

非晶硅光伏电池表面高效光陷阱结构设计*

周 骏^{1)2)†} 孙永堂²⁾ 孙铁国³⁾ 刘 晓¹⁾ 宋伟杰⁴⁾

1) (宁波大学光学与光电子技术研究所, 宁波 315211)

2) (江苏大学光信息科学与技术系, 镇江 212013)

3) (常州亿晶光电科技有限公司, 常州 213223)

4) (中国科学院宁波材料技术与工程研究所, 宁波 315201)

(2010年8月12日收到; 2010年12月21日收到修改稿)

提出一种应用于非晶硅光伏电池表面的光陷阱结构, 该结构主要由衍射光栅、低折射率 MgF_2 膜层、高折射率 ZnS 膜层及金属 Ag 反射镜组成. 在标准测试条件 (AM1.5 , 100 mW/cm^2 和 $25 \text{ }^\circ\text{C}$) 下, 运用严格耦合波理论, 通过计算 $400\text{--}1000 \text{ nm}$ 波段内的 $1 \text{ }\mu\text{m}$ 厚非晶硅光伏电池的吸收光子数加权平均 $\xi_{\text{AM1.5}}$, 优化光陷阱结构的设计参数. 结果表明: 对于电池前表面减反射结构, 在衍射光栅周期为 800 nm 、高度为 160 nm 、占空比为 0.6125 、 MgF_2 和 ZnS 膜层厚度分别为 90 和 55 nm 时, $\xi_{\text{AM1.5}}$ 达到 74.3% ; 在电池背表面沉积 ZnS/Ag 膜层后, $\xi_{\text{AM1.5}}$ 增大到 76.95% . 因此, 该光陷阱结构可以大幅度提高非晶硅光伏电池的光电转换效率.

关键词: 光陷阱结构, 衍射光栅, 减反射膜, 非晶硅光伏电池

PACS: 88.40.jj, 42.25.Fx, 81.05.Gc, 87.80.Cc

1. 引言

晶硅光伏电池具有较高的转换效率, 制备技术成熟, 因而占有大部分的市场份额, 其缺点是目前的成本较高. 而最近发展起来的薄膜光伏电池 (如非晶硅光伏电池和微晶硅光伏电池等) 由于制造用料少、成本低, 日益受到人们的关注^[1-3]. 但是, 由于薄膜光伏电池材料较薄并且在长波段光子吸收系数很小, 导致电池的转换效率较低. 因此, 在电池表面制备光学结构以增强电池对光子的吸收, 是提高薄膜光伏电池光电转换效率的一种重要方法. 通常, 人们在电池前表面制备减反膜结构以减少光的反射, 如单层减反膜^[4,5] 或多层减反膜^[6]. 相对于单层减反膜, 采用折射率连续变化的多层膜结构的优点是在较宽光谱范围内高透射^[7], 缺点是这种多层膜易破裂, 而且在制备过程中会出现膜层间附着、膨胀失配及层间扩散等问题^[8]. 另一方面, 在电池前表面制备其他形式的光学结构也可以极大降低光的反射, 如在非晶硅光

伏电池表面制备周期为微米量级的衍射光栅减反结构可以明显提高电池的量子效率^[9]. 此外, 在电池背表面采用衍射光栅与布拉格反射光栅等结构反射透射光, 可以增加光在电池内的传播路径, 提高电池对光子的吸收^[10,11].

近年来, 随着光学微加工技术的巨大进步, 可以制备出多种亚微米结构的光学元件^[12,13]. 对于亚微米光栅, 其周期小于入射光波长时, 改变光栅的结构参数可以有效地分配反射光和透射光的能量^[14], 但是其高透射的光谱范围较窄. 对光伏电池而言, 需要在太阳光谱的较宽波段内实现光的高透射. 为此, 我们结合亚微米光栅结构和多层折射率渐变膜层的优点, 设计一种由衍射光栅、低折射率 MgF_2 膜层和高折射率 ZnS 膜层组成的光陷阱结构, 通过研究光栅周期、槽深、占空比以及 MgF_2 膜层厚度和 ZnS 膜层厚度取值对光伏电池光子吸收的影响, 在较大范围实现光的高透射. 同时, 考虑到非晶硅材料在长波段的吸收系数很小, 在电池背表面沉积 ZnS/Ag 反射镜, 增强电池对透射光子的吸收, 提高电池光电转换效率.

* 国家自然科学基金 (批准号: 60977048)、中国科学院国际合作计划 (批准号: 038611)、宁波市国际科技合作计划 (批准号: 2010D10018)、宁波大学王宽成幸福基金和常州亿晶光电科技有限公司资助的课题.

† E-mail: ejzhou@yahoo.com.cn

2. 光陷阱结构模型与效能判据

设计的非晶硅光伏电池光陷阱结构模型如图 1 所示. 该结构由上到下可分为入射区、周期性光栅区、MgF₂ 膜层区、ZnS 膜层区、非晶硅电池、ZnS 缓冲层和金属 Ag 反射镜等七个水平层. 对应电池前表面减反结构的是衍射光栅、MgF₂ 膜层和 ZnS 膜层; 对应电池背表面的光陷阱结构是 ZnS/Ag 反射镜. 图 1 中, Λ 为光栅周期, w 为光栅宽度, d 为光栅槽深, t_1, t_2, t_3, t_4 和 t_5 分别为 MgF₂ 膜层、ZnS 膜层、非晶硅电池、ZnS 缓冲层和金属 Ag 膜厚度. 对比文献 [15] 所设计的结构, 该结构可采用剥离 (lift-off) 技术, 通过传统工艺方法制备. 此外, 光栅材料为 MgF₂ 介质, 可与 MgF₂ 膜层加工连为一体, 以消除制备过程中存在的膜层间附着和扩散渗透等问题.

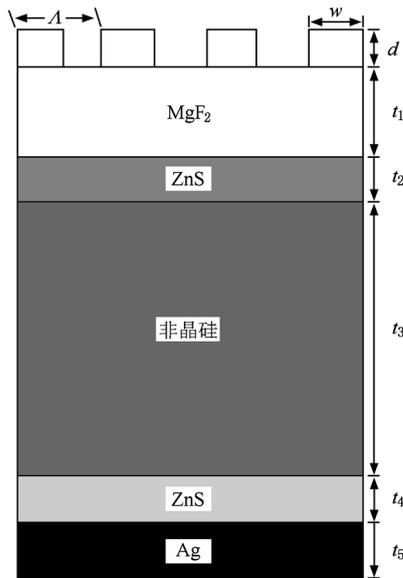


图 1 非晶硅光伏电池表面光陷阱结构模型

光伏电池的吸收光子数加权平均 $\xi_{\text{AMI.5}}$ 可描述光陷阱结构增强光伏电池吸收太阳光的效能, $\xi_{\text{AMI.5}}$ 可定义为

$$\xi_{\text{AMI.5}} = \frac{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} A(\lambda) N(\lambda) d\lambda}{\int_{\lambda}^{\lambda_2} N(\lambda) d\lambda}. \quad (1)$$

这里 λ 为入射光波长, λ_1 和 λ_2 分别为电池吸收光谱范围的上下边界, 一般选取 $\lambda_1 = 400 \text{ nm}$, $\lambda_2 = 1000 \text{ nm}$; $A(\lambda)$ 是非晶硅电池对波长为 λ 的光吸收

率, 可以表示为

$$A(\lambda) = 1 - R(\lambda) - T(\lambda), \quad (2)$$

其中 $R(\lambda)$ 和 $T(\lambda)$ 分别是对应波长为 λ 的入射光在电池前表面的反射率和背表面的透射率, 可由严格耦合波分析计算得到^[16]; $N(\lambda)$ 是在标准测试条件 (AM1.5, 100 mW/cm² 和 25 °C) 下, 入射光子数随波长 λ 的分布, 即太阳光谱, $N(\lambda)$ 由下式表示:

$$N(\lambda) = \frac{W(\lambda)}{E(\lambda)} = \frac{W(\lambda)\lambda}{hc}, \quad (3)$$

其中 $W(\lambda)$ 是对应波长为 λ 的太阳光辐照强度, $E(\lambda)$ 是波长为 λ 的光子能量, $h = 6.6261 \times 10^{-34} \text{ J/s}$, $c = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$.

显然, 对于不同的光陷阱结构, 其增强光伏电池吸收太阳光的效能不同. 在假定非晶硅光伏电池光生载流子的传输和收集效率一定的情况下, 光伏电池吸收的光子数加权平均 $\xi_{\text{AMI.5}}$ 越大, 对应的电池光电转换效率就越高.

3. 数值模拟及结果讨论

为优化设计非晶硅光伏电池表面的光陷阱结构, 需要计算对应的光伏电池的吸收光子数加权平均 $\xi_{\text{AMI.5}}$. 采用标准测试条件, 在波长 $\lambda = 400\text{--}1000 \text{ nm}$ 的范围内, 应用 (3) 式可求得入射光子数随波长 λ 的分布 $N(\lambda)$, 结果如图 2 所示. 模拟中非晶硅光伏电池的厚度 t_3 取 1 μm , 其他参量的取值列于表 1. 同时, 图 3 给出了模拟中采用的各种材料的色散关系曲线, 其中 n 为折射率, k 为消光系数.

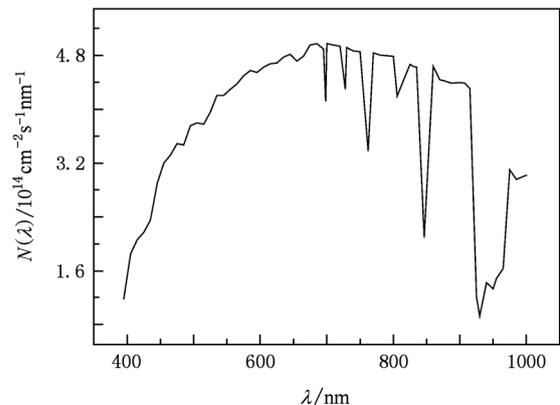


图 2 标准测试条件下各波长光子数分布 $N(\lambda)$

表 1 数值模拟中的相关参量取值

参 量	取 值
衍射光栅周期 Λ/nm	400
衍射光栅槽深 d/nm	100
衍射光栅占空比 w/Λ	0.5
MgF_2 膜层厚度 t_1/nm	150
ZnS 膜层厚度 t_2/nm	50

3.1. 电池前表面光陷阱结构的优化设计

3.1.1. 光栅参数的优化

当波长在 400—1000 nm 范围内的光垂直入射到非晶硅光伏电池前表面时,亚微米衍射光栅的周期、槽深及占空比对入射光的反射率均有影响. 对于不同的衍射光栅结构,由(2)式可知,各波长的光的反射率 $R(\lambda)$ 越小,进入电池的光子数越多,非晶硅光伏电池对入射光的吸收率 $A(\lambda)$ 越大,此波段内光伏电池的吸收光子数加权平均 $\xi_{\text{AMI}.5}$ 也越大. 所以, $\xi_{\text{AMI}.5}$ 最大时对应的衍射光栅的结构参数为

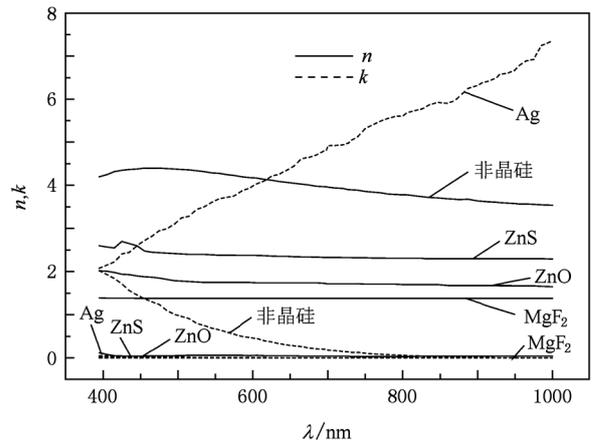


图 3 $\text{MgF}_2, \text{ZnS}, \text{ZnO}, \text{Ag}$ 和非晶硅的色散关系曲线

光栅的最优参数^[16,17]. 衍射光栅各参数与 $\xi_{\text{AMI}.5}$ 的关系如图 4 所示. 由图 4 可知,当衍射光栅的结构参数取值为 $\Lambda = 800 \text{ nm}, d = 160 \text{ nm}$ 和 $w/\Lambda = 0.6125$ 时,电池的 $\xi_{\text{AMI}.5}$ 取得最大值为 72.86%.

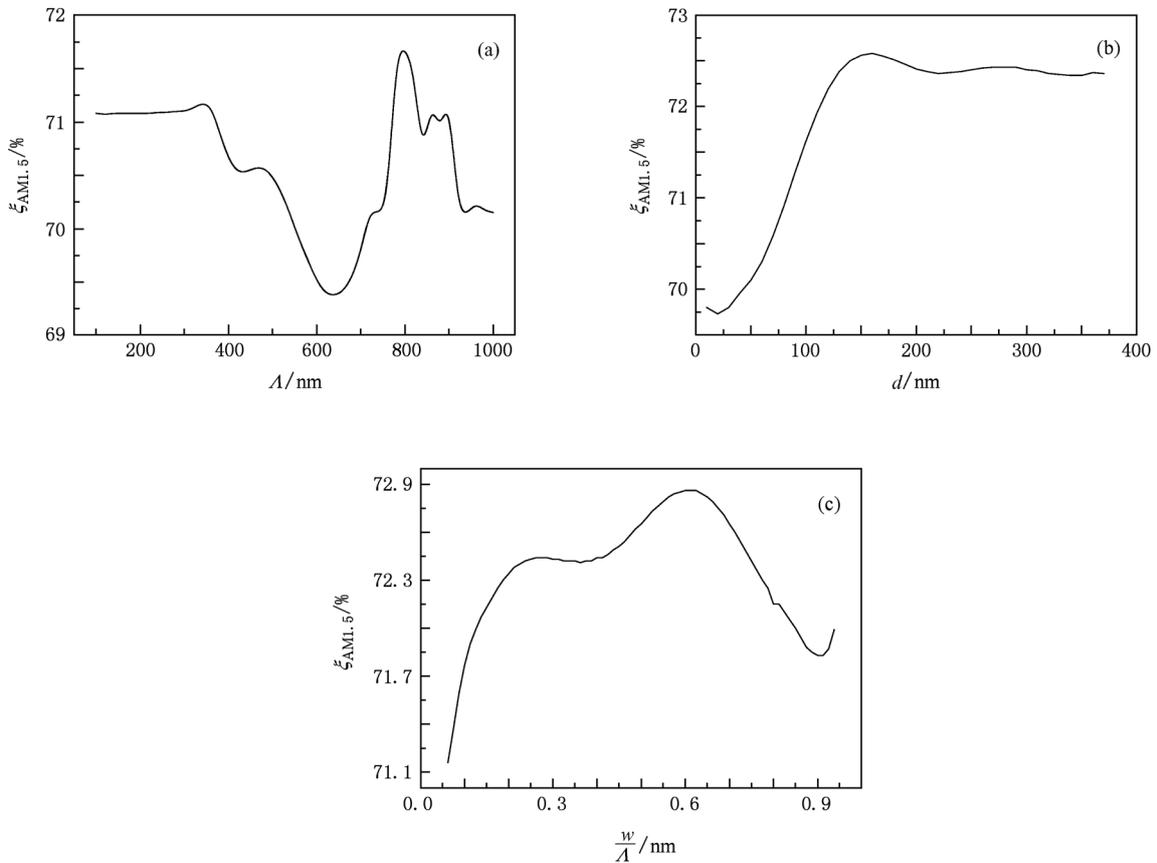


图 4 电池前表面衍射光栅结构参数与 $\xi_{\text{AMI}.5}$ 的关系 (a) 光栅周期 Λ 与 $\xi_{\text{AMI}.5}$ 的关系, (b) 光栅深度 d 与 $\xi_{\text{AMI}.5}$ 的关系, (c) 光栅占空比 w/Λ 与 $\xi_{\text{AMI}.5}$ 的关系

3.1.2. 低折射率膜层厚度和高折射率膜层厚度的优化

图1所示的非晶硅光伏电池前表面光陷阱结构可看作具有双层介质膜的衍射光栅^[18],当入射光经衍射光栅由低折射率膜层 MgF_2 进入到高折射率膜层 ZnS 时,在400—1000 nm 波长范围内,如果低折射率膜层 MgF_2 和高折射率膜层 ZnS 的厚度满足一优化值,使得电池前表面结构的有效反射率 R_{eff} 取得最小值,则电池对入射光子的吸收最多^[19]. 由(1)式可知,此时电池的 $\xi_{AMI.5}$ 取得最大值. 为此,我们对不同厚度的 MgF_2 膜层和 ZnS 膜层情况下电池的 $\xi_{AMI.5}$ 进行了计算,所得结果如图5所示. 从图5可以看出:当 MgF_2 膜层厚度 t_1 一定,而 ZnS 膜层厚度 t_2 增大时,电池的 $\xi_{AMI.5}$ 先增大后减小;当 ZnS 膜层厚度 t_2 一定时, MgF_2 膜层厚度 t_1 的变化对电池 $\xi_{AMI.5}$ 的影响不显著. 结果表明,当 $t_1 = 90$ nm 和 $t_2 = 55$ nm 时,电池的 $\xi_{AMI.5}$ 最大, $\xi_{AMI.5}$ 可以达到 74.31%.

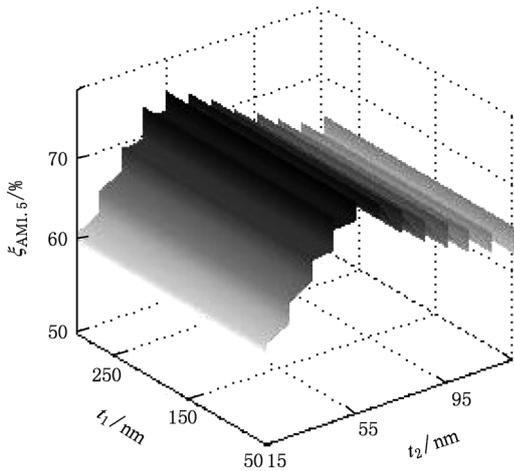


图5 MgF_2 膜层厚度 t_1 、 ZnS 膜层厚度 t_2 与 $\xi_{AMI.5}$ 的关系

对于不同厚度的 MgF_2 和 ZnS 膜层,在 $\lambda = 400$ —1000 nm 范围内电池对各波长吸收的光子数如图6所示. 由图6可知:当 $t_1 = 90$ nm, t_2 从 55 nm 增大到 105 nm 时,几乎在整个波段内吸收的光子数都减少,特别是在可见光区电池吸收的光子数大幅下降,而在长波波段的吸收峰位置有所偏移,并且吸收峰剧烈下降. 当 $t_2 = 105$ nm, t_1 从 90 nm 增大到 150 nm 时,电池在可见光—蓝光区域吸收的光子数下降,而在可见光—红橙光及紫光区域吸收的光子数增加,但在长波长区域吸收的光子数相差不大. 由此可知,当 MgF_2 和 ZnS 的膜层厚度分别取 90 和

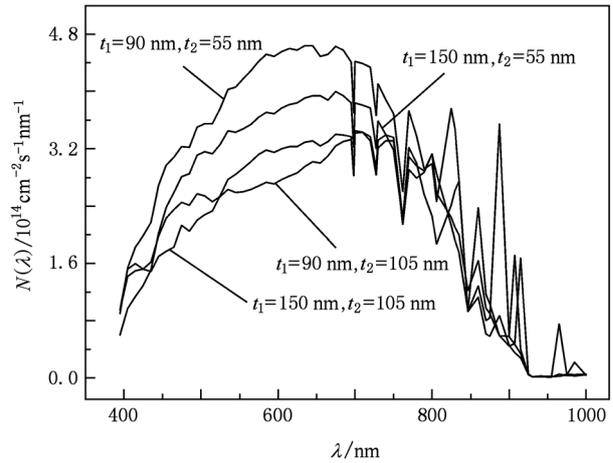


图6 当 $t_1 = 90, 150$ nm 和 $t_2 = 55, 105$ nm 时,电池在400—1000 nm 波长范围内吸收的光子数

55 nm 时,在400—1000 nm 波长范围内电池吸收的光子总数最多,故此时电池的 $\xi_{AMI.5}$ 取得最大值.

3.2. 电池背表面沉积 ZnS/Ag 结构

非晶硅薄膜在可见光波段(400—760 nm)的吸收系数为单晶硅的500倍,而且非晶硅电池通常较薄(1 μm). 但是,非晶硅薄膜在长波段光的吸收系数很小,故有大量光子透射. 图7为前表面光陷阱结构经优化设计后非晶硅电池的背表面在 $\lambda = 600$ —1000 nm 范围内的透射率. 由图7可知,电池背表面在长波段(大于800 nm)的透射率较大. 因此,在电池背表面沉积 ZnS/Ag 反射镜结构,使透射光子经反射进入非晶硅电池被二次吸收,则电池对光子的吸收总数增多. 由(1)式知,该反射镜结构使光伏电池的吸收光子数加权平均 $\xi_{AMI.5}$ 增大,光电转换效率相应提高. 模拟结果表明,当缓冲层 ZnS 厚度为 150 nm,金属 Ag 厚度为 200 nm 时,透射光子几乎全

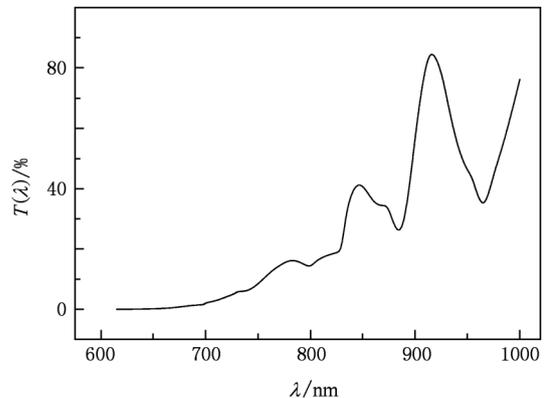


图7 电池背表面在长波段的透射谱

部被反射进入光伏电池,此时电池的 $\xi_{\text{AMI.5}}$ 达到 76.95%. 经计算,采用 ZnO 单层减反膜(厚度为 70 nm)的非晶硅光伏电池的 $\xi_{\text{AMI.5}}$ 为 71.24%. 比较后可知,采用本文提出的光陷阱结构,优化设计后的非晶硅光伏电池的 $\xi_{\text{AMI.5}}$ 增大了 5.71%.

在 400—1000 nm 波段内,优化的 ZnO 单层减反膜与优化设计的光陷阱结构的非晶硅光伏电池吸收的光子数如图 8 所示. 由图 8 可知,与 ZnO 单层减反膜结构相比,由衍射光栅、低折射率膜层、高

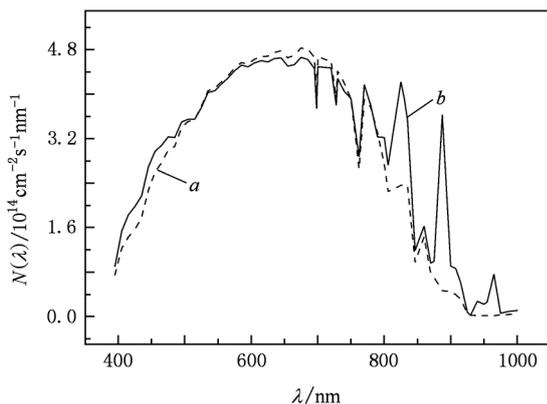


图 8 光伏电池在 400—1000 nm 波段内吸收的光子数 曲线 *a* 对应优化的 ZnO 减反膜,曲线 *b* 对应设计的光陷阱结构

折射率膜层及金属反射镜组成的光陷阱结构,几乎在整个 400—1000 nm 波段内吸收的光子数都较多. 特别在长波段范围出现了很强的光子吸收峰,导致总的吸收光子数增多. 因此,本文设计的非晶硅光伏电池的光陷阱结构是一种波长范围较宽的高效光俘获结构.

4. 结 论

本文设计了主要由衍射光栅、低折射率 MgF_2 膜层、高折射率 ZnS 膜层及金属 Ag 反射镜组成的应用于非晶硅光伏电池的光陷阱结构. 在标准测试条件下,400—1000 nm 波段内采用 ZnO 单层减反射膜时,非晶硅光伏电池吸收的光子数加权平均 $\xi_{\text{AMI.5}}$ 最大值为 71.24%. 对于设计的电池前表面减反射结构,在衍射光栅周期为 800 nm、高度为 160 nm、占空比为 0.6125、 MgF_2 和 ZnS 膜层厚度分别为 90 和 55 nm 时, $\xi_{\text{AMI.5}}$ 达到 74.3%; 在电池背表面沉积 ZnS/Ag 金属膜层后, $\xi_{\text{AMI.5}}$ 增大到 76.95%. 因此,本文提出的非晶硅电池的光陷阱结构可以大幅度提高电池的光电转换效率.

- [1] Shah A, Torres P, Tscharner R, Wyrsh N, Keppner H 1999 *Science* **285** 692
- [2] Saha J K, Haruta K, Koabayshi Y, Shirai T 2009 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **93** 1154
- [3] Han X Y, Hou G F, Wei C C, Zhang X D, Dai Z H, Li G J, Sun J, Chen X L, Zhang D K, Xue J M, Zhao Y, Geng X H 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4254 (in Chinese) [韩晓艳、侯国付、魏长春、张晓丹、戴志华、李贵君、孙建、陈新亮、张德坤、薛俊明、赵颖、耿新华 2009 物理学报 **58** 4254]
- [4] Kuo M L, Poxson D J, Kim Y S, Mont F M, Kim J K, Schubert E F, Lin S Y 2008 *Opt. Lett.* **33** 2527
- [5] Kong W J, Shen Z C, Wang S H, Shao J D, Fan Z X, Lu C J 2010 *Chin. Phys. B* **19** 044210
- [6] Yu Z N, Gao H, Wu W, Ge H X, Chou S Y 2003 *J. Vac. Sci. Technol. B* **21** 2874
- [7] Sai H, Kanamori Y, Arafune K, Ohshitta Y, Yamaguch M 2007 *Prog. Photovolt. Res. Appl.* **15** 415
- [8] Senoussaoui N, Krause M, Muller J, Bunte E, Brammer T, Stiebig H 2004 *Thin Solid Films* **451—452** 397
- [9] Stiebig H, Haase C, Haase C, Zahren C, Zahren C, Rech B, Senoussaoui N 2006 *J. Non-Cryst. Solids* **352** 1949
- [10] Sai H, Fujiwara H, Kondo M 2009 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **93** 1087
- [11] Yang K H, Yang J Y 2009 *Solar Energy* **83** 2050
- [12] Wang X D, Liao Y L, Liu B, Ge L J, Li G H, Fu S J, Chen Y F, Cui Z 2008 *Microelectron. Eng.* **85** 910
- [13] Ahn S W, Lee K D, Kim J S, Kim S H, Lee S H, Park J D, Yoon P W 2005 *Microelectron. Eng.* **78—79** 314
- [14] Gran E B, Moharam M G 1996 *Appl. Opt.* **35** 795
- [15] Kim H J, Depauw V, Agostinelli G, Beaucarne G, Poortmans J 2006 *Thin Solid Films* **511—512** 411
- [16] Zhao L, Zuo Y H, Zhou C L, Lia H L, Diao H W, Wang W G 2009 *Solar Energy* **84** 110
- [17] Feng N N, Michel J, Zeng L, Liu J F, Hong C Y, Kimerling L C 2007 *Proceedings of the 5th World Conference on Transactions on Electron Devices* (Washington: IEEE) pp1926—1932
- [18] Kong W J, Yun M J, Sun X, Liu J H, Fan Z X, Shao J D 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 4904 (in Chinese) [孔伟金、云茂金、孙欣、刘均海、范正修、邵建达 2008 物理学报 **57** 4904]
- [19] Sahoo K C, Li Y M, Chang E Y 2009 *Comput. Phys. Commun.* **180** 1721

Design of a highly efficient light-trapping structure for amorphous silicon solar cell^{*}

Zhou Jun^{1)2)†} Sun Yong-Tang²⁾ Sun Tie-Tun³⁾ Liu Xiao¹⁾ Song Wei-Jie⁴⁾

1) (*Institute of Optics and Photoelectronics, Ningbo University, Ningbo 315211, China*)

2) (*Department of Optical Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China*)

3) (*Changzhou Yijing Optical-Electronic Company Limited, Changzhou 213223, China*)

4) (*Ningbo Institute of Material Technology and Engineering, Chinese Academy of Sciences, Ningbo 315201, China*)

(Received 12 August 2010; revised manuscript received 21 December 2010)

Abstract

A highly efficient light-trapping structure consisting of a diffractive grating, a MgF_2 film, a ZnS film and Ag reflector, is used for a-Si:H solar cell. Using the rigorous coupled wave theory, the weighted absorptance photon number ($\xi_{\text{AM1.5}}$) of a 1 μm thick a-Si:H solar cell is calculated in a wavelength range from 400 to 1000 nm for the AM1.5 solar spectrum at 25 °C. It is used to design the optimal parameters of the light-trapping structure. Results indicate that $\xi_{\text{AM1.5}}$ of the solar cell can reach 74.3%, if the period, the depth and the duty cycle of the diffractive grating, and the height of the MgF_2 film and the ZnS film are 800 nm, 160 nm, 0.6125, 90 nm and 55 nm, respectively. If a ZnS/Ag film is fabricated on the rear surface of the solar cell, a larger $\xi_{\text{AM1.5}}$ (76.95%) can be obtained. It is demonstrated that the trapping structure is useful for elevating the efficiency of the solar cell.

Keywords: light-trapping structure, diffractive grating, antireflective film, amorphous silicon solar cells

PACS: 88.40.jj, 42.25.Fx, 81.05.Gc, 87.80.Cc

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60977048), the International Cooperation Program of Chinese Academy of Sciences (Grant No. 038611), the International Science and Technology Cooperation Program of Ningbo, China (Grant No. 2010D10018), the K. C. Wong Magna Foundation of Ningbo University, China and Changzhou Yijing Optical-Electronic Company Limited, China.

[†] E-mail: ejzhou@yahoo.com.cn