

金属光栅和光子晶体背反射提升硅薄膜 太阳能电池光吸收的研究

何孝金 刘敏 张姚姚 刘雪芹

重庆理工大学光电信息学院, 重庆 400054

摘要 陷光是改善太阳能电池光吸收进而提高其效率的关键技术之一。利用时域有限差分(FDTD)数值模拟方法,系统地研究了以金属铝光栅、反蛋白石结构三维光子晶体(3D PC)以及光子晶体和金属光栅叠层分别作为硅薄膜太阳能电池的背反射结构对电池光吸收的影响。结果表明,金属光栅背反射主要增强太阳能电池对红外波长范围的光吸收。当金属光栅的周期为 700 nm、高度为 100 nm 和占空比为 0.7 时,太阳能电池较金属铝背反射器参考电池对 750~1200 nm 波段的光平均吸收率增强了 45.4%。用于硅薄膜太阳能电池背反射结构的反蛋白石结构 3D PC,其最佳结构参数是空气介质球半径为 150 nm 和层数为 2。相对金属铝背反射器,这种 3D PC 背反射结构,对硅薄膜太阳能电池在 750~1200 nm 范围的光吸收平均增加了 34.8%。叠层背反射结构太阳能电池对 300~1200 nm 全波段具有最优的光吸收增强效果,相对金属铝背反射结构光吸收平均增加了 32%,优于单独使用金属光栅或者光子晶体的效果。由于金属光栅和光子晶体良好的反射特性,透射光被反射回太阳能电池吸收层进行二次或多次吸收,增强了硅薄膜太阳能电池的吸收效率。

关键词 光栅;太阳能电池;陷光技术;金属光栅;光子晶体

中图分类号 O436 **文献标识码** A

doi: 10.3788/LOP53.050501

Study on Improving Light Absorption of Si Thin-Film Solar Cells with Metal Grating and Photonic Crystals back Reflectors

He Xiaojin Liu Min Zhang Yaoyao Liu Xueqin

School of Optoelectronic Information, Chongqing University of Technology, Chongqing 400054, China

Abstract Light trapping is one of the key issues to improve the light absorption and increase the efficiency of solar cells. The absorption of Si thin film solar cells with different structures of back reflector, such as metal Al grating, inverse opal structure three dimension photonic crystal (3D PC) and their combination are systematically researched by utilizing finite difference time domain (FDTD) method. The results show that metal grating back reflector can mainly enhance the absorption of infrared light for solar cells. When the metal grating with the structural parameters of period is 700 nm, height is 100 nm, and duty cycle is 0.7, the average absorption rate of the solar cells in wavelength range of 750~1200 nm can be improved by 45.4% via replacing metal Al back reflector. For Si thin-film solar cells with inverse opal structure 3D PC the back reflector, the optimal structural parameters of air medium sphere are that the air medium sphere radius is 150 nm and the number of layers is 2. Compared to the metal Al back reflector, the average absorption rate of solar cells with 3D PC in wavelength range of 750~1200 nm can be improved a relative amount of 34.8%. Solar cells with combined structure back reflector has the best light absorption in wavelength range of 300~1200 nm. Compared to the metal Al back reflector, the average absorption rate can be improved a relative amount of 32%, which is better than metal grating or 3D PC. Due to the excellent reflection characteristics of metal grating and photonic crystals, the transmitted light is reflected back to absorbing

收稿日期: 2015-10-11; **收到修改稿日期:** 2015-12-07; **网络出版日期:** 2016-03-29

基金项目: 重庆市基础与前沿研究计划项目(cstc2015jcyjA50033)

作者简介: 何孝金(1991—),男,硕士研究生,主要从事新能源材料与器件方面的研究。E-mail:1173682133@qq.com

导师简介: 刘雪芹(1971—),男,博士,教授,主要从事新能源材料与器件方面的研究。E-mail:xqliu@cqut.edu.cn (通信

联系人)

layer, so that it can be absorbed two or more times. So the absorption efficiency of Si thin-film solar cells can be improved greatly.

Key words gratings; solar cells; light trapping technology; metal grating; photonic crystal

OCIS codes 050.2770; 050.5298; 350.6050

1 引言

硅薄膜太阳能电池由于原料储量丰富、生产技术成熟而具有潜在的应用前景。由于硅是间接带隙半导体材料,对整个太阳光谱整体吸收相对较弱。因此,对于厚度不超过 $10\ \mu\text{m}$ 的薄膜太阳能电池,通过优化电池中的陷光结构、改善光吸收来提高效率,成为各类高效薄膜电池研究的主要技术^[1-2]。目前电池中主要的陷光技术有减反膜、表面织构化、背反射器、表面等离子激元、光子晶体和光栅^[3-8]等。减反膜、表面织构化和金属背反射是基于几何光学原理的传统陷光机制,在各类太阳能电池中已经得到广泛应用。减反膜技术基于薄膜干涉原理在电池前表面制备光学厚度为吸收中心波长 $1/4$ 的薄膜来减少反射损失^[3,9]。表面织构化是在电池前表面制备一层厚度 $10\ \mu\text{m}$ 左右的绒面结构利用光的折射和散射来增强电池的光吸收(不适用于吸收层厚度仅几微米的薄膜电池)^[4,10]。电池后表面的背反射器能够将到达电池底部的光反射回电池内进行二次或多次吸收^[11-12]。

近年来,基于波动光学原理的光栅和光子晶体等新型微纳陷光结构因具有优越的光学性能,在太阳能电池领域受到了广泛关注^[13-14]。相比于传统的金属铝背反射结构,光栅背反射结构因具有衍射和散射效应而能显著提升电池的光吸收^[15-16]。光子晶体的光子禁带特性使能量处于禁带范围内的光不能在晶体中传播,用作太阳能电池的背反射器能在某些特定波段产生 100% 的反射^[17-18]。本文设计了分别以金属铝光栅、反蛋白石结构三维光子晶体(3D PC)以及光子晶体和金属光栅叠层结构分别作为 $4\ \mu\text{m}$ 吸收层厚度的硅薄膜太阳能电池的背反射结构,采用时域有限差分(FDTD)数值模拟方法,系统地研究了三种背反射陷光结构对太阳能电池光吸收的影响。结果表明,相比于金属铝背反射器,三种背反射陷光结构能较大程度地增强太阳能电池的光吸收能力。金属光栅带来的吸收增强主要集中在红外光区域;3D PC 则对硅薄膜太阳能电池在整个光谱内的吸收都有较明显的增强作用,在蓝紫光和红外光区域效果相对更加显著。光子晶体和金属光栅叠层结构则集合了各自的优势使电池不仅对红外光的吸收明显增强,还对整个光谱的吸收带来了显著提升。

2 陷光结构与数值模拟方法

图 1 为具有不同背反射陷光结构的硅薄膜太阳能电池二维模型示意图,其中背反射陷光结构分别为金属铝、金属铝光栅、反蛋白石结构 3D PC 以及光子晶体和金属光栅叠层结构。各种陷光结构相应的太阳能电池吸收层硅材料的厚度均设定为 $4\ \mu\text{m}$,减反射涂层(AR)的厚度均为 $150\ \text{nm}$ (中心波长 $600\ \text{nm}$ 的 $1/4$)、折射率均为 1.87(空气与硅材料折射率的等比中项)。以图 1(a)中金属铝背反射器太阳能电池模型作为参考电池。图 1(b)中金属铝光栅结构是由横截面为矩形的纳米柱周期性排列而成,其中纳米柱横截面的高度 H 取值范围为 $50\sim 500\ \text{nm}$,占空比($D=a/b$)从 0.1 到 0.9,相邻两纳米柱之间的距离 b 即光栅周期 P 从 100 到 $1000\ \text{nm}$ 。图 1(c)中反蛋白石结构 3D PC 是在二氧化硅材料中嵌入数层介电常数为 1 空气介质小球,小球的半径 R 以 $50\ \text{nm}$ 的步长从 $50\ \text{nm}$ 增加到 $500\ \text{nm}$,层数 L 由 1 变化到 10。图 1(d)中将光子晶体和金属光栅叠层作为电池的背反射结构。通过在数值仿真过程中改变金属光栅、光子晶体以及光子晶体和金属光栅叠层等各项重要结构参数,模拟其作为硅薄膜太阳能电池的背反射较传统金属铝背反射对太阳能电池光吸收的影响。

利用基于 FDTD 的 MEEP 软件包严格求解麦克斯韦方程组来模拟太阳能电池的光吸收。FDTD 法是基于时域电磁场微分方程的数值算法,直接在时域上将麦克斯韦旋度方程作二阶精度的中心差分近似,从而将时域微分方程的求解转换为差分方程的迭代求解,被广泛运用于电磁场和电磁波运动规律及运动过程的计算机模拟中。其基本原理^[19]是将一个单位原胞划分成许多网格小状,将麦克斯韦方程组的空间微分项和时间微分项化为差分的形式。在这种差分格式中,每个网格上的电场(磁场)分量仅与它相邻的磁场(电场)分量及上一时间步该点的电场(磁场)有关,当给定初始条件和边界条件时,每一时间步计算网格空间格点的电

场或磁场分量,随着时间步的推算,就能直接模拟电磁波的传播及其与物体的相互作用过程。MEEP是由麻省理工学院开发的一款能够实现FDTD算法的实用共享软件包^[20]。在仿真过程中使用真实的材料模型(包括材料的介电常数、电导率、各向异性或非线性等性质),结合FDTD法的基本原理准确模拟光(电磁波)在光栅、光子晶体等结构中的传播。

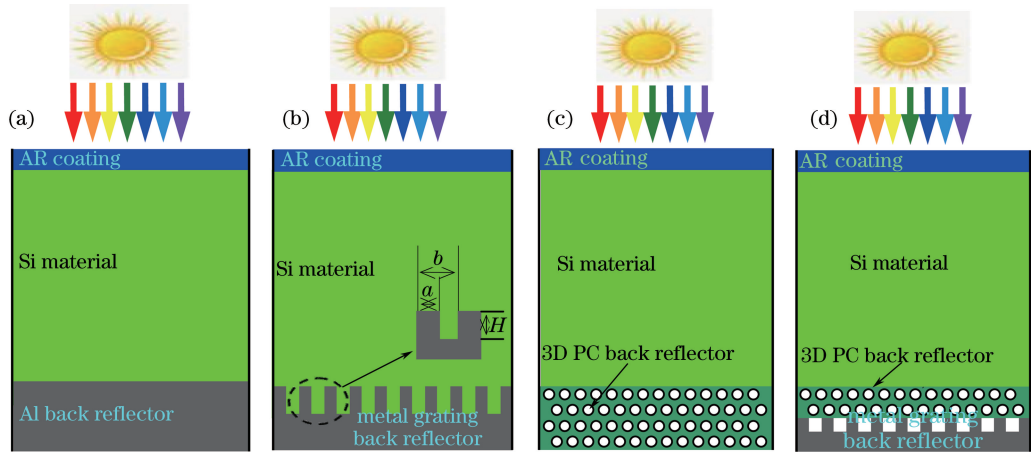


图1 不同背反射结构硅薄膜太阳能电池的二维模型示意图。

(a) 金属背反射; (b) 金属光栅背反射; (c) 光子晶体背反射; (d) 光子晶体+金属光栅背反射

Fig. 1 Two-dimensional model schematic of Si thin-film solar cell with different back reflector structures.

(a) Metal back reflector; (b) metal grating back reflector;

(c) photonic crystals back reflector; (d) photonic crystals+metal grating back reflector

3 结果与讨论

3.1 金属光栅结构的优化

光栅是基于多缝衍射原理使光发生色散,将相同入射条件下的不同波长的光,散射到不同方向的光学元器件。作为硅薄膜太阳能电池的背反射结构,金属铝光栅的三个重要参数周期 P 、高度 H 和占空比 D 的变化对太阳能电池的光吸收影响很大。只有当其各项参数与太阳电池结构良好匹配时,光栅才能在太阳电池中展现更好的陷光效果。图2给出了当 $H=100\text{ nm}$ 、 $D=0.7$ 时,不同周期 P 下的金属光栅背反射结构硅薄膜太阳能电池的吸收光谱图。从图中可以明显看出,当光栅周期 $P=700\text{ nm}$ 时,太阳电池对整个光谱的整体吸收情况较参考电池增强最明显,在波长大于 750 nm 的红外光区域这一提升更加显著。当 $P=700\text{ nm}$ 、 $D=0.7$ 时,图3(a)中显示了太阳电池对波长范围为 $750\sim 1200\text{ nm}$ 和 $300\sim 1200\text{ nm}$ 的光平均吸收率随光栅高度 H 的变化,当 $H=100\text{ nm}$ 时,太阳电池对两个波段范围内光平均吸收率最大,即电池对整个光谱的吸收效果最好。当 $P=700\text{ nm}$ 、 $H=100\text{ nm}$ 时,图3(b)中显示了太阳电池对波长范围为 $750\sim 1200\text{ nm}$ 和 $300\sim 1200\text{ nm}$ 的光平均吸收率随光栅占空比的变化图,可以看出电池在两个波段范围内光平均吸收率随着 D 的增大而增加,当 $D>0.5$ 后变化趋于平缓,在 $D=0.7$ 时出现两个比较明显的峰值。

金属光栅给太阳电池带来的光吸收提升主要集中在波长大于 750 nm 的红外光范围内。当光栅参数取 $P=700\text{ nm}$ 、 $H=100\text{ nm}$ 和 $D=0.7$ 时,提升最为显著,太阳电池在 $750\sim 1200\text{ nm}$ 波长范围内光的平均吸收率相比于金属铝背反射结构增强了 45.4% ,在 $300\sim 1200\text{ nm}$ 全光谱范围增加了 17.6% 。薄膜电池的厚度通常很薄,因此光子极易透过,尤其在红光和近红外波段,不能充分吸收入射光。金属光栅作为太阳能电池的背反射结构,能够显著提高太阳能电池的吸收效率,主要是因为这种陷光结构能将入射光子束缚在电池内,延长光子在电池内的传播路径,使其得到充分吸收。一方面光栅能够通过其衍射和散射效应将光以更广的角度和更高的反射率反射回太阳电池内部进行二次或多次吸收;另一方面由于背反射光栅的金属纳米周期性结构,在界面处会激发表面等离子激元效应,能够将纵向入射的光耦合成横向传播的光,有效提高了光子的传播长度,从而增强了太阳能电池的光吸收能力^[21]。

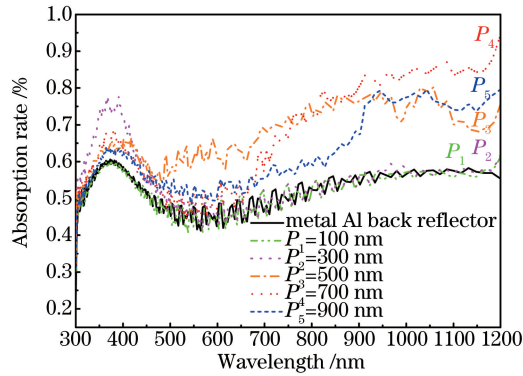
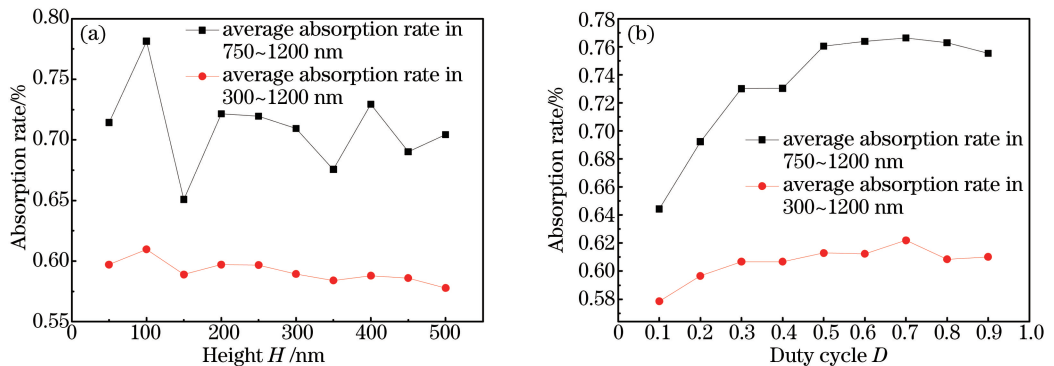


图2 不同周期下的金属光栅背反射结构硅薄膜太阳能电池的光吸收图

Fig. 2 Light absorption figure of Si thin-film solar cell using metal grating back reflector with different periods

图3 (a) 光平均吸收率随 H 的变化; (b) 光平均吸收率随占空比 D 的变化Fig. 3 (a) Average light absorption rate varies with H ; (b) average light absorption rate varies with D

3.2 光子晶体结构的优化

光子晶体由两种具有不同介电常数的电介质材料,在空间中按一定的周期排列形成,如同半导体一样具有能带结构,其根本特征是在电介质层表面出现布拉格散射,产生光子带隙,能量位于带隙中的光子不能传播。由于其优越的光学特性,光子晶体在太阳能电池中的应用受到了广泛关注,尤其是一维光子晶体,人们对其用于太阳能电池背反射结构进行了深入研究。3D PC 具有全方位的带隙,本文研究了 3D PC 用作硅薄膜太阳能电池的背反射器的陷光效应。

将在二氧化硅材料中填充介电常数为 1 的空气介质球而形成的反蛋白石结构 3D PC 作为硅薄膜太阳能电池的背反射器,通过在仿真过程中模拟空气介质球的层数 L 和半径 R 的变化对太阳能电池光吸收的影响,探索具有最佳陷光效果的 3D PC 结构参数。图 4 给出了 3D PC 背反射结构中空气介质球具有不同半径 R 的硅薄膜太阳能电池的光吸收变化(空气介质球的层数 $L=2$)。可以明显看出,空气介质球的半径变化对电池光吸收影响很大,当半径 $R=150$ nm 时,太阳能电池的吸收相对于金属铝背反射结构参考电池提升幅度最大。当 $R=150$ nm 时,太阳能电池对 750~1200 nm 和 300~1200 nm 光谱范围的平均吸收率随填充空气介质球的层数 L 的变化如图 5 所示,从图中可以看出,当 $L=2$ 时,太阳能电池具有最优吸收率。

综上,用于硅薄膜太阳能电池背反射结构的反蛋白石结构 3D PC,其最佳结构参数是空气介质球半径 $R=150$ nm 和层数 $L=2$ 。相对金属铝背反射器,这种 3D PC 背反射结构,对硅薄膜太阳能电池在 300~1200 nm 全光谱范围的光吸收平均率增加了 30.5%,而对薄膜硅电池重要的 750~1200 nm 近红外波段,平均吸收率增加了 34.8%。这是因为透过硅薄膜太阳能电池吸收层的长波光子,受到光子晶体带隙,强反射特性影响,透射光被反射回太阳能电池吸收层进行二次或多次吸收,增强了太阳能电池的光吸收。在模拟结果中发现,在 750~1200 nm 近红外波段光子晶体的引入对太阳能电池吸收增强相对比较明显,光子晶体的优化带隙当位于近红外波段时,有利于太阳能电池对太阳光谱的全面利用。

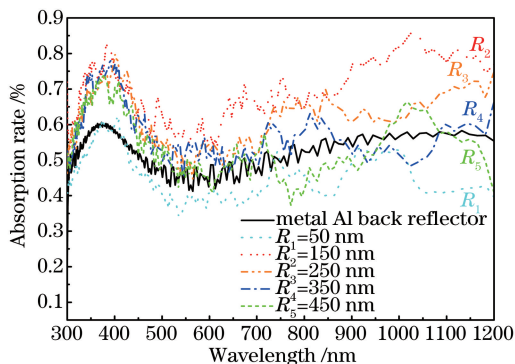
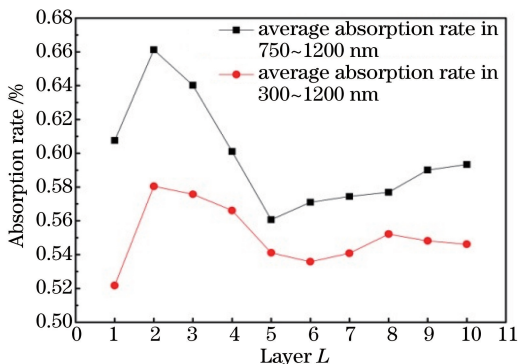


图 4 不同半径下 3D PC 背反射结构硅薄膜太阳能电池的光吸收图

Fig. 4 Light absorption figure of Si thin-film solar cell using 3D PC back reflector with different radius

图 5 光平均吸收率随 L 的变化图Fig. 5 Average light absorption rate varies with L

3.3 光子晶体和金属光栅叠层结构的优化

如前所述,反蛋白石结构 3D PC 和金属光栅背反射结构都能明显增强硅薄膜太阳能电池的吸收能力。为了进一步提高穿过薄膜电池吸收层的透射光的反射率,增强硅薄膜电池的陷光效果,将光子晶体和金属光栅两种结构组合在一起形成叠层,作为太阳能电池的复合背反射结构。

仿真中不断调整光子晶体和金属光栅叠层结构参数,研究了硅薄膜太阳能电池在 300~1200 nm 光谱范围内的光吸收。结果表明,在叠层复合背反射结构中,当光子晶体的 $L=2$ 、 $R=150$ nm 和金属光栅的 $P=700$ nm、 $H=700$ nm、 $D=0.7$ 时,太阳能电池的光吸收效果最为理想。对比单独使用金属光栅和光子晶体,叠层背反射结构具有最优吸收效果的结构参数,发现光栅 H 发生了变化,分别为 $H=100$ nm 和 $H=700$ nm,这可能是因为在叠层结构中透射光先经过反蛋白石 3D PC,使得经过金属光栅的光子光谱特性发生了变化。

图 6 给出了各种背反射结构(金属铝、金属光栅、3D PC 以及光子晶体和金属光栅叠层)的光吸收变化对

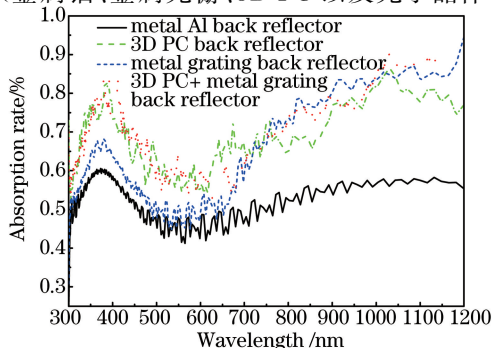


图 6 最优参数下不同背反射结构硅薄膜太阳能电池的吸收光谱图

Fig. 6 Absorption spectrum of Si thin-film solar cell with different back reflectors under optimal parameters

比图。叠层背反射结构太阳能电池在 300~1200 nm 全波段具有最优的光吸收增强效果,相对金属铝背反射结构光吸收率平均增加了 32%,优于单独使用光子晶体的 30.5%和金属光栅的 17.6%。值得注意的是,采用光子晶体和金属光栅叠层背反射结构,硅薄膜太阳能电池的吸收增强在靠近硅的截止吸收波长(1100 nm)附近尤为显著(图 6 中 1000~1200 nm 波段)。光子晶体和金属光栅共同作用,显著增加了硅薄膜电池对长波光子的吸收。这表明光子晶体和金属光栅叠层结构能够在硅薄膜太阳能电池中实现较好的陷光效应。

4 结 论

系统地研究了铝金属光栅、反蛋白石结构 3D PC 以及光子晶体和金属光栅叠层作为硅薄膜太阳能电池背反射结构,对硅薄膜太阳能电池光吸收的影响。利用基于 FDTD 法的 MEEP 软件包对光在各种陷光结构的硅薄膜太阳能电池中的传播进行模拟仿真,结果表明,相比于传统的金属铝背反射结构,金属光栅背反射带来的吸收增强主要集中在红外光区域,3D PC 则对电池在整个光谱内的吸收都有较明显地增强。光子晶体和金属光栅叠层结构则集合了各自的优势,使电池不仅对红外光的吸收明显增强,还对整个光谱的吸收显著提升。上述研究对设计高效率薄膜太阳能电池具有重要的实际意义。

参 考 文 献

- 1 Mallick S B, Agrawal M, Peumans P. Optimal light trapping in ultra-thin photonic crystal crystalline silicon solar cells [J]. *Opt Express*, 2010, 18(6): 5691-5706.
- 2 Jia Yukun, Yang Shie, Guo Qiaoneng, *et al.*. Optimal design of light trapping structure for broadband absorption enhancement in amorphous silicon solar cell [J]. *Acta Physica Sinica*, 2013, 62(24): 247801.
贾玉坤, 杨仕娥, 郭巧能, 等. 非晶硅太阳能电池宽光谱陷光结构的优化设计 [J]. *物理学报*, 2013, 62(24): 247801.
- 3 Das C, Lambertz A, Huepkes J, *et al.*. A constructive combination of antireflection and intermediate-reflector layers for a-Si/ μ_c -Si thin film solar cells [J]. *Appl Phys Lett*, 2008, 92(5): 053509.
- 4 Dobrzański L, Drygala A. Surface texturing of multicrystalline silicon solar cells [J]. *Journal of Achievements in Materials and Manufacturing Engineering*, 2008, 31(1): 77-82.
- 5 Springer J, Poruba A, Müllerova L, *et al.*. Absorption loss at nanorough silver back reflector of thin-film silicon solar cells [J]. *Journal of Applied Physics*, 2004, 95(3): 1427-1429.
- 6 Zhao Yang, He Jianfang, Yang Rongcao, *et al.*. Two-dimensional surface plasmonic grating optical absorber with gradually varying structure [J]. *Acta Optica Sinica*, 2014, 34(2): 0223005.
赵 阳, 何建芳, 杨荣草, 等. 结构渐变的二维表面等离子体光栅光吸收器 [J]. *光学学报*, 2014, 34(2): 0223005.
- 7 Chutinan A, John S. Light trapping and absorption optimization in certain thin-film photonic crystal architectures [J]. *Physics Review A*, 2008, 78(2): 023825.
- 8 Zheng G G, Xian F L, Li X Y. Enhancement of light absorption in thin film silicon solar cells with metallic grating and one-dimensional photonic crystals [J]. *Chin Phys Lett*, 2011, 28(5): 054213.
- 9 Dobrzański L, Szindler M, Drygala A, *et al.*. Silicon solar cells with Al₂O₃ antireflection coating [J]. *Open Physics*, 2014, 12(9): 666-670.
- 10 Li W, Hao H, He M, *et al.*. ZnO: Al/Al back reflector with good adhesion on a flexible polyimide substrate for thin film silicon solar cells [J]. *Surface and Coatings Technology*, 2014, 258: 991-995.
- 11 Chen Peizhuan, Hou Guofu, Suo Song, *et al.*. One-dimensional photonic crystal (1D PC)-based back reflectors for amorphous silicon thin film solar cell [J]. *Acta Physica Sinica*, 2014, 63(7): 077301.
陈培专, 侯国付, 索 松, 等. 基于一维光子晶体的新型背反射器及其在非晶硅薄膜太阳能电池中的应用 [J]. *物理学报*, 2014, 63(7): 077301.
- 12 Yue G, Sivec L, Owens J M, *et al.*. Optimization of back reflector for high efficiency hydrogenated nanocrystalline silicon solar cells [J]. *Appl Phys Lett*, 2009, 95(26): 263501.
- 13 Huang Xianjun, Zhang Yaojun, An Hongchang. Reduction of reflection in amorphous silicon thin film solar cell with double grating structure [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2015, 52(7): 073101.
黄祥军, 张耀举, 安鸿昌. 双层光栅结构减小非晶硅薄膜太阳能电池的反射 [J]. *激光与光电子学进展*, 2015, 52(7): 073101.

- 14 Lu Huidong, Shen Hongjun, Li Lei, *et al.*. A structure design of the amorphous silicon single-junction thin-film solar cells for increasing sunlight absorption[J]. *Acta Optica Sinica*, 2013, 33(8): 0831003.
卢辉东, 沈宏君, 黎磊, 等. 一种增加单结非晶硅薄膜太阳能电池光吸收的结构设计[J]. *光学学报*, 2013, 33(8): 0831003.
- 15 Yu Z, Raman A, Fan S. Fundamental limit of light trapping in grating structures[J]. *Opt Express*, 2010, 18(103): A366-A380.
- 16 Sammito D, Zilio P, Zacco G, *et al.*. Light trapping properties of metallic gratings on wafer-based silicon solar cells[J]. *Nano Energy*, 2014, 2(3): 337-342.
- 17 Zeng L, Yi Y, Liu J, *et al.*. Efficiency enhancement in Si solar cells by textured photonic crystal back reflector[J]. *Appl Phys Lett*, 2006, 89(11): 111111.
- 18 Varghese L T, Xuan Y, Niu B, *et al.*. Enhanced photon management of thin-film silicon solar cells using inverse opal photonic crystals with 3d photonic bandgaps[J]. *Advanced Optical Materials*, 2013, 1(10): 692-698.
- 19 Byun S J, Byun S Y, Lee J, *et al.*. An optical simulation algorithm based on ray tracing technique for light absorption in thin film solar cells[J]. *Solar Energy Materials & Solar Cells*, 2011, 95(1): 408-411.
- 20 Oskooi A F, Roundy D, Ibanescu M, *et al.*. MEEP: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method[J]. *Computer Physics Communications*, 2010, 181(3): 687-702.
- 21 Atwater H A, Polman A. Plasmonics for improved photovoltaic devices[J]. *Nature Materials*, 2010, 9(3): 205-213.