

doi: 10.3788/gzxb20124109.1076

# 多晶硅表面陷阱坑形貌的光学性能模拟

张发云

(1 新余学院 新能源科学与工程学院, 江西省高等学校硅材料重点实验室, 江西 新余 338004)

**摘 要:**采用 COMSOL Multiphysics 3.5a 有限元分析软件中的 RF 模块对 3 种硅片绒面的陷阱坑形貌(轻度腐蚀、正常腐蚀和过度腐蚀)的光学性能进行了数值模拟. 通过求解麦克斯韦方程组和材料本构方程, 获得了 3 种陷阱坑的表面电场  $z$  分量、表面磁场  $y$  分量和反射率的变化规律. 结果表明: 当波长为 600 nm 时, 轻度腐蚀陷阱坑的表面电场  $z$  分量和表面磁场  $y$  分量的数值最小, 反射率最高(约为 35%); 正常腐蚀陷阱坑的表面电场  $z$  分量和表面磁场  $y$  分量其次, 反射率约为 17%; 过度腐蚀陷阱坑的表面电场  $z$  分量和表面磁场  $y$  分量的数值最大, 反射率最低(约为 10%). 通过实验和模拟结果对比可知, 模拟值和试验值的反射率变化趋势基本一致, 两者吻合较好, 可为实际生产和试验提供理论参考.

**关键词:**多晶硅; 陷阱坑; 形貌; 陷光; 数值模拟  
**中图分类号:** TM 914.4      **文献标识码:** A

**文章编号:** 1004-4213(2012)09-1076-5

于绒面形貌结构的设计和分析, 为太阳能电池制绒工艺参数的优化提供理论指导.

## 0 引言

太阳能电池的转换效率主要取决于它的收集光的能力, 表面光滑硅片的反射率相对较高. 因此, 在硅太阳能电池中, 通常采用绒面技术来降低硅片表面的光反射<sup>[1-4]</sup>. 目前, 在多晶硅表面的各种绒面制备方法中, 各向同性腐蚀技术可以比较容易地整合到当前的太阳能电池处理工序中, 且成本相对较低, 在大规模工业化生产中, 各向同性腐蚀法已经广泛应用于多晶硅太阳能电池绒面技术<sup>[5-8]</sup>.

但由于酸液的自催化性使其在应用过程中出现可控性差、重复性差等问题, 这无疑会给新型的酸腐蚀液研制和大规模生产带来很大的困难. 因此, 运用计算机仿真技术对多晶硅绒面的陷阱坑形貌进行数值模拟, 使其光学性能达到最优, 为优化酸腐蚀的配方及工艺参数, 缩短研制周期, 减少实验费用, 提供一种强有力的技术研究手段. 目前, 运用计算机模拟技术研究多晶硅绒面形貌的光学特性还未完全展开, 少量研究主要集中于多晶硅形貌对光的反射率影响的数值计算<sup>[9-11]</sup>.

本文利用 COMSOL Multiphysics 3.5a 有限元软件中的 RF 模块对多晶硅绒面的陷阱坑形貌进行了模拟, 获得了不同陷阱坑形貌的光学性能, 揭示了太阳光在多晶硅绒面内的传播规律, 模拟结果可用

## 1 数值计算模型

### 1.1 控制方程

#### 1.1.1 麦克斯韦方程

利用 COMSOL3.5a 有限元软件中的 RF 模块解决确定边界条件下的麦克斯韦方程组为

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} &= -\nabla \times \mathbf{E} & \nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho \\ \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} &= \nabla \times \mathbf{H} - \mathbf{J} & \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \end{aligned} \quad (1)$$

式中,  $\mathbf{E}$  为电场强度,  $\mathbf{D}$  为电位移矢量(电通量密度或电感应强度),  $\mathbf{H}$  为磁场强度,  $\mathbf{B}$  为磁通量密度(磁感应强度),  $\mathbf{J}$  为电流密度,  $\rho$  为电荷密度.

#### 1.1.2 本构关系

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} \quad \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} \quad \mathbf{J} = \sigma \mathbf{E} \quad (2)$$

式中,  $\epsilon_0$  为真空中的介电常量,  $\mu_0$  为真空中的磁导率,  $\sigma$  为电导率.

### 1.2 数值建模

图 1 分别为不同深度的多晶硅表面陷阱坑的几何形貌. 图中的 3 种形式分别为轻度腐蚀、正常腐蚀和过度腐蚀. 几何模型采用模拟软件中的 CAD 模块进行构建, 从图中可以看出, 几何图形分为两部分, 左侧为空气层, 右侧(深色区域)为 Si 层. 采用自

**基金项目:**国家自然科学基金(No. 51164033)和江西省教育厅科技项目(No. GJJ10647)资助

**作者简介:**张发云(1967—),男,副教授,工学博士,主要研究方向为太阳能电池材料制备技术及数值模拟. Email: zfyabc@126.com

**收稿日期:** 2011-10-31; **修回日期:** 2012-06-28

由网格参量,内建网格尺寸选择特别细化,分别划分为 39 421 个、41 480 个和 50 887 个三角形单元(如图 2).

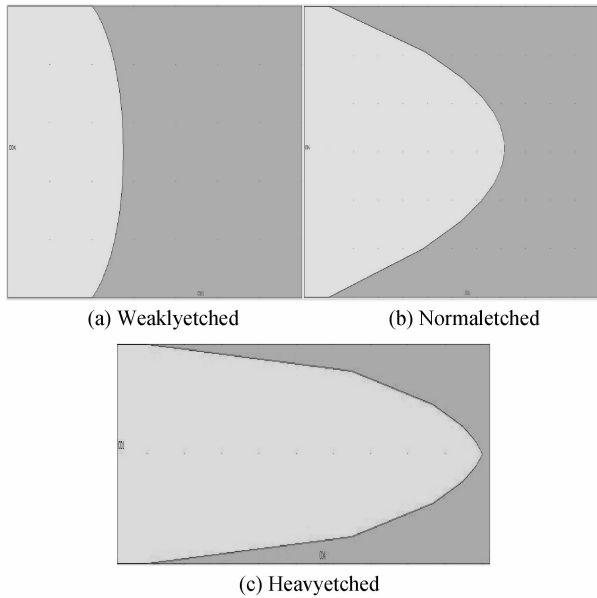


图 1 硅片表面陷阱坑的几何模型  
Fig. 1 Geometry model of trap pit of silicon wafer surface

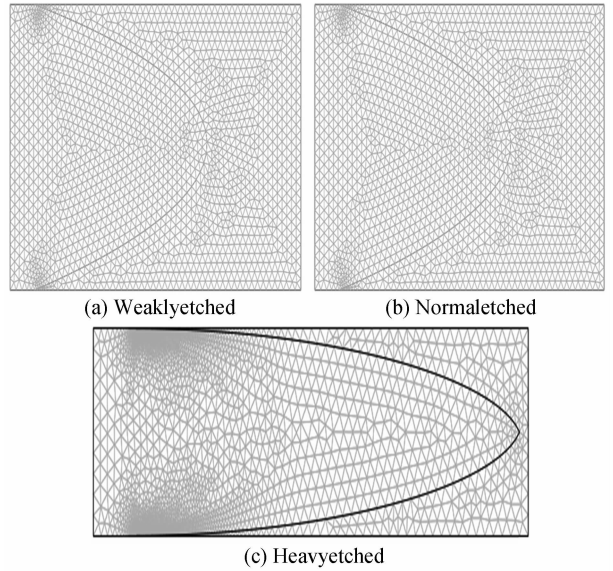


图 2 硅片表面陷阱坑的有限元网格图  
Fig. 2 The FEM mesh drawing of trap pit of silicon wafer surface

## 2 模拟结果分析

图 3 和图 4 分别为不同陷阱坑形貌的表面电场

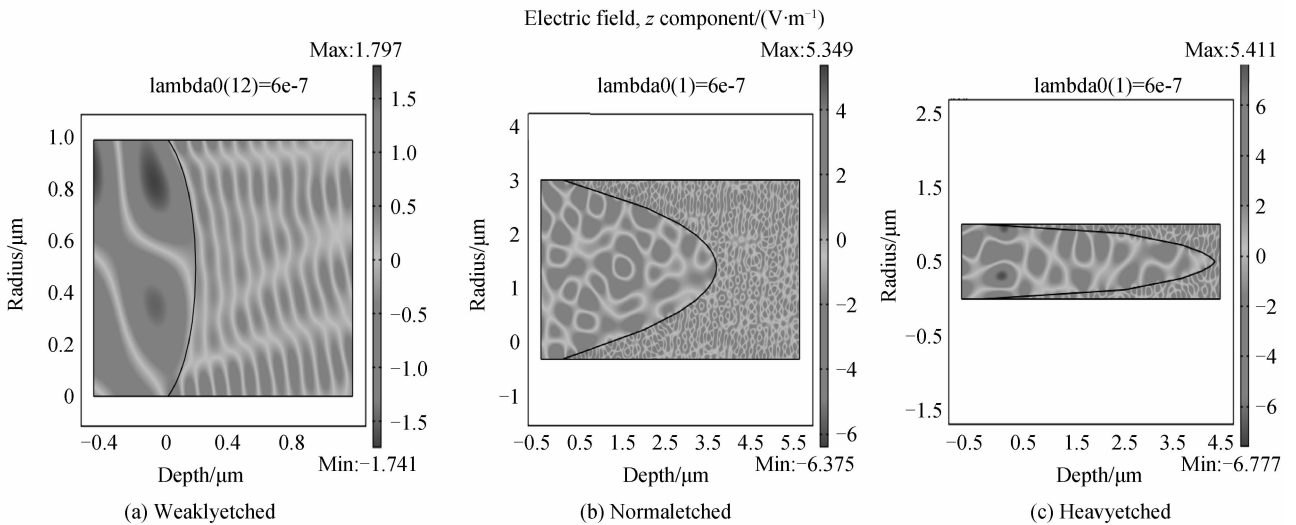


图 3 不同陷阱坑形貌的表面电场  $z$  分量分布( $\lambda=600 \text{ nm}$ )  
Fig. 3 Distribution of surface electric field  $z$  component for different trap pit morphology

$z$  分量和磁场  $y$  分量的分布图( $\lambda=600 \text{ nm}$ ). 由图可知,硅片陷阱坑形貌的不同,电场  $z$  分量和磁场  $y$  分量分布的也不同,与硅片正常腐蚀和过度腐蚀相比,轻度腐蚀陷阱坑的电场  $z$  分量和磁场  $y$  分量的密度明显较稀,强度也偏小. 当波长为  $600 \text{ nm}$  时,轻度腐蚀陷阱坑表面电场的  $z$  分量最大值为  $1.797 \text{ V/m}$ ,最小值为  $-1.741 \text{ V/m}$ ;正常腐蚀陷阱坑表面电场的  $z$  分量最大值为  $5.349 \text{ V/m}$ ,最小值为  $-6.375 \text{ V/m}$ ,分别为轻度腐蚀陷阱坑的 2.98 倍和 3.66 倍;过度腐蚀陷阱坑表面电场的  $z$  分量最大值为  $5.411 \text{ V/m}$ ,最小值为  $-6.777 \text{ V/m}$ ,超过了正常

腐蚀陷阱坑表面电场的大小. 对于表面磁场的  $y$  分量来说,轻度腐蚀陷阱坑最大值  $7.752 \times 10^{-3} \text{ A/m}$ ,最小值  $-7.512 \times 10^{-3} \text{ A/m}$ ,正常腐蚀陷阱坑比轻度腐蚀的表面磁场  $y$  分量大多,其最大值为  $3.32 \times 10^{-2} \text{ A/m}$ ,最小值为  $-3.53 \times 10^{-2} \text{ A/m}$ ,而过度腐蚀陷阱坑的表面磁场  $y$  分量最大,其最大值为  $3.73 \times 10^{-2} \text{ A/m}$ ,最小值为  $-3.75 \times 10^{-2} \text{ A/m}$ ,约为轻度腐蚀的表面磁场  $y$  分量数值的 5 倍. 总之,对于表面电场  $z$  分量和磁场  $y$  分量来说,过度腐蚀陷阱坑的最大,正常腐蚀陷阱坑的其次,轻度腐蚀陷阱坑的最小.

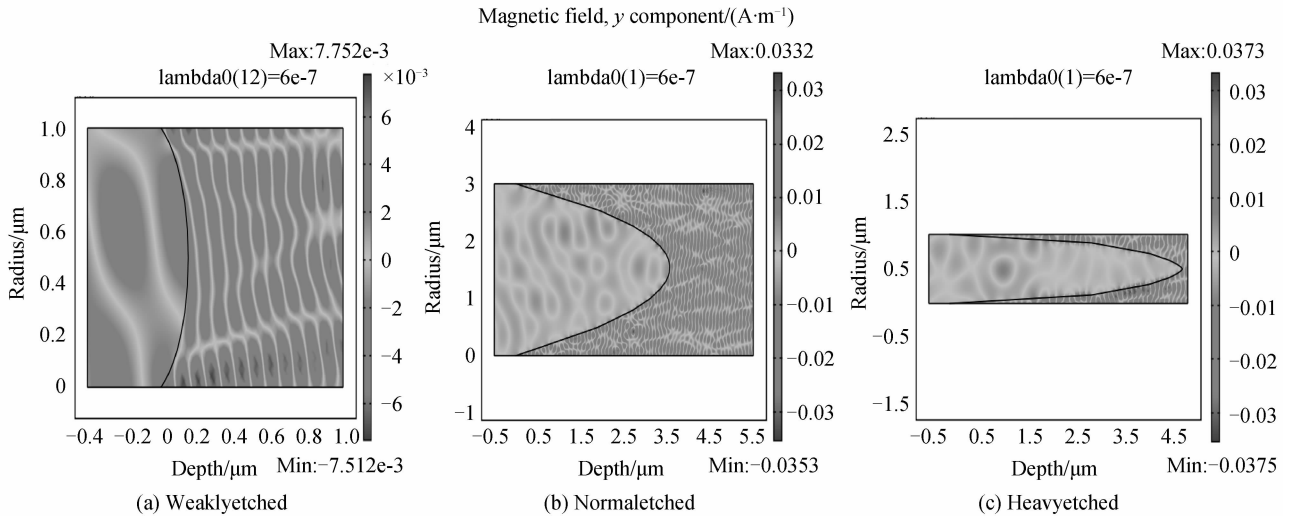


图4 不同陷阱坑形貌的表面磁场  $y$  分量分布 ( $\lambda=600 \text{ nm}$ )

Fig. 4 Distribution of surface magnetic field  $y$  component for different trap pit morphology

图5为不同陷阱坑形貌反射率的模拟曲线图。从图5可以看出:在 $400\sim 1100 \text{ nm}$ 光谱范围内,轻度腐蚀硅片反射率的大小约为35%;与轻度腐蚀相比,正常腐蚀和过度腐蚀的陷阱坑具有较好的陷光作用,其反射率明显偏小;正常腐蚀陷阱坑反射率的

模拟值在17%左右,而过度腐蚀陷阱坑的反射率最低,大小约为10%;但过度腐蚀的硅片会变得更脆,更易破裂,而且在这些缺陷处极易形成复合中心,减少有效载流子的数量,降低制绒后对光的吸收效果,所以应当尽量避免过度腐蚀的现象发生。

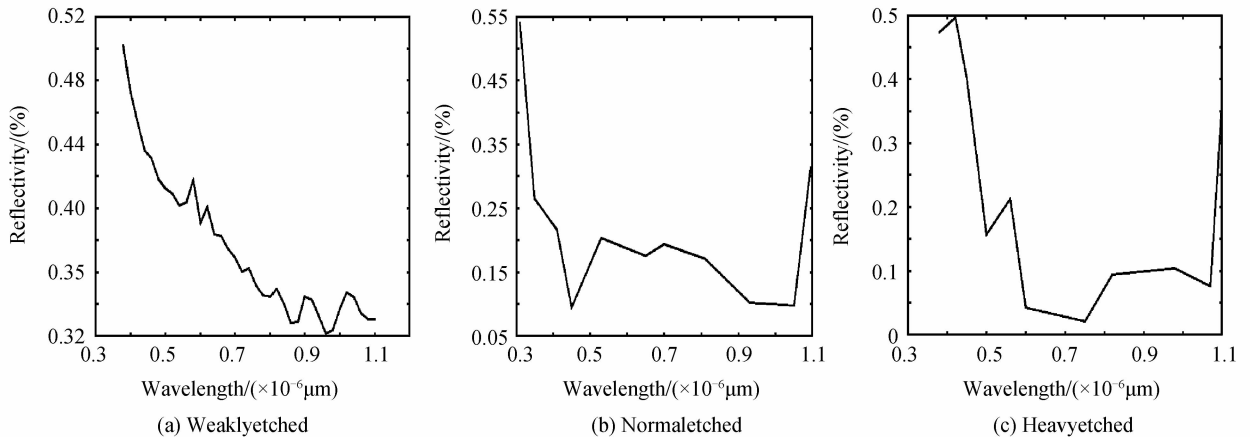


图5 不同陷阱坑形貌反射率的模拟曲线图

Fig. 5 The simulation curves of reflectivity of different trap pit morphology

### 3 实验验证

本实验所用的硅片为江西赛维 LDK 公司生产的硼掺杂 P 型多晶硅片,电阻率为  $0.5\sim 3.0 \Omega \cdot \text{cm}$ ,厚度为  $220 \mu\text{m}$  左右.硅片在  $\text{HF}$  (40% wt) 和  $\text{HNO}_3$  (70% wt) 混合溶液中进行腐蚀,为了控制反应速度,采用  $\text{NaH}_2\text{PO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  溶液进行稀释.反应在室温下进行,反应结束后,立即用去离子水冲洗硅片,然后在碱液中清洗,再用去离子水冲洗,最后在  $\text{N}_2$  气氛中烘干.采用扫描电镜分析硅片表面绒面形貌,利用紫外分光光度计检测其反射率.

图6为不同陷阱坑形貌反射率的实测曲线.由图可知,在 $400\sim 1100 \text{ nm}$ 光谱范围内,过度腐蚀硅片陷光能力最优,正常腐蚀硅片其次,轻度腐蚀硅片

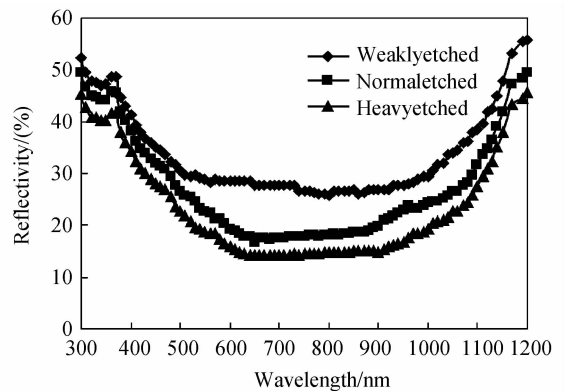


图6 不同陷阱坑形貌的反射率实测曲线

Fig. 6 The measured curves of the reflectance of different trap pit morphology

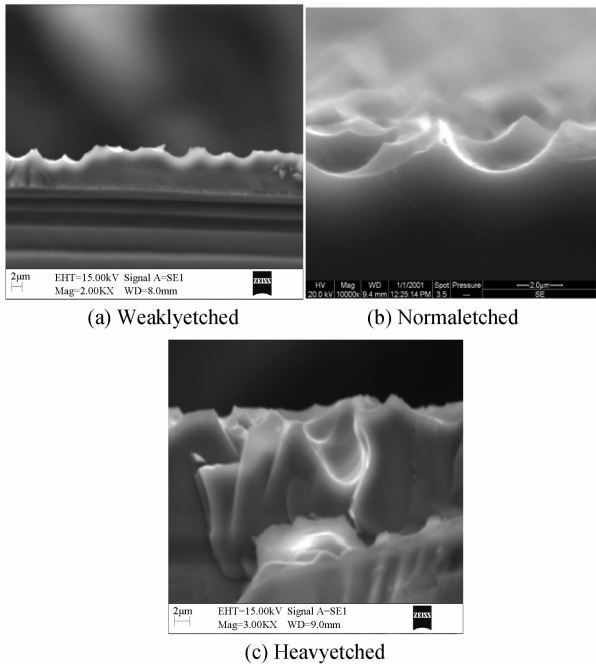


图 7 不同陷阱坑的形貌

Fig. 7 The morphology of different trap pit

最差。对比图 5 和图 6 中可以看出,两者的数值大小和变化趋势基本一致,在腐蚀深度较浅时的陷阱坑反射率大小偏高,随着腐蚀时间延长,陷阱坑深度的增加(如图 7),使得入射光在硅片表面被反射的次数越多,硅片对入射光的吸收也更多,其表面陷光能力随之提高,从而使得硅片表面反射率大小明显降低。总体来说,数值模拟结果和实验值两者吻合较好,模拟结果在一定程度上可以应用于指导实际生产和实验研究。

## 4 结论

采用 COMSOL Multiphysics 3.5a 有限元分析软件中的 RF 模块较好地模拟了 3 种不同陷阱坑形貌硅片的光学性能,分别获得了陷阱坑的表面电场  $z$  分量、表面磁场  $y$  分量和反射率的变化规律。通过实验和模拟结果对比可知,模拟值和试验值的反射率变化趋势基本一致,两者吻合较好。数值模拟结果可以用于分析多晶硅表面陷阱坑演化过程,优化多晶硅绒面陷光行为,揭示太阳光在多晶硅陷阱坑内的传播规律,并为实际生产和试验提供理论参考,这对太阳能电池的研究和发展具有重要意义。

## 参考文献

- [1] STEINERT M, ACKER J, OSWALD S, *et al.* Study on the mechanism of silicon etching in HNO<sub>3</sub>-Rich HF/HNO<sub>3</sub> mixtures[J]. *J Phys Chem C*, 2007, **111**(5): 2133-2140.
- [2] EIN-ELI Y, GORDON N, STAROSVETSKY D. Reduced light reflection of textured multicrystalline silicon via NPD for solar cells applications[J]. *Solar Energy Materials & Solar Cells*, 2006, **90**(12): 1764-1772.
- [3] ZHAO Bai-chuan, MENG Fan-ying, CUI Rong-qiang, *et al.* Investigation of surface texture by chemical method on polysilicon solar cells [J]. *Acta Energetica Solaris Sinica*, 2002, **23**(6): 759-762.  
赵百川,孟凡英,崔容强,等. 多晶硅太阳能电池表面化学织构工艺[J]. *太阳能学报*, 2002, **23**(6): 759-762.
- [4] GUO Zhi-qiu, LIUXi-yun, SHEN Hui, *et al.* Isotropic texturing of multicrystalline silicon[J]. *Journal of Materials Science & Engineering*, 2007, **25**(1): 68-70.  
郭志球,柳锡运,沈辉,等. 各向同性腐蚀法制备多晶硅绒面[J]. *材料科学与工程学报*, 2007, **25**(1): 68-70.
- [5] ZHANG Fa-yun, YE Jian-xiong. Research on texturing of multicrystalline silicon with acidic etching[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2011, **40**(2): 222-226.  
张发云,叶建雄. 多晶硅表面酸腐蚀绒面研究[J]. *光子学报*, 2011, **40**(2): 222-226.
- [6] TSUJINO K, MATSUMURA M, NISHIMOTO Y. Texturization of multicrystalline silicon wafers for solar cells by chemical treatment using metallic catalyst [J]. *Solar Energy Materials & Solar Cells*, 2006, **90**(1): 100-110.
- [7] ERIK M, HANS J S, DANIEL N W, *et al.* Acidic texturing of multicrystalline silicon wafers[C]. Proceedings of the 31st IEEE Photovoltaic Specialists Conference. Orlando, Florida, USA: IEEE, 2005: 1039-1042.
- [8] MACDONALD D H, CUEVAS A, KERR M J, *et al.* Texturing industrial multicrystalline silicon solar cells [J]. *Solar Energy*, 2004, **76**(1-3): 277-283.
- [9] QIU Ming-bo, HUANG Yin-hui, LIU Zhi-dong, *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.
- [10] TENG Fan, LIU Zhi-ling, PENG Huan, *et al.* Lingt reflectivity calculation of acid corrosion surface of multicrystalline silicon [J]. *Acta Energetica Solaris Sinica*, 2009, **30**(10): 1139-1142.  
滕繁,刘志凌,彭欢,等. 酸腐蚀多晶硅表面的反射率计算[J]. *太阳能学报*, 2009, **30**(10): 1139-1142.
- [11] YAGI T, Y URAOKA, FUYUKI T. Ray-trace simulation of light trapping in silicon solar cell with texture structures [J]. *Solar Energy Materials & Solar Cells*, 2006, **90**(16): 2647-2656.

## A Simulation Study on Optical Properties of Trap Pits Morphology of Multicrystalline Silicon

ZHANG Fa-yun

(1 *Institute of New Energy Science and Engineering, Key Laboratory of Jiangxi University for Silicon Materials, Xinyu University, Xinyu, Jiangxi 338004, China*)

**Abstract:** Optical properties of trap pit morphology of multicrystalline silicon (weaklyetched, normaletched and heavyetched) were simulated by solving the Maxwell and material equations, using RF MODULE of COMSOL Multiphysics version 3. 5a. The varying laws of surface electric field a component, surface magnetic field y component and reflectivity of three kinds of trap pits were obtained. It is indicated that the value of surface electric field  $z$  component and surface magnetic field y component of weaklyetched trap pit is the least, and its reflectivity is the highest (about 35%) at wavelength of 600nm; followed by that of normaletched trap pit, its reflectivity is about 17%; the value of surface electric field  $z$  component and surface magnetic field y component of heavyetched trap pit is the most, its reflectivity is the lowest (about 10%). Compared the experimental date with the simulation results, change trend of numerical simulation results are accorded with that of experimental ones, which provided for the practice production of acidic texturing of multicrystalline silicon as theory bases.

**Key words:** Multicrystalline silicon; Trap pits; Trap light; Numerical simulation