

doi:10.3788/gzxb20144312.1223003

# 基于光栅结构薄膜太阳能电池吸收层结构设计和优化

耿浩珂,孙晓红,张旭,梁建,刘雯

(郑州大学 信息工程学院 河南省激光与光电信息技术重点实验室,郑州 450052)

**摘 要:**设计了一种具有光栅结构砷化镓吸收层的薄膜太阳能电池,利用严格耦合波方法分析了矩形光栅和双层矩形光栅结构砷化镓吸收层在 280~900 nm 入射波长范围内的吸收效率.分析表明:在吸收层厚度一定的条件下,矩形光栅结构相比于平坦形吸收层的吸收率有较大提高;双层矩形光栅吸收效果更为明显,其对可见光的吸收率在较大波长范围内比单层矩形光栅提高了至少 10%,比平坦形提高了至少 20%.可见通过结构设计,光子在光栅内随机反射增加了光在吸收层的作用时间和距离,增强了吸收层对光的吸收率,进而提高薄膜太阳能电池的光电转换效率.

**关键词:**光电子学;吸收层;耦合波分析;吸收光谱;光栅;砷化镓

中图分类号:O431

文献标识码:A

文章编号:1004-4213(2014)12-1223003-5

## Structural Design and Optimization of Absorption of Thin Film Solar Cells Based on Grating Structure

GENG Hao-ke, SUN Xiao-hong, ZHANG Xu, LIANG Jian, LIU Wen

(Henan Key Laboratory of Laser and Opto-electric Information Technology, College of Information Engineering, Zhengzhou University, Zhengzhou 450052, China)

**Abstract:** A thin film solar cell with a grating in the layer was designed to increase the absorption of gallium arsenide thin-film layer. By using rigorous coupled wave method, the absorption efficiency in the range of 280~900 nm was analyzed for GaAs layer with single and double rectangular gratings. When the thickness of absorption layer obtained under certain circumstances, the rate of absorption compared to the rectangular grating structure of the non patterned absorber layer was greatly improved. The absorption rate of double rectangular grating increased by at least 10% over single rectangular grating and 20% over non patterned, which is more obvious. The results indicate that, by designing the structure, random reflection photonic in grating increases the effect of time and distance in the light absorption layer, enhanced the absorption rate and finally improve the photoelectric conversion efficiency of the thin film solar cell.

**Key words:** Optoelectronics; Absorption layer; Coupled wave analysis; Absorption spectra; Grating; GaAs

**OCIS Codes:** 270.5290; 200.0200; 220.0220

## 0 引言

太阳能电池可以将光能转换为电能,但由于光子流失导致太阳能电池光电转换效率普遍不高.造成光子流失的原因主要有两方面,一是吸收层薄膜材料本身对光的吸收率小,二是吸收层的结构不利于光子的

吸收转换.针对第一个问题,需要研究新型的对光转换效率高且吸收波长范围更宽的材料,而对于第二个问题,太阳能电池吸收层可以设计成各种结构,由于光子在不同微纳结构内会产生多种效应,这些效应可以提高吸收层对光子的捕获和转化率.早期的第一代硅电池通过在表面增加各种涂层来提高光的捕获<sup>[1]</sup>;第二

基金项目:国家自然科学基金(No. 11104251)资助

第一作者:耿浩珂(1990-),男,硕士研究生,主要研究方向为光伏太阳能. Email: ghk@snzou.cn

导师(通讯作者):孙晓红(1971-),女,博士,教授,博导,主要研究方向为光通讯、光电子器件. Email: iexhsun@zzu.edu.cn

收稿日期:2014-03-24;录用日期:2014-06-13

<http://www.photon.ac.cn>

代、第三代通过在电池吸收层表面增加纳米颗粒<sup>[2]</sup>、设计光路引导结构<sup>[3]</sup>或者设计吸收层的结构<sup>[4-5]</sup>来增加吸收层光场强度,最终达到提高光子捕获效率的目的.

薄膜太阳能电池相对于传统太阳能电池转换效率低下的主要原因是其对长波长光的吸收能力比较弱<sup>[6-7]</sup>.长波长的光被充分吸收需要传输距离远大于薄膜太阳能电池的厚度,显然薄膜太阳能电池的厚度达不到对长波长光充分吸收的要求.因此,在保持材料低成本优势的基础上提高转化效率,就必须捕捉太阳光谱范围内更宽波长的光子,为达到这一目的,吸收层的各种结构设计被提出.光栅结构由于良好的反射与散射特性被应用于太阳能电池的各个部分,2009年Prieto I等将光栅结构用于太阳能电池窗口层,在较宽波长范围内吸收率可以提高22%,部分波长的吸收率可以提高46%<sup>[8]</sup>.2012年,沈宏君等设计了由一维衍射光栅和一维光子晶体组成的太阳能电池背反射器,其对750~1100 nm波长范围的反射率大于99.5%,在400~750 nm也有很高的反射率<sup>[9]</sup>.

本文通过对吸收层结构进行设计,相比于平坦型吸收层,在不增加材料使用量的情况下实现光子吸收率的提高.通过设计光栅结构和双层光栅结构,利用严格耦合波分析法,通过计算入射波的反射率和透射率最终得到吸收层的吸收率.

### 1 吸收层模型

图1为太阳能电池二维模型,自上而下依次是金属网、ITO、吸收层、银背反射层.

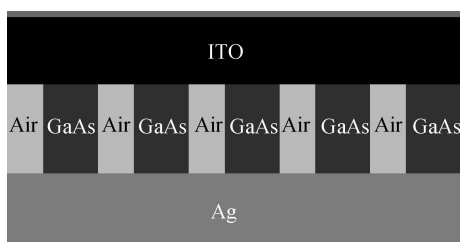


图1 太阳能电池二维模型  
Fig.1 2D solar cell model

入射光进入吸收层被半导体材料吸收后,产生光生载流子被ITO收集并通过银电极和ITO层上层的金属网作为电流导出.

吸收层材料采用砷化镓,砷化镓是一种重要的半导体材料,属III-V族化合物半导体,其禁带宽度比较宽,光谱响应和太阳光谱匹配能力较好,当光线照射到砷化镓上之后,部分光子会被吸收,被吸收的光子一部分被转换为电子,另外一部分转换为热能等其它能量.砷化镓折射率和吸收率与入射波长关系是非线性的,如图2,本文使用其复折射率( $n$ 为折射率实部, $k$ 为折射率虚部)在宏观上对光子吸收率进行计算.

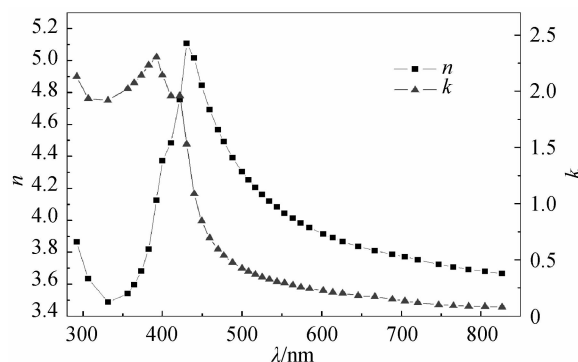


图2 砷化镓材料的折射率  $n$  和吸收系数  $k$   
Fig.2 Refractive index  $n$  and extinction coefficient  $k$  of GaAs

### 2 一维光栅反射率透射率耦合波分析

如图3,光栅在  $y$  方向(垂直纸面)均匀分布,在  $x$  方向上周期性分布,周期为  $T$ ,占空比为  $f$ .光栅在  $z$  方向上分为三层,第一层为空气层( $z < 0$ ),第二层为光栅层( $0 < z < h$ ),光栅厚度为  $h$ ,第三层也为空气层( $z > h$ ).这里的空气层相对于光栅层被认为厚度无穷大,空气层介电常数为  $\epsilon$ .光栅层介电常数具有周期性,即

$$\epsilon(x) = \epsilon(x + T) \tag{1}$$

用傅里叶级数形式展开得

$$\epsilon(x) = \sum_{r=-\infty}^{+\infty} \epsilon_r \exp(i2\pi r x / T) \tag{2}$$

其中傅里叶系数

$$\epsilon_r = \frac{1}{T} \int_0^T \epsilon(x) \exp(-i2\pi r x / T) \tag{3}$$

当波长为  $\lambda$  的平面波从一区以角度  $\theta$  入射进入矩形光栅时,需满足光栅方程<sup>[10]</sup>

$$n_i \sin \theta_m - n_i \sin \theta = \frac{m\lambda}{T} \tag{4}$$

式中  $n_i$  为光栅介质的折射率,  $m$  为衍射级次,  $\theta_m$  为第  $m$  级衍射角.

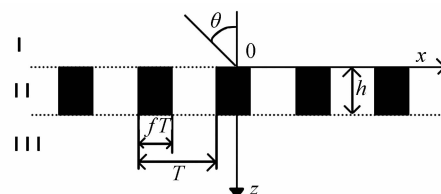


图3 一维矩形光栅结构吸收层示意图  
Fig.3 Schematic view of the investigated complete patterned stack

耦合波分析给出了光栅衍射电磁场边值问题麦克斯韦方程组的精确解<sup>[11-13]</sup>.将入射光分为TE和TM偏振分量,由麦克斯韦方程组导出稳态分析方程为

$$\nabla \times (\mu_r^{-1} \nabla \times \mathbf{E}) - k_0^2 \left( \epsilon_r - \frac{j\sigma}{\omega\epsilon_0} \right) \mathbf{E} = 0 \tag{5}$$

$$\nabla \times \left( \left( \epsilon_r - \frac{j\sigma}{\omega\epsilon_0} \right)^{-1} \nabla \times \mathbf{H} \right) - k_0^2 \mu_r \mathbf{H} = 0 \tag{6}$$

由式(5)、(6)得到入射介质层和基底层电磁场的

表达式;利用傅里叶级数展开光栅层的介电常数,推导出耦合波微分方程组;在不同的区域边界上运用电磁场边界条件,求解 TE 和 TM 偏振分量的各个透射和反射级次的振幅和效率,得到吸收层吸收率。

在没有特别说明的情况下,本文计算的所有结果均为 TE 偏振分量垂直入射( $\theta=0$ )条件下得到的。

### 3 数值模拟与分析

#### 3.1 矩形光栅吸收效率分析

当光线向吸收层入射时,平坦形结构由于入射面平整,大部分被反射回去的光线将不能进入吸收层被吸收.而将吸收层刻蚀成光栅结构之后,光在吸收层内随机反射使传播时间和距离变长<sup>[14-15]</sup>,增加了光栅区域光场强度<sup>[16]</sup>,使更多的光子能够有机会与吸收层作用最终提高吸收效率。

设矩形光栅周期  $T=400\text{ nm}$ , 填充因子  $f=0.675$ ,图 4 给出了该矩形光栅结构在入射波长为  $280\sim 900\text{ nm}$  时吸收率变化曲线,以相同厚度的平坦形吸收层吸收率曲线作为对比。

从图 4 可以看出,入射光波长在  $280\sim 850\text{ nm}$  范

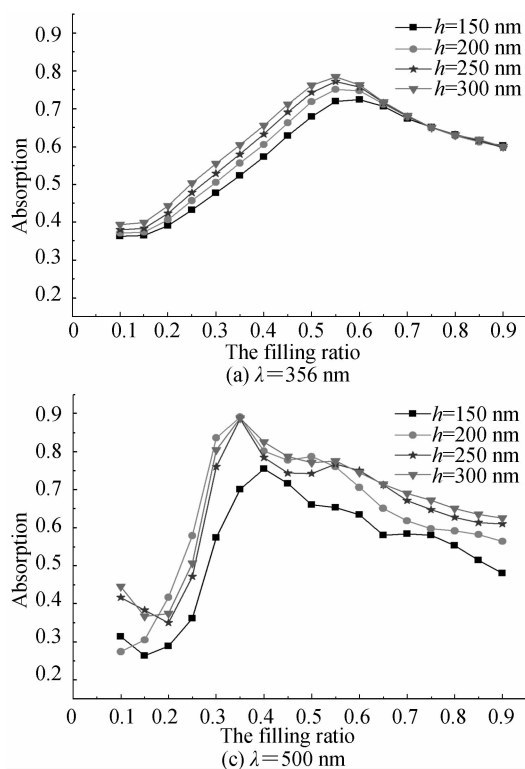


图 5 不同入射波长( $\lambda$ )下填充比对吸收率影响

Fig. 5 Effect of the filling factor on the absorption efficiency under different wavelength( $\lambda$ )

从图 5 中可以看出,当入射波长小于等于光栅周期时,光栅吸收率大小主要取决于刻槽深度,在填充比一定的情况下,刻槽深度越大吸收率越高,但并不明显.同时光栅填充比对吸收率影响也比较大,入射波长为  $356\text{ nm}$  时,填充比在  $0.55$  左右吸收率达到最大;入

围内,在厚度相同的条件下,当矩形光栅填充比为  $0.675$  时,吸收率比平坦结构在整体上高出了至少  $10$  个百分点。

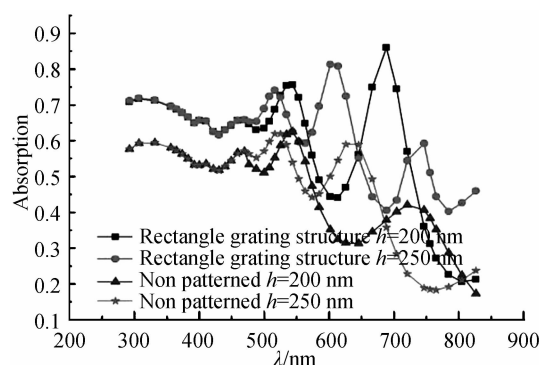
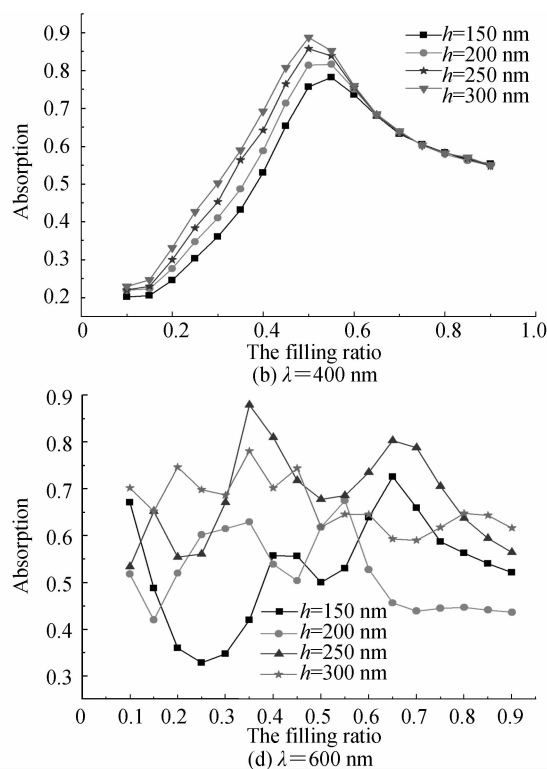


图 4 具有砷化镓一维光栅结构的砷化镓吸收层的吸收效率  
Fig. 4 Effect of 1D patterning on the absorption spectra of an isolated GaAs layer

图 5 给出了入射光波长为  $356\text{ nm}$ 、 $400\text{ nm}$ 、 $500\text{ nm}$ 、 $600\text{ nm}$  时矩形光栅(周期  $T=400\text{ nm}$ )吸收率随填充比变化的曲线。



射波长为  $400\text{ nm}$  时,填充比在  $0.5$  左右吸收率达到最大;入射波长为  $500\text{ nm}$  时,填充比在  $0.35$  左右吸收率达到最大,此时已经出现曲线的相交,刻槽深度不再是影响吸收率的唯一因素;当入射波长为  $600\text{ nm}$ ,各曲线相交部分特别多且起伏也比较多,光栅填充比对各

个波长入射光吸收率的影响较明显,刻槽深度为 250 nm 时各个填充比下的吸收率普遍高于深度更深的 300 nm. 因此可得:当入射波长小于光栅周期时,光栅吸收层吸收率主要受吸收材料多少和光子接触面积影响,光栅厚度一定的情况下,吸收率会在某个填充比附近达到最大值;当入射波长大于光栅周期时,光栅吸收层吸收率不仅受吸收材料多少与光子接触面积的影响,受填充比影响的效果也非常明显,这是由于不同填充比下光子在光栅结构上形成的光场强度分布不同造成的,综合各因素影响,可以找到吸收效果最好的结构参数.

### 3.2 双层光栅吸收层结构优化设计

基于分析研究,设计了具有不同填充比的双层光栅结构吸收层. 设计思路为:双层光栅的第一层设计为填充比较小的光栅,重点吸收某一频率范围的光波,同时较小的填充比有利于未被吸收的光波透过,第二层针对上一层没有充分吸收的光波进行再次吸收,最终提高可见光波段的整体吸收率. 设计结构如图 6.

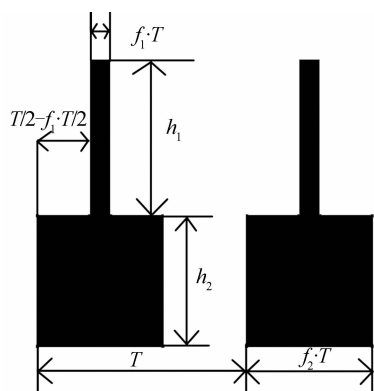


图 6 双层光栅结构

Fig. 6 Double rectangular grating structure

结构周期  $T=400$  nm, 第一层厚度  $h_1=300$  nm, 填充比  $f_1=0.1$ ; 第二层厚度  $h_2=250$  nm, 填充比  $f_2=0.675$ ; 该结构与厚度为 250 nm、周期为 400 nm、填充比为 0.625 的单层矩形光栅和厚度为 250 nm 的平坦形吸收层吸收率对比曲线如图 7.

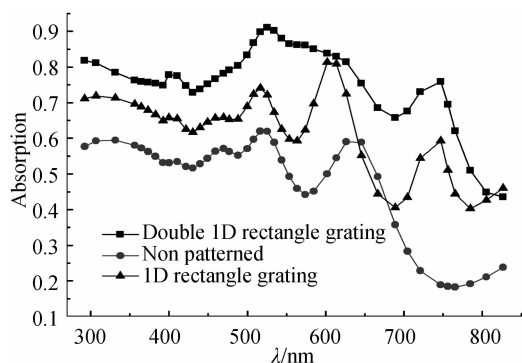


图 7 双层、单层光栅、平板形吸收率

Fig. 7 Absorption of double, single rectangular grating and non patterned structure

由图可知,在填充比为 0.675 的矩形光栅正上方加一个填充比为 0.1 的光栅后,入射波长在 300~800 nm 时,双层光栅结构对光的吸收率有了显著提高,在较宽波长范围内,其吸收率提高了 10% 以上,部分波长吸收率可以提高 25%.

## 4 结论

本文设计了两种太阳能电池吸收层光栅结构,通过严格耦合波法分析了该结构的吸收率. 与平坦型结构的吸收率相比,填充比为 0.675、厚度为 200 nm、周期为 400 nm 的矩形光栅结构的吸收率有了明显提高,在波长为 689 nm 时,矩形光栅吸收率达到了 86%,比同样厚度的平坦形吸收率提高了 50%. 但单层光栅结构对入射光吸收率提高的波长范围有限,为了使可见光各个波长的吸收率都有较大提高,设计了双层光栅结构,通过增加较小填充比的第一层光栅来重点吸收第二层光栅结构不容易吸收的光波,相比单层光栅对可见光波段各个波长吸收率有明显提高,特别是入射波长为 524 nm 时,吸收率提高到了 91%. 矩形光栅结构相比于平坦形增加了光子在吸收层的作用时间和距离,增强了吸收层的光场强度,吸收层光子吸收率得到了明显提高. 该研究为制备高效率高性能太阳能电池结构提供了参考依据.

### 参考文献

- [1] MEIER J, KRÖLL U, VALLAT-SAUVAIN E, *et al.* Amorphous solar cells, the micrograph concept and the role of VHF-GD deposition technique [J]. *Solar Energy*, 2004, **77** (6): 983-993.
- [2] ZHUANG Tao-jun, SU Zi-sheng, LIU Ya-dong, *et al.* Enhanced performance of small molecular weight organic solar cells by incorporating Ag nanoparticles [J]. *Chinese Journal of Lumin*, 2011, **32**(12): 1266-1270.  
庄陶钧, 苏子生, 刘亚东, 等. Ag 纳米颗粒对有机小分子太阳能电池性能的改善 [J]. *发光学报*, 2011, **32**(12): 1266-1270.
- [3] EBBESEN T W, GENET C. Light in tiny holes [J]. *Nature*, 2007, **445**(4): 39-46.
- [4] ZHANG Xu, SUN Xiao-hong, JIANG Liu-di. Absorption enhancement using nanoneedle array for solar cell [J]. *Applied Physics Letters*, 2013, **103**(21): 211110.
- [5] HAO Yu, SUN Xiao-hong, SUN Yan, *et al.* Grating based absorption layer for enhanced absorption in gallium arsenide solar cells [J]. *Chinese Journal of Lumin*, 2013, **34**(6): 769-775.  
郝宇, 孙晓红, 孙焱, 等. 基于光栅结构的砷化镓高效率吸收层设计 [J]. *发光学报*, 2013, **34**(6): 769-775.
- [6] LI Xiao-wei, TAN Qiao-feng, JIN Guo-fan. Surface profile optimization of antireflection gratings for solar cells [J]. *Optik*, 2011, **23**(122): 2078-2082.
- [7] SIMONE Z, MARCO L, LUCIO C A. Light trapping regimes in thin-film silicon solar cells with a photonic pattern [J]. *Optics Express*, 2010, **18**(5): 4260-4274.
- [8] PRIETO I, GALIANA B, POSTIGO P A, *et al.* Enhanced quantum efficiency of Ge solar cells by a two-dimensional photonic crystal nanostructured surface [J]. *Applied Physics Letters*, 2009, **94**(19): 191102.

- [9] SHEN Hong-jun, LU Hui-dong, CHENG Xue-zhen. Back reflectors of thin-film silicon solar cells consisting of one-dimensional diffraction Grating and one-dimension photonic crystal[J]. *Chinese Journal of Lumin*, 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.
- [10] MARCIANTE J R, FARMIGA N O, HIRSH J I, *et al.* Optical measurement of depth and duty cycle for binary diffraction gratings with subwavelength features[J]. *Applied Optics*, 2003, **42**(16):3234-3240.
- [11] MOHARAM M G, GRANN E B, POMMET D A. Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings[J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 1995, **12**(5):1068-1076.
- [12] YANG Li-Ming, YA Guo-Guang. Rigorous diffraction analysis for small periods binary optical system [J]. *Acta Optica Sinica*, 1999, **19**(1):106-112.  
杨李茗,杨国光.小周期二元光学元件的矢量分析[J]. *光学学报*, 1999, **19**(1):106-112.
- [13] MOHARAM M G, POMMET D A, GRANN E B. Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings enhanced transmittance matrix approach[J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 1995, **12**(5):1077-1086.
- [14] PING S, BLOCH A N, STEPLEMAN R S. Wavelength-selective absorption enhancement in thin-film solar cells[J]. *Applied Physics Letters*, 1983, **43**(6):579-581.
- [15] HEINE C, MORF R H. Submicrometer gratings for solar energy applications[J]. *Applied Optics*, 1995, **34**(14):2476-2482.
- [16] YAN Hui, GU Pei-fu. Computation and analysis of electric field distribution in one-dimensional gratings[J]. *Journal of Zhejiang University(Engineering Science)*, 2008, **42**(2):299-302.  
严晖,顾培夫.一维光栅结构中电场分布的计算分析[J]. *浙江大学学报(工学版)*, 2008, **42**(2):299-302.