

基于光栅结构的碲化镉太阳能电池吸收层设计

孙晓红, 张琳, 李文阳, 郭敏强

(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 450001)

摘 要:设计了一种吸收层为双填充比矩形光栅结构的碲化镉薄膜太阳能电池,利用时域有限差分法对矩形光栅和双填充比矩形光栅碲化镉吸收层在 250~1 000 nm 入射波长范围内的吸收效率进行分析.实验结果表明:相比于平板型吸收层,单填充比和双填充比矩形光栅结构的吸收效率均有较大提高;双填充比矩形光栅在整个可见光范围内的吸收率整体得到提高,其对可见光的平均吸收率相比于平板型至少提高 10%.可见通过优化太阳能电池吸收层的结构,光子在光栅内的随机反射增加了光在吸收层的作用时间和距离,提高了薄膜太阳能电池的光电转换效率.

关键词:太阳能电池;光栅;时域有限差分法;吸收层;碲化镉

中图分类号: O431 **文献标志码:** A **doi:**10.3969/j.issn.1671-6833.201505039

0 引言

可持续发展是 21 世纪人类面临的一个重大问题.新型的可再生能源,如太阳能、风能、水电等清洁能源越来越受到人们的青睐.太阳能不释放任何对大气有害的气体,是一种清洁能源^[1].在可再生能源的研究中,太阳能电池是一个非常重要的研究领域^[2].有关数据显示:预计到 2025 年,光伏能源将占人类总能源的 22% 左右,到 21 世纪中期,太阳能发电将达到能源市场的 30% 以上^[3].

目前太阳能电池光电转换效率不高主要是由于光子流失.造成光子流失的主要原因有:①吸收层的材料对光的吸收率小;②吸收层本身的结构不利于光电转换^[4].对于第一个原因,应尽量减少光在入射面的反射,同时提高光子的主动吸收能力^[5],可选用光电转换效率高的材料.提高效率,降低成本一直是光伏(PV)材料的研究重点^[6].薄膜太阳能电池的研究及其应用是当今光伏领域的热点,碲化镉(CdTe)薄膜是一种发展较快的太阳能电池吸收层材料^[7].碲化镉材料制成的太阳能电池具有直接能隙,其能隙值为 1.45 eV,正好位于理想太阳能电池的能隙范围内,并具有

很高的吸光系数,成为可以获得高效率理想太阳能电池的材料之一^[8].CdTe 易沉积成大面积的薄膜,并且 CdTe 薄膜太阳能电池的制造成本较低,已成为美、德、日、意等国研发的主要对象^[9].

针对第二个问题可以设计出具有高吸收率的太阳能电池吸收层结构.太阳能电池总的吸收效率等于各层吸收效率之和^[10],笔者主要对吸收层结构进行优化设计.近年来,在太阳能电池中加入光栅结构来提高吸收率成为一个非常热门的话题,光栅结构可以提高太阳能电池的吸收效率^[11].通过设计矩形光栅型结构,利用时域有限差分法,计算吸收层的吸收率.然后进一步在矩形光栅结构的基础上优化填充比和碲化镉介质厚度,设计双填充比光栅的吸收层结构,探究其对吸收率的影响.

1 吸收层模型的 FDTD 法分析

吸收层主要采用碲化镉材料,碲化镉是一种化合物半导体,属于 II-VI 族化合物,性能稳定,是直接带隙半导体,光吸收强,其禁带宽度与地面太阳光谱有很好的匹配,最适合于光电能量转换,所以具有更高的光电转换效率.碲化镉材料的折射率与入射波长成非线性关系,图 1 为碲化镉材

收稿日期:2015-05-26;修订日期:2015-08-01

基金项目:国家自然科学基金资助项目(11104251)

作者简介:孙晓红(1970—),女,河南郑州人,郑州大学教授,博士,主要从事光通信研究,E-mail: iexhsun@zzu.edu.cn.

引用本文:孙晓红,张琳,李文阳,等.基于光栅结构的碲化镉太阳能电池吸收层设计[J].郑州大学学报(工学版),2016,37(2):92-96.

料在 250 ~ 1 000 nm 对应的色散关系曲线,这里采用其复折射率, n 为折射率实部, k 为折射率虚部。

图 2 为二维的沿 x 方向无限延伸的矩形光栅结构,模型的背景介质为空气,即上部和下部均为空气层,中间层为矩形光栅结构,光栅的厚度为 h ,光入射角为 θ ,光栅的周期为 T ,填充比为 f ,即在一个晶格周期内碲化镉介质的宽度为 $f \times T$ 。笔者研究在 TE 和 TM 偏振分量光垂直 ($\theta = 0$) 入射条件下得到的结果。

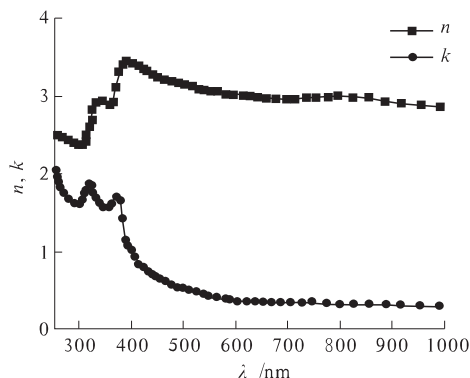


图 1 碲化镉材料的折射率实部 n 和虚部 k

Fig. 1 Refractive index n and extinction coefficient k of CdTe

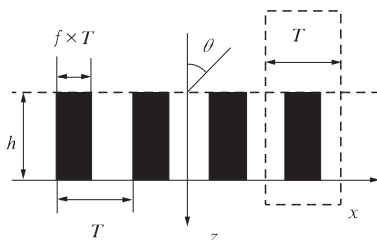


图 2 矩形光栅结构吸收层

Fig. 2 The structure of rectangular grating in the absorption layer

时域有限差分法是把 Maxwell 旋度方程在时间和空间领域上进行差分化,将电磁场进行空间和时间上的离散化,得到电磁场演化的迭代方程组,实现在一定体积内和一段时间上对连续电磁场的数据取样压缩^[12]。通过计算电场以及磁场随时间的变化情况,进而得出空间电磁场的时间演化过程。利用时域有限差分法对该模型进行数值计算,Maxwell 旋度方程为

$$\begin{cases} \nabla \times H = \frac{\partial D}{\partial t} \\ D = \varepsilon E \\ \nabla \times E = -\frac{\partial B}{\partial t} \\ B = \mu H \end{cases} \quad (1)$$

式中: ε 为介电常数; μ 为磁导系数。对方程组(1)进行归一化处理,得到

$$\begin{cases} \nabla \times H = \sqrt{\varepsilon_0 \mu_0} \frac{\partial D}{\partial t} \\ D = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} E \\ \nabla \times E = -\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0} \frac{\partial B}{\partial t} \\ B = \frac{\mu}{\mu_0} H \end{cases} \quad (2)$$

在各向同性介质中,式中: $\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$; $\mu = \mu_0 \mu_r$ 。

FDTD 方法是一种研究电磁场问题的时域数值方法,它在解决复杂外形、非均匀介质、时域、宽带散射和辐射系统的电磁问题时具有独特的优越性^[13]。用差分代替微分作为根本出发点,根据 Yee 氏网格中各个场量的分配直接将麦克斯韦旋度方程转化成差分方程组,在空间和时间上完成电磁场问题的离散。笔者在不同的边界区域上运用电磁场边界条件,求解 TE 和 TM 偏振分量下的吸收层吸收效率。

2 实验模拟及分析

2.1 平板型与矩形光栅型结构吸收率对比

相对于平板型结构来说,把吸收层雕刻成矩形光栅结构,使得太阳能电池与光的接触面积增大,并且光在电池内部经过多次反射,以增加光路长度;同时产生的衍射效应使电池表面反射减弱,从而增加吸收率^[14]。

实验模拟的矩形光栅周期 $T = 400$ nm,碲化镉介质厚度 $h = 300$ nm,填充因子 $f = 0.7$ 。图 3 为光垂直入射时,在碲化镉介质厚度相同的情况下,平板型结构和矩形光栅结构随波长变化的吸收率曲线。从图 3 中可以看出,在 250 ~ 1 000 nm 波长范围内,平板型结构在 TE 模式和 TM 模式下的吸收率曲线基本重合,在 TE 模式和 TM 模式下矩形光栅结构的平均吸收率整体上都高于平板型结构的吸收率,其中在 TE 模式下平均高出约 5%,TM 模式下平均高出约 10%。

2.2 填充比对矩形光栅结构的影响

矩形光栅的填充比对吸收层的吸收效率有很大的影响。光栅槽宽度不同,结构表面附近的电磁场强分布会有显著的变化^[15]。图 4 为矩形光栅周期 $T = 400$ nm,厚度 $h = 300$ nm 时,TE 和 TM 模式下不同填充比的平均吸收率变化曲线。

从图 4 可以看出,随着填充比增加,矩形光栅结构的吸收率在 TE 模式和 TM 模式下呈先升高,后稍有下降的趋势。在填充比为 0.7 时,两种模式

下吸收率基本相同,约为 75%;在 TE 模式下,填充比为 0.6 时,最大平均吸收率为 76.71%;在 TM 模式下,填充比为 0.8 时,最大平均吸收率为 75.69%。由以上分析可知,矩形光栅的吸收效率不仅与介质材料有关,填充比 f 也是一个重要的影响因素。综合填充比对矩形光栅平均吸收效率的影响,可以设计出平均吸收效率在整个波段范围内较高的吸收层结构。

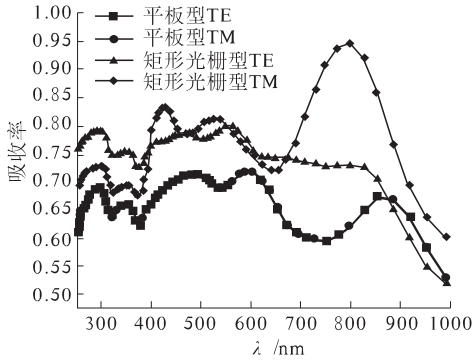


图3 平板型和矩形光栅结构的吸收率对比图

Fig.3 The absorption efficiency of non patterned and rectangle grating structure

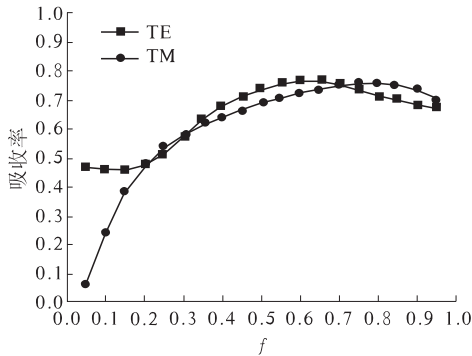
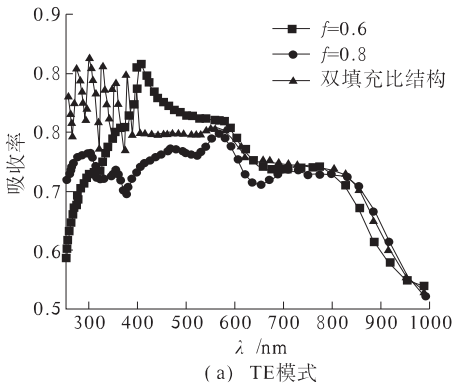


图4 不同填充比平均吸收率曲线 ($h = 300\text{ nm}$)

Fig.4 The average absorption efficiency of different filling ratio ($h = 300\text{ nm}$)

2.3 双填充比矩形光栅设计与优化

基于对矩形光栅填充比的研究,设计了具有



(a) TE模式

双填充比的矩形光栅吸收层结构。这里吸收层的填充比选取 $f_1 = 0.6$ 和 $f_2 = 0.8$ 。在介质厚度 $h = 300\text{ nm}$,光栅周期 $T = 400\text{ nm}$,填充比为 0.6 时,在 TE 模式下有最大的平均吸收率;填充比为 0.8 时,在 TM 模式下有最大的平均吸收率。在每个光栅单元内,选取光栅的填充比 0.6 和 0.8 交错排列,如图 5 所示,其中 $f_1 = 0.6, f_2 = 0.8$ 。这样综合了填充比为 0.6 和 0.8 时的吸收率优势,提高了 TE 模式和 TM 模式下在 $250 \sim 1\,000\text{ nm}$ 范围内整个波段的平均吸收率。图 6 为在碲化镉厚度 $h = 300\text{ nm}$ 时,双填充比结构与填充比为 0.6 和 0.8 时在 TE 模式和 TM 模式下的吸收率对比图。从图 6 可以看出,双填充比结构显著提高了在短波长范围内的吸收率,在中长波段双填充比结构的吸收率在部分波长范围内虽稍低于单填充比结构的吸收率,但总体来看,双填充比结构的平均吸收率高于单填充比结构的吸收率。

计算碲化镉厚度 $h = 300\text{ nm}$ 时,在 $250 \sim 1\,000\text{ nm}$ 波长范围内的平均吸收率,可以得到双填充比结构的平均吸收率在两种模式下相对于平板型和单填充比光栅结构均有所提高。双填充比结构的设计使得在 TE 模式下的平均吸收率达到 75.41%,在 TM 模式下的平均吸收率达到 78.92%,且在 TE 模式下最高可达到 92.58%,在 TM 模式下最高可达 93.53%。

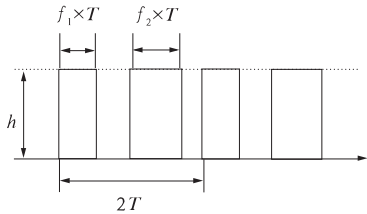
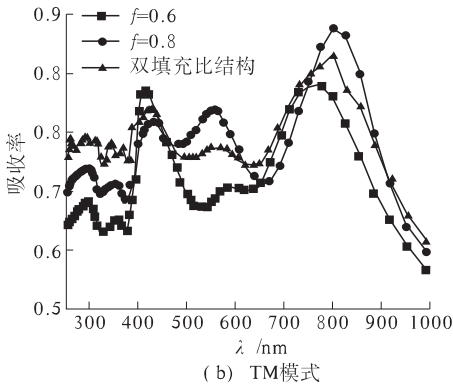


图5 双填充比矩形光栅结构 ($f_1 = 0.6, f_2 = 0.8$)

Fig.5 The structure of double filling ratios rectangular grating ($f_1 = 0.6, f_2 = 0.8$)



(b) TM模式

图6 单填充比和双填充比矩形光栅结构吸收率

Fig.6 The absorption efficiency of the structure of single filling ratio and double filling ratios

除了填充比以外,矩形光栅的厚度也会对吸收率有影响.图7所示为碲化镉厚度 h 从50~1 000 nm对应的TE和TM模式下双填充比矩形光栅结构的平均吸收率曲线.

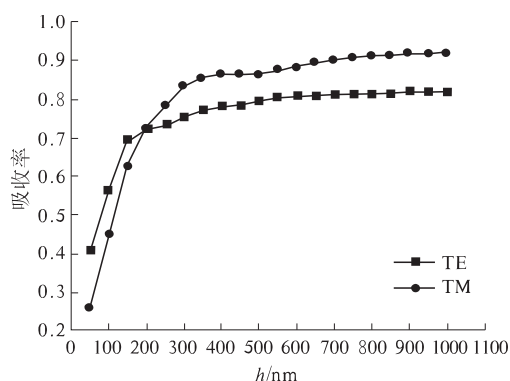


图7 不同厚度的双填充比光栅的平均吸收率

Fig. 7 The average absorption efficiency of different thickness of double filling ratios rectangular grating

从图7中可看出,随着矩形光栅的厚度从50 nm增加到300 nm,在TE模式和TM模式下,平均吸收率随着厚度的增加显著提高,在厚度为200 nm时,两种模式下的吸收率基本重合,在250~1 000 nm的平均吸收率可达到72.49%;当矩形光栅的厚度大于300 nm时,在TE模式和TM模式下平均吸收率虽有增加,但增加的趋势变缓,总体来看仍是厚度越大,平均吸收率越高.两种模式相比,在厚度大于200 nm时,TM模式下的平均吸收率要大于TE模式下的平均吸收率.综合分析,双填充比 $f_1=0.6$ 、 $f_2=0.8$ 对应的矩形光栅结构的吸收率随着光栅厚度的增加而增加,但在厚度大于300 nm时,平均吸收率的增加幅度越来越小,约高出10%.

3 结论

笔者设计了一种新型的双填充比矩形光栅吸收层结构,该结构是基于碲化镉作为光栅的填充材料.碲化镉材料的使用增加了太阳能电池在长波长范围内的吸收效率.通过时域有限差分法分析了双填充比矩形光栅结构的吸收率,在填充比为0.6、0.8依次重复排列的矩形光栅结构中,当厚度均为200 nm时,在TE模式和TM模式下的平均吸收率均可达到72%以上,最高可达90%以上.在此基础上通过对光栅厚度的模拟与分析,发现厚度小于300 nm时,随着厚度增加,两种模式下的平均吸收率均有显著提高;厚度300 nm以上时,随着厚度增加,两种模式下的平均吸收率增加

缓慢,TE模式下平均吸收率接近80%,TM模式下平均吸收率接近90%。光栅结构和平板型结构相比,由于光子在吸收层内的多次反射和散射^[16],增加了作用时间和距离,有效增强了光场强度,提高了太阳能电池的吸收效率.该研究结果为制备高效率太阳能电池吸收层结构提供了参考依据.

参考文献:

- [1] DAS N, CHAROENPITAKS K, ISLAM S. Analysis of incident light angles on nano-grating structure for minimizing reflection losses in GaAs solar cells[C]//Power engineering conference (AUPEC), 2013 Australasian Universities. IEEE, 2013: 1-6.
- [2] DAS N, ISLAM S. Optimization of nano-grating structure to reduce the reflection losses in gaas solar cells [C]//Universities power engineering conference (AUPEC), 2012 22nd Australasian. IEEE, 2012: 1-5.
- [3] 刘震. 金属纳米等离子体增强硅薄膜太阳能电池光吸收[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2013: 1-49.
- [4] 耿浩珂, 孙晓红, 张旭, 等. 基于光栅结构薄膜太阳能电池吸收层结构设计和优化[J]. 光子学报, 2014, 43(12): 1223003-1-5.
- [5] RAHMAN F N, KHALIL M I, LATIF T, et al. Performance enhancement of thin-film c-Si solar cell with group III-V material grating structures [C]//Applied electrical engineering and computing technologies (AEECT), 2013 IEEE Jordan Conference on. IEEE, 2013: 1-5.
- [6] MUNGAN E S, DONGAONKAR S. From process to modules: end-to-end modeling of CSS-deposited CdTe solar cells[J]. Photovoltaics, IEEE 2014, 4(3): 954-961.
- [7] 王启明, 褚君浩, 郑有焘. 太阳能电池发展现状及性能提升研究[M]. 北京: 科学出版社, 2014.
- [8] BANAI R, BLISSETT C, BUURMA C, et al. Polycrystalline CdTe solar cells on buffered commercial TCO-coated glass with efficiencies above 15% [C]//Photovoltaic specialists conference (PVSC), IEEE, 2011: 003410-003414.
- [9] 张榕, 周海平, 陈红. 碲化镉薄膜太阳能电池及其溅射制备[J]. 材料导报, 2006, 20(11): 47-50.
- [10] 郝宇, 孙晓红, 孙焱, 等. 基于光栅结构的碲化镉高效率吸收层设计[J]. 发光学报, 2013, 34(6): 769-775.
- [11] ZAIDI S H, GEE J M, RUBY D S. Diffraction grating structures in solar cells [C]//Photovoltaic specialists

- conference, 2000. Conference Record of the Twenty-Eighth IEEE. IEEE, 2000: 395 – 398.
- [12] 陈跃飞, 李南, 李响, 等. FDTD 模拟软件电磁建模模块的研究和实现[J]. 现代电子技术, 2007, 30(11): 24 – 26.
- [13] 黄纪军, 马兴义, 栗毅, 等. 复杂目标的 FDTD 几何 – 电磁建模方法[J]. 微波学报, 2005, 21(S1): 44 – 48.
- [14] 杨理理, 宣益民, 韩玉阁, 等. 光栅表面太阳能电池吸收特性及其优化[J]. 工程热物理学报, 2011, 32(5): 816 – 818.
- [15] 黄少茹, 鲁拥华, 王沛, 等. 填充比对金属光栅与介质光栅激发表面等离子波的不同影响[J]. 量子电子学报, 2013, 30(2): 225 – 230.
- [16] JI L, THOMAS M A, CUI J, et al. Blazed pyramidal gratings for enhanced light trapping in very thin film solar cells [J]. Photovoltaic specialists conference (PVSC), 2012(38): 338 – 341.

Structural Design of Absorption Layer in CdTe Solar Cells Based on Grating Structure

SUN Xiaohong, ZHANG Lin, LI Wenyang, GUO Minqiang

(School of Information Engineering, Henan Key Laboratory of Laser and Opto-electric Information Technology, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China)

Abstract: A thin-film solar cell with a grating of double filling ratios in the layer was designed. The structure of double filling ratios is to increase the absorption in the CdTe thin-film layer. By applying FDTD method, the absorption efficiency in the range of 250 ~ 1 000 nm has been analyzed for CdTe layer with rectangular and rectangular with double filling ratios grating. The results show that the absorption efficiency of the single filling ratio and double filling ratios grating structures can be improved relative to the flat absorption layer. The average absorption rate of double filling ratios grating increased by at least 10% over non patterned in the range of almost all visible spectrum. 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, and finally improves the photo electric conversion efficiency of the thin-film solar cell.

Key words: solar cells; grating, FDTD(finite-difference time-domain); absorption layer; CdTe