

基于微腔-抗反射谐振杂化模式的吸收增强型有机太阳能电池的理论研究

赵泽宇 刘晋侨 李爱武 牛立刚 徐颖

Theoretical study of microcavity-antireflection resonance hybrid modes enhanced absorption of organic solar cells

Zhao Ze-Yu Liu Jin-Qiao Li Ai-Wu Niu Li-Gang Xu Ying

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 65, 248801 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.248801

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.248801>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I24>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

三元 P3HT:PTB7-Th:PCBM 聚合物太阳能电池性能的研究

[Mechanism of ternary polymer solar cells based on P3HT: PTB7-Th: PCBM](#)

物理学报.2016, 65(7): 078801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.078801>

基于 PTB7,Bis-PC<sub>70</sub>BM,PC<sub>70</sub>BM 的高效率有机三元太阳能电池

[Efficient organic ternary solar cells based on PTB7 and PC<sub>70</sub>BM with Bis-PC<sub>70</sub>BM](#)

物理学报.2016, 65(2): 028801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.028801>

PTCBI 作为阴极修饰层对 Rubrene/C<sub>70</sub> 器件性能的影响

[Influence of PTCBI as cathode modification on the performances of Rubrene/C<sub>70</sub> based organic solar cells](#)

物理学报.2015, 64(20): 208801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.208801>

氧化锌掺铝绒面薄膜在有机光伏电池中的应用

[ZnO:Al textured films for improved performance in organic photovoltaics](#)

物理学报.2015, 64(17): 178801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.178801>

多温度阶梯退火对有机聚合物太阳能电池器件性能的影响

[Effect of multiple temperature-step annealing on the performances of polymer solar cells](#)

物理学报.2014, 63(4): 048801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.048801>

# 基于微腔-抗反射谐振杂化模式的吸收增强型有机太阳能电池的理论研究\*

赵泽宇<sup>1)2)</sup> 刘晋侨<sup>3)</sup> 李爱武<sup>1)</sup> 牛立刚<sup>1)</sup> 徐颖<sup>1)†</sup>

1) (吉林大学电子科学与工程学院, 集成光电子学国家重点联合实验室, 长春 130012)

2) (中国科学院光电技术研究所, 微细加工光学技术国家重点实验室, 成都 610209)

3) (西安交通大学机械工程学院, 西安 710049)

(2016年5月18日收到; 2016年8月29日收到修改稿)

有机太阳能电池中的微腔模式可以在谐振波长附近增强光与物质的相互作用, 提高有源层的光吸收, 但是其内禀的窄带宽特性限制了器件的宽频谱吸收性能. 本文提出一种模式杂化机制, 通过在器件外部引入盖层, 激发盖层内支持的抗反射谐振模式, 使其与器件内在的微腔模式发生耦合作用, 形成两个新的杂化模式. 杂化模式可以拓宽模式谐振带宽, 有利于增强太阳能电池的宽频谱光吸收. 理论计算表明, 通过设计杂化模式的谐振位置, 基于模式杂化机制的平板器件的最优化总吸收率相比传统的微腔器件的最优化性能提高了37%, 并同样优越于广泛研究的基于表面等离激元的光栅机制, 这证明提出的模式杂化机制是一种简单高效的光束束缚机制.

**关键词:** 有机太阳能电池, 微腔模式, 抗反射谐振态, 杂化模式

**PACS:** 88.40.jr, 88.40.H-, 42.50.Pq, 42.25.Bs

**DOI:** 10.7498/aps.65.248801

## 1 引言

基于小分子和聚合物的有机太阳能电池因其成本低、功耗低、制作工艺简单、质量轻和可实现柔性等优点获得了广泛的关注与研究<sup>[1-3]</sup>, 在可持续发展的绿色环保能源领域显示了越来越重要的地位. 有机太阳能电池的诸多性能指标中, 最重要的指标是器件效率, 提高效率对于其大规模产业化应用至关重要. 器件工作原理是光电转换过程, 因此除了优化器件的电学性能, 例如研发新的有源层材料和改善电极性能<sup>[4,5]</sup>等, 通过光学设计提高器件的光吸收性能也尤为重要<sup>[6-9]</sup>. 在有机太阳能电池的设计中, 通常采用金属作为半透明电极, 这是由于金属成本低、蒸镀工艺简单. 在这样的器件结构中, 双电极之间会存在一个微腔模式<sup>[10-12]</sup>, 其

谐振波长在500—600 nm(由腔长和材料折射率决定), 与有机太阳能电池的有源层高吸收区域有着非常好的符合. 在微腔谐振波长附近, 光与物质的相互作用会大大增强, 这有助于提高器件的光吸收性能, 进而能够提高器件效率. 然而, 微腔模式本身的带宽很窄, 而太阳能电池需要宽频谱的光吸收. 研究者们提出了一些办法来解决这一问题, 例如引入盖层来拓宽微腔模式的带宽<sup>[10]</sup>或设计超薄电极<sup>[11,12]</sup>. 尽管这些设计避免了微腔模式窄带宽带来的不利因素, 但是也无法充分利用微腔模式增强光吸收的优点.

本文提出一种模式杂化机制, 用来解决微腔模式窄带宽的缺点. 在传统的微腔器件外部, 引入高折射率的盖层, 其内部支持抗反射谐振态<sup>[13-15]</sup>, 在谐振波长附近可以提高结构的透射率, 增强入射光与器件的相互作用. 引入的抗反射谐振态与器

\* 国家自然科学基金(批准号: 61378053)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: xuying1969@hotmail.com

件内在的微腔模式会发生耦合, 激发起两个新的杂化模式, 其谐振波长可以通过调节盖层和微腔长度来调控. 相比单模式, 杂化模式具有宽的谐振带宽, 因此有利于满足太阳能电池的宽频谱光吸收需求. 本文详细分析了模式杂化机制的优越性, 并将其与传统的微腔模式机制和基于表面等离激元的光栅机制做比较, 进而指出模式杂化机制是一种简单高效的光束缚机制.

## 2 研究结果与讨论

### 2.1 模式杂化机制

图 1 所示为本文研究的几种器件结构, 是基于 PCDTBT:PC<sub>70</sub>BM 体系的有机聚合物太阳能电池 [4,11], 其有源层厚度为 55 nm, 阴极和阳极材料均为金属 Ag, 阳极修饰层 MoO<sub>3</sub> 的厚度为  $X$ . 器件 MC (microcavity) 是传统的微腔器件, 在其阴极上

涂覆厚度为  $Y$  的 ZnS 薄膜盖层, 构成我们设计的器件 AR-MC (antireflection-microcavity). 此外, 我们在计算上考虑一种虚拟器件 AR, 其结构与器件 AR-MC 类似, 只是去掉了阳极, 考虑该种器件可以更好地分析抗反射谐振态的性质.

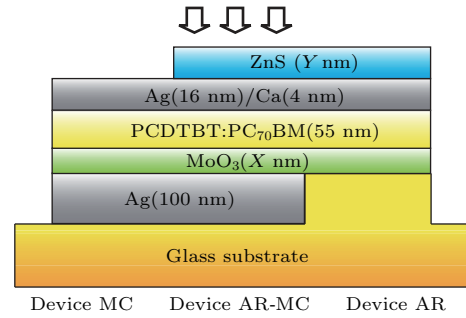


图 1 (网刊彩色) 本文研究的三种有机太阳能电池的结构示意图

Fig. 1. (color online) Schematic of the studied organic solar cells in this work.

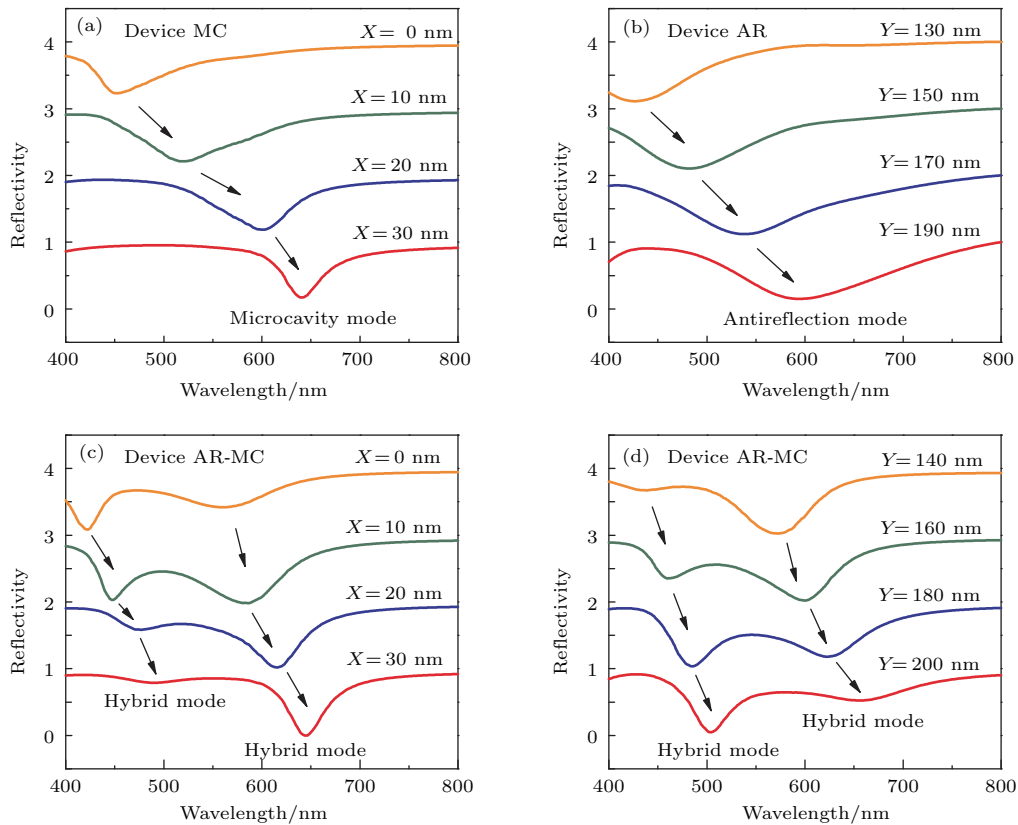


图 2 (a) 器件 MC 在正入射光下的反射谱随 MoO<sub>3</sub> 厚度  $X$  的变化; (b) 器件 AR 在正入射光下的反射谱随 ZnS 厚度  $Y$  的变化; 器件 AR-MC 在正入射光下的反射谱随 (c) MoO<sub>3</sub> 厚度和 (d) ZnS 厚度  $Y$  的变化, 在 (c) 和 (d) 的计算中, 分别固定参数  $Y = 160$  nm 和  $X = 15$  nm

Fig. 2. (a) Reflectivity spectra of device MC under normal incidence for different thicknesses of MoO<sub>3</sub>; (b) reflectivity spectra of device AR under normal incidence for different thicknesses of ZnS; reflectivity spectra of device AR-MC under normal incidence for different thicknesses of (c) MoO<sub>3</sub> and (d) ZnS. In the calculation of (c) and (d), we have fixed parameters of  $Y = 160$  nm and  $X = 15$  nm, respectively.

我们首先研究MoO<sub>3</sub>和ZnS的厚度对器件中的光学模式的调控作用. 图2为采用时域有限差分(FDTD)法<sup>[16,17]</sup>计算的几种器件在正入射光下的反射谱, 材料折射率参数选自文献<sup>[11, 18]</sup>. 在计算中, 我们忽略有源层的消光系数, 这样可以更清晰地观察模式的性质. 我们发现, 在器件MC中, 微腔模式的谐振波长受到MoO<sub>3</sub>的厚度 $X$ 的影响, 随着 $X$ 的增大, 谐振波长红移, 如图2(a)所示. 类似地, 器件AR中支持的抗反射谐振态的谐振波长受到盖层厚度的影响, 随着ZnS厚度的增大, 谐振波长红移, 如图2(b)所示. 因此, 在器件AR-MC中, 微腔模式和抗反射谐振态会同时被支持, 因此出现两个谐振峰, 如图2(c)和图2(d)所示, 这里分别计算了器件AR-MC的反射谱随MoO<sub>3</sub>和ZnS的厚度的变化. 可以看到, 随着 $X$ 和 $Y$ 的增大, 两个谐振峰均发生红移, 说明这两个模式同时具有微腔模式和抗反射谐振态的性质, 是二者耦合而形成的杂化模式. 为了更好地说明模式杂化的过程, 图3展示了器件AR-MC的反射谱随MoO<sub>3</sub>厚度 $X$ 的色散关系, 可以看到两处黄色区域, 代表形成了两个杂化模式. 在图3中, 同样给出了器件MC中微腔模式和器件AR中抗反射谐振态的色散, 由两条白色虚线表示. 可以看到, 这两个模式在色散曲线上有交叉(见白色虚线), 进而发生耦合, 呈现出

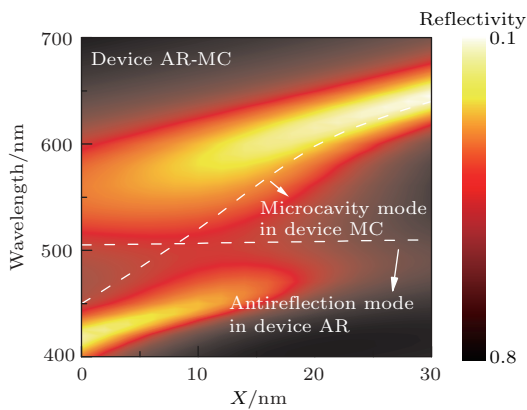


图3 (网刊彩色) 器件AR-MC在正入射光下的反射谱随MoO<sub>3</sub>厚度 $X$ 变化的色散图, 其中, 计算时固定ZnS厚度 $Y = 160$  nm, 图中两条白色虚线分别表示器件MC中微腔模式和器件AR中抗反射谐振态的色散

Fig. 3. (color online) Reflectivity dispersion diagram of device AR-MC under normal incidence as a function of MoO<sub>3</sub> thickness  $X$ , where the two white dashed lines represent the dispersion of the microcavity resonance in Device MC and antireflection resonance in Device AR.

器件AR-MC中的反交叉色散性质<sup>[19–23]</sup>, 类似于光子与激子强耦合出现的拉比劈裂现象.

## 2.2 平板器件的性能研究

从以上的计算可以认识到, 我们设计的器件AR-MC中可以同时支持两个光学杂化态, 相比于只具有单模式的传统器件MC, 这有利于拓宽谐振模式的带宽, 对于需要宽频谱吸收的太阳能电池具有非常重要的意义. 此外, 由于我们可以通过调节MoO<sub>3</sub>和ZnS的厚度来调控谐振峰的位置, 因此可以期待通过调谐杂化态共振位置与有源层高吸收区域符合来获得增强有机太阳能电池光吸收的效果.

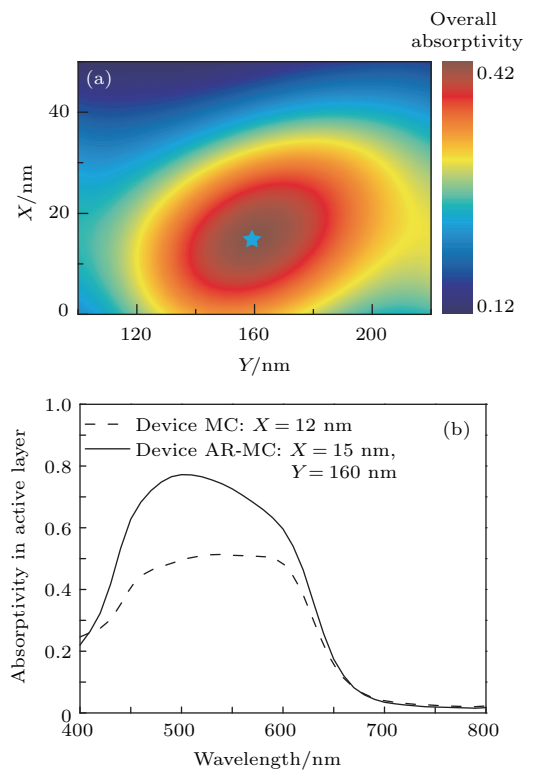


图4 (网刊彩色) (a) 器件AR-MC总吸收率随MoO<sub>3</sub>厚度 $X$ 和ZnS厚度 $Y$ 的变化, 存在一个最佳厚度组合( $X = 15$  nm,  $Y = 160$  nm), 获得最佳的吸收性能; (b) 最佳厚度组合下器件AR-MC和器件MC中有源层的光吸收谱

Fig. 4. (color online) (a) Overall absorptivity of device AR-MC as a function of  $X$  and  $Y$ , where we can find an optimal combination of the thickness (that is,  $X = 15$  nm and  $Y = 160$  nm) to obtain the best absorption performance; (b) absorptivity spectra in the active layer of Device AR-MC and device MC with the best absorption performance.

为了验证这一设想, 计算了器件AR-MC中有源层的光吸收性能. 我们仍然采用FDTD方法, 之后的计算都会考虑有源层的消光系数. 在得到有源



层的吸收谱后, 定义一个总吸收率的概念<sup>[24,25]</sup>, 其定义为

$$A_{\text{Total}} = \frac{\int a(\lambda)S(\lambda)d\lambda}{\int S(\lambda)d\lambda},$$

其中  $a(\lambda)$  代表有源层吸收谱,  $S(\lambda)$  表示 AM1.5 标准下的太阳光谱<sup>[25]</sup>. 因此, 总吸收率可以表征器件有源层对太阳光的吸收性能. 关于有源层吸收谱  $a(\lambda)$  的计算方法简介如下. 在 FDTD 方法中, 需要对空间和时间进行差分<sup>[17]</sup>. 我们选择正方形网格, 空间步长  $\Delta s = 5 \text{ nm}$ , 时间步长  $\Delta t = \Delta s/(2c)$ , 其中  $c$  表示真空光速. 本文计算平板结构和光栅结构, 采用二维 FDTD 计算, 使用 Matlab 编程, 建模网格形状可以参考图 8,  $Y$  方向上下两侧各加载 30 层完美匹配层,  $X$  方向左右边界选择布洛赫周期边界. 对于光栅结构, 周期选择实际周期, 需要加载正弦褶皱形状; 对于平板结构, 周期选择空间步长  $\Delta s$  即可. 计算时在入射介质内利用布洛赫边界条件引入入射平面波, 然后在计算结束的最后一个周期内分别对入射能流和反射能流做积分, 得到入射功率和反射功率, 进而可以计算器件的吸收, 其包括有源层的吸收和电极上的损耗. 对于有源层的光吸收, 需要计算有源层上下界面的能流差, 进而得到有源层的吸收谱  $a(\lambda)$ , 代入上式并在 400—800 nm 区间内做积分得到总吸收率, 其表征有源层的光吸收性能.

在图 4(a) 中, 计算了正入射下总吸收率随着  $\text{MoO}_3$  和  $\text{ZnS}$  厚度的变化. 可以看到, 存在一个最佳的厚度设计 ( $X = 15 \text{ nm}$ ,  $Y = 160 \text{ nm}$ ) 使得总吸收率达到最大. 这是由于在该厚度组合下, 器件中支持的杂化模式谐振波长与有源层高吸收区域有着非常好的符合, 且双杂化态拓宽了吸收带宽, 因此获得了最佳的吸收性能. 在图 4(b) 中给出了该厚度组合下器件 AR-MC 有源层的吸收谱, 如黑色实线所示. 我们同时也优化了器件 MC 的性能, 发现在  $\text{MoO}_3$  厚度为 12 nm 时会获得最佳总吸收率, 并将其有源层的吸收谱示于图 4(b), 由黑色虚线表示. 对比发现, 具有双模式的器件 AR-MC 获得了更宽频段的吸收增强效果, 因此其吸收性能优于具有单模式的器件 MC. 以总吸收率作为指标, 器件 AR-MC 的总吸收率达到 0.415, 相比器件 MC ( $\sim 0.302$ ) 有了 37% 的提升.

为了进一步研究杂化模式的性质, 图 5(a) 和图 5(b) 分别展示了器件 MC 和器件 AR-MC 中的场分布. 计算时选择 TE 偏振正入射光, 图中给出的是器件中电场振幅的分布. 可以看到, 对于器件 MC, 电场增强集中在有源层内, 这体现了微腔模式的激发. 对于器件 AR-MC, 电场增强除了一部分集中在有源层内, 还有一部分集中在  $\text{ZnS}$  盖层内, 这体现了杂化模式的特点, 即同时具有微腔模式和抗反射谐振态的性质. 同时, 由于双杂化模式的激发, 有源层内的电场增强带宽得到拓展, 因此器件 AR-MC 具有更好的光吸收性能, 这体现了我们设计的基于微腔模式和抗反射谐振态耦合的杂化模式的光束缚机制的优越性.

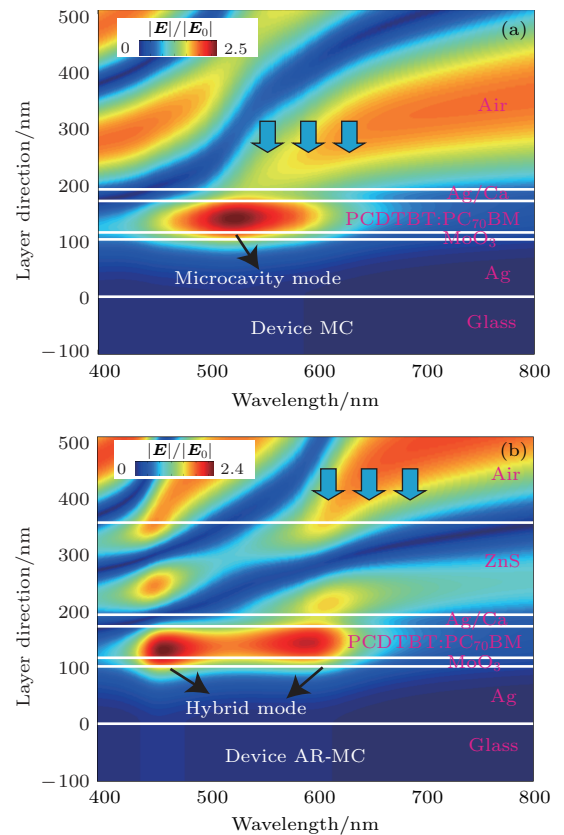


图 5 (网刊彩色) (a) 器件 MC 和 (b) 器件 AR-MC 在 TE 偏振正入射光下的器件内的电场分布图

Fig. 5. (color online) The electric field intensity distribution of (a) device MC and (b) device AR-MC under TE-polarized normal incidence.

### 2.3 光栅器件的性能研究

在 2.2 节中, 我们分析了平板器件的性能, 指出本文设计的器件 AR-MC 具有增强的光吸收性能. 在接下来的研究中, 将表明该光束缚机制已经可以使得器件内的光吸收性能达到最大化.

作为对比,我们在器件中引入被广泛研究的光栅结构,该结构可以激发起器件内的表面等离子激元<sup>[26-29]</sup>,从而对入射光进行有效的束缚.在实验上,可以通过在衬底上加工光栅结构,然后再蒸镀或涂覆功能层来制作光栅器件,器件形貌见图8所示.由于表面等离子激元只能在TM偏振下激发,因此接下来的计算中只考虑TM偏

振.图6(a)展示了计算得到的在TM偏振正入射光下不同光栅周期 $\Lambda$ 的器件AR-MC有源层光吸收谱,其中光栅高度选择50 nm.我们发现,光栅的引入可以使得长波长区域(700—800 nm)的吸收有一定的增强,但是在有源层高吸收区域(450—650 nm)却不明显,反而有一定的下降.

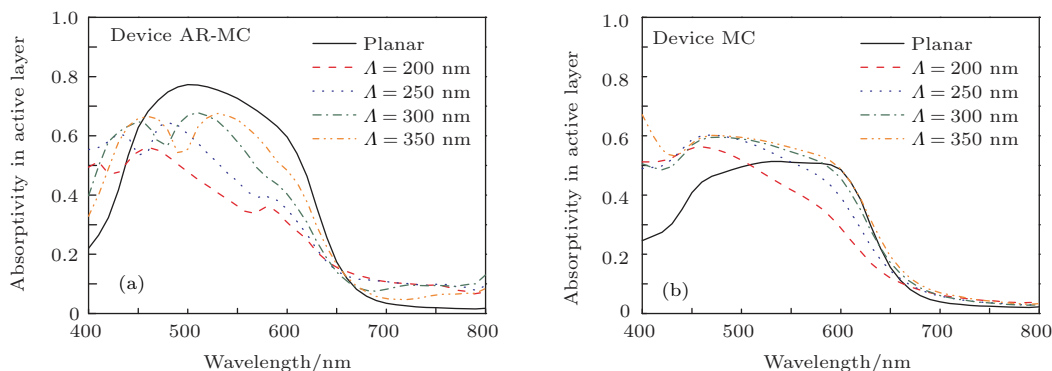


图6 (网刊彩色) 平板以及不同光栅周期的(a)器件AR-MC和(b)器件MC在TM偏振正入射光下的有源层光吸收谱  
Fig. 6. (color online) Absorptivity spectra in the active layer of (a) device AR-MC and (b) device MC for different periods under TM-polarized normal incidence.

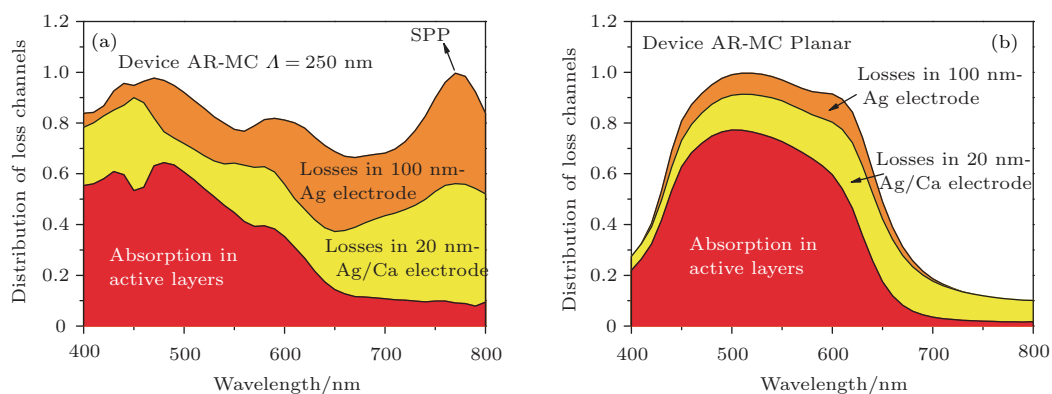


图7 (网刊彩色) (a)周期为250 nm的器件AR-MC和(b)平板器件AR-MC中光损耗途径分布图,其中红色、黄色和橙色区域分别表示有源层的有效光吸收、Ag/Ca阴极内的光损耗以及Ag阳极内的光损耗  
Fig. 7. (color online) Distribution of loss channels for (a) corrugated device AR-MC with period of 250 nm and (b) planar device AR-MC, where the red, yellow and orange region represent the light absorption by active layer, Ag/Ca cathode and Ag anode, respectively.

为了分析这个现象,我们以250 nm周期为例,计算了器件中光损耗的途径,结果示于图7(a),其中,红色、黄色和橙色区域分别表示有源层的有效光吸收、Ag/Ca阴极内的光损耗以及Ag阳极内的光损耗.作为对比,在图7(b)给出了平板器件AR-MC中的光损耗途径,可以看到得益于宽频谱的双杂化态,入射光大部分被有源层吸收掉,只有一小部分损耗在阴极和阳极上.然而,引入光栅结构后(图7(a)),入射光受到光栅的衍射和散射作

用,与器件材料的相互作用大大增强.在短波长区域(450—650 nm),由于模式杂化机制的引入,平板器件的有源层吸收已经很充分,此时光栅的引入反而使得入射光与金属电极的作用增强,提高了电极上的光损耗,而有源层的光吸收减弱.在长波长区域(700—800 nm),光栅的引入激发起器件中的表面等离子激元( $\sim 770$  nm),使得在金属电极和有源层内的光吸收都有增强,然而这里的有源层吸收能力很弱,因此带来的收益很有限.总体看来,引入光

栅结构后器件的性能反而有所下降. 这证明了我们提出的模式杂化机制已经可以使得器件的吸收性能达到最大化, 因此不再需要其他的光束缚机制. 作为补充, 我们在图 8 给出了 770 nm 入射光下器件 AR-MC 中的磁场分布图, 可以看到金属电极界面的场增强效应, 验证了表面等离子激元的激发.

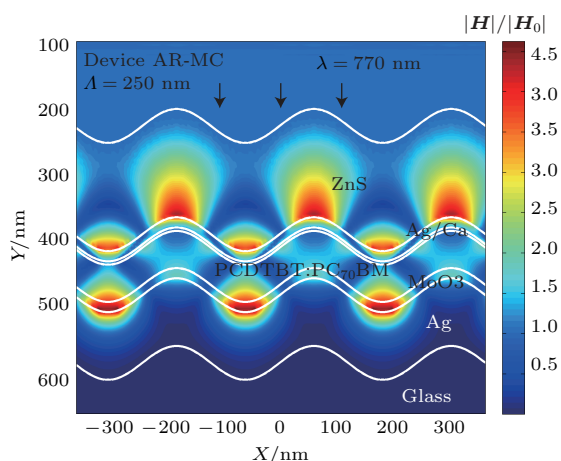


图 8 (网刊彩色) 周期 250 nm 的器件 AR-MC 在 770 nm 波长的 TM 偏振正入射光下的磁场分布

Fig. 8. (color online) Magnetic field intensity distribution of corrugated device AR-MC with period of 250 nm under TM polarized normal incidence with wavelength of 770 nm.

从上面的研究看到, 模式杂化机制已经可以最大化优化器件 AR-MC 的光吸收性能. 然而, 对于器件 MC, 微腔模式并不足以使其吸收性能达到最大化, 因此我们研究在器件 MC 中引入光栅结构, 提高其吸收性能, 并与我们设计的平板器件 AR-MC 的吸收性能做对比. 图 6 (b) 给出了计算得到的在 TM 偏振正入射光下不同光栅周期  $\Lambda$  的器件 MC 有源层光吸收谱, 可以看到, 只具有单模式的平板器件 MC 的光吸收性能并没有实现最大化, 通过引入光栅结构可以进一步增强其性能. 为了比较不同周期的器件 AR-MC 和器件 MC 的光吸收性能, 我们把这些器件的总吸收率示于图 9, 其中虚线表示平板器件, 圆圈表示不同周期的光栅器件. 可以看到, 我们设计的平板器件 AR-MC 具有最好的吸收性能, 这受益于宽频谱的双杂化模式与有源层高吸收区域的符合. 而引入光栅后其性能会下降, 这是由于平板器件的吸收性能已经最大化, 光栅的引入反而会提高金属电极上的光损耗, 不利于器件的光吸收性能. 对于平板器件 MC, 其吸收性能并没有最大化, 因此光栅结构的引入可以进一步提高其性

能, 使其接近我们设计的平板器件 AR-MC. 由于光栅结构的引入会提高加工成本和难度, 而我们设计的平板器件制作工艺简单, 因此可以认为我们提出的模式杂化机制是一种简单高效的提高有机太阳能电池光吸收性能的光束缚机制.

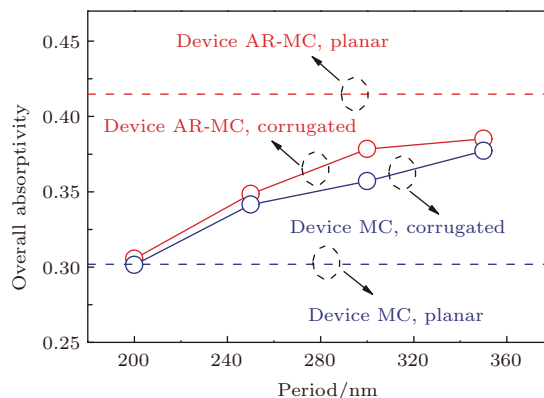


图 9 平板和不同周期的器件 AR-MC 和器件 MC 的总吸收率

Fig. 9. Overall absorptivity for planar and corrugated device AR-MC and device MC with different periods.

从以上分析可以知道, 我们提出的模式杂化机制适用于双金属电极的微腔太阳能电池器件, 用于改善微腔模式带宽窄的缺陷. 对于不采用双金属电极的器件, 例如传统的氧化铟锡电极器件, 器件中并不存在窄带宽的微腔模式, 因此不再需要光束缚机制, 有源层厚度在 100 nm 左右即可获得最优化的器件性能. 本文研究模式杂化机制不仅适合工作在薄有源层厚度区间 (例如本文研究的 55 nm) 的体异质结电池, 更适合给体、受体本身都很薄 (不超过 20 nm) 的小分子薄膜电池, 我们将在下一步的工作中对该类器件开展研究.

### 3 结 论

本文研究了一种用于提高有机太阳能电池吸收性能的光束缚机制——模式杂化机制. 该机制利用器件内在的微腔模式与外界引入的盖层内支持的抗反射谐振态的耦合作用, 形成双杂化态, 其谐振波长可以通过调节盖层厚度和腔长来调控, 并且双杂化态具有宽频谱带宽, 有利于实现太阳能电池中的宽频谱光吸收增强效果. 理论计算表明, 基于模式杂化机制的平板器件总吸收率相比微腔器件有 37% 的提升, 并且引入光栅结构后吸收性能不再进一步增强, 这说明模式杂化机制已经可以实现

平板器件的吸收性能最优化, 并证明了模式杂化机制是一种简单高效的提高有机太阳能电池光吸收性能的光束缚机制.

### 参考文献

- [1] Kim J Y, Lee K, Coates N E, Moses D, Nguyen T Q, Dante M, Heeger A J 2007 *Science* **317** 222
- [2] Li G, Shrotriya V, Huang J, Yao Y, Moriarty T, Emery K, Yang Y 2005 *Nat. Mater.* **4** 864
- [3] You J, Dou L, Yoshimura K, Kato T, Ohya K, Moriarty T, Emery K, Chen C C, Gao J, Li G, Yang Y 2013 *Nat. Commun.* **4** 1446
- [4] Huang L Q, Zhou L Y, Yu W, Yang D, Zhang J, Li C 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 038103 (in Chinese) [黄林泉, 周玲玉, 于为, 杨栋, 张坚, 李灿 2015 物理学报 **64** 038103]
- [5] Li Q, Li H Q, Zhao J, Huang J, Yu J S 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 128803 (in Chinese) [李青, 李海强, 赵娟, 黄江, 于军胜 2013 物理学报 **62** 128803]
- [6] Zhang X L, Song J F, Li X B, Feng J, Sun H B 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 243901
- [7] Sefunc M A, Okyay A K, Demir H V 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 093117
- [8] Zhang X L, Song J F, Feng J, Sun H B 2013 *Opt. Lett.* **38** 4382
- [9] Williamson A, McClean É, Leipold D, Zerulla D, Runge E 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 093307
- [10] Lin H W, Chiu S W, Lin L Y, Huang Z Y, Chen Y H, Lin F, Wong K T 2012 *Adv. Mater.* **24** 2269
- [11] Sergeant N P, Hadipour A, Niesen B, Cheyns D, Heremans P, Peumans P, Rand B P 2012 *Adv. Mater.* **24** 728
- [12] Chen K S, Yip H L, Salinas J F, Xu Y X, Chueh C C, Jen A K Y 2014 *Adv. Mater.* **26** 3349
- [13] Kats M A, Blanchard R, Genevet P, Capasso F 2013 *Nat. Mater.* **12** 20
- [14] Zhang X L, Song J F, Li X B, Feng J, Sun H B 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102** 103901
- [15] Kats M A, Sharma D, Lin J, Genevet P, Blanchard R, Yang Z, Qazilbash M M, Basov D N, Ramanathan S, Capasso F 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 221101
- [16] Zhang X L, Feng J, Song J F, Li X B, Sun H B 2011 *Opt. Lett.* **36** 3915
- [17] Taflove A 1998 *Advances in Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method* (London: Artech House)
- [18] Luxpop Inc. <http://www.luxpop.com> [2016-5-17]
- [19] Kena-Cohen S, Forrest S R 2010 *Nat. Photon.* **4** 371
- [20] Zhang Z Y, Wang H Y, Du J L, Zhang X L, Hao Y W, Chen Q D, Sun H B 2014 *Appl. Phys. Lett.* **105** 191117
- [21] Zhang X L, Feng J, Han X C, Liu Y F, Chen Q D, Song J F, Sun H B 2015 *Optica* **2** 579
- [22] Hao Y W, Wang H Y, Zhang Z Y, Zhang X L, Chen Q D, Sun H B 2013 *J. Phys. Chem. C* **117** 26734
- [23] Zhang Z Y, Wang H Y, Du J L, Zhang X L, Hao Y W, Chen Q D, Sun H B 2015 *IEEE Photon. Technol. Lett.* **27** 821
- [24] Zhang X L, Song J F, Li X B, Feng J, Sun H B 2013 *Org. Electron.* **14** 1577
- [25] Min C, Li J, Veronis G, Lee J Y, Fan S, Peumans P 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 133302
- [26] Jin Y, Feng J, Zhang X L, Xu M, Bi Y G, Chen Q D, Wang H Y, Sun H B 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 163303
- [27] Jin Y, Feng J, Xu M, Zhang X L, Wang L, Chen Q D, Wang H Y, Sun H B 2013 *Adv. Opt. Mater.* **1** 809
- [28] Bi Y G, Feng J, Chen Y, Liu Y S, Zhang X L, Li Y F, Xu M, Liu Y F, Han X C, Sun H B 2015 *Org. Electron.* **27** 167
- [29] Jin Y, Feng J, Zhang X L, Xu M, Chen Q D, Wu Z J, Sun H B 2015 *Appl. Phys. Lett.* **106** 223303



# Theoretical study of microcavity-antireflection resonance hybrid modes enhanced absorption of organic solar cells\*

Zhao Ze-Yu<sup>1)2)</sup> Liu Jin-Qiao<sup>3)</sup> Li Ai-Wu<sup>1)</sup> Niu Li-Gang<sup>1)</sup> Xu Ying<sup>1)†</sup>

1) (State Key Laboratory on Integrated Optoelectronics, College of Electronic Science and Engineering, Jilin University, Changchun 130012, China)

2) (State Key Laboratory of Optical Technologies on Micro-Engineering and Nano-Fabrication, Institute of Optics and Electronics, Chinese Academy of Science, Chengdu 610209, China)

3) (School of Mechanical Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

( Received 18 May 2016; revised manuscript received 29 August 2016 )

## Abstract

Organic solar cells based on small molecules and conjugated polymers are attracting much attention due to their merits of low costs, simple fabrication processes, light weights, and mechanical flexibilities. Metals are usually considered as promising candidates for the semi-transparent electrodes. In such devices, a strong microcavity resonance can be supported between the two electrodes, resulting in a narrowed bandwidth of light absorption, which, unfortunately, will lower the performances of organic solar cells since broadband absorption is always highly desired. To overcome this obstacle, people have proposed many designs such as using ultra-thin electrodes or using dielectric-metal hybrid electrodes. Although the light absorption bandwidth can be improved considerably, the absorption efficiency would be lowered due to the weakened microcavity resonance. This is a tough problem that always bothers both researchers and engineers. To solve this problem, we propose a light trapping scheme based on broadband hybrid modes due to the hybridization between microcavity resonance and antireflection resonance. By introducing a capping layer outside the device structure, antireflection resonance can be excited inside the capping layer and can then couple with the intrinsic microcavity resonance, inducing dual microcavity-antireflection resonance hybrid modes. The hybrid modes are of broadband and their resonant wavelengths can be easily designed by tuning the capping layer thickness and cavity length, since the capping layer thickness would affect the antireflection resonance while the cavity length would affect the microcavity resonance. By matching the resonance with the high absorption region of the active layer, the overall absorptivity of the proposed device can be greatly enhanced by  $\sim 37\%$  compared to the conventional microcavity based device where only one mode, that is, the microcavity resonance can be supported. Moreover, we compare our light trapping scheme with the surface plasmon-polaritons based scheme where surface waves are excited to help improve the light absorption. We find that the overall absorptivity of the proposed device cannot be further improved when we introduce grating structure into the device in order to excite surface plasmon-polaritons. This is mainly because the light absorption based on our hybrid mode scheme is already thorough so that the introduction of grating structure can only improve the light loss dissipated in the metal electrodes due to scatterings and diffractions by the gratings. Therefore, the proposed hybrid mode based scheme can be considered as a simple and effective light trapping scheme for organic solar cells and may find applications in both polymer and small molecular based organic solar cells.

**Keywords:** organic solar cells, microcavity resonance, antireflection resonance, hybrid mode

**PACS:** 88.40.jr, 88.40.H-, 42.50.Pq, 42.25.Bs

**DOI:** 10.7498/aps.65.248801

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61378053).

† Corresponding author. E-mail: [xuying1969@hotmail.com](mailto:xuying1969@hotmail.com)