

基于 CaF_2/W 多层膜人工双曲介质的近场热光伏器件

杜伟 尹格 马云贵

High-performance near-field thermophotovoltaic device with CaF_2/W multilayer hyperbolic metamaterial emitter

Du Wei Yin Ge Ma Yun-Gui

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 69, 204203 (2020) DOI: 10.7498/aps.69.20200892

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200892>

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

用于热光伏系统的近场辐射光谱控制表面结构

Surface structure for manipulating the near-field spectral radiative transfer of thermophotovoltaics

物理学报. 2018, 67(2): 024209 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20171531>

热光伏能量转换器件的热力学极限与优化性能预测

Thermodynamic limit and optimal performance prediction of thermophotovoltaic energy conversion devices

物理学报. 2020, 69(5): 057202 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191835>

压电材料双曲壳热弹耦合作用下的混沌运动

Chaotic motion of piezoelectric material hyperbolic shell under thermoelastic coupling

物理学报. 2019, 68(1): 010501 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181714>

含双曲超构材料的复合周期结构的带隙调控及应用

Band gap engineering and applications in compound periodic structure containing hyperbolic metamaterials

物理学报. 2020, 69(15): 154205 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200084>

二维极化激元学近场研究进展

Recent progress of near-field studies of two-dimensional polaritonics

物理学报. 2019, 68(11): 110701 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190341>

金属衬底上石墨烯的红外近场光学

Near-field infrared microscopy of graphene on metal substrate

物理学报. 2020, 69(2): 027803 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191598>

基于 CaF_2/W 多层膜人工双曲介质的 近场热光伏器件*

杜玮 尹格 马云贵†

(浙江大学光电科学与工程学院, 现代光学仪器国家重点实验室, 杭州 310012)

(2020 年 6 月 11 日收到; 2020 年 6 月 30 日收到修改稿)

基于近场热辐射的热光伏器件是一种极具应用前景的热电转换器件. 近场下由于倏逝波的隧穿作用, 可以获得远超黑体辐射的热流及热电功率, 此时辐射表面光子态密度是个关键因素. 本文提出了一种具有高表面态密度的 CaF_2/W 多层膜人工双曲介质作为辐射器, 可以针对有限温度热源获得高效热电转化效果. 采用禁带宽度为 0.17 eV 的铋化铜 p-n 结作为接收端, 在 200 K 温度差和 50 nm 近场间隙下, 理论上计算获得了超过 1 kW/m 的高发电功率, 热电转化效率在 11% 以上, 显著高于热电材料的能量转换效率. 与纯钨热源情形相比, 双曲介质具有更高的倏逝波态密度, 有助于显著增强辐射热流与能量利用率. 进一步研究发现, 当多层膜双曲介质厚度超过 140 nm 时, 基底的影响已经可以忽略, 这对器件的实际制作非常有益. 相对于纳米线阵列或自然双曲介质, 本文提出的多层膜结构在制作和带宽上具有明显优势, 研究结果为近场热光伏的发展起到了促进作用.

关键词: 近场辐射, 双曲超材料, 热光伏器件, 废热回收

PACS: 42.68.Ay, 72.80.Ey, 78.67.Pt

DOI: 10.7498/aps.69.20200892

1 引言

自工业革命后, 世界上的总能量消耗呈几何级数增长, 然而, 这其中只有不到 1% 是清洁和可再生能源, 到 2050 年, 预计世界总能量消耗为 25—30 TW^[1]. 能源的大量消耗也产生了大量的废热, 如果能用便携式设备将其加以回收利用产生电能, 将有极大的意义. 按照热源温度, 废热可以分为高温废热 ($> 900\text{ K}$)、中温废热 (约 500—900 K) 和低温废热 ($< 500\text{ K}$)^[2]. 目前, 技术上中高温废热资源回收利用相对比较成熟, 但由于低温废热的温度较低, 回收利用相对困难, 在工业和生活废热中低温废热能量远大于高温和中温废热, 所以低温废热的回收利用对经济和环境都具有深远意义^[2]. 热

电技术是固态回收低温废热利用技术的主要途径之一, 在换热的同时可以通过热电材料 Seebeck 效应进行全固态的热电转换, 但传统热电器件由于材料热电优值 (thermoelectric figure of merit, ZT) 难以取得显著突破, 导致其在回收低温废热时能量转化效率有限^[3,4]. 另一种固态回收技术是利用热光伏器件 (thermophotovoltaic devices), 热光伏器件通常由热发射体 (源) 和光伏二极管 (接收体) 组成, 可将物体辐射出来的热能通过光子作为载体和光伏效应转化为电能, 优点是功率密度大、安静、便携性好且一般无需维护, 适用于远程控制和作为便携性电源, 然而该技术仍存在热电转换效率低且低温下输出功率低的缺点, 对于该器件的设计, 使源发射的电磁波波长与接收体的最高效转化波长相匹配十分重要, 因为不能转换为载流子的那一

* 国家自然科学基金 (批准号: 61775195) 和浙江省自然科学基金 (批准号: LR15F050001, LZ17A040001) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yungui@zju.edu.cn

部分电磁能量的损失对热光伏器件的效率影响较大^[5,6].

为了有效提高热光伏器件转换功率和效率, Whale 和 Cravalho^[7] 提出了近场热光伏器件概念, 利用倏逝波来增强辐射功率. 当物体的间距与辐射主波长相当或者远小于辐射主波长时, 利用表面等离子激元或表面声子谐振激元模式可以极大增强倏逝波光子的近场隧穿效率与空间波谱范围, 获得远超普朗克极限的热辐射能量传输功率. 石墨烯、氮化硼等自然材料可以实现高表面态密度, 但是它们存在着难于制备或者窄带等不利因素^[8–11]. 与之对照, 人工超材料具有灵活设计的优势, 尤其是双曲各向异性介质也具有很高的界面光子态密度, 它的双曲色散特性支持自由空间中的倏逝波光子在其内部的自由传播, 其在近场热传递上具有很大的应用发展潜力^[12–14].

领域内对近场热光伏技术从基础理论与效率提高上已有一定的研究. 理论上, Park 等^[15] 提出的 p-n 结的热光伏器件模型将少数载流子的流动考虑在内, 为热光伏效率和功率计算作了更严谨的分析. 于海童等^[16] 结合涨落耗散定律的随机 FDTD 方法, 对 GaSb 表面光栅复杂结构参与的近场辐射传热进行严格计算. 在较低温热光伏器件的设计和实验测量方面, Zhao 等^[17] 提出使用基于近场等离子耦合的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 半导体热光子系统, 在 600 K 热源、300 K 冷端以及 10 nm 间隙等条件下, 热电转化效率为 9.8%, 输出功率为 9.6 W/cm², 但是该器件制作较困难且近场间隙过小. Fiorino 等^[18] 在近场热光伏的实验上首次获得突破, 测量得到 655 K 热源、60 nm 间隙条件下微米面积大小的热光伏器件输出功率, 比远场情况提高了 40 倍, 为间隙几十纳米范围的近场热光伏实验测量奠定了基础. 此外, 针对中高温热源 (1000 K, 1300 K) 的近场热光伏器件也被进一步改进^[19,20]. 这些设计大都基于自然材料辐射器, 利用人工结构性能参数上还有显著提升空间, 特别是针对近场应用, 探索一种易于制作的高效率人工热辐射体仍具有很大研究意义.

本文设计了一种基于 CaF_2/W 多层膜人工双曲介质结构的近场热光伏器件, 利用 CaF_2 的红外低损耗特性可以在远红外波段获得损耗可控的等效介电系数^[21], 这对增强近场耦合效率有重要帮助, 钨可保持器件高温稳定性^[15], 该结构也具有很

大的可制作性. CaF_2/W 多层膜双曲型人工介质结构在较宽的频率范围内呈现双曲色散特性, 具有高表面态密度, 支持自由空间中的倏逝波光子在其内部的传播, 高密度的倏逝波光子在近场间隙下的隧穿可以大幅提升辐射热流^[22,23], 增强辐射功率. 同时, 通过调节双曲介质的结构参数使辐射光子频率与 InSb 半导体带隙宽度相匹配, 可以进一步优化提高热电转换效率. 本文设计采用了三种辐射器结构, 分别为 GaF_2/W 多层膜双曲型人工介质材料 (hyperbolic metamaterial, HMM)、钨 (W) 以及以钨作为基底的 HMM 结构 (WHMM), 并以禁带宽度为 0.17 eV 的半导体锑化铟 (indium antimonide, InSb) 作为接收体^[24]. 为了探究 HMM 结构对辐射热流、器件功率和效率的提升作用以及实际应用中基底的存在对器件性能的影响, 分别将其与以 W 和 WHMM 为源的器件进行对比. 源和接收端的温度分别为 500 和 300 K, 近场间隙为 50 nm, HMM 结构参数由等效介质理论计算^[25–27], 基于波动电动力学理论和格林函数方法计算了近场热辐射热流大小^[28,29], 利用半导体扩散方程推导了热光伏器件的光电流谱^[30], 进一步计算得到该器件的功率和转换效率. 研究发现 HMM 结构能够大幅提升器件性能, 且当 HMM 结构超过 140 nm 时, 基底对器件的性能影响可以忽略. 本文设计的基于 CaF_2/W 多层膜人工双曲介质的近场热光伏器件在低温热源情况下具有较高热电功率和转换效率, 为近场热光伏器件的发展提供了一个思路.

2 p-n 结型热光伏器件理论

本文提出的热光伏器件如图 1 所示. 源的温度为 T_1 , 接收体为 p-n 结型半导体. 半导体分为 p 区与 n 区, 两个区域中间有耗尽层. 为简化模型, 假定整个接收体的温度均衡为 T_2 . 热光伏器件的源是由厚度为 $t_w = 5$ nm 的钨与厚度为 $t_{\text{CF}} = 30$ nm 的 CaF_2 交替放置所组成, 其中钨可保持器件高温稳定性, CaF_2 材料的低折射率和对辐射电磁波的低吸收率特性可有效降低能量损耗. 它们的相对厚度决定了复合材料的综合电磁学特性, 针对既定工作温度 ($T_1 = 500$ K), 当前比值对应最大计算热流. 在一维 (1D) 多层结构中, 满足间隙距离不小于超材料周期的条件时, 可不考虑局域效应, 使用准静态等效介质理论预测近场热辐射, 这种多层结

构的有效介电系数具体可计算为^[25–27]:

$$\varepsilon_{\perp} = (t_W \varepsilon_W + t_{CF} \varepsilon_{CF}) / (t_W + t_{CF}), \quad (1a)$$

$$\varepsilon_{//} = (t_W + t_{CF}) \varepsilon_W \varepsilon_{CF} / (t_W \varepsilon_{CF} + t_{CF} \varepsilon_W), \quad (1b)$$

其中, ε_{\perp} 是面内方向的介电系数, $\varepsilon_{//}$ 是垂直于面内方向的介电系数, ε_{CF} 是 CaF_2 的介电系数, 这里取 2^[21], ε_W 是钨的介电系数^[15]. 图 2(a) 给出了这种人工介电材料的介电系数谱. 对于 HMM 结构的介电常数张量, 在 HMM 中的色散关系满足

$$\frac{\beta^2}{\varepsilon_{\perp}} + \frac{k_z^2}{\varepsilon_{//}} = \frac{\omega^2}{c_0^2}. \quad (2)$$

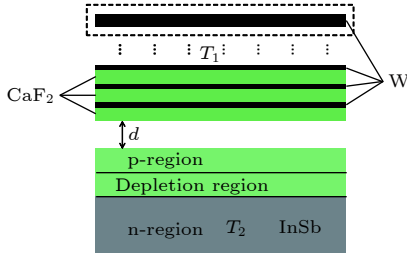


图 1 p-n 结型热光伏器件示意图

Fig. 1. Schematic of the near-field TPV system with a p-n junction.

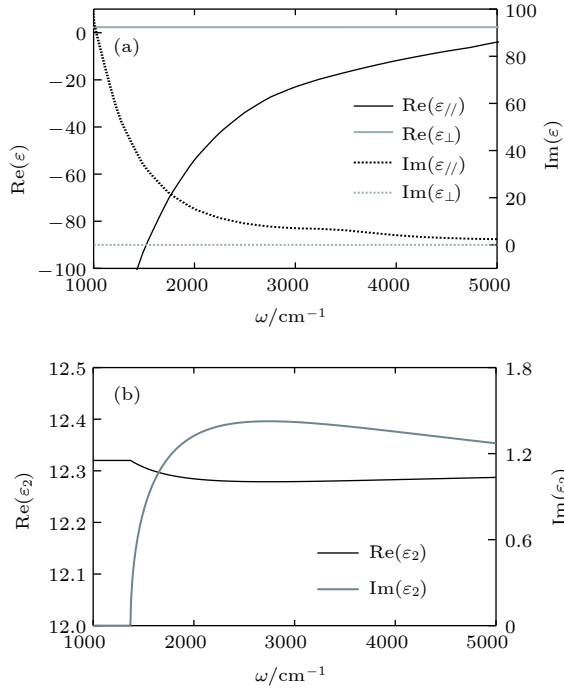


图 2 (a) 钨和 CaF_2 组成的人工介电材料的介电系数; (b) 半导体碲化铟的介电系数谱

Fig. 2. (a) Effective dielectric function of the HMM emitter; (b) permittivity of InSb.

对于 p 极化波, $\varepsilon_{\perp} \times \varepsilon_{//} < 0$, 即当波矢 $\beta > \omega/c_0$ 时仍可以传播, 此时波矢空间呈双曲面形. 在

频率取 $1000\text{--}5000\text{ cm}^{-1}$ 波数范围时, 满足双曲条件 $\varepsilon_{\perp} \times \varepsilon_{//} < 0$ 且 $\varepsilon_{//} < 0$, 此时 CaF_2/W 多层膜结构处于第二类双曲区间^[31]. 工作源温度设为 500 K , 由维恩位移定律可知此时辐射光子分布主频率为 1735.3 cm^{-1} 波数, 与双曲区间带频率可以较好匹配. 在此基础上, 减小 (增加) 多层膜周期会造成色散关系曲线蓝 (红) 移, 它会降低工作频率处热光子的近场隧穿效率, 因为双曲介质的表面态密度在附近具有最大值.

接收体采用窄禁带半导体 InSb 的介质模型, 其禁带宽度 E_g 为 0.17 eV , 可在相对较低的温度下工作, 在室温下的介电系数表示为^[24]

$$\varepsilon_2(\omega) = \left(n + i \frac{\alpha(\omega)}{2k_0} \right)^2, \quad (3)$$

其中, $k_0 = \omega/c$ 是真空中波数, $n = 3.4$ 是介质折射率. 当频率 $\omega > \omega_g$ 时, $\alpha(\omega) = 0.7 \times 10^6 \text{ m}^{-1} \times \sqrt{(\omega - \omega_g)/\omega_g}$; 当 $\omega < \omega_g$ 时, $\alpha(\omega) = 0$, 表明半导体对此频段的光子没有吸收作用, $\omega_g = 2.583 \times 10^{14} \text{ rad} \cdot \text{s}^{-1}$ 是禁带宽度 E_g 对应的频率. 图 2(b) 给出了 InSb 的介电系数谱. 在计算中假定半导体的 p 区、n 区与中间的耗尽层的介电系数都由 (3) 式来决定^[32].

2.1 近场热辐射传输模型

针对近场辐射热流的计算, 本文采用经典的基于电动力学理论以及格林函数方法. 热源与接收体温度分别为 T_1 和 T_2 , 间距为 d , 此时两无限大平板间的近场热辐射流 h (即单位面积上的坡印廷能流, 单位 W/m^2), 表示从辐射器辐射到接收端的总热流大小, 由下式给出^[28,29]:

$$\begin{aligned} h(T_1, T_2, d) &= \int_0^\infty \frac{d\omega}{4\pi^2} [\Theta(\omega, T_1) - \Theta(\omega, T_2)] \\ &\quad \times \int_0^\infty dk k [\tau_s(\omega, k) + \tau_p(\omega, k)] \\ &= \int_0^\infty \frac{d\omega}{4\pi^2} [\Theta(\omega, T_1) - \Theta(\omega, T_2)] H_\omega(\omega, d) \\ &= \int_0^\infty d\omega h_\omega(\omega, d), \end{aligned} \quad (4)$$

其中 $\Theta(\omega, T) = \hbar\omega / [\exp(\hbar\omega / (k_B T)) - 1]$ 是光子能量分布谱, τ_p 和 τ_s 是 p 极化波和 s 极化波的透射几率. $H_\omega(\omega, d)$ 为热传输谱 (单位 $\text{W}/(\text{m}^2 \cdot \text{rads}^{-1})$), 即不同频率透射光子的 τ_p 和 τ_s 对于波数 k 的积分叠加

结果, $h_\omega(\omega, d)$ 为热能传输谱 (单位 $\text{W}/(\text{m}^2 \cdot \text{rads}^{-1})$) 表示单位频率单位面积上的辐射热流, 数学上是 $H_\omega(\omega, d)$ 和光子能量分布谱 $\Theta(\omega, T)$ 的乘积. 人工结构的作用是调控热光子的近场透射几率, 即 τ_p 和 τ_s 的大小. 相对于石墨烯等具有红外表面等离子激元响应的自然材料^[8,11], 双曲材料的优势是在空间波谱上具有超宽带响应能力, 且其频率波段可以通过结构设计进行调解, 以适应不同的实际工作温度需求.

2.2 热光伏器件功率和效率模型

由 InSb 接收的辐射热能在 InSb 中有损耗时会随着传播距离而衰减, InSb 内的热能传输分布谱 $hz(z, \omega)$ (单位 $\text{W}/(\text{m}^2 \cdot \text{rads}^{-1})$) 是指在接收端中热能传输谱随位置 z 的变化, 由下式表示^[24]:

$$hz(z, \omega) = [\Theta(\omega, T_1) - \Theta(\omega, T_2)] \int_0^\infty \frac{dk k}{4\pi^2} \times [\tau_s(\omega, k) + \tau_p(\omega, k)] \exp[-2\text{Im}(k_2^z z)], \quad (5)$$

其中 $\exp[-2\text{Im}(k_2^z z)]$ 表示接收的光子在 InSb 内部的衰减因子^[33]. 当 $z = 0$ 时, (5) 式表示 p-n 结表面的热传输, 即热能传输谱, 是由 p-n 结吸收的总热能谱. 由于热流在接收体内的分布梯度, 使得少数载流子分布产生浓度梯度从而发生迁移运动产生光电流. 在半导体 InSb 内, 只有频率大于 ω_g 的光子可以在 p-n 结内产生电子-空穴对, 并向着相反方向移动, 假设大于 ω_g 的光子均可以产生电子-空穴对, 即内量子效率按 100% 计算. p 区和 n 区的少数载流子的运动由下面的扩散方程来描述^[30]:

$$D_e \frac{d^2 (n_e(z, \omega) - n_e^0)}{dz^2} - \frac{n_e(z, \omega) - n_e^0}{\tau_e} + gz(z, \omega) = 0, \quad (6a)$$

$$D_h \frac{d^2 (n_h(z, \omega) - n_h^0)}{dz^2} - \frac{n_h(z, \omega) - n_h^0}{\tau_h} + gz(z, \omega) = 0, \quad (6b)$$

其中 $D_{e(h)}$ 是电子 (空穴) 扩散系数, $n_{e(h)}$ 是少数载流子浓度, $n_{e(h)}^0$ 是稳态载流子浓度, $\tau_{e(h)}$ 是电子 (空穴) 的弛豫时间. $gz(z, \omega)$ 是接收辐射热流后电子-空穴对的产生率, 可以表示为

$$gz(z, \omega) = -\frac{dh_z(z, \omega)}{dz} \cdot \frac{1}{\hbar\omega}. \quad (7)$$

结合 p 区和 n 区的边界方程, 采用有限差分法求解扩散和边界方程得到 p 区和 n 区的载流子分布, 从而得到 p 区、n 区和耗尽层的电流密度,

p 区和 n 区的电流密度可由少数载流子的浓度梯度表示:

$$j_e(\omega) = eD_e \left. \frac{dn_e(z, \omega)}{dz} \right|_{z=a}, \quad (8a)$$

$$j_h(\omega) = -eD_h \left. \frac{dn_h(z, \omega)}{dz} \right|_{z=b}. \quad (8b)$$

在耗尽层中的电流密度可以认为是这一部分所吸收的热流全部转化为光电流:

$$j_{dp}(\omega) = e \frac{hz(a, \omega) - hz(b, \omega)}{\hbar\omega}. \quad (9)$$

由于 $j_e(\omega)$, $j_h(\omega)$ 和 $j_{dp}(\omega)$ 的方向均为 n 区指向 p 区, 总光电流谱 $J_{dt}(\omega)$ 是这三者之和 $|J_{dt}(\omega)| = |j_e(\omega)| + |j_h(\omega)| + |j_{dp}(\omega)|$, 光伏器件产生的总光电流是在禁带频率以上的光电流谱积分, 即 $|J_t| = \int_{\omega_g}^\infty |J_{dt}(\omega)| d\omega$.

热光伏器件的暗电流 J_0 可表示为^[34]

$$J_0 = e \left(\frac{n_i^2 D_h}{N_D \sqrt{\tau_h}} + \frac{n_i^2 D_e}{N_A \sqrt{\tau_e}} \right), \quad (10)$$

开路电压 V_{oc} 可以表示为^[35]

$$V_{oc} = (k_B T / e) \ln(J_t / J_0 + 1), \quad (11)$$

其中 n_i 是 p-n 结的本征载流子浓度, N_A 是受主浓度, N_D 是施主浓度, InSb 的相关参数如表 1 所列. 热光伏器件的最大输出功率由下式给出^[34]:

$$P_E = FF J_t V_{oc}, \quad (12)$$

其中 FF 是填充因子:

$$FF = \left[1 - 1 / \ln \left(\frac{J_t}{J_0} \right) \right] \times \left[1 - \ln \left(\ln \left(\frac{J_t}{J_0} \right) \right) / \ln \left(\frac{J_t}{J_0} \right) \right]. \quad (13)$$

最后得到热光伏器件的转换效率为

$$\eta = P_E / h. \quad (14)$$

该热光伏模型中 p-n 结所使用的 InSb 半导体材料参数在表 1 中列出.

表 1 InSb 半导体的参数^[24]
Table 1. Electric parameters of InSb^[24].

参数	p 区	n 区
载流子浓度/ cm^{-3}	$N_A = 10^{19}$	$N_D = 10^{19}$
扩散系数/ $\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	$D_e = 186$	$D_h = 5.21$
弛豫时间/ns	$\tau_e = 1.45$	$\tau_h = 1.81$
复合速率/ $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	$u_p = 104$	$u_n = 0$
区域长度/ μm	$L_p = 0.4$	$L_n = 10$

3 仿真结果与讨论

本文采用 HMM, W, WHMM 三种源, 将以 HMM 与 W 为源的器件进行对比, 探究 HMM 结构对热光伏器件性能的提升作用, WHMM 作为实际应用中的源与 HMM 理想源进行对比, 分析实际应用中基底的存在对 HMM 器件的影响. 双曲型人工介质结构的周期小于源与接收体的间距 50 nm, 故其介电常数可以使用等效介质理论计算. 辐射器温度取值 500 K, 研究低温时该器件的性能.

图 3(a)—图 3(c) 依次表示源为 W, WHMM, HMM 结构的热光伏器件的 p 极化波透射几率 τ_p 分布. 当使用钨作为源时, 低频下钨发射率较低, τ_p 值小; 频率高到一定程度, 钨变成一个良好发射体, τ_p 值变大, 然而对于源的温度较低 ($T_1 = 500$ K) 的情形, 光子分布谱高频部分的贡献已经非常小. 对于以钨作基底的 WHMM 结构, CaF_2/W 多层膜结构厚度取值 140 nm, 透射几率 τ_p 分布由图 3(b) 给出, 由于该结构在较宽的频率范围内呈现双曲色散特性, 支持自由空间中的倏逝波传播, 图 3(b) 中真空色散关系的光锥线 (白色虚线) 下有一条离散高阶模式延伸到较宽的频率范围. HMM 结构中 τ_p 分布如图 3(c) 所示, 由于 HMM 结构厚度使电

磁波无法穿透, 所有阶双曲波导模式连续且合并出现一条宽度明显增加的亮线. 图 3(d) 是这三种结构在间距 $d = 50$ nm 时的热传输谱 H_ω , 与 τ_p 的分布图相符合, 以 HMM 与 W 为源相对比, 热传输谱有较大提升, HMM 与实际模型 WHMM 相比, 在低频时差别不大, 高频时有提升作用, 主要是由于高频波段时色散关系由双曲型逐渐变为椭圆型, 此时电磁波在介质中有更深的穿透深度, 基底的屏蔽效应表现更为明显.

将源的温度设置为 500 K, 受光子能量分布谱 $\Theta(\omega, T)$ 的影响, 热能传输谱 h_ω 与图 3(d) 中热传输谱 H_ω 的分布有了较大的差别, h_ω 高频部分的幅值大幅降低, 三种热光伏器件的热能传输谱 h_ω 分布如图 4(a) 所示. 图 4(b)—图 4(d) 是三种不同源下的热流传输谱在 p 区的分布 $hz(\omega, z)$, 图中虚线表示 InSb 禁带宽度的对应频率 ω_g . 当 $\omega < \omega_g$ 时, InSb 的介电系数虚部为 0, 对这个频率范围内的光子没有吸收作用, 所以 hz 不会衰减, 然而实际情况中一部分光子会在接收端被消耗转化为热能影响器件性能, 故可在接收端使用金属背板反射这部分光子^[36]. 当频率大于 ω_g 时, hz 会随着在接收端深度 z 的增加而衰减, 由 (6a) 式和 (7) 式可知, 此时会产生光生载流子.

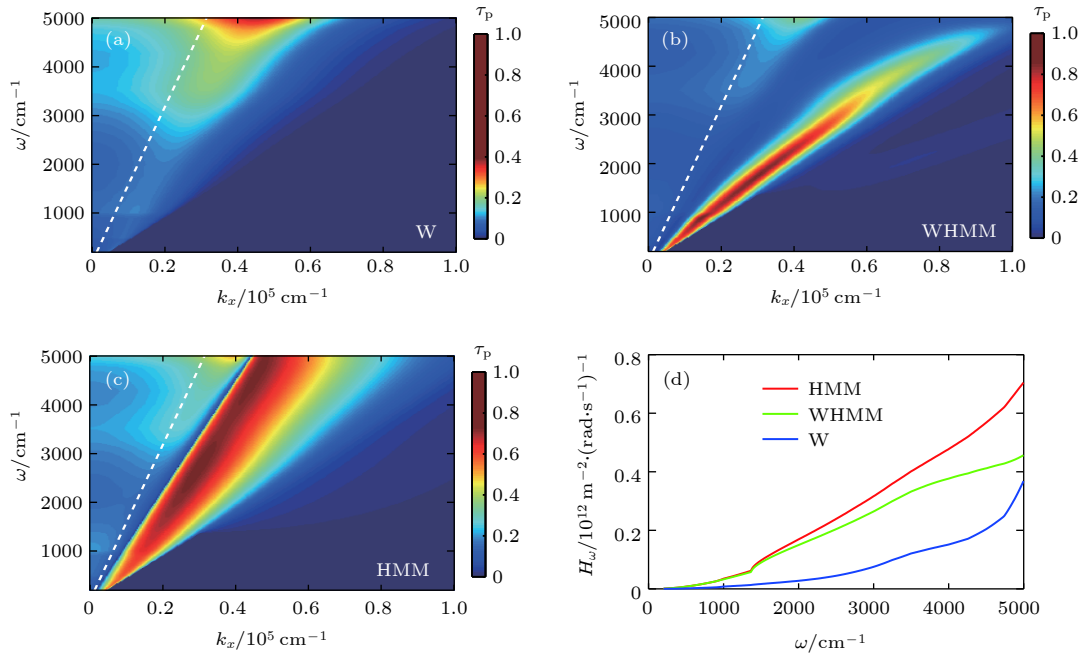


图 3 距离为 50 nm 时的透射几率 τ_p 的分布 (a), (b), (c) 对应的源的结构分别是 W, WHMM, HMM 时的情形; (d) 间距为 50 nm 时的热传输谱

Fig. 3. p-polarization transmission possibility $\tau_p(\omega, k_x)$ with the emitter (a) W, (b) WHMM, (c) HMM; (d) thermal radiation spectrum.

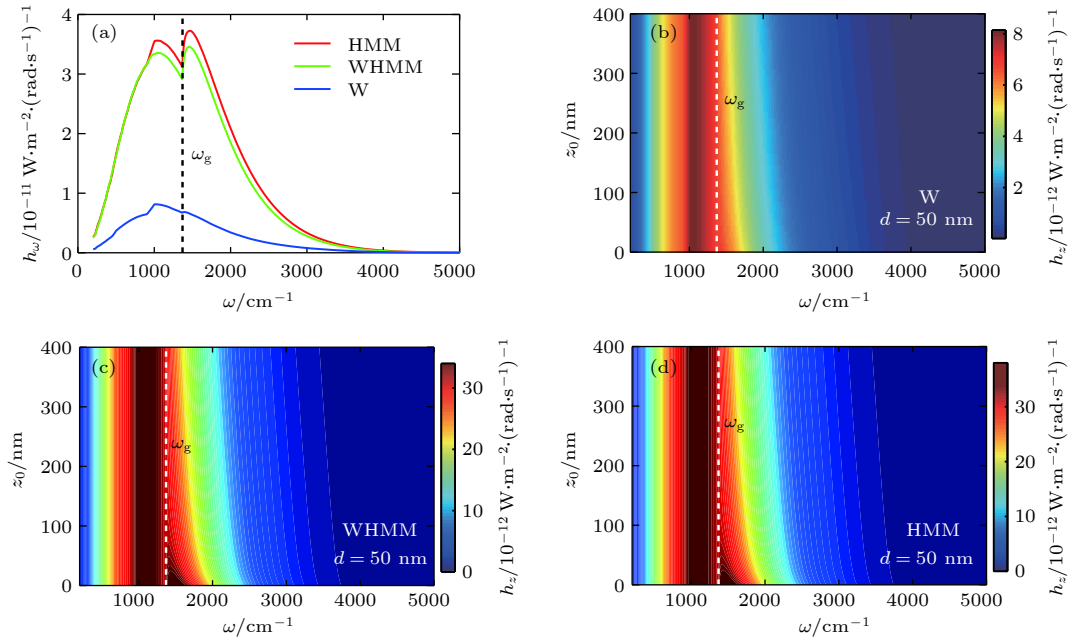


图 4 (a) 不同源结构下热传输谱 h_ω 的分布; (b), (c) 和 (d) 分别是在 p-n 结内的 p 区区域的热能分布 $h_z(z, \omega)$, 其中源的结构分别是 (b) W, (c) WHMM, (d) HMM

Fig. 4. (a) Heat flux density spectrum with the emitter of W, WHMM and HMM; and heat flux density in the p-region with the emitter of (b) W, (c) WHMM, and (d) HMM.

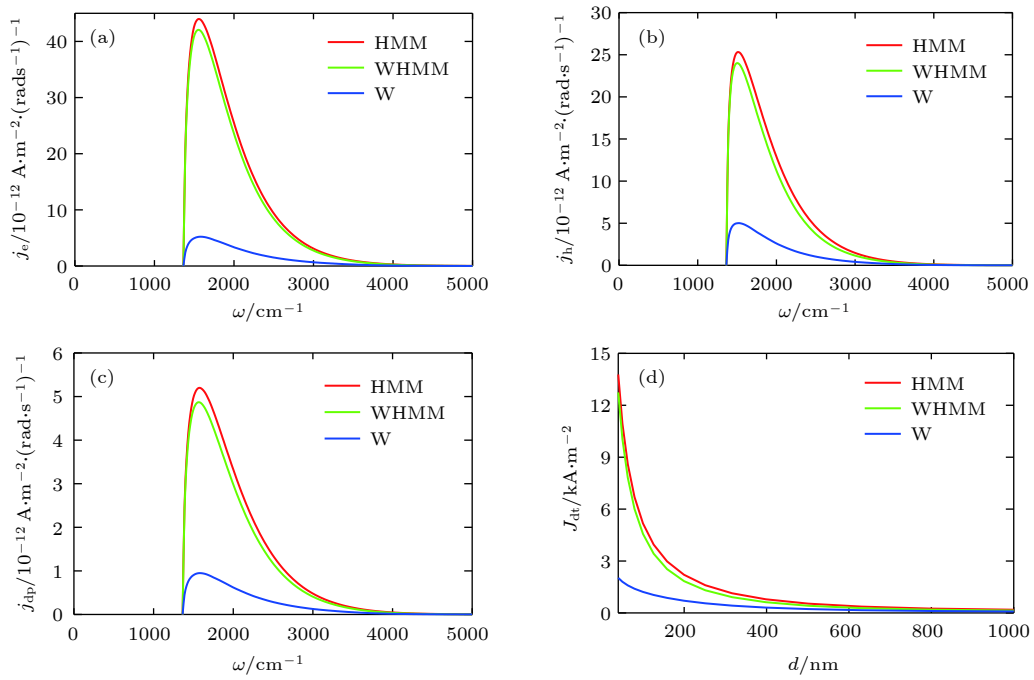


图 5 间距为 $d = 50 \text{ nm}$ 时的电流谱 (a) p 区 $j_e(\omega)$; (b) n 区 $j_h(\omega)$; (c) 耗尽层内 $j_{dp}(\omega)$; (d) p-n 结内的总电流大小 j_t 随间距的变化

Fig. 5. Current density spectrum in the (a) p-region, (b) n-region, and (c) depletion region; (d) total current with respect to the vacuum gap width.

当 $\omega < \omega_g$ 时, 接收端中的热传输分布谱 $h_z(z, \omega)$ 不会随其深度 z 变化, 没有光生载流子的产生, 光生电流值为 0. p 区、n 区和耗尽层三个区的厚度分别为 400 nm , $10 \mu\text{m}$ 和 100 nm . 图 5(a)—图 5(c)

分别给出了 p 区、n 区和耗尽层内的电流谱, 在所设定的源温度 500 K 下, ω_g 附近有最大的光生电流密度, p 区的光生电流 j_e 最大, 这是因为电子的迁移率远大于空穴 [24]. 图 5(d) 是光生电流随间隙

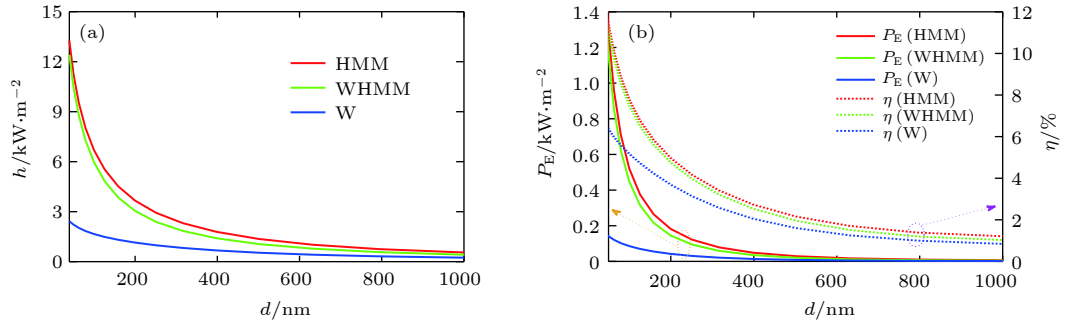


图 6 (a) 不同结构作为源时的辐射热流 h 随间距的变化; (b) 热光伏器件的总输出功率 P_E 与热能转换效率 η 随间距的变化
Fig. 6. (a) Total heat flux density and (b) net power and conversion efficiency of the proposed system as a function of the vacuum gap width.

d 的变化, 可以看到, HMM 结构与 W 结构相比在 50 nm 间隙下可以使器件光生电流值有 5 倍的提高.

这三种源结构下的总辐射热流与间隙的关系如图 6(a) 所示. 可以看到, HMM 结构相比 W 结构, 器件的辐射热流有大幅度的提高. 对比图 6(a) 和图 5(d), 光生电流近似与热辐射功率呈正比关系, 这表明光生电流大小主要由热辐射传输功率决定. 由 (12) 式和 (14) 式可以得到这三种热光伏器件的热电功率 P_E 和转换效率 η 随间隙 d 的变化分别如图 6(b) 中的实线和虚线所示, P_E 和 η 随 d 的增加而减小, 在 50 nm 时, 使用纯钨热源的器件功率为 141.4 W/m^2 , 转换效率为 6.36%, 使用 HMM 结构分别提高了 8 倍和 0.78 倍, 功率可达 1.2768 kW/m^2 , 效率可达 11.35%, 与纯钨热源情形相比, 双曲介质具有更高的倏逝波态密度, 有助于显著增强辐射热流与能量利用率; 实际源 WHMM 模型与理想源 HMM 模型器件性能差别不大, 这表明当多层膜双曲介质厚度超过 140 nm 时, 基底的影响已经可以忽略, 这对器件的实际制作非常有益.

4 结 论

本文提出了一种能够大幅提升输出功率和热电转换效率, 且适用于低温热源的热光伏器件, 利用 GaF_2/W 多层膜人工双曲介质结构作为源, 窄禁带半导体 InSb 作为接收体, 探究了其在热源 500 K 且接收端室温 300 K 时的辐射热流、输出功率和转换效率, 与以钨作为源的器件相比, 发现该结构大幅提高了近场热光伏器件的输出功率和热电效率, 并且在实际情况即有基底时的模型中仍有良好性能表现, 为近场热光伏器件的应用起到了促进作用.

根据当前设计, 提高热源温度 T_1 , 光子能量分布中高频光子比重增加, h_ω 的峰值将向高频方向移动, 将会进一步提升热光伏器件的热电功率和转换效率. 研究中假设了 InSb 半导体具有 100% 内量子效率, 后续研究为了接近实际情形, 需要将光子在半导体的损耗和复合过程考虑进来. 此外, 低于接收端禁带宽度对应频率 ω_g 的光子不能被接收端吸收, 而大于频率 ω_g 的光子在激发电子-空穴对后有能量剩余, 所以如何进一步改善辐射源结构, 有效操控系统中的辐射热流光谱分布有待进一步研究.

参考文献

- [1] Hoeffert M I, Caldeira K, Jain A K, Haites E F, Harvey L D D, Potter S D, Schlesinger M E, Schneider S H, Watts R G, Wigley T M L, Wuebbles D J 1998 *Nature* **395** 881
- [2] BCS, Inc 2008 *Waste Heat Recovery. Technology and Opportunities in U.S. Industry* (Hinsdale: BCS) pp6–19
- [3] Liu W S, Jie Q, Kim H S, Ren Z F 2015 *Acta Mater.* **87** 357
- [4] Alam H, Ramakrishna S 2013 *Nano Energy* **2** 190
- [5] Chan W R, Bernel P, Pilawa-Podgurski R C N, Marton C H, Jensen K F, Senkevich J J, Joannopoulos J D, Soljacic M, Celanovic I 2013 *PNAS* **110** 5309
- [6] Bierman D M, Lenert A, Chan W R, Bhatia B, Celanovic I, Soljacic M, Wang E N 2016 *Nat. Energy* **1** 16068
- [7] Whale M D, Cravalho E G 2002 *IEEE Trans. Energy Convers.* **17** 130
- [8] Yang J, Du W, Su Y, Fu Y, Gong S, He S, Ma Y 2018 *Nat. Commun.* **9** 4033
- [9] Thomas N H, Sherrott M C, Broulliet J, Atwater H A, Minnich A J 2019 *Nano Lett.* **19** 3898
- [10] Zhao B, Guizal B, Zhang Z M, Fan S, Antezza M 2017 *Phys. Rev. B* **95** 245437
- [11] Zwol P J, Thiele S, Berger C, Heer W A, Chevrier J 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 264301
- [12] Liu B, Shen S 2013 *Phys. Rev. B* **87** 115403
- [13] Jin S, Lim M, Lee S S, Lee B J 2016 *Opt. Express* **24** A635
- [14] Shi J, Liu B, Li P, Ng L Y, Shen S 2015 *Nano Lett.* **15** 1217
- [15] Park K, Basu S, King W P, Zhang Z M 2008 *J. Quant.*

- Spectrosc. Radiat. Transfer* **109** 305
- [16] Yu H T, Liu D, Yang Z, Duan Y Y 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 024209 (in Chinese) [于海童, 刘东, 杨震, 段远源 2018 物理学报 **67** 024209]
- [17] Zhao B, Santhanam P, Chen K, Buddhiraju S, Fan S 2018 *Nano Lett.* **18** 5224
- [18] Fiorino A, Zhu L, Thompson D, Mittapally R, Reddy P, Meyhofer E 2018 *Nat. Nanotechnol.* **13** 806
- [19] Papadakis G T, Buddhiraju S, Zhao Z, Zhao B, Fan S 2020 *Nano Lett.* **20** 1654
- [20] Datas A, Vaillon R 2019 *Appl. Phys. Lett.* **114** 133501
- [21] Malitson I H 1963 *Appl. Opt.* **2** 1103
- [22] Liu X L, Zhang R Z, Zhang Z M 2014 *Int. J. Heat Mass Transfer* **73** 389
- [23] Biehs S A, Tschikin M, Messina R, Ben-Abdallah P 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102** 131106
- [24] Lim M K, Jin S K, Lee S S, Lee B J 2015 *Opt. Express* **23** A240
- [25] Poddubny A, Iorsh I, Belov P, Kivshar Y 2013 *Nat. Photonics* **7** 958
- [26] Liu X L, Bright T J, Zhang Z M 2014 *J. Heat Transfer* **136** 092703
- [27] Zhang R Z, Zhang Z M 2017 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **197** 132
- [28] Volokitin A I, Persson B N J 2007 *Rev. Mod. Phys.* **79** 1291
- [29] Volokitin A I, Persson B N J 1999 *J. Phys. Condens. Matter* **11** 345
- [30] Vaillon R, Robin L, Muresan C, Ménézo C 2006 *Int. J. Heat Mass Transfer* **49** 4454
- [31] Guo Y, Newman W, Cortes C L, Jacob Z 2012 *ADOP* **2012** 1
- [32] Francoeur M, Vaillon R, Mengüç M P 2011 *IEEE Trans. Energy Convers.* **26** 686
- [33] Lang S, Tschikin M, Biehs S A, Petrov A Y, Eich M 2014 *Appl. Phys. Lett.* **104** 121903
- [34] Laroche M, Carminati R, Greffet J 2006 *J. Appl. Phys.* **100** 063704
- [35] Baldasaro P F, Raynolds J E, Charache G W, DePoy D M, Ballinger C T, Donovan T, Borrego J M 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 3319
- [36] Bright T J, Wang L P, Zhang Z M 2014 *J. Heat Transfer* **136** 062701

High-performance near-field thermophotovoltaic device with CaF_2/W multilayer hyperbolic metamaterial emitter^{*}

Du Wei Yin Ge Ma Yun-Gui[†]

(State Key Laboratory of Modern Optical Instrumentation, College of Optical Science
and Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310012, China)

(Received 11 June 2020; revised manuscript received 30 June 2020)

Abstract

Thermophotovoltaic (TPV) device is a thermoelectric conversion method with great application prospects. In the far-field regime, the thermoelectric power is usually small due to the Planck blackbody radiation limit, but can be substantially enhanced in the near-field regime where evanescent waves will participate in the heat transfer by tunneling. In this aspect, the surface optical density of state is a key factor that will determine the transfer conversion of thermal photons. Plasmonic or phononic resonance materials have been discussed in the literature to acquire large heat flux. Besides, metamaterial is another way to pursue the design freedoms for the same purpose. In this work, we propose a $[\text{CaF}_2/\text{W}]_n$ multilayer based infrared hyperbolic metamaterial (HMM) with high surface density of states as an emitter of a high-performance TPV cell made of an InSb p-n junction (energy bandgap = 0.17 eV). The effective medium theory (EMT) is utilized to describe the electromagnetic behavior of the HMM. The near-field heat flux is calculated based on electrodynamic wave theory and Green's function method, and the photocurrent of thermophotovoltaic device is derived using diffusion equation for semiconductor. For comparison, we design three different radiators, i.e. tungsten film (W), $[\text{GaF}_2/\text{W}]_n$ multilayer hyperbolic metamaterial (HMM), and tungsten-grounded HMM (WHMM). Compared with the pure tungsten radiator, the artificial structure exhibits the hyperbolic dispersion characteristic in a wide frequency range, which gives rise to a higher local density of states, in particular in the hyperbolic-to-elliptic spectral transition region. As a result, the radiation power and the energy conversion efficiency are greatly enhanced, which are more easily realized by a matched emission band achieved by the structural design. We find that the thermophotovoltaic device with WHMM radiator has a similar power and conversion efficiency to that with the HMM radiator. The influence of the substrate can be ignored when the hyperbolic metamaterial is thicker than 140 nm, very beneficial to the actual fabrication of the device. By our system, with multilayer hyperbolic metamaterial (HMM) radiator, a high electric power $>1 \text{ W/m}^2$ and a conversion efficiency about 11% can be obtained at a bias temperature of 200 K and a 100 nm vacuum gap. Compared with nanowire arrays or natural hyperbolic material, the multilayer structure proposed in this paper has obvious advantages in bandwidth and manufacturing and may find important applications in near-field thermophotovoltaic device and other relevant areas.

Keywords: near-field thermal radiation, hyperbolic metamaterial, thermophotovoltaic cell, heat recycling

PACS: 42.68.Ay, 72.80.Ey, 78.67.Pt

DOI: 10.7498/aps.69.20200892

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61775195) and the Natural Science Foundation of Zhejiang Province, China (Grant Nos. LR15F050001, LZ17A040001).

[†] Corresponding author. E-mail: yungui@zju.edu.cn