

Photonmanagement in Dünnsolarzellen

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

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

Master of Science in Mikrotechnik Samuel Wiesendanger

geboren am 22.08.1980 in St. Gallen.

Gutachter

1. Prof. Dr. Falk Lederer, Friedrich-Schiller-Universität Jena, Deutschland
2. Prof. Dr. Ralf B. Wehrspohn, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Deutschland
3. Prof. Dr. Bernd Rech, Technische Universität Berlin, Deutschland

Tag der Disputation: 16.06.2015

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen	4
2.1	Die halbleiterbasierte Solarzelle	4
2.2	Das Referenzsonnenspektrum	4
2.3	Funktionsweise einer halbleiterbasierten Solarzelle	6
2.3.1	Ladungsträgererzeugung	6
2.3.2	Ladungsträgertrennung	7
2.4	Materialanforderungen	8
2.5	Verlustmechanismen	8
2.5.1	Reflexionsverluste	8
2.5.2	Subbandlückenphotonen	9
2.5.3	Thermalisierungsverluste	9
2.5.4	Rekombinationsverluste	9
2.6	Photonmanagement	10
2.6.1	Texturierte Oberflächen	10
2.6.2	Hochkonversion	12
2.6.3	Abwärtskonversion	13
2.6.4	Dünnschichtzellen	13
2.6.5	Plasmonische Strukturen	14
2.7	Numerische Analyse	17
2.7.1	Die Maxwellgleichungen	17
2.7.2	Werkzeuge zur numerischen Lösung der Maxwellgleichungen	23
2.8	Zusammenfassung	31
3	Periodische Strukturen für das Photonmanagement	32
3.1	Effekte optischer Gitter	32
3.2	Zweidimensionale periodische Strukturen	36
3.3	Periodische Strukturen durch Selbstorganisation	40

3.3.1	Herstellungsverfahren	41
3.3.2	Bandstruktur	42
3.3.3	Bowtieantennen in organischen Solarzellen	45
3.4	Zusammenfassung	50
4	Teilperiodische Strukturen auf texturierten Substraten	51
4.1	Invertierte Opale auf texturierten Oberflächen	54
4.2	Zusammenfassung	62
5	Aperiodische Strukturen aus texturierten Substraten	63
5.1	Konform texturierte Oberflächen	63
5.2	Nichtkonform texturierte Oberflächen	71
5.3	Zusammenfassung	80
6	Transformationsoptik in der Photovoltaik	82
6.1	Die Maxwellgleichungen in nichtkartesischen Koordinatensystemen . . .	83
6.2	Reflexionsverlustminderung am Frontkontakt	88
6.3	Zusammenfassung	95
7	Zusammenfassung und Ausblick	96
	Literaturverzeichnis	99
	Anhang A	110
A.1	Publikationen	110
	Veröffentlichungen in begutachteten Zeitschriften	110
	Eingeladene Vorträge	110
	Konferenzbeiträge	111
	Buchkapitel	111
A.2	Danksagung	112
A.3	Erklärung	114
A.4	Lebenslauf	115
	Anhang B	117
B.1	Eigenwertproblem der FMM	117
B.2	Funktional der Helmholtzgleichung	121
B.3	Transformation der Maxwellgleichungen	122
B.4	Quasikonforme Abbildung	124

1 Einleitung

Mit dem Entscheid einiger europäischer Länder, langfristig auf die Atomenergie zu verzichten, traten die sogenannten erneuerbaren Energien in den Vordergrund. Damit sind jene Energiequellen gemeint, die nicht auf fossilen Brennstoffen basieren. Darunter fallen beispielsweise die Sonne, Wind- und Wasserkraft. Insbesondere der Sonne als Energiequelle wird erhebliches Potential attestiert. Tatsächlich hat die Leistung aus installierten Photovoltaikmodulen in Deutschland in den Boomjahren von 2009-2012, auch aufgrund nationaler Förderprogramme, jährlich um ca. 7 GW Leistung zugenommen. In den darauf folgenden Jahren erlitt die installierte Leistung einen erheblichen Einbruch, da Anpassungen des Erneuerbare-Energie-Gesetzes (EEG) insbesondere die Installation kleinerer Anlagen weniger attraktiv machten.

Die täglich auf der Erdoberfläche auftreffende Strahlungsenergie der Sonne übertrifft den weltweiten Bedarf zur Zeit um ein Vielfaches. Selbst mit moderaten Wirkungsgraden der Solarzellen wäre der Gesamtbedarf theoretisch gedeckt, ungeachtet der Probleme die Verteilung betreffend. Das zunehmende Bewusstsein für Energieverbrauch und -effizienz in weiten Teilen der Erde soll zudem den wachsenden Energiebedarf der aufstrebenden Länder ausgleichen, so die Hoffnung.

Trotzdem war die Photovoltaik bisher nicht in der Lage, einen signifikanten Anteil der Energienachfrage zu decken. Im Jahre 2013 leistete die Photovoltaik einen Beitrag von knapp 5 %^a zur Bruttostromerzeugung in Deutschland. Dies ist in erster Linie den immer noch höheren Gestehungskosten im Vergleich zu fossilen Energieträgern geschuldet. Die Gestehungskosten, manchmal auch Stromgestehungskosten genannt, sind die Herstellungs- und Betriebskosten einer Energieumwandlungsanlage und werden in Euro pro Kilowatt angegeben. Um die sogenannte Netzparität (grid parity) zu erreichen, bei der die Stromgestehungskosten erneuerbarer Energieträger und der Strompreis konventioneller elektrischer Energie sich gerade die Waage halten, müssen vor allem die Kosten der Photovoltaikmodule und -anlagen sinken.

Der überwiegende Anteil der installierten Solarzellen besteht nach wie vor aus kristallinem Silizium. Dieses besitzt die richtigen optischen Eigenschaften und die ge-

^aZahlen gemäß Bundesverband der Energie- und Wasserwirtschaft (BDEW) 2013.

forderte hohe Reinheit. Allerdings hat diese Reinheit ihren Preis. Die Herstellung der Siliziumeinkristalle ist sehr energieaufwändig, was zu Lasten des Modulpreises geht. Einen Ausweg bilden sogenannte Dünnschichtsolarzellen. Sie werden im Gegensatz zu den waferbasierten kristallinen Solarzellen nicht durch Zersägen des Einkristalls, sondern in einer Gasphasenabscheidung gewonnen. Wie der Name bereits andeutet, sind Dünnschichtsolarzellen um bis zu zwei Größenordnungen dünner als waferbasierte Zellen. Damit ist ein erheblicher Beitrag zur Kostenreduktion durch verringerten Materialverbrauch möglich. Allerdings erwachsen aus dünneren Zellen neue Nachteile, deren Auswirkungen minimiert werden sollen.

Die im Hinblick darauf angewandten Methoden werden unter dem Begriff Photonmanagement zusammengefasst. Damit sind optische Effekte gemeint, die eine effizientere Verwendung der solaren Photonen ermöglichen. Diesem Ziel soll in der vorliegenden Arbeit nachgegangen werden. Ein verfolgter Ansatz besteht darin, bereits bekannte und angewandte Methoden für das Photonmanagement miteinander zu kombinieren.

Mit einer Ausnahme im zweiten Kapitel werden ausschließlich Solarzellen basierend auf der einen oder anderen Form von Silizium betrachtet. Im Vordergrund steht dabei die numerische Betrachtung und Bewertung der vorgeschlagenen Elemente für das Photonmanagement. Grundlage bilden die Maxwellgleichungen, die mit Hilfe verschiedener Werkzeuge gelöst werden. Damit einhergehend können nur elektrodynamische Vorgänge beobachtet werden können.

Die nachfolgende Arbeit ist in sechs Kapitel unterteilt, die jeweils wieder in Abschnitte und Unterabschnitte gegliedert sind. Nach der Einleitung in diesem Kapitel über das Ziel dieser Arbeit folgen im nächsten Teil die Grundlagen, was die Photovoltaik und insbesondere das Photonmanagement als auch die numerischen Methoden betrifft.

Die nächsten drei Kapitel behandeln die betrachteten Ansätze zur Effizienzsteigerung von Solarzellen, wobei der Handlungsstrang von periodischen Strukturen über hybride Ansätze aus einer Komposition aus randomisierten und periodischen Elementen hin zu aperiodischen Geometrien verlaufen soll.

Das dritte Kapitel umfasst periodische Elemente für das Photonmanagement. Dabei lassen sich einige Effekte perfekter optischer Gitter anschaulich erklären. Sodann werden an die jeweiligen spektralen Anforderungen angepasste Gitter auf der sonnenzugewandten bzw. -abgewandten Seite einer absorbierenden Schicht angebracht. Eine separate Optimierung der beiden Gitter lässt eine erhebliche Steigerung des Absorptionsvermögens zu.

Das vierte Kapitel befasst sich mit Strukturen, die sowohl perfekte als auch amorphe Elemente aufweisen. In zahlreichen Arbeiten wurde bereits gezeigt, dass der Vor-

teil amorpher Strukturen häufig darin besteht, optisch breitbandig zu reagieren. Dies ist sehr oft vorteilhaft, denn selbst wenn die Resonanzen periodischer Strukturen lokal zu einer höheren Absorption führen, so ist in der Summe eine größere Bandbreite günstiger.

Im Mittelpunkt des fünften Kapitels stehen aperiodische Strukturen, die randomisierte Oberflächen und Grenzflächen enthalten. Hier geht es insbesondere um die Frage, was für Eigenschaften randomisierte Texturen aufweisen müssen, um eine Steigerung des Absorptionsvermögens zu erzielen. Ziel ist dabei nicht primär eine abgesonderte Optimierung der Texturen, sondern eine angepasste Fabrikationsmethode, die die geforderten optischen Eigenschaften der Textur in einfacher Weise vorwegnimmt.

Das sechste Kapitel schließlich widmet sich der Verwendung der Transformationsoptik in der Photovoltaik. Ziel dabei ist es, die vor allem in der Numerik oft vernachlässigten Leiterbahnen des frontseitigen Kontaktes in den Fokus zu richten, um die Reflexionsverluste an jenen zu reduzieren.

2 Grundlagen

2.1 Die halbleiterbasierte Solarzelle

In diesem Kapitel soll die Basis gelegt werden, die zum Verständnis dieser Arbeit vonnöten ist. Diese umfasst sowohl eine kurze Einführung in die Photovoltaik als auch einen Überblick über die verwendeten numerischen Methoden.

Die Mehrzahl der installierten Photovoltaikmodule besteht aus einem Halbleiter, der mit Hilfe geeigneter Dotierung einen p-n-Übergang bildet. Zwar gibt es auch Ansätze den in Pflanzen stattfindenden Prozess der Photosynthese nachzuempfinden, jedoch führen solche Solarzellen immer noch ein Nischendasein [O'Regan und Grätzel, 1991; Heo et al., 2013]. In dieser Arbeit sollen nur Systeme behandelt werden, die Halbleiter in der einen oder anderen Form enthalten und an der Grenzfläche von p- zu n-dotiertem Bereich ein internes Feld ausbilden. Letzteres ist ein Schlüsselement in halbleiterbasierten Solarzellen.

Im Wesentlichen lässt sich die Umwandlung der optischen Energie des Sonnenlichts in elektrische Energie mittels Solarzellen in zwei Schritte unterteilen. Die einfallenden Photonen treten mit der Zelle in Interaktion, indem sie absorbiert werden und dabei elektrische Ladungsträger generieren. Dieser Prozess soll als Ladungsträgererzeugung bezeichnet werden. In einem anschließenden Prozess müssen diese Ladungsträger voneinander getrennt werden, um eine unmittelbare Rekombination zu vermeiden. Dies geschieht gerade an dem internen Feld, das entsteht, wenn zwei unterschiedlich dotierte Halbleiter in Kontakt gebracht werden.

2.2 Das Referenzsonnenspektrum

Die spektrale Verteilung der auf der Erdoberfläche eintreffenden Photonen wird durch die verschiedenen Bestandteile der Erdatmosphäre sowie die tatsächlich in der Erdatmosphäre zurückgelegte Strecke beeinflusst. Ausgehend vom Sonnenspektrum außerhalb der Erdatmosphäre wurde das Photonenspektrum auf der Erdoberfläche für verschiedene Szenarien simuliert [Gueymard, 2001]. Das Sonnenspektrum außerhalb der Atmosphäre ist in Abb. 2.1a gezeigt. Als Referenzspektrum zur Bewertung der Effizi-

enz von Solarzellen hat sich hingegen der Datensatz ASTM G173-03g [ASTM, 2003] der American Society of Testing and Materials durchgesetzt. Es wurde für eine Luftmasse AM (engl. air mass) von 1.5 berechnet. Die Luftmasse AM ist dabei definiert als die mit der minimalen Distanz normierte Strecke, die das Sonnenlicht in der Atmosphäre zurücklegen muss, um zur Solarzelle zu gelangen, d. h.

$$\text{AM} = \frac{d}{h},$$

wobei d die tatsächlich zurückgelegte Distanz in der Erdatmosphäre bezeichnet und h die kleinstmögliche Distanz. Für eine kugelschalenförmig angenommene Atmosphäre ist h die Dicke der Schale in radialer Richtung (Abb. 2.1b). Soll die Solarzelle auf Meereshöhe installiert werden, so entspricht r dem mittleren Erdradius. In erster Näherung kann die Atmosphäre tatsächlich als Kugelschale betrachtet werden. Damit ist auch h konstant und die Luftmasse ist nur noch eine Funktion des Breitengrades φ . Geometrische Betrachtungen liefern schließlich

$$\text{AM}(\varphi) = \sqrt{\left(\frac{r}{d} \cos \varphi\right)^2 + \frac{2r}{d} + 1} - \frac{r}{d} \cos \varphi. \quad (2.1)$$

Für nördliche Breiten bis zu ca. 75° lässt sich die eins unter der Wurzel in Gl. (2.1) schreiben als $\left(\frac{1}{\cos \varphi}\right)^2$, und damit vereinfacht sich Gl. (2.1) zu

$$\text{AM}(\varphi) \approx \frac{1}{\cos \varphi}. \quad (2.2)$$

Der Wert AM1.5 für die Luftmasse wurde im Hinblick darauf gewählt, dass die jährlich zu erwartenden Ausbeuten mit photovoltaischen Anlagen in ausgewählten amerikanischen Städten über bzw. unter AM1.5 sich die Waage halten [Hulstrom et al., 1985; Ross und Gonzalez, 1980]. Ein angenommener Sollwert von 1.5 entspricht einer geographischen Breite von

$$\varphi = \arccos \frac{1}{1.5} \approx 48.2^\circ. \quad (2.3)$$

Die Bezeichnung AM0 für das Sonnenspektrum außerhalb der Erdatmosphäre ist folglich konsistent mit obiger Definition, da in diesem Falle $d = 0$ m gilt.

Wird nur die direkte Sonneneinstrahlung in Betracht gezogen, so entspricht der Neigungswinkel θ der Solarzellenebene zur lokalen Horizontalen gerade der nördlichen Breite. Das Referenzspektrum G173-03g^b hingegen enthält nicht nur die direkte Sonneneinstrahlung, sondern auch einen Anteil diffusen Lichts. Hierfür muss jedoch

^bDas 'g' steht für global und soll den Unterschied zur direkten Sonneneinstrahlung hervorheben

zusätzlich zur geographischen Breite der Neigungswinkel θ angegeben werden. Für das Spektrum ASTM G173-03g wurde ein Neigungswinkel $\theta = 37^\circ$ verwendet. Dies entspricht der mittleren nördlichen Breite der 48 zusammenhängenden Bundesstaaten der USA. Der Einfallswinkel des direkten Sonnenlichts auf die Solarzelle, gemessen von der Zellennormalen, beträgt somit 11.2° [Gueymard et al., 2002]. Das globale Sonnenspektrum ASTM G173-03g wurde in dieser Arbeit durchgehend verwendet.

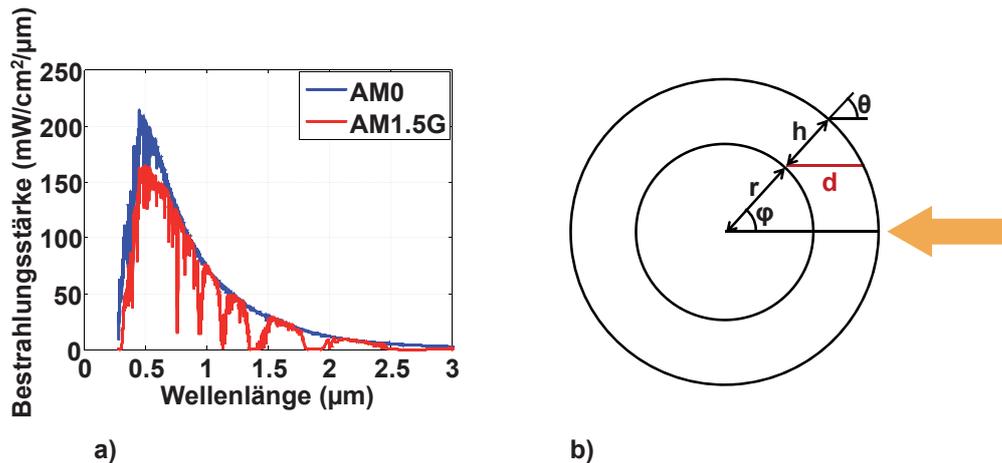


Abbildung 2.1: a) Spektrale Bestrahlungsstärke der Sonne außerhalb der Atmosphäre (blau) und auf Meereshöhe bei 48.2° nördlicher Breite. b) Skizze zur Berechnung der Luftmasse (air mass) in Abhängigkeit des Breitengrades φ .

2.3 Funktionsweise einer halbleiterbasierten Solarzelle

2.3.1 Ladungsträgererzeugung

Damit ein einfallendes Photon vom Halbleiter in der Solarzelle absorbiert werden kann, muss seine Energie größer als die Bandlücke E_g des Halbleiters sein, sodass ein Elektron vom Valenzband ins Leitungsband gehoben werden kann. Die im Valenzband hinterlassene positive Ladung wird Loch genannt. Das verwendete Materialsystem und damit einhergehend dessen Bandlücke ist demnach von entscheidender Bedeutung für die Funktion einer Solarzelle.

In Anbetracht der spektralen Eigenschaften des einfallenden Sonnenlichts auf der Erdoberfläche muss die Bandlücke so gewählt werden, dass möglichst viele Photonen absorbiert werden. Andererseits ist die maximale theoretische Energieausbeute eines Photons mit einer Energie $E > E_g$ begrenzt bei E_g , wohingegen die überschüssige Energie bei der Thermalisierung zur Leitungsbandunterkannte ungenutzt verloren

geht. Aus diesem Grund darf die Bandlücke nicht zu klein gewählt werden. Abbildung 2.2a zeigt die tatsächlich verwertbare Leistung des Sonnenspektrums für eine bestimmte Bandlücke E_g , charakterisiert durch die entsprechende Wellenlänge $\lambda_g = \frac{hc}{E_g}$, wobei h die Plancksche Konstante bezeichnet und c die Vakuumlichtgeschwindigkeit. Vom Originalspektrum können nur diejenigen Photonen absorbiert werden, deren Wellenlänge kleiner als λ_g ist. Die hochenergetischen Photonen mit $\lambda < \lambda_g$ wiederum erleiden Verluste. Wird ein Elektron vom Valenzband ins Leitungsband gehoben, so wird die Energiedifferenz zur Leitungsbandunterkante für die Anregung von Phononen mittels Kollisionen mit dem Kristallgitter verwendet und steht zur Energiegewinnung nicht mehr zur Verfügung. Somit bleibt unter dem Strich der grüne Anteil in Abb. 2.2 zur Energiegewinnung übrig.

Diese einfachen Betrachtungen erlauben eine erste Abschätzung der maximal erreichbaren Konversionseffizienz von optischer in elektrische Leistung als Funktion der Bandlücke E_g , indem die grüne Fläche aus Abb. 2.2a zur roten Fläche ins Verhältnis gesetzt wird. Es zeigt sich, dass kristallines Silizium mit einer Bandlücke von ca. 1.1 eV in dieser Hinsicht sehr gut geeignet ist (Abb. 2.2b). Der maximale Wirkungsgrad beträgt ca. 48 % und liegt fast genau bei 1.1 eV.

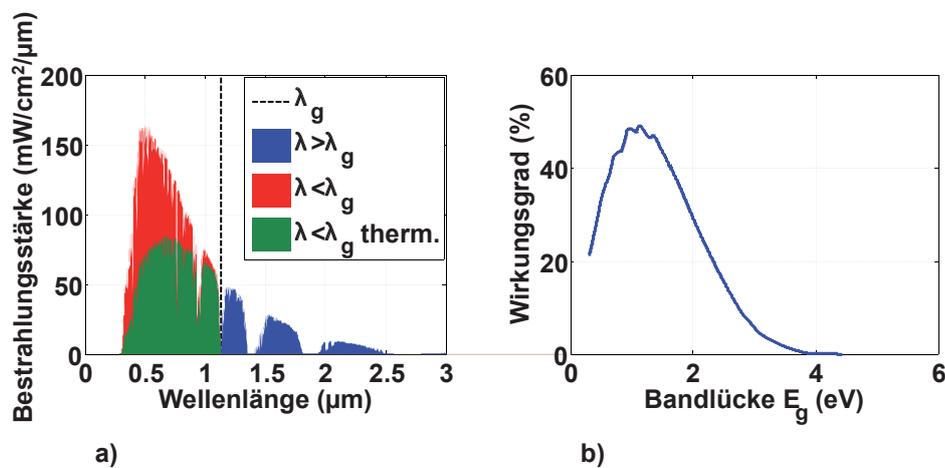


Abbildung 2.2: a) Gesamte und verwertbare im Sonnenspektrum enthaltene Leistungen für einen Halbleiter mit entsprechender Bandlücke $\lambda_g = hc/E_g$. Nach Abzug der Subbandlückenphotonen (blau) und der Thermalisierungsverluste (rot) bleibt die nützliche Leistung (grün) übrig. b) Maximaler Wirkungsgrad als Funktion der Bandlücke.

2.3.2 Ladungsträgertrennung

Die im ersten Schritt erzeugten Ladungsträger müssen einem äußeren Stromkreis zugeführt werden, um dort Arbeit zu verrichten. Die Trennung von Elektron und Loch

wird in der sogenannten Raumladungs- oder Verarmungszone eines p-n-Übergangs vollzogen, wobei die Ladungsträger aufgrund ihrer Ladung in entgegengesetzte Richtungen getrieben werden. Das elektrische Feld an der Grenze zwischen den p- und n-dotierten Regionen entsteht durch die Diffusion der Majoritätsladungsträger. Dabei hinterlassen sie die ortsfesten Atomrümpfe mit einer Überschussladung, daher der Name Raumladungszone. Dies geschieht sowohl für die Elektronen in der n-dotierten Region als auch für die Löcher in der p-dotierten Region. Dadurch tragen die Überschussladungen entgegengesetzte Vorzeichen und es baut sich ein elektrisches Feld auf. Dieser Vorgang dauert so lange fort, bis das elektrische Feld groß genug ist, um die Diffusionsströme zu unterbinden. Es entsteht ein Gleichgewichtszustand. Das elektrische Feld dehnt sich im Wesentlichen nur über die Verarmungszone aus. Im Vergleich zur Gesamtdicke aus p- und n-dotierter Schicht ist die Verarmungszone sehr dünn.

2.4 Materialanforderungen

Aus dem oben Gesagten folgt, dass die Wahrscheinlichkeit einer Absorption in der Verarmungszone verhältnismäßig gering ist. Idealerweise sollte die Absorption aber dort stattfinden, denn nur dort herrscht ein elektrisches Feld, um die Ladungsträger voneinander zu trennen. Trotzdem können außerhalb der Verarmungszone absorbierte Photonen zu einem verwertbaren Strom beitragen, wenn sie durch Diffusion zufällig in die Verarmungszone geraten. Folglich ist ein hochreiner Kristall mit wenigen Fehlstellen für eine funktionstüchtige Solarzelle dieser Art vonnöten. Kristallines Silizium erfüllt demnach zwei wichtige physikalische Voraussetzungen zur Verwendung in einer Solarzelle. Es besitzt die richtige Bandlücke zur Absorption von solaren Photonen und eine hinreichend große Diffusionslänge der erzeugten Ladungsträger.

2.5 Verlustmechanismen

Wie im Unterabschnitt 2.3.1 erwähnt, können vom gesamten Sonnenspektrum nur Teile zur Umwandlung in elektrische Energie genutzt werden. Nachfolgend werden die Hauptverlustkanäle einzeln beschrieben.

2.5.1 Reflexionsverluste

Ein Teil der Energie des einfallenden Lichtes geht durch Reflexion an der sonnenzugewandten Seite verloren. Verursacht werden diese Verluste durch den relativ hohen Unterschied im Brechungsindex von Umgebungsmedium und absorbierendem Halbleiter. Bei senkrechtem Einfall aus Luft mit $n \approx 1$ und einem Brechungsindex des Halbleiters von $n \approx 3.5$ ergeben die Fresnelschen Formeln für die Intensität einen Reflexionsgrad

von $R = \frac{(3.5-1)^2}{(3.5+1)^2} \approx 31\%$. Diese Zahl lässt sich jedoch stark reduzieren, wenn eine sogenannte Antireflexionsschicht verwendet wird. Diese Antireflexionsschicht ist idealerweise transparent für das Sonnenlicht und besitzt einen Brechungsindex, der zwischen demjenigen des Umgebungsmediums und dem des Halbleiters liegt. Die beiden neuen Reflexionsgrade an den Grenzflächen der Antireflexionsschicht sind jeweils kleiner als der Reflexionsgrad R ohne Antireflexionsschicht. Folglich ist auch deren Produkt und damit der Gesamtreflexionsgrad kleiner als R .

Aber selbst bei einer perfekten Antireflexionsschicht treten noch Verluste auf, die durch die Leiterbahnen des Frontseitenkontaktes verursacht werden. Dieser Anteil macht ca. 10% aus. Einen möglichen Ansatz zur Minderung dieser Verluste wird im Kapitel 6 dargelegt.

2.5.2 Subbandlückenphotonen

Die Erzeugung eines Elektron-Loch-Paares ist nur möglich, wenn die Energie des einfallenden Photons größer als die Bandlücke ist, damit ein Elektron vom Valenzband ins Leitungsband angehoben werden kann. Alle Photonen mit geringerer Energie werden nicht absorbiert. Ein Ausweg bildet die sogenannte Hochkonversion zweier niederenergetischer Photonen zu einem Photon mit einer Energie größer als die Bandlücke.

2.5.3 Thermalisierungsverluste

Am anderen Ende des Spektrums reicht die Energie der Photonen zwar aus, um Elektron-Loch-Paare zu erzeugen, jedoch bleibt auch hier der Teil der Energie, der die Bandlückenenergie übersteigt, ungenutzt, da das ins Leitungsband gehobene Elektron im Bereich von Picosekunden durch mehrfache Kollisionen mit dem Kristallgitter an die Unterkante des Leitungsbandes relaxiert.

2.5.4 Rekombinationsverluste

Ein ins Leitungsband gehobenes Elektron kann wieder mit einem Loch im Valenzband interagieren. Dieser Vorgang wird Rekombination genannt und tritt insbesondere an Stellen mit einer hohen Kristalldefektdichte auf, wie zum Beispiel an den Oberflächen (Oberflächenrekombination). An Oberflächen ist die Kristallstruktur abrupt gestört. Die freien Bindungen erzeugen Zustände in der Bandlücke. Man verhindert dies, indem die Oberflächen durch Aufbringen einer Oxidschicht passiviert werden [Nelson, 2003].

2.6 Photonmanagement

Nicht nur aus optischer Sicht ist kristallines Silizium ein geeignetes Material für Solarzellen. Es ist nicht toxisch und in großen Mengen vorhanden. Allerdings ist die Herstellung hochreinen Siliziums sehr energieintensiv. Siliziumeinkristalle werden mittels des Czochralski-Verfahrens, benannt nach seinem Erfinder, gewonnen. Es ist ein Tiegelziehverfahren, bei dem ein Saatkristall in eine Schmelze des zu kristallisierenden Materials getaucht wird. Der Saatkristall wird dabei in ständiger Rotation langsam aus der Schmelze gezogen. Das erstarrende Material lagert sich an den Saatkristall an und setzt dessen Kristallgitter fort [Plummer et al., 2000].

Ein weiterer Vorteil kristallinen Siliziums ist die Tatsache, dass die Verarbeitung durch die Kenntnisse der Mikroelektronik sehr ausgereift ist. Ein wohl entscheidender Nachteil hingegen sind die damit verbundenen hohen Kosten zur Herstellung ganzer Module, die einem breiten Marktanteil zuwiderlaufen.

Die vordergründig einfachste Lösung wäre von waferbasierten, mehrere hundert Mikrometer dicken Zellen zu sogenannten Dünnschichtsolarzellen überzugehen. Dünnschichtsolarzellen werden nicht durch Zersägen eines Einkristalls gewonnen, sondern durch physikalische oder chemische Gasphasenabscheidung. Der Zusatz 'Dünnschicht' bezieht sich dabei eher auf Technologien mit potentieller Massenfertigung als auf die tatsächliche geometrische Ausdehnung einer Schicht.

In dieser Weise hergestellte Solarzellen besitzen jedoch eine mindere Materialqualität. Sie zeigen eine höhere Defektdichte, die folglich eine höhere Rekombinationsrate im Vergleich zu reinen Kristallen nach sich zieht. Dies ist gleichbedeutend mit einer kleineren Diffusionslänge. Um jedoch auch bei Dünnschichtsolarzellen ein akzeptables Maß an Absorption zu erreichen, sind zusätzliche Konzepte vonnöten. Diese Konzepte werden unter dem Begriff Photonmanagement zusammengefasst. Damit gemeint sind optische Effekte zur Erhaltung, im besten Falle sogar zur Steigerung, der Absorption bei kleinerem Volumen des absorbierenden Halbleiters.

2.6.1 Texturierte Oberflächen

Mittlerweile zum Standard geworden sind texturierte Oberflächen. Sie vereinen zwei wichtige Eigenschaften für das Photonmanagement in sich. Einerseits führen sie zu einem sanfteren Übergang des Brechungsindexverlaufs vom Umgebungsmedium zum Halbleiter, andererseits stellen sie einen lateralen Wellenvektor zur Verfügung, womit die Beugung in höhere Winkel zur Einfallrichtung begünstigt wird. Daraus resultiert zum einen ein reduzierter Reflexionsgrad und zum anderen eine Verlängerung des optischen Weges im Halbleiter. Dies ist insbesondere für die großen Wellenlängen im

Sonnenspektrum wichtig, bei welchen der Absorptionskoeffizient gering ist [Dewan et al., 2012; Isabella et al., 2010b].

Die wohl einfachste Texturierung einer Oberfläche ist ein binäres Gitter [Zanotto et al., 2010; Bozzola et al., 2012]. Ein solches ist in zwei Dimensionen in Abb. 2.3a gezeigt. $|\mathbf{k}_I| = \frac{2\pi}{\lambda}n_I$ und $|\mathbf{k}_{II}| = \frac{2\pi}{\lambda}n_{II}$ sind die Beträge der Wellenvektoren der einfallenden Welle im Medium charakterisiert durch den Brechungsindex n_I beziehungsweise der gebeugten Welle im Medium mit Brechungsindex n_{II} . In der Solarzellengemeinschaft hat es sich durchgesetzt vom Brechungsindex zur Charakterisierung eines Materials zu sprechen. Damit ist die Quadratwurzel aus der relativen Permittivität gemeint. Der vom Gitter bereitgestellte laterale Wellenvektor entspricht dabei einem reziproken Gittervektor mit dem Betrag $G = \frac{2\pi}{\Lambda}$, wobei Λ die Periode des Gitters im direkten Raum bezeichnet. Die Impulserhaltung verlangt, dass der Wellenvektor der gebeugten Welle \mathbf{k}_{II} die Summe aus dem Wellenvektor \mathbf{k}_I der einfallenden Welle und einem reziproken Gittervektor \mathbf{G} ist, d. h.

$$\mathbf{k}_{II} = \mathbf{k}_I + \mathbf{G}. \quad (2.4)$$

Der komplette Satz potentiell propagierender Moden lässt sich wie folgt bestimmen (Abb. 2.3). Man zeichne zwei konzentrische Kreise mit Radien $|\mathbf{k}_I|$ und $|\mathbf{k}_{II}|$ und trage den Wellenvektor des einfallenden Feldes \mathbf{k}_I ein. Nun addiere man zur Parallelkomponente k_{Ix} alle ganzzahligen Vielfachen von G und lege ausgehend vom Kreiszentrum die Gesamtstrecke $k_{Ix} + mG$ so, dass der Endpunkt der Strecke auf der Kreisbahn mit Radius $|\mathbf{k}_{II}|$ zu liegen kommt. Daraus ergibt sich die Normalkomponente k_{IIz} . Mit dem Satz des Pythagoras' erhält man einen mathematischen Ausdruck für k_{Iz} in Reflexion [Gl. (2.5a)] und für k_{IIz} in Transmission [Gl. (2.5b)]. Hierbei sind m_I und m_{II} ganze Zahlen, die die jeweilige Beugungsordnung in Reflexion respektive Transmission bezeichnen. Also ist

$$k_{Iz}^2 = k_I^2 - \left(k_{Ix} + \frac{2\pi}{\Lambda}m_I\right)^2 = (k_0n_I)^2 - \left(k_0n_I \sin \theta_I + \frac{2\pi}{\Lambda}m_I\right)^2 \quad (2.5a)$$

$$k_{IIz}^2 = k_{II}^2 - \left(k_{Ix} + \frac{2\pi}{\Lambda}m_{II}\right)^2 = (k_0n_{II})^2 - \left(k_0n_I \sin \theta_I + \frac{2\pi}{\Lambda}m_{II}\right)^2. \quad (2.5b)$$

Die zugehörigen Beugungswinkel sind dann gegeben durch

$$\alpha_{I,m} = \arccos \frac{k_{Iz,m}}{k_I} \quad (2.6a)$$

$$\alpha_{II,m} = \arccos \frac{k_{IIz,m}}{k_{II}}. \quad (2.6b)$$

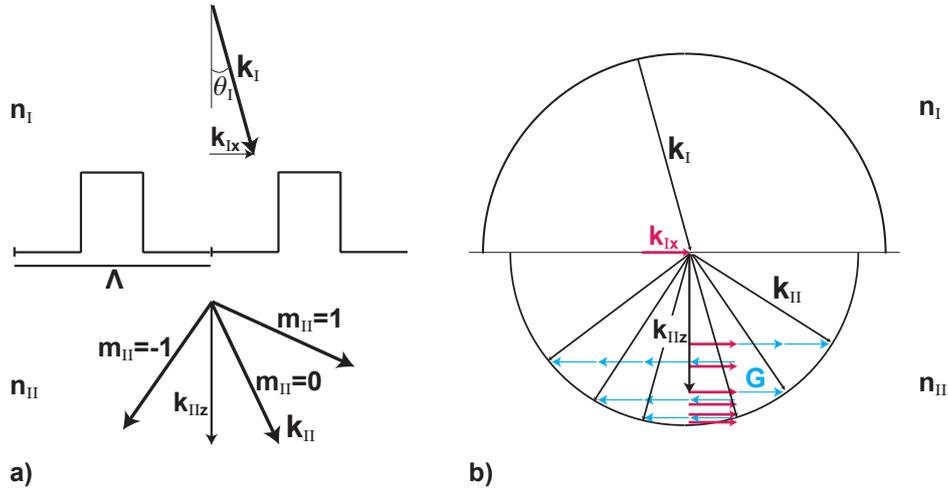


Abbildung 2.3: a) Beugung einer ebenen Welle mit Wellenvektor \mathbf{k}_I an einem binären Gitter der Periode Λ . Die verschiedenen Beugungsordnungen in Transmission sind schematisch mit den ganzen Zahlen m_{II} gekennzeichnet. Nicht gezeigt sind die ebenfalls auftretenden Beugungsordnungen in Reflexion. b) Die Normalkomponenten k_{IIz} ergeben sich aus dem Wellenvektor \mathbf{k}_{II} mit $|\mathbf{k}_{II}| = \frac{2\pi}{\lambda}n_{II}$ im Austrittsmedium und der Parallelkomponente $k_{Ix} + G$, für die k_{IIz} reellwertig ist.

Aufgrund ihrer Periodizität besitzen optische Gitter nur diskret verteilte Resonanzwellenlängen. Dennoch sind Effizienzsteigerungen mittels periodischer Elemente schon vielfach nachgewiesen worden [Zanotto et al., 2010; Mann et al., 2011; Bozzola et al., 2012]. Um hingegen eine breitbandige Antwort zu erhalten, müssen viele Gitter unterschiedlicher Periode überlagert werden. Im Grenzfall sehr vieler Einzelgitter entsteht so eine randomisierte Textur [Dewan et al., 2012].

2.6.2 Hochkonversion

Ein weiterer Ansatz zur Effizienzsteigerung von Solarzellen besteht in dem Bestreben, die Photonen mit Energien unterhalb der Bandlücke zu nutzen, denn selbst eine Solarzelle aus Silizium mit einer nahezu idealen Bandlücke von ca. 1.1 eV erleidet ungefähr 18% Verluste im langwelligen Spektralbereich. Mittels sukzessiver Absorption zweier niederenergetischer Photonen und anschließender Emission eines Photons mit der Summe der beiden Einzelenergien kann auch dieser Spektralbereich jenseits der Bandlücke verwendet werden (Abb. 2.4a). Dieser Prozess wird Hochkonversion (Up-conversion) genannt, da die Frequenz des emittierten Photons im Vergleich zu der der absorbierten Photonen zunimmt [Trupke et al., 2002b]. Als Hochkonvertermaterial, in welchem die schrittweise Absorption stattfinden soll, wird insbesondere trivalentes Erbium Er^{3+} in Betracht gezogen [Shalav et al., 2005; Fischer et al., 2010]. Als Erweiterung dieser Methode wurde überdies vorgeschlagen, plasmonische Nanopartikel einzubetten, die durch Nahfeldkopplung sowohl die Absorption zweier Photonen des

einfallenden Feldes als auch die Emission des hochkonvertierten Photons begünstigen sollen [Fischer et al., 2011].

2.6.3 Abwärtskonversion

Die Photonen im kurzwelligen Spektralbereich können ebenfalls effizienter verwertet werden, indem die Energie, die die Bandlücke übersteigt, nicht bei der Anregung von Phononen verloren geht, sondern das einzelne Photon in zwei energieärmere Photonen umgewandelt wird (Abb. 2.4b). Analog zur Hochkonversion wird dieser Prozess als Abwärtskonversion (Downconversion) bezeichnet [Trupke et al., 2002a; Richards, 2006].

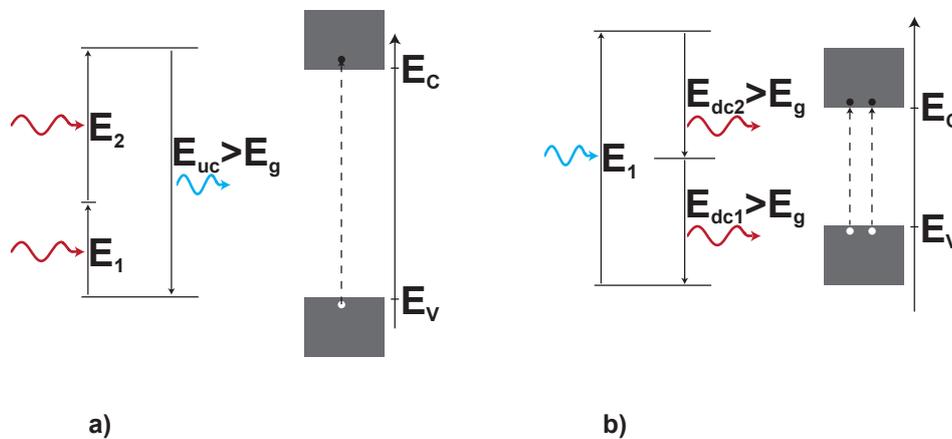


Abbildung 2.4: a) Hochkonversion zweier niederenergetischer Photonen mit Energien E_1 und E_2 zu einem Photon mit Energie E_{uc} , das vom Halbleiter absorbiert werden kann. b) Abwärtskonversion eines hochenergetischen Photons mit Energie E_1 zu zwei niederenergetischen Photonen mit Energien E_{dc1} und E_{dc2} . Die Energien der abwärtskonvertierten Photonen müssen jeweils größer sein als die Bandlücke, um absorbiert zu werden.

2.6.4 Dünnschichtzellen

Die in den vorangegangenen Unterabschnitten skizzierten Maßnahmen zielten vor allem darauf ab, das Kosten-Nutzen-Verhältnis zu günstigeren Werten zu verschieben, indem die Effizienz der Solarzelle gesteigert wird. Einen erheblichen Anteil der Kosten von kristallinen Siliziumsolarzellen macht jedoch das Basismaterial Silizium aus. Allein die Mengenreduktion des Siliziums kann demnach einen bedeutenden Kostenvorteil nach sich ziehen. Aber auch die Verwendung von mikrokristallinem Silizium, das z. B. aus der Gasphase abgeschieden werden kann, bietet Kosteneinsparungen.

Natürlich sind diese zwei Maßnahmen nicht frei von Nachteilen. Der Übergang von waferbasierten Zellen zu Dünnschichtzellen geht mit einer verminderten Absorp-

tion insbesondere bei den großen Wellenlängen einher. Mikrokristallines Silizium lässt sich zwar leichter herstellen, hat aber aufgrund seiner schlechteren Materialqualität eine höhere Rekombinationsrate. Typische Schichtdicken dürfen die Diffusionslänge der elektrischen Ladungsträger nicht überschreiten, da außerhalb der Verarmungszone generierte Elektron-Loch-Paare mit hoher Wahrscheinlichkeit wieder rekombinieren, bevor sie das sie voneinander trennende interne elektrische Feld des p-n-Übergangs erreicht haben. Aus diesem Grund weisen Dünnschichtsolarzellen meist eine intrinsische Schicht zwischen den p- bzw. n-dotierten Regionen auf. Damit wird der Ort, an dem ein elektrisches Feld herrscht, praktisch auf die gesamte intrinsische Region ausgeweitet, womit die Trennung der Ladungsträger bedeutend wahrscheinlicher wird.

2.6.5 Plasmonische Strukturen

An der Grenze eines Halbleiters zu einem Metall können sogenannte Oberflächenplasmonpolaritonen (SPP, engl. surface plasmon polariton) angeregt werden. Das sind Quasiteilchen, die bei der Kopplung zwischen kollektiven Schwingungen der Leitungsbandelektronen, sogenannten Plasmonen, und dem elektromagnetischen Feld entstehen. In seiner einfachsten Form ist ein SPP ein elektromagnetisches Feld, das sich entlang einer planaren Grenzfläche zwischen einem Metall und einem Dielektrikum fortpflanzt (Abb. 2.5). Die Amplitude des Feldes fällt exponentiell mit der Entfernung zur Grenzfläche ab. Das SPP ist demnach ein Oberflächenfeld, dessen Ausdehnung sich auf die nächste Umgebung zur Grenzfläche beschränkt. Die lokale Begrenzung führt zu einer Erhöhung der Feldamplitude an der Grenzfläche. Dieses Phänomen wiederum hat in eine Vielzahl von Anwendungen Eingang gefunden [Boisdé und Harmer, 1996; Agranovich (Editor) und Mills (Editor), 1982; Ponath (Editor) und Stegeman (Editor), 1991; Zhang et al., 2014].

Die Dispersionsrelation erhält man mit Hilfe der Maxwellgleichungen und der entsprechenden Übergangsbedingungen [Boardman, 1982; Zayats et al., 2005]. Die Maxwellgleichungen werden im nächsten Abschnitt ausführlich betrachtet. Die Lösungen der Maxwellgleichungen sind wellenförmig in x-Richtung, wohingegen die Amplitude in z-Richtung mit zunehmender Entfernung von der Grenzfläche bei $z = 0$ exponentiell abfällt. Als erstes soll ein TM-polarisiertes Feld betrachtet werden, das nur eine magnetische Feldkomponente parallel zur Grenzfläche besitzt.

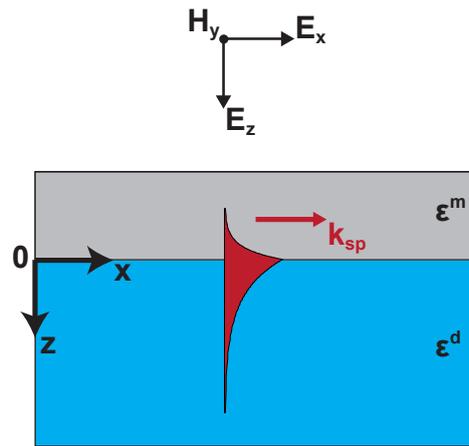


Abbildung 2.5: Grenzfläche zwischen einem Dielektrikum (blau) mit relativer Permittivität ϵ^d und einem Metall (grau) mit relativer Permittivität ϵ^m .

Die Ausdrücke für die Felder bei $z > 0$ lauten

$$\mathbf{H}^>(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} 0 \\ A \\ 0 \end{pmatrix} e^{ik_x x - k_z^d z - i\omega t} \quad (2.7a)$$

$$\mathbf{E}^>(\mathbf{r}, t) = -A \frac{c}{i\omega \epsilon_0 \epsilon^d} \begin{pmatrix} Ak_z^d \\ 0 \\ Bik_x \end{pmatrix} e^{ik_x x - k_z^d z - i\omega t}. \quad (2.7b)$$

Für $z < 0$ gilt

$$\mathbf{H}^<(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} 0 \\ B \\ 0 \end{pmatrix} e^{ik_x x + k_z^m z - i\omega t} \quad (2.8a)$$

$$\mathbf{E}^<(\mathbf{r}, t) = -\frac{c}{i\omega \epsilon_0 \epsilon^m} \begin{pmatrix} -Bk_z^m \\ 0 \\ ik_x \end{pmatrix} e^{ik_x x + k_z^m z - i\omega t}. \quad (2.8b)$$

Dabei sind k_z^d und k_z^m die z-Komponenten des Wellenvektors im dielektrischen bzw. metallischen Medium, k_x ist die Komponente parallel zur Grenzfläche. Die Koeffizienten A und B werden durch die Übergangsbedingungen festgelegt. Die Gleichungen

für das elektrische Feld erhält man mit der Gleichung $\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ und $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$. Die z -Komponenten k_z^d und k_z^m lauten

$$k_z^d = \sqrt{k_x^2 - \varepsilon^d \left(\frac{\omega}{c}\right)^2} \quad (2.9a)$$

$$k_z^m = \sqrt{k_x^2 - \varepsilon^m \left(\frac{\omega}{c}\right)^2}. \quad (2.9b)$$

Die Übergangsbedingungen bei $z = 0$ fordern Stetigkeit der Parallelkomponenten E_x und H_y der Felder. Daraus folgt

$$A = B \quad (2.10a)$$

$$A \frac{k_z^d}{\varepsilon^d} = -B \frac{k_z^m}{\varepsilon^m}. \quad (2.10b)$$

Dieses Gleichungssystem für A und B hat nicht triviale Lösungen falls

$$\frac{k_z^m}{k_z^d} = -\frac{\varepsilon^m}{\varepsilon^d}. \quad (2.11)$$

Den Wellenvektor des SPP erhält man schließlich, indem Gl. (2.11) quadriert wird und die Gln. (2.9) eingesetzt werden

$$k_x = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\varepsilon^m \varepsilon^d}{\varepsilon^m + \varepsilon^d}}. \quad (2.12)$$

Unter bestimmten Voraussetzungen kann der Realteil des Nenners theoretisch zum Verschwinden gebracht werden, und folglich divergiert k_x . Allerdings muss dazu der Realteil von ε^m negativ sein. Dies ist bei Metallen für Frequenzen unterhalb der Plasmafrequenz der Fall. Physikalisch möglich sind jedoch nur endliche Werte, die nichtsdestotrotz sehr groß werden können. Diesen Effekt macht man sich nicht zuletzt auch in der Photovoltaik zu Nutze.

Ein analoges Vorgehen für ein TE-polarisiertes Feld mit nur einer elektrischen Feldkomponente parallel zur Grenzfläche lässt für die entsprechenden Gl. (2.10) nur Trivillösungen zu. TE polarisierte SPP sind folglich für planare Grenzflächen wie in Abb. 2.5 nicht möglich.

Der Ansatz zur Absorptionsgradsteigerung mittels der plasmonischen Feldüberhöhung wird auch in der Photovoltaik verfolgt [Rockstuhl et al., 2008; Atwater und Polman, 2010; Pillai und Green, 2010; Haug et al., 2011].

2.7 Numerische Analyse

Die Ausbreitung elektromagnetischer Wellen wird durch die Maxwellgleichungen beschrieben. Um die im vorangegangenen Abschnitt vorgestellten Maßnahmen zur Effizienzsteigerung einer Solarzelle quantitativ zu beurteilen, werden hier verschiedene numerische Methoden angewandt. Ziel dieser Methoden ist es, die Maxwellgleichungen numerisch zu lösen und das ortsabhängige elektrische oder magnetische Feld zu bestimmen. Hierbei ist es möglich, im Zeitbereich oder aber im Frequenzbereich zu arbeiten. Obwohl Simulationen im Zeitbereich gewisse Vorteile mit sich bringen, namentlich ein ganzes Spektrum mit einer einzigen Simulation zu berechnen, ist die Abbildung der dielektrischen Funktionen der verwendeten Materialien alles andere als trivial. Aus diesem Grund werden für die vorliegende Arbeit Methoden im Frequenzbereich verwendet. Zum einen die Fourier-Modal-Methode (FMM) [Moharam und Gaylord, 1981; Li, 1997] und außerdem die Finite-Elemente-Methode (FEM) [Jin, 2002; Silvester und Ferrari, 1990].

Im Folgenden werden zunächst die Maxwellgleichungen eingeführt. Meist ist jedoch nicht das elektrische oder magnetische Feld von Interesse, sondern davon abgeleitete Größen. Letztere werden im Anschluss hergeleitet. Die beiden numerischen Methoden zu deren Lösung sollen kurz beschrieben werden.

2.7.1 Die Maxwellgleichungen

2.7.1.1 Die Maxwellgleichungen im Zeitbereich

Die Maxwellgleichungen im Zeitbereich lauten

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \rho_{ext}(\mathbf{r}, t) \quad (2.13a)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \quad (2.13b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.13c)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{j}_{makr}(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t). \quad (2.13d)$$

Die Kürzel 'ext' und 'makr' im Index sollen klarstellen, dass es sich um die externe Ladungsdichte $\rho_{ext}(\mathbf{r}, t)$ bzw. die makroskopische Stromdichte $\mathbf{j}_{makr}(\mathbf{r}, t)$ handelt. Die Gl. (2.13) enthalten neben dem elektrischen Feld $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ und der magnetischen Flussdichte $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ zwei Hilfsgrößen. Die dielektrische Verschiebung $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ und das magnetische Feld $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$. Wird die Multipolentwicklung bei der makroskopisch gemittelten Dipoldichte abgebrochen, dann können die elektrische Dipoldichte, auch dielektrische

Polarisation, $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ und die magnetische Dipoldichte, auch Magnetisierung, $\mathbf{M}(\mathbf{r}, t)$ eingeführt werden

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \varepsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{P}(\mathbf{r}, t) \quad (2.14a)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\mu_0} [\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{M}(\mathbf{r}, t)], \quad (2.14b)$$

wobei ε_0 und μ_0 die Permittivität bzw. Permeabilität des Vakuums bezeichnen und über die Beziehung $c^2 = \frac{1}{\varepsilon_0 \mu_0}$ mit der Lichtgeschwindigkeit c im Vakuum verbunden sind. Da in dieser Arbeit ausschließlich Frequenzen im optischen Spektralbereich betrachtet werden sollen, kann die externe Ladungsdichte vernachlässigt werden. Das Gleiche gilt für die Magnetisierung $\mathbf{M}(\mathbf{r}, t)$, da in natürlich vorkommenden Materialien die magnetischen Effekte bei optischen Frequenzen ebenfalls verschwindend klein sind [Lifshitz et al., 1984].

Ein oszillierendes Feld, das bei der Kreisfrequenz ω schwingt, wird monochromatisch genannt. Der Einfachheit halber wird das Feld in komplexer Schreibweise dargestellt

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t}. \quad (2.15)$$

$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)$ ist die frequenzabhängige Amplitude. Das reale elektrische Feld $\mathbf{E}_r(\mathbf{r}, t)$ ist jedoch reell und lässt sich mittels Gl. (2.15) schreiben als

$$\mathbf{E}_r(\mathbf{r}, t) = \text{Re}[\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)] = \frac{1}{2} [\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, t)] = \frac{1}{2} [\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + c.c.]. \quad (2.16)$$

$\text{Re}[\]$ bezeichnet dabei den physikalisch relevanten Realteil des Ausdrucks in der Klammer. Das konjugierte Komplex eines Ausdrucks wird mit einem * oder mit *c.c.* (engl. complex conjugate) symbolisiert. Gleichungen (2.15) und (2.16) wurden hier beispielhaft für das elektrische Feld $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ aufgeschrieben, haben aber für alle Felder Gültigkeit. Besitzt $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ eine beliebige Zeitabhängigkeit, so kann es zerlegt werden in eine Superposition aus monochromatischen Feldern mit passenden Amplituden $\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)$, welche durch die inverse Fouriertransformation von $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ gegeben sind

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) e^{i\omega t} dt. \quad (2.17)$$

Für die Beziehung zwischen $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r}, \omega)$ und $\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)$ folgt aus Gl. (2.14a) und der Linearität der Fouriertransformierten

$$\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r}, \omega) = \varepsilon_0 \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) + \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}, \omega). \quad (2.18)$$

Die in den Gln. (2.13) auftretenden zeitlichen Ableitungen führen, angewandt auf Gl. (2.17), zu einem zusätzlichen Faktor $-i\omega$ pro Ableitung. Die komplexen Maxwellgleichungen im Frequenzraum lauten mit oben genannten Annahmen demnach

$$\varepsilon_0 \nabla \cdot \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) + \nabla \cdot \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}, \omega) = 0 \quad (2.19a)$$

$$\nabla \times \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega\mu_0 \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) \quad (2.19b)$$

$$\nabla \cdot \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) = 0 \quad (2.19c)$$

$$\nabla \times \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) = \hat{\mathbf{j}}_{\text{makr}}(\mathbf{r}, \omega) - i\omega \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}, \omega) - i\omega\varepsilon_0 \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega). \quad (2.19d)$$

Die Gln. (2.19) müssen nun noch umformuliert werden, sodass sie nur noch ein unbekanntes Feld enthalten. Dies kann sowohl für das elektrische Feld $\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)$ als auch für das magnetische Feld $\hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega)$ erfolgen. Die Herleitung der sogenannten Wellengleichung soll hier für das elektrische Feld geschehen, verläuft für das magnetische Feld aber ganz analog. Die Idee ist die Folgende: Man wende auf beiden Seiten von Gl. (2.19b) den Rotationsoperator an und setze Gl. (2.19d) ein, d. h.

$$\nabla \times \nabla \times \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega\mu_0 \hat{\mathbf{j}}_{\text{makr}}(\mathbf{r}, \omega) + \mu_0\omega^2 \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}, \omega). \quad (2.20)$$

Die dielektrische Polarisation $\hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}, \omega)$ ist ein reines Materiefeld, dessen Anteil im Vakuum verschwindet. Es beschreibt die Antwort der Materie auf ein externes Feld. Diese Antwort ist im Allgemeinen eine komplizierte Funktion von $\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)$. Für nicht allzu hohe externe Felder kann jedoch eine lineare Abhängigkeit angesetzt werden

$$\hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}, \omega) = \varepsilon_0 \chi_e(\mathbf{r}, \omega) \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega). \quad (2.21)$$

Die komplexe Proportionalitätskonstante $\chi_e(\mathbf{r}, \omega)$ wird elektrische Suszeptibilität genannt. Der Beitrag der Leitungselektronen zur Stromdichte kann mit Hilfe der elektrischen Leitfähigkeit in die relative Permittivität integriert werden, sodass der Term $\hat{\mathbf{j}}_{\text{makr}}(\mathbf{r}, \omega)$ entfällt. Die Wellengleichung (2.20) lautet schließlich

$$\nabla \times \nabla \times \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = 0. \quad (2.22)$$

Hierbei bezeichnet $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega) = 1 + \chi_e(\mathbf{r}, \omega)$ die dimensionslose relative Permittivität. Das magnetische Feld $\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega)$ kann mit Gl. (2.19b) bestimmt werden.

2.7.1.2 Dissipative Prozesse und der Poyntingsche Satz

Die numerische Bewertung eines Modells einer Solarzelle erfolgt nun unter der An-

nahme einer Beleuchtung des Modells mit einer ebenen Welle einer bestimmten Frequenz ω_0 . Es werden keine Pulse betrachtet, womit für ein komplettes Spektrum über alle Frequenzen gescannt werden muss. Die Fouriertransformierte eines Feldes reduziert sich dann auf eine Fourierkomponente der Frequenz ω_0 . Für jede Frequenz muss sodann bestimmt werden, wie viele Photonen des Sonnenspektrums absorbiert werden und in welchem Bereich des Modells, denn mit parasitärer Absorption, z. B. in den Metallkontakten, tritt auch Absorption auf, die nicht von Nutzen für die Ladungsträgererzeugung ist.

Der Poyntingsche Satz beschreibt die Energieerhaltung elektromagnetischer Felder und wird dazu verwendet, um aus den berechneten ortsabhängigen Feldverteilungen den lokalen Absorptionsgrad zu bestimmen [Jackson, 2006].

Ausgangspunkt sind die Maxwellgleichungen (2.13b) und (2.13d). Multiplikation der Gl. (2.13b) mit $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ und der Gl. (2.13d) mit $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ führt zu

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \cdot [\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)] + \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \cdot \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.23a)$$

$$-\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot [\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)] = \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t). \quad (2.23b)$$

Allgemein gilt die Vektoridentität

$$\nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) = \mathbf{H} \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) - \mathbf{E} \cdot (\nabla \times \mathbf{H}). \quad (2.24)$$

Die Differenz der Gln. (2.23) liefert unter Verwendung der Gl. (2.24)

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \cdot \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot [\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)] = -\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t). \quad (2.25)$$

Nun definiert man den Poyntingvektor als

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t). \quad (2.26)$$

Man erhält schließlich

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \cdot \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t). \quad (2.27)$$

Diese lokale Energiebilanz ist der Poyntingsche Satz. Er besagt, dass sich die lokale elektromagnetische Energiedichte durch die Quellen der Energiestromdichte und durch die Umwandlung der elektromagnetischen Energie ändert.

Gemäß Gl. (2.15) schreiben sich die Felder für eine Fourierkomponente

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega_0) e^{-i\omega_0 t} + c.c. \quad (2.28a)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega_0) e^{-i\omega_0 t} + c.c. \quad (2.28b)$$

Damit folgt für die zeitliche Ableitung in Gl. (2.27)

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{2} i\omega_0 \left[\varepsilon_0 \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega_0) + \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}, \omega_0) \right] e^{-i\omega_0 t} + c.c. \quad (2.29a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{2} i\omega_0 \left[\mu_0 \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega_0) + \hat{\mathbf{M}}(\mathbf{r}, \omega_0) \right] e^{-i\omega_0 t} + c.c. \quad (2.29b)$$

Die zeitliche Mittelung, gekennzeichnet durch die spitzen Klammern, für den ersten Summanden des Terms auf der linken Seite der Gl. 2.27 lautet

$$\left\langle \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) \right\rangle = \left\langle \frac{1}{4} \left[\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega_0) e^{-i\omega_0 t} + c.c. \right] \left[-i\omega_0 \left\{ \varepsilon_0 \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega_0) + \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}, \omega_0) \right\} e^{-i\omega_0 t} + c.c. \right] \right\rangle \quad (2.30a)$$

$$= \frac{1}{4} i\omega_0 \left(\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega_0) \cdot \hat{\mathbf{P}}^*(\mathbf{r}, \omega_0) - \hat{\mathbf{E}}^*(\mathbf{r}, \omega_0) \cdot \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}, \omega_0) \right) \quad (2.30b)$$

und analog für den Term $\langle \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \cdot \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \rangle$. Insgesamt erhält man

$$\left\langle \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \cdot \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \right\rangle = \quad (2.31a)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{4} i\omega_0 \left[\left(\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega_0) \cdot \hat{\mathbf{P}}^*(\mathbf{r}, \omega_0) - \hat{\mathbf{E}}^*(\mathbf{r}, \omega_0) \cdot \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}, \omega_0) \right) \right. \\ &+ \left. \left(\hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega_0) \cdot \hat{\mathbf{M}}^*(\mathbf{r}, \omega_0) - \hat{\mathbf{H}}^*(\mathbf{r}, \omega_0) \cdot \hat{\mathbf{M}}(\mathbf{r}, \omega_0) \right) \right] \\ &= \frac{1}{2} \omega_0 \left(\text{Im} \left[\hat{\mathbf{E}}^*(\mathbf{r}, \omega_0) \cdot \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}, \omega_0) \right] + \text{Im} \left[\hat{\mathbf{H}}^*(\mathbf{r}, \omega_0) \cdot \hat{\mathbf{M}}(\mathbf{r}, \omega_0) \right] \right) \end{aligned} \quad (2.31b)$$

Schließlich folgt nach Einsetzen in die zeitliche Mittelung der Gl. (2.27)

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{S}(\mathbf{r}, t) \rangle = -\frac{1}{2} \omega_0 \left(\text{Im} \left[\hat{\mathbf{E}}^*(\mathbf{r}, \omega_0) \cdot \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}, \omega_0) \right] + \text{Im} \left[\hat{\mathbf{H}}^*(\mathbf{r}, \omega_0) \cdot \hat{\mathbf{M}}(\mathbf{r}, \omega_0) \right] \right) - \langle \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \rangle. \quad (2.32)$$

Ausgehend von linearen Medien folgt dann

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{S}(\mathbf{r}, t) \rangle = -\frac{1}{2} \omega_0 \left(\varepsilon_0 \text{Im} [\varepsilon(\mathbf{r}, \omega_0)] \left| \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega_0) \right|^2 + \mu_0 \text{Im} [\mu(\mathbf{r}, \omega_0)] \left| \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega_0) \right|^2 \right), \quad (2.33)$$

hierbei wurde die Stromdichte wiederum in die relative Permittivität integriert. Im[] liefert den Imaginärteil des Ausdrucks in der Klammer. Die lokalen Energieverluste bzw. -gewinne hängen folglich von den Imaginärteilen der relativen Permittivität und der relativen Permeabilität ab. Die Integration der Gl. (2.33) über ein Volumen führt dann zu einer globalen Aussage der Energieverluste bzw. -gewinne in dem betrachteten Volumen.

Damit lässt sich nun der Anteil des in einem gewählten Raumbereich der Solarzelle absorbierten Lichts auf zwei Arten bestimmen. Das Prinzip wird in Abbildung 2.6 dargestellt.

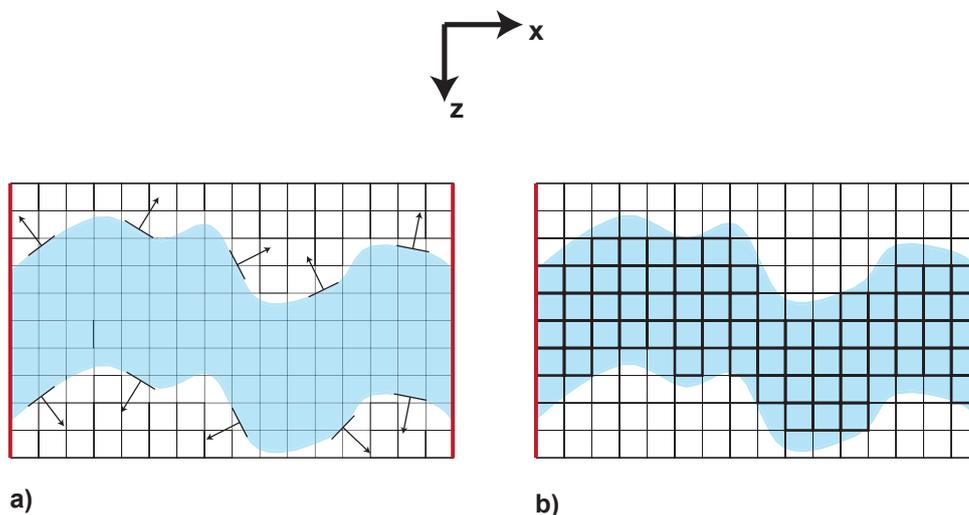


Abbildung 2.6: Berechnung der absorbierten Leistung in einem gewünschten Bereich (blaue Fläche). a) Oberflächenintegral der Normalkomponenten des Poyntingvektors über die Außenfläche des gewünschten Bereichs mit periodischen Randbedingungen (die schwarzen Pfeile sind die lokalen Flächennormalen). b) Volumenintegral der Divergenz des Poyntingvektors über das Volumen des gewünschten Bereichs (die hervorgehobenen schwarzen Quadrate deuten die Elementarvolumina an, die zum Volumenintegral beitragen).

Angenommen, es soll bestimmt werden, welcher Anteil des in z-Richtung einfallenden Lichts in einer aus einem verlustbehafteten Material bestehenden Schicht absorbiert wird, könnte man einerseits eine einfache Energiebilanz der einfallenden und der transmittierten Leistung aufstellen. Dazu wird die Normalkomponente des Poyntingvektors über die gesamte Randfläche integriert (Abb. 2.6a). Werden periodische Randbedingungen angenommen, so fließt kein Licht aus den Seitenrändern heraus, und der Beitrag der Seitenflächen verschwindet. Diese Vorgehensweise verwendet den

linken Term der Gl. (2.33), wobei das Volumenintegral mit Hilfe des Gaußschen Integralsatzes in ein Oberflächenintegral umgewandelt werden kann

$$\int_V \nabla \cdot \langle \mathbf{S}(\mathbf{r}, t) \rangle dx^3 = \oint_A \langle \mathbf{S}(\mathbf{r}, t) \rangle \cdot \mathbf{n}(\mathbf{r}) dA. \quad (2.34)$$

Andererseits lässt sich aber auch die Änderung der elektromagnetischen Feldenergie berechnen, indem das Volumenintegral des rechten Terms in Gl. (2.33) ausgeführt wird (Abb. 2.6b). Da im optischen Spektralbereich die relative Permeabilität als identisch gleich eins angenommen werden kann, ist der Energieverlust proportional zum Imaginärteil der relativen Permittivität und zum Volumenintegral der quadrierten elektrischen Feldamplitude.

2.7.2 Werkzeuge zur numerischen Lösung der Maxwellgleichungen

2.7.2.1 Fourier-Modal-Methode (FMM)

Diese Methode ist für in zwei Dimensionen periodische Strukturen geeignet, denn dann lassen sich alle in den Maxwellgleichungen involvierten Größen in eine Fourierreihe entwickeln. Dies betrifft sowohl die Felder als auch die Dielektrizitätsverteilungen, welche die Materialien beschreiben. In der dritten Dimension wird die Struktur in hinreichend dünne Schichten zerlegt, sodass in dieser Raumrichtung die Eigenschaften jeder Schicht als konstant betrachtet werden können. Als Beleuchtung dient eine ebene Welle der Form (2.15), die in einer bestimmten Richtung aus dem Superstrat auf die Struktur einfällt. Die Vorgehensweise soll hier nur kurz umrissen werden. Eine detaillierte Ausführung ist in Anhang B.1 zu finden.

Abbildung 2.7a zeigt einen Schnitt entlang der z -Achse durch die zu untersuchende Struktur mit der entsprechenden Diskretisierung in dünne Schichten, in welchen $\varepsilon(x)$ keine Funktion von z ist [Nojonen und Turunen, 1994]. In Abb. 2.7b ist eine mögliche Struktur gezeigt, die in x -Richtung und y -Richtung periodisch ist und durch zwei Halbräume begrenzt wird. Die jeweiligen Perioden sind Λ_x bzw. Λ_y . Allgemein kann die gesamte Struktur in z -Richtung in drei Bereiche unterteilt werden. Das Superstrat befindet sich bei z -Koordinaten $z < z_1$ mit Brechungsindex n_I , aus dem das Licht auf die Struktur einfällt. L ist die Anzahl der Schichten, in die die Struktur unterteilt wird, sodass $L + 1$ virtuelle Grenzflächen entstehen. Das Substrat mit Brechungsindex n_{II} liegt bei z -Koordinaten $z > z_{L+1}$, in welchem sich das transmittierte Licht ausbreitet. Dazwischen befindet sich eine mitunter komplizierte Gitterstruktur bei $z_1 < z < z_{L+1}$. Sowohl im Superstrat als auch im Substrat herrscht ein homogenes $\varepsilon(\omega)$, welches im

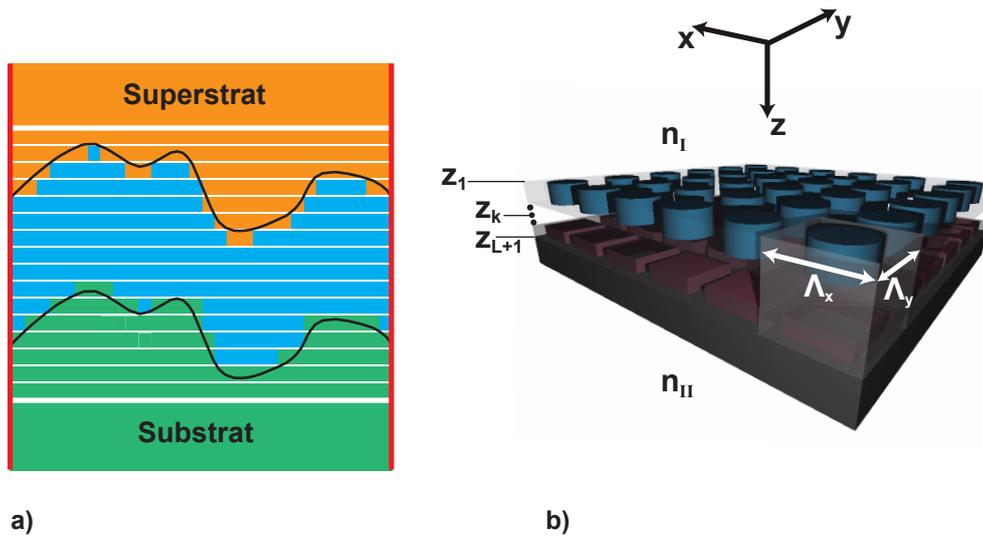


Abbildung 2.7: a) Aufteilung der Struktur in ein homogenes Substrat sowie ein homogenes Superstrat und einer periodischen Struktur dazwischen, die in z-Richtung in dünne Schichten zerlegt wird. b) Beispiel eines zweifach periodischen Gitters mit Gitterperioden Λ_x und Λ_y und den virtuellen Grenzflächen z_k .

Superstrat zusätzlich reell und positiv sein soll. In diesen halbunendlichen Räumen können die Felder als Rayleighentwicklung dargestellt werden

$$\mathbf{E}_R(x, y, z) = \sum_{m,n} \mathbf{R}_{mn} e^{i(\alpha_m x + \beta_n y + \gamma_{mn}^R (z - z_1))}, \quad z < z_1 \quad (2.35a)$$

$$\mathbf{E}_T(x, y, z) = \sum_{m,n} \mathbf{T}_{mn} e^{i(\alpha_m x + \beta_n y + \gamma_{mn}^T (z - z^{L+1}))}, \quad z > z^{L+1}. \quad (2.35b)$$

Hierbei sind \mathbf{R}_{mn} und \mathbf{T}_{mn} die komplexen Amplituden der reflektierten bzw. transmittierten Beugungsordnungen. Die einzelnen Beugungsordnungen werden durch die ganzzahligen Parameter m und n charakterisiert, γ_{mn} ist zugehörige Propagationskonstante, und α_m und β_n bezeichnen die lateralen Wellenvektoren

$$\alpha_m = \alpha_0 + \frac{2\pi}{\Lambda_x} m \quad \text{und} \quad \beta_n = \beta_0 + \frac{2\pi}{\Lambda_y} n, \quad (2.36)$$

wobei α_0 und β_0 die x- bzw. y-Komponente des Wellenvektors der einfallenden Welle sind. Die unendlichen Summen in Gl. (2.35) werden bei den Fourierordnungen $m = N_x$ bzw. $n = N_y$ abgebrochen. Die Impulserhaltung verbindet α_m , β_n und γ_{mn} mittels

$$\text{Reflexion:} \quad (\gamma_{mn}^R)^2 = (n_I k_0)^2 - \alpha_m^2 - \beta_n^2 \quad (2.37)$$

$$\text{Transmission:} \quad (\gamma_{mn}^T)^2 = (n_{II} k_0)^2 - \alpha_m^2 - \beta_n^2. \quad (2.38)$$

Hierbei bezeichnet k_0 die Wellenzahl im Vakuum ($k_0 = \frac{2\pi}{\lambda}$), wobei λ die Wellenlänge darstellt. Im Bereich des Gitters sind elektrisches und magnetisches Feld gemäß Gl. (2.19b) und Gl. (2.19d) gekoppelt

$$\nabla \times \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega\mu_0 \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) \quad (2.39a)$$

$$\nabla \times \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) = -i\omega\varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega). \quad (2.39b)$$

Die Gln. (2.39) gelten für lineare Medien. Die makroskopische Stromdichte $\hat{\mathbf{j}}_{\text{makr}}(\mathbf{r}, \omega)$ ist wiederum in die relative Permittivität integriert. Die z-Komponenten E_z und H_z von $\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)$ bzw. $\hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega)$ lauten

$$E_z = -\frac{1}{i\omega\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \quad (2.40a)$$

$$H_z = \frac{1}{i\omega\mu(\mathbf{r}, \omega)} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right). \quad (2.40b)$$

Gemäß dem Floquet-Bloch Theorem ist das Feld in einer zweifach periodischen Struktur eine pseudoperiodische Funktion

$$E_x(x, y, z) = \sum_{m,n} E_{xmn} e^{i(\alpha_m x + \beta_n y + \gamma_{mn} z)}. \quad (2.41)$$

Die Ausdrücke für E_y , H_x und H_y lauten ganz analog. Die Permittivitätsverteilung und deren Inverses werden ebenfalls als Fourierreihe geschrieben

$$\varepsilon(x, y) = \varepsilon_0 \sum_{p,q} \varepsilon_{pq} \exp \left[2\pi i \left(\frac{px}{\Lambda_x} + \frac{qy}{\Lambda_y} \right) \right] \quad (2.42a)$$

$$\frac{1}{\varepsilon(x, y)} = \frac{1}{\varepsilon_0} \sum_{p,q} \kappa_{pq} \exp \left[2\pi i \left(\frac{px}{\Lambda_x} + \frac{qy}{\Lambda_y} \right) \right]. \quad (2.42b)$$

Setzt man die Gln. (2.40) und die Fourierentwicklungen sowohl der transversalen Feldkomponenten (2.41) als auch die Fourierentwicklung der Permittivitätsverteilungen (2.42) in die Gln. (2.39) ein, ergibt sich schließlich ein Eigenwertproblem mit $l = 2N_x N_y$ Eigenmoden. Die Eigenwerte sind die zugehörigen Propagationskonstanten γ_l . Die Eigenvektoren sind die komplexen Feldamplituden E_x und E_y bzw. H_x und H_y .

Das Feld in einer der dünnen, in der z-Richtung invarianten, Schicht ist dann eine Superposition dieser Eigenmoden mit noch unbekanntem Koeffizienten zur Gewichtung der einzelnen Beugungsordnungen. An den Schichtgrenzen bei z_k müssen die Tangentialkomponenten der elektrischen und magnetischen Felder stetig übergehen.

Zusammen mit der Maxwellgleichung (2.19a) lassen sich sowohl die unbekanntenen Koeffizienten als auch die komplexen Amplituden \mathbf{R}_{mn} und \mathbf{T}_{mn} der Beugungsordnungen in Reflexion bzw. Transmission bestimmen. Die Beugungseffizienzen, definiert als die normierte z-Komponente des zeitgemittelten Poyntingvektors, lauten schließlich

$$\eta_{Rmn} = \operatorname{Re} \left[\frac{\gamma_{mn}^R}{\gamma_{00}^R} \right] |\mathbf{R}_{mn}|^2 \quad (2.43a)$$

$$\eta_{Tmn} = \operatorname{Re} \left[\frac{\gamma_{mn}^T}{\gamma_{00}^R} \right] |\mathbf{T}_{mn}|^2. \quad (2.43b)$$

Von Interesse ist in der Mehrzahl der Fälle der Transmission- bzw. Reflexionsgrad, ungeachtet der Beugungsrichtung. Dazu muss lediglich über alle Beugungsordnungen summiert werden.

2.7.2.2 Finite-Elemente-Methode

Die finite Elemente Methode ist eine numerische Technik zur approximativen Lösung von Randwertproblemen. Sie wurde erstmals in den 1940er Jahren erwähnt. Der erste Anwendungsbereich lag in der Luftfahrt [Turner et al., 1956]. Kurz danach folgten weitere Einsatzbereiche wie die Strukturanalyse und der Elektromagnetismus. Die Idee der Methode besteht darin, das Gesamtgebiet in Elemente zu unterteilen und die Gesamtlösung durch einfache Ansatzfunktionen mit freien Parametern in diesen Elementen darzustellen. Da die Elemente klein sind im Vergleich zur Gesamtgröße des untersuchten Bereichs, sind die Anforderungen an die Interpolationsfunktionen weniger streng. Polynome bis zum vierten Grad sind üblicherweise schon ausreichend. Dieses Verfahren ist für eine ganze Klasse von partiellen Differentialgleichungen anwendbar. Grob kann die Prozedur in drei Schritte unterteilt werden:

- Aufteilung des Gebietes in Elemente (Diskretisierung)
- Wahl der Interpolationsfunktionen
- Aufstellung und Lösung eines linearen Gleichungssystems

Aufteilung des Gebietes in Elemente

Für irreguläre zwei- bzw. dreidimensionale Strukturen sind Dreiecke bzw. Tetraeder als Elemente am besten geeignet. Die Feinheit des Gitters wird unter anderem durch die Länge der Elementkanten bestimmt. Abbildung 2.8a zeigt zwei mögliche Elementaufteilungen für eine einfache Struktur (für diesen Spezialfall wären auch rechteckige Elemente angebracht gewesen). Abbildung 2.8b und 2.8c zeigen die Nummerierung zweier benachbarter Elemente isoliert bzw. verbunden betrachtet. Die Anzahl der Punkte pro Elementkante, im Folgenden Knotenpunkte genannt, ist abhängig von der

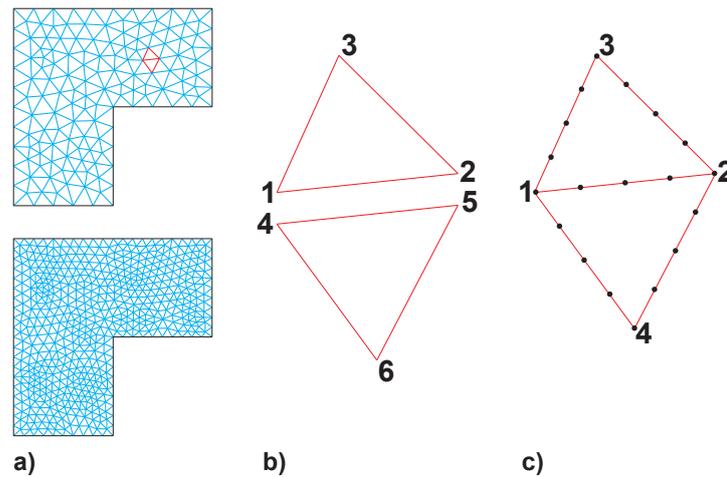


Abbildung 2.8: a) Grobes und feines Gitter für eine Beispielstruktur. b) Nummerierung der Gitterpunkte für isolierte Elemente. c) Nummerierung der Gitterpunkte für verbundene Elemente. Die schwarzen Punkte auf den Elementgrenzen werden Knotenpunkte genannt.

Interpolationsfunktion. An den Grenzen zweier benachbarter Elemente müssen die berechneten Werte der Knotenpunkte identisch sein. Folglich lässt sich die Nummerierung im isolierten Fall in Beziehung setzen zur Nummerierung mit verbundenen Elementen. Ohne zusätzliche Punkte auf den Elementkanten fallen die Knoten 1 und 4 bzw. 2 und 5 in Abb. 2.8b zusammen. In Matrixschreibweise erhält man für die Knotenpunkte des Beispiels in Abb. 2.8b

$$\begin{pmatrix} \bar{y}_1 \\ \bar{y}_2 \\ \bar{y}_3 \\ \bar{y}_4 \\ \bar{y}_5 \\ \bar{y}_6 \end{pmatrix}_{\text{dis}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{y}_1 \\ \bar{y}_2 \\ \bar{y}_3 \\ \bar{y}_4 \end{pmatrix}_{\text{con}}$$

oder kurz
$$\bar{\mathbf{y}}_{\text{dis}} = \mathbb{C} \bar{\mathbf{y}}_{\text{con}}. \tag{2.44}$$

y steht für die physikalische Größe von Interesse. Die Kürzel 'dis' (engl. disconnected) und 'con' (engl. connected) bezeichnen die beiden Nummerierungsweisen. Die Querstriche über y sollen andeuten, dass es sich um einen Approximativwert handelt und nicht um den Wert der exakten Lösung.

Wahl der Interpolationsfunktionen

Sehr häufig, jedoch nicht notwendigerweise immer, werden als Interpolationsfunktionen Polynome verwendet, da sie mathematisch gut handhabbar sind. Wird beispielsweise ein Polynom ersten Grades gewählt, so variiert der gesuchte Wert linear zwischen den Knotenwerten eines Elements. Je höher der Grad des Polynoms, umso mehr Punkte werden auf einer Elementkante eingefügt. Für ein eindimensionales Problem lauten die Interpolationspolynome in Abhängigkeit des Grades p des Polynoms für das Element k

$$\bar{y}^k(x) = \sum_{i=1}^{p+1} \bar{y}_i^k \frac{\prod_{\substack{n=1 \\ n \neq i}}^{p+1} (x - x_n)}{\prod_{\substack{n=1 \\ n \neq i}}^{p+1} (x_i - x_n)} = \sum_{i=1}^{p+1} \bar{y}_i^k N_i^k \quad (2.45)$$

mit den Interpolationspolynomen N_i^k

$$N_i^k = \frac{\prod_{\substack{n=1 \\ n \neq i}}^{p+1} (x - x_n^k)}{\prod_{\substack{n=1 \\ n \neq i}}^{p+1} (x_i^k - x_n^k)}. \quad (2.46)$$

Hierbei bezeichnet x die Position und \bar{y} den Wert an diesem Punkt des Elements.

Aufstellung und Lösung des linearen Gleichungssystems

Die unbekannt, zu bestimmenden Werte sind die Approximativwerte \bar{y}_i^k in Gl. (2.45). Aus der Wellengleichung (2.20) erhält man bei verschwindender äußerer Ladungsdichte ($\nabla \cdot \hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r}, \omega) = 0$) die Helmholtzgleichung

$$\left[\Delta + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \right] \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = 0. \quad (2.47)$$

Die Helmholtzgleichung kann folglich komponentenweise gelöst werden. Der Einfachheit halber soll ein eindimensionales Randwertproblem betrachtet werden

$$-\frac{d}{dx} \left(a \frac{dy}{dx} \right) + by - f = 0 \quad x \in (0, L) \quad (2.48a)$$

$$\text{mit} \quad y|_{x=0} = p \quad \text{und} \quad \left[a \frac{dy}{dx} + cy \right]_{x=L} = q. \quad (2.48b)$$

Dabei bezeichnet y die unbekannte Funktion, während a und b bekannte Parameter darstellen, die die physikalischen Eigenschaften des betrachteten Systems beschreiben. f ist eine gegebenenfalls vorhandene, jedoch bekannte, Anregung. p , q und c sind ebenfalls bekannte Parameter. Ein Vergleich zeigt, dass die Helmholtzgl. (2.47) für eine Feldkomponente eine spezielle Form der Gl. (2.48) ist. Mathematisch lässt sich die approximative Lösung der Helmholtzgleichung als Variationsproblem behandeln. Gesucht ist ein stationärer Punkt des Funktionals $F(\bar{y})$ mit vorgegebenen Randbedingungen

$$\begin{cases} \delta F(\bar{y}) &= 0 \\ \bar{y}|_{x=0} &= p. \end{cases} \quad (2.49)$$

Das Funktional des Elements k lautet

$$F^k(\bar{y}^k) = \frac{1}{2} \int_{x_l^k}^{x_r^k} \left[a \left(\frac{d\bar{y}^k}{dx} \right)^2 + (\bar{y}^k)^2 b \right] dx - \int_{x_l^k}^{x_r^k} f \bar{y}^k dx, \quad (2.50)$$

wobei x_l^k und x_r^k die Grenzpunkte des Elementes k bezeichnen. Der Beweis, dass Gl. (2.50) tatsächlich das gesuchte Funktional ist, wird im Anhang B.2 erbracht. Nun müssen noch die Gleichungen aufgestellt werden, um die Vorfaktoren der Interpolationsfunktionen zu bestimmen. Dazu werden zusätzlich homogene Neumann Randbedingungen angenommen mit $c = q = 0$. Dann schreibt sich das Funktional $F(\bar{y})$ des Randwertproblems als

$$F(\bar{y}) = \sum_{k=1}^M F^k(\bar{y}^k), \quad (2.51)$$

wobei k über alle Elemente läuft. Werden die Interpolationsfunktionen der Gl. (2.45) in obige Gleichung eingesetzt und nach \bar{y}^k abgeleitet, folgt

$$\frac{\partial F^k}{\partial \bar{y}_i^k} = \sum_{j=1}^{p+1} \bar{y}_j^k \int_{x_l^k}^{x_r^k} a \left(\frac{dN_i^k}{dx} \frac{dN_j^k}{dx} + b N_i^k N_j^k \right) dx - \int_{x_l^k}^{x_r^k} N_i^k f dx. \quad (2.52)$$

Der Grad des Interpolationspolynoms sei wiederum mit p bezeichnet. In Matrixform erhält man

$$\left(\frac{\partial F^k}{\partial \bar{y}_i^k} \right) = \mathbb{K}^k \bar{\mathbf{y}}^k - \mathbf{g}^k = 0, \quad (2.53)$$

mit

$$K_{ij}^k = \int_{x_i^k}^{x_r^k} a \left(\frac{dN_i^k}{dx} \frac{dN_j^k}{dx} + bN_i^k N_j^k \right) dx \quad (2.54a)$$

$$g_i^k = \int_{x_i^k}^{x_r^k} N_i^k f dx. \quad (2.54b)$$

Für jedes Element k ergibt sich eine Gleichung der Form (2.53). Um alle Elemente mit einzuschließen, müssen die Elementmatrizen noch zusammengestellt werden. Die komplette Matrix \mathbb{M}_{dis} in der isolierten Schreibweise ist demnach

$$\mathbb{M}_{\text{dis}} = \begin{bmatrix} \mathbb{K}^1 & & & \\ & \mathbb{K}^2 & & \\ & & \dots & \\ & & & \mathbb{K}^k \end{bmatrix}. \quad (2.55)$$

Desgleichen gilt für \mathbf{g}_{dis}

$$\mathbf{g}_{\text{dis}} = \begin{bmatrix} \mathbf{g}^1 \\ \mathbf{g}^2 \\ \dots \\ \mathbf{g}^k \end{bmatrix}. \quad (2.56)$$

Die Gleichungen für alle Elemente k lauten also

$$\mathbb{M}_{\text{dis}} \bar{\mathbf{y}}_{\text{dis}} = \mathbf{g}_{\text{dis}}. \quad (2.57)$$

Nun wird beiderseits von links mit \mathbb{C}^T multipliziert und Gl. (2.44) eingesetzt

$$\mathbb{C}^T \mathbb{M}_{\text{dis}} \mathbb{C} \bar{\mathbf{y}}_{\text{con}} = \mathbb{C}^T \mathbf{g}_{\text{dis}}. \quad (2.58)$$

In der verbundenen Schreibweise wird Gl. (2.58) mit $\mathbb{M} = \mathbb{C}^T \mathbb{M}_{\text{dis}} \mathbb{C}$ und $\mathbf{g}_{\text{con}} = \mathbb{C}^T \mathbf{g}_{\text{dis}}$ zu

$$\mathbb{M} \bar{\mathbf{y}}_{\text{con}} = \mathbf{g}_{\text{con}}, \quad (2.59)$$

mit den Komponenten \bar{y}_{con}^i des Vektors $\bar{\mathbf{y}}_{\text{con}}$ als Unbekannte.

2.8 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurden die theoretischen sowie numerischen Grundlagen, die zum Verständnis dieser Arbeit nötig sind, gelegt. Neben den Zielen im ersten Teil wurden die physikalisch relevanten Größen zur Beurteilung der Effizienz von Solarzellen eingeführt und Methoden zu deren numerischen Bestimmung erläutert. Mit diesen Vorarbeiten können nun die verschiedenen Ansätze des Photonmanagements untersucht werden.

3 Periodische Strukturen für das Photonmanagement

3.1 Effekte optischer Gitter

Bereits mit einfachen periodischen Elementen lässt sich das Absorptionsvermögen von Solarzellen steigern. Die auftretenden Effekte werden in diesem Kapitel diskutiert. Im zweiten Abschnitt stehen dielektrische Gitter im Zentrum, wohingegen im dritten Abschnitt plasmonische Strukturen betrachtet werden.

Periodische Strukturen für das Photonmanagement fungieren als optische Gitter und zielen darauf ab, die Interaktionslänge des Sonnenlichtes mit dem absorbierenden Material zu erhöhen [Kroll et al., 2008; Haase und Stiebig, 2007]. Anwendung finden die Gitter sowohl auf der Frontseite von Solarzellen, wo sie der erhöhten Einkopplung dienen, als auch als Rückstreuer an der Solarzellenrückseite.

Um die Wirkungsweise der Gitter anschaulich darzulegen, wird zunächst eine unstrukturierte, $20\ \mu\text{m}$ dicke Schicht aus kristallinem Silizium (c-Si) betrachtet [Green und Keevers, 1995]. Diese wird sodann mit je einem optischen Gitter auf der Front- sowie der Rückseite versehen. Das Gitter auf der Frontseite soll den Indexübergang vom Umgebungsmedium zum Silizium sanfter gestalten. Aus diesem Grund wird hier ein pyramidales Gitter angenommen, das im Anschluss unverändert eingesetzt wird. Auf der Rückseite soll ein Gitter aus periodisch angeordneten Zylindern verwendet werden. Die Dimensionen dieses Gitters sind zu optimieren.

Sowohl das Material des pyramidalen Gitters an der Frontseite als auch die Zylinder auf der Rückseite sollen ebenfalls aus c-Si bestehen. Das Photonmanagement soll demnach in den absorbierenden Halbleiter selbst integriert werden.

Das Absorptionsvermögen wird dabei mit Hilfe der FMM berechnet, wobei die geometrischen Größen des rückseitigen Gitters als freie Parameter dienen. An dieser Stelle offenbart sich jedoch ein Nachteil der FMM: Besitzen die beiden Gitter auf der Front- bzw. Rückseite unterschiedliche Perioden, so muss ein Übergitter gebildet werden, dessen Periode dem kleinsten gemeinsamen Vielfachen der beiden einzelnen

Perioden entspricht. Dies führt mitunter schnell an die Grenzen des Möglichen, was die numerische Handhabbarkeit betrifft.

Deshalb wird die Periode P des pyramidalen Frontseitengitters auf $1.2\ \mu\text{m}$ festgelegt. Dies entspricht der Basislänge der quadratischen Grundfläche einer Pyramide. In diese Periode lässt sich eine hinreichend große Anzahl von kleineren Perioden ganzzahlig einfügen, sodass das Gitter auf der Rückseite dennoch einer Optimierung zugänglich wird.

Abbildung 3.1a zeigt die Einheitszelle der untersuchten Struktur. Die erste Schicht besteht aus Glas und ist $1\ \mu\text{m}$ dick. Offensichtlich ist diese Ausdehnung im Vergleich zu realen Solarzellen viel zu klein, jedoch lässt sich damit die letzte Grenzfläche zwischen dem Glas und dem Umgebungsmedium vor dem Wiederaustritt des Lichtes berücksichtigen. Direkt darunter folgt eine $200\ \text{nm}$ dicke Schicht aus Zinkoxid (ZnO). Das ZnO wird als absorptionsfrei angesehen mit einer konstanten relativen Permittivität $\varepsilon_r = 4$. Diese Vereinfachung ist gerechtfertigt, da sich die optischen Eigenschaften von ZnO im untersuchten Spektralbereich von $400\ \text{nm}$ bis $1100\ \text{nm}$ nur unwesentlich ändern. Die Schicht aus ZnO übernimmt die pyramidale Form des Glases. Angrenzend folgt das c-Si.

Auf der Rückseite wird das Gitter aus c-Si durch die Periode p , den Durchmesser d und die Höhe h der Zylinder festgelegt. Der Durchmesser d der Zylinder wird als Funktion der kleinen Periode p mit Hilfe des Tastverhältnisses angegeben. Der besseren Übersicht willen ist die Struktur in Abb. 3.1b nochmals gezeigt, diesmal mit einem Schnitt parallel zur Einfallsrichtung durch die Spitze der Pyramide verlaufend. Die Beleuchtung erfolgt von oben auf das Glas.

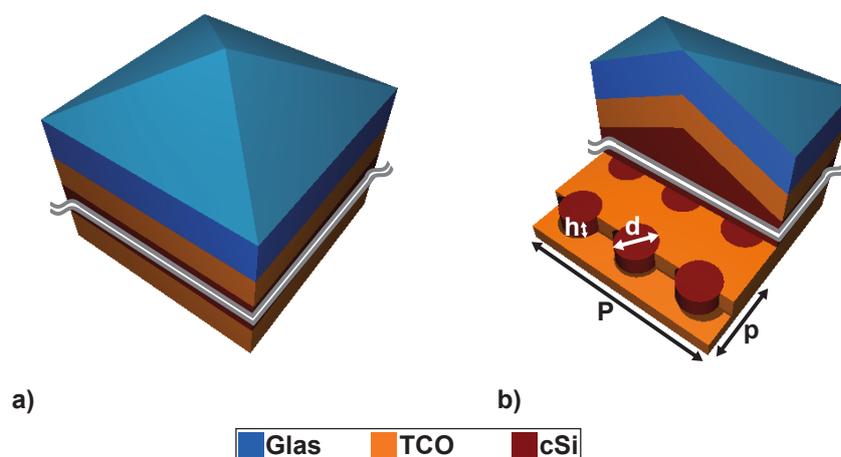


Abbildung 3.1: a) Einheitszelle der untersuchten periodischen Struktur. b) Schnitt durch die Struktur entlang einer Ebene senkrecht zur Pyramidengrundfläche durch deren Spitze, um das rückseitige Gitter aus in einem quadratischen Gitter angeordneten Zylindern aufzuzeigen.

Die Gesamtabsorption ergibt sich aus einer einfachen Bilanzbetrachtung. Das Licht, welches weder reflektiert noch transmittiert worden ist, ist notgedrungen absorbiert worden. Folglich gilt $A(\lambda) = 1 - R(\lambda) - T(\lambda)$. Hierbei bezeichnen $A(\lambda)$, $R(\lambda)$ und $T(\lambda)$ das Absorptions-, Reflexions- und Transmissionsspektrum der simulierten Struktur. Diese drei Größen sind natürlich abhängig von der Wellenlänge λ .

Zunächst wird der Einfluss des frontseitigen Gitters untersucht. Das bedeutet, das Gitter auf der Rückseite ist vorerst nicht vorhanden. Abbildung 3.2a zeigt die Absorptionsspektren für die $20\ \mu\text{m}$ dicke *c*-Si Schicht. Gut zu erkennen sind die Fabry-Perot Oszillationen an der Absorptionskante im Spektrum für eine komplett unstrukturierte Schicht. Da die Schichtdicke vergleichsweise groß ist, liegen die einzelnen Resonanzen sehr dicht beieinander. Außerdem ist die auf Grund des hohen Brechungsindexkontrastes sehr schlechte Einkopplung der kleinen Wellenlängen erkennbar.

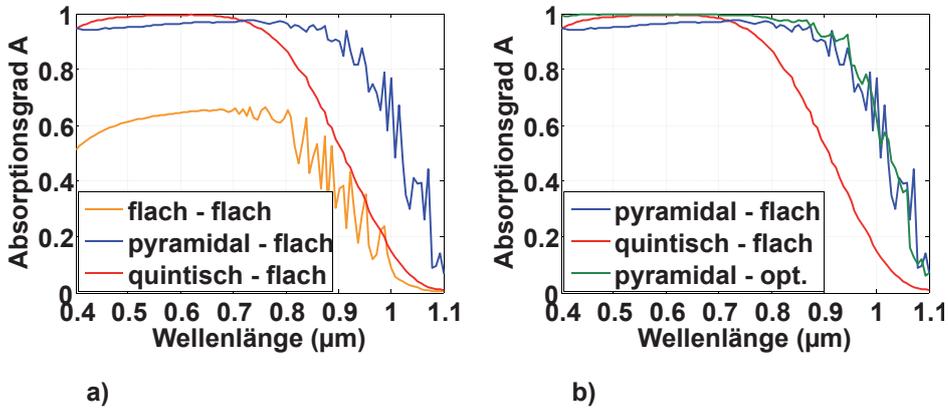


Abbildung 3.2: a) Absorptionsspektren einer $1\ \mu\text{m}$ dicken kristallinen Siliziumschicht mit optischen Gittern an der Frontseite. b) Absorptionsspektren für eine frontunterstützte $20\ \mu\text{m}$ dicke kristalline Siliziumschicht und mit optimiertem rückseitigen Gitter aus quadratisch angeordneten Zylindern.

Wird nun die Frontseite strukturiert, so lässt sich die Einkopplung enorm steigern, selbst wenn auf der Rückseite noch immer kein Gitter vorhanden ist und das über den gesamten Spektralbereich.

Diese Situation soll nun mit einer nahezu perfekten Einkopplung verglichen werden [Fahr et al., 2008b]. Für eine kontinuierliche Änderung des Brechungsindex entlang der Beleuchtungsrichtung und Schichtdicken, deren optische Dicke größer als die Wellenlänge ist, stellt eine sogenannte quintische Variation das Optimum dar [Southwell, 1983]. Die Indexvariation folgt dabei einem Polynom fünften Grades als Funktion der normierten optischen Weglänge t_{opt} . Normiert wird mit der gesamten optischen Weglänge

$$n(t_{\text{opt}}) = n_{\text{air}} + (n_{\text{cSi}} - n_{\text{air}})(6t_{\text{opt}}^5 - 15t_{\text{opt}}^4 + 10t_{\text{opt}}^3). \quad (3.1)$$

Der Übergang startet bei einem Brechungsindex von Luft (hier $n_{air} = 1$) und endet bei einem Wert von $n_{cSi} = 3.5$. Die Übergangszone erstreckt sich über eine Distanz von $1 \mu\text{m}$. Abbildung 3.3 zeigt den Brechungsindexverlauf sowohl als Funktion der realen Distanz als auch als Funktion des optischen Weges.

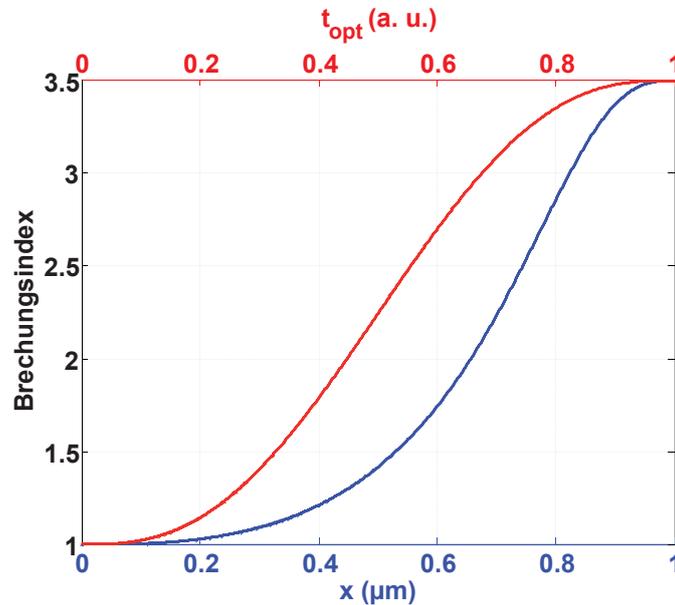


Abbildung 3.3: Brechungsindexverlauf als Funktion der Distanz x (blau) und als Funktion der normierten optischen Weglänge t_{opt} (rot) für eine quintische Variation der Brechzahl wie in Gl. (3.1).

Tatsächlich lässt sich der Absorptionsgrad bei kleinen Wellenlängen auf nahezu eins steigern. Damit ist das pyramidale Gitter sogar noch zu übertreffen. Jedoch fehlt mit dieser praktisch perfekten Einkopplung das Element der Beugung. Wird das pyramidale Gitter verwendet, so liegt der Absorptionsgrad bis ca. 700 nm unterhalb desjenigen mit quintischem Brechzahlverlauf. Die Absorptionskante hingegen ist um rund 120 nm in den roten Spektralbereich verschoben.

Eine weitere Steigerung der Effizienz lässt sich mit einem angepassten Gitter auf der Rückseite erzielen. Zu optimieren ist dabei die Periode p der Anordnung der Zylinder. Wie erwähnt, ist die Gesamtperiode P der Einheitszelle ein ganzzahliges Vielfaches der kleinen Periode p . Außerdem muss noch die Ausdehnung der Zylinder selbst festgelegt werden, indem die Höhe h und der Durchmesser d angepasst werden. Letzterer wird dabei als Funktion der kleinen Periode p über das Tastverhältnis dc festgelegt, das angibt, wie groß d im Verhältnis zu p ist ($d = p dc$).

Werden die drei genannten Parameter systematisch variiert, so findet sich ein Optimum bei einer kleinen Periode p von 600 nm , einer Zylinderhöhe h von 300 nm und einem Tastverhältnis dc von 0.6 . Das zugehörige Absorptionsspektrum ist in Abb. 3.2b dargestellt. Da die c-Si Schicht mit $20 \mu\text{m}$ schon ziemlich dick ist, lässt sich auch der

Absorptionsgrad nicht mehr sehr stark steigern. Dennoch ist über einen weiten Wellenlängenbereich eine leichte Erhöhung des Absorptionsvermögens zu verzeichnen.

Als Vergleichsgröße zwischen den verschiedenen Solarzellenmodellen dient die Kurzschlussstromdichte. Sie wird berechnet, indem das simulierte Absorptionsspektrum $A(\lambda)$ gewichtet wird mit dem einfallenden Sonnenspektrum $\Phi(\lambda)$. Das ergibt den Anteil der solaren Photonen, die tatsächlich absorbiert werden. Anschließend wird über den gesamten betrachteten Spektralbereich integriert

$$j_{SC} = e_0 \int A(\lambda)\Phi(\lambda)d\lambda, \quad (3.2)$$

wobei e_0 die Elementarladung bezeichnet. In dieser Definition steckt implizit die Annahme, dass jedes absorbierte Photon ein Elektron-Loch-Paar erzeugt und dass diese Ladungsträger nicht wieder rekombinieren. Der resultierende Wert für j_{SC} stellt demnach eine obere Grenze einer perfekten Solarzelle dar.

Um die berechneten Werte der Kurzschlussstromdichten vergleichen zu können, muss noch das Volumen des absorbierenden Materials berücksichtigt werden. Die dergestalt normierte Kurzschlussstromdichte steigt von $1.10 \text{ mA/cm}^2/\mu\text{m}^3$ für den quintischen Brechzahlverlauf auf $1.24 \text{ mA/cm}^2/\mu\text{m}^3$ bei ausschließlicher Anwendung des pyramidalen Gitters auf der Frontseite. Wird zusätzlich noch das optimierte Gitter auf der Rückseite verwendet, so beträgt die Kurzschlussstromdichte schließlich $1.27 \text{ mA/cm}^2/\mu\text{m}^3$.

3.2 Zweidimensionale periodische Strukturen

Neben dem Bestreben, die Kosten für siliziumbasierte Solarzellen durch einen verminderten Materialverbrauch zu senken, existieren auch Ansätze, das Materialsystem zu wechseln. Silizium wird dabei durch einen organischen Halbleiter ersetzt [Tripathi und Pflaum, 2006; Afzali et al., 2002]. Von den organischen Halbleitern erhofft man sich insbesondere ein günstiges Kosten-Nutzen-Verhältnis, da die Verarbeitung vergleichsweise einfach ist und überdies großflächige Strukturen möglich sind [Günes et al., 2007; Wöhrle und Meissner, 1991; Hoppe und Sariciftci, 2004].

Das Funktionsprinzip ist dem der inorganischen Solarzelle sehr ähnlich. Ein einfallendes Photon erzeugt ein Exziton, das anschließend in ein Elektron-Loch-Paar aufgetrennt werden muss. Die besondere Schwierigkeit besteht in diesem Fall jedoch in einer verhältnismäßig hohen Exzitononenbindungsenergie, was die Trennung der Ladungsträger erschwert. Aus diesem Grund konnten organische Solarzellen bisher nur kleine Wirkungsgrade vorweisen. Hier erhofft man sich durch die hohen Feldüberhö-

hungen an plasmonischen Partikeln einen Fortschritt [Zhang et al., 2010; Le und Alù, 2014; Kim et al., 2008; Le et al., 2011].

Dazu sollen im Folgenden zwei Ansätze näher untersucht werden. Zum einen werden in diesem Abschnitt Goldstege mit einem organischen Halbleiter kombiniert. Je nach Lage des Goldsteges lässt sich das Absorptionsvermögen im Vergleich zu einer Referenzsolarzelle ohne Goldstege steigern. Nach einer kurzen allgemeinen Darlegung möglicher Geometriedefinitionen durch Selbstorganisation im nächsten Abschnitt wird zum andern im Unterabschnitt 3.3.3 der Einfluss metallischer Bowtieantennen auf das Absorptionsvermögen untersucht.

Vorerst jedoch werden einfache zweidimensionale Gitter aus Goldstegen mit einer organischen Halbleiterschicht aus Diindenoperylen (DIP) untersucht [Dürr et al., 2002; Dürr et al., 2003; Heilig et al., 2004]. Die optischen Daten wurden von der Universität Tübingen zur Verfügung gestellt.

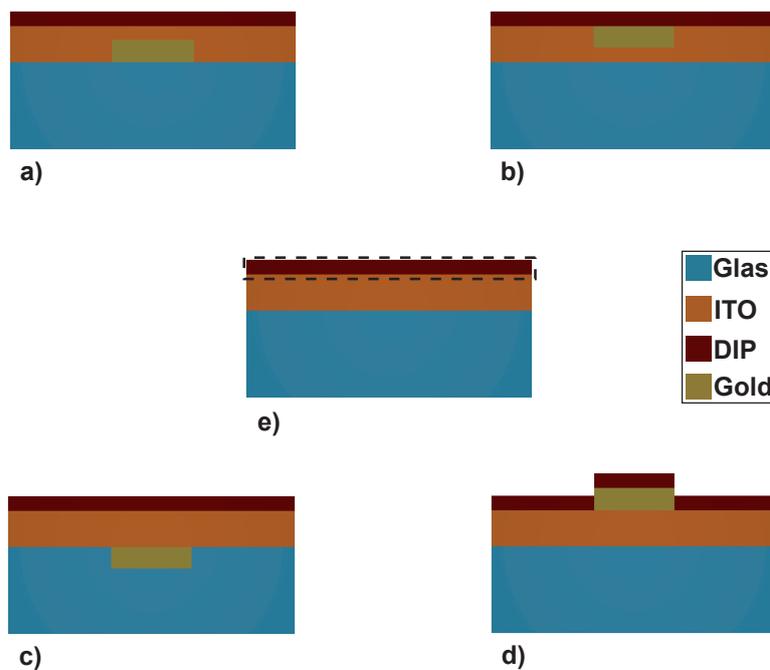


Abbildung 3.4: a)-d) Untersuchte Strukturen inklusive einer 20 nm dicken Schicht aus DIP (rot) für verschiedene Positionen der Goldstege (gelb). e) Referenzgeometrie mit und ohne DIP angedeutet durch die gestrichelt umrandete Region.

Um einen Eindruck davon zu bekommen, wie gut sich solche Strukturen mit einer rein elektrodynamischen Betrachtung beschreiben lassen, wird zunächst die Geometrie ausgewählt, bei welcher ein Goldsteg mit einer Breite von 110 nm und einer Höhe von 30 nm auf einer 50 nm dicken Schicht aus Indiumzinnoxid (ITO) liegt (Abb. 3.4d). Darauf folgt eine 20 nm dicke Schicht aus DIP, wobei die Schichtdicke konstant ist, also auch auf dem Goldsteg 20 nm beträgt. Das Substrat besteht aus Glas. Die Struktur soll

in horizontaler Richtung mit einer Periode von 390 nm fortgesetzt werden. Zielgröße der Simulation ist das Extinktionsspektrum, welches mit der experimentellen Messung verglichen werden soll. Die Extinktion beschreibt die Änderung der Transmission aufgrund der An- bzw. Abwesenheit des Goldsteg im Verhältnis zur Transmission ohne Goldsteg und ist definiert als

$$E(\lambda) = 1 - \frac{T(\lambda)}{T_0(\lambda)}, \quad (3.3)$$

wobei $T(\lambda)$ und $T_0(\lambda)$ die Transmissionsspektren der gewünschten Struktur bzw. der Referenzstruktur ohne Goldsteg bezeichnen. Das gestrichelt umrandete Gebiet in Abb. 3.4e ist in der Referenzstruktur ebenfalls nicht enthalten. Die Messungen wurden in Tübingen vorgenommen.

Die Beleuchtung erfolgt von oben aus einem Medium mit $n = 1$ direkt auf den Goldsteg bzw. die Schicht aus DIP, und zwar sowohl für TE-polarisiertes Licht (elektrisches Feld parallel zu den Goldstegen) als auch für TM-polarisiertes Licht (magnetisches Feld parallel zu den Goldstegen). Beobachtet wird von unten durch das Glas mit einem Objektiv, das eine numerische Apertur von 0.5 besitzt. Für die Simulation hingegen wird auf der lichtabgewandten Seite ein halbumendlicher Raum aus Glas mit $n = 1.5$ angenommen.

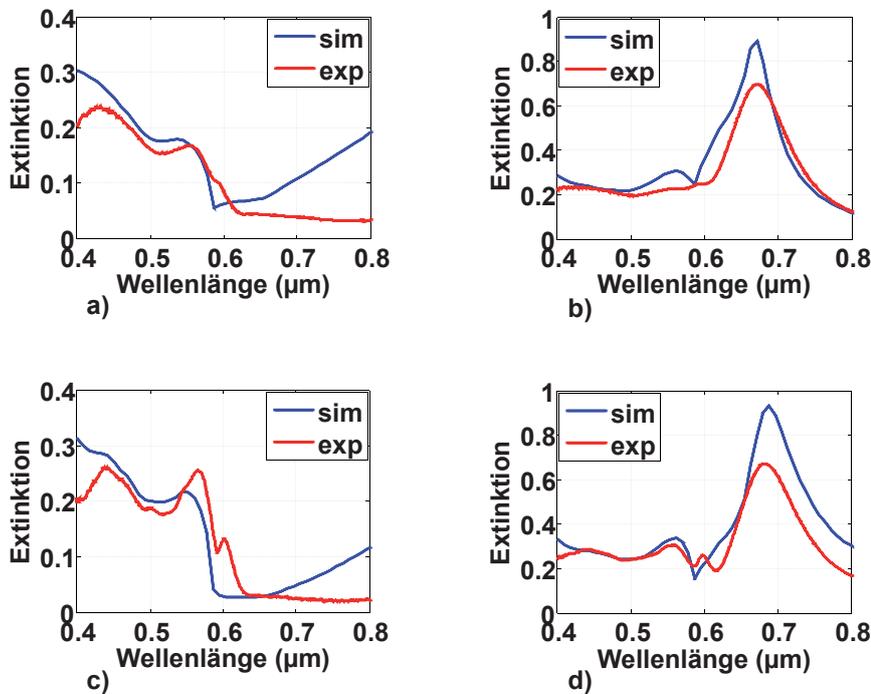


Abbildung 3.5: Vergleich der Extinktionsspektren aus der Simulation (blau) und dem Experiment (rot). Spektren ohne DIP für a) TE-Polarisation und b) TM-Polarisation. Spektren mit DIP für c) TE-Polarisation und d) TM-Polarisation.

Um die letzte Grenzfläche Glas-Luft zu berücksichtigen, wird die Transmission mit einem generischen Faktor von 0.96 multipliziert, was der Leistungstransmission durch eine glatte Grenzfläche zwischen $n = 1.5$ und $n = 1$ entspricht. Alle Beugungsordnungen, die nicht innerhalb der numerischen Apertur des Objektivs liegen, werden nicht berücksichtigt.

In Abb. 3.5 werden die gemessenen Extinktionsspektren mit den Ergebnissen der Simulationsrechnung verglichen. Die obere Reihe in Abb. 3.5 zeigt die Spektren ohne DIP für die TE-Polarisation in Abb. 3.5a und die TM-Polarisation in Abb. 3.5b. Die untere Reihe in Abb. 3.5 zeigt die Spektren mit 20 nm DIP für die TE-Polarisation in Abb. 3.5c und die TM-Polarisation in Abb. 3.5d.

Der allgemeine Trend lässt sich ziemlich gut beschreiben, auch wenn bei den absoluten Werten Abweichungen auftreten. Einzig ein Anstieg der Extinktion für die TE-Polarisation ab Wellenlängen über ca. 650 nm ist im Experiment nicht zu beobachten. Der Effekt lässt sich auf eine Restabsorption im Gold bei großen Wellenlängen zurückführen. Glücklicherweise ist der Absorptionskoeffizient von DIP oberhalb von ca. 600 nm verschwindend klein, sodass sich der Effekt vernachlässigen lässt.

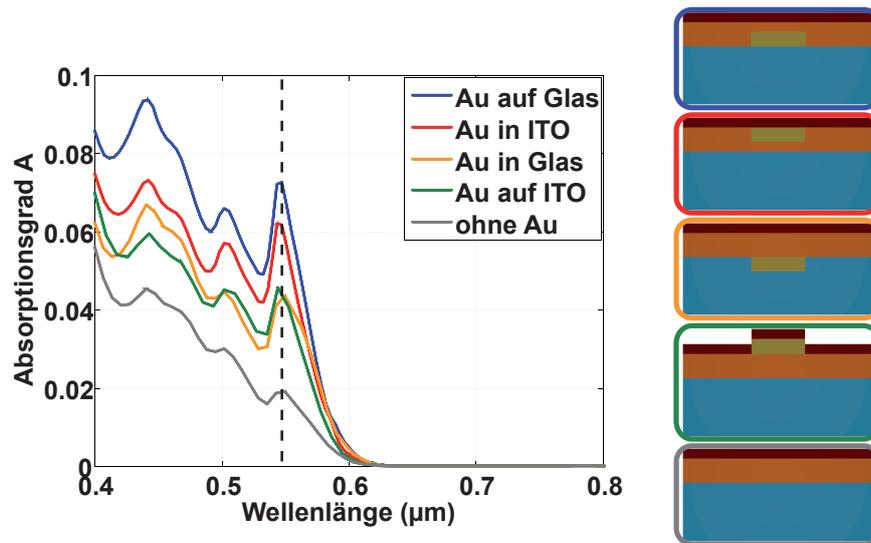


Abbildung 3.6: Absorptionsspektren einer 20 nm dicken Schicht aus DIP mit verschiedenen Positionen der Goldstege entsprechend den Piktogrammen.

Die Simulationen können also verwendet werden, um herauszufinden, welche Konfiguration in Abb. 3.4 am vorteilhaftesten ist. Dies ist eine vergleichsweise einfache Optimierung. Für eine vorgegebene Geometrie muss lediglich bestimmt werden, wo der Goldsteg platziert werden sollte, um ein Maximum an absorbiertem Licht zu erhalten. Abbildung 3.6 zeigt die Absorption im DIP für die vier Geometrien in Abb. 3.4a bis 3.4d. Die Referenzstruktur entspricht der Konfiguration in Abb. 3.4e in der Mitte, hier jedoch mit 20 nm DIP auf dem ITO aber weiterhin ohne Goldsteg.

Im Gegensatz zu dem oben beschriebenen Test, der die prinzipielle Eignung der Methode untersuchen sollte, erfolgt der Lichteinfall diesmal von unten durch das Glas, so wie es in einer Solarzelle der Fall wäre.

Es zeigt sich, dass es für die gewählten Dimensionen am günstigsten ist, den Goldsteg auf dem Glas zu platzieren. In dieser Konfiguration besitzt er eine optimale Entfernung zum Halbleiter, sodass eine große Feldamplitude gerade im Bereich des absorbierenden Halbleiters zu liegen kommt. Abbildung 3.7 zeigt die normierten Feldamplituden bei 565 nm, angedeutet durch die schwarze gestrichelte Linie in Abb. 3.6. Absolut betrachtet, zeigt die Feldverteilung in Abb. 3.7b die höchste Steigerung der Feldamplitude, allerdings an der Grenze zwischen dem Glassubstrat und der Schicht aus ITO, sodass in der DIP Schicht davon nahezu nichts mehr zu erkennen ist und insgesamt die Struktur in Abb. 3.4a den größten Nutzen bringt.

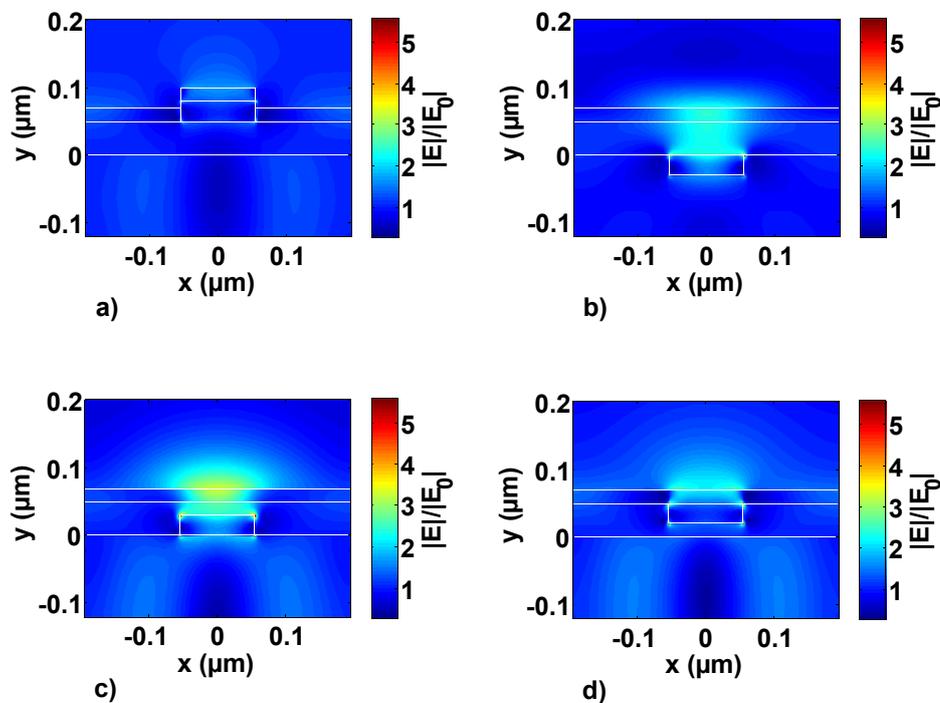


Abbildung 3.7: Normierte elektrische Feldamplitude bei unterschiedlicher Positionierung des Goldsteges. Die Normierungsgeometrie ist diejenige des Schichtstapels bestehend aus ITO und DIP. Die Dicke des organischen Halbleiters beträgt 20 nm. Die weißen Linien deuten die Materialgrenzen an. Die Farbskala ist am oberen Ende bei dem gleichen Wert begrenzt. Lichteinfall erfolgt von oben in TM-Polarisation (siehe Text).

3.3 Periodische Strukturen durch Selbstorganisation

Wie im Unterabschnitt 2.6.1 bereits erwähnt wurde, liegt in der strikten Periodizität optischer Gitter der Nachteil, dass der Effekt auf einige diskret verteilte Wellenlängen

beschränkt ist. In der Photovoltaik ist jedoch insbesondere auf der Frontseite eine breitbandige Antwort der optischen Strukturen wünschenswert.

Aus diesem Grund werden anstelle von einfachen binären Gittern Überlagerungen zweier oder mehrerer Gitter mit unterschiedlicher Periodizität verwendet, die mehr resonante Wellenlängen aufweisen. Der Grenzfall sehr vieler überlagerter Gitter führt schließlich zu randomisierten Strukturen. Diese werden in den nächsten Kapiteln behandelt.

Auf der Rückseite hingegen ist das Spektrum des Sonnenlichtes schon stark eingeschränkt, da die großen Wellenlängen bereits nach kurzen Distanzen absorbiert worden sind und lediglich kurzwelliges Licht die Rückseite der Solarzelle erreicht [Bermel et al., 2007; Wehrspohn und Üpping, 2012]. Aus diesem Grund werden hier auf der Rückseite invertierte Opale verwendet, da diese gerade die Eigenschaft besitzen diskret verteilte Resonanzen aufzuweisen. Die Resonanzwellenlänge soll dabei so gewählt werden, dass sie bei der Absorptionskante liegt. Letztere ist definiert als die spektrale Position, an der der Absorptionsgrad einer bestimmten Geometrie auf die Hälfte des Maximalwertes abgesunken ist.

3.3.1 Herstellungsverfahren

Im Hinblick auf eine großflächige Produktion sind insbesondere Opale von Interesse. Darunter versteht man mehrere übereinander gestapelte Monolagen von Kugeln, die in einer zweidimensionalen dichten Packung angeordnet sind. Man spricht dabei auch von photonischen Kristallen. Allgemein versteht man darunter, eine periodische Variation der Brechzahlverteilung, wobei die typischen Periodenlängen im Bereich der Wellenlänge liegen. Diese Nomenklatur rührt von der Analogie zu einem Festkörper her, der ein periodisches elektrisches Potential, verursacht durch die Atomrümpfe, aufweist. So, wie im Festkörper gewisse Energiewerte im Bereich der Bandlücke für die Elektronen verboten sind, kann ein photonischer Kristall eine photonische Bandlücke besitzen [Bykov, 1972; Yablonovitch, 1987]. Diese photonische Bandlücke gibt die Wellenvektoren an, für welche keine Frequenz bzw. Energie existiert. Folglich kann sich Licht im photonischen Kristall nicht ausbreiten kann.

Die Herstellung der Opale ist vergleichsweise einfach [López, 2006]. Man macht sich die natürliche Tendenz kolloidaler Partikel zur Selbstorganisation zu Nutze. Dazu wird ein präpariertes Substrat in eine Lösung getaucht, in welcher sich die zu deponierenden Kugeln befinden. Anschließend wird das Lösungsmittel verdampft wobei sich durch den Prozess der Selbstorganisation eine Opalstruktur herausbildet. Dabei ergeben sich für kristalline Strukturen zwei mögliche Schichtfolgen. Entweder die dritte Monolage liegt direkt über der ersten. In diesem Falle lautet die Schichtfolge ABABA

und die Struktur besitzt die hexagonal dichteste Packung (hcp, engl. hexagonal close packed), oder aber die dritte Monolage liegt im Vergleich zur ersten um eine Lücke versetzt und erst die vierte liegt wieder direkt über der ersten Monolage. Dann lautet die Schichtfolge ABCABC und das Gitter ist kubisch flächenzentriert (fcc, engl. face centered cubic).

Im Allgemeinen lässt sich die Schichtfolge jedoch nicht präzise kontrollieren, sodass die Anordnung der Monolagen untereinander von einer gewissen Unordnung geprägt ist [Wang et al., 2003; Vlasov et al., 2000]. Zwar konnte theoretisch nachgewiesen werden, dass die thermodynamisch stabile kristalline Phase ein fcc-Gitter ausbildet, jedoch ist die Differenz der freien Energie zum hcp-Gitter sehr klein. Daraus folgt, dass synthetisierte Opale im Normalfall eine zufällige Schichtfolge von hexagonalen Monolagen enthalten (rhcp, engl. random hcp). Für photovoltaische Anwendungen hat sich außerdem eine anschließende Invertierung als vorteilhaft herausgestellt, da solche Strukturen eine komplette photonische Bandlücke aufweisen können [Busch und John, 1998]. Bei invertierten Opalen werden die Hohlräume zwischen den Kugeln mit einem Material gefüllt und in einem zweiten Schritt die Kugeln herausgelöst. Das Resultat ist ein opalartiger Hohlraum. Obwohl im weiteren Verlauf dieser Arbeit nur noch invertierte Opale mit kugelförmigen Lufteinschlüssen in einem Trägermaterial betrachtet werden, wird dennoch weiterhin von Kugeln gesprochen. Dabei handelt es sich einfach um Kugeln aus Luft mit einer Brechzahl von eins.

3.3.2 Bandstruktur

Das optische Verhalten eines invertierten Opals ist abhängig vom Durchmesser der kugelförmigen Hohlräume. Die Wahl eines bestimmten Kugeldurchmessers legt auch die Periode des Opals fest. Um tatsächlich periodische Strukturen untersuchen zu können wird im Folgenden angenommen, dass der Opal ein fcc-Gitter ausbildet. Die Charakterisierung periodischer Strukturen geschieht mit Hilfe der Bandstruktur. Dazu werden die Eigenzustände und Eigenwerte der Maxwellgleichungen bestimmt. Zur numerischen Lösung des Eigenwertproblems kann sowohl das elektrische als auch das magnetische Feld verwendet werden. Die Wellengleichung für das elektrische Feld lautet

$$\nabla \times \nabla \times \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = 0. \quad (3.4)$$

Die Dispersion aufgrund der Geometrie ist im Allgemeinen viel größer als die Materialdispersion, weshalb Letztere im Folgenden vernachlässigt wird. Überdies wird die Absorption nicht berücksichtigt, da sie für die verwendeten Materialien im relevanten Spektralbereich sehr gering ist. $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)$ wird zu $\varepsilon(\mathbf{r})$ und ist eine rein reelle Größe. Für

ein unendlich ausgedehntes Gitter können sogenannte Blochmoden als Ansatz verwendet werden, welche aus einem periodischen Anteil und einer ebenen Welle bestehen, wobei der periodische Anteil die Periodizität des Gitters besitzt [Joannopoulos et al., 2011; Schilling, 2002], d. h.

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{u}_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (3.5)$$

mit

$$\mathbf{u}_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathbf{u}_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}). \quad (3.6)$$

Hierbei bezeichnet n den Bandindex und \mathbf{R} ist ein beliebiger direkter Gittervektor im Kristall. Der obige Ansatz für $\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)$, eingesetzt in Gl. (3.4), führt schließlich auf folgendes Eigenwertproblem:

$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} (i\mathbf{k} + \nabla) \times [(i\mathbf{k} + \nabla) \times \mathbf{u}_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})] = \frac{\omega^2(\mathbf{k})}{c^2} \mathbf{u}_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (3.7)$$

Sowohl $\varepsilon(\mathbf{r})$ als auch $\mathbf{u}_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ besitzen die Periodizität des Gitters und können folglich als Fourierreihen dargestellt werden. Es gilt

$$\mathbf{u}_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_j \mathbf{u}_{\mathbf{G}_j} e^{i\mathbf{G}_j \cdot \mathbf{r}} \quad (3.8a)$$

$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} = \sum_j \kappa_{\mathbf{G}_j} e^{i\mathbf{G}_j \cdot \mathbf{r}}, \quad (3.8b)$$

wobei $\mathbf{u}_{\mathbf{G}_j}$ und $\kappa_{\mathbf{G}_j}$ die Fourierkoeffizienten für $\mathbf{u}_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ bzw. $\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})}$ sind. Summiert wird über alle reziproken Gittervektoren \mathbf{G}_j . Die Gln. (3.8) werden sodann in Gl. (3.7) eingesetzt. Durch die Fourierentwicklungen der Gln. (3.8) entsteht ein homogenes Gleichungssystem, dessen Lösung die Eigenwerte $\omega_{n,\mathbf{k}}$ als Funktion des Wellenvektors \mathbf{k} liefert. Das Eigenwertproblem wurde in der vorliegenden Arbeit mit Hilfe des Softwarepakets MIT Photonic Bands (MPB) gelöst [John und Joannopoulos, 2001]. Der Wellenvektor fährt dabei charakteristische Punkte des reziproken Gitters ab. Die Eigenwerte werden schließlich über die zugehörigen Wellenvektoren aufgetragen. Die Moden einer periodischen Struktur bilden demnach eine Schar von kontinuierlichen Kurven $\omega_n(\mathbf{k})$, die durch den Bandindex n charakterisiert werden. Die Beziehung zwischen $\omega_n(\mathbf{k})$ und \mathbf{k} wird Dispersionsrelation genannt.

Theoretisch erhält man die Dispersionsrelation, indem man die komplexe Feldamplitude in Form einer ebenen Welle $\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, \omega)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ schreibt. Nach Einsetzen in die Helmholtzgl. (2.47) folgt

$$\left(-k^2(\omega) + \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon(\omega)\right)\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, \omega) = 0, \quad (3.9)$$

mit dem Betrag k des Wellenvektors \mathbf{k} . Hier wurde wiederum angenommen, dass keine externen Ladungen vorhanden sind, sodass die Divergenz von $\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)$ verschwindet. Der Ausdruck in der Klammer muss demnach verschwinden, woraus folgt

$$k^2(\omega) = \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon(\omega). \quad (3.10)$$

Gleichung (3.10) kann dazu verwendet werden, einem inhomogenen Medium, dessen Permittivitätsvariationen jedoch auf sehr kleinen Skalen im Vergleich zur Wellenlänge geschehen, einen effektiven Brechungsindex zuzuweisen. Dann sind die Lösungen der Wellengleichung nicht mehr Blochwellen, sondern ebene Wellen, die der Dispersionsrelation (3.10) genügen jedoch mit ebendieser effektiven Brechzahl bzw. Permittivität $\varepsilon_{eff}(\mathbf{r})$. Kapitel 6 wird darauf Bezug nehmen.

Die Bandstruktur eines invertierten Opals aus Zinkoxid mit einem Kugelradius von 300 nm ist in Abb. 3.8a gezeigt.

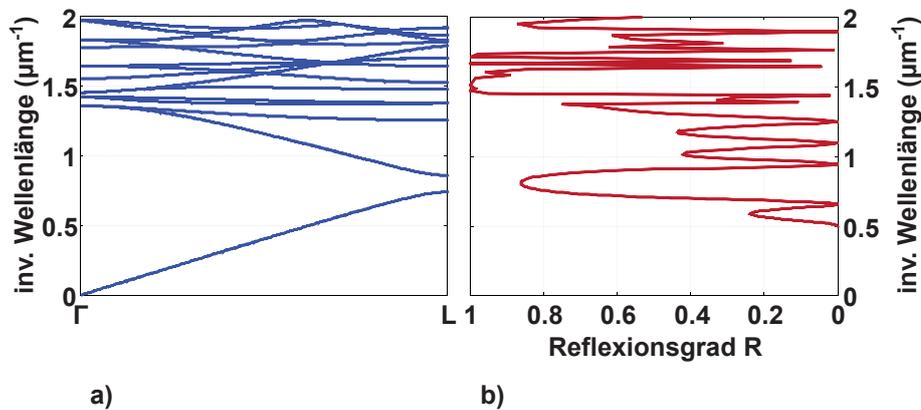


Abbildung 3.8: a) Bandstruktur in Γ –L Richtung für einen invertierten Opal bestehend aus Zinkoxid mit kugelförmigen Lufteinschlüssen mit Radius 300 nm. b) Reflexionsspektrum eines invertierten Opals mit den gleichen Material- und Geometrieigenschaften wie in a) bestehend aus vier Monolagen von Kugeln. Der Opal bildet sowohl in a) als auch in b) ein kubisch flächenzentriertes Gitter.

Wichtig für den Opal als Rückreflektor ist in erster Linie die Richtung Γ –L im reziproken Gitter. Dies entspricht der Raumdiagonalen des fcc-Gitters, welche senkrecht zur Substratoberfläche steht. Abbildung 3.8a zeigt die Bandstruktur entlang

dieser Γ –L Kante. In dieser Richtung existiert ein Stoppband bei ca. $0.8 \mu\text{m}^{-1}$. Dies entspricht einer Wellenlänge von ca. $1.25 \mu\text{m}$. In dieser Raumrichtung können sich keine Wellen ausbreiten. Tatsächlich zeigt Abb. 3.8b, dass der Reflexionsgrad R bei dieser Wellenlänge ein lokales Maximum besitzt. Um den Reflexionsgrad R als Funktion der Wellenlänge zu bestimmen, wurde die FMM benutzt. Der invertierte Opal ist in der Beleuchtungsrichtung im Gegensatz zur Bandstruktursimulation jedoch auf vier Monolagen im fcc-Gitter beschränkt.

Zusätzlich tritt aber noch eine weitere spektrale Region mit hoher Reflexion bei ca. $1.5 \mu\text{m}^{-1}$ auf, was einer Wellenlänge von ungefähr 670 nm entspricht. Die Gruppengeschwindigkeit, definiert als die Ableitung der Dispersionsrelation $\omega(\mathbf{k})$ nach \mathbf{k} , ist am Rand der Brillouinzone sehr klein. In diesem sogenannten "slow light" Regime ist die Interaktionszeit einer Blochmode mit dem photonischen Kristall erhöht [Duché et al., 2008], was ebenfalls zu einem erhöhten Reflexionsgrad führt. Aus Gründen, die später ersichtlich werden, wird ein dergestalt dimensionierter invertierter Opal als im 'diffraktiven Modus' operierend genannt, wohingegen Ersterer 'beim Stoppband' arbeitet. Eine Skalierung des Kugeldurchmessers erlaubt es nun, die beiden Regionen hoher Reflexion zu anderen spektralen Positionen hin zu verschieben, damit beispielsweise gerade an der Absorptionskante eine hohe Rückreflexion auftritt.

3.3.3 Bowtieantennen in organischen Solarzellen

In diesem Unterabschnitt soll nun der Einfluss metallischer Bowtiestrukturen auf das Absorptionsverhalten einer organischen Halbleiterschicht aus Pentacen (PEN) numerisch untersucht. PEN wird in der organischen Halbleitertechnik auf Grund seiner hohen Ladungsträgermobilität [Schön et al., 2001] häufig verwendet. Außerdem ist PEN ein bevorzugtes Material, da es sich chemisch als äußerst stabil erwiesen hat [Schön, 2001].

Die Bowtiestrukturen können mittels *shadow nanosphere lithography* hergestellt werden. Dabei wird, wie im Unterabschnitt 3.3.1 erklärt, eine Monolage aus monodispersen Kugeln auf ein Substrat aufgebracht. Anschließend wird ein Metall der Wahl abgeschieden, wobei nur die Lücken zwischen den Kugeln beschichtet werden. Verschiedene Prozesse im Voraus erlauben ein Anpassen der Form der Nanostrukturen. So können die dreieckförmigen Lücken sowohl verkleinert als auch vergrößert werden. Überdies kann durch eine von der Substratsenkrechten abweichende Beschichtungsrichtung die Form der Dreiecke gestreckt werden [Kandulski, 2007].

Abbildung 3.9a zeigt die Monolage der Kugeln auf dem Substrat. Das beschichtete Substrat nachdem die als Maske dienenden Kugeln entfernt worden sind, ist in Abb. 3.9b gezeigt. Die zahlreichen Spitzen, die die metallischen Partikel aufweisen, sol-

len mit der daran auftretenden Feldüberhöhung zu einer gesteigerten Absorption im organischen Halbleiter führen. Sofern die Ausdehnung der Partikel in der Wachstumsrichtung nicht allzu groß ist, kann der Querschnitt als invariant betrachtet werden. Der organische Halbleiter wird anschließend auf die Goldpartikel abgeschieden. Aufgrund der optischen Eigenschaften des Halbleiters betragen die üblichen Schichtdicken um die 100 nm. Die Goldpartikel sollen jedoch komplett vom Halbleiter überdeckt werden, was wiederum deren Dicke einschränkt. Damit ist die Annahme eines unveränderlichen Querschnitts der Partikel gerechtfertigt.

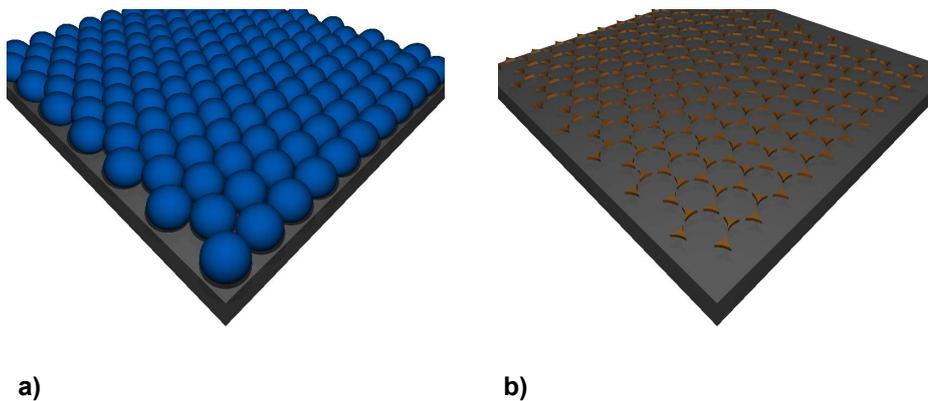


Abbildung 3.9: a) Monolage aus Kugeln als Maske auf einem Substrat. b) Metallische Partikel nach deren Aufwachsen und Entfernen der Kugeln. Der organische Halbleiter wird auf die Struktur in b) aufgebracht.

Die Grundstruktur besteht dabei aus einem Substrat aus Indiumzinnoxid (ITO), auf das die plasmonischen Partikel aus Gold aufgebracht werden. Darauf wird eine 80 nm dicke Schicht aus PEN aufgetragen. Die Schichtdicke ist konstant. Demnach befindet sich das PEN auch auf den Goldpartikeln, genauso wie vorhin bei den Goldstegen mit DIP. Als Rückseitenkontakt dient Silber. Die Goldpartikel müssen sorgfältig dimensioniert und positioniert werden, um vorteilhafte Streueigenschaften zu besitzen und nicht primär absorptiv zu wirken. Ausgangspunkt des oben erwähnten Herstellungsprozesses sind Kugeln, die sich in einem zweidimensionalen hexagonalen Gitter anordnen. Der Durchmesser der Kugeln legt dabei die Periodizität des Gitters fest. Die Größe der Bowtieantennen wird variiert, indem die Durchmesser der ortsfesten Kugeln verändert werden. Die Abbildungen 3.10a und 3.10b zeigen die hexagonalen Gitter. Die Elementarzelle ist rot unterlegt. Ist der Skalierungsfaktor des Kugeldurchmesser klein, so sind die Zwischenräume und damit die Partikel vergleichsweise groß (Abb. 3.10a). Ein Vergrößern der Kugeln lässt die Zwischenräume schrumpfen (Abb. 3.10b).

Die Spitzen der dreieckförmigen Partikel sind leicht abgerundet worden. Dies erleichtert die Simulationen, da ansonsten in den exakten Spitzen ein sehr feines Gitter

erzeugt wird, was eine entsprechend rechenintensive Simulation zur Folge hat. Dies ist aber auch aus physikalischer Sicht sinnvoll, denn im Experiment werden die Strukturen auch keine perfekt zulaufenden Spitzen aufweisen. Das Piktogramm in Abb. 3.10 zeigt die Schichtfolge entlang eines Schnittes der Struktur in der Beleuchtungsrichtung.

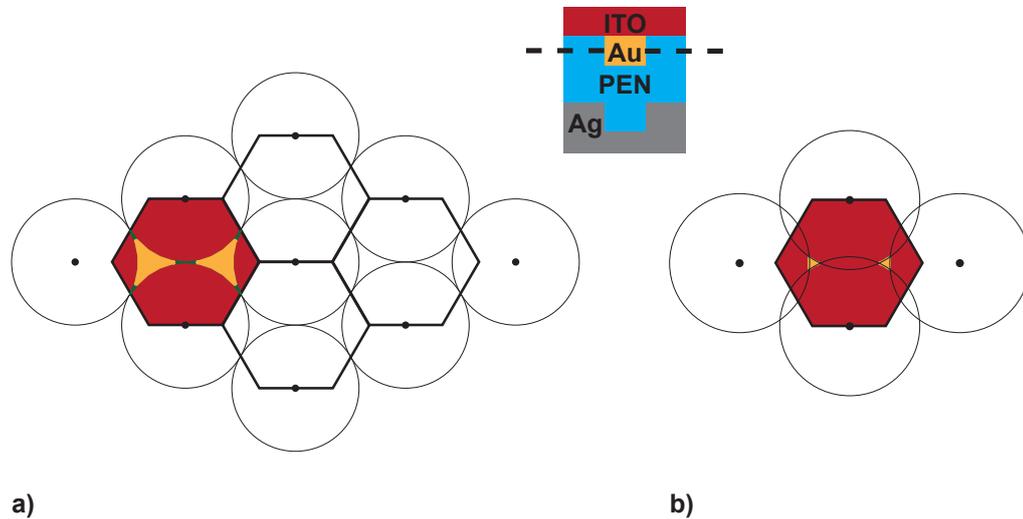


Abbildung 3.10: a) Zweidimensionales hexagonales Gitter aus metallischen Nanopartikeln (gelb). Die Spitzen der eigentlichen Lücken (grün) zwischen den Kreisen, wurden für die Simulation leicht abgerundet. Die Einheitszelle (rot) ist ein reguläres Sechseck. b) Die Partikelgröße wird variiert, indem die Radien der ortsfesten Kreise verändert werden. Das Piktogramm zeigt einen Querschnitt entlang der Beleuchtungsrichtung. Die Kürzel stehen dabei für ITO: Indiumzinnoxid (rot), Au: Gold (gelb), PEN: Pentacen (blau), Ag: Silber (grau). Die gestrichelte Linie zeigt die Position, an welcher später die Feldverteilungen gezeigt werden.

Nun müssen also eine angepasste Periode und die dazugehörige optimale Skalierung für die 80 nm dicke PEN Schicht bestimmt werden. Abbildung 3.11 zeigt den normierten Betrag der Feldamplitude für eine Einfallspolarisation in x-Richtung (Abb. 3.11a) und in y-Richtung (Abb. 3.11b). Normierungswert ist der Betrag der Feldamplitude ohne Goldpartikel. Gezeigt sind die normierten Felder entlang eines Schnittes senkrecht zur Einfallrichtung auf halber Höhe der Goldpartikel (gestrichelte Linie im Piktogramm der Abb. 3.10). Hierbei misst der Kugelradius 120 nm und die Skalierung dieses Radius beträgt 1.011. Die normierten Werte der Feldamplituden sind am oberen Ende begrenzt, da an der Metalloberfläche die Feldwerte in der Numerik unphysikalische Werte annehmen. Gut zu erkennen sind die Feldüberhöhungen an den Spitzen der Goldpartikel. Erwartungsgemäß resultiert für die y-Polarisation keine Feldüberhöhung an den zentralen Spitzen, da in dieser Richtung keine Anregung möglich ist. Abbildung 3.13 zeigt die erhaltenen spektralen Ergebnisse. Werden die beiden eben erwähnten Parameter optimiert, so erscheint an der Absorptionskante ein zusätzliches Merkmal, das durch die Goldpartikel verursacht wird.

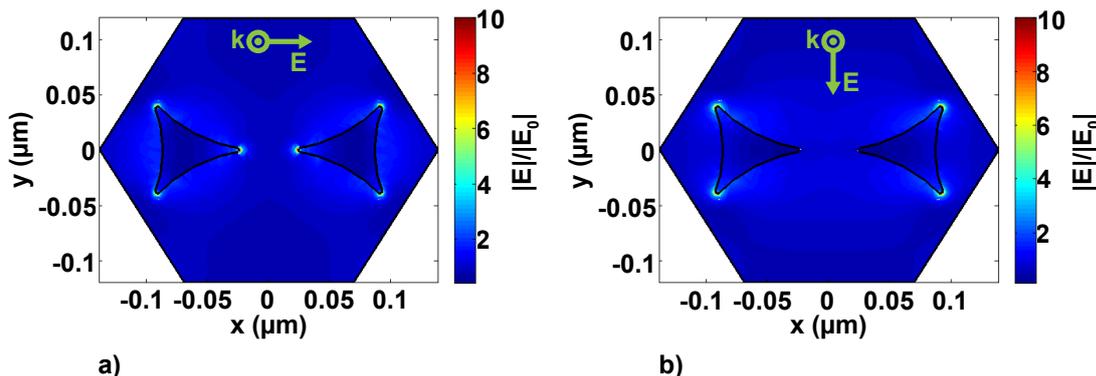


Abbildung 3.11: Feldüberhöhung auf halber Höhe der Goldpartikel an deren Spitzen für a) x-polarisiertes und b) y-polarisiertes Licht. Die Farbskala ist am oberen Ende bei einem Wert von zehn limitiert.

In Zusammenarbeit mit der Universität Konstanz^c und der Universität Tübingen^d sind erste Goldpartikel hergestellt worden. Die Goldpartikel auf dem Substrat sind in Konstanz aufgetragen worden. Die anschließende Deposition des PEN ist sodann in Tübingen vorgenommen worden. Die optischen Daten für PEN stammen ebenfalls aus Tübingen. Eine Elektronenstrahlmikroskopieaufnahme der Bowtieantennen ist in Abb. 3.12a gezeigt. Der Nominalradius der Kugeln beträgt darin jedoch 200 nm. Aus dieser Aufnahme sind die Kugeldurchmesser mit Hilfe eines Algorithmus aus der Bildbearbeitung extrahiert worden. Abb. 3.12b zeigt die Kugeln, die erfolgreich erkannt worden sind und deren Durchmesser in die Evaluation eingeflossen sind. Die Radien der 80 erkannten Kugeln sind in Abb. 3.12c gezeigt. Die Streuung reicht von ca. 170 nm bis ca. 200 nm. Der Mittelwert beträgt ca. 182 nm und die Standardabweichung liegt bei 7 nm. Die zugehörige Skalierung wurde auf 1.026 bestimmt. Das entsprechende Absorptionsspektrum ist ebenfalls in Abb. 3.13 gezeigt. Das Absorptionsvermögen ist leicht reduziert im Vergleich zur optimierten Struktur. Die Kurzschlussstromdichte beträgt 9.28 mA/cm^2 , wohingegen der Wert bei 9.61 mA/cm^2 für die optimierte Geometrie liegt. Zum Vergleich: die Kurzschlussstromdichte für die Struktur ohne Goldpartikel beläuft sich auf 8.65 mA/cm^2 . Dies ist gleichbedeutend mit einer Steigerung der Kurzschlussstromdichte um 7 % bzw. 11 % verglichen mit den beiden anderen Spektren. Diese Werte sind für sich genommen nicht sonderlich überzeugend. Der enorme Vorteil der untersuchten Strukturen liegt jedoch in der einfachen Herstellung auf potentiell großen Flächen.

^cUniversität Konstanz, Fachbereich Physik, ehem. LS Leiderer.

^dEberhard Karls Universität Tübingen, Inst. für Physikalische und Theoretische Chemie, AG Meixner.

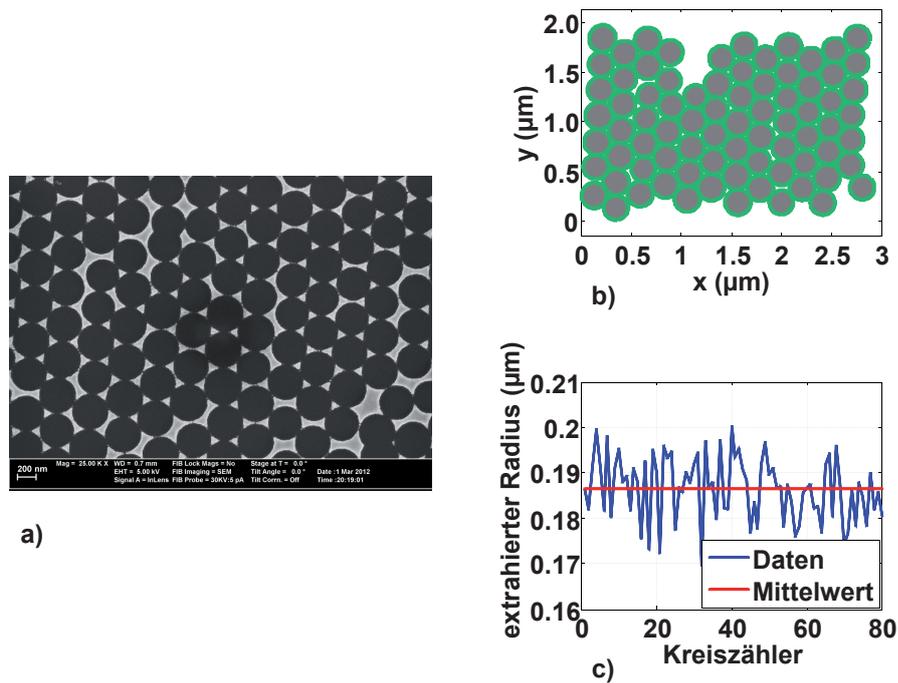


Abbildung 3.12: a) Bestimmung der Zylindergrößen aus einer SEM Aufnahme, zur Verfügung gestellt von der Arbeitsgruppe Meixner der Universität Tübingen. b) Vom Algorithmus erkannte Zylinder sind grün umrandet. c) Extrahierter Radius (blau) mit resultierendem Mittelwert (rot).

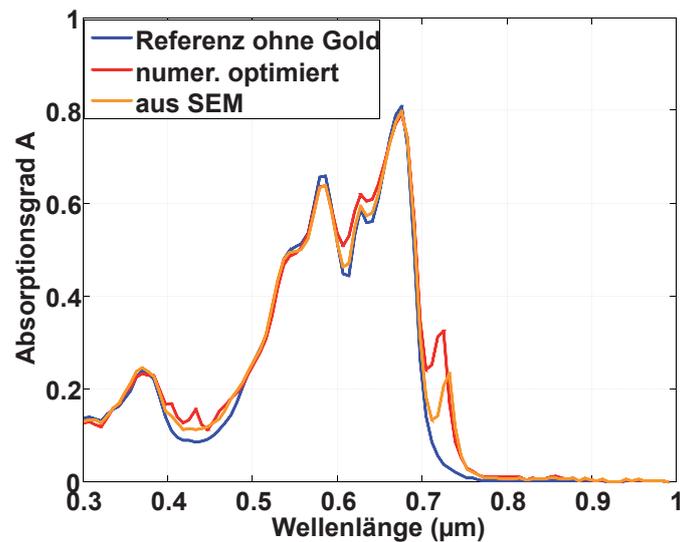


Abbildung 3.13: Absorptionsspektren einer 80 nm dicken Schicht aus PEN ohne Nanopartikel (blau), mit optimierten Nanopartikeln (rot) und Nanopartikel dimensioniert gemäß der SEM-Aufnahme in Abb. 3.12a.

3.4 Zusammenfassung

Dieses Kapitel widmete sich verschiedenen periodischen Strukturen für das Photonmanagement. Im ersten Abschnitt sind mit einem sehr einfachen Modell einer Solarzelle die Effekte periodischer Strukturen sowohl auf der Front- als auch auf der Rückseite untersucht worden. Eine wichtige Schlussfolgerung daraus ist die Bedeutsamkeit einer guten Einkopplung des Sonnenlichtes mittels einer Antireflexstruktur.

Im zweiten und dritten Abschnitt wurde eine konkrete Solarzellegeometrie untersucht. Der absorbierende Halbleiter war dabei nicht Silizium, sondern ein organischer Halbleiter. Die mit dieser Materialklasse erzielten Effizienzen sind immer noch gering. Wie sich herausstellte, lässt sich durch Einbetten metallischer Nanopartikel das Absorptionsvermögen im Vergleich zu Strukturen ohne Nanopartikel um 11 % steigern. In diesem Sinne sollte das einfache Herstellungsverfahren mittels Selbstorganisation die organische Photovoltaik etwas mehr in den Vordergrund zu rücken in der Lage sein.

Außerdem sind photonische Strukturen, die durch Selbstorganisation entstehen eingeführt worden. Diese invertierten Opale finden vor allem auf der Solarzellenrückseite Anwendung und werden in den folgenden Kapiteln eingehender betrachtet.

4 Teilperiodische Strukturen auf texturierten Substraten

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit der gleichzeitigen Verwendung von periodischen Strukturen und randomisierten Texturen in einer Solarzelle. Das Herstellungsverfahren führt zu einem vorübergehenden Symmetrieverlust der periodischen Struktur, welcher sich jedoch positiv auf das Absorptionsvermögen der Solarzelle auswirkt.

Eine Steigerung der Komplexität im Vergleich zu den Strukturen des vorangegangenen Kapitels besteht darin, die Frontseite mit einer randomisierten Textur zu versehen. Dabei steht wiederum eine gute Einkopplung über einen breiten Spektralbereich im Vordergrund. Auf der Rückseite hingegen soll erneut bei der Absorptionskante eine selektive Antwort der photonischen Struktur bestehen. Diesen unterschiedlichen spektralen Anforderungen wird mit texturierten Oberflächen auf der Lichteinfallseite und mit invertierten Opalen auf der Rückseite Rechnung getragen.

Des Weiteren spielt auch die Dicke der absorbierenden Schicht eine wichtige Rolle, da sich insbesondere für Halbleiter mit indirekter Bandlücke die Absorptionskante mit zunehmender Schichtdicke in den roten Spektralbereich verschiebt [Würfel, 2008].

Die Herstellung der invertierten Opale vollzieht sich in gleicher Weise wie im Unterabschnitt 3.3.1 dargelegt. Hingegen wird die Selbstorganisation der Kugeln durch die strukturierte Oberfläche zunächst verhindert. Unmittelbar nach der Textur sind die Kugeln noch zufällig angeordnet und folgen vielmehr dem Höhenprofil der Textur als einer perfekten Anordnung in einem fcc-Gitter. Dieser Zustand wird im Folgenden amorpher Opal genannt. Nach und nach bildet sich jedoch auch auf texturierten Oberflächen eine periodische, opalartige Struktur aus [Üpping et al., 2011]. Das bedeutet, dass die Struktur auf der Rückseite zwar als periodisch vorgesehen ist mit einer Resonanz bei der Absorptionskante, dass aber aufgrund der Herstellungsprozedur in Verbindung mit der texturierten Oberfläche notgedrungen nur eine teilperiodische Struktur entsteht.

Zu klären bleibt nun, ob diese lokal beschränkte Unordnung in unmittelbarer Umgebung der Textur dem optischen Verhalten der Opalstruktur abträglich ist oder nicht.

Tatsächlich lässt sich zeigen, dass die unvermeidliche Unordnung in der Opalstruktur für das Photonmanagement von Vorteil ist [Wiesendanger et al., 2013b].

Die untersuchte Solarzelle besteht aus mikrokristallinem Silizium (μ -Si:H). Die optischen Daten wurden vom Forschungszentrum Jülich zur Verfügung gestellt [IEK-5, 2013]. Die auf der Frontseite verwendete Oberflächentextur ist einer realen, mittels eines Rasterkraftmikroskops bestimmten, Textur nachempfunden. Sie stammt ebenfalls vom Forschungszentrum Jülich und ähnelt einer Textur, wie sie auch von Berginski *et al.* beschrieben worden ist [Berginski et al., 2007].

Für μ -Si:H Solarzellen mit typischen Schichtdicken des Absorbers von bis zu einigen Mikrometern werden solche Texturen üblicherweise durch einen nasschemischen Prozess erhalten [Kluth et al., 1999], in welchem ein auf ein Glassubstrat aufgebracht leitfähiges Oxid (TCO, engl. transparent conductive oxide) strukturiert wird.

Die daraus resultierenden Oberflächen werden im Wesentlichen durch zwei Größen charakterisiert. In lateraler Richtung werden die Detailgrößen durch die normierte Autokorrelationsfunktion (ACF, engl. autocorrelation function) beschrieben. Für reellwertige Funktionen, wie zum Beispiel ein Höhenprofil $h(x, y)$, ist sie definiert durch

$$ACF(\tau_x, \tau_y) = \frac{\int_{L_x} \int_{L_y} h_n(x, y) h_n(x + \tau_x, y + \tau_y) dx dy}{\int_{L_x} \int_{L_y} h_n(x, y) h_n(x, y) dx dy}. \quad (4.1)$$

Hierbei sind L_x und L_y die Ausdehnungen der Textur in x- bzw. y-Richtung. Das Höhenprofil $h(x, y)$ gibt demnach die Ausdehnung der Textur in z-Richtung an. Das mit $h_n(x, y)$ bezeichnete Höhenprofil, ist das Originalhöhenprofil $h(x, y)$ nach Abzug des Durchschnitts aller seiner Werte, sodass die Textur in z-Richtung um null zentriert ist.

Die resultierende ACF erreicht ihren Maximalwert $ACF_{max} = 1$ bei null. Die laterale Korrelationslänge (LCL, engl. lateral correlation length) ist dann definiert als die Distanz, nach welcher die ACF auf den Wert $\frac{1}{e}$ abgesunken ist. Theoretisch lässt sich eine LCL sowohl in x- als auch in y-Richtung bestimmen. Aufgrund der Herstellungsweise existiert jedoch keine Vorzugsrichtung für Details der randomisierten Textur und die ACF ist nahezu radialsymmetrisch bezüglich der z-Achse.

In der vertikalen Ausdehnung wird das Höhenprofil durch die Rauigkeit R_{rms} (engl. root mean square) charakterisiert. Diese ist definiert durch

$$R_{rms} = \sqrt{\frac{1}{L_x L_y} \int_{L_x} \int_{L_y} h_n^2(x, y) dx dy}. \quad (4.2)$$

Von der ursprünglichen randomisierten Textur wird für die nachfolgenden Untersuchungen ein Ausschnitt von $4 \times 4 \mu\text{m}^2$ ausgewählt. Die Größe des Ausschnitts ist

dabei so gewählt, dass einerseits die Textur hinreichend viele charakteristische Details aufweist und andererseits keine zusätzlichen Ortsfrequenzen durch das Anwenden periodischer Randbedingungen eingeführt werden.

Mit Hilfe dieses Ausschnitts wird eine konform texturierte Schicht gebildet, indem die Textur parallel zur Substratnormalen um die Schichtdicke verschoben wird. Konform bedeutet folglich, dass die beiden Grenzflächen identisch und lediglich um einen bestimmten Wert gegeneinander verschoben sind.

Wird nun die lokal definierte Schichtdicke eingeführt, die die Entfernung zwischen zwei Grenzflächen in Richtung der Substratnormalen misst, so ist diese Dicke für alle lateralen Positionen konstant. Davon abweichende Strukturen werden im nächsten Abschnitt behandelt.

Das Umgebungsmedium ist wiederum ZnO mit einer dispersionslosen relativen Permittivität $\varepsilon_r = 4$.

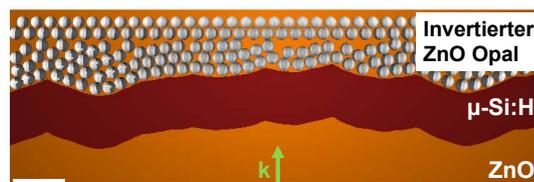


Abbildung 4.1: Querschnitt entlang der Beleuchtungsrichtung durch die betrachtete Solarzelle. Die konform texturierte Schicht besteht aus mikrokrystallinem Silizium (rot). Darauf werden die kugelförmigen Luft einschlüsse (weiß) der Opalstruktur platziert. Das Trägermaterial (orange) besteht aus Zinkoxid. Der Lichteinfall geschieht von unten. Die Vergleichslänge misst 50 nm.

Abbildung 4.1 zeigt einen Querschnitt durch ein dreidimensionales Modell einer Solarzelle entlang der Beleuchtungsrichtung. Eine konform texturierte μ -Si:H Schicht umgeben von ZnO auf der Seite des einfallenden Lichtes und einer invertierten Opalstruktur auf der Rückseite. Aufgrund der Textur ist, wie erwähnt, die Selbstorganisation bei der Herstellung des Opals gestört. Nur im Kleinen ist eine regelmäßige Anordnung der Kugeln vorhanden. Um der anwachsenden Ordnung bis hin zum perfekten fcc-Gitter Rechnung zu tragen, werden auf die zufällig angeordneten Kugeln zusätzlich Opale mit einer vollkommenen Periodizität darüber angefügt. Die Textur auf der Frontseite sorgt dafür, dass ein polarisationsabhängiges Verhalten nahezu ausgeschlossen werden kann, da jede Polarisation formal mit der gleichen Struktur interagiert.

4.1 Invertierte Opale auf texturierten Oberflächen

Zur Bestimmung der Positionen der Kugeln auf der Textur ist ein geeigneter Algorithmus entwickelt worden. Die Idee ist, in einem ersten Schritt den geometrischen Ort aller möglichen Mittelpunkte von Kugeln mit gegebenem Radius zu bestimmen, sodass die Kugeln direkt auf der texturierten Oberfläche aufliegen.

Diese potentiellen Mittelpunkte werden mit Hilfe sogenannter morphologischer Operatoren aus der Bildbearbeitung bestimmt [Soille, 2003]. Im vorliegenden Fall geschieht dies mit einem Dilatationsoperator. Dabei wird der Mittelpunkt einer Kugel mit dem Radius der aufzutragenden Schichtdicke über die Oberfläche gefahren. Alle Punkte, die oberhalb der Oberfläche und innerhalb der Kugel liegen, bilden vereinigt die neue Schicht und damit auch eine neue Oberfläche. Die neue Oberfläche ist genau der geometrische Ort aller möglichen Mittelpunkte von oben.

Anschließend werden diese Mittelpunkte aufsteigend nach ihrer z -Koordinate sortiert und der Reihe nach mit Kugeln versehen, wobei ein Überlappen der Kugeln ausgeschlossen wird.

In diesem Sinne wird selbst bei texturierten Oberflächen von Kugellagen gesprochen, wobei zunächst so viele Kugeln wie möglich auf der Oberfläche platziert werden. Dabei ist es durchaus möglich, dass eine Kugel in dieser Kugellage eine z -Koordinate aufweist, die größer ist als die kleinstmögliche z -Koordinate, da zuerst die gesamte neue Kugellage aufgefüllt wird.

Um später den so entstandenen amorphen Opal mit einem perfekten Opal zu kombinieren, werden die Täler im amorphen Opal, die genügend Platz für eine weitere Kugel aufweisen, nachträglich mit einer solchen versehen.

Die Analyse der optischen Eigenschaften der Solarzelle geschieht in diesem Falle mit einer Modifikation der ursprünglich vorgeschlagenen FMM. Die Schicht, in welcher der Großteil der Absorption stattfindet, wird dabei inkohärent betrachtet [Kroll et al., 2012]. Diese inkohärente Version ist insbesondere für vergleichsweise dicke absorbierende Schichten geeignet, die eine homogene Region enthalten.

Abbildung 4.2 beschreibt das Vorgehen schematisch. Die Idee ist, die gesamte Struktur in drei Teilstrukturen zu unterteilen. Jeweils zwei davon (Region 1 und 3) auf der Front- bzw. der Rückseite sind örtlich inhomogene Regionen. Diese sind üblicherweise die vorgeschlagenen photonischen Elemente für das Photonmanagement. Die dritte Teilstruktur (Region 2) ist die homogene Schicht dazwischen.

Die Beugungseffizienzen in Reflexion und Transmission werden anschließend lediglich für die zwei Randregionen mittels einer kohärenten FMM berechnet.

Daraus resultieren große Matrizen, deren Einträge angeben, wie die einzelnen Beugungsordnungen miteinander koppeln. Diese Beugungseffizienzen werden in einem

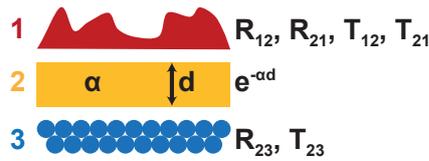


Abbildung 4.2: Aufteilung der Gesamtstruktur in drei Substrukturen für die inkohärente FMM. Die beiden Grenzregionen **1** und **3** werden kohärent berechnet und die resultierenden Beugungseffizienzen anschließend mittels eines Exponentialterms $e^{-\alpha d}$ miteinander gekoppelt. Die homogene Schicht wird über die Absorptionskonstante α und die Schichtdicke d charakterisiert. R_{ij} und T_{ij} bezeichnen die Beugungseffizienzen in Reflexion bzw. Transmission aus Region i an bzw. nach Region j .

zweiten Schritt inkohärent miteinander gekoppelt, und zwar mittels eines einfachen, abnehmenden Exponentialterms, welcher den Imaginärteil der Propagationskonstanten mal die Schichtdicke der homogenen Region im Exponenten enthält. Der Imaginärteil der Propagationskonstanten beschreibt die Dissipation des Lichtes in der Solarzelle und ist im Allgemeinen verschieden für alle Beugungsordnungen. Der Exponentialterm ist eine rein reelle Größe.

Der Einfluss dieser inkohärent betrachteten Region lässt sich mit Matrix A beschreiben, deren Einträge ebendiese Exponentialterme sind. Diese Matrix gibt an, wie stark eine bestimmte Beugungsordnung gedämpft wird.

Die Gesamtreflexion bzw. -transmission ist dann die unendliche Reihe aller Intensitätsbeiträge, die die homogene Schicht beliebig oft durchlaufen haben, wobei bei jedem kompletten Durchgang ein zusätzlicher Faktor $AR_{21}AR_{23}$ hinzukommt, d. h.

$$\begin{aligned} R_{tot} &= R_{12} + T_{21}AR_{23}AT_{12} + T_{21}AR_{23}AR_{21}AR_{23}AT_{12} + \dots \\ &= R_{12} + T_{21}AR_{23} \frac{1}{1 - AR_{21}AR_{23}} AT_{12} \end{aligned} \quad (4.3a)$$

$$\begin{aligned} T_{tot} &= T_{23}AT_{12} + T_{23}AR_{21}AR_{23}AT_{12} + T_{23}AR_{21}AR_{23}AR_{21}AR_{23}AT_{12} + \dots \\ &= T_{23} \frac{1}{1 - AR_{21}AR_{23}} AT_{12}. \end{aligned} \quad (4.3b)$$

Die zweifachen Indizes geben jeweils die Richtung der Reflexion bzw. Transmission an. So stellt z. B. R_{12} die Reflexion aus Region **1** an Region **2** dar.

Dieses Vorgehen ist in völliger Analogie zum Reflexions- bzw. Transmissionsspektrum eines einfachen Fabry-Perot Resonators. In den Gln. (4.3) sind lediglich die Reflexions- bzw. Transmissionskoeffizienten des Resonators durch Matrizen und die einfachen Phasenfaktoren beim Durchlaufen des Resonators hier durch Dämpfungsfaktoren der Form $e^{-\alpha d}$ ersetzt worden. Der erwähnte Imaginärteil der Propagationskonstanten wird mit α , die Schichtdicke der inkohärent betrachteten Schicht mit d bezeichnet.

Sowohl das ZnO auf der Frontseite als auch das ZnO des Trägermaterials des invertierten Opals wird als verlustfrei angenommen. Die Gesamtabsorption ist wiederum durch $A(\lambda) = 1 - R(\lambda) - T(\lambda)$ gegeben.

Ziel dieser inkohärenten Betrachtung ist die angemessene Berücksichtigung der Kohärenzeigenschaften des Sonnenlichtes. Die Kohärenzlänge für einen Schwarzkörper bei ca. 5800 K liegt bei einigen Hundert Nanometern [Donges, 1998]. Sind die üblichen Schichtdicken größer als dieser Wert, so ist für spektral integrierte Größen wie die Kurzschlussstromdichte j_{SC} , die inkohärente Betrachtung angemessen.

Außerdem führen die beugenden Elemente an der Frontseite der Solarzelle zu einer räumlichen Verteilung des Lichtes über einen breiten Winkelbereich. Damit geht die Fähigkeit zur Interferenz für Licht, das mehreren Reflexionen an der Front- und der Rückseite unterworfen ist, verloren.

Als Referenzstruktur dient eine unstrukturierte Schicht aus μ -Si:H, ausgestattet mit einem Rückseitenkontakt aus Silber. Da in diesem Falle zwei absorbierende Medien vorhanden sind, jedoch nur die Absorption in der μ -Si:H Schicht von Interesse ist, muss diese auf anderem Wege berechnet werden. Dazu wird eine der beiden Seiten in Gl. (2.34) berechnet. Für einen einfachen Schichtstapel sind die Grenzflächen wohl definiert, und es bietet sich, an den rechten Term zu benutzen. Dazu ist lediglich der zeitgemittelte Poyntingvektor über die Grenzflächen zu integrieren und die Leistungsbilanz pro Schicht aufzustellen. Jede Erweiterung des Modells der Solarzelle muss sich schließlich an dieser Referenz messen lassen. Ist eine Modifikation des Modells nicht in der Lage, den einfachen Silberspiegel auf der Rückseite hinsichtlich der Absorption im Halbleiter zu übertreffen, so ist sie zu verwerfen.

Als Nächstes muss nun noch der invertierte Opal als beugendes Element auf der Rückseite dimensioniert werden. Ziel dabei ist ein hoher Reflexionsgrad an der Absorptionskante. Letztere hingegen ist abhängig von der Schichtdicke des Absorbers, da insbesondere im langwelligen Spektralbereich zunehmend absorbiert wird. Dies muss bei der Dimensionierung des invertierten Opals berücksichtigt werden.

Dazu werden die Absorptionsspektren von μ -Si:H Schichten unterschiedlicher Dicke bestimmt. Diese Spektren sind in Abb. 4.3a gezeigt.

Für das weitere Vorgehen wird die Schichtdicke des Absorbers auf $1 \mu\text{m}$ festgelegt, da dies einer üblichen Dicke für μ -Si:H Zellen entspricht. Der Reflexionsgrad sollte demnach um 630 nm ein Maximum aufweisen.

Eine nützliche Eigenschaft der Maxwellgleichungen ohne Quellen und Ströme ist deren Skaleninvarianz. Das bedeutet, eine Multiplikation aller Geometriegrößen mit einem konstanten Faktor führt zu denselben Gleichungen. Damit ist die Anpassung des dispersionsfreien invertierten Opals besonders einfach. Die spektralen Positionen der Reflexionsmaxima in Abb. 3.8b skalieren mit dem Radius der Kugeln.

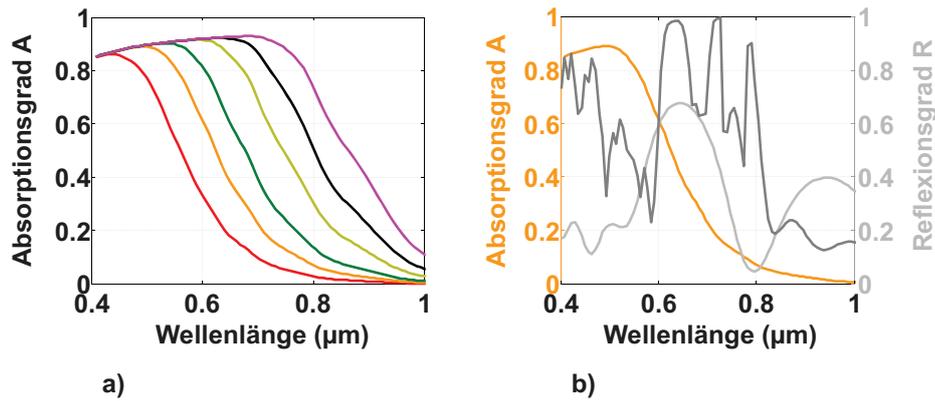


Abbildung 4.3: a) Absorptionsspektren einer Absorberschicht aus mikrokristallinem Silizium für Schichtdicken von $0.4 \mu\text{m}$ (rot), $1 \mu\text{m}$ (orange), $2 \mu\text{m}$ (dunkelgrün), $5 \mu\text{m}$ (hellgrün), $10 \mu\text{m}$ (schwarz) und $20 \mu\text{m}$ (violett). b) Absorptionsspektrum für eine $1 \mu\text{m}$ dicke mikrokristalline Schicht (orange) und Reflexionsspektren zweier daran angepasster invertierter Opale mit Kugelradien von 140 nm (hellgrau) und 325 nm (dunkelgrau).

Abbildung 4.3b zeigt nochmals das Absorptionsspektrum der $\mu\text{-Si:H}$ Schicht. Damit das Stoppband an der Absorptionskante zu liegen kommt, muss ein Radius von 140 nm gewählt werden. Wird nun der Radius vergrößert, so verschiebt sich die Kurve in Abb. 3.8b zunehmend in den roten Spektralbereich, bis schließlich die zweite Region mit hohem Reflexionsgrad an die Absorptionskante zu liegen kommt.

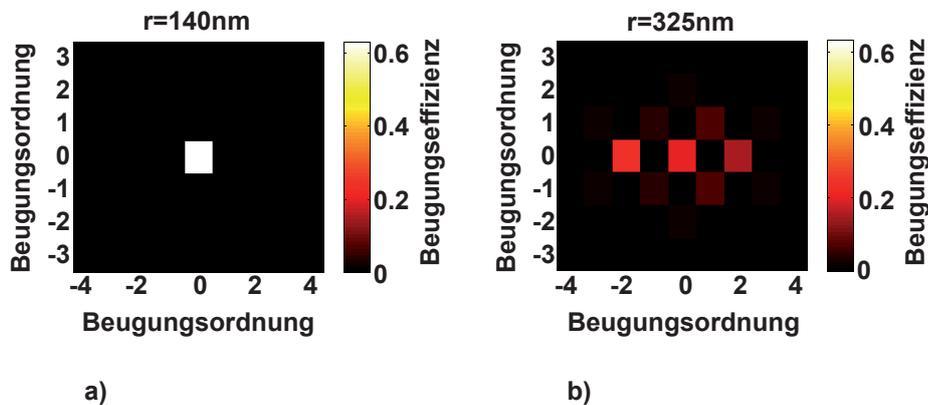


Abbildung 4.4: a) Beugungseffizienz eines vierlagigen invertierten Opals aus Zinkoxid bei einem Kugelradius von 140 nm . b) Gleiche Konfiguration wie in a), aber mit einem Kugelradius von 325 nm .

Werden nun die Beugungseffizienzen an der Absorptionskante für beide Radien dargestellt, so zeigt sich, dass das Stoppband zwar betragsmäßig die höchste Beugungseffizienz aufweist, dass aber im Wesentlichen in die nullte Ordnung gebeugt wird (Abb. 4.4a). Im Gegensatz dazu wird im diffraktiven Modus eine Vielzahl von höheren Beugungsordnungen angeregt, die in einen größeren Winkel zur Einfallsrich-

tung gebeugt werden und folglich auch einen erhöhten optischen Weg im Absorber zurücklegen (Abb. 4.4b).

Der diffraktive Modus des invertierten Opals sollte demnach zu höheren Kurzschlussströmen führen als beim Stoppband, weshalb zunächst nur bei diesen größeren Radien Untersuchungen vorgenommen werden. Nichtsdestotrotz bleibt die eben erwähnte Vermutung erst noch zu beweisen.

Nach diesen Vorarbeiten können nun die Strukturen mit zunehmender Komplexität hinsichtlich ihrer Effizienz untersucht werden. Die einfachste Anordnung bildet eine homogene unstrukturierte Schicht mikrokristallinen Siliziums der Dicke $1\ \mu\text{m}$. Damit ist auch das Volumen des Absorbers festgelegt, welches, um der Vergleichbarkeit der Strukturen Willen, konstant gehalten werden muss. Abbildung 4.5 zeigt die Absorptionsspektren dieser Strukturen.

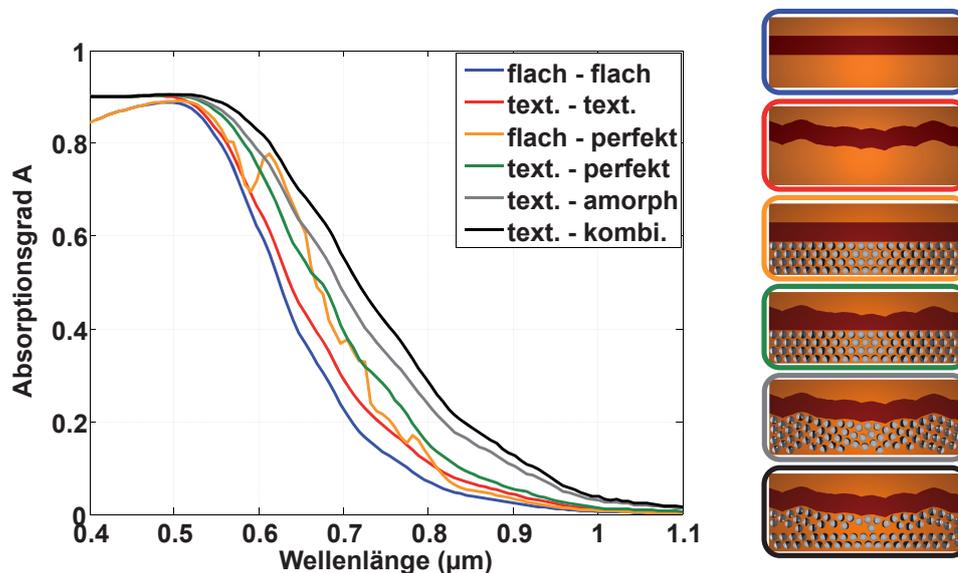


Abbildung 4.5: Absorptionsspektren ausgewählter Geometrien zur Erklärung der auftretenden Effekte für eine $1\ \mu\text{m}$ dicke mikrokristalline Schicht. Die abgekürzten Einträge in der Legende 'text.' bzw 'kombi.' beziehen sich auf texturierte Oberflächen bzw. kombinierte invertierte Opale bestehend aus einem amorphen und einem perfekten Opal. Der Kugelradius beträgt weiterhin $325\ \text{nm}$.

Dabei lassen sich bereits einige Schlussfolgerungen ziehen. Zum einen senkt sich der Absorptionsgrad vom Maximum bei ca. $500\ \text{nm}$ auch bei abnehmenden Wellenlängen wieder leicht ab. Dies ist auf eine erhöhte Fresnelreflexion zurückzuführen. Im Vergleich zu den übrigen Spektren liegt die Absorptionskante im blauen Spektralbereich am tiefsten. Das lässt auf eine mangelnde Verwertung der großen Wellenlängen schließen.

Als Nächstes werden die glatten Grenzflächen durch randomisierte Texturen ersetzt. Bereits diese Änderung ist in der Lage, die Auswirkung der zwei Schwachpunkte

der ersten Struktur erheblich zu mildern. Nicht nur, dass die Textur den Indexübergang vom Umgebungsmedium zum Absorber sanfter gestaltet und damit die Einkopplung erhöht, sie führt auch zu einer gesteigerten Beugung in höhere Winkel zur Substratnormalen und damit einhergehend zu größeren optischen Weglängen. Allerdings ist dieser zweite Effekt in der gewählten Geometrie nicht besonders ausgeprägt und die Rotverschiebung der Absorptionskante vergleichsweise gering.

Wird hingegen die unstrukturierte Schicht als solche belassen und lediglich mit einem perfekten invertierten Opal versehen, so ist die mangelhafte Einkopplung bei kleinen Wellenlängen immer noch ersichtlich. Zusätzlich tritt jedoch ein weiteres Merkmal bei der Resonanzwellenlänge des invertierten Opals bei ca. 620 nm auf.

Eine Textur auf der Frontseite zusammen mit einem perfekt invertierten Opal ist ebenfalls gezeigt. Diese Struktur ist von eher theoretischem Interesse, da es technisch wohl schwierig sein wird, die Textur auf der Rückseite vollkommen eingeebnet zu haben. Dessen ungeachtet zeigt sie jedoch das Zusammenspiel zwischen Front- und Rückseite. Die Textur führt nämlich wiederum zu einer guten Einkopplung. Das Merkmal bei der Resonanzwellenlänge des invertierten Opals ist hingegen nicht mehr ersichtlich. Das liegt daran, dass die randomisierte Grenzfläche das einfallende Licht bereits über einen großen Winkelbereich gebeugt hat.

Der nächste Schritt besteht darin, die Textur, wie bei der zweiten betrachteten Struktur, sowohl auf der Front- als auch auf der Rückseite anzuwenden. Zusätzlich wird aber auch noch ein amorpher Opal aus ca. vier Kugellagen hinzugefügt. Dies führt zu einer weiteren Rotverschiebung der Absorptionskante. Da der invertierte Opal jedoch keine periodische Anordnung aufweist, fehlen auch die diskreten Merkmale im Absorptionsspektrum. Vielmehr führt der invertierte Opal aufgrund der globalen Brechungsindexminderung zu einer erhöhten breitbandigen Reflexion zurück in den Absorber.

Als Letztes ist der Fall mit beidseitiger Textur und einer Kombination aus amorphem und perfektem invertierten Opal auf der Rückseite dargestellt. Es zeigt sich, dass diese Geometrie, die die Realität am genauesten abbildet, auch zu der größten Absorptionssteigerung im Vergleich zur unstrukturierten Geometrie führt.

Wie erwähnt, müssen sich all diese Vorschläge aber an dem simplen, metallischen Rückseitenkontakt messen lassen, da es allemal einfacher ist, Letzteren aufzutragen, als all die optischen Strukturen zu produzieren. Abbildung 4.6 zeigt die normierten Kurzschlussstromdichten der untersuchten Strukturen. Die Umrandungen der Piktogramme tragen die gleiche Farbe wie die zugehörigen Symbole. Mit Bezug auf die Piktogramme ist die Beleuchtung von oben.

Bei den Kreisen diente die einfache unstrukturierte Schicht als Referenz. Für die Kreuze hingegen wurde als Referenz diese unstrukturierte Schicht zusätzlich mit ei-

nem Silberkontakt versehen. Aufgrund der höheren Referenzkurzschlussstromdichte verschieben sich die normierten Größen nach unten.

Um Werte größer als eins zu erhalten, ist demnach eine Textur auf der Frontseite und eine beliebige opalartige Struktur auf der Rückseite vonnöten, wobei das beste Resultat der kombinierte invertierte Opal erreicht.

Außerdem gezeigt ist der Fall eines amorphen invertierten Opals aus zwanzig Lagen. Diese Situation wird als Grenzfall sehr vieler Kugellagen betrachtet: tatsächlich liegen die normierten Werte nur unwesentlich über den Werten für die kombinierte Struktur. Daraus lässt sich schließen, dass eine Kombination aus zwei amorph angeordneten Kugellagen und zwei Kugellagen perfekter Anordnung schon sehr nah an das erreichbare Optimum herankommt.

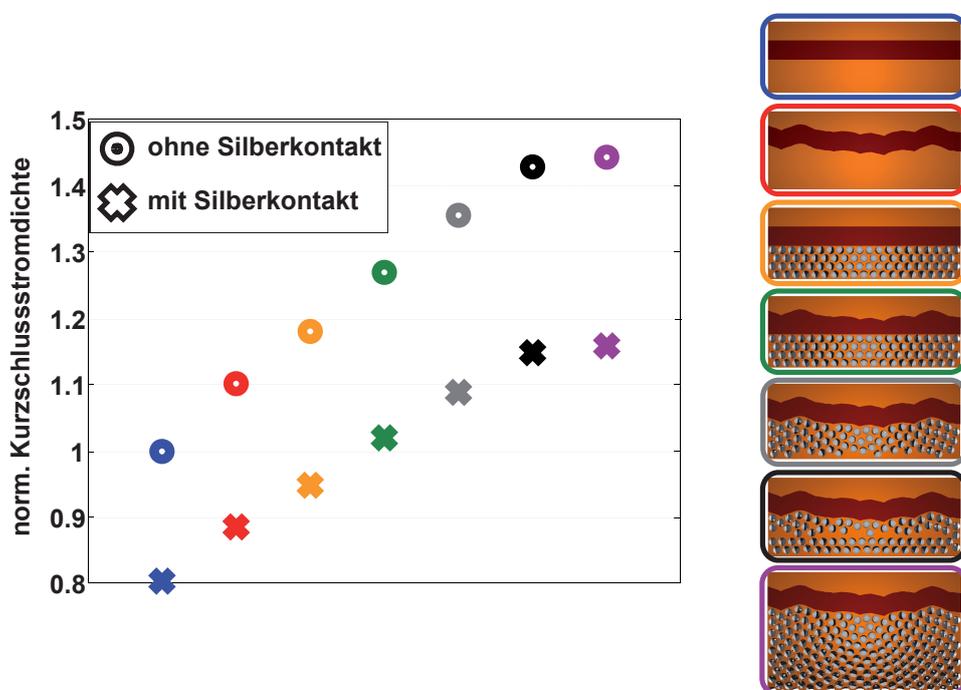


Abbildung 4.6: Normierte Kurzschlussstromdichten mit der unstrukturierten Schicht als Referenz (Kreise) und mit der mit einem Silberkontakt versehenen unstrukturierten Schicht als Referenz (Kreuze).

Simulationensresultate für größere Schichtdicken zeigt Abb. 4.7. In Abb. 4.7a dargestellt ist die normierte Kurzschlussstromdichte im diffraktiven Modus für die flache Schicht, die frontseitig texturierte Schicht mit einem perfekten invertierten Opal auf der Rückseite und die kombinierte Geometrie mit sowohl amorphem als auch perfektem invertierten Opal.

Eine Textur auf der Frontseite, kombiniert mit einem perfekten invertierten Opal, führt annähernd zur gleichen Kurzschlussstromdichte wie die Referenz mit Silberkon-

takt. Dieser Grad an Komplexität ist folglich mindestens erforderlich, um die Referenz zu übertreffen.

Mit zunehmender Schichtdicke wird der Effekt der optischen Strukturen erwartungsgemäß immer geringer, da die Absorption im Silizium als solches steigt. Für Schichtdicken unterhalb von ca. $5\ \mu\text{m}$ ist der Gewinn jedoch durchaus beträchtlich. Da das Bestreben ohnehin zu dünneren Zellen geht, scheint dieser Ansatz seine Berechtigung zu haben.

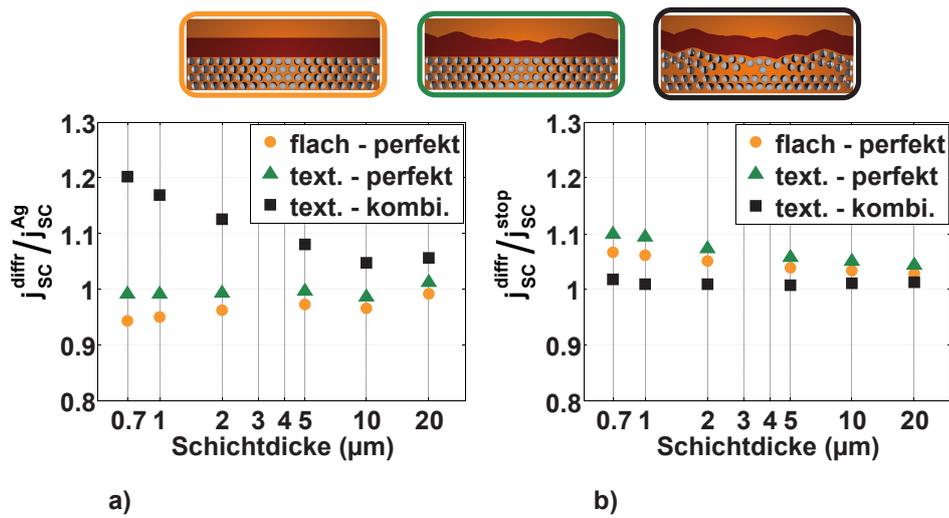


Abbildung 4.7: a) Normierte Kurzschlussstromdichten mit der mit einem Silberkontakt versehenen unstrukturierten Schicht als Referenz für ausgewählte Geometrien. b) Verhältnis der Kurzschlussstromdichten aus den Geometrien im diffraktiven Modus und am Stopband.

Dieselben Werte wie in Abb. 4.7a jedoch für das Stopband sind nicht gezeigt. Stattdessen ist in Abb. 4.7b das Verhältnis der Kurzschlussstromdichten aus dem diffraktiven Modus und derjenigen am Stopband dargestellt. Weiter oben wurde die Vermutung angestellt, dass aufgrund der erhöhten Beugung in große Winkel zur Einfallsrichtung der diffraktive Modus im Vorteil ist. Tatsächlich ist das Verhältnis der Kurzschlussstromdichten in Abb. 4.7b stets größer als eins. Die ausschließliche Betrachtung des diffraktiven Modus war somit gerechtfertigt.

Tabelle 4.1 listet die erhaltenen Kurzschlussstromdichten nochmals numerisch auf. Für den kombinierten invertierten Opal und eine Textur erhält man eine Steigerung von beinahe 50 % im Vergleich zur unstrukturierten Schicht und immer noch ca. 16 % im Vergleich zur unstrukturierten Schicht mit Silberkontakt.

Bezeichnung	Geometrie			j_{SC} (mA/cm ²)	j_{SC}^{norm} a. u. ^d	$j_{SC}^{Ag,norm}$ a. u. ^e
	Frontseite	Rückseite	Opal			
flach - flach	flach	flach	ohne	13.73	1.0	0.79
text. - text.	texturiert	texturiert	ohne	15.33	1.17	0.89
flach - perfekt	flach	flach	perfekt	16.43	1.20	0.95
text. - amorph	texturiert	texturiert	amorph	18.88	1.38	1.09
text. - kombi.	texturiert	texturiert	kombi.	20.19	1.47	1.17

^d unstrukturierte μ -Si:H Schicht als Normierungsreferenz

^e unstrukturierte μ -Si:H Schicht mit Silberspiegel als Normierungsreferenz

Tabelle 4.1: Kurzschlussstromdichten im diffraktiven Modus für eine 1 μ m dicke μ -Si:H Schicht.

4.2 Zusammenfassung

An die spektralen Anforderungen der Front- und Rückseite angepasste optische Elemente wurden in diesem Kapitel in eine Solarzelle aus mikrokristallinem Silizium integriert. Um eine gute Einkopplung des Sonnenlichtes zu ermöglichen, ist auf der Frontseite eine breitbandige Antireflexwirkung erforderlich, die durch eine randomisierte Textur gewährleistet wurde. Auf der Rückseite hingegen ist aufgrund des bereits eingeschränkten Spektrums eine hohe Rückreflexion an der Absorptionskante erwünscht. Dies wurde durch invertierte Opalstrukturen erreicht.

Werden die invertierten Opale auf einer texturierten Oberfläche gebildet, so verhindert die Textur die Entstehung eines perfekten invertierten Opals. Erst mit zunehmender Schichtzahl bildet sich schließlich dennoch eine periodische Anordnung.

Dass ein gewisses Maß an Unordnung der Effizienz einer Solarzelle durchaus zuträglich ist, wurde bereits von mehreren Seiten demonstriert [Vynck et al., 2012; Bozzola et al., 2013].

Eine Mischung aus amorphen und periodischen Strukturen zeigte auch hier die höchste Steigerung der Kurzschlussstromdichte, da sie die Vorteile beider Regime verbindet.

Für eine 1 μ m dicke Absorberschicht konnte die Kurzschlussstromdichte mit angepassten invertierten Opalen im Vergleich zu einer unstrukturierten, mit einem Silber-rückseitenkontakt versehenen, Schicht um bis zu 16 % gesteigert werden.

5 Aperiodische Strukturen aus texturierten Substraten

Bei konsequenter Weiterverfolgung des eingeschlagenen Weges müssen als Nächstes auch die periodischen optischen Elemente auf der Solarzellenrückseite aufgegeben werden. In diesem Kapitel übernehmen auch auf der sonnenabgewandten Seite randomisierte Texturen das Photonmanagement.

Aperiodische Strukturen können als Grenzfall einer Überlagerung sehr vieler periodischer Strukturen unterschiedlicher Periodizität betrachtet werden. Streng genommen sind jedoch alle in dieser Arbeit betrachteten Systeme periodisch, da das Rechengebiet um der numerischen Handhabbarkeit Willen mit periodischen Randbedingungen versehen wird. Dennoch wird hier von nichtperiodischen Systemen gesprochen, da die Periodizität allenfalls in der Numerik eingeführt wird.

5.1 Konform texturierte Oberflächen

Durch die Streuung des einfallenden Sonnenlichtes in einen breiten Winkelbereich kann der Absorptionsgrad texturierter Schichten eines absorbierenden Halbleiters um den Faktor $4n^2$ gesteigert werden, wobei n den Brechungsindex des Halbleiters bezeichnet [Yablonovitch und Cody, 1982]. Zahlreiche Arbeiten beschäftigten sich mit der Frage, welche Eigenschaften die Textur theoretisch besitzen müsste, um eine möglichst große Steigerung des Absorptionsgrades zu erzielen [Fahr et al., 2008a; Isabella et al., 2010a; Kowalczewski et al., 2012].

Neue Texturen, die die bereits etablierten Substrate hinsichtlich der Effizienz übertreffen, basieren zum Beispiel auf sowohl in lateraler als auch in vertikaler Richtung skalierten Versionen der etablierten Texturen [Fahr et al., 2011]. Ein weiterer Ansatz besteht darin, das Fourierspektrum entweder des gestreuten Lichtes oder der Textur selbst zu optimieren [Sheng et al., 2011]. Die konkrete Herstellung bleibt bei diesen Ansätzen allzu oft nur vage angedeutet. Mögliche Wege zu deren Realisierung wurden jedoch ebenfalls vorgeschlagen [Boccard et al., 2012; Cui et al., 2013b].

Der Ansatz, der hier verfolgt wird, zielt in erster Linie darauf ab, den Herstellungsprozess der randomisierten Textur zu vereinfachen [Wiesendanger et al., 2013a]. Die Vorgehensweise beginnt nicht mit einer theoretischen Überlegung hinsichtlich der optimalen Eigenschaften einer Textur und anschließender Realisierung. Vielmehr wird eine vergleichsweise einfache Methode vorgeschlagen, um randomisierte Oberflächen zu erhalten, deren geometrische Eigenschaften durch einige wenige Parameter festgelegt sind. Ziel dieser Vorgehensweise ist eine weitgehende Entkopplung der geometrischen von den optischen Eigenschaften des texturierten TCOs. Werden die Texturen nämlich, wie oben erwähnt, durch einen nasschemischen Prozess eines TCOs auf einem Glassubstrat erhalten, so ist es oft nur bedingt möglich, die geometrischen Eigenschaften von den elektrooptischen Eigenschaften getrennt zu optimieren. Das bedeutet, dass das Streuverhalten einer Textur zwar bis zu einem gewissen Grad durchaus optimiert werden kann, dass damit aber gleichzeitig die elektrooptischen Eigenschaften festgelegt sind, die einem einwandfreien Funktionieren der Solarzelle mitunter zuwiderlaufen.

Des Weiteren ist das Wachstum der einzelnen Schichten der Solarzelle zu beachten. Scharfe Spitzen im Substrat zum Beispiel sind einem defektarmen Wachstum von μ -Si:H im Allgemeinen nicht zuträglich [Python et al., 2009], was zu erhöhten Rekombinationsverlusten führt.

Die hier vorgeschlagene Idee hat ihren Ursprung in der Entstehung amorpher invertierter Opale des vorangegangenen Kapitels. Hier jedoch soll die Prozedur umgekehrt werden. Anstatt mit einer randomisierten Textur zu beginnen und darauf Kugeln zu platzieren, ist der Ausgangspunkt nun ein flaches Substrat, auf welches Kugeln unterschiedlicher Größe aufgebracht werden. Die Kugelgröße soll dabei einer bestimmten Statistik folgen, die üblicherweise durch einige wenige Parameter definiert ist. Dadurch wird eine effiziente Optimierung möglich.

In einem zweiten Schritt werden die Zwischenräume zwischen den Kugeln mit einer geeigneten Methode aufgefüllt, bis eine zusammenhängende Fläche entstanden ist [Stein et al., 2008]. Die resultierende Fläche widerspiegelt die Größenverteilung der Kugeln und bildet die Grundfläche, auf welche die komplette Schichtfolge der Solarzelle aufgetragen werden soll.

Je nach Beschaffenheit der Textur kann diese nun auf verschiedene Arten in die Solarzelle integriert werden. Wird eine p-i-n Konfiguration gewählt, so dient der eben erhaltene texturierte TCO als Frontkontakt, worauf dann der p-i-n Übergang in dieser Reihenfolge aufgetragen wird und mit einem rückseitigen TCO sowie einem Metallkontakt abgeschlossen wird. Wird hingegen eine n-i-p Konfiguration bevorzugt, so wird auf den texturierten TCO als Erstes eine Metallschicht aufgebracht, die als Rückseitenkontakt fungiert. Danach folgt der n-i-p Übergang in dieser Reihenfolge.

Die zweite Methode bietet den Vorteil, dass das Material der Kugeln sowie das Füllmaterial nahezu beliebig gewählt werden können, da das einfallende Licht nicht zu diesen Schichten durchdringen wird. Wichtig in beiden Fällen ist jedoch die Tatsache, dass Oberflächendefinition und Materialdeposition bei der Herstellung zwei separate Schritte bilden, womit elektrischen und optischen Rahmenbedingungen einfacher begegnet werden kann.

Abbildung 5.1 zeigt die zwei wesentlichen Schritte bei der Herstellung der texturierten Schicht. In Abb. 5.1a ist das flache Substrat mit einer Grundfläche von $5 \times 5 \mu\text{m}^2$ mit den darauf platzierten Kugeln unterschiedlichen Durchmessers dargestellt. Eine resultierende konform texturierte Schicht ist in Abb. 5.1b gezeigt.

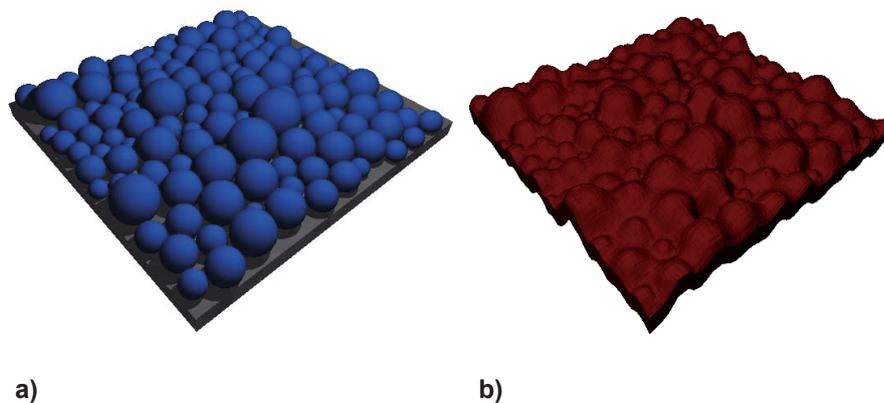


Abbildung 5.1: a) Zufällig angeordnete Kugeln unterschiedlicher Größe auf flachem Substrat. Auffüllen der Zwischenräume führt zu einer Textur mit von der Kugelgrößenverteilung abhängigen Detailgrößen. b) Die aus a) resultierende konform texturierte Schicht.

Die Positionen der Kugeln werden mit demselben Algorithmus wie im vorangehenden Kapitel bestimmt. Allerdings legt die kleinstmögliche z -Koordinate des Kugelmittelpunktes deren Position noch nicht eindeutig fest, da das Substrat im hier vorliegenden Fall flach ist. Aus diesem Grund wird in einem zweiten Schritt die Kugel zum Zentrum des Substrates hingezogen, bis sie eine oder mehrere bereits platzierte Kugeln berührt. Überdies wird ein Auftürmen der Kugeln übereinander verboten, obwohl eine geringe Wahrscheinlichkeit besteht, dass sich zwei kleine Kugeln in der Nähe einer großen stapeln. Das Resultat ist eine dichte Monolage aus Kugeln mit einer vorgegebenen Größenverteilung.

Aus experimenteller Sicht ist diese Vorgehensweise, das numerische Analogon einer viskosen Paste mit den darin enthaltenen Kugeln, die sich zwischen zwei Glasplättchen befindet. Werden die Glasplättchen nun so weit zusammengedrückt, dass deren Abstand ungefähr dem Durchmesser der größten Kugel entspricht, entsteht die gewünschte Monolage auf dem Substrat, wobei die Anordnung der Kugeln völlig zufällig

ist. Außerdem erlaubt dieses Vorgehen, die Kugeln vom Zentrum des Substrats aus in Richtung Rand zu verteilen, ohne dass dabei große Lücken zwischen den Kugeln entstehen.

Um aus den Positionen und den zugehörigen Radien ein kontinuierliches Oberflächenprofil zu erzeugen, wird eine Interpolation vorgenommen [Sandwell, 1987]. Die Menge der Stützpunkte der Interpolation setzt sich aus zwei Teilmengen zusammen: Zum Einen aus den Punkten mit den Koordinaten $(x/y/2R(x,y))$, deren Koordinaten aus den oben bestimmten Kugelmittelpunkten abgeleitet werden können, wobei $R(x,y)$ den Kugelradius an der Position mit x-Koordinate x und y-Koordinate y bezeichnet.

Zur leichteren Veranschaulichung sind Abb. 5.2a erst einige wenige Kugeln auf das Substrat aufgebracht worden. Zum Anderen aus den das $5 \times 5 \mu\text{m}^2$ große Gebiet begrenzenden Randpunkten. Die z-Komponente für alle Randpunkte wird auf den kleinsten auftretenden Radius $R(x,y)$ gesetzt. Abb. 5.2b zeigt das komplett mit Kugeln bedeckte Substrat zusammen mit der Gesamtheit aller Stützpunkte für die Interpolation. Die Fixierung der Randpunkte auf einen konstanten Wert hat in Abb. 5.1b noch nicht stattgefunden.

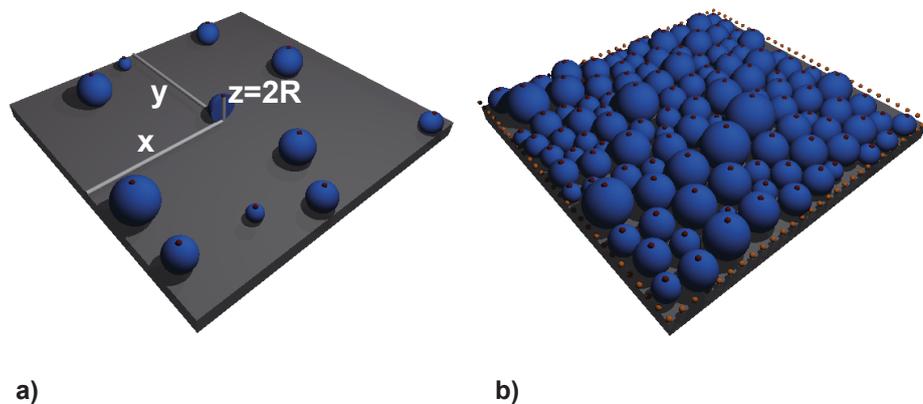


Abbildung 5.2: a) Stützpunkte aus den Kugeln für die Interpolation zur Erzeugung einer zusammenhängenden Fläche eines noch dünn besiedelten Substrates. Die Stützpunkte (rot) besitzen die Koordinaten $(x/y/z)$. b) Gesamtheit aller Stützpunkte bestehend aus den oberen Kugelpolen (rote Punkte) und den auf konstantem Niveau fixierten Randpunkten (orange Punkte).

Nicht berücksichtigt wird im Folgenden hingegen die Frage, ob die texturierte Oberfläche eine zufriedenstellende Qualität bei der anschließenden Materialabscheidung erlaubt. Sollten Experimente zu einem späteren Zeitpunkt ergeben, dass der Parameterraum, der die Kugelgrößen beschreibt, eingeschränkt werden muss, so ist dies ohne Weiteres umsetzbar.

Um das Prinzip darzulegen, wird hier vorerst eine vereinfachte Geometrie einer Solarzelle betrachtet. Erweiterungen hin zu komplizierten System sind jedoch möglich. Die Solarzelle besteht aus einem absorbierenden Halbleiter, der in einen TCO eingebettet ist. Der Halbleiter besteht wiederum aus mikrokristallinem Silizium. Der TCO besitzt eine dispersionslose relative Permittivität $\varepsilon_r = 4$. Die Schichtdicke des Absorbers beträgt $3\ \mu\text{m}$.

Das Absorptionsvermögen dieser Schicht wird anschließend aus denselben Gründen wie im vorigen Kapitel mit der inkohärenten FMM berechnet. Aufgrund der Textur kann auch hier eine Vorzugsrichtung der Polarisation ausgeschlossen werden. Der Lichteinfall ist ebenfalls senkrecht zur Substratnormalen, Vergleichsgröße ist wiederum die Kurzschlussstromdichte j_{SC} .

Als Referenzgeometrien dienen bereits etablierte Texturen, die auf die gleiche Modellkonfiguration angewandt werden. Eine solche Textur ist das kommerziell erhältliche Asahi-U Substrat. Eine weitere Vergleichstextur ist das am Forschungszentrum Jülich produzierte Substrat, welches auch im vorangegangenen Kapitel verwendet worden war. Die dritte Referenz bildet ein Substrat der Universität Neuchâtel [Steinhauser et al., 2007]. Die drei Referenztexturen weisen eine Rauigkeit R_{rms} von 36 nm, 170 nm und 81 nm auf.

Als Grundlage für die Größenverteilung der Kugeln dient eine Gaußverteilung

$$f(r) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(r - \mu)^2}{2\sigma^2}\right]. \quad (5.1)$$

Gleichung (5.1) ist die Wahrscheinlichkeitsdichte der Häufigkeit eines bestimmten Radius r mit einem mittleren Radius μ und einer Standardabweichung σ . Der mittlere Radius μ variiert dabei zwischen 50 nm und 625 nm, die Standardabweichung σ zwischen 50 nm und 350 nm, wobei Standardabweichungen größer als das Doppelte des mittleren Radius ausgeschlossen werden. Dies kann damit begründet werden, dass Texturen mit sehr großen Standardabweichungen im Vergleich zum mittleren Radius auch eine breitbandige Antwort zeigen, ohne einen bestimmten Spektralbereich des Sonnenlichtes zu bevorzugen. Genau das ist jedoch wünschenswert, da die absolute Erhöhung der Kurzschlussstromdichte an der Absorptionskante am höchsten ist. Negative Radien werden selbstredend ebenfalls außer Acht gelassen. Die Verteilungsfunktion der Gl. (5.1) ist im Hinblick darauf gewählt worden, die Ortsfrequenzen der Textur auf einen Bereich zu beschränken, der sich für eine Streuung an der Absorptionskante als besonders vorteilhaft erweist.

Der ausgewählte Parameterbereich für den mittleren Radius μ und die Standardabweichung σ stellt sich als groß genug heraus, um ein ausgesprochenes Maximum der Kurzschlussstromdichte aufzuweisen. Jede Kombination aus μ und σ führt zu einer

Textur mit ganz spezifischen Eigenschaften. Bei sehr kleinen Standardabweichungen σ besitzen alle Kugeln nahezu den gleichen Durchmesser, was zu einer geringen Rauigkeit führt. Ist hingegen der mittlere Radius μ klein, so sind auch die lateralen Details der Textur eher klein.

Abbildung 5.3 zeigt die Absorptionsspektren der $3\ \mu\text{m}$ dicken, konform texturierten $\mu\text{-Si:H}$ Schicht für einen mittleren Radius von $325\ \text{nm}$ und ausgewählte Standardabweichungen, die den Einfluss jener Größe gut aufzeigen.

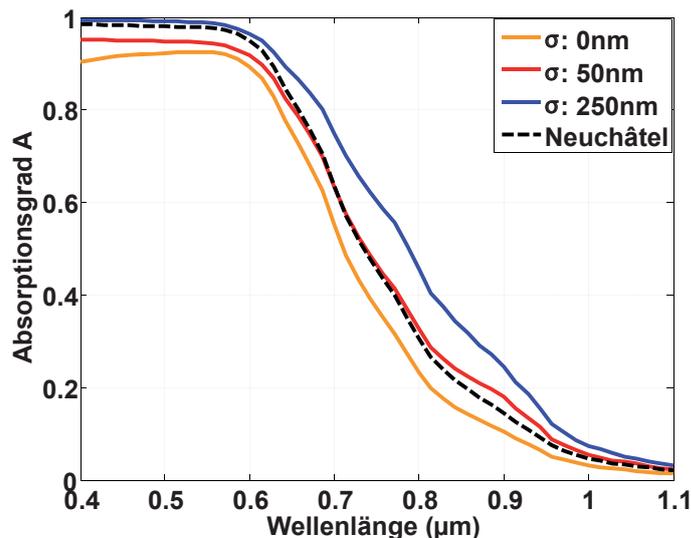


Abbildung 5.3: Absorptionsspektren konform texturierter Schichten einer Dicke von $3\ \mu\text{m}$ für verschiedene Standardabweichungen σ der Kugelgrößenverteilung. Der mittlere Radius μ beträgt $325\ \text{nm}$.

Grundsätzlich hat eine abnehmende Standardabweichung zwei Effekte. Zum Einen führt die erwähnte geringe Rauigkeit zu einer schlechten Einkopplung. Die Grenzfläche ist dann nahezu planar. Andererseits ist aber auch die Variation in den lateralen Detailgrößen unzureichend, denn um einen großen Bereich von gestreuten Wellenvektoren ansprechen zu können, sind viele unterschiedlich Details vonnöten [Wang et al., 2012]. Dieser Effekt führt zu einem substantiellen Verlust an Effizienz. Wird die Standardabweichung von $250\ \text{nm}$ auf $50\ \text{nm}$ reduziert, so verschiebt sich die Absorptionskante um rund $50\ \text{nm}$ in den blauen Spektralbereich. Nimmt σ schließlich den Wert null an, bedeutet das, dass alle Kugeln exakt den gleichen Durchmesser haben. Die Reustraigkeit resultiert allein aus der zufälligen Anordnung der Kugeln. Wie zu erwarten sind hier sowohl Lichteinkopplung als auch Lichtstreuung am schwächsten.

Ebenfalls in Abb. 5.3 gezeigt ist das Absorptionsspektrum der Referenzstruktur mit der Textur aus Neuchâtel. Das Absorptionsvermögen dieser Struktur ist insbesondere bei kleinen Wellenlängen sehr gut. Hingegen ist auch hier im Vergleich zur Struktur mit hoher Standardabweichung ein mangelhaftes Streuvermögen in hohe Winkel

zur Substratnormalen ersichtlich. Die Absorptionskante ist deutlich in den blauen Spektralbereich verschoben.

Um das Zusammenspiel von mittlerem Radius und Standardabweichung klarer darzustellen, sind diese zwei Parameter in den oben erwähnten Parameterbereichen variiert worden. Das Ergebnis ist in Abb. 5.4 als Konturdiagramm gezeigt. Das schwarze Dreieck ist der Bereich der von vornherein ausgeschlossen wurde. Ins Auge fällt sofort, dass unabhängig vom mittleren Radius μ eine höhere Standardabweichung σ immer von Vorteil ist. Sie hat einen viel größeren Einfluss auf die Kurzschlussstromdichte als μ . Dies untermauert die Wichtigkeit einer breiten Detailgrößenverteilung, um auch in einen ausgedehnten Winkelbereich streuen zu können.

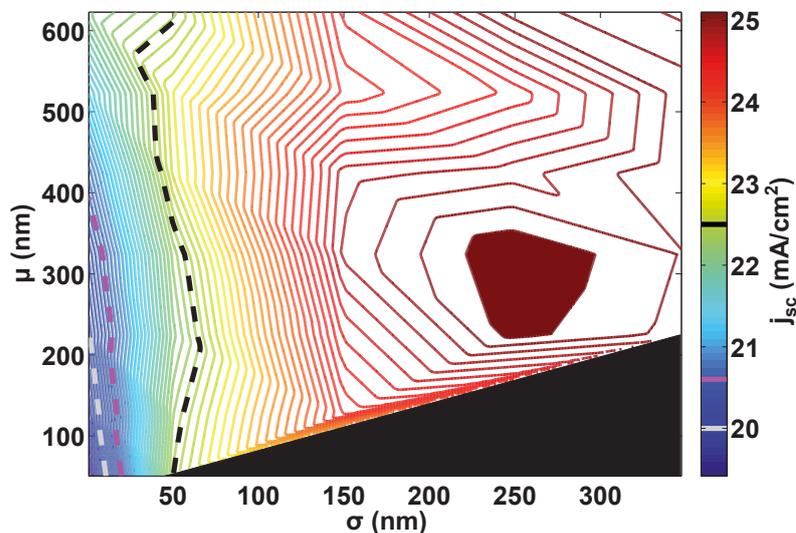


Abbildung 5.4: Konturdiagramm der Kurzschlussstromdichte j_{sc} als Funktion des mittleren Radius μ und der Standardabweichung σ der Kugelgrößenverteilung. Die braune Fläche zeigt den Parameterraum maximaler Kurzschlussstromdichte. Die gestrichelten Linien sind die Isostromdichtelinien bei den Werten der Referenzstrukturen von Asahi-U (grau) aus Jülich (violett) und aus Neuchâtel (schwarz).

Überdies existiert jedoch auch ein optimaler Radius. Das lässt sich damit erklären, dass ein, im Vergleich zum optimalen, reduzierter Radius tendenziell zu einer geringeren Rauigkeit führt, worauf die Kurzschlussstromdichte sinkt. Wird der mittlere Radius jedoch zu groß gewählt, so sind die laterale Detailgrößen dominiert von diesen großen Radien, anstatt breit verteilt vorzuliegen. Dieser Effekt ist jedoch weit weniger ausgeprägt und eine bedeutendere Rolle kommt der Standardabweichung der Größenverteilung zu.

Zum Vergleich sind zusätzlich in Abb. 5.4 die Isostromdichtelinien bei den Werten der Referenzstrukturen gezeigt. Die Kurzschlussstromdichte der Struktur mit dem Substrat von Asahi-U liegt bei 20 mA/cm². Leicht darüber liegt das Substrat aus Jü-

lich mit einer Kurzschlussstromdichte von 20.6 mA/cm^2 . Das Substrat aus Neuchâtel schließlich liefert eine Kurzschlussstromdichte von 22.5 mA/cm^2 .

Wird aus dem gesamten Parameterbereich für μ und σ das Optimum ausgewählt, so lässt sich eine Kurzschlussstromdichte von 25.2 mA/cm^2 erzielen. Dies ist gleichbedeutend mit einer Steigerung um mindestens 12 % und maximal 26 % im Vergleich zu den Referenzsubstraten.

Des Weiteren wird eine Realisierung solcher Strukturen dadurch erleichtert, dass der Bereich mit optimaler Effizienz vergleichsweise groß ist. So ändert sich die Kurzschlussstromdichte nur unwesentlich, solange der mittlere Radius μ zwischen 225 nm und 350 nm und die Standardabweichung σ zwischen 225 nm und 300 nm liegen.

Um einer möglichen Realisierung weiter Vorschub zu leisten, wäre es jedoch wünschenswert, die Anzahl der involvierten Kugelgrößen zu reduzieren, weil dadurch nicht ständig ein großes Arsenal an unterschiedlichen Kugelgrößen bereitgehalten werden muss. Anstatt also Kugeln mit zufällig verteilten Radien anzunehmen, soll die ursprüngliche Größenverteilung mit einer ausgewählten Anzahl diskret verteilter Radien abgebildet werden. Zu beantworten bleibt dann die Frage, wie weit sich diese Anzahl an Radien reduzieren lässt, ohne dass die Solarzelle allzu große Verluste erleidet.

Um diese Frage zu klären, wird die Anzahl der Kugelgrößen auf fünf beschränkt und die Prozedur der Oberflächenerzeugung mit diesen fünf Werten wiederholt. Anstatt direkt einer Kugel direkt den Wert des Zufallsgenerators zuzuweisen, wird derjenige aus den fünf vorgegebenen Radien gewählt, der dem Zufallswert am nächsten liegt. Die Kugelgrößen wurden nach Verfügbarkeit bei der Firma microParticles GmbH ausgewählt [microParticles, 2014].

Abbildung 5.5a zeigt die beiden Absorptionsspektren im Falle einer kontinuierlichen Radienverteilung sowie für den Fall von lediglich fünf ausgewählten Radien. Die tatsächlichen Häufigkeitsverteilungen sind in Abb. 5.5b und Abb. 5.5c gezeigt. Die Gaußverteilungen mit einem mittleren Radius μ von 325 nm einer Standardabweichung σ von 250 nm mit jeweils normierten Amplituden sind ebenfalls gezeigt. Im Vergleich zum theoretischen Verlauf der Gaußverteilungen sind die kleinen Radien in den tatsächlichen Häufigkeitsverteilungen leicht übervertreten.

Wie sich herausstellt, lässt sich die kontinuierliche Größenverteilung sehr gut mit einigen wenigen diskret verteilten Radien abbilden. Der Unterschied in den Kurzschlussstromdichten liegt bei unter 2 %.

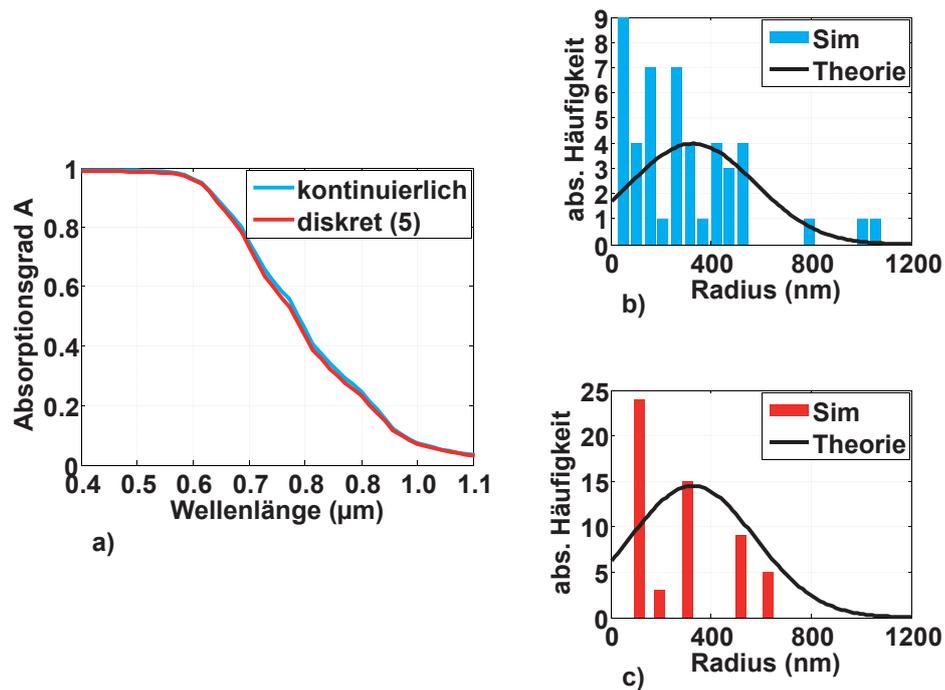


Abbildung 5.5: a) Absorptionsspektren für eine kontinuierliche Radienverteilung (blau) und für eine Radienverteilung mit fünf diskret verteilten Werten (rot). Die ausgewählten Radien liegen bei 101 nm, 206 nm, 304 nm, 515 nm und 640 nm. Zugehörige Häufigkeitsverteilungen für b) die kontinuierliche Verteilung und c) die diskrete Verteilung bei einem mittleren Radius $\mu=325$ nm und einer Standardabweichung $\sigma=250$ nm. Die Balken in b) und c) tragen die entsprechende Farbe. Die schwarzen Linien in b) und c) sind die Gaußverteilungen für die genannten Parameter. Deren Amplituden sind normiert.

5.2 Nichtkonform texturierte Oberflächen

Wie bereits gezeigt, erweist sich die Integration randomisierter Oberflächentexturen als besonders wirkungsvoll für das Photonmanagement. Bei der Herstellung solcher Solarzellen bildet eine randomisierte Textur üblicherweise das Startsubstrat für die nachfolgende Materialabscheidung, worauf Schicht für Schicht aufgetragen wird. Auch in der numerischen Betrachtung von Solarzellen wird deren zunehmende Komplexität berücksichtigt. Anstatt von einfachen absorbierenden Schichten auszugehen, werden p- und n-dotierte Regionen mit einbezogen. Ebenso werden die Rückseitenkontakte nicht mehr nur als perfekte Leiter angesehen, sondern als reale Metalle mit Dispersion und Dämpfung.

Hingegen wurden die Grenzflächen zwischen den einzelnen Materialschichten lange Zeit als unveränderlich betrachtet. Nahezu unabhängig von der ursprünglichen Textur wachse das abgeschiedene Material in der Richtung der Substratnormalen und hinterlasse eine neue Grenzfläche, die im Wesentlichen die gleiche Morphologie besitzt wie

die ursprüngliche Textur, so die Annahme. Ein solches Wachstum wurde in Kapitel 4 als 'konform' bezeichnet.

Tatsächlich aber kann sich die Morphologie einer Textur mit fortschreitendem Schichtwachstum sehr wohl ändern: Dann nämlich, wenn das Wachstum vorwiegend in Richtung der lokalen Flächennormalen erfolgt. Diese Art von Wachstum wird isotrop genannt.

Ob sich eine konforme oder eine isotrope oder noch eine weitere Wachstumsart ausbildet, ist unter anderem von der Depositionsmethode abhängig. Während die meisten physikalischen Gasphasenabscheidungen zu einem konformen Wachstum führen, ist es für chemische Gasphasenabscheidungen überwiegend isotrop. Diese Erkenntnis hat sich auch in der numerischen Betrachtung niedergeschlagen.

Eine Konsequenz des isotropen Wachstums ist beispielsweise eine positionsabhängige Schichtdicke [Jovanov et al., 2013c]. Noch komplexere Modelle, die eine Mischung aus isotropem und konformem Wachstum annehmen, wurden ebenfalls untersucht [Sever et al., 2013; Jovanov et al., 2013b]. Dabei wurden erhebliche Unterschiede zwischen den einzelnen Grenzflächenmorphologien beobachtet [Cui et al., 2013a]. Es wäre folglich erstaunlich, wenn das Absorptionsvermögen von Solarzellen mit randomisierten Texturen nicht ebenfalls von den Morphologien der Grenzflächen abhinge. Um diese Fragen zu klären, werden in diesem Kapitel das isotrope und das konforme Wachstum verglichen [Wiesendanger et al., 2014]. Ausgangspunkt ist immer eine randomisierte Textur vom Typ Asahi-U mit einer Größe von $5 \times 5 \mu\text{m}^2$.

Grundsätzlich führt ein isotropes Wachstum zu einer Vergrößerung der lateralen Details mit zunehmender Schichtdicke. Kleinere Merkmale werden dabei ausgewaschen. Dieses Phänomen wird nach gängiger Meinung negativ bewertet. Im Gegenzug ist das Verschwinden sehr kleiner Details der Verlustminderung im metallischen Rückseitenkontakt zuträglich.

Das Zusammenspiel der unterschiedlichen Texturmorphologien in den einzelnen Grenzflächen ist folglich von großer Bedeutung für die spätere Effizienz der Solarzelle. Im Hinblick auf eine möglichst wirtschaftliche Verwendung des Grundrohstoffs wäre es wünschenswert, ein zur Deposition bereites TCO-Substrat vorab zu vermessen und abhängig von den erhaltenen geometrischen Eigenschaften der Textur eine darauf zugeschnittene Schichtfolge mit der richtigen Wachstumsmethode abzuscheiden, sodass die Textur des Metallkontaktes optimal auf den Wellenlängenbereich angepasst ist, der die Rückseite auch tatsächlich erreicht und nicht schon vorher mehrheitlich absorbiert worden ist.

Die Solarzelle, die hier untersucht werden soll, besteht aus einem zweidimensionalen Querschnitt entlang der Beleuchtungsrichtung einer kompletten Schichtfolge,

basierend auf dem $5 \times 5 \mu\text{m}^2$ großen Substrat. In der dritten Raumrichtung soll die Geometrie translationsinvariant sein.

Die Schichtfolge berücksichtigt explizit alle involvierten Materialien. Ausgangspunkt ist, wie erwähnt, ein texturiertes ZnO Substrat. Darauf wird ein p-i-n Übergang aus amorphem Silizium (a-Si:H) abgeschieden. Anschließend folgt erneut ein TCO, der dazu dient, den Metallkontakt räumlich von der absorbierenden a-Si:H Region zu trennen und damit die plasmonischen Verluste zu dämpfen. Abgeschlossen wird die Solarzelle mit einem Rückseitenkontakt aus Silber.

Da beim isotropen Wachstum die Schichtdicke nach obiger Definition positionsabhängig ist, wird jeweils von der nominalen Dicke gesprochen. Die nominale Dicke entspricht dem Radius der Kugel, deren Mittelpunkt über die Oberfläche wandert. Die nominalen Schichtdicken für die p- bzw. n-dotierten Regionen betragen 10 nm. Die intrinsische a-Si:H Schicht dazwischen nimmt ausgewählte Schichtdicken d zwischen 40 nm und 300 nm an. Der TCO auf der Rückseite ist nominal 100 nm dick.

Die Beschränkung auf eine zweidimensionale Geometrie stellt im Vergleich zu realen Solarzellen zwar eine Vereinfachung dar, die physikalischen Effekte und deren Zusammenspiel können jedoch auch damit analysiert und die Schlussfolgerungen qualitativ auch auf dreidimensionale Strukturen extrapoliert werden.

Die Solarzellegeometrie wird vollständig im Dreidimensionalen erzeugt. Erst ganz zum Schluss wird zur numerischen Betrachtung daraus der Querschnitt in zwei Dimensionen extrahiert. Aufgrund der durch die Wachstumsart hervorgerufenen Veränderungen der Oberflächenmorphologie wird das ursprüngliche Substrat in lateraler Richtung skaliert. Damit können die Detailgrößen in dieser Richtung variiert werden, während die vertikale Ausdehnung unverändert bleibt. Die Skalierung geschieht mit einem Skalierungsfaktor, der als Proportionalitätskonstante in die neue Ausdehnung der Textur eingeht. Der Skalierungsfaktor reicht dabei von einem Fünftel bis zum Wert von zwei. Große Skalierungsfaktoren führen zu glatteren Oberflächen, wohingegen geringe Skalierungsfaktoren zu kleineren lateralen Details in der Textur führen.

Auf das skalierte Substrat werden anschließend alle Materialschichten aufgetragen. Dazu müssen bei jeder Skalierung alle internen Grenzflächen zwischen den benachbarten Materialien berechnet werden. Dies gilt jedoch nur für das isotrope Wachstum, denn im Falle des konformen Wachstums sind alle Grenzflächen identisch mit dem Anfangssubstrat und müssen lediglich in vertikaler Richtung um die jeweilige Schichtdicke verschoben werden.

Ausgehend vom TCO Substrat werden die Grenzflächen in der Reihenfolge p-dotierte Schicht, intrinsische Schicht, n-dotierte Schicht und schließlich rückseitiger TCO berechnet. Die neuen Grenzflächen werden wie im Abschnitt 4.1 bestimmt. Zum

Tragen kommt wiederum der gleiche morphologische Operator, der das Wandern einer Kugel mit bestimmtem Radius über die Oberfläche nachempfunden.

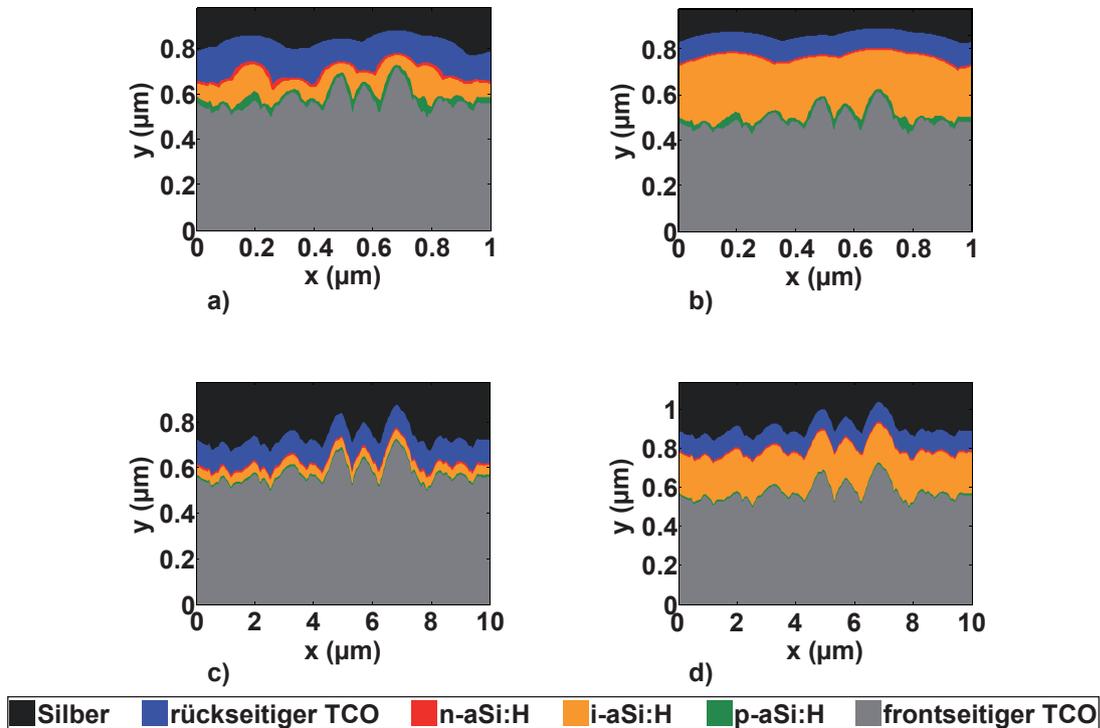


Abbildung 5.6: Höhenprofile untersuchter Geometrien für das isotrope Wachstum. Für die obere Reihe a) und b) ist das Originalprofil mit einem Faktor 0.2 skaliert worden. Die intrinsischen Schichtdicken betragen a) 40 nm und b) 200 nm. Für die untere Reihe c) und d) beträgt der laterale Skalierungsfaktor zwei, bei den gleichen intrinsischen Schichtdicken wie in a) bzw. b).

Nachdem die komplette Schichtfolge bestimmt worden ist, wird ein Querschnitt davon ausgewählt, um eine zweidimensionale Grundgeometrie zu erhalten. Die Randregionen dieser zweidimensionalen Geometrien werden mittels eines gleitenden Durchschnittsfilters leicht modifiziert, um periodische Randbedingungen in lateraler Richtung einführen zu können.

Da die Schichtdicke für das isotrope Wachstum nicht konstant ist, sind auch die Volumina der einzelnen Materialschichten nicht einfach durch das Produkt aus Grundfläche und der jeweiligen Schichtdicke gegeben. Folglich müssen die Schichtdicken bei den Strukturen mit konformem Wachstum angepasst werden, um aussagekräftige Vergleiche zwischen den beiden Wachstumsmethoden anstellen zu können. Die Volumina entsprechender Schichten müssen in beiden Fällen identisch sein. Eine solche Anpassung ist beim konformen Wachstum besonders einfach. Die Grenzflächen müssen dazu nur leicht in vertikaler Richtung vom Nominalwert weggeschoben werden, bis die beiden Volumina für beide Wachstumsarten gleich sind.

Abbildung 5.6 zeigt die Schichtfolgen für eine laterale Skalierung mit dem Faktor 0.2 für eine nominale Dicke der intrinsischen Schicht von 40 nm in Abb. 5.6a und 200 nm in Abb. 5.6b. Bei gleichen intrinsischen Schichtdicken wie in Abb. 5.6a und Abb. 5.6b, jedoch mit einem lateralen Skalierungsfaktor von zwei, entstehen die in Abb. 5.6c und Abb. 5.6d gezeigten Schichtfolgen. Die Beleuchtungsrichtung ist in diesen Fällen von unten. Abgesehen von der lateralen Ausdehnung ist der texturierte TCO in allen Abb. 5.6a-d gleich. Darauf folgt die p-dotierte Schicht, die intrinsische Schicht, die n-dotierte Schicht und der rückseitige TCO. Zuletzt folgt der Silberkontakt.

Aus den Abb. 5.6a und Abb. 5.6b ist ersichtlich, dass bei kleinen Skalierungsfaktoren die Schichtdicke in der Tat eine nicht konstante Funktion der lateralen Position x ist. Die lateralen Details werden größer und der Detailreichtum nimmt mit zunehmendem Materialwachstum ab.

Bei großen Skalierungsfaktoren hingegen sind die üblichen Schichtdicken bedeutend kleiner als die laterale Ausdehnung der Grenzflächen. Die lokale Flächennormale und die Substratnormale sind dann beinahe zusammenfallend und die Schichtdicken wiederum nahezu positionsunabhängig.

Die optische Beurteilung der Strukturen wird mittels des kommerziell erhältlichen FEM Löser JCMSuite vorgenommen [Burger et al., 2005]. Damit ist die Bestimmung der orts aufgelösten Absorption besonders einfach. Im Gegensatz zum vorangegangenen Kapitel wird mit der FEM-Methode hier die komplette Struktur kohärent betrachtet. Ist das elektrische oder wahlweise das magnetische Feld bestimmt, so lässt sich, wie in Unterabschnitt 2.7.1 dargelegt, die lokale Absorption berechnen. Alle involvierten Materialien werden als verlustbehaftet angenommen. Die für die Solarzelle entscheidende Größe ist jedoch nur der Anteil des Sonnenlichtes, der in der intrinsischen Schicht absorbiert worden ist. Zwar werden solare Photonen auch in den übrigen Schichten absorbiert, jedoch leisten sie damit keinen Beitrag zur Kurzschlussstromdichte. Die lokale Absorption muss folglich über das Volumen der intrinsischen Schicht integriert werden.

Das Umgebungsmedium ist auch hier ein reines Dielektrikum mit einer relativen Permittivität von 2.25. Die Beleuchtung erfolgt aus diesem Umgebungsmedium senkrecht zur flachen TCO Grundfläche. Die einfallende ebene Welle ist einmal TM-polarisiert (Magnetfeld parallel zur invarianten Richtung) und einmal TE-polarisiert (elektrisches Feld parallel zur invarianten Richtung). Anschließend wird über beide Polarisierungen gemittelt.

Um die Effekte der einzelnen Elemente in der gesamten Geometrie leichter auseinander halten zu können, werden zunächst einige Modellgeometrien gebildet, die den Einfluss von frontseitiger und rückseitiger Texturierung exemplarisch darlegen. Diese

Strukturen erheben nicht den Anspruch, einer möglichen Realisierung zugänglich zu sein. Sie dienen nur der einfacheren Klärung der auftretenden Effekte. Die einzelnen Geometrien sind in der Tabelle 5.1 anhand der Legendeneinträge in Abb. 5.7 erläutert.

Bezeichnung	Piktogramm	strukturierte Grenzflächen ^d	unstrukturierte Grenzflächen
flach - flach		keine	alle
flach - text.		intrin./n-dot. n-dot./rTCO rTCO/Silber	fTCO/p-dot. p-dot./intrin.
text. - flach		fTCO/p-dot. p-dot./intrin.	intrin./n-dot. n-dot./rTCO rTCO/Silber
konform		alle	keine

^d intrin. intrinsisch, n-dot. n-dotiert, rTCO rückseitiger TCO, fTCO frontseitiger TCO, p-dot. p-dotiert

Tabelle 5.1: Untersuchte Modellgeometrien mit den jeweiligen texturierten Grenzflächen.

Abbildung 5.7 zeigt die Absorptionsspektren dieser Modellgeometrien. Die intrinsische Schicht ist jeweils 200 nm dick. In Abb. 5.7a ist die laterale Korrelationslänge LCL sehr klein und beträgt 43 nm. Das Absorptionsspektrum des Schichtstapels mit unstrukturierten Grenzflächen ist darin gezeigt. Aufgrund der kohärenten Betrachtung treten starke Modulationen im Spektrum zu Tage. Diese Fabry-Perot Oszillationen entstehen durch die Interferenz des an den flachen Grenzflächen reflektierten Lichtes. Die spektrale Separation dieser Fabry-Perot Resonanzen lässt auf eine Interferenz in der p-dotierten Schicht schließen.

Ist hingegen lediglich die Rückseite texturiert, so lässt sich eine Erhöhung des Absorptionsvermögens für große Wellenlängen feststellen, da diese an der texturierten Rückseite gestreut werden. Bei den kleinen Wellenlängen sind die Spitzen der Fabry-Perot Resonanzen jedoch kaum noch vorhanden, da diese Moden nicht mehr ausreichend angeregt werden. Das führt unter anderem dazu, dass hier der Absorptionsgrad sogar leicht unter demjenigen des Schichtstapels liegt.

Das Gegenstück besitzt nur eine texturierte Frontseite. Letztere sorgt für eine effiziente Einkopplung des Lichtes über den gesamten Spektralbereich im Vergleich zum

vorherigen Fall mit flacher Frontseite. Selbst bei hohen Wellenlängen über 600 nm ist der Absorptionsgrad vergleichbar zum Fall mit ausschließlich texturierter Rückseite. Daraus folgt, dass der wirkungsvollen Einkopplung, verursacht durch eine texturierte Frontseite, eine enorme Bedeutung zukommt.

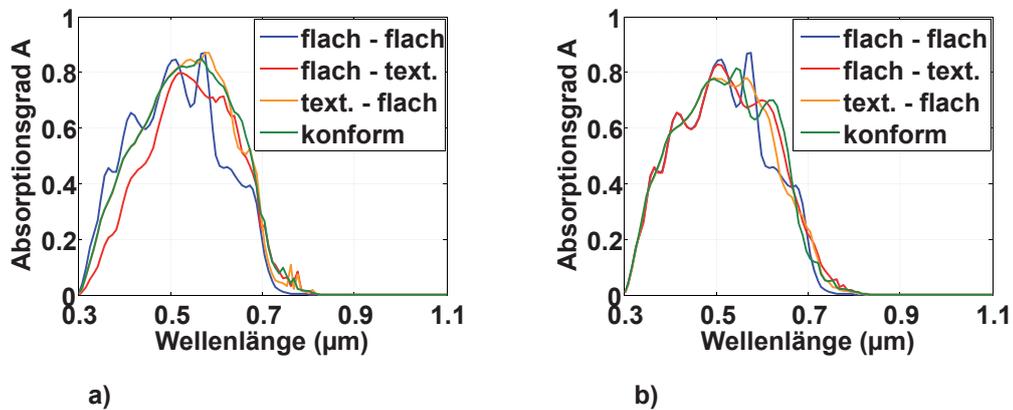


Abbildung 5.7: Absorptionsspektren einer nominal 200 nm dicken intrinsischen a-Si:H Schicht bei lateralen Korrelationslängen LCL von a) 43 nm und b) 300 nm für ausgewählte Geometrien.

Die Konfiguration mit konform texturierten Grenzflächen ist in Abb. 5.7a ebenfalls gezeigt. Hier ist die laterale Korrelationslänge zu klein, um an der Rückseitentextur geeignete laterale Detailgrößen zu bilden. Die Wellenlängen, die die Rückseite der Solarzelle überhaupt erreichen, sind verglichen mit den Details der Grenzfläche zu groß. Der Unterschied zum Fall mit unstrukturierter Rückseite ist folglich sehr klein.

Im Gegensatz zu Abb. 5.7a sind in Abb. 5.7b die Absorptionsspektren für eine große LCL von 300 nm gezeigt. Die Modellgeometrien sind exakt die gleichen wie in Abb. 5.7a. Aus diesem Grund ist das Absorptionsspektrum des Schichtstapels unverändert.

Für solch große LCLs ist die vertikale Variation der Textur im Vergleich zu den lateralen Detailgrößen klein. Die Struktur mit flacher Frontseite ist deshalb sehr ähnlich zum einfachen Schichtstapel. Die Fabry-Perot Oszillationen sind wieder deutlich zu erkennen. Hingegen enthält die Textur auf der Rückseite selbst bei diesen großen LCLs immer noch eine leichte Modulation. Diese Modulation ist bedeutend besser angepasst an den relevanten Wellenlängenbereich und führt letztlich zu einer erhöhten Absorption bei großen Wellenlängen.

Die Struktur mit flachen Grenzflächen auf der Rückseite zeigt trotz der großen lateralen Skalierung leicht verringerte Reflexionsverluste im Vergleich zum Schichtstapel. Der Unterschied zum Schichtstapel ist jedoch wesentlich geringer im Vergleich zu den kleinen LCLs in Abb. 5.7a.

Nochmals dargestellt in Abb. 5.7b ist die konform texturierte Struktur. Eine große Ähnlichkeit besteht dabei zum Fall mit flacher Rückseite. Erst bei großen Wellenlängen werden Unterschiede ersichtlich. Dies verdeutlicht, dass auch bei großen lateralen Skalierungsfaktoren die Textur nicht vollends eingeebnet worden ist, und die verbleibende Modulation zu einer Interaktion mit Photonen im großen Wellenlängenbereich führt.

Aufgrund der komplizierten Interaktionsmechanismen des Sonnenlichtes mit den optischen Strukturen ist eine quantitative Beschreibung der Effizienz einer Struktur in Abhängigkeit von einer einzelnen geometrischen Eigenschaft einer Textur im Allgemeinen nicht möglich [Meier et al., 2001; Franken et al., 2007].

Werden hingegen die beiden Wachstumsmodelle miteinander verglichen, so ist es unter Berücksichtigung der oben genannten Annahme einer internen Quanteneffizienz von eins sehr wohl möglich, Hinweise darauf zu liefern, welche Wachstumsart für eine vorgegebene Textur geeignet ist.

Ein weiterer kritischer Punkt sind die gegebenenfalls texturierten metallischen Kontakte auf der Rückseite. Insbesondere für kleine Dicken der intrinsischen Schicht kann der langwellige Anteil des Sonnenlichtes bis zum Metallkontakt vordringen, da in diesem Spektralbereich der Absorptionskoeffizient stark abnimmt. Aufgrund der Oberflächenstrukturierung im Metall können lokalisierte Oberflächenplasmonpolaritonen angeregt werden. Dies geht im Allgemeinen mit erhöhten Verlusten einher, welche erst einmal kompensiert werden müssen. Wie im Unterabschnitt 3.3.3 gezeigt, ist dies durchaus zu bewerkstelligen, gestaltet sich sehr oft jedoch als schwierig.

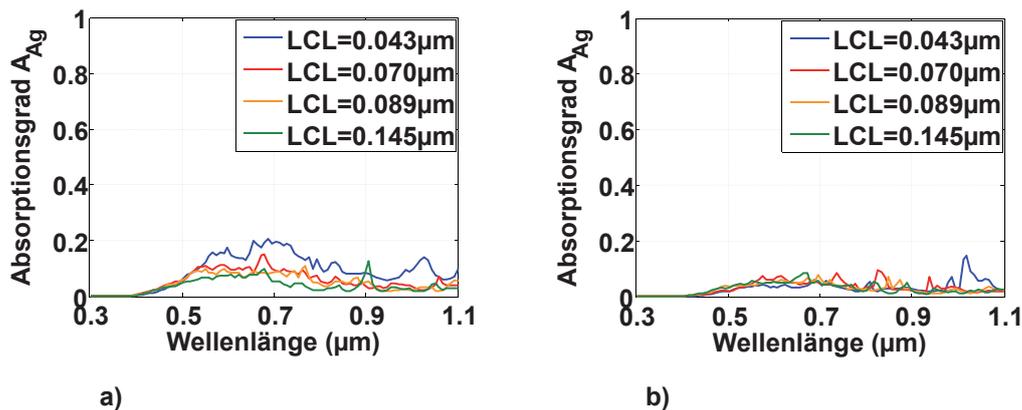


Abbildung 5.8: Absorptionsspektren des metallenen Rückseitenkontaktes aus Silber bei einer nominal 40 nm dicken intrinsischen a-Si:H Schicht für a) das konforme und b) das isotrope Wachstum für verschiedene laterale Korrelationslängen LCL.

Abbildung 5.8 vergleicht den Anteil des im metallischen Rückseitenkontakt absorbierten Sonnenlichtes zwischen den beiden Wachstumsmodellen für verschiedene

LCLs. Die nominale Dicke der intrinsischen Schicht ist mit 40 nm absichtlich klein gewählt, um den Effekt ersichtlich zu machen.

Das konforme Wachstum ist in Abb. 5.8a gezeigt. Wie erwähnt sind alle darin betrachteten Grenzflächen bei einer konstanten LCL identisch. Unterschiede erwachsen lediglich aus einem erhöhten Skalierungsfaktor. Es zeigt sich, dass die plasmonischen Verluste mit steigenden Detailgrößen erheblich reduziert werden. So werden bis zu 20 % des einfallenden Sonnenlichtes absorbiert mit einer LCL von ca. 43 nm.

Abbildung 5.8b zeigt die Absorptionsspektrum im Rückseitenkontakt für das isotrope Wachstum. Die Grenzflächen zwischen den einzelnen Materialien verändern sich dabei, wobei die Detailgrößen zunehmen. Aus diesem Grund ist bereits bei kleinen Skalierungsfaktoren der Absorptionsgrad im Metall gering.

Die quantitative Beurteilung der Strukturen erfolgt wiederum mittels der Kurzschlussstromdichte j_{SC} . Abbildung 5.9 zeigt das Verhältnis der beiden Werte der Stromdichten resultierend aus konformem und isotropem Wachstum für die ansonsten identische Geometrie als Funktion der lateralen Skalierung. Die intrinsische Schicht nimmt dabei nominale Dicken von 40 nm, 80 nm, 200 nm und 300 nm an. Die Linien dienen der einfacheren Orientierung. Die Kürzel im Exponenten der y-Achsenbeschriftung 'iso' und 'conf' sollen die beiden Wachstumsmodelle isotrop bzw. konform bezeichnen. Die Originaltextur besitzt eine LCL von 170 nm.

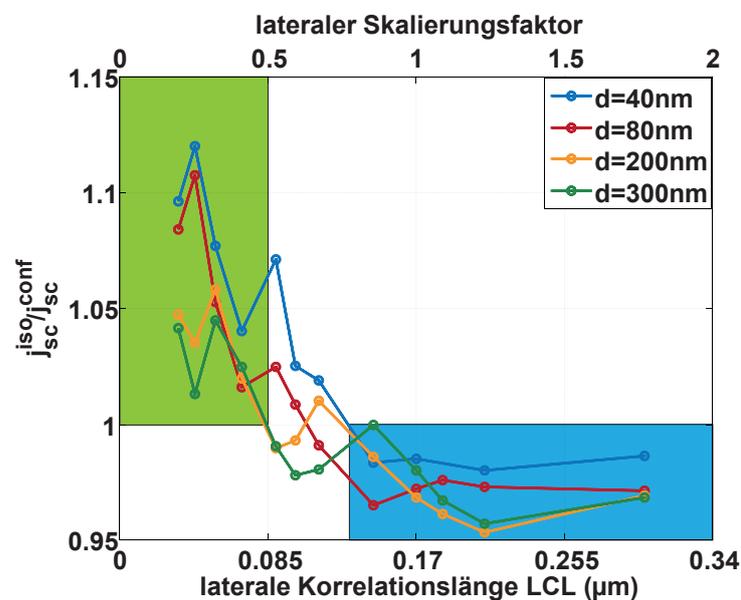


Abbildung 5.9: Verhältnis der Kurzschlussstromdichten aus dem isotropen und dem konformen Wachstum für verschiedene nominale intrinsische Schichtdicken d . Die farblich hinterlegten Regionen (grün und blau) kennzeichnen die Gebiete, in welchen ein klarer Leistungsvermögensvorteil einer Wachstumsart über dem der anderen existiert. Die durchgezogenen Linien dienen der Orientierung.

Bei kleinen LCLs von bis zu 85 nm ist das isotrope Wachstum klar im Vorteil. Im Vergleich zum konformen Wachstum beträgt der Unterschied bis zu ca. 12%. Das Gegenteil ist der Fall bei LCLs über 85 nm. Dort führt das konforme Wachstum zu besseren Ergebnissen. Der Effekt ist hier jedoch geringer ausgeprägt als bei kleinen LCLs. Diese Erkenntnisse behalten ihre Richtigkeit bis hinunter zu intrinsischen Schichtdicken von ca. 200 nm. Für dünnere intrinsische Schichtdicken ist das isotrope Wachstum auch bei größeren LCLs im Vorteil. Beispielsweise arbeitet eine Struktur mit einer 40 nm dicken intrinsischen Schicht effizienter beim isotropen als beim konformen Wachstum bis hinauf zu einer LCL von ca. 140 nm. Jenseits einer LCL von 140 nm ist das konforme Wachstum dem isotropen Wachstum in den hier betrachteten Fällen immer vorzuziehen. Das liegt wiederum daran, dass beim isotropen Wachstum die Detailgrößen mit der Schichtdicke anwachsen und die plasmonischen Verluste im nahe gelegenen Metallkontakt reduziert werden, wohingegen die Grenzflächenmorphologie des Metallkontaktes bei dicken intrinsischen Schichten eine untergeordnete Rolle spielt.

5.3 Zusammenfassung

In diesem Kapitel standen randomisierte Oberflächentexturen im Vordergrund, die als Grenzflächen zwischen den unterschiedlichen Materialien in die Solarzelle geometrie eingehen. Der erste Abschnitt befasste sich mit der Frage, wie solche randomisierten Texturen möglichst einfach herzustellen wären. Der hier verfolgte Ansatz basierte auf der Idee, Kugeln unterschiedlicher Größe auf ein flaches Substrat aufzutragen. Die Radien der Kugeln sollten dabei einer bestimmten Verteilung folgen, die durch eine möglichst kleine Anzahl von Parametern charakterisiert wird. Für die Untersuchungen hier wurde eine Gaußverteilung angenommen. Die freien Parameter waren der mittlere Radius und die Standardabweichung. Dies ist der Schlüsselaspekt dieses Ansatzes, da die kleine Anzahl freier Parameter eine effiziente Optimierung erst ermöglicht.

Eine Parameterstudie zeigte, dass die Standardabweichung eine weitaus bedeutendere Rolle spielt als der mittlere Radius. Dies lässt sich damit erklären, dass in diesem Fall die Textur viele unterschiedlich große Details aufweist, was einer effizienten Streuung zuträglich ist. Für eine 3 μm dicke Schicht aus $\mu\text{-Si:H}$ ließ sich die Kurzschlussstromdichte im Vergleich zu den Referenzstrukturen mit bereits etablierten Texturen um mindestens 12% steigern.

Es sei hier jedoch erwähnt, dass es durchaus möglich ist eine andere Verteilungsfunktion zu finden, die zu noch besseren Ergebnissen führt. Wie erwähnt, ist die Grun-

didee, die Textur mit einigen wenigen Parametern zu beschreiben, und sie dadurch einer Optimierung zugänglich zu machen.

Im zweiten Abschnitt dieses Kapitels wurde die lange außer Acht gelassene Art und Weise des Materialwachstums bei Gasphasenabscheidungen untersucht. Abhängig von der Methode ist das Wachstum meist konform bzw. meist isotrop. Folglich sind, abhängig wiederum von der Methode, auch die Grenzflächenmorphologien Änderungen unterworfen.

Eine detaillierte Untersuchung der beiden Wachstumsarten zeigte, dass insbesondere bei kleinen lateralen Detailgrößen das isotrope Wachstum einen erheblichen Vorteil im Vergleich zum konformen Wachstum bringt. Der Grund dafür liegt in den reduzierten plasmonischen Verlusten im Metallkontakt auf der Rückseite der Solarzelle. Damit ist es möglich für eine gegebene randomisierte Textur die optimale Wachstumsart auszuwählen.

6 Transformationsoptik in der Photovoltaik

Das nachfolgende Kapitel steht etwas abgesondert zu den bisherigen Kapiteln. Hier sollen einmal nicht der absorbierende Halbleiter, sondern die Kontakte auf der Frontseite ins Zentrum gerückt werden. Mit Ansätzen aus der Transformationsoptik werden geeignet gestaltete Brechzahlverteilungen um die Frontkontakte herum dimensioniert, sodass sich die Reflexionsverluste an den Kontakten nahezu eliminieren lassen.

Je nach Prozess sind bis zu fünf Prozent der Frontfläche durch die Leiterbahnen der Metallkontakte belegt. Dieser Umstand wird in der numerischen Betrachtung von Solarzellen üblicherweise vernachlässigt, soll hier nun aber volle Aufmerksamkeit genießen.

Die Idee hat ihren Ursprung in den Versuchen, Objekte unter sogenannten Tarnkappen einem Beobachter visuell unzugänglich zu machen [Li und Pendry, 2008]. Die vorgeschlagenen Tarnkappen müssen dabei eine bestimmte Verteilung der relativen Permittivitätstensoren $\bar{\epsilon}_r(\mathbf{r})$ sowie der Permeabilitätstensoren $\bar{\mu}_r(\mathbf{r})$ aufweisen. Genauso sollen hier die Regionen um die Leiterbahnen herum gezielt gestaltete Permittivitätsverteilungen aufweisen, um eben diese Leiterbahnen dem Sonnenlicht unsichtbar zu machen.

Im Gegensatz zu richtigen Tarnkappen ist die Aufgabe hier jedoch bedeutend einfacher, da die Wellenfront hinter dem zu tarnenden Objekt nicht wieder rekonstruiert werden muss. Ziel ist einzig, das Licht um die Kontakte herumzuleiten, die Phasenlage dahinter ist unerheblich.

In diesem Sinne wird hier wohlweislich nicht der in diesem Zusammenhang häufig benutzte Begriff 'cloaking' verwendet [Pendry et al., 2006; Leonhardt und Philbin, 2009; Leonhardt und Philbin, 2010; Chen et al., 2010; Kildishev und Shalaev, 2011; Liu und Zhang, 2012; Pendry et al., 2012; Liu et al., 2013].

6.1 Die Maxwellgleichungen in nichtkartesischen Koordinatensystemen

Die numerische Betrachtung von Systemen, die sowohl ein Vakuum als auch metallische Strukturen enthalten, ist besonders schwierig. Die Variation des elektrischen Feldes beispielsweise geschieht im Vakuum für den optischen Spektralbereich auf Skalen von einigen Hundert Nanometern, im Metall hingegen lediglich auf Skalen von einigen Nanometern. Um alle hochfrequenten Variationen angemessen zu berücksichtigen, muss demnach die zugrundeliegende Diskretisierung fein genug gewählt werden. Dies wiederum führt in Regionen mit langsamer Variation zu einer Auflösung weit jenseits des Notwendigen und damit zu einer ineffizienten Verwendung der Rechenressourcen. Überdies sind gerade im Bereich der optischen Fasern die Geometrien so, dass ein regelmäßiges Netz als Grundgebiet ungeeignet ist.

Hier kommt nun die Transformationsoptik zum Zuge. Anstatt nämlich ein regelmäßiges kartesisches Gitter zu wählen, wird ein dem Problem angepasstes Gitter gewählt, und dieses wird sodann mittels einer konformen Abbildung auf das kartesische Gitter abgebildet. Eine Abbildung heißt konform, wenn sie winkelgetreu ist. Dabei bleiben die Winkel zwischen Koordinatenlinien erhalten. Die Koordinatenlinien werden durch die Variation einer Koordinate bei gleichzeitiger Fixierung aller übrigen Koordinaten definiert. Jede analytische Funktion in der komplexen Zahlenebene $w = f(z) = f(x + iy) = u(x, y) + iv(x, y)$ ist konform. Eine analytische Funktion in der komplexen Zahlenebene erfüllt die Cauchy-Riemann Gleichungen

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} \quad \text{und} \quad \frac{\partial v}{\partial x} = -\frac{\partial u}{\partial y}. \quad (6.1)$$

Die Transformation mittels einer konformen Abbildung wird durch die Forminvarianz der Maxwellgleichungen ermöglicht. Ihre mathematische Struktur bleibt unter Koordinatentransformationen erhalten. Werden die üblichen kartesischen Koordinaten x, y, z durch eine Koordinatentransformation überführt in $x'(x, y, z), y'(x, y, z), z'(x, y, z)$ und die Maxwellgleichungen in diesem neuen Koordinatensystem aufgeschrieben, so besitzen sie exakt die gleiche Form wie im ursprünglichen Koordinatensystem x, y, z jedoch mit veränderten Materialeigenschaften $\vec{\epsilon}'(x', y', z')$ und $\vec{\mu}'(x', y', z')$. Der Beweis wird im Anhang A.3 erbracht.

Im transformierten Koordinatensystem, gekennzeichnet durch einen Apostroph $'$, nehmen die Maxwellgleichungen formal also dieselbe Gestalt an wie in kartesischen Koordinaten der Gl. (2.13). Die Felder und Materialeigenschaften im transformierten

Raum schreiben sich jedoch als Funktion der Metrik der Transformation [Ward und Pendry, 1996]

$$\mathbf{E}'(\mathbf{r}', t) = (\mathcal{J}^T)^{-1} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \quad (6.2a)$$

$$\mathbf{H}'(\mathbf{r}', t) = (\mathcal{J}^T)^{-1} \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \quad (6.2b)$$

$$\mathbf{j}'(\mathbf{r}', t) = \frac{\mathcal{J} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t)}{\det \mathcal{J}} \quad (6.2c)$$

$$\rho'(\mathbf{r}', t) = \frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{\det \mathcal{J}} \quad (6.2d)$$

$$\bar{\boldsymbol{\epsilon}}'(\mathbf{r}') = \frac{\mathcal{J} \bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{r}) \mathcal{J}^T}{\det \mathcal{J}} \quad (6.2e)$$

$$\bar{\boldsymbol{\mu}}'(\mathbf{r}') = \frac{\mathcal{J} \bar{\boldsymbol{\mu}}(\mathbf{r}) \mathcal{J}^T}{\det \mathcal{J}}. \quad (6.2f)$$

In den Gln. (6.2) bezeichnet \mathcal{J} die Jacobimatrix. Deren Einträge sind gegeben durch

$$\mathcal{J}_{ij} = \frac{\partial x'_i}{\partial x_j}. \quad (6.3)$$

Schematisch ist das Problem der Umlenkung des Sonnenlichtes um die Frontkontakte in Abb. 6.1 gezeigt. Die erforderliche Transformation überführt die obere Halbebene (Abb. 6.1a) auf ein Gebiet, das den unteren rechten Teil ausschließt (Abb. 6.1b). In diesen Bereich soll der elektrische Kontakt zu liegen kommen, sodass seine Anwesenheit nahezu vernachlässigt werden kann.

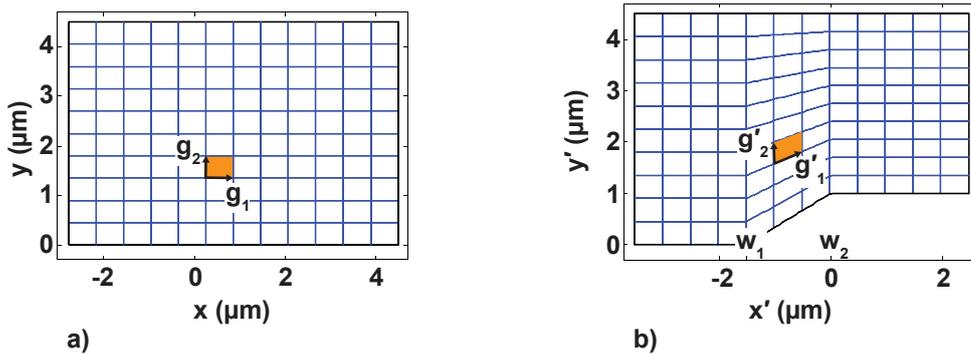


Abbildung 6.1: a) Originalhalbraum mit einem kartesischen Gitter. b) Transformierter Raum mit einer transfiniten Interpolation. Der Zielraum der Transformation in b) wird durch die drei Punkte w_1 , w_2 und w_3 festgelegt, wobei w_3 im Unendlichen liegt. Die Pfeile zeigen die lokalen Einheitsvektoren der eingefärbten Zelle.

Gesucht ist also eine Abbildungsvorschrift, die die beiden Räume in Abb. 6.1a und Abb. 6.1b verbindet. Eine mögliche Vorschrift ist, wie erwähnt, eine konforme Abbildung. Streng genommen muss die konforme Transformation jedoch über die gesamte

komplexe Zahlenebene angewandt werden. Ein weiterer Nachteil der konformen Abbildung liegt darin, dass der Übergang zwischen w_1 und w_2 in Abb. 6.1b nicht frei gewählt werden kann, sondern sich aus der Transformation ergibt.

Im Gegenzug erlauben nichtkonforme Abbildungen die freie Gestaltung dieses Übergangs, jedoch handelt man sich dann neue Schwierigkeiten ein. Startet man nämlich mit einem isotropen Material mit skalarem $\varepsilon(x, y, z)$ und $\mu(x, y, z)$ so resultieren nach der Transformation gemäß Gl. (6.2e) und Gl. (6.2f) im Allgemeinen anisotrope Materialeigenschaften, wobei $\vec{\varepsilon}'(x', y', z')$ und $\vec{\mu}'(x', y', z')$ Tensoren sind. Dies ist ein Folge der Ungültigkeit der Gl. (6.1) für nichtkonforme Abbildungen. Um das Sonnenlicht um die Frontkontakte herum zu leiten, müssen folglich sowohl die Permittivität als auch die Permeabilität lokal und überdies anisotrop definiert werden. In der Praxis stellt dies eine hohe Hürde auf dem Weg zu einer Realisierung dar.

Einen Ausweg aus diesem Dilemma bilden sogenannte quasikonforme Abbildungen [Leonhardt, 2006; Ergin, 2012]. Damit wird zwar eine gewisse Anisotropie eingeführt, jedoch lässt sich diese bei geschickter Wahl der Abbildungsvorschrift bis zu vernachlässigbarer Größe minimieren. Aus diesen Gründen werden quasikonforme Abbildungen meist bevorzugt. Sie vereinen die Designfreiheit mit der Isotropie konformer Transformationen so, dass eine Realisierung im Experiment bedeutend erleichtert wird.

Im allgemeinen Fall lässt sich keine analytische Funktion für die Transformationsvorschrift finden. Aus diesem Grund wird meist eine einfache transfinite Interpolation zwischen den Randpunkten des Gebietes vorgenommen. Abbildung 6.1b zeigt die Interpolation dieses Gitters. Die x-Werte sind jeweils die gleichen in Abb. 6.1a und Abb. 6.1b, lediglich die y-Werte unterscheiden sich. Das so erhaltene Gitter dient als Anfangsbedingung für ein Optimierungsproblem mit dem Ziel, die Anisotropie zu minimieren. Ausführliches dazu findet sich im Anhang B.4.

Der Einfachheit halber wird hier eine zweidimensionale, jedoch bereits auf das gestellte Problem angepasste Situation, betrachtet. In der dritten Raumrichtung werden die Strukturen als invariant angenommen. In diesem Falle ist bei einer isotropen Ausgangsverteilung der Permittivität $\varepsilon(\mathbf{r})$ auch die transformierte Permittivität $\varepsilon'(\mathbf{r}')$ eine skalare Größe. Die transformierte Permittivität soll nun hergeleitet werden.

In einer Ebene senkrecht zur invarianten Richtung sei die Position eines Punktes mit den Koordination (x/y) mit der komplexen Zahl $z = x + iy$ beschrieben. Die partiellen Ableitung lauten dann

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\frac{\partial}{\partial z} + \left(\frac{\partial}{\partial z}\right)^*}{2} \quad \text{und} \quad \frac{\partial}{\partial y} = \frac{i\frac{\partial}{\partial z} - i\left(\frac{\partial}{\partial z}\right)^*}{2}. \quad (6.4)$$

Damit wird die Helmholtzgl. (2.47) zu

$$\left[\left(\frac{\partial}{\partial z} \right)^* \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\mathbf{r}) \right] \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = 0. \quad (6.5)$$

Die Funktion, die die Abbildungsvorschrift definiert, sei zunächst allgemein mit $w(z)$ bezeichnet und bilde alle z auf w ab. Es sollen nur analytische Funktion $w(z)$ zur Verwendung kommen, die überdies nicht von z^* abhängen sollen. Daraus resultieren folglich konforme Abbildungen. Es gilt dann

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} \right)^* \frac{\partial}{\partial z} = \left| \frac{dw}{dz} \right|^2 \left(\frac{\partial}{\partial w} \right)^* \frac{\partial}{\partial w}. \quad (6.6)$$

Eingesetzt in die Helmholtzgl. (6.5) führt dies zu

$$\left[\left| \frac{dw}{dz} \right|^2 \left(\frac{\partial}{\partial w} \right)^* \frac{\partial}{\partial w} + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\mathbf{r}) \right] \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = 0. \quad (6.7)$$

Schließlich setzt man

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \left| \frac{dw}{dz} \right|^2 \varepsilon'(\mathbf{r}). \quad (6.8)$$

Eingesetzt in Gl. (6.7) lässt sich der Faktor $\left| \frac{dw}{dz} \right|^2$ ausklammern, und man erhält

$$\left[\left(\frac{\partial}{\partial w} \right)^* \frac{\partial}{\partial w} + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon'(\mathbf{r}) \right] \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = 0. \quad (6.9)$$

Gleichung (6.9) sieht formal genauso aus wie die ursprüngliche Helmholtzgl. (6.5), lediglich mit modifizierter Permittivität gemäß Gl. (6.8).

Im hier vorliegenden Falle sollen also die Leiterbahnen umschifft werden. Es reicht demnach aus, das einfallende Sonnenlicht möglichst verlustfrei um die halbe Breite der Leiterbahnen zur Seite umzulenken.

Für diese vergleichsweise einfache Abbildungsvorschrift bietet sich die Schwarz-Christoffel Transformation an [Driscoll und Trefethen, 2002]. Allgemein bildet sie einen Halbraum konform auf das Innere eines Polygons ab (Abb. 6.2a und Abb. 6.2b). Das Polygon besitzt die Eckpunkte w_i , an welchen die Innenwinkel mit φ_i bezeichnet werden. Eckpunkte im Unendlichen sind möglich. Die Transformation für ein Polygon mit N Eckpunkten lautet dann [Henrici, 1974]

$$\frac{dw}{dz} = A(z - z_1)^{\alpha_1 - 1} \dots (z - z_N)^{\alpha_N - 1} = A \prod_{i=1}^N (z - z_i)^{\alpha_i - 1} \quad (6.10)$$

mit $\alpha_i \pi = \varphi_i$. A ist eine Proportionalitätskonstante. Integration auf beiden Seiten liefert

$$w(z) = B + A \int_{z_0}^z \prod_{i=1}^N (u - z_i)^{\alpha_i - 1} du \quad (6.11)$$

mit der Integrationskonstanten B . Soll nun der obere komplexe Halbraum auf das Innere eines gegebenen Polygons abgebildet werden, so muss Gl. (6.11) gelöst werden. Das Problem besteht darin, dass die zu den Eckpunkten w_i des Polygons zugehörigen Originalpunkte z_i unbekannt sind. Da sie auf der Grenze zwischen den abgebildeten Regionen liegen, lässt sich nur sagen, dass alle z_i auf der reellen Achse liegen müssen. Lediglich zwei von den Originalpunkten lassen sich frei wählen. Damit werden die Konstanten A und B festgelegt. Denn tatsächlich ist die Abbildung des Halbraums auf das Innere eines Polygons nicht eindeutig bestimmt. Es existieren jeweils ein Translation- und ein Rotationsfreiheitsgrad.

Für ein allgemeines Polygon lässt sich dieses Schwarz–Christoffel Parameterproblem nicht mehr analytisch lösen. Diese Fälle können mit Hilfe der Schwarz–Christoffel Toolbox (SC Toolbox) für Matlab behandelt werden [Driscoll, 1996].

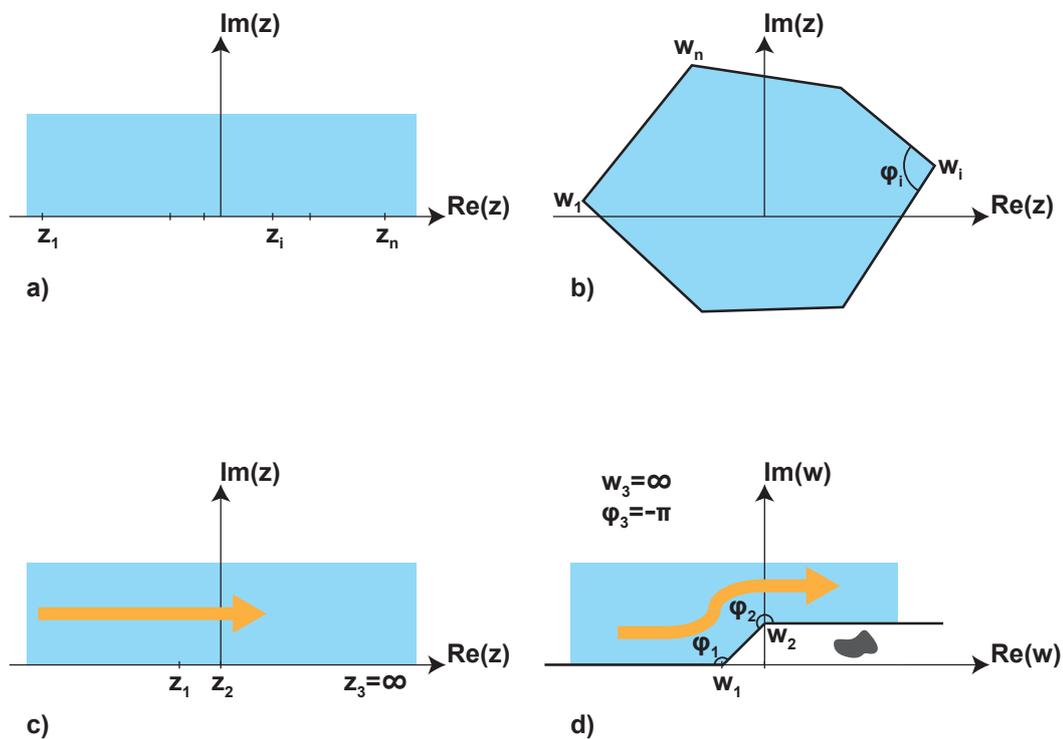


Abbildung 6.2: Allgemeine Transformation a) der oberen komplexen Halbebene auf b) das Innere eines beliebigen Polygons. Abbildung c) der oberen komplexen Halbebene auf d) das Innere des Polygons, definiert durch die Punkte w_1, w_2 und w_3 , wobei Letzterer im Unendlichen liegt.

6.2 Reflexionsverlustminderung am Frontkontakt

Die Umlenkung des einfallenden Sonnenlichtes um die Leiterbahnen des frontseitigen Kontaktes ist in Abb. 6.2c und 6.2d schematisch dargestellt. Der Bereich unten rechts in Abb. 6.2d ist für das Sonnenlicht, das hier von links eintreffen soll, unsichtbar. Hier müssen die Leiterbahnen platziert werden. Das definierende Polygon wird durch die drei Punkte w_1 , w_2 und w_3 festgelegt, wobei w_3 im Unendlichen liegt. In diesem Falle entfällt ein Faktor in Gl. (6.10). Diese Situation lässt eine analytische Betrachtung zu. Um die Abbildungsvorschrift $w(z)$ zu erhalten, muss Gl. (6.10) integriert werden. Das führt auf

$$w(z) = -\frac{(z - z_1)^{\alpha_1}(z - z_2)^{\alpha_2} \left(\frac{z_1 - z}{z_1 - z_2}\right)^{-\alpha_1}}{\alpha_2(\alpha_2 + 1)(z_1 - z_2)^2} \cdot \left[\alpha_2(z - z_2) {}_2F_1 \left(1 - \alpha_1, \alpha_2 + 1; \alpha_2 + 2; \frac{z - z_2}{z_1 - z_2} \right) + (\alpha_2 + 1)(z_1 - z_2) {}_2F_1 \left(-\alpha_1, \alpha_2; \alpha_2 + 1; \frac{z - z_2}{z_1 - z_2} \right) \right]. \quad (6.12)$$

Hierbei bezeichnet ${}_2F_1$ die Gaußsche oder gewöhnliche hypergeometrische Funktion [Heine, 1861; Bieberbach, 1944]. Damit lässt sich nun die Transformation der oberen komplexen Halbebene auf das gewünschte Gebiet vollziehen. Abbildung 6.3 zeigt den Originalraum in Abb. 6.3a, sowie das transformierte Gebiet in Abb. 6.3b. Gut zu erkennen ist, dass sich die Koordinatenlinien in beiden Teilabbildungen unter 90° schneiden. Das bedeutet, die Winkel bleiben bei der Transformation lokal erhalten, im Gegensatz zu Abb. 6.1b.

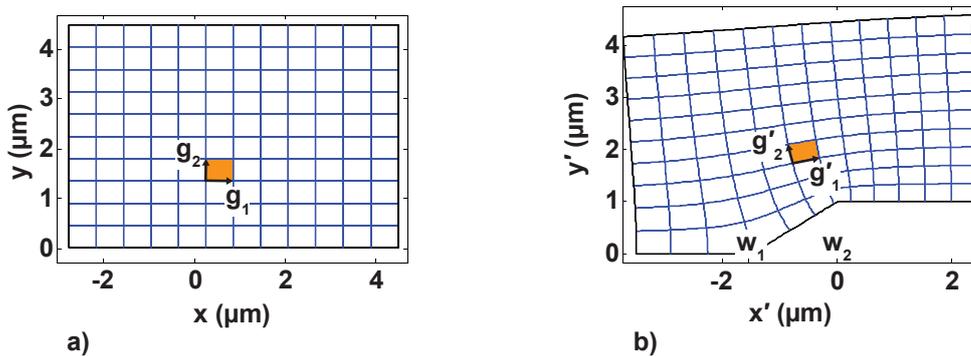


Abbildung 6.3: a) Originalhalbebene. b) Mittels Schwarz-Christoffel Transformation erhaltener Raum unter Ausschluss des Gebietes unten rechts. Die Koordinatenlinien schneiden sich rechtwinklig. Die Winkel bleiben bei der Transformation lokal erhalten.

Damit können nun auch die zugehörigen Brechzahlprofile mit Hilfe der Gl. (6.8) berechnet werden. Abbildung 6.4a zeigt die positionsabhängige Brechungsindexver-

teilung für einen isotropen, homogenen Originalraum mit Brechungsindex $n = 1.5$.

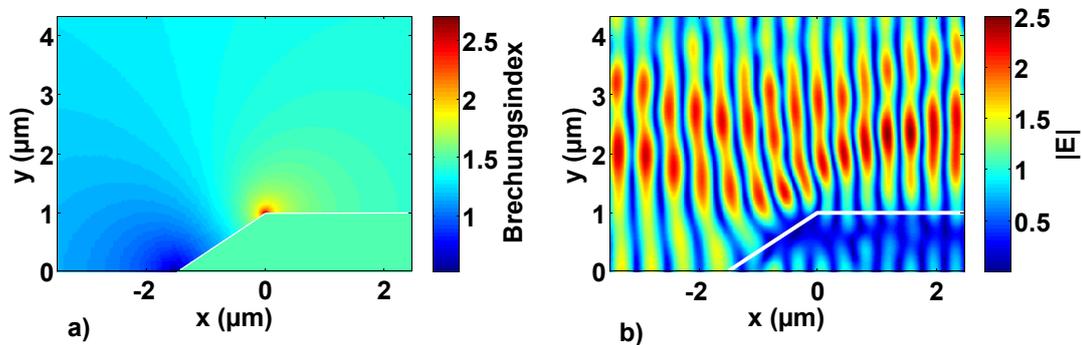


Abbildung 6.4: a) Mittels Schwarz-Christoffel Transformation erhaltene Brechzahlverteilung. b) Feldamplitude bei Beleuchtung aus negativer x-Richtung mit einer z-polarisierten ebenen Welle.

Die optische Beurteilung erfolgt bei Beleuchtung mit einer ebenen Welle. Einfallrichtung ist von links aus der negativen x-Richtung. Die ebene Welle ist in der dritten Raumrichtung (z-Richtung) polarisiert.

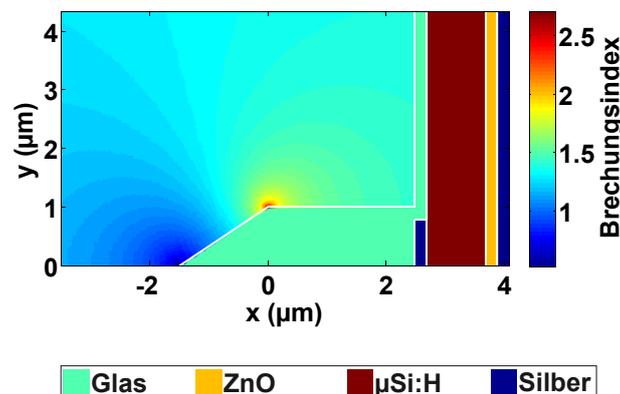


Abbildung 6.5: Halbe Solarzellegeometrie mit angepasster Brechzahlverteilung zur Umleitung des von links einfallenden Sonnenlichtes. Für die komplette Struktur muss an der x-Achse gespiegelt werden. Die Rückreflexion am frontseitigen Kontakt (dunkelblaues kleines Rechteck) soll möglichst gering gehalten werden.

Um die Effektivität der Lichtumlenkung zu prüfen, wird dieses Indexprofil später in eine Solarzelle integriert werden. Vorerst soll aber nur eine qualitative Untersuchung vorgenommen werden. Jedoch werden bereits hier die Symmetrieeigenschaften der später angenommenen Solarzellegeometrie übernommen. Aus diesem Grund wird zunächst nur die Umlenkung in positiver y-Richtung betrachtet. Die x-Achse stellt eine Spiegelsymmetrieachse dar. In Verbindung mit der z-polarisierten Welle müssen folglich an den Rändern mit konstantem y-Wert perfekt magnetische Leiter angewandt werden.

Die Halbräume links und rechts der Struktur mit $x \rightarrow \pm\infty$ werden mit PML (engl. perfectly matched layers) modelliert. Die Simulation wird mit Comsol Multiphysics durchgeführt.

Abbildung 6.4b zeigt die Feldamplitude bei 1100 nm Wellenlänge, die sich in der Tat größtenteils um den Bereich unten rechts herum windet. Für die quantitative Auswertung, wird sodann eine $1\ \mu\text{m}$ dicke Schicht aus $\mu\text{-Si:H}$ hinzugefügt. Auf der Oberfläche wird eine Leiterbahn eines frontseitigen Kontaktes aufgebracht. Darum herum muss die Brechzahlverteilung gemäß Abb. 6.4a gestaltet sein. Der Vollständigkeit halber folgt auf der Rückseite der Solarzelle eine 100 nm dicke Schicht aus ZnO. Wie in Abschnitt 5.2 erklärt, dient diese Schicht der Reduktion der plasmonischen Verluste. Bei unstrukturierten Metalloberflächen ist dies allerdings unkritisch. Der rückseitige Kontakt besteht aus einer Silberschicht.

Abbildung 6.5 zeigt schematisch die komplette Geometrie der Solarzelle. Das Umgebungsmedium außerhalb der Struktur in Abb. 6.5 besitzt einen Brechungsindex von eins. Die Halbräume daraus werden wiederum mit PML modelliert.

Das Absorptionsspektrum der $\mu\text{-Si:H}$ Schicht wird über den gewohnten Wellenlängenbereich von 300 nm bis 1100 nm bestimmt. Dieses Spektrum muss mit demjenigen ohne Frontkontakt verglichen werden. Optimalerweise kann durch die richtige Brechzahlverteilung das Vorhandensein des Frontkontaktes vollständig übergangen werden.

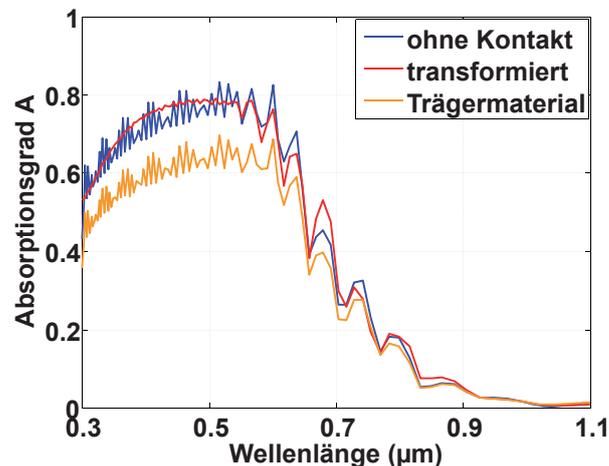


Abbildung 6.6: Absorptionsspektren ohne frontseitigen Kontakt (blau), mit frontseitigem Kontakt umgeben von Zinkoxid (orange) und mit angepasster Brechzahlverteilung um den frontseitigen Kontakt (rot).

Das Absorptionsvermögen der $\mu\text{-Si:H}$ Schicht ohne Frontkontakt ist in Abb. 6.6 gezeigt. Dieses Spektrum dient als Referenz. Bei optimaler Umlenkung des Lichtes lässt sich dieses Spektrum wiederherstellen. Wird jedoch anstelle des angepassten Brech-

zahlprofils lediglich ein homogenes Medium mit Brechungsindex $n = 1.5$ verwendet, so sinkt die Absorption erwartungsgemäß. Die optimierte Struktur besitzt ein Brechzahlprofil wie in Abb. 6.5 gezeigt. Das entsprechende Absorptionsspektrum ist in Abb. 6.6 ebenfalls dargestellt. Es zeigt sich, dass die qualitativ bereits in der Abb. 6.4 ersichtliche gute Umlenkung in der Tat nahezu den Fall ohne Frontkontakt zu rekonstruieren in der Lage ist.

Allerdings ist dabei zu beachten, dass der Brechungsindex in Abb. 6.4a mitunter unphysikalische Werte annimmt. Zum einen werden an der Position mit $x = 0 \mu\text{m}$ und $y = 1 \mu\text{m}$ sehr hohe Brechzahlen verlangt. Zum anderen sind um $x = -1.5 \mu\text{m}$ die Werte für den Brechungsindex kleiner als eins. Es bleibt zu klären, ob eine Beschränkung der Brechzahl auf sinnvolle Werte Einbußen nach sich zieht.

Am unteren Ende wird der Brechungsindex bei einem Wert von $n = 1$ begrenzt. Aus Gründen, die später klar werden, wird die obere Grenze bei $n = 1.5$ festgelegt. Mit dieser Wertebeschränkung des Brechungsindex lassen die Simulationen nahezu keine Verschlechterung des Absorptionsvermögens feststellen. Abbildung 6.7 zeigt das Absorptionsspektrum mit beschränkter Brechzahlverteilung zusätzlich zu den Absorptionsspektren in Abb. 6.6.

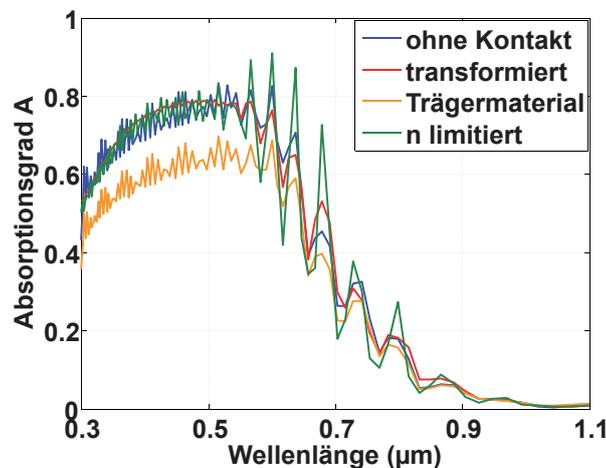


Abbildung 6.7: Absorptionsspektren ohne frontseitigen Kontakt (blau), mit frontseitigem Kontakt umgeben von Zinkoxid (orange) und mit angepasster Brechzahlverteilung um den frontseitigen Kontakt (rot). Das Absorptionsspektrum resultierend aus der Brechzahlverteilung mit beschränktem Wertebereich ist außerdem in grün gezeigt.

Als Nächstes stellt sich die Frage, wie ein berechnetes Brechzahlprofil wie in Abb. 6.4a zu realisieren wäre. Eine Idee besteht darin, ein sogenanntes Metamaterial zu bilden [Pendry, 2000; Zhao et al., 2009; Della Giovampaola und Engheta, 2014; Veselago, 1968]. Dieses besteht, in Anlehnung an einen Festkörper, aus kleinen Strukturen, den Metaatomen, die genauso wie im Festkörper, in einem periodischen

Gitter angeordnet sind. Die Gitterperioden sind üblicherweise kleiner als die verwendete Wellenlänge. Die einzelnen Metaatome können nicht aufgelöst werden, sondern verhalten sich zusammen wie ein effektives Medium. Die Wahl der Metaatome, sowohl was die Form als auch das Material betrifft, erlaubt eine gezielte Gestaltung der optischen Eigenschaften bis hin zu solchen, die in natürlichen Materialien nicht existieren.

In zwei Dimensionen bietet sich zum Beispiel ein photonischer Kristall aus in einem quadratischen Gitter angeordneten kreisförmigen Löchern in einem Trägermaterial an. Allein durch die Variation des Durchmessers des Loches verändert sich die Bandstruktur und damit der effektive Brechungsindex. Abbildung 6.8 zeigt die Banddiagramme für zwei Situationen.

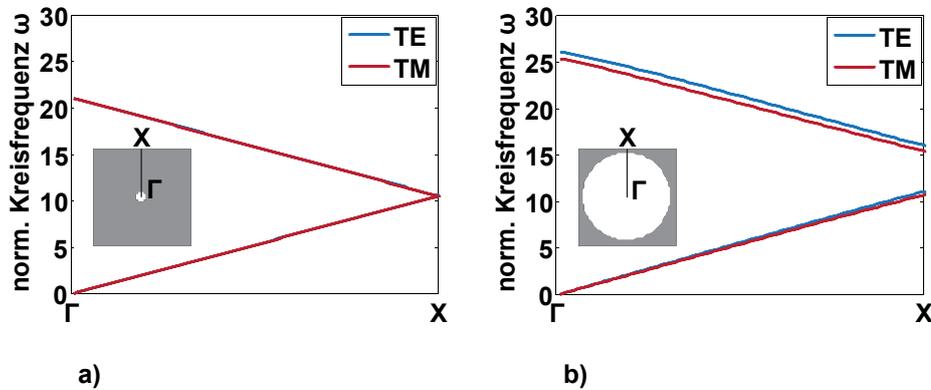


Abbildung 6.8: Banddiagramme für in einem quadratischen Gitter angeordnete kreisförmige Hohlräume in einem Trägermaterial der Brechzahl $n = 1.5$. Das Verhältnis aus Durchmesser und Periode des Gitters beträgt a) 0.1 und b) 0.9.

In Abb. 6.8a beträgt der Durchmesser des Kreises zehn Prozent der Periode, in Abb. 6.8b neunzig Prozent der Periode. Das Trägermaterial besitzt den Brechungsindex $n = 1.5$, das Loch hat den Brechungsindex $n = 1$. Dargestellt ist das Banddiagramm nur entlang der Richtung $\Gamma - X$, in welcher der Lichteinfall stattfinden soll.

Die Piktogramme zeigen schematisch die beiden Elementarzellen. Da das reziproke Gitter eines quadratischen Gitter wiederum ein quadratisches Gitter ist, ist der Weg entlang dessen das Banddiagramm aufgetragen ist ebenfalls darin gezeigt. Korrekterweise gehören diese zwei Informationen jedoch nicht in die gleiche Darstellung, da das eine im direkten, das andere im reziproken Raum liegt.

Um die effektiven Materialparameter zu bestimmen, wird die Quadratwurzel aus Gl. (3.10) gezogen und nach ω aufgelöst

$$\omega = \frac{ck}{\sqrt{\varepsilon(\omega)}} = \frac{ck}{n_{eff}}. \quad (6.13)$$

Liegt k in der Nähe des Γ -Punktes, so ist die Kreisfrequenz ω eine lineare Funktion des Wellenvektors k . Der effektive Brechungsindex n_{eff} ist umgekehrt proportional zur Steigung der Dispersionsrelation um den Γ -Punkt. Nimmt der Radius Werte zwischen 5% und 95% der Periode an, so ergibt sich ein effektiver Brechungsindex als Funktion der Skalierung des Lochdurchmessers. Dies ist in Abb. 6.9 gezeigt.

Bei sehr kleinen Skalierungsfaktoren spielt das Loch nahezu keine Rolle und der effektive Brechungsindex entspricht im Wesentlichen demjenigen des Trägermaterials. Am anderen Ende des Skalierungsbereichs ist der effektive Brechungsindex hingegen ziemlich weit entfernt vom Brechungsindex $n = 1$. Durch die Kreisform ist es einfach nicht möglich, den Brechungsindex noch weiter hinunter zu drücken. Nichtsdestotrotz lässt sich mit diesem Vorgehen der effektive Brechungsindex in einem gewissen Bereich nach Wunsch einstellen. Bedingung hierfür ist allerdings, dass die Periode des quadratischen Gitters klein ist im Vergleich zur Wellenlänge.

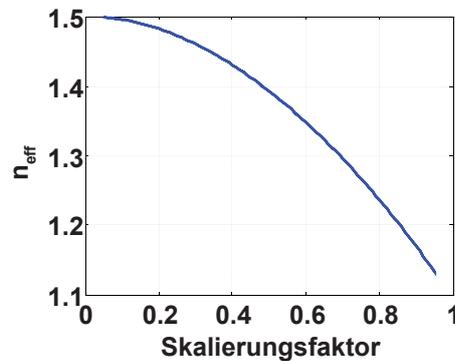


Abbildung 6.9: Effektiver Brechungsindex als Funktion der Zylinderradiusskalierung.

Zur Reproduktion des Brechzahlprofils in Abb. 6.4a wird nun ein quadratisches Gitter über das Gebiet gelegt. An jedem Gitterpunkt wird der lokale Brechungsindex bestimmt und mit Abb. 6.9 der zugehörige Skalierungsfaktor. Auch deshalb wurde bei den Simulationen der Brechungsindex bei $n = 1.5$ beschränkt, da mit der eben vorgeschlagenen Methode die Brechunghzahl nicht größer sein kann als diejenige des Trägermaterials.

In Abb. 6.10a und 6.10b sind nochmals die unbeschränkte und die beschränkte Brechzahlverteilung zu sehen. Zwei mögliche Realisierungen der beschränkten Brechzahlverteilung mittels eines photonischen Kristalls sind in Abb. 6.10c und 6.10d gezeigt. Die Perioden der quadratischen Gitter betragen 200 nm in Abb. 6.10a bzw. 100 nm in Abb. 6.10b. Gut zu erkennen ist der Bereich um $x = 1 \mu\text{m}$ und $y = 1 \mu\text{m}$, in welchem der geforderte Brechungsindex den Wert $n = 1.5$ übersteigt.

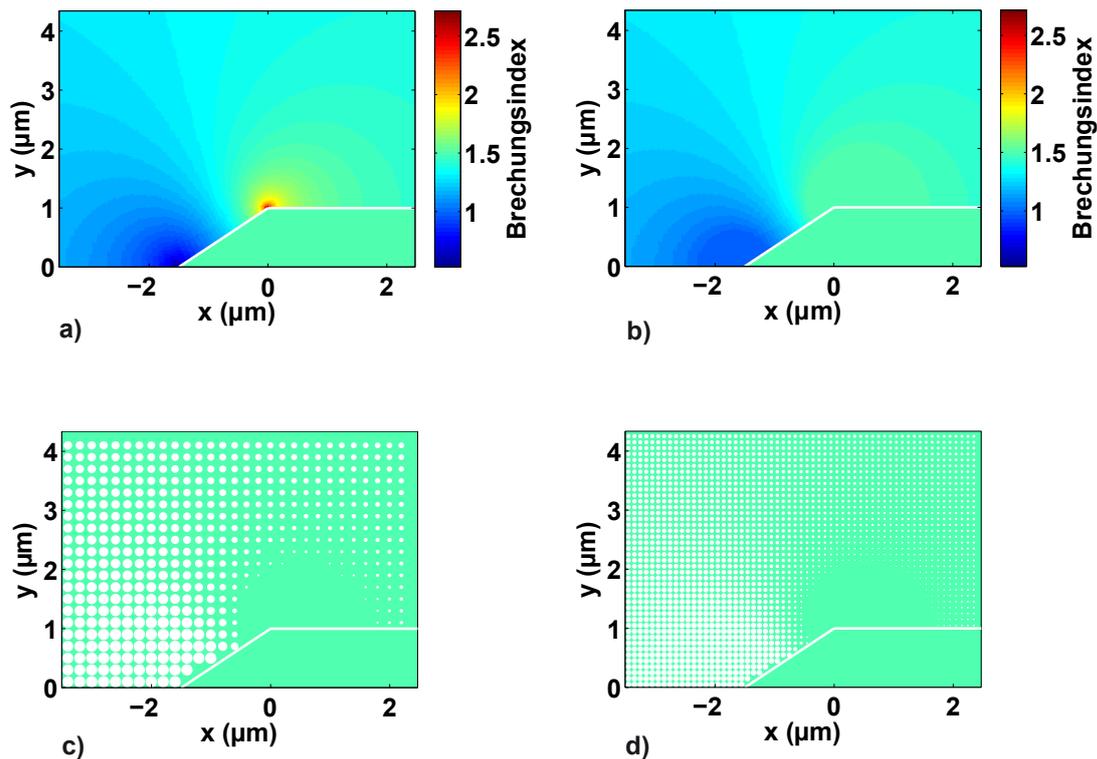


Abbildung 6.10: a) Berechnete Brechzahlverteilung ohne Einschränkung. b) Berechnete Brechzahlverteilung beschränkt auf Werte zwischen 1 und 1.5. Mögliche Realisierungen der Verteilung in b) mittels eines photonischen Kristalls aus Luftlöchern in einem Träger mit Brechungsindex 1.5. Die Perioden des quadratischen Gitters betragen c) 200 nm und d) 100 nm.

Wird nun das Absorptionsvermögen der $1\ \mu\text{m}$ dicken $\mu\text{-Si:H}$ Schicht genauso wie vorhin berechnet, so zeigt sich, dass die Annahme großer Wellenlängen gegenüber der Periode mit den Brechzahlverteilungen in 6.10c und 6.10d nicht zulässig ist. Abbildung 6.11 zeigt nochmals das Referenzabsorptionsspektrum ohne frontseitigen Kontakt. Außerdem abgebildet sind die Absorptionsspektren, wenn die Brechzahlverteilung mit einem photonischen Kristall erzeugt werden für verschiedene Perioden des photonischen Kristalls. Geht man von einem Brechungsindex des Halbleiters von etwas unter 3.5 aus, entspricht eine Periode von 200 nm einer Wellenlänge von knapp 700 nm und eine Periode von 100 nm einer Wellenlänge von ca. 350 nm. Ziemlich genau an diesen spektralen Positionen beginnt das Absorptionsvermögen in Abb. 6.11 einzubrechen. Bei diesen Perioden kann folglich noch nicht von einem effektiven Medium gesprochen werden. Wird die Periode hingegen noch weiter auf 70 nm reduziert, so lässt sich das Absorptionsspektrum ohne Frontkontakt beinahe wieder herstellen, ohne allzu große Einbußen hinnehmen zu müssen.

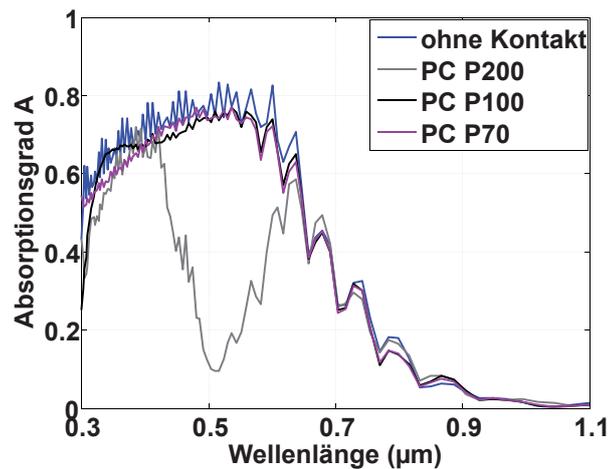


Abbildung 6.11: Absorptionsspektren ohne frontseitigen Kontakt (blau) und mit frontseitigem Kontakt umgeben von einem angepassten photonischen Kristall. Die Periode des photonischen Kristalls ist konstant und beträgt 200 nm (grau), 100 nm (schwarz) und 70 nm (violett).

6.3 Zusammenfassung

Das Ziel dieses Kapitels bestand darin, Ansätze der Transformationsoptik in die Photovoltaik zu integrieren, um die Rückreflexion an den frontseitigen Metallkontakten zu reduzieren. Durch eine gezielt gestaltete Brechzahlverteilung ließ sich dies bewerkstelligen. Die Anforderungen an die modifizierte Struktur waren jedoch weit weniger streng als beim sogenannten 'cloaking', d. h. dem unsichtbar machen für einen Beobachter, da die Phasenlage der Wellenfront nach dem Hindernis nicht wiederhergestellt werden musste. Es zeigte sich, dass es tatsächlich möglich ist, das Absorptionsspektrum der Referenzstruktur ohne frontseitigen Metallkontakt nahezu vollständig wiederherzustellen.

Außerdem wurde eine mögliche Realisierung der positionsabhängigen Brechzahlverteilung vorgeschlagen. Die zugrundeliegende Idee war, einen photonischen Kristall als Basis zu verwenden, dessen Struktur lokal angepasst werden musste, um die gewünschte Brechzahl zu erhalten. Um dem photonischen Kristall allerdings einen effektiven Brechungsindex zuweisen zu können, musste die Elementarzelle wesentlich kleiner sein als die kleinste auftretende Wellenlänge. Dies führte dazu, dass die Periode des quadratisch angenommenen Gitters höchstens 70 nm betragen durfte. In diesem Falle ließ sich die theoretische Brechzahlverteilung mit Hilfe des photonischen Kristalls realisieren und das daraus resultierende Absorptionsspektrum wich nur unwesentlich vom Referenzspektrum ab.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Der Schwerpunkt dieser Arbeit lag in der numerischen Begutachtung verschiedenster Aspekte des Photonmanagements, angefangen bei einfachen periodischen Gittern, welche sowohl auf der lichteinfallenden Seite als auch auf der Solarzellenrückseite angewandt wurden.

Mit periodischen Systemen lassen sich Resonanzen bei diskret verteilten Frequenzen bzw. Wellenlängen ausnutzen. Auf der Rückseite hat dieser Ansatz durchaus seine Berechtigung. An der Frontseite hingegen ist eine breitbandige Antwort wichtiger, um eine gute Einkopplung zu ermöglichen.

In Übereinstimmung mit Arbeiten Dritter zeigte sich auch hier, dass hybride Ansätze, die sowohl periodische als auch amorphe Elemente in sich vereinen, sehr oft die besten Resultate liefern. Glücklicherweise ist es überdies häufig so, dass dieses gewisse Maß an Unordnung nicht zusätzlich eingeführt werden muss, sondern aus sich selbst erwächst. Dies war insbesondere im vierten Kapitel der Fall, in welchem eine Opalstruktur auf ein texturiertes Substrat aufgebracht worden war.

Im Anschluss daran wurden Strukturen untersucht, die randomisierte Texturen als Grenzflächen enthielten. Dabei stand jedoch nicht eine theoretische Optimierung der geometrischen Eigenschaften der Texturen im Vordergrund, sondern eine möglichst einfache Produktionsweise, die sich mit Hilfe einiger weniger Parameter im Hinblick auf das Absorptionsvermögen optimieren lässt.

Es zeigte sich, dass Kugeln mit einer gaußförmigen Größenverteilung dazu geeignet sind texturierte Oberflächen mit positiven Eigenschaften für das Photonmanagement zu erzeugen. Die daraus entstandenen konform texturierten Schichten zeigten ein höheres Absorptionsvermögen im Vergleich zu etablierten texturierten Substraten. Im weiteren Verlauf der Untersuchungen stellte sich außerdem heraus, dass es genügt, die gaußförmige Wahrscheinlichkeitsdichte der Kugelgrößen an einigen wenigen Stützstellen nachzubilden. Dies ist einer zusätzlichen Vereinfachung in der Produktion der konformen Schichten weiter zuträglich.

In eine ähnliche Stoßrichtung verlief das vorletzte Kapitel. Um den Rohstoff Silizium kosteneffizient zu nutzen, ist der Frage nachgegangen worden, ob für ein gegebenes

texturiertes Substrat eine optimale Schichtdicke des hauptsächlich absorbierenden Materials existiert, und auf welche Weise das abzuscheidende Material wachsen soll. Es konnte dargelegt werden, dass bis zu einer bestimmten lateralen Detailgröße ein isotropes Wachstum in Richtung der lokalen Flächennormalen gegenüber dem konformen Wachstum in Richtung der Substratnormalen von Vorteil ist. Dies liegt in erster Linie an der Reduktion der plasmonischen Verluste im ebenfalls texturierten metallischen Rückseitenkontakt.

Das letzte Kapitel schließlich beschäftigte sich etwas abge sondert von den vorangegangenen Kapiteln mit dem Versuch, transformationsoptische Ansätze in die Photovoltaik zu integrieren, mit dem Ziel, die Rückreflexion an den Leiterbahnen des frontseitigen Kontaktes zu minimieren, indem das einfallende Sonnenlicht um die Kontakte herumgeführt wird. Mit gezielt gestalteten Brechzahlverteilungen ließ sich dies tatsächlich bewerkstelligen. Überdies wurde eine Option vorgeschlagen, mit Hilfe derer sich das geforderte Brechzahlprofil in die Tat umsetzen lässt. Sowohl aus rein theoretischer Sicht als auch bei Anwendung der vorgeschlagenen Realisierung ließ sich das ursprüngliche Absorptionsvermögen ohne frontseitige Kontakte in der Simulation wieder herstellen.

Zukünftige Bestrebungen, der Photovoltaik mehr Präsenz zu verschaffen, werden voraussichtlich in zwei Richtungen verlaufen. Zum einen werden Solarzellen, basierend auf organischen Halbleitern, wohl zunehmend an Einfluss gewinnen, selbst wenn sie, was die Wirkungsgrade betrifft, noch nicht mit den inorganischen Solarzellen mithalten können. Ihr schlagendes Argument sind die geringeren Kosten und die potentiell großflächige Produktion. Selbstredend muss sich erst zeigen, dass sie damit unter dem Strich tatsächlich kostengünstiger sind. Da organische Halbleiter jedoch auch in anderen Bereichen als der Photovoltaik Anwendung finden, wird die Forschung auf diesem Gebiet ohnehin weiter getrieben werden, und es ist wahrscheinlich, dass die Photovoltaik ebenfalls davon profitieren wird.

Auf der anderen Seite des Kostenspektrums im Hocheffizienzbereich sind Mehrfachübergangszellen ein vielversprechender Ansatz, um einen möglichst großen Spektralbereich des Sonnenlichtes zu nutzen. Dabei stellt sich die Frage, ob es günstiger ist, das einfallende Licht zuerst aufzutrennen und zu den einzelnen Solarzellen mit unterschiedlicher Bandlücke zu lenken. Dies erfordert zusätzliche optische Elemente, die aufeinander abgestimmt werden müssen. Andererseits ist es auch möglich, die einzelnen Subsolarzellen seriell zu durchlaufen. Dies ist aus optischer Sicht einfacher, zieht aber ausgefeiltes Design nach sich, da der höchste generierte Strom dem kleinsten erzeugten Strom aller Subsolarzellen entspricht.

Bis diese Solarzellen allerdings Realität werden, vergeht wohl noch einige Zeit und bis dahin bleibt Silizium das Material der Wahl, da es in ausreichender Menge

vorhanden ist und die Bearbeitungskompetenzen sehr weit fortgeschritten sind. In diesem Sinne soll die vorliegende Arbeit einen Beitrag zu einer vermehrten Anwendung der Photovoltaik im gesamten Energiegewinnungsspektrum leisten, auch durch die vorgeschlagenen kostenreduzierenden Maßnahmen.

Literaturverzeichnis

- [Afzali et al., 2002] A. Afzali, C. D. Dimitrakopoulos, und T. L. Breen, *High-performance, solution-processed organic thin film transistors from a novel pentacene precursor*, J. Am. Chem. Soc. **124**:8812–8813 (2002).
- [Agranovich (Editor) und Mills (Editor), 1982] V. M. Agranovich (Editor) und D. L. Mills (Editor), *Surface Polaritons*, Modern Problems in Condensed Matter Sciences. North Holland (1982).
- [ASTM, 2003] ASTM Standard G173-03, West Conshohocken, PA, American Society for Testing and Materials (2003).
- [Atwater und Polman, 2010] H. A. Atwater und A. Polman, *Plasmonics for improved photovoltaic devices*, Nat. Mater. **9**:205–213 (2010).
- [Berginski et al., 2007] M. Berginski, J. Hüpkes, M. Schulte, G. Schöpe, H. Stiebig, B. Rech, und 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**:074903 (2007).
- [Bermel et al., 2007] P. Bermel, C. Luo, L. Zeug, L. C. Kimerling, und J. D. Joannopoulos, *Improving thin-film crystalline silicon solar cells efficiencies with photonic crystals*, Opt. Express **15**(25):16986–17000 (2007).
- [Bieberbach, 1944] L. Bieberbach, *Theorie der Differentialgleichungen*, Dover Publications, New York (1944).
- [Boardman, 1982] A. D. Boardman, *Electromagnetic Surface Modes*, Wiley (1982).
- [Boccard et al., 2012] M. Boccard, C. Battaglia, S. Hänni, K. Söderström, J. Escarré, S. Nicolay, F. Meillaud, M. Despeisse, und C. Ballif, *Multiscale transparent electrode architecture for efficient light management and carrier collection in solar cells*, Nano Lett. **12**(3):1344–1348 (2012).

- [Boisdé und Harmer, 1996] G. Boisdé und A. Harmer, *Chemical and Biochemical Sensing with Optical Fibers and Waveguides*, Optoelectronics Library. Artech House (1996).
- [Bozzola et al., 2012] A. Bozzola, M. Liscidini, und L. C. Andreani, *Photonic light-trapping versus Lambertian limits in thin film silicon solar cells with 1D and 2D periodic patterns*, Opt. Express **20**(S2):A224–A244 (2012).
- [Bozzola et al., 2013] A. Bozzola, M. Liscidini, und L. C. Andreani, *Broadband light trapping with disordered photonic structures in thin-film silicon solar cells*, Prog. Photovolt: Res. Appl. :n/a–n/a (2013).
- [Burger et al., 2005] S. Burger, R. Klose, A. Schädle, F. Schmidt, und L. Zschiedrich, *FEM modelling of 3D photonic crystals and photonic crystal waveguides*, Proc. SPIE **5728**:164–173 (2005).
- [Busch und John, 1998] K. Busch und S. John, *Photonic band gap formation in certain self-organizing systems*, Phys. Rev. E **58**(3):3896–3908 (1998).
- [Bykov, 1972] V. P. Bykov, *Spontaneous emission in a periodic structure*, J. Exp. Theor. Phys. **35**:269–273 (1972).
- [Chen et al., 2010] H. Chen, C. T. Chan, und P. Sheng, *Transformation optics and metamaterials*, Nat. Mater. **9**:387–396 (2010).
- [Cui et al., 2013a] H. Cui, M. A. Green, P. Campbell, O. Kunz, und S. Varlamov, *A photovoltaic light trapping estimation method for textured glass based on surface decoupling calculation*, Sol. Energy Mater. Sol. Cells **109**:82–90 (2013a).
- [Cui et al., 2013b] H. Cui, S. Pillai, P. Campbell, und M. A. Green, *A novel silver nanoparticle assisted texture as broadband antireflection coating for solar cell applications*, Sol. Energy Mater. Sol. Cells **109**:233–239 (2013b).
- [Della Giovampaola und Engheta, 2014] C. Della Giovampaola und N. Engheta, *Digital metamaterials*, Nat. Mater. **13**:1115–1121 (2014).
- [Dewan et al., 2012] R. Dewan, J. I. Owen, D. Madzharov, V. Jovanov, J. Hüpkes, und D. Knipp, *Analyzing nanotextured transparent conductive oxides for efficient light trapping in silicon thin film solar cells*, Appl. Phys. Lett. **101**:103903 (2012).
- [Donges, 1998] A. Donges, *The coherence length of black-body radiation*, Eur. J. Phys. **19**:245–249 (1998).

- [Driscoll, 1996] T. A. Driscoll, *Algorithm 756: A matlab toolbox for schwarz-christoffel mapping*, ACM Trans. Math. Softw. **22**(2):168–186 (1996).
- [Driscoll und Trefethen, 2002] T. A. Driscoll und L. N. Trefethen, *Schwarz-Christoffel Mapping*, Cambridge University Press (2002).
- [Duché et al., 2008] D. Duché, L. Escoubas, J. J. Simon, P. Torchio, W. Vervisch, und F. Flory, *Slow Bloch modes for enhancing the absorption of light in thin films for photovoltaic cells*, Appl. Phys. Lett. **92**:193310 (2008).
- [Dürr et al., 2003] A. C. Dürr, N. Koch, M. Kelsch, A. Rühm, J. Ghijsen, R. L. Johnson, J.-J. Pireaux, J. Schwartz, F. Schreiber, H. Dosch, und A. Kahn, *Interplay between morphology, structure, and electronic properties at diindenoperylene-gold interfaces*, Phys. Rev. B **68** (2003).
- [Dürr et al., 2002] A. C. Dürr, F. Schreiber, M. Münch, N. Karl, B. Krause, V. Kruppa, und H. Dosch, *High structural order in thin films of the organic semiconductor diindenoperylene*, Appl. Phys. Lett. **81**(12):2276–2278 (2002).
- [Ergin, 2012] T. Ergin (2012), *Photonic Metamaterials for Transformation Optics*, PhD thesis Karlsruher Institut für Technologie.
- [Fahr et al., 2011] S. Fahr, T. Kirchartz, C. Rockstuhl, und F. Lederer, *Approaching the Lambertian limit in randomly textured thin-film solar cells*, Opt. Express **19**(S4):A865–A874 (2011).
- [Fahr et al., 2008a] S. Fahr, C. Rockstuhl, und F. Lederer, *Engineering the randomness for enhanced absorption in solar cells*, Appl. Phys. Lett. **92**:171114 (2008a).
- [Fahr et al., 2008b] S. Fahr, C. Rockstuhl, und F. Lederer, *Rugate filter for light-trapping in solar cells*, Opt. Express **16**(13):9332–9343 (2008b).
- [Fischer et al., 2010] S. Fischer, J. C. Goldschmidt, P. Löper, G. H. Bauer, R. Brüggemann, K. Krämer, D. Biner, M. Hermle, und S. W. Glunz, *Enhancement of silicon solar cell efficiency by upconversion: Optical and electrical characterization*, J. Appl. Phys. **108**:044912 (2010).
- [Fischer et al., 2011] S. Fischer, F. Hallermann, T. Eichelkraut, G. von Plessen, K. Krämer, D. Biner, H. Steinkemper, M. Hermle, und J. C. Goldschmidt, *Plasmon enhanced upconversion luminescence near gold nanoparticles-simulation and analysis of the interactions*, Opt. Express **20**(1):271–282 (2011).

- [Franken et al., 2007] R. H. Franken, R. L. Stolck, H. Li, C. H. M. van der Werf, J. K. Rath, und 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**:014503 (2007).
- [Günes et al., 2007] S. Günes, H. Neugebauer, und N. S. Sariciftci, *Conjugated polymer-based organic solar cells*, Chem. Rev. **107**(4):1324–1338 (2007).
- [Green und Keevers, 1995] M. A. Green und M. J. Keevers, *Optical properties of intrinsic silicon at 300k*, Prog. Photovolt: Res. Appl. **3**(3):189–192 (1995).
- [Gueymard, 2001] C. A. Gueymard, *Parameterized transmittance model for direct beam and circumsolar spectral irradiance*, Solar Energy **71**(5):325–346 (2001).
- [Gueymard et al., 2002] C. A. Gueymard, D. Myers, und K. Emery, *Proposed reference irradiance spectra for solar energy systems testing*, Solar Energy **73**(6):443–467 (2002).
- [Haase und Stiebig, 2007] C. Haase und H. Stiebig, *Thin-film silicon solar cells with efficient periodic light trapping texture*, Appl. Phys. Lett. **91**:061116 (2007).
- [Haug et al., 2011] F.-J. Haug, T. Söderström, A. Naqavi, und C. Ballif, *Resonances and absorption enhancement in thin film silicon solar cells with periodic interface texture*, J. Appl. Phys. **109**:084516 (2011).
- [Heilig et al., 2004] M. Heilig, M. Domhan, und H. Port, *Optical properties and morphology of thin diindenoperylene films*, J. Lumin. **110**:290–295 (2004).
- [Heine, 1861] E. Heine, *Handbuch der Kugelfunctionen*, G. Reimer (1861).
- [Henrici, 1974] P. Henrici, *Applied and Computational Complex Analysis: Vol.: 1*, Wiley New York (1974).
- [Heo et al., 2013] J. H. Heo, S. H. Im, J. H. Noh, T. N. Mandal, C.-S. Lim, J. A. Chang, Y. H. Lee, H.-J. Kim, A. Sarkar, M. K. Nazeeruddin, M. Grätzel, und S. I. Seok, *Efficient inorganic–organic hybrid heterojunction solar cells containing perovskite compound and polymeric hole conductors*, Nature Photon. **7**:486–491 (2013).
- [Hoppe und Sariciftci, 2004] H. Hoppe und N. S. Sariciftci, *Organic solar cells: An overview*, J. Mater. Res. **19**(7):1924–1945 (2004).
- [Hulstrom et al., 1985] R. Hulstrom, R. Bird, und C. Riordan, *Spectral solar irradiance data sets for selected terrestrial conditions*, Solar Cells **15**:365–391 (1985).

- [IEK-5, 2013] IEK-5, Forschungszentrum Jülich (2013).
- [Isabella et al., 2010a] O. Isabella, J. Krč, und M. Zeman, *Modulated surface textures for enhanced light trapping in thin-film silicon solar cells*, Appl. Phys. Lett. **97**:101106 (2010a).
- [Isabella et al., 2010b] O. Isabella, F. Moll, J. Krč, und M. Zeman, *Modulated surface textures using zinc-oxide films for solar cells applications*, Phys. Stat. Sol. (a) **207**(3):642–646 (2010b).
- [Jackson, 2006] J. D. Jackson, *Klassische Elektrodynamik 4. Auflage*, Walter de Gruyter (2006).
- [Jin, 2002] J.-M. Jin, *The Finite Element Method in Electromagnetics*, Wiley-IEEE Press (2002).
- [Joannopoulos et al., 2011] J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn, und R. D. Meade, *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light 2nd edition*, Princeton University Press (2011).
- [John und Joannopoulos, 2001] S. John und J. D. Joannopoulos, *Block-iterative frequency-domain methods for Maxwell's equations in a planewave basis*, Opt. Express **8**(3):173–190 (2001).
- [Johnson, 2007] S. G. Johnson, *Coordinate Transformation & Invariance in Electromagnetism: notes for the course 18.369 at MIT*, (2007).
- [Jovanov et al., 2013a] V. Jovanov, U. Palanchoke, P. Magnus, H. Stiebig, J. Hüpkes, P. Sichanugrist, M. Konagai, S. Wiesendanger, C. Rockstuhl, und D. Knipp, *Light trapping in periodically textured amorphous silicon thin film solar cells using realistic interface morphologies*, Opt. Express **21**(S4):A595–A606 (2013a).
- [Jovanov et al., 2013b] V. Jovanov, X. Xu, S. Sherstha, M. Schulte, J. Hüpkes, und D. Knipp, *Predicting the interface morphologies of silicon films on arbitrary substrates: Application in solar cells*, ACS Appl. Mater. Interfaces **5**:7109–7116 (2013b).
- [Jovanov et al., 2013c] V. Jovanov, X. Xu, S. Shrestha, M. Schulte, J. Hüpkes, M. Zeman, und D. Knipp, *Influence of interface morphologies on amorphous silicon thin film solar cells prepared on randomly textured substrates*, Sol. Energy Mater. Sol. Cells **112**:182–189 (2013c).
- [Kandulski, 2007] W. Kandulski (2007), *Shadow Nanosphere Lithography*, PhD thesis Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn.

- [Kildishev und Shalaev, 2011] A. V. Kildishev und V. M. Shalaev, *Transformation optics and metamaterials*, Phys.-Usp. **54**(1) (2011).
- [Kim et al., 2008] S.-S. Kim, S.-I. Na, J. Jo, D.-Y. Kim, und Y.-C. Nah, *Plasmon enhanced performance of organic solar cells using electrodeposited Ag nanoparticles*, Appl. Phys. Lett. **93** (2008).
- [Kluth et al., 1999] O. Kluth, B. Rech, H. L., S. Wieder, G. Schöpe, C. Beneking, H. Wagner, A. Löffl, und H. W. Schock, *Texture etched ZnO:Al coated glass substrates for silicon based thin film solar cells*, Thin Solid Films **351**:247–253 (1999).
- [Kowalczewski et al., 2012] P. Kowalczewski, M. Liscidini, und L. C. Andreani, *Engineering Gaussian disorder at rough interfaces for light trapping in thin-film solar cells*, Opt. Lett. **37**(23):4868–4870 (2012).
- [Kroll et al., 2008] M. Kroll, S. Fahr, C. Helgert, C. Rockstuhl, F. Lederer, und T. Pertsch, *Employing dielectric diffractive structures in solar cells – a numerical study*, Phys. Stat. Sol. (a) **205**(12):2777–2795 (2008).
- [Kroll et al., 2012] M. Kroll, M. Otto, K. Fuchs, R. B. Wehrspohn, E. B. Kley, A. Tünnermann, und T. Pertsch, *Black silicon for solar cell applications*, Proc. SPIE 8438, Photonics for Solar Energy Systems IV :843817 (2012).
- [Le et al., 2011] K. Q. Le, A. Abass, B. Maes, P. Bienstman, und A. Alù, *Comparing plasmonic and dielectric gratings for absorption enhancement in thin-film organic solar cells*, Opt. Express **20**(S1):A39–A50 (2011).
- [Le und Alù, 2014] K. Q. Le und A. Alù, *Fano-induced solar absorption enhancement in thin organic photovoltaic cells*, Appl. Phys. Lett. **105**:141118 (2014).
- [Leonhardt, 2006] U. Leonhardt, *Optical conformal mapping*, Science **312** (2006).
- [Leonhardt und Philbin, 2009] U. Leonhardt und T. G. Philbin, *Transformation optics and the geometry of light*, Progress in Optics **53**(08):69–152 (2009).
- [Leonhardt und Philbin, 2010] U. Leonhardt und T. G. Philbin, *Geometry and Light: The Science of Invisibility*, Dover Publications (2010).
- [Li und Pendry, 2008] J. Li und J. B. Pendry, *Hiding under the carpet: A new strategy for cloaking*, Phys. Rev. Lett. **101**:203901 (2008).
- [Li, 1997] L. Li, *New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings*, J. Opt. Soc. Am. A **14**(10):2758–2767 (1997).

- [Lifshitz et al., 1984] E. M. Lifshitz, L. D. Landau, und L. P. Pitaevskii, *Electrodynamics of Continuous Media: 8*, Butterworth Heinemann (1984).
- [Liu et al., 2013] D. Liu, L. H. Gabrielli, M. Lipson, und S. G. Johnson, *Transformation inverse design*, Opt. Express **21**(12):14223–14243 (2013).
- [Liu und Zhang, 2012] Y. Liu und X. Zhang, *Recent advances in transformation optics*, Nanoscale **4**:5277–5292 (2012).
- [López, 2006] C. López, *Three-dimensional photonic bandgap materials: semiconductors for light*, J. Opt. A: Pure Appl. Opt. **8**:R1–R14 (2006).
- [Mann et al., 2011] S. A. Mann, R. R. Grote, R. M. Osgood Jr., und J. A. Schuller, *Dielectric particle and void resonators for thin film solar cell textures*, Opt. Express **19**(25):25729–25740 (2011).
- [Meier et al., 2001] J. Meier, E. Vallat-Sauvain, S. Dubail, U. Kroll, J. Dubail, S. Gaylay, L. Feitknecht, P. Torres, S. Faÿ, D. Fischer, und A. Shah, *Microcrystalline/micromorph silicon thin-film solar cells prepared by VHF-GD technique*, Sol. Energy Mater. Sol. Cells **66**:73–84 (2001).
- [microParticles, 2014] microParticles GmbH, Forschungs- und Entwicklungslaboratorium, Volmerstr. 9A, ZBU Berlin (2014).
- [Moharam und Gaylord, 1981] M. G. Moharam und T. K. Gaylord, *Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction*, J. Opt. Soc. Am. **71**(7):811–818 (1981).
- [Nelson, 2003] J. Nelson, *The Physics of Solar Cells*, Imperial College Press, 1 edition (2003).
- [Noponen und Turunen, 1994] E. Noponen und J. Turunen, *Eigenmode method for electromagnetic synthesis of diffractive elements with three-dimensional profiles*, J. Opt. Soc. Am. A **11**(9):2494–2502 (1994).
- [O’Regan und Grätzel, 1991] B. O’Regan und M. Grätzel, *A low-cost, high-efficiency solar cell based on dye-sensitized colloidal TiO₂ films*, Nature **353**:737–740 (1991).
- [Pendry, 2000] J. B. Pendry, *Negative refraction makes a perfect lens*, Phys. Rev. Lett. **85**(18):3966–3969 (2000).
- [Pendry et al., 2012] J. B. Pendry, A. Aubry, D. R. Smith, und S. A. Maier, *Transformation optics and subwavelength control of light*, Science **337**(6094):549–552 (2012).

- [Pendry et al., 2006] J. B. Pendry, D. Schurig, und D. R. Smith, *Controlling electromagnetic fields*, Science **312**(5781):1780–1782 (2006).
- [Pillai und Green, 2010] S. Pillai und M. A. Green, *Plasmonics for photovoltaic applications*, Sol. Energy Mater. Sol. Cells **94**:1481–1486 (2010).
- [Plummer et al., 2000] J. D. Plummer, M. D. Deal, und P. B. Griffin, *Silicon VLSI Technology: Fundamentals, Practice and Modeling*, Prentice Hall PTR (2000).
- [Ponath (Editor) und Stegeman (Editor), 1991] H.-E. Ponath (Editor) und G. I. Stegeman (Editor), *Nonlinear Surface Electromagnetic Phenomena*, Modern Problems in Condensed Matter Sciences. North Holland (1991).
- [Python et al., 2009] M. Python, O. Madani, D. Dominé, F. Meillaud, E. Vallat-Sauvain, und C. Ballif, *Influence of the substrate geometrical parameters on microcrystalline silicon growth for thin-film solar cells*, Sol. Energy Mater. Sol. Cells **93**:1714–1720 (2009).
- [Richards, 2006] B. S. Richards, *Luminescent layers for enhanced silicon solar cell performance: Down-conversion*, Sol. Energy Mater. Sol. Cells **90**:1189–1207 (2006).
- [Rockstuhl et al., 2008] C. Rockstuhl, S. Fahr, und F. Lederer, *Absorption enhancement in solar cells by localized plasmon polaritons*, J. Appl. Phys. **104**:123102 (2008).
- [Ross und Gonzalez, 1980] R. G. Ross und C. C. Gonzalez, *Reference conditions for reporting terrestrial photovoltaic performance*, PHV-5 session of AS/ISES 1980 Annual Meeting, Phoenix AZ :1091–1097 (1980).
- [Sandwell, 1987] D. T. Sandwell, *Biharmonic spline interpolation of GEOS-3 and SEASAT altimeter data*, Geophys. Res. Lett. **14**(2):139–142 (1987).
- [Schilling, 2002] J. Schilling (2002), *Herstellung und optische Eigenschaften von 2D- und 3D-photonischen Kristallen aus makroporösem Silizium*, PhD thesis Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg.
- [Schön, 2001] J. H. Schön, *On the stability of organic field-effect transistor materials*, Appl. Phys. Lett. **79**(25):4163–4164 (2001).
- [Schön et al., 2001] J. H. Schön, C. Kloc, und B. Batlogg, *Low-temperature transport in high-mobility polycrystalline pentacene field-effect transistors*, Phys. Rev. B **63**:125304 (2001).

- [Sever et al., 2013] M. Sever, B. Lipovšek, J. Krč, A. Čampa, G. Sanchez, F.-J. Haug, M. Duchamp, W. Soppe, und M. Topič, *Combined model of non-conformal layer growth for accurate optical simulation of thin-film silicon solar cells*, Sol. Energy Mater. Sol. Cells **119**:59–66 (2013).
- [Shalav et al., 2005] A. Shalav, B. S. Richards, T. Trupke, K. W. Krämer, und H. U. Güdel, *Application of $\text{NaYF}_4:\text{Er}^{3+}$ up-converting phosphors for enhanced near-infrared silicon solar cell response*, Appl. Phys. Lett. **86**:013505 (2005).
- [Sheng et al., 2011] X. Sheng, S. G. Johnson, J. Michel, und L. C. Kimerling, *Optimization-based design of surface textures for thin-film si solar cells*, Opt. Express **19**(S4):A841–A850 (2011).
- [Silvester und Ferrari, 1990] P. P. Silvester und R. L. Ferrari, *Finite Elements for Electrical Engineers 2nd edition*, Cambridge University Press (1990).
- [Soille, 2003] P. Soille, *Morphological Image Analysis: Principles and Applications*, Springer-Verlag New York (2003).
- [Southwell, 1983] W. H. Southwell, *Gradient-index antireflection coatings*, Opt. Lett. **8**(11):584–586 (1983).
- [Stein et al., 2008] A. Stein, F. Li, und N. R. Denny, *Morphological control in colloidal crystal templating of inverse opals, hierarchical structures, and shaped particles*, Chem. Mater. **20**:649–666 (2008).
- [Steinhauser et al., 2007] J. Steinhauser, S. Faÿ, N. Oliveira, E. Vallat-Sauvain, und C. Ballif, *Transition between grain boundary and intragrain scattering transport mechanisms in boron-doped zinc oxide thin films*, Appl. Phys. Lett. **90**:142107 (2007).
- [Thompson et al., 1998] J. F. Thompson, B. K. Soni, und N. P. Weatherill, *Handbook of Grid Generation*, CRC Press (1998).
- [Tripathi und Pflaum, 2006] A. K. Tripathi und J. Pflaum, *Correlation between ambipolar transport and structural phase transition in diindenoperylene single crystals*, Appl. Phys. Lett. **89**:082103 (2006).
- [Trupke et al., 2002a] T. Trupke, M. A. Green, und P. Würfel, *Improving solar cell efficiencies by down-conversion of high-energy photons*, J. Appl. Phys. **92**(3):1668–1674 (2002a).

- [Trupke et al., 2002b] T. Trupke, M. A. Green, und P. Würfel, *Improving solar cell efficiencies by up-conversion of sub-band-gap light*, J. Appl. Phys. **92**(7):4117–4122 (2002b).
- [Turner et al., 1956] M. J. Turner, R. W. Clough, H. C. Martin, und L. J. Topp, *Stiffness and deflection analysis of complex structures*, J. Aeronaut. Sci. **23**(9):805–823 (1956).
- [Üpping et al., 2011] J. Üpping, R. Salzer, M. Otto, T. Beckers, L. Steidl, R. Zentel, R. Carius, und R. B. Wehrspohn, *Transparent conductive oxide photonic crystals on textured substrates*, Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications **9**:31–34 (2011).
- [Veselago, 1968] V. G. Veselago, *The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of ϵ and μ* , Sov. Phys. Usp. **10**(4):509–514 (1968).
- [Vlasov et al., 2000] Y. A. Vlasov, V. N. Astratov, A. V. Baryshev, A. A. Kaplyanskii, O. Z. Karimov, und M. F. Limonov, *Manifestation of intrinsic defects in optical properties of self-organized opal photonic crystals*, Phys. Rev. E **61**(5):5784–5793 (2000).
- [Vynck et al., 2012] K. Vynck, M. Burrelli, F. Riboli, und D. S. Wiersma, *Photon management in two-dimensional disordered media*, Nat. Mater. **11**:1017–1022 (2012).
- [Wang et al., 2012] Y. Wang, X. Zhang, L. Bai, Q. Huang, und C. Wei, *Effective light trapping in thin film silicon solar cells from textured Al doped ZnO substrates with broad surface feature distributions*, Appl. Phys. Lett. **100**:263508 (2012).
- [Wang et al., 2003] Z. L. Wang, C. T. Chan, W. Y. Zhang, Z. Chen, N. B. Ming, und P. Sheng, *Optical properties of inverted opal photonic band gap crystals with stacking disorder*, Phys. Rev. E **67**:016612 (2003).
- [Ward und Pendry, 1996] A. J. Ward und J. B. Pendry, *Refraction and geometry in Maxwell's equations*, J. Mod. Opt. **43**(4):773–793 (1996).
- [Wehrspohn und Üpping, 2012] R. B. Wehrspohn und J. Üpping, *3D photonic crystals for photon management in solar cells*, J. Opt **14**:024003 (2012).
- [Wiesendanger et al., 2014] S. Wiesendanger, T. Bischoff, V. Jovanov, D. Knipp, S. Burger, F. Lederer, und C. Rockstuhl, *Effects of film growth modes on light trapping in silicon thin film solar cells*, Appl. Phys. Lett. **104**:231103 (2014).

- [Wiesendanger et al., 2013a] S. Wiesendanger, M. Zilk, T. Pertsch, F. Lederer, and C. Rockstuhl, *A path to implement optimized randomly textured surfaces for solar cells*, Appl. Phys. Lett. **103**:131115 (2013a).
- [Wiesendanger et al., 2013b] S. Wiesendanger, M. Zilk, T. Pertsch, C. Rockstuhl, and F. Lederer, *Combining randomly textured surfaces and photonic crystals for the photon management in thin film microcrystalline silicon solar cells*, Opt. Express **21**(S3):A450–A459 (2013b).
- [Wöhrle und Meissner, 1991] D. Wöhrle und D. Meissner, *Organic solar cells*, Adv. Mater. **3**(3) (1991).
- [Würfel, 2008] P. Würfel, *Physics of Solar Cells: From Principles to New Concepts*, Wiley-VCH (2008).
- [Yablonovitch, 1987] E. Yablonovitch, *Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics*, Phys. Rev. Lett. **58**(20):2059–2062 (1987).
- [Yablonovitch und Cody, 1982] E. Yablonovitch und G. D. Cody, *Intensity enhancement in textured optical sheets for solar cells*, IEEE Trans. Electron. Dev. **29**(2):300–305 (1982).
- [Zanotto et al., 2010] S. Zanotto, M. Liscidini, und L. C. Andreani, *Light trapping regimes in thin-film silicon solar cells with a photonic pattern*, Opt. Express **18**(5):4260–4274 (2010).
- [Zayats et al., 2005] A. V. Zayats, I. I. Smolyaninov, und A. A. Maradudin, *Nano-optics of surface plasmon polaritons*, Physics Reports **408**:131–314 (2005).
- [Zhang et al., 2010] D. Zhang, A. Horneber, J. Mihaljevic, U. Heinemeyer, K. Braun, F. Schreiber, R. Scholz, und A. J. Meixner, *Plasmon resonance modulated photoluminescence and Raman spectroscopy of diindenoperylene organic semiconductor thin film*, J. Lumin. **131**:502–505 (2010).
- [Zhang et al., 2014] Y. Zhang, B. Jia, Z. Ouyang, und M. Gu, *Influence of rear located silver nanoparticle induced light losses on the light trapping of silicon wafer-based solar cells*, J. Appl. Phys. **116**:124303 (2014).
- [Zhao et al., 2009] R. Zhao, J. Zhou, T. Koschny, E. N. Economou, und C. M. Soukoulis, *Repulsive casimir force in chiral metamaterials*, Phys. Rev. Lett. **103**:103602 (2009).

Anhang A

A.1 Publikationen

Veröffentlichungen in begutachteten Zeitschriften

1. S. Wiesendanger, M. Zilk, T. Pertsch, C. Rockstuhl, und F. Lederer, *Combining randomly textured surfaces and photonic crystals for the photon management in thin film microcrystalline silicon solar cells*, Opt. Express **21**(S3):A450–A459 (2013b)
2. S. Wiesendanger, M. Zilk, T. Pertsch, F. Lederer, und C. Rockstuhl, *A path to implement optimized randomly textured surfaces for solar cells*, Appl. Phys. Lett. **103**:131115 (2013a)
3. S. Wiesendanger, T. Bischoff, V. Jovanov, D. Knipp, S. Burger, F. Lederer, und C. Rockstuhl, *Effects of film growth modes on light trapping in silicon thin film solar cells*, Appl. Phys. Lett. **104**:231103 (2014)
4. V. Jovanov, U. Palanchoke, P. Magnus, H. Stiebig, J. Hüpkes, P. Sichanugrist, M. Konagai, S. Wiesendanger, C. Rockstuhl, und D. Knipp, *Light trapping in periodically textured amorphous silicon thin film solar cells using realistic interface morphologies*, Opt. Express **21**(S4):A595–A606 (2013a)

Eingeladene Vorträge

1. C. Rockstuhl, S. Fahr, S. Wiesendanger, und F. Lederer, *Photon Management in Thin-Film Solar Cells*, **Tacona 2011**, Bad Honnef, Deutschland
2. S. Wiesendanger, S. Fahr, T. Kirchartz, C. Rockstuhl, und F. Lederer, *Achieving the Yablonovitch Limit in Thin-Film Solar Cells with Tailored Randomly Textured Interfaces*, **Optical Nanostructures and Advanced Materials for Photovoltaics 2011**, Austin, Texas

3. C. Rockstuhl, S. Fahr, S. Wiesenganger, und F. Lederer, *Novel Idealistic and Realistic Approaches for a Better Photon Management*, **Light Energy and the Environment 2013**, Tucson, Arizona

Konferenzbeiträge

1. S. Wiesendanger, C. Rockstuhl, und Falk Lederer, *Front and rear side photonic nanostructures for an optimal photon management*, **Light Energy and the Environment 2012**, Eindhoven, Niederlande
2. S. Wiesendanger, T. Bischoff, V. Jovanov, D. Knipp, S. Burger, F. Lederer, und C. Rockstuhl, *Numerical investigations on the effects of film growth modes on light trapping in silicon thin film solar cells*, **Light Energy and the Environment 2014**, Canberra, Australien
3. M. F. Schumann, S. Wiesendanger, J.-C. Goldschmidt, K. Bittkau, U. W. Paetzold, A. Sprafke, R. B. Wehrspohn, C. Rockstuhl, und M. Wegener, *Cloaking of Metal Contacts on Solar Cells*, **Conference on Lasers and Electro-Optics 2015**, San Jose CA, USA
4. A. Abass, S. Wiesendanger, und C. Rockstuhl, *Going beyond the Lambertian limit of solar cells with transformation optics*, **International Symposium on Modern Optics and Its Applications 2015**, Bandung, Indonesien

Buchkapitel

1. M. Peters, H. Hauser, B. Bläsi, M. Kroll, C. Helgert, S. Fahr, S. Wiesendanger, C. Rockstuhl, T. Kirchartz, U. Rau, A. Mellor, L. Steidl, und R. Zentel, *Rear side diffractive gratings for silicon wafer solar cells*, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Kapitel 3:49–90 (2015)

A.2 Danksagung

Einer ganzen Reihe von Personen, die in der einen oder anderen Form zu dieser Arbeit beigetragen haben, bin ich zu Dank verpflichtet.

Ich bedanke mich bei Szilvia Mammel, die mir in allen administrativen Angelegenheiten stets sehr hilfsbereit zur Seite gestanden hat.

Außerdem bedanke ich mich bei Dr. Lutz Leine für die zuverlässige und entgegenkommende Wartung und Erweiterung der Infrastruktur wohl wissend, dass diese Arbeit nicht immer sehr dankbar ist.

Natürlich gehört ein ganz besonderer Dank Prof. Dr. Falk Lederer und Prof. Dr. Carsten Rockstuhl für die Betreuung und Unterstützung in wissenschaftlichen Belangen.

Des Weiteren bedanke ich mich ausdrücklich bei Matthias Zilk und Thomas Paul für die von ihnen zur Verfügung gestellten Programme, die die Basis für weite Teile dieser Arbeit waren.

Bei Sven Burger bedanke ich mich für die tatkräftige Unterstützung bei der Eingewöhnung und Verwendung von JCMWave.

Für die Zusammenarbeit mit der Universität Tübingen bedanke ich mich bei Dominik Gollmer, Katharina-Anna Broch, Monika Fleischer sowie Dai Zhang

Überdies bedanke ich mich für die Zusammenarbeit bei Vladislav Jovanov und Prof. Dr. Dietmar Knipp der Jacobs University Bremen

Aber auch die Zusammenarbeit mit den Projektpartnern muss an dieser Stelle unbedingt erwähnt werden:

André Hoffmann und Dr. Ulrich Paetzold sowie Prof. Dr. Reinhard Carius und Prof. Dr. Uwe Rau vom Forschungszentrum Jülich

Johannes Eisenlohr, Dr. Benedikt Bläsi sowie Dr. Jan Christoph Goldschmidt vom Fraunhofer Institut für solare Energie in Freiburg

Dr. Alexander Sprafke, Daniela Schneevoigt sowie Prof. Dr. Ralf B. Wehrspohn von der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

Deepu Kumar, Florian Hallermann und Prof. Dr. Gero von Plessen von der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen

Nicht zu vergessen die Arbeitsgruppe Photonik sowie das Institut der Angewandten Physik der Friedrich-Schiller-Universität Jena

Abschließend bedanke ich mich selbstverständlich beim Bundesministerium für Bildung und Forschung BMBF für die Finanzierung der Promotionsstelle.

Zu guter Letzt gehört all denjenigen Personen ein Dank, die hier Erwähnung hätten finden müssen aber in Vergessenheit geraten sind.

A.3 Erklärung

Hiermit erkläre ich ehrenwörtlich, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig, 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.

Nachfolgende Personen haben in beschriebener Weise unentgeltlich zu dieser Arbeit beigetragen:

1. Die experimentellen Ergebnisse in Abbildung 3.5 stammen von Dominik Gollmer von der Arbeitsgruppe Kern des Instituts für Angewandte Physik der Universität Tübingen.
2. Die SEM-Aufnahme in Abbildung 3.12a wurde von der Arbeitsgruppe Meixner des Instituts für Physikalische und Theoretische Chemie der Universität Tübingen angefertigt.

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, 25. Juni 2015

Unterschrift

A.4 Lebenslauf

Persönliche Daten

Name Samuel Wiesendanger

Geburtsdatum 22.08.1980

Geburtsort St. Gallen, Schweiz

Nationalität Schweiz

Ausbildung

1995 - 1999 Gymnasium Kantonsschule Trogen AR/Schweiz

13.12.1999 Abitur

2000 - 2004 Mikrotechnikstudium an der Eidgenössischen Technischen Hochschule Lausanne EPFL/Schweiz

2005 Masterarbeit am Laboratoire de Métrologie et Nanophotonique der EPFL mit dem Titel *Bestimmung der nicht-radiativen Relaxationszeit von Gasen mittels des photoakustischen Effekts*

09.04.2005 Masterdiplom

Beruflicher Werdegang

2005 - 2008 Entwicklungsingenieur bei ABB Schweiz

- 2008 - 2010 wissenschaftlicher Mitarbeiter und Promotionsstudent
an der Eidgenössischen Technischen Hochschule Zürich
ETHZ/Schweiz
- 2011 - 2015 wissenschaftlicher Mitarbeiter und Promotionsstudent an
der Friedrich-Schiller-Universität Jena/Deutschland
- 16.06.2015 Dissertation mit dem Titel *Photonmanagement in Dünnsolarzellen*

Lehrtätigkeit

SS2012 Grundkonzepte der Optik

WS2012/2013 Elektrodynamik

Jena, 25. Juni 2015

Unterschrift

Anhang B

B.1 Eigenwertproblem der FMM

Der besseren Übersicht halber wird das Prinzip anhand eines einfachen binären Gitters, eingebettet in ein homogenes Medium, erklärt. Abbildung B.1a zeigt einen Schnitt entlang der z -Achse mit der entsprechenden Diskretisierung in dünne Schichten, in welchen $\varepsilon(x)$ keine Funktion von z ist. In Abb. B.1b ist eine Struktur gezeigt, die in x -Richtung und y -Richtung periodisch mit den jeweiligen Perioden Λ_x und Λ_y ist. Allgemein kann die gesamte Struktur in z -Richtung in drei Bereiche unterteilt werden.

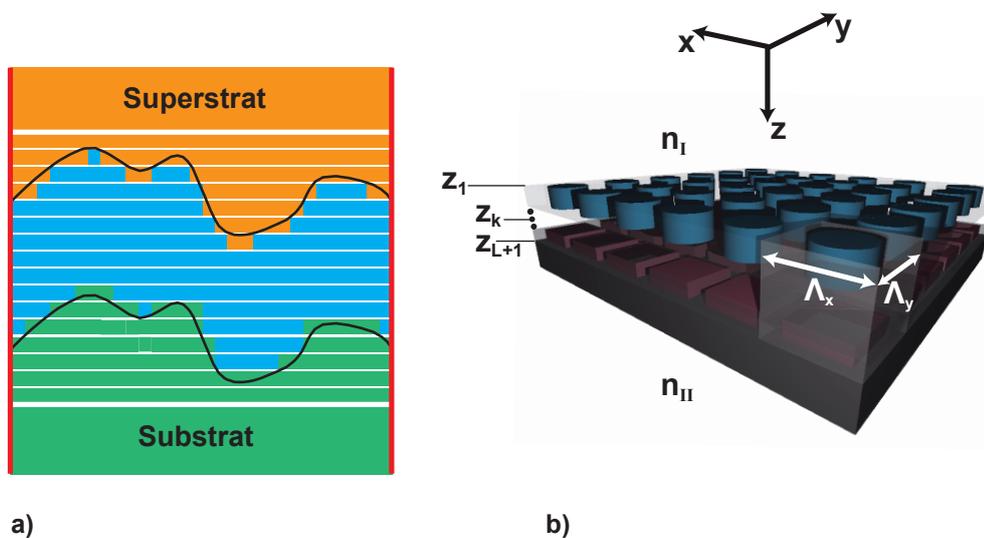


Abbildung B.1: Berechnung der absorbierten Leistung in einem gewünschten Bereich (blaue Fläche). a) Die Struktur wird in z -Richtung in dünne Schichten zerlegt. b) Vereinfachte Darstellung eines Gitters mit schräg einfallender Beleuchtung.

Das Superstrat befindet sich bei z -Koordinaten $z < z_1$ mit Brechungsindex n_I , aus dem das Licht auf die Struktur einfällt. L ist die Anzahl Schichten, in die die Struktur unterteilt wird, sodass $L + 1$ virtuelle Grenzflächen entstehen. Das Substrat liegt bei z -Koordinaten $z > z_{L+1}$, mit Brechungsindex n_{II} , in welchem sich das transmittierte Licht ausbreitet. Dazwischen, bei $z_1 < z < z_{L+1}$, liegt eine mitunter komplizierte Gitterstruktur. Sowohl im Superstrat als auch im Substrat herrscht ein homogenes $\varepsilon(\omega)$,

welches im Superstrat zusätzlich reell und positiv sein soll. In diesen halbunendlichen Räumen können die Felder als Rayleighentwicklung dargestellt werden

$$\mathbf{E}_R(x, y, z) = \sum_{m,n} \mathbf{R}_{mn} e^{i(\alpha_m x + \beta_n y + \gamma_{mn}^R (z - z_1))}, \quad z < z_1 \quad (\text{B.1a})$$

$$\mathbf{E}_T(x, y, z) = \sum_{m,n} \mathbf{T}_{mn} e^{i(\alpha_m x + \beta_n y + \gamma_{mn}^T (z - z^{L+1}))}, \quad z > z^{L+1}. \quad (\text{B.1b})$$

Hierbei sind \mathbf{R}_{mn} und \mathbf{T}_{mn} die komplexen Amplituden der reflektierten bzw. transmittierten Beugungsordnungen, γ_{mn} ist die zur Beugungsordnung gehörige Propagationskonstante und α_m und β_n bezeichnen die lateralen Wellenvektoren

$$\alpha_m = \alpha_0 + \frac{2\pi}{\Lambda_x} m \quad \text{und} \quad \beta_n = \beta_0 + \frac{2\pi}{\Lambda_y} n \quad (\text{B.2})$$

mit der x-Komponente α_0 und der y-Komponente β_0 des Wellenvektors der einfallenden Welle. Λ_x und Λ_y sind die Periodenlängen des Gitters in x-Richtung bzw. in y-Richtung. Bei der numerischen Betrachtung werden die unendlichen Summen in Gl. (B.1) üblicherweise bei einer hinreichend großen Anzahl von Fourierordnungen $m = N_x$ bzw. $n = N_y$ abgebrochen. Die Impulserhaltung verbindet α_m , β_n und γ_{mn} mittels

$$\text{Reflexion:} \quad (\gamma_{mn}^R)^2 = (n_I k_0)^2 - \alpha_m^2 - \beta_n^2 \quad (\text{B.3})$$

$$\text{Transmission:} \quad (\gamma_{mn}^T)^2 = (n_{II} k_0)^2 - \alpha_m^2 - \beta_n^2. \quad (\text{B.4})$$

Hierbei bezeichnet k_0 die Wellenzahl im Vakuum $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda}$, wobei λ die Wellenlänge darstellt.

Im Bereich des Gitters sind elektrisches und magnetisches Feld gekoppelt gemäß Gl. (2.19b) und Gl. (2.19d)

$$\nabla \times \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega\mu_0 \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) \quad (\text{B.5a})$$

$$\nabla \times \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) = -i\omega\varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega). \quad (\text{B.5b})$$

Die Gln. (B.5) gelten für lineare Medien. Die makroskopische Stromdichte $\hat{\mathbf{j}}_{\text{makr}}(\mathbf{r}, \omega)$ ist wiederum in die relative Permittivität integriert. Die z-Komponenten E_z und H_z von $\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)$ bzw. $\hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega)$ lauten

$$E_z = -\frac{1}{i\omega\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \quad (\text{B.6a})$$

$$H_z = \frac{1}{i\omega\mu(\mathbf{r}, \omega)} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right). \quad (\text{B.6b})$$

Einsetzen in die Gln. (B.6) ergibt

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} = i\omega\mu(\mathbf{r}, \omega)H_y - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{i\omega\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \right] \quad (\text{B.7a})$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial z} = -i\omega\mu(\mathbf{r}, \omega)H_x - \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{i\omega\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \right] \quad (\text{B.7b})$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} = -i\omega\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)E_y + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{i\omega\mu(\mathbf{r}, \omega)} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) \right] \quad (\text{B.7c})$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial z} = i\omega\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)E_x + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{i\omega\mu(\mathbf{r}, \omega)} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) \right]. \quad (\text{B.7d})$$

Diese Darstellung wurde der einheitlichen Erscheinung wegen gewählt. Wie erwähnt, gilt jedoch $\mu(\mathbf{r}, \omega) = \mu_0$. Gemäß dem Floquet-Bloch Theorem ist das Feld in einer zweifach periodischen Struktur eine pseudoperiodische Funktion

$$E_x(x, y, z) = \sum_{m,n} E_{xmn} e^{i(\alpha_m x + \beta_n y + \gamma_{mn} z)}. \quad (\text{B.8})$$

Die Ausdrücke für E_y , H_x und H_y lauten ganz analog. Die Permittivitätsverteilung und deren Inverses werden ebenfalls als Fourierreihe geschrieben mit den Fourierordnungen p bzw. q

$$\varepsilon(x, y) = \varepsilon_0 \sum_{p,q} \varepsilon_{pq} \exp \left[2\pi i \left(\frac{px}{\Lambda_x} + \frac{qy}{\Lambda_y} \right) \right] \quad (\text{B.9a})$$

$$\frac{1}{\varepsilon(x, y)} = \frac{1}{\varepsilon_0} \sum_{p,q} \kappa_{pq} \exp \left[2\pi i \left(\frac{px}{\Lambda_x} + \frac{qy}{\Lambda_y} \right) \right]. \quad (\text{B.9b})$$

Die Fourierentwicklungen der Felder [Gl. (B.8)] und der Permittivität [Gl. (B.9)] werden schließlich in Gl. (B.7) eingesetzt

$$\omega\varepsilon_0\gamma E_{xmn} = k_0^2 H_{ymn} - \alpha_m \sum_{p,q} \kappa_{m-p, n-q} (\alpha_p H_{ypq} - \beta_q H_{xpq}) \quad (\text{B.10a})$$

$$\omega\varepsilon_0\gamma E_{ymn} = -k_0^2 H_{xmn} - \beta_n \sum_{p,q} \kappa_{m-p, n-q} (\alpha_p H_{ypq} - \beta_q H_{xpq}) \quad (\text{B.10b})$$

$$\omega\mu_0\gamma H_{xmn} = -k_0^2 \sum_{p,q} \varepsilon_{m-p, n-q} E_{ypq} + \alpha_m (\alpha_m E_{ymn} - \beta_n E_{xmn}) \quad (\text{B.10c})$$

$$\omega\mu_0\gamma H_{ymn} = k_0^2 \sum_{p,q} \varepsilon_{m-p, n-q} E_{xpq} + \beta_n (\alpha_m E_{ymn} - \beta_n E_{xmn}). \quad (\text{B.10d})$$

Die Gl. (B.10) stellen ein Eigenwertproblem dar. Um dieses zu lösen, werden die Felder in Spaltenvektoren angeordnet. Die Feldamplitudenmatrizen besitzen $N_x \cdot N_y$

Einträge. In Kolonnenform, verdeutlicht durch die Tilde, lautet das elektrische Feld dann

$$\tilde{\mathbf{E}} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{E}}_x \\ \tilde{\mathbf{E}}_y \end{pmatrix} \text{ mit } \tilde{E}_{xn} = \tilde{E}_{x,p+N_xq} = E_{xpq} \text{ und } \tilde{E}_{yn} = \tilde{E}_{y,p+N_xq} = E_{ypq}. \quad (\text{B.11})$$

Das magnetische Feld wird analog behandelt, erhält jedoch zusätzlich den Vorfaktor $\sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}}$. Damit wird das Eigenwertproblem der Gl. (B.10)

$$k_0\gamma\tilde{\mathbf{E}} = \mathbf{F}\tilde{\mathbf{H}} \quad (\text{B.12a})$$

$$k_0\gamma\tilde{\mathbf{H}} = \mathbf{G}\tilde{\mathbf{E}} \quad (\text{B.12b})$$

mit

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \tilde{\alpha}_n\tilde{\kappa}_{n-p}\tilde{\beta}_p & k_0^2\delta_{np} - \tilde{\alpha}_n\tilde{\kappa}_{n-p}\tilde{\alpha}_p \\ -k_0^2\delta_{np} + \tilde{\beta}_n\tilde{\kappa}_{n-p}\tilde{\beta}_p & -\tilde{\beta}_n\tilde{\kappa}_{n-p}\tilde{\alpha}_p \end{pmatrix} \quad (\text{B.13a})$$

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} -\tilde{\alpha}_n\tilde{\beta}_n\delta_{np} & -k_0^2\tilde{\varepsilon}_{n-p} + \tilde{\alpha}_n^2\delta_{np} \\ k_0^2\tilde{\varepsilon}_{n-p} - \tilde{\beta}_n^2\delta_{np} & \tilde{\alpha}_n\tilde{\beta}_n\delta_{np} \end{pmatrix} \quad (\text{B.13b})$$

zu

$$\mathbf{F}\mathbf{G}\tilde{\mathbf{E}} = k_0^2\gamma^2\tilde{\mathbf{E}}. \quad (\text{B.14})$$

Gl. (B.14) ergibt $l = 2N_xN_y$ Eigenmoden mit den zugehörigen Propagationskonstanten γ_l und den komplexen Feldamplituden E_{xmnt} und E_{ymnt} . Die transversalen Komponenten H_{xmnt} und H_{ymnt} des magnetischen Feldes lassen sich mit Gl. (B.12b) bestimmen. Das Feld in einer der dünnen, in der z-Richtung invarianten, Schicht ist

dann eine Superposition dieser Eigenmoden. Für die Schicht zwischen z_k und z_{k+1} beispielsweise lauten die Felder

$$E_x(x, y, z) = \sum_{l=1}^{2N_x N_y} [A_l e^{i\gamma_l(z-z_k)} + B_l e^{-i\gamma_l(z-z_{k+1})}] \cdot \sum_{m,n} E_{xmnt} e^{i(\alpha_m x + \beta_n y)} \quad (\text{B.15a})$$

$$E_y(x, y, z) = \sum_{l=1}^{2N_x N_y} [A_l e^{i\gamma_l(z-z_k)} + B_l e^{-i\gamma_l(z-z_{k+1})}] \cdot \sum_{m,n} E_{ymnt} e^{i(\alpha_m x + \beta_n y)} \quad (\text{B.15b})$$

$$H_x(x, y, z) = k_0 \sum_{l=1}^{2N_x N_y} [A_l e^{i\gamma_l(z-z_k)} - B_l e^{-i\gamma_l(z-z_{k+1})}] \cdot \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} \sum_{m,n} H_{xmnt} e^{i(\alpha_m x + \beta_n y)} \quad (\text{B.15c})$$

$$H_y(x, y, z) = k_0 \sum_{l=1}^{2N_x N_y} [A_l e^{i\gamma_l(z-z_k)} - B_l e^{-i\gamma_l(z-z_{k+1})}] \cdot \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} \sum_{m,n} H_{ymnt} e^{i(\alpha_m x + \beta_n y)}. \quad (\text{B.15d})$$

Die Indizes m und n laufen über die Beugungsordnungen N_x bzw. N_y . An den Grenzflächen bei den z_k müssen die Tangentialkomponenten der elektrischen und magnetischen Felder stetig übergehen. Zusammen mit der Maxwellgleichung (2.19a) lassen sich sowohl die unbekanntenen Koeffizienten A_l und B_l als auch die komplexen Amplituden \mathbf{R}_{mn} und \mathbf{T}_{mn} der Beugungsordnungen in Reflexion bzw. Transmission bestimmen.

B.2 Funktional der Helmholtzgleichung

Gesucht sei ein stationärer Punkt des Funktionals $F(\bar{y})$ mit vorgegebenen Randbedingungen. Das Variationsproblem dazu lautet

$$\begin{cases} \delta F(\bar{y}) &= 0 \\ \bar{y}|_{x=0} &= p. \end{cases} \quad (\text{B.16})$$

Die Lösung dieses Variationsproblems soll der Lösung der Helmholtzgleichung entsprechen. Nun muss also das zur Helmholtzgleichung zugehörige Funktional $F(\bar{y})$ bestimmt werden. Dieses Funktional ist durch folgenden Ausdruck gegeben [Jin, 2002]

$$F(\bar{y}) = \frac{1}{2} \int_0^L \left[a \left(\frac{d\bar{y}}{dx} \right)^2 + b\bar{y}^2 \right] dx - \int_0^L f\bar{y} dx + \left[\frac{c}{2}\bar{y}^2 - q\bar{y} \right]_{x=L}. \quad (\text{B.17})$$

Um zu beweisen, dass das eben formulierte Variationsproblem tatsächlich äquivalent ist zum Randwertproblem (2.48), wird die Variation von $F(\bar{y})$ nach \bar{y} durchgeführt:

$$\delta F(\bar{y}) = \int_0^L \left[a \left(\frac{d\bar{y}}{dx} \right) \left(\frac{d\delta\bar{y}}{dx} \right) + b\bar{y}\delta\bar{y} \right] dx - \int_0^L f\delta\bar{y}dx + [(c\bar{y} - q)\delta\bar{y}]_{x=L}. \quad (\text{B.18})$$

Vorausgesetzt, a ist stetig im gesamten Bereich, kann der erste Term auf der rechten Seite von Gl. (B.18) partiell integriert werden:

$$\delta F(\bar{y}) = \int_0^L \left[-\frac{d}{dx} \left(a \frac{d\bar{y}}{dx} \right) + b\bar{y} \right] \delta\bar{y}dx + \left[a \frac{d\bar{y}}{dx} \delta\bar{y} \right]_{x=0}^{x=L} - \int_0^L f\delta\bar{y}dx + [(c\bar{y} - q)\delta\bar{y}]_{x=L}. \quad (\text{B.19})$$

Die geforderte Stetigkeit von a ist keine notwendige Bedingung. Es lässt sich zeigen, dass die partielle Integration für Teilstücke um Unstetigkeitsstellen ausgeführt werden kann. Da \bar{y} bei $x = 0$ konstant ist, verschwindet $\delta\bar{y}|_{x=0}$, und es folgt

$$\delta F(\bar{y}) = \int_0^L \left[-\frac{d}{dx} \left(a \frac{d\bar{y}}{dx} \right) + b\bar{y} \right] \delta\bar{y}dx + \left[\left(a \frac{d\bar{y}}{dx} + c\bar{y} - q \right) \delta\bar{y} \right]_{x=L} - \int_0^L f\delta\bar{y}dx. \quad (\text{B.20})$$

Stationäres Verhalten von F erfordert $\delta F(\bar{y}) = 0$, d. h.

$$\int_0^L \left[-\frac{d}{dx} \left(a \frac{d\bar{y}}{dx} \right) + b\bar{y} - f \right] \delta\bar{y}dx + \left[\left(a \frac{d\bar{y}}{dx} + c\bar{y} - q \right) \delta\bar{y} \right]_{x=L} = 0. \quad (\text{B.21})$$

Soll Gl. (B.21) für beliebige $\delta\bar{y}$ erfüllt sein, müssen sowohl der Integral- als auch der Randwertterm separat verschwinden, d. h.

$$-\frac{d}{dx} \left(a \frac{d\bar{y}}{dx} \right) + b\bar{y} - f = 0 \quad (\text{B.22a})$$

$$a \frac{d\bar{y}}{dx} + c\bar{y} - q = 0. \quad (\text{B.22b})$$

Ein Vergleich zeigt, dass dies gerade dem Randwertproblem (2.48) entspricht.

B.3 Transformation der Maxwellgleichungen

Der nachfolgende Beweis folgt im Wesentlichen der Beweisführung von S. G. Johnson [Johnson, 2007]. Ausgangspunkt ist Ampères Gesetz (2.13d)

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) + \bar{\epsilon}(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t). \quad (\text{B.23})$$

Eine differenzierbare Transformation überführt \mathbf{r} in \mathbf{r}' . Die zugehörige Jacobimatrix ist definiert durch

$$\mathcal{J}_{ab} = \frac{\partial x'_a}{\partial x_b}. \quad (\text{B.24})$$

Im Weiteren Verlauf wird die Indexschreibweise angewandt. Überdies wird die Einsteinsche Summenkonvention verwendet, wobei über gleiche Indizes summiert wird. Dann lautet Gl. (B.23)

$$\frac{\partial}{\partial x_a} H_b \epsilon_{abc} = \epsilon_{cd}(\mathbf{r}) \frac{\partial E_d(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + j_c(\mathbf{r}, t). \quad (\text{B.25})$$

ϵ_{abc} bezeichnet hier wie üblich den Levi-Civita Tensor. Mit Gl. (B.24) lassen sich die partiellen Ableitungen verbinden gemäß

$$\frac{\partial}{\partial x_a} = \frac{\partial x'_b}{\partial x_a} \frac{\partial}{\partial x'_b} = \mathcal{J}_{ba} \frac{\partial}{\partial x'_b}. \quad (\text{B.26})$$

Die Felder transformieren gemäß

$$E_a(\mathbf{r}, t) = \mathcal{J}_{ba} E'_b(\mathbf{r}', t) \quad (\text{B.27a})$$

$$H_a(\mathbf{r}, t) = \mathcal{J}_{ba} H'_b(\mathbf{r}', t). \quad (\text{B.27b})$$

Damit lautet Gl. (B.25)

$$\mathcal{J}_{ia} \frac{\partial}{\partial x'_i} (\mathcal{J}_{jb} H'_j(\mathbf{r}', t)) \epsilon_{abc} = \epsilon_{cd}(\mathbf{r}) \mathcal{J}_{ld} \frac{\partial E'_l(\mathbf{r}', t)}{\partial t} + j_c(\mathbf{r}, t). \quad (\text{B.28})$$

Da $\frac{\partial}{\partial x_a} \mathcal{J}_{jb} = \frac{\partial}{\partial x_b} \mathcal{J}_{ja}$ ist, gilt $\frac{\partial}{\partial x_a} \mathcal{J}_{jb} \epsilon_{abc} = 0$ und damit ist $\frac{\partial}{\partial x_a} \mathcal{J}_{jb} = 0$. Multiplikation mit \mathcal{J}_{kc} auf beiden Seiten führt zu

$$\mathcal{J}_{kc} \mathcal{J}_{jb} \mathcal{J}_{ia} \frac{\partial}{\partial x'_i} H'_j(\mathbf{r}', t) \epsilon_{abc} = \mathcal{J}_{kc} \epsilon_{cd}(\mathbf{r}) \mathcal{J}_{ld} \frac{\partial E'_l(\mathbf{r}', t)}{\partial t} + \mathcal{J}_{kc} j_c(\mathbf{r}, t). \quad (\text{B.29})$$

Per Definition gilt $\mathcal{J}_{ia} \mathcal{J}_{jb} \mathcal{J}_{kc} \epsilon_{abc} = \epsilon_{ijk} \det \mathcal{J}$. Damit folgt

$$\frac{\partial}{\partial x'_i} H'_j(\mathbf{r}', t) \epsilon_{ijk} = \frac{1}{\det \mathcal{J}} \mathcal{J}_{kc} \epsilon_{cd}(\mathbf{r}) \mathcal{J}_{ld} \frac{\partial E'_l(\mathbf{r}', t)}{\partial t} + \frac{\mathcal{J}_{kc} j_c(\mathbf{r}, t)}{\det \mathcal{J}}. \quad (\text{B.30})$$

In der Vektorschreibweise wird daraus

$$\nabla' \times \mathbf{H}'(\mathbf{r}', t) = \frac{\mathcal{J} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t)}{\det \mathcal{J}} + \frac{\mathcal{J} \bar{\epsilon}(\mathbf{r}) \mathcal{J}^T}{\det \mathcal{J}} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}'(\mathbf{r}', t). \quad (\text{B.31})$$

Setzt man

$$\bar{\bar{\boldsymbol{\epsilon}}}(\mathbf{r}') = \frac{\mathcal{J}\bar{\bar{\boldsymbol{\epsilon}}}(\mathbf{r})\mathcal{J}^T}{\det \mathcal{J}} \quad (\text{B.32a})$$

$$\mathbf{j}'(\mathbf{r}', t) = \frac{\mathcal{J}\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)}{\det \mathcal{J}}, \quad (\text{B.32b})$$

folgt

$$\nabla' \times \mathbf{H}'(\mathbf{r}', t) = \bar{\bar{\boldsymbol{\epsilon}}}(\mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}'(\mathbf{r}', t) + \mathbf{j}'(\mathbf{r}', t). \quad (\text{B.33})$$

Das Vorgehen für das elektrische Feld $\mathbf{E}'(\mathbf{r}', t)$ ist ganz analog.

B.4 Quasikonforme Abbildung

Ziel der quasikonformen Abbildung ist die Minimierung der Anisotropie. Es soll im Folgenden ein zweidimensionaler Fall in TE-Polarisation betrachtet werden [Ergin, 2012]. Das elektrische Feld zeigt entlang der invarianten z -Richtung. Ausgangspunkt für die quasikonforme Abbildung sind die transformierte relative Permittivität der Gl. (B.32a) und analog dazu die transformierte relative Permeabilität mit einer ursprünglichen relativen Permittivität $\bar{\bar{\boldsymbol{\epsilon}}}(\mathbf{r})$ und einer ursprünglichen relativen Permeabilität von eins

$$\bar{\bar{\boldsymbol{\epsilon}}}(\mathbf{r}') = \frac{\mathcal{J}\bar{\bar{\boldsymbol{\epsilon}}}(\mathbf{r})\mathcal{J}^T}{\det \mathcal{J}} = \frac{\bar{\bar{\boldsymbol{\epsilon}}}(\mathbf{r})}{\det \mathcal{J}} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 x}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 x}{\partial y'^2} & \frac{\partial x \partial y}{\partial x'^2} + \frac{\partial x \partial y}{\partial y'^2} & 0 \\ \frac{\partial x \partial y}{\partial x'^2} + \frac{\partial x \partial y}{\partial y'^2} & \frac{\partial^2 y}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 y}{\partial y'^2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.34a})$$

$$\bar{\bar{\boldsymbol{\mu}}}(\mathbf{r}') = \frac{\mathcal{J}\mathcal{J}^T}{\det \mathcal{J}} = \frac{1}{\det \mathcal{J}} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 x}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 x}{\partial y'^2} & \frac{\partial x \partial y}{\partial x'^2} + \frac{\partial x \partial y}{\partial y'^2} & 0 \\ \frac{\partial x \partial y}{\partial x'^2} + \frac{\partial x \partial y}{\partial y'^2} & \frac{\partial^2 y}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 y}{\partial y'^2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.34b})$$

Gleichung (B.34a) lässt sich mit Gl. (B.34b) schreiben als $\bar{\bar{\boldsymbol{\epsilon}}}(\mathbf{r}') = \bar{\bar{\boldsymbol{\mu}}}(\mathbf{r}')\bar{\bar{\boldsymbol{\epsilon}}}(\mathbf{r})$. Gesucht seien die Hauptwerte der Materialparameter, da diese invariant unter Koordinatentransformationen sind. Die Eigenwerte des Permittivitätstensors sind gerade diese Hauptwerte. Aufgrund der gewählten Polarisation bleiben $\varepsilon'_z(\mathbf{r}')$, $\mu'_x(\mathbf{r}')$ und $\mu'_y(\mathbf{r}')$. Es folgt direkt

$$\varepsilon'_z(\mathbf{r}') = \frac{\varepsilon_{zz}(\mathbf{r})}{\det \mathcal{J}}. \quad (\text{B.35})$$

Außerdem sind die magnetischen Hauptwerte verbunden über

$$\mu'_x(\mathbf{r}')\mu'_y(\mathbf{r}') = 1. \quad (\text{B.36})$$

Die Brechungsindizes entlang der Hauptachsen in der xy-Ebene lauten

$$n'_x(\mathbf{r}') = \sqrt{\mu'_y(\mathbf{r}')\varepsilon'_z(\mathbf{r}')} \quad (\text{B.37a})$$

$$n'_y(\mathbf{r}') = \sqrt{\mu'_x(\mathbf{r}')\varepsilon'_z(\mathbf{r}')}. \quad (\text{B.37b})$$

Als Maß für die Anisotropie wird die Größe α eingeführt

$$\alpha(\mathbf{r}') = \max\left(\frac{n'_x(\mathbf{r}')}{n'_y(\mathbf{r}')}, \frac{n'_y(\mathbf{r}')}{n'_x(\mathbf{r}')}\right) = \max(\mu'_y(\mathbf{r}'), \mu'_x(\mathbf{r}')). \quad (\text{B.38})$$

Gemäß Gl. (B.38) führt eine minimale Anisotropie zugleich zu einer verschwindenden magnetischen Antwort mit $\bar{\boldsymbol{\mu}}'(\mathbf{r}') = \mathbb{1}$. Quasikonforme Abbildungen sind demnach theoretisch gleich in zweifacher Hinsicht vorteilhaft. Sie führen zu einer isotropen, dielektrischen Permittivität und zu einer relativen Permeabilität von eins. Um die Anisotropie zu minimieren, muss $\alpha(\mathbf{r})$ gegen eins streben. Mit Gl. (B.38) wird der zu minimierende Term

$$\alpha(\mathbf{r}') + \frac{1}{\alpha(\mathbf{r}')} = \mu'_x(\mathbf{r}') + \frac{1}{\mu'_x(\mathbf{r}')} = \mu'_y(\mathbf{r}') + \frac{1}{\mu'_y(\mathbf{r}')}. \quad (\text{B.39})$$

Einsetzen der magnetischen Hauptwerte führt schließlich zu

$$\alpha(\mathbf{r}') + \frac{1}{\alpha(\mathbf{r}')} = \frac{\text{tr}(\mathcal{J}^T \mathcal{J})}{\det \mathcal{J}}. \quad (\text{B.40})$$

Gleichung (B.40) existiert für alle transformierten Einheitszellen in Abb. 6.3. Integration über alle Einheitszellen führt zum sogenannten modifizierten Liaofunktional gegeben durch [Thompson et al., 1998]

$$F = \int_{A'} \frac{\text{tr}(\mathcal{J}^T \mathcal{J})}{\det \mathcal{J}} d\mathbf{r}'. \quad (\text{B.41})$$

Integriert wird über die gesamte Fläche A' der transformierten Region. Die quasikonforme Abbildung ergibt sich durch Minimierung des modifizierten Liaofunktionals F .