

硅薄膜太阳能电池表面纳米线阵列光学设计

耿超 郑义 张永哲 严辉

Optical design of nanowire array on silicon thin film solar cell

Geng Chao Zheng Yi Zhang Yong-Zhe Yan Hui

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 070201 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.070201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.070201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I7>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

广义非线性薛定谔方程描述的波坍缩及其演变

[Collapse and evolution of wave field based on a generalized nonlinear Schrödinger equation](#)

物理学报.2016, 65(4): 040201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.040201>

点堆中子动力学方程组曲率权重法的解

[Curvature weight method of solving the point reactor neutron kinetic equations](#)

物理学报.2015, 64(22): 220201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.220201>

耦合高压斯特林制冷效应的复合磁制冷循环的数值模拟

[Numerical simulation of a hybrid magnetic refrigeration combined with high pressure Stirling regenerative refrigeration effect](#)

物理学报.2015, 64(21): 210201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.210201>

水平温差对环形浅液池内 Marangoni-热毛细对流的影响

[Effect of horizontal temperature difference on Marangoni-thermocapillary convection in a shallow annular pool](#)

物理学报.2015, 64(14): 140202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.140202>

轴对称构件受力分析的插值粒子法

[Interpolating particle method for mechanical analysis of space axisymmetric components](#)

物理学报.2015, 64(10): 100204 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.100204>

硅薄膜太阳能电池表面纳米线阵列光学设计*

耿超¹⁾ 郑义¹⁾ 张永哲^{1)2)†} 严辉^{1)‡}

1)(北京工业大学材料科学与工程学院, 北京 100124)

2)(中国科学院半导体研究所, 半导体材料科学重点实验室, 北京 100083)

(2015年11月8日收到; 2016年1月18日收到修改稿)

陷光结构的优化是增加硅薄膜太阳能电池光吸收进而提高其效率的关键技术之一. 以硅纳米线阵列为代表的光子晶体微纳陷光结构具有突破传统陷光结构 Yablonovith 极限的巨大潜力. 通常硅纳米线阵列可以用作太阳能电池的增透减反层、轴向 p-n 结、径向 p-n 结. 针对以上三种应用, 本文运用有限时域差分 (FDTD) 法系统研究了硅纳米线阵列在 300—1100 nm 波段的光学特性. 结果表明, 当硅纳米线作为太阳能电池的减反层时, 周期 $P = 300$ nm, 高度 $H = 1.5$ μm , 填充率 (FR) 为 0.282 条件下时, 反射率最低为 7.9%. 当硅纳米线作为轴向 p-n 结电池时, $P = 500$ nm, $H = 1.5$ μm , $FR = 0.55$ 条件下纳米线阵列的吸收效率高达 22.3%. 硅纳米线作为径向 p-n 结电池时, 其光吸收主要依靠纳米线, 硅纳米线 $P = 300$ nm, $H = 6$ μm , $FR = 0.349$ 条件下其吸收效率高达 32.4%, 进一步提高其高度吸收效率变化不再明显. 此外, 本文还分析了非周期性硅纳米线阵列的光学性质, 与周期性硅纳米线阵列相比, 直径随机分布和位置随机分布的硅纳米线阵列都可以使吸收效率进一步提高, 相比于周期性硅纳米线阵列, 优化后直径随机分布的硅纳米线阵列吸收效率提高了 39%, 吸收效率为 27.8%. 本文运用 FDTD 法对硅纳米线阵列的光学特性进行设计与优化, 为硅纳米线阵列在太阳能电池中的应用提供了理论支持.

关键词: 光子晶体, 硅纳米线阵列, 有限时域差分法, 太阳能电池

PACS: 02.60.Cb, 42.25.Gy

DOI: 10.7498/aps.65.070201

1 引言

太阳能电池是利用半导体光电效应直接将太阳能转化为电能的一种绿色清洁能源装置. 以纳米技术为依托的新型太阳能电池采用独特的纳米结构达到了良好的陷光效果^[1-4], 可以有效增加薄膜电池的光吸收, 提高光电转换效率. 因此纳米结构对电池内光学行为的影响必须得到有效的模拟, 才能合理定量地描述太阳能电池的光学特性.

目前, 硅纳米线阵列由于具有独特的光学性质被引入硅太阳能电池的研究, 为新一代硅太阳能电池的

低成本制作、转化效率的提升提供了新思路. 其在太阳能电池领域的研究热点主要有以下三方面: 硅纳米线结构作为传统平板太阳能电池的减反层、制备轴向 p-n 结、径向 p-n 结硅纳米线阵列太阳能电池^[5-7] (图 1). 对于传统金字塔形陷光结构而言, 其平均反射率在 15% 左右, 由于结构尺寸远大于光波波长, 理论上光程最大可增加 $4n^2$ 倍 (即 Yablonovith 极限, 其中 n 为材料折射率, 对晶硅材料 $4n^2 \approx 50$), 而以光子晶体为代表的微纳陷光结构可以突破陷光结构 Yablonovith^[8-10] 极限. 文献表明, 硅纳米线阵列可使太阳光入射的路径长度增大 73 倍^[11], 是一种高效的陷光结构. Hu 和 Chen^[12] 通过计算,

* 国家自然科学基金 (批准号: 51302081, 61575010, 61574009, 11274028, 11574014)、北京市科技新星 (批准号: Z141109001814053)、北京市科委先导与优势材料创新项目 (批准号: Z151100003315018, Z151100003315004, Z151100003515003) 和中国科学院重点实验室开放课题 (批准号: KLSMS-1404) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yzzhang@bjut.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: hyan@bjut.edu.cn

对柱形硅纳米线阵列的光学特性进行了分析, 研究表明, 硅纳米线阵列可以通过改变其形状、结构等实现多种对光场的管理功能, 其反射率远低于传统金字塔结构的反射率, 并且能有效地提高其在长波段处的吸收率, 提高电池转换效率. 但文中仅讨论了空间中硅纳米线阵列的光学特性, 并未给出纳米线阵列与硅基底相结合时其光学性质. 当硅纳米线作为 p-n 结电池时, 得益于其独特的结构, 径向 p-n 结纳米线可以将光吸收与载流子的输运方向正交化, 在纳米线轴向上吸收光子, 而在径向上收集光生载流子^[12-18]. 由于载流子是径向漂移的, 因而其漂移长度大大减少, 降低载流子的复合, 提高了电池的效率. Jung 等^[15]利用硅纳米线阵列结构设计径向 p-n 结太阳能电池, 其效率达到了 7.19%. Kayes 等^[19]在有 p-n 结的平面硅片上刻蚀硅纳米线阵列, 得到轴向 p-n 结太阳能电池, 他们利用长度半径比较高的硅纳米线充分提高了光子吸收率, 理论计算表明轴向 p-n 结太阳能电池能量转化效率能达到 11%. 但轴向或径向 p-n 结硅纳米线太阳能电池的效率均低于传统的平板晶硅 p-n 结太阳能电池, 还需要进一步优化纳米线阵列的结构和光学特性来提高其电池效率.

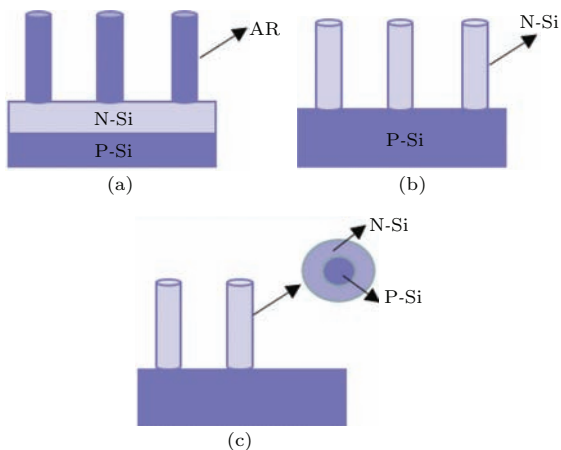


图1 纳米线阵列在太阳能电池中的应用

Fig. 1. The application of nanowire in solar cell.

针对硅纳米线阵列在太阳能电池中的以上三种应用, 其对硅纳米线的光学特性也有不同的要求, 因此需要有针对性地进行设计与优化, 从而降低硅纳米线的光学损失, 提高太阳能电池转换效率. 本文对硅纳米线阵列的光学特性进行了设计与计算, 分析比较了周期性阵列的高度、直径和周期等形貌参数对反射率、吸收率的影响, 旨在对硅纳米线阵列

在太阳能电池中的不同应用提供设计与优化, 得到最佳的吸收效率. 同时, 研究了形貌参数对非周期性硅纳米线阵列光吸收的影响规律.

2 设计与建模

本文采用有限时域差分 (FDTD) 法对硅纳米线阵列的光学特性进行计算. 硅纳米线阵列结构如图 2 所示. 其中纳米线直径为 D , 周期为 P , 高度为 H_1 , 填充率定义为 $FR = \pi D^2 / (4P^2)$, 底层硅基底厚度为 H_2 . 由其结构可得, 纳米线紧密排列时, $FR_{\max} = 0.785$. 麦克斯韦方程组是支配宏观电磁现象的一组基本方程, 假设入射光波为一平面波, 我们采用三维 FDTD 法对空间领域内的电场和磁场进行交替计算, 通过时间领域上更新来模仿电磁场的变化, 达到数值计算的目的.

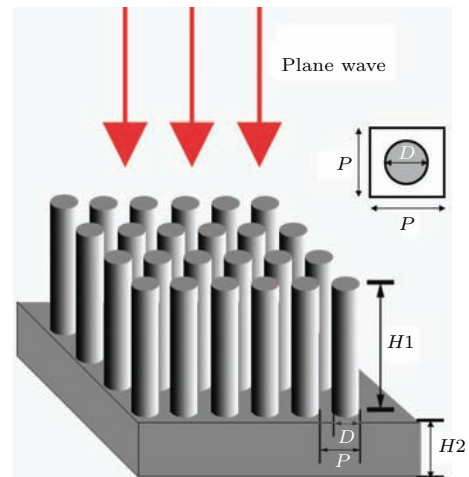


图2 硅纳米线阵列结构示意图

Fig. 2. The structure of the nanowire.

为了计算简洁方便, 在 x, y 方向均设置为周期边界条件, 在 z 方向设置为完全匹配边界条件. 对于单晶硅而言, 其最佳光谱吸收范围是 300—1100 nm, 而在此波段范围内掺杂的硅与本征硅的光学常数差异很小^[19], 可以基本忽略, 因此我们可以使用相同的光学常数来进行计算. 计算时, 我们采用光学手册^[20]中实验测得的本征硅的光学常数. 为了更好地定量分析不同硅纳米线结构对太阳光的吸收, 文中计算了太阳光的吸收效率 η . 在计算光吸收效率时假设每个光子能量大于能带间隙时仅能产生一对电子-空穴对, 且其电子-空穴对的能量为 hc/λ_g , 其中, λ_g 为硅能带间隙对应的

波长. 吸收效率 η 计算公式为

$$\eta = \frac{\int_{310 \text{ nm}}^{\lambda_g} I(\lambda)A(\lambda)(\lambda/\lambda_g)d\lambda}{\int_{310 \text{ nm}}^{4000 \text{ nm}} I(\lambda)d\lambda}, \quad (1)$$

(1) 式中, λ 为入射光波长, $I(\lambda)$ 为标准规定的 AM1.5 标准太阳光谱辐照度, $A(\lambda)$ 为光吸收率, 硅能带间隙对应的波长 λ_g 为 1100 nm, 而 4 μm 为可利用太阳能光谱的上限波长.

3 模拟计算与优化

单晶硅的带隙宽度为 1.12 eV, 理论上从 300—1100 nm 波段的太阳光都能用于光伏发电. 太阳能电池的光学损失主要由反射损失和吸收损失两方面组成, 因此需要合理的光学设计来降低太阳能电池的光学损失, 以提高吸收效率.

3.1 周期性纳米线阵列的光学特性

首先计算了硅纳米线阵列作为减反层时的光学性质. 对于裸硅来说, 其在 300—1100 nm 波段范围内平均反射率在 30% 以上. 因此降低反射率是减少光学损失的重要途径.

由图 1(a) 可知, 硅纳米线阵列作为减反层时, 其应当有较低的反射率, 以达到减反陷光的目的. 图 3 为硅纳米线阵列在不同周期 P 、填充率 FR 和高度 H 下的反射率 R . 由图 3(a) 可以看到, 在纳米线阵列高度固定 ($H = 1.5 \mu\text{m}$) 时, FR 是影响纳米线阵列反射率的主要因素, 当 FR 不断增加时 P 先降低后增加, 在 $P = 300 \text{ nm}$, $FR = 0.282$ 时, R 最

低为 7.9%. 从图 3(b) 可知提高纳米线的高度也可以有效地降低其反射率, 当 $H = 10 \mu\text{m}$ 时, R 仅为 5.8%. 经计算可知: P 对于 R 的影响较小, FR 和纳米线高度 H 是影响反射率的主要因素, FR 在 0.3 时有较低的反射率, 同时提高其高度也可以有效地降低其反射率.

对于图 1(b), 当硅纳米线作为轴向 p-n 结电池时, 硅纳米线阵列与硅基底共同组成了电池的 p-n 结, 需要合理的优化纳米线阵列的几何参数, 降低其光学损失, 提高增整体的吸收效率 η . 我们将此结构称为结构 B. 为了更清楚地了解几何参数如何影响其吸收效率, 我们分别计算了 300—1100 nm 波段内硅纳米线阵列和硅基底的吸收情况.

结构 B 的相关参数为: $P = 500 \text{ nm}$, $H1 = 1.5 \mu\text{m}$, $H2 = 1 \mu\text{m}$, $D = 100\text{—}400 \text{ nm}$. 图 4(a) 为结构 B 的吸收情况, 同时与 2.5 μm 厚的硅薄膜的吸收情况进行了比较; 图 4(b) 和图 4(c) 分别为纳米线和硅基底的吸收规律; 图 4(d) 为不同周期下填充率随吸收效率的变化规律. 从图 4(a) 可以看到, 与 2.5 μm 厚的硅薄膜相比, 结构 B 的吸收有了明显提高. 由 (1) 式可得, $D = 300 \text{ nm}$ 时该结构吸收效率为 23.4%, 而同等厚度 2.5 μm 的硅薄膜其吸收效率为 19.4%, 吸收效率提高了 20.6%. 在 300—600 nm 波段其吸收率随着直径增加而增加, 而在 600—1100 nm 波段随着直径增加其吸收率变化并不明显. 在短波段处, 入射光的波长小于或接近于硅纳米线阵列的结构尺寸, 使得入射光散射效应占主导作用, 延长了光的路径长度, 增加了光的吸收. 在长波段处, 入射光的波长大于硅纳米线阵

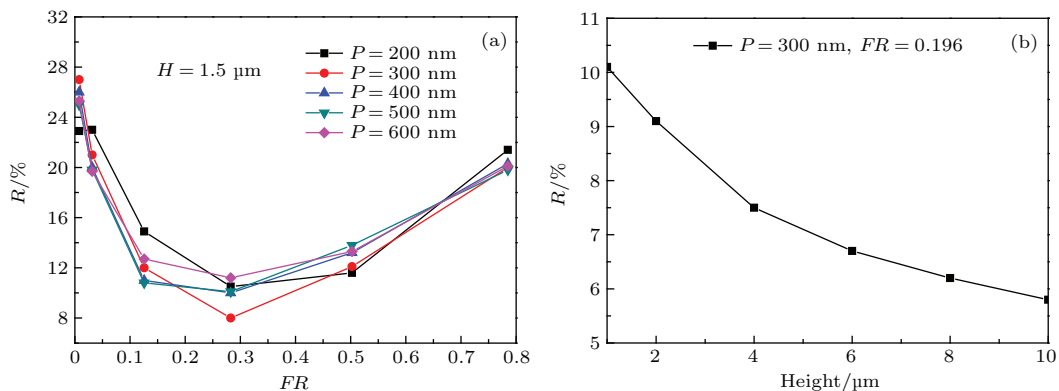


图 3 (网刊彩色) 纳米线阵列反射率 (a) 不同周期和填充率下的反射率; (b) 不同高度纳米线阵列的反射率
Fig. 3. (color online) Reflection of the SiNW array: (a) Reflection of the SiNW array with varying period and filling ratio; (b) reflection of the SiNW array with varying height.

列的结构尺寸,使得长波段的入射光很容易地穿透硅纳米线阵列,从而导致了长波段处较低的吸收率.同时注意到纳米线直径较小时其吸收甚至比硅薄膜还低,原因是较细的硅纳米线的填充率较低,仅有底部的硅基底对光有一定的吸收,因此需要适当提高纳米线的填充率来获得较高的吸收效率.

图4(d)为由(1)式计算得到的吸收效率,可以看到相对于同等厚度的硅薄膜,纳米线阵列可以有效地提高吸收效率.在周期不变时,填充率是影响

吸收效率的一个重要因素,吸收效率随填充率的增加先增加后减小,填充率在0.35—0.55范围内时,硅纳米线阵列有较高的吸收效率,当填充率进一步提高到最大0.785,此时较高的填充率使得纳米线阵列基本上等同于一层硅薄膜,反射率较高,不能对光有效地吸收.在填充率不变时,增大周期也可以提高吸收效率,当周期增加到400 nm以上时,其吸收效率变化很小,此时影响吸收效率的主要因素仍然是填充率.

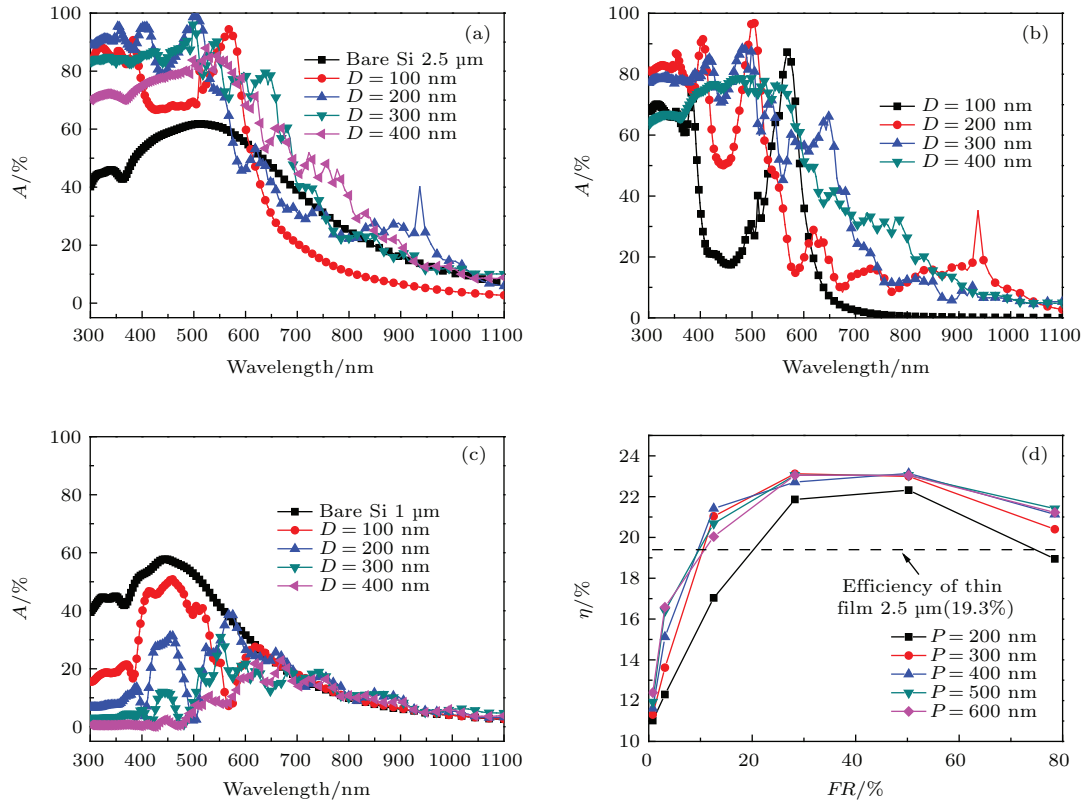


图4 (网刊彩色) 硅纳米线阵列直径对吸收率的影响曲线 ($P = 500 \text{ nm}$, $H = 1.5 \mu\text{m}$, $D = 100\text{--}400 \text{ nm}$) (a) 整体吸收率; (b) 硅纳米线阵列的吸收率; (c) 硅基底吸收率; (d) 不同周期纳米线直径对吸收效率的影响
Fig. 4. (color online) Absorption of the SiNW arrays with varying diameter ($P = 500 \text{ nm}$, $H = 1.5 \mu\text{m}$, $D = 100\text{--}400 \text{ nm}$): (a) The total absorption; (b) absorption of the SiNW arrays; (c) absorption of the Si film; (d) ultimate efficiency of the SiNW arrays as a function of lattice constant for several filling ratios.

对于图1(c)的径向p-n结电池来说,硅纳米线阵列作为太阳电池的p-n结,因此需要提高硅纳米线阵列对光的有效吸收.因此我们进一步研究了高度对硅纳米线阵列吸收效率的影响.

图5为 $P = 300 \text{ nm}$, $D = 200 \text{ nm}$, $H = 1\text{--}10 \mu\text{m}$ 时硅纳米线阵列的吸收率.图5(a)为硅纳米线阵列的高度随吸收率的变化情况,图5(b)和图5(c)分别为硅纳米线阵列和硅基底的吸收情况,图5(d)为由(1)式计算得到的不同高度下吸收效率随高度的变化情况.在图5(a)中,随着硅

纳米线阵列高度的增加其吸收率也随之增加,在300—500 nm波段内,硅纳米线高度对其吸收率影响不大,原因是硅在短波长处较高的吸收系数使其有较高的吸收率.在500—850 nm波段,吸收率有着明显的提高,高度增加使硅纳米线阵列的几何尺寸大于入射光波,入射光的散射效应明显,增加了光在硅纳米线阵列中的传播路径,提高了对光的吸收.因此对于径向p-n结电池来说,提高硅纳米线的长度可以有效地提高其吸收效率.在图5(d)中,在填充率一定时,吸收效率均随

高度增加而增加,在填充率为0.349,硅纳米线高度为6 μm 时,其吸收效率最高为32.4%,进一步增加高度其吸收效率变化不再明显.在高度一定

时,吸收效率随填充率提高先增加后降低,填充率在0.35—0.55范围内硅纳米线阵列有较高的吸收效率.

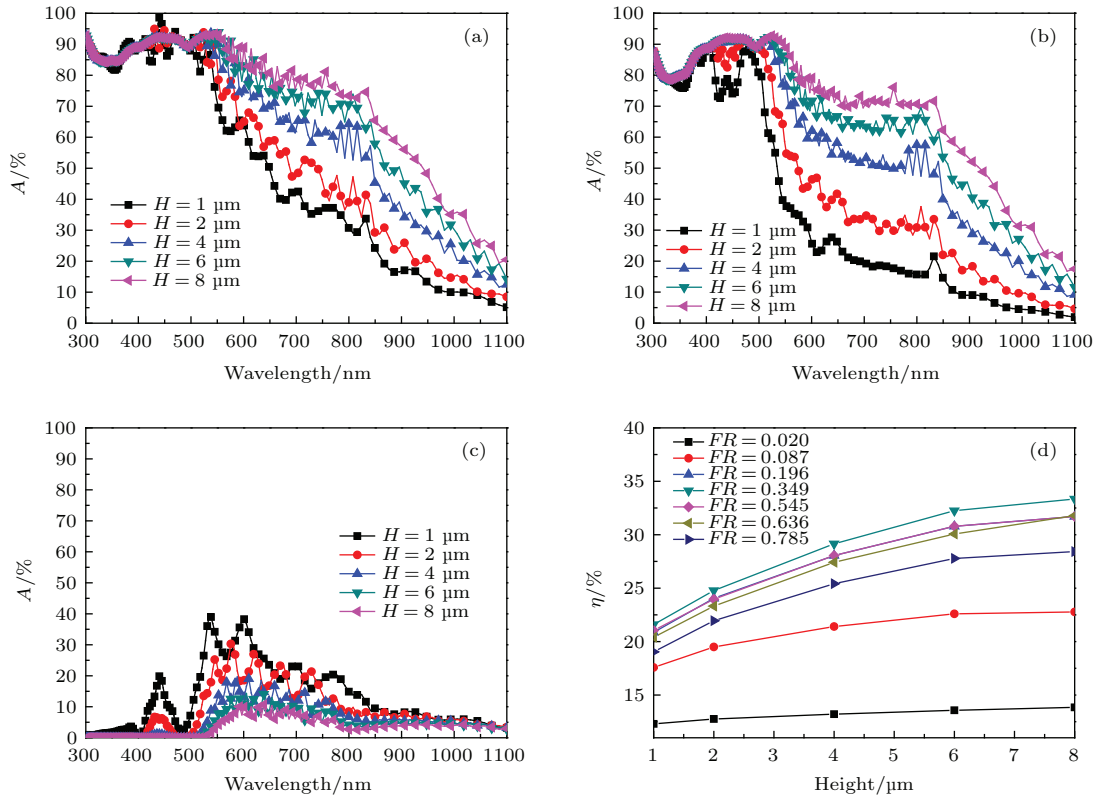


图5 (网刊彩色) 硅纳米线阵列高度对吸收率的影响曲线 ($P = 300 \text{ nm}$, $D = 200 \text{ nm}$, $H = 1\text{—}10 \mu\text{m}$) (a) 整体吸收率; (b) 纳米线阵列的吸收率; (c) 底部薄膜吸收率; (d) 不同填充率下纳米线高度对吸收效率的影响
Fig. 5. (color online) Absorption of the SiNW arrays with varying height ($P = 300 \text{ nm}$, $D = 200 \text{ nm}$, $H = 1\text{—}10 \mu\text{m}$): (a) The total absorption; (b) absorption of the SiNW arrays; (c) absorption of the Si film; (d) ultimate efficiency of the SiNW arrays as a function of lattice constant for several filling ratios.

3.2 非周期性硅纳米线阵列的光学特性

在制备硅纳米线阵列的过程中,硅纳米线阵列的几何参数因环境因素出现波动,并非严格的周期性阵列,因此我们对非周期性的硅纳米线阵列的光学特性进行了研究.

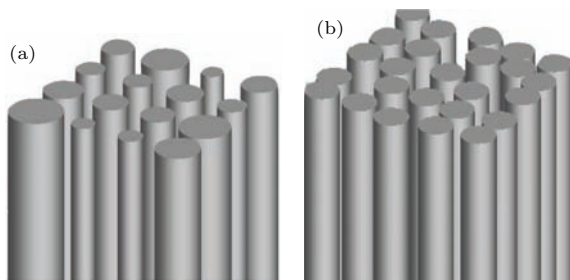


图6 非周期性硅纳米线阵列 (a) 直径随机波动; (b) 位置随机分布
Fig. 6. Random nanowire arrays: (a) Random diameter nanowire arrays; (b) random position nanowire arrays.

图6(a)和图6(b)分别为直径波动和位置随机分布的硅纳米线阵列,其中硅纳米线高度 $H = 1 \mu\text{m}$,周期 $P = 200 \text{ nm}$,直径 $D = 140 \text{ nm}$.引入随机函数,分别使硅纳米线的直径与位置在一定范围内波动,波动值 f 为10%—30%.

图7(a)和图7(b)分别为位置随机分布和直径波动的硅纳米线阵列的吸收率曲线,图7(c)为最终的吸收效率,图7(d)—(f)分别为周期性硅纳米线阵列和 $f = 10\%$ 时,位置随机分布、直径随机分布硅纳米线阵列的电场强度.在600—1100 nm波段,硅纳米线阵列直径的波动会使吸收率有明显的提高.并且随着波动值增加其吸收率也随之增加. $f = 30\%$ 时,其吸收效率为27.9%,而周期性硅纳米线阵列吸收效率仅为19.9%.由图7(c)可知位置随机分布同样可以使硅纳米线阵列的吸收率提高,当 $f = 20\%$ 时,吸收效率最

大为23%。图7(d)–(f)为硅纳米线阵列截面的电场强度分布图，可以看出其内部共振情况：周期性排列的硅纳米线阵列硅纳米线之间的共振情况并不明显，电场强度较低；位置随机分布的硅纳米线阵列相较于周期性硅纳米线阵列，其硅纳

米线之间共振情况有所提高，电场强度在部分位置有所提高；而对于直径随机分布的硅纳米线阵列其硅纳米线之间的共振明显，电场强度有了明显的提高，有效增加了硅纳米线阵列对于能量的吸收。

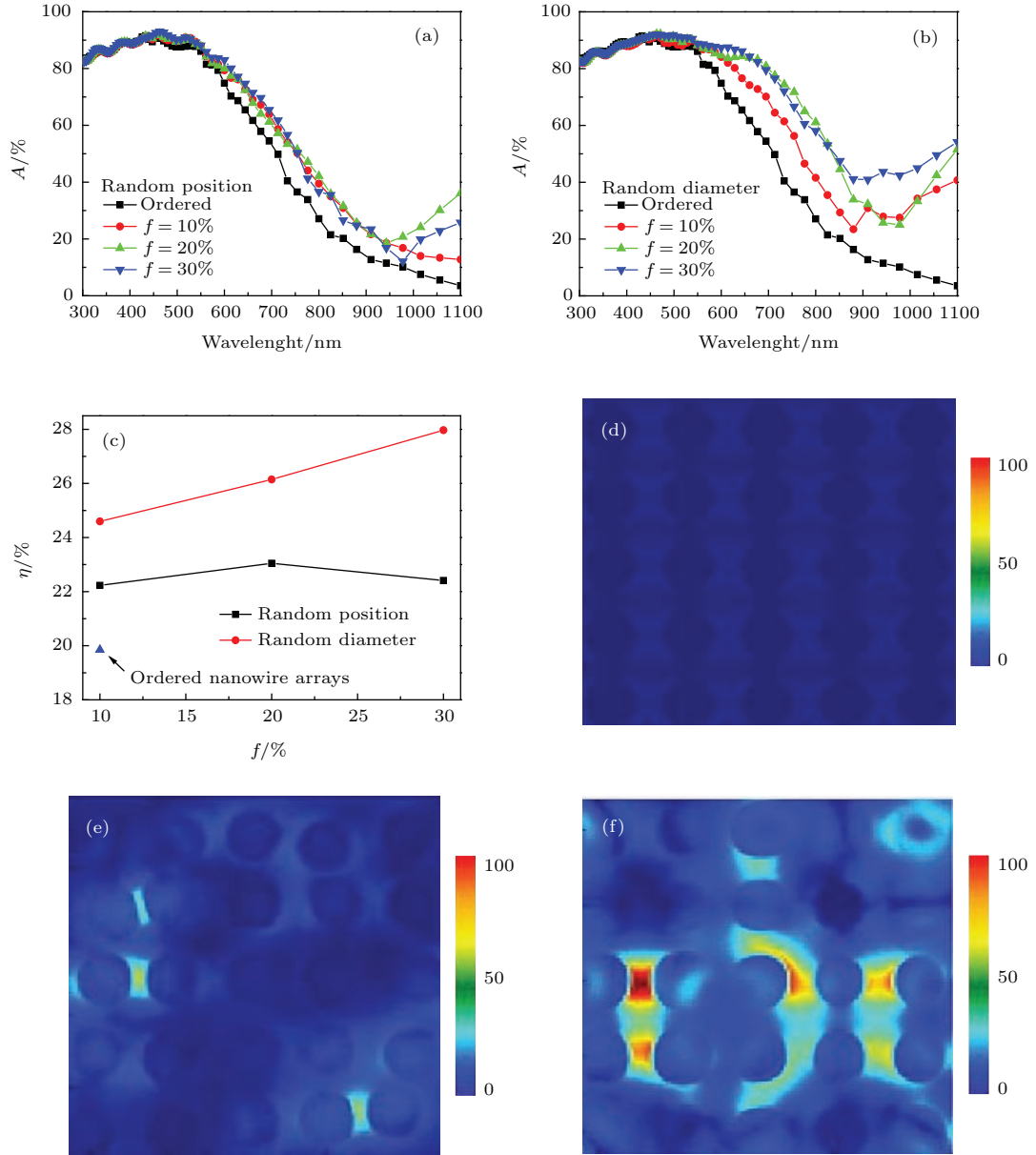


图7 (网刊彩色) 周期阵列、位置随机波动、直径随机分布硅纳米线阵列的电场强度分布 (a) 位置波动硅纳米线阵列的吸收率; (b) 直径波动硅纳米线阵列的吸收率; (c) 周期阵列、位置随机波动、直径随机分布硅纳米线阵列吸收效率; (d) 周期性硅纳米线阵列电场强度; (e) 位置随机分布硅纳米线阵列的电场强度; (f) 直径随机分布硅纳米线阵列的电场强度

Fig. 7. (color online) The cross view of electric field energy density distributions of the ordered nanowire arrays, random position nanowire arrays and random diameter nanowire arrays: (a) The absorption of random diameter nanowire arrays; (b) the absorption of random position nanowire arrays; (c) ultimate efficiencies of the ordered nanowire arrays, random position nanowire arrays and random diameter nanowire arrays; (d) the electric density of ordered silicon nanowire arrays; (e) the electric density of random position silicon nanowire arrays; (f) the electric density of random diameter silicon nanowire arrays.

4 结 论

硅纳米线阵列可以作为太阳电池的减反层, 轴向 p-n 结、径向 p-n 结太阳电池, 对于以上三种应用, 其对纳米线阵列的光学特性要求是不同的. 本文运用 FDTD 法对硅纳米线阵列的光学特性进行了有针对性的设计与优化, 以降低硅纳米线的光学损失, 提高太阳电池的转换效率. 结果表明: 当硅纳米线作为太阳电池的减反层时, 在周期 $P = 300 \text{ nm}$, 高度 $H = 1.5 \text{ }\mu\text{m}$, 填充率为 0.282 时, 反射率最低为 7.9%; 对于轴向 p-n 结电池, 当硅纳米线周期 $P = 500 \text{ nm}$, 高度 $H = 1.5 \text{ }\mu\text{m}$, 填充率在 0.35—0.55 时, 硅纳米线阵列的吸收效率均在 22% 以上, 而同等厚度的硅薄膜电池其吸收效率仅为 19.3%; 对于径向 p-n 结电池, 其光吸收主要依靠纳米线, 在周期 $P = 300 \text{ nm}$, 纳米线的高度 $H = 6 \text{ }\mu\text{m}$ 时, 填充率为 0.349, 其吸收效率达 32.4%, 进一步增加其高度吸收效率提高不再明显. 相比于周期性硅纳米线阵列, 非周期性硅纳米线阵列有更高的吸收效率. 直径随机分布和位置随机分布的硅纳米线阵列都可以使吸收效率进一步提高, 优化后直径随机分布的硅纳米线阵列由于硅纳米线之间强烈的耦合作用, 吸收效率提高了 39%, 达到了 27.8%. 本文对硅纳米线阵列的光学特性进行设计与优化, 为硅纳米线阵列在太阳电池中的应用提供了理论支持.

参考文献

- [1] Chen L, Wang Q K, Shen X Q, Chen W, Huang K, Liu D M 2015 *Chin. Phys. B* **24** 104201
- [2] Tian B, Kempa T J, Lieber C M 2009 *Chem. Soc. Rev.* **38** 16
- [3] Chen F X, Wang L S, Xu W Y 2013 *Chin. Phys. B* **22** 045202
- [4] Martinson A B F, Elam J W, Hupp J T, Pellin M J 2007 *Nano Lett.* **7** 2183
- [5] Green M A 2004 *Sol. Energy* **76** 3
- [6] Jeong S, McGehee M D, Cui Y 2013 *Nat. Commun.* **4** 2950
- [7] Stelzner T, Pietsch M, Andra G, Falk F, Ose E, Christiansen S 2008 *Nanotechnology* **19** 295203
- [8] Wang K X, Yu Z, Liu, Cui Y V, Fan S 2012 *Nano Lett.* **12** 1616
- [9] Yu Z, Raman A, Fan S 2010 *PNAS* **107** 17491
- [10] Park B, Kim M, Lee Y 2011 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **95** 1141
- [11] Garnett E, Yang P D 2010 *Nano Lett.* **10** 1082
- [12] Hu L, Chen G 2007 *Nano Lett.* **7** 3249
- [13] Sun C, Min W L, Linn N C, Jiang P, Jiang B 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 231105
- [14] Yang L M, Pan C Y, Lu F P, Chang C W, Feng S W, Tu L W 2015 *Opt. Laser Technol.* **67** 72
- [15] Jung J Y, Guo Z Y, Jee S W, Um H D, Park K T, Hyun M S, Yang J M, Lee J H 2010 *Nanotechnology* **21** 445303
- [16] Hao J, Lu N, Xu H, Wang W, Gao L, Chi L 2009 *Chem. Mater.* **21** 1802
- [17] Kim J, Inns D, Fogel K, Sadana D 2010 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **94** 2091
- [18] Peng K, Xu Y, Wu Y, Yan Y, Lee S T, Zhu J 2005 *Small* **1** 1062
- [19] Kayes B M, Atwater H A, Lewis N S 2005 *J. Appl. Phys.* **97** 114302
- [20] Palik E D 1985 *Handbook of Optical Constants of Solids* (Ed. 2) (San Diego: Academic Press) pp519–529

Optical design of nanowire array on silicon thin film solar cell*

Geng Chao¹⁾ Zheng Yi¹⁾ Zhang Yong-Zhe^{1)2)†} Yan Hui^{1)‡}

1) (*College of Materials Science and Engineering, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China*)

2) (*Key Laboratory of Semiconductor Materials Science, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China*)

(Received 8 November 2015; revised manuscript received 18 January 2016)

Abstract

Light trapping has been considered as an important strategy to increase the conversion efficiency of silicon thin film solar cell. It shows that photonic crystal with feature size comparable to the wavelength, for example, the silicon nanowire array has a great potential to exceed the conventional Yablonovitch $4n^2$ limit. Silicon nanowire array has been designed and constructed on silicon thin film solar cell due to its excellent optical properties. Generally, silicon nanowire array is used as the antireflection coating, axial or radial p-n junction of solar cell. Different applications of the silicon nanowire arrays need different optical properties. Theoretical investigations show that the optical property is strongly dependent on the structural parameters. In this work, several structural parameters including period (P), diameter (D), height (H), and filling ratio (FR) are optimized when silicon nanowire array plays different roles. Here, by using the finite difference time domain (FDTD) method, we focus on the relations between the structural parameters and the optical properties including reflection and absorption from 300 to 1100 nm. In the FDTD simulation model, the substrate material is crystal silicon film, and the silicon nanowire array is on the surface of the substrate. In this calculation, the top and the bottom of the unit cell are air with perfectly matched layers, and with periodic boundary conditions at the side walls. When the silicon nanowire array is used as the antireflection coating, the silicon nanowire array shows a lowest reflection (7.9%) with $H = 1.5 \mu\text{m}$, $P = 300 \text{ nm}$, and $FR = 0.282$. When silicon nanowire array acts as axial p-n junction solar cell (the p-n junction is formed by substrate and nanowire array), the absorption efficiency reaches a maximum value of 22.3% with $H = 1.5 \mu\text{m}$, $P = 500 \text{ nm}$, and $FR = 0.55$. When the silicon nanowire array acts as the radial p-n junction solar cell, the absorption efficiency could obtain a maximum value of 32.4% with $H = 6 \mu\text{m}$, $P = 300 \text{ nm}$, $FR = 0.349$. In addition, the optical properties of silicon nanowire array with random diameter and position are also analyzed here. The absorption efficiency of optimized random silicon nanowire array reaches 27.8% compared with a value of 19.9% from ordered silicon nanowire array. All of these results presented here can provide a theoretical support for the silicon thin film solar cell to increase the efficiency in the future application.

Keywords: photonic crystal, silicon nanowire arrays, finite difference time domain method, solar cell

PACS: 02.60.Cb, 42.25.Gy

DOI: 10.7498/aps.65.070201

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51302081, 61575010, 61574009, 11274028, 11574014), the Beijing Nova Program, China (Grant No. Z141109001814053), the Science and Technology Commission of Beijing Municipality, China (Grant Nos. Z151100003315018, Z151100003515004, Z151100003515003), and the Open Foundation of Key Laboratory of Chinese Academy of Sciences (Grant No. KLSMS-1404).

† Corresponding author. E-mail: yzzhang@bjut.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: hyan@bjut.edu.cn