

银纳米光栅增加晶体硅薄膜太阳能电池光吸收的研究

卢辉东 铁生年* 刘杰

青海大学新能源光伏产业研究中心, 青海 西宁 810016

摘要 为了提高晶体硅(c-Si)薄膜太阳能电池对光的俘获能力,提出了一种可以显著增强光吸收的电池结构,该结构由减反射层、有源层和背反射镜组成。基于有效折射率调制的基本原则和严格耦合波理论,通过数值计算与仿真讨论了不同结构层的光学特性,计算了减反射层的透射率、背反射镜的反射率和经过优化后的c-Si薄膜太阳能电池的吸收率。在AM1.5G(地面上接受到的以48°入射的太阳光谱,包含漫反射)照射下,当入射角小于75°,有源层的厚度为20 μm时,太阳能电池在400~850 nm、850~1000 nm、1000~1100 nm波长范围内平均吸收率分别为85.7%、49%、14%,有效弥补了c-Si薄膜太阳能电池近红外波段吸收不足的缺陷。

关键词 光伏; 晶体硅薄膜; 太阳能电池; 表面等离子体激元; 陷光; 金属纳米光栅

中图分类号 TM914.4 **文献标识码** A

doi: 10.3788/LOP53.080401

Absorption Enhancement of Crystalline Silicon Thin Film Solar Cell Using Nano Binary Silver Grating

Lu Huidong Tie Shengnian Liu Jie

New Energy (Photovoltaic) Industry Research Center, Qinghai University, Xining, Qinghai 810016, China

Abstract In order to enhance light trapping in the crystalline silicon(c-Si)thin film solar cell, a cell structure that can significantly enhance light absorption is presented, which is composed of antireflection coatings, active layer, and back mirrors. Based on the basic principle of effective refractive index modulation and the rigorous coupled wave theory, optical properties of different layers are discussed through the numerical calculation and simulation, including the transmissivity of antireflection coatings, the reflectivity of back mirror, and the absorptance of the optimized c-Si thin film solar cell. Under the radiation of AM1.5G (solar spectrum including diffused reflection received at the earth surface with a 48° angle incidence) spectrum and for the c-Si thin film solar cell with 20 μm thick active layer, incident wave with TM polarization, and incident angle less than 75°, the integrated absorptance reaches 85.7%, 49%, and 14%, respectively when the wavelength ranging from 400 to 850 nm, 850 to 1000 nm, and 1000 to 1100 nm. It can effectively compensate for the shortage of near infrared absorptance in the crystalline silicon thin film solar cell.

Key words photovoltaic; crystalline silicon thin film; solar cell; surface plasmon; light trapping; nano binary metallic grating

OCIS codes 040.5350; 310.6860; 350.6050; 050.1950; 240.6700

1 引言

目前限制薄膜太阳能电池发展的一个严重问题是:半导体材料的光吸收深度远远大于光子扩散深度,且对禁带能量附近的光很不敏感,因此薄膜太阳能电池光电转换效率较低。提高晶体硅(c-Si)薄膜太阳能电池的光俘获能力主要从减少表面反射和增加光在太阳能电池内传播的路径长度这两方面来考虑。利用硅有源层前表面的绒面结合背反射镜可以实现较好的陷光作用。传统的电池陷光是通过几何光学的方法来增加

收稿日期: 2015-12-21; **收到修改稿日期:** 2015-12-29; **网络出版日期:** 2016-07-29

基金项目: 青海省重点实验室发展专项资金(2014-Z-Y31, 2015-Z-Y18)

作者简介: 卢辉东(1987—),男,硕士,助教,主要从事新能源光伏方面的研究。E-mail: luhuidong123@126.com

* **通信联系人。** E-mail: tieshengnian@163.com

光子在薄膜太阳能电池中的穿越路径长度和通过增设平板金属反射镜来减少透射光子数量,但这些方法不能应用于有源层很薄的薄膜太阳能电池^[1]。在过去的几年里,金属微腔共振^[2]、表面等离子体共振^[3]、光子晶体禁带特性^[4]、微腔^[5]、波导^[6]、慢光效应^[7-8]和热辐射光谱控制特性^[9]已被广泛研究,这为薄膜太阳能电池陷光的研究提供了方向。银虽然具有热损耗,但相比于其他金属却有最小吸收系数。当金属纳米颗粒、光栅、金属表面具有微结构或缺陷时,会形成表面等离子共振^[10]。Rockstuhl等^[11]报道了利用矩形和圆柱体的银纳米光栅作为非晶硅太阳能电池的背反射镜,Atwater等^[12]研究并实验制作出大面积的金属纳米等离子体太阳能电池。相对于传统硅太阳能电池,在表面等离子体共振条件下有源层的吸收可激发出更多电子-空穴对。因此,本文提出把背反射镜制作成圆柱形结构,利用光与金属银纳米圆柱产生的表面等离子体激元来增加晶体硅薄膜太阳能电池的光吸收。

2 模型与方法

晶体硅薄膜太阳能电池结构如图1所示,从电池顶部向下分别为减反射层 SiO_2 、 Si_3N_4 、 TiO_2 , 活性层 c-Si 和背反射镜 Ag, 它们的厚度分别为 d_1 、 d_2 、 d_3 、 h 、 d_4 , 背反射镜由银纳米圆柱形光栅组成, r 为银圆柱的半径, T 为银圆柱形光栅的周期, θ 为光波入射角。

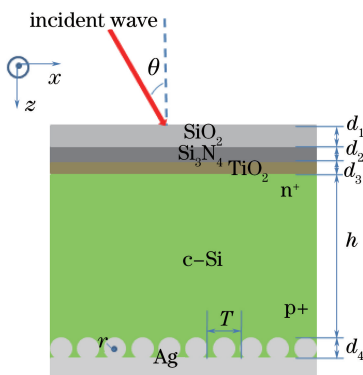


图1 晶体硅薄膜太阳能电池结构图

Fig. 1 Schematic diagram of c-Si thin film solar cell structure

介质材料的折射率随波长变化而变化, SiO_2 的折射率用 Cauchy 公式^[13] 表示为

$$n_{\text{SiO}_2}(\lambda) = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4}, \quad (1)$$

式中 $A = 1.491$, $B = 0.00686$, $C = -0.0007648$. Si_3N_4 、 TiO_2 的折射率用 Sellmeier 公式^[14-15] 分别表示为

$$n_{\text{Si}_3\text{N}_4}(\lambda) = \sqrt{1 + \frac{2.8939\lambda^2}{\lambda^2 - 0.13967^2}}, \quad (2)$$

$$n_{\text{TiO}_2}(\lambda) = \sqrt{5.913 + \frac{0.2441\lambda^2}{\lambda^2 - 0.0803}}, \quad (3)$$

式中 λ 为波长, 单位为 μm 。有源层 c-Si 的色散数据来自文献^[16], 并通过牛顿插值法获得更多折射率随波长变化的数据, Ag 的折射率用 Drude 模型来描述^[17]。c-Si、Ag、 SiO_2 、 Si_3N_4 、 TiO_2 的折射率如图2所示, 波长在 $300 \sim 1100 \text{ nm}$ 之间变化时, c-Si 和 Ag 的折射率 n 、消光系数 k 有很大的变化[图2(a)], SiO_2 、 Si_3N_4 、 TiO_2 在该波段的折射率 n 变化较小[图2(b)]。

采用严格耦合波理论(RCWA)进行数值模拟, 利用 Matlab 软件编程计算, 可以得到减反射层的透射率、背反射镜的反射率、电池的光吸收率, 计算中主要分析入射光为横磁(TM)波偏振的情形。

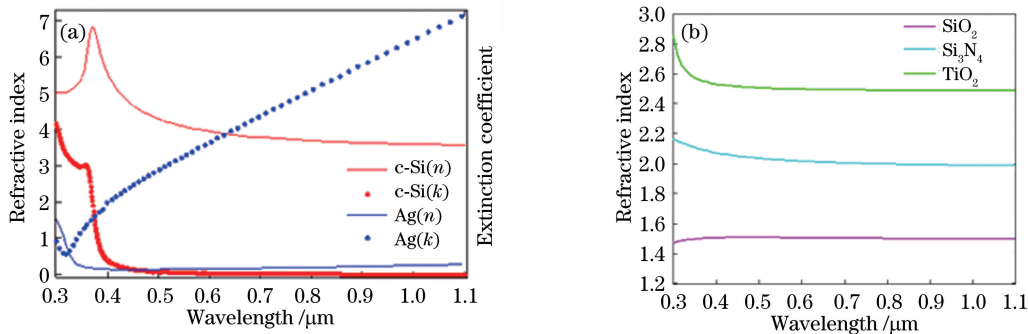


图 2 折射率随波长变化

Fig. 2 Refractive index versus wavelength

3 计算仿真

3.1 减反射层的光学特性

为了能够消除空气与晶体硅界面间产生的高反射,需要镀折射率渐变的介质膜。减反射层为折射率从上到下逐渐增大的 SiO₂、Si₃N₄ 和 TiO₂ 介质材料。利用“四分之一波”低反射膜,当薄膜的光学厚度是入射光波长 1/4 时可以得到具有最小反射率的膜层厚度^[18]:

$$t = \frac{\lambda}{4n}, \quad (4)$$

式中 t 为镀膜厚度, λ 为中心波长, n 为介质材料折射率。当最优厚度分别为 $d_1=120$ nm、 $d_2=90$ nm、 $d_3=50$ nm 时,减反射层在 TM 偏振下的反射光谱如图 3 所示(不同颜色代表不同大小的反射率),当入射角度小于 75° ,波长在 380~1100 nm 范围内时减反射层的透射率在 95% 以上。

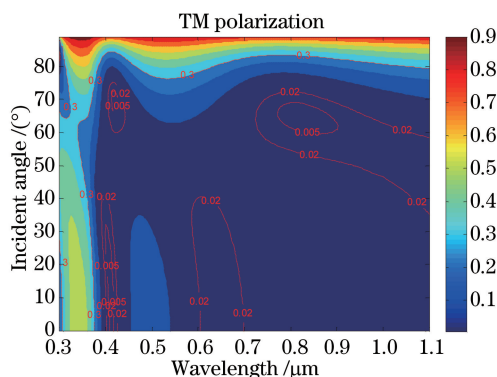


图 3 减反射层的反射光谱

Fig. 3 Reflection spectrum of antireflection coating

3.2 背反射镜的光学特性

太阳能电池背反射镜采用银纳米圆柱形光栅的周期性结构,利用光栅的动量补偿作用激发表面等离子体激元,表面等离子体激元是 TM 波。这种横磁波在金属和吸收材料表面沿横向传播,增加了长波段光子与吸收材料的相互作用时间,可有效地增加有源层对太阳光的吸收,进而提高光生电流密度。金属纳米等离子体激元增强光吸收主要有三种机理,分别是金属纳米颗粒散射、近场增强和表面等离子波^[19]。经过优化后的银圆柱形光栅的周期 $T=250$ nm,圆柱的直径 $d_4=188$ nm。银圆柱形光栅的反射光谱如图 4 所示(不同颜色代表不同大小的反射率),在长波段 750~1100 nm 范围内的反射率高于 97%。光垂直入射时,银圆柱形光栅的光场分布如图 5 所示(不同颜色代表不同光强,单位为 cd),其中 Z 是电池的厚度, X 是电池宽度。可以看到,透过电池有源层到达银光栅的 760,800,830,900,970 nm 长波都在银表面上产生了散射,在近场增强了表面等离子波,表面等离子波沿光栅和有源层的界面横向传播,有效增强了薄膜电池对长波光子的俘获能力。

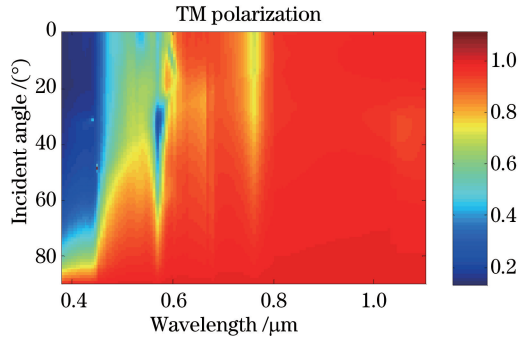


图4 银圆柱形光栅的反射光谱

Fig. 4 Reflection spectrum of silver cylindrical grating

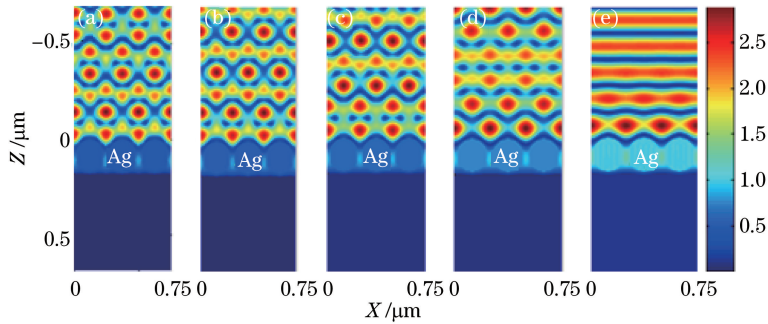


图5 光垂直入射时,光栅的光场分布图,波长分别为(a) 760 nm、(b) 800 nm、(c) 830 nm、(d) 900 nm和(e) 970 nm

Fig. 5 Optical field distribution of grating when light is vertically incident with a wavelength of

(a) 760 nm, (b) 800 nm, (c) 830 nm, (d) 900 nm, and (e) 970 nm, respectively

4 结果和讨论

RCWA 是对麦克斯韦方程组的严格求解,利用该方法可以计算出不同入射波长的平面波在电池前表面的反射率 $R(\lambda)$ 、背表面的透射率 $T(\lambda)$,从而得到吸收率 $A(\lambda) = 1 - R(\lambda) - T(\lambda)$ 。在数值模拟中,为了避免出现数值不稳定,通常使用增强透射矩阵方法,该方法在横电(TE)、TM 偏振入射光波的情况下可以获得收敛、稳定的解。此次用到的晶体硅薄膜太阳能电池有源层的厚度 $h = 20 \mu\text{m}$,一些文章中提到有源层只有几微米,然而, $20 \mu\text{m}$ 太阳能电池优势在于透过有源层到达背反射层的光谱窄于几微米太阳能电池的光谱,显著增强了短波的吸收,为优化背反射层获得近红外波段的光俘获提供了可能。光垂直入射时,裸硅片(无任何陷光结构)及分别镀有减反射层和背反射镜的吸收光谱如图 6 所示,其中 ARC 是增透膜。大量短波长

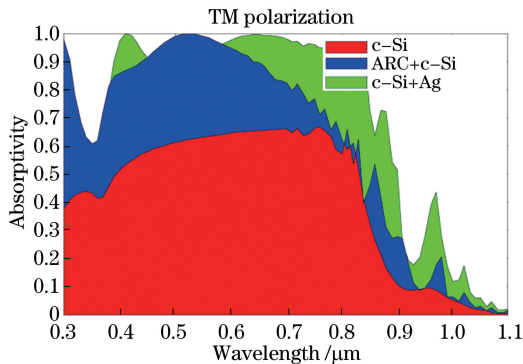


图6 光垂直入射时,裸硅片、镀有减反射层和背反射镜的吸收光谱

Fig. 6 Absorption spectrum for different c-Si cell designs those bare, with ARC, and with silver back reflector when light is vertically incident

的光子被电池的前层(减反射层和 c-Si)吸收, 增加的吸收率为 19%; 长波长的光子被电池的后层(c-Si 和背反射镜)吸收, 增加的吸收率为 10.7%。

由于硅是间接带隙半导体材料, 只有当组成光线的光子能量大于晶体硅禁带宽度 E_g (1.12 eV) 时, 光子才能被吸收而产生光子-空穴对。因此, 模拟了在不同入射角度下, 优化后的晶体硅薄膜电池吸收不同能量光子的光谱, 如图 7 所示, 红色表示高吸收率。TE 波的吸收率低于 TM 波的吸收率, 原因是表面等离子体共振产生的是 TM 波, 该波沿着电池横向传播, 增加了光路径。图 7(a) 所示的 TE 波的吸收率为 $A_{TE}(\lambda)$, 图 7(b) 所示的 TM 波的吸收率为 $A_{TM}(\lambda)$, 薄膜电池的光吸收率^[20]

$$A(\lambda) = \frac{A_{TE}(\lambda) + A_{TM}(\lambda)}{2}, \quad (5)$$

当入射角小于 75° 时, 电池在 400~850 nm、850~1000 nm、1000~1100 nm 波长范围内的平均吸收率分别为 85.7%、49%、14%。

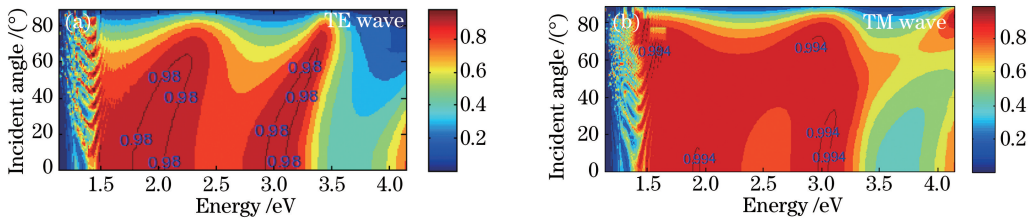


图 7 太阳能电池吸收光谱

Fig. 7 Absorption spectrum of solar cell

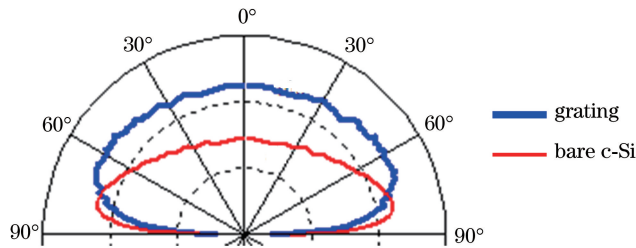


图 8 总吸收率随入射角度的变化

Fig. 8 Absorptivity versus incident angle

将提出的减反射层和背反射镜用在有源层厚度为 $20 \mu\text{m}$ 的晶体硅薄膜太阳能电池中, 在 AM1.5G 辐射下, 电池的总吸收率随入射角度的变化如图 8 所示。曲线所围成的面积表示的是入射角在 $-90^\circ \sim 90^\circ$ 范围内变化时电池总的吸收率, 有减反射层和背反射镜的晶体硅薄膜电池在入射角度 $0 \sim 80^\circ$ 范围内的总吸收率比没有任何陷光结构的薄膜太阳能电池提高了一倍。

5 结 论

用折射率渐变的介质材料和银纳米圆柱形光栅作为晶体硅薄膜太阳能电池的减反射层和背反射镜, 利用“四分之一波”低反射膜和表面等离子体激元特性来增强晶体硅薄膜太阳能电池的光吸收。采用 RCWA 对提出的减反射层的透射率、背反射镜的反射率进行了仿真模拟。在 TM 偏振状态下, 优化的所有参数为 $d_1 = 120 \text{ nm}$ 、 $d_2 = 90 \text{ nm}$ 、 $d_3 = 50 \text{ nm}$ 、 $h = 20 \mu\text{m}$ 、 $d_4 = 188 \text{ nm}$ 、 $T = 250 \text{ nm}$ 。当入射角度小于 75° 、波长在 380~1100 nm 范围内时, 减反射层的透射率在 95% 以上; 在长波段 750~1100 nm 范围内背反射镜的反射率高于 97%。增加透射率和反射率的主要机制可以归因于多层膜的干涉和表面等离子体激元。把优化的减反射层和背反射镜用在晶体硅薄膜太阳能电池上, 可以有效增强电池在短波段和近红外波段处的吸收, 为制备高效晶体硅薄膜太阳能电池提供了一定的参考。

参 考 文 献

- 1 Hao H Y, Li W M, Xing J, *et al.* Enhanced absorption in nanocrystalline silicon thin film solar cells using surface

- plasmon polaritons[C]. 2011 International Conference on Materials for Renewable Energy & Environment, 2011, 1: 242-246.
- 2 Todorov Y, Andrews A M, Sagnes I, *et al.* Strong light-matter coupling in subwavelength metal-dielectric microcavities at terahertz frequencies[J]. *Physical Review Letters*, 2009, 102(18): 186402.
 - 3 Liu C H, Su G Y, Gou F W, *et al.* Absorption enhancement of thin film solar cells using back binary metallic grating[J]. *Optical and Quantum Electronics*, 2014, 46(10): 1365-1372.
 - 4 Zhou D Y, Biswas R. Photonic crystal enhanced light-trapping in thin film solar cells[J]. *Journal of Applied Physics*, 2008, 103(9): 093102.
 - 5 Li Changhong, Wan Yong, Mao Qiangming. Research of slow light performances of photonic crystal coupled resonator optical waveguides formed by oval rods cavities[J]. *Acta Optica Sinica*, 2015, 35(4): 0416002.
李长红, 万 勇, 毛强明. 椭圆柱微腔光子晶体耦合腔波导的慢光特性研究[J]. *光学学报*, 2015, 35(4): 0416002.
 - 6 Bozhevolnyi S I, Volkov V S, Devaux E, *et al.* Channel plasmon subwavelength waveguide components including interferometers and ring resonators[J]. *Nature*, 2006, 440: 508-511.
 - 7 Krauss T F. Slow light in photonic crystal waveguides[J]. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2007, 40(9): 2666-2670.
 - 8 Castellanos Muñoz M, Petrov A Y, O'Faolain L, *et al.* Optically induced indirect photonic transitions in a slow light photonic crystal waveguide[J]. *Physical Review Letters*, 2014, 112(5): 053904.
 - 9 Lim M, Jin S, Lee S S, *et al.* Graphene-assisted Si-InSb thermophotovoltaic system for low temperature applications[J]. *Optics Express*, 2015, 23(7): A240-A253.
 - 10 Pillai S. Surface plasmons for enhanced thin-film silicon solar cells and light emitting diodes[D]. Sydney: University of New South Wales, 2007: 28-72.
 - 11 Rockstuhl C, Fahr S, Lederer F. Absorption enhancement in solar cells by localized plasmon polaritons[J]. *Journal of Applied Physics*, 2008, 104(12): 123102.
 - 12 Atwater H A, Polman A. Plasmonics for improved photovoltaic devices[J]. *Nature Materials*, 2010, 9(3): 205-213.
 - 13 Philipp H R. Optical properties of silicon-nitride[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 1973, 120(2): 295-300.
 - 14 Devore J R. Refractive indices of rutile and sphalerite[J]. *Journal of the Optical Society of America*, 1951, 41(6): 416-419.
 - 15 Malitson I H. Interspecimen comparison of refractive index of fused silica[J]. *Journal of the Optical Society of America*, 1965, 55(10): 1205-1208.
 - 16 Green M A. Self-consistent optical parameters of intrinsic silicon at 300 K including temperature coefficients[J]. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2008, 92(11): 1305-1310.
 - 17 Rakić A D, Djurišić A B, Elazar J M, *et al.* Optical properties of metallic films for vertical-cavity optoelectronic devices [J]. *Applied Optics*, 1998, 37(22): 5271-5283.
 - 18 Chhajed S, Schubert M F, Kim J K, *et al.* Nanostructured multilayer graded-index antireflection coating for Si solar cells with broadband and omnidirectional characteristics[J]. *Applied Physics Letters*, 2008, 93(25): 251108.
 - 19 Lim S H, Mar W, Matheu P, *et al.* Photocurrent spectroscopy of optical absorption enhancement in silicon photodiodes via scattering from surface plasmon polaritons in gold nanoparticles [J]. *Journal of Applied Physics*, 2007, 101(10): 104309.
 - 20 Akimov Y A, Koh W S, Sian S Y, *et al.* Nanoparticle-enhanced thin film solar cells: Metallic or dielectric nanoparticles? [J]. *Applied Physics Letters*, 2010, 96(7): 073111.