

# TiO<sub>2</sub> 光学间隔层增强聚合物太阳能电池 光吸收的分析\*

李国龙<sup>1)†</sup> 李进<sup>1)</sup> 甄红宇<sup>2)</sup>

1) (宁夏大学宁夏光伏材料重点实验室, 银川 750021)

2) (浙江大学现代光学仪器国家重点实验室, 杭州 310027)

(2012年3月5日收到; 2012年4月10日收到修改稿)

基于共轭聚合物给体材料聚 3-己基噻吩 (P3HT) 和富勒烯衍生物受体材料 (6, 6)-苯基-C61 (PCBM) 共混的体异质结构的聚合物太阳能电池因其空穴载流子迁移率低而限制了 P3HT : PCBM 功能层厚度, 从而影响了器件对入射光的吸收. 在聚合物功能层和反射电极间插入 TiO<sub>2</sub> 光学间隔层可以使器件内电场重新分布并改善器件的光吸收. 基于薄膜传递矩阵法计算了不同的 P3HT : PCBM 功能层厚度和 TiO<sub>2</sub> 插入层厚度的器件内光电场和光吸收. 理论分析证明: 器件结构为铟锡氧化物 (ITO) (100 nm)/聚 3, 4-乙撑二氧噻吩/聚苯乙烯磺酸盐 PEDOT : PSS (40 nm)/P3HT : PCBM/TiO<sub>2</sub>/LiF (1 nm)/Al (120 nm) 时, 插入 10 nm 厚的 TiO<sub>2</sub> 膜层可以使器件的聚合物功能层厚度在减薄 25 nm 的同时增加 16.3% 的光子吸收数, 并且不明显降低功能层的激子分离概率, 即功能层和 TiO<sub>2</sub> 光学间隔层厚度分别约为 75 和 10 nm 时的器件性能为宜, 此结果通过器件性能实验得以证实.

**关键词:** 光学间隔层, 传递矩阵法, 聚合物太阳能电池

**PACS:** 72.40.+w, 88.40.jr, 84.60.Jt

## 1 引言

聚合物太阳能电池因其柔性而易于制备、成本低廉、光学吸收波长的可调控性等优点<sup>[1-3]</sup>, 对于新能源的开发与利用具有重要意义和潜在价值. 从 2000 年开始, 世界范围内对聚合物太阳能电池的关注与研究极大地促进了其能量转换效率的提高, 并得到实际应用. 目前, 基于聚 3-己基噻吩 (P3HT) : (6, 6)-苯基-C61 (PCBM) 体系的体异质结聚合物太阳能电池仍是当前该领域内研究的热点<sup>[4,5]</sup>. 这种电池受限于功能层薄膜空穴载流子迁移率低的原因, 使得 P3HT : PCBM 功能层不能太厚<sup>[6,7]</sup>. 然而, 功能层太薄又会降低器件的光学吸收; 对于铟锡氧化物 (ITO) 电极-功能层-金属电极

结构的器件, 入射光和来自金属电极的反射光在器件内相互叠加, 产生了光学干涉<sup>[8,9]</sup>, 使金属电极附近的光强减为 0, 在靠近金属电极处形成了死区. 在死区内, 光生电荷载流子大量减少, 而在 ITO/聚 3, 4-乙撑二氧噻吩/聚苯乙烯磺酸盐 (PEDOT : PSS) 一侧的电子-空穴对增加, 这种“死区效应”非常不利于各自电极对分离电荷的收集<sup>[10,11]</sup>. 为了克服以上缺点, 不仅需要考虑到如何提高器件内电荷传输效率和增加功能层对光的吸收率, 同时也需要消除这种光学干涉造成的死区效应. 解决这一问题的有效方法之一是在阴极附近加入 n 型的光学间隔层, 改变器件内的电场分布, 以增加聚合物功能层的有效吸收<sup>[12,13]</sup>. 本文选择 TiO<sub>2</sub> 作为光学间隔层, 是因为 TiO<sub>2</sub> 作为电子受体和电子传输层材料已用于染料敏化太阳能电池、多层有机小分子太阳能电

\* 宁夏科技支撑项目资助的课题.

† E-mail: liglo@yahoo.cn

池以及聚合物太阳能电池中<sup>[14-17]</sup>, 并且对器件性能的提升非常有效.

本文基于多层膜模型的传递矩阵方法 (transfer matrix method, TMM) 计算了 TiO<sub>2</sub> 光学间隔层增强聚合物太阳能电池内电场和光学吸收<sup>[18,19]</sup>. 比较了加入 10 nm 厚 TiO<sub>2</sub> 光学间隔层的器件内光强分布与不加光学间隔层的器件内光强分布, 又得到了 0, 10, 20, 30, 40 nm 的 TiO<sub>2</sub> 光学间隔层厚度下, 不同功能层厚度的归一化吸收光子数. 最后, 采用溶胶-凝胶法制备了不同厚度的 TiO<sub>2</sub> 并制备了聚合物太阳能电池器件<sup>[11,20]</sup>. 在暗态以及光照为 100 mW/cm<sup>2</sup>, 并且光谱符合 AM1.5 G 的标准太阳光模拟器照射条件下, 获得了器件的电流密度-电压曲线.

## 2 器件的光学与电学模型

聚合物太阳能电池通常是沉积在玻璃或塑料基板上的多层薄膜器件. 当太阳光从空气垂直入射到器件内时, 由麦克斯韦方程可以推导出描述器件内光电场强度的多层薄膜传递矩阵. 这里  $k$  层的薄膜器件的传递矩阵为<sup>[19]</sup>

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \left\{ \prod_{j=1}^K \begin{bmatrix} \cos \delta_j & \frac{i}{\eta_j} \sin \delta_j \\ i\eta_j \sin \delta_j & \cos \delta_j \end{bmatrix} \right\} \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_s \end{bmatrix}, \quad (1)$$

其中,  $\eta_j = n_j - ik_j$ ,  $\eta_s$  分别是薄膜和基板的复折射率,  $\delta = 2\pi n_j d_j / \lambda$  是薄膜的相位厚度,  $d$  是薄膜的物理厚度. 器件的反射率由 (2) 式计算得到:

$$R = \frac{|n_0 B - C|^2}{|n_0 B + C|^2}, \quad (2)$$

其中,  $n_0$  是空气的折射率. 对于反射型器件, 器件内的光子吸收数为

$$G_{\text{opt}} = T \cdot S, \quad (3)$$

其中,  $T$  是符合美国材料试验协会 (ASTM) G173-03 的标准太阳光谱的入射光子流,  $S = 1 - R$  为光谱吸收率.

根据 Mihailetchi 等的理论<sup>[21]</sup>, 只有一部分激子变成了自由电荷载流子, 这一比率决定了器件的内量子效率, 并依赖于器件电场  $E$  和外界温度  $T$  的变化. Onsager-Braun 模型描述了这一过程<sup>[22]</sup>:

$$G = g_{\text{eff}} G_{\text{opt}} P(T, E)$$

$$- \frac{e(\mu_n + \mu_p)}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} (np - n_i^2)(1 - P(T, E)), \quad (4)$$

其中,  $G$  是产生的自由电荷载流子数,  $g_{\text{eff}}$  是吸收光子数转化为激子数的比例,  $G_{\text{opt}}$  是器件功能层光子吸收数,  $\mu_{n(p)}$  和  $n(p)$  分别是电子 (空穴) 电荷迁移率和载流子密度,  $\varepsilon_0$  和  $\varepsilon_r$  分别是真空介电常数和相对介电常数,  $G_{\text{opt}}$ ,  $n$ ,  $p$  都是位置  $x$  的函数,  $P(T, E)$  为器件内功能层的激子分离概率<sup>[22]</sup>:

$$P(T, E) = \frac{4}{\sqrt{\pi} a^3} \int_0^\infty \frac{k_D(x, T, E)}{k_D(x, T, E) + k_F(T)} \times x^2 e^{-\frac{x^2}{a^2}} dx, \quad (5)$$

其中,  $a$  是激子分离距,  $k_F$  和  $k_D$  分别为激子回到基态和激子分离成自由电荷载流子的数量.

## 3 实验

### 3.1 TiO<sub>2</sub> 溶胶的制备

实验中, 采用了溶胶-凝胶法 (sol-gel) 制备了 TiO<sub>2</sub> 膜层. 使用钛酸四正丁酯 (Ti (OC<sub>4</sub>H<sub>9</sub>)<sub>4</sub>, 国药集团, 98.0%, 10 mL) 作为 TiO<sub>2</sub> 前驱体与乙二醇甲醚 (CH<sub>3</sub>OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>OH, 上海化学试剂, 50 mL) 及乙醇胺 (H<sub>2</sub>NCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>OH, 国药集团, 5 mL) 混合盛入三口烧瓶里, 容器通入氩气并将容器放在硅油槽内使用磁力搅拌, 使混合溶液在 80 °C 下加热 2 h 后再在 120 °C 加热 1 h, 两步加热过程重复进行一次后, 将 TiO<sub>2</sub> 溶液保存在异丙醇内备用.

### 3.2 聚合物太阳能电池的制备

分别用丙酮、去离子水、乙醇各超声清洗 ITO 玻璃基板 (深圳南玻, ITO 厚约 100 nm) 15 min 后, 用氮气吹干; 经等离子体处理后再次清洁基片表面, 用一次性针管加 0.45 μm 水性滤头滴涂后, 用匀胶机 (KW-4 型, 中国科学院微电子中心) 对 PEDOT : PSS (Baytron AI 4083 型) 高速旋涂成膜, 在 100 °C 下烘烤 1 h, 厚度约为 40 nm; P3HT (Nichem, 分子量为 18000) 和 PCBM (FEM, 纯度为 99%), 质量配比为 1.2 : 1, 溶于 1 mL chlorobenzene (Alfa Aesar, 纯度为 99%), 常温搅拌 12 h 后, 在手套箱内使用一次性针管加 0.45 μm 有机滤头对溶液过滤后均匀滴涂在 PEDOT : PSS 膜层上, 以一定转速用匀胶机对其旋涂成膜; 各膜层厚度分

别由台阶仪 (Dectak3 型) 测定; 将保存在异丙醇内的  $\text{TiO}_2$  前驱体溶液以一定转速旋涂在 P3HT : PCBM 膜层上, 转移至手套箱外经过水解反应形成  $\text{TiO}_2$  薄膜, 膜层厚度由单光谱反射率反演法确定 [23], 器件再次转移至手套箱, 在热板上以  $150^\circ\text{C}$  加热退火 10 min, 使聚合物功能层与  $\text{TiO}_2$  薄

膜结晶; 在  $6 \times 10^{-6}$  Torr (1 Torr = 133.322 Pa) 真空状态下, 先后热蒸镀约 1 nm 的 LiF 和 120 nm 的 Al. 利用光学吸收和循环伏安法 (CV) 确定  $\text{TiO}_2$  的最高已占轨道能级和最低未占轨道能级 [11], 该器件结构和能级结构排列如图 1 所示.

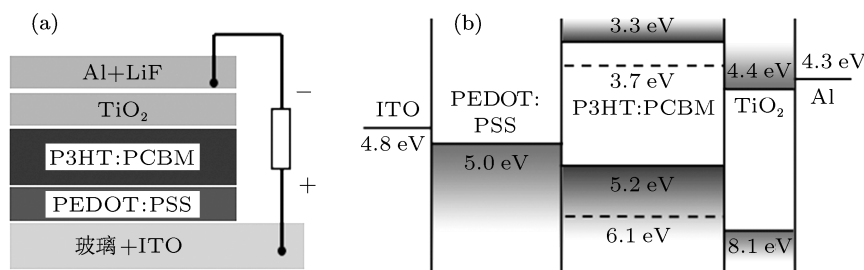


图 1 (a) 加入光学间隔层  $\text{TiO}_2$  的器件结构; (b) 器件的能级排列

由图 1(a), 制备的器件结构为: ITO (100 nm)/PEDOT : PSS (40 nm)/P3HT : PCBM (可变)/ $\text{TiO}_2$ (可变)/LiF (1 nm)/ Al (120 nm); 由图 1(b) 可知,  $\text{TiO}_2$  的导带能级约为 4.4 eV, 价带能级约为 8.1 eV, 带隙较宽. 导带与 PCBM 的 LUMO 能级相差 0.7 eV, 与 Al 的功函数接近, 价带与 PCBM 能级相差 2 eV, 可以与 P3HT : PCBM 和 Al 膜层形成良好的欧姆接触.

在图 2 中, 使用 X 射线衍射仪 (XRD, X'Pert PRO, Netherlands) 测试了由  $\text{TiO}_2$  前驱体溶液制备的  $\text{TiO}_2$  薄膜的 XRD 图谱. 可以发现: 在退火温度远低于结晶温度 ( $T_C \geq 450^\circ\text{C}$ ) 时,  $\text{TiO}_2$  薄膜已经形成了很好的锐钛矿结构, 并出现 (101) 面择优取向. 晶粒大小与衍射线宽化程度的关系式为 [24]

$$D = K\lambda/\beta \cos \theta, \quad (6)$$

其中  $D$  定义为垂直于反射晶面 ( $hkl$ ) 方向的晶粒平均尺度, 设有  $m$  个晶面, 晶面间距为  $d$ , 则  $D = md$ ;  $\theta$  为掠射角;  $\lambda$  为 X 射线波长;  $\beta$  为衍射线的本征增宽度;  $K$  为 Scherrer 常数. 根据 XRD 图谱, 并由 (6) 式计算得到  $\text{TiO}_2$  的晶粒大小约为 8 nm; 由“瞬态电流-时间的关系实验曲线”即可确定渡越时间  $t$ ; 再根据下列表达式便可求出迁移率  $\mu$  值 [25]:

$$\mu = d/Vt, \quad (7)$$

式中,  $d$  为样品厚度,  $V$  为电压,  $t$  为渡越时间, 皆为实验可测量的物理量. 基于该方法测量得到的  $\text{TiO}_2$

薄膜的电子迁移率约为  $1.7 \times 10^{-4} \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ . 可见, 这种  $\text{TiO}_2$  薄膜也是很好的电子传输层材料.

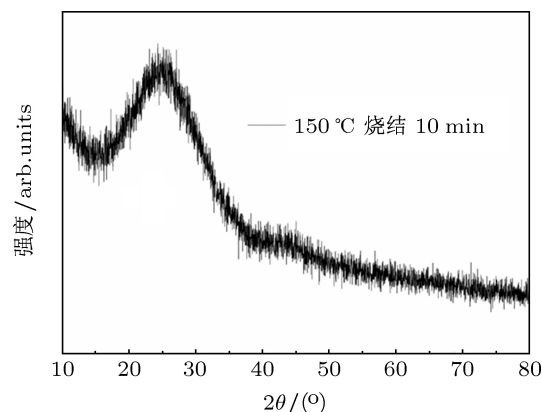


图 2  $\text{TiO}_2$  薄膜的 XRD 图谱

## 4 仿真与实验结果分析

根据 TMM, 计算了其他膜层厚度不变的情况下, 当聚合物功能层 P3HT : PCBM 厚度为 80 nm, 入射光波长分别为 400, 500 和 600 nm 时, 在加入和不加 10 nm 厚  $\text{TiO}_2$  的情况下器件内的光强  $|E(x)|^2$  分布如图 3 所示.

对比图 3(a) 和 (b) 后发现, 插入  $\text{TiO}_2$  后, 器件内的光电场分布发生了变化——三种波长的入射光在器件内的光强峰值向聚合物功能层中间发生偏移; 阴极附近功能层区域的光强明显得到增强; 在波长较短时 (400 和 500 nm), 光强峰值也没有明

显减小. 由此可以推知, 加入 10 nm 厚的  $\text{TiO}_2$  光学间隔层后, 聚合物功能层对较短波长的可见光的吸收得到了加强. 为了进一步优化这种器件结构的光学吸收性能, 根据 TMM 计算了在不同间隔层厚度、不同功能层厚度下的归一化吸收光子数, 如图 4 所示.

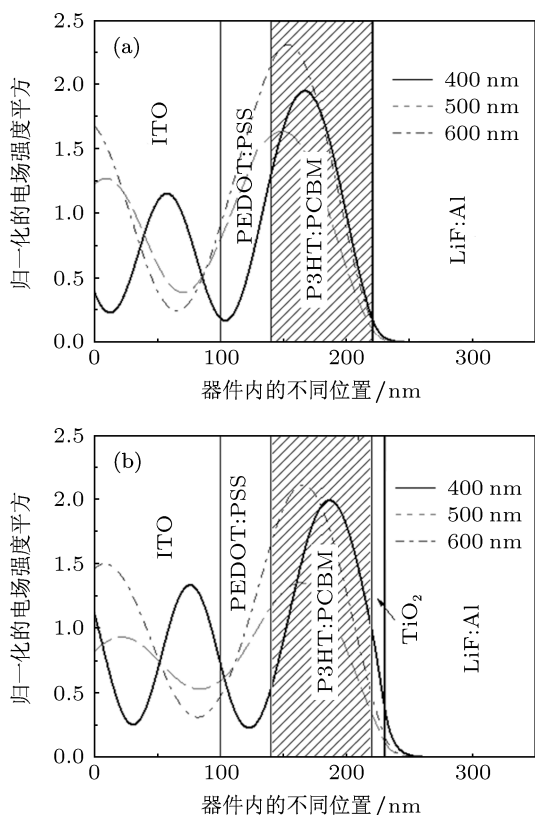


图 3 (a) 在不同入射光波长下功能层厚度为 80 nm 的器件内电场 (a) 无间隔层; (b)  $\text{TiO}_2$  间隔层厚度为 10 nm

图 4 中计算了聚合物功能层厚度从 0 到 250 nm 变化时,  $\text{TiO}_2$  厚度分别为 0, 10, 20, 30, 40 nm 的器件的归一化吸收光子数. 可以发现, 随着功能层厚度增加, 吸收光子数增加; 膜厚增加到一定值时, 光子吸收数达到极大; 继续增加厚度时, 光子吸收数出现了振荡并趋于饱和, 这源于光学干涉效应引起的光电场  $E(x)$  的周期性分布, 继而影响了器件对光子的吸收; 无光学间隔层器件的最佳光子吸收厚度为 100 nm 左右; 当  $\text{TiO}_2$  为 10 nm 时, 器件光子吸收的最佳厚度为 75 nm 左右, 与相同功能层厚度的无光学间隔层器件相比, 光子吸收数增加了 16.3%; 当  $\text{TiO}_2$  分别为 20, 30, 40 nm 时, 最佳厚度分别为 55, 35, 20 nm 左右, 光子第一吸收峰值 (即功能层薄膜由薄变厚时薄膜的光子吸收最大值) 由 1.51 下降到 0.29. 可见, 由于加入了  $\text{TiO}_2$ , 最

佳光子吸收的功能层厚度变薄, 由无光学间隔层器件的 100 nm 减小到了  $\text{TiO}_2$  厚度为 10 nm 时器件的 75 nm 左右, 此时器件功能层最大光子吸收数几乎没有减小. 根据 (3)—(5) 式对器件内的光电转换过程的描述可知, 并非所有的吸收光子被转化为自由电荷载流子.

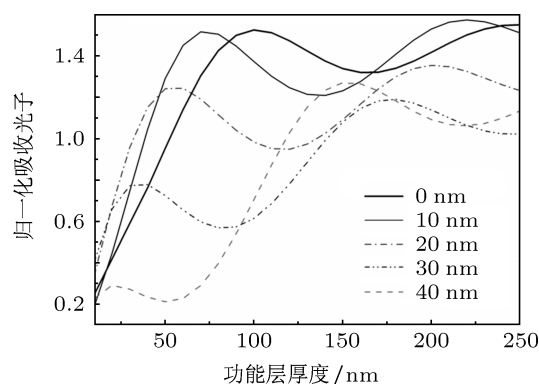


图 4 不同光学间隔层厚度下功能层厚度与归一化吸收光子数的关系

表 1 各特征参量具体值 [26]

电子迁移率 $\mu_e/\text{m}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	$5 \times 10^{-7}$
空穴迁移率 $\mu_p/\text{m}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	$1 \times 10^{-8}$
介电常数 $\epsilon_r/\text{F} \cdot \text{m}^{-1}$	3.5
激子分离距离 $a/\text{nm}$	1.285
内电场 $V_{oc}/\text{V}$	0.6
激子返回基态数 $k_F/\text{s}^{-1}$	$10^4-10^8$

这里, 假定了吸收光子全部转化为激子, 根据其他文献给出的如表 1 所示的特征参量值以及 (3)—(5) 式, 计算了不同的  $k_F$  (激子返回到基态的衰变概率) 在不同 P3HT:PCBM 厚度情况下的激子分离概率  $P(T, E)$  随膜层厚度的变化, 如图 5 所示.

在温度和外电场一定的情况下, 功能层 P3HT:PCBM 变厚时, 激子分离率呈下降趋势, 且  $k_F$  越大, 即激子回到基态的概率越大, 分离概率越低, 随功能层厚度变化越明显. 如图 5 所示, 当激子返回基态数  $k_F$  为  $10^4, 10^5, 10^6, 10^7$  时, 激子分离概率分别在功能层厚度为 160, 150, 100 和 70 nm 处下降最迅速, 其中  $k_F = 10^6 \text{ s}^{-1}$  为在常温下测得 [26]. 由此可知, 聚合物功能层变厚时, 虽然吸收光子数会有增加, 但是器件的电学性能会变差. 为了得到好的器件性能, 功能层厚度不应超过激子分离概率下降最快处的厚度. 通过在器件内加入 10 nm 厚的光

学间隔层  $\text{TiO}_2$ , 器件的功能层光子吸收最佳厚度约为 75 nm, 与  $k_F$  为  $10^6$  时的激子分离概率下降最快处所对应的功能层厚度更接近. 由此可见, 加入 10 nm 厚的光学间隔层  $\text{TiO}_2$  引起的器件内光电场的重新分布使功能层光子吸收增加, 同时也有利于增加器件功能层激子分离的概率, 提高电极收集空穴和电子电荷载流子的效率.

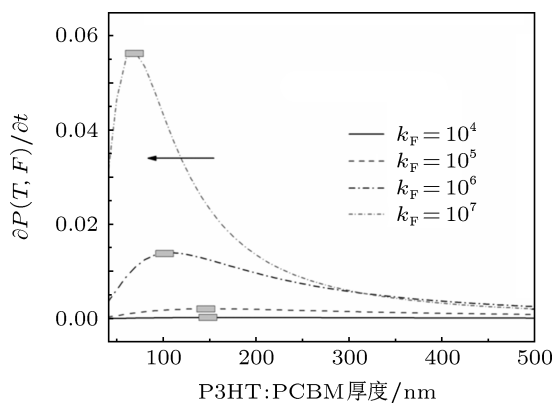


图5 不同功能层厚度下的激子分离概率随厚度变化率的变化

这里, 制备了三种不同结构的器件. 器件 A 的结构为 ITO (100 nm)/ PEDOT : PSS (40 nm)/ P3HT : PCBM (75 nm)/  $\text{TiO}_2$  (10 nm)/ LiF (1 nm)/ Al (120 nm); 器件 B 的结构为 ITO (100 nm)/ PEDOT : PSS (40 nm)/ P3HT : PCBM (75 nm)/ LiF (1 nm)/ Al (120 nm); 器件 C 的结构为 ITO (100 nm)/ PEDOT : PSS (40 nm)/ P3HT : PCBM (75 nm)/  $\text{TiO}_2$  (20 nm)/ LiF (1 nm)/ Al (120 nm). 在太阳光模拟器 (Oriol 94023 型, NEWPORT)  $100 \text{ mW} \cdot \text{cm}^{-2}$  的光照条件下, 用 Agilent 4155C 半导体参数分析仪获得了三种器件的光电流密度-外加电压曲线 ( $J$ - $V$ ), 如图 6 所示.

在图 6 中, 器件 A, B 和 C 的电压均为 0.535 V 左右, 短路电流密度分别为 11.6, 9.9 和  $7.5 \text{ mA/cm}^2$ , 填充因子分别为 69.1%, 48.5% 和 47.1%. 由此可见: 当 P3HT : PCBM 的厚度固定为 75 nm 时, 器件内插

入 10 nm 厚的  $\text{TiO}_2$  薄膜确实增加了器件的短路电流密度和填充因子; 然而, 当插入的  $\text{TiO}_2$  薄膜厚度为 20 nm 时, 器件的短路电流密度和填充因子同时下降了. 这说明合适的  $\text{TiO}_2$  薄膜厚度不但增强了器件内的光吸收, 而且也能够有效地降低器件内的串联电阻.

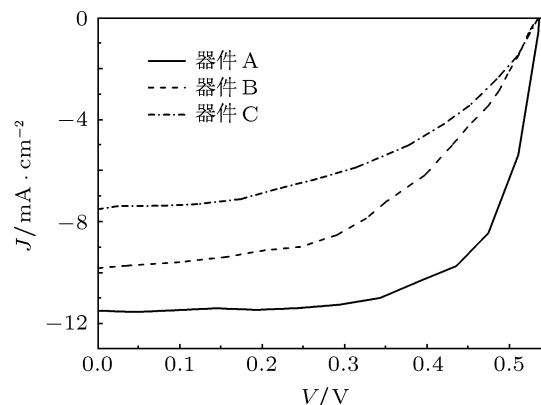


图6 不同  $\text{TiO}_2$  厚度的器件  $J$ - $V$  曲线

## 5 结论

用 TMM 法计算了  $\text{TiO}_2$  光学间隔层增强聚合物太阳能电池内光电场和光学吸收, 得到了入射光波长分别为 400, 500 和 600 nm 时, 在加入 10 nm 厚  $\text{TiO}_2$  光学间隔层的情况下的器件内光强  $|E(x)|^2$  分布, 并与不加光学间隔层的器件内光强分布进行了比较. 发现插入  $\text{TiO}_2$  后, 三种波长的入射光在器件内的光强峰值向聚合物功能层中间发生偏移; 阴极附近功能层区域的光强明显得到增强; 得到了 0, 10, 20, 30, 40 nm 间隔层厚度下不同功能层厚度的归一化吸收光子数以及不同的功能层厚度下的激子分离概率随厚度的变化率, 发现在加入了  $\text{TiO}_2$  后, 最佳光子吸收的功能层厚度变薄, 即当  $\text{TiO}_2$  为 10 nm 时, 最佳厚度为 75 nm 左右. 实验结果也证明了这一点.

- [1] Li G, Shrotriya V, Huang J S, Yao Y, Moriarty T, Emery K, Yang Y 2005 *Nat. Mater.* **4** 864
- [2] Park S H, Roy A, Beaupre S, Cho S, Coates N, Moon J S, Moses D, Leclerc M, Lee K, Heeger A J 2009 *Nat. Photonics* **3** 297
- [3] Kim J Y, Lee K, Coates N E, Daniel M, Nguyen T Q, Mark D, Heeger A J 2007 *Science* **317** 222

- [4] Chen D, Atsuhiko N, Wei D, Dennis N, Thomas P R 2011 *Nano Lett.* **11** 561
- [5] Oskar A, Christoph L, Siegfried B 2011 *Phys. Rev. B* **84** 085208
- [6] Melzer C, Koop E, Mihailitchi V D, Blom P W M 2004 *Adv. Funct. Mater.* **14** 865
- [7] Monestier F, Simon J J, Torchio P, Escoubas L, Flory F, Bailly S,

- Bettignies R, Stephane G, Defranoux C 2007 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **91** 405
- [8] Pettersson L A A, Roman L S, Olle I 1999 *J. Appl. Phys.* **86** 487
- [9] Hao Z H, Hu Z Y, Zhang J J, Hao Q Y, Zhao Y 2010 *Acta Phys. Sin.* **60** 117106 (in Chinese) [郝志红, 胡子阳, 张建军, 郝秋艳, 赵颖 2010 物理学报 **60** 117106]
- [10] Gilot J, Barbu I, Wienk M M, Janssen R A J 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 113520
- [11] Snaith H J, Greenham N C, Friend R H 2004 *Adv. Mater.* **16** 1640
- [12] Hänsel H, Zettl H, Krausch G, Kisselev R, Thelakkat M, Schmidt H W 2003 *Adv. Mater.* **15** 2056
- [13] Hayakawa A, Yoshikawa O, Fujieda T, Uehara K, Yoshikawa S 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 163517
- [14] Lee K M, Hsu C Y, Chiu W H, Tsui M C, Tung Y L, Tsai S Y, Ho K C 2009 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **93** 2003
- [15] Beek W J E, Wienk M M, Janssen R A J 2004 *Adv. Mater.* **16** 1009
- [16] Long Y B 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 193301
- [17] Schulze K, Uhrich C, Schueppel R, Leo K, Pfeiffer M, Brier E, Reinhold E, Baeuerle P 2006 *Adv. Mater.* **18** 2872
- [18] Andersson B V, Huang D M, Moulé A J, Olle I 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 043302
- [19] Macleod H A 2001 *Thin-Film Optical Filters* (3rd Ed.) (Bristol: Institute of Physics Publishing)
- [20] Meng X J, Cheng J G, Li B, Tang J, Ye H J, Guo S L, Chu J H 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 811 (in Chinese) [孟祥建, 程建功, 李标, 唐军, 叶红娟, 郭少令, 褚君浩 2000 物理学报 **49** 811]
- [21] Mihailetchi V D, Koster L J A, Hummelen J C, Blom P W M 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 216601
- [22] Braun C L 1984 *J. Chem. Phys.* **80** 4157
- [23] Zhu D X, Shen W D, Ye H, Liu X, Zhen H Y 2008 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **41** 235104
- [24] Cheng H M, Ma J M, Zhao Z G, Qi L M 1995 *Chem. Mater.* **7** 663
- [25] Kim J Y, Kim S H, Lee H H, Lee K, Ma W L, Gong X, Heeger A J 2006 *Adv. Mater.* **18** 572
- [26] Koster L J A, Smits E C P, Mihailetchi V D, Blom P W M 2005 *Phys. Rev. B* **72** 085205

# Analysis of the light absorption enhancement in polymer solar cell with TiO<sub>2</sub> optical spacer\*

Li Guo-Long<sup>1)†</sup> Li Jin<sup>1)</sup> Zhen Hong-Yu<sup>2)</sup>

1) (Ningxia Key Laboratory of PV Materials, Ningxia University, Yinchuan 750021, China)

2) (State Key Laboratory of Modern Optical Instrumentation, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China)

(Received 5 March 2012; revised manuscript received 10 April 2012)

## Abstract

The thickness of the active layer is limited by its low carrier mobility in the polymer solar cell composed of the blend bulk-heterojunction formed by conjugated polymer as donor material and fullerene as acceptor material, which can affect the light absorption in the polymer solar cell. TiO<sub>2</sub> inserted into polymer solar cell as optical spacer can redistribute the electromagnetic field inside the device and enhance the light absorption of it. In this paper, light intensity and absorption inside the devices with different thicknesses of P3HT : PCBM layer and TiO<sub>2</sub> layer are calculated based on transfer matrix method. Theoretical analysis shows that inserting 10 nm TiO<sub>2</sub> into the device can increase 16.3% light absorption, simultaneously thinning the active layer by 25 nm and the thickness of active layer will not apparently reduce the dissociation rate of the excitons. With the device structure of ITO (100 nm) /PEDOT : PSS (40 nm) /P3HT : PCBM /TiO<sub>2</sub> /LiF (1 nm)/Al (120 nm), the optimal thicknesses of the active layer and TiO<sub>2</sub> are 75 nm and 10 nm respectively, which is confirmed by the experimental results from the devices with three different structures.

**Keywords:** optical spacer, transfer matrix method, polymer solar cell

**PACS:** 72.40.+w, 88.40.jr, 84.60.Jt

---

\* Project supported by the Science and Technology Project of Ningxia, China.

† E-mail: liglo@yahoo.cn