creative commons
COMMONS DEED

저작자표시-비영리-동일조건변경허락 2.0 대한민국

이용자는 아래의 조건을 따르는 경우에 한하여 자유롭게

- 이 저작물을 복제, 배포, 전송, 전시, 공연 및 방송할 수 있습니다.
- 이차적 저작물을 작성할 수 있습니다.

다음과 같은 조건을 따라야 합니다:

저작자표시. 귀하는 원저작자를 표시하여야 합니다.

비영리. 귀하는 이 저작물을 영리 목적으로 이용할 수 없습니다.

동일조건변경허락. 귀하가 이 저작물을 개작, 변형 또는 가공했을 경우에는, 이 저작물과 동일한 이용허락조건하에서만 배포할 수 있습니다.

- 귀하는, 이 저작물의 재이용이나 배포의 경우, 이 저작물에 적용된 이용허락조건을 명확하게 나타내어야 합니다.
- 저작권자로부터 별도의 허가를 받으면 이러한 조건들은 적용되지 않습니다.

저작권법에 따른 이용자의 권리는 위의 내용에 의하여 영향을 받지 않습니다.

이것은 이용허락규약(Legal Code)을 이해하기 쉽게 요약한 것입니다.

Disclaimer

dCollection

공학석사학위논문

파장이하 주기를 갖는 V형태 플라즈모닉 태양전지의 광흡수 특성 해석을 위한 유효 매질 모델의 제안 및 응용

Suggestion and application of an effective medium model to analyse light absorption characteristics of V shaped plasmonic solar cells with subwavelength periodic structure

2012년 8월

서울대학교 대학원
전기 컴퓨터 공학부
김 원 석

파장이하 주기를 갖는 V형태 플라즈모닉 태양전지의 광흡수 특성 해석을 위한 유효 매질 모델의 제안 및 응용

Suggestion and application of an effective medium model to analyse light absorption characteristics of V shaped plasmonic solar cells with subwavelength periodic structure

지도교수 박 남 규

이 논문을 공학석사 학위논문으로 제출함

2012년 8월

서울대학교 대학원

전기 컴퓨터 공학부

김 원 석

김원석의 공학석사 학위논문을 인준함

2012년 8월

위 원 장 _____ (인)

부 위 원 장 _____ (인)

위 원 _____ (인)

초 록

태양전지의 효율을 얻기 위한 과정은 크게 두 가지 단계로 나눌 수 있다. 첫 번째는 구조의 흡수 물질로의 광흡수, 두 번째는 흡수된 광을 이용한 광-전 변환 과정이다. 첫 번째 과정인 광흡수 효율 극대화를 위해서는 물질 표면으로 입사된 빛을 흡수 물질로 잘 전달할 수 있도록 재료의 광학적 성질을 이용하여 구조적 설계를 잘하는 것이 중요하다. 두 번째 과정인 광-전 변환 효율을 높이기 위해서는 광흡수로 생성된 전자, 정공을 양극으로 잘 전달할 수 있도록 재료의 반도체적 성질을 이용하여 접합부의 에너지 레벨 설계를 잘 하는 것이 중요하다. 하지만 두 번째 과정에 대한 연구는 첫 번째 과정에 의한 결과 구조물에 의존하여 문제를 재설정해야 하므로, 높은 광흡수 효율을 얻을 수 있는 구조의 선행적 정의가 총체적인 태양전지 연구의 방향 설정에 있어서 중요하다. 실제로, 최근의 태양전지 연구 동향을 보면 광흡수 효율을 높일 수 있는 구조 설계에 관련된 연구가 큰 비중으로 진행되고 있는 것을 알 수 있다. 하지만 대부분 정량적인 방법의 나열식 연구가 많이 진행되고 있는 실정이다.

본 논문에서는 광학적 관점에서 구조의 광흡수 문제에 초점을 맞추고, 정성적인 방법으로 흡수와 손실이라는 두 가지 메커니즘의 원인 분석 및 해결 방안에 대한 연구를 진행하였다. 흡수층에는 비결정질 실리콘을 사용하고 반사층에는 은을 사용하여, 반사 효과 및 표면 플라즈몬 효과로 광 경로를 증가시켜 높은 광흡수율을 얻을 수 있는 박막형 플라즈모닉스 태양전지를 기반으로 하였다. V형태 모양을 갖는 파장 한계 크기의 주기를 갖는 구조를 구현하여 특성 분석을 위해 유효매질 이론을 적용하였다. 정확한 분석을 위해 금속층의 투과 깊이를 고려하여 이론을 수정하

고, 흡수, 반사, 금속 손실의 메커니즘을 해석하였다. 끝으로, 반사, 금속 손실을 줄여서 흡수 물질로의 광흡수를 증가시킬 수 있는 방안을 모색하였다.

주요어 : 플라즈모닉 태양전지, 광흡수, 금속 손실, 유효 매질 이론, 유효 유전율, 임피던스 매칭

학 번 : 2010-23248

목차

초록 i

목차 iii

그림목차 v

표목차 vii

제 1장 서론 1

1.1 연구의 배경 1

1.1.1 V형태 구조 2

1.1.2 나노 콘, 나노 와이어 구조 3

1.1.3 나노 돔 구조 4

1.2 연구의 목적 6

1.3 논문의 구성 7

제 2장 배경 이론 8

2.1 표면 플라즈몬 8

2.2 표면 플라즈몬을 이용한 태양전지 10

2.3 유효 매질 이론 12

2.4 표피 깊이(Skin depth) 효과 14

제 3장 연구 결과 15

3.1 평면, V형태 구조 박막형 태양전지 전산모사 15

3.1.0 단원 목표 15

3.1.1 전산모사 구조와 방법 15

3.1.2 기본 가정 및 FOM 정의 16

3.1.3 평면 구조의 전산모사 결과 17

3.1.4 V형태 구조의 전산모사 결과 18

3.1.5 단원 요약 20

3.2 유효 매질 이론을 이용한 박막형 태양전지의 광흡수 특성 분석 21
3.2.0 단원 목표 21
3.2.1 기준 구조 선정 및 특성 분석 21
3.2.2 유효 매질 이론을 이용한 유효 유전율 값 계산 23
3.2.3 유효 유전율 전이 현상을 이용한 광흡수 특성 분석 25
3.2.4 단원 요약 28
3.3 금속층의 투과 깊이(penetration depth) 효과를 고려한 수정된 유효 매질 모델 제안 30
3.3.0 단원 목표 30
3.3.1 금속층의 투과 깊이 효과 30
3.3.2 투과 깊이 효과를 고려한 유효 유전율 계산 31
3.3.3 단원 요약 34
3.4 수정된 유효 매질 모델 기반의 향상된 광흡수율을 얻을 수 있는 구조의 제안 36
3.4.0 단원 목표 36
3.4.1 금속층의 모서리를 제거한 구조 36
3.4.2 투과 특성을 포함한 다중접합 구조의 설계 37
3.4.2-1 유전율 설계 38
3.4.2-2 구조 설계 및 효율 검증 39
제 4장 결론 **41**
참고문헌 **42**
Abstract **44**

그림 목차

그림 1.1(a) V형태 구조 유기태양전지 및 내부 각도 변화에 따른 반사 횟수 증가 특성
(b) 내부각도 변화에 따른 광변환 전류 값 및 효율.....3
그림 1.2 (a) 나노 콘, 나노 와이어 구조의 공정을 통한 구현, (b) 평면 구조, 나노 콘
구조, 나노 와이어 구조의 반사율, 투과율, 흡수율.....3
그림 1.3 (a) 평면 구조, 나노 와이어 구조, 나노 콘 구조 위에 SiO_2알갱이를 올려놓았
을 때의 유효 굴절률 값의 변화 및, (b) 각도에 따른 광 흡수율 특성.....4
그림 1.4 (a) 나노 돔 구조, (b) 전산모사 나노 돔 구조 및 전기장 패턴, (c) 구조별 광
흡수 효율, ITO 포함된 나노 돔 구조, ITO 포함되지 않은 나노 돔 구조,
ITO 포함된 평면 구조, ITO 포함되지 않은 평면 구조.....5
그림 2.1 (a) 유전체, 금속 경계면에서의 표면 플라즈몬 여기 현상 및
(b) 경계면 수직 방향으로의 전기장 세기 감쇄 현상.....8
그림 2.2 격자 금속층을 이용한 위상 정합.....9
그림 2.3 (a) 후면 격자 금속층을 표면 플라즈몬에 의한 광경로 증가 모식도
(b) 은 격 자 구조에 의한 광흡수율 증가 현상.....10
그림 2.4 (a) 플라즈모닉 다중접합 태양전지 모식도
(b) Ga/In/As 다중접합 태양전지 구조..... 11
그림 2.5 (a) K벡터 방향으로 Λ의 파장이하 주기를 갖는 구조의 모식도
(b) TE-polarized, (c) TM-polarized 일 때의 경우.....12
그림 2.6 ϵ_i는 a만큼, ϵ_s는 b만큼의 할당량을 갖는 주기$\Lambda = a + b$의 격자 시스템.....13
그림 2.7 표피 깊이(Skin depth) 효과 모식도.....14
그림 3.1 (a) 전산모사를 위한 박막형 태양전지의 평면구조 및
(b) V형태 구조(P=주기, T=흡수층 두께, H=높이, Angle=기울기 각도).....16
그림 3.2 (a) 비결정질 실리콘의 굴절률 및 (b)은의 유전율 값.....16
그림 3.3 (a) 비결정질 실리콘의 두께 파장의 변화에 따른 광흡수 효율 변화
(b) 두께 증가에 따른 최대 광흡수 경향성 및 수렴 특성.....18
그림 3.4 V형태 구조의 주기를 고정시켰을 때, V와 지면이 이루는 각도와 두께의
변화에 따른 FOM 특성.....19

그림 3.5 (a) V형태 구조 태양전지에서 주기 변화에 따라 얻을 수 있는 최대 FOM 값 및 (b) 그 때의 기울기 각도.....20
그림 3.6 기준구조의 기울기 각도, 파장 변화에 따른 (a) 광흡수율($A(\lambda)$), (b) 구조 반사율($R(\lambda)$), (c) 금속 손실률($R(\lambda)$).....22
그림 3.7 (a) 기울기 각도=73도인 구조, (b) 기울기 각도=26도인 구조에서의 파장에 따른 광 흡수율($A(\lambda)$), (b)구조 반사율($R(\lambda)$), (c)금속 손실률($R(\lambda)$).....23
그림 3.8 V형태 기준 구조와 3층을 갖는 유효 유전율 구조와의 대응.....23
그림 3.9 T=260nm, P=200nm일 때, (a) H=300nm, (b) H=50nm인 유효 유전율 근사 구조, (c) H=300nm, (d) H=50nm인 전산모사 구조의 광흡수 및 반사 특성.....25
그림 3.10 기준 구조의 위치와 파장에 따른 유효 유전율 값(H=260nm).....27
그림 3.11 유효 유전율 값으로 모델링한 구조의 시간 평균된 광흡수 정도 및 그 위치..27
그림 3.12 전산모사 구조의 시간 평균된 광흡수 정도 및 그 위치.....27
그림 3.13 기준 구조의 위치와 파장에 따른 유효 유전율 값(H=50nm).....28
그림 3.14 (a) 금속층 두께에 따른 입사광의 투과정도를 알아보기 위한 전산모사 구조 (b) 금속층 두께 변화와 파장의 변화에 따른 투과정도.....31
그림 3.15 금속층의 투과 깊이 고려시, 입사광의 effective length 변화.....32
그림 3.16 투과 깊이를 고려한 장파장 영역에서의 유효 유전율 값, L은 각각의 파장에서의 투과 깊이.....33
그림 3.17 유효 유전율 값으로 모델링한 구조의 시간 평균된 광흡수 정도 및 그 위치..34
그림 3.18 각각의 파장에서 나타나는 광 흡수율의 시간에 대한 평균값.....34
그림 3.19 (a) 금속 모서리를 제거한 전산모사 구조 (b) 투과 깊이를 고려하여 계산된 유효 유전율 (c) 제안된 구조의 광흡수율, 금속 손실률, 구조 반사율.....37
그림 3.20 (a) 설계된 유효 유전율의 실수부 및 (b) 허수부.....39
그림 3.21 (a) 제안된 구조의 FOM 및 광 흡수율, 금속 손실률, 구조 반사율, (b) 주기 증가에 따른 최대 FOM과, 제안된 구조의 FOM 비교.....40
그림 3.22 전산 모사 구조 및 장파장 대역에서 파장의 변화에 따른 시간 평균된 광흡수 패턴.....40

표 목차

표1. V형태 구조의 기울기 각도와 입사광 파장의 변화에 따른 광흡수 특성.....22
표2. 구조의 반사율()=0 일 때와 금속 손실률$R(\lambda)L(\lambda)$=0 일 때의 유효 유전율 값과 광흡수율의 특징.....29

제 1장 서론

1.1 연구의 배경

1.1.1 개요

태양전지에 관련된 연구는 고효율화 및 저가격화라는 두 가지 명제를 충족시키기 위하여 많은 연구가 진행되고 있다. 고효율을 얻기 위해서는 높은 광흡수 효율을 갖는 광학적 구조의 설계가 초석이 되어야하는데, 저가격화를 위해서 박막화된 구조를 밑거름으로 해야 한다.

태양전지의 광흡수 효율과 관련된 변수는 두 가지로 나눌 수 있다. 첫 번째는 광흡수 재료 고유의 광학적 특성, 두 번째는 입사된 빛이 재료의 표면에서 반사, 굴절, 산란 효과를 겪고, 재료의 내부에서 이동할 수 있는 광경로이다. 따라서 태양전지에 사용할 광흡수 재료가 결정되면, 광경로 증가에 관련된 변수 문제를 해결하여야 광흡수 효율을 높일 수 있다. 광-경로를 증가시키기 위해서 직관적으로 생각할 수 있는 방법은 재료의 두께 증가이다. 하지만 흡수된 빛에 의해 생성된 전자-정공이 소멸되지 않고 양극으로 이동할 수 있는 거리(diffusion length)의 한계 및 재료비 상승 문제로, 재료의 두께 증가는 궁극적인 해결방법이 아니다. 따라서 금속의 높은 산란, 반사 및 플라즈몬(plasmon) 여기 효과를 이용한 플라즈모닉 태양전지(Plasmonic Solar Cell)가 새로운 방안으로 많은 연구가 진행되고 있다. 특히 플라즈모닉 태양전지를 이용하면 박막화가 가능하기 때문에, 저가격화란 명제를 충족시키기 쉽다. 하지만, 플라즈모닉 효과는 금속과 흡수 재료와의 공진을 통하여 발생하는 현상이기 때문에,

금속의 흡수율도 무시할 수 없을 커지게 되는 광흡수 파장 영역도 발생하게 된다. 따라서 후면 금속층을 기본으로 증착한 플라즈모닉 태양전지에 관련된 연구를 위해서는 다음과 같이 두 가지 손실 변수를 고려해야 한다. 첫째는 태양전지 표면에서 반사 및 후방 산란되는 성분, 그리고 둘째는 플라즈모닉 효과를 얻기 위해 사용하는 금속의 손실률 성분이다. 이 두 가지 성분을 줄인다면 흡수 재료의 광흡수율을 높일 수 있다.

아래의 1.1.2는 기하광학의 관점에서 반사, 후방 산란 성분을 굴절, 전방 산란 성분으로의 전환 확률을 높인 V형태 구조, 1.1.3은 첫 번째 변수인 반사 및 후방 산란 성분을 줄여서 재료의 광흡수율을 높인 실리콘 기반의 나노 콘, 나노 와이어 구조, 1.1.3은 첫 번째 변수와 두 번째 변수를 모두 줄여서 재료의 광흡수율을 높인 나노 돔 구조이다.

1.1.2 V형태 구조

V형태 구조를 갖는 태양전지에 대한 연구는 주로 기하광학의 관점에서 진행되어 왔다. 그림 1.1(a)는 수-수백 마이크로 크기의 금속 기판 위에 수십 나노의 크기를 갖는 유기물을 증착한 태양전지 구조이다.[1] 구조 내부로의 반사 횟수는 $N_{\max} = \frac{\pi - \theta_i + \alpha}{2\alpha}$($\theta_i$: 빛의 입사각, α : substrate normal에 대한 각도)을 따르는 것을 나타낸다. 그림 1.1(b)는 내부각이 $2\alpha = 45$도일 때 최고의 광-변환 전류 값 및 효율을 얻을 수 있다는 것을 보여준다.

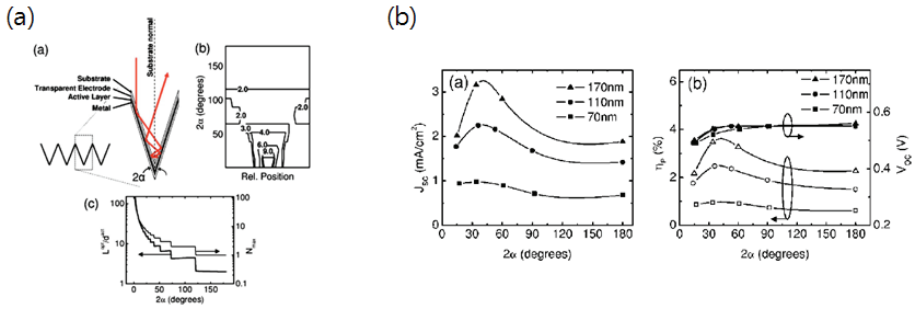

그림 1.1 (a) V형태 구조 유기태양전지 및 내부 각도 변화에 따른 반사 횟수 증가 특성 (b) 내부각도 변화에 따른 광변환 전류 값 및 효율 [1]

1.1.3 나노 콘, 나노 와이어 구조

나노 콘 구조를 이용한 태양전지의 경우, 약 $5\mu m$ 두께의 실리콘을 이용하여 300nm-1200nm영역의 파장을 거의 100% 흡수한다.[2] 공기층과 실리콘층의 임피던스 매칭(impedance matching)이 연속적으로 잘 이루어져서 반사율이 거의 0%에 가깝다. 나노 와이어 구조의 경우 나노 콘 구조에 비하여 공정이 간단하나, 표면 임피던스 매칭(impedance matching) 문제로 반사율이 다소 존재하고, 광흡수율도 평면 구조에 비해서는 높지만 나노 콘 구조에 비하면 낮은 편이다.

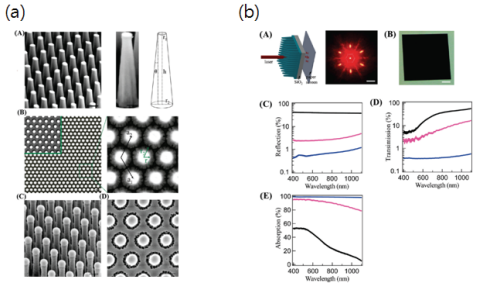

그림 1.2 (a) 나노 콘, 나노 와이어 구조의 공정을 통한 구현 (b) 평면 구조(검정), 나노 콘 구조(파랑), 나노 와이어 구조(빨강)의 반사율, 투과율, 흡수율 [2]

나노 콘, 나노 와이어 구조의 경우, 빛의 입사각에 따른 광흡수 특성도 평면 구조에 비하여 상당히 좋다.[3] 그림 1.3(b)는 입사광 60도 이상에 대해서는 각도변화에 따른 광 흡수율의 영향이 거의 없음을 보여준다.

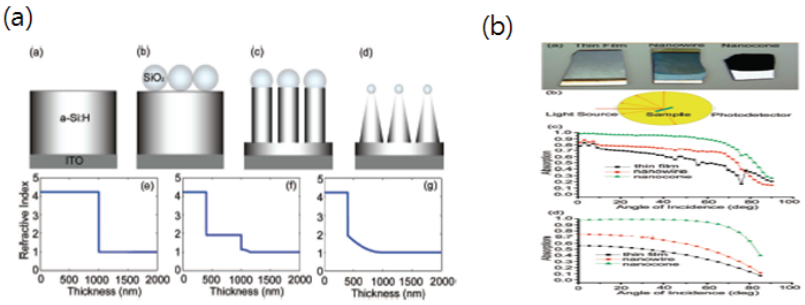

그림 1.3 (a) 평면 구조, 나노 와이어 구조, 나노 콘 구조 위에 SiO_2 알갱이를 올려놓았을 때의 유효 굴절률 값의 변화 및 (b) 각도에 따른 광 흡수율 특성 [3]

1.1.4 나노 돔 구조

그림 1.4(a)는 나노 돔 구조의 태양전지로, 전면의 돔 구조가 임피던스 매칭을 효과적으로 하여주고 후면의 주기성을 갖는 나노 콘 모양의 금속층은 장파장의 입사광을 플라즈몬 효과로 잡아주는 역할을 할 수 있도록 구현한 비결정질 실리콘 기반의 구조이다.[4] 여기서 사용된 전면의 투명 전극층은 표면 임피던스 매칭을 돕고, 후면의 투명 전극층은 흡수층에 비해 낮은 굴절률을 갖도록 하여 유전체 도파로(dielectric waveguide) 모드를 형성하거나, 금속층이 여기하는 플라즈몬 효과에 의한 손실률을 줄여주는 역할을 한다. 그림 1.4(b)는 나노 돔 구조의 전산모사 구조이며, 각 파장별 전기장 패턴을 도시한다. 전기장이 흡수층 내에 공진된 모드를 형성하는 것을 볼 수 있다. 그림 1.4(c)는 400nm-800nm 대역에서 약 94%의 광흡수 효율을 얻은 것을 나타낸다.

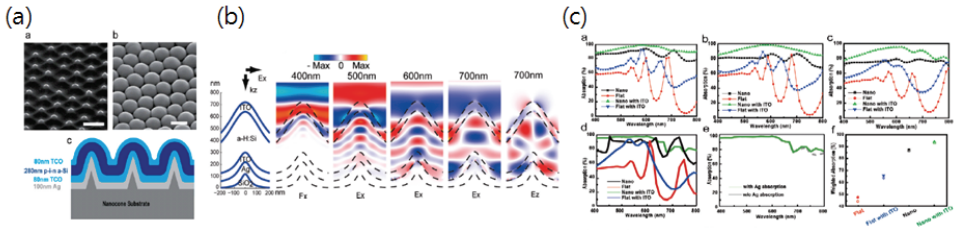

그림 1.4 (a) 나노 돔 구조, (b) 전산모사 나노 돔 구조 및 전기장 패턴, (c) 구조별 광 흡수 효율, ITO 포함된 나노 돔 구조(초록), ITO 포함되지 않은 나노 돔 구조 (검정), ITO 포함된 평면 구조(파랑), ITO 포함되지 않은 평면 구조(빨강) [4]

1.2 연구의 목적

높은 광흡수 효율을 갖는 태양전지 구조를 설계함에 있어서 정량적인 방법의 연구는 많이 진행되었지만, 그에 비하여 정성적인 방법의 연구는 많이 이루어지지 않고 있다. 광을 흡수해야하는 파장의 범위는 넓은 반면에 각각의 파장에 따른 광흡수 효율 패턴은 제각각의 서로 다른 결과를 나타내기 때문에 정성적인 방법론을 바탕으로한 해석에는 많은 어려움이 따른다. 하지만 나노 구조를 이용한 광흡수 효율 증가에 관련된 연구는 구조적 한계에 봉착해 있고, 나열식의 연구가 많이 진행되고 있는 실정이다.

본 논문에서는 정성적인 방법론에 초점을 맞추어 태양전지의 광흡수 메커니즘을 유효 유전율 전이 현상을 이용하여 새롭게 해석할 것이다. 광흡수 효율에 영향을 미치는 변수를 최소화 하고, 반사방지 코팅막 설계에 적용되는 유효 매질 이론(Effective Medium Theory)을 파장 한계 주기를 갖는 금속층이 포함된 플라즈모닉 태양전지 구조에 적용하여 이론을 검증해보고, 정확한 모델링을 위하여 유효 매질 이론을 바탕으로한 수정된 해석 모델을 제안할 것이다. 마지막으로, 수정된 해석 모델을 이용하여 광흡수율의 근본 한계를 분석하고 이를 해결할 수 있는 방안을 모색하도록 하겠다.

1.3 논문의 구성

제 2장에서는 본 논문의 분석을 위하여 필요한 배경이론에 대한 설명을 담았다. 금속 구조를 이용한 플라즈모닉 태양전지에 대한 기본 설명과, 구조 분석용 도구로 삼을 유효 매질 이론에 대해 정리할 것이다. 그리고 유효 매질 이론을 금속층이 포함된 태양전지 구조에 완벽히 적용하여 해석을 하기 위해서는, 이론의 수정이 필요한데, 그 관련 개념인 표피 깊이 (skin depth) 효과를 간략히 언급하겠다.

제 3장에서는 전산 모사를 통한 구조의 분석을 위하여 기본 가정 및 특성 이해를 하고, 기준 구조를 정하여 유효 매질 이론을 적용한 해석을 진행할 것이다. 특히, 금속층을 사용한 구조에서는 다소 맞지 않는 부분이 발생하는데, 실제 구조와의 정확한 모델링을 위하여 투과 깊이 (penetration depth) 효과를 고려하도록 수정할 것이다. 마지막으로, 태양전지의 광흡수 특성을 정확히 설명할 수 있는 수정된 개념을 이용하여 좀 더 높은 효율을 가질 수 있는 구조를 제안할 것이다.

제 2장 배경 이론

2.1 표면 플라즈몬 (Surface Plasmon Polariton)

표면 플라즈몬(Surface Plasmon Polariton)이란, 유전체(dielectric)와 도체(conductor) 사이의 경계면을 따라 전파되는 전자기적 들뜸(electromagnetic excitation) 현상을 일컫는다. [5],[6] 즉, 도체의 전자 플라즈마의 진동과 입사된 전자기 파동이 서로 결합된 일종의 공진 현상이다. 여기되는 표면 플라즈몬파는 경계면에 속박되어 있으면서, 경계면에 수직한 방향으로는 급격한 감쇄가 일어나는 특징을 갖고 있다. 그림 2.1은 여기된 표면 플라즈몬의 공진 현상을 전기장과 자기장 성분으로 도식화하여 나타낸 것이다. 전기장은 경계면에 수직한 방향으로 형성되고, 자기장은 경계면에 수평한 방향으로 형성되는 것을 알 수 있다.

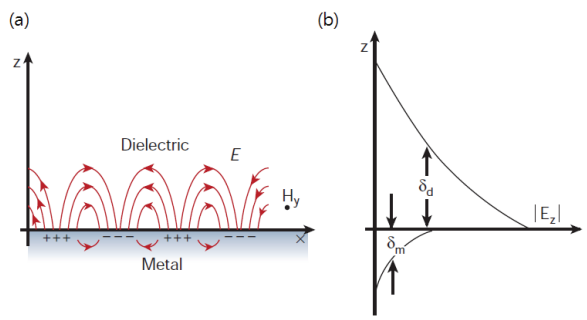

그림 2.1 (a) 유전체, 금속 경계면에서의 표면 플라즈몬 여기 현상 및 (b) 경계면 수직 방향으로의 전기장 세기 감쇄 현상 [5]

표면 플라즈몬 여기를 위한 전파상수(wave number) 값은 $k_{sp} = k_0\sqrt{\frac{\epsilon_d\epsilon_m}{\epsilon_d+\epsilon_m}}$ 으로 표현되며, 주어진 경계조건에서 맥스웰 방정식

(Maxwell equation)을 풀어서 얻을 수 있다. [5],[6] 따라서 표면 플라즈몬 여기를 위해서는 유전체의 유전율(permittivity) ϵ_d와 도체의 유전율 ϵ_m이 서로 반대의 부호를 가져야 한다. 금속 물질의 경우 ϵ_m의 실수부가 음의 값을 갖기 때문에, ϵ_d의 실수부가 양의 값을 갖는 유전체와의 경계면에서 표면 플라즈몬 여기 현상을 관찰할 수 있는 것이다.

하지만 표면 플라즈몬 전파상수 k_{sp}는 자유공간 상에서 동일 주파수를 갖는 광자의 전파상수 k_0보다 크다. 따라서 표면 플라즈몬 여기를 위해서는 표면 플라즈몬과 광자간의 위상 정합(phase matching)이 필요한데, 플라즈모닉 태양전지에서 많이 쓰이는 방법이 바로 그림 2.2와 같은 격자(grating) 금속을 이용한 위상 정합 방법이다.

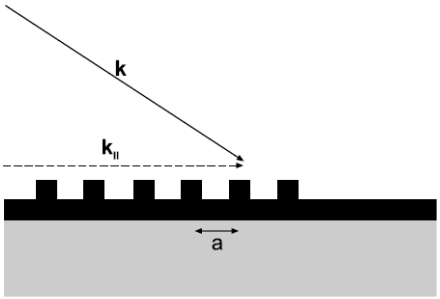

그림 2.2 격자 금속층을 이용한 위상 정합 [5]

금속층의 표면에 주기 a를 갖는 얇은 두께의 격자 구조를 만들어 주면 입사각 θ에 대하여 $k_{sp} = k_0 \sin\theta \pm \nu \frac{2\pi}{a}, \nu = 1,2,3,\cdots$ 와 같은 조건이 성립되어서, 입사된 광자와 표면 플라즈몬 여기에 필요한 운동량 어긋남(momentum mismatch)을 보정해준다. 이는 곧 금속층의 격자 주기설정값의 변화로, 표면 플라즈몬의 여기 여부를 결정할 입사광의 주파수(frequency)를 선택할 수 있다는 것을 의미한다.

2.2 표면 플라즈몬을 이용한 태양전지

격자(Grating) 금속층 표면에 입사된 빛은 플라즈몬(plasmon)으로 변환되어 수평 방향의 성분을 갖게 된다. 따라서 격자 금속을 태양전지 흡수층의 상단, 하단부에 접합하여 광경로의 증가를 통한 광흡수율의 증가를 꾀할 수 있는데, 이것이 바로 플라즈모닉 태양전지(Plasmonic Solar Cell)이다. 그림 2.3(a)는 격자 금속을 하단부에 접합하여 흡수 층에서 흡수되지 못하고 투과되는 빛을 다시 흡수 층으로 반사 또는 회절시켜서 재흡수를 가능하도록 하는 모식도를 나타낸다.[7] 그림 2.3(b)는 흡수 층 역할을 하는 비결정질 실리콘(amorphous silicon) 하부에 주기 a의 격자 구조를 갖는 격자 은(Ag)을 후면에 접합하였을 때, 파장 600-800nm 대역에서 플라즈몬 공진 주파수(plasmon resonance frequency)가 발생하여 광 흡수율이 증가하는 것을 보여준다.[8]

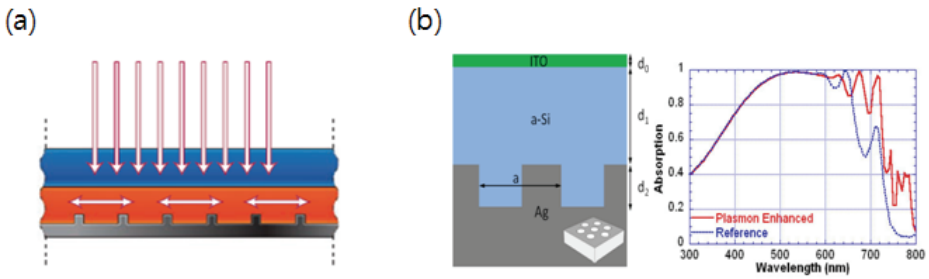

그림 2.3 (a) 후면 격자 금속층의 표면 플라즈몬에 의한 광경로 증가 모식도 [7] (b) 은 격자 구조에 의한 광흡수율 증가 현상 [8]

그림 2.4(a)는 서로 다른 밴드 갭(band gap)을 갖는 반도체 물질의 다중접합 구조의 모식도이다.[7] 가장 높은 밴드 갭 에너지를 갖는 물질을 최상층에, 가장 낮은 밴드 갭 에너지를 갖는 물질을 최하층에 배열한다. 그리고 각 층의 경계면은 서로 주기가 다른 격자 금속을 이용하여 구분

한다. 빛이 입사되면, 최상 흡수층에서 물질의 밴드 갭에 해당하는 에너지만큼 광이 흡수되고, 낮은 준위의 에너지 레벨을 갖는 광자는 바로 하단부의 흡수층에 흡수된다. 이러한 과정이 최하층까지 반복되도록 하면서 광 에너지 손실을 작게 만들 수 있다. 각 흡수층에서 흡수가 필요한 광자 주파수의 광경로를 증가시키기 위해서 각 경계면에 서로 다른 주기의 격자 금속층을 배열하면, 서로 다른 플라즈몬 공진 주파수를 갖도록 설계할 수 있다. 그림 2.4(b)는 실제로 구현한 Ga/In/As 다중접합 태양전지 구조이며, 각각의 층에서 흡수하는 밴드 영역의 스펙트럼을 볼 수 있다. [9]

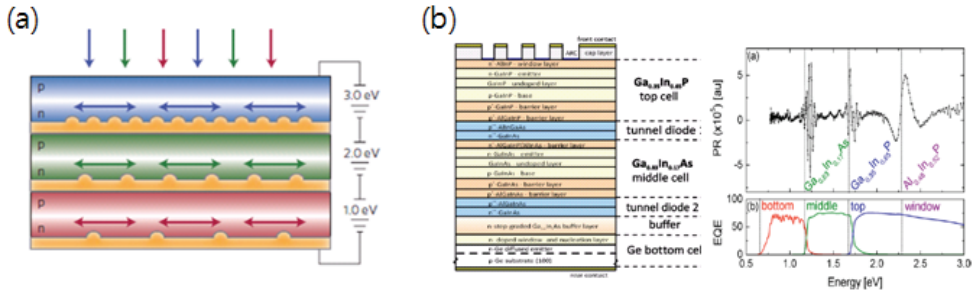

그림 2.4 (a) 플라즈모닉 다중접합 태양전지 모식도 [7], (b) Ga/In/As 다중접합 태양전지 구조 [9]

2.3 유효 매질 이론 (Effective Medium Theory)

빛이 파장 이하(subwavelength)의 주기를 갖는 구조에 입사하면, 0차항(zeroth-order)을 제외한 그 이상의 회절(diffraction) 성분은 거의 나타나지 않는다. 따라서 빛이 이방성(anisotropic) 물질에 입사하였을 때, 입사된 빛의 수직한 방향으로 유전율 ϵ_s를 갖는 물질이 f만큼, 유전율 ϵ_i를 갖는 물질이 1-f만큼 차지하고 있다고 가정하면, TM-polarized된 빛은 $\frac{1}{\epsilon_{TM}} = \frac{f}{\epsilon_s} + \frac{1-f}{\epsilon_i}$, TE-polarized된 빛은 $\epsilon_{TE} = f\epsilon_s + (1-f)\epsilon_i$와 같이 유효 유전율로 인지한다. [10],[11]

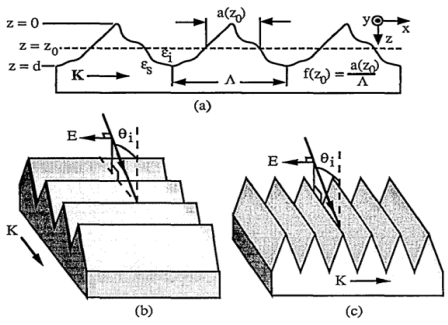

그림 2.5 (a) K벡터 방향으로 Λ의 파장이하 주기를 갖는 구조의 모식도
(b) TE-polarized, (c) TM-polarized 일 때의 경우 [10]

TM-polarized된 빛이 그림 2.6과 같은 구조에 입사된 경우, 주기의 K벡터 방향으로 전기장이 편광되어 있으므로 ϵ_i와 ϵ_s는 직렬연결된 것으로 생각할 수 있다. 따라서 전기장이 주기의 K벡터 방향으로 일정하게 걸려 있고, 유전율 ϵ_i와 ϵ_s을 갖는 축전기가 직렬 연결된 시스템이므로, 총 정전용량은 $\frac{1}{C_{total}} = \frac{1}{C_i} + \frac{1}{C_s}$으로 구할 수 있다. 이 때, $C_i = \epsilon_i \frac{S}{a}$,

$C_s = \epsilon_s \frac{S}{b}$, $C_{total} = \epsilon_{total} \frac{S}{a+b}$이고 S는 가우스 폐곡면을 의미한다. 이를 ϵ_i와 ϵ_s에 대하여 정리하면, $\frac{a+b}{\epsilon_{total}} = \frac{a}{\epsilon_i} + \frac{b}{\epsilon_s}$와 같이 표현할 수 있다. 따라서 파장 이하의 주기를 갖는 시스템에서는 빛이 ϵ_i와 ϵ_s을 유효하게 느끼므로 $\epsilon_{eff} = \epsilon_{total}$이라고 할 수 있기 때문에, 균질화(homogenization)된 시스템으로의 해석이 가능하다. TE-polarized된 빛이 입사된 경우에는 ϵ_i와 ϵ_s이 병렬연결된 시스템으로 생각할 수 있으므로, $(a+b)\epsilon_{TE} = a\epsilon_s + b\epsilon_i$으로 표현할 수 있다.

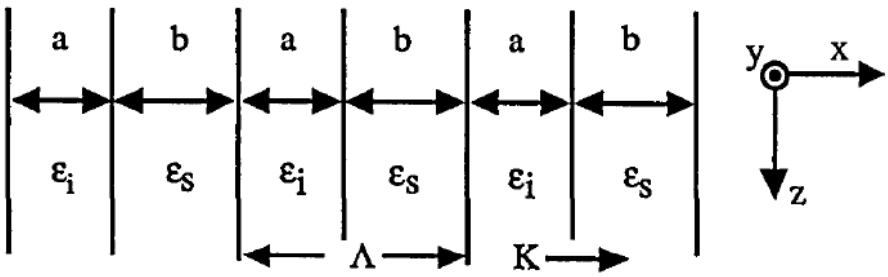

그림 2.6 ϵ_i는 a만큼, ϵ_s는 b만큼의 할당량을 갖는 주기 $\Lambda = a+b$의 격자 시스템 [11]

2.4 표피 깊이(Skin depth) 효과

전자기파가 금속층에 입사되면 그 세기가 $e^{-\frac{z}{\delta}}$로 급격하게 감소한다. 이 때, $\delta = \sqrt{\frac{1}{\pi\sigma_0\mu_0 f}}$로 표현되며 금속층 내부에서 전기장, 또는 자기장의 세기가 $\frac{1}{e}$만큼 되는 길이를 일컫는다. [12]

(σ_0는 금속의 dc conductivity, μ_0는 투자율, f는 입사된 빛의 주파수)

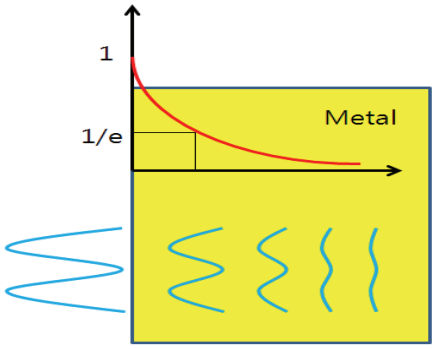

그림 2.7 표피 깊이(Skin depth) 효과 모식도

제 3 장 연구 결과

3.1 평면, V형태 구조 박막형 태양전지 전산모사

3.1.0 단원 목표

박막형 태양전지 구조의 전산 모사를 위한 구조를 규정하고, 태양전지의 광흡수 특성을 대표할 수 있는 FOM을 정의한다. 일반 평면구조와, 임피던스 매칭으로 좋은 광흡수 특성을 보일 것으로 예상되는 V형태 태양전지 구조의 광흡수 특성을, 정의한 FOM 값을 이용하여 비교 분석해 본다.

3.1.1 전산모사 구조와 방법

본 논문에서는 비결정질 실리콘 기반의 박막형 태양전지 구조를 유한요소법 기반의 2-D Comsol Multiphysics를 사용하여 수치해석적으로 분석하였다. 전산모사는 그림 3.1(a)와 같은 평면 구조, 그림 3.1(b)와 같은 V형태 구조 두 가지 종류를 기반으로 모델링하여 비교 분석하였다. 금속층에 의한 플라즈몬 여기 효과를 분석하기 위하여 TM-polarized된 입사광원을 가정하였다. 변수를 최대한 줄이기 위하여 흡수층과 반사층만 있는 구조를 택하였다. 흡수층 물질로는 비결정질 실리콘을 사용하고, 반사층 물질로는 은(Ag)을 사용하였다.

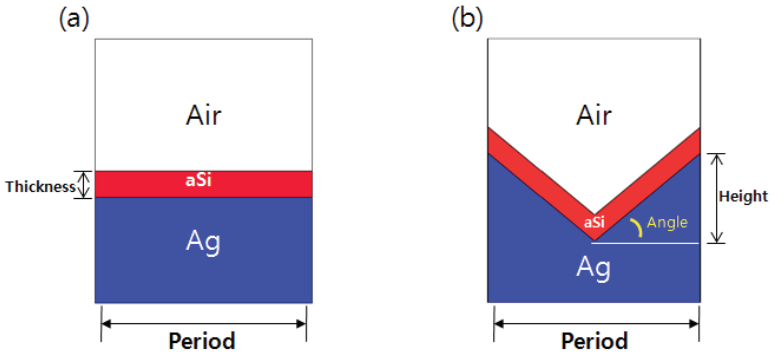

그림 3.1 (a) 전산모사를 위한 박막형 태양전지의 평면구조 및 (b) V형태 구조 (P=주기, T=흡수층 두께, H=높이, Angle=기울기 각도)

각각의 굴절률(n-i*k)과 유전율(eps1+i*eps2) 값은 그림 3.2와 같다.

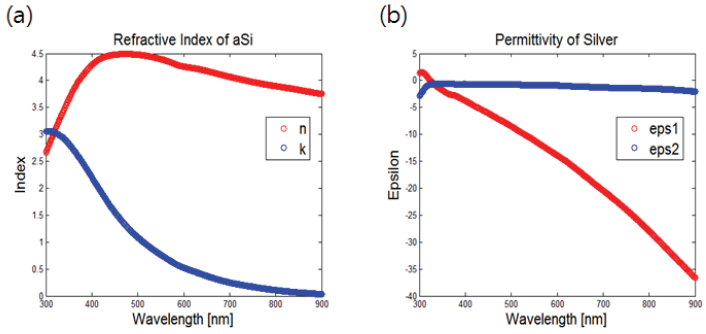

그림 3.2 (a) 비결정질 실리콘의 굴절률 및 (b) 은의 유전율 값 [14]

3.1.2 기본 가정 및 FOM 정의

태양전지의 표면으로 단위 면적당 AM1.5G의 전력밀도를 갖는 파장 λ의 빛이 입사되고, 입사된 빛 에너지의 총량은 흡수층의 광 흡수율($A(\lambda)$), 금속의 손실률($L(\lambda)$), 구조의 반사율($R(\lambda)$)의 총합 100%로 분할

됨을 가정한다. 즉, $A(\lambda)+L(\lambda)+R(\lambda)=1$ 이다. 광 흡수 매질로 사용하는 비결정질 실리콘은 밴드 갭(band gap) 이상의 에너지를 갖는 파장 대역만 흡수한다. 따라서 최대 약 900nm의 파장을 갖는 빛 에너지까지 흡수할 수 있다. 입사된 광자 1개는 한 쌍의 엑시톤(exciton)만을 발생시킨다. 밴드 갭 이상의 에너지를 갖는 광자가 흡수되면 밴드 갭만큼의 에너지를 제외한 나머지는 흡수되지 않는다. 따라서 구조의 FOM은 다음과 같이 정의할 수 있다.

$$FOM = \frac{\int_{300nm}^{900nm} \frac{I(\lambda)}{\hbar w} A(\lambda) d\lambda}{\int_{300nm}^{900nm} \frac{I(\lambda)}{\hbar w} d\lambda}$$

이 때, $A(\lambda) = \frac{P_{active}(\lambda)}{P_{AM1.5G}(\lambda)}$는 광 흡수율, $\hbar$는 플랑크 상수, w는 입사된 빛의 주파수 특성을 나타낸다. 본 논문에서 주요 결과 값으로 사용하게 되는 FOM 값은, AM1.5G의 입사광이 포함할 수 있는 총 photon flux대하여 흡수층에 여기되는 photon flux의 비율을 의미한다.

3.1.3 평면 구조의 전산모사 결과

그림 3.3(a)는 평면 구조에서의 파장, 비결정질 실리콘 두께에 따른 광 흡수율($A(\lambda)$)의 변화를 나타낸다. Fabry-Perot 공진 효과에 의하여, 동일 파장에서 흡수층의 두께 변화에 따라 광 흡수율($A(\lambda)$)의 최대값과 최소값이 주기적으로 나타나는 현상을 볼 수 있다. 그림 3.3(b)는 앞서 정의한 FOM 값을 비결정질 실리콘 두께변화에 따라서 도시한 그래프이다. 흡수층의 두께가 커질수록 광흡수율이 점진적으로 증가하는 것이 아니라, 주기적인 공진 양상을 갖고, FOM=0.6 값에 수렴해가는 것을 확인

할 수 있다. 따라서 평면 구조의 태양전지에서 얻을 수 있는 최대 photon flux는 60% 정도인 것을 알 수 있다. 하지만 비결정질 실리콘의 소수 반송자 확산 길이(minority carrier diffusion length)가 약 300nm이므로,[13] 실제 제작을 통해 얻을 수 있는 FOM 값은 이보다 더 낮다고 할 수 있다.

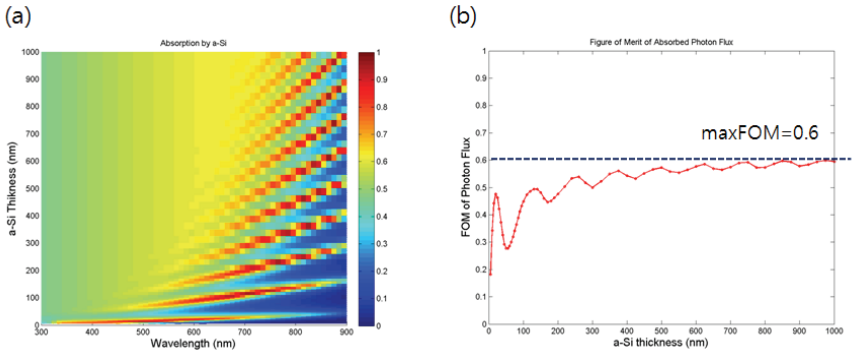

그림 3.3 (a) 비결정질 실리콘의 두께 파장의 변화에 따른 광흡수 효율 변화
(b) 두께 증가에 따른 최대 광흡수 경향성 및 수렴 특성

3.1.4 V형태 구조의 전산모사 결과

그림 3.4는 일정한 주기 P에 대하여, V형태 금속층의 기울기 각도(Angle)의 변화[0-83도]와, 증착되는 비결정질 실리콘의 두께 T의 변화[20nm-300nm]에 따른 FOM 값을 도시한 그림이다. 큰 경향성을 보았을 때, 주기 P=20nm-200nm인 구조와, P=400nm-2000nm인 구조로 크게 두 그룹을 지어서 생각해볼 수 있다. 전자 그룹의 경우, 두께 T와 기울기 각도 Angle이 커질수록 FOM 값이 증가한다. 약 70도 이상의 기울기 각도에서 높은 FOM 값을 얻을 수 있다. 반면 후자 그룹의 경우, FOM 값이 최대가 되는 구조가 주기적인 양상으로 나타난다. 약 63도와 80도의

기울기 각도에서 FOM 값이 최대가 됨을 알 수 있다.

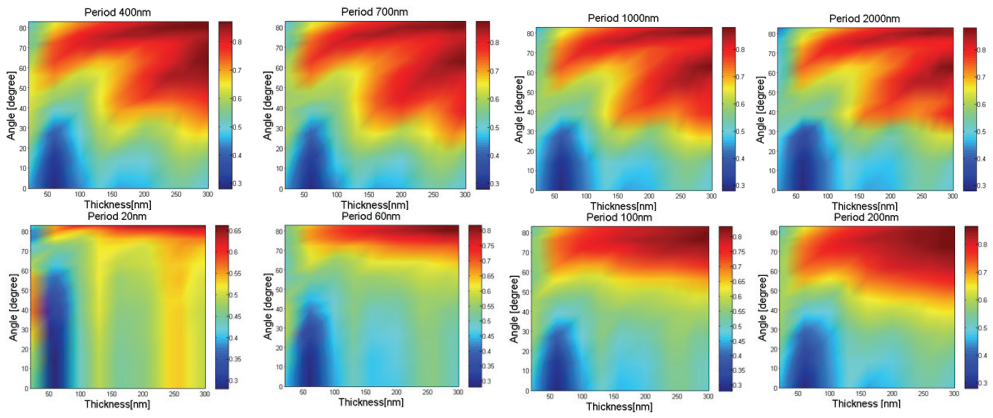

그림 3.4 V형태 구조의 주기를 고정시켰을 때, V와 지면이 이루는 각도와 두께의 변화에 따른 FOM 특성

그림 3.5(a)는 주기 P의 변화에 따라 나타나는 FOM의 최대값을 나타낸 그래프이다. 눈여겨볼 점은, 주기 P=200nm를 기점으로 하여 그 이상의 주기에서 얻을 수 있는 최대 FOM 값은 0.85이상으로 상당히 크게 나타났다는 것이다. 하지만 주기 P=200nm이상에서는 주기가 아무리 증가해도 최대 FOM 값은 0.9이하로 수렴한다. 그럼에도 불구하고, 평면구조에서 얻을 수 있는 최대 FOM 값 0.6에 비교하여서는 매우 좋은 값을 얻을 수 있다는 것을 알 수 있다. 그림 3.5(b)는 FOM 값이 최대로 나타나는 기울기 각도의 최소값을 나타낸 그래프이다. 주기 P=400nm를 기점으로 하여 그 이상의 주기에서는 약 63도로 수렴하고, 그 이하의 주기에서는 각도가 커질수록 최대 FOM 값도 함께 증가하는 경향성을 보인다. 특히 주기 P=200nm이하에서 그 경향성이 뚜렷하게 보인다.

따라서 주기 P=400nm이상의 영역은 기하광학으로 근사되는 영역으로,

입사된 빛의 구조 내부로의 표면반사 횟수 $N_{\max} = \frac{\pi - \theta_i + \alpha}{2\alpha}$($\theta_i$: 빛의 입사각, α : substrate normal에 대한 각도)에 영향을 받아 약 63도의 기울기 각도에서 광 경로의 증가가 최대가 된다. 반면 주기 P=200nm이하의 영역은 나노광학으로 근사되는 영역으로, 유효 매질 이론에 근거한 반사방지(antireflection) 효과에 영향을 받는 것으로 해석할 수 있다. 즉, 기울기 각도가 커질수록 굴절률 변화의 굴곡이 완만해지기 때문에 FOM 값이 증가하게 된다. 한편, 주기 200nm-400nm인 영역은 기하광학과 나노광학의 현상이 동시에 나타나는 영역으로 해석할 수 있다.

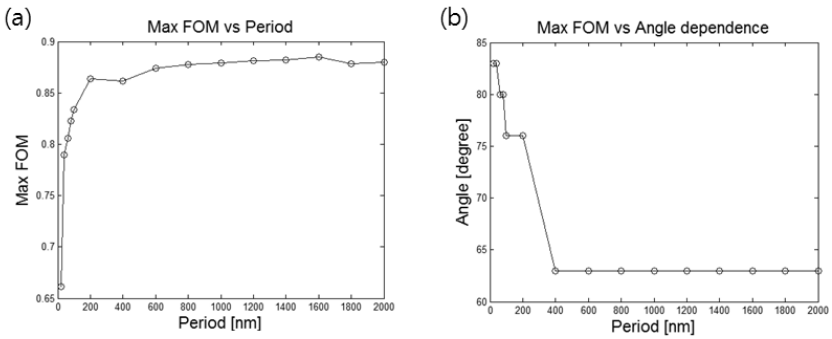

그림 3.5 (a) V형태 구조 태양전지에서 주기 변화에 따라 얻을 수 있는 최대 FOM 값 및 (b) 그 때의 기울기 각도

3.1.5 단원 요약

태양전지의 특성을 나타내는 지표인 FOM 값을 정의하고, 구조의 광흡수 및 photon flux 정도를 비교해볼 수 있다. 흡수층과 금속층을 V형태 모양으로 배열하면 주기 200nm이상에서 85%이상의 높은 FOM 값을 얻을 수 있었고, FOM 값이 최대로 발생하는 구조의 주기 및 각도를 분석함으로써, 기하광학과 나노광학 특성이 나타나는 경계를 예측할 수 있다.

3.2 유효 매질 이론(Effective Medium Theory)을 이용한 박막형 태양전지의 광흡수 특성 분석

3.2.0 단원 목표

높은 광흡수율을 얻을 수 있는 태양전지 구조의 설계를 목표로, 반사방지(antireflection) 관련 연구에서 주로 사용되는 유효 매질 이론(Effective Medium Theory)을, [15] 금속층이 포함된 V형태 태양전지 구조에 적용하여 흡수 및 반사 특성의 해석을 시도하여 본다. 유효 유전율 값을 계산하여 모델링하고, 실제 구조에서의 광흡수 특성과의 상관관계 및 그 한계를 알아본다.

3.2.1 기준 구조 선정 및 특성 분석

본 단원에서는 3.1단원에서의 전산모사 결과를 토대로 유효 매질 이론을 기반으로 구조를 광학적으로 모델링하겠다. 파장보다 주기가 작은 반사방지(antireflection) 해석 영역으로 근사가 가능하면서, 적은 두께로 재료를 최대한 적게 쓸 수 있고, 0.85이상의 높은 FOM 값을 얻을 수 있는 주기 P=200nm, T=260nm 구조를 기준 구조로 선정하였다.

그림 3.6은 기준 구조의 기울기 각도 변화에 따른 광 흡수율($A(\lambda)$), 금속 손실률($L(\lambda)$), 구조 반사율($R(\lambda)$)을 주어진 파장 λ의 변화에 따라서 도시한 그래프이다. 기울기 각도가 60도 이상이 되면 공기층과 흡수층의 임피던스 매칭(impedance matching)이 매우 잘 이루어지기 때문에, 단파장 영역에서의 광 흡수율($A(\lambda)$)은 거의 100%가 된다. 장파장 영역에서도 역시 임피던스 매칭이 잘 이루어져서 반사율($R(\lambda)$)은 거의 0%로 나

타나지만, 은으로 인한 금속의 손실률($L(\lambda)$)이 크게 발생하기 때문에 광 흡수율($A(\lambda)$)은 상대적으로 작게 나타난다. 반면, 기울기 각도가 60도 이하인 구조에서는 금속의 손실률($L(\lambda)$이 거의 0%로 나타나지만, 반사율($R(\lambda)$)이 높아서 광 흡수율($A(\lambda)$)은 상당히 작은 값으로 나타난다.

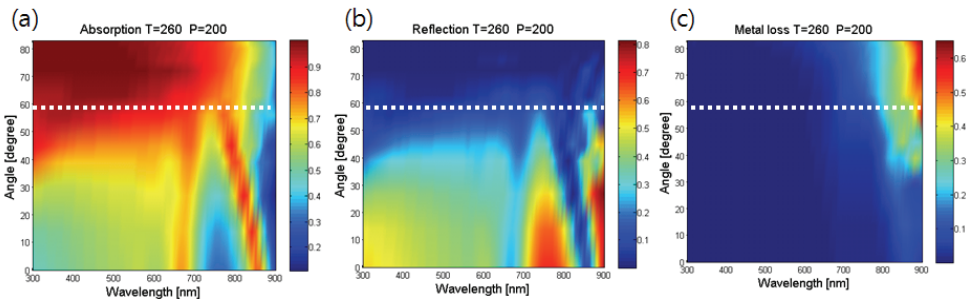

그림 3.6 기준구조의 기울기 각도, 파장 변화에 따른 (a) 광흡수율($A(\lambda)$), (b) 구조 반사율($R(\lambda)$), (c) 금속 손실률($R(\lambda)$), 기울기 각도 60도의 기준선(흰 점선)

Angle(기울기 각도)	단파장 영역	장파장 영역
60도 이상	$R(\lambda)$=0, $A(\lambda)$=1, $L(\lambda)$=0	$R(\lambda)$=0, $A(\lambda)$+ $L(\lambda)$=1
60도 이하	$L(\lambda)$=0, $A(\lambda)$+ $R(\lambda)$=1	$L(\lambda)$=0, $A(\lambda)$+ $R(\lambda)$=1

표1. V형태 구조의 기울기 각도와 입사광 파장의 변화에 따른 광흡수 특성

기울기 각도 73도를 갖는 그림 3.7(a)의 경우, 굴절률이 연속적으로 변하기 때문에 Fabry-Perot 공진 효과에 거의 영향을 받지 않고, 그림 3.7(b)의 경우에는 굴절률의 불연속점이 발생하기 때문에, Fabry-Perot 공진 효과에 큰 영향을 받는 것으로 예상할 수 있다.

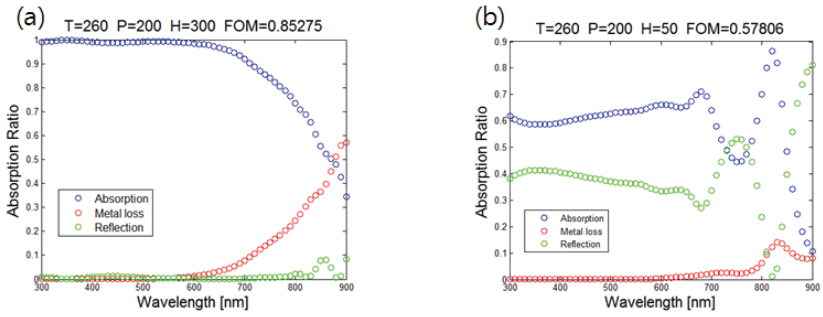

그림 3.7 (a) 기울기 각도=73도인 기준 구조, (b) 기울기 각도=26도인 기준 구조에서의 파장에 따른 광 흡수율($A(\lambda)$), 구조 반사율($R(\lambda)$), 금속 손실률($R(\lambda)$)

3.2.2 유효 매질 이론을 이용한 유효 유전율 값 계산

0차항(zeroth-order)의 유효 매질 이론(Effective Medium Theory) 모델을 이용하여 그림 3.7(a) 구조의 유효 유전율 값을 계산하였다. TM-polarized된 입사광에 의한 유효 유전율은 $\frac{1}{\epsilon_{TM}} = \frac{f}{\epsilon_s} + \frac{1-f}{\epsilon_i}$ 으로 표현할 수 있다. 이 때, f는 ϵ_s 매질의 주기 대비 공간 차지 정도를 나타낸다. 그림 3.8은 V형태 기준 구조를 3개의 각기 다른 유효 유전율 층을 갖는 구조로 근사할 수 있는 것을 보여준다.

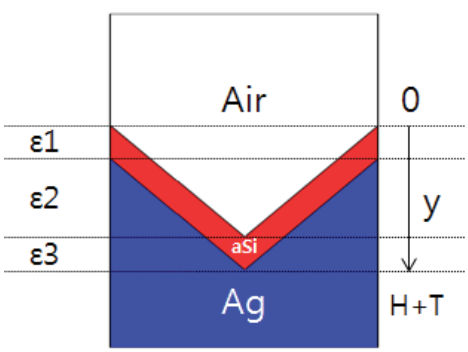

그림 3.8 V형태 기준 구조와 3층을 갖는 유효 유전율 구조와의 대응

TM-polarized 광원이 구조에 수직 입사하는 것을 가정했을 때, 진행 방향에 평행하게 y축을 설정하면 각 층의 유효 유전율 값은 아래의 식과 같이 표현할 수 있다.

$$\frac{1}{\epsilon_1}=\frac{1}{\epsilon_{air+aSi}}=\frac{1-\frac{y}{H}}{\epsilon_{air}}+\frac{\frac{y}{H}}{\epsilon_{aSi}} \quad \cdots ①$$

$$\frac{1}{\epsilon_2}=\frac{1}{\epsilon_{air+aSi+ag}}=\frac{1-\frac{y}{H}}{\epsilon_{air}}+\frac{\frac{T}{H}}{\epsilon_{aSi}}+\frac{\frac{y-T}{H}}{\epsilon_{ag}} \quad \cdots ②$$

$$\frac{1}{\epsilon_3}=\frac{1}{\epsilon_{aSi+ag}}=\frac{1-\frac{y-T}{H}}{\epsilon_{aSi}}+\frac{\frac{y-T}{H}}{\epsilon_{ag}} \quad \cdots ③$$

위의 식을 이용하여 그림 3.7(a) P=200nm, T=260nm, H=300nm 구조와 그림 3.7(b) P=200nm, T=260nm, H=50nm 구조를 세 개의 층으로 모델링하여 광흡수 특성을 조사하고, 전산모사 구조의 결과와 비교해볼 수 있다. 그림 3.9의 (a)와 (b)는 유효 유전율을 모델링한 구조의 광흡수 특성을, (c)와 (d)는 전산모사 구조의 광흡수 특성을 나타낸다. 유효 유전율 모델링 구조의 특성상, 비결정질 실리콘과 은의 총 흡수율($A(\lambda)+L(\lambda)$)과 구조 반사율$R(\lambda)$의 두 가지 독립된 정보를 얻을 수 있다.

H=300nm, H=50nm인 두 가지 구조를 비교해보았을 때, 전자의 경우보다 후자의 경우에 더 큰 오차가 발생한 것을 알 수 있다. 사실, 해석의 기준 구조로 삼은 주기 P=200nm을 갖는 구조는 입사 파장 λ (300nm-900nm)에 대하여 파장 이하(subwavelength) 근사에 적용하기에는 다소 애매한 크기이다. 하지만 H=300nm 구조의 경우, 구조 반사율 $R(\lambda)$이 거의 0%에 가깝게 나타나면서 구조 내부에서의 주기 구조에 의한 0차항(zeroth order)및 그 이상의 고차항(higher order) 성분을 갖는

회절(diffraction) 성분이 거의 나타나지 않게 된다. 따라서 고차항 회절 성분을 고려하지 않아도, 0차항(zeroth-order)의 유효 매질 이론(Effective Medium Theory) 모델에 의한 근사가 잘 적용이 되는 것이다. 반면 H=50nm 구조의 경우에는 반사 성분이 크기 때문에, 0차항 이상의 회절 성분도 고려하여 계산한 고차항(higher-order)의 유효 매질 이론 모델을 적용하면 좀 더 낮은 오차율의 근사가 가능할 것으로 예상된다.

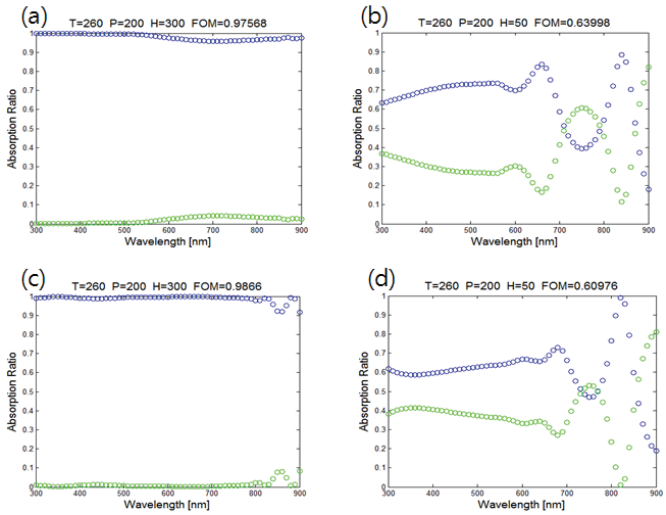

그림 3.9 T=260nm, P=200nm일 때, (a) H=300nm, (b) H=50nm인 유효 유전율 근사 구조, (c) H=300nm, (d) H=50nm인 전산모사 구조의 광흡수(파랑) 및 반사(초록) 특성

3.2.3 유효 유전율 전이 현상을 이용한 광흡수 특성 분석

그림 3.10는 파장 λ=300nm, 660nm, 900nm일 때 유효 유전율 $\epsilon_{eff} = \epsilon_1 + i\epsilon_2$ 값의 실수부와 허수부를 나타내고, 그림 3.11은 계산된 유효 유전율 값을 이용하여 모델링한 3층 구조의 유효매질 모델에서 나타

나는 광흡수 패턴이다. 그림 3.12는 전산모사 구조에서 파장에 따른 광흡수율의 시간에 대한 평균값을 나타낸다. Air+aSi 최상층과 Air+aSi+Ag의 중간층의 유효 유전율 값이 연속적인 형태를 나타내며, 임피던스 매칭(impedance matching)이 잘 이루어진 것을 알 수 있다. aSi+Ag가 이루는 최하층에서는 순간적인 ϵ_1값의 전이가 일어난다. 특히 이 구간에서 ϵ_2값은 매우 큰 값으로, 대부분의 흡수가 이 구간에서 일어날 것으로 예상할 수 있다. λ=300nm일 때의 ϵ_2값을 미루어보면, 최상층으로부터의 거리 d=300nm인 부근에서 가장 많은 흡수가 일어날 것으로 예측할 수 있는데, 그림 3.11에서 예측 것과 같은 결과를 확인할 수 있고, 그림 3.12(a)에 나타난 광흡수 패턴으로도 그 경향성을 확인할 수 있다. λ=660nm일 때에는 ϵ_1 값은 d=400nm 부근에서 값이 급격히 음의 부호로 작아지면서 높은 반사를 낼 수 있는 모드가 순간적으로 형성된다. ϵ_2값으로 미루어보아 d=300nm-400nm 부근에서 많은 광흡수율을 가질 것으로 예상되는데, 그림 11과 그림 3.12(b)에서 예측된 것과 같은 결과를 확인할 수 있다. λ=900nm일 때는 ϵ_1값이 순간적으로 -400까지 떨어지면서 d=490nm인 지점에서 반사 강화 모드가 발생한다. ϵ_2값으로 미루어보아 이 부근에서 흡수율이 높을 것으로 예상할 수 있지만, 그림 3.12(c)의 광흡수 패턴을 보면 d=560nm 부근인 모서리 부근에서 실제로 가장 많은 흡수가 일어나는 것을 확인할 수 있다. 따라서 장파장 영역에서는 유효 매질 이론을 이용한 해석이 맞지 않는다는 것을 알 수 있다.

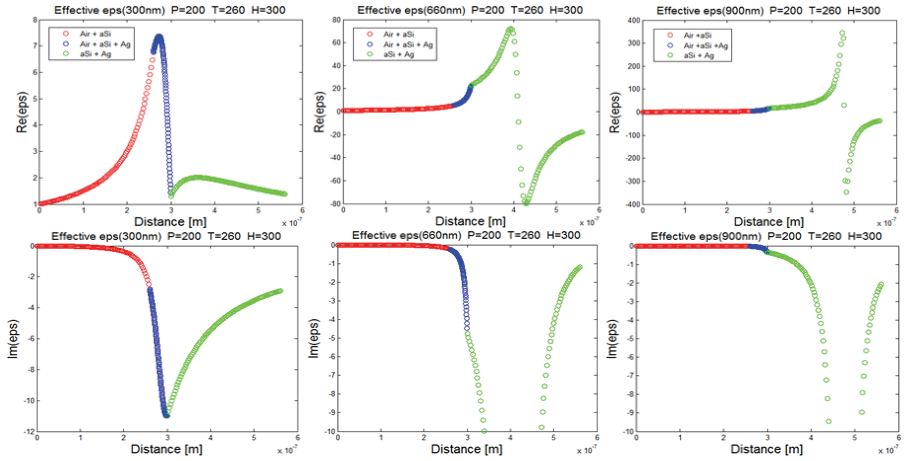

그림 3.10 기준 구조의 위치와 파장에 따른 유효 유전율 값(H=260nm)

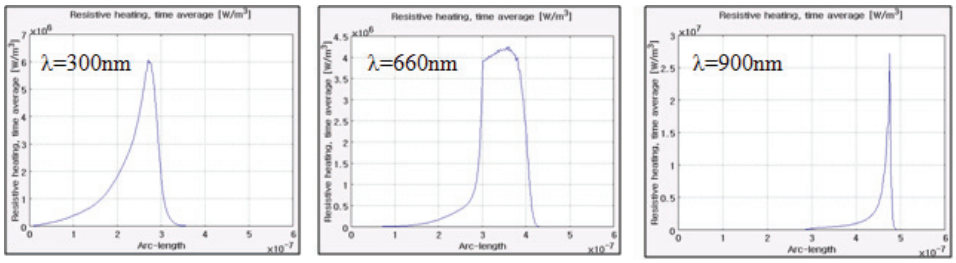

그림 3.11 유효 유전율 값으로 모델링한 구조의 시간 평균된 광흡수 정도 및 그 위치

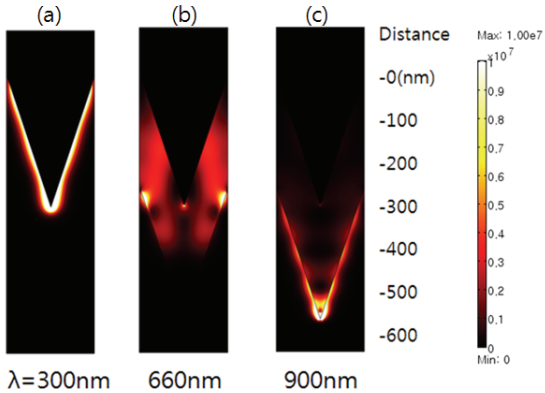

그림 3.12 전산모사 구조의 시간 평균된 광흡수 정도 및 그 위치

같은 방법으로 그림 3.7(b) 구조에서의 유효 유전율 값을 계산하여 그림 3.13에 도시하였다. 앞선 구조와 달리, 최상층과 중간층 사이에서 유전율의 불연속점이 많이 관찰된다. 따라서 임피던스 매칭이 제대로 이루어지지 않기 때문에 반사율이 크게 증가하는 것으로 예상할 수 있다. aSi+Ag 영역에서는 앞선 구조와 유사한 전이 현상을 볼 수 있다.

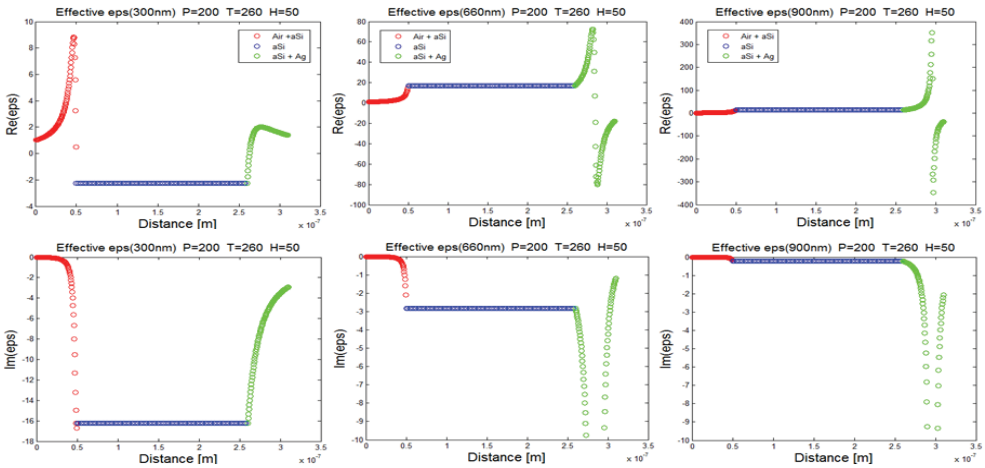

그림 3.13 기준 구조의 위치와 파장에 따른 유효 유전율 값(H=50nm)

3.2.4 단원 요약

그림 3.7(a)은 $R(\lambda)$=0, $A(\lambda)$+$L(\lambda)$=1, 그림 3.7(b)은 $L(\lambda)$=0, $A(\lambda)$+$R(\lambda)$=1인 관계식을 갖는 구조를 나타낸다. 각 구조의 특징을 정리하면 다음과 같다. 전자는 유효 유전율 값이 연속성을 갖는다는 것, aSi+Ag 영역의 전이 영역이 긴 거리에 걸쳐서 일어난다는 것, 그리고 후자는 유효 유전율 값이 불연속성을 갖는다는 것, aSi+Ag 영역의 전이 영역이 짧은 거리에 걸쳐서 일어난다는 것이다. 따라서 유효 유전율의 연속성은 $R(\lambda)$=0을 의미하고, aSi+Ag 영역의 전이 영역이 짧은 거리에 걸쳐서 일어

나는 특성은 $L(\lambda)$=0을 의미한다. 이와 같은 결론은 구조의 광흡수율($A(\lambda)$) 값의 개선에 있어서 매우 중요한 단서가 된다. 하지만 λ=900nm 일 때, 유효 유전율을 이용한 광흡수 패턴의 예측이 전산모사 결과와 맞지 않았는데, 이는 다음 장에서 다루어보도록 한다.

조건	특징	결과
$R(\lambda)$=0	유전율의 연속성	$R(\lambda)$=0 $A(\lambda)$+$L(\lambda)$=1
	흡수층, 금속층의 유전율 전이 영역이 넓게 나타남	$L(\lambda)$>0
$L(\lambda)$=0	유전율의 불연속성	$R(\lambda)$>0
	흡수층, 금속층의 유전율 전이 영역이 좁게 나타남	$L(\lambda)$=0 $A(\lambda)$+$R(\lambda)$=1

표2. 구조의 반사율($R(\lambda)$)=0 일 때와 금속 손실률($L(\lambda)$)=0 일 때의 유효 유전율 값과 광흡수율의 특징

3.3 금속층의 투과 깊이(Penetration depth) 효과를 고려한 수정된 유효 매질 모델 제안

3.3.0 단원 목표

기존의 유효 매질 이론을 이용한 금속층이 포함된 V형태 구조 태양전지의 광흡수 패턴에 대한 해석에는 장파장 영역에서 부정확하게 나타났다. 따라서 장파장 영역에서의 광흡수 특성을 유효 유전율 값으로 정확하게 모델링하기 위하여, 금속의 투과 깊이(penetration depth) 효과를 고려하여 계산하고 그 정확성을 알아본다.

3.3.1 금속층의 투과 깊이(penetration depth) 효과

금속층에 빛이 입사할 경우, 표피 깊이(skin depth) 효과에 의하여 투과 깊이(penetration depth)가 결정된다. 따라서 투과 깊이 이상으로는 빛의 투과율이 0에 수렴하므로, 입사된 빛은 고유의 투과 깊이 이상의 금속 매질을 인지하지 못한다. 따라서 금속층이 포함된 파장 이하(subwavelength) 구조를 유효 유전율 모델로 근사하기 위해서는 금속의 투과 깊이를 고려하여 유효 유전율을 계산해야한다.

그림 3.14(a)는 빛의 투과율을 구하기 위한 전산모사 구조이고, 그림 3.14(b)는 파장과 금속층의 두께 변화와 그에 따른 빛의 투과율을 도시한 그래프이다. 파장 λ=750nm 이하의 빛은 금속을 거의 투과하지 못하고 비결정질 실리콘에 흡수되거나, 금속층의 두께 20nm 미만의 표면 영역에서 흡수된다는 것을 예상할 수 있다. 반면 λ=750nm 이상의 빛은 k 값이 작은 재료의 특성상 비결정질 실리콘에 거의 흡수되지 못하고, 금

속층으로 향하는 양이 많기 때문에 금속의 투과 깊이까지 입사광이 전파된다. 따라서 금속의 투과 깊이 이하의 층에서 흡수가 크게 발생하게 되고, 금속 손실률($L(\lambda)$) 값이 커지게 된다.

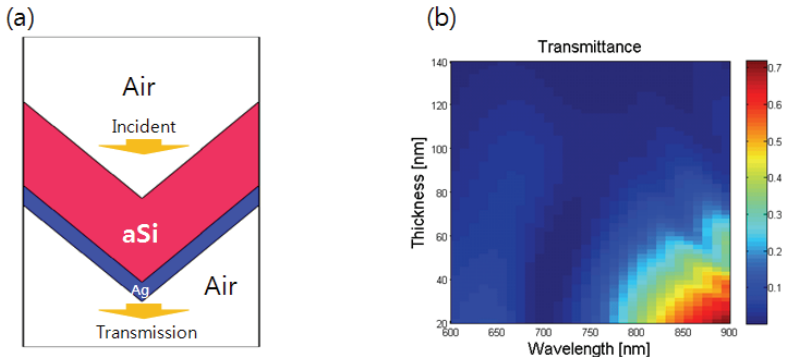

그림 3.14 (a) 금속층 두께에 따른 입사광의 투과정도를 알아보기 위한 전산모사 구조 (b) 금속층 두께 변화와 파장의 변화에 따른 투과정도

3.3.2 투과 깊이(Penetration depth)효과를 고려한 유효 유전율 계산

장파장 영역에서의 금속 손실률 ($L(\lambda)$)이 발생하는 원인 및 그 영역을 정확히 알기 위해서는 각 파장에서의 투과 깊이(penetration depth)를 고려하여 유효 매질 이론을 적용해야한다. 그림 3.15는 금속층의 투과 깊이 효과를 고려하였을 때, 빛이 V형태 구조의 내부로 진행하면서 유효하게 느낄 수 있는 길이(effective length)가 줄어드는 것을 보여준다.

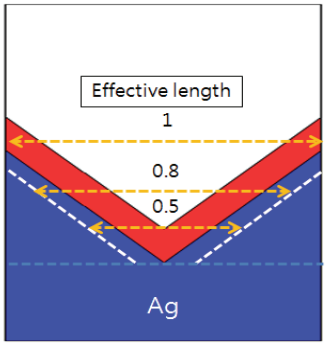

그림 3.15 금속층의 penetration depth를 고려하였을 때의
입사광의 effective length의 변화

따라서 투과 깊이(penetration depth)를 고려한 유효 유전율의 계산 값은 다음과 같다.

$$\frac{1}{\epsilon_{air+aSi}} = \frac{1-\frac{y}{H}}{\epsilon_{air}} + \frac{\frac{y}{H}}{\epsilon_{aSi}} \quad \text{... ① EMT 모델과}$$

$$\frac{1}{\epsilon_{air+aSi+ag}} = \frac{1-\frac{y}{H}}{\epsilon_{air}} + \frac{\frac{T}{H}}{\epsilon_{aSi}} + \frac{\frac{y-T}{H}}{\epsilon_{ag}} \quad \text{... ② EMT 모델과 동일}$$

$$\frac{1}{\epsilon_{aSi+ag}} = \frac{\frac{P}{H}(H+T-y)}{\frac{l_{total}}{\epsilon_{aSi}}} + \frac{\frac{2(L_x)}{l_{total}}}{\epsilon_{ag}} \quad \text{... ③ 투과 깊이(penetration depth) 고려한 수정된 모델}$$

(where $L_x = \frac{P}{2H}(y-T), \quad \text{if } L_{pene\,depth} > \frac{P}{2H}(y-T)$)

$= L_{pene\,depth}, \quad \text{if } L_{pene\,depth} \le \frac{P}{2H}(y-T)$

투과 깊이(penetration depth)는 투과율이 25%미만이 되는 두께로 정의

하였으며, 그림 3.14(b)의 데이터를 토대로 파장 λ=800nm, 850nm, 900nm 일 때의 $L_{pene\,depth}$= 34nm, 50nm, 60nm로 구하여 수정된 유효 매질 모델에 대입하여 계산하였다. 그림 3.16는 위에서 구한 식을 이용하여 파장 λ=800nm, 850nm, 900nm에서의 유효 유전율 값을 계산한 결과이다. 그림 3.17 유효 유전율 값으로 모델링한 구조의 시간 평균된 광흡수 정도 및 그 위치를 도시한 결과이고, 그림 3.18은 전산모사 구조에서 각각의 파장에서 나타나는 광 흡수율의 시간에 대한 평균값을 나타낸다. 장파장 영역에서의 투과 깊이를 고려한 유효 매질 모델을 구현한 결과, 이 수정된 모델은 거리 d=520nm-560nm 영역에서 강한 광흡수가 일어나는 것을 정확히 설명할 수 있다. d=540nm부근에서 매우 짧은 거리에 걸쳐 ϵ_1과 ϵ_2의 순간적인 전이가 일어나며 반사 및 흡수 강화 모드가 발생하게 된다. 유전율 전이가 일어나는 경계면에서 반사율이 매우 크게 나타나지만, ϵ_2의 값이 상당이 크기 때문에 강한 흡수가 일어나는 것으로 해석할 수 있다.

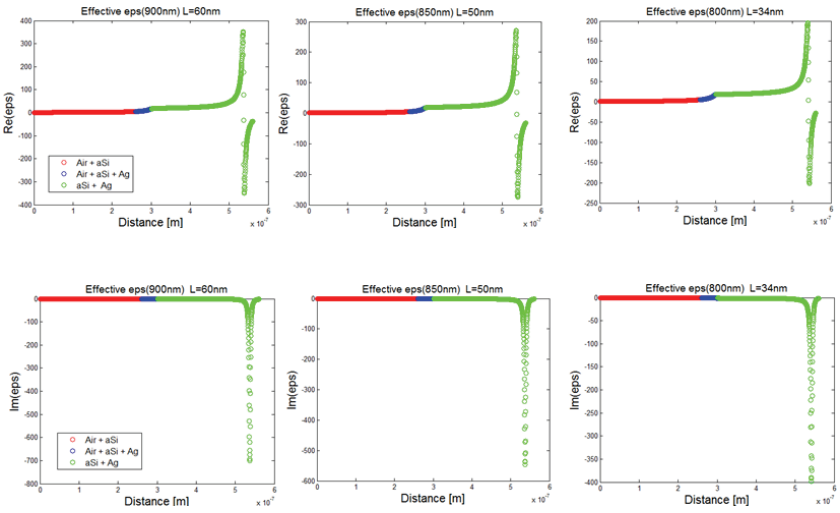

그림 3.16 Penetration depth를 고려한 장파장 영역에서의 유효 유전율 값, L은 각각의 파장에서의 penetration depth

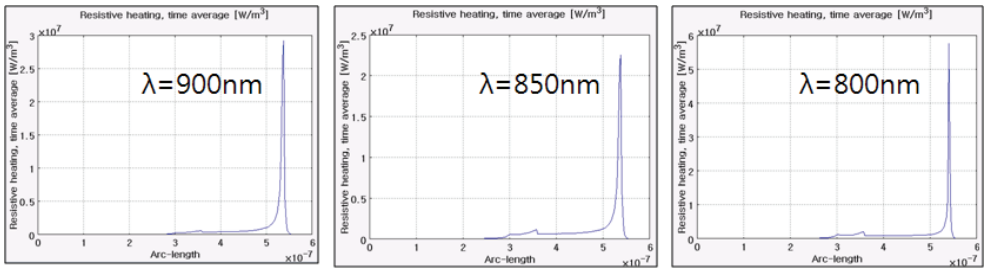

그림 3.17 유효 유전율 값으로 모델링한 구조의 시간 평균된 광흡수 정도 및 그 위치

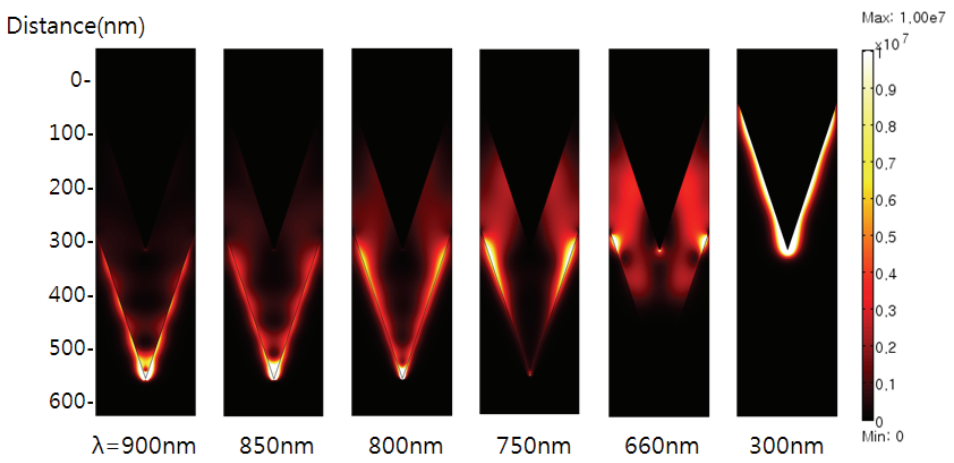

그림 3.18 각각의 파장에서 나타나는 광흡수율의 시간에 대한 평균값

3.3.3 단원 요약

유효 매질 이론(Effective Medium Theory)을 적용하여 금속층이 포함된 파장 이하(subwavelength) 구조를 갖는 태양전지의 광흡수 특성을 분석하면, 장파장 대역에서는 일치하지 않는 결과를 보여주었다. 왜냐하면, 빛이 금속을 투과할 수 있는 길이에는 한계가 있기 때문에 빛이 유

효하게 느낄 수 있는 금속층의 두께는 한계가 있기 때문이다. 파장 λ =750nm 이하의 대역의 빛은 금속층을 투과하기 전에 흡수층에 대부분이 흡수되지만, 그 이상의 파장 값을 갖는 장파장 대역의 빛은 흡수층에 머무는 시간보다 금속층에 머무는 시간이 더 길기 때문에 금속의 파장별 투과 깊이(penetration depth)를 고려하여 유효 매질 이론 모델을 수정해야한다. 수정된 모델을 적용하면, 단파장 영역뿐만 아니라 장파장 영역의 광흡수 특성도 정확히 해석할 수 있다.

3.4 수정된 유효 매질 모델 기반의 향상된 광흡수율 얻을 수 있는 구조의 제안

3.4.0 단원 목표

앞선 단원까지에서의 분석에 사용한 V형태 박막형 태양전지 구조는 임피던스 매칭(impedance matching)이 전 파장대역에서 이루어져서 구조 반사율 $R(\lambda)$=0에 수렴하는 특징을 갖는다. 하지만 흡수층과 반사층이 서로 임피던스 매칭된 구조의 특성으로 말미암아 흡수층의 k값이 작은 장파장 영역의 경우, k값이 큰 반사층에 흡수되어 많은 손실이 발생한다. 따라서 투과 깊이(penetration depth)를 고려한 모델을 기반으로 하여 금속 손실률($L(\lambda)$)을 줄이고 장파장에서 광 흡수율($A(\lambda)$)을 높일 수 있는 방법을 모색해본다.

3.4.1 금속층의 모서리를 제거한 구조

금속층의 모서리를 제거함으로써 기대되는 효과는, 광학적 관점과 유효 유전율 관점의 두 가지 관점에서 생각해볼 수 있다. 광학적 관점에서 보면, 안테나 효과 및 강한 플라즈몬 여기에 의한 금속층의 모서리에 강한 전기장이 집속되는 현상을 완화하여 금속 손실률($L(\lambda)$)을 줄일 수 있다. 표2에서 얻은 결론을 참고하여 유효 유전율 관점에서 보면, 흡수층과 금속층에 의해 나타나는 유전율의 전이 영역을 좁게 만들 수 있기 때문에 금속 손실률($L(\lambda)$)을 줄일 수 있다. 그림 3.19(a)는 금속층의 모서리를 없앤 전산모사 구조이다. 그림 3.19(b)는 투과 깊이(penetration depth)를 고려하여 계산된 유효 유전율 값을 나타내며, 앞서 유효 유전율의 관점

에서 예상한 바와 같이, V형태 구조에 비하여 금속층의 유전율 전이 영역이 좁게 나타나는 것을 보여준다. 이 효과로 인하여 그림 3.19(c)에서 볼 수 있듯이 금속 손실률($L(\lambda)$)가 크게 감소한 것을 알 수 있다. 하지만 흡수층의 k값이 너무 작기 때문에 광흡수율($A(\lambda)$)로 전환되는 비율보다 구조 반사율($R(\lambda)$)로 전환되는 비율이 높아지는 부작용이 발생했지만, FOM 값은 0.8749로 V형태 구조에 비해 약 3% 증가된 결과를 보여준다.

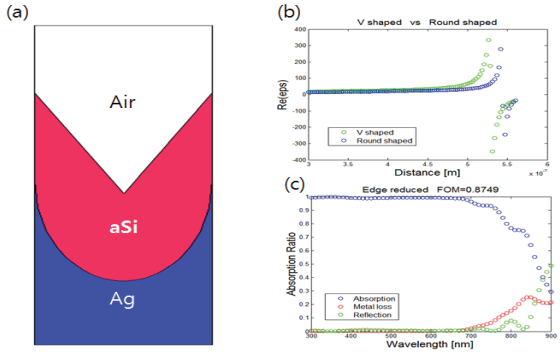

그림 3.19 (a) 금속 모서리를 제거한 전산모사 구조 (b) penetration depth를 고려하여 계산된 유효 유전율 값 (c) 제안된 구조의 광흡수율, 금속 손실률, 구조 반사율

3.4.2 투과 특성을 포함한 다중접합 구조의 설계

3.4.2-1 투과 특성 도입의 필요성

앞선 결과에서 볼 수 있듯이, λ=800nm-900nm의 장파장 대역에서 비결정질 실리콘의 k값이 매우 작기 때문에 금속층의 도움 없이는 효율을 증가시키기가 쉽지가 않다. 따라서 금속 손실률($L(\lambda)$)과 구조 반사율($R(\lambda)$)은 다음과 같은 관계를 따른다.

$L(\lambda)\times R(\lambda)=f(\lambda)$, (f는 λ에 의존하는 임의의 함수)
$f(\lambda)$의 의존성을 줄이기 위하여, $A(\lambda)+L(\lambda)+R(\lambda)=1$의 방정식에 투과율을 나타내는 변수 $T(\lambda)$를 추가하면 $L(\lambda)\times R(\lambda)=f(\lambda)$식의 변형을 꾀할 수 있고, 따라서 $A(\lambda)+L(\lambda)+R(\lambda)+T(\lambda)=1$인 새로운 모델을 도출할 수 있다. 이 모델은 곧 다중접합 구조를 의미한다.

3.4.2-2 유전율 설계

기존의 3층 유효 매질 시스템에서, 4층과 5층의 유효 매질을 추가한다. 4층은 고유물질을 갖는 흡수층으로, 5층은 유전율 전이 현상이 짧은 순간에 나타날 수 있도록 흡수층과 금속층의 유효 매질로 설정한다.

$$\frac{1}{\epsilon_4}=\frac{1}{\epsilon_{aSi}} \qquad \text{..... 4층}$$

$$\frac{1}{\epsilon_5}=\frac{1-\frac{L_x}{l_{total}}}{\epsilon_{aSi}}+\frac{\frac{L_x}{l_{total}}}{\epsilon_{ag}} \qquad \text{..... 5층}$$

여기서, L_x는 빛이 금속층을 유효하게 느끼는 길이, l_{total}는 유효하게 느끼는 주기 할당량을 의미한다. 그림3-20은 파장 λ=900nm에서 위의 식으로 설계한 구조의 유효 유전율 값을 나타낸다. 초록색은 기존에 구현된 1, 2, 3층을, 빨간색은 고유물질을 갖는 흡수층을 의미하는 4층을, 그리고 파란색은 유전율 전이 현상이 나타나는 유효 매질층인 5층을 의미한다. 1, 2, 3층 구조만 있을 때에는 장파장 대역의 전기장 및 자기장이 금속 모서리에서 여기되는 플라즈몬 모드 및 유전율 전이 현상으로 발생하는 3층 최하단의 유전율 전이 모드 때문에 금속 손실률($L(\lambda)$)이 상당히 크

게 발생하지만, 4층을 추가함으로써 표면 플라즈몬에 의한 금속 손실률($L(\lambda)$)성분이 투과율 성분($T(\lambda)$)으로 전환될 수 있다. 따라서 4층의 두께를 잘 조절하여 최적화한다면, 투과된 성분을 5층 하단의 유전율 전이 모드와 3층 하단의 유전율 전이 모드 사이에서 공진하도록 하여 Fabry-Perot 공진 효과에 의한 광흡수 효율 향상도 기대할 수 있다.

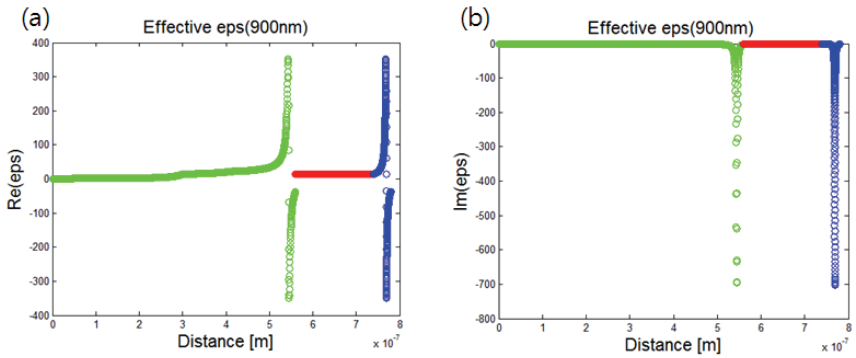

그림 3.20 (a) 설계된 유효 유전율의 실수부 및 (b) 허수부

3.4.2-3 구조 설계 및 효율 검증

3.4.1에서 제안한 유효 유전율 값을 토대로 총 다섯 층의 유효 매질층을 갖는 이중접합구조를 설계하였다. 4층은 180nm 두께의 비결정질 실리콘, 5층은 40nm두께의 비결정질 실리콘과 은의 혼합층으로 구현하였다. 그 결과, 그림 3.18에서와 같이 200nm 주기의 구조의 한계를 넘어서 FOM 값 0.8925를 달성하였다. 이 값은 수 마이크로미터의 주기 이상을 갖는 V형태 구조가 가질 수 있는 최대 FOM 값의 한계를 넘은 값이다. 그림 3.19는 제안된 전산모사 구조에서의 시간 평균된 광흡수 패턴으로, 장파장의 입사광에 대하여 비결정질 실리콘의 접합 부분에서 발생한 플라즈몬 모드가 하단부의 흡수층으로 상당량 여기되어서 공진 모드를 형성하

고 있는 것을 나타낸다.

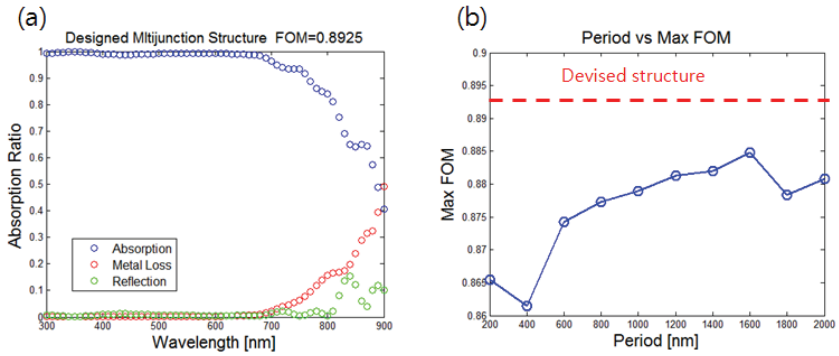

그림 3.21 (a) 제안된 구조의 FOM 값 및 광 흡수율, 금속 손실률, 구조 반사율, (b) 주기 증가에 따른 V형태 구조에서의 최대 FOM 값과, 제안된 구조의 FOM 값 비교

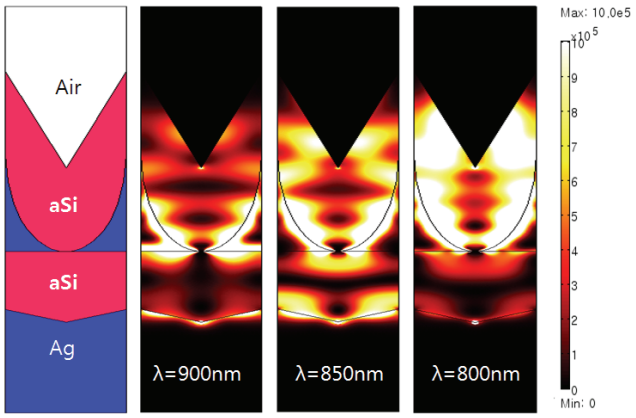

그림 3.22 전산 모사 구조 및 장파장 대역에서 파장의 변화에 따른 시간 평균된 광흡수 패턴

제 4장 결론

박막형 태양전지 구조의 전산 모사를 위한 구조를 규정하고, 태양전지의 광흡수 특성을 대표할 수 있는 FOM을 정의하면 서로 다른 구조를 갖는 태양전지 구조의 광 흡수 특성을 쉽게 비교할 수 있다. 특히 흡수층과 금속층을 V형태로 평행하게 배열한 구조에서는 FOM 값이 최대로 발생할 때의 주기 및 각도를 분석함으로써, 기하광학과 나노광학 특성이 나타나는 경계를 예측할 수 있다.

반사방지(Antireflection) 관련 연구에서 주로 사용되는 유효 매질 이론을 금속층이 포함된 V형태 태양전지 구조에 적용하여 유효 유전율 값을 모델링하면 750nm 이하의 파장대역에서의 흡수 특성을 쉽게 분석할 수 있다. 금속의 penetration depth를 고려하여 모델을 수정하면 금속 투과성이 강한 750nm 이상의 파장대역에서의 흡수 특성 또한 해석이 가능하다.

$R(\lambda)$=0의 특성을 나타내는 V형태 구조와 $L(\lambda)$=0인 특성을 나타내는 평면 구조를 분석하면, 유효 유전율의 연속성은 $R(\lambda)$=0을 가능하게 하고, aSi+Ag 층의 짧은 유효 유전율 전이 영역은 $L(\lambda)$=0을 가능하게 할 수 있다. 하지만 유효 유전율이 전이영역이 긴 구조를 짧게 갖도록 재모델링하면 금속의 손실률 ($L(\lambda)$)은 줄일 수 있지만, 흡수층의 낮은 k값 때문에 광흡수율 ($A(\lambda)$)의 증가에는 한계가 있다. 따라서 구조 반사율 ($R(\lambda)$)값으로 상당부분 변환 된다. $L(\lambda)\times R(\lambda)=f(\lambda)$와 같이 금속 손실률과 반사율이 상당한 의존성을 갖고 있기 때문에 새로운 변수의 도입으로 둘의 관계식을 깰 수 있다. 투과율 ($T(\lambda)$) 변수의 도입으로 다중접합 구조를 설계하여 V형태 구조의 한계를 넘는 FOM 값을 얻을 수 있다.

참고문헌

[1] Seung-Bum Rim1, Shanbin Zhao2, Shawn R. Scully2, Michael D. McGehee2, and Peter Peumans1, "An effective light trapping configuration for thin-film solar cells", Appl. Phys. Lett. 91, 243501, 2007.

[2] Yuerui Lu and Amit Lal* "High-Efficiency Ordered Silicon Nano-Conical-Frustum Array Solar Cells by Self-Powered Parallel Electron Lithography", *Nano Lett.*, 2010, *10* (11), pp 4651–4656

[3] Jia Zhu, Shanhui Fan† and Yi Cui, "Optical Absorption Enhancement in Amorphous Silicon Nanowire and Nanocone Arrays", *Nano Lett.*, 2009, *9* (1), pp 279–282

[4] J Zhu, CM Hsu, Z Yu, S Fan, "Nanodome Solar Cells with Efficient Light Management and Self-Cleaning", Nano Lett., 2010, 10 (6), pp 1979–1984

[5] S. A. Maier, Plasmonics: Fundamentals and Applications (Springer, 2007)

[6] W. L. Barnes, A. Dereux, and T. W. Ebbesen, "Surface plasmon subwavelength optics", Nature 424, 824-830, 2003.

[7] Harry A. Atwater and Albert Polman, "Plasmonics for improved photovoltaic devices", Vol9 March 2010, Nature materials

[8] Akimov, Y. A.; Koh, W. S.; Ostrikov, K. *Opt. Express* 2009, 17

[9] E C novas, DF Marr n, A Mart , A Luque, “Photoreflectance analysis of a GaInP/GaInAs/Ge multijunction solar cell”, Applied Physics, 2010.

[10] Daniel H. Raguin and G. Michael Morris, “Analysis of antireflection-structured surfaces with continuous one-dimensional surface profiles”, Applied Optics, Vol. 32, No. 14, 10 May 1993.

[11] D. Raguin and G. M. Morris, "Antireflection structured surfaces for the infrared spectral region," Appl. Opt. 32, 1154-1167, 1993.

[12] Ramo, S., J. R. Whinnery, and T. Van Duzer. “Fields and Waves in Communication Electronics”. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1965.

[13] Street, R. A. *Hydrogenated Amorphous Silicon* Cambridge University Press: Cambridge, 1991.

[14] D. Y. Smith, E. Shiles, and M. Inokuti, in Handbook of Optical Constants of Solids, edited by E. D. Palik (Academic, New York, 1985)

[15] Daniel Poitras and J. A. Dobrowolski, “Toward Perfect Antireflection Coatings. 2. Theory”, Applied Optics, Vol. 43, Issue 6, pp. 1286-1295, 2004.

Abstract

A process of solar cells to get efficiency can be roughly divided into two steps. First step is light absorption by a structure, and second step is process to convert photons from absorbed light sources to electrons. For the first step to maximize light absorption efficiency, it is important to design a structure to make incident light sources propagating from surface to inside the structure by using optical properties of materials. For the second step to enhance photon to electron conversion efficiency, it is important to design energy level system of junctions which makes electron-hole pairs from photons propagate to electrodes by using semiconducting properties of materials. However, to do the second step research, since it depends on the results of the first step research, we have to redefine a research direction. Therefore it is important to pre-define a structure which can get high light absorption efficiency to set general research direction of solar cells. Recent trends show that researches to design a structure with enhanced light absorption efficiency are great importance of solar cells' research topics. However, quantitative methods based research like list fragments have been mostly done.

In this paper, we focus on a light absorption problem from an optical point of view, analyse and prove mechanism of absorption and loss based on qualitative methods. We use amorphous silicon in active layer, and silver in reflecting layer to enhance light propagation length in the suggested structure by the effects of reflection and

surface plasmon polaritons. This type of solar cells is called thin film plasmonic solar cells, candidate of third generation solar cells. We design V shaped subwavelength periodic structure, and apply effective medium theory to analyse the structure. To analyse precisely, we correct that theory with considering penetration depth of metallic layer, and analyse mechanism of absorption, reflection, and metallic loss. At the end, we seek methods which can enhance light absorption to the active layer of solar cells by reducing reflection and metallic loss properties of the structure.

Key words : Plasmonic Solar Cells, Light absorption, Metallic loss, Effective Medium Theory, Effective permittivity, Impedance matching
Student Number : 2010-23248