2013年6月

文章编号: 1000-7032(2013)06-0769-07

基于光栅结构的砷化镓高效率吸收层设计

郝 宇1,孙晓红1*,孙 燚1,张 旭1,贾 巍2

(1. 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,河南 郑州 450052;2. 上海航天技术研究院,上海 201109)

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对矩形光栅和三角 形光栅结构砷化镓吸收层在 300~900 nm 入射波长范围内的吸收效率进行了分析。结果表明:相比于平坦吸 收层,两种光栅结构在 TE 和 TM 偏振光条件下吸收效率均有提高,峰值吸收率可提高 55.9%。并对矩形光 栅、三角形光栅结构参数进行了优化设计,对两种光栅吸收层的角度依赖性做了分析,得出在填充比和厚度 相同的情况下,正三角形光栅吸收层的角度依赖性最优。最后利用有限元法对入射光在电池吸收层的吸收 增强效应进行了理论模拟,通过与平坦结构吸收层的电场分布对比,可以直观地看出入射光在光栅结构吸收 层的吸收增强效应。该研究结果为制备高效率、高性能太阳能电池结构提供了参考依据。

关 键 词: 砷化镓; 吸收层; 光栅; 吸收效率 中图分类号: 0431 **文献标识码:** A **DOI**: 10.3788/fgxb20133406.0769

Grating Based Absorption Layer for Enhanced Absorption in Gallium Arsenide Solar Cells

HAO Yu¹, SUN Xiao-hong^{1*}, SUN Yi¹, ZHANG Xu¹, JIA Wei²

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

2. Shanghai Academy of Aerospace Technology, Shanghai 201109, China)

* Corresponding Author, E-mail: iexhsun@zzu. edu. cn

Abstract: A design is proposed to significantly increase the absorption of gallium arsenide thin-film layer. This is achieved by patterning a grating in the layer. By using rigorous coupled wave method, the absorption efficiency in the range of 300 ~900 nm has been analyzed for GaAs layer with rectangular and triangle gratings. The results show that the absorption efficiency of the two structures can be improved relative to the flat absorption layer and the peak absorption rate can be increased by 55.9%. And the structural parameters of the two structures have been also optimized. By analyzing the incident angular dependence of the two structures, it is concluded that solar cells with the triangular absorption layer have better characteristics in the same condition of thickness and filling factor. On the other hand, the finite element method is used to calculate the field distribution for different absorption layers. Good absorption enhancement can be observed directly from the absorption layer with gratings. The research provides a reference for the preparation of solar cell structures with high performance.

Key words: GaAs; absorption layer; grating; absorption

收稿日期: 2013-03-15;修订日期: 2013-05-02

作者简介:郝宇(1985-),男,山东菏泽人,主要从事光栅结构在太阳能电池中的应用研究。

E-mail: hao66699@126.com

基金项目: 国家自然科学基金(11104251)资助项目

1引言

光子的流失是导致太阳能电池效率低下的一 大原因。针对这一难题,各种结构都被用来增加 太阳能电池的捕光能力。第一代硅电池在表面增 加各种涂层来增加光的捕获^[1];第二、三代太阳 能电池在电极表面加入纳米颗粒,利用等离子激 元效应增加电池的短路电流^[2]。2013 年, Jonathan Grandidie 等^[3]通过在铟锡氧化物上添加二 氧化硅小球散射阵列,将非晶硅电池的整体转换 效率提高至 11.1%。

薄膜太阳能电池效率低下的主要原因是对长 波长的光的捕获能力较弱。对于长波长的光,其 被吸收所要求的最小传播路径远大于载流子在电 池内部扩散的长度。例如,在700 nm 的波长处, 如被电池吸收,则载流子在电池内的传播路径要 达到5 µm,而薄膜电池的厚度一般达不到这个数 值,这就限制了薄膜电池对长波长光的吸收。即 使在电池表面增加各种涂层,其总体效率也只有 10% 左右^[4]。要提高电池的捕光能力,必须增加 光在电池内部的传播路径或者时间。光栅结构因 其良好的散射和反射性能而被广泛用来增加太阳 能电池的捕光能力。传统的金属背反射器对光的 吸收较强,在长时间照射下,金属的温度不断增 高,造成电池性能不稳定。光栅可以用来替代传 统的金属背反射器解决这一问题[5-11]。2012年, 沈洪君等^[8]设计的一维光栅(1D grating)硅太阳 能电池的背反射器对 750~1 100 nm 波段光的反 射率始终高于 99.5%。光栅结构还可以作为窗 口透射层。I. Prieto 等^[12]设计的 InGaP 光栅窗口 层将电池的吸收效率在较宽范围内平均提高了 22%,个别波长处可以提高46%。这些提高电池 吸收效率的方法都显示了光栅结构对太阳能电池 捕光能力的提升。但一维光栅背部反射器往往具 有较大的厚度。例如,利用硅和二氧化硅组成的 一维光栅背反射器来反射 300~700 nm 波长范围 内的光,要想获得良好的反射效果,光栅至少需要 5个周期,厚度达到1 µm,而传统金属背反射器 的厚度仅为50 nm 左右。可见,具有一维光栅背 反射器的电池的厚度大大增加。

本文提供了一种方法,既可以提高电池的吸 收效率又不增加电池的厚度。将砷化镓吸收层分 别做成矩形光栅结构和三角形光栅结构,利用严 格耦合波方法,分别计算了两种结构吸收层的吸收效率。结果表明:与平坦的吸收层相比,光栅结构可以很好地增加太阳能电池的吸收效率;与一维背部反射光栅相比,电池厚度没有增加。

2 模型和计算方法

太阳能电池整体吸收效率等于各层吸收效率 之和^[13],故本文只以吸收层的吸收效率作为研究 对象。图1(a)所示为一维矩形光栅结构的砷化镓 吸收层示意图。背景介质为空气,砷化镓在 x 方向 上以周期 a 无限排列(此处取4个周期作为示意)。 光栅厚度为 d,周期为 a,填充比为 r,即一个晶格周 期内砷化镓介质的宽度为 ra。光从 z 方向入射,本 文在没有明确说明的情况下,光入射方向均垂直于 光栅顶部。图1(b)给出了所用砷化镓材料的色散 关系,实线为折射率实部,虚线为折射率虚部。入 射波长设为 300~900 nm,以可见光波段为主要研 究对象。从色散关系图中可以看出,所用砷化镓的 截止吸收波长为 850 nm。



- 图1 (a) 一维矩形光栅结构的砷化镓吸收层示意图;
 (b)砷化镓材料的折射率 n 和吸收系数 k。
- Fig. 1 (a) Schematic view of the investigated complete patterned stack. (b) Refractive index n and extinction coefficient k of GaAs.
- 3 矩形光栅的严格耦合波分析 严格耦合波在分析一维光栅衍射效率的问题

771

上比其他方法有更明显的优势,而且易于编程。 本文采用图 2 所示的光栅结构来模拟分析一维光 栅砷化镓吸收层的吸收效率, I 区(Region I)和 II 区(Region II)为空气, I 区和 II 区之间为一维 周期光栅结构,由砷化镓和空气交替排列,周期为 *a*,刻槽深度为*d*,光入射到光栅表面,入射角为*θ*。 入射光电场分量表示为:

 $E_{inc} = \exp[-jkn_1(\sin\theta_x + \cos\theta_z)],$ (1) 式中,k 为入射波波矢,k = 2 π/λ ; λ 为入射光波 长; n_1 为空气折射率。 I 区的电场为入射电场和 各级反射电场的叠加:

$$E_{1,y} = E_{inc,y} + \sum_{i=-\infty}^{+\infty} R_i \exp[-j(k_{xi}x - k_{1,zi}z)].$$
(2)

Ⅱ区光栅的透射功率为各级出射电场的叠加:

$$E_{II,y} = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} T_i \exp\{-j[k_{xi}x - k_{II,zi}(z-d)]\}.$$
(3)

*R*_{*i*} 为归一化的 *i* 级反射波电场复振幅, *T*_{*i*} 为归一 化的 *i* 级透射波电场复振幅,其中:

$$k_{xi} = k [n_{\rm I} \sin\theta - i(\lambda/a)], \qquad (4)$$

$$k_{\tau,zi} = \begin{cases} + k [n_{\tau}^{2} - (k_{xi}/k)^{2}]^{1/2} & kn_{\tau} > k_{xi} \\ - jk [(k_{xi}/k) - n_{\tau}^{2}]^{1/2} & k_{xi} > kn_{\tau} \end{cases}$$

$$\tau = I, II, \qquad (5)$$

则入射电场的反射效率为[14]:

$$E_{ii} = R_i R_i^* \operatorname{Re}\left(\frac{k_{1,ii}}{k_0 n_1 \cos\theta}\right), \qquad (6)$$

透射效率为[14]:





$$E_{ii} = T_i T_i^* \operatorname{Re}\left(\frac{k_{\mathrm{II},zi}}{k_0 n_{\mathrm{I}} \cos\theta}\right), \qquad (7)$$

故砷化镓薄膜的吸收效率为:

$$W = 1 - \sum_{i=-\infty}^{+\infty} (E_{i} + E_{i}).$$
 (8)

4 数值模拟与分析

4.1 一维矩形光栅吸收层的吸收特性

设矩形光栅吸收层的厚度 d = 0.225 μm,填 充因子(Filling factor)r = 0.675,周期(Period)a = 0.45 μm。图 3 给出了该光栅结构在 300 ~ 900 nm 入射波长范围内的内吸收效率曲线图。作为 对照,同时给出了平坦结构吸收层在同样入射波 长范围内的吸收效率。



图 3 具有砷化镓一维光栅结构的砷化镓吸收层的吸收 效率

Fig. 3 Effect of 1D patterning on the absorption spectra of an isolated GaAs layer

当光波入射到光栅结构中时,存在散射和反 射效应。光栅结构对光波的散射延长了光子在吸 收层内的传播路径:同时,反射叠加的光波可在光 栅表面产生干涉效应,从而形成驻波,产生所谓的 慢光效应[15]。慢光效应减小了光在吸收层中的 传播速度,从而增加了光与吸收介质的接触时间。 图 3 中的结果显示,在 300~850 nm 范围内,不论 在 TE 还是 TM 模式下,光栅结构吸收层的吸收效 率均高于平坦吸收层的吸收效率。其中,在TE 模式下,光栅吸收层在700~800 nm 的平均捕光 效率可以达到 60% 左右,比平坦吸收层大约高 30%。吸收最大出现在750 nm 处,光栅吸收层的 吸收效率可以达到 85.7%, 而平坦吸收层只有 29.8%。在300~570 nm 波段,光栅吸收层的吸 收效率比平坦吸收层平均高15%左右。在TM模 式下,在630~780 nm 入射波长范围内,光栅吸收

层的平均吸收效率可以达到 58% 左右,比平坦吸收层的平均吸收效率高 28% 左右。

图 4 给出了填充因子为 0.675, 吸收层厚度 分别为 0.175, 0.225, 0.275, 0.325 μm 时的吸收 效率。



- 图 4 一维矩形光栅吸收层刻槽深度 d(a = 0.38 μm, r = 0.625) 与吸收效率的关系。(a) TE 模式;(b) TM 模式。
- Fig. 4 Relationship of the parameter d with the rectangle absorption of 1D grating ($a = 0.38 \ \mu m$ and r = 0.625). (a) TE mode. (b) TM mode.

在 TM 模式下,入射波长为 300~450 nm 时, 吸收效率随吸收层厚度的增加而增大;而在 TE 模式下,在 300~450 nm 范围内,其各个厚度的吸 收效率相当。说明该入射光波段的吸收效率对刻 槽深度并不敏感。综合 TE、TM 模式来看,在刻槽 深度为 0.325 μm 时,吸收层的综合表现较好。

4.2 三角形光栅吸收层的吸收特性

在太阳能电池中,三角形光栅结构经常被用 来增强对光的散射效应^[16]。在实际制作过程中, 因三角形光栅的制作难度较大,通常采用阶梯形 状光栅代替三角光栅。图 5 所示为砷化镓三角形 光栅代替模型的简易示意图,每个阶梯宽度选为 0.01 μm,光栅周期为 *T*,厚度为 *h*,一周期内砷化 镓介质宽度为 *l*,长度单位均为 μm,顶角大小为 α(°)。该光栅的填充比定义为 1/*T*。



Fig. 5 Analysis model of triangle grating

图 6 给出了 α = 30°、光栅厚度固定为 0.225 μm 时,不同的填充比下吸收层所对应的吸收效 率,并与相同厚度的平坦吸收层的吸收效率进行 了对比。



图 6 α = 30°时,填充比对吸收效率的影响。(a) TE 模式;(b) TM 模式。

Fig. 6 Effect of the filling factor on the absorption efficiency $(\alpha = 30^{\circ})$. (a) TE mode. (b) TM mode.

通过图 6 可知,与同等厚度的平坦吸收层相比,该光栅吸收层的吸收增强效应主要出现在300~580 nm。在 TE 模式下,增强最大值出现在填充比为 0.5,入射波长为300 nm 处;在 TM 模式下,增强最大值出现在填充比为 1,入射波长为400 nm处。而在 570~850 nm 波段,三角形光栅在 TM 模式下的吸收效果不如平坦吸收层。

从图 7 可以看出,相对于平坦吸收层,该光栅 吸收层的吸收增强集中于短波长波段(300~550 nm)。在 TE 模式下,填充比分别为0.7,0.9,1 时,



图 7 α = 60°时,填充比对吸收效率的影响。(a) TE 模式;(b) TM 模式。

Fig. 7 Effect of the filling factor on the absorption efficiency $(\alpha = 60^{\circ})$. (a) TE mode. (b) TM mode.

吸收增强范围较宽,在 300 ~ 760 nm 范围内除了 个别波长(580 ~ 610 nm)外,均获得了较大的吸 收增强。其中在填充比为1,入射波长为 300 nm 时,吸收效率绝对增强可达 55%。在 TM 模式下, 吸收增强主要出现在填充比为 0.7,0.9,1,入射 波长为 300 ~ 460 nm 范围内。综合 TE、TM 模式 可知填充比为 1 时吸收效果最好,TE 模式下的最 大吸收为 91%,TM 模式下的最大吸收为 98%。

从图 6 和图 7 可以看出,三角形光栅吸收层 在 700~850 nm 的吸收效率比平坦吸收层低。为 了说明造成这一问题的原因,图 8 给出了填充比 为 1,α = 30°时的三角形光栅的吸收效率与平坦 吸收层的衍射效率(包括吸收效率、反射率和透 射率)的对比图。

从图 8 可以看出,造成三角光栅在长波长处 吸收效率低的主要原因是这一结构对 700~850 nm 波段光的反射较强。因为该光栅结构参数不 能与这一波段的光产生阻抗匹配,无法形成共振, 产生不了表面驻波,无法增加光与介质层的接触 时间,所以吸收效率就低于平坦吸收层。这是三 角形光栅存在的缺陷之一。从图 7 和图 6 可知, 增加三角形的顶角可以减小这一缺陷。在 AM1.5



- 图 8 平坦光栅(a)和 30°顶角一维三角光栅(b)在 300~ 900 nm 内的衍射效率对比
- Fig. 8 Diffraction efficiency of non patterned slab (a) and 1D triangular grating with an apex angle $30^{\circ}(b)$

标准太阳光下,太阳辐照密度在可见光范围内的 能量主要集中 600 nm 左右^[18],所以这一缺陷对 总体效率影响不大。

4.3 光栅结构吸收层的角度依赖性

角度依赖性是影响太阳能电池性能的一个非 常关键的参数,它表征了太阳能电池的吸收能力 对光入射角度的关系。为了验证光栅吸收层的角 度依赖性是否良好,图9给出了矩形光栅吸收层、 顶角分别为30°和60°的三角形光栅吸收层的角 度依赖性曲线,作为对照,同时给出了平坦吸收层



图 9 砷化镓吸收层的角度依赖性

Fig. 9 Angular dependence of the absorption in the GaAs absorbing layer

5

电磁场分布特性

为了说明光栅对光波的局域作用[17],采用有

限元法,以相同厚度(0.225 µm)的一维矩形光栅

吸收层(r=0.675,a=0.45 μm)和平坦吸收层为

研究对象,计算了两种结构在750 nm 波长入射时

的电磁场分布,结果如图 10 所示。其中图(a)和

的角度依赖性曲线。不论是平坦结构还是光栅结构,当入射角度改变50°时,吸收效率差值都不超过10%,不会因为角度的改变而产生巨大的差异。可见4种结构均具有良好的角度依赖性。相对于平坦吸收层,光栅结构在同波长下所有入射角度内的吸收效率都要更优。顶角为60°的光栅吸收层在所有入射角度内的效率均高于其他结构,在入射角度为34°时,最大可提高25%。



图 10 矩形光栅 (*a*=0.38 μm, *r*=0.625)的电场分布图(a),磁场分布图(c)。平坦吸收层的电场分布图(b),磁场分 布图(d)。

Fig. 10 Mapping of $E_y(a)$ and $H_x(c)$ components in the isolated 1D grating ($a = 0.38 \ \mu m$ and r = 0.625), and mapping of $E_y(b)$ and $H_x(d)$ components in the isolated non patterned slab.

和图(d)中白色直线之间的部分代表砷化镓,背 景均为空气。

图 3 中,矩形光栅对 750 nm 波长的吸收 (85.7%)比平坦吸收层的吸收(29.8%)增强了 55.9%。从图 10 可以看出,矩形光栅对电场分量 和磁场分量都有很好的局域效应,可以将光很好 地限制在吸收层内,而平坦吸收层对电磁分量的 局域控制则远不及光栅结构。两种结构的电磁场 分布图与图 3 中各自在 750 nm 处的吸收效率可 以很好地对应,验证了光栅结构的吸收增强效应。

6 结 论

设计了两种新的砷化镓吸收层结构,通过严

格耦合波方法分析了新结构的吸收效率,并与平 坦吸收层的吸收效率进行了对比。填充比为 0.675的单独砷化镓吸收层在 300~850 nm 入射 波长范围内的吸收效率明显高于同样厚度的单独 平坦吸收层;在波长为 750 nm 处,最大可提高 55.9%。矩形光栅厚度为 0.325 µm 时的平均吸 收效率最好。三角形光栅可以显著增加 300~ 550 nm 波段的吸收。正三角形光栅在 0°~90°入 射范围内,吸收效率比平坦吸收层平均高 15%, 比矩形吸收层高 5%。通过有限元法计算了光栅 的电磁场分布,结果表明电磁场分布与吸收效率 有良好的对应关系。相比于平坦吸收层,光栅吸 收层在特定波长内的吸收效率增加,源于波长与 光栅之间的阻抗匹配产生了共振效应,使入射光 在光栅表面进入布洛赫驻波模式,从而产生慢光, 增加了光子与吸收介质的接触时间,提高了吸收 效率。另一方面,光在光栅内部的反射和散射增 加了光在吸收层内的传播路径,更有利于光被吸 收。该研究结果为制备高效率、高性能太阳能电 池结构提供了参考依据。

参考文献:

- [1] Meier J, Kroll 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 T J, Su Z S, Liu Y D, et al. Enhanced performance of small molecular weight organic solar cells by incorporating Ag nanoparticles [J]. Chin. J. Lumin. (发光学报), 2011, 32(12):1266-1270 (in Chinese).
- [3] Grandidier J, Weitekamp R A, Deceglie M G, et al. Solar cell efficiency enhancement via light trapping in printable resonant dielectric nanosphere arrays [J]. Phys. Status Solidi A, 2013, 210(2):255-260.
- [4] Bermel P, Luo C, Zeng L, et al. Improving thin-film crystalline silicon solar cell efficiencies with photonic crystals [J]. Opt. Exp., 2007, 15(25):16986-17000.
- [5] 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
- [6] Peters M, Goldschmidt J C. Efficiency limit and example of a photonic solar cell [J]. J. Appl. Phys., 2011, 110(4): 043104-1-5.
- [7] Curtin B, Biswas R, Dalal V. Photonic crystal based back reflectors for light management and enhanced absorption in amorphous silicon solar cells [J]. Appl. Phys. Lett., 2009, 95(23):231102-1-3.
- [8] 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-dimensionalphotonic crystal [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2012, 33(6):633-639 (in Chinese).
- [9] Zheng G G, Xian F L, Li X Y, et al. 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):054213-1-4.
- [10] Sheng X, Johnson S G. Integrated photonic structures for light trapping in thin-film Si solar cells [J]. Appl. Phys. Lett., 2012, 100(11):111110-1-3.
- [11] Lozano G, Colodrero S, Caulier O. Theoretical analysis of the performance of one-dimensional photonic crystal-based [J]. Phys. Chem. C, 2010, 114(8):3681-3687.
- [12] 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]. Appl. Phys. Lett., 2009, 94(19):191102-1-3.
- [13] Gomard G, Drouard E, Letartre X, et al. Two-dimensional photonic crystal for absorption enhancement in hydrogenated amorphous silicon thin film solar cells [J]. Appl. Phys., 2010, 108(12):123102-1-8.
- [14] Moharam M G, Grann E B, Pommet D A, et al. Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings [J]. Opt. Soc. Am. A, 1995, 12(5):1068-1076.
- [15] Zhao Y, Zhao H W, Zhang X Y, et al. Research on some new mechanisms of slow light and its applications [J]. Opt. Precision Eng. (光学 精密工程), 2009, 17(2):237-245 (in Chinese).
- [16] Wu F B, Zhang D W. The light trapping in solar cells based on periodic nano-structures gratings [J]. Laser Journal (激 光杂志), 2010, 31(5):15-17 (in Chinese).
- [17] Li J W, Xie H L, Zhao H B. Solar Cells Operating Principles, Technology, and System Applactions [M]. Beijing: Publishing House of Electronic Industry, 1987:2-3 (in Chinese).