

基于新型材料 PTB7-Th 的串联结构聚合物 太阳能电池仿真研究

黄智森 臧月* 辛青林 君

(杭州电子科技大学电子信息学院, 杭州 310018)

摘 要 采用新型给体材料 PTB7-Th 与受体材料 PC₇₁BM 的混合层作为串联结构聚合物太阳能电池的后电池。通过光学传输矩阵理论,研究前后电池活性层厚度以及超薄金属 Ag 薄膜对串联器件短路电流密度的影响。结果表明:当前电池厚度为 190nm、后电池厚度为 90nm 时,器件的短路电流密度达到最大值。通过在中间连接层引入超薄金属 Ag 薄膜,利用光学谐振微腔效应,实现前后电池的电流匹配,可以进一步提高串联结构聚合物太阳能电池的性能。

关键词 聚合物太阳能电池,串联结构,光学仿真,超薄金属 Ag 薄膜

Optical modeling of tandem PSCs based on a new material PTB7-Th

Huang Zhimiao Zang Yue Xin Qin Lin Jun

(Electronics and Information College, Hangzhou Dianzi University, Hangzhou 310018)

Abstract Polymer solar cells (PSCs) that harvesting clean solar energy has been considered as a promising candidate for the next generation of photovoltaic technology to solve the impending energy crisis. Compared with conventional inorganic solar cells, PSCs exhibited advantages, such as low cost, light-weight, and roll-to-roll processing on flexible substrates. In order to improve the performance of PSCs, a highly efficient donor polymer PTB7-Th combined with acceptor fullerene PC₇₁BM was introduced as the subcell in the series-connected polymer tandem solar cells. The effects of active layer thickness and use of ultrathin Ag film on the short-current density (J_{sc}) were studied based on transfer matrix method. It was found that the maximum J_{sc} was achieved in the tandem device with a front cell active layer thickness of 190nm and a back subcell blend layer thickness of 90nm. The performance of the tandem cells can be further improved by inserting an ultrathin Ag layer in the interconnection layer with micro-cavity effect to realize the current matching in the subcells.

Key words polymer solar cells, tandem structure, optical modeling, ultrathin metal Ag film

聚合物太阳能电池由于具有低成本、柔性、质轻和可大面积制备等优势,成为最具发展潜力的下一代光伏发电技术^[1]。通过设计和合成新型材料、优化器件结构,单异质结聚合物太阳能电池的效率已接近 10%^[2-3]。然而,由于单一聚合物给体材料的吸收波长范围窄,不能充分利用太阳光并转换成电能,造成能量损失。当太阳光的光子能量小于给体材料的禁带宽度时,这部分太阳光无法被吸收;而当太阳光的光子能量大于给体材料的禁带宽度时,多余的光子能量会通过热辐射释放出来。因此,为了

解决这一问题,科学家们通过将两个不同的子电池串联起来实现对太阳光的互补吸收,制备了高效率的串联结构聚合物太阳能电池。

串联结构聚合物太阳能电池通常包括一个宽带隙的前电池和一个窄带隙的后电池,前电池吸收能量高的光子,后电池吸收能量低的光子,两个子电池通过中间连接层(ICL)实现串联^[4]。串联结构电池的开路电压(V_{oc})等于两个子电池开路电压之和,而短路电流(I_{sc})等于两个子电池短路电流中较小的那个数值。因此,如何实现两个子电池短路电流

基金项目:国家重点研发计划重大科学仪器设备开发重点专项(2016YFF0101908);国家自然科学基金(61705054);浙江省自然科学基金(LQ17F050002)

作者简介:黄智森(1997-),男,本科生,主要研究方向为有机太阳能电池。

联系人:臧月,女,博士,副研究员,主要研究领域为有机太阳能电池。

的匹配对开发高性能的串联结构聚合物太阳能电池是十分重要的。通过减少两个子电池活性层材料的吸收交叠是平衡子电池电流的有效方法之一,然而由于目前缺乏好性能的窄带隙($E_g < 1.5\text{eV}$)聚合物材料使这一方法受到限制^[5]。此外,还可通过调节器件内部的光场分布来达到电流匹配的目的^[6]。例如在中间连接层中引入超薄金属层,利用光学谐振微腔效应对两个子电池的光吸收进行调控,实现前后电池的电流匹配,进而提高串联结构器件的总电流。

最近,科学家们研发了一种新型的聚合物给体材料—PTB7-Th^[7]。由于其分子具有二维结构,因此 PTB7-Th 具有较高的光吸收效率和载流子迁移率。基于 PTB7-Th 和 PC₇₁BM 的单异质结器件效率已达到 9%~10%^[8-9]。基于这些研究进展,有必要将 PTB7-Th:PC₇₁BM 电池应用到串联结构体系中,实现高效率的串联结构聚合物太阳能电池。

本研究将 PTB7-Th:PC₇₁BM 作为串联结构器件的后电池,P3HT:PC₇₁BM 作为前电池,基于光学传输矩阵理论,通过光学仿真,研究前后电池活性层厚度、超薄金属薄膜对串联器件性能的影响。通过合理设计器件结构,调节活性层光吸收,平衡前后电池的光电流,最终实现高效率的串联结构聚合物太阳能电池。

1 理论模型

聚合物太阳能电池通常由多层不同材料的薄膜构成,器件内的光场分布可以通过光学传输矩阵法得到^[10]。光学传输矩阵理论本质上是求解麦克斯韦方程组。对于具有 m 个薄膜的器件,共有 $m+1$ 个界面($j=0,1,2,\dots,m,m+1$),最外面的两层 $j=0$ 和 $j=m+1$ 层的光电场通过传播矩阵 S 来联系,见式(1)。

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

式中, S 为光场传播矩阵; $\bar{E}_0^\pm, \bar{E}_{m+1}^\pm$ 分别是在第 0 和第 $m+1$ 层,沿正负方向传播的光电场强度。

其中, S 可按式(2)得到。

$$S = \left(\prod_{n=1}^m I_{(n-1)n} L_n \right) \cdot I_{m(m+1)} \quad (2)$$

式中, $I_{(n-1)n}$ 为在第 $n-1$ 层和第 n 层界面光场传播的界面矩阵; $I_{m(m+1)}$ 为在第 m 层和第 $m+1$ 层界面光场传播的界面矩阵; L_n 为相移矩阵,由于光

在第 n 层传播会被材料吸收,从而发生一个相移,该相移用矩阵 L_n 描述。

S 矩阵称为光学薄膜传输矩阵。通过将以上公式进行推广,就可以计算出各层中任意一点的光电场,见式(3)。

$$\bar{E}_j(x) = \bar{E}_j^+(x) + \bar{E}_j^-(x) \quad (3)$$

式中, $\bar{E}_j(x)$ 为第 j 层内任何一处的光电场强度, $\bar{E}_j^+(x)$ 和 $\bar{E}_j^-(x)$ 分别为第 j 层内任何一处沿正负方向传播的光电场强度。

根据式(3)可以得到聚合物太阳能电池活性层理论的光吸收效率,从而获得最优化的器件结构。

2 结果与讨论

本研究中所涉及的材料分子式如图 1(a)所示;串联结构聚合物太阳能电池的器件结构如图 1(b)所示。PTB7-Th 的禁带宽度为 1.57eV,因此作为串联电池的后电池,而前电池采用宽禁带聚合物 P3HT。图 2 给出了 PBT7-Th:PC₇₁BM 和 P3HT:PC₇₁BM 薄膜的复折射率。由图可知,前后电池活

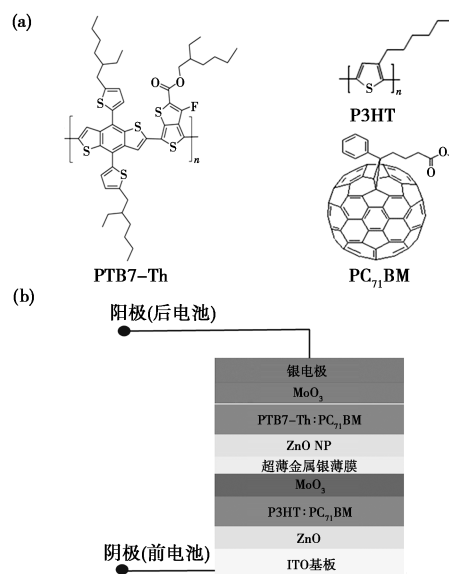


图 1 材料分子式(a)与器件结构(b)图

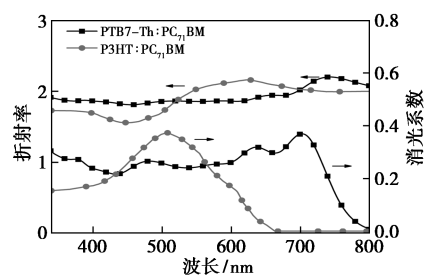


图 2 PBT7-Th:PC₇₁BM 和 P3HT:PC₇₁BM 薄膜的复折射率变化趋势图

性层具有很好的互补吸收特性,有利于获得高性能的串联结构聚合物太阳能电池器件。

基于薄膜材料的复折射率,利用光学传输矩阵理论,可以对串联结构聚合物太阳能电池的性能进行仿真。不同前后电池活性层厚度对串联结构聚合物太阳能电池短路电流密度(J_{sc})的影响见图 3。P3HT:PC₇₁BM 的厚度变化范围为 40~200nm, PBT7-Th:PC₇₁BM 的厚度变化范围为 40~150nm。可以看出,当前电池的厚度从 40nm 增加到 100nm 时,P3HT:PC₇₁BM 层的短路电流密度小于 PBT7-Th:PC₇₁BM 层,因此 P3HT:PC₇₁BM 层是限制串联器件性能的主要因素。然而,当前电池的厚度大于 190nm 时,后电池 PBT7-Th:PC₇₁BM 层具有较低的 J_{sc} 值,从而限制整个器件的性能。因此,当前电池厚度为 190nm、后电池厚度为 90nm 时,串联结构器件总的 J_{sc} 可以达到最大值,为 10.41mA/cm²。

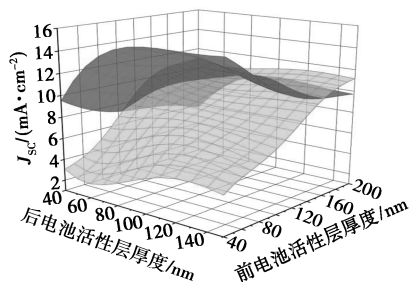


图 3 前(上平面)后(下平面)电池活性层厚度对串联结构聚合物太阳能电池短路电流密度的影响
(中间连接层为 MoO₃/ZnO NP)

研究人员发现,通过在中间连接层引入超薄金属 Ag 薄膜,利用光学谐振微腔效应可以提高串联结构太阳能电池的性能。因此,本实验设计了基于 MoO₃/Ag/ZnO NP 中间连接层的串联结构器件,其中 Ag 薄膜厚度为 4nm。图 4 给出了在引入 Ag 薄层后,前后电池活性层厚度对器件短路电流密度的影响。由图可见,串联结构聚合物太阳能电池的最大 J_{sc} 为 11mA/cm²,此时前电池的厚度为 200nm,后电池的厚度为 90nm。因此,超薄金属 Ag 薄膜提高了串联结构器件的短路电流密度。此时器件内部的光场分布情况如图 5 所示。由图可见,由于金属 Ag 薄膜的反射作用,波长为 300~600nm 的太阳光主要被前电池吸收;而由于谐振微腔效应,600~780nm 的太阳光被限制在后电池中。因此,提高了整个器件的光吸收效率,使得前后电池的光电流更加匹配。

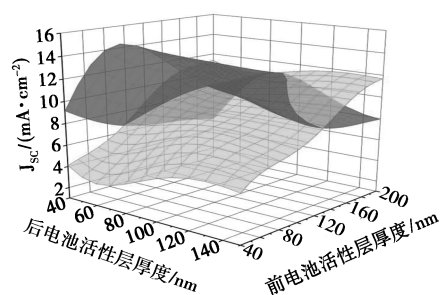


图 4 前(上平面)后(下平面)电池活性层厚度对串联结构聚合物太阳能电池短路电流密度的影响
(中间连接层为 MoO₃/Ag/ZnO NP)

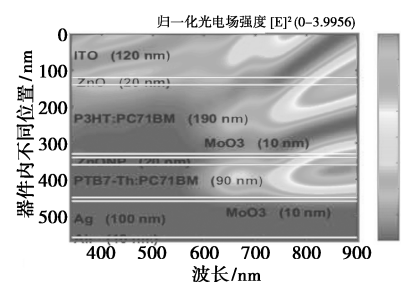


图 5 串联结构聚合物太阳能电池器件内部的光场分布图

3 结论

基于光学传输矩阵理论,系统研究了基于新型给体材料 PTB7-Th 的串联结构聚合物太阳能电池的性能。研究表明,当前电池 P3HT:PC₇₁BM 的厚度为 190nm,后电池 PBT7-Th:PC₇₁BM 的厚度为 90nm 时,串联结构聚合物太阳能电池的短路电流密度最大。利用谐振微腔效应,在中间连接层引入超薄金属 Ag 薄膜,可以进一步提高其短路电流密度。因此,本研究为制备高性能的串联结构聚合物太阳能电池提供了理论支持。

参考文献

- [1] 胡洪超,崔英德.聚合物太阳能电池及材料研究进展[J].化工学报,2016,67(S1):7-21.
- [2] Chen J D, Cui C, Li Y Q, et al. Single-junction polymer solar cells exceeding 10% power conversion efficiency[J]. Advanced Materials, 2015, 27(6): 1035-1041.
- [3] He Z, Zhong C, Su S, et al. Enhanced power-conversion efficiency in polymer solar cells using an inverted device structure [J]. Nature Photonics, 2012, 6(9): 591-595.
- [4] Sista S, Hong Z, Chen L M, et al. Tandem polymer photovoltaic cells-current status, challenges and future outlook[J]. Energy Environmental Science, 2011, 4(5): 1606-1620.

(下转第 143 页)