

# 有机光伏电池物理性能的模拟<sup>\*</sup>

封 伟<sup>†</sup> 高中扩

(天津大学材料科学与工程学院, 天津 300072)  
(2007 年 7 月 6 日收到, 2007 年 11 月 26 日收到修改稿)

在分析有机聚合物光伏器件物理工作过程的基础上, 依据光学原理和扩散理论建立了非相干光吸收模型和激子传输模型. 模拟了限制光伏效率的光学吸收和激子扩散两个主要过程, 获得了薄膜厚度与光学吸收、转换效率之间的函数关系, 为增强有机薄膜的光学吸收、激子分离与传输并获得高转换效率的有机光伏电池奠定理论基础.

关键词: 有机光伏电池, 光学吸收, 激子扩散, 模拟

PACC: 7860, 7865T, 7820, 8220W

## 1. 引 言

有机聚合物光伏电池采用共轭聚合物作为光伏材料, 制作工艺简单、成本低廉, 可大面积制成柔性器件<sup>[1]</sup>, 这些优点使得聚合物光伏电池的研究越来越受到重视. 近年来, 随着共轭聚合物的快速发展, 特别是给体/受体(D/A)复合理论的逐渐成熟<sup>[2,3]</sup>, 使共轭聚合物在保持其低成本、可加工性等优点的基础上, 光电转换效率已经提高到了 6% 左右<sup>[4]</sup>. 和无机光伏电池相比<sup>[5]</sup>, 有机光伏电池相对较低的转换效率<sup>[6]</sup>是制约其广泛应用的主要瓶颈, 只有得到高转换效率、性能稳定的光伏电池, 才能实现聚合物光伏电池的商业化. 所以, 探索更有效的途径以改善有机光伏电池光电转换效率是当前的重要研究热点.

聚合物光伏电池效率的提高可以通过材料的选择和器件结构的优化来实现. 另外, 从理论上分析光伏效应机理和过程、光伏电池的运行特性, 探讨影响光电转换效率的主要因素, 也为获得高转换效率的光伏电池提供了重要途径. 在有机光伏电池模拟中, 可以通过激活层的薄膜厚度、内部微观结构<sup>[7]</sup>、相分离程度与光学吸收、光电转换效率之间的关系和激子的传输、分裂<sup>[8]</sup>以及自由电荷向两电极处的输运效应加以分析. 本文中, 我们选用具有较高的电子亲和能, 较大的可见光吸收系数及较好的

光稳定性和化学稳定性的有机染料对称 *N, N'*-二苯并咪唑-3, 4, 9, 10-四羧酸二亚酰胺(PV)作为电子受体材料, 具有高电导率且环境稳定性、成膜性和溶解性均较好的导电聚合物聚(3-十二烷基)噻吩(PAT12)<sup>[9]</sup>作为给体材料, 对两者所形成典型的 D/A 型有机聚合物光伏电池进行了理论分析. 根据光学原理和扩散理论, 建立了非相干光吸收模型和激子传输模型, 模拟了限制光伏效率的光吸收和激子扩散两个主要过程. 这为充分掌握有机光伏电池的工作特性, 提高材料的光学吸收效率、电荷的收集效率、电池的光电转换效率, 制作高效光伏电池提供了理论基础.

## 2. 理 论

### 2.1. 器件中光电场的分布

当一束频率范围一定的光垂直照射到厚度一定的介质时, 在介质内部会由于前后两界面反射而形成的光波, 这些光波会与入射光相互叠加. 若介质的厚度不是远大于入射光的波长时, 介质中就会发生比较明显的干涉效应, 所形成的光电场是由入射光和各次反射光波相叠加而成, 并非光强度的简单叠加. 对于聚合物光伏电池的激活层, 其薄膜厚度在 10—100 nm 范围, 远小于入射光波长, 因此必须考虑光学干涉效应对器件中光电场分布的影响.

聚合物光伏电池中光电场理论模型的建立, 我

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号: 60307001, 50573057)和教育部新世纪优秀人才支持计划(批准号: NCET-060232)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: weifeng@tju.edu.cn

们采用图 1 所示的结构, 多层膜结构由夹在两个半无限层 ( $j=0, j=m+1$ ) 之间的  $m$  个单层组成, 设 ( $j=1, 2, \dots, m$ ) 层的厚度为  $d_j$ , 复折射率为

$$\bar{n}_j = n_j + ik_j,$$

并假设各个界面均为光学平面. 图 1 所表示的符号  $R$  和  $T$  分别是反射率和透射率,  $R'$  和  $T'$  分别是修正反射率和修正透射率,  $R^*$  和  $T^*$  分别是基片反射率和基片透射率.

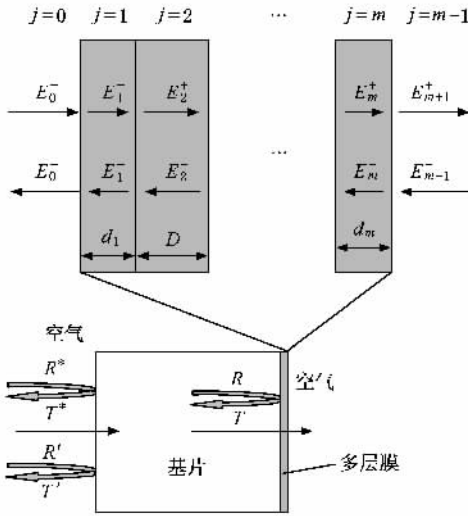


图 1 多层膜中光传播示意图

假设入射光从左至右沿着表面法线方向入射, 任意两层之间的界面处入射光被分为透射波和反射波. 在相邻的  $j$  和  $k$  层的界面处, 分别用  $\bar{E}_j^\pm$  和  $\bar{E}_k^\pm$  表示在  $j$  层和  $k$  层中沿正向和反向传播的光电场, 这时光电场的传播可由分层介质的界面矩阵  $I_{jk}$  加以表示<sup>[10]</sup>, 即

$$\begin{bmatrix} \bar{E}_j^+ \\ \bar{E}_j^- \end{bmatrix} = I_{jk} \begin{bmatrix} \bar{E}_k^+ \\ \bar{E}_k^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{t_{jk}} & r_{jk} \\ r_{jk} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{E}_k^+ \\ \bar{E}_k^- \end{bmatrix}. \quad (1)$$

对沿着表面法线方向传播的平面波, 其菲涅耳复合反射系数和透射系数分别为

$$\begin{aligned} r_{jk} &= (\bar{n}_j - \bar{n}_k) / (\bar{n}_j + \bar{n}_k), \\ t_{jk} &= 2\bar{n}_j / (\bar{n}_j + \bar{n}_k). \end{aligned}$$

光波在  $j$  层中传播所引起的吸收和相位移, 可由阶层矩阵  $L_j$  表示, 即

$$L_j = \begin{bmatrix} e^{-i\xi_j d_j} & 0 \\ 0 & e^{i\xi_j d_j} \end{bmatrix}, \quad (2)$$

式中

$$\xi_j = (2\pi/\lambda)\bar{n}_j,$$

其中  $\lambda$  为入射光波长. 这样, 介于最外两层  $j=0$  和  $j=m+1$  层之间多层膜对光电场所产生的影响可用转移矩阵  $S$  加以表示, 即

$$\begin{bmatrix} \bar{E}_0^+ \\ \bar{E}_0^- \end{bmatrix} = S \begin{bmatrix} \bar{E}_{m+1}^+ \\ \bar{E}_{m+1}^- \end{bmatrix}, \quad (3)$$

式中

$$\begin{aligned} S &= \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} \\ &= \left( \prod_{n=1}^m I_{(n-1)n} L_n \right) I_{m(m+1)}. \end{aligned}$$

因而可得单层膜的反射系数和透射系数分别为

$$\begin{aligned} r &= \bar{E}_0^- / \bar{E}_0^+ = S_{21} / S_{11}, \\ t &= \bar{E}_{m+1}^+ / \bar{E}_0^+ = S_{11}^{-1}. \end{aligned}$$

这时, 多层膜的吸收效率为

$$\eta_A = 1 - T - R,$$

其中多层膜透射率为

$$T = |t|^2 \bar{n}_{m+1} / \bar{n}_0,$$

多层膜折射率为

$$R = |r|^2.$$

光伏电池器件一般沉积在透明的玻璃基片上, 其厚度为 0.1—1 mm, 远大于入射光波长  $\lambda$ , 因此衬底在空气/基片、基片/膜界面的影响可通过修正  $T$  和  $R$  来处理<sup>[11]</sup>. 设基片对入射光的折射指数为  $\bar{n}_0$ , 可得

$$\begin{aligned} R' &= \frac{R^* + R}{1 + R^* R}, \\ T' &= \frac{T^* T}{1 + R^* R}, \end{aligned} \quad (4)$$

式中

$$\begin{aligned} R^* &= \left| \frac{1 - \bar{n}_0}{1 + \bar{n}_0} \right|^2, \\ T^* &= \left| \frac{2}{1 + \bar{n}_0} \right|^2. \end{aligned}$$

这时, 吸收效率校正为

$$\eta_A = 1 - T' - R'.$$

为确定多层膜中光电场的分布, 需要计算任意  $j$  层中的光电场, 总的转移矩阵  $S$  可表示为

$$S = S_j^- L_j S_j^+,$$

其中

$$S_j^- = \left( \prod_{n=1}^{j-1} I_{(n-1)n} L_n \right) I_{(j-1)j} S_j^+$$

$$= \left( \prod_{n=j+1}^m I_{(n-1)n} L_n \right) I_{n(n+1)}.$$

光电场在  $j$  层左边界面处正向传播与入射光波有如下关系:

$$\frac{\bar{E}_j^+}{E_0^+} = t_j^+ = \frac{1}{1 + \frac{S_{j12}^- S_{j21}^+}{S_{j11}^- S_{j11}^+} e^{2i\xi_j d_j}}. \quad (5)$$

同样可得  $j$  层左边界面处负方向的电场

$$\frac{\bar{E}_j^-}{E_0^+} = t_j^- = t_j^+ \frac{S_{j21}^+}{S_{j11}^+} e^{2i\xi_j d_j}. \quad (6)$$

因而  $j$  层中任意点  $x$  处的光电场为

$$\begin{aligned} \bar{E}_j(x) &= \bar{E}_j^+(x) + \bar{E}_j^-(x) \\ &= (t_j^+ e^{2i\xi_j d_j} + t_j^- e^{-2i\xi_j d_j}) \bar{E}_0^+. \end{aligned} \quad (7)$$

## 2.2. 光生激子的产生和传输

入射光子的能量大于激子产生所需要的能量时,就会引起材料对光的吸收并在材料内部产生激子.对于波长为  $\lambda$  的入射光,激活层中  $j$  层的某点  $x$  处单位时间内所吸收的光子能量  $Q_j(x)$  为

$$Q_j(x) = \frac{1}{2} c \epsilon_0 \alpha_j n_j |\bar{E}_j(x)|^2, \quad (8)$$

式中  $c$  为光速,  $\epsilon_0$  为真空介电常数,  $n_j$  和  $\alpha_j = 4\pi k_j / \lambda$  分别为  $j$  层材料的折射率和吸收系数.结合(7)式,(8)式可变为

$$\begin{aligned} Q_j(x) &= \alpha_j T_j I_0 \left[ e^{-\alpha_j x} + \rho_j'^2 e^{-\alpha_j (2d_j - x)} \right. \\ &\quad \left. + 2\rho_j'' e^{-\alpha_j d_j} \cos\left(\frac{4\pi n_j}{\lambda}(d_j - x) + \delta_j''\right) \right] \quad (9) \end{aligned}$$

式中  $I_0$  为入射光光强,  $T_j = (n_j/n_0) |t_j^+|^2$  为  $j$  层的透射强度,  $\rho_j'$ ,  $\rho_j''$  分别为复合折射指数的绝对部分和校正部分.从(9)式可以看出,  $j$  层中  $x$  点处对入射光的吸收由三部分组成,分别为  $x$  点处的透射波、反射波以及两波产生的相干波<sup>[12]</sup>.因而单位时间单位体积内  $j$  层中  $x$  点处所产生的激子数  $G_j(x)$  可表示为

$$G_j(x) = \theta_1 \frac{Q_j(x)}{h\nu}, \quad (10)$$

式中  $\nu$  为入射光频率,  $\theta_1$  为激子的量子产额,即每吸收一个能量大于  $E_g$  的光子所能产生的激子数.

由于多层膜中不同位置处光吸收密度的差异,激子在薄膜中会产生浓度梯度,激子不带电荷,因而激子的传输只能通过扩散引起.设  $n$  为激子浓度,  $D$  为激子扩散系数,  $\tau$  为激子的平均寿命,只考

虑一维情况,即假定激子浓度只随层中位置  $x$  的变化,且扩散系数  $D$  与浓度无关.激子的扩散方程可表示为<sup>[13]</sup>

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - \frac{n}{\tau} + G(x). \quad (11)$$

(11)式等号右边第一项为激子扩散传输项,第二项为激子复合损失项,第三项则为激子的光产生项.当激子的产生、扩散和损失达到平衡时,激子浓度分布达到稳态,不再随时间而变化,(11)式可化为激子稳态扩散方程

$$\frac{d^2 n}{dx^2} = \beta^2 n(x) - \frac{1}{D} G(x), \quad (12)$$

式中  $\beta = 1/L = 1/\sqrt{D\tau}$  为激子扩散长度  $L$  的倒数.对于多层膜中的  $j$  层,有

$$\frac{d^2 n}{dx^2} = \beta_j^2 n(x) - \frac{1}{D_j} G_j(x), \quad (13)$$

式中  $D_j$  为激活层中  $j$  层的激子扩散系数,  $\beta_j = 1/L_j = 1/\sqrt{D_j \tau_j}$  为  $j$  层激子扩散长度  $L_j$  的倒数,  $G_j(x)$  则为  $j$  层中光生激子产生率.

假设激子在电极/薄膜界面及扩散到 D/A 界面处都可以分裂成自由电荷,可得边界条件为<sup>[11]</sup>

$$\begin{aligned} n &= 0 \Big|_{x=0}, \\ n &= 0 \Big|_{x=x_{\text{DA}}}. \end{aligned} \quad (14)$$

在  $j$  层中,激子扩散至 D/A 界面处对光电流密度的贡献为

$$\begin{aligned} J_{\text{photo}}^j &= -q D_j \left. \frac{dn}{dx} \right|_{x=x_{\text{DA}}} \\ &= -q \frac{1}{\beta_j^2 \tau} \left. \frac{dn}{dx} \right|_{x=x_{\text{DA}}}, \end{aligned} \quad (15)$$

式中  $q$  为电子电荷量,  $x_{\text{DA}}$  为 D/A 界面的位置.假设  $\eta_{\text{CT}} \eta_{\text{CC}} = 1$ ,即激子能全部分离成空穴和电子,且空穴和电子在电极处能全部被收集,这里  $\eta_{\text{CT}}$  表示激子分离效率,  $\eta_{\text{CC}}$  表示电极处的电荷收集效率,则  $j$  层中在  $x = x_{\text{DA}}$  的外部量子效率  $\eta_{\text{EQE}}^j$  可表示为

$$\eta_{\text{EQE}}^j = \frac{J_j/q}{\frac{1}{2} c \epsilon_0 |\bar{E}_0^+|^2}. \quad (16)$$

由

$$G_j \propto |\bar{E}_0^+|^2,$$

可得

$$J_j \propto |\bar{E}_0^+|^2.$$

因而从(16)式可知,  $\eta_{\text{EQE}}^j$  与入射光强无关.对于多层膜器件,对每一个 D/A 界面处的  $\eta_{\text{EQE}}^j$  求和,即可

得到光伏电池总的外部量子效率  $\eta_{EQE}$  ,即

$$\eta_{EQE} = \sum \eta_{EQE}^j \quad (17)$$

由方程(10)(12)和边界条件(14)求得

$$n(x) = \frac{\theta_1 \alpha T I_0}{h\nu D (\beta^2 - \alpha^2)}$$

$$\times \left[ C_1 e^{-\beta x} + C_2 e^{\beta x} + e^{-\alpha x} + A e^{\alpha x} + B \cos\left(\frac{4\pi\chi}{\lambda}(d-x) + \delta''\right) \right] \quad (18)$$

其中,

$$C_1 = \frac{e^{\beta l} - e^{-\alpha d} + A(e^{\beta l} - e^{-\alpha d}) + B\left[e^{\beta l} \cos\left(\frac{4\pi\chi}{\lambda}d + \delta''\right) - \cos(\delta'')\right]}{e^{-\beta l} - e^{\beta l}}$$

$$C_2 = \frac{e^{\beta l} - e^{-\alpha d} + A(e^{-\beta l} - e^{\alpha d}) + B\left[e^{-\beta l} \cos\left(\frac{4\pi\chi}{\lambda}d + \delta''\right) - \cos(\delta'')\right]}{e^{-\beta l} - e^{\beta l}}$$

$$A = \rho''^2 e^{-2\alpha d}$$

$$B = 2 \frac{\beta^2 - \alpha^2}{\beta^2 + (4\pi\eta/\lambda)^2} \rho'' e^{-\alpha d}$$

$\chi$  为材料的消光系数.相应所产生的光电流密度  $J_{photo}$  为

$$J_{photo} = \frac{\theta_1 \alpha T I_0}{h\nu (\beta^2 - \alpha^2)} \left\{ \beta C_1 e^{-\beta l} + \beta C_2 e^{\beta l} + \alpha e^{-\alpha d} - \alpha A e^{\alpha x} - \frac{4\pi\eta}{\lambda} B \sin\delta'' \right\} \quad (19)$$

作为实例,我们选用 PAT12 和 PV 作为光伏材料,构建了一个典型的 D/A 异质结聚合物光伏电池,电池结构如下:玻璃(1 mm)/ITO(100 nm)/PAT12(20—100 nm)/PV(50 nm)/Al(100 nm).模拟中所涉及到的一些参量如表 1 所列,这里我们假设激子的量子产额为 1,即  $\theta_1 = 1$ .对上述的光吸收和激子传输过程采用 Matlab 软件进行编程处理.

表 1 模拟激子扩散时的部分参量取值

| 参 量   | 取 值                   | 数据来源   |
|---|-----------------------|--------|
| 激子扩散系数 $D/m^2 \cdot s^{-1}$                 | $8 \times 10^{-7}$    | 文献 14] |
| 激子扩散长度 $L/nm$                               | 10—20                 | 文献 3]  |
| PV 电子迁移率 $\mu_n/m^2 \cdot V^{-1} s^{-1}$    | $2.4 \times 10^{-10}$ | 文献 15] |
| PAT12 空穴迁移率 $\mu_p/m^2 \cdot V^{-1} s^{-1}$ | $6.3 \times 10^{-7}$  | 文献 10] |

### 3. 模拟结果及分析

图 2 所示为不同 PAT12 厚度时激子产生浓度与位置  $x$  的关系.这里取 PAT12 厚度  $d$  分别为 20, 40, 60, 80 和 100 nm,其中图 2(a)和(b)是激子扩散长度  $L$  分别为 10 和 20 nm 时激子产生浓度与位置

关系.图 2(c)比较了两种激子扩散长度对激子浓度影响的规律.从图 2(a)和(b)可知, PAT12 厚度  $d$  对激子的产生有很大的影响.随着厚度的增加,器件对光的吸收效率及内部所产生的光电场强度也随之增加,因此激子浓度相应地增加.当激子扩散长度  $L = 10$  nm,薄膜厚度为 20 nm 时,激子最大浓度为  $2.2 \times 10^{18} m^{-2} s^{-1}$ .随着器件厚度增加至 100 nm 时,激子最大产生浓度也增加至  $3.46 \times 10^{18} m^{-2} s^{-1}$ .然而,激子扩散长度一定时,激子浓度并不是随着厚度的增加而一直增加,而是先增至一最大值,然后逐渐降低. $L = 10$  nm 时,其最大值的范围为 10—35 nm,  $L = 20$  nm 时的最大值范围为 28—46 nm.从图 2(c)可以看出,激子扩散长度对激子浓度有很大的影响,扩散长度从 10 nm 增加至 20 nm 时,激子最大浓度却增加了 2—3 倍.

图 3 为激子扩散长度  $L$  为 10 和 20 nm 时的光电流密度  $J_{photo}$  与器件的薄膜厚度  $d$  之间的关系.由以上分析可知,随着薄膜厚度的增加,光吸收效率增加,激子的浓度也随之增加.激子的寿命非常短,在整个寿命内所能扩散的长度是有限的.随着薄膜厚度的增加,就会阻碍光生激子所能到达 D/A 界面的比例,实际产生贡献的激子也会随之部分地减少.

从图 3 可以看出,光电流先是随着薄膜厚度的增加而达到最大值,随后就会随着薄膜厚度的增加而逐渐减小.因而对于一定扩散长度的激子,都有一最佳膜厚,激子扩散长度分别为 10 和 20 nm 时所

对应的最佳薄膜厚度分别在 22—35 和 36—50 nm 之间, 大约为激子扩散长度的 2 倍. 同时可以看出, 激子扩散长度对光电流的影响也很大, 激子扩散长

度在 20 nm 时较 10 nm 的光电流范围有很大的提高, 最大值为 70 A/m<sup>2</sup>, 而 10 nm 时的最大光电流值为 47 A/m<sup>2</sup>, 对应的膜厚分别为 42 和 28 nm.

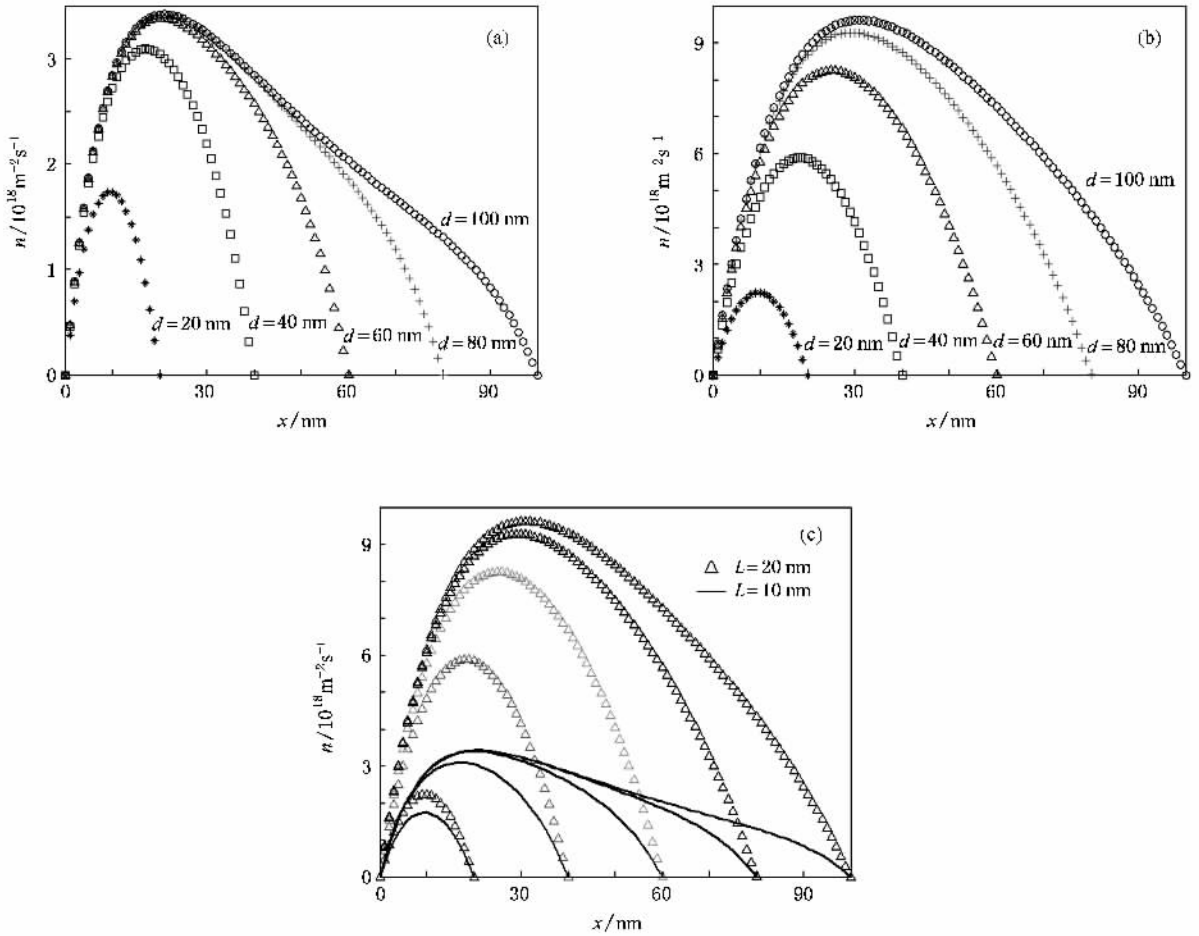


图 2 不同 PAT12 厚度时器件中激子的分布 (a)  $L = 10 \text{ nm}$ , (b)  $L = 20 \text{ nm}$ , (c) 激子扩散长度对激子浓度的影响规律

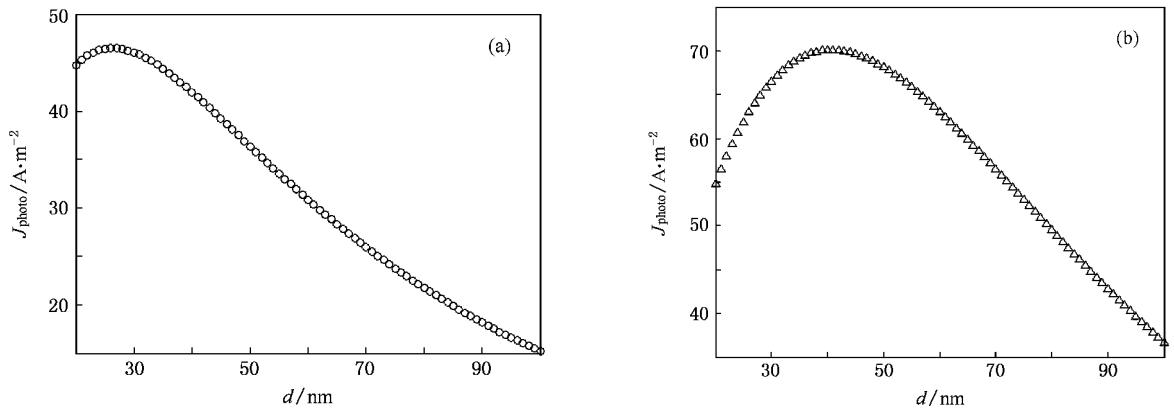
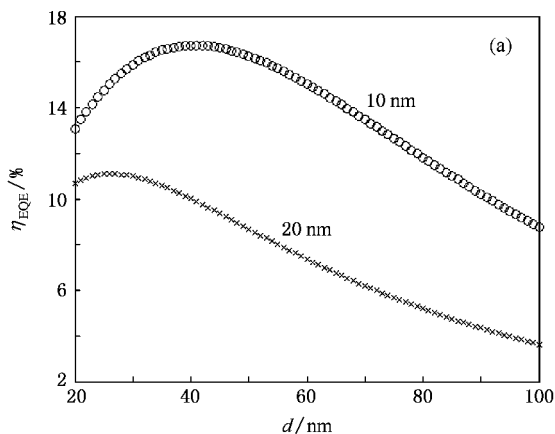


图 3 光电流密度  $J_{\text{photo}}$  与薄膜厚度  $d$  的关系 (a)  $L = 10 \text{ nm}$ , (b)  $L = 20 \text{ nm}$

图 4 为光电流密度  $J_{\text{photo}}$  与入射光强  $I$  之间的关系. 从图 4 可以看出, 光电流密度与入射光强基本

上呈线性关系,这从(19)式也可以分析得到.光电流密度与入射光强之间的线性关系表明缺陷处或杂质处电荷的损失主要是单分子复合所引起的,这就意味着部分电荷被缺陷所俘获,而后再与异种电荷发生复合.在高光强下双分子复合并不是电荷的主要损失部分,这也与电荷的光生和传输情况相一致,即光生激子分裂形成的电子空穴对在电场情况下快速分离成电子和空穴,而后电子和空穴分别由各自的空间通道所传输:电子沿着 PV 分子传输到 Al 电极,空穴则由 PAT12 分子传输到 ITO 电极.

图 5 是外部量子效率  $\eta_{\text{EQE}}$  与膜厚  $d$  及入射光波长  $\lambda$  的关系,其中图 5(a) 是  $\eta_{\text{EQE}}$  与膜厚  $d$  的关系,图 5(b) 是  $\eta_{\text{EQE}}$  与入射光波长  $\lambda$  的关系.这里我们选取的 PAT12 的厚度  $d = 60 \text{ nm}$ ,激子扩散长度  $L = 10 \text{ nm}$ .从图 5(a) 可以看出,薄膜厚度对外部量子效率  $\eta_{\text{EQE}}$  的影响与对光电流密度的影响基本一致,



都是随着薄膜厚度先增加至最大值而后逐渐降低.从 5 图(b) 可以看出,外部量子效率在入射光波长  $\lambda$  为 350 和 640 nm 处达到最大值,而在  $\lambda = 460 \text{ nm}$  处达到最小值,这与我们的实验结果<sup>[16]</sup> 是相同的.

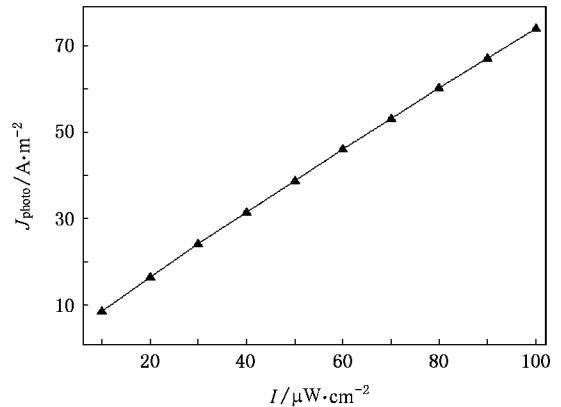


图 4 光电流密度  $J_{\text{photo}}$  与入射光强  $I$  的关系

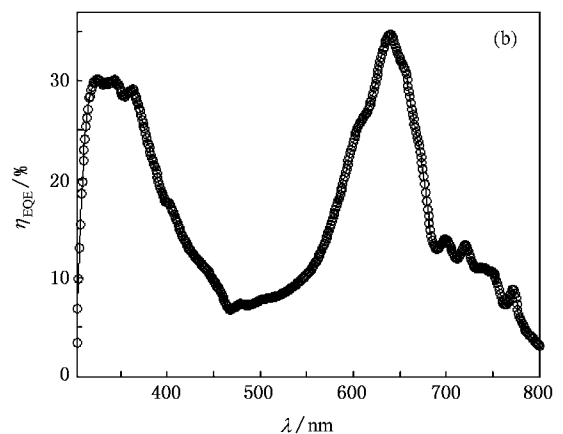


图 5 外部量子效率  $\eta_{\text{EQE}}$  与膜厚  $d$  及入射光波长  $\lambda$  的关系 (a)  $\eta_{\text{EQE}}$  与  $d$  的关系 (b)  $\eta_{\text{EQE}}$  与  $\lambda$  的关系

## 4. 结 论

本文利用非相干光吸收模型表述了聚合物光伏电池的多层介质结构.以典型的 D/A 型异质结光伏电池 ITO/PAT12/PV/Al 和所选用材料的各种参数为基础,利用光学原理和扩散理论,建立了非相干光吸收模型和激子传输模型,模拟了限制有机光伏效率的光吸收和激子扩散两个主要过程.分析了不同薄膜厚度和激子扩散长度对光电流、外部量子效率

的影响,旨在找出不同膜厚与光学吸收、转换效率之间的函数关系.为提高薄膜光子吸收效率、器件光电转换效率并制作高效光伏电池奠定了理论基础.从模拟分析可知,激子扩散长度的增加,器件的光电流值也会随之有较大的增加;对于一定的激活层薄膜材料,都存在一个最佳薄膜厚度使其光电流达到最大值.就本文中所采用的 PAT12 和 PV 而言,激子扩散长度为 20 nm 时,其最佳薄膜厚度约为 43 nm,所对应的最大光电流密度可达  $70 \text{ A/m}^2$ ,外部量子效率约为 16.3%.

- [ 1 ] Koster L J A , Smits E C P , Mihaiilechi V D , Blom P W M 2005 *Phys. Rev. B* **72** 085205
- [ 2 ] Ren J , Zheng J B , Zhao J L 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 2868 ( in Chinese ) [ 任 驹、郑建邦、赵建林 2007 物理学报 **56** 2868 ]
- [ 3 ] Feng W , Cao M , Wei W , Wu H C , Wan M X , Yoshino K 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1157 ( in Chinese ) [ 封 伟、曹 猛、韦 玮、吴洪才、万梅香、吉野胜美 2001 物理学报 **50** 1157 ]
- [ 4 ] Xue J G , Uchida S , Rand B P , Forrest S R 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 5757
- [ 5 ] Slaoui A , Collins R T 2007 *MRS Bull.* **32** 211
- [ 6 ] Tian R Y , Yang R Q , Peng J B , Cao Y 2005 *Chin. Phys.* **14** 1032
- [ 7 ] Hoppe H , Glatzel T , Niggemann M , Schwinger W , Schaeffler F , Hinsch A , Lux-Steiner M C , Sariciftci N S 2006 *Thin Solid Films* **511** 587
- [ 8 ] Martens T , D 'Haen J , Munters T , Beelen Z , Goris L , Manca J , D 'Olieslaeger M , Vanerzande D , De Schepper L , Andriessen R 2003 *Synthetic Metals* **138** 243
- [ 9 ] Feng W , Xu Y L , Yi W H , Zhou F , Wang X G , Katsumi Y 2003 *Chin. Phys.* **12** 426
- [ 10 ] Nakamura J , Murata K , Takahashi K 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 132105
- [ 11 ] Peumans P , Yakimov A , Forrest S R 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 3693
- [ 12 ] Breyer C , Vogel M , Mohr M , Johnev B 2006 *Phys. Stat. Sol. B* **243** 3176
- [ 13 ] Pettersson L A A , Roman L S , Inganas O 1999 *J. Appl. Phys.* **86** 487
- [ 14 ] Kannan B , Castelino K , Majumdar A 2003 *Nano Lett.* **3** 1729
- [ 15 ] Rand B P , Xue J G , Uchida S , Forrest S R 2005 *J. Appl. Phys.* **98** 124902
- [ 16 ] Feng W , Fujii A , Lee S , Yoshino K 2000 *J. Appl. Phys.* **88** 7120

## Simulation of physical properties of organic photovoltaic cell \*

Feng Wei<sup>†</sup> Gao Zhong-Kuo

( School of Materials Science and Engineering , Tianjin University , Tianjin 300072 , China )

( Received 6 July 2007 ; revised manuscript received 26 November 2007 )

### Abstract

We propose models of the incoherent optical absorption and exciton transport to simulate the processes of absorption and exciton diffusion in organic photovoltaic devices according to the optical principle and diffusion theory. The functional relation of optical absorption , and the power conversion efficiency versus the thickness of the film has been obtained. We demonstrate that the developed model can be useful for the modelling of the optical absorption and exciton separation in the optimization of devices of organic photovoltaic cells with high power conversion efficiency.

**Keywords :** organic photovoltaic cell , optical absorption , exciton diffusion , simulation

**PACC :** 7860 , 7865T , 7820 , 8220W

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant Nos. 60307001 , 50573057 ) and the Program for the New Century Excellent Talents in University of Ministry of Education , China ( Grant No. NCET-060232 ).

<sup>†</sup> E-mail : weifeng@tju.edu.cn