

纳米线减反层的解析设计法*

朱兆平 秦亦强[†]

(南京大学现代工程与应用科学学院, 南京大学光伏工程中心, 南京大学固体微结构物理国家重点实验室, 南京 210093)

(2013年1月26日收到; 2013年4月12日收到修改稿)

本文通过分析比较给出了常用二维等效介质理论解析解的适用条件并且将有效介质理论的适用范围推广至零级衍射边界处, 并通过 FDTD 模拟验证了该解析方法的准确性. 这不仅解决了长期以来没有精确二维有效介质理论 (2D-EMT) 解析解的困境, 而且使得直接用解析公式设计和定量解释减反微结构的减反效果变得可能, 有着广泛的应用前景.

关键词: 零级衍射光栅, 有效介质理论, 太阳能电池减反, 纳米线阵列

PACS: 78.20.-e, 88.40.H-, 43.20.E, 61.46.Km **DOI:** 10.7498/aps.62.157801

1 引言

减小反射率无论在太阳能电池^[1,2]还是光电探测器以及增透膜领域都是非常重要的研究课题, 包括介质减反^[3,4], 微结构二次反射减反^[5], 微结构等效介质减反^[6-8], 微结构散射减反^[9,10]等多种方法. 通过涂有介质减反层能够将反射率降至 0, 但是由于介质涂层折射率的有限性和涂层与衬底的晶格失配以及热龟裂等缺点, 大大限制了介质减反层的应用范围. 另一方面, 周期较小的微结构称作零级衍射光栅, 平面波经过该微结构其波前并不发生改变, 这种现象类似平面波经过介质涂层, 因而该层微结构能够等效为减反层, 其等效折射率由有效介质理论 (effective medium theory, EMT) 决定.

一维微结构的 EMT 解析解 (closed-form solution) 能够精确地得到微结构的等效折射率^[11,12]. 然而自从上世纪 90 年代以来, 理论上就没有精确二维微结构的 EMT 解析解出现^[13-15], EMT 的热点也从介电材料、半导体材料转向金属超构材料^[16], 人们绕过推导二维微结构的 EMT 解析解, 转而在数值方法得到准确的二维微结构的等效折射率并借此设计减反微结构功能层^[8,17].

近期, 随着实验工艺的进展, 小周期微结构变

得越来越容易获得. 仿生蛾眼 (Moth-eye) 结构^[18]和黑硅 (black silicon)^[19]由于优良的低反射率受到广泛关注. 人们在理论上试图使用二维 EMT 解析解得到微结构的等效折射率并取得了进展^[20-22], 但还是能看到二维 EMT 解析解与数值模拟或者实验数据在某些波段的巨大差距^[21,23-25]. 没有精确的二维 EMT 解析解仍是一个难题.

本文通过 FDTD 数值模拟, 证实众多二维 EMT 解析解并不是一无是处, 相反, 如果给各个解析解限定适当的归一化周期, 将会使得相应的解析解非常准确, 从而巧妙地解决了没有二维精确解析解的难题. 据此, 进一步提出了基于解析解设计微结构减反层的方法, 该方法简单易行, 经过数值模拟证实能够准确设计减反微结构层. 为进一步解释黑硅低反射率和解析设计微结构减反层奠定了基础.

2 二维等效介质理论适用范围: 零级衍射光栅

2.1 理论模型

当一束平面波入射到周期光栅后, 被光栅分成两组等相位面的波前, 特定方向的波前发生干涉, 形成经过光栅后的衍射光波 (图 1). 为了方便研究,

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2010CB6307030) 和国家自然科学基金 (批准号: 11074118, 11274164) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: yqqin@nju.edu.cn

将光栅分为三个层级,以距离恰好有一个光栅周期的任意一对光线为研究对象,只看光达到光栅层和光最后离开光栅层的相位差.光束相干的条件:

$$P \times n_m \times \sin \theta_m + P \times n_i \times \sin \theta_i = m\lambda, \quad m = \pm 1, \pm 2 \dots, \quad (1)$$

其中 P 为光栅周期, n_i 和 θ_i 分别是入射光所经历的折射率和入射到光栅上的入射角, n_m 和 θ_m 则分别是第 m 级衍射光所经历的折射率和衍射角, λ 为入射光在自由空间的波长.

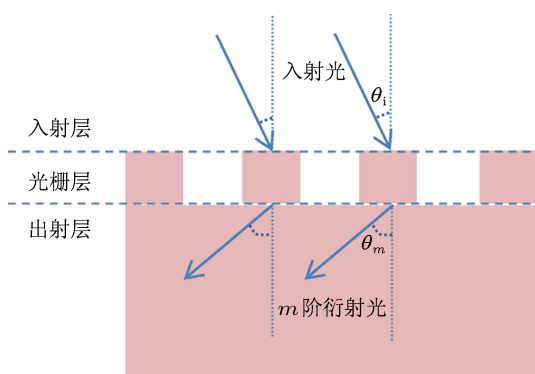


图1 入射角为 θ_i 的平面波从均匀入射层入射到达光栅后被前被切割,然后进入均质介 n_m 发生角度为 θ_m 的 m 级衍射的示意图

考虑到空气 $n_i = 1$, n_m 是基底的折射率 n_s , 上述公式处理为关于衍射角的形式 [26-28]:

$$\sin \theta_m = \frac{m\lambda}{n_s P} - \frac{\sin \theta_i}{n_s}. \quad (2)$$

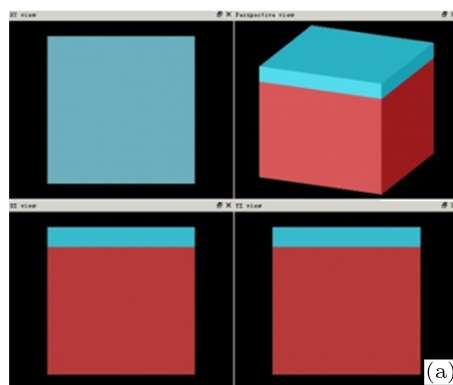


图2 (a) 波长 1200 nm 的单色光入射到有一层均质介质层的硅基底上; (b) 垂直截面上电场矢量模方的瞬时图,波前依然保持同相位

将均质介质层换成周期纳米圆柱 (circle), 分别模拟周期为 $P = 300 \text{ nm}, 330 \text{ nm}, 350 \text{ nm}, 360 \text{ nm}$ 的高度不一致,直径不一致的 Si 圆柱体, (图3中

因而,没有高阶衍射光的临界条件是

$$|\sin \theta_m| = \left| \frac{m\lambda}{n_s P} - \frac{\sin \theta_i}{n_s} \right| > 1, \quad (3)$$

即当一个光栅的周期小到

$$P < \frac{\lambda}{n_s + \sin \theta_i}, \quad (4a)$$

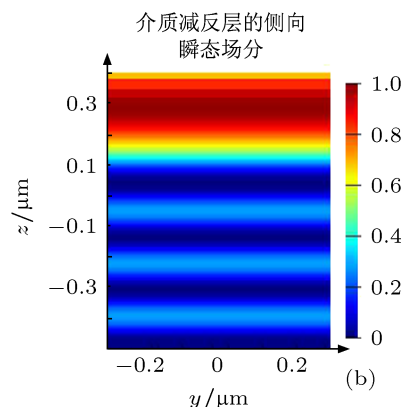
或归一化周期满足

$$\frac{P}{\lambda} < \frac{1}{n_s + \sin \theta_i}. \quad (4b)$$

入射角为 θ_i 的平面波经过该层微结构层,不再发生高阶衍射,这样的光栅被称为零级衍射光栅, (4) 式就是零级衍射光栅的边界条件,其中 $\frac{P}{\lambda}$ 定义为归一化周期.下面将通过 FDTD 证实满足该条件的微结构的对光的调制作用可以等效为介质层,即满足 EMT 条件.

2.2 数值模拟

采用时域有限差分法 (FDTD) 数值解含有结构的麦克斯韦方程,以验证周期光栅的等效为介质层的条件.在软件 FDTD solution 8.0 中,用波长 1200 nm 的单色光照射涂有一层某折射率的均质介质层的硅基底 (如图 2(a)).得到垂直于该结构的截面上电场矢量模方的瞬态图 ($\text{real}(E_x)^2 + \text{real}(E_y)^2 + \text{real}(E_z)^2$) (如图 2(a)).可以清楚看到,平面波入射到均质介质层上并进入硅基底,波前没有发生改变,还是平面波.



第一行中的结构图).图3中第一行的场图,可以很清楚地看到对于固定的 1200 nm 入射的单色光,随着微结构的周期从 300 nm 逐渐增大到 360 nm,进

入到基底的波前逐渐显现干涉图样, 而且很明显的分界线是 $P = 340 \text{ nm}$ 左右. 由于硅在 1200 nm 波长处的折射率近似为 $n = 3.5$, 所以周期 340 nm 对应的归一化周期 $\frac{P}{\lambda} = \frac{340 \text{ nm}}{1200 \text{ nm}}$ 正好等于 $\frac{1}{n_s}$, 也就是说只有当 $\frac{P}{\lambda} < \frac{1}{n_s}$ (图 3 中虚线的左半边), 该微结构才不改变入射光的波前, 对光的调制作用等效于介质层 (参照图 2 中场图). 图 3 中下面两行是将材料换成 $n = 2$ 的纯介电材料, 光照波长为 680 nm 模拟中的结构图和场图. 不失一般性地研究了圆柱 (circle) 和三角柱 (triangle) 随周期改变对波前的调制的变化. 同样可以看到当归一化周期满足

$\frac{P}{\lambda} < \frac{1}{n_s}$ 时, 微结构的作用类似均质介质层; 当归一化周期 $\frac{P}{\lambda} > \frac{1}{n_s}$ 时, 该周期微结构使得平面波发生明显的干涉, 这时的微结构不能再当作均匀介质层, 有效介质层理论不再适用.

上述模拟证实了材料, 形貌, 高度对周期光栅是否能等效为均匀介质层都没有影响. 不同于有效介质理论需要满足归一化周期远远小于 1 的苛刻条件, 本部分证实只要微结构的归一化周期满足 (4) 式, 该微结构就可以等效为均匀介质层. 这样就将 EMT 的适用范围拓展至零级衍射边界条件处, 大大增加了该理论的适用范围.

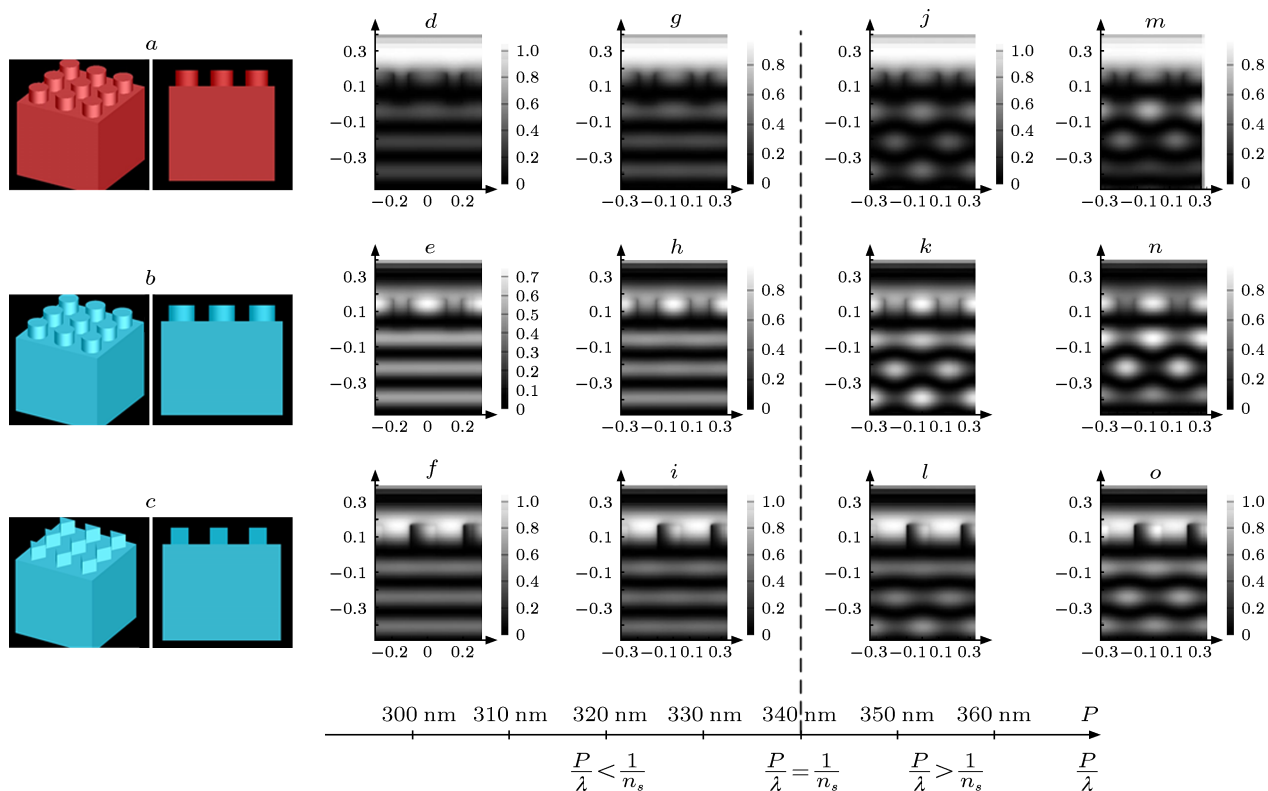


图 3 最上面一行的左边是在硅材料上构造周期 $P = 300 \text{ nm}, 330 \text{ nm}, 350 \text{ nm}, 360 \text{ nm}$ 的纳米圆柱阵列的结构图, 右边是在 1200 nm 波长光照下的场图; 下面两行的左边是在 $n = 2$ 的介质材料上构造周期 $P = 300 \text{ nm}, 330 \text{ nm}, 350 \text{ nm}, 360 \text{ nm}$ 的纳米圆柱 (circle) 和纳米三角柱 (triangle) 阵列的结构图, 右边是经过 680 nm 单色光照射得到的场图

3 二维等效介质理论解析解的使用条件

当正入射的光经过归一化周期满足 $\frac{P}{\lambda} < \frac{1}{n_s}$ 的周期微结构时, 光的行为类似经过一介质层的行为, 这样的微结构可以等效为均匀介质层, EMT 理论认为该微结构的等效折射率仅仅和每一层微结构的

填充率 (又称作填充因子 FF: filling factor) 有关系. 每一层微结构的填充率定义为该层中所含介质的面积占该层面积的比值.

零级衍射微结构的等效折射率可以通过两种方法获得: 最简单的方法是直接用 2D-EMT 解析公式得到微结构的等效折射率; 一般的方法是利用数值软件计算反射率、透射率随微结构层高度变化的 Fabry-Perot 震荡图, 反推出该层的等效折射

率 [8,17,29]. 一直以来, 二维等效介质理论 (2D-EMT) 解析公式得到的等效折射率都偏离数值计算得到的等效折射率.

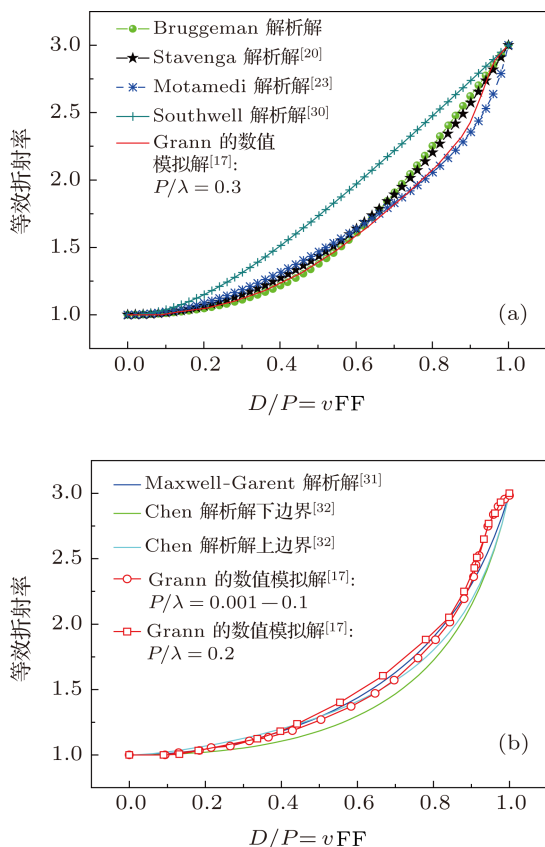


图 4 $n_{\text{sub}} = 3$ 的二维微结构等效折射率与其填充率的关系曲线 (a) 中显示的是各个解析解与归一化周期较大的数值解, 其中包括 Stavenga 公式 [20] (黑色实心五角星)、Motamedi 公式 [23] (蓝色米子)、Bruggeman 公式 [33] (淡绿色实心圆)、Southwell 公式 [30] (深绿色十字); (b) 中显示的是解析解和归一化周期较小的数值解, 包括 Chen 公式 [32] (上边界为淡蓝色线, 下边界为淡绿色线)、Maxwell-Garnett 公式 [31] (蓝色实线)

如图 4 所示, 以基底折射率 $n_{\text{sub}} = 3$ 的高折射率为例制作二维微结构, 给出了不同填充率下的等效折射率曲线. 横坐标为 $\frac{D}{P} = \sqrt{\text{FF}}$ 是为了利于各解析公式得到的等效折射率和文献 [17] 中 RCWA 得到的数值解进行比较.

根据前一部分的模拟证实, 不管是解析方法还是数值模拟法, 所有的将微结构等效为某一等效介质的方法都必须在微结构满足零级衍射条件以下才能使用, 这里微结构的归一化周期必须满足

$$\frac{P}{\lambda} < \frac{1}{n_s + n_i \sin \theta} = \frac{1}{n_s} = \frac{1}{3} = 0.33.$$

图 4(a) 和 (b) 中显示的分别为大归一化周期 ($\frac{P}{\lambda} = 0.3$) 和小归一化周期 ($\frac{P}{\lambda} = 0.2$ 和 $\frac{P}{\lambda} = 0.1$)

下的精确的数值解和相关解析公式的比较. 其中红色的三根线 (图 4(a) 中红实线, 图 4(b) 中红的空心圆圈和方框线) 都是文献 [17] 中数值模拟精确得到的等效折射率随填充率变化的曲线. 可以看到, 零级衍射边界以下, 固定填充率的微结构的等效折射率将随着微结构归一化周期的增大而逐渐增大. 如图 4(b) 中红色空心圆线所示, 当 $\frac{P}{\lambda} \leq 0.1$ 时, 固定填充率的微结构等效折射率不再随着归一化周期减小而减小, 此时的解被称为“静态解”. 也就是说, 只有 $\frac{P}{\lambda} \leq 0.1$ 时, 传统有效介质理论才完全正确. 通过比较解析解在不同填充率下与数值解的接近程度, 可以判断出各个解析公式的使用条件. 图 4(a) 中除去偏离数值解较大的 Southwell 公式, Bruggeman 公式、Stavenga 公式、Motamedi 公式都比较接近大归一化周期的数值解 [23]; 图 4(b) 中 Chen's upper boundary 公式在大部分填充率的时候低于静态解, 所以也不够准确; Maxwell-Garnett 公式处在归一化周期 $\frac{P}{\lambda} = 0.2$ 和 $\frac{P}{\lambda} = 0.1$ 的数值解之间, 因而适合在小归一化周期条件下使用. 虽然各种解析解有不同的理论基础, 但是由于没有考虑到其使用范围, 解析解将偏离精确解, 这就是当前理论上认为二维解析解不正确的重要原因.

通过以上分析, 可以简单地给出目前所报道的 2D-EMT 解析公式的有效使用范围:

1) 当微结构周期 P 在衍射边界条件以外, 即归一化周期 $\frac{P}{\lambda} > \frac{1}{n_s + n_i \sin \theta}$ 时 (对于硅材料 $\frac{1}{n_s + n_i \sin \theta} = \frac{1}{3}$), 2D-EMT 完全不适用, 此时进入纳米光子学领域, 微结构的减反设计需要通过较为繁琐的数值模拟才能得到, 这种结构形貌复杂并且不能有些许偏离, 对实验制作提出了较高的要求.

2) 当微结构周期 P 在衍射边界条件以内且非常接近该零级衍射边界条件, 即归一化周期满足 $\frac{2}{3} \left(\frac{1}{n_s + n_i \sin \theta} \right) < \frac{P}{\lambda} \leq \frac{1}{n_s + n_i \sin \theta}$ 时, 可以用 Bruggeman 相关公式和 Motamedi 公式配合使用来得到微结构等效折射率: 对于结构填充率 $0 < \text{FF} < 0.4$ 或 $\text{FF} > 0.8$ 的微结构, 选用 Bruggeman 相关公式得到的等效折射率能保证在 3% 以下的误差, 这其中 Stavenga 公式为显函数, 形式上更简单, 也更为常用; 对于结构填充率 $0.4 < \text{FF} < 0.8$ 的微结构, 选用 Motamedi 公式能保证得到的等效折射率偏离数值解的误差保持在 3% 以下.

3) 当微结构周期 P 进一步减小, 即归一化周

期满足 $\frac{1}{3} \left(\frac{1}{n_s + n_i \sin \theta} \right) < \frac{P}{\lambda} < \frac{2}{3} \left(\frac{1}{n_s + n_i \sin \theta} \right)$ 时 (对于硅材料 $0.1 < \frac{P}{\lambda} < 0.2$), Maxwell-Garnett 公式在 $FF < 0.8$ 的填充率范围显得更为准确, 这与 Maxwell-Garnett 理论是基于低密度介电混合假定是一致的 [24].

4) 当微结构周期 P 小到无限小, 即归一化周期满足 $\frac{P}{\lambda} \ll \frac{1}{n_s + n_i \sin \theta}$ 时, Chen's upper boundary 比较准确. 这个归一化周期范围就是传统的有效介质层理论所规定的使用范围. 对于可见光, 该微结构周期必须小到几十纳米左右, 这么小的微结构在实验上实现是很困难的. 因而本文大大拓展了 2D-EMT 的适用范围, 并且给出了不同使用条件下的准确的 2D-EMT 解析解.

4 基于等效介质理论解析设计减反微结构: 实例

为了验证有效折射率解析解在适当归一化周期条件下得到微结构等效折射率的准确性, 我们分别利用 Stavenga 公式和 Maxwell-Garnett 公式在硅材料上设计针对 650 nm 波长减反的微结构, 并将减反效果和氮化硅减反层的进行比较. 图 5 中黑色正方形空心线显示了 $n = 2$, 厚度为 80 nm 的氮化硅介质减反层在硅衬底上, 对 650 nm 实现完全减反的反射率图, 310—1120 nm 太阳光谱加权反射率为 9.9%.

在 650 nm 处 $n_{si} = 3.85$, 根据相干减反原理, 当减反层的折射率满足振幅等分要求

$$n_{ARC} = \sqrt{n_{Si} \times n_{air}} = 1.962, \quad (5)$$

高度满足相位匹配条件

$$d = \frac{\lambda}{2n} = \frac{650 \text{ nm}/2}{2 \times 1.962} \approx 83 \text{ nm}, \quad (6)$$

减反层上下界面两个复振幅分量的振幅大小相等, 相位相差半波长, 从而对 650 nm 波长的光完全减反.

先用 Stavenga 公式设计微结构减反层. 根据第三部分的讨论, Stavenga 公式必须在零级衍射边界条件处才能精确得到微结构的等效折射率. 则针对 650 nm 减反的微结构周期为 $P = \frac{\lambda}{n_s + n_i \sin \theta} \approx 168 \text{ nm}$. 选用圆柱体作为结构基元, 则该圆柱体的

直径将由 Stavenga 解析公式决定, 令

$$n_{eff} = [FF \times n_{silicon}^{2/3} + (1 - FF) \times n_{air}^{2/3}]^{3/2} = n_{ARC} = 1.962, \quad (7)$$

其中, 填充率 $FF = \frac{\pi r^2}{P^2}$, r 为圆柱体的半径. 得到 $r = 59 \text{ nm}$.

将 FDTD solutions 8.0 的 x, y 方向边界条件设置为周期性边界条件, 在硅基底上构造周期为 168 nm, 半径为 59 nm, 高度为 83 nm 的圆柱阵列. 宽谱照射下, 反射率如图 5 红色空心圆形线所示, 该结构实现了 650 nm 完全减反, 其加权反射率为 8.0%.

再用 Maxwell-Garnett (M-G) 公式来设计微结构减反层. 根据 M-G 公式的所要满足的归一化使用条件, 针对 650nm 减反的微结构的周期必须满足 $P = \frac{1}{2} \frac{\lambda}{n_s + n_i \sin \theta} = 84 \text{ nm}$. 同样令 M-G 公式

$$n_{eff} = n_i \sqrt{\frac{1 + 2FF \times \left(\frac{n_s^2 - n_i^2}{n_s^2 + 2n_i^2} \right)}{1 - FF \times \left(\frac{n_s^2 - n_i^2}{n_s^2 + 2n_i^2} \right)}} = n_{ARC} = 1.962, \quad (8)$$

得到 $r = 36.5 \text{ nm}$. 在 FDTD solutions 8.0 中设置 $P = 84 \text{ nm}$, 高度 83 nm, 半径为 36.5 nm 的周期圆柱阵列, 宽谱照射下该结构的反射率如图 5 蓝色空心三角形线所示, 明显看到该结构对设计波长完全减反, 加权反射率为 9.4%.

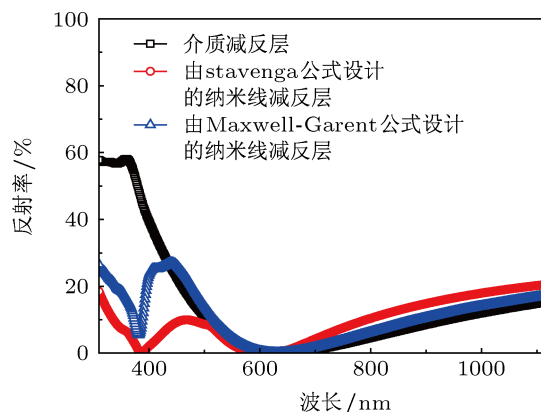


图 5 在硅衬底上设计针对 650 nm 的减反纳米线阵列和减反层的反射率图

从图 5 可以看到, Maxwell-Garnett 公式设计的减反微结构, 在短波到 420 nm 左右还能较好地符合氮化硅介质层的减反效果, 而 Stavenga 公式设计

的微结构, 早在 500 nm 就不再符合介质层的减反效果. 这是因为逐渐减小的波长以及短波长硅的大折射率使得归一化周期超过各结构的零级衍射边界而出现高阶衍射, 此时微结构不再能等效为介质减反层, 各 EMT 解析解也失效. 这一结果证明了第二部分中讨论的内容, 即 M-G 公式的使用条件较为远离零级衍射边界.

总之, EMT 解析解的各个具体形式只有在确定的归一化周期下使用才能精确得到微结构的等效折射率. Stavenga 公式可以准确设计二维较大周期的减反微结构, Maxwell-Garnett 公式可以准确设计二维较小周期的减反微结构.

最后, 我们指出在设计微结构减反层时, 只求准确, 所以可以先找到合适的公式和其相应的归一化周期再去设计微结构; 在解释微结构的等效折射率时, 入射光波长和微结构结构周期已经确定好,

也就规定了此时的归一化周期, 那么只能选择该归一化周期下对应的二维解析公式.

5 结论

本文从光栅衍射方程出发, 用 FDTD solutions 8.0 得到微结构等效为减反层时归一化周期所要满足的条件. 并在该条件下, 发现二维有效介质理论解析解在合适的归一化周期下, 能够非常正确地得到微结构的等效折射率. 克服了二维微结构一直没有准确解析解的困难. 在此基础上, 为了验证解析解的准确性, 分别用 Stavenga 公式和 Maxwell-Garnett 公式直接在折射率较大的硅衬底上设计了针对 650 nm 减反的减反微结构, 通过与介质减反层的减反效果比较, 发现用解析解设计的微结构实现了设计波长的完全减反. 结果显示, 这种方法较之数值法能更容易地设计减反微结构 [34].

- [1] Kelzenberg M D, Boettcher S W, Petykiewicz J A, Turner-Evans D B, Putnam M C, Warren E L, Spurgeon J M, Briggs R M, Lewis N S, Atwater H A 2010 *Nat. Mater.* **9** 239
- [2] Polman A, Atwater H A 2012 *Nat. Mater.* **11** 174
- [3] Kuo M L, Poxson D J, Kim Y S, Mont F W, Kim J K, Schubert E F, Lin S Y 2008 *Opt. Lett.* **11** 174
- [4] Prevo B G, Hon E W, Velev O D 2007 *J. Mater. Chem.* **17** 791
- [5] Her T H, Finlay R J, Wu C, Deliwala S, Mazur E 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 1673
- [6] Strehlke S, Bastide S, Guillet J, Le'vy-Cle'ment C 2000 *Mater. Sci. Eng. B* **69** 81
- [7] Xi J Q, Schubert M F, Kim J K, Schubert E F, Chen M, Lin S Y, Liu W, Smart J A 2007 *Nat. Photonics* **1** 176
- [8] Grann E B, Moharam M G, Pomet D A 1994 *J. Opt. Soc. Am. A* **11** 2695
- [9] Green M A, Pillai S 2012 *Nat. Photonics* **6** 130
- [10] Spinelli P, Verschuuren M A, Polman A 2012 *Nat. Comms.* **3**:692 1
- [11] Raguin D H, Morris G M 1993 *Appl. Opt.* **32** 1154
- [12] Raguin D H, Morris G M 1993 *Appl. Opt.* **32** 2582
- [13] Scheller M, Wietzke S, Jansen C, Koch M 2009 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **42** 065415
- [14] Sancho-Parramon J, Janicki V 2008 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **41** 215304
- [15] Chen S H, Wang H W, Chang T W 2012 *Opt. Express* **20** A197
- [16] Aspnes D E 2011 *Thin Solid Films* **519** 2571
- [17] Grann E B, Moharam M G, Pomet D A 1995 *J. Opt. Soc. Am. A* **12** 333
- [18] Sun C H, Jiang P, Jiang B 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 061112
- [19] Huang Y F, Chattopadhyay S, Jen Y J, Peng C Y, Liu T, Hsu Y K, Pan C L, Lo H C, Hsu C H, Chang Y H, Lee C S, Chen K H, Chen L C 2007 *Nat. Nanotech.* **2** 770
- [20] Stavenga D G, Foletti S, Palasantzas G, Arikawa K 2006 *Proc. R. Soc. B* **273** 661
- [21] Pei T H, Thiyagu S, Pei Z 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 153108
- [22] Zhu J, Yu Z F, Burkhard G F, Hsu C M, Connor S T, Xu Y Q, Wang Q, McGehee M, Fan S H, Cui Y 2009 *Nano Lett.* **9** 279
- [23] Motamedi M E, Southwell W H, Gunning W J 1992 *Appl. Opt.* **31** 4371
- [24] Hu L, Chen L 2007 *Nano Lett.* **7** 3250
- [25] Xiong Z Q, Zhao F Y, Yang J, Hu X H 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 181903
- [26] Heine C, Morf R H 1995 *Appl. Opt.* **34** 2476
- [27] Kikuta H, Toyota H, Yu W J 2003 *Opt. Rev.* **10** 63
- [28] Gaylord T K, Baird W E, Moharam M G 1986 *Appl. Opt.* **25** 4562
- [29] Diedenhofen S L, Janssen O T A, Grzela G, Bakkers E P A M, Rivas J G 2011 *Acs Nano* **5** 2316
- [30] Southwell W H 1991 *J. Opt. Soc. Am. A* **8** 549
- [31] Merrill W M, Diaz R E, LoRe M M, Squires M C, Alexopoulos N G 1999 *IEEE Trans. Antennas Propag.* **47** 142
- [32] Chen F T, Craighead H G 1995 *Opt. Lett.* **20** 121
- [33] Pe' rez R 2009 *J. Appl. Polym. Sci.* **113** 2264
- [34] Zhou J, Sun Y T, Sun T T, Liu X, Song W J 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 088802 (in Chinese) [周骏, 孙永堂, 孙铁囤, 刘晓, 宋伟杰 2011 物理学报 **60** 088802]

Nanowires array designed by means of two-dimension closed-form solution for antireflection*

Zhu Zhao-Ping Qin Yi-Qiang[†]

(College of Engineering and Applied sciences, PV Engineering Research Center, National Laboratory of Solid State Microstructures, Nanjing University, Nanjing 210093, China)

(Received 26 January 2013; revised manuscript received 12 April 2013)

Abstract

By investigating the difference between the analytic solutions obtained from commonly used two-dimensional effective medium theory and the numerical solutions, we found that any analytical solution was quite accurate only at its right normalized cycle, determined by its own effective range. Thus, one should solve the problem that “there was no closed-form solution for the effective permittivity of a two-dimensional zero-order grating”, and expand the applied scope of the effective medium theory to the boundary of zero-order diffraction. Secondly, by using the two-dimensional analytical solution, we have designed a nanowires anti-reflection layer in silicon, which fully meet the needs of the design that reach zero reflectance at 650 nm; and the spectrum averaged reflection from 310–1120 nm is 8%, lower than silicon nitride anti-reflection layer 9.9%. Stavenga formula can be used to design a large normalized period antireflective microstructure, while the Maxwell-Garnett formula can be used to design a small normalized cycle antireflective microstructure. Design of antireflection structure by two-dimensional closed form solution directly is viable, which have huge potential application value.

Keywords: zero-order diffraction grating, effective medium theory, anti-reflection for solar cell, nanowires array

PACS: 78.20.-e, 88.40.H-, 43.20.E, 61.46.Km

DOI: 10.7498/aps.62.157801

* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2010CB6307030), and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11074118, 11274164).

[†] Corresponding author. E-mail: yqqin@nju.edu.cn