# 金属纳米栅格薄膜等离激元太阳能电池的优化设计

# 周 朕 史林兴

(淮海工学院理学院,江苏连云港 222005)

摘要 为提高薄膜太阳能电池的性能,运用时域有限差分和粒子群优化算法,对薄膜太阳能电池金属纳米栅格的 结构参数进行了优化设计。优化后,金属纳米栅格薄膜太阳能电池的短路电流与无金属纳米栅格太阳能电池相比 提高了 39%。对不同极化情况下电池光的吸收和量子效率的提高进行了分析,分析结果表明,经金属纳米栅格耦 合进入吸收层的导波模、金属纳米栅格表面等离激元以及吸收层中的法布里-珀罗共振导致了薄膜太阳能电池性 能的提高。

关键词 光学设计;薄膜太阳能电池;纳米栅格;表面等离激元;粒子群优化算法;时域有限差分 中图分类号 O539 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/LOP49.112303

# Optimized Design of Plasmonic Thin Film Solar Cells with Metal Nanogratings

#### Zhou Zhen Shi Linxing

(College of Science, Huaihai Institute of Technology, Lianyungang, Jiangsu 222005, China)

Abstract To improve the performances of thin-film solar cells, particles swarm optimization and the finitedifference time domain algorithm are combined to optimize the structural parameters of the metal nanogratings on the surface of solar cells. A test for the short circuit current over the solar spectrum shows an enhancement up to 39%when comparing with bare thin film cell. Absorption improvement and quantum efficiency enhacement in different polarization mode are analysed. Analytical results show that, the guided-wave modes coupled in the absorbing layer by metal nanogratings, surface plasmon polaritons supported by metal nanogratings and Fabri Pérot resonance in the absorbing layer lead to the performance improvement in thin-film solar cells.

**Key words** optical design; thin-film solar cell; nanogratings; surface plasmon polaritons; particles swarm optimization algorithm; finite-difference time domain

OCIS codes 230.1950; 350.6050

## 1 引 言

光伏发电技术发展迅猛,2008 年全世界光伏发电量达到 5 GW,2015 年有望达到 20 GW。目前,单晶硅 太阳能电池占市场主流,厚度一般在 180~300 μm,虽然其转化效率较高,但是单晶硅的提炼和制备过程成 本较高,且造成环境污染<sup>[1]</sup>。薄膜太阳能电池制备过程成本低,渐渐引起了人们的兴趣。提高硅基太阳能电 池的能量转换效率有许多技术途径<sup>[2~4]</sup>。近来,利用金属纳米结构形成局域表面等离子体来实现硅基薄膜 太阳能电池性能提高逐渐成为人们研究的热点<sup>[5,6]</sup>。

表面等离激元是强度随金属表面距离指数衰减的电磁波与金属表面自由电子的混合体<sup>[7]</sup>。由于光子与 电子的共振,金属表面附近电磁场特性被改变,纳米尺度金属结构的透射光可以得到增强,这使得表面等离 激元可以应用于很多领域,例如,提高太阳能电池、LED 和光探测器的效率就是众多研究热点之一<sup>[8~12]</sup>。通

收稿日期: 2012-05-29; 收到修改稿日期: 2012-07-26; 网络出版日期: 2012-10-18

基金项目:淮海工学院引进人才科研启动基金(KQ07071, KQ08027, KX08039)资助课题。

作者简介:周 朕(1980—),男,硕士,讲师,主要从事纳米材料制备及仿真计算等方面的研究。

E-mail: yishui8524@163.com

本文电子版彩色效果请详见中国光学期刊网(http://www.opticsjournal.net)

常情况下,光不能有效地在数百纳米至微米量级的尺度内被吸收,如果能将入射光局限在数百纳米厚的光吸 收转换层内,增强光场强度,就可以提高光电转换吸收材料的利用率,同时可以满足对光能高效利用的需求。

金属表面等离激元波可通过金属纳米栅格激发产生。但入射光耦合成为周期性金属纳米结构表面的等 离激元需要入射光波矢与表面等离激元波矢相匹配。采用一维纳米栅格的方法可以实现波矢匹配,这种办 法被很多研究者证明可以有效的达到动量匹配并将入射光耦合激发表面等离子激元<sup>[7,13]</sup>。Pala 等<sup>[13]</sup>建立 了一个二维带有金属银栅格 SiO<sub>2</sub> 覆盖的硅薄膜太阳能电池模型,与不带金属银栅格相比,太阳能电池短路 电流调高了 43%。以此模型为基准,通过粒子群优化算法,使用时域有限差分算法,优化得到合适的模型参 数,使太阳能电池光电短路电流提高了 39%,并对短路电流提高的原因进行了探究。

#### 2 模拟设计

所设计的金属银纳米栅格构建在 SiO<sub>2</sub> 覆盖的硅薄膜太阳能电池上。模型自上而下依次由银纳米栅格、缓冲层 SiO<sub>2</sub>、吸收层 Si 和基底 SiO<sub>2</sub> 组成。缓冲层 SiO<sub>2</sub>、吸收层 Si 的厚度分别为 10 nm 和 50 nm。金属栅格呈周期性分布,周期为 P。栅格的横截面选择的是矩形,高为 H,宽为 W,如图 1 所示。





图 1 电池结构原理图。(a)三维结构;(b)二维结构

Fig. 1 Structure schematic. (a) A three-dimensional view ; (b) a cross-sectional view

金属栅格选用银是因为银纳米结构在可见光波段有较强的透射增强<sup>[5]</sup>。入射光为波长范围为 400~1100 nm 的 AM 1.5 太阳谱。因为太阳光为自然光,所以两种极化方式 TE、TM 在计算时必须同时考虑,这 里假定二者影响权重相同。

电池结构中的材料采用多系数模型(MCM)。计算区域上下层边界选用完全匹配层(PML),理论上可 以把正入射的电磁场完全吸收;两侧为周期性边界。入射波为λ时,电池结构中的吸收层所吸收的太阳能功 率为

$$P_{\rm abs} = -0.5 \,\overline{\omega} I(\varepsilon) \int_{V} |E|^2 \,\mathrm{d}V, \qquad (1)$$

式中 ω 为入射波的频率, E 为吸收层中电场, I(ε)为吸收层介电常数的虚部, V 为电池吸收层的体积。假设 电池吸收层吸收的光子能完全转化为自由载流子,即内量子效率为 1, 且自由载流子能够全部转化为短路电流, 那么波长为 λ 的光照射电池, 电池量子效率用 Q<sub>e</sub>(λ)表示为

$$Q_{\rm e}(\lambda) = \frac{P_{\rm abs}(\lambda)}{P_{\rm in}(\lambda)},\tag{2}$$

式中  $P_{abs}(\lambda)$ 为电池模型的吸收功率,  $P_{in}(\lambda)$ 为入射太阳能的功率。

对应不同波长,金属银纳米栅格太阳能电池量子效率的提高为 $g(\lambda)$ 

$$g(\lambda) = \frac{Q_{\text{nanostrips}}(\lambda)}{Q_{\text{bare}}(\lambda)},$$
(3)

式中 Q<sub>nanostrips</sub>(λ)和 Q<sub>bare</sub>(λ)分别为金属银纳米栅格太阳能电池和无金属银纳米栅格太阳能电池的量子效率 短路电流可表示为

$$J_{\rm sc} = e \int \frac{\lambda}{hc} Q_{\rm e}(\lambda) I_{\rm AM1.5}(\lambda) d\lambda.$$
(4)

与无金属银栅格太阳能电池相比,短路电流的提高 γ。可表示为

$$\gamma_{\rm e} = \frac{e \int \frac{\lambda}{hc} Q_{\rm nanostrips}(\lambda) I_{\rm AM1.5}(\lambda) d\lambda}{e \int \frac{\lambda}{hc} Q_{\rm bare}(\lambda) I_{\rm AM1.5}(\lambda) d\lambda}.$$
(5)

利用二维结构时域有限差分(FDTD)算法来计算电池的量子效率和用粒子群优化算法(PSO)进行电池 结构参数优化。首先,在粒子群算法中对电池结构的参数在给定范围内初始化;然后,利用时域有限差分算 法计算电池的短路电流的提高值,并把结果返还给粒子群程序;粒子群算法不断迭代,选出短路电流提高值 最高时所对应的电池模型参数。

太阳能电池金属银纳米栅格的起始参数设定为:宽为60 nm,高为90 nm,周期为310 nm。经过20 个粒子50 次迭代,使电池的短路电流提高值达到了1.39,对应的电池参数:宽为82 nm,高为55 nm,周期为287 nm。金属银纳米栅格优化结果如图2 所示。



图 2 金属银纳米栅格优化。(a)高度;(b)宽度;(c)周期;(d)短路电流提高值



### 3 分 析

#### 3.1 金属银纳米栅格对太阳能电池光吸收和量子效率的影响

图 3 为 TM 波正入射时,太阳能电池光吸收和量子效率随波长变化的情况。图 3(a)中,在波长为 433、480、634、860、1028 nm 附近时,光吸收得到增强,对应图中的 a、b、c、d、e 五个吸收峰,这一点在描述随波长 变化的量子效率提高的图 3(b)中也得到印证。图 3(b)中波长为 634 nm 量子效率增强最强。但是,硅吸收 层在 634 nm 在无栅格时吸收较弱,所以尽管量子效率增强最强,但光吸收仍然不大。与之相似的是,尽管 波长为 860 nm 和 1028 nm 量子效率提高值均在 1.5 左右,但是由于电池吸收层近红外光吸收较弱,所以在 图 3(a)中的光吸收仍然较弱。因此,在波长为 433、480、634 nm 时,金属银纳米栅格太阳能电池在 TM 波作 用下,光吸收提高明显。

图 4 为 TE 波正入射时,太阳能电池光吸收和量子效率随波长的变化情况。图 4 (a)中,在波长为 690 nm时,光吸收增强最大,对应图中的吸收峰 f。对比图 4 (b)的量子效率提高值,可以看出在吸收峰 f 处,量子效率可以提高近 50 倍。但是在 400~500 nm 范围内,即电池吸收层吸收强的范围内,量子效率并没有 提高反而减小。所以,在 TE 波作用下,金属银纳米栅格对太阳能电池光吸收提高作用较弱。



图 3 TM (a)金属纳米栅格对电池光吸收谱的影响; (b)量子效率的提高随波长的变化

Fig. 3 (a) Effect of metal nanograting on absorption for the solar cell in TM; (b)  $g(\lambda)$  versus wavelength in TM



图 4 TE(a)金属纳米栅格对电池光吸收谱的影响;(b)量子效率的提高随波长的变化 Fig. 4 (a) Effect of metal nanograting on absorption for the solar cell in TE; (b) g(λ) versus wavelength in TE



图 5 正入射条件下,归一时间平均场的分布 TM 波。(a) 433 nm; (b) 487 nm; (c) 643 nm; (d) 860 nm; (e) 1028 nm; (f) 690 nm TE 波

Fig. 5 Normalized and time-averaged field intensity for normal-incidence TM. (a) 433 nm; (b) 487 nm; (c) 643 nm; (d) 860 nm; (e) 1028 nm; (f) 690 nm TE

#### 3.2 金属银纳米栅格太阳能电池短路电流提高原因的探讨

图 5 为正入射条件下,吸收峰 a、b、c、d、e 和 f 的归一时间平均场的分布。图 6 为不同极化条件下,量子效率提高值自然对数值在不同波长和周期下的情况,图 6(a)为 TM 波,图 6(b)为 TE 波。此时,金属银纳米 栅格的高为 55 nm,宽为 82 nm。图 6 中,a、b、c、d、e 对应金属栅格周期为 287 nm。

TM 波下,经金属栅格形成表面等离激元并耦合进入吸收层形成导波模,使吸收层场强增强,如图 5(a)和图 5(b)所示。图 6(a)中,波长为 500 nm 附近,不同的栅格周期下对应的许多狭长的黄色弯条状区域,就是导波模的体现。栅格周期为 287 nm 时,由于导波模的存在,使图 3(a)中 a、b 两个波长位置的量子效率得到提高。



图 6 不同波长和周期下的量子效率提高值的自然对数分布图。(a) TM 波; (b) TE 波 Fig. 6 Map for the natrual logrithm of enhancement of quantum efficiency versus incident wavelength and metal nanogratings period. (a) TM; (b) TE

TM 波在金属栅格附近产生表面等离激元,使电池吸收层场强分布增强,从而使得光吸收增大,量子效 率提高。图 5(c)中在金属银栅格的下方吸收层中由于表面等离激元而产生较强的近场分布。图 6(a)中 c 所对应的 600~700 nm 较宽范围的量子效率提高红黄色区域,就是局域表面等离子体作用的结果,与图 3 中 c 吸收峰位置相吻合,所以 c 吸收峰就是表面等离激元共振吸收峰。由图 6可知,随着栅格周期的增大,金属 栅格间距减小,近场电磁场相互作用,导致局域表面等离激元发生红移<sup>[13]</sup>。

另外由于吸收层厚度不变,还会因法布里-珀罗共振,使吸收层中场强增强,如图 5(d)、图 5(e)所示。 图 6(a)中 d、e 所对应波长区域在不同栅格周期下的量子效率提高带便是由此产生,并与图(3)中吸收峰 d、e 相对应。

TE 波作用下,形成的 TE 导波模可增强电池吸收层的光吸收,如图 5(f)所示。这一点还可以通过 图 6(b)得到验证,导波模在的狭长区域带,量子效率提高较大。而且,随着栅格周期的增加导波模在不断红 移的同时渐渐变弱。图 6(b)中f点恰好在一条 TE 导波模上,其与图 4 中吸收峰f 相吻合。另外,在图 6(b) 上方波长为 1050 nm 和 850 nm 对应两条不太明显的量子效率提高值带,其位置与 TE 波作用下量子效率提 高值带相同,也是因法布里-珀罗共振而形成。

根据以上分析知,由于金属栅格而产生的局域表面等离激元、导波模,以及吸收层中的法布里-珀罗共振 是金属栅格薄膜太阳能电池光吸收提高的主要原因。

4 结 论

通过粒子群优化算法和时域有限差分算法,对金属银纳米栅格硅薄膜太阳能电池模型参数进行优化,使 电池短路电流提高了 39%。其中,因金属银纳米栅格而形成的导波模和局域等离子体极化以及吸收层中的 法布里-珀罗共振起到了重要的作用。这说明通过金属纳米栅格薄膜太阳能电池结构参数的改变,有助于电 池性能的提高。优化后太阳能电池结构简单,参数较少,今后可在丰富参数的基础之上继续接近真实的太阳 能电池的性能研究。

#### 参考文献

周 舟,周 健,孙晓玮等. 薄膜太阳能电池异型布拉格背反射结构设计与制作[J]. 光学学报, 2011, 31(7): 0731002

<sup>1</sup> H. Atwater, A. Polman. Plasmonics for improved photovoltaic devices[J]. Nature Materials, 2010, 19: 205~214

<sup>2</sup> Zhou Zhou, Zhou Jian, Sun Xiaowei *et al.*. Design of an irregularly shaped DBR for thin film solar cells[J]. Acta Optica Sinica, 2011, **31**(7): 0731002

- 3 Yuan Genfu, Yao Yansheng, Chen Xuehui *et al.*. Exerimental study on the quality of material surface applied laser chemical combined etching[J]. *Chinese J. Lasers*, 2010, **37**(1): 281~283
- 袁根福,姚燕生,陈雪辉 等.激光和化学复合刻蚀加工表面质量的实验研究[J].中国激光,2010,37(1):281~283

4 Wang Kunxia, Feng Shimeng, Xu Huatian *et al.*. Relation between the multicrystalline silicon surface structure and the pittrap effect[J]. *Acta Optica Sinica*, 2012, **32**(3): 0324001

王坤霞,冯仕猛,徐华天等.多晶硅不同晶面陷阱坑形貌与陷光效应的关系[J].光学学报,2012,32(3):0324001

- 5 W. Wang, S. M. Wu, K. Reinhardt *et al.*. Broadband light absorption enhancement in thin-film silicon solar cells[J]. Nano Letters, 2010, 10(6): 2012~2018
- 6 Xu Yishen, Gu Jihua, Tao Zhi *et al.*. Design of a broadband anti-reflection coating for solar cells[J]. Infrared and Laser Engineering, 2009, **38**(6): 999~1002

许宜申,顾济华,陶 智等.宽波长太阳能电池抗反射层结构设计[J].红外与激光工程,2009,38(6):999~1002

- 7 Bai Wenli, Guo Baoshan, Cai Likang *et al.*. Simulation of light coupling enhancement and localization of transmission field via subwavelength metallic gratings[J]. *Acta Physica Sinica*, 2009, **58**(11): 8021~8026 自文理, 郭宝山, 蔡利康等. 亚波长金属光栅的光耦合增强效应及透射局域化的模拟研究[J]. 物理学报, 2009, **58**(11): 8021~8026
- 8 K. R. Catchpole. Surface plasmons for enhanced silicon light-emitting diodes and solar cells[J]. J. Lumin., 2006, **121**(2): 315~318
- 9 J. Schuller, E. Barnard, W. S. Cai et al.. Plasmonics for extreme light concentration and manipulation [J]. Nature Materials, 2010, 9: 193~204
- 10 Xu Zhenfeng, Su Ping, Cao Liangcai *et al*.. Design of a high extraction efficiency light emitting diode with two crossed grating structures[J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2007, **36**(5): 715~717 许振丰,苏 萍,曹良才等. 具有双光栅结构的高提取效率发光二极管的设计[J]. 红外与激光工程, 2007, **36**(5): 715~717
- 11 Zhang Ming, Zhao Yun, Zhou Feng et al.. Application of the wire metal grating in the fiber sensors[J]. Chinese J. Lasers, 2011, 38: s105004

张 明,赵 云,周 峰等.金属纳米线栅在光纤传感器中的应用[J].中国激光,2011,38:s105004

12 Zhao Huaxin, Jiang Yongxiang, Luo Tianqiong *et al.*. Hollow optical fiber sensor based on surface plasmon resonance[J]. Acta Optica Sinica, 2012, 32(6): 0628001

赵华新,蒋永翔,罗天穹 等.基于表面等离子体共振原理的空芯光纤传感器[J].光学学报,2012,32(6):0628001

13 R. A. Pala, J. White, E. Barnard *et al.*. Design of plasmonic thin-film solar cells with broadband absorption enhancements [J]. Adv. Mater., 2009, 21: 1~6