光伏电池表面抛物锥阵列微结构的反射特性研究

高永锋¹ 赵琼华¹ 许孝芳¹ 任乃飞¹ 周 明² 张丁月¹ ¹江苏大学机械工程学院,江苏镇江 212013 ²清华大学摩擦学国家重点实验室,北京 100084

摘要 采用时域有限差分法(FDTD)对硅基太阳能电池表面抛物锥阵列微结构的反射特性进行研究,分析了抛物锥 阵列的高度、底面占空比、周期等参数对其抗反射性能的影响。研究表明,反射率随底面占空比、高度的增大而减 小。在锥高 600 nm 且抛物锥底面直径等于周期的情况下,锥底面直径分别取 128,160,213,256,320 nm 时,微结构 在硅的响应光谱 300~1200 nm 内均能获得低于 3%的反射率;在此基础上提出一种大、小抛物锥相切排列的新型复 合结构,将硅的响应光谱波段内的反射率进一步降低至 1%以下,为硅基太阳能电池抗反射表面的设计提供了一种 新的思路。

关键词 衍射;抗反射;时域有限差分法;抛物锥;太阳能电池
中图分类号 0436 文献标识码 A
doi: 10.3788/CJL201542.0808004

Research on Reflection Properties of Silicon Based Solar Cells with Parabolic Cone Array Structure

Gao Yongfeng¹ Zhao Qionghua¹ Xu Xiaofang¹ Ren Naifei¹ Zhou Ming² Zhang Dingyue¹ ¹College of Mechanical Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang, Jiangsu 212013, China ²State Key Laboratory of Tribology, Tsinghua University, Beijing 100084, China

Abstract The anti-reflection properties of silicon based solar cell with parabolic cone array structure is studied. The parameters of structure that influence the anti-reflection performance, such as the height of parabolic cone array, the period and the duty factor, are analyzed by using of the finite-difference time-domain method. The analysis shows that the reflectivity tends to reduce as the height and duty factor of structure increase. According to the simulation result, less than 3% reflectivity can be achieved in the whole response spectrum of silicon solar cell (wavelength from 300 nm to 1200 nm) for 5 groups of parameters, i.e. the base diameter of parabolic cone is 128, 160, 213, 256, 320 nm respectively, with the array's height of 600 nm and the period of array equal to the base diameter. A novel composite structure based on parabolic cone is also proposed, which reduces the reflectivity to 1%. It provides a novel design approach for the anti-reflective surface of silicon-based solar cells. **Key words** diffraction; anti-reflection; finite- difference time-domain; parabolic cone; solar cell **OCIS codes** 050.6624; 120.5700; 050.1940

1 引 言

光学损失是影响太阳能电池转换效率的关键因素之一。目前硅基太阳能电池在光伏市场占据着主导地位¹¹,但其基底材料硅的折射率较高,随波长不同在3.5~6.5之间变化,光照射至硅平面时反射率高达30%

收稿日期: 2015-03-09; 收到修改稿日期: 2015-04-13

基金项目:国家973计划(2011CB013004)、江苏省高校自然科学研究项目(13KJB460004,13KJB510006)、江苏省光子制造科学与技术重点实验室开放基金项目(GZ200907)、江苏大学高级人才基金项目(14JDG073)、江苏大学大学生实践创新训练项目 (201410299097W,201510299188W)

作者简介:赵琼华(1980—),女,硕士研究生,主要从事太阳能电池减反射方面的研究。E-mail: maggie_littlefish@hotmail.com 导师简介:高永锋(1969—),男,博士,副教授,主要从事光子晶体、光通信器件设计与制备技术、飞秒激光微纳加工和激光 测粒等方面的研究。E-mail: absgyf69@163.com(通信联系人)

以上,造成光能的大量损失,因此如何降低电池表面的反射率是目前亟待解决的问题。传统的方法为在电 池表面制备一层或多层减反薄膜,但其适用的波段范围较狭窄,并且由于不同材料的引入而存在附着力差、 不稳定等弊端。在基体表面织构二维亚波长微结构的方法可以有效避免以上问题,而且能够实现宽波段内 减反,引起了国内外学者广泛的关注。

对多种不同类型结构的反射性能研究相继被报道,Motamedi等^[2]研究了二维方柱型光栅在红外波段的 抗反射特性;Li等^[3]对硅表面圆柱型周期阵列结构进行了模拟研究,当圆柱高度H=5000 nm时可见光波段反 射率低于4%;Ting等^[4]比较了硅表面圆锥、金字塔型结构在可见光范围内的减反性能;斯坦福大学的Zhu等^[5-6] 对纳米锥、纳米线降低反射以及增强吸收的性能做了一系列研究工作;梁磊^[7]等用化学腐蚀法制备了纳米线 阵列,在400~700 nm波段内反射率低于5%;纳米孔、凹槽等结构也被证实具有类似的陷光作用^[8-11]。Boden 和 Bagnall^[12]提出微结构的轮廓对其反射性能以及适用的减反波段起着决定作用,硅基太阳能电池的响应光 谱为350~1150 nm^[13],因此有必要探索其对应的最佳结构轮廓及最优参数。王翔等^[14]在300~1200 nm波段内 对比分析了等截面和渐变截面两大类结构的抗反射特性,发现截面呈梯度变化的微纳米结构具有更好的减 反性能,这对硅基太阳能电池抗反射表面的设计具有指导意义。

本文研究了抛物锥阵列结构在硅的响应光谱区间内的反射特性,该结构截面面积大小逐渐变化,其等效折射率从锥体顶端到底部呈近似线性变化。利用时域有限差分法(FDTD)分析了底面占空比、周期、高度等结构参数对反射率的影响,得到在300~1200 nm 波长范围内反射率均低于3%的五组参数;并在此基础上提出了一种大尺寸抛物锥和小尺寸抛物锥相切排列的新型复合结构,此种结构有助于解决正方排列时圆形底部之间存在间隙的问题,将反射率进一步降低至1%。同时,抛物锥阵列的结构高度仅为600 nm,有利于减小电池厚度、节约成本。

2 抛物锥阵列结构抗反射性能的FDTD模拟

微结构模型采用抛物锥体(其轴截面曲线为抛物线),呈二维周期性正方排列,结构参数为周期T、底面直径 D、高度H,如图1所示。当微结构尺度达到亚波长量级时,标量衍射理论不再适用,必须使用矢量衍射理论或 等效介质理论¹¹⁵进行分析。时域有限差分法(FDTD)是矢量分析法中主要的一种,由Yee提出的元胞结构能使 整个空间域中随时间变化的电、磁场值都得到准确的求解,从而能够较为精准地描述电磁场的传播特性,因此 采用FDTD方法可对抛物锥阵列结构的抗反射性进行精确分析。在进行计算机仿真时,将x-y平面四周设置为 周期性边界条件(PBC),同时在z轴两端设置完美匹配层(PML)。在微结构阵列上方一定高度设置入射光源,并 在光源之后一定距离位置处设置监视器用以观察反射波的电磁场分布、坡印廷矢量以及功率等。



图 1 抛物锥阵列结构示意图 Fig.1 Schematic diagram of parabolic cone array structure

2.1 底面占空比D/T对反射率的影响

利用等效介质理论可将抛物锥近似为多层膜,根据多层膜零反射所需满足的方程组¹⁶¹,可估算出抛物锥 阵列的结构高度 H=589 nm。取高度 H=600 nm,周期 T=320 nm,计算底面直径 D 分别为 0.4T、0.6T、0.8T、 0.9T、T时,光波垂直入射的反射率,结果如图 2 所示,反射率 R 随底面占空比 D/T 增大而显著下降,整个观察 波段内的最大反射率从 D/T=0.4 时的 27%降至 D/T=1.0 的 3%。



图 2 抛物锥底面占空比不同时反射率随波长的变化曲线 Fig.2 Reflectivity versus wavelength at different *D/T* values

2.2 结构高度 H 对反射率的影响

依据图 2 的计算结果,取底面占空比 D/T=1.0,另取周期 T=320 nm,观察结构高度 H递增时垂直入射反射 率 R 的变化,见图 3。当高度由 200 nm 增至 600 nm 时,反射率显著降低,从13%降至 3%;高度继续增加时,反 射率虽仍呈总体下降趋势,但降幅已经不明显,整体水平逐渐趋向于零。虽然反射率随高度 H 的增大而降 低,但结构高度越大意味着太阳能电池越厚、相应的生产成本也会增加,因此必须在满足减反性能的同时尽 量减小电池厚度,在此将最佳结构高度选为 H=600 nm。



图 3 抛物锥结构高度不同时反射率随波长的变化曲线 Fig.3 Reflectivity versus wavelength at different *H* values

2.3 周期T对反射率的影响

图 4 为 *D*/*T*=1.0, *H*=600 nm, 周期 *T* 分别为 128、160、213、256、320、640 nm, 垂直入射时的反射率变化曲线。除周期 *T*=640 nm 时反射水平较高之外,其余五组参数的反射率非常接近,均低于 3%。由此可知,当周期小于波长时,周期的变化对反射率影响甚小;反之,当周期大于某一临界值时,结构的减反性能会受到较大的影响。



图4 抛物锥周期不同时反射率随波长的变化曲线



通过以上对各参数的模拟研究,得到在300~1200 nm 波长范围内反射率低于3%的五组结构参数:H= 600 nm,D=T=128、160、213、256、320 nm。考虑到实际应用中较大尺寸的微结构更便于加工制备,可参考D=

T=320 nm这一组参数。

3 结构的优化设计

由于抛物锥底面为圆形,正方排列时锥体底部之间存在间隙,使得基底有一小部分直接裸露在空气中, 导致该区域因折射率突变引起一定的反射。为解决此问题,提出了一种优化设计方案:在抛物锥阵列间隙 处设置小尺寸抛物锥,即一种大小抛物锥相间排列的新型复合结构,如图5所示。小尺寸抛物锥也呈二维周 期性正方排列,与大尺寸抛物锥阵列具有相同的周期*T*,其中小抛物锥底部直径*d*与大抛物锥底部直径*D*的 关系为 $d = (\sqrt{2} - 1)D$,即小抛物锥与相邻的四个大抛物锥相切。



图 5 复合型抛物锥阵列平面示意图。 (a) 俯视图; (b) 剖面图 Fig.5 Plane graph of composite structure. (a) Top view; (b) cross section

图 6 为平面硅、半球阵列结构、抛物锥阵列结构、复合结构的反射率对比图,平面硅的最大反射率高达 54%,在平面硅基底上构筑微结构之后,反射率显著降低。但同样为纳米尺度的表面微结构,其结构形状不 同,所起的减反效果存在较大差异。以半球阵列结构为例,该结构能将观察波段内的最大反射率降低至 26%,但平均反射率仍维持在15%左右;而具有相同底面直径的抛物锥阵列在观察波段内的最大反射率仅为 3%,在将抛物锥阵列优化为复合结构后,反射率进一步降低至1%以下。



图 6 平面硅 & 半球阵列结构 & 抛物锥阵列结构 & 复合结构反射率对比图

Fig.6 Reflectivity versus wavelength of flat silicon & hemisphere array structure & parabolic cone array structure & composite structure 对于之前得到的五组反射率低于 3%的抛物锥阵列结构参数,对其相应的优化结构都进行了模拟计算,发现它们在硅响应光谱内的反射率都在 1%以内,如图7所示。同时,本文还考察了光源斜入射时复合结构的反







射性能,见图 8,可见波长小于 800 nm 时,反射率受入射角的影响很小;当波长大于 800 nm 时,反射率随入射角的增大呈明显上升趋势。该结构在入射角为 30°时,300~1000 nm 波段内的反射率都低于 5%,有效的实现了宽 波段、大角度入射的减反性能。

4 分析与讨论

基于等效介质理论简洁直观的特点,利用该理论对模拟结果进行分析和讨论。当微结构尺度小于光波 长时,只存在零级衍射,光波无法分辨出结构的表面轮廓,当光通过微结构时等效于经过了一层均匀介质, 该层等效介质的折射率n_{eff}可由麦克斯韦方程组的物质方程及边界条件推导得出¹¹⁷:

$$n_{\rm eff} = \sqrt{\frac{(1 - f + fn_s^2)[f + (1 - f)n_s^2] + n_s^2}{2[f + (1 - f)n_s^2]}}, \qquad (1)$$

式中f为微结构的体填充因子即体积占空比,n。为材料折射率,在此为硅的折射率。将微结构划分为许多层 截面平行于底面的小薄片,每一层对应的等效折射率nem都能用(1)式计算得出。本文中的微结构单元为抛物 锥,其平行于底面的截面面积沿高度方向从上到下是逐渐增大的,因此每一薄层对应的体填充因子f以及nem 也是逐渐变化的,整个微结构阵列可以看做是从空气到硅基底之间的一个折射率连续变化过渡区,根据菲 涅耳理论,折射率突变越小,反射也越小,与蛾眼效应¹¹⁸的减反原理相同。

对抛物锥的轴截面建立坐标系,如图9,截面曲线满足抛物线方程 $y' = \frac{4H}{D^2} x'^2$,在坐标 y'处取一厚度很小的薄层,可得该薄层的体填充因子 $f = \frac{\pi y'}{4H} \left(\frac{D}{T} \right)^2$,代入(1)式即可计算出这一薄层的等效折射率 n_{eff} ,在这里取 n_s =3.644(硅的光谱响应曲线峰值对应波长 λ_0 = 860 nm^[19]的折射率)。由于体填充因子 f与底面占空比 D/T的 平方成正比,等效折射率 n_{eff} 随f单调递增,因而 n_{eff} 关于 D/T也是单调递增的。图 10为五组不同占空比对应 的等效折射率 n_{eff} 沿锥体高度方向变化的曲线,等效折射率都从1开始连续增大,显然,D/T越大,抛物锥底部 最靠近硅基底那一薄层的 n_{eff} 越大,当D/T=1.0时,该层的 n_{eff} 取得最大值,与基体的折射率最接近,在此处因



图 9 抛物锥的轴截面图 Fig.9 Axial section of parabolic cone



折射率突变产生的反射就越小。

对于周期T、底部直径D相同但结构高度H不同的抛物锥来说,从锥体顶部至底部等效折射率net的改变量 是一样的,但net的改变速度不同。图11为结构高度不同时net沿锥体高度方向的分布图,可见结构高度越高, net随y'变化的曲线斜率越小,即折射率增加越缓慢,单位高度内的折射率突变程度越小,因而反射率越低。

图 12 为抛物锥阵列结构、半球阵列结构以及复合结构的等效折射率分布图,由于半球结构的高度与底面半径相同,远小于抛物锥阵列的高度,其等效折射率沿高度方向增加较快,即折射率突变较大,因而造成反射率水平较高。复合结构对反射性能产生的影响同样也可以用等效介质理论进行分析。以 λ_0 = 860 nm 为例,取 *D*/*T*=1.0时可以计算出正方排列抛物锥底部对应的 n_{eff} = 2.674;对结构进行优化设计后,各薄层的体积填充比增大, f_e = (4 – 2 $\sqrt{2}$) f_p ,其中 f_e 为复合结构各薄层的体积填充比, f_p 为抛物锥阵列结构各薄层的体积填充比,因此复合结构在锥底部的等效折射率 n_{effe} 也增大, n_{effe} =3.083,更接近于硅基底的折射率。



图 12 抛物锥阵列结构&半球阵列结构&复合结构的等效折射率分布

Fig.12 Effective refractive Index versus y' position of parabolic cone array structure & hemisphere array structure & composite structure

另外,整个微结构的体积占空比 $F = \frac{\pi}{8} \left(\frac{D}{T} \right)^2$,当 $\frac{D}{T} = 1.0$ 时,优化前,抛物锥体的体积占空比 F_p =39.3%; 优化后,复合型抛物锥体的体积占空比 $F_e = (4 - 2\sqrt{2}) \times F_p = 46\%$ 。曹召良等^[20]经研究得出体积占空比 F = 50射率的关系:0<F<50%时,反射率随微结构的体积占空比增大而减小;50%<F<1时,反射率则随 F 增大而增 大。本文提出的两种结构体积占空比 F 都在50%以内,显然,优化后的复合结构因体积占空比更大而使得反 射率进一步降低。

图 13 为平面硅、抛物锥阵列结构和复合结构分别在监视器位置处的坡印廷矢量对比图,图(a)中平面硅 的反射坡印廷矢量大小为10⁻³量级,而在硅基体上构筑抛物锥微结构阵列后降至10⁻⁵,且其分布也截然不同, 如图(b)所示;将抛物锥阵列优化为复合结构后,小尺寸抛物锥的引入进一步改变了坡印廷矢量的分布,坡印 廷矢量较大的区域面积较之图(b)明显缩小,观察面绝大部分区域的坡印廷矢量都较小,如图(c)所示。可见, 微结构的引入对场的分布产生了很大的影响,从而使反射率得以减小。

5 结 论

利用时域有限差分法(FDTD)对硅基太阳能电池表面抛物锥阵列微结构的反射特性进行了研究,并利用 等效介质理论对各参数的影响原因进行了分析。发现反射率随抛物锥底面占空比增大而减小;结构高度越 大,反射率越小;当周期远小于波长时,周期的变化对反射率影响很小,但当周期大于某一临界值时,结构的



图 13 监视器观察面上的坡印廷矢量分布图。(a) 平面硅; (b) 抛物锥阵列结构; (c) 复合结构

Fig.13 Poynting vector distribution of the monitor. (a) Flat Si Substrate; (b) parabolic cone array structure; (c) composite structure 减反性能会受到较大影响。所设计的抛物锥阵列结构在高度为600 nm,周期分别为128、160、213、256、320 nm 时,对 300~1200 nm 入射光的反射率均低于3%。在此基础上提出了一种大、小抛物锥相间排列的新型复合 结构,此结构有助于解决抛物锥正方排列时圆形底部存在间隙的问题,从而减小硅基底裸露区域因折射率 突变引起的反射,将观察波段内的最大反射率进一步降低至1%以下,并且在斜入射的情况下减反效果也较 为优异,为硅基太阳能电池抗反射表面的设计和制备提供了一种新的思路。

参考文献

1 Zhou Tao, Lu Xiaodong, Zhang Ming, *et al.*. Crystalline silicon solar-cell development status and trends[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2013, 50(3): 030002.

周 涛,陆晓东,张 明,等.晶硅太阳能电池发展状况及趋势[J].激光与光电子学进展,2013,50(3):030002

- 2 Motamedi M E, Southwell W H, Gunning W J. Antireflection surfaces in silicon using binary optics technology[J]. Applied Optics, 1992, 31(22): 4371-4376.
- 3 Li J, Yu H Y, Wong S M, et al.. Design guidelines of periodic Si nanowire arrays for solar cell application[J]. Applied Physics Letters, 2009, 95(24): 243113.
- 4 Ting C J, Chen C F, Chou C P. Antireflection subwavelength structures analyzed by using the finite difference time domain method[J]. Optik-International Journal for Light and Electron Optics, 2009, 120(16): 814-817.
- 5 Zhu J, Yu Z, Fan S, *et al.*. Nanostructured photon management for high performance solar cells[J]. Materials Science and Engineering: R: Reports, 2010, 70(3): 330-340.
- 6 Wang K X, Yu Z, Liu V, et al.. Absorption enhancement in ultrathin crystalline silicon solar cells with antireflection and light-trapping nanocone gratings[J]. Nano letters, 2012, 12(3): 1616-1619.

7 Liang Lei, Xu Qinfang, Hu Manli, *et al.*. Investigation of anti-reflection properties of crystalline silicon solar cell surface silicon nanowire arrays[J]. Acta Physica Sinica, 2013, 62(3): 037301.

梁 磊,徐琴芳,忽满利,等.晶体硅太阳电池表面纳米线阵列减反射特性研究[J].物理学报,2013,62(3):037301.

8 Yang Huan, Huang Shan, Duan Jun, *et al.*. Contrastive study on laser ablation of single-crystal silicon by 1030 nm femtosecond laser and 355 nm nanosecond laser[J]. Chinese J Lasers, 2013, 40(1): 103003.

杨 焕,黄 珊,段 军,等.飞秒与纳秒激光刻蚀单晶硅对比研究[J].中国激光, 2013, 40(1): 103003.

9 Zhang Lidian, Shen Honglie, Yue Zhihao. Preparation and property of antireflective complex structures on multicrystalline silicon surface[J]. Acta Optica Sinica, 2013, 33(6): 0631002.

张力典, 沈鸿烈, 岳之浩. 多晶硅减反射复合结构的制备与性能[J]. 光学学报, 2013, 33(6): 0631002.

10 Kong Weijin, Cao Kaihua, You Chenglong, et al.. Optimization of wide spectrum anti-reflective grating for solar cell[J]. Acta Optica

Sinica, 2013, 33(12): 1205001.

孔伟金,曹凯华,由成龙,等.太阳能电池用宽光谱减反射光栅的优化设计[J].光学学报,2013,33(12):1205001.

- 11 Wang Haiyan, Sun Xiaofeng, Zhang Yuxiang, et al.. Manufacture and photoelectric properties of porous silicon and its use in solar cells[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2005, 42(2): 52-56.
- 王海燕,孙晓峰,张宇翔,等.多孔硅的光电性质及在太阳能电池中的应用[J].激光与光电子学进展,2005,42(2):52-56.
- 12 Yu Rongjin. Optics and solar energy[J]. Acta Optica Sinica, 2009, 29(7): 1751-1755.

于荣金.光学与太阳能[J].光学学报,2009,29(7):1751-1755.

- 13 Boden S A, Bagnall D M. Tunable reflection minima of nanostructured antireflective surfaces[J]. Applied Physics Letters, 2008, 93 (13): 133108.
- 14 Wang Xiang, Yu Yanqing, Chu Jiaru. Simulation and research on reflection properties of two-dimension micro/nano structre surface by FDTD method[J]. Acta Photonic Sinica, 2012, 41(2): 159-165.

王 翔, 余彦清, 褚家如. 二维微纳米结构表面反射特性的时域有限差分法模拟研究[J]. 光子学报, 2012, 41(2): 159-165.

- 15 Lalanne P, Lemercier-Lalanne D. On the effective medium theory of subwavelength periodic structures[J]. Journal of Modern Optics, 1996, 43(10): 2063-2085.
- 16 Dos Santos J M, Bernardo L M. Antireflection structures with use of multilevel subwavelength zero-order gratings[J]. Applied optics, 1997, 36(34): 8935-8938.
- 17 Gaylord T K, Baird W E, Moharam M G. Zero-reflectivity high spatial-frequency rectangular-groove dielectric surface-relief gratings[J]. Applied optics, 1986, 25(24): 4562-4567.
- 18 Yoshida A. Antireflection of the butterfly and moth wings through microstructure[J]. Forma, 2002, 17(2): 75-89.
- 19 Wang Dianyuan, Wang Qingkai, Peng Dan, et al.. Research experiment of measuring spectral response of Si solar cells[J]. Physics Experiment Action, 2007, 27(9): 8-10.

王殿元, 王庆凯, 彭 丹, 等. 硅太阳能电池光谱响应曲线测定研究性实验[J]. 物理实验, 2007, 27(9): 8-10.

20 Cao Zhaoliang, Lu Zhenwu, Li Fengyou, et al.. Design consideration of two-dimensional anti-reflective subwavelength periodic gratings[J]. Optics & Precision Engineering, 2002, 10(6): 537-541.

曹召良, 卢振武, 李凤友, 等. 二维抗反射亚波长周期结构光栅的设计分析[J]. 光学精密工程, 2002, 10(6): 537-541.

栏目编辑:刘丰瑞