

# 斐波纳契数列准周期微结构光吸收特性

董泽东 刘友文

南京航空航天大学理学院, 江苏 南京 211106

**摘要** 设计了一种按斐波纳契数列排列的准周期光学微结构。在 TM 偏振模式下, 运用严格耦合波分析(RCWA)方法, 对光学微结构的光吸收率进行了数值计算。讨论了斐波纳契级数、占空比以及镀膜厚度 3 种因素对微结构光吸收效率的影响。得出在 AM1.5 太阳能光谱辐照度下, 当斐波纳契级数为  $S_3$ 、占空比  $f=0.7$  以及镀膜厚度  $t=20$  nm 时, 该结构在 300~1100 nm 波段内最高平均吸收率可以达到 95.17%, 说明在太阳能电池表面抗反射层应用方面具有很大的潜力。

**关键词** 衍射; 太阳能电池; 严格耦合波分析方法; 光吸收

**中图分类号** O436.2 **文献标识码** A

**doi:** 10.3788/AOS201636.0605001

## Optical Absorption Properties of Quasi-Periodic Microstructures Arranged by Fibonacci Sequence

Dong Zedong Liu Youwen

College of Science, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing, Jiangsu 211106, China

**Abstract** A new kind of quasi-periodic optical microstructure arranged by the Fibonacci sequence is proposed. In the case of TM polarization, the absorptivity of the optical microstructure is calculated numerically based on the rigorous coupled wave analysis (RCWA) method. A parametric study is carried out to evaluate the influences of Fibonacci series duty ratio and the thickness of the coating film on microstructure. Under AM1.5 solar spectral irradiance, when the Fibonacci series is  $S_3$ , the duty ratio is  $f=0.7$ , and the thickness of the coating film is  $t=20$  nm, the maximum averaged absorptivity can reach 95.17% within the wavelength of 300~1100 nm, which suggests that it has great potential to be an anti-reflection layer on the surface of solar cells.

**Key words** diffraction; solar cell; rigorous coupled wave analysis method; optical absorption

**OCIS codes** 050.1950; 050.1940; 310.1210; 310.6628

## 1 引 言

当一束单色平面光波入射在衍射光栅的表面时, 会产生反射和透射两种形式的光波。在实际生产和生活中, 为了最大化地将光能转化为需要的能量, 需要在电池表面设计一种光学微结构使电池表面反射光最大限度减少以达到增加电池光学吸收的目的。太阳能电池是通过光电效应或者光化学效应直接把光能转化为电能的装置, 作为衍射光栅的应用, 提高太阳能电池表面的透光性能也一直是研究的重点之一。太阳能电池表面的透光性能与其材料和结构两个因素息息相关。单晶硅是太阳能电池现阶段使用最普遍的材料, 但其高成本高昂, 探索和研发新材料也就成为太阳能电池发展的重要课题之一。与表面平坦的结构相比, 由于多次反射和衍射, 结构表面的微结构对光学和热学参数的影响更加显著, 因此对新的太阳能电池表面抗反射层的光学微结构的探索也从未间断。相对于二维和三维的周期性结构<sup>[1-6]</sup>, 一维周期性微结构简单易于进行大规模制造生产, 因而一维平面周期性结构也被广泛用作太阳能电池表面抗反射层。1996 年, 美国的 R E Smith 在基底介质 GaAs 表面沉积一维矩形状条形光栅结构, 其周期是 3.28  $\mu\text{m}$ , 而当入射光的波长为

**收稿日期:** 2016-01-04; **收到修改稿日期:** 2016-02-18

**基金项目:** 国家自然科学基金(11174147)

**作者简介:** 董泽东(1990-), 男, 硕士研究生, 主要从事微结构光学方面的研究。E-mail: 872557943@qq.com

**导师简介:** 刘友文(1966-), 男, 博士, 教授, 主要从事信息光子学方面的研究。E-mail: ywliu@nuaa.edu.cn(通信联系人)

975 nm时,结构的透射率可以达到77%<sup>[7]</sup>。Simone Zanotto等<sup>[8]</sup>结合传统减反射膜和一维光栅结构以提高光电转化率。2012年,Lili Yang<sup>[9]</sup>等设计了一种由3种不同高度构成且呈周期性排列的结构,计算得到的吸收率是宽波带的。2014年,Qiang Cheng等<sup>[10]</sup>设计了一种光栅高度相同而深度不同的复杂的硅太阳能电池结构,使得电池对光的吸收率进一步提高。N Ahmad等<sup>[11]</sup>提出一种以金属镍为材料的一维矩形周期性光栅结构,讨论了周期及光栅深度对吸收率的影响。后来,Wuchang Ding等<sup>[12]</sup>在高度不变的硅光栅太阳能电池上镀上一层膜,使得光的反射急剧减少。同在2014年,周涛等<sup>[13]</sup>利用传输矩阵的方法优化设计多种介质膜材料的单层、双层增透膜结构,可将上表面的光反射率降低到5%以下。高永峰等<sup>[14]</sup>采用时域有限差分法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,发现一种大小抛物锥相切排列的新型复合结构,在响应光谱波段内的反射率可以达到1%以下。2015年,吕晓占等<sup>[15]</sup>基于皮秒激光的冷加工特点,制备了高效减反射晶硅表面的微结构,结构的平均反射率低于5%。而王利果等<sup>[16]</sup>利用湿法化学腐蚀对单晶硅衬底表面进行制绒,使波长为1011 nm处最低反射率从制绒前的34.7%降低到了9.14%。同在2015年,黄祥军等<sup>[17]</sup>设计了一种双层光栅结构太阳能电池结构,与无光栅非晶硅薄膜太阳能电池相比,其设计的结构可以将光的吸收效率提高39.2%。国内外众多学者致力于提高太阳能电池光吸收效率的研究,使得该领域有了显著的发展和进步。

本文设计了一种光栅高度呈斐波纳契数列准周期排列、以单晶硅为基底材料的光学微结构。研究基于TM偏振的模式,且入射光垂直入射。运用严格耦合波分析(RCWA)方法<sup>[18-20]</sup>计算结构的光吸收率,首先讨论了斐波纳契级数、占空比两种因素对光吸收率的影响,之后在初始结构的表面镀上一层Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>薄膜,计算并讨论了镀膜厚度对结构光吸收率的影响。经过对斐波纳契级数、占空比以及镀膜厚度3个结构参数的逐步优化,最后得到光吸收相对较好的结构参数组合。

## 2 结构设计

斐波纳契数列,又称黄金分割数列,指的是这样一个数列:0、1、1、2、3、5、8、13、21、34、...在数学上,斐波那契数列递归定义如下:

$$S_n = S_{n-1} + S_{n-2} (n \geq 2, n \in N^*), \tag{1}$$

设:  $S_0 = B, S_1 = A$ , 根据斐波纳契数列,则级数  $S_2$  到  $S_5$  对应的结构分别为:

$$S_2 = AB AB \dots, \quad S_3 = ABA ABA \dots,$$

$$S_4 = ABAAB ABAAB \dots,$$

$$S_5 = ABAABABAABAABABA \dots,$$

依此类推可以得到  $S_6$  及更大级数对应的结构。

由斐波纳契数列产生规律,设计了一种按斐波纳契数列排列的准周期光学微结构,如图1所示(级数为  $S_3$  的准周期光学微结构)。光栅层选择  $h_1 = 100$  nm 和  $h_2 = 50$  nm 两种不同高度,其中高度为  $h_1 = 100$  nm 的设为  $A$ ,高度  $h_2 = 50$  nm 的即为  $B$ ,图中  $L = d + w = 120$  nm,占空比  $f = d/L$ 。

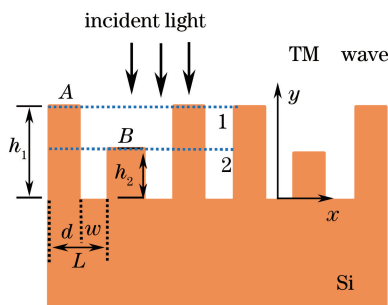


图1 级数  $S_3$  的光学微结构示意图

Fig. 1 Schematic of series  $S_3$  optical microstructure

### 3 计算和讨论

RCWA 是对麦克斯韦方程组的精确求解,利用 RCWA 方法可以计算出入射平面波在所设计的光学微结构的反射率。由于基底层相对于上面介质层要厚得多,因此可认为基底层是无限厚的,就可以不考虑透射光,根据  $A = 1 - R$  ( $R$  为反射率) 得到所要求的光吸收率。用平均光吸收率来评价结构在一定入射光谱下整体的光吸收能力,用  $\bar{A}$  表示平均光吸收率,可以表示为:

$$\bar{A} = \frac{\int_{\lambda} \Phi(\lambda) A(\lambda) d\lambda}{\int_{\lambda} \Phi(\lambda) d\lambda}, \quad (2)$$

式中  $\Phi(\lambda)$  是入射太阳光谱,这里用到通过光子通量测量的大气质量 (AM) 1.5 光谱,  $A(\lambda)$  是用 RCWA 计算得到的随入射波长变化的吸收率。分别对斐波纳契级数、占空比以及镀膜的厚度 3 种因素对光吸收率的影响进行计算和讨论。

#### 3.1 斐波纳契级数对光吸收率的影响

斐波纳契结构是一个递推数列的准周期结构,选取部分级数设计光学微结构 ( $S_2 \sim S_7$ )。控制每一级数对应结构的占空比都为  $f = 0.5$ 。为了比较不同级数对吸收率的影响,通过 (2) 式计算得到  $S_2 \sim S_7$  结构在 300 ~ 1100 nm 波段内平均光吸收率的柱状图如图 2 所示。可以发现:级数  $S_2$  的平均光吸收率为 86.35%,  $S_3$  的平均光吸收高于  $S_2$  为 87.73%, 而级数更大的  $S_4, S_5, S_6$  都没有  $S_3$  的平均光吸收率高。具体的平均光吸收率的数值见表 1。

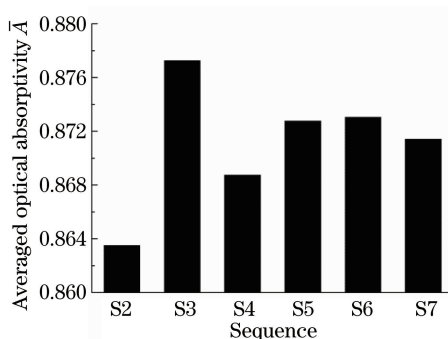


图 2 级数  $S_2 \sim S_7$  结构的平均光吸收率

Fig. 2 Averaged optical absorptivity of series  $S_2 \sim S_7$  structures

表 1  $S_2 \sim S_7$  微结构平均光吸收率

Table 1 Averaged optical absorptivity of  $S_2 \sim S_7$  microstructures

Sequence	$S_2$	$S_3$	$S_4$	$S_5$	$S_6$	$S_7$
Averaged optical absorptivity $\bar{A}$	0.8635	0.8773	0.8688	0.8728	0.8731	0.8714

#### 3.2 占空比对吸收率的影响

选用  $S_3 \sim S_6$  4 种级数对应的准周期结构,利用 RCWA 方法进行计算,得到的光吸收率随波长变化的关系如图 3 所示。为了比较这些结构的光吸收率,利用 (2) 式计算了 4 种级数的结构对应不同占空比在 300 ~ 1100 nm 波段内的平均光吸收率。以  $S_3$  为例,计算得到对应占空比  $f = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$  结构的平均光吸收率分别为: 79.79%、87.46%、87.73%、91.77%、79.99%。综合图 3 的 4 幅图和算得的数据可以看出:当  $f = 0.1$  时,它们的平均光吸收率在波长 300 ~ 1100 nm 范围内明显是最低的,从  $f = 0.3$  至  $f = 0.5$  平均光吸收率随占空比的增大而升高,直到  $f = 0.7$  时,光吸收率达到最大值。随着占空比进一步变大,光吸收率又呈下降的趋势。其结果可以从光学介质薄膜理论得到合理的解释<sup>[21]</sup>,处于两种均匀介质之间的四分之一波长光学厚度的均匀介质膜,其折射率等于两种均匀介质折射率的几何平均值时,其反射率可以达到最小为零。对于这里所研究的结构,可看成微结构光栅层介于均匀的空气和硅基之间,随着占空比  $f = d/L$  的增加,光栅层的等效折射率增加,它的反射减小吸收增加,当等效折射率超过最小反射所对应的值时,继续增加占空比将会导致反射率的增加吸收下降。另外,从图 3 也可以发现,光吸收率的峰值很大程度也取决于占空

比的大小;随着占空比的增大,光吸收率的峰值会往长波长的方向移动,即会出现红移的现象。

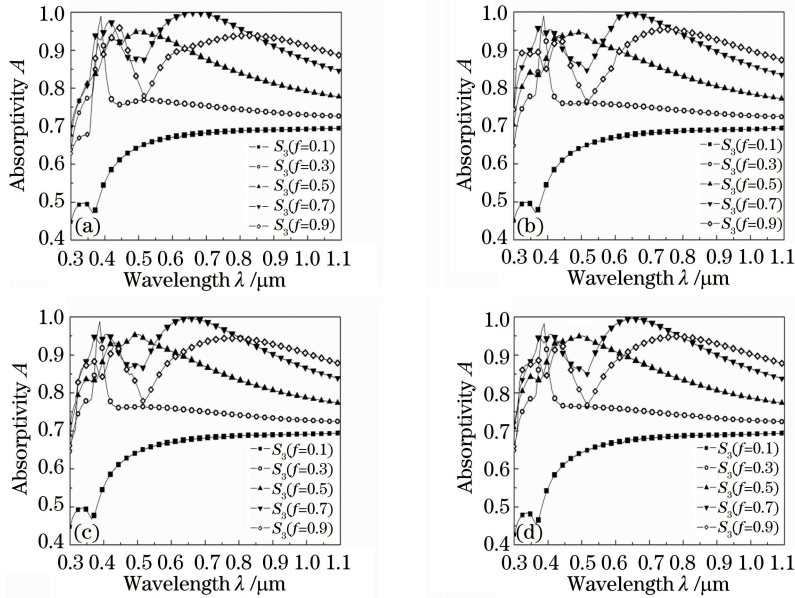


图 3 (a)  $S_3$ ; (b)  $S_4$ ; (c)  $S_5$ ; (d)  $S_6$  不同占空比对应结构的光吸收率

Fig. 3 Optical absorptivity of (a)  $S_3$ ; (b)  $S_4$ ; (c)  $S_5$ ; (d)  $S_6$  structures with different duty ratios

以  $S_3$  为例,在不同占空比的情况下,其光吸收率的峰值所对应的波长值如表 2 所示。同样,把微结构光栅层等效成均匀的介质薄膜,它的反射率取决于等效折射率(占空比)及光波经过等效均匀介质薄膜引起的相位差<sup>[21]</sup>,简单的计算可以发现随着占空比的增加,反射的峰谷即透射的峰值波长将发生红移,其趋势与用 RCWA 方法是一致的。

表 2 不同占空比  $S_3$  结构光吸收率的峰值所对应的波长值

Table 2 Wavelength for peak of optical absorptivity of  $S_3$  structure with different duty ratios

Duty ratios $f$	0.3	0.5	0.7	0.9
$\lambda$ /nm	388	508	668	820

### 3.3 镀膜厚度对吸收率的影响

由光的干涉相消知识可知,如果选用折射率介于空气和硅基之间的材料在图 1 所示结构的表面镀上一层减反膜,延长光在结构内部的传播距离,重新分配硅基表面的透射光和反射光的能量,结构的光吸收会得到明显提高。通常空气的折射率为 1,硅基的平均折射率为 3.5,而氮化硅( $\text{Si}_3\text{N}_4$ )的平均折射率为 2.05,介于空气和硅基的折射率之间,所以选取氮化硅在图 1 所示结构的表面镀上一层减反膜,图 4 所示为镀膜后的结构。

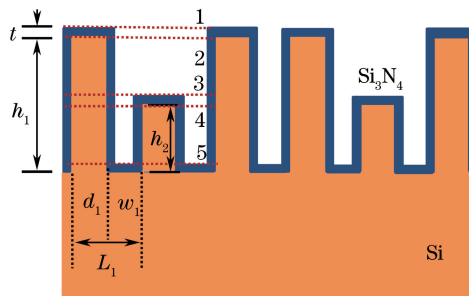


图 4 镀膜后级数  $S_3$  对应的光学微结构示意图

Fig. 4 Schematic of optical microstructure of series  $S_3$  after coating

设定每种级数对应结构的占空比都为  $f=0.5$ ,  $h_1=100$  nm 和  $h_2=50$  nm,  $L=120$  nm, 选取  $t=0, 10, 15, 20, 25$  nm 5 种膜厚,利用 RCWA 方法计算得到光吸收率随波长变化的关系如图 5 所示。从图中可以发

现,镀上一层  $\text{Si}_3\text{N}_4$  膜后,  $S_3 \sim S_6$  4 种级数对应结构的光吸收率和未镀膜相比,在  $300 \sim 450 \text{ nm}$  和  $550 \sim 1100 \text{ nm}$  波段内有着显著的提升,并且当膜厚从  $t=0$  变化到  $t=20 \text{ nm}$  的过程中,随着镀膜厚度的增加,光吸收率的平均值也随之增加,当  $t=20 \text{ nm}$  时,平均光吸收率达到最大值。其中  $S_3$  结构对应膜厚  $t=20 \text{ nm}$  光吸收率最高,达到  $95.17\%$ 。而随着膜厚继续增加,其平均光吸收率又开始下降。另外还可以发现,随着膜厚的增加,光吸收率的峰值也会发生红移现象,如表 3 所示。 $S_3 \sim S_6$  4 种级数对应结构不同膜厚的平均光吸收率如表 4 所示。

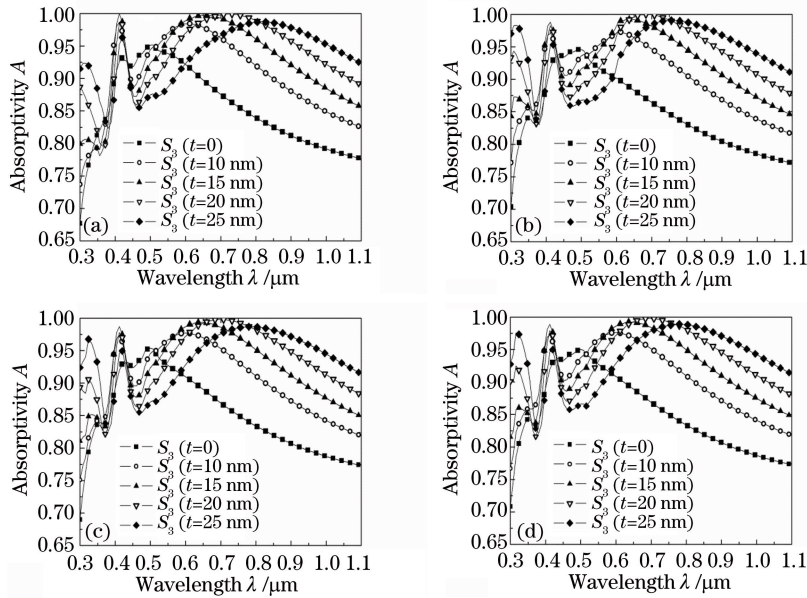


图 5 不同膜厚 (a)  $S_3$ ; (b)  $S_4$ ; (c)  $S_5$ ; (d)  $S_6$  结构的光吸收率

Fig. 5 Optical absorptivity of (a)  $S_3$ ; (b)  $S_4$ ; (c)  $S_5$ ; (d)  $S_6$  structures with different coating thicknesses

表 3 不同膜厚  $S_3$  结构光吸收率的峰值所对应的波长值

Table 3 Wavelength for peak of optical absorptivity of  $S_3$  structure with different coating thicknesses

$t / \text{nm}$	0	10	15	20	25
Wavelength / nm	508	604	652	724	820

表 4 不同膜厚  $S_3 \sim S_6$  结构的平均光吸收率

Table 4 Averaged optical absorptivity of  $S_3 \sim S_6$  structures with different coating thicknesses

Sequence	$S_3$	$S_4$	$S_5$	$S_6$
$t=0$	0.8773	0.8688	0.8728	0.8731
$t=10 \text{ nm}$	0.9255	0.9175	0.9214	0.9212
$t=15 \text{ nm}$	0.9400	0.9340	0.9374	0.9367
$t=20 \text{ nm}$	0.9517	0.9404	0.9426	0.9421
$t=25 \text{ nm}$	0.9313	0.9319	0.9326	0.9324

## 4 结 论

设计了一种有效增加光吸收的一维光学微结构,利用 RCWA 方法,模拟计算了 TM 偏振模式下光学微结构的光吸收率。通过讨论和分析斐波纳契级数、占空比以及镀膜厚度等参数对结构光吸收率的影响,得到入射波长在  $300 \sim 1100 \text{ nm}$  波段、级数在  $S_2 \sim S_7$  范围内,当级数为  $S_3$ 、占空比  $f=0.7$  以及镀膜厚度  $t=20 \text{ nm}$  时,所设计的一维斐波纳契数列准周期光学微结构的平均光吸收率达到最高为  $95.17\%$ 。说明这种光学微结构在太阳能电池表面抗反射层的领域具有非常好的应用前景。

## 参 考 文 献

1 Narayanaswamy A, Chen G. Thermal emission control with one-dimensional metallodielectric photonic crystals [J].



- Physical Review B, 2004, 70(12): 125101.
- 2 Popov E, Bonod N, Enoch S. Comparison of plasmon surface waves on shallow and deep metallic 1D and 2D gratings[J]. Optics express, 2007, 15(7): 4224-4237.
  - 3 Heinzl A, Boerner V, Gombert A, *et al.*. Radiation filters and emitters for the NIR based on periodically structured metal surfaces[J]. Journal of Modern Optics, 2000, 47(13): 2399-2419.
  - 4 Maruyama S, Kashiwa T, Yugami H, *et al.*. Thermal radiation from two-dimensionally confined modes in microcavities [J]. Applied Physics Letters, 2001, 79(9): 1393-1395.
  - 5 Sai H, Yugami H, Akiyama Y, *et al.*. Spectral control of thermal emission by periodic microstructured surfaces in the near-infrared region[J]. Journal of the Optical Society of America A, 2001, 18(7): 1471-1476.
  - 6 Fleming J G, Lin S Y, Moreno J B. A three-dimensional photonic-crystal emitter for thermal photovoltaic power generation[R]. New Mexico, US: Sandia National Laboratories, 2003.
  - 7 Warren M E, Smith R E, Vawter G A, *et al.*. High-efficiency subwavelength diffractive optical element in GaAs for 975 nm[J]. Optics Letters, 1995, 20(12): 1441-1443.
  - 8 Zanotto S, Liscidini M, Andreani L C. Light trapping regimes in thin-film silicon solar cells with a photonic pattern[J]. Optics Express, 2010, 18(5): 4260-4272.
  - 9 Yang L, Xuan Y, Han Y, *et al.*. Investigation on the performance enhancement of silicon solar cells with an assembly grating structure[J]. Energy Conversion and Management, 2012, 54(1): 30-37.
  - 10 Cheng Q, Li P, Lu J, *et al.*. Silicon complex grating with different groove depths as an absorber for solar cells[J]. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2014, 132: 70-79.
  - 11 Ahmad N, Stokes J, Cryan M J. Solar absorbers using 1D and 2D periodic nanostructured nickel films[J]. Journal of Optics, 2014, 16(12): 125003.
  - 12 Ding W, Jia R, Li H, *et al.*. Design of two dimensional silicon nanowire arrays for antireflection and light trapping in silicon solar cells[J]. Journal of Applied Physics, 2014, 115(1): 014307.
  - 13 Zhou Tao, Lu Xiaodong, Li Yuan, *et al.*. Upper surface anti-reflection coating on crystalline silicon solar cell[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2014, 51(10): 103101.  
周 涛, 陆晓东, 李 媛, 等. 晶硅太阳能电池上表面增透膜研究[J]. 激光与光电子学进展, 2014, 51(10): 103101.
  - 14 Gao Yongfeng, Zhao Qionghua, Xu Xiaofang, *et al.*. Research on reflection properties of silicon based solar cells with parabolic cone array structure[J]. Chinese J Lasers, 2015, 42(8): 0808004  
高永锋, 赵琼华, 许孝芳, 等. 光伏电池表面抛物锥阵列微结构的反射特性研究[J]. 中国激光, 2015, 42(8): 0808004.
  - 15 Lü Xiaozhan, Ji Lingfei, Wu Yan, *et al.*. Fabrication of high performance anti-reflection silicon surface by picosecond laser scanning irradiation with chemical corrosion [J]. Chinese J Lasers, 2015, 42(4): 0403006.  
吕晓占, 季凌飞, 吴燕, 等. 皮秒激光-化学复合法制备高效减反射晶硅表面微结构研究[J]. 中国激光, 2015, 42(4): 0403006.
  - 16 Wang Liguang, Zhao Zhenyue, Zhang Xiaodan, *et al.*. Optimization of light trapping structure on textured silicon substrate for heterojunction solar cells[J]. Acta Optica Sinica, 2015, 35(2): 0216001.  
王利果, 赵振越, 张晓丹, 等. 异质结太阳能电池硅衬底绒面陷光结构的优化[J]. 光学学报, 2015, 35(2): 0216001.
  - 17 Huang Xiangjun, Zhang Yaoju, An Hongchang. Reduction of reflection in amorphous silicon thin film solar cell with double grating structure[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2015, 52(7): 073103.  
黄祥军, 张耀举, 安鸿昌. 双层光栅结构减小非晶硅薄膜太阳能电池的反射[J]. 激光与光电子学进展, 2015, 52(7): 073103.
  - 18 Gaylord T K, Moharam M G. Planar dielectric grating diffraction theories[J]. Applied Physics B, 1982, 28(1): 1-14.
  - 19 Gaylord T K, Moharam M G. Analysis and applications of optical diffraction by gratings[J]. Proceedings of the IEEE, 1985, 73(5): 894-937.
  - 20 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]. Journal of the Optical Society of America A, 1995, 12(5): 1068-1076.
  - 21 M Born, E Wolf. Principles of optics: Electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1999.