

doi: 10.3788/gzxb20144305.0523001

# 新型硅薄膜太阳能电池混合陷光结构

时彦朋, 王晓东, 刘雯, 杨添舒, 杨富华

(中国科学院半导体研究所 集成技术工程研究中心, 北京 100083)

**摘 要:**针对应用于薄膜太阳能电池的一种混合陷光结构进行了分析研究, 该结构由位于电池正面的电介质颗粒和位于电池背面的金属颗粒构成. 运用有限时域差分法模拟分析了正面电介质颗粒与背面金属颗粒对光吸收增强的不同作用范围. 运用电场图分析了其对光吸收增强的机制, 包括两种颗粒的散射作用和金属纳米颗粒的表面等离子体近场增强作用. 分别优化了正面电介质颗粒和背面金属颗粒的材料、大小等参量, 获得了一种优化后的混合陷光结构. 实验表明带有这种混合陷光结构的电池短路电流密度相对于参考电池提高了 30.3%, 该方法为提高薄膜太阳能电池效率提供了新思路.

**关键词:**太阳能电池; 混合陷光结构; 时域有限差分法; 电介质颗粒; 金属颗粒; 光吸收; 模拟

中图分类号: O436

文献标识码: A

文章编号: 1004-4213(2014)05-0523001-5

## New Hybrid Light Trapping Structure in Silicon Thin Film Solar Cells

SHI Yan-peng, WANG Xiao-dong, LIU Wen, YANG Tian-shu, YANG Fu-hua

(Engineering Research Center for Semiconductor Integrated Technology, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China)

**Abstract:** In this paper, a kind of hybrid light trapping structures in thin film crystalline silicon solar cells, combined of dielectric nanoparticles on the front and metal nanoparticles on the rear, was reported. Numerical simulations were performed based on the finite-difference time-domain solutions, and the wavelength ranges that the dielectric nanoparticles and metal nanoparticles had impact on, were systematically analyzed. The absorption enhancement mechanisms were shown through the electric field figures, including the scattering of these two kinds of nanoparticles, and the near field enhancement of surface plasmons excited by the metal nanoparticles. Simulation-based optimizations of the periods and sizes of Ag, TiO<sub>2</sub> etc nanoparticles were given. Furthermore, a 30.3% increase in the short circuit current density was obtained in a solar cell with the optimized hybrid light trapping structure. This structure, combined of the different nanoparticles with different locations, is a new way to improve the conversion efficiency of thin film solar cells.

**Key words:** Solar cells; Hybrid light trapping structure; Finite-difference time-domain method; Dielectric nanoparticles; Metal nanoparticles; Light absorption; Simulation

**OCIS Codes:** 230.1950; 310.6628; 290.1350; 290.2558; 350.6050

## 0 引言

作为第二代太阳能电池<sup>[1]</sup>, 薄膜太阳能电池因为其消耗原材料少而倍受青睐. 硅薄膜电池吸收层典型厚度为 1~2 μm, 而通常硅对太阳光谱充分吸收的光学厚度为 180 μm, 因此电池吸收层对光并不能实现充

分吸收, 造成电池效率相对较低. 因为电池本身厚度的原因, 传统减反结构<sup>[2]</sup>如表面织构化(表面起伏 2~10 μm)等不适用薄膜电池. 为了降低电池成本的同时提高其光电转换效率, 在薄膜电池上应用各种陷光结构是目前薄膜电池研究的重要课题之一. 目前, 陷光结构的研究热点主要有金属纳米颗粒<sup>[3-6]</sup>、电介质颗

基金项目: 国家重点基础研究发展计划(No. 2012CB934204)和国家自然科学基金(Nos. 61076077, 61274066)资助

第一作者: 时彦朋(1987-), 男, 博士研究生, 主要研究方向为薄膜太阳能电池光吸收的模拟研究. Email: ypsi@semi.ac.cn

导师(通讯作者): 杨富华(1961-), 男, 研究员, 主要研究方向为微纳结构太阳能电池芯片及集成; 宽禁带半导体大功率器件; 纳米结构电子器件及集成; MEMS 器件. Email: fhyang@semi.ac.cn

收稿日期: 2013-07-22; 录用日期: 2013-11-19

<http://www.photon.ac.cn>

粒<sup>[7]</sup>、光栅结构<sup>[8-10]</sup>和光子晶体<sup>[11-12]</sup>等微纳结构. 在传统单一陷光结构的基础上, 本课题组系统研究过混合陷光结构, 从总体上给出了混合结构的参量设计原则.

本文对应用于薄膜太阳能电池的混合陷光结构进行了模拟研究, 采用传统正面陷光结构与背面陷光结构相结合的方式增强太阳能电池的光吸收. 由于在电池正面时金属颗粒会对光有部分吸收, 而电介质颗粒由于其吸收系数很小, 对光的吸收很弱, 可以忽略<sup>[7]</sup>; 而在背面时金属颗粒对光的作用要比电介质颗粒的散射效果好<sup>[13]</sup>, 但是采用这种正面电介质颗粒、背面金属颗粒的混合陷光结构目前并没有相关研究, 因此在本文采用正面常用电介质颗粒作陷光结构, 背面常用金属颗粒作陷光结构. 用有限时域差分法 (Finite-Difference Time-Domain, FDTD) 模拟对这种混合陷光结构的参量设计进行了理论上的计算, 并分析了正面和背面陷光结构对不同波段光吸收的增强效果. 通过对吸收层电场图的分析证实了正面与背面陷光结构增强光吸收时, 相互作用可以忽略不计, 因此可以通过分别优化正面电介质颗粒与背面银颗粒的占空比来得到最优的混合陷光结构. 这种混合陷光结构的应用为提高薄膜太阳能电池的光吸收和效率提供了一种新的思路.

## 1 设计与建模

图 1(a) 为本文涉及到的电池模型示意图. 电池结

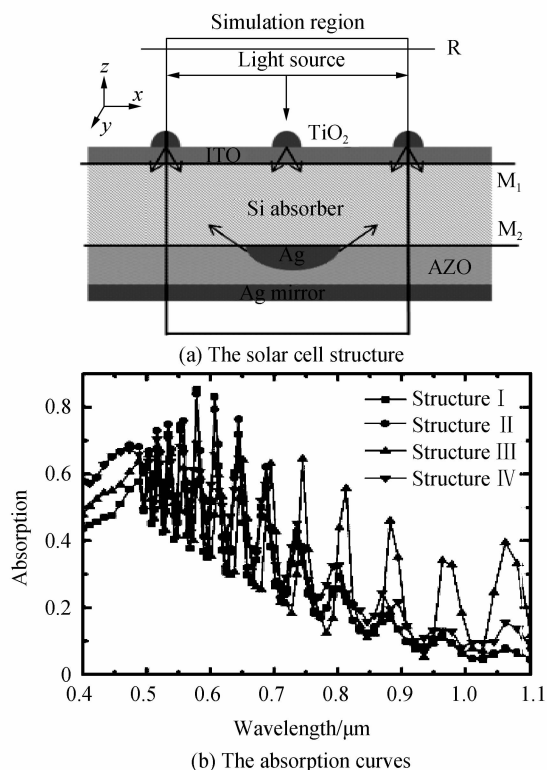


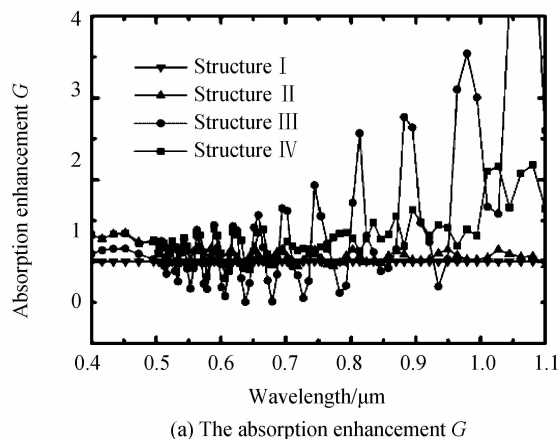
图 1 文中计算所涉及的电池结构图和各种结构电池的吸收示意图

Fig. 1 The solar cell structure used in the paper and the absorption curves of Structure I、II、III、IV cells

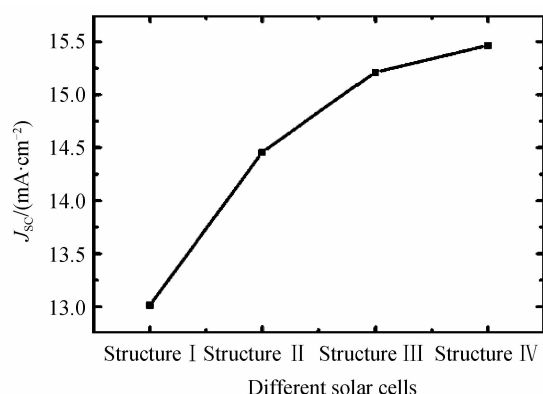
构组成从上到下依次为半径 100 nm 周期 400 nm 半球形  $\text{TiO}_2$  颗粒, 100 nm 厚的 ITO 导电层作为前电极<sup>[14]</sup>, 1  $\mu\text{m}$  单晶硅作为吸收层, 半径 200 nm 周期 800 nm 的半球形 Ag 颗粒, 嵌入在厚度为 250 nm 的 ZnO:Al 背电极中. 在电池结构的背后是一层 100 nm 厚的银反射镜<sup>[15]</sup>. 平面波光源从正面入射, 波长范围是 400~1100 nm. 为了模拟计算简洁方便, 在  $x$  方向设置了反对称边界条件, 在  $y$  方向设置了对称边界条件,  $z$  方向为完全匹配边界条件 (PML). 硅吸收层的吸收是通过计算穿过监视器  $M_1$ 、 $M_2$  的能流差得到. 为了排除 Ag 颗粒和电极的寄生吸收, 监视器放在硅吸收层的表面. 硅电池表面的反射由监视器 R 得到. 模拟区域如图 1(a) 中矩形框所示.

通过模拟计算, 得到这种混合陷光结构的全光谱吸收曲线如图 1(b) 所示. 主要涉及到的电池有 4 种: 无陷光结构电池, 仅正面含有  $\text{TiO}_2$  颗粒的电池, 仅背面含有 Ag 颗粒的电池, 既有正面  $\text{TiO}_2$  颗粒又有背面 Ag 颗粒的电池, 分别标记为 Structure I, Structure II, Structure III, Structure IV. 这里  $\text{TiO}_2$  颗粒主要是降低短波段光的反射, 而背面 Ag 颗粒主要是散射回长波段的透射光. 因此  $\text{TiO}_2$  颗粒的周期选取为 400 nm, Ag 颗粒的周期选取为 800 nm<sup>[16]</sup>. 由吸收曲线可以看出, 在短波段 Structure IV 电池吸收曲线与 Structure II 电池接近, 高于 Structure I 电池和 Structure III 电池. 在长波段 Structure IV 电池的吸收曲线与 Structure III 电池接近, 高于 Structure I 电池和 Structure II 电池. 也就是说混合陷光结构电池结合了  $\text{TiO}_2$  颗粒和 Ag 颗粒增强光吸收的优点, 在整个波段对光吸收都有较好的增强作用. 在本文中尝试改变正面电介质与背面光栅结构的材料以对光吸收实现更好的增强作用. 比较正面  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{Si}_3\text{N}_4$ ,  $\text{SiO}_2$  颗粒, 背面 Ag, Al, Au 金属颗粒对光吸收增强的作用.

图 2(a) 为文中主要计算的几种电池相对无陷光结构 Structure I 电池的吸收增强比率, 进一步可以明显看出几种电池针对参考电池的吸收增强的波长范围.



(a) The absorption enhancement  $G$



(b) The short circuit current density of these cells

图2 Structure I、II、III、IV 电池的光吸收增强比(与 Structure I 电池相比)和几种电池的短路电流密度  
Fig. 2 The absorption enhancement G of Structure I、II、III、IV cells (compared to Structure I cell) and the short circuit current density of these cells

(b) 图所示为不同电池的短路电流密度图 ( $J_{sc}$ ), Structure I、II、III、IV 电池的  $J_{sc}$  值分别为 13.0 mA/cm<sup>2</sup>, 14.5 mA/cm<sup>2</sup>, 15.2 mA/cm<sup>2</sup>, 15.5 mA/cm<sup>2</sup>. 针对参考电池 (Structure D), 另外几种电池的短路电流密度增加量分别为 1.5 mA/cm<sup>2</sup>, 2.2 mA/cm<sup>2</sup>, 2.5 mA/cm<sup>2</sup>.

图3为几种电池在446 nm, 1011 nm 波长处的电场图. (a)~(d)为以446 nm 为代表的短波段的光吸收的电场图情况. 由于短波段的光一部分被吸收层的表面吸收, 另外一部分被表面反射回空气中, 不能透射到吸收层的底部, 因此在吸收层底部的金属银颗粒不能对光吸收起到增强作用; 相反, 由于 TiO<sub>2</sub> 颗粒较强的散射作用, 入射光可以深入到吸收层表面以下 300 nm 或者更深, 远大于(a)、(c) 电池的吸收(光穿透深度小于 100 nm), 从而增加了吸收层对短波段光的吸收. 对于长波段的光, 1 μm 的硅吸收层不足以全部吸收, 部分会透射出电池. 正面 TiO<sub>2</sub> 颗粒周期为 400 nm, 相比

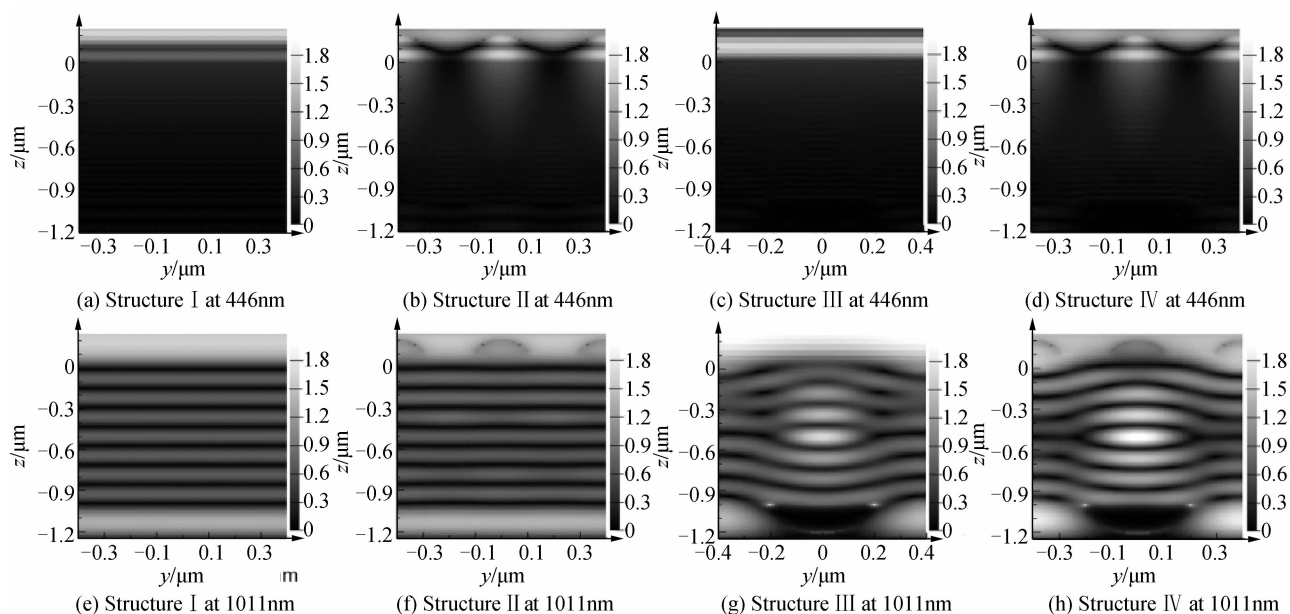


图3 Structure I、II、III、IV 电池在 446 nm, 1011 nm 波长处的电场图

Fig. 3 The electromagnetic grams of Structure I、II、III、IV cells at the wavelength 446 nm and 1 011 nm

于长波段光的波长很小, 因此 TiO<sub>2</sub> 颗粒相对于长波段光来说, 相当于一层有一定有效折射率的薄膜, 对光的传播影响不大. 而背面半径较大的银颗粒可以将透射光散射回电池吸收层, 图(g)、(h)即为银颗粒对透射光的散射作用, 形成一种在 x 方向上周期性的布洛赫衍射振荡图像<sup>[16]</sup>, 背面无银颗粒的(e)、(f)则是典型的法布里帕罗振荡. 布洛赫衍射振荡能将透射光散射回吸收层, 从而增强对长波段光的吸收.

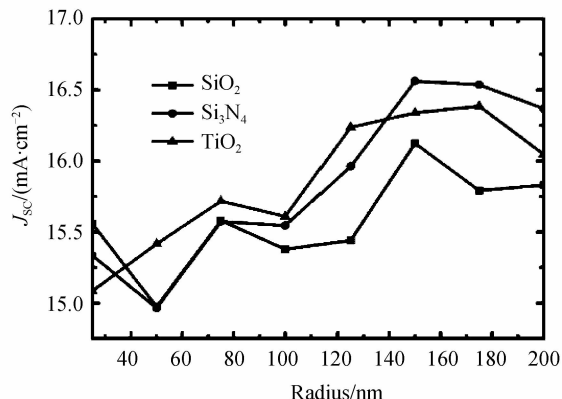
根据电场图分析 TiO<sub>2</sub> 和 Ag 颗粒的作用: TiO<sub>2</sub> 颗粒作为散射体, 形成一种电介质光栅降低光的反射; 而 Ag 颗粒除了作为一个散射体形成一种金属光栅之外, 其表面等离子体 (SPPs) 的近场增强作用<sup>[17-18]</sup> 仍然有效, 但是作用范围非常小, 只在银颗粒的边缘有所

体现.

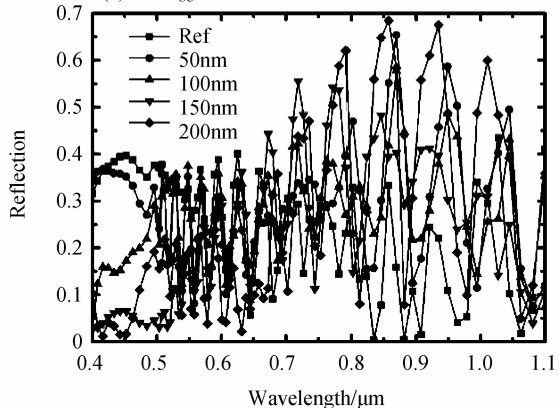
## 2 结果与讨论

图4(a)表示的是 TiO<sub>2</sub>, SiO<sub>2</sub> 和 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 颗粒电池的短路电流密度随颗粒半径变化的示意图, 保持半径周期比例不变. 由图可以看出, 当电池正面电介质颗粒不同时, 电池的短路电流密度变化趋势类似. 当电介质颗粒半径较小时, 短路电流密度随颗粒半径增大而增大, 半径到一定大小后随半径增大而减小. 取其中 TiO<sub>2</sub> 颗粒画出其不同半径 (50 nm, 100 nm, 150 nm, 200 nm) 情况下的反射曲线图. 从反射曲线可以看出相对于参考电池 (正面没有 TiO<sub>2</sub> 颗粒, 其余与其他电池相同), 带有 TiO<sub>2</sub> 颗粒的电池在短波段均有较小的反射, 在长

波段有较大的反射. 当颗粒半径增加时电池表面的反射在短波段反射进一步降低, 而在长波段反射却有所增加. 因此颗粒半径存在一个最佳值使得电池的光吸收在太阳能光谱上积分取得最大值, 即短路电流密度取得最大值. 在图中所示为在  $\text{Si}_3\text{N}_4$  半径为 150 nm 处取得.



(a) The  $J_{sc}$  of solar cells with different dielectric NPs



(b) The reflection of solar cells with different radii of  $\text{TiO}_2$

图 4 正面不同电介质颗粒的混合陷光结构的短路电流密度曲线和不同半径的  $\text{TiO}_2$  颗粒混合陷光结构电池表面的反射(背面均为半径 200 nm 的金属 Ag 颗粒)

Fig. 4 The short circuit current density of hybrid light trapping structure solar cells with different kinds of dielectric nanoparticles and the reflection of hybrid light trapping structure solar cells with different radius of  $\text{TiO}_2$  nanoparticles (with Ag nanoparticles radius 200 nm on the rear)

与研究正面电介质颗粒的方法类似, 背面金属对光吸收增强的效果也可以进行同样的研究. 不同金属不同半径下的电池短路电流密度如图 5 所示. 这里为了计算大半径的金属颗粒对光吸收增强的影响, 将背电极 AZO 的厚度调整为 360 nm. 可以看得出来在很大的范围内短路电流密度随金属颗粒半径的增大而变大, 最大值为金属 Ag 颗粒在半径 320 nm 处取得. 由于尺寸越大的金属颗粒其表面等离子体特性越不明显, 因此金属颗粒所起到的主要作用是对透射光进行散射.

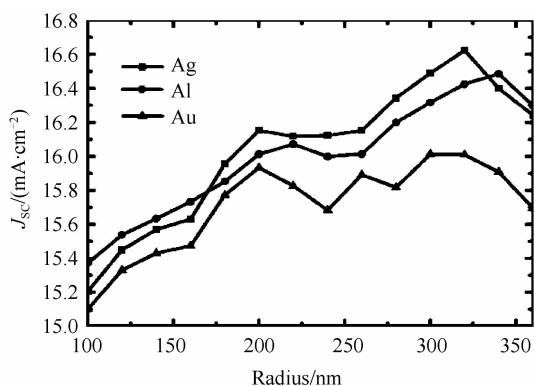
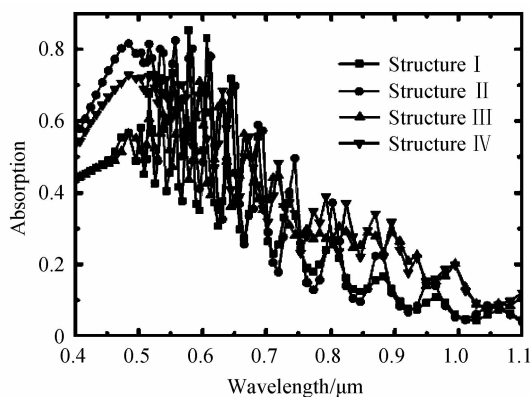


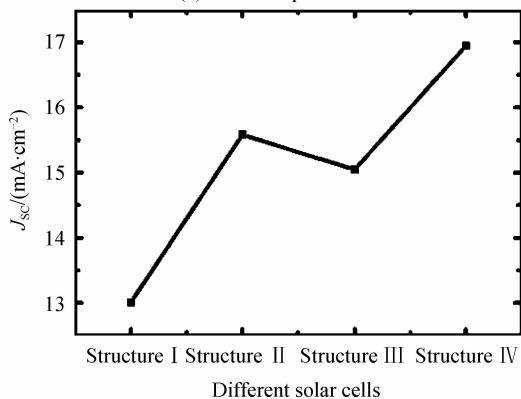
图 5 不同背面金属颗粒不同半径情况下, 电池的短路电流密度曲线(正面均为半径 100 nm  $\text{TiO}_2$  颗粒)

Fig. 5 The short circuit current density of solar cells with different metal nanoparticles at varying radius (with 100 nm radius of  $\text{TiO}_2$  nanoparticles on the front)

由以上模拟优化计算可以得到当正面电介质颗粒为  $\text{Si}_3\text{N}_4$  半径 150 nm, 背面金属颗粒为 Ag 半径为 320 nm 时电池的短路电流密度取得最大. 选取这两个参量为优化后的混合结构参量, 计算这种结构的电池对光的吸收和短路电流密度如图 6 所示. 优化后的电池短路电流密度达到  $16.95 \text{ mA/cm}^2$ , 比初始参考电池 ( $13.0 \text{ mA/cm}^2$ ) 增加了 30.3%.



(a) The absorption curves



(b) The short circuit current density

图 6 最终优化得到的混合陷光结构电池 Structure IV 及对应的其他几种结构电池的吸收曲线和短路电流密度

Fig. 6 The absorption curves and the short circuit current density of the optimized hybrid light trapping structure "Structure IV" cells and the corresponding Structure I, II, III cells

从以上可以看出陷光结构对于硅薄膜太阳能电池光吸收的增强作用是明显的.由光波导理论可以知道光在介质中的传播形式主要有辐射模式和导波模式.辐射模式的光波寿命很短,在介质中的传播距离有限;而导波模式能在介质中传播很长的距离,可以保证被介质充分吸收.光入射进平板波导时不会形成导波模式.入射光只有在被散射后才能使其传播角度大于介质与空气的全反射角,才有可能耦合进导波模式.陷光结构在散射光的同时可以将入射光耦合进导波模式从而增加光在吸收层的光学路径,达到增强光吸收的目的<sup>[19]</sup>.导波模式可以和平面波耦合,形成一个导波共振,对应电池光谱响应曲线上的一个吸收峰.通过优化陷光结构的周期和占空比可以增加导波模式的数量,从而在光谱上产生更多的吸收峰,得到光吸收在宽光谱上的增强<sup>[20]</sup>.通过图 6(a)的吸收曲线可以看得出来,相比于参考电池,混合陷光结构的电池吸收曲线多出了好多的峰值,从而提高了硅薄膜太阳能电池的短路电流密度.

### 3 结论

本文运用 FDTD 软件对混合陷光结构的参量进行了优化设计.首先讨论了正面 TiO<sub>2</sub> 颗粒和背面 Ag 颗粒混合陷光结构在宽光谱对光吸收的增强,根据其电场图分析了混合陷光结构增强电池光吸收的机理.然后通过改变正面电介质颗粒和背面金属颗粒的材料和大小进行优化.最终得到优化后的混合陷光结构,短路电流密度比参考电池增加 30.3%.这种新结构为提高薄膜太阳能电池的效率提供了一种新方法.

#### 参考文献

[1] GREEN M. Recent developments in photovoltaics[J]. *Solar Energy*, 2004, **76**(1-3): 3-8.  
 [2] QIU Ming-bo, HUANG Yin-hui, LIU Zhi-dong, et al. Numerical study on effect of silicon texture structure on reflectance of light[J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, **28**(12): 2394-2399.  
 邱明波,黄因慧,刘志东,等.硅片绒面形貌影响光线反射的数值研究[J]. *光学学报*, 2008, **28**(12): 2394-2399.  
 [3] CATCHPOLE K R, POLMAN A. Design principles for plasmon enhanced solar cells[J]. *Applied Physics Letters*, 2008, **93**(19): 191113.  
 [4] SHI Y P, WANG X D, LIU W, et al. Multilayer silver nanoparticles for light trapping in thin film solar cells[J]. *Journal of Applied Physics*, 2013, **113**(17): 176101-176103.  
 [5] LIU W, WANG X D, LI Y Q, et al. Surface plasmon enhanced GaAs thin film solar cells [J]. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2011, **95**(2): 693-698.  
 [6] SUN Chen, LI Chuan-hao, SHI Rui-ying, et al. A study of influences of metal nanoparticles on absorbing efficiency of organic solar cells[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2012, **41**(11): 1335-1341.  
 孙晨,李传皓,石瑞英,等.金属纳米颗粒对有机太阳能电池光吸收效率影响的研究[J]. *光子学报*, 2012, **41**(11): 1335-

1341.  
 [7] DUHRING M B, MORTENSEN N A, SIGMUND O. Plasmonic versus dielectric enhancement in thin-film solar cells [J]. *Applied Physics Letters*, 2012, **100**(21): 211914.  
 [8] GUO Chu-cai, YE Wei-min, YUAN Xiao-dong, 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.  
 [9] PETERS M, RUDIGER M, HAUSER H, et al. Diffractive gratings for crystalline silicon solar cells-optimum parameters and loss mechanisms[J]. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 2011, **20**(7): 862-873.  
 [10] WANG Xiang, YU Yan-qing, CHU Jia-ru. Simulation and research on reflection properties of two- dimension micro/ nano structure surface by FDTD method[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2012, **41**(2): 159-165.  
 王翔,余彦清,褚家如,等.二维微纳结构表面反射特性的时域有限差分法模拟研究[J]. *光子学报*, 2012, **41**(2): 159-165.  
 [11] MENG X, DEPAUW V, GOMARD G, et al. Design, fabrication and optical characterization of photonic crystal assisted thin film monocrystalline-silicon solar cells [J]. *Optics Express*, 2012, **20**(S4): A465-A475.  
 [12] GOMARD G, DROUARD E, LETARTRE X, et al. Two-dimensional photonic crystal for absorption enhancement in hydrogenated amorphous silicon thin film solar cells [J]. *Journal of Applied Physics*, 2010, **108**(12): 123102.  
 [13] WANG E, WHITE T P, and CATCHPOLE K R. Resonant enhancement of dielectric and metal nanoparticle arrays for light trapping in solar cells[J]. *Optics Express*, 2012, **20**(12): 13226-13237.  
 [14] HE Zhuo-ming, JIN Shang-zhong, LIANG Pei, et al. Structural simulations of amorphous silicon solar cells[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2011, **40**(2): 204-208.  
 何卓铭,金尚忠,梁培,等.非晶硅太阳能电池结构模拟研究[J]. *光子学报*, 2011, **40**(2): 204-208.  
 [15] WANG Chun-lei, WANG Chao, MAO Yan-li. Effect of substrate temperature on the properties of textured Ag/AZO back electrodes prepared by magnetron sputtering[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2013, **42**(7): 812-816.  
 王春雷,王超,毛艳丽.衬底温度对磁控溅射法制备的 Ag/AZO 绒面背电极性能的影响[J]. *光子学报*, 2013, **42**(7): 812-816.  
 [16] MENG X Q, EMMANUEL D, GUILLAUME G, et al. Combined front and back diffraction gratings for broad band light trapping in thin film solar cell [J]. *Optics Express*, 2012, **20**(S5): A560-A571.  
 [17] XU R, WANG X D, SONG L, et al. Influence of the light trapping induced by surface plasmons and antireflection film in crystalline silicon solar cells[J]. *Optics Express*, 2012, **20**(5): 5061-5068.  
 [18] LAGOS N, SIGALAS M M, LIDORIKIS E. Theory of plasmonic near-field enhanced absorption in solar cells[J]. *Applied Physics Letters*, 2011, **99**(6): 063304.  
 [19] BATTAGLIA C, HSU C M, SODERSTROM K, et al. Light trapping in solar cells: can periodic beat random? [J]. *Acs Nano*, 2012, **6**(3): 2790-2797.  
 [20] YU Z F, RAMAN A, FAN S H. Fundamental limit of nanophotonic light trapping in solar cells[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2010, **107**(41): 17491-17496.