

doi: 10.3788/gzxb20164502.0223003

一维和双层二维光子晶体太阳能电池背反射器

武振华¹, 李思敏², 张文涛¹, 高凤艳¹

(1 桂林电子科技大学 电子工程与自动化学院 广西高校光电信息处理重点实验室, 广西 桂林 541004)

(2 广西科技大学, 广西 柳州 545006)

摘要:利用 a-Si:H 和 SiO₂ 等介质, 设计了一种由一维光子晶体和双层二维光子晶体组成的非晶硅薄膜太阳能电池背反射器. 利用时域有限差分法对该背反射器在入射光波长范围为 300~1100 nm 波段的反射率和透射率进行仿真, 计算不同结构参量下非晶硅太阳能电池短路电流密度并进行比较分析, 最终得到了最佳背反射器结构. 结果表明: 设计的太阳能电池背反射器能够有效地延长入射光在太阳能电池吸收层的传播路径, 有助于缓解太阳能电池吸收层厚度对电池吸收效率的影响, 提高了电池吸收层对入射光的吸收效率. 一维光子晶体和双层二维光子晶体结构的背反射器可以大幅度提高电池的光捕获能力, 将非晶硅薄膜太阳能电池的短路电流密度提高到 31.96 mA/cm², 较常用的 Ag/ZnO 背反射器结构非晶硅薄膜太阳能电池提高了 51.0%.

关键词:光子晶体; 反射器; 时域有限差分; 非晶硅薄膜太阳能电池; 传播路径; 反射率; 光捕获

中图分类号: O431

文献标识码: A

文章编号: 1004-4213(2016)02-0223003-5

Back Reflector of Solar Cells Consisting of One-dimensional Photonic Crystal and Double-layered Two-dimensional Photonic Crystal

WU Zhen-hua¹, LI Si-min², ZHANG Wen-tao¹, GAO Feng-yan¹

(1 Guangxi Colleges and Universities Key Laboratory of Optoelectronic Information Processing, Institute of Electrical Engineering and Automation, Guilin University of Electronic Technology, Guilin, Guangxi 541004, China)

(2 Guangxi University of Science and Technology, Liuzhou, Guangxi 545006, China)

Abstract: A highly efficient back reflector of amorphous silicon thin-film solar cells, which is consisting of one-dimensional photonic crystal and double-layered two-dimensional photonic crystal was designed by medium a-Si:H and SiO₂. The structure parameters of the back reflector were optimized by calculating its reflectivity and transmissivity at the range of 300~1100 nm by the finite difference time domain method. The optimal structure was obtained by the calculation and comparison of the short circuit current density in different structural parameters. The results show that the propagation path of photon in the cells can be extended and it can help to reduce the influence of the absorption layer's thickness on the efficiency of the cells, and improve the absorption efficiency of the battery. So the highly efficient back reflector can greatly enhance the capacity of light harvesting and improve the short circuit current density to 31.96 mA/cm², which is increased by 51.0% comparing with the solar cell with metallic back reflector of Ag/ZnO that is widely used now.

Key words: Photonic crystal; Reflector; Finite difference time domain; Amorphous silicon thin-film solar cells; Propagation path; Reflectivity; Light trapping

OCIS Codes: 230.5298; 160.5293; 160.5298; 230.0250

基金项目: 广西自然科学基金(Nos. 2014GXNSFGA118003, 2013GXNSFDA019002)、广西教育厅基金(No. ZD2014057)和桂林市科学研究与技术开发项目(No. 20140127-1)资助

第一作者: 武振华(1989-), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为光子晶体. Email: wuzhenhua_1989@163.com

导师(通讯作者): 李思敏(1963-), 男, 教授, 博士, 主要研究方向为天线、微波电路、电磁脉冲通讯系统和电磁场理论与数值计算. Email: siminl@guet.edu.cn

收稿日期: 2015-08-18; **录用日期:** 2015-10-09

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

0 引言

非晶硅薄膜太阳能电池以其低成本、可弯曲、便于批量生产等优点被广泛应用于光伏发电系统^[1-2],但目前它的光能转化效率只能达到10%左右^[3-4],这是由于非晶硅薄膜太阳能电池的光子吸收层一般都小于1 μm,光子在电池吸收层的光程较短,导致其对长波光子的吸收率较低^[4-6].为了提高非晶硅薄膜太阳能电池对光能的转化效率,可在吸收层背部增加高效背部反射器,将其透过吸收层的光再反射回吸收层,提高入射光利用率^[7].

目前常用的背反射器是Ag/ZnO和Al/ZnO金属反射器^[8-10].这两种金属反射器在较宽频域内具有较高的反射率,但金属反射器在反射和散射入射光的同时,金属表面也会吸收一部分光能,即光在其表面每反射一次就会损失3%~8%的能量^[11-12],这就使得Ag/ZnO和Al/ZnO金属反射器无法获得较高的反射率;此外,金属元素易于扩散,在室外环境使用一段时间后,金属离子容易扩散到太阳能电池内部,破坏太阳能电池的稳定性,影响电池性能^[11].

光子晶体是由不同介电常量物质在空间成周期性排列而形成的,具有光子禁带^[13-15].因此,可以通过改变光子晶体的材料和结构来控制光子晶体的光子禁带,以满足对特定波段电磁波反射的需要.

本文设计了一种由一维光子晶体和双层二维光子晶体结构组成的背反射器.基于此结构的太阳能电池背反射器可以大幅度增加入射光在电池吸收层的光程,从而提高太阳能电池的转换效率.

1 结构与数值模拟

电池整体结构如图1,将一维光子晶体放置于电池底层,双层二维光子晶体分别放置于电池吸收层的上层和下层.一维光子晶体结构可以在其光子禁带中获得接近100%的高反射率,双层二维光子晶体可以将入射光多次以很大的角度反射回吸收层.

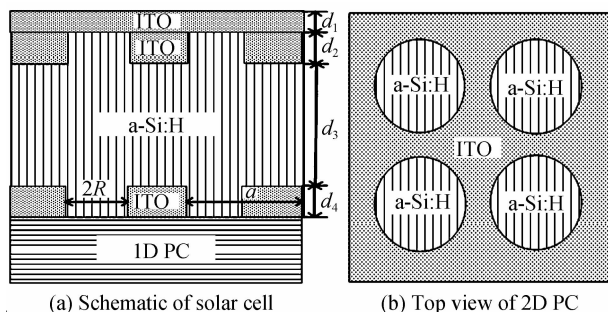


图1 一维和双层二维光子晶体背反射器非晶硅薄膜太阳能电池结构示意图

Fig. 1 Schematic of amorphous silicon thin-film solar cells with 1D and double-layered 2D Photonic Crystal back reflector

太阳能电池主要吸收太阳光谱中波长范围在300~1 100 nm的入射光^[16-18].非晶硅薄膜太阳能电池的吸收层是a-Si:H,其厚度一般为500 nm,可以对波长小于600 nm的光波进行有效地吸收^[12],所以一维光子晶体结构光子禁带的频带范围应该设计为600~1 100 nm,而对太阳能电池数值计算的入射光波长范围应为300~1 100 nm.

1.1 一维光子晶体的数值分析

一维光子晶体是由介电常量不同的两种介质薄层在一个方向上以不同的厚度周期堆积而成的,其光子禁带与两种介质层的厚度、折射率以及周期数有关^[11].组成一维光子晶体的两种介质的光学厚度分别表示为 $d_1 = \lambda_0 / 4n_1$, $d_2 = \lambda_0 / 4n_2$,其中 λ_0 为光子禁带的中心波长, n_1 和 n_2 分别为两种介质的折射率.

以两种介质的折射率为研究对象,固定中心波长和周期数,取光子禁带中心波长 $\lambda_0 = 800$ nm,周期 $N = 4$,逐渐改变两种介质的折射率,使两种介质的折射率差在0.5~3.5逐渐增加,分别对其反射率进行模拟计算.如图2,将反射率大于0.99的部分定义为光子禁带,其宽度随着两种介质折射率比值的增大而增大.

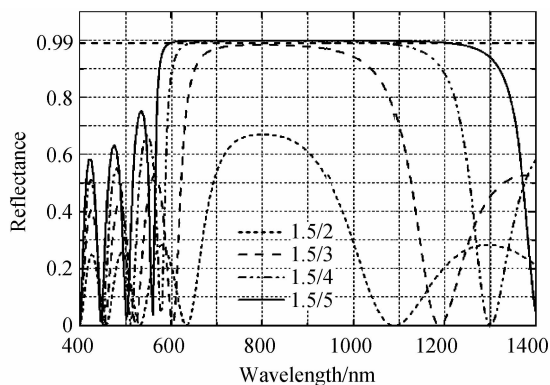


图2 两种介质折射率比与光子禁带的关系

Fig. 2 Refractive index ratio vs. photonic band gap

本文选取两种常见的介质SiO₂和a-Si:H堆砌成一维光子晶体,这两种介质的折射率分别为 $n_{\text{SiO}_2} = 1.46$ 和 $n_{\text{a-Si:H}} = 4$ ($\lambda = 650$ nm),其折射率比较大,并且这两种介质很容易与太阳能电池吸收介质耦合.当取光子禁带中心波长 $\lambda_0 = 800$ nm时,两种介质层的周期厚度分别为 $d_{\text{SiO}_2} = 130$ nm和 $d_{\text{a-Si:H}} = 50$ nm.

以一维光子晶体周期数 N 为研究对象,固定两种介质的周期层厚度,使一维光子晶体的周期 N 从1逐渐增加到5,模拟计算对应一维光子晶体的反射率.同样将反射率大于0.99的部分定义为光子禁带,如图3,可以看出光子禁带宽度随着两种介质周期数 N 的增加而增加.当周期数 $N = 5$ 时,一维光子晶体在波长范围为600~1 100 nm时反射率大于99%,满足设计需要.

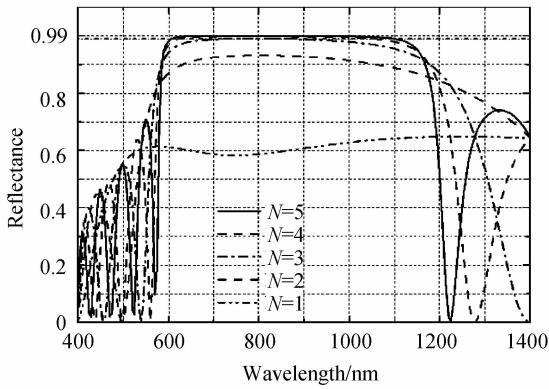


图3 一维光子晶体周期数与光子禁带的关系
Fig.3 Period of 1D PC vs. photonic band gap

1.2 双层二维光子晶体的数值分析

二维光子晶体的结构如图1(b),在ITO(Indium Tin Oxides, ITO)层中,半径为 R 的非晶硅圆柱体以晶格常量为 a 的正方格子呈周期排列,其厚度为 d_2 ,填充因子为 f_0 ,两层二维光子晶体取相同的结构参量。

以二维光子晶体填充率 f 为研究对象,当二维光子晶体介电函数虚部 $\epsilon(G)$ 取得最大值时,二维光子晶体的衍射效率最高,即二维光子晶体的散射效果最佳。二维光子晶体的介电函数的虚部可表示为^[18]

$$\epsilon(G) = f(\epsilon_{\text{a-Si}} - \epsilon_{\text{ITO}}) \frac{2J_1(GR)}{GR} \quad (1)$$

式中, $f = \pi R^2/a^2$ 是二维光子晶体的填充因子。当 $R/a = 0.38$ 时, $\epsilon(G)$ 取得最大值。在其他参量不变的情况下,二维光子晶体获得最大衍射率,此时填充因子 $f \approx 0.45$ 。假定非晶硅薄膜太阳能电池只有吸收层可以吸收入射光,不计其它介质对光的吸收。对该结构太阳能电池进行数值计算,得到太阳能电池的反射率 $R(\lambda)$ 和透射率 $T(\lambda)$,从而可将太阳能电池对光的吸收率可表示为

$$A(\lambda) = 1 - R(\lambda) - T(\lambda) \quad (2)$$

太阳能电池的短路电流密度可表示为^[4,19]

$$J_{\text{sc}} = \int \frac{\lambda q}{hc} A(\lambda) S(\lambda) d\lambda \quad (3)$$

式中, q 为电子的电荷量, h 为普朗克常量, c 为真空中的光速, $S(\lambda)$ 为太阳辐射光谱(AM1.5)。太阳能电池短路电流密度 J_{sc} 可以很好地反映太阳能电池的光能转化效率,比较不同参量下太阳能电池短路电流密度,可以有效地对太阳能电池结构进行优化。

为了进一步说明二维光子晶体填充因子对太阳能电池效率的影响,保持二维光子晶体的其他参量不变,将 R/a 的值从0.2逐渐增加到0.5,分别模拟计算各电池结构的短路电流密度 J_{sc} 。从图4中可以看出,电池短路电流密度随填充因子的变化先增加后减小,当 $R/a = 0.38$ (即填充因子 $f \approx 0.45$)时,取得最大值。

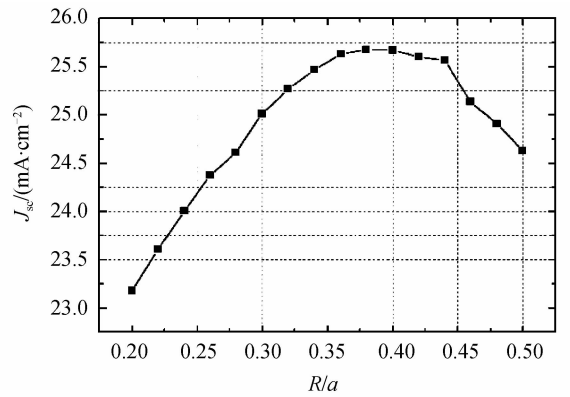


图4 二维光子晶体填充因子与电池短路电流的关系
Fig.4 Filling ratio of 2D PC vs. short circuit current density of the solar cell

二维光子晶体厚度 d_2 对二维光子晶体的光学性能有一定的影响,间接影响了太阳能电池的短路电流密度大小。以二维光子晶体厚度 d_2 为研究对象,使填充因子 $f = 0.45$ 和晶格常量 $a = 200$ nm,二维光子晶体厚度 d_2 从50 nm逐渐增加到150 nm,分别模拟计算各电池结构的短路电流密度 J_{sc} 。在图5中可以看出, J_{sc} 随着 d_2 的增加先增大后减小,曲线成贝壳形状,当厚度 $d_2 = 110$ nm时,电池短路电流密度 J_{sc} 取得最大值。

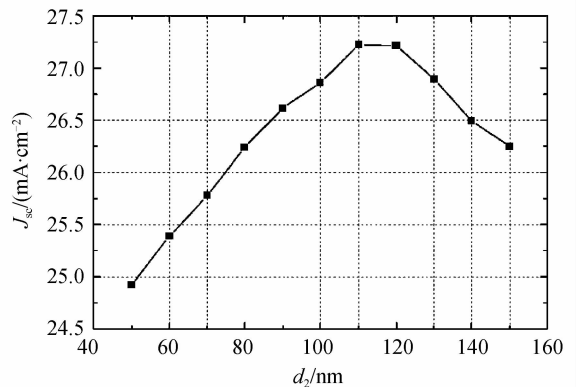


图5 二维光子晶体厚度与电池短路电流密度的关系
Fig.5 Thickness of 2D PC vs. short circuit current density of the solar cell

同理,以二维光子晶体的晶格常量 a 为研究对象,使填充因子 $f = 0.45$ 和厚度 $d_2 = 110$ nm,二维光子晶体晶格周期 a 在200 nm~700 nm均匀变化。如图6,太阳能电池短路电流密度 J_{sc} 随着晶格周期 a 的变化先增大后减小,当晶格周期 $a = 500$ nm时,电池短路电流密度 J_{sc} 取得最大值。

为了获得最佳的背反射器结构参量,以二维光子晶体厚度 d_2 和晶格周期 a 两个参量为研究对象。同时改变二维光子晶体的厚度 d_2 和晶格常量 a ,使 d_2 和 a 的取值范围与上述讨论中的取值相同,即 d_2 的取值范围为50~150 nm, a 的取值范围为200~700 nm。两种参量任意组合,对组合得到的太阳能电池背反射器结

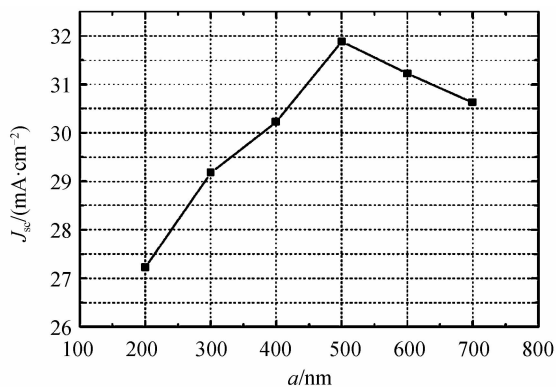


图6 晶格周期与电池短路电流密度的关系

Fig. 6 Lattice period vs. short circuit current density of the solar cell

构进行数值模拟,计算出对应的电池短路电流密度 J_{sc} , 并进行比较,如图7,太阳能电池短路电流密度 J_{sc} 取较大值时,二维光子晶体厚度 d_2 和晶格常量 a 取值分别集中在 $d_2 = 500 \sim 600$ nm 和 $a = 110 \sim 120$ nm 的区域内,处于上述区域内的电池短路电流值差别不大;当两个结构参量的取值分别为 $a = 500$ nm, $d_2 = 110$ nm 时,电池短路电流密度 J_{sc} 取得最大值 31.96 mA/cm².

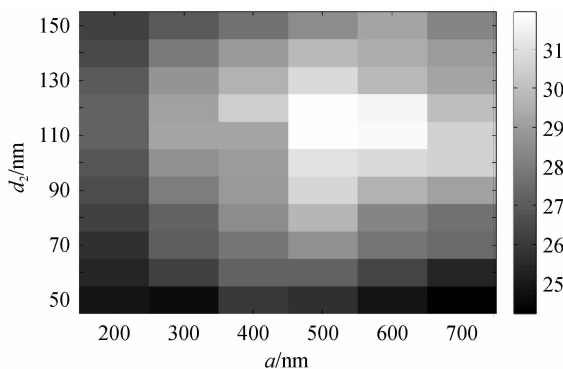


图7 二维光子晶体厚度和晶格周期与电池短路电流密度的关系

Fig. 7 Thickness and Lattice period of 2D PC vs. short circuit current density of the solar cell

2 对比与分析

通过对一维和双层二维光子晶体背反射器结构参数的优化,得到了最佳背反射器结构.为了更直观地体现太阳能电池的优越性,分别对具有相同吸收层厚度的四种结构((a)不具有背反射器(作为参考)、(b)Ag/ZnO背反射器、(c)一维光子晶体背反射器、(d)一维和双层二维光子晶体背反射器,结构示意图如图8)的非晶硅薄膜太阳能电池进行数值模拟.

从图9、10中可以看出:一维和双层二维光子晶体结构背反射器相对其他三种背反射器结构,电池光的吸收率和光电流密度在整个数值模拟波段(300~1100 nm)都有明显的提高;当入射光的波长小于

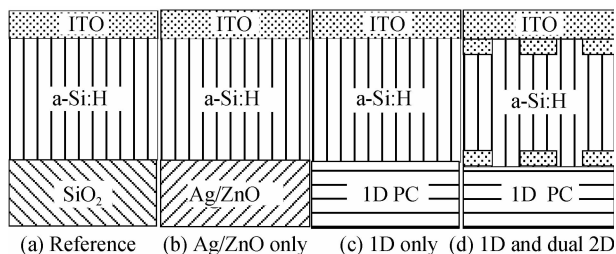


图8 四种不同背反射器结构电池的结构示意图

Fig. 8 Schematic of solar cells with four different structures

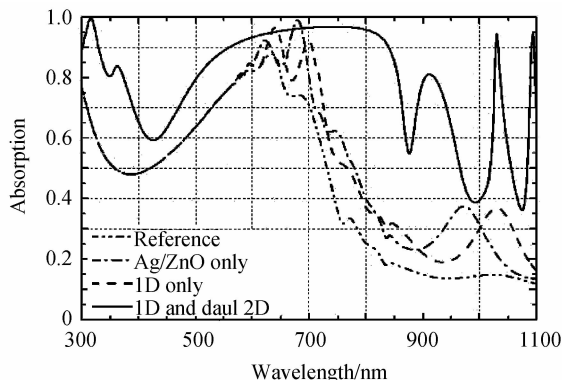


图9 四种不同背反射器结构电池的吸光率曲线

Fig. 9 Absorption curves for four different back reflector structures

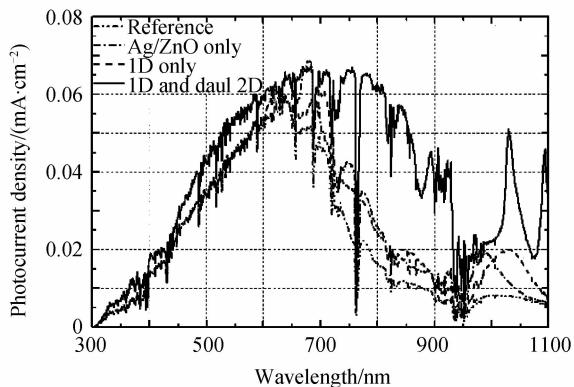


图10 四种不同背反射器结构电池的光电流密度曲线

Fig. 10 Photocurrent density curves for four different back reflector structures

600 nm 时, (a)、(b)、(c)这三种结构太阳能电池的吸收率和光电流密度基本相同,这是由于500 nm厚的吸收层可以对波长小于600 nm的入射光有效吸收,改变底部反射器类型不影响这部分入射光的吸收;一维和双层二维光子晶体背反射器结构与Ag/ZnO背反射器以及一维光子晶体结构背反射器相比,可以有效减少电池对波长小于600 nm入射光的反射,以及提高电池吸收层对该波段入射光的吸收;当入射光波范围在600~1100 nm时,三种具有背反射器结构的太阳能电池与不具有背反射器结构的电池相比,光的吸收率和光电流密度都有一定的提高,而且具有一维和双层二维光子晶体背反射器结构太阳能电池的性能较其他结构太阳能电池提升最明显,即在相同情况下该结构太

太阳能电池的光能转化效率最高。

表 1 给出了在相同条件下四种不同背反射器结构的非晶硅薄膜太阳能电池的短路电流密度。可以看出,具有一维和双层二维光子晶体背反射器的电池获得最大的短路电流密度 $J_{sc} = 31.96 \text{ mA/cm}^2$,比无背反射器结构非晶硅薄膜太阳能电池的短路电流密度提高了 77.9%,同时也分别比 Ag/ZnO 背反射器与一维光子晶体背反射器结构电池短路电流提高了 51.0% 和 50.1%。

表 1 四种不同背反射器结构非晶硅薄膜太阳能电池的短路电流密度

Table 1 Short circuit current density of amorphous silicon thin film solar cells with four different back reflector structures

Back reflector	$J_{sc}/(\text{mA} \cdot \text{cm}^{-2})$
No back reflector (as reference)	17.97
Flat Ag/ZnO back reflector	21.16
1D PC back reflector	21.28
1D and dual 2D PC back reflector	31.96

3 结论

设计了一种基于一维光子晶体和双层二维光子晶体的非晶硅薄膜太阳能电池高效背反射器,并模拟计算这种背反射器结构的非晶硅薄膜太阳能电池的吸收曲线和光电流密度曲线等光学特性,与目前常用的 Ag/ZnO 背反射器结构电池、一维光子晶体背反射器结构电池的光学特性进行对比与分析。结果表明,与目前常用的两种电池背反射器结构相比,这种一维和双层二维光子晶体背反射器可以大幅度提高非晶硅薄膜太阳能电池吸收层对入射光,特别是对长波长入射光的捕获与吸收,较大地提高了非晶硅薄膜太阳能电池的转化效率,为高性能非晶硅薄膜太阳能电池的结构设计提供了重要参考。

参考文献

- [1] FAHR S, ROCKSTUHL C, LEDERER F. Sandwiching intermediate reflectors in tandem solar cells for improved photon management[J]. *Applied Physics Letters*, 2012, **101**(13): 133904.
- [2] KUZMA-FILIPK I J, DUERINCKX F, KERSCHAUER E V, et al. Chirped porous silicon reflectors for thin-film epitaxial silicon solar cells[J]. *Journal of Applied Physics*, 2008, **104**(7): 073529.
- [3] PARK Y, DROUARD E, DAIF O E, et al. Absorption enhancement using photonic crystals for silicon thin film solar cells[J]. *Optics Express*, 2009, **17**(16): 14312-14321.
- [4] ZENG L, BERMEL P, YI Y, et al. Demonstration of enhanced absorption in thin film Si solar cells with textured photonic crystal back reflector[J]. *Applied Physics Letters*, 2008, **93**(22): 221105.
- [5] CURTIN B, BISWAS R, DALAL V. Photonic crystal based

- back reflectors for light management and enhanced absorption in amorphous silicon solar cells[J]. *Applied Physics Letters*, 2009, **95**(23): 231102.
- [6] ZENG L, YI Y, HONG C, et al. Efficiency enhancement in Si solar cells by textured photonic crystal back reflector[J]. *Applied Physics Letters*, 2006, **89**(11):111111.
- [7] KRC J, ZEMAN M, LUXEMBOURG S L, et al. Modulated photonic-crystal structures as broadband back reflectors in thin-film solar cells[J]. *Applied Physics Letters*, 2009, **94**(15): 153501.
- [8] SAINJU D, VAN DEN OEVER P J, PODRAZA N J, et al. Origin of optical losses in Ag/ZnO back-reflectors for thin film Si photovoltaics[C]. IEEE, 2006: 1732-1735.
- [9] DAHAL L R, SAINJU D, LI J, et al. Comparison of Al/ZnO and Ag/ZnO interfaces of back-reflectors for thin film Si: H photovoltaics[C]. IEEE, 2009: 001702-001707.
- [10] CHO J S, BAEK S, LEE J C, et al. Optimization of ZnO/Ag back-reflectors for silicon thin film solar cell application[C]. IEEE, 2010: 001479-001482.
- [11] CHEN Pei-zhuan, HOU Guo-fu, SUO Song, et al. Simulation, design and fabrication of one-dimensional photonic crystal back reflector for silicon thin film solar cell[J]. *Acta Physica Sinica*, 2014, **63**(12): 128801.
陈培专,侯国付,索松,等. 硅基薄膜太阳电池一维光子晶体背反射器的模拟设计与制备[J]. *物理学报*, 2014, **63**(12): 128801.
- [12] ZHOU D, BISWAS R. Photonic crystal enhanced light-trapping in thin film solar cells[J]. *Journal of Applied Physics*, 2008, **103**(9): 093102.
- [13] CHOI C G, HAN Y T, KIM J T. Polymer photonic crystal nano-systems fabricated by nanoimprint lithography [C]. IEEE, 2006:4893-4896.
- [14] ZHANG Hai-feng, MA Li, LIU Shao-bin. Periodic band gap structure for unmagnetized photonic crystals [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2008, **37**(08):1566-1570.
章海锋,马力,刘少斌. 非磁化等离子体光子晶体的禁带周期性研究[J]. *光子学报*, 2008, **37**(08):1566-1570.
- [15] LUO Yan-hong, ZHAO Huan-yu, LI Gong-ping. Investigation of photonic band gaps of two-dimensional photonic crystals based on lattice configuration[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2014, **43**(12): 1231001.
骆岩红,赵寰宇,李公平,基于晶格效应的光子晶体带隙特性研究. *光子学报*, 2014,**43**(12): 1231001.
- [16] LE K Q, JOHN S. Synergistic plasmonic and photonic crystal light-trapping: Architectures for optical up-conversion in thin-film solar cells[J]. *Optics Express*, 2014, **22**(101): A1-A12.
- [17] DEPAUM V, MENG X Q, DAIF O E, et al. Micrometre-thin crystalline-silicon solar cells integrating numerically optimized 2-d photonic crystals [J]. *IEEE Journal of Photovoltaics*, 2014, **4**(1):215-223.
- [18] BISWAS R, DING C G, PUSCASU I, et al. Theory of sub-wavelength hole arrays coupled with photonic crystals for extraordinary thermal emission [J]. *Physical Review B*, 2006, **74**(4): 045107.
- [19] CHUTINAN A, KHERANI N P, ZUKOTYNSKI S. High-efficiency photonic crystal solar cell architecture[J]. *Optics Express*, 2009, **17**(11): 8871-8878.