

非晶硅太阳能电池宽光谱陷光结构的优化设计*

贾玉坤 杨仕娥[†] 郭巧能[‡] 陈永生 郜小勇 谷锦华 卢景霄

(郑州大学物理工程学院, 材料物理教育部重点实验室, 郑州 450052)

(2013年8月9日收到; 2013年9月17日收到修改稿)

陷光是改善薄膜太阳能电池光吸收进而提高其效率的关键技术之一. 以非晶硅 (α -Si) 薄膜太阳能电池为例, 设计了一种新的复合陷光结构: 在 Ag 背电极与硅薄膜之间制备一维 Ag 纳米光栅, 并通过保形生长在电池前表面沉积结构的减反膜. 采用有限元数值模拟方法, 研究了该复合陷光结构对电池光吸收的影响, 并对 Ag 纳米光栅的结构参数进行了优化. 模拟结果表明: 该复合陷光结构可在宽光谱范围内较大地提高太阳能电池的光吸收; 当 Ag 纳米光栅的周期 P 为 600 nm, 高度 H 为 90 nm, 宽度 W 为 180 nm 时, 在 AM1.5 光谱垂直入射条件下 α -Si 薄膜电池在 300—800 nm 波长范围内总的光吸收较无陷光结构的参考电池提高达 103%, 其中在 650—750 nm 长波范围内的光子吸收率提高达 300% 以上. 结合电场强度分布, 对电池在各个波段光吸收提高的物理机制进行了分析. 另外, 该复合陷光结构的引入, 还较大地改善了非晶硅电池对太阳光入射角度的敏感性.

关键词: 非晶硅太阳能电池, 陷光, 银纳米光栅, 数值模拟

PACS: 78.20.Bh, 88.40.hj

DOI: 10.7498/aps.62.247801

1 引言

非晶硅 (α -Si) 薄膜太阳能电池由于具有制备工艺简单、成本低廉、工艺相对成熟等优势, 在第二代太阳能电池中始终占据着重要位置. 但是, 与晶体硅太阳能电池相比, α -Si 薄膜电池的光电转换效率还很低, 这主要是由于薄膜材料内部缺陷态密度较高, 为了减少载流子的复合, 薄膜电池的厚度通常很薄, 因此不能充分吸收入射光, 尤其在红光和近红外波段, 从而限制了电池的短路电流. 可见, 采用“陷光”技术, 在进一步减小薄膜电池物理厚度的同时, 增大电池的光吸收是提高电池效率的关键所在.

当前, 太阳能电池中常用的“陷光”技术有: 减反膜、表面织构、表面等离子激元 (SP) 和光子晶体等^[1-5]. 减反膜技术是根据薄膜干涉原理设计的, 通过在电池前表面沉积一层光学厚度为入射光波长 $1/4$ 的薄膜以减少前表面的反射损失^[6,7]. 显然, 单层减反膜仅对单一波长有很好的减反效果, 且对入射角度依赖较大. 表面织构在太阳能电池尤其是单

晶硅和多晶硅电池中得到了广泛的应用^[8], 但晶体硅电池表面微米级的织构显然无法应用于薄膜太阳能电池. SP 是金属与电介质界面上的自由电子在入射光子激励下的集体振荡^[9], 包括金属纳米结构表面激发的局域表面等离子激元 (LSP) 和金属/半导体薄膜界面传播的表面等离子极化激元 (SPP) 两种. 近年来, 表面等离子激元在太阳能电池中应用取得了许多可喜的研究成果^[10,11]. 但是, 与减反膜相似, LSP 和 SPP 也仅在某一个或某几个波长附近较窄的光谱区域有较好的陷光效果, 因此可大幅度提高薄膜太阳能电池的短路电流, 且对入射角不敏感的宽光谱陷光结构的设计至关重要.

本文综合利用上述几种陷光技术, 先在非晶硅电池的 Ag 背电极上刻蚀形成一维 Ag 纳米光栅, 然后再在其上进行保形生长, 依次沉积非晶硅膜 (包括 n, i, p 三层) 和 ITO 减反膜, 从而获得了一种由前表面的减反膜、表面织构和背表面的 Ag 纳米光栅组成的复合陷光结构. 采用有限元数值模拟方法, 研究了 Ag 纳米光栅的结构参数和入射角度对电池

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2011CB201606) 和国家自然科学基金 (批准号: 11204276, 51007082) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: yangshie@zzu.edu.cn

[‡] 通讯作者. E-mail: gqin@zzu.edu.cn

光吸收的影响,并结合电池中电场强度的分布,阐述了不同波段光吸收增强的物理机制.

2 数值模型与参数

图 1 为有复合陷光结构的 α -Si 薄膜太阳电池的二维模型. 该电池从下至上依次为 Ag 背电极及一维 Ag 纳米光栅、 α -Si 薄膜 (包括 n, i, p 三层)、ITO 透明导电膜. 太阳光由电池的前表面垂直入射,模型在电池上下表面采用完美匹配层 (PML) 吸收边界条件,左右两侧则采用周期性边界条件 (PBC).

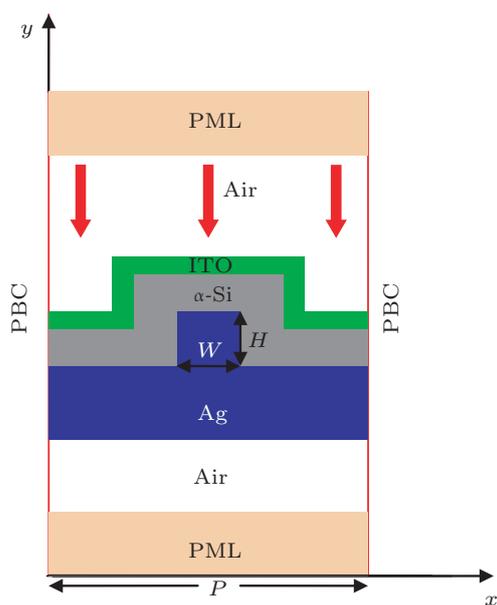


图 1 α -Si 薄膜太阳电池的二维数值模型

为了计算 α -Si 薄膜电池的光吸收,利用基于有限元法的 COMSOL 软件包严格求解麦克斯韦方程组. 这里用波长为 300—800 nm 的横磁波 (TM 波, 电场方向沿 x 方向) 和横电波 (TE 波, 电场方向沿 z 方向) 分别进行入射. 模型中 ITO, α -Si 和 Ag 背电极的厚度分别为 60, 100 和 100 nm. Ag 纳米光栅是由横截面为矩形的 Ag 纳米柱周期性排列而成,其中 Ag 纳米柱横截面的高度 H 取值范围为 50—120 nm, 宽度 W 为 120—200 nm, 相邻两纳米柱之间的距离即光栅周期 P 为 500—900 nm. ITO 的折射率取为 1.9, Ag, α -Si 折射率均取自于文献 [12]. 为了便于分析和比较,文中将仅有 Ag 背电极无其他陷光结构的电池记作参考电池 1 (Ref1), 将前表面沉积了 60 nm ITO 减反膜的电池记作参考电池 2 (Ref2). 模拟中保持所有电池中的 α -Si 薄膜

体积相同.

模型中材料对入射光子的吸收率 $A(\lambda)$ 定义为

$$A(\lambda) = \frac{\frac{\omega}{2} \epsilon_0 \int_V \text{Im}[\epsilon(\omega)] |E|^2 dV}{\frac{1}{2} S |\text{Re}(\mathbf{E}_i \times \mathbf{H}_i)|}, \quad (1)$$

其中 ω 为入射光的角频率, ϵ_0 为真空介电常数, $\text{Im}[\epsilon(\omega)]$ 为材料介电常数的虚部, $|E|^2$ 为被计算区域的电场强度的模的平方, V 为计算区域的体积. S 为积分区域的表面积, $\frac{1}{2} |\text{Re}(\mathbf{E}_i \times \mathbf{H}_i)|$ 为入射波的平均能流密度. AM1.5 光照下材料的吸收光谱

$$G(\lambda) = \phi_0(\lambda) A(\lambda), \quad (2)$$

其中 $\phi_0(\lambda)$ 为标准 AM1.5 太阳光谱的光子流密度. 对整个入射波长范围内的 $G(\lambda)$ 积分即可得吸收的总光子数

$$G_T = \int_{\text{AM1.5G}} G(\lambda) d\lambda, \quad (3)$$

参考电池中 α -Si 层吸收的总光子数为 G_{Ref} , 则可计算引入陷光结构后电池光吸收提高的百分比 E_{abs} :

$$E_{\text{abs}} = \frac{G_T - G_{\text{Ref}}}{G_{\text{Ref}}} \times 100\%. \quad (4)$$

3 结果与讨论

3.1 陷光结构的优化

根据薄膜干涉原理, ITO 膜的厚度为 $1/4$ 介质波长时减反效果较好, 故模型中 ITO 减反膜的厚度取为 60 nm. 另外, 模拟中发现, Ag 纳米光栅的结构参数中宽度 W 对电池光吸收的影响很小, 文中 W 取为 180 nm 并保持不变, 研究了高度 H 和周期 P 对 α -Si 薄膜电池光吸收的影响. 首先, 分别计算了不同 H 和 P 情况下, 有复合陷光结构的 α -Si 薄膜电池在 AM1.5 光照下的吸收光谱, 然后计算 α -Si 层中总的光吸收以及相对于 Ref1 光吸收提高的百分比 E_{abs} , 如图 2 所示. 从图 2 可以看出, E_{abs} 随着 P 和 H 的增加均呈现先增大后减小的变化趋势, 但高度 H 对 E_{abs} 的影响相对较小. 可见, 该复合陷光结构太阳电池的光吸收对 Ag 纳米柱横截面的几何尺寸的变化不敏感, 这也为后续工业化生产中纳米光栅的制备提供了很好的兼容性. 当 $H = 90$ nm, $P = 600$ nm 时, E_{abs} 达最大值 103%, 此时 α -Si 薄膜电池可吸收 AM1.5 太阳光谱 300—800 nm 波段中 77.1% 的光子.

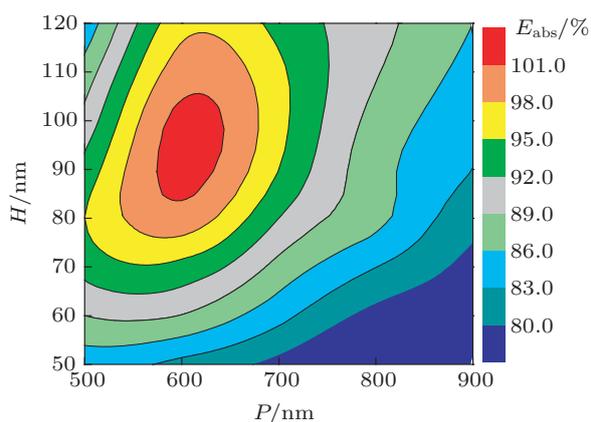


图2 不同 H 和 P 情况下电池总的光吸收相对于 Ref1 的提高百分比 E_{abs} (%)

3.2 陷光机理的分析

图 3(a) 和 (b) 分别为 $P = 600 \text{ nm}$, $H = 90 \text{ nm}$ 时 $\alpha\text{-Si}$ 电池在 TE 波、TM 波及混合波 (即 $(\text{TE} + \text{TM})/2$) 入射下的光子吸收率曲线及其相对于 Ref1 的提高百分比, 参考电池 Ref1 和 Ref2 的光子吸收率曲线也在图 3(a) 中给出. 图 4 给出了不同波长下电池内部的电场强度分布. 从图 3(a) 可以看到, 参考电池 Ref1 仅在 570 nm 附近有一较强吸收峰, 其电场强度如图 4(a) 所示, 此时 $\alpha\text{-Si}$ 层中电场呈现明显的层状分布, 这显然是由法布里 - 珀罗 (F-P) 干涉造成的. Ref1 在其他波段的光子吸收率 $A(\lambda)$ 都很低, 其中在 $650\text{--}760 \text{ nm}$ 的长波段 $A(\lambda)$ 甚至低于 20%. 当在 $\alpha\text{-Si}$ 前表面沉积 ITO 膜后, 电池 Ref2 的 F-P 干涉峰红移至 580 nm 处, 其电场强度分布见图 4(b); 另外, Ref2 在 460 nm 附近出现一个新的吸

收峰, 根据减反理论: $2nd = (2k + 1)\lambda/4$, 其中 ITO 的折射率 n 为 1.9 厚度 d 为 60 nm , 当 k 取 0 时波长 λ 为 456 nm , 说明该波段电池光吸收的增加是来自 ITO 减反膜的贡献.

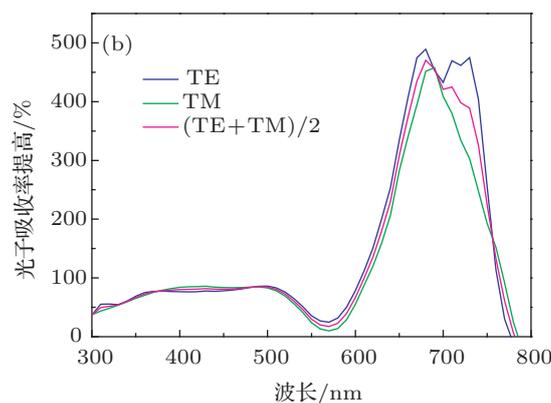
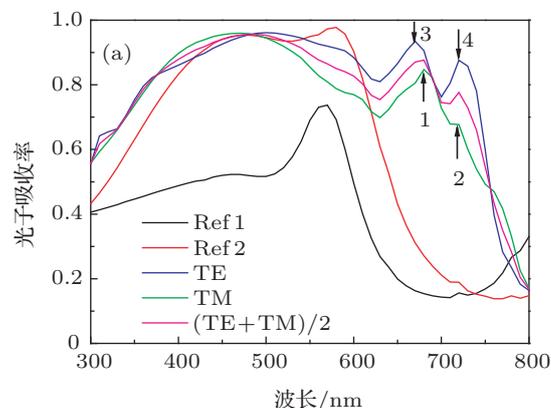


图3 (a) $P = 600 \text{ nm}$, $H = 90 \text{ nm}$ 时 $\alpha\text{-Si}$ 电池在 TE 波、TM 波及混合波 (即 $(\text{TE} + \text{TM})/2$) 入射下的光子吸收率曲线, 其中 Ref1 和 Ref2 为参考电池的光子吸收率曲线; (b) 与 Ref1 相比, 该复合陷光结构电池的光子吸收率提高百分比

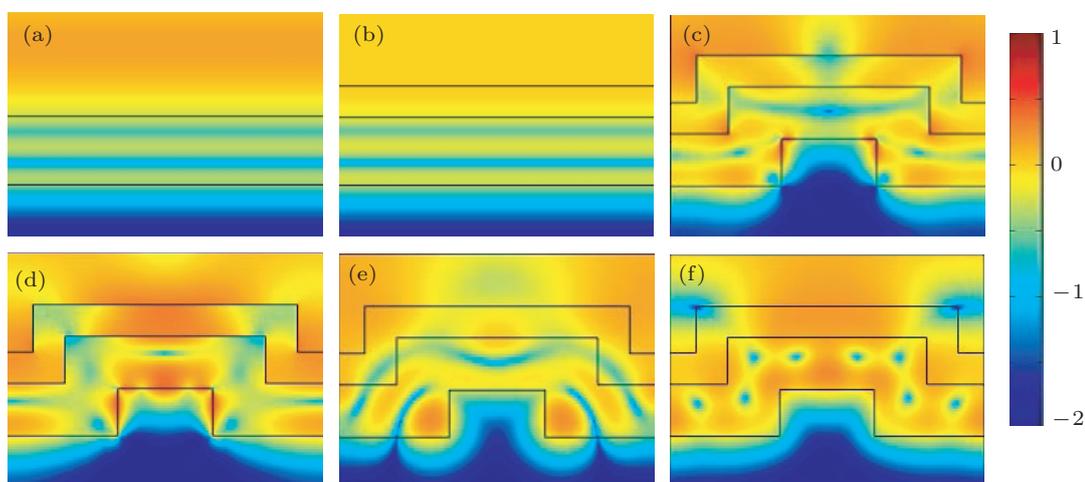


图4 不同波长下 $\alpha\text{-Si}$ 电池内部的电场强度 (以 10 为底对数) 分布 (a) Ref1, 570 nm ; (b) Ref2, 580 nm ; (c)—(f) 复合陷光结构电池: 680 nm TM 波; 720 nm TM 波; 670 nm TE 波; 720 nm TE 波

采用上述优化的复合陷光结构后,与参考电池 Ref1 相比,电池的光子吸收率在 300—780 nm 波长范围内均有明显提高,几乎覆盖了整个入射光谱.其中,在 400—500 nm 的中波段,电池的 $A(\lambda)$ 值提高约为 85%,与 Ref2 相当.在 300—400 nm 的短波段,电池的光吸收率较 Ref2 又有所提高,这应归因于电池前表面织构的陷光作用.更重要的是,对于有复合陷光结构的电池,无论采用 TM 或 TE 波入射,均在 600—780 nm 的长波段出现两个新的吸收峰,其中在 650—750 nm 之间的电池的光子吸收率较 Ref1 提高了 300%以上,如图 3(b) 所示,该波段光吸收的提高主要来自背电极上 Ag 纳米光栅结构的陷光作用.

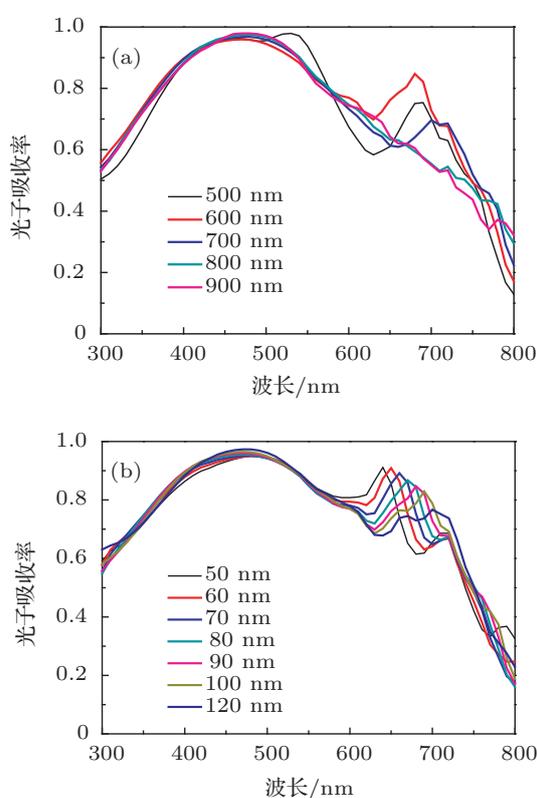


图 5 TM 波入射下复合陷光结构电池的光子吸收率随 (a) 周期 P , (b) 高度 H 的变化

图 4(c) 和 (d) 分别为有复合陷光结构的电池在 680 和 720 nm TM 波入射下的电场分布,二者分别与图 3(a) 中的峰 1 和峰 2 相对应.图 4(c) 中电场主要集中在 α -Si 层内部及 Ag 背电极与 α -Si 层界面附近,而图 4(d) 在 Ag 纳米柱表面及相邻两纳米柱之间的电场明显增强.为了进一步探究峰 1 和峰 2 的来源,图 5 给出了电池的光子吸收率随周期 P 和高度 H 的变化情况.由图 5 可知,随着周期 P 的增大,峰 1 不仅位置发生了红移,而且强度逐渐减弱

甚至消失;随 H 的增大峰 1 亦发生了明显红移.峰 2 的位置随 H 的增大略有红移,但却不随 P 而移动.另外,模拟中还发现,峰 1 的位置随 α -Si 膜的厚度变化较大,而峰 2 则对 α -Si 膜厚不敏感.结合图 4(c) 和 (d) 中的电场分布特征,我们认为,峰 1 主要来自波导模式的贡献,峰 2 则是由于 Ag 纳米光栅表面的局域表面等离子共振 (LSPR) 及其相互作用的结果.因为波导本征模式的波长与散射中心的几何尺寸有关,尺寸越大,本征模式的波长越长^[13],故峰 1 随 H 的增大发生红移;而随着周期 P 的增大,纳米光栅的散射作用减弱,本征模式的耦合强度也随之下降.LSPR 的峰位随金属纳米结构尺寸的增大而红移,却不随周期变化^[14];但随着 P 的增大,相邻两纳米柱之间 LSPR 的耦合作用减弱,吸收峰的强度亦有所下降,这与图 5 中峰 2 的变化趋势完全一致.

采用 TE 波入射时,不会在 Ag 背电极和 Ag 纳米光栅表面激发 SPP 或 LSP,故图 3(a) 中峰 3 和 4 与 SPP 和 LSP 无关.模拟中发现,峰 3 和 4 随 H 和 P 变化的规律与峰 1 相似;另外,图 4(e) 和 (f) 中的电场强度分布表明,此时电场主要集中在 α -Si 层中间区域,且向两侧逐渐减弱,呈现典型的波导模特征.因此,我们认为 3(a) 中峰 3 和 4 是来源于 α -Si 层中波导模式的贡献.与 TM 波相比,TE 波在长波段的吸收峰强度较大,这主要是由于 TM 波在 Ag 背电极和 Ag 纳米光栅表面激发 SPP 和 LSP,增大了入射光的焦耳热损耗所致^[15].Lin 和 Yang^[16] 的研究也表明,将电池背电极织构化,光吸收的提高大部分应归因于本征层内波导模式的激发.

3.3 入射角对电池光吸收的影响

在上述模拟中,太阳光均是垂直入射(入射角 $\theta = 0^\circ$),下面以 $W = 180$ nm, $H = 90$ nm, $P = 600$ nm 的复合陷光结构电池为例,研究入射角对电池光吸收的影响,并与参考电池 Ref1 进行比较.图 5(a) 为该复合陷光结构电池的光子吸收率随入射波长(混合波)和入射角度的变化情况.由图 6(a) 可知,随着入射角度 θ 的增加,在整个入射波长范围内电池的光子吸收率均呈现下降趋势,但下降速率不大,且光子吸收率的色散逐渐减小.当 $\theta = 60^\circ$ 时,在 300—750 nm 波长范围内的光子吸收率仍保持在 0.5 左右.

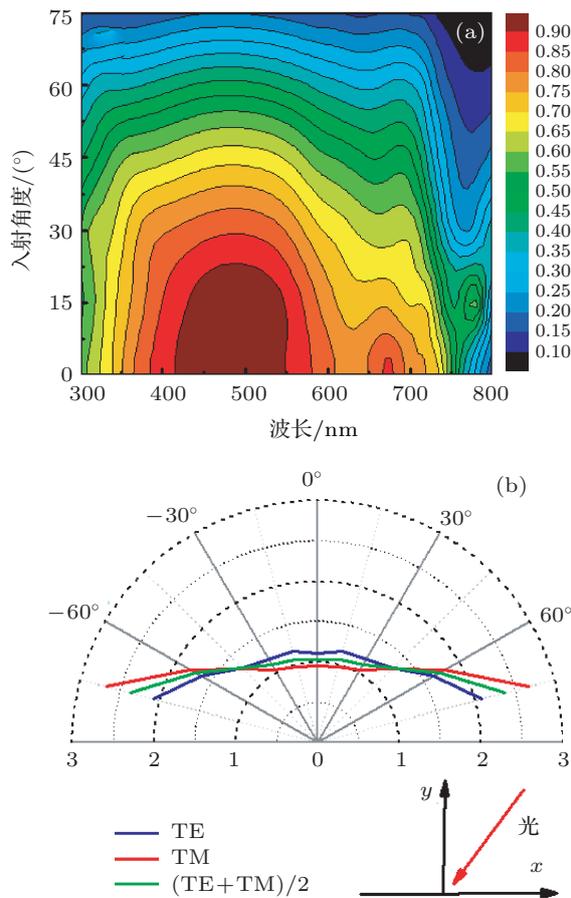


图6 (a) 复合陷光结构电池的光子吸收率随入射波长(混合波)和入射角度的变化; (b) 不同入射角下复合陷光电池总的光吸收相对于参考电池 Ref1 的提高倍数

采用 AM1.5 光谱以不同角度入射时, 该复合陷

光结构电池总的光吸收相对于 Ref1 的提高比见图 6(b). 如图所示, 不论以 TE 波还是 TM 波入射, 该复合陷光结构电池总的光吸收较 Ref1 均有不同程度的提高. 其中 $|\theta| < 45^\circ$, TE 波入射时光吸收提高比大于 TM 波, 但 $|\theta| > 45^\circ$, 以 TM 波入射电池的光吸收增大更明显. 以混合波 ((TM+TE)/2) 入射时, 电池总的光吸收提高比随入射角 θ 的增大呈现单调增大趋势, 从 0° 时的 1.03 倍增大至 75° 时的 2.67 倍. 上述结果表明, 与参考电池相比, 有复合陷光结构的电池对入射角的敏感度下降.

4 结论

以 α -Si 薄膜电池为例, 设计了一种可实现宽光谱陷光的复合陷光结构. 采用有限元数值模拟方法, 对复合陷光结构中 Ag 纳米光栅的结构参数进行了优化, 并对电池光吸收提高的物理机制进行了分析. 当 Ag 纳米光栅的周期 P 为 600 nm, 高度 H 为 90 nm, 宽度 W 为 180 nm 时, AM1.5 光谱垂直入射下电池总的光吸收较参考电池 Ref1 提高了 103%; 其中, 中短波段光吸收的改善主要归因于前表面减反膜和表面织构的贡献, 而长波段光子吸收率的提高则是 Ag 纳米光栅表面等离激元和波导模共同作用的结果. 另外, 该复合陷光结构的引入, 还较大地改善了 α -Si 电池对太阳光入射角度的敏感性.

- [1] Chutinan A, John S 2008 *Phys. Rev. A: At. Mol. Opt. Phys.* **78** 3825
- [2] Li X F, Chen Y R, Miao J, Zhou P 2007 *Opt. Express* **15** 1907
- [3] Zeman M, Isabella O, Jaeger K 2010 *Res. Soc. Symp. Proc.* **3** 1245
- [4] Matheu P, Lim S H, Derkacs D, McPheeters C 2008 *Phys. Rev. B* **93** 3108
- [5] Yu X M, Zhao J, Hou G F, Zhang J J, Zhang X D, Zhao Y 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 120101 (in Chinese) [于晓明, 赵静, 侯国付, 张建军, 张晓丹, 赵颖 2013 物理学报 **62** 120101]
- [6] Khaldun A, Khalid O, Hassan Z 2012 *Sol. Energy* **86** 541
- [7] Ahn H J, Kim S I, Yoon J C 2012 *Nanoscale* **4** 4464
- [8] Byun S J, Byun S Y 2011 *Curr. Appl. Phys.* **11** 23
- [9] Barnes W L, Dereux A, Ebbesen T W 2003 *Nature* **424** 824
- [10] Derkacs D, Lim S H, Matheu P, Yu E T 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 3103
- [11] Pillai S, Catchpole K R, Trupke T, Green M A 2007 *J. Appl. Phys.* **101** 3105
- [12] Palik E D 1998 *Handbook of Optical Constants of Solids* (USA: Academic Press) p350, 571, 369
- [13] Soderstrom K, Haug F J 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 3508
- [14] Beckers T, Bittkau K 2010 *Phys. Status Solidi.* **207** 661
- [15] Li Y, Okuno Y 2012 *Prog. Photovolt: Res. Appl.* **10** 1002
- [16] Lin H Y, Yang K 2012 *Opt. Express* **20** 104

Optimal design of light trapping structure for broadband absorption enhancement in amorphous silicon solar cell*

Jia Yu-Kun Yang Shi-E[†] Guo Qiao-Neng[‡] Chen Yong-Sheng Gao Xiao-Yong
Gu Jin-Hua Lu Jing-Xiao

(Key Laboratory of Materials Physics of Ministry of Education, School of Physical Engineering, Zhengzhou University, Zhengzhou 450052, China)

(Received 9 August 2013; revised manuscript received 17 September 2013)

Abstract

Light trapping is one of the key issues to improve the light absorption and increase the efficiency of thin film solar cell. In this paper, a novel combined light trapping structure consisting of back one-dimensional (1D) Ag nano-grating and front conformal antireflective coating is proposed for amorphous silicon (α -Si) thin film solar cell. By a numerical simulation based on the finite element method, the effect of the combination on the light absorption of α -Si solar cell is investigated, and the Ag nano-grating parameters are optimized. The results show that the combined light trapping structure can enhance broadband absorption in thin-film solar cell. For the α -Si solar cell with the combined structure at $P = 600$ nm, $H = 90$ nm, and $W = 180$ nm, the integrated absorption is enhanced by 103% under AM1.5 illumination at normal incidence in a wavelength range of 300–800 nm, and the photon absorption rate is increased by 300% in a long-wavelength range of 650–750 nm compared with the reference cell. We discuss the physical mechanism of absorption enhancement in different wavelength ranges from the electrical field amplitude distributions in the solar cells. In addition, the solar cell with the combined structure is much less sensitive to the angle of incident light.

Keywords: amorphous silicon solar cells, light-trapping, Ag nano-grating, numerical simulation

PACS: 78.20.Bh, 88.40.hj

DOI: 10.7498/aps.62.247801

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2011CB201606) and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11204276, 51007082).

[†] Corresponding author. E-mail: yangshie@zzu.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: gqin@zzu.edu.cn