

doi: 10.3788/gzxb20124102.0159

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

王翔, 余彦清, 褚家如

(中国科学技术大学 精密机械与精密仪器系, 合肥, 230027)

摘要: 亚波长微纳米结构表面具有优良的抗反射特性, 本文以硅基太阳能电池响应光谱的 300~1 200 nm 为应用基础, 利用时域有限差分法计算了表面面形、结构参量的占空比、高度和周期以及光波入射角等对二维微纳米结构表面反射特性的影响, 并结合等效介质理论进行了进一步理论分析, 结果表明: 等截面光栅结构的反射率较大, 结构参量影响也较小; 锥形渐变截面光栅结构的抗反射性能较好, 且反射率随着占空比、结构高度的增大而显著下降; 同时, 光波在光栅法线的 $\pm 40^\circ$ 范围内入射时, 反射率均较小. 通过对亚波长微纳米光栅结构的反射特性的模拟和分析, 为抗反射表面的设计和制作提供了基础.

关键词: 微纳米结构表面; 亚波长光栅; 抗反射; 时域有限差分法; 模拟

中图分类号: O436

文献标识码: A

文章编号: 1004-4213(2012)02-0159-7

0 引言

硅基太阳能电池作为一种新型能源已成为现阶段研究热点之一. 由于其光电转换效率较低, 人们试图利用多层膜、表面织构以及衍射光栅加强背反射等手段来降低反射、增加光吸收效率, 以期提高光电转换效率^[1-5]. 其中表面织构以其亚波长结构的抗反射特性受到广泛的关注.

在二维亚波长结构的光学特性研究领域, 国内外的学者利用严格耦合波法分析了方柱型、锥型和半球型等亚波长光栅结构在可见光或红外波段的抗反射特性^[6-10]. Leem 等^[11] 利用严格耦合波法对具有圆柱形和半球形组合的亚波长二维周期结构反射特性进行了分析. Y C Chang^[12], C H Chang 和 Jose A. 等^[13] 利用等效介质理论分析了金字塔和锥型结构在可见光波段的反射特性; Ting 等^[14] 利用时域有限差分法研究了金字塔型和圆锥型的二维周期结构在可见光波段的抗反射特性. 相关的研究虽然分析和计算方法以及考察光谱范围不同, 但是均表明亚波长的微纳米结构表面具有很好的抗反射特性^[15], 且相对因受到折射率对膜材料的限制以及膜的附着性和稳定性等影响的多层膜结构来说有着显著的优势.

对于硅基太阳能电池来说, 其光谱响应区间为 350~1 150 nm^[16], 为此, 可以在覆盖这一宽光谱范

围内, 通过构建亚波长的表面微纳米结构来提高其抗反射性能. 现阶段, 在亚波长光栅结构光学性能分析中, 由于等效介质理论主要适用于结构周期小于波长的情况, 而严格耦合波法在模拟二维结构时计算较为复杂且程序不具有通用性. 因此, 本文利用时域有限差分法 (Finite-Difference Time-Domain, FDTD), 对硅基的几种典型微纳米结构表面的结构参量与反射特性的关系进行模拟研究, 从而为微纳米结构表面的设计和制造提供理论指导.

1 微纳米结构表面反射特性的模拟

用于亚波长微纳米结构表面光学特性模拟的数值计算方法中, 包括有限元法和边界元法的积分法主要用于分析具有连续轮廓的结构, 而对于离散型轮廓结构则多用严格耦合波法和时域有限差分法等微分法来分析. 时域有限差分法是目前用于分析电磁场传播与衍射问题最广泛的数值计算方法之一. 它不仅适用于分析有限孔径非周期结构衍射光学元件, 而且适用于分析周期衍射光学元件, 同时能够对复杂的结构进行精确的模拟.

现阶段, 硅基太阳能电池的抗反射亚波长结构表面, 主要有利用化学方法得到的金字塔型结构, 以及基于微纳米刻蚀技术获得的规则结构, 如方柱型, 圆柱型, 圆锥型和半球型等. 本文以这五种典型的二维亚波长微纳米结构表面为例来进行反射特性的模

基金项目: 重大科学研究计划项目(973)计划(No. 2010CB934700)资助

第一作者: 王翔(1964—), 男, 副教授, 博士, 主要研究方向为微纳米制造技术、光学测量及仪器. Email: wxyl@ustc.edu.cn

收稿日期: 2011-09-19; 修回日期: 2011-11-10

拟计算. 图 1(a)为二维正方柱光栅型微纳米结构, 其结构参量可定义为光栅宽度 W , 周期 T , 光栅高度 H . 为方便计算, 令 X 、 Y 方向上的占空比均为 f , 即有 $f=W/T$.

图 1(b)~(e)分别为圆柱型、金字塔型、圆锥型和半球型二维微纳米结构, 参照正方柱型结构, 可对定义结构参量有周期 T , 光栅高度 H , 占空比 f (对应的光栅宽度 W 为凸台底部的直径和边长与周期 T 的比值).

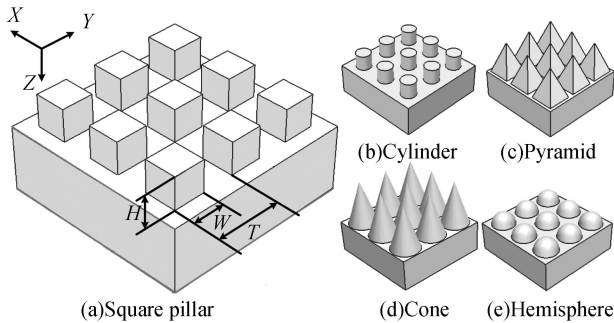


图 1 五种亚波长浮雕结构示意图

Fig. 1 Schematic diagram of sub-wavelength relief structures

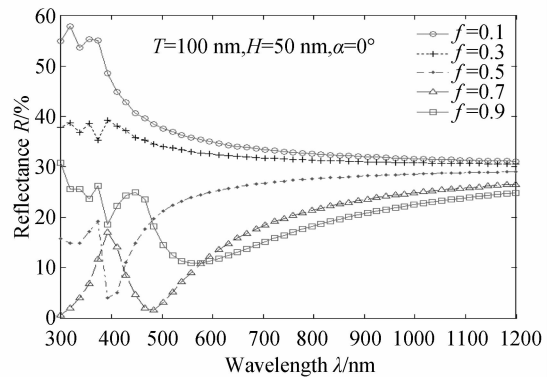
设入射的太阳光波为平面波. 其入射角 α 为入射方向与微纳米结构表面的法线方向 (Z 向) 的夹角 (XZ 或 YZ 平面); 由硅基太阳能电池光谱响应区间设定模拟计算的波长 λ 范围为 $300\sim 1200$ nm. 因此, 为了分析微纳米结构表面的结构参量对反射性能的影响, 根据微光学理论, 对于具有亚波长尺度的微纳米结构来说, 其周期可分别选取为 $T=50$ nm, 100 nm, 200 nm, 300 nm; 光栅结构高度为 $H=50$ nm, 100 nm, 200 nm, 400 nm; 占空比 f 取值为 $0.1\sim 1.0$.

1.1 等截面微纳米结构的模拟计算

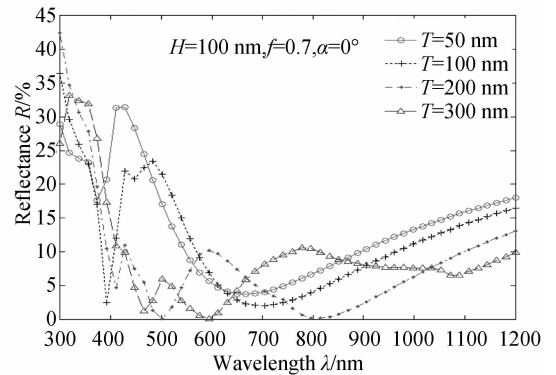
在图 1 所示的典型结构中, 方柱型和圆柱型为二维等截面的微纳米光栅结构. 在不同周期和不同高度下, 对不同占空比的反射率 R 进行了模拟 (取 $0.1\sim 0.9$, 当 $f=1.0$ 时二维等截面结构将转变为无表面结构的平面), 结果表明占空比 $f=0.7$ 左右时, 在考察的全波段内的整体反射率相对较低. 图 2(a)为方柱型微纳米结构, 周期 $T=100$ nm, 高度 $H=50$ nm, 入射角 $\alpha=0^\circ$, 占空比 $f=0.1\sim 0.9$ 时反射率 R 的变化情况, 当 f 较小时, 反射率较高; 随着 f 的增大, 反射率随之降低; 当 $f>0.7$ 时, 反射率转而升高. 因此, 在其他结构参量影响的模拟分析时均取占空比 $f=0.7$ 来进行计算.

当微纳米光栅结构占空比一定 ($f=0.7$), 相同结构高度 H 下, 在近紫外波段反射率随着周期 T 的增大而增大; 在可见和红外波段, 反射率呈波动变化, 周期 T 增大, 波动影响的带宽也随之增大; 且随着波长的增大, 波动的趋势趋于一致. 图 2(b)为结

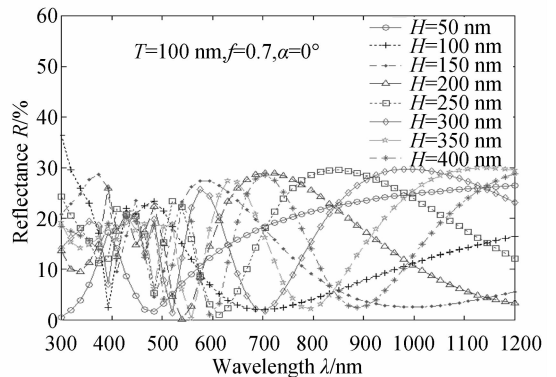
构高度 $H=100$ nm, 入射角 $\alpha=0^\circ$, 结构周期分别为 $T=50$ nm, 100 nm, 200 nm, 300 nm 时方柱型光栅结构反射率 R 随波长的变化情况. 由图 2(b)可知, 反射率曲线在短波段的波动较大, 随着波长增大, 其变化逐渐趋于一致.



(a) R versus λ at different f values



(b) R versus λ at different T values



(c) R versus λ at different H values

图 2 二维方柱型结构参量与反射率的关系

Fig. 2 The relationship between reflectance and structural parameters of two-dimension square pillar type structure

对于二维等截面的微纳米光栅结构来说, 不同结构高度 H 对反射率的影响也具有类似的规律. 图 2(c)为方柱型结构在占空比 $f=0.7$, 周期 $T=100$ nm, 入射角 $\alpha=0^\circ$, 结构高度分别为 $H=50$ nm, 100 nm, 150 nm, 200 nm, 250 nm, 300 nm, 350 nm, 400 nm 时的反射率 R 随波长的变化情况. 由图 2(c)可知, 在整个波长范围内, 反射率 R 均表现为上下波动的变化, 且随着 H 的增加, 反射没有显著的降低, 而在短波段的波动频率增大, 波动的带宽也随着

H 的增加呈现为红移增大。

对于微纳米结构表面的反射特性来说,入射角对反射率将有着直接影响.图3为 $T=200\text{ nm}$, $H=100\text{ nm}$, $f=0.7$,入射角 $\alpha=0\sim 80^\circ$ 时,方柱型微纳米结构平面的反射率 R 的变化情况.由图3可以看出,当 $\alpha<40^\circ$ 时,入射角的变化对反射率的影响较小,在全波段上的反射率也较小;当 $\alpha>40^\circ$ 时,对于某一波长,随着入射角的增大反射率变化增大,且反射率的幅值也随之增大;同时,反射率在整个波段上随着入射角 α 的变化有所波动,且在近红外的长波段,随着波长的增大,反射率也有增大的趋势。

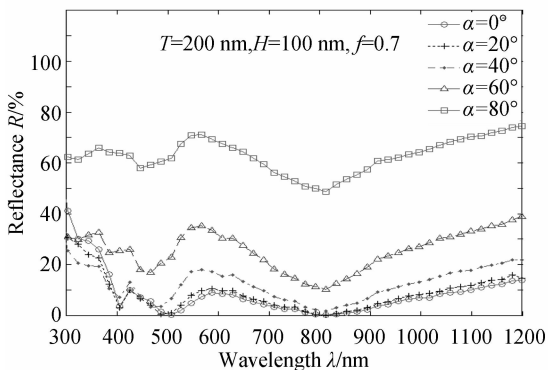


图3 反射率与入射角(α)的关系

Fig. 3 The relationship between reflectance and incident angle

经过对具有亚波长特征的圆柱型和方柱型微纳米结构的模拟计算可知,不同的光栅结构占空比 f 、周期 T 以及结构高度 H 等结构参量对反射率 R 的影响规律相似,虽然具有一定的抗反射性能,但反射率仍较高。

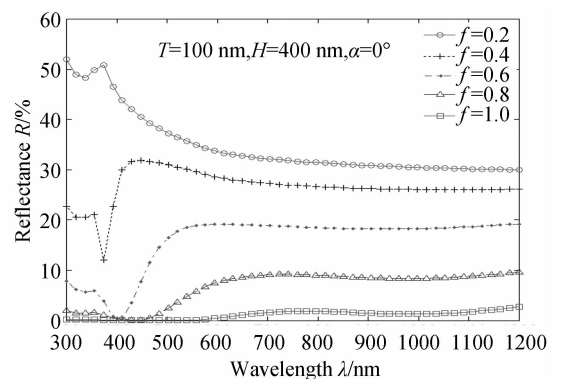
1.2 梯度截面光栅的模拟计算

在图1中,金字塔型、圆锥型和半球型微纳米结构在高度方向上为递变截面.对于这类具有梯度变化截面的二维微纳米光栅结构,也可以利用与上节相同的方法来进行模拟.即利用FDTD对不同的占空比 f 和不同周期 T 、不同高度 H 的几种递变截面的二维光栅结构进行计算。

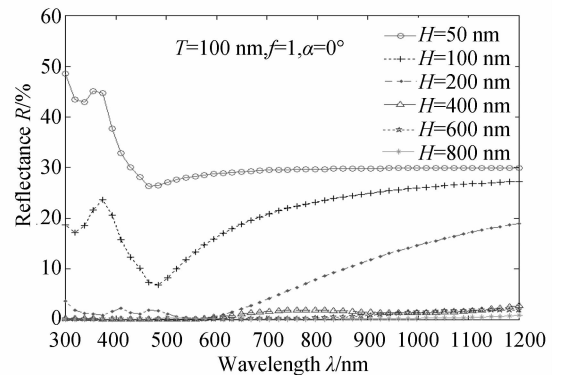
图4(a)为二维金字塔型微纳米光栅结构,在周期 $T=100\text{ nm}$,结构高度 $H=400\text{ nm}$,平面波入射角 $\alpha=0^\circ$,占空比为 $f=0.2\sim 1.0$ (即二维金字塔光凸台底部边长 W 与对应周期 T 的比值 $f=W/T$) 时反射率 R 变化情况.由图可知,在任一波长下,反射率 R 随着占空比 f 的增大而减小,且在 $f=1.0$ 时取得最小。

通过对不同周期和不同结构高度下,占空比影响的模拟计算发现,均表现出与图4(a)相同的趋势,即:占空比 f 越大,在评价的全波段范围内对应的反射率越低.同时,在对同样具有递变截面的圆锥型和半球型二维光栅结构模拟中均有相同的规律。

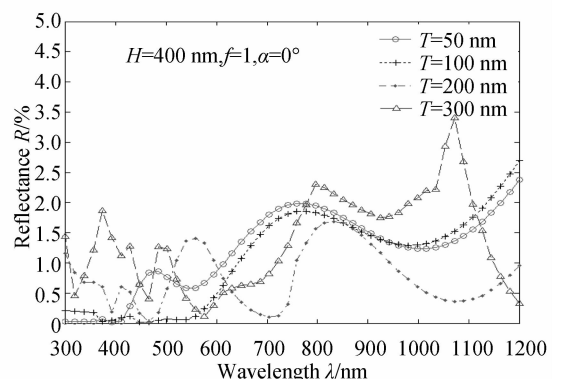
为了进一步了解具有递变截面微纳米结构高度对反射率的影响,对于占空比 $f=1$ 的梯度截面微纳米二维光栅结构,在入射角 $\alpha=0^\circ$ 时,不同周期 T 下均表现出具有相同的影响趋势,即其结构高度越大,在评价的全波段范围对应的反射率也越小.图4(b)是金字塔型结构的反射率 R 变化情况,对应的参量有: $\alpha=0^\circ$, $T=100\text{ nm}$,结构高度 H 分别为 50 nm , 100 nm , 200 nm , 400 nm , 600 nm , 800 nm , (为了了解单元结构高度 H 的进一步影响,在此取值时增选了 $H=600\text{ nm}$, 800 nm 来模拟),由图4(b)可知, H 越大,反射率越低,且有 $H\geq 400\text{ nm}$ 时,反射率趋于零。



(a) R versus λ at different f values



(b) R versus λ at different H values



(c) R versus λ at different H values

图4 二维金字塔型结构参量与反射率的关系

Fig. 4 The relationship between reflectance and structural parameters of two-dimension pyramidal structure

根据图4(a)和图4(b)的计算结果,现取占空比 $f=1$,高度 $H=400\text{ nm}$,入射角 $\alpha=0^\circ$,来模拟不同

周期 T 对金字塔型光栅结构反射率 R 的影响. 图 4(c) 为 $T=50\text{ nm}, 100\text{ nm}, 200\text{ nm}, 300\text{ nm}$ 时的反射率变化曲线, 由图 4(c) 可知, 对于占空比和高度相对确定的情况下, 周期 T 的变化对反射率的影响较小.

对于平面入射波的入射角 α 在 $0\sim 80^\circ$ 范围内变化时, 对应的金字塔型二维微纳米结构的反射率也将发生很大的变化. 图 5 为 $f=1, H=400\text{ nm}, T=200\text{ nm}$ 时的模拟结果, 在 $\alpha < 40^\circ$ 时, 入射角的变化对反射率 R 的变化影响较小, 且均小于 3%; 当 $\alpha > 40^\circ$, 反射率随着入射角增大而迅速增大.

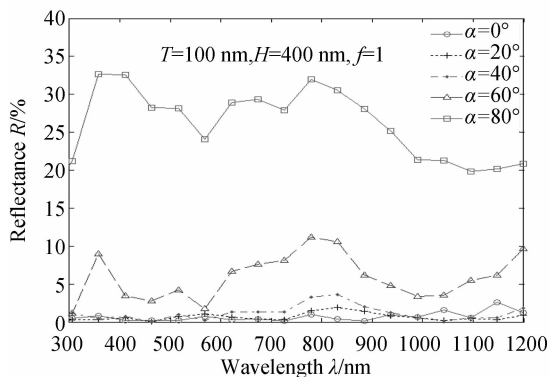


图 5 反射率与入射角 α 的关系

Fig. 5 The relationship between reflectance and incident angle α

以上示例的金字塔型二维光栅结构与同样为梯度截面变化的圆锥型结构的反射率变化的规律是一致的. 但是, 对于具有梯度截面变化的半球型结构而言, 却稍有不同, 即半球形结构高度 $H=fT/2$, 当占空比 $f=1$ 时, 高度直接由周期确定, 经模拟计算可知, 当周期较小 ($T \leq 100\text{ nm}$) 时, 在评价的全波段范围内反射率较高, 周期 T 为 $200\sim 300\text{ nm}$ 时, 反射率略有降低.

2 分析与讨论

通过对五种亚波长结构反射率的模拟计算, 得到了结构参量等对反射率的影响规律. 图 6 给出了五种亚波长结构经优化后反射率 R 随波长的变化情况. 其中等截面微纳米结构 (方柱型和圆柱型) 的参量分别为 $T=100\text{ nm}, H=100\text{ nm}, f=0.7, \alpha=0^\circ$; 梯度截面微纳米结构中的金字塔型和圆锥型的参量为 $T=100\text{ nm}, H=400\text{ nm}, f=1, \alpha=0^\circ$; 半球型结构参量为 $T=300\text{ nm}, f=1, \alpha=0^\circ$. 可以看出五种结构中, 梯度截面变化的金字塔型和圆锥型二维微纳米结构的抗反射效果是最好的, 在全波段范围内反射率最大分别不超过 3% 和 5%.

2.1 等截面光栅反射率特性分析

根据上节的模拟可知, 具有等截面的亚波长方

柱型和圆柱型微纳米光栅结构, 虽然表现出一定的抗反射特性, 但相关的结构参量 (高度和周期) 的影响也较为复杂, 反射率仍较高. 为此, 可以借助等效介质理论来进一步分析, 即当微纳米光栅结构周期小于入射光波长 ($T < \lambda/n_s$)^[17] 时, 亚波长周期结构具有均匀介质的特性, 可以将其简化为一层均匀介质薄膜来分析其光学特性.

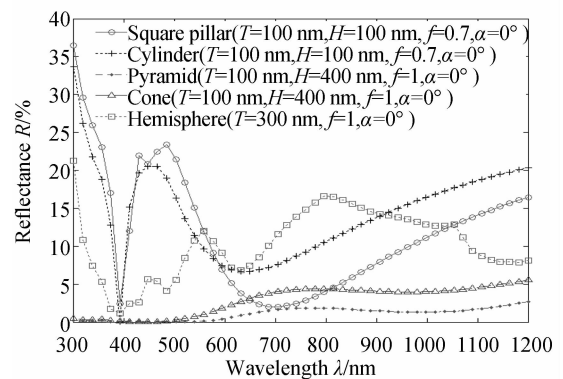


图 6 不同二维浮雕结构表面与反射率的关系对比

Fig. 6 The comparison of the relationship between reflectance and different two-dimension relief structure surfaces

对于单层膜来说, 影响其光学特性的主要参量即是其折射率, 二维方柱型光栅结构的等效折射率可以表示为^[17]

$$n = \left| \frac{(1-F + Fn_s^2)[F + (1-F)n_s^2] + n_s^2}{2[F + (1-F)n_s^2]} \right|^{1/2} \quad (1)$$

式中 $F=f^2$ 为整个光栅的占空比 (对于非正方形结构 $F=f_x \times f_y$); n_s 是材料折射率.

当光线为正入射时 ($\alpha=0^\circ$), 等效单层膜的反射率可由式 (2) 表达^[18]

$$R = \frac{(n_0 - n_s)^2 \cos^2 \delta + ((n_0 n_s / n) - n)^2 \sin^2 \delta}{(n_0 + n_s)^2 \cos^2 \delta + ((n_0 n_s / n) + n)^2 \sin^2 \delta} \quad (2)$$

式中 $n_0=1$ (空气); $\delta=(2\pi/\lambda)nH$, 为光从膜层上表面到下表面的相位差.

从式 (2) 可知, 对于一定的波长 λ , 等效膜的反射率 R 仅与等效折射率 n 和高度 H 相关. 根据薄膜的光学特性, 当其厚度为四分之一波长时反射率为极小. 故由式 (2) 可知: 当结构高度 $H=(\lambda/4n) \cdot (2m+1)$ ($m=0, 1, 2, \dots$) 时, 反射率取得极小值

$$R_{\min} = \left| \frac{n_0 n_s - n^2}{n_0 n_s + n^2} \right|^2 \quad (3)$$

当 $H=(\lambda/4n) \cdot (2m+2)$ ($m=0, 1, 2, \dots$) 时, 反射率取极大值

$$R_{\max} = \left| \frac{n_0 - n_s}{n_0 + n_s} \right|^2 \quad (4)$$

因此, 在不同波长上, 微纳米结构表面的反射率 R 随着 H 变化呈上下波动. 同理也可知, 对于一定高度 H , 反射率 R 随着波长的变化而上下波动, 如 $\lambda=(4nH)/(2m+1)$ ($m=0, 1, 2, \dots$) 时, 反射率为

极小值, $\lambda = (4nH) / (2m+2)$ ($m=0, 1, 2, \dots$) 时, 反射率取得极大值. 同时, 由相位差 $\delta = (2\pi/\lambda)nH$ 可知, 当波长 λ 或高度 H 变化时, 表征反射率曲线波动周期数的 δ 的变化量 ($\Delta\delta = 2\pi$ 为一个周期) 也随之变化, 且有 H 越大, $\Delta\delta$ 越大, 反射率在整个光谱范围上下波动的频率也越大.

在上节模拟计算的图 2(c) 中, 反射率随着高度 H 和波长 λ 的变化而上下波动. 图 2(c) 中当 $\lambda = 700$ nm 时, $H = 100$ nm 和 300 nm 取极小值, $H = 200$ nm 和 400 nm 取极大值; 且随着 H 的增加波动也随之增加.

同时, 由式(1)可知, 单层膜的等效折射率除了与材料在不同波长上的折射率有关, 还主要取决于占空比 f 的大小. 当 f 从 0~1 变化时, 对应的等效折射率 n 也将从 $n_0 \sim n_s$ 变化; 则由式(2)可以看出, 当 $f=0$ 时, $n=n_0$, 或当 $f=1$ 时, $n=n_s$, 反射率 R 均取得极大值, 并可由式(4)确定. 即对于一定的波长 λ 和结构高度 H 可以由式(1)和式(2)得到反射率最小的相对优化的占空比.

如设式(2)中 H 、 λ 和 n_s 一定, 由 $dR/dn=0$ 和式(1)可得到在紫外和可见光波段的 $f=0.6 \sim 0.8$ 时 R 取极小值; 在红外波段 f 在 0.9 附近 R 取极小值, 且在 $f=0.7 \sim 0.9$ 时反射率极为相近. 因此, 对于评价的全波段范围, 占空比 f 在 0.7 附近时反射率均较低, 与图 2(a) 所示的模拟结果一致.

对于 H 和 f 一定的等截面微纳米光栅结构, 由式(1)和式(2)知, 不同周期下的反射率是相同的. 如上节模拟计算, 图 2(b) 所示的周期对反射率影响关系可知, 在红外波段, 不同周期下的反射率趋于一致. 但是, 在短波段则有明显的变化. 其原因是当周期 T 与 λ 相近时, 超出了等效介质理论的适用范围, 即不能将微纳米光栅结构简化为一个单层膜来分析其光学特性. 因此, 可以从光栅衍射的角度来分析周期对反射率的影响, 即当周期与波长接近时, 光栅不仅仅只有零级衍射, 同时存在其它级次的衍射, 故在对应波段的反射率也就出现了波动; 周期越大被影响的光谱范围也越大. 由图 2(b) 可知, 当 T 较小时, 仅在紫外波段出现波动; 随着周期增大, 出现波动的光谱范围也越大, 当 $T=300$ nm 时, 影响扩至红外波段.

2.2 梯度截面光栅反射率特性分析

对于具有良好抗反射性能的梯度变化截面的二维微纳米结构, 其反射特性可以利用多层膜结构来进一步分析. 如图 7 所示, 梯度变化结构可通过在高度方向的分层来获得近似的多层膜^[19]: 1) 将侧面轮廓划分为 N 层薄片, 每层厚度要足够的薄(与波长

相关), 如图 7(a); 2) 将每层薄片转化为等厚膜片, 其截面尺度可取分离薄片上下截面尺度的均值, 如图 7(b); 3) 再通过式(1)的等效折射率计算, 将每层等厚膜片分别转化为一层薄膜, 构建出等厚的、具有不同折射率的多层膜结构, 如图 7(c).

对于多层膜结构来说, 要使其反射率最小, 其多层膜的折射率从顶部到底部应呈梯度变化 ($n_0 < n_1 < n_2 < \dots < n_N < n_s$). 由文献[20]可知, 如所有层的反射均为零, 则必须满足

$$n_i^2 = n_{i+1} n_{i-1} \quad (i=1, 2, \dots, N; n_{N+1} = n_s) \quad (5)$$

同时, 每层的厚度 d_i 应满足

$$d_1 n_1 = d_2 n_2 = \dots = d_N n_N = \lambda/4 \quad (\sum d_i = H) \quad (6)$$

式中 λ 为入射光波长.

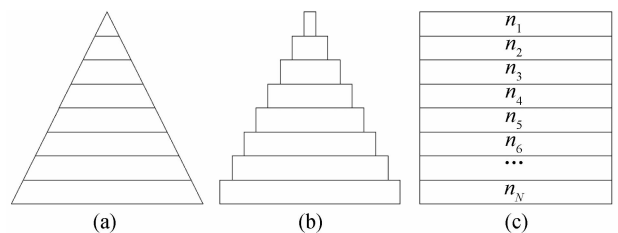


图 7 金字塔型结构的多层膜等效图

Fig. 7 Multilayer equivalent figure of the pyramidal structure

由薄膜光学可知, 薄膜的光学厚度为入射光波四分之一特征波长时, 其反射率取得极小值. 对于梯度变化的微纳米结构, 在分层时, 从几何和等效折射率的角度, 分层越多(层厚越小)等效计算将越接近原型, 相邻层间的折射率变化越小; 当等效薄膜层满足式(6)的等效光学厚度时, 反射率也越小; 所以, 光栅结构的高度 H 越大, 等效后的膜层数越多, 在更宽的波段范围内的反射率也越小. 当光栅高度 H 达到一定的值, 反射率将趋近于零. 如图 4(b) 所示的模拟计算结果, H 越大反射率越低; 当 $H=400$ nm 时, 在全波段上最大反射率小于 3%; 当结构高度 $H=600$ nm 和 800 nm 时, 反射率趋于零.

由于入射光在两种折射率不同的介质界面上会发生反射, 且两介质的折射率相差越小, 反射也就越小^[15]. 对于梯度变化的微纳米浮雕结构(如金字塔型)等效为多层膜后, 分层厚度越小, 相邻等效薄膜层的等效折射率将越接近; 当相邻等效薄膜层的折射率满足式(5)时, 对应的反射率为最小; 同理, 浮雕结构与基底之间的等效折射率也应变化较小, 即由式(5)可知, 微纳米浮雕结构等效的最底层薄膜的折射率 n_N 和基底折射率 n_s 的变化越小, 即当光栅结构的占空比 $f=1$ 时, 将有 $n_N \approx n_s$, 则反射为最小. 如上节图 4(a) 所示的不同占空比 f 与反射率关系的模拟计算结果, 在 300~1 200 nm 波段内, 占空比 f 越大, 反射率越小, 且 $f=1$ 时反射率最低.

因此,梯度截面结构的抗反射性能要优于等截面结构;而在梯度截面结构中,在将其等效成多层膜时,每两层膜的等效折射率相差越小,等效折射率变化越平缓,则反射也越低.对于半球型由于受到结构高度的限制,反射率相对较大,而金字塔和圆锥型结构的抗反射性能为最优,如图6所示.利用具有梯度截面的二维微纳米浮雕结构,通过其结构参量的优化设计,来获得在入射介质与基底之间形成折射率渐变的等效薄膜,可以实现宽光谱的减反射效果.

3 结论

本文以硅基太阳能电池常用工作波段为分析基础,利用FDTD的数值分析方法,来模拟计算五种典型二维亚波长微纳米结构表面的反射特性,通过对光栅结构的占空比、高度和周期等结构参量的正交模拟,结果表明,具有梯度变化截面的微纳米结构相对等截面光栅结构来说,具有很好的抗反射性能;同时,光波入射角度对反射率的影响也较为显著,当入射角度 $\alpha < 40^\circ$ 时,反射率较小,而随着入射角度的继续增大,反射率也将显著增大.在模拟计算的基础上,结合等效介质和衍射的理论分析,对不同结构参量与反射率的关系展开了进一步的分析和讨论,从而为利用FDTD的数值计算提供了理论支持.为此,通过对亚波长微纳米光栅结构的反射特性的模拟和分析,为太阳能电池抗反射表面的设计和制作提供了坚实的基础.

参考文献

- [1] GANGOPADHYAYA U, KIM K H, DHUNGEL S K, *et al.* A novel low cost texturization method for large area commercial mono-crystalline silicon solar cells[J]. *Solar Energy Materials & Solar Cells*, 2006, **90**(20): 3557-3567.
- [2] TVINGSTEDT K, ZILIO S D, INGANÄSI O, *et al.* Trapping light with micro lenses in thin film organic photovoltaic cells [J]. *Optics Express*, 2008, **16**(26): 21608-21615.
- [3] SAARINEN J J, WEISS S M, FAUCHET P M, *et al.* Reflectance analysis of a multilayer one-dimensional porous silicon structure: Theory and experiment [J]. *Applied Physics*, 2008, **104**(1): 013103-1~013103-7.
- [4] MUTITU J G, SHI Shou-yuan, CHEN Cai-hua, *et al.* Thin film silicon solar cell design based on photonic crystal and diffractive grating structures [J]. *Optics Express*, 2008, **16**(19): 15238-15248.
- [5] HE Zhuo-ming, JIN Shang-zhong, LIANG Pei, *et al.* Structural simulations of amorphous silicon solar cells [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2011, **40**(2): 204-208.
何卓铭, 金尚忠, 梁培, 等. 多晶硅表面酸腐蚀制备绒面研究 [J]. 光子学报, 2011, **40**(2): 204-208.
- [6] SAHOO K C, LI Yi-ming, EDWARD Y C. Numerical calculation of the reflectance of sub-wavelength structures on silicon nitride for solar cell application [J]. *Computer Physics Communications*, 2009, **180**(10): 1721-1729.
- [7] SONG Y M, LEE Y T. Investigation of geometrical effects of antireflective subwavelength grating structures for optical device applications [J]. *Optical and Quantum Electronics*, 2009, **41**(10): 771-777.
- [8] ZHANG Fa-yun, YE Jian-xiong. Texturing of multicrystalline silicon with acidic etching [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2011, **40**(2): 222-226.
张发云, 叶建雄. 多晶硅表面酸腐蚀制备绒面研究 [J]. 光子学报, 2011, **40**(2): 222-226.
- [9] CHEN H L, CHUANG S Y, LIN C H, *et al.* Using colloidal lithography to fabricate and optimize sub-wavelength pyramidal and honeycomb structures in solar cells [J]. *Optics Express*, 2007, **15**(22): 14793-14803.
- [10] SUN Mei, XING Su-xia, CHEN Yuan-yuan, *et al.* Enhanced transmission through periodic H-shaped arrays [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2010, **39**(9): 1602-1605.
孙梅, 邢素霞, 陈媛媛等. 周期排列的 H-空气槽光学特性研究 [J]. 光子学报, 2010, **39**(9): 1602-1605.
- [11] LEEM J W, JOO D H, YU J S. 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.
- [12] CHANG Y C, MEI G H, CHANG T W, *et al.* Design and fabrication of a nanostructured surface combining antireflective and enhanced-hydrophobic effects [J]. *Nanotechnology*, 2007, **18**(28): 285303-285308.
- [13] CHANG C H, DOMINGUEZ-CABALLERO J A, CHOI H J, *et al.* Nanostructured gradient-index antireflection diffractive optics [J]. *Optics Letters*, 2011, **36**(12): 2354-2356.
- [14] TING C J, CHEN C F, CHOU C P. Antireflection subwavelength structures analyzed by using the finite difference time domain method [J]. *Optik*, 2009, **120**(16): 814-817.
- [15] CHATTOPADHYAY S, HUANG Y F, JEN Y J, *et al.* Antireflecting and photonic nanostructures [J]. *Materials Science and Engineering R*, 2010, **69**(1~3): 1-35.
- [16] YU Rong-jin. Optics and solar energy [J]. *Acta Photonica 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.
- [17] 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.
- [18] 唐晋发, 顾培夫, 刘旭, 等. 现代光学薄膜技术 [M]. 杭州: 浙江大学出版社, 2006: 20-24.
- [19] OKUNO T. Development of subwavelength structure coating (SWC) and its application to imaging lenses [C]. *SPIE-OSA*, 2010, **7652**: 765203-1-765203-8.
- [20] JOAO M, SANTOS D, BERNARDO L M. Antireflection structures with use of multi-level subwavelength zero-order gratings [J]. *Applied Optics*, 1997, **36**(34): 8935-8938.

Simulation and Research on Reflection Properties of Two- dimension Micro/nano Structure Surface by FDTD Method

WANG Xiang, YU Yan-qing, CHU Jia-ru

(Department of Precision Machinery and Precision Instrument, University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China)

Abstract: The sub-wavelength micro/nano structure surfaces have an excellent anti-reflective property. Based on application foundation of silicon-based solar cells response spectrum of 300~1 200 nm, reflection characteristics of two-dimension micro/nano structure surface were calculated influenced by the surface face forms, structure parameters with duty ratio, height and period, and incident angle of light waves, using the finite difference time domain method. Further analysis was done by effective medium theory. The results show that the reflectivity is large for the grating structure of uniform section, and the influence of structure parameters is small; anti-reflective performance of a taped gradient section structure is much better, and the reflectivity is observably reduced with duty ratio and height increased; and it also showed that the reflectivity is a little smaller at the incident angle range of $\pm 40^\circ$. The simulation and analysis on reflective property of sub-wavelength micro/nano grating structure, provide the basis on the design and fabrication of anti-reflection surfaces.

Key words: Micro/nano structure surface; Sub-wavelength grating; Anti-reflection; Finite-Difference Time-Domain(FDTD); Simulation