

GEFÖRDERT VOM



**Bundesministerium
für Bildung
und Forschung**

Abschlussbericht des Teilvorhabens
„Photonische Nanostrukturen als richtungsselektive Filter“
im Verbundprojekt
„Nanovolt – Optische Nanostrukturen für die Photovoltaik“

Zuwendungsempfänger:

Institut für Festkörpertheorie und –optik
Institut für Angewandte Physik
Friedrich-Schiller-Universität Jena

Förderkennzeichen:

03SF0322E

Vorhabensbezeichnung:

Photonische Nanostrukturen als richtungsselektive Filter

Laufzeit des Vorhabens:

01.10.2006 - 30.09.2010

Berichtszeitraum:

01.10.2006 - 30.09.2010

I	Kurzdarstellung	4
1	Aufgabenstellung	4
2	Vorraussetzungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde.....	4
3	Planung und Ablauf des Vorhabens.....	6
4	Wissenschaftlicher und technischer Stand, an dem angeknüpft wurde	7
5	Zusammenarbeit mit anderen Stellen	9
II	Eingehende Darstellung	11
1	Erzielte wissenschaftlich-technische Ergebnisse und Verwendung der Zuwendungen	11
1.1	Arbeitspaket A: Design und Modellierung.....	11
1.1.1	Design einer idealen Filterstruktur zur Effizienzsteigerung einer Solarzelle durch Beeinflussung des Akzeptanzwinkels.....	11
1.1.2	Optimierung von Filterstrukturen auf Basis eindimensionaler photonischer Kristalle.....	13
1.1.3	Design und Charakterisierung stochastischer Oberflächen für das Light- Trapping	17
1.1.4	Entwicklung approximativer numerischer Verfahren zur Simulation der Absorption in Solarzellen	24
1.2	Arbeitspaket B: Nanostrukturtechnologie.....	26
1.2.1	Herstellung deterministischer Light-Trapping Strukturen	26
1.2.2	Optimierung vorstrukturierten Substrate zur Beeinflussung des Wachstums von Kolloidkristallen	30
1.2.3	Skalierung der Strukturierungsverfahren auf große Flächen.....	32
1.3	Arbeitspaket C: Experimentelle Charakterisierung	34
2	Wichtige Positionen des Zahlenmäßigen Nachweises	37
3	Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit.....	38
4	Voraussichtlicher Nutzen und Verwertbarkeit der Ergebnisse	38
5	Ergebnisse Dritter	39
6	Veröffentlichungen der Ergebnisse	40
6.1.1	Bachelorarbeiten	40
6.1.2	Zeitschriften.....	40
6.1.3	Konferenzpublikationen.....	41
6.1.4	Eingeladene Konferenzpräsentationen.....	41
6.1.5	Konferenzbeiträge	42

Literaturverzeichnis.....	44
III Erfolgskontrollbericht.....	45
1 Beitrag des Ergebnisses zu den förderpolitischen Zielen	45
2 Wissenschaftlich technische Ergebnisse, Nebenergebnisse und gesammelte Erfahrungen.....	45
3 Fortschreibung des Verwertungsplans.....	46
4 Arbeiten, die zu keiner Lösung geführt haben.....	47
5 Präsentationsmöglichkeiten für mögliche Nutzer.....	47
6 Einhaltung der Ausgaben- und Zeitplanung	47

I Kurzdarstellung

1 Aufgabenstellung

Das Ziel des Verbundprojektes „Nanovolt“ war die **Verbesserung des Wirkungsgrades von Solarzellen** und die **Optimierung der Materialnutzung** durch den Einsatz nanostrukturierter optischer Materialien. Der Projekt-Verbund orientierte sich an drei konkreten Einzelaufgaben:

- (I) Entwicklung richtungsselektiver Filter für die Unterdrückung der Reemission und für die Verbesserung von Lichtfallen,
- (II) Effizienzsteigerung von Frequenz-Downkonversion solarer Photonen,
- (III) Verstärkung nichtlinearer Frequenz-Upkonversionseffekte durch metallische Nanopartikel.

Das Teilprojekt der Friedrich-Schiller-Universität Jena „Photonische Nanostrukturen als richtungsselektive Filter“ beschränkte sich auf die Einzelaufgabe (I) mit der Zielsetzung einer theoretische Beschreibung und einer experimentellen Verifikationen von richtungsselektiven Filtern und Lichtfallen.

Für die theoretische Beschreibung sollten leistungsfähige numerische Verfahren entwickelt werden, die es erlauben das Verhalten optischer Nanostrukturen für richtungsselektive Filter über den gesamten solaren Spektralbereich zu simulieren. Insbesondere sollten diese numerischen Verfahren an die Erfordernisse der Optimierung photovoltaischer Elemente angepasst werden, um komplexe Optimierungsaufgaben lösen zu können.

Im Weiteren sollten die entwickelten numerischen Methoden angewandt werden, um leistungsfähige Spektral- und Winkel-Filter zu entwerfen, deren technologische Realisierung mittels hochpräziser Nanostrukturverfahren demonstriert werden sollte. Infrage kommende Strukturierungsverfahren waren hierzu zu entwickeln oder anzupassen, um die vielfältigen Randbedingungen erfüllen zu können, welche für die Realisierung des komplexen optoelektronischen Systems „Solarzelle“ erforderlich sind.

Zur Verifikation der theoretischen Methoden und der technologischen Ansätze sollten optische Charakterisierungsverfahren eingesetzt werden, mittels derer die spektral aufgelöste richtungsselektive Transmissions-, Reflektions- und Streucharakteristik der hergestellten Elemente präzise vermessen werden kann.

2 Voraussetzungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde

Die beiden beteiligten Institute besaßen vor dem Projekt ausreichende Vorkenntnisse zu den im Projekt bearbeiteten Themen. Die in das Projekt eingebrachte Expertise der beiden Institute (IFTO und IAP) lässt sich dabei sehr gut diskriminieren zwischen einer theoretisch/numerischen (IFTO) auf der einen und einer experimentellen (IAP) auf der anderen Seite. Auf die Voraussetzungen in diesen beiden Gebieten soll im Folgenden kurz individuell eingegangen werden. Gemein ist aber beiden Partnern, dass sie mit sehr unspezifischen Fähigkeiten und Vorarbeiten zum Thema Photonenmanagement in Solarzellen begannen. Beide Partner besaßen allerdings Fähigkeiten, die man in Arbeiten zu diesem Thema unmittelbar einbringen konnte; notfalls mit geeigneten Adaptionen, die im ersten Teil des Projektes

durchgeführt wurden. Hier konnte insbesondere durch die Vernetzung im Verbundprojekt fehlende Expertise und mangelnde Kompetenz auf dem Gebiet der Solarzellen, insbesondere deren elektrischer Eigenschaften, die als Randbedingungen immer auch mit berücksichtigt werden müssen, behoben werden.

Der Partner IFTO hatte vor dem Verbundprojekt verschiedene Arbeiten zu theoretischen Betrachtungen der Lichtausbreitung in photonischen Kristallen; oder allgemeiner, in optisch periodischen Medien, durchgeführt. Diese waren aber hauptsächlich theoretischer Natur und verfolgten das Ziel, umfassendes Wissen über mögliche Phänomene zu erlangen und insbesondere zu untersuchen, in welchem Umfang sich Eigenschaften der Lichtausbreitung durch die Wahl einer geeigneten Geometrie der Struktur steuern lassen können. Wichtige Beispiele dieser Vorarbeiten sind:

- der Nachweis der verlustarmen, beugungsfreien Ausbreitung und Lenkung von Licht in photonischen Schichtkristallen sowie in 3D photonischen Kristallen,
- die Entwicklung der Modenbeschreibung für Defektarrays in nichtlinearen photonischen Kristallen,
- das Design und Herstellung photonischer Kristalleschichten mit exzellenten optischen Eigenschaften im sichtbaren Spektralbereich und
- die Steuerung der Dispersion und Gruppengeschwindigkeit von Defektwellenleitern in photonischen Kristallen für Pulsformexperimente.

Diese eher theoretisch orientierten Arbeiten wurden ergänzt durch die Entwicklung numerischer Methoden, welche die Verifizierung dieser oben genannten Phänomene ermöglichte. Dazu zählt vor allem die:

- Erweiterung der 3D-FDTD Methode zur Modellierung experimentell relevanter Messgrößen (Transmission, Dispersion) und der Größe des Rechenfensters, und damit einer realistischeren Simulation, durch Parallelisierung.

Diese theoretischen Voraussetzungen zum Verständnis und zur Steuerung der Lichtausbreitung durch eine geeignete optische Mikro- bzw. Nanostruktur und die Fähigkeit, diese auch numerisch zu verifizieren, konnten ideal verwendet werden, um das praxisnahe und vor allem auch hochgradig anwendungsrelevante Projektthema erfolgreich zu bearbeiten.

Einen vergleichbaren Ausgangspunkt besaß auch der experimentelle Partner des Projektes, das IAP. Dort wurden umfangreiche Arbeiten zur Herstellung von Mikro- und Nanostrukturen durchgeführt, die aber alle nicht explizit im Rahmen des Themas Photonmanagement in Solarzellen Anwendung gefunden haben. Beispiele dieser Vorarbeiten sind:

- Photonische Kristalle u.a. in einem Schichtsystem aus $\text{SiO}_2/\text{Nb}_2\text{O}_5/\text{SiO}_2$ mit einem niedrigen Brechzahlkontrast für den nahen Infrarotbereich,
- Photonische Kristalle mit signifikanten Perioden in der Größe von 200 nm mit dem Ziel, stark dispersive Effekte auch im sichtbaren Spektralbereich beobachten zu können und
- die Herstellung vielschichtiger diffraktiver Elemente

Weiterhin konnten die meisten der so hergestellten Strukturen bezüglich ihrer optischen Funktionalität mit geeigneten Messaufbauten charakterisiert werden. Dazu zählten vor allem auch spektroskopische Messplätze, die in ihrem Umfang allerdings noch nicht angepasst waren an die Voraussetzungen zur optischen Charakterisierung von Strukturen für das Photonmanagement.

3 Planung und Ablauf des Vorhabens

In vollständiger Übereinstimmung mit dem Projektantrag wurde in der Planung des Projektablaufs und in der anschließenden Durchführung darauf geachtet, dass das Problem der Verwendung eines photonischen Kristalls als richtungsselektiver Filter in einer Solarzelle mit ansteigender Komplexität behandelt wurde. Dabei lassen sich drei Phasen unterscheiden. Es ist zu betonen, dass die Aufgaben in diesen Phasen keine strikte zeitliche Trennung erfuhren, sondern eher, wo angebracht und möglich, parallel bearbeitet wurden

In einer ersten Phase wurden theoretisch noch relativ abstrakte Arbeiten über die prinzipielle Anforderung an den richtungsselektiven Filter und dessen Wirkung durchgeführt. Dabei wurde die Filterfunktion als ideal angenommen, so dass der Filter in einem bestimmten spektralen und angularen Bereich das Licht entweder vollständig transmittiert oder vollständig reflektiert. Insbesondere die Wahl der Grenzen zwischen Transmission und Reflektion als Funktion der Wellenlänge und als Funktion des Einfallswinkels, angepasst an die ganz speziell betrachtete Modellsolarzelle, und die vollständige Berücksichtigung der spektralen Zusammensetzung des Sonnenlichtes standen hier im Mittelpunkt. Auch wurde unterschieden zwischen dem Beitrag des direkten und dem von diffus gestreutem Sonnenlicht sowie der Intensität der Sonneneinstrahlung als Funktion eines gesamten Jahres. Diese vereinfachten Rechnungen unter Berücksichtigung möglichst vieler Randbedingungen sollten dazu dienen, den idealen Filter zu definieren, so dass in allen weiteren Betrachtungen losgelöst von diesen Randbedingungen gearbeitet werden konnte. Die Zielfunktion aller realen Filter die betrachtet wurden lässt sich dadurch reduzieren auf eine optimale Annäherung an diese ideale Filterfunktion.

In einer zweiten Phase wurden vereinfachte eindimensionale photonische Kristalle sowohl theoretisch/numerisch als auch experimentell untersucht, um die ideale Filterfunktion durch ein reales System abzubilden. Dies war ein sehr attraktiver Ansatz, da mit der relativ großen Anzahl an Freiheitsgraden eine sehr gute Möglichkeit bestand, die ideale Filterfunktion zu implementieren, so dass wesentliche Ideen des Projektes verwirklicht werden konnten. Gleichzeitig konnten in diesem System sehr gut eine ganze Reihe von Problemen und Fragestellungen gelöst und beantwortet werden, die sich als generische Eigenschaften nahezu aller photonischer Kristalle ergaben, unabhängig von ihrer Dimensionalität.

In einer dritten Phase wurden dreidimensionale photonische Kristalle sowohl experimentell als auch theoretisch bezüglich ihrer Verwendung als winkelselektiver Filter untersucht. Hier konnten zielgerichtet Erkenntnisse aus der zweiten Phase verwendet werden, um die prinzipielle Auslegung solcher Systeme und den sinnvollen Parameterbereich für deren geometrische Details von vornherein einzuschränken. Diese Arbeiten sind dann auch charakterisiert durch ein erhöhtes Maß an Vernetzung mit anderen Partnern im Verbundprojekt, da die gesteckten Projektziele nur durch Bündelung der Expertise erreicht werden konnten.

Parallel zu diesen Kernthemen wurde an verschiedenen weiteren Themen in Übereinstimmung mit dem Projektantrag gearbeitet. Diese konnten durch die intensive Kooperation mit einigen Partnern auch wesentlich weiter als ursprünglich vorgesehen entwickelt werden.

4 Wissenschaftlicher und technischer Stand, an dem angeknüpft wurde

Die Nutzung regenerativer Quellen zur langfristigen Abdeckung des Energiebedarfs ist eines der zentralen Elemente einer zukunftsorientierten Gesellschaft, zu deren Sicherstellung die verschiedensten Techniken und Technologien Anwendung finden werden. Dabei spielte die Photovoltaik zum Zeitpunkt der Antragstellung noch keine herausragende Rolle, da deren mögliches Potential der Umwandlung von Sonnenenergie in elektrische Energie im Ansatz noch nicht erschöpft war, was vor allem auch auf deren unzureichende Effizienz zurückzuführen war. Deren Steigerung war und ist das Hauptziel aktueller Forschungsanstrengungen, wobei bis zum Zeitpunkt der Antragstellung dieses Verbundprojektes eine Optimierung meistens in der reinen Verbesserung der Materialeigenschaften bestand. Das Thema des Photonmanagements bzw. der Entwicklung von Lichtfallen, wie es in diesem Projekt behandelt wurde, war schlecht entwickelt und erfuhr erst im Laufe der vergangenen Jahre umfangreiche Beachtung sowohl in der Industrie als auch im akademischen Umfeld.

Ausgangspunkt ist die Betrachtung des Wirkungsgrades einer Solarzelle aus einer einzelnen Absorberschicht. Der ist physikalisch limitiert und besitzt nach Shockley und Queisser einen maximalen Wert von 33 %. Dieser wird allerdings in realisierten Elementen nicht erreicht. Werte um die 15 % für Solarzellen aus polykristallinem Silizium und nur leicht höhere Werte für Zellen aus monokristallinem Silizium werden praktisch erzielt. Als Hauptursachen für die geringeren Wirkungsgrade können optische Verluste bzw. ungenügende Absorption des Lichtes, die Rekombination photogenerierter Ladungsträger und elektrische Widerstandsverluste identifiziert werden. Das Teilproblem der ungenügenden Absorption wurde in ersten Ansätzen durch den Entwurf und die Entwicklung von Tandem- und Trippelzellen, aufgebaut aus Halbleitern mit ideal angepasstem und stark wellenlängenselektivem Absorptionsverhalten, zu lösen versucht. In dem Zusammenhang war für uns die Verwendung von Dünnschichtsolarzellen aus mikrokristallinem und amorphem Silizium auf preiswerten Substraten relevant. Die Fragen zur Materialoptimierung in diesen Systemen können als separierbar von der Fragestellung betrachtet werden, wie der Wirkungsgrad einer Solarzelle durch den Einsatz hocheffektiver Lichtfallen gesteigert werden kann. Letztere Konzepte waren Gegenstand des vorgeschlagenen Verbundprojektes.

Der direkteste Ansatz besteht zunächst nicht in der Optimierung einer Lichtfalle, sondern in der Erhöhung der eingestrahlten Leistung durch Reduzierung von Abschattungseffekten auf der sonnenzugewandten Seite einer Solarzelle. Dieser Ansatz wird als Rückseitenzelle bezeichnet. In ihm vereinigen sich Konzepte, notwendige elektrische Kontaktflächen auf der Rückseite der Solarzelle zu integrieren bzw. Strukturen der Frontseite vertikal in dieser zu vergraben. So wird die Fläche der Solarzelle maximiert, in der Licht in die absorbierenden Schichten eindringen kann.

Ein zweiter Ansatz ist die Verwendung dielektrischer Schichten, welche die Reflexionsverluste des Lichtes beim Eintritt in die Solarzelle minimieren. Nachteilig ist, dass einzelne Schichten es nicht ermöglichen, die Reflexion spektral breitbandig zu unterdrücken. Ihre Geometrie

kann lediglich auf einen schmalen Spektralbereich um eine Arbeitswellenlänge optimiert werden. Für stark abweichende Wellenlängen treten unerwünschte Reflexionen auf, die es zu reduzieren gilt. Dies ist möglich durch den Einsatz von mehrlagigen Antireflexschichten. So lassen sich spektral breitbandige Filter implementieren; mit dem Nachteil stark erhöhter Kosten. Ein komplementärer Ansatz um den Weg des Lichtes innerhalb der Solarzelle zu erhöhen, ist die Verwendung eines stark reflektierenden Materials auf der Rückseite der Solarzelle. Dieser idealerweise „weiße Körper“ wird aus einem hochreflektierendem Metall wie Silber oder Aluminium hergestellt, wobei Aluminium auf Grund der geringeren Kosten bevorzugt wird. Durch diese Maßnahme wird der Weg des Lichtes in der Solarzelle um den Faktor 2 erhöht. Dies ist jedoch wegen des spektral variierenden Absorptionsvermögens der aktiven Materialien, insbesondere für langwelliges Licht, ungenügend.

Um den Weg des Lichtes zusätzlich zu erhöhen, kann zunächst eine raue Frontoberfläche verwendet werden, welche durch chemische Ätzprozesse in polykristallinem Silizium erzeugt wird. Die Erhöhung des Wirkungsgrades durch solche stochastischen Oberflächen basiert auf zwei alternativen physikalischen Effekten in Abhängigkeit von der mittleren Periode der rauen Oberfläche. Ist diese sehr viel kleiner als die Wellenlänge, wird das Licht die Details der Struktur nicht auflösen können und stattdessen optische Eigenschaften eines homogenen Mediums mit einem tiefenabhängigen effektiven Brechungsindex erfahren. Dieser variiert kontinuierlich zwischen dem für Luft und dem des Substratmediums. Für ein solches Schichtsystem mit einem Gradientenindex ist die Reflexion über einen ausgedehnten Spektralbereich effektiv unterdrückt. Ist die mittlere Periode der rauen Oberfläche sehr viel größer als die Wellenlänge, wirkt die Oberfläche wie ein Diffuser, der Licht in alle Raumrichtungen abstrahlt. Ideal ist sie eine Lambertsche-Oberfläche, bei der jegliche Information über den Einfallswinkel des Lichtes zerstört wird. Unabhängig von diesem wird Licht in den gesamten Halbraum der Solarzelle gleichförmig abgestrahlt. Wenn die Korrelation zwischen Einfallswinkel und Ausfallswinkel zerstört wurde, wird die Intensität im Medium um einen Faktor n^2 erhöht, wobei n die Brechzahl des Solarzellenmediums ist. Licht, welches an der Rückseite der Solarzelle reflektiert wird, kann jetzt durch Totalreflexion an der Eintrittsfläche zu mehreren Durchläufen durch die Zelle gezwungen werden, was die Absorption signifikant erhöht. Nachteilig an stochastischen Oberflächen ist, dass durch die Erhöhung der Gesamtoberfläche die Ladungsträgerrekombination gesteigert wird, was zu unerwünschten Verlusten führen kann. Hier gilt es ein Optimum zu finden. Licht jenseits des Grenzwinkels der Totalreflexion kann darüber hinaus auch wieder durch Diffusion aus dem absorbierenden Medium hinausgebeugt werden. Solche stochastischen Oberflächen und die eben entworfene Argumentation waren zum Zeitpunkt des Projektstarts für waferbasierte Siliziumsolarzellen etabliert, die sehr dick sind. Vergleichbare Betrachtungen zu Dünnschichtsolarzellen sind erst durch die Antragsteller im Laufe des Verbundprojektes durchgeführt worden.

Eine weitere Möglichkeit, Kontrolle über die Ausbreitungsrichtung des Lichtes in der Struktur zu erhalten, besteht in der Verwendung von auf die Front- oder Rückseite integrierten Gitterstrukturen. Durch das Gitter wird Licht in wohl definierte Richtungen abgelenkt. Durch Optimierung der Designparameter kann Licht mit maximaler Effizienz in höhere Ordnung gebeugt werden, was zu einer Verlängerung des Lichtweges in der Solarzelle um einen Faktor $1/\cos(\varphi_n)$ führt, wobei φ_n der Beugungswinkel der n -ten Ordnung im Medium ist. Nachteilig ist, dass Gitter sehr wellenlängenselektiv arbeiten und ihre Funktionalität so nur für einen engen Spektralbereich optimiert werden kann. Weiterhin wird durch die Reziprozität des

Lichtweges der nicht absorbierte Anteil des Lichtes nach einmaligem Durchlaufen der Zelle optimal aus der Struktur ausgekoppelt. Dies limitiert die maximal erreichbare Absorption.

Erkenntnisse aus all diesen Systemen fanden Einfluss in die Betrachtungen zum Thema Photonmanagement mit richtungsselektiven Filtern, wie sie in diesem Verbundprojekt durchgeführt wurden.

5 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

In dem Projekt Nanovolt gab es eine umfangreiche Zusammenarbeiten mit allen beteiligten Partnern. Die Intensität der Zusammenarbeit variierte dabei leicht von Partner zu Partner und erstreckte sich sowohl auf konkrete experimentelle Kooperationen, Ergänzung von Expertise in Simulation und Experiment zur Lösung anstehender Probleme als auch auf einen regen Austausch und Diskurs der darauf abzielte, gemeinsam Ansätze zur Lösung auftretender Fragestellungen zu finden.

Mit Kollegen der MLU gab es eine umfangreiche Zusammenarbeit zur Herstellung, der experimentellen Charakterisierung und der numerischen Simulation photonischer Kristalle und deren Verwendung als richtungsselektive Filter für verschiedene Solarzellen. Der Fokus lag dabei auf Opalen. Es wurden, wie in der eingehenden Darstellung der durchgeführten Arbeiten weiter unten ausführlich beschrieben, zum Beispiel strukturierte Substrate mittels Methoden der Nanofabrikation hergestellt, die ein Wachstum von Opalen in einer bevorzugten kristallographischen Orientierung ermöglichten. Gemeinsame Untersuchungen bezüglich der Optimierung der Geometrie solcher Substrate und dem Finden der optimalen Methode, die Kolloidkristalle anschließend darauf wachsen zu lassen, wurden gemeinsam durchgeführt. Neben diesen experimentellen Arbeiten wurden auch mehrere gemeinsame Themen auf dem Gebiet der Simulation bearbeitet. So konnte eruiert werden, welches Potential die Integration eines Opals als Zwischenreflektor in einer Tandemsolarzelle besitzt und welchen Einfluss Defekte auf die Funktionalität des Opals haben. Diese numerischen Arbeiten ergänzten sich gegenseitig ausgezeichnet, da in der MLU Betrachtungen auf der Basis von Bandstrukturechnungen durchgeführt wurden und an der FSU Transmission und Reflexion endlicher Systeme als Funktion aller relevanter Parameter analysiert wurde. Erst die Kombination beider Ansätze erlaubte es, ein umfassendes Verständnis über diese Systeme zu erlangen.

Im Rahmen der Arbeiten zu Opalen bestand darüber hinaus intensiver Kontakt und eine enge Zusammenarbeit mit den Kollegen aus Mainz, die vor allem bei der Klärung aller technischen Details bezüglich der Herstellung und des experimentell zugänglichen Parameterbereiches von Opalen ideale Ansprechpartner waren. Durch intensive Einbeziehung in die Diskussion konnte sichergestellt werden, dass nicht längere Zeit in den Simulationen Eigenschaften von nicht experimentell zugänglichen Strukturen untersucht wurden, sondern immer sehr fokussiert und dicht am Experiment gearbeitet wurde. Weiterhin sind vielfältige Ideen entwickelt wurden, wie Opale mit einem Gradienten der Größe der Kugel als bessere winkelselektive Filter verwendet werden können. Diese konnten zu einem Großteil in Simulationen verifiziert werden.

Auch mit den Kollegen des FZJ konnten vielfältige Arbeiten zu verschiedenen Themen durchgeführt werden. Diese betrafen zu einem Großteil die Diskussion des Einflusses von Oberflächentexturen auf die optischen Eigenschaften einer Solarzelle und deren Verwendung als winkelselektive Filter. Die experimentelle Expertise des FZJ und deren Bereitstel-

lung von gemessenen Oberflächentexturen realer Solarzellen war hier Grundvoraussetzung, um in den eigenen Arbeiten die entwickelten Methoden auf praxisrelevante Strukturen anzuwenden und belastbare, sowie vor allem auch im Experiment verifizierbare Aussagen, zu gewinnen. Weiterhin konnten durch das FZJ tabellierte Eigenschaften aller relevanten Materialien zur Verfügung gestellt werden, die in sämtlichen Betrachtungen berücksichtigt wurden. Ohne diese unkomplizierte Bereitstellung dieser Kompetenz hätten viele Simulationen nicht in so kurzer Zeit erfolgreich durchgeführt werden können.

Mit den Kollegen aus Stuttgart (später Jülich) konnten verschiedene Arbeiten gemeinsam zum Thema winkelselektiver Filter und deren Optimierung für kristalline Silizium-Solarzellen und a-Si:H Dünnschicht-Solarzellen durchgeführt werden. Insbesondere war es durch die Zusammenarbeit mit Stuttgart überhaupt erst möglich, elektronische Eigenschaften von Solarzellen und zeitaufgelöste Einstrahlcharakteristika der Sonne in den Simulationen zu berücksichtigen. Die Betrachtung winkelselektiver Filter wurde später auch um die Untersuchung ihrer Verwendung in Fluoreszenzkonzentratoren erweitert. In diesen gemeinsamen Arbeiten konnte gezeigt werden, dass Rugate-Filter als mögliche Realisierung eines winkelselektiven Filters einfach herstellbar sind und doch einen Großteil der gestellten Anforderungen an einen idealen Filter erfüllen und diesen approximativ gut abbilden können. Daher wurden nach der Identifizierung der Parameter eines idealen Filters in Abhängigkeit der Dicke der Solarzelle Implementierungen mit realen Materialien für diesen Filter gesucht, um das Potential experimentell zu verifizieren. Optimierte schließlich Rugate-Filter bestehend aus co-deponierten Mischungen aus TiO_2 und SiO_2 .

In diese Diskussionen zum Light-Trapping wurden auch Kollegen aus Freiburg eingebunden, die sich in einer Zusammenarbeit zum Thema Ultra-Light-Trapping schließlich konkretisierte. Dieses Konzept verfolgt das Ziel, die Effizienz einer Solarzelle jenseits des allgemein als Obergrenze akzeptierten Yablonovitch-Limit zu steigern. Weiterhin wurden intensiv Fragen zur Simulation photonischer Mikro- und Nanostrukturen in Solarzellen diskutiert und konkret wurde gemeinsam an Problemen der Simulation von Defekten und deren Auswirkung auf die Funktionalität der Solarzellen gearbeitet.

Eine solche intensive Zusammenarbeit bezüglich der Simulation photonischer Nanostrukturen wurde auch mit den Kollegen aus Aachen gepflegt. Hier lag der Fokus allerdings mehr auf der Analyse der Eigenschaften metallischer Nanostrukturen und im speziellen ihrer Verwendung zur Verstärkung nichtlinearer Frequenz-Upconversioneffekte. Gerade die Simulation metallischer Nanostrukturen mit einer nichtsphärischen Geometrie stellt immer noch eine große Herausforderung dar, so dass Gewissheit über die Belastbarkeit der Ergebnisse numerischer Simulationen erst gewonnen werden kann, wenn diese untereinander verglichen werden. Dieser Vergleich wurde durchgeführt. Weiterhin konnten wir unsere Expertise bei der Analyse linearer Eigenschaften plasmonischer Strukturen zur Lösung von Problemen der nichtlinearen Frequenz-Upconversion einbringen.

Es ist zu betonen, dass alle diese Zusammenarbeiten ausgezeichnet dokumentiert sind und in vielen gemeinsamen Veröffentlichungen und Konferenzbeiträgen resultierten.

II Eingehende Darstellung

1 *Erzielte wissenschaftlich-technische Ergebnisse und Verwendung der Zuwendungen*

1.1 **Arbeitspaket A: Design und Modellierung**

1.1.1 **Design einer idealen Filterstruktur zur Effizienzsteigerung einer Solarzelle durch Beeinflussung des Akzeptanzwinkels**

Die Möglichkeit, die Effizienz einer Solarzelle durch Einschränkung des Akzeptanzwinkels für ankommende Strahlung zu steigern, beruht auf zwei wesentlichen Gegebenheiten. Eine klassische Solarzelle empfängt Licht unter direkter Beleuchtung (wie es z.B. für ein nachgeführtes System der Fall ist) nur aus einem sehr kleinen Winkelbereich, nämlich die gerichtete Strahlung der Sonne mit einem Öffnungswinkel von ca. $0,5^\circ$ sowie die circumsolar gestreute Strahlung mit einem Winkelbereich von wenigen Grad. Die Abstrahlung der Solarzelle aufgrund strahlender Rekombination erfolgt jedoch in den gesamten Halbraum. Shockley und Queisser [1] haben gezeigt, dass durch eine konzentrierte Beleuchtung der Solarzelle durch Vergrößerung des einfallenden Winkelspektrums (dies entspricht einer Fokussierung des einfallenden Lichtes) der Wirkungsgrad einer Solarzelle ansteigt. Der gleiche Effekt ergibt sich jedoch auch, wenn nicht das einfallende Winkelspektrum vergrößert sondern das abgestrahlte Winkelspektrum verkleinert wird. Dies kann durch einen winkelselektiven Filter erfolgen, der für einen gewissen Spektralbereich nur Licht unter kleinen Winkeln passieren lässt. Selbst für ein nicht nachgeführtes System lässt sich eine Wirkungsgradsteigerung erreichen, da die von der Solarzelle emittierte Strahlung eine wesentliche kleinere Bandbreite hat als die einfallende Sonnenstrahlung. Hieraus ergibt sich ein Optimierungsproblem bezüglich des Akzeptanzwinkels (*angle of acceptance*) und der energetischen Lage der Stoppbandkante (*stop wavelength*).

Weiterhin hat Yablonovitch [2] gezeigt, dass durch eine Lambertsche Streuung des Lichtes innerhalb der Solarzelle der Lichtweg für schwach absorbiertes Licht im infraroten Spektralbereich um einen Faktor von bis zu $4n^2$ erhöht werden kann, wobei n die Brechzahl des Solarzellenmaterials ist. Dieser Effekt beruht darauf, dass der größte Teil des gestreuten Lichtes durch Totalreflexion in der Solarzelle gehalten wird und nur ein kleiner Bruchteil in den Verlustkegel der Totalreflexion entweichen kann. Wird durch einen winkelselektiven Filter der Akzeptanzwinkel der Solarzelle von $-\pi \dots +\pi$ auf $-\theta_{th} \dots +\theta_{th}$ verkleinert, so steigt die Wegverlängerung auf einen Wert von $4n^2/\sin^2(\theta_{th})$. Hierdurch ergibt sich eine Effizienzsteigerung auch für eine nicht durch rein strahlende Rekombination limitierte Solarzelle aufgrund einer besseren Nutzung des infraroten Spektralbereiches. Die Nutzung dieser Effekte durch Verkleinerung des Akzeptanzwinkels einer Solarzelle wird im Weiteren unter dem Begriff *Ultra-Light-Trapping* zusammengefasst.

Durch den Projektpartner an der Universität Stuttgart wurde ein elektronisches Solarzellenmodell entwickelt, welches wesentliche Aspekte der Ladungsträgergeneration und -rekombination im Volumen (strahlend, nicht-strahlend sowie Auger-Rekombination) und an den Grenzflächen beschreibt. Anhand eines über ein Jahr hinweg aufgenommenen, zeitaufgelösten Sonnenspektrums für Stuttgart kann mit diesem Modell der jährliche Ertrag und der

jährliche mittlere Wirkungsgrad einer Solarzelle bestimmt werden. Nach Anpassung der Schnittstellen des in MatLab geschriebenen Programms an die Simulationstools und Arbeitsabläufe in Jena konnte dieses Modell dazu verwendet werden, zunächst eine ideale Filterfunktion zu bestimmen und darauf aufbauend im Anschluss reale Filtersysteme zu entwerfen und zu optimieren.

Für die Ermittlung des idealen Filters wurden, wie bereits beschrieben, zwei Parameter eingeführt, welche die winkel- und wellenlängenabhängige Transmission des Filters beschreibenden: Der Akzeptanzwinkel (*angle of acceptance*) und die Lage der Stopbandkante (*stop wavelength*). Die ideale Transmissionsfunktion ist mit diesen beiden Parametern dann dahingehend bestimmt, als dass ihre Transmission überall 100% ist, es sein denn, die Wellenlänge ist größer als *stop wavelength* und der Einfallswinkel ist ebenfalls größer als *angle of acceptance*. Dies ist notwendig, da diffus gestreutes Licht mit kurzen Wellenlängen, welches ebenfalls auf die Solarzelle in einer realen Umgebung fällt, zur Gesamteffizienz beiträgt. Der Filter muss daher in diesem Spektralbereich perfekt transparent sein. Oberhalb der *stop wavelength* hingegen darf der Filter lediglich für Licht bis zu einem bestimmten kritischen Winkel durchsichtig sein. Für Winkel größer als *angle of acceptance* soll der Filter hingegen perfekt reflektierend sein, um reemittiertes Licht in diesem Spektralbereich in der Solarzelle zu führen. Diese idealisierte Filterfunktion ist in Abb. 1 zu sehen.

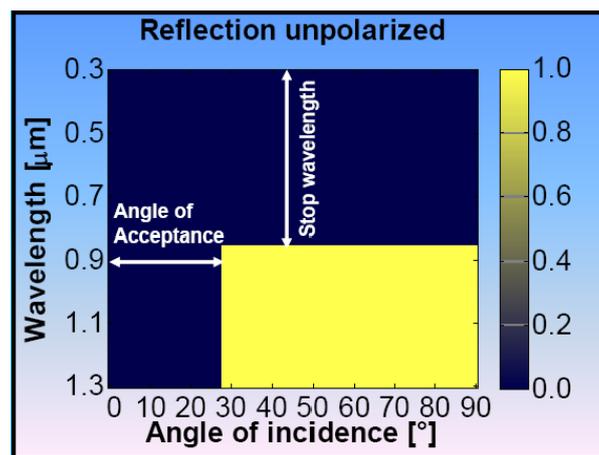


Abb. 1 Generalisierte Definition einer idealen Filterfunktion abgeleitet aus der gewünschten optischen Funktionalität. Der Filter ist durch zwei Parameter charakterisiert, dem Akzeptanzwinkel (*angle of acceptance*) und der Lage der Stopbandkante (*stop wavelength*).

In den Simulationen zur Solarzelleffizienz konnte nachgewiesen werden, dass ein optimaler Filter immer dann vorliegt, wenn der Akzeptanzwinkel 5° beträgt. Kleinere Werte würden das zircumsolare Licht zu stark beschneiden und die Effizienzsteigerung auf Grund von Ultra-Light-Trapping überkompensieren. Bei größeren Werten gibt es hingegen einen Gewinn durch Ausschneiden des diffusen Lichtes bei gleichzeitig besserer Nutzung des direkten und zircumsolaren Sonnenlichtes.

Ausgehend von diesem Wissen (5° für *angle of acceptance*) konnten Solarzellen verschiedener Dicke, welche mit Filtern variierender *stop wavelength* ausgestattet waren, bezüglich ihrer Effizienz bewertet werden, welche in Abb. 2 dargestellt ist. Es zeigt sich, dass es eine optimale Dicke für kristalline Siliziumzellen gibt, welche unterhalb der gegenwärtig typischerweise verwendeten Waferdicken liegt. Dickere Zellen erleiden Effizienzeinbußen auf

Grund zunehmender Verluste durch Rekombination. Dünnere Zellen sind hingegen durch ihre zu geringe Absorption im Roten und Infraroten limitiert. Die Effizienz einer Solarzelle mit einer optimalen Dicken von $56\ \mu\text{m}$ kann dann von $26,8\%$ (bei idealer Antireflexbeschichtung) durch Verwendung eines idealen Filters auf $29,1\%$ gesteigert werden.

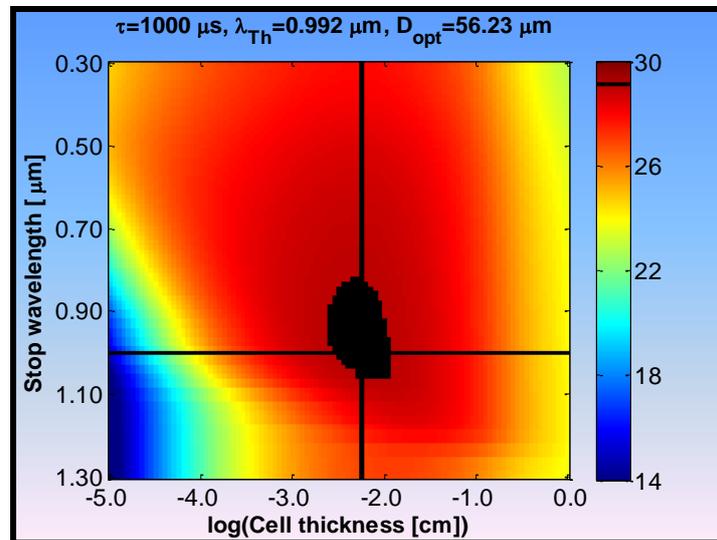


Abb. 2 Solarzelleneffizienz über deren Dicke und der *stop wavelength* des Filters. Der Filter ist charakterisiert durch zwei Parameter, dem Akzeptanzwinkel (auf 5° gesetzt) und der Stoppbandkante (*stop wavelength*).

1.1.2 Optimierung von Filterstrukturen auf Basis eindimensionaler photonischer Kristalle

In einem nächsten Schritt wurde ein geeignetes Design für einen eindimensionalen photonischen Kristall gesucht, welcher die idealisierte Reflexionsfunktion hinreichend gut annähert. Dieses Design wurde auf der Basis vier verschiedener Annahmen konzipiert, die es ermöglichen, einen analytischen Ausdruck für das Brechzahlprofil des Filters abzuleiten. Dieses wird dann durch einige wenige freie Parameter beschrieben. Die berücksichtigten Annahmen sind zum einen eine perfekte Transmission, was zu einem quintischen Brechzahlprofil führt, das einen graduellen Übergang der Brechzahl zwischen dem Umgebungsmedium und der Solarzelle sicherstellt. Zum Zweiten wird eine aufgeprägte periodische Indexmodulation angenommen, welche zu einem Reflexionsband in einem eng begrenzten Spektralbereich führt. Hier zeigte sich, dass solche Filter idealerweise durch eine Exponentialfunktion beschrieben werden können, welche als Argument eine sinusförmige Modulation besitzen. Dies erlaubt eine ausreichend starke Unterdrückung von Nebenmaxima in der Reflexion, welche der Filter nicht besitzen soll. Die weitere Reduzierung verbleibender Nebenmaxima erfolgt in einem dritten Schritt durch Multiplikation dieses Brechzahlprofils mit einer Fensterfunktion (Hartmann- oder Gaussfunktion). Der Einfluss dieser letzten Annahme wird offenbar, wenn das richtungsabhängige Reflexionsverhalten untersucht wird. Es zeigt sich dabei, dass sich der spektrale Bereich hoher Reflexion bei schrägem Einfall zu kürzeren Wellenlängen verschiebt und sich so ein Wellenlängenintervall ergibt, bei dem senkrecht einfallendes Licht transmittiert und schräg einfallendes Licht reflektiert wird. Das so entstandene Indexprofil eines Filters ist in Abb. 3 dargestellt.

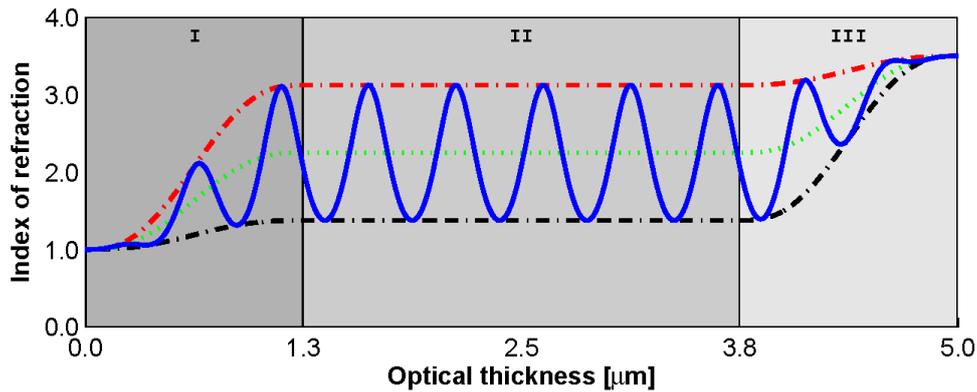


Abb. 3 Brechzahlverlauf eines spektral- und richtungsselektiven Filters, der ein Reflexionsverhalten zeigt, das in guter Näherung der idealisierten Reflexionsfunktion entspricht.

Im Weiteren wurden numerische Verfahren angewandt, welche die freien Parameter des Filterdesigns bezüglich der Maximierung der Effizienz der Solarzelle optimieren. Für die Evaluierung der Effizienz wurde eine komplette Simulation der Energiekonversionseffizienz durchgeführt, welche reale Beleuchtungsverhältnisse über ein Jahr zeitlich aufgelöst annimmt. An dieser Stelle gilt es zu betonen, dass mit diesem Ansatz erstmals vollständig mit einem realen Vorschlag für einen Filter nachgewiesen werden konnte, dass optische Strukturen die Effizienz einer Solarzelle signifikant über das theoretische Limit für eine nicht-konzentrierende Solarzelle anheben können. Damit ist ein wesentliches, im Projektantrag beschriebenes Ziel erreicht.

In einem nächsten Schritt wurde dieses Rugate-Filter-Design auf die Materialkombination $\text{SiO}_2\text{-TiO}_2$ angewendet. Diese beiden Materialien empfehlen sich, da sie weitestgehend mit variablen Mischungsverhältnissen gesputtert werden können und sich so ein kontinuierlicher Brechzahlverlauf realisieren lässt. Dazu wurden die Dispersion der Brechzahlen der beiden Materialien in die Berechnung der winkel- und wellenlängenaufgelösten Transmission einbezogen. Das bisherige analytische Design des Brechzahlverlaufs gilt bei Realisierung mit solchen realen Materialien dann nur für eine konkrete Designwellenlänge, während bei abweichenden Wellenlängen die Dispersion zu Modifikationen des Brechzahlverlaufs führt. Um dennoch optimale Ergebnisse zu erzielen, wurde in die bisherige Optimierung diese Designwellenlänge als zusätzlicher Designparameter aufgenommen.

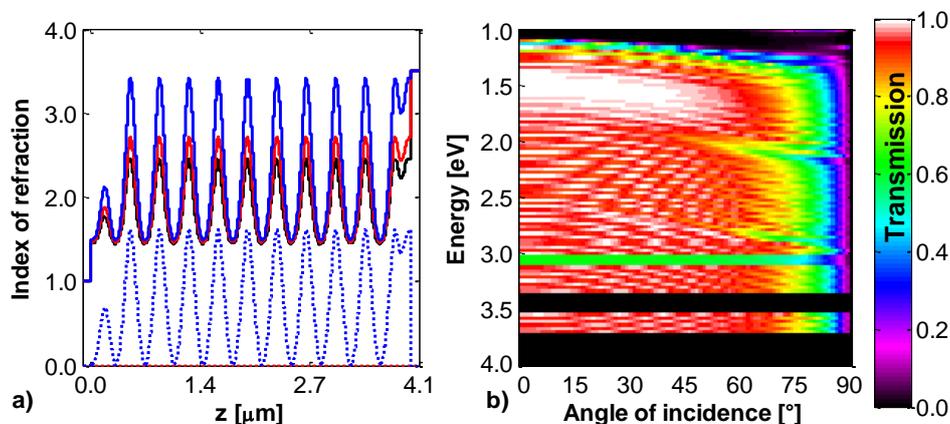


Abb. 4 a) Brechzahlverlauf eines optimierten, spektral- und richtungsselektiven Filters bestehend aus SiO_2 und TiO_2 . Auf Grund der Materialdispersion gibt es Unterschiede für verschiedene Wellenlängen (blau - 310 nm, rot - 500 nm, schwarz - 1280 nm). b) Ener-

gie- und winkelaufgelöste Transmission, welche im IR durch das Stopband und im UV durch die Absorption [gepunktete Linie in a)] im Filter gegen Null geht.

Die globale Suche nach Parametersätzen, welche höchste Jahreserträge versprechen, brachte zwei optimale Schichtdicken zu Tage, wobei für die Siliziumdicke $56 \mu\text{m}$ angesetzt wurde und ansonsten die gleichen Zellparameter wie für Abb. 2 benutzt wurden. Der dicke Filter ist ca. $4 \mu\text{m}$ dick (siehe Abb. 4). Diese Dicke erlaubt mehrere Perioden des Brechzahlverlaufs, so dass das Stopband sehr gut ausgeprägt ist und es zu einer erfolgreichen Unterdrückung der Reemission im langwelligen Spektralbereich kommt. Allerdings führt die große Dicke trotz des geringen Absorptionskoeffizienten von TiO_2 im kurzwelligen Spektralbereich gemäß dem Lambert-Beerschen-Gesetz zu einer spürbaren Absorption. Da der Filter auf der Frontseite der Solarzelle aufgebracht ist, verhindert eine so abgemilderte Transmission höhere Solarzelleneffizienzen. Mit einem solchen Filter wurde eine Solarzelleneffizienz von 25,78% prognostiziert. Ein dünner Filter mit einer Dicke von ca. 500 nm entspricht im Brechzahlverlauf eher einem rein quintischen Brechzahlprofil. Ein solches Schichtsystem weist eine breitbandig hohe Transmission auf. Des Weiteren profitiert die Solarzelle wegen der geringen Dicke von einer höheren Transmission im UV. Allerdings kann so kein wirksames Stopband ausgebildet werden, so dass die Reemission nur geringfügig unterdrückt wird. Der hierfür gefundene Filter erlaubt eine Effizienz von 25,76%; ein nur marginaler Unterschied zum dicken Filter.

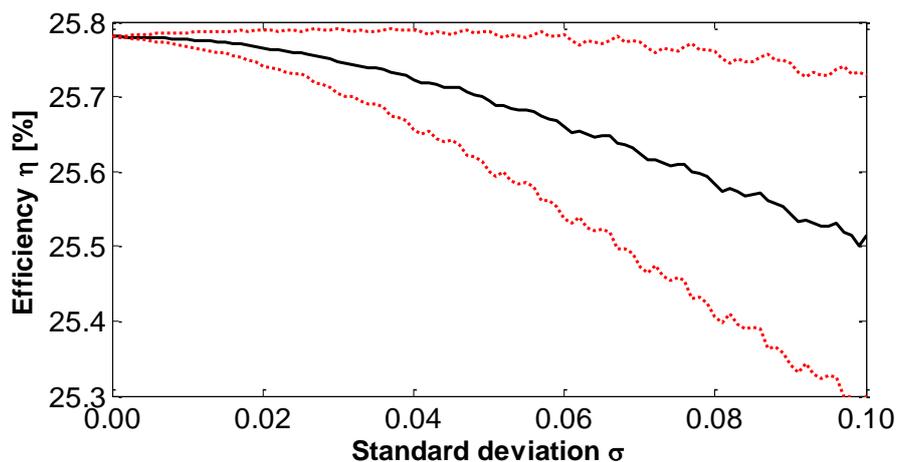


Abb. 5 Solarzelleneffizienz über Standardabweichung der Modifikation der einzelnen Schichtdicken.

Eine weitere wichtige Frage auf dem Weg zu herstellbaren Filtern besteht in der Toleranz des Filterdesigns bezüglich Fertigungsschwankungen. Für die Toleranzanalyse berechneten wir die Jahreseffizienzen für modifizierte Schichtsysteme. Um die Transmission zu berechnen wird das Schichtsystem in einzelne dünne Schichten mit konstantem Brechungsindex zerlegt. Ursprünglich hatte jede Schicht eine unmodifizierte optische Dicke (entspricht der Dicke multipliziert mit der Brechzahl) von 15 nm. In jedem Schritt dieser Analyse veränderten wir jede Schichtdicke proportional zu einer Zufallszahl, wobei die Zufallszahlen normalverteilt um 1.0 mit der Standardabweichung σ waren. Für die Erhebung statistischer Daten führten wir für jedes σ 100 Filtermodifikationen durch. Das arithmetische Mittel (schwarz) sowie der Standardabweichungskorridor (rot) sind in Abb. 5 gezeichnet. Wie leicht ersichtlich ist, weist der Filter eine hohe Toleranz gegenüber solchen Dickenfehlern auf, da die Filtereffizienz nur um 0,1 % fällt, falls alle Schichten einen durchschnittlichen Fehler von 5% aufweisen.

Ein weiteres Kriterium für herstellbare Filter ist die Anzahl der zu fertigen Schichten. Idealerweise haben die bisher vorgeschlagenen Filter einen kontinuierlichen Brechzahlverlauf, um unnötige Einkoppelverluste zu vermeiden. Um die Kontinuität zu gewährleisten, müssen die einzelnen Schichten optisch dünner als ein Zwanzigstel der kleinsten relevanten Wellenlänge, also dünner als 10-20 nm sein. Für eine Evaluierung dieses Kriteriums bezüglich der Gesamteffizienz berechneten wir die Jahreseffizienzen für Solarzellen, die mit dem dünnen Filter bestückt waren, für verschiedene Anzahlen von Schichten, mit denen das ursprünglich analytische Profil approximiert wurde. Das Ergebnis dieser Untersuchung ist in Abb. 6 dargestellt. Dabei sinkt die Effizienz nur um 0,5% wenn die optische Dicke einer Einzelschicht von 10 nm auf 100 nm ansteigt (die optische Gesamtdicke des dünnen Filters beträgt bei der Designwellenlänge 1000 nm).

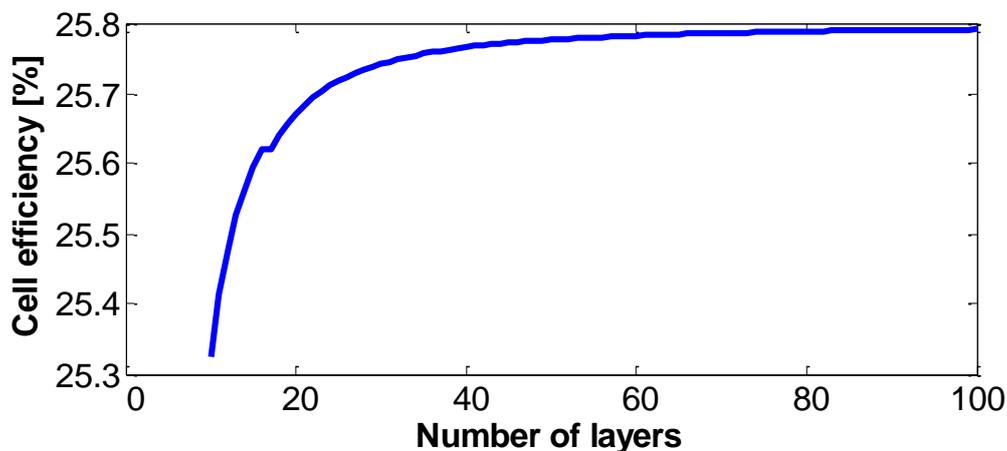


Abb. 6 Jahreseffizienzen für Solarzellen, die mit dem dünnen Filter bestückt waren, für verschiedene Anzahlen von Schichten, mit denen das ursprünglich analytische Profil approximiert wurde.

Ausgehend von den beiden Erkenntnissen, dass sich zum einen bei Verwendung realer (absorbierender) Materialien die Betrachtung dünner Filter lohnt und sich zum anderen solche dünnen Filter mit nur geringen Effizienzeinbußen durch wenige Schichten realisieren lassen, wurde die Optimierungsstrategie weiterentwickelt. Ursprünglich wurde der komplexe Brechzahlverlauf durch analytische Funktionen beschrieben, um nur wenige Parameter optimieren zu müssen. Wenn aber nur noch 10 Schichten optimiert werden müssen, lassen sich solche Schichtsysteme auch durch 20 Parameter beschreiben (10 Dicken und 10 Mischungsverhältnisse). Als Startwert für die so durchgeführte Optimierung diente das ursprüngliche analytische Profil, welches durch 10 Schichten approximiert wurde. Die anschließende Optimierung brachte eine Effizienz von 26,1%, also noch einmal eine Verbesserung um 0,4 % gegenüber dem ursprünglichen Profil, was sich dadurch begründen lässt, dass mehr Freiheitsgrade in das System gebracht wurden. Der entsprechende Brechzahlverlauf und die berechnete energie- und winkelaufgelöste Transmission sind in Abb. 7 dargestellt. Ein Vergleich zwischen dem optimierten 10-Schichtsystem und dem ursprünglichen Analytischen ergibt auch eine breitbandig erhöhte Transmission für senkrechten Einfall und ein erhöhte Reflexion im IR für schrägen Einfall. Eingangs wurde erwähnt, dass mit idealer Antireflexbeschichtung, also ohne jegliches Light-Trapping, eine Effizienz von 26,8% erreicht werden kann. Mit dem hier vorgeschlagenen Design werden jedoch nur 26,1 % erreicht. Begründen lässt sich dies durch die idealisierte verlustfreie Transmission. Reale Solarzellen mit einem Reflexions-

verlust von 5% würden dann auch nur noch eine Effizienz von 24,8% erreichen, also deutlich weniger als solche mit dem real herstellbaren Filter.

Damit ist der wichtige Meilenstein des Designs und der Simulation optimierter, herstellbarer, richtungsselektiver Filter innerhalb des Projektes erfolgreich bearbeitet worden.

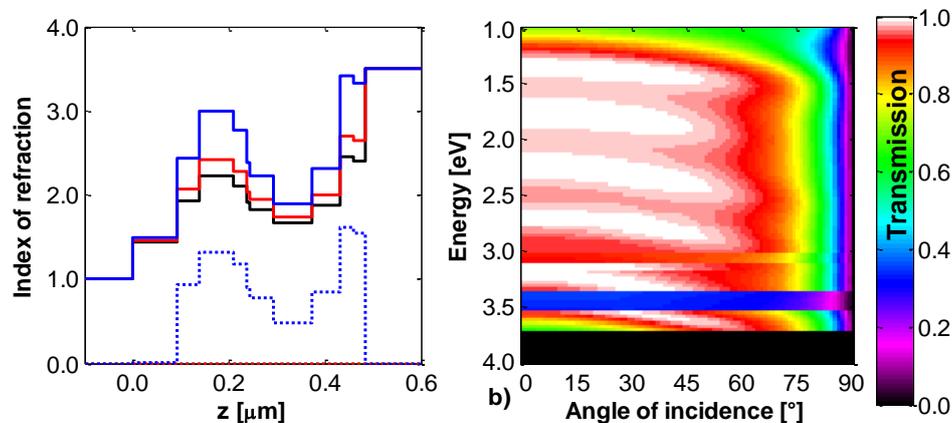


Abb. 7 a) Brechzahlverlauf eines optimierten, spektral- und richtungsselektiven Filters bestehend aus 10 Schichten mit variablen Mischungsverhältnissen zwischen SiO_2 und TiO_2 (blau - 310 nm, rot - 500 nm, schwarz - 1280 nm). b) Energie- und winkelaufgelöste Transmission.

1.1.3 Design und Charakterisierung stochastischer Oberflächen für das Light-Trapping

Eine signifikante Steigerung der Effizienz von Solarzellen ist durch die Verwendung statistisch rauher, streuender Oberfläche möglich. In Zusammenarbeit mit dem Projektpartner FZ Jülich wurden daher die Light-Trapping-Eigenschaften strukturierter ZnO-Grenzflächen, welche in amorphen Si-Solarzellen zur Anwendung kommen, untersucht. Während zu Projektbeginn der positive Effekt solcher rauhen ZnO-Grenzflächen bereits bekannt war [3], war ein genaues Verständnis der Wirkmechanismen, insbesondere des Einflusses spezifischer Charakteristika der Oberflächenstruktur, nicht gegeben.

In einem ersten Schritt wurden daher umfassende numerische Simulationen bezüglich der Eigenschaften texturierter Oberflächen und ihrer Wirkung auf die Absorptionseigenschaften in Dünnschicht-Solarzellen durchgeführt. Untersucht wurde ein Schichtsystem, wie es als Teil einer realen Dünnschicht-Solarzelle aus amorphem Silizium genutzt wird. Die Schichtfolge bestand aus einem Glassubstrat mit einer 1 μm dicken Schicht aus texturiertem ZnO und einer 250 nm dicken Schicht aus amorphem Silizium (a-Si:H). Ausgangspunkt für die Rechnungen war ein experimentell mit einem Atomkraftmikroskop vermessenes Oberflächenprofil einer hergestellten Struktur. Die Strukturen wurden vom Projektpartner in Jülich bereitgestellt. Zur Evaluation des Einflusses der Oberflächentextur auf die Absorption wurde das Oberflächenprofil in geeigneter (repräsentativer) Form modifiziert und die Änderung der sich daraus ergebenden Absorption des Lichtes in der a-Si:H-Schicht wurde bestimmt. Für die Berechnung der Absorption wurde zunächst die Lichtausbreitung rigoros mit Hilfe der *Finite-Difference Time-Domain (FDTD)-Methode* berechnet. Aus der elektrischen Feldverteilung im stationären Zustand lässt sich die Divergenz des Poyntingvektors, die ein Maß für die lokale Absorption ist, orts aufgelöst bestimmen. Integration über die gesamte a-Si:H-Schicht liefert so ein Maß für die durch die Dünnschicht-Solarzelle absorbierte Lichtleistung. Für die Berech-

nungen wurde eine Probenfläche von $7\ \mu\text{m} \times 7\ \mu\text{m}$ genommen. Der primäre Modifikationsparameter der Oberfläche war die Höhe der verbleibenden Krater, wenn die „Täler“ der rauen Oberfläche mit ZnO aufgefüllt werden.

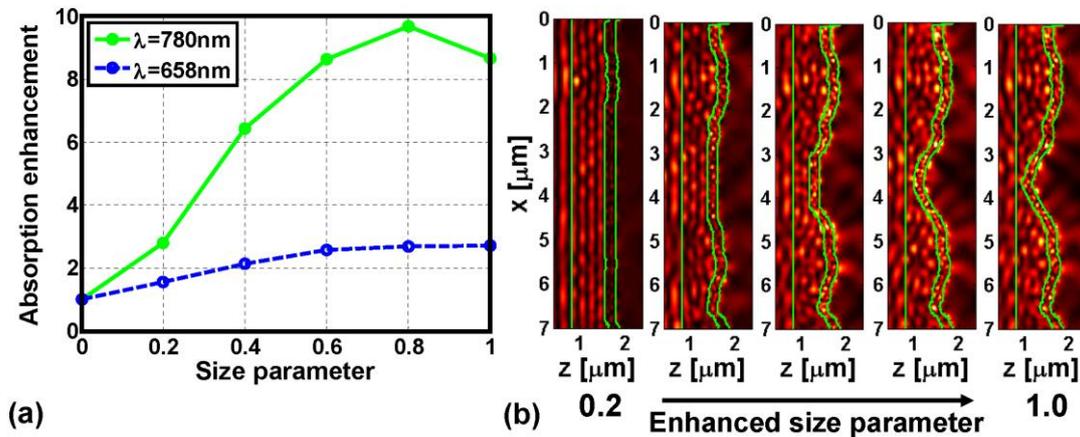


Abb. 8 Änderung der Absorption in einer a-Si:H Schicht, deponiert auf einer texturierten ZnO Oberfläche als Funktion der Höhe des Profils für zwei verschiedene Wellenlängen. Die Intensitäten ausgewählter Höhenprofile im selben Querschnitt sind im unteren Teil des Bildes dargestellt. Die Farbskala ist in allen Abbildungen identisch. Lichtausbreitung erfolgt in die positive z-Richtung. Die eingezeichneten Linien bezeichnen nacheinander die Grenzschichten zwischen dem Glassubstrat und der ZnO-Schicht, der ZnO-Schicht und der a-Si:H Schicht, und der a-Si:H Schicht und Luft.

In Abb. 8 ist die Absorption in der a-Si:H-Schicht als Funktion des Parameters *size* dargestellt. Wie Abb. 8(b) zu erkennen ist, bezeichnet dieser Parameter die Höhe des Oberflächenprofils. Besitzt dieser Parameter den Wert 1, wird das Oberflächenprofil nicht modifiziert. Besitzt dieser Parameter den Wert null, ist das Oberflächenprofil komplett aufgefüllt. Die Änderung der Absorption relativ zu einer unstrukturierten ZnO Schicht ($size = 0$) ist für zwei signifikante Wellenlängen, 780 nm und 658 nm, bestimmt. Diese beiden Wellenlängen sind für die gewünschten Light-Trapping-Effekte in den Solarzellen relevant. Rechnungen mit kürzeren Wellenlängen (488 nm) führten zu keiner signifikanten Erhöhung der Absorption, da bei diesen kurzen Wellenlängen a-Si:H bereits ausgezeichnet absorbiert und die texturierte Oberfläche somit keinen signifikanten Einfluss auf die Absorption hat. Querschnitte der optischen Intensität für eine Wellenlänge von 780 nm und das zugehörige Oberflächenprofil für ausgewählte Tiefen der texturierten Oberfläche sind in Abb. 8(b) dargestellt. Es ist zu erkennen, dass Licht mit größeren Wellenlänge bei einem geeigneten Oberflächenprofil bis zu 10-mal stärker absorbiert wird im Vergleich zur untexturierten ZnO-Schicht. Die Absorptionserhöhung ist für längere Wellenlängen größer als für kürzere. Bei langen Wellenlängen (780 nm) hat amorphes Silizium niedrige Absorptionskoeffizienten und damit die Schicht einen niedrigen Absorptionsgrad, d.h. ein Lichtfalleneffekt kann sich voll ausbilden. Bei kürzeren Wellenlängen ist der Absorptionskoeffizient höher und damit ist der Absorptionsgrad bereits so groß, dass der Lichtfalleneffekt nur noch einen geringen zusätzlichen Beitrag liefern kann. Die Absolutabsorption ist bei kurzen Wellenlängen dennoch größer.

Zur Identifizierung lokaler Texturelemente, die die Absorption begünstigen, ist in Abb. 9 diese lokale Absorption zusammen mit der Oberflächentextur dargestellt. Die Absorption wurde

dazu entlang der z-Richtung integriert. Die Wellenlänge im ausgewählten Beispiel ist 780 nm. Die Oberflächentextur mit der maximalen Absorptionserhöhung wurde ausgewählt.

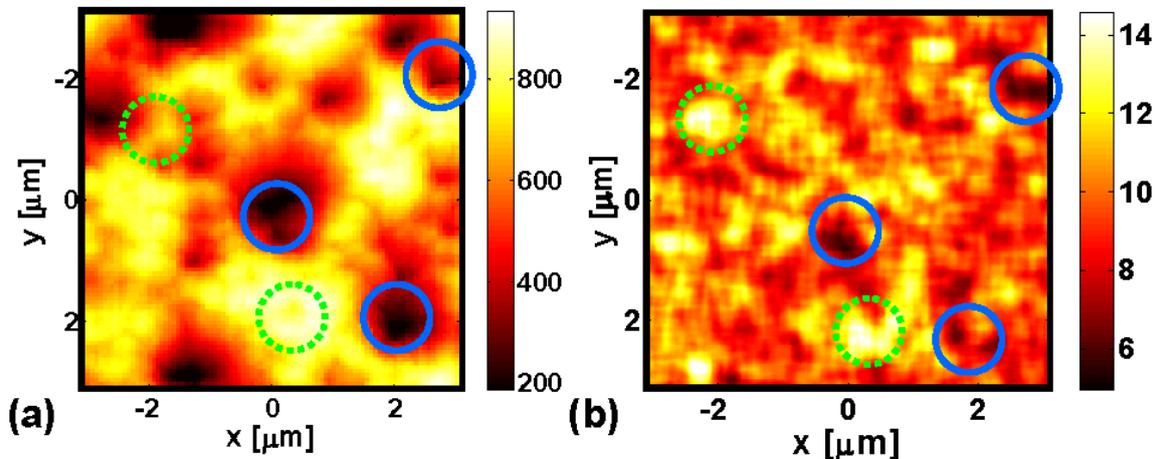


Abb. 9 (a) Höhenprofil der ausgewählten Oberflächenstruktur. (b) Lokale Absorptionserhöhung relativ zum untexturierten Substrat bei einer Wellenlänge von 780 nm. Das Absorptionsprofil wurde mit einem Tiefpassfilter mit einer Breite von 300 nm x 300 nm sanft geglättet.

Es ist zu erkennen, dass die Erhöhung der Absorption dort am geringsten ist, wo Krater im Oberflächenprofil existieren. Sie ist am stärksten in räumlichen Bereichen, wo Spitzen existieren. Das sind erste Hinweise darauf, dass in der Tat Lichtfokussierungseffekte und der *lightning rod effect* für eine Lichtkonzentration des Feldes in Bereichen mit starker positiver Oberflächenkrümmung verantwortlich sind.

Parallel zu den Untersuchungen an realen ZnO-Oberflächenstrukturen wurde versucht, geeignete Strategien zur Optimierung der Oberfläche texturierter Substrate zu finden, welche die Lichtabsorption in einer darunter liegenden a-Si:H-Schicht maximieren. Diese Untersuchungen wurden zunächst an eindimensional strukturierten Grenzflächen durchgeführt, um den numerischen Aufwand zur Verifikation des Einflusses bestimmter Optimierungsstrategien im Rahmen zu halten. Dennoch erlaubte dies die Abschätzung des der Methode innewohnenden Potentials. Für die Arbeiten wurde eine zweigeteilte Strategie gewählt. Optimierte wurde die Oberfläche unter der Annahme einer skalaren Beschreibung für die Lichtausbreitung. Dies erlaubt eine numerisch sehr effiziente Behandlung des Problems. Die eigentliche Absorption des Lichtes in der Struktur wurde anschließend rigoros unter Annahme einer realen Oberfläche berechnet.

Für die Analyse wurde eine 350 nm dicke a-Si:H-Schicht angenommen. Auf der sonnenzugewandten Seite wurde in der Simulation eine texturierte Schicht aus ZnO appliziert. Das Oberflächenprofil dieser Schicht wurde mittels eines Optimierungsalgorithmus bestimmt. Die vordergründige Anforderung war, dass das Winkelspektrum der Oberfläche bei einer bestimmten Designwellenlänge eine Kastenverteilung erzeugt. Die Breite dieses Kastens wird im Folgenden mit dem Parameter w bezeichnet. Die Absorption in der Solarzelle mit dem so gefundenen Oberflächenprofil wurde anschließend rigoros berechnet. Durch eine anschließende Gewichtung mit dem Sonnenspektrum konnte die Anzahl der absorbierten Photonen bestimmt werden. Die Absorptionserhöhung (Anzahl der absorbierten Photonen in der Solarzelle mit der texturierten Oberfläche normiert auf die Anzahl absorbierten Photonen in der

Zelle ohne diese Schicht) als Funktion des Parameters w ist in Abb. 10 dargestellt. Als Rückseitenreflektor wurde ein perfekter Leiter angenommen und das Beleuchtungsfeld ist unpolarisiert. Es ist zu erkennen, dass mit ansteigender Breite w die Absorption signifikant erhöht wird. Ursache ist eindeutig, dass das Licht in der Schicht einen längeren Weg zurücklegt und so die Absorptionswahrscheinlichkeit erhöht wird. Ein weiterer Anteil kommt vom Light-Trapping, da Licht sich auch unter Winkeln in dem System ausbreiten wird, die zur totalen Reflexion erforderlich sind. Da Licht, das in Vorwärtsrichtung gestreut wird, einen geringeren Beitrag zur Absorption leistet, war es folgerichtig, diese Anteile aus dem Winkelspektrum zu entfernen. Das so entstandene Winkelspektrum gleicht zwei Kastenfunktionen, als deren Abstand der Parameter d eingeführt wurde. Als Funktion dieses Parameters d konnte die Absorption weiter optimiert werden, wie in Abb. 10 zu erkennen ist.

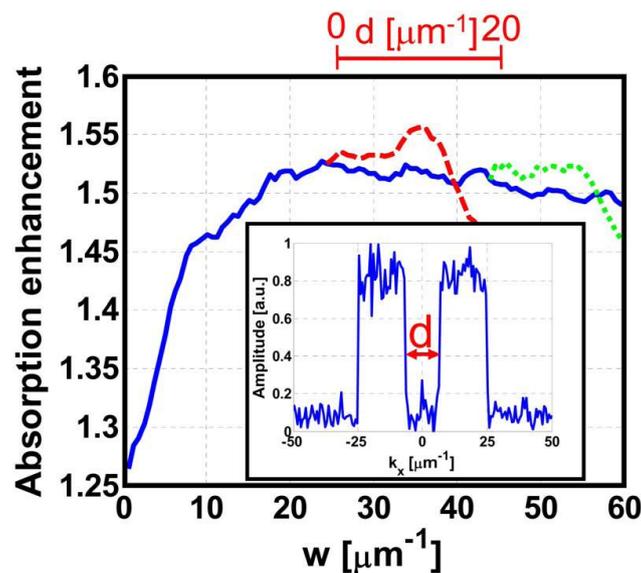


Abb. 10 Relative Absorptionserhöhung in einer a-Si:H-Schicht mit einer optischen Filterfunktion, deren winkelselektives Streuverhalten optimiert wurde. Die Absorptionserhöhung wurde berechnet als die Anzahl der absorbierten Photonen normiert auf die Anzahl der absorbierten Photonen ohne diesen optischen Filter. Das winkelaufgelöste Streuverhalten ist durch zwei Parameter beschrieben. w gibt die Breite des kastenförmigen Raumspektrums an, in das das Licht gestreut wird. d gibt die Breite einer zentralen Aussparung an. Die Erhöhung der Absorption ist zunächst berechnet als Funktion des Parameters w . Für ein festes w wurde dann d variiert. Es ist zu erkennen, dass die Anzahl der absorbierten Photonen in der Solarzelle um einen Faktor von 1,55 gesteigert werden kann, wenn ein geeigneter Filter verwendet wird.

Mit der Kenntnis dieser optimierten Streuverteilung wurden erneut in Zusammenarbeit mit dem FZ Jülich weitere reale Oberflächenstrukturen analysiert, um zu verifizieren ob sich die gewonnen Erkenntnisse auf die beobachtete Wirkung der Strukturen anwenden lassen.

Dazu wurden verschiedene Texturen mit einem Atomkraftmikroskop großflächig vermessen. Diese digitalisierten Oberflächen wurden in den anschließend von uns durchgeführten rigorosen Simulationen vollständig berücksichtigt. Dabei standen zwei verschiedene Arten der Simulation im Vordergrund. Zum einen wurden die richtungselektiven Streueigenschaften dieser Texturen untersucht, wenn sie zwei isotrope, homogene Halbräume trennen. Der eine Halbraum wurde dabei als ZnO angenommen, für den zweiten Halbraum wurde ein Medium mit einer Brechzahl zwischen $n = 1$ und $n = 4$ angenommen. Für eine $n = 1$ würde die be-

trachtete Grenzfläche der experimentell zugänglichen zwischen ZnO und Luft entsprechen, für $n = 4$ würde die Grenzfläche eher die interne Grenzfläche der Solarzelle zwischen dem Superstrat und der a-Si:H-Schicht abbilden. Wie sich zeigte, ist die Betrachtung dieser Grenzfläche essentiell, falls man ihre richtungsselektiven Streueigenschaften mit einer einhergehenden Absorptionserhöhung korrelieren möchte.

Die entsprechende Berechnung der Absorptionserhöhung stellte den zweiten Teil der durchgeführten Simulationen dar. Hierfür wurden im numerischen Experiment auf die Oberflächen-Texturen dünne a-Si:H-Schichten appliziert und anschließend die Absorption in diesen Schichten für verschiedene Wellenlängen numerisch bestimmt. Eine Normierung dieser Ergebnisse auf die Absorption einer planaren, ansonsten aber gleichartigen a-Si:H-Schicht, erlaubt die Berechnung der Absorptionserhöhung. Die betrachtete Solarzelle wurde im numerischen Experiment dabei so gewählt, dass sie die Topzelle einer Tandemzelle vollständig abbildet. Die Maximierung der Lichtabsorption in dieser Topzelle muss dabei als essentiell zur Steigerung der Gesamteffizienz erachtet werden.

Sämtliche Simulationen wurden wiederum mittels der FDTD-Methode durchgeführt. Für die Simulation der Streueigenschaften sowie der Absorptionserhöhung wurden die beiden Wellenlängen 633 nm und 720 nm ausgewählt. Diese beiden Wellenlängen zeichnen sich dadurch aus, dass sie am unteren bzw. oberen Ende des Spektralbereiches liegen, welcher für das Photonmanagement relevant ist.

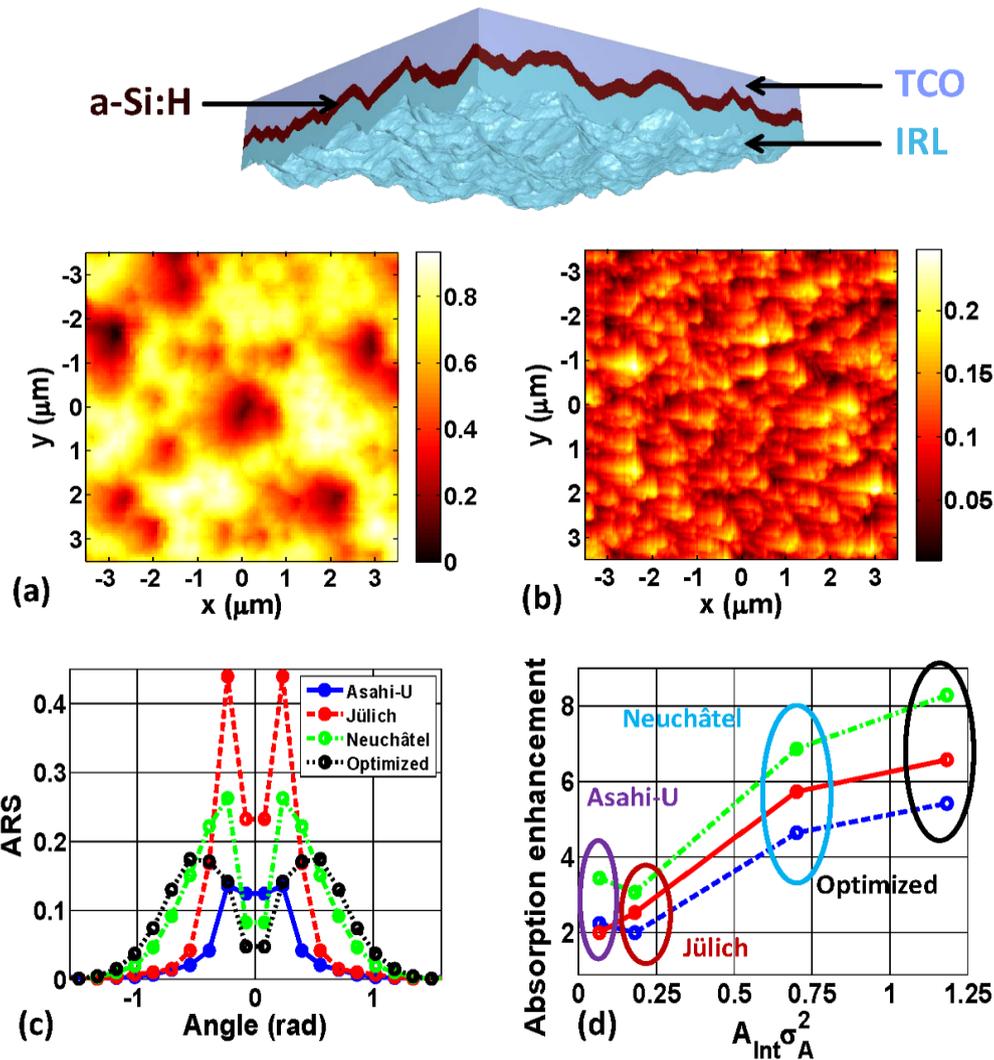


Abb. 11 Über der Abbildung ist der prinzipielle Aufbau der untersuchten Solarzelle zu sehen. Die Zelle besteht aus einem TCO (ZnO im speziellen Fall) in das die Oberflächenstruktur integriert ist. Auf dieser Textur wurde konform a-Si:H abgeschieden und die Zelle wird mit einem Dielektrikum abgeschlossen, welches die Eigenschaften des Zwischenreflektors hat. Für die Simulationen gemessene Oberflächenprofile von dem Substrat aus Jülich (a) und dem Asahi Substrat (b) sind ebenfalls zu sehen. (c) zeigt die Streuwinkelverteilung für die verschiedenen Substrate bei einer Wellenlänge von 633 nm unter der Annahme, dass die Textur ZnO und ein Medium mit $n = 4$ separiert. In (d) ist schließlich die Absorptionserhöhung durch die Texturen für drei verschiedene a-Si:H Schichtdicken zu sehen (grüne Punkt-Strichlinie 125 nm, blaue Strichlinie 250 nm, rote Linie 375 nm). Die Absorptionserhöhung ist bei 720 nm dargestellt.

Ausgewählte Oberflächentexturen die analysiert wurden sowie die Gesamtgeometrie der berücksichtigten Zelle sind Abb. 11a und Abb. 11b zu sehen. Ausgewählte Ergebnisse zur Berechnung der Streueigenschaften (evaluiert im Sinne der Winkelverteilung, in die das Licht gestreut wird) der verschiedenen berücksichtigten Texturen (Oberflächentexturen aus Jülich, Neuchâtel und von Asahi wurden analysiert), sind in Abb. 11c zu sehen. In diesem Beispiel sind die Streueigenschaften gegen ein Medium mit $n = 4$ gezeigt, wobei die Beleuchtungswellenlänge 633 nm betrug. Auch wenn es hier aus Platzgründen nicht dargestellt wurde, sei angemerkt, dass der Haze für das Substrat aus Jülich am höchsten ist. Nachteilig für dieses Substrat ist allerdings, dass das Licht nicht in einen großen Winkelbereich gestreut wird,

sondern in paraxialer Nähe verbleibt. Diese geringe Ablenkung hat nur eine geringe Absorptionserhöhung zur Folge, da so der optische Weg nur marginal von dem abweicht, welche das Licht in einer a-Si:H-Schicht ohne Textur erfahren würde. Das Substrat aus Neuchâtel hat demgegenüber eine wesentlich bessere Richtungsselektivität in ihrem Streuverhalten. Auch wenn nominell weniger gestreut wird (kleinerer *Haze*), wird das Licht doch in einen großen Winkelbereich gestreut. Das Substrat weist Strukturen mit einer hohen Ortsfrequenz und einer ausreichenden Höhe auf, welche dieses Streuverhalten begünstigen.

Diese bevorzugten Eigenschaften schlagen sich auch in der Absorptionserhöhung nieder, welche durch die verschiedenen Texturen verursacht werden. Die Ergebnisse sind für verschiedene a-Si:H-Schichtdicken in Abb. 11d zu sehen. Zur besseren Darstellung wurde entlang der x-Achse eine substratspezifische Kenngröße verwendet, in welche die Streueigenschaften der Oberfläche einfließen. Im speziellen ist dort das Produkt aus der integrierten ARS (ohne das spekulare Licht) und der Halbwertsbreite der die ARS für hohe Winkel gut approximierenden Gaussfunktion zu sehen. Die physikalische Motivation für dieses Kriterium besteht in der Annahme, dass sich eine gute Textur zum einen durch eine effiziente Streuung und zum anderen durch eine möglichst breite Streukeule auszeichnet. Offensichtlich gibt es eine sehr gute Korrelation zwischen der Absorptionserhöhung und dieser Gütefunktion. Dies belegt eindrucksvoll, dass es nicht in jedem Falle wichtig ist, viel zu streuen, sondern dass es vor allem essentiell ist, Licht in einen hohen Winkelbereich zu streuen. Diese Ergebnisse stehen in exzellentem Einklang mit den Erkenntnissen welche aus der bereits vorgestellten Optimierung einer künstlichen, eindimensional strukturierten, streuenden Oberfläche gewonnen wurden.

Die Simulationsergebnisse zeigen, dass die Streueigenschaften für gutes Light-Trapping am besten bei der Textur aus Neuchâtel repräsentiert sind, weshalb diese auch die höchste Absorptionserhöhung erlaubt. Die getroffenen Aussagen sind unabhängig von den untersuchten a-Si:H-Schichtdicke und konnte auch bei Simulationen mit anderen Wellenlängen bestätigt werden. Da die Strukturen nicht resonant sind, kann davon ausgegangen werden, dass diese Erkenntnisse allgemeingültig sind.

Mit den gewonnen Einsichten wurde anschließend eine künstliche Oberfläche dahingehend optimiert, dass für diese das oben eingeführte Gütekriterium maximal ist. Das beste Resultat dieser Optimierung ist ebenfalls bezüglich der Streueigenschaften in Abb. 11c und bezüglich der Absorptionseigenschaften in Abb. 11d aufgenommen worden. Es ist zu erkennen, dass die Streustärke dieser Oberfläche sogar noch geringer ist, als die der Textur aus Neuchâtel. Der Winkelbereich, in den gestreut wird, ist allerdings noch einmal etwas erhöht. Da letztere Größe quadratisch in die Gütefunktion eingeht, war zu erwarten, dass die Absorptionserhöhung sogar noch einmal gesteigert werden konnte. Genau dies wurde dann auch entsprechend verifiziert.

Neben der Konzentration auf die Eigenschaften der texturierten Oberfläche wurde weiterhin auch untersucht, welche Auswirkung die richtungsselektiven Streueigenschaften solcher Strukturen auf eine komplette Solarzelle haben. Hier stand insbesondere das Zusammenspiel mit einem dielektrischen Zwischenreflektor im Vordergrund. Die Zielsetzung hier ist die Optimierung des Zwischenreflektors mit Hinblick auf die Erhöhung der Absorption in der amorphen Topzelle. Die Ergebnisse sind in Abb. 12 zusammengefasst. Gezeigt ist die relative Veränderung der Absorption in der amorphen Topzelle mit Zwischenreflektor bezogen auf die Situation ohne Zwischenreflektor für drei verschiedene Szenarien. Gemeinsam ist den

Szenarien, dass eine Schichtstruktur angenommen wird, die mit einer texturierten ZnO-Schicht beginnt, auf der eine 250 nm dicke, amorphe Silizium-Schicht als Topzelle appliziert wird. Auf dieser a-Si:H-Schicht wird dann ein Zwischenreflektor mit variabler Dicke konform abgeschieden. Die drei Fälle unterschieden sich darin, dass in Abb. 12a nach dem Zwischenreflektor ein Luft-Halbraum, in Abb. 12b eine 40 nm dicke mikrokristalline Silizium Schicht gefolgt von einem Luft-Halbraum und in Abb. 12c ein mikrokristalliner Silizium-Halbraum angenommen wird.

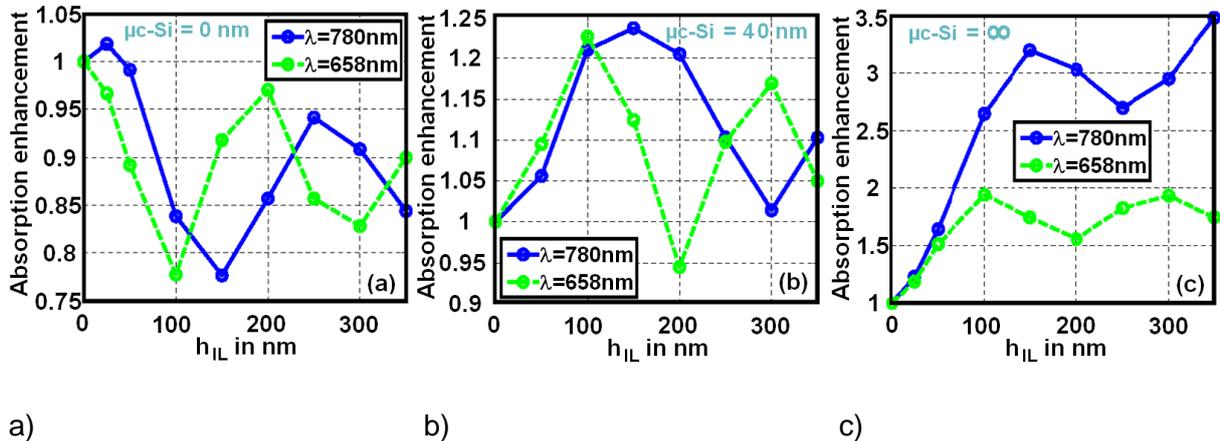


Abb. 12 Simulierte Absorptionsveränderung in der amorphen Topzelle durch den Einsatz eines Zwischenreflektors. Für jede simulierte Schichtstruktur wurde dieselbe gemessene Topographie einer texturierten ZnO-Schicht auf Glas angenommen. Auf der ZnO Schicht wurde eine 250 nm dicke a-Si:H-Schicht gefolgt von einem Zwischenreflektor angenommen. Die Dicke des Zwischenreflektors wurde im Bereich von 0 nm bis 350 nm variiert. Es wurden drei unterschiedliche optische Abschlüsse betrachtet. In (a) wurde Luft angenommen, in (b) wurde eine 40 nm dicke mikrokristalline Si-Schicht gefolgt von Luft angenommen, in (c) ein Halbraum aus mikrokristallinem Silizium.

Man erkennt deutlich die Fabry-Perot-Oszillationen in der Absorption. Diese zeigen im Vergleich zu glatten Grenzflächen eine größere Periode bezüglich der Schichtdicke. In Abb. 12a sieht man, dass der Zwischenreflektor zu einer Reduzierung der Absorption führt, da hier die Schicht als Anti-Reflex-Schicht wirkt. Erst durch den Abschluss mit mikrokristallinem Silizium führt die Implementierung einer solchen Schicht zu einer Absorptionserhöhung. Abb. 12c zeigt das für die Tandemzelle realistischste Szenario, während Abb. 12b eine Struktur beschreibt, die durch Nahfeldmikroskopie untersucht werden kann. In beiden Fällen sieht man eine Verstärkung der Absorption bei etwa denselben Schichtdicken, so dass die Struktur in Abb. 12b für experimentelle Studien herangezogen werden kann. Es lässt sich entnehmen, dass die Absorption im schwach absorbierenden Bereich ($\lambda = 780 \text{ nm}$) um den Faktor 3 erhöht werden kann.

1.1.4 Entwicklung approximativer numerischer Verfahren zur Simulation der Absorption in Solarzellen

Die detaillierte Untersuchung des Einflusses verschiedener zweidimensionaler Oberflächentexturen auf die Absorption innerhalb einer Solarzelle ist mit rigorosen numerischen Methoden durch massiven Einsatz von Rechenkapazität zwar lösbar, jedoch sind umfangreiche Studien und die Lösung von Optimierungsproblemen extrem zeitaufwendig. Aufgrund der Evaluation der Güte einer Solarzelle mittels integrierter Kriterien muss allerdings hinterfragt

werden, ob dieser Aufwand gerechtfertigt ist. Die Verwendung approximativer Methoden zur Reduktion des Aufwandes stellt eine attraktive Möglichkeit dar, diese integrierten Kriterien mit vernachlässigbarem Fehler vorherzusagen, auch wenn dann potentiell für einzelne Wellenlängen starke Abweichungen im Vergleich zum rigorosen Model beobachtet werden könnten.

Um insbesondere größere Raumgebiete behandeln zu können, wurden deshalb Strahlverfolgungsalgorithmen etabliert. In diesem Verfahren wird das Beleuchtungsfeld in ein Bündel von Strahlen zerlegt, welche an jeder Grenzfläche reflektiert bzw. transmittiert werden und darüber hinaus eine Änderung der Richtung erfahren. Die Wahrscheinlichkeit der Ablenkung in eine bestimmte Richtung an einer Grenzfläche wird mit Hilfe der skalaren Beugungstheorie gewonnen. Bei Durchgang der Strahlen durch die Solarzelle können diese absorbiert werden. Sukzessives Verfolgen des Weges der Strahlen, beschrieben als eine Abfolge von Ausbreitung und Reflexion/Transmission an Grenzflächen, erlaubt die Bestimmung der Gesamtabsorption. Diese lässt sich mit diesem Verfahren sehr schnell berechnen. Es ist zu beachten, dass die Berechnung unter der Annahme einer inkohärenten Beleuchtung (Abb. 13) erfolgt. Weitere Abweichungen zur rigorosen Beschreibung ergeben sich durch vollständige Vernachlässigung von Nahfeldeffekten. Simulationen an einfachen Strukturen zeigen, dass in der Tat integrierte Kriterien, wie die Anzahl der absorbierten Photonen, mit einer Genauigkeit von weniger als 5% Abweichung vom rigorosen Wert bestimmt werden können.

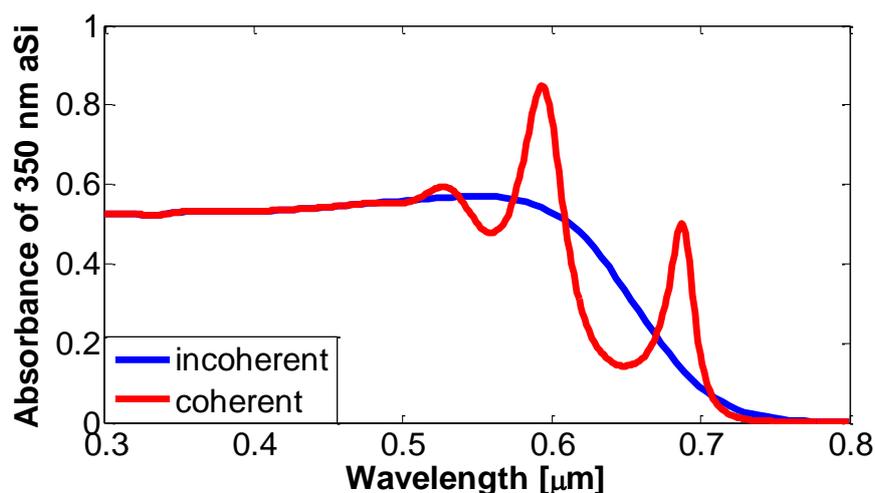


Abb. 13 Spektral aufgelöste Absorption in einer 350 nm dicken Schicht aus amorphem Silizium für kohärente (rigorose Rechnung) und inkohärente (Strahlverfolgung) Beleuchtung.

Eine zusätzliche Erweiterung des Ansatzes der reinen Strahlverfolgung auf ein wellenoptisches Modell erlaubt es zusätzlich, die für Dünnschicht-Solarzellen typischen Interferenzeffekte nahe der Absorptionskante hinreichend genau zu reproduzieren. In einem derart erweiterten numerischen Verfahren kann transparenten, streuenden Oberflächen ein approximatives Reflexions- und Streuverhalten zugeordnet werden. Das Streumuster wird ähnlich zur Dünnelemente-Methode berechnet, wobei auch noch die Fresnel-Formeln und die Effektivmedientheorie mit einbezogen werden. Da die mit dieser Methode extrahierbare Streumatrix allerdings nicht für zurücklaufende Wellen energieerhaltend ist, mussten einige Erweiterungen vorgenommen werden, um auch die am Rückseitenspiegel reflektierten Wellen behandeln zu können. Durch eine Unterteilung in kohärente und inkohärente Wellen kann die Energieerhaltung erzwungen werden und dem Wellencharakter des Lichtes entsprochen

werden. Die vorliegende Implementierung wurde zuerst für sinusförmige Oberflächen mit Perioden von weniger als einem Zehntel bis zum Zehnfachen der Wellenlänge getestet. In Transmission kommt es dabei nur dann zu spürbaren Abweichungen vom rigorosen Verhalten, wenn die Wellenlänge ungefähr der betrachteten Periode entspricht. Dies entspricht aber genau der Erwartung und bestätigt die Grenzen der Methode.

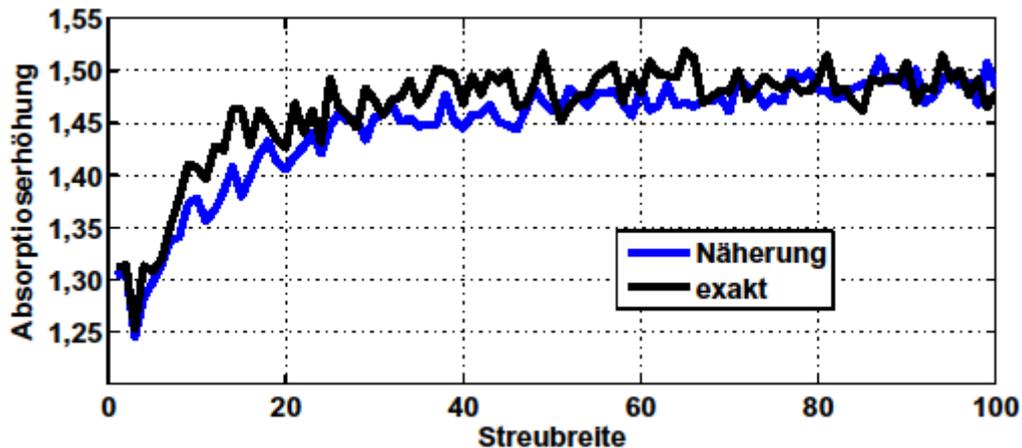


Abb. 14 Vergleich der exakten Berechnung der Absorptionserhöhung mit den Ergebnissen des approximativen Modells unter der Annahme, dass texturierte Oberflächen mit unterschiedlicher Streubreite in die Solarzelle integriert wurden.

Um die Güte des Modells zu bewerten, wurde es anschließend unter Annahme von referenziellen Dünnschichtsolarzellen getestet. Die betrachteten Zellen bestanden aus 350 nm planarem amorphem Silizium zwischen einer rauen ZnO Schicht und einem perfekten Rückseitenspiegel. Die Rauigkeit der Oberfläche wurde mit der Dünnen-Elemente-Methode analog zu Abb. 10 so optimiert, dass die Amplituden der gestreuten Wellenvektoren außerhalb der sogenannten Streubreite verschwinden und innerhalb dieser möglichst homogen verteilt sind. Es wurden Oberflächen für verschiedene Streubreiten optimiert und deren optischer Nutzen evaluiert. Dazu wurde die Erhöhung der Anzahl der absorbierten Photonen in dem Spektralbereich von 300 nm bis 800 nm berechnet. Diese Ergebnisse sind als Vergleich zwischen der approximativen Methode und einer exakten Methode in Abb. 14 dargestellt. Insgesamt wird über alle Streubreiten hinweg das Ergebnis der exakten rigorosen Lösung ausgezeichnet wiedergegeben. Zu kleineren Abweichungen kommt es bei mittleren Streubreiten, die sich durch Detailgrößen im Bereich der Wellenlänge auszeichnen.

1.2 Arbeitspaket B: Nanostrukturtechnologie

1.2.1 Herstellung deterministischer Light-Trapping Strukturen

Neben den beschriebenen eindimensionalen Photonischen Kristallen und stochastisch texturierten Oberflächen können darüber hinaus klassisch bi-periodische Elemente zur Steigerung der Absorption in Dünnschichtsolarzellen auf der Basis von Silizium verwendet werden, welche ein wohl definiertes spektrales und winkelselektives Streuverhalten besitzen. Der am weitesten verbreitete Ansatz zur Lösung des Problems ist die Anwendung von randomisierten, pyramidenförmigen Nanostrukturen auf der Zelloberseite. Diese können durch nass-chemische Ätzprozesse vornehmlich in kristallinem Silizium hergestellt werden. Bezüglich der experimentellen Optimierung der lateralen Strukturgrößen und Aspektverhältnisse dieser Pyramiden für eine Anwendung in mikrokristallinen Dünnschicht-Solarzellen ist jedoch die

Anwendung anderer Herstellungsverfahren notwendig, um Freiheiten in der Realisierung optimierter Geometrien zu ermöglichen. Von Kollegen aus dem FZ Jülich [4] wurde theoretisch nachgewiesen, wie periodische Anordnungen pyramidenförmiger Nanostrukturen zur Erhöhung der Absorption aufgrund eines optimierten Light-Trapping-Effektes in einer Dünnschicht-Solarzelle beitragen können. Der Einfluss der Anzahl der diskreten Stufen, aus denen die Pyramide besteht, stand dabei im Vordergrund. Hierzu wurden von uns in Jena pyramidenförmige Oberflächenprofile experimentell realisiert, welche nach den Vorgaben der Simulation auf einer Solarzelle Verwendung finden können. Eine prinzipielle Designvorgabe ist in Abb. 15 zu erkennen.

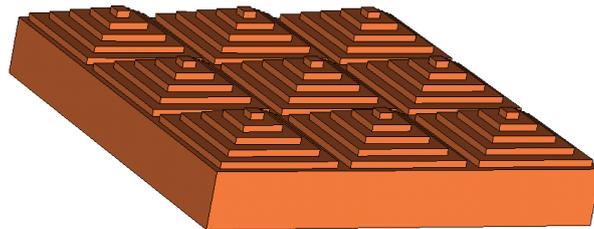


Abb. 15 Designvorgabe für eine Light-Trapping-Struktur als pyramidenförmiges Oberflächenprofil, welches als Multi-Level-Form genähert wurde.

Die Herstellung design-optimierter Pyramiden war uns durch die Elektronenstrahlithographie mit der Belichtungsanlage Vistec SB350 OS möglich. Hierzu wurde der Elektronenstrahl-Resist im Variable-Dose-Mode belichtet, d.h. zusätzlich zur lateralen Strukturierung wurde die Elektronendosis über die Fläche variabel angepasst, um im Resist unterschiedliche Belichtungstiefen zu realisieren und damit die Profiltiefe zu variieren. Die angewandte Belichtungsstrategie ist schematisch in Abb. 16 dargestellt. Die auf diese Weise hergestellten Pyramiden mit einer Grundfläche von $2\ \mu\text{m}$ konnten bezüglich ihrer lateralen Geometrie und ihrer Profiltiefe im SEM beziehungsweise AFM evaluiert werden (Abb. 17).

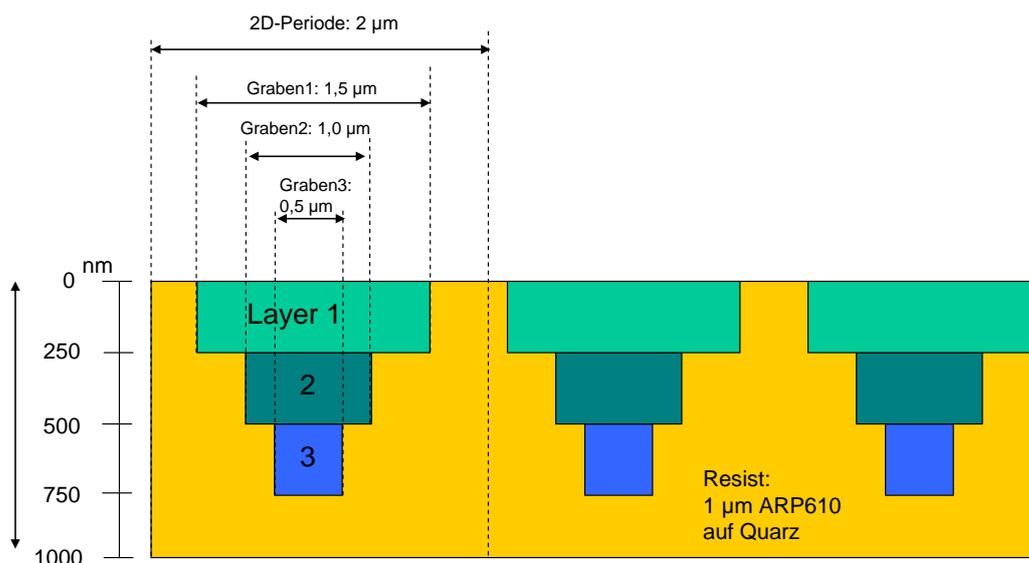


Abb. 16 Für die Herstellung der Pyramidenstrukturen erfolgte eine mehrstufige Belichtungsprozedur im Variable-Dose-Mode der Elektronenstrahlithographie.

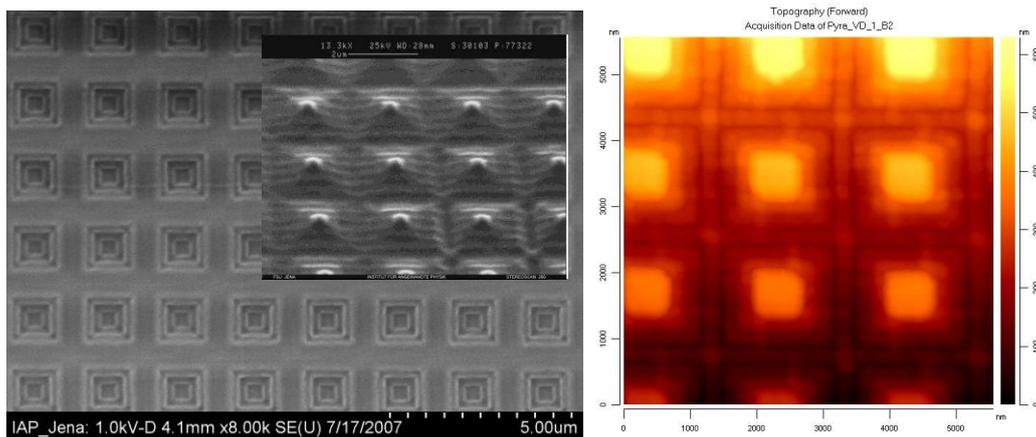


Abb. 17 SEM-Aufnahme und AFM-Topographie hergestellter Pyramidenstrukturen

Die große Flexibilität der Elektronenstrahlolithographie ermöglicht zusätzlich eine Untersuchung des Einflusses topographischer Parameter der Nanostrukturen auf die Effizienz ihrer optischen Filterfunktion. Hierzu wurden in einer systematischen Studie die Belichtungsparameter und ihr Einfluss auf das realisierte Profil untersucht (Abb. 18). Durch einen Proportionaltransfer können diese Pyramidenstrukturen in geeignete funktionelle Schichtsysteme wie Silizium und TCO übertragen werden, um sie für die Implementierung in realen Solarzellen nutzbar zu machen.

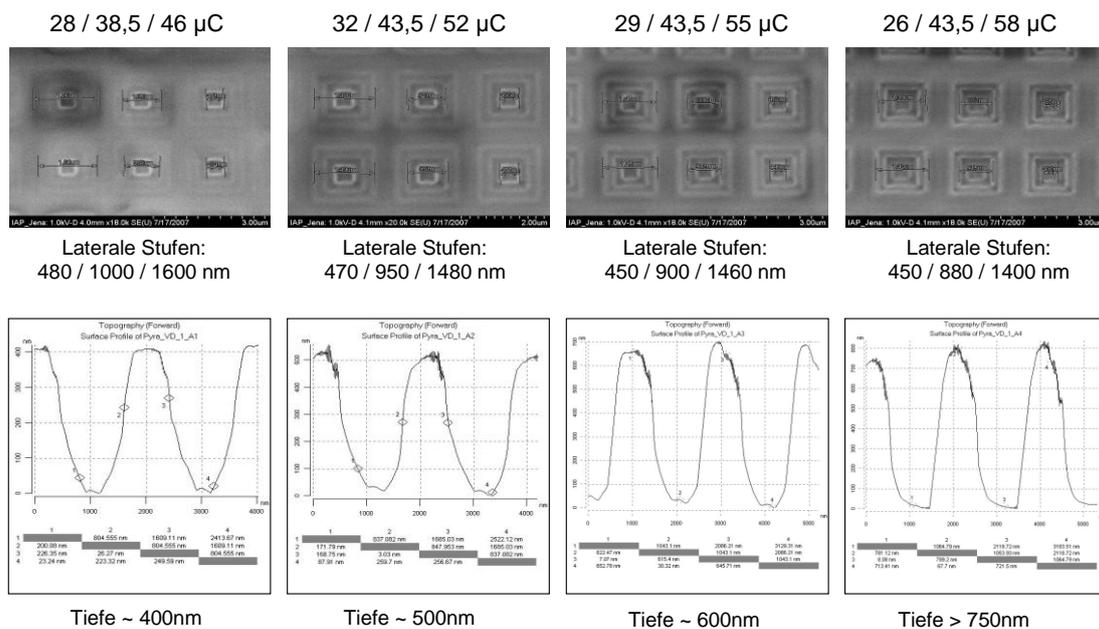


Abb. 18 Studie zur Bestimmung geeigneter Belichtungsabläufe in Abhängigkeit von der eingetragenen Elektronenstrahlendosis für unterschiedliche Stufenniveaus für die Herstellung der Pyramidenstrukturen.

Weiterhin wurde untersucht, inwiefern durch eine Integration binärer Beugungsstrukturen in eine amorphe Dünnschichtsolarzelle eine vorteilhafte Beeinflussung der Winkelspektralverteilung des einfallenden Lichtes möglich ist. Im Gegensatz zu den bereits beschriebenen Pyramidenstrukturen weisen diese Single-Level-Elemente eine wesentlich geringere Strukturhöhe von nur wenig mehr als 100 nm auf, wodurch sie insbesondere besser in die sehr dünne Absorberschicht amorpher Zellen eingebettet werden können.

Gegenüber dem bisher verfolgten Ansatz stochastisch aufgerauter Oberflächen bieten solche deterministischen Beugungsstrukturen den Vorteil, dass eine Korrelation zwischen Geometrie und Streuverteilung mit geringem numerischem Aufwand hergestellt werden kann. Entsprechend ist es möglich, gezielt die Winkelverteilung des einfallenden Lichtes in den Reflexionsbereich eines winkelselektiven Filters zu transformieren. Dabei ist zu beachten, dass die dispersiven Eigenschaften der Streuung so eingestellt werden müssen, dass insbesondere die schwach absorbierten Spektralanteile an der Absorptionskante in den Reflexionsbereich gestreut werden. Ein weiterer Vorteil der betrachteten Strukturen ist eine Integrierbarkeit auf der lichtabgewandten Seite der Solarzelle. Damit kann auf eine direkte Strukturierung des Front-TCO verzichtet werden, beispielsweise wenn dies aufgrund eines inversen Zellaufbaus gar nicht möglich ist (sogenannte Substrat-Konfiguration oder auch nip-Typ, der z.B. bei Rolle-zu-Rolle-Beschichtungsverfahren erforderlich ist).

Gegenstand der Arbeiten waren deshalb technologische Untersuchungen zur Integration deterministischer binärer Streustrukturen in Dünnschichtsysteme auf Basis von amorphem Silizium. Dafür wurden berechnete Beugungsstrukturen mittels des oben bereits beschriebenen deterministischen Lithographieprozesses hergestellt. Weiterhin wurde in Kooperation mit den Projektpartnern am FZ Jülich die Überwachung der Nanostrukturen mit den aktiven Absorberschichten untersucht.

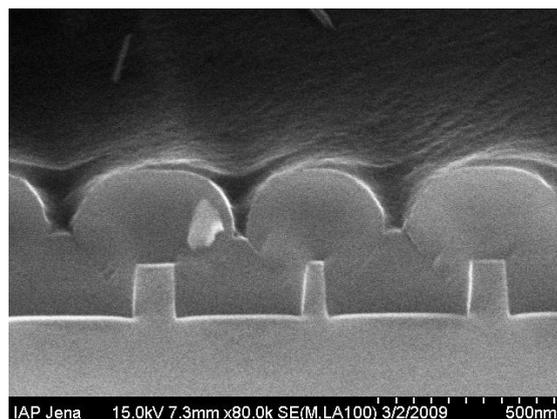


Abb. 19 Rasterelektronenmikroskopaufnahme eines mit einem amorphem Siliziumfilm überwachsenen nanostrukturierten SiO_2 -Substrats

Mittels hochauflösender Elektronenstrahlolithographie wurden Resist-beschichtete SiO_2 -Substrate mit Nano-Gitterstrukturen belichtet und nachfolgend mit einem Ätzprozess ins Substrat übertragen. Diese strukturierten Wafer dienten als Ausgangsmaterialien für nachfolgende Aufwuchsprozesse solarer Absorberschichten. Dabei sollte insbesondere untersucht werden, wie sich diese deterministischen Streustrukturen aus dem Substrat in das Schichtsystem übertragen, da die zugrundeliegenden Wachstumsprozesse bisher nur ungenügend auf vorstrukturierten Oberflächen untersucht worden sind. Abb. 19 zeigt exemplarisch ein solches mit einer amorphen Siliziumschicht überwachsenes Substrat. Dabei sind der Strukturübertrag und die einhergehende Veränderung der Strukturparameter, wie z.B. Verrundungen und Änderungen des Füllfaktors gut zu erkennen.

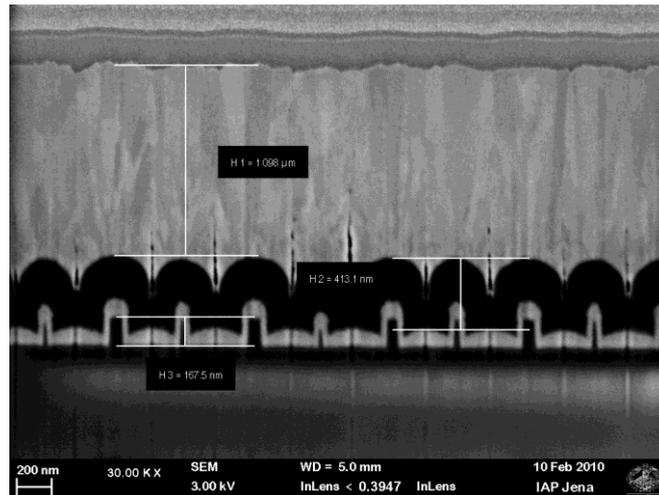


Abb. 20 Rasterelektronenmikroskopaufnahme einer amorphen Dünnschichtsolarzelle auf einem nanostrukturierten SiO_2 -Substrats.

Im Weiteren wurden die Untersuchungen auf komplexere Schichtsysteme ausgedehnt, die dem endgültigen photovoltaischen Element entsprechen. Dafür wurde einerseits eine zusätzliche TCO-Schicht aus ZnO:Al auf die vorstrukturierten Substrate appliziert. Damit wurden das Füllverhältnis der Strukturen und damit die Aufwachsdynamik modifiziert. Weiterhin wurde die Dicke der amorphen Siliziumschicht auf das relevante Absorbermaß erhöht und durch einen dicken ZnO:Al-Kontakt abgeschlossen. Abb. 20 zeigt exemplarisch eine solche nanostrukturierte Dünnschicht-Solarzelle. An einer solchen Struktur konnten mittels optischer und elektrischer Charakterisierungsmethoden erfolgreich die gewünschten Light-Trapping-Eigenschaften nachgewiesen werden (siehe Arbeitspaket C)

1.2.2 Optimierung vorstrukturierter Substrate zur Beeinflussung des Wachstums von Kolloidkristallen

Im Rahmen der Forschungsaktivität zu winkelselektiven optischer Filtern wurde in Zusammenarbeit mit dem Projektpartner der Uni Halle experimentell die Verwendung vorstrukturierter Substrate zur Optimierung der Aufwachsrichtung Photonischer Kristalle untersucht. Die hierzu verwendeten künstlichen Opale wurden bisher in einem selbstorganisierten Prozess auf planaren Substraten hergestellt und wachsen ohne externe Einflüsse in die thermodynamisch favorisierte Γ -L-Richtung. Nach den in Halle durchgeführten Simulationsrechnungen ist eine optimierte winkelselektive Filterfunktion für einen in Γ -X-Richtung gewachsenen, invertierten Opal zu erwarten [5]. In Jena wurde daher der Ansatz verfolgt, individuell nanostrukturierte Substrate bereitzustellen, welche den Aufwachsprozess gezielt beeinflussen. Durch periodische Vertiefungen im Quarzglas-Substrat werden die einzelnen PMMA-Kugeln, welche das Opal-Template bilden, gezwungen, in ihrer ersten Monolage ein Gitter mit achsensenkrechter Symmetrie auszubilden. Entsprechend präparierte Quarzglas-Oberflächen konnten mit den Standardverfahren der Elektronenstrahlolithographie (Vistec SB 350 OS) und Trockenätzverfahren hergestellt werden (Abb. 21).

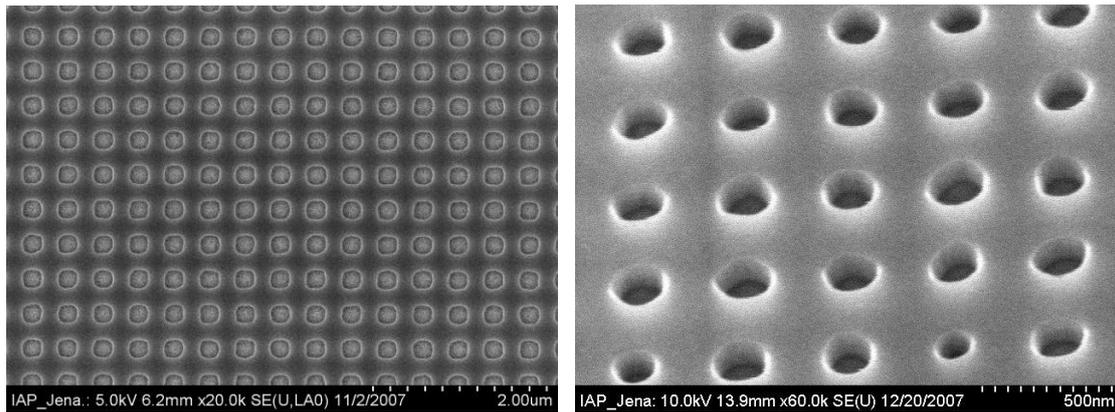


Abb. 21 Rasterelektronenmikroskopaufnahme eines vorstrukturierten Quarzglas-Substrat zur gezielten Beeinflussung des Wachstums künstlicher Opale. Die zweidimensionale-Periode der Struktur beträgt 410 nm, der Lochdurchmesser 200 nm und die Lochtiefe 150 nm.

Die Experimente zum Kristallwachstum in Halle zeigten jedoch, dass eine Beeinflussung der Wachstumsrichtung mit solchen Substraten nicht flächendeckend stattfinden kann, da es einzelnen Kugeln möglich ist, Zwischenpositionen zwischen den Löchern zu besetzen und damit lokal die bevorzugte hexagonale Anordnung auszubilden. Dies ist deutlich in Abb. 22 zu erkennen.

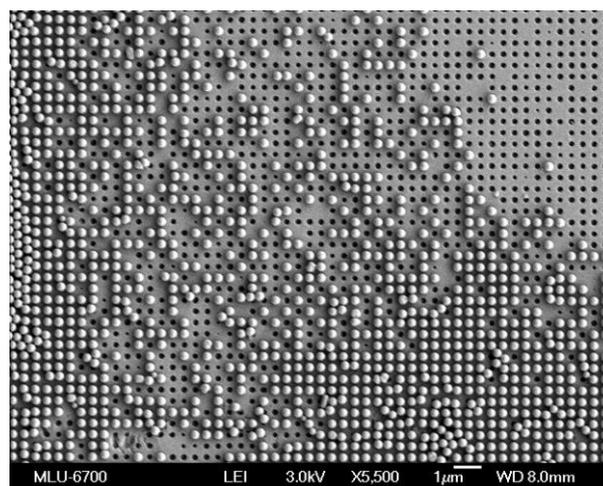


Abb. 22 Rasterelektronenmikroskopaufnahme vom Aufwuchsprozess der ersten Monolage eines künstlichen Opals. Die Besetzung der Löcher erfolgt durch PMMA-Kugeln mit einem Durchmesser von 403 nm. Besonders am rechten Rand sind deutlich Bereiche zu erkennen, in denen die Besetzung von Zwischengitterplätzen zu einem Übergang zu Γ -L-Wachstum mit hexagonaler Symmetrie führt.

In einem daraus folgenden Iterationsschritt zur Optimierung der nanostrukturierten Substrate wurden Quarzglas-Oberflächen hergestellt, die keine Besetzung von Zwischenpositionen gestatten. Eine Rasterelektronenmikroskopaufnahme ist in Abb. 23 gezeigt. Mit diesen Strukturen konnte erfolgreich erzwungen werden, dass die erste Monolage des künstlichen Opals großflächig und mit sehr wenigen Defekten mit einer der Γ -X-Richtung entsprechenden Symmetrie wächst (siehe Abb. 24). Dieses Wachstum kann von einer endlichen Anzahl weiterer Kristalllagen übernommen werden, bevor der Kristall nach dem Überschreiten einer kritischen Dicke erneut zum thermodynamisch favorisierten Γ -L-Wachstum relaxiert.

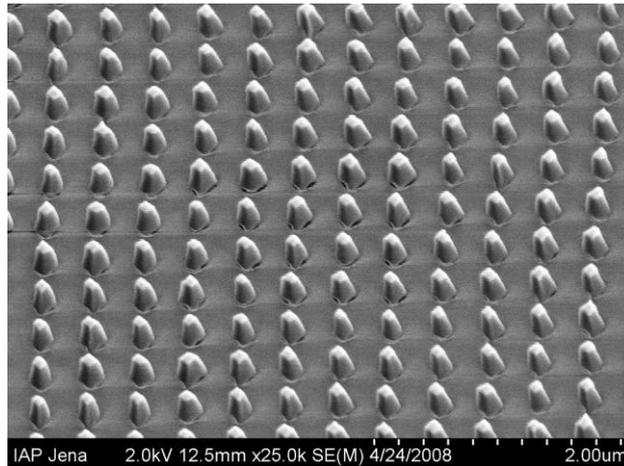


Abb. 23 Rasterelektronenmikroskopaufnahme eines vorstrukturierten Quarzglas-Substrat zur gezielten Beeinflussung des Wachstums künstlicher Opale. Die 2D-Periode der Struktur beträgt 410 nm, der Lochdurchmesser wurde bis zum Rand der periodischen Einheitszelle aufgeweitet. Es verbleiben 200 nm hohe Quarz-Säulen, die im darauf folgenden Aufwuchsprozess als Stützpfiler für PMMA-Kugeln dienen.

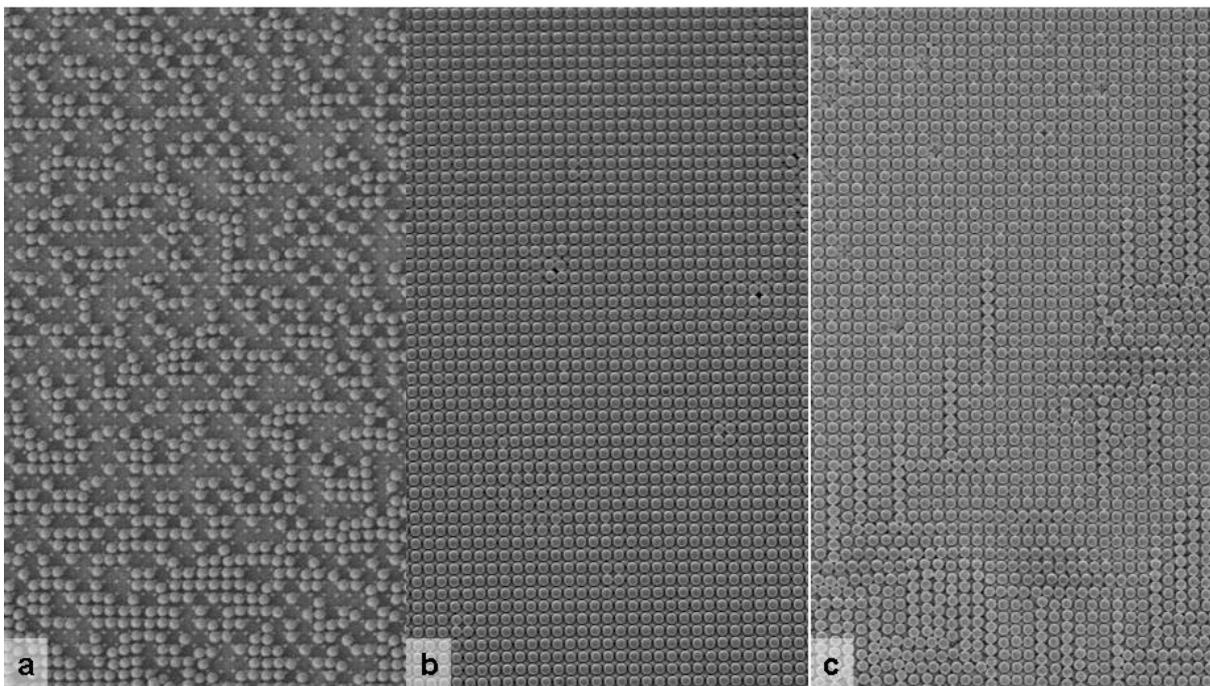


Abb. 24 Rasterelektronenmikroskopaufnahmen von in Halle gewachsenen Opalen auf in Jena vorstrukturierten Substraten. Für a) wurde die Kolloidlösung mit der Hand verteilt, bei b) wurde das „Dip-Coating-Verfahren verwendet, c) entstand mittels Spin-Coating.

1.2.3 Skalierung der Strukturierungsverfahren auf große Flächen

Um eine systematische Untersuchung der Opal-Aufwuchsbedingungen zu ermöglichen, war es nötig, eine sehr große Anzahl solcher Substrate zur Verfügung zu stellen. Diese Aufgabe führte die in Jena vorhandene Elektronenstrahl-Lithographie-Anlage Vistec SB350 OS aufgrund ihres intrinsisch seriellen Schreibregimes an die Grenzen einer zeit- und kosteneffektiven Nutzung. Eine prinzipielle Minimierung der Belichtungszeiten ist bei dieser Technologie bereits wesentlich durch das Arbeiten mit einem variablen Formstrahl (*variable shaped*

beam) verwirklicht. Dabei wird der ursprünglich gaussförmige Elektronenstrahl aufgeweitet und entweder mittels zweier Rechteckblenden auf rechteckige oder dreieckige Form auf bis zu $2,5\ \mu\text{m} \times 2,5\ \mu\text{m}$ große Gitterzellen beschnitten. Durch Aneinandersetzen der dabei entstehenden Belichtungseinheiten (Stempel) wird die Probe belichtet (Abb. 25a). Dementsprechend wird die Schreibzeit einer Struktur wesentlich durch die Summe der sie zusammensetzenden Stempel bestimmt. Jeder Stempel wird, abhängig von technologisch vorgegebenen Randbedingungen, wie der Sensitivität des verwendeten Elektronenstrahl-Resists und dem Sondenstrom der Elektronenstrahlanlage, auf einer Zeitskala von $1,5\text{-}2,5\ \mu\text{s}$ belichtet.

Um ein quadratisches Gitter mit einer Periode von $410\ \text{nm}$ durch in erster Näherung quadratische Stempel zu belichten (Abb. 25b), wie im vorliegenden Fall gefordert, benötigt man pro cm^2 mindestens $5,9 \times 10^8$ Stempel. Multipliziert mit der Belichtungszeit pro Stempel ergibt dies eine vergleichsweise lange Belichtungszeit von $15\text{-}25$ Minuten pro cm^2 . Zusätzlich zu dieser reinen Belichtungszeit müssen in der Praxis weitere Zeiteinheiten zum Handling, zum Temperaturengleich des Substrats und zur Justage des Substrates zum Elektronenstrahl berücksichtigt werden. Das serielle Belichten einer sehr großen Anzahl von nanostrukturierten Substraten würde damit zu Belichtungszeiten führen, die sich leicht auf mehrere zehn Stunden und gar Tage addieren. Dies ist aufgrund der hohen Kosten ein nicht praktikabler Ansatz.

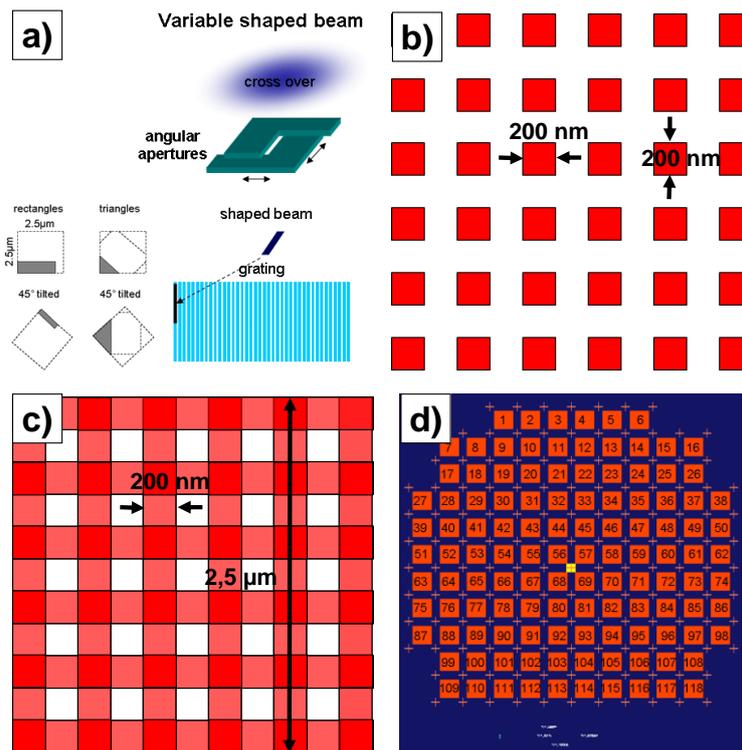


Abb. 25 a) Prinzip der Elektronenstrahl-Lithographieanlage mit variablem Formstrahl (variable shaped beam). b) Prinzipskizze der zu belichtenden Stempel in einem standardisierten quadratischen Gitter und c) bei der zeitsparenden und strukturell äquivalenten Belichtung gekreuzter eindimensionaler Gitter. d) Layoutvorschau von 118 nanostrukturierten Einzelchips mit Sägemarken auf einem 4"-Wafer.

Die Skalierung des Strukturierungsverfahrens mit hohen Effizienzen auf große Flächen erforderte daher die Implementierung eines technologisch optimierten Belichtungsregimes. Hierbei wurde der Gedächtnis-Effekt des Elektronenstrahl-Lackes und sein guter Kontrast genutzt. Verwendet wurde der chemisch verstärkte Positivresist FEP171 der Firma Fuji-Film.

Dieser zeigt in erster Näherung das binäre Verhalten eines idealen Resists: Oberhalb eines diskreten Schwellwertes der Dosis, also der pro Flächeneinheit applizierten Elektronen, ist er vollständig belichtet und unterhalb dieses Wertes nahezu unverändert. Dabei ist es unerheblich, ob die Elektronen in einem oder mehreren Belichtungsschritten deponiert wurden. Daraus folgt, dass ein quadratisches Gitter alternativ auch durch die serielle, um 90° gekreuzte Belichtung zweier eindimensionaler Gitter mit halber Dosis erfolgen kann, wie in Abb. 25c schematisch dargestellt ist. Während die Gesamtdosis an den Kreuzungspunkten so hoch ist, dass der Schwellwert zur vollständigen Durchbelichtung des Resists erreicht wird, bleibt der Resist auf der übrigen Fläche, auf die nur die halbe Dosis appliziert wurde, unverändert. Die Länge eines einzelnen Stempels ist damit nur noch durch die Größe der Rechteckblende des variablen Formstrahls auf 2,5 µm begrenzt. Mit diesem Verfahren war es möglich, die Anzahl der Stempel für die Zielstruktur um fast eine Größenordnung auf $9,7 \times 10^7$ pro cm^2 zu reduzieren. Die entsprechende Schreibzeit verringert sich auf 2,5-4 Minuten/ cm^2 . Darüber hinaus tritt ein weiterer gewünschter Effekt bezüglich der Strukturqualität der einzelnen Nanostrukturen auf: Das Belichten gekreuzter Gitter zieht eine stärkere Verrundung der Kanten nach sich und ermöglicht kreisförmige Nanostrukturen in einem quadratischen Gitter. Aus dieser Maske konnten durch einen standardisierten Trockenätzprozess die gewünschte Kegelform hergestellt werden. Abb. 25d zeigt schematisch die Vorschau des Layouts von insgesamt 118 Parzellen, die gleichzeitig auf einem 4"-Quarz-Wafer plaziert wurden. Die Optimierung der Strukturierungstechnologie stellte eine notwendige Voraussetzung für die Reduktion der Schreibzeit um nahezu eine Größenordnung und infolge dessen für die Bereitstellung einer so großen Anzahl strukturierter Substrate zur Untersuchung des Wachstums von Kolloidkristallen dar.

1.3 Arbeitspaket C: Experimentelle Charakterisierung

Zur Experimentellen Verifikation der Leistungsfähigkeit winkelselektiver Filter, wurde ein Filterelement entworfen, welches für den Spektralbereich einer amorphen Silizium-Dünnschichtsolarzelle angepasst ist. Dieses System wurde ausgewählt, da derartige Zellen durch den Projektpartner FZ Jülich zur Verfügung gestellt werden konnten und obendrein über eine integrierte streuende Grenzfläche verfügen, welche den Lichtweg innerhalb der Solarzelle randomisiert für die Wirksamkeit des Filters von entscheidender Bedeutung ist. Der Filter wurde bei dem Lohnbeschichter MSO Jena hergestellt und durch den Projektpartner ISE Freiburg optisch charakterisiert. Abb. 26 zeigt die mit unpolarisiertem Licht gemessene Transmission des hergestellten Filters, dessen optische Bandkante für senkrechten Einfall bei 760 nm liegt. Die Transmission für senkrechten Einfall beträgt mehr als 95% zwischen 400 nm und 750 nm. Für schrägen Einfall liegt eine erhöhte Reflexion bis hinab zu 600 nm vor.

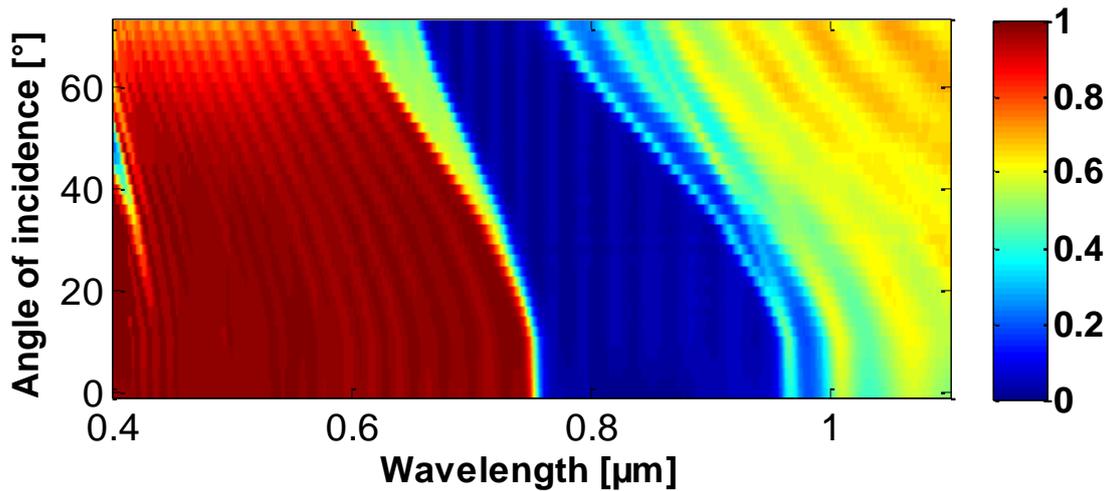


Abb. 26 Gemessene winkel- und wellenlängenaufgelöste Transmission des von MSO-Jena hergestellten Filters für unpolarisiertes Licht.

Dieser Filter wurde zum direkten Nachweis des Light-Trapping-Effektes beim Projektpartner FZ Jülich auf das Trägerglas einer amorphen Silizium-Dünnschichtsolarzelle appliziert, von der anschließend die externe Quanteneffizienz (EQE) bestimmt wurde. Da in diesem Aufbau zusätzliche Fresnel-Reflexionsverluste am Filterglas entstehen, wurde die EQE auch an einem Referenzaufbau mit einem unbeschichteten Trägerglas als Referenzfilter gemessen. In Abb. 27 ist zu erkennen, dass beide Zellen bis zu einer Wellenlänge von 600 nm den gleichen Verlauf der EQE aufweisen. Für größere Wellenlängen profitiert die Zelle mit Filter von einer Erhöhung der Absorption aufgrund des durch die Winkelselektivität verstärkten Light-Trapings. Kurz unterhalb der Absorptionskante des Filters liegt ein Verhältnis zwischen den beiden gemessenen EQEs von 1,20 vor. Die Wirksamkeit eines winkelselektiven Filters konnte somit auch experimentell bestätigt werden.

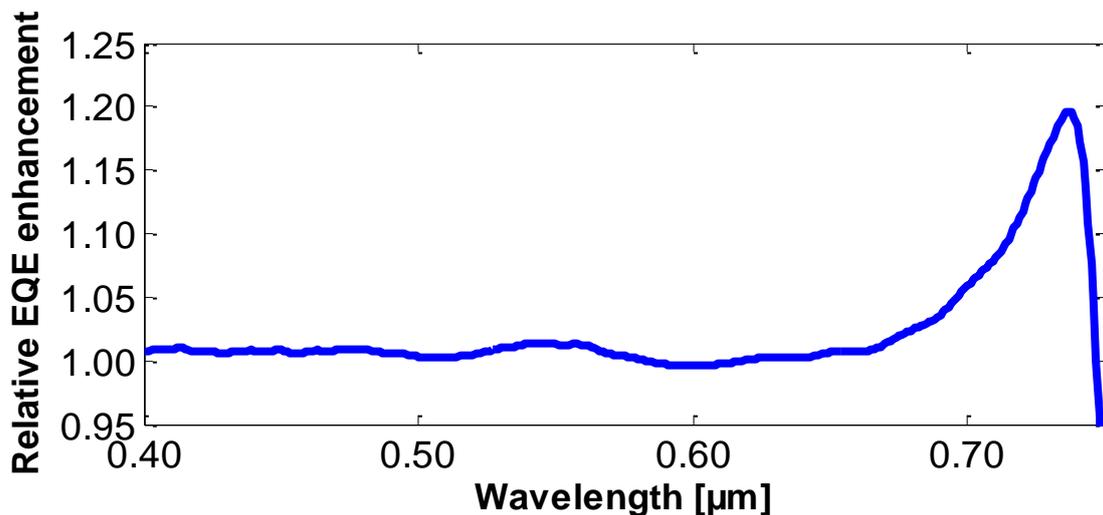


Abb. 27 Relative Verbesserung der EQE der Zelle mit Filter im Vergleich zur Zelle ohne Filter.

Im Rahmen der Arbeiten zur Nanostrukturtechnologie wurden routinemäßig sämtliche hergestellten Proben mittels hochauflösender Rasterelektronenmikroskopie charakterisiert. Hierdurch konnte eine Rückkopplung zwischen Prozessparametern und den erzielten Strukturgeometrien gewährleistet werden und die Einhaltung der geometrischen Zielgrößen garantiert werden. Weiterhin wurde im Verlauf des Projektes eine *Focused-Ion-Beam (FIB)-Anlage*

in Betrieb genommen. Hierbei handelt es sich um eine Kombination eines Rasterelektronenmikroskopes mit einer Gallium-Ionenstrahl-Quelle, welche eine Materialbearbeitung mit wenigen Nanometern Genauigkeit erlaubt. Hierdurch war es möglich Querschnitte fertig prozessierter Proben mit komplexer Schichtfolge anzufertigen, ohne dass die Proben zerstört wurden und für weitere Charakterisierungsschritte verloren gingen. Ein nach diesem Verfahren angefertigter Querschnitt ist beispielsweise in Abb. 20 zu sehen. Die *FIB*-Anlage gestattet es zudem, nach dem *Slice-and-View-Prinzip* mit einer festen Schrittweite zahlreiche Querschnittsaufnahmen hintereinander anzufertigen. Zur vollständigen Rekonstruktion der dreidimensionalen Struktur einer Probe aus einem Satz solcher Querschnittsaufnahmen wurden geeignete Bildverarbeitungsalgorithmen entwickelt. Mit diesen Algorithmen ist es möglich die verschiedenen Querschnittsaufnahmen in einem globalen Koordinatensystem zu registrieren um den Drift und eventuelle Positionsschwankungen (Jitter) der Probe während der Aufnahme zu kompensieren. Anschließend können anhand des Materialkontrastes die verschiedenen Bestandteile der Struktur segmentiert werden und in eine Voxelrepräsentation überführt werden. Zur Charakterisierung von Kolloidkristallen wurde außerdem ein Algorithmus zur vollautomatischen Lokalisierung von Kugeln entwickelt.

Zur Charakterisierung photovoltaischer Bauelemente wurde ein Messplatz zur spektral und winkelaufgelösten Messung der externen Quanteneffizienz aufgebaut. Dieser wurde zur Charakterisierung binär strukturierte Dünnschichtsolarzellen verwendet, welche beim Projektpartner FZ Jülich auf vorstrukturierten Substraten aus Jena prozessiert wurden. Ein Querschnitt solch einer Zelle ist in Abb. 20 dargestellt. Einen Vergleich der EQE einer Solarzelle mit deterministischer Strukturierung und einer planaren Referenzzelle ist in Abb. a dargestellt. Es ist zu erkennen, dass es durch die Strukturierung über den gesamten Spektralbereich zu einer Verbesserung der EQE kommt. Diese resultiert zum einen aus einer besseren Antireflex-Wirkung, da sich die Struktur des Substrates teilweise auf die Licht-Seite der Solarzelle durchprägt, zum anderen aus einem Light-Trapping-Effekt durch die Anregung geführter Moden in der aktiven Schicht der Solarzelle sowie einer nichtresonanten Wegverlängerung aufgrund der Lichtbeugung an der strukturierten Oberfläche. Der Einfluss des Light-Trappings wird besonders deutlich, wenn man die EQE-Spektren auf eins normiert und hierdurch den Einfluss der Antireflex-Wirkung ausblendet (siehe Abb. b). Die Winkelabhängigkeit der EQE der strukturierten Dünnschichtsolarzelle ist in Abb. a dargestellt. Zunächst ist zu erkennen, dass sich die spektralen Merkmale stark mit wachsendem Einfallswinkel verschieben, dabei bleibt der ungefähre Verlauf jedoch erhalten. Dies wird besonders deutlich, wenn statt der Quanteneffizienz der spektral integrierte Photostrom betrachtet wird. In Abb. b ist zu erkennen, dass sich der Photostrom auch bei großen Einfallswinkeln nicht wesentlich ändert, sofern man von einer Verkleinerung der projizierten Fläche der Solarzelle absieht (da dies ein generischer Effekt ist, wurde er in der Darstellung explizit nicht berücksichtigt). Die Messungen zeigen, dass bei geeigneter Dimensionierung der deterministischen Strukturierung, eine breitbandige und winkelunabhängige Absorptionserhöhung realisierbar ist.

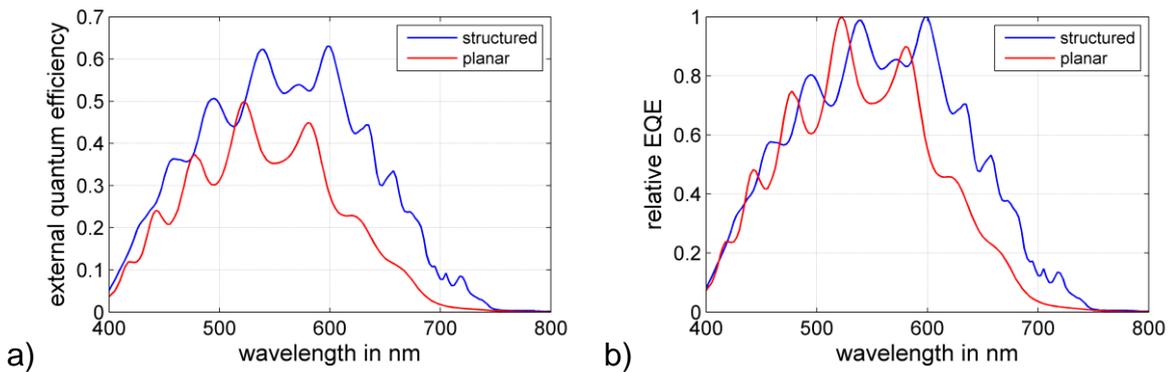


Abb. 28 a) Vergleich der spektralen Quanteneffizienzen einer strukturierten amorphen Dünnschichtsolarzelle (blaue Kurve, Zellaufbau siehe Abb. 20) sowie einer planaren Referenzzelle (rote Kurve) aus dem gleichen Beschichtungslauf. Zur Verdeutlichung des durch die Strukturierung erzeugten Light-Trapping-Effektes wurden die EQE-Spektren in b) auf eins normiert.

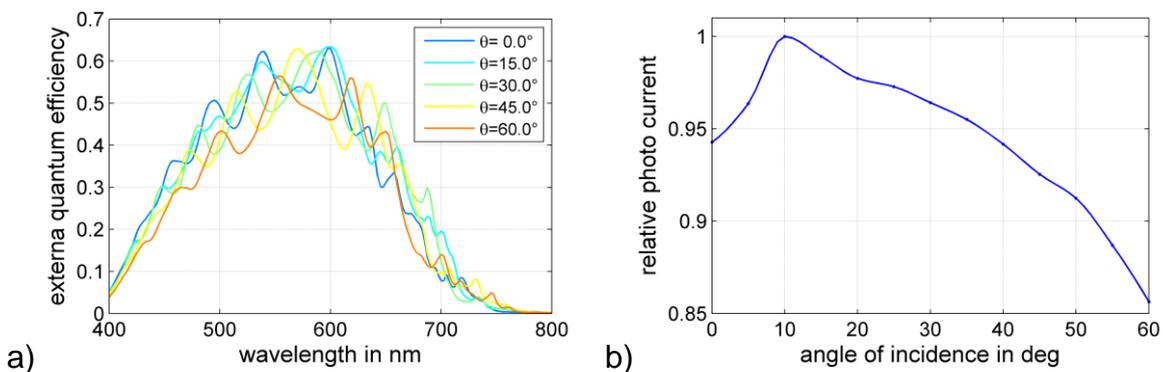


Abb. 28 a) Winkelabhängigkeit einer wie in dargestellt strukturierten amorphen Dünnschichtsolarzelle. b) Zugehörige Winkelabhängigkeit des spektral integrierten Photostromes bei Beleuchtung mit einem AM1.5G-Spektrum. Die Änderung der projizierten Fläche der Solarzelle wurde hierbei explizit nicht berücksichtigt.

2 Wichtige Positionen des Zahlenmäßigen Nachweises

Die Fördermittel wurden im Bearbeitungszeitraum entsprechend der Antragstellung verausgabt. Die Mittel werden im zahlenmäßigen Nachweis detailliert dargestellt. Hier sollen nur die wesentlichen Positionen grob umrissen werden:

	ca. Antragssumme	ca. Verausgabung
wissenschaftliches Personal	150 T€	161 T€
Hilfskräfte	5 T€	5 T€
Geräte	9 T€	10 T€
Sachmittel	42 T€	42 T€
Reisen	11 T€	12 T€
Investitionen	15 T€	12 T€

3 *Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit*

Da die Arbeiten entsprechend des bei der Beantragung vorgelegten und bewilligten Arbeitsplans durchgeführt wurden, kann von der Angemessenheit der geleisteten Arbeiten ausgegangen werden.

Gleichzeitig stehen den im Vorhaben geleisteten Arbeiten keine in der Zwischenzeit bekannt gewordenen Ergebnisse Dritter entgegen. Deshalb ist die Notwendigkeit der Arbeiten auch heute noch begründet.

4 *Voraussichtlicher Nutzen und Verwertbarkeit der Ergebnisse*

In Kooperation mit den weiteren Partnern im Verbund NanoVolt wurden umfangreiche Arbeiten zu nanostrukturierten photovoltaischen Systemen durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Arbeiten werden derzeit im Projekt InfraVolt verwertet. Der initiierte Verbund InfraVolt erforscht die physikalisch-technischen Grundlagen von Solarzellen mit dem besonderen Schwerpunkt der Ausnutzung des infraroten Spektrums.

Weiterhin hat sich das der Antragsteller Friedrich-Schiller-Universität Jena in vielfältiger Form in Kooperationen mit der Solarindustrie Deutschlands eingebracht. Die Friedrich-Schiller-Universität Jena übernimmt dort vielfach die Rolle eines Kompetenzträgers und Technologietreibers für Photonmanagement.

Unter Mitwirkung der Friedrich-Schiller-Universität Jena wurde ein Antrag bei der DFG zur Einrichtung eines Paketantrags NanoPho gestellt. Dieser Antrag war erfolgreich und der Paketantrag wird gefördert, wobei sich die Friedrich-Schiller-Universität Jena weiterhin wesentlich in die dort verfolgten Forschungsthemen einbringen wird. Außerdem konnte sich die Friedrich-Schiller-Universität Jena erfolgreich ein Forschungsprojekt zur Untersuchung Organisch-Anorganischer Solarzellen (HypoSolar) einbringen.

Weiterhin war der vom Cluster CoOPTICS initiierte Antrag SolLux bei der Thüringer Aufbaubank erfolgreich. Die Friedrich-Schiller-Universität Jena übernimmt in diesem Verbundforschungsvorhaben mit mehreren beteiligten Firmen die Rolle eines wesentlichen Technologietreibers für nanostrukturierte Solarzellen. Somit werden die von der Friedrich-Schiller-Universität Jena bisher erreichten Ergebnisse nun innerhalb wesentlich verstärkter und überregionaler Konsortien in anwendungsnahe Forschungsvorhaben überführt.

Die im Rahmen dieses Projektes gewonnenen Forschungsergebnisse finden zudem in der von der Friedrich-Schiller-Universität Jena getragenen Ausbildung von Physikern in der Abbe School of Photonics ihren unmittelbaren Niederschlag. Durch das Kompetenznetzwerk OptoNet e.V. wird ein aktiver Wissenstransfer auch an nicht direkt am Projekt beteiligte mittelständische Firmen betrieben.

Die wissenschaftlich-technische sowie wirtschaftliche Ergebnisverwertung des geförderten Vorhabens erfolgt deshalb sowohl in weiteren öffentlich geförderten Projekten als auch in direkter Kooperation mit der Solarindustrie.

5 Ergebnisse Dritter

Forschungsergebnisse Dritter in Bezug auf richtungsselektive Filter zur Steigerung der Effizienz von Solarzellen wurden von Tvingstedt veröffentlicht [Tving]. Dabei besteht der Filter aus einer perforierten Metallschicht, welche gleichzeitig als Frontseitenspiegel fungiert. Um dennoch Licht in die Zelle zu koppeln, befinden sich Mikrolinsen über den Löchern. Diese sammeln das Licht aus einer Fläche, die größer als das zugehörige Loch ist, und fokussieren es in die Zelle. Schräg einfallendes Licht wird neben das Loch auf das Metall fokussiert und kann nicht mehr in die Zelle einkoppeln. Licht, welches die Zelle wieder verlassen könnte, wird vom Metall wieder in die Zelle zurückreflektiert. In der angeführten Literatur wurde das Konzept in Verbindung mit organischen Solarzellen erfolgreich mit einer Steigerung der Absorption von bis zu 25% demonstriert. In Verbindung mit Silizium basierten Solarzellen ergibt sich die Schwierigkeit über einen sehr großen Spektralbereich die Abbildungseigenschaften (chromatische Abberation) der Mikrolinsen konstant zu halten, oder aber die Lochgröße entsprechend zu erhöhen, was allerdings die Filterwirkung verschlechtern würde. Des Weiteren ist bei Verwendung eines Metallspiegels an der Frontseite keine spektrale Anpassung der Filterwirkung (winkelunabhängige Transmission im kurzwelligen Bereich, winkelabhängige Transmission im langwelligen Bereich) möglich, wie sie aber für erdgebundene Zellen für maximale Effizienzen nötig ist. Eine ähnliche Arbeit [Krav], die aber nicht näher auf das mögliche Lichtfallenpotential eingeht, bedient sich halber Rotationsellipsoide an Stelle der Linsen. Solche Konzentratoren fokussieren einfallendes Licht an den unteren Scheitelpunkt. Der Akzeptanzwinkel lässt sich dabei durch Höhe und maximalen Querschnitt einstellen.

Eine theoretische Arbeit bezüglich der Verwendung eines Photonischen Kristalls als richtungsselektiven Filter wurde von Mutitu et al. [Mutitu] veröffentlicht. Das dort vorgestellte Konzept bestätigt die prinzipielle Wirksamkeit richtungsselektiver Filter, ohne jedoch auf genaue Designkriterien oder verschiedene Beleuchtungssituationen einzugehen. Der vorgeschlagene, schachbrettartige zweidimensionale Photonische Kristall ist zudem nur für eine Polarisationsrichtung wirksam und stellt im Bezug auf eine experimentelle Realisierung aufgrund seiner kleinen Elementarzelle von nur 210 nm sehr hohe Anforderungen an die Nanotechnologie.

Eine theoretische Studie bezüglich der Verwendung deterministischer Binärstrukturen zur Verbesserung des Light-Trapping in einer amorphen Silizium-Dünnschicht solarzelle wurde von Čampa et al. veröffentlicht [Campa]. Die dort vorgestellten Ergebnisse bestätigen die Wirksamkeit deterministischer Binärstrukturen für die im Rahmen des Projektes demonstrierten Strukturgrößen.

- [Tving] K. Tvingstedt, S. Dal Zilio, O. Inganäs, and M. Tormen, "Trapping light with micro lenses in thin film organic photovoltaic cells," *Optics Express* **16**, 21608-21615 (2008).
- [Krav] V. G. Kravets, and A. N. Grigorenko, "Retinal light trapping in textured photovoltaic cells," *Appl. Phys. Lett.* **97**, 143701 (2010).
- [Mutitu] J. G. Mutitu, S. Shi, A. Barnett, and D. W. Prather, "Angular Selective Light Filter Based on Photonic Crystals for Photovoltaic Applications," *IEEE Photonics Journal* **2**, 490-499 (2010).

[Campa] A. Čampa, O. Isabella, R. van Erven, P. Peeters, H. Borg, J. Krč, M. Topič, and M. Zeman, "Optimal design of periodic surface texture for thin-film a-Si:H solar cells," *Prog. Photovolt: Res. Appl.* **18**, 160–167 (2010).

6 Veröffentlichungen der Ergebnisse

6.1.1 Bachelorarbeiten

1. R. Berlich, "Photonenmanagement in Solarzellen: Analyse eines Ray Tracing Modells zur Absorptionsberechnung", Friedrich-Schiller-Universität, 2009
2. T. Eichelkraut, "Photon management in solar cells: Analysis of a wave optical model for calculating the light absorption", Friedrich-Schiller-Universität, 2009

6.1.2 Zeitschriften

1. S.-S. Lo, C.-C. Chen, F. Garwe, and T. Pertsch, "Broad-band anti-reflection coupler for a Si thin-film solar cell," *J. Phys. D: Appl. Phys.* **40**, 754-758 (2007).
2. C. Rockstuhl, F. Lederer, K. Bittkau and R. Carius, "Light Localization at Randomly Textured Surfaces for Solar-Cell Applications", *Appl. Phys. Lett.* **91**, 171104, (2007)
3. S. Fahr, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Engineering the randomness for enhanced absorption in solar cells", *Appl. Phys. Lett.* **92**, 171114 (2008)
4. C. Rockstuhl, S. Fahr, and F. Lederer, "Absorption enhancement in solar cells by localized plasmon polaritons", *Journal of Applied Physics* **104**, 123102, (2008).
5. C. Rockstuhl, S. Fahr, F. Lederer, T. Beckers, K. Bittkau, and R. Carius, "Local versus global absorption in thin-film solar cells with randomly textured surfaces", *Appl. Phys. Lett.* **93**, 061105, (2008).
6. S. Fahr, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Rugate filter for light-trapping in solar cells," *Opt. Express* **16**, 9332-9343 (2008)
7. C. Ulbrich, S. Fahr, J. Üpping, M. Peters, T. Kirchartz, C. Rockstuhl, R. Wehrspohn, A. Gombert, F. Lederer, and U. Rau, "Directional selectivity and ultra-light-trapping in solar cells," *phys. stat. sol. (a)* **205**, 2831–2843 (2008)
8. M. Kroll, S. Fahr, C. Helgert, C. Rockstuhl, F. Lederer, and T. Pertsch, "Employing dielectric diffractive structures in solar cells", *Phys. Stat. Sol. (a)* **205**, 2777, (2008)
9. F. Hallermann, C. Rockstuhl, S. Fahr, G. Seifert, S. Wackerow, H. Graener, G. v. Plessen, and F. Lederer, "On the use of localized plasmon polaritons in solar cells", *Phys. Stat. Sol. (a)* **205**, 2844, (2008)
10. K. Bittkau, T. Beckers, S. Fahr, C. Rockstuhl, F. Lederer, and R. Carius, "Nanoscale investigation of light-trapping in a-Si:H solar cell structures with randomly textured interfaces", *Phys. Stat. Sol. (a)* **205**, 2766, (2008)
11. C. Rockstuhl and F. Lederer, "Suppression of the local density of states in a medium made of randomly arranged dielectric spheres", *Phys. Rev. B* **79** 132202, (2009)
12. S. Fahr, C. Rockstuhl, F. Lederer, "Metallic nanoparticles as intermediate reflectors in tandem solar cells", *Appl. Phys. Lett.* **95**, 121105 (2009)

13. A. Bielawny, C. Rockstuhl, F. Lederer, and R. B. Wehrspohn, "Intermediate reflectors for enhanced top cell performance in photovoltaic tandem cells", *Opt. Express* **17**, 8439, (2009)
14. C. Rockstuhl, K. Bittkau, T. Beckers, R. Carius, and F. Lederer, "The impact of intermediate reflectors on light absorption in tandem solar cells with randomly textured surfaces", *Appl. Phys. Lett.* Vol. **94**, 211101, (2009)
15. C. Rockstuhl, S. Fahr, F. Lederer, K. Bittkau, T. Beckers, R. Carius, F.-J. Haug, T. Söderström, and C. Ballif, "Comparison and optimization of randomly textured surfaces in thin-film solar cells", *Optics Express* Vol. **18**, A335, (2010)
16. S. Fahr, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "The interplay of intermediate reflectors and randomly textured surfaces in tandem solar cells", *Appl. Phys. Lett.* Vol. **97**, 173510, (2010)
17. C. Rockstuhl, S. Fahr, F. Lederer, F.-J. Haug, T. Söderström, S. Nicolay, M. Despeisse, and C. Ballif, "Light absorption in textured thin film silicon solar cells: A simple scalar scattering approach vs. rigorous simulation", *Appl. Phys. Lett.* Vol. **98**, 051102, (2011)

6.1.3 Konferenzpublikationen

1. C. Ulbrich, S. Fahr, M. Peters, J. Üpping, T. Kirchartz, C. Rockstuhl, J.-C. Goldschmidt, P. Löper, R. Wehrspohn, A. Gombert, F. Lederer, and U. Rau, "Enhanced light-trapping in solar cells by directional selective optical filters", *SPIE Photonics Europe 2008*, Strasbourg, France
2. S. Fahr, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Rugate filter for ultra light trapping in solar cells", *SPIE Photonics Europe 2008*, Strasbourg, France
3. T. Beckers, K. Bittkau, C. Rockstuhl, S. Fahr, F. Lederer, and R. Carius, "The optical near-field of randomly textured light trapping structures for thin-film solar cells", *SPIE* 7002, 70020D, (2008)
4. S. Fahr, C. Ulbrich, T. Kirchartz, U. Rau, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Optimization of Rugate filters for ultra light-trapping in solar cells", *SPIE* 7002, 70020B, (2008)
5. A. Bielawny, P. T. Miclea, R. B. Wehrspohn, S.-M. Lee, M. Knez, C. Rockstuhl, M. Lisca, F. Lederer, and R. Carius, "Three-dimensional photonic crystals as intermediate filter for thin-film tandem solar cells", *SPIE* 7002, 700208, (2008)
6. C. Ulbrich, S. Fahr, M. Peters, J. Üpping, T. Kirchartz, C. Rockstuhl, J. Christoph Goldschmidt, P. Löper, R. Wehrspohn, A. Gombert, F. Lederer, and U. Rau, "Directional selectivity and light-trapping in solar cells", *SPIE* 7002, 70020A, (2008)

6.1.4 Eingeladene Konferenzpräsentationen

1. T. Pertsch, "Nanostructured surfaces for efficiency enhancement of solar cells," 398th WE-Heraeus-Seminar on Photon Management in Solar Cells, Bad Honnef, Germany, 2007.

2. C. Rockstuhl and F. Lederer, "Surface Plasmon Polaritons in Metallic Nanostructures: Fundamentals and their Application to Solar Cells", 398th WE-Heraeus-Seminar on Photon Management in Solar Cells 2007, Bad Honnef, Germany
3. C. Rockstuhl, "Surface Plasmon Polaritons in Metallic Nanostructures: Fundamentals and their Application to Solar Cells", Workshop on Progress towards a Next Generation Photovoltaics 2008, Madrid, Spain
4. F. Lederer, C. Rockstuhl, F. Lederer, „Photon management in thin-film solar cells“, OSA Topical Meeting Integrated Photonics Research, 2010, Monterey, USA

6.1.5 Konferenzbeiträge

3. A. Bielawny, A. von Rhein, R. B. Wehrspohn, C. Rockstuhl, M. Lisca, F. Lederer, B. Lange, R. Zentel, R. Carius, "Diffractive and energy selective photonic crystal for thin film tandem solar cells", SPIE Optics + Photonics 2007, San Diego, California, USA
4. A. Bielawny, A. von Rhein, R. B. Wehrspohn, R. Carius, C. Rockstuhl and F. Lederer, "Spectrally Selective Photonic Structures for Photovoltaic Applications", 71. Annual Meeting of the Deutsche Physikalische Gesellschaft 2007, Regensburg, Germany
5. A. Bielawny, A. von Rhein, R. B. Wehrspohn, R. Carius, C. Rockstuhl and F. Lederer, "3D Photonic Crystals as Diffractive and Energy Selective Filter for Tandem Thin Film Solar Cells", MRS Spring Meeting 2007, San Francisco, California, USA
6. A. Bielawny, A. von Rhein, R. B. Wehrspohn, R. Carius, C. Rockstuhl, M. Lisca and F. Lederer, "Spectrally Selective Photonic Structures for Photovoltaic Applications", PECS VII 2007, Monterey, California, USA
7. S. Fahr, C. Rockstuhl, F. Lederer, C. Ulbrich, T. Kirchartz, and U. Rau "Rugate Filter for Light-Trapping in Solar Cells", 398. WE-Heraeus-Seminar on Photon Management in Solar Cells 2007, Bad Honnef, Germany
8. M. Lisca, C. Rockstuhl, F. Lederer, A. Bielawny, R. Wehrspohn "3D Photonic Crystals as Materials for Solar Cells", 398. WE-Heraeus-Seminar on Photon Management in Solar Cells 2007, Bad Honnef, Germany
9. T. Beckers, K. Bittkau, R. Carius, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Light scattering in textured ZnO for solar cell application on a nanoscopic scale", 398. WE-Heraeus-Seminar on Photon Management in Solar Cells 2007, Bad Honnef, Germany
10. C. Ulbrich, S. Fahr, J. Üpping, M. Peters, T. Kirchartz, C. Rockstuhl, R. Wehrspohn, A. Gombert, F. Lederer and Uwe Rau, "Ultra-Light-Trapping and Directional Selectivity in Solar Cells", First International Forum on Multidisciplinary Education and Research for Energy Science 2008, Tokyo, Japan
11. C. Ulbrich, S. Fahr, M. Peters, J. Üpping, T. Kirchartz, C. Rockstuhl, J.-C. Goldschmidt, P. Löper, R. Wehrspohn, A. Gombert, F. Lederer, and U. Rau „Enhanced light-trapping in solar cells by directional selective optical filters“, SPIE Photonics Europe 2008, Strasbourg, France
12. S. Fahr, C. Rockstuhl, and F. Lederer, „Rugate filter for ultra light trapping in solar cells“, SPIE Photonics Europe 2008, Strasbourg, France

13. T. Beckers, K. Bittkau, C. Rockstuhl, S. Fahr, F. Lederer and R. Carius, „ The optical near-field of randomly textured light trapping structures for thin-film solar cells“, SPIE Photonics Europe 2008, Strasbourg, France
14. T. Beckers, C. Bittkau, R. Carius, C. Rockstuhl, and F. Lederer, “Designing Randomness – the Impact of Textured Surfaces on the Efficiency of Thin-Film Solar Cells”, CLEO/QELS 2008 San Jose, California, USA
15. A. Bielawny, P. T. Miclea, R. Wehrspohn, S. M. Lee, M. Knez, R. Carius, M. Lisca, C. Rockstuhl, and F. Lederer, “Photonic intermediate layer for silicon tandem solar cells”, 72. Annual Meeting of the Deutsche Physikalische Gesellschaft 2008, Berlin, Germany
16. T. Beckers, K. Bittkau, C. Rockstuhl, S. Fahr, F. Lederer and R. Carius, „Nano-scale investigation of light scattering at randomly textured light trapping structures for thin-film silicon solar cells“, MRS Spring Meeting 2008, San Francisco, California, USA
17. M. Peters, J. C. Goldschmidt, P. Löper, C. Ulbich, T. Kirchartz, S. Fahr, S. W. Glunz, A. Gombert “PHOTONIC STRUCTURES FOR THE APPLICATION IN SOLAR CELLS” 20th Workshop on Quantum Solar Energy Conversion - (QUANTSOL 2008) March 1-7, 2008, Bad Gastein, Salzburg, Österreich
18. S. Fahr, C. Menzel, T. Paul, C. Rockstuhl, and F. Lederer, “Periodic arrays of metallic nanoparticles as efficient intermediate reflectors in aSi:H- μ cSi solar cells”, OWTNM 2009, Jena, Germany
19. A. Bielawny, J. Üpping, P. T. Miclea, R. B. Wehrspohn, C. Rockstuhl, F. Lederer, M. Peters, L. Steidl, R. Zentel, S. –M. Lee, M. Knez, A. Lambertz, and R. Carius, “3D photonic crystal interlayers for micromorph thin film silicon tandem cell”, 73. Annual Meeting of the Deutsche Physikalische Gesellschaft 2009, Dresden, Germany
20. C. Rockstuhl, S. Fahr, and F. Lederer, “How to Enhance Absorption in Thin Film Single and Tandem Solar Cells using Localized Plasmons?”, PECS VIII 2009, Sydney, Australia
21. A. Bielawny, J. Üpping, P. T. Miclea, R. B. Wehrspohn, C. Rockstuhl, F. Lederer, M. Peters, L. Steidl, R. Zentel, S. –M. Lee, M. Knez, A. Lambertz, and R. Carius, “3D photonic crystal interlayers for micromorph thin film silicon tandem cell”, PECS VIII 2009, Sydney, Australia
22. C. Rockstuhl, S. Fahr, T. Paul, C. Menzel, F. Lederer, K. Bittkau, T. Beckers, and R. Carius “Photon Management in Thin Film Solar Cells”, CLEO/QELS 2009 Baltimore, Maryland, USA
23. S. Fahr, C. Rockstuhl, and F. Lederer, “Plasmonics in Thin Film Solar Cells”, TaCo-Na-Photonics 2009 Bad Honnef, Germany
24. R. Wehrspohn, J. Uepping, A. Bielawny, C. Rockstuhl and R. Carius, “3D Photonic Crystal Intermediate Reflector for Micromorph Thin-film Tandem Solar Cell”, MRS Fall Meeting 2009 Boston, MA
25. A. Bielawny, J. Üpping, P. T. Miclea, R. B. Wehrspohn, C. Rockstuhl, F. Lederer, M. Peters, L. Steidl, R. Zentel, S. –M. Lee, M. Knez, A. Lambertz, and R. Carius, “3D Photonic Crystal Intermediate Reflector for Micromorph Thin-Film Tandem Solar Cell”,

- 24th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition 2009, Hamburg, Germany
26. C. Rockstuhl, S. Fahr, and F. Lederer, "Optimized Surface Profiles for Thin Film aSi:H Solar Cells", 24th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition 2009, Hamburg, Germany
 27. T. Beckers, K. Bittkaz, R. Carius, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Nanoscale Investigation of Intermediate Reflectors in Tandem Solar Cells with Randomly Textured Surfaces", 24th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition 2009, Hamburg, Germany
 28. S. Fahr, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Metallic Nanoparticles as Efficient Intermediate Reflectors in aSi:H- μ cSi Solar Cells", 24th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition 2009, Hamburg, Germany
 29. J. Üpping, A. Bielawny, P. T. Miclea, R. B. Wehrspohn, C. Rockstuhl, F. Lederer, M. Peters, L. Steidl, R. Zentel, S. -M. Lee, M. Knez, A. Lambertz, and R. Carius, "3D photonic crystal intermediate reflectors for micromorph thin film silicon tandem cell", SPIE Optics + Photonics 2009, San Diego, USA
 30. J. Üpping, R.B. Wehrspohn, C. Helgert, T. Pertsch, C. Ulbrich, T. Kirchhartz, U. Rau, L. Steidl, R. Zentel, „Inverted opal structures for ultra light trapping in solar cells”, SPIE Photonics Europe 2010, Brüssel, Belgien
 31. M. Kroll, T. Käsebier, M. Otto, R. Salzer, R.B. Wehrspohn, E.-B. Kley, T. Pertsch, "Optical modeling of needle like silicon surfaces produced by an ICP-RIE process", SPIE Photonics Europe 2010, Brüssel, Belgien
 32. M. Otto, T. Käsebier, M. Kroll, R.B. Wehrspohn, "Optimization of the electrical and optical properties of ALD-deposited TCOs on black silicon surfaces", SPIE Photonics Europe 2010, Brüssel, Belgien
 33. S. Fahr, C. Rockstuhl, and F. Lederer, "Intermediate reflectors in thin film solar cells comprising randomly textured surfaces", SPIE Photonics Europe 2010, Brüssel, Belgien

Literaturverzeichnis

- [1] W. Shockley and H.J. Queisser, "Detailed Balance Limit of Efficiency of p-n Junction Solar Cells," J. Appl. Phys. **32**, 510-519 (1961).
- [2] E. Yablonovitch, "Statistical ray optics," J. Opt. Soc. Am. **72**, 899-907 (1982).
- [3] J. Müller, B. Rech, J. Springer, and M. Vanecek, "TCO and light trapping in silicon thin film solar cells," Sol. Energy **77**, 917-930 (2004).
- [4] C. Haase and H. Stiebig, "Thin-film silicon solar cells with efficient periodic light trapping texture," Appl. Phys. Lett., vol. 91, 2007, p. 061116.
- [5] J. Üpping, A. Bielawny, P.T. Miclea, and R.B. Wehrspohn, "3D photonic crystals for ultra-light trapping in solar cells," SPIE **7002**, 70020W (2008).

III Erfolgskontrollbericht

1 Beitrag des Ergebnisses zu den förderpolitischen Zielen

Im Rahmen des Vorhabens erfolgte die Erarbeitung und Umsetzung von Konzepten für die Realisierung von nanostrukturierten Solarzellen deutlich über die Grenzen des zum Startzeitpunkt bestehenden Standes der Forschung hinaus. Mit Hilfe von Nanostrukturen wurden Möglichkeiten zur Realisierung neuartiger photovoltaischer Systeme mit gesteigerter Funktionalität eruiert. Die Grenzen der weiteren Verbesserung der Strukturen und der Skalierung in Bezug auf Strukturgrößen und Effizienzsteigerung wurden evaluiert.

Das Vorhaben diente damit der Erschließung der wissenschaftlich-technischen Grundlagen für die Energietechnologie des 21. Jahrhunderts. Es erfolgte der Abbau von Wissens- und Technologiebarrieren bei der Realisierung und Anwendung von Nanotechnologien in der Photovoltaik.

Die erzielten Ergebnisse entsprechen somit insgesamt den umfangreichen Forderungen der Bekanntmachung zum Förderprogramm.

2 Wissenschaftlich technische Ergebnisse, Nebenergebnisse und gesammelte Erfahrungen

Aufzählung der wichtigsten wissenschaftlich-technischen Ergebnisse

- Etablierung einer breiten methodischen Basis zur Simulation und Modellierung photonischer Nanostrukturen in photovoltaischen Systemen
- Design einer idealen Filterstruktur zur Effizienzsteigerung einer Solarzelle durch Beeinflussung des Akzeptanzwinkels, welche es ermöglicht, das theoretische Effizienzlimit für unkonzentrierte Beleuchtung zu überwinden
- Überführung der idealen Filterstruktur in ein technisch realisierbares System auf Basis eindimensionaler photonischer Kristalle
- Optimierung von Filtern auf Basis eindimensionaler photonischer Kristalle unter Berücksichtigung konkreter Materialsysteme sowie Materialdispersion und Fertigungstoleranzen
- Experimenteller Nachweis der Wirksamkeit winkelselektiver Filter anhand eines a-Si:H-Dünnschichtsolarellensystems
- Charakterisierung der der Light-Trapping-Eigenschaften stochastischer Oberflächen für den Einsatz in a-Si:H-Dünnschichtsolarellenszellen anhand gemessener Topographien und rigoroser optischer Simulationen
- Ableitung von Gütekriterien für die Topographie stochastischer Oberflächen bezüglich ihrer Light-Trapping-Effizienz
- Verifikation der abgeleiteten Gütekriterien anhand Bezüglich des Ortsfrequenzspektrums und Streuverhaltens optimierter synthetischer Oberflächenprofile
- Entwicklung approximativer numerischer Verfahren zur Simulation der Absorption in Solarellenszellen
- Herstellung deterministischer Light-Trapping Strukturen mittels binärer und mehrstufiger lithographischer Verfahren

- Optimierung lithographisch vorstrukturierter Substrate zur Beeinflussung des Wachstums von Kolloidkristallen entlang einer thermodynamisch nicht favorisierten Wachstumsrichtung
- Skalierung lithographischer Strukturierungsverfahren auf für photovoltaische Untersuchungen angepasste große Flächen
- Implementierung nanoskaliger binärer Beugungsstrukturen in ein a-Si:H-Dünnschichtsolarzellensystem und experimenteller Nachweis des Light-Trapping-Effekts
- Entwicklung von Bildverarbeitungsalgorithmen zur dreidimensionalen Geometrierekonstruktion mittels Focused-Ion-Beam-Slicing
- Experimentelle Charakterisierung von in photovoltaischen Systemen eingesetzten nanostrukturierten Elementen mittels winkel- und wellenlängenaufgelöster optischer Verfahren

3 Fortschreibung des Verwertungsplans

Im Projekt wurden die wissenschaftlich-technischen Grundlagen nanostrukturierter Solarzellen zur Effizienzsteigerung photovoltaischer Systeme durch Photonenmanagement erarbeitet.

Die Verwertung der im Projekt erarbeiteten Ergebnisse erfolgt einerseits durch den Transfer der neuen Erkenntnisse hin zu den vielfältigen Partnern aus Forschung und Wirtschaft die insbesondere in der Region angesiedelt sind und mit denen die Friedrich-Schiller-Universität eng zusammenarbeitet. Dies erfolgte einerseits durch eine ganze Reihe von Veranstaltungen, in denen die Partner über die neuen methodischen Ansätze informiert und teilweise auch geschult worden sind. Gleichzeitig erfolgte ein intensiver Wissens- und Know-how-Transfer durch den Personalaustausch. An der Friedrich-Schiller-Universität wurden Mitarbeiter durch studentische Ausbildung und verschiedene Formen von Qualifizierungsarbeiten zu den modernen Methoden optischer Nanostrukturen ausgebildet. Diese arbeiten nachfolgend in den benachbarten Forschungsinstituten und Industriefirmen und transferieren damit auf sehr effiziente Weise das erworbene Wissen.

Der Transfer der Ergebnisse in die Industrie ist die Grundlage für die wirtschaftliche Verwertung der Forschungsergebnisse der Friedrich-Schiller-Universität. Gleichzeitig ist die Friedrich-Schiller-Universität auch an einer ganzen Reihe von direkten Industrieprojekten zur Verwertung der Forschungsergebnisse beteiligt. Dabei werden die gewonnenen Erkenntnisse zu optischen Nanostrukturen direkt eingesetzt, um praxisrelevante Lösungen für Anwendungsprobleme zu erzielen, die auf einer Methodik beruhen, die erst aus der grundsätzlichen Forschung in der Friedrich-Schiller-Universität hervorgegangen ist.

Darüber hinaus erfolgt die Verwertung der Projektergebnisse in weiteren öffentlich geförderten Forschungsprojekten, deren Akquirierung erst durch die an der Friedrich-Schiller-Universität erarbeiteten Ergebnisse der Grundlagenforschung möglich wurde. Dazu gehören Projekte, die sich auch weiterhin mit grundsätzlichen Fragestellungen auseinandersetzen sowie Projekte in denen mit weiteren Partnern Probleme untersucht werden, die zur Anwendung der bereits erlangten Forschungsergebnisse beitragen werden.

Die im Rahmen dieses Projektes gewonnenen Forschungsergebnisse finden zudem in der von der Friedrich-Schiller-Universität Jena getragenen Ausbildung von Physikern in der Abbe School of Photonics ihren unmittelbaren Niederschlag. Durch das Kompetenznetzwerk

OptoNet e.V. wird ein aktiver Wissenstransfer auch an nicht direkt am Projekt beteiligte mittelständische Firmen betrieben.

4 *Arbeiten, die zu keiner Lösung geführt haben*

keine

5 *Präsentationsmöglichkeiten für mögliche Nutzer*

Die Projektergebnisse wurden in verschiedenen Fachzeitschriften und auf nationalen und internationalen Tagungen sowie Messen einer breiten Öffentlichkeit zugänglich gemacht. Damit sind die erzielten Ergebnisse für mögliche Nutzer abrufbar.

Darüber hinaus wurden durch den Verbund mehrere Workshops und Fachtagungen organisiert, in denen unterschiedliche Teilnehmergruppen über neueste Ergebnisse informiert wurden, z.B. wurden Symposien zum Thema „Photonics for Solar Energy Systems“ im Rahmen der SPIE-Photonics-Europe-Konferenzen durch den Projektverbund gestaltet.

6 *Einhaltung der Ausgaben- und Zeitplanung*

Die Arbeiten im Rahmen des Projektes erfolgten plangemäß. Die ursprünglichen Arbeits- und Kostenplanungen konnten eingehalten werden. Die Meilensteine wurden erfüllt.