

激光与光电子学进展

薄膜太阳能电池双界面光栅结构的优化分析

陈科, 吴胜, 郑红梅*, 田文立, 刘志杰

合肥工业大学机械工程学院, 安徽 合肥 230009

摘要 设计了一种半圆形前置与梯形后置双界面的光栅结构的单晶硅薄膜太阳能电池, 利用时域有限差分法对该结构和对照组进行了模拟计算, 通过分析短路电流密度和吸收光谱可知, 双界面光栅结构的光捕获性能优于单界面光栅结构, 利用电磁场分布对该结构在长波段(750~1100 nm)的吸收增强机理进行了分析。此外, 针对前置半圆形后置梯形光栅结构, 进一步优化了后置梯形光栅的左右斜率与同周期下前后光栅的偏移程度, 结果表明非规则的梯形结构具有较好的光捕获表现, 通过吸收效率云图也能发现偏移程度在 40 nm 时效果最佳。通过计算分析, 短路电流密度的最优值达到了 20.17 mA/cm², 相较于平板结构的短路电流密度提高了 58.1%, 研究结果对于薄膜太阳能电池的光栅结构设计具有一定的指导意义。

关键词 薄膜; 太阳能电池; 时域有限差分法; 光捕获; 半圆形光栅; 梯形光栅; 短路电流密度

中图分类号 TK514

文献标志码 A

doi: 10.3788/LOP202259.0731001

Optimization Analysis of Dual-Interface Grating Structures for Thin Film Solar Cells

Chen Ke, Wu Sheng, Zheng Hongmei*, Tian Wenli, Liu Zhijie

College of Mechanical Engineering, Hefei University of Technology, Hefei, Anhui 230009, China

Abstract A structure of the front semicircle and rear trapezoidal dual-interface grating monocrystalline silicon thin film solar cell was designed. The structure and the control group were simulated by the finite-difference time-domain method. It is shown that the dual-interface has better light-trapping performance than the single-interface grating structure by analysis of the short circuit current density and absorption spectrum. The absorption enhancement mechanism of the structure at long wavelength (750-1100 nm) was analyzed by using electromagnetic field distribution. In addition, for the front semicircle rear trapezoidal grating structure, the left and right slope of rear trapezoidal grating and the offset degree of front and rear gratings under the same period are further optimized. The results show that the irregular trapezoidal gratings have better light-trapping performance, and through the absorption efficiency cloud diagram, the best effect can be found when the offset degree is at 40 nm. The optimal short-circuit current density reaches 20.17 mA/cm², which is 58.1% higher than the planar structure by calculation and analysis. The research results have certain guiding significance for the grating structure design of thin film solar cells.

Key words thin film; solar cell; finite-difference time-domain method; light trapping; semicircular grating; trapezoidal grating; short circuit current density

收稿日期: 2021-07-08; 修回日期: 2021-08-06; 录用日期: 2021-08-31

基金项目: 国家自然科学基金重点项目(51435003)

通信作者: hongmei891121@163.com

1 引言

随着社会的高速发展,清洁能源的利用和开发变得越发迫切,其中太阳能电池主要是通过将太阳能转化为电能来实现对太阳能的利用^[1]。在光伏市场中,常见的太阳能电池活性层材料主要有单晶硅(c-Si)、多晶硅和非晶硅,单晶硅薄膜太阳能电池因其制造成本低、光电转换效率高和使用寿命长等优点获得了广泛应用。另一方面减少活性层的厚度会涉及更加复杂的加工工艺,但是更薄的活性层会产生更有效的电子空穴收集和更少的体积重组^[2-4]。目前的主要问题是单晶硅材料具有较宽的吸收带和间接带隙,活性层的厚度与少数载流子扩散长度相当的太阳能电池一般支持很少的光波导模式,尤其是在长波段(750~1100 nm),正是因为缺乏共振导致光耦合到这些波导模式的光捕获方案未能取得预期的效果^[5-7]。为了解决这一问题,多种纳米陷光结构被提出并得到实际应用,主要是前置光栅结构和后置光栅结构,前置光栅结构能够引起光源的散射从而扩大光的有效传播路径,后置光栅一般设置为金属光栅结构,由于吸收层与相应的金属表面相邻,表面区域自由电子和光子相互作用形成电磁模式,被称为局部表面等离子共振(LSPRs)^[8-12]。结构设计包括金属纳米颗粒、表面纹理结构、周期性光栅结构、苞状蛾眼结构、纳米柱、纳米锥、纳米线。通过多种模式的协同作用来增强太阳能电池的光捕获性能,例如散射模式、衍射模式、光波导模式、LSPRs、表面等离子共振(SPPs),以及法布里-珀罗谐振(FPRs)^[13-17]。2016年Hsu等^[18]设计了一种前后光栅周期不匹配的双层三角形光栅结构,通过

改变前后光栅周期的不匹配程度来提高太阳能光子的吸收率,使得 J_{sc} 达到了 38 mA/cm^2 。2021年Aly等^[19]提出了一种 SiO_2 梯形光栅结构,能够产生衍射和散射的效果来实现有效的光捕获,使得 J_{sc} 达到了 24.8 mA/cm^2 ,相较于传统的太阳能电池提高了83%。

基于现有的研究成果,本文提出了一种周期匹配的前置半圆形后置梯形的的光栅结构,利用时域有限差分法(FDTD)进行模拟分析,设置多个对照组来对比结构的光捕获性能,同时针对后置梯形光栅的斜率以及同周期下前后光栅的不同位置做了进一步研究分析。

2 薄膜太阳能电池结构

本文提出的相关结构及对照组模型结构如图1所示,这些结构材料自上而下分别为AZO(ZnO:Al)抗反射层、厚为400 nm的c-Si活性层、厚为50 nm的 SiO_2 钝化层,同时考虑到电极的导电性以及制造工艺的问题选取厚度为200 nm的Ag层作为反射层^[8,19]。图1(a)展示了平板结构通过优化AZO层的厚度来获得最佳的 J_{sc} ^[20],设置AZO层的厚度为60 nm,同时考虑到电池的导电性,将厚为50 nm的 SiO_2 层更换成厚为50 nm的AZO层。图1(b)FC和图1(c)RT分别代表仅有前置半圆形光栅结构和仅有后置梯形光栅结构,设置背栅Ag结构厚度为50 nm,并镶嵌在 SiO_2 层中以实现电池的导电性,周期与光栅周期保持一致。图1(d)FCRT代表前置半圆形后置梯形光栅结构,为了最大化地维持c-Si活性层的面积不变,设置梯形的下底宽度与半圆的直径相等,梯形的高度等于半圆的半径,同时设置

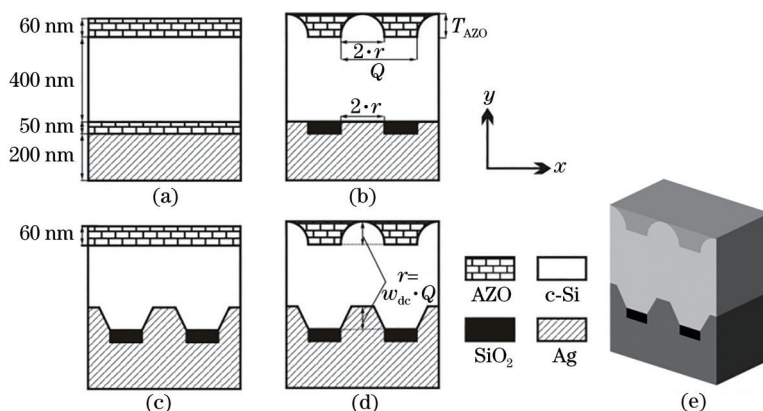


图1 单晶硅薄膜太阳能电池结构模型图。(a)平板结构;(b)FC结构;(c)RT结构;(d)FCRT结构;(e)FCRT结构立体模型图
Fig. 1 Structure model of monocrystalline silicon thin film solar cells. (a) Planar structure; (b) FC structure; (c) RT structure; (d) FCRT structure; (e) stereoscopic model diagram of FCRT structure

背栅宽度也等于半圆的直径。图 1(e) 为 FCRT 结构的立体模型图。在模型构建过程中,设置梯形光栅结构为等腰梯形,为了扩大仿真范围,控制 FC 和 FCRT 结构中的 AZO 层厚度与前置半圆形光栅的高度保持一致,即 $T_{AZO}=r$ 。

近年来,随着微纳制造技术的快速发展,聚焦离子束(FIB)、等离子体增强化学气相沉积(PECVD)和层转移等技术被广泛应用于薄膜太阳能电池(TFSCs)的制备,设计出了越来越多的复杂结构模型,并取得了良好的光捕获效果^[21-22]。对于所提出的 FCRT 结构,可分为两部分来制造,针对后置梯形光栅结构主要采用 FIB 刻蚀与沉积技术,而对于前置半圆形光栅结构主要采用激光干涉光刻和反应离子蚀刻技术来完成。

3 数值模拟与分析

利用 Lumerical 公司的商业软件 FDTD Solutions 来进行结构的模拟计算, x 和 y 方向分别设置为周期性边界和完美匹配层(PML)边界条件,在 AM1.5 光源的条件下,将入射光源设置为平面波,沿 y 轴负方向垂直入射,模拟计算波长范围为 300~1100 nm,借助 FDTD 中的文本来控制吸收层,使光的吸收仅限于 c-Si 活性层,避免了 Ag 的寄生吸收,为了达到所需的精度,设置模拟步长为 4 nm,模拟时间为 1000 fs,网格精度为 2 nm。在计算过程中定义短路电流密度的计算公式为

$$J_{sc} = e \times \int_{300}^{1100} \frac{\lambda}{hc} \Phi_{AM1.5}(\lambda) A(\lambda) d\lambda, \quad (1)$$

式中: e 为电子电量; λ 为入射光的波长; h 为普朗克常数; c 为真空中的光速; $\Phi_{AM1.5}(\lambda)$ 为标准的 AM1.5 光谱; $A(\lambda)$ 为光吸收效率。在计算过程中,一个入射光子只能形成一个电子空穴对,所有的载流子被认为由电极获得,无复合损失。另一方面定义光吸收效率的计算公式为

$$A(\lambda) = \frac{0.5\omega I_m(\epsilon_r, \epsilon_0) \int_{\Omega} |E_0|^2 d\Omega}{\Phi_{AM1.5}(\lambda) \times S}, \quad (2)$$

式中: ω 为角频率; I_m 为计算域中材料介电常数的虚部; Ω 为半导体区域的总体积; S 为仿真区域; ϵ_r 为 c-Si 的相对介电常数; ϵ_0 为真空介电常数; E_0 为局部电场振幅。

通过计算横电波(TE)和横磁波(TM)偏正光下的 J_{sc} ,观察和分析模型的光学特性,并令非偏正光下的 J_{sc} 为 TE 和 TM 偏正光下 J_{sc} 的平均值。模拟分析

的过程中,分别设置光栅周期 Q (100~500 nm)、占空比 ω_{dc} (0.1~0.4)、等腰梯形光栅中腰的斜率 k (1.2~4),并设置圆形光栅的半径 $r = Q \times \omega_{dc}$,相关模型的优化结果如表 1 所示,能够发现 FC、RT、FCRT 三种结构的 J_{sc} 相比于平板结构有了很大的提高,另一方面也能看出这三种光栅结构的 J_{sc} 值差距并不是很大,这是由于在优化的过程中通过设置梯形的高度和下底分别等于半圆形的半径和直径,尽可能使梯形光栅的面积与半圆形光栅的面积一致。

表 1 模型优化结果
Table 1 Model optimized results

Solar cell	Q /nm	ω_{dc}	k	J_{sc} /($\text{mA} \cdot \text{cm}^{-2}$)
Planar	-	-	-	12.76
FC	500	0.4	-	18.15
RT	450	0.25	1.2	18.73
FCRT	450	0.15	1.6	19.10

3.1 短路电流密度与光吸收效率

图 2 为 4 种结构在不同偏振光下对应的 J_{sc} 值,相较于平板结构均有所提高,能够发现 FC 和 FCRT 结构主要是 TE 偏振光占主导地位,而 RT 结构则是 TM 偏振光占主导地位,相较于其他结构,FCRT 结构在 TE 偏正光下的 J_{sc} 值最为突出,而 RT 结构在 TM 偏正光下的 J_{sc} 值最为突出。

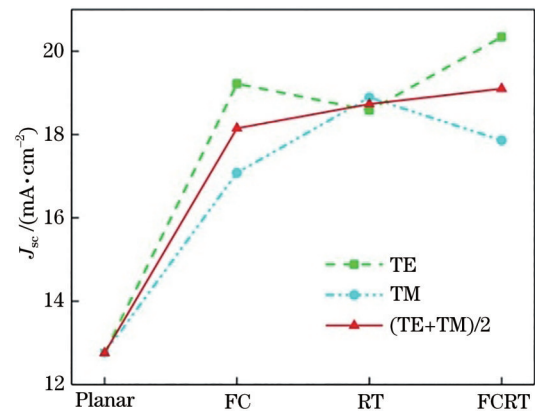


图 2 不同偏振光下对应的短路电流密度

Fig. 2 Short-circuit current densities under different polarized light conditions

图 3 为吸收效率光谱,相较于平板结构,3 种光栅结构的吸收效率均有明显的提升。在 TE 偏振光下,FCRT 结构的吸收效率明显要优于其他结构,尤其是波长在 650~850 nm 的范围内,同时 FC 结构的吸收效率也优于 RT 结构,特别是在波长范围 850~

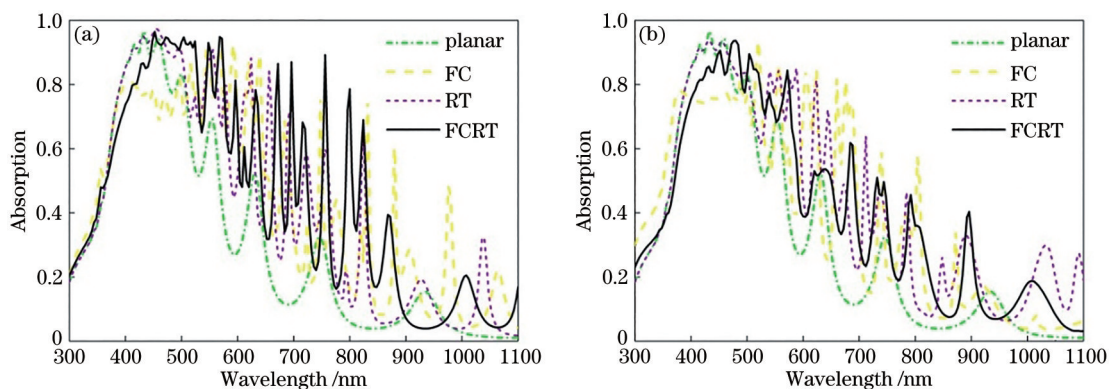


图 3 吸收效率光谱。(a) TE; (b) TM

Fig. 3 Absorption efficiency spectra. (a) TE; (b) TM

1000 nm 内。在 TM 偏振光下, RT 结构的吸收效率相较于其他结构表现更为突出, 主要集中在 850~1100 nm 的波长范围内, 其次 FCRT 结构的吸收表现优于 FC 结构, 尤其是在 860~1100 nm 的波长范围内, 拥有明显的吸收增强效果。以上结论与图 2 中的现象保持一致, 这也说明双层光栅结构的光捕获效果要优于单层光栅结构。

3.2 吸收增强光谱与电磁场强度分布

为了分析 FCRT 结构的吸收增强机理, 进一步研究了该结构的吸收增强光谱与电磁场分布, 在计算过程中将光栅结构的光吸收效率与平板结构的比值定义为光吸收增强, 如图 4 所示。在 550~1100 nm 的波长范围内, 吸收增强效果都是非常明显的, 为了研究具体的光吸收增强机理, 在 TE 偏振光下的长波段范围内选取 824 nm、1012 nm 两个峰值点(分

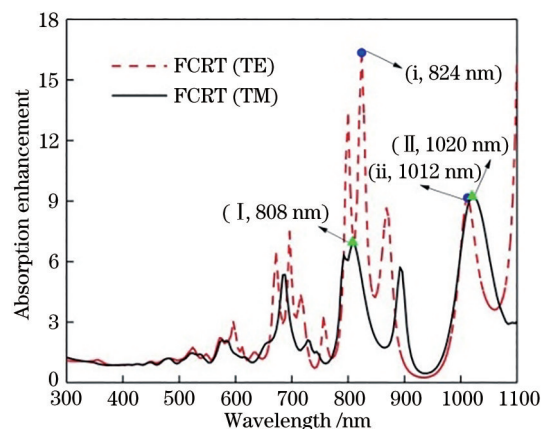


图 4 吸收增强光谱

Fig. 4 Absorption enhancement spectra

别标记为 i、ii) 来分析电场强度的分布, 在 TM 偏振光下的长波段范围内选取 808 nm、1020 nm 两个峰

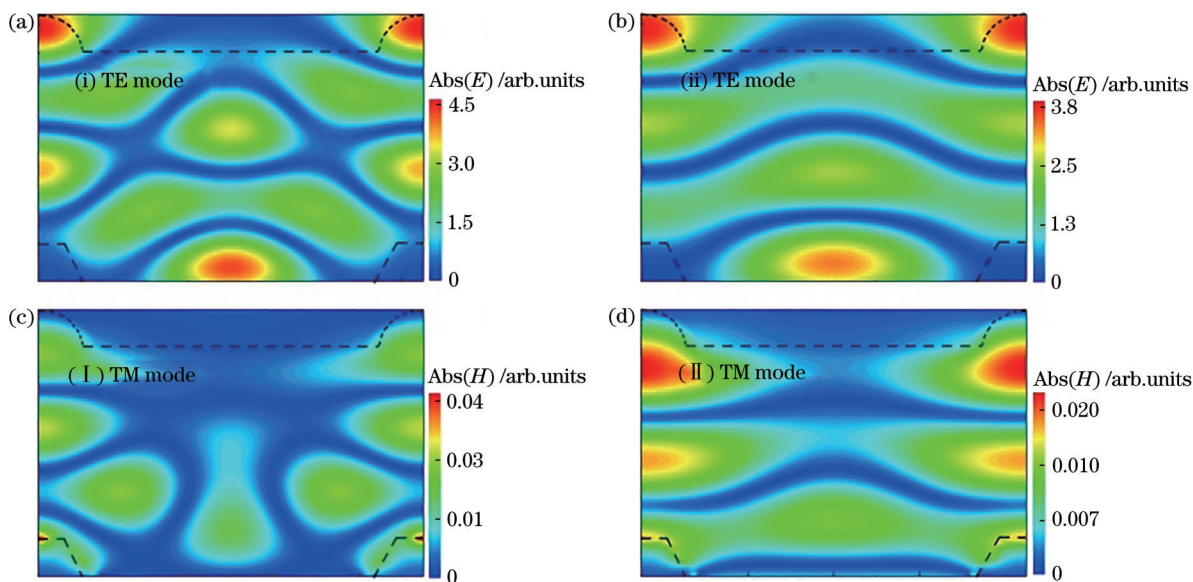


图 5 电磁场强度分布

Fig. 5 Electromagnetic field intensity distribution

值点(分别标记为 I、II)来分析磁场强度分布。图 5 为以上峰值点对应的电磁场分布图。

结合电磁场分析可以发现:1) 图 5(a)电场分布揭示了吸收增强峰 i 的光吸收增强主要来自 FPRs 和光集中的联合影响,图 5(b)电场分布揭示了吸收增强峰 ii 的光吸收增强主要依赖于光集中和衍射的复合影响。同时也能注意到部分区域的电场分布不均匀是由于添加了前后光栅导致 c-Si 活性层的形状发生了改变。2) 图 5(c)磁场分布表明吸收增强峰 I 的吸收增强主要来源于 LSPRs 和光散射,图 5(d)磁场分布表明吸收增强峰 II 的吸收增强主要来自 FPRs 和 LSPRs 模式的协同作用。

3.3 对 FCRT 结构模型进一步优化分析

第 2 节设置 FCRT 结构中的后置梯形光栅为等腰梯形结构,为了进一步提升光捕获性能,采取控制变量法,保持其他参数与表 1 中的最优参数相同(即 $Q=450\text{ nm}$ 、 $\omega_{dc}=0.15$),设置后置梯形光栅结构的左右斜率不匹配,左、右侧斜率分别为 k_1 (1.2~4)和 k_2 (1.2~4),如图 6 所示。观察后置梯形斜率不匹配的前置半圆形后置梯形光栅(MS-FCRT)结构在非偏正光下的短路电流密度分布图可以发现,最优的 $J_{sc}=19.38\text{ mA/cm}^2$ 出现在 region 1 中,对应 $k_1=4, k_2=1.2$ 。MS-FCRT 结构性能相较于 FCRT 结构有了少许的提升,这说明非规则梯形结构的光捕获性能要优于等腰梯形结构。

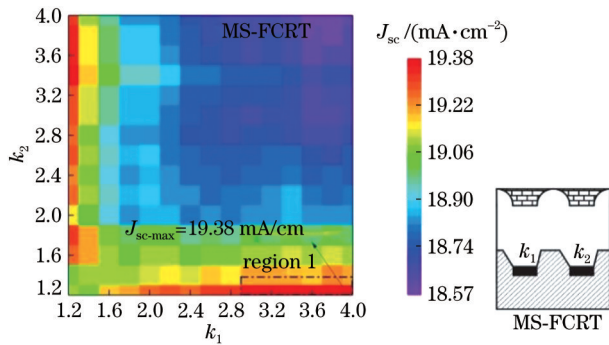


图 6 MS-FCRT 短路电流密度分布图和结构图

Fig. 6 Short circuit current density distribution and structure diagram of MS-FCRT

保持前后光栅的周期一致,进一步分析前后光栅位置不匹配对光捕获性能的影响,其他优化参数与 MS-FCRT 结构中的保持一致,设置前置半圆形光栅的偏移距离 x (0~400 nm),如图 7 所示,其中 η_{abs} 表示光吸收效率,观察前后光栅位置不匹配的前置半圆形后置梯形光栅(ML-FCRT)结构在非偏正光

下的吸收效率云图可以发现,在长波段范围内有明显的线条增强,尤其是在 region 1 中的波长为 880 nm、960 nm 和 1020 nm 处, $J_{sc-max}=20.17\text{ mA/cm}^2$ 对应偏移距离 $x=40\text{ nm}$ 。

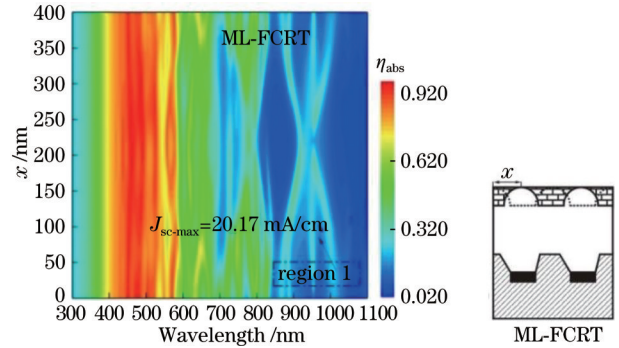


图 7 ML-FCRT 吸收效率云图和结构图

Fig. 7 Cloud diagram of absorption efficiency and structure diagram of ML-FCRT

图 8 为前述 6 种结构的 J_{sc} 柱状图,可以发现通过不断地优化, J_{sc} 的值也获得了进一步提高,FCRT 结构明显要优于单一的 FC 和 RT 结构,而通过对比 MS-FCRT 结构与 FCRT 结构可以看出,后置非规则梯形要优于规则的等腰梯形光栅。同时最终的 ML-FCRT 结构的最佳 J_{sc} 达到了 20.17 mA/cm^2 ,相较于平板结构提高了 58.1%,较 MS-FCRT 结构提高了 4.1%。

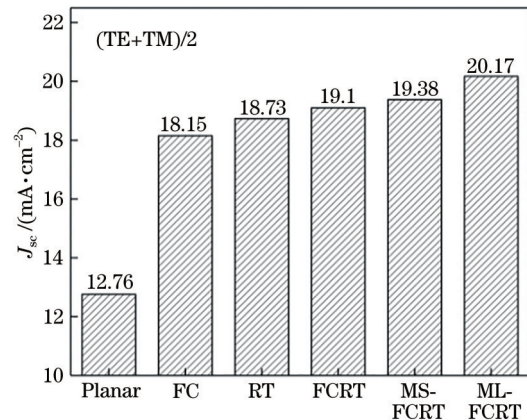


图 8 短路电流密度柱状图

Fig. 8 Short circuit current density histogram

4 结 论

本文提出了一种半圆形前置与梯形后置的双界面光栅单晶硅薄膜太阳能电池结构,在模拟计算的过程中,设置多个对照组并进行参数优化,为了更好地比较光栅结构对光捕获性能的影响,最大化

地控制前置半圆形与后置梯形光栅的面积一致。通过分析 J_{sc} 和光吸收效率可知, FCRT 双界面光栅结构的光捕获性能要优于单一光栅的结构, 针对最佳的 FCRT 结构也分析了该结构的吸收增强机理。此外, 为了提升 FCRT 的光捕获效果, 进一步分析了后置梯形光栅的左右斜率和同周期下不同位置的前后光栅排布对光吸收的影响, 结果显示非规则的梯形要优于规则的等腰梯形光栅结构, 同周期下不同位置的前后光栅排布也能使光捕获效果得到提升, 最终的优化模型 ML-FCRT 结构的 J_{sc} 达到了 20.17 mA/cm^2 , 相较于平板结构提高了 58.1%。基于上述发现, 下一步将设计出更有效的光捕获方案来增强薄膜太阳能电池的光捕获效果。

参 考 文 献

- [1] Zhang X Q, Li Y H, Zhang C. Research progress on solar cell[J]. Materials China, 2014, 33(7): 436-441.
张秀清, 李艳红, 张超. 太阳能电池研究进展[J]. 中国材料进展, 2014, 33(7): 436-441.
- [2] Ali N, Hussain A, Ahmed R, et al. Advances in nanostructured thin film materials for solar cell applications[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2016, 59: 726-737.
- [3] Liu L, Huo Y P, Zhao K J, et al. Broadband absorption enhancement in plasmonic thin-film solar cells with grating surface[J]. Superlattices and Microstructures, 2015, 86: 300-305.
- [4] Tan X Y, Yan W S, Tu Y T, et al. Small pyramidal textured ultrathin crystalline silicon solar cells with double-layer passivation[J]. Optics Express, 2017, 25(13): 14725-14731.
- [5] Park J S, Kim S, Xie Z J, et al. Point defect engineering in thin-film solar cells[J]. Nature Reviews Materials, 2018, 3(7): 194-210.
- [6] Lu X D, Wang X X, Gao J, et al. Two-cavity light-trapping scheme used in ultrathin c-Si solar cells[J]. Optics Letters, 2018, 43(19): 4731-4734.
- [7] Fang H H, Li X Z, Zhou Y K, et al. Ultrafast spectroscopy of hot carriers in perovskites[J]. Acta Optica Sinica, 2021, 41(8): 0823009.
方红华, 黎潇泽, 周运科, 等. 钙钛矿中热载流子的超快光谱探测[J]. 光学学报, 2021, 41(8): 0823009.
- [8] Chen K, Wang Y Y, Zheng H M, et al. Optical absorption of one-dimensional aluminium back grating crystalline silicon thin film solar cell[J]. Acta Photonica Sinica, 2015, 44(11): 1125001.
陈科, 汪园园, 郑红梅, 等. 一维铝背栅单晶硅薄膜太阳能电池光吸收分析[J]. 光子学报, 2015, 44(11): 1125001.
- [9] Madzharov D, Dewan R, Knipp D. Influence of front and back grating on light trapping in microcrystalline thin-film silicon solar cells[J]. Optics Express, 2011, 19(S2): A95-A107.
- [10] Schuller J A, Barnard E S, Cai W, et al. Plasmonics for extreme light concentration and manipulation[J]. Nature Materials, 2010, 9(3): 193-204.
- [11] Chen K, Wu R, Zheng H M, et al. Reflection behavior of two-dimensional super-quadratic subwavelength gratings for silicon-based photovoltaics[J]. Journal of the Optical Society of America. A, Optics, Image Science, and Vision, 2019, 36(4): 647-654.
- [12] Sheng X, Hu J J, Michel J, et al. Light trapping limits in plasmonic solar cells: an analytical investigation [J]. Optics Express, 2012, 20(S4): A496-A501.
- [13] Shi X, Sun C, Wang X Q. One-dimensional diffraction grating structure for rear reflection surface of thin film silicon solar cells[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2018, 55(1): 010501.
石鑫, 孙诚, 王晓秋. 适用于薄膜硅太阳能电池背反射面的一维衍射光栅结构[J]. 激光与光电子学进展, 2018, 55(1): 010501.
- [14] Fang X, Zhao C Y. Grating absorption and enhancement in silicon nanowire arrays with thin blocks[J]. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2017, 194: 7-16.
- [15] Deng C, Tan X Y, Jiang L H, et al. Efficient light trapping in silicon inclined nanohole arrays for photovoltaic applications[J]. Optics Communications, 2018, 407: 199-203.
- [16] He Z, Gu J H, Sha W E I, et al. Efficient volumetric method of moments for modeling plasmonic thin-film solar cells with periodic structures[J]. Optics Express, 2018, 26(19): 25037-25046.
- [17] Lan J, Chen J S, Xiao Z G, et al. Simulation of broadband anti-reflective and bud-shaped moth-eye structure[J]. Acta Optica Sinica, 2021, 41(14): 1416001.
兰俊, 陈劲松, 肖志刚, 等. 一种宽波段减反的新型苞状蛾眼结构模拟研究[J]. 光学学报, 2021, 41(14): 1416001.
- [18] Hsu W C, Tong J K, Branham M S, et al. Mismatched front and back gratings for optimum light trapping in ultra-thin crystalline silicon solar cells[J]. Optics Communications, 2016, 377: 52-58.
- [19] Aly A M A, Hussein M, Yahia A, et al. Highly efficient SiO_2 trapezoidal grating-based thin-film solar

- cell[J]. Journal of the Optical Society of America B, 2021, 38(3): 922-931.
- [20] Chen K, Wu R, Zheng H M, et al. Light-trapping schemes for silicon thin-film solar cells via super-quadratic subwavelength gratings[J]. Applied Optics, 2019, 58(31): 8702-8712.
- [21] Kim C S, Ahn S H, Jang D Y. Review: developments in micro/nanoscale fabrication by focused ion beams [J]. Vacuum, 2012, 86(8): 1014-1035.
- [22] Qian F S, Deng J, Xiong F Z, et al. Direct growth of high quality graphene nanowalls on dielectric surfaces by plasma-enhanced chemical vapor deposition for photo detection[J]. Optical Materials Express, 2020, 10(11): 2909-2918.