doi:10.3788/gzxb20174604.0431002

余弦光栅硅薄膜太阳能电池光吸收分析

陈科,吴睿,郑红梅,汪园园

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

摘 要:设计了一维双层余弦共形光栅结构的单晶硅薄膜太阳能电池.利用时域有限差分法模拟计算了 双层余弦共形光栅结构和对照组结构的吸收光谱;利用归一化光吸收密度的概念,定量分析了 300~ 700 nm 和 700~1 100 nm 两个波段的光吸收效率.结果表明双层共形光栅结构具有更好的全波段吸收 效率,且在长波段余弦光栅比矩形光栅具有更好的光捕获和吸收作用.利用光吸收增强谱和电磁场强度 分布图,分析了余弦光栅在长波段的吸收增强机理.通过计算短路电流密度,发现双层余弦共形光栅结 构比平板结构太阳能电池的短路电流密度提高了 79.5%,余弦光栅结构比矩形光栅结构的短路电流密 度提高了 8.5%.

Optical Absorption of Cosine Grating Silicon Thin Film Solar Cell

CHEN Ke, WU Rui, ZHENG Hong-mei, WANG Yuan-yuan

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

Abstract: A structure of one-dimensional bilayer cosine conformal grating crystalline silicon thin film solar cell was designed. The absorption spectra of bilayer cosine conformal grating structure and contrast groups were simulated by using the finite difference time domain method ; The absorption efficiencies of two wavelength regions of $300 \sim 700$ nm and $700 \sim 1100$ nm were quantitatively analyzed by using the concept of normalized optical absorption density. It was found that bilayer conformal grating structure has better absorption efficiency in full wavelength band and cosine grating has better light trapping and absorbing than rectangular grating in long wavelength region. To analyze the mechanism of optical absorption enhancement spectra and distributions of electromagnetic field intensity were plotted. Through the calculation of short-circuit current density, it was found that the short-circuit current density of bilayer cosine conformal grating crystalline silicon thin film solar cell increased by 79. 5% relative to planar structure, the short-circuit current density of cosine grating structure.

Key words: Optoelectronics; Light absorption; Finite difference time domain method; Cosine grating; Silicon thin film solar cell; Short-circuit current density

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

0 引言

在当今太阳能电池的研究领域中,薄膜太阳能电池(Thin Film Solar Cell, TFSC)是研究最为广泛的一种类型.从制造工艺和可持续生产方面考虑,用硅元素半导体材料来制造薄膜太阳能电池是相对简单和直接

通讯作者:郑红梅(1966-),女,教授,博士,主要研究方向为传感器及测控技术、机械系统动力学. Email:189527876@qq.com 收稿日期:2016-11-17;录用日期:2016-12-20

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,教授,博士,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

的方法^[1].单晶硅的带隙为1.1 eV,对能量3.4 eV以下的光子表现出间接带隙的特性,在近红外波段对太阳光的吸收很微弱^[2].合理设计薄膜太阳能电池的结构可以增强其光吸收性能,尤其是在1100 nm 以内的近 红外波段^[3-4].

衍射光栅在薄膜太阳能电池中的应用,可以更好地增加太阳光在吸收层中的光程.在一定的条件下,光 栅将入射光耦合成光波导模式,还会在金属光栅与电介质结合面处产生表面等离子激元共振(Surface Plasmon Resonances, SPRs)模式,这都会增强薄膜太阳能电池的光吸收^[5-8].2009 年斯坦福大学 Geballe 先 进材料实验室的研究人员在厚度为 50 nm 的单晶硅上添加二维周期性 Ag 光栅,在光波导模式和 SPRs 模式 双重作用下电池的短路电流提高了 43%^[9].2011 年德国不来梅雅各布大学 Dietmar Knipp 教授等在微晶硅 薄膜太阳能电池上运用双层光栅,通过改变前后光栅的周期和高度得到了一个最大的短路电流 19.1 mA/ cm^{2[10]}.2015 年孟加拉工程技术大学 M. A. Awal 等设计了吸收层厚度为 300 nm 的晶体硅薄膜太阳能电池, 并在吸收层的上方设置了一层周期性 Si 顶栅,在 Ag 背接触层设置了一层周期性凹槽,这种双层混合陷光结 构使得光吸收在宽波段上提高了约 46%^[11].

除了对光栅的空间布局进行研究之外,很多学者还研究得出光栅的几何形状对太阳能电池的抗反射特性和陷光效应有很大的影响^[12-14].2012年中国科学技术大学的王翔博士等研究发现具有梯度变化截面的微纳米光栅结构比等截面光栅结构具有更好的抗反射性能^[15].2015年电子科技大学的郭小伟博士等设计了一种余弦表面陷光结构,并将该结构的陷光性能与传统的倒置金字塔结构进行对比,发现在近红外波段,余弦表面陷光结构的效果更好^[16].

基于前者的研究成果,本文设计了一种双层余弦共形光栅薄膜太阳能电池结构,并对其进行了模拟研究,以提高薄膜太阳能电池的光吸收效率.

1 薄膜太阳能电池结构

图 1 为设计的单晶硅薄膜太阳能电池结构以及对照组结构模型.该结构从上到下依次是 AZO(ZnO: Al)层、c-Si 层、SiO₂ 层和 Ag 金属背接触层,它们的厚度依次是 100 nm、300 nm、50 nm 和 200 nm.图 1(a) 是平板薄膜太阳能电池结构(P-TFSC);图 1(b)是单层光栅薄膜太阳能电池结构(M-TFSC),该结构的 Ag 背栅镶嵌在 SiO₂ 层中,其高度等于 SiO₂ 层的厚度;图 1(c)和(d)是双层光栅薄膜太阳能电池结构(B-TFSC),顶栅和背栅的周期和占空比均相等,分别记为 Q 和 w_{dc},顶栅的高度记为 H;图 1(e)和(f)是底层光 栅薄膜太阳能电池结构(Bot-TFSC);图 1(g)和(h)是双层共形光栅薄膜太阳能电池结构(CB-TFSC).



图1 单晶硅薄膜太阳能电池结构

Fig. 1 Crystalline silicon TFSC structure

2 数值模拟与分析

主要采用有限时域差分法(Finite Difference Time-Domain,FDTD)进行模拟分析,在AM1.5光源的条件下,波长段为 300~1100 nm,通过软件 FDTD solutions 中的文本来控制吸收层,使光的吸收仅限于硅质层,排除金属 Ag 的寄生吸收.首先对上述单晶硅薄膜太阳能电池的结构参数进行优化扫描,主要参数是光栅高度 H(40~100 nm)、光栅周期 Q(200~600 nm)和光栅的占空比 $w_{de}(0.2~0.8)$,优化的结果见表 1.

表1 优化结果 Table 1 **Optimized** results Solar cell H/nm Q/nm Wde M-TFSC 50 400 0.6 Cos B-TFSC 100 600 0.8 Rec_B-TFSC 50 300 0.6 Cos_Bot-TFSC 600 0.8 60 Rec_Bot-TFSC 500 0.4 40 Cos CB-TFSC 500 0.6 60 Rec_CB-TFSC 40 400 0.4

2.1 光吸收效率与归一化光吸收密度

图 2 为 8 种结构的吸收光谱.从图 2(c)~(h)中可以看出,这 6 种结构的光吸收效率相对于平板结构和 单层光栅结构均有明显的提高.为了进一步分析这 6 种结构在 300~1 100 nm 全波段的光吸收效率,根据式 (1)分别计算了 300~700 nm 和 700~1 100 nm 两个波长段的归一化光吸收密度^[17].





图 2 吸收光谱 Fig. 2 Absorption spectra

$$\rho_{\rm abs} = \frac{\int_{\lambda_{\rm min}}^{\lambda_{\rm max}} \eta_{\rm abs}(\lambda) \,\mathrm{d}\lambda}{\lambda_{\rm max} - \lambda_{\rm min}} \tag{1}$$

式中 η_{abs}为光吸收效率,λ_{min}和 λ_{max}为波长段的最小波长和最大波长值.图 3 为归一化光吸收密度曲线.

从图 3(a)可以看出余弦光栅结构在 300~700 nm 波段的光吸收没有明显的优势,在 B-TFSC 结构里, 余弦光栅要比矩形光栅吸收效果差;在 Bot-TFSC 结构里,余弦光栅要优于矩形光栅,Bot-TFSC 结构在短 波段的光吸收效果最差.在 TM 偏振光条件下,余弦光栅在 CB-TFSC 结构里比矩形光栅吸收效果好,在 TE 偏振光条件下比矩形光栅差.短波段范围内,TE 偏振光条件下的光吸收效果要优于 TM 偏振光条件下的光 吸收效果.从图 3(b)可以看出余弦光栅结构在 700~1 100 nm 波段的光吸收比矩形光栅强,在 TM 偏振光 条件下更为明显.Bot-TFSC 结构在长波段的光吸收效果最好,B-TFSC 结构最差.从图 3(c)可以看出在非偏 振光条件下,余弦光栅结构在长波段的光吸收效果要比矩形光栅好,在短波段除了 B-TFSC 结构外,余弦光 栅也要优于矩形光栅.CB-TFSC 结构结合了其它两种结构的优势,在 300~1 100 nm 全波段光吸收效率 最高.



图 3 AM1.5 光照下的归一化光吸收密度曲线 Fig. 3 Normalized optical absorption density curves under AM1.5 illumination

2.2 光吸收增强谱与电磁场强度分布

为了进一步分析余弦光栅在 CB-TFSC 结构里的光吸收增强机理,分别在 TE 和 TM 偏振光条件下得出 Cos_CB-TFSC 和 Rec_CB-TFSC 两种电池相对于平板结构的光吸收增强谱,如图 4.



图 4 光吸收增强谱 Fig. 4 Absorption enhancement spectra

图 4(a)和(b)分别为 TE 和 TM 偏振光条件下的光吸收增强谱,图 4(c)为非偏振光条件下的光吸收增强谱,在图 4(a)中取 752 nm、830 nm、858 nm 和 1 080 nm 四个波长点(图中标记的波长点)来分析电场强度的分布;在图 4(b)中取 866 nm、896 nm、948 nm 和 956 nm 四个波长点(图中标记的波长点)来分析磁场强度的分布.图 5 为 700~1 100 nm 波段中部分波长点的电磁场强度分布图.

从图 5(a)中可以看出 Cos_CB-TFSC 在该波长点的光吸收增强主要来自光波导模式耦合,而 Rec_CB-TFSC 没有完全实现光波导模式耦合,有部分电磁场能量发散到硅层以外.在大于1000 nm 的波长段,Rec_CB-TFSC 要优于 Cos_CB-TFSC.从图 5(b)中可以看出在该波长点两种 Ag 光栅表面均激发了 SPRs 模式,但余弦光栅表面激发的 SPRs 模式比矩形光栅的范围广且强度更高.结合图 4(c)可以发现在 700~1100 nm



波段里,Cos_CB-TFSC的光吸收性能比 Rec_CB-TFSC 整体要好,这种增强主要来自光波导模式耦合和 SPRs 模式.从图 4(b)和 4(c)可以看出余弦光栅结构光吸收增强的波长段范围较矩形光栅结构发生了红移, 这种现象主要是 SPRs 模式导致的.

2.3 短路电流密度

根据式(2)计算得到图1中8种单晶硅薄膜太阳能电池的短路电流密度,如表2.

$$J_{\rm sc} = e \times \int_{\lambda_{\rm min}}^{\lambda_{\rm max}} \frac{\eta_{\rm abs}(\lambda) \times {\rm SP}(\lambda)}{E_e(\lambda)} d\lambda$$
⁽²⁾

式中 e 为电子电量, $E_e(\lambda)$ 是波长为 λ 的单个光子的能量, $SP(\lambda)$ 是 AM1.5 光谱.

表 2 中 P-TFSC 的短路电流密度为 9.8 1mA/cm², Rec_CB-TFSC 的为 16.23 mA/cm², Cos_CB-TFSC 的为 17.61 mA/cm². Cos_CB-TFSC 的短路电流密度较 P-TFSC 提高了 79.5%, 较 Rec_CB-TFSC 提高了 8.5%. 由表 2 得到图 6 所示的短路电流密度曲线, 从图 6 可以看出余弦光栅单晶硅薄膜太阳能电池的短路电流密度相对于矩形光栅单晶硅薄膜太阳能电池均有所提高.





3 结论

本文设计了一种双层余弦共形光栅单晶硅薄膜太阳能电池结构,将该结构和对照组结构进行了优化,并 模拟计算了单晶硅薄膜太阳能电池的光吸收效率谱.运用归一化光吸收密度的概念分别对 6 种结构在 300 ~700 nm 和 700~1100 nm 波段的光吸收性能进行了对比分析.结果表明,双层共形光栅单晶硅薄膜太阳能 电池结构具有更高的光吸收效率,余弦光栅比矩形光栅在长波段有更好的光捕获和吸收作用.双层余弦共形 光栅单晶硅薄膜太阳能电池比平板结构太阳能电池的短路电流密度提高了 79.5%,余弦光栅结构比矩形光 栅结构的短路电流密度提高了 8.5%,可为单晶硅薄膜太阳能电池的结构设计提供参考.

参考文献

[1] SHEN Hong-jun, LI Ting, LU Hui-dong, et al. Enhancement of light absorption in thin film silicon solar cells with light traping[J]. Chinese Journal of Luminescence, 2016, 37(7): 816-822.

沈宏君,李婷,卢辉东,等.利用陷光结构增加硅薄膜太阳能电池的吸收效率[J].发光学报,2016,37(7):816-822.

[2] POORTMANS J, ARKHIPOV V. Thin film solar cells [M]. GAO Yang, transl. Shanghai: Shanghai Jiao Tong University Press, 2012:6-8.

波特曼斯,阿尔希波夫.薄膜太阳能电池[M].高扬,译.上海:上海交通大学出版社,2012:6-8.

- [3] LIU Dong, YANG Dong, GAO Yang, *et al.* Flexible near-infrared photovoltaic devices based on plasmonic hot-electron injection into silicon nanowire arrays[J]. *Angewandte Chemie*, 2016, **55**(14):4577-4581.
- [4] ATWATER H A, POLMAN A. Plasmonics for improved photovoltaic devices[J]. *Nature Materials*, 2010, **9**(3): 205-213.
- [5] 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.
- [6] 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.
- [7] WU W, MAGNUSSON R. Total absorption of TM polarized light in a 100 nm spectral band in a nanopatterned thin a-Si film[J]. *Optics Letters*, 2012, **37**(11): 2103-2105.

- [8] SARAVANAN S, DUBEY R S. Optical absorption enhancement in 40 nm ultrathin film silicon solar cells assisted by photonic and plasmonic modes[J]. *Optics Communications*, 2016, **377**:65-69.
- [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] 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.
- [11] 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.
- [12] XU Z, HUANG F H, LI X, et al. Role of nanocone and nanohemisphere arrays in improving light trapping of thin film solar cells[J]. Optics Communications, 2016, 377:104-109.
- [13] LI X, TAN Q, JIN G. Surface profile optimization of antireflection gratings for solar cells[J]. Optik, 2011, 122(23): 2078-2082.
- [14] SHI Yan-peng, WANG Xiao-dong, LIU Wen, et al. New hybrid light trapping structure in silicon thin film solar cells
 [J]. Acta Photonica Sinica, 2014, 43(5):0523001.

时彦朋,王晓东,刘雯,等.新型硅薄膜太阳能电池混合陷光结构[J].光子学报,2014,43(5):0523001.

- [15] 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. 二维微纳米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. [16] GUO X,ZHOU Y,LIU B,*et al*. Cosine light-trapping nanostructures for thin film solar cells[J]. *Optics Letters*,2015,**40**
- (16):3866-3868.
- [17] CHEN Ke, WANG Yuan-yuan, ZHENG Hong-mei, 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.

Foundation item: The National Natural Science Foundation of China (No. 51435003)