文章编号：1000-7032(2012)06-0633-07

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

沈宏君[1*]，卢辉东[1]，程学珍[2]
(1. 宁夏大学 物理电气信息学院，宁夏 银川 750021；
2. 宁夏宁电光伏材料有限公司，宁夏 银川 750021)

摘要： 设计了一种由一维衍射光栅和一维光子晶体组成的用于薄膜硅太阳能电池的背反射器，采用勒让德多项式展开法对一维光子晶体和三角形光栅结构进行了参数优化，并对400～1 200 nm入射电磁波的反射率进行了模拟计算。结果表明：在高反射率的一维光子晶体作用下，利用衍射光栅可以得到大倾角的反射光，有效地延长光子在电池吸收体的传播路径，使其得到充分吸收。衍射光栅加光子晶体结构的背反射器可以大幅提高电池的捕光能力，提高太阳能电池的转化效率。

关 键 词： 光子晶体；衍射光栅；硅薄膜太阳能电池；反射率
中图分类号： O431 **文献标识码：** A **DOI：** 10.3788/fgxb20123306.0633

Back Reflectors of Thin-film Silicon Solar Cells Consisting of One-dimensional Diffraction Gratings and One-dimensional Photonic Crystal

SHEN Hong-jun[1*], LU Hui-dong[1], CHENG Xue-zhen[2]
(1. *School of Physics and Electrical Information*, *Ningxia University*, *Yinchuan* 750021, *China*;
2. *Ningxia Ning Electric Photovoltaic Material Limited Company*, *Yinchuan* 750021, *China*)
* *Corresponding Author*, *E-mail*: *shenhongj2004@126.com*

Abstract: We designed a type of reflector that consisted of one-dimensional diffraction gratings and one-dimensional photonic crystal. It can be used for thin-film silicon solar cells. The structure parameters were optimized by Legendre polynomial expansion method, and the reflectivity at the range of 400～1 200 nm was calculated. Under the high reflectivity one-dimensional photonic crystal, the propagation path of the photon can be extended and absorbed in the battery. The results show that the diffraction grating and a back reflector in the photonic crystal structure are efficient at the range of 750～1 100 nm. Back-reflection layer can greatly improve the light harvesting capacity and enhance the conversion efficiency of solar cells.

Key words: photonic crystal; diffraction grating; silicon thin film solar cells; reflectivity

收稿日期： 2012-03-01；**修订日期：** 2012-04-28
基金项目： 国家自然科学基金(61167002)；宁夏自然科学基金(NZ1046)资助项目
作者简介： 沈宏君(1970－)，男，宁夏银川人，博士，主要从事光子晶体在太阳能电池中的应用的研究。

1 引 言

低廉的成本和成熟简便的制造技术使得单晶硅薄膜太阳能电池成为下一代大规模使用的光伏电池中最有力的竞争者。单晶硅薄膜太阳能电池不仅对单晶硅材料的消耗量大幅减少,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[1]。然而,由于薄膜结构缩短了光子在电池吸收层中的路径,光吸收效率也随之降低,这个问题对于硅、锗等间接带隙结构材料尤为突出。单晶硅材料电池的一个主要的缺点是对于波长靠近带隙(约1 100 nm)的光子的吸收率很低。尤其是在750 ~ 1 100 nm波长范围,对应的吸收层厚度是10 μm ~ 3 mm,这个值远远超过了大多数单晶硅薄膜太阳能电池中心硅吸收层的厚度,导致这一波段内的光子吸收率很低。如果这部分长波长光子能够得到充分利用,太阳能电池的转换效率将会得到有效的提高[2-6]。

构造合适的薄膜太阳能电池吸收层的背反射器,可以使穿过电池吸收层没有被有效吸收的长波长光子反射回吸收层进行二次吸收,提高太阳能电池的转换效率。为此,本文设计了一种衍射光栅加一维光子晶体结构的硅薄膜太阳能电池的背反射器,我们把这种衍射光栅位于一维光子晶体顶层的结构叫做介质膜光栅结构。在一维光子晶体保证高反射率的同时,通过衍射光栅得到大倾角的反射光,将光子路径从薄膜的垂直方向改变到薄膜的侧向,有效地延长了光路径。

2 模型和计算方法

底部反射器分别为一维光子晶体和三角形介质膜光栅的硅薄膜太阳能电池如图1所示。图1(a)是Si/SiO_2一维光子晶体结构的背反射层,Si层的厚度为 $h=\lambda/4n_h$,SiO_2的厚度为 $d=\lambda/4n_d$,其中 n_h、n_d 分别是Si、SiO_2的折射率,λ 是一维光子晶体的中心波长。由于光子晶体存在禁带,即处于禁带波长范围的光不能传播,因此,改变中心波长可得到操作频率范围不同的一维光子晶体。图1(b)、(c)分别用等腰三角形介质膜光栅、直角三角形介质膜光栅做背反射器,与图1(a)相比,除了对入射光的反射外,还引入了衍射效应,可以获得大倾斜角的反射光。具有大倾斜角的衍射光沿着电池体的侧向传播,延长了传播路径,增强了电池对光子的吸收。

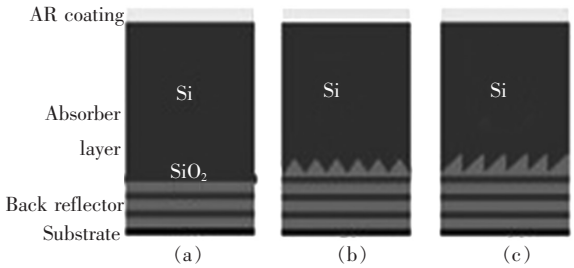

图1 薄膜太阳能电池示意图

Fig. 1 Thin-film solar cell diagram

三角形介质膜光栅的基本结构如图2所示,衬底为K9玻璃或石英玻璃。建立如图2所示的坐标系。位于Si/SiO_2一维光子晶体顶层的三角形光栅结构,其截面在 X-Z 平面内,光栅矢量沿 X 方向。勒让德多项式展开法[7-8](LPEM)是利用麦克斯韦方程组和边界条件对具有周期型结构的光栅及光子晶体进行计算的一种数值方法,可以计算光栅、光子晶体和介质膜光栅结构的反射特性。三角形介质膜光栅LPEM模型建立的思想是:将多层介质膜光栅的空间分为4个区域——区域Ⅰ为电池吸收体,区域Ⅱ为三角光栅区,区域Ⅲ为Si/SiO_2一维光子晶体,区域Ⅳ为光出射区。

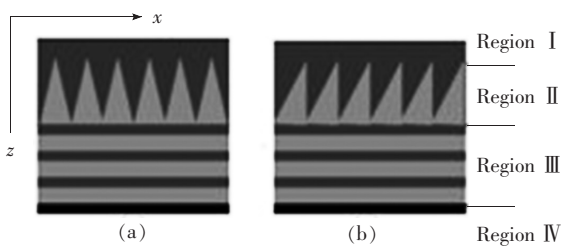

图2 三角形多层介质膜光栅的基本结构示意图

Fig. 2 Schematic of the triangle of multi-layer dielectric gratings

电场在介质膜光栅外的传播满足瑞利展式,即

$$\text{Ⅰ区:}\quad E_1=\hat{u}e^{-jk_{10}\cdot r}+\sum_{i=-\infty}^{+\infty}R_i e^{-jk_{1i}\cdot r},\qquad(1)$$

$$\text{Ⅳ区:}\quad E_3=\sum_{i=-\infty}^{+\infty}T_i e^{-jk_{3i}\cdot(r-d\hat{z})},\qquad(2)$$

R_i、T_i 分别为反射系数和透射系数,其中 $r=x\hat{x}+z\hat{z}$,$k_{1i}=k_{xi}\hat{x}+k_{zli}\hat{z}$,$k_{3i}=k_{xi}\hat{x}+k_{z3i}\hat{z}$,且有 $k_{xi}=k_1\sin\alpha-i2\pi/\Lambda_G$,$k_{zli}=\sqrt{k_l^2-k_{xi}^2}$,$k_l=2\pi/\lambda n_l$,$l=1,3$(表示Ⅰ、Ⅳ区)。

Ⅱ和Ⅲ区：依据布洛赫定理，TE 偏振波的方程可写成如下形式：

$$E = \sum_i [E_{yi}(z)\hat{y}] \exp(-\mathrm{j}k_{xi}x), \tag{3}$$

$$H = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \sum_i [H_{xi}(z)\hat{x} + H_{zi}(z)\hat{z}] \exp(-\mathrm{j}k_{xi}x). \tag{4}$$

在整个介质膜光栅区中光的传播满足麦克斯韦方程和边界连续条件。把式(3)、(4)代入麦克斯韦方程得到线性微分方程，用伽辽金方法可以把微分方程转化成代数方程：

$$E_{yi}(z) = \sum_{m=0}^{+\infty} h_m^i P_m(\xi), \tag{5}$$

$$H_{xi}(z) = \sum_{m=0}^{+\infty} t_m^i P_m(\xi), \tag{6}$$

其中 $\xi = [2(z - z_l) - d_l]/d_l$，$d_l$ 表示第 l 层厚度；$p_m(\xi)$ 表示勒让德多项式的第 m 项；h_m^i、t_m^i 为未知系数。同理，TM 偏振波的方程：

$$E = \sum_i [E_{xi}(z)\hat{x} + E_{zi}(z)\hat{z}] \exp(-\mathrm{j}k_{xi}x), \tag{7}$$

$$H = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \sum_i [H_{yi}(z)\hat{y}] \exp(-\mathrm{j}k_{xi}x), \tag{8}$$

$$E_{xi}(z) = \sum_{m=0}^{+\infty} q_m^i P_m(\xi),\ H_{yi}(z) = \sum_{m=0}^{+\infty} l_m^i P_m(\xi), \tag{9}$$

将三角形介质膜光栅分成 L 层，依据边界连续性条件，最终得到勒让德多项式的系数 q_m^i、h_m^i、t_m^i、l_m^i，对 TE、TM 模取合适的衍射级次就可以得到 R_i、T_i 的解。由此可以得到反射和透射的各个衍射级次的衍射效率为：

$$\begin{cases} \eta_{\mathrm{D}1i} = -\mathrm{Re}(k_{1iz}/k_{10z}) R_i R_i^*, \\ \eta_{\mathrm{D}3i} = \mathrm{Re}(k_{3iz}/k_{10z}) T_i T_i^*. \end{cases} \tag{10}$$

3　数值模拟与分析

考虑到半导体材料 Si 和 SiO_2 在可见-近红外(400 ~ 1 200 nm)范围的高频区具有较大的色散，为了使模拟计算结果更加符合实验结果，我们在不同波段取不同的折射率，在各个波段内分别计算一维光子晶体、一维衍射光栅和介质膜光栅的反射率，再叠加得到整个可见-近红外波长范围的 TE 和 TM 模反射率曲线。图 3 绘出了 Si、SiO_2 折射率色散关系曲线[9-10]。

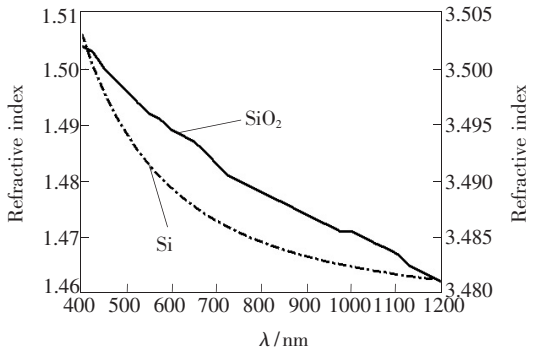

图 3　Si 和 SiO_2 的折射率色散关系

Fig. 3　Refractive-index of Si and SiO_2 as a function of wavelength

3.1　一维光子晶体的数值分析

对于 Si/SiO_2 结构的一维光子晶体，Si 层和 SiO_2 层的厚度分别为 h、d，周期 $a = h + d$，周期数为 N。接下来研究硅太阳能电池对近红外光的吸收，这里中心波长取 $\lambda = 900$ nm，折射率分别为 $n_h = 3.48$，$n_d = 1.47$，得到 $h = 64.7$ nm，$d = 153$ nm，$a = 217.7$ nm。图 4(a)是其带隙图，第一带隙出现在归一化频率($\omega a/2\pi c$)为 0.18 ~ 0.31 范

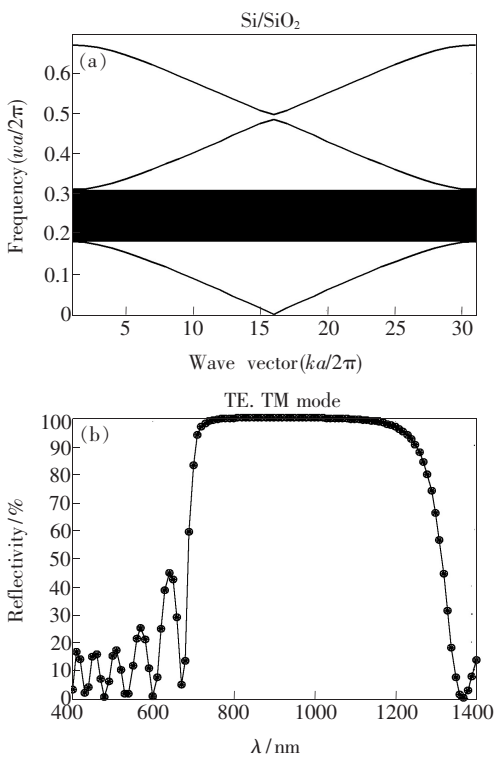

图 4　(a) 一维光子晶体带隙图；(b)光线垂直入射时，5 层 Si/SiO_2 的 TE、TM 模反射谱。

Fig. 4　(a) One-dimensional photonic crystal band-gap diagram; (b) reflectivity of Si/SiO_2 at normal incidence for TE, TM polarization with five layers.

围内,对应的波长为702~1 209 nm。可见这种结构完全符合在750~1 100 nm的100%反射。5层 Si/SiO_2 一维光子晶体反射率与波长关系的模拟结果如图4(b)所示,通过计算,当 $N \geqslant 5$ 时,反射率的值趋近稳定,波长在700~1 200 nm的反射率是99.95%。故 $N=5$(厚度为1 088.5 nm)时可以满足高反射率的要求。它的缺点是对于400~750 nm的光反射率低下而且仅仅只能反射,没有衍射存在,不能有效地延长光路径。

3.2 三角形光栅的衍射特性

由于三角形光栅的衍射特性优于矩形光栅[11],本文选择三角形光栅作为研究对象。如图5为三角形光栅结构,图中 h 为光栅槽深度(单位:μm),T 为光栅周期(单位:μm),占空比 $f=(T-\Delta)/T$。三角形光栅的衍射特性与结构参数(周期、占空比、槽深度)有紧密关系,为获得高衍射效率,需要计算和优化。基于加工能力,三角形光栅制造起来比较困难,我们把三角形光栅简化为制作阶梯光栅[12-13],当台阶数越多时,越接近三角形光栅,简化结构越接近实际结构,计算结果更精确。

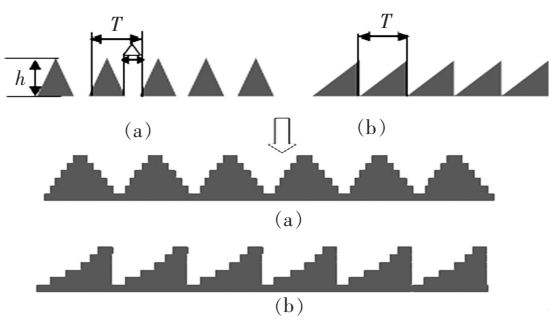

图5 三角形光栅的简化计算模型

Fig. 5 Simplify the calculation model of triangular grating

硅电池的截止吸收波长为800 nm,如果将截止吸收波长增加至硅的带隙波长,短路电流密度将提高65%[4]。取硅的带隙波长为1 100 nm,光由Si垂直入射到三角形光栅上,为了实际制造及便于研究,我们取周期 $T=1$ μm。图6为等腰三角形光栅在不同的占空比下衍射效率随槽深度的变化关系。当占空比 $f=0.8$ 时,对于TE模,衍射效率最高达到78%,对应的槽深度为0.47 μm;对于TM模,衍射效率最高达到72%,对应的槽深度为0.52 μm。对TE、TM求平均得到衍射效率最高时占空比 $f=0.8$,对应的槽深度 $h=0.48$ μm。

对于直角三角形光栅,周期 $T=1$ μm。图7为不同的占空比下衍射效率随槽深度的变化关系。

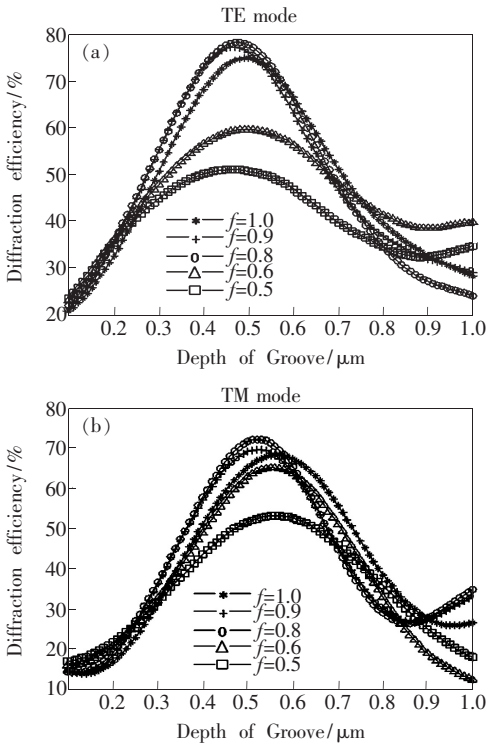

图6 等腰三角形光栅衍射效率随槽深度的变化关系

Fig. 6 Changes in the relationship of the isosceles triangle diffraction efficiency with the groove depth

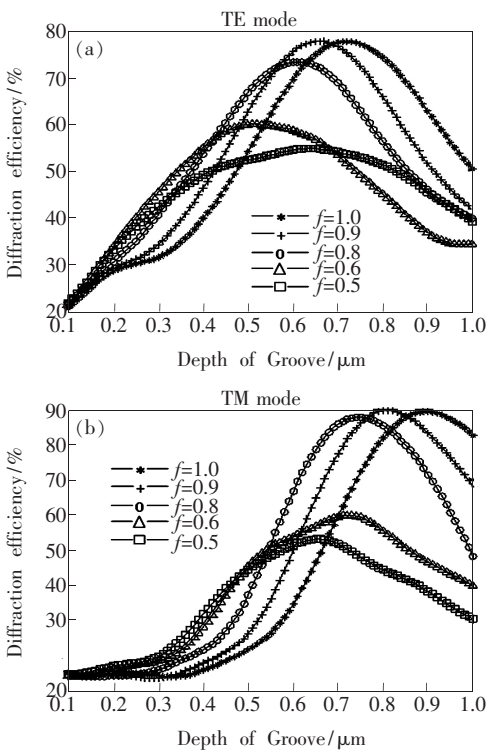

图7 直角三角形光栅衍射效率随槽深度的变化关系

Fig. 7 Changes in the relationship of the right triangle diffraction efficiency with the groove depth

当占空比 $f=1.0$ 时，对于 TE 模，衍射效率最高达到 77%，对应的槽深度为 0.72 μm。对于 TM 模，衍射效率最高为 89%，对应的槽深度为 0.89 μm。对 TE、TM 求平均，得到衍射效率最高时占空比 $f=1.0$，对应的槽深度 $h=0.77$ μm。

4　介质膜光栅的数值分析

对于等腰三角形介质膜光栅，由上文的分析可知，光栅的周期 $T=1$ μm，占空比 $f=0.8$，槽深度 $h=0.48$ μm，一维光子晶体的周期数 $N=5$，则等腰三角形介质膜光栅的厚度为 1.568 5 μm。由图 8 可知，光线垂直入射时，TE、TM 模在 720 ~ 1 200 nm 的反射率高于 99.2%，在 400 ~ 720 nm 的平均值为 88%。可见该结构不但保证了 750 ~ 1 100 nm 光的高反射率，还对可见光部分也具有很好的反射效果。图 9 为 TE、TM 偏振模式反射谱，可以发现 TE、TM 模在 30°、45°时对可见光部分的反射率有所下降，但在长波长部分仍然保证了高反射率；在 60°有很高的反射率。

对于直角三角形介质膜光栅，光栅的周期 $T=1$ μm，占空比 $f=1.0$，槽深度 $h=0.77$ μm，一维光子晶体的周期数 $N=5$，直角三角形介质膜光栅的厚度为 1.858 5 μm。由图 10 可知，光线垂直入射时，TE 模在 700 ~ 1 200 nm 的反射率高于 99.6%，在 400 ~ 700 nm 的平均值也有 97.2%。TM 模则在 750 ~ 900 nm 的反射率高于 99.6%，在 1 000 ~ 1 200 nm 的反射率高于 99.8%，在 900 ~ 1 000 nm之间的反射率有一个较大的下降，在 990 nm 有一个最小值 70%，但平均反射率为 94.1%。在 400 ~ 720 nm 的平均值为 91.8%。可见该结构不但保证了对 750 ~ 1 100 nm 光的高反射率，还对可见光部分也有很高的反射效果。图 11 为 TE、TM 偏振模式反射谱，可以发现，在 30°时，TE、TM 模对可见光部分的反射率有所下降，但在长波长部分仍然保证了高反射率。在偏转角度大于 45°时，在 400 ~ 1 200 nm 的反射率极高。

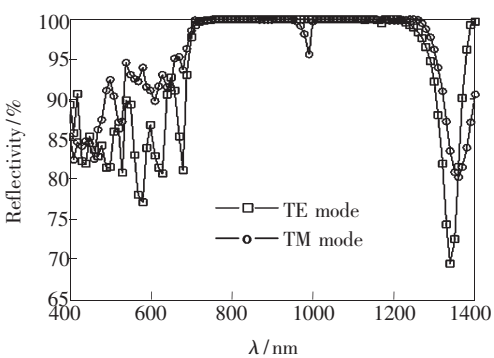

图 8　光线垂直入射时，等腰三角形介质膜光栅的 TE、TM 偏振模式反射谱。

Fig. 8　Reflectivity of the isosceles media multi-layer gratings at normal incidence for TE, TM polarization.

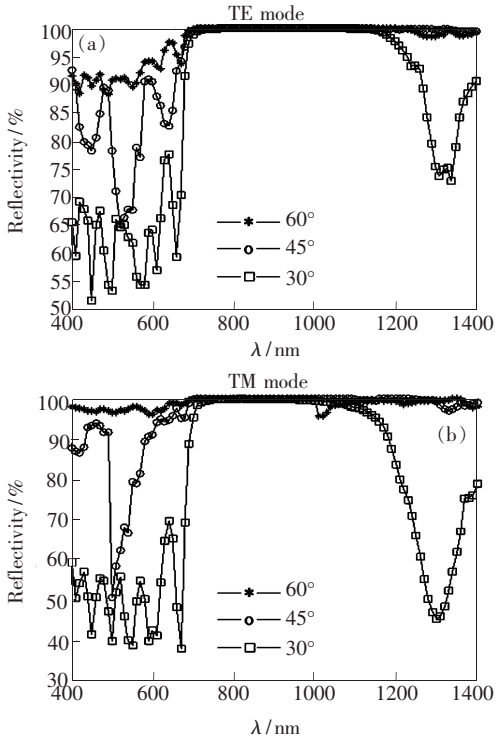

图 9　光线入射角度不同时，等腰三角形介质膜光栅的 TE、TM 偏振模式反射谱。

Fig. 9　Reflectivity of the isosceles media multi-layer gratings at different incident angle for TE, TM polarization.

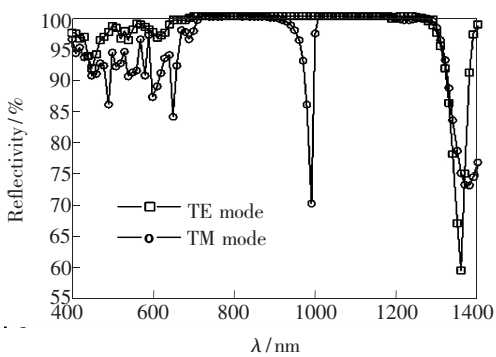

图 10　光线垂直入射时，直角三角形介质膜光栅的 TE、TM 偏振模式反射谱。

Fig. 10　Reflectivity of right triangle multi-layer dielectric gratings at normal incidence for TE, TM polarization.

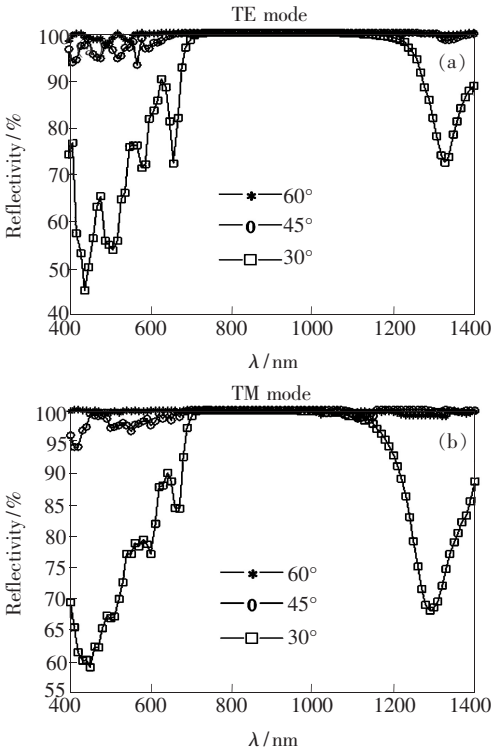

图11 光线入射角度不同时,直角三角形介质膜光栅的TE、TM偏振模式反射谱。

Fig. 11 Reflectivity of right triangle multi-layer dielectric gratings at different incident angle for TE, TM polarization.

5 结 论

设计了一种可用于硅薄膜太阳能电池背反射器的三角形介质膜光栅结构,采用勒让德多项式展开法分别对一维光子晶体及三角形光栅的结构参数进行了讨论和优化。对于一维光子晶体,取中心波长为900 nm,周期 $a=217.7$ nm,当周期数 $N=5$ 时,反射率可达到99.95%。对于三角形光栅,取硅的带隙波长为1 100 nm,光由Si垂直入射到等腰三角形和直角三角形光栅上,为了获得高衍射效率,分别寻找到了合适的周期 $T=1$ μm、占空比 $f=0.8$、槽深度 $h=0.48$ μm和周期 $T=1$ μm、占空比 $f=1.0$、槽深度 $h=0.77$ μm。将一维光子晶体与三角形衍射光栅组成等腰三角形介质膜光栅和直角三角形介质膜光栅,比较了光线垂直入射与偏转角度分别为30°,45°,60°时反射率随波长的变化。发现TE、TM模在750~1 100 nm这一波长范围内,反射率始终高于99.5%,在400~750 nm也有很高的反射率。因此,本文所设计的两种不同形状的三角形介质膜光栅能高效、大倾角、全方位地反射400~1 200 nm的入射光,这种结构的背反射层用作太阳能电池的反射器可以大大提高电池的捕光能力,从而提高太阳能电池的转化效率。

参 考 文 献:

[1] Xiong Shaozhen, Zhu Meifang. *Solar Cell Foundation and Application* [M]. Beijing: Science Press, 2009:231-237 (in Chinese).

[2] Wada K, Kmerling L C, Toyoda N. Back reflector of solar cells: US, 6750393 [P]. 2004-06-15.

[3] Zeng L, Yi Y, Hong C, *et al*. Efficiency enhancement in Si solar cells by textured photonic crystal back reflector [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2006, 89(11):111111-1-3.

[4] Li Huihua, Wang Qingkang. Design of the back reflectors of thin-film silicon solar cells [J]. *Acta Sinica Quantum Optica* (量子光学学报), 2009, 15(4):380-386 (in Chinese).

[5] Li Xiuxia, Han Peide, Yang Yibiao, *et al*. Reflector of solar cells based on photonic crystal heterostructures [J]. *Acta Photonica Sinica* (光子学报), 2010, 39(10):1786-1789 (in Chinese).

[6] Liu Chunxu, Wang Pengcheng, Luo Yongshi, *et al*. Tb^{3+}-Er^{3+} couples as spectral converters in $NaYF_4$ for GaAs solar cells [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2011, 32(11):1120-1125 (in Chinese).

[7] Khavasi A, Mehrany K, Rashidian B. Three-dimensional diffraction analysis of gratings based on legendre expansion electromagnetic fields [J]. *Opt. Soc. Am.* B, 2007, 24(10):2676-2685.

[8] Khavasi A, Jahromi A K, Mehrany K. Longitudinal legendre polynomial expansion of electromagnetic fields for analysis of arbitrary-shaped gratings [J]. *Opt. Soc. Am.* A, 2008, 25(7):1564-1574.

[9] Wemple S H, Didomenico M. Behavior of the electronic dielectric constant in covalent and ionic materials [J]. *Phys. Rev.* B, 1971, 3(4):1338-1351.

[10] Lin Yongchang, Lu Weiqiang. *Principles of Optical Films* [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 1990:349-350

(in Chinese).

[11] Chutinan A, Kherani N P, Zukotynski S. High-efficiency photonic crystal solar cell arc-hitecture [J]. *Opt. Express*, 2009, 17(11):8871-8878.

[12] Cao Yanbo, Ai Hua. Calculation of vectorial diffraction efficiency of subwavelength blazed gratings [J]. *Chinese Optics* (中国光学), 2010, 3(6):679-683 (in Chinese).

[13] Li Yanhua, Pan Miao, Pang Aisuo, *et al*. The application of electroluminescence imaging to detection the hidden defects in silicon solar cells [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2011, 32(4):378-382 (in Chinese).

《发 光 学 报》

——EI 收录期刊　中文核心期刊

《发光学报》创刊于 1980 年，由中国科学院主管，中国科学院长春光学精密机械与物理研究所和中国物理学会发光分会主办，科学出版社出版，是以凝聚态物质中的激发过程为专业方向的综合性学术刊物。

《发光学报》于 1992 年、1996 年、2000 年、2004 年连续四次被《中文核心期刊要目总览》评为“物理学类核心期刊”，现已被《中国学术期刊(光盘版)》、《中国期刊网》和“万方数据资源系统”等列为源期刊。英国《科学文摘》(SA)自 1999 年，美国《化学文摘》(CA)和俄罗斯《文摘杂志》(AJ)自 2000 年，美国《剑桥科学文摘社网站》自 2002 年，日本《科技文献速报》(CBST, JICST)自 2003 年已定期收录检索《发光学报》的论文。2008 年，《发光学报》被荷兰“Elsevier Bibliographic Databases”确定为源期刊，2010 年被美国“EI”确定为源期刊。《发光学报》2000 年获中国科学院优秀期刊二等奖，2001 年获国家科技部“双效期刊”称号，2002 年获中国科学院科学出版基金“择重”资助，2004 年入选《中国知识资源总库·中国科技精品库》。本刊内容丰富、信息量大，主要反映发光学专业领域的科研和技术成果，及时报道国内外的学术动态，开展学术讨论和交流，为提高我国发光学科的学术水平服务。

《发光学报》自 2011 年改为月刊，A4 开本，144 页，国内外公开发行。国内定价：40 元，全年 480 元，全国各地邮局均可订阅。《发光学报》欢迎广大作者、读者广为利用，踊跃投稿。

地　址：长春市东南湖大路 3888 号
《发光学报》编辑部
邮　编：130033
电　话：(0431)86176862, 84613407
E-mail：fgxbt@126.com

国内统一刊号：CN 22-1116/O4
国际标准刊号：ISSN 1000-7032
国内邮发代号：12-312
国外发行代号：4863BM
http://www.fgxb.org