

一种增加单结非晶硅薄膜太阳能电池光吸收的结构设计

卢辉东¹ 沈宏君¹ 黎磊² 荆文杰¹

(¹ 宁夏大学物理电气信息学院, 宁夏 银川 750021
² 江西师范大学物理与通信电子学院, 江西 南昌 330022)

摘要 提出了一种包含增透膜和背反射层的非晶硅薄膜太阳能电池结构, 其中增透膜由折射率从低到高的 4 层介质材料组成, 背反射层由三角形介质衍射光栅和一维光子晶体结构组成。利用严格耦合波理论和平面波展开法, 对介质层厚度和光栅进行优化设计, 数值计算了增透膜和背反射层在入射角为 $0^\circ \sim 60^\circ$ 之间的反射效率。结果表明, 增透膜在 300~750 nm 波长范围内存在高透射率, 背反射层在 600~750 nm 波长范围内存在高反射率。对于活性层厚度为 700 nm 的非晶硅薄膜太阳能电池, 在入射波的 TM 偏振状态下, 入射角小于 75° 时, 电池经优化后在 300~750 nm 波长范围内平均吸收率为 95%。

关键词 薄膜; 增透膜; 衍射光栅; 光子晶体; 吸收; 太阳能电池

中图分类号 O436 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201333.0831003

A Structure Design of the Amorphous Silicon Single-Junction Thin-Film Solar Cells for Increasing Sunlight Absorption

Lu Huidong¹ Shen Hongjun¹ Li Lei² Yan Wenjie¹

(¹ School of Physics and Electrical Information, Ningxia University, Yinchuan, Ningxia 750021, China
² College of Physics and Communication Electronics, Jiangxi Normal University, Nanchang, Jiangxi 330022, China)

Abstract A kind of amorphous silicon(a-Si) thin film solar cell structure, which has an antireflection (AR) coating and a back reflector, is presented. The AR coating consists of four dielectric materials with refractive index from low to high. The back reflector consists of a triangle dielectric diffraction grating and a one-dimensional photonic crystal structure. The parameters of the dielectric layers and the grating are optimized by rigorous coupled wave analysis and plane wave theory method. The reflection efficiency of the AR coating and back reflector with incident angle range of $0^\circ \sim 60^\circ$ are calculated numerically. The results show that the AR coating has high transmission within the wavelength range of 300~750 nm and the back reflector has high reflection within the wavelength range of 600~750 nm. For the a-Si thin film solar cell with 700-nm-thick active layer, with incident wave of TM polarization and incident angle which is less than 75° , the solar cell has an average absorptance of 95% after optimizing in wavelength range of 300~750 nm.

Key words thin films; antireflection coatings; diffraction gratings; photonic crystals; absorption; solar energy

OCIS codes 310.1210; 050.1950; 350.4238; 300.1030; 350.6050

1 引言

硅基薄膜太阳能电池的低成本和成熟简便的制造技术使其成为下一代大规模使用的光伏电池中最有力的竞争者。硅基薄膜太阳能电池不仅大幅减少对硅

材料的消耗量, 其极薄的厚度还可显著减少半导体材料中光生载流子在扩散中的复合, 使光生电流更加易于收集。然而薄膜结构缩短了光子在电池活性层中的路径, 光吸收效率也随之降低。限制非晶硅

收稿日期: 2012-12-24; **收到修改稿日期**: 2013-04-06

基金项目: 国家自然科学基金(61167002, 61066002)

作者简介: 卢辉东(1987—), 男, 硕士研究生, 主要从事光子晶体及光栅在太阳能电池中的应用等方面的研究。

E-mail: luhuidong123@126.com

导师简介: 沈宏君(1970—), 男, 博士, 副教授, 主要从事光子晶体光波导及太阳能电池方面的研究。

E-mail: shenhongj2004@126.com(通信联系人)

(a-Si)薄膜太阳能电池效率的一个主要因素是长波长光子的吸收厚度与薄的活性层之间的矛盾,而增加陷光是提高硅基薄膜太阳能电池效率的主要途径^[1-7]。因此,在电池表面制备光学结构以增强电池对光子的吸收,是提高薄膜太阳能电池光电转换效率的一种重要方法。通常是在电池上表面加增透(AR)膜和在电池底部增加有皱纹的背反射层。Chhajed等^[7]研究并实验制作出具有高透射率的增透膜,三层折射率渐变增透膜的最大优点是入射角在 $0^\circ \sim 90^\circ$ 范围和整个波段内都有低的反射率。Springer等^[8]研究了一种银表面涂有氧化锌的背反射层,因为金属存在着固有损耗,对于不同皱纹的银背反射层,650 nm激光的吸收损耗为 $3\% \sim 8\%$ 。选择没有吸收损耗的折射率渐变介质材料做增透膜和选择衍射光栅、光子晶体做背反射层是一种有益的尝试^[3,9]。

本文设计了一种增加光吸收的非晶硅薄膜太阳能电池结构,包括增透膜、活性层和背反射层。利用严格耦合波理论对所建模型在入射光波长为 $300 \sim 750$ nm、TM偏振状态下电池各部分的光学特性进行了模拟计算。

2 结构设计

图1为增加光吸收的非晶硅薄膜太阳能电池的示意图,从电池顶部向下分别为 SiO_2 膜层,ITO膜层, TiO_2 膜层,晶体硅膜层,a-Si活性层,三角介质衍射光栅和一维光子晶体层,它们的厚度分别为 $d_1, d_2, d_3, d_4, d_5, h$ 和 d_6 。ITO的折射率取1.9,晶体硅的折射率取3.5,由于 SiO_2 和 TiO_2 在可见光范围具

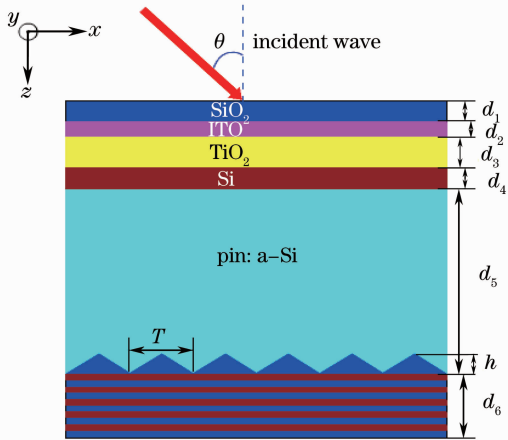


图1 增加非晶硅薄膜太阳能电池吸收的结构设计示意图
Fig. 1 Schematic of the designed structure for improving the absorption of the amorphous Si thin film solar cell

有较大的色散,为了符合实际, SiO_2 的折射率色散可用柯西公式计算得出,即

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

式中 $A = 1.491, B = 0.00686, C = -0.0007648$ 。 TiO_2 的折射率色散公式为

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

(1)、(2)式中波长 λ 的单位为微米。介质衍射光栅的周期 T 固定为 $1 \mu\text{m}$,一维光子晶体由 Si/SiO_2 组成。

3 参数优化

利用严格耦合波理论^[8,10]数值模拟所设计的结构。采用Matlab软件编程计算,可以得到增透膜的透射率、背反射层的反射率和电池的光吸收率。增透膜为4层折射率渐变材料,通过数值模拟各层厚度和透射率的关系,得到最优厚度分别为 $d_1 = 120$ nm, $d_2 = 80$ nm, $d_3 = 50$ nm, $d_4 = 20$ nm。图2为经过优化增透膜各层厚度得到的TM偏振的反射谱,其中蓝色表示高透射。由图2可知,入射角度小于 70° ,波长在 $300 \sim 750$ nm范围时增透膜的透射率很高,光容易进入电池活性层。入射角度大于 70° 时,随着入射角度的增大,透射率迅速下降。对于太阳能电池的增透膜来说,着重考虑的是入射角度在 $0^\circ \sim 60^\circ$ 范围内。入射角度过大,意味着太阳处在刚刚升起或快要落下的状态,此时太阳光强不会很强^[11]。非晶硅活性层材料缺陷态较多,非晶硅电池通常采用pin型结构。p层、n层为电池内建电场产生的来源,厚度在几纳米到几十纳米之间;i层的厚度是提高电池转化效率的关键,在一般情况下i层的厚度在 $400 \sim 700$ nm之间。选择pin型非晶硅厚度 $d_5 = 700$ nm。背反射层为三角形衍射光栅加一维光子晶体结构,为有效抑制低阶衍射,增加高阶衍射,进而达到最高的衍射效率,并使再次反射回活性层的光子沿电池的横向传播以增加光程,选取三角形光栅的槽深度为 $h = 480$ nm^[12]。一维光子晶体由不同介质材料Si和 SiO_2 交替组成,Si层的厚度 $a = \lambda/(4n_1)$, SiO_2 的厚度 $b = \lambda/(4n_2)$,其中 n_1 和 n_2 分别为Si和 SiO_2 的折射率。改变中心波长时,这种类型的一维光子晶体可以充当光在一定频率范围的布拉格反射镜。这里为了在长波长范围有高反射率,选取中心波长为 600 nm,对应的Si和 SiO_2 的折射率为3.5和1.5, $a = 43$ nm, $b = 100$ nm,周期厚度 $A =$

$a+b=143$ nm。利用平面波展开法^[13]计算了出现第一完全带隙时归一化频率 $[\omega a/(2\pi c)]$,其中 ω 为入射光波频率, c 为光速]为 $0.179\sim 0.306$,对应的波长为 $467\sim 799$ nm。此范围的波长不能在 Si/SiO₂ 的一维光子晶体中传播,即 100% 反射回活性层,保证了背反射层的高反射。为了减小背反射层的厚度,5 个周期层可以达到所要求的高反射^[14],其总厚度 $d_6=715$ nm。图 3 为 TM 偏振状态下,入射光从空气射入三角形介质衍射光栅与 Si/SiO₂ 一维光子晶体的反射光谱,其中红色表示高反射。由图 3 可知,入射角在 $0^\circ\sim 60^\circ$ 范围内,结构对 $430\sim 750$ nm 的入射光有很高的反射率,故这种背反射层具有高效全方位的特点。

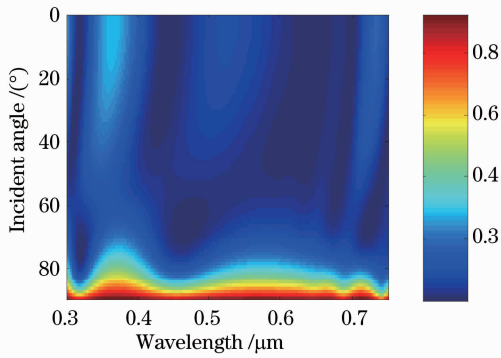


图 2 增透膜的反射光谱

Fig. 2 Reflection spectrum of AR coating

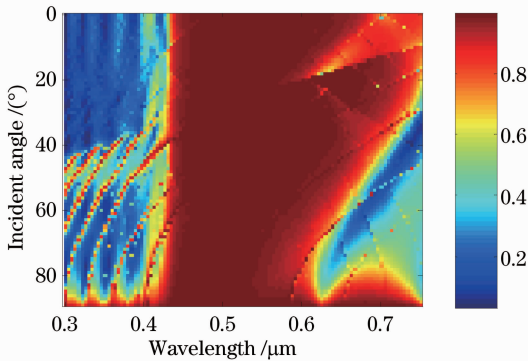


图 3 三角形介质光栅加一维 Si/SiO₂ 光子晶体的反射光谱

Fig. 3 Reflection spectrum of triangle dielectric grating and one-dimensional Si/SiO₂ photonic crystal

4 数值模拟和讨论

严格耦合波理论是对麦克斯韦方程组的严格求解,利用该方法可以计算出不同波长的入射平面波在电池前表面的反射率 $R(\lambda)$ 和在电池背表面的透射率 $T(\lambda)$,从而得到吸收率为 $A(\lambda) = 1 - R(\lambda) -$

$T(\lambda)$ 。在数值模拟中,为了避免出现数值不稳定,通常使用增强透射矩阵方法,这种方法对于 TM 和 TE 偏振状态的入射光可以获得收敛、稳定的解^[15-16]。

图 4 为 TM 偏振状态下不同入射角度的吸收图谱。由图 4 可知,如果没有增透膜,光在空气和非晶硅的界面仅有 50% 左右的光子被反射而不能进入活性层。增透膜的作用是让更多的光子进入电池活性层,从而提高电池对光子的吸收。非晶硅具有良好的弱光效应,对于 700 nm 厚的电池活性层,可以吸收 300~600 nm 波长范围内的光子。因此,背反射层主要接收到的波长是在 600~750 nm 范围内,三角形衍射光栅和一维光子晶体组成的背反射层可以使该波段光子再次反射回电池内进行吸收,大幅提高了电池对该波段太阳光的吸收效率。

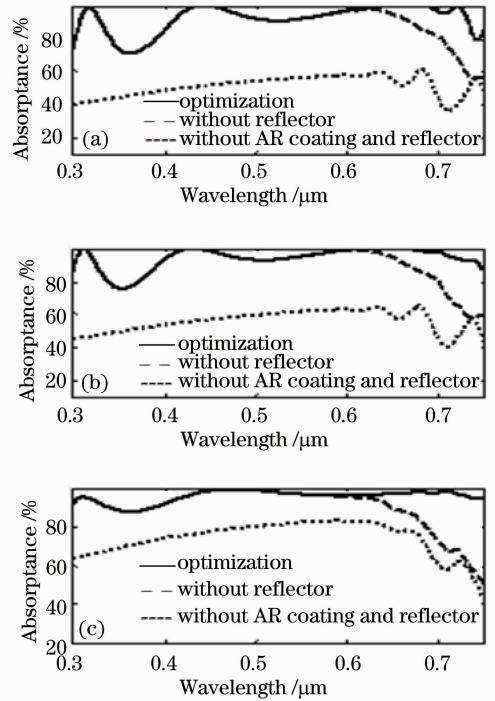


图 4 不同入射角的 TM 偏振光吸收效率。(a) $\theta=0^\circ$;
(b) $\theta=30^\circ$;(c) $\theta=60^\circ$

Fig. 4 Light absorbance for TM polarized waves with different incident angles. (a) $\theta=0^\circ$;(b) $\theta=30^\circ$;(c) $\theta=60^\circ$

图 5 和图 6 分别为增透膜和背反射层对光吸收的增强。由图 5 和图 6 可知,随着入射角度的增大,增透膜对活性层吸收光子的强化作用下降,说明电池上表面反射回空气的光子增多。对于背反射层恰恰相反,当光子到达活性层与背反射层界面时,入射角度越大,背反射层的反射率越高,更能提高活性层对 600~750 nm 波长范围内入射光的吸收。

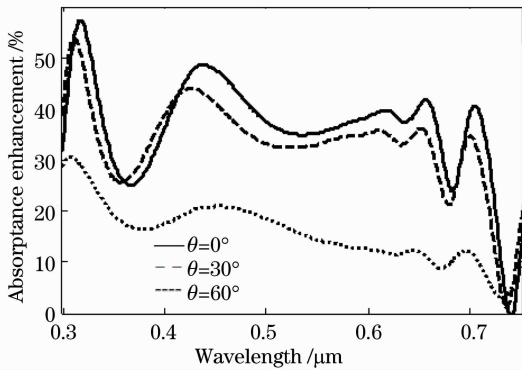


图 5 增透膜对吸收的增强

Fig. 5 Absorbance enhancement of AR coating

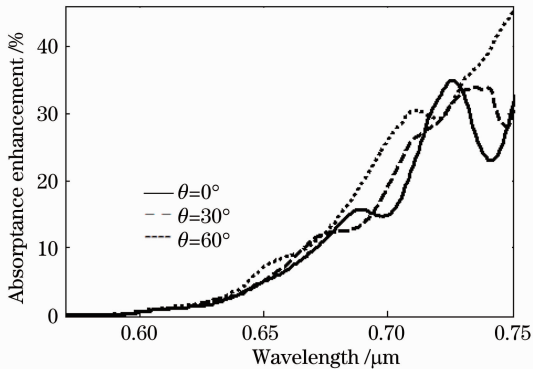


图 6 背反射层对吸收的增强

Fig. 6 Absorbance enhancement of back reflector

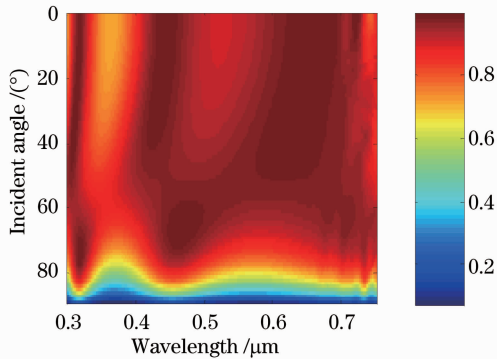


图 7 太阳能电池吸收光谱

Fig. 7 Absorbance spectrum of the solar cell

图 7 为 TM 偏振状态下入射角度在 $0^\circ \sim 90^\circ$ 之间, 波长在 $300 \sim 750 \text{ nm}$ 之间的吸收光谱, 红色表示高吸收率。由图 7 可知, 当入射角小于 75° 时, 电池在 $300 \sim 750 \text{ nm}$ 波长范围内平均吸收率为 95% 。

5 结 论

设计了一种能够有效增加光吸收的非晶硅薄膜太阳能电池结构。利用严格耦合波理论和平面波展开法优化了各层的厚度。增透膜由折射率渐变的 4 层

介质材料组成, 总厚度为 270 nm , 用于提高电池对光的吸收。为了使电池更充分吸收 $600 \sim 750 \text{ nm}$ 长波长光子, 设计了由三角形介质衍射光栅和一维光子晶体结构组成的背反射层, 衍射光栅厚度为 480 nm , 一维光子晶体的总厚度为 715 nm 。在一维光子晶体保证高反射率的同时, 三角形衍射光栅增加了高阶衍射, 使得反射回活性层的光沿着电池的侧向传播, 有效地延长了光子在活性层的传播路径, 增加了电池对光的俘获能力。数值模拟计算了 TM 偏振状态下的吸收图谱, 对于厚度为 700 nm 的活性层, 该新结构能有效地增加非晶硅薄膜太阳能电池对光的吸收, 从而提高转化效率。

参 考 文 献

- 1 P Bermel, C Luo, L Zeng, *et al.*. Improving thin-film crystalline silicon solar cell efficiencies with photonic crystals [J]. *Opt Express*, 2007, 15(25): 16986–17000.
- 2 D Y Zhou, R Biswas. Photonic crystal enhanced light-trapping in thin film solar cells [J]. *J App Phys*, 2008, 103(9): 093102.
- 3 L Zeng, Y Yi, C Y Hong, *et al.*. Efficiency enhancement in Si solar cells by textured photonic crystal back reflector [J]. *Appl Phys Lett*, 2006, 89(11): 111111.
- 4 W Zhang, G G Zheng, X Y Li. Design of light trapping structures for light-absorption enhancement in thin film solar cells [J]. *Optik*, 2013, 124(6): 2531–2534.
- 5 G G Zheng, F L Xian, X Y Li. 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.
- 6 Zhou Zhou, Zhou Jian, Sun Xiaowei, *et al.*. Design of an irregularly shaped DBR for thin film solar cells [J]. *Acta Optica Sinica*, 2011, 31(7): 0731002.
周 舟, 周 健, 孙晓玮, 等. 薄膜太阳能电池异型布拉格背反射结构设计 [J]. *光学学报*, 2011, 31(7): 0731002.
- 7 S Chhajed, M F Schubert, J K Kim, *et al.*. Nanostructured multilayer graded-index antireflection coating for Si solar cells with broadband and omnidirectional characteristics [J]. *App Phys Lett*, 2008, 93(25): 251108.
- 8 J Springer, A Poruba, L Mullerova, *et al.*. Absorption loss at nanorough silver back reflector of thin-film silicon solar cells [J]. *J Appl Phys*, 2004, 95(3): 1427–1429.
- 9 M G Moharam, Eric B Grann, Drew A Pommet, *et al.*. Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings [J]. *J Opt Soc Am A*, 1995, 12(5): 1068–1076.
- 10 Kong Weijin, Yun Maojin, Cui Chunling, *et al.*. Diffraction property of multi-layer dielectric grating with trapezium groove [J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, 28(7): 1415–1419.
孔伟金, 云茂金, 崔春玲, 等. 梯形介质膜光栅衍射特性分析 [J]. *光学学报*, 2008, 28(7): 1415–1419.
- 11 Chen Fengxiang, Wang Lisheng. Optimized design of antireflection coating for silicon solar cells with board angle usage [J]. *Acta Energaie Solaris Sinica*, 2008, 29(10): 1262–1266.
陈凤翔, 汪礼胜. 宽角度硅太阳能电池减反射膜的优化设计 [J]. *太阳能学报*, 2008, 29(10): 1262–1266.
- 12 Shen Hongjun, Lu Huidong, Cheng Xuezhen. Back reflectors of thin-film silicon solar cells consisting of one-dimensional diffraction gratings and one-dimensional photonic crystal [J].

Chinese J 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.

- 13 K M Ho, C T Chan, C M Soukoulis. Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures [J]. Phys Rev Lett, 1990, 65(25): 3152–3155.
- 14 J Krc, M Zeman, S L Luxembourg, *et al.*. Modulated photonic-crystal structures as broadband back reflectors in thin-film solar cells [J]. Appl Phys Lett, 2009, 94(15): 153501.
- 15 Kong Weijin, Wang Shuhao, Wei Shijie, *et al.*. Diffraction

property of broadband metal multi-layer dielectric gratings based on rigorous coupled-wave analysis [J]. Acta Physica Sinica, 2011, 60(11): 114214.

孔伟金, 王书浩, 魏世杰, 等. 基于严格耦合波理论的宽光谱金属介质膜光栅衍射特性分析[J]. 物理学报, 2011, 60(11): 114214.

- 16 Fan Shuwei, Zhou Qinghua, Li Hong. Research of optimization design of groove diffraction grating profile parameters [J]. Acta Optica Sinica, 2010, 30(11): 3133–3139.
- 樊叔维, 周庆华, 李红. 槽型衍射光栅结构参数优化设计研究[J]. 光学学报, 2010, 30(11): 3133–3139

栏目编辑: 张腾