

纳米表面二维周期半圆凹槽增强硅薄膜太阳能电池光吸收

刘震 王玉晓[†] 宋瑛林[‡] 张学如

(哈尔滨工业大学物理系, 哈尔滨 150001)

(2013年4月7日收到; 2013年5月5日收到修改稿)

利用时域有限差分方法, 研究硅薄膜上下表面周期半圆凹槽结构对于太阳光吸收的增强效应. 研究发现这种结构可以实现太阳光宽波段的光吸收增强, 通过调节 SiO_2 表面减反层厚度和凹槽半径长度来实现薄膜太阳能电池最大的光吸收, 并实现了波长在 300—1000 nm 范围的太阳光吸收总能量比没有这种结构下硅薄膜光吸收提高了约 117%.

关键词: 硅薄膜, 半圆凹槽, 吸收增强

PACS: 78.67.-n, 88.40.jj

DOI: 10.7498/aps.62.167801

1 引言

传统的硅基太阳能电池面临的两大突出问题是提高太阳能电池的光伏转换效率和降低太阳能电池的成本, 开发研制硅薄膜太阳能电池以减少硅片原材料的消耗来降低硅太阳能电池的成本成为热点领域. 传统的硅基太阳能电池的硅层厚度一般在 180—300 μm , 而一般的硅薄膜太阳能电池的厚度大约几微米, 很大程度地降低了硅原料带来的成本. 并且硅薄膜的厚度要小于载流子的扩散长度, 这一点更有利于光激发的电子空穴对在复合之前的采集, 有利于光伏转换. 但是降低硅活化层的厚度直接导致了光在硅层中的有效传播长度的减小, 从而大大降低了硅活化层的光吸收和光伏转变效率.

目前提高薄膜太阳能电池的光电转换一方面在于改善硅薄膜材料制备工艺和光电性能, 已经有大量的研究和文献报道^[1-5], 另一方面是对薄膜表面的处理. 最新研究发现, 薄膜太阳能电池的表面纳米微结构可以有效增强薄膜太阳能电池的光吸收, 实现光伏转换效率的提高. Atwater 和 Polman^[6]

提出金属等离子体提高太阳能电池光伏转换的三种方式. Pala 等^[7]通过在 Si 基底上 SiO_2 减反层上表面设计 Ag 一维亚波长光栅结构, 使太阳能电池短路电流提高了 43%. Spinelli 等^[8]仿真计算了通过在 Si 基底上的 Si_3N_4 减反层上设计一层周期 Ag 纳米颗粒, 使得在 300—1100 nm 波段的光吸收相对于无纳米颗粒的情况下提高了 50%. Zanotto 等^[9]通过研究计算 Si 表面一维亚波长光栅结构减反层结构可以增大薄膜太阳能电池短路电流. 诸多前沿的研究工作都从理论和实验上寻找最优的纳米微结构来提高太阳能电池的转换效率^[10-19].

本文从亚波长光栅减反和导膜共振原理出发, 提出了一种二维表面半圆凹槽光栅结构. 理论分析表明: 这种二维表面凹槽周期结构可有效降低阳光表面的反射系数, 特别是通过调节半圆形凹槽的半径, 可改变表面反射系数. 目前, 尚未发现有此种结构提出. 考虑到太阳光是自然偏振, 进一步研究发现了这种结构下对光的吸收几乎不受光偏振角度的影响, 最终实现二维表面凹槽周期结构对阳光吸收有效增强, 与实际应用较为接近.

[†] 通讯作者. E-mail: wangyx@hit.edu.cn

[‡] 通讯作者. E-mail: ylsong@hit.edu.cn

2 数值模拟结构模型和理论

本文在厚度 $d = 0.5 \mu\text{m}$ 硅薄膜设计二维周期半圆形凹槽光栅结构, 然后在硅薄膜上表面加了一层 SiO_2 钝化层, 如图 1(a) 所示, 形成仿真的薄膜太阳能电池单元. 凹槽光栅以 SiO_2 填充, 周期 P 为 $0.5 \mu\text{m}$, 凹面是半径为 r 的半圆形. 平面光场沿 z 轴负方向垂直入射到硅薄膜表面, 光沿 x 轴偏振, 光源为波长从 $300\text{--}1000 \text{ nm}$ 范围 AM1.5 标准太阳光光谱. 图 1(b) 所示为坐标轴设置, x, y 轴如图所示, 坐标原点在硅薄膜上表面. 计算编程软件为 FDTD solutions, 为使计算精确, 计算网格精度为 $5 \text{ nm} \times 5 \text{ nm} \times 5 \text{ nm}$.

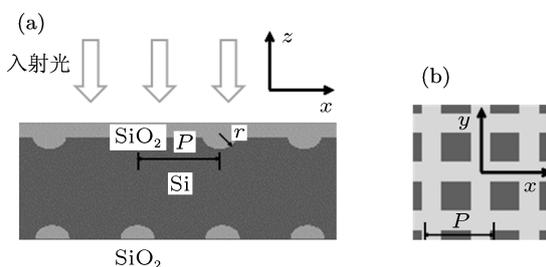


图 1 (a) 太阳能电池的横向切面图; (b) 垂直方向二维周期凹槽界面

二维表面凹槽结构可以根据亚波长光栅理论定性分析. 由于周期半圆凹槽可以看成是二维亚波长光栅, 在光栅区域, 相对介电常数可以通过傅里叶展开为

$$\epsilon(x, y) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \epsilon_{mn} \exp \left[i \left(m \frac{2\pi}{P} x + n \frac{2\pi}{P} y \right) \right] \quad (m = 0, \pm 1, \dots; n = 0, \pm 1, \dots). \quad (1)$$

直入射的平面波光场可以表示为

$$\mathbf{E}_{\text{in}} = (E_0, 0, 0) \exp(ik_0 z). \quad (2)$$

根据光栅理论可知, 通过表面二维光栅结构光会发生多级衍射, 衍射光波矢:

$$\begin{aligned} \beta_x &= k_{0x} + \frac{2\pi}{P} m, \\ \beta_y &= k_{0y} + \frac{2\pi}{P} n, \end{aligned} \quad (m = 0, \pm 1, \dots; n = 0, \pm 1, \dots). \quad (3)$$

由于平面光场是垂直入射, 波矢无 x, y 分量, 所以衍射光:

$$\begin{aligned} \beta_x &= \frac{2\pi}{P} m, \\ \beta_y &= \frac{2\pi}{P} n, \end{aligned}$$

$$(m = 0, \pm 1, \dots; n = 0, \pm 1, \dots). \quad (4)$$

假设光经过上下界面反射的相移分别为 ϕ_1 和 ϕ_2 , 那么当光在薄膜中传输满足

$$2\beta d + \phi_1 + \phi_2 = 2K\pi, \quad (5)$$

上式 $\beta = \sqrt{k_0^2 n^2 - \beta_x^2 - \beta_y^2}$, $K = 0, 1, 2, \dots$, 便会出现导膜共振, 从而使这部分光在薄膜中有效传输长度增加, 直接引起硅薄膜对于光吸收的增加. 另外, 凹槽光栅衍射会在局域实现聚焦的场增强效应, 硅层内单位体积的吸收能量:

$$P_{\text{abs}}(\lambda) = \frac{1}{2} \omega \epsilon'' |E_0(\lambda)|^2, \quad (6)$$

ϵ'' 为硅介电常数虚部, 局域场增强有利于硅层局域的光吸收.

3 模拟结果与分析

图 2 给出了用平面光垂直入射到很厚的硅基板的反射谱、从表面到 $0.5 \mu\text{m}$ 厚度处的透射谱以及 $0.5 \mu\text{m}$ 厚度的吸收谱, 从中可以看出, 入射光场大部分被反射和透射出硅薄层, 这直接导致硅薄层对于光吸收部分很小, 当波长大于 600 nm 时, $0.5 \mu\text{m}$ 厚硅薄层的光吸收部分已不足入射光的 0.2 , 所以通过设计结构减少反射和透射来增加光吸收非常关键.

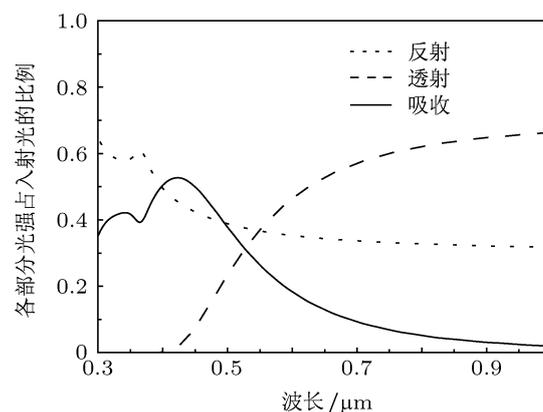


图 2 $0.5 \mu\text{m}$ 厚硅层的反射透射和吸收谱

下面讨论硅上表面二维周期凹槽光栅的减反效果. 通过调节凹面的半径 r 从 60 nm 到 160 nm 变化, 观察其对反射谱的影响. 比较图 2 反射谱和图 3(a) 可以看出, 凹槽光栅结构的减反效果非常明显, 还可以看出随凹面半径的增大, 反射光在长波长波段单调减小, 但是在可见光波段则是先减小后增大. 但是利用光栅结构减小的反射光并非全部被硅

薄层吸收, 其实这部分能量只有很小量被吸收, 而大部分则是透射出去. 由图 3(b) 直接看出, 随着凹面半径的增大, 长波长光反射减小的同时, 其透射出去的光却明显增大. 通过计算吸收谱如图 3(c) 可

知, $0.5 \mu\text{m}$ 厚 Si 薄层光吸收谱峰值随着凹面半径 r 的增大先增大后减小, 当半径为 100 nm 时, 出现最大的吸收峰值, 于是就选定 100 nm 为优化的半径长度.

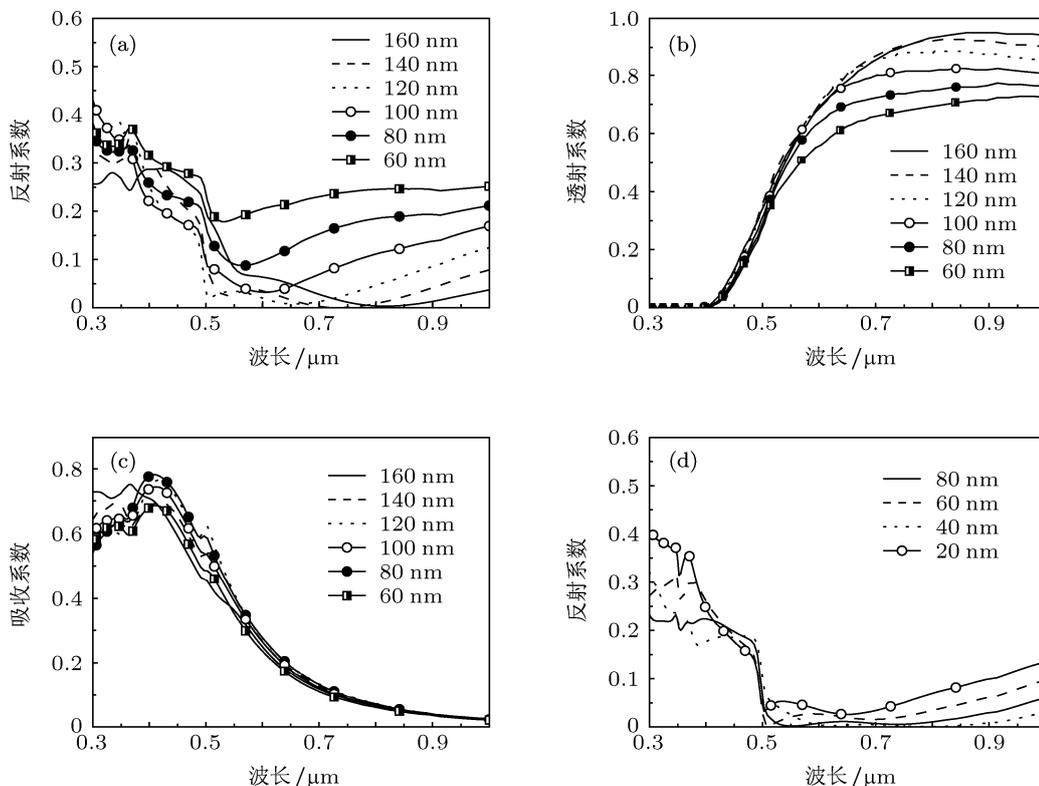


图 3 (a) 凹槽半径对反射谱的影响; (b) 凹槽半径对透射谱的影响; (c) 凹槽半径对吸收谱的影响; (d) SiO_2 钝化层厚度对反射谱的影响

另外对于太阳能电池而言, 表面钝化层是必不可少的, 它可以降低电池表面载流子复合速率, 增加少子寿命. 图 3(d) 给出了具有半圆凹槽光栅 Si 层上表面 SiO_2 钝化层厚度对于反射谱的影响, 表面钝化层进一步减小了入射光的反射, 通过比较选定 SiO_2 钝化层厚度为 60 nm , 可以看出, 利用网格凹面光栅和 SiO_2 钝化层可以将波长大于 500 nm 的光反射减小到了 5% 以下.

以上研究显著减小了入射光的反射, 从而增加了射入大硅薄膜太阳能电池的有效光场. 通过计算, 在这种情况下硅薄膜太阳能电池对于 $300\text{—}1000 \text{ nm}$ 太阳光总吸收能量增强为 107% . 尝试在底面加一层 Al 反射层来减少透射光, 发现硅薄膜的总光吸收增强效果不理想, 主要是因为金属层对于透射到底面的光场有很大的吸收引起的. 为进一步讨论在硅薄膜底面对称地设计二维周期半圆凹槽光栅来减小透射增强光吸收, 图 4 给出了具有上下表面周期网格凹面光栅结构太阳能电池单元吸

收谱, 上下凹面半径都为 100 nm , SiO_2 钝化层为 60 nm , 凹槽以 SiO_2 填充. 通过与图 2 硅薄层吸收谱的比较可知, 实现了在 $300\text{—}1000 \text{ nm}$ 太阳光谱宽波段的吸收增强, 计算总的光吸收增强约为 110% .

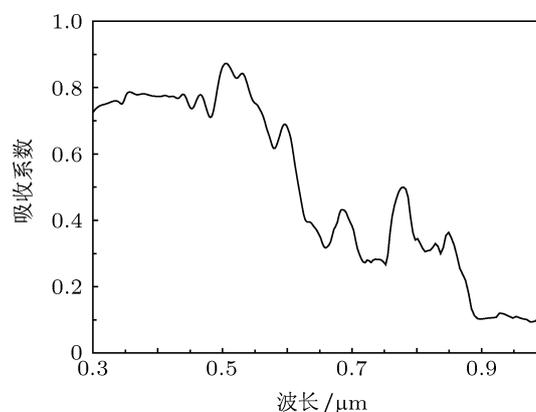


图 4 硅薄膜电池上下凹面光栅半径 100 nm 的吸收谱

由于太阳光是自然偏振光, 所以更希望太阳能电池的光吸收增强不受光偏振方向的影响. 由图

5(a) 所示, 通过积分计算了这种结构的太阳能电池单元从 300—1000 nm 太阳光能量总吸收的增强随光偏振角度的变化. 计算发现相对于单层硅薄膜光总吸收增强都在 110% 附近, 受光偏振方向的影响非常小. 图 5(b) 为进一步计算了底面凹面半径对于硅薄膜太阳能电池单元的光吸收增强, 半径为 140 nm 时太阳能电池的总太阳光吸收增强达 117%.

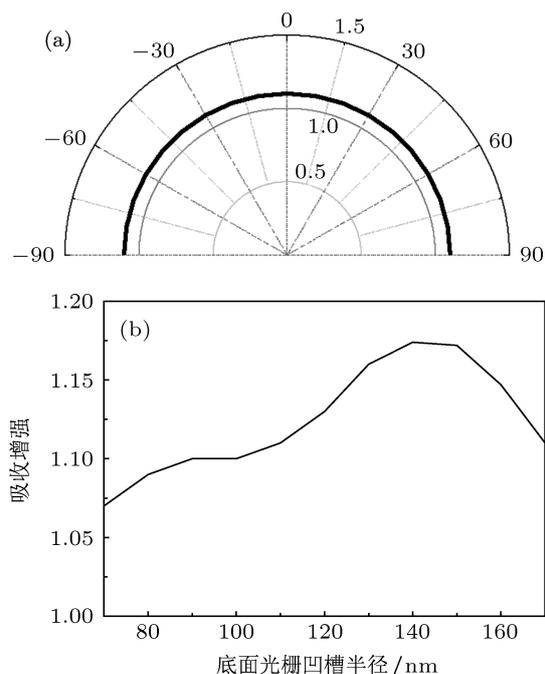


图 5 (a) 光偏振角度对于光吸收增强的影响; (b) 底面凹槽光栅半径对吸收增强影响

图 6(a) 为最终优化的薄膜太阳能电池单元在太阳光谱下的吸收谱线, Si 薄膜厚度 0.5 μm , 上表面光栅凹面半径 100 nm, 周期为 0.5 μm , 下表面光栅凹面半径 140 nm, SiO_2 钝化层厚度 60 nm. 可以直观地看出, 在太阳能光谱入射下薄膜太阳能电池单元相对于单层硅膜在宽波段下有显著的吸收增强, 但是对长波段尤其是红外波段的吸收增强较弱. 增强的吸收谱主要有两个方面: 首先入射光经过光栅衍射后在界面处多次反射增大了光在硅层里的有效吸收长度; 另外凹面光栅对于光场的聚集作用形成局域场增强效应, 从而提高了硅薄膜的吸收. 图 6(a) 中 0.5 μm 硅薄膜的吸收尖峰是由于硅薄膜 Fabry-Perot (F-P) 腔共振引起的, 而薄膜太阳能电池的吸收尖峰一方面是由 F-P 腔引起的, 另一方面是由光栅衍射引起的导膜共振造成的. 由图 6(b) 和 (c) 可以看出, 入射的光场大部分被聚集在半圆凹槽中, 并且使透过上表面半圆凹槽的光场在其下方形成了光聚集, 形成局域的常增强效应, 同样底面的光栅也使光在硅薄膜中形成聚集, 只是由于光波经硅薄膜吸收损耗后, 局域场增强相对弱一些. 图 6(d) 为 $z = -0.25 \mu\text{m}$ 即在电池单元硅层 0.25 μm 深度平面的电场分布, 也可以看到经过光栅衍射干涉下的场增强效果, 这部分增强的光场更有利于硅层光吸收, 从而提高光电转化效率.

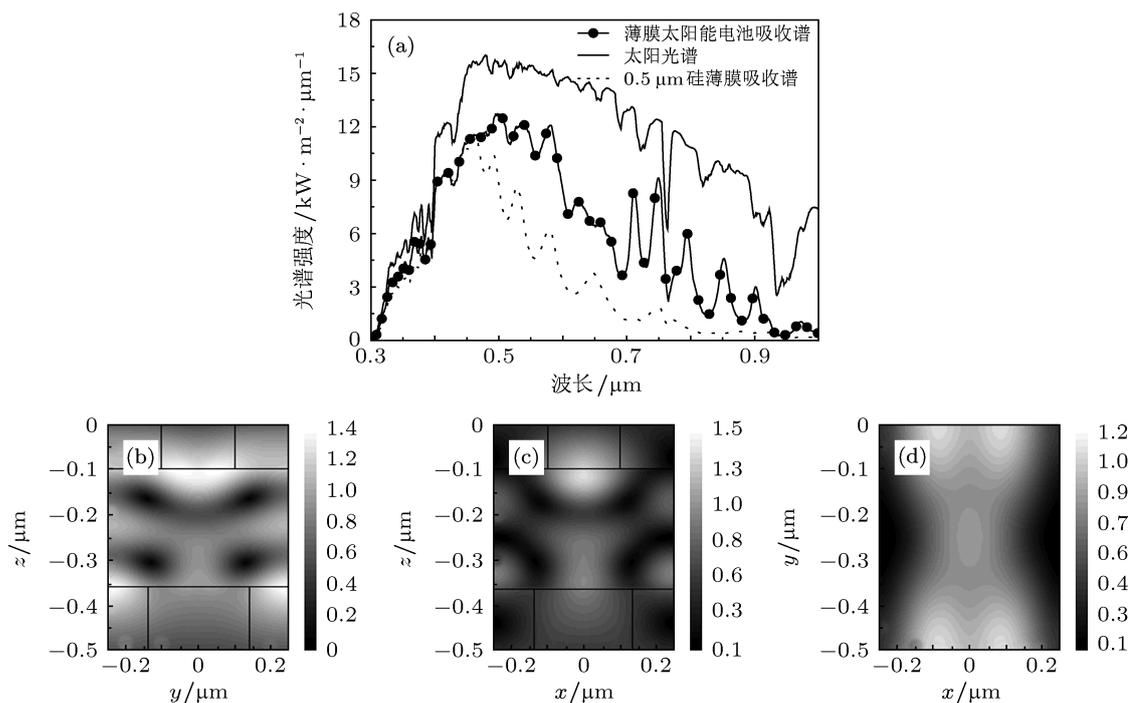


图 6 (a) 太阳光谱照射下 0.5 μm 硅薄膜与薄膜太阳能电池吸收谱; (b) $x=0$ 面硅层电场分布; (c) $y=0$ 面硅层电场分布; (d) $z = -0.25 \mu\text{m}$ 硅层中的电场分布

4 结论

利用 FDTD 方法, 模拟了上下面具有二维周期性半圆凹槽光栅结构的硅薄膜太阳能电池的光吸收增强效果. 研究了半圆凹槽光栅的减反作用, 以及凹面半径和光偏振角度对于太阳光总吸收增强的影响. 发现光吸收增强几乎不受光偏振方向影响,

并实现宽波段的吸收谱增强效果. 通过优化结构最终实现了波长从 300 nm 到 1000 nm 太阳光谱总能量吸收提高了 117%. 这么显著的光吸收增强对于提高薄膜太阳能电池的转换效率十分有利. 但是由于对于红外波段的吸收增强效果较弱, 仍需要对增强对红外光的吸收做进一步研究.

-
- [1] Huang R, Lin X Y, Yu Y P, Lin K X, Yao R H, Huang W Y, Wei J H, Wang Z H, Yu C Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 3950 (in Chinese) [黄锐, 林璇英, 余云鹏, 林揆训, 姚若河, 黄文勇, 魏俊红, 王照奎, 余楚迎 2004 物理学报 **53** 3950]
- [2] He D Y 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 779 (in Chinese) [贺德衍 2001 物理学报 **50** 779]
- [3] Xu G Y, Wang T M, He Y L, Ma Z X, Zheng G Z 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 1798 (in Chinese) [徐刚毅, 王天民, 何宇亮, 马智训, 郑国珍 2000 物理学报 **49** 1798]
- [4] Wang L J, Zhu M F, Liu F Z, Liu J L, Han Y Q 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2934 (in Chinese) [汪六九, 朱美芳, 刘凤珍, 刘金龙, 韩一琴 2003 物理学报 **52** 2934]
- [5] Liu M, Liu H, He Y L 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2875 (in Chinese) [刘明, 刘宏, 何宇亮 2003 物理学报 **52** 2875]
- [6] Atwater H, Polman A 2010 *Nature Materials* **9** 205
- [7] Pala R A, White J, Barnard E, Liu J, Brongersma M L 2009 *Adv. Mater.* **21** 2504
- [8] Spinelli P, Hebbink M, de Waele M, Black L, Lenzmann F, Polman A 2011 *Nano Lett.* **11** 1760
- [9] Zanotto S, Liscidini M, Andreani L C 2012 *Opt. Express* **18** 4260
- [10] Bermel P, Luo C Y, Zeng L R, Kimerling L C, Joannopoulos J D 2007 *Opt. Express* **15** 16986
- [11] Beck F J, Polman A, Catchpole K R 2009 *J. Appl. Phys.* **105** 114310
- [12] Catchpole K R, Polman A 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 191113
- [13] Mokkapati S, Beck F J, Polman A, Catchpole K R 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 053115
- [14] Nagel J R, Scarpulla M A 2010 *Opt. Express* **18** 139
- [15] Diukman I, Orenstein M 2011 *Solar Energy Materials & Solar Cells* **95** 2628
- [16] Garnett E, Yang P D 2010 *Nano Lett.* **10** 1082
- [17] Lim S H, Matheu M P, Derkacs D, Yu E T 2007 *J. Appl. Phys.* **101** 104309
- [18] Heine C, Morf R H 1995 *Appl. Phys.* **34** 2476
- [19] Meng X Q, Depauw V, Gomard G, Daif O E, Trompoukis C, Drouard E, Jamois C, Fave A, Dross F, Gordon I, Seassal C 2012 *Proceedings of SPIE* **8425** 84250R

Nano surface two-dimensional periodic half-round grooves enhanced light absorption in silicon film solar cell

Liu Zhen Wang Yu-Xiao[†] Song Ying-Lin[‡] Zhang Xue-Ru

(Department of Physics, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China)

(Received 7 April 2013; revised manuscript received 5 May 2013)

Abstract

The influence of nano surface two-dimensional periodic half-round grooves on the enhancement of light absorption in silicon film solar cell is studied with the finite-difference time-domain method. The result shows that the broadband solar spectrum absorption is enhanced. The light optical absorption in Si thin-film cell is enhanced by optimizing the thickness of SiO₂ anti-reflection film and the radius of half-round grooves, and the total integrated absorption of solar spectrum wavelength in a range from 300 nm to 1000 nm is about 117% greater than that of single silicon thin film.

Keywords: silicon thin-film, half-round grooves, absorption enhancement

PACS: 78.67.-n, 88.40.jj

DOI: 10.7498/aps.62.167801

[†] Corresponding author. E-mail: wangyx@hit.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: ylsong@hit.edu.cn