

衍射光栅和光子晶体增强晶体硅薄膜太阳能电池光俘获的模拟

卢辉东 铁生年* 刘杰

青海大学新能源光伏产业研究中心, 青海 西宁 810016

摘要 提出了一种可以吸收宽光谱的晶体硅薄膜太阳能电池结构,其中增透膜为三角形衍射光栅,背反射层由以晶体硅为背景的三角晶格的空气圆柱形光子晶体组成。采用严格耦合波理论和平面波展开法,模拟研究了衍射光栅和光子晶体对提高电池吸收率的影响。结果表明,入射角度在 $0^\circ\sim 60^\circ$ 之间,增透膜在 $380\sim 1100\text{ nm}$ 波长范围内存在高透射率,背反射层在 $800\sim 1100\text{ nm}$ 波长范围内存在高反射率。对于有源层厚度为 $20\ \mu\text{m}$ 的晶体硅薄膜太阳能电池,在入射波为TM偏振状态下,自然光垂直入射时,三角形衍射光栅使光吸收率增加 18% ,二维光子晶体使光吸收率增加 6% 。有增透膜和背反射层的晶体硅薄膜太阳能电池,当入射角度小于 60° 时,在 $380\sim 850\text{ nm}$ 波长范围内平均吸收率为 87.6% ,在 $850\sim 1000\text{ nm}$ 波长范围内平均吸收率为 49% 。

关键词 探测器; 太阳能电池; 衍射光栅; 光子晶体; 吸收

中图分类号 TM914.4 **文献标识码** A

doi: 10.3788/LOP53.070403

Simulation of Enhancing Light Trapping in Crystalline Silicon Thin Film Solar Cells with Diffraction Gratings and Photonic Crystals

Lu Huidong Tie Shengnian Liu Jie

New Energy Industry Research Center, Qinghai University, Xining, Qinghai 810016, China

Abstract A structure of crystalline silicon thin film solar cells are proposed, which can absorb broadband spectrum. The antireflection (AR) coating is triangular diffraction grating and the back reflection layer is composed of air column photonic crystal (PC) of triangular lattice on the background of crystalline silicon. The influences of the diffraction grating and PC on the enhancement of the optical absorption in the cell are simulated using the rigorous coupled wave analysis and plane wave theory method. The results show that for the incident angles of $0^\circ\sim 60^\circ$, the AR coating has low reflection within the wavelength range of $380\sim 1100\text{ nm}$ and the back reflection layer has high reflection within the wavelength range of $800\sim 1100\text{ nm}$. For the c-Si thin film solar cell with an active layer thickness of $20\ \mu\text{m}$, under the TM polarization state of the incident wave and when the white light is at a vertical incidence, the light absorption rate is increased by 18% from the triangular diffraction grating and by 6% from the two-dimensional PC. For the crystalline silicon thin film solar cells with AR coating and the back reflection layer, when the incident angle is less than 60° , the average absorption rate is 87.6% in the wavelength range of $380\sim 850\text{ nm}$ and 49% in the wavelength range of $850\sim 1000\text{ nm}$.

Key words sensors; solar cell; diffraction grating; photonic crystal; absorption

OCIS codes 040.5350; 350.6050; 050.1950; 310.1210

1 引言

随着薄膜晶硅片切割技术的发展,晶硅片由于具有原材料丰富、少子寿命较高和电池性能稳定等优点,已被视为降低传统晶硅电池成本的有效途径之一。晶体硅(c-Si)薄膜太阳能电池对于太阳光谱存在一条响应

收稿日期: 2015-12-21; **收到修改稿日期:** 2016-03-10; **网络出版日期:** 2016-06-24

基金项目: 青海省重点实验室发展专项资金(2014-Z-Y31,2015-Z-Y18)

作者简介: 卢辉东(1987—),男,硕士,助教,主要从事新能源光伏方面的研究。E-mail: luhuidong123@126.com

* **通信联系人.** E-mail: tieshengnian@163.com

曲线,以单晶硅太阳能电池为例,通常只有 $0.38\sim 1.1\ \mu\text{m}$ 波长范围内的太阳光才能被太阳能电池吸收并用于发电,但晶体硅的吸收系数随着波长的增长而迅速降低。由布格尔定律可知,要彻底吸收长波长的光子需要很厚的有源层厚度,尤其在波长范围 $800\sim 1100\ \text{nm}$,相应的吸收长度处于 $10\ \mu\text{m}\sim 3\ \text{mm}$ 之间,这个值远远超过了大多数晶体硅薄膜太阳能电池中心硅材料的厚度,导致不能被吸收的长波长光波和其余波段的有效光波进入太阳能电池致使电池温度升高,降低了电池的光电转换效率。另一方面,由于薄膜晶硅片的有源层非常薄,存在严重的光学损失,从陷光结构角度看,对于大于 $800\ \text{nm}$ 波长的光线尤为严重。美国国家可再生能源实验室公开发表的测试结果指出,红外线($\lambda > 700\ \text{nm}$)约占太阳光谱总辐射能量的 55% ^[1]。为了提高太阳能电池对长波长频段光子的吸收,Chhajed 等^[2]利用光的干涉相消原理研究并实验制作出具有高透射的增透(AR)膜,三层折射率渐变增透膜的最大优点是入射角在 $0^\circ\sim 60^\circ$ 范围和整个波段内都有较低的反射率。具有前光栅的薄膜太阳能电池可以利用前光栅在短波段的减反射作用,有效地提升薄膜电池在短波光谱段的吸收效率^[3-4]。为了捕获更宽的光谱,许多背反射层的设计和制作方法相继被提出,如利用金属纳米等离子体激元^[5-6],介质衍射光栅和一维光子晶体^[7-9],二、三维光子晶体^[10-12]等结构。本文选择三角形衍射光栅作为增透膜并选择二维(2D)光子晶体(PC)作为背反射层,提出了一种可以吸收宽光谱的晶体硅薄膜太阳能电池结构,计算了增透膜、背反射层对电池光吸收起的增强作用。

2 理论方法

晶体硅薄膜太阳能电池的示意图见图 1,从电池顶部向下介质材料分别为 SiO_2 , Si_3N_4 , TiO_2 , c-Si 和 2D-PC,它们的厚度分别为 d_1, d_2, d_3, d_4 。

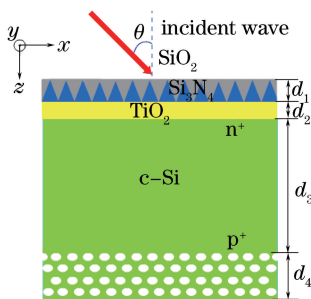


图 1 增加光吸收的薄膜太阳能电池示意图

Fig. 1 Schematic of thin film solar cells of enhancing light absorption

介质材料的折射率色散随波长变化, SiO_2 的折射率色散用柯西公式^[13]表示:

$$n_{\text{SiO}_2}(\lambda) = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4}, \quad (1)$$

式中常数 $A=1.491, B=0.00686, C=-0.0007648$ 。 $\text{Si}_3\text{N}_4, \text{TiO}_2$ 的折射率色散用 Sellmeier 公式^[14-15]表示:

$$n_{\text{Si}_3\text{N}_4}(\lambda) = \sqrt{1 + \frac{2.8939\lambda^2}{\lambda^2 - 0.13967^2}}, \quad (2)$$

$$n_{\text{TiO}_2}(\lambda) = \sqrt{5.913 + \frac{0.2441\lambda^2}{\lambda^2 - 0.0803}}, \quad (3)$$

式中 λ (波长)的单位均为微米。三角形衍射光栅的周期为 $1\ \mu\text{m}$ 时,有利于增加太阳能电池有源层的光吸收率^[16],利用严格耦合波理论和平面波展开法,用 Matlab 软件编程计算,可以得到增透膜的透射率、背反射层的反射率、电池的光吸收率和光子晶体的带隙结构。计算中主要分析入射光为 TM 偏振的情形。

3 仿真结果和讨论

3.1 衍射光栅的特性

光栅最重要的属性是通过耦合得到更高阶衍射的光来增加光在有源层的有效路径。三角形衍射光栅增透膜表面积比平面增透膜提高了 1.4 倍。光线在三角形衍射光栅表面多次反射,有效增强了入射太阳光的

利用率,从而提高光生电流密度。图2为光从空气射入三角形衍射光栅的反射光谱,光栅深度 $d_1=0.7\ \mu\text{m}$, $d_2=0.1\ \mu\text{m}$,其中蓝色表示高透射。入射角在 $0\sim 60^\circ$ 范围内,波长在 $380\sim 1100\ \text{nm}$ 的入射光的平均透射率在95%以上,故这种增透膜层具有良好的角度选择性。图3为计算出的波长为 $600\ \text{nm}$ 和 $800\ \text{nm}$ 的入射光在三角形衍射光栅中的光强分布,可以看出入射光通过三角形光栅衍射进入有源层的光强很大。

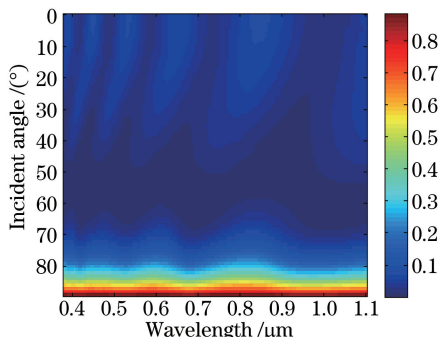
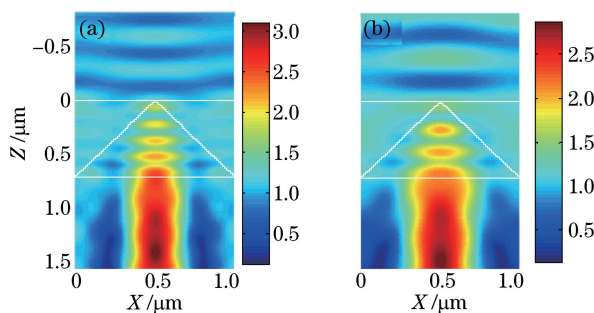


图2 增透膜的反射光谱

Fig. 2 Reflection spectrum of AR coating

图3 光垂直入射时,光栅器件的光强分布。(a) 波长为 $600\ \text{nm}$; (b) 波长为 $800\ \text{nm}$ Fig. 3 Intensity distribution of gratings at normal incidence. (a) Wavelength is $600\ \text{nm}$; (b) wavelength is $800\ \text{nm}$

3.2 二维光子晶体的性质

背反射层是以晶体硅为背景的三角晶格的空气圆柱形结构光子晶体,晶格常数为 a ,圆柱半径为 r ,已有的研究表明基底和圆柱的折射率相差越大,带隙越宽。三角晶格的二维光子晶体比正方晶格更容易出现带隙。图4是利用平面波展开法计算的光子晶体带隙结构,空气孔的半径取 $r=0.375a$ ^[10],从图上可以得出,TE偏振出现第一完全带隙时归一化频率为 $0.228\sim 0.356(\omega a/2\pi c)$,对应的波长为 $700\sim 1095\ \text{nm}$,此范围的波长不能在二维光子晶体中传播,即完全反射回有源层,保证了背反射层的高反射率。背反射层能接收到的光波长大部分在 $800\sim 1100\ \text{nm}$ 范围内,这部分波长位于带隙波长附近,光子在激发电子-空穴对时的热损耗小,可以更有效地提高电池的光电转换效率。故中心波长取 $900\ \text{nm}$,第一完全带隙中心归一化频率为

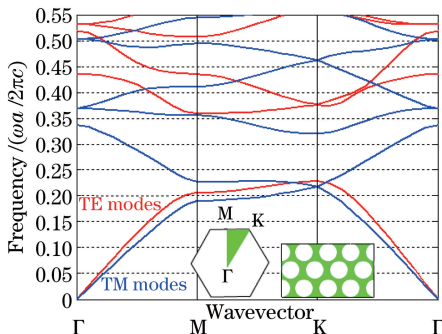


图4 光子晶体的带隙结构

Fig. 4 Band gap structure of PC

$0.29(\omega a / 2\pi c)$, 利用公式

$$\frac{\omega a}{2\pi c} = \frac{a}{\lambda} = \frac{a}{0.85 \mu\text{m}} = 0.29, \quad (4)$$

可算出三角格子晶格常数 $a = 0.25 \mu\text{m}$ 。

如图 5 所示, 对于 TM 偏振来说, 4 层二维三角空气孔光子晶体在 $800 \sim 1100 \text{ nm}$ 之间的反射率达 100% , 4 层的厚度 $d_4 = 2\sqrt{3}a = 0.867 \mu\text{m}$ 。二维三角晶格的空气圆柱形结构光子晶体的反射光谱如图 6 所示, 其中红色表示高反射率, 正是由于光子晶体存在的带隙属性, 能够让某一频段的光波完全反射。图 7 为光垂直入射时, 波长分别为 $800, 900, 1000, 1100 \text{ nm}$ 时 TM 偏振的光强分布。入射光到达有源层和光子晶体界面时, 使光尽可能沿着与界面平行的方向传播, 增加了光的传播路径, 电池的捕光能力得到大幅提高。

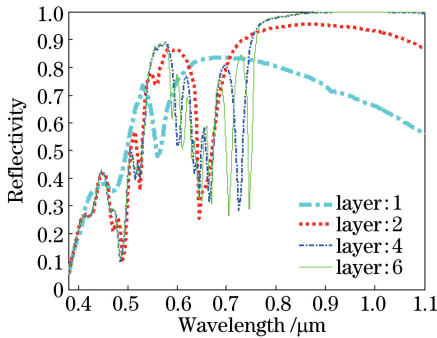


图 5 光垂直入射时, 不同层数的 TM 偏振模式反射谱

Fig. 5 Reflective spectrum for TM polarization mode with different layers at normal incidence

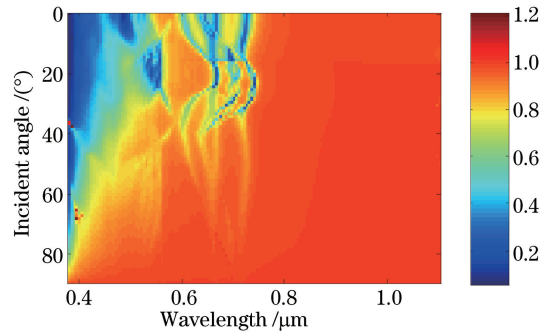


图 6 二维光子晶体的反射光谱

Fig. 6 Reflection spectrum of 2D photonic crystal

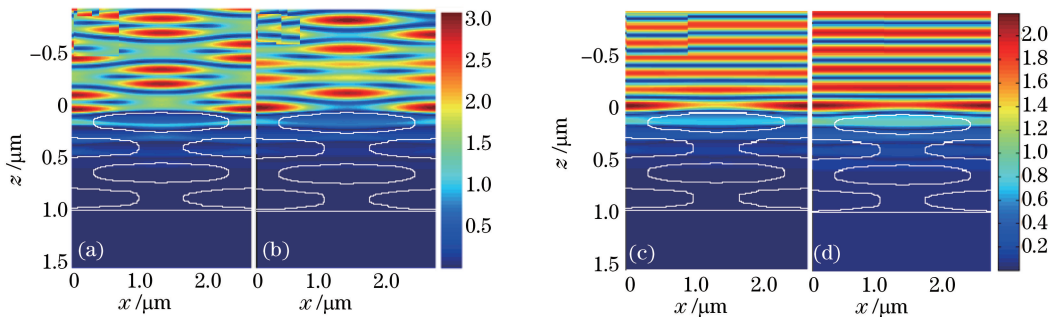


图 7 光垂直入射时, 二维光子晶体的光强分布。(a) 波长为 800 nm ;

(b) 波长为 900 nm ; (c) 波长为 1000 nm ; (d) 波长为 1100 nm

Fig. 7 Intensity distribution of 2D-PC at normal incidence. (a) Wavelength is 800 nm ;

(b) wavelength is 900 nm ; (c) wavelength is 1000 nm ; (d) wavelength is 1100 nm

3.3 太阳能电池的光吸收

电池有源层的吸收率随波长的变化公式为^[17]

$$A(\lambda) = \omega \cdot \text{Im}(\epsilon) \int |E(\lambda, r)|^2 dV, \quad (5)$$

式中 ω 和 E 分别是角频率和电场振幅, $\text{Im}(\epsilon)$ 是晶硅的介电常数的虚部, 积分区间位于硅层。吸收由 AM1.5 G 光谱加权得到太阳光谱吸收和吸收光谱强度。有源层晶体硅的折射率色散数据取自文献[18], 并通过牛顿插值法得到不同波长下晶体硅的折射率色散数据。图 8 为只有三角形衍射光栅且无背反射层的结构在光垂直入射时不同厚度有源层所对应的吸收率。有源层只有 $2 \mu\text{m}$ 时, 吸收率为 38.4% , 随着有源层变厚, 吸收率增加, 当晶体硅厚度为 $20 \mu\text{m}$ 时, 吸收率为 63.1% , 波长在 $380 \sim 750 \text{ nm}$ 的平均吸收率为 92% , 吸收率的待提升波段大部分位于波长 $750 \sim 1100 \text{ nm}$ 之间, 这部分光的吸收系数小, 要完全吸收必须加背反射层。

图 9 为光垂直入射时, 裸硅片(无任何陷光结构)、有增透膜、有背反射层的吸收光谱。仿真模拟有源层

厚度为 $20\ \mu\text{m}$ 的单晶硅太阳电池不同层对光谱吸收起到的作用,大量短波长的光子被电池的前层(增透膜+c-Si)吸收,吸收率增加 18%,长波长的光子被电池的后层(c-Si+背反射层)吸收,吸收率增加 6%。入射角度在 $0\sim 90^\circ$ 之间,波长在 $380\sim 1100\ \text{nm}$ 之间的吸收光谱如图 10 所示,红色表示高吸收率。由图 10 可知,当入射角小于 60° 时,电池在 $380\sim 850\ \text{nm}$ 波长范围内平均吸收率为 87.6%,在 $850\sim 1000\ \text{nm}$ 波长范围内平均吸收率为 49%,在 $1000\sim 1100\ \text{nm}$ 波长范围内平均吸收率为 15.6%。

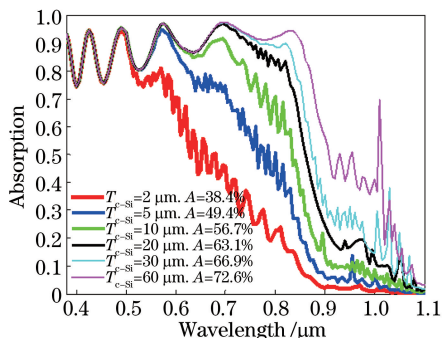


图 8 光垂直入射时,不同厚度有源层的吸收光谱

Fig. 8 Absorption spectra of the active layer with different thicknesses at normal incidence

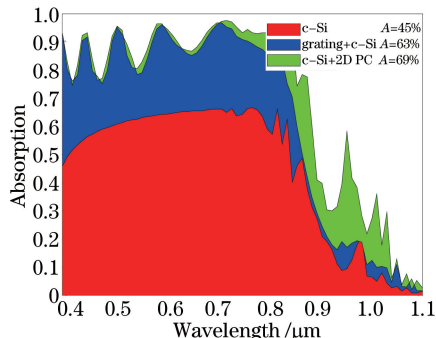


图 9 光垂直入射时,裸硅片、三角形衍射光栅和光子晶体的吸收光谱

Fig. 9 Absorption spectra of c-Si, triangular diffraction grating and PC at normal incidence

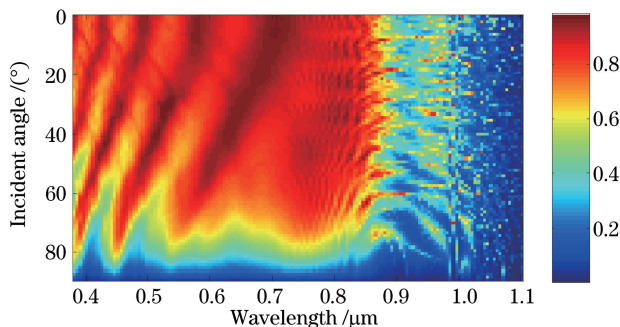


图 10 太阳电池吸收光谱

Fig. 10 Absorption spectrum of the solar cell

4 结 论

采用三角形衍射光栅做增透膜,用二维光子晶体做背反射层,可以显著提高晶体硅薄膜太阳电池对 $380\sim 1100\ \text{nm}$ 波长范围的光吸收率。物理机理主要归于光栅的衍射属性以及光子晶体的禁带属性。具有吸收宽光谱的晶体硅薄膜太阳电池结构的基本参数为 $d_1=0.7\ \mu\text{m}$, $d_2=0.1\ \mu\text{m}$, $d_3=20\ \mu\text{m}$, $r=0.375a$, $a=0.25\ \mu\text{m}$, $d_4=0.87\ \mu\text{m}$ 。光垂直入射时,三角形衍射光栅吸收率增加 18%,二维光子晶体吸收率增加 6%。计算了不同厚度有源层的吸收光谱,有源层的厚度为 $20\ \mu\text{m}$ 时,数值模拟了太阳电池的吸收光谱,在入射角度小于 60° 时,电池在 $380\sim 850\ \text{nm}$ 波长范围内平均吸收率为 87.6%,在 $850\sim 1000\ \text{nm}$ 波长范围内平均吸收率为 49%,在 $1000\sim 1100\ \text{nm}$ 波长范围内平均吸收率为 15.6%。做到了宽的耦合波段范围和良好的角度选择性,该结构有效提高了晶体硅薄膜太阳电池光俘获效率。

参 考 文 献

- Green M A, Keevers M J. Optical properties of intrinsic silicon at 300 K[J]. Progress in Photovoltaics: Research and Applications, 1995, 3(3): 189-192.
- Chhajed S, Schubert M F, Kim J K, *et al.*. Nanostructured multilayer graded-index antireflection coating for Si solar cells with broadband and omnidirectional characteristics[J]. Appl Phys Lett, 2008, 93(25): 251108.

- 3 Liang Zhaoming, Wu Yonggang, Xia Zihuan, *et al.*. Influence of front and back grating period on light trapping of dual-grating structure thin film solar cell[J]. *Acta Phys Sin*, 2014, 63(19): 198801.
梁钊铭, 吴永刚, 夏子奂, 等. 前后光栅周期对于双光栅结构薄膜太阳能电池光俘获效应的影响[J]. *物理学报*, 2014, 63(19): 198801.
- 4 Lee Y C, Tseng S C, Chen H L, *et al.*. Using autocloning effects to develop broad-bandwidth, omnidirectional antireflection structures for silicon solar cells[J]. *Optics Express*, 2010, 18(s3): A421-A431.
- 5 Trompoukis C. Photonic nanostructures for advanced light trapping in thin crystalline silicon solar cells[J]. *Phys Status Solidi*, 2015, 212(1): 140-155.
- 6 Liu C H, Su G Y, Gou F W, *et al.*. Absorption enhancement of thin film solar cells using back binary metallic grating [J]. *Opt Quant Electron*, 2014, 46(10): 1365-1372.
- 7 Tseng P C, Yu P C, Chena H C, *et al.*. Angle-resolved characteristics of silicon photovoltaics with passivated conical-frustum nanostructures[J]. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2011, 95(9): 2610-2615.
- 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 Zeng L, Yi Y, Hong C Y, *et al.*. Efficiency enhancement in Si solar cells by textured photonic crystal back reflector[J]. *Appl Phys Lett*, 2006, 89(11): 111111.
- 10 Bermel P, Luo C Y, Zeng L R, *et al.*. Improving thin-film crystalline silicon solar cell efficiencies with photonic crystals [J]. *Optics Express*, 2007, 15(25): 16986-17000.
- 11 Zhou D Y, Biswas R. Photonic crystal enhanced light-trapping in thin film solar cells[J]. *J Appl Phys*, 2008, 103(9): 093102.
- 12 Chutinan A, Kherani N P, Zukotynski S. High-efficiency photonic crystal solar cell architecture [J]. *Optics Express*, 2009, 17(11): 8871-8878.
- 13 Philipp H R. Optical properties of silicon nitride[J]. *J Electrochemical Society*, 1973, 120(2): 295-300.
- 14 Devore J R. Refractive indices of rutile and sphalerite[J]. *J Opt Soc Am*, 1951, 41(6): 416-419.
- 15 Malitson I H. Interspecimen comparison of the refractive index of fused silica[J]. *J Opt Soc Am*, 1965, 55(10): 1205-1208.
- 16 Li Guolong, Li Jin. The light absorption enhancement in polymer solar cells with periodic nano-structures gratings[J]. *Acta Phys Sin*, 2012, 61(20): 207204.
李国龙, 李 进. 微纳光栅结构增加聚合物太阳能电池光吸收的研究[J]. *物理学报*, 2012, 61(20): 207204.
- 17 Zhu L H, Shao M R, Peng R W, *et al.*. Broadband absorption and efficiency enhancement of an ultra-thin silicon solar cell with a plasmonic fractal[J]. *Optics Express*, 2013, 21(S3): A313-A323.
- 18 Green M A. Self-consistent optical parameters of intrinsic silicon at 300 K including temperature coefficients[J]. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2008, 92(11): 1305-1310.