

# 基于阳极氧化铝纳米光栅的薄膜硅太阳能电池 双重陷光结构设计仿真\*

秦飞飞 张海明<sup>†</sup> 王彩霞 郭聪 张晶晶

(天津工业大学理学院, 天津 300387)

(2014年3月22日收到; 2014年5月27日收到修改稿)

本文提出了表面和底部均带有阳极氧化铝(AAO)纳米光栅的薄膜硅太阳能电池双重陷光结构, 利用FDTD软件仿真研究了AAO纳米光栅的周期、厚度和占空比对薄膜硅太阳能电池短路电流密度的影响, 并对AAO结构参数进行了优化. 仿真结果表明, 表面AAO最佳结构参数是周期440 nm, 厚度75 nm, 占空比0.5, 底部AAO最佳结构参数是周期380 nm, 厚度90 nm, 占空比为0.75. 双重AAO组合陷光结构可有效增加薄膜硅太阳能电池在280—1100 nm范围内的光吸收, 吸收相对增强可以达到74.44%.

**关键词:** 薄膜硅太阳能电池, 阳极氧化铝, 陷光结构, 时域有限差分法

**PACS:** 88.40.-j, 78.20.Bh, 72.40.+w, 42.70.-a

**DOI:** 10.7498/aps.63.198802

## 1 引言

薄膜硅太阳能电池以其用料少、成本低的特点而备受人们青睐. 但是与晶体硅电池相比, 薄膜硅太阳能电池面临着光电转化效率较低的难题. 一方面由于表面反射的存在, 如果没有减反结构, 30%以上的光将损失掉<sup>[1-4]</sup>. 另一方面随着Si吸收层厚度的减少, Si材料对光的吸收也会减少. 例如当厚度从1 mm减少到10 μm时, c-Si对光吸收的极限波长将从1108 nm减少到800 nm<sup>[5]</sup>, 这使得大量的光在没有被吸收之前就溢出了<sup>[6,7]</sup>. 为此, 人们提出了各种不同的方法来提高薄膜硅太阳能电池的光电转换效率. 其中表面制绒、纳米线、刻录表面光栅、利用表面等离子体效应、制造多层耦合结构<sup>[8-13]</sup>等是常见的表面陷光方法. 而由布拉格反射器(distributed bragg reflector, DBR)或金属背反射层和光栅构成的叠层光栅结构<sup>[14-19]</sup>, 周期性的金属、绝缘层波导背反射结构<sup>[20]</sup>等是常见的背部陷光方法. 然而表面制绒等表面减反结构制备工

艺复杂, 条件苛刻、成本高, 而叠层光栅等底部陷光结构的制备一般要涉及到刻蚀或平版印刷等工艺, 这使得常见陷光结构不能得到广泛的应用.

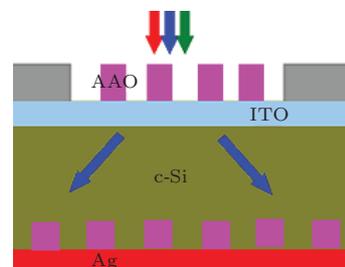


图1 (网刊彩色) 表面和底部都带有AAO纳米光栅的太阳能电池结构示意图

阳极氧化铝(anodic aluminum oxide, AAO)模板最早是由Masuda首先报道制备的<sup>[21]</sup>. 由于具有独特的周期性多孔结构和相对简单的制备条件<sup>[22]</sup>, AAO被广泛用于纳米材料微结构制备的模板或基底<sup>[23,24]</sup>. 但最近, AAO作为光子晶体, 在光学方面的应用研究越来越得到了人们的广泛研究和重视. 有学者直接将AAO作为光子晶体材料用于设计太阳能电池陷光结构, 并取得了很好的效

\* 国家自然科学基金(批准号: 61274064)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯作者. E-mail: zhmtjwl@163.com

果. 2010年, Sheng等设计了用AAO和DBR做背反射陷光结构的薄膜硅太阳能电池结构<sup>[25]</sup>, 从实验的角度说明了该结构的可行性. 2013年, Yang等提出了用AAO和TiO<sub>2</sub>做表面减反层的薄膜硅太阳能电池结构<sup>[26]</sup>, 仿真研究了该结构对太阳能电池光吸收的影响. 但是在以往的研究工作中, 将AAO模板作为光栅同时引入到太阳能电池的表面和底部做双重陷光结构的研究尚未见报道. AAO的几何参数对薄膜硅太阳能电池光吸收影响的系统研究亦未见报道.

为此本文将AAO模板作为纳米光栅引入到薄膜硅太阳能电池中, 首次提出了一种如图1所示的表面和底部均带有AAO纳米光栅的薄膜硅太阳能电池结构. 在这个设计中, 表面AAO起到减反作用, 底部AAO和Ag起到抑制长波长光子溢出、增加光在Si吸收层中光程的作用. 利用基于时域有限差分法(finite difference time domain, FDTD)的软件分别系统地仿真研究了表面和底部AAO的周期、厚度、占空比等参数对薄膜硅太阳能电池短路电流密度的影响, 得到了最优AAO纳米光栅结构参数. 在此基础上研究了组合条件下AAO纳米光栅对薄膜硅太阳能电池光吸收的影响. 这为实际制备表面和底部AAO陷光结构提供了很好的理论指导.

## 2 模型建立与仿真

本文采用的仿真软件是Lumerical公司开发的FDTD Solutions软件. 仿真模型如图2所示, 定义相邻两个AAO的孔中心之间的距离为AAO的周期 $a$ , AAO的厚度为 $d$ , 在一个周期中AAO的孔径所占的比例为占空比 $f$ . 选用的光源是波长范围为280—1100 nm的平面波, 入射方向为垂直入射. 反射谱监视器放在光源上方80 nm处, 研究表面带有AAO时透射谱监视器放在Si吸收层下表面处, 研究底部带有AAO和组合结构时透射谱监视器在AAO下表面和Ag背反射层的交界面处. 在 $x$ 轴和 $y$ 轴方向选用的是周期性边界条件,  $x$ - $y$ 平面的仿真区域选取一个矩形, 其中心同AAO孔中心重合, 边长等于一个AAO的周期. 在 $z$ 轴方向选用的是完全匹配层(perfectly matched layers, PML)条件.  $z$ 轴的仿真区域覆盖整个监视器、光源、吸收层、陷光结构所构成的范围. 研究表面AAO参数

对光吸收的影响时选用图2(a), 研究底部AAO参数对光吸收的影响时选用图2(b), 研究组合结构时选用图2(c). 通过仿真可以得到带有AAO陷光结构的1000 nm厚的c-Si的透射谱 $T(\lambda)$ 和反射谱 $R(\lambda)$ . 通过对数据的积分处理可以得到不同AAO参数下的短路电流密度, 其计算公式是<sup>[27]</sup>

$$J_{sc} = e\eta \int_{280}^{1100} A(\lambda) I_{AM1.5} d\lambda, \quad (1)$$

上式中 $e$ 是电子电量,  $\eta$ 是载流子收集效率(在这里取极限条件 $\eta = 1$ ),  $A(\lambda) = 1 - R(\lambda) - T(\lambda)$ 是仿真得到的吸收系数,  $I_{AM1.5}$ 是太阳能电池的能量密度谱线.

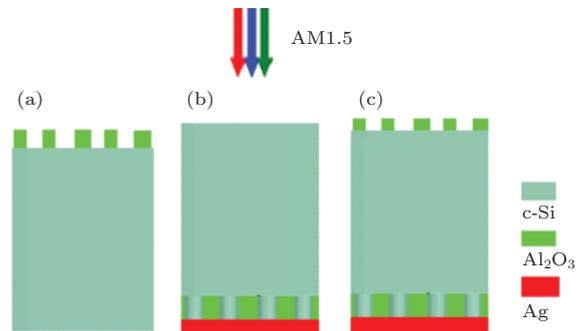


图2 (网刊彩色) 带有AAO纳米光栅的仿真模型

## 3 结果与讨论

### 3.1 AAO纳米光栅结构参数对硅光吸收影响

用太阳能电池的短路电流密度相对增强量 $\alpha$ 为参数衡量AAO对光吸收的影响,  $\alpha$ 的定义为

$$\alpha = (J'_{sc} - J_{sc}) / J_{sc}, \quad (2)$$

式中 $J'_{sc}$ 为有陷光结构的薄膜硅太阳能电池短路电流密度,  $J_{sc}$ 为等量Si构成的无AAO和Ag等陷光结构的薄膜硅太阳能电池的短路电流密度. 不加任何陷光结构下, 本文按(1)式计算所获得的 $J_{sc} = 35.12 \text{ mA/cm}^2$ , 表面和底部不同AAO参数下的 $\alpha$ 数值如图3所示. 图3(a)到(d)是AAO只在上表面且周期分别为100 nm, 200 nm, 300 nm和400 nm时的数据, (e)到(h)是AAO在底部且周期分别为100 nm, 200 nm, 300 nm和400 nm时的数据. 从图3中可以看出, AAO在表面和底部都有 $J_{sc}$ 增强效果, 且效果与其结构参数有直接的关系. 对于表面AAO, 当周期为100 nm, 200 nm和300

nm时,较好的 $J_{sc}$ 相对增强效果集中在AAO厚度在50到100 nm之间、占空比在0到0.75之间变化所构成的范围内.而当表面AAO周期为400 nm时,在占空比大于0.5,厚度在100到200 nm范围内也有较好的 $J_{sc}$ 相对增强效果.对于底部AAO,当周期为100 nm时,较好的 $J_{sc}$ 相对增强效果集中在厚度为0到100 nm之间,占空比在0到0.5之间构成的范围内.当周期为200 nm时,较好的 $J_{sc}$ 相对

增强效果集中在厚度在0到100 nm之间,占空比在0到0.75之间所构成的范围内.当周期为300 nm和400 nm时,较好的 $J_{sc}$ 相对增强效果集中在厚度为75到200 nm之间,占空比为0.5到0.8之间变化时所构成的范围.从图3中可以得到AAO的 $J_{sc}$ 相对增强效果同其结构参数的整体关系,总结图中数据并通过进一步仿真,可以对AAO结构参数做出优化.

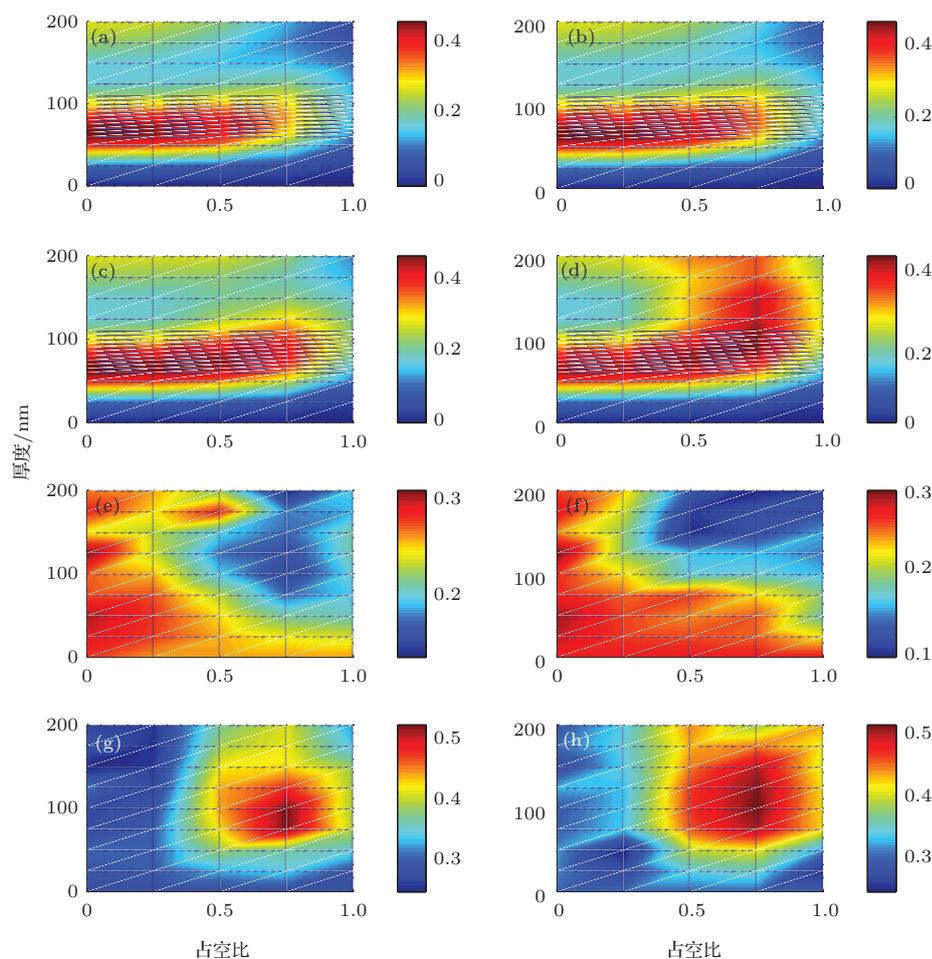


图3 (网刊彩色)  $J_{sc}$  相对增强同 AAO 结构参数之间的关系

### 3.2 AAO 纳米光栅占空比的优化

为了研究表面和底部 AAO 占空比对薄膜硅太阳能电池光吸收的影响,实现对占空比的优化.总结图3中的数据并通过进一步仿真,得到了不同占空比下的 $J_{sc}$ 相对增强,结果如图4所示.图中红线是 AAO 只在上表面时的数据,黑线是 AAO 在底部时的数据.从图4可以看出,对于 AAO 在表面的情况,当占空比小于0.75时 $J_{sc}$ 相对增强效果变化不

大,当占空比等于0.5时会出现最佳值.对于 AAO 在底部的情况,当占空比在0到0.75之间变化时, $J_{sc}$ 相对增强效果随着占空比的增加而增加,当占空比等于0.75时相对增强效果达到最佳,当占空比大于0.75时 $J_{sc}$ 相对增强效果迅速下降.从图4中还可以看出,单考虑占空比对 $J_{sc}$ 相对增强效果的影响时,当占空比小于0.48时,表面 $J_{sc}$ 相对增强效果要比底部强,而当占空比大于0.48时 AAO 在底部有更好的 $J_{sc}$ 相对增强效果.

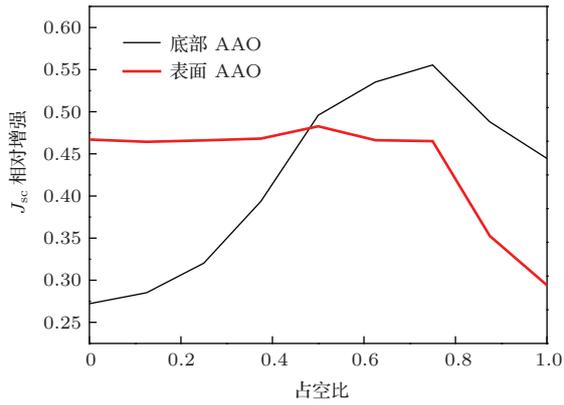


图4 (网刊彩色) 表面和底部 AAO 不同占空比条件下的  $J_{sc}$  相对增强

### 3.3 AAO 纳米光栅厚度的优化

为了研究 AAO 厚度对薄膜硅太阳能电池光吸收的影响, 实现对厚度的优化, 仿真计算了不同厚度条件下的  $J_{sc}$  相对增强, 结果如图 5 所示. 图中红线是 AAO 只在上表面时的数据, 黑线是 AAO 在底部时的数据. 从图 5 中可以看出, AAO 光吸收增强效果与 AAO 厚度有关. 对于表面 AAO, 当厚度从 20 nm 到 75 nm 之间变化时,  $J_{sc}$  增强效果迅速增大, 在 75 nm 处达到最佳值, 当厚度大于 75 nm 时,  $J_{sc}$  增强效果又开始减小. 对于底部 AAO, 当厚度在 20 nm 到 80 nm 之间变化时,  $J_{sc}$  相对增强缓慢上升, 当厚度在 80 nm 到 110 nm 之间变化时,  $J_{sc}$  相对增强趋于平缓, 并在 90 nm 时达到最佳值. 当厚度大于 110 nm 时,  $J_{sc}$  相对增强又会减小. 此外从图 5 中还可看到, 单考虑厚度对  $J_{sc}$  相对增强效果的影响时, AAO 在底部的陷光效果要比上表面好.

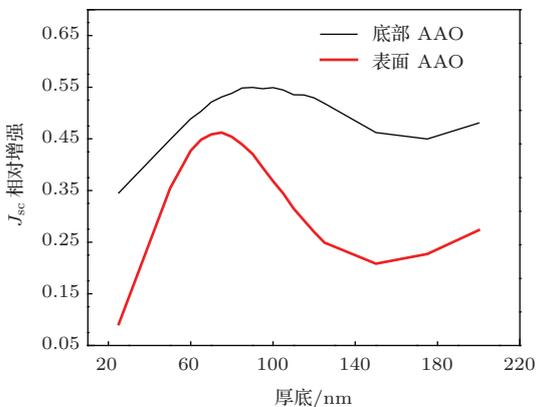


图5 (网刊彩色) 表面和底部不同 AAO 厚度下的  $J_{sc}$  相对增强 (表面和底部 AAO 周期均为 314.28 nm, 占空比分别为 0.5 和 0.75)

### 3.4 AAO 纳米光栅周期的优化

为了研究 AAO 周期对薄膜硅太阳能电池光吸收的影响, 实现对周期的优化, 仿真计算了在不同厚度条件下的  $J_{sc}$  相对增强, 结果如图 6 所示. 图中红线是 AAO 只在表面时的数据, 黑线是 AAO 在底部的数据. 从图 6 中可以看出, 上表面  $J_{sc}$  相对增强都在 50% 左右, 在周期为 440 nm 时有最佳的增强效果. 对于底部 AAO, 当周期小于 300 nm 时,  $J_{sc}$  相对增强随着周期的增加迅速上升, 当期在 300 nm 到 460 nm 范围内变化时,  $J_{sc}$  相对增强变化不大, 当周期为 380 nm 时有最佳的增强效果, 当周期大于 460 nm 时,  $J_{sc}$  相对增强又会迅速减小. 从图 6 中还可以看出, 只考虑周期的条件下, 在 300 nm 到 460 nm 范围内, 底部 AAO 的  $J_{sc}$  相对增强效果要比上表面好.

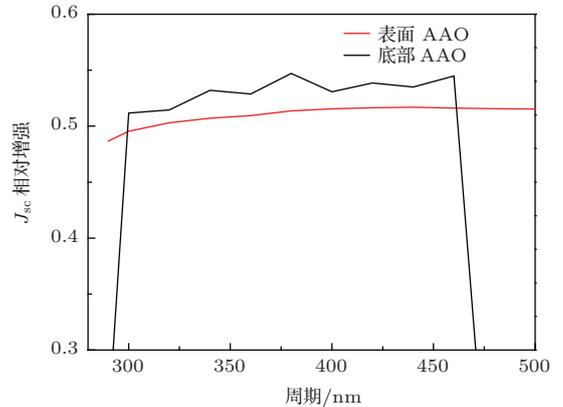


图6 (网刊彩色) 表面和底部不同 AAO 周期下的  $J_{sc}$  相对增强 (表面和底部占空比分别为 0.5 和 0.75, 厚度分别为 75.6 nm 和 78.6 nm)

### 3.5 组合条件下的光学特性研究

通过前面的讨论可以看到, AAO 单独在上表面作为减反层和底部作为背反射层都有很好的光吸收增强效果. 表面和底部最佳的结构参数是: 表面周期 440 nm, 厚度 75 nm, 占空比 0.5, 底部周期 380 nm, 厚度 90 nm, 占空比为 0.75. 为了得到更高的陷光效果, 将表面和底部 AAO 结构做了组合, 得到了表面和底部都带有 AAO 的组合陷光结构. 考虑到周期对 AAO 的  $J_{sc}$  相对增强的影响不大, 且底部的陷光效果要比表面好, 为了建模方便, 在讨论组合结构时, 表面和底部的周期都为 380 nm, 其他参数采用的是最佳值. 不同陷光结构下的吸收谱线模拟图如图 7 所示. 从图 7 中可以看出, 与无陷光结构的时候相比, 无论是表面还是底部 AAO 都能

加强太阳能电池的光吸收. 上表面 AAO 可以加强 280—600 nm 范围内的吸收, 而底部 AAO 和 Ag 背反射结构可以加强 500—1100 nm 范围内的光吸收, 在组合结构下, 280—1100 nm 范围内的光吸收都会被加强. 对图 7 做积分处理, 可得到不同组合结构下的吸收率, 结果如表 1 所示. 从表 1 中可以看出, 不同陷光结构对光吸收的影响略有不同, 组合结构下光吸收率可达到 64.37%. 与裸硅相比, 相对增强为 74.44%, 与此对应的  $J_{sc}$  从 35.12 mA/cm<sup>2</sup> 增加到 71.59 mA/cm<sup>2</sup>.

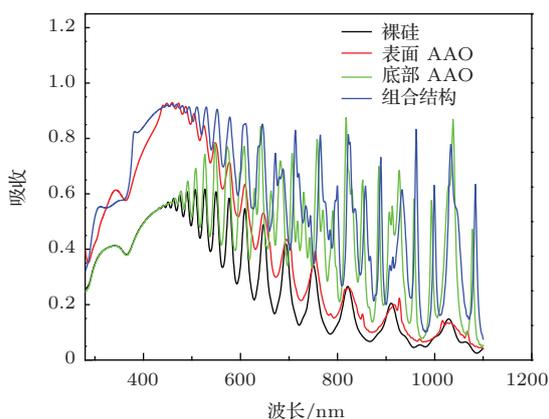


图 7 (网刊彩色) 不同陷光结构下的吸收谱线模拟图

表 1 不同陷光结构下的吸收率

	吸收率/%	相对增强/%
裸硅	36.90	
表面 AAO	54.54	47.80
底部 AAO	45.33	22.85
组合陷光结构	64.37	74.44

## 4 结 论

本文提出了一种新型的表面和底部都带有 AAO 纳米光栅的薄膜硅太阳能电池陷光结构. 利用 FDTD 方法分别仿真研究了表面和底部 AAO 占空比、厚度、周期对太阳能电池光电特性的影响. 仿真结果表明, AAO 的陷光作用与其几何参数息息相关. 表面 AAO 最佳结构参数是周期 440 nm, 厚度 75 nm, 占空比 0.5, 底部 AAO 最佳结构参数是周期 380 nm, 厚度 90 nm, 占空比 0.75. 吸收光谱的仿真结果表明, 组合结构下可加强薄膜硅太阳能电池 280—1100 nm 范围内的光吸收, 吸收相对增强可以达到 74.44%.

由于 AAO 制作简便, 成本低廉, 适于批量生产, 可以预计在不久的将来, AAO 在薄膜硅太阳能电池应用上必将发挥更大的作用.

## 参考文献

- [1] Chen J Y, Chang W L, Huang C K, Sun K W 2011 *Opt. Express* **19** 14411
- [2] Sun C H, Ho B J, Jiang B, Jiang P 2008 *Opt. Lett.* **33** 2224
- [3] Mizutani A, Kanamori Y, Maruyama A, Kikuta H 2009 *J. Opt. Soc. Am. A* **26** 337
- [4] Li Y F, Zhang J H, Yang B 2010 *Nano Today* **5** 117
- [5] Herzinger C M, Johs B, McGahan W A, Woollam J A, Paulson W 1998 *Appl. Phys.* **83** 3323
- [6] Wada K, Kimerling L C, Toyodan N 2004 *Patent* **6** 750 393
- [7] Zeng L, Yi Y, Hong C, Liu J, Feng N, Duan X, Kimerling L C, Alamairu B A 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 111111
- [8] Zhu Z P, Qin Y Q 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 157801 (in Chinese) [朱兆平, 秦亦强 2013 物理学报 **62** 157801]
- [9] Li G L, He L J, L J, Li X S, Liang S, Gao M M, Yuan H W 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 197202 (in Chinese) [李国龙, 何力军, 李进, 李学生, 梁森, 高忙忙袁海雯 2013 物理学报 **62** 197202]
- [10] Fang J, Qi Y H, Wang C R, Wei Z, Fang Y Q, Yi Z Z, Jing X 2012 *Microelectron. Eng.* **103** 126
- [11] Bermel P, Luo C Y, Zeng L R, Lionel C, Kimerling, John D 2007 *Opt. Express* **15** 16986
- [12] Zhong H, Gao Y Y, Zhou R L, Zhou B J, Tang L Q, Wu L X, Li H J 2011 *Spectrosc. Spect. Anal.* **3** 1739 (in Chinese) [钟慧, 高永毅, 周仁龙, 周并举, 唐立强, 吴玲锡, 李宏建 2011 光谱学与光谱分析 **3** 1739]
- [13] Cheng F X, Wang L S, Xu W Y 2013 *Chin. Phys. B* **22** 045202
- [14] James G M, Shi S Y, Chen C H, Timothy C, Allen B, Christiana H, Dennis W P 2008 *Opt. Express* **16** 15238
- [15] Joannopoulos J D, Johnson S G, Winn J N Meade R D 2008 *Photonic Crystals: Molding The Flow of Light* (Princeton: Princeton University Press) p44
- [16] Sheng P, Bloch A, Stepleman R 1983 *Appl. Phys. Lett.* **43** 579
- [17] Morf R H, Kiess H 1989 *Proceedings of Ninth E. C. Photovoltaic Solar Energy Conference Freiburg, West Germany, September 25–29, 1999* p313
- [18] Kiess H, Morf R H 1989 *Proceedings of the Optical Materials Technology for Energy Efficiency and Solar Energy Conversion VIII San Diego, USA, August 10–11, 1989* p124
- [19] Heine C, Morf R H 1995 *Appl. Opt.* **34** 2476
- [20] Zheng C G, Jiang J L, Xian F L, Qiang H X, Wu H, Li X Y 2011 *Chin. Phys. B* **20** 094201
- [21] Masuda H, Fukuda K 1995 *Science* **268** 1466
- [22] Liu H W, Guo H M, Wang Y L, Shen C M, Yang H T, Wang Y T, Wei L 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 626 (in Chinese) [刘虹雯, 郭海明, 王业亮, 申承民, 杨海涛, 王雨田, 魏龙 2004 物理学报 **53** 626]

- [23] Shimizu T, Nagayanagi M, Ishida T, Sakata O, Oku T, Sakaue H, Takahagi T, Shingubara S 2006 *Electrochem. Solid-State Lett.* **9** 13
- [24] Liu W, Liu X H, Cui W B, Gong W J, Zhang Z D 2013 *Chin. Phys. B* **22** 027104
- [25] Sheng X, Liu J F, Coronel N, Agarwal A M, Michel, Kimling L C 2010 *IEEE Photonic. Tech. L.* **22** 1394
- [26] Yang T S, Wang X D, Liu W, Shi Y P, Yang F H 2013 *Opt. Express* **21** 18207
- [27] Sheng X, Liu J F, Michel J, Agarwal A G, Kimmerling L C 2009 *Proceedings of the 34th IEEE Photovoltaic Specialists Conference Philadelphia, PA, June 7–12, 2009* p2395

## Design and simulation of anodic aluminum oxide nanograting double light trapping structure for thin film silicon solar cells\*

Qin Fei-Fei Zhang Hai-Ming<sup>†</sup> Wang Cai-Xia Guo Cong Zhang Jing-Jing

(School of Science, Tianjin Polytechnic University, 300387, China)

( Received 22 March 2014; revised manuscript received 27 May 2014 )

### Abstract

In this paper, we design a type of light trapping structure with an anodic aluminum oxide (AAO) nanograting on the surface and the backside of thin Si solar cells. Simulation of the influence of AAO's period, hole thickness, and duty cycle on thin Si solar cell's short current density are carried out by finite difference time domain method. Simulation results show that the optimum size for surface AAO is 0.5 for duty cycle, 75 nm for thickness, 440nm for period, and the optimum AAO size for rear AAO is 0.75 for duty cycle, 90nm for thickness, 380nm for period. The double AAO light trapping structure can increase the light absorption in the wavelength range from 280 to 1100nm, the absorption relative enhancement is 74.44%.

**Keywords:** thin Si solar cell, anodic aluminum oxide, light trapping structure, finite difference time domain method

**PACS:** 88.40.-j, 78.20.Bh, 72.40.+w, 42.70.-a

**DOI:** 10.7498/aps.63.198802

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61274064).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: zhmtjwl@163.com