

# 비정질 실리콘 박막 태양전지 효율 향상을 위한 양극산화 알루미늄 템플레이트를 이용한 플라즈모닉 금 나노점 배열 최적화

## Plasmonic gold nanodot array optimization on a-Si thin film solar cells using anodic aluminum oxide templates

배규영\*, 김경식<sup>†</sup>

Kyuyoung Bae and Kyoungsik Kim

(2013년 9월15일 접수; 2013년 9월23일 심사완료; 2013년9월24일 게재확정)

### Abstract

The fabrication method of plasmonic nanodots on silicon substrate has been developed to improve the efficiency of thin film solar cells. Nanoscale metallic nanodots arrays are fabricated by anodic aluminum oxide (AAO) template mask which can have different structural parameters by varying anodization conditions. In this paper, the structural parameters of gold nanodots, which can be controlled by the diverse structures of AAO template mask, are investigated to enhance the optical properties of a-Si thin film solar cells. It is found that optical properties of the thin film solar cells are improved by finding optimization values of the structural parameters of the gold nanodot array.

**Key Words:** Anodic aluminum oxide, plasmonic, thin film solar cell.

### 기호설명

AAO Anodic aluminum oxide

$J_{ph}$  Total absorbed photocurrent

## 1. 서론

최근 수십년간 천연자원의 고갈로 인해 태양전지 시장은 급속도로 성장하고 있다. 실리콘을 기반으로 한 태양전지는 많은 연구가 진행되었고 상용화 되어 판매되고 있는 제품도 이미 많은 실정이다. 그리고 태양전지에 금속 나노 입자를 이용하여 태양전지 효율을 향상 시키는 연구도 최근 수년 내에 진행되어 왔다.[1-2]

본 연구에서는 비정질 실리콘 기반 태양전지 구조 위에 양극산화 알루미늄(AAO) 템플레이트를 이용해 금속 입자를 올리는 구조의 최적화에 대해서 연구를 하였다. AAO의 격자 간격과 홀의 기는 각각 AAO에 걸어주는 전압과 pore widening 시간에 따라

결정되는데, 이를 이용하여 태양전지의 효율을 최대한 높일 수 있는 금속입자의 최적화 구조로 배열 할 수 있다. 금속 입자들의 높이 또한 증착 시간에 따라 결정되기 때문에 금속 배열의 격자 간격, 입자의 지름, 입자의 높이를 최적화 할 수 있다. 최적화 구조를 찾기 위해서 Finite-Difference Time-Domain (FDTD) 시뮬레이션 방법을 이용하였다.

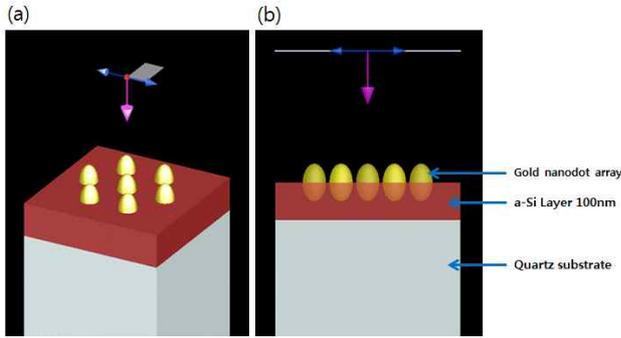
## 2. 실험방법

### 2.1 비정질 실리콘 태양전지 구조

시뮬레이션에서 사용된 비정질 실리콘 태양전지의 구조는 그림 1과 같다. 퀴츠(quartz)기판 위에 100nm 두께의 얇은 박막 비정질 실리콘이 증착되어 있는 구조위에 AAO템플릿을 이용한 금 나노점 배열이 있는 형태로서 비정질 실리콘 태양전지의 기본 형태는 일반적인 박막 태양전지의 구조를 따랐다.[1] 나노점 배열은 전해질 용액을 옥살산으로 하여 만든 AAO로부터 템플레이트를 분리해서, 태양전지 구조 위에 올려 마스크로써 사용해 금을 증착시켰을 때 형성된 모습

<sup>†</sup> School of Mechanical Engineering, Yonsei Univ  
E-mail : kks@yonsei.ac.kr  
TEL : (02)2123-5815

\* School of Mechanical Engineering, Yonsei Univ.



**Fig. 1** Scheme of the gold nanodot array added a-Si solar cell. (a) structure of the simulated a-Si photo-voltaic device. (b) cross-section view of the simulated a-Si photovoltaic device.

으로 설정했다.[2] 연구에서는 3D 시뮬레이션을 위해서 Lumerical 사(社)의 FDTD 소프트웨어를 사용하였으며, 이 소프트웨어는 맥스웰 방정식의 계산에 알맞게 되어있어서 본 계산을 통해 얻고자 하는 비정질 실리콘 층에서의 흡수율을 계산할 수 있다. 시뮬레이션 계산 설정은 3차원 시스템에 2nm resolution의 메쉬에 500fs의 시뮬레이션 시간 조건으로 설정했다. 경계조건 설정에서, 옆면은 대칭구조(symmetric)로 설정하고 윗면과 아랫면은 완전흡수조건(perfect matched layer)으로 설정했다. 광원은 수직 평면파(plane wave)로 입사하는 조건으로 놓고 파장 범위는 300nm에서 800nm로 설정하였다. 이는 비정질 실리콘의 밴드갭이 1.7eV이기 때문에 실제 광흡수를 하는 영역으로 설정한 것이다. 쿼츠, 금의 광학 물성치는 Palik's Handbook of Optical Constants of Solids<sup>1)</sup>에서 가져왔고, 비정질 실리콘의 광학 물성치는 Refractive Index Info를 참조했다.[3]

### 2.2 Absorbed photocurrent 계산

비정질 실리콘층에서의 흡수를 통해서 absorbed photocurrent를 아래의 식으로 계산할 수 있다.[3]

$$J_{ph} = ABS(\lambda) \times J_{solar}(\lambda).$$

여기서 비정질 실리콘층의 흡수는 입사된 power( $P_{in}$ )와 빠져나간 power( $P_{out}$ ) 사이의 관계식으로 구할 수 있다.

$$ABS(\lambda) = \frac{P_{in}(\lambda) - P_{out}(\lambda)}{P_{incident}(\lambda)}.$$

또한 AM1.5G reference spectrum에서 solar spectral current density를 얻을 수 있고

$$J_{solar}(\lambda) = N_0(\lambda) \times e^-,$$

이 때,

$$N_0(\lambda) = \frac{P_{solar}(\lambda)}{E_{ph}(\lambda)}$$

는 입사된 photon flux 이고,  $e^-$ 는 전자 전하량,  $E_{ph} = hc/\lambda$ 는 광자 에너지 이고  $h$ 는 플랑크 상수,  $c$ 는 광속이다.

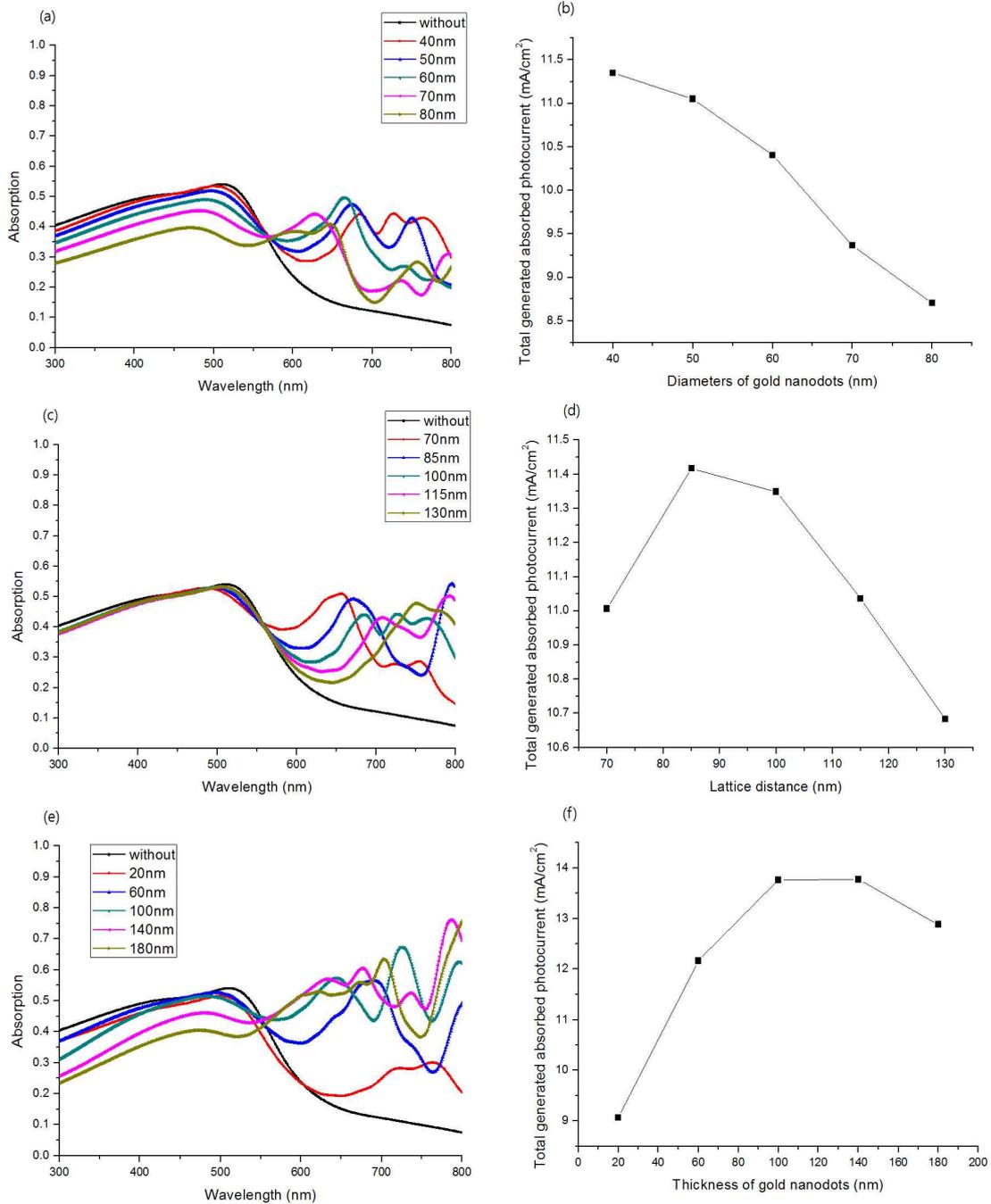
## 3. 결과 및 고찰

### 3.1 입자 직경 최적화

그림 2(a)는 금 입자의 직경이 각각 40, 50, 60, 70, 80nm일 때의 파장에 따른 흡수율을 보여준다. 입자의 직경은 AAO 템플레이트를 제작할 때 pore widening을 위한 에칭 시간을 조절 하면 템플레이트의 구멍 크기가 정해지고, 이것을 이용해 금을 증착하면 원하는 직경의 금 배열을 얻을 수 있다. 여기서 격자거리는 100nm이고 입자 두께는 50nm로 설정했다. 금 입자가 없을 때보다 있을 때 570nm 파장 이후로 흡수가 증가하는 것을 확인할 수 있는데, 이는 금 입자에 의한 플라즈모닉 효과로 비정질 실리콘에 들어가는 빛의 양이 많아져서 나타난 현상으로 볼 수 있다. 반면, 570nm이전의 파장에서는 흡수율이 줄어든 것을 볼 수 있는데 이는 반사가 증가해서 일어난 현상으로 볼 수 있다. 입자의 직경이 커질수록 전체적인 흡수율이 감소했고 total generated absorbed photocurrent의 계산을 통해서 그림 2(b)에서처럼 직경 40nm일 때 최대의 효율을 내는 것을 확인할 수 있었다.

### 3.2 격자 거리 최적화

그림 2(c)는 금 배열의 격자 거리에 따른 흡수율 분포를 보여준다. 격자 거리는 각각 70, 85, 100, 115, 130nm인데 이는 양극산화 전압을 각각 30, 35, 40, 45, 50V로 걸어주었을 때 형성되는 AAO의 간격이다. 저 범위를 벗어나게 되면 구조형성이 잘 안되고 배열 간격이 매우 불규칙해진다. 입자 크기는 3.1절에서 찾은 최적화 값인 40nm로 설정했고 두께는 그대로 두었다. 그림 2(c)에서 볼 수 있듯이 간격이 넓어지면서 570nm 파장 이후의 흡수 피크(absorption peak)가 긴 파장으로 옮겨가게 되는데 전반적인 흡수율은 크게 다르지는 않다. 그러나 AM 1.5G의 solar spectral current density에 잘 맞는 흡수율을 가지는 85nm 격자 구조에서 최대의 효율을 보였다.



**Fig. 2** Absorption spectra and total generated absorbed photocurrents with diameter of gold nanodots (a) and (b), lattice distance (c) and (d), and thickness of gold nanodots (e) and (f).

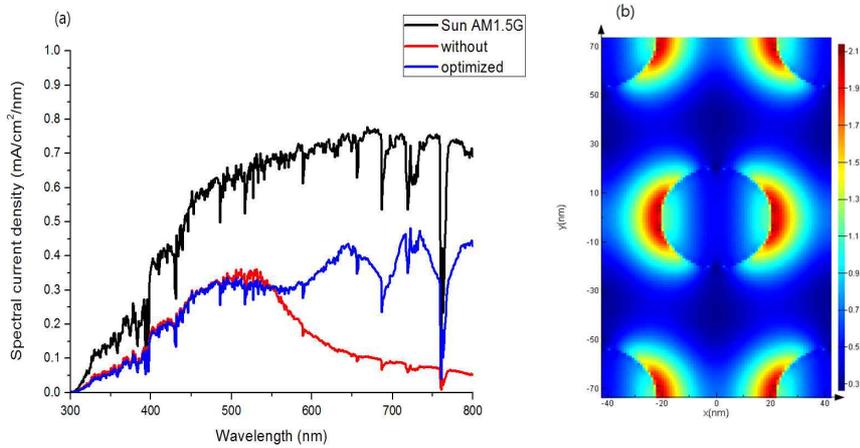
### 3.3 입자 두께 최적화

입자의 두께에 따라선 보다 명확한 효과를 보여주었다. 그림 2(e)에서처럼 입자의 두께가 증가할수록 570nm 이후의 파장영역에서 흡수율이 크게 증가하는 것을 보였고 어느 정도 높이 이상에선 전반적으로 흡수율이 높았으나, 100nm, 140nm에서 solar spectral current density에 잘 맞아서 높은 효율을 보였다. 이때 그림 2(f)에서처럼 두 값의 차이는 거의 없으므로 가격 효율적 측면에서

자료를 더 적게 쓰는 100nm두께를 최적화 값으로 설정하였다.

### 3.4 최적화를 통한 최종 구조

위의 시뮬레이션 결과를 토대로 비정질 실리콘 태양전지의 효율을 최대 높일 수 있는 금 나노점 배열의 최적화 값이 결정되었다. 입자의 직경은 40nm이고 격자 간격은 85nm, 금 입자의 두께는 100nm이다. 따라서 85nm의 격자 간격과 40nm



**Fig. 3** (a) Spectral absorbed photocurrent density of the optimized gold nanodot array added and conventional a-Si solar cells illuminated by the AM 1.5G solar spectrum. Spectral current density of the solar spectrum is also represented (b) FDTD simulation of the e-field distribution at a 800nm wavelength.

의 구멍 크기를 갖는 AAO 템플레이트를 제작 후 마스크로 써서 비정질 실리콘 위에 100nm의 금을 증착시키면 높은 효율을 갖는 박막 태양전지를 얻을 수 있다. 최적화 구조가 갖는 Total absorbed photocurrent ( $J_{ph}$ )는  $13.76 mA/cm^2$ 이고 이는 태양에너지로부터 최대 얻을 수 있는 total  $J_{ph}$ 인  $29.84 mA/cm^2$ 의 약 46%에 해당하는 값이다. 금 나노점 배열이 없는 구조에서의 total  $J_{ph}$ 은  $7.90 mA/cm^2$ 로, 금 나노점 배열로 인해서 74%의 향상을 보였다. 그림 3(a)에서 볼 수 있듯이, 570nm 이후에 금 나노점 배열로 인해 비정질 실리콘층에서의 흡수율이 크게 향상되었고 이는 그림 3(b)에서 보이는 플라즈모닉 효과에 의한 e-field의 증가로 인한 것이라고 할 수 있다.

#### 4. 결론

본 연구를 통해서 기존의 비정질 실리콘 태양전지위에 AAO 템플레이트를 이용한 금 나노점 배열을 증착하여 태양전지 효율을 크게 향상시켰다. 시뮬레이션을 이용해 비정질 실리콘에서의 흡수율을 구했고, 이를 이용해 total absorbed photocurrent( $J_{ph}$ )를 계산하여 태양전지 효율이 증가했음을 정량적으로 보였다. 금 나노점 배열이 없을 경우와 비교하여, 배열이 있을 때  $J_{ph}$  값이  $7.90 mA/cm^2$ 에서  $13.76 mA/cm^2$ 로 74% 가량 향상되었다. 이는 태양에너지 전체의 total  $J_{ph}$ 인  $29.84 mA/cm^2$ 의 46%로써, 상당량의 태양에너지를

전기 에너지로 바꿔줄 수 있다. 이를 이용해 비정질 실리콘 태양전지의 구조를 완성하면 고효율의 박막 태양전지를 개발할 수 있을 것이다.

#### 후기

본 연구는 방위사업청과 국방과학연구소가 지원하는 국방 피탐지 감소기술 특화연구센터 사업의 일환으로 수행되었습니다.

#### REFERENCES

- [1] D. Derkacs, S. H. Lim, P. Matheu, W. Mar et al, 2006, "Improved performance of amorphous silicon solar cells via scattering from surface plasmon polaritons in nearby metallic nanoparticles", Appl. Phys. Lett., Vol.89, pp.093103
- [2] Yu. A. Akimov, W. S. Koh, S. Y. Sian, and S Ren, 2010, "Nanoparticle-enhanced thin film solar cells: Metallic or dielectric nanoparticles?", Appl. Phys. Lett., Vol.96, pp.073111
- [3] Gumin Kang, Haesung Park, Dongheok Shin, Seunghwa Baek, Minjung Choi et al, 2013, "Broadband Light-Trapping Enhancement in an Ultrathin Film a-Si Absorber Using Whispering Gallery Modes and Guided Wave Modes with Dielectric Surface-Textured Structures", Advanced

Materials, Vol.25, No.18, pp.2617-2623

- [4] A. Sangar, A Merlen, P. Torchio, S. Vedraïne, F Flory et al, 2013, "Fabrication and characterization of large metallic nanodots arrays for organic thin film solar cells using anodic aluminum oxide templates", Sol. Energy Mater. Sol. Cells, Vol.117, pp.657-662
- [5] Edward D. Palik, 1985, "Handbook of Optical Constants of Solids", Academic Press, Boston.
- [6] Refractive Index database: RefractiveIndex.INFO, <http://refractiveindex.info>
- [7] J. Grandidier, M. G. Deceglie, D. M. Callahan, and H. A. Atwater, 2012, "Simulations of solar cell absorption enhancement using resonant modes of a nanosphere array", Journal of Photonics for Energy, Vol.2, pp.024502