

¹ Yee

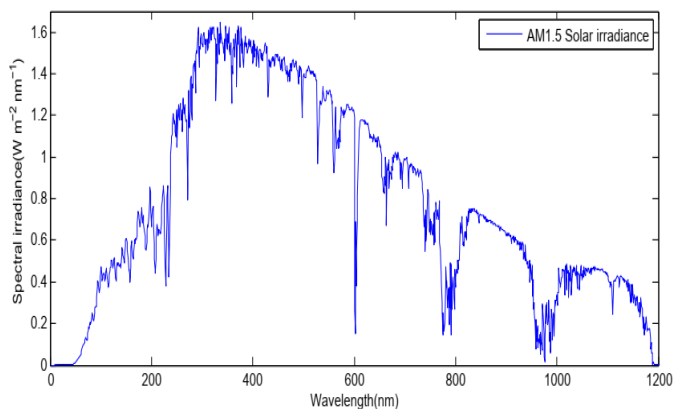
² Perfectly matched layer



شکل ۴. نمای جانبی سلول واحد مدل شبیه‌سازی ما در صفحه $x-z$ ، شامل PML و شرایط مرزی تناوبی.

نتایج و بحث

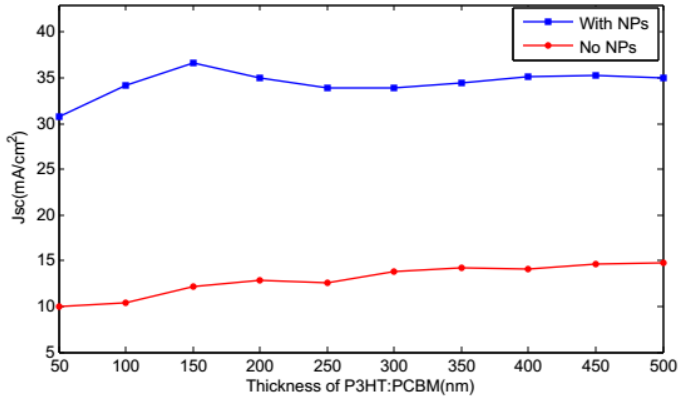
برای انجام شبیه‌سازی از نرم‌افزار لومریکال - واحد FDTD استفاده می‌کنیم. طی انجام محاسبات، کوچک‌ترین گام $dx=dy=dz=0.1 \text{ nm}$ در نظر گرفته می‌شود. طول موج‌های منبع نور مورد استفاده در شبیه‌سازی در ناحیه $1200-300 \text{ nm}$ قرار دارند و از طریق استاندارد AM1.5، مربوط به نور خورشید، شکل ۵ تعیین می‌شود. قبل از شروع شبیه‌سازی، قسمت‌های حقیقی و موهومی ضریب شکست (ثابت دی‌الکتریک) مواد را با مقادیر تجربی آن‌ها کاملاً برازش می‌کنیم.



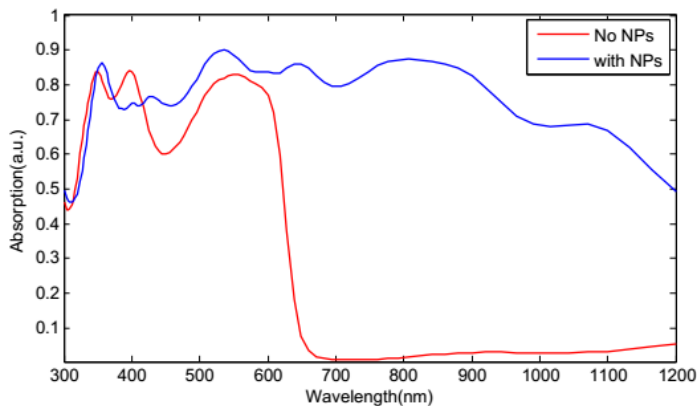
شکل ۵. استاندارد AM1.5 تابش نور خورشید.

در سلول خورشیدی آلی مورد مطالعه، لایه فعال P3HT:PCBM نقش مهمی را در میزان چگالی جریان اتصال - کوتاه و جذب سلول خورشیدی ایفا می‌کند از این‌رو تلاش ما بر این است که تا حد ممکن میزان چگالی جریان اتصال - کوتاه و جذب را در آن افزایش دهیم، بدین منظور، از نانوآستوانه‌های فلزی مختلف در داخل این لایه فعال

استفاده می‌کنیم تا مقدار این دو کمیت را افزایش دهیم. در گام نخست به منظور درک نقش و تأثیر حضور نانوذرات فلزی، مقادیر چگالی جریان اتصال- کوتاه و جذب بر حسب طول موج را در حضور نانواستوانه‌های توپر (شکل ۲-الف) بررسی می‌کنیم. از این رو، نانواستوانه‌هایی با ابعاد و جنس‌های مختلف (آلومینیوم، مس، طلا و نقره) بررسی شده است. نتایج بررسی‌ها و محاسبات ما نشان می‌دهد هنگامی که نانواستوانه‌های توپر از جنس آلومینیوم باشند نسبت به حالتی که نانواستوانه‌ها از جنس‌های دیگری مانند مس، طلا و نقره، مورد استفاده قرار می‌گیرند، چگالی جریان اتصال- کوتاه به طور قابل ملاحظه‌ای افزایش می‌یابد. علاوه بر این، هنگامی که نانواستوانه‌های آلومینیومی دارای ارتفاع (طول) و شعاع ۵۰ nm و ۱۵ nm باشند، باعث می‌شود که در ضخامت ۱۵۰ nm از لایه فعال P3HT:PCBM چگالی جریان اتصال- کوتاه بیشترین مقدار خود را داشته باشد (شکل ۶-الف) یعنی در واقع ضخامت بهینه‌ای برای لایه فعال برای عملکرد بهتر سلول خورشیدی به دست می‌آوریم. با توجه به این نتایج، در ادامه کار، این ابعاد از نانواستوانه‌ها را مبنای کارمان قرار می‌دهیم و تغییرات مورد نظر خود را بر روی همین ابعاد از نانواستوانه‌ها اعمال می‌کنیم. در این شکل افت شدید چگالی جریان اتصال-کوتاه در حالت بدون نانوذره را می‌توان به طول عمر کوتاه اکسایتون، ضخامت زیاد لایه فعال و در نتیجه احتمال افزایش بازترکیب حامل‌های بار الکتریکی نسبت داد. همان‌طور که می‌دانیم قرار گرفتن نانواستوانه‌ها در لایه فعال یک روش مؤثر برای افزایش جذب نور و به موازات آن افزایش چگالی جریان اتصال- کوتاه از طریق تشدید پلاسمون سطحی جایگزیده (میدان نزدیک) یا پراکندگی (میدان دور) است [۳۲]. هم‌چنین حضور نانوذرات باعث از بین رفتن بازترکیب اکسایتون‌های دوتایی می‌شود و در نتیجه نرخ تفکیک اکسایتون را در لایه فعال افزایش می‌دهد [۶]. چگالی جریان اتصال- کوتاه، اساساً به تعداد فوتون‌های جذب شده وابسته است بنابراین در ضخامت ۱۵۰ nm از لایه فعال می‌توان بیان کرد که نرخ جذب فوتون و ظرفیت انتقال حامل‌های بار به واسطه برانگیختگی تشدید پلاسمون سطحی افزایش یافته است. در شکل (۶-ب)، منحنی جذب لایه فعال P3HT:PCBM با و بدون حضور نانوذرات نیز نشان داده شده است. با وارد کردن نانواستوانه‌ها به ساختار، یک میدان وابسته به اندازه آن‌ها به لایه فعال اضافه می‌گردد که این احتمالاً به دلیل جفت شدن تشدید الکترون‌های آزاد رسانش است (پلاسمون) که منجر به افزایش جذب در لایه فعال می‌شود. قله جذب مشاهده شده در طول موج ۵۵۰ nm، ممکن است به دلیل بخش موهومی ضریب شکست یا به دلیل فرکانس پلاسمون در طول موج خاص باشد. با توجه به این‌که ناحیه طیفی جذب لایه فعال P3HT:PCBM در محدوده ۶۵۰ - ۴۰۰ nm قرار دارد از این رو در حالت بدون نانوذره، بعد از این محدوده کاهش سریعی در نمودار جذب مشاهده می‌کنیم ولی در حضور نانوذرات میزان جذب افزایش بیشتری نسبت به حالت قبلی به‌ویژه در بخش انتهایی ناحیه مرئی و فروسرخ دارد. این موضوع ناشی از این عامل است که طیف جذبی نانومیله‌های آلومینیومی در محدوده بالای طیف مرئی و فروسرخ واقع شده است [۳۳] در نتیجه حضور این نانوذرات علاوه بر این که باعث افزایش جذب در این نواحی می‌شود افزون بر این به دلیل تأثیرات تشدید پلاسمون سطحی جایگزیده نانوذرات آلومینیومی، کاهش آرام و نوسانی نسبت به حالت بدون نانوذرات مشاهده می‌کنیم. در طول موج‌های پایین‌تر (۴۰۰ - ۳۰۰ nm) بین دو نمودار جذب، تفاوت آشکاری مشاهده نمی‌شود زیرا در این نواحی نانوذرات جذب قوی‌ای ندارند در نتیجه حضور یا نبود آن‌ها باعث تغییر چندانی در منحنی‌های جذب نمی‌شود. البته ما در این مرحله برای مقایسه بهتر، علاوه بر الگوی هگزگونالی شکل، از یک الگوی مربعی نیز برای آرایش نانواستوانه‌ها نیز استفاده کردیم که نتایج به دست آمده نشان داد که الگوی هگزگونالی منجر به نتایج بسیار بهتری برای کمیت‌های مورد نظر می‌شود. ما هم‌چنین از مواد مختلفی برای جنس نانواستوانه‌ها بهره گرفتیم که هیچ کدام از آن‌ها بهبود قابل توجه‌ای به اندازه آلومینیوم بر روی چگالی جریان اتصال- کوتاه و جذب در این مطالعه ایجاد نکردند. بنابراین با توجه به این نتایج در ادامه کار ما از نانواستوانه‌های آلومینیومی و الگوی هگزگونالی برای قرارگیری آن‌ها استفاده می‌کنیم.



(الف)

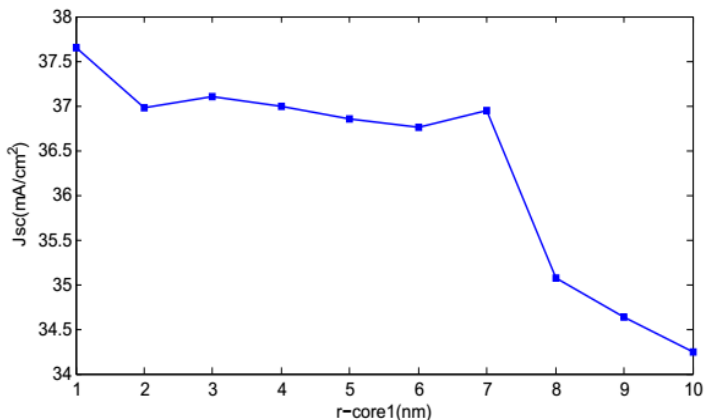


(ب)

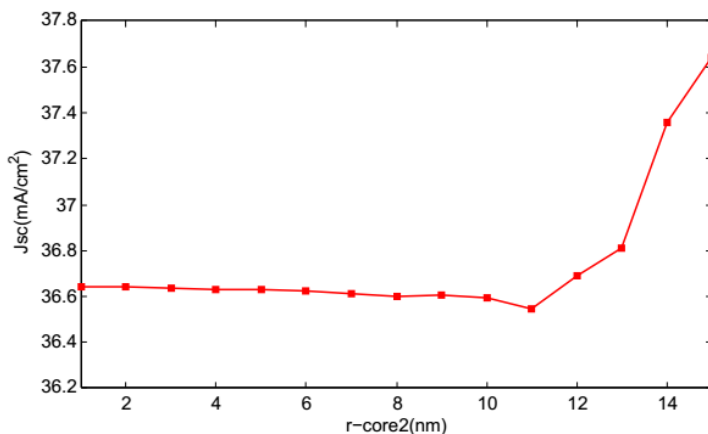
شکل ۶. الف) نمودار چگالی جریان اتصال کوتاه بر حسب ضخامت لایه P3HT:PCBM با و بدون حضور نانواستوانه‌ها، ب) نمودار جذب بر حسب طول موج، با و بدون حضور نانواستوانه‌ها، در ضخامت ۱۵۰ nm از P3HT:PCBM.

بعد از این که مشخص شد که حضور نانواستوانه‌ها باعث تغییر قابل ملاحظه‌ای در چگالی جریان اتصال-کوتاه و جذب در لایه فعال P3HT:PCBM می‌شود، اکنون در مرحله دوم می‌خواهیم نانواستوانه‌های با دو هسته به شکل بیضی‌وار (شکل ۲-ب) را به کار ببریم و تأثیر آن‌ها را مورد بررسی قرار دهیم. بدین منظور در این مرحله، ارتفاع و شعاع نانواستوانه‌ها را برابر با همان مقادیر مرحله قبل به ترتیب ۵۰ nm و ۱۵ nm، در نظر می‌گیریم ولی شعاع‌های کوچک و بزرگ هسته بیضی‌وار شکل را تغییر می‌دهیم تا به مقدار بهینه‌ای برای این شعاع‌ها دست یابیم. جنس هسته‌ها را از یک ماده دی‌الکتریک با ثابت دی‌الکتریک ۱ یا هوا در نظر گرفته‌ایم، در شکل‌های (۷-الف) و (۷-ب) نتایج محاسبات چگالی جریان اتصال-کوتاه بر حسب تغییر شعاع‌های کوچک (r-core1) و بزرگ (r-core2) هسته‌ها رسم شده است. مطابق با نتایج نشان داده شده در شکل‌ها، هنگامی که اندازه شعاع‌های کوچک و بزرگ هسته‌ها به ترتیب برابر ۱ nm و ۱۵ nm است، مقدار چگالی جریان اتصال-کوتاه نسبت به حالت قبل، افزایش دارد و برابر با ۳۷٫۷ mA/cm² است. به نظر می‌رسد که حضور هسته‌ها (حفره‌ها) منجر به ایجاد دو قطبی‌هایی در سطح مشترک فلز-دی‌الکتریک (هوا) درون نانواستوانه‌ها

می‌شود، باعث تقویت میدان‌های جایگزیده در نزدیکی سطح نانوذرات در برهم‌کنش با نور فرودی می‌شوند بنابراین با حضور تشدید پلاسمون‌های سطحی جایگزیده و پراکندگی رو به جلوی نور توسط این نانوذرات می‌توان آن‌ها را به‌عنوان یک منبع نور ثانویه در نظر گرفت که شار فوتون و نور کلی جذب‌شده را در لایه فعال افزایش می‌دهند. در نهایت تعداد اکسایتون‌های بیشتری تولید می‌شود که این می‌تواند دلیل بهبود چگالی جریان اتصال - کوتاه و جذب باشد. ما محاسبات بالا را با پر کردن هسته‌هایی از موادی با جنس‌های مختلف تکرار کردیم ولی تغییر چشم‌گیری در نتایج محاسبات مشاهده نشد، به نظر می‌رسد که تغییر ابعاد هسته‌ها تأثیر بیشتری بر روی کمیت‌های بالا دارد تا تغییر جنس هسته‌ها، بنابراین با در نظر گرفتن این امر، در ادامه کار هسته‌ها را از جنس هوا در نظر می‌گیریم.



(الف)

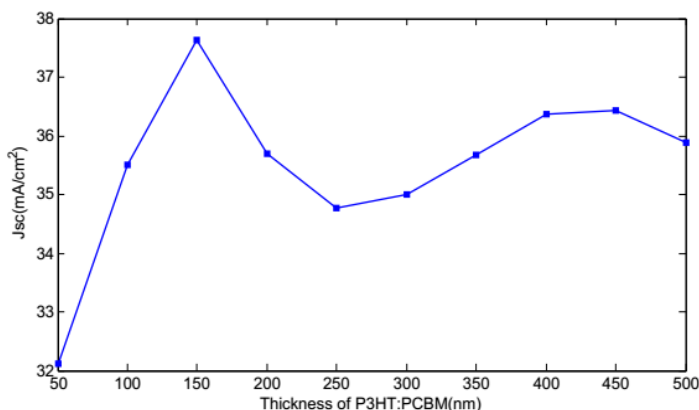


(ب)

شکل ۷. الف) نمودار چگالی جریان اتصال - کوتاه بر حسب شعاع کوچک هسته نانو استوانه‌ها برای ضخامت 150 nm از P3HT:PCBM. ب) نمودار چگالی جریان اتصال - کوتاه بر حسب شعاع بزرگ هسته نانو استوانه‌ها برای ضخامت 150 nm از P3HT:PCBM

همان‌طور که می‌دانیم ضخامت لایه فعال P3HT:PCBM پارامتر بسیار مهمی در تعیین مقدار چگالی جریان اتصال - کوتاه و جذب سلول خورشیدی است که بر توانایی انتقال الکترون و حفره تأثیر دارد و ضخامت بیش از حد آن به

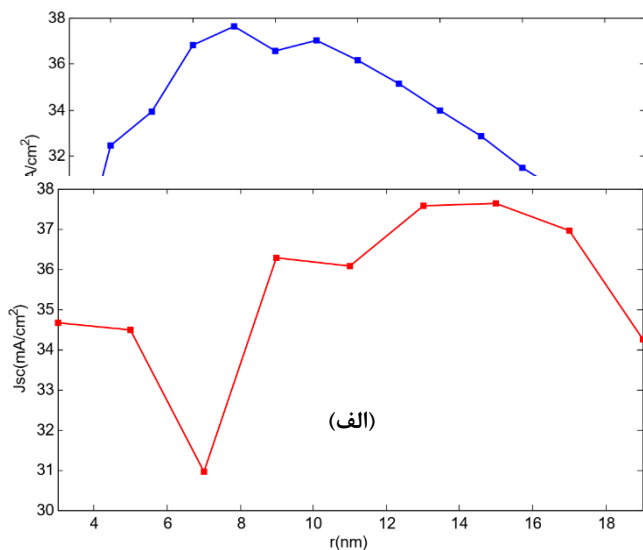
دلیل طول انتشار محدود اکسایتون‌ها مانع از انتقال الکترون‌ها و حفره‌ها می‌شود. بنابراین در مرحله سوم می‌خواهیم بررسی کنیم که آیا حضور هسته‌ها باعث تغییری در ضخامت بهینه لایه فعالی که در مرحله قبل به دست آمد می‌شود یا خیر؟ بنابراین برای انجام این کار چگالی جریان اتصال- کوتاه را برای ضخامت‌های مختلف (۵۰ تا ۵۰۰ nm) با حضور نانواستوانه‌های هسته- پوسته آلومینیوم محاسبه کردیم. همان‌طور که شکل ۸ نشان می‌دهد در ضخامت ۱۵۰ nm، این کمیت نسبت به ضخامت‌های دیگر وضعیت مناسب‌تری دارد. به عبارت دیگر حضور هسته‌ها در داخل نانواستوانه‌ها باعث تغییری در ضخامت بهینه لایه فعال P3HT:PCBM نمی‌شود ولی باعث افزایشی در چگالی جریان اتصال- کوتاه می‌شود. همان‌طور که در بالا نیز بیان شد این وضعیت می‌تواند به دلیل جذب نور و تولید جفت الکترون- حفره بیشتری با حضور نانواستوانه‌های آلومینیومی در این ضخامت باشد.



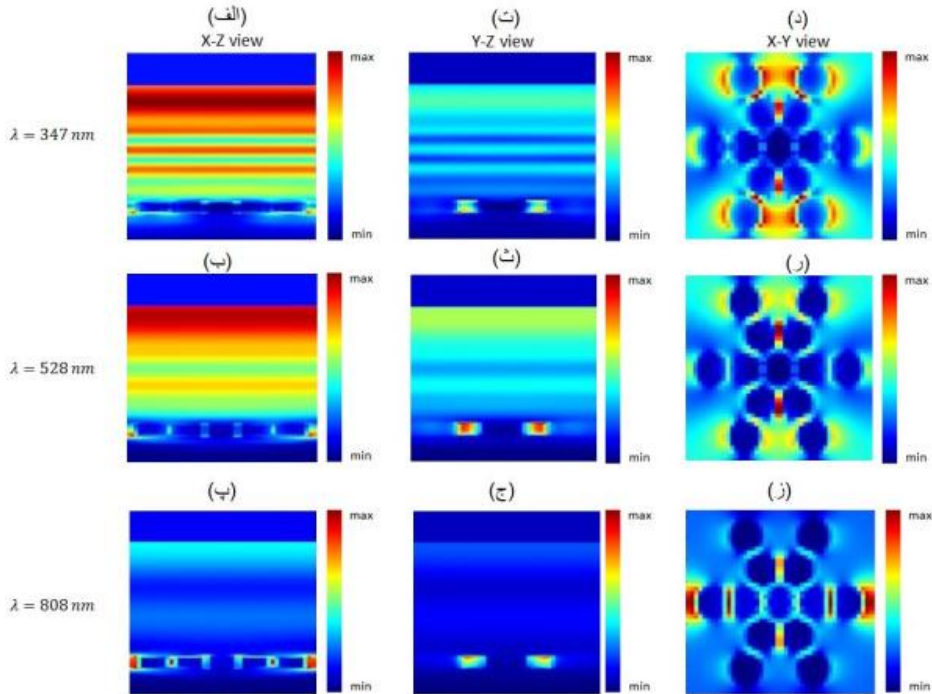
شکل ۸. نمودار چگالی جریان اتصال- کوتاه برحسب ضخامت لایه فعال P3HT:PCBM در حضور نانواستوانه‌های دارای هسته.

در مرحله پایانی محاسبات، اکنون می‌خواهیم تأثیر تغییر شعاع و ارتفاع پوسته‌های نانواستوانه‌ها (r , h) را بررسی کنیم، وقتی که لایه فعال دارای ضخامت بهینه (۱۵۰ nm) و هسته‌ها دارای شعاع‌های (۱ nm و ۱۵ nm) هستند. در شکل (۹-الف) نمودار چگالی جریان اتصال- کوتاه برحسب ارتفاع نانواستوانه‌ها (۱۵۰-۱۰ nm) را رسم کرده‌ایم. همان‌طوری که نتایج محاسبات نشان می‌دهد با افزایش ارتفاع نانواستوانه‌ها، چگالی جریان اتصال- کوتاه ابتدا افزایش می‌یابد (در ارتفاع ۵۰ nm به مقدار بیشینه خود می‌رسد) و سپس روندی کاهشی پیدا می‌کند. در اینجا حضور نانواستوانه‌ها با ارتفاع (۵۰-۱۰ nm) باعث افزایش طول مسیر نوری و کاهش احتمال بازترکیب الکترون- حفره می‌شود که این به نوبه خود تأثیر به‌سزایی در افزایش چگالی جریان اتصال- کوتاه دارد. با افزایش ارتفاع نانواستوانه‌های بیشتر از ۵۰ nm می‌توان بیان کرد که مقدار زیادی از نور فرودی توسط خود آن‌ها جذب می‌شود و مقدار کمتری از نور وارد لایه فعال می‌گردد، بنابراین کاهش چگالی جریان و جذب را می‌توان ناشی از حجم بزرگ‌تر نانوذرات و هم‌چنین تداخل مخرب نور پراکنده‌شده توسط نانواستوانه‌ها و نور فرودی دانست. شکل (۹-ب) نتایج مربوط به چگالی جریان اتصال- کوتاه را برحسب تغییرات شعاع نانواستوانه‌ها نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، در شعاع ۱۵ nm، چگالی جریان اتصال- کوتاه بهبود قابل‌ملاحظه‌ای نسبت به وضعیت‌های با و بدون نانواستوانه‌های توپیر (شکل ۶-ب) دارد و به مقدار بیشینه‌ای برابر با $38/9 \text{ mA/cm}^2$ می‌رسد. بعد از آن با افزایش شعاع، مقدار چگالی جریان اتصال- کوتاه کاهش

می‌یابد. در توجیه این موضوع می‌توان گفت که تشدید پلاسمون یک نانوذره از نظر طیفی با تشدید نانوذره دیگر همپوشانی دارد و دو تشدید پلاسمون با یکدیگر جفت می‌شوند. این جفت‌شدگی، میدان‌های جایگزیده را که از برهم‌کنش کلونی بین بارهای سطحی دو ذره حاصل می‌شود، تقویت می‌کند که در نهایت منجر به جذب بیشتری خواهد شد [۳۴]. در نانوآستوانه‌های فلزی با شعاع کوچک که جذب بر پراکندگی غالب است می‌توانیم تأثیرات میدان نزدیک یا برانگیختگی تشدید پلاسمون‌ها را داشته باشیم [۶]. این نانوذرات می‌توانند به‌عنوان آنتن‌های زیرموج استفاده شوند و تشدید میدان الکتریکی آن‌ها نمی‌تواند به‌طور کامل در لایه فعال وارد شود ولی شدت میدان الکتریکی را متمرکز می‌کند و جذب را نسبت به حالت بدون نانوذره افزایش می‌دهند. در محاسبات ما نانوذرات دارای شعاع بزرگ‌تر از ۱۵ nm چگالی جریان اتصال- کوتاه پایین‌تری را دارند که این می‌تواند به این دلیل باشد که هنگامی که نانوذرات خیلی به یکدیگر نزدیک می‌شوند مانند آینه‌ای برای نور فرودی عمل می‌کنند و با انعکاس نور به بیرون از لایه فعال، از ورود نور به اندازه کافی به لایه فعال جلوگیری می‌کنند [۲۷]. اکنون که بهینه‌ترین وضعیت نانوآستوانه‌های هسته- پوسته مشخص شده است، به‌منظور مقایسه، نمودار جذب لایه P3HT:PCBM در سه حالت: بدون حضور نانوذرات، با حضور نانوآستوانه‌های توپر و هسته- پوسته در شکل (۹-ج) نشان داده شده است. مطابق با نتایج نشان داده‌شده در شکل، حضور هسته‌ها در طول موج‌های پایین باعث تغییر محسوسی در جذب نمی‌شود ولی در طول موج‌های بالا با حضور نانوآستوانه‌های آلومینیومی هسته- پوسته، جذب بیشتری در لایه P3HT:PCBM رخ می‌دهد. حضور نانوآستوانه‌ها و تغییر ساختار آن‌ها باعث ایجاد قله‌های جذب در $\lambda_1 = 347 \text{ nm}$ می‌شود. همان‌طور که در نمودار کاملاً مشخص است در محدوده طول موجی ۱۲۰۰-۷۰۰ nm (ناحیه فرورسرخ) با افزایش جذب روبه‌رو هستیم. در اینجا هسته‌ها دارای شعاع‌های کوچک و بزرگی به ترتیب برابر با ۱ nm و ۱۵ nm دارند یعنی شکلی میله‌ای‌مانند و کاملاً کشیده دارند. هرچه هسته‌ها کشیده‌تر باشند پراکندگی رو به جلویی توسط این نانوذرات در لایه فعال ایجاد می‌گردد که باعث می‌شود جذب نور در داخل لایه فعال در ناحیه طول موج‌های فرورسرخ افزایش پیدا کند که با توجه به توزیع میدان‌ها می‌توان آن‌ها را به‌خوبی درک کرد. در نهایت این پراکندگی‌ها ناشی از هسته‌ها، باعث افزایش طول مسیر نوری و جذب نور بیشتر در لایه فعال می‌شوند. همچنین با توجه به این نمودار می‌توان بیان کرد که تمام طول موج‌های نوری به‌طور یکسان در افزایش جذب نوری شرکت نمی‌کنند، حتی اگر تشدیدهای میدان الکتریکی قوی از خود نشان دهند.



(ب)



شکل ۱۰. توزیع میدان الکتریکی در سلول خورشیدی در طول موج‌های ۳۴۷، ۵۲۸، ۸۰۸ nm (الف-پ) در صفحه $X-Z$ ، (ت-ج) در صفحه $Y-Z$ ، (د-ز) در صفحه $X-Y$.

همان‌طور که پیش‌تر نیز بیان شد در طول موج nm ، یک قله در نمودار جذب داریم ولی با توجه توزیع میدان‌ها در اطراف ساختار اثرات تشدید پلاسمون سطحی کمتری مشاهده می‌شود که این می‌تواند به دلیل اثرات پراکندگی را به جلو در این وضعیت باشد که در توزیع میدان‌ها کاملاً مشخص است.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، با استفاده از روش عددی FDTD تأثیر حضور نانوآستوانه‌های آلومینیومی توپر و هسته- پوسته بر روی چگالی جریان اتصال- کوتاه و جذب در یک سلول خورشیدی آلی بررسی شد. محاسبات ما نشان داد که حضور این نانوآستوانه‌ها باعث افزایش قابل‌ملاحظه‌ای در چگالی جریان اتصال- کوتاه و جذب نسبت به حالت بدون نانوذرات می‌شود. افزون بر آن، حضور یا نبود هسته‌ها باعث ایجاد نتایج متفاوتی برای این کمیت‌ها می‌شود. مقادیر این کمیت‌ها به ارتفاع، شعاع نانوآستوانه‌ها، شعاع‌های کوچک و بزرگ هسته‌ها و همچنین ضخامت لایه فعال وابسته است. این ضخامت بهینه مستقل از وجود هسته‌های موجود در نانوآستوانه‌ها است. همچنین نتایج شبیه‌سازی نشان داد که در ضخامت بهینه لایه فعال 150 nm ، ارتفاع آستوانه 50 nm ، شعاع بدنه 15 nm و حفره‌های بیضی‌وار شکل با شعاع‌های کوچک و بزرگ 1 nm و 15 nm ، چگالی جریان اتصال- کوتاه برابر با $38/9\text{ mA/cm}^2$ است که نسبت به حالت بدون حفره افزایشی در حدود $6/16\%$ درصد را نشان می‌دهد.

References

- [1] Peter Amalathas, A., & Alkaisi, M. M. (2019). Nanostructures for Light Trapping in Thin Film Solar Cells. *Micromachines*, 10(9), 619. <https://doi.org/10.3390/mi10090619>
- [2] Hoppe, H., & Sariciftci, N. S. (2004). Organic solar cells: An overview. *Journal of Materials Research*, 19(7), 1924-1945. <https://doi.org/10.1557/JMR.2004.0252>
- [3] Paranthaman, M. P., Wong-Ng, W., & Bhattacharya, R. N. (2016). *Semiconductor Materials for Solar Photovoltaic Cells*. Springer International Publishing. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-20331-7>
- [4] Xu, X., Kyaw, A. K. K., Peng, B., Zhao, D., Wong, T. K. S., Xiong, Q., Sun, X. W., & Heeger, A. J. (2013). A plasmonically enhanced polymer solar cell with gold-silica core-shell nanorods. *Organic Electronics*, 14(9), 2360-2368. <https://doi.org/10.1016/j.orgel.2013.05.038>
- [5] Fathy, M. (2021). Plasmonic Photocurrent Improvement in P3HT:PCBM Organic Solar Cells. *Avrupa Bilim ve Teknoloji Dergisi*(28), 1508-1516. <https://doi.org/10.31590/ejosat.1022871>
- [6] Lim, E. L., Yap, C. C., Mat Teridi, M. A., Teh, C. H., Mohd Yusoff, A. R. B., & Hj Jumali, M. H. (2016). A review of recent plasmonic nanoparticles incorporated P3HT: PCBM organic thin film solar cells. *Organic Electronics*, 36, 12-28. <https://doi.org/10.1016/j.orgel.2016.05.029>
- [7] Mohsin, A. S. M., Mobashera, M., Malik, A., Rubaiat, M., & Islam, M. (2020). Light trapping in thin-film solar cell to enhance the absorption efficiency using FDTD simulation. *Journal of Optics*, 49(4), 523-532. <https://doi.org/10.1007/s12596-020-00656-w>
- [8] Omrani, M. K., & Fallah, H. (2018). Improving light trapping of polymer solar cell via doping a new array of triple core-shell spherical nanoparticles utilizing realistic modeling. *Solar Energy*, 163, 600-609. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2018.01.065>
- [9] Mann, V., & Rastogi, V. (2020). FDTD simulation studies on improvement of light absorption in organic solar cells by dielectric nanoparticles. *Optical and Quantum Electronics*, 52(5), 233. <https://doi.org/10.1007/s11082-020-02328-2>
- [10] N'Konou, K., Many, V., Ruiz, C. M., Treguer-Delapierre, M., & Torchio, P. (2018). Effect of shell thickness of gold-silica core-shell nanospheres embedded in an organic buffer matrix for plasmonic solar cells. *Journal of Applied Physics*, 123(6), 063102 <https://doi.org/10.1063/1.5013329>
- [11] Li, Y-F., Kou, Z-L., Feng, J., & Sun, H-B. (2020). Plasmon-enhanced organic and perovskite solar cells with metal nanoparticles. *Nanophotonics*, 9(10), 3111-3133. <https://doi.org/10.1515/nanoph-2020-0099>
- [12] Notarianni, M., Vernon, K., Chou, A., Aljada, M., Liu, J., & Motta, N. (2014). Plasmonic effect of gold nanoparticles in organic solar cells. *Solar Energy*, 106, 23-37. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2013.09.026>
- [13] Feng, L., Niu, M., Wen, Z., & Hao, X. (2018). Recent Advances of Plasmonic Organic Solar Cells: Photophysical Investigations. *Polymers*, 10(2), 123. <https://doi.org/10.3390/polym10020123>
- [14] Islam, K., Alnuaimi, A., Battal, E., Okyay, A. K., & Nayfeh, A. (2014). Effect of gold nanoparticles size on light scattering for thin film amorphous-silicon solar cells. *Solar Energy*, 103, 263-268. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2014.02.023>
- [15] Dong, H., Wu, Z., Lu, F., Gao, Y., El-Shafei, A., Jiao, B., Ning, S., & Hou, X. (2014). Optics-electrics highways: Plasmonic silver nanowires@TiO₂ core-shell nanocomposites for

- enhanced dye-sensitized solar cells performance. *Nano Energy*, 10, 181-191. <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2014.09.011>
- [16] Du, P., Jing, P., Li, D., Cao, Y., Liu, Z., & Sun, Z. (2015). Plasmonic Ag@Oxide Nanoprisms for Enhanced Performance of Organic Solar Cells. *Small*, 11(20), 2454-2462. <https://doi.org/10.1002/smll.201402757>
- [17] Janković, V., Yang, Y., You, J., Dou, L., Liu, Y., Cheung, P., Chang, J. P., & Yang, Y. (2013). Active Layer-Incorporated, Spectrally Tuned Au/SiO₂ Core/Shell Nanorod-Based Light Trapping for Organic Photovoltaics. *American Chemical Society Nano*, 7(5), 3815-3822. <https://doi.org/10.1021/nn400246g>
- [18] Nelson, M. D., & Di Vece, M. (2019). Using a Neural Network to Improve the Optical Absorption in Halide Perovskite Layers Containing Core-Shells Silver Nanoparticles. *Nanomaterials*, 9(3), 437. <https://doi.org/10.3390/nano9030437>
- [19] Shen, W., Tang, J., Yang, R., Cong, H., Bao, X., Wang, Y., Wang, X., Huang, Z., Liu, J., Huang, L., Jiao, J., Xu, Q., Chen, W., & Belfiore, L. A. (2014). Enhanced efficiency of polymer solar cells by incorporated Ag-SiO₂ core-shell nanoparticles in the active layer. *Royal Society of Chemistry Advances*, 4(9), 4379-4386. <https://doi.org/10.1039/C3RA45495A>
- [20] Hao, Y., Song, J., Yang, F., Hao, Y., Sun, Q., Guo, J., Cui, Y., Wang, H., & Zhu, F. (2015). Improved performance of organic solar cells by incorporating silica-coated silver nanoparticles in the buffer layer. *Journal of Materials Chemistry C*, 3(5), 1082-1090. <https://doi.org/10.1039/C4TC01990C>
- [21] Wang, Z., Hao, Y., Wang, W., Cui, Y., Sun, Q., Ji, T., Li, Z., Wang, H., & Zhu, F. (2016). Incorporating silver-SiO₂ core-shell nanocubes for simultaneous broadband absorption and charge collection enhancements in organic solar cells. *Synthetic Metals*, 220, 612-620. <https://doi.org/10.1016/j.synthmet.2016.08.004>
- [22] Liu, S., Jiang, R., You, P., Zhu, X., Wang, J., & Yan, F. (2016). Au/Ag core-shell nanocuboids for high-efficiency organic solar cells with broadband plasmonic enhancement. *Energy & Environmental Science*, 9(3), 898-905. <https://doi.org/10.1039/C5EE03779D>
- [23] Zarei, K., & Emami, F. (2020). Absorption enhancement and efficiency improvement of an organic solar cell embedded with core-shell Au@ITO nanoparticles. *Optical and Quantum Electronics*, 52(6), 275. <https://doi.org/10.1007/s11082-020-02401-w>
- [24] Singh, G., Sekhon, J. S., & Verma, S. S. (2020). Enhanced photocurrent in thin-film GaAs solar cells with embedded Al nanoparticles. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*, 42(7), 815-823. <https://doi.org/10.1080/15567036.2019.1587082>
- [25] Pathak, N. K., Parthasarathi, Kumar, P. S., & Sharma, R. P. (2019). Tuning of the surface plasmon resonance of aluminum nanoshell near-infrared regimes. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 21(18), 9441-9449. <https://doi.org/10.1039/C9CP01115C>
- [26] Islam, M. Z., Snigdha, F., & Hasan, M. S. (2018, March 20-22). *Plasmonically-enhanced absorption in organic solar cells with metal nanostructures [Conference session]*. 9th International Renewable Energy Congress, Hammamet, Tunisia. <https://doi.org/10.1109/IREC.2018.8362477>
- [27] Hasheminassab, S. M. S., Imanieh, M., Kamali, A., Emamghorashi, S. A., & Hassanhosseini, S. (2021). Influence of the Shape and Size of Ag Nanoparticles on the Performance Enhancement of CIGS Solar Cells: the Role of Surface Plasmons. *Plasmonics*, 16(1), 273-282. <https://doi.org/10.1007/s11468-020-01280-x>

- [28] Ren, W., Zhang, G., Wu, Y., Ding, H., Shen, Q., Zhang, K., Li, J., Pan, N., & Wang, X. (2011). Broadband absorption enhancement achieved by optical layer mediated plasmonic solar cell. *Optics express*, 19(27), 26536-26550. <https://doi.org/10.1364/OE.19.026536>
- [29] Sobhani, F., Heidarzadeh, H., & Bahador, H. (2020). Efficiency enhancement of an ultra-thin film silicon solar cell using conical-shaped nanoparticles: similar to superposition (top, middle, and bottom). *Optical and Quantum Electronics*, 52(9), 387. <https://doi.org/10.1007/s11082-020-02487-2>
- [30] Taflove, A., & Hagness, S. C. (2005). *Computational electromagnetics: the finite-difference time-domain method* (3 ed.). Artech House. https://books.google.com/books/about/Computational_Electrodynamics.html?id=n2ViQgAACAAJ
- [31] Zygidis, T. T. (2017). A Short Review of FDTD-Based Methods for Uncertainty Quantification in Computational Electromagnetics. *Mathematical Problems in Engineering*, 2017(1), 1-8. <https://doi.org/10.1155/2017/9247978>
- [32] N'Konou, K., & Torchio, P. (2019). Optical Absorption Modeling of Plasmonic Organic Solar Cells Embedding Ag-SiO₂ Core-Shell Nanoparticles. In S. Mohapatra, T. A. Nguyen, & P. Nguyen-Tri (Eds.), *Noble Metal-Metal Oxide Hybrid Nanoparticles* (pp. 265-282). Woodhead Publishing. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-814134-2.00013-9>
- [33] Lecarme, O., Sun, Q., Ueno, K., & Misawa, H. (2014). Robust and Versatile Light Absorption at Near-Infrared Wavelengths by Plasmonic Aluminum Nanorods. *American Chemical Society Photonics*, 1(6), 538-546. <https://doi.org/10.1021/ph500096q>
- [34] Deka, N., Islam, M., Sarswat, P. K., & Kumar, G. (2018). Enhancing solar cell efficiency with plasmonic behavior of double metal nanoparticle system. *Vacuum*, 152, 285-290. <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2018.03.026>