

# 半球凹坑表面玻璃基片在薄膜电池中的陷光应用

钟建平 王庆康

(上海交通大学微纳科学技术研究院, 上海 200240)

**摘要** 研究了一种新颖的具有紧密型半球凹坑阵列表面结构的玻璃基片。运用严格耦合波分析(RCWA)方法研究了此玻璃基模型在光垂直入射条件下的透射衍射,数值结果表明此类玻璃基片可以有效地衍射光线。当结构周期在 $2.6\ \mu\text{m}$ 附近时,玻璃基片在长波段( $0.6\sim 0.8\ \mu\text{m}$ )具有较高的雾度。为了改善薄膜电池的陷光效果,考虑将此玻璃基片运用到非晶硅薄膜太阳能电池结构中,数值结果表明与平板结构薄膜太阳能电池相比,当结构周期为 $2.6\ \mu\text{m}$ 时,光垂直入射条件下非晶硅薄膜结构在 $0.3\sim 0.8\ \mu\text{m}$ 波段平均吸收率提高 $18.7\%$ ,在 $0.6\sim 0.8\ \mu\text{m}$ 波段吸收率提高 $17.9\%\sim 77.7\%$ 。

**关键词** 薄膜;薄膜太阳能电池;光子晶体;陷光;衍射

中图分类号 TK513 文献标识码 A doi: 10.3788/AOS201333.0231001

## Glass Substrate with Hemisphere Pits Surface for Light Trapping in Thin Film Solar Cells

Zhong Jianping Wang Qingkang

(Research Institute of Micro/Nano Science and Technology, Shanghai Jiaotong University, Shanghai 200240, China)

**Abstract** Glass substrate with novel compact hemisphere pits surface structure is studied. Based on rigorous coupled wave analysis (RCWA), the diffraction of the structured glass substrate is thematically calculated. It is found that this kind of glass substrate can effectively diffract the normal incident light. It has high haze when the period is around  $2.6\ \mu\text{m}$  with long wavelengths of  $0.6\sim 0.8\ \mu\text{m}$ . This glass substrate is utilized in thin film solar cells for light trapping in our simulation. Compared with flat thin film structure, the average absorption is enhanced by  $18.7\%$  within  $0.3\sim 0.8\ \mu\text{m}$  and the absorption is enhanced by  $17.9\%\sim 77.7\%$  within  $0.6\sim 0.8\ \mu\text{m}$  bandwidth for the structure with a period of  $2.6\ \mu\text{m}$  under normal illumination.

**Key words** thin films; thin film solar cell; photonic crystal; light trapping; diffraction

**OCIS codes** 310.6845; 050.1970; 120.5710; 050.5298; 310.4165

## 1 引 言

薄膜电池结构一般可以在价格低廉的玻璃、塑料、陶瓷和金属片等不同材料基板上生长,可以用等离子体增强化学气相沉积(PECVD)和溅射等方法实现大面积生长,与体硅太阳能电池相比,具有可大面积制备、成本低等优势。光子在厚度小于 $2\ \mu\text{m}$ 的吸收层里不能被完全吸收,而薄膜电池吸收层厚

度在几百纳米至 $1\ \mu\text{m}$ ,因此平板薄膜电池对光的吸收率不高,尤其是长波段光子在薄膜吸收层的有限光路里吸收率较低,因此增强长波段光子在薄膜吸收层里的吸收至关重要。为了提高光子在薄膜结构中的吸收率,通常考虑在表面反射低的前提下延长光子在吸收层的光路,需要增强进入吸收层的光衍射,尤其是高级次衍射,这样有利于增强陷光。近年

收稿日期: 2012-08-30; 收到修改稿日期: 2012-09-27

基金项目: 国家 863 计划(2011AA050518)、国家 973 计划(2012CB934302)和上海市科委项目(11DZ2290303)资助课题。

作者简介: 钟建平(1988—),男,硕士研究生,主要从事纳米光电子学和微纳制造技术等方面的研究。

E-mail: fitrs@sjtu.edu.cn

导师简介: 王庆康(1962—),男,教授,博士生导师,主要从事纳米光电子学和微纳制造技术等方面的研究。

E-mail: wangqingkang@sjtu.edu.cn(通信联系人)

来许多方法被用来增强薄膜电池的陷光,这些方法通常都是通过新颖的结构<sup>[1~7]</sup>来实现陷光增强,但这些新结构都以提高成本为代价。玻璃基底作为廉价且可大面积制备的基底而被广泛运用于薄膜电池结构中,采用图形化和各向同性刻蚀可以得到具有微纳结构表面的玻璃基片,基于此类基片制备的薄膜太阳能电池结构具有良好的陷光效果<sup>[8]</sup>。

本文研究了一种通过各向异性刻蚀得到的表面半球凹坑阵列玻璃基片。对结构衬底以及基于此结构衬底的非晶硅薄膜电池进行了衍射和反射的数值计算,得到了结构参数对透射衍射谱的影响,并优化了结构参数以实现吸收率的提高。

## 2 数值原理与模型

在本文的方法中,核心算法是严格耦合波分析(RCWA)理论<sup>[9,10]</sup>。运用 RCWA 方法对结构进行计算的过程包括三个步骤:1)得到入射区域与传输区域的电磁场表达式;2)得到电磁场的傅里叶阐述以及薄膜太阳能电池的介电常数;3)在不同的界面上应用电磁场边界条件,以得到不同数学模型下的振幅和各级衍射效率。

对于三维(3D)结构,考虑任意入射方向的矢量方程。通过提取一个假定的时谐因子  $\exp(-i\omega t)$ ,麦克斯韦方程组可以得到如下表达形式:

$$\frac{\partial}{\partial y}E_z - \frac{\partial}{\partial z}E_y = i\omega\mu H_x, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}E_x - \frac{\partial}{\partial x}E_z = i\omega\mu H_y, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}E_y - \frac{\partial}{\partial y}E_x = i\omega\mu H_z, \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial y}H_z - \frac{\partial}{\partial z}H_y = -i\omega\epsilon_0\epsilon_{r,x}E_x, \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}H_x - \frac{\partial}{\partial x}H_z = -i\omega\epsilon_0\epsilon_{r,y}E_y, \quad (5)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}H_y - \frac{\partial}{\partial y}H_x = -i\omega\epsilon_0\epsilon_{r,z}E_z, \quad (6)$$

式中  $t$  为时间,  $\omega$  为角速度,  $\epsilon_0$  为真空中介电常数,  $\mu$  为材料的磁导率,  $E$  为电场强度,  $H$  为磁场强度。媒质通过一个对角参数张量来描述,它的分量有  $\epsilon_{r,x}$ ,  $\epsilon_{r,y}$  和  $\epsilon_{r,z}$ 。

将(3)、(6)式代入(1)、(2)、(4)、(5)式,得到了横向的麦克斯韦方程组:

$$\frac{\partial}{\partial z}E_x = \frac{-i}{\omega\epsilon_0} \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\epsilon_{r,z}} \frac{\partial}{\partial y} H_x + \left( \frac{i}{\omega\epsilon_0} \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\epsilon_{r,z}} \frac{\partial}{\partial x} + i\omega\mu \right) H_y, \quad (7)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}E_y = \left( \frac{-i}{\omega\epsilon_0} \frac{\partial}{\partial y} \frac{1}{\epsilon_{r,z}} \frac{\partial}{\partial y} - i\omega\mu \right) H_x + \frac{i}{\omega\epsilon_0} \frac{\partial}{\partial y} \frac{1}{\epsilon_{r,z}} \frac{\partial}{\partial x} H_y, \quad (8)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}H_x = \frac{i}{\omega\mu} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} E_x + \left( \frac{i}{\omega\epsilon_0} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} - i\omega\epsilon_0\epsilon_{r,x} \right) E_y, \quad (9)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}H_y = \left( \frac{i}{\omega\mu} \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} + i\omega\epsilon_0\epsilon_{r,x} \right) E_x + \frac{-i}{\omega\mu} \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} E_y. \quad (10)$$

光作为一种特殊的电磁波,在垂直入射条件下,经过薄膜结构将产生反射和衍射。为了得到反射场和衍射场强度,一个解决方案是在(7)~(10)式上直接利用其边界条件来计算,但计算代价比较高。为了准确计算所有级数的衍射效率,良好的仿真网格划分是必要的。为了解这些方程,将结构分割成简单的垂直方向同质的网格区域,也就是说,网格区域具有独立于  $z$  的参量  $\epsilon_{r,x}$ ,  $\epsilon_{r,y}$  和  $\epsilon_{r,z}$ , 一个复杂的多层周期结构就这样被分解成网格的堆积,整体的计算转变成具有独立参量的网格计算。

为了验证算法的准确性,在此先构建参考文献[11]中的绝缘体上硅(SOI)亚波长光栅结构,并计算反射率,如图1所示,将利用 RCWA 算法得到的

仿真数据和文献实验数据进行比较。

从图1可以看出,无论是 TE 模还是 TM 模,实验数据和模拟数据整体上能很好地吻合,RCWA 算法得到的计算数据可以反映出实际测量的数据的变化规律。

玻璃可以利用氢氟酸和氟化胺等进行湿法刻蚀,这种刻蚀通常不具有方向性,即各向同性刻蚀。本课题组通过对玻璃基片实行表面图形化后,在氢氟酸中进行各向同性刻蚀得到了如图2(a)所示的紧密型半球凹坑阵列表面玻璃基片,图2(a)为此类基片的扫描电子显微镜(SEM)照片。此结构具有良好的二维周期性,为二维光子晶体结构,且制备简易,可实现大面积制备,成本低廉,从而具有较高的实用价值。

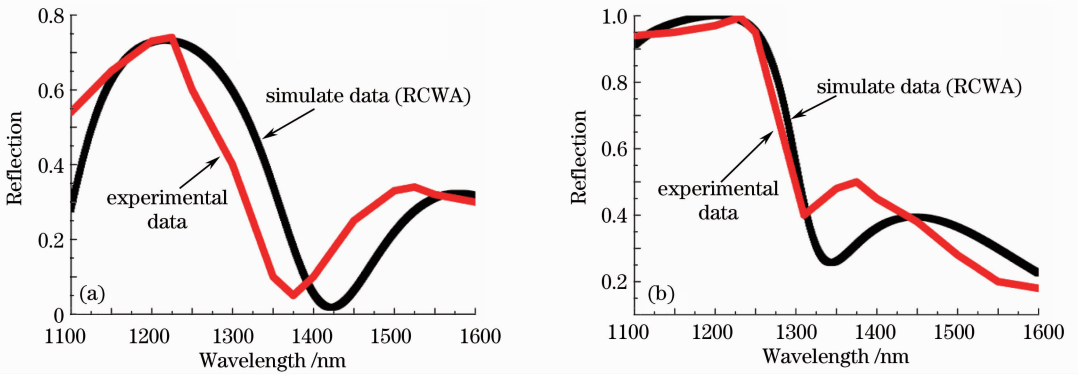


图 1 (a)TE 模及(b)TM 模模拟与实验反射谱比较

Fig.1 Comparison of simulate and experimental reflection spectra for (a) TE mode and (b) TM mode

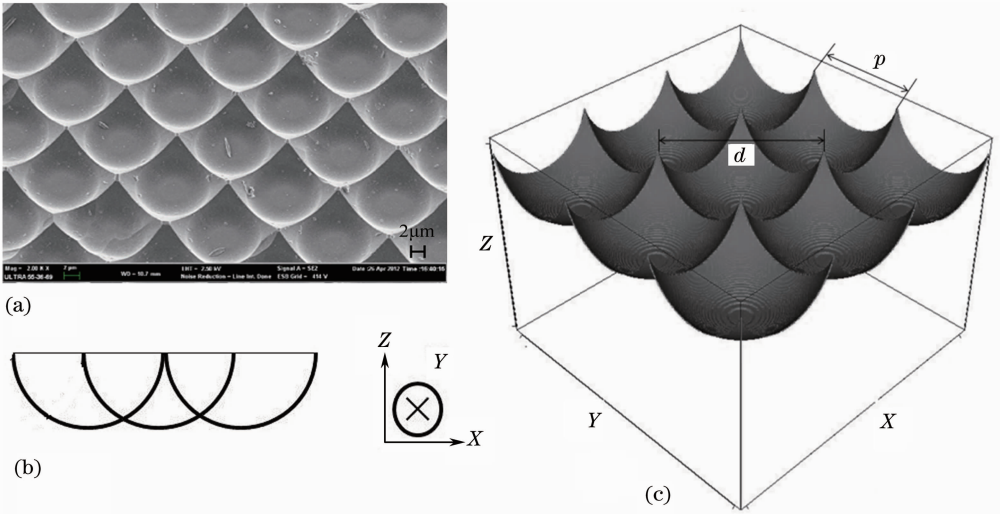


图 2 紧密型半球凹坑阵列玻璃基 SEM 图和数值模型图。(a) SEM 图；(b)“交叉式”模型；(c)三维模型  
Fig.2 SEM image of close hemisphere pits array glass substrate and numerical model. (a) Image of SEM; (b) “cross” model; (c) 3D model

针对图 2(a)所示的实际结构图,结合各向同性刻蚀的特点,构建了“交叉式”半球凹坑阵列结构模型来模拟计算,相邻两个半球边界各自过对方的球心,这符合各向同性刻蚀的特点,最后刻蚀剩下交叉尖端,在此称之为“交叉式”结构模型,如图 2(b)所示。周期为  $p$ ,半球凹坑的半径为  $R$ ,有  $R = \frac{\sqrt{2}}{2}p$ ,在  $X, Y$  方向为相同的“交叉式”半球组成的阵列,具有周期性和对称性,如图 2(c)所示。

为了研究薄膜电池结构的光学性能,需要各层材料的光学参数,在此取玻璃折射率为 1.5,非晶硅(a-Si)的折射率和消光系数来自 SOPRA<sup>[12]</sup>,掺铝氧化锌(AZO)膜的折射率和消光系数来自 Santbergen 等<sup>[13]</sup>的研究,Ag 的折射率和消光系数来自 Palik<sup>[14]</sup>的研究。通过非晶硅的吸收光谱<sup>[13]</sup>和 AM 1.5G 太阳光能量谱进行比较,确定计算的光谱

范围为  $0.3 \sim 0.8 \mu\text{m}$ 。在凹坑阵列玻璃基的凹坑结构面依次叠层  $0.3 \mu\text{m}$  AZO 作为前电极,  $0.5 \mu\text{m}$  a-Si p-i-n 作为吸收层,  $0.1 \mu\text{m}$  AZO 作为背面电极及过渡层,  $0.3 \mu\text{m}$  Ag 作为背面反射层。各层材料厚度相同的平板结构如图 3(a)所示,具有半球凹坑的结构如图 3(b)所示。

### 3 模拟结果与分析

薄膜电池结构的效率主要在于两点:1)表面反射率;2)光子在吸收层中的光路。为了得到良好的陷光效果,需要在表面反射率低的前提下,尽可能增加光子在吸收层(即 a-Si p-i-n 层)中的光路,即增强光的散射。这里考察光的透射衍射,用透射衍射效率来表征光在薄膜结构中的陷光效果。

在  $500 \mu\text{m}$  玻璃基片上刻蚀半球凹坑阵列表面结构得到玻璃基片,在此基片结构面上叠层得到如

图 3(b)所示的非晶硅薄膜结构,在  $X$  和  $Y$  方向设置周期边界条件(PBC),周期为  $p$ 。半球凹坑阵列表面结构在  $X$ 、 $Y$  两个方向周期性相同,为对称的表

面浮雕结构,反射率与极化角无关<sup>[15]</sup>。不妨以归一化的 TM 极化波垂直入射,计算电池表面反射情况,表面反射谱如图 4 所示。

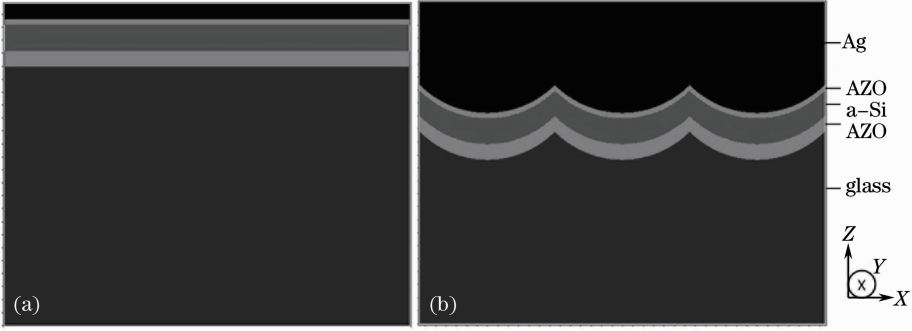


图 3 (a)平板结构和(b)基于半球凹坑阵列玻璃基片的非晶硅薄膜结构比较

Fig. 3 Comparison of (a) flat structure and (b) thin film structure based on the hemisphere pits array glass substrate

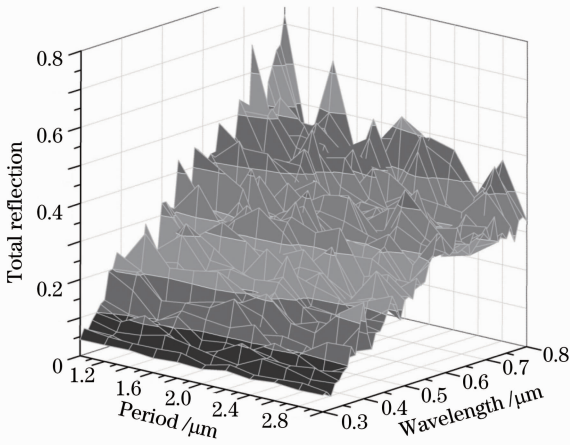


图 4 表面反射率在不同周期条件下随波长的分布

Fig. 4 Total reflection of the surface as a function of wavelength with different periods

如图 4 所示,周期在  $1 \sim 3 \mu\text{m}$  变化时,随着波长的增大,整体表面反射率增大;周期  $p > 2.0 \mu\text{m}$  时,在长波段的表面反射率优于小周期条件下的反射情况;当周期  $p$  为  $2.6 \mu\text{m}$  附近值时,在长波段的表面反射率明显低于其他周期情况。

垂直入射光经过微结构后会发发生衍射, $X$ 、 $Y$  方向有不同的衍射级次,衍射角度大于零,衍射光的光路比垂直光的光路大,为了增大光在薄膜中的光路,需要尽量增强光的衍射。定义衍射效率比  $\eta_{(DE)}$ ,即除零级外衍射总强度与零级衍射强度的比值来表征衍射的强弱:

$$\eta_{(DE)} = \frac{\sum_m \sum_n \eta_{DE_{mn}} (m, n \neq 0)}{\eta_{DE_{00}}}, \quad (11)$$

式中  $m, n$  为  $X$ 、 $Y$  方向的衍射级次。

雾度反映的是透明或半透明材料的内部或表面由于光漫射造成的云雾状或混沌的外观,通常以漫射的光通量与透过材料的光通量之比来表示。以衍射总强度与透射总强度之比来表示透射衍射强度:

$$H_{\text{haze}} = \frac{\sum_m \sum_n \eta_{DE_{mn}} (m, n \neq 0)}{\sum_m \sum_n \eta_{DE_{mn}}} \times 100\%, \quad (12)$$

容易得到衍射效率比和雾度的关系为  $\frac{1}{H_{\text{haze}}} = \frac{1}{\eta_{(DE)}} + 1$ 。

衍射效率比  $\eta_{(DE)}$  越大,雾度也越大。

为了考察玻璃表面结构对玻璃基片雾度的影响,计算玻璃在空气中的透射衍射强度,采用如图 5 所示玻璃/空气结构模型,在  $X$ 、 $Y$  方向设置 PBC,光从平表面垂直入射。衍射级次为  $(x, y) = (m, n)$ ,对应的透射衍射强度为  $\eta_{DE_{mn}}$ ,在这里计算到最为显著的前 4 级衍射,即  $m, n = -4 \sim +4$ 。

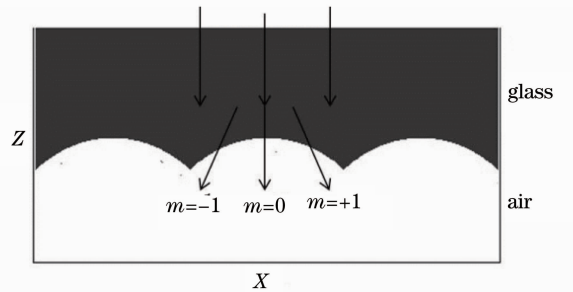


图 5 垂直入射光经过玻璃表面微结构后发生衍射

Fig. 5 Normal incident light diffracted by the microstructure

图 6 给出了周期为  $2.2\sim 3.2\ \mu\text{m}$  时,玻璃基底的衍射效率比  $\eta_{\text{(DE)}}$  随入射波长的变化规律。随着波长的增大,  $\eta_{\text{(DE)}}$  呈上升趋势,在大于  $0.6\ \mu\text{m}$  波段出现峰值,且随着周期变大,峰值发生红移,周期大于  $3\ \mu\text{m}$  时峰值移出  $0.3\sim 0.8\ \mu\text{m}$  波段。衍射效率比  $\eta_{\text{(DE)}}$  在  $2.6\ \mu\text{m}$  周期时,在长波段  $0.6\sim 0.8\ \mu\text{m}$  具有约 16 的取值,此时玻璃基片在长波段具有较高的雾度。

从图 4 可以知道薄膜电池在  $2.6\ \mu\text{m}$  周期时具有较低的表面总反射率,图 6 显示玻璃基片在  $2.6\ \mu\text{m}$  周期附近时具有高的雾度,以  $2.6\ \mu\text{m}$  周期为此结构的优化值。针对图 3 所示平板结构和基于半球凹坑阵列玻璃基的非晶硅薄膜电池结构,计算吸收率,如图 7 所示。

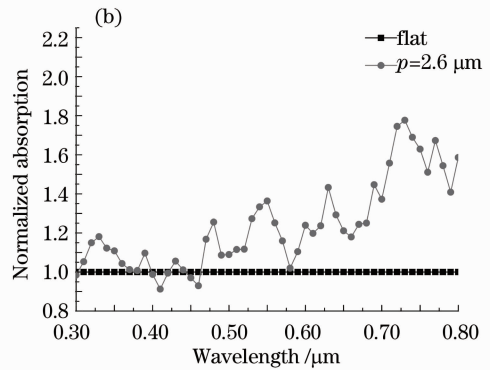
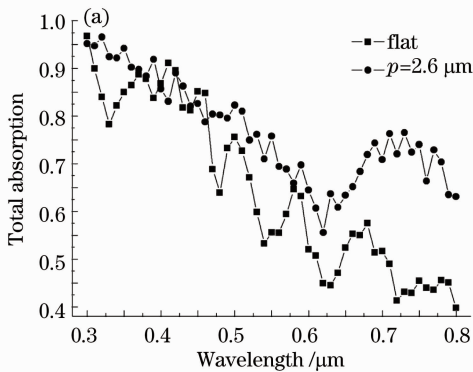


图 7 (a)当周期为  $2.6\ \mu\text{m}$  时薄膜电池光吸收率与平板结构薄膜电池光吸收率比较及(b)归一化吸收率  
Fig. 7 (a) Comparison of absorption and the flat thin film solar cell with the period of  $2.6\ \mu\text{m}$  and (b) normalized absorption

数值计算表明,基于表面结构化玻璃基片的薄膜太阳能电池与相同厚度平板薄膜结构相比,在周期为  $2.6\ \mu\text{m}$  时,吸收率得到了明显的增强,尤其是在长波段的吸收率,在  $0.3\sim 0.8\ \mu\text{m}$  波段平均吸收率提高  $18.7\%$ ,在长波段  $0.6\sim 0.8\ \mu\text{m}$  波段对入射光的吸收率增强  $17.9\%\sim 77.7\%$ ,相对平板结构吸收率的归一化吸收率为  $1.24\sim 1.78$ 。由于非晶硅在短波段( $0.3\sim 0.45\ \mu\text{m}$ )具有很高的吸收系数,光在吸收层表面几百纳米处就几乎完全被吸收<sup>[16]</sup>,从而微米结构的光衍射效果对于此波段的影响较小;在中长波段(大于  $0.45\ \mu\text{m}$ ),由于微米结构的衍射效果增加了光在薄膜中的光路,从而增强了陷光效果,提高了吸收率。

## 4 结 论

通过对平板玻璃基片进行各向同性刻蚀得到半球凹坑表面结构玻璃基底,结合各向同性刻蚀的特点构建了“交叉式”半球结构模型,基于 RCWA 算

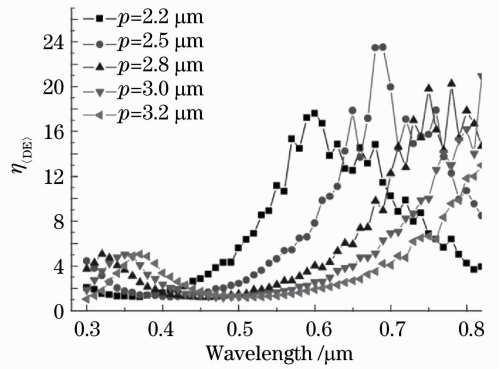


图 6 当周期为  $2.2\sim 3.2\ \mu\text{m}$  时,  $\eta_{\text{(DE)}}$  随入射波长变化情况  
Fig. 6  $\eta_{\text{(DE)}}$  as a function of wavelength when the period changes between  $2.2\sim 3.2\ \mu\text{m}$

法对玻璃基底和薄膜太阳能电池进行了光学计算。数值结果表明,此基底可以有效地衍射长波段光,在周期为  $2.6\ \mu\text{m}$  时,玻璃基底取得较高的雾度;在玻璃基底结构面加层得到的非晶硅薄膜太阳能电池,在周期为  $2.6\ \mu\text{m}$  时,  $0.3\sim 0.8\ \mu\text{m}$  波段平均吸收率提高  $18.7\%$ ,在长波段  $0.6\sim 0.8\ \mu\text{m}$  波段对入射光的吸收率增强  $17.9\%\sim 77.7\%$ ,相对平板结构的归一化吸收率为  $1.24\sim 1.78$ 。

## 参 考 文 献

- 1 H. Sai, Y. Kanamori, K. Arafune *et al.*. Light trapping effect of submicron surface textures in crystalline Si solar cells[J]. *Progress in Photovoltaics*, 2007, **15**(5): 415~423
- 2 Y. M. Song, S. Y. Bae, J. S. Yu *et al.*. Closely packed and aspect-ratio-controlled antireflection subwavelength gratings on GaAs using a lenslike shape transfer[J]. *Opt. Lett.*, 2009, **34**(11): 1702~1704
- 3 M. A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa *et al.*. Solar cell efficiency tables (Version 31)[J]. *Progress in Photovoltaics*, 2008, **16**(1): 61~67
- 4 Y. Kameya, K. Hanamura. Enhancement of solar radiation absorption using nanoparticle suspension[J]. *Solar Energy*,

- 2011, **85**(2): 299~307
- 5 Y. M. Song, J. S. Yu, Y. T. Lee. Antireflective submicrometer gratings on thin-film silicon solar cells for light-absorption enhancement[J]. *Opt. Lett.*, 2010, **35**(3): 276~278
- 6 K. Yamamoto, A. Nakajima, M. Yoshimi *et al.*. A high efficiency thin film silicon solar cell and module[J]. *Solar Energy*, 2004, **77**(6): 939~949
- 7 Zhou Zhou, Zhou Jian, Sun Xiaowei *et al.*. Design of an irregularly shaped DBR for thin film solar cells[J]. *Acta Optica Sinica*, 2011, **31**(7): 0731002  
周 舟, 周 健, 孙晓玮 等. 薄膜太阳能电池异型布拉格背反射结构设计制作[J]. 光学学报, 2011, **31**(7): 0731002
- 8 J. Kim, A. J. Hong, J. W. Nah *et al.*. Three-dimensional a-Si:H solar cells on glass nanocone arrays patterned by self-assembled Sn nanospheres[J]. *J. Am. Chem. Soc.*, 2012, **16**(1): 265~271
- 9 Yang Xuefeng, Shi Tielin, Zuo Haibo *et al.*. Research on optical properties of hierarchical structure in butterfly wing scales based on rigorous coupled-wave analysis[J]. *Acta Optica Sinica*, 2011, **31**(7): 0733002  
杨雪峰, 史铁林, 左海波 等. 基于严格耦合波理论的蝴蝶鳞翅分级结构光学特性研究[J]. 光学学报, 2011, **31**(7): 0733002
- 10 Wang Zhenhua, Wu Yonggang, Ling Leijie *et al.*. Guided-mode resonance spectral characteristics in tunable orthogonal grating [J]. *Acta Optica Sinica*, 2011, **31**(5): 0505002  
王振华, 吴永刚, 凌磊婕 等. 正交双光栅结构的导模共振光谱特性[J]. 光学学报, 2011, **31**(5): 0505002
- 11 Guo Chucai, Ye Weimin, Yuan Xiaodong *et al.*. Research on reflection characteristics of sub-wavelength gratings [J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(12): 3272~3276  
郭楚才, 叶卫民, 袁晓东 等. 亚波长光栅反射特性研究[J]. 光学学报, 2009, **29**(12): 3272~3276
- 12 SOPRA N&K Database[DB/OL]. <http://refractiveindex.info>. 2012-07-01
- 13 R. Santbergen, J. M. Goud, M. Zeman *et al.*. The AM1.5 absorption factor of thin-film solar cells[J]. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 2010, **94**(5): 715~723
- 14 D. Edward Palik. Handbook of Optical Constants of Solids[M]. Boston: Academic Press, 1985. 355~356
- 15 Yu Weixing, Lu Zhenwu, Wang Peng *et al.*. Vector analysis of two-dimensional surface-relief structure diffraction [J]. *Acta Optica Sinica*, 2001, **21**(8): 980~986  
鱼卫星, 卢振武, 王 鹏 等. 二维表面浮雕结构的矢量衍射分析[J]. 光学学报, 2001, **21**(8): 980~986
- 16 Reihul Dewan, Marko Marinkovic, Rodrigo Noriega *et al.*. Light trapping in thin-film silicon solar cells with sub micro surface texture [J]. *Opt. Express*, 2009, **17**(25): 58~65

栏目编辑: 韩 峰