

太阳能电池用宽光谱减反射光栅的优化设计

孔伟金^{1,2} 曹凯华¹ 由成龙¹ 云茂金^{1,2} 王兴耀¹ 秦小奇¹ 李 凯¹ 吴师岗³

¹ 青岛大学物理科学学院, 山东 青岛 266071
² 山东省高校光子学材料与技术重点实验室, 山东 青岛 266071
³ 山东理工大学材料科学与工程学院, 山东 淄博 255049

摘要 为降低太阳能电池片表面的反射率,提出了一种基于SiO₂/TiO₂膜层的减反射光栅,该光栅由基底、浮雕结构和表面薄膜覆盖层组成。以加权平均反射率为评价函数,采用严格耦合波理论和遗传算法对光栅的槽深、周期、占空比、入射角和包覆层厚度等参数进行优化。所设计的太阳能电池用减反射光栅在入射波长为300~1100 nm,入射角度在±40°范围变化时加权平均反射率低于2.16%,最小加权平均反射率低于1.04%。数值分析表明设计的光栅具有优良的工艺容差。

关键词 光栅;减反射;宽光谱;严格耦合波理论

中图分类号 O484.4⁺1 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201333.1205001

Optimization of Wide Spectrum Anti-Reflective Grating for Solar Cell

Kong Weijin^{1,2} Cao Kaihua¹ You Chenglong¹ Yun Maojin^{1,2}

Wang Xingyao¹ Qin Xiaoqi¹ Li Kai¹ Wu Shigang³

¹ College of Physics Science, Qingdao University, Qingdao, Shandong 266071, China

² Key Laboratory of Photonics Materials and Technology in Universities of Shandong, Qingdao, Shandong 266071, China

³ School of Material Science and Engineering, Shandong University of Technology, Zibo, Shandong 255049, China

Abstract An anti-reflective grating used for solar cell is proposed based on SiO₂/TiO₂ film to reduce its surface loss. It consists of substrate, relief structure and surface thin film. Rigorous coupled wave theory and genetic algorithm are employed to optimize the parameters such as groove depth, duty cycle, incident angle and thickness of surface thin film according to the merit function of the weighted average reflectivity. The optimized grating has the lower weighted average reflectivity than 2.16% with the incident wavelength from 300 nm to 1100 nm and the incident angle around ±40°. The lowest weighted average reflectivity is only 1.04%. Simulation results show sufficient manufacture tolerance of the designed grating.

Key words gratings; anti-reflective; wide spectrum; rigorous coupled wave theory

OCIS codes 050.1950; 050.2770; 050.6624; 310.6628

1 引 言

太阳能电池是利用光电效应把太阳能直接转换为电能的器件^[1]。影响电池效率的因素主要有电学损失和光学损失,其中光学损失来源是电池表面反射、遮挡损失和电池材料的内部量子效应^[2]。当入射光照射到未经光学补偿的高折射率晶体硅(c-Si)材料表面时,只有2/3的入射光可以入透太阳能电池内部^[3]。因此寻求理想的表面增透结构对于提高

c-Si太阳能电池效率至关重要。传统c-Si太阳能电池采用减反射膜(ARC)降低表面反射损失,利用SiN_x、SiO₂/TiO₂、MgF₂/TiO₂/SiO₂等膜层材料对特定波长的反射光存在位相差的干涉原理,可以实现减反射效果^[4-5]。然而ARC结构只能在较窄的光谱和入射角范围内获得低表面反射率,并不是一种理想的宽光谱宽角度的减反射结构。1967年,Clapham首次发现一种黑夜飞行的飞蛾,其眼角膜

收稿日期: 2013-06-17; **收到修改稿日期**: 2013-07-11

基金项目: 国家自然科学基金(11274188,11104166)、青岛市科技计划基础研究项目[12-1-4-2(17)-jch]、国家级大学生创新创业训练计划项目(201211065046)

作者简介: 孔伟金(1976—),男,博士,教授,主要从事衍射光学方面的研究。E-mail: kwj@163.com

几乎不产生对近红外光的反射,从而使其能躲避天敌^[6]。受这种特殊眼角膜抗反射作用的启发,亚波长光栅结构被广泛应用于减反射领域。研究表明,亚波长光栅具有减反射特性和偏振双折射效应^[7-9],与传统 ARC 结构相比,具有减反射性能稳定、高耐久性、低表面效应等优点,还能实现大角度和宽光谱范围内的减反射。Hava 等^[10]设计出 SiO₂ 或聚碳酸酯介质包覆层的表面增透光栅结构,在 500~900 nm 光谱范围获得很低的表面反射率。陈健等^[11]设计了掺锡氧化铟介质包覆层矩形光栅结构,太阳光入射角在 ±40° 的范围内表面反射率保持在 6% 以下。

本文结合太阳能量分布光谱以及 c-Si 材料的内部量子效率,基于严格耦合波理论,建立减反射结构的衍射机理模型和减反射结构性能评价函数,采用遗传算法,对减反射结构的光栅周期、占空比、槽深等参数进行优化。针对 300~1100 nm 波长范围入射光,设计了一种宽光谱和宽角度的 c-Si 太阳能电池用矩形光栅减反射结构。并讨论了所设计的减反射结构的工艺容差。

2 优化设计理论

设计的 c-Si 太阳能电池表面减反射光栅结构如图 1 所示,包括基底表面刻蚀一维周期性亚波长光栅结构和顶层 SiO₂/TiO₂ 减反射膜。考虑到工艺实现,光栅浮雕形状选择矩形,由于矩形光栅结构直接刻蚀在基底上,消除了传统方法中的附着、抗蚀刻、耐久性和扩散渗透等方面缺陷^[12]。包覆层材料 SiO₂/TiO₂ 是最常用的太阳能电池双层减反膜材料,具有很好的折射率匹配以及膨胀系数匹配^[13],有较好的减反射性能和结构稳定性。

定义太阳能增透光栅结构各参数的表示方法为 $\{\Lambda, D, f, \theta, d_{\text{SiO}_2}, d_{\text{TiO}_2}\}$,其中 Λ 为光栅区周期, D 为光栅槽深, f 为光栅占空比, θ 为入射角, d_{SiO_2} 为 SiO₂ 包覆层厚度, d_{TiO_2} 为 TiO₂ 包覆层厚度。

光栅的表面反射率取决于光栅的结构参数,当光栅的特征尺寸接近于或小于入射波长时,标量理论中的假设和近似不再成立,而且元件的偏振特性也不能忽略。这样就必须采用严格的电磁场矢量衍射理论来求解亚波长光栅的衍射特性和电场分布特性^[14]。为了精确地评估太阳能减反射结构的性能,采用严格耦合波理论同时考虑 TE 偏振和 TM 偏振的反射,定义对应波长点的表面反射率函数^[15]为

$$R(\lambda) = \frac{1}{2} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} [E(\lambda)_{m, \text{TE}} + E(\lambda)_{m, \text{TM}}], \quad (1)$$

式中 $E(\lambda)_{m, \text{TE}}$ 和 $E(\lambda)_{m, \text{TM}}$ 分别为采用严格耦合波理论对浮雕结构和介质包覆层建立 TE、TM 偏振麦克斯韦方程组的数值解。在数值计算过程中,可能会遇到矩阵元发散的问题,采用 Moharam 等^[16]提出的增强透射矩阵方法计算光栅和介质包覆层结构,得到对于 TE、TM 偏振的稳定数值结果。

采用 Leem 等^[17]定义的加权平均反射率 R_w 评估光栅结构对太阳能电池性能的影响。加权平均反射率反映了表面反射的光子能量与总可用光子能量的比值,由单个波长点的反射率、入射光子通量 (AM 1.5 的太阳光谱^[18])、硅材料的内部量子效率 (IQE),可计算出整个光谱范围内的加权平均反射率为

$$R_w = \frac{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} F(\lambda) Q(\lambda) R(\lambda) d\lambda}{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} F(\lambda) Q(\lambda) d\lambda}, \quad (2)$$

式中 $F(\lambda)$ 为入射光子通量, $R(\lambda)$ 为光栅结构在对应波长点的反射率, $Q(\lambda)$ 为报道的 c-Si 太阳能电池结构的内部量子效率^[19], λ_1 取 300 nm, λ_2 取 1100 nm。由加权平均反射率可以很准确地判断光栅结构在 c-Si 的光谱范围内总的减反射效果,通过运用遗传算法对 R_w 的最小化来实现光栅结构的优化设计。

c-Si 的色散关系光谱曲线如图 2 所示, c-Si 的折射率 n 、消光系数 k 在研究的光谱范围内都有很多的变化,对表面反射率的影响很大。为了使模拟结果更接近真实情况,用对应波长的折射率 n 、消光系数 k 求解对应波长点处表面反射率^[20]。SiO₂ 和 TiO₂ 在研究光谱也有一定的色散效应,由于

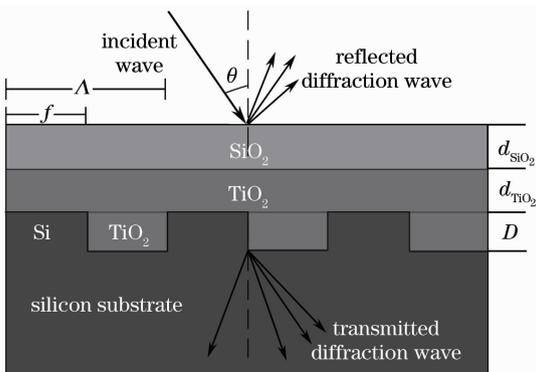


图 1 c-Si 太阳能电池表面减反射光栅结构
Fig. 1 Anti-reflective grating structure for a c-Si solar cell surface

$\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$ 作为光栅结构的减反射介质薄膜结构,其折射率受实际制作工艺的影响很大,与其单独测量的值有差别^[21]。这里采用宽光谱太阳能电池减反射膜研究中常用减反射膜材料的折射率数值,

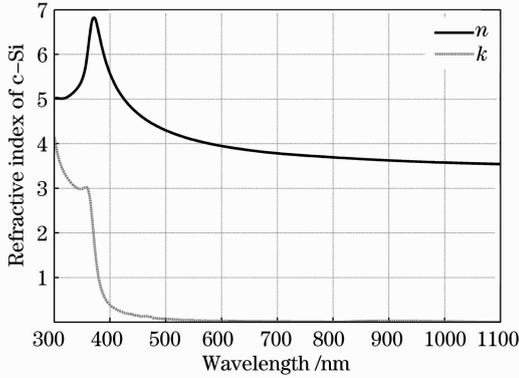


图2 c-Si的色散关系

Fig. 2 Dispersion relation of c-Si

SiO_2 取 1.46、 TiO_2 取 2.3^[22]。

3 光栅结构的优化

遗传算法是借鉴生物界进化规律而编写的随机化搜索方法,是一种通过模拟自然进化现象达到搜索最优解的方法,其内在的并行性大大提高了全局寻优能力,而其概率化的寻优方法又大大减少了陷入局部最优的可能性,因此十分适合对光栅结构参数的优化。根据所提出的优化设计方案,对光栅结构,运用遗传算法对减反射光栅结构 $\{\Delta, D, f, \theta, d_{\text{SiO}_2}, d_{\text{TiO}_2}\}$ 进行优化。其中遗传算法基本参数为:种群数 1000,精英种群数 100,交叉变异概率为 0.75,进化代数 60。对于参数的变化范围,考虑亚波长增透光栅结构特点以及 $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$ 减反膜结构膜厚变化规律,选择 $\{200, 40, 0.5, 0^\circ, 85, 45\}$ 至 $\{300, 60, 0.8, 20^\circ, 100, 65\}$ 。优化得到 R_{wmin} 为 1.04%,其结构参数如表 1 所示。

表 1 减反射光栅结构参数

Table 1 Parameters of anti-reflective grating structure

Δ / nm	D / nm	f	θ / ($^\circ$)	d_{SiO_2} / nm	d_{TiO_2} / nm
284	45.5	0.6	11	98.5	51.5

根据表 1 中的光栅结构参数,绘出研究光谱范围内减反射光栅结构表面反射率光谱曲线如图 3(a)所示,虽然 300~350 nm 光谱范围内表面反射率大于 12%,但由于此光谱范围太阳光光子通量

很低,对太阳能电池性能影响不大。图 3(b)绘出了 400~1000 nm 光谱范围内表面反射率光谱曲线,表面反射率低于 1% 的带宽达到 500 nm,光谱范围为 430~930 nm。

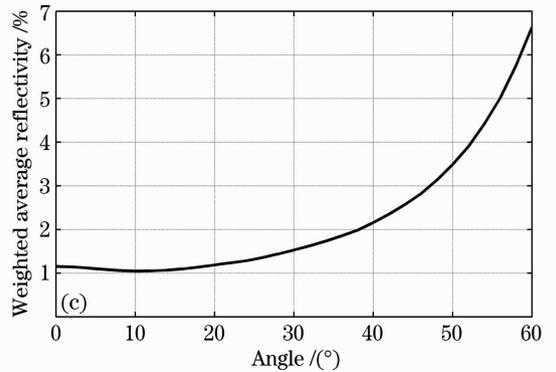
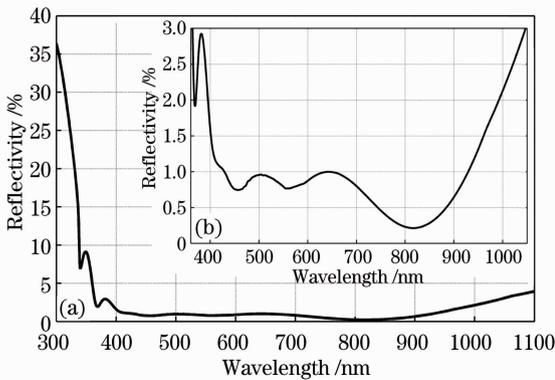


图 3 减反射光栅结构性能指标。(a) 300~1100 nm 反射率;(b) 400~1000 nm 反射率;
(c) 加权平均反射率与入射角的关系

Fig. 3 Property index of anti-reflective grating structure. (a) Reflectivity for 300~1100 nm; (b) reflectivity for 400~1000 nm; (c) weighted average reflectivity versus incident angle

图 3(c)为光栅结构加权平均反射率与入射角的关系曲线。出现最低加权平均反射率 1.04% 的入射角为 11° ,倾斜入射可以增大光子在太阳能电池内的有效光程,可提高太阳能电池光电转换效率。当入射角在 $0\sim 40^\circ$ 范围内变化时,优化后的减反射

光栅结构加权平均反射率小于 2.16%。入射角在 $0\sim 20^\circ$ 范围内变化时,加权平均反射率低于 1.15%,光栅结构在入射角 $\pm 20^\circ$ 变化范围有极佳的减反射性能。

4 工艺容差分析

由于微加工过程中存在误差,造成 c-Si 太阳能电池减反射光栅结构的周期、槽深、占空比、介质包覆层厚度以及光栅形状发生偏差,必然会对光栅结构的增透效果产生影响,从而影响电池效率。刻蚀光栅端面倾角造成光栅几何参数的误差,使得矩形光栅变成梯形光栅,由于刻蚀过程中浮雕结构上表面被抗蚀剂层保护,可近似认为上表面宽度保持 f ,图 4 为梯形光栅结构示意图,图中 $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$ 介质包覆层被省略。定义结构参数, β 为梯形底角。

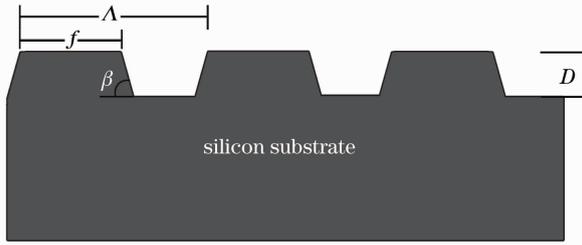


图 4 梯形光栅结构示意图

Fig. 4 Schematic diagram of trapezium grating structure

梯形光栅结构模型建立思想:在光栅区内将梯形光栅分为 L 层(取 $L=30$),只要分的足够细,每一分层则可以看作一个矩形光栅^[23]。则每一层的厚

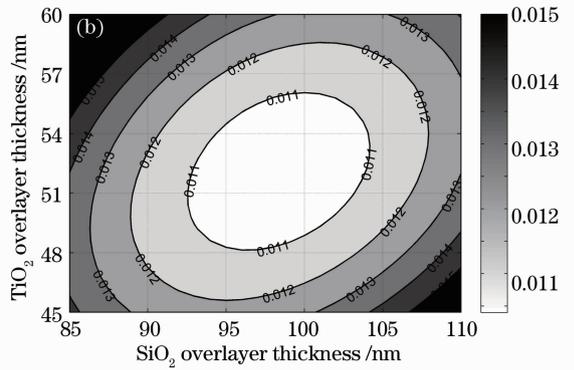
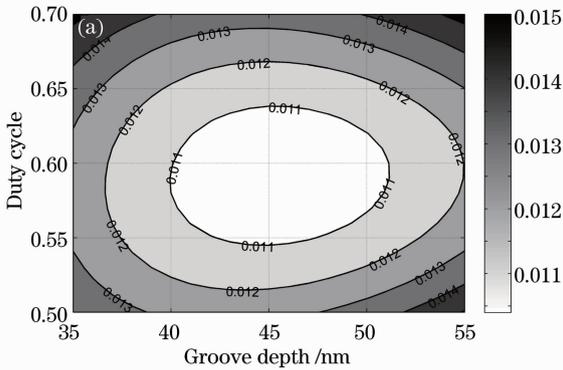


图 6 减反射光栅结构工艺容差分析

Fig. 6 Fabrication tolerance analysis of anti-reflective grating structure

由图 6(a)可见当固定光栅的其他结构参数,入射角为 11° ,槽深在 $40 \sim 51$ nm、占空比在 $0.54 \sim 0.64$ 之间变化时,其 $300 \sim 1100$ nm 光谱范围加权平均反射率低于 1.1% ,光栅周期为 284 nm,即光栅浮雕结构允许变化范围是 $153 \sim 182$ nm。图 6(b)表明 SiO_2 介质膜包覆层厚度在 $92 \sim 104$ nm、 TiO_2 介质包覆层厚度在 $48 \sim 56$ nm 之间变化时,减反射光栅结构的 $300 \sim 1100$ nm 光谱范围加权平均反射率低于 1.1% 。由此可见设计的 c-Si 太阳能电池表面减反射光栅结构具有较大的工艺容差,满足制备

度为 D/L ,每一层的占空比也发生变化,定义每一分层的上底与周期(每个分层的周期不变)的比值为该层的占空比,采用递推公式推导出每一分层本征模式场的振幅系数,从而获得光栅的反射衍射和透射衍射中各级次的效率,从而得到梯形光栅对应波长处的反射率 $R(\lambda)$ 。绘出刻蚀端面倾斜度(即梯形底角)的变化对光栅结构减反射效果的影响如图 5 所示。

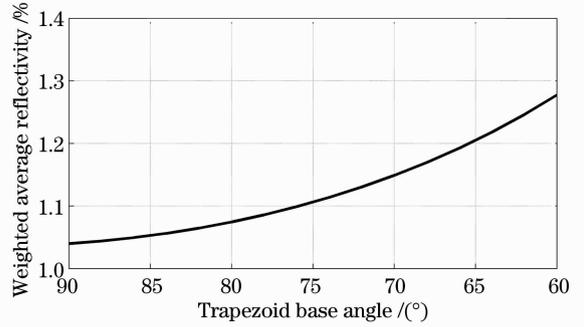


图 5 梯形光栅结构角谱特性曲线

Fig. 5 Angular spectrum properties of trapezium grating structure

由图 5 可见当固定光栅其他结构参数,入射角为 11° ,梯形底角在 $76^\circ \sim 90^\circ$ 范围内变化时,其 $300 \sim 1100$ nm 光谱范围加权平均反射率低于 1.1% 。光栅结构参数误差对光栅性能影响如图 6 所示。

的工艺要求。

5 结 论

基于一维矩形光栅结构,采用严格耦合波理论和遗传算法,设计了一种晶体硅太阳能电池表面减反射结构。矩形光栅周期、占空比、槽深、 SiO_2 包覆层厚度和 TiO_2 包覆层厚度分别为 284 、 0.6 、 45.5 、 98.5 、 51.5 nm 时,入射角为 11° 条件下,光栅减反射结构在 $300 \sim 1100$ nm 光谱范围内加权平均反射率仅为 1.04% 。表面反射率低于 1% 的带宽达到

500 nm。入射角在 $\pm 20^\circ$ 范围内变化时,对平均反射率几乎没有影响,在 $\pm 40^\circ$ 范围内变化时,加权平均反射率总能低于2.16%,满足宽带宽、大角度范围减反射需要。

参 考 文 献

- 1 Wu Fengbing, Zhang Dawei. The light trapping in solar cells based on periodic nano-structures gratings [J]. Laser Journal, 2010, 31(5): 15-17.
吴奉炳, 张大伟. 太阳能电池中微纳陷光光栅结构[J]. 激光杂志, 2010, 31(5): 15-17.
- 2 Xianqin Meng, Emmanuel Drouard, Guillaume Gomard, *et al.*. Combined front and back diffraction gratings for broad band light trapping in thin film solar cell [J]. Opt Express, 2012, 20(105): A560-A571.
- 3 Xu Yishen, Gu Jihua, Tao Zhi, *et al.*. Design of a broadband anti-reflection coating for solar cells [J]. Infrared and Laser Engineering, 2009, 38(6): 999-1002.
许宜申, 顾济华, 陶智, 等. 宽波长太阳能电池抗反射层结构设计[J]. 红外与激光工程, 2009, 38(6): 999-1002.
- 4 Wu Jiang, Shen Weidong, Yuan Wenjia, *et al.*. Anti-ultraviolet radiation of antireflection coatings for display plastics [J]. Acta Optica Sinica, 2011, 31(2): 0231001.
武江, 沈伟东, 袁文佳, 等. 抗紫外辐射塑料显示面板的减反射膜[J]. 光学学报, 2011, 31(2): 0231001.
- 5 Yang Wenhua, Wu Dingxiang, Li Hongbo. Design and numerical analysis of anti-reflection coating for space high-efficiency Si solar cells [J]. Chinese J Semiconductors, 2004, 25(9): 1118-1122.
杨文华, 吴鼎祥, 李红波. 空间高效硅太阳能电池减反射膜设计与数值分析[J]. 半导体学报, 2004, 25(9): 1118-1122.
- 6 P B Clapham, M C Hutley. Reduction of lens reflexion by the "moth eye" principle [J]. Nature, 1973, 244(5414): 281-282.
- 7 Ye Xin, Jiang Xiaodong, Zhang Jicheng, *et al.*. Research development of subwavelength antireflection gratings [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2010, 47(6): 060501.
叶鑫, 蒋晓东, 张继成, 等. 亚波长减反射光栅的研究进展[J]. 激光与光电子学进展, 2010, 47(6): 060501.
- 8 Zhou Yun, Ye Yan, Shen Su, *et al.*. Research on the characteristics of sub-wavelength grating color filter [J]. Acta Optica Sinica, 2011, 31(1): 0123003.
周云, 叶燕, 申溯, 等. 亚波长光栅结构彩色滤光片研究[J]. 光学学报, 2011, 31(1): 0123003.
- 9 Ma Weitao, Zhou Jun, Huang Shuiping, *et al.*. Characteristic of subwavelength dielectric grating with metal layer and its sensing applications [J]. Chinese J Lasers, 2011, 38(9): 0905008.
马伟涛, 周骏, 黄水平, 等. 金属膜衬底上亚波长介质光栅结构的特性及传感应用[J]. 中国激光, 2011, 38(9): 0905008.
- 10 S Hava, M Auslender. Design and analysis of low-reflection grating microstructures for a solar energy absorber [J]. Solar Energy Materials & Solar Cells, 2000, 61(2): 143-151.
- 11 Chen Jian, Wang Qingkang, Li Haihua. Microstructured design for light antireflection on thin film silicon solar cells [J]. Semiconductor Optoelectronics, 2011, 32(1): 24-29.
陈健, 王庆康, 李海华. 硅薄膜太阳能电池抗反射微纳结构研究[J]. 半导体光电, 2011, 32(1): 24-29.
- 12 Liu Hanyu, Wang Qingkang. 3D TLM method simulation for antireflection characteristics of subwavelength structures [J]. Optoelectronic Technology, 2008, 28(1): 50-54.
刘汉玉, 王庆康. 亚波长结构的抗反射特性三维 TLM 方法模拟[J]. 光电子技术, 2008, 28(1): 50-54.
- 13 Gu Peifu, Zheng Zhenrong, Zhao Yongjiang, *et al.*. Study on the mechanism and measurement of stress of TiO₂ and SiO₂ thin-films [J]. Acta Physica Sinica, 2006, 55(12): 6459-6463.
顾培夫, 郑臻荣, 赵永江, 等. TiO₂ 和 SiO₂ 薄膜应力的产生机理及实验探索[J]. 物理学报, 2006, 55(12): 6459-6463.
- 14 Kong Weijin, Yun Maojin, Sun Xin, *et al.*. Diffraction property of multi-layer dielectric gratings studied by rigorous coupled wave analysis [J]. Acta Physica Sinica, 2008, 57(8): 4904-4910.
孔伟金, 云茂金, 孙欣, 等. 基于严格耦合波理论的多层介质膜光栅衍射特性分析[J]. 物理学报, 2008, 57(8): 4904-4910.
- 15 Li Xiaowei, Tan Qiaofeng, Jin Guofan. Surface profile optimization of antireflection gratings for solar cells [J]. Optik-International Journal for Light and Electron Optics, 2011, 122(23): 2078-2082.
- 16 M G Moharam, D A Pomment, E B Grann, *et al.*. Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis of surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach [J]. J Opt Soc Am, 1995, 12(5): 1077-1086.
- 17 J W Leem, D H Joo, J S Yu. Biomimetic parabola-shaped AZO subwavelength grating structures for efficient antireflection of Si-based solar cells [J]. Solar Energy Materials & Solar Cells, 2011, 95(8): 2221-2227.
- 18 National Standardization Technical Committee. Solar Energy-Reference Solar Spectral Irradiance at the Ground at Different Receiving Conditions—Part 1: Direct Normal and Hemispherical Solar Irradiance for Air Mass 1.5 GB/T 17683-1-1999 [S]. Beijing: China Standard Press, 1999.
国家标准技术委员会. 太阳能在地面不同接收条件下的太阳光谱辐照度标准—第1部分大气质量1.5的流向直接日射辐照度和半球向日射辐照度. GB/T 17683-1-1999 [S]. 北京: 中国标准出版社, 1999.
- 19 B Thaidigsmann, A Wolf, D Biro. Accurate determination of the IQE of screen printed silicon solar cells by accounting for the finite reflectance of metal contacts [C]. Proceedings of 24th European PV Solar Energy Conference and Exhibition, Hamburg, Germany, 2009: 21-25.
- 20 L Zhao, Y H Zuo, C L Zhou, *et al.*. A highly efficient light-trapping structure for thin-film silicon solar cells [J]. Solar Energy, 2010, 84(1): 110-115.
- 21 Yuan Hairong, Xiang Xianbi, Chang Xiulan, *et al.*. Double layer antireflection coating on Al_{0.8}Ga_{0.2}As/GaAs solar cells [J]. Acta Energetica Solaris Sinica, 2000, 21(4): 371-378.
袁海荣, 向贤碧, 常秀兰, 等. Al_xGa_{1-x}As/GaAs 太阳能电池 MgF₂/ZnS 双层减反射膜的研究[J]. 太阳能学报, 2000, 21(4): 371-378.
- 22 Liu Yongsheng, Yang Wenhua, Zhu Yanyan, *et al.*. Design of new nano anti-reflection coating for space silicon solar cells [J]. Acta Physica Sinica, 2009, 58(7): 4992-4996.
刘永生, 杨文华, 朱艳燕, 等. 新型空间硅太阳能电池纳米减反射膜系的优化设计[J]. 物理学报, 2009, 58(7): 4992-4996.
- 23 Kong Weijin, Yun Maojin, Cui Chunling, *et al.*. Diffraction property of multi-layer dielectric grating with trapezium groove [J]. Acta Optica Sinica, 2008, 28(7): 1415-1419.
孔伟金, 云茂金, 崔春玲, 等. 梯形介质膜光栅衍射特性分析[J]. 光学学报, 2008, 28(7): 1415-1419.