

doi:10.3788/gzxb20144301.0131001

基于 FDFD 方法周期结构的薄膜太阳能电池特性

魏源¹, 肖峰¹, 吴博¹, 黄志祥¹, 吴先良^{1,2}

(1 安徽大学 电子信息工程学院 智能计算与信号处理重点实验室, 合肥 230039)

(2 合肥师范学院 物理电子系, 合肥 230061)

摘 要:利用非均匀媒质界面等效参量提取方案结合频域有限差分方法对周期结构薄膜太阳能电池的光学特性进行了数值分析及机理探究. 结合等离子体共振条件, 研究了两种设计结构的反射、传输、吸收特性及场分布特性, 结果表明在低频点, 介质和银分界面的场强明显增强, 吸收明显增大. 探讨了增强因子与结构、入射波长及入射角度间的关系, 并分析了其内在的物理机理. 结果表明, 增强因子在低频时较大且随入射角度增大而增大, 最大可达 5.7.

关键词:频域有限差分方法; 薄膜太阳能电池; 等离子体效应; 斜入射

中图分类号: O441.4

文献标识码: A

文章编号: 1004-4213(2014)01-0131001-6

Thin-film Solar Cells Characteristic with Periodic Structure Based on FDFD method

WEI Yuan¹, XIAO Feng¹, WU Bo¹, HUANG Zhi-Xiang¹, WU Xian-Liang^{1,2}

(1 Key Laboratory of Intelligent Computing and Signal Processing, Anhui University, Hefei 230039, China)

(2 Department of Physics and Electronic Engineering, Hefei Normal University, Hefei 230061, China)

Abstract: Using the new inhomogeneous medium interface equivalent parameter scheme combined with the finite-difference frequency-domain method, numerical analysis on mechanism of the optical properties of the thin-film solar cell with periodic structure was presented. The plasmon resonance condition was used to study the reflection, the transmission, the absorption characteristics, and the distribution of total field. In the low frequency point, the enhancement of the total field is obvious at the interface of the medium layer and the Ag layer, and the absorption increases significantly. Furthermore, the relationship between the enhancement factor, the structure, the incident wavelength and the angle of incidence was discussed, and its intrinsic physical mechanism was also analyzed. The enhancement factor is very large at low frequency and increases with the enhancement of the incident angle. The results show that the enhancement factor can increase to 5.7. The proposed research work can provide a relevant theory and technical reference for the design and optimization of the actual organic thin-film solar cells.

Key words: Finite-Difference Frequency-Domain (FDFD); Thin-film solar cell; Plasma effect; Oblique incidence

OCIS Codes: 310.6860; 240.0240

0 引言

近年来, 由于太阳能电池能将可再生、清洁的太

能转化为电能, 其研究和优化工作受到越来越多人的关注, 然而在降低成本以及提高其能量转化效率等方面仍有许多工作亟待解决.

基金项目:国家自然科学基金(Nos. 60931002, 61101064, 51277001)、安徽省杰出自然科学基金(No. 1108085J01)、安徽省高校自然科学基金(Nos. KJ2011A002, KJ2011A242)、教育部新世纪优秀人才基金(No. NCET-12-0596)和教育部博士点基金(No. 20123401110009)资助

第一作者:魏源(1988—), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为电磁场散射理论及数值方法. Email: weiyuanjay@126.com

通讯作者:黄志祥(1979—), 男, 教授, 博士, 主要研究方向为电磁高性能计算及新型材料电磁特性. Email: zxhuang@ahu.edu.cn

导师:吴先良(1955—), 男, 教授, 博士, 主要研究方向为无线通信及计算电磁学与应用. Email: xlwu@ahu.edu.cn

收稿日期:2013-04-23; **录用日期:**2013-06-14

<http://www.photon.ac.cn>

薄膜太阳能电池基本结构包括抗反射层、吸收材料和背反射层,其中抗反射层^[1]是用来减少太阳能电池上表面光的反射.吸收层是一种弱光吸收材料,如非晶硅^[2];背反射层^[3-4]是用来将透射的光反射回去以增强吸收,然而这样的结构工作效率仍不高.因此,引入表面等离子体共振方案来进一步改善光的捕获和利用效率.表面等离子体共振(Surface Plasmon Resonance, SPR)是限制在金属粒子表面的自由电子与入射电磁波发生耦合共振引发的强相互作用而产生的极化激元现象.SPR通常在拥有正介电常量的电介质和拥有负介电常量的金属的分界面产生,且需满足一定条件^[5].基于光激发 SPR 需要解决波矢失配问题,对薄膜太阳能电池,采用金属纳米周期结构和亚波长散射机理来激发 SPR^[6-7].理论和实验结果^[8]表明在一定波长范围由于 SPR 的作用光的吸收会极大地增强.

在处理太阳能电池内部光的传播和散射问题时,需要严格处理麦克斯韦方程.实际中多数光学材料均是色散媒质,通常情况下用时域有限差分方法(Finite-Difference Time-Domain, FDTD)^[9]处理媒质色散特性.然而,在 Lorentz-Drude 模型中,用 FDTD 处理贵金属(如 Ag)的复介电常量^[10]时需要多项 Lorentz 修正,因此处理递归卷积时将消耗大量的 CPU 内存及时间.而频域有限差分法(Finite-Difference Frequency Domain, FDFD)^[11]可以直接利用实验得到介质离散频率点的复介电常量,计算效率较高;且 FDFD 在处理周期结构和斜入射情况时有其独有的优势.

FDFD 的基本离散格式采用交错网格,可以满足离散条件,但在解决有高对比度的电介质和金属分界面时将会导致结果发散.本文采用平均方案进行不同介质分界面处理,利用混合吸收边界条件(PML和 Mur 的结合)进一步降低寄生的数值反射.

1 理论及数值计算模型

1.1 FDFD 算法构造

图 1 是两个不同结构的二维等离子体薄膜非晶硅(Amorphous Silicon, A-Si)太阳能电池晶胞.由于 S 极化波不能激发 SPR^[12],只考虑 P 极化波的电磁分量 H_z 、 E_x 和 E_y .其中所有材料都是非磁性,即 $\mu_r=1$.

图 1 的两种结构主要由铟锡氧化物(Indium Tin Oxide, ITO)、吸收材料(A-Si)、电极(Ag)和基底组成,对应的厚度分别为 d_1 、 d_2 、 d_3 、 d_4 .图 1(a)是一个完整的 Ag 带结构,记为结构一.图 1(b)是由四个相距 d_s 的 Ag 带结构,记为结构二.在 Ag 带之间是吸收材料,能增强等离子体效应.两个结构的顶部和底部采用混合吸收边界条件,左右两边采用周期边界条件(Periodic Boundary Conditions, PBC).

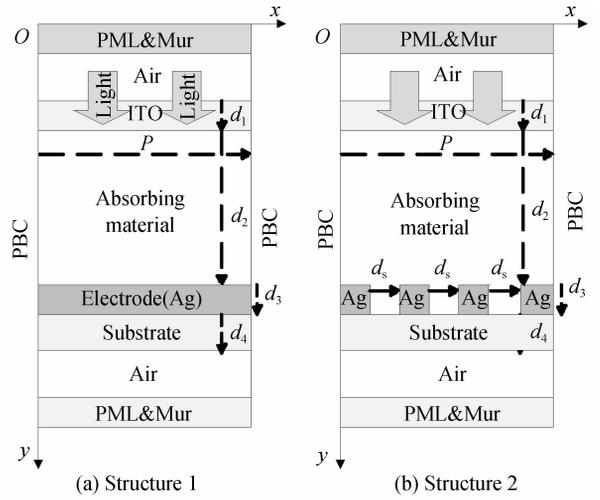


图 1 薄膜太阳能电池结构胞图

Fig. 1 The unit cell of thin-film solar cell

对具有复介电常量 $\epsilon_r(x, y)$ 的各向同性非均介质,其总场的波动方程为^[13]

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\epsilon_r(x, y)} \frac{\partial H_z}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{\epsilon_r(x, y)} \frac{\partial H_z}{\partial y} \right] + k_0^2 H_z = 0 \quad (1)$$

式中 k_0 是自由空间中的波数,利用二阶中心差分,有

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\epsilon_r(x, y)} \frac{\partial H_z}{\partial x} \right] = \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{H_z(i+1, j) - H_z(i, j)}{\epsilon_r(i+1/2, j) \Delta x} - \frac{H_z(i, j) - H_z(i-1, j)}{\epsilon_r(i-1/2, j) \Delta x} \right] + O(\Delta x^2) \quad (2)$$

式中, Δx 是 x 方向步长.图 2 为处理非均匀介质操作图.

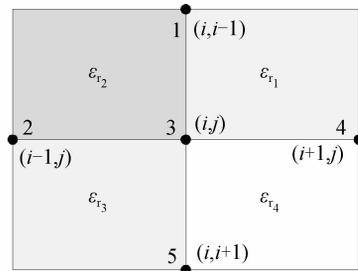


图 2 非均匀材料处理

Fig. 2 The inhomogeneous material treatment

对 P 极化波介电常量采用平均方案,即

$$\frac{1}{\epsilon_r(i+1/2, j)} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\epsilon_r} + \frac{1}{\epsilon_r} \right] \quad (3)$$

$$\frac{1}{\epsilon_r(i-1/2, j)} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\epsilon_r} + \frac{1}{\epsilon_r} \right] \quad (4)$$

令 $\Phi_1 = H_z^i(i, j-1)$, $\Phi_2 = H_z^i(i-1, j)$, $\Phi_3 = H_z^i(i, j)$, $\Phi_4 = H_z^i(i+1, j)$, $\Phi_5 = H_z^i(i, j+1)$, 其中 1, 2, 3, 4, 5 是图 2 中为 FDFD 算法所需的 5 个节点,式(1)的离散方程为

$$\sum_{m=1}^5 c_m \Phi_m = 0 \quad (5)$$

式中

$$c_1 = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\epsilon_r} + \frac{1}{\epsilon_r} \right] \frac{1}{\Delta y^2} \quad (6)$$

$$c_2 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\epsilon_r} + \frac{1}{\epsilon_r} \right) \frac{1}{\Delta x^2} \quad (7)$$

$$c_3 = -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\epsilon_r} + \frac{1}{\epsilon_r} + \frac{1}{\epsilon_r} + \frac{1}{\epsilon_r} \right) \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} \right) + k_0^2 \quad (8)$$

$$c_4 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\epsilon_r} + \frac{1}{\epsilon_r} \right) \frac{1}{\Delta x^2} \quad (9)$$

$$c_5 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\epsilon_r} + \frac{1}{\epsilon_r} \right) \frac{1}{\Delta y^2} \quad (10)$$

利用 FDFD 所构成的代数方程可以求出总场 H_z^s , 由于入射场 H_z^{inc} 是已知的, 可以通过 $H_z^s = H_z^{\text{inc}} + H_z^s$ 进而得到散射场 H_z^s .

1.2 边界条件

如图 1, 在顶部和底部边界本文采用 PML 和 Mur 吸收边界条件结合的混合吸收边界条件, 目的是为了减少寄生反射, PML 吸收边界条件其形式为^[14]

$$\frac{\partial^2 H_z^s}{\partial x^2} + \frac{1}{s_y} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{s_y} \frac{\partial H_z^s}{\partial y} \right) + k_0^2 H_z^s = 0 \quad (11)$$

式中

$$s_y = \begin{cases} 1 - j_0 \frac{\sigma(y)}{\omega \epsilon_0}, & \text{in PML} \\ 1, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (12)$$

ϵ_0 是自由空间介电常量, ω 是入射光波的角频率, 电导率 σ 分布为

$$\sigma(j) = \frac{C}{\Delta y} \left[\frac{j-1}{2} \right]^Q \quad (j=1, 2, \dots, 8) \quad (13)$$

$$\sigma(j+1/2) = \frac{C}{\Delta y} \left[\frac{j}{L} \right]^Q \quad (j=0, 1, \dots, 8) \quad (14)$$

式中, L 是 PML 层数, Q 是多项式的阶数, C 是一个常量. 优化后的参量设置为 $L=8, Q=3.7, C=0.02$. 运用二阶中心差分可得

$$\frac{1}{s_y} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{s_y} \frac{\partial H_z^s}{\partial y} \right) = \frac{1}{s_y(j)\Delta y} \left[\frac{H_z^s(i, j+1) - H_z^s(i, j)}{s_y(j+1/2)\Delta y} - \frac{H_z^s(i, j) - H_z^s(i, j-1)}{s_y(j-1/2)\Delta y} \right] \quad (15)$$

以顶部 $y=0$ 为例, 二阶 Mur 吸收边界条件形式为

$$\left[\frac{\partial}{\partial y} - j_0 \left(k_0 + \frac{1}{2k_0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \right] H_z^s \Big|_{y=0} = 0 \quad (16)$$

式(16)可离散为

$$f_1 H_z^s(i, j) + f_2 H_z^s(i-1, j) + f_3 H_z^s(i+1, j) + f_4 H_z^s(i, j+1) = 0 \quad (17)$$

式中

$$f_1 = 2 \exp(j_0 k_0 \Delta y) - 2k_0^2 \Delta x^2 \exp(j_0 k_0 \Delta y) - 2 \quad (18)$$

$$f_2 = f_3 = 1 - \exp(j_0 k_0 \Delta y) \quad (19)$$

$$f_4 = 2k_0^2 \Delta x^2 \quad (20)$$

沿 x 轴方向的周期边界条件形式为

$$H_z^s(x+P, y) = H_z^s(x, y) \exp(-j_0 k_0 \cos \theta \cdot P) \quad (21)$$

$$H_z^s(x, y) = H_z^s(x+P, y) \exp(j_0 k_0 \cos \theta \cdot P) \quad (22)$$

式中 P 是周期, θ 是入射角度.

2 数值结果及分析

2.1 等离子体效应

本文考虑一种半无限大的结构, 上半部分是 Ag, 下半部分是 A-Si, Ag 层和 A-Si 层的 H_z 值由式(23)和(24)表示为

$$H_z(x, y) = \exp(jk_y^{\text{Si}} \cdot y - jk_x \cdot x), y < 0 \quad (23)$$

$$H_z(x, y) = \exp(-jk_y^{\text{Ag}} \cdot y - jk_x \cdot x), y > 0 \quad (24)$$

$$k_y^{\text{Ag}} = \beta_y^{\text{Ag}} + j\alpha_y^{\text{Ag}}$$

式中 κ, α, β 分别是传播、衰减、相位常量. 对 P 极化波,

Ag 层对 A-Si 层的反射系数为 $R = \frac{\epsilon_r^{\text{Ag}} \cdot k_y^{\text{Si}} - \epsilon_r^{\text{Si}} \cdot k_y^{\text{Ag}}}{\epsilon_r^{\text{Ag}} \cdot k_y^{\text{Si}} + \epsilon_r^{\text{Si}} \cdot k_y^{\text{Ag}}}$,

其极点为

$$\epsilon_r^{\text{Ag}} \cdot k_y^{\text{Si}} + \epsilon_r^{\text{Si}} \cdot k_y^{\text{Ag}} = 0 \quad (25)$$

根据 $(k_y^{\text{Si}})^2 = k_0^2 \epsilon_r^{\text{Si}} - k_x^2$, $(k_y^{\text{Ag}})^2 = k_0^2 \epsilon_r^{\text{Ag}} - k_x^2$, 可以得出 \tilde{x} 方向传播常量 k_x , 即 $k_x = k_0 \left(\frac{\epsilon_r^{\text{Si}} \epsilon_r^{\text{Ag}}}{\epsilon_r^{\text{Si}} + \epsilon_r^{\text{Ag}}} \right)^{1/2}$, $k_x = \beta_x + j\alpha_x$, 考虑到 SPR 是一种衰减的表面波, 可知 y 方向的衰减常量要满足

$$\alpha_y^{\text{Ag}} < 0, \alpha_y^{\text{Si}} < 0 \quad (26)$$

通过求解极点方程(26), 所得结果如图 3. 由图可知非晶硅部分的衰减常量在入射波波长 $\lambda=550$ nm 时开始变为负数, 即当如射波长 $\lambda > 550$ nm 时等离子体共振态存在.

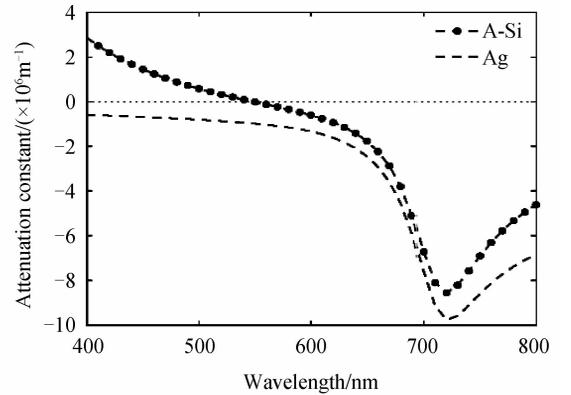


图 3 y 方向 Ag 层和 A-Si 层的衰减常量
Fig. 3 They-directed attenuation constants in the Ag and A-Si layers

2.2 数值结果及分析

图 1 所示周期纳米结构薄膜太阳能电池的吸收材料是 A-Si, 电极是银 (Ag), 基底是玻璃 (SiO_2). 左边结构的几何参量设置为 $d_1=25$ nm, $d_2=140$ nm, $d_3=40$ nm, $d_4=30$ nm, $P=200$ nm. 考虑到结构的一致性, 右边结构的几何参量设置为 $d_1=25$ nm, $d_2=116$ nm, $d_3=40$ nm, $d_4=30$ nm, $P=200$ nm, $d_s=40$ nm. 入射场方向为 y 方向, 幅度为 1 的波长范围从 400 nm 到 800 nm 的 p 极化平面波 $H_z^{\text{inc}}(x, y) = \exp(-jk_0(x \cdot$

$\cos \theta + y \cdot \sin \theta$). 空间步长设置为 $\Delta x = \Delta y = 0.5 \text{ nm}$, θ 是入射角, 定义为入射光与 SC 上表面的夹角, 本文选取角度分别为 $30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$.

图 4 是入射角为 90° 时图 2 中两种结构中吸收材料的吸收功率密度比较, 吸收功率密度由式 (27) 给出

$$\eta = \frac{\int_{S_a} \sigma_a |E|^2 ds}{\Delta S_a} \quad (27)$$

式中 ΔS_a 代表吸收材料面积 $\sigma_a = -\omega \epsilon_0 \text{Im}(\epsilon_{ra})$ 是吸收材料的电导率. 图中结构二的吸收功率密度在低频部分 (即波长大于 660 nm) 明显比结构一强. 结构二在该波长范围能激发强烈的 SPR, 因此场值有显著增强, 即 $|E|^2$ 变大, 从而吸收功率密度有明显的增强.

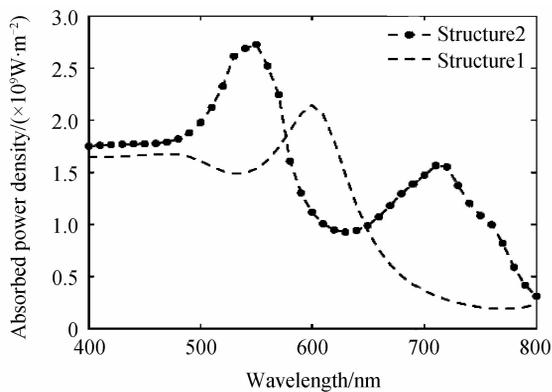


图 4 两种结构的非晶硅吸收功率密度

Fig. 4 The absorbed power density by the A-Si for different structures

图 5 给出了两种结构在入射角为 90° 的零阶反射系数和传输系数, 其计算式为

$$\begin{cases} R_p = \frac{\left| \frac{1}{P} \int_0^p H_z^i(x, y) \exp(jk_0 \cos \theta x) dx \right|^2}{b^2} \\ T_p = \frac{\left| \frac{1}{P} \int_0^p H_z^t(x, y) \exp(jk_0 \cos \theta x) dx \right|^2}{b^2} \end{cases} \quad (28)$$

式中 b 是入射光的幅值, 引入

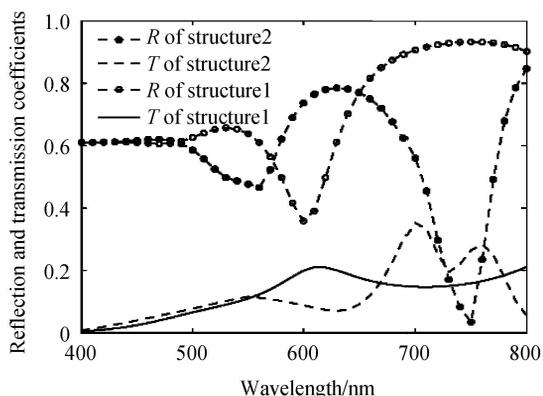


图 5 两种结构的反射和传输系数

Fig. 5 The reflection (R) and transmission (T) coefficients for the two structures

$$A(\lambda) = 1 - R(\lambda) - T(\lambda) \quad (29)$$

$A(\lambda)$ 代表吸收. 图 6 给出吸收的曲线, 该曲线和图 4 中的吸收功率密度曲线趋势相吻合, 均反映出低频时结构二的吸收要比结构一的吸收高很多.

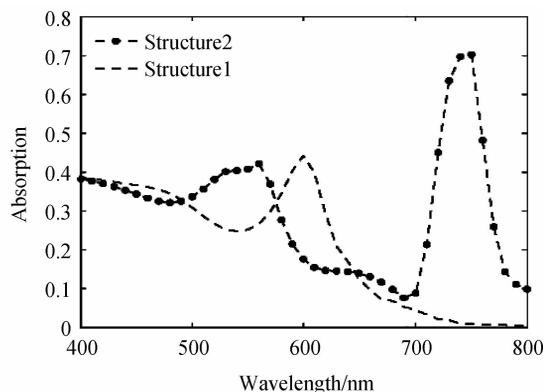
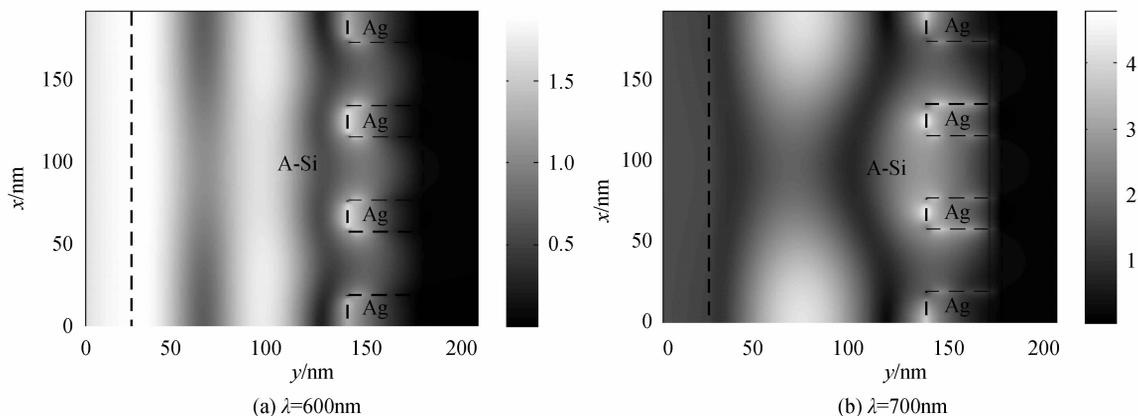


图 6 两种结构的吸收

Fig. 6 The absorption for the two structures

图 7 给出了结构二在入射角为 90° 波长为 $600 \text{ nm}, 700 \text{ nm}, 750 \text{ nm}$ 和 780 nm 处的磁场总场 H_z 分布, 图中可观测到在非晶硅和银分界面由于 SPR 而产生的场值增强示意图.



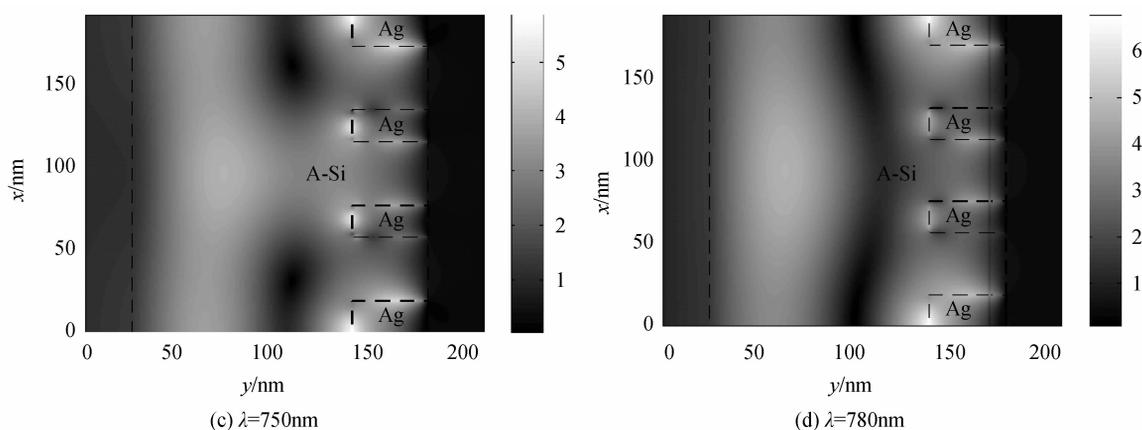


图 7 结构二在不同入射波长下的 H_z 分布

Fig. 7 The H_z field distribution for the structure 2 at different wavelengths

由图 4 可见在低频部分结构二有较明显的优势,本文引出增强因子 $\kappa = \eta_2 / \eta_1$, η_2 代表结构二的吸收功率密度, η_1 代表结构一的吸收功率密度. 图 8 为不同入射角度对吸收功率密度和增强因子的影响,从图 8 中可以发现随着入射角度的增大,非晶硅的吸收功率密度也随着增大. 图 9 反映出无论入射角如何变化,在低频处增强因子都较大,垂直入射时增强因子最大可达 5.7 左右. 这是由于结构二在低频时 SPR 引起的吸收

增强,也能从图 9 中看出低频时的增强因子也随着入射角的增大而增大.

3 结论

本文运用 FDFD 算法对周期薄膜太阳能电池进行数值模拟. 结果表明:薄膜太阳能电池对光的吸收和其结构以及入射角度相关;结构上的影响主要是由于吸收媒质和金属电极分界面会激发等离子体共振,从而能增强吸收. 同时给出了激发等离子体共振的条件. 另外,利用 FDFD 算法能够方便处理斜入射问题的优越性,给出了不同入射角条件下的光的吸收特性. 本文的理论结果为实际有机薄膜太阳能电池的设计及优化提供了相关理论及参考技术.

参考文献

- [1] ZHOU Wei-dong, MENG Tao, LI Chen, *et al.* Microstructured surface design for omnidirectional antireflection coatings on solar cells[J]. *Journal of Applied Physics*, 2007, **102**(10): 103-105.
- [2] CHOPRA K L, PAULSON P D, DUTTA V. Thin-film solar cells: An overview[J]. *Progress In Photovoltaics: Research And Applications*, 2004, **12**(2-3): 69-92.
- [3] ZENG L, YI Y, HONG C, *et al.* Efficiency enhancement in Si solar cells by textured photonic crystal back reflector [J]. *Applied Physics Letters*, 2006, **89**(11): 111-111.
- [4] HAASE C, STIEBIG H. Thin-film silicon solar cells with efficient periodic light trapping texture[J]. *Applied Physics Letters*, 2007, **91**(6): 061-116.
- [5] ZIA R, SELKER M D, CATRYSSSE P B, *et al.* Geometries and materials for subwavelength surface plasmon modes[J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 2004, **21**(12): 2442-2446.
- [6] DITLBACHER H, KRENN J R, FELIDJ N, *et al.* Fluorescence imaging of surface plasmon fields[J]. *Applied Physics Letters*, 2002, **80**(3): 404-406.
- [7] RAETHER H. Surface plasmons on smooth and rough surfaces and on gratings[M]. Berlin:Springer-Verlag, 1988.
- [8] WANG C C D, CHOY W C H, DUAN Chun-hui, *et al.* Optical and electrical effects of gold nanoparticles in the active layer of polymer solar cells [J]. *Journal of Materials Chemistry*, 2011, **22**: 1206-1211.

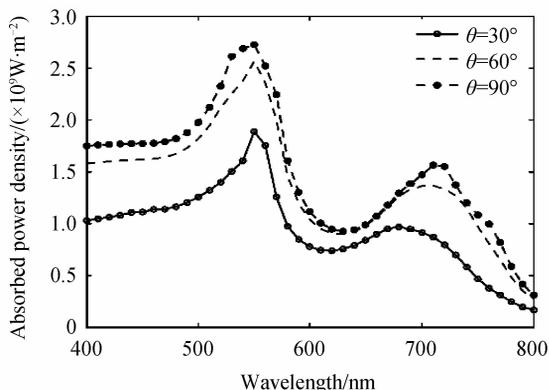


图 8 吸收功率密度和入射角度的关系

Fig. 8 The relationship between absorbed power density and incident angle

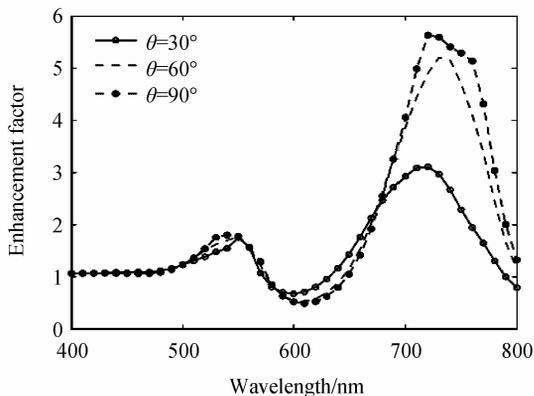


图 9 增强因子和入射角度的关系

Fig. 9 The relationship between enhancement factor and incident angle

- [9] SUN Chen, LI Chuan-hao, SHI Rui-ying, *et al.* A study of influences of metal nanoparticles on absorbing efficiency of organic solar cells[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2012, **41**(11): 1335-1341.
孙晨, 李传皓, 石瑞英, 等. 金属纳米颗粒对有机太阳能电池光吸收效率影响的研究[J]. *光子学报*, 2012, **41**(11): 1335-1341.
- [10] QIU M, HES L. A nonorthogonal finite-difference time-domain method for computing the band structure of a two-dimensional photonic crystal with dielectric and metallic inclusions[J]. *Journal of Applied Physics*, 2000, **87**(12): 8268-8275.
- [11] ZHU Z M, BROWN T. Full-vectorial finite-difference analysis of microstructured optical fibers[J]. *Optics Express*, 2002, **10**(17): 853-864.
- [12] HOMOLA J, YEE S S, GAUGLITZ G. Surface plasmon resonance sensors: review[J]. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 1999, **54**(1-2): 3-15.
- [13] CHEW W C. *Waves and fields in inhomogenous media*[M]. New York: Van Nostrand Reinhold, 1990.
- [14] CHEW W C, WEEDON W H. A 3-D perfectly matched medium from modified Maxwell's equations with stretched coordinates[J]. *Microwave and Optical Technology Letters*, 1994, **7**(13): 599-604.