

doi: 10.3788/gzxb20154411.1125001

一维铝背栅单晶硅薄膜太阳能电池光吸收分析

陈科, 汪园园, 郑红梅, 於孝朋

(合肥工业大学 机械与汽车工程学院 安徽省数字化设计与制造重点实验室, 合肥 230009)

摘 要: 分别以铝、银、硅为一维背栅设计了三种单晶硅结构的薄膜太阳能电池. 利用时域有限差分法, 在入射光为 300 nm~1100 nm 的波长段, 计算了三种背栅材料的单晶硅薄膜太阳能电池单晶硅层的光吸收效率; 利用计算所得到的磁场强度分布特点, 分析了 600 nm 以上波长段光吸收增强的机理. 定义了归一化光吸收密度的概念, 以定量衡量给定波段的光吸收效率. 通过比较三种太阳能电池的归一化光吸收密度和短路电流密度, 发现铝背栅比硅背栅和银背栅能更加有效地提高单晶硅薄膜太阳能电池的全波段光吸收效率.

关键词: 光电子学; 单晶硅; 时域有限差分法; 光栅; 薄膜太阳能电池; 短路电流密度

中图分类号: TK514

文献标识码: A

文章编号: 1004-4213(2015)11-1125001-7

Optical Absorption of One-Dimensional Aluminium Back Grating Crystalline Silicon Thin Film Solar Cell

CHEN Ke, WANG Yuan-yuan, ZHEN Hong-mei, YU Xiao-peng

(Digital Design and Manufacture Key Laboratory of Anhui Province, School of Mechanical and Automotive Engineering, Hefei University of Technology, Hefei 230009, China)

Abstract: A structure of crystalline silicon thin film solar cell consisting of one-dimensional back gratings and aluminium metal reflection was designed. Silicon, silver and aluminium were used as the back gratings' materials respectively. The finite-difference time-domain simulations were conducted to compute crystalline silicon's optical absorption between wavelength of 300 nm and 1100 nm. To analysis the mechanism of optical absorption enhancement, magnetic field intensity distributions above wavelength 600nm were plot. Normalized optical absorption density was defined to measure optical absorption of full band quantitatively. Together with short-circuit current, it was used to compare full band optical absorption of three kinds of crystalline silicon thin film solar cells. In contrast, aluminium back gratings enhance crystalline silicon's optical absorption most efficiently.

Key words: Optoelectronics; Crystalline silicon; Finite difference time domain method; Grating; Thin film solar cell; Short-circuit current density

OCIS Codes: 250.0250; 040.5350; 050.2770; 230.7370; 310.6845

0 引言

单晶硅作为目前最普遍使用的太阳能电池吸收层材料, 由于其能带结构是间接带隙, 在近红外波段对太阳光的吸收非常微弱. 研究表明, 单晶硅需要 10 μm 才能有效吸收波长为 800 nm 的太阳光, 而太阳光波长为 1100 nm 时, 单晶硅则需要 1 mm 以上才能充分吸

收^[1]. 目前单晶硅太阳能电池吸收层的厚度一般在 180~300 μm 之间^[2]. 但随着太阳能电池的大量开发使用, 减少单晶硅层的厚度逐渐成为控制太阳能电池成本的一个重要因素. 而要减少单晶硅层的厚度就必须通过合理设计太阳能电池的结构以增加太阳光在吸收层中的光程, 尤其是在 600 nm 之上的长波长段.

金属反射层被用来增加底层太阳能电池的光反射, 但单一的这种结构最多只能增加一倍的光程. 周期

基金项目: 国家自然科学基金重点项目 (No. 51435003) 资助

第一作者: 陈科 (1965-), 男, 博士, 博导, 主要研究方向为机电产品的现代设计理论和方法. Email: K.Chen@163.com

通讯作者: 汪园园 (1989-), 男, 博士研究生, 主要研究方向为薄膜太阳能电池的光吸收. Email: wyy3190@163.com

收稿日期: 2015-06-15; 录用日期: 2015-08-17

性光栅结构能给垂直入射的太阳光提供横向波矢,从而将垂直入射的光波耦合进横向光波导^[3-6].波导耦合模式使得垂直入射的太阳光在特定波长位置变为横向传播,因此能够极大增加该波长位置的光吸收.2008年,麻省理工学院 L. Zeng 等人在 Si/Si₃N₄ 组成的一维布拉格反射器的上面设计了一层 Si 光栅(文中分别用 G_Si, G_Ag, G_Al 表示 Si, Ag 和 Al 光栅),在 1100 nm~1200 nm 波长段使得外量子效率(External Quantum Efficiency, EQE)提高了 135 倍^[7].2015 年孟加拉工程技术大学 Talukder 研究小组在 300 nm 厚度的 c-Si 吸收层上设计了一层 Si 顶栅,这种结构比平面结构的硅基薄膜太阳能电池对太阳光的吸收增加了 46%^[8].

尽管周期性光栅结构能非常有效地将光耦合进光波导,但这种结构只能在特定的一些波长发生耦合,而且发生耦合的波长区域非常窄.而金属光栅不但能将垂直入射的光耦合进光波导,还能在较宽的波长段激发出表面等离激元谐振(Surface Plasmon Resonances, SPRs)模式^[9].这种模式是在金属表面区域的一种自由电子和光子相互作用形成的电磁模式,电磁场被局限在金属和介质结合面附近,具有很强的局域场增强特点^[10-13].

2009 年斯坦福大学 Brongersma 课题组在单晶硅吸收层上加了周期为 295 nm 的 Ag 光栅,在 SPRs 模式和光波导模式共同作用下使得单晶硅吸收层的短路电流提高了 43%^[9].2014 年,苏州纳米所陈沁教授等人提出局域表面等离激元谐振(Local Surface Plasmon Resonances, LSPRs)模式波长的位置随着金属光栅的宽度增加而发生红移,利用这种效应来设计级联结构的顶部 Ag 光栅结构可以实现宽波段的光吸收^[14].2010 年美国空军学院 Yalin Lu 研究组提出了将掩埋的 Ag 光栅和 Ag 反射层结合用在硅基薄膜太阳能电池(Thin Film Solar Cell, TFSC)上的方式,以克服顶部 Ag 光栅对入射光没有进入就被反射的缺点,这种结构使得 a-Si 层光吸收增强了 30%^[15].2013 年该课题组将这种结构用到了由 a-Si 和 μ c-Si 组成的级联薄膜太阳能电池中,主要是利用这种结构在长波段能激发 SPRs 模式来增加底层 μ c-Si 对长波段的光吸收^[16].2013 年 S. A. Maier 研究组将 Al 顶栅置于 500 nm 的 GaAs 吸收层之上,使光电二极管的外部量子效率 EQE 提高了 22%^[17].

尽管 Ag 背栅和 Al 背栅都能产生除了波导模式之外的 SPRs 模式来增加吸收层的光吸收,但由于金属材料在长波段的光吸收普遍很高,所以在波导模式对应的波长段会使得光吸收效率比 Si 背栅结构要小.

为了研究 Si, Ag, Al 中更加适合于制备单晶硅薄膜太阳能电池的背栅材料,本文定义了光吸收密度和

归一化光吸收密度来表征太阳能电池的全波段光吸收能力大小,然后计算出这三种一维背栅单晶硅薄膜太阳能电池的归一化光吸收密度,以确定哪种背栅材料能更加有效地提高一维背栅单晶硅薄膜太阳能电池的全波段光吸收.

1 光吸收效率及短路电流密度计算

1.1 光吸收效率

由于 c-Si 的带隙为 1.1 eV,结合太阳光谱(如图 1),选择计算的波长范围为 300 nm~1100 nm.利用时域有限差分软件 FDTD solutions 计算三种结构的薄膜太阳能电池在 300 nm~1100 nm 波长范围的电磁场分布,然后利用计算出的电场分布 E ,根据式(1)计算不同结构对各个波长的吸收功率 P_{abs} ,再与光源的该波长功率 P_{tot} 相除得到对该波长的吸收效率 η_{abs} .

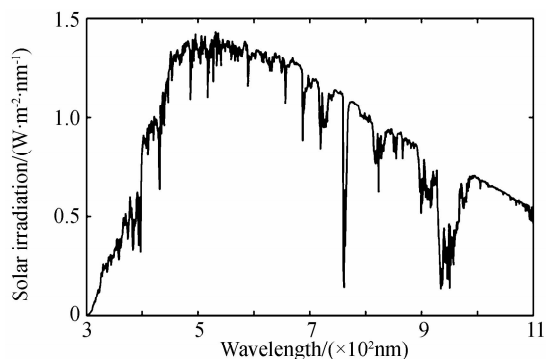


图 1 AM1.5 光谱 SP(λ)

Fig. 1 AM1.5 optical spectrum SP(λ)

$$P_{\text{abs}}(\lambda) = 0.5 \times \tau \omega \times \text{imag}(\epsilon) \times \int_V |E|^2 dV \quad (1)$$

$$\eta_{\text{abs}} = \frac{P_{\text{abs}}}{P_{\text{tot}}} \quad (2)$$

AM1.5 光照条件下

$$\lambda_{\text{tot}} = \text{SP}(\lambda) \quad (3)$$

将式(1)和(3)代入式(2)可得光吸收效率为

$$\eta_{\text{abs}} = \frac{\tau \omega \times \text{imag}(\epsilon) \times \int_V |E|^2 dV}{2 \times \text{SP}(\lambda)} \quad (4)$$

ϵ 为吸收层材料 c-Si 的介电常数.

1.2 光吸收密度与归一化光吸收密度

为了在 c-Si 可吸收的光波长 300 nm~1100 nm 全波段考虑硅基薄膜太阳能电池对太阳光的吸收,定义光吸收密度 Ω_{abs} 和归一化光吸收密度 ρ_{abs} 分别为

$$\Omega_{\text{abs}} = \int_{\lambda_{\text{min}}}^{\lambda_{\text{max}}} \eta_{\text{abs}} d\lambda \quad (5)$$

$$\rho_{\text{abs}} = \frac{\Omega_{\text{abs}}}{\lambda_{\text{max}} - \lambda_{\text{min}}} = \frac{\int_{\lambda_{\text{min}}}^{\lambda_{\text{max}}} \eta_{\text{abs}} d\lambda}{\lambda_{\text{max}} - \lambda_{\text{min}}} \quad (6)$$

光吸收密度 Ω_{abs} 为光吸收效率在 λ_{min} 和 λ_{max} 波段内的积分.根据计算出的 Ω_{abs} 可以直观比较各种结构全波段吸收效率的高低.

归一化光吸收密度 ρ_{abs} 为 λ_{min} 和 λ_{max} 区域内的光吸收效率的归一化积分. 根据归一化光吸收密度可以比较不同波段内的全波段光吸收效率的大小.

1.3 短路电流密度

c-Si 的载流子的扩散长度约为 $100 \mu\text{m}$, 远远大于 300 nm 的单晶硅层厚度, 所以由于光照激发产生的载流子全部能够被端面的电极收集, 用于提供外部电流. 通常认为一个光子只能激发一个自由电子, 所以可以利用光吸收率和 AM1.5 光谱 $\text{SP}(\lambda)$, 根据式(7)计算短路电流密度, 即

$$J_{\text{sc}} = e \times \int_{\lambda_{\text{min}}}^{\lambda_{\text{max}}} \frac{\eta_{\text{abs}}(\lambda) \times \text{SP}(\lambda)}{E_e(\lambda)} d\lambda \quad (7)$$

式中 e 为电子电量, $E_e(\lambda)$ 是波长为 λ 的单个光子的能量, 则

$$E_e(\lambda) = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (8)$$

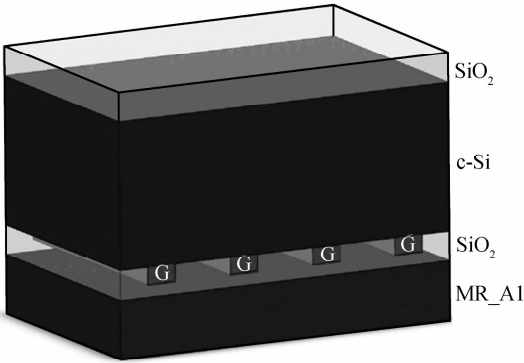
将式(7)代入式(6)可得短路电流密度为

$$J_{\text{sc}} = e \times \int_{\lambda_{\text{min}}}^{\lambda_{\text{max}}} \frac{\eta_{\text{abs}}(\lambda) \times \text{SP}(\lambda) \times \lambda}{h \times c} d\lambda \quad (9)$$

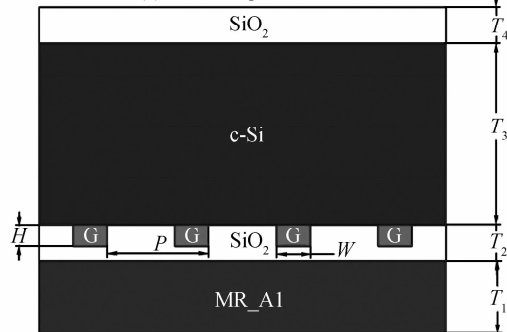
式中 e 为电子电量, h 为普朗克常量, c 为光速.

2 薄膜太阳能电池结构

图2(a)为本文所设计的单晶硅薄膜太阳能电池三维模型, 自上到下分别为顶部 SiO_2 层, c-Si 层, 底部 SiO_2 层和 Al 金属反射层 MR_Al, 以及嵌套在底部



(a) 3D conceptual schematic



(b) Cross-sectional view

图2 一维背栅单晶硅薄膜太阳能电池结构

Fig. 2 The proposed 1D-grating TFSC structure

SiO_2 层中的周期性背栅 G. 该结构的参数如图2(b), 分别为 T_4 、 T_3 、 T_2 、 T_1 , 背栅 G 的厚度为 H , 宽度为 w , 周期为 P . 为了研究背栅 G 对薄膜太阳能电池光电转换的影响, 在分析中保持 $T_1 = 200 \text{ nm}$, $T_2 = 100 \text{ nm}$, $T_3 = 500 \text{ nm}$, $T_4 = 100 \text{ nm}$, $H = 60 \text{ nm}$, $w = 100 \text{ nm}$.

3 数值模拟与分析

3.1 光吸收效率与背栅周期的关系

图3为 Si, Ag, Al 三种材料背栅的单晶硅薄膜太阳能电池(分别简称为 Si-TFSC, Ag-TFSC, Al-TFSC)吸收层分别在 TE 与 TM 偏振条件下的光吸收效率 η_{abs} 随背栅周期 P ($200 \text{ nm} \sim 600 \text{ nm}$) 变化的吸收效率谱云图.

对比图3(a)、(c)和(e), 可以发现三种背栅材料的单晶硅薄膜太阳能电池的光吸收效率云图区别不是很大. 在 TE 偏振条件下, 薄膜吸收层光吸收增强主要与法布里-珀罗(Fabry-Pérot, FP)谐振和光学波导模式相关. 图3中 600 nm 波长以下吸收效率的大小不随着背栅周期发生红移, 这部分的光吸收增强主要来自 FP 谐振. 根据式 $2nT_2 = k\lambda_k$ [18], 这部分光吸收增强主要集中在短波长段 ($300 \text{ nm} \sim 600 \text{ nm}$). 随着波长变长, FP 谐振导致的光吸收效率峰变得越来越稀疏, 在 $600 \text{ nm} \sim 1100 \text{ nm}$ 波长段的 FP 谐振只有 3 个吸收峰, 而且吸收强度十分微弱. 除了 FP 谐振, 在 TE 偏振光照条件下, 由于背栅的周期性给入射光波提供了横向的波矢 $2\pi/P$, 使得垂直传播的光波在波长与 c-Si 波导层的特征模式波长相等时能将这些特定波长的光耦合成横向传播的光波导. 这种光学波导耦合能够极大地增强光吸收, 但只能发生在波长非常窄的区域[9]. 在图3中, TE 偏振条件下, 在波长 $600 \text{ nm} \sim 1100 \text{ nm}$ 波长段有很明显的 6 条吸收增强的曲线, 而且十分狭窄, 这是来自光学波导模式耦合的吸收增强.

对比图3(b)、(d)和(f), 可以发现在 TM 偏振条件下三种薄膜太阳能电池吸收效率云图区别较大, 而且主要是在 $600 \text{ nm} \sim 1100 \text{ nm}$ 的长波段. Si-TFSC 在 TM 偏振条件下和在 TE 偏振条件下区别不大, 主要是长波段的吸收效率稍微有所下降. Ag-TFSC 和 Al-TFSC 在 $300 \text{ nm} \sim 600 \text{ nm}$ 波长段吸收效率增强曲线随着背栅周期的变化不大, 这部分区域的吸收增强也主要来自 FP 谐振. 吸收效率增强曲线的位置与在 TE 偏振条件下基本一致, 但 Ag-TFSC 的吸收效率比 Al-TFSC 吸收效率要小. 由于 TM 偏振光照能够激发 Ag 和 Al 背栅与 c-Si 结合面处的 SPPs 谐振模式, 在 $600 \text{ nm} \sim 1100 \text{ nm}$ 的波长段, 除了在 TE 偏振条件下存在的 FP 谐振和光学波导模式外, 这部分波长段的光吸收增强还与 SPRs 模式有关.

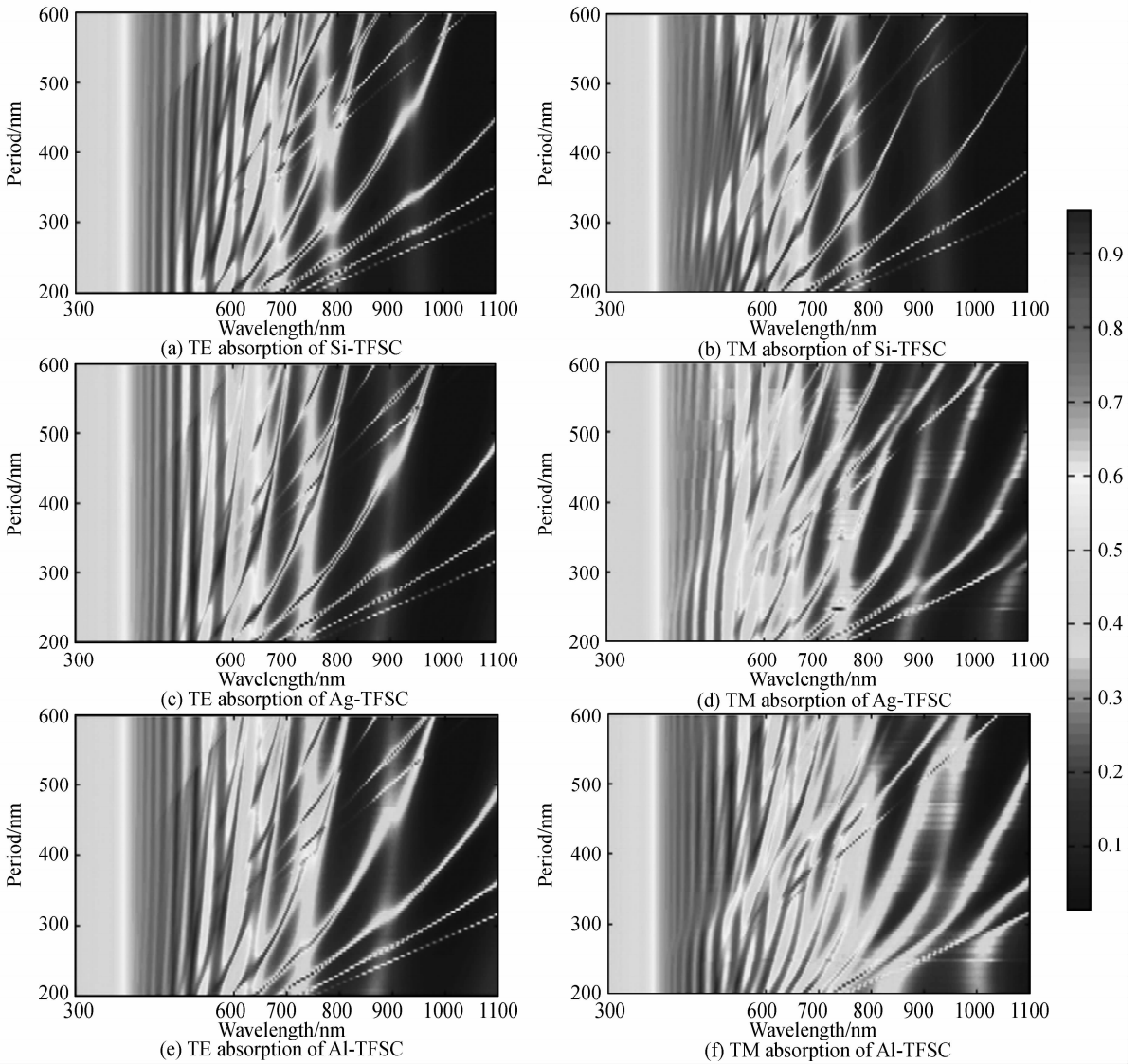


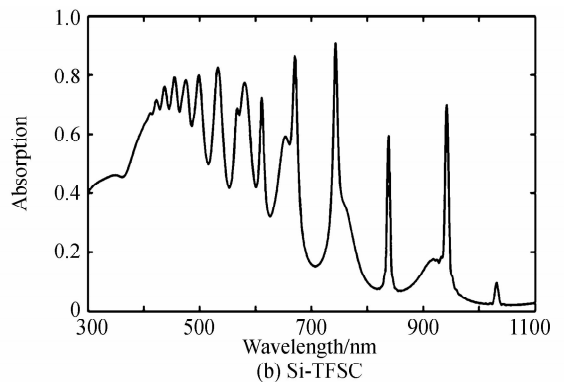
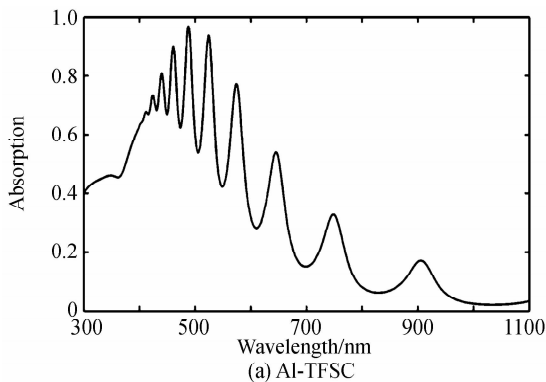
图3 吸收效率随背栅周期的变化

Fig. 3 Absorption with gratings' period

根据图3的吸收效率云图分布情况,选择背栅周期 $P=300\text{ nm}$ 的情况来分析该波段 TM 偏振光下吸收增强的原因,以及对单晶硅薄膜太阳能电池的归一化光吸收密度 ρ_{abs} 和短路电流密度 J_{sc} 所产生的影响.

3.2 各结构的吸收谱与磁场强度分布

图4分别为 TM 偏振光照条件下,无背栅单晶硅薄膜太阳能电池(用 Non-TFSC 表示), Si-TFSC, Ag-TFSC 以及 Al-TFSC 在背栅周期为 $P=300\text{ nm}$ 情况



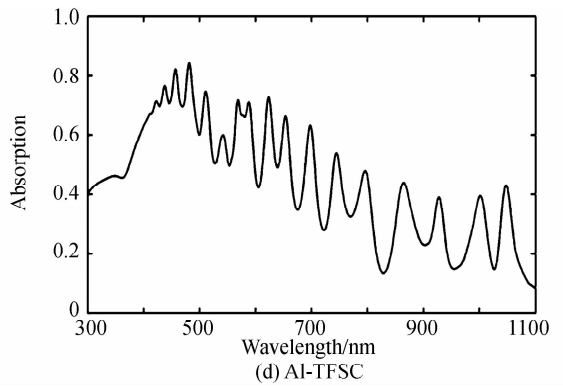
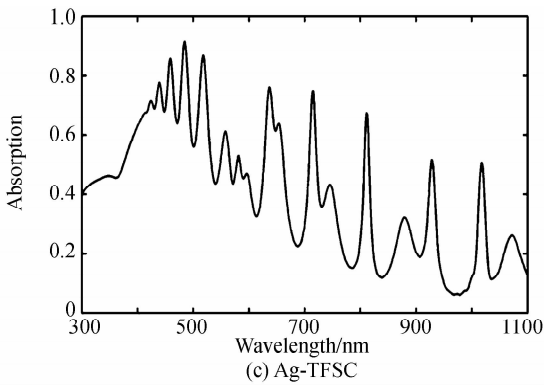


图4 c-Si层光吸收效率谱

Fig. 4 Silicon layer's absorption spectra

下 c-Si 吸收层的光吸收效率谱.

从图4中可以看出,Non-TFSC的光吸收效率谱在600 nm~1100 nm波长段只有三个吸收峰,这三个吸收峰来自c-Si层的FP谐振. Si-TFSC在600 nm~1100 nm波段有六个吸收峰,这六个吸收峰位置的磁场分布图如图5,从图中可以看出这六个吸收峰来自背栅的波导模式耦合. Ag-TFSC与Al-TFSC在600 nm~1100 nm波长段的九个吸收峰处的磁场强度分布图如图6和图7.

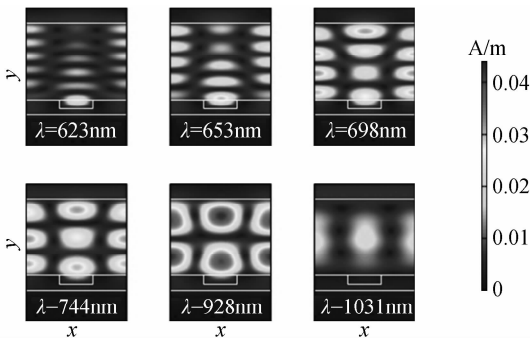


图5 Si-TFSC在六个吸收峰位置的磁场强度分布

Fig. 5 Magnetic field intensity distribution of Si TFSC at the six absorption peaks

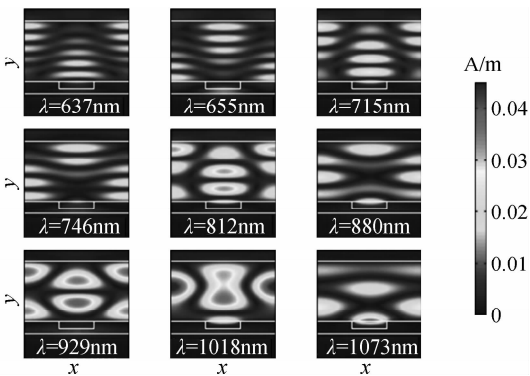


图6 Ag-TFSC在九个吸收峰位置的磁场强度分布

Fig. 6 Magnetic field intensity distribution of Ag-TSFC at the nine absorption peaks

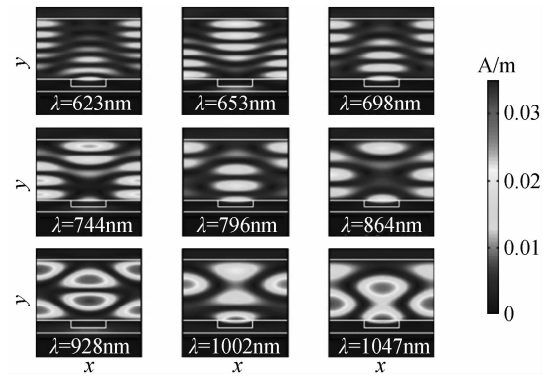


图7 Al-TFSC在九个吸收峰位置的磁场强度分布

Fig. 7 Magnetic field intensity distribution of Al-TSFC at the nine absorption peaks

与Si-TFSC相比,虽然在波导模式吸收峰位置的强度稍有减小,但由于SPRs模式的存在,Ag-TFSC和Al-TFSC吸收峰的宽度有明显的变宽.

3.3 归一化光吸收密度 ρ_{abs} 与短路电流密度 J_{sc}

从图4可以看出,三种带背栅结构的单晶硅薄膜太阳能电池中Si-TFSC和Ag-TFSC的吸收效率峰值大于Al-TFSC,但Al-TFSC吸收峰的宽度明显大于Si-TFSC和Ag-TFSC.为了比较这三种带背栅结构的薄膜太阳能电池的全波段吸收效率,利用式(6)计算了300 nm~1100 nm的全波段归一化光吸收密度 ρ_{abs} .图8(a)为在保持背栅宽度 $w=100$ nm情况下,改变背栅周期 P 计算得到的归一化光吸收密度 ρ_{abs} .图8(b)为在固定背栅周期 $P=300$ nm,改变背栅宽度 w 计算得到的归一化光吸收密度 ρ_{abs} .从图8可以看出三种加背栅的薄膜太阳能电池的光吸收密度有明显提高, Si-TFSC和Ag-TFSC的归一化光吸收密度相差不大, Al-TFSC的归一化光吸收密度比前面两者高出2%到4%.从归一化光吸收密度的大小可以发现Al-TFSC在300 nm~1100 nm全波段对太阳光的吸收量要大于其他两种背栅单晶硅薄膜太阳能电池.

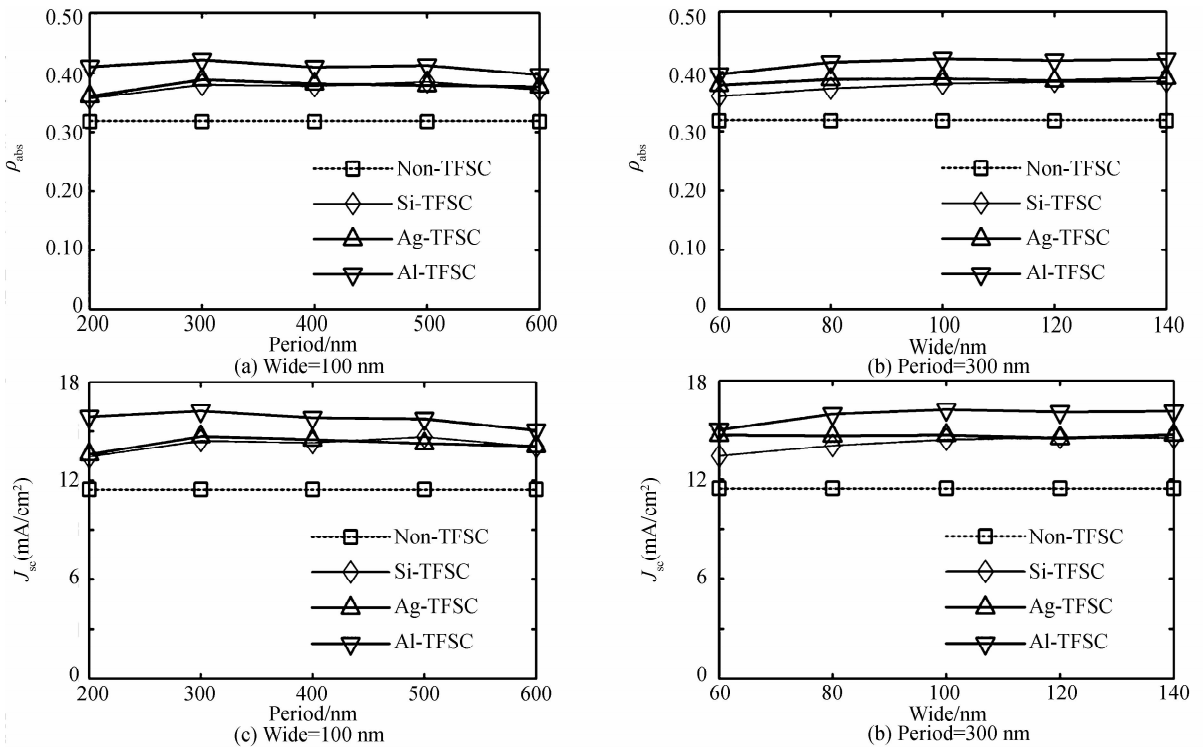


图 8 AM1.5 光照下的归一化光吸收密度和短路电流密度

Fig. 8 Normalized optical absorption density ρ_{abs} and short-circuit current J_{sc} under AM1.5 illumination

在归一化光吸收密度分析中没有考虑太阳光谱的实际情况,本文结合 AM1.5 光谱(图 1),利用式(9),从短路电流密度的角度来比较这四种结构的薄膜太阳能电池.图 8(c)为四种结构单晶硅薄膜太阳能电池在背栅宽度等于 100 nm,取背栅周期 P 分别为 200 nm、300 nm、400 nm、500 nm 和 600 nm 时的短路电流密度 J_{sc} .图 8(d)是四种单晶硅薄膜太阳能电池在维持背栅周期 $P=300$ nm,背栅宽度 w 分别取为 60 nm、80 nm、100 nm、120 nm 和 140 nm 时的短路电流密度.根据图 4(c)、(d),可以发现在 Al 金属反射层基础上,加上背栅结构都能明显增加单晶硅薄膜太阳能电池的短路电流密度 J_{sc} .Si 背栅和 Ag 背栅对单晶硅吸收层的短路电流密度增强效果相当,若背栅宽度 w 取 80 nm 以上,Al-TFSC 的短路电流密度比 Si-TFSC 和 Ag-TFSC 高出约 2 mA/cm².

4 结论

本文研究了三种材料背栅加铝金属反射层结构的单晶硅薄膜太阳能电池在 300 nm~1100 nm 波段的光吸收效率 η_{abs} .与 Si-TFSC 和 Ag-TFSC 相比,Al-TFSC 对 600 nm~1100 nm 的长波段吸收更加明显:归一化光吸收密度 ρ_{abs} 比后者高出 2% 到 4%,短路电流密度 J_{sc} 比后者要高 0.5 到 2 mA/cm².通过归一化光吸收密度和短路电流密度的比较发现 Al 背栅比 Si 背栅和 Ag 背栅更适合用于制备一维背栅单晶硅薄膜太阳能电池.

参考文献

- [1] HERZINGER C M, JOHS B, MCGAHAN W A, *et al.* Ellipsometric determination of optical constants for silicon and thermally grown silicon dioxide via a multi-sample, multi-wavelength, multi-angle investigation[J]. *Journal of Applied Physics*, 1998, **83**(6): 3323-3336.
- [2] ATWATER H A, POLMAN A. Plasmonics for improved photovoltaic devices[J]. *Nature Materials*, 2010, **9**(3): 205-213.
- [3] LLOPIS F, TOBIAS I. The role of rear surface in thin silicon solar cells[J]. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2005, **87**(1-4): 481-492.
- [4] EISELE C, NEBEL C E, STUTZMANN M. Periodic light coupler gratings in amorphous thin film solar cells[J]. *Journal of Applied Physics*, 2001, **89**(12): 7722-7726.
- [5] MIN C, LI J, VERONIS G, *et al.* Enhancement of optical absorption in thin-film organic solar cells through the excitation of plasmonic modes in metallic gratings[J]. *Applied Physics Letters*, 2010, **96**(13): 133302.
- [6] 李淑芬, 李成仁, 宋昌列. 光波导理论基础教程[M]. 北京: 电子工业出版社. 2013:114.
- [7] ZENG L, YI Y, HONG C, *et al.* Efficiency enhancement in Si solar cells by textured photonic crystal back reflector[J]. *Applied Physics Letters*, 2006, **89**(11): 111111-111113.
- [8] AWAL M A, AHMED Z, TALUKDER M A. An efficient plasmonic photovoltaic structure using silicon strip-loaded geometry[J]. *Journal of Applied Physics*, 2015, **117**(6): 063109.
- [9] PALA R A, WHITE J, BARNARD E, *et al.* Design of plasmonic thin-film solar cells with broadband absorption enhancements[J]. *Advanced Materials*, 2009, **21**(34): 3504-3509.
- [10] BARNES W L, DEREUX A, EBBESEN T W. Surface plasmon subwavelength optics [J]. *Nature*, 2003, **424**

- (6950); 824-830.
- [11] SARID D, CHALLENGER W. Modern introduction to surface plasmons [M]. Cambridge, United Kingdom; Cambridge University Press. 2010;164.
- [12] 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.
- [13] MAIER S A, ATWATER H A. Plasmonics: Localization and guiding of electromagnetic energy in metal/dielectric structures[J]. *Journal of Applied Physics*, 2005, **98**(1): 011101.
- [14] WEN L, SUN F, CHEN Q. Cascading metallic gratings for broadband absorption enhancement in ultrathin plasmonic solar cells[J]. *Applied Physics Letters*, 2014, **104**(15): 151106.
- [15] WANG W, WU S, REINHARDT K, *et al.* Broadband light absorption enhancement in thin-film silicon solar cells[J]. *Nano Letters*, 2010, **10**(6): 2012-2018.
- [16] ZHANG X, KNIZE R, LU Y. Enhanced light absorption in thin-film tandem solar cells using a bottom metallic nanograting[J]. *Applied Physics A: Materials Science & Processing*, 2014, **115**(2): 509-515.
- [17] HYLTON N P, LI X F, GIANNINI V, *et al.* Loss mitigation in plasmonic solar cells: aluminium nanoparticles for broadband photocurrent enhancements in GaAs photodiodes[J]. *Scientific Reports*, 2013, **3**: 2874.
- [18] YANG M, LI J, LIN F, *et al.* Absorption enhancements in plasmonic solar cells coated with metallic nanoparticles[J]. *Plasmonics*, 2013, **8**(2): 877-883.