

Photon-Management in Dünnschicht-Solarzellen

Dissertation
zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

vorgelegt dem Rat der Physikalisch–Astronomischen Fakultät
der Friedrich–Schiller–Universität Jena

von Diplom–Physiker Stephan Fahr

geboren am 21.04.1980 in Spremberg

Gutachter

1. Prof. Dr. Falk Lederer, Friedrich–Schiller–Universität Jena, Deutschland
2. Prof. Dr. Bernd Rech, Technische Universität Berlin, Deutschland
3. Prof. Dr. Dietmar Knipp, Jacobs University Bremen, Deutschland

Tag der Disputation: 22.11.2011

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Grundlagen	6
2.1	Die Halbleitersolarzelle	6
2.1.1	Der intrinsische Halbleiter	6
2.1.2	Der dotierte Halbleiter	11
2.1.3	Der beleuchtete p-n-Übergang	12
2.2	Verwendete Materialien	16
2.2.1	Transparente leitfähige Oxide	16
2.2.2	Kristallines Silizium	17
2.2.3	Amorphes Silizium	18
2.2.4	Mikrokristallines Silizium	19
2.3	Grenzfälle der Konversionseffizienzen	19
2.3.1	Maximale Konversionseffizienzen solarer Energie	20
2.3.2	Das Shockley-Queisser-Limit	21
2.3.3	Anzahl der Einzelzellen	21
2.3.4	Konzentration und Lichtfallen	22
2.4	Optische Konzepte zur Steigerung der Effizienzen	23
2.4.1	Verbesserung der Einkopplung	24
2.4.2	Verbesserung der Absorption	25
2.4.3	Modifikation des Spektrums	28
2.5	Verwendete numerische Verfahren	29
2.5.1	Maxwellsche Gleichungen	29
2.5.2	Methode der finiten Differenzen im Zeitbereich	30
2.5.3	Fourier-Modal-Methode	32
2.5.4	Korringa-Kohn-Rostocker-Methode	35
2.5.5	Skalare Dünne-Elemente-Methode	37
2.5.6	Bestimmung der Kurzschlussstromdichte	38
2.5.7	Anmerkungen bezüglich optischer Konstanten	38
2.6	Zusammenfassung	39
3	Photon-Management in Einfachsolarzellen	40
3.1	Deterministische Oberflächentexturen	40
3.1.1	Biperiodisch angeordnete Nanokugeln	42
3.1.2	Weitere deterministische Strukturelemente	46
3.2	Anpassen des Streuverhaltens texturierter Oberflächen	48
3.2.1	Einfluss der Breite der Streuverteilung	50
3.2.2	Unterdrückung kurzer Wege	51

3.3	Zufällige Oberflächentexturen	53
3.3.1	Einfluss lateraler Skalierung	55
3.3.2	Einfluss vertikaler Skalierung	59
3.3.3	Einfluss der Absorberdicke	60
3.4	Einschränkung des Akzeptanzwinkels	63
3.4.1	Ideale winkel- und wellenlängenabhängige Filterfunktion	64
3.4.2	Realisierung eines einzigen Reflexionsbandes	66
3.4.3	Optimierung für ideale Materialien	68
3.4.4	Optimierung für reale Materialien	70
3.5	Zusammenfassung	73
4	Photon-Management in Tandemzellen	75
4.1	Dünnschicht-Tandemzellen	75
4.2	Zwischenreflektoren	76
4.3	Metallische Nanopartikel als Zwischenreflektoren	78
4.3.1	Implementierung metallischer Nanodisks	79
4.3.2	Optimierung der Geometrie	80
4.3.3	Verhalten unter schrägem Einfall	83
4.4	Zusammenspiel mit rauen Oberflächen	84
4.4.1	Photonischer Kristall als Zwischenreflektor	86
4.4.2	Vergleich der verschiedenen Zwischenreflektorkonzepte	88
4.5	Invertierter Opal als Zwischenreflektor	90
4.5.1	Verbesserung der Absorption der μcSi -Zelle	92
4.5.2	Numerische Validierung an realen Strukturen	96
4.6	Zusammenfassung	98
5	Zusammenfassung und Ausblick	99
	Literaturverzeichnis	101
	Publikationen	118
	Patente	118
	Buchkapitel	118
	Veröffentlichungen in begutachteten Zeitschriften	118
	Veröffentlichungen in Tagungsbänden	120
	Eingeladene Vorträge	121
	Konferenzbeiträge	121
	Lebenslauf	124
	Danksagung	126
	Erklärung	128

1 Einleitung

Was brauchen wir da noch
die dreckigen Kohlen?

(Eduard Rhein)

Um den Klimawandel zu verlangsamen und die mit ihm einhergehenden Probleme zu verringern, ohne dabei den aktuellen Lebensstandard zu gefährden, ist ein Umstieg auf eine auf erneuerbaren Energieträgern basierende Energieversorgung notwendig. Ein weiterer Ausbau der Wasserkraft gilt in Europa als ökonomisch wenig sinnvoll. Bei der Bioenergie wird Sonnenlicht mittels Photosynthese in Biomasse und anschließend in für den Menschen nutzbare Energie umgewandelt. Der Gesamtwirkungsgrad beträgt dabei weit weniger als 1 % [1, 2]. Die Geothermie hat den Nachteil der geringen Energiedichte und Wärmeleitfähigkeit des Erdbodens. Die Nutzung der Gezeiten und Wellen stellt sich bisher noch als technisch schwierig dar. Dementsprechend wird heutzutage neben der Nutzung von Wind- und Wasserkraft der Solarthermie und der auf Solarzellen basierenden Photovoltaik ein großes Potential zugeordnet [3]. Die Solarzellen absorbieren von der Sonne emittierte und auf der Erde einfallende Photonen mit ausreichender Energie, wobei durch die Absorption Valenzelektronen angeregt und ins Leitungsband gehoben werden. Durch die interne Asymmetrie der Solarzelle werden die entstandenen Elektron-Loch-Paare idealerweise getrennt, bevor sie rekombinieren können, und einem externen Stromkreis zugeführt. Dort können die Ladungsträger einen Teil ihrer Energie abgeben, um anschließend der Solarzelle wieder im Grundzustand zugeführt zu werden [4].

Erste photovoltaische Elemente wurden von Charles Fritts bereits im Jahr 1894 realisiert, die allerdings eher wegen ihrer Photoleitfähigkeit verwendet wurden. Seit dem Beginn der Verfügbarkeit von hochwertigem Silizium in den 1950ern konnten Solarzellen erstmals signifikante Leistungen bereitstellen [5]. Durch die anfänglich hohen Kosten war die Erforschung von Solarzellen hauptsächlich auf Anwendungen im Weltraum beschränkt. Mit der Ölkrise in den 1970ern rückten regenerative Energieträger allerdings erstmals in den Fokus der breiten Öffentlichkeit. Gestiegene Forschungsausgaben führten in der Folge dann auch zu alternativen Materialien, wie amorphem Silizium und organischen Halbleitern, und den Tandem- und Multizellkonzepten. Darüber hinaus stellten sich Solarzellen als ideale Energiequellen heraus,

wenn es sich um geringe, aber schwierig bereitzustellende Leistungen handelte [6].

In den 1980ern und 1990ern wurde der Markt von waferbasierten Zellen dominiert, für deren Herstellung sowohl die Werkzeuge als auch die Siliziumreste der Halbleiterindustrie verwendet wurden. Des Weiteren konnten dank umfangreicher Fördermaßnahmen, speziell in Europa und Japan, die Herstellungskosten gesenkt und die Zell- und Moduleffizienzen kontinuierlich gesteigert werden. Diese beiden Faktoren resultierten in einer jährlichen Steigerung der Produktion zwischen 15 % und 25 % [4] und einer 80 % Lernkurve [7] (entspricht einer Senkung der Kosten auf 80 % bei Verdopplung der kumulierten Produktion).

Gegen Ende dieser Periode etablierte sich die Photovoltaik als eigener Industriezweig mit extra für ihre Zwecke gefertigten Anlagen und Materialien. Der Anschluss von Solarzellen an das Stromnetz in Verbindung mit einer festgelegten Einspeisevergütung sorgte für die nötigen stabilen Bedingungen für Investoren und erlaubte so Wachstumsraten von ungefähr 40 % zwischen 2000 und 2007 [8].

Obwohl sich die klassischen waferbasierten Zellen durch Langlebigkeit und Verlässlichkeit auszeichneten, stieg gleichzeitig der Marktanteil von Dünnschichtszellen. Solche Zellen können potentiell mit weniger Material- und Energieaufwand nebst niedrigeren Kosten gefertigt werden, was sich letztendlich in einem kleineren Verhältnis von Kosten zu generierter Leistung pro Fläche und in kürzeren Energierückgewinnungszeiten [9] bemerkbar macht. Auf Grund der reduzierten zurückzulegenden Wegstrecke der Ladungsträger innerhalb des dünneren Absorbers kann auch auf qualitativ schlechteres Ausgangsmaterial zurückgegriffen werden. Um diese Vorteile noch weiter auszubauen, ist die Forschung und Industrie bestrebt, die Absorberdicken noch weiter zu reduzieren. Um dabei nach wie vor eine hohe Absorption des einfallenden Lichtes zu gewährleisten, besteht der Bedarf an einem effektiven *Photon-Management*. Unter diesem Begriff sind im Allgemeinen diejenigen Methoden gebündelt, die optische Effekte zur Erhöhung der Solarzelleneffizienz ausnutzen, wie zum Beispiel die Reduzierung der Reflexionsverluste, die Streuung des Lichtes zur Verlängerung des effektiven Lichtwegs im Absorber sowie die spektrale Veränderung oder die Konzentration des einfallenden Lichtes.

Die vorliegende Dissertation behandelt verschiedene Konzepte des Photon-Managements in Dünnschicht-Solarzellen, wobei die numerische Evaluierung der verschiedenen vorgestellten Möglichkeiten eine große Rolle spielt. Dabei verbessern die hier vorgestellten Konzepte ausschließlich die optischen Eigenschaften der untersuchten Solarzelle. Die damit einhergehenden Auswirkungen auf die elektronischen Eigenschaften der Solarzelle, die in letzter Konsequenz vielleicht auch gegen das jeweilige Photon-Management sprechen, werden hingegen nicht betrachtet. Die Stärke der Arbeit ist vielmehr in der exakten Behandlung der optischen Eigenschaften und da-

mit präzisen Bestimmung des Absorptionsverhaltens angesiedelt. Die Präsentation der Ergebnisse ist in vier Kapitel unterteilt. Im folgenden, zweiten Kapitel werden zunächst die für die Photovoltaik relevanten Prozesse in einer Halbleitersolarzelle dargestellt. Daran schließt sich eine Diskussion der erreichbaren Wirkungsgrade und bisher dokumentierter Ansätze zum Photon-Management an. Abgeschlossen wird das Kapitel mit einer Beschreibung der numerischen Methoden, mit denen die Wechselwirkung des einfallenden Lichtes mit der Solarzelle im Rahmen dieser Dissertation behandelt wurde.

Gegenstand des dritten Kapitels sind Einfachsolarzellen, also Solarzellen, bei denen die photovoltaische Konversion in nur einem Absorber stattfindet. Anfänglich werden Oberflächentexturen und deren Optimierung in Bezug auf eine verbesserte Absorption diskutiert, wobei der Absorber selbst als planare Schicht angenommen wird. Im weiteren Verlauf werden auch Solarzellen diskutiert, bei denen der Absorber konform auf einem texturierten Superstrat abgeschieden ist. In diesem Zusammenhang wird gezeigt, wie ein fundamentales Limit bezüglich des Absorptionsverhaltens mit heutigen Oberflächentexturen erreicht werden kann. Am Ende des Kapitels wird ein Filter vorgestellt, der das einfallende Licht in der Zelle konzentriert und so zum einen die Absorption verbessert und zum anderen dazu beiträgt, die Verluste durch strahlende Rekombination zu minimieren.

Im vierten Kapitel dieser Dissertation liegt der Fokus auf Tandemsolarzellen. Dabei werden zuerst die dabei auftretenden Probleme benannt und das Konzept des Zwischenreflektors zur räumlichen Steuerung der Absorption des Lichtes eingeführt. Anschließend wird ein neues Konzept für einen solchen Zwischenreflektor präsentiert, dessen Funktionalität auf den speziellen optischen Eigenschaften von metallischen Nanopartikeln basiert. Daraufhin wird gezeigt, dass sich mit der Implementierung eines Zwischenreflektors zusammen mit der Verwendung von texturierten Oberflächen höhere Wirkungsgrade erzielen lassen, als wenn nur eines dieser beiden Konzepte zum Tragen kommt. Abgeschlossen wird das Kapitel von Untersuchungen über die Implementierung eines invertierten Opals als Zwischenreflektor.

Das fünfte Kapitel fasst die Dissertation zusammen und gibt einen kurzen Ausblick auf weitere Fragestellungen.

2 Grundlagen

Neun Zehntel aller wissenschaftlichen Arbeit
ist stumpf machende Mühe.

(Adolf von Harnack)

2.1 Die Halbleitersolarzelle

In einem einfachen Modell einer Solarzelle werden einfallende Photonen absorbiert, wobei Valenzelektronen angeregt und ins Leitungsband gehoben werden und entsprechend Löcher im Valenzband verbleiben. Die angeregten Ladungsträger bewegen sich anschließend frei oder durch interne Felder getrieben. Die Weglängen, die dabei zurück gelegt werden können, sind durch die Lebensdauer und die Beweglichkeit der Ladungsträger determiniert. Durch die Bewegung und eine interne Asymmetrie der Solarzelle, beispielsweise eine räumlich variierende Dotierung, werden die Ladungsträger räumlich getrennt. Die angeregten Ladungsträger können dann an den jeweiligen externen Kontakten abfließen, wobei sie einen Teil ihrer Energie an einen externen Verbraucher abgeben und so der Solarzelle wieder im Grundzustand zugeführt werden können. All diese Prozesse lassen sich mit gleichzeitig n- und p-dotierbaren Halbleitern realisieren, während die Umsetzung zum Beispiel mit Metallen an den zu kurzen Lebensdauern und im Falle von ionischen Kristallen an der zu geringen Beweglichkeit scheitert. Zum weiteren Verständnis wird im Folgenden ein p-n-Übergang in einem Halbleiter betrachtet. Dabei wird gezeigt, dass ein solcher p-n-Übergang zur Trennung der angeregten Ladungsträger benutzt werden kann, und eine idealisierte Strom-Spannungs-Kennlinie hergeleitet.

2.1.1 Der intrinsische Halbleiter

Der zuerst betrachtete intrinsische ideale Halbleiterkristall ist durch die Valenzbandkante E_V und die Leitungsbandkante E_L charakterisiert. Im thermischen Gleichgewicht kann die Besetzung der Zustände bei der Temperatur T in den Bändern durch die jeweilige Fermi-Funktion $f(E)$ mit der Fermi-Energie E_F [siehe Abb. 2.1 a)] und

der Boltzmann-Konstante k_B beschrieben werden:

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{E-E_F}{k_B T}\right]}. \quad (2.1)$$

Angeregte Elektronen im Leitungsband verhalten sich analog zu freien Teilchen, allerdings mit einer sich aus der Bandstruktur ergebenden effektiven Masse. Die Dichte der Elektronen im Leitungsband n kann mit der Zustandsdichte $Z(E)$ [siehe Abb. 2.1 b)] durch

$$n = \int_{E_L}^{\infty} f(E)Z(E)dE \quad (2.2)$$

ausgedrückt werden. Für $E_L - E_F \gg k_B T$ und eine wurzelförmige Zustandsdichte in der Nähe der Bandkante (Halbleiterkristall) lässt sich die Integration ausführen, wobei ausgenutzt wird, dass die Fermi-Energie schneller abfällt, als die Zustandsdichte ansteigt, und man erhält mit der effektiven Zustandsdichte N_L , die von der Temperatur T und der konkreten Bandstruktur des Halbleiters abhängt [10]:

$$n = N_L \exp\left[\frac{E_F - E_L}{k_B T}\right]. \quad (2.3)$$

Analog gilt für die Dichte der angeregten Löcher im Valenzband

$$p = N_V \exp\left[\frac{E_V - E_F}{k_B T}\right], \quad (2.4)$$

mit der effektiven Zustandsdichte N_V . Aus Gl. (2.3) und Gl. (2.4) folgt dann für die intrinsische Dichte n_i aus dem Ansatz $n=p$:

$$n = p = n_i = \sqrt{N_L N_V} \exp\left[\frac{E_V - E_L}{2k_B T}\right]. \quad (2.5)$$

Einsetzen in Gl. (2.3) liefert:

$$E_F = \frac{E_V + E_L}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{N_V}{N_L}. \quad (2.6)$$

Die Dichte der beweglichen Ladungsträger im intrinsischen Halbleiter ist also durch die Bandlücke $E_G = E_V - E_L$ und die Temperatur bestimmt, während die Fermi-Energie näherungsweise in der Mitte der Bandlücke liegt.

In einem Halbleiter, der der Wärmestrahlung aus seiner Umgebung ausgesetzt ist, werden permanent Elektron-Loch-Paare durch Absorption dieser Strahlung erzeugt. Im Gleichgewicht rekombinieren aber auch entsprechend viele Elektron-Loch-Paare, um eben jene thermische Hintergrundstrahlung wieder an die Umgebung abzuge-

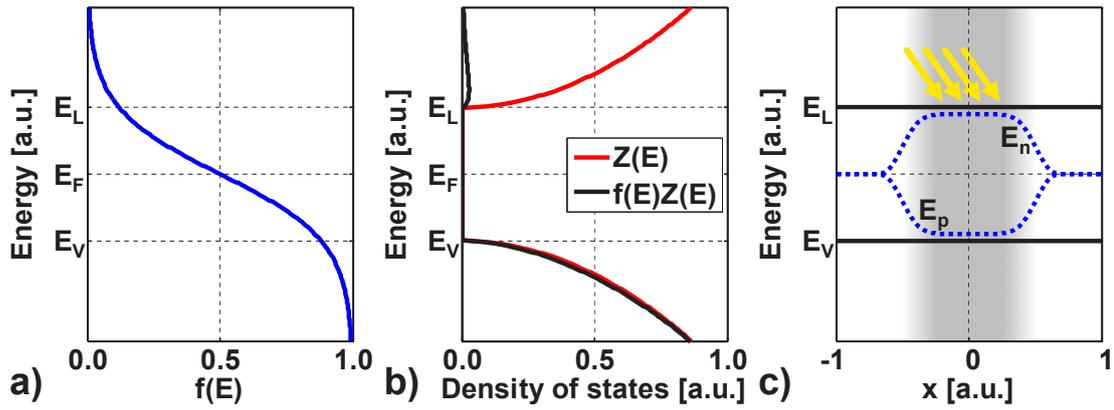


Abb. 2.1: a) Fermi-Funktion $f(E)$. b) Zustandsdichte $Z(E)$ und Dichte der besetzten Zustände $f(E)Z(E)$. c) Aufspaltung der Fermi-Energie in Quasi-Fermi-Energien durch zusätzliche Anregung von Elektron-Loch-Paaren unter Beleuchtung.

ben und so den Halbleiter im thermischen und strahlenden Gleichgewicht mit der Umgebung zu halten.

Durch Absorption von Photonen einer zusätzlichen Lichtquelle werden weitere Elektronen im Leitungsband und Löcher im Valenzband generiert. Für Photonenergien, die größer als die Bandlücke sind ($h\nu > E_G$, mit dem planckschen Wirkungsquantum h), werden auch von den Bandkanten entfernte Zustände entgegen Gl. (2.1) besetzt. Man spricht in diesem Zusammenhang auch von heißen Ladungsträgern. Durch Stöße mit Phononen und anderen Ladungsträgern wird jedoch nach Zeiträumen im Sub-ps-Bereich das thermische Gleichgewicht jedes Bandes mit dem Halbleiter [4, 11] erreicht. Das heißt, dass Elektronen und Löcher wieder vermehrt Zustände nahe den Bandkanten besetzen. Die überschüssige Energie wird dabei in Form von Wärme (Gitterschwingungen) abgegeben; man spricht in diesem Zusammenhang von Thermalisierungsverlusten. Für die Betrachtung von Inter-Band-Prozessen, welche deutlich unwahrscheinlicher sind und entsprechend auf Zeitskalen von ns bis μ s ablaufen, kann also ein sich instantan einstellendes thermisches Quasi-Gleichgewicht angenommen werden. Um das neue Gleichgewicht konsistent zu den bisherigen Beziehungen zu beschreiben, werden die Quasi-Fermi-Energien E_n für die Elektronen und E_p für die Löcher eingeführt [siehe Abb. 2.1 c)]. Ersetzen von E_F durch E_n in Gl. (2.3) und Umstellen nach E_n ergibt dann:

$$E_n = E_L + k_B T \ln \frac{n}{N_L}, \quad (2.7)$$

und analog für E_p

$$E_p = E_V - k_B T \ln \frac{p}{N_V}. \quad (2.8)$$

Analog zu Gl. (2.5) gilt dann noch:

$$np = n_i^2 \exp \left[\frac{E_n - E_p}{k_B T} \right]. \quad (2.9)$$

In Solarzellen ist die Absorption von Photonen der wichtigste Prozess zur Erzeugung von zusätzlichen Elektron-Loch-Paaren. Die entsprechende Generationsrate G ist dabei unter Vernachlässigung von Stoßionisation [12] und Absorption durch freie Ladungsträger durch

$$G(\mathbf{r}) = \int_0^\infty a(\mathbf{r}, \lambda) \Phi_{\text{Sun}}(\lambda) d\lambda \quad (2.10)$$

gegeben, wobei $a(\mathbf{r}, \lambda)$ die spektral und orts aufgelöste Absorptivität und $\Phi_{\text{Sun}}(\lambda)$ das einfallende Sonnenspektrum in Photonen pro Fläche, Zeit- und Wellenlängenintervall bezeichnet.

Für die Rekombination von Elektron-Loch-Paaren gibt es mehrere Möglichkeiten. Die strahlende Rekombination, auch als spontane Emission bezeichnet, ist prinzipbedingt wegen der Reziprozität von Emissivität und Absorptivität [13] unvermeidbar. Die Rekombinationsrate R_{Rad} kann gemäß

$$R_{\text{Rad}} = B(np - n_i^2) \quad (2.11)$$

mit der Konstanten B (für Si in der Größenordnung von $10^{-15} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$) beschrieben werden. Insbesondere bei dicken Zellen gilt es zu beachten, dass das emittierte Licht auch wieder reabsorbiert werden kann, es also per se nicht für die Ladungsträgergeneration verloren ist.

Ein weiterer (nahezu) unvermeidbarer Prozess ist die sogenannte Auger-Rekombination. Dabei rekombinieren ein Elektron und ein Loch unter nichtstrahlender Abgabe der freigesetzten Energie an einen weiteren Ladungsträger. Dieser relaxiert anschließend in seinem Band durch Wechselwirkung mit Phononen. Hier ist folglich eine Reabsorption nicht möglich, sodass dieser Verlustmechanismus möglichst unterdrückt werden muss. Bei diesem Dreiteilchenprozess gilt entsprechend für die Rekombinationsrate R_{Aug} mit den Konstanten C_n und C_p (für Si in der Größenordnung von $10^{-30} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$):

$$R_{\text{Aug}} = np(nC_n + pC_p) - R_{\text{Aug}0}. \quad (2.12)$$

Die Größe $R_{\text{Aug}0}$ steht für die Rekombinationsprozesse ohne zusätzliche Beleuchtung. Von besonderer Bedeutung ist dieser Prozess in hochdotierten Halbleitern, da dort die Dichte der angeregten Ladungsträger näherungsweise durch die Dichte der Dotieratome gegeben ist.

Ein weiterer wichtiger Prozess ist die Shockley-Read-Hall-Rekombination [14, 15]. Dabei rekombinieren Elektronen und Löcher an Defekten mit Energieniveaus E_T innerhalb der Bandlücke mit der Rate R_{SRH} ,

$$R_{\text{SRH}} = \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n + n_0) + \tau_n(p + n_i^2/n_0)}. \quad (2.13)$$

Hierbei steht τ_p für die Lebensdauer eines Loches, wenn alle Defekte mit Elektronen besetzt sind, und entsprechend τ_n für die Lebensdauer eines Elektrons, wenn alle Defekte mit Löchern besetzt sind. Die Größe n_0 berechnet sich gemäß Gl. (2.3) mit $E_F = E_T$. Für Defektniveaus in der Mitte der Bandlücke ist die Rekombinationsrate am größten und beeinträchtigt die Lebensdauer der Elektron-Loch-Paare am stärksten [10]. Dieser Prozess ist durch Verbesserungen der Qualität der Halbleiterkristalle und eine Verringerung von Defektdichten entlang von Oberflächen durch entsprechende Passivierung minimierbar.

Die Bewegung der Elektronen im Leitungsband und der Löcher im Valenzband wird durch den Gradienten der zugehörigen Quasi-Fermi-Energie bestimmt. Die lokale Stromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ lässt sich dann mit den Beweglichkeiten für Elektronen und Löcher, μ_n und μ_p , folgendermaßen ausdrücken:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = n\mu_n \text{grad}E_n(\mathbf{r}) + p\mu_p \text{grad}E_p(\mathbf{r}), \quad (2.14)$$

wobei der erste Summand für den Anteil der Elektronen und der zweite für den Anteil der Löcher steht. Schlussendlich ergeben sich folgende Bilanzgleichungen mit der alle Rekombinationen beinhaltenden Rate R [10] und der Elementarladung e :

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = G(\mathbf{r}) - R(\mathbf{r}) + \text{div} \left[\frac{n\mu_n}{e} \text{grad}E_n(\mathbf{r}) \right], \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial p(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = G(\mathbf{r}) - R(\mathbf{r}) - \text{div} \left[\frac{p\mu_p}{e} \text{grad}E_p(\mathbf{r}) \right]. \quad (2.16)$$

Das heißt, eine zusätzliche Beleuchtung führt zunächst zu einer Verschiebung der Quasi-Fermi-Energien. Daraufhin werden die angeregten Ladungsträger durch den nun vorhandenen Gradienten aus der beleuchteten Zone getrieben. Überall rekombinieren des Weiteren überschüssige Elektronen und Löcher, sodass sich in einiger Entfernung vom beleuchteten Halbleiter der Gleichgewichtszustand für den unbelichteten Halbleiter einstellt [siehe Abb. 2.1 c)]. An dieser Stelle sei noch angemerkt, dass ein Spannungsmessgerät eben nur in der Lage ist, Differenzen in der Fermi-Energie zu messen [10].

2.1.2 Der dotierte Halbleiter

Durch Zugabe von geeigneten Fremdatomen (Dotierung) können zusätzliche Energieniveaus bereitgestellt werden, die idealerweise nur wenige 10 meV von den Leitungsbandkanten entfernt sind. Dadurch können die Dotieratome leicht thermisch ionisiert werden. Donatoren (n-Dotierung) können ein Elektron in das Leitungsband abgeben und besitzen ihr Energieniveau E_D idealerweise knapp unter E_L . Akzeptoren (p-Dotierung) wiederum können ein Elektron aus dem Valenzband aufnehmen und sind durch ein Energieniveau E_A knapp über E_V gekennzeichnet. Im Folgenden bezeichne N_{D+} in einem n-dotierten Halbleiter die Dichte der Donatoren, die ein Elektron abgegeben haben. Die Größe N_{D+} ist dann durch

$$N_{D+} = \frac{N_D}{1 + 2 \exp\left[\frac{E_F - E_D}{k_B T}\right]} \quad (2.17)$$

gegeben, wobei N_D der Dichte aller Donatoratome entspricht. Die Gültigkeit der Gleichungen (2.3)-(2.5) bleibt davon unberührt. Des Weiteren ist die Bilanz der angeregten Ladungsträger durch

$$p + N_{D+} = n \quad (2.18)$$

gegeben. Da im Allgemeinen bei tiefen Temperaturen $|E_F - E_V| \gg |E_L - E_F| \approx |E_F - E_D| \gg k_B T$ gilt, werden nahezu alle angeregten Elektronen von den Donatoren stammen, also $p \ll n$ und $n \approx N_{D+}$. Ausgehend von Gl. (2.3) gilt dann näherungsweise

$$E_F = \frac{E_D + E_L}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{N_D}{2N_L}. \quad (2.19)$$

Einsetzen von Gl. (2.19) in Gl. (2.3) führt zu:

$$n = \sqrt{\frac{N_L N_D}{2}} \exp\left[\frac{E_D - E_L}{2k_B T}\right]. \quad (2.20)$$

Im Gegensatz dazu sind bei Raumtemperatur nahezu alle Donatoren ionisiert [10], $n = N_D$, und die Fermi-Energie ist durch

$$E_F = E_L + k_B T \ln \frac{N_D}{N_L} \quad (2.21)$$

gegeben. Für beide Temperaturfälle ist daraus ersichtlich, dass sich die Fermi-Energie durch Dotieren verschieben lässt. Es sei noch angemerkt, dass ähnliche Beziehungen auch für die Dotierung mit Akzeptoren gelten.

Da im Allgemeinen für unkonzentrierte Beleuchtung im n-dotierten Halbleiter $n=N_D \gg p$ gilt, ist zusammen mit Gl. (2.14) ersichtlich, dass die Leitfähigkeit durch die Elektronen im Leitungsband dominiert ist – er also im Vergleich eine Barriere für Löcher darstellt [10]. Umgekehrt leitet ein p-dotierter Halbleiter besonders gut Löcher, während der Transport der Elektronen auf Grund ihrer geringeren Dichte behindert ist.

2.1.3 Der beleuchtete p-n-Übergang

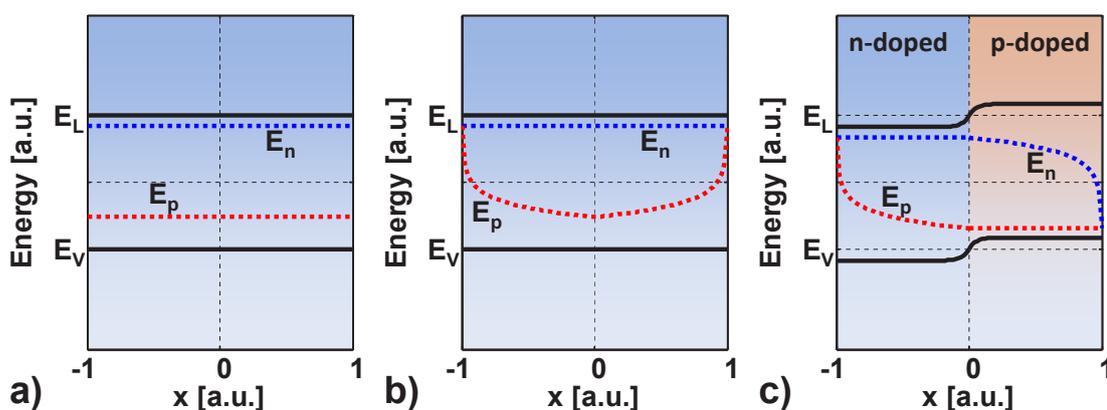


Abb. 2.2: a) Schematische Darstellung der Energieniveaus in einem n-dotierten Halbleiter mit konstanter Generationsrate. b) Energieniveaus eines Halbleiters, der bei $|x|=1$ durch eine Oberfläche begrenzt ist, die eine hohe Dichte an Rekombinationszentren hat. c) Energieniveaus eines symmetrischen p-n-Übergangs mit homogener Generationsrate und verschwindendem externen Stromfluss.

Abbildung 2.2 a) zeigt schematisch die Lage der Energieniveaus eines homogenen n-dotierten Halbleiters mit konstanter Generationsrate. Durch die Generation steigt die Elektronen- und Löcherdichte und damit auch die Rekombinationsrate, bis sich beide Prozesse gegenseitig kompensieren. In dem dargestellten Fall der schwachen Anregung ist die Dichte der Dotieratome N_D deutlich größer als die Dichte der generierten Elektron-Loch-Paare. Dadurch ändert sich an der Größenordnung von $n \approx N_D$ nichts, und für E_n kann Gl. (2.21) herangezogen werden. Im Gegensatz dazu wird p drastisch verändert, sodass E_p durch Beleuchtung vom Wert für den unbeleuchteten Halbleiter gemäß Gl. (2.8) abweicht. Dadurch kommt es zu der sichtbaren asymmetrischen Aufspaltung der Quasi-Fermi-Energien.

Abbildung 2.2 b) zeigt den schematischen Verlauf von $E_n(x)$ und $E_p(x)$ für einen homogenen n-dotierten Halbleiter erneut mit konstanter Generationsrate, der in diesem Fall allerdings bei $|x|=1$ begrenzt ist. An den Oberflächen soll die Rekombination dominieren, sodass Verhältnisse wie im unbeleuchteten Zustand herrschen, also die Lage der Quasi-Fermi-Energie $E_n(|x|=1) = E_p(|x|=1) = E_F$ gemäß Gl. (2.21)

allein durch die Dotierung bestimmt ist. Durch die Generation steigen innerhalb des Volumens n und p . Folglich gilt auch $E_n(|x|<1) > E_F$ und $E_p(|x|<1) < E_F$. Auf Grund der Symmetrie hat E_n bei $x=0$ ein Maximum und E_p ein Minimum. Somit fließen alle angeregten Elektronen und Löcher mit $x<0$ nach links und mit $x>0$ nach rechts. Da die Generationsrate konstant ist, fließen nach links genauso viele Elektronen (und Löcher) wie nach rechts und der Gesamtstrom verschwindet. Für die Rekombination an der Oberfläche müssen Elektronen- und Löcherstrom vom Betrag her gleich sein. Auf Grund von $n \gg p$ ist die Leitfähigkeit der Löcher deutlich kleiner als die der Elektronen und folglich ist von E_p ein deutlich größeres Gefälle als von E_n nötig, um die Löcher in die Rekombinationszone zu drängen.

Werden ein n- und ein p-dotierter Halbleiter in Kontakt gebracht, liegt ein sogenannter p-n-Übergang vor. Abbildung 2.2 c) zeigt den schematischen Verlauf von $E_n(x)$ und $E_p(x)$ für einen symmetrischen ($N_A=N_D$, $N_V=N_L$) p-n-Übergang mit konstanter Generationsrate und dominierender Oberflächenrekombination. Die Diskussion der n-dotierten Seite verläuft analog zu Abb. 2.2 b). Die p-dotierte Seite ist so stark dotiert, dass p durch die Dichte der Akzeptoren N_A bestimmt ist, also $p \approx N_A$. Die Dichte an Elektronen im Leitungsband ist nunmehr durch die Generations- und Rekombinationsrate und den Fluss zur Oberfläche analog zu den Löchern auf der n-dotierten Seite bestimmt. Bei $x=0$ wird die Stetigkeit von $E_n(x)$ und $E_p(x)$ und ihrer Gradienten gefordert, was zu den verschmierten Sprüngen von $E_V(x)$ und $E_L(x)$ um $x=0$ führt. Damit der Gesamtstrom verschwindet, muss unter Beachtung der Symmetrie das Maximum von E_n und das Minimum von E_p weiterhin bei $x=0$ liegen. Die Differenz

$$U = E_n(x=-1) - E_p(x=1) \quad (2.22)$$

entspricht der messbaren Spannung und wird für den Fall eines verschwindenden externen Stromflusses als Leerlaufspannung U_{OC} bezeichnet.

In einem weiteren Schritt wird die linke Seite mit der rechten Seite über einen externen Widerstand in Kontakt gebracht. Dadurch ergibt sich ein nichtverschwindender Gesamtstrom I . Das bedeutet, dass nun weniger Löcher zum linken Kontakt und weniger Elektronen zum rechten Kontakt getrieben werden müssen; das Maximum von E_n verschiebt sich also zu positiven x und das Minimum von E_p zu negativen x [siehe Abb. 2.3 a)].

Für die Herleitung des Zusammenhangs von $I(U)$ geht man davon aus, dass der relevante Anteil von I aus dem Bereich X stammt, in dem sich die Quasi-Fermi-Energien E_n und E_p nur wenig ändern. Des Weiteren wird das Problem auf eine eindimensionale Beschreibung reduziert. Der insgesamt fließende Strom I ergibt sich dann im stationären Fall aus dem Elektronenstrom [10] gemäß Gl. (2.15) und mit

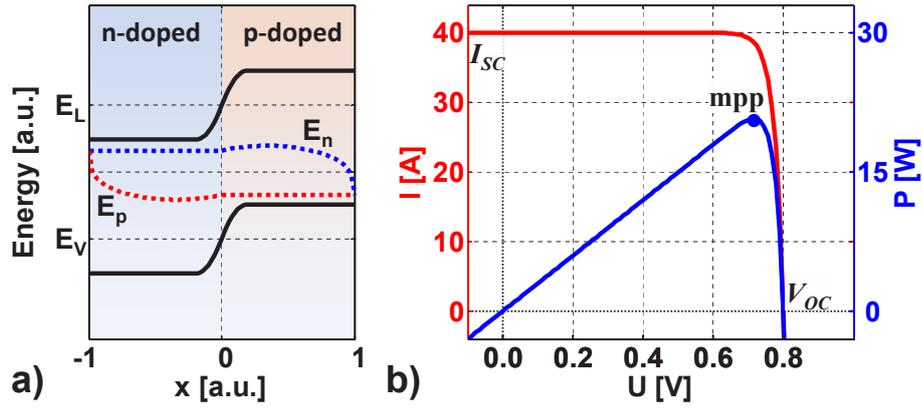


Abb. 2.3: a) Schematische Darstellung der Energieniveaus eines symmetrischen p-n-Übergangs mit homogener Generationsrate und nichtverschwindendem externen Stromfluss. b) Strom und abgegebene Leistung über der Spannung.

der bestrahlten Fläche A zu:

$$I = Ae \int_X G(\mathbf{r}) - R(\mathbf{r}) dx, \quad (2.23)$$

wobei das Integral nur über den relevanten Teilbereich X verläuft. Im idealen Fall, für den nur strahlende Rekombination vorliegt, lässt sich die Rekombinationsrate im relevanten Volumen unter Beachtung von Gl. (2.9) und Gl. (2.11) als

$$R = B(np - n_i^2) = Bn_i^2 \left\{ \exp \left[\frac{E_n - E_p}{k_B T} \right] - 1 \right\} \quad (2.24)$$

schreiben. Mit $E_n - E_p = eU$ ergibt sich für den Strom:

$$I = eA \int_X G(\mathbf{r}) - R(\mathbf{r}) dx = eA \int G(\mathbf{r}) dx - I_0 \left\{ \exp \left[\frac{eU}{k_B T} \right] - 1 \right\}. \quad (2.25)$$

Für den Fall des Kurzschlusses ($U=0$) ergibt sich demnach:

$$I = eA \int G(\mathbf{r}) dx = I_{SC}. \quad (2.26)$$

Der Kurzschlussstrom I_{SC} hängt dabei direkt mit der Generation von Elektron-Loch-Paaren, also mit der Absorption des Halbleiters und dem einfallenden Sonnenspektrum, zusammen. Der Dunkelstrom I_0 hingegen ist durch die Rekombinationsmechanismen gegeben und erhöht sich mit steigender Temperatur. Beide Ströme sind proportional zur bestrahlten Fläche. Für den Vergleich von Solarzellen nutzt man entsprechend die auf die Flächen normierten Stromdichten $J_{SC} = I_{SC}/A$ und $J_0 = I_0/A$. Zusammengefasst lässt sich die $I(U)$ -Kennlinie mit den zwei Größen J_{SC} und J_0 in

Form der Diodengleichung schreiben:

$$I(U) = AJ_{\text{SC}} - AJ_0 \left\{ \exp \left[\frac{eU}{k_{\text{B}}T} \right] - 1 \right\}. \quad (2.27)$$

Abbildung 2.3 b) zeigt einen exemplarischen Verlauf von $I(U)$ und $P(U)$. Die Leerlaufspannung ($I=0$) berechnet sich nach Umstellen von Gl. (2.27) durch

$$U_{\text{OC}} = \frac{k_{\text{B}}T}{e} \ln \left(1 + \frac{J_{\text{SC}}}{J_0} \right). \quad (2.28)$$

Die abgegebene Leistung, $P=UI$, erreicht ihr Maximum am sogenannten *maximum power point* [mpp, siehe Abb. 2.3 b)] bei der Spannung U_{mpp} und dem Strom I_{mpp} . Die Suche nach der Nullstelle von $\frac{\partial P}{\partial U}$ führt nach Umstellen und Verwenden von Gl. (2.28) auf die implizite Gleichung:

$$U_{\text{mpp}} = \frac{k_{\text{B}}T}{e} \left\{ \exp \left[\frac{e(U_{\text{OC}} - U_{\text{mpp}})}{k_{\text{B}}T} \right] - 1 \right\}. \quad (2.29)$$

Daraus ist ersichtlich, dass U_{mpp} mit steigender Leerlaufspannung wächst. Die Leerlaufspannung wiederum lässt sich gemäß Gl. (2.28) durch eine Erhöhung der Anzahl der einfallenden Photonen (größeres J_{SC}) und durch ein Vermeiden von Rekombination (kleineres J_0) steigern. Der Wirkungsgrad η der Solarzelle ist durch die maximale extrahierbare Leistung gegeben:

$$\eta = \frac{U_{\text{mpp}} I_{\text{mpp}}}{A \int \frac{hc}{\lambda} \Phi_{\text{Sun}}(\lambda) d\lambda}, \quad (2.30)$$

wobei c die Vakuumlichtgeschwindigkeit bezeichnet. Es sei angemerkt, dass eine Verbesserung der Absorption sowohl zu einer Steigerung von J_{SC} als auch von J_0 führt und sich so U_{mpp} nur marginal ändert.

An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass der exponentielle Zusammenhang $I(U)$ aus der prinzipbedingten strahlenden Rekombination herrührt und nicht an den p-n-Übergang gebunden ist. Letzterer stellt vielmehr nur Barrieren für Elektronen und Löcher bereit, sodass die Ladungen getrennt werden. Falls auch die Shockley-Read-Hall-Rekombination relevant ist, gelangt man zur Zweiodengleichung. Dieses Modell lässt sich dann noch um einen Parallelwiderstand, welcher für zellinterne Kurzschlüsse steht, und einen Serienwiderstand, welcher alle Verluste auf dem Weg zum Verbraucher beinhaltet, erweitern [10]. Diese Ergänzungen entsprechen zusätzlichen Konversionsverlusten und senken entsprechend den Wirkungsgrad. Durch Optimierung der eingesetzten Materialien, ihrer Dicken und der entsprechenden Dotierprofile wird versucht, nichtstrahlende Rekombination zu vermeiden und

so die Sammelwahrscheinlichkeit der generierten Ladungsträger an den Kontakten zu erhöhen und unnötige Sprünge in den Quasi-Fermi-Energien zu vermeiden.

2.2 Verwendete Materialien

In einer Solarzelle müssen verschiedenste Effekte, wie Generation von Elektron-Loch-Paaren, Ladungstransport und Photon-Management realisiert werden, wobei dafür die unterschiedlichsten Materialien eingesetzt werden. Teilweise hat eine funktionale Schicht auch mehrere Aufgaben, beispielsweise sorgen transparente leitfähige Oxide (engl. *transparent conductive oxide*, TCO) sowohl für den Transport von Ladungsträgern als auch für eine Reduzierung von Reflexionsverlusten und für eine gute Streuung des einfallenden Lichtes. Im folgenden Abschnitt werden kurz verschiedene TCO vorgestellt, von denen sich ZnO als besonders vorteilhaft erweist. Daran anschließend werden noch die für diese Dissertation relevanten Halbleiter bezüglich ihrer Eigenschaften und Herstellung vorgestellt, da sich daraus die jeweils sinnvolle Absorberdicke und Anforderungen an das Photon-Management ergeben.

2.2.1 Transparente leitfähige Oxide

In Solarzellen, die aus einzelnen funktionalen Schichten bestehen, werden die Ströme an der dotierten Ober- und Unterseite durch metallische Leiterbahnen abgegriffen. Ein längerer durchschnittlicher Weg der Ladungsträger bis zu den Kontakten und eine geringe laterale Leitfähigkeit resultieren dabei in einem größeren Serienwiderstand. Auf der anderen Seite führt eine hohe Dichte an Kontakten zu verstärkten Abschattungseffekten und in der Folge zu einer geringeren Lichteinkopplung. Die Abschattungseffekte können durch Metallkontakte mit hohem Aspektverhältnis verringert werden [16]. Im Fall von Dünnschichtsolarzellen wird auf die Oberseite ein leitfähiges, transparentes und texturiertes Material aufgebracht, um gleichzeitig eine effiziente Lichteinkopplung und einen geringen Serienwiderstand zu ermöglichen. Leitfähige und transparente Materialien werden auch für Zwischenreflektoren in Tandemzellen [17] und als Pufferschicht zwischen Absorber und metallischem Rückspiegel benötigt [18, 19]. In den meisten Fällen handelt es sich dabei um ein Oxid, wie ZnO, SnO₂ oder Indium-Zinn-Oxid (ITO) [20].

Unter diesen ist ITO das Oxid mit der höchsten Beweglichkeit der Ladungsträger, sodass ITO mit einer geringeren Dichte an freien Ladungsträgern hergestellt werden kann und entsprechend im nahen Infrarot eine geringere Absorption aufweist. Bedingt durch die Konkurrenz mit dem stetig wachsenden Markt der Flüssigkristallbildschirme, wo gute optische Eigenschaften eine wichtige Rolle spielen, ist der

Preis für Indium in den letzten Jahren gestiegen. Auf Grund dieses Kostennachteils, gepaart mit dem geringen weltweiten Vorkommen von Indium, wird ITO in der Massenproduktion von Solarzellen für die Zukunft nur eine untergeordnete Rolle eingeräumt [21].

Kommerziell erhältlich und weit verbreitet sind Substrate des Typs Asahi-U, die auf per Gasphase abgeschiedenem SnO_2 basieren, das sich als nicht anfällig gegenüber Säuren und Basen erweist [20]. Auf Grund der höheren Transparenz und höheren Stabilität gegenüber Wasserstoffplasma, was der Herstellung von siliziumbasierten Dünnschichtzellen entgegenkommt [22], findet ZnO zunehmende Beachtung [23]. Beschichtungen aus ZnO können sowohl mittels chemischer Gasphasenabscheidung [24, 25] als auch durch Sputtern [22] hergestellt werden. Die per Gasphasenabscheidung gewachsenen Oxide weisen bereits eine Oberflächentextur auf, die mit steigender Schichtdicke ausgeprägter wird. Die gesputterten Schichten sind anfangs planar, können aber durch ein Benetzen mit verdünnter Salzsäure strukturiert werden. Durch diese Prozesskette ist eine getrennte Optimierung der Leitfähigkeit und Transparenz auf der einen Seite und der Streuung des einfallenden Lichtes beziehungsweise der Morphologie der ZnO-Filme auf der anderen Seite möglich [26].

2.2.2 Kristallines Silizium

Ungefähr 85 % des aktuellen Photovoltaikmarktes basieren auf kristallinem und multikristallinem Silizium. Hierbei handelt es sich um einen indirekten Halbleiter mit einer Bandlücke von $E_G=1,17\text{ eV}$ (1060 nm). Die darauf basierende Solarzellenentwicklung profitierte von einem Wissenstransfer bezüglich Herstellung und Verarbeitung aus der Mikroelektronik. Für die Module werden Wafer mit Dicken ab 180 μm verwendet. Dünnere Wafer ($\approx 100\text{ }\mu\text{m}$) würden höhere Effizienzen [6] und einen geringeren Materialverbrauch erlauben, besitzen aber auch eine geringere mechanische Stabilität. Wegen der hohen Kosten des Ausgangsmaterials weisen kommerziell erfolgreiche Module Effizienzen ab 10 % auf [27, 28]. In defektarmen monokristallinen Zellen dominiert Auger-Rekombination in den hochdotierten Regionen und bei hoher Intensität. Ansonsten ist die Shockley-Read-Hall-Rekombination in niedrigdotierten und insbesondere in multikristallinen Regionen sowie an der Oberfläche relevant. Unbehandelte Oberflächen weisen, bedingt durch fehlende abgesättigte Bindungen, eine hohe Defektdichte auf, sodass die entsprechenden Oberflächen passiviert werden. Die Beweglichkeit und die Diffusionslängen der Elektronen sind größer als die der Löcher, sodass oft die Oberseite hoch n-dotiert ist und der größte Teil der Solarzelle leicht p-dotiert. Der maximale theoretische Wirkungsgrad für unkonzentrierte Beleuchtung liegt bei 29 % [28]; im Labor wurden 24,4 % [29] mit kristallinem und

20,3 % [30] mit multikristallinem Silizium erreicht. Im Rahmen dieser Dissertation wurde untersucht, inwieweit sich die Effizienz von solchen auf kristallinem Silizium basierenden Solarzellen durch Einschränken des Akzeptanzwinkels erhöhen lässt (siehe Abschnitt 3.4).

2.2.3 Amorphes Silizium

Obwohl die Inhalte aus Abschnitt 2.1 nur für kristalline Festkörper dargestellt wurden, gelten sie qualitativ auch für amorphe Festkörper. In den 1970er Jahren wurde amorphes Silizium erstmals durch Glühentladungen in Silan hergestellt und kurze Zeit später wurde über die erste darauf basierende Solarzelle berichtet [31]. Auf Grund der Unordnung absorbiert amorphes Silizium im sichtbaren Spektralbereich deutlich besser als kristallines Silizium [4] und kann somit zur Fertigung deutlich dünnerer Solarzellen herangezogen werden. Gleichzeitig erhöht sich auch die Bandlücke auf $E_G \approx 1,7$ eV. Durch die Unordnung sind nicht mehr alle Si-Atome vierfach koordiniert gebunden. Die Dichte dieser Defekte kann verringert werden, indem ungesättigte Bindungen durch Wasserstoffatome abgesättigt werden. Man spricht in diesem Zusammenhang auch von hydrogenisiertem amorphem Silizium (aSi:H). Die Beweglichkeit der Elektronen ist trotzdem noch ungefähr 500 mal schlechter als in kristallinem Silizium. Die Löcher sind wiederum noch einmal unbeweglicher als die Elektronen. Entsprechend ist die p-dotierte Seite der Sonne zuzuwenden. Insgesamt sind Ladungsträger in aSi:H durch ein recht kleines Produkt von Lebensdauer und Beweglichkeit charakterisiert [32, 33], sodass eine sinnvolle Absorberdicke auf wenige 100 nm beschränkt ist [34]. Zusätzlich haben die Minoritätsladungsträger in dotiertem aSi:H eine noch geringere Reichweite, sodass man bestrebt ist, die Dicken der dotierten Schichten so gering wie möglich zu halten. Eine typische aSi:H-Solarzelle besteht deswegen aus einer dünnen (wenige 10 nm) p-Schicht, einer intrinsischen i-Schicht (wenige 100 nm) und einer dünnen (wenige 10 nm) n-Schicht. Die Herstellung von aSi:H-Schichten geschieht heutzutage per plasmagestützter Gasphasenabscheidung (PECVD). Durch Einstellen der Radiofrequenz, der Partialdrücke der Reaktionsgase und der Substrattemperatur wird versucht, gute elektronische Eigenschaften gepaart mit hohen Abscheideraten uniform zu erreichen. Zellen, die auf aSi:H basieren, zeichnen sich durch einen Abfall ihrer Effizienz während der ersten 1000 Stunden aus, der durch lichtinduzierte Degradation (Staebler-Wronski-Effekt [35]) verursacht wird. Diese Degradation fällt bei dünneren Zellen geringer aus [36] und kann durch Tempern nahezu vollständig rückgängig gemacht werden, sodass aSi:H-Zellen im Sommer effizienter als im Winter sind. Für die Bewertung von aSi:H-Zellen ist entsprechend auch der stabilisierte Wirkungsgrad zu berücksichtigen, der

für kommerzielle Module bei $\approx 6\%$ [37] liegt und im Labor Spitzenwerte von $9,5\%$ [38] erreicht.

2.2.4 Mikrokristallines Silizium

Zu den positiven Aspekten der aSi:H-Technologie zählt, dass großflächig Zellen hergestellt werden können, die bereits miteinander verschaltet sind und deren Fertigung nur einen geringen Materialeinsatz erfordert [9]. Zusätzlich handelt es sich bei Silizium um ein ungiftiges Material, dessen Verfügbarkeit nicht durch sein natürliches Vorkommen beschränkt ist. Entsprechend gab es Bestrebungen, diese Vorteile mit höheren stabilisierten Wirkungsgraden zu verbinden. In der Schweiz in Neuchâtel wurden mit hochfrequenter PECVD Zellen aus mikrokristallinem Silizium (μcSi) gefertigt, die sich als stabil gegenüber lichtinduzierter Degradation erwiesen [39]. Die elektronischen Eigenschaften sind von μcSi besser als von aSi:H und aus optischer Sicht ist μcSi vergleichbar mit kristallinem Silizium, sodass Absorberdicken von einigen wenigen μm möglich und für eine hinreichende Absorption im langwelligen Spektralbereich auch nötig sind. Nachteilig erweist sich dabei die geringe Wachstumsgeschwindigkeit von weniger als 40 nm/min [37], wobei auch hier stetig Fortschritte zu verzeichnen sind [40]. Durch das kristalline Wachstum gibt es bei konformer Abscheidung auf Texturen, die durch hohe Aspektverhältnisse gekennzeichnet sind, unterschiedliche Kristallorientierungen und in der Folge Korngrenzen. Diese sind durch eine hohe Defektdichte und damit einhergehender Volumenrekombination gekennzeichnet. Durch Tempern oder Bestrahlung wird versucht, den Anteil an Korngrenzen zu verringern und somit höhere Stromdichten zu erreichen.

2.3 Grenzfälle der Konversionseffizienzen

Für eine Abschätzung dessen, was Photovoltaik zu leisten vermag, ist ein detaillierter Blick auf mögliche Grenzfälle der Konversionseffizienzen von Sonnenlicht in auf der Erde geleistete Arbeit unumgänglich. Im folgenden Abschnitt wird kurz dargelegt, welche maximalen Wirkungsgrade bei der Umwandlung des Sonnenlichtes in auf der Erde nutzbare Energie erreicht werden können. Anschließend wird der maximale Wirkungsgrad für erdgebundene Einfachsolarzellen diskutiert. Abschließend wird gezeigt, wie sich dieser Wirkungsgrad durch Konzentration des einfallenden Lichtes oder das Zusammenspiel mit zusätzlichen Solarzellen weiter steigern lässt.

2.3.1 Maximale Konversionseffizienzen solarer Energie

Für eine Carnot-Maschine, die Wärme von der Sonnenoberfläche (Temperatur T_S) abtransportiert und an das Kältebad Erde (T_E) wieder abgibt, lässt sich der thermodynamische Wirkungsgrad von

$$\eta_C = 1 - T_E/T_S = 95 \% \quad (2.31)$$

angeben [11, 41]. Sobald die Energie in Form von Photonen von der Sonne zur Erde transportiert wird, ergibt sich eine leicht reduzierte Effizienz, da die Solarzelle auf Grund der Reziprozität von Emissivität und Absorptivität [13] nun ihrerseits Photonen abstrahlt. Die maximale so erreichbare Landsberg-Effizienz [42] ergibt sich zu

$$\eta_L = 1 - \frac{4T_E}{3T_S} + \frac{T_E^4}{3T_S^4} = 93,3 \% \quad (2.32)$$

Hierbei musste angenommen werden, dass bei der Umwandlung der Photonen keine weitere Entropie erzeugt wird und dass die Verlustphotonen nur in Richtung Sonne abgestrahlt werden. Ein entsprechendes auf kaskadierten optischen Isolatoren aufbauendes Gedankenexperiment findet sich in Ref. [43].

Ein deutlich einfacherer Aufbau beinhaltet einen schwarzen Absorber (Temperatur T_A), dem Energie von der Sonne zufließt und der diese an eine Carnot-Maschine abgibt oder in Form von Schwarzkörperstrahlung abstrahlt. Der Wirkungsgrad der Carnot-Maschine wächst mit steigender Absorbtemperatur. Gleichzeitig sinkt aber die der Konversion zur Verfügung stehende Leistung, da die abgestrahlte Leistung mit T_A^4 skaliert. Der maximale Schwarzkörperwirkungsgrad ergibt sich für eine Absorbtemperatur von $T_A \approx 2500$ K zu [10]

$$\eta_S = \left(1 - \frac{T_A^4}{T_S^4}\right) \left(1 - \frac{T_E}{T_A}\right) = 85,4 \% \quad (2.33)$$

Bei Verwendung von unendlich vielen Absorbern, die alle an ihre eigene Carnot-Maschine angeschlossen sind und die alle nur in einem engen Spektralbereich absorbieren und entsprechend emittieren, lässt sich dieser Wirkungsgrad auf [11]

$$\eta_O = 86,8 \% \quad (2.34)$$

steigern. Auch für diese Effizienzen darf der Strahlungstransport nur zwischen Sonne und Absorber stattfinden.

2.3.2 Das Shockley-Queisser-Limit

Für die Herleitung des Shockley-Queisser-Limits von Einfachsolarzellen [44] werden mehrere Annahmen getroffen. Die erste besagt, dass nur strahlende Prozesse zur Generation und Rekombination von Elektron-Loch-Paaren beitragen. Des Weiteren soll jedes absorbierte Photon auch nur ein Elektron-Loch-Paar erzeugen. Die Differenz zwischen der Photonenergie und der Bandlücke kann dadurch letztendlich nicht genutzt werden und fällt als Thermalisierungsverlust an. Die Solarzelle soll weiterhin so dick sein, dass alle Photonen mit Energien größer als die Bandlücke E_G vollständig absorbiert werden und der Absorber für kleinere Energien perfekt transparent ist. Folglich stehen diese Photonen auch nicht zur Konversion zur Verfügung. Im Detail wird eine homogene Aufspaltung der Quasi-Fermi-Energien angenommen, die sich einstellt, wenn es zu wiederholter Reabsorption und Reemission innerhalb des Absorbers kommt.

Ohne eine externe Spannung und zusätzliche Beleuchtung ist eine Solarzelle im Gleichgewicht mit ihrer Umgebung bezüglich der absorbierten und emittierten Wärmestrahlung. Diesem Sachverhalt wird durch den zweiten Term auf der rechten Seite von Gl. (2.27) Rechnung getragen:

$$AJ_0 \exp \left[\frac{eU}{k_B T} \right] - AJ_0. \quad (2.35)$$

AJ_0 steht dabei für die Anzahl an Elektron-Loch-Paaren, die durch Absorption von Wärmestrahlung aus der Umgebung mit Energien oberhalb der Bandlücke erzeugt werden. Der linke Term steht für die Anzahl an Elektron-Loch-Paaren, deren Rekombination zur Emission beiträgt. Diese Wärmestrahlung stellt neben der Thermalisierung und der Transparenz einen weiteren Verlust dar. Für eine Beleuchtung mit dem direkten Sonnenlicht und eine Emission aus der Solarzelle in den gesamten oberen Halbraum ergibt sich mit den getroffenen Annahmen eine maximale Effizienz von

$$\eta_{SQ} = 32,5\% \quad (2.36)$$

bei einer optimalen Bandlücke von $E_G=1,13\text{ eV}$ [41]. Dieses Limit stellt das strahlende Limit von erdgebundenen Einfachsolarzellen dar.

2.3.3 Anzahl der Einzelzellen

Im Falle des strahlenden Limits und einer Bandlücke von $E_G=1,13\text{ eV}$ gehen $\approx 27\%$ der einfallenden Leistung durch Thermalisierung und $\approx 29\%$ durch die Transparenz im IR verloren. Beide Verluste können minimiert werden, indem mehrere Absor-

ber mit unterschiedlichen Bandlücken in sogenannten Tandem-, Tripel- oder Multi-junction-Solarzellen verwendet werden. Die Zellen sind dabei nach ihrer Bandlücke sortiert übereinander gestapelt, wobei das Material mit der höchsten Bandlücke zuoberst angesiedelt ist. Dadurch werden die hochenergetischen Photonen mit nur geringen Thermalisierungsverlusten absorbiert, während Photonen mit Energien unterhalb der Bandlücke zu den folgenden Zellen vordringen können. Theoretisch wäre es möglich, jede Zelle mit zwei Kontakten zu versehen, sodass sie unabhängig von den anderen Zellen an ihrem jeweiligen *maximum power point* betrieben werden kann. In der Praxis erweist es sich aber als einfacher, benachbarte Zellen mit einem Tunnelübergang [45] ohmisch zu verbinden, sodass durch alle Zellen ein gemeinsamer Strom fließt und sich die Einzelspannungen zur Gesamtspannung addieren. Durch diese Serienschaltung bestimmt allerdings auch der kleinste beteiligte Strom den Gesamtstrom. Durch Anpassen der Bandlücken und Absorberdicken und durch entsprechendes Photon-Management wird versucht, eine Stromanpassung zu erreichen, dass also alle Zellen an ihrem *maximum power point* den gleichen Strom liefern. Für Tandemzellen mit den optimalen Bandlücken von 1,64 und 0,94 eV ist eine Effizienz von 44,3% im strahlenden Limit möglich [41]. Tandemzellen, die aus aSi:H und μSi bestehen, werden detaillierter in Kapitel 4 behandelt. Für den Fall unendlich vieler Bandlücken ergibt sich eine Effizienz von 65,4% [41].

2.3.4 Konzentration und Lichtfallen

Eine weitere Möglichkeit, um die Effizienz von Solarzellen zu beeinflussen, besteht darin, das einfallende Licht beispielsweise mit einer Linse zu konzentrieren. Dabei fokussiert die Linse das auf sie direkt einfallende Sonnenlicht auf eine kleinere Solarzellenfläche. Durch die Fokussierung wird das diffuse Licht des Himmels nicht mehr genutzt und man ist auf eine Nachführung des Moduls angewiesen. Auf diesem Wege können jedoch hocheffiziente Solarzellen, die meistens teuer in der Herstellung sind, mit kostengünstigeren Optiken zu einem marktfähigen Modul kombiniert werden. Insbesondere in Gegenden mit geringer Bewölkung und entsprechend geringem Anteil an diffuser Strahlung (Spanien) sind solche Konzepte empfehlenswert. Ein weiterer Effekt der Konzentration ist, dass die Kurzschlussstromdichte J_{SC} gesteigert werden kann, da eine höhere Photonendichte auf die Zelle fällt, ohne dass dabei die Dunkelstromdichte J_0 verändert wird. Das führt dazu, dass die Zelle bei einer höheren Spannung betrieben wird, also jedes absorbierte Photon geringere Thermalisierungsverluste erleidet. Ein Temperaturanstieg auf Grund der höheren eingebrachten Energiedichte kann allerdings auch zu einem größeren J_0 führen, sodass Konzentratorzellen je nach Konzentration aktiv oder passiv gekühlt werden müssen.

Das Problem der Kühlung kann umgangen werden, wenn auf die Solarzelle ein Filter aufgebracht wird, der nur für den Winkelbereich transparent ist, unter dem das Sonnenlicht einfällt. Dadurch sinkt J_0 , wobei J_{SC} nahezu gleich bleibt (das diffuse Licht kann in diesem Fall auch nicht von der Zelle umgesetzt werden) und die Spannung am Arbeitspunkt analog zu obiger Diskussion gesteigert werden kann. Es konnte gezeigt werden, dass im strahlenden Limit die maximale Effizienz unabhängig von der Konzentration ist, solange der Raumwinkel der Emission mit dem Raumwinkel, unter dem Sonnenlicht einfällt, übereinstimmt [41]. Bei Vernachlässigung der diffusen Strahlung ist für eine einfache Solarzelle ein maximaler Wirkungsgrad von 44,6 % bei einer Bandlücke von 0,94 eV möglich. Tandemzellen erreichen 59,7 % bei 1,41 und 0,71 eV. Mit unendlich vielen Einzelzellen sind 86,8 % möglich [46]. Interessanterweise entspricht dieser Wert dem Maximum aus Gl. (2.34). Eine detaillierte Darstellung der Problematik des Einschränkens des Emissionswinkels, insbesondere unter Beachtung der diffusen Strahlung, findet sich in Abschnitt 3.4.

2.4 Optische Konzepte zur Steigerung der Effizienzen

Wie Gl. (2.10), Gl. (2.26) und Gl. (2.30) entnommen werden kann, führt eine Verbesserung der Absorptivität einer gegebenen Solarzelle durch geeignetes Photon-Management zu einer größeren Kurzschlussstromdichte und somit zu einem verbesserten Wirkungsgrad. Alternativ kann dieses Photon-Management dann auch dazu genutzt werden, weniger Absorbermaterial zu verwenden, was neben einem höheren Durchsatz auch einen geringeren Serienwiderstand und somit größere U_{mpp} erlaubt.

An dieser Stelle sei erwähnt, dass sich mit einer vernachlässigbar dünnen Absorberschicht zwischen zwei unendlich ausgedehnten Halbräumen mit den jeweiligen Brechzahlen n_1 und n_2 für Licht der Wellenlänge λ eine Absorptivität von

$$A = \frac{n_1}{n_1 + n_2} \quad (2.37)$$

erreichen lässt. Charakterisiert ist die Absorberschicht durch die verschwindende Dicke W und die optimierte Brechzahl n gemäß [47]

$$n = \frac{1+i}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{n_1+n_2}{\delta}} + \frac{1-i}{6\sqrt{2}} \frac{n_1^3+n_2^3}{(n_1+n_2)^{1,5}} \sqrt{\delta}. \quad (2.38)$$

δ steht dabei für $2\pi W/\lambda$. Normalerweise handelt es sich bei Solarzellen aber um Absorber mit nicht verschwindender Dicke. Daraus ergeben sich die zwei Vorga-

ben, einerseits die Einkopplung des Lichtes in den Absorber und andererseits die Absorptivität zu maximieren. Die folgenden Abschnitte geben eine Übersicht über dokumentierte Konzepte, die diese Ziele verfolgen.

2.4.1 Verbesserung der Einkopplung

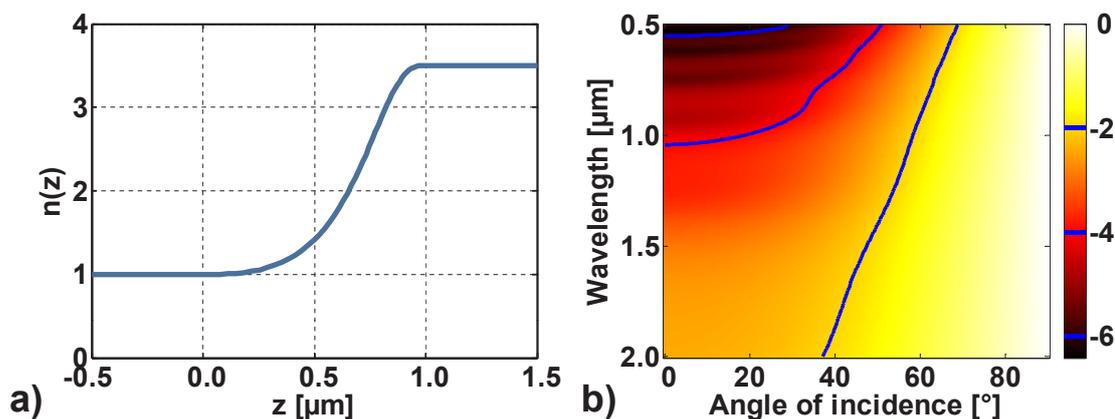


Abb. 2.4: a) Quintischer Brechzahlverlauf eines 1 μm dicken Schichtsystems für $n_1=1,0$ und $n_2=3,5$. b) Dekadischer Logarithmus der Reflektivität für unpolarisiertes Licht als Funktion des Einfallswinkels und der Wellenlänge.

An einer Grenzfläche, die zwei Medien mit den Brechzahlen n_1 und n_2 trennt, tritt Fresnel-Reflexion auf, die um so größer ausfällt, je größer der Brechzahlkontrast ist. Typische anorganische Halbleiter sind durch eine Brechzahl n_2 mit $\Re n_2 > 3$ gekennzeichnet, wobei $\Re n_2$ für den Realteil von n_2 steht. Somit gilt es, diese Reflexionsverluste zu minimieren, um dennoch hohe Wirkungsgrade erreichen zu können. Die einfachste Antireflexschicht besteht aus einer Lambda-Viertel-Schicht der Brechzahl $\sqrt{n_1 n_2}$. In diesem Fall ist die Transmission nur für diskrete Wellenlängen maximiert. Durch zusätzliche Schichten lässt sich dies aber auf weitere Wellenlängen ausdehnen [48, 49]. Die Verwendung von kontinuierlichen Brechzahlverläufen erweist sich in diesem Sinne als vorteilhafter [50]. Für die analytische Darstellung des Brechzahlprofils wird die z -Achse als senkrecht zum Schichtsystem gewählt. Das Schichtsystem startet bei $z=0$. Da Reflektivitäten und Transmissivitäten von Schichtsystemen von den Phasendifferenzen abhängen, empfiehlt es sich, die optische Dicke T_{opt} mit

$$T_{\text{opt}} = \int n(z) dz \quad (2.39)$$

als Argument zur Beschreibung des Brechzahlverlaufs zu benutzen. Das zur Reflexionsminderung vorgeschlagene quintische Brechzahlprofil lautet [50]:

$$n(T_{\text{opt,norm}}) = n_1 + (n_2 - n_1) (6T_{\text{opt,norm}}^5 - 15T_{\text{opt,norm}}^4 + 10T_{\text{opt,norm}}^3) , \quad (2.40)$$

mit $T_{\text{opt,norm}}$ als der optischen Dicke, die so normiert ist, dass sie innerhalb des Brechzahlprofils nur Werte zwischen 0 und 1 annimmt. Abbildung 2.4 a) zeigt den entsprechenden Brechzahlverlauf eines $1\ \mu\text{m}$ dicken Schichtsystems für $n_1=1,0$ und $n_2=3,5$ und Abb. 2.4 b) den dekadischen Logarithmus der wellenlängen- und winkelaufgelösten Reflektivität für unpolarisiertes Licht. Zur Berechnung der spektralen Eigenschaften wurde die Transfer-Matrix-Methode [51] benutzt. Offenbar lässt sich so eine nahezu perfekte Transmission für beide Polarisationsrichtungen und nahezu alle Einfallswinkel realisieren, solange das Verhältnis von Wellenlänge zu Gesamtdicke $\lesssim 1$ ist. An dieser Stelle sei noch darauf hingewiesen, dass der quintische Verlauf nicht optimal ist [50] – für diese Arbeit wurde er aber auf Grund seiner einfachen analytischen Beschreibung bevorzugt.

Ein kontinuierlicher Verlauf des effektiven Brechungsindex lässt sich unter anderem durch nanoporöse Strukturen [52, 53] realisieren. Alternativ kann die Oberfläche auch mit optischen Mikro- [54–56] oder Nanostrukturen [57, 58] versehen werden. Neben der zu erwartenden Streuung kann eine breitbandig verbesserte Einkopplung insbesondere dann beobachtet werden, wenn die lateralen Strukturgrößen im Subwellenlängenbereich liegen und sich der Querschnitt der Strukturen kontinuierlich verändert, sodass der effektive Brechungsindex beide Halbräume adiabatisch miteinander verbindet. Hierbei zeigt sich, dass die Einkopplung umso besser ausfällt, je größer das Aspektverhältnis ist.

Des Weiteren bietet es sich an, die Oberfläche makroskopisch zu texturieren. Bei hinreichend steilen Flanken kann es dazu kommen, dass Licht an einer Flanke zwar reflektiert wird, aber nach weiterer Ausbreitung eine andere Flanke trifft [59, 60]. Diese zusätzlichen Transmissionsereignisse erhöhen den Anteil an eingekoppeltem Licht. Entsprechend finden sich auf einigen Zellen aus kristallinem Silizium pyramidenförmige Texturen, die durch anisotropes Ätzen entstehen. Für höchste Effizienzen werden diese Texturen noch mit ein oder zwei Antireflexschichten versehen [29, 61].

2.4.2 Verbesserung der Absorption

Eine vollständige Absorption lässt sich im Zusammenspiel von einer hochtransparenten Oberfläche mit einer unendlich dicken Zelle erreichen [62]. Dünne Absorber haben hingegen den Vorteil, dass sie im Allgemeinen mit geringerem Materialverbrauch und deswegen mit geringeren Kosten gefertigt werden können, wobei sich potentiell in diesem Zusammenhang noch ein geringerer Serienwiderstand und verminderte Rekombinationsverluste ergeben können. Zur Beurteilung einer Maßnahme, die auf eine verbesserte Absorption abzielt, hat sich das Maß der Verlängerung

des effektiven Weges [63]

$$P(\lambda) = -\frac{1}{\alpha(\lambda)T_{\text{cell}}} \ln(1 - A(\lambda)) \quad (2.41)$$

etabliert. Dabei bezeichnet $\alpha(\lambda)$ den Absorptionskoeffizienten und $A(\lambda)$ die Absorptivität der betrachteten Zelle mit der Dicke T_{cell} .

Für die Verlängerung des effektiven Weges stehen mehrere Optionen zur Verfügung. Dazu gehören die verstärkte Absorption von langsamem Licht in Photonischen Kristallen [64], die Verwendung von optischen Filtern, welche gestreutes Licht am Verlassen der Zelle hindern (siehe Abschnitt 3.4) [65, 66], die Ankopplung an Resonanzen und die Streuung des einfallenden Lichtes. In Frage kommende Resonanzen sind lokalisierte [67, 68] und propagierende Oberflächen-Plasmon-Polaritonen [69–71], die mit einem erhöhten Nahfeld einhergehen, im Absorber geführte Moden [72, 73] und Fabry-Perot-Resonanzen [74]. Für die Streuung können dielektrische [75] und metallische Nanopartikel [76–78] sowie zufällig texturierte (siehe Abschnitt 3.2 und 3.3) Oberflächen verwendet werden. Die Nanopartikel selbst können ungeordnet oder geordnet verteilt sein. Im letzteren Fall kann es sich um Liniengitter mit binärem [77, 79–83] oder kontinuierlichem Profil [54, 84, 85] handeln, aber auch um komplexere Strukturen, wie biperiodische Anordnungen von Kugeln [80, 86, 87], Zylindern [78, 88–90], Pyramiden [91] oder Kegeln [56, 92]. Zusätzlich kann noch unterschieden werden, ob der Absorber selbst in seiner Höhe moduliert ist oder ob es sich um eine planare Schicht handelt. Insgesamt stellt sich heraus, dass durchmodulierte Absorber bei gleichem Materialeinsatz mehr Photonen als ihre planaren Gegenstücke absorbieren und dass biperiodische Gitter besser abschneiden als vergleichbare Liniengitter. Im Allgemeinen ist für hocheffiziente Solarzellen das Sonnenspektrum von 350 nm bis 800 nm oder sogar über 1100 nm hinaus relevant. Dementsprechend ist eine alleinige Fokussierung auf einen engen resonanten Spektralbereich nicht zielführend. Vielmehr muss eine breitbandige Reflexionsverminderung in Verbindung mit einer effektiven Streuung beziehungsweise Lokalisierung des nur schwach absorbierten Lichtes in der aktiven Schicht erreicht werden.

Eli Yablonovitch berechnete das strahlenoptische oder auch Lambertsche Limit von $P=4(\Re n)^2$ für Zellen mit einer perfekt transmittierenden Vorderseite, einem perfekten Rückreflektor, verschwindender Absorptivität der aktiven Schicht mit der Brechzahl n und einem perfekten Lambertschen Streuer [93]. Für Silizium ergibt sich so der beachtliche Wert von $P \approx 50$. Für nichtverschwindende Absorption lassen sich ebenso analytische Ausdrücke angeben [94].

Da bei dünnen Absorberdicken der vektorielle Charakter des elektromagnetischen Feldes und Interferenzeffekte eine Rolle spielen, stellte sich die Frage, ob es nicht

ein weiteres Limit jenseits des strahlenoptischen Limits von $P=4(\Re n)^2$ gibt. Für niedrigbrechende, schwach absorbierende Schichten der fast reellen Brechzahl n_2 , die in hochbrechende transparente Schichten (Brechzahl n_1) eingebettet sind, die wiederum mit einem Lambertschen Streuer verbunden sind, ergibt sich im Fall verschwindender Absorberdicken eine gegenüber dem Lambertschen Limit verbesserte Wegverlängerung von [95]:

$$P = 4(\Re n_2)^2 \left[\frac{2n_1}{3\Re n_2} + \frac{1}{3} \left(\frac{n_1}{\Re n_2} \right)^5 \right] \quad (2.42)$$

Dabei wird auch ausgenutzt, dass evaneszente Felder bei der Herleitung des Lambertschen Limits vernachlässigt werden. Die Erhöhung beruht im Wesentlichen darauf, dass auf die dünnen Absorberschichten nahezu streifend einfallendes Licht außerordentlich gut absorbiert wird.

In einer schlussendlich ähnlichen Arbeit, bei der ein periodischer Superstreuer das Licht in eine nur 5 nm dicke, niedrigbrechende Schicht koppelt, die zwischen einem Metallrückspiegel und einer hochbrechenden Schicht eingebettet ist, konnte eine effektive Wegverlängerung von ≈ 100 für Einfallswinkel bis zu 70° erreicht werden [96]. Im Falle von auf Silizium basierenden Solarzellen sind diese beiden Konzepte allerdings eher von akademischem Interesse. Zum einen geht es in der Praxis nicht allein um möglichst hohe Steigerungen der Absorptivität, sondern auch um eine möglichst hohe absolute Absorptivität. Entsprechend ist es praktikabler, sich auf dickere Schichten zurückzuziehen, da diese schon mit moderaten Wegverlängerungen eine höhere Absorptivität aufweisen und sich so am Ende mehr Photonen absorbieren lassen. Zum anderen ist es auch schwierig, transparente Materialien mit einem Brechungsindex deutlich größer als 3,5 zu finden, was für siliziumbasierte Solarzellen relevant wäre.

Das Limit von $P=4(\Re n)^2$ ist gemäß seiner Herleitung unabhängig vom Einfallswinkel, da der Streuer die Lambertsche Verteilung für alle auf ihn einfallenden Strahlen generiert. Durch Ankopplung an die oben genannten Resonanzen [80, 83, 85] oder die Implementierung von gekreuzten V-förmigen Gräben auf der Vorder- und Rückseite [97, 98] ist es für bestimmte Einfallswinkel und Wellenlängen möglich, das Lambertsche Limit zu überschreiten. Hingegen für den Fall, dass über ein großes Wellenlängen- und Einfallswinkelintervall gemittelt wird, existierte bis vor Kurzem keine Struktur, die für relevante Absorberdicken das Lambertsche Limit übertrifft. Jedoch konnte kürzlich gezeigt werden, dass dies mit asymmetrischen deterministischen Pyramiden für Absorberdicken zwischen 1 und $10 \mu\text{m}$ im Falle von μcSi -Zellen gelingt [99]. Der Abschnitt 3.3 widmet sich intensiv der Frage, inwiefern das Lam-

bertsche Limit auch mit dünneren Absorbern erreicht werden kann.

2.4.3 Modifikation des Spektrums

In den bisherigen Betrachtungen wurde davon ausgegangen, dass jedes Photon nur ein Elektron-Loch-Paar erzeugen kann. Dadurch werden aber gerade die hochenergetischen Photonen nur ineffizient genutzt, da die Überschussenergie $h\nu - E_G$ in Form von Wärme an die Solarzelle abgegeben wird. Bei der Stoßionisation [12] gibt ein Photon mit einer Energie größer als der doppelten Bandlücke ($h\nu > 2E_G$) einen Teil seiner Energie an ein zweites Elektron ab, sodass mehrere Elektron-Loch-Paare generiert werden. Mit unkonzentrierter Beleuchtung kann bei einer Bandlücke von $E_G \approx 1$ eV ein Wirkungsgrad von 55 % erreicht werden. Bei voller Konzentration und verschwindender Bandlücke wird der Wirkungsgrad aus Gl. (2.34) erreicht [4]. Dafür muss allerdings vorausgesetzt werden, dass die Ladungsträger ihre Energie nicht an das Gitter abgeben und ihnen entsprechend eine andere (höhere) Temperatur zugeordnet wird [100].

Eine andere Möglichkeit zur besseren Ausnutzung der hochenergetischen Photonen besteht darin, sogenannte Downkonverter zu verwenden [101]. Dabei werden Drei-Niveau-Systeme zur Konvertierung verwendet. Idealerweise besitzt der Downkonverter eine Bandlücke, die geringfügig größer ist als das Doppelte der Bandlücke des Halbleiters, und ein Niveau direkt in der Mitte. Dadurch können die hochenergetischen Photonen absorbiert und zweistufig über das Zwischenniveau als niederenergetische Photonen wieder emittiert werden. Der Konverter selbst kann sowohl vor als auch hinter der Solarzelle platziert werden. Wenn das Licht zuerst die Solarzelle passiert, sollte diese allerdings für Photonen mit Energien $h\nu > 2E_G$ transparent sein, damit diese den Konverter erreichen können. Wenn der Konverter vor der Solarzelle platziert ist, wird ein Anteil des konvertierten Lichtes in den oberen Halbraum abgestrahlt. Dieser Anteil kann dadurch verringert werden, indem die Brechzahl des Konverters erhöht wird. In beiden Fällen kann ein maximaler Wirkungsgrad von ≈ 40 % bei einer Bandlücke von 1,05 eV erreicht werden [101].

In nichtidealen Solarzellen gibt es mehrere Verlustmechanismen, die besonders ausgeprägt am kurzwelligen Ende des einfallenden Spektrums sind. Ein Verlust ist die Absorption des UV-Lichtes im Deckglas. Dieser Verlust kann nicht beliebig minimiert werden, da für die mechanische Stabilität des fertigen Moduls eine Mindestdicke von wenigen mm erforderlich ist. Ein weiterer Verlust resultiert aus der geringen Eindringtiefe des kurzwelligen Lichtes in den Absorber. Dadurch wird ein Großteil der Photonen dieses Spektralbereichs nahe der oberen Grenzfläche absorbiert. Auf Grund der hohen Oberflächendefektdichte und der hohen Dotierung rekombinieren

die dort generierten Elektron-Loch-Paare jedoch verstärkt und tragen folglich nur sehr ineffizient zum Gesamtstrom bei. Letztendlich resultiert daraus für den kurzwelligen Spektralbereich eine messbar verschlechterte Quantenausbeute [102]. Ein Ansatz, um diese Verluste zu verringern, besteht darin, diese Photonen durch Photolumineszenz in energieärmere umzuwandeln, die dann von der Solarzelle effizienter konvertiert werden [103]. Für Solarzellen aus μcSi wurde eine Verbesserung von J_{SC} um 10 % vorausgesagt [104], für kristalline Siliziumzellen wurde bereits eine Verbesserung der Effizienz um 0,4 % erreicht [105].

Neben der Verbesserung der Ausnutzung der hochenergetischen Photonen bieten auch die Photonen mit Energien unterhalb der Absorberbandlücke Potential zur Stromerzeugung. Eine Möglichkeit ist dabei die Hochkonversion, bei der mehrere niederenergetische Photonen absorbiert werden und ein Photon mit einer Energie oberhalb der Bandlücke emittiert wird. Für die Hochkonversion stehen verschiedene Mechanismen unter Ausnutzung von realen und virtuellen Niveaus mit entsprechend variierenden Wirkungsgraden zur Verfügung [106]. Experimentell konnte schon nachgewiesen werden [107], dass hochkonvertierte Photonen von einer Siliziumsolarzelle absorbiert wurden, jedoch sind die aktuellen Konversionseffizienzen unter normalen Beleuchtungsbedingungen noch zu gering. Theoretische Überlegungen zeigen, dass unter normaler Beleuchtung 47,6 % und bei voller Konzentration 62,2 % möglich sind [108]. Dabei wurde der Hochkonverter wie eine lichtemittierende Diode betrachtet, die von einer Tandemzelle getrieben wird, welche an das nichtabsorbierte niederenergetische Spektrum angepasst wurde.

2.5 Verwendete numerische Verfahren

Um einen Einblick in die Wechselwirkung des einfallenden Lichtes mit der Solarzelle zu bekommen, werden in der vorliegenden Arbeit verschiedene numerische Verfahren angewendet. Die betrachteten Solarzellen erwiesen sich als unterschiedlich komplex, sodass nicht immer numerische Allzweckwaffen bemüht werden mussten, sondern auch der Problemstellung besser angepasste Methoden mit entsprechend geringerem Bedarf an Ressourcen zum Einsatz gekommen sind. Die folgenden Abschnitte sollen in Kürze die verwendeten Methoden vorstellen, insbesondere bezüglich ihrer Stärken und Schwächen.

2.5.1 Maxwellsche Gleichungen

Ausgegangen wird für die Darstellung der verwendeten numerischen Methoden, mit denen die Wechselwirkung von Licht mit Materie rigoros beschrieben wird, von den

(makroskopischen) Maxwell'schen Gleichungen im Zeitbereich

$$\mathbf{rot} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t), \quad (2.43)$$

$$\mathbf{rot} \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t), \quad (2.44)$$

$$\mathbf{div} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t), \quad (2.45)$$

$$\mathbf{div} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (2.46)$$

(mit der elektrischen Feldstärke \mathbf{E} , der elektrischen Flussdichte $\mathbf{D}=\varepsilon_0\mathbf{E}+\mathbf{P}$, der elektrischen Polarisation \mathbf{P} , der magnetischen Feldstärke \mathbf{H} , der magnetischen Flussdichte \mathbf{B} , der elektrischen Ladungsdichte ρ und der Stromdichte \mathbf{j}). Für die hier betrachteten Spektralbereiche, Modellsysteme und Materialien kann ohne Beschränkung der Allgemeinheit angenommen werden, dass ρ verschwindet und der Zusammenhang $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)=\mu_0\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ gilt.

2.5.2 Methode der finiten Differenzen im Zeitbereich

Bei der Methode der finiten Differenzen im Zeitbereich (engl. *finite-difference time-domain* (FDTD)) handelt es sich um ein numerisches Verfahren, bei dem die Maxwell'schen Gleichungen raum-zeitlich diskretisiert werden und die Ausbreitung der Felder iterativ in diskreten Zeitschritten Δt unter Berücksichtigung von vorhandenen Quellen erfolgt, bis beispielsweise der stationäre Zustand erreicht ist. Dafür werden die elektromagnetischen Felder, Quellen und relevanten Strukturen räumlich diskretisiert, wobei die Schrittweite Δ der räumlichen Diskretisierung deutlich feiner als die kleinste relevante Wellenlänge zu wählen ist, um etwaige Nahfelder noch geeignet abbilden zu können. Die Diskretisierung erfolgt standardmäßig auf dem sogenannten Yee-Gitter [109], einem speziellen kartesischen Raster. Das elektrische Feld \mathbf{E} ist mittig auf den Seitenflächen eines Einheitswürfels der Kantenlänge Δ derart diskretisiert, dass nur die zur entsprechenden Flächennormalen parallele Feldkomponente vertreten ist. Das magnetische Feld \mathbf{H} ist mittig auf den Kanten angeordnet, wobei nur die jeweilige Projektion des Feldes auf die Kante vorliegt. Damit sind die Gitter des elektrischen und magnetischen Feldes um ein Viertel einer Raumdiagonale des Einheitswürfels versetzt.

Zusätzlich zur räumlichen Verschiebung der Felder sind elektrisches und magnetisches Feld auch zeitlich um einen halben Zeitschritt gegeneinander verschoben. Um das elektrische Feld zum folgenden Zeitschritt $N+1$ zu berechnen, wird die Rotationsgleichung (2.43) in finiten Differenzen [110] formuliert und nach dem gesuchten Wert umgestellt. Dabei stellt sich heraus, dass nur das aktuelle elektrische Feld zum

Zeitschritt N und das (aktuelle) magnetische Feld zum Zeitschritt $N + \frac{1}{2}$ benötigt werden. Anschließend wird analog für die Berechnung des magnetischen Feldes zum Zeitschritt $N + \frac{3}{2}$ mit Gl. (2.44) verfahren, wobei das magnetische Feld zum Zeitschritt $N + \frac{1}{2}$ und das soeben berechnete elektrische Feld zum Zeitschritt $N + 1$ zum Einsatz kommen.

Bei der Formulierung der finiten Differenzen erweist es sich als Vorteil, dass die elektrischen und magnetischen Felder sowohl räumlich als auch zeitlich gegeneinander verschoben auftreten, da so eine in den Diskretisierungsschrittweiten quadratische Genauigkeit erreicht wird [110] – für verschwindende Schrittweiten also die Realität abgebildet wird. Zusätzlich sind die Divergenzgleichungen (2.45) und (2.46) durch die spezielle Wahl des Yee-Gitters automatisch erfüllt, sofern die Anfangsfelder divergenzfrei sind [110], was trivialerweise für einen feldfreien Raum gilt.

Bei der numerischen Umsetzung wird ein endliches Rechengebiet angesetzt. Für die Berechnung der Rotationsterme werden die Feldwerte von benachbarten Gitterpunkten benötigt, in der Folge also auch die Werte von Nachbarn des Randes des endlichen Rechengebietes. Dieser Konflikt kann durch periodische Randbedingungen oder durch perfekt absorbierende, endlich dicke Materialien an den Rändern umgangen werden. Bei Letzteren dringen aus dem Rechengebiet propagierende Wellen reflexionsarm ein und werden innerhalb dieser Materialien absorbiert. Etwaige an den Rändern des Rechengebietes reflektierte Wellen werden erneut absorbiert, sodass insgesamt nur Wellen mit vernachlässigbarer Amplitude von außen in das unmodifizierte Rechengebiet einfallen und ein unendlicher Außenraum simuliert wird.

An die Schrittweite des Raumes Δ wird die Bedingung $\lambda_{\min}/\Delta \geq 10$ gestellt, wobei λ_{\min} der kleinsten effektiven, relevanten Wellenlänge entspricht. Bei größeren Diskretisierungen werden eine auf dem Gitter basierende Anisotropie [111] und Abweichungen von der numerischen Phasengeschwindigkeit bemerkbar [112]. Darauf aufbauend wird $\Delta t \leq \sqrt{3}\Delta/c$ mit der zeitlichen Schrittweite Δt und mit c als der Vakuumlichtgeschwindigkeit gefordert [110], was das Courant-Limit genannt wird. Größere zeitliche Schrittweiten führen, vereinfacht formuliert, zu exponentiell wachsenden Feldern der effektiven Wellenlänge 2Δ .

Ein Vorteil der FDTD-Methode ist, dass es sich um ein explizites Verfahren handelt, welches leicht parallelisiert werden kann, was annehmbare Laufzeiten (Größenordnung ein Tag) bei der rigorosen Behandlung von im Vergleich zur Wellenlänge großen Raumgebieten (groß sind bereits 10 Wellenlängen entlang der drei Raumrichtungen) ermöglicht. Nachteilig erweisen sich die formulierten Bedingungen an die zu wählenden Schrittweiten, da eine Halbierung von Δ bei einer dreidimensionalen Rechnung zu einer Verachtfachung des Speicherbedarfs und zu einer Verlängerung der Laufzeit um den Faktor 16 führt.

Für die in dieser Arbeit vorgestellten, mit der FDTD-Methode durchgeführten Rechnungen wurde das frei verfügbare Softwarepaket MEEP [113, 114] verwendet. Darin wird zwischen \mathbf{E} und \mathbf{D} der spezielle Zusammenhang

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \varepsilon_\infty(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \sum_n \mathbf{P}_n(\mathbf{r}, t) \quad (2.47)$$

hergestellt, wobei für die einzelnen \mathbf{P}_n die folgende Differentialgleichung durch finite Differenzen implementiert ist:

$$\frac{d^2}{dt^2} \mathbf{P}_n(\mathbf{r}, t) + \gamma_n(\mathbf{r}, t) \frac{d}{dt} \mathbf{P}_n(\mathbf{r}, t) + \omega_n^2(\mathbf{r}, t) \mathbf{P}_n(\mathbf{r}, t) = \sigma_n(\mathbf{r}, t) \omega_n^2(\mathbf{r}, t) \mathbf{E}_n(\mathbf{r}, t). \quad (2.48)$$

Die Parameter γ_n , ω_n und σ_n müssen dabei geeignet gewählt werden, sodass im betrachteten Spektralbereich der Zusammenhang zwischen \mathbf{E} und \mathbf{D} möglichst realitätsnah wiedergegeben wird.

2.5.3 Fourier-Modal-Methode

Bei der *Fourier modal method* (FMM) beziehungsweise *rigorous coupled wave analysis* (RCWA) handelt es sich um ein Verfahren zur Berechnung des stationären Zustands im Frequenzraum, das heißt, allen Feldern und etwaigen Quellen liegt eine Zeitabhängigkeit der Form $\exp[-i\omega t]$ zugrunde. Zusätzlich zu den Annahmen aus Abschnitt 2.5.1 kann angenommen werden, dass auch \mathbf{j} verschwindet. Im Frequenzraum wird für den Zusammenhang zwischen \mathbf{E} und \mathbf{D} eine lokale, lineare, isotrope und dispersive Beziehung

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) = \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \quad (2.49)$$

mit der Permittivität des Vakuums ε_0 angesetzt. Mit der Substitution $\tilde{\mathbf{H}} = \sqrt{\mu_0/\varepsilon_0} \mathbf{H}$ reduzieren sich dann die Maxwell'schen Gleichungen (2.44) - (2.45) auf die folgende Form im Frequenzraum:

$$\mathbf{rot} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = +\frac{i\omega}{c} \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega), \quad \mathbf{rot} \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = -\frac{i\omega}{c} \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega), \quad (2.50)$$

$$\mathbf{div} [\varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)] = 0, \quad \mathbf{div} \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) = 0. \quad (2.51)$$

Da $\mathbf{div} [\mathbf{rot}]$ identisch verschwindet, sind obige Divergenzgleichungen automatisch erfüllt.

Die zugrunde liegende Geometrie ist in Abb. 2.5 schematisch dargestellt. Von der Struktur wird gefordert, dass sie sich in L Schichten zerlegen lässt, in denen jeweils die Permittivität invariant entlang der Hauptpropagationsrichtung (z -Achse)

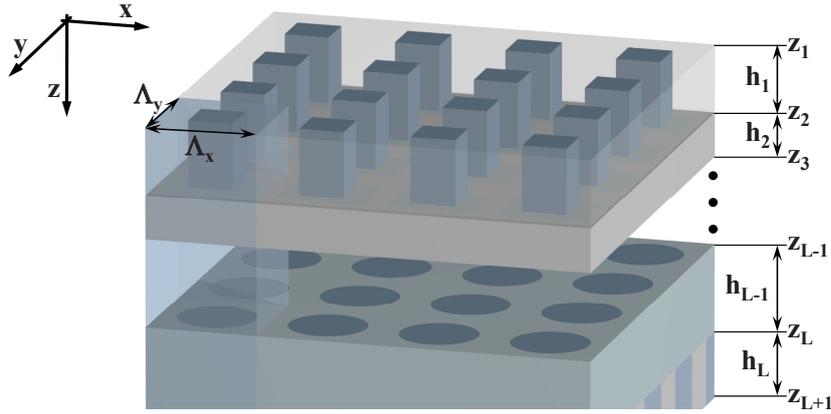


Abb. 2.5: Schematische Darstellung der behandelten Geometrie in der FMM/RCWA. Die Struktur ist entlang der vertikalen Richtung aus L einzelnen Schichten der Dicke h_l aufgebaut, in denen sich die Permittivität nur periodisch entlang der beiden lateralen Richtungen verändert.

ist, $\varepsilon(x, y, z) = \varepsilon^{(l)}(x, y)$. Entlang der beiden lateralen Richtungen (x - und y -Achse) wiederholt sich die Permittivität periodisch mit den allen Schichten gemeinen Gitterkonstanten Λ_x und Λ_y :

$$\varepsilon^{(l)}(x, y) = \varepsilon^{(l)}(x + \Lambda_x, y + \Lambda_y), \quad (2.52)$$

wobei der Index l die jeweilige Schicht bezeichnet. Als Beleuchtung wird eine ebene Welle mit dem Wellenzahlvektor $\mathbf{k} = \left(k_{x0}, k_{y0}, \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(z < 0) - k_{x0}^2 - k_{y0}^2} \right)^T$ angenommen. Auf Grund der Periodizität der gesamten Struktur kann das Floquet-Bloch-Theorem [115] auf jede elektromagnetische Feldkomponente $f^{(l)}(x, y, z)$ angewandt werden:

$$f^{(l)}(x + \Lambda_x, y + \Lambda_y, z) = f^{(l)}(x, y, z) \exp [i(k_{x0}\Lambda_x + k_{y0}\Lambda_y)]. \quad (2.53)$$

Die Funktion $f^{(l)}(x, y, z)$ setzt sich somit multiplikativ aus einer echt periodischen Funktion $f^{(l)}(x, y, z) \exp [-i(k_{x0}x + k_{y0}y)]$ und der Phase $\exp [+i(k_{x0}x + k_{y0}y)]$ zusammen. Entsprechend kann $f^{(l)}(x, y, z)$ als Pseudo-Fourierreihe dargestellt werden:

$$f^{(l)}(x, y, z) = \sum_{m=-M}^M \sum_{n=-N}^N f_{mn}^{(l)}(z) \exp [i(k_{xm}x + k_{yn}y)], \quad (2.54)$$

wobei

$$k_{xm} = k_{x0} + \frac{2\pi m}{\Lambda_x}, \quad k_{yn} = k_{y0} + \frac{2\pi n}{\Lambda_y} \quad (2.55)$$

gilt. Gleichung (2.54) ist im Sinne der Fourierreihendarstellung für den Grenzübergang $M, N \rightarrow \infty$ exakt. In der numerischen Implementierung nehmen M und N jedoch nur endliche Werte an. In den als homogen angenommenen Halbräumen ober-

($z < 0$) und unterhalb ($z > z_{L+1}$) der Struktur wird das Feld als Rayleighentwicklung geschrieben:

$$f^{(0)}(x, y, z) = \sum_{m,n,\pm} f_{mn\pm}^{(0)} \exp [i(k_{xm}x + k_{yn}y \pm \gamma_{mn}^{(0)}z)] , \quad z < 0 \quad (2.56)$$

$$f^{(L+1)}(x, y, z) = \sum_{m,n,\pm} f_{mn\pm}^{(L+1)} \exp [i(k_{xm}x + k_{yn}y \pm \gamma_{mn}^{(L+1)}z)] , \quad z > z_{L+1} \quad (2.57)$$

wobei für $\gamma_{mn}^{(0,L+1)}$ die Beziehung

$$(\gamma_{mn}^{(0,L+1)})^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon^{(0,L+1)} - k_{xm}^2 - k_{yn}^2 \quad (2.58)$$

mit den Vorzeichenkonventionen $\Re \gamma_{mn}^{(0,L+1)} > 0$ und $\Im \gamma_{mn}^{(0,L+1)} > 0$ gilt. Falls eine periodische Struktur mit einer ebenen Welle beleuchtet wird, entspricht die Rayleighentwicklung den einzelnen Beugungsordnungen des Gitters inklusive des evaneszenten Nahfeldes. Die einfallenden Felder sind dabei durch $+$ für $z < 0$ und durch $-$ für $z > z_{L+1}$ charakterisiert. Bis auf die Amplitude $f_{00+}^{(0)}$, die zu der einfallenden ebenen Welle gehört, wird ihnen aus physikalischen Gründen eine verschwindende Amplitude zugeordnet.

Auf Grund der Invarianz von $\varepsilon^{(l)}(x, y)$ innerhalb der l -ten Schicht entlang der z -Richtung, wird für $f^{(l)}(x, y, z)$ der Separationsansatz

$$f^{(l)}(x, y, z) = \sum_{m=-M}^M \sum_{n=-N}^N f_{mn}^{(l)} \exp [i(k_{xm}x + k_{yn}y)] \exp [i\gamma^{(l)}z] \quad (2.59)$$

gewählt. Des Weiteren werden die beiden Rotationsgleichungen (2.50) dazu verwendet, um die beiden z -Komponenten zu eliminieren. Das anschließende Einsetzen des Ansatzes gemäß Gl. (2.59) für die x - und y -Komponenten der beiden Felder liefert das algebraische Eigenwertproblem [116]

$$\hat{F}^{(l)} \hat{G}^{(l)} \mathbf{E}_{\perp}^{(l)} = (\gamma^{(l)})^2 \mathbf{E}_{\perp}^{(l)}, \quad (2.60)$$

wobei $\mathbf{E}_{\perp}^{(l)} = (\mathbf{E}_x^{(l)}, \mathbf{E}_y^{(l)})^T$ bezeichnet und die einzelnen Einträge von $f_{mn}^{(l)}$ gemäß $f_{mn}^{(l)} = \mathbf{f}_{m+(2M+1)*n}^{(l)}$ organisiert sind. Beim Erstellen der beiden Matrizen $\hat{F}^{(l)}$ und $\hat{G}^{(l)}$ haben sich spezielle Regeln beim Erstellen der Fourierreihendarstellung des periodischen $\varepsilon^{(l)}(x, y)$ als vorteilhaft erwiesen [117–119]. Das Lösen des Eigenwertproblems Gl. (2.60) liefert $U = 2(2M + 1)(2N + 1)$ Eigenlösungen, also U Eigenwerte $(\gamma_u^{(l)})^2$ mit den zugehörigen Eigenvektoren $(\mathbf{E}_{xu}^{(l)}, \mathbf{E}_{yu}^{(l)})^T$. Zusätzlich werden noch die Eigenvektoren für das magnetische Feld gemäß $\tilde{\mathbf{H}}_{\perp u}^{(l)} = \hat{G}^{(l)} \mathbf{E}_{\perp u}^{(l)} / \gamma_u^{(l)}$ berechnet. Für

die z -abhängigen Feldkomponenten der l -ten Schicht aus Gl. (2.54) kann dann der folgende Ansatz formuliert werden [116]:

$$E_{jmn}(z)^{(l)} = \sum_{u=1}^U E_{jmnu}^{(l)} [a_u^{(l)} \exp [i\gamma_u^{(l)} \tilde{z}] + b_u^{(l)} \exp [-i\gamma_u^{(l)} (\tilde{z} - h_l)]], \quad (2.61)$$

$$\tilde{H}_{jmn}(z)^{(l)} = \sum_{u=1}^U \tilde{H}_{jmnu}^{(l)} [a_u^{(l)} \exp [i\gamma_u^{(l)} \tilde{z}] - b_u^{(l)} \exp [-i\gamma_u^{(l)} (\tilde{z} - h_l)]], \quad (2.62)$$

wobei $j \in \{x, y\}$ und $\tilde{z} = z - z_l$ die relative z -Koordinate in der l -ten Schicht der Dicke h_l bezeichnet. Die Unbekannten $a_u^{(l)}$ und $b_u^{(l)}$ sind dabei mit den Unbekannten $a_u^{(l+1)}$ und $b_u^{(l+1)}$ über eine Streumatrix miteinander verknüpft, die durch Fordern der Stetigkeit von \mathbf{E}_\perp und $\tilde{\mathbf{H}}_\perp$ an der zugehörigen Grenze unter Einbeziehung von Gl. (2.54), Gl. (2.61) und Gl. (2.62) bestimmt werden kann:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}^{(l+1)} \\ \mathbf{b}^{(l)} \end{pmatrix} = \hat{S}^{(l)} \begin{pmatrix} \mathbf{a}^{(l)} \\ \mathbf{b}^{(l+1)} \end{pmatrix}, \quad (2.63)$$

$$\hat{S}^{(l)} = \begin{pmatrix} \hat{E}_\perp^{(l+1)} & -\hat{E}_\perp^{(l)} \\ \hat{H}_\perp^{(l+1)} & \hat{H}_\perp^{(l)} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \hat{E}_\perp^{(l)} \hat{\Gamma}^{(l)} & -\hat{E}_\perp^{(l+1)} \hat{\Gamma}^{(l+1)} \\ \hat{H}_\perp^{(l)} \hat{\Gamma}^{(l)} & \hat{H}_\perp^{(l+1)} \hat{\Gamma}^{(l+1)} \end{pmatrix}, \quad (2.64)$$

wobei $\hat{\Gamma}^{(l)}$ für eine aus den $\exp(i\gamma_u^{(l)} h_l)$ aufgebaute Diagonalmatrix steht und $\hat{E}_\perp^{(l+1)}$ und $\hat{H}_\perp^{(l+1)}$ aus den jeweiligen Eigenvektoren aufgebaut sind. Bei mehreren Schichten kann durch Verkettung der einzelnen Streumatrizen eine Gesamtmatrix bestimmt werden. Diese verknüpft die einfallende ebene Welle [siehe Gl. (2.56)] mit den im Superstrat und Substrat auslaufenden gebeugten Wellen [siehe Gl. (2.56) und Gl. (2.57)]. Schlussendlich können alle Koeffizienten bestimmt und das elektromagnetische Feld überall rigoros berechnet werden. Der numerische Aufwand skaliert dabei linear mit der Anzahl der Schichten und in der dritten Potenz mit U .

2.5.4 Korrington-Kohn-Rostocker-Methode

Strukturen, die aus einzelnen homogenen Schichten aufgebaut sind, wobei die Schichten zusätzlich sich nicht überlappende, periodisch angeordnete Kugeln enthalten dürfen, können sehr effizient mit einem an die Korrington-Kohn-Rostocker-Methode (KKR) [120, 121] angelehnten Formalismus behandelt werden. Für die vorliegende Dissertation wurde das in Fortran geschriebene Programm MULTEM2 [122, 123] verwendet. Ausgehend von Gl. (2.50) und Gl. (2.51) und den entsprechenden Annahmen wird die Streuung einer ebenen Welle an einer sich im Koordinatenursprung befindlichen Kugel im Frequenzraum betrachtet. Das gestreute Feld lässt sich dann

in Kugelkoordinaten als

$$\mathbf{E}_{\text{scat}}(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sum_{p=1}^2 a_{lmp}(k_{x0}, k_{y0}, k_{z0}, E_x, E_y, E_z) \Phi_{lmp}(\mathbf{r}) \quad (2.65)$$

schreiben, wobei die konkrete Form der auslaufenden Wellen $\Phi_{lmp}(\mathbf{r})$ je nach numerischer Umsetzung unterschiedlich gewählt ist, aber in jedem Fall auf den sphärischen Hankelfunktionen h_l und den Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ basiert. Der Index p wurde in obiger Kurznotation eingeführt, da es bei der Beschreibung in Kugelkoordinaten für jede Indexkombination lm jeweils zwei verschiedene Eigenfunktionen gibt. Die Amplituden der gestreuten Kugelwellen a_{lmp} sind bekannte Funktionen der Komponenten des Wellen- und Amplitudenvektors des einfallenden Feldes [122].

Wird eine biperiodische Anordnung von Kugeln mit einer ebenen Welle beleuchtet, ergibt sich für das Streufeld ein analoger Ansatz der Form:

$$\mathbf{E}_{\text{scat}}(\mathbf{r}) = \sum_{l,m,p} \sum_{\mathbf{R}} b_{lmp} \Phi_{lmp}(\mathbf{r}) \exp [i(k_{x0}R_x + k_{y0}R_y)], \quad (2.66)$$

wobei \mathbf{R} einen Gittervektor mit den Komponenten R_x und R_y bezeichnet. Dieses Streufeld trägt natürlich zu dem auf alle Kugeln einfallenden Feld bei, sodass die b_{lmp} selbstkonsistent bestimmt werden müssen.

Das auf die Kugel im Koordinatenursprung einfallende Streufeld hat die Form:

$$\mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sum_{p=1}^2 c_{lmp} \Psi_{lmp}(\mathbf{r}), \quad (2.67)$$

wobei $\Psi_{lmp}(\mathbf{r})$ die einfallenden Wellen beschreibt, die analog zu den $\Phi_{lmp}(\mathbf{r})$ aufgebaut sind, dabei allerdings auf den sphärischen Besselfunktionen j_l basieren. Für die c_{lmp} besteht ein Zusammenhang folgender Form:

$$c_{lmp} = \sum_{l',m',p'} A_{ll'mm'pp'} b_{l'm'p'}. \quad (2.68)$$

Die $A_{ll'mm'pp'}$ sind analytisch berechenbar [124] und hängen unter anderem vom Gitter, dem Wellenzahlvektor und dem die Kugeln umgebenden Medium ab.

Durch Fordern der Stetigkeit des tangentialen E - und H -Feldes an der Kugeloberfläche kann der Zusammenhang zwischen einer einfallenden Welle der Form $c_{lmp} \Psi_{lmp}(\mathbf{r})$ und den gestreuten Wellen der Form $d_{lmp} \Phi_{lmp}(\mathbf{r})$ bestimmt werden. Hierbei ergibt sich die einfache Relation

$$d_{lmp} = T_{lp} c_{lmp}, \quad (2.69)$$

die besagt, dass das Streufeld in diesem Fall nur aus einer auslaufenden Welle besteht. Die T_{lp} hängen dabei unter anderem von den Materialparametern der betrachteten Kugeln sowie des Umgebungsmediums ab.

Für die selbstkonsistente Bestimmung der b_{lmp} wird Gl. (2.68) auf der rechten Seite um das einfallende Feld I_{lmp} erweitert und in Gl. (2.69) eingesetzt:

$$b_{lmp} = T_{lp} \left(\sum_{l',m',p'} A_{ll'mm'pp'} b_{l'm'p'} + I_{lmp} \right), \quad (2.70)$$

wobei die I_{lmp} vom Amplituden- und Wellenzahlvektor der einfallenden ebenen Welle abhängen. Obiges Gleichungssystem lässt sich auch in Matrixschreibweise formulieren:

$$\mathbf{b} = \hat{T}(\hat{A}\mathbf{b} + \mathbf{I}) \quad (2.71)$$

und entsprechend lösen:

$$\mathbf{b} = [\hat{T}^{-1} - \hat{A}]^{-1} \hat{T}\mathbf{I}. \quad (2.72)$$

Damit ist die Streumatrix, die eine gegebene einfallende ebene Welle mit den auslaufenden Kugelwellen verknüpft, bestimmt.

Für die Propagation der Kugelwellen durch Schichtgrenzen hinweg wird das elektromagnetische Feld an den Schichtgrenzen durch ebene Wellen mit lateralen Komponenten der Wellenzahlvektoren gemäß Gl. (2.55) beschrieben. Dieser Wechsel des Funktionensystems erlaubt eine leichtere Formulierung der Übergangsbedingungen. Entsprechend wird das elektromagnetische Feld in den homogenen Schichten auch nur als Superposition von ebenen Wellen dargestellt. Insgesamt lassen sich auch hier Streumatrizen ähnlich zu Gl. (2.63) aufstellen, die ebene Wellen an den Schichtgrenzen miteinander verknüpfen. Somit können für eine gegebene einfallende ebene Welle die Beugungseffizienzen im Superstrat und Substrat bestimmt werden.

Die Implementierung in der Form von MULTEM2 wurde im Rahmen der vorliegenden Dissertation dahingehend modifiziert, dass die Verwendung von dispersiven Permittivitäten ermöglicht wurde. Des Weiteren wurde das Maximum für den Index l erhöht, sodass eine höhere Genauigkeit im Falle von sich fast berührenden Kugeln oder bei Kugeln mit Radien größer als der Wellenlänge ermöglicht wurde.

2.5.5 Skalare Dünne-Elemente-Methode

Die skalare Dünne-Elemente-Methode findet eine weite Verbreitung zur Berechnung des Streuverhaltens von optisch dünnen, periodischen, optischen Elementen. Diese Methode kann solange angewandt werden, wie die lateralen Detailgrößen des optischen Elementes groß und die optische Dicke klein im Vergleich zur Wellenlänge

sind. Als einfallendes Feld wird eine paraxiale ebene Welle angesetzt. Für die folgende Beschreibung wird angenommen, dass sich das optische Element zwischen den beiden Grenzen bei $z=0$ und $z=d_0$ befindet. Zusätzlich hat es eine ortsabhängige Dicke $d(x, y)$. Das Feld besitzt nach der Propagation durch das optische Element näherungsweise die Form

$$E(x, y, d_0) = E(x, y, 0) \exp \left[i \frac{2\pi [(n_2 - n_1)d(x, y) + n_1 d_0]}{\lambda} \right], \quad (2.73)$$

wobei n_2 die Brechzahl des Materials des optischen Elementes ist und n_1 die Brechzahl des Außenraums. Eine anschließende Fouriertransformation erlaubt die Bestimmung des Fernfeldes.

2.5.6 Bestimmung der Kurzschlussstromdichte

Zur Bewertung der verschiedenen Maßnahmen zum Photon-Management wird sich im Rahmen dieser Dissertation oft auf die Kurzschlussstromdichte J_{SC} zurückgezogen. Dafür wird das entsprechende Absorptionsspektrum $A(\lambda)$ mit der spektral aufgelösten Anzahl an einfallenden Photonen $\Phi_{\text{Sun}}(\lambda)$ gewichtet und anschließend integriert:

$$J_{SC} = \int_0^{\infty} e A(\lambda) EQE(\lambda) \Phi_{\text{Sun}}(\lambda) d\lambda. \quad (2.74)$$

Dabei bezeichnet e die Elementarladung und $EQE(\lambda)$ die externe Quanteneffizienz, also die spektral aufgelöste Effizienz der Umwandlung von einfallenden Photonen in an den Kontakten gesammelten Elektronen. Üblicherweise wird hierfür der idealisierte Wert von 1 angenommen. Für das Sonnenspektrum wird entweder das direkte (AM1.5d) oder das globale (AM1.5g) Sonnenspektrum [125] verwendet.

2.5.7 Anmerkungen bezüglich optischer Konstanten

Prinzipiell muss zwischen dem Materialparameter Permittivität und dem Wellenparameter Brechzahl unterschieden werden. Da es sich im Bereich der Solarzellen durchgesetzt hat, sich zum Großteil bei der Beschreibung der eingesetzten Materialien auf die Brechzahl zu beziehen, wird dieser Terminus in dieser Dissertation, wohlwissend seiner nicht ganz adäquaten Verwendung, oft benutzt. Unter der Brechzahl sei in diesem Fall einfach die Wurzel der Permittivität verstanden und nicht die Verknüpfung von Wellen- und Materialparametern durch eine Dispersionsrelation.

Auf Grund der Kramers-Kronig-Relationen [126] sind absorbierende (und damit alle real existierenden) Materialien durch eine dispersive Permittivität charakterisiert. Von Relevanz ist dies in der vorliegenden Dissertation bei der Bestimmung

der Absorptivität in den betrachteten Absorbern. Entsprechend wurden für deren Beschreibung auch immer gemessene, optische Daten herangezogen. Dies ist allerdings mit dem Nachteil verbunden, dass sich so auf eine konkrete Herstellungsweise festgelegt wird. Für die numerischen Untersuchungen wurden die optischen Daten von aSi:H der Literatur entnommen [102, 127]. Die Daten für μcSi wurden am Forschungszentrum Jülich (Deutschland) per Ellipsometrie und photothermischer Deflektionsspektroskopie gemessen. Deutlich geringer fällt hingegen die Dispersion der betrachteten transparenten Dielektrika aus, da hier der relevante (transparente) Spektralbereich hinreichend weit von dem Spektralbereich entfernt ist, in dem erhöhte Absorptivität vorliegt. Somit ist es im Hinblick auf eine hohe Allgemeingültigkeit durchaus zulässig, diese Materialien durch eine konstante, reellwertige Permittivität zu beschreiben.

2.6 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurden eingangs die wesentlichen Mechanismen in einem beleuchteten p-n-Übergang dargestellt, wie Generation, Rekombination und Transport von Elektronen und Löchern. Unter anderem wurde für eine ideale Solarzelle, in der Rekombination nur strahlend erfolgt, ein exponentieller Zusammenhang zwischen der Spannung und der Kurzschlussstromdichte hergeleitet. Die Materialien aSi:H und μcSi , aus denen sich Dünnschichtsolarzellen fertigen lassen, wurden kurz vorgestellt. In einer kurzen Diskussion der Wirkungsgrade wurden die möglichen Maximalwerte sowohl für Einfachsolarzellen als auch für Tandemzellen genannt. Des Weiteren wurden mehrere Maßnahmen, die dem Photon-Management dienen, aufgeführt. Unter anderem wurde auf die Relevanz und die Realisierung sowohl einer guten Einkopplung als auch einer Verbesserung der Absorption des einfallenden Lichtes eingegangen. Abgeschlossen wurde das Kapitel mit einem Überblick über die in dieser Dissertation verwendeten numerischen Verfahren, mit denen für eine gegebene Struktur und ein konkretes Beleuchtungsszenario Reflektivität und Transmissivität und gegebenenfalls auch das ortsaufgelöste elektromagnetische Feld bestimmt werden können.

3 Photon-Management in Einfachsolarmzellen

Eine Investition in Wissen
bringt noch immer die besten Zinsen.

(Benjamin Franklin)

In der Einleitung wurden bereits mehrere Wege aufgezeigt, wie die Anzahl absorberter Photonen erhohet werden kann – auch uber das Shockley-Queisser-Limit (siehe Abschnitt 2.3.2) hinaus. Konzepte, deren Ziel eine spektrale Umverteilung des Sonnenlichtes ist (siehe Abschnitt 2.4.3), werden jedoch im Rahmen dieser Dissertation nicht behandelt. In diesem Kapitel liegt der Fokus auf Einfachsolarmzellen, das heist auf Solarmzellen, bei denen die photovoltaische Konversion nur an einem p-n-Ubergang stattfindet. Der Schwerpunkt der vorgestellten Ergebnisse liegt dabei auf der Verbesserung der Einkopplung und effektiven Streuung sowie Lokalisierung des einfallenden Lichtes. Fur diese Zwecke wurde das Potential der Implementierung sowohl deterministisch als auch zufallig texturierter Oberflachen untersucht. Das Kapitel wird durch einen Abschnitt abgeschlossen, der sich der Einschrankung des Akzeptanzwinkels und damit einer Verbesserung der Absorption und einer Unterdruckung der Reemission widmet.

3.1 Deterministische Oberflachentexturen

Der Einfachheit halber sollen zunachst nur Solarmzellen betrachtet werden, bei denen der Absorber aus einer planaren Schicht besteht. Bei einer planaren Schicht konnen prinzipiell zwei verschiedene Phanomene ausgenutzt werden. Zum einen bildet eine hochbrechende Schicht einen Resonator, dessen Endspiegel aus der oberen und unteren Grenzflache bestehen. Fur eine gegebene Schichtdicke kann es dann bei bestimmten Wellenlangen zu stehenden Wellen im Resonator kommen – den sogenannten Fabry-Perot-Resonanzen. Diese sind von einer besseren Lichteinkopplung in den Absorber auf Grund der destruktiven Interferenz der reflektierten Lichtanteile begleitet. Insgesamt ist dann die lokale Feldstarke im Resonator erhohet, was schlussendlich zu einer erhoheten Absorption fuhrt [74].

Zum anderen liegt ein Schichtwellenleiter vor, zu dessen Eigenmoden unter Umständen auch im Absorber geführte Moden gehören. An diese kann zum einen über einzelne Streuzentren [72, 73] und zum anderen über ein Gitter angekoppelt werden. Die Periodizität kompensiert dabei über einen reziproken Gittervektor die für die Anregung benötigte Differenz der beiden beteiligten transversalen Wellenzahlvektoren [128, 129]. Genau genommen handelt es sich wegen der unendlichen Ausdehnung des Gitters um Leckmoden. Auf Grund der damit verbundenen Verlängerung des effektiven Weges innerhalb des Wellenleiters kann es so, insbesondere im langwelligen, schlecht absorbierten Spektralbereich, zu stark ausgeprägten, wenn auch spektral extrem schmalbandigen Erhöhungen der Absorptivität kommen.

Neben diesen beiden Resonanzen führen Oberflächentexturen noch zu einer Reduzierung von Einkoppelverlusten und zur Anregung von schräg im Absorber propagierenden Beugungsordnungen [54, 80, 130]. Dadurch wird ausgenutzt, dass gebeugtes Licht im Absorber einen längeren effektiven Weg zurücklegt und somit besser absorbiert wird. Dass die Implementierung von periodischen Strukturen zu einer Steigerung der Absorptivität im schwach absorbierten langwelligen Spektralbereich führen kann, wurde bereits frühzeitig theoretisch erkannt [131] und experimentell bestätigt [132].

All diese Effekte hängen im Detail von der betrachteten Geometrie und der Wellenlänge ab und sind zusätzlich in den einzelnen Spektralbereichen von unterschiedlicher Relevanz, sodass eine Optimierung eines einzelnen Effektes zwar das physikalische Verständnis fördert, aber mitnichten die Anzahl an absorbierten Photonen maximiert. Entsprechend wurde in dieser Dissertation der Ansatz verfolgt, das Absorptionsspektrum für eine gegebene Oberflächentextur rigoros zu berechnen und die damit zugängliche Kurzschlussstromdichte als Bewertungsmaß heranzuziehen. Diese Vorgehensweise hat die beiden Vorteile, dass zum einen alle Effekte im Rahmen der Rechengenauigkeit berücksichtigt werden und zum anderen der für die Solarzelle relevante Spektralbereich in Gänze betrachtet wird.

Auf Grund des geringeren numerischen Aufwandes ist ein Großteil der veröffentlichten Untersuchungen auf Oberflächen beschränkt, die nur entlang einer Richtung periodisch moduliert sind [54, 79, 80, 130, 133–135]. Im Gegensatz dazu werden in den nächsten beiden Abschnitten Untersuchungen präsentiert, denen biperiodisch modulierte Oberflächentexturen zugrunde liegen. Im Detail werden Kugeln, Pyramiden, parabelförmige Berge und die Inversen der beiden Letztgenannten zur Bildung der Oberflächentextur herangezogen, wobei eine Erhöhung der Anzahl der absorbierten Photonen angestrebt wird.

3.1.1 Biperiodisch angeordnete Nanokugeln

In Wasser gelöste Polymer-Nanokugeln können sich selbstorganisiert während der Verdunstung des Wassers in regelmäßigen Mustern anordnen [136]. Wie sich in Experimenten von Partnern an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg zeigte, werden die Ergebnisse dabei umso defektfreier, je monodisperser die Nanokugeln vorliegen und je langsamer das Wachstum erfolgt. Ersteres konnte auch schon numerisch verifiziert werden [137]. Ein solcher Prozess ermöglicht die Realisierung von biperiodischen Gittern auf großen Flächen bei relativ geringen Kosten. Tendenziell neigen monodisperse Kolloidlösungen zur selbstorganisierten Bildung von hexagonalen Monolagen während der Verdunstung des Lösungsmittels [136], jedoch kann eine quadratische Anordnung der Nanokugeln durch vortexturierte Substrate [138] oder bei Verwendung eines Spin-Coaters durch zusätzlich hervorgerufene Scherkräfte [139] erzwungen werden.

Abbildung 3.1 a) zeigt den prinzipiellen Aufbau der untersuchten Zellen. Für eine vereinfachte Diskussion ist der Aufbau auf wenige relevante Bestandteile reduziert. Die Zellen bestehen jeweils aus einer planaren, 350 nm dicken Schicht aus aSi:H. Als Rückseite wirkt ein perfekter Spiegel (engl. *perfect electric conductor* (PEC)), der in der Simulation durch eine Brechzahl von $n_{\text{subs}}=0+40i$ charakterisiert ist. Zur zusätzlichen Kontaktierung der Zelle befindet sich über der aSi:H-Schicht noch ein 200 nm dicker Film, der durch eine Brechzahl von $n=2,0$ beschrieben wird, um ein TCO wie ZnO zu repräsentieren. Die Nanokugeln mit Radius ρ wurden dabei biperiodisch in einem quadratischen Raster mit der Gitterperiode Λ entlang der Oberfläche angeordnet, sodass ein polarisationsinsensitives Verhalten der Zelle bei senkrechtem Einfall auf Grund der C_4 -Symmetrie vorliegt. Für die Nanokugeln wurde auch ein absorptions- und dispersionsfreies Dielektrikum mit der Brechzahl $n=2,0$ gewählt. Für die Beleuchtung wurde eine senkrecht einfallende ebene Welle angenommen.

Die Anzahl der Freiheitsgrade innerhalb des Designprozesses wird dadurch erhöht, dass der Kugelradius kleiner als die halbe Gitterperiode sein darf ($2\rho \leq \Lambda$). Experimente von Partnern am Institut für Angewandte Physik in Jena und an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg zeigten, dass solche Proben auf vortexturierten Substraten erfolgreich hergestellt werden können. Ein sich anschließendes Tempern ermöglicht dabei eine weitere Volumenkontraktion der Nanokugeln. Für die numerische Behandlung wurde die KKR-Methode (siehe Abschnitt 2.5.4) verwendet, die eine Bestimmung der Beugungseffizienzen erlaubt. Da das aSi:H das einzige absorbierende Material in dieser Zellkonfiguration ist und durch das PEC-Substrat

die Transmission verschwindet, kann die Absorptivität $A(\lambda)$ einfach durch

$$A(\lambda) = 1 - \sum_i R_i(\lambda) \quad (3.1)$$

mit $R_i(\lambda)$ als der Intensität der i -ten reflektierten Beugungsordnung berechnet werden.

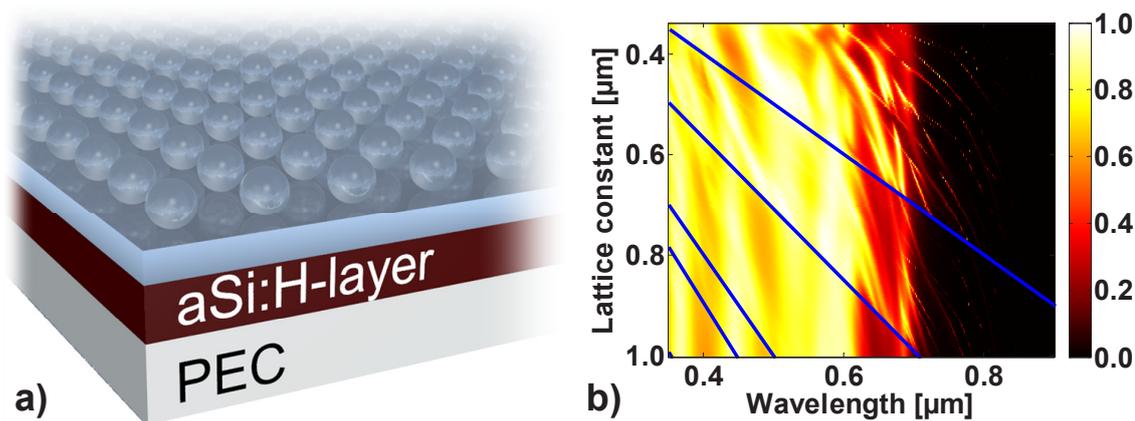


Abb. 3.1: a) Prinzipieller Aufbau der untersuchten Zellen. Dielektrische Nanokugeln formen ein biperiodisches Muster auf der Zelloberfläche. Der Absorber besteht aus aSi:H und ist von ZnO und einem PEC-Substrat umgeben. b) Absorptionsspektrum für variierende Gitterperiode, wobei der Kugelradius $\rho=170$ nm beträgt. Die blauen Linien kennzeichnen eine Änderung der Anzahl der propagierenden reflektierten Beugungsordnungen.

Abbildung 3.1 b) zeigt die berechnete Absorptivität über der Wellenlänge des einfallenden Lichtes in Abhängigkeit von der Gitterperiode Λ , wobei der Kugelradius auf $\rho=170$ nm gesetzt wurde. Bei der untersuchten Konfiguration fungiert die hochbrechende aSi:H-Schicht als Wellenleiter. Die Ankopplung an die diskreten geführten Wellenleitermoden kann mit den schmalbandigen Erhöhungen der Absorptivität identifiziert werden. Gemäß Abb. 3.1 b) können die Wellenleitermoden in zwei Kategorien entsprechend ihres Anstiegs gegenüber der Wellenlänge unterteilt werden. Diese entsprechen dabei den transversal-elektrischen und transversal-magnetischen Moden, die verschiedene Dispersionsrelationen aufweisen [140].

Für steigende Λ kommt es entlang der Verläufe von markanten Strukturen innerhalb der Abb. 3.1 b) immer wieder zu abrupten Änderungen (zumeist zu einer Verringerung der Absorptivität) in der Nähe der blauen Linien. Diese Linien markieren das Einsetzen höherer Beugungsordnungen in der Luft (Rayleigh-Wood-Anomalien [141]). Dazu kommt es, wenn der Betrag eines durch das Gitter gemäß Gl. (2.55) bereitgestellten lateralen Wellenzahlvektors gleich dem Betrag des Wellenzahlvektors im Außenraum ist:

$$\left(\frac{2\pi m}{\Lambda}\right)^2 + \left(\frac{2\pi n}{\Lambda}\right)^2 = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2. \quad (3.2)$$

Die oberste Linie kennzeichnet zum Beispiel das Einsetzen der ersten Beugungsordnung bei $\lambda=\Lambda$. Oberhalb einer solchen Linie wird das einfallende Licht auf in der Luft propagierende Ordnungen und auf in das aSi:H gestreute Licht aufgeteilt. Wenn durch ein Erhöhen von Λ eine solche Linie passiert wird, können zusätzliche Beugungsordnungen in der Luft propagieren. Die Anregung bedient sich dabei zumeist der schon existierenden Beugungsordnungen, zu denen auch schon das in das aSi:H gestreute Licht gehört. Dementsprechend kommt es zu den beobachtbaren abrupten Änderungen.

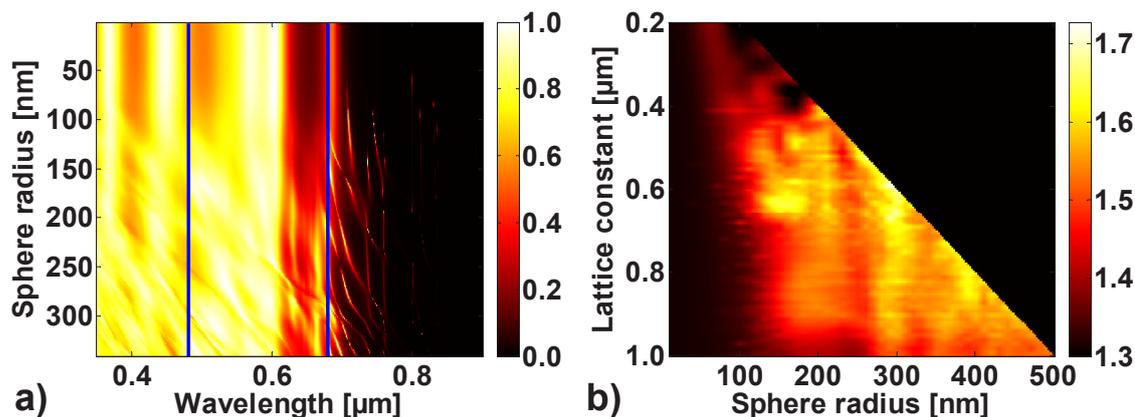


Abb. 3.2: a) Absorptionsspektrum für variierenden Kugelradius, wobei die Gitterperiode $\Lambda=0,68 \mu\text{m}$ beträgt. Die blauen Linien kennzeichnen eine Änderung der Anzahl der propagierenden reflektierten Beugungsordnungen. b) Erhöhung von J_{SC} über dem Kugelradius und der Gitterperiode gegenüber der Referenzzelle, die nur aus einer planaren aSi:H-Schicht auf einem PEC-Substrat besteht.

Des Weiteren wurden Absorptionsspektren für eine konstante Gitterperiode von $\Lambda=0,68 \mu\text{m}$ und variierenden Kugelradius berechnet, welche in Abb. 3.2 a) dargestellt sind. Für verschwindende Radien absorbiert die Zelle so viele Photonen wie die Referenzzelle mit planaren Grenzflächen. Bei kurzen Wellenlängen, wo das in die aSi:H-Schicht eingekoppelte Licht bereits nach einem Durchlauf absorbiert wird, spielen nur die Luft-ZnO- und die ZnO-aSi:H-Grenzfläche eine Rolle. In einem solchen Fall fungiert die 200 nm dicke ZnO-Schicht als eine Antireflexschicht und es kommt spektral selektiv zu einer besseren Lichteinkopplung und entsprechend zu einer Absorptionserhöhung [siehe Abb. 3.2 a) bei 450 nm]. Bei größeren Wellenlängen und entsprechend größeren Absorptionslängen im aSi:H spielt auch die aSi:H-PEC-Grenzfläche eine Rolle. Es kann dann zur Ankopplung an die eingangs erwähnten Fabry-Perot-Resonanzen kommen [siehe Abb. 3.2 a) bei 680 nm].

Der Abb. 3.2 a) lässt sich auch entnehmen, dass Nanokugeln mit einem Radius von $\rho>50 \text{ nm}$ ausreichend stark streuen, um zu beobachtbaren Details in den Absorptionsspektren zu führen. Mit steigenden Radien dominieren diese Details die spektrale Antwort immer stärker. Bei sich berührenden Nanokugeln ($\Lambda=2\rho$) stellt sich dabei

die größte Absorptivität im relevanten Spektralbereich zwischen 350 und 600 nm ein. Zusätzlich kann auch hier wieder die Anregung von geführten Moden durch die scharfen Absorptionspeaks im langwelligen Spektralbereich identifiziert werden. Da die Kugeln die Dispersionsrelation der geführten Moden mit beeinflussen, verändert sich die spektrale Position der Absorptionspeaks mit dem Kugelradius.

Zur Berechnung der Kurzschlussstromdichte J_{SC} gemäß Abschnitt 2.5.6 wurde das direkte Sonnenspektrum AM1.5d [125] verwendet. Abbildung 3.2 b) zeigt die Erhöhung von J_{SC} in Abhängigkeit vom Kugelradius und der Gitterperiode gegenüber der Referenzzelle, die nur aus einer planaren aSi:H-Schicht auf einem PEC-Substrat besteht. Für verschwindenden Kugelradius ergibt sich so der reflexmindernde Einfluss der ZnO-Schicht, der bereits zu einer Verbesserung um den Faktor von 1,31 führt. Des Weiteren wird ersichtlich, dass für ein großes J_{SC} eine hohe Packungsdichte der Nanokugeln angestrebt werden muss. Das Optimum, was einer Erhöhung von J_{SC} um einen Faktor von 1,73 entspricht, liegt bei $\rho=290$ nm und $\Lambda=0,59$ μ m.

Weitere Details, wie zum Beispiel der Einfluss der Permittivität der Nanokugeln oder des Substrats, sind ausführlich in der Literatur diskutiert [80]. Die hier vorgeschlagene Verwendung von Kugelmonolagen wurde im Anschluss von anderen Gruppen aufgegriffen und im Zusammenhang mit GaAs-Solarzellen experimentell untersucht [86]. In der neueren Literatur findet sich eine ähnlich geartete Diskussion mit dem Fokus auf SiO₂-Nanokugeln, wobei an Stelle der ZnO-Schicht eine 80 nm dicke ITO-Schicht verwendet wurde und die aSi:H-Schicht nur 100 nm dick ist. Die Autoren erreichten dabei numerisch eine Verbesserung um 12 % [87].

An dieser Stelle sei noch angemerkt, dass anstatt der Nanokugeln auch klassische Lüneburglinsen [142] untersucht wurden. Bei Lüneburglinsen handelt es sich um Kugeln mit einer radialabhängigen Permittivität, welche strahlenoptisch betrachtet zwei konzentrische Kugeloberflächen perfekt aufeinander abbilden. Für den klassischen Fall fällt eine dieser Kugeloberflächen mit der Oberfläche der Lüneburglinse zusammen, während die zweite Kugeloberfläche durch einen unendlichen Radius gekennzeichnet ist. Mit solchen Linsen wird einfallendes Licht direkt hinter den Lüneburglinsen fokussiert. Dafür wurde die vorliegende Version von MULTEM2 dahingehend modifiziert, dass auch Kugeln mit radialabhängiger Permittivität behandelt werden konnten [143]. Auf Grund der generell schlechten Lichteinkopplung lagen die dabei erreichten Verbesserungen von J_{SC} bestenfalls bei 20 %, sodass dieses Konzept nicht weiter verfolgt wurde.

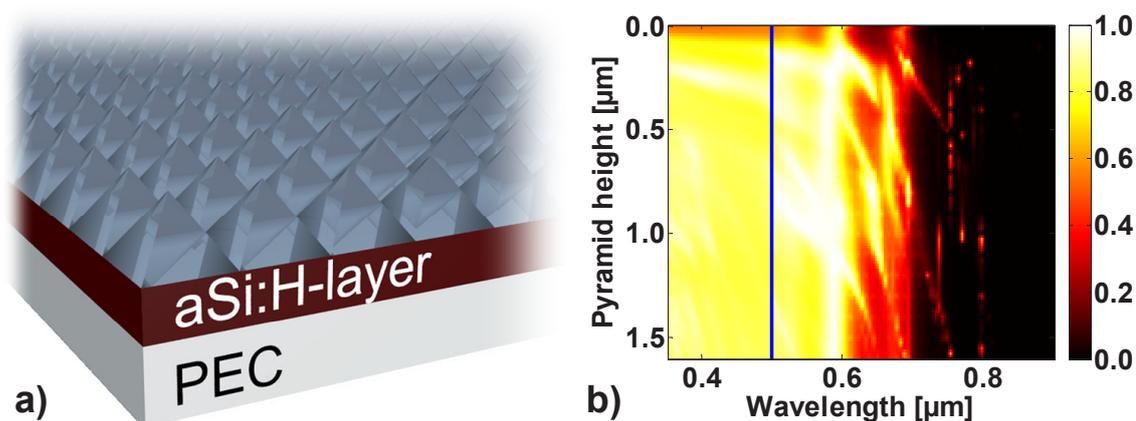


Abb. 3.3: a) Prinzipieller Aufbau der untersuchten Zellen. Dielektrische Pyramiden formen ein quadratisches Muster auf der Zelloberfläche. Der Absorber ist eine aSi:H-Schicht auf einem PEC-Substrat. b) Absorptionsspektren von Zellen mit biperiodisch angeordneten Pyramiden für variierende Höhe der Pyramiden, wobei die Gitterperiode auf $\Lambda=0,50\ \mu\text{m}$ gesetzt wurde. Die blaue Linie kennzeichnet das Einsetzen der ersten reflektierten Beugungsordnung.

3.1.2 Weitere deterministische Strukturelemente

Des Weiteren wurden Pyramiden und parabelförmige Berge und deren invertierte Gegenstücke mit der Höhe h und der zur Gitterperiode Λ identischen Basislänge untersucht [siehe exemplarisch Abb. 3.3 a)]. Für die entsprechende numerische Implementierung wurde die RCWA (siehe Abschnitt 2.5.3) verwendet. Um die kontinuierlichen Oberflächen abzubilden, wurden diese in mindestens 10 Schichten mit der Maximaldicke von 200 nm unterteilt. Eine hinreichende Genauigkeit wurde sichergestellt, indem 21×21 Fourier-Ordnungen verwendet wurden.

Analog zu Abb. 3.2 a) ist in Abb. 3.3 b) die Absorption über der Wellenlänge und der Höhe der im Abstand von $\Lambda=0,50\ \mu\text{m}$ biperiodisch angeordneten Pyramiden dargestellt. Im gesamten Spektralbereich erlaubt der graduelle Verlauf des Querschnitts der Pyramiden eine effiziente Kopplung zwischen dem ZnO und der Luft [144]. Im langwelligeren Spektralbereich kann erneut die Anregung von im aSi:H geführten Moden mit den schmalen Absorptionspeaks identifiziert werden. Bei einer Wellenlänge von 600 nm gibt es eine höhenunabhängige Verbesserung der Absorption, die auf einer Fabry-Perot-Resonanz im aSi:H basiert. Für Wellenlängen unterhalb von 550 nm wird jegliches in das aSi:H eingekoppelte Licht auf Grund des hohen Absorptionskoeffizienten absorbiert, sodass sich optimale Strukturen für diesen Spektralbereich durch eine besonders effiziente Unterdrückung von Reflexionsverlusten auszeichnen. Zwischen 550 nm und 700 nm wird für eine hohe Absorption zusätzlich noch eine gute Streuung des einfallenden Lichtes in die aSi:H-Schicht gefordert. Oberhalb von 800 nm ist auch hier keine signifikante Absorptivität erreichbar.

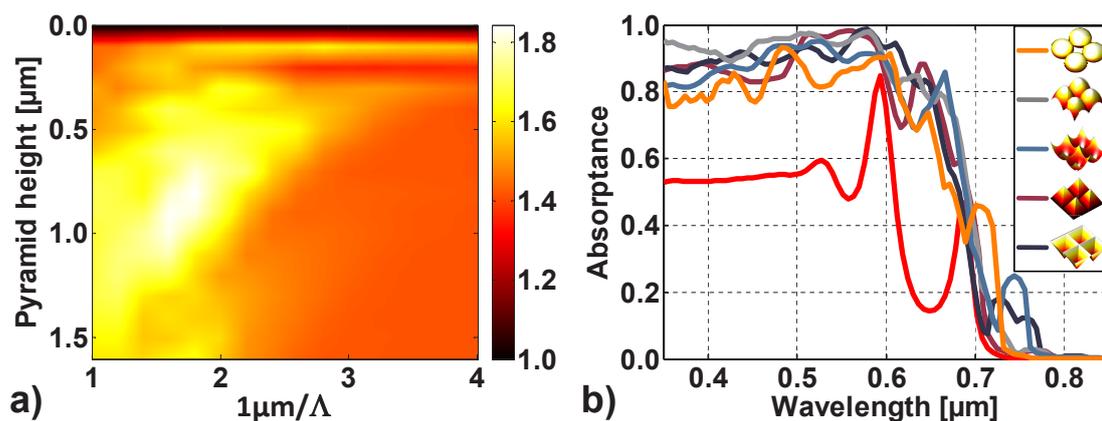


Abb. 3.4: a) Erhöhung von J_{SC} über der inversen Periode und der Höhe der Pyramiden gegenüber der Referenzzelle, die nur aus einer planaren aSi:H-Schicht auf einem PEC-Substrat besteht. b) Absorptionsspektren für die diskutierten Fälle der Pyramiden und parabelförmigen Berge nebst ihrer invertierten Gegenstücke sowie dem Optimum aus Abb. 3.2 b) und dem Spektrum der Referenzzelle (rot).

Die berechnete Verbesserung von J_{SC} gegenüber der Referenzzelle, die nur aus einer planaren aSi:H-Schicht auf einem PEC-Substrat besteht, ist in Abb. 3.4 a) als Funktion der Pyramidenhöhe und der inversen Gitterperiode dargestellt. Für Wellenlängen größer als die Gitterperiode kann das einfallende Licht nicht mehr die einzelnen Details der Oberflächentextur auflösen und seine Ausbreitung wird eher durch einen effektiven Brechungsindex bestimmt, der auf Grund der pyramidenförmigen Textur graduell ist [144]. Demzufolge wirkt die Textur wie eine Antireflexschicht mit einem variierenden Brechungsindex mit Werten zwischen minimal 1,0 (Luft) und maximal 2,0 (ZnO). Im Grenzfall großer Perioden kann die Textur mithilfe strahlenoptischer Methoden betrachtet werden. Je nach lokaler Neigung der Seitenflächen der Textur kann es so zu Mehrfachreflexionen des einfallenden Lichtes kommen, was einer Erhöhung der Lichteinkopplung entgegenkommt. Für Strukturdetails in der Größenordnung von $0,5\mu\text{m}$ wird das Licht offenbar effektiv in die aSi:H-Schicht eingekoppelt und dort wirksam gestreut, was eine Verlängerung des effektiven Lichtweges bedingt und folglich zu einer Steigerung der Absorptivität führt. Analoge Rechnungen mit ähnlichen Resultaten wurden auch für die anderen Strukturen durchgeführt. Es sei darauf hingewiesen, dass die hohe Symmetrie zu einer polarisationsunabhängigen Antwort der Zelle führt, andererseits aber nicht unbedingt an alle Moden innerhalb der aSi:H-Schicht für alle Wellenlängen effektiv angekoppelt werden kann [145]. In der neueren Literatur finden sich entsprechend Hinweise, dass geeignet angepasste asymmetrische Texturen zu noch höheren Strömen führen können [91, 99].

Eine Zusammenstellung der optimierten Geometrieparameter und der entspre-

Tab. 3.1: Details zu den für die verschiedenen untersuchten biperiodischen Oberflächen gefundenen Verbesserungen von J_{SC} gegenüber der Referenzzelle. Im Detail wurden von links nach rechts untersucht: Nanokugeln, parabelförmige Berge, parabelförmige Täler, invertierte Pyramiden und Pyramiden.

Oberfläche					
Maximale Erhöhung	1,73	1,90	1,87	1,84	1,81
Optimale Periode [μm]	0,59	0,63	0,63	0,56	0,50
Optimale Höhe [μm]	0,58	1,20	1,50	0,80	0,80
Verbesserung für $\Lambda=0,25 \mu\text{m}$		1,58	1,52	1,55	1,55

chenden maximalen Verbesserungen von J_{SC} gegenüber der Referenzzelle findet sich in Tab. 3.1, wobei die zugehörigen Absorptionsspektren in Abb. 3.4 b) dargestellt sind. Die mit biperiodisch strukturierten Oberflächen erreichbaren Verbesserungen bewegen sich im Bereich zwischen 1,73 und 1,90, wobei die Nanokugeln noch am schlechtesten abschneiden. Die optimalen Perioden liegen bei $\approx 0,60 \mu\text{m}$, also in dem Spektralbereich, in dem die Absorptionslänge in aSi:H die Absorberdicke maßgeblich übersteigt.

Solche Perioden erweisen sich im Nachhinein in vielerlei Hinsicht als optimal. Zum einen sind sie noch hinreichend klein, um eine effiziente Einkopplung des gut absorbierten Lichtes unterhalb der Bandkante zu ermöglichen. Zum anderen ist die Anzahl der Beugungsordnungen im aSi:H noch überschaubar, sodass das langwellige Licht mit entsprechend schrägen Beugungswinkeln im aSi:H propagiert und so effektiv längere Wege zurücklegt.

3.2 Anpassen des Streuverhaltens texturierter Oberflächen

Im vorigen Abschnitt war die Oberfläche periodisch moduliert. Die optimalen Gitterperioden hatten dabei eine Größenordnung von $\approx 0,60 \mu\text{m}$. Dadurch tragen zum gestreuten Feld nur wenige diskrete laterale Wellenzahlvektoren bei. Entsprechend sollten dann bei einer größeren Periode deutlich mehr laterale Wellenzahlvektoren am Streuverhalten beteiligt sein. Bei den bisherigen Ansätzen wird bei großen Perioden aber nicht mehr hinreichend in höhere Ordnungen gestreut, die wegen ihres längeren effektiven Weges im aSi:H jedoch am besten absorbiert werden. In diesem Zusammenhang stellt sich die Frage, ob es dennoch möglich ist, Oberflächen so maßzuschneidern, dass sich eine gewünschte Streuantwort ergibt. Dieser Abschnitt ist

der Beantwortung dieser Frage gewidmet [84]. Die betrachtete Solarzelle ist in Abb. 3.5 a) dargestellt. Der Absorber besteht aus einer 350 nm dicken aSi:H-Schicht auf einem planaren Substrat mit dem Brechungsindex n_{Subs} . Auf der Oberseite ist eine texturierte ZnO-Schicht aufgebracht, die entlang einer lateralen Richtung als invariant angenommen wird. Dies erlaubt die Reduktion des numerischen Aufwandes.

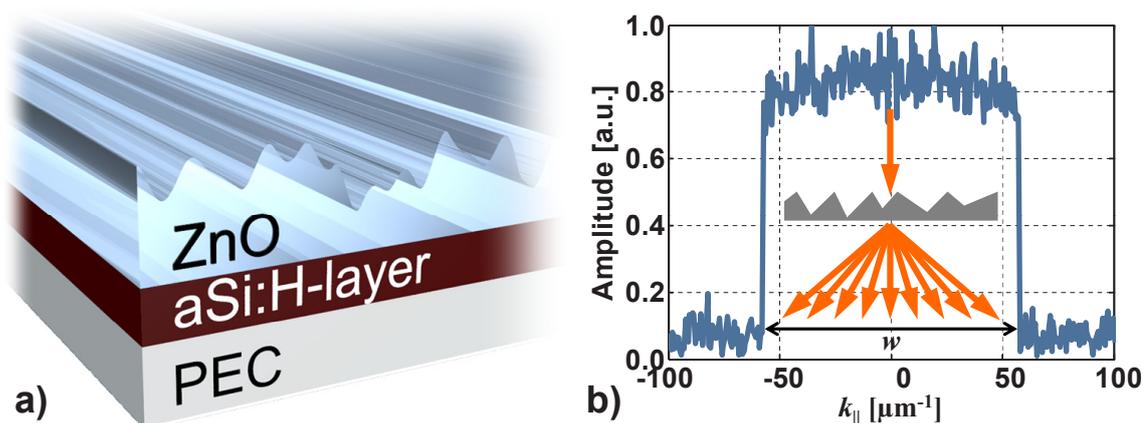


Abb. 3.5: a) Prinzipieller Aufbau der untersuchten Zellen. Eine 350 nm dicke aSi:H-Schicht ist von einer dielektrischen, texturierten Oberfläche und einem Substrat umgeben. b) Definition der Breite w im Ortsfrequenzraum.

Die Untersuchung erfolgte in zwei Schritten. Zuerst wurden Oberflächenprofile generiert, die zu einer gewünschten Streuantwort führen. Im zweiten Schritt wurden die zugehörigen Absorptionsspektren berechnet und die Anzahl an absorbierten Photonen bestimmt, um die Texturen bewerten zu können.

Zur Beschreibung der Wechselwirkung des einfallenden Lichtes mit der Textur wurde zunächst die skalare dünne-Elemente-Methode (siehe Abschnitt 2.5.5) benutzt. Nach der Propagation durch die Textur wird das elektrische Feld Fourier-transformiert. Das Ergebnis kann dann im Ortsfrequenzraum mit den Amplituden der auslaufenden ebenen Wellen, die durch ihren lateralen Wellenzahlvektor $k_{||}$ charakterisiert sind, identifiziert werden. Durch Anwendung des iterativen Fourier-Transform-Algorithmus [146] ist es möglich, die Phasenfunktion des Streuers so zu bestimmen, dass sich eine vordefinierte Amplitudenverteilung der auslaufenden Wellen einstellt. Begonnen wurde mit Zielfunktionen, bei denen das Licht isotrop innerhalb eines um $k_{||}=0$ zentrierten Intervalls der Breite w im Ortsfrequenzraum gestreut wird [siehe Abb. 3.5 b)]. Die zugrunde liegende Idee besteht darin, dass die Anzahl an absorbierten Photonen umso höher ausfallen sollte, je mehr Licht in schräg im aSi:H propagierende Moden gekoppelt wird. Für die Periode der maßzuschneidenden Oberflächen wurde ein Wert von $10\ \mu\text{m}$ gewählt, sodass Effekte auf Grund der Periodizität vernachlässigt werden konnten.

3.2.1 Einfluss der Breite der Streuverteilung

Ausgehend von diesen in einer skalaren Näherung ermittelten Phasenprofilen wurden die Absorptionsspektren der zugehörigen Zellen berechnet. Die Phasenprofile wurden dabei in Höhenprofile gemäß Gl. (2.73) übersetzt, wobei eine Designwellenlänge λ_{opt} angenommen wurde, bei der zum einen das Fernfeld im Rahmen der dünnen-Elemente-Methode mit dem gewünschten Fernfeld übereinstimmt und die zum anderen die Maximalhöhe der jeweiligen Textur bestimmt. Für die Berechnung wurde die RCWA (siehe Abschnitt 2.5.3) mit 101 Fourierkomponenten verwendet. Das kontinuierliche Oberflächenprofil wurde dafür in 16 Schichten zerlegt, was eine ausreichende Genauigkeit gewährleistete. Für die Textur wurde ein transparentes Dielektrikum mit der Brechzahl 1,95 gewählt. Die Kurzschlussstromdichte J_{SC} wurde entsprechend dem Abschnitt 2.5.6 berechnet. Um den Einfluss der unterschiedlichen Oberflächentexturen bewerten zu können, wurde J_{SC} auf die Kurzschlussstromdichte der Referenzzelle normiert. Als Referenzzelle wurde zunächst eine gleich dicke aSi:H-Schicht gewählt, die zudem nur von Luft umgeben war. An diesem Punkt der Untersuchungen wurde für das senkrecht einfallende Licht der elektrische Feldvektor parallel zu den Gräben (TE-polarisiert) gewählt, wobei sich qualitativ ähnliche Ergebnisse auch für TM-polarisiertes Licht ergaben.

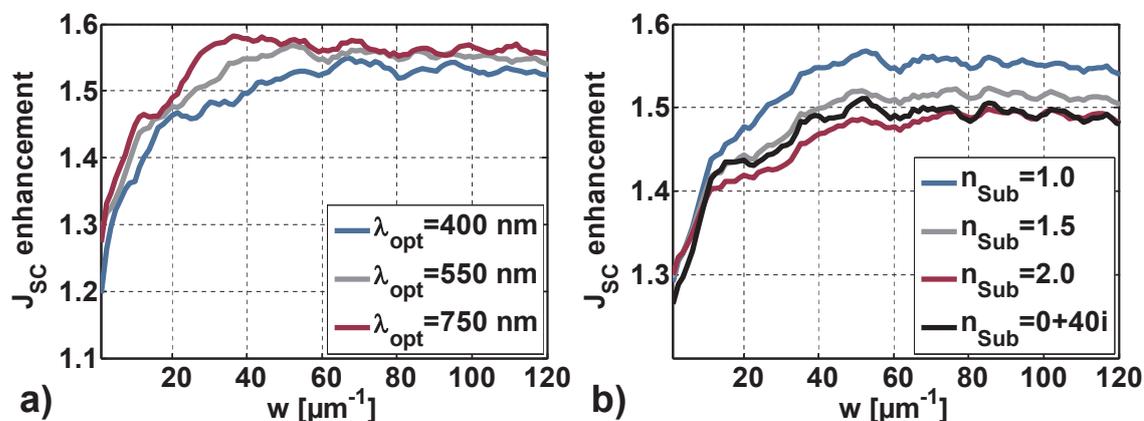


Abb. 3.6: Verbesserung der Anzahl an absorbierten Photonen gegenüber der planaren Referenzzelle über der spektralen Breite w für a) verschiedene Designwellenlängen λ_{opt} ($n_{\text{Subs}}=1,0$) und b) für verschiedene Brechungsindizes des Substrats ($\lambda_{\text{opt}}=550 \text{ nm}$).

Die Abb. 3.6 a) zeigt die Verbesserung von J_{SC} über der Breite der Streuverteilung für verschiedene Designwellenlängen gegenüber der Referenzzelle für eine Substratbrechzahl von 1,0. Die Verbesserung basiert auf zwei Effekten. Ein Effekt ist die direkte Verlängerung des Lichtweges im aSi:H durch Streuung. Der zweite Effekt ist eine teilweise Lokalisierung des Lichtes im aSi:H durch Totalreflexion, wobei nichtabsorbiertes Licht auch wieder durch die Textur ausgekoppelt werden kann. Im Grenzfall $w=0 \mu\text{m}^{-1}$ ist die ZnO-Schicht unstrukturiert und kann entsprechend

nicht streuen. Auf Grund ihres Brechungsindex zwischen Luft und aSi:H wirkt sie jedoch wie eine Antireflexschicht und führt zu geringeren Reflexionsverlusten. Folglich kommt es in diesem Grenzfall bereits zu einer Verbesserung von mehr als 20%. Des Weiteren lässt sich aus den dargestellten Ergebnissen schließen, dass im Allgemeinen größere Designwellenlängen höhere Verbesserungen ermöglichen. Dies liegt daran, dass größere λ_{opt} zu dickeren Texturen und folglich zu sanfteren Übergängen des effektiven Brechzahlprofils führen, was insgesamt zu einer stärkeren Verringerung der Einkoppelverluste führt. Zusätzlich lässt sich für große w eine Sättigung, wenn nicht sogar eine Verschlechterung, von J_{SC} verzeichnen. Da große Ortsfrequenzen auch im aSi:H zu evaneszenten Feldern führen, diese aber nur marginal zur Gesamtabsorption beitragen, kommt es in der Folge zu dem beobachteten Effekt.

Die Abb. 3.6 b) zeigt für verschiedene Substratbrechzahlen die Verbesserung von J_{SC} gegenüber der Referenzzelle, deren Substrat die gleiche Brechzahl hatte, als Funktion von w bei einer Designwellenlänge von $\lambda_{\text{opt}}=550$ nm. Für steigende Substratbrechzahlen nimmt die Verbesserung tendenziell ab. Zum einen sinkt das Reflexionsvermögen der Substratgrenze mit sinkendem Brechzahlkontrast. Da davon aber auch die Referenzzelle betroffen ist, sollte sich dies nicht direkt auf die Verbesserung auswirken. Eine größere Substratbrechzahl führt aber auch zu einem größeren kritischen Winkel der Totalreflexion, sodass mehr Licht aus dem aSi:H in das Substrat transmittiert, was auf diesem Weg zu einem geringeren J_{SC} führt. Eine Ausnahme von dieser Tendenz bildet das PEC-Substrat mit $n_{\text{subs}}=0+40i$. Obwohl jegliches Licht an der Grenze zum Substrat reflektiert wird, ist die gezeigte Verbesserung gering, da die Referenzzelle auch schon von der hohen Reflektivität profitiert und entsprechend ein geringeres Verbesserungspotential besteht. Da es letztendlich gilt, die Absolutanzahl absorbiertener Photonen zu maximieren, ist dennoch ein PEC-Substrat zu bevorzugen.

3.2.2 Unterdrückung kurzer Wege

Offensichtlich ist es nur bedingt von Vorteil, das Licht isotrop zu streuen. Speziell das gestreute Licht mit einem lateralen Wellenzahlvektor k_{\parallel} nahe $0 \mu\text{m}^{-1}$ trägt nur wenig zur Gesamtabsorption bei, da dieses den kürzesten Weg im aSi:H zurücklegt. Um die Anregung eben jener Komponenten zu unterbinden, wurden weitere Phasenprofile generiert, deren Streuantwort ähnlich zu den bisherigen Profilen ausfällt, wobei jedoch ein Ortsfrequenzintervall der Breite d zentriert um $k_{\parallel}=0 \mu\text{m}^{-1}$ ausgespart wurde. Die Untersuchungen fanden bei einer Designwellenlänge von 550 nm und mit einem PEC-Substrat statt. Für die Beleuchtung wurde unpolarisiertes Licht gewählt. Die Ergebnisse dieses Maßschneiderns der Streuantwort sind in Abb. 3.7

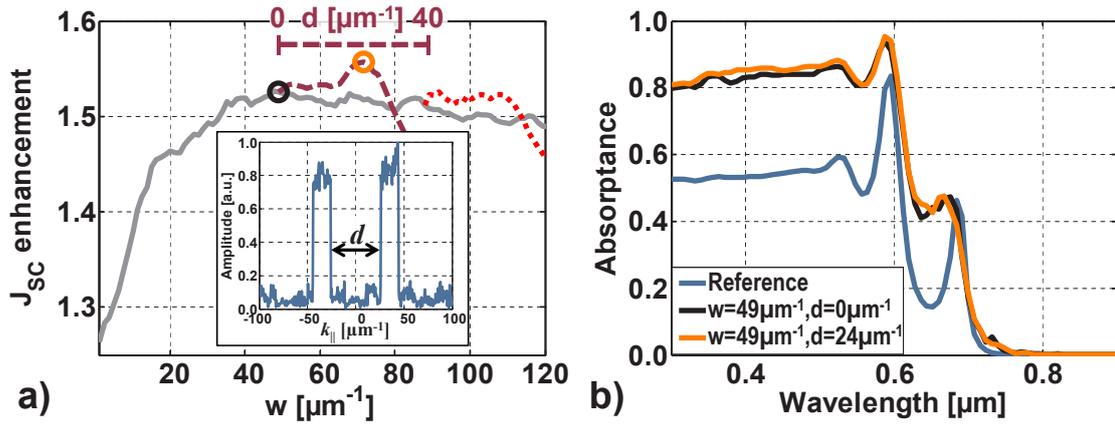


Abb. 3.7: a) Verbesserung der Anzahl an absorbierten Photonen gegenüber der untexturierten Referenzzelle für verschiedene w ($d=0 \mu\text{m}^{-1}$, grau). Die Verbesserung ist auch als Funktion von d für $w=49 \mu\text{m}^{-1}$ (dunkelrot) und $w=88 \mu\text{m}^{-1}$ (rot) dargestellt. Die Insetgrafik zeigt exemplarisch das Ortsfrequenzspektrum der Textur für ein nichtverschwindendes d . b) Absorptionsspektren verschiedener Zellen: Referenzzelle auf PEC-Substrat (blau), texturierte Zellen mit $w=49 \mu\text{m}^{-1}$ und $d=0 \mu\text{m}^{-1}$ (schwarz) und mit $w=49 \mu\text{m}^{-1}$ und $d=24 \mu\text{m}^{-1}$ (orange).

zusammengefasst. Die Insetgrafik in Abb. 3.7 a) zeigt ein exemplarisches Streuspektrum eines mit dem IFTA-Algorithmus generierten Phasenprofils und die Bedeutung des Parameters d . Die graue Kurve stellt die Verbesserung von J_{SC} gegenüber der Referenzzelle dar und entspricht dem bisher diskutierten Aufziehen des Streuspektrums ($d=0 \mu\text{m}^{-1}$). Ausgehend vom Maximum dieser Kurve ($w=49 \mu\text{m}^{-1}$, schwarzer Kreis) wurde der Parameter d erhöht. Die entsprechenden Resultate werden durch die dunkelrote Kurve wiedergegeben. Offenbar kann die Verbesserung von J_{SC} von 1,52 weiter auf 1,56 ($d=24 \mu\text{m}^{-1}$, orange Kreis) erhöht werden.

Für einen adäquaten Vergleich wurde J_{SC} für eine äquivalente Zelle berechnet, die anstelle des texturierten ZnO mit einer Antireflexschicht bedeckt war. Im Detail verlief der Brechungsindex der Antireflexschicht kontinuierlich von 1,0 bis 2,0 gemäß eines quintischen Polynoms (siehe Abschnitt 2.4.1) über der optischen Dicke, was eine sehr gute Unterdrückung der Reflexion nahezu unabhängig vom Einfallswinkel und der Wellenlänge ermöglicht. Die entsprechende Verbesserung von J_{SC} lag dabei nur bei 1,38. Aus dem Vergleich mit der Verbesserung um 1,56 für die maßgeschneiderte Textur kann geschlossen werden, dass die optimierte Textur nicht nur Reflexionsverluste verringert, sondern auch durch Streuung zu einer Verlängerung des effektiven Weges des Lichtes im aSi:H beiträgt.

Die im Vergleich mit $w=88 \mu\text{m}^{-1}$ (rote Kurve) erreichten höheren Verbesserungen für $w=49 \mu\text{m}^{-1}$ (dunkelrote Kurve) können ebenfalls erklärt werden. Für $w=49 \mu\text{m}^{-1}$ ist nur ein kleiner Bereich des Ortsfrequenzspektrums mit nichtverschwindenden Amplituden involviert. Diese entsprechen im aSi:H propagierenden Moden, die stark

absorbiert werden. Durch die Unterdrückung der Moden mit k_{\parallel} nahe $0 \mu\text{m}^{-1}$ wird das einfallende Licht in die übrigen Moden gestreut und kann so besser absorbiert werden. Hingegen für $w=88 \mu\text{m}^{-1}$ ist ein größerer Bereich im Ortsfrequenzspektrum angeregt, wobei der äußere Teil davon schon zu im aSi:H evaneszenten Feldern gehört, die entsprechend wenig Feldüberlapp mit der aSi:H-Schicht haben und nur marginal zur Gesamtabsorption beitragen. Durch Unterdrückung der mittleren Ortsfrequenzen wird mehr Licht in eben jene evaneszenten Felder transferiert, sodass weniger Licht in den propagierenden Moden bereitsteht und die Gesamtabsorption schwächer als für $w=49 \mu\text{m}^{-1}$ ausfällt. Für den Fall, dass d einen kritischen Wert übersteigt, wird das Licht nicht mehr effektiv in propagierende Moden gekoppelt, was das Absinken der dunkelroten und roten Kurve für große d erklärt.

Der Vollständigkeit halber sind in Abb. 3.7 b) die relevanten Absorptionsspektren dargestellt. Zum einen ist das Spektrum der untexturierten Referenzzelle gezeigt (blau), die aus einer 350 nm dicken aSi:H-Schicht auf einem PEC-Substrat besteht. Des Weiteren ist noch das Spektrum der Zelle, die zum Maximum der grauen Kurve aus Abb. 3.7 a) ($w=49 \mu\text{m}^{-1}$ und $d=0 \mu\text{m}^{-1}$, schwarz) und zum Maximum der dunkelroten Kurve ($w=49 \mu\text{m}^{-1}$ und $d=24 \mu\text{m}^{-1}$, orange) gehört, dargestellt. Die letztgenannte entspricht dabei der maximalen gefundenen Verbesserung von J_{SC} . Über den gesamten Spektralbereich ist eine Verbesserung der Absorption gegenüber der untexturierten Zelle zu beobachten. Insbesondere im kurzwelligen Spektralbereich findet sich eine konstant hohe Absorption. Eine Erweiterung der hier dargestellten Optimierung auf eine in beide lateralen Richtungen strukturierte Oberfläche erbrachte eine Verbesserung der Absorption von 1,5 bis 8,0 je nach Absorberdicke und betrachteter Wellenlänge [147]. Eine echte dreidimensionale Optimierung erweist sich bisher aber noch als zu anspruchsvoll bezüglich der benötigten Rechentchnik. Eine zielgerichtete Untersuchung einer Auswahl derzeit verfügbarer Texturen ist im nächsten Abschnitt dargestellt.

3.3 Zufällige Oberflächentexturen

Das Potential von zufällig texturierten Oberflächen zur Verbesserung des Absorptionsverhaltens wurde bereits frühzeitig erkannt [148, 149], jedoch erweist sich die Optimierung ihrer Herstellung auf Grund der Komplexität als nichttrivial. Idealerweise ist das verwendete TCO im Spektralbereich zwischen 350 und 1100 nm transparent, besitzt eine hohe Leitfähigkeit, erlaubt ein defektarmes Wachstum des Absorbermaterials und verbessert die Absorption in den Spektralbereichen, in denen die Absorptionsdicke die Absorberdicke übertrifft. Entsprechend finden sich derzeit verschiedene texturierte Oberflächen, von denen jedoch keine Kurzschlussstromdich-

ten oberhalb des Lambertschen Limits (siehe Abschnitt 2.4.2) ermöglicht.

In diesem Abschnitt wird gezeigt, dass heutige Texturen durch geeignetes laterales und vertikales Skalieren ihrer Oberfläche dahingehend verbessert werden können, dass die zugehörigen Zellen nahe dem Lambertschen Limit operieren und in engen Spektralbereichen sogar darüber hinaus [150]. Dabei sei angemerkt, dass hier nur die optischen Aspekte betrachtet wurden und eine weitergehende Beachtung der elektronischen Eigenschaften die schlussendliche Wahl der Textur beeinflussen kann.

Der prinzipielle Aufbau der untersuchten Solarzellen ist in Abb. 3.8 a) dargestellt. Das texturierte ZnO ist auf einen Halbraum aus Glas aufgebracht. Darauf befindet sich eine 250 nm dicke, konform abgeschiedene aSi:H-Schicht, der eine weitere ZnO-Schicht folgt. Eine vollständige Rückreflexion wird erreicht, indem die Zelle von einem planaren, perfekten elektrischen Leiter (PEC) mit der Brechzahl $n_{\text{Subs}}=0+40i$ abgeschlossen wird, wobei der minimale Abstand zum aSi:H 100 nm beträgt.

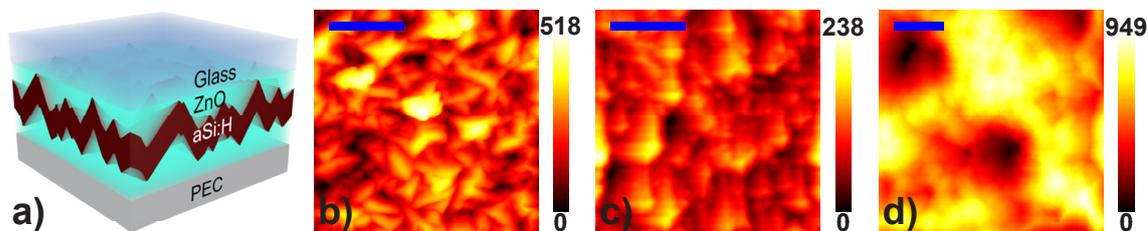


Abb. 3.8: a) Prinzipieller Aufbau der untersuchten Solarzelle. Eine 250 nm dicke aSi:H-Schicht ist konform zwischen texturiertem ZnO abgeschieden. Die Zelle wird durch planares Glas und einen perfekten Rückreflektor abgeschlossen. Topologien in nm von Substraten die in b) Neuchâtel, von c) Asahi und in d) Jülich hergestellt wurden. Der blaue Balken kennzeichnet 1 μm .

Die hier untersuchten Texturen wurden bereits im Rahmen der Arbeiten an dieser Dissertation in der Literatur diskutiert [147]. Im Detail handelt es sich dabei um ein kommerziell erhältliches Superstrat von Asahi [siehe Abb. 3.8 c)] mit lateralen Details in der Größenordnung von $D_{\text{lat}} \approx 500 \text{ nm}$ und einer maximalen Modulatiohshöhe von $H_{\text{tex}} \approx 250 \text{ nm}$ und Superstraten, die in Neuchâtel [151] [Abb. 3.8 b), $D_{\text{lat}} \approx 500 \text{ nm}$ und $H_{\text{tex}} \approx 500 \text{ nm}$] und Jülich [152] [Abb. 3.8 d), D_{lat} im Bereich von 1-2 μm und $H_{\text{tex}} \approx 1 \mu\text{m}$] hergestellt wurden.

Zur Berechnung der Absorption im aSi:H wurde die RCWA (siehe Abschnitt 2.5.3) verwendet, sodass hier periodische Superzellen betrachtet werden. Die Superzellen waren dabei ausreichend groß gewählt, um den Einfluss von Effekten auf Grund der Periodizität gering zu halten. Die Topologie der Superstrate wurde mit einem Atomkraftmikroskop aufgenommen, wobei für die numerische Umsetzung Areale mit den Abmessungen von $3 \times 3 \mu\text{m}^2$ bei den Proben von Asahi und Neuchâtel und $4,5 \times 4,5 \mu\text{m}^2$ bei der Textur aus Jülich berücksichtigt wurden. Die vermessenen Topologien wurden geringfügig an den Rändern modifiziert, um kontinuierliche

Übergänge der Oberfläche bei periodisch angeordneten Superzellen zu realisieren. In die Berechnung gingen bis zu 21×21 Fourierkomponenten ein, um eine ausreichende Konvergenz der Kurzschlussstromdichten zu gewährleisten. Für die Beleuchtung wurde senkrecht einfallendes, linear polarisiertes Licht gewählt. Da die Topologien keine Vorzugsrichtung zeigen, kann aber davon ausgegangen werden, dass die Ergebnisse denen für unpolarisierte Beleuchtung entsprechen. Das Glas und das ZnO wurden als perfekt transparent angenommen und mit den jeweiligen Brechzahlen von 1,5 und 2,0 beschrieben. Da bei der vorliegenden Wahl der optischen Daten nur das aSi:H absorptionsfähig ist, kann die Absorptivität $A(\lambda)$ im aSi:H erneut gemäß Gl. (3.1) berechnet werden. Die Absorptivität wurde für 111 gleichmäßig verteilte Wellenlängen zwischen 300 und 850 nm berechnet.

3.3.1 Einfluss lateraler Skalierung

Das so berechnete Absorptionsspektrum für das exemplarische Neuchâtel Superstrat ist in Abb. 3.9 a) dargestellt. Zusätzlich zur Wellenlänge wurde auch die Größe der lateralen Details verändert, indem die gesamte zugrunde liegende Topologie *lateral* mit dem Faktor f_{scal} skaliert wurde. Ein Skalierungsfaktor von $f_{\text{scal}}=1$ [$\lg(f_{\text{scal}})=0$] entspricht dabei der Originalstruktur. Bei dieser Berechnung wurde die Höhe der Textur auf dem Originalwert belassen. Ähnliche Graphen ergaben sich auch für die anderen beiden Superstrate.

Erneut kann der betrachtete Spektralbereich grob in drei Bereiche unterteilt werden. Unterhalb von 550 nm wird Licht, das in die aSi:H-Schicht einkoppelt, bei der gewählten Schichtdicke auf Grund des hohen intrinsischen Absorptionskoeffizienten vollständig absorbiert. Folglich entstehen Verluste nur durch Reflexionen an der Glas-ZnO- und der ZnO-aSi:H-Grenzfläche. Entsprechend lässt sich aus der Absorption in diesem Spektralbereich direkt auf das Vermögen der Textur, das einfallende Licht in die aSi:H-Schicht einzukoppeln, schließen. Oberhalb von 800 nm ist die Absorption von aSi:H auch im Zusammenspiel mit absorptionssteigernden Maßnahmen vernachlässigbar, sodass dieser Spektralbereich keine nennenswerten Beiträge zur Kurzschlussstromdichte liefert. Im Bereich zwischen 550 und 800 nm reicht die aSi:H-Dicke nicht zur vollständigen Absorption aus, jedoch kann eine hohe Absorption dadurch erreicht werden, dass eine Verlängerung des effektiven Weges in Verbindung mit einer guten Einkopplung realisiert wird. Entsprechend ist dies auch der Spektralbereich, in dem eine Verlängerung des effektiven Weges die größte Wirkung zeigen wird.

Im Grenzfall sehr kleiner Skalierungsfaktoren ($f_{\text{scal}} \lesssim 10^{-2}$) sind alle lateralen Details der texturierten Grenzflächen wesentlich kleiner als die Wellenlänge, sodass

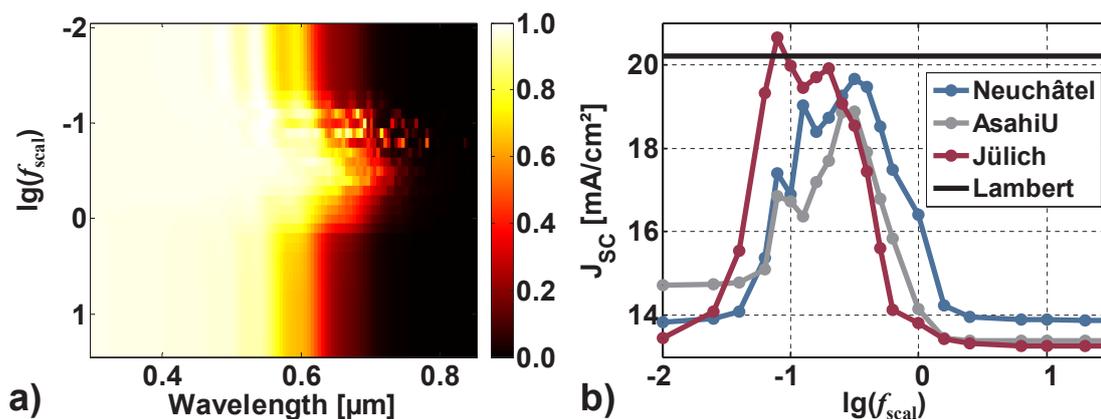


Abb. 3.9: a) Absorptionsspektren der in Abb. 3.8 a) gezeigten Solarzelle für variierenden lateralen Skalierungsfaktor f_{scal} für das Substrat aus Abb. 3.8 b). b) Kurzschlussstromdichte J_{SC} der betrachteten Solarzelle für die verschiedenen untersuchten Superstrate als Funktion des lateralen Skalierungsfaktors f_{scal} . Die schwarze horizontale Linie markiert J_{SC} im Lambertschen Limit für einen Reflexionsverlust an der Glas-ZnO-Grenzfläche von 2,0 %.

das Licht dort eher ein kontinuierliches effektives Brechzahlprofil erfährt und Reflexionsverluste entsprechend verringert [50] werden. Im Grenzfall großer Skalierungsfaktoren ($f_{scal} > 10$) ist die Grenzfläche soweit gestreckt, dass das einfallende Licht nur ein lokal verkipptes Schichtsystem vorfindet. Somit tragen alle Grenzflächen, insbesondere die zwischen Glas und ZnO und die zwischen ZnO und aSi:H, zur Gesamtreflexion bei. In der Folge wird weniger Licht in die aSi:H-Schicht eingekoppelt. Schlussendlich breitet sich das einfallende Licht für diese beiden Grenzfälle verschwindender oder extrem großer lateraler Details nahezu ungestreut aus. Demnach ist in beiden Fällen die Propagation des Lichtes unabhängig von der betrachteten Wellenlänge nur mit einer relativ kurzen Verweilzeit im absorbierenden Material verbunden, was dem Erreichen des Lambertschen Limits hinderlich ist [93, 96].

Wie jedoch Abb. 3.9 a) entnommen werden kann, existiert oberhalb von 550 nm ein Spektralbereich, der sich durch eine verstärkte Absorption auszeichnet. Diese Verstärkung tritt allerdings nur für Skalierungsfaktoren auf, die nur wenig kleiner als 1 sind [$-1 \lesssim \lg(f_{scal}) \lesssim 0$]. Die lateralen Details der skalierten Neuchâtel-er Textur liegen für solche f_{scal} in der Größenordnung von ≈ 150 nm. Demnach können die betrachteten Strukturen teilweise durch das einfallende Licht im aSi:H aufgelöst werden und teilweise liegen sie im Subwellenlängenbereich. Im letzteren Fall liegt ein kontinuierliches effektives Brechzahlprofil vor, sodass das Licht für solche lateralen Details gut inkoppelt. An den größeren Strukturen wird das Licht gestreut. Für Licht, das dabei von der ZnO-aSi:H-Grenzfläche zurück in das ZnO reflektiert wird, gibt es in diesem Fall erneut die Chance in das aSi:H einzukoppeln. Dies ist möglich, wenn das Licht direkt auf eine andere Flanke des texturierten ZnO reflektiert

wird oder wenn es einen Umweg über die Glas-ZnO-Grenzfläche nimmt, an der es totalreflektiert wird [153]. Schlussendlich resultieren diese zusätzlichen Transmissionsereignisse in einer verbesserten Lichteinkopplung.

Zusätzlich können aber für solche Größen der Einzelstrukturen noch weitere Effekte auftreten, die in einer besseren Lokalisierung des Lichtes in der aSi:H-Schicht resultieren. Diese Effekte führen in Verbindung mit einer guten Einkopplung zu der im Vergleich mit extrem großen oder kleinen Skalierungsfaktoren erhöhten Absorptivität. Ein Mechanismus ist der *lightning rod effect*, der auf einer Feldlokalisierung an stark gekrümmten Oberflächen beruht [154–156]. Des Weiteren kann es zur Anregung von Leckmoden innerhalb des aSi:H-Filmes kommen. Da die betrachteten zufälligen Texturen nicht durch eine diskrete Menge, sondern durch ein Kontinuum lateraler Wellenzahlvektoren charakterisiert sind, werden die Leckmoden nicht resonant, sondern nur schwach angeregt [157]. Dabei kommt den randomisierten Texturen zu gute, dass bestimmte Streumechanismen auf Grund von vorherrschenden Symmetrien nicht schon von vornherein ausgeschlossen werden können [91, 99]. Und schlussendlich wird Licht gestreut, welches auf Grund eines der Totalreflexion ähnlichen Effektes erneut mit dem Absorber wechselwirken kann und so eine effektive Wegverlängerung erfährt.

Vergleichbare Untersuchungen, bei denen das der Sonne zugewandte, streuende ZnO durch Glas ersetzt wurde und somit die Glas-ZnO-Grenzfläche eliminiert wurde, lieferten qualitativ ähnliche Ergebnisse – bis auf den Unterschied, dass der Reflexionsverlust beim Übergang vom Glas ins ZnO verschwand. Dieses Ergebnis ist insofern relevant, als dass immer wieder die Totalreflexion an der Glas-ZnO-Grenzfläche bemüht wird, um eine Verlängerung des effektiven Weges zu begründen. Bei den vorliegenden lateralen Details kann das Licht nur im aSi:H die Strukturen auflösen, während im ZnO oder im Glas das Licht hauptsächlich nur als evaneszent abfallendes Nahfeld oder aber als ebene Welle mit zur Beleuchtung identischem lateralem Wellenzahlvektor existiert. Aus den Untersuchungen lässt sich also schliessen, dass ein der Totalreflexion ähnlicher Prozess direkt an der Grenze zwischen dem nunmehr texturierten Glas und dem direkt folgenden aSi:H stattfindet.

Im Anschluss an die Berechnung der Absorptionsspektren wurde aus diesen mithilfe des globalen Sonnenspektrums AM1.5g [125] gemäß Abschnitt 2.5.6 die zugehörige Kurzschlussstromdichte J_{SC} berechnet. Die für die verschiedenen untersuchten Texturen berechneten J_{SC} sind in Abb. 3.9 b) über dem dekadischen Logarithmus von f_{scal} abgetragen. Zum besseren Verständnis sei an dieser Stelle angemerkt, dass ein Skalierungsfaktor von $f_{scal}=1$ [$\lg(f_{scal})=0$] dem unskalierten Superstrat entspricht. Die schwarze horizontale Linie entspricht dem Lambertschen Limit für nichtver-

schwindende Absorption [94], für welches die Absorptivität gemäß:

$$A(\lambda) = \frac{0,98(1 - \exp[-4\alpha(\lambda)T_{\text{cell}}])}{1 - [1 - (1,5/\Re n(\lambda))^2] \exp[-4\alpha(\lambda)T_{\text{cell}}]}, \quad (3.3)$$

berechnet wurde. Der Term $\alpha(\lambda)$ steht für den spektral aufgelösten Absorptionskoeffizienten mit $\alpha(\lambda)=4\pi\Im n(\lambda)/\lambda$, $\Re n(\lambda)$ und $\Im n(\lambda)$ bezeichnen den Real- und Imaginärteil des Brechungsindex von aSi:H und $T_{\text{cell}}=250\text{ nm}$ entspricht der Dicke der aSi:H-Schicht. Der Faktor von 0,98 berücksichtigt die Reflexionsverluste an der Glas-ZnO-Grenzfläche. Diese Verluste könnten zwar durch zusätzliche Antireflexschichten abgesenkt werden; sie spielen aber für die Argumentation in diesem Abschnitt keine wichtige Rolle.

Wie der Abb. 3.9 b) entnommen werden kann, stimmen die Kurven für J_{SC} für verschiedene Substrate qualitativ überein. In den Grenzfällen extrem kleiner oder großer f_{scal} ist J_{SC} nur noch schwach abhängig von der lateralen Skalierung und ist entsprechend obiger Diskussion nur durch die texturabhängige Reduzierung der Einkoppelverluste bestimmt.

Bei Skalierungsfaktoren um $\lg(f_{\text{scal}})\approx-1$ befindet sich das globale Maximum für alle betrachteten Substrate. Wegen der Unterschiede in den Größenordnungen der lateralen Details D_{lat} der unskalierten Texturen sind die Kurven selbstverständlich gegeneinander verschoben. Zur besseren Diskussion sind die relevanten Parameter dieser Maxima noch einmal quantitativ in Tab. 3.2 zusammengefasst. Bemerkenswerterweise lassen sich demnach mit allen untersuchten Texturen die höchsten Kurzschlussstromdichten erreichen, wenn die lateralen Abmessungen der jeweiligen Texturdetails in der mit modernen Technologien der Nanofabrikation [158] erreichbaren Größenordnung von 150 nm liegen. In der Nähe des Maximums profitiert die Zelle von der verbesserten Absorption im langwelligen Spektralbereich. Für kleinere Skalierungsfaktoren ist nur ein geringer Anteil der Texturdetails ausreichend groß, um Licht effektiv in der aSi:H-Schicht streuen zu können, womit sich die bis zum Maximum kontinuierliche Steigerung von J_{SC} mit wachsendem f_{scal} erklären lässt. Analog sind für größere f_{scal} nur noch wenige Texturdetails klein genug, um das Licht noch effektiv im aSi:H lokalisieren zu können. Entsprechend kommt es ab dem Maximum zu einem kontinuierlichen Absinken von J_{SC} mit weiter steigendem f_{scal} .

Tab. 3.2: Für die untersuchten Superstrate sind $\lg(f_{\text{scal}})$ und D_{lat} zusammengefasst, für die jeweils das maximale J_{SC} erreicht wurde.

Superstrat	$\lg(f_{\text{scal}})$	D_{lat} [nm]	J_{SC} [mA/cm ²]
Neuchâtel	-0,5	160	19,67
Asahi-U	-0,5	160	18,87
Jülich	-1,1	120	20,66
Lambert			20,22

3.3.2 Einfluss vertikaler Skalierung

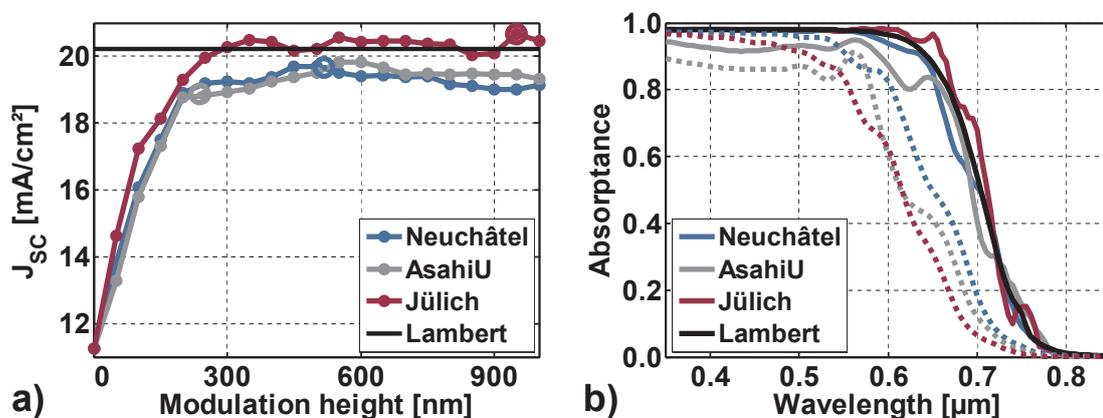


Abb. 3.10: a) Kurzschlussstromdichte J_{sc} der untersuchten Solarzelle für verschiedene Höhen der verwendeten Texturen nach vorheriger Optimierung der lateralen Skalierung. Die schwarze horizontale Linie markiert J_{sc} im Lambertschen Limit für einen Reflexionsverlust an der Glas-ZnO-Grenzfläche von 2,0%. b) Berechnete Absorptionsspektren für optimale laterale Skalierungsfaktoren für die verschiedenen Superstrate. Das schwarze Spektrum entspricht dem Lambertschen Limit für einen Reflexionsverlust an der Glas-ZnO-Grenzfläche von 2,0%. Die gepunkteten Spektren wurden für die unskalierten Texturen berechnet.

Gemäß Tab. 3.2 erlauben alle untersuchten Texturen ein maximales J_{sc} im Bereich von 19-21 mA/cm². Damit sei der Schluss erlaubt, dass die genaue Form der Details einer potentiellen Textur nur von geringer Bedeutung ist. Vielmehr kommt es auf die richtige Größenordnung der lateralen Details an. Um diesen Schluss weiter zu untermauern, wurde J_{sc} als Funktion von der maximalen Texturhöhe H_{tex} berechnet. Dafür wurden die untersuchten Texturen vertikal skaliert, wobei f_{scal} den Werten aus Tab. 3.2 entsprach, also zu den Maxima aus Abb. 3.9 b) gehörte. Die Ergebnisse sind in Abb. 3.10 a) dargestellt. Die offenen Kreise repräsentieren dabei die vertikal unskalierten Texturen. Für kleine H_{tex} erweisen sich die Texturen als flach und die Zellen weisen zu hohe Reflexionsverluste auf. Für steigende H_{tex} kann mehr Licht in die aSi:H-Schicht eingekoppelt werden, wobei das Licht auf Grund der optimierten Texturdetails zusätzlich gut lokalisiert und entsprechend besser absorbiert wird. Für Texturhöhen oberhalb von 200 nm kommt es jedoch zu einer Sättigung von J_{sc} . Einer Argumentation aus der Literatur folgend [96] ergibt sich diese Sättigung, sobald alle Streumechanismen optimal ausgenutzt werden. In diesem Zusammenhang stellt sich die Frage, inwiefern im Bereich der Sättigung schon das Lambertsche Limit erreicht ist.

Abbildung 3.10 b) visualisiert die berechneten Absorptionsspektren, die zu den jeweiligen Maxima in Abb. 3.9 b) gehören. Dabei wurden die Spektren mit dem Ziel einer besseren Übersichtlichkeit geglättet. Offenbar weisen alle Superstrate, mit

Ausnahme des recht flachen Superstrats von Asahi, sehr geringe Reflexionsverluste im Spektralbereich unterhalb von 550 nm auf. Zu Vergleichszwecken ist auch noch die gemäß Gl. (3.3) für das Lambertsche Limit berechnete Absorptivität als schwarzes Spektrum gezeigt. Über den gesamten relevanten Spektralbereich weichen die Absorptionsspektren der optimal skalierten Texturen nur wenig vom Lambertschen Limit ab. Entsprechend lässt sich schlussfolgern, dass solche Texturen ein Streuverhalten nahe dem Lambertschen Limit im relevanten Spektralbereich ermöglichen. Für Vergleichszwecke sind auch noch die zugehörigen Absorptionsspektren der lateral unskalierten Texturen in Abb. 3.10 b) gepunktet dargestellt.

3.3.3 Einfluss der Absorberdicke

In den bisher dargestellten Untersuchungen war die aSi:H-Schicht stets 250 nm dick. In der Literatur finden sich widersprüchliche Hinweise darauf, dass für eine wirksame Streuung die Texturdetails entweder in der Größenordnung der Absorberdicke [159] oder aber in der Größenordnung der effektiven Wellenlänge [160] liegen sollten. Bezüglich der lateralen Ausdehnung der Streuzentren suggerieren die Ergebnisse aus Tab. 3.2 eine Größenordnung nahe der effektiven Wellenlänge. Die Untersuchungen bezüglich der vertikalen Ausdehnung sind im Folgenden dargestellt.

Zu diesem Zweck wurde die Kurzschlussstromdichte für verschiedene Absorberdicken berechnet, wobei die folgenden Untersuchungen nur für die Neuchâtelur Textur getätigt wurden. Diese Einschränkung ist akzeptabel, da sich in den bisher dargestellten Ergebnissen zeigte, dass der Einfluss der lateralen Skalierung deutlich stärker ins Gewicht fällt als die konkrete Wahl der Textur. Für die laterale Skalierung wurde das Optimum gemäß Abb. 3.9 b) von $f_{scal}=10^{-0,5}$ gewählt. Um die Frage nach der notwendigen Modulationshöhe zu beantworten, wurde J_{SC} zusätzlich noch für verschiedene Modulationshöhen zwischen 0 und 2000 nm analog zu den Ergebnissen aus Abb. 3.10 a) bestimmt.

Für einen einfachen Vergleich der zu den verschiedenen aSi:H-Dicken gehörenden Kurzschlussstromdichten wurden diese auf das J_{SC} , das im jeweiligen Lambertschen Limit gemäß Gl. (3.3) erreicht werden kann, normiert. Diese normierten Ergebnisse sind in Abb. 3.11 a) dargestellt, wobei für die aSi:H-Dicke die Werte 100, 250, 500 und 750 nm gewählt wurden. Die normierten Kurzschlussstromdichten in Abhängigkeit von der Modulationshöhe haben für 250, 500 und 750 nm einen ähnlichen Verlauf. Bei einer Modulationshöhe von 200 nm werden jeweils bereits 90% des Lambertschen Limits erreicht. Für weiter steigende Modulationshöhen flachen die Kurven ab, erreichen bei 600 nm ihr Maximum und fallen dann langsam wieder ab, wobei Letzteres am deutlichsten für die 250 nm dicke aSi:H-Schicht zu erkennen ist.

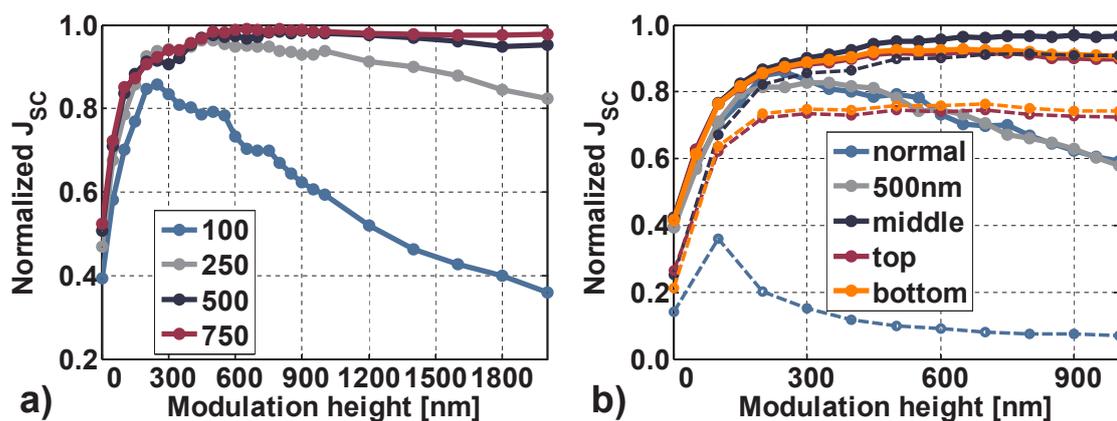


Abb. 3.11: a) Auf das jeweilige Lambertsche Limit normierte Kurzschlussstromdichte J_{SC} der untersuchten Solarzelle für verschiedene Absorberdicken in Abhängigkeit von der Modulationshöhe der Neuchâtelers Textur. b) Auf das jeweilige Lambertsche Limit normierte Kurzschlussstromdichte J_{SC} der untersuchten Solarzelle in Abhängigkeit von der Modulationshöhe der Neuchâtelers Textur für die unveränderte Geometrie (blau), mindestens 500 nm ZnO zwischen PEC und aSi:H (grau), und für einen 750 nm dicken Streuer, in den die aSi:H-Schicht mittig (schwarz), oben (dunkelrot) oder unten (orange) implementiert ist. Die Absorberdicke beträgt 100 (durchgezogen) oder 20 nm (gestrichelt).

Anders verhält es sich für die 100 nm dicke aSi:H-Schicht. Das Maximum der Kurve von 86 % wird bereits bei einer Modulationshöhe von 250 nm erreicht. Für weiter steigende Modulationshöhen fällt die Kurve kontinuierlich ab. J_{SC} fällt für eine Modulationshöhe von 2000 nm sogar geringer aus als im planaren Fall. Aus der kontinuierlichen Abnahme des Absorptionskoeffizienten von aSi:H mit steigender Wellenlänge folgt, dass sich der spektrale Bereich, in dem die Absorption einer Solarzelle durch Streuung zu verbessern ist, mit steigender Absorberdicke hin zu größeren Wellenlängen verschiebt. In einer Kontrollrechnung für den 100 nm dicken Absorber ergab sich aber, dass der optimale laterale Skalierungsfaktor immer noch bei $f_{scal} \approx 10^{-0,5}$ liegt. Entsprechend ist das schlechtere Abschneiden des dünneren Absorbers nicht durch eine unzureichende Wahl der lateralen Skalierung begründbar.

Verglichen mit der 250 nm dicken aSi:H-Schicht fallen die zurücklegbaren effektiven Wege im Falle des nur 100 nm dicken Absorbers kürzer aus, da effektiv 150 nm hochbrechendes Material wegfallen. Falls dies Auswirkungen auf das Streuverhalten hätte, sollte sich dies in einer Kontrollrechnung widerspiegeln, bei der die untere ZnO-Schicht dicker ausfällt. Die Ergebnisse sind in Abb. 3.11 b) dargestellt, bei der der minimale Abstand zwischen dem aSi:H und dem PEC von 100 (blau) auf 500 nm (grau) gesteigert wurde. Offenbar hat die Dicke der ZnO-Schicht bei der gegebenen lateralen Skalierung keinen Einfluss mehr, was insofern verständlich ist, als dass der Großteil der Texturdetails kleiner als die effektive Wellenlänge des relevanten Lich-

tes im ZnO ist und somit im ZnO neben dem evaneszenten Feld hauptsächlich eine ebene Welle propagiert, deren Wellenzahlvektor identisch zu dem des einfallenden Feldes ist. Bei senkrechtem Einfall ändert sich mit steigender ZnO-Dicke also nur der Wert der mit der Propagation durch das ZnO akkumulierten Phase dieser ebenen Welle, was sich nur marginal auf das Streuverhalten auswirkt.

An dieser Stelle gilt es sich im Zusammenhang mit der betrachteten Solarzelle zu vergegenwärtigen, dass einerseits das Lambertsche Limit nur mit einer starken Streuung erreicht werden kann und dass andererseits Streuer und Absorber identisch sind. Intuitiv ist klar, dass bei gegebener Wellenlänge und dem vorliegenden Brechzahlkontrast zwischen aSi:H und umgebendem ZnO für eine gute Streuung auch eine hinreichende vertikale Ausdehnung eines streuenden Objektes vorliegen muss, um einen signifikanten Phasenunterschied zwischen im Streuer und außerhalb des Streuers propagierendem Licht zu gewährleisten. Dies hat zur Folge, dass zu dünne Absorber zwangsläufig das Lambertsche Limit selbst im Falle optimaler lateraler und vertikaler Skalierung nicht erreichen können.

Um die These, dass der Streuer zum Erreichen des Lambertschen Limits hinreichend dick sein muss, weiter zu untermauern, wurde von einer 750 nm dicken aSi:H-Zelle ausgegangen und diese in drei verschiedenen Varianten modifiziert, wobei die berechneten normierten Kurzschlussstromdichten ebenfalls in Abb. 3.11 b) von durchgezogenen Linien repräsentiert sind. Im ersten Fall (orange) wurden die unteren 650 nm optisch dadurch beschrieben, dass nur der Realteil der Brechzahl von aSi:H angenommen wurde. Dadurch trägt dieser Teil weiterhin zur Streuung bei, jedoch ist er nicht absorbierend. Des Weiteren ist der Brechzahlkontrast zwischen der komplexen Brechzahl der 100 nm dicken Absorberschicht und der rein reellwertigen Brechzahl zumindest im schwach absorbierten Spektralbereich gering, sodass das Licht nahezu reflexionsfrei zwischen den beiden Materialien wechseln kann. Der zweite Fall (rot) ist analog, jedoch sind die oberen 650 nm transparent. Im dritten Fall (schwarz) waren die oberen und unteren 325 nm – in Summe also 650 nm – transparent. Allen drei Fällen ist die Dicke der absorbierenden Schicht von 100 nm gemein – Unterschiede gibt es lediglich in der vertikalen Anordnung.

Offenbar liegen die normierten Kurzschlussstromdichten dieser drei untersuchten Fälle für alle Modulationshöhen über den Resultaten, bei denen die streuende Schicht nur 100 nm dick ist (grau und blau). Ferner ist zu bemerken, dass mit diesem Konzept das Lambertsche Limit auch wieder mit Modulationshöhen von ≈ 500 nm erreicht wird. Zur weiteren Verifikation wurden diese Rechnungen für die eben dargestellten drei Fälle mit einer nur 20 nm dicken aSi:H-Schicht durchgeführt. Die Ergebnisse sind gestrichelt in Abb. 3.11 b) zu sehen. Die Unterschiede zwischen der 20 nm dicken und der 750 nm dicken Streuschicht fallen hier noch drastischer

aus. Ohne zusätzliches hochbrechendes Material werden nicht einmal 40 % des Lambertschen Limits erreicht, während im Falle der Einbettung in eine 750 nm dicke hochbrechende Schicht 91 % erreicht werden können, allerdings nur für den Fall, dass die aSi:H-Schicht mittig im Streuer untergebracht ist. In den Fällen, dass die aSi:H-Schicht oben oder unten im Streuer zu finden ist, werden nur $\approx 75\%$ erreicht. Die genaue Ursache für diesen Unterschied ist noch nicht geklärt.

Die Ergebnisse dieses Abschnittes lassen sich in folgende, zum Erreichen des Lambertschen Limits hinreichende Kriterien zusammenfassen:

1. Die lateralen Detailgrößen sollten in der Größenordnung der effektiven, zu streuenden Wellenlänge liegen.
2. Die streuende Schicht sollte eine vertikale Ausdehnung haben, welche die effektive, zu streuende Wellenlänge übertrifft.
3. Es ist auf eine hinreichende Modulationshöhe zu achten. Der finale Wert wird sich dabei als Kompromiss zwischen elektronischen Verlusten (Rekombination an der Oberfläche), Fertigungsproblemen (Aspektverhältnis, Stabilität) und optischem Gewinn (Reduzierung von Reflexionsverlusten, Verlängerung des effektiven Weges) ergeben.

3.4 Einschränkung des Akzeptanzwinkels

In Abschnitt 2.3.4 wurde bereits darauf verwiesen, dass sich die Effizienz einer Solarzelle dadurch steigern lässt, dass der Winkelbereich eingeschränkt wird, in den die Solarzelle abstrahlt. In diesem Abschnitt wird dieses Konzept auf Solarzellen angewandt, die auf kristallinem Silizium basieren, wobei die hier vorgestellten Untersuchungen prinzipiell auf alle Solarzellen ausgedehnt werden können, die eine streuende Oberfläche enthalten. Der Fokus liegt auf wellenlängen- und richtungsselektiven Filtern, die im langwelligen Spektralbereich eine Verlängerung des effektiven Weges des Lichtes innerhalb des Absorbers bewirken und auch zu einer Unterdrückung der Reemission führen, ohne Absorptionseinbußen im kurzwelligen Spektralbereich hinnehmen zu müssen. Durch Einschränkung des Akzeptanz- oder Emissionswinkels auf θ_A kann dann der effektive Weg im Absorber um den Faktor $P=4(\Re n)^2 / \sin^2 \theta_A$ verlängert werden [161], was im Prinzip zu größeren J_{SC} führt. Die verbesserte Absorption erlaubt dünnere Zellen und damit weniger Materialverbrauch und geringere Rekombinationsverluste. Durch die gleichzeitige Unterdrückung der Reemission sinkt der Dunkelstrom aus Gl. (2.27) und somit ergibt sich eine größere Leerlaufspannung gemäß Gl. (2.28). Letztendlich verspricht das Verwenden eines solchen Filters das Erreichen höherer Effizienzen.

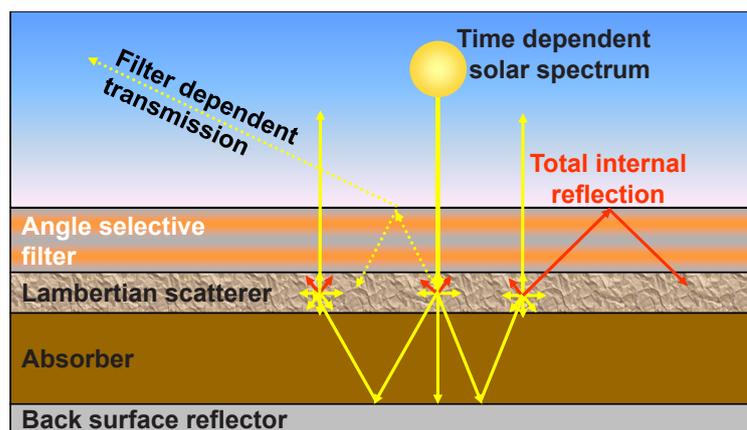


Abb. 3.12: Prinzipskizze der betrachteten Solarzelle.

Abbildung 3.12 zeigt eine Prinzipskizze der betrachteten Solarzelle. Die Solarzelle besteht aus einem wellenlängen- und winkelselektiven Filter, einem perfekten Lambertschen Streuer, dem Absorber und einem perfekten Rückspiegel. Die Solarzelle wird nachgeführt, sodass das direkte Sonnenlicht stets senkrecht einfällt. Das direkte Sonnenlicht kann den Filter passieren und wird am Diffusor isotrop gestreut. Für die Simulation wurde angenommen, dass es zu keinen zusätzlichen Reflexionsverlusten an der Streuer-Absorber-Grenzfläche kommt. Im Absorber selbst werden dann durch Absorption Elektronen-Loch-Paare generiert. Das nichtabsorbierte und das reemititierte Licht tragen zum auslaufenden Licht bei, welches, wenn es bereits den Streuer passiert hat, die Zelle gemäß der wellenlängen- und winkelselektiven Charakteristik des Filters nicht verlässt. Für die Zellsimulation wurde ein in MATLAB geschriebenes Programm von Projektpartnern der Universität Stuttgart verwendet, mit dessen Hilfe abhängig von verschiedenen Zellparametern (Dicke, Lebensdauer, Rekombinationsgeschwindigkeit, Beschreibung der Auger-Rekombination) die Jahresertragseffizienz η_{Jahr} berechnet werden konnte [66, 162]. Dabei wurden reale Beleuchtungsverhältnisse beachtet, wie sie in Stuttgart (Deutschland) über ein Jahr zeitlich aufgelöst anzutreffen sind. Als Absorbermaterial wurde kristallines Silizium gewählt, da dieses höhere Wirkungsgrade erlaubt und sich dadurch die zusätzlichen Investitionen in die Nachführung rentieren. Die Absorption innerhalb des Siliziums wurde entsprechend der Methode für eine Zelle mit Lambertschem Streuer und perfektem Rückspiegel berechnet [94]. Die Dotierung der Zelle wurde auf $1,5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ gesetzt und Auger-Rekombinationsmechanismen wurden entsprechend umgesetzt [28, 163].

3.4.1 Ideale winkel- und wellenlängenabhängige Filterfunktion

Für die Ermittlung der idealen Filterfunktion wurden ein Akzeptanzwinkel θ_A und eine Schwellwellenlänge λ_{Thr} eingeführt. Die ideale Filterfunktion ist mit diesen bei-

den Parametern dann dahingehend bestimmt, als dass ihre Transmissivität überall 1 ist, es sei denn, die Wellenlänge ist größer als λ_{Thr} und der Einfallswinkel ist größer als θ_A . Eine solche idealisierte Filterfunktion ist in Abb. 3.13 a) zu sehen. Im schwach absorbierten Spektralbereich oberhalb von λ_{Thr} kommt es so zu einer Verlängerung des effektiven Weges für das direkte und zirkumsolare Sonnenlicht und in der Folge zu einer verbesserten Absorption. Mit dem direkten und zirkumsolaren Sonnenlicht ist hier das Licht der Sonnenscheibe und das aus ihrer unmittelbaren Umgebung gemeint. Unterhalb von λ_{Thr} sollte der Filter perfekt transparent sein, damit diffus gestreutes Licht, welches ebenfalls auf die Solarzelle in einer realen Umgebung einfällt und in einem nicht unerheblichen Anteil zur Gesamteffizienz beiträgt, den Filter passieren kann.

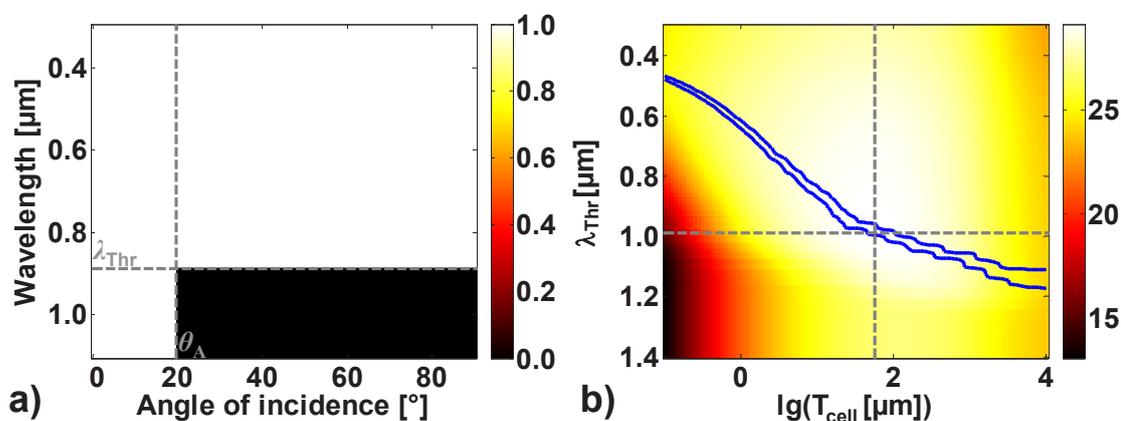


Abb. 3.13: a) Allgemeine Definition der Transmissivität des idealen Filters, die aus der gewünschten optischen Funktionalität abgeleitet ist. Die Filterfunktion ist charakterisiert durch 2 Parameter, den Akzeptanzwinkel θ_A und die spektrale Bandkante λ_{Thr} . b) Jahresertragseffizienz in % als Funktion der Dicke der Solarzelle T_{cell} und von λ_{Thr} bei $\theta_A=2,5^\circ$.

Die diesbezüglichen Berechnungen von η_{Jahr} ergaben, dass für einen optimalen Filter der Akzeptanzwinkel $2,5^\circ$ beträgt, also der Apertur der Sonne einschließlich des zirkumsolaren Anteils [164] entsprechen muss. Kleinere Werte beschneiden das zirkumsolare Licht derart stark, dass dies nicht mehr durch die verbesserte Absorption im langwelligen Spektralbereich kompensiert wird [162]. Bei größeren Werten dringt zwar mehr diffuses Licht in die Zelle ein, der Verlust auf Grund der sinkenden Absorption oberhalb von λ_{Thr} wird dadurch aber nicht aufgewogen. Dieser kleinste Winkel von $\theta_A=2,5^\circ$ erlaubt trotzdem noch eine Verlängerung des effektiven Weges im Silizium von ≈ 6500 . Der optimale Wert für λ_{Thr} hängt wiederum von der Absorberdicke, dem spektral abhängigen Absorptionskoeffizienten, den Details der Spektren des direkten und diffusen Sonnenlichtes und vom Zelltyp ab.

Abbildung 3.13 b) zeigt η_{Jahr} von Solarzellen, die auf kristallinem Silizium basieren, in Abhängigkeit von der Absorberdicke T_{cell} und λ_{Thr} , wobei der Akzeptanzwin-

kel auf den optimalen Wert von $\theta_A=2,5^\circ$ gesetzt wurde. Es zeigt sich, dass es eine optimale Dicke bei $T_{\text{cell}}\approx 50\ \mu\text{m}$ für kristalline Siliziumzellen gibt, welche unterhalb der aktuell verwendeten Waferdicken liegt. Dickere Zellen erleiden Effizienzeinbußen auf Grund zunehmender Verluste durch Rekombination. Dünnere Zellen sind hingegen durch ihre zu geringe Absorption im Roten und Infraroten limitiert. Die Jahresertragseffizienz von Zellen mit der optimalen Dicke von $56\ \mu\text{m}$ kann folglich von $26,8\%$ ($\lambda_{\text{Thr}}=1,4\ \mu\text{m}$) durch Verwendung eines idealen Filters auf $29,1\%$ gesteigert werden.

3.4.2 Realisierung eines einzigen Reflexionsbandes

Im Anschluss wurde versucht, diese ideale Filterfunktion durch eine photonische Struktur zu realisieren. Am erfolgversprechendsten erwiesen sich dabei Schichtsysteme, deren sich anschließende experimentelle Umsetzung positive Ergebnisse zeigte [165, 166]. Für das Design von Schichtsystemen wurden in der Vergangenheit mehrere Methoden entwickelt, wobei jede ihre individuellen Vor- und Nachteile besitzt. Synthesemethoden [167] benutzen physikalisches Verständnis um Initialbrechzahlprofile zu erstellen. Verfeinerungsmethoden [168, 169] wiederum benötigen ein Ausgangsprofil, um eine Bewertungsfunktion zu minimieren, in dem sie beispielsweise Dicken und Brechzahlen einzelner Schichten modifizieren. Falls sich das Problem als zu komplex gestaltet oder keine Ausgangsprofile existieren, kommen globale Optimierungsstrategien, wie genetische Optimierung [170] oder simulierte Abkühlung [171] zum Einsatz. Diese Methoden sind in der Lage ein (globales) Optimum zu finden. Zur Zeit sind solche Methoden jedoch numerisch noch zu aufwendig, um den gesamten Parameterraum überprüfen zu können. Folglich ist ihre Anwendung auch mit dem ihnen anhaftenden Zweifel verbunden, ob die gefundene Lösung auch tatsächlich dem globalen Optimum entspricht. Als weiterer Nachteil erweist sich der Mangel an physikalischem Verständnis darüber, worauf das optimierte Schichtsystem basiert und warum es sich als besser erweist.

In diesem Abschnitt wird ein Filterdesign in einem 4-stufigen Prozess aus bestehenden Designprinzipien abgeleitet. Als erstes wird die gewünschte reflexionsmindernde Wirkung durch die Verwendung eines quintischen Brechzahlprofils gemäß Abschnitt 2.4.1 erreicht. Darauf aufbauend wird ein einzelnes Reflexionsband implementiert. Im Anschluss werden gewisse Nebenmaxima im Reflexionsspektrum, die aus der Endlichkeit des Schichtsystems herrühren, unterdrückt, um eine hohe Transmission im Spektralbereich außerhalb des Reflexionsbandes zu gewährleisten. Schlussendlich werden alle Prinzipien kombiniert und ein entsprechender Filter auf Solarzellen angewendet. Dieser Prozess erlaubt es, für das Brechzahlprofil des Fil-

ters einen analytischen Ausdruck abzuleiten, welcher durch wenige freie Parameter beschrieben wird.

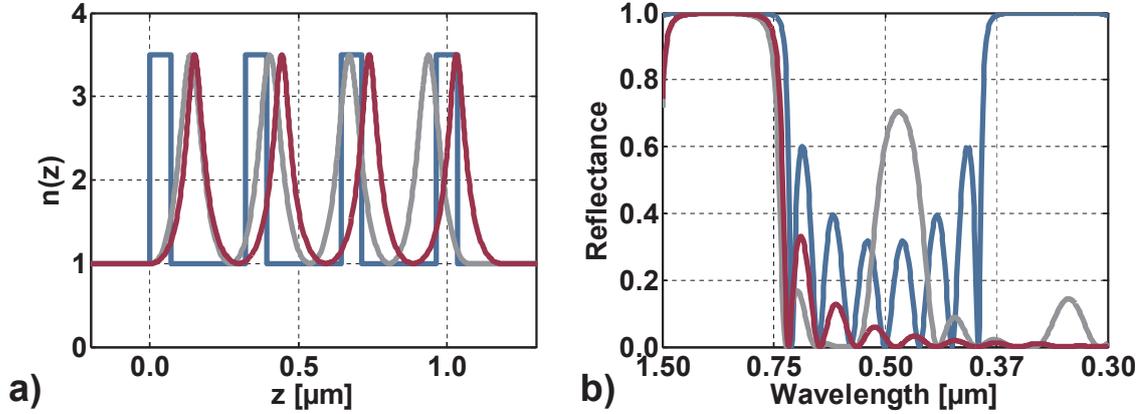


Abb. 3.14: a) Vier Perioden eines binären (blau), eines sinusförmigen (grau) und eines exponentiell sinusförmigen (dunkelrot) Brechzahlprofils mit $n_{\min}=1,0$ und $n_{\max}=3,5$ bei einer Designwellenlänge von $\lambda_0=1,0\ \mu\text{m}$. b) Die entsprechenden Reflexionsspektren.

Abbildung 3.14 zeigt das Brechzahlprofil und das zugehörige Reflexionsverhalten bei senkrechtem Einfall für drei verschiedene Filter. Die Designwellenlänge λ_0 , bei der hohe Reflexion gefordert ist, wurde in allen drei Fällen auf $1,0\ \mu\text{m}$ gesetzt. Der einfachste Filter besteht aus einem binären Bragg-Spiegel, wobei die Brechzahlen der einzelnen Schichten zwischen einem hohen (n_{\max}) und einem niedrigen (n_{\min}) Index alternieren. Die optischen Dicken der einzelnen Schichten betragen dabei jeweils ein Viertel der Designwellenlänge. Offenbar führt ein solches Profil zu weiteren Reflexionspeaks bei ungeraden Vielfachen der fundamentalen Wellenzahl [siehe die blaue Linie in Abb. 3.14 b) bei $0,33\ \mu\text{m}$]. Sinusförmige Profile der Form

$$n(T_{\text{opt}}) = n_{\min} + \frac{n_{\max} - n_{\min}}{2} \left[1 + \sin \left(\frac{4\pi}{\lambda_0} T_{\text{opt}} - \frac{\pi}{2} \right) \right], \quad (3.4)$$

mit der optischen Dicke T_{opt} gemäß Gl. (2.39) weisen in ihrem Reflexionsspektrum schwächer ausgeprägte höhere Bänder auf [52]. Allerdings sind bei solchen Profilen auch die höheren geradzahigen Ordnungen im Reflexionsspektrum vorhanden [siehe graue Linie in Abb. 3.14 b) bei $0,50\ \mu\text{m}$] – jedoch sind diese schwächer betont. Durch Anwenden der Fourier-Synthese-Methode [172, 173] lässt sich für kleine Brechzahlintervalle zeigen, dass höhere Ordnungen unterdrückt werden können, wenn ein exponentielles Profil eines sinusförmigen Arguments [52, 174] verwendet wird:

$$n(T_{\text{opt}}) = \sqrt{n_{\min} n_{\max}} \exp \left[\frac{\ln \left(\frac{n_{\max}}{n_{\min}} \right)}{2} \sin \left(\frac{4\pi}{\lambda_0} T_{\text{opt}} - \frac{\pi}{2} \right) \right] \quad (3.5)$$

In Abb. 3.14 b) ist für ein solches Profil nur ein einzelnes Reflexionsband auszumachen (dunkelrote Linie), das somit die gestellten Anforderungen erfüllt. Die verbleibenden Oszillationen werden durch die Endlichkeit des betrachteten Schichtsystems verursacht. Diese Nebenbanden können durch spezielle Fensterfunktionen (Hartman, Kaiser, Gauß), die in der Signalbearbeitung verwendet werden, vermieden werden [175]. Folglich erlaubt die Kombination einer kontinuierlichen Einhüllenden mit einem Brechzahlprofil gemäß Gl. (3.5) ein einzelnes Reflexionsband um λ_0 mit ansonsten hoher Transmissivität bei senkrechten Einfall [176].

Für das Einschränken des Akzeptanzwinkels der Solarzelle wird die typische Blauverschiebung des Reflexionsbandes für schrägen Einfall [177] ausgenutzt. Dabei wird das Reflexionsband durch Wahl der Designwellenlänge so positioniert, dass es für senkrechten Einfall bei Wellenlängen knapp oberhalb der Bandkante von Silizium liegt. Licht knapp unterhalb der Bandkante kann so den Filter für senkrechten Einfall passieren, wird aber durch das blauverschobene Reflexionsband am schrägen Ausströmen gehindert. Licht mit kleineren Wellenlängen kann auch für schrägen Einfall in die Zelle einkoppeln [176].

3.4.3 Optimierung für ideale Materialien

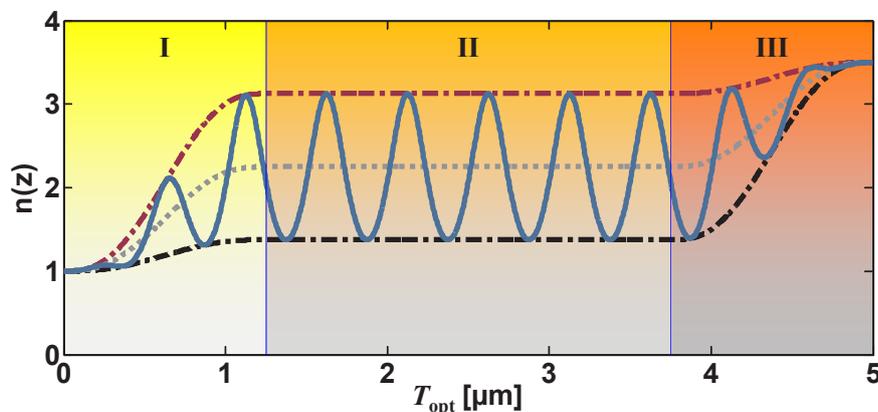


Abb. 3.15: Schematischer Verlauf des Brechzahlprofils des Filters ($T_{\text{opt,ges}}=5\ \mu\text{m}$, $\lambda_0=1,0\ \mu\text{m}$, $T_{\text{Apo}}=0,25 \times T_{\text{opt,ges}}$, $A_{\text{max}}=0,7$, $n_{\text{min,v}}=1,0$, $n_{\text{max,v}}=3,5$).

Bis zu diesem Punkt wurden die einzelnen Designkriterien vorgestellt, die in Kombination zu der gewünschten guten Einkopplung und der geforderten hohen Reflektivität für schrägen Einfall nahe der Bandkante führen sollen. Die Kombination dieser Designkriterien ergab ein Brechzahlprofil, das schematisch in Abb. 3.15 über der optischen Dicke dargestellt ist. Als Vorteil erweist sich dabei, dass sich das gesamte Profil mit wenigen freien Parametern beschreiben lässt. Der erste Parameter ist die optische Gesamtdicke des Schichtsystems $T_{\text{opt,ges}}$ und bestimmt im Wesentlichen die

maximale Reflektivität. Der zweite ist die Designwellenlänge λ_0 , welche die Position des Reflexionspeaks festlegt. Eine hohe Transmissivität unterhalb der Bandkante des Filters wird durch einen quintischen Verlauf des mittleren Brechungsindex (graue Linie in Abb. 3.15 in den Bereichen I und III) erreicht. Dies führt auch zu einer für Solarzellenanwendungen wichtigen geringen Polarisationsabhängigkeit des Filters für schrägen Einfall [178]. Die Nebenbanden werden minimiert, indem quintische Verläufe für die Einhüllenden (dunkelrote und schwarze Kurven in Abb. 3.15) in den Regionen I und III verwendet werden. Entsprechenden Einfluss haben die Dicken dieser Regionen auf das letztendliche Reflexionsverhalten des Filters. Ihre Dicken werden der Einfachheit halber als gleich groß angesetzt und im Folgenden mit T_{Apo} bezeichnet. Ein weiterer Parameter bezieht sich auf die maximale Amplitude der Brechzahlmodulation und ist mit A_{max} bezeichnet. Für den Brechzahlverlauf selbst wird angenommen, dass Werte zwischen $n_{\text{min},v}$ und $n_{\text{max},v}$ zur Verfügung stehen. Der Einfluss der Phase des sinusförmigen Arguments hat sich als marginal herausgestellt und wurde entsprechend nicht weiter berücksichtigt. Gemäß Gl. (3.5) werden die Werte n_{min} und n_{max} benötigt. In Region II ($T_{\text{Apo}} < T_{\text{II}} < T_{\text{opt,ges}} - T_{\text{Apo}}$) sind n_{min} und n_{max} Konstanten und durch

$$n_{\text{min,II}} = \frac{n_{\text{min},v} + n_{\text{max},v}}{2} - A_{\text{max}} \frac{n_{\text{max},v} - n_{\text{min},v}}{2} \quad (3.6)$$

$$n_{\text{max,II}} = \frac{n_{\text{min},v} + n_{\text{max},v}}{2} + A_{\text{max}} \frac{n_{\text{max},v} - n_{\text{min},v}}{2} \quad (3.7)$$

gegeben. Im Bereich I ($0 < T_{\text{I}} < T_{\text{Apo}}$) unterliegen sie einem quintischen Verlauf gemäß

$$n_{\text{min,I}}(T_{\text{I}}) = n_{\text{min},v} + (n_{\text{min,II}} - n_{\text{min},v})Q(T_{\text{I,norm}}) \quad (3.8)$$

$$n_{\text{max,I}}(T_{\text{I}}) = n_{\text{min},v} + (n_{\text{max,II}} - n_{\text{min},v})Q(T_{\text{I,norm}}), \quad (3.9)$$

wobei $Q(x)$ durch

$$Q(x) = (6x^5 - 15x^4 + 10x^3) \quad (3.10)$$

gegeben ist und $T_{\text{I,norm}}$ der normierten optischen Dicke entspricht, die für $T_{\text{I}} = T_{\text{Apo}}$ den Wert 1 erreicht. Im Bereich III ($T_{\text{opt,ges}} - T_{\text{Apo}} < T_{\text{III}} < T_{\text{opt,ges}}$) gilt wiederum:

$$n_{\text{min,III}}(T_{\text{III}}) = n_{\text{min,II}} + (n_{\text{max},v} - n_{\text{min,II}})Q(T_{\text{III,norm}}) \quad (3.11)$$

$$n_{\text{max,III}}(T_{\text{III}}) = n_{\text{max,II}} + (n_{\text{max},v} - n_{\text{max,II}})Q(T_{\text{III,norm}}), \quad (3.12)$$

wobei $T_{\text{III,norm}}$ proportional zur optischen Dicke ist und so normiert wurde, dass $T_{\text{III,norm}} = 0$ für $T_{\text{III}} = T_{\text{opt,ges}} - T_{\text{Apo}}$ und $T_{\text{III,norm}} = 1$ für $T_{\text{III}} = T_{\text{opt,ges}}$. Abbildung 3.15 zeigt einen solchen Brechzahlverlauf (blau) über der optischen Dicke für $A_{\text{max}} = 0,7$, $\lambda_0 = 1,0 \mu\text{m}$, $T_{\text{opt,ges}} = 5 \mu\text{m}$, $T_{\text{Apo}} = 0,25 \times T_{\text{opt,ges}}$, $n_{\text{min},v} = 1,0$ und $n_{\text{max},v} = 3,5$.

Ausgehend von dieser analytischen Darstellung wurden mehrere Szenarien angenommen und versucht, die Parameter entsprechend den jeweiligen Bedingungen zu optimieren. Als erstes wurde eine 50 μm dicke Zelle betrachtet und angenommen, dass für die Brechzahlen der Schichten des Filters alle Werte zwischen $n_{\min,v}=1,0$ und $n_{\max,v}=3,5$ zugänglich sind. Die entsprechende Referenzzelle, für die perfekte Transmission für alle Einfallswinkel und Wellenlängen angenommen wurde, hatte eine Jahresertragseffizienz von $\eta_{\text{Jahr}}=26,8\%$. Für den optimalen Filter wurden Simplexoptimierungen [179] an 1000 verschiedenen Startparametern mit dem Ziel der Maximierung von η_{Jahr} durchgeführt. Das beste Schichtsystem führte zu einer Effizienz von $\eta_{\text{Jahr}}=27,9\%$.

3.4.4 Optimierung für reale Materialien

Für die experimentelle Umsetzung werden auch Brechzahlen benötigt, die nur leicht größer als 1,0 sind, um eine entsprechend gute Unterdrückung von Reflexionsverlusten für senkrechten Einfall zu erreichen. Mit porösem Silizium wären kontinuierliche Brechzahlprofile mit Werten zwischen 1,0 (Luft) und 3,5 (Silizium) möglich [52]. Mit Silizium wäre folglich eine monolithische Integration möglich, allerdings verbietet sich dieses Konzept auf Grund der hohen Absorption im kurzwelligen Spektralbereich. Eine Abscheidung von SiO_2 mit verkipptem Substrat kann zu schräg wachsenden Nanodrähten führen, die einen effektiven Index bis zu $n_{\min,v}=1,05$ ermöglichen [53]. Im Hinblick auf die mechanische Stabilität empfiehlt sich hier aber eher die Co-Deposition [180] zweier Materialien. Die Kombination $\text{SiO}_2\text{-TiO}_2$ liegt nahe, da beide Materialien im relevanten Spektralbereich nahezu transparent sind und weitestgehend mit variablen Mischungsverhältnissen gesputtert werden können. So ließe sich ein kontinuierlicher Brechzahlverlauf realisieren. Brechzahlen zwischen 1,5 (limitiert durch SiO_2) und 2,5 (limitiert durch TiO_2) wären so möglich. Die verbleibende Lücke zwischen 2,5 und Silizium führt zwar immer noch zu Reflexionsverlusten, allerdings liegen diese in der Größenordnung von nur 4%.

Bei der Optimierung des Schichtsystems aus diesen beiden Materialien wurden in der Berechnung der winkel- und wellenlängenaufgelösten Transmission die Materialdispersion der Brechzahlen voll berücksichtigt. Das bisherige analytische Design [Gl. (3.6)-Gl. (3.12)] des Brechzahlverlaufs gilt bei Realisierung mit solchen realen Materialien dann nur noch für eine konkrete Designwellenlänge, während bei abweichenden Wellenlängen die Materialdispersion zu Modifikationen des Brechzahlverlaufs führt. Um dennoch optimale Ergebnisse zu erzielen, wurde in die bisherige Optimierung diese Designwellenlänge als zusätzlicher Designparameter aufgenommen.

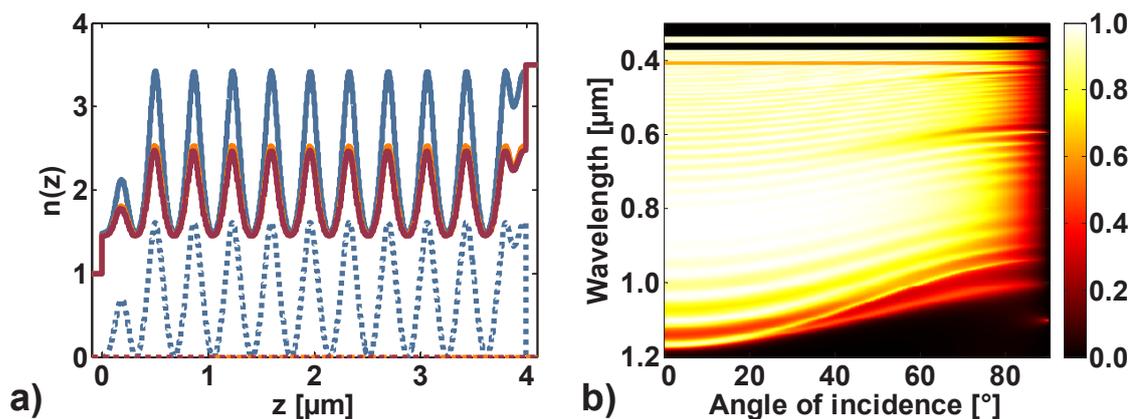


Abb. 3.16: a) Brechzahlverlauf eines optimierten spektral- und richtungsselektiven Filters bestehend aus SiO_2 und TiO_2 . Auf Grund der Materialdispersion gibt es Unterschiede für verschiedene Wellenlängen (blau-300 nm, orange-700 nm, dunkelrot-1100 nm). Der Realteil von $n(z)$ ist durchgezogen, der Imaginärteil gepunktet. b) Wellenlängen- und winkelaufgelöste Transmissivität, welche im IR wegen des Stoppbandes und im UV wegen der Absorption [gepunktete Linie in a)] im Filter gegen 0 geht.

Die globale Suche nach Parametersätzen, die eine maximale Jahresertragseffizienz ermöglichen, wobei für die Siliziumdicke $50\ \mu\text{m}$ angesetzt wurden, führte zu zwei unterschiedlich dicken Filtern. Der dickere Filter ist dabei ungefähr $4\ \mu\text{m}$ dick [siehe Abb. 3.16 a)]. Diese Dicke erlaubt mehrere Perioden des Brechzahlverlaufs, sodass das Stoppband sehr gut ausgeprägt ist und es zu einer erfolgreichen Unterdrückung der Reemission im langwelligen Spektralbereich kommt. Allerdings führt die große Dicke trotz des geringen Absorptionskoeffizienten von TiO_2 im kurzwelligen Spektralbereich gemäß dem Lambert-Beerschen-Gesetz zu einer signifikanten Absorption. Da der Filter auf der Frontseite der Solarzelle aufgebracht ist, verhindert eine so verringerte Transmissivität höhere Solarzelleneffizienzen. Für solche Filterdicken wurde $\eta_{\text{Jahr}}=25,78\%$ prognostiziert. Der dünnere Filter war um die $500\ \text{nm}$ dick und entsprach in seinem Brechzahlverlauf eher einem reinen quintischen Brechzahlverlauf. Ein solches Schichtsystem weist eine breitbandig hohe Reduzierung der Reflexionsverluste auf. Des Weiteren profitiert die Solarzelle wegen der geringen Dicke von einer höheren Transmissivität im UV. Allerdings kann auf diese Weise kein wirksames Reflexionsband ausgebildet werden, sodass die Reemission nur geringfügig unterdrückt wird. Für den hierfür gefundenen Filter wurde $\eta_{\text{Jahr}}=25,76\%$ berechnet – ein nur marginaler Unterschied zum deutlich dickeren Filter.

Eine weitere wichtige Frage auf dem Weg zu herstellbaren Filtern ist die nach der Toleranz des Filterdesigns gegenüber Fertigungsungenauigkeiten. Für diese Toleranzanalyse wurde der Wirkungsgrad für Schichtsysteme berechnet, welche durch Modifikationen eines Ausgangsfilters hervorgegangen sind. Zur Bestimmung der Transmission wird das Schichtsystem in einzelne dünne Schichten mit konstantem Bre-

chungsindex zerlegt. Der unmodifizierte Ausgangsfilter bestand aus Schichten, die alle eine optische Dicke von 15 nm hatten. Dieses Schichtsystem wurde dann dadurch modifiziert, dass jede Schichtdicke proportional zu einer Zufallszahl verändert wurde, wobei die Zufallszahlen normalverteilt um 1,0 mit der Standardabweichung σ waren. Für die Erhebung statistischer Daten wurden für jedes σ 100 Filtermodifikationen durchgeführt. Es zeigte sich, dass der Filter eine hohe Toleranz gegenüber solchen Dickenfehlern aufweist, da der Wirkungsgrad nur um 0,1 % fällt, falls alle Schichten im Schnitt um 5 % von ihrer Solldicke abweichen [65].

Ein weiteres Kriterium für herstellbare Filter besteht in der Anzahl der zu fertigenden Schichten. Idealerweise haben die hier vorgeschlagenen Filter einen kontinuierlichen Brechzahlverlauf, um unnötige Einkoppelverluste zu vermeiden. Um diesen kontinuierlichen Brechzahlverlauf zu gewährleisten, müssen die einzelnen Schichten optisch dünner als ein Zwanzigstel der kleinsten relevanten Wellenlänge, also dünner als 10-20 nm sein. Für eine Evaluierung dieses Kriteriums bezüglich η_{Jahr} wurde sich auf den dünnen Filter beschränkt, dessen optische Gesamtdicke bei der Designwellenlänge 1000 nm beträgt. Hierfür wurden η_{Jahr} für verschiedene Anzahlen von Schichten berechnet, mit denen das ursprünglich analytische Profil approximiert wurde. Das Ergebnis dieser Untersuchung war, dass η_{Jahr} nur um 0,5 % sank, wenn die optische Dicke einer Einzelschicht von 10 nm auf 100 nm ansteigt.

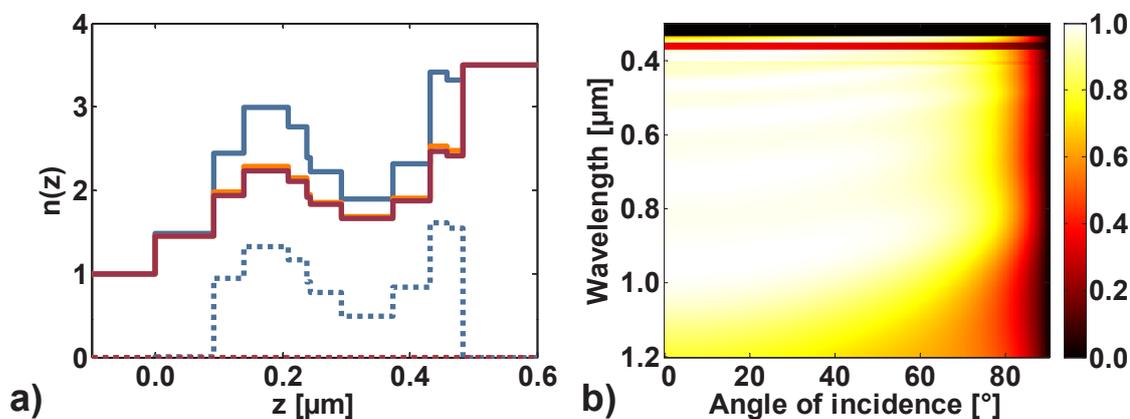


Abb. 3.17: a) Brechzahlverlauf bei drei verschiedenen Wellenlängen eines optimierten, spektral- und richtungselektiven Filters bestehend aus 10 Schichten mit variablen Mischungsverhältnissen zwischen SiO_2 und TiO_2 (blau-300 nm, orange-700 nm, dunkelrot-1100 nm). Der Realteil von $n(z)$ ist durchgezogen, der Imaginärteil gepunktet. b) Wellenlängen- und winkelaufgelöste Transmissivität.

Ausgehend von den beiden Erkenntnissen, dass sich zum einen bei Verwendung realer (absorbierender) Materialien die Betrachtung dünner Filter lohnt, und sich zum anderen solche dünnen Filter mit nur geringen Effizienzeinbußen durch wenige Schichten realisieren lassen, wurde die Optimierungsstrategie weiterentwickelt.

Ursprünglich wurde der komplexe Brechzahlverlauf durch analytische Funktionen beschrieben, um nur wenige Parameter optimieren zu müssen. Wenn aber nur noch wenige Schichten optimiert werden müssen, lassen sich solche Schichtsysteme auch durch zwei Parameter pro Schicht beschreiben (Dicke und Mischungsverhältnis). Als Startwert für die so durchgeführte Optimierung diente das ursprüngliche analytische Profil des dünnen Filters, das durch 10 Schichten approximiert wurde. Die anschließende Optimierung brachte eine Effizienz von 26,1 %, also noch einmal eine Verbesserung um 0,4 % gegenüber dem ursprünglichen Profil, was sich dadurch begründen lässt, dass mehr Freiheitsgrade in das System eingebracht wurden. Der entsprechende Brechzahlverlauf und die berechnete wellenlängen- und winkelaufgelöste Transmission sind in Abb. 3.17 dargestellt. Bei einigen Wellenlängen im Blauen ist auch hier die Transmission wegen der Absorption des TiO_2 vermindert.

Ein weiterer Vergleich zwischen dem optimierten 10-Schichtsystem und dem ursprünglichen analytischen Profil ergab auch eine breitbandig erhöhte Transmission für senkrechten Einfall und eine erhöhte Reflexion im Infraroten für schrägen Einfall. Im Zusammenhang von Abb. 3.13 b) wurde erwähnt, dass mit einer idealen Antireflexbeschichtung, also ohne eine Einschränkung des Akzeptanzwinkels, eine Effizienz von 26,8 % erreicht werden kann. Mit dem hier vorgeschlagenen Design werden jedoch nur 26,1 % erreicht. Begründen lässt sich dies durch die idealisierte verlustfreie Transmission, die für Abb. 3.13 b) angenommen wurde. Reale Solarzellen mit einem Reflexionsverlust von 5 % würden dann auch nur noch eine Effizienz von 25,5 % erreichen, also deutlich weniger als mit dem real herstellbaren Filter. Damit wurde das Design und die Simulation optimierter herstellbarer richtungsselektiver Filter erstmals als Thema bearbeitet.

3.5 Zusammenfassung

In diesem Kapitel ging es um Photon-Management in Solarzellen, bei denen die photovoltaische Konversion in nur einem Material stattfindet. Anfänglich wurde der Einfluss auf das Absorptionsverhalten von biperiodischen Anordnungen von Nanokugeln, Pyramiden, parabelförmigen Bergen und den invertierten Gegenstücken der beiden letztgenannten Strukturelemente auf der Oberfläche einer planaren aSi:H-Schicht untersucht. Als optimal erwiesen sich dabei Gitterkonstanten von ≈ 600 nm. Ergänzend wurde dargestellt, inwiefern texturierte Oberflächen auf planaren Absorbern bezüglich ihres Streuverhaltens optimiert werden können. In einer weiteren Untersuchung wurden gegenwärtige, texturierte Superstrate, auf denen eine aSi:H-Schicht konform abgeschieden wird, lateral skaliert. Dabei zeigte sich, dass sich die erreichbaren Kurzschlussstromdichten durch laterale Details in einer Größenordnung

von ≈ 150 nm maximieren lassen. Für solche Strukturgrößen und eine hinreichende vertikale Modulierung wird das Licht breitbandig ähnlich dem Lambertschen Limit absorbiert. Des Weiteren konnte für diesen Zelltyp, bei dem Absorber und Streuer typischerweise identisch sind, gezeigt werden, dass zum Erreichen des Lambertschen Limits ein hinreichend dicker Streuer gegeben sein muss. Abgeschlossen wird das Kapitel durch eine Diskussion über die prinzipiellen Auswirkungen eines Filters, der den Akzeptanzwinkel am langwelligen Ende des relevanten Spektralbereichs einschränkt. Am Beispiel einer auf kristallinem Silizium basierenden Solarzelle wurde sowohl eine ideale Filterfunktion identifiziert als auch ein realisierbares, auf einzelnen optischen Schichten basierendes Konzept zu dessen Realisierung vorgeschlagen.

4 Photon-Management in Tandemzellen

Wir machen uns hier nicht fertig,
aber mehr machen geht auch nicht.

((un)bekannter Doktorand)

Im Abschnitt 2.3.3 wurde auch darauf hingewiesen, dass sich Thermalisierungsverluste durch Verwendung mehrerer Absorber mit unterschiedlichen Bandlücken verringern lassen. Zusätzlich erlaubt dies noch die Ausnutzung eines breiteren Spektralbereichs. Solche *multi-junction*-Zellen mit mehreren Absorbern werden hauptsächlich aus III-V-Halbleitern hergestellt. Durch Mischkompositionen lassen sich dabei die einzelnen Bandlücken einstellen. Auf Grund der aufwendigen Herstellung sind diese Zellen hauptsächlich in der Raumfahrt [181] oder in Konzentratoranlagen [182] zu finden. In diesem Kapitel geht es um kostengünstigere, auf Silizium basierende, sogenannte mikromorphe Zellen, deren Grundprinzipien und Felder der Verbesserung im ersten Abschnitt eingehend dargestellt werden. Der darauf folgende Abschnitt beschäftigt sich mit der Frage, inwiefern spektrales Photon-Management solche Tandemzellen noch weiter verbessern kann. Abgeschlossen wird das Kapitel mit Betrachtungen von Tandemzellen, die sowohl raue Oberflächen zwecks Streuung und verbesserter Lichteinkopplung beinhalten als auch Strukturen, die spektrales Photon-Management zum Ziel haben.

4.1 Dünnschicht-Tandemzellen

In den 1980ern [183] und 1990ern [184] wurde das Konzept der mikromorphen Tandemzellen vorgeschlagen und erste Untersuchungen diesbezüglich getätigt. Dabei handelt es sich um Dünnschicht-Tandem-Zellen mit einer der Sonne zugewandten Zelle aus aSi:H und einer darunter liegenden Zelle aus μcSi . Mit diesem Konzept lassen sich experimentell Effizienzen um die 12% erreichen [185], wobei die gesamten Vorteile der Dünnschichttechnologien und des Siliziums zum Tragen kommen [186]. Das heißt, solche Zellen können großflächig, bei niedrigen Temperaturen, auf flexible Substrate und womöglich aus Materialien mit geringer Ausgangsqualität gefertigt

werden, wobei Silizium ungiftig ist und die Materialverfügbarkeit auch in der Zukunft kein Problem darstellen sollte. Zusätzlich entsprechen die beiden Bandlücken (1,7 eV und 1,1 eV) ungefähr den idealen Werten für erdgebundene Tandemzellen (1,64 eV und 0,94 eV).

4.2 Zwischenreflektoren

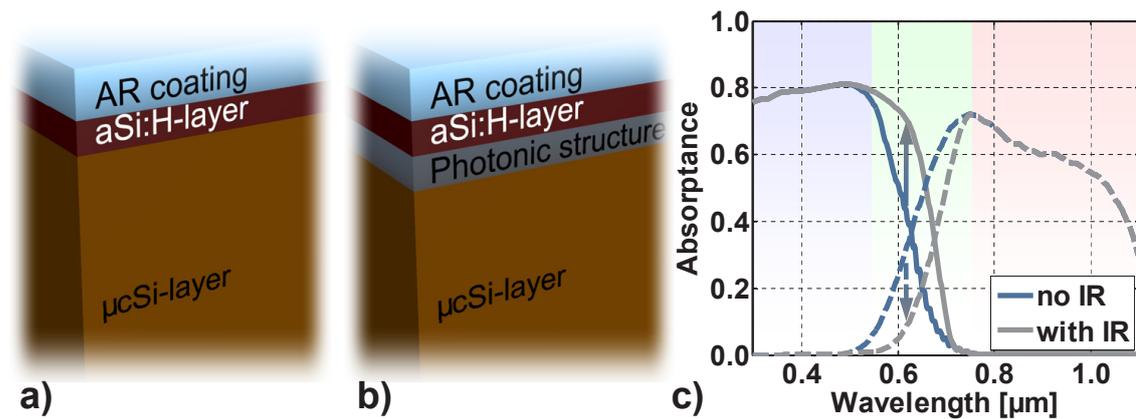


Abb. 4.1: a) Schematischer Aufbau einer mikromorphen Tandemzelle, bestehend aus einer Antireflexbeschichtung, der aSi:H-Zelle und der μ Si-Zelle. b) Zwischen den beiden Zellen ist eine photonische Struktur implementiert. c) Absorptionsspektren einer 350 nm dicken aSi:H-Zelle (durchgezogen) und einer 4 μ m dicken μ Si-Zelle (gestrichelt) ohne (blau) Zwischenreflektor. Die grauen Linien verdeutlichen den Einfluss eines Zwischenreflektors.

Abbildung 4.1 a) zeigt einen schematischen Aufbau einer mikromorphen Tandemzelle. Frontseitig ist eine Antireflexstruktur mit einem kontinuierlichen Brechzahlverlauf zwischen Luft und ZnO (siehe Abschnitt 2.4.1) zur Verbesserung der Lightkopplung angebracht. Die Dicke der aSi:H-Zelle beträgt 350 nm und die der μ Si-Zelle 4 μ m. In den folgenden numerischen Untersuchungen wurde für den Rückreflektor ein PEC mit der Brechzahl $0+40i$ angenommen. Die zugehörigen berechneten Absorptionsspektren sind in Abb. 4.1 c) als blaue Linien dargestellt, wobei dem aSi:H die durchgezogene und dem μ Si die gestrichelte Linie entspricht.

Die Dicke der aSi:H-Zelle ist insofern auf wenige 100 nm limitiert, als dass mit dickeren Zellen zwar mehr Photonen absorbiert und entsprechend mehr Elektron-Loch-Paare generiert werden, auf Grund der lichtinduzierten Degradation und der schlechten elektronischen Eigenschaften aber geringere Wirkungsgrade erreicht werden (siehe Abschnitt 2.2.3) [34]. Eine solche Dicke ist im Allgemeinen nicht ausreichend, um das volle Potential der unteren μ Si-Zelle abzurufen. Um das Ziel hoher stabiler Effizienzen mit dem Konzept mikromorpher Tandemzellen zu erreichen, muss zwangsläufig durch geeignetes Photon-Management der in der nur

wenige 100 nm dicken aSi:H-Zelle generierte Strom gesteigert werden.

Die Implementierung einer spektral selektiven photonischen Struktur als Zwischenreflektor (engl. *intermediate reflector* (IR)) zwischen den beiden Zellen, so wie in Abb. 4.1 b) dargestellt, kann in diesem Sinne zu verbesserten Wirkungsgraden führen [187]. Das kurzwellige Licht unterhalb von ≈ 550 nm wird bereits beim ersten Durchgang durch die aSi:H-Zelle absorbiert, da die Absorptionslänge von aSi:H hinreichend kurz ist. Das langwellige Licht mit Wellenlängen oberhalb von ≈ 750 nm kann bei der gegebenen Dicke nicht mehr von der aSi:H-Zelle absorbiert werden. Ein idealer Zwischenreflektor ist für diese Photonen transparent, sodass noch ausreichend Photonen in der μcSi -Zelle absorbiert werden können. Zwar lässt sich teilweise ein durch den Zwischenreflektor verringerter Photonenfluss in die μcSi -Zelle durch dickere μcSi -Zellen kompensieren, jedoch ist diese Option wegen der geringen Wachstumsgeschwindigkeit von μcSi und einer damit einhergehenden Steigerung der Fertigungskosten nur bedingt anwendbar. In dem dazwischen liegenden Spektralbereich von 550-750 nm reflektiert ein idealer Zwischenreflektor das Licht, welches im ersten Durchgang durch die aSi:H-Zelle noch nicht absorbiert wurde, sodass der effektive Weg des Lichtes in der aSi:H-Zelle verlängert wird. Dies führt dann in diesem Spektralbereich zu einer verbesserten Absorption der aSi:H-Zelle und zu einer reduzierten Absorption der μcSi -Zelle, so wie es schematisch durch die grauen Spektren in Abb. 4.1 c) angedeutet ist. Schlussendlich ermöglicht ein solcher Zwischenreflektor höhere Kurzschlussstromdichten der aSi:H-Zelle und damit der Tandemzelle.

In der Literatur sind bereits einige Konzepte für solche Zwischenreflektoren diskutiert. Durch die Implementierung homogener dielektrischer Schichten aus ZnO [34, 184, 188] oder SiO_x [17, 189, 190] erhöht sich zum einen die Anzahl der reflektierenden Grenzflächen und zum anderen erhöht sich die jeweilige Reflektivität auf Grund des erhöhten Brechzahlkontrastes. Im Falle von planaren Grenzflächen bildet die dielektrische Schicht einen nahezu symmetrischen Fabry-Perot-Resonator, bei dem sich die spektrale Position maximaler Reflexion durch Variieren der Resonatorlänge, also der Schichtdicke, einstellen lässt. Numerische Optimierungen zeigen, dass sich J_{SC} der aSi:H-Zelle um einen Faktor von 1,06 verbessern lässt, wenn eine Dicke von 74 nm für eine solche ZnO-Schicht angenommen wird. Die Vorteile dieses Konzeptes liegen in der Prozesskompatibilität – jedoch ist generell die Einkopplung in die μcSi -Zelle wegen der geringen spektralen Selektivität breitbandig reduziert.

Eine spektral selektive Reflektivität lässt sich mithilfe von photonischen Kristallen (PhK) realisieren [191, 192]. Dabei handelt es sich um Strukturen, deren Permittivität periodisch moduliert ist. Falls die Struktur nur in einer Richtung moduliert ist, handelt es sich um einen eindimensionalen PhK, deren bekanntester Vertreter der Bragg-Spiegel sein dürfte. Beispiele für zweidimensionale PhK sind photonische

Kristallfasern [193, 194] und im weiteren Sinne biperiodisch modulierte Schichtwellenleiter [195, 195]. Opale [196–198] und Holzstapelstrukturen [199] gehören zu den dreidimensionalen PhK.

In einem unendlich ausgedehnten PhK kann die Propagation des elektromagnetischen Feldes mithilfe von Blochmoden beschrieben werden, wobei der Blochvektor einer Dispersionsrelation genügt. Dabei kann es passieren, dass in einem spektralen Bereich kein reellwertiger Blochvektor existiert und sich das Feld folglich nicht ungedämpft ausbreiten kann. In diesem Zusammenhang spricht man von einer vollständigen photonischen Bandlücke [191]. Für den Zweck des Zwischenreflektors reicht allerdings schon eine unvollständige und damit richtungsselektive Bandlücke aus, da der Großteil des noch nicht absorbierten Lichtes nahezu senkrecht zum Superstrat propagiert [94]. Eine solche richtungsselektive Bandlücke existiert für Bragg-Spiegel [177] und entsprechend konnte die Kombination einer mikromorphen Tandemzelle und eines Bragg-Spiegels bereits erfolgreich numerisch untersucht werden [200, 201]. Die Implikationen eines dreidimensionalen PhK werden im letzten Abschnitt dieses Kapitels diskutiert, während der nächste Abschnitt einer weiteren Möglichkeit zur Realisierung einer spektral selektiven Reflektivität, die allerdings nicht auf einem PhK basiert, gewidmet ist.

4.3 Metallische Nanopartikel als Zwischenreflektoren

Im Laufe der Arbeiten an der vorliegenden Dissertation wurde die Verwendung von metallischen Nanopartikeln angeregt [202, 203], da diese spektral selektiv eine hohe Reflektivität ermöglichen. Dabei wurde vorgeschlagen, metallische Nanopartikel in gegenwärtig verwendete ZnO-Zwischenschichten einzubetten. Durch die vollständige Einbettung des Metalls kann eine unerwünschte Erhöhung der Oberflächenrekombinationsraten vermieden werden. Zusätzlich liegt die Vermutung nahe, dass die Leitfähigkeit des Zwischenreflektors verbessert wird. Falls die metallischen Nanopartikel aus Edelmetallen wie Gold oder Silber bestehen, können lokalisierte Oberflächenplasmon-Polaritonen (LSPPs) angeregt werden. Diese LSPPs gehen mit einer harmonischen Oszillation des freien Elektronengases einher, welche durch das einfallende Licht getrieben wird. Die Resonanzfrequenz hängt dabei im Speziellen von der Dispersion des Metalls und des Umgebungsmaterials und von der Form des Partikels ab [204, 205]. Licht mit Frequenzen nahe der Resonanzfrequenz wird besonders stark gestreut und es kommt zu einer Verstärkung des Nahfeldes, während Licht mit Frequenzen fern der Resonanz nahezu unbeeinflusst bleibt.

In der das Konzept zum ersten Mal vorstellenden Arbeit [202] wurden nur metallische Nanodrähte berücksichtigt, die sich unendlich entlang einer räumlichen Dimension ausdehnen. Dies erlaubte eine Reduzierung des numerischen Aufwandes. Allerdings können die LSPPs nur für eine Polarisationsrichtung des einfallenden Lichtes angeregt werden. Entsprechend ist diese Arbeit nur zur Vorstellung des Konzeptes geeignet, da das einfallende Sonnenlicht als unpolarisiert angenommen werden muss. Falls jedoch dreidimensionale Nanopartikel ausreichend hoher Symmetrie vorliegen, können die Resonanzen auch mit unpolarisiertem Licht angeregt werden. Dieser Argumentation folgend wurde das Konzept auf biperiodisch angeordnete Nanodisks ausgeweitet [203].

4.3.1 Implementierung metallischer Nanodisks

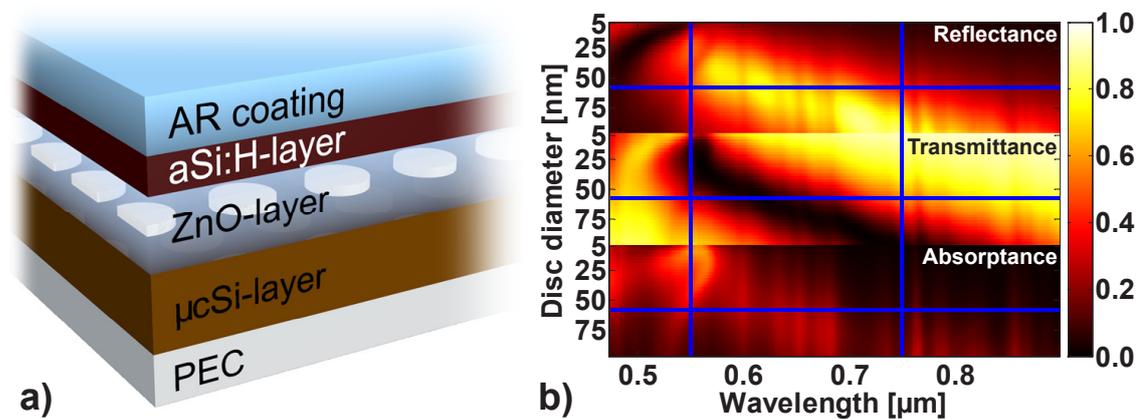


Abb. 4.2: a) Darstellung der untersuchten mikromorphen Tandemzelle, bei der Nanodisks aus Silber in den ZnO-Zwischenreflektor eingebettet sind. Einkoppelverluste werden durch eine Antireflexbeschichtung unterdrückt. Der Rückreflektor besteht aus einem perfekten elektrischen Leiter. b) Spektrale Eigenschaften biperiodisch angeordneter Nanodisks als Funktion ihres Durchmessers. Die Nanodisks haben eine Höhe von 29 nm und einen Mit-tenabstand, der das 1,78-fache ihres Durchmessers beträgt. Die zwei senkrechten blauen Linien markieren den spektralen Bereich, in dem eine hohe Reflektivität angestrebt wird, während die horizontalen Linien den optimierten Nanodisks entsprechen.

Abbildung 4.2 a) zeigt eine schematische Implementierung von metallischen Nanodisks in eine mikromorphe Tandemzelle. Um die Lichteinkopplung zu maximieren, ist an der Oberseite eine Antireflexbeschichtung (AR coating) aufgebracht, die auf einem quintischen Verlauf des Brechungsindex (siehe Abschnitt 2.4.1) von 1,0 (Luft) auf 2,0 (ZnO) basiert. Die Dicke der aSi:H-Zelle wurde auf 350 nm gesetzt. Der Zwischenreflektor basiert auf einer homogenen ZnO-Schicht, in welche Nanodisks aus Silber mittig eingebettet sind. Die μcSi -Zelle ist 4 μm dick, was einem Wert am oberen Ende der sinnvollen Dicken entspricht. Der Rückreflektor besteht aus einem perfekten elektrischen Leiter.

Wenn der Abstand zwischen den Nanodisks und den Siliziumgrenzflächen größer als die Abklinglänge des evaneszenten Nahfeldes der LSPPs ist, dann kann davon ausgegangen werden, dass die optischen Eigenschaften der Metallpartikel unabhängig von der höheren Permittivität des aSi:H und μcSi sind. Dies erlaubt es, die spektralen Eigenschaften der Nanodisks zuerst separat zu untersuchen. Abbildung 4.2 b) zeigt berechnete Spektren der Reflektivität, Transmissivität und Absorptivität für biperiodisch angeordnete Nanodisks aus Silber für variierenden Durchmesser der Nanodisks. Dabei wurde angenommen, dass die Nanodisks von unendlich ausgedehntem ZnO umgeben sind. Für die Berechnung wurde die RCWA (siehe Abschnitt 2.5.3) mit 21×21 Fourierordnungen benutzt. Der Mittenabstand nächster Nachbarn entlang beider lateraler Richtungen beträgt dabei ein 1,78-faches des Durchmessers. An dieser Stelle sei vorweggegriffen, dass dieser Mittenabstand schon dem optimierten Zellsystem entspricht. Zur Diskussion der spektralen Eigenschaften ist der genaue numerische Wert jedoch nebensächlich, solange der Abstand groß genug ist, um Kopplungseffekte zwischen nächsten Nachbarn vernachlässigen zu können. Frühere Untersuchungen von metallischen Nanopartikeln mit vergleichbarer Größe zeigten, dass Kopplungseffekte die spektralen Eigenschaften zu dominieren beginnen, wenn der Abstand kleiner ist als das 1,5-fache der Breite der Partikel [77].

Wie der Abb. 4.2 b) entnommen werden kann, weist eine solche Anordnung von metallischen Nanodisks ein ausgeprägtes Reflexionsband nur in spektraler Nähe zur LSPP-Resonanz auf – mit einem ansonsten hochtransmittiven Untergrund. Dieses Reflexionsverhalten wird im Folgenden dazu benutzt, einen spektral selektiven Zwischenreflektor in mikromorphe Tandemzellen zu implementieren. Über die Wahl der dielektrischen Umgebung und der Größe der Nanodisks kann die spektrale Position und die Breite der Resonanz den Anforderungen der aSi:H- und μcSi -Zelle angepasst werden. Der spektrale Bereich, in dem eine hohe Reflektivität gewünscht ist, wird durch die zwei senkrechten blauen Linien in Abb. 4.2 b) gekennzeichnet. Des Weiteren besteht durch die Wahl des Abstandes zwischen den Nanodisks eine gewisse Kontrolle über das Verhältnis zwischen dem zurück zur aSi:H-Zelle reflektierten und dem in die μcSi -Zelle transmittierten Licht. Abhängig vom einfallenden Sonnenspektrum und der zur Verfügung stehenden Schichtdicken lässt sich dann numerisch eine optimale Form, Größe, vertikale Position und laterale Anordnung finden.

4.3.2 Optimierung der Geometrie

Für die Bestimmung der optimalen Geometrie müssen die Absorptionsspektren der einzelnen Zellen berechnet werden. Die (zeitlich gemittelte) lokal absorbierte Leis-

tion ist durch die Divergenz des zeitlich gemittelten Poyntingvektors

$$\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}, \omega) \rangle = \frac{1}{2} \Re [\mathbf{E}_c(\mathbf{r}, \omega) \times \mathbf{H}_c^*(\mathbf{r}, \omega)] \quad (4.1)$$

gegeben [206]. Hier bezeichnen \mathbf{E}_c und \mathbf{H}_c die komplexen Amplituden des elektrischen und magnetischen Feldes und ω steht für die Kreisfrequenz des einfallenden Lichtes. Die Absorptivität einer Zelle kann dann ganz allgemein durch Integration der lokal absorbierten Leistung über den relevanten Raumbereich und anschließende Normierung auf das einfallende Feld bestimmt werden. Im vorliegenden Fall empfiehlt es sich jedoch, das Volumenintegral mithilfe des Gaußschen Integralsatzes in ein Oberflächenintegral umzuwandeln. Für die Bestimmung der Absorptivität einer Zelle ist so nur noch die Integration entlang zweier Grenzflächen erforderlich. Dies reduziert den numerischen Aufwand, da die Felder nicht mehr entlang der Hauptpropagationsrichtung räumlich diskretisiert werden müssen. Im Anschluss an die Berechnung der Absorptionsspektren wurden die Kurzschlussstromdichten der beiden Zellen mithilfe des direkten Sonnenspektrums AM1.5d [125] gemäß Abschnitt 2.5.6 berechnet.

In der numerischen Implementierung wurde eine reellwertige Brechzahl von 2,0 für das ZnO des Zwischenreflektors angenommen. Die spektral aufgelöste Permittivität von Silber [207] entstammt der Literatur. Die Anordnung der metallischen Nanodisks kann durch wenige Parameter beschrieben werden. Im Detail handelt es sich um den Mittenabstand nächster Nachbarn Λ , den Durchmesser d und die Höhe h der Nanodisks und die Abstände z_1 und z_2 zu den Siliziumgrenzflächen.

Für die Optimierung der geometrischen Parameter wurde eine geeignete gradientenbasierte Optimierungsmethode [208] verwendet. Die dabei zu maximierende Größe war die kleinere der beiden Kurzschlussstromdichten der Einzelzellen. Auf diesem Wege wird eine Stromanpassung der beiden Zellen inhärent sichergestellt. Zum Beispiel kann in einer Konfiguration, in der die aSi:H-Zelle weniger Strom als die μcSi -Zelle liefert, die Dichte der Nanodisks erhöht werden, sodass mehr Licht reflektiert wird und sich der Abstand der beiden Kurzschlussstromdichten verringert. Insgesamt konnte eine Verbesserung von J_{SC} der aSi:H-Zelle um einen Faktor von 1,14 erreicht werden, wenn als Referenzzelle eine Tandemzelle ohne einen Zwischenreflektor angenommen wird, und um einen Faktor von 1,07, wenn die optimierte 74 nm dicke ZnO-Schicht implementiert ist. Die optimierten Parameter entsprechen dabei denen der blauen horizontalen Linien in Abb. 4.2 b), also einer Höhe $h=29,4$ nm, einem Durchmesser $d=57$ nm und einem Gitterabstand $\Lambda=101,3$ nm. Des Weiteren ergaben sich für den optimierten vertikalen Abstand zur aSi:H-Grenzfläche ein $z_1=49,3$ nm und zur μcSi -Grenzfläche ein $z_2=31,3$ nm.

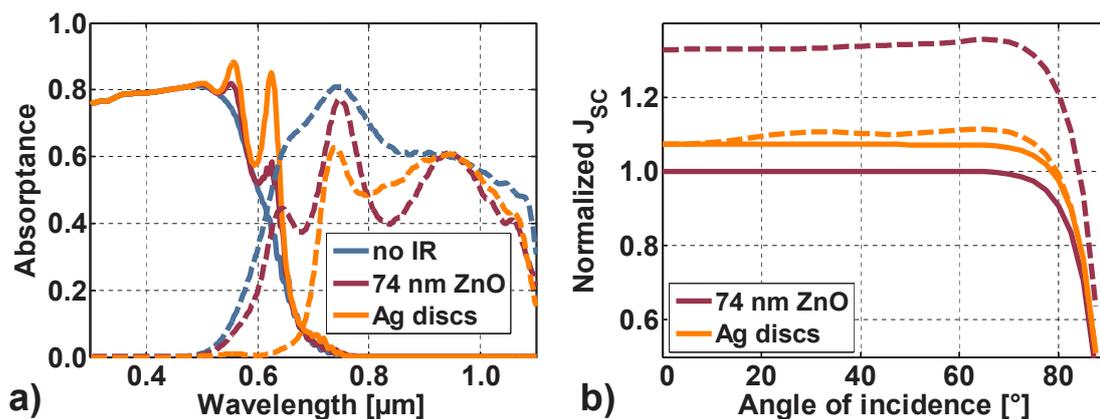


Abb. 4.3: a) Absorptionsspektren einer 350 nm dicken aSi:H-Zelle (durchgezogene Linien) und einer 4 μm dicken μcSi-Zelle (gestrichelt), wobei wahlweise kein Zwischenreflektor (blau), eine 74 nm dicke ZnO-Schicht (dunkelrot), oder die optimierten in ZnO eingebetteten Silber-Nanodisks (orange) implementiert wurden. b) Normierte Kurzschlussstromdichte der aSi:H-Zelle (durchgezogen) und μcSi-Zelle (gestrichelt) über dem Einfallswinkel. Als Zwischenreflektor fungierten eine 74 nm dicke ZnO-Schicht (dunkelrot) oder die optimierten Silber-Nanodisks (orange). Die Ergebnisse entstammen einer Mittelung über beide Polarisierungsrichtungen des Lichtes und über Azimutwinkel von 0° und 45°. Normiert wurde gegen die aSi:H-Zelle für senkrechten Einfall und den ZnO-Zwischenreflektor.

Abbildung 4.3 a) zeigt die berechneten Absorptionsspektren der aSi:H- (durchgezogene Linie) und der μcSi-Zelle (gestrichelt) für den Fall, dass das μcSi direkt auf aSi:H folgt (blau), für die optimierte 74 nm dicke ZnO-Schicht (dunkelrot), die in Abschnitt 4.2 bereits erwähnt wurde, und für den Fall, dass die optimierten Nanodisks in einer 110 nm dicken ZnO-Schicht ($z_1+h+z_2=110$ nm) eingebettet sind (orange). Eine Verbesserung der Absorption der aSi:H-Zelle im relevanten Spektralbereich zwischen 550 und 750 nm ist deutlich erkennbar. Es sei darauf hingewiesen, dass die Oszillationen in den μcSi-Spektren, die aus der Endlichkeit der μcSi-Zelle und der vollständigen Reflexion an der Rückseite resultieren, mit einem Gaußfilter weggemittelt wurden, um die Spektren leichter erfassbar zu machen.

Anschließend stellte sich die Frage nach der Robustheit des gefundenen Designs gegenüber etwaigen Herstellungstoleranzen. Dafür wurde J_{SC} berechnet, wobei jeweils ein geometrischer Parameter um $\pm 5\%$ verändert wurde. Dabei ergab sich, dass solche Veränderungen der vertikalen Parameter (h , z_1 , z_2) die Güte der Tandemzelle um weniger als 1% beeinflussen – sich die Zelle diesbezüglich also als robust erweist. Eine Erhöhung des Metallgehaltes, also ein Verringern des Mittenabstandes oder ein Vergrößern des Durchmessers, führt jedoch zu einem Absinken von J_{SC} um 5%, da dann zu wenig Licht in die μcSi-Zelle gelangen kann. Eine Verringerung des Metallgehaltes führt hingegen zu weniger in die aSi:H-Zelle reflektiertem Licht und zu einer Verringerung von J_{SC} um auch wieder nur 1%. Folglich liegt ein robustes Design leicht neben dem Optimum und weist einen geringeren Metallgehalt auf.

4.3.3 Verhalten unter schrägem Einfall

In einem weiteren Schritt wurde untersucht, inwiefern die Zwischenreflektoren unter schrägem Einfall höhere Kurzschlussstromdichten erlauben. Eine starke Abhängigkeit der Tandemzelle vom Einfallswinkel gilt es zu vermeiden, da bei nichtnachgeführten Modulen das Sonnenlicht nicht immer senkrecht einfällt. Auf Grund der hohen Symmetrie der gesamten Tandemzelle liegt die Vermutung nahe, dass nur kleine Schwankungen der Kurzschlussstromdichten bei Veränderungen des Einfallswinkels zu erwarten sind. Die Rotationssymmetrie der Nanodisks und deren Anordnung in einem quadratischen Raster reduziert den relevanten Parameterraum der lateralen Komponenten des Wellenzahlvektors des einfallenden Lichtes auf ein Achtel und entsprechend den interessanten Azimuthwinkelbereich auf das Intervall von 0° bis 45° . Da es sich nur um langsam veränderliches Verhalten der Tandemzelle mit dem Azimuthwinkel zu erwarten ist, wurden als Beleuchtungsszenarien nur die beiden extremen Azimuthwinkel ausgewählt. Die Rechnungen erfolgten des Weiteren für beide Polarisationsrichtungen und für verschiedene Polarwinkel.

In Abb. 4.3 b) sind die gemittelten Kurzschlussstromdichten der aSi:H- (durchgezogen) und μcSi -Zelle (gestrichelt) in Abhängigkeit vom Polarwinkel dargestellt. Die untersuchten Zwischenreflektorkonzepte waren einerseits die optimierte 74 nm dicke ZnO-Schicht und andererseits die in ZnO eingebetteten optimierten Silber-Nanodisks. Dabei sind nur die über beide Polarisationsrichtungen und beide Azimuthwinkel gemittelten Werte dargestellt. Um den Zugriff auf die relative Verbesserung zu erleichtern, wurden die Ergebnisse auf die Kurzschlussstromdichte der aSi:H-Zelle bei senkrechtem Einfall für den Fall der ZnO-Schicht normiert. Dabei bestätigt sich, dass die gewählte Optimierungsstrategie zwangsläufig zu identischen Kurzschlussstromdichten der beteiligten Zellen (bei senkrechtem Einfall) führt. Für schrägen Einfall nimmt die Kurzschlussstromdichte der aSi:H-Zelle wegen steigender Fresnel-Reflexionsverluste an der obersten aSi:H-Grenzfläche ab. Damit einhergehend nimmt aber auch der effektive Weg des Lichtes in der μcSi -Zelle zu, sodass es zunächst zu einer diesbezüglichen Steigerung, für noch größere Winkel aber ebenso zu einem kontinuierlichen Abfall von J_{SC} kommt.

Wie der Abb. 4.3 b) weiter entnommen werden kann, ist über den betrachteten Bereich des Einfallswinkels die aSi:H-Zelle diejenige, die für beide Zwischenreflektoren im Sinne der Stromanpassung die Tandemzelle limitiert. Des Weiteren stellt sich auch heraus, dass eben diese limitierende Kurzschlussstromdichte für den dielektrischen Zwischenreflektor über alle Einfallswinkel kleiner ist als bei Verwendung der Silber-Nanodisks. Quantitativ ergibt sich über den gesamten Winkelbereich eine Verbesserung der Kurzschlussstromdichte der Tandemzelle um einen Faktor von

mindestens 1,07. Damit ist das Potential von solchen plasmonischen Zwischenreflektoren in Tandemzellen unter realistischen Bedingungen weiter untermauert.

4.4 Zusammenspiel mit rauen Oberflächen

Im Abschnitt 4.2 wurde argumentiert, dass die Effizienz von mikromorphen Tandemzellen erhöht werden kann, indem die Anzahl der in der aSi:H-Zelle absorbierten Photonen gesteigert wird. Dies gelingt zum einen durch die Integration texturierter Oberflächen ähnlich zu den im vorangegangenen Kapitel 3 beschriebenen Arbeiten. Ein anderer Ansatz besteht in der Implementierung eines geeigneten Zwischenreflektors. Die bisherigen theoretischen Arbeiten beziehen sich dabei allerdings auf idealisierte Systeme, in denen insbesondere die Texturierung der Superstrate realer Tandemzellen vernachlässigt ist [200–203]. Diese Idealisierung suggeriert jedoch einen verminderten Nutzen moderner vorgeschlagener Zwischenreflektorkonzepte, da die getroffenen Annahmen nicht direkt auf kommerzielle Produkte angewandt werden können. Um solche Konzepte zumindest für weitere Untersuchungen attraktiv zu machen, muss gezeigt werden, dass sich der Wirkungsgrad von Tandemzellen, deren Superstrat bereits texturiert ist, durch die Implementierung eines Zwischenreflektors weiter steigern lässt. Einer solchen Verifizierung ist dieser Abschnitt gewidmet. Hierbei wird gezeigt, dass die texturierte Oberfläche Reflexionsverluste reduziert und zu einer spektralen Verschmierung der spektralen Antwort des Zwischenreflektors führt. Weiterhin wird gezeigt, dass sich die Funktionalität beider Konzepte (der texturierten Oberfläche und des Zwischenreflektors) für das Photon-Management ergänzen und sich nicht gegenseitig nachteilig beeinflussen.

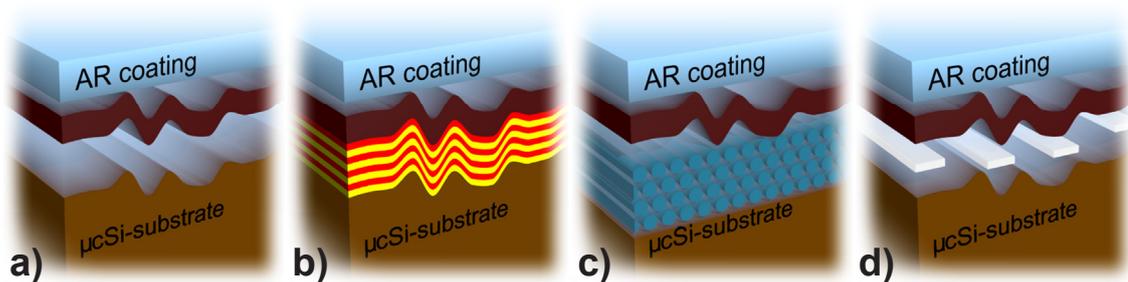


Abb. 4.4: Darstellungen der untersuchten Zwischenreflektorkonzepte: a) homogene ZnO-Schicht, b) eindimensionaler PhK, c) zweidimensionaler PhK und d) metallische in ZnO eingebettete Nanodrähte.

Abbildung 4.4 zeigt dreidimensionale Darstellungen der hier betrachteten Zwischenreflektoren. Die zugrunde liegende mikromorphe Tandemzelle beinhaltet bereits eine Antireflexbeschichtung (AR coating), die auf einem kontinuierlichen Brechzahlprofil (siehe Abschnitt 2.4.1) basiert. Die Dicke der aSi:H-Zelle beträgt 250 nm.

Des Weiteren wurde eine unendlich dicke μcSi -Zelle angenommen, um die Untersuchungen unabhängig von der spezifischen Wahl des Rückreflektors oder der μcSi -Dicke zu gestalten. In einem finalen Design muss natürlich die μcSi -Zelle dahingehend angepasst werden, dass beide Zellen identische Ströme generieren. Die untersuchten Zwischenreflektoren sind bereits in der Literatur numerisch untersucht. Im Detail handelt es sich um eine homogene dielektrische Schicht (mit einem Brechungsindex von 2,0) [200, 201], einen eindimensionalen Photonischen Kristall (PhK) (mit alternierenden Brechungsindizes von 1,7 und 2,0) [200], einen zweidimensionalen PhK und metallische Nanodrähte (rechteckiger Querschnitt mit einer Höhe von 30 nm und einer Breite vom 0,4-fachen ihrer Gitterkonstante) [202]. Weitere Details können den angegebenen Literaturstellen entnommen werden. Im Gegensatz zu realen Systemen wurde angenommen, dass alle Strukturen entlang einer lateralen Richtung invariant sind. Da aber alle relevanten physikalischen Mechanismen in der hiesigen Betrachtung enthalten sind, kann davon ausgegangen werden, dass die grundlegenden Schlussfolgerungen auch auf reale Systeme anwendbar sind. Um die lokalisierten Oberflächen-Plasmon-Polaritonen anregen und die Ergebnisse für die verschiedenen Zwischenreflektoren miteinander vergleichen zu können, wurde nur mit einer TM-polarisierten (magnetisches Feld ist parallel zur invarianten Richtung) ebenen Welle beleuchtet.

Zusätzlich wurde noch eine texturierte ZnO-Schicht zwischen der Antireflexbeschichtung und der aSi:H-Zelle implementiert. Die allen Berechnungen zugrunde liegende künstlich generierte Textur besitzt eine laterale Ausdehnung von 2700 nm und weist laterale Detailgrößen um ≈ 180 nm auf, die dem unteren Ende von hergestellten Texturen entsprechen [22]. Da im Falle des zweidimensionalen PhK oder der metallischen Nanopartikel dem Zwischenreflektor eine Periode Λ zugrunde liegt, wurden entsprechende Superzellen behandelt, welche eine laterale Ausdehnung von $N\Lambda$ hatten, wobei N der kleinsten natürlichen Zahl mit $2000 \text{ nm} \leq N\Lambda$ entspricht. Die generierte Textur wurde dann entsprechend gekürzt, sodass eine periodische Anordnung der Einheitszelle des Zwischenreflektors möglich war. Durch die spezielle Wahl von N ist sichergestellt, dass Einflüsse auf Grund der Periodizität der Superzelle im betrachteten Spektralbereich nahezu vernachlässigbar sind. Um noch verlässlichere Aussagen zu erhalten, wurden alle Untersuchungen für zwei verschiedene, künstlich generierte Texturen durchgeführt und die Ergebnisse im Anschluss gemittelt.

Zur Berechnung der elektromagnetischen Felder wurde die RCWA (siehe Abschnitt 2.5.3) mit 61 (im Falle der metallischen Nanodrähte 81) Fourierordnungen benutzt. Für die Berechnung der Absorptivitäten wurde die lokal absorbierte Leistung gemäß Gl. (4.1) auf das einfallende Feld normiert und über die Raumgebiete der einzelnen Zellen integriert, wobei größere, geeignete Raumgebiete mithilfe von Ober-

flächenintegralen zusammengefasst wurden [209], um den numerischen Aufwand zu reduzieren. Das texturierte ZnO wurde durch eine konstante reellwertige Brechzahl von 2,0 beschrieben, um eine unnötig verfrühte Beschränkung der Diskussion auf ein spezielles ZnO zu vermeiden. Zusätzlich durchgeführte Testrechnungen mit einer realen, dispersiven und komplexwertigen Permittivität belegten, dass die mit der Näherung eines nichtdispersiven Materials gezogenen Schlussfolgerungen ihre Gültigkeit behalten. Die spektral aufgelöste Permittivität von Silber [207] entstammte der Literatur. Im Anschluss an die Berechnung der Absorptionsspektren wurden die Kurzschlussstromdichten J_{SC} der einzelnen Zellen mithilfe des globalen Sonnenspektrums AM1.5g [125] gemäß Abschnitt 2.5.6 bestimmt.

Um den Einfluss der texturierten ZnO-Schicht auf die Tandemzelle zu evaluieren, wurde J_{SC} der aSi:H- und μcSi -Zelle für verschiedene maximale Modulationshöhen bestimmt. Zusätzlich wurde noch ein die spektrale Position der erhöhten Reflexion maßgeblich bestimmender Parameter variiert. Für die homogene ZnO-Schicht [Abb. 4.4 a)] und den eindimensionalen PhK [Abb. 4.4 b)] war dies deren Dicke, für den zweidimensionalen PhK [Abb. 4.4 c)] der Radius und im Falle der metallischen Nanodrähte [Abb. 4.4 d)] ihre Breite.

4.4.1 Photonischer Kristall als Zwischenreflektor

Der betrachtete zweidimensionale PhK besteht aus sechs Lagen von dielektrischen Zylindern der Brechzahl 4,0, die in einem Medium der Brechzahl 2,0 hexagonal angeordnet sind. Eine relativ breite Bandlücke wird mit diesem Brechzahlkontrast für ein Verhältnis von Zylinderdurchmesser zu Gitterkonstante von 0,48 erreicht [191]. Zur Vergegenwärtigung der spektralen Eigenschaften des PhK ist das Reflexionsspektrum als Funktion des Zylinderradius in Abb. 4.5 a) dargestellt, wobei für die beiden umgebenden Halbräume eine Brechzahl von 4,0 (entspricht ungefähr dem umgebenden Silizium) angenommen wurde. Mehrere Bandlücken können identifiziert werden, wobei sich ihre spektrale Position durch Verändern des Durchmessers der Zylinder einstellen lässt. Falls dieser PhK als Zwischenreflektor verwendet wird, kann erwartet werden, dass Licht mit Wellenlängen nahe der Bandlücken in die aSi:H-Zelle reflektiert wird.

Der Einfluss des PhK auf die beiden Zellen kann den beiden schwarzen Kurven in Abb. 4.5 b) entnommen werden, in welcher die Kurzschlussstromdichten der aSi:H-Zelle (durchgezogen) und der μcSi -Zelle (gestrichelt) in Abhängigkeit vom Zylinderradius für die unmodulierte Textur dargestellt sind. Für kleine Radien fungiert der PhK wie eine Schicht mit einem effektiven Brechungsindex, dessen Dicke proportional mit dem Radius wächst. Die Lage des spektralen Bereiches, in dem die

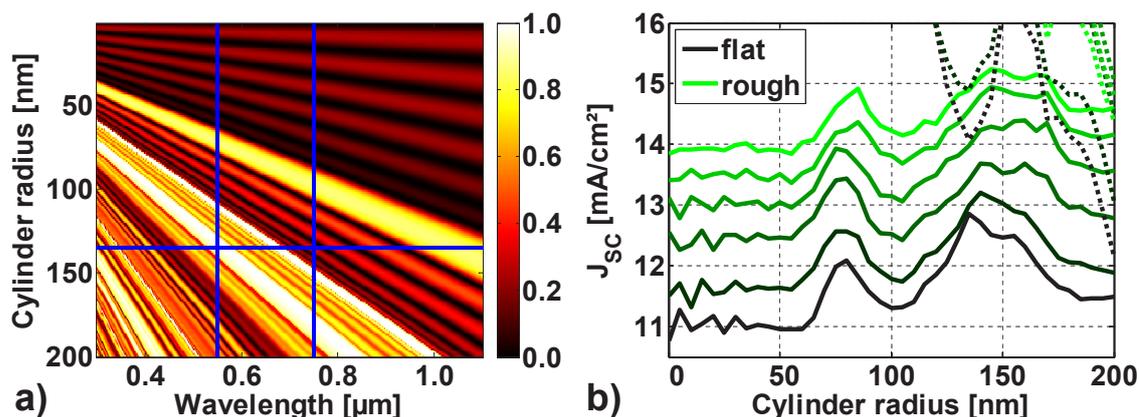


Abb. 4.5: a) Reflexionsspektrum von sechs Lagen dielektrischer Zylinder mit einer Brechzahl von 4,0, die in einem hexagonalen Gitter in einem Medium mit einer Brechzahl von 2,0 eingebettet sind. Die umgebenden Halbräume haben eine Brechzahl von 4,0. Das Verhältnis von Durchmesser zu Gitterkonstante beträgt 0,48. b) Kurzschlussstromdichten der aSi:H- (durchgezogen) und μcSi -Zelle (gestrichelt) für eine maximale Modulationshöhe, die von 0 nm (schwarz) auf 250 nm (grün) in 50 nm-Schritten variiert wurde. Der zweidimensionale PhK war implementiert.

Absorption in der aSi:H-Zelle durch Fabry-Perot-Resonanzen verstärkt wird, hängt somit direkt mit dem Radius zusammen [200, 210], wodurch die Oszillationen von J_{SC} der aSi:H-Zelle für kleine Radien erklärt werden.

Für einen Radius von 70 nm ist ein lokales Maximum zu erkennen. Der zugehörige Zwischenreflektor weist erhöhte Reflexion für Wellenlängen um 600 nm auf [siehe Abb. 4.5 a)]. Das ist der Spektralbereich, in dem die Absorptionslänge in aSi:H die Absorberdicke übersteigt. Für einen Radius von 135 nm wird jedoch eine noch größere Kurzschlussstromdichte erreicht, bei dem Bandlücken höherer Ordnung ausgenutzt werden. Die schwarze gestrichelte Linie repräsentiert die Kurzschlussstromdichte der μcSi -Zelle. Offenbar limitiert die aSi:H-Zelle für die untersuchten Zylinderradien die Tandemzelle. Für Radien größer als 150 nm verschieben sich die Bandlücken höherer Ordnung in den Spektralbereich oberhalb von 750 nm, sodass die Kurzschlussstromdichte der μcSi -Zelle absinkt.

Anschließend wurde die maximale Modulationshöhe vom planaren Fall (schwarz) in 50 nm-Schritten bis auf 250 nm (grün) variiert, wobei diese Ergebnisse auch in Abb. 4.5 b) dargestellt sind. Den Resultaten kann entnommen werden, dass die erreichbaren Kurzschlussstromdichten der aSi:H-Zelle mit steigender maximaler Modulationshöhe zunehmen. Dies erlaubt die Schlussfolgerung, dass sich die reflexionsmindernde und streuende Wirkung der texturierten Oberflächen mit der wellenlängenselektiven Reflexion eines Zwischenreflektors kombinieren lässt.

4.4.2 Vergleich der verschiedenen Zwischenreflektorkonzepte

Tab. 4.1: Zusammenfassung der erreichten Verbesserungen der Kurzschlussstromdichten der jeweiligen Zwischenreflektorkonzepte für den planaren Fall und eine maximale Modulationshöhe von 250 nm.

Konzept	ohne	ZnO-Schicht	1D PhK	2D PhK	Ag Nanodrähte
bei $h=0$ nm	1,00	1,07	1,12	1,16	1,19
bei $h=250$ nm	1,17	1,30	1,36	1,43	1,41

Für die anderen Zwischenreflektorkonzepte wurde analog zu dem hier im Detail dargestellten Fall des zweidimensionalen PhK verfahren. Die Tab. 4.1 fasst die mit den verschiedenen optimierten Zwischenreflektoren erreichten Verbesserungen der Kurzschlussstromdichte der Tandemzelle sowohl für den planaren Fall als auch für eine maximale Modulationshöhe von 250 nm zusammen. Die Verbesserungen beziehen sich dabei immer auf die untexturierte Tandemzelle, in die kein Zwischenreflektor implementiert wurde. Intuitiv können die untersuchten Zwischenreflektorkonzepte in lateral homogene und lateral inhomogene Strukturen unterteilt werden [211]. Die ZnO-Schicht und der eindimensionale PhK basieren auf homogenen Schichten, wohingegen der zweidimensionale PhK aus einzelnen Nanopartikeln aufgebaut ist, die in einem homogenen Medium eingebettet sind. Ebenso verhält es sich mit dem Zwischenreflektor, der auf den metallischen Nanodrähten basiert. Neben der spektral selektiven Reflexion wird das Licht auch in stärkerem Maße an den Einzelpartikeln gestreut, was zusätzlich die Absorption in der aSi:H-Zelle verbessert. Folglich erlauben derartige lateral inhomogene Zwischenreflektoren höhere Effizienzen.

An dieser Stelle sei noch speziell für den zweidimensionalen PhK erwähnt, dass der funktionale Zusammenhang zwischen der Kurzschlussstromdichte und dem Geometrieparameter des Zwischenreflektors für steigende maximale Modulationshöhen erhalten bleibt [siehe Abb. 4.5 b)]. Dies kann aber auch erwartet werden, da es sich bei der photonischen Bandlücke um eine vollständige Bandlücke handelt, die ergo auch für gestreutes Licht zu erhöhter Reflexion führt. Die Zunahme des gestreuten Lichtes mit verstärkter Modulation der Oberfläche führt somit zwangsläufig zu einer erhöhten Absorption in der aSi:H-Zelle und erlaubt somit verbesserte Effizienzen der Tandemzelle. Ähnliches konnte auch für den Zwischenreflektor, der auf eingebetteten metallischen Nanodrähten basiert, beobachtet werden. Hingegen für die homogene ZnO-Schicht und den eindimensionalen PhK führt eine stärkere Modulation der Oberfläche zu einer Verschmierung des funktionalen Zusammenhanges zwischen der Kurzschlussstromdichte und dem Geometrieparameter, da die spektrale Antwort dieser Zwischenreflektoren stärker vom Einfallswinkel abhängt.

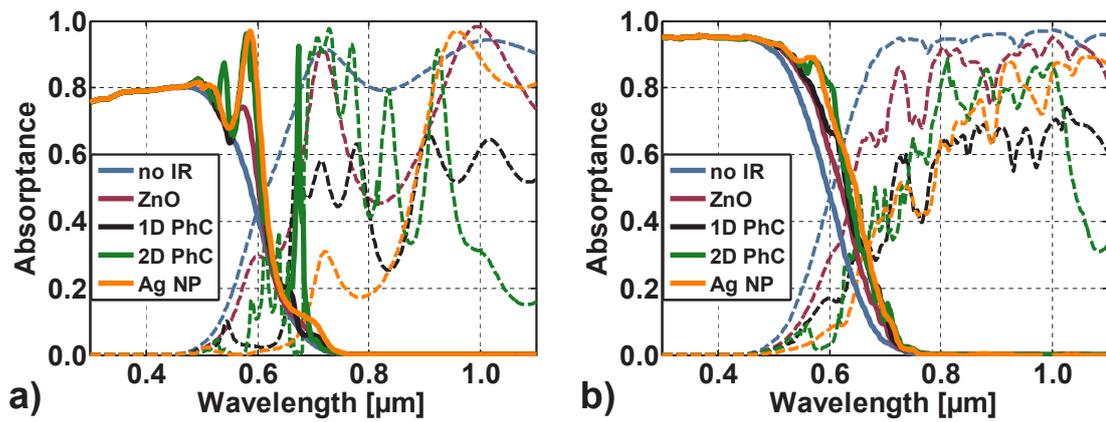


Abb. 4.6: **a)** Absorptionsspektren der aSi:H- (durchgezogene Linien) und der μ Si-Zelle (gestrichelt) für den planaren Fall, wobei verschiedene jeweils optimierte Zwischenreflektoren implementiert sind (blau - kein Zwischenreflektor, dunkelrot - homogene ZnO-Schicht, schwarz - eindimensionaler PhK, grün - zweidimensionaler PhK und orange - in ZnO eingebettete Nanodrähte aus Silber). **b)** Analog zu a), aber für eine maximale Modulationshöhe von 250 nm.

Abbildung 4.6 a) zeigt die Absorptionsspektren der aSi:H- (durchgezogene Linien) und der μ Si-Zelle (gestrichelt) für die jeweils optimierten Zwischenreflektoren im planaren Fall. Ausgangspunkt ist eine untexturierte planare Tandemzelle ohne einen Zwischenreflektor (blau). Im Spektralbereich unterhalb von 500 nm wird das eingekoppelte Licht komplett in der aSi:H-Zelle absorbiert. Für größere Wellenlängen nimmt die Absorptivität der aSi:H-Zelle immer mehr ab, bis sie schließlich bei ≈ 750 nm vernachlässigbar klein wird, während die Absorptivität des μ Si-Halbraums kontinuierlich zunimmt. Die Implementierung eines optimierten Zwischenreflektors führt offenbar zu einer Zunahme der Absorptivität der aSi:H-Zelle auf Kosten der Absorptivität der μ Si-Zelle bei Wellenlängen um 600 nm. In Abb. 4.6 b) sind die jeweils optimierten Absorptionsspektren für den Fall dargestellt, dass die zusätzliche texturierte ZnO-Schicht mit einer maximalen Modulationshöhe von 250 nm eingebracht ist. Im Vergleich mit 4.6 a) ergeben sich dabei zwei wichtige Änderungen. Zum einen ist die Absorptivität der aSi:H- und μ Si-Zelle breitbandig erhöht, da die Textur zu geringeren Einkoppelverlusten und zu verstärkter Streuung führt. Zum anderen ist die Verbesserung der Absorption im spektralen Bereich erhöhter Reflexion durch den Zwischenreflektor verschmiert, was sich in Form einer Rotverschiebung der Absorptionskante widerspiegelt – einem Effekt, der sich so auch in Experimenten wiederfindet. Dieses Verschmieren stellt sich in diesem Zusammenhang als eine generische Eigenschaft aller untersuchten Zwischenreflektorkonzepte heraus. Nach diesen Untersuchungen können folgende fünf Schlussfolgerungen gezogen werden.

1. Ausgehend von einer planaren Tandemzelle ohne Zwischenreflektor führt die Implementierung einer texturierten Oberfläche zu einer Steigerung der Kurz-

schlussstromdichten beider Zellen auf Grund von verbesserter Lichteinkopplung und verstärkter Streuung.

2. Obwohl die Details für die verschiedenen untersuchten Zwischenreflektorkonzepte variieren, lassen sich höhere Kurzschlussstromdichten in der aSi:H-Zelle auch durch einen geeignet angepassten Zwischenreflektor erreichen. Jedoch muss beim konkreten Design des Zwischenreflektors beachtet werden, dass eine hinreichende Lichteinkopplung in eine schlussendlich endlich dicke μcSi -Zelle gewährleistet sein muss [189].
3. Die Effizienz einer planaren Tandemzelle, die bereits einen Zwischenreflektor enthält, kann durch eine zusätzliche texturierte ZnO-Schicht gesteigert werden und eine texturierte Tandemzelle kann durch einen zusätzlichen Zwischenreflektor noch weiter verbessert werden.
4. In der Gegenwart von texturierten Oberflächen führt die Implementierung eines Zwischenreflektors zu einer Rotverschiebung der Absorptionskante der aSi:H-Zelle – etwaige resonante Effekte werden spektral verschmiert.
5. Im Vergleich mit nichtstreuenden ermöglichen streuende Zwischenreflektoren potentiell größere Verbesserungen der aSi:H-Zelle.

4.5 Invertierter Opal als Zwischenreflektor

Ein Ergebnis des vorangegangenen Abschnittes ist, dass inhomogene Zwischenreflektoren nicht nur von der Rückreflexion profitieren, sondern auch von der zusätzlichen Streuung an den Inhomogenitäten, sodass sich potentiell längere effektive Lichtwege ergeben. Entsprechend soll dieses Kapitel damit abgeschlossen werden, dass eine mikromorphe Tandemzelle untersucht werden soll, die sowohl texturierte Oberflächen als auch einen dreidimensionalen PhK als Zwischenreflektor beinhaltet [212]. Für das untersuchte Zellsystem werden dabei sowohl experimentelle als auch numerische Ergebnisse vorgestellt. Während im vorigen Abschnitt zweidimensionale Strukturen untersucht wurden, sind solche dreidimensionalen Strukturen schlussendlich relevant für die Implementierung in realen Solarzellen.

Der berücksichtigte dreidimensionale PhK basiert auf einem Opal, der aus einer kubisch-flächenzentrierten Anordnung von nominell identischen dielektrischen Kugeln besteht. Solche Opale lassen sich großflächig nahezu defektfrei und dabei mehrere Kugellagen dick aus kolloidalen Lösungen durch Verdunsten der Flüssigkeit herstellen [136, 139, 198]. Damit die Reflexion nicht durch parasitäre Streuung dominiert wird, ist ein nahezu perfektes Kristallwachstum unabdingbar [213], welches

durch eine gute Monodispersität der Kugeln [137] und durch möglichst langsames Wachstum erreicht wird. Tendenziell wächst der Kristall entlang der Raumdiagonalen der kubischen Einheitszellen (in der Kristallsprache ist dies die Γ -L- oder $\langle 1,1,1 \rangle$ -Richtung), sodass sich in der Draufsicht eine hexagonale Anordnung der Kugeln ergibt [136]. Durch Infiltrieren mit einem zweiten Material und Herauslösen der Kugeln [214] entsteht dann der invertierte Opal, wobei hierdurch auch eine gewisse Kontrolle über die Leitfähigkeit und den Indexkontrast entsteht. Dies hat insofern Auswirkungen, da sich zum Beispiel erst ab einem bestimmten Indexkontrast eine vollständige photonische Bandlücke [199, 215] bildet. Eine an dieser Stelle ausreichende, unvollständige, und damit richtungsselektive Bandlücke existiert jedoch schon zwischen den ersten beiden Bändern für Lichteinfall entlang der Γ -L-Richtung [197, 216, 217].

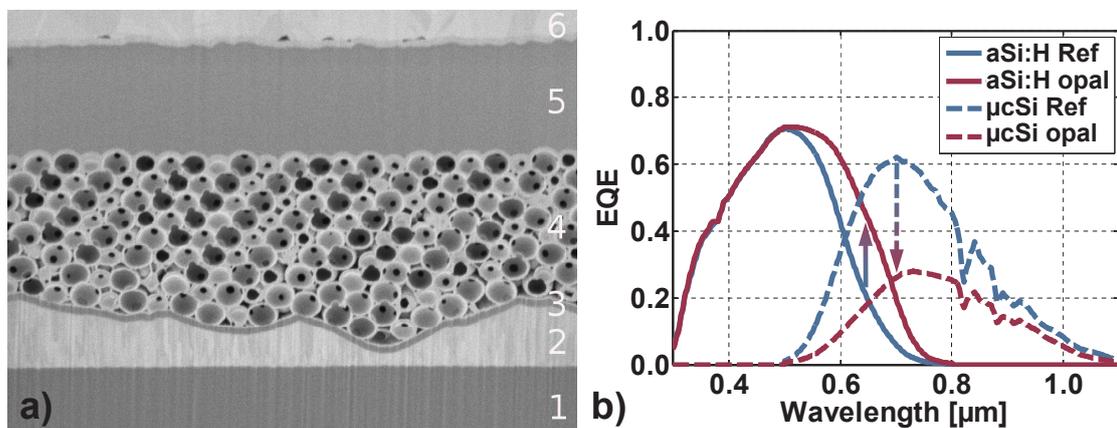


Abb. 4.7: a) Rasterelektronenstrahlmikroskopaufnahme eines Schnittes durch eine hergestellte mikromorphe Tandemzelle. Zu erkennen ist das planare Glassuperstrat (1), das texturierte ZnO (2), die aSi:H-Zelle (3), der invertierte Opal (4), die μ Si-Zelle (5) und der metallische Rückkontakt (6). b) Gemessene externe Quanteneffizienz EQE der beiden Zellen für den Fall des invertierten Opals (blau) und der Referenzzelle ohne Zwischenreflektor (dunkelrot).

Abbildung 4.7 a) zeigt einen Querschnitt einer hergestellten mikromorphen Tandemzelle, die mit einem PhK als Zwischenreflektor ausgestattet ist. Die Schritte zur Herstellung des invertierten Opals [218] müssen dabei kompatibel mit der bereits gefertigten aSi:H-Zelle sein, die auf einem texturierten ZnO-Superstrat [22] abgeschieden wurde. Eine Behandlung mit Sauerstoffplasma sorgte für die nötige hydrophile aSi:H-Oberfläche. In einem Dip-Coater wurde anschließend ein polykristalliner Opal aus PMMA-Kugeln bei einer Ziehgeschwindigkeit von $\approx 3,25$ mm pro Stunde gewachsen. Indem im nächsten Schritt die Probe für 3 Minuten auf 90°C erhitzt wurde, schmolzen die Kugeln lokal zusammen, sodass sich die mechanische Stabilität des Opals erhöhte. Das ZnO zur Invertierung des Opals wurde per Atomlagenabscheidung in Einzelschritten entlang der Kugeloberflächen deponiert. Durch

Variieren der Precursor während der Abscheidung kann die Dotierung des ZnO mit Aluminium und damit die Leitfähigkeit und der Absorptionskoeffizient entscheidend beeinflusst werden [219]. Abschließend wurde das PMMA entfernt und es verblieb der invertierte ZnO-Opal. Zur Komplettierung der Prozesskette wurde dann noch die μSi -Zelle und der metallische Rückkontakt gefertigt.

Die spektral gemessene externe Quanteneffizienz $EQE(\lambda)$ (siehe Abschnitt 2.5.6) der aSi:H- (durchgezogene Linien) und der μSi -Zelle (gestrichelt) ist in Abb. 4.7 b) dargestellt. Zum Vergleich sind auch noch Werte der Referenzzelle gezeigt, bei der die μSi -Zelle ohne einen Zwischenreflektor direkt auf die aSi:H-Zelle folgt. Unterhalb von ≈ 500 nm sind keine Unterschiede zu verzeichnen, da das einfallende Licht bereits auf dem ersten Weg durch die aSi:H-Zelle absorbiert wird. Im Spektralbereich zwischen 500 und 750 nm führt offenbar der invertierte Opal zu einer erhöhten Absorption in der aSi:H-Zelle. Die $EQE(\lambda)$ der μSi -Zelle ist jedoch im gesamten Spektralbereich verglichen mit der Referenzzelle geringer. Integriert ergibt sich eine um den Faktor von 1,26 verbesserte Kurzschlussstromdichte der aSi:H-Zelle und eine auf 46 % verschlechterte Kurzschlussstromdichte der μSi -Zelle.

4.5.1 Verbesserung der Absorption der μSi -Zelle

Der Durchmesser der Kugeln beträgt ungefähr 300 nm und ist so gewählt, dass das erste photonische Stopband bei ≈ 650 nm liegt. Licht mit größeren Wellenlängen ist dann nicht mehr in der Lage, einzelne Kugeln aufzulösen und entsprechend kann der PhK in guter Näherung durch einen effektiven Brechungsindex beschrieben werden. Da der invertierte Opal einen großen Volumenanteil von Luft (77,7% [220]) besitzt, ist der zuweisbare effektive Brechungsindex recht klein (nahe 1). Dadurch sind beim Übergang vom aSi:H in den Zwischenreflektor und aus ihm heraus in das μSi hohe Reflexionsverluste zu erwarten. Prinzipiell lassen sich Reflexionen an den Grenzen von PhK verringern, indem der PhK adiabatisch in den Außenraum übergeht [221]. Für die Implementierung in Dünnschichtsolarzellen ist diese Methode allerdings zu aufwendig. Näherungsweise lässt sich der adiabatische Übergang aber auch durch eine einfache homogene dielektrische Schicht realisieren. Als Material bietet sich hierfür ZnO an, da die Brechzahl in der richtigen Größenordnung liegt und die Herstellung einer ZnO-Schicht problemlos in die bestehende Prozesskette integriert werden kann. Im Folgenden wird das Potential solcher ZnO-basierten Schichten zur Verbesserung der optischen Kopplung zwischen dem invertierten Opal und den angrenzenden Zellen offengelegt.

In einer ersten Untersuchung wurde der Durchmesser der Kugeln des invertierten Opals bezüglich einer maximalen Kurzschlussstromdichte der aSi:H-Zelle optimiert.

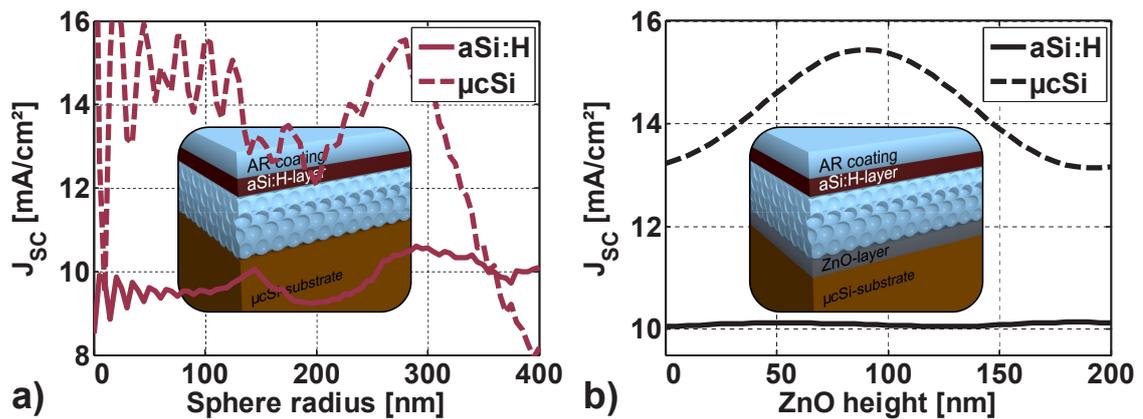


Abb. 4.8: a) Die Inselgraphik zeigt die untersuchte mikromorphe Tandemzelle, in die ein invertierter Opal als Zwischenreflektor eingebettet ist. Der Graph zeigt die berechnete Kurzschlussstromdichte J_{SC} der beiden Zellen für verschiedenen Kugelradien. b) Es wurde eine zusätzliche ZnO-Schicht implementiert. Der Graph zeigt die Kurzschlussstromdichte J_{SC} über der ZnO-Dicke.

Eine Darstellung des betrachteten Systems ist in der Inselgraphik in Abb. 4.8 a) zu sehen. Zur Vereinfachung des numerischen Aufwandes wurde die texturierte ZnO-Schicht weggelassen und von einer planaren 350 nm dicken aSi:H-Zelle ausgegangen, die von einem oberen Halbraum begrenzt war, der durch eine Brechzahl von 2,0 charakterisiert wurde. Für die Beleuchtung wurde eine ebene Welle angenommen. Der invertierte Opal bestand aus 10 Kugellagen. Der Einfluss störender Reflexionen an der Rückseite der μcSi -Zelle wurde unterbunden, indem stattdessen ein unendlicher Halbraum aus μcSi betrachtet wurde. Die elektromagnetischen Felder wurden unter Verwendung der RCWA (siehe Abschnitt 2.5.3) mit 11×11 Fourierordnungen berechnet. Darauf aufbauend wurde die lokale Absorption gemäß Gl. (4.1) bestimmt und durch geeignete Oberflächenintegrale die Absorptivität jeder Zelle berechnet. Anschließend wurde gemäß Abschnitt 2.5.6 die jeweilige Kurzschlussstromdichte J_{SC} mithilfe des globalen Sonnenspektrums AM1.5g [125] berechnet.

Der Graph in Abb. 4.8 a) zeigt J_{SC} der aSi:H- (durchgezogene Linie) und der μcSi -Zelle (gestrichelt) als Funktion des Kugelradius. Für einen verschwindenden Kugelradius ergibt sich ein J_{SC} der aSi:H-Zelle von $8,5 \text{ mA/cm}^2$. Für Radien unterhalb von 100 nm sind die Strukturdetails des PhK deutlich kleiner als die relevanten Wellenlängen. Entsprechend führt ein größerer Radius nur zu einer Steigerung der Dicke dieser effektiven Schicht, welche auf Grund des hohen Brechzahlkontrastes an den Siliziumgrenzflächen einen Fabry-Perot-Resonator bildet. Dabei führt eine Dickenänderung zu einer spektralen Verschiebung der Antiresonanzen, die durch erhöhte Reflexion gekennzeichnet sind, und in der Folge zu den beobachtbaren Oszillationen von J_{SC} über dem Kugelradius [200]. Bei einem Radius von 145 nm kommt es zu einem lokalen Maximum von $10,1 \text{ mA/cm}^2$, welches auf der erhöhten Reflexi-

on auf Grund der Bandlücke zwischen den ersten beiden Bändern in Γ -L-Richtung basiert. Bei einem Kugelradius von 290 nm existiert ein weiteres Maximum für die Kurzschlussstromdichte der aSi:H-Zelle von $10,6 \text{ mA/cm}^2$, bei dem höhere Bandlücken ausgenutzt werden. Allerdings zeigte sich, dass hierfür deutlich dickere μSi -Zellen nötig sind, um noch eine Stromanpassung beider Zellen zu gewährleisten. Folglich sollen hier im Detail nur die Ergebnisse für einen optimierten Kugelradius von 145 nm dargestellt werden.

Für diesen Fall liefert die unendlich dicke μSi -Zelle ein J_{SC} von $13,2 \text{ mA/cm}^2$. Um diesen Wert zu verbessern und somit dünnere und folglich kostengünstigere μSi -Zellen zu ermöglichen, wurde zwischen dem invertierten Opal und der μSi -Zelle eine ZnO-Schicht mit einer Brechzahl von 2,0 eingefügt [siehe Inselgraphik in Abb. 4.8 b)]. Die Kurzschlussstromdichte der aSi:H- und der μSi -Zelle wurden dann als Funktion der Dicke der ZnO-Schicht berechnet. Der Graph in Abb. 4.8 b) zeigt die berechnete Kurzschlussstromdichte J_{SC} der beiden Zellen über der Dicke der zusätzlichen ZnO-Schicht. Offenbar hat diese Schicht nur einen geringen Einfluss auf J_{SC} der aSi:H-Zelle (durchgezogene Linie), welches sich nahezu konstant um $10,1 \text{ mA/cm}^2$ bewegt. Anders ist es bei der μSi -Zelle (gestrichelt), bei der die optische Kopplung zwischen dem invertierten Opal und der μSi -Zelle verbessert und J_{SC} auf das Maximum von $15,4 \text{ mA/cm}^2$ durch eine 90 nm dicke ZnO-Schicht gesteigert werden kann.

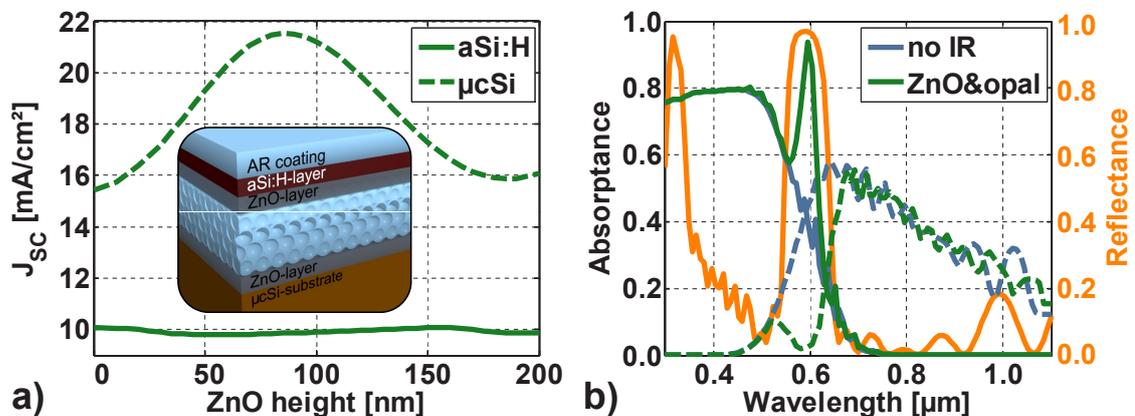


Abb. 4.9: a) Kurzschlussstromdichte J_{SC} der Zelle, die um eine zusätzliche ZnO-Schicht zwischen der aSi:H-Zelle und dem invertierten Opal erweitert wurde (siehe Inselgraphik). Die untere ZnO-Schicht war 90 nm dick. b) Absorptionsspektren der aSi:H- und μSi -Zelle für den Fall, dass kein Zwischenreflektor (blau) und dass ein invertierter Opal (grün), der von optimierten ZnO-Schichten umgeben ist, implementiert ist. Zusätzlich ist noch das Reflexionsspektrum des zweitgenannten Zwischenreflektors dargestellt (orange), wobei für das Ein- und Ausfallsmedium jeweils eine Brechzahl von 4,0 angenommen wurde.

Motiviert durch dieses positive Resultat wurde in einem weiteren Schritt noch eine zweite ZnO-Schicht zwischen der aSi:H-Zelle und dem invertierten Opal eingebettet [siehe Inselgraphik in Abb. 4.9 a)], wobei die Dicke der unteren ZnO-Schicht auf

90 nm gesetzt wurde. Auch hierfür wurde wieder die Kurzschlussstromdichte J_{SC} der beiden Zellen als Funktion der Dicke der ZnO-Schicht berechnet, wobei die Ergebnisse im Graphen in Abb. 4.9 a) dargestellt sind. Durch den Einsatz der zweiten ZnO-Schicht lässt sich J_{SC} der μSi -Zelle weiter auf $21,5 \text{ mA/cm}^2$ für eine ZnO-Dicke von 85 nm steigern. Der Natur der verbesserten optischen Kopplung zwischen dem invertierten Opal und den Siliziumgrenzen geschuldet, wird nunmehr insgesamt weniger Licht zurück zur aSi:H-Zelle reflektiert. Entsprechend sinkt J_{SC} der aSi:H-Zelle durch Implementieren der beiden optimierten ZnO-Schichten von ursprünglich $10,1 \text{ mA/cm}^2$ auf nunmehr $9,9 \text{ mA/cm}^2$.

In einem weiteren Schritt der Evaluierung dieser zusätzlichen ZnO-Schichten wurde für die hier diskutierten Fälle die jeweilige Dicke der μSi -Zelle bestimmt, die zur Stromanpassung nötig ist. Ohne einen Zwischenreflektor waren dies nur 800 nm. Allerdings beträgt dabei die gemeinsame Kurzschlussstromdichte auch nur $8,9 \text{ mA/cm}^2$. Dieser Wert kann um 11 % gesteigert werden, indem ein Opal implementiert wird, der durch einen Kugelradius von 145 nm charakterisiert ist. Jedoch steigt dadurch die benötigte μSi -Dicke auf 3000 nm. Falls auch noch die beiden ZnO-Schichten eingefügt werden, sind nur noch 1400 nm μSi erforderlich, wobei J_{SC} weiterhin um 11 % auf $10,1 \text{ mA/cm}^2$ erhöht werden kann.

Zur besseren Diskussion sind noch einige Absorptionsspektren in Abb. 4.9 b) dargestellt. Die grünen Kurven entsprechen dem Fall, in dem der Opal zusammen mit den beiden optimierten ZnO-Schichten implementiert war und die μSi -Zelle 1400 nm dick ist – beide Zellen also stromangepasst sind. Deutlich ist eine Absorptionserhöhung bei einer Wellenlänge von $\approx 600 \text{ nm}$ zu erkennen. Zum Vergleich zeigen die blauen Kurven die Absorptionsspektren für den Fall, dass kein Zwischenreflektor vorhanden ist und die μSi -Zelle immernoch 1400 nm dick ist. Dies entspricht zwar nicht dem Fall der Stromanpassung, jedoch erlaubt diese Dickenwahl einen direkten Vergleich der beiden Konzepte im gesamten Spektralbereich. Für Wellenlängen unterhalb von 500 nm wird jegliches einfallendes Licht in der aSi:H-Zelle unabhängig von der Wahl des Zwischenreflektors absorbiert, sodass hier die grünen mit den blauen Kurven übereinstimmen. Im Spektralbereich um 600 nm profitiert die Tandemzelle mit dem Opal von der verbesserten Reflexion insofern, als dass nun im Vergleich zur Referenzzelle mehr Licht in der aSi:H-Zelle und entsprechend weniger Licht in der μSi -Zelle absorbiert wird. Wegen der verbesserten optischen Kopplung zwischen dem invertierten Opal und den beiden Zellen sind im langwelligen Spektralbereich erneut keine signifikanten Unterschiede zwischen den Spektren der jeweiligen Zellen zu erkennen.

Zusätzlich wurden auch noch die reinen optischen Eigenschaften eines invertierten Opals betrachtet, der zwischen die beiden optimierten ZnO-Schichten einge-

bettet war. Für das Superstrat und Substrat wurde eine angepasste Brechzahl von 4,0 gewählt, um den Übergang zwischen den Zellen und dem Zwischenreflektor mit einzubeziehen. Das so berechnete Reflexionsspektrum ist ebenfalls in Abb. 4.9 b) dargestellt (orange). Offenbar fällt der spektrale Bereich erhöhter Reflektivität mit dem der verbesserten Absorption in der aSi:H-Zelle zusammen. Die niedrige Reflektivität bei höheren Wellenlängen lässt auf eine breitbandig verbesserte optische Kopplung zwischen den Siliziumzellen und dem invertierten Opal schließen, wobei die Ursache in der Anwesenheit der ZnO-Schichten zu suchen ist.

4.5.2 Numerische Validierung an realen Strukturen

Die hier beschriebenen Zellen wurden von Partnern auch experimentell untersucht. Dazu wurde eine aSi:H-Schicht homogen auf eine texturierte ZnO-Schicht abgeschieden. Auf das aSi:H wurde anschließend ein Opal gewachsen und mit ZnO invertiert. Von dieser Probe wurden mit einem fokussierten Ionenstrahl dünne Streifen abgetragen, sodass nach jedem Schnitt der Querschnitt mit einem Rasterelektronenstrahlmikroskop aufgenommen werden konnte. Insgesamt wurde aus der Probe ein Quader mit einer Grundfläche von $4,9 \mu\text{m} \times 4,5 \mu\text{m}$ und einer Höhe von $5,0 \mu\text{m}$ aufgezeichnet. Aus den einzelnen Aufnahmen der Querschnitte wurden die dreidimensionalen Profile der Grenzen der aSi:H-Schicht bestimmt. Als Referenz diente dabei die Glas-ZnO-Grenzfläche, die als planar angenommen wurde. Die Koordinaten der Kugelzentren wurden mit einer verallgemeinerten Hough-Transformation bestimmt [222]. Um die einzelnen Querschnitte passend hintereinander anordnen zu können, wurde sich am gemittelten Kristallgitter der Kugeln orientiert. Die rekonstruierte Geometrie der Probe ist in Abb. 4.10 a) dargestellt, wobei als Substrat nachträglich eine μcSi -Zelle eingefügt wurde. Aus der Analyse der Kugelpositionen ergab sich, dass die Kugeln in den ersten zwei bis drei Lagen auf Grund der Textur amorph angeordnet sind, wobei dabei auch größere Freiräume zu verzeichnen sind [218]. Je mehr Lagen abgeschieden wurden, desto eher wurde das kubisch-flächenzentrierte Gitter favorisiert, bei dem sich die Kugeln in den einzelnen Lagen hexagonal anordnen.

Diese Schritte hatten das Ziel, die vollständige dreidimensionale Struktur mit allen Defekten in einer numerischen Simulation abbilden zu können. Zur rigorosen Berechnung des elektromagnetischen Feldes wurde die FDTD-Methode (siehe Abschnitt 2.5.2) herangezogen. Entlang der lateralen Richtungen wurden periodische Randbedingungen angenommen, wobei in vertikaler Richtung sogenannte *perfectly matched layers* [223, 224] verwendet wurden. Die Diskretisierung des Raumes erfolgte mit einer Auflösung von $\approx 8 \text{ nm}$. Die gewählten Brechzahlen für das Glassuperstrat, das ZnO des Opals und das ZnO der Textur betragen in dieser Reihenfolge: 1,5, 1,7

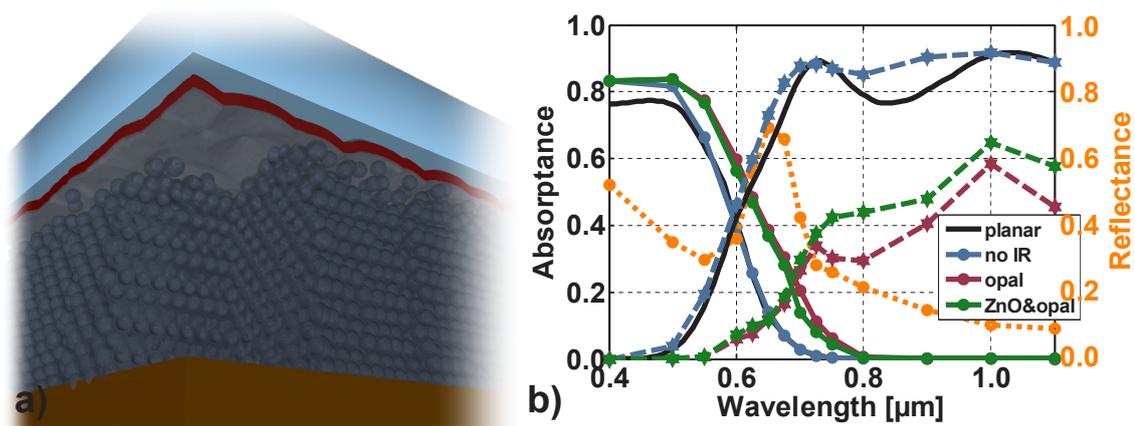


Abb. 4.10: a) Dreidimensionale Rekonstruktion eines auf einer texturierten aSi:H-Zelle gefertigten invertierten Opals. b) Zugehörige berechnete Absorptionsspektren der aSi:H- und μcSi -Zelle für verschiedene Szenarien: kein Zwischenreflektor (blau) oder der invertierte Opal ohne (dunkelrot) und mit zusätzlichen ZnO-Schichten (grün). Zusätzlich ist noch das Reflexionsspektrum des invertierten Opals gezeigt (orange), wenn er von zwei Halbräumen aus ZnO umgeben wäre.

und 1,94 und entsprechen damit exemplarisch gemessenen Werten. Die Absorptivität der aSi:H-Zelle wurde berechnet, indem der zeitlich gemittelte Poyntingvektor entlang einer Ebene im Glassuperstrat und einer Ebene zwischen der aSi:H- und der μcSi -Zelle integriert wurde und das Ergebnis auf das einfallende Feld normiert wurde. Aus dem Flächenintegral entlang der zweitgenannten Ebene konnte auch die Absorptivität der μcSi -Zelle bestimmt werden.

Die berechneten Absorptionsspektren der aSi:H-(durchgezogen) und μcSi -Zelle (gestrichelt) sind in Abb. 4.10 b) dargestellt. Dabei wurden verschiedene Zwischenreflektorkonzepte untersucht. Ausgangspunkt ist eine untexturierte Tandemzelle ohne Zwischenreflektor (schwarz). Auch hier offenbart sich erneut, dass durch Texturieren der ZnO-Schicht (blau) die Lichteinkopplung breitbandig verbessert werden kann. In einem weiteren Schritt wurde der rekonstruierte invertierte Opal implementiert (dunkelrot), wodurch eine deutliche Steigerung der Absorptivität der aSi:H-Zelle zwischen 550 und 700 nm zu verzeichnen ist. Dem gegenüber steht die schon im Experiment [siehe Abb. 4.7 b)] beobachtbare Verschlechterung der Absorptivität der μcSi -Zelle im gesamten langwelligen Spektralbereich. Zusätzlich wurde noch das Reflexionsspektrum (orange) des invertierten Opals berechnet, wobei für das Superstrat ein ZnO-Halbraum mit der vermessenen Oberflächentextur und für das Substrat ein ZnO-Halbraum angenommen wurde. Obwohl der invertierte Opal auf einer texturierten Oberfläche gewachsen ist und nahe dem Superstrat Kugeln unregelmäßig angeordnet sind, ist ein Reflexionspeak zu verzeichnen, dessen spektrale Lage mit der photonischen Bandlücke des ungestörten Kristalls zusammenfällt. Somit kann geschlussfolgert werden, dass ein invertierter Opal als spektral selektiver

Zwischenreflektor in mikromorphen Tandemzellen eingesetzt werden kann.

Die durch den Einsatz des invertierten Opals reduzierte Absorptivität der μcSi -Zelle muss jedoch auch hier zwingend gesteigert werden. Deswegen wurde zusätzlich noch der Fall untersucht, bei dem die beiden für den untexturierten Fall optimierten ZnO-Schichten implementiert wurden (grün). Wie auch schon für den untexturierten Fall zu beobachten war, kann die Absorptivität der μcSi -Zelle gesteigert werden, wobei durch den Einsatz der beiden zusätzlichen ZnO-Schichten die Absorptivität der aSi:H-Zelle und damit die Reflektivität des Zwischenreflektors nahezu unverändert bleibt. Damit konnte gezeigt werden, dass sich auch im texturierten und damit defektbehafteten Fall die Reflektivität eines auf einem PhK basierenden Zwischenreflektors im langwelligen Spektralbereich oberhalb der photonischen Bandlücke durch die Implementierung zusätzlicher dielektrischer Schichten reduzieren lässt.

4.6 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde argumentiert, dass durch die Implementierung eines spektral selektiven Zwischenreflektors in eine mikromorphe Tandemzelle die Anzahl der in der aSi:H-Zelle absorbierten Photonen und somit der Wirkungsgrad erhöht werden kann. Im einfachsten Fall wird dafür eine TCO-Schicht verwendet, allerdings ist dann die maximale Reflektivität durch den Brechzahlkontrast an den TCO-Silizium-Grenzflächen limitiert. Eine höhere Reflektivität lässt sich durch die zusätzliche Implementierung von geeignet proportionierten metallischen Nanopartikeln erreichen. Dabei besteht nahezu freie Kontrolle über die spektralen Eigenschaften, da sich die spektrale Lage des Reflexionsbandes durch Anpassen der Form und Größe der Nanopartikel einstellen lässt und über den mittleren Abstand eine nachträgliche Kontrolle über die maximale Reflektivität besteht. Des Weiteren konnte anhand von zweidimensionalen Untersuchungen gezeigt werden, dass der Wirkungsgrad in einer Tandemzelle, die sowohl texturierte Oberflächen als auch einen angepassten Zwischenreflektor enthält, höher ausfällt, als wenn nur eine dieser beiden Maßnahmen des Photon-Managements vertreten ist. Diese Ergebnisse konnten an einer realen Tandemzelle, deren dreidimensionale Struktur rekonstruiert wurde, bestätigt werden, wobei als Zwischenreflektor ein invertierter Opal fungierte. Sowohl experimentell als auch numerisch zeigte sich jedoch, dass durch den Einsatz des invertierten Opals die Absorption in der μcSi -Zelle verringert wird. Numerisch konnte daraufhin für den planaren und den texturierten Fall gezeigt werden, dass diese Verschlechterung teilweise durch den Einsatz von zusätzlichen homogenen ZnO-Schichten an den Silizium-Opal-Grenzflächen kompensiert werden kann.

5 Zusammenfassung und Ausblick

Die Welt hat genug für jedermanns Bedürfnisse,
aber nicht für jedermanns Gier.

(Mahatma Gandhi)

In dieser Arbeit wurden Maßnahmen vorgestellt, die die Ausbreitung des einfallenden Lichtes derart modifizieren, dass dadurch der Wirkungsgrad von Dünnschicht-Solarzellen gesteigert wird. Die Stärke der vorgestellten numerischen Untersuchungen liegt dabei in der rigorosen Lösung der Maxwell'schen Gleichungen, welche die Analyse realer Systeme ohne Approximationen erlaubt. Um allgemeine Aussagen treffen zu können, wurde die Simulation der elektronischen Prozesse unterlassen, weil ansonsten eine zu starke Fokussierung auf eine konkrete Solarzelle zu befürchten wäre.

In der vorliegenden Arbeit konnten fundamentale Aussagen bezüglich der Ausgestaltung einer idealen Textur getroffen werden, welche für gegenwärtige Dünnschicht-Solarzellen über den gesamten relevanten Spektralbereich sowohl Reflexionsverluste unterdrückt als auch zu einer Verlängerung des effektiven Weges führt.

Gegenstand der Arbeit war auch der Entwurf eines spektral- und winkelselektiven Filters, der den Akzeptanzwinkel einer Solarzelle mit dem Ziel einer verbesserten Absorption im langwelligen Spektralbereich einschränkt. Hierfür konnte erstmals eine Struktur vorgeschlagen werden, die theoretisch eine Steigerung des Wirkungsgrades erlaubt. Die Schwierigkeit bestand neben dem Erreichen der gewünschten Filterfunktion auch darin, den Wirkungsgrad der bestehenden Solarzelle nicht durch eine zu geringe Einkopplung übermäßig zu verschlechtern.

Im weiteren Verlauf wurden auch Tandemzellen auf der Basis von amorphem und mikrokristallinem Silizium untersucht. Bei diesen ist die Implementierung eines Zwischenreflektors ein probates Mittel zur Steigerung des Wirkungsgrades. In diesem Zusammenhang wurde die Verwendung von metallischen Nanopartikeln zur Realisierung der gewünschten spektral selektiven Reflektivität angeregt. Des Weiteren konnte auch gezeigt werden, dass sich die Vorzüge von texturierten Oberflächen mit dem Konzept der Zwischenreflektoren vereinen und in Kombination beider Maßnahmen höhere Wirkungsgrade erzielen lassen, als wenn nur eine dieser Komponenten implementiert ist.

Einen weiter wachsenden Photovoltaikmarkt vorausgesetzt, wird sich der Ein-

satz numerischer Verfahren immer weiter etablieren. Zum einen, um optimale Mikrostrukturen zu identifizieren und zum anderen, um elektrische und optische Simulation miteinander zu verbinden. Dieser Schritt wird seine Bedeutung erlangen, sobald es ökonomisch sinnvoll ist, Solarzellen an die spektralen Gegebenheiten einzelner geographischer Regionen anzupassen, beispielweise bezüglich der geometrischen Details der Mikrostrukturen, der Dotierung und Dicke der einzelnen Schichten, der optischen und elektronischen Eigenschaften des Ausgangsmaterials und der Ausgestaltung der metallischen Kontakte. In diesem Zusammenhang ist die Ausweitung der hier dargestellten Untersuchungen auch auf alternative Zellsysteme, beispielsweise organische Solarzellen, denkbar.

Für auf Silizium basierende Dünnschicht-Solarzellen ist kein Mangel am Ausgangsmaterial zu erwarten, sodass mit diesen eine ökologisch verträgliche Energieversorgung möglich scheint. Allerdings steht immer wieder der Wert von 10% für den minimalen Wirkungsgrad eines Moduls, damit der Strompreis unter Beachtung der Kosten des Komplettsystems, welches neben den Modulen auch Gleichrichter und Speichertechniken beinhaltet, mit dem Strompreis fossiler Energielieferanten vergleichbar ist. Eine Grundvoraussetzung zur Erreichung dieses Zieles ist ein fundamentales Verständnis darüber, wie die Absorption innerhalb der Solarzelle verbessert werden kann. Mit der vorliegenden Arbeit hoffe ich dazu beigetragen zu haben.

Falls sich die bisherigen optischen Ansätze, deren Ziele sich auf die Maximierung der Absorption reduzieren lassen, als unzureichend erweisen sollten, wird sicherlich noch die spektrale Modifikation des Sonnenspektrums eine Rolle spielen. Insbesondere im Zusammenspiel von Farbzentren mit Nanopartikeln ergibt sich ein großes Verwertungspotential – es stellen sich aber auch die Fragen nach der korrekten Beschreibung des Farbzentrums bis hin zur Optimierung einer Solarzelle, in der Absorber, Nanopartikel und Farbzentren miteinander wechselwirken.

Literaturverzeichnis

Bei den Chemikern ist das Problem
immer die Lösung.

(Klaus Klages)

- [1] J. Barber, "Biological solar energy," *Philos. Trans. R. Soc. A-Math. Phys. Eng. Sci.* **365**(1853), 1007–1023 (2007).
- [2] L. Reijnders and M. A. J. Huijbregts, "Life cycle greenhouse gas emissions, fossil fuel demand and solar energy conversion efficiency in European bioethanol production for automotive purposes," *J. Clean Prod.* **15**(18), 1806–1812 (2007).
- [3] Q. Schiermeier, J. Tollefson, T. Scully, A. Witze, and O. Morton, "Energy alternatives: Electricity without carbon," *Nature* **454**(7206), 816–823 (2008).
- [4] J. Nelson, *The physics of solar cells* (Imperial College Press, 2003).
- [5] D. M. Chapin, C. S. Fuller, and G. L. Pearson, "A New Silicon p-n Junction Photocell for Converting Solar Radiation into Electrical Power," *J. Appl. Phys.* **25**(5), 676–677 (1954).
- [6] M. A. Green, "Photovoltaics: coming of age," *Conference Record of the Twenty First IEEE Photovoltaic Specialists Conference, Kissimmee* **1**, 1–8 (1990).
- [7] M. A. Green, "The future of crystalline silicon solar cells," *Prog. Photovoltaics* **8**(1), 127–139 (2000).
- [8] B. A. Sandén, "Solar solution: the next industrial revolution," *Materials Today* **11**(12), 22–24 (2008).
- [9] A. V. Shah, H. Schade, M. Vanecek, J. Meier, E. Vallat-Sauvain, N. Wyrsh, U. Kroll, C. Droz, and J. Bailat, "Thin-film Silicon Solar Cell Technology," *Prog. Photovoltaics* **12**(2), 113–142 (2004).
- [10] P. Würfel, *Physics of Solar Cells: From Principles to New Concepts* (WILEY-VCH, 2005).
- [11] M. A. Green, *Third Generation Photovoltaics: Advanced Solar Energy Conversion* (Springer, 2006).
- [12] M. C. Beard, K. P. Knutsen, P. Yu, J. M. Luther, Q. Song, W. K. Metzger, R. J. Ellingson, and A. J. Nozik, "Multiple Exciton Generation in Colloidal Silicon Nanocrystals," *Nano Lett.* **7**(8), 2506–2512 (2007).

-
- [13] G. Kirchhoff, "Ueber das Verhältniss zwischen dem Emissionsvermögen und dem Absorptionsvermögen der Körper für Wärme und Licht," *Ann. Phys.* **185**(2), 275–301 (1983).
- [14] W. Shockley and W. T. Read, "Statistics of the Recombinations of Holes and Electrons," *Phys. Rev.* **87**(5), 835–842 (1952).
- [15] R. N. Hall, "Electron-Hole Recombination in Germanium," *Phys. Rev.* **87**(2), 387–387 (1952).
- [16] S. R. Wenham, C. B. Honsberg, and M. A. Green, "Buried contact silicon solar cells," *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **34**(1-4), 101–110 (1994).
- [17] D. Dominé, P. Buehlmann, J. Bailat, A. Billet, A. Feltrin, and C. Ballif, "Optical management in high-efficiency thin-film silicon micromorph solar cells with a silicon oxide based intermediate reflector," *phys. stat. sol. (RRL)* **2**(4), 163–165 (2008).
- [18] F.-J. Haug, T. Söderström, O. Cubero, V. Terrazzoni-Daudrix, and C. Ballif, "Plasmonic absorption in textured silver back reflectors of thin film solar cells," *J. Appl. Phys.* **104**(6), 064509 (2008).
- [19] F.-J. Haug, T. Söderström, O. Cubero, V. Terrazzoni-Daudrix, and C. Ballif, "Influence of the ZnO buffer on the guided mode structure in Si/ZnO/Ag multilayers," *J. Appl. Phys.* **106**(3), 044502 (2009).
- [20] W. Beyer, J. Hüpkes, and H. Stiebig, "Transparent conducting oxide films for thin film silicon photovoltaics," *Thin Solid Films* **516**(2-4), 147–154 (2007).
- [21] V. Fthenakis, "Sustainability of photovoltaics: The case for thin-film solar cells," *Renew. Sust. Energ. Rev.* **13**(9), 2746–2750 (2009).
- [22] O. Kluth, B. Rech, L. Houben, S. Wieder, G. Schöpe, C. Beneking, H. Wagner, A. Löffl, and H. W. Schock, "Texture etched ZnO:Al coated glass substrates for silicon based thin film solar cells," *Thin Solid Films* **351**(1-2), 247–253 (1999).
- [23] C. Beneking, B. Rech, S. Wieder, O. Kluth, H. Wagner, W. Frammelsberger, R. Geyer, P. Lechner, H. Rübel, and H. Schade, "Recent developments of silicon thin film solar cells on glass substrates," *Thin Solid Films* **351**(1-2), 241–246 (1999).
- [24] S. Nicolay, M. Despeisse, F. J. Haug, and B. Ballif, "Control of LPCVD ZnO growth modes for improved light trapping in thin film silicon solar cells," *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **95**(3), 1031–1034 (2011).
- [25] S. Fay, J. Steinhauser, N. Oliveira, E. Vallatsauvain, and C. Ballif, "Optoelectronic properties of rough LP-CVD ZnO:B for use as TCO in thin-film silicon solar cells," *Thin Solid Films* **515**(24), 8558–8561 (2007).
- [26] J. Müller, B. Rech, J. Springer, and M. Vanecek, "TCO and light trapping in silicon thin film solar cells," *Sol. Energy* **77**(6), 917–930 (2004).

- [27] M. A. Green, "Crystalline and thin-film silicon solar cells: state of the art and future potential," *Sol. Energy* **74**(3), 181–192 (2003).
- [28] M. J. Kerr, A. Cuevas, and P. Campbell, "Limiting Efficiency of Crystalline Silicon Solar Cells Due to Coulomb-Enhanced Auger Recombination," *Prog. Photovoltaics* **11**(2), 97–104 (2002).
- [29] J. Zhao, A. Wang, M. A. Green, and F. Ferrazza, "19.8% efficient "honeycomb" textured multicrystalline and 24.4% monocrystalline silicon solar cells," *Appl. Phys. Lett.* **73**(14), 1991–1993 (1998).
- [30] O. Schultz, S. W. Glunz, and G. P. Willeke, "Multicrystalline silicon solar cells exceeding 20% efficiency," *Prog. Photovoltaics* **12**(7), 553–558 (2004).
- [31] D. E. Carlson and C. R. Wronski, "Amorphous silicon solar cell," *Appl. Phys. Lett.* **28**(11), 671–673 (1976).
- [32] R. Könenkamp, S. Muramatsu, H. Itoh, S. Matsubara, and T. Shimada, "Mobility-Lifetime Product in Hydrogenated Amorphous Silicon," *Jpn. J. Appl. Phys.* **29**(12), L2155–L2158 (1990).
- [33] H. Okamoto, H. Kida, S. Nonomura, K. Fukumoto, and Y. Hamakawa, "Mobility-lifetime product and interface property in amorphous silicon solar cells," *J. Appl. Phys.* **54**(6), 3236–3243 (1983).
- [34] T. Söderström, F.-J. Haug, V. Terrazzoni-Daudrix, and C. Ballif, "Flexible micromorph tandem a-Si/ μ c-Si solar cells," *J. Appl. Phys.* **107**(1), 014507 (2010).
- [35] D. L. Staebler and C. R. Wronski, "Reversible conductivity changes in discharge-produced amorphous Si," *Appl. Phys. Lett.* **31**(4), 292–294 (1977).
- [36] Y. Uchida, M. Nishiura, H. Sakai, and H. Haruki, "Stability of P-I-N hydrogenated amorphous silicon solar cells to light exposure," *Sol. Cells* **9**, 3–12 (1983).
- [37] A. G. Aberle, "Thin-film solar cells," *Thin Solid Films* **517**(17), 4706–4710 (2009).
- [38] J. Meier, J. Spitznagel, U. Kroll, C. Bucher, S. Faÿ, T. Moriarty, and A. Shah, "Potential of amorphous and microcrystalline silicon solar cells," *Thin Solid Films* **451-452**, 518–524 (2004).
- [39] J. Meier, R. Flückiger, H. Keppner, and A. Shah, "Complete microcrystalline p-i-n solar cell-Crystalline or amorphous cell behavior?" *Appl. Phys. Lett.* **65**(7), 860–862 (1994).
- [40] A. Gordijn, A. Pollet-Villard, and F. Finger, "At the limit of total silane gas utilization for preparation of high-quality microcrystalline silicon solar cells at high-rate plasma deposition," *Appl. Phys. Lett.* **98**(21), 211501 (2011).

- [41] A. Martí and G. L. Araújo, “Limiting efficiencies for photovoltaic energy conversion in multigap systems,” *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **43**(2), 203–222 (1996).
- [42] P. T. Landsberg and G. Tonge, “Thermodynamic energy conversion efficiencies,” *J. Appl. Phys.* **51**(7), R1–R20 (1980).
- [43] H. Ries, “Complete and reversible absorption of radiation,” *Appl. Phys. B* **32**(3), 153–156 (1983).
- [44] W. Shockley and H. J. Queisser, “Detailed Balance Limit of Efficiency of p-n Junction Solar Cells,” *J. Appl. Phys.* **32**(3), 510–519 (1961).
- [45] S. S. Hegedus, F. Kampas, and J. Xi, “Current transport in amorphous silicon n/p junctions and their application as “tunnel” junctions in tandem solar cells,” *Appl. Phys. Lett.* **67**(6), 813–815 (1995).
- [46] A. de Vos and H. Pauwels, “On the thermodynamic limit of photovoltaic energy conversion,” *Appl. Phys. A* **25**(2), 119–125 (1981).
- [47] C. Hägglund, P. S. Apell, and B. Kasemo, “Maximized Optical Absorption in Ultrathin Films and Its Application to Plasmon-Based Two-Dimensional Photovoltaics,” *Nano Lett.* **10**(8), 3135–3141 (2010).
- [48] M. Ghebrehbrhan, P. Bermel, Y. Avniel, J. D. Joannopoulos, and S. G. Johnson, “Global optimization of silicon photovoltaic cell front coatings,” *Opt. Express* **17**(9), 7505–7518 (2009).
- [49] M. F. Schubert, F. W. Mont, S. Chhajed, D. J. Poxson, J. K. Kim, and E. F. Schubert, “Design of multilayer antireflection coatings made from co-sputtered and low-refractive-index materials by genetic algorithm,” *Opt. Express* **16**(8), 5290–5298 (2008).
- [50] W. H. Southwell, “Gradient-index antireflection coatings,” *Opt. Lett.* **8**(11), 584–586 (1983).
- [51] R. Jacobsson, “Inhomogeneous and coevaporated homogeneous films for optical applications,” *Phys. Thin Films* **8**, 51–98 (1975).
- [52] E. Lorenzo, C. J. Oton, N. E. Capuj, M. Ghulinyan, D. Navarro-Urrios, Z. Garburro, and L. Pavesi, “Porous silicon-based rugate filters,” *Appl. Opt.* **44**(26), 5415–5421 (2005).
- [53] J. Q. Xi, M. F. Schubert, J. K. Kim, E. F. Schubert, M. Chen, S.-Y. Lin, W. Liu, and J. A. Smart, “Optical thin-film materials with low refractive index for broadband elimination of Fresnel reflection,” *Nat. Photon.* **1**, 176–179 (2007).
- [54] R. Dewan, M. Marinkovic, R. Noriega, S. Phadke, A. Salleo, and D. Knipp, “Light trapping in thin-film silicon solar cells with submicron surface texture,” *Opt. Express* **17**(25), 23058 (2009).

- [55] J. Zhu, Z. Yu, G. F. Burkhard, C. Hsu, S. T. Connor, Y. Xu, Q. Wang, M. McGehee, S. Fan, and Y. Cui, "Optical Absorption Enhancement in Amorphous Silicon Nanowire and Nanocone Arrays," *Nano Lett.* **9**(1), 279–282 (2009).
- [56] J. Zhu, C. Hsu, Z. Yu, S. Fan, and Y. Cui, "Nanodome Solar Cells with Efficient Light Management and Self-Cleaning," *Nano Lett.* **10**(6), 1979–1984 (2010).
- [57] H. L. Chen, S. Y. Chuang, C. H. Lin, and Y. H. Lin, "Using colloidal lithography to fabricate and optimize sub-wavelength pyramidal and honeycomb structures in solar cells," *Opt. Express* **15**(22), 14793–14803 (2007).
- [58] Y. Kanamori, M. Sasaki, and K. Hane, "Broadband antireflection gratings fabricated upon silicon substrates," *Opt. Lett.* **24**(20), 1422–1424 (1999).
- [59] S.-B. Rim, S. Zhao, S. R. Scully, M. D. McGehee, and P. Peumans, "An effective light trapping configuration for thin-film solar cells," *Appl. Phys. Lett.* **91**(24), 243501 (pages 3) (2007).
- [60] G. Willeke, H. Nussbaumer, H. Bender, and E. Bucher, "A simple and effective light trapping technique for polycrystalline silicon solar cells," *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **26**(4), 345–356 (1992).
- [61] J. Zhao, A. Wang, P. Altermatt, and M. A. Green, "Twenty-four percent efficient silicon solar cells with double layer antireflection coatings and reduced resistance loss," *Appl. Phys. Lett.* **66**(26), 3636–3638 (1995).
- [62] D. Redfield, "Multiple-pass thin-film silicon solar cell," *Appl. Phys. Lett.* **25**(11), 647–648 (1974).
- [63] J. A. Rand and P. A. Basore, "Light-trapping silicon solar cells-experimental results and analysis," *Conference Record of the Twenty Second IEEE Photovoltaic Specialists Conference, Las Vegas* **1**, 192–197 (1991).
- [64] D. Duché, L. Escoubas, J.-J. Simon, P. Torchio, W. Vervisch, and F. Flory, "Slow Bloch modes for enhancing the absorption of light in thin films for photovoltaic cells," *Appl. Phys. Lett.* **92**(19), 193310 (2008).
- [65] S. Fahr, U. Ulbrich, T. Kirchartz, U. Rau, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Rugate filter for light-trapping in solar cells," *Opt. Express* **16**(13), 9332–9343 (2008).
- [66] C. Ulbrich, S. Fahr, J. Üpping, M. Peters, T. Kirchartz, C. Rockstuhl, R. Wehrspohn, A. Gombert, F. Lederer, and U. Rau, "Directional selectivity and ultra-light-trapping in solar cells," *phys. stat. sol. (a)* **205**(12), 2831–2843 (2008).
- [67] C. Hägglund and B. Kasemo, "Nanoparticle Plasmonics for 2D-Photovoltaics: Mechanisms, Optimization, and Limits," *Opt. Express* **17**(14), 11944–11957 (2009).
- [68] F. Hallermann, C. Rockstuhl, S. Fahr, G. Seifert, S. Wackerow, H. Graener, G. V. Plessen, and F. Lederer, "On the use of localized plasmon polaritons in solar cells," *phys. stat. sol. (a)* **205**(12), 2844–2861 (2008).

- [69] H. A. Atwater and P. Polman, "Plasmonics for improved photovoltaic devices," *Nat. Mater.* **9**(3), 205–213 (2010).
- [70] V. E. Ferry, L. A. Sweatlock, D. Pacifici, and H. A. Atwater, "Plasmonic Nanostructure Design for Efficient Light Coupling into Solar Cells," *Nano Lett.* **8**(12), 4391–4397 (2008).
- [71] T. Kume, S. Hayashi, H. Ohkuma, and K. Yamamoto, "Enhancement of Photoelectric Conversion Efficiency in Copper Phthalocyanine Solar Cell: White Light Excitation of Surface Plasmon Polaritons," *Jpn. J. Appl. Phys.* **34**(12), 6448–6451 (1995).
- [72] K. R. Catchpole and S. Pillai, "Absorption enhancement due to scattering by dipoles into silicon waveguides," *J. Appl. Phys.* **100**(4), 044504 (2006).
- [73] P. N. Saeta, V. E. Vivian, D. Pacifici, J. N. Munday, and H. A. Atwater, "How much can guided modes enhance absorption in thin solar cells?" *Opt. Express* **17**(23), 20975–20990 (2009).
- [74] F.-C. Chen, J.-L. Wu, and Y. Hung, "Spatial redistribution of the optical field intensity in inverted polymer solar cells," *Appl. Phys. Lett.* **96**(19), 193304 (2010).
- [75] Y. A. Akimov, W. S. Koh, S. Y. Sian, and S. Ren, "Nanoparticle-enhanced thin film solar cells: Metallic or dielectric nanoparticles?" *Appl. Phys. Lett.* **96**(7), 073111 (2010).
- [76] K. R. Catchpole and A. Polman, "Plasmonic solar cells," *Opt. Express* **16**(26), 21793–21800 (2008).
- [77] C. Rockstuhl, S. Fahr, and F. Lederer, "Absorption enhancement in solar cells by localized plasmon polaritons," *J. Appl. Phys.* **104**(12), 123102 (2008).
- [78] C. Rockstuhl and F. Lederer, "Photon management by metallic nanodiscs in thin film solar cells," *Appl. Phys. Lett.* **94**(21), 213102 (2009).
- [79] P. Bermel, C. Luo, L. Zeng, L. C. Kimerling, and J. D. Joannopoulos, "Improving thin-film crystalline silicon solar cell efficiencies with photonic crystals," *Opt. Express* **15**(25), 16986–17000 (2007).
- [80] M. Kroll, S. Fahr, C. Helgert, C. Rockstuhl, F. Lederer, and T. Pertsch, "Employing dielectric diffractive structures in solar cells - a numerical study," *phys. stat. sol. (a)* **205**(12), 2777–2795 (2008).
- [81] R. A. Pala, J. White, E. Barnard, J. Liu, and M. L. Brongersma, "Design of Plasmonic Thin-Film Solar Cells with Broadband Absorption Enhancements," *Adv. Mater.* **23**(10), 3504–3509 (2009).
- [82] W. Wang, S. Wu, K. Reinhardt, Y. Lu, and S. Chen, "Broadband Light Absorption Enhancement in Thin-Film Silicon Solar Cells," *Nano Lett.* **10**(6), 2012–2018 (2010).

- [83] L. Zeng, Y. Yi, C. Hong, J. Liu, N. Feng, X. Duan, L. C. Kimerling, and B. A. Alamariu, "Efficiency enhancement in Si solar cells by textured photonic crystal back reflector," *Appl. Phys. Lett.* **89**(11), 111111 (2006).
- [84] S. Fahr, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Engineering the randomness for enhanced absorption in solar cells," *Appl. Phys. Lett.* **92**(17), 171114 (2008).
- [85] A. Lin and J. Phillips, "Optimization of random diffraction gratings in thin-film solar cells using genetic algorithms," *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **92**(12), 1689 – 1696 (2008).
- [86] T.-H. Chang, P.-H. Wu, S.-H. Chen, C.-H. Chan, C.-C. Lee, C.-C. Chen, and Y.-K. Su, "Efficiency enhancement in GaAs solar cells using self-assembled microspheres," *Opt. Express* **17**(8), 6519–6524 (2009).
- [87] J. Grandidier, D. M. Callahan, N. Munday, and H. A. Atwater, "Light Absorption Enhancement in Thin-Film Solar Cells Using Whispering Gallery Modes in Dielectric Nanospheres," *Adv. Mater.* **23**(10), 1272–1276 (2011).
- [88] B. Curtin, R. Biswas, and V. Dalal, "Photonic crystal based back reflectors for light management and enhanced absorption in amorphous silicon solar cells," *Appl. Phys. Lett.* **95**(23), 231102 (2009).
- [89] I. Prieto, B. Galiana, P. A. Postigo, C. Algora, L. J. Martínez, and I. Rey-Stolle, "Enhanced quantum efficiency of Ge solar cells by a two-dimensional photonic crystal nanostructured surface," *Appl. Phys. Lett.* **94**(19), 191102 (2009).
- [90] D. Zhou and R. Biswas, "Photonic crystal enhanced light-trapping in thin film solar cells," *J. Appl. Phys.* **103**(9), 093102 (2008).
- [91] O. Deparis, J. P. Vigneron, O. Agustsson, and D. Decroupet, "Optimization of photonics for corrugated thin-film solar cells," *J. Appl. Phys.* **106**(9), 094505 (2009).
- [92] Y. M. Song, J. S. Yu, and Y. T. Lee, "Antireflective submicrometer gratings on thin-film silicon solar cells for light-absorption enhancement," *Opt. Lett.* **35**(3), 276–278 (2010).
- [93] E. Yablonovitch, "Statistical ray optics," *J. Opt. Soc. Am.* (1917-1983) **72**(7), 899–907 (1982).
- [94] M. A. Green, "Lambertian light trapping in textured solar cells and light-emitting diodes: analytical solutions," *Prog. Photovoltaics* **10**(4), 235–241 (2002).
- [95] M. A. Green, "Enhanced evanescent mode light trapping in organic solar cells and other low index optoelectronic devices," *Prog. Photovoltaics* p. 5 (2010).
- [96] Z. Yu, A. Raman, and S. Fan, "Fundamental limit of nanophotonic light trapping in solar cells," *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **107**(41), 17491–17496 (2010).

- [97] P. Campbell, "Enhancement of light absorption from randomizing and geometric textures," *J. Opt. Soc. Am. B* **10**(12), 2410–2415 (1993).
- [98] P. Campbell and M. A. Green, "Light trapping properties of pyramidally textured surfaces," *J. Appl. Phys.* **62**(1), 243–249 (1987).
- [99] S. E. Han and G. Chen, "Toward the Lambertian Limit of Light Trapping in Thin Nanostructured Silicon Solar Cells," *Nano Lett.* **10**(11), 4692–4696 (2010).
- [100] P. Würfel, "Solar energy conversion with hot electrons from impact ionisation," *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **46**(1), 43–52 (1997).
- [101] T. Trupke, M. A. Green, and P. Würfel, "Improving solar cell efficiencies by down-conversion of high-energy photons," *J. Appl. Phys.* **92**(3), 1668–1674 (2002).
- [102] M. Zeman, R. A. C. M. M. van Swaaij, J. W. Metselaar, and R. E. I. Schropp, "Optical modeling of a-Si:H solar cells with rough interfaces: Effect of back contact and interface roughness," *J. Appl. Phys.* **88**(11), 6436–6443 (2000).
- [103] C. Strümpel, M. McCann, G. Beaucarne, V. Arkhipov, A. Slaoui, V. Švrček, C. del Cañizo, and I. Tobias, "Modifying the solar spectrum to enhance silicon solar cell efficiency-An overview of available materials," *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **91**(4), 238–249 (2007).
- [104] W. G. J. H. M. van Sark, A. Meijerink, R. E. I. Schropp, J. A. M. van Roosmalen, and E. H. Lysen, "Enhancing solar cell efficiency by using spectral converters," *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **87**(1-4), 195–409 (2005).
- [105] V. Švrček, A. Slaoui, and J.-C. Muller, "Silicon nanocrystals as light converter for solar cells," *Thin Solid Films* **451**, 384–388 (2004).
- [106] F. Auzel, "Upconversion and Anti-Stokes Processes with f and d Ions in Solids," *Chem. Rev.* **104**(1), 139–174 (2004).
- [107] A. Shalav, B. S. Richards, T. Trupke, K. W. Krämer, and H. U. Güdel, "Application of NaYF₄:Er³⁺ up-converting phosphors for enhanced near-infrared silicon solar cell response," *Appl. Phys. Lett.* **86**(1), 013505 (2005).
- [108] T. Trupke, M. A. Green, and P. Würfel, "Improving solar cell efficiencies by up-conversion of sub-band-gap light," *J. Appl. Phys.* **92**(7), 4117–4122 (2002).
- [109] K. Yee, "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media," *IEEE Trans. Antennas Propag.* **14**(3), 302–307 (1966).
- [110] A. Taflov and S. C. Hagness, *Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method*, second ed. (Artech House, 2000).
- [111] Y. Liu, "Fourier Analysis of Numerical Algorithms for the Maxwell Equations," *J. Comput. Phys.* **124**, 396–416 (1996).

- [112] J. B. Schneider and C. L. Wagner, “FDTD dispersion revisited: faster-than-light propagation,” *IEEE Microw. Guided W.* **9**(2), 54–56 (1999).
- [113] A. Farjadpour, D. Roundy, A. Rodriguez, M. Ibanescu, P. Bermel, J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, and G. W. Burr, “Improving accuracy by subpixel smoothing in the finite-difference time domain,” *Opt. Lett.* **31**(20), 2972–2974 (2006).
- [114] A. F. Oskooi, D. Roundy, M. Ibanescu, P. Bermel, J. D. Joannopoulos, and S. G. Johnson, “MEEP: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method,” *Comput. Phys. Commun.* **181**(3), 687–702 (2010).
- [115] K. Sakoda, *Optical properties of photonic crystals* (Springer, 2001).
- [116] E. Noponen and J. Turunen, “Eigenmode method for electromagnetic synthesis of diffractive elements with three-dimensional profiles,” *J. Opt. Soc. Am. A* **11**(9), 2494–2502 (1994).
- [117] L. Li, “Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures,” *J. Opt. Soc. Am. A* **13**(9), 1870–1876 (1996).
- [118] L. Li, “New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings,” *J. Opt. Soc. Am. A* **14**(10), 2758–2767 (1997).
- [119] P. Lalanne, “Improved formulation of the coupled-wave method for two-dimensional gratings,” *J. Opt. Soc. Am. A* **14**(7), 1592–1598 (1997).
- [120] J. Korrynga, “On the calculation of the energy of a Bloch wave in a metal,” *Physica* **13**(6-7), 392–400 (1947).
- [121] W. Kohn and N. Rostoker, “Solution of the Schrödinger Equation in Periodic Lattices with an Application to Metallic Lithium,” *Phys. Rev.* **94**(5), 1111–1120 (1954).
- [122] N. Stefanou, V. Yannopapas, and A. Modinos, “Heterostructures of photonic crystals: frequency bands and transmission coefficients,” *Comput. Phys. Commun.* **113**(1), 49–77 (1998).
- [123] N. Stefanou, V. Yannopapas, and A. Modinos, “MULTEM 2: A new version of the program for transmission and band-structure calculations of photonic crystals,” *Comput. Phys. Commun.* **132**(1-2), 189–196 (2000).
- [124] A. Modinos, “Scattering of electromagnetic waves by a plane of spheres-formalism,” *Physica A* **141**(2-3), 575–588 (1987).
- [125] ASTM Standard G173-03, “Standard tables for reference solar spectral irradiances: direct normal and hemispherical on 37° tilted surface,” West Conshohocken (PA): American Society for Testing and Materials; 2003. Available from: URL <http://www.astm.org>.

- [126] V. Lucarini, J. Saarinen, K. Peiponen, and E. Vartiainen, *Kramers-Kronig Relations in Optical Materials Research* (Springer, 2005).
- [127] O. Vetterl, F. Finger, R. Carius, P. Hapke, L. Houben, O. Kluth, A. Lambertz, A. Mück, B. Rech, and H. Wagner, “Intrinsic microcrystalline silicon: A new material for photovoltaics,” *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **62**(1), 97–108 (2000).
- [128] M. L. Dakss, L. Kuhn, P. F. Heidrich, and B. A. Scott, “Grating Coupler for Efficient Excitation of Optical Guided Waves in Thin Films,” *Appl. Phys. Lett.* **16**(12), 523–525 (1970).
- [129] M. Neviere, R. Petit, and M. Cadilhac, “About the theory of optical grating coupler-waveguide systems,” *Opt. Commun.* **8**(2), 113–117 (1973).
- [130] R. Dewan and D. Knipp, “Light trapping in thin-film silicon solar cells with integrated diffraction grating,” *J. Appl. Phys.* **106**(7), 074901 (2009).
- [131] P. Sheng, A. N. Bloch, and R. S. Stepleman, “Wavelength-selective absorption enhancement in thin-film solar cells,” *Appl. Phys. Lett.* **43**(6), 579–581 (1983).
- [132] Y. Bai, A. M. Barnett, J. A. Rand, and D. H. Ford, “Light-trapping and back surface structures for polycrystalline silicon solar cells,” *Prog. Photovoltaics* **7**(5), 353–361 (1999).
- [133] C. Haase and H. Stiebig, “Optical properties of thin-film silicon solar cells with grating couplers,” *Prog. Photovoltaics* **14**(7), 629–641 (2006).
- [134] C. Heine and R. H. Morf, “Submicrometer gratings for solar energy applications,” *Appl. Opt.* **34**(7), 2476–2482 (1995).
- [135] H. Stiebig, C. Haase, C. Zahren, B. Rech, and N. Senoussaoui, “Thin-film silicon solar cells with grating couplers An experimental and numerical study,” *J. Non-Cryst. Solids* **352**(9-20), 1949–1952 (2006).
- [136] N. Denkov, O. Velev, P. Kralchevski, I. Ivanov, H. Yoshimura, and K. Nagayama, “Mechanism of formation of two-dimensional crystals from latex particles on substrates,” *Langmuir* **8**(12), 3183–3190 (1992).
- [137] M. Allard and E. H. Sargent, “Impact of polydispersity on light propagation in colloidal photonic crystals,” *Appl. Phys. Lett.* **85**(24), 5887–5889 (2004).
- [138] C. Jin, M. A. McLachlan, D. W. McComb, R. M. de La Rue, and N. P. Johnson, “Template-Assisted Growth of Nominally Cubic (100)-Oriented Three-Dimensional Crack-Free Photonic Crystals,” *Nano Lett.* **5**(12), 2646–2650 (2005).
- [139] A. Mihi, M. Ocaña, and H. Míguez, “Oriented Colloidal-Crystal Thin Films by Spin-Coating Microspheres Dispersed in Volatile Media,” *Adv. Mater.* **18**(17), 2244–2249 (2006).
- [140] P. Yeh, *Optical Waves in Layered Media* (John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2005).

- [141] A. Hessel and A. A. Oliner, "A new theory of Wood's anomalies on optical gratings," *Appl. Opt.* **4**(10), 1275–1297 (1965).
- [142] J. Sochacki, "Exact analytical solution of the generalized Luneburg lens problem," *J. Opt. Soc. Am.* (1917-1983) **73**(6), 789–795 (1983).
- [143] B. R. Johnson, "Light scattering by a multilayer sphere," *Appl. Opt.* **35**(18), 3286–3296 (1996).
- [144] W. H. Southwell, "Pyramid-array surface-relief structures producing antireflection index matching on optical surfaces," *J. Opt. Soc. Am. A* **8**(3), 549–553 (1991).
- [145] K. R. Catchpole and M. A. Green, "A conceptual model of light coupling by pillar diffraction gratings," *J. Appl. Phys.* **101**(6), 063105 (2007).
- [146] R. W. Gerchberg and W. O. Saxton, "A practical algorithm for the determination of the phase from image and diffraction plane pictures," *Optik* **35**, 237–246 (1972).
- [147] C. Rockstuhl, S. Fahr, K. Bittkau, T. Beckers, R. Carius, F.-J. Haug, T. Söderström, C. Ballif, and F. Lederer, "Comparison and optimization of randomly textured surfaces in thin-film solar cells," *Opt. Express* **18**(S3), A335–A341 (2010).
- [148] H. W. Deckman, C. R. Wronski, H. Witzke, and E. Yablonovitch, "Optically enhanced amorphous silicon solar cells," *Appl. Phys. Lett.* **42**(11), 968–970 (1983).
- [149] T. Tiedje, B. Abeles, J. M. Cebulka, and J. Pelz, "Photoconductivity enhancement by light trapping in rough amorphous silicon," *Appl. Phys. Lett.* **42**(8), 712–714 (1983).
- [150] S. Fahr, T. Kirchartz, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Approaching the Lambertian Limit in Randomly Textured Thin-Film Solar Cells," *Opt. Express* **19**(S4), A865–A874 (2011).
- [151] J. Steinhauser, S. Faÿ, N. Oliveira, E. Vallat-Sauvain, and C. Ballif, "Transition between grain boundary and intragrain scattering transport mechanisms in boron-doped zinc oxide thin films," *Appl. Phys. Lett.* **90**(14), 142107 (2007).
- [152] M. Berginski, J. Hüpkens, M. Schulte, G. Schöpe, H. Stiebig, B. Rech, and M. Wuttig, "The effect of front ZnO:Al surface texture and optical transparency on efficient light trapping in silicon thin-film solar cells," *J. Appl. Phys.* **101**(7), 074903 (2007).
- [153] M. J. Keevers, T. L. Young, U. Schubert, and M. A. Green, "10% Efficient CSG Minimodules," *Proceedings of the 22nd European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition, Milan* (2007).

- [154] K. Bittkau, T. Beckers, S. Fahr, C. Rockstuhl, F. Lederer, and R. Carius, “Nanoscale investigation of light-trapping in a-Si:H solar cell structures with randomly textured interfaces,” *phys. stat. sol. (a)* **205**(12), 2766–2776 (2008).
- [155] C. Rockstuhl, F. Lederer, K. Bittkau, and R. Carius, “Light localization at randomly textured surfaces for solar-cell applications,” *Appl. Phys. Lett.* **91**(17), 171104 (2007).
- [156] C. Rockstuhl, S. Fahr, F. Lederer, K. Bittkau, T. Beckers, and R. Carius, “Local versus global absorption in thin-film solar cells with randomly textured surfaces,” *Appl. Phys. Lett.* **93**(6), 061105 (2008).
- [157] K. Bittkau, R. Carius, and C. Lienau, “Guided optical modes in randomly textured ZnO thin films imaged by near-field scanning optical microscopy,” *Phys. Rev. B* **76**(3), 035330 (2007).
- [158] C. Battaglia, J. Escarré, K. Söderström, L. Erni, L. Ding, G. Bugnon, A. Billet, M. Boccard, L. Barraud, S. de Wolf, F. Haug, M. Despeisse, and C. Ballif, “Nanoimprint Lithography for High-Efficiency Thin-Film Silicon Solar Cells,” *Nano Lett.* **11**(2), 661–665 (2011).
- [159] G. Jin, P. C. Widenborg, P. Campbell and S. Varlamov, “Lambertian matched absorption enhancement in PECVD poly-Si thin film on aluminum induced textured glass superstrates for solar cell applications,” *Prog. Photovoltaics* **18**(8), 582–589 (2010).
- [160] R. H. Franken, R. L. Stolk, H. Li, C. H. M. van der Werf, J. K. Rath, and R. E. I. Schropp, “Understanding light trapping by light scattering textured back electrodes in thin film n-i-p-type silicon solar cells,” *J. Appl. Phys.* **102**(1), 014503 (2007).
- [161] J. C. Miñano, *Physical Limitations to Photovoltaic Energy Conversion*, chap. Optical confinement in photovoltaics, pp. 50–83 (Adam Hilger, Bristol, 1990).
- [162] C. Ulbrich, S. Fahr, M. Peters, J. Üpping, T. Kirchartz, C. Rockstuhl, J. C. Goldschmidt, P. Löper, R. Wehrspohn, A. Gombert, F. Lederer, and U. Rau, “Directional selectivity and light-trapping in solar cells,” *Photonics for Solar Energy Systems II* **7002**(1), 70020A (2008).
- [163] M. J. Kerr and A. Cuevas, “General parameterization of Auger recombination in crystalline silicon,” *J. Appl. Phys.* **91**(4), 2473–2480 (2002).
- [164] D. Buie and A. G. Monger, “The effect of circumsolar radiation on a solar concentrating system,” *Sol. Energy* **76**(1), 181–185 (2004).
- [165] C. Ulbrich, M. Peters, B. Bläsi, T. Kirchartz, A. Gerber, and U. Rau, “Enhanced light trapping in thin-film solar cells by a directionally selective filter,” *Opt. Express* **18**(102), A133–A138 (2010).
- [166] M. Peters, J. C. Goldschmidt, T. Kirchartz, and B. Bläsi, “The photonic light trap—Improved light trapping in solar cells by angularly selective filters,” *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **93**(10), 1721–1727 (2009).

- [167] J. A. Dobrowolski and D. G. Lowe, "Optical thin film synthesis program based on the use of Fourier transforms," *Appl. Opt.* **17**(19), 3039–3050 (1978).
- [168] P. Baumeister, "Design of multilayer filters by successive approximations," *J. Opt. Soc. Am.* (1917-1983) **48**(12), 955–958 (1958).
- [169] P. G. Verly, A. V. Tikhonravov, and M. K. Trubetskov, "Efficient refinement algorithm for the synthesis of inhomogeneous optical coatings," *Appl. Opt.* **36**(7), 1487–1495 (1997).
- [170] J.-M. Yang and C.-Y. Kao, "An Evolutionary Algorithm for the Synthesis of Multilayer Coatings at Oblique Light Incidence," *J. Lightwave Technol.* **19**(4), 559–570 (2001).
- [171] S. Kirkpatrick, J. Gelatt, C. D., and M. P. Vecchi, "Optimization by Simulated Annealing," *Science* **220**(4598), 671–680 (1983).
- [172] G. Boivin and D. St.-Germain, "Synthesis of gradient-index profiles corresponding to spectral reflectance derived by inverse Fourier transform," *Appl. Opt.* **26**(19), 4209–4213 (1987).
- [173] B. G. Bovard, "Rugate filter theory: an overview," *Appl. Opt.* **32**(28), 5427–5442 (1993).
- [174] W. H. Southwell, "Extended-bandwidth reflector designs by using wavelets," *Appl. Opt.* **36**(1), 314–318 (1997).
- [175] W. Southwell, "Using apodization functions to reduce sidelobes in rugate filters," *Appl. Opt.* **28**(23), 5091–5094 (1989).
- [176] S. Fahr, C. Ulbrich, T. Kirchartz, U. Rau, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Optimization of Rugate filters for ultra light-trapping in solar cells," *Photonics for Solar Energy Systems II* **7002**(1), 70020B (2008).
- [177] W. Southwell, "Omnidirectional Mirror Design With Quarter-Wave Dielectric Stacks," *Appl. Opt.* **38**(25), 5464–5467 (1999).
- [178] M. J. Minot, "The angular reflectance of single-layer gradient refractive-index films," *J. Opt. Soc. Am.* (1917-1983) **67**(8), 1046–1050 (1977).
- [179] J. A. Nelder and R. Mead, "A Simplex Method for Function Minimization," *Comput. J.* **7**(4), 308–313 (1965).
- [180] W. J. Gunning, R. L. Hall, F. J. Woodberry, W. H. Southwell, and N. S. Gluck, "Codeposition of continuous composition rugate filters," *Appl. Opt.* **28**(14), 2945–2948 (1989).
- [181] S. Bailey, G. Landis, and R. Raffaele, "The Next-Generation of Space Cells for Diverse Environments," in *Space Power*, A. Wilson, ed., vol. 502 of *ESA Special Publication*, p. 9 (2002).

- [182] A. Gombert, A. Hakenjos, I. Heile, J. Wüllner, T. Gerstmaier, and S. van Riesen, “FLATCON CPV SYSTEMS-Field Data and new Developments,” Proceedings of the 24th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition, Hamburg (2009).
- [183] K. Okuda, H. Okamoto, and Y. Hamakawa, “Amorphous Si/Polycrystalline Si Stacked Solar Cell Having More Than 12% Conversion Efficiency,” Jpn. J. Appl. Phys. **22**(9), L605–L607 (1983).
- [184] D. Fischer, S. Dubail, J. A. Anna Selvan, N. Pellaton Vaucher, R. Platz, C. Hof, U. Kroll, J. Meier, P. Torres, H. Keppner, N. Wyrsh, M. Goetz, A. Shah, and K.-D. Ufert, “The Micromorph Solar Cell: Extending a-Si:H Technology towards Thin Film Crystalline Silicon,” Conference Record of the Twenty Fifth IEEE Photovoltaic Specialists Conference, Washington pp. 1053–1056 (1996).
- [185] M. Yoshimi, T. Sasaki, T. Sawada, T. Suezaki, T. Meguro, T. Matsuda, K. Santo, K. Wadano, M. Ichikawa, A. Nakajima, and K. Yamamoto, “High efficiency thin film silicon hybrid solar cell module on 1m²-class large area substrate,” Proceedings of 3rd World Conference on Photovoltaic Energy Conversion, Osaka pp. 1566–1569 (2003).
- [186] K. L. Chopra, P. D. Paulson, and V. Dutta, “Thin-film solar cells: an overview,” Prog. Photovoltaics **12**(2-3), 69–92 (2004).
- [187] A. Bielawny, J. Üpping, and R. B. Wehrspohn, “Spectral properties of intermediate reflectors in micromorph tandem cells,” Sol. Energy Mater. Sol. Cells **93**(11), 1909–1912 (2009).
- [188] T. Söderström, F.-J. Haug, X. Niquille, V. Terrazzoni, and C. Ballif, “Asymmetric intermediate reflector for tandem micromorph thin film silicon solar cells,” Appl. Phys. Lett. **94**(6), 063501 (2009).
- [189] P. Buehlmann, J. Bailat, D. Dominé, A. Billet, F. Meillaud, A. Feltrin, and C. Ballif, “In situ silicon oxide based intermediate reflector for thin-film silicon micromorph solar cells,” Appl. Phys. Lett. **91**(14), 143505 (2007).
- [190] C. Das, A. Lambertz, J. Huepkes, W. Reetz, and F. Finger, “A constructive combination of antireflection and intermediate-reflector layers for a-Si/ μ c-Si thin film solar cells,” Appl. Phys. Lett. **92**(5), 053509 (2008).
- [191] J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn, and R. D. Meade, *Photonic crystals : molding the flow of light*, second ed. (Princeton University Press, 2008).
- [192] E. Yablonovitch, “Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics,” Phys. Rev. Lett. **58**(20), 2059–2062 (1987).
- [193] J. C. Knight, T. A. Birks, P. S. J. Russell, and D. M. Atkin, “All-silica single-mode optical fiber with photonic crystal cladding,” Opt. Lett. **21**(19), 1547–1549 (1996).

- [194] P. Russell, "Photonic Crystal Fibers," *Science* **299**(5605), 358–362 (2003).
- [195] M. Notomi, K. Yamada, A. Shinya, J. Takahashi, C. Takahashi, and I. Yokohama, "Extremely Large Group-Velocity Dispersion of Line-Defect Waveguides in Photonic Crystal Slabs," *Phys. Rev. Lett.* **87**(25), 253902 (2001).
- [196] Y. A. Vlasov, X.-Z. Bo, J. C. Sturm, and D. J. Norris, "On-chip natural assembly of silicon photonic bandgap crystals," *Nature* **414**(6861), 289–293 (2001).
- [197] H. Míguez, C. López, F. Meseguer, A. Blanco, L. Vázquez, R. Mayoral, M. Ocaña, V. Fornés, and A. Mifsud, "Photonic crystal properties of packed submicrometric SiO₂ spheres," *Appl. Phys. Lett.* **71**(9), 1148–1150 (1997).
- [198] B. Lange, F. Fleischhaker, and R. Zentel, "Functional 3D photonic films from polymer beads," *phys. stat. sol. (a)* **51**(11), 3618–3635 (2007).
- [199] H. S. Sözüer and J. P. Dowling, "Photonic Band Calculations for Woodpile Structures," *J. Mod. Opt.* **41**(2), 231–239 (1994).
- [200] A. Bielawny, C. Rockstuhl, F. Lederer, and R. B. Wehrspohn, "Intermediate reflectors for enhanced top cell performance in photovoltaic thin-film tandem cells," *Opt. Express* **17**(10), 8439 (2009).
- [201] P. G. O'Brien, A. Chutinan, K. Leong, N. P. Kherani, A. A. Ozin, and S. Zukotynski, "Photonic crystal intermediate reflectors for micromorph solar cells: a comparative study," *Opt. Express* **18**(5), 4478–4490 (2010).
- [202] S. Fahr, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Metallic nanoparticles as intermediate reflectors in tandem solar cells," *Appl. Phys. Lett.* **95**(12), 121105 (2009).
- [203] S. Fahr, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Improving the efficiency of thin film tandem solar cells by plasmonic intermediate reflectors," *Photonics and Nanostructures* **8**(4), 291–296 (2010).
- [204] K. L. Kelly, E. Coronado, L. L. Zhao, and G. C. Schatz, "The Optical Properties of Metal Nanoparticles: The Influence of Size, Shape, and Dielectric Environment," *J. Phys. Chem. B* **107**(3), 668–677 (2003).
- [205] M. Pelton, J. Aizpurua, and G. Bryant, "Metal-nanoparticle plasmonics," *Laser & Photon. Rev.* **2**(3), 136–159 (2008).
- [206] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics* (John Wiley & Sons, Inc., 1999).
- [207] P. B. Johnson and R. W. Christy, "Optical Constants of the Noble Metals," *Phys. Rev. B* **6**(30), 4370–4379 (1972).
- [208] Die interne MATLAB Funktion `fmincon` wurde verwendet.
- [209] S. Fahr, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Intermediate reflectors in thin film solar cells comprising randomly textured surfaces," *Photonics for Solar Energy Systems III* **7725**(1), 77250O (2010).

- [210] C. Rockstuhl, F. Lederer, K. Bittkau, T. Beckers, and R. Carius, “The impact of intermediate reflectors on light absorption in tandem solar cells with randomly textured surfaces,” *Appl. Phys. Lett.* **94**(21), 211101 (2009).
- [211] S. Fahr, C. Rockstuhl, and F. Lederer, “The interplay of intermediate reflectors and randomly textured surfaces in tandem solar cells,” *Appl. Phys. Lett.* **97**(17), 173510 (2010).
- [212] J. Üpping, A. Bielawny, R. B. Wehrspohn, T. Beckers, R. Carius, U. Rau, S. Fahr, C. Rockstuhl, F. Lederer, M. Kroll, T. Pertsch, L. Steidl, and R. Zentel, “Three-dimensional photonic crystal intermediate reflectors for enhanced light-trapping in tandem solar cells,” *Adv. Mater.* **23**(34), 3896–3900 (2011).
- [213] A. F. Koenderink, A. Lagendijk, and W. L. Vos, “Optical extinction due to intrinsic structural variations of photonic crystals,” *Phys. Rev. B* **72**(15), 153102 (2005).
- [214] J. E. G. J. Wijnhoven and W. L. Vos, “Preparation of Photonic Crystals Made of Air Spheres in Titania,” *Science* **281**(5378), 802–804 (1998).
- [215] K. Busch and S. John, “Photonic band gap formation in certain self-organizing systems,” *Phys. Rev. E* **58**(3), 3896–3908 (1998).
- [216] Y. A. Vlasov, V. N. Astratov, O. Z. Karimov, A. A. Kaplyanskii, V. N. Bogomolov, and A. V. Prokofiev, “Existence of a photonic pseudogap for visible light in synthetic opals,” *Phys. Rev. B* **55**(20), 13357 (1997).
- [217] J. Üpping, P. T. Miclea, R. B. Wehrspohn, T. Baumgarten, and S. Greulich-Weber, “Direction-selective optical transmission of 3D fcc photonic crystals in the microwave regime,” *Photonics Nanostruct.* **8**(2), 102–106 (2010).
- [218] J. Üpping, R. Salzer, M. Otto, T. Beckers, L. Steidl, R. Zentel, R. Carius, and R. B. Wehrspohn, “Transparent conductive oxide photonic crystals on textured substrates,” *Photonics Nanostruct.* **9**(1), 31–34 (2011).
- [219] J. Üpping, A. Bielawny, S. Fahr, C. Rockstuhl, F. Lederer, L. Steidl, R. Zentel, T. Beckers, A. Lambertz, R. Carius, and R. B. Wehrspohn, “Micromorph silicon tandem solar cells with fully integrated 3D photonic crystal intermediate reflectors,” *Photonics for Solar Energy Systems III* **7725**(1), 77250K (2010).
- [220] N. Tétreault, A. Mihi, H. Míguez, H. Míguez, I. Rodríguez, G. A. Ozin, F. Mesguier, and V. Kitaev, “Dielectric Planar Defects in Colloidal Photonic Crystal Films,” *Adv. Mater.* **16**(4), 346–349 (2004).
- [221] T.-T. Kim, S.-G. Lee, M.-W. Kim, H. Y. Park, and J.-E. Kim, “Experimental demonstration of reflection minimization at two-dimensional photonic crystal interfaces via antireflection structures,” *Appl. Phys. Lett.* **95**(1), 011119 (2009).

-
- [222] T. Peng, A. Balijepalli, S. K. Gupta, and T. W. LeBrun, “Algorithms for On-Line Monitoring of Components in an Optical Tweezers-Based Assembly Cell,” Conference Proceedings of the 26th Computers and Information in Engineering Conference, Philadelphia **3**, 297–309 (2006).
- [223] J.-P. Berenger, “A Perfectly Matched Layer for the Absorption of Electromagnetic Waves,” *J. Comput. Phys.* **114**, 185–200 (1994).
- [224] D. S. Katz, E. T. Thiele, and A. Taflove, “Validation and extension to three dimensions of the Berenger PML absorbing boundary condition for FD-TD meshes,” *IEEE Microw. Guided W.* **4**(8), 268–270 (1994).

Publikationen

Patente

1. M. Bass, A. Rapaport, S. Fahr, J. Koroschetz, and B. Brickeen, “Lasers that operate independently of temperature,” United States Patent 7450626 (2008).

Buchkapitel

1. C. Rockstuhl, S. Fahr, and F. Lederer, *New concepts for a next generation of photovoltaics*, chap. Surface Plasmon Polaritons in metallic nanostructures: fundamentals and their application to thin film solar cells (eingereicht bei Springer).¹

Veröffentlichungen in begutachteten Zeitschriften

1. K. Bittkau, T. Beckers, S. Fahr, C. Rockstuhl, F. Lederer, and R. Carrius, “Nanoscale investigation of light-trapping in a-Si:H solar cell structures with randomly textured interfaces,” *phys. stat. sol. (a)* **205**(12), 2766–2776 (2008).
2. F. Dreisow, M. Heinrich, A. Szameit, S. Doering, S. Nolte, A. Tuennermann, S. Fahr, and F. Lederer, “Spectral resolved dynamic localization in curved fs laser written waveguide arrays,” *Opt. Express* **16**(5), 3474–3483 (2008).
3. S. Fahr, T. Kirchartz, C. Rockstuhl, and F. Lederer, “Approaching the Lambertian Limit in Randomly Textured Thin-Film Solar Cells,” *Opt. Express* **19**(S4), A865–A874 (2011).
4. S. Fahr, C. Rockstuhl, and F. Lederer, “Improving the efficiency of thin film tandem solar cells by plasmonic intermediate reflectors,” *Photonics and Nanostructures* **8**(4), 291–296 (2010).
5. S. Fahr, C. Rockstuhl, and F. Lederer, “The interplay of intermediate reflectors and randomly textured surfaces in tandem solar cells,” *Appl. Phys. Lett.* **97**(17), 173510 (2010).

¹Für diese Dissertation direkt relevante Veröffentlichungen sind **fett** gedruckt.

6. S. Fahr, C. Rockstuhl, and F. Lederer, “Metallic nanoparticles as intermediate reflectors in tandem solar cells,” *Appl. Phys. Lett.* **95**(12), 121105 (2009).
7. S. Fahr, C. Rockstuhl, and F. Lederer, “Engineering the randomness for enhanced absorption in solar cells,” *Appl. Phys. Lett.* **92**(17), 171114 (2008).
8. S. Fahr, U. Ulbrich, T. Kirchartz, U. Rau, C. Rockstuhl, and F. Lederer, “Rugate filter for light-trapping in solar cells,” *Opt. Express* **16**(13), 9332–9343 (2008).
9. S. Fahr, T. Clausnitzer, E.-B. Kley, and A. Tünnermann, “Reflective diffractive beam splitter for laser interferometers,” *Appl. Opt.* **46**(24), 6092–6095 (2007).
10. D. Friedrich, O. Burmeister, A. Bunkowski, T. Clausnitzer, S. Fahr, E.-B. Kley, A. Tünnermann, K. Danzmann, and R. Schnabel, “Diffractive beam splitter characterization via a power-recycled interferometer,” *Opt. Lett.* **33**(2), 101–103 (2008).
11. F. Hallermann, C. Rockstuhl, S. Fahr, G. Seifert, S. Wackerow, H. Graener, G. V. Plessen, and F. Lederer, “On the use of localized plasmon polaritons in solar cells,” *phys. stat. sol. (a)* **205**(12), 2844–2861 (2008).
12. M. Kroll, S. Fahr, C. Helgert, C. Rockstuhl, F. Lederer, and T. Pertsch, “Employing dielectric diffractive structures in solar cells - a numerical study,” *phys. stat. sol. (a)* **205**(12), 2777–2795 (2008).
13. J. Koroshetz, B. Brickeen, S. Fahr, A. Rapaport, and M. Bass, “Athermal emission in Yb,Er:glass,” *Opt. Express* **15**(18), 11530–11535 (2007).
14. C. Menzel, C. Rockstuhl, T. Paul, S. Fahr, and F. Lederer, “Imbert-Fedorov shift at metamaterial interfaces,” *Phys. Rev. A* **77**(1), 013810 (2008).
15. C. Rockstuhl, S. Fahr, F. Lederer, F.-J. Haug, T. Söderström, S. Nicolay, M. Despeisse, and C. Ballif, “Light absorption in textured thin film silicon solar cells: A simple scalar scattering approach versus rigorous simulation,” *Appl. Phys. Lett.* **98**(5), 051102 (2011).
16. C. Rockstuhl, S. Fahr, K. Bittkau, T. Beckers, R. Carius, F.-J. Haug, T. Söderström, C. Ballif, and F. Lederer, “Comparison and optimization of randomly textured surfaces in thin-film solar cells,” *Opt. Express* **18**(S3), A335–A341 (2010).
17. C. Rockstuhl, S. Fahr, and F. Lederer, “Absorption enhancement in solar cells by localized plasmon polaritons,” *J. Appl. Phys.* **104**(12), 123102 (2008).

18. C. Rockstuhl, S. Fahr, F. Lederer, K. Bittkau, T. Beckers, and R. Carius, "Local versus global absorption in thin-film solar cells with randomly textured surfaces," *Appl. Phys. Lett.* **93**(6), 061105 (2008).
19. C. Ulbrich, S. Fahr, J. Üpping, M. Peters, T. Kirchartz, C. Rockstuhl, R. B. Wehrspohn, A. Gombert, F. Lederer, and U. Rau, "Directional selectivity and ultra-light-trapping in solar cells," *phys. stat. sol. (a)* **205**(12), 2831–2843 (2008).
20. J. Üpping, A. Bielawny, R. B. Wehrspohn, T. Beckers, R. Carius, U. Rau, S. Fahr, C. Rockstuhl, F. Lederer, M. Kroll, T. Pertsch, L. Steidl, and R. Zentel, "Three-dimensional photonic crystal intermediate reflectors for enhanced light-trapping in tandem solar cells," *Adv. Mater.* **23**(34), 3896–3900 (2011).

Veröffentlichungen in Tagungsbänden

1. T. Beckers, K. Bittkau, C. Rockstuhl, S. Fahr, F. Lederer, and R. Carius, "The optical near-field of randomly textured light trapping structures for thin-film solar cells," *Photonics for Solar Energy Systems II* **7002**(1), 70020D (2008).
2. S. Fahr, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Intermediate reflectors in thin film solar cells comprising randomly textured surfaces," *Photonics for Solar Energy Systems III* **7725**(1), 77250O (2010).
3. S. Fahr, C. Ulbrich, T. Kirchartz, U. Rau, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Optimization of Rugate filters for ultra light-trapping in solar cells," *Photonics for Solar Energy Systems II* **7002**(1), 70020B (2008).
4. D. Friedrich, O. Burmeister, M. Britzger, A. Bunkowski, T. Clausnitzer, S. Fahr, E.-B. Kley, A. Tünnermann, K. Danzmann, and R. Schnabel, "Power-recycled michelson interferometer with a 50/50 grating beam splitter," *Journal of Physics Conference Series* **122**(1), 012018 (2008).
5. C. Rockstuhl, C. Etrich, C. Helgert, C. Menzel, T. Paul, S. Fahr, T. Pertsch, J. Dorfmueller, R. Esteban, W. Khunsin, R. Vogelgesang, K. Kern, A. Dmitriev, K. Bittkau, T. Beckers, R. Carius, and F. Lederer, "Large scale simulations in the realm of nanooptics," *Proc. SPIE* **7604**, 76040D (2010).
6. C. Ulbrich, S. Fahr, M. Peters, J. Üpping, T. Kirchartz, C. Rockstuhl, J. C. Goldschmidt, P. Löper, R. B. Wehrspohn, A. Gombert, F. Lederer, and U. Rau, "Directional selectivity and light-trapping in solar cells," *Photonics for Solar Energy Systems II* **7002**(1), 70020A (2008).
7. J. Üpping, A. Bielawny, S. Fahr, C. Rockstuhl, F. Lederer, L. Steidl, R. Zentel, T. Beckers, A. Lambertz, R. Carius, and R. B. Wehrspohn, "Micromorph silicon tandem solar cells with fully integrated 3D photonic crystal intermediate reflectors," *Photonics for Solar Energy Systems III* **7725**(1), 77250K (2010).

Eingeladene Vorträge

1. F. Lederer, C. Rockstuhl, and S. Fahr, "Approaching the Lambertian Limit in Randomly Textured Thin-Film Solar Cells," MRS Fall Meeting 2011, Boston, Massachusetts, USA.
2. F. Lederer, C. Rockstuhl, and S. Fahr, "Photon Management in Thin Film Solar Cells," IPR 2010 OSA Topical Meeting, Monterey, California, USA.
3. C. Rockstuhl, S. Fahr, S. Wiesendanger, and F. Lederer, "Photon Management in Thin-Film Solar Cells," Tacona 2011, Bad Honnef, Deutschland.
4. C. Rockstuhl, S. Fahr, and F. Lederer, "Randomly textured surfaces for photon management in silicon thin film solar cells," SOLAR 2010 OSA Topical Meeting, Tucson, Arizona, USA.
5. C. Rockstuhl, C. Menzel, T. Paul, S. Fahr, F. Lederer, C. Etrich, C. Helgert and T. Pertsch, "Large scale simulations in the realm of nanooptics," SPIE Photonics West 2010, San Francisco, USA.
6. S. Wiesendanger, S. Fahr, T. Kirchartz, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Achieving the Yablonovitch Limit in Thin-Film Solar Cells with Tailored Randomly Textured Interfaces," Optical Nanostructures and Advanced Materials for Photovoltaics 2011 OSA Topical Meeting, Austin, Texas, USA.

Konferenzbeiträge

1. T. Beckers, K. Bittkau, C. Rockstuhl, S. Fahr, F. Lederer, and R. Carius, "Nano-scale investigation of light scattering at randomly textured light trapping structures for thin-film silicon solar cells," MRS Spring Meeting 2008, San Francisco, California, USA.
2. T. Beckers, K. Bittkau, C. Rockstuhl, S. Fahr, F. Lederer, and R. Carius, "The optical near-field of randomly textured light trapping structures for thin-film solar cells," SPIE Photonics Europe 2008, Straßburg, Frankreich.
3. S. Fahr, C. Rockstuhl, F. Lederer, M. Kroll, T. Pertsch, T. Beckers, R. Carius, U. Rau, L. Steidl, R. Zentel, J. Üpping, and R. B. Wehrspohn, "Photonic Crystal Intermediate Reflector in Micromorph Tandem Solar Cells," CLEO/QELS 2011, Baltimore, Maryland, USA.
4. S. Fahr, T. Paul, S. Mühlig, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Absorption enhancement in thin-film solar cells by nanophotonic structures," PhoNa International Workshop 2010, Jena, Deutschland.
5. S. Fahr, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Intermediate reflectors in thin film solar cells comprising randomly textured surfaces," SPIE Photonics Europe 2010, Brüssel, Belgien.

6. S. Fahr, C. Rockstuhl, M. Kroll, C. Helgert, F. Lederer, and T. Pertsch, "Photon Management in Silicon Based Thin Film Solar Cells," The 12th Euregional Workshop on Novel Concepts for Future Thin-Film Silicon Solar Cells 2010, Delft, Niederlande.
7. S. Fahr, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Metallic Nanoparticles as Efficient Intermediate Reflectors in aSi:H- μ cSi Solar Cells," 24th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition 2009, Hamburg, Deutschland.
8. S. Fahr, C. Menzel, T. Paul, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Periodic arrays of metallic nanoparticles as efficient intermediate reflectors in aSi:H- μ cSi solar cells," OWTNM 2009, Jena, Deutschland.
9. S. Fahr, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Plasmonics in Thin Film Solar Cells," TaCoNa-Photonics 2009, Bad Honnef, Deutschland.
10. S. Fahr, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Rugate filter for ultra light trapping in solar cells," SPIE Photonics Europe 2008, Straßburg, Frankreich.
11. S. Fahr, C. Rockstuhl, F. Lederer, C. Ulbrich, T. Kirchartz, and U. Rau "Rugate Filter for Light-Trapping in Solar Cells," 398. WE-Heraeus-Seminar on Photon Management in Solar Cells 2007, Bad Honnef, Deutschland.
12. D. Friedrich, O. Burmeister, M. Britzger, A. Bunkowski, T. Clausnitzer, S. Fahr, E.-B. Kley, A. Tünnermann, K. Danzmann, and R. Schnabel, "Power-recycled michelson interferometer with a 50/50 grating beam splitter," 7th Edoardo Amaldi Conference on Gravitational Waves 2007, Sydney, Australien.
13. T. Paul, C. Menzel, S. Fahr, S. Mühlig, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Anomalous diffraction and refraction in negative-index metamaterials," PhoNa International Workshop 2010, Jena, Deutschland.
14. T. Paul, C. Menzel, S. Fahr, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Adapted Fourier modal method for the analysis of higher harmonic generation in arbitrary bi-periodic multi-layer structures," OWTNM 2009, Jena, Deutschland.
15. M. Peters, J. C. Goldschmidt, P. Löper, C. Ulbrich, T. Kirchartz, S. Fahr, B. Bläsi, S. W. Glunz, A. Gombert, "Photonic Structures for the Application on Solar Cells," 20th Workshop on Quantum Solar Energy Conversion - (QUANTSOL 2008), 2008, Bad Gastein, Salzburg, Österreich.
16. C. Rockstuhl, S. Fahr, and F. Lederer, "Optimized Surface Profiles for Thin Film aSi:H Solar Cells," 24th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition 2009, Hamburg, Deutschland.
17. C. Rockstuhl, S. Fahr, T. Paul, C. Menzel, F. Lederer, K. Bittkau, T. Beckers, and R. Carius, "Photon Management in Thin Film Solar Cells," CLEO/QELS 2009, Baltimore, Maryland, USA.

18. C. Rockstuhl, S. Fahr, and F. Lederer, "How to Enhance Absorption in Thin Film Single and Tandem Solar Cells using Localized Plasmons?," PECS VIII 2009, Sydney, Australien.
19. C. Ulbrich, S. Fahr, J. Üpping, M. Peters, T. Kirchartz, C. Rockstuhl, R. B. Wehrspohn, A. Gombert, F. Lederer, and U. Rau, "Ultra-Light-Trapping and Directional Selectivity in Solar Cells," First This International Forum on Multi-disciplinary Education and Research for Energy Science 2008, Tokyo, Japan.
20. C. Ulbrich, S. Fahr, M. Peters, J. Üpping, T. Kirchartz, C. Rockstuhl, J.-C. Goldschmidt, P. Löper, R. B. Wehrspohn, A. Gombert, F. Lederer, and U. Rau, "Enhanced light-trapping in solar cells by directional selective optical filters," SPIE Photonics Europe 2008, Straßburg, Frankreich.
21. J. Üpping, T. Beckers, R. Carius, U. Rau, S. Fahr, C. Rockstuhl, F. Lederer, M. Kroll, T. Pertsch, L. Steidl, R. Zentel, and R. B. Wehrspohn, "3D photonic crystal integrated in a micromorph thin film silicon tandem cell," 77th Annual Meeting of the Deutsche Physikalische Gesellschaft 2011, Dresden, Deutschland.
22. J. Üpping, A. Bielawny, S. Fahr, C. Rockstuhl, F. Lederer, T. Beckers, A. Lambert, R. Carius, L. Steidl, R. Zentel, and R. B. Wehrspohn, "3D inverted opal intermediate reflector layer integrated in micromorph thin film silicon tandem cell," PECS IX 2010, Granada, Spanien.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name	Stephan Fahr
geboren am	21.04.1980
in	Spremberg, Deutschland
Familienstand	ledig, zwei Kinder
Nationalität	deutsch

Akademische Karriere

08/2011	Abgabe der Dissertation mit dem Titel „Photon-Management in Dünnschicht-Solarzellen“
seit 01/2007	Wissenschaftlicher Mitarbeiter und Promotionsstudent am Institut für Festkörpertheorie und -optik an der Friedrich-Schiller-Universität Jena, Deutschland
06–12/2006	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Angewandte Physik an der Friedrich-Schiller-Universität Jena, Deutschland

Lehrtätigkeit

SS 2010	Seminar Grundkonzepte der Optik
WS 2009/10	Seminar Elektrodynamik
SS 2009	Seminar Computational Photonics
WS 2007/08	Seminar Elektrodynamik
WS 2006/07	Grundpraktikum Experimentalphysik für Mediziner

Studium

- 05/2006 Diplomabschluss („Sehr Gut“) in Physik an der Friedrich-Schiller-Universität Jena, Deutschland
- 11/2004–05/2006 Diplomarbeit mit dem Titel „*Gitter für die interferometrische Gravitationswellendetektion*“ am Institut für Angewandte Physik an der Friedrich-Schiller-Universität Jena, Deutschland
- 06-08/2005 Austauschstudent am CREOL, Orlando, Florida, USA
- 10/2000–05/2006 Studium der Physik an der Friedrich-Schiller-Universität Jena, Deutschland

Wehrdienst

- 07/1999–04/2000 Wehrdienst in Germersheim, Karlsruhe, Berlin, Holzdorf

Schulbildung

- 1992–1999 Abitur (Note 1,1) am Max-Steenbeck Gymnasium, Cottbus, Deutschland
- 1986–1992 Wilhelm-Pieck-Oberschule, Friedrichshain, Deutschland

Danksagung

Zu einem Erfolg gehört mehr als die Freude eines subjektiven Interesses an seinem Tun, dazu gehört die Besessenheit einer Überzeugung von der objektiven Wichtigkeit seiner Arbeit.

(Max Steenbeck)

Im Nachhinein offenbart sich erst, wieviel Hilfe und Unterstützung tatsächlich nötig war, um dieses Werk in seiner jetzigen Fassung zu beenden. Zu allererst gilt mein Dank Prof. Dr. Falk Lederer, der mir die Möglichkeit gab, in seinem Umfeld zu promovieren.

An dieser Stelle danke ich auch den Gutachtern für das Lesen und Evaluieren dieser Arbeit.

Mit Jun.-Prof. Dr. Carsten Rockstuhl hatte ich einen engagierten Betreuer, der mir den nötigen Freiraum und Rückhalt bereit stellte, meine eigenen Ideen zu verwirklichen, der mich aber auch durch seinen Einsatz dazu antrieb, in Zeiten der Mühe nicht locker zu lassen. Danke.

Der Großteil dieser Arbeit entstand im Umfeld des Instituts für Festkörpertheorie und -optik. Entsprechend haben die Mitarbeiter der Arbeitsgruppe Photonik einen entscheidenden Beitrag geleistet und ich bin ihnen zu Dank verpflichtet. Insbesondere möchte ich mich bei Dr. Lutz Leine für das Pflegen der Infrastruktur bedanken. Bei den folgenden drei Personen fällt es mir schwer, ihren Anteil in einen einzigen Aspekt zu bündeln. Neben der Kollegialität, fachlichen Unterstützung und den gemeinsamen Abenden bedanke ich mich bei Christoph Menzel für seine Rolle als Raumteiler, bei Thomas Paul für die spärlichen Programmteile zwischen den Kommentarzeilen und bei Stefan Mühlig für die Kaffeepausen am frühen Morgen.

Ferner gilt mein Dank auch externen Kollegen, wie Karsten Bittkau, Benedikt Bläsi, Reinhard Carius, Volker Hagemann, Thomas Pertsch, Uwe Rau und Ralf B. Wehrspohn für die sehr gute Zusammenarbeit.

Im Rahmen der Projekte NanoVolt und Nanosun hatte ich auch das Privileg Thomas Beckers, Jan-Christoph-Goldschmidt, Christian Helgert, Thomas Kirchartz,

Matthias Kroll, Martin Otto, Marius Peters, Liv Prönnecke, Carolin Ulbrich, Johannes Üpping und Lorenz Steidl kennen zu lernen. Neben der offenen und fruchtbaren Zusammenarbeit genoß ich auch die gemeinsamen Doktorandentreffen, bei denen ich unter anderem Zeuge der legendären Schwein-zu-Wurst-Effizienz jenseits der eins wurde. Insbesondere möchte ich mich an dieser Stelle noch einmal explizit bei Thomas Kirchartz, Carolin Ulbrich und Johannes Üpping bedanken, da sie mir gezeigt haben, wie gut eine Zusammenarbeit funktionieren kann.

Des Weiteren möchte ich mich bei Martin Bischoff, Roland Koim, Claudia Schnohr und Frank Setzpfandt bedanken, mit denen ich meine Studienzeit und im Speziellen etliche Doppelkopfspiele verbringen durfte.

Rückblickend bin ich auch Menschen zu Dank verpflichtet, die es so vielleicht nicht ahnen. Dazu gehören zuvorderst die Entwickler von POV-Ray, die Entwickler von MATLAB und damit einer der besten Hilfen der Welt und die Entwickler von L^AT_EX. Der Aufbau meiner Literaturliste wurde mir enorm durch das NASA's Astrophysics Data System, die Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek und durch Google scholar erleichtert. Meine Finanzierung wurde durch die Geldgeber BMBF, DFG und Thüringer Aufbaubank ermöglicht.

Ferner lässt sich sagen, dass ich ohne Frank Ristau und Dr. Thorsten Skorupski wohl nie Physik studiert hätte. Dafür und für den Informatikleistungskurs 1994-1999 bin ich auch jetzt noch dankbar.

An dieser Stelle bedanke ich mich der Vollständigkeit halber noch bei allen Ungenannten.

Zu guter Letzt bedanke ich mich bei meinen Freunden und meiner Familie, die mich in allen erdenklichen Belangen unterstützt haben.

Erklärung

Hiermit erkläre ich ehrenwörtlich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig, ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel und Literatur angefertigt habe. Die aus anderen Quellen direkt oder indirekt übernommenen Daten und Konzepte sind unter Angabe der Quelle gekennzeichnet.

Weitere Personen waren an der inhaltlich-materiellen Erstellung der vorliegenden Arbeit nicht beteiligt. Insbesondere habe ich hierfür nicht die entgeltliche Hilfe von Vermittlungs- bzw. Beratungsdiensten (Promotionsberater oder andere Personen) in Anspruch genommen. Niemand hat von mir unmittelbar oder mittelbar geldwerte Leistungen für Arbeiten erhalten, die im Zusammenhang mit dem Inhalt der vorgelegten Dissertation stehen.

Die Arbeit wurde bisher weder im In- noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

Die geltende Promotionsordnung der Physikalisch-Astronomischen Fakultät ist mir bekannt.

Ich versichere ehrenwörtlich, dass ich nach bestem Wissen die reine Wahrheit gesagt und nichts verschwiegen habe.

Jena, 8. August 2011

Unterschrift