

# 基于传输矩阵法的聚合物太阳能电池光学性能分析

李 祥<sup>1</sup> 文尚胜<sup>1,2</sup> 姚日晖<sup>1,2</sup> 陈东成<sup>1</sup> 桂宇畅<sup>1</sup>

(<sup>1</sup> 华南理工大学高分子光电材料与器件研究所, 广东 广州 510640)  
<sup>2</sup> 发光材料与器件国家重点实验室, 广东 广州 510640)

**摘要** 采用基于传输矩阵法的光学模型及 Matlab 软件, 模拟了以聚合物 P<sub>3</sub>HT:PCBM 为活性层的倒装太阳能电池, 并分析了模拟电池的吸光率及其内部光电场分布。探讨了厚度、入射角度以及新结构对电池光学性能的影响。模拟结果表明, 电池的光吸收主要由活性层厚度决定, 分别随着电子传输层和空穴传输层厚度的增加而下降。当光入射角度增大时, 由于光程的增加电池的吸光率随之增加, 在 40° 入射角时达到最大; 由于其他光学作用, 器件吸光率在 40° 入射角以后反而降低; 证明了光斜入射时电场在整个器件中分布是不连续的。通过在基本结构的适当位置插入一层薄膜构成的微腔器件, 由于光学共振效应能够有效提高电池的光吸收。

**关键词** 薄膜; 吸光率; 传输矩阵法; 倒装聚合物太阳能电池; 光电场分布

**中图分类号** O439; TM914.4<sup>+</sup>2 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201232.0631002

## Analysis of Optical Performance on Polymer Solar Cell Based on Transfer Matrix Method

Li Xiang<sup>1</sup> Wen Shangsheng<sup>1,2</sup> Yao Rihui<sup>1,2</sup> Chen Dongcheng<sup>1</sup> Gui Yuchang<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institute of Polymer Optoelectronic Materials and Devices,

South China University of Technology, Guangzhou, Guangdong 510640, China

<sup>2</sup> State Key Laboratory of Luminescent Materials and Devices, South China University of Technology,  
Guangzhou, Guangdong 510640, China

**Abstract** Optical simulations based on transfer matrix method, combined with Matlab have been performed to investigate optical properties of inverted polymer solar cell (IPSC). Effects of thickness, angle of incidence and structure on optical performance of IPSC are studied theoretically. Simulations reveal that optical absorption is mainly dependent on active thickness and has faint decrease as thickness of electron transport layer and hole transport layer increase, respectively. Path length of light inside a solar cell increases so that more light is absorbed. The absorption rate reaches its maximum under the angle of 40°. However, as with other optical effects the absorption rate reduced with the increase of angle, when the angles above 40°; Furthermore, simulations demonstrate optical electric field for p-polarized light is discontinuous at boundaries. A microcavity device which has been constructed by a dioxide (TiO<sub>2</sub>) layer into the basic structure can significantly enhance light absorption due to the optical resonance effect.

**Key words** thin films; optical absorption; transfer matrix method; inverted polymer solar cell; optical electric field distribution

**OCIS codes** 310.6860; 200.4860; 230.2090; 260.3160

## 1 引 言

随着煤炭、石油和天然气等非可再生能源的日益枯竭, 新能源特别是太阳能的研究成为目前国内

外研究的重点和热点<sup>[1~3]</sup>。相比于无机硅太阳能电池, 聚合物太阳能电池具有柔性、易制备、光学吸收波长可调控及潜在的价格低廉等优势, 所以聚合物

**收稿日期**: 2011-11-15; **收到修改稿日期**: 2012-01-06

**基金项目**: 广东省工业科技攻关计划项目(B09B2071220)和广东省国际科技合作计划项目(B09B2051110)资助课题。

**作者简介**: 李 祥(1989—), 男, 硕士研究生, 主要从事聚合物电池方面的研究。E-mail: lxscut@163.com

**导师简介**: 文尚胜(1964—), 男, 博士, 副教授, 主要从事有机及无机半导体材料与器件等方面的研究。

E-mail: shshwen@scut.edu.cn(通信联系人)

太阳能电池的研究对于新能源的开发和利用具有重要的意义和价值<sup>[4~6]</sup>。

体异质结电池自诞生以来<sup>[7]</sup>,由于其能够大大提高激子分离的效率从而提高能量转换效率,如今已被广泛应用在聚合物太阳能电池中。这种结构的电池工作基本原理为:1)活性层吸收入射光,产生激子;2)激子扩散至给体受体界面受给,受体的界面能而分离成自由载流子;3)自由载流子在阴阳极的化学势的驱动下分别传输到阳极和阴极。由电池的工作原理可知要获得高能量转换效率的聚合物太阳能电池,除了控制活性层形貌,获得高迁移率材料,优化电极和表面外,提高材料的光吸收效率也是至关重要的。当前大多数的研究都集中在新材料的合成,而利用其相关的物理机制如干涉原理,微腔效应等来提高器件光吸收的报道却很少。同时由式  $\eta_{\text{EQE}}$  (外量子效率) =  $\eta_{\text{A}}$  (光吸收效率)  $\times$   $\eta_{\text{QE}}$  (内量子效率)<sup>[8]</sup>可知提高电池的光吸收也是提高器件外量子效率一个基本因素。

在聚合物太阳能电池中,入射波长往往大于各层薄膜的物理厚度并且由于入射光在薄膜内部相邻各界面层的多个反射与折射,光的干涉效应对活性层的光吸收影响很大,因而电池的光吸收效率与活性层的材料组成、入射波长、器件厚度及结构是密不可分的。而通过光学模拟可以很清楚的看出它们之间的关系并且预测相关电学性能。如今,光学模拟已经成为研究聚合物太阳能电池的一个强有力工具,它已经被用来优化聚合物太阳能电池的结构<sup>[9]</sup>,开发新的几何结构<sup>[10]</sup>以及探讨器件的量子效率<sup>[11]</sup>等。而传输矩阵法作为一种简单有效的数学方法被普遍应用于聚合物光电器件的光学模拟<sup>[12,13]</sup>。

本文基于传输矩阵法的光学模型以及 Matlab 软件,模拟分析了器件内部各层厚度、入射角度以及器件结构对电池光学性能的影响,并探讨了相关物理机制,为聚合物太阳能电池相关光学分析及应用提供理论参考。

## 2 理论模型

### 2.1 传输矩阵法

传输矩阵法是应用矩阵方法来研究光在分层介质中传播时的分光透射特性、分光反射特性及分光吸收特性等,它依据菲涅耳反射和透射<sup>[12]</sup>。描述光在相邻界面传播时的界面矩阵为

$$\mathbf{I}_{jk} = \frac{1}{t_{jk}} \begin{bmatrix} 1 & r_{jk} \\ r_{jk} & 1 \end{bmatrix}, \quad (1)$$

式中  $r_{jk}, t_{jk}$  分别为菲涅耳反射系数和透射系数。描述光在穿过每层薄膜时的吸收及相移层矩阵为

$$\mathbf{L}_j = \begin{bmatrix} \exp(-i\xi_j d_j) & 0 \\ 0 & \exp(i\xi_j d_j) \end{bmatrix}, \quad (2)$$

式中  $\xi_j = (2\pi/\lambda)N_j$ ,  $N_j$  和  $d_j$  分别为  $j$  层膜的光学导纳和厚度。对于整个器件,其转移矩阵为

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} = \left[ \prod_{v=1}^m \mathbf{I}_{(v-1)v} \mathbf{L}_v \right] \mathbf{I}_{m(m+1)}, \quad (3)$$

则对于整个器件其透射率和折射率分别为

$$\begin{cases} T = |t|^2 \frac{n_{m+1}}{n_0} = \left| \frac{1}{S_{11}} \right|^2 \frac{n_{m+1}}{n_0}, \\ R = |r|^2 = \left| \frac{S_{21}}{S_{11}} \right|^2, \end{cases} \quad (4)$$

式中  $t, r$  分别为透射系数与反射系数,  $n_{m+1}, n_0$  分别为出射介质与入射介质的折射率,由(1)~(4)式可知整个器件的光吸收效率为

$$A = 1 - T - R. \quad (5)$$

由活性层内某一点单位时间内吸收的能量<sup>[14]</sup>可知器件内部光电场的分布直接决定激子的产生率,进而影响器件的短路电流。因此研究器件内部光电场的分布对于研究电池的光吸收效率及相关电学性能是十分必要的。为了计算第  $j$  层内某一点的电场有

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}'_j \mathbf{L}_j \mathbf{S}''_j, \quad (6)$$

$$\mathbf{S}'_j = \begin{bmatrix} S'_{j11} & S'_{j12} \\ S'_{j21} & S'_{j22} \end{bmatrix} = \left[ \prod_{v=1}^{j-1} \mathbf{I}_{(v-1)v} \mathbf{L}_v \right] \mathbf{I}_{(j-1)j}, \quad (7)$$

$$\mathbf{S}''_j = \begin{bmatrix} S''_{j11} & S''_{j12} \\ S''_{j21} & S''_{j22} \end{bmatrix} = \left[ \prod_{v=j+1}^m \mathbf{I}_{(v-1)v} \mathbf{L}_v \right] \mathbf{I}_{m(m+1)}, \quad (8)$$

$$\mathbf{E}_j(x) = \frac{\mathbf{S}''_{j11} \exp[-i\xi_j(d_j - x)] + \mathbf{S}''_{j21} \exp[i\xi_j(d_j - x)]}{\mathbf{S}'_{j11} \mathbf{S}''_{j11} \exp(-i\xi_j d_j) + \mathbf{S}'_{j12} \mathbf{S}''_{j21} \exp(i\xi_j d_j)} \mathbf{E}_0^+, \quad (9)$$

由(6)~(9)式可方便地求出器件中任意一层薄膜任意点的电场。

### 2.2 相关模拟说明

在传统的正装结构中, PEDOT:PSS 作为一种空穴传输层被广泛应用于聚合物电池中,由于其旋涂在 ITO 上时的不稳定性会降低聚合物电池的光电性能<sup>[15,16]</sup>,故而采用倒装结构以有效避免该问题。如今倒装结构已广泛运用在聚合物太阳能电池(IPSC)中<sup>[17,18]</sup>。本文模拟的就是一种常见的倒装聚合物太阳能电池,其基本结构(一维几何图见图1)为 Glass/ITO(150 nm)/ZnO(10 nm)/P<sub>3</sub>HT:PCBM(100 nm)/MoO<sub>3</sub>(10 nm)/Ag(100 nm),其中 ITO

为锡金属氧化物,作为阴极,Ag 作为阳极,ZnO 和 MoO<sub>3</sub> 分别为电子传输层和空穴传输层,活性层则为聚(3-己基噻吩)(P<sub>3</sub>HT)和 1-(3-甲氧羰基)-丙基-1-苯基-(6,6)C61(PCBM)按 1:1 比例混合而成(P<sub>3</sub>HT:PCBM),其化学结构式及电子转移过程如图 2 所示<sup>[19]</sup>。模拟中所涉及到材料的光学参数均来自文献[11,20,21]。由于模拟中的活性层在 700 nm 波长后的吸收很少,故模拟所讨论的波长范围仅为 350~700 nm 之间。模拟中的材料 glass,ITO,ZnO 以及 TiO<sub>2</sub> 的消光系数在所讨论的波长范围内均为 0,且由于此波段内 Ag 的高反射率,故整个器件的光吸收效率可近似的看为活性层的吸收效率。

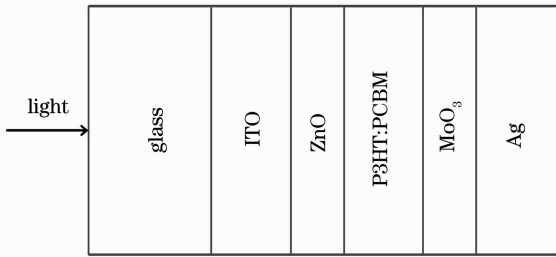


图 1 倒装聚合物太阳能电池结构图  
Fig.1 Structure for the IPSC

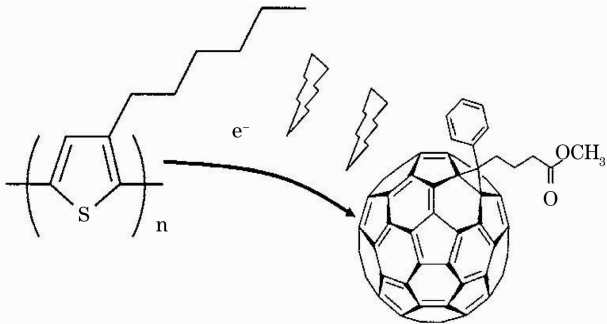


图 2 P<sub>3</sub>HT:PCBM 化学结构式以及电子转移  
Fig.2 Chemical structure of P<sub>3</sub>HT and PCBM electrons are transferred from P<sub>3</sub>HT to PCBM under illumination

### 3 计算结果与讨论

#### 3.1 厚度对电池吸光率的影响

考虑到电子传输层和空穴传输层的厚度对器件电学性能的影响,讨论的厚度范围为 0~20 nm。首先探讨不同电子传输层厚度对器件吸光率的影响,此时,其他各层厚度均为其基本厚度,如图 3 所示。可知,随着 ZnO 厚度从 0~20 nm 依次递增,器件的吸光率在入射波长为 350~450 nm 之间依次递减,甚至当入射波长为 400 nm 时,电池吸光率由无 ZnO 时的 69% 减少到 ZnO 厚度为 20 nm 时的

49%,吸光率减少了接近 20%;在入射波长为 460~530 nm 之间随着 ZnO 厚度的增加,吸光率则有微量增加;在入射波长大于 530 nm 之后,器件的吸光率几乎不受 ZnO 厚度的影响。但从整个吸收波长范围来看,很明显器件的吸收光还是随着 ZnO 厚度的增加而减少。同样比较了不同空穴传输层厚度对器件吸光率的影响,如图 4 所示。可知,当入射波长在 350~380 nm 时,电池吸光率随着 MoO<sub>3</sub> 厚度增加而增加;而当入射波长为 380~640 nm 时,吸光率则随着 MoO<sub>3</sub> 厚度的增加依次减少;当入射波长大于 640 nm 以后,吸光率随着 MoO<sub>3</sub> 厚度的增加有少量增加。从整个吸收波长范围来看,器件的吸收光还是随着 MoO<sub>3</sub> 厚度的增加而有微弱的减少。故在器件制作过程中,从光学性能来看,ZnO 厚度与 MoO<sub>3</sub> 厚度都不宜太厚。

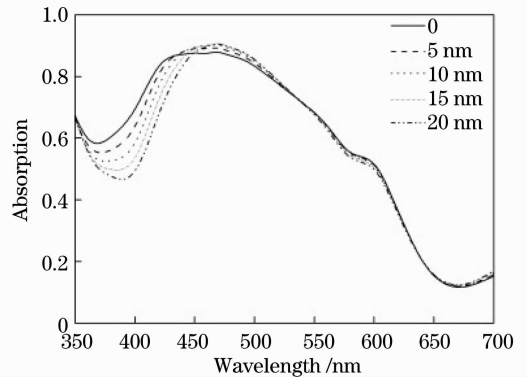


图 3 不同厚度的 ZnO 和器件吸光率关系  
Fig.3 Absorption spectra for different thicknesses of the ZnO layer

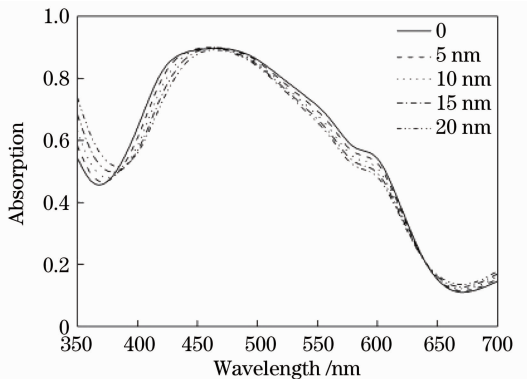


图 4 不同厚度的 MoO<sub>3</sub> 和器件吸光率关系  
Fig.4 Absorption spectra for different thicknesses of the MoO<sub>3</sub> layer

进一步比较了入射波长为 400 nm 时活性层内不同 ZnO 厚度的光电场分布与入射波长为 360 nm 时活性层内不同 MoO<sub>3</sub> 厚度的光电场分布差异(选择这 2 个波长,是因为这 2 个波长内器件的吸光率

随着各自厚度变化明显,趋势一致,易于比较)。在图 5 中,光电场为实际器件内部电场比上入射电场的归一化常量。由图 4(a)可知,随着 ZnO 厚度的增加,对应的活性层每个位置的光电场强度都随之减少,这也正是入射波长为 400 nm 时电池吸光率随着 ZnO 厚度增加而减少的原因。而图 5(b)中活性层中部分位置所对应的电场强度随着 MoO<sub>3</sub> 厚度的增加而增加,而另一部分位置上所对应电场强度则是随着 MoO<sub>3</sub> 厚度的增加而下降,但从整个活性层内电场分布来看,光电场强度还是有所增加。比较图 5(a)和(b),可以明显看到图 5(a)中电场强度的峰值和谷值所对应的活性层位置并不随着 ZnO 厚度的增加而变化,而对于图 5(b),电场强度的峰值和谷值所对应的活性层的位置却随着 MoO<sub>3</sub> 厚度的增加而右移。该现象可以根据文献[22]所描述的光的干涉效应来解释,在整个聚合物太阳能电池器件中,电场强度峰值所对应的位置由下式决定

$$\sum n_i d_i = \frac{m}{2} \lambda - \frac{\varphi}{4\pi} \lambda, \quad (10)$$

式中  $n_i d_i$  为电场强度最大值所对应的位置与电极 Ag 之间的光学距离;  $n_i$  和  $d_i$  分别为 Ag 电极与最大值所对应位置之间各层薄膜的折射率和物理距离;  $\lambda$  为入射波长;  $\varphi$  为 Ag 电极的反射相移;  $m$  则为一个正整数,表示级数。由(10)式可知当 MoO<sub>3</sub> 厚度增加,其他条件不变时,活性层内电场峰所在位置为了

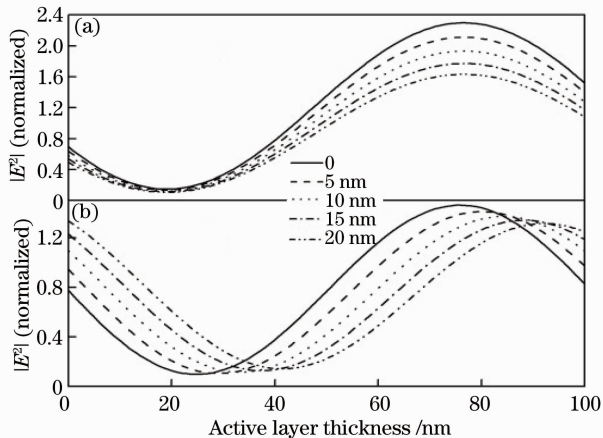


图 5 不同厚度的电子传输层和空穴传输层对活性层内光电场分布的影响。(a)不同 ZnO 厚度;(b)不同 MoO<sub>3</sub> 厚度

Fig. 5 Penetration of optical electric field within active layer for different thickness of electron transport layer and hole transport layer. (a) Different thicknesses of ZnO layer; (b) different thicknesses of MoO<sub>3</sub> layer

保持同 Ag 电极相同的光学距离会向右移动,而 ZnO 厚度的变化并不会影响活性层内电场峰所处的位置和 Ag 电极之间的光学距离。由此可知在活性层和 Ag 电极之间可通过插入一层调节电场分布的薄膜层使多数波长的电场强度峰值位于活性层最佳位置从而使电池吸光率达到最大值。

在电子传输层与空穴传输层厚度都不变化的情况下,器件的吸光率与活性层厚度的关系如图 6 所示。可以很清楚的看到器件光吸收效率主要是由活性层的厚度决定的,且随着活性层厚度的增加吸光率在每个人射波长内都呈震荡式增加,这主要是由入射光和从阴极反射回来的光发生干涉造成的;当入射光波峰与反射光波峰相遇时则出现图中的吸收峰,反之则出现图中的吸收谷,至于吸收峰与吸收谷出现的位置则与入射波长有关。但从整个趋势来看活性层光吸收效率还是随着活性层厚度增加而增加。

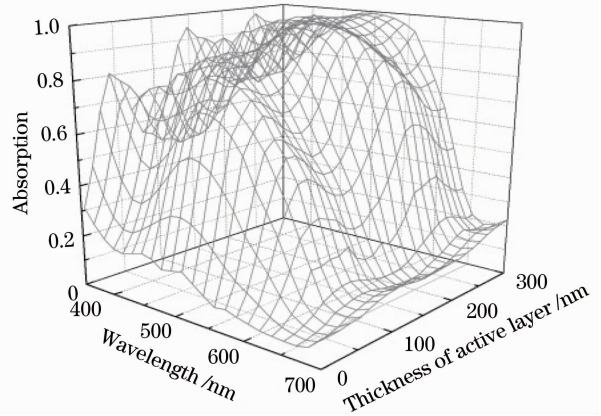


图 6 器件吸光率与活性层厚度的关系

Fig. 6 Absorption spectra of IPSC for different thicknesses of active layer

### 3.2 入射角度对器件吸光率的影响

随着折叠式聚合物太阳能电池的出现<sup>[23~25]</sup>,斜入射光对电池光电性能的影响很大,但目前在这方面的研究还比较少,而在一些相关研究的报道中出现了矛盾<sup>[26,27]</sup>,故有关理论有待进一步深入研究。

图 7 为本文所模拟的基本结构 glass/ITO (150 nm)/ZnO(10 nm)/P<sub>3</sub>HT:PCBM(100 nm)/MoO<sub>3</sub> (10 nm)/Ag(100 nm)的倒装电池的光吸光率和入射角度的关系。由图 7 可知,相比于正入射光,入射角度在 0°~50°范围内入射光在 350~700 nm 范围内器件吸光率均有所增加,且吸收率最大值由 470 nm 正入射时的 86% 增加到 40°入射时的 94.86%,而当入射角度大于 60°时,器件的吸光率则开始急剧下降;在 350~400 nm 短波长范围内,随着入射角的增加,器件吸光率平均增加甚至达到 15% 以上,直到入射角大于

70°时才低于正入射时的吸光率；在 430~700 nm 波长范围内，入射角度从 0°依次增加到 40°时，器件的吸光率依次增加，在入射角度大于 40°后吸光率则依次减少。分析其原因为，当光斜入射时，其在最末一层薄膜的光程由正入射时的  $nd$  变为入射角度为  $\theta$  时的  $nd/\cos\theta$ ，光程增加了  $1/\cos\theta - 1$  倍，入射角度越大，其光程越长，这将导致入射光在电池中经过更多的路程从而有更大的吸收率；而另一方面，随着入射角度的增加，入射光在各层薄膜界面上的反射和折射也将发生变化，特别是当入射角度大于 60°（空气与玻璃的布儒斯特角为 60°）时反射将大幅度增加从而导致器件光吸收的大幅度下降。

在文献[26]中，当光斜入射时，电池内部光电场连续分布在器件内，而在文献[27]中，电池内部

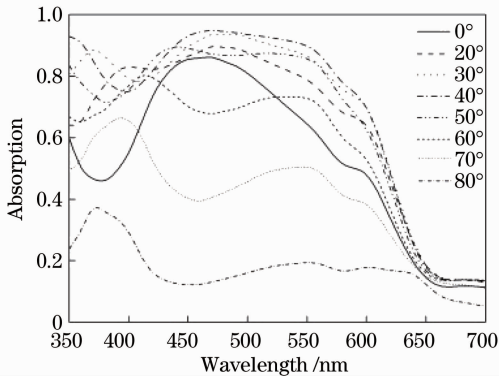


图 7 器件吸光率与不同入射角度的关系

Fig. 7 Absorption spectra of IPSC for different angles of incidence

光电场在相邻薄膜界面分布不连续，是跳跃式的。为了进一步确证斜入射时的光电场分布情况，进一步模拟了 glass/ITO(150 nm)/ZnO(10 nm)/P<sub>3</sub>HT:PCBM(100 nm)/MoO<sub>3</sub>(10 nm)/Ag(100 nm) 这种基本结构光入射角分别为 40°和 60°时，其 TM 波(p 偏振)和 TE 波(s 偏振)在整个器件内的电场分布情况(见图 8)，此时入射波长为 460 nm。由图 8 可清楚的看到对于 s 偏振光，其电场连续分布在器件中，而对于 p 偏振光，电场在相邻层的界面处出现了跳跃，其分布不连续。这可以由麦克斯韦方程组所推导的边界条件来解释，光波从一种介质进入另一种介质时在界面两侧的电场和磁场强度的切向分量处处连续，其平行于界面的电场必须是连续的<sup>[28]</sup>，光正入射时或者斜入射时的分量 s 偏振光平行于界面，因此它们在穿过相邻两层界面时电场分布是连续的，而对于 p 偏振光由于其既有平行于界面又有垂直于界面的光分量(见图 9)，导致其在穿过相邻两层界面时的电场分布不连续。该结果和文献[27]相符，再次说明了斜入射时光电场是不连续地分布在器件中。

### 3.3 结构对器件吸光率的影响

由于 glass/TiO<sub>2</sub> 界面的反射率比 glass/ITO 界面的反射率大很多<sup>[29,30]</sup>，故在原基本结构中的 Glass 与 ITO 之间插入一层 TiO<sub>2</sub> 后，glass/TiO<sub>2</sub> 界面和 Ag 极之间便构成一个微腔结构。器件结构为 glass/TiO<sub>2</sub> ( $x$  nm)/ITO (150 nm)/ZnO (10 nm)/P<sub>3</sub>HT:PCBM(100 nm)/MoO<sub>3</sub> (10 nm)/Ag(100 nm)

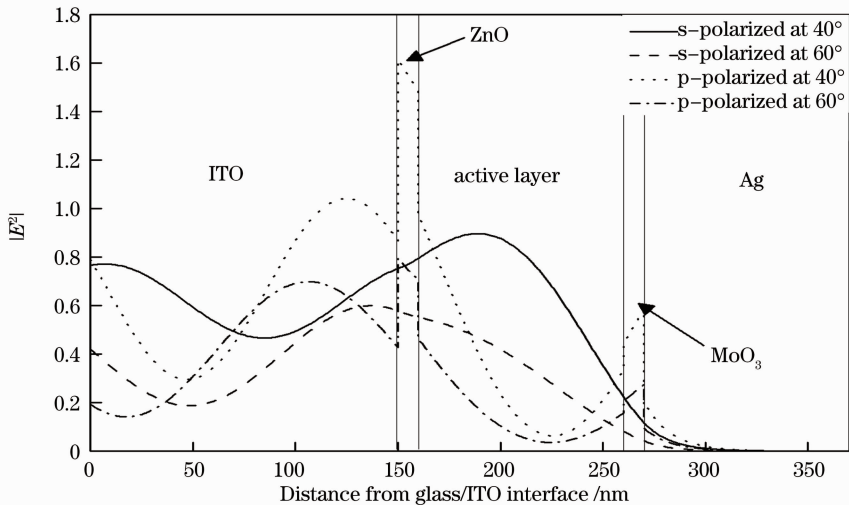


图 8 入射波长为 460 nm 时光电场在整个器件内部分布情况

Fig. 8 Normalized simulation of optical field distribution (for 460 nm illumination) as a function of distance from glass/ITO interface

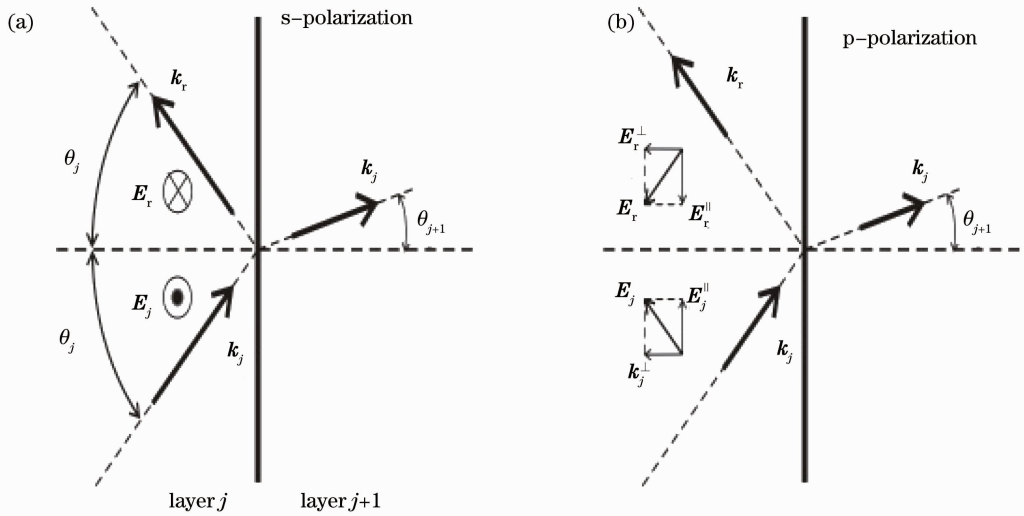


图 9 相邻两层薄膜之间的反射与折射( $\mathbf{K}, \mathbf{E}, \theta$  分别代表波矢量, 对应的电场矢量以及相关界面角度)

Fig. 9 Reflection and refraction at an interface between layers  $j$  and  $j+1$  ( $\mathbf{K}, \mathbf{E}, \theta$  represents wave vectors, associated electric field vectors, and angles with respect to interface normal  $\theta$ )

与基本结构 glass/ITO(150 nm)/ZnO(10 nm)/P<sub>3</sub>HT:PCBM(100 nm)/MoO<sub>3</sub>(10 nm)/Ag(100 nm)之间的吸光率差异如图 10 所示, 可知当在 glass 与 ITO 之间插入一层 TiO<sub>2</sub> 时, 具有新结构的器件和原来的结构相比, 其吸光率在整个吸收波长范围内震荡很明显, 具有多个吸收峰, 且随着 TiO<sub>2</sub> 厚度的依次增加, 峰值均有向右移动的趋势, 由此可以看出新结构的器件具有明显的微腔效应。当 TiO<sub>2</sub> 厚度为 90 nm(此时器件在整个波长范围内具有最大的光吸收)时, 器件吸光率在入射波长为 400~450 nm, 640~700 nm 两个波段范围内均有所下降, 但是由于其在入射波长为 350~400 nm, 450~640 nm 时的强吸收, 特别是当入射波长分别为 380, 480, 600 nm 时, 电池具有三个吸收峰, 吸光率分别达到 98.91%, 97.55%, 75.55%。所以从整个吸收波长范围来看, 微腔效应能有效的提高光吸收。这主要是因为从 Ag 极反射回来的光与从 glass/TiO<sub>2</sub> 界面反射回来的光发生光学共振作用。发生光学共振的条件由(11)式<sup>[30]</sup>表示, 其中  $n_i, d_i$  分别为 glass/TiO<sub>2</sub> 界面与 Ag 极之间各层薄膜的折射率和厚度,  $L_{pen}$  为电场在 Ag 电极内的穿透深度,  $\lambda$  为入射波长,  $m$  为正整数, 表示级数。当入射光满足(11)式时, 微腔器件中的光电场便会增加从而产生更大的电池光吸收, 这可以由入射波长为 380 nm, TiO<sub>2</sub> 厚度为 90 nm 时的微腔结构和基本结构内部光电场分布的差异看出(见图 11):

$$\sum n_i d_i + L_{pen} = \left(m - \frac{1}{2}\right) \frac{\lambda}{2}. \quad (11)$$

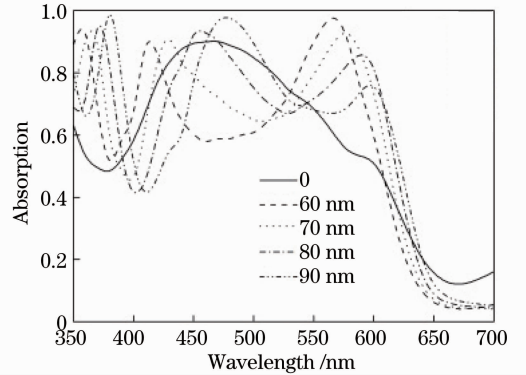


图 10 不同入射波长下器件吸收率与氧化钛厚度关系  
Fig. 10 Absorption spectra for different thicknesses of TiO<sub>2</sub> layer

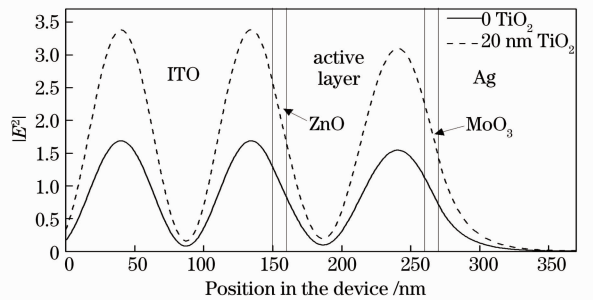


图 11 微腔器件与基本器件内部光电场分布  
Fig. 11 Calculated optical electric field distribution (for 380-nm illumination) of microcavity device and basic device

在金属电极和活性层之间插入一层合适的薄膜层来调节器件内部光电场分布从而优化电池吸光效率, 这层薄膜必须具备三个基本条件: 高的电导率, 高的透光性及恰当的能级匹配。ITO 由于具有高的电导率和透光性, 且其位于 P<sub>3</sub>HT:PCBM/MoO<sub>3</sub>

和 Al 之间时的能级匹配性<sup>[31]</sup>,故进一步比较了微腔电池 glass/TiO<sub>2</sub> (60 nm)/ITO (150 nm)/ZnO (10 nm)/P<sub>3</sub>HT:PCBM(100 nm)/MoO<sub>3</sub> (10 nm)/Ag (100 nm)以及插入一层 ITO 时的电池 glass/TiO<sub>2</sub> (60 nm)/ITO(150 nm)/ZnO(10 nm)/P<sub>3</sub>HT:PCBM (100 nm)/MoO<sub>3</sub> (10 nm)/ITO2(*x* nm)/Ag(100 nm)之间的吸光率差别,如图 12 所示。由图 12 可知改变 ITO2 的厚度在某一个入射波长确实能起着调节吸光率的作用,但从整个活性层吸收波段范围来看,器件的光吸收并无明显增大趋势,这和文献[31]中的结论一致,通过调节 ITO2 厚度的变化,活性层的吸收光能量无明显增加。而文献[31]中之所以通过改变 ITO2 厚度的变化来提高电池能量转化效率,主要是在吸收同样光能量的时候,调节 ITO2 厚度可以避免活性层在靠近金属电极的一侧有大的光电场,从而使大量的激子产生于离金属电极更远的地方进而有效减少激子的淬灭(目前研究认为激子产生的位置离金属电极越远,其淬灭的可能性越小)。

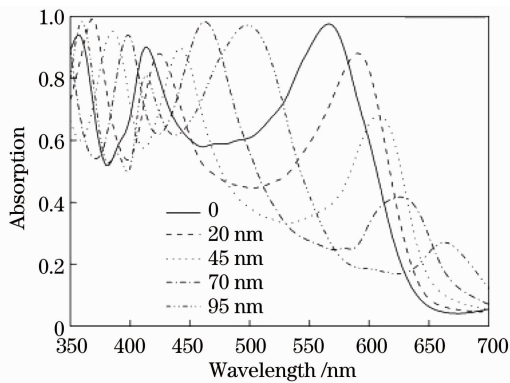


图 12 不同 ITO2 厚度与微腔器件吸光率的关系

Fig. 12 Absorption spectra of microcavity device for different thicknesses of ITO2 layer

## 4 结 论

基于传输矩阵法的光学模型以及 Matlab 软件模拟了膜层厚度、入射角度以及器件结构对倒装聚合物太阳能电池光学性能的影响,并分析了相关原因。研究表明:1)随着电子传输层、空穴传输层厚度的增加,器件光吸收相对整个吸收波段范围而言随之降低,随着活性层厚度的增加,器件吸光率呈震荡式增加;2)随着入射角度的增加,器件的吸光率依次增加,当入射角度为 40°时达到最大值,当入射角度继续增加时吸光率则开始下降,且角度大于 60°后急剧下降;证明了当光斜入射时,对于 s 偏振

光,电场在器件内部分布是连续的,而对于 p 偏振光,电场在相邻界面处出现了跳跃,分布不连续;3)在 glass/ITO 之间插入一层 TiO<sub>2</sub> 后所构成的微腔器件由于光学共振效应能够提高光电场强度从而有效提高电池光吸收,而继续在微腔器件的 MoO<sub>3</sub> 与 Ag 电极之间插入一层 ITO 后,器件的吸收光从整个吸收波段范围来看并无明显增加。

## 参 考 文 献

- 1 Qiu Dongdong, Wang Rui, Cheng Xiang'ai *et al.*. Mechanisms research on continuous wave laser induced damage to solar cells [J]. *Chinese J. Lasers*, 2011, **38**(3): 0302006  
邱冬冬,王睿,程湘爱等.连续激光对太阳能电池的损伤机理研究[J].*中国激光*, 2011, **38**(3): 0302006
- 2 Xiong Xicheng, Xie Quan, Yan Wanjuan. Study on relation between thickness of  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> thin film and solar photon wavelength[J]. *Acta Optica Sinica*, 2011, **31**(5): 0531004  
熊锡成,谢泉,闫万珺.  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 薄膜的厚度与光子波长的关系研究[J]. *光学学报*, 2011, **31**(5): 0531004
- 3 Zhou Zhou, Zhou Jian, Sun Xiaowei *et al.*. Design of an irregularly shaped DBR for thin film solar cells[J]. *Acta Optica Sinica*, 2011, **31**(7): 0731002  
周舟,周健,孙晓玮等.薄膜太阳能电池异型布拉格背反射结构设计及制作[J]. *光学学报*, 2011, **31**(7): 0731002
- 4 Li Weimin, Guo Jinchuan, Sun Xiuyan *et al.*. Effects of illumination intensity and temperature on double-layer heterojunction organic photovoltaic device performance [J]. *Chinese J. Lumin.*, 2011, **32**(7): 724~728  
李卫民,郭金川,孙秀泉等.辐照强度及温度对双层异质结有机光伏器件性能的影响[J]. *发光学报*, 2011, **32**(7): 724~728
- 5 C. J. Barec. Organic photovoltaics technology and market[J]. *Sol. Eng. Mater. Sol. Cells*, 2004, **83**(2-3): 273~292
- 6 F. Monestier, J. J. Simon, P. Torchio *et al.*. Modeling the short circuit current density of polymersolar cells based on P3HT:PCBM blend[J]. *Sol. Eng. Mater. Sol. Cells*, 2007, **9**(5): 405~410
- 7 G. Yu, J. Gao, J. C. Hummelen *et al.*. Polymer photovoltaic cells-enhanced efficiencies via a network of internal donor-acceptor heterojunctions[J]. *Science*, 1995, **270**(5243): 1789~1791
- 8 Zhao Xinyan, Mi Baoxiu, Gao Zhiqiang *et al.*. Recent progress in the numerical modelling for organic thin film solar cells[J]. *Sci. China Phys. Mech. Astron.*, 2011, **54**(3): 375~387
- 9 D. Gilles, F. Karen, A. Tayebbeh *et al.*. Design of efficient organic tandem cells: on the interplay between molecular absorption and layer sequence [J]. *J. Appl. Phys.*, 2007, **102**(12): 123109
- 10 M. Niggemann, M. Glatthaar, P. Lewer *et al.*. Functional micropillar substrate for organic solar cells [J]. *Thin Solid Films*, 2006, **511**(26): 628~633
- 11 D. Gilles, F. Karen, C. Markus *et al.*. Angle dependence of external and internal quantum efficiencies in bulk-heterojunction organic solar cells[J]. *J. Appl. Phys.*, 2007, **102**(5): 054516
- 12 L. A. Pettersson, L. S. Roman, O. Inganäs. Modeling photocurrent action spectra of photovoltaic devices based on organic thin films[J]. *J. Appl. Phys.*, 1999, **86**(1): 487~496
- 13 Gui Yuchang, Wen Shangsheng, Zhang Jianping *et al.*. Analysis of light out-coupling efficiency in top-emitting polymer light-emitting devices[J]. *Acta Optica Sinica*, 2011, **31**(6): 0631002  
桂宇畅,文尚胜,张剑平等.顶发射聚合物发光二极管的出光率分析[J]. *光学学报*, 2011, **31**(6): 0631002
- 14 A. J. Moule, K. Meerholz. Minimizing optical losses in bulk

- heterojunction polymer solar cells[J]. *Appl. Phys. B*, 2007, **86**(4): 721~727
- 15 J. S. Kim, R. H. Friend, F. Cacialli. Improved operational stability of polyfluorene-based organic light-emitting diodes with plasma-treated indium-tin-oxide anodes[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1999, **74**(21): 3084~3086
- 16 M. P. de Jong, L. J. van IJendoorn, M. J. A. de Voigt. Stability of the interface between indium-tin-oxide and poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/poly(styrenesulfonate) in polymer light-emitting diodes[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2000, **77**(14): 2255~2257
- 17 Y. Sahin, S. Alem, R. de Bettignies *et al.*. Development of air stable polymer solar cells using an inverted gold on top anode structure[J]. *Thin Solid Films*, 2005, **476**(2): 340~343
- 18 G. Li, C. W. Chu, V. Shrotriya *et al.*. Efficient inverted polymer solar cells[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2006, **88**(25): 253503~253505
- 19 Huang Jinsong, Li Gang, Yang Yang. Influence of composition and heat-treatment on the charge transport properties of poly(3-hexylthiophene) and [6,6]-phenyl C61-butyric acid methyl ester blends[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2005, **87**(11): 112105
- 20 Y. J. Lee, W. T. Nichols, D. G. Kim *et al.*. Chemical vapour transport synthesis and optical characterization of MoO<sub>3</sub> thin films[J]. *J. Phys. D.*, 2009, **42**(11): 115419
- 21 J. R. Tumbleston, D. H. Ko, T. Samulski. Edward *et al.*. Electrophotonic enhancement of bulk heterojunction organic solar cells through photonic crystal photoactive layer[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2009, **94**(4): 043305
- 22 E. Istrate, E. H. Sargent. Measurement of the phase shift upon reflection from photonic crystals[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2005, **86**(15): 151112
- 23 S. -B. Rim, S. Zhao, S. R. Scully *et al.*. An effective light trapping configuration for thin-film solar cells[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2007, **91**(24): 243501
- 24 Zhou Yinhua, Zhang Fengling, K. Tvingstedt *et al.*. Multifolded polymer solar cells on flexible substrates[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2008, **93**(3): 033302
- 25 V. Andersson, K. Tvingstedt, W. Tian *et al.*. Optical modeling of a folded organic solar cell[J]. *J. Appl. Phys.*, 2008, **103**(9): 094520
- 26 D. Cheyns, B. P. Rand, B. Verreert *et al.*. The angular response of ultrathin film organic solar cells[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2008, **92**(24): 243310
- 27 A. Meyer, H. Ade. The effect of angle of incidence on the optical field distribution within thin film organic solar cells[J]. *J. Appl. Phys.*, 2009, **106**(11): 113101
- 28 Wei Guanghui, Yan Jixiang. Matrix Optics [M]. Beijing: Weapon Industry Press, 1995. 216~218  
魏光辉, 阎吉祥. 矩阵光学[M]. 北京: 兵器工业出版社, 1995. 216~218
- 29 H. K. Kim, S. H. Cho, J. R. Oh *et al.*. Deep blue, efficient, moderate microcavity organic light-emitting diodes[J]. *Organic Electronics*, 2010, **11**(1): 137~145
- 30 Cho Sang-Hwan, Song Young-Woo, Lee Joon-gu *et al.*. Weak-microcavity organic light-emitting diodes with improved light out-coupling[J]. *Opt. Express*, 2008, **16**(17): 12632~12639
- 31 Chen Fang-Chung, Wu Jyh-Lih, Hung Yi. Spatial redistribution of the optical field intensity in inverted polymer solar cells[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2010, **96**(19): 193304

栏目编辑: 韩 峰