

文章编号:1671-6833(2013)04-0115-05

稳态条件下体异质结有机太阳能电池的数值分析

叶会英<sup>1</sup>, 魏富鹏<sup>1</sup>, 刘伟<sup>2</sup>, 申翠丽<sup>1</sup>, 王海燕<sup>2</sup>

(1. 郑州大学 信息工程学院, 河南 郑州 450001; 2. 郑州大学 物理工程学院, 河南 郑州 450001)

摘要: 采用 Gummel 提出的一种非耦合算法对体异质结有机太阳能电池进行数值模拟. 在一维模型上对顶电极与底电极之间距离等间距网格划分及基本方程组差分离散, 并采用牛顿迭代法将非线性方程组线性化, 求出其数值解, 最后仿真验证了算法的正确性.

关键词: 体异质结; 有机太阳能电池; 非耦合算法; 牛顿迭代法; 数值解

中图分类号: TN204; TN304.52 文献标志码: A doi:10.3969/j.issn.1671-6833.2013.04.027

0 引言

一种新型太阳能电池采用半导体薄膜材料有机体异质结<sup>[1-2]</sup>作为其关键组成部分. 要了解这种器件的工作原理及性能, 需要分析其电势、载流子浓度所满足的非线性偏微分方程组<sup>[1]</sup>. 本研究的目的是在已有模型基础上, 寻求一种新的数值解法, 即将微分方程组线性化, 用有限差分法使连续方程离散化, 最终给出相应的数值解和计算机仿真结果<sup>[3-5]</sup>. 这种数值分析求解过程实现了对有机体异质结工作原理及性能的定量分析, 为进一步研究工作打下基础.

1 器件的一维模型

体异质结通过图 1 所示的金属-半导体-金属的结构来描述, 能带分布如图 2 所示, 半导体的导带底和价带顶分别是由受体物质最低未占据分子轨道 (LUMO) 和给体物质的最高占据分子轨道 (HOMO) 构成, 受体的 LUMO 和给体的 HOMO 的能级之差为其带隙  $E_{gap}$ . 受束缚的电子和空穴对 (激子) 在给受体界面处电场力的作用下, 分离成自由电荷, 电子和空穴分别在受体和给体中传输到两端电极, 从而产生光电流.

有机体异质结的特性可由泊松方程、电子电流连续性方程和空穴电流连续性方程描述<sup>[6]</sup>.

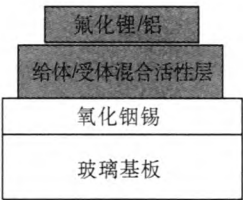


图 1 体异质结有机太阳能电池结构

Fig. 1 Structure of BHJ solar cells

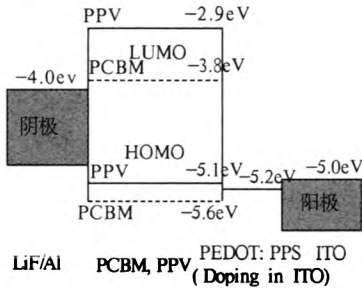


图 2 有机太阳能电池能带示意图

Fig. 2 Diagram of the energy levels of BHJ solar cells

电势满足的泊松方程:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) = \frac{q}{\epsilon} [n(x) - p(x)]. \quad (1)$$

电流连续性方程:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} J_n(x) + qU(x) = 0; \\ \frac{\partial}{\partial x} J_p(x) - qU(x) = 0. \end{cases} \quad (2)$$

式中:  $\varphi(x)$  为电势;  $n(x)$ 、 $p(x)$  分别为电子浓度 and 空穴浓度;  $J_n(x)$ 、 $J_p(x)$  分别为电子电流密度和空穴电流密度;  $U(x)$  为载流子净产生率;  $q$  为电

收稿日期: 2013-03-18; 修订日期: 2013-06-10

基金项目: 河南省科技攻关计划资助项目 (112102310404)

作者简介: 叶会英 (1966-), 女, 郑州大学教授, 博士, 主要从事光电测试技术及信号处理等方面的研究. E-mail: ie-hyye@zzu.edu.cn

子电量;  $\varepsilon$  为介电常数. 净产生率  $U(x)$  满足以下关系:

$$U(x) = PG - (1 - P)R. \quad (3)$$

$R = \gamma(np - n_{\text{int}}^2)$  表示双分子型的复合率:

$G = 2.7 \times 10^{27} \text{ m}^{-3}$  是电子空穴对产生率.

在弱场下, 对于给定电场强度和温度, 激子分离成自由载流子的离解概率  $P$  可表示为

$$P = k_{\text{diss}}(T, E) / [k_{\text{diss}}(T, E) + k_f(T)]. \quad (4)$$

激发态激子分解速率  $k_{\text{diss}}(T, F)$  表达式为

$$k_{\text{diss}}(T, E) = (3\gamma/4\pi a^3) [\exp(-E_B/k_B T)] [1 + b + b^2/3 + b^3/18 + b^4/180 + \dots]. \quad (5)$$

式中:  $b = q^3 E / (8\pi\epsilon k_B^2 T^2)$ ;  $\gamma = q\mu/\varepsilon = q(\mu_n + \mu_p)/(2\varepsilon)$  是复合系数;  $a$  是电子和空穴对之间的距离;  $E(x) = -d\varphi(x)/dx$  表示电场强度;  $k_f$  是激子衰退到基态的衰退率.

考虑载流子的漂移和扩散效应, 电子电流和空穴电流表达式为

$$\begin{cases} J_n = -qn\mu_n \frac{\partial \varphi}{\partial x} + qD_n \frac{\partial n}{\partial x} \\ J_p = -qp\mu_p \frac{\partial \varphi}{\partial x} - qD_p \frac{\partial p}{\partial x} \end{cases} \quad (6)$$

式中:  $D_{n,p} = \mu_{n,p} V_t$  是载流子扩散系数;  $\mu_{n,p}$  是电子/空穴迁移率;  $V_t = k_B T/q$  是热电压,  $k_B$  是波尔兹曼常数,  $T$  是绝对温度.

边界条件:  $\varphi(0) = (-V_a + E_{\text{gap}})/2$ ,  $\varphi(L) = (V_a - E_{\text{gap}})/2$ ,  $n(0) = p(L) = N_c$ ,  $n(L) = p(0) = N_c \exp(-E_{\text{gap}}/V_t)$  其中  $L$  是有机层厚度,  $V_a$  是外加偏压,  $E_{\text{gap}}$  是禁带宽度.  $N_c$  是导带和价带的有效态密度.

## 2 线性化处理及数值解

### 2.1 连续方程离散化处理

在顶电极和底电极之间建立一维坐标, 把有机层厚度  $L$  等分  $N$  个格点. 可以得到离散化的数学模型表达式为

$$\begin{cases} [J_n(M) - J_n(M-1)/\Delta x] + qU(k) = 0; \\ [J_p(M) - J_p(M-1)/\Delta x] - qU(k) = 0; \\ [\varphi(k+1) - 2\varphi(k) + \varphi(k-1)/\Delta x^2] = (q/\varepsilon)[n(k) - p(k)]. \end{cases} \quad (7)$$

边界条件:  $\varphi(0) = (-V_a + E_{\text{gap}})/2$ ;  $\varphi(L) = (V_a - E_{\text{gap}})/2$ ;  $n(0) = p(L) = N_c$ ,  $n(L) = p(0) = N_c \exp(-E_{\text{gap}}/V_t)$ .

$k = 1, 2, \dots, N$ ;  $M = 1, 2, \dots, N-1$ ,  $M$  表示第  $k-1$  和  $k$  之间的中点格点. Scharfetter-Gummel 方法<sup>[5]</sup>认为在格点  $k$  和  $k+1$  之间, 电场、迁移率、电

流密度的变化可以忽略, 则由式(7)得到

$$dn/dx + (n/V_t)E - J_n/(\mu_n q V_t) = 0. \quad (8)$$

积分得  $n(x) = n(0)\exp(-Ex/V_t) + J_n \cdot (\mu_n q E)^{-1} \cdot [1 - \exp(-Ex/V_t)]$ . 以格点  $k$  为原点, 得出  $n(k+1)$  与  $n(k)$  的关系式为

$$n(k+1) = n(k)\exp\left[\frac{\varphi(k+1) - \varphi(k)}{V_t}\right] - \frac{J_n \Delta x}{\mu_n q [\varphi(k+1) - \varphi(k)]} \left\{ 1 - \exp\left[\frac{\varphi(k+1) - \varphi(k)}{V_t}\right] \right\}.$$

于是得出电子电流  $J_n$  的离散表达式:

$$\begin{aligned} J_n(M) &= \frac{\mu_n q}{\Delta x} [\varphi(k) - \varphi(k+1)] \cdot \\ &= \frac{n(k+1)\exp\left[\frac{\varphi(k) - \varphi(k+1)}{V_t}\right] - n(k)}{\exp\left[\frac{\varphi(k) - \varphi(k+1)}{V_t}\right] - 1} \quad (10) \\ &= J_n[n(k), n(k+1), \varphi(k), \varphi(k+1)]. \end{aligned}$$

同理, 得出空穴电流  $J_p$  表达式:

$$\begin{aligned} J_p(M) &= \frac{\mu_p q}{\Delta x} [\varphi(k) - \varphi(k+1)] \cdot \\ &= \frac{p(k)\exp\left[\frac{\varphi(k) - \varphi(k+1)}{V_t}\right] - p(k+1)}{\exp\left[\frac{\varphi(k) - \varphi(k+1)}{V_t}\right] - 1} \quad (11) \\ &= J_p[p(k), p(k+1), \varphi(k), \varphi(k+1)]. \end{aligned}$$

将上述两式代入基本方程组(7)可以得到只含有三类变量  $\varphi, n, p$  的  $3 \times (N-2)$  个方程组:

$$\begin{cases} F_n\{n(k-1), n(k), n(k+1), p(k), \varphi(k-1), \\ \varphi(k), \varphi(k+1)\} = 0; \\ F_p\{p(k-1), p(k), p(k+1), n(k), \varphi(k-1), \\ \varphi(k), \varphi(k+1)\} = 0; \\ F_\varphi\{n(k), \varphi(k), \varphi(k-1), \varphi(k), \varphi(k+1)\} = 0. \end{cases} \quad (12)$$

其中  $2 \leq k \leq N-1$ .  $k=1$  和  $N$  处的  $\varphi, n, p$  值由边界条件确定, 因此上述方程组共有  $3 \times (N-2)$  个未知量, 此时正好有  $3 \times (N-2)$  个方程, 因此解可以确定. 但是由于方程数目较多, 且都是非线性的, 因此必须借助数值分析方法和计算机仿真技术才能很好地给出结果.

### 2.2 非线性方程线性化处理

采用非耦合法<sup>[6]</sup>求解方程, 即当求  $\varphi, n, p$  变量中的一个时, 假定另外两个量是已知的, 每求得一次结果就置换原来的值, 直到所求结果满足指定精度为止. 再结合牛顿迭代法即可实现非线性方程的线性化, 最后反复迭代求得数值解<sup>[7]</sup>.

由于非线性泊松方程的解较为简单,所以先从求解式(12)泊松方程开始,其展开形式为

$$F_{\varphi} = a_{\varphi k} \varphi(k-1) + b_{\varphi k} \varphi(k) + c_{\varphi k} \varphi(k+1) + d_{\varphi k} = 0. \quad (13)$$

其中:  $a_{\varphi k} = (\Delta x)^{-2}$ ,  $b_{\varphi k} = -2(\Delta x)^{-2}$ ,  $c_{\varphi k} = (\Delta x)^{-2}$ ,  $d_{\varphi k} = (q/\varepsilon)[p(k) - n(k)]$ .

考虑载流子浓度  $n$ ,  $p$  与电位  $\varphi$  的关系:  $n(k) = n_{\text{int}} \exp\{[\varphi(k) - \phi_n(k)]/V_i\}$ ,  $p(k) = n_{\text{int}} \exp\{[\phi_p(k) - \varphi(k)]/V_i\}$ . 其中:  $\phi_n(k) = \varphi(k) - (k_b T/q) \cdot \ln[n(k)/n_{\text{int}}]$ ,  $\phi_p(k) = \varphi(k) - (k_b T/q) \cdot \ln[p(k)/n_{\text{int}}]$  是准费米势,边界值为:  $\phi_n(0) = \phi_p(0) = 0$ ,  $\phi_n(N) = \phi_p(N) = V_a$ .

将式(13)在  $\varphi^0(k-1)$ ,  $\varphi^0(k)$ ,  $\varphi^0(k+1)$  处 Taylor 展开,忽略二阶以上高次项,得方程:  $F_{\varphi} =$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial F_{\varphi}^0}{\partial \varphi(k-1)} \Delta \varphi(k-1) + \frac{\partial F_{\varphi}^0}{\partial \varphi(k)} \Delta \varphi(k) + \\ & \frac{\partial F_{\varphi}^0}{\partial \varphi(k+1)} \Delta \varphi(k+1) + F_{\varphi}^0 = \\ & a_{\varphi k} \Delta \varphi(k-1) + b_{\varphi k} \Delta \varphi(k) + c_{\varphi k} \Delta \varphi(k+1) + \\ & d_{\varphi k} = 0. \end{aligned} \quad (14)$$

上式是关于  $\Delta \varphi$  的线性方程,由上式解得  $\Delta \varphi$  后,对初值  $\varphi^0$  进行修正:

$$\varphi^0(k) = \varphi^0(k) + \Delta \varphi \quad (2 \leq k \leq N-1)$$

式(14)中:

$$\begin{aligned} a_{\varphi k} &= (\Delta x)^{-2}; \\ b_{\varphi k} &= -2(\Delta x)^{-2} - (q/\varepsilon) \cdot [p^0(k) + n^0(k)]/V_i; \\ c_{\varphi k} &= (\Delta x)^{-2}; \quad d_{\varphi k} = (\Delta x)^{-2} \cdot \varphi^0(k-1) - 2(\Delta x)^{-2} \varphi^0(k) + (\Delta x)^{-2} \varphi^0(k+1) + (q/\varepsilon)[p^0(k) - n^0(k)]. \end{aligned}$$

求解电子电流连续性方程时,将  $\varphi$  和  $p$  视为定值,代入  $J_n$  表达式(10)到离散方程表达式(12)  $F_n = 0$ ,整理得到关于  $n(k)$  的非线性方程:

$$F_n = a_{nk} n(k-1) + b_{nk} n(k) + c_{nk} n(k+1) + d_{nk} = 0. \quad (15)$$

令  $k_0(k) = (3/4\pi a^3) [\exp(-E_B/k_B T)] [1 + b(k) + b(k)^2/3 + b(k)^3/18 + b(k)^4/180 + \dots]$ ,  $1 \leq k \leq N$ .

式(15)中系数为

$$\begin{aligned} a_{nk} &= (\mu_n \cdot \Delta x^{-2}) [\varphi(k-1) - \varphi(k)] \cdot \{\exp\{[\varphi(k-1) - \varphi(k)] \cdot V_i^{-1}\} - 1\}^{-1}; \\ b_{nk} &= -(\mu_n \cdot \Delta x^{-2}) \{[\varphi(k-1) - \varphi(k)] \exp\{[\varphi(k-1) - \varphi(k)] \cdot V_i^{-1}\} \cdot \{\exp\{[\varphi(k-1) - \varphi(k)] \cdot V_i^{-1}\} - 1\}^{-1} + [\varphi(k) - \varphi(k+1)] \cdot \{\exp\{[\varphi(k) - \varphi(k+1)] \cdot V_i^{-1}\} - 1\}^{-1}\}; \end{aligned}$$

$$c_{nk} = (\mu_n \cdot \Delta x^{-2}) \cdot [\varphi(k) - \varphi(k+1)] \cdot \{\exp\{[\varphi(k-1) - \varphi(k)] \cdot V_i^{-1}\} \cdot \{\exp\{[\varphi(k) - \varphi(k+1)] \cdot V_i^{-1}\} - 1\}^{-1}\}^{-1}; \quad d_{nk} = \{k_0(k) \gamma G - k_f \gamma [n(k) p(k) - n_{\text{int}}^2]\} \cdot [k_0(k) \gamma + k_f]^{-1}.$$

将式(15)在  $n^0(k-1)$ ,  $n^0(k)$ ,  $n^0(k+1)$  处进行 Taylor 展开,忽略二阶以上高次项,得线性方程:

$$\begin{aligned} F_n &= \frac{\partial F_n^0}{\partial n(k-1)} \Delta n(k-1) + \frac{\partial F_n^0}{\partial n(k)} \Delta n(k) + \\ & \frac{\partial F_n^0}{\partial n(k+1)} \Delta n(k+1) + F_n^0 = \\ & a_{nk} \Delta n(k-1) + b_{nk} \Delta n(k) + c_{nk} \Delta n(k+1) + \\ & d_{nk} = 0. \end{aligned} \quad (16)$$

上式是关于  $\Delta n$  的线性方程组,由上式解得  $\Delta n$  后,对初值  $n^0$  进行修正:

$$n^0(k) = n^0(k) + \Delta n \quad (2 \leq k \leq N-1)$$

式(16)中:  $a_{nk} = a_{nk}$ ;  $b_{nk} = b_{nk} - k_f \gamma p^0(k) \cdot [k_0(k) \gamma + k_f]^{-1}$ ;  $c_{nk} = c_{nk}$ ;  $d_{nk} = a_{nk} n^0(k-1) + b_{nk} n^0(k) + c_{nk} n^0(k+1) + \{k_0(k) \gamma G - k_f \gamma [n^0(k) p^0(k) - n_{\text{int}}^2]\} \cdot [k_0(k) \gamma + k_f]^{-1}$ .

求解空穴电流连续性方程时,将  $\varphi$  和  $n$  视为定值,代入  $J_p$  表达式(11)到离散方程表达式(12)  $F_p = 0$ ,整理得到关于  $p(k)$  的非线性方程组:

$$F_p = a_{pk} p(k-1) + b_{pk} p(k) + c_{pk} p(k+1) + d_{pk} = 0. \quad (17)$$

式中:

$$a_{pk} = -(\mu_p \cdot \Delta x^{-2}) [\varphi(k-1) - \varphi(k)] \cdot \{\exp\{[\varphi(k-1) - \varphi(k)] \cdot V_i^{-1}\} \cdot \{\exp\{[\varphi(k-1) - \varphi(k)] \cdot V_i^{-1}\} - 1\}^{-1}\}^{-1};$$

$$b_{pk} = (\mu_p \cdot \Delta x^{-2}) \{[\varphi(k) - \varphi(k+1)] \exp\{[\varphi(k) - \varphi(k+1)] \cdot V_i^{-1}\} \cdot \{\exp\{[\varphi(k) - \varphi(k+1)] \cdot V_i^{-1}\} - 1\}^{-1} + [\varphi(k-1) - \varphi(k)] \cdot \{\exp\{[\varphi(k-1) - \varphi(k)] \cdot V_i^{-1}\} - 1\}^{-1}\};$$

$$c_{pk} = -(\mu_p \cdot \Delta x^{-2}) [\varphi(k) - \varphi(k+1)] \cdot \{\exp\{[\varphi(k) - \varphi(k+1)] \cdot V_i^{-1}\} - 1\}^{-1};$$

$$d_{pk} = -\{k_0(k) \gamma G - k_f \gamma [n(k) p(k) - n_{\text{int}}^2]\} \cdot [k_0(k) \gamma + k_f]^{-1}.$$

将方程(17)在  $p^0(k-1)$ ,  $p^0(k)$ ,  $p^0(k+1)$  处进行 Taylor 展开,忽略二阶以上高次项,得方程:

$$\begin{aligned} F_p &= \frac{\partial F_p^0}{\partial p(k-1)} \Delta p(k-1) + \frac{\partial F_p^0}{\partial p(k)} \Delta p(k) + \\ & \frac{\partial F_p^0}{\partial p(k+1)} \Delta p(k+1) + F_p^0 = \\ & a_{pk} \Delta p(k-1) + b_{pk} \Delta p(k) + c_{pk} \Delta p(k+1) + \\ & d_{pk} = 0. \end{aligned} \quad (18)$$

上式是关于 $\Delta p$ 的线性方程组,由上式解得 $\Delta p$ 后,对初值 $p^0$ 进行修正:

$$p^0(k) = p^0(k) + \Delta p \quad (2 \leq k \leq N-1)$$

式(18)中: $a_{pk} = a_{bk}$ ;  $b_{pk} = b_{bk} + k_f \gamma n^0(k) \cdot [k_0(k) \gamma + k_f]^{-1}$ ;  $c_{pk} = c_{bk}$ ;  $d_{pk} = a_{bk} p^0(k-1) + b_{bk} p^0(k) + c_{bk} p^0(k+1) - \{k_0(k) \gamma G - k_f \gamma [n^0(k) p^0(k) - n_{int}^2]\} \cdot [k_0(k) \gamma + k_f]^{-1}$ .

综合以上计算,经过线性化处理后,非线性方程组(12)转化成了线性方程组(19),即:

$$\begin{cases} F_n = a_{nk} \Delta n(k-1) + b_{nk} \Delta n(k) + c_{nk} \Delta n(k+1) + d_{nk} = 0; \\ F_p = a_{pk} \Delta p(k-1) + b_{pk} \Delta p(k) + c_{pk} \Delta p(k+1) + d_{pk} = 0; \\ F_\varphi = a_{\varphi k} \Delta \varphi(k-1) + b_{\varphi k} \Delta \varphi(k) + c_{\varphi k} \Delta \varphi(k+1) + d_{\varphi k} = 0. \end{cases} \quad (19)$$

$(2 \leq k \leq N-1)$

采用非耦合法的基本思想求解,经过反复迭代即可求出数值解.

### 3 模型的计算机仿真

根据建立的模型及数值分析方法,选取器件参数: $E_{gap} = 1.34 \text{ eV}$ ,  $\mu_n = 2.5 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{Vs}$ ,  $\mu_p = 3.0 \times 10^{-8} \text{ m}^2/\text{Vs}$ ,  $N_c = 2.5 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$ ,  $G = 2.7 \times 10^{27} \text{ m}^{-3}$ ,  $\varepsilon = 3.0 \times 10^{-11} \text{ F/m}$ ,  $a = 1.3 \text{ nm}$ ,  $k_f = 1.5 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$ . 使用 MATLAB 软件编写计算程序,可得短路、开路时的电势  $\varphi(x)$ 、 $n(x)$ 、 $p(x)$  的分布波形图.

从图3可以看出,在短路情况下,除 $x=0$ 和 $x=L$ 附近外,电势接近于线性分布,这是由于短路时器件内部的电场非常大,且电场强度接近于一个常数所至.图4和图6反映了载流子浓度分布的短路时不对称性和开路时对称性,结合公式(15)、(16)可求出两种情况下的光电流  $J = J_n + J_p$ ,

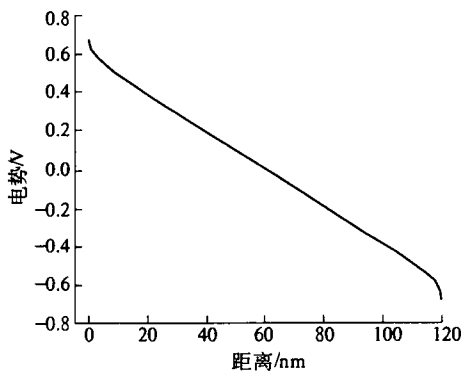


图3 短路时的电势分布  
Fig.3 The distribution of potential at short circuit

有机层内部载流子不对称性分布对应的光电流  $J$  是一个不为零的常数,而对称性分布下的光电流  $J$  则等于零.在开路情况下,由于 HOMO 和 LUMO 能级的不同,使得在有机层中形成了 0.8 V 的电势差,也造成了图5中电势分布的线性区变窄.

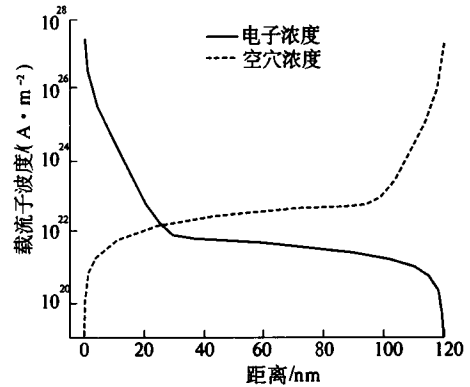


图4 短路时的载流子浓度分布  
Fig.4 The distribution of carrier densities at short circuit

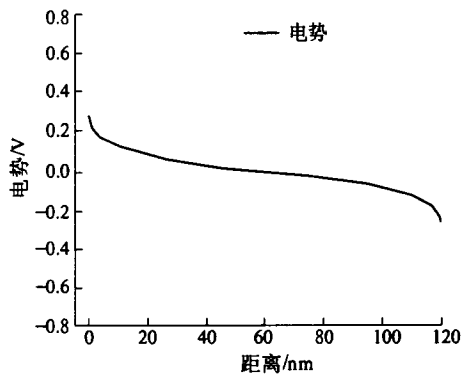


图5 开路时的电势分布  
Fig.5 The distribution of potential at open circuit

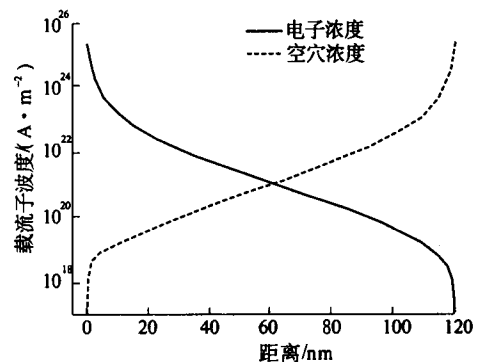


图6 开路时的载流子浓度分布  
Fig.6 The distribution of carrier densities at open circuit

### 4 结论

笔者所提出的方法,在加入边界条件的基础上,求解方程组的数值解,即可获得稳态时有机体异质结的电势、载流子浓度的分布.对器件的短路、开路情况做了仿真,和文献[1]中的理论结果

吻合,用 MATLAB 软件编程,语言简单,精确度高.为进一步研究有机太阳能电池的其他特性奠定了基础.

### 参考文献:

- [1] KOSTER L J A, SMITS E C P, MIHAILETCHI V. D, et al. Device model for the operation of polymer/fullerene bulk heterojunction solar cells[J]. *Physical Review*, 2005, 72(8):185-205.
- [2] 邢宏伟,彭应全,杨青森,等. 有机体异质结太阳能电池的数值分析[J]. *物理学报*, 2008, 57: 7374-7379.
- [3] 张悦,杨康. 稳态条件下 PN 结器件一维模型的数值分析[J]. *沈阳理工大学学报*, 2006, 25(5): 59-61.
- [4] 张志刚,刘长军,黄卡玛,等. 一维 PN 结二极管稳态模型的数值模拟[J]. *洛阳工业高等专科学校学报*, 2005, 15(1):29-32.
- [5] SCHARFETTER D L, GUMMEL H K. *IEEE Trans [J]. Electron Devices*, 1969, 64(16):284-289.
- [6] GUMMEL H A. Self-Consistent Iterative Scheme for One Dimensional Steady State Transistor Calculations [J]. *IEEE Trans on Electron Devices*, 1964(11): 445.
- [7] MAENNING B, DRECHSEL J. Organic p-i-n solar-cells. [J] *Appl. Phys. A*, 2004, 97(1): 4452-4455.

## Numerical Analysis for Bulk Heterojunction Organic Solar Cells under Steady-state Condition

YE Hui-ying<sup>1</sup>, WEI Fu-peng<sup>1</sup>, LIU Wei<sup>2</sup>, SHEN Cui-li<sup>1</sup>, WANG Hai-yan<sup>2</sup>

(1. School of Information Engineering, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China; 2. Physical Engineering College, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China)

**Abstract:** A numerical simulation on bulk heterojunction (BHJ) organic solar cells by decouple algorithm put forward by Gummel is described in this paper. The distance between the top and bottom electrode is meshed equidistantly, and the basic equations are turned into finite difference discrete forms under the one dimensional model, then the nonlinear equations are converted into linearization with the Newton-Raphson method. Numerical solution can be obtained in this way. The correctness of this solution is verified with computer simulation.

**Key words:** bulk heterojunction; organic solar cell; decouple algorithm; Newton-Raphson method; numerical solution