

# 超陷光黑硅结构研究

钱超峰 王庆康 李海华

(上海交通大学微纳科学技术研究院薄膜与微细技术教育部重点实验室  
微米/纳米加工技术国家级重点实验室, 上海 200240)

**摘要** 研究了超陷光黑硅表面圆锥阵列结构的设计。将圆锥结构分为五层,利用等效媒质理论进行了参数设计。考虑了硅材料折射率随波长的变化,用严格耦合波理论对不同入射角,圆锥阵列结构高度以及占空比时的反射率进行了计算分析。发现,圆锥阵列超陷光结构的周期为 135 nm,高度为 480 nm 时,在  $0^\circ\sim 60^\circ$  入射角范围内,对波长为 300~1200 nm 的入射光的反射率都小于 5%。

**关键词** 衍射;黑硅;等效媒质理论;超陷光;圆锥阵列结构

**中图分类号** O436 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201131.1005007

## Design of Black Silicon with Ultra-Light-Trapping Structure

Qian Chaofeng Wang Qingkang Li Haihua

(National Key Laboratory of Micro/Nano Fabrication Technology, Key Laboratory for Thin Film and Micro Fabrication Technology of Ministry of Education, Research Institute of Micro/Nano Science and Technology, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

**Abstract** The conical array on the surface of ultra-light-trapping black silicon, which is divided into five layers, is designed using the equivalent medium theory. It's considered that the refractive index of silicon varying with the wavelength. The elements which affect the reflectivity are analyzed systematically using the rigorous coupled-wave theory, such as incident angle, the height of the conical array and the duty factor. According to the simulation, the reflectivity is always less than 5% when the incident wavelength is from 300 to 1200 nm and the incident angle is from  $0^\circ$  to  $60^\circ$  with the conical array's period of 135 nm and its height of 480 nm.

**Key words** diffraction; black silicon; rigorous coupled-wave theory; ultra-light-trapping; conical array

**OCIS codes** 000.2690; 120.5700; 050.1950; 230.1950

## 1 引言

太阳能电池的性能是由该电池的光电特性决定的,而电池性能的损失主要来源于光学损失和电学损失。如何增强电池的光吸收率是提高电池效率的主要课题之一。采用抗反射薄膜和绒面形貌是减少太阳能电池表面反射的常用方法<sup>[1,2]</sup>,但只有在很窄的入射角范围内才能达到低反射率。黑硅因其对近紫外-近红外波段的光几乎全部吸收,使原本灰色

有光泽的表面,看上去变成了黑色<sup>[3]</sup>,这种新材料一出现就引起了研究人员的高度关注。Her 等<sup>[4]</sup>采用飞秒脉冲激光的方法来制备黑硅,但其工艺比较复杂,成本也比较高昂;Ma 等<sup>[5,6]</sup>利用电化学腐蚀工艺制备了黑硅,虽然工艺简单,成本低廉,但低反射波段范围比较窄(450~650 nm)。这两种方法制备的黑硅结构厚度都在 4  $\mu\text{m}$  以上,应用于太阳能电池和光传感器上则可能因结构自身厚度而增加了对

**收稿日期**: 2011-04-15; **收到修改稿日期**: 2011-05-09

**基金项目**: 国家 863 计划(2011AA050518)、国家 973 计划(2010CB933702)和上海市科学技术委员会纳米专项项目(0952nm06400)资助课题。

**作者简介**: 钱超峰(1987—),男,硕士研究生,主要从事纳米光电子学和微纳制造工艺等方面的研究。

E-mail: chaofengqian@sjtu.edu.cn

**导师简介**: 王庆康(1962—),男,教授,博士生导师,主要从事纳米光电子学和微纳制造工艺等方面的研究。

E-mail: wangqingkang@sjtu.edu.cn(通信联系人)

光的吸收损失<sup>[7]</sup>,从而降低了太阳能电池和光传感器的效率。随着成熟的微纳电子加工工艺技术在一元光学中的引入,作为抗反射应用的亚波长结构的研究越来越多。一维亚波长结构已经被广泛应用于抗反射结构<sup>[8,9]</sup>,文献<sup>[10~12]</sup>对孔洞、方形等二维亚波长结构的衍射特性进行了研究分析,但这些应用与研究主要在红外波段,对整个可见光波段进行研究的少见报道。南洋理工大学 Li 等<sup>[13]</sup>模拟了硅表面周期性圆柱结构的衍射特性,结构周期为 300 nm,直径小于 150 nm,当高度 5000 nm 时,整个可见光波段反射率很低,但是当结构高度下降时,反射率明显上升。如何降低高度成了一个难题。

本文设计和模拟了正方排列圆锥阵列的反射特性。用分层圆柱来拟合圆锥结构,利用等效媒质理论,对五层圆柱结构进行了参数设计,进行了理论验证,并分析了折射率随入射波长变化而变化时对反射率的影响。用严格耦合波理论对设计的结构在 300~1200 nm 波长范围内进行了模拟计算,并分析了入射角、高度和占空比对反射率的影响。所设计的圆锥阵列结构,在 0°~60°入射角范围内,对波长为 300~1200 nm 的入射光的反射率都小于 5%,并且高度仅为 480 nm,有效地降低了黑硅厚度,为黑硅材料的制造、高效超陷光太阳能电池和光传感器的设计和研发提供了依据。

## 2 设计与建模

二维正方排列圆锥结构参数:周期  $p$ ,圆锥底面半径  $R$ ,高度  $h$ ,体填充因子  $R_f = \pi R^2/3p^2$ ,取中心波

长  $\lambda_0 = 700$  nm,这个入射波长下硅的折射率  $n_{\text{SiO}} = 3.78$ 。由等效媒质理论可知<sup>[14]</sup>,当亚波长结构的尺寸远小于入射光波长时,只有零级衍射存在,而其他级次衍射都为倏逝波,类似于光波通过一等效均匀媒质。 $d_x$  和  $d_y$  分别为二维单台阶  $x$  和  $y$  方向上的周期; $n_s$  与  $n_i$  分别为衬底材料和入射介质的折射率。二维临界周期  $(d_x/\lambda, d_y/\lambda) < 1/(n_s + n_i)$ ,对于正方排列的圆柱结构,  $d_x = d_y = p, p < 1/(3.78 + 1) = 146.3$  nm。对于圆锥结构应该分层处理,层数越多,结果越精确,计算也就越复杂。根据等效媒质理论多台阶递推方法设计规则:

$$\frac{n_1}{n_i} = \frac{n_2}{n_1} = \dots = \frac{n_k}{n_{k-1}} = \frac{n_s}{n_k}, \quad (2)$$

$$h_1 n_1 = h_2 n_2 = \dots = h_k n_k = \lambda/4, \quad (3)$$

式中  $n_l$  为第  $l$  层等效折射率,  $h_l$  为第  $l$  层的高度,  $l = 1, 2, \dots, k$  本文将圆锥结构分为五层,根据(2),(3)式计算可得,  $n_1 = 1.25, h_1 = 140.2$  nm;  $n_2 = 1.56, h_2 = 112.32$  nm;  $n_3 = 1.95, h_3 = 89.97$ ;  $n_4 = 2.43, h_4 = 72.11$  nm;  $n_5 = 3.04, h_5 = 57.64$  nm。由此可得:高度  $h = 472.2$  nm,底层圆柱结构的填充因子  $f = 0.667$ 。底层圆柱半径  $r = 0.92 \times p/2$ 。取圆锥阵列结构  $p = 135$  nm,高度  $h = 480$  nm,圆锥底面半径  $R = 0.9 \times p/2 = 60.75$  nm。利用严格耦合波理论对设计的圆锥阵列结构进行计算机模拟仿真时,  $x$ - $y$  平面四边设置了周期性边界条件(PBC),如图 1(a)所示;在  $z$  轴方向设置了完全匹配层(PML),如图 1(b)所示。

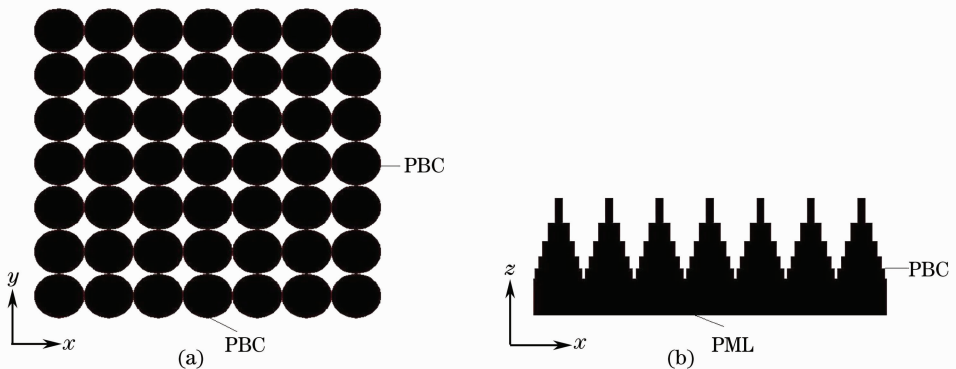


图 1 边界条件。(a)  $x$ - $y$  平面;(b)  $x$ - $z$  平面  
Fig. 1 Boundary condition. (a)  $x$ - $y$  plane; (b)  $x$ - $z$  plane

## 3 结果与分析

不考虑折射率随波长的变化,在 300~1200 nm 波长范围内,设中心波长为  $\lambda_0 = 700$  nm,取折射率

$n_{\text{SiO}} = 3.783$ ,入射角为 0°。对设计好的结构,利用严格耦合波理论进行了 0 级和 1 级衍射数值计算,如图 2 所示,入射波长在 300~1200 nm 范围内时,1 级

甚至更高级次的衍射波很小,可以认为只有0级衍射;当亚波长结构的周期远小于入射波长时,总反射率等于0级反射波的反射效率;在中心波长 $\lambda_0 = 700$  nm处,反射率很小,接近于零。对于台阶结构,反射率出现波动,周期性亚波长结构的台阶数为 $k$ ,则有 $k$ 个零反射点的位置,分别为: $\frac{k+1}{2k}\lambda, \frac{k+1}{2(k-1)}\lambda, \dots$ ,

$\frac{k+1}{4}\lambda, \frac{k+1}{2}\lambda$ 。将圆锥结构分成五个台阶,即 $k = 5$ ,有5个零反射点,对应波长约为2100,1050,700,500和400 nm处。在300~1200 nm范围内,有4个零反射点,分别为400,500,700和1050 nm,与图2(a)的结果基本一致。

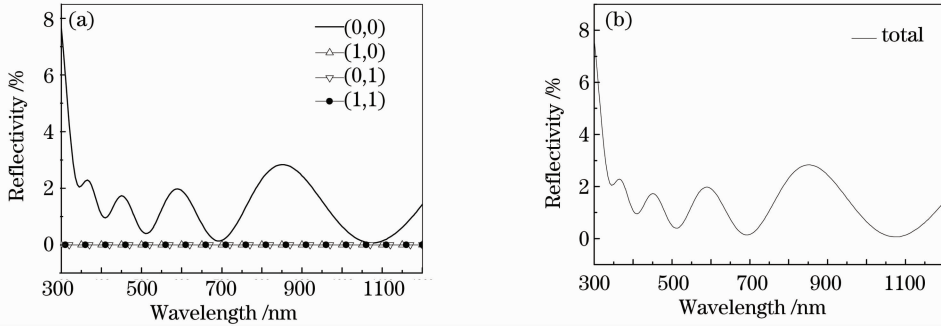


图2 (a) 0,1级衍射和(b)总反射率的数值计算

Fig. 2 Numerical calculation of the zeroth-order and the first-order diffraction and (b) the total reflection

实际上,晶体硅的折射率随着波长的不同而变化,如图3所示。在300~1200 nm范围内,折射率在3.5~6.5之间变化,折射率的变化不能忽视。在计算圆锥结构的反射率时,需要对不同波长时的折射率进行修正。

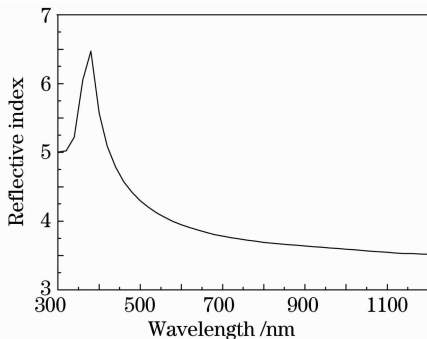


图3 晶体硅的折射率随入射波长的变化

Fig. 3 Refractive index of crystal silicon versus the incident wavelength

对折射率进行修正后,对不同入射角、高度及占空比,进行了反射率的数值计算。取圆锥阵列结构参数分别为周期 $p = 135$  nm,高度 $h = 480$  nm,圆锥底半径 $R = 0.9 \times p/2 = 60.75$  nm。图4为当入射角分别为 $0^\circ, 15^\circ, 30^\circ, 45^\circ$ 和 $60^\circ$ 时的反射率曲线。当 $\lambda/d < 1$ 时,不同入射角的变化规律比较一致,随着波长的增加,反射率下降,并且入射角越大,反射率越大。当小入射角即 $0^\circ \sim 30^\circ$ 时,反射率变化不大,当入射角比较大时,反射率迅速增加;当 $\lambda/d > 1$ 时,不同入射角的振荡趋势类似,但随着入射角的增

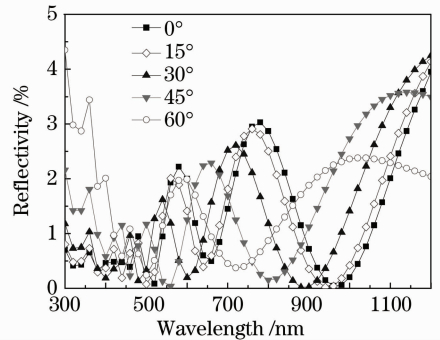


图4 不同入射角时反射率随波长的变化

Fig. 4 Reflectivity versus wavelength at different incidence angle

大,波峰向左移动,且有所减小。

根据等效媒质理论,光波由入射媒质通过亚波长结构区域时,周期性亚波长结构可以等效为均匀介质的薄膜。当 $\lambda/d < 1$ 时,入射波长比亚波长结构的高度小,相当于入射在厚衬底的均匀介质上,反射率随着入射角的增加而增大;当 $\lambda/d > 1$ 时,入射波长比结构的高度大,相当于在均匀介质的薄膜上,同一波长时,不同入射角,光波在媒质中的光程不同,入射角越大,光程越大,等效于膜层的有效厚度减小了,最小反射的波长变短,反射率的零点在图4中向左移动。

图5为当不同波长下反射率随入射角的变化,可以看到入射角从 $0^\circ \sim 60^\circ$ 时,反射率都小于5%,并且最多只有一个波峰或者波谷,表面没有干涉现象的产生。图4中入射角分别为 $0^\circ, 15^\circ, 30^\circ, 45^\circ$ 和

60°时,300~1200 nm 波段内的反射率都不到 5%。综合图 4,图 5,周期  $p=135$  nm,高度  $h=480$  nm,圆锥底半径  $r=60.75$  nm 时,入射角在  $0^\circ\sim 60^\circ$  内变化时,300~1200 nm 波段内的反射率都小于 5%。

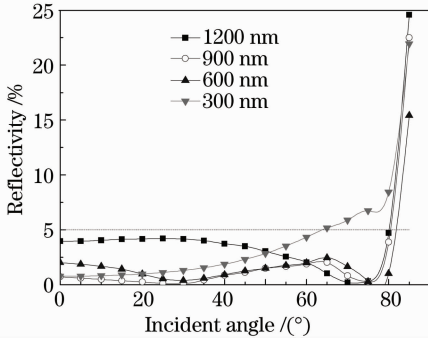


图 5 不同波长下反射率随入射角的变化

Fig. 5 Reflectivity versus incidence angle with different wavelength

图 6 为当入射角为  $0^\circ$ ,周期  $p=135$  nm,圆锥底面半径  $R=60.75$  nm,圆锥结构高度不同时,反射率随入射波长的变化。当高度不同时,波峰位置不同,波峰的值也不同。当入射波长不同时,反射率随光栅高度的变化都具有周期性,但是周期是不同的,其变化周期随着波长的增加而增加,并且波峰的高度随着入射波长的增加而增大<sup>[15]</sup>。由图 6 可知,随着波长的增加,同一光栅高度的波峰值增大,反射率发生振荡,并且振荡间距越来越大。入射光波长远大于光栅周期时,亚波长结构可以等效为均匀介质的薄膜,光入射到薄膜上,薄膜厚度  $d = \lambda(N/2 + 1/4)$  ( $N=0,1,2,\dots$ ) 时,反射光和经过薄膜后的二次反射光相抵消,此时反射率最小。所以随着光栅高度的增加,反射率最小值对应的波长增加,反射率的零点右移。

图 7 为当入射角为  $0^\circ$ ,周期  $p=135$  nm,高度  $h=480$  nm,圆锥底面半径  $R$  分别为  $0.45p, 0.4p,$

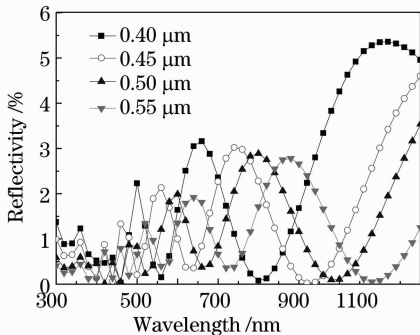


图 6 高度不同时反射率随波长的变化

Fig. 6 Reflectivity versus wavelength with different height

0.35 $p$  和 0.3 $p$  时,反射率随波长的变化。圆锥的体填充因子  $R_p = \frac{\pi R^2}{3P^2}$ ,  $R$  是圆锥底面半径,  $R_p = \pi x^2/12 \leq \pi/12 \approx 0.262$ 。由图 7 可知,圆锥底面半径越小,体占空比越小,反射率越大。曹召良等<sup>[16]</sup> 给出了填充因子  $R_p$  和反射率的关系,当  $0 < R_p < 0.5$  时,反射率随着填充因子的增大而减小;当  $0.5 < R_p < 1$  时,反射率随着填充因子的增大而增大。而圆锥的体填充因子  $R_p \leq 0.262$ , 底面半径越小,填充因子越小,反射率也就越大。

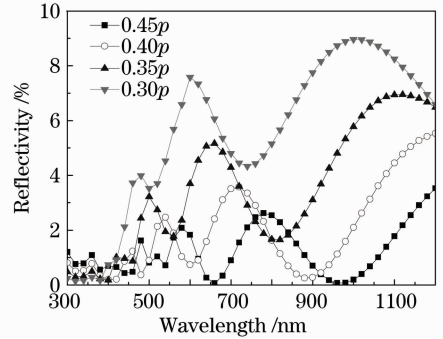


图 7 圆锥底面半径不同时反射率随波长的变化

Fig. 7 Reflectivity versus wavelength with different radius of the conical bottom

## 4 结 论

研究了超陷光黑硅表面正方排列的圆锥阵列结构的设计。将圆锥结构分成五层,利用等效媒质理论进行了参数设计。考虑了硅材料的折射率随波长的变化,用严格耦合波理论对设计的结构进行了计算分析。分析结果发现,当入射角增大时,反射率曲线波峰左移,近紫外波段的反射率增加,近红外波段的反射率减小;当高度增加时,反射率曲线波峰右移,波峰减小;当圆锥底面半径越小时,体占空比越小,反射率越大。所设计的圆锥阵列超陷光结构的周期为 135 nm,高度为 480 nm 时,在  $0^\circ\sim 60^\circ$  入射角范围内,对波长为 300~1200 nm 的入射光的反射率都小于 5%。

## 参 考 文 献

- 1 Zheng Zhengrong, Gu Perfu, Chen Haixing *et al.*. Design and preparation of super broadband antireflection coating[J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(7): 2026~2029  
郑臻荣, 顾培夫, 陈海星 等. 超宽带减反射膜的设计和制备[J]. *光学学报*, 2009, **29**(7): 2026~2029
- 2 Qiu Mingbo, Huang Yinhu, Liu Zhidong *et al.*. Numerical study on effect of silicon texture structure on reflectance of light[J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, **28**(12): 2394~2399  
邱明波, 黄因慧, 刘志东 等. 硅片绒面形貌影响光线反射的数值研究[J]. *光学学报*, 2008, **28**(12): 2394~2399

- 3 M. A. Sheehy, L. Winston, J. C. Carey *et al.*. Role of the background gas in the morphology and optical properties of laser-microstructured silicon [J]. *Chem. Mater.*, 2005, **17**(14): 3582~3586
- 4 T. H. Her, R. J. Finlay, C. Wu *et al.*. Microstructuring of silicon with femtosecond laser pulses[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1998, **73**(12): 1673~1675
- 5 L. L. Ma, Y. C. Zhou, N. Jiang *et al.*. Wide-band “black silicon” based on porous silicon[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2006, **88**(17): 171907
- 6 C. C. Striemer, P. M. Fauchet. Dynamic etching of silicon for broadband antireflection applications[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2002, **81**(16): 2980~2981
- 7 S. Strehlke, S. Bastide, J. Guillet. Design of porous silicon antireflection coatings for silicon solar cells[J]. *Mater. Sci. Engng.*, 2000, **69-70**(14): 81~86
- 8 Guo Chucai, Ye Weimin, Yuan Xiaodong *et al.*. Research on reflection characteristics of sub-wavelength gratings[J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(12): 3272~3276  
郭楚才, 叶卫民, 袁晓东等. 亚波长光栅反射特性研究[J]. *光学学报*, 2009, **29**(12): 3272~3276
- 9 Fan Shuwei, Zhou Qinghua, Li Hong. Research of optimization design of groove diffraction grating profile parameters[J]. *Acta Optica Sinica*, 2010, **30**(11): 3133~3139  
樊叔维, 周庆华, 李红. 槽型衍射光栅结构参数优化设计研究[J]. *光学学报*, 2010, **30**(11): 3133~3139
- 10 Zheng Zhimin, Ding Tianhuai, Zhang Jianfu. Characteristics of aperture-array diffraction and its application [J]. *Acta Optica Sinica*, 2006, **26**(2): 294~299  
郑志敏, 丁天怀, 张建福. 小孔阵列衍射特性与应用[J]. *光学学报*, 2006, **26**(2): 294~299
- 11 Wang Fei, Yu Hongyu, Li Junshuai *et al.*. Optical absorption enhancement in nanopore textured-silicon thin film for photovoltaic application[J]. *Opt. Lett.*, 2010, **35**(1): 40~42
- 12 Chen Sihai, Cheng Zhijun, Huang Guang *et al.*. Design and fabrication of subwavelength antireflection gratings [J]. *Acta Optica Sinica*, 2003, **23**(11): 1359~1361  
陈四海, 程志军, 黄光等. 亚波长消反射光栅[J]. *光学学报*, 2003, **23**(11): 1359~1361
- 13 Li Junshuai, Yu Hongyu, Wong Shemein *et al.*. Design guidelines of periodic Si nanowire arrays for solar cell application [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2009, **95**(24): 243113
- 14 P. Lalanne, D. Lemericièr-Lalanne. On the effective medium theory of subwavelength periodic structures[J]. *Modern Opt.*, 1996, **43**(10): 2063~2085
- 15 Zhang Zequan, Huang Yuanshen, Zhuang Songlin *et al.*. Diffraction efficiency of sub-wavelength gratings[J]. *Chinese J. Scientific Instrument*, 2007, **28**(4): 587~592  
张泽全, 黄元申, 庄松林等. 亚波长光栅的衍射效率[J]. *仪器仪表学报*, 2007, **28**(4): 587~592
- 16 Cao Zhaoliang, Lu Zhenwu, Li Fengyou *et al.*. Design consideration of two-dimensional anti-reflective subwavelength periodic gratings[J]. *Opt. & Precision Engng.*, 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