

基于FDFD方法研究含石墨烯薄膜太阳能电池的电磁特性

周丽 魏源 黄志祥 吴先良

Study on the electromagnetic properties of thin-film solar cell grown with graphene using FDFD method

Zhou Li Wei Yuan Huang Zhi-Xiang Wu Xian-Liang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 018101 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.018101

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.018101>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I1>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

Si面4H-SiC衬底上外延石墨烯近平衡态制备

Quasi-equilibrium growth of monolayer epitaxial graphene on SiC (0001)

物理学报.2014, 63(3): 038102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.038102>

三维自组装Eu³⁺-石墨烯复合材料的制备及其磁性研究

Synthesis and magnetic properties of three-dimensional self-assembly Eu³⁺-graphene composite material

物理学报.2013, 62(18): 188102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.188102>

石墨烯/银纳米复合材料的制备及其影响因素研究

Preparation and influencing factors of graphene-silver nanocomposites

物理学报.2013, 62(14): 148101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.148101>

嵌入线型缺陷的石墨纳米带的热输运性质

Thermal transport of graphene nanoribbons embedding linear defects

物理学报.2013, 62(6): 068102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.068102>

L型石墨纳米结的热输运

Thermal transport in L-shaped graphene nano-junctions

物理学报.2011, 60(2): 028103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.60.028103>

基于FDFD方法研究含石墨烯薄膜太阳能电池的电磁特性*

周丽¹⁾ 魏源¹⁾ 黄志祥^{1)†} 吴先良^{1)2)‡}

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

2) (合肥师范学院电子信息工程学院, 合肥 230061)

(2014年7月13日收到; 2014年8月23日收到修改稿)

近年来, 基于非晶硅太阳能电池在提高能量转换效率和降低成本等方面的研究越来越受到学者的关注, 其中, 太阳能电池吸收峰值的位置, 反映了电池对该频点及其附近频谱光波吸收具有较好的效果. 然而, 非晶硅太阳能电池的吸收峰位置主要是由非晶硅和金属电极的参数决定, 很难实现位置的可调以及进一步的吸收效率增加. 所以, 在周期结构太阳能电池的金属光栅结构中引入单层石墨烯薄膜, 借助石墨烯的特殊光电特性, 即介电常数可通过改变化学势 μ_c 来调谐, 并结合频域有限差分方法的数值模拟, 理论上实现了对太阳能电池能量吸收峰位置的调谐. 针对石墨烯电导率的虚部出现奇异点, 本文提出了采用数值拟合予以解决奇异点的方法, 数值结果表明近似表达式的最大绝对误差为0.8%. 本设计结构的理论结果可为实际有机薄膜太阳能电池在工作频段的调节和优化提供理论基础和技术支撑.

关键词: 石墨烯, 薄膜太阳能电池, 频域有限差分方法, 化学势

PACS: 81.05.ue, 78.67.Wj, 42.25.Bs, 73.50.Mx

DOI: 10.7498/aps.64.018101

1 引言

相对于化石燃料的不可再生性和对环境的严重污染, 太阳能电池可以将可再生的、清洁的太阳光转换成电能. 而其中, 薄膜太阳能电池依据其高的能量转化效率和较低的成本, 更加受到关注. 薄膜太阳能电池主要包括非晶硅薄膜太阳能电池、多晶硅薄膜太阳能电池和有机薄膜太阳能电池. 以非晶硅太阳能电池^[1]为例, 其优点包括对光吸收率高、材料成本低等. 然而, 在大于650 nm的光谱中吸收效果较差, 因此, 在周期结构太阳能电池中加入金属光栅, 利用表面等离子体共振效应, 进一步改善了光的俘获和利用效率^[2,3]. 但是, 非晶硅和

金属光栅的电参数决定了非晶硅薄膜太阳能电池的吸收峰位置, 为此, 我们在金属电极上加入单层石墨烯薄膜, 利用其光学特性来调节太阳能电池的吸收峰位置.

石墨烯是指碳原子以 sp^2 轨道, 杂化轨道堆垛成蜂窝状结构的二维薄膜, 可以看成是单层的石墨结构, 层厚约为0.335 nm. 自2004年Novoselov等成功从石墨中分离出石墨烯^[4]以来, 因其独特的物理光学特性^[5,6]和潜在的电学性能成为人们关注的热点, 例如高强度的光耦合^[7], 门电压可控的光电导率^[8]等. 在包括光调制器^[9,10]、晶体管^[11]、传感器^[12]、变换光学^[13]等学科领域的广泛应用中, 起到不同作用. 同时, 石墨烯作为一种二维材料, 打破了二维晶体在常温下不能稳定存在的传统物

* 国家自然科学基金 (批准号: 51277001, 61101064, 61471001)、教育部新世纪优秀人才基金 (批准号: NCET-12-0596)、教育部博士点基金 (批准号: 20123401110009)、安徽省杰出青年基金 (批准号: 1108085J01) 和安徽省高校重点项目 (批准号: KJ2012A103) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zxhuang@ahu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: xlwu@ahu.edu.cn

理学观点^[14,15]. 石墨烯的质地异常坚硬. 室温下, 石墨烯的电子迁移率为 $15000 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, 可以被看做是一种优良导体. 在光波波段, 单层石墨烯对光波的透射率高达97.7%^[16], 可利用石墨烯代替贵金属氧化锡铟、金等来改善太阳能电池的性能和降低制作成本. 但是, 现如今的研究主要关注于石墨烯太阳能电池的光吸收和传输特性, 并未考虑其吸收峰的优化问题.

在本论文中, 我们利用频域有限差分 (finite-difference frequency-domain, FDFD)^[17] 方法, 研究了石墨烯加在非晶硅薄膜太阳能电池中对吸收峰位置的影响. 首先结合解析及拟合公式, 得到石墨烯在入射波波长为400—800 nm间的电导率和介电常数. 其次, 通过调节化学势 μ_c 的大小, 改变太阳能电池在低频处吸收峰的位置. 与未加石墨烯的参考结构相比较, 我们的设计结构在低频处的吸收峰位置实现了可调谐作用.

2 石墨烯的光电特性

理论和实验数据表明, 在电磁光谱中, 石墨烯具有二维复光电导率

$$\sigma_c = \sigma_r + i\sigma_i, \quad (1)$$

其中, σ_r 和 σ_i 分别表示石墨烯电导率的实部和虚部. 石墨烯电导率与入射波波长 λ , 温度 T , 跳频参数 t , 化学势 μ_c 相关. 其中, 化学势 μ_c 是关于载流子密度的函数, 我们可以通过调节门电压、电磁场和化学掺杂来改变 μ_c 大小^[18]. 计算石墨烯电导率的实部公式为

$$\sigma_r = \sigma_0 \left[\frac{18 - (\hbar\omega/t)^2}{\pi 12 \sqrt{3}} \right] \psi_r \kappa, \quad (2)$$

其中,

$$\psi_r = \tanh \left(\frac{\hbar\omega + 2\mu_c}{4k_B T} \right) + \tanh \left(\frac{\hbar\omega - 2\mu_c}{4k_B T} \right), \quad (3)$$

$$\kappa = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{F(\hbar\omega/2t)}} K \left(\frac{2\hbar\omega/t}{F(\hbar\omega/2t)} \right), & \hbar\omega < 2t, \\ \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega/t}} K \left(\frac{F(\hbar\omega/2t)}{2\hbar\omega/t} \right), & \hbar\omega \geq 2t, \end{cases} \quad (4)$$

$$F(x) = (1+x)^2 - 0.25(x^2-1)^2, \quad (5)$$

$$K(m) = \int_0^1 ((1-x^2)(1-mx^2))^{-1/2} dx. \quad (6)$$

计算石墨烯电导率的虚部公式为

$$\sigma_i = \frac{\sigma_0}{\pi} \left\{ \frac{4\mu_c}{\hbar\omega} \left[1 - 2 \left(\frac{\mu_c}{3t} \right)^2 \right] - \left[1 - \left(\frac{\hbar\omega}{6t} \right)^2 \right] \gamma \right\}, \quad (7)$$

其中,

$$\gamma = \log \frac{|\hbar\omega + 2\mu_c|}{|\hbar\omega - 2\mu_c|}. \quad (8)$$

在公式中, $\sigma_0 = e^2/4\hbar$, t 是石墨烯的跳频参数, $\hbar$ 是约化普朗克常数, k_B 是玻尔兹曼常数, ω 是角频率. 由(8)式可以看出, 当 $\hbar\omega = 2\mu_c$ 时, 电导率的虚部 σ_i 会出现奇异点. 然而, 实验结果显示, 在 $\hbar\omega = 2\mu_c$ 附近, 未观察到电导率的虚部出现急剧下降现象^[19]. 所以, 为了消除奇异点, 采用拟合公式近似解析解, 修正方程中的 κ 和 γ 项为

$$\kappa' = \begin{cases} 4.6936 - 2.897 \tanh(|\hbar\omega - 2t|^{0.546}), & \hbar\omega < 2t, \\ 4.6936 \exp(-0.7714 |\hbar\omega - 2t|^{0.4727}), & \hbar\omega \geq 2t, \end{cases} \quad (9)$$

$$\gamma' = \log \left(\frac{|\hbar\omega + 2\mu_c| - \psi_i}{|\hbar\omega - 2\mu_c| + \psi_i} \right), \quad (10)$$

其中,

$$\psi_i = 2k_B T \left\{ \tanh \left(\frac{|\hbar\omega + 2\mu_c|}{4k_B T} \right) - \tanh \left(\frac{|\hbar\omega - 2\mu_c|}{4k_B T} \right) \right\}. \quad (11)$$

根据(2)和(7)式, 得石墨烯电导率的实部和虚部随化学势 μ_c 和温度 T 的变化图, 如图1所示.

图1为入射波波长为400—800 nm时, 石墨烯电导率随化学势 μ_c 、温度 T 的变化. 其中, $t = 2.7 \text{ eV}$. 从图中可以看出, 近似解在 $\hbar\omega = 2\mu_c$ 处不存在奇异点. 在图1(a), (b)中, $T = 300 \text{ K}$, 当 μ_c 从0.9 eV增大到1.02 eV时, 石墨烯电导率的频率蓝移, 跃变位置也发生偏移. 在图1(c), (d)中, $\mu_c = 0.9 \text{ eV}$, 温度从45 K上升到300 K, 电导率实部的频率蓝移, 虚部变化不明显.

在对太阳能电池电磁计算中, 将石墨烯的电导率转换为复相对介电常数

$$\varepsilon_{\text{eff}} = 1 + i\sigma_c/\omega\varepsilon_0 d, \quad (12)$$

其中, d 表示石墨烯的厚度, ε_0 表示真空中的介电常数. 根据(12)式, 给出石墨烯复介电常数的实部与虚部随化学势 μ_c 和层厚 d 的变化图, 如图2所示.

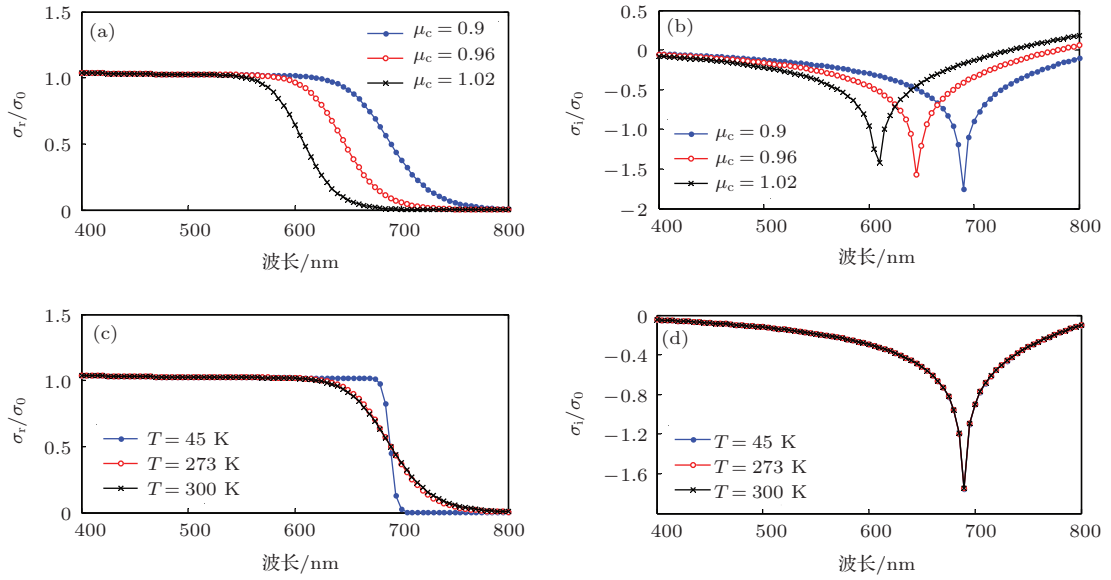


图1 (网刊彩色) 石墨烯电导率 (a) 实部随 μ_c 变化; (b) 虚部随 μ_c 变化; (c) 实部随 T 变化; (d) 虚部随 T 变化

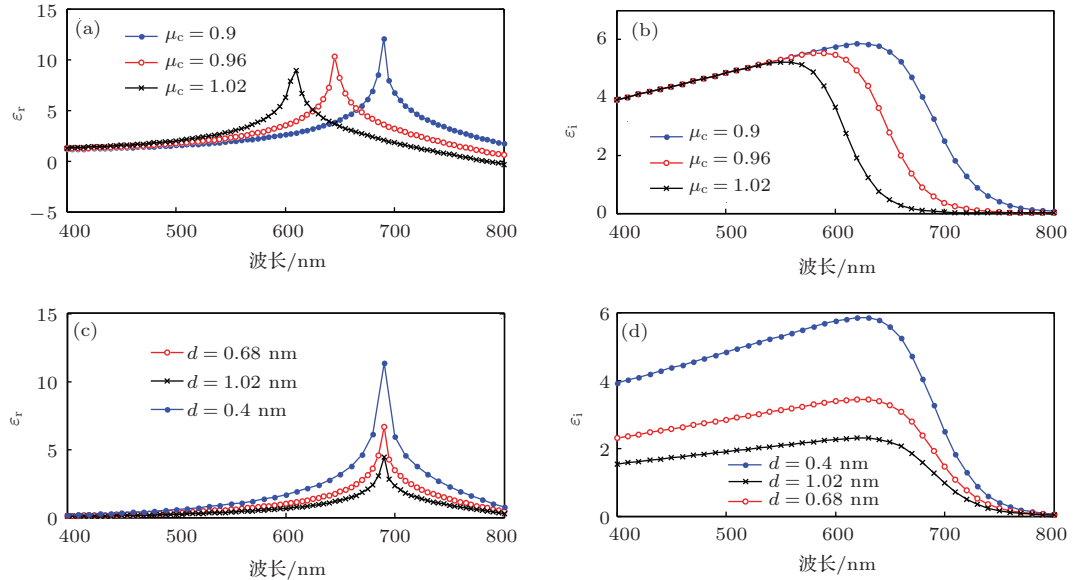


图2 (网刊彩色) 石墨烯介电常数 (a) 实部随 μ_c 变化; (b) 虚部随 μ_c 变化; (c) $\mu_c = 0.9$ eV 时虚部随 d 变化; (d) $\mu_c = 0.9$ eV 时实部随 d 变化

从图2(a), (b) 可知, 改变化学势 μ_c 的大小, 石墨烯介电常数的实部和虚部会随之发生变化. 从图2(c), (d) 可知, 石墨烯的层厚 d 从 0.4 nm 增加到 1.02 nm, 其介电常数的实部和虚部值变小, 峰值位置没有发生改变. 同时, 石墨烯的导电能力随层厚变化也发生改变, 所以, 改变石墨烯的层厚, 不会影响设计结构的光吸收和频率峰位置. 综上所述, 在室温下, 固定石墨烯的等效层厚为 0.4 nm, 在太阳能电池中加入单层石墨烯薄膜, 利用其光电特性, 对薄膜太阳能电池的吸收频率峰位置进行调节.

3 理论及数据计算模型

3.1 FDFD 算法构造

两个不同结构的二维等离子体薄膜非晶硅太阳能电池晶胞如图3所示. 由于 S 极化波不能激发表面等离子体共振 (surface plasma resonance, SPR), 我们主要考虑 P 极化光, 其电磁分量为 H_z , E_x , E_y . 其中, 所有的材料都是非磁性的, 即 $\mu_r = 1$.

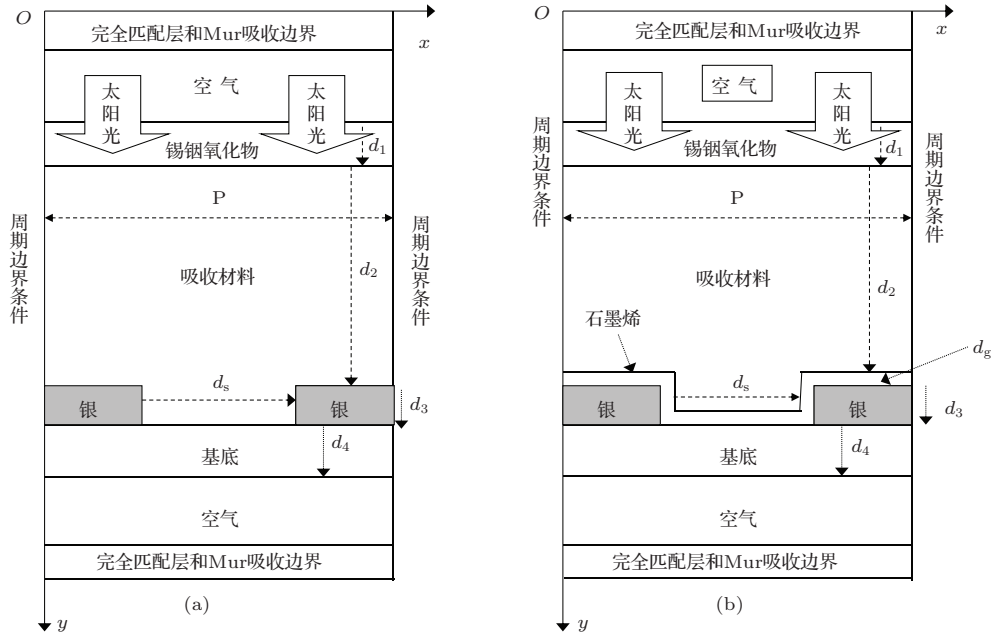


图3 薄膜太阳能电池结构胞图 (a) 结构一; (b) 结构二

如图3所示, 薄膜太阳能电池结构胞图主要由锡锡氧化物(indium tin oxide, ITO)、非晶硅吸收材料(amorphous silicon, A-Si)、银电极(silver electrode, Ag)和基底(SiO_2)组成, 其厚度分别为 d_1, d_2, d_3, d_4 . 结构一为未加石墨烯层的结构胞图, 电极间的间距为 d_s . 结构二为在电极与吸收层、基底与吸收层的分界面加入单层石墨烯薄膜的结构胞图, 石墨烯层厚度为 d_g , 间距为 d_s . 两个结构的顶部和底部都采用混合吸收边界条件, 左右采用周期边界条件.

对于含复介电常数 $\epsilon_r(x, y)$ 的二维各向同性非均匀介质, 其总场的波动方程^[20]为

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\epsilon_r(x, y)} \frac{\partial H_z^t}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\epsilon_r(x, y)} \frac{\partial H_z^t}{\partial y} \right) + k_0^2 H_z^t = 0, \quad (13)$$

其中, k_0 为自由空间中的波数. 利用二阶中心差分, 有

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\epsilon_r(x, y)} \frac{\partial H_z^t}{\partial x} \right) \\ &= \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{H_z^t(i+1, j) - H_z^t(i, j)}{\epsilon_r(i+1/2, j)\Delta x} \right. \\ & \quad \left. - \frac{H_z^t(i, j) - H_z^t(i-1, j)}{\epsilon_r(i-1/2, j)\Delta x} \right) + o(\Delta x^2), \end{aligned} \quad (14)$$

其中, Δx 是 x 方向的步长.

由于涉及到非均匀交界面的处理, 操作示意图如图4所示, $\epsilon_{r1}, \epsilon_{r2}, \epsilon_{r3}, \epsilon_{r4}$ 分别表示图4中矩形

区域的介电常数. 实心黑点代表五个不同的节点1, 2, 3, 4, 5, 中心黑点3被四个不同介电常数的矩形区域包围. 利用这种处理方法, 可以把介质分界面问题考虑在内.

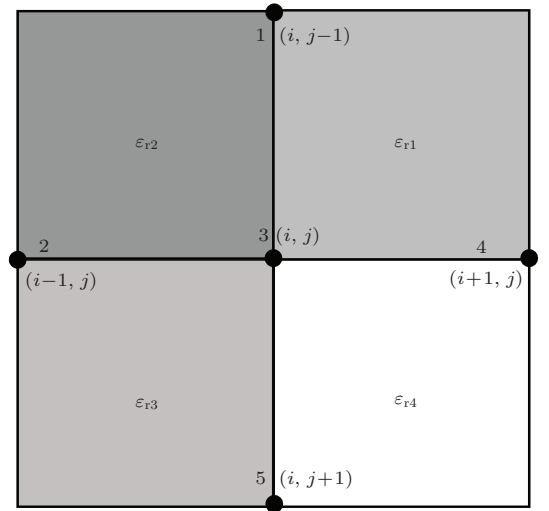


图4 非均匀材料处理

对于P极化入射光, 介电常数采用平均方案, 即

$$\frac{1}{\epsilon_r(i+1/2, j)} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\epsilon_{r1}} + \frac{1}{\epsilon_{r4}} \right), \quad (15)$$

$$\frac{1}{\epsilon_r(i-1/2, j)} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\epsilon_{r2}} + \frac{1}{\epsilon_{r3}} \right). \quad (16)$$

令 $\Phi_1 = H_z^t(i, j-1)$, $\Phi_2 = H_z^t(i-1, j)$, $\Phi_3 = H_z^t(i, j)$, $\Phi_4 = H_z^t(i+1, j)$, $\Phi_5 = H_z^t(i,$

$j+1$), 下标 1, 2, 3, 4, 5 分别为图 4 中的 5 个节点. 则 (13) 式离散成形如

$$\sum_{m=1}^5 c_m \Phi_m = 0 \quad (17)$$

的 FDFD 方程. 其中,

$$c_1 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\varepsilon_{r1}} + \frac{1}{\varepsilon_{r2}} \right) \cdot \frac{1}{\Delta y^2}, \quad (18)$$

$$c_2 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\varepsilon_{r2}} + \frac{1}{\varepsilon_{r3}} \right) \cdot \frac{1}{\Delta x^2}, \quad (19)$$

$$c_3 = -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\varepsilon_{r1}} + \frac{1}{\varepsilon_{r2}} + \frac{1}{\varepsilon_{r3}} + \frac{1}{\varepsilon_{r4}} \right) \times \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} \right) + k_0^2, \quad (20)$$

$$c_4 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\varepsilon_{r4}} + \frac{1}{\varepsilon_{r1}} \right) \cdot \frac{1}{\Delta x^2}, \quad (21)$$

$$c_5 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\varepsilon_{r3}} + \frac{1}{\varepsilon_{r4}} \right) \cdot \frac{1}{\Delta y^2}, \quad (22)$$

其中, $\Delta x, \Delta y$ 分别表示 x, y 方向的步长.

利用 (17) 式, 可以计算总场 H_z^t . 由于所考虑的周期结构模型处于自由空间中, 入射平面波为

$$H_z^{\text{inc}}(x, y) = \exp(-jk_0(x \cos \theta + y \sin \theta)), \quad (23)$$

其中, θ 为入射光与太阳能电池上表面的夹角. 则根据 $H_z^t = H_z^{\text{inc}} + H_z^s$, 可求出散射场 H_z^s .

3.2 边界条件处理

3.2.1 混合吸收边界条件

如图 3 所示, 为了减少寄生反射, 在周期结构顶部和底部采用混合吸收边界条件, 即完全匹配层 (perfectly matched layer, PML) 和二阶 Mur 吸收边界条件.

考虑到 PML 吸收边界条件, 则波动方程的形式如下:

$$\frac{\partial^2 H_z^s}{\partial x^2} + \frac{1}{s_y} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{s_y} \frac{\partial H_z^s}{\partial y} \right) + k_0^2 H_z^s = 0, \quad (24)$$

其中,

$$s_y = \begin{cases} 1 - j_0 \frac{\sigma(y)}{\omega \varepsilon_0}, & \text{PML 内,} \\ 1, & \text{其他,} \end{cases} \quad (25)$$

S_y 表示 PML 参数, ε_0 是自由空间的介电常数, ω 是入射光的角频率, 电导率 σ 的多项式为

$$\sigma(j) = \frac{C}{\Delta y} \left(\frac{j-1/2}{L} \right)^Q, \quad j = 1, 2, \dots, 8, \quad (26)$$

$$\sigma(j+1/2) = \frac{C}{\Delta y} \left(\frac{j}{L} \right)^Q, \quad j = 0, 1, \dots, 8, \quad (27)$$

其中, j 是 y 方向坐标值, L 是 PML 层数, Q 是多项式的阶数, C 是常数, Δy 是 y 方向的步长. 经优化后, 参数设置分别为 $L = 8, Q = 3.7, C = 0.02$.

对 (24) 式采用二阶中心差分得

$$\begin{aligned} & \frac{1}{s_y} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{s_y} \frac{\partial H_z^s}{\partial y} \right) \\ &= \frac{1}{s_y(j) \cdot \Delta y} \left[\frac{H_z^s(i, j+1) - H_z^s(i, j)}{s_y(j+1/2) \cdot \Delta y} \right. \\ & \quad \left. - \frac{H_z^s(i, j) - H_z^s(i, j-1)}{s_y(j-1/2) \cdot \Delta y} \right]. \end{aligned} \quad (28)$$

为进一步提高吸收效果, 在 PML 最外侧加入一层二阶 Mur 吸收边界. 以顶部 $y = 0$ 为例, Mur 吸收边界形式为

$$\left[\frac{\partial}{\partial y} - j_0 \left(k_0 + \frac{1}{2k_0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \right] H_z^s \Big|_{y=0} = 0. \quad (29)$$

经差分离散得

$$\begin{aligned} & f_1 H_z^s(i, j) + f_2 H_z^s(i-1, j) \\ & + f_3 H_z^s(i+1, j) + f_4 H_z^s(i, j+1) = 0, \end{aligned} \quad (30)$$

其中,

$$\begin{aligned} f_1 &= 2 \exp(j_0 k_0 \Delta y) - 2k_0^2 \Delta x^2 \\ & \quad \times \exp(j_0 k_0 \Delta y) - 2, \end{aligned} \quad (31)$$

$$f_2 = f_3 = 1 - \exp(j_0 k_0 \Delta y), \quad (32)$$

$$f_4 = 2k_0^2 \Delta x^2. \quad (33)$$

3.2.2 周期边界条件

考虑到薄膜太阳能电池为周期结构, 则需要实现沿 x 轴方向的周期边界条件设置. 依据 Floquet 理论, 有

$$\begin{aligned} & H_z^s(x+P, y) \\ &= H_z^s(x, y) \exp(-j_0 k_0 \cos \theta \cdot P), \end{aligned} \quad (34)$$

$$\begin{aligned} & H_z^s(x, y) \\ &= H_z^s(x+P, y) \exp(j_0 k_0 \cos \theta \cdot P), \end{aligned} \quad (35)$$

其中, P 是周期, θ 是沿着 x 方向的入射角度. 与 FDFD 相比较, 时域有限差分法 (finite-difference time-domain, FDTD) [21] 在处理周期结构中无法得到下一节点的散射场值, 所以, FDTD 在处理 (35) 式时较为困难, 特别是对于斜入射问题 [22].

4 数值结果及分析

周期纳米结构的薄膜太阳能电池如图 3 所示, 吸收材料为 A-Si, 电极为 Ag, 基底为 SiO₂. 结构一

的几何参数分别为 $d_1 = 25$ nm, $d_2 = 120$ nm, $d_3 = 40$ nm, $d_4 = 30$ nm, $d_s = 100$ nm, $P = 200$ nm. 结构二的参数分别为 $d_1 = 25$ nm, $d_2 = 120$ nm, $d_3 = 40$ nm, $d_4 = 30$ nm, $d_g = 0.4$ nm, $d_s = 100$ nm, $P = 200$ nm. P 极化入射波方向为 y 方向, 幅值为 1, 波长范围为 400—800 nm. 结构一的空间步长设置为 $\Delta x = \Delta y = 0.5$ nm, 结构二的空间步长设置为 $\Delta x = \Delta y = 0.2$ nm. θ 定义为入射光与太阳能电池上表面的夹角.

图 5 所示是入射角为 90° 时, 结构一和结构二中吸收材料的吸收功率密度比较. 吸收功率密度 η 可由下式计算得:

$$\eta = \frac{1}{\Delta S_a} \int_{S_a} \sigma_a |E|^2 ds, \quad (36)$$

其中, S_a 表示吸收材料区域, ΔS_a 为 S_a 的面积, $\sigma_a = -\omega \varepsilon \operatorname{Im}(\varepsilon_{ra})$ 为吸收材料的电导率.

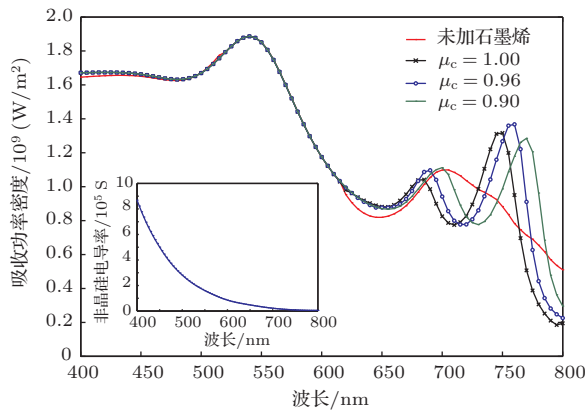


图 5 (网刊彩色) 非晶硅吸收功率密度比较. 红色点实线表示结构一中未加石墨烯层的非晶硅吸收功率密度 (在加石墨烯层的结构二中, 绿色点实线表示化学势 $\mu_c = 0.9$ eV 时非晶硅吸收功率密度, 蓝色圈实线表示化学势 $\mu_c = 0.96$ eV 时非晶硅吸收功率密度, 黑色叉实线表示化学势 $\mu_c = 1.00$ eV 时非晶硅吸收功率密度. 插图为非晶硅的电导率随波长的变化图)

由图 5 插图可知, 由于非晶硅的电导率在 650—800 nm 间较低, 则会导致薄膜太阳能电池在此区间内的吸收效率降低, 为此, 结构一和结构二都利用了金属光栅结构来激发产生 SPR, 致其吸收功率密度在低频波段可以大幅度提高. 例如, 在图 5 中, 结构一和结构二在波长为 700 nm 附近出现一吸收峰. 又如图 5 所示, 在一定波长范围内, 化学势 μ_c 从 0.9 eV 增大到 1.0 eV, 结构二的吸收功率密度峰值频率会发生蓝移. 其原因是结构二在加入一层石墨烯后, 由于其光电特性, 使分界面处金属表面等离子体的谐振频率发生改变, 最终导致吸

收峰的位置发生变化. 且从图 5 中可以看出, 结构二在 750 nm 附近又出现一吸收峰, 这主要是因为石墨烯与银电极之间发生耦合, 产生了等离子体共振 [23].

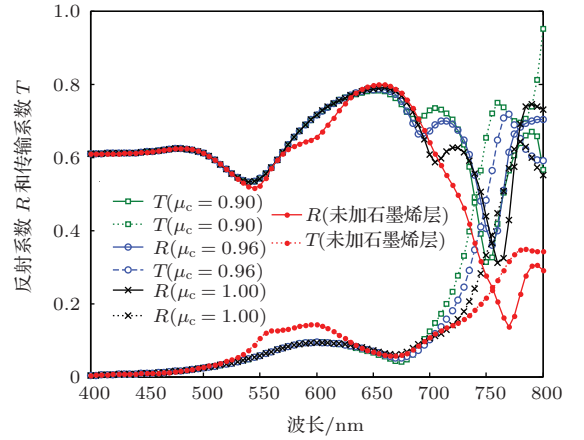


图 6 (网刊彩色) 未加石墨烯结构与加石墨烯结构的非晶硅反射系数和传输系数 (红色点实线与红色点虚线分别表示结构一的反射系数与传输系数, 绿色矩形实线与绿色矩形虚线分别表示结构二在化学势 $\mu_c = 0.9$ eV 时的反射系数与传输系数. 蓝色圈实线与蓝色圈虚线分别表示结构二在化学势 $\mu_c = 0.96$ eV 时的反射系数与传输系数. 黑色叉实线与黑色叉虚线分别表示结构二在化学势 $\mu_c = 1.0$ eV 时的反射系数与传输系数)

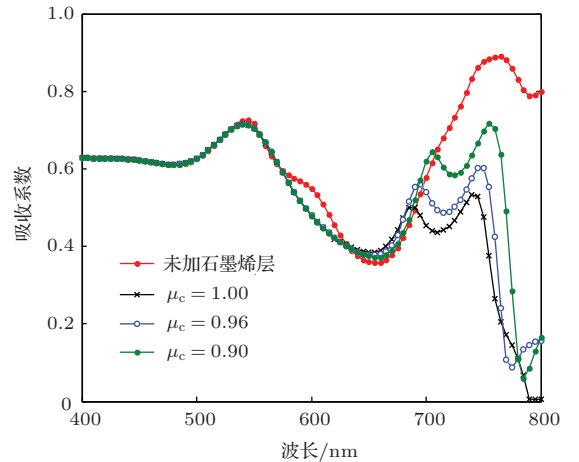


图 7 (网刊彩色) 未加石墨烯结构与加石墨烯结构的非晶硅吸收系数

图 6 给出两种结构在入射角为 90° 的零阶反射系数和传输系数, 其计算公式如下:

$$R_p = \frac{\left| \frac{1}{P} \int_0^P H_z^s(x, y_r) \exp(jk_0 \cos \theta x) dx \right|^2}{A^2},$$

$$T_p = \frac{\left| \frac{1}{P} \int_0^P H_z^t(x, y_t) \exp(jk_0 \cos \theta x) dx \right|^2}{A^2}, \quad (37)$$

其中, R_p 和 T_p 分别表示零阶反射系数和零阶传输

系数, A 是入射光的幅值. 根据 (37) 式所示的反射和传输系数计算公式, 可得吸收系数 $A(\lambda)$ 为

$$A(\lambda) = 1 - R(\lambda) - T(\lambda), \quad (38)$$

图 7 为吸收系数 $A(\lambda)$ 的曲线图. 从图 7 可以看出, 结构一与结构二的吸收曲线与图 5 的吸收功率密度曲线趋势基本符合. 然而, 图 5 所示为非晶硅吸收材料的吸收, 图 7 所示为非晶硅吸收材料、石墨烯与银金属电极共同作用的吸收. 现如今, 大多数商业软件都是基于 (38) 式来计算材料吸收, 与 (36) 式比较, 则存在一定的幅度误差.

下图 8 所示为结构一与结构二的磁场总场 H_z^t 分布图. 图 8(a), (c) 为结构一在波长 $\lambda = 700$ nm 和 $\lambda = 770$ nm 时的磁场总场 H_z^t 分布图, 图 8(b), (d) 为结构二在化学势 $\mu_c = 0.9$ eV、波长 $\lambda = 700$ nm 和 $\lambda = 770$ nm 时的磁场总场 H_z^t 分布图. 图中可观测到在非晶硅与银分界面处由于 SPR 而产生的场强增强现象. 且在 $\lambda = 700$ nm 和 $\lambda = 770$ nm 处, 由于结构二在银与非晶硅分界面处加入石墨烯, 石墨烯与银电极发生耦合, 磁场总场 H_z^t 的场强分布更强.

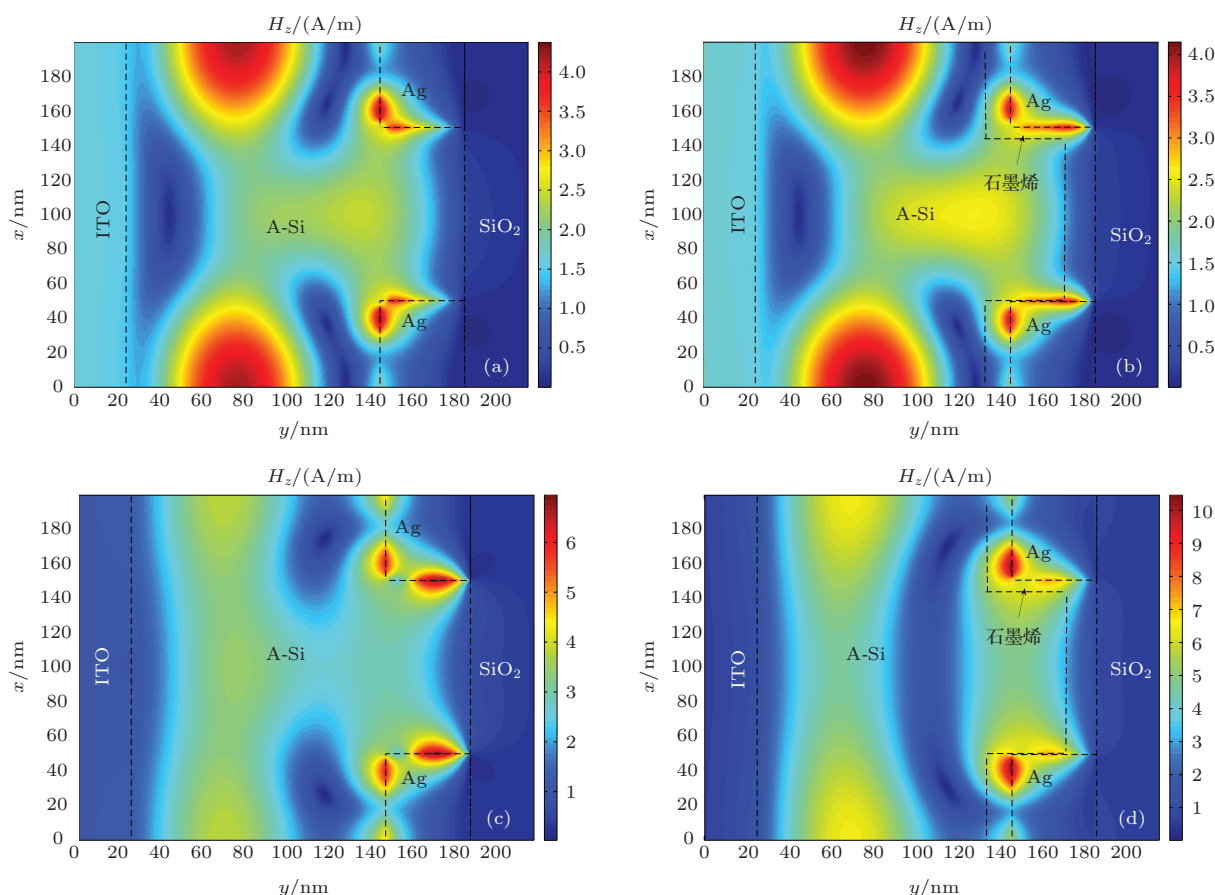


图 8 (网刊彩色) 未加石墨烯结构与加石墨烯结构在 $\lambda = 700$ nm 和 $\lambda = 770$ nm 处的 H_z^t 分布 (a) 结构一在 $\lambda = 700$ nm 处的 H_z^t 分布; (b) 结构二在化学势 $\mu_c = 0.9$ eV, $\lambda = 700$ nm 时的 H_z^t 分布; (c) 结构一在 $\lambda = 770$ nm 处的 H_z^t 分布; (d) 结构二在化学势 $\mu_c = 0.9$ eV, $\lambda = 770$ nm 时的 H_z^t 分布.

5 结 论

本文利用石墨烯特殊的光电特性, 运用 FDFD 方法对含石墨烯的薄膜太阳能电池进行了数值模拟, 结果表明调节化学势 μ_c 的大小, 可以使分界面表面等离子体谐振频率发生改变, 从而改变薄膜太阳能电池的吸收峰位置. 同时, 针对设计结构的反射、传输、吸收特性及场分布结果, 说明表面等离子

体共振能增强薄膜太阳能电池的吸收. 在实际有机薄膜太阳能电池的制备中, 利用我们的理论结果, 可以得到所需频率峰处的太阳能电池特性, 为实际有机薄膜太阳能电池的设计和 optimization 提供了理论基础及技术支撑.

参考文献

- [1] Carlson D E, Wronski C R 1976 *Appl. Phys. Lett.* **28** 671

- [2] Sha W E I, Choy W C H, Chew W C 2010 *Opt. Express* **18** 5993
- [3] Wei Y, Xiao F, Wu B, Huang Z X, Wu X L 2014 *Acta. Photon. Sin.* **43** 62 (in Chinese) [魏源, 肖峰, 吴博, 黄志祥, 吴先良 2014 光子学报 **43** 62]
- [4] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V 2004 *Science* **306** 666
- [5] Bao Q L, Kian P L 2012 *ACS Nano* **6** 3677
- [6] Wu H Q 2013 *Chin. Phys. B* **22** 098106
- [7] Nair R R, Blake P, Grigorenko A N, Novoselov K S, Booth T J, Stauber T, Peres N M R, Geim A K 2008 *Science* **320** 1308
- [8] Wang F, Zhang Y B, Tian C S, Girit C, Zettl A, Crommie M, Shen Y R 2008 *Science* **320** 206
- [9] Liu M, Yin X B, Ulin-Avila E, Geng B, Zentgraf T, Ju L, Wang F, Zhang X 2011 *Nature* **474** 64
- [10] Lu Z L, Zhao W S 2012 *J. Opt. Soc. Am. B* **29** 1490
- [11] Schwierz F 2010 *Nat Nanotechnol* **5** 487
- [12] Wu L, Chu H S, Koh W S, Li E P 2010 *Opt. Express* **18** 14395
- [13] Vakil A, Engheta N 2011 *Science* **10** 1291
- [14] Peierls R 1935 *Annals de l'I. H. P.* **5** 177
- [15] Landau L 1937 *Phys. Z. Sowjetunion* **11** 26
- [16] Yin W H, Han Q, Yang X H 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 248502 (in Chinese) [尹伟红, 韩勤, 杨晓红 2012 物理学报 **61** 248502]
- [17] beilenhoff K, Heinrich W, Hartnagel H L 1992 *IEEE T. Microw. Theory.* **40** 540
- [18] Simsek E 2013 *Opt. Lett.* **38** 1437
- [19] Li Z Q, Henriksen E A, Jiang Z, Hao Z, Martin M C, Kim P, Stormer H L, Basov D N 2008 *Nat. Phys.* **4** 532
- [20] Chew W C 1990 *Waves and Fields in Inhomogeneous Media* (New York: Van Nostrand Reinhold) p121
- [21] Wang H, Huang Z X, Wu X L, Ren X G 2011 *Chin. Phys. B* **20** 114701
- [22] Lu S L, Wu X L, Ren X G, Mei Y S, Shen J, Huang Z X 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 194701 (in Chinese) [鲁思龙, 吴先良, 任信钢, 梅诣偲, 沈晶, 黄志祥 2012 物理学报 **61** 194701]
- [23] Ren X G, Sha W E I, Choy W C H 2013 *Opt. Express* **21** 31824

Study on the electromagnetic properties of thin-film solar cell grown with graphene using FDFD method*

Zhou Li¹⁾ Wei Yuan¹⁾ Huang Zhi-Xiang^{1)†} Wu Xian-Liang^{1)2)‡}

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

2) (School of Electronic and Information Engineering, Hefei Normal University, Hefei 230061, China)

(Received 13 July 2014; revised manuscript received 23 August 2014)

Abstract

In recent years amorphous silicon solar cells have been receiving a great deal of interest due to their high energy conversion efficiency and low cost. The positions of absorption peak reflect the good absorption performance at specific frequency point or nearby spectra. However, the absorption peaks of amorphous silicon solar cell which are mainly determined by the properties of amorphous silicon and metal electrode, cannot be tuned. And the absorption efficiency can not be further enhanced also. Therefore, monolayer graphene film will be employed in the solar cells with periodic structure due to its remarkable electro-optic properties. With a suitable chemical potential applied, the dielectric constant of graphene can be tuned. This design mainly aims to tune the position of the absorption peak based on the graphene by using finite-difference frequency-domain method. Also, an approximate fitted function is developed in order to overcome the singularity in the exact expression. Numerical results show that the approximate closed form expression generates results within a maximum absolute error of 0.8%. Theoretical results provide the realistic organic thin-film solar cells with theoretical basis and technical support.

Keywords: graphene, thin-film solar cell, finite-difference frequency-domain, chemical potential

PACS: 81.05.ue, 78.67.Wj, 42.25.Bs, 73.50.Mx

DOI: 10.7498/aps.64.018101

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51277001, 61101064, 61471001), the Program for New Century Excellent Talents in University of Ministry of Education of China (Grant No. NCET-12-0596), the Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20123401110009), the Fund for Distinguished Young Scholars of Anhui Province, China (Grant No. 1108085J01), and the Key Program of the Higher Educations of Anhui Province, China (Grant No. KJ2012A103).

† Corresponding author. E-mail: zxhuang@ahu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: xlwu@ahu.edu.cn