

УДК 537.311:322

МРНТИ 29.19.22:47.09.48

ИССЛЕДОВАНИЕ ДВУХСЛОЙНОГО АНТИОТРАЖАЮЩЕГО ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ SiC МОДЕЛИРОВАНИЕМ С ПОМОЩЬЮ «LUMERICAL FTDT»

СУЛТАНОВ А.Т., НУСУПОВ К.Х., БЕЙСЕНХАНОВ Н.Б.

Казахстанско-Британский технический университет

Аннотация: В данной работе с помощью программы “lumerical FTDT” осуществлены симуляции для определения оптимальных толщин слоев в антиотражающих покрытиях SiC/MgF₂, осажденных на полированный кремний. Двухслойная структура SiC(60 нм) + MgF₂(110 нм) показала наименьшее отражение (< 0,5%) в интервале длин волн 500-800 нм. Однако анализ величин поглощения света и плотности тока короткого замыкания кремниевого солнечного элемента показывает, что среди рассмотренных антиотражающих покрытий SiC/MgF₂ наиболее эффективным является двухслойная структура SiC(50 нм) + MgF₂(110 нм). Это обусловлено низким отражением в области 317-485 нм и увеличением плотности тока солнечного элемента до 179,0 А/м².

Ключевые слова: антиотражающие покрытия, карбид кремния, Lumerical FTDT, кремниевые солнечные элементы

STUDY OF DOUBLE-LAYER ANTIREFLECTION COATING BASED ON SiC BY «LUMERICAL FTDT» SIMULATIONS

Abstract: In this paper, using the “lumerical FTDT” software, simulations have been carried out to determine the optimal layer thicknesses in antireflection SiC/MgF₂ coatings deposited on polished silicon. The double layer structure SiC(60 nm) + MgF₂(110 nm) showed the lowest reflection (<0.5%) in the wavelength range from 500 to 800 nm. However, an analysis of the light absorption and short-circuit current density of a silicon solar cell shows that among the considered antireflection SiC/MgF₂ coatings, the most effective is the double layer structure SiC(50 nm) + MgF₂(110 nm). This is due to the low reflection in the region of 317-485 nm and the increase of the solar cell current density up to 179.0 A/m².

Key words: Antireflection coating, Silicon carbide, Lumerical FTDT, Silicon solar cell

«LUMERICAL FTDT» ҚОЛДАНУЫМЕН СИМУЛЯЦИЯЛАҢУ ҮШІН SiC НЕГІЗІНДЕГІ ЕКІ ҚАБАТТЫҚ ШАҒЫЛЫСҚА ҚАРСЫ ЖАБЫНДЫ ЗЕРТТЕУ

Аңдатпа: Бұл жұмыста “lumerical FTDT” бағдарламасын қолдана отырып, жылтыратылған кремнийдің үстіне шөгілген шағылысқа қарсы SiC/MgF₂ жабындардың қабаттарының оңтайлы қалыңдығын анықтау үшін модельдеу жүргізілді. SiC(60 нм) + MgF₂(110 нм) екі қабатты құрылым толқын ұзындығы 500-ден 800 нм-ге дейінгі ең төменгі шағылысты (<0,5%) көрсетті. Алайда, кремнийлі күн батареясының жарық сіңіруін және қысқа тұйықталу тогының тығыздығын талдауы SiC/MgF₂ шағылысқа қарсы ауытқу қабаттардың арасында SiC(50 нм) + MgF₂(110 нм) екі қабатты құрылым ең тиімді болып табылады. Бұл 317-485 нм аймақтағы шағылыстың төмендігі мен және күн батареясының ток тығыздығының 179,0 А/м²-ге дейін өсуімен байланысты.

Түйінді сөздер: шағылысқа қарсы жабындар, кремний карбиді, Lumerical FTDT, кремний күн батареялары

Введение

Уменьшение оптических потерь в солнечных элементах является одним из ключевых методов увеличения их эффективности. Отражение возникает в результате перехода распространяющегося света из одной среды в другую. Среда характеризуется показателем преломления (n), который количественно определяет скорость света в среде по отношению к скорости света в вакууме [1]. Кремний обладает сравнительно высоким показателем преломления (3.9) и от его поверхности отражается около 40% падающего света [2]. Эти потери могут быть существенно снижены использованием антиотражающих покрытий. Джон Стронг в 1936 году [3] теоретически показал, что однослойная структура способна уменьшить отражение до 0% для некоторой определенной длины волны, но не для широкого спектра длин волн. Однослойные структуры не могут быть применены для солнечных панелей. Для уменьшения отражения в широком спектре длин волн используются многослойные структуры.

Одним из методов уменьшения отражения предложен Лордом Рэйлером в 1880 году [4]. Суть этого метода заключается в использовании материалов с показателем преломления, уменьшающимся от подложки (n_{sub}) к среде (n_{air}).

Двухслойные структуры ZnS/MgF_2 и $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ показывают отличные результаты по уменьшению отражения [5-7]. Однако их использование предполагает предварительное нанесение пассивирующего слоя. Использование универсальных покрытий, выполняющих как пассивирующие, так и просветляющие функции, позволяют упростить технологию производства солнечных батарей.

Такие преимущества аморфного карбида кремния, как широкая запрещенная зона, отличный коэффициент теплового расширения, подходящий для кремниевых пластин, относительно хорошая термическая и механическая стабильность [8,9], возможность использовать одновременно в качестве просветляющего и пассивирующего слоя [10], делают

его важным материалом для использования в кремниевых солнечных элементах. Тем не менее, применение карбида кремния для этих целей еще недостаточно изучено и требует более глубокого исследования.

В данной работе с помощью численной симуляции FTDT проведено исследование антиотражающих покрытий SiC/MgF_2 для кремниевых солнечных элементов.

Эксперимент

Для симуляции антиотражающих покрытий и определения величин отражения, поглощения и плотности тока короткого замыкания была использована программа *lumerical FTDT* [11]. Антиотражающее покрытие было осаждено на полированный кремний толщиной 2 микрона. Малая толщина подложки была выбрана для уменьшения времени расчета симуляции и это не оказывает влияния на конечный результат отражения.

В качестве источника света выступает источник плоских волн с длинами в диапазоне 300-800 нм, падающих на поверхность антиотражающего покрытия под прямым углом. Горизонтальные границы были выставлены на идеально подобранный слой (*Perfectly Matched Layer, PML*) для того, чтобы свет от горизонтальных границ не отражался обратно в область симуляции и не влиял на конечные результаты. Для получения наиболее точных результатов монитор поля частотной области и мощности располагался сразу за источником света. Также была добавлена аналитическая группа для оценки значения поглощения кремнием и плотности тока короткого замыкания (J_{sc}). Оптимизация антиотражающего слоя проводилась методом поэтапного изменения толщины каждого слоя, пока минимум отражения не был найден.

Данные о зависимости действительной и мнимой частей показателя преломления (n, k) от длины волны λ для SiC взяты из [12], для MgF_2 – из [13]. Данные для Si были взяты из библиотеки программы «*lumerical FTDT*».

Результаты и обсуждение

Дизайн двухслойного антиотражающего покрытия на кремнии включает слой карбида кремния и фторида магния (рис. 1). Проведена оптимизация покрытий с целью выявления оптимальных толщин слоев для достижения минимального отражения солнечного света.

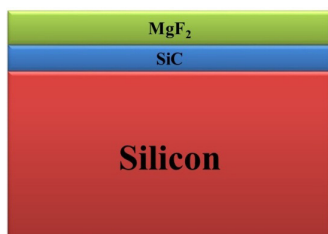


Рис. 1 – Дизайн двухслойного антиотражающего покрытия SiC + MgF₂ на кремнии

Для двухслойной структуры выявление оптимальных толщин слоев было проведено в два этапа. Первоначально осуществляется вариация толщины слоя карбида кремния при некоторой первоначальной толщине слоя фторида магния для выявления оптимальной величины dSiC, при которой отражение света имеет минимальные значения. Затем при этой определенной величине dSiC осуществляется вариация толщины слоя фторида магния для определения оптимальной величины dMgF₂, при которой отражение света имеет минимальные значения.

Первоначальная толщина слоя фторида магния $d(\text{MgF}_2) = \lambda_0(\text{MgF}_2)/(4 \cdot n(\text{MgF}_2)) \approx 110$ нм оценивалась как толщина однослой-

ного покрытия с показателем преломления $n(\text{MgF}_2) = 1.38$, оптимальная для уменьшения отражения света с длиной волны $\lambda_0(\text{MgF}_2) = 600$ нм. Вариация толщины слоя SiC осуществляется в пределах толщин 40-70 нм, так как предполагалось, что оптимальная толщина $d(\text{SiC}) = \lambda_0(\text{SiC})/(4 \cdot n(\text{SiC}))$ однослойного покрытия SiC с показателем преломления $n(\text{SiC}) = 2,6$ лежит в этих пределах для интервала длин волн $\lambda_0(\text{SiC}) = 416 - 728$ нм.

Как видно на рис. 2а (кривая 3), наименьшее отражение света в широком интервале длин волн 500-800 нм характерно для двухслойного антиотражающего покрытия SiC(60 нм)/MgF₂(110 нм). Величина отражения в этом интервале длин волн варьируется в пределах от 0,0045% до 0,4547% (или ~0.005 – 0.5%) и, по существу, является превосходным результатом.

Для системы SiC(50 нм)/MgF₂(110 нм) (рис. 2а, кривая 2) величина отражения варьируется в пределах от 0,97 до 1,63%, но в более широком интервале длин волн от 422 до 800 нм. Это может существенно увеличить КПД солнечных элементов, поэтому обе двухслойные системы, имеющие слой SiC толщиной 60 и 50 нм, были выбраны для дальнейшего анализа и сравнения.

Вариация толщины слоя MgF₂ осуществляется в пределах толщин 100-130 нм, так как предполагалось, что оптимальная толщина слоя $d(\text{MgF}_2) = \lambda_0(\text{MgF}_2)/(4 \cdot n(\text{MgF}_2))$ однослойного покрытия MgF₂ с показателем пре-

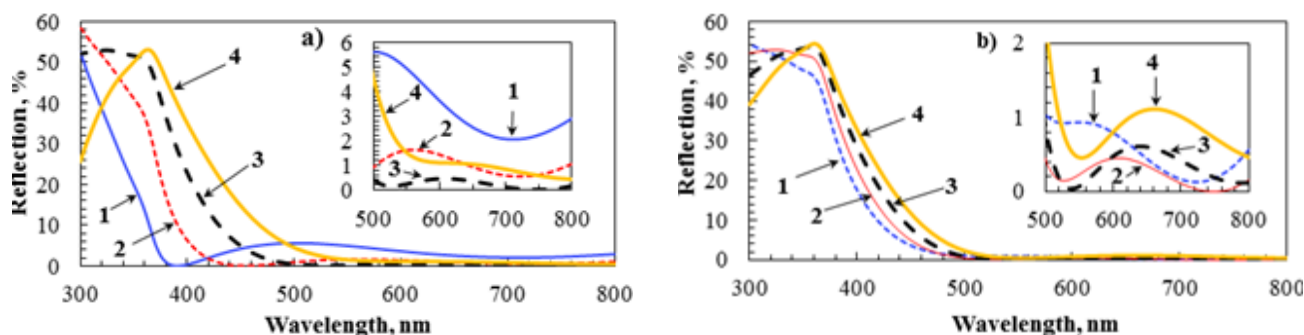


Рис. 2 – Отражение света от двухслойного антиотражающего покрытия SiC + MgF₂ на кремнии: (а) 1 – SiC(40 нм) + MgF₂(110 нм); 2 – SiC(50 нм) + MgF₂(110 нм); 3 – SiC(60 нм) + MgF₂(110 нм); 4 – SiC(70 нм) + MgF₂(110 нм); (б) 1 – SiC(60 нм) + MgF₂(100 нм); 2 – SiC(60 нм) + MgF₂(110 нм); 3 – SiC(60 нм) + MgF₂(120 нм); 4 – SiC(60 нм) + MgF₂(130 нм)

ломления $n(\text{MgF}_2) = 1.38$ лежит в этих пределах для интервала длин волн $\lambda_0(\text{MgF}_2) = 552\text{--}718$ нм. Вариация в этих пределах толщины слоя MgF_2 при величине $d\text{SiC} = 60$ нм позволило определить методом FDTD оптимальную величину $d\text{MgF}_2$, при которой отражение света имеет минимальные значения. Как видно на рис. 2b (кривая 2), наименьшее отражение света в интервале длин волн 500–800 нм характерно для той же структуры $\text{SiC}(60 \text{ nm})/\text{MgF}_2(110 \text{ nm})$ и варьируется в пределах от $\sim 0,005\%$ до $\sim 0,5\%$.

Это позволяет утверждать о повышенной эффективности двухслойной структуры $\text{SiC}(60 \text{ nm}) + \text{MgF}_2(110 \text{ nm})$ как антиотражающего покрытия. Было решено провести дополнительные симуляции для определения величин поглощения света кремнием и плотности тока короткого замыкания солнечного элемента, содержащего вышеуказанные антиотражающие покрытия.

Как видно на рис. 3 (кривая 1), двухслойная структура $\text{SiC}(50 \text{ nm}) + \text{MgF}_2(110 \text{ nm})$ имеет явные преимущества, так как при его использовании кремний поглощает значительно больше света, в особенности, в интервале длин волн от 317 нм до 493 нм.

Расчеты плотности тока короткого замыкания солнечного элемента подтвердили эти данные, так как использование покрытия $\text{SiC}(50 \text{ nm}) + \text{MgF}_2(110 \text{ nm})$ дало возможность получить максимальную плотность тока $179,0 \text{ A/m}^2$ вместо $175,3 \text{ A/m}^2$ для $\text{SiC}(60 \text{ nm}) + \text{MgF}_2(110 \text{ nm})$.

Действительно, как видно на рисунке 2a (кривая 2), отражение для этого покрытия значительно ниже в области длин волн от 317 до 485 нм, чем для $\text{SiC}(60 \text{ nm}) + \text{MgF}_2(110 \text{ nm})$ (рис. 2a, кривая 3). Таким образом, установлено, что среди рассмотренных антиотражающих покрытий на основе SiC наиболее эффективным является двухслойная структура $\text{SiC}(50 \text{ nm}) + \text{MgF}_2(110 \text{ nm})$.

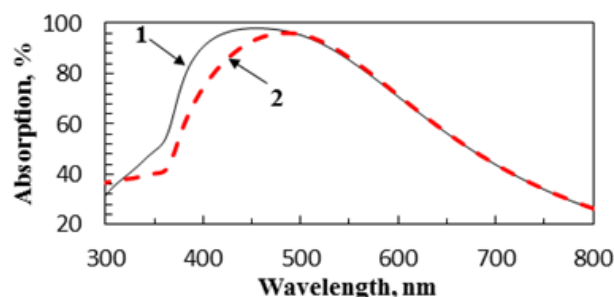


Рис. 3 – Волновая зависимость поглощения света кремнием при использовании двухслойных антиотражающих покрытий на основе SiC/MgF₂:

1 – SiC(50 nm) + MgF₂(110 nm); 2 – SiC(60 nm) + MgF₂(110 nm)

Заклучение

Рассмотрены двухслойные антиотражающие покрытия на кремнии, включающие слои карбида кремния и фторида магния. Проведена оптимизация с помощью программы *lumerical FDTD* с целью выявления оптимальных толщин слоев и достижения минимального отражения света.

Выявлено, что двухслойная структура $\text{SiC}(60 \text{ nm}) + \text{MgF}_2(110 \text{ nm})$ имеет наименьшее отражение ($\sim 0.005\text{--}0.5\%$) в интервале длин волн 500–800 нм среди рассмотренных покрытий на основе SiC. Для структуры $\text{SiC}(50 \text{ nm})/\text{MgF}_2(110 \text{ nm})$ величина отражения варьируется в пределах $0.97\text{--}1.63\%$, но в более широком интервале длин волн 422–800 нм. Однако анализ величин поглощения света и плотности тока короткого замыкания кремниевое солнечного элемента позволил установить, что среди рассмотренных антиотражающих покрытий SiC/MgF_2 наиболее эффективным является двухслойная структура $\text{SiC}(50 \text{ nm}) + \text{MgF}_2(110 \text{ nm})$ ввиду низкого отражения в области 317–485 нм и максимальной плотности тока $179,0 \text{ A/m}^2$.

Таким образом, сделано заключение о высоком потенциале карбида кремния как эффективного просветляющего материала для кремниевой солнечной технологии.

REFERENCES

1. H.K. Raut, V.A. Ganesh, A.S. Nair, S. Ramakrishna. Anti-reflective coatings: A critical, in-depth review. *Energy Environ. Sci.* 4:10 (2011) 3779–3804.

2. H.R. Philipp and H. Ehrenreich. Optical properties of semiconductors. *Phys. Rev.* 129 (1963) 1550-1560.
3. J. Strong. On a Method of Decreasing the Reflection from Nonmetallic Substances. s.l.: California Institute of Technology, 1936.
4. L. Rayleigh. On Reflection of Vibrations at the Confines of two Media between which the Transition is Gradual. *Proceedings of the London Mathematical Society.* s1-11(1) (1879) 51–56.
5. M. Cid, N. Stem, C. Brunetti, A.F. Beloto and C.A.S. Ramos. Improvements in anti-reflection coatings for high efficiency silicon solar cells. *Surface and Coatings Technology.* 106(2-3) (1998) 117-120.
6. S. Kermadia, N. Agoudjilb, S. Sali, R. Tala-Ighil, M. Boumaour. Sol-gel Synthesis of SiO₂-TiO₂ film as antireflection coating on silicon. *Materials Science Forum.* 206 (2009) 221-224.
7. J. Zhao and A.G Martin. Optimized Antireflection Coatings for High-Efficiency Silicon Solar Cells. *IEEE Transactions on Electron Device.* 38(8) (1991) 1925–1934.
8. Y.-H. Joung, H. Kang, J. Kim, H.-S. Lee, J. Lee and W. Choi. SiC formation for a solar cell passivation layer using an RF magnetron co-sputtering system. *Nanoscale Research Letters.* 7(1) (2012) 22.
9. K.Kh. Nussupov, N.B. Beisenkhanov, D.I. Bakranova, S. Keiinbay, A.A. Turakhun and A.A. Sultan. Low-temperature synthesis of α -SiC nanocrystals. *Physics of the Solid State.* 61(12) (2019) 2473-2479.
10. I. Martín, M. Vetter, A. Orpella, J. Puigdollers, A. Cuevas, and R. Alcubilla. Surface passivation of p-type crystalline Si by plasma enhanced chemical vapor deposited amorphous SiC_x:H films. *Applied Physics Letters.* 79(14) (2001) 2199–2201.
11. FDTD. <https://www.lumerical.com/products/fdtd/>. [Online]
12. P. T. B. Shaffer. Refractive Index, Dispersion, and Birefringence of Silicon Carbide Polytypes. *Applied Optics* 10(5) (1971) 1034.
13. L.V. Rodríguez-de Marcos, J.I. Larruquert, J.A. Méndez and J.A. Aznárez. Self-consistent optical constants of MgF₂, LaF₃, and CeF₃ films. *Optical Materials Express.* 7(3) (2017) 989.