

锥型亚波长光栅在薄膜晶硅电池中的吸收增强效应分析

邵彪^{1,2} 张瑞英^{2*} 赵春雨² 董建荣² 杨辉² 张金仓¹

¹ 上海大学物理系, 上海 200444

² 中国科学院苏州纳米技术与纳米仿生研究所纳米器件及相关材料研究部, 江苏 苏州 215123

摘要 基于严格耦合波理论,从反射率、吸收增强因子、光生载流子几率和理想光电转换效率几个方面模拟分析了不同锥型亚波长光栅对 $1\ \mu\text{m}$ 厚晶硅电池产生的影响。模拟结果得出:在相同光栅高度下,虽然小周期($P=100\ \text{nm}$)锥形亚波长光栅的表面反射率低于大周期($P=500\ \text{nm}$)结构的表面反射率,但是大周期锥形亚波长光栅薄膜晶硅电池的光生载流子几率和理想光电转换效率高于小周期结构的相应值,且这种区别随着光栅高度增加而增加。在 AM1.5D 太阳光谱下,最优化的大周期光栅使得薄膜晶硅电池光生载流子几率和理想效率增加 1.4 倍和 1.65 倍,而最优化的小周期光栅只能分别增加 0.54 倍和 0.48 倍。

关键词 光电子学;吸收增强;严格耦合波理论;太阳能电池;宽谱减反

中图分类号 TK914.4

文献标识码 A

doi: 10.3788/LOP49.043101

Absorption Enhancement Induced by Nanocone Grating in Si Thin Film Solar Cells

Shao Biao^{1,2} Zhang Ruiying² Zhao Chunyu² Dong Jianrong²

Yang Hui² Zhang Jincang¹

¹ Department of Physics, Shanghai University, Shanghai 200444, China

² Division of Nano-Device and Related Materials, Suzhou Institute of Nano-Tech and Nano Bionics, Chinese Academy of Sciences, Suzhou, Jiangsu 215123, China

Abstract Broadband absorption enhancement effect induced by nanocone grating in $1\ \mu\text{m}$ thick Si solar cells has been numerically investigated by rigorous coupled-wave analysis method. Even though the great antireflection performance has been achieved in the nanocone grating of $P=100\ \text{nm}$, the higher optical generation rate and ultimate efficiency are achieved in the solar cell with nanocone grating of $P=500\ \text{nm}$ and $H=350\ \text{nm}$, which is 1.4 times and 1.65 times higher than that in planar Si.

Key words optoelectronics; absorption enhancement; rigorous coupled-wave analysis; solar cell; broadband antireflection

OCIS codes 310.1210; 310.6628; 310.6860

1 引言

晶硅电池组件成本中,硅片、电池加工和组装 3 部分分别占组件成本的 39%、21%和 40%,这 3 个环节中的材料成本共占组件成本的 60%左右。由此可见,降低光伏系统的成本首先要降低组件成本,而降低组件成本首先要降低材料成本,特别是晶硅材料成本。为了解决此深层次的矛盾,从晶硅电池的研究角度来说

收稿日期: 2012-01-12; 收到修改稿日期: 2012-01-20; 网络出版日期: 2012-02-23

基金项目: 教育部留学回国人员科研启动基金和江苏省科技支撑-工业项目(BE2009056)资助课题。

作者简介: 邵彪(1987—),男,硕士研究生,主要从事太阳能电池表面亚波长结构方面的研究。

E-mail: shaobiao1987@163.com

导师简介: 张金仓(1957—),男,博士,教授,主要从事凝聚态与材料物理方面的研究。E-mail: jczhang@shu.edu.cn

* 通信联系人。E-mail: ryzhang2008@sinano.ac.cn

一直在做两方面的工作:1)提高光电转换效率,2)薄层化。

从光学角度分析,由于硅是高折射率和大色散关系材料,因此减少反射损耗成为提高硅太阳能电池光电转换效率的必要步骤。在工业生产中,通过湿法刻蚀制备的倒金字塔结构可实现一定程度的反射降低和吸收增强效果,不过该结构在全光谱范围中的反射损失仍然超过 10%^[1,2]。近些年,基于零级衍射效应,亚波长结构已经从理论上证明可获得宽谱广角减反效果^[3~5];在实验上,该结构已经通过各种纳米制备方法成功应用于 GaAs、GaN、玻璃、聚合物等材料,获得非常有效的宽谱广角减反效果^[6~9]。有关硅(包括晶硅,微晶硅,非晶硅)亚波长结构的报道更是层出不穷,使得宽谱广角范围内减反行为几乎成为该结构能否有效提高电池效率的唯一评判标准^[10~12]。同时,严格耦合波分析理论(RCWA)^[13~15]成为公认的亚波长结构模拟方法,计算和实验所得结果基本相符^[16]。众多模拟和实验结果表明,深宽比越大的亚波长结构,反射率越小,并进一步认为该结构应用于硅太阳能电池,效率提高更加显著。

本文着眼于高性价比的薄膜晶硅电池,基于严格耦合波分析理论,通过计算太阳能电池的相关参数,包括表面反射率、吸收增强因子、光生载流子几率和理想光电转换效率,全面分析了锥形亚波长光栅对 1 μm 厚晶硅电池的影响,结果得出:在相同光栅高度下,1)小周期($P=100\text{ nm}$)的锥形亚波长光栅的反射率近乎为零,但电池的光生载流子几率和理想效率增加较少;2)尽管大周期($P=500\text{ nm}$)的锥形亚波长光栅的减反效果有限,但电池的光生载流子几率和理想效率增加许多,且这种区别随着光栅高度增加而增加。并对其中蕴含的物理本质进行了阐释。该项研究将有利于更加合理有效地利用亚波长结构来提高薄膜晶硅电池光电转换效率,真正获得高性价比的太阳能电池。

2 模拟模型

为了分析锥形亚波长光栅(NCG)对光学吸收增强效应的影响,基于严格耦合波分析理论对不同锥形亚波长光栅的薄膜晶硅电池的光学吸收进行模拟。从光学吸收和材料成本的平衡角度考虑,模拟选定薄膜晶硅电池总厚度为 1000 nm,且该薄膜晶硅电池由硅锥形亚波长光栅与平板薄膜晶硅两部分组成,具体结构如图 1 所示。其中顶部锥形亚波长光栅由周期(P)与高度(H)的密堆积圆锥体组成,底部剩余的平板薄膜晶硅的厚度为 $(1000-H)\text{ nm}$ 。模拟通过改变周期 P 和高度 H ,获得不同锥形亚波长光栅对薄膜晶硅电池相关参数的影响,从而优化出高效薄膜晶硅电池需要的亚波长结构。

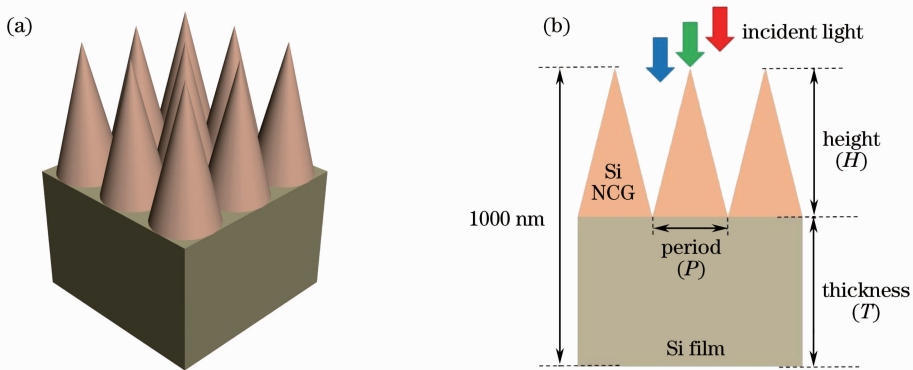


图 1 薄膜晶硅电池模型结构图。(a)三维视图;(b)具有结构尺寸的剖面视图

Fig. 1 A schematic diagram of the simulated Si-based solar cell structure, (a) A 3D conceptual schematic; (b) a cross-sectional view outlining the device's structure to be used in simulations

严格耦合波理论是利用麦克斯韦方程组和边界条件对具有周期型结构的光栅进行精确求解的一种方法^[13],其准确程度取决于场的空间谐波级数展开数目和能量守恒。实验中建立的锥形亚波长光栅的薄膜晶硅电池理论模型是基于严格耦合波理论,通过在每一层结构中构建耦合波方程,接着逐层应用电场和磁场边界连续条件,将各个分层的电场和磁场通过耦合波方程联系起来,求解反射和透射的衍射波振幅,从而得到反射率、透射率和吸收率。为了与晶硅材料的吸收光谱相匹配,模拟中的人射光波长在 300~1000 nm 范围内变化,且均为垂直入射。模拟中晶硅材料的光学参数(折射率 n 和吸收长度 L)通过 MD2000D 椭圆偏振

仪测得,如图 2 所示。实验中涉及的亚波长结构,均能通过纳米加工制造技术制备,比如阳极氧化铝(AAO)^[17~19],纳球光刻(NSL)^[20~22]等。

实验中为量化表征亚波长结构对太阳电池光学吸收的影响,引入了光生载流子几率 G 。

$$G(H, P) = \int_{300}^{1000} [1 - r(\lambda)] f(\lambda) \alpha(\lambda) \times \exp[-\alpha(\lambda)L(H, P)] d\lambda = \int_{300}^{1000} g(\lambda, H, P) f(\lambda) d\lambda, (1)$$

式中 $r(\lambda)$ 为总反射率, $f(\lambda)$ 为 AM1.5D 光谱中光子流密度(单位面积单位时间单位波长的光线中具有的光子数), $\alpha(\lambda)$ 为硅的吸收系数, $L(H, P)$ 为有效光学吸收路径, λ 为入射光波长, $g(\lambda, H, P)$ 为特定亚波长结构 (H, P) 在特定波长下的吸收率。为了表征特定亚波长结构在特定波长下吸收增强效果,在整个模拟过程中将具有亚波长结构的薄膜晶硅电池吸收率与单纯平板薄膜晶硅电池吸收率的比值定义为吸收增强因子 Δ ^[23]。

$$\Delta(\lambda, H, D) = \frac{g(\lambda, H, P)}{g(\lambda, H = 0, P = 0)}. (2)$$

假设晶硅材料吸收一个光子就能产生一组电子空穴对,那么理想转换效率 η 可以表示为

$$\eta = \frac{\int_0^{\lambda_g} f(\lambda) \Delta(\lambda, H, P) \frac{\lambda}{\lambda_g} d\lambda}{\int_0^{\infty} f(\lambda) d\lambda}. (3)$$

式中 λ_g 相当于带边的波长。

3 结果与讨论

首先基于严格耦合波分析理论,计算了不同尺寸的锥形亚波长光栅的反射率,模拟结果如图 3 所示,图中实线为平板晶硅反射率。从图中可以看出, $P=100$ nm 与 $P=500$ nm 两组锥形亚波长光栅的表面反射率都随着光栅高度 H 的增加而降低。当高度 H 相同, $P=100$ nm 锥形亚波长光栅的反射率远小于 $P=500$ nm 锥形亚波长光栅的反射率。还可以看到在 AM1.5D 太阳光谱中光子束密度较高的区域 ($\lambda > 500$ nm), $P=100$ nm, $H=350$ nm 与 $P=100$ nm, $H=500$ nm 两种锥形亚波长光栅的表面反射率近乎为零。而且 $P=100$ nm, $H \geq 350$ nm 的锥形亚波长光栅可以在整个晶硅吸收光谱(300~1000 nm)中实现低于

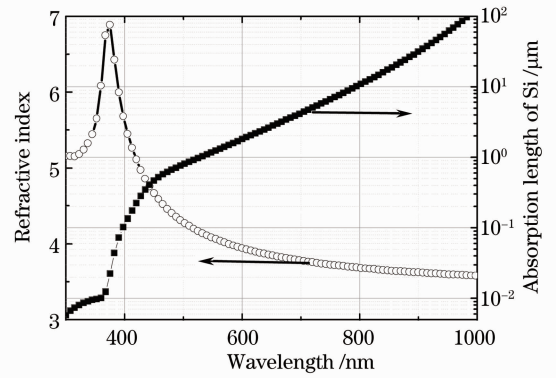


图 2 晶硅材料在不同波长下的反射率和吸收长度
Fig. 2 Refractive index and its absorption length of Si material at different wavelength

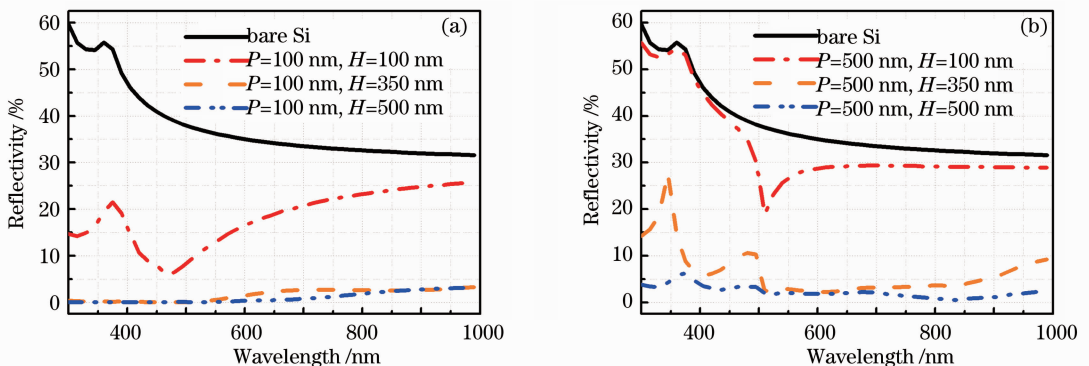


图 3 不同尺寸的锥形亚波长光栅和平板晶硅的理论反射光谱。(a) $P=100$ nm; (b) $P=500$ nm

Fig. 3 Simulated reflectivity of bare Si and nanocone structure with different height. (a) $P=100$ nm; (b) $P=500$ nm

5%的反射率。但是对于 $P=500\text{ nm}$ 的亚波长结构, $\lambda<500\text{ nm}$ 时, $H<500\text{ nm}$,反射率始终大于5%; $\lambda>500\text{ nm}$,尽管 $H>350\text{ nm}$ 时,光栅表面的反射率下降了很多,但始终大于5%。因此,小周期的锥形亚波长光栅的减反性能优于大周期的亚波长光栅。

为了进一步探讨锥形亚波长光栅对该类晶硅电池的作用,结合严格耦合波理论以及(2)式,计算了具有不同锥形亚波长光栅的薄膜晶硅电池的光学吸收增强因子。其吸收增强因子、入射光波长和亚波长光栅高度的关系如图4所示。从图4(a)中可以看出,当 $P=100\text{ nm}$, $\lambda<500\text{ nm}$ 时,无论高度 H 如何变化,吸收增强因子均在1.0~2.5之间徘徊。这可归因于高光学吸收系数和低反射率的共同作用。然而,在 $1\text{ }\mu\text{m}$ 厚晶硅电池中,低光学吸收系数和谐振腔干涉效应共同作用,使得吸收增强因子在波长 $500\sim 1000\text{ nm}$ 范围内显现出准周期变化趋势。因为部分区域存在干涉相消现象,导致这些区域的吸收增强因子小于1,即该亚波长结构在这些入射光区域不仅没有使得薄膜晶硅电池的吸收增强,反而减弱。由此可见,即使在整个光谱中能够获得最低的反射率,小周期的锥形亚波长光栅在提高薄膜晶硅电池吸收率上的效果也不明显。

图4(b)为 $P=500\text{ nm}$ 锥形亚波长光栅的薄膜晶硅电池的吸收增强因子与入射光波长和光栅高度的关系图。与图4(a)相比,当 $H>200\text{ nm}$ 时,整个晶硅吸收光谱范围($300\sim 1000\text{ nm}$)内都能实现吸收增强。当 $\lambda>500\text{ nm}$ 时,吸收增强因子均大于1.5,并随着波长红移而增加,同时表现出准周期波动趋势。这是因为材料的吸收长度大于自身厚度(本模拟中薄膜晶硅电池的厚度为 $1\text{ }\mu\text{m}$)时,材料对光的吸收会产生谐振效应。如图2所示,在长波段($\lambda>750\text{ nm}$)中,晶硅的本征吸收长度大于 $5\text{ }\mu\text{m}$,使得谐振腔效应将更为显著。此外,长波段的入射光作用于该亚波长光栅,还会导致高阶衍射耦合和零阶衍射的消逝波耦合,这些吸收增强机制与表面反射减少共同作用,使得该波段内大部分的吸收增强因子处于5~10之间,有一些吸收增强因子处于10~30之间。该模拟结果表明锥形亚波长光栅对于薄膜晶硅电池的吸收增强作用并不仅仅取决于亚波长结构的减反性能,谐振增强效应、高阶衍射耦合和零阶衍射的消逝波耦合对整个结构的吸收增强,特别是在长波段的吸收增强,同样做出了巨大贡献。

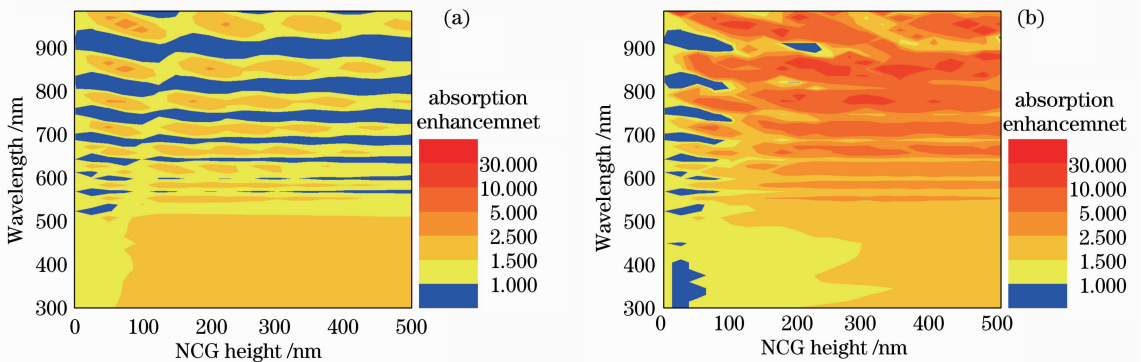


图4 不同锥形亚波长光栅在不同波长下产生的吸收增强因子关系图。(a) $P=100\text{ nm}$; (b) $P=500\text{ nm}$

Fig. 4 Mapping the absorption enhancement with both NCG parameters and wavelength. (a) $P=100\text{ nm}$; (b) $P=500\text{ nm}$

为了获得 $1\text{ }\mu\text{m}$ 厚的晶硅电池需要的最优化锥形亚波长光栅,在上述模拟结果的基础上基于(1)式计算得出其光生载流子几率 G 。计算结果如图5所示,在任何光栅高度下, $P=500\text{ nm}$ 亚波长结构电池的光生载流子几率都高于 $P=100\text{ nm}$ 电池的光生载流子几率。随着光栅高度 H 增加,具有这两种亚波长结构的薄膜晶硅电池的光生载流子几率均表现出增大的趋势,并逐渐趋向于饱和出现峰值。大周期光栅电池的光生载流子几率增加更快。图5(a)中对于 $P=100\text{ nm}$ 亚波长结构的电池,最大光生载流子几率出现在 $H=175\text{ nm}$ 处,其值为 331.29 W/cm^2 ,相当于 $1\text{ }\mu\text{m}$ 厚平板薄膜晶硅电池的1.54倍;对于 $P=500\text{ nm}$ 亚波长结构的电池,最大光生载流子几率出现在 $H=350\text{ nm}$ 处,其值为 525.63 W/cm^2 ,为 $1\text{ }\mu\text{m}$ 厚平板薄膜晶硅电池的2.4倍。实验中同时基于(3)式计算了具有上述亚波长结构的薄膜晶硅电池的理想光电转换效率 η ,计算结果如图5(b)所示。可以看到理想光电转换效率 η 表现出与光生载流子几率 G 相似的趋势,任何锥形亚波长光栅的薄膜晶硅电池的理想光电转换效率都高于平板薄膜晶硅电池的理想光电转换效率。由于权重因子 λ/λ_g 的作用,理想光电转换效率提高的幅度大于光生载流子几率提高的幅度。对于 $P=100\text{ nm}$ 亚波长

结构的电池,最大理想光电转换效率出现在 $H=175\text{ nm}$ 处,其值为 15.37% ,相当于 $1\text{ }\mu\text{m}$ 厚平板薄膜晶硅电池的 1.48 倍;对于 $P=500\text{ nm}$ 亚波长结构的电池最大理想光电转换效率出现在 $H=350\text{ nm}$ 处,其值为 27.58% ,相当于 $1\text{ }\mu\text{m}$ 厚平板薄膜晶硅电池的 2.65 倍。很明显,大周期($P=500\text{ nm}$, $H=350\text{ nm}$)锥形亚波长光栅的薄膜晶硅电池可以实现最佳的光生载流子几率和理想光电转换效率。

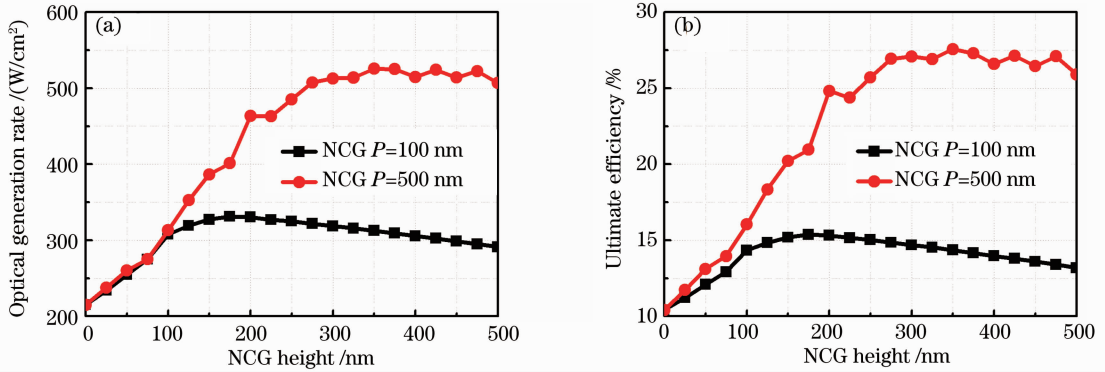


图5 不同锥形亚波长光栅使薄膜晶硅电池获得的光生载流子几率(a)和理想光电转换效率(b)

Fig. 5 Si thin film solar cell with different nanocone profile. (a) optical generation rate; (b) ultimate efficiency

综合比较各种尺寸的锥形亚波长光栅的减反性能、光生载流子几率与理想光电转换效率,虽然 $P=100\text{ nm}$, $H=350\text{ nm}$ 和 $P=100\text{ nm}$, $H=500\text{ nm}$ 两种结构的锥形亚波长光栅减反能力略优于 $P=500\text{ nm}$, $H=350\text{ nm}$ 这一结构,但是后者在拥有良好减反性能的同时,用于薄膜晶硅电池中体现出的光生载流子几率和理想光电转换效率远高于前两种结构。因此,据模拟结果得出 $P=500\text{ nm}$, $H=350\text{ nm}$ 为最优的锥形亚波长光栅。这也说明减反性能并不是薄膜晶硅电池表面亚波长结构设计的唯一标准,而是需要结合器件设计综合考虑减反性能、光生载流子几率以及理想光电转换效率进行选择。

4 结 论

基于严格耦合波理论对不同锥形亚波长光栅的薄膜晶硅电池(厚度为 $1\text{ }\mu\text{m}$)进行理论模拟分析。研究发现亚波长结构的减反性能、谐振增强效应、高阶衍射耦合和零阶衍射的波导模激发的共同作用,使得吸收增强可在任意具有锥形亚波长光栅的薄膜电池中实现。通过模拟计算,得到最优化的薄膜晶硅电池的表面锥形亚波长光栅($P=500\text{ nm}$, $H=350\text{ nm}$),其光生载流子几率和光电转换效率分别提高 140% 和 165% 。

参 考 文 献

- 1 M. A. Green, J. Zhao, A. Wang *et al.*. Very high efficiency silicon solar cells-science and technology[J]. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 1999, **46**(10): 1940~1947
- 2 J. Zhao, A. Wang, M. A. Green *et al.*. 19.8% efficient "honeycomb" textured multicrystalline and 24.4% monocrystalline silicon solar cells[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1998, **73**(14): 1991~1993
- 3 B. S. Thornton. Limit of the moth's eye principle and other impedance-matching corrugations for solar-absorber design[J]. *J. Opt. Soc. Am.*, 1975, **65**(3): 267~270
- 4 Daniel Poitras, J. A. Dobrowolski. Toward perfect antireflection coatings. 2. theory[J]. *Appl. Opt.*, 2004, **43**(6): 1286~1295
- 5 Ma Youqiao, Zhou Jun, Sun Tietun *et al.*. Design of antireflection structure of photovoltaic cells with sub-wavelength grating based on EMT[J]. *Acta Energetica Solaris Sinica*, 2010, **31**(10): 1353~1358
马佑桥, 周 骏, 孙铁囤 等. 基于等效介质理论的光伏电池亚波长光栅减反结构设计 [J]. *太阳能学报*, 2010, **31**(10): 1353~1358
- 6 Young Min Song, Sung Jun Jang, Jae Su Yu *et al.*. Bioinspired parabola subwavelength structures for improved broadband antireflection[J]. *Small*, 2010, **6**(9): 984~987
- 7 C. H. Chiu, Peichen Yu, H. C. Kuo *et al.*. Broadband and omnidirectional antireflection employing disordered GaN nanopillars[J]. *Opt. Express*, 2008, **16**(12): 8748~8754

- 8 A. Gombert, W. Glaubitt, K. Rose *et al.*. Subwavelength-structured antireflective surfaces on glass[J]. *Thin Solid Films*, 1999, **351**: 73~78
- 9 Chia Jen Ting, Fuh-Yu Chang, Chi Feng Chen *et al.*. Fabrication of an antireflective polymer optical film with subwavelength structures using a roll-to-roll micro-replication process[J]. *J. Micromech. Microeng.*, 2008, **18**(7): 075001
- 10 H. L. Chen, S. Y. Chuang, C. H. Lin *et al.*. Using colloidal lithography to fabricate and optimize sub-wavelength pyramidal and honeycomb structures in solar cells[J]. *Opt. Express*, 2007, **15**(22): 14793~14803
- 11 Darin Madzharov, Rahul Dewan, Dietmar Knipp. Influence of front and back grating on light trapping in microcrystalline thin-film silicon solar cells[J]. *Opt. Express*, 2011, **19**(52): 95~107
- 12 Stephen Y. Chou, Wenyong Deng. Subwavelength amorphous silicon transmission gratings and applications in polarizers and waveplates[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1995, **67**(6): 742
- 13 M. G. Moharam, T. k. Gaylord. Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction[J]. *J. Opt. Soc. Am.*, 1981, **71**(7): 811~818
- 14 M. G. Moharam, T. k. Gaylord. Rigorous coupled-wave analysis of metallic surface-relief gratings[J]. *J. Opt. Soc. Am. A*, 1986, **3**(11): 1780~1787
- 15 M. G. Moharam, D. A. Pommet, E. B. Grann *et al.*. Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings; enhanced transmittance matrix approach[J]. *J. Opt. Soc. Am. A*, 1995, **12**(5): 1077~1086
- 16 C. Sun, W. Min, C. Linn Nicholas *et al.*. Templated fabrication of large area subwavelength antireflection gratings on silicon[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2007, **91**(23): 231105
- 17 M. Hu, R. Yu, J. Macmanusdriscoll *et al.*. Large-area silica nanotubes with controllable geometry on silicon substrates [J]. *Appl. Surface Science*, 2009, **255**(6): 3563~3566
- 18 Li Mengke, Lu Mei, Kong Lingbin *et al.*. Photoluminescence properties of silicon nano wires and carbon nanotube-silicon nanowire composite arrays[J]. *Chin. Phys. Lett.*, 2002, **19**(11): 1703~1706
- 19 J. Liang, H. Luo, R. Beresford *et al.*. A growth pathway for highly ordered quantum dot arrays[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2004, **85**(24): 5974
- 20 Y. Wang, N. Lu, H. Xu *et al.*. Biomimetic corrugated silicon nanocone arrays for self-cleaning antireflection coatings[J]. *Nano Research*, 2010, **3**(7): 520~527
- 21 Jian Xu, Yi Yin, Haiming Ma *et al.*. A novel trilayer antireflection coating using dip-coating technique[J]. *Chin. Opt. Lett.*, 2011, **9**(7): 073101
- 22 H. Xu, N. Lu, D. Qi *et al.*. Broadband antireflective Si nanopillar arrays produced by nanosphere lithography[J]. *Microelectronic Engineering*, 2009, **86**(4): 850~852
- 23 W. Wang, S. Wu, Kitt Reinhardt *et al.*. Broadband light absorption enhancement in thin-film silicon solar cells[J]. *Nano Lett.*, 2010, **10**(6): 2012~2018