

Strooien met licht

Dunnefilm-zonnecellen bevatten nanotexturen die het invallende zonlicht verstrooien en zo de absorptie van licht in de absorberende laag verhogen. Voor een maximale absorptie moet de morfologie van de nanotexturen geoptimaliseerd worden. Om deze optimalisering door te kunnen voeren, ontwikkelen we een verstrooiingsmodel dat op de scalaire verstrooiingstheorie gebaseerd is. Door de optimalisering leren we welke textuurparameters de verstrooiing voornamelijk beïnvloeden en hoe groot het maximaal verwachte effect van de nanotexturen zal zijn. Klaus Jäger

Met een totale geïnstalleerde capaciteit van meer dan 100 gigawattpiek aan het eind van 2012 is fotovoltaïsch (PV) gegenereerde elektriciteit niet meer uit de globale elektriciteitsportefolio weg te denken. Voor het grootste gedeelte van de geïnstalleerde en geproduceerde PV-modules worden zonnecellen van kristallijn silicium gebruikt, met een rendement van 17-25%. Omdat deze zonnecellen van siliciumwafers met een dikte van enkele honderden micrometers gemaakt worden, is het materiaal- én energieverbruik voor de productie zeer hoog. In tegenstelling tot deze cellen zijn de actieve lagen van dunnefilm-zonnecellen maar enkele micrometers dik, dus ruwweg honderd keer zo dun als kristallijne zonnecellen. Behalve een forse materiaalbesparing hebben dunnefilm-zonnecellen nog een ander voordeel: ze kunnen tot flexibele modules verwerkt worden, zoals in figuur 1 te zien is.

Dunnefilm-zonnecellen kunnen van verschillende materialen worden gemaakt, zoals cadmiumtelluride (CdTe), koper-indium-gallium-diselenide (CIGS), of organische materialen. Deze materialen zijn echter vaak giftig (CdTe), zeldzaam (In) of hebben problemen met stabiliteit (organisch). Als we de zonnecel

maken van dunne siliciumlaagjes, hebben we deze problemen niet.

Een groot nadeel van dunnefilm-zonnecellen van amorf (a-Si:H) [1] of nanokristallijn (nc-Si:H) [2] silicium is het relatief lage gestabiliseerde rendement van rond de 10%. Door een amorfe cel op een nanokristallijne cel te stapelen (een zogenaamde tandemcel) kan het zonnespectrum vanwege de verschillende bandkloven van a-Si:H en nc-Si:H beter benut worden wat een rendement van rond de 12% oplevert. Dunnefilm-silicium-zonnecellen bevatten nanotexturen die het invallende zonlicht verstrooien zoals in figuur 3a geschetst is. Daardoor wordt de

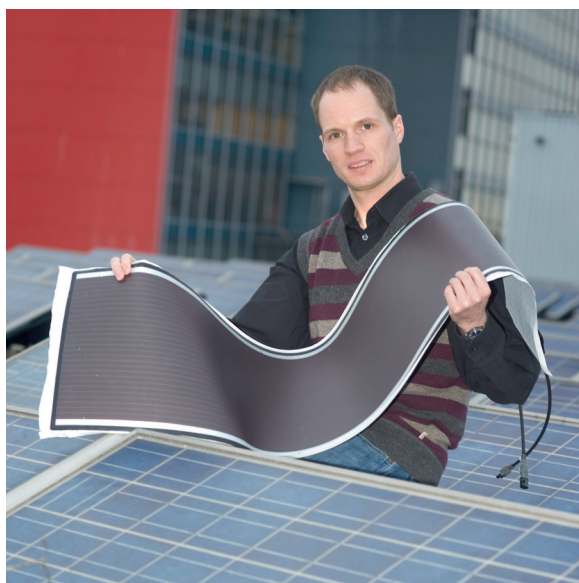
gemiddelde weglengte van de fotonen in de absorberende lagen van de zonnecel vergroot, wat tot een hogere absorptie leidt en vervolgens tot een hogere stroom. Figuur 3b laat het effect van nanotexturen op het externe quantumrendement (EQE) zien: dat wil zeggen dat over een groot gedeelte van het spectrum en met name in het rood een hogere fractie van de fotonen omgezet wordt in geïncollimeerde ladingsdragers.

Voor de uiteindelijke opbrengst van de zonnecel is de morfologie van de nanotexturen bepalend en dus is het zeer belangrijk om geoptimaliseerde structuren te ontwerpen. In dit artikel laten we zien hoe we de morfologieën optimaliseren.

Hiervoor hebben we vier bouwstenen nodig: (1) een optisch model dat de verstrooiing van de nanotexturen kan voorspellen, (2) een elektrisch model waarmee het effect van de verstrooiing op de zonnecelopbrengst kan worden bepaald, (3) een manier om goed controleerbare computergegenereerde nanotexturen te maken, en (4) een algoritme om de optimalisering door te kunnen voeren.

Modelleren van de verstrooiing en zonnecelparameters

Ons verstrooiingsmodel – de

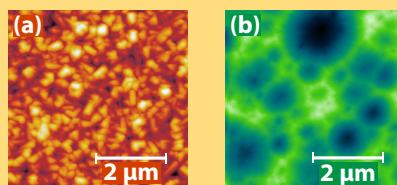


Figuur 1 De auteur met een flexibele PV-module van HyET Solar in een veld van traditionele niet-flexibele PV-modules. Foto: T. van Dijk.

Technologische realisatie van nanotexturen in dunnefilm-zonnecellen

In het algemeen worden nanotexturen via getextureerde laagjes van transparante geleidende oxiden (TCO, *transparent conducting oxide*) in de zonnecellen ingebouwd. De meest gebruikelijke TCO-materialen zijn tindioxide en zinkoxide. De werking van de TCO-laag is drievoudig: ten eerste dient deze zeer transparant te zijn om zo veel mogelijk licht door te laten naar de fotoactieve siliciumlagen. Ten tweede dient ze goed elektrisch geleidend te zijn, omdat de laag ook functioneert als elektrisch contact aan de voorzijde van de cel. Ten derde verstrooit de TCO-laag met haar nanogetextureerde oppervlak het binnenkomende licht.

Sommige TCO-lagen krijgen hun structuur door het productieproces; andere moeten nabehandeld worden, bijvoorbeeld door nat-chemisch etsen.

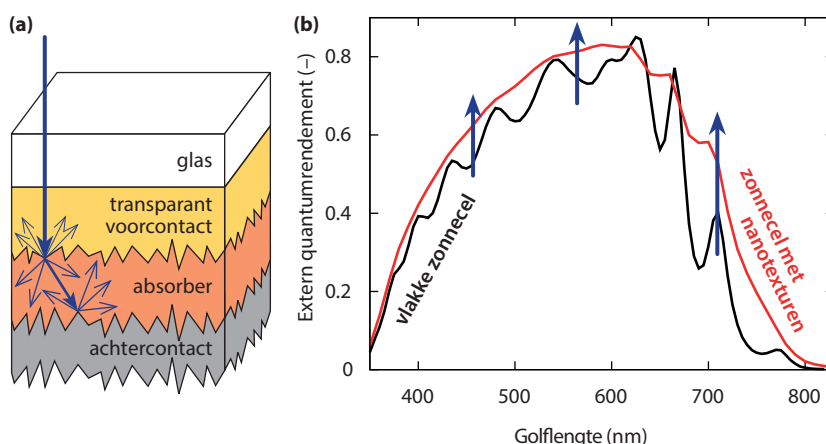


Figuur 2 Twee voorbeelden van nanogetextureerd TCO: a) pyramideachtig tindioxide en b) kraterachtig zinkoxide.

eerste bouwsteen – is in de scalaire verstrooiingstheorie geformuleerd, waarin het vectorkarakter van het elektromagnetische veld en dus het licht wordt genegeerd. Verder maakt het model gebruik van de Fraunhofer diffractie-integraal, wat betekent dat het doorgelaten veld direct achter het verstrooiende object en het verstrooide lichtveld ver achter het object via Fouriertransformaties aan elkaar gekoppeld zijn. Door het gebruiken van eenvoudige aannames voor het veld direct achter het verstrooiende object kunnen we snelle fouriertransformatie (*fast Fourier transform*) algoritmes gebruiken waardoor het model zeer snel is. Het verstrooiingsmodel is zo geformuleerd dat het voor grensovervlakken tussen willekeurige materialen werkt (zie kader *Het verstrooiingsmodel*) [3].

Figuur 4 toont de hoekafhankelijke intensiteitsdistributie (AID) en de haze voor twee verschillende TCO-luchtgrensovervlakken. Zoals we kunnen zien, kan het model de gemeten parameters goed nabootsen, hoewel de twee onderzochte texturen erg verschillen. Het is opmerkelijk om te zien dat een oude theorie, zoals de klassieke diffractietheorie, nog steeds van groot nut is voor de toegepaste natuurkunde.

Als tweede bouwsteen gebruiken we de opto-elektrische simulatiesoftware, ASA, die al meer dan 25 jaar aan de TU Delft wordt ontwikkeld [4]. Met ASA kunnen we het effect van de nanotexturen op de prestatie van dunnefilm-silicium-zonnecellen bestuderen. In figuur 5a zien we de EQE en de stroom-



Figuur 3 a) Verstrooiing van licht binnen een dunnefilm-silicium-zonnecel en b) het effect van de verstrooiing op het externe quantumrendement ten opzichte van een vlakke zonnecel.

spanningskarakteristiek van een zonnecel met alleen vlakke grensovervlakken. De vlakke cel is gebruikt om de elektrische parameters in ASA te kalibreren. Figuur 5b toont resultaten voor een cel met nanotexturen afkomstig van zinkoxide met een kraterachtige structuur en een *root-mean-square* (rms)-ruwheid (σ_r) van 35 nm. We zien dat het verstrooiingsmodel het effect van de nanotexturen op het gedrag van de zonnecel zeer goed kan simuleren [3].

Op zoek naar geoptimaliseerde nanostructuren

Computergegenereerde Perlinterstructuren [5] die een willekeurige hoogteverdeling met een vaste laterale structuurgrootte l combineren, zoals in de inzet van figuur 6 geschetst is, vormen de derde bouwsteen. Voor de optimalisering tellen we Perlinterstructuren met

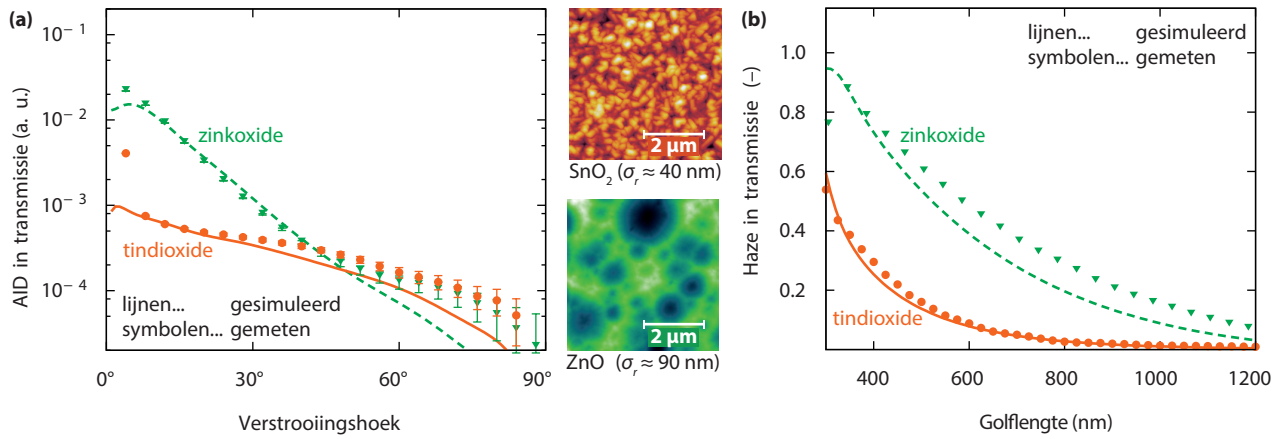
verschillende l bij elkaar op, waarbij we de totale rms-ruwheid constant houden. Deze combinatie van verschillende l scheidt een zeer grote parameter ruimte waarbinnen we de optimalisering uit kunnen voeren.

De vierde en laatste bouwsteen is het *simulated-annealing* algoritme dat een optimum zoekt, net als een systeem

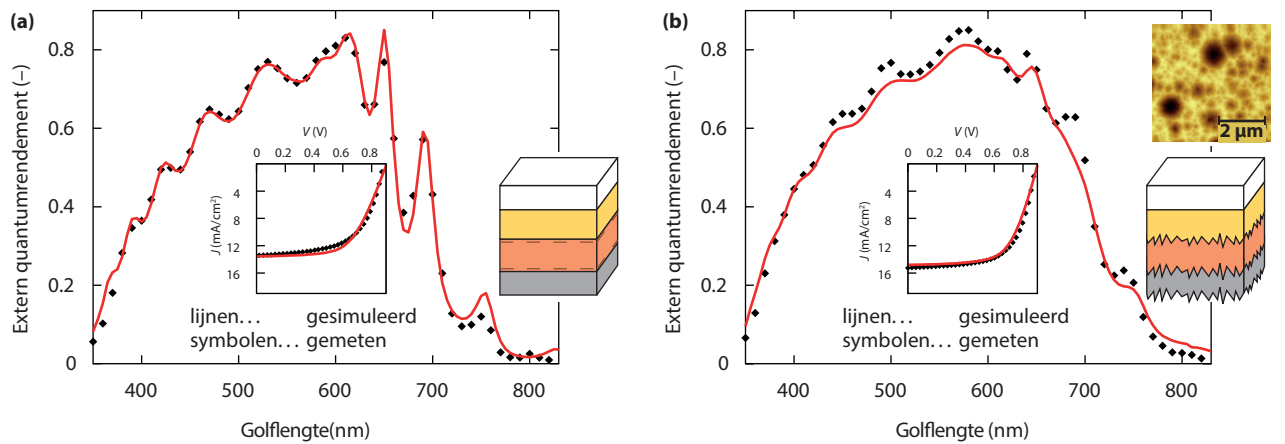
Klaus Jäger studeerde in 2008 af aan de ETH Zürich in Zwitserland als natuurkundige en promoveerde in 2012 cum laude aan de TU Delft. Hij werkte een jaar bij het Arnhemse bedrijf HyET Solar, dat flexibele zonnecellenfolie maakt. Sinds november 2013 is hij postdoc in de sectie Photovoltaic Materials and Devices van de TU Delft.



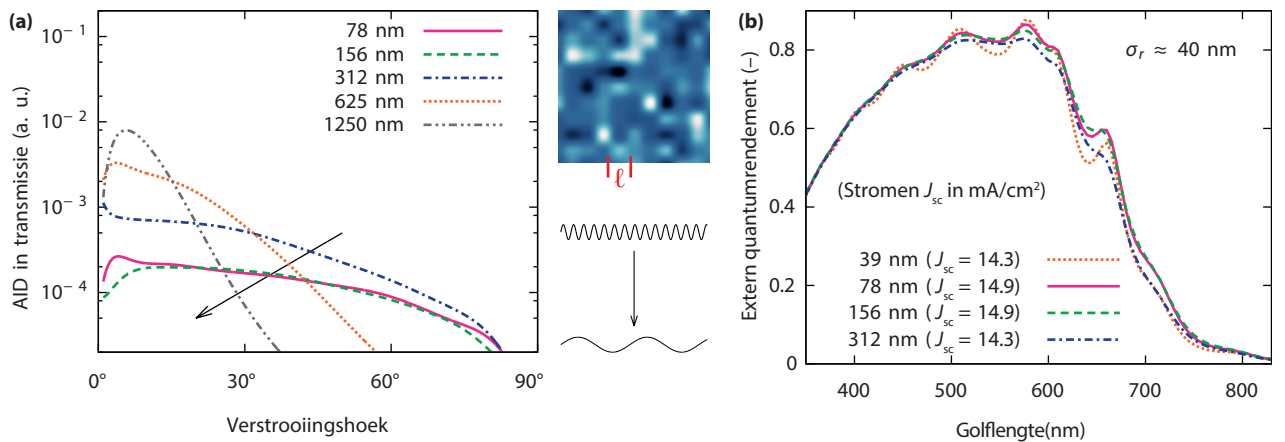
k.jaeger@erlenrain.at



Figuur 4 a) De AID bij 600 nm en b) de haze in transmissie voor twee verschillende TCO-lucht grensooppervlakken: piramide-achtig tindi-oxide van Asahi met een *root-mean-square*-(rms)-ruwheid $\sigma_r \approx 40$ nm en kraterachtig zinkoxide met $\sigma_r \approx 90$ nm.



Figuur 5 Gemeten en gesimuleerde zonnecelparameters voor een cel met a) vlakke grensooppervlakken en b) ruwe grensooppervlakken die door kraterachtig zinkoxide met $\sigma_r \approx 35$ nm zijn verkregen.



Figuur 6 a) AID bij 600 nm (TCO-lucht) en b) EQE van zonnecellen met Perlinnanotexturen ($\sigma_r \approx 40$ nm) en verschillende laterale structuur-groottes l .

dat langzaam afkoelt, om een toestand met een minimale inwendige energie te bereiken. In plaats van de inwendige energie gebruiken we de absorptie van licht in de absorberende laag die we met behulp van het verstrooiingsmodel in ASA kunnen berekenen. Het resultaat van de optimaliseringen is zeer merkwaardig: er overleeft altijd maar een laterale structuurgrootte – alle andere sterven uit. Een nanotex-

tuur met een optimale l verstrooit dus beter dan een superpositie van meerdere texturen met verschillende l . Om dit resultaat beter te begrijpen bestuderen we het effect van l op de verstrooiings- en zonnecelparameters. Figuur 6a laat zien dat l een duidelijke invloed heeft op de hoekafhankelijke intensiteitsverdeling: hoe kleiner l , des te meer licht wordt verstrooid in grote hoeken. Het effect op de EQE

van zonnecellen laten we in figuur 6b zien: Voor de gegenereerde stroom bestaat dus een optimale l . Een grotere l leidt tot minder verstrooiing naar grote hoeken en voor een te kleine l wordt minder licht verstrooid omdat het licht de nanotextuur dan niet meer ziet maar een geleidelijke overgang tussen de twee materialen ondervindt [6]. De hoogte van de nanotexturen beïnvloedt de vorm van het verstrooide

Beschrijvende verstrooiingsparameters

Een gedeelte van licht dat door een nanogetextureerd grensooppervlak heen gaat, wordt verstrooid – het *diffuse* gedeelte. Het andere gedeelte passeert het grensooppervlak onverstoord – dit gedeelte noemen we *gericht*.

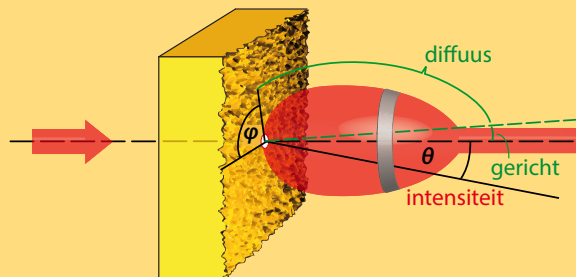
In het algemeen gebruiken we twee verstrooiingsparameters: de hoekafhankelijke intensiteitsdistributie (*angular intensity distribution*, AID) en de *haze* (H , waas). De AID geeft de fractie van het licht aan die in een bepaalde ruimtehoek wordt verstrooid. Door de AID over alle richtingen (behalve de gerichte) te integreren, verkrijgen we de diffuse transmissie,

$$T_{dif}(\lambda) = \int_0^{2\pi} \int_{\theta_i}^{\pi/2} \text{AID}(\theta) \sin \theta d\theta d\phi$$

De *haze* is gedefinieerd als de diffuse (verstrooide) fractie van het totale doorgelaten licht, dat wil zeggen:

$$H_T(\lambda) = \frac{T_{dif}(\lambda)}{T_{ger}(\lambda) + T_{dif}(\lambda)}$$

De diffuse reflectie en de *haze* in reflectie kunnen op soortgelijke wijze worden berekend.



Figuur 7 Illustratie van verstrooiing aan een nanogetextureerd oppervlak.

Het verstrooiingsmodel

In het verstrooiingsmodel wordt eerst het veld U ver achter de verstrooiende structuur berekend door Fouriertransformaties van de pupillenfuncties G_T en G_R ,

$$G_T(x,y) = \exp\{ik_0 z(x,y) (n_1 - n_2)\},$$

$$G_R(x,y) = \exp\{ik_0 2z(x,y) n_1\}.$$

Met de pupillenfuncties schatten we de fase van het veld direct achter de nanotextuur af. n_1 en n_2 zijn de brekingsindices van de twee materialen waar de nanotextuur tussen ligt. $z(x,y)$ is de hoogtefunctie van de nanotextuur, die wij met een atoomkrachtmicroscop (AFM) meten. Merk op dat voor transmissie beide brekingsindices be-

langrijk zijn, maar voor reflectie alleen n_1 . Middels het veld U worden vervolgens de AID en de *haze* bepaald. De AID is een functie van de bolcoördinaten (θ, ϕ) . Vanwege het isotrope karakter van de nanotexturen kunnen we ervan uitgaan dat de AID niet afhankelijk is van de azimut ϕ . Dus kunnen we in de reële uitwerking over alle waarden middelen binnen een te definiëren band $(\theta, \theta + \Delta\theta)$, wat de ruis aanzienlijk doet verminderen. Omdat de *haze* ook nog eens via een integratie over θ wordt verkregen, is de ruis daarvan een stuk minder.

Behalve de totale reflectie en transmissie van het grensooppervlak bevat het model geen enkele andere fitparameter.

veld nauwelijks, maar ze bepaalt wel de fractie van het licht dat wordt verstrooid. Bij een constante ruwheid heeft een nanotextuur met een geoptimaliseerde l de voorkeur boven een textuur die uit een superpositie van texturen met verschillende l bestaat. Vanwege het effect van de nanotextuur op de elektrische eigenschappen van de zonnecel kan een superpositie van een textuur met grote laterale en verticale groottes plus een textuur met kleine laterale en verticale groottes echter geschikter zijn dan een textuur met scherpe piekjes (dus met kleine laterale maar grote verticale kenmerken).

Vooruitzicht

In mijn proefschrift [7] heb ik een verstrooiingsmodel ontwikkeld dat ons samen met de opto-elektrische software ASA in staat stelt om het ef-

fect van nanotexturen op de prestatie van dunnefilm-zonnecellen te voorspellen. Dit is een zeer belangrijke toepassing voor zowel academisch onderzoek alsook industriële ontwikkeling. Verder heb ik met hulp van het verstrooiingsmodel naar geoptimaliseerde nanotexturen gezocht. Deze optimalisering laat duidelijk zien dat de laterale structuurgrootte de verstrooiing en dus de opbrengst van de zonnecellen aanzienlijk beïnvloedt. Maar het wordt ook duidelijk dat we van deze geoptimaliseerde structuren geen heel grote sprongen in het rendement meer kunnen verwachten. Daarvoor is het nodig om nieuwe zonnecelmaterialen met betere elektrische eigenschappen te ontwikkelen.

Dankwoord

Ik wil René van Swaaij en Miro Zeman

(PVMD-sectie te Delft) hartelijk danken voor de talloze discussies. Verder wil ik HyET Solar (voorheen Nuon Helianthos) bedanken voor het financieren van dit promotieonderzoek.

Referenties

- 1 W.M.M. Kessels, *NTvN* 67 (april 2001) 92-96.
- 2 A.C. Bronneberg, *NTvN* 79 (september 2013) 366-369.
- 3 K. Jäger, M. Fischer, R.A.C.M.M. van Swaaij en M. Zeman, *J. Appl. Phys.* 111 (2012) 083108.
- 4 M. Zeman, O. Isabella, S. Solntsev en K. Jäger, *Sol. Energy Mat. Sol. Cells* 119 (2013) 94-111.
- 5 K. Perlin, *Comput. Graph.* 26 (2002) 3.
- 6 K. Jäger, M. Fischer, R.A.C.M.M. van Swaaij en M. Zeman, *Opt. Express* 21 (2013) A656-A668.
- 7 K. Jäger, *On the Scalar Scattering Theory for Thin-Film Solar Cells*, proefschrift, TU Delft (2012).