

NiO_x 作为空穴传输层对有机太阳能电池光吸收的影响*

蒲年年¹⁾ 李海蓉^{1)2)†} 谢龙珍¹⁾

1) (兰州大学物理科学与技术学院微电子研究所, 兰州 730001)

2) (兰州大学磁学与磁性材料教育部重点实验室, 兰州 730001)

(2013年10月24日收到; 2013年12月7日收到修改稿)

基于多层膜系模型的传输矩阵方法、麦克斯韦方程和光子吸收方程, 研究了NiO_x作为替代3,4-乙撑二氧噻吩:聚苯乙烯磺酸盐 (PEDOT:PSS) 的空穴传输材料对聚3-己噻吩 (P3HT) 和富勒烯衍生物 ([6,6]-phenyl-C61-butyrac acid methyl ester, PC61BM) 共混体异质结有机太阳能电池器件内部光电场分布和光吸收特性的影响. 分别制备了以NiO_x和PEDOT:PSS为空穴传输层, P3HT:PCBM为活性层的有机太阳能电池, 并通过数值模拟的方法比较了NiO_x和PEDOT:PSS两种空穴传输材料对器件光伏特性的影响. 结果表明: 10 nm的NiO_x空穴传输层器件比40 nm的PEDOT:PSS器件获得了更大的短路电流和填充因子, 并具有更高的能量转化效率.

关键词: NiO_x, P3HT:PCBM, 聚合物太阳能电池, 光吸收

PACS: 72.40.+W, 88.40.jr, 84.60.jt

DOI: 10.7498/aps.63.067201

1 引言

有机聚合物太阳能电池因其制备工艺简单、可柔性化、成本低廉等优点, 吸引了众多科学家的关注. 随着聚合物太阳能电池效率的提升和新型半导体材料的研发, 逐渐促使其在产业化方面快速发展. 聚3-己基噻吩 (P3HT) 和富勒烯衍生物 ([6,6]-phenyl-C61-butyrac acid methyl ester, PC61BM) 的混合结构^[1] 一经研制成功就因其具有较高的能量转化效率成为研究的热点. 目前基于P3HT和PC61BM的太阳能电池的效率已经达到5%以上^[2-4]. 在P3HT和PC61BM太阳能电池中通常应用聚3,4-乙撑二氧噻吩:聚苯乙烯磺酸盐 (PEDOT:PSS) 作为空穴传输材料, 这种聚合物材料有着制备工艺简单、导电性能好等优点, 但其吸水性和pH呈酸性, 会腐蚀铟锡氧化物 (ITO) 电极^[5,6]; 其沉积特性会使沉积的薄膜表面形貌不一

致, 导致器件的电学特性发生很大的变化^[7,8]. 过厚的PEDOT:PSS薄膜会影响到空穴的传输, 太薄又不利于激子的分离, 而且会造成激子在ITO表面的猝灭. 对于ITO阳极-传输层-活性层-金属阴极结构的太阳能电池, 其中每一层的厚度和光学常数均会影响到光在器件内的分布, 并且入射光和经金属电极反射光在器件内形成干涉现象^[9-11]. PEDOT:PSS作为空穴传输材料的器件, 由于光干涉现象影响到金属电极附近光强几近为零, 并且光生载流子急剧减少, 形成光生激子大量复合的死区, 同时ITO/PEDOT:PSS一侧光强增大造成光生激子大量增加. 这种“死区效应”^[12-14] 非常不利于光生激子的分离和收集. 解决上述问题的方法之一就是替换空穴传输材料, 改变器件内部的光电场分布, 以提升器件的能量转化效率. 而氧化镍NiO材料具有较宽的带隙 ($E_{\text{gap}} \geq 3 \text{ eV}$), 它可以透过大部分可见光并且能够有效地阻挡电子向阳极的泄漏; 其能带与给体材料和ITO均能形

* 甘肃省自然科学基金计划 (批准号: 1107RJZA090) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: hrli@lzu.edu.cn

成欧姆接触^[15,16]; 其对器件中毗邻层有良好的化学稳定性和惰性. 本文通过溶胶凝胶法制备了用于替代 PEDOT : PSS 的 NiO_x 膜, 通过麦克斯韦方程和多层膜系传输矩阵法分别计算了以 NiO_x 和 PEDOT : PSS 为空穴传输层、P3HT : PCBM 为活性层的有机太阳能电池内的光电场分布和光吸收, 对比发现 NiO_x 膜可改变器件内部光电场; 通过对比不同厚度 NiO_x 膜太阳能电池光伏特性, 研究得出 NiO_x 膜的最优化厚度并且对最优化厚度的器件样品进行了数值模拟.

2 实验

通过溶胶凝胶法制备氧化镍 NiO_x 膜: 四水合醋酸镍 (Ni(OCOCH₃)₂ · 4H₂O, Aldrich, 纯度 99.998%) 作为前驱体, 分散到乙二醇单甲醚 (CH₃OCH₂CH₂OH, Aldrich, 纯度 99.99%) 中, 乙醇胺 (H₂NCH₂CH₂OH, Aldrich, 纯度 99.95%) 作为稳定剂滴入溶液中增加前驱体的溶解量, 乙酸 (CH₃COOH, Aladin, electronic grade) 作为催化剂使溶液均质透明. 经过热水浴 80 °C 加热 2 h, 120 °C 加热 2 h, 经黑箱陈化 72 h 后配制成 0.1 M 的溶液.

为了研究 NiO_x 膜和 PEDOT : PSS 膜对于 P3HT : PCBM 器件的影响, 我们分别制备了如下结构的器件: ITO/PEDOT : PSS/P3HT : PCBM/LiF : Al 和 ITO/NiO_x/P3HT : PCBM/LiF : Al. ITO 玻璃基片 (深圳南玻, 电阻率 10 Ω·cm) 分别经洗液、丙酮、乙醇和去离子水超声清洗, 然后用高压氮气吹干放入真空干燥室烘烤 2 h. PEDOT : PSS (Aldrich) 溶液用 0.45 μm 水溶性滤头过滤后以 5000 r/min 转速旋涂, 薄膜厚度约 40 nm. NiO_x 前驱液以合适的速度在 ITO 基片上旋涂然后在温度设定 150 °C 的热板上加热 10 min. 活性层的溶液采用质量比为 P3HT (P3HT, Rieketmetals) : PCBM (PC61BM, Aldrich) 1 : 0.8 溶于邻二氯苯 (ODCB, Aladin, electronic grade) 配制溶液, 在 50 °C 水浴锅内加热搅拌 1 h 后旋涂, 在手套箱中放置 20 min 后以备蒸镀. 在真空度为 10⁻⁴ Pa 的条件下, 蒸镀 1 nm 的 Li : F 和 100 nm 的 Al 电极, 器件的有效面积由图形化的 ITO 阳极和顶部 Al 阴极共同限定, 本器件的有效面积为 4 mm². 实验室条件为万级净化间. 所有实验步骤除去真空蒸镀过程均在手套箱中完成. 旋涂机型号是沈阳司乐的 TA-280 匀胶机; 薄膜厚度用 Veeco Dektak8

型表面轮廓仪测得; 在室温、大气环境下, 用北京创拓 XPX-2000 型号氙灯模拟大气质量 AM1.5G, 100 mW/cm² 的太阳光作为入射光源, 用 Newport 标准太阳能电池进行标定. 电池器件的电流密度-电压 (*J-V*) 特性曲线由 Keithley SMU2410 型测试仪测得. 用北京量创科技 EM12-PV 精致型多入射角激光偏振仪测得薄膜材料的折射率和消光系数. NiO_x 的禁带宽度由武汉斯科特公司的 S310 型电化学工作站循环伏安法测得. NiO_x 的表面形貌采用 Asylum Research 公司的 MFP-3D™ 型原子力显微镜 (AFM), 工作在轻敲模式. 采用日本理学公司的 Rigaku DPmax22400 型转靶多晶 X 射线衍射仪分析样品的晶体结构

3 结果与讨论

3.1 NiO_x 薄膜表征

如图 1(a) 所示, ITO 上生长的 10 nm NiO_x 是均匀平滑的薄膜, 其表面粗糙均方根 (RMS) 仅为 0.2 nm. 图 1(b) 是 NiO_x 膜的 X 射线衍射 (XRD) 图谱. 可以看出, 150 °C 退火处理后的 NiO_x 膜是无定形态、各项同性的. 而 450 °C 退火处理 30 min 后的样品的衍射峰有典型的 NiO 结构特征.

3.2 光吸收

有机聚合物太阳能电池在玻璃或者柔性透明基底上制作, 太阳光入射时, 用麦克斯韦方程组可以描述器件内部光电场的多层膜系矩阵^[17-19]:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{B} \\ \mathbf{C} \end{bmatrix} = \left\{ \prod_{i=1}^K \begin{bmatrix} \cos \delta_i & \frac{1}{\eta_i} \sin \delta_i \\ \eta_i \sin \delta_i & \cos \delta_i \end{bmatrix} \right\} \times \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_s \end{bmatrix}, \quad (1)$$

其中 δ_i 为第 i 层的相位距离, $\delta_i = \frac{2\pi\eta_i d_i}{\lambda}$, d_i 是第 i 层薄膜的物理厚度; η_i 为第 i 层的折射率, $\eta_i = \eta_i - \mathbf{I} \times k_i$, \mathbf{I} 是虚数单位; η_s 为基板的折射率, k_i 是第 i 层的消光系数. 器件的折射率 R 和透射率 T 分别为

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

$$T = \frac{n_0 n_s}{|n_0 B + C|}, \quad (3)$$

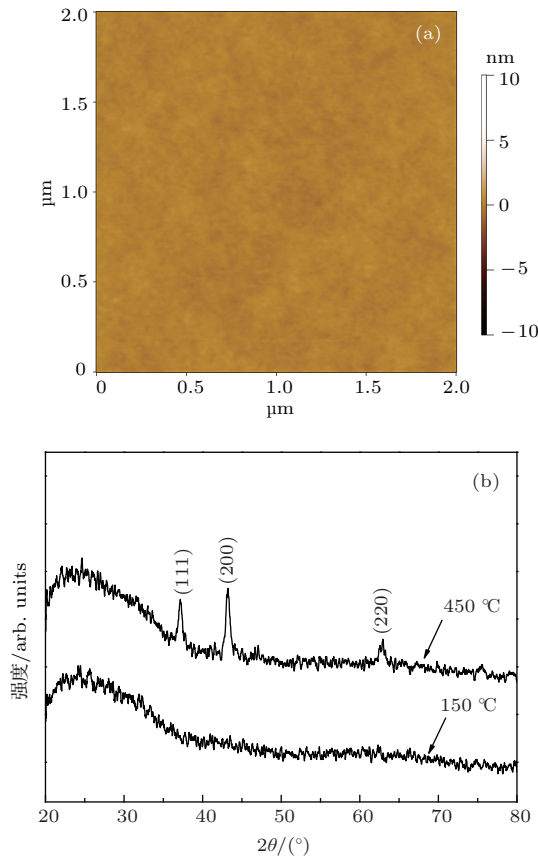


图1 (a) 10 nm NiO_x 样品的 AFM 图像; (b) 10 nm NiO_x 膜的 XRD 图谱

其中 n_0 为空气折射率 $n_0 = 1$. 对于反射型器件, 光的干涉效应贯穿于整个器件内, 其光电场强度由麦克斯韦方程表示, 并做了如下假设: 1) 每一层薄膜都是各向均质同性; 2) 每层界面都是平行的; 3) 每层介质的折射率 n_i 和消光系数 k_i 均是不依赖于厚度、只与波长 λ 有关的量; 4) 光是垂直入射. 对于每层有机物的能量分布 Q 是 λ 和位置 x 的函数, 由波印廷矢量公式: $Q - \text{div}(P) = 0$, 其中 $P = \frac{1}{2}(E \times H)$ 计算得到:

$$Q(x, \lambda) = \frac{n_i}{n_0} \alpha I_{\text{solarlight}} \left| \frac{E(x)^2}{E_0} \right|, \quad (4)$$

其中 $\alpha = \frac{4\pi K_i}{\lambda}$ 为消光系数, $I_{\text{solarlight}}$ 是符合美国材料协会 (ASTM)G173-03 的标准太阳能光谱. 我们将能量分散于每一秒的时间间隔上, 这样能量分布便成为波长 λ 和器件内部距离 x 的函数. $G(x, \lambda) = \frac{Q(x, \lambda)}{h\nu}$. 本文光区的总的光子吸收是可知的, 由光波长的下限和上限积分可以得到关于器件内部距离 x 的光子吸收函数:

$$G(x) = \int G(x, \lambda) d\lambda. \quad (5)$$

选取波长 350, 500, 650 和 750 nm 四种不同

的光波, 通过麦克斯韦方程组和多层膜系传输矩阵, 计算了结构为 ITO (100 nm)/PEDOT:PSS (40 nm)/P3HT:PCBM (100 nm)/LiF:Al (100 nm) 的器件和结构为 ITO (100 nm)/NiO_x (10 nm)/P3HT:PCBM (100 nm)/LiF:Al (100 nm) 的器件的归一化电场强度的平方 $|E(x)^2|$ 的数值分布, 如图 2 所示.

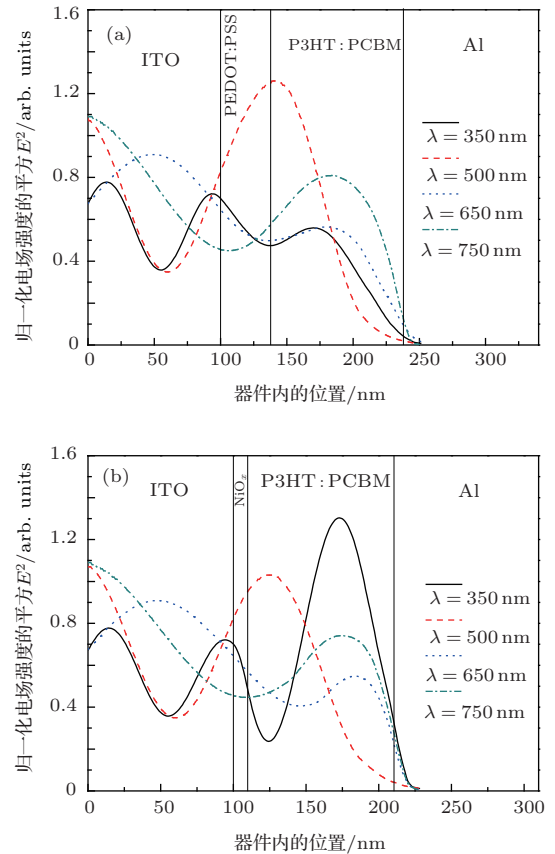


图2 (a) ITO/PEDOT:PSS/P3HT:PCBM/LiF:Al 结构的器件归一化电场强度的平方 $|E(x)^2|$; (b) ITO/NiO_x/P3HT:PCBM/LiF:Al 结构的器件归一化电场强度的平方 $|E(x)^2|$

经对比图 2(a) 和 (b) 中 PEDOT:PSS 膜作为空穴传输层的器件和 NiO_x 膜作为空穴传输层的器件后发现, 在 NiO_x 的器件中波长 $\lambda = 350$ nm 和波长 $\lambda = 500$ nm 的光波电场的峰值向 P3HT:PCBM 层中心偏移; $\lambda = 350$ nm 的光波的电场强度更高的同时, $\lambda = 650$ nm 和 $\lambda = 750$ nm 的光波的电场强度并没有衰减; 波长 λ (500, 650, 750 nm) 的光波在阴极附近的活性层区域的光强并没有发生较强的衰减, 有效地减缓了“死区效应”, 这进一步说明 NiO_x 作为空穴传输层的器件对于中短波长的光有较强的吸收. 为了进一步研究光子吸收的情况, 根据光子吸收数公式, 计算了不同厚度 NiO_x 层和厚度变化的活性层在波长 $\lambda = 350$ nm

到波长 $\lambda = 750 \text{ nm}$ 条件下的光子吸收数 $G(x)$, 如图 3 所示.

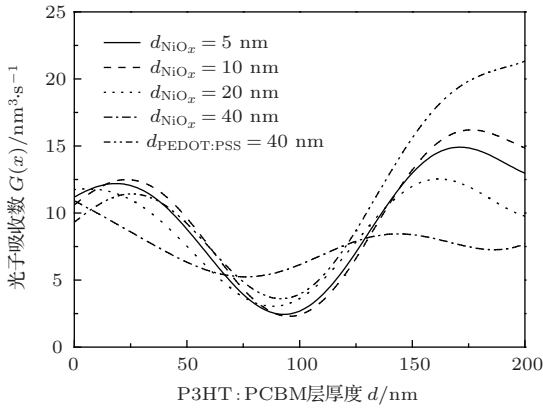


图 3 不同厚度 NiO_x 器件中活性层和光子吸收数的关系

图 3 分别对 P3HT : PCBM 层厚度从 0 到 200 nm, NiO_x 层厚度从 5 nm 到 40 nm, PEDOT:PSS 层厚度 40 nm 的器件 P3HT : PCBM 层的光子吸收数进行了计算, 得到器件活性层光子吸收数 $G(x)$ 呈现规则的变化: 初始随着 NiO_x 层厚度 d 的增加而增加, 并且在 NiO_x 层厚度 $d = 10 \text{ nm}$ 且 P3HT : PCBM 厚度 = 175 nm 时活性层的光子吸收数 $G(x)$ 达到最大; 进而光子吸收数 $G(x)$ 随着 d 的增加反而减少, 当 NiO_x 层厚度 $d = 40 \text{ nm}$ 且 P3HT : PCBM 厚度 = 175 nm 时器件活性层的光子吸收数 $G(x)$ 最小. 器件 $G(x)$ 随着活性层厚度的增加而呈现出震荡特性, 这表明照射时光波在器件内部形成了干涉效应并造成了 $|E(x)|^2$ 的周期性分布, 进而影响到了 $G(x)$ 的分布. 当 NiO_x 厚度 $d = 10 \text{ nm}$ 时获得了最佳的光子吸收数, 其第一吸收峰位置 ($x = 25 \text{ nm}$) 和 PEDOT : PSS 厚度为 $d = 40 \text{ nm}$ 时的第一吸收峰 ($x = 24 \text{ nm}$) 接近, 峰值为 $12.49 \text{ nm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$, 高于 PEDOT : PSS 的峰值 $11.42 \text{ nm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$. 当 NiO_x 层厚度 $d = 5, 20, 40 \text{ nm}$ 时其第一吸收峰的位置分别为 18, 6, 1 nm, 相应的峰值分别为 $12.1917, 11.799, 10.914 \text{ nm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$. 说明 NiO_x 层厚度 $d = 10 \text{ nm}$ 时, 在第一吸收峰附近有最优化的光子吸收数.

3.3 器件数值模拟

稳态时器件内部的电学特性由稳态电流连续性方程得到 [18,19]:

$$\frac{dJ(x)}{qdz} + G(x) - R(x) = 0, \quad (6)$$

其中 $J(x)$ 为器件内部的 x 点的电流密度, $G(x)$ 为自由载流子产生率, $R(x)$ 为自由载流子复合率. 假设自由载流子分离概率为 1, 则 $G(x)$ 仅仅是依赖 P3HT : PCBM 层中每秒钟吸收的光子数量的函数. 而器件内的复合损失已被广泛地研究, 主要是两种复合方式: 一阶复合和双分子复合 [20]. 可以将有机活性层看作一种均质物质, 利用迁移和扩散方程 [18,19] 解得

$$J = J_{\text{diffusion}} + J_{\text{drift}}. \quad (7)$$

假设激子分离概率与载流子产生率一致, 当考虑到界面的载流子分布时则边界条件相对以上方程来说至关重要. 取理想化边界条件, 即阴极处无空穴电流和阳极处无电子电流. 通过 MATLAB 软件模拟出稳态电流.

我们对性能最优的器件 J - V 特性曲线通过稳态条件下的电流连续性方程、迁移扩散方程在双分子复合条件下进行了数值模拟, 结果如图 4 所示. 图中 NiO_x 器件的数值模拟得出开路电压 $V_{\text{oc}} = 0.552 \text{ V}$, 与实验结果 $V_{\text{oc}} = 0.554 \text{ V}$ 非常符合. 同时, PEDOT : PSS 器件的数值模拟结果 $V_{\text{oc}} = 0.579 \text{ V}$, 与实验结果 $V_{\text{oc}} = 0.583 \text{ V}$ 也非常接近. 实验中所用参数如表 1 所示.

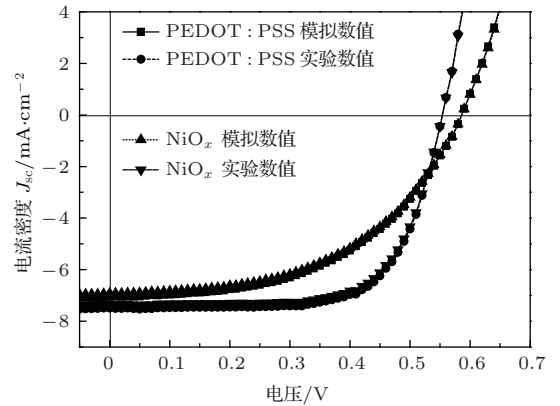


图 4 常温条件下对于两种器件的 J - V 特性的曲线模拟和实验结果

4 NiO_x 厚度优化设计

图 5 为基于不同 NiO_x 厚度的太阳能电池在光照条件下的 J - V 特性曲线. 由 J - V 特性曲线清晰地表明器件的短路电流密度 J_{sc} 、开路电压 V_{oc} 、填充因子 FF 及能量转化效率 PCE 随 NiO_x 厚度变化的关系. 具体参数由表 2 给出.

由表 2 可见, 器件的短路电流密度 J_{sc} 随着 NiO_x 的厚度增加而减少: 5 nm 的 NiO_x 器

件获得了制备的器件中最大的电流密度, $J_{sc} = 7.841 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}$, 其后 J_{sc} 随着厚度的增加反而逐步减少, 当 NiO_x 厚度为 40 nm 时, $J_{sc} = 4.324 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}$. 这说明 5 nm 到 20 nm 的 NiO_x 作为空穴传输层 (HTL) 有较好的光传输特性, 可以有效减少激子在 NiO_x 中的复合. 40 nm 的 NiO_x 薄膜作为 HTL 自身光吸收较大, 导致在活性层中光生激子的数量减少, 这与 $G(x)$ 得到的结论一致; 同时 40 nm 的 NiO_x 膜非常不利于激子的传输. 然而 5 nm NiO_x 相比 10 nm NiO_x 器件更利于激子传输, 有更好的传输特性. 对比 40 nm PEDOT : PSS 器件 $J_{sc} = 7.055 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ 和 10 nm NiO_x 器件 $J_{sc} = 7.492 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ 后发现, NiO_x 器件的 J_{sc} 有明显提升, 说明 NiO_x 薄膜有效地减缓了“死区效应”, 增强了活性层的光吸收.

表 1 器件数值模拟所用参数 [21]

PEDOT : PSS 的功函数/eV	5
P3HT 的 HOMO/eV	5.3
PCBM 的 LUMO/eV	3.7
Al 的功函数/eV	4.31
NiO_x 的功函数/eV	5.1
电子迁移率/ $\text{m}^2\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$	5×10^{-7}
空穴迁移率/ $\text{m}^2\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$	1×10^{-8}
电子空穴对距离/nm	1.285
衰减率/ s^{-1}	1.8×10^6

表 2 基于 ITO/HTL/P3HT : PCBM/LiF : Al 结构的器件在模拟太阳光照射条件下的参数

器件样品	V_{oc}/V	$J_{sc}/\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$	$FF/\%$	$PCE/\%$
5 nm- NiO_x	0.547	7.841	55.24	2.786
10 nm- NiO_x	0.554	7.492	59.18	2.895
20 nm- NiO_x	0.538	6.108	53.93	1.809
40 nm- NiO_x	0.536	4.324	49.56	1.352
40 nm-PEDOT : PSS	0.583	7.055	51.18	2.106

5 结 论

通过麦克斯韦方程和膜系传输矩阵及 $G(x)$ 公式, 分别计算了 NiO_x 薄膜和 PEDOT : PSS 薄膜作为空穴传输材料的有机太阳能电池的光电场分布和光吸收特性, 得到了入射光波长为 350, 500, 650 及 750 nm 时器件内部光强的归一化平方 $|E(x)|^2$

对于 NiO_x 器件, 可明显地观察到器件的 V_{oc} 随厚度的变化关系: 5 nm 器件 $V_{oc} = 0.547$; 而 10 nm 的器件随着薄膜厚度的增加反而减少, $V_{oc} = 0.554 \text{ V}$; 40 nm 器件有着最小的开路电压, $V_{oc} = 0.536 \text{ V}$. 本体异质结 bulk heterojunction (B-HJ) 太阳能电池的 V_{oc} 主要受给体的最高分子占据能级和受体的最低未占据能级之差以及两个电极功函数之差的影响; 不同厚度的 NiO_x 器件 V_{oc} 从 0.554 V 到 0.536 V 有着明显变化, 这说明 NiO_x 膜的性能对于器件 V_{oc} 的提升优化有着重要的影响. 器件的 FF 和 PCE 的变化类似于器件 V_{oc} . 综上所述: 10 nm NiO_x 的器件有着最大的 V_{oc} 和 FF 及适当的 J_{sc} , 所以有着最大的 PCE , 比 PEDOT : PSS 器件更具有优势.

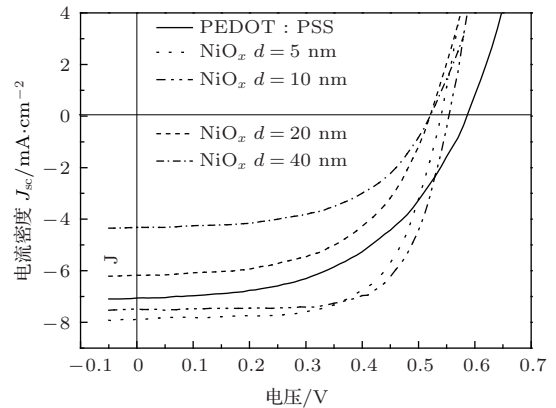


图 5 基于不同 NiO_x 厚度的器件和基于 PEDOT : PSS 的器件在光照条件下的 J - V 特性曲线

分布, 发现在 NiO_x 器件内部 4 种波长的光强峰值比 PEDOT : PSS 器件内的峰值均向活性层内部偏移, Al 电极附近的光吸收有明显增强. 得到了 5, 10, 20 和 40 nm NiO_x 膜和 40 nm PEDOT : PSS 膜条件下不同活性层厚度的光吸收, 发现在 175 nm 活性层, 10 nm NiO_x 膜比 40 nm PEDOT : PSS 膜器件在第一光吸收峰值上有明显提高. 两种太阳能电池电学特性测试结果显示: NiO_x 薄膜作为 HTL

能有效提高器件的 J_{sc} , FF 和 PCE. NiO_x 薄膜比 PEDOT:PSS 薄膜有效减缓了“死区效应”, 更适合作为有机聚合物太阳能电池的空穴传输层. 另外还对最优化器件的 $J-V$ 特性曲线进行了数值模拟.

参考文献

- [1] Padinger F, Rittberger R S, Sariciftci N S 2003 *Adv. Funct. Mater.* **13** 85
- [2] Ma W, Yang C, Gong X, Lee K, Heeger A J 2005 *Adv. Funct. Mater.* **15** 1617
- [3] Kim J Y, Kim S H, Lee H H, Lee K, Ma W, Gong X, Heeger A J 2006 *Adv. Mater.* **18** 572
- [4] Li G, Yao Y, Yan H, Shrotriya V, Yang G, Yang Y 2007 *Adv. Funct. Mater.* **17** 1636
- [5] Girtan M, Rusu M 2010 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **94** 446
- [6] Rider D A, Worfolk B J, Harris K D, Lalany A, Shahbazi K, Fleischauer M D, Buriak J M 2010 *Adv. Funct. Mater.* **20** 2404
- [7] Hains A W, Marks T J 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 023504
- [8] Pingree L S, Macleod B A, Ginger D S 2008 *J. Phys. Chem. C* **112** 7922
- [9] Kim J, Jung S, Jeong I 2012 *J. Opt. Soc. Korea* **1** 6
- [10] Li G L, Li J, Zhen H Y 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 207203 (in Chinese)[李国龙, 李进, 甄红宇 2012 物理学报 **61** 207203]
- [11] Gilot J, Barbu I, Wienk M M, Janssen R A 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 113520
- [12] McNeill C R, Westenhoff S, Groves C, Friend R H, Greenham N C 2007 *J. Phys. Chem. C* **111** 19153
- [13] Credginton D, Durrant J R 2012 *J. Phys. Chem. Lett.* **3** 1465
- [14] Faria G C, de Azevedo E R, von Seggern H 2013 *Macromolecules* **46** 7865
- [15] Irwin M D, Servaites J D, Buchholz D B, Leever B J, Liu J, Emery J D, Marks T J 2011 *Chem. Mater.* **23** 2218
- [16] Xiao Z G, Zeng X S, Guo H M, Zhao Z F, Shi T F, Wang Y Q 2012 *Acta Phys. Lett.* **61** 026802 (in Chinese)[肖正国, 曾雪松, 郭浩民, 赵志飞, 史同飞, 王玉琦 2012 物理学报 **61** 026802]
- [17] Shen X C 1992 *Optical Properties of Semiconductor* (Beijing: Science Press) p20 (in Chinese) [沈学础 1992 半导体光学性质 (北京: 科学出版社) 第 20 页]
- [18] Monestier F, Simon J J, Torchio P, Escoubas L, Flory F, Bailly S, Defranoux C 2007 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **91** 405
- [19] Vacar D, Maniloff E S, McBranch D W, Heeger A J 1997 *Phys. Rev. B* **56** 4573
- [20] Deibel C, Strobel T, Dyakonov V 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 036402
- [21] Hausermann R, Knapp E, Moos M, Reinke N A, Flatz T, Ruhstaller B 2009 *J. Appl. Phys.* **106** 507

Influence of NiO_x hole-transporting layer on the light absorption of the polymer solar cells*

Pu Nian-Nian¹⁾ Li Hai-Rong^{1)2)†} Xie Long-Zhen¹⁾

1) (*Institute of Micro-Electronics, Lanzhou University, Lanzhou 730001, China*)

2) (*Key Laboratory for Magnetism and Magnetic Materials of the Ministry of Education, Lanzhou University, Lanzhou 730001, China*)

(Received 24 October 2013; revised manuscript received 7 December 2013)

Abstract

Polymer solar cell composed of the blend bulk- heterojunctions is fabricated by the conjugated polymer as donor material and fullerene as acceptor material. P3HT and PCBM are chosen in the present study. The effect of the NiO_x layer on the light absorption of the polymer solar cell is investigated via the transfer matrix of the multilayer dielectric film, Maxwell equations and photon absorption equation. NiO_x as alternative material of PEDOT : PSS in polymer solar cell can redistribute the electromagnetic field of device and effectively improve the light absorption. in the device with structure of ITO/HTL/P3HT : PCBM/LiF : Al, and the effects of PEDOT : PSS and the NiO_x on the performance of device are investigated by numerical simulation. The results show that the optimal NiO_x layer device with a thickness of 10 nm has a larger short-circuit current, filling factor and energy-conversion efficiency than the 40 nm thick PEDOT : PSS device.

Keywords: NiO_x , P3HT : PCBM, polymer solar cell, light absorption

PACS: 72.40.+W, 88.40.jr, 84.60.jt

DOI: 10.7498/aps.63.067201

* Project supported by the Gansu Province Science and Technology Plan, China (No. 1107RJZA090).

† Corresponding author. E-mail: hrli@lzu.edu.cn