

利用球型微纳米颗粒结构表面减小硅基太阳能电池的光反射

廖同庆¹, 魏小龙¹, 吴 昇², 李 杨¹

(1. 安徽大学 电子信息工程学院, 安徽 合肥 230061; 2. 合肥师范学院 计算机系, 安徽 合肥 230601)

摘 要: 为了在理想的光频范围内扩展硅太阳能电池的低反射特性, 设计了一种由球型微纳米颗粒周期排列构成的光学微结构。利用球型微纳米颗粒结构表面良好的抗反射特性, 扩展硅基太阳能电池的超低反射特性。首先采用 Mie 散射理论研究了单个球型硅颗粒的散射特性; 进而使用 MEEP 仿真软件通过控制变量法分析了多个颗粒构成的周期性二维光学微结构的光反射特性, 分析了球型微纳米颗粒的周期数、半径、间距对反射率的影响。结果表明: 合理选择球形颗粒的半径、间距以及周期数构成合适的周期性二维光学微结构, 可以在理想的光频范围内获得超低反射特性。

关键词: 微纳米颗粒; 硅基太阳能电池; Mie 散射理论; 控制变量法; 超低反射

中图分类号: TN01 **文献标志码:** A **DOI:** 10.3788/IRLA201645.0116001

Reduction of reflected light from silicon solar cells through spherical optical micro/nano-structure

Liao Tongqing¹, Wei Xiaolong¹, Wu Sheng², Li Yang¹

(1. School of Electronics and Information Engineering, Anhui University, Hefei 230061, China;

2. Department of Computer Science and Technology, Hefei Normal University, Hefei 230601, China)

Abstract: In order to expand the low reflective properties of silicon solar cells in a perfect frequency range, a kind of optical microstructures composed of period arranged spherical silica particle was designed. The excellent anti-reflective property of optical micro/nano-structure was used to expand the ultra-low reflective property of silicon solar cells. First, the scattering property of a single spherical silica particle was studied using Mie scattering theory. Then, the reflective property of periodic two-dimensional optical micro-structures composed of multiple particles was analyzed by simulation software "MEEP". The results of the simulation demonstrate that when the radius, spacing and periodic number of spherical particles are reasonably selected, the ultra-low reflection will occur in a perfect frequency range.

Key words: micro/nano-particle; silicon solar cells; Mie scattering theory; method of controlling variables; ultra-low reflection

收稿日期: 2015-05-29; 修订日期: 2015-06-30

基金项目: 高等学校博士学科点专项科研基金(20123401120008); 安徽省高等学校自然科学研究重大项目(KJ2015ZD04)

作者简介: 廖同庆(1976-), 男, 教授, 博士, 主要从事现代光通信的研究。Email: t.liao@ahu.edu.cn

0 引言

硅基太阳能电池利用半导体材料的光伏效应将光能转换为电能。长期以来,提高太阳能电池光电转换效率一直是人们努力解决的问题,而影响太阳能电池转换效率的一个重要因素是太阳能电池上表面入射光的反射损耗^[1]。近些年来,为了最大限度地降低光反射损耗,如多层膜、衍射光栅以及表面织构结构等途径被人们用来试图降低反射、增加光吸收效率,以期提高光转换效率^[2]。其中表面织构结构不仅克服了薄膜的粘附性、热膨胀失配等缺陷,而且以其亚波长结构的抗反射特性受到广泛的关注。

目前,对于亚波长结构的分析方法有许多种,但没有任何一种方法对所有类型的微结构具有通用性。通常根据微结构尺寸大小和材料来选择不同的分析方法。如 D.H.Raguin, Sahoo^[3-4]等运用等效介质理论和严格耦合波理论对微结构进行研究,发现二维光学微结构比一维光学微结构具有更好的抗反射特性,并且在可见光波段周期性二维梯度截面(如半球形、金字塔和锥型)结构与周期性二维等截面(如矩形、方柱形和圆柱形)结构相比较,后者的抗反射性能更佳;而 Ting^[5]等运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的抗反射特性。虽然相关的研究分析和计算方法不同,但是结果均表明二维光学微结构表面具有很好的抗反射特性。

文中采用 Mie 散射理论,在于其适合研究任何尺寸大小和材料的颗粒。通过计算分析可知,Mie 散射对颗粒极限情况的计算结果与瑞利散射和夫琅禾费衍射理论基本一致,但是瑞利散射和夫琅禾费衍射理论不能用于颗粒粒径与波长相近的散射计算。因此文中首先使用 Mie 散射理论分析单个球形硅颗粒的散射特性,进而使用 MEEP 仿真软件对二维微结构表面的结构参量与反射特性的关系进行仿真研究,从而为二维光学微结构表面的设计和制造提供理论指导。

1 Mie 散射理论

1.1 理论基础

对于规则的球形散射体,在入射到散射体上的电磁场的波长与散射体的线度可比拟时,散射体对

电磁场的散射作用可以精确地用 Mie 散射理论处理。根据 Mie 散射理论,球形颗粒对平面线极化光的消光作用由散射和吸收两部分组成,并且从入射光方向来看,散射光又有前向散射和后向散射之分。它们可分别表示如下:

$$R_{\text{ext}} = \frac{2}{\alpha^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \text{Re}(a_n + b_n) \quad (1)$$

$$R_{\text{sca}} = \frac{2}{\alpha^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \text{Re}(|a_n|^2 + |b_n|^2) \quad (2)$$

$$R_{\text{abs}} = R_{\text{ext}} - R_{\text{sca}} \quad (3)$$

$$R_{\text{back}} = \frac{1}{\alpha^2} \left| \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (-1)^n \text{Re}(a_n + b_n) \right|^2 \quad (4)$$

$$R_{\text{forward}} = R_{\text{sca}} - R_{\text{back}} \quad (5)$$

式中: R_{ext} 、 R_{sca} 、 R_{abs} 分别为消光系数、散射系数、吸收系数, R_{forward} 、 R_{back} 分别为前向散射和后向散射系数。 a_n 和 b_n 为 Mie 散射系数,表达式分别为:

$$a_n = \frac{\psi_n(\alpha) \psi_n'(m\alpha) - m \psi_n'(\alpha) \psi_n(m\alpha)}{\xi_n(\alpha) \psi_n'(m\alpha) - m \xi_n'(\alpha) \psi_n(m\alpha)} \quad (6)$$

$$b_n = \frac{m \psi_n(\alpha) \psi_n'(m\alpha) - \psi_n'(\alpha) \psi_n(m\alpha)}{m \xi_n(\alpha) \psi_n'(m\alpha) - \xi_n'(\alpha) \psi_n(m\alpha)} \quad (7)$$

式中: m 为散射颗粒与周围介质的相对折射率。对于非吸收性颗粒 m 为实数;对于导体或吸收性颗粒 m 为复数,其虚部是颗粒对光吸收的量化。 $\alpha = 2\pi a/\lambda$ 为颗粒无量纲尺度参数, a 为颗粒的半径。 $\psi_n(z)$ 和 $\xi_n(z)$ 函数的表达式分别为:

$$\psi_n(z) = \sqrt{\frac{\pi z}{2}} J_n(z) \quad (8)$$

$$\xi_n(z) = \sqrt{\frac{\pi z}{2}} H_n(z) \quad (9)$$

式中: z 表示 α 或 $m\alpha$; $J_n(z)$ 和 $H_n(z)$ 分别表示第一类 Bessel 函数和第一类 Hankel 函数。

1.2 数值分析

一般来说进入单晶硅的可利用光子波段为 380~1100 nm,根据公式(1)~(9)当硅颗粒半径 $a = 180$ nm 时,利用国际公认的标准计算软件 MATLAB 对单个球形硅颗粒的散射特性进行数值计算。如图1所示,在单晶硅可利用的光子波段内,消光作用主要取决于光的散射,吸收系数几乎为零。这是由于颗粒与周围介质的相对折射率为实数 $m = 3.42$ 时,颗粒对入射光无吸收作用。同时在颗粒半径确定的情况下,图中散射系数曲线随着入射波长的变化而变化,并且曲线极峰的出现与参考文献[6]介绍的共振现象相

符,这是颗粒电多极子和磁多极子耦合叠加的结果。

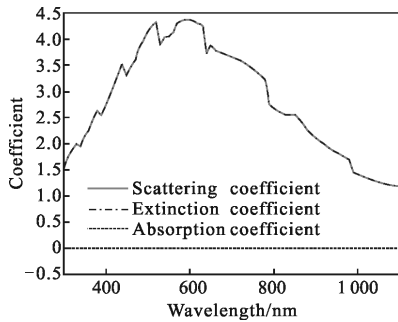


图 1 真空中半径为 180 nm 硅颗粒的光学特性曲线

Fig.1 Optical characteristic curves of silicon particle with a radius of 180 nm in vacuum

由图 2、图 3 可知,散射系数不仅与入射光的波长有关,而且与颗粒的半径相关。随着颗粒半径的增大,散射特性曲线极峰向长波长方向移动。该现象与参考文献[7]采用等离子体理论分析散射极峰右移现象吻合。即随着颗粒半径的增大,多极子振荡的弛豫时间变长,导致振动频率变小,因此曲线极峰发生了右移^[7]。

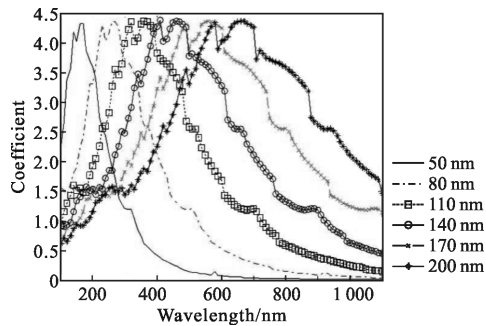


图 2 真空中不同半径的硅颗粒的散射特性曲线

Fig.2 Scattering characteristic curves of silicon particle with different radius in vacuum

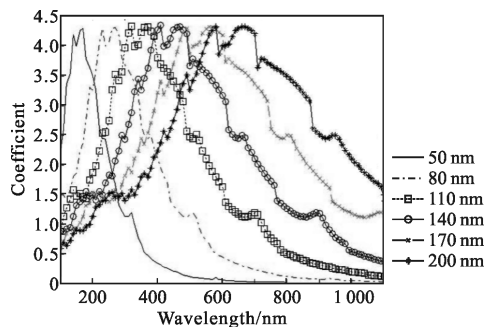


图 3 真空中不同半径的硅颗粒的前向散射特性曲线

Fig.3 Forward scattering characteristic curves of silicon particle with different radius in vacuum

由图 3、图 4 可知,颗粒的前向散射占优势,且当颗粒半径大于 100 nm 时,散射特性曲线高极峰位于较长的光子波段。而高极峰对增强透射起决定作用,因而选择半径大于 100 nm 的硅微粒可以有效减小反射光。

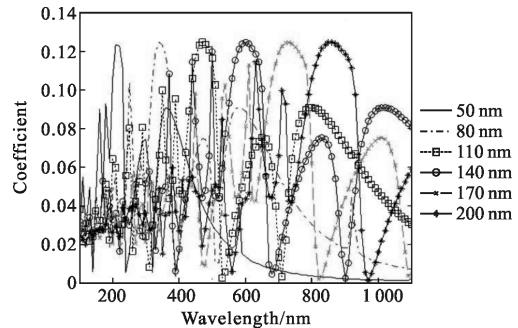


图 4 真空中不同半径的硅颗粒的后向散射特性曲线

Fig.4 Back scattering characteristic curves of silicon particle with different radius in vacuum

2 周期性二维光学微结构的光反射特性

用 Mie 散射理论分析多个颗粒的散射时计算较为复杂,至今还没有出现公认的具有普适性的计算公式。在上述分析单个球形颗粒散射特性的基础上,利用 MEEP 软件模拟仿真周期性二维光学微结构的光反射特性。

MEEP 是一款由麻省理工学院开发的基于时域有限差分法的电磁系统仿真软件,而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,它能够对复杂的结构进行精确的模拟计算^[8]。以下利用 MEEP 软件以高斯源作为仿真的激励源,模拟电磁波垂直入射到二维光学微结构上的反射率,同时为方便起见,模拟计算均采用 TE 波进行分析。

2.1 模型的建立

利用 MEEP 软件建立由球形颗粒构成的周期性二维光学微结构模型,该模型通过多个颗粒之间的相干散射减小光的反射,基本模型如图 5 所示。由图可知,周期性球颗粒的二维光学微结构表面包含周期数、颗粒半径以及颗粒间距三个基本结构参数。该图中周期数 $N=4$,颗粒半径 $a=300$ nm,间距 $D=400$ nm。通过对该模型建立最优化的结构参数达到周期性二维光学微结构超低仿真反射值。



图 5 光学微结构模型的横截面

Fig.5 Cross sectional of the optical micro-structures model

2.2 不同周期数下的反射特性

为讨论硅颗粒周期数对表面反射特性的影响,根据 1.2 节的分析结论选取颗粒半径 $a=300\text{ nm}$ 、颗粒间距 $D=50\text{ nm}$ 的周期性二维光学微结构。周期数分别为 1、11、15、21、31(表面覆盖面积分别为 $0.04\text{ }\mu\text{m}^2$ 、 $7.29\text{ }\mu\text{m}^2$ 、 $13.69\text{ }\mu\text{m}^2$ 、 $27.04\text{ }\mu\text{m}^2$ 、 $59.29\text{ }\mu\text{m}^2$) 时,其表面反射率曲线如图 6 所示。

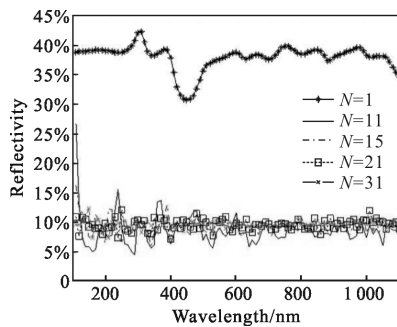


图 6 不同周期数下光学微结构表面的反射率曲线

Fig.6 Reflective curves of optical micro-structure with different periodic numbers

由图 6 可知,随着颗粒周期数的增加,反射率曲线的波动幅度逐渐减小。同时相对于单个硅颗粒,反射率显著降低,而且当颗粒周期数达到一定值时,反射率曲线在 10% 左右浮动。根据参考文献[9],单晶硅太阳能电池作为硅太阳能电池中效率最高且工艺技术最成熟的太阳能电池,其表面的反射率约为 30%,而采用表面织构技术在硅基表面形成一定面积的周期性的或随机性几何结构的太阳能电池,可将反射率降到 20%,如若再有减反射膜,反射率能降到 10%。由此可见,该光学微结构在理想的光频范围内具有超低反射特性。

此外,颗粒周期数对反射特性的影响程度只是在周期数为较小值时表现明显。这与散射现象的物

理机理有关:物质在入射光的作用下,原子发生极化并以与入射光相同的频率做强迫振动,形成振动偶极子,各振动偶极子发生的次波是相干的,这里由多个散射颗粒组成的二维光学微结构相当于一个 Mie 谐振器^[10]。

2.3 不同半径下的反射特性

选取四组半径大小不同的二维光学微结构,分别为 100 nm、150 nm、200 nm、250 nm,其中颗粒间距 $D=50\text{ nm}$,周期数 $N=15$,其表面反射率曲线如图 7 所示。

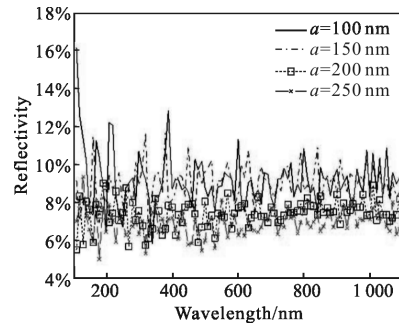


图 7 不同半径下光学微结构表面的反射率曲线

Fig.7 Reflective curves of optical micro-structure with different radius

由图 7 可知,在理想的光频范围内该二维光学微结构显示出亚波长微纳米结构表面优良的抗反射特性,其反射率远低于 20%。虽然四组半径大小不同的颗粒表现出不同的抗反射性能,但随着半径的增大,反射率曲线的波动幅度也逐渐减小,达到一定值时曲线将逐渐下移至 7% 左右浮动。这是由于随着颗粒半径的增大,二维周期性光学微结构的占空比趋于 1,二维截面结构将转变为无表面结构的平面。由等效介质薄膜理论可知,在材料折射率确定的情况下,单层膜的等效折射率只与占空比有关。

2.4 不同间距下的反射特性

由 2.3 节分析可知,当光学微结构表面的占空比趋于 1,即颗粒直径远大于间距时,反射率曲线的波动幅度逐渐减小,且曲线最终趋于一个稳定值。如图 8 所示,选取颗粒半径 $a=100\text{ nm}$,周期数 $N=15$,间距分别为 50 nm、200 nm、400 nm、600 nm,讨论随着颗粒间距的逐渐增大,反射率曲线的变化趋势。

由图 8 可知,随着颗粒间距的增大,反射率曲线不断上移。尤其当颗粒间距等于直径的 3 倍时,反射率曲线与图 6 中单个颗粒的反射率曲线相似,表现出

散射的不相关性。根据参考文献[11],颗粒相距很近时就要考虑颗粒之间的相互影响,这种散射叫相关性散射,它在数学上处理异常复杂。参考文献中还指出满足不相关散射的条件是微粒间距至少大于其直径的 3 倍。因此图 6 的仿真结果与参考文献[11]完全相同。

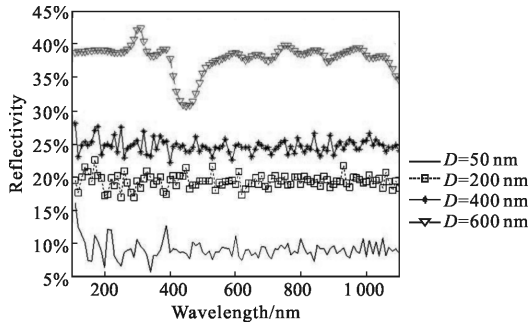


图 8 不同间距下光学微结构表面的反射率曲线

Fig.8 Reflective curves of optical micro-structure with different spacings

3 结 论

文中首先采用 Mie 散射理论研究了单个球形硅颗粒的散射特性,结果表明颗粒半径大于 100 nm 时具有减反射作用。在上述基础上使用 MEEP 软件仿真研究了颗粒半径、间距以及周期数对周期性二维光学微结构反射率的影响。结果表明:(1) 颗粒周期数对反射特性的影响程度只是在周期数为较小值时表现明显;(2) 随着半径的增大,反射率曲线的波动幅度也逐渐减小,达到一定值时曲线将逐渐下移至 7%左右浮动;(3) 随着颗粒间距的增大,反射率曲线不断上移,尤其当颗粒间距等于直径的 3 倍时,反射率曲线类似于单个颗粒的反射率曲线,表现出散射的不相关性。

因而,增加颗粒周期数、降低颗粒间距与半径的比值,可以使周期性二维光学微结构在理想的光频范围内具有超低反射特性。

参 考 文 献:

[1] Zhou Tao, Lu Xiaodong, Zhang Ming, et al. Upper surface anti-reflection coating on crystalline silicon solar cell [J]. *Laser and Optoelectronics Progress*, 2014, 51 (3): 103101. (in Chinese)
周涛, 陆晓东, 张明, 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(3): 103101.
[2] Wang Xiang, Yu Yanqing, Zhu Jiaru. Simulation and research on reflection properties of two-dimension micro/nano structure surface by FDTD Method [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2012, 41(2): 159-164. (in Chinese)
王翔, 余彦清, 褚家如. 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[J]. *光子学报*, 2012, 41(2): 159-164.
[3] Raguin D H, Morris G M. Antireflection structured surfaces for the infrared spectral region [J]. *Appl Opt*, 1993, 32(7): 1154-1167.
[4] Sahoo K C, Li Yiming, 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.
[5] Ting C J, Chen C F, Chou C P. Antireflection sub-wavelength structures analyzed by using the finite difference time domain method [J]. *Optic*, 2009, 120(16): 814-817.
[6] Born M, Wolf E. Principles of Optics [M]. Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2006: 634-660. (in Chinese)
波恩, 沃耳夫. 光学原理 [M]. 北京: 电子工业出版社, 2006: 634-660.
[7] Han Tao, Meng Fanying, Zhang Sun, et al. Theoretical investigation of anti-reflective properties of Ag nano-particles [J]. *Acta Physica Sinica*, 2011, 60(2): 027303. (in Chinese)
韩涛, 孟凡英, 张孙, 等. 银纳米颗粒减反射特性的研究 [J]. *物理学报*, 2011, 60(2): 027303.
[8] Liao Tongqing, Peng Lulu, Xiao Guangdong, et al. Reduce reflected light from silicon solar cells based on optical microstructure[J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2015, 44 (1): 201-204. (in Chinese)
廖同庆, 彭露露, 肖广东, 等. 基于周期性二维光学微结构减小硅太阳能电池光的反射[J]. *红外与激光工程*, 2015, 44(1): 201-204.
[9] Li Huaihui, Wang Xiaoping, Wang Lijun, et al. Progress of silicon solar cells[J]. *Materials Review*, 2011, 32(19): 146. (in Chinese)
李怀辉, 王小平, 王丽军, 等. 硅半导体太阳能电池进展 [J]. *材料导报*, 2011(19): 146.
[10] Spinelli P, Verschuuren M A, Polman A. Broadband omnidirectional antireflection coating based on sub wavelength surface Mie resonators [J]. *Nature Communication*, 2012, 692: ncomms1691.
[11] Kerker M. The Scattering of Light and Other Electromagnetic Radiation[M]. New York: Academic Press, 1969: 125-132.