

文章编号: 1000-7032(2022)12-1983-08

## 反式平面钙钛矿太阳能电池的光学损失分析

郭日朗, 吴绍航\*, 张翠苓, 谢 恹, 刘雅晴, 麦耀华

(暨南大学 信息科学技术学院, 新能源技术研究院, 广东 广州 510632)

**摘要:** 实现高效率光伏器件的先决条件之一是入射光被吸光层有效吸收, 因此系统分析钙钛矿光伏电池中的光学损失机制, 优化吸光层的光吸收, 对于提升效率十分重要。本文针对反式平面钙钛矿太阳能电池, 结合电池外量子效率(EQE)、薄膜光吸收特性和理论模拟, 对比研究钙钛矿吸光层和[6,6]-phenyl-C61-butyric acid methyl ester (PCBM)界面层厚度变化对光生电流的影响。研究结果显示, 除了寄生吸收以外, 界面层对光场的调节可以影响器件中吸光层的光吸收。模拟结果显示, 660 nm的钙钛矿薄膜和40 nm的PCBM薄膜可作为优化的选择, 其对应积分电流为24.93 mA/cm<sup>2</sup>。本文还探究了PbI<sub>2</sub>层的加入对钙钛矿吸光层吸收特性的影响, 结果显示PbI<sub>2</sub>聚集在钙钛矿层靠入射光侧时会导致显著的光学损失, 而PbI<sub>2</sub>聚集在钙钛矿层靠背电极一侧时, 则影响相对较小。

**关键词:** 钙钛矿; 光学分析; 传输矩阵模型; 光吸收

中图分类号: TM914.4 文献标识码: A DOI: 10.37188/CJL.20220241

## Optical Loss Analysis of Inverted Planar Perovskite Solar Cells

GUO Ri-lang, WU Shao-hang\*, ZHANG Cui-ling, XIE Yi, LIU Ya-qing, MAI Yao-hua

(Institute of New Energy Technology, College of Information Science and Technology, Jinan University, Guangzhou 510632, China)

\* Corresponding Author, E-mail: wushaohang@jnu.edu.cn

**Abstract:** One of the prerequisites for realizing high efficiency photovoltaic devices is that the incident light is effectively absorbed by the light absorbing layer. Therefore, it is very important to improve efficiency to systematically analyze the optical loss mechanism of perovskite photovoltaic cells and optimize the light absorption of the light absorbent layer. In this paper, for inverted planar perovskite solar cells, combining with the external quantum efficiency (EQE) of the cell, the light absorption characteristics of the film and theoretical simulation, the effects of the thickness changes of perovskite thin film as the light absorption layer and [6,6]-phenyl-C61-butyric acid methyl ester (PCBM) thin film as the interface layer on photogenerated current were compared and studied. The results show that, in addition to parasitic absorption, the adjustment of the optical field by the interface layer can affect the optical absorption of the light absorption layer in the device. The simulation results show that 660 nm perovskite film and 40 nm PCBM film can be used as the optimal choice, and the corresponding integral current is 24.93 mA/cm<sup>2</sup>. This paper also explored the influence of the addition of PbI<sub>2</sub> layer on the absorption characteristics of the perovskite light absorbing layer. The results indicate that when PbI<sub>2</sub> accumulates on the side of the perovskite layer near the incident light, it leads to significant optical loss. However, when PbI<sub>2</sub> accumulates on the side of the perovskite

收稿日期: 2022-06-17; 修订日期: 2022-07-14

基金项目: 广东省基础与应用基础研究基金项目(粤佛联合基金重点项目2021B1515120003); 国家自然科学基金青年项目(62005099) 资助

Supported by Guangdong Basic and Applied Basic Research Fund (Key project of Guangdong-Foshan Joint Fund, 2021B1515120003); National Natural Science Foundation of China (62005099)

layer near the back electrode, the influence is relatively small.

**Key words:** perovskite; optical analysis; transfer matrix model; light absorption

## 1 引 言

截止到目前,钙钛矿(Perovskite,简称PVK)太阳能电池被认证的最高实验室转换效率已达到25.7%<sup>[1]</sup>,但是距离理论极限(~31%)<sup>[2]</sup>还有较大的差距。钙钛矿太阳能电池的器件结构主要有三种:正式介孔结构、正式平面结构和反式平面结构。反式平面结构电池具有容易制备且器件稳定性好的优势,也被认为是最具产业化可行性的钙钛矿器件。系统分析反式平面结构钙钛矿太阳能电池的光学损失机制,对其性能的进一步提升具有重要意义。

器件的光生电流值影响效率,其主要受钙钛矿层的光吸收影响,公式<sup>[3]</sup>为 $J_{ph} = q \int_{\lambda} \Phi(\lambda) A(\lambda) d\lambda$ ,其中, $q$ 为单位电荷, $\lambda$ 为入射光波长, $\Phi$ 为AM 1.5G光谱的光子通量, $A$ 为钙钛矿层的吸收光谱。2015年,牛津大学Snaith团队<sup>[4]</sup>对“玻璃/FTO/TiO<sub>2</sub>/钙钛矿/Spiro-OMeTAD/Au”结构进行光学分析,当钙钛矿薄膜厚度较薄(75 nm)时,光生电流受界面层影响较大,当钙钛矿层厚度达到492 nm时则受界面层影响很小。同年,昆士兰大学Meredith团队<sup>[5]</sup>揭示了钙钛矿电池中钙钛矿薄膜存在两种光吸收模式,即短波段受Beer-Lambert法则主导而长波段受干涉影响,从而导致光生电流密度和钙钛矿薄膜厚度并非完全单调一致。

本文将系统研究反式平面钙钛矿电池的光学特性。首先,分析各层薄膜的光学特性,并建立模型,和实际器件的外量子效率(External quantum efficiency, EQE)进行比对,分析并确认光学模拟的可靠性。然后采用传输矩阵模型仿真在钙钛矿和PCBM薄膜厚度连续变化情况下光学特性的变化。特别地,针对普遍存在的PbI<sub>2</sub>过量情况,本文还模拟了将PbI<sub>2</sub>分别插入钙钛矿前或后表面对钙钛矿光吸收的影响。

## 2 测试原理与传输矩阵模型

光照射在物体上主要会发生反射、吸收和透射,还有微量的散射等。假设入射光占比为100%(即1),则反射光( $R$ )、透过光( $T$ )和吸收光( $A_{abs}$ )的关系式为 $1 = R + T + A_{abs}$ (散射等其他光传播行为

忽略不计)<sup>[6]</sup>,通过紫外-可见-近红外分光光度计测量得到物体对光的反射和透射,再通过公式 $A_{abs} = 1 - R - T$ 计算出物体对光的吸收量。

本文采用的是反式结构的钙钛矿太阳能电池:glass/ITO/poly[bis(4-phenyl)(2,4,6-trimethylphenyl)amine](PTAA)/PVK/[6,6]-phenyl-C61-butyric acid methyl ester(PCBM)/Ag。如图1所示,首先测量ITO玻璃的透过和反射,然后在基底上依次制备各膜层,每沉积一层都要测量透过和反射,直至整个器件制备完毕。由公式 $A_{abs} = 1 - R - T$ 计算得出每一次测量的吸收结果,并用沉积一膜层后的吸收减去沉积该膜层前的吸收,通过该方法即可获得每一膜层的吸收,其中重点关注钙钛矿层的吸收。

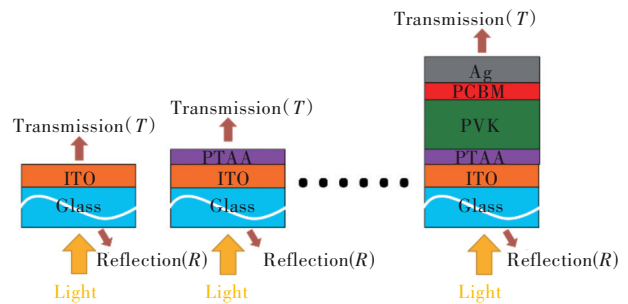


图1 测量薄膜吸收原理图

Fig.1 Schematic diagram of measuring film absorption

钙钛矿太阳能电池属于多层薄膜结构<sup>[7]</sup>,除玻璃基底相对比较厚(超过1 mm),其他膜层都比较薄,在1 μm范围内。基于光路模拟的传输矩阵模型能准确地反映光在多层薄膜器件里的入射、反射和吸收等<sup>[8-9]</sup>,该模型假设器件具有各向同性且均匀的介质,以及平面平行的分层结构<sup>[10-11]</sup>。从光谱型椭偏仪中提取光学特性数据,包括复折射率中的折射率 $n$ (Refractive index)和消光系数 $k$ (Extinction coefficient)(如图S1),以及从台阶仪中提取各层薄膜厚度数据,将这些数据代入传输矩阵模型,通过计算器件内部的光电场分布,进而计算出各层的光吸收分布<sup>[12-13]</sup>。在传输矩阵模型的仿真中也重点关注钙钛矿层的吸收。本文的传输矩阵模型利用Python编程语言实现仿真,代码来自斯坦福大学McGehee组<sup>[14]</sup>,具体数学物理模型<sup>[15]</sup>见补充文件。

### 3 结果与讨论

本文采用  $\text{FA}_{0.95}\text{Cs}_{0.05}\text{PbI}_3$  钙钛矿, 其主要能对 300~850 nm 波长范围内的光吸收并进行光电转换。因此, 以下实验测试和仿真模拟的波长均在 300~850 nm 范围内。

#### 3.1 钙钛矿吸收曲线与 EQE 曲线比较

图 2(a)~(i) 为改变 PCBM 和钙钛矿层厚度时器件的光谱响应特性。钙钛矿厚度为 460, 560, 700 nm, PCBM 厚度为 20, 40, 90 nm。图 2(a)~(i)

的横坐标为入射光波长( $\lambda$ ), 纵坐标为电池器件的 EQE 强度或对光的吸收比重。黑色曲线代表器件的 EQE, 绿色曲线代表通过传输矩阵模型仿真出的钙钛矿的吸收, 红色曲线代表由实测透过和反射计算得出的钙钛矿的吸收。EQE 曲线反映从光入射吸收到电输出的结果, 模拟吸收曲线反映具有平坦表面的光吸收结果, 而计算出的吸收曲线反映具有粗糙度表面的光吸收结果, 三种曲线进行对比是为了验证忽略一定粗糙度后的传输矩阵光学分析能够与电学分析相匹配(如表 S1)。

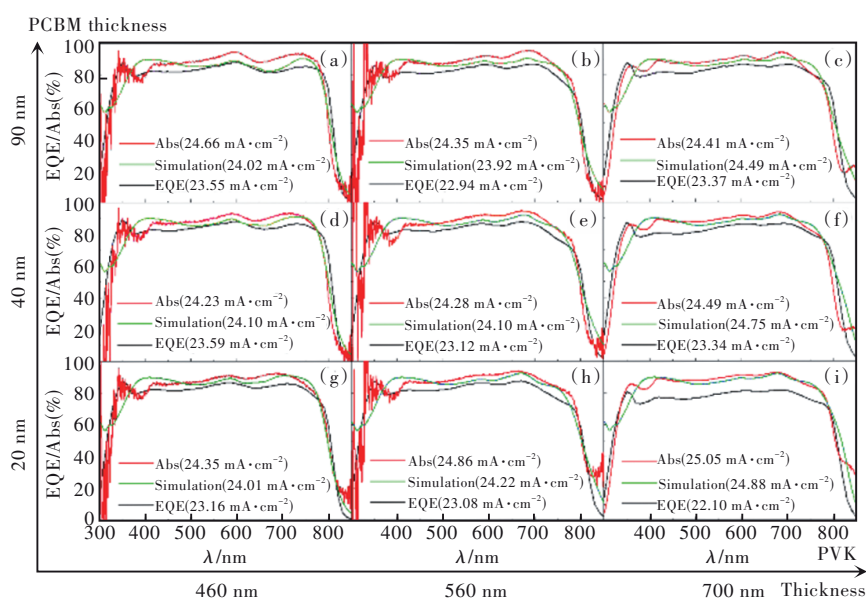


图 2 钙钛矿薄膜的吸收曲线与器件 EQE 曲线的比较

Fig.2 Comparison of absorption curve of perovskite thin film with EQE curve of device

波长在 300~500 nm 范围内时, 三条曲线的形状并不相同, 其可能的原因是器件入光面的表面复合产生的影响以及钙钛矿的缺陷影响了对该波段范围内的光电转化。虽然曲线的形状不同, 但是从图 S3 可以看出, 每一波段范围内的积分电流差异较小, 对最终结果影响较小。在 500~800 nm 的波长范围内, 三条曲线的形状和走向大致相同, 但存在一定差异。其原因在于: (1) 钙钛矿材料本身的特性决定, 它对每种波长的光电转换能力不尽相同, 且器件存在一定的缺陷, 致使对于不同波长, 器件 EQE 与钙钛矿吸收之间的差值不同; (2) 绿线和红线分别对应的吸收曲线不能完全重合, 其原因来源于不同波长的光子入射到完整器件与入射到非完整器件的光场分布存在区别及传输矩阵模型的缺点: 模型只能模拟互不干扰的多层平面薄膜, 而实际情况中器件里的各层之间不是平面刚性接触的, 它们是相互接触、相互影响甚至互

相反应混合的, 而且传输矩阵模型只考虑光的透过、反射和吸收, 没有考虑散射等情况的发生。当波长大于 800 nm 时, 除部分红线外, 大部分曲线趋于零值。实际上, 在该钙钛矿体系下, 即使曲线未趋近于零值也不可能将光能转变为电能, 因此本文不做深入探讨。

图 2(a)~(i) 中三种曲线图例标签括号里的积分电流分别为: (1) 将钙钛矿的吸收与 AM1.5G 光谱相乘得到的积分电流; (2) 模拟仿真获得的积分电流; (3) EQE 设备测得的器件的积分电流。三者积分电流相比基本符合, 测试计算得到的积分电流 > 模拟仿真的积分电流 > EQE 设备测得的积分电流。原因在于: 在测试计算中, 微量的散射被计算到钙钛矿的吸收里, 导致其数值偏大; 而在仿真中假设载流子完全利用, 忽略了载流子的复合<sup>[16]</sup>; 然而, 在实际情况下制备的钙钛矿器件会不可避免地产生缺陷, 从而增加载流子的耗损<sup>[17]</sup>, 导



致载流子利用率整体降低。

从图 2(a)~(i)可以看出,在不同的图之间,同类型同颜色的曲线也不同,体现在大于 550 nm 波长的曲线形状(如图 S4 和图 S5),其变化规律是:随着 PCBM 或 PVK 厚度的增加,波峰波谷会整体红移,即向长波方向移动。因为长波的光能到达银背电极,产生反射导致干涉现象的产生,最终形成驻波,产生波峰波谷,波峰波谷位置会随 PCBM 或 PVK 厚度变化而移动。其原因为薄膜厚度的改变导致入射光的光程发生了变化,最终造成同一波长的光干涉强度改变。在波长小于 550 nm 处曲线形状基本不变,因为短波(300~550 nm 波长)的光穿透力比较差,还没到达银背电极就已经被完全吸收。从整体趋势上来看,钙钛矿薄膜越厚,光吸收越多,但实际制备却愈发困难,所以需要选择合适的膜层厚度来制备电池器件。

从最终曲线形状来看,可以看出图 2(a)~(i)中(除 300~400 nm 处的绿色曲线外),每张图里的三条曲线形状是大致相同的,EQE 曲线相对于两种吸收曲线平行下移,推测是电池内电荷传输及载流子复合损耗等问题产生的,该结果证明了光学分析和电学分析的一致性,同时证明了光学分析的可靠性。为了能够更快更便捷地分析如何提高电池的短路电流,本文将采用软件模拟的方式来进行前期的探索,为后续实验提供理论指导,如此既能提高工作效率,又能减少对实验材料的浪费。所以以下内容均采用传输矩阵模型进行模拟仿真。

### 3.2 PCBM 和 PVK 的厚度对积分电流的影响

如图 3 所示,采用软件模拟不同 PCBM 和 PVK 厚度时钙钛矿的吸收,再通过将钙钛矿的吸收乘以 AM1.5G 光谱,并对波长在 300~850 nm 范围内的结果进行积分计算得出积分电流。用不同颜色来区分积分电流的大小,更直观地显示钙钛矿吸收的多少。

如图 3(a)所示,当 PCBM 厚度固定时,随着 PVK 厚度的增加,钙钛矿吸收并不是直线上升和一直增加的,期间会出现小幅度的波动,这是由器件内干涉现象所致,但钙钛矿吸收的整体趋势是增加的。当 PVK 厚度小于 150 nm 时,钙钛矿吸收所换算的积分电流不超过 20 mA/cm<sup>2</sup>。当 PVK 厚度从 0 nm 增加到 200 nm,钙钛矿吸收的增长趋势比较迅猛,积分电流迅速增加。之后,随着 PVK

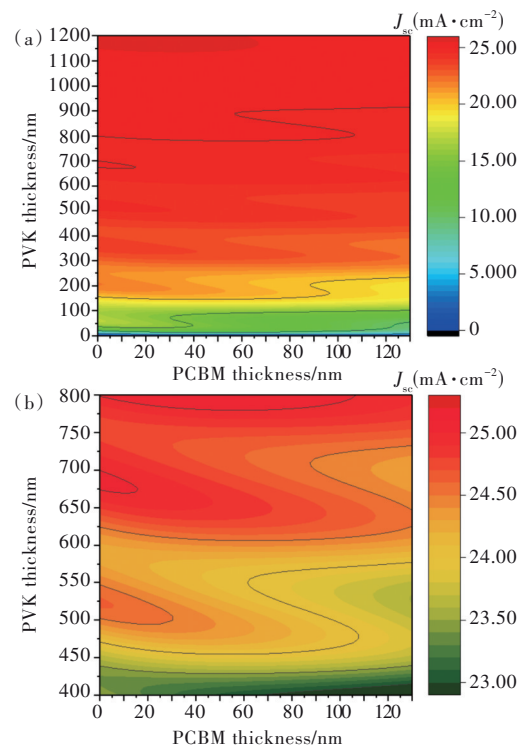


图 3 软件模拟不同 PCBM 和 PVK 厚度时钙钛矿吸收计算出的积分电流

Fig.3 The software simulates the integrated current calculated by perovskite absorption with different thickness of PCBM and PVK

厚度的进一步增加,积分电流的增加趋势逐渐减缓。当 PVK 从 1 200 nm 增加到 2 000 nm 时,其吸收所换算的积分电流提升很小(<0.5 mA/cm<sup>2</sup>),因此,本文模拟 PVK 最大厚度为 1 200 nm。

虽然从光学吸收的角度上看,PCBM 越薄,钙钛矿吸收越多;PCBM 越厚,钙钛矿吸收越少(如图 3(a))。但是在实际器件中,PCBM 太薄不能完全覆盖钙钛矿层,导致钙钛矿层与电极直接接触进而产生器件漏电;太厚又会因吸收过多的光而影响钙钛矿的吸收,所以 PCBM 需要选择一个合适的厚度。本文主要采用 40 nm,在工艺上容易实现良好的覆盖性,具体操作可行性高。

本文所制备的 PVK 厚度主要在 400~800 nm 之间,所以将图 3(a)中 PVK 厚度在 400~800 nm 的区间进行放大查看(如图 3(b))。因为越厚的钙钛矿薄膜越难高质量地制备<sup>[18]</sup>,所以在此应选择一个合适的 PVK 厚度。在图 3(b)中,当 PCBM 为 40 nm 时,最佳的 PVK 厚度在 500, 660, 800 nm 附近。实际制备中,钙钛矿薄膜的厚度受溶液浓度影响显著,难以获得高质量的钙钛矿厚膜。一般情况下,虽然 PVK 厚度的增加可以增强光捕获能

力,但是薄膜质量下降会导致器件内部复合加剧<sup>[19-20]</sup>,最终限制了对电极电荷的提取。因此,当钙钛矿过厚时,产生的大多数载流子在到达电极之前将重组<sup>[21]</sup>,所以排除 800 nm。而 500 nm 和 660 nm 的钙钛矿薄膜都能高质量地制备,从模拟结果来看,基于本文的结构和材料,660 nm PVK 的积分电流更高,为 24.92 mA/cm<sup>2</sup>,所以采用 660 nm 的钙钛矿薄膜有助于获得更高的效率。

### 3.3 (光照下)电池器件里的光电场分布和钙钛矿光生载流子的产生率

图 4(a)展示了当改变钙钛矿薄膜的厚度时不同波长的光在钙钛矿器件中的场强分布情况。横坐标代表各膜层在电池器件的位置,从左到右分别为 ITO(100 nm)、PTAA(25 nm)、PVK(分别为 460, 560, 700 nm)、PCBM(40 nm)、Ag(130 nm);纵坐标为归一化的光场强度,光线从左垂直入射。

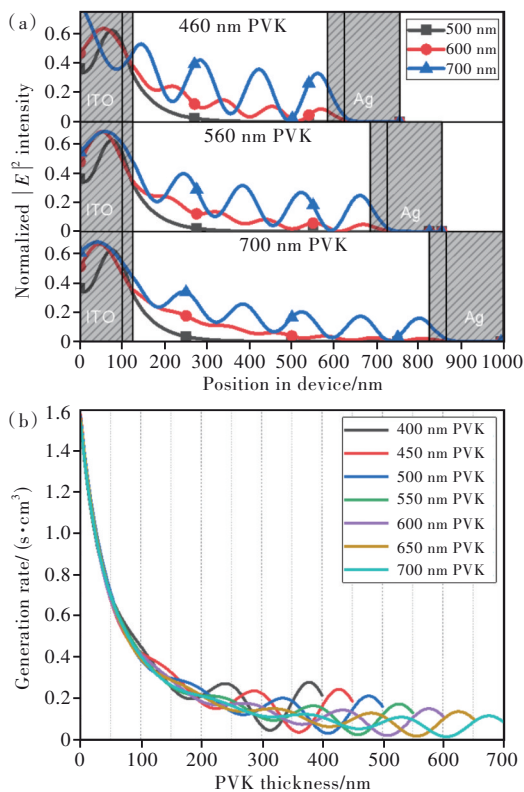


图 4 光的场强分布(a)和光生载流子的产生率(b)

Fig.4 The field intensity distribution of light (a) and the generation rate of photogenerated carriers(b)

由图 4(a)可以看出,当光入射到器件内部后并不会一直衰减,会在部分位置较强或较弱,呈波浪状,说明光在器件里发生了干涉现象。因为只有钙钛矿层才能将吸收的光能转变成电能,所以

重点观察 PVK 里的光强分布。波长为 500 nm 的光照射到器件中,其光强分布遵循 Beer-Lambert 吸收定律。由于 PVK 的高吸收系数,光在 PVK 里的强度逐渐降低,基本没有光能到达金属银背电极<sup>[6]</sup>,波长在 300~550 nm 的入射光也是如此。而 600 nm 的光强度在 PVK 里呈波浪状分布,因为该部分的光既遵循 Beer-Lambert 吸收定律,又能到达银背电极产生反射,使入射光与反射光相互叠加从而形成干涉,最终导致驻波的出现,其是两种吸收模式的结合,且波长越长的入射光在器件内的干涉现象越明显,如 700 nm 的入射光,其波峰波谷的差值更大。因此,器件对于短波和长波光吸收方式不尽相同,且所得到的结论适用于其他波长的入射光。随着 PVK 厚度的增加,光在 PVK 内的干涉效应逐渐减弱,这也说明在整体趋势上,PVK 增厚使吸光更加充分,能减少光到达背电极。银电极对可见光的反射率很大,电极内部光的干涉极弱,光电场强度很小且随光的深入很快降至为零<sup>[22]</sup>。

图 4(b)展示了 PCBM 为 40 nm 时,不同钙钛矿厚度的器件里钙钛矿层的光生载流子产生率随 PVK 厚度的变化,该处画出了 7 种不同厚度的 PVK。可以看到,光在钙钛矿内产生干涉现象后,随 PVK 厚度增加,载流子产生率整体的波峰波谷值都会随之降低,与图 4(a)得出的结论相吻合;而且峰值位置都在靠近银电极一侧,距离银电极约 60~65 nm 的位置(实际上,当 PCBM 厚度改变时,峰值位置就会发生改变,但影响较小,PCBM 越厚,峰位离银电极越近,如图 S6)。

通过图 4(a)能够细致解析在器件里 PVK 内单一波长光的场强分布,而通过图 4(b)能够对钙钛矿主要吸光波段进行整体分析,能从宏观实际应用的角度观察。根据不同的需求可以采用不同的分析方法。

综合上述分析,本文推荐使用 660 nm 的 PVK (FA<sub>0.95</sub>CS<sub>0.05</sub>PbI<sub>3</sub>)和 40 nm 的 PCBM。

### 3.4 PbI<sub>2</sub>层的加入对钙钛矿吸收的影响

在当今较高效率的钙钛矿器件<sup>[23-24]</sup>中,通常存在着 PbI<sub>2</sub> 过量。因此,高质量钙钛矿薄膜中是存在着一定量的 PbI<sub>2</sub> 的,而 PbI<sub>2</sub> 的存在位置跟工艺有很大关系。2017 年,中科院游经碧等<sup>[25]</sup>采用两步法实现了 21% 的器件效率,PbI<sub>2</sub> 主要富集在钙钛矿上表面。2018 年,北京大学赵清等<sup>[26]</sup>在钙钛矿

两侧均构建  $\text{PbI}_2$  钝化层,从而实现了更高的效率。由此,本文将深入分析  $\text{PbI}_2$  对器件光学特性的影响。在软件模拟仿真中将  $\text{PbI}_2$  单独做一层放在 PVK 层的前表面或后表面,用来探究其

对 PVK 吸收的影响。如图 5(a)~(i)所示,每幅图里横坐标为入射光波长,纵坐标是对光的吸收比重,每种颜色代表每一层的吸收,其中灰色代表反射( $R$ )。

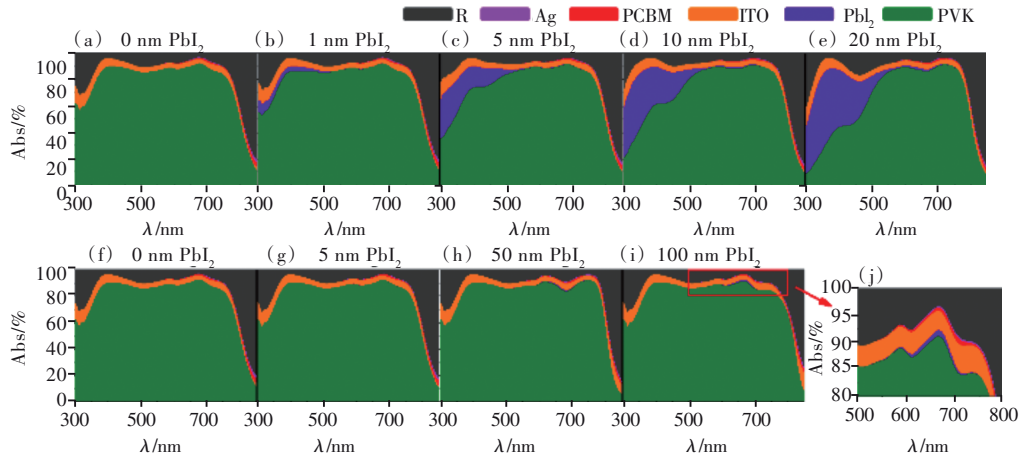


图 5 软件分别模拟当不同厚度的  $\text{PbI}_2$  层加入到钙钛矿前表面或后表面时对钙钛矿吸收的影响

Fig.5 The software simulates the effect on perovskite absorption when  $\text{PbI}_2$  layers with different thicknesses are added to the front surface or the back surface of perovskite

图 5(a)~(e)模拟了 5 种不同厚度的  $\text{PbI}_2$  层加在钙钛矿层靠近入射光一侧(即在 PTAA 层和 PVK 层之间,即 PVK 层的前表面), $\text{PbI}_2$  层的加入

会明显降低 PVK 对短波(300~550 nm 波长)光的吸收(如图 6(a))。这是因为短波光的穿透能力不强。且  $\text{PbI}_2$  对该波段的光有较大吸收,其还会

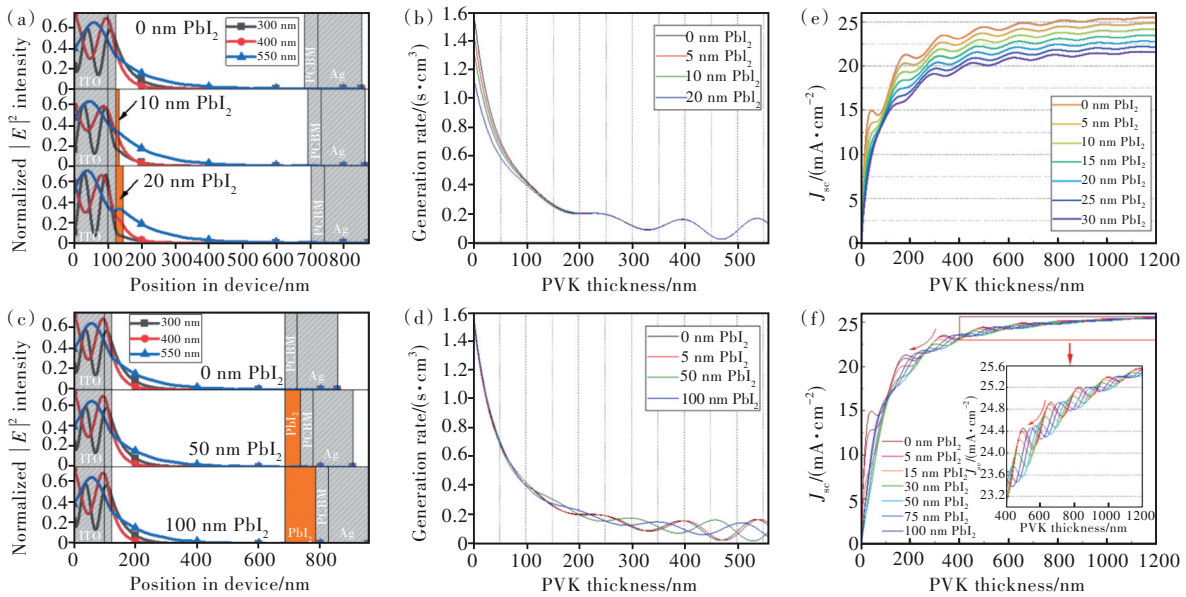


图 6 在钙钛矿层靠近入射光侧加入不同厚度  $\text{PbI}_2$  时光的场强分布(a)和光生载流子的产生率(b);在钙钛矿层靠 Ag 电极侧加入不同厚度  $\text{PbI}_2$  时光的场强分布(c)和光生载流子的产生率(d);软件分别模拟当不同厚度的  $\text{PbI}_2$  层加入到不同厚度的钙钛矿前(e)、后(f)对钙钛矿吸收的影响。

Fig.6 The field intensity distribution of light (a) and the generation rate of photogenerated carriers (b) when different  $\text{PbI}_2$  thicknesses are added to the side of the perovskite layer near the incident light. The field intensity distribution of light (c) and the generation rate of photogenerated carriers (d) when different  $\text{PbI}_2$  thicknesses are added to the side of the perovskite layer near the Ag electrode. The software simulates the influence of different thickness of  $\text{PbI}_2$  layer on perovskite absorption when it is added to the front surface (e) or the back surface (f) of perovskite of different thickness.



降低整个器件对 460~470 nm 光的吸收,使器件出现一个吸收低谷(如图 5(e))。且从图 6(b)可知,  $\text{PbI}_2$  越厚, PVK 内入光面至 100 nm 厚的光生载流子的产生率越小。

图 5(f)~(i)模拟了 4 种不同厚度的  $\text{PbI}_2$  层加在钙钛矿层靠近银背电极一侧(即在 PVK 层和 PCBM 层之间,即 PVK 层的后表面)。当 PVK 足够厚(如达到 560 nm)时,短波光在经过 PVK 层时已经被完全吸收(如图 6(c)),所以  $\text{PbI}_2$  层的加入不影响钙钛矿在短波处的吸收。即使  $\text{PbI}_2$  层达到了 100 nm(如图 5(i)),  $\text{PbI}_2$  也只对 550~750 nm 的光有微量的吸收(如图 5(j)),其吸收所换算的积分电流也不超过 0.1 mA/cm<sup>2</sup>。此时,  $\text{PbI}_2$  层的加入主要影响钙钛矿对长波(550~850 nm 波长)段的吸收。因为整个器件的厚度发生了变化,改变了光程,致使每种波长的光在器件里产生干涉现象,形成驻波的波峰波谷大小和位置产生变化。且从图 6(d)得出,光生载流子的产生率发生了明显的变化。

图 6(e)~(f)中横坐标为 PVK 层的厚度,纵坐标为积分电流,每种颜色的曲线代表固定  $\text{PbI}_2$  厚度时,随 PVK 厚度的增加,钙钛矿吸收计算出积分电流大小的变化。如图 6(e)所示,当  $\text{PbI}_2$  层加在 PVK 层前表面时,随  $\text{PbI}_2$  厚度的增加,钙钛矿的吸收明显降低,与图 5(a)~(e)的结果一致。如

图 6(f)所示,当  $\text{PbI}_2$  层加在 PVK 层后表面时,从整体上看,随着  $\text{PbI}_2$  厚度的增加,降低了钙钛矿吸收最大值及其所对应的厚度。

上述分析表明,  $\text{PbI}_2$  层在 PVK 层前时明显降低钙钛矿吸收,在 PVK 层后时则影响相对较小,只改变钙钛矿吸收曲线的形状。

## 4 结 论

本文采用传输矩阵模型模拟了钙钛矿的吸收,并与实际钙钛矿薄膜的吸收和电池器件的 EQE 图像进行了比对,三者曲线大致相同,证明了光学分析和电学分析的一致性,同时证明了传输矩阵模型的可靠性。研究表明:(1)不同波长的光在器件中的吸收模式不同,在 300~550 nm 区间以 Beer-Lambert 吸收为主,在 550~850 nm 区间内 Beer-Lambert 吸收和干涉吸收均有显著影响;(2)除寄生吸收外,界面层对光场的调节也对器件中吸光层的光吸收有影响;(3)对于常用钝化材料  $\text{PbI}_2$ ,应当避免其存在光入射一侧。综上所述,对于钙钛矿薄膜电池而言,需要多个膜层共同优化实现光管理,而非单一增加钙钛矿薄膜的厚度。

本文补充文件和专家审稿意见及作者回复内容的下载地址:<http://cjl.lightpublishing.cn/thesisDetails#10.37188/CJL.20220241>。

## 参 考 文 献:

- [ 1 ] National Renewable Energy Laboratory. Best research-cell efficiency chart [EB/OL]. (2022-01-26) [2022-06-14]. <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>.
  - [ 2 ] SHOCKLEY W, QUEISSER H J. Detailed balance limit of efficiency of *p-n* junction solar cells [J]. *J. Appl. Phys.*, 1961, 32(3): 510-519.
  - [ 3 ] KOÇ M, SOLTANPOOR W, BEKTAŞ G, *et al.* Guideline for optical optimization of planar perovskite solar cells [J]. *Adv. Opt. Mater.*, 2019, 7(23): 1900944-1-10.
  - [ 4 ] BALL J M, STRANKS S D, HÖRANTNER M T, *et al.* Optical properties and limiting photocurrent of thin-film perovskite solar cells [J]. *Energy Environ. Sci.*, 2015, 8(2): 602-609.
  - [ 5 ] LIN Q Q, ARMIN A, NAGIRI R C R, *et al.* Electro-optics of perovskite solar cells [J]. *Nat. Photonics*, 2015, 9(2): 106-112.
  - [ 6 ] MA S, QIAO W Y, CHENG T, *et al.* Optical-electrical-chemical engineering of PEDOT:PSS by incorporation of hydrophobic nafion for efficient and stable perovskite solar cells [J]. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2018, 10(4): 3902-3911.
  - [ 7 ] VAN EERDEN M, JAYSANKAR M, HADIPOUR A, *et al.* Optical analysis of planar multicrystalline perovskite solar cells [J]. *Adv. Opt. Mater.*, 2017, 5(18): 1700151-1-10.
  - [ 8 ] 李祥, 文尚胜, 姚日晖, 等. 基于传输矩阵法的聚合物太阳能电池光学性能分析 [J]. *光学学报*, 2012, 32(6): 0631002-1-8.
- LI X, WEN S S, YAO R H, *et al.* Analysis of optical performance on polymer solar cell based on transfer matrix method

- [J]. *Acta Opt. Sinica*, 2012, 32(6): 0631002-1-8. (in Chinese)
- [ 9 ] DENNLER G, FORBERICH K, SCHARBER M C, *et al.* Angle dependence of external and internal quantum efficiencies in bulk-heterojunction organic solar cells [J]. *J. Appl. Phys.*, 2007, 102(5): 054516-1-7.
- [ 10 ] RAOULT E, BODEUX R, JUTTEAU S, *et al.* Optical characterizations and modelling of semitransparent perovskite solar cells for tandem applications [C]. *Proceedings of the 36th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition, Marseille, France*, 2019: 9-13.
- [ 11 ] CHEN Y H, CHEN C W, HUANG Z Y, *et al.* Microcavity-embedded, colour-tuneable, transparent organic solar cells [J]. *Adv. Mater.*, 2014, 26(7): 1129-1134.
- [ 12 ] PETTERSSON L A A, ROMAN L S, INGANÄS O. Modeling photocurrent action spectra of photovoltaic devices based on organic thin films [J]. *J. Appl. Phys.*, 1999, 86(1): 487-496.
- [ 13 ] CHEN C W, HSIAO S Y, CHEN C Y, *et al.* Optical properties of organometal halide perovskite thin films and general device structure design rules for perovskite single and tandem solar cells [J]. *J. Mater. Chem. A*, 2015, 3(17): 9152-9159.
- [ 14 ] BURKHARD G F, HOKE E T, MCGEHEE M D. Accounting for interference, scattering, and electrode absorption to make accurate internal quantum efficiency measurements in organic and other thin solar cells [J]. *Adv. Mater.*, 2010, 22(30): 3293-3297.
- [ 15 ] ZHAO X Y, MI B X, GAO Z Q, *et al.* Recent progress in the numerical modeling for organic thin film solar cells [J]. *Sci. China Phys., Mech. Astron.*, 2011, 54(3): 375-387.
- [ 16 ] LIU B, SOE C M M, STOUMPOS C C, *et al.* Optical properties and modeling of 2D perovskite solar cells [J]. *Sol. RRL*, 2017, 1(8): 1700062-1-8.
- [ 17 ] ZHANG H, TOUDERT J. Optical management for efficiency enhancement in hybrid organic-inorganic lead halide perovskite solar cells [J]. *Sci. Technol. Adv. Mater.*, 2018, 19(1): 411-424.
- [ 18 ] SHI P J, DING Y, REN Y K, *et al.* Template-assisted formation of high-quality  $\alpha$ -phase  $\text{HC}(\text{NH}_2)_2\text{PbI}_3$  perovskite solar cells [J]. *Adv. Sci.*, 2019, 6(21): 1901591-1-10.
- [ 19 ] FARROKHIFAR M, ROSTAMI A, SADOOGI N. Opto-electrical simulation of organic solar cells [C]. *Proceedings of 2014 European Modelling Symposium, Pisa*, 2014: 507-512.
- [ 20 ] MAJUMDER C, RAI A, BOSE C. Performance optimization of bulk heterojunction organic solar cell [J]. *Optik*, 2018, 157: 924-929.
- [ 21 ] IAKOBSON O D, GRIBKOVA O L, TAMEEV A R, *et al.* A common optical approach to thickness optimization in polymer and perovskite solar cells [J]. *Sci. Rep.*, 2021, 11(1): 5005-1-6.
- [ 22 ] 曹婧. 基于传输矩阵法的有机太阳能电池的光学计算研究 [D]. 广州: 暨南大学, 2013.  
CAO J. *Research on Optical Calculation of Organic Solar Cells Based on Transfer Matrix Method* [D]. Guangzhou: Jinan University, 2013. (in Chinese)
- [ 23 ] YOO J J, SEO G, CHUA M R, *et al.* Efficient perovskite solar cells *via* improved carrier management [J]. *Nature*, 2021, 590(7847): 587-593.
- [ 24 ] LI Z, LI B, WU X, *et al.* Organometallic-functionalized interfaces for highly efficient inverted perovskite solar cells [J]. *Science*, 2022, 376(6591): 416-420.
- [ 25 ] JIANG Q, CHU Z M, WANG P Y, *et al.* Planar-structure perovskite solar cells with efficiency beyond 21% [J]. *Adv. Mater.*, 2017, 29(46): 1703852-1-7.
- [ 26 ] ZHAO Y C, LI Q, ZHOU W K, *et al.* Double-side-passivated perovskite solar cells with ultra-low potential loss [J]. *Sol. RRL*, 2019, 3(2): 1800296.



郭日朗(1997-),男,广东中山人,硕士研究生,2020年于五邑大学获得学士学位,主要从事钙钛矿太阳能电池的研究。

E-mail: longsun@stu2020.jnu.edu.cn



吴绍航(1987-),男,广西贵港人,博士,副研究员,2015年于中国科学院长春光学精密机械与物理研究所获得博士学位,主要从事高效稳定的钙钛矿太阳能电池的研究。

E-mail: wushaohang@jnu.edu.cn