

مدلسازی گیراندازی نور درون سلول های خورشیدی نانوپلاسمونیک با استفاده از روش FDTD

آرزو فیروزی^{۱*}، احمد محمدی^۲

۱- کارشناسی ارشد فیزیک اتمی و مولکولی

۲- استادیار فیزیک اتمی و مولکولی

آدرس پست الکترونیک نویسنده رابط: arezoo.firoozi67@yahoo.com

چکیده

با بهره گیری از تکنیک تبدیل Z با استفاده از روش $FDTD$ مدل پاشندگی عمومی به منظور شبیه سازی سلول های خورشیدی نانوپلاسمونیک ارائه می گردد. مدل ارائه شده توانایی توصیف خواص اپتیکی تمامی مواد از جمله سیلیکون کریستالی و فلزات پلاسمونیک در محدوده وسیعی از فرکانس ها در فضای $FDTD$ را دارد. به منظور بررسی دقت و کارایی کدهای نوشته شده، جذب نور توسط فیلم دو لایه ای از جنس سیلیکون و نقره به ترتیب به ضخامت ۳۰۰ و ۱۰۰ نانومتر شبیه سازی می گردد. همخوانی بسیار خوب میان نتایج حاصل از شبیه سازی و حل تحلیلی نشان دهنده دقت و کارایی کدهای نوشته شده می باشد.

واژه های کلیدی: سلول های خورشیدی نانوپلاسمونیک، روش $FDTD$ ، مدل پاشندگی عمومی، تبدیل Z

۱- مقدمه:

سلول های خورشیدی از جمله وسایل اپتوالکترونیکی هستند که نور خورشید را به طور مستقیم به انرژی الکتریکی تبدیل می کنند. به دلیل کاربرد روزافزون سلول های خورشیدی بررسی برهم کنش نور با چنین ساختارهایی و همچنین طراحی یک ساختار بهینه از اهمیت بسیار زیادی برخوردار است. بررسی برهم کنش نور با چنین ساختارهایی نیازمند حل دقیق معادلات تمام برداری ماکسول می -

باشد، که جز در موارد خاص، حل تحلیلی وجود ندارد و باید از تکنیک‌های محاسباتی استفاده شود. روش‌های عددی مختلفی برای حل معادلات دیفرانسیلی وجود دارند، از جمله روش المان متناهی (FEM^1)، روش ممان‌ها (MoM^2) و روش تفاضل متناهی دامنه زمان ($FDTD^3$). از میان روش‌های عددی موجود، روش تفاضل متناهی دامنه زمان را به دلیل توانایی در حل مسائل پیچیده الکترومغناطیسی در دامنه زمان، به ویژه برهم کنش نور با انواع مواد (خطی، غیر خطی، شبه مواد، ناهمگن، ناهمسانگرد، پاشنده و ...)، به منظور طراحی و شبیه سازی یک ساختار بهینه برگزیده‌ایم.

سلول‌های خورشیدی عموماً از یک لایه نیم‌رسانا به عنوان ماده فعال تشکیل شده‌اند. به علت فراوانی بسیار سیلیکون در طبیعت، این ماده از مهمترین نیم‌رساناهای مورد استفاده در سلول‌های خورشیدی به عنوان ماده فعال می‌باشد. به منظور شبیه‌سازی سلول‌های خورشیدی به کمک روش $FDTD$ ، از آنجایی که این روش وابسته به زمان است، باید از مدل‌های توصیفی (درود، لورنتس و درود-لورنتس) استفاده کرد. در محدوده‌ی طول موجی ۴۰۰-۱۱۰۰ نانومتر مدل لورنتس توصیف قابل قبولی از ثابت گذردهی سیلیکون کریستالی ارائه می‌دهد. اما به دلیل عدم توانایی این مدل در توصیف خواص اپتیکی سیلیکون در ناحیه طول موجی کمتر از ۴۰۰ نانومتر، نتایج به دست آمده در این نواحی معتبر نمی‌باشد. مرجع [1] مدل مناسبی به منظور شبیه‌سازی سیلیکون کریستالی به کمک روش $FDTD$ ارائه داده است. اما این مدل، مدل مناسبی جهت شبیه‌سازی مواد پلاسمونیک از جمله: نقره، طلا، مس، آلومینیوم و ... که عموماً با مدل درود-لورنتس توصیف می‌شوند [2-4]، نمی‌باشد. از این رو در این مقاله مدل پاشندگی عمومی ارائه می‌دهیم که به کمک این مدل به همراه تکنیک تبدیل Z می‌توان تمامی مواد را در محدوده وسیعی از فرکانس‌ها در فضای $FDTD$ شبیه‌سازی نمود.

۲- روش $FDTD$

در این روش فضای شبیه‌سازی به سلول‌های مکعبی تقسیم می‌شود که این مکعب‌ها یاخته‌ی نام دارند. در هر سلول مولفه‌های میدان الکترومغناطیسی به صورت یک در میان روی سلولی که در موقعیت i و j و k قرار دارد در نظر گرفته می‌شوند. هر میدان E به فاصله‌ی نصف سلول از مبدأ در راستای جهت گیری‌اش قرار دارد و هر میدان H به اندازه‌ی نصف سلول در تمام راستاها به جز راستای جهت گیری‌اش جابه‌جا شده است. سلول ارائه شده توسط Yee که روشی برای شبکه بندی فضایی معادلات ماکسول در حوزه‌ی زمان است برای دو مد الکترومغناطیسی، در شکل ۱ نشان داده شده است. در مد الکتریکی عرضی (TE)، میدان الکتریکی در صفحه‌ی xy و میدان مغناطیسی در امتداد محور Z قرار می‌گیرد و در مد مغناطیسی عرضی (TM)، میدان مغناطیسی در صفحه‌ی xy و میدان الکتریکی در امتداد محور Z قرار می‌گیرد.

برای محاسبه‌ی میدان‌ها ابتدا از معادلات ماکسول شروع می‌کنیم. سپس با به کارگیری تقریب تفاضل متناهی بر روی معادلات وابسته به زمان ماکسول، مجموعه‌ای از روابط برای محاسبه‌ی میدان الکتریکی عرضی TE به صورت زیر به دست می‌آید. مقدار میدان در هر لحظه تنها توسط مقادیر مربوطه در زمان‌های قبل در نقاط مجاور در شبکه محاسبه می‌شوند.

¹Finite Element Method

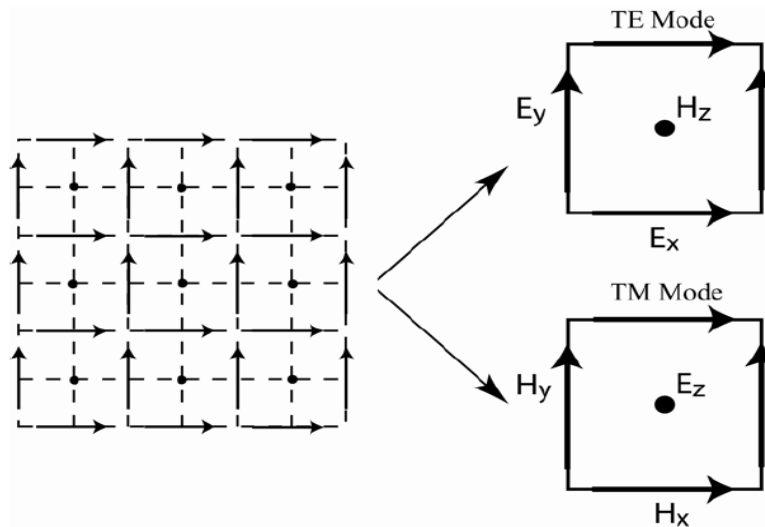
² Method of Moments

³ Finite Difference Time Domain

$$D_x^{n+1/2}(i+1/2, j) = D_x^{n-1/2}(i+1/2, j) + \frac{\Delta t}{\Delta x \cdot \sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} (H_z^n(i+1/2, j+1/2) - H_z^n(i-1/2, j+1/2)) \quad (1)$$

$$D_y^{n+1/2}(i, j+1/2) = D_y^{n-1/2}(i, j+1/2) + \frac{\Delta t}{\Delta x \cdot \sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} (-H_z^n(i+1/2, j+1/2) + H_z^n(i-1/2, j+1/2)) \quad (2)$$

$$H_z^{n+1}(i+1/2, j+1/2) = H_z^n(i+1/2, j+1/2) + \frac{\Delta t}{\Delta x \cdot \sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} (E_x^{n+1/2}(i+1/2, j+1) - E_x^{n+1/2}(i+1/2, j) - E_y^{n+1/2}(i+1, j+1/2) + E_y^{n+1/2}(i, j+1/2)) \quad (3)$$



شکل (۱) گسسته سازی فضا با مربع ها و موقعیت مولفه های میدان الکتریکی و مغناطیسی بر روی سلول Yee.

۳- مدل پاشندگی عمومی :

در مدل ارائه شده فرض می کنیم ثابت دی الکتریک با رابطه زیر به فرکانس وابسته باشد:

$$\epsilon(\omega) = \frac{a_0 + a_1(j\omega) + a_2(j\omega)^2 + \dots + a_n(j\omega)^n}{b_0 + b_1(j\omega) + b_2(j\omega)^2 + \dots + b_n(j\omega)^n} \quad (4)$$

که در آن ضرایب a و b مقادیر ثابت اند و $j = \sqrt{-1}$ ، ω فرکانس و $\epsilon(\omega)$ ثابت دی الکتریک مدل پاشندگی عمومی است. همانگونه که ملاحظه می شود، صورت و مخرج رابطه به شکل یک سری می باشد که از مجموع جمله های $a_p(j\omega)^p$ در صورت و

$b_p(j\omega)^p$ در مخرج تشکیل شده و مقدار p از صفر تا n تغییر می کند. رابطه (۴) را می توان با جداسازی جمله های حقیقی و موهومی به صورت زیر نوشت:

$$\varepsilon(\omega) = \frac{(a_0 - a_2(\omega)^2 + \dots + a_n(\omega)^n) + j(a_1 + a_3(j\omega)^3 + \dots + a_{n-1}(j\omega)^{n-1})}{(b_0 - b_2(\omega)^2 + \dots + b_n(\omega)^n) + j(b_1 + b_3(j\omega)^3 + \dots + b_{n-1}(j\omega)^{n-1})} \quad (5)$$

از طرفی می توان ثابت دی الکتریک مختلط را بر حسب مولفه های حقیقی و موهومی بنویسیم:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_r(\omega) + j\varepsilon_i(\omega) \quad (6)$$

که در آن $\varepsilon_r(\omega)$ قسمت حقیقی و $\varepsilon_i(\omega)$ قسمت موهومی ثابت دی الکتریک است. از مقایسه رابطه (۵) و (۶) مقادیر موهومی و حقیقی ثابت دی الکتریک به دست می آید.

$$\varepsilon(\omega) = \frac{(a_0 b_0 + (a_0 b_2 - a_1 b_1 + a_2 b_0)\omega^2 + \dots + a_n b_n \omega^n)}{b_0^2 + (-2b_0 b_1 + b_1^2)\omega^2 + \dots + b_n^2 \omega^{2n}} \quad (7)$$

$$\varepsilon(\omega) = \frac{(a_1 b_0 - a_0 b_1)\omega + (a_0 b_3 + a_2 b_1 - a_1 b_2 - a_3 b_0)\omega^3 + \dots + (a_{n-1} b_n - a_n b_{n-1})\omega^{2n+1}}{b_0^2 + (-2b_0 b_1 + b_1^2)\omega^2 + (2b_0 b_4 - 2b_1 b_3 + b_2^2)\omega^4 + \dots + b_n^2 \omega^n} \quad (8)$$

اگر رابطه (۴) را تا مرتبه ۴ به کار ببریم در این صورت مقادیر a و b را می توان با برازش مدل پاشندگی عمومی با داده های آزمایشگاهی به دست آورد. این مقادیر برای سیلیکون کریستالی و فلز نقره در جدول ۱ آورده شده است.

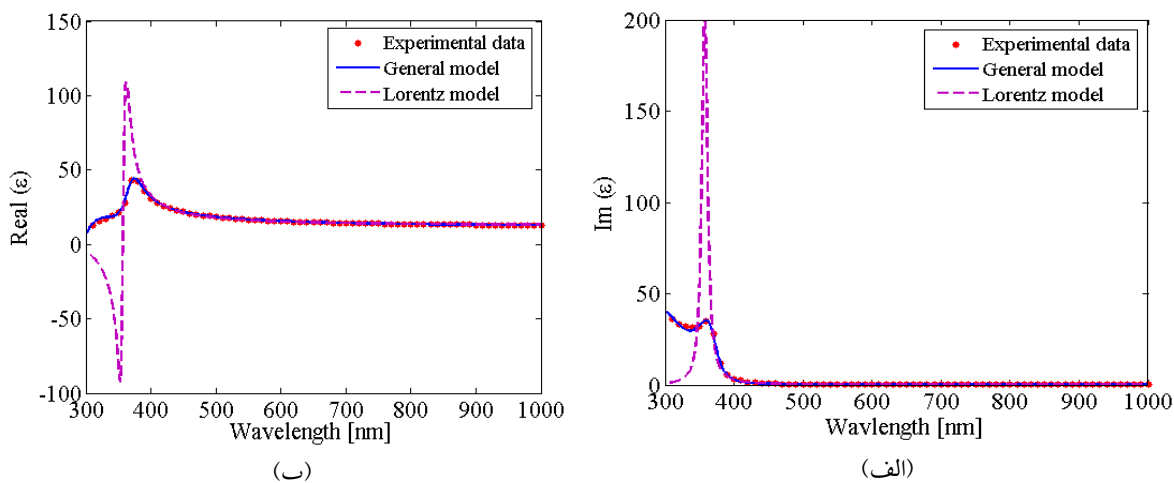
جدول (۱) ضرایب a و b برازش شده با داده های آزمایشگاهی برای سیلیکون و فلز نقره.

	Si	Ag
a0	1.2840×10^{64}	2.2641×10^{63}
a1	7.3776×10^{47}	4.3878×10^{47}
a2	5.0347×10^{32}	2.4751×10^{32}
a3	1.2886×10^{16}	9.4302×10^{15}
a4	1	4.2106
b0	1.0895×10^{63}	0
b1	6.1265×10^{46}	6.5185×10^{43}
b2	6.8496×10^{31}	1.1548×10^{31}
b3	2.0645×10^{15}	2.2397×10^{15}
b4	1	1

برای وارد کردن مواد پاشنده به فضای $FDTD$ تکنیک های متفاوتی پیشنهاد شده است. از جمله تکنیک های ارائه شده عبارت است از: تکنیک همگردش بازگشتی^۴، تکنیک معادله دیفرانسیل کمکی^۵، و روش تبدیل Z ^۶ [5].

تکنیک تبدیل Z یکی از کاربردی ترین تکنیک ها، تبدیل یک مسئله از دامنه زمان به دامنه بسامد است. با به کارگیری تبدیل فوریه معادله های دیفرانسیلی به معادله های جبری تبدیل می شوند، به گونه ای که اغلب تحلیل را به طور قابل ملاحظه ای ساده می کنند. تکنیک تبدیل Z تعمیمی از تبدیل فوریه زمان گسسته است، که حوزه زمان گسسته n را به حوزه بسامد تبدیل می کند. مزیت اصلی این روش این است، که قضیه همگردش در حوزه زمان گسسته، با یک حاصل ضرب به حوزه Z تبدیل می گردد.

به منظور بررسی صحت روابط به دست آمده، قسمت موهومی و حقیقی سیلیکون به دست آمده از مدل پاشندگی عمومی، مدل لورنتس و داده های آزمایشگاهی در شکل (۲) و مدل پاشندگی عمومی، مدل درود و داده های آزمایشگاهی برای فلز نقره در شکل (۳) نشان داده شده است. همانطور که در شکل ۲ نشان داده شده است همخوانی بسیار خوبی میان مدل پاشندگی عمومی و داده های آزمایشگاهی در محدوده ۴۰۰-۱۰۰۰ نانومتر وجود دارد. در صورتی که مدل لورنتس توانایی توصیف خواص اپتیکی سیلیکون در ناحیه طول موجی کمتر از ۴۰۰ نانومتر را ندارد. همچنین به کارگیری این مدل برای فلز نقره همانطور که از نتایج به دست آمده مشخص است برخلاف مدل درود، همخوانی خوبی با داده های آزمایشگاهی دارد.

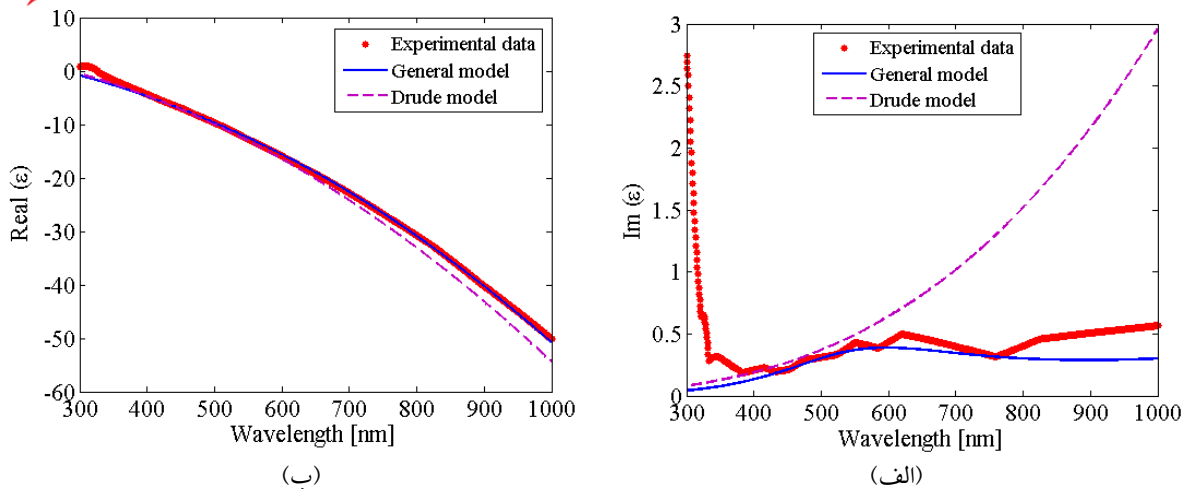


شکل (۲) مقایسه قسمت (الف) موهومی و (ب) حقیقی ثابت دی الکتریک سیلیکون کریستالی به دست آمده از مدل پاشندگی عمومی، مدل لورنتس و داده های آزمایشگاهی.

⁴ Recursive-Convolution Method

⁵ Auxiliary Differential Equation (ADE) method

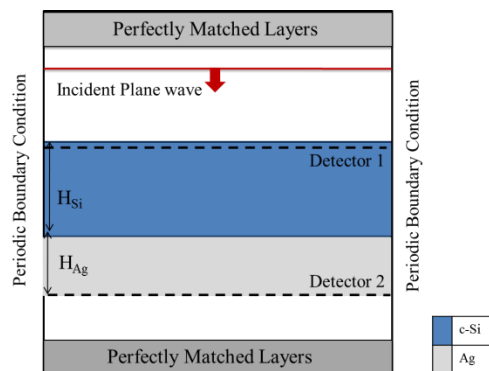
⁶ Z-transform method



شکل (۳) مقایسه قسمت (الف) موهومی و (ب) حقیقی ثابت دی الکتریک نقره به دست آمده از مدل پاشندگی عمومی، مدل درود و داده های آزمایشگاهی.

۴- اعتبارسنجی کد

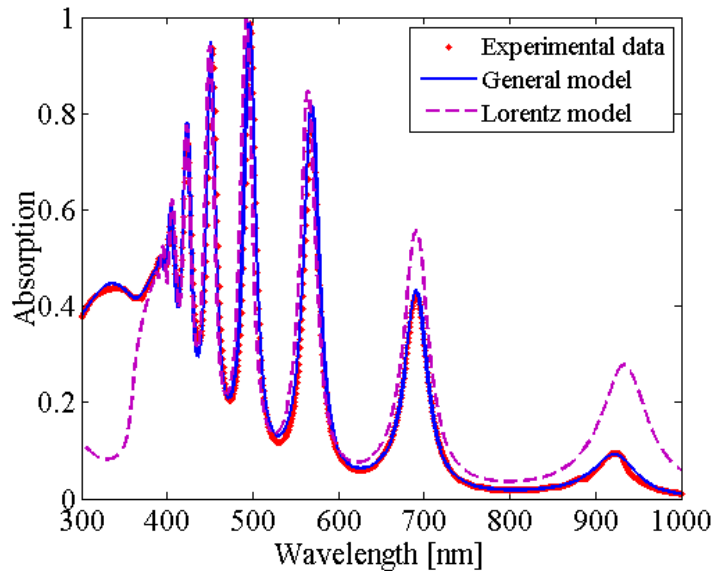
به منظور بررسی دقت و کارایی کدهای نوشته شده، جذب نور توسط فیلم دو لایه ای از جنس سیلیکون و نقره به ترتیب به ضخامت ۳۰۰ و ۱۰۰ نانومتر را شبیه سازی می کنیم. دلیل انتخاب این مثال، وجود جواب های تحلیلی دقیق برای حل این مسئله جهت مقایسه با کدهای نوشته شده موجود می باشد. فضای شبیه سازی طراحی شده در روش *FDTD* در شکل ۴ نشان داده شده است.



شکل (۴) فضای شبیه سازی شده در روش *FDTD* به همراه شرایط مرزی.

در مرزهای بالا و پایین به منظور جلوگیری از بازتاب های غیر فیزیکی به درون فضای مسئله از شرایط مرزی جاذب استفاده می کنیم و در مرزهای چپ و راست، شرایط مرزی دوره ای اعمال می گردد. همان طور که در شکل نشان داده شده است برای محاسبه جذب از دو آشکارساز در ابتدا و انتهای فضای شبیه سازی استفاده می کنیم. با تفاضل شار محاسبه شده توسط این دو آشکارساز می توان جذب درون سلول را محاسبه کرد. نتیجه ی محاسبه ی جذب بر حسب طول موج به ازای داده های آزمایشگاهی، مدل پاشندگی عمومی و مدل لورنتس برای سیلیکون در شکل ۵ نشان داده شده است. همان طور که از نتایج به دست آمده مشخص است، مدل پاشندگی عمومی

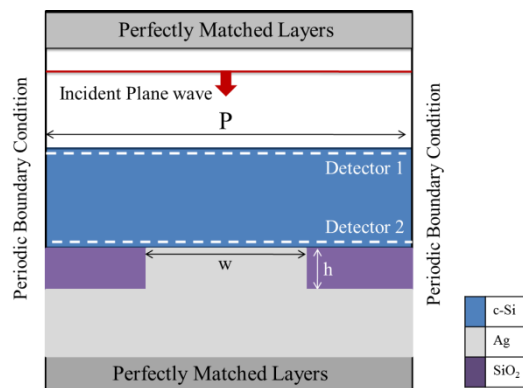
همخوانی خوبی در نواحی طول موجی کمتر از ۴۰۰ نانومتر با حل تحلیلی دارد. اما به کارگیری مدل لورنتس برای توصیف خواص اپتیکی سیلیکون باعث می شود جوابها در این ناحیه با حل تحلیلی همخوانی خوبی نداشته باشد.



شکل (۵) مقایسه نتایج حاصل از شبیه سازی و جواب تحلیلی، برای فیلم دو لایه ای از جنس سیلیکون و نقره به ترتیب با ضخامت ۳۰۰ نانومتر و ۱۰۰ نانومتر.

۵- نتایج

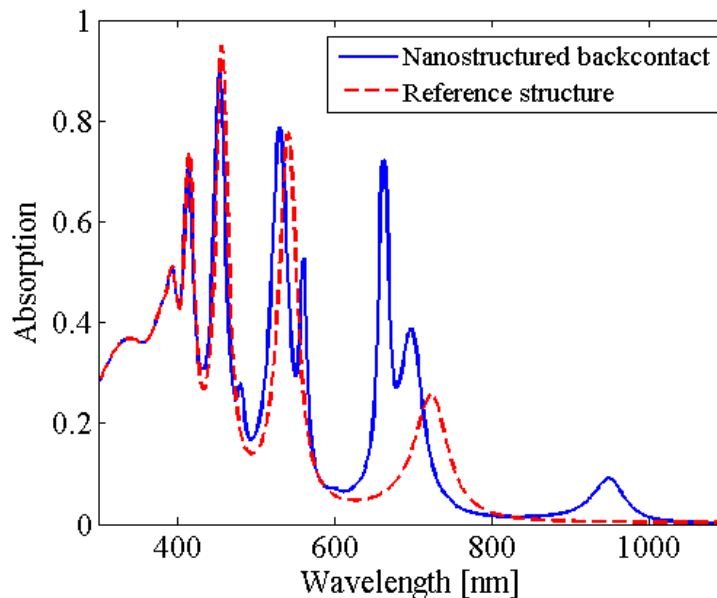
با توجه به اطمینان از صحت روابط نوشته شده، به منظور افزایش بهره ی سلول های خورشیدی ساختاری شامل آرایه ای متناوب از نانومیله های پلاسمونیک از جنس نقره در انتهای سلول خورشیدی سیلیکونی را شبیه سازی می کنیم. نانومیله ها درون لایه ی دی-الکترونیک به ضریب شکست ۱/۵ قرار گرفته اند (شکل (۶)).



شکل (۶) فضای شبیه سازی در روش FDTD. به کارگیری آرایه ای متناوب از نانومیله های پلاسمونیک در انتهای سلول.

دوره تناوب (P)، ضخامت (w) و ارتفاع نانومیلها (h) به ترتیب ۲۰۰، ۱۰۰، ۸۰ نانومتر و ضخامت ماده جاذب ۲۰۰ نانومتر انتخاب شده است. ارتفاع لایه دی الکتریک را برابر با ارتفاع نانومیلها در نظر می گیریم. ساختار موردنظر تحت تابش موج با قطبش TE قرار می گیرد.

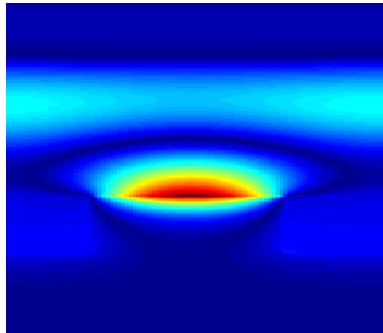
نتیجه محاسبه ی جذب اپتیکی درون سلول برحسب طول موج در گستره ی ۳۰۰-۱۱۰۰ نانومتر در شکل (۷) نشان شده است. نمودار خط چین جذب درون سلول بدون حضور نانومیلها، و نمودار خط پیوسته جذب درون سلول خورشیدی به همراه نانومیلها را نشان می دهد. همانطور که مشخص است جذب درون سلول با به کارگیری نانومیلها به طور قابل ملاحظه ای افزایش می یابد. نانومیلها به کار گرفته شده در انتهای سلول موجب برانگیختگی مدهای موجبری و پلاسمونیک در طول موج های بلند، که سیلیکون در این نواحی جذب پایینی دارد، می شوند.



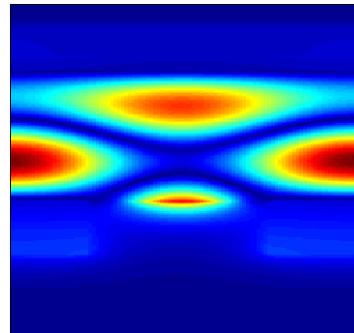
شکل (۷) جذب اپتیکی درون سلول برحسب طول موج در حضور آرایه ای از نانومیلهای پلاسمونیک در انتهای سلول. ضخامت، ارتفاع و دوره تناوب نانومیلها به ترتیب، ۱۰۰، ۸۰ و ۲۰۰ نانومتر و ضخامت ماده فعال ۲۰۰ نانومتر می باشد.

به منظور بررسی مدهای برانگیخته شده توسط ساختار مورد نظر، توزیع شدت میدان مغناطیسی درون سیلیکون و در اطراف نانومیلها به ازای طول موج های ۶۹۷ و ۹۵۰ نانومتر در شکل (۸) نشان داده شده است. به دلیل ساختار تناوبی نانومیلها شدت میدان را تنها به ازای یک دوره تناوب در شکل نشان داده ایم. همانطور که توزیع شدت میدانها نشان می دهد، قرار دادن نانومیلها در انتهای سلول باعث ایجاد یک میدان بسیار قوی و متمرکز درون ماده فعال می شود. از آنجایی که میزان جذب با توان دوم میدان متناسب است، جذب درون سلول خورشیدی به میزان قابل توجهی افزایش می یابد. شکل ۸(الف) توزیع شدت میدان در طول موج ۶۹۷ نانومتر را نشان می دهد، افزایش جذب در این طول موج مربوط به برانگیختگی مدهای

موجبری می شود، و با توجه به توزیع شدت میدان در طول موج ۹۵۰ نانومتر می توان گفت که افزایش جذب مربوط به برانگیختگی مدهای پلاسمونیک می باشد.



(ب)



(الف)

شکل (۸) توزیع شدت میدان مغناطیسی درون سلول و اطراف نانومیله ها در طول موج های، (الف) ۶۹۷ نانومتر، (ب) ۹۵۰ نانومتر.

۶- نتیجه گیری

در این مقاله با بهره گیری از تکنیک تبدیل z با استفاده از روش $FDTD$ مدل پاشندگی عمومی ارائه دادیم که علاوه بر همخوانی خوب این مدل با مدل درود-لورنتس برای فلزات، همخوانی بسیار خوبی میان مدل پاشندگی عمومی و داده های آزمایشگاهی برای سیلیکون وجود دارد.

۷- فهرست منابع:

- [1] Deinega, Alexei and Sajeev, John, *Effective optical response of silicon to sunlight in the finite-difference time-domain method*, Optics letters, 37, 2012, 112-114.
- [2] Lee, K. H., I. Ahmed, R. S. M. Goh, E. H. Khoo, E. P. Li, and T. G. G. Hung, *Implementation of the FDTD method based on lorentz-drude dispersive model on GPU for plasmonics applications*, Progress In Electromagnetic Research, 116, 2011, 441-456.
- [3] Shahmansouri, A. and B. Rashidian, *GPU implementation of split-field of finite-difference time-domain method for drude-lorentz dispersive media*, Progress In Electromagnetic Research, 125, 2012, 55-77.
- [4] Etchegoin, P. G., E. C. Le Ru, and M. Meyer, *An analytic model for the optical properties of gold*, J. Chem. Phys., 125, 2006, 164705-3.
- [5] D. M. Sullivan, *Electromagnetic Simulation Using the FDTD Method*, New York (2000).