

유전박막이 도포된 나노원뿔 패턴된 단결정 Si 기판의 광특성

김은아 · 박지민 · 고은지 · 김동욱*
물리학과, 이화여자대학교, 서울특별시, 03760

Optical Characteristics of Nanocone-patterned c-Si Wafers Coated with Dielectric Thin Films

Eunah Kim · Jimin Park · Eun-Ji Ko · Dong-Wook Kim*
Department of Physics, Ewha Womans University, Seoul, 03760, Korea

ABSTRACT: We investigated the influences of dielectric thin film coating on the optical characteristics of c-Si wafers with nanocone (NC) arrays using finite-difference time-domain (FDTD) simulations. Dielectric thin films on high-refractive-index surface can lower optical reflection and reflection dips appear at the wavelengths where destructive interference occurs. The optical reflection of the NC arrays was lower than that of the dielectric-coated planar wafer in broad wavelength range. Remarkable antireflection effects of the NC array could be attributed to beneficial roles of the NCs, including the graded refractive index, multiple reflection, diffraction, and Mie resonance. Dielectric thin films modified the optical reflection spectra of the NC arrays, which could not be explained by the interference alone. The optical properties of the dielectric-coated NC arrays were determined by the inherent optical characteristics of the NC arrays.

Key words: Antireflection, c-Si, Nanocone, Dielectric

Nomenclature

c-Si : crystalline silicon

subscript

AR : antireflection

NC : nanocone

FDTD : finite-difference time-domain

GRI : graded refractive index

1. 서론

결정질 실리콘(c-Si) 웨이퍼 기반 태양전지는 가격 경쟁력, 높은 효율, 탁월한 공정 완성도, 그리고 안정적 동작 특성 등으로 인하여 태양광 시장에서 압도적 점유율을 보이고 있다. 하지만, 간접형 천이 반도체인 실리콘의 광흡수 계수는 매우 작은 편이

어서 광흡수율을 증진하려는 다양한 연구 노력이 있어 왔다. 가장 보편적인 반사율 저감(AR, antireflection) 기술은 유전체 박막 도포와 표면 텍스처링(texturing) 등이 있다. 나노 공정의 지속적 진보에 따라, 나노 구조를 이용한 AR 기술이 급속히 발달하고 있는데 나노 구조를 이용하면 넓은 파장 영역에서 매우 뛰어난 AR 효과를 구현할 수 있다¹⁻⁸⁾. 하지만, 식각 과정에서 생기는 결함, 나노 구조에서는 도핑 농도의 공간적 분포 변화, 표면 광집속 효과 등이 심각한 광전하의 재결합 손실을 가져올 수 있어 패시베이션(passivation) 기술의 중요성이 대두되고 있다¹⁻³⁾.

본 연구에서는 넓은 파장 영역에서 뛰어난 AR 효과를 보이는 NC (nanocone) 배열 구조 위에 유전체 박막을 도포할 때 나타나는 반사율 변화를 조사하였다. 잘 알려진 대로 평평한 기판의 경우, 유전체 박막이 광반사율에 미치는 영향은 간섭 효과로 쉽게 설명할 수 있다. NC 구조의 광학적 특성도 단순한 간섭 효과로 설명이 될지 또는 다른 요인들에 대한 고려가 필요할지 고찰하는 것이 이 연구의 가장 중요한 목적이다. 이 결과를 바탕으로 c-Si NC 배열 구조의 광반사율을 극소화하기 위한 유전체 박막 증착 조건은 어떠한지 고찰해 보았다.

*Corresponding author: dwkim@ewha.ac.kr

Received February 16, 2017; Revised March 23, 2017;

Accepted March 24, 2017

2. 계산방법

본 연구에서는 FDTD (finite-difference time-domain) 계산을 통하여 유전체 박막도포가 실리콘 기판의 광반사율 스펙트럼에 미치는 영향을 연구하였다. 특히, 평평한(planar) 기판과 함께 표면에 NC 배열구조가 패턴된 실리콘 기판의 광특성을 비교하였다. 시뮬레이션은 상용 소프트웨어(Lumerical FDTD Solutions, V8.7.4)를 이용하였다. 일반적으로 실리콘 기판에 패시베이션 목적으로 도포하는 유전체 박막에는 Si_3N_4 , HfO_2 , Al_2O_3 등이 있는데 가시광선 영역에서 2.05 ~ 2.15의 굴절률을 갖는 HfO_2 박막을 도포한 경우를 조사하였다⁹⁾.

Fig. 1(a)에 보는 바와 같이 NC는 육각형 배열구조로 실리콘 기판 위에 형성되었으며, NC의 아래직경은 215 nm, 높이는 470 nm, 주기는 300 nm인 경우를 살펴 보았다. 계산에 필요한 실리콘의 광학상수는 Palik¹⁰⁾ 결과를 사용했으며, Fig. 1(a)에서처럼 입사광은 선형 편광된 빛이 수직 입사하는 경우를 고려하였다. 배열 구조는 단위 셀(unit cell)이 주기적으로 반복되기 때문에, 적절한 경계 조건을 부여하여 시료의 광특성을 계산할 수 있다. 과거 본연구진은 계산에서 고려한 NC 배열구조를 실제 제작하고 가시광선 영역에서 계산 결과와 거의 동일한 광 특성을 실험을 통하여 확인한 바 있다⁵⁾.

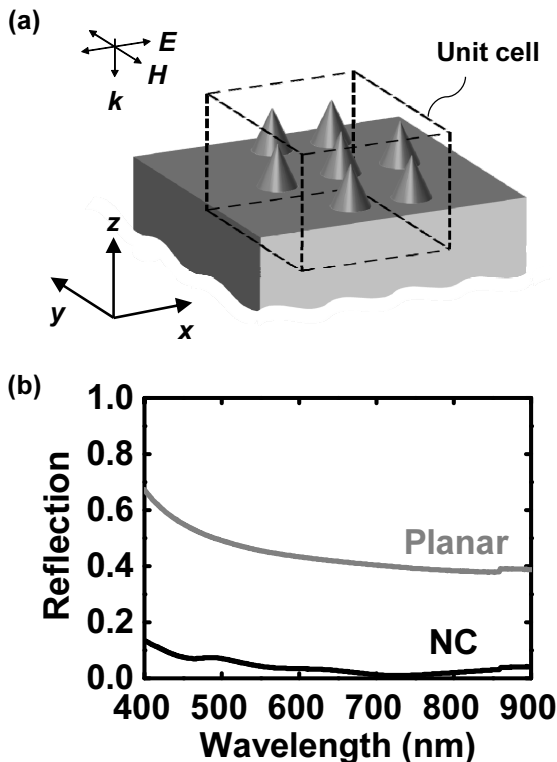


Fig. 1. (a) Schematic illustrations of the nanocone (NC) arrays and the unit cell used for the FDTD simulations. (b) Calculated optical reflection spectra of planar and NC Si wafers

3. 결과 및 고찰

Fig. 1(b)는 FDTD 계산으로 얻은 반사율 결과를 보여준다. 계산에서 고려한 전파장 영역에 걸쳐 NC 패턴된 실리콘 기판의 광 반사율이 평평한 실리콘 기판의 반사율보다 훨씬 작다. 이러한 광반사율 저감 효과는 GRI (graded refractive index), 다중 반사 (multiple reflection), 회절, Mie 공명 등에 기인한 것으로 알려져 있다²⁻⁵⁾. 원기둥 형태의 나노구조와 비교하면 NC 구조는 점진적 굴절률 변화로 넓은 파장 영역에서 더욱 뛰어난 AR 효과를 보이며, 도핑(doping)이나 전극 및 유전박막 증착 시에도 나노구조 전체 면적에 균일한 공정 수행이 가능하다는 장점이 있다^{3,4)}.

Fig. 2는 평평한 실리콘 기판에 유전박막이 도포되지 않은 (bare) 경우와 다양한 두께의 유전박막이 도포된 경우 나타나는 반사율 차이를 보여준다. 유전박막이 도포된 경우는 모두 반사율 값의 감소를 가져왔다. 첫째 이유는 유전박막의 굴절률 값이 실리콘의 굴절률 값보다는 작기 때문에 빛이 기판에 입사하면서 겪는 굴절률 값 차이를 줄여서 반사율을 감소시키기 때문이다.

다음으로 유전 박막의 두께에 따른 광반사율 차이를 살펴 보자. 30 nm인 경우를 제외하면 50, 100, 200 nm 유전박막이 도포된 경우는 파장이 400 ~ 900 nm인 영역에서 광반사율 값이 0인 경우가 나타난다. 이는 박막-공기 계면과 박막-실리콘 계면에서 반사한 빛이 상쇄 간섭을 일으키는 파장에 해당한다. 평평한 기판의 경우는 FDTD와 같은 수치해석 방법 대신 전달 행렬 (transfer matrix) 방법과 같은 해석적인 방법으로도 광 특성을 설명할 수 있다. Fig. 2에서 고려한 경우와 동일한 기판에 대하여 전달 행렬 방법으로 상쇄 간섭이 나타날 조건을 찾아보면 50 nm 유전박막에서는 파장이 410 nm일 때 상쇄 간섭 조건이 충족되고, 100 nm 유전박막에서는 파장이 820 nm일 때, 200 nm 유전박막에서는 파장이 546 nm일 때 상쇄 간섭이 나타남을 알 수 있다. 이와 같이 유전박막이 평평한 기판의 광반사율에 끼치는 영향은 유전박막과 실리콘의 굴절률 값의 차이 그리고 두께에 따

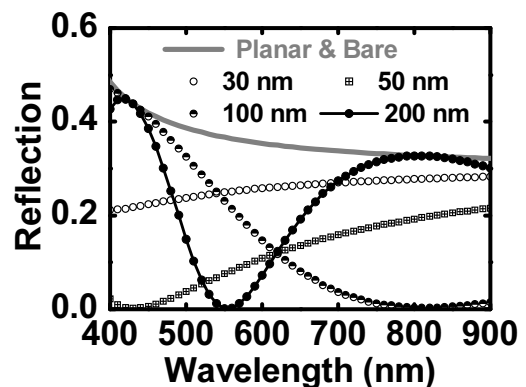


Fig. 2. Optical reflection spectra of bare and dielectric-coated planar Si wafers. The thickness of the dielectric thin films is varied from 30 to 200 nm

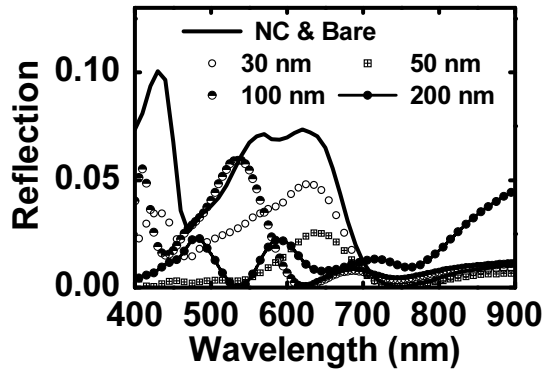


Fig. 3. Optical reflection spectra of bare and dielectric-coated NC-patterned Si wafers. The thickness of the dielectric thin films is varied from 30 to 200 nm

른 간섭 현상을 바탕으로 잘 설명할 수 있다.

Fig. 3은 표면에 NC 배열구조가 패턴된 실리콘 기판에 유전 박막이 도포되지 않은(bare) 경우와 다양한 두께의 유전박막이 도포된 경우 나타나는 반사율 스펙트럼을 보여준다. NC 구조는 파장이 400~900 nm인 영역에서 최대 반사율 값이 10% 정도일 정도로 낮은 반사율 값을 보인다. 또한, 파장이 450 nm 부근에서 반사율 극소값이 나타나고 700 nm 이상 파장에서는 매우 낮은 반사율 특성을 보인다. 이는 앞서 기술한 바와 같이 Mie 공명 모드를 포함한 NC 구조의 AR 특성에 기인한 것이다. 그 결과, 유전 박막이 NC 구조의 반사율에 끼치는 영향은 평평한 기판의 구조와는 큰 차이를 보인다.

먼저, 유전 박막의 두께가 30 nm와 50 nm인 경우를 살펴 보자. 유전 박막이 도포된 NC 시료를 보면 파장이 700 nm 이하일 때에는 반사율이 감소했고, 파장이 700 nm 이상인 영역에서는 반사율 차이가 미미하다. 두 경우 모두 700 nm 이하 파장에서 뚜렷한 반사율 감소가 나타났지만, 특히 50 nm 유전박막 경우 현격한 반사율 감소 효과가 나타나서 고려한 전체 파장 영역(400~900 nm)에서 최대 반사율 값은 2% 정도에 지나지 않았다. 평평한 시료에서도 30과 50 nm 유전 박막의 AR 효과가 짧은 파장에서 두드러졌고 50 nm 경우에 더 큰 반사율 감소를 보였다는 점은 유사하다. 50 nm 유전박막이 도포된 NC 시료의 경우에는 파장이 550 nm 이하 영역에서 반사율 값이 거의 0에 가깝게 나타난다. 반면, 50 nm 유전박막이 도포된 평평한 시료에서 파장이 410 nm일 때에 상쇄간섭이 나타났다.

다음으로 유전 박막의 두께가 100 nm인 경우를 살펴 보자. 100 nm 유전 박막도 더 얇은 유전 박막과 유사하게 파장이 700 nm 이하인 영역에서 반사율 감소를 보인다. 700 nm 이상 파장에서는 그 차이가 크지는 않지만, 유전박막이 도포된 NC의 반사율 값이 박막이 도포되지 않은 NC의 반사율 값보다 크게 나타났다. 또, 파장이 600 nm일 때에 100 nm 유전 박막이 도포된 NC 시료의 반사율 값이 0이 되었다는 점이 눈에 띈다. 평평한 시료에

서는 파장이 820 nm일 때에 상쇄 간섭이 나타났다. 200 nm 유전 박막은 파장이 700 nm 이하인 영역에서 대략 2% 이하의 낮은 반사율을 보였으며, 파장이 546 nm에서는 반사율 값이 0이 되었다. 546 nm는 평평한 기판에서 상쇄 간섭이 일어났던 점과 동일하다. 파장이 700 nm 이상인 영역에서는 유전 박막이 없는 경우보다 더 큰 반사율 값을 보인다.

이와 같이 NC 구조의 광반사율 특성은 평평한 시료와 비교하면, 뚜렷한 차이점을 다수 발견할 수 있다. 먼저, 평평한 시료에서 상쇄간섭에 의하여 반사율 값이 0이 되는 파장값에서 NC 구조의 반사율 값은 반드시 0이 되지는 않았다. 그 이유는 NC의 기울어진 옆면에 입사한 빛이 유전 박막에서 겪는 경로차는 평평한 면에 수직 입사한 빛이 겪는 경로차와 다르기 때문이다.

NC 구조의 AR 효과는 GRI, 다중 반사, 회절, Mie 공명 등에 기인하는데, 이들 효과들은 모두 NC 표면에 도포한 유전박막에 의하여 영향을 받는다. 유전 박막의 굴절률이 실리콘의 굴절률보다는 작지만 공기의 굴절률보다는 크기 때문에, 유전박막이 도포된 NC에서 GRI 효과는 줄어든다. 유전박막의 두께가 두꺼울수록 이 영향은 더욱 뚜렷해질 것이다. GRI 효과는 긴 파장 영역에서 주된 AR 효과의 원인이 된다. 따라서, 유전박막의 두께가 100과 200 nm인 NC에서 700 nm 이상 파장 영역에서의 반사율 값이 유전박막이 없는 경우의 반사율 값보다 더 큰 이유는 GRI 효과의 차이로 생각된다. 다중 반사의 경우는 짧은 파장 영역에서 주요한 AR 효과의 원인이 되는데, 유전 박막이 있으면 빛이 표면에서 반사되는 양 그리고 반사된 빛이 다시 표면에 입사할 때에 굴절되는 양상이 달라지게 된다. 이번 연구에서 고려한 모든 두께의 유전 박막이 700 nm 이하 짧은 파장 영역에서 반사율 값을 감소시킨 것으로 보아, 다중 반사의 경우에는 유전 박막이 긍정적 영향을 끼친 것으로 보인다. 유전박막이 존재하면 회절되는 빛의 세기와 Mie 공명에 의해 NC 내부에 집속되는 빛의 양에도 영향을 끼칠 수 있을 것이다. 이러한 모든 영향들을 해석적 방법으로 정량적으로 따져보는 일은 상당한 어려움이 예상된다. 따라서, 특정 나노구조에 맞는 바람직한 유전박막 도포 조건을 찾기 위해서는 본 연구에서와 같이 수치해석 방법을 유용하게 활용할 수 있을 것이다.

4. 결론

본 연구에서는 유전 박막이 실리콘 NC 배열구조의 광 특성에 끼치는 영향을 FDTD 계산 연구를 통하여 조사하여 보았다. NC 구조의 광 특성 양상은 평평한 기판과는 큰 차이를 보였다. 우리가 고려한 전체 파장 영역(400~900 nm)에서는 50 nm 유전 박막이 도포된 경우가 가장 낮은 반사율 특성을 보였다. 이 결과는 평평한 시료와는 달리, 파장보다 작은 크기의 나노구조에서 나타나는 고유한 광 특성을 이해하기 위해서는 파동 광학적 고찰이 반드시 이루어져야 한다는 점을 잘 보여준다. 이번 연구 결과

는 실리콘 나노구조 기반 광전자 소자에서 AR 효과 또는 패시베이션 목적으로 유전 박막을 도포하는 경우 최적화된 두께를 결정하기 위해서는 수치해석 방법이 유용하게 쓰일 수 있음을 잘 보여준다.

후 기

본 연구는 2013년도 산업통상자원부의 재원으로 한국에너지기술평가원(KETEP)의 지원을 받아 수행한 연구과제입니다 (No. 20123010010160).

References

1. J. Oh, H.-C. Yuan, and H. M. Branz, "An 18.2%-efficient black silicon solar cell achieved through control of carrier recombination", *Nat. Nanotech.* 7, pp. 743-748, 2012.
2. Y. Cho, E. Kim, M. Gwon, H. H. Park, J. Kim, and D.-W. Kim, "SiN_x layers on nanostructured Si solar cells: Effective for optical absorption and carrier collection", *Appl. Phys. Lett.* 107, p. 153101, 2015.
3. E. Kim, Y. Cho, A. Sohn, D.-W. Kim, H. H. Park, and J. Kim, "Surface photovoltage characterizations of Si nanopillar arrays for verifying field-effect passivation using a SiN_x layer", *Curr. Appl. Phys.* 16, pp. 141-144, 2016.
4. Y. Cho, M. Gwon, H.-H. Park, J. Kim, and D.-W. Kim, "Wafer-scale nanoconical frustum array crystalline silicon solar cells: promising candidates for ultrathin device applications", *Nanoscale* 6, pp. 9568-9573, 2014.
5. E. Kim, Y. Cho, K.-T. Park, J.-H. Choi, S.-H. Lim, Y.-H. Cho, Y.-H. Nam, J.-H. Lee, and D.-W. Kim, "Mie resonance-mediated antireflection effects of Si nanocone arrays fabricated on 8-in. wafers using a nanoimprint technique", *Nanoscale Res. Lett.* 10, pp. 1-5, 2015.
6. J. Kim, M. D. Kumar, J.-H. Yun, H.-H. Park, E. Lee, D.-W. Kim, H. Kim, M. Kim, J. Yi, H. Kim, and C. Jeong, "Transparent conductor-embedding nanolens for Si solar cells", *Appl. Phys. Lett.* 106, p. 151904, 2015.
7. K. J. Yu, L. Gao, J. S. Park, Y. R. Lee, C. J. Corcoran, R. G. Nuzzo, D. Chanda, and J. A. Rogers, "Light trapping in ultrathin monocrystalline silicon solar cells", *Adv. Energy Mater.* 3, pp. 1401-1406, 2013.
8. S. Kim, Y. Cho, A. Sohn, and D.-W. Kim, "Optical absorption enhancement for ultrathin c-Si solar cells using Ag nanoparticle and nano-hole arrays", *Curr. Photovolt. Res.* 4, pp. 64-67, 2016.
9. D. L. Wood, K. Nassau, T. Y. Kometani, and D. L. Nash, "Optical properties of cubic hafnia stabilized with yttria", *Appl. Opt.* 29, pp. 604-607, 1990.
10. E. D. Palik, "Handbook of optical constants of solids III", Academic Press, New York, 1998.