

适用于薄膜硅太阳能电池背反射面的一维衍射光栅结构

石鑫, 孙诚, 王晓秋

大连大学物理科学与技术学院, 辽宁 大连 116622

摘要 有效提高薄膜硅太阳能电池光转换效率是清洁能源利用领域的一个重要问题。设计了一种以三角形一维衍射光栅为基础的薄膜硅太阳能电池的背部反射器结构,用以有效提高硅太阳能电池的光转换效率。利用时域有限差分(FDTD)法,从光栅结构形状、倾斜角度、光栅周期以及光栅间隔等4个方面分别研究了薄膜硅太阳能电池下表面的光反射率。结果表明,由等腰直角三角形组成的一维光栅结构的背反射能力最强,合理增大光栅周期也将有助于提高硅太阳能电池的背面光反射率。此外,研究还发现,对于间隔型一维衍射光栅结构,平面波入射光会在和光栅周期对应的波长处发生共振现象。利用该特性,一维衍射光栅结构还可作为一种波长选择器。

关键词 光栅; 一维衍射光栅; 太阳能电池; 薄膜硅电池; 背反射

中图分类号 O436 文献标识码 A

doi: 10.3788/LOP55.010501

One-Dimensional Diffraction Grating Structure for Rear Reflection Surface of Thin Film Silicon Solar Cells

Shi Xin, Sun Cheng, Wang Xiaoqi

College of Physical Science and Technology, Dalian University, Dalian, Liaoning 116622, China

Abstract In the community of green energy utilization, it has been a key issue to effectively enhance the light conversion of thin film silicon solar cells. A rear surface reflector structure of thin film silicon solar cells based on triangular one-dimensional diffraction gratings is designed, which can effectively enhance the light utilization efficiency of the solar cells. With a variety of grating structure types, inclination angles, grating periods and grating separations, the light reflectance of the rear surface of thin film silicon solar cells are respectively studied via the finite difference time domain (FDTD) method. The results indicate that the one-dimensional grating structure consist of isosceles right triangles gives rise to an optimal rear surface reflectance, and the reasonable increase of the grating period can also enhance the light reflectance of rear surface of the silicon solar cells. Besides, the study in this work also shows that there appears a resonance peak in the reflectance curve when the light wavelength matches the grating period of the gratings. Based on this diffraction characteristics, the one-dimensional grating structures proposed in this work can also be utilized as a wavelength selector in future designs.

Key words gratings; one-dimensional diffraction grating; solar cell; thin film silicon cell; rear surface reflector

OCIS codes 050.1950; 230.1950; 310.6860

1 引言

在资源日益紧缺的当下,新型可再生能源将在未来的生活中扮演重要角色。薄膜硅太阳能电池以其耗材少、成本低、弱光性好等优点,在国际光伏市场中占据着越来越重要的地位。太阳能电池中单晶硅电池的光电转换效率是最高的,但是受成本、材料

纯度和制备工艺的限制,尚未大规模投入市场^[1]。

单晶硅材料的太阳能电池有一个重要缺陷:对于波长靠近带隙的光子的吸收率很低。特别是在750~1100 nm的波长范围内,其对应的吸收层厚度为10~3000 μm ,而大多数薄膜硅太阳能电池中心的吸收层厚度要远远小于这个值,故对上述波长范围内的光吸收率极低。如果这部分长波长的光子能

收稿日期: 2017-08-04; 收到修改稿日期: 2017-08-14

基金项目: 辽宁省“百千万人才工程”项目(辽百千万立项[2017]5号)、辽宁省自然科学基金(20170540044)

作者简介: 石鑫(1993—),男,硕士研究生,主要从事纳米光学方面的研究。E-mail: 834550844@qq.com

导师简介: 王晓秋(1961—),女,博士,教授,主要从事纳米光学方面的研究。E-mail: wangxqdl@sina.com(通信联系人)

够得到充分利用,太阳能电池的转换效率将会得到有效的提高^[2]。

目前,提高薄膜硅太阳能电池光吸收效率的方法主要分为三种:降低上表面光的反射率、增加光子在电池内部的光学路径长度以及增加电池下表面的光反射率。第一种方法可以通过增透膜来实现,其中常用的介质材料有 SiO_2 和 Si_3N_4 等。其他的一些减反方法是基于散射和阻抗匹配的原则^[3-4]。第二种方法是利用金属粒子表面等离子激元^[5-8],通过增强散射来有效提高薄膜硅太阳能电池的光吸收。迄今为止,已经有很多研究小组提出了将金属表面等离子体应用于薄膜硅太阳能电池的基本设计,并且计算出了金属纳米颗粒的最佳参数^[9-16]。其中金属纳米颗粒的大小、形状、材料和周围的介质环境是影响最大光散射和耦合效率的主要因素^[17-19]。结果表明,利用表面等离子体共振特性,可以实现良好的宽带增透膜效果^[20]。第三种方法,增加光在薄膜电池内部的光学路径长度,使透过电池上表面的光在电池的下表面被大量反射,以实现光的再次反射从而增加光学传播路径^[21-22]。

本文将一维光栅应用在薄膜硅太阳能电池下表面,形成背反射器,通过选择合适折射率的材料,使更宽波段内的入射光被反射回吸收层被再次利用。利用时域有限差分(FDTD)方法,从光栅结构形状、倾斜角度、光栅周期以及光栅间隔等4个方面分别研究了薄膜硅太阳能电池下表面的光反射率。经过结构优化和数据分析,得到了一种作为波长选择器的光栅结构。

2 薄膜硅太阳能电池背反射面设计

2.1 设计思路及模型

一维光栅具有良好的衍射效应,因此可以将其设置于薄膜硅太阳能电池的下表面,将透过电池吸收层未被吸收的光子有效地反射回去,进行二次吸收,以达到提高光转换效率的作用。基于这一思路,设计了一种采用三角形结构的一维光栅背面反射器,具体结构如图1所示。在图1中,形状相同的三角形在硅下表面呈周期排列,形成一维衍射光栅。其中 d 为三角形底边长, h 为三角形高, θ 为三角形倾斜角度, b 为光栅间隔(即相邻三角形底边间距),光栅介质材料使用 SiO_2 。平面波入射光垂直向下入射。

2.2 模拟计算方法

FDTD法本质上是对麦克斯韦方程组的一种差分表示,在电场和磁场节点空间和时间上都采用交

错抽样,以此来解决电磁波在电磁介质中传播和反射的问题。研究利用基于FDTD法的FDTD Solutions软件模拟计算。如图1所示,平面波入射光沿 y 轴负方向入射,在 x 方向上使用周期性边界条件, y 方向上使用完全匹配层(PML)边界条件。研究中取入射光的波长范围为 $400\sim 1200\text{ nm}$ 。

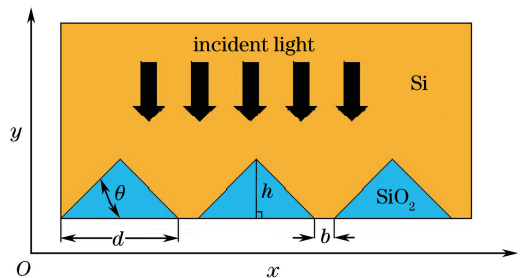


图1 薄膜硅太阳能电池背面一维光栅结构设计图
Fig. 1 Structural design of one-dimensional grating at rear surface of thin film silicon solar cells

3 连续型一维光栅

3.1 光栅结构形状对薄膜硅太阳能电池光效率的影响

图2给出了不同结构形状一维光栅在太阳能电池背反射面的设计模型,设计了三种三角形结构:直角三角形、一般三角形和等腰三角形。在上述模型中,相邻三角形底边间距即光栅间隔设为 $b=0$,此时为连续型光栅,三角形底边长 d 即为连续型光栅的光栅周期。

首先研究图2中给出的连续型一维光栅的不同结构形状对薄膜硅太阳能电池光效率的影响。具体的电池背部光反射率的结果如图3所示。在图3的计算中,三种三角形的底和高均保持不变,分别为 $d=600\text{ nm}$ 和 $h=300\text{ nm}$ 。在图3中,general-1、general-2和general-3分别对应着图2(b)所示结构中一般三角形的倾角 θ 依次取 86° , 79° 和 72° 时的情形。从图3结果可见,当波长为 $400\sim 1200\text{ nm}$ 的平面光波垂直入射经过一维光栅后,各种结构下的光反射率都会随着入射光波长的改变而变化。在 $400\sim 650\text{ nm}$ 波长范围内,各种结构下的反射率均呈上升趋势且大小基本相同。对于波长在 700 nm 以上的入射光,各种结构下的反射率大致趋势都是先下降后上升,大约在 1050 nm 波长时,光反射率达到了一个低点。在波长大于 700 nm 时,通过比较不同光栅结构所对应的反射率结果可知,等腰直角三角形结构的反射率整体最高,直角三角形的反射率最低,三个一般三角形给出的反射率介于上述两者之间。

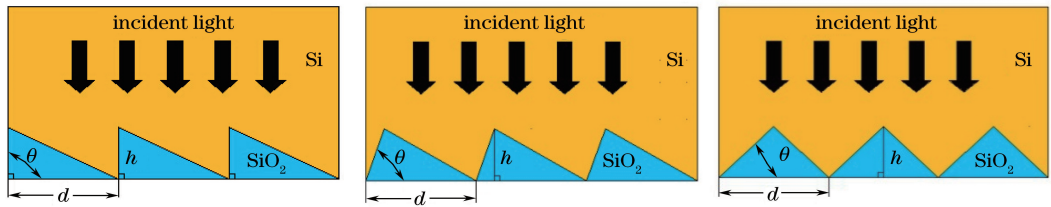


图2 三角形形状分别为(a)直角三角形、(b)一般三角形和(c)等腰三角形的连续型一维光栅结构设计图

Fig. 2 Structural designs of continuous one-dimensional gratings with the triangle shapes of (a) right triangle, (b) general triangle and (c) isosceles triangle, respectively

进一步比较图3中从直角三角形到等腰直角三角形逐渐过渡的三个一般三角形,不难发现,越接近等腰直角三角形的,反射率曲线整体数值越高;接近直角三角形的,整体数值越低。从图3的结果可知,等腰直角三角形一维光栅可以有效地提高薄膜硅太阳能电池背反射面的整体反射率。上述结论在物理本质上可以通过全反射的原理来深入理解:由于计算模型中的介质材料分别为Si和SiO₂,又因等腰直角三角形具有对称性,垂直入射的光可以在相邻的三角形表面发生两次全反射;而对于直角三角形和一般三角形,平面波垂直照射,最多可以在三角形某一表面发生一次全反射。因此,等腰直角三角形结构的一维光栅反射能力最强。

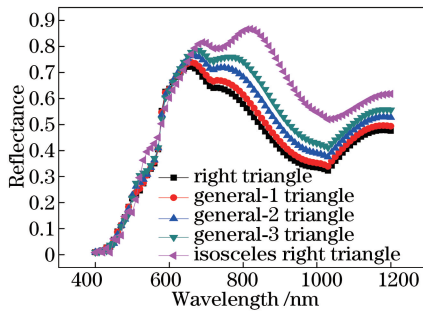


图3 连续型一维光栅不同结构对应的电池背部光反射率结果

Fig. 3 Rear surface reflectance of the cells with different structures of continuous one-dimensional gratings

3.2 倾斜角度对薄膜硅太阳能电池光效率的影响

在图3给出的等腰直角三角形结构一维光栅具有较好反射能力的基础上,进一步研究了组成一维光栅的等腰三角形不同倾斜角度对电池背面光反射率的影响效果,即在10°~45°之间逐渐改变图2(c)所示光栅结构中的倾角 θ ,得到的反射率结果如图4所示。在图4结果的计算中,三角形的底边长均保持为 $d=600$ nm。

由图4可知,当等腰三角形倾角在10°~25°范围内时,薄膜硅太阳能电池背面反射率基本类似,不同倾角之间没有明显变化的,当倾角在30°~45°范

围内时,背面光反射率随着倾角的增大而逐渐提高。由此可见,在小角度范围内,等腰三角形的倾斜角度对薄膜硅太阳能电池背面反射率的影响较小,而当倾斜角度增大到一定数值时,背部光反射率则开始随角度的增大有效提高。对等腰三角形而言,当 $\theta=45^\circ$ 时即构成等腰直角三角形时,从几何光学角度来说,这种结构可以将垂直照射下来的光最为有效地进行两次全反射,并且垂直反射回去,因此倾角为45°的等腰三角形所对应的一维光栅能够给出最高的电池背面光反射率;这一结论与图4中观察到的 $\theta=45^\circ$ 时对应的反射率曲线在研究的整个波长范围内整体最高的结果相一致。

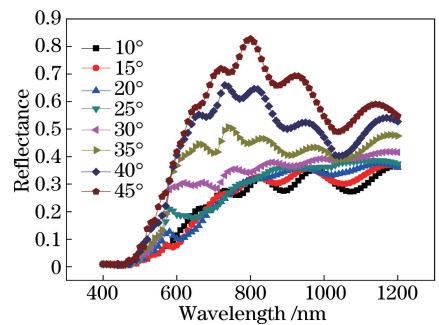


图4 等腰三角形连续型一维光栅结构对应的电池背部光反射率随倾斜角度 θ 的变化

Fig. 4 Rear surface reflectance of the cells as a function of the inclination angle θ for the continuous one-dimensional grating structure with the triangle shape of isosceles triangle

3.3 光栅周期对薄膜硅太阳能电池光效率的影响

在等腰直角三角形所构成一维光栅的基础上,研究了连续型一维光栅中不同光栅周期(光栅周期 d 在400~1200 nm之间逐渐改变)对薄膜硅太阳能电池背反射面增反效果的影响,如图5所示。同时,为了方便比较,图5中也给出了在电池下表面没有设置任何光栅结构时所对应的反射率曲线。

通过观察图5中给出的不同光栅周期所对应的反射率曲线可知,当光波长在400~600 nm之间变

化时,薄膜硅太阳能电池背部反射率的变化基本相同,都呈上升趋势。当入射光在 800~1200 nm 波长范围内时,较小光栅周期(如 $d = 400$ nm)的光栅结构给出的反射率较低,而较大的光栅周期(如 $d = 800$ nm, 1000 nm 或 1200 nm)所对应的光栅结构获得的反射率较高。由此可见,在一定波长范围内,连续型一维光栅的光栅周期越大,薄膜硅太阳能电池下表面的背反射能力越强。进一步比较图 5 中曲线在长波长处的结果可知,连续型一维光栅的背反射能力最强时所对应的光栅周期为 $d = 1000$ nm。

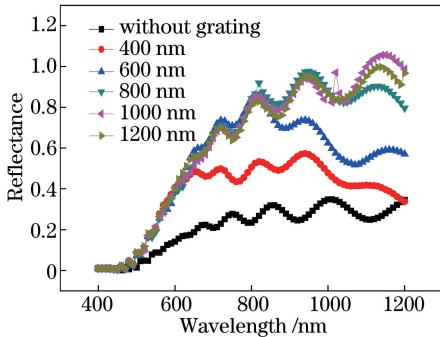


图 5 等腰直角三角形连续型一维光栅结构对应的电池背部光反射率随光栅周期 d 的变化

Fig. 5 Rear surface reflectance of the cells as a function of the grating period d for the continuous one-dimensional grating structure with the triangle shape of isosceles right triangle

4 间隔型一维光栅

以上讨论了连续型一维光栅(即光栅间隔 $b = 0$)结构对薄膜硅太阳能电池背反射率的影响。由于光栅间隔参数也有可能对电池背反射率产生影响,因此在上述研究结果的基础上,进一步研究了间隔型一维光栅结构(即 $b > 0$)。在对间隔型光栅研究时,利用图 1 所示的光栅结构,通过在 0~600 nm 之间逐渐改变光栅间隔 b 来系统地研究其对薄膜硅太阳能电池背反射面的增反效果,如图 6 所示。结合前文的主要结论,在该节的计算中三角形均采用增反效果最好的等腰直角三角形。此外,三角形的底边长也选择同样在图 5 中给出较好增反效果的较大数值,即 $d = 1000$ nm。由于光栅间隔在 500~700 nm 之间所计算出的反射率曲线基本相同,为了便于观察,没有在图 6 中给出光栅间隔为 500 nm 和 600 nm 的曲线。

通过观察图 6 中的反射率曲线可知,在 400~600 nm 的波长范围内,光栅间隔的不同对反射率曲线的影响较小。而对于波长大于 600 nm 的光,光栅

间隔的改变开始对薄膜硅太阳能电池的背反射率曲线产生较明显的影响,具体为:当光栅间隔逐渐增大时,反射率曲线逐渐减小,表明其背反射效果逐渐减弱;相反地,当光栅间隔逐渐减小时,反射率曲线则在整体上逐渐升高,尤其当光栅间隔 $b = 100$ nm 时,其对应的反射率曲线与 $b = 0$ 所对应的曲线十分接近,即与连续型一维光栅所给出的背反射效果相似。

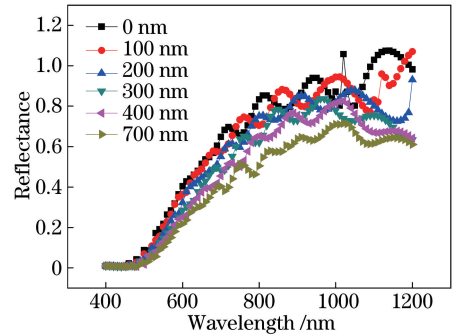


图 6 等腰直角三角形间隔型一维光栅结构对应的电池背部光反射率随光栅间隔 b 的变化

Fig. 6 Rear surface reflectance of the cells as a function of the grating separation b for the discontinuous one-dimensional grating structure with the triangle shape of isosceles right triangle

值得注意的是,在图 6 所示结果的计算过程中,由于三角形底边始终保持为 $d = 1000$ nm,因此,当光栅间隔 b 逐渐从 0 增加至 700 nm 的同时,间隔型一维光栅的光栅周期(即图 1 所示的 $d + b$)也同时发生变化。所以,图 6 给出的结果对于间隔型一维光栅来说,是其光栅间隔和光栅周期同时改变后的变化趋势。为了更加细致地分析研究光栅间隔及光栅周期在所提出的间隔型一维光栅结构中对电池背反射效果的影响,下面固定光栅周期为 $d + b = 1000$ nm,通过逐渐改变图 1 所示结构中的三角形底边大小 d 和相应的光栅间隔 b ,计算了其反射率曲线,具体结果如图 7(a)所示。

观察图 7(a)可知,在相同的光栅周期前提下,光栅间隔为 $b = 0$ 的光栅结构所对应的反射率曲线最高,说明其背反射能力最强,即连续型一维光栅比相同光栅周期下的间隔型一维光栅的背反射效率更高。另外,图 7(a)中还展现出了另外一个现象,即当入射光的波长约为 1000 nm 时,反射率曲线均出现了一个共振峰。为了确认这一现象的非偶然性,研究通过改变固定的光栅周期,进行了与图 7(a)类似的计算,其结果如图 7(b)~(d)所示。从图 7(b)~(d)所给出的结果中不难发现,在固定的光栅周期下,反射率曲线

都会出现一个共振峰,且共振波长大小非常接近其相应的光栅周期。从物理光学的角度来分析,发现这一现象正是由布拉格衍射所形成的;由于该一维光栅结构的组成基础是等腰直角三角形,当平面波入射光垂

直照射时,反射光波的光程差为光栅周期的整数倍,因而在接近于光栅周期的波长处产生了明显的共振效应。图7结果表明,所设计的这种间隔型一维光栅,还可以作为一种波长选择器来使用。

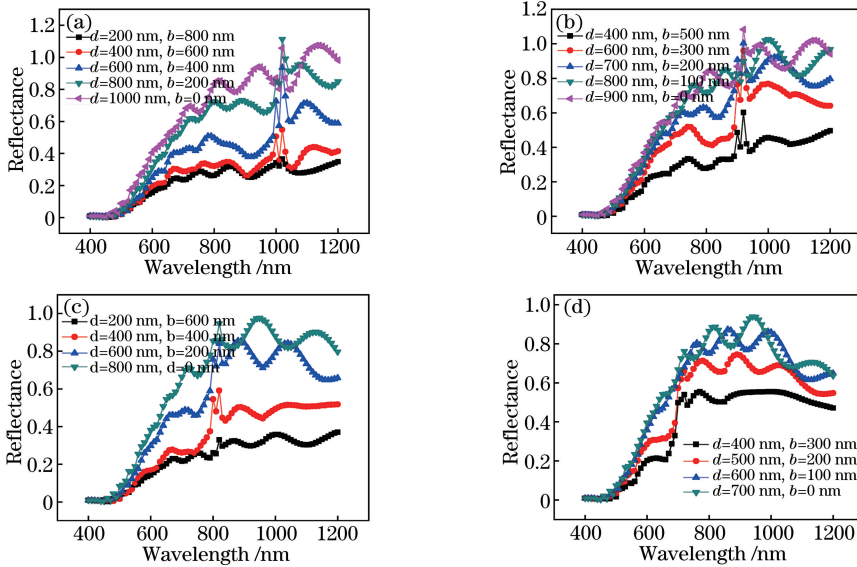


图7 等腰直角三角形间隔型一维光栅结构对应的电池背部光反射率随光栅周期的变化。

光栅周期($d+b$)分别为(a) 1000 nm、(b) 900 nm、(c) 800 nm和(d) 700 nm

Fig. 7 Rear surface reflectance of the cells as a function of the grating period for the discontinuous one-dimensional grating structure with the triangle shape of isosceles right triangle. The grating period ($d+b$) is (a) 1000 nm, (b) 900 nm, (c) 800 nm and (d) 700nm, respectively

5 结 论

背面反射率是提高薄膜硅太阳能电池转换效率的重要参数,将一维衍射光栅应用于硅电池的下表面设计,系统研究了该一维光栅各主要参数对光反射率的影响效果,得到以下主要结论:1) 等腰直角三角形组成的一维光栅结构的背反射能力最好,这是由于垂直照射的入射光在这种几何结构下会发生两次全反射,从而被最为有效地垂直反射回硅电池中,进而被继续加以利用;2) 对于连续型的一维光栅结构,合理增大光栅周期将有助于提高背面光反射率;3) 与间隔型一维光栅相比,在相同的光栅周期下,连续型一维光栅结构能够给出更为有效的背反射效果。另外,由于布拉格衍射效应的存在,对于间隔型一维光栅来说,入射光会在和光栅周期对应的波长处发生共振现象,产生一个共振峰。利用这一特性,所提出的一维衍射光栅结构还可以作为一种波长选择器来进一步被加以利用。

参 考 文 献

[1] Zhang Z J, Wang T T, Zeng H P. Research progress

on thin film solar cells [J]. Electronic Components and Materials, 2010, 29(11): 75-78.

张中俊, 王婷婷, 曾和平. 薄膜太阳能电池的研究进展 [J]. 电子元件与材料, 2010, 29(11): 75-78.

[2] Shen H J, Lu H D, Cheng X Z. Back reflectors of thin-film silicon solar cells consisting of one-dimensional diffraction gratings and one-dimensional photonic crystal [J]. Chinese Journal of Luminescence, 2012, 33(6): 633-639.

沈宏君, 卢辉东, 程学珍. 一维衍射光栅和一维光子晶体组成的硅薄膜太阳能电池背反射器 [J]. 发光学报, 2012, 33(6): 633-639.

[3] Müller J, Rech B, Springer J, *et al.* TCO and light trapping in silicon thin film solar cells [J]. Solar Energy, 2004, 77(6): 917-930.

[4] Macdonald D H, Cuevas A, Kerr M J, *et al.* Texturing industrial multicrystalline silicon solar cells [J]. Solar Energy, 2004, 76(1): 277-283.

[5] Dou X J, Min C J, Zhang Y Q, *et al.* Surface plasmon polaritons optical tweezers technology [J]. Acta Optica Sinica, 2016, 36(10): 1026004.

豆秀婕, 闵长俊, 张聿全, 等. 表面等离激元光镊技术 [J]. 光学学报, 2016, 36(10): 1026004.

- [6] Shan H Y, Zu S, Fang Z Y. Research progress in ultrafast dynamics of plasmonic hot electrons [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2017, 54(3): 030002.
单杭永, 祖帅, 方哲宇. 表面等离子激元热电子超快动力学研究进展[J]. *激光与光电子学进展*, 2017, 54(3): 030002.
- [7] Li T, Chen J, Zhu S N. Manipulating surface plasmon propagation: from beam modulation to near-field holography [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2017, 54(5): 050002.
李涛, 陈绩, 祝世宁. 表面等离子激元的传播操控: 从波束调制到近场全息[J]. *激光与光电子学进展*, 2017, 54(5): 050002.
- [8] Wang Y, Wang X, Li L W. Properties of light trapping of thin film solar cell based on surface plasmon polaritons [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2015, 52(9): 092401.
王玥, 王暄, 李龙威. 基于表面等离子激元薄膜太阳能电池陷光特性的研究[J]. *激光与光电子学进展*, 2015, 52(9): 092401.
- [9] Wang Z X, Sun C, Wang X Q. Modification of front surface antireflection of silicon solar cells with composite metallic nanoparticle arrays [J]. *Plasmonics*, 2017, 12(3): 589-596.
- [10] Sun C, Wang Z X, Wang X Q, *et al.* A surface design for enhancement of light trapping efficiencies in thin film silicon solar cells[J]. *Plasmonics*, 2016, 11(4): 1003-1010.
- [11] Sun C, Wang X Q. Efficient light trapping structures of thin film silicon solar cells based on silver nanoparticle arrays [J]. *Plasmonics*, 2015, 10(6): 1307-1314.
- [12] Sun C, Su J, Wang X Q. A design of thin film silicon solar cells based on silver nanoparticle arrays [J]. *Plasmonics*, 2015, 10(3): 633-641.
- [13] Ding D, Yang S E, Chen Y S, *et al.* Numerical simulation of light absorption enhancement in microcrystalline silicon solar cells with Al nanoparticle arrays [J]. *Acta Physica Sinica*, 2015, 64(24): 248801.
丁东, 杨仕娥, 陈永生, 等. Al 纳米颗粒增强微晶硅薄膜太阳能电池光吸收的模拟研究 [J]. *物理学报*, 2015, 64(24): 248801.
- [14] Catchpole K R, Polman A. Design principles for particle plasmon enhanced solar cells [J]. *Applied Physics Letters*, 2008, 93(19): 191113.
- [15] Hägglund C, Zäch M, Petersson G, *et al.* Electromagnetic coupling of light into a silicon solar cell by nanodisk plasmons [J]. *Applied Physics Letters*, 2008, 92(5): 053110.
- [16] Pillai S, Catchpole K R, Trupke T, *et al.* Surface plasmon enhanced silicon solar cells [J]. *Journal of Applied Physics*, 2007, 101(9): 093105.
- [17] Akimov Y A, Koh W S, Ostrikov K. Enhancement of optical absorption in thin-film solar cells through the excitation of higher-order nanoparticle plasmon modes [J]. *Optics Express*, 2009, 17(12): 10195-10205.
- [18] Rockstuhl C, Lederer F. Photon management by metallic nanodiscs in thin film solar cells [J]. *Applied Physics Letters*, 2009, 94(21): 213102.
- [19] Zhu J, Yu Z, Jeong S, *et al.* Nanostructured light management for advanced photovoltaics [M]. New York: Springer, 2011: 363.
- [20] Diukman I, Orenstein M. How front side plasmonic nanostructures enhance solar cell efficiency [J]. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2011, 95(9): 2628-2631.
- [21] Akimov Y A, Ostrikov K, Li E P. Surface plasmon enhancement of optical absorption in thin-film silicon solar cells [J]. *Plasmonics*, 2009, 4(2): 107-113.
- [22] 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.