

色散效应对钝化硅太阳能电池减反射膜系设计的影响

王安祥¹, 张晓军¹, 李继军²

(1. 西安工程大学 理学院, 陕西 西安 710048;

2. 内蒙古工业大学 理学院, 内蒙古 呼和浩特 010051)

摘要: 在考虑折射率色散效应基础上, 以加权平均反射率作为评价函数, 通过智能优化算法对空间硅太阳能电池减反射膜进行优化设计, 得到了最佳的膜厚参数, 并与不考虑色散下设计的减反射膜进行了比较。对 $\text{MgF}_2/\text{TiO}_2$, $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$ 双层减反射膜, 与不考虑色散情形相比, 考虑色散下优化后的最小加权平均反射率分别减小了 36.6% 和 37.6%; 对具有厚度为 15 nm 的 SiO_2 钝化层的硅太阳能电池的 $\text{MgF}_2/\text{TiO}_2$, $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$ 减反射膜重新优化设计, 与不考虑色散情形相比, 考虑色散下优化后的最小加权平均反射率分别减小了 43.9% 和 33.7%; 对具有不同厚度钝化层的空间硅太阳能电池, 在考虑色散下进行了减反射膜的优化设计。结果发现, 随着钝化层厚度的增加, 所得减反射膜的最小加权平均反射率也随之增大, 减反射效果越来越弱。最后, 在考虑与未考虑色散情形下, 将钝化层膜厚也作为反演参量后重新设计。结果表明: 在色散情形下所设计的减反射膜更佳, 对于 $\text{MgF}_2/\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ (钝化层) 膜系, 最佳膜厚参量为 $d_1(\text{MgF}_2)=97.6$ nm, $d_2(\text{TiO}_2)=40.2$ nm, $d_3(\text{SiO}_2)=4.9$ nm; 对于 $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ (钝化层), 最佳膜厚参量为 $d_1(\text{SiO}_2)=85.1$ nm, $d_2(\text{TiO}_2)=43.4$ nm, $d_3(\text{SiO}_2)=1.8$ nm。

关键词: 色散效应; 加权平均反射率; 减反射膜; 硅太阳能电池; 智能优化算法

中图分类号: TN304 **文献标志码:** A **DOI:** 10.3788/IRLA201847.0621003

Dispersion effect on optimized design of anti-reflection coatings for passivated silicon solar cells dispersion

Wang Anxiang¹, Zhang Xiaojun¹, Li Jijun²

(1. School of Science, Xi'an Polytechnic University, Xi'an 710048, China;

2. School of Science, Inner Mongolia University of Technology, Hohhot 010051, China)

Abstract: Based on the refractive index dispersion effect, the weighted average reflectivity was used as evaluation function, and the best film thickness parameters of the anti-reflection coatings for the space silicon solar cell was obtained by the intelligent optimization algorithm. The optimization results were compared with that of the anti-reflection coatings designed without considering the dispersion. It displayed that after optimizing, the minimal weighted average reflectivity of the $\text{MgF}_2/\text{TiO}_2$ and $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$ anti-reflection coatings were reduced by 36.6% and 37.6% under considering the dispersion effect than that without considering dispersion effect. And then the $\text{MgF}_2/\text{TiO}_2$ and $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$ anti-reflection coatings were deposited on the silicon solar cells with a thickness of 15 nm SiO_2 passivation layer and

收稿日期: 2018-01-10; 修订日期: 2018-02-20

基金项目: 国家自然科学基金(11562016); 陕西省自然科学基金(2016JM1018); 陕西省教育厅科研项目(16JK1327)

作者简介: 王安祥(1974-), 男, 副教授, 硕士, 主要从事目标光散射特性和颜色光学方面的研究。Email: waxiang0921@126.com

optimized again. Comparing without considering dispersion effect, the minimal weighted average reflectivity in the case of dispersion was reduced by 43.9% and 33.7% for the $\text{MgF}_2/\text{TiO}_2$ and $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$ coatings with passivation layer, respectively. The optimal design of the anti-reflection coatings were carried out for the space silicon solar cells with different thickness passivation layer. It was found that the minimum weighted average reflectivity of the anti-reflection coatings increased with the increase of the thickness of the passivation layer, meaning that the anti-reflection effect got weaker and weaker. Finally, the anti-reflection coatings were redesigned when the thickness of the passivation layer was also considered as an inversion parameter considering the refractive-index dispersion effect or not. The results show that the anti-reflection film is more optimization by considering the dispersion. For the $\text{MgF}_2/\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ (passivation layer) film system, the optimal film thickness parameters are $d_1(\text{MgF}_2)=97.6$ nm, $d_2(\text{TiO}_2)=40.2$ nm, $d_3(\text{SiO}_2)=4.9$ nm. For the $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ (passivation layer) film system, the optimal film thickness parameters are $d_1(\text{SiO}_2)=85.1$ nm, $d_2(\text{TiO}_2)=43.4$ nm, $d_3(\text{SiO}_2)=1.8$ nm.

Key words: dispersion effect; weighted average reflectivity; anti-reflection coating; silicon solar cell; intelligent optimization algorithm

0 引言

硅太阳能电池是一种把光能转换为电能的半导体光电器件,为了提高硅太阳能电池的光电转换效率,在其表面镀减反射膜成为解决这一问题最主要的方法之一^[1],设计减反射膜的关键问题是确定所选定作为减反射膜材料的膜层厚度,并且结合硅材料的光谱响应和 AM0 太阳光谱特性,使电池在所工作的光谱区域内获得最小的加权平均反射率。

关于太阳能电池减反射膜系设计研究已有很多报道^[2-4],但均没有考虑材料的色散效应,在宽光谱范围内将材料折射率的取值当作固定常量,由于大部分减反射膜材料的折射率随波长有较大的变化,特别是在 300~600 nm 波长范围内变化更为显著,而且膜层在整个光谱范围内的色散差别不能被忽略,因此在膜系设计中考虑色散因素极有必要。白一鸣等人研究了色散效应对晶体硅太阳能电池反射率的影响^[5],将考虑与未考虑色散情形下硅太阳能电池减反射膜的理论计算值分别与实验数据^[6-7]进行对比,得出色散情形下的反射率与实验数据更相符,而未考虑色散情形与实验数据相差较大的结论,但没有进一步开展在膜系优化设计中将色散效应因素加以考虑的研究。

文中将在考虑晶体硅和减反射膜材料的折射率色散效应基础上,通过智能优化算法设计包含 SiO_2 钝化层的 $\text{MgF}_2/\text{TiO}_2$ 、 $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$ 双层减反射膜,为空间硅太阳能电池减反射膜的优化设计与制备提供理论上指导。

1 晶体硅及减反射材料的折射率色散

在进行考虑材料折射率色散效应的减反射膜系设计优化中,首先必须确定晶体硅和减反射膜材料的色散关系,在确定晶体硅的色散关系中,若采用 Wemple 提出的折射率单振子理论模型^[8],得到晶体硅在 350~1 100 nm 的折射率随波长增大而单调减小,而实验测量数据表明在 350~370 nm 波长区域折射率随波长增大而增大,在 370~828.8 nm 波段折射率随波长增大而减小^[9],由于参考文献[9-10]所提供晶体硅的折射率实验数据的波长范围有限,不能得到在 350~1 100 nm 波段完整的折射率色散数据。因此,这里晶体硅在 349.2~828.8 nm 波段的折射率采用参考文献[9]的数据,而在 830~1 100 nm 波段的折射率则通过 Wemple 的折射率单振子理论模型计算获取,得到硅在 350~1 100 nm 波段的折射率色散数据。晶体硅的折射率色散关系如图 1 所示,由图 1 可知,晶体硅在 350~370 nm 波长区域折射率随波长增大而增大,在 370~1 100 nm 波段

折射率随波长增大而减小。根据文献所给出的在光谱区域(0.213 86~1.083 0)修正的 Sellmeier 方程^[11], 计算出其在光谱区域的折射率; SiO₂ 和 TiO₂ 的折射率色散关系也是通过 Wemple 的折射率单振子理论模型和文献提供的材料参数得到, 图 2 为 MgF₂、SiO₂ 及 TiO₂ 的折射率色散关系曲线, 由图 2 可知, 上述几种减反射膜材料在 350~1 100 nm 波长区域折射率随波长增大而减小。

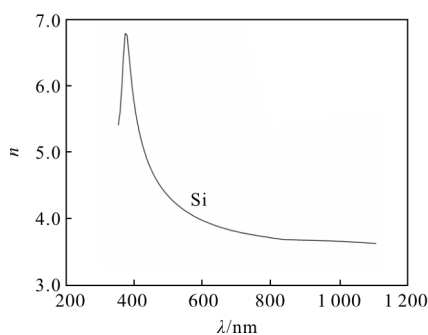


图 1 晶体硅的折射率色散关系

Fig.1 Refractive-index dispersion relation of crystalline silicon

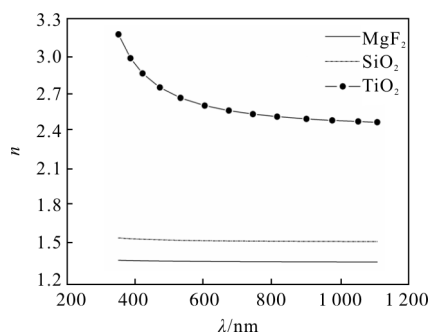


图 2 三种减反射膜材料的折射率色散关系

Fig.2 Refractive-index dispersion relation of three anti-reflection coatings

2 加权平均反射率的计算与智能优化算法

光学干涉矩阵法是研究多层薄膜理论最广泛采用的方法^[4], 对于膜系基本研究和数值计算, 均具有快捷和普遍的优点。已知 k 层膜系的各层膜材料的折射率和厚度, 分别为 $n_j, d_j (j=1, 2, \dots, k)$, 入射介质和基底材料折射率分别为 n_0, n_{k+1} 。设光线入射角为 θ_0 , 光线在各膜层和基底的折射角 θ_j 根据菲涅耳定律获得:

$$n_0 \sin \theta_0 = n_j \sin \theta_j \quad (j=1, 2, \dots, k, k+1) \quad (1)$$

第 j 层的干涉特征矩阵为:

$$M_j = \begin{bmatrix} \cos \delta_j & i \sin \delta_j / \eta_j \\ i \eta_j \sin \delta_j & \cos \delta_j \end{bmatrix} \quad (2)$$

式中: δ_j 为第 j 层的相位厚度, $\delta_j = \frac{2\pi}{\lambda} n_j d_j \cos \theta_j (j=1, 2, \dots, k)$; η_j 为有效折射率。即:

$$\eta_j = \begin{cases} n_j / \cos \theta_j & p \text{ 分量} \\ n_j \cos \theta_j & s \text{ 分量} \end{cases} \quad (3)$$

膜系的特征矩阵为:

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \left\{ \prod_{j=1}^k \begin{bmatrix} \cos \delta_j & i \sin \delta_j / \eta_j \\ i \eta_j \sin \delta_j & \cos \delta_j \end{bmatrix} \right\} \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_{k+1} \end{bmatrix} \quad (4)$$

多层膜和基片的组合导纳为 $Y=C/B$ 。

从而可计算出光学薄膜的反射率为:

$$R = \left| \frac{1-Y/\eta_0}{1+Y/\eta_0} \right|^2 \quad (5)$$

因此, 只要已知多层膜系中入射介质、各层膜及基底的折射率, 各层膜的几何厚度, 光波入射角和波长范围, 就可计算出该膜系在该波长区域的反射率。在减反射膜膜系设计中, 考虑到 AM0 太阳光谱功率分布与硅的光谱响应曲线不一致, 用它们的乘积作为权重因子, 得到在整个光谱范围内的加权平均反射率为:

$$R_w = \frac{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} S(\lambda) Q(\lambda) R(\lambda) d\lambda}{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} S(\lambda) Q(\lambda) d\lambda} \quad (6)$$

式中: $S(\lambda)$ 为 AM0 太阳光谱功率分布; $Q(\lambda)$ 为硅的光谱响应; $R(\lambda)$ 为减反射膜在对应波长点的反射率; λ_1 和 λ_2 为光谱波长下限和上限, $\lambda_1=350 \text{ nm}$, $\lambda_2=1 100 \text{ nm}$ 。这里用 5 960 K 黑体辐射光谱模拟 AM0 太阳光谱, 图 3、4 分别为晶体硅的内部量子效率和 AM0 太阳光谱的相对功率分布曲线。

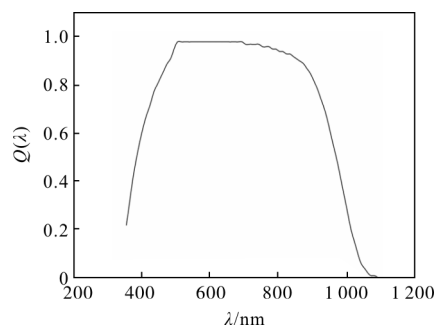


图 3 晶体硅的光谱响应

Fig.3 Spectral response of crystalline silicon

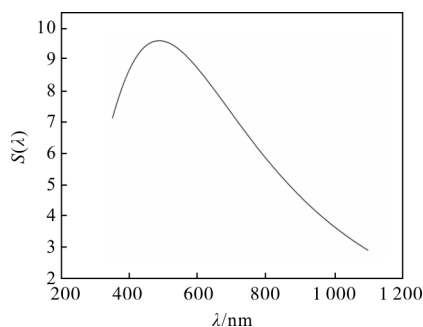


图 4 AM0 太阳光谱的相对功率分布

Fig.4 Relative power distribution of the AM0 solar spectrum

在空间硅太阳能电池表面减反射膜的设计中,所采用的智能优化算法为遗传模拟退火算法,它是将遗传算法与模拟退火算法相结合而构成的一种性能优良的搜索寻优算法,结合了遗传算法优良的全局搜索特性和退火算法极强的局部搜索特性,由于遗传模拟退火算法的原理和具体实现步骤在许多文献中已有详细描述^[11-12],就不再重复说明。这里考虑色散与未考虑色散情形下减反射膜系设计中所使用算法的参数设置完全相同,参数如下:编码形式采用二进制编码,采用单点交叉,群体大小 $M=100$; 最大遗传代数 $\text{maxgen}=200$; 交叉概率 $p_c=0.7$; 变异概率 $p_m=0.01$ 。温度参量 $T_0=200$, 终止温度 $T=1$, 温度衰减参数 $\alpha=0.85$, 马可夫链长度与种群数相同,也为 $k=100$ 。

3 考虑折射率色散效应下的减反射膜设计与分析

下面将在考虑折射率色散效应情形下,利用智能优化算法设计空间硅太阳能电池表面减反射膜,并与不考虑色散情形下的结果进行比较。由于考虑折射率色散效应所得的反射率数值计算结果与实际情况更接近,因此,在定量评定考虑与未考虑色散情形下所设计的减反射膜优劣时,将不考虑色散情形下通过智能算法反演所得膜厚参量,代入考虑色散下减反射膜加权平均反射率计算公式中得到的结果,与考虑色散情形下所得减反射膜的加权平均反射率进行比较。

(1) 双层减反射膜

在考虑折射率色散情形下,分别利用智能优化算法反演出 $\text{MgF}_2/\text{TiO}_2$, $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$ 双层减反射膜

的最佳膜层厚度。对于 $\text{MgF}_2/\text{TiO}_2$ 双层膜,膜厚 $d_1(\text{MgF}_2)=97.1 \text{ nm}$, $d_2(\text{TiO}_2)=47.2 \text{ nm}$ 时,有最小加权平均反射率 $R_{\text{wmin}}=2.63\%$; 对于 $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$ 双层膜,膜厚 $d_1(\text{SiO}_2)=85.1 \text{ nm}$, $d_2(\text{TiO}_2)=45.8 \text{ nm}$ 时,有最小的加权平均反射率 $R_{\text{wmin}}=2.12\%$ 。而不考虑折射率色散效应情形下, MgF_2 、 TiO_2 及 SiO_2 的折射率分别为 $n(\text{MgF}_2)=1.38$ 、 $n(\text{TiO}_2)=2.3$ 及 $n(\text{SiO}_2)=1.46$, 基底硅的折射率 $n(\text{Si})=3.9$, 同样通过智能优化算法反演出上述双层膜的最佳膜层厚度,对于 $\text{MgF}_2/\text{TiO}_2$ 双层膜,膜厚 $d_1(\text{MgF}_2)=96.2 \text{ nm}$, $d_2(\text{TiO}_2)=59.1 \text{ nm}$ 时,有最小的加权平均反射率 $R'_{\text{wmin}}=1.98\%$; 对于 $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$ 双层膜,膜厚 $d_1(\text{SiO}_2)=88.5 \text{ nm}$, $d_2(\text{TiO}_2)=57.6 \text{ nm}$ 时,有最小的加权平均反射率 $R'_{\text{wmin}}=2.55\%$, 这里说明一下, R'_{wmin} 为不考虑色散效应下的加权平均反射率,将上述不考虑折射率色散效应下的膜厚反演参数代入考虑折射率色散下的加权平均反射率计算公式,得到 $\text{MgF}_2/\text{TiO}_2$ 和 $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$ 双层膜的加权平均反射率分别为 $R_{\text{wmin}}=4.15\%$ 和 $R_{\text{wmin}}=3.40\%$, 都远大于考虑色散情形下的最小加权平均反射率,表明考虑折射率色散效应后所设计的减反射膜将更佳。由计算可知,与不考虑折射率色散效应相比,考虑色散效应下的 $\text{MgF}_2/\text{TiO}_2$, $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$ 双层减反射膜最小加权平均反射率分别降低了 36.6% 和 37.6% 。图 5、6 分别为考虑色散与否情形下通过智能优化算法参数反演所获得的 $\text{MgF}_2/\text{TiO}_2$ 与 $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$ 减反射膜的反射率,标识“—”曲线是不考虑色散下通过智能优化算法反演所得膜厚参量,代入不考虑色散下减反射膜反射率计算公式中所得结果;曲线“-o-”和曲线“-▲-”分别为考虑和未考虑色散下通过智能优化算法反演所得膜厚参量,均代入考虑色散下减反射膜的反射率计算公式中所得结果。比较曲线可知,对于膜厚确定的减反射膜,考虑与不考虑色散情形下反射率的差别主要在短波区域,在其他波长范围都相差较小,特别是 $\text{MgF}_2/\text{TiO}_2$ 减反射膜在 $700\sim 1100 \text{ nm}$ 波长范围内两种情形的反射率相差极小。从图可知,在短波范围内,考虑色散下通过智能优化算法反演所得减反射膜的反射率明显大于未考虑色散下的结果,而在长波范围内,考虑色散下通过智能优化算法反演所得反射率小于未考虑色散下的结果。

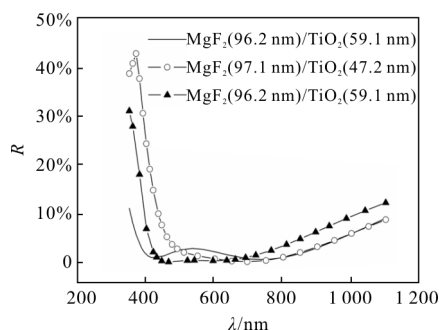


图 5 MgF₂/TiO₂ 双层减反射膜的反射率随波长的变化曲线

Fig.5 Reflectivity curves of MgF₂/TiO₂ double-layer anti-reflective coating with the wavelengths

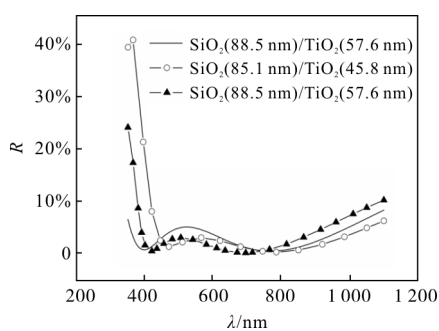


图 6 SiO₂/TiO₂ 双层减反射膜的反射率随波长的变化曲线

Fig.6 Reflectivity curves of SiO₂/TiO₂ double-layer anti-reflective coating with the wavelengths

(2) 钝化层膜厚固定情形下减反射膜的优化

由于太阳能电池要进行表面钝化,上述设计的两层减反射膜实际很难达到期望的减反射效果,下面进行考虑有钝化层时双层减反射膜的优化,并通过智能优化算法对有钝化层电池的减反射膜重新进行优化设计,这里将双层减反射膜看作是三层膜(钝化层为膜系的第三层)进行设计,反演出最佳的膜层厚度,与一般的三层膜设计不同在于钝化层的参数(折射率 n , 膜厚 d)已经确定。若设计中钝化层为 SiO₂, 膜厚为 15 nm, 在考虑色散效应情形下,对于 MgF₂(97.1 nm)/TiO₂(47.2 nm) 双层膜实际上变为 MgF₂(97.1 nm)/TiO₂(47.2 nm)/SiO₂(15 nm) 三层膜,计算此时加权平均反射率 $R_{wmin}=7.99%$,显然减反射效果不太理想,将 MgF₂、TiO₂ 膜层厚度作为反演参量,在考虑折射率色散情形下,通过智能优化算法参数反演得到膜厚 $d_1(\text{MgF}_2)=99.0 \text{ nm}$, $d_2(\text{TiO}_2)=29.0 \text{ nm}$ 时,有最小的加权平均反射率, $R_{wmin}=3.11%$,可见考虑色散效应下通过智能优化算法得到的加权平均反射率降低很多。在不考虑色散

情形下,对于 MgF₂(96.2 nm)/TiO₂(59.1 nm) 双层膜实际上变为 MgF₂(96.2 nm)/TiO₂(59.1 nm)SiO₂(15 nm) 三层膜,将上述膜层参数代入考虑色散效应的加权平均反射率计算公式,得到 $R_{wmin}=12.57%$ 。若将膜层厚度作为反演参量,通过智能优化算法参数反演得到 $d_1(\text{MgF}_2)=97.6 \text{ nm}$, $d_2(\text{TiO}_2)=40.8 \text{ nm}$,将上述膜层参数代入考虑色散效应的加权平均反射率计算公式,得到 $R_{wmin}=5.54%$ 。因此,对具有钝化层且膜厚为 15 nm 的硅太阳电池的 MgF₂/TiO₂、SiO₂/TiO₂ 减反射膜重新优化设计,与不考虑色散情形相比,考虑色散下优化后的最小加权平均反射率分别减小了 43.9% 和 33.7%。图 7 为上述情形下所设计的 MgF₂/TiO₂/SiO₂(15 nm) 减反

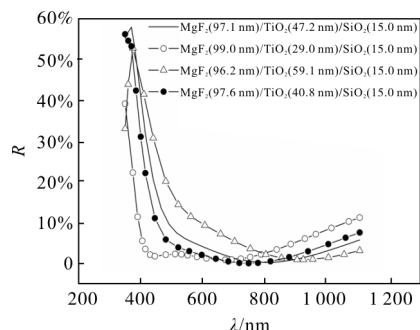


图 7 考虑与未考虑色散情形下 MgF₂/TiO₂/SiO₂(15 nm) 减反射膜的反射率

Fig.7 Reflectivity of MgF₂/TiO₂/SiO₂(15 nm) anti-reflective coatings in the case of considering and without consideration of dispersion

射膜的反射率。可见,加权平均反射率最小所对应的 MgF₂(99.0 nm)/TiO₂(29.0 nm)/SiO₂(15 nm) 减反射膜,在 350~610 nm 波长范围内的反射率最小,而在 790~1100 nm 波长范围内的反射率最大。表 1 和图 8 分别为考虑与未考虑色散情形下 SiO₂/TiO₂/SiO₂(15 nm) 减反射膜的优化结果和相应的反射率,同样得到在考虑折射率色散情形下,将 SiO₂、TiO₂ 膜层厚度作为反演参量所得 SiO₂(85.9 nm)/TiO₂(28.5 nm)/SiO₂(15.0 nm) 减反射膜的加权平均反射率最小,并且该减反射膜在 350~450 nm 波长范围内的反射率在图中四种情形中最小,而在 870~1100 nm 波长范围内的反射率最大。需要说明一下,表 1 中 $R_{wmin}=7.99%$ 为优化前后的膜厚参量均代入考虑色散的加权平均反射率公

式所得结果,下文表 2~4 皆是如此。

表 1 具有 15 nm 厚度 SiO₂ 钝化层的硅太阳能电池的 SiO₂/TiO₂ 减反射膜的优化

Tab.1 Optimization of SiO₂/TiO₂ anti-reflection coating for silicon solar cell with a thickness of 15 nm SiO₂ passivation layer

	Without dispersion	With dispersion
Before optimization	$d_1(\text{SiO}_2)=88.5 \text{ nm}$	$d_1(\text{SiO}_2)=85.1 \text{ nm}$
	$d_2(\text{TiO}_2)=57.6 \text{ nm}$	$d_2(\text{TiO}_2)=45.8 \text{ nm}$
	$d_3(\text{SiO}_2)=15.0 \text{ nm}$	$d_3(\text{SiO}_2)=15.0 \text{ nm}$
	$R_{\text{wmin}}=11.28\%$	$R_{\text{wmin}}=7.59\%$
After optimization	$d_1(\text{SiO}_2)=90.6 \text{ nm}$	$d_1(\text{SiO}_2)=85.9 \text{ nm}$
	$d_2(\text{TiO}_2)=40.0 \text{ nm}$	$d_2(\text{TiO}_2)=28.5 \text{ nm}$
	$d_3(\text{SiO}_2)=15.0 \text{ nm}$	$d_3(\text{SiO}_2)=15.0 \text{ nm}$
	$R_{\text{wmin}}=5.55\%$	$R_{\text{wmin}}=3.68\%$

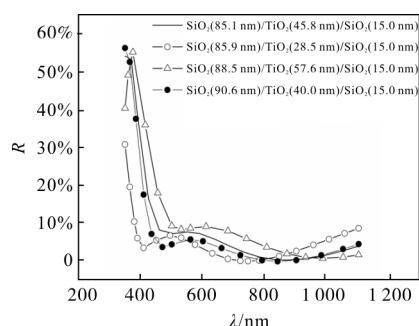


图 8 考虑与未考虑色散情形下 SiO₂/TiO₂/SiO₂(15 nm) 减反射膜的反射率

Fig.8 Reflectivity of SiO₂/TiO₂/SiO₂(15 nm) anti-reflective coatings in the case of considering and without considering dispersion

(3) 钝化层厚度作为反演参量下减反射膜的优化

由于钝化层 SiO₂ 厚度不同,会影响硅太阳能电池的有效减反作用。在考虑色散情形下,钝化层不同厚度时通过智能优化算法所得减反射膜的参量优化结果如表 2 所示,可见钝化层 SiO₂ 厚度越大,所得减反射膜的加权平均反射率也随之增大,减反射效果越来越削弱。

下面将 SiO₂ 钝化层的膜厚作为优化参量,在考虑折射率色散情形下,通过智能算法对多层减反射膜进行优化设计,这里设定膜层几何厚度搜索范围为 5~200 nm,表 3 是考虑折射率色散下钝化层膜厚作为反演参量时减反射膜的优化结果。结果表明,将钝化层厚度作为反演参量所得减反射膜的加

表 2 考虑色散下对具有不同厚度钝化层的空间硅太阳能电池减反射膜的优化结果

Tab.2 Optimization results of anti-reflection coatings for space silicon solar cells with different thickness passivation layers in the case of considering dispersion

Film system	Thickness of passivation layer/nm	Optimization results
MgF ₂ /TiO ₂ /SiO ₂	$d_3(\text{SiO}_2)=10.0$	$d_1(\text{MgF}_2)=98.2 \text{ nm}$ $d_2(\text{TiO}_2)=33.9 \text{ nm}$ $R_{\text{wmin}}=2.66\%$
	$d_3(\text{SiO}_2)=20.0$	$d_1(\text{MgF}_2)=99.8 \text{ nm}$ $d_2(\text{TiO}_2)=25.1 \text{ nm}$ $R_{\text{wmin}}=3.96\%$
	$d_3(\text{SiO}_2)=30.0$	$d_1(\text{MgF}_2)=101.1 \text{ nm}$ $d_2(\text{TiO}_2)=19.4 \text{ nm}$ $R_{\text{wmin}}=6.71\%$
	$d_3(\text{SiO}_2)=40.0$	$d_1(\text{MgF}_2)=46.3 \text{ nm}$ $d_2(\text{TiO}_2)=10.3 \text{ nm}$ $R_{\text{wmin}}=9.72\%$
	$d_3(\text{SiO}_2)=10.0$	$d_1(\text{SiO}_2)=86.2 \text{ nm}$ $d_2(\text{TiO}_2)=33.0 \text{ nm}$ $R_{\text{wmin}}=2.71\%$
	$d_3(\text{SiO}_2)=20.0$	$d_1(\text{SiO}_2)=87.5 \text{ nm}$ $d_2(\text{TiO}_2)=24.6 \text{ nm}$ $R_{\text{wmin}}=5.11\%$
	$d_3(\text{SiO}_2)=30.0$	$d_1(\text{SiO}_2)=48.1 \text{ nm}$ $d_2(\text{TiO}_2)=11.8 \text{ nm}$ $R_{\text{wmin}}=8.21\%$
	$d_3(\text{SiO}_2)=40.0$	$d_1(\text{SiO}_2)=32.9 \text{ nm}$ $d_2(\text{TiO}_2)=8.7 \text{ nm}$ $R_{\text{wmin}}=9.77\%$

表 3 钝化层厚度作为反演参量时减反射膜的优化结果

Tab.3 Optimization results of the anti-reflection coatings when the thickness of the passivation layer is used as an inversion parameter

Film system	Without dispersion	With dispersion
MgF ₂ /TiO ₂ /SiO ₂	$d_1(\text{MgF}_2)=96.4 \text{ nm}$	$d_1(\text{MgF}_2)=97.6 \text{ nm}$
	$d_2(\text{TiO}_2)=52.6 \text{ nm}$	$d_2(\text{TiO}_2)=40.1 \text{ nm}$
	$d_3(\text{SiO}_2)=5.0 \text{ nm}$	$d_3(\text{SiO}_2)=5.0 \text{ nm}$
	$R_{\text{wmin}}=4.39\%$	$R_{\text{wmin}}=2.54\%$
SiO ₂ /TiO ₂ /SiO ₂	$d_1(\text{SiO}_2)=88.7 \text{ nm}$	$d_1(\text{SiO}_2)=85.6 \text{ nm}$
	$d_2(\text{TiO}_2)=51.1 \text{ nm}$	$d_2(\text{TiO}_2)=38.9 \text{ nm}$
	$d_3(\text{SiO}_2)=5.0 \text{ nm}$	$d_3(\text{SiO}_2)=5.0 \text{ nm}$
	$R_{\text{wmin}}=3.69\%$	$R_{\text{wmin}}=2.21\%$

权平均反射率比表 2 中不同钝化层厚度下减反膜优化结果中加权平均反射率要小。从两种膜系的优

化结果来看,考虑折射率色散效应的加权平均反射率小于未考虑折射率色散效应的情形。而且考虑和未考虑色散效应情形下钝化层的优化结果均为膜层厚度搜索范围的下限值。

若将膜层几何厚度搜索范围为 0~200 nm,所得减反射膜的优化结果如表 4 所示,从不考虑折射率色散效应的优化结果来看,所得两种减反射膜的钝化层厚度均为零,最终其他参量优化结果与双层减反射膜的优化结果完全相同。而从考虑折射率色散效应优化结果来看,钝化层作为反演参量所得减反射膜的加权平均反射率要小于钝化层厚度固定情形下的结果。但是所得钝化层 SiO₂ 厚度太小,不仅镀膜工艺实现困难,而且表面钝化作用也减弱。

表 4 钝化层厚度作为反演参量时减反射膜的优化结果

Tab.4 Optimization results of the anti-reflection coatings when the thickness of the passivation layer is used as an inversion parameter

Film system	Without dispersion	With dispersion
MgF ₂ /TiO ₂ /SiO ₂	d ₁ (MgF ₂)=96.2 nm, d ₂ (TiO ₂)=59.1 nm, d ₃ (SiO ₂)=6.3×10 ⁻⁸ nm R _{min} =4.15%	d ₁ (MgF ₂)=97.6 nm, d ₂ (TiO ₂)=40.2 nm, d ₃ (SiO ₂)=4.9 nm R _{min} =2.54%
	d ₁ (SiO ₂)=88.5 nm, d ₂ (TiO ₂)=57.6 nm, d ₃ (SiO ₂)=1.1×10 ⁻⁷ nm R _{min} =3.40%	d ₁ (SiO ₂)=85.1 nm, d ₂ (TiO ₂)=43.4 nm, d ₃ (SiO ₂)=1.8 nm R _{min} =2.10%

图 9、10 分别为考虑色散下五种钝化层不同厚

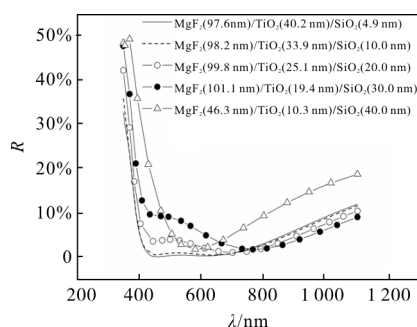


图 9 考虑色散下具有五种厚度钝化层的 MgF₂/TiO₂ 减反射膜优化后反射率随波长变化曲线

Fig.9 Curves of the reflectivity of optimized MgF₂/TiO₂ antireflection coatings with the wavelengths under five thickness passivation layers in the case of considering dispersion

度的 MgF₂/TiO₂、SiO₂/TiO₂ 减反射膜反射率优化曲线,钝化层厚度越小,所得优化减反射膜的反射率在短波区域越小,而在长波区域越大,当钝化层的厚度大于 30 nm 时,减反射膜的减反射效果将会越来越差。

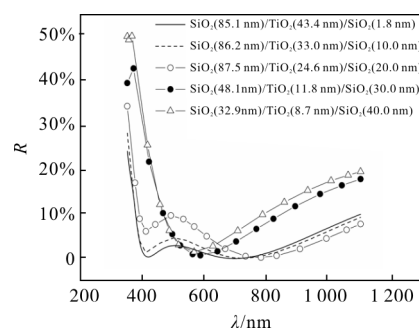


图 10 考虑色散下具有五种厚度钝化层的 SiO₂/TiO₂ 减反射膜优化后反射率随波长变化曲线

Fig.10 Curves of the reflectivity of optimized SiO₂/TiO₂ antireflection coatings with the wavelengths under five thickness passivation layers in the case of considering dispersion

尽管上述研究获得了在考虑色散情形下空间硅太阳能电池减反射膜的最佳膜厚参量,但是在实际镀膜过程中所镀膜厚并不能与计算结果完全相同,图 11、12 分别为 MgF₂(97.6 nm)/TiO₂(40.2 nm)/SiO₂(4.9 nm) 和 SiO₂(85.1 nm)/TiO₂(43.4 nm)/SiO₂(1.8 nm)减反射膜系的加权平均反射率随各层膜厚偏差的变化曲线。从图中可以看到,当各膜层厚度偏离理论设计值时,膜系的加权平均反射率都会明显增加,其中钝化层厚度对膜系的加权平均反射率影响最大,而最上层膜的厚度对加权平均反射率影响最小。以 MgF₂(97.6 nm)/TiO₂(40.2 nm)/SiO₂(4.9 nm)减反射膜为例,其最小加权平均反射

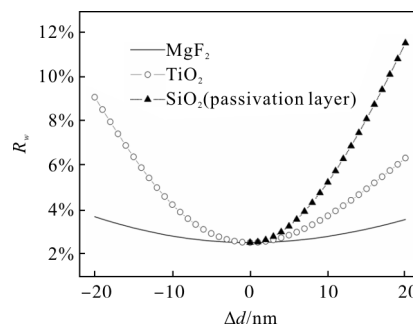


图 11 加权平均反射率随 MgF₂、TiO₂ 和 SiO₂ 钝化层膜厚的变化
Fig.11 Weighted average reflectivity as a function of thickness of MgF₂, TiO₂ and SiO₂ passivation layer

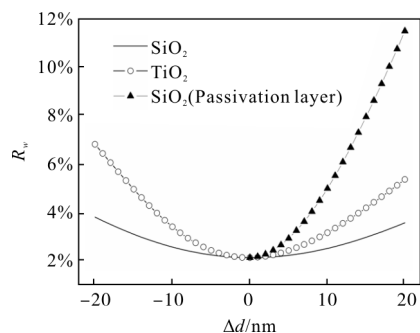


图 12 加权平均反射率随 SiO₂、TiO₂ 和 SiO₂ 钝化层膜厚的变化
Fig.12 Weighted average reflectivity as a function of thickness of SiO₂, TiO₂ and SiO₂ passivation layer

率 $R_{w\min}=2.54$, 当 MgF₂ 厚度加减 2 nm 时, 加权平均反射率 R_w 都增至 2.55%; 当 TiO₂ 厚度加减 2 nm 时, 加权平均反射率 R_w 都增至 2.60%; 当钝化层 SiO₂ 厚度加减 2 nm 时, 加权平均反射率 R_w 也都增至 2.66%。所以如需控制膜系加权平均反射率小于 2.60%, 实际镀膜时, 膜厚精度应控制在 2 nm 以内。

4 结 论

文中在考虑折射率色散效应的基础上, 通过智能优化算法对空间硅太阳能电池减反射膜进行了设计, 得到了加权平均反射率最小时减反射膜的最优化厚度及反射率曲线, 并与未考虑折射率色散效应下所设计的减反射膜系进行了比较, 然后分析在考虑色散情形下, 钝化层不同厚度时通过智能优化算法所得减反射膜的参量优化结果, 最后将 SiO₂ 钝化层膜厚也作为优化参量, 在考虑折射率色散情形下, 通过智能算法对多层减反射膜进行优化设计, 结果表明: 考虑色散下所得到的加权平均反射率要小于未考虑色散下所得到的加权平均反射率, 考虑色散下减反射膜的反射率在短波区域的减反射效果得到很大改善; 随着钝化层厚度的增加, 所得减反射膜的加权平均反射率也随之增大, 减反射效果越来越减弱; 钝化层作为反演参量所得减反射膜的加权平均反射率要小于钝化层膜厚固定时所得减反射膜的加权平均反射率。因此, 考虑折射率色散效应将会有助于设计出更优化的减反射膜, 以便为空间硅太阳能电池减反射膜的制备提供理论上的依据, 更有效地提高太阳能电池的转换效率。

致谢:

感谢上海电力学院太阳能研究所刘永生老师所提供的硅的光谱响应数据。

参考文献:

- [1] Yang Wenhua, Wu Dingxiang, Li Hongbo. Design and numerical analysis of anti-reflection coatings for space high-efficiency Si solar cells [J]. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2004, 25(9): 1118-1122. (in Chinese)
- [2] Gong Chen, Zhang Jingquan, Feng Lianghuan, et al. The optimization of triple layer anti-reflection coatings and its application on solar cells [J]. *Journal of Function Materials*, 2013, 44(4): 603-606. (in Chinese)
- [3] Sun Xipeng, Xiao Zhibin, Du Yongchao. Design of broadband antireflection coating for new gallium arsenide solar cell [J]. *Acta Optica Sinica*, 2016, 36(4): 0431002. (in Chinese)
- [4] 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. (in Chinese)
- [5] Bai Yiming, Chen Nuofu, Peng Changtao, et al. Refractive-index dispersion effect on anti-reflection coatings of crystalline Si solar cells [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2007, 36(7): 1202-1206. (in Chinese)
- [6] Bouhafis D, Moussi A, Chikouche A, et al. Design and simulation of antireflection coating systems for opoelectronic devices: application to silicon solar cells [J]. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 1998, 52: 79-93.
- [7] Cid M, Stem N, Brumetti C, et al. Improvements in antireflection for high-efficiency silicon solar cells [J]. *Surface and Coatings Technology*, 1998, 106: 117-120.
- [8] Wemple S H, Didomenico M. Behavior of the electronic dielectric constant in covalent and ionic materials [J]. *Phys Rev B*, 1971, 3(4): 1338-1351.
- [9] Palik E D. Handbook of Optical Constants of Solids [M]. New York: Academic Press, 1985: 557-561.
- [10] Li Jingzhen. Handbook of Optics [M]. Xi'an: Press of Science in Shanxi, 1986. (in Chinese)
- [11] Wang Anxiang, Zhang Xiaojun, Cao Yunhua. Application of genetic simulated annealing algorithm in parameters retrieval of dispersion equation for glass and crystal [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2015, 44(11): 3197-3203. (in Chinese)
- [12] Wang Anxiang, Feng Jian. Genetic simulated annealing algorithm in the parameter retrieval of light scattering model [J]. *Laser Technology*, 2009, 33(1): 32-35. (in Chinese)