

硅纳米锥阵列结构参数对抗反射性能研究

严鑫¹,黎相孟^{1,2},赵泽鹏¹,刘晨华¹

(1. 中北大学 机械工程学院,山西 太原 030051; 2. 西安交通大学 机械工程学院,陕西 西安 710049)

摘要:为得到太阳能硅基板上不同尺寸纳米锥阵列结构对抗反射性能的影响规律,采用时域有限差分法进行仿真分析。在已完成的3个模型基础上,以 $0.3\ \mu\text{m}\sim 1.2\ \mu\text{m}$ 光源波段内的平均反射率作为目标函数,对硅纳米锥阵列结构的高度、周期以及上、下端直径进行研究分析,得到了硅纳米锥阵列结构参数变化对平均反射率的影响规律。根据影响规律进行参数选择,分别建立了3个优化模型。通过优化后的模型与初始模型的对比可以发现,优化后的模型抗反射性能有较大提升。

关键词:纳米锥形阵列;抗反射;时域有限差分法;平均透射率;参数优化

中图分类号:TM914.4;TB383 **文献标志码:**A **文章编号:**1671-5276(2021)01-0017-04

Antireflection Performance of Silicon Nano Cone Array Structure Parameters

YAN Xin¹, LI Xiangmeng^{1,2}, ZHAO Zepeng¹, LIU Chenhua¹

(1. School of Mechanical Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, China;

2. School of Mechanical Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: In order to obtain the influence of different sizes of nano cone array structure on solar silicon substrate anti reflection performance, the finite difference time domain method was used for simulation analysis. On the basis of three established models, the average reflectivity in the range of $0.3\ \mu\text{m}\sim 1.2\ \mu\text{m}$ was taken as the objective function to study and analyze the structure height, period, upper and lower surface diameter of silicon nano cone array, thus the influence of structural parameters of silicon nano cone array on average reflectivity was obtained. According to the law of influence, three optimization models were built up. In comparison with the initial model, great improvement on the antireflection performance of the optimized model has been made.

Keywords: nano cone arrays; antireflection; finite difference time-domain method; average reflectivity; parameter optimization

0 引言

光在通过两个界面时,由于菲涅尔反射现象,产生反射光波与入射光波。太阳能硅基板可在入射光的作用下产生电能,入射光波的能量大小影响着太阳能电池的发电能力^[1]。以 $<100>$ 晶向硅片为基板的太阳能电池是当今太阳能发电的主力军,是终结能源危机的有效途径^[2],但是菲涅尔反射现象的存在会造成太阳能电池的发电能力的下降。增透薄膜是最常用的解决菲涅尔反射的方法。传统的增透膜技术分为单层膜增透和多层膜增透技术。单层膜增透是利用光的干涉达到增透的目的,但增透的波长范围窄,对单层膜的材料要求严格,需要满足: $n = \sqrt{n_1^2 + n_2^2}$ (n_1, n_2 分别为增透膜两边材料的折射率)^[3]。多层膜增透克服了单层膜增透只针对特定波长的缺点,在多波长上有增透效用^[4],缺点是衬底材料有黏结问题且温度变化较大时易发生脱落^[5-6]。在20世纪人们发现夜蛾能在晚上飞行并躲避障碍物,遂对夜蛾进行研究,继而发现夜蛾在夜间来去自如的秘密——因其自身的蛾眼结构。

蛾眼结构是利用光波长对等于或者小于自身周期结构辨别能力弱的特点,对于光波可以近似成折射率渐变的介质来减少光的菲涅尔反射。1973年第一个人工抗反射微纳结构^[7]被制造出来。蛾眼结构是多层薄膜的进阶形式,但不同于传统的多层薄膜增透,蛾眼结构克服了多层薄膜的一系列缺点,并且可以实现宽波段与广角度的增透^[8-9]。纳米锥形阵列作为蛾眼结构的一种,通过在单晶硅基板上刻蚀出纳米锥形阵列可以实现宽波段上的抗反射效果^[10],同时纳米锥形阵列结构属于太阳能硅基板的一部分,不存在由于增透结构与基底的热匹配性能较差而引起薄膜的裂纹与脱落^[11]。之前有文章介绍了纳米锥形阵列结构的制备方法,并且测量了部分样品的反射率^[12],由于实验是有穷性的,并未对纳米锥形阵列结构的抗反射规律进行分析,对于其增透机理也并未过多解释。本文利用数值仿真的方法对锥形阵列结构的抗反射规律进行分析研究,在此基础上进行结构参数的优化,分别建立3种模型并进行分析研究,得到具有优越抗反射性能的锥形阵列结构。

基金项目:国家自然科学基金青年科学基金资助项目(51705479);山西省应用基础研究项目青年科技研究基金资助项目(201701D221128)

第一作者简介:严鑫(1995—),男,河南焦作人,硕士研究生,研究方向为光学器件设计、微纳制造、表面工程。

1 模型建立以及数值方法分析

实验中制备的硅锥形阵列结构如图 1(a) 所示,图 1(b) 为使用 FDTD Solutions 软件建模而成的仿真模型,图 1(c) 为结构参数示意图, A 为阵列周期, D_b 和 D_t 分别为底端直径与顶端直径, Z 为阵列高度, $n_1, n_2, \dots, n_i, n_{i+1}$ 为各膜层的折射率。

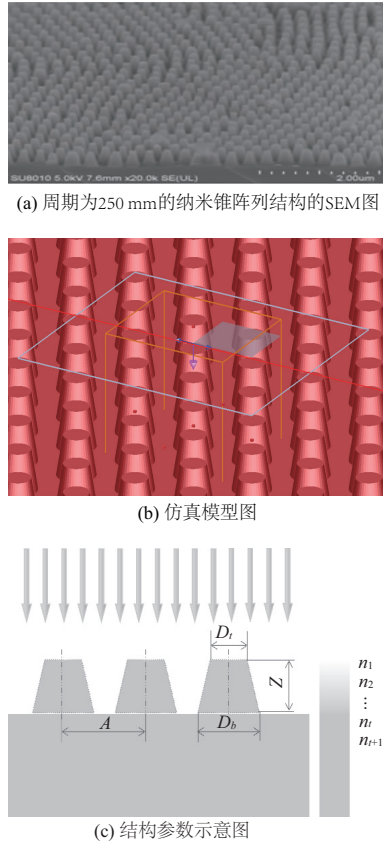


图 1 硅锥形阵列结构、仿真及结构参数图

使用正入射平面波光源作为仿真光源,光源的波长设置为 $0.3 \mu\text{m} \sim 1.2 \mu\text{m}$ 。在数值仿真中仿真模型边界条件的设置极为重要,图 2 为纳米锥阵列结构反射电场 x 方向与 y 方向的分量图,模型的电场分布在 x 和 y 方面分别为对称与反对称分布,所以在 x, y 方向分别设置为对称与反对称的边界条件。

纳米锥形阵列结构的蛾眼结构是替代多层渐变薄膜的,其折射率的变化是渐变的。在光波正入射时,光的反射率由菲涅尔方程可得

$$R = \left(\frac{n_2 - n_1}{n_2 + n_1} \right)^2 \quad (1)$$

其中: R 为反射率; n_1, n_2 分别为两个相邻两介质的折射率。由式(1)可知两介质材料的折射率相差越小,反射光的能量也就越小。硅纳米锥形阵列的渐变效果由空气的折射率数值渐变到硅基板的折射率数值来反映的,如图 1(c) 所示。当入射光为正入射时,多层薄膜的反射系数为

$$r = \frac{(m_{11} + m_{12} m_{i+1}) n_0 - (m_{21} + m_{22} n_{i+1})}{(m_{11} + m_{12} m_{i+1}) n_0 + (m_{21} + m_{22} n_{i+1})} \quad (2)$$

其中: m_{11}, m_{12} 分别为多层膜的传输矩阵系数; n_0, n_{i+1} 为多层膜对应层数的膜层折射率^[13-14]。

每一个波长对应的折射率渐变效果是不同的,对应的膜层数以及每层的折射率也不相同,由式(1)、式(2)可以得到,对各个波长进行单独研究,会造成分析过程冗杂。本文基于太阳能发电设备的特性,采用 $0.3 \mu\text{m} \sim 1.2 \mu\text{m}$ 整体波段上的平均反射率作为目标函数进行研究分析。

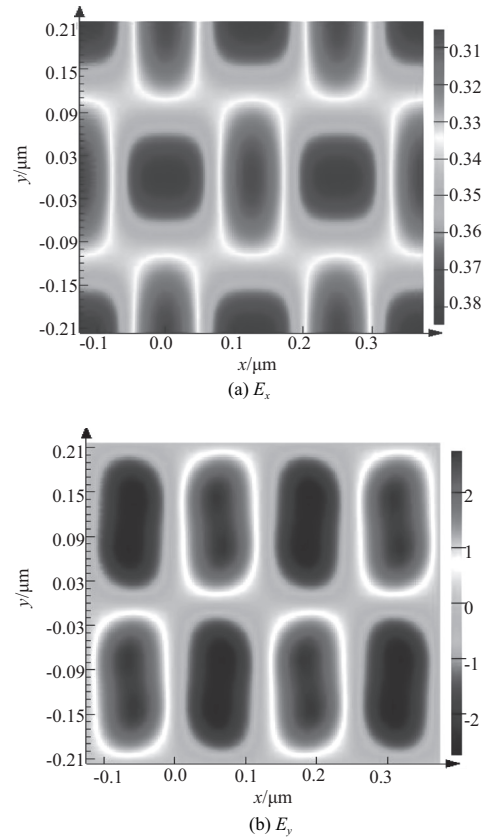


图 2 电场的 x, y 方向分量

2 仿真结果分析

仿真分别选择了实验中 250 nm 、 400 nm 与 800 nm 粒子直径自组装刻蚀形成的形貌参数,建立了模型 1、模型 2 与模型 3。各个模型的阵列结构参数如表 1 所示。研究范围与每个模型自身的参数有关,参照表 2。

表 1 锥形结构的模型参数 单位: nm

形貌参数	模型 1	模型 2	模型 3
阵列高度 Z	400	600	600
底端直径 D_b	200	300	600
顶端直径 D_t	100	100	300
阵列周期 A	250	400	800

表2 纳米锥形阵列结构参数研究范围 单位: nm

形貌参数	模型 1	模型 2	模型 3
阵列高度 Z	0~1 500	0~1 500	0~1 500
底端直径 D_b	100~250	100~400	300~800
顶端直径 D_t	1~200	1~300	1~600
阵列周期 A	200~1 000	300~1 200	600~1 500

图3为3个初始模型与未经加工硅基板的光反射率对比图,相较于未经加工硅基板43.29%的平均反射率,模型1、模型2与模型3的平均反射率分别为15.20%、17.40%、12.84%。平均反射率均明显降低,实现了 $0.3\mu\text{m}\sim 1.2\mu\text{m}$ 全波段的增透,表明3个模型具有较强的抗反射性能。

对锥形阵列结构的高度 Z 进行研究, Z 的取值范围为 $0\text{ nm}\sim 1\,500\text{ nm}$ 。图4表明随着纳米锥形阵列的高度提高,平均反射率不断下降,最终将平均反射率控制在10%左右。根据等效折射率理论,在其他参数不变的情况下,随着纳米锥阵列结构高度增加,结构的多层膜层数 n_{i+1} 变大,导致相邻层面的折射率差值变小,结构的折射率渐变效果变得更好。但是随着纳米锥阵列结构的高宽比增大,需要精确地控制 SF_6 与 C_4F_8 的气体比例以及刻蚀的时长。关键的技术难点在于纳米自组装的粒子既要能被去除,同时又要要求去除粒子与硅基板的速率是可控的。

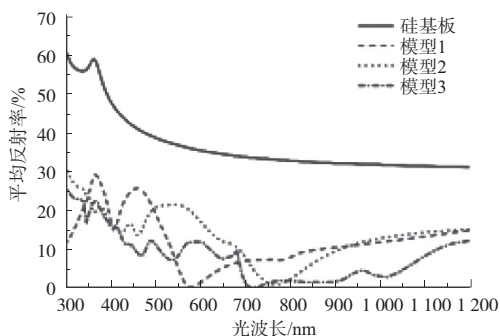


图3 模型1、模型2、模型3与硅基板的反射率图

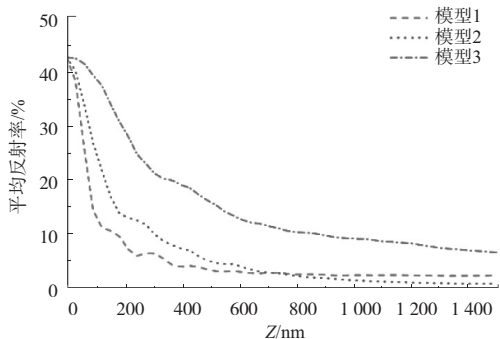


图4 阵列高度的反射率影响图

对底顶端直径 D_b 进行分析,3个模型的 D_b 如表2,模型1与模型2扫描范围起点为顶端阵列直径100nm处,模型3为300nm处,范围的终点值为对应结构的周期数

值。如图5所示,仿真结果表明:随着底端直径增大,对应模型的平均反射率逐步降低,这表明锥形阵列结构要想达到较好的折射率渐变效果,就应该尽量地提高底端直径,直至占空比达到1.0。这给制造工艺提出了要求,制作抗反射的纳米锥形阵列时,当刻蚀到底端直径与结构周期相等时,就应停止刻蚀。

接下来对结构参数中的顶端直径 D_t 进行分析, D_t 的取值范围如表2。从图6可以看出,随着顶端直径的增加,3个模型的反射率先减小后增大,在模型1、模型2、模型3中, D_t 为125nm、175nm与100nm时平均反射率最小,说明此时的锥形阵列对于入射光的抗反射效果最佳。

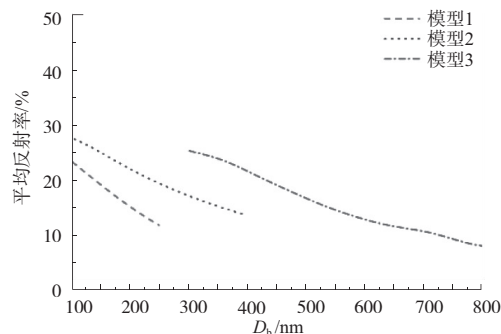


图5 底端直径的反射率影响图

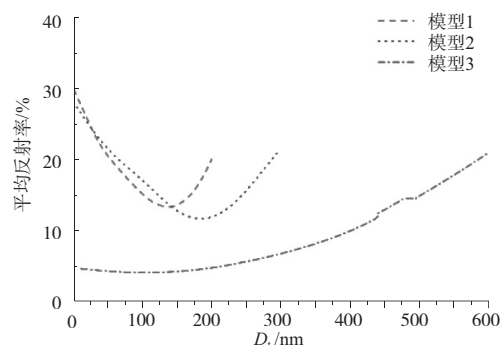


图6 顶端直径的反射率影响图

图7是对纳米锥形结构周期 A 的研究,结果表明随着周期 A 的不断增大,3个模型的平均反射率都是不断增加的。

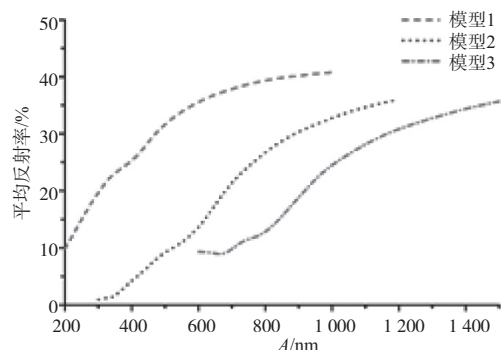


图7 阵列周期的反射率影响图

最后综合以上4个分析结果,找出每一个参数的较优解,将其带入仿真模型中建立如表3所示的3个优化后的

锥形阵列结构模型参数,并进行仿真分析。由图 7、图 8 可知,优化后模型 1、模型 2、模型 3 的平均透射率分别为 3.89%、3.65%、1.34%。

表 3 优化后锥形结构的模型参数 单位: nm

形貌参数	模型 1	模型 2	模型 3
阵列高度 Z	1 000	1 000	1 000
底端直径 D_b	250	400	800
顶端直径 D_t	125	175	100
阵列周期 A	250	400	800

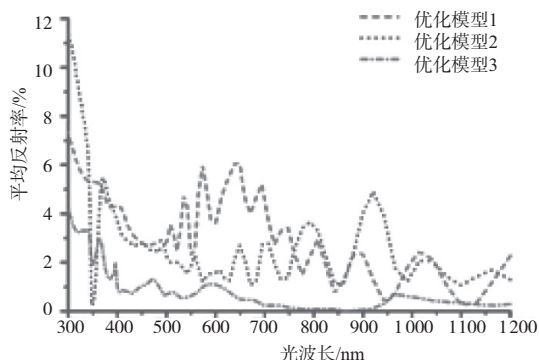


图 8 3 个优化后模型的反射率图

3 结语

为了提高硅基板太阳能的发电效率,克服实验的有穷性,探索硅锥形阵列结构的抗反射机理及规律,在实验的基础上进行 FDTD 仿真研究,得到硅纳米锥形阵列结构参数对平均透射率的影响规律。在光源为正入射的 $0.3 \mu\text{m} \sim 1.2 \mu\text{m}$ 的情况下,以波段内的平均透射率作为目标函数,对纳米锥形阵列结构参数进行了一系列的分析、仿真并得到规律:增加阵列高度、增加底端直径,减小阵列周期以及选择合适的顶端直径都可以降低平均反射率。优化后的模型 1、模型 2 与模型 3 对比初始模型,其平均透射率分别下降了 11.31%、13.75% 与 11.50%;对比平整的硅基板平均透射率分别下降了 39.40%、39.64% 与 41.95%。以上数据表明优化后的硅纳米锥形阵列结构能有效地降低平均反射率。

参考文献:

- [1] WANG Y L, CHEN M X, LI D H, et al. Mesoporous silica hybrids as an antireflective coating to enhance light harvesting and achieve over 16% efficiency of organic solar cells[J]. Journal of Materials Chemistry C, 2019, 7(47): 14962-14969.
- [2] 陈鹏, 朱智富, 黄福闯, 等. 储能电站电源管理系统研究[J]. 机械制造与自动化, 2019, 48(6): 178-182.
- [3] M. 光学原理[M]. 杨葭荪, 译. 北京: 科学出版社, 1978.
- [4] 岳威, 韩永昶, 东野斯阳, 等. 大尺寸硅基体 633 nm 和 3.5~4.1 μm 双波段高反射膜研制[J]. 红外与激光工程, 2012, 41(7): 1854-1857.
- [5] KHAN S B, WU H, FEI Z, et al. Antireflective coatings with enhanced adhesion strength[J]. Nanoscale, 2017, 9(31): 11047-11054.
- [6] LAI F I, YANG J F, LIAO W X, et al. Enhanced omnidirectional and weatherability of $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ solar cells with ZnO functional nanorod arrays[J]. Scientific Reports, 2017, 7(1): 14927.
- [7] CLAPHAM P B, HUTLEY M C. Reduction of lens reflexion by the "moth eye" principle[J]. Nature, 1973, 244, : 281-282.
- [8] HUANG Y F, CHATTOPADHYAY S, JEN Y J, et al. Improved broadband and quasi-omnidirectional anti-reflection properties with biomimetic silicon nanostructures[J]. Nature Nanotechnology, 2007, 2(12): 770-774.
- [9] SUN J, WANG X, WU J, et al. Biomimetic moth-eye nanofabrication: enhanced antireflection with superior self-cleaning characteristic[J]. Scientific Reports, 2018, 8(1): 5438.
- [10] 郭旭东, 董亭亭, 付跃刚, 等. 圆锥形仿生蛾眼抗反射微纳结构的研制[J]. 红外与激光工程, 2017, 46(9): 0910002.
- [11] YOO Y J, KIM Y J, KIM S Y, et al. Mechanically robust antireflective moth-eye structures with a tailored coating of dielectric materials[J]. Optical Materials Express, 2019, 9(11): 4178.
- [12] 黎相孟, 祝锡晶, 魏慧芬, 等. 尺寸形貌对硅纳米锥阵列结构反射特性的影响[J]. 河北科技大学学报, 2018, 39(6): 487-493.
- [13] 沈自才, 沈建, 刘世杰, 等. 渐变折射率薄膜的分层评价探讨[J]. 物理学报, 2007, 56(3): 1325-1328.
- [14] 卢权, 唐振方. 渐变折射率减反膜的设计及其全向性能[J]. 光学技术, 2015, 41(4): 305-308.

收稿日期: 2020-07-15