



## 钙钛矿/硅异质结叠层太阳电池：光学模拟的研究进展

王其 延玲玲 陈兵兵 李仁杰 王三龙 王鹏阳 黄茜 许盛之 侯国付 陈新亮 李跃龙 丁毅 张德坤 王广才 赵颖 张晓丹

## Perovskite/silicon heterojunction tandem solar cells: Advances in optical simulation

Wang Qi Yan Ling-Ling Chen Bing-Bing Li Ren-Jie Wang San-Long Wang Peng-Yang Huang Qian  
Xu Sheng-Zhi Hou Guo-Fu Chen Xin-Liang Li Yue-Long Ding Yi Zhang De-Kun Wang Guang-Cai  
Zhao Ying Zhang Xiao-Dan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 057802 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20201585

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201585>

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

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

钙钛矿/硅叠层太阳电池中平面a-Si:H/c-Si异质结底电池的钝化优化及性能提高

Passivation optimization and performance improvement of planar a-Si:H/c-Si heterojunction cells in perovskite/silicon tandem solar cells

物理学报. 2019, 68(2): 028101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181759>

宽带隙钙钛矿材料及太阳电池的研究进展

Research progress of wide bandgap perovskite materials and solar cells

物理学报. 2020, 69(20): 207401 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200822>

钙钛矿太阳电池中的缓冲层研究进展

Progress in perovskite solar cells based on different buffer layer materials

物理学报. 2020, 69(13): 138401 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200543>

肖特基钙钛矿太阳电池结构设计与优化

Simulation and architectural design for Schottky structure perovskite solar cells

物理学报. 2020, 69(5): 057901 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191891>

高效平面异质结有机-无机杂化钙钛矿太阳电池的质量管理

Quality management of high-efficiency planar heterojunction organic-inorganic hybrid perovskite solar cells

物理学报. 2018, 67(15): 158801 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172600>

喷墨打印钙钛矿太阳能电池研究进展与展望

Inkjet printed perovskite solar cells: progress and prospects

物理学报. 2019, 68(15): 158807 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190302>

综述

# 钙钛矿/硅异质结叠层太阳能电池: 光学模拟的研究进展\*

王其<sup>1)2)3)4)5)</sup> 延玲玲<sup>1)2)3)4)5)</sup> 陈兵兵<sup>1)2)3)4)5)</sup> 李仁杰<sup>1)2)3)4)5)</sup>  
 王三龙<sup>1)2)3)4)5)</sup> 王鹏阳<sup>1)2)3)4)5)</sup> 黄茜<sup>1)2)3)4)5)</sup> 许盛之<sup>1)2)3)4)5)</sup>  
 侯国付<sup>1)2)3)4)5)</sup> 陈新亮<sup>1)2)3)4)5)</sup> 李跃龙<sup>1)2)3)4)5)</sup> 丁毅<sup>1)2)3)4)5)</sup>  
 张德坤<sup>1)2)3)4)5)</sup> 王广才<sup>1)2)3)4)5)</sup> 赵颖<sup>1)2)3)4)5)†</sup> 张晓丹<sup>1)2)3)4)5)‡</sup>

1) (南开大学, 光电子薄膜器件与技术研究所, 太阳能转换中心, 天津 300350)

2) (天津市光电子薄膜器件与技术重点实验室, 天津 300350)

3) (薄膜光电子技术教育部工程研究中心, 天津 300350)

4) (化学科学与工程协同创新中心, 天津 300072)

5) (南开大学可再生能源转换与储存中心, 天津 300072)

(2020年9月23日收到; 2020年10月14日收到修改稿)

近几年, 钙钛矿/硅异质结叠层太阳能电池发展迅速, 效率已经从 13.7% 提升到 29.1%. 由于叠层电池器件的制作工艺复杂, 而叠层太阳能电池中的光学损失对转换效率的影响很大, 所以通过光学模拟进而获得高效电池至关重要. 本文首先从商业软件和自建模型两方面概述了光学模拟的方法, 接着从反射损失和寄生吸收两方面针对光学模拟研究进展进行了总结和分析, 最后指出了叠层电池光学模拟过程中需要注意的问题. 钙钛矿/硅异质结叠层太阳能电池的转换效率极限最高可达 40%, 具备很大的提升空间, 结合模拟工作的研究, 叠层电池的发展将会取得更大的进步.

**关键词:** 钙钛矿/硅叠层电池, 光学模拟, 反射损失, 寄生吸收

**PACS:** 78.20.Bh, 78.20.Ci, 78.56.-a, 78.67.-n

**DOI:** 10.7498/aps.70.20201585

## 1 引言

采用背接触晶硅电池 (interdigitated back contact, IBC) 与异质结晶硅电池 (heterojunction with intrinsic thin layer, HIT) 结合工艺制备的晶硅电池效率世界记录为 26.7%<sup>[1]</sup>. 晶硅电池的理论极限效率为 29.4%, 考虑到光学与电学的实际可能的

损失后, 其实际的理论效率只有 27.1%<sup>[2]</sup>, 效率提升空间有限. 而钙钛矿近年来发展迅速<sup>[3]</sup>, 具有带隙可调、工艺简单等优点, 适宜做顶电池吸收层材料. 模拟结果显示, 顶电池吸收层材料的适宜带隙应为 1.6—1.9 eV<sup>[4]</sup>, 最常用的吸收材料一般为甲胺铅碘 ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ , 即  $\text{MAPbI}_3$ <sup>[5]</sup>) 或者甲脒铅碘 ( $\text{HC}(\text{NH}_2)_2\text{PbI}_3$ , 即  $\text{FAPbI}_3$ <sup>[6]</sup>) 及其相近变体. 随着叠层电池的发展, 发现 Cs 离子、Rb 离子以及 Cl

\* 国家重点研发计划 (批准号: 2018YFB1500103)、国家自然科学基金 (批准号: 61674084)、高等学校学科创新引智计划 (111 计划) (批准号: B16027)、天津市军民融合项目 (批准号: 18ZXJMTG00220) 和中央高校基本科研业务费 (批准号: 63201171, 63201173) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhaoygds@nankai.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: xdzhang@nankai.edu.cn

离子、Br 离子在钙钛矿吸收剂中掺杂会使得顶电池性能提升明显, 如  $\text{Cs}_{0.07}\text{Rb}_{0.03}\text{FA}_{0.765}\text{MA}_{0.135}\text{Pb}(\text{I}_{0.85}\text{Br}_{0.15})_3$ <sup>[7]</sup>,  $\text{Cs}_{0.1}\text{FA}_{0.9}\text{PbI}_{2.865}\text{Br}_{0.135}$ <sup>[8]</sup> 作为顶电池吸收材料的使用, 显著地提升了叠层电池的性能. 如果能将晶硅电池和钙钛矿电池结合起来, 效率将会有更大的提升.

叠层电池的概念最初是由 Jackson<sup>[9]</sup> 提出的, 因其宽光谱吸收、高开路电压 ( $V_{\text{OC}}$ )、高效率 and 低成本等优点受到人们的广泛关注. 其转换效率的理论极限最高达 46.1%<sup>[4]</sup>. 而钙钛矿/硅异质结叠层电池也有着巨大的潜力. 钙钛矿/硅异质结叠层器件常见的结构有四端和两端串联两种, 如图 1(a) 和图 1(b) 所示<sup>[10]</sup>. 机械堆叠的四端结构, 两个子单元独立放置并连接, 可以独立地保持在最大功率点. 但四端结构会使所有外部电力设备 (如逆变器) 加倍工作. 钙钛矿/硅异质结两端叠层太阳能电池的顶、底电池直接串联减少了子电池中功能层的使用, 顶、底电池之间通过具有高效率的隧穿结连接, 如锡掺杂的氧化铟 (indium tin oxide, ITO) 等, 这样能使更多的光子到达底电池. 两端叠层太

阳电池制备过程简单, 减少了寄生吸收, 增加了太阳光的利用率, 适合产业化. 最新的研究报告指出, 德国亥姆霍兹研究所 (HZB) 创造了钙钛矿/硅叠层电池的最高效率, 达 29.1%<sup>[11]</sup>. 通过理论计算得出钙钛矿/硅异质结叠层太阳电池的转换效率超过 30%, 最高可超过 40%<sup>[12-14]</sup>. 相比于单结太阳能电池, 超过了 Shockley-Queisser(S-Q) 极限<sup>[15]</sup>, 有着非常好的发展前景.

在两端叠层太阳能电池中, 钙钛矿材料充当顶电池的有效光学吸收层主要吸收短波段范围 (300—800 nm) 的光, 晶硅 (c-Si) 作为底电池的光学吸收层吸收长波段范围 (800—1200 nm) 的光. 电流取决于子电池中的最小电流, 合理分配光谱, 使顶、底电池电流匹配, 达到最大输出电流, 显得至关重要. 光学优化能够提高光利用率, 通过实施光学管理策略来改善器件的不足, 这对电池效率的提升以及厚度的减薄都具有非常重要的意义. 图 1(c) 和图 1(d) 分别给出了钙钛矿 ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ ) 和晶硅 (c-Si) 吸收层的光学常数<sup>[16,17]</sup>.

钙钛矿/硅异质结叠层太阳电池光学模拟工作

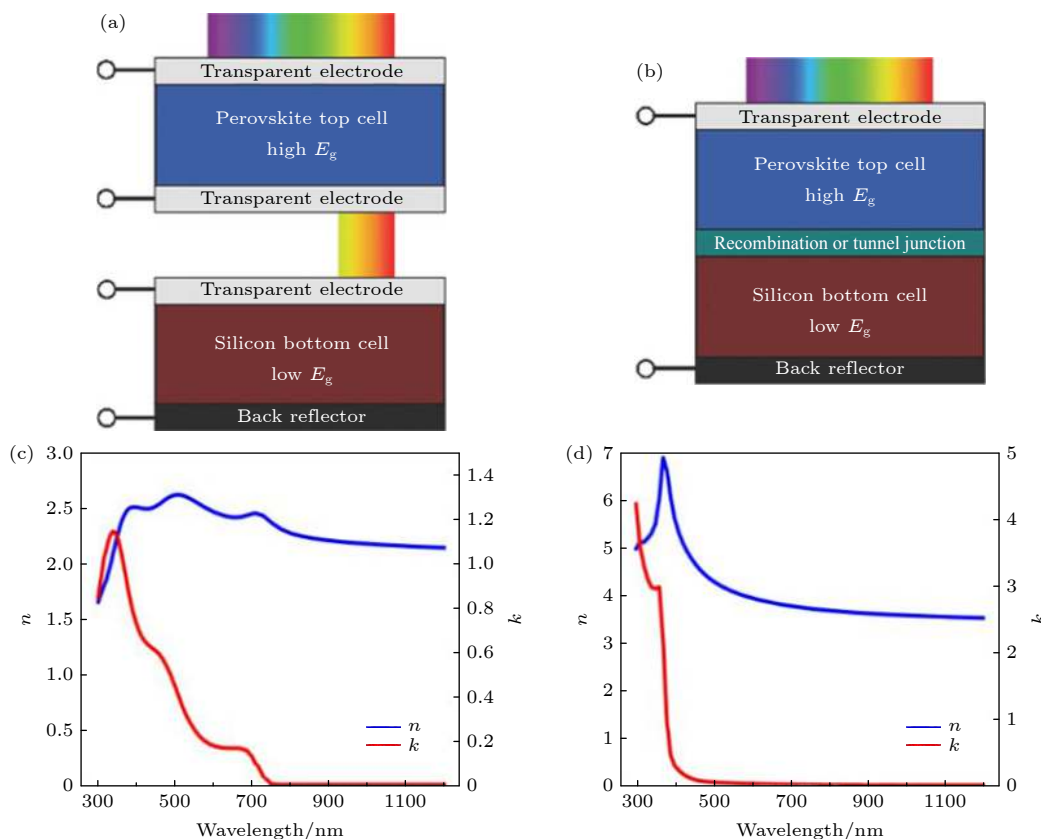


图 1 钙钛矿/硅叠层太阳能电池 (a) 四端结构和 (b) 两端结构<sup>[10]</sup>; (c) 钙钛矿和 (d) 晶硅吸收层的光学常数<sup>[16,17]</sup>

Fig. 1. (a) Four terminal structure and (b) two terminal structure<sup>[10]</sup> of the perovskite / silicon tandem solar cells; optical constants of (c) perovskite and (d) c-Si absorbers<sup>[16,17]</sup>.

主要从材料的光学常数出发,对整体器件进行模拟,分析器件中每层材料的光学损耗,进而对实验提出针对性改进,提升器件整体的光学性能.日本岐阜大学 Fujiwara 等<sup>[18]</sup>在2014年采用光学导纳法对  $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$  太阳电池进行了光损失分析,并取得了理想的结果.此后几年,他们又将这种方法推广到钙钛矿/硅异质结叠层太阳电池的光学模拟优化中,并在以平面或绒面硅做底电池的叠层电池中取得了很好的优化结果<sup>[19,20]</sup>.瑞士 Altazin 等<sup>[21]</sup>也在2018年对底电池的衬底陷光结构进行了分析,并且取得了  $19.6 \text{ mA/cm}^2$  的最大短路电流密度.底电池的优化使叠层电池对长波段光的吸收明显改进,但同时钙钛矿顶电池由于近年来发展迅速,具有更大的光学优化潜力.2018年,德国亥姆霍兹研究所针对顶电池钙钛矿层的厚度进行了优化,进一步提升了器件的性能<sup>[22]</sup>.2019年,澳大利亚国立大学对钙钛矿/硅异质结叠层电池进行了外量子效率 (external quantum efficiency, EQE) 模拟,并对钙钛矿层的厚度和带隙都进行了优化<sup>[23]</sup>.但是由于叠层电池顶、底电池串联,整体电流取决于较小的一方.除了对顶、底电池分别优化外,还应综合考虑,保持顶、底电池的电流匹配.另外,近年来的光学模拟工作在器件的寄生吸收和反射损失两方面还有很大的提升空间.

本文一方面从软件模拟和自建模型模拟分析了现有的光学模拟的方法.另一方面,从减反层的选择、衬底陷光结构的优化、寄生吸收优化以及对非吸收层材料的优化等方向对钙钛矿/硅异质结叠层太阳电池的光学优化工作做了相关的介绍.最后对未来钙钛矿/硅异质结叠层太阳电池的光学优化进行了展望.

## 2 光学模拟的方法

针对叠层电池光学模拟的方法有很多种,但基本上都要对器件进行光学建模.不同的方法,建模的方式也不同,从而分析的结果和精度都有所差别.因而根据实际情况选择合适的方法非常重要.这些模拟方法总体上可以分为使用商用软件模拟和自建模型模拟.

### 2.1 商用软件模拟

因为商用软件简单快捷,大多数针对叠层电池

的模拟都是通过软件来进行的.常见的软件模拟包有 TCAD<sup>[24,25]</sup>, FDTD<sup>[26]</sup>, AFORS-HET<sup>[27]</sup>, GenPro4<sup>[28,29]</sup>, OPTOS<sup>[30]</sup>, JCMsuite<sup>[22]</sup> 等.这些软件是通过写好的程序包结合已经建立的电池光学模型,对电池器件或太阳光谱在不同的角度进行仿真并优化.图2(a)和图2(b)分别是基于 OPTOS 和 JCMsuite 软件的光学建模过程.在表1中对这些光学模拟软件进行了简单的概括.

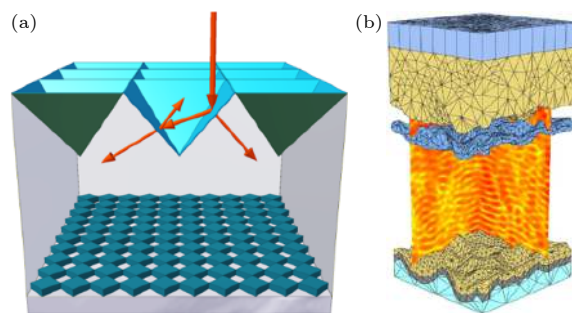


图2 (a) 基于 OPTOS 软件的光传播模拟过程<sup>[31]</sup>; (b) 基于 JCMsuite 的光伏建模过程<sup>[32]</sup>

Fig. 2. (a) Light spread process simulated by OPTOS<sup>[31]</sup>; (b) the optical model built by JCMsuite<sup>[32]</sup>.

对光伏器件模拟的软件包有很多,针对模拟内容和要求选择合适的软件模拟包可以轻松完成模拟工作.如果要求复杂或使用软件难以做到,需要考虑自建模型模拟方法.

### 2.2 自建模型模拟

软件模拟的模型固定,遇到与软件内部模型不符合的情况时常常难以进行.而自建模型可调整性强,能有效地指导实验,有些机构通过自建模型方法实现对叠层器件的模拟,这种自建模型对叠层电池的光学优化工作一般从材料的光学常数出发,利用材料的光学常数结合转换矩阵等方法计算出其反射、透射曲线,进而得出整体 EQE 吸收曲线<sup>[47,48]</sup>.通过 EQE 曲线以及各层材料吸收曲线对器件进行光损耗分析,进而根据分析结果调整电池中材料的厚度、带隙等参数,将器件的光吸收最大化.

而自建模型的重点通常在材料的光学常数拟合上.通常,使用椭圆偏振仪测量材料光学常数最为精确,Gong 等<sup>[49]</sup>在2017年使用这种方法精确测量了  $\text{SiO}_2$  等材料的光学常数.国内,徐继鹏等<sup>[50]</sup>和李江等<sup>[51]</sup>同样使用了椭圆偏振仪精确测量了透明玻璃上材料的光学常数.值得一提的是,这种方法还能精确测量膜厚,有利于后续模拟工作.也有

表 1 商用软件模拟包及其功能  
Table 1. Simulation package of commercial software and its functions.

软件名称	功能	参考文献
JCMsuite	适用于复杂纳米光学系统的仿真	[22]
FDTD	使用时域有限差分算法对太阳能电池模拟	[26]
AFORS-HET	用于异质结构太阳能电池的数值模拟软件	[27]
SunCalculator	用于计算所测量的综合太阳辐照度的角度和光谱分布	[33]
Solar spectrum calculator	确定入射到器件的光谱辐照度的直接分量, 散射分量和全局分量	[34]
TRACEY	用于确定模块在各种入射光谱下的效率以及相关光学损耗	[35]
OPAL	模拟太阳能电池前表面(主要是减反层)	[36]
OPTOS	基于矩阵的仿真算法, 能有效地计算任何表面陷光结构的反射率和透射率	[37,38]
PC3 D	用于硅太阳能电池的开源三维器件模拟器	[39,40]
SETFOS	计算短路电流密度( $J_{sc}$ ), 开路电压( $V_{oc}$ )和填充因子(FF), 添加光散射层以增强吸收	[21,41]
SCAPS	一维太阳能电池仿真, 适用于晶硅、砷化镓、非晶硅和微晶硅太阳能电池	[42]
WXAMPS	一维太阳能电池模拟	[43—46]

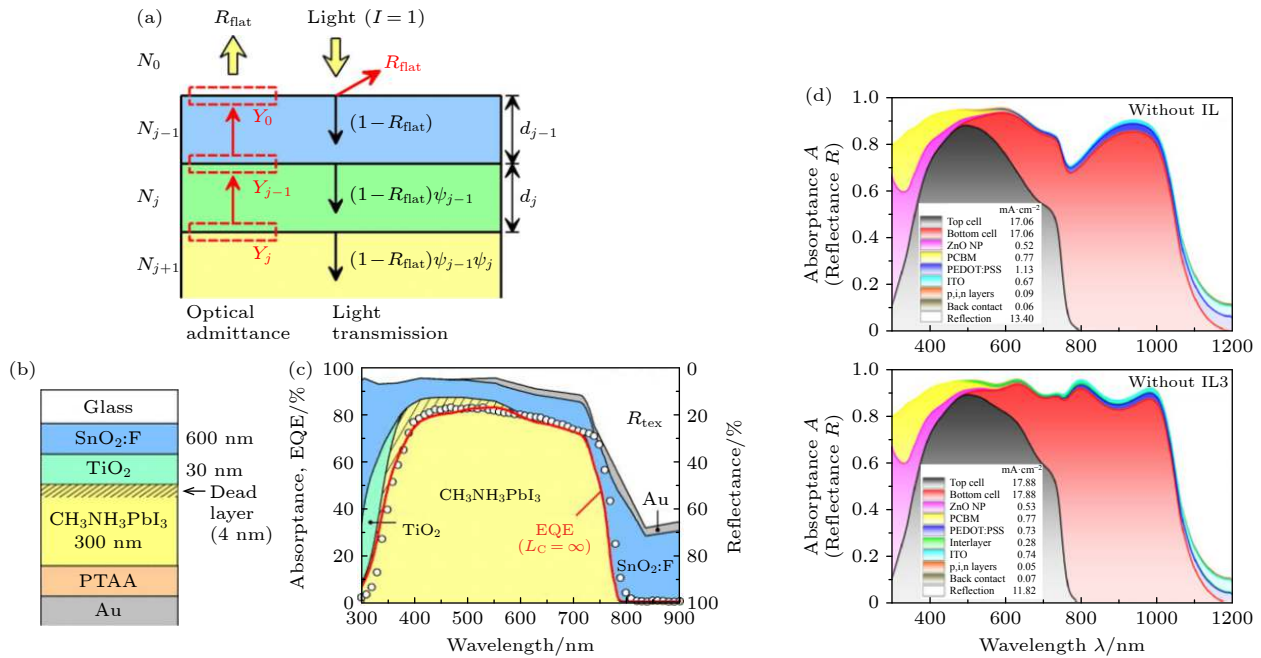


图 3 (a) 光学导纳法自建模型的光线分析过程<sup>[19]</sup>;  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  为吸收层的太阳能电池的 (b) 结构和 (c) 光学损耗分析<sup>[19]</sup>; (d) 钙钛矿/硅异质结叠层太阳能电池隧穿结优化的光损耗分析<sup>[59]</sup>

Fig. 3. (a) Light analysis process of optical admittance method<sup>[19]</sup>; (b) structure and (c) optical loss analysis of solar cells with  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  as absorber<sup>[19]</sup>; (d) tunnel junction optical loss analysis of perovskite / silicon tandem solar cells<sup>[59]</sup>.

些方法不需要借助仪器使得模拟过程更加简便. 早在 2009 年 Prange 等<sup>[52]</sup> 提出了基于单粒子密度算子的线性光学常数理论. 2010 年, Minkov<sup>[53]</sup> 和 Marquetz 等<sup>[54]</sup> 利用反射光谱和透射光谱结合计算机迭代算法计算了材料的光学常数. 随着计算机技术的发展, 计算机算法在拟合光学常数的过程中使用越来越频繁. 常用的优化算法有蚁群算法 (ant colony optimization)<sup>[55]</sup>、模拟退火算法 (simulated annealing)<sup>[56]</sup>、遗传算法 (genetic algorithms)<sup>[57]</sup>、神经网络

络算法 (neural networks)<sup>[58]</sup> 以及各种混合优化算法. 这些寻优算法都能很好地寻找目标函数的最优解, 从而拟合出比较符合实验材料的光学常数. 2016 年, 日本 Fujiwara 课题组<sup>[19,20]</sup> 就将模拟退火算法结合光学导纳法应用到钙钛矿及其他类型太阳能电池的模拟上, 取得了不错的结果, 图 3(a)—图 3(c) 显示了光学导纳法的计算过程以及计算结果分析. 2018 年, 德国杜伊斯堡大学又将传输矩阵结合遗传算法应用到钙钛矿/硅异质结叠层太阳

电池的模拟工作中,对器件的隧穿结进行光学优化设计,获得了  $0.82 \text{ mA/cm}^2$  的短路电流密度的提升<sup>[59]</sup>,图 3(d)给出了基于传输矩阵和遗传算法的模拟结果分析。

另外,还有一些光学常数拟合工作使用的是光学薄膜的物理色散模型.由于薄膜的光学常数表达式为  $N(\lambda) = n(\lambda) + ik(\lambda)$ ,其中  $N$  是复折射率,  $n$  是折射率,  $k$  是消光系数,  $\lambda$  是波长.这种关系不是简单的对应,对不同的介质材料相应的制约因素也不同.这种对应关系主要由材料的色散模型所决定.常见的色散模型有 Cauchy 模型、F-B 模型、Sellmeier 模型、Tauc-Lorentz 模型等.这些色散模型对应模拟的薄膜材料的性质列于表 2.

表 2 光学色散模型及其适用材料

Table 2. Optical dispersion model and its applicable materials.

光学色散模型	材料类型	文献
Cauchy model	大多数介质材料	[60]
Sellmeier model	无吸收的透明介质	[60]
F-B model	非半导体和绝缘体材料	[61]
Lorentz oscillator model	一般用于红外光谱区的介质膜	[62]
Tauc-Lorentz model	无定型半导体(非晶半导体)和绝缘体材料	[63]
Drude model	金属和透明导电膜	[64]

商用软件模拟由于器件模型固定,模拟过程简单高效.自建模型因为可对模型进行调试,更接近实验,结果更精确.如果把自建模型和商用软件模拟结合起来,利用自建模型的精确性和软件方便快捷的特点能更进一步提升模拟的效率,这将是一条模拟方法上的新思路.

### 3 光学优化的进展

光学损失主要包括反射损失和寄生吸收两方面.为此,本文重点关注了降低电池中反射损失和寄生吸收的光学优化工作的进展.

#### 3.1 反射损失

减少反射损失的途径包括两部分:一是在器件前表面设计一层减反层增加前表面的抗反射能力进而减少逸出器件的光;二是使用绒度衬底,将进入器件的光吸收最大化.二者都能有效提高光吸收.

##### 3.1.1 减反层

在叠层器件中,反射损耗占光学损耗的很大一

部分,而减反层可以降低光反射,增大光吸收.所以减反层的设计在模拟工作中极为重要.减反层(anti-reflective coating, ARC)通常使用的材料有 LiF<sup>[65]</sup> 和  $\text{MgF}_2$ <sup>[66]</sup> 材料,或 LM 箔<sup>[67]</sup> 和 PDMS<sup>[68]</sup> 等反射层结构.

2017 年,美国亚利桑那州立大学 Manzoor 等<sup>[69]</sup>将带有不规则金字塔的 PDMS 聚合物制成的涂层,分别使用在平面的器件和具有平面前表面后表面制绒的硅电池上,分别获得了  $3.0$  和  $1.7 \text{ mA/cm}^2$  的短路电流密度提升.并且,将此涂层应用于平面钙钛矿太阳能电池上,获得了  $1.9 \text{ mA/cm}^2$  的短路电流密度提升.使用 PDMS 作减反层的器件结构和光学分析结果如图 4(a) 和图 4(b) 所示. PDMS 层由于较小的折射率,能够降低器件正面反射率和调整叠层电池的电流失配问题.2018 年,德国亥姆霍兹研究所在叠层电池的正面采用了制绒的 LM 箔,叠层器件效率从  $23.4\%$  提升至  $25.5\%$ <sup>[67]</sup>,器件结构和模拟结果分析如图 4(c)—图 4(e) 所示.同年,南开大学侯福华等<sup>[70]</sup>将 PDMS 减反层应用在叠层电池上,获得了  $21.93\%$  的效率和  $1.72 \text{ mA/cm}^2$  的短路电流密度提升.

不过,由于 PDMS 和 LM 箔是一种聚合物,光学性质的模拟工作复杂,所以很多工作中减反层用的都是  $\text{MgF}_2$  和 LiF,并且  $\text{MgF}_2$  和 LiF 的吸收较低,工艺上能做到厚度更薄,对于入射光的减反射效果较好.德国亥姆霍兹研究所在 2019 年把 LiF 应用在叠层电池中,同时对钙钛矿厚度进行优化,最后获得了  $26\%$  的转换效率和  $1.4 \text{ mA/cm}^2$  的短路电流密度提升<sup>[71]</sup>,结果显示在图 5(a) 和图 5(b) 中.同年,德国弗劳恩霍夫太阳能系统研究所也使用了另一种减反射材料  $\text{MgF}_2$ ,光学性能大大改善<sup>[72]</sup>,其结构和模拟分析结果如图 5(c) 所示.更多使用减反层的模拟工作列在表 3 中.

##### 3.1.2 衬底陷光结构

在叠层电池中,衬底陷光结构能使入射光在太阳能电池内部进行多次反射,充分吸收光从而减少反射损失.通过制绒可以使衬底表面织构化,形成类金字塔的陷光结构,这样的陷光结构对红外光子的吸收增加,产生更多的光生载流子,器件整体的电流和效率也随之提高.因此对衬底陷光结构的优化也非常重要,有效的陷光结构设计能大幅度提升器件性能.

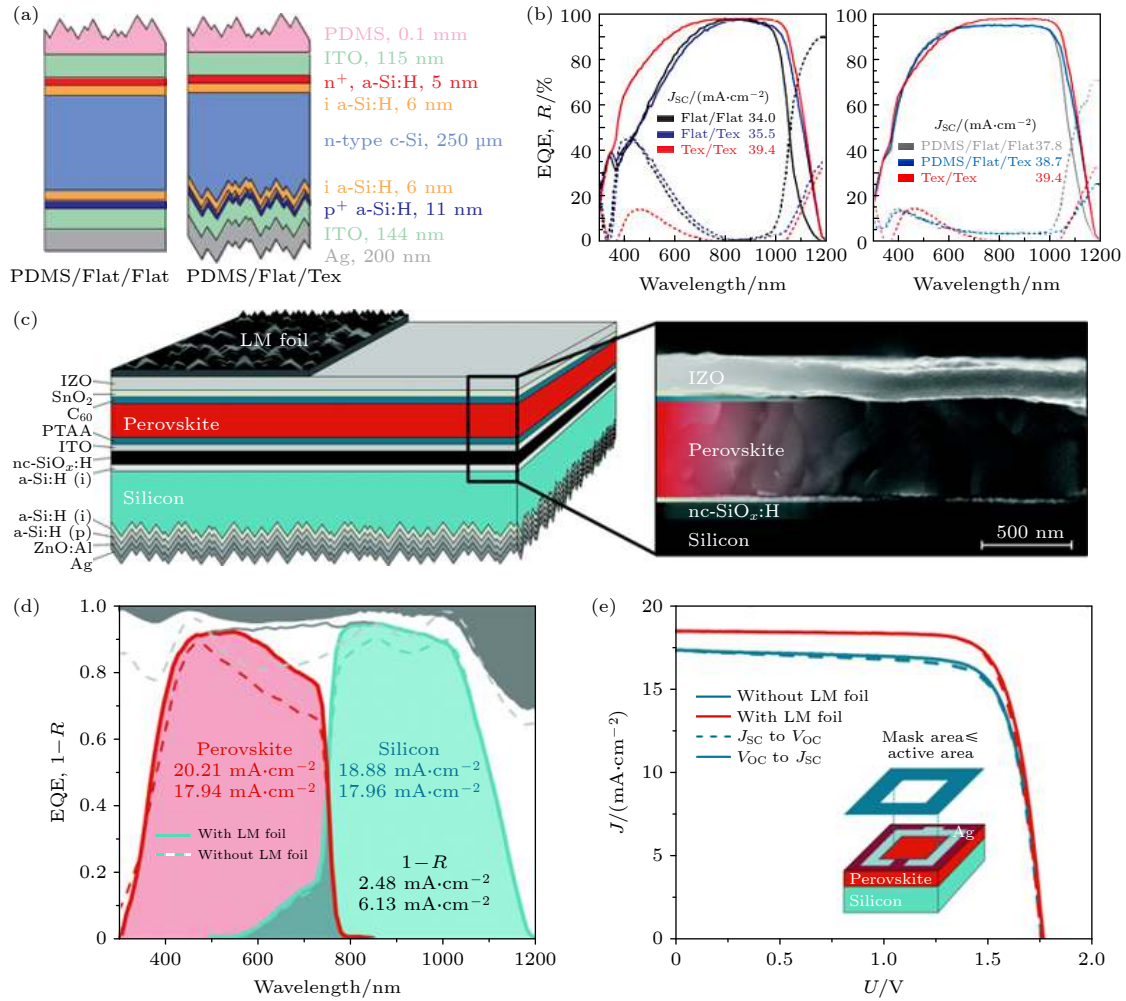


图 4 (a) PDMS 作减反层的电池结构<sup>[69]</sup>; (b) 有、无 PDMS 减反层的器件 EQE 对比<sup>[69]</sup>; (c) LM 箔作减反层的电池结构<sup>[67]</sup>; (d), (e) LM 箔作减反层的优化结果<sup>[67]</sup>

Fig. 4. (a) Solar cell structure using PDMS as anti-reflection coating<sup>[69]</sup>; (b) EQE comparison with and without PDMS<sup>[69]</sup>; (c) solar cell structure using LM foil as anti-reflection coating<sup>[67]</sup>; (d) (e) optimized result using LM foil as anti-reflection coating<sup>[67]</sup>.

表 3 使用减反层减少器件反射损耗

Table 3. Using anti-reflection coating to reduce reflection loss of device.

ARC	Structure	$J_{sc}$ /(mA·cm <sup>-2</sup> )	Improved $J_{sc}$ /(mA·cm <sup>-2</sup> )	Year	Ref.
LiF	LiF/ITO/SnO <sub>2</sub> /PCBM/perovskite/NiO/ITO/silicon	21.3	1.6	2018	[22]
LiF	LiF/ITO/TiO <sub>2</sub> /perovskite/spiro/p-nc-SiO <sub>x</sub> :H/defective layer/silicon	16.7	1.4	2016	[65]
LM foil	LM/IZO/SnO <sub>2</sub> /C <sub>60</sub> / perovskite/PTAA/ITO/nc-SiO <sub>x</sub> :H/a-Si:H/Si/a-Si:H/ZnO:Al/Ag	19.4	2.3	2018	[67]
PDMS	PDMS/ITO/na-Si:H/ia-Si:H/C-Si/ia-Si:H/pa-Si:H/ITO/Ag	37.5	3.0	2017	[69]
LiF	LiF/IZO/SnO <sub>2</sub> /C <sub>60</sub> /perovskite /PTAA/ITO/nc-SiO <sub>x</sub> :H(n)/silicon	19.2	1.4	2019	[71]
LiF	LiF/ITO/SnO <sub>2</sub> /PCBM/ perovskite /NiO/ITO/silicon	19.0	1.4	2017	[73]
MgF <sub>2</sub>	MgF <sub>2</sub> /ITO/SnO <sub>2</sub> /C <sub>60</sub> / perovskite /NiO/ITO/silicon	19.8	1.0	2018	[74]
MgF <sub>2</sub>	MgF <sub>2</sub> /IZO/spiro/ perovskite /TiO <sub>2</sub> /ITO/Ag	19.55	1.5	2019	[72]

没有衬底陷光结构的电池器件, 即平面硅表面上沉积钙钛矿顶电池的叠层器件的反射损失很严重. 2016 年, 荷兰代尔夫特理工大学 Santbergen 等<sup>[75]</sup>模拟了 6 种类型的衬底陷光结构对叠层器件

的影响. 这 6 种陷光结构如图 6(a) 所示, 分别是具有平面硅底电池的叠层电池、背面制绒但正面平坦的结构以及增加了中间层的叠层电池结构、具有双面制绒的硅底电池和掩埋层的叠层电池以及增加

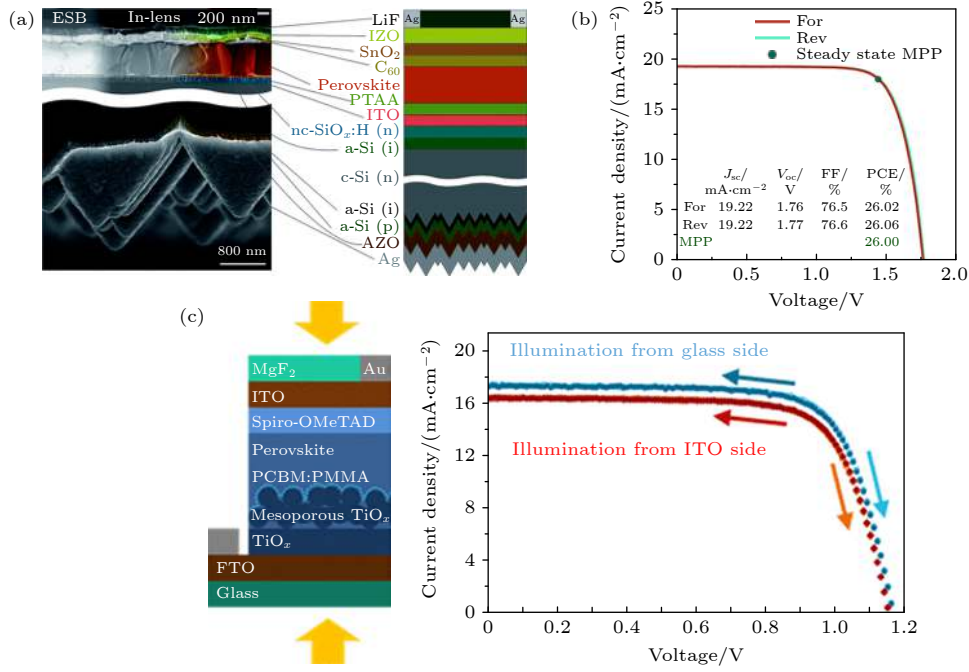


图 5 (a) 使用 LiF 作减反层的电池结构<sup>[71]</sup>; (b) LiF 作减反层的电池优化结果<sup>[71]</sup>; (c) 使用 MgF<sub>2</sub> 作减反层的电池结构和优化结果<sup>[72]</sup>  
Fig. 5. (a) Solar cell structure with LiF as anti-reflection coating<sup>[71]</sup>; (b) optimized result with LiF as anti-reflection coating<sup>[71]</sup>; (c) solar cell structure and optimization result with MgF<sub>2</sub> as anti-reflection coating<sup>[72]</sup>.

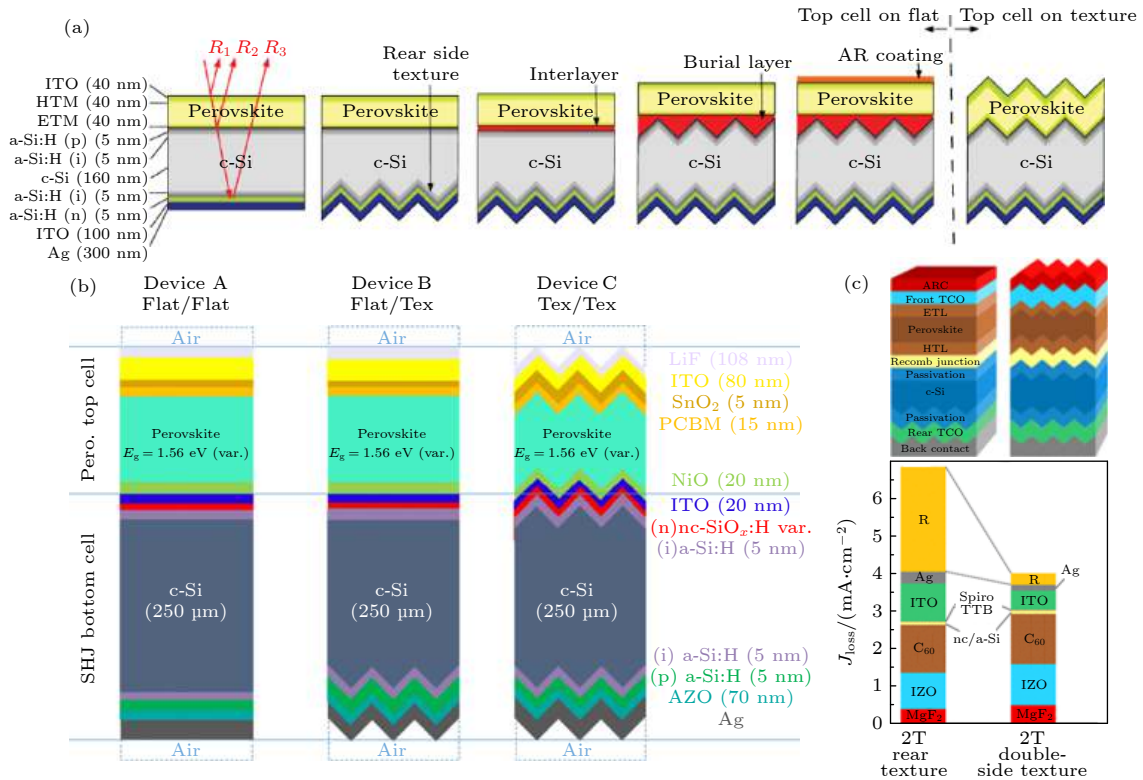


图 6 (a) 具有平面硅底电池的叠层电池、背面制绒但正面平坦的结构以及增加了中间层的叠层电池结构、具有双面制绒的硅底电池和掩埋层的叠层电池以及增加了减反层的叠层电池、顶和底电池均是双面制绒的叠层器件<sup>[75]</sup>; (b) 平面的硅、单面制绒的硅以及双面制绒的硅作为底电池的钙钛矿/硅异质结叠层器件结构<sup>[76]</sup>; (c) 具有单面制绒、双面制绒的器件的光损耗对比图<sup>[23]</sup>  
Fig. 6. (a) Perovskite/silicon tandem solar cell structure with flat silicon, single-side textured silicon with/without interface layer, tandem solar cell with double-side textured silicon and burial layer, solar cell with anti-reflection layer and double-sided textured structure<sup>[75]</sup>; (b) perovskite/silicon tandem solar cell structure with flat silicon, one-side textured silicon and double-side textured silicon as bottom cell<sup>[76]</sup>; (c) comparison of optical loss of devices with one-side texture, double-side texture devices<sup>[23]</sup>.

了减反层的叠层电池、顶和底电池均是双面制绒的叠层器件. 发现没有陷光结构的器件反射损失最高, 顶和底电池均是双面制绒结构的叠层器件光学性能最好, 并获得了  $20.25 \text{ mA/cm}^2$  的短路电流密度. 2018 年, 德国亥姆霍兹研究所 Mazzarella 等<sup>[76]</sup>也分别对图 6(b) 中平面的硅、单面制绒的硅以及双面制绒的硅作为底电池的钙钛矿/硅异质结叠层太阳能电池进行模拟, 得出双面制绒的硅作为底电池的叠层器件光学性能最优, 并获得  $20.9 \text{ mA/cm}^2$  的短路电流密度. 2019 年, 澳大利亚国立大学 Jacobs 等<sup>[23]</sup>分别在具有单面制绒和双面制绒的硅底电池

上沉积钙钛矿顶电池, 结果显示具有双面制绒结构的器件反射损失最低, 如图 6(c) 所示.

除了单面制绒和双面制绒的结构, 陷光结构的工作还可以考虑在其他方向上做出改变. 2018 年, 德国亥姆霍兹研究所将钙钛矿层生长在具有六角形正弦纳米结构的基底上, 这种陷光结构的使用与生长在平面基底上的钙钛矿相比, 光损耗大大降低的同时光吸收显著增加<sup>[22]</sup>, 这个工作中的陷光结构微观结构及其模拟结果分析如图 7(a)—图 7(e) 所示. 2014 年, 香港理工大学使用带有蛾眼纹理结构的钙钛矿作为叠层电池顶电池, 这种蛾眼纹理

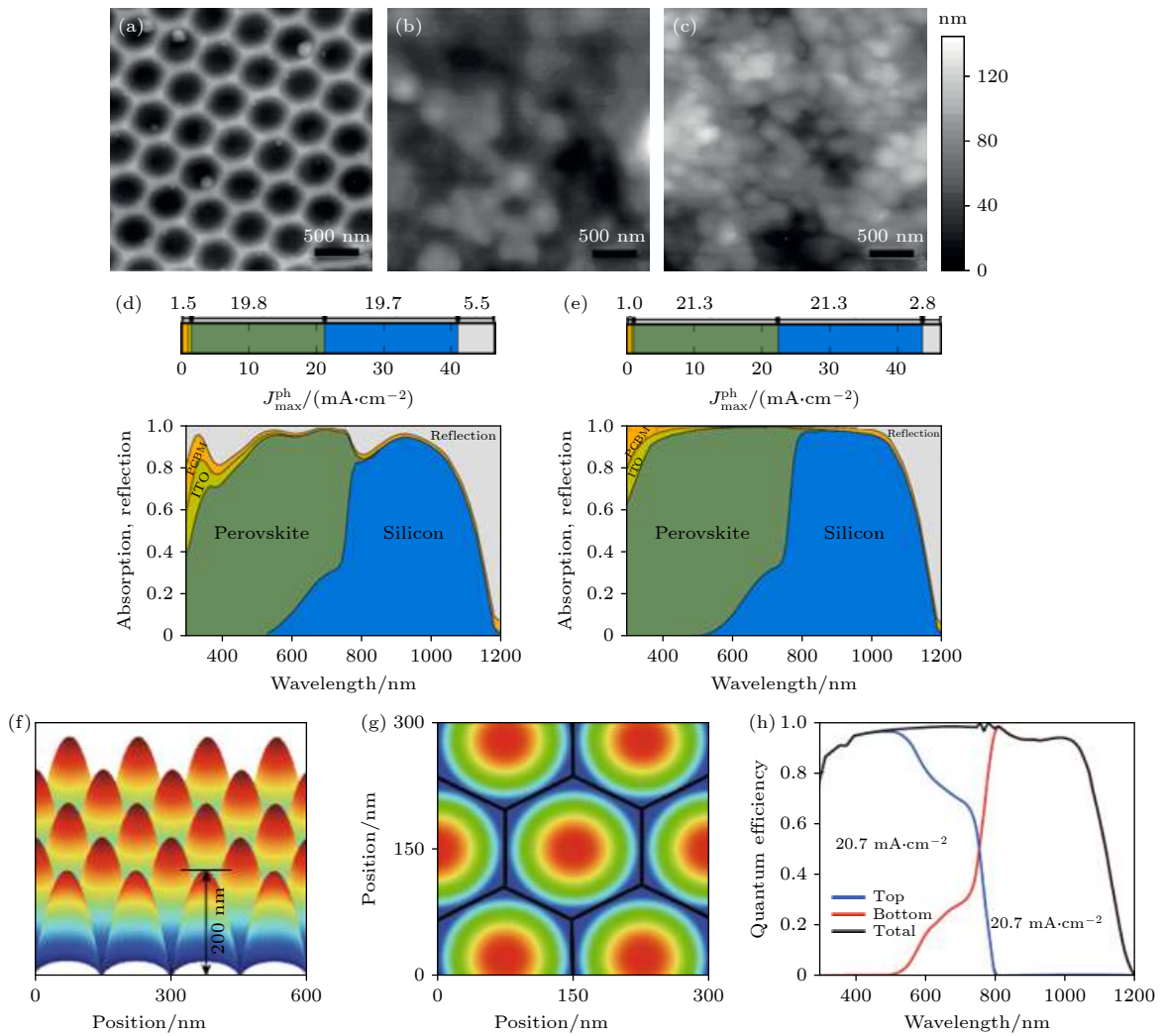


图 7 (a) 具有六角形正弦纳米结构的基底原子力显微图 (AFM)<sup>[22]</sup>; (b) 生长在这种基底上的钙钛矿的原子力显微图 (AFM)<sup>[22]</sup>; (c) 平面钙钛矿的原子力显微图 (AFM)<sup>[22]</sup>; (d) 未使用陷光结构的电池 EQE 图<sup>[22]</sup>; (e) 使用陷光结构后的电池 EQE 图<sup>[22]</sup>; (f) 和 (g) 蛾眼纹理钙钛矿的结构图<sup>[77]</sup>; (h) 使用蛾眼纹理钙钛矿的叠层器件 EQE 图<sup>[77]</sup>

Fig. 7. (a) Atom force microscopy (AFM) of substrate with hexagonal sinusoidal nanostructure<sup>[22]</sup>; (b) AFM image of perovskite growing on this substrate<sup>[22]</sup>; (c) AFM image of flat perovskite<sup>[22]</sup>; (d) EQE curve of solar cell without dimple structure<sup>[22]</sup>; (e) EQE curve of solar cell with dimple structure<sup>[22]</sup>; (f) and (g) structure image of perovskite with moth eye texture<sup>[77]</sup>; (h) EQE curve of device with moth eye textured perovskite<sup>[77]</sup>.

的陷光结构可以实现  $20.7 \text{ mA/cm}^2$  的短路电流密度<sup>[77]</sup>, 图 7(f)—图 7(h) 显示了这种蛾眼纹理的微观结构及其器件模拟结果分析. 2020 年, 美国亚利桑那州立大学 Chen 等<sup>[78]</sup> 基于带有亚微米级金字塔的双面制绒硅底电池 (如图 8(a) 和图 8(c) 所示), 提出了一种新的钙钛矿/硅叠层太阳能电池结构, 器件中所有金字塔尺寸都不超过  $1 \mu\text{m}$ , 图 8(b) 和图 8(d) 显示这项工作获得了高达 26% 的转换效率以及高于  $19 \text{ mA/cm}^2$  的短路电流密度. 光反射和寄生吸收的减小说明陷光结构对增加光路和光在器件内部的反射起着显著的作用.

### 3.2 寄生吸收

通常, 太阳能电池中非活性层的吸收称为寄生吸收, 这些吸收对太阳能电池中的短路电流密度没有贡献, 所以对寄生吸收的改善在光学优化中很重要. 在非吸收层中, 造成寄生吸收的主要原因是透明导电层对光的吸收. 透明导电层主要有石墨烯、银纳米线电极、 $\text{MoO}_x$  作为缓冲层的薄金属层、掺锌的氧化铟 (indium zinc oxide, IZO) 或者 ITO 等. 每种材料都有其优缺点, 例如: 银纳米线网状电极稳定性不好并且制造技术复杂, 氧化石墨烯透明度高但是电阻很高, ITO 导电率低但可适当增加厚度

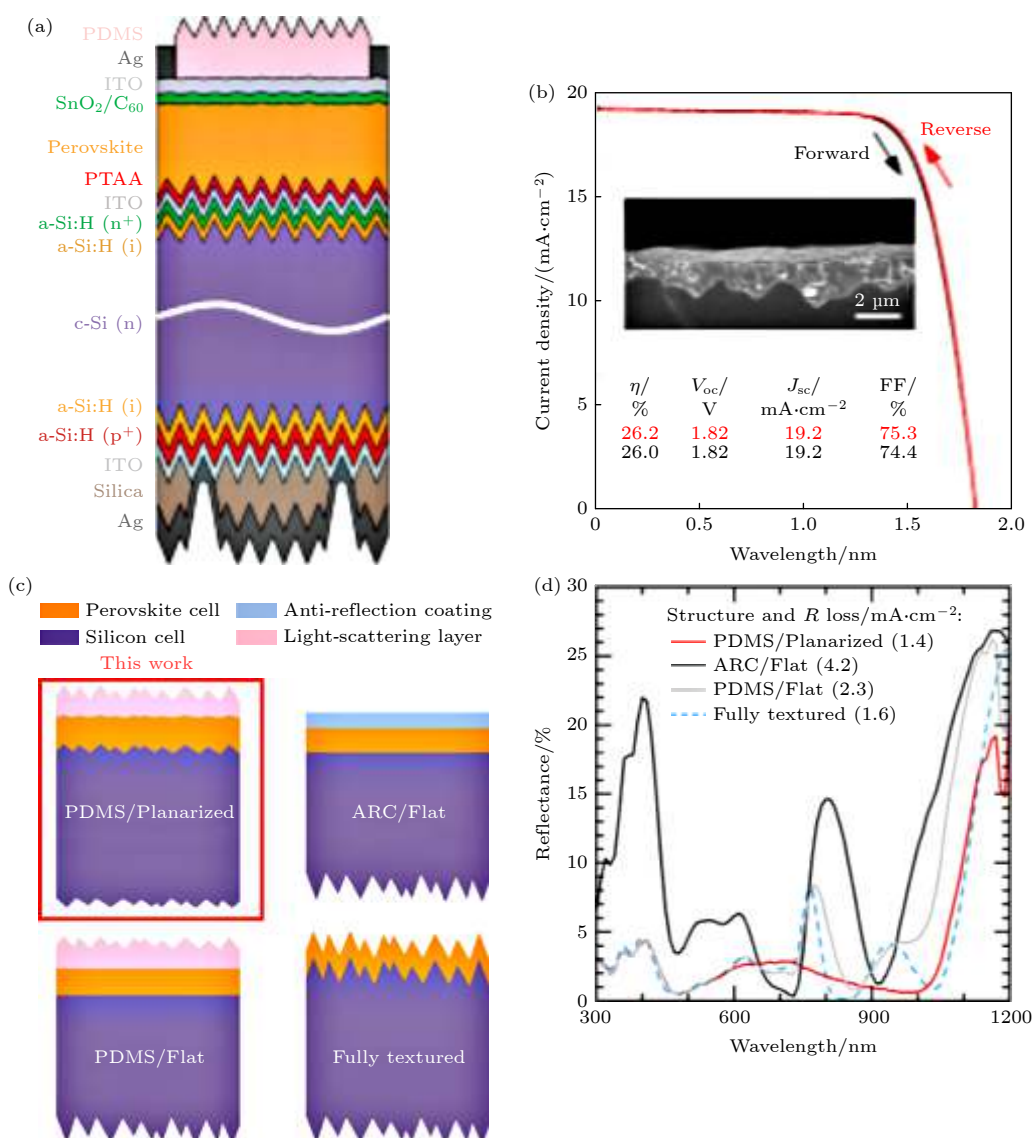


图 8 (a) 带有亚微米级金字塔制绒的钙钛矿/硅叠层太阳能电池结构<sup>[78]</sup>; (b) 叠层器件  $I$ - $V$  测试结果<sup>[78]</sup>; (c) 与其他陷光结构的对比<sup>[78]</sup>; (d) 使用四种陷光结构的叠层器件的反射损耗模拟结果对比图<sup>[78]</sup>

Fig. 8. (a) Structure of perovskite/silicon tandem solar cell with submicron pyramids textured structure<sup>[78]</sup>; (b)  $I$ - $V$  results of devices<sup>[78]</sup>; (c) comparison with the other light trapping structures<sup>[78]</sup>; (d) comparison of reflection loss of the device using four kinds of structure<sup>[78]</sup>.

来增加导电性. 透明导电薄膜 (transparent conductive oxide, TCO) 的另一个缺点是其溅射制备工艺会损坏其他层, 所以需要引入缓冲层 (MoO<sub>3</sub>, ZnO 和 SnO<sub>2</sub> 等) 保护薄膜不被破坏.

2015 年, 卢布尔雅那大学电气工程学院联合洛桑联邦理工 (EPFL) 学院 Filipic 等<sup>[12]</sup> 对钙钛矿/硅叠层电池的透明导电层和 Spiro-OMeTAD 进行光学优化, 大大改善了器件的光吸收. 中国科学院 Wang 等<sup>[79]</sup> 2016 年提出开槽和棱镜 SiO<sub>2</sub> 结构并且使用光学性质更好的 ITO 减少了钙钛矿电池的寄生吸收, 将器件短路电流密度提升到 23.92 mA/cm<sup>2</sup>, 这种结构及其吸收显示在图 9(a) 和图 9(b) 中. 2017 年, 德国亥姆霍兹研究所 Jager 等<sup>[73]</sup> 又对钙钛矿/硅叠层电池的电子传输层 (electron transport

layer, ETL) 以及 ITO 层进行优化设计, 并且采用倒置结构, 将器件的短路电流密度提升了 2.8 mA/cm<sup>2</sup>, 其优化结果如图 9(c) 和图 9(d). 在光学角度上对器件寄生吸收进行优化的模拟已经很成熟, 但是减少寄生吸收的设计还需要结合电学性能考虑, 不然光学性能提升的同时会造成电学上的损失从而造成器件整体性能的下降. 2019 年, Kohnen 等<sup>[71]</sup> 的工作表明: 仅从光学角度对 ITO 进行优化与光学和电学结合的优化结果比较, 虽然短路电流密度略有提升, 但是转换效率却下降了, 如图 9(e) 和图 9(f) 所示.

分析器件的光损耗, 能直接看出所有材料的寄生吸收, 从而针对性地对寄生吸收大的材料进行厚度、材料、带隙等方面的优化. 不同结构的器件引起

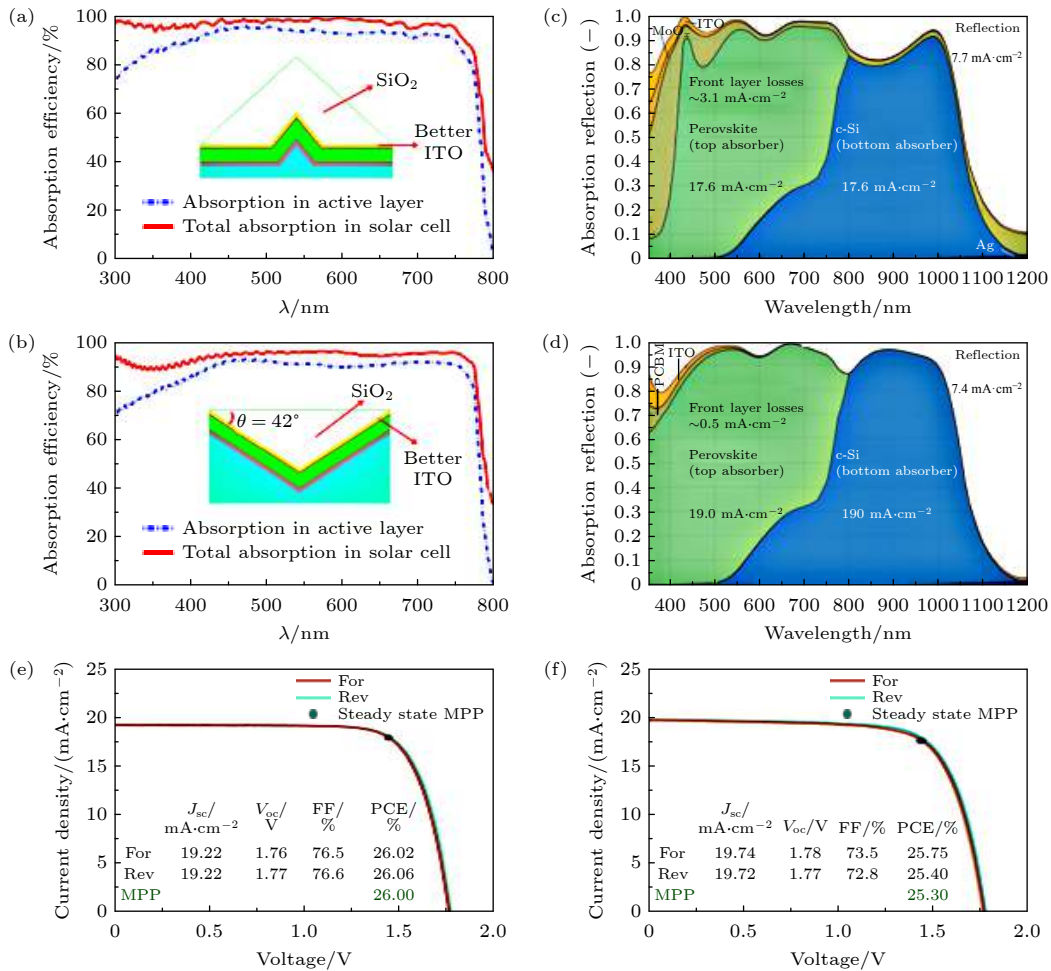


图 9 (a) 开槽和 (b) 棱镜 SiO<sub>2</sub> 结构减少钙钛矿太阳能电池寄生吸收<sup>[79]</sup>; 叠层电池优化寄生吸收 (c) 前和 (d) 后的器件 EQE 对比图<sup>[73]</sup>; (e) 光学和电学综合考虑对 ITO 寄生吸收优化<sup>[71]</sup>; (f) 仅从光学角度优化 ITO 的寄生吸收<sup>[71]</sup>

Fig. 9. (a) Slotted and (b) prismatic structure of SiO<sub>2</sub> to reduce parasitic absorption of perovskite solar cells<sup>[79]</sup>; EQE comparison of tandem solar cells (c) before and (d) after optimizing for parasitic absorption<sup>[73]</sup>; (e) optimization for parasitic absorption of ITO with both optical and electrical considerations<sup>[71]</sup>; (f) optimization for parasitic absorption of ITO only considerate optical aspect<sup>[71]</sup>.

主要寄生吸收的材料不同, 优化方式也随之改变. 寄生吸收的优化对叠层器件光学优化有着十分重要的影响.

#### 4 总结和展望

钙钛矿/硅叠层太阳电池可以突破 Shockley-Queisser (S-Q) 单结电池效率极限, 具有非常大的潜力. 有关其材料设计优化、光学损耗的分析等工作都在不断完善, 光学模拟仿真也在这些工作中起着至关重要的作用. 本文着重从光学优化的方法和优化内容等方面对光学模拟优化近期的研究进展做出了概述. 由于光学损耗主要是器件的反射损失和寄生吸收引起的, 本文重点讲述了在减反射和衬底陷光结构方面的优化和发展, 并且对减少非吸收层寄生吸收的工作进行了概述. 通过对光学优化工作的研究, 可以促进更高效率器件的制备.

尽管叠层电池光学模拟优化的工作已经取得很大进展, 但是还存在着一些问题. 未来的光学模拟优化应该从以下几个方面考虑: 1) 模拟工作应该与实验有着密切联系, 让模拟结果不是只能给出简单的实验设计方向, 要能分析出实验中存在的问题并且对实验内容给出明确的指导方向; 2) 无论是使用商用软件模拟还是自建模型模拟, 模拟的精确度一定要高, 这样才能更接近实际实验内容. 可以选择优化算法或结合机器测试使模拟的数据尽可能精确; 3) 在叠层器件中, 反射损失和寄生吸收是主要的光学损失, 要尽可能地降低这两种光学损失必须要设计合理的叠层器件结构, 如设计合理的绒度衬底以降低反射损失, 选择寄生吸收较小的光学薄膜作为透明导电层, 尽可能地将电子传输层或空穴传输层的厚度降低以减小寄生吸收; 4) 由于叠层电池的短路电流取决于最小的那个子电池, 所以顶、底电池的电流匹配也非常重要. 所以不能单独取子电池最优模拟结果, 将顶底电池模拟结果结合起来, 选择一个最优模拟策略.

#### 参考文献

[1] Yoshikawa K, Kawasaki H, Yoshida W, Irie T, Konishi K, Nakano K, Uto T, Adachi D, Kanematsu M, Uzu H 2017 *Nat. Energy* **2** 17032

[2] Wolf S D, Descoedres A, Holman Z C, Ballif C 2012 *Green* **2** 7

[3] Kojima A, Teshima K, Shirai Y, Miyasaka T 2019 *J. Am.*

*Chem. Soc.* **131** 6050

[4] Bailie C D, McGehee M D 2015 *MRS Bull.* **40** 681

[5] Etgar L, Gao P, Xue Z, Peng Q, Chandiran A K, Liu B, Nazeeruddin M K, Graetzel M 2012 *J. Am. Chem. Soc.* **134** 17396

[6] Eperon G E, Stranks S D, Menelaou C, Johnston M B, Herz L M, Snaith H J 2014 *Energy Environ. Sci.* **7** 982

[7] Dewi H A, Wang H, Li J, Thway M, Sridharan R, Stangl R, Lin F, Aberle A G, Mathews N, Bruno A, Mhaisalkar S 2019 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **11** 34178

[8] Qiu W, Paetzold U W, Aernouts T, Debucquoy M, Ghehlaar R, Poortmans J 2018 *Energy Environ. Sci.* **11** 1489

[9] Jackson E 1995 *Transactions of the Conference on the Use of Solar Energy* Tucson, October 31–November 1, 1995 **5** 122

[10] Werner J, Niesen B, Ballif C 2018 *Adv. Mater. Interfaces* **17** 00731

[11] Kohnen E 2020 *European PV Solar Energy Conference and Exhibition (EUPVSEC)* Lisbon, Portugal, Germany, September 7–11, 2020

[12] Filipic M, Loper P, Niesen B, de Wolf S, Krc J, Ballif C, Topic M 2015 *Opt. Express* **23** A263

[13] Loper P, Niesen B, Moon S J, Martin de Nicolas S, Holovsky J, Remes Z, Ledinsky M, Haug F J, Yum J H, De Wolf S, Ballif C 2014 *IEEE J. Photovoltaics* **4** 1545

[14] Lal N N, White T P, Catchpole K R 2014 *IEEE J. Photovoltaics* **4** 1380

[15] Shockley W, Queisser H J 1961 *J. Appl. Phys.* **32** 510

[16] Brittman S, Garnett E C 2016 *J. Phys. Chem. A* **120** 616

[17] Green M A 2015 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **92** 1305

[18] Hara T, Maekawa T, Minoura S, Sago Y, Niki S, Fujiwara H 2014 *Phys. Rev. Appl.* **2** 034012

[19] Nakane A, Tampo H, Tamakoshi M, Fujimoto S, Kim K M, Kim S, Shibata H, Niki S, Fujiwara H 2016 *J. Appl. Phys.* **120** 61

[20] Nakane A, Fujimoto S, Fujiwara H 2017 *J. Appl. Phys.* **122** 20

[21] Altazin S, Stepanova L, Lapagna K, Losio P, Ruhstaller B 2018 *Opt. Express* **26** A579

[22] Chen D, Manley P, Tockhorn P, Eisenhauer D, Jäger K 2018 *J. Photonics Energy* **8** 2

[23] Jacobs D A, Langenhorst M, Sahli F, Richards B S, Paetzold U W 2019 *J. Phys. Chem. Lett.* **10** 3159

[24] Askari S A, Kumar M, Das M K 2018 *Semicond. Sci. Technol.* **33** 115003

[25] Guang T Y, Pei Q G, Paul, Procel, Gianluca, Limodio, Arthur, Weeber 2018 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **186** 13

[26] Park H, Lee Y J, Shin M, Lee Y J, Lee J, Park C, Yi 2018 *Curr. Photovoltaics Research* **4** 102

[27] Borah C K, Tyagi P K, Kumar S, Patel K 2018 *Comput. Mater. Sci.* **151** 65

[28] Santbergen R, Uzu H, Yamamoto K, Zeman M 2019 *IEEE J. Photovoltaics* **PP** 1

[29] Macqueen R W, Martin L, Jens N, Mathias M, Clemens G, Sara J C, Klaus J G, Tayebjee M J Y, Schmidt T W, Bernd R 2018 *Mater. Horiz.* **5** 1065

[30] Nico T, Oliver H H, Christoph G J, Benedikt B S 2018 *Opt. Express* **26**

[31] Solar Energy Systems, Johannes E, Nico T, Habtamu G <https://pvlighthouse.com.au/cms/simulation-programs/optos> [2020-10-23]

[32] JCMSuite, Jservice <http://www.jservice.com.cn/sciencenews/jcmsuite/> [2020-10-23]

[33] Ernst M, Holst H, Winter M, Altermatt P P 2016 *Sol. Energy*

- Mater. Sol. Cells* **157** 913
- [34] Bird R E, Riordan C 1986 *J. Climate Appl. Meteor.* **25** 87
- [35] McIntosh K R, Cotsell J N, Norris A W, Powell N E, Ketola B M 2010 *Photovoltaic Specialists Conference Hawaii*, June 20–25, 2010 p269
- [36] Baker-Finch S C, McIntosh K R 2010 *Photovoltaic Specialists Conference (PVSC)* December 17–19, 2010 p2184
- [37] Eisenlohr J, Tucher N, Hn O, Hauser H, Peters M, Kiefel P, Goldschmidt J C, Bläsi B 2015 *Opt. Express* **23** A502
- [38] Tucher N, Eisenlohr J, Kiefel P, Höhn O, Bläsi B 2015 *Opt. Express* **23** A1720
- [39] Basore P A 2020 *IEEE J. Photovoltaics* **10** 905
- [40] Basore P A 2018 *IEEE J. Photovoltaics* **9** 106
- [41] Simulation Software, Beat R, Daniele B <http://www.fluxim.com/setfos-intro/> [2020-10-23]
- [42] Simulation Software, Alex N, Marc B, Koen D, Stefaan D, Johan V <http://scaps.elis.ugent.be/> [2020-10-23]
- [43] Liu Y, Sun Y, Rockett A 2012 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **98** 124
- [44] Liu Y, Sun Y, Rockett A 2012 *IEEE Photovoltaic Specialists Conference Austin, USA*, June 3–8, 2012 p000902
- [45] Liu Y, Heinzl D, Rockett A 2011 *IEEE Photovoltaic Specialists Conference Orlando, USA*, February 17–19, 2011 p002753
- [46] Liu Y, Heinzl D, Rockett A 2010 *IEEE Photovoltaic Specialists Conference Honolulu, USA*, June 20–25, 2010 p001943
- [47] Qarony W, Hossain M I, Hossain M K, Uddin M J, Haque A, Saad A R, Tsang Y H 2017 *Results Phys.* **7** 4287
- [48] Chen G L, Han C, Yan L L, Li Y, Zhao Y, Zhang X D 2019 *J. Semicond.* **40** 12
- [49] Gong J, Dai R, Wang Z, Zhang C, Yuan X, Zhang Z 2017 *Mater. Res. Express* **4** 085005
- [50] Xu J P, Zhang R J, Zhang Y, Wang Z Y, Chen L, Huang Q H, Lu H L, Wang S Y, Zheng Y X, Chen L Y 2016 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18** 3316
- [51] Li J, Tang J Y, Pei W, Wei X H, Huang F 2015 *Acta Phys. Sin.* **11** 110702 (in Chinese) [李江, 唐敬友, 裴旺, 魏贤华, 黄峰 2015 物理学报 **11** 110702]
- [52] Prange M P, Rehr J J, Rivas G, Kas J J, Lawson, John W 2009 *Phys. Rev. E* **80** 15
- [53] Minkov A D 2000 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **22** 1157
- [54] Marquez E, Ramirez-Malo J, Villares P, Jimenez-Garay R, Ewen P J S, Owen A E 2000 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **139** 535
- [55] Yue L, Chen H 2019 *EURASIP J. Wireless Commun.* **19** 1474
- [56] Henderson D, Jacobson S H, Johnson A W 2003 *Handbook of Metaheuristics* (Boston: Springer) (Vol.3) p287
- [57] Li J C, Su J H 2012 *Adv. Mater. Res.* **462** 33
- [58] Attia A A, El-Bana M S, Habashy D M, Fouad S S, El-Bakry M Y 2017 *J. Appl. Res. Technol.* **15** 423
- [59] Bittkau K, Kirchartz T, Rau U 2018 *Opt. Express* **26** 181
- [60] Ye F, Gu B, Huang X Q 2010 *Opt. Instrum.* **32** 90 (in Chinese) [叶帆, 顾兵, 黄晓琴 2010 光学仪器 **32** 90]
- [61] Li G L, Zhong J M, Wang L H, Li J, He L J, Li H B, Gao M M 2016 *Las. Optoelect. Prog.* **53** 4 (in Chinese) [李国龙, 钟景明, 王立惠, 李进, 何力军, 李海波, 高忙忙 2016 激光与光电子学进展 **53** 4]
- [62] Su W T, Li B, Liu D Q, Zhang F S 2007 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **40** 3343
- [63] Zhou Y 2010 *M. S. Thesis* (Beijing: University of Chinese Academy of Sciences) (in Chinese) [周毅 2010 硕士学位论文 (北京: 中国科学院研究生院)]
- [64] Jiang H L, Liu Q N 2016 *Semiconductor Optoelectronics* **37** 218 (in Chinese) [蒋和伦, 刘启能 2016 半导体光电 **37** 218]
- [65] Nakanishi A, Takiguchi Y, Miyajima S 2016 *Phys. Status Solidi A. ePSS* **213** 1997
- [66] Hou Y, Aydin E, Bastiani M D, Xiao C, Isikgor H F, Xue D J 2020 *Science* **367** 1135
- [67] Jošt M, Köhnen E, Morales-Vilches A B, Lipovšek B, Jäger K, Macco B, Al-Ashouri A, Krč J, Korte L, Rech B 2018 *Energy Environ. Sci.* **11** 3511
- [68] Tao H, Zhang W, Zhang C, Han L, Wang J, Tan B, Li Y, Kan C 2019 *Opt. Commun.* **56** 112
- [69] Manzoor S, Yu Z J, Ali A, Ali W, Bush K A, Palmstrom A F, Bent S F, Mcgehee M D, Holman Z C 2017 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **165** 1022
- [70] Hou F H, Han C, Isabella O, Yan L L, Shi B, Chen J, An S C, Zhou Z, Huang W, Ren H Z, Zhao Y, Zhang X D 2018 *Nano Energy* **56** 234
- [71] Köhnen E, Jot M, Morales-Vilches A B, Tockhorn P, Al-Ashouri A, Macco B, Kegelmann L, Korte L, Rech B, Schlattmann R 2019 *Sustainable Energy Fuels* **3** 1995
- [72] Bett A J, Winkler K M, Bivour M 2019 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **11** 45796
- [73] Jäger K, Korte L, Rech B, Albrecht S 2017 *Opt. Express* **25** 12
- [74] Salman M, Jakob H, Kevin A B, Axel F P, Joe C, Zhengshan J Y, Stacey F B, Michael D M, Zachary C H 2018 *Opt. Express* **26** 27441
- [75] Santbergen R, Mishima R, Meguro T, Hino M, Uzu H, Blanker J, Yamamoto K, Zeman M 2016 *Opt. Express* **24** A1288
- [76] Mazzarella L, Werth M, Jäger K, Jošt M, Stannowski B 2018 *Opt. Express* **26** 103
- [77] Schneider B W, Lal N N, Baker-Finch S, White T P 2014 *Opt. Express* **22** Suppl 6 A1422
- [78] Chen B, Yu Z J, Manzoor S, Manzoor S, Wang S, Weigand W, Yu Z, Yang G, Ni Z, Dai X, C.Holman Z, Huang J 2020 *Joule* **4** 850
- [79] Wang D L, Cui H J, Hou G J, Zhu Z G, Yan Q B, Su G 2016 *Sci. Rep.* **6** 18922

## REVIEW

# Perovskite/silicon heterojunction tandem solar cells: Advances in optical simulation\*

Wang Qi<sup>1)2)3)4)5)</sup> Yan Ling-Ling<sup>1)2)3)4)5)</sup> Chen Bing-Bing<sup>1)2)3)4)5)</sup>  
 Li Ren-Jie<sup>1)2)3)4)5)</sup> Wang San-Long<sup>1)2)3)4)5)</sup> Wang Peng-Yang<sup>1)2)3)4)5)</sup>  
 Huang Qian<sup>1)2)3)4)5)</sup> Xu Sheng-Zhi<sup>1)2)3)4)5)</sup> Hou Guo-Fu<sup>1)2)3)4)5)</sup>  
 Chen Xin-Liang<sup>1)2)3)4)5)</sup> Li Yue-Long<sup>1)2)3)4)5)</sup> Ding Yi<sup>1)2)3)4)5)</sup>  
 Zhang De-Kun<sup>1)2)3)4)5)</sup> Wang Guang-Cai<sup>1)2)3)4)5)</sup>  
 Zhao Ying<sup>1)2)3)4)5)†</sup> Zhang Xiao-Dan<sup>1)2)3)4)5)‡</sup>

1) (*Institute of Photoelectronic Thin Film Devices and Technology, Solar Energy Conversion Center, Nankai University, Tianjin 300350, China*)

2) (*Key Laboratory of Photoelectronic Thin Film Devices and Technology of Tianjin, Tianjin 300350, China*)

3) (*Engineering Research Center of Thin Film Photoelectronic Technology of Ministry of Education, Tianjin 300350, China*)

4) (*Collaborative Innovation Center of Chemical Science and Engineering (Tianjin), Tianjin 300072, China*)

5) (*Renewable Energy Conversion and Storage Center, Nankai University, Tianjin 300072, China*)

( Received 23 September 2020; revised manuscript received 14 October 2020 )

## Abstract

Perovskite/silicon heterojunction tandem solar cells have developed rapidly in recent years, and their efficiency is enhanced from 13.7% to 29.1%. As is well known, the optical loss has a great influence on the efficiency. Due to the complex fabrication process of tandem solar cells, it is important to obtain high-performance tandems through optical simulation. In this paper, optical simulation methods are mainly summarized from two aspects: commercial software and self-built model. Then, the progress of optical simulation is analyzed in terms of reflection loss and parasitic absorption. Finally, what should be paid more attention to in the optical simulation of tandem solar cells is pointed out. The efficiency limit of perovskite/silicon heterojunction tandem solar cells can reach up to 40%, but there remains much room for improvement. The research on optical simulation will lay the foundation of developing the tandem solar cells.

**Keywords:** perovskite/silicon tandem solar cells, optical simulation, reflection losses, parasitic absorption

**PACS:** 78.20.Bh, 78.20.Ci, 78.56.-a, 78.67.-n

**DOI:** 10.7498/aps.70.20201585

\* Project supported by the National Key R&D Program of China (Grant No. 2018YFB1500103), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61674084), the Innovation and Talent Introduction Plan in Colleges and Universities (111 plan), China (Grant No. B16027), the Military Civilian Integration Project of Tianjin, China (Grant No. 18ZXJMTG00220), and the Fundamental Research Funds of Central Universities, China (Grant Nos. 63201171, 63201173).

† Corresponding author. E-mail: [zhaoygds@nankai.edu.cn](mailto:zhaoygds@nankai.edu.cn)

‡ Corresponding author. E-mail: [xdzhang@nankai.edu.cn](mailto:xdzhang@nankai.edu.cn)