

金属纳米图案对钙钛矿电池的光学增强*

韩非¹⁾ 江舟¹⁾ 王晨¹⁾ 周华²⁾ 沈向前^{1)3)†}

1) (新疆大学物理科学与技术学院, 新疆固态物理与器件重点实验室, 乌鲁木齐 830046)

2) (山东大学物理学院, 济南 250100)

3) (上海交通大学, 金属基复合材料国家重点实验室, 上海 200240)

(2024 年 5 月 1 日收到; 2024 年 6 月 9 日收到修改稿)

表面等离激元共振 (SPR) 是调控太阳电池光谱响应、增强能量转换效率的重要策略之一. 但对于平面异质型的钙钛矿电池, 由于各功能层厚度对金属纳米结构的尺寸限制, SPR 的响应波段通常被束缚在很窄的可见光区域, 且共振能量的消散以外层电子的热吸收为主. 本文基于时域有限差分方法 (FDTD) 和严格耦合波分析 (RCWA), 系统研究了不同金属图案的 SPR 图谱. 结果表明, 通过对图案形状、厚度、周期等特征参数的优化, 可以在近红外区域观察到明显的 SPR 现象, 同时散射在消光中占据主导地位. 对于最优的金属圆环, SPR 峰值对应的波长为 772 nm, 此时相对吸收、散射和消光截面分别为 0.54, 1.39 和 1.93, 钙钛矿响应层在 700–850 nm 之间的加权平均吸收从 53.61% 提升到 65.36%. 相应器件的光生电流密度从 20.39 mA/cm² 增至 22.72 mA/cm², 光电转换效率相对提升了 11.45%.

关键词: 金属纳米图案, 等离激元共振, 钙钛矿电池, 转换效率**PACS:** 88.30.gg, 88.40.H-, 88.40.J-, 88.40.jj**DOI:** 10.7498/aps.73.20240607

1 引言

发展光伏等新型的清洁能源技术是应对化石能源短缺和环境污染的有力举措之一, 对助推国家实施“碳达峰”和“碳中和”战略目标具有十分重要的积极意义. 在众多体系的太阳电池中, 有机-无机杂化金属卤素钙钛矿电池因其优异的光电性能、简易的制备工艺、丰富的原材料以及低廉的成本, 自问世以来一直吸引着众多学者的关注^[1-4]. 经过十几年的研究, 单结钙钛矿电池的光电转换效率已从最初的 3.8% 提升到了 26.1%, 并展现出良好的运行稳定性^[5,6]. 但目前为止, 对钙钛矿电池的调控策略主要集中在提高响应层的结晶质量和改善界面的电荷传导能力上, 如组分工程、传输层优化、缺

陷钝化等^[7-12]. 为了进一步提升电池的性能, 光学调控开始引起人们的重视^[13,14].

在特定的光场中, 金属纳米结构的表面电子云随入射光子的频率发生集体振荡, 诱导产生表面等离激元共振 (surface plasmon resonance, SPR). 这种机制可以在金属表面形成束缚电磁波, 从而对限域范围内的光波实施远场散射、近场增强以及界面光波导等调控^[15-17]. SPR 的共振位置 (波长) 和振动强度显著依赖金属纳米结构的形状、尺寸、组成以及包覆的介质环境, 因而可以通过这些参数的变化来对其剪裁设计. 这些特点使得 SPR 在光电器件的增强调控方面极具吸引力, 并被广泛应用到硅基电池、有机电池、染料敏化电池等不同类型的太阳电池中^[18,19]. 基于 SPR 的响应增强调控也是当前钙钛矿电池研究的热点之一. 典型的工作有:

* 国家自然科学基金 (批准号: 12164047)、新疆维吾尔自治区自然科学基金 (批准号: 2022D01C20) 和新疆维吾尔自治区天山创新团队 (批准号: 2023D14001) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: sxqlyq@xju.edu.cn

Zhang 等^[20]通过在介孔钙钛矿电池的支架层中引入直径分别为 80 nm 和 8 nm 的球状 Au@SiO₂ 核壳结构,在宽波段范围内大幅提升了电池的量子响应效率,光生电流密度和能量转换效率因此显著增强.由于并没有观察到相应波段光学吸收的提升,他们推测光电流的改善可能是源自 SPR 所诱导的激子结合能下降,从而导致了载流子的分离和提取效率的上升.随后,Saliba 等^[21]采用直径分别为 40 nm 和 2 nm 的 Ag@TiO₂,在正式的介孔电池中也观察到了类似现象.但他们根据实验结果和理论模型,认为光电流的提升应归因于等离激元诱导的光子辐射循环.在此基础上,Yuan 等^[22-26]对金属纳米结构的形状和特征尺寸做了不同程度的改进,并分别应用到电子传输层、钙钛矿响应层以及空穴传输层.他们的研究发现,在 SPR 激励下,金属中的热电子可以跨越肖克利势垒,注入到邻域半导体的导带中.一方面,热电子可以填充半导体中的电荷缺陷,降低载流子的非辐射复合损失;另一方面,额外的电子增大了导带的载流子密度,电荷传输层的导电性和载流子迁移率得到明显改善.同时,热电子的注入还导致了电子传输层费米能级的上移,降低了其表面势垒.在这些机制的共同作用下,开路电压、短路电流、填充因子都得到显著提升.

尽管效果显著,SPR 在钙钛矿电池中的应用仍然面临很多的挑战.由于钙钛矿电池的电荷传输层厚度通常在 10—50 nm 左右,这就把金属纳米

结构的尺寸限制在了一个很小的范围^[16].与之对应地,金属纳米结构的共振峰也被限制在较窄的可见光波段,而对于器件响应较弱的近红外波段的光子则收效甚微.此外,根据等离激元的极化模型,对于小尺寸的金属纳米结构,吸收在其消光模式中占主导地位,而要实现较优的光子散射,结构的特征尺寸需要大于 90 nm^[15].事实上,在已有的文献中,SPR 对钙钛矿电池的光学调控仅限于近场增强效应,而远场散射和光波导模式鲜见报道.

相比金属颗粒,二维金属图案在水平面内的形状、尺寸、周期等特征参数可以不受器件功能层厚度的限制,这为基于 SPR 的钙钛矿电池设计提供了一种全新的思路.本文采用时域有限差分方法 (FDTD) 和严格耦合波分析 (RCWA),系统研究了不同金属图案的 SPR 特性.优化后的金属图案能在近红外区域对光波产生强烈的共振散射,从而延长光子在响应层中的路径并增加吸收效率.对于最优的金属圆环,钙钛矿响应层在 700—850 nm 之间的加权平均吸收从 53.61% 提升到了 65.36%,相应器件的光生电流密度和能量转换效率得到了大幅提升.

2 模型与方法

本文以典型的反式钙钛矿电池为研究对象,器件模型及相应功能层的厚度如图 1(a) 所示,从迎

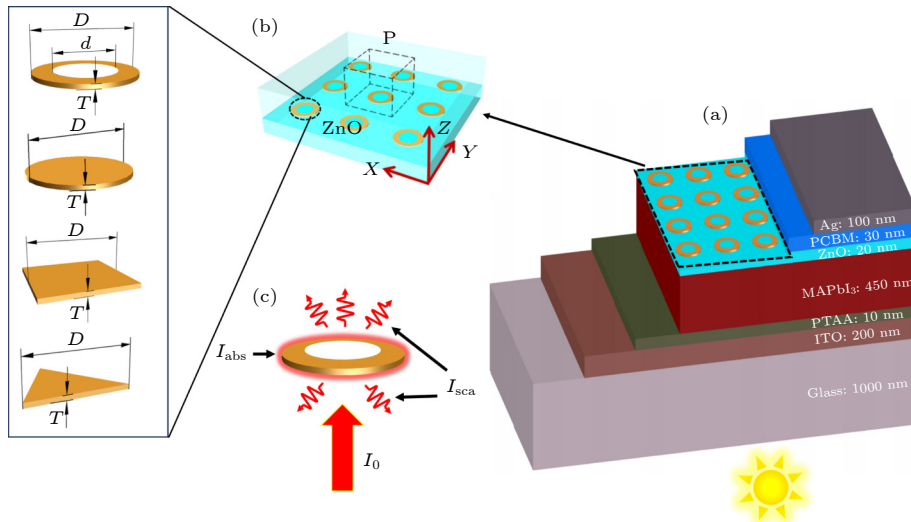


图 1 仿真模型及结构参数 (a) 基于金属图案的钙钛矿电池示意图; (b) 不同金属图案的形状及特征参数; (c) 金属图案与光波的共振作用示意图

Fig. 1. Simulation model and structural parameters: (a) Schematic diagram of a perovskite solar cell based on metal patterns; (b) shapes and characteristic parameters of different metal patterns; (c) schematic diagram of the resonance interaction between metal patterns and light waves.

光面到背电极依次为 Glass/ITO/PTAA/MAPbI₃/PCBM/Ag (ITO, 氧化铟锡玻璃; PTAA, 聚[双(4-苯基)(2, 4, 6-三甲基苯基)胺]; MAPbI₃, 甲胺铅碘化合物; PCBM, 富勒烯衍生物). 如图 1(b) 所示, 考虑圆环、圆盘、正方、三角 4 种不同金属图案对电池响应性能的影响. 为了避免对可见光的阻挡, 金属图案被设置在电池的上界面, 即电子传输层和钙钛矿层之间. 此外, 为了防止金属和钙钛矿接触, 采用 ZnO 作为介质层包覆金属图案. 光源为连续型的平面波, 垂直辐照在电池的表面. 空间网格采用边长为 1 nm 的立方体, 即 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 1$ nm, 相应时间步长 $\Delta t = 0.5$ ns. 水平方向设置为周期性边界条件, 垂直方向的边界采用完美匹配层.

如图 1(c) 所示, 对于强度为 I_0 的入射光, 在共振状态下, 部分光子偏离了原有的传播路径, 被金属图案吸收或者散射, 分别记为 I_{abs} 和 I_{sca} . 吸收和散射之和称之为消光, 记为 I_{ext} . 金属图案的 SPR 特性可以通过相对吸收、散射和消光截面来描述, 分别记为 Q_{abs} , Q_{sca} 和 Q_{ext} , 计算方法如下:

$$Q_{\text{abs}} = \frac{I_{\text{abs}} \cdot S_{\text{sim}}}{I_0 \cdot S_{\text{geo}}}, \quad (1)$$

$$Q_{\text{sca}} = \frac{I_{\text{sca}} \cdot S_{\text{sim}}}{I_0 \cdot S_{\text{geo}}}, \quad (2)$$

$$Q_{\text{ext}} = \frac{I_{\text{ext}} \cdot S_{\text{sim}}}{I_0 \cdot S_{\text{geo}}}, \quad (3)$$

式中, S_{geo} 和 S_{sim} 分别为金属图案的几何面积及选定模拟区域的面积. 根据上述定义可知, Q_{ext} 越大, 说明金属图案对光波的调控作用越强, Q_{ext} 最大时所对应的波长即为共振波长. 在共振位置, 若 $Q_{\text{abs}} > Q_{\text{sca}}$, 说明等离激元的能量主要通过金属的吸收来消散, 反之则说明散射在共振中占主导地位.

3 结果与讨论

以圆环为例, 首先计算金属图案的 SPR 图谱与其自身特征参数的变化关系. 如图 1(b) 所示, 圆环的形状由厚度 T 、外径 D 以及内径 d 确定, 模拟周期用 P 表示. 为排除其他层的干扰, 计算时光从 ZnO 介质中直接入射. 在初始状态下, 这 4 个参数分别设置为 10, 600, 300 和 150 nm, 然后保持其中 3 个参数不变, 依次扫描 T , P , D 和 d , 计算出相应的 Q_{abs} , Q_{sca} 和 Q_{ext} , 所得结果如图 2 所示. 从图 2(a3) 可以看出, 随着厚度 T 的增大, 圆环对光

波的作用不断加强. 当 $T > 4$ nm 后, 特定波长的 Q_{ext} 开始明显大于其他波段. 这表明金属圆环对光波产生了共振, 但此时共振峰所对应的波长 λ 约为 1200 nm, 超出了钙钛矿电池的最大响应波长 (~ 850 nm). 此外, 对比图 2(a1), (a2) 可以看出, 此时的 Q_{abs} 要明显大于 Q_{sca} , 说明在这种条件下, 金属自身的吸收是 SPR 能量消散的主要方式. 随着 T 继续增大, 共振峰逐渐向近红外区域移动, 同时 Q_{sca} 不断增大, Q_{abs} 逐渐减小. 为方便比较, 图 3 给出了 $\lambda = 800$ nm 时, 金属圆环的吸收、散射及消光截面随其自身厚度的变化关系, 当 $T = 18$ nm, Q_{abs} 和 Q_{sca} 达到最大, 分别为 0.42 和 1.25. 这说明此时金属圆环对光波的作用最强, 且散射在消光中占据了主导地位. 考虑到 T 的进一步增加并不会对 Q_{ext} 和 Q_{sca} 再有明显的提升, 相反, Q_{abs} 会出现一定程度的上升. 因而, 可以认为金属圆环的最优厚度即为 18 nm.

图 2(b1)—(b3) 给出了 SPR 图谱随周期 P 的变化关系, 当 $P > 700$ nm, 圆环开始对光波产生明显的共振调制. 在这一区域, 可以明显观察到 $Q_{\text{sca}} > Q_{\text{abs}}$, 即散射在消光中占据主导地位. 随着 P 的增大, 共振峰值保持在波长 700—900 nm 之间, 振动强度先上升再小幅降低, 最优值出现在 $P = 850$ nm 附近. 如图 2(c1)—(d3) 所示, 随着圆环外径 D 和内径 d 的增大, 共振峰分别向长波段和短波段移动. 对于近红外波段光子的响应, 两者的最优值分别为 360 nm 和 100 nm.

图 4(a) 为最优条件下圆环的 SPR 响应曲线, 此时共振峰对应的波长为 772 nm, 相应的相对消光、散射和吸收截面分别为 1.93, 1.39 和 0.54. 即在这种情况下, 圆环将对近红外区域的光子产生等离共振, 并以光子散射的形式消散共振能量. 图 4(c), (d) 为 $\lambda = 772$ nm 的入射光, 经圆环共振后的剖面光强 (平行入射光方向) 和俯视光强 (垂直入射光方向) 分布. 从图 4(c) 可以看出, 经金属纳米结构的等离共振调制后, 光子在远场方向发生了明显的散射. 图 4(d) 的俯视图表明, 圆环内径边沿与光波作用最强, 且散射后的光子在空间呈现不均匀的分布. 图 4(b) 为光子经圆环等离共振后的散射角分布, 可以看出大部分光子的散射角在 30° 以上, 这更加直观地证实了散射在激元能量消散中的主导地位. 类似地, 进一步计算了其他几种金属图案的 SPR 特性, 其最优的响应参数见表 1.

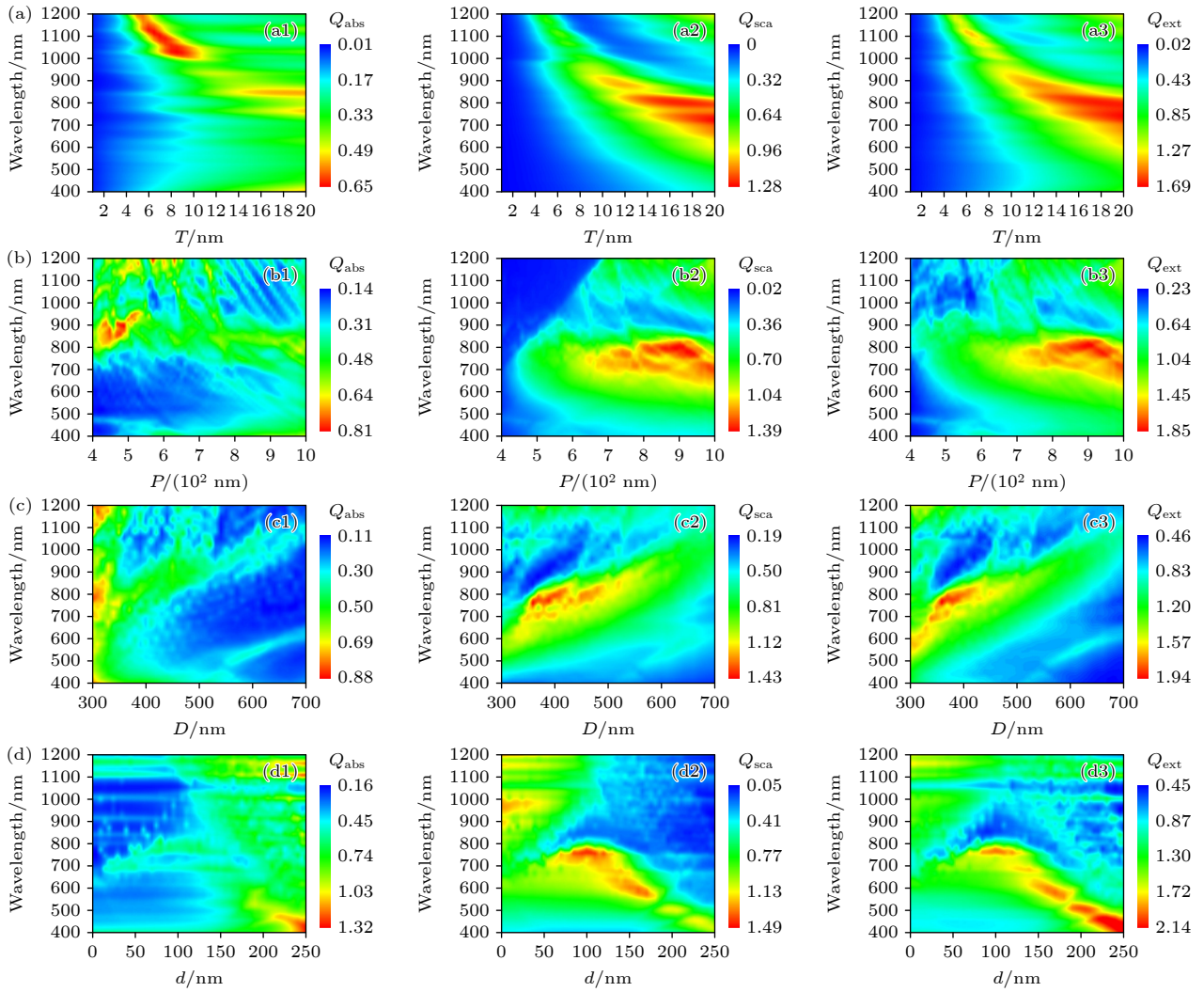
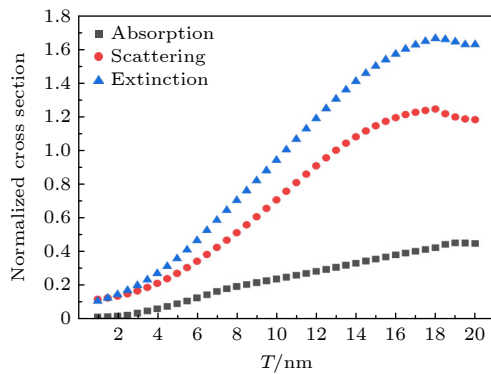


图2 金属圆环的吸收、散射及消光光谱随特征参数的变化关系

Fig. 2. Dependence of absorption, scattering and extinction spectra of metal annulus on its characteristic parameters.

图3 $\lambda = 800 \text{ nm}$ 时, 金属圆环的吸收、散射及消光截面随厚度的变化关系Fig. 3. Relationship between absorption, scattering, and extinction of a metal annulus varies with its thickness at $\lambda = 800 \text{ nm}$.

在上述优化的基础上, 进一步分析了金属图案对钙钛矿层的吸收提升情况. 图 5(a) 为包含不同

金属图案的钙钛矿层的吸收光谱. 为了排除玻璃、ITO 等非响应层的反射和寄生吸收对结果产生的影响, 采用图 5(a) 中插图所示的计算模型, 即光直接从钙钛矿层入射. 从图 5(a) 可以看出, 对于 $\lambda < 700 \text{ nm}$ 区域的光子, 钙钛矿拥有极高的吸收率, 此时不同金属图案的吸收曲线与参照样 (无图案) 的吸收曲线几乎一致. 随着波长的增大, 钙钛矿对光子的响应能力减弱, 到 $\lambda = 750 \text{ nm}$, 吸收曲线开始出现明显的下降. 此时, 金属图案对光波的 SPR 调控开始发挥作用. 与参照样相比, 不同金属图案的吸收曲线在这一区域均有明显的提升. 整体而言, 金属圆环的响应效率最高. 为了更直观的对比, 对不同图案在 700—850 nm 波段的吸收曲线做了加权平均, 结果如图 5(b) 所示, 参照样在这一区域的加权平均吸收是 53.61%, 经过三角、圆盘、四方、圆

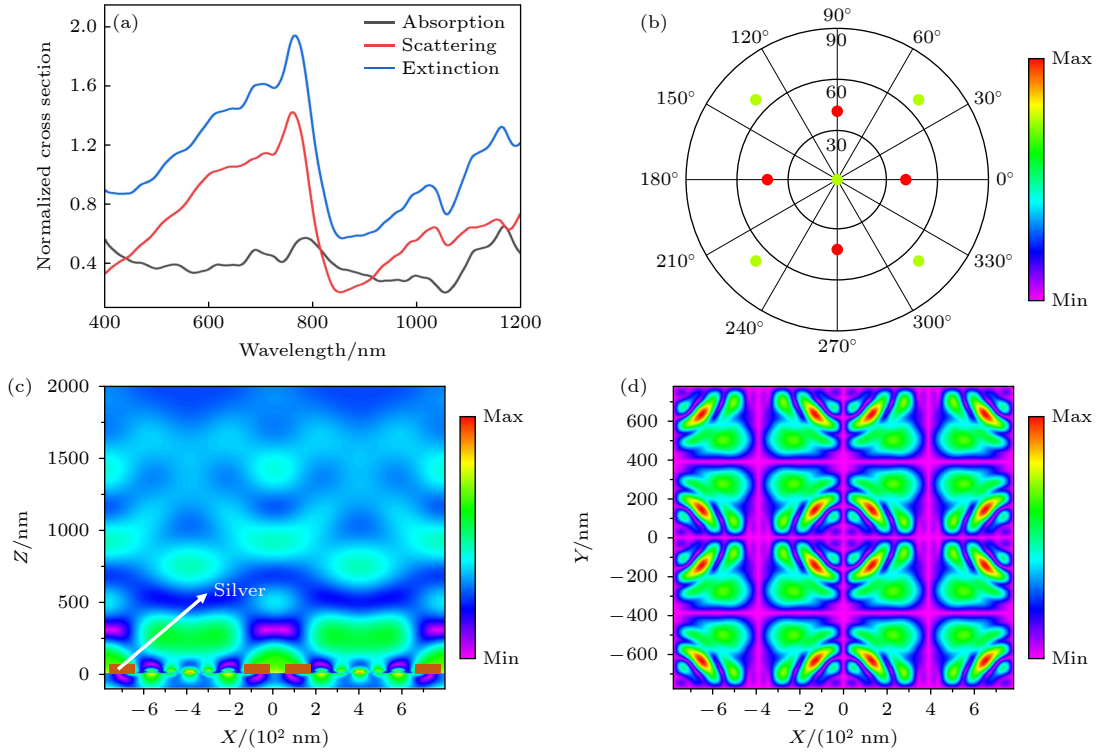


图 4 金属圆环的表面等离激元共振响应特性 (a) 相对吸收、散射及消光曲线; (b) 光子散射角分布; (c) 剖面光强分布; (d) 俯视光强分布

Fig. 4. SPR response characteristics of metal annulus: (a) Relative absorption, scattering, and extinction curves; (b) angular distribution of light scattered by the silver annulus; (c), (d) the spatial distribution of the electric field viewed from (c) a profile perspective and (d) a top-down perspective.

表 1 不同金属图案的最优结构参数及相应的 SPR 响应特性

Table 1. Optimal structural parameters and corresponding SPR response characteristics of different metallic patterns.

	T/nm	P/nm	D/nm	d/nm	$\lambda_{\text{max}}/\text{nm}$	Q_{abs}	Q_{sca}	Q_{ext}
Square	18	900	350	—	760	0.53	1.34	1.87
Annulus	18	850	360	100	772	0.54	1.39	1.93
Triangle	20	700	480	—	778	0.31	0.82	1.13
Circle	12	780	350	—	714	0.61	1.20	1.81

环 4 种金属图案调控后, 加权平均吸收分别增加到了 59.58%, 61.98%, 64.17% 和 65.36%.

最后, 采用理想二极管模型^[27]研究了不同金属图案对图 1(a) 所示的钙钛矿电池的光电响应特性的调控. 其中, 光生电流密度 J_{sc} 的计算方法如下:

$$J_{\text{sc}} = \int e \frac{\lambda}{hc} S(\lambda) \text{EQE}(\lambda) d\lambda, \quad (4)$$

式中 e , λ , h , c 分别是电子电量、光子波长、普朗克常数和真空中的光速. $S(\lambda)$ 和 $\text{EQE}(\lambda)$ 分别为太阳的标准辐照光谱和钙钛矿电池的外量子响应效率. 电池的光电转换效率 η 计算方法为

$$\eta = \frac{J_{\text{sc}} V_{\text{oc}} \text{FF}}{P_{\text{in}}}, \quad (5)$$

式中, P_{in} 为太阳总的辐照功率, 计算中采用 AM 1.5G 标准太阳光谱. V_{oc} 和 FF 分别为电池开路电压和填充因子, 根据已报道的实验结果, 其值分别取 1.12 V 和 80%^[28].

如图 5(c) 所示, 不同图案电池的 EQE 在 $\lambda < 700 \text{ nm}$ 的波段无明显区别. 而在 $\lambda > 750 \text{ nm}$ 的区域, 经金属图案调控的电池的响应效率要明显高于参照电池, 且圆环的表现整体最优, 这与图 5(a) 中的吸收光谱得到的结论一致. 参照电池的短路电流密度为 20.39 mA/cm^2 , 经三角、圆盘、四方、圆环调控后, 电流分别提升到了 21.46, 21.91, 22.48 和 22.72 mA/cm^2 . 综合图 2 和图 4 可以推断, 金属纳米图案的引入对近红外区域的光子产生了等离共振散射, 这种效应延长了光子在钙钛矿层中的

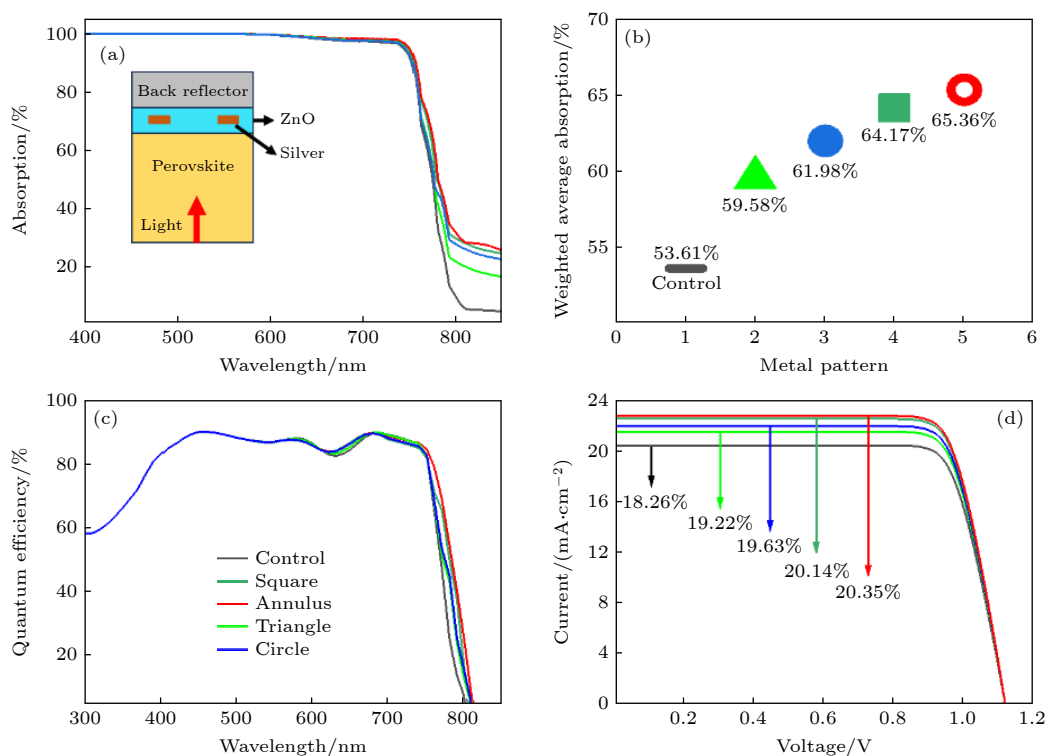


图 5 金属图案调控的钙钛矿电池的光电响应特性

Fig. 5. Photoelectric response characteristics of perovskite solar cells incorporating different shapes of metal patterns.

传播路径,从而增大其被吸收的效率和相应器件的光生电流密度.从这个角度看,共振峰的位置和散射强度是决定电池效率提升的根本因素.从表 1 可知,对比 4 种不同的金属图案,圆环具有最高的消光和散射,同时共振峰的也相对较优,这些因素导致圆环修饰的电池展现出最高的光生电流密度.图 5(d) 为不同电池的伏安特性曲线,参照电池的光电转换效率为 18.26%,经圆环优化后,电池效率最高达到了 20.35%,相对提高了 11.45%,这与已报道的基于 SPR 增强的钙钛矿电池的效率提升相当 [18–24].

4 总 结

本文通过 FDTD 和 RCWA,在纳米尺度上对不同金属图案的消光、散射、吸收等 SPR 特性进行了较为系统的探讨,并以此为基础提升了钙钛矿电池在近红外区域的光子响应效率.相比三维的金属纳米颗粒,二维的金属图案在水平面内的特征参数不受器件功能层厚度的限制,从而可以更灵活地调控 SPR 的响应波段、振动强度以及激元能量的消散方式.对于最优的金属圆环,其共振峰所对应的波长为 772 nm,相对吸收、散射和消光截面分

别为 0.54, 1.39 和 1.93.通过远场散射,这种结构能大幅提升钙钛矿在 700–850 nm 波段的光谱响应,从而使器件获得更高的光生电流密度和能量转换效率.本文的研究结果为钙钛矿电池在近红外区域的陷光设计提供了一条新的路径,同时为其他类似器件的 SPR 调控提供了一个“图谱化”的参考依据.

参考文献

- [1] Huang Z Q, Li L, Wu T Q, Xue T Y, Sun W, Pan Q, Wang H D, Xie H F, Chi J M, Han T, Hu X T, Su M, Chen Y W, Song Y L 2023 *Nat. Commun.* **14** 1204
- [2] Yao M L, Liao J X, Lu H F, Huang Q, Cui Y F 2024 *Acta Phys. Sin.* **8** 088801 (in Chinese) [姚美灵, 廖纪星, 逮好峰, 黄强, 崔艳峰 2024 物理学报 **8** 088801]
- [3] Zhu H, Teale S, Lintangpradipto M N, Mahesh S, Chen B, McGehee M D, Sargent E H, Bakr O M 2023 *Nat. Rev. Mater.* **8** 569
- [4] Raza H, Imran T, Gao Y, Azeem M, Younis M, Wang J N, Liu S W, Yang Z C, Liu Z H, Chen W 2024 *Energ. Environ. Sci.* **17** 1819
- [5] Green M A, Dunlop E D, Yoshita M, Kopidakis N, Bothe K, Siefer G, Hao X 2023 *Prog. Photovoltaics* **31** 651
- [6] The National Renewable Energy Laboratory (NREL) 2024 <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html/>
- [7] Cui X H, Xu Q J, Shi B, Hou F H, Zhao Y, Zhang X D 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 207401 (in Chinese) [崔兴华, 许巧静, 石标, 侯福华, 赵颖, 张晓丹 2020 物理学报 **69** 207401]

- [8] Park J, Kim J, Yun H, Paik M J, Noh E, Mun H J, Kim M G, Shin T J, Seok S I 2023 *Nature* **616** 724
- [9] Chen R, Liu S W, Xu X J, Ren F M, Zhou J, Tian X Y, Yang Z C, Guanz X Y, Liu Z H, Zhang S S, Zhang Y Q, Wu Y Z, Han L Y, Qi Y B, Chen W 2022 *Energ. Environ. Sci.* **15** 2567
- [10] Shen X Q, Lin X S, Peng Y, Zhang Y Q, Long F, Han Q F, Wang Y B, Han L Y 2024 *Nano-Micro Lett.* **16** 201
- [11] Zhang S F, Ye F, Wang X Y, Chen R, Zhang H D, Zhan L Q, Jiang X Y, Li Y W, Ji X Y, Liu S J, Yu M J, Yu F R, Zhang Y L, Wu R H, Liu Z H, Ning Z J, Neher D, Han L Y, Lin Y Z, Tian H, Chen W, Stolterfoht M, Zhang L J, Zhu W H, Wu Y Z 2023 *Science* **380** 404
- [12] Huang Y M, Wu Y Z, Xu X L, Qin F F, Zhang S H, An J K, Wang H J, Liu L 2022 *Chin. Phys. B* **31** 128802
- [13] Zhao S, Zhou H, Wang S Y, Han F, Jiang S H, Shen X Q 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 038801 (in Chinese) [赵颂, 周华, 王淑英, 韩非, 蒋斯涵, 沈向前 2022 物理学报 **71** 038801]
- [14] Berry F, Mermet Lyaudoz R, Cuevas Davila J M, Djemmah D A, Nguyen H S, Seassal C, Fourmond E, Chevalier C, Amara M, Drouard E 2022 *Adv. Energy Mater.* **12** 2200505
- [15] Moakhar S R, Gholipour S, Masudy-Panah S, Seza A, Mehdikhani A, Riahi-Noori N, Tafazoli S, Timasi N, Lim Y F, Saliba M 2020 *Adv. Sci.* **7** 1902448
- [16] Li Y F, Kou Z L, Feng J, Sun H B 2020 *Nanophotonics-Berlin* **9** 3111
- [17] Yan G D, Zhang Z H, Guo H, Chen J P, Jiang Q S, Cui Q N, Shi Z L, Xu C X 2023 *Chin. Phys. B* **32** 067302
- [18] Atwater H A, Polman A 2010 *Nat. Mater.* **9** 205
- [19] Ueno K, Oshikiri T, Sun Q, Shi X, Misawa H 2018 *Chem. Rev.* **118** 2955
- [20] Zhang W, Saliba M, Stranks S D, Sun Y, Shi X, Wiesner U, Snaith H J 2013 *Nano Lett.* **13** 4505
- [21] Saliba M, Zhang W, Burlakov V M, Stranks S D, Sun Y, Ball J M, Johnston M B, Goriely A, Wiesner U, Snaith H J 2015 *Adv. Funct. Mater.* **25** 5038
- [22] Yuan Z C, Wu Z W, Bai S, Xia Z H, Xu W D, Song T, Wu H H, Xu L H, Si J J, Jin Y Z, Sun B Q 2015 *Adv. Energy Mater.* **5** 1500038
- [23] Cui X, Chen Y H, Zhang M, Harn Y W, Qi J B, Gao L K, Wang Z L, Huang J S, Yang Y K, Lin Z Q 2020 *Energ. Environ. Sci.* **13** 1743
- [24] Yao K, Zhong H J, Liu Z L, Xiong M, Leng S F, Zhang J, Xu Y X, Wang W Y, Zhou L, Huang H T, Jen A K Y 2019 *Acs Nano* **13** 5397
- [25] Li F Z, Lo T W, Deng X, Li S Q, Fan Y L, Lin F R, Cheng Y H, Zhu Z L, Lei D Y, Jen A K Y 2022 *Adv. Energy Mater.* **12** 2200186
- [26] Yao K, Li S Q, Liu Z, Ying Y, Dvořák P, Fei L, Sikola T, Huang H T, Nordlander P, Jen A K Y, Lei D 2021 *Light-Sci. Appl.* **10** 219
- [27] Cuce E, Cuce P M, Karakas I H, Bali T 2017 *Energ. Convers. Manage.* **146** 205
- [28] Xu C Y, Hu W, Wang G, Niu L B, Elseman A M, Liao L P, Yao Y Q, Xu G B, Luo L, Liu D B, Zhou G D, Li P, Song Q L 2020 *ACS Nano* **14** 196

Optical enhancement of perovskite solar cells by metallic nano-patterns*

Han Fei¹⁾ Jiang Zhou¹⁾ Wang Chen¹⁾ Zhou Hua²⁾ Shen Xiang-Qian^{1)3)†}

1) (*Xinjiang Key Laboratory of Solid State Physics and Devices, School of Physical Science and Technology,*

Xinjiang University, Urumqi 830046, China)

2) (*School of Physics, Shandong University, Jinan 250100, China*)

3) (*State Key Laboratory of Metal Matrix Composites, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China*)

(Received 1 May 2024; revised manuscript received 9 June 2024)

Abstract

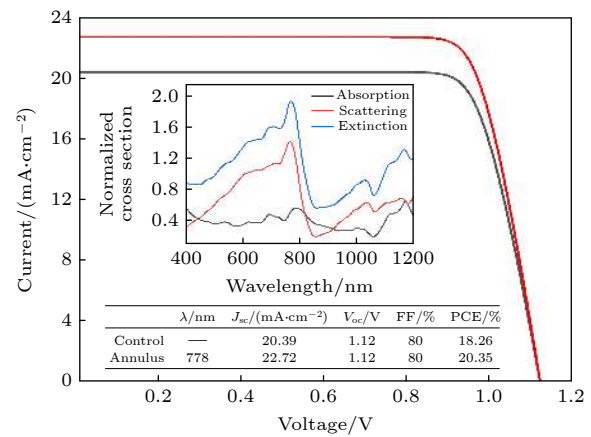
The integration of metallic nanoparticles (MNPs) with plasmonic effects is an alternative approach to managing photons and charge carriers, and is considered as a promising method of advancing solar cell technologies. Plasmonic-enhanced solar energy harvesting involves three mechanisms: hot-electron injection, light trapping, and modulation of energy flow direction through dipole-dipole coupling. It has been observed that these phenomena significantly improve the performance of silicon, gallium arsenide, dye-sensitized, and organic solar cells. However, for emerging perovskite solar cells, the light trapping effect, specifically, through

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12164047), the Natural Science Foundation of Xinjiang Uygur Autonomous Region of China (Grant No. 2022D01C20), and the Tianshan Innovation Team Program of Xinjiang Uygur Autonomous Region of China (Grant No. 2023D14001).

† Corresponding author. E-mail: sxqlyq@xju.edu.cn

the far-field scattering of MNPs, has been seldom reported. The anomalous phenomenon is primarily attributed to the size constraints imposed on MNP by the thickness of the functional layers in cell devices. According to the theory of localized surface plasmon resonance (SPR), the characteristic size of the MNP needs to be larger than 90 nm to achieve optimal photon scattering. Conversely, the charge transport layers such as NiO_x and SnO_2 in perovskite solar cells are usually very thin, with thickness ranging from a few nanometers to several tens of nanometers. Therefore, the community of perovskite solar cells still faces a great challenge in harvesting light through plasmonic scattering.

Comparing with MNPs, none of the shape, size, periodicity, and other characteristic parameters of two-dimensional metal patterns within the horizontal plane are not limited by the thickness of the device's functional layer, thus making it more flexible to regulate the SPR response band, vibration intensity, and becoming a method of dissipating plasmonic energy. In this work, based on the finite-difference time-domain (FDTD) method and rigorous coupled-wave analysis (RCWA), we systematically investigate the SPR spectra of different metal patterns. The results demonstrate that by optimizing characteristic parameters such as pattern shape, thickness, and periodicity, a significant SPR phenomenon can be observed in the near-infrared region, with scattering dominating extinction. For the optimal metal ring pattern, the SPR peak corresponds to a wavelength of 772 nm, with the cross-section of relative absorption, scattering, and extinction being 0.54, 1.39, and 1.93, respectively. The weighted average absorption of the perovskite response layer in a range of 700–850 nm increases from 53.61% to 65.36%. Correspondingly, the photocurrent density of the device increases from 20.39 to 22.72 mA/cm^2 , and the photoelectric conversion efficiency is relatively improved by 11.45%. This research provides a novel path for designing light trapping in perovskite solar cells in the near-infrared region, and serves as a “spectrum-based” reference for SPR regulation in other similar devices.



Keywords: metal nanopatterning, plasmon resonance, perovskite solar cells, conversion efficiency

PACS: 88.30.gg, 88.40.H-, 88.40.J-, 88.40.jj

DOI: 10.7498/aps.73.20240607

金属纳米图案对钙钛矿电池的光学增强

韩非 江舟 王晨 周华 沈向前

Optical enhancement of perovskite solar cells by metallic nano-patterns

Han Fei Jiang Zhou Wang Chen Zhou Hua Shen Xiang-Qian

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 168801 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20240607

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240607>

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

基于金属纳米球等离子增强的高效钙钛矿/硅电池设计

Design of high efficiency perovskite/silicon tandem solar cells based on plasmonic enhancement of metal nanosphere

物理学报. 2022, 71(3): 038801 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211585>

新型空间太阳能电池用的钙钛矿薄膜与器件的电子辐照效应

Effect of electron irradiation on perovskite films and devices for novel space solar cells

物理学报. 2024, 73(3): 036102 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231568>

钙钛矿太阳能电池中缺陷及其钝化策略研究进展

Progress of defect and defect passivation in perovskite solar cells

物理学报. 2022, 71(16): 166801 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220359>

BaTiO₃掺杂调控内建电场提升钙钛矿太阳能电池性能

Improvement of performance of perovskite solar cells through BaTiO₃ doping regulated built-in electric field

物理学报. 2024, 73(3): 038801 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231139>

甲脒碘化铅单晶基钙钛矿太阳能电池的研究

High performance perovskite solar cells synthesized by dissolving FAPbI₃ single crystal

物理学报. 2023, 72(1): 018801 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221461>

氧化锌纳米棒形貌控制及其在钙钛矿太阳能电池中作为电子传输层的应用

Morphology control of zinc oxide nanorods and its application as an electron transport layer in perovskite solar cells

物理学报. 2020, 69(17): 178101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200555>