

Sonnige Aussichten für Solarzellen

VIRTUELLES PROTOTYPING VON NANOSTRUKTUREN

Solarzellen machen eine praktisch unbegrenzte Energiequelle nutzbar – die elektromagnetische Strahlung der Sonne. Ob sich Solarzellen für die Stromversorgung in Zukunft durchsetzen werden, hängt von ihrem Wirkungsgrad und den Kosten ab. Neue nanophotonische Materialien und Technologien, aber auch Simulationssoftware, die auf der Finite-Difference-Time-Domain-Methode beruht, könnten der Schlüssel für eine effizientere Nutzung des Sonnenlichts sein.

PAUL PADDON
BERNHARD MICHEL

In den letzten beiden Jahrzehnten hat sich der Preis für Solarstrom mehr als halbiert. Er ist aber immer noch wesentlich teurer als die Stromversorgung mit fossilen und nuklearen Brennstoffen. Solarzellen haben jedoch das Potenzial, einen Beitrag zum zukünftigen weltweiten Energiebedarf zu leisten, da Innovationen ihren Wirkungsgrad erhöhen und somit den Solarstrompreis senken könnten.

Kristalline Siliziumzellen mit typischen Wirkungsgraden zwischen 13 und 22 Prozent sind derzeit am weitesten verbreitet. Sie machen mehr als 90 Prozent des photovoltaischen Markts aus. Dieser rapide wachsende Markt unterliegt allerdings einem steten Wandel. Tatsächlich findet schon mehr als die Hälfte aller Silizium-Wafer Verwendung im Solarenergiesektor. Seit 2006 übertrifft die Fotovoltaik die Halbleiterindustrie im weltweiten Verbrauch an Silizium.

Dünnschicht-Solarzellen sind innovative Konkurrenten der kristallinen Siliziumzellen. Ihren attraktiven, geringeren Produktionskosten stehen etwas niedrigere Wirkungsgrade zwischen 8 und 18 Prozent gegenüber. Diese Zellen basieren typischerweise auf Vielfachschichten verschiedener Materialien auf Glas- oder Metallsubstraten. Der Wunsch nach niedrigeren Kosten und höheren Wirkungsgraden regt Forscher dazu an, immer wieder neue nanophotonische Technologien zu untersuchen und auf ihre Eignung für die Optimierung von Solarzellen zu überprüfen.

Mottenaugenstruktur statt Beschichtung

Jeder, der schon einmal einen polierten Silizium-Wafer in der Hand hatte, wird festgestellt haben, dass er fast wie ein Spiegel aussieht. Tatsächlich reflektiert die Siliziumoberfläche nahezu die Hälfte des Sonnenlichts. Antireflex-Beschichtungen sind nötig, um die Reflexion zu reduzieren und so die Lichtabsorption in der Zelle zu erhöhen. Breitbandbeschichtungen zur Reflexunterdrückung über das gesamte Sonnenspektrum wären ideal. Konventionelle Breitbandbeschichtungen setzen sich jedoch aus vielen Lagen unterschiedlicher Materialien zusammen, was sich beim Preis signifikant bemerkbar machen würde. In der Praxis bringt man daher meist nur eine Einzelschicht aus SiN_x oder TiO_2 auf die Siliziumzelle auf. Sie reduziert die Reflexion wir-

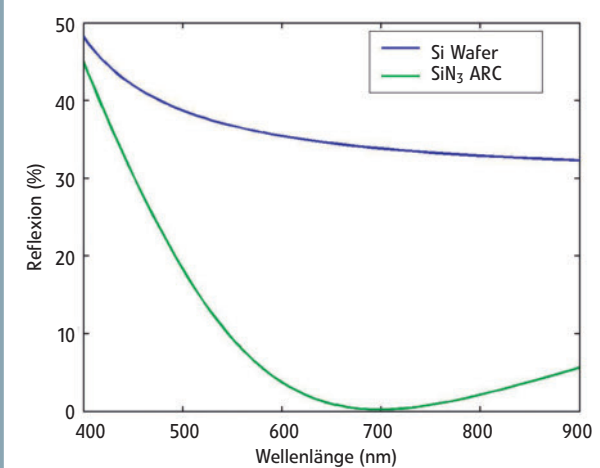
KONTAKT

Simuloptics GmbH,
D-91126 Schwabach,
Tel. +49 (0) 91 22 /8 30 -3 00,
Fax +49 (0) 91 22 /8 30 -3 03,
www.simuloptics.de

Lumerical Solutions, Inc.,
Vancouver BC, Canada V6C 1H2,
www.lumerical.com

kungsvoll zwischen 600 und 800 nm (**Bild 1**), lässt aber eine relativ starke Restreflexion bei anderen Wellenlängen zu, was den Wirkungsgrad wiederum reduziert. Eine kostengünstige nanophotoni-

Reflexion mit und ohne ARC

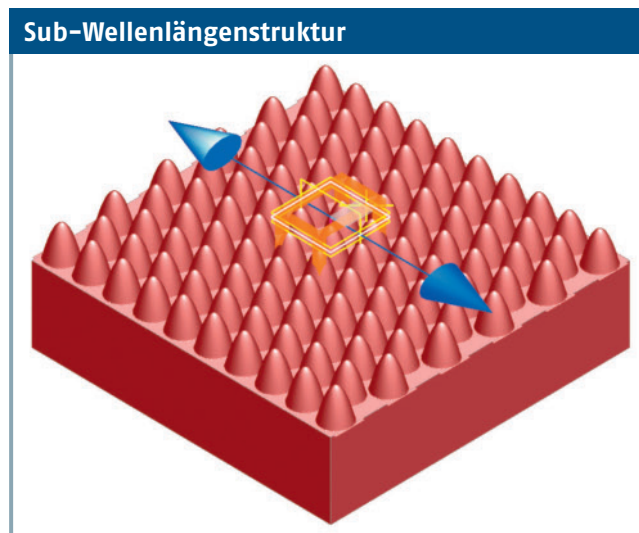


1 Reflexion von Silizium-Wafern mit und ohne Antireflex-Beschichtung (ARC)

sche Lösung für eine Breitband-Antireflexbeschichtung beruht auf Sub-Wellenlängenstrukturen, die einem Mottenaugen gleich (Bild 2). Einige nachtaktive Motten tragen solche Strukturen auf der Oberfläche ihrer Augen und unterdrücken so effizient die Reflexion von Licht. Während sie bei den Motten zur Tarnung dienen, erhöhen sie bei Solarzellen die Lichtabsorption und gleichzeitig die Ladungsträgerausbeute. Man ätzt Mottenaugenstrukturen in Silizium-Wafer, indem man mittels Rotationsbeschichtung (Spin Coating) kolloidale Siliziumdioxid-Monolagen aufbringt und als Ätzmasken verwendet [1]. Die Reflexionseigenschaften solcher Strukturen lassen sich quantitativ modellieren.

Das ganze Spektrum mit einer Simulation

Die Finite-Difference-Time-Domain- (FDTD-) Methode hat sich als industrieller Standard für die quantitative Simulation von nanophotonischen Strukturen und Systemen etabliert. Aufbauend auf den Arbeiten von Yee [2], löst die FDTD-Methode die Maxwell-Gleichungen zeitabhängig auf einem diskreten Raumgitter. Die Vorteile sind Genauigkeit – außer der räumlichen und zeitlichen Diskretisierung gehen keine weiteren Näherungen ein – und Flexibilität. Somit erschließt diese Methode auch komplexe heterogene Strukturen der Simulation, die sich aus beliebigen Materialien zusammensetzen. Da die Rechnerleistungen bei gleichzeitig fallenden Preisen steigen, können Simulationsaufgaben,



2 In einen Silizium-Wafer geätzte Mottenaugenstruktur

die vor wenigen Jahren noch als unlösbar galten, inzwischen auf normalen Desktop-Computern oder auf Laptops bearbeitet werden. Der Laptop, auf dem dieser Text geschrieben wurde, ist immerhin so schnell, dass er 1995 noch zu den Top 500 der schnellsten Supercomputer gezählt hätte. Das ist ein Grund für den zunehmenden Einsatz der FDTD-Methode in der industriellen Forschung und Entwicklung.

Das Mottenaugen besteht aus einem Siliziumsubstrat mit einer hexagonalen Oberflächenstruktur und einer Periode von $a = 510$ nm. Die Einheitszelle dieser Struktur besteht aus einem paraboloidförmigen Höcker mit einer Höhe von 800 nm und einem Basisdurchmesser von 470 nm. Da die Strukturdimensionen vergleichbar mit der Wellenlänge sind, kann das elektromagnetische Feld keine Details davon auflösen. Es »sieht« im Wesentlichen nur eine Schicht mit einem kontinuierlichen Brechungsindexübergang. Betrachtet man eine dünne

Scheibe der Schicht, ergibt sich in Abhängigkeit von der Höhe z der Füllfaktor (Siliziumanteil)

$$f(z) = 2\pi r(z)^2 / (a^2 \sqrt{3})$$

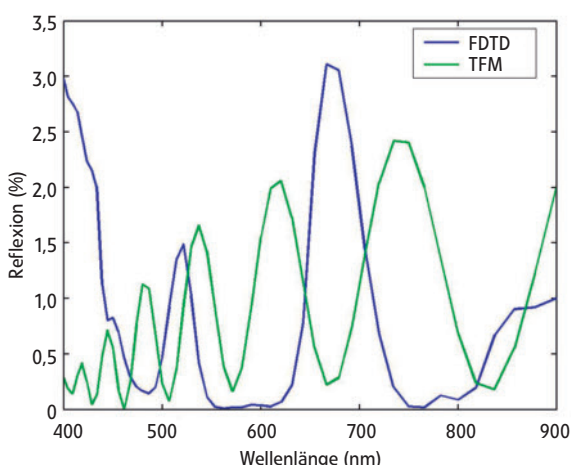
wobei $r(z)$ der Radius des Siliziumhöckers in der Höhe z ist. Mit zunehmendem $r(z)$ nimmt also auch der Füllfaktor des Siliziums und damit der effektive Brechungsindex zu. Im Rahmen der Effektiv-Medium-Näherung in [1] ist der Brechungsindex als Funktion der Höhe z gegeben durch

$$n(z) = \left[f(z)n_{Si}^q + (1-f(z))n_{air}^q \right]^{1/q}$$

mit $q = 2/3$, wobei n_{Si} den stark mit der Wellenlänge variierenden komplexen Brechungsindex von Silizium und n_{air} den Brechungsindex der umgebenden Luft bezeichnet. Setzt man den so definierten effektiven Brechungsindex in eine Schichtrechnung ein, die das Mottenaugen in sehr viele Einzelschichten zerlegt, kann man grob die Reflexion der Mottenaugenstruktur abschätzen, wie die grüne Kurve in Bild 3 zeigt. Da der Brechzahlkontrast zwischen Silizium und Luft sehr hoch ist, liefert dieser Ansatz nur eine grobe Näherung. Qualitativ ergibt sich eine deutliche Reduktion der Reflexion – ein vielversprechendes Ergebnis, das wir nun mit der FDTD-Methode genauer modellieren.

Für die Simulationen verwenden wir die kommerzielle Software »FDTD Solutions« von Lumerical. Dabei gehen wir von einem senkrechten Lichteinfall aus. Das in FDTD Solutions eingebaute dispersive Modell der optischen Eigenschaften von Silizium erlaubt es, das ganze Reflexionsspek-

FDTD-Simulation und Effektiv-Medium-Näherung



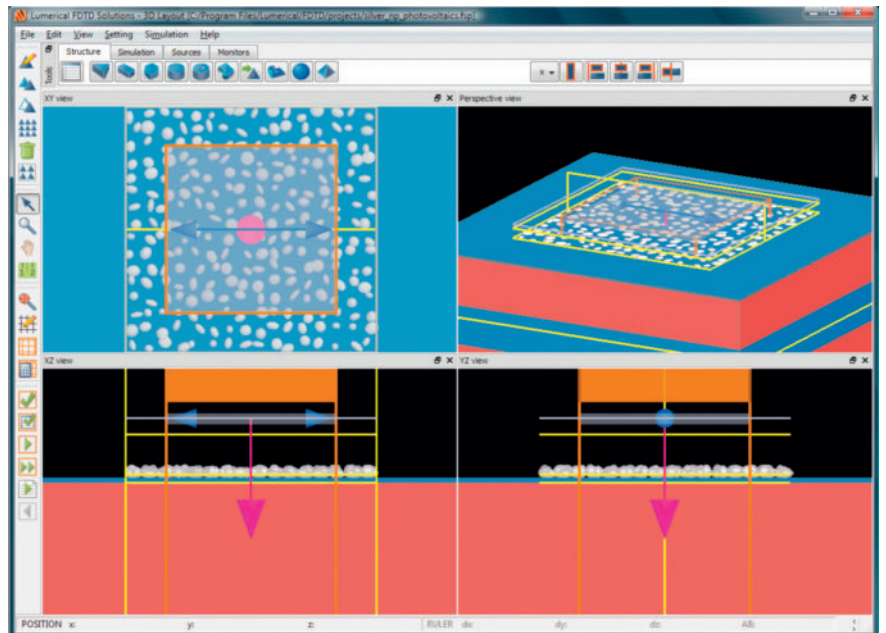
3 Reflexion von einem Silizium-Wafer mit eingetzter Mottenaugenstruktur, berechnet mit FDTD Solutions (blau) und einem Effektiv-Medium-Modell für dünne Schichten (grün)

► trum in einem einzigen Simulationslauf zu berechnen. Das Ergebnis wird in der blauen Kurve in **Bild 3** dargestellt und ist deutlich verschieden von der Effektiv-Medium-Näherung. Letztere versagt offensichtlich bei der quantitativen Analyse des Mottenaugenmodells, während die FDTD-Simulation zuverlässige Ergebnisse liefert.

Ein weiterer Vorteil der FDTD-Methode ist, dass sich mit ihr die Reflexionseigenschaften unterschiedlicher Strukturen mit verschiedenen Perioden, Ätztiefen sowie anderen Formen der Höcker simulieren lassen. Damit ist man in der Lage, das Design zu optimieren, ohne für jede Struktur einen neuen Prototyp fertigen zu müssen. Ebenso lassen sich Einflüsse wie Oberflächenrauigkeit und andere Störungen der Struktur systematisch untersuchen. Die FDTD-Methode eignet sich für das virtuelle Prototyping von Nanostrukturen, insbesondere von nanostrukturierten Solarzellen.

Silber als Lichtfalle

Auf die relativ dicken Silizium-Wafer entfällt ein großer Anteil der Kosten bei den Solarmodulen. Dünnschichttechnologie kann zwar kostengünstiger sein, ist aber im Vergleich zu kristallinen Siliziumzellen weniger effizient, aufgrund der relativ geringen Lichtabsorption und der Ladungsträgerverluste durch Rekombination an der Oberfläche. Alternative, innovative Techniken sind daher nötig, um auch in den Dünnschichten Licht wirkungsvoll einzufangen.

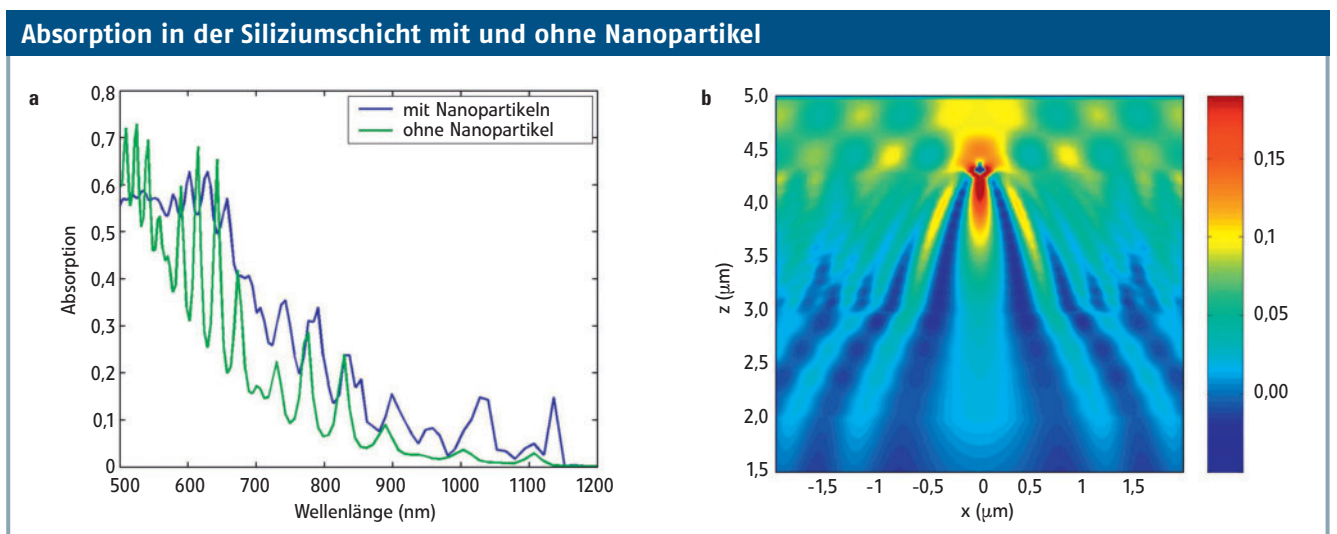


4 Silber-Nanopartikel auf einem SOI-Wafer

Eine dieser vielversprechenden Techniken setzt Metall-Nanopartikel ein (**Bild 4**), um Licht in das Silizium einzukoppeln [4]. Ein thermischer Verdampfungsprozess erzeugt Silber-Nanopartikel auf der Oberfläche der Solarzelle, die nach dem Erstarren durch die Oberflächenspannung koaleszieren. Die so entstehenden zufälligen Nanostrukturen aus Silber haben im Durchschnitt einen Durchmesser von 100 nm. Die Partikel befinden sich oberhalb einer dielektrischen Beschichtung auf einem sogenannten SOI-Wafer (Silicon on Insulator – Silizium auf Isolator). Bei geschickter Wahl des dielektrischen Materials lässt sich die Resonanz des Oberflä-

chenplasmons der Silberpartikel so einstellen, dass die Schicht wie eine Lichtfalle wirkt. **Bild 4** zeigt eine mit dem Layout-Editor von FDTD Solutions erstellte SOI-Struktur mit Silber-Nanopartikeln. Die obere Siliziumschicht ist 1250 nm dick und mit einer 30-nm-SiO₂-Schicht bedeckt. Die untere SiO₂-Schicht ist 1000 nm dick.

Wir modellieren das einfallende Sonnenlicht als breitbandige kollimierte Lichtquelle, die auf einen 3 x 3 μm² großen Ausschnitt der Oberfläche fällt. Zur Berechnung des nach oben reflektierten beziehungsweise nach unten transmittierten Energieflusses verwendet FDTD Solu-



5 a) Berechnete Absorption in der oberen Siliziumlage, mit (blau) und ohne (grün) Nanopartikel; b) Energieflussdichte (Betrag des Poyntingvektors) in der Nähe eines Silberteilchens auf der SOI-Struktur. Ganz klar ist zu erkennen, wie viel Licht das Teilchen in die Siliziumschicht streut. Dies führt schließlich zu einer höheren Absorption in der Siliziumschicht

tions sogenannte Power-Monitore, die in **Bild 4** gelb umrandet dargestellt sind. Ein dritter Power-Monitor misst den Energiefluss von der nativen Oxidschicht in die obere Siliziumschicht. Der Energieerhaltungssatz erlaubt es dann, die Absorption in den Nanopartikeln und in der oberen Siliziumschicht zu bestimmen.

FDTD Solutions berücksichtigt alle optischen Effekte in der Schicht vollständig und ohne Näherungen: die Oberflächenplasmon-Resonanz der Nanopartikel, die Vielfachstreuung zwischen der Schicht des SOI-Wafers und den Nanopartikeln sowie auch die Kopplung mit Wellenleitermoden. **Bild 5** zeigt die Absorption in der Siliziumschicht an einem Silizium-Wafer mit Nanopartikeln (blau) und einem ohne (grün). Klar erkennbar ist, dass die Nanopartikel auf der Schicht die Absorption signifikant erhöhen, vor allem bei größeren Wellenlängen. Über alle Wellenlängen gewichtet, sagt die Simulation eine Erhöhung des Wirkungsgrads um 24 Prozent voraus. Das Ergebnis scheint der Intuition zu widersprechen, da man erwarten würde, dass eine Solarzelle mit Silberbeschich-

tung mehr Licht reflektiert und nicht weniger. Dies zeigt aber nur, wie stark sich die Eigenschaften von Nanopartikeln von denen dünner Schichten unterscheiden und wie wenig man sich hier auf die Intuition verlassen darf.

Die Software FDTD Solutions wird in Deutschland von Simuloptics in Schwabach vertrieben. ■

Fazit: Günstiger Solarstrom

Neue Technologien zur Nanostrukturierung von Oberflächen haben das Potenzial, die Kosten von Solarzellen der nächsten Generation zu senken und deren Wirkungsgrad zu erhöhen. Das würde Solarstrom billiger machen. Simulationen mit der FDTD-Methode unterstützen diese Entwicklung, indem sie Designern ein virtuelles Prototyping ermöglichen. Aufgrund der ständig steigenden Rechengeschwindigkeiten und der sinkenden Preise für Computer ist abzusehen, dass FDTD-basierte Simulationen eine immer wichtigere

Rolle bei der Entwicklung neuer Solarzellentechnologien spielen werden.

LITERATUR

- 1 C. H. Sun, P. Jiang, and B. Jiang: ›Broadband moth-eye antireflection coatings on silicon‹; Appl. Phys. Lett. 92, 061112 (2008)
- 2 Kane Yee: ›Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media‹; Antennas and Propagation, IEEE Transactions on 14 (1966) S. 302 – 307
- 3 H. A. Macleod: ›Thin-Film Optical Filters‹; 3rd ed., Institute of Physics, Bristol 2001
- 4 S. Pillai, K. R. Catchpole, T. Trupke, and M. A. Green: ›Surface plasmon enhanced silicon solar cells‹; J. Appl. Phys. 101, 093105 (2007)

AUTOREN

PAUL PADDON, PhD, ist Director Sales bei Lumerical Solutions in Vancouver, Kanada.

Dr. BERNHARD MICHEL ist Geschäftsführer von Simuloptics in Schwabach (E-Mail: bm@simuloptics.de).