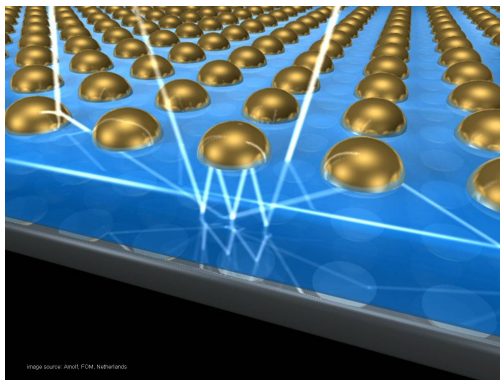




Universiteit Antwerpen

Metallische nanoschillen op een zonnecel

Nick Van den Broeck



Promotor: Prof. Dr. Jacques Tempère

Co-promotor: Dra. Katrijn Putteneers

Eindverhandeling ingediend tot het behalen van de graad van Master in de Fysica

UNIVERSITEIT ANTWERPEN, DEPARTEMENT FYSICA
academiejaar 2009 – 2010

Dankwoord

Het document dat u nu in handen houdt is het resultaat van 2 jaar hard zwoegen. Ongeacht mijn naam in grote letters op de voorpagina staat zijn er nog vele andere mensen die rechtstreeks en onrechtstreeks hebben bijgedragen aan deze thesis.

De twee mensen waarnaar mijn grootste en oprechte dank uitgaat zijn mijn promotor Prof. Dr. Jacques Tempère en co-promotor Dra. Katrijn Putteneers.

Overheen deze twee jaar is mijn respect voor professor Tempère enorm gegroeid. Ik vind het nog steeds ongelooflijk hoe, ongeacht de vele taken die op zijn schouders rusten, hij nog steeds tijd kan vrijmaken om zijn vele studenten, waarbij ik met trots zeg dat ik tot die groep mag behoren, te begeleiden. Ik ben stilaan enorm gaan genieten van de vele discussies die we rondom dit onderwerp hebben gehad al moet ik eerlijk toegeven dat er ook momenten waren waarop het meer een monoloog van uw kant was. Ik wil u niet alleen bedanken voor alle hulp doorheen de ongelooflijke doolhof van de fysica en voor de grappige insteek waarmee u altijd iedereen aan het lachen kunt krijgen. Ik zou u ook graag willen bedanken voor de introductie in dit onderzoeksdomein dat mij nog elke dag meer en meer interesseert. De soms ongezone lange werkmarrathons neem ik er met plezier bij.

Ook Katrijn ben ik alle dank verschuldigd. Het opsommen van alle dingen waarmee zij geholpen heeft zou dit dankwoord langdradig maken en dat wil ik graag vermijden. Maar de manier waarop zij ‘haar masterstudentje’ heeft begeleidt dwingt respect af. Op de één of andere manier wist zij altijd hoe het verder moest als ik vastliep in de berekeningen of de redeneringen. En op de zeldzame momenten dat ze zelf geen raad wist, heeft ze mij toch op de weg naar een oplossing kunnen zetten.

Verder wil ik ook alle mensen van de TQC groep bedanken. Niet enkel voor de leuke en soms wat rare gesprekken aan de lunchtafel, maar ook voor de antwoorden op de vele kleine vragen die ik mocht komen stellen. Of het nu over de bolfuncties of de topologie van een drie dimensionale sfeer in een vier dimensionale ruimte ging, ze konden altijd antwoorden. Ook wil ik Jeroen en Ben speciaal vermelden. Samen met Jacques en Katrijn hebben ze deze thesis doorgenomen om er de vele spellingfouten uit te halen.

Verder zou ik ook nog graag willen bedankje willen uitzenden naar de personen van IMEC. Zij hebben mij voorzien van betrouwbare data over zowel zonnecellen als nanoschillen.

Tot slot: Aan iedereen die ik vergeten ben: Dank U!

English summary

In the current drive to renewable energy and a healthier world much research is being done on improving the performance of solar cells. As a contribution to this research a new concept is introduced in this thesis and calculations are performed to check the gain in performance of solar cells due to the concept.

The main idea on which this work is build, is that when photons have a longer path length inside the Space Charge Region (SCR) of the solar cell more charge carriers that contribute to the photocurrent will be created. It is proposed to achieve a longer path length by distributing nanoshells on top of the solar cell. These nanoshells will scatter a part of the incoming wave. In a first approximation these scattered photons will propagate away from the nanoshell in a radial way and therefore travel through the solar cell under an angle instead of perpendicular to the surface, hence increasing the path length through the SCR.

A study of the solar cell and the solar spectrum will be performed to gather information about the efficiency of the solar cell. A microscopic study of generation, diffusion and recombination processes in the solar cell will lead to the transport equations. Solving these equations will provide the quantum efficiencies of photons entering the solar cell. A distinction will be made between unperturbed photons following a path perpendicular to the surface of the solar cell and scattered photons propagating at an angle through the solar cell. This provides information about the conditions a scattering center will have to obey to provide the correct ratio of unperturbed versus scattered photons depending on the frequency of the photons.

Simultaneously the optical properties of nanoshells are calculated using Mie theory. The cross section of both scattering and absorption will provide information on the effect of the nanoshell on the incoming light waves. Using this we can map the amount of photons that are scattered or absorbed by nanoshells with different dimensions and materials. The motivation to use nanoshells as a scattering center lies in the exceptional properties of these nanostructures due to Localized Surface Plasmon Polaritons and their tunability.

The goal of this work is to provide a first and basic calculation to study the concept and provide information on whether it works or not. Unfortunately the results are not decisive. Even though no configuration is found providing an increase in performance, the loss of efficiency is much smaller than expected from absorption alone proving that the scattered photons indeed contribute more than when their trajectory is perpendicular to the surface.

The absence of a higher performance can be attributed to absorption and backscattering of the photons by the nanoshells hence decreasing the amount of photons that reach the solar cell hence decreasing the amount of photons that reach the solar cell. Some suggestions to overcome this problem are mentioned in the conclusion.

Inhoudsopgave

Inhoudsopgave	iii
Lijst van gebruikte symbolen	v
Inleiding	x
Situering	x
Doelstelling	x
Overzicht	xi
1 Zonnecellen	1
1.1 Overzicht	1
1.2 Beschrijving van de werking van een zonnecel	2
1.2.1 Het maken van mobiele elektronen	2
1.2.2 Het oogsten van elektronen	4
1.3 Doelstelling	11
1.4 Het ideale rendement van een zonnecel	14
1.4.1 Theoretisch spectrum	14
1.4.2 Reëel spectrum	17
1.5 Microscopische studie van de np-junctie	22
1.5.1 De depletielaag	22
1.5.2 De transportvergelijkingen	26
1.5.3 De kwantumefficiëntie	37
1.5.4 De generatieterm: De Beer-Lambert wet	40
1.6 De standaard kristallijne Si-zonnecel	44
1.6.1 Dikte van de depletielaag voor niet-constante dopering	44
1.6.2 Parameters van een standaard zonnecel	47
1.6.3 Het verloop van de concentratie	47
1.6.4 De totale kwantumefficiëntie met reflectie	50
1.6.5 Het rendement	52
2 Nanoschillen	54
2.1 Overzicht	54
2.2 Nanoschillen: een introductie	54

2.2.1	Opbouw en eigenschappen	55
2.2.2	Toepassingen	57
2.3	Verstrooiingstheorie	59
2.3.1	EM-veld rondom een nanoschil	59
2.3.2	De werkzame doorsnede	72
2.4	De gebruikte gegevens	74
3	De combinatie	78
3.1	Overzicht	78
3.2	De generatieterm	79
3.2.1	De ongestoorde fotonen	80
3.2.2	De verstrooide fotonen	80
3.2.3	De totale generatieterm	83
3.3	Het rendement van het nanoschil-zonnecel systeem	84
3.4	Optimalisatie	85
3.4.1	Bij verschillende stralen van de nanoschil	85
3.4.2	Bij verschillende dichtheden aan nanoschillen	86
3.4.3	Bij verschillende materiaalkeuzes	86
3.4.4	De optimale nanoschil	87
4	Conclusie	93
4.1	Het huidige model	93
4.2	Mogelijke verbeteringen	94
	Appendix: De coëfficiënten van het veld rondom de nanoschil	96
	Bibliografie	99

Lijst van gebruikte symbolen

Hoofdstuk 1: Zonnecellen

Symbol	Omschrijving	Eenheden
$\alpha(\omega)$	Absorptiecoëfficiënt	$\frac{1}{\text{m}}$
δ	Totale dikte van de depletielaag	m
ε	Relatieve permittiviteit	
ε_0	Vacuüm permittiviteit	$\frac{\text{F}}{\text{m}}$
ϵ	Rendement	
$\mu_{n/p}$	Mobiliteit van de minderheidsladingsdragers in n/p-regio	$\frac{\text{m}^2}{\text{V s}}$
ν	Frequentie van het licht	Hz
ν_g	Frequentie van licht met de bandkloofenergie	Hz
ω	Pulsatie van het licht ($\omega = 2\pi\nu$)	Hz
$\sigma_{n/p}$	Eenheidsloze constante $\left(\frac{L_{n/p}S_{n/P}}{D_{n/p}}\right)$	
τ	Relaxatietijd	s
$\mathcal{A}(z, \omega)$	Absorptie	$\frac{1}{\text{m}^3 \text{s}}$
c	Lichtsnelheid	m/s
\mathcal{C}	Constante gedefinieerd in vergelijking (1.71)	$\frac{1}{\text{m}^3}$
d	Totale dikte van de zonnecel	m
$D_{n/p}$	Diffusieconstante in n/p-regio	$\frac{\text{m}^2}{\text{s}}$
$ e $	Elementaire lading	C
$\vec{E}(\vec{r})$	Elektrisch veld	$\frac{\text{V}}{\text{m}}$
E_c	Energie overeenkomstig met de bodem van de conductieband	J
E_F	Energie van het Fermi niveau	J
E_g	Bandkloofenergie	J
E_u	Energie die uit de zonnecel komt	J

Symbol	Omschrijving	Eenheden
\vec{F}	Extern aangelegd elektrisch veld	$\frac{V}{m}$
$f_\lambda(\lambda)$	Energie per oppervlakte en per seconde afkomstig van de zon	$\frac{W}{m^2 m}$
$f_{n/p}(z)$	Concentratieverschil aan ladingsdragers t.o.v. de stationaire toestand	$\frac{1}{m^3}$
$g(z, \omega)$	Generatieterm voor de zonnecel	$\frac{1}{m^3 s}$
$G_{n/p}$	Algemene generatieterm in de transportvergelijkingen	$\frac{1}{m^3 s}$
h	Dikte van het n-gebied tot aan de depletielaag	m
\hbar	Constante van Dirac	J s
$I(\nu)$	Stralingsfluxdichtheid uit de zwarte straler	$\frac{W}{m^2 m}$
$I(z, \omega)$	Stralingsfluxdichtheid op positie z	$\frac{W}{m^2 m}$
I_0	Stralingsfluxdichtheid aan het oppervlak van de zonnecel	$\frac{W}{m^2 m}$
$\vec{J}_{n/p}$	Ladingsstroomdichtheid in de zonnecel	$\frac{A}{m^2}$
k	Constante van Boltzmann	$\frac{J}{K}$
$L_{n/p}$	Diffusielengte van de n/p-regio	m
$n_{air\ mass}$	Factor die de dikte van de atmosfeer weergeeft	
n_λ	Aantal fotonen per oppervlakte en per seconde afkomstig van de zon	$\frac{1}{m^2 s m}$
$N(\text{conditie})$	Aantal fotonen dat voldoet aan de conditie	$\frac{1}{m^2}$
$N(z)$	Doperingsconcentratie op positie z	$\frac{1}{m^3}$
N_a	Doperingsconcentratie aan acceptoren in het p-gebied	$\frac{1}{m^3}$
N_d	Doperingsconcentratie aan donoren in het n-gebied	$\frac{1}{m^3}$
$\dot{n}_0(\omega)$	Ingezonden deeltjesfluxdichtheid	$\frac{1}{m^2 s}$
$p(z)/n(z)$	Concentratie aan ladingsdragers op positie z : gaten/elektronen	$\frac{1}{m^3}$
P_{in}	Inkomend vermogen	W
P_{uit}	Uitgaand vermogen	W
q	Lading	C
$QE_{n/p/depl/tot}$	Kwantumefficiëntie van de n/p-regio / depletiegebied / totale zonnecel	

Symbol	Omschrijving	Eenheden
$R(\omega)$	Reflectantie van het oppervlak	
\mathcal{R}_b	Bruikbaar vermogen per oppervlakte	$\frac{\text{W}}{\text{m}^2}$
\mathcal{R}_i	Ingezonden vermogen per oppervlakte	$\frac{\text{W}}{\text{m}^2}$
\mathcal{R}_u	Verkregen vermogen per oppervlakte	$\frac{\text{W}}{\text{m}^2}$
$S_{n/p}$	Recombinatiesnelheid in de zonnecel	$\frac{\text{s}}{\text{m}}$
T	Temperatuur van de zwarte straler	K
U	Potentiële energie	J
$U_{n/p}$	Algemene recombinatie-term in de trans- portvergelijkingen	$\frac{1}{\text{m}^3 \text{s}}$
V	Potentiaalval over de depletielaag	$\frac{\text{J}}{\text{C}}$
w	Totale dikte van de depletielaag	m
$w_{n/p}$	Dikte van de depletielaag in het n/p-gebied	m

Hoofdstuk 2: Nanoschillen

Symbol	Omschrijving	Eenheden
ε_0	Vacuüm permittiviteit	$\frac{F}{m}$
$\varepsilon_{1/2/3}$	Relatieve permittiviteit van regio 1, 2 of 3	
μ_0	Vacuüm permeabiliteit	$\frac{N}{A^2}$
$\mu_{1/2/3}$	Relatieve permeabiliteit van regio 1, 2 of 3	
ω	Pulsatie van het licht	Hz
$a^{el/mag}(\omega)$	Coëfficiënten van het veld rondom de nanoschil	
$\vec{B}(\vec{r}, t)$	De magnetische inductie	$\frac{Wb}{m^2}$
c	Lichtsnelheid	$\frac{m}{s}$
$\vec{D}(\vec{r}, t)$	Het elektrisch verplaatsingsveld	$\frac{C}{m^2}$
$\vec{E}(\vec{r}, t)$	Het elektrisch veld	$\frac{V}{m}$
E_0	Amplitude van het elektrisch veld van de inkomende vlakke golf	$\frac{V}{m}$
$\vec{E}_{in}(\vec{r}, t)$	Elektrisch veld van de inkomende vlakke golf	$\frac{V}{m}$
$\mathcal{F}_{l,m}^{opp}(r, \omega)$	Flux doorheen een oppervlakte	W
$\tilde{\mathcal{H}}_l(r)$	Aangepaste sferische Hankelfunctie	
$\vec{H}(\vec{r}, t)$	Het magneetveld	$\frac{A}{m}$
$\vec{H}_{in}(\vec{r}, t)$	Magnetisch veld van de inkomende vlakke golf	$\frac{A}{m}$
$h_l^{(1)}(r)$	Sferische Hankelfunctie van de eerste soort	
$\tilde{J}_l(r)$	Aangepaste sferische Besselfunctie	
$\vec{J}(\vec{r}, t)$	Elektrische ruimtestroomdichtheid	$\frac{A}{m^2}$
$j_l(r)$	Sferische Besselfunctie van de eerste soort	
k_3	Impedantie, verhouding tussen het magnetisch en elektrisch veld van de inkomende golf	$\frac{A}{V}$
l	Orbitaalkwantumgetal	
m	Magnetisch kwantumgetal	
\vec{n}	Normaal op een oppervlakte	
$q_{1/2/3}$	Golfvector van regio 1, 2 of 3	$\frac{1}{m}$
$Q_{scatt/abs/tot}(\omega)$	Werkzame doorsnede	m^2
R_c	Straal van de kern van de nanoschil	m
R_s	Buitenstraal van de nanoschil	m
$\vec{S}(\vec{r}, t)$	Poynting vector	$\frac{W}{m^2}$
$\vec{Y}_{l,l,m}(\theta, \varphi)$	Vector bolfuncties	
$Y_{l,m}(\theta, \varphi)$	Bolfuncties	

Hoofdstuk 3: Combinatie

Symbool	Omschrijving	Eenheden
$\alpha(\omega)$	Absorptiecoëfficiënt	$\frac{1}{\text{m}}$
ϵ	Rendement	
$\mathcal{A}(z, \omega)$	Absorptie	$\frac{1}{\text{m}^3 \text{s}}$
$f(\vec{r})$	Afgelegde afstand in een absorberend medium	m
$F_{\text{scatt/ongestoord}}$	Fractie aan verstrooide/ongestoorte fotonen	
$g(z, \omega)$	Generatieterm	$\frac{1}{\text{m}^3 \text{s}}$
$\vec{n}(\vec{r}, \omega)$	Fotonstroom op positie \vec{r}	$\frac{1}{\text{m}^2 \text{s}}$
$\dot{n}(z, \omega)$	Fotonstroom doorheen een oppervlakte	$\frac{1}{\text{m}^2 \text{s}}$
n_{NS}	Dichtheid aan nanoschillen op het oppervlak van de zonnecel	$\frac{1}{\text{m}}$
$Q_{\text{abs/scatt/tot}}$	Werkzame doorsnede van de nanoschil	m^2
$R(\omega)$	Reflectantie	
R_c	Straal van de kern van de nanoschil	m
R_s	Buitenstraal van de nanoschil	m

Inleiding

Situering

Silicium zonnecellen vormen al sinds enige tijd een onderdeel van onze maatschappij. In het licht van de recente zoektocht naar alternatieve, groene energie vormen ze één van de vele mogelijke oplossingen. Een hoge productiekost tenopzichte van andere energiebronnen en een laag rendement vormen echter nog steeds een probleem. Vandaar dat er in de hedendaagse wereld nog steeds veel onderzoek wordt verricht naar zonnecellen.

In een volledig andere sector, maar desalniettemin even interessant, vinden we de nanoschil. In de maatschappij, en specifiek in de industrie, is er een zoektocht naar miniaturisatie aan de gang. In dit onderzoek, dat onvermijdelijk leidt naar nanotechnologie, wordt veel energie en geld gestoken. Eén van de veelbelovende nanostructuren die op deze zoektocht ontstaan zijn is de metallische nanoschil. De metallische nanoschil, bestaande uit een diëlektrische kern met daar rond een metalen schil, geniet veel aandacht vanwege de zeer interessante en uitgesproken optische en opto-elektronische eigenschappen.

Doelstelling

Het doel van deze thesis is om zonnecellen en nanoschillen te combineren en na te gaan of nanoschillen die bovenop een zonnecel geplaatst worden een gunstige invloed hebben op de werking van een zonnecel. De zonnecel is interessant vanwege zijn vermogen om de energie van de zon rechtstreeks om te zetten in elektriciteit. Eén van de grootste nadelen van een zonnecel is echter het lage rendement. Het basis idee is om dit rendement te verhogen door gebruik te maken van andere technieken en structuren. In dit onderzoek wordt een eerste berekening gedaan om na te gaan of het rendement van de zonnecel verhoogd kan worden door gebruik te maken van de optische eigenschappen van metallische nanoschillen. Concreet wil men dit doen door nanoschillen op het oppervlak van de zonnecel te plaatsen zodat het licht verstrooid wordt aan de nanoschil. Het concept wordt meer in detail uitgelegd nadat de nodige basisbegrippen geïntroduceerd zijn.

Het doel van deze thesis ligt niet zozeer in het creëren van een exacte theoretische

beschrijving voor het nanoschil-zonnecel systeem maar eerder in het aantonen van het concept dat hier naar voren wordt geschoven. Hoewel zoveel mogelijk effecten in rekening worden gebracht zullen er toch aanzienlijke vereenvoudigingen en aannames worden doorgevoerd. Uiteindelijk ligt het doel in het aantonen of het ontcrachten van de mogelijkheden die het concept nanoschil-zonnecel te bieden heeft.

Overzicht

Deze thesis is opgedeeld in 3 grote delen, gevold door een korte conclusie in deel 4.

Deel 1 handelt over de theorie van de zonnecel. Hierbij wordt eerst aandacht geschonken aan een zeer rudimentaire uitleg rondom de theoretische opbouw van een zonnecel. Op basis van deze uitleg wordt een eerste theoretische en zeer idealistische afschatting gedaan van het rendement van een silicium zonnecel. Nadien wordt er meer gedetailleerd ingegaan op de interne werking van de np-junctie. Op deze wijze worden de microscopische processen die bijdragen aan de werking van de zonnecel in rekening gebracht. In het laatste hoofdstuk van het deel over zonnecellen wordt deze microscopische kijk op het systeem gebruikt om de afschatting van het rendement bij te stellen naar een realistischere waarde.

Deel 2 handelt over de metallische nanoschillen. Hierbij wordt de nadruk gelegd op de effecten van een nanoschil op ingezonden elektromagnetische golven. Het doel hiervan is de te berekenen hoeveel licht er door de nanoschil geabsorbeerd of verstrooid wordt. Dit wordt concreet bereikt door de werkzame doorsnede van zowel de absorptie als de verstrooiing uit te rekenen.

Eens de twee systemen apart bestudeerd zijn, zullen ze in deel 3 gecombineerd worden tot één geheel. Hierbij worden de theorieën uit de twee vorige delen gebruikt om een afschatting te maken van het rendement van het nanoschil-zonnecel systeem. De nanoschillen geven immers een groot aantal parameters om mee te spelen en het is interessant om de verschillende effecten op de zonnecel te bestuderen.

In deel 4 sluiten we het werk af met een bondige conclusie van de verkregen resultaten. Aansluitend wordt een korte uiteenzetting gegeven over mogelijke pistes om dit werk voort te zetten.

Hoofdstuk 1

Zonnecellen

1.1 Overzicht

Eenvoudig gezegd kan men een zonnecel aanzien als een foton-naar-elektron convertor. Het idee achter een zonnecel is namelijk dat ingezonden licht, meestal van de zon, wordt omgezet in bruikbare elektriciteit. Het principe verantwoordelijk voor deze conversie is de np-junctie. Het is dankzij de halfgeleider technologie dat het concept van de np-junctie ontstaan is. Hoewel het in praktijk een zeer eenvoudig concept lijkt, blijkt het aantal toepassingen enorm: denk maar aan bijvoorbeeld de LED, de zonnecel en de diode.

Het grootste nadeel van de huidige zonnecellen is de lage efficiëntie. De efficiëntie duidt op de verhouding tussen de verkregen energie en de ingezonden energie. Een lage efficiëntie betekent dat er veel energie verloren gaat in het proces. Hoewel theoretische berekeningen een mogelijke efficiëntie van 35% voorspellen, blijkt deze in praktijk eerder rond 25% te liggen [5].

We bekijken eerst bij wijze van inleiding de basiswerking van een zonnecel. We zullen bestuderen hoe de np-junctie werkt en met welke processen we rekening moeten houden. Nadien zal het rendement van een ideale zonnecel onder belichting van een theoretisch en reëel spectrum bepaald worden.

In de daarop volgende secties wordt de werking van de zonnecel vertaald in formules zodat de eigenschappen geformuleerd in de doelstelling berekend kunnen worden.

In de allerlaatste sectie van dit hoofdstuk worden de waarden voor een kristalijne silicium zonnecel in de verkregen vergelijkingen ingevuld en wordt een meer realistisch rendement van de zonnecel berekend.

1.2 Beschrijving van de werking van een zonnecel

In deze sectie wordt de basiswerking van de standaard zonnecel uiteengezet zodat de doelstelling in meer detail kan beschreven worden. Hier zullen een aantal belangrijke concepten worden geïntroduceerd om de werking van de np-junctie correct te begrijpen. Als u reeds vertrouwd bent met de werking van de np-junctie dan kan u deze basisinleiding overslaan.

1.2.1 Het maken van mobiele elektronen

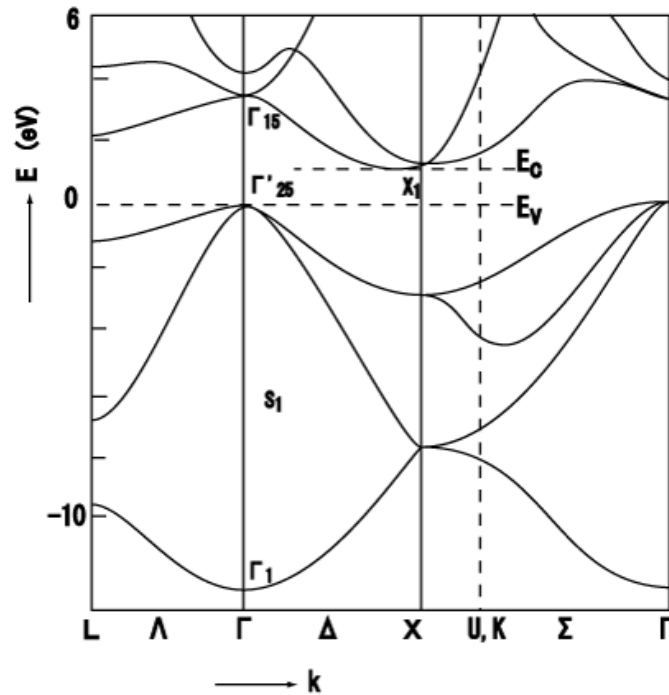
Een zonnecel is een systeem dat fotonen met een geschikte energie gebruikt om vrije ladingsdragers te genereren die in een extern circuit gebruikt kunnen worden als stroom. Het is welbekend dat licht gebruikt kan worden om elektronen uit de valentieband van een halfgeleider los te slaan. Zo creëert men vrije ladingen (het elektron enerzijds en het overgebleven gat anderzijds) die doorheen het materiaal kunnen bewegen. Het woord vrij slaat hier eerder op niet gebonden elektron dan op een elektron zonder interacties met zijn omgeving. Het elektron zal immers bewegen doorheen het rooster van de halfgeleider. Kijken we op het niveau van het elektron, dan zal het op zijn weg doorheen het materiaal fononen en andere elektronen tegenkomen. Het zal hieraan verstrooien. Op die manier zal het elektron een beweging in het materiaal maken. Voor het gat geldt dezelfde redenering.

De energie die nodig is om een elektron 'vrij' te maken komt overeen met de energie van de bandkloof van de halfgeleider (voor bijvoorbeeld Si is dit 1.11 eV). In bepaalde halfgeleiders (zoals Si) is er bovendien ook een fonon nodig. Dit komt doordat Si een indirecte halfgeleider is (bekijk figuur 1.1 voor de bandenstructuur van Si). Dit wil zeggen dat het hoogste punt van de valentieband niet op dezelfde k -vector ligt als het laagste punt van de conductieband. Daarom is er niet enkel energie maar ook impuls nodig om een elektron te exciteren naar de conductieband. Dit vormt bij zonnecellen niet zo'n probleem omdat er op kamertemperatuur voldoende fononen aanwezig zijn voor een goede werking. Het is wel mogelijk om in Si elektronen te exciteren zonder een fonon, maar dan moet er een energie van 3.4 eV geleverd worden i.p.v. 1.11 eV.

Als een elektron geëxciteerd wordt, zal het een verhoging in energie verkrijgen gelijk aan de energie van het foton dat voor de excitatie zorgde. Als deze energie groter is dan de bandkloofenergie zal het elektron niet op de bodem van de conductieband terecht komen maar aangeslagen worden naar een toestand met hogere energie. Door interacties met het rooster zal deze energie echter snel verloren gaan en worden omgezet in warmte door botsingen met het rooster. Dit noemt men relaxatie. Ook het gat zal een gelijkaardige relaxatie ondergaan en evolueren naar de bovenste energieniveaus van de valentieband.

Het elektron zal dus al zijn energie verliezen tot het nog enkel de energie van de bandkloof heeft. Normaal gezien zal het elektron na verloop van tijd (vele ordes groter dan de relaxatietijd) terug recombineren met een gat. Als zo'n recombinatie plaatsvindt kan er een foton met de energie van de bandkloof worden uitgezonden.

Aan de relaxaties kunnen we niets doen, deze zullen altijd aanwezig zijn doordat



Figuur 1.1: Schematische voorstelling van de bandenstructuur van Si [8]. Merk op dat het hoogste punt van de valentieband op het Γ punt ligt, terwijl het laagste punt van de conductieband op het X punt ligt. Daarom is Si een indirecte halfgeleider.

het elektron in het rooster beweegt. Het idee achter een zonnecel is dat men probeert te voorkomen dat het elektron zal recombineren met een gat zodat het elektron uit de zonnecel verwijderd kan worden om gebruikt te worden in een extern stroomkring. Hoe we dit doen wordt verder besproken.

Het is dus belangrijk te beseffen dat een ingezonden foton een elektron kan exciteren. Dit elektron kan verwijderd worden en gebruikt worden in een stroomkring. Het foton zal steeds een energie groter dan of gelijk aan de bandkloof moeten bezitten om een elektron te kunnen exciteren. Als de energie gelijk is aan de bandkloofenergie zal de kans op excitatie bestaan maar klein zijn omdat het aantal elektronen dat kan geëxciteerd worden klein is (enkel de elektronen in het hoogste niveau van de valentieband kunnen dan geëxciteerd worden naar de conductieband). Als het foton meer energie bezit dan nodig is voor de excitatie tussen twee energieniveaus kan deze extra energie overgedragen worden aan het elektron als kinetische energie. Deze kinetische energie gaat verloren als warmte en is dus verloren energie.

1.2.2 Het oogsten van elektronen

Een resterende vraag is hoe we de elektronen uit de zonnecel kunnen verwijderen en gebruiken in een uitwendig circuit. Hiervoor moeten we voorkomen dat de elektronen gaan recombineren met de gaten. Dit kunnen we doen aan de hand van een np-junctie. Een np-junctie is de combinatie van twee halfgeleiders, de ene gedopeerd met donoren en de andere met acceptoren. Om de werking goed te begrijpen bekijken we de opbouw van een np-junctie

Neem een halfgeleider (zoals Si met 4 valentie elektronen) en dopeer die met donoren. Donoren zijn atomen met extra valentie elektronen ten opzichte van de basis atomen in de halfgeleider (in het geval van Si kan men bijvoorbeeld As of P gebruiken). Neem nogmaals dezelfde halfgeleider, maar dopeer die nu met acceptoren. Acceptoren zijn atomen met minder elektronen dan het basis atoom dat gebruikt is in de halfgeleider. Bij acceptoren en donoren is het dus belangrijk te kijken welk atoom er door deze dopering vervangen wordt (bij een kristallijn Si rooster is dat vanzelfsprekend Si, maar in complexere structuren hoeft dit niet zo te zijn). Indien men deze twee halfgeleiders met verschillende soorten dopering tegen elkaar plaatst ontstaat een np-junctie.

Laten we het geval van Si wat beter bestuderen zodat dit concept duidelijk wordt. Si heeft 4 valentie elektronen. Dit wil zeggen dat het zal binden met 4 naburige Si atomen om zo de ideale 8 valentie elektronen te verkrijgen. Vervang nu een Si atoom door een P atoom. Het P atoom heeft 5 valentie elektronen, maar heeft nog steeds 4 Si burens die elk een binding willen. Dit geeft 9 elektronen in de binding tussen de atomen, wat dus 1 teveel is voor de (ideale) octetstructuur van de donor. Bij lage temperatuur zal dit extra elektron zich in de buurt van de bindingen bevinden maar het zal zeer eenvoudig zijn dit ene elektron los te trekken uit de binding en mobiel te maken. De thermische energie bij kamertemperatuur is vaak al genoeg. Hetzelfde principe is van toepassing bij acceptoren, alleen is er dan een elektron te weinig (dus een gat teveel).

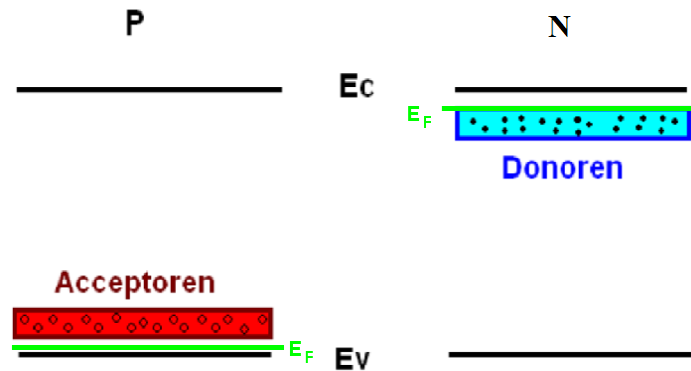
Merk wel op dat elk atoom op zich ladingsneutraal is. Dit wil zeggen dat zolang het 9^{de} elektron gebonden blijft het geheel neutraal is. Als het elektron geëxciteerd wordt en vrij kan bewegen, dan laat het lokaal een positieve lading achter. Het analoge geldt voor een gat. De 'overschot' aan lading waardoor geen ladingsneutraliteit geldt noemt men de excess lading.

Een halfgeleider met acceptoren noemen we een p-type omdat er een overschot aan positieve gaten is. Een halfgeleider met donoren noemen we een n-type.

We plakken nu twee gedopeerde halfgeleiders, een n-type en een p-type, aan elkaar. Doordat de halfgeleiders anders gedopeerd zijn zal het Fermi niveau van de aparte delen op een andere energie liggen. Bekijk figuur 1.2. Hierop is de bandenstructuur van het p-type en n-type apart te zien.

Wat gaat er nu gebeuren? De elektronen en de gaten zullen door thermische excitatie 'vrij' doorheen hun materiaal kunnen bewegen. Plakt men de twee halfgeleiders aan elkaar, dan zal diffusie ervoor zorgen dat gaten uit het p-type en elektronen uit het n-type over de materiaalgrens zullen diffunderen en met elkaar zullen recombineren.

Maar dit proces blijft niet doorgaan. Voor elk elektron dat uit het n-type verdwijnt,



Figuur 1.2: Schematisch overzicht van de bandenstructuur van een p- en n-type gedopeerde halfgeleider.

blijft er immers een positieve exces lading achter in dat gebied. Voor elk gat dat in het p-type verdwijnt (of wordt opgevuld door een elektron) blijft een negatieve exces lading achter. Hierdoor zal er in het p-type een negatieve exces lading worden opgebouwd en in het n-type een positieve. De exces ladingen zullen opgebouwd worden in een gebied rond het scheidingsoppervlak tussen het n- en p-gebied. Hierdoor zal het diffusieproces tegengegaan worden en zullen de ladingsdragers ervan weerhouden worden om over te steken. Het gebied waarin deze exces lading wordt opgebouwd noemt men het depletiegebied [22, 23]. Dit depletiegebied vormt de barrière die ervoor zal zorgen dat de ladingsdragers ruimtelijk gescheiden worden.

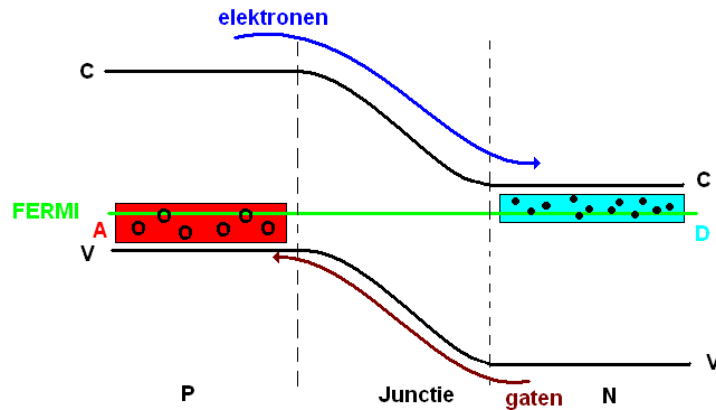
Hoe groot deze barrière is zal o.a. bepaald worden door de concentratie aan doperingen. De concentratie aan doperingen in elk gebied staat immers in rechtstreeks verband met de concentratie aan vrije ladingdragers in dat gebied. Omdat de depletie laag wordt opgebouwd uit recombinerende ladingen zal de hoeveelheid lading in de depletie laag in het n-type en het p-type gelijk zijn. Omdat de doperingsconcentratie in beide gebieden niet hetzelfde is zal de grootte van de depletie laag in elk gebied verschillen.

De combinatie van een n-type en een p-type halfgeleider creëert een junctie. De junctie zoals deze hier is uitgelegd wordt een np-junctie genoemd. Op dit moment is er geen verschil tussen een pn- en een np-junctie, maar dit verandert zodra er licht op het systeem wordt ingestuurd. Indien er licht wordt ingestraald zullen we eerst het gebied noteren waarop het licht valt. Bij een pn-junctie valt het licht dus in op het p-type. Bij een np-junctie is dit omgekeerd.

In praktijk zal men er vaker voor kiezen om een np-junctie te gebruiken omdat de mobiliteit van elektronen in het p-gebied hoger is dan de mobiliteit van de gaten in het n-gebied. Praktisch geeft dit een verbetering voor het verwijderen van de elektronen.

1.2.2.1 De np-junctie in thermisch evenwicht

In de np-junctie klopt de bandenstructuur zoals die staat weergegeven in figuur 1.2 niet meer helemaal. De materialen zijn nu aan elkaar gekoppeld. Door de diffusie van elektronen en gaten zal de bandenstructuur veranderen. Concreet zullen de banden zodanig op elkaar afgestemd worden dat de Fermi niveaus van de twee halfgeleiders overeen komen. Een correctere bandenstructuur voor de np-junctie staat afgebeeld in figuur 1.3.

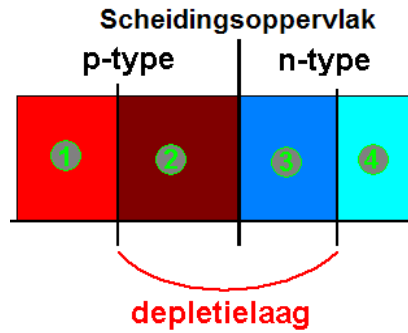


Figuur 1.3: Schematische voorstelling van de pn-junctie in thermisch evenwicht. Door het uitwisselen van elektronen zullen de bandenstructuren in beide materialen zich aan elkaar aangepast hebben zodat het Fermi niveau op hetzelfde niveau ligt in beide materialen.

In een bandenstructuur (die eigenlijk de potentiële energie weergeeft voor een elektron) zal een elektron altijd zo laag mogelijk willen zitten. Dit wil zeggen dat elektronen die nu aan de p-kant bij de depletielaag aankomen een veel lagere energie kunnen verkrijgen als ze verhuizen naar de n-kant (wat ze dan ook gaan doen eens ze in het depletiegebied zitten). De elektronen zullen niet terug kunnen, want dan moeten ze eerst meer potentiële energie zien te verkrijgen. Voor gaten geldt een gelijkaardig maar omgekeerd verhaal. Gaten willen juist omhoog in de bandenstructuur en zullen dus naar het p-type evolueren. Met ander woorden we hebben een structuur die de ruimtelijke scheiding van ladingen mogelijk maakt.

Hoe ziet de situatie er nu uit (bekijk ook figuur 1.4)?

1. Aan de ene zijde hebben we een heel gebied dat p-gedopeerd is waarbij vrije gaten (de meerderheidsladingsdragers) bewegen in een negatieve neutraliserende achtergrond. De gaten kunnen niet ontsnappen, want ze kunnen niet voorbij de depletielaag.
2. Daarnaast bevindt zich het p-gedeelte van de depletielaag. Hier zullen er gaten uit het materiaal verwijderd zijn en zal er dus een negatieve excess lading zijn. Deze



Figuur 1.4: Schematisch overzicht van de verschillende regio's in een pn-junctie. Voor uitleg rondom de verschillende regio's wordt naar de tekst verwezen.

exces ladingen zijn ionen die vast zitten aan het rooster en die zich dus niet zullen verplaatsen.

3. Dan komen we in het n-gedeelte van de depletie laag. Hier zullen elektronen verwijderd zijn en zal dus een positieve exces lading zijn achtergebleven. Ook hier zijn het de ionen die aan het rooster verbonden zijn die geladen zijn.
4. Voorbij de depletie laag zitten we in het n-type gedeelte. Hier zijn vrije elektronen die bewegen in een positieve neutraliserende achtergrond. Deze elektronen kunnen niet ontsnappen want ze kunnen niet over de depletie laag.

We bekijken enkele eigenschappen van het systeem. Als eerste kunnen we uit bovenstaande uitleg de exces ladingsdichtheid afleiden. Een schets van de exces ladingsdichtheid staat weergegeven in figuur 1.5a.

Uit de exces ladingsdichtheid kunnen we ook het elektrisch veld en de elektrostatische potentiaal bepalen. Beschouw namelijk volgende formules [23]:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon\epsilon_0} \quad (1.1)$$

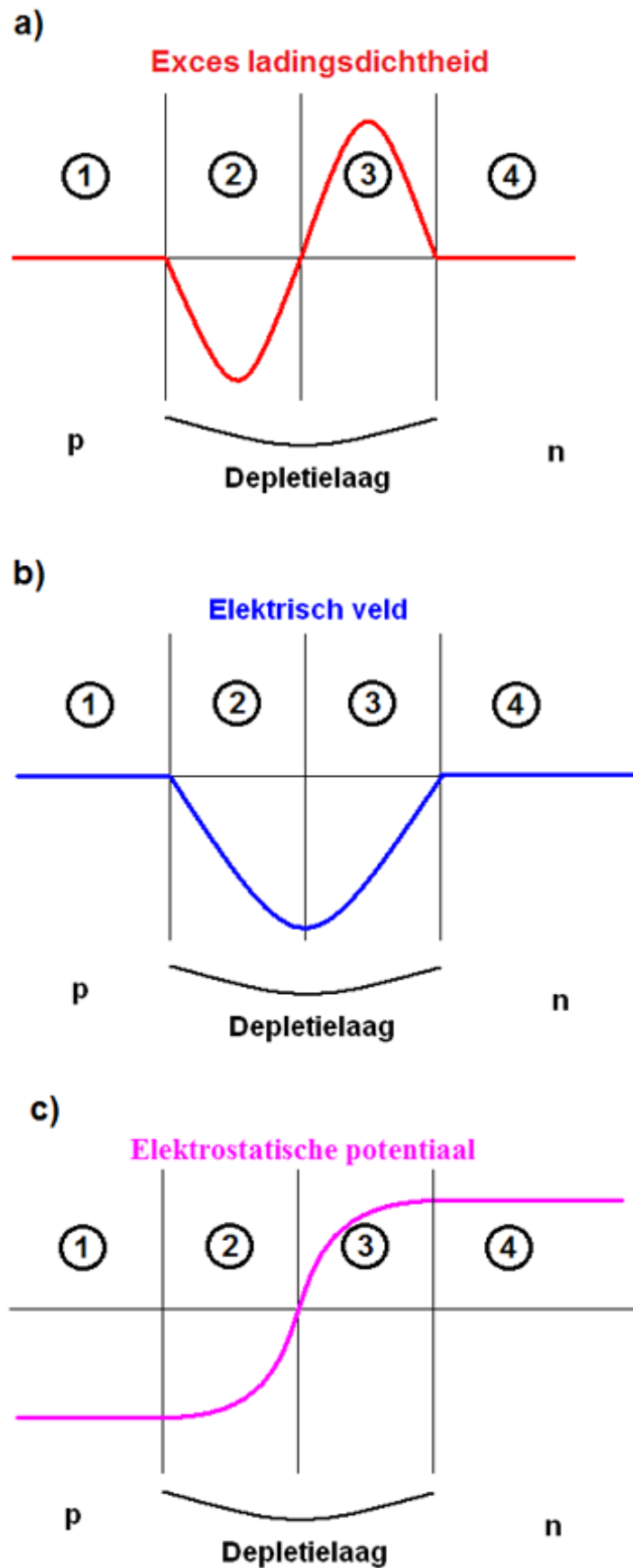
$$\vec{\nabla}\phi = -\vec{E} \quad (1.2)$$

$$\nabla^2\phi = -\frac{\rho}{\epsilon\epsilon_0}, \quad (1.3)$$

met ϵ de relatieve permittiviteit en ϵ_0 de vacuüm permittiviteit.

Deze vergelijkingen zeggen dat (in 1 dimensie) de exces ladingsdichtheid ρ ($\frac{C}{m^3}$) de afgeleide van het elektrisch veld \vec{E} ($\frac{V}{m}$) is. Het elektrisch veld is de afgeleide van de elektrostatische potentiaal ϕ (V). Op die manier kunnen we uit de exces ladingsdichtheid ook het elektrisch veld en de elektrostatische potentiaal schetsen.

Het elektrisch veld staat weergegeven in figuur 1.5b is overal gelijk aan nul, behalve in het depletie gebied zelf: daar is het elektrisch veld negatief. Een elektrisch veld zal een



Figuur 1.5: Schematische weergave van a) de exces ladingsdichtheid ρ , b) het elektrisch veld \vec{E} en c) de potentiaal ϕ in een np-junctie.

beweging van de ladingsdragers veroorzaken. In dit geval zal het veld de gaten naar het p-type drijven, wat juist de reden was waarom de diffusie die de depletielaag opbouwde stopte. Analogoos zal dit elektrische veld op de elektronen een kracht in de richting van het n-type uitoefenen.

De elektrostatistische potentiaal staat weergegeven in figuur 1.5c.

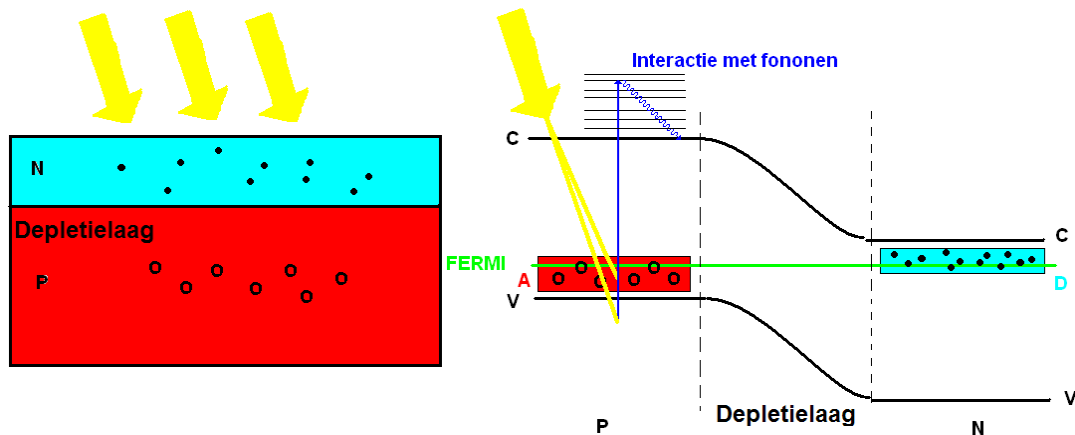
Herinner ook dat de elektrostatistische potentiaal ϕ overeen komt met de potentiële energie U op de lading q na:

$$\phi = \frac{U}{q}$$

Dit wil zeggen dat voor elektronen figuur 1.5c over de x-as gespiegeld moet worden om de potentiële energie te verkrijgen. Voor de gaten moet de figuur niet gespiegeld worden. Vaak zal men enkel de elektrostatistische potentiële energie voor elektronen afbeelden en zeggen dat gaten het liefst omhoog in de figuur bewegen.

1.2.2.2 De np-junctie onder bias

Nu we weten hoe het systeem in evenwicht er uit ziet, kunnen we het gaan verstoren. In het kader van zonnecellen denken we dan automatisch aan licht, fotonen die op het oppervlak van het systeem worden ingestuurd. Bekijk ook figuur 1.6.



Figuur 1.6: Schematisch overzicht van de np-junctie. De rechtse figuur geeft de bandenstructuur. Hier is te zien dat de potentiële energie voor een elektron in de conductionband hoger zal zijn in het p-type dan in het n-type. De gele lijnen staan voor fotonen.

Het eerste waar we in de praktijk rekening mee moeten houden is de weerkaatsing van licht op het oppervlak van de halfgeleider. Dit hangt natuurlijk af van het soort materiaal. In praktijk zal men een laag *SiN* bovenop de zonnecel leggen. Deze laag heeft een donkerblauwe kleur en zal dus minder licht reflecteren dan het lichtgrijs kleurige silicium. Wat men ook nog doet is het oppervlak bewerken en oneffen maken om nog

minder reflectie te hebben. Met deze technieken wordt in deze thesis geen rekening gehouden. Er wordt geen antireflecterende coating aangenomen op het oppervlakte van de zonnecel. De reflectie van een silicium oppervlak wordt wel in rekening gebracht.

Eens het licht deze oppervlakte voorbij is, en zich dus in het materiaal bevindt zal het geabsorbeerd worden door het materiaal (de halfgeleiderstructuren zijn immers niet transparant). Deze absorptie wordt beschreven door de wet van Beer-Lambert (zie sectie 1.5.4 op pagina 40):

$$I(z, \omega) = I_0 e^{-\alpha(\omega)z}$$

Het symbool I_0 staat voor de stralingsfluxdichtheid die doorheen het oppervlak raakt (dus na de reflectie) en ω is de pulsatie van het licht. De stralingsfluxdichtheid $I(\omega)$ zal dus exponentieel afnemen als functie van de afstand z tot het oppervlak. Er zal dus minder energie en dus minder fotonen voorhanden zijn als men dieper in het materiaal indringt. Het symbool $\alpha(\omega)$ staat voor de absorptiecoëfficiënt van het materiaal.

Elk foton dat in het materiaal raakt heeft een kans om een elektron te exciteren uit de valentieband. Het aantal elektronen dat op een bepaalde diepte onder het oppervlak geëxciteerd wordt is afhankelijk van de intensiteit op die diepte. Natuurlijk zal niet elk foton ook daadwerkelijk een ladingsdrager excitatie veroorzaken, er zijn ook andere oorzaken waardoor fotonen verloren gaan.

Eens een elektron geëxciteerd raakt zal het een diffusieproces doorheen het materiaal ondergaan. Hierbij zal het (zoals reeds hierboven vermeld) zijn eventuele kinetische energie verliezen en relaxeren naar de bodem van de conductieband. Als we het elektron niet kunnen scheiden van het gat zal na verloop van tijd een recombinatie optreden en zal de energie van het foton verloren gaan. Enkel elektronen die dicht genoeg bij de depletielaag gecreëerd worden zullen ruimtelijk gescheiden kunnen worden. Hetzelfde geldt voor gaten in het p-type.

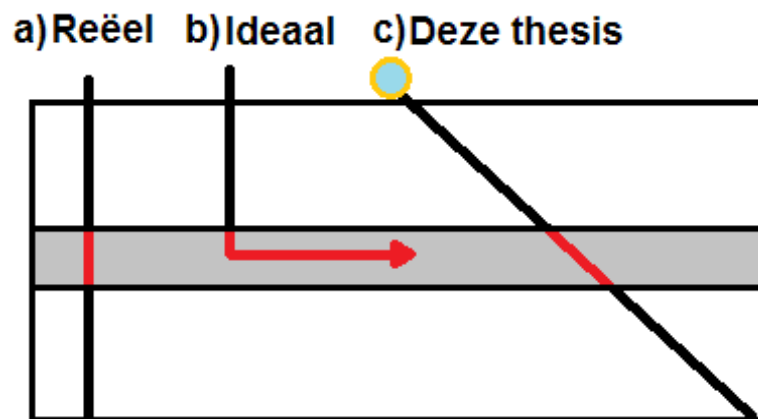
Hoe verder een excitatie van de depletielaag gebeurt, hoe kleiner de kans dat een ladingsdrager zal meedoen aan de fotostroom. De fotostroom is de stroom die uit de zonnecel gewonnen wordt. De kans dat een excitatie een ladingsdrager oplevert die deelneemt aan de fotostroom wordt de kwantumefficiëntie genoemd.

Het is belangrijk op te merken dat vooral de diffusie van minderheidsladingsdragers belangrijk is. In het n-gebied zijn dit de gaten en in het p-gebied zijn dit de elektronen. Het zijn deze ladingsdragers die via de stroomcontacten aan de depletielaag in een stroomkring terecht kunnen komen. Dit kan men begrijpen aan de hand van figuur 1.6. Op deze figuur is te zien dat onder invloed van het elektrisch veld in de depletielaag de elektronen zich van het p- naar het n-gebied over de depletielaag zullen verplaatsen en de gaten van het n- naar het p-gebied. Het elektrisch veld zal verhinderen dat meerderheidsladingsdragers zich over het depletiegebied bewegen.

1.3 Doelstelling

Nu het concept van de zonnecel begrepen is wordt het tijd de doelstelling van deze thesis concreter uit te drukken. Het algemeen doel van zonnecelonderzoek is de verhoging van het rendement van de zonnecel. Dit kan bereikt worden door zoveel mogelijk ladingsdragers over de depletielaag te laten diffunderen. Hiervoor moeten er zoveel mogelijk fotonen zo dicht mogelijk bij de depletielaag geabsorbeerd worden.

In deze thesis willen we dit bereiken door het pad van de fotonen te verleggen zodat ze een langere weglengte in de depletielaag hebben. Ideaal gezien zou een foton eerst zo snel mogelijk tot aan de depletielaag gebracht moeten worden om absorpties buiten de depletielaag te minimaliseren. Eens in de depletielaag zou het foton hierbinnen moeten blijven om zeker geabsorbeerd te worden in dit gebied. Zie figuur 1.7b.



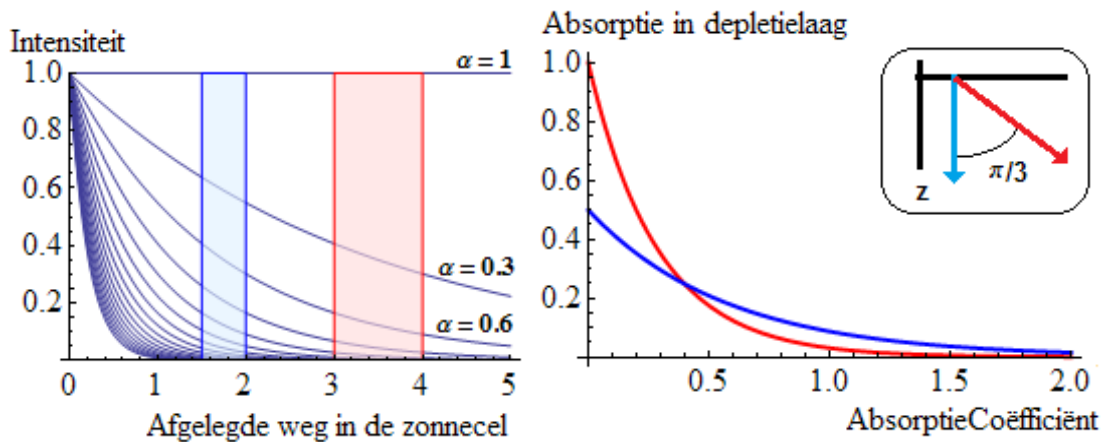
Figuur 1.7: Schematische weergave van het principe achter deze thesis: een schuin invallend foton zal een grotere weglengte in het depletiegebied hebben. Hierdoor zullen er meer fotonen gabsorbeerd worden in en rond de depletielaag waardoor er ook meer ladingsdragers zullen gecreëerd worden die bijdragen aan de foto-stroom. a) de situatie in de standaard kristalijne Si zonnecellen. b) de ideale, maar weinig realistische situatie. c) Een schuin invallend foton zoals ze in deze thesis zullen beschouwd worden.

Zo'n traject is echter niet eenvoudig te realiseren. In deze thesis wordt een tussenweg gezocht via de verstrooiing van fotonen aan nanodeeltjes. In dit geval zullen nanoschillen gebruikt worden vanwege hun zeer goede optische eigenschappen en de grote afstelbaarheid van deze structuren.

In deze thesis wordt aangenomen dat een nanoschil een deel van de ingestuurde fotonen radiaal zal verstrooien. Hierdoor zal het foton niet loodrecht op het zonneceloppervlak maar schuin doorheen de zonnecel propageren. Een foton dat schuin door de depletielaag propageert zal een langere weglengte in deze laag hebben dan wanneer het loodrecht van de ene kant naar de andere kant van de depletielaag zou bewegen. Er zal dus een groter aandeel aan fotonen in en vlak rond de depletielaag geabsorbeerd worden.

Dit wordt grafisch weergegeven op figuur 1.7c. Er dient opgemerkt te worden dat in deze thesis geen rekening gehouden wordt met breking aan het zonneceloppervlak.

Een opmerking die hierbij gemaakt kan worden is dat met gebruik van dit principe de fotonen ook een langere weglengte afleggen in het absorberend materiaal alvorens de depletielaag te bereiken. Dit is inderdaad correct en zal een deel van de winst door gebruik van nanoschillen teniet doen. Indien echter de absorptiecoëfficiënt klein genoeg is zullen er toch meer fotonen in en vlak rond het depletiegebied gecreëerd worden dan bij een verticaal pad. Voor een hoge absorptie zal het voorgestelde concept niet werken omdat er dan teveel fotonen in het gebied voor de depletielaag geabsorbeerd worden waardoor het aantal fotonen dat daadwerkelijk tot aan de depletielaag geraakt heel klein is.



Figuur 1.8: Rekenvoorbeeld dat het concept achter deze thesis ondersteunt. De inzet aan de rechterkant geeft een schets van de situatie weer. De blauwe lijn op de inzet geeft het pad van een loodrecht invallend foton, de rode lijn geeft het pad van een foton dat onder een hoek invalt. De linkse figuur geeft het verloop van de intensiteit in de zonnecel in functie van de afgelegde weg voor verschillende absorptiecoëfficiënten α . Het blauwe gebied stelt de depletielaag voor indien de afgelegde weg gelijk is aan de diepte in de zonnecel. Het rode gebied stelt dezelfde depletielaag voor, maar voor een foton dat onder een hoek $\frac{\pi}{3}$ invalt. De rechtse figuur toont de absorptie in de depletielaag in functie van de absorptiecoëfficiënt voor het blauwe en het rode pad.

Dit kan het best verduidelijkt worden door middel van figuur 1.8. De linker figuur geeft het verloop van de intensiteit in een absorberend medium voor verschillende absorptiecoëfficiënten. Het blauwe gebied is de weglengte in de depletielaag voor een foton dat loodrecht invalt, het rode gebied voor een foton dat onder een hoek $\frac{\pi}{3}$ invalt. Voor deze waarde zal de depletielaag dubbel zo dik lijken voor het foton dat schuin invalt, maar de depletielaag zal ook dubbel zo ver lijken te liggen. De rechtse figuur geeft de absorptie in de depletielaag. Het is duidelijk te zien dat voor een kleine absorptiecoëfficiënt de absorptie van het schuine pad wel degelijk groter is dan bij grote absorptiecoëfficiënten.

In het verdere verloop van deze thesis zal blijken dat de absorptiecoëfficiënt van silicium in bepaalde frequentiegebieden voldoende klein is om een hoger rendement te kunnen verkrijgen door de fotonen schuin door de zonnecel te laten propageren.

1.4 Het ideale rendement van een zonnecel

Voordat we dieper ingaan op de microscopische processen die zich afspelen binnen een np-junctie gaan we het rendement van een theoretische, ideale zonnecel bekijken. Het woord 'ideaal' duidt aan dat we in dit hoofdstuk zullen aannemen dat elk elektron met een energie boven de bandkloof ook nuttige energie oplevert. We beschouwen dus geen recombinatieprocessen, wel relaxatieprocessen. In een eerste stap zullen we het spectrum van het invallend licht benaderen als dat van een zwarte straler. In een tweede stap zullen we overgaan op het echte zonnenspectrum.

1.4.1 Theoretisch spectrum

1.4.1.1 Ideaal rendement

Als eerste benadering om het rendement van een zonnecel te berekenen zal er gekeken worden naar een zonnecel onder ideale omstandigheden en onder belichting van een theoretisch spectrum. Het is algemeen geweten dat het spectrum van de zwarte straler één van de beste benaderingen is voor het spectrum van de zon.

De vergelijking voor een zwarte straler is:

$$I(\nu)d\nu = \frac{2h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} d\nu \quad (1.4)$$

$I(\nu)$ staat voor de stralingsfluxdichtheid per oppervlakte-eenheid en per tijdseenheid voor een bepaalde frequentie (ν). Het symbool h staat voor de constante van Planck, k voor de constante van Boltzmann, c is de lichtsnelheid en T duidt op de temperatuur (voor de zon is $T = 5780$ K). Het spectrum van de zwarte straler staat weergegeven in figuur 1.9.

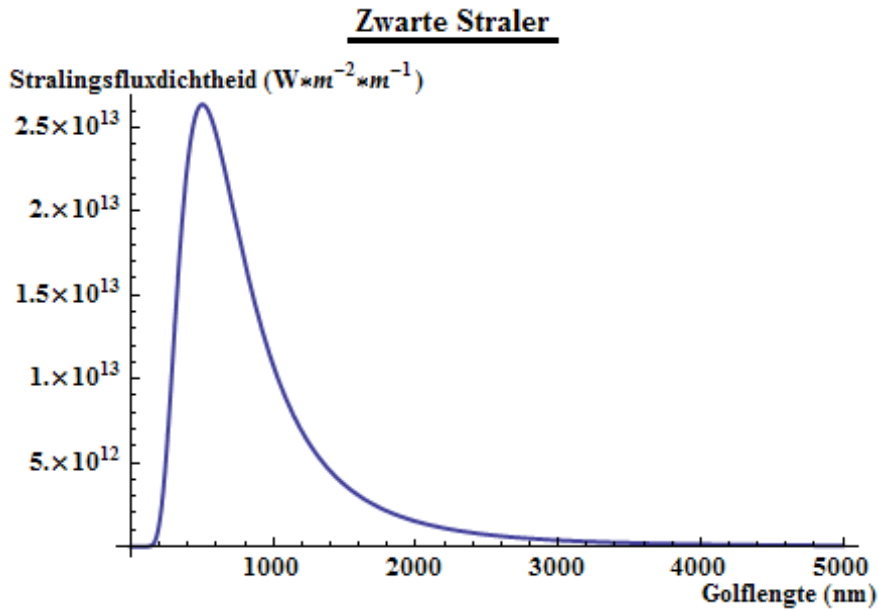
Eerst berekent men de totale ingezonden energie per oppervlakte-eenheid en per seconde \mathcal{R}_i . Het totale ingezonden vermogen is dus:

$$\mathcal{R}_i = \int_0^\infty I(\nu)d\nu. \quad (1.5)$$

Invullen van vergelijking (1.4) en het doorvoeren van de substitutie $x = \frac{h\nu}{kT}$ geeft:

$$\mathcal{R}_i = \frac{2h}{c^3} \left(\frac{kT}{h}\right)^4 \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx. \quad (1.6)$$

Ten tweede berekend men de verkregen energie per seconde. Hiervoor geldt dat het verkregen vermogen gelijk is aan het aantal verkregen elektronen maal de energie per elektron dat voor de fotostroom kan gebruikt worden (deze energie is gelijk aan de energie van de bandkloof). Het aantal elektronen komt overeen met het aantal ingezonden fotonen met energie groter dan of gelijk aan de bandkloof energie E_g ($E_g = 1.11$ eV voor Si). We vinden dan voor de bruikbare energiedichtheid \mathcal{R}_b :



Figuur 1.9: Het spectrum van een zwarte straler voor een temperatuur van 5780 K , representatief voor het spectrum van de zon.

$$\mathcal{R}_b = \int_{\nu_b}^{\infty} I(\nu) d\nu \quad (1.7)$$

ν_b staat voor de frequentie van de fotonen die een energie gelijk aan de bandkloof hebben. Het aantal bruikbare fotonen per seconde is dan gelijk aan:

$$N(\nu \geq \nu_g) = \int_{\nu_g}^{\infty} \frac{I(\nu)}{E_\nu} d\nu = \int_{\nu_g}^{\infty} \frac{I(\nu)}{h\nu} d\nu \quad (1.8)$$

Of nog:

$$N(\nu \geq \nu_g) = \frac{2}{c^3} \left(\frac{kT}{h} \right)^3 \int_{x_g}^{\infty} \frac{x^2}{e^x - 1} dx \quad (1.9)$$

De energiedichtheid die uit de zonnecel verkregen kan worden komt nu overeen met het aantal fotonen met een energie groter dan de bandkloof vermenigvuldigd met de energie van de bandkloof:

$$\mathcal{R}_u = N(\nu \geq \nu_g) E_g$$

Voor Si is $E_g = 1.11\text{ eV} = 1.7784 \times 10^{-19}\text{ J}$. Dit komt overeen met een frequentie van: $\nu_g = \frac{E_g}{h} = 2.6839 \times 10^{14}\text{ Hz}$. Daar $x = \frac{h\nu}{kT}$, is $x_g = \frac{E_g}{kT} = 2.2286$.

Numeriek uitwerken van de integralen geeft:

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = 6.4939 \quad (1.10)$$

$$\int_{x_g}^{\infty} \frac{x^2}{e^x - 1} dx = 1.2777 \quad (1.11)$$

en dus vinden we voor het rendement ϵ :

$$\epsilon = \frac{\mathcal{R}_u}{\mathcal{R}_i} = \frac{N(\nu \geq \nu_g) E_g}{\frac{2h}{c^3} \left(\frac{kT}{h}\right)^4 \cdot 6.4939} \quad (1.12)$$

$$= \frac{\frac{2}{c^3} \left(\frac{kT}{h}\right)^3 \cdot 1.2777 \cdot 1.11 \text{ eV}}{\frac{2h}{c^3} \left(\frac{kT}{h}\right)^4 \cdot 6.4939} \quad (1.13)$$

en met $k = 1.3806 \times 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$, $c = 299792458 \frac{\text{m}}{\text{s}}$, $h = 6.6260693 \times 10^{-34} \text{ J s}$ en $T = 5780 \text{ K}$ vinden we voor het rendement:

$$\epsilon = 0.438$$

$\epsilon = 43.8\%$

(1.14)

1.4.1.2 Ideale bandkloof

Er zijn verschillende materialen die in aanmerking komen om een zonnecel te vormen. In theorie kan men eender welke combinatie van n- en p-type halfgeleiders gebruiken. De vraag is echter, welke combinatie is de beste? Een lagere bandkloof zal betekenen dat er meer elektronen geëxciteerd kunnen worden, maar een hogere bandkloof geeft minder energieverlies vanwege relaxaties. Het is dus een evenwicht tussen beide dat gezocht wordt.

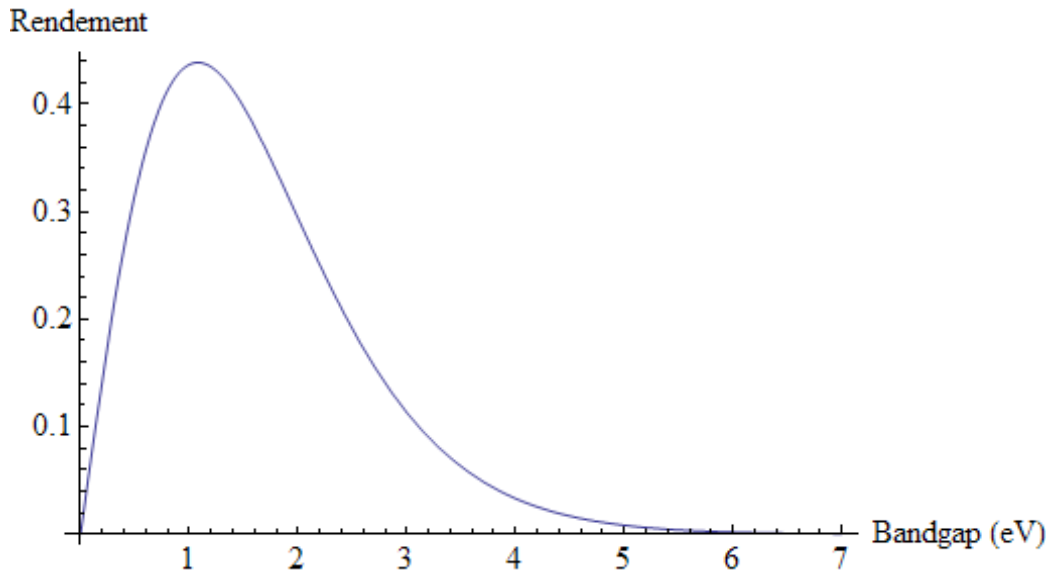
Aangezien de energie die in de zonnecel wordt gestoken altijd dezelfde is zal $E_{in} = 6.4939kT$ als een constante aanzien worden. Dit geeft:

$$\epsilon = \frac{\int_{x_g}^{\infty} \frac{x^2 E_g}{e^x - 1} dx}{kT \cdot 6.4939}, \quad (1.15)$$

waarbij ook x_g nog van E_g afhangt, namelijk: $x_g = \frac{E_g}{kT}$.

Dit geeft een verloop van het rendement in functie van E_g zoals weergegeven in figuur 1.10.

Deze figuur vertoont een maximum bij $E_g = 1.07872 \text{ eV}$. Dit maximum komt overeen met een rendement van 0.438778 of 43.9%. In tabellen kan men dan opzoeken welke halfgeleidercombinatie hier het dichtst in de buurt ligt. Op enkele exotische combinaties na ligt Si hier met 1.11 eV het dichtst bij in de buurt. Gecombineerd met de lage productieprijs maakt de grootte van de bandkloof Si tot een ideaal materiaal om een zonnecel mee te maken.



Figuur 1.10: Deze figuur geeft het rendement van een zonnecel onder ideale omstandigheden en voor een theoretisch spectrum in functie van de bandkloof energie.

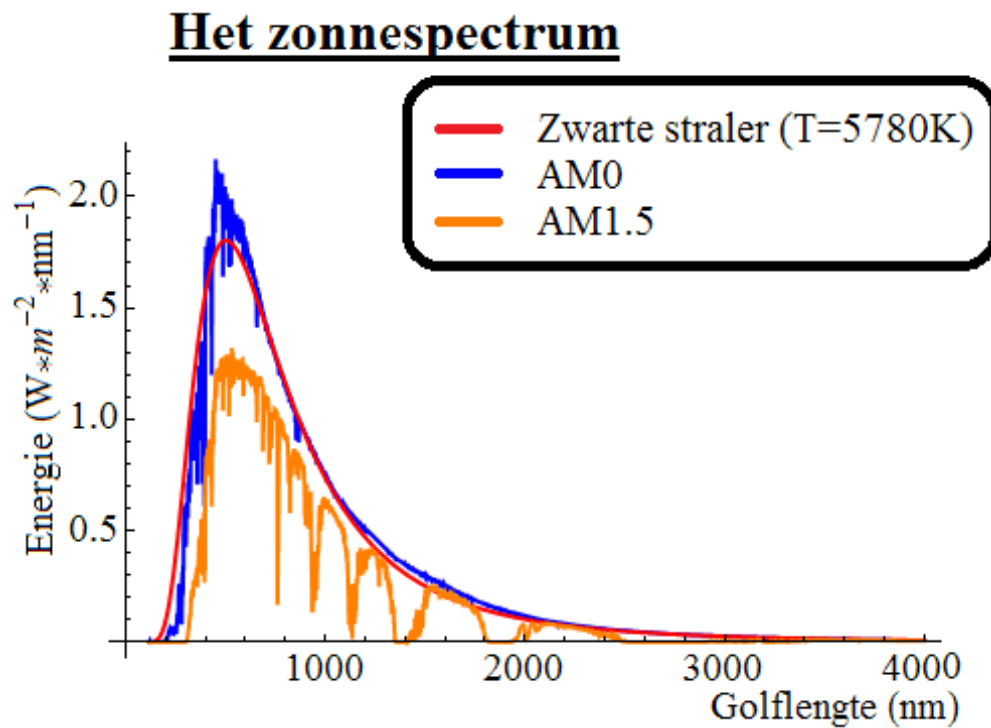
1.4.2 Reëel spectrum

1.4.2.1 Ideaal rendement

In sectie 1.4.1 is het rendement van een zonnecel onder ideale omstandigheden en voor een theoretisch spectrum berekend. Uiteraard is dit een rendement dat in de praktijk moeilijk bereikt zal worden. De eerste stap naar een meer realistisch rendement is het gebruiken van een reëel spectrum in plaats van een theoretisch spectrum. Het reëel AM1.5 spectrum staat afgebeeld in figuur 1.11. AM1.5 staat voor Air Mass 1.5 en duidt op het spectrum van de zon met de atmosferische absorptie meegerekend indien de zon een op een declinatie van $\gamma = 41.81^\circ$ zou staan. De factor 1.5 wordt dan berekend via:

$$\begin{aligned} n_{air\ mass} &= \frac{\text{Optische weglengte tot aan de zon}}{\text{Optische weglengte indien de zon in de zenit staat}} \\ &= \frac{1}{\sin(\gamma)} \end{aligned}$$

Het standaardspectrum dat door de fotovoltaïsche industrie gebruikt wordt bestaat uit een lijst datapunten, waarin voor een lijst golflengten het geïntegreerd vermogen per oppervlakte in het overeenkomstige golflengte interval gegeven wordt. Voor lage golflengten (van 200 tot 400 nm) werkt het histogram met golflengte intervallen van 0.5 nm, voor hogere golflengten (van 400 tot 1700 nm) met intervallen van 1 nm en vanaf 1700 tot 4000 nm wordt er gewerkt met intervallen van 5 nm. De breedte van deze golflengte intervallen zal in het vervolg worden aangeduid als $\Delta\lambda$ (in nm), terwijl het



Figuur 1.11: Deze figuur geeft het reële AM1.5 spectrum van de zon (oranje), het AM0 spectrum (blauw) en de theoretische zwarte straler (rood). Deze spectra voldoen aan de standaard die is opgelegd door de zonnecelindustrie en is verkregen door de 'American Society for Testing and Materials' (ASTM) [1]. Deze spectra zijn herschaald om een correcte verhouding te verkrijgen. De zwarte straler en het AM 0 spectrum zijn herschaald naar een geïntegreerd vermogen per oppervlakte van 1353 W/m^2 [22]. Het AM 1.5 spectrum heeft een totaal vermogen per oppervlakte van 823 W/m^2 . [6]

vermogen per oppervlakte per interval wordt aangeduid als f_λ (in $\frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{nm}}$).

De totale inkomende energie per seconde die op een oppervlak A terecht komt is dan gelijk aan:

$$P_{in} = A \int_0^\infty f_\lambda d\lambda,$$

of, omdat we enkel discrete waarden hebben:

$$P_{in} = A \sum_{\lambda=200 \text{ nm}}^{4000 \text{ nm}} f_\lambda \Delta\lambda \quad (1.16)$$

P_{in} wordt dus uitgedrukt in W ($= \frac{\text{J}}{\text{s}}$). Hierbij begaan we een fout omdat we enkel sommeren over de opgemeten golflengten en niet het gehele spectrum in de som meenemen. Deze fout zal echter minimaal zijn omdat de staarten van het spectrum zeer klein zijn.

Het bruikbare vermogen wordt op een analoge manier bekomen:

$$P_{uit} = A \sum_{\lambda=200 \text{ nm}}^{4000 \text{ nm}} \Theta_\lambda (E(\lambda) - E_b) n_\lambda \Delta\lambda h\nu_b \quad (1.17)$$

Hierbij staat Θ_λ voor de trapfunctie:

$$\Theta_\lambda(x) = \begin{cases} 1 & \text{Als } x \geq 0 \\ 0 & \text{Als } x < 0 \end{cases}$$

Voor een ideale zonnecel is $\Theta_\lambda(x) = 1$ voor energieën groter dan de bandkloof. In een reële zonnecel zal dit niet 1 zijn, maar een ingewikkelde functie van x . Deze functie zal weergeven hoeveel ladingsdragers er door een foton met energie x opgewekt kunnen worden. Het symbool n_λ staat voor het aantal fotonen per bin. Dit komt dus overeen met de energie per bin f_λ zoals gegeven door het AM1.5 zonnenspectrum, gedeeld door de energie per foton $h\nu$. Wiskundig geeft dit:

$$n_\lambda = \frac{f_\lambda}{h\nu} = \frac{f_\lambda \lambda}{hc} \quad (1.18)$$

De term $h\nu_g$ geeft de energie van de bandkloof en dus ook de energie van elke bruikbare ladingsdrager. Hierbij staat ν_g voor de frequentie van een foton met een energie gelijk aan de bandkloofenergie $E_g = h\nu_g$.

Het rendement wordt dan verkregen uit:

$$\epsilon = \frac{P_{uit}}{P_{in}} \quad (1.19)$$

Dit is uitgerekend met het programma Mathematica[®] en geeft als resultaat:

$$\epsilon = \frac{440.16}{900.76} = 0.48866$$

$\epsilon = 48.9\%$

(1.20)

Merk op dat dit rendement hoger is dan het rendement bij het theoretisch spectrum. Dit wil niet zeggen dat er meer bruikbare energie wordt verkregen, maar wel dat er meer energie verkregen wordt ten opzichte van de energie die in het systeem wordt gestoken. Het feit dat bij een reëel spectrum bepaalde golflengten ontbreken kan het rendement verhogen als deze golflengten toch geen nuttige energie aanbrachten. Door het ontbreken van zo'n "nutteloze" golflengten zal P_{in} verminderen terwijl P_{uit} niet verandert, wat uiteraard resulteert in een hoger rendement.

Opmerking: *Eigenlijk moet er ook rekening gehouden worden met de emissie van de zonnecel zelf. Het is namelijk zo dat de zonnecel zelf ook een zwarte straler voorstelt met een temperatuur gelijk aan de kamertemperatuur (≈ 300 K). Deze factor zal tot een extra verlies leiden en moet dus afgetrokken worden van P_{in} . Uit vergelijking (1.4) volgt dat voor de kamertemperatuur de uitgezonden energie gelijk is aan:*

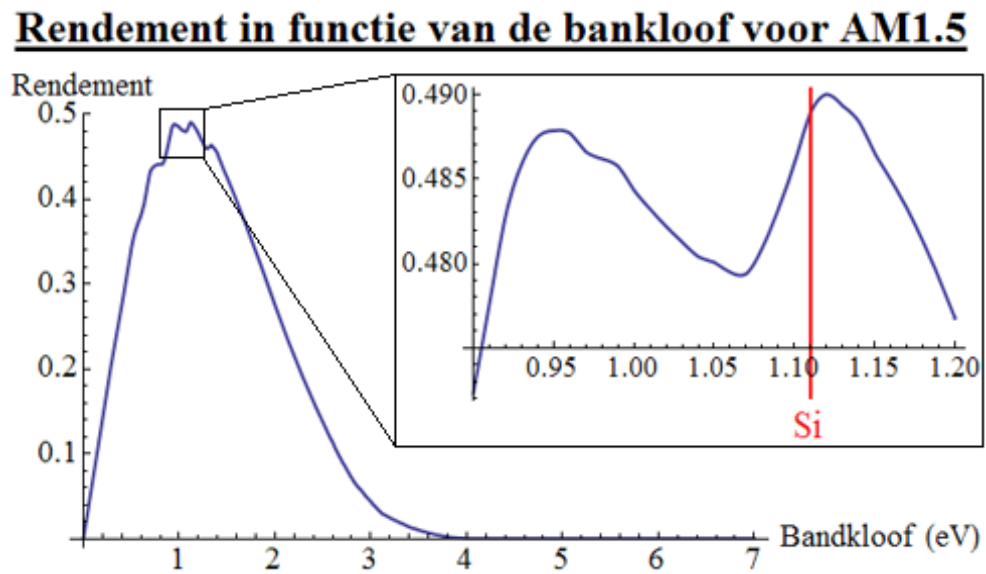
$$P_{zonnecel} = 1.88 \text{ W} \quad (1.21)$$

Dit wordt vergeleken met P_{in} en P_{uit} die respectievelijk 900.76 W en 440.16 W bleken te zijn. Dit wil zeggen dat $P_{zonnecel}$ slechts 0.2% van P_{in} en 0.4% van P_{uit} voorstelt. Het is dus gerechtvaardigd het verlies van de uitstraling van de zonnecel zelf te verwaarlozen. Verder zijn er ook andere effecten die nog in rekening gebracht moeten worden. Zo zullen er elektronen verloren gaan in de zonnecel door recombinaties. Een aantal van deze recombinatie processen worden in rekening gebracht in de microscopische studie van de zonnecel in sectie 1.5. Ook het extern circuit zal een invloed uitoefenen op de zonnecel onder andere door het ontstaan van een dark current door opbouw van ladingsdragers aan de contacten met het externe circuit. Deze invloed is niet in rekening gebracht in de berekeningen.

1.4.2.2 Ideale bandkloof

Door gebruik te maken van het reële AM1.5 zonnenspectrum kan ook de afschatting van de ideale bandkloof verbeterd worden. Het verloop van het rendement in functie van de bandkloof voor het AM1.5 spectrum staat weergegeven in figuur 1.12.

Het maximale rendement wordt nu behaald bij een bandkloof van 1.1201 eV. Silicium is dus nog steeds een van de beste materialen om een zonnecel uit op te bouwen. Het maximale rendement dat bij deze ideale bandkloof gehaald kan worden is 49%.



Figuur 1.12: Het rendement van een ideale zonnecel in functie van de bandkloof voor het reële AM1.5 zonnenspectrum. Merk de lichte variaties op rondom het maximum van de functie. Deze variaties ontstaan door de absorpties in de atmosfeer. De inzet is een uitvergroting van het gebied met het maximale rendement. De rode lijn geeft de bandkloof van Si aan: 1.11 eV.

1.5 Microscopische studie van de np-junctie

In dit hoofdstuk wordt de np-junctie van naderbij bekeken. Het doel is namelijk het berekenen van de kwantumefficiëntie (QE). Deze QE staat voor de kans dat een foton met een bepaalde golflengte nuttige energie oplevert.

Om deze grootheid te kunnen berekenen moet de diffusie van ladingsdragers doorheen de np-junctie bestudeerd worden. Hiervoor zullen we eerste de transportvergelijkingen opstellen. Nadien worden deze vergelijkingen met de gepaste randvoorwaarden opgelost. Hieruit volgt dan de concentratie van de ladingsdragers waaruit de QE kan worden afgeleid.

Deze theorie staat in de literatuur uitgewerkt [22]. Hier zullen slechts de eindresultaten en de belangrijkste aannames opgesomd worden. We merken nu alvast op dat de transportvergelijkingen slechts in 1 dimensie zullen behandeld worden. We zullen enkel de diepte z onder het oppervlak van de zonnecel als variabele beschouwen.

Voordat de transportvergelijkingen worden uitgelegd en uitgerekend berekenen we eerst de dikte van de depletielaag dewelke we in de verdere berekeningen nodig zullen hebben.

1.5.1 De depletielaag

Eerst bestuderen we de depletielaag van naderbij. Meer bepaald zullen we de dikte van de depletielaag berekenen, gebaseerd op gegevens van IMEC. Hiervoor moet de Poissonvergelijking in het n- en het p-gebied opgelost worden en met elkaar verbonden worden. We gaan uit van een constante dopering in het p-gebied [3] en een voorlopig algemene positie afhankelijke dopering in het n-gebied.

1.5.1.1 Berekening van het potentiaalverval

Voordat we met de echte berekening van de dikte van de depletielaag beginnen berekenen we nog eerst de potentiaalval overheen de depletielaag, die we later zullen nodig hebben. Deze potentiaalval V ontstaat omdat de potentiaal anders zal zijn aan beide zijden van de depletielaag. Dit is juist nodig om de ladingsscheiding te verkrijgen.

Het potentiaalverval kan berekend worden door te vertrekken van de volgende vergelijking die in de literatuur gevonden kan worden [22]:

$$V = \frac{k_b T}{q} \ln \left(\frac{N_d N_a}{n_i^2} \right). \quad (1.22)$$

Hierbij staat n_i voor de intrinsieke ladingsdichtheid. Deze wordt gedefinieerd door:

$$n_i^2 = np = N_c N_v e^{\frac{-E_g}{k_b T}}, \quad (1.23)$$

waarin (binnen de parabolische band benadering):

$$N_{c/v} = 2 \left(\frac{m_{c/v}^* k_b T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}. \quad (1.24)$$

Voor kamertemperatuur hebben we typisch:

$$n_i = 1.02 \times 10^{10} \frac{1}{\text{cm}^3}, \quad (1.25)$$

waarmee uit te rekenen valt dat de potentiaalval over de depletielaag neerkomt op:

$$V = 0.89 \frac{\text{J}}{\text{C}}. \quad (1.26)$$

1.5.1.2 Oplossen van de Poissonvergelijking

We lossen de Poissonvergelijking in beide gebieden op.

***p*-type** In het *p*-type gebied beschouwen we de doperingsconcentratie N_a als een constante en heeft de Poissonvergelijking de eenvoudige vorm:

$$\nabla^2 \phi_p = \frac{eN_a}{\varepsilon}. \quad (1.27)$$

Deze vergelijking zegt dat in 1 dimensie de tweede afgeleide van de potentiaal ϕ een constante is. De potentiaal is dus een veelterm van tweede orde:

$$\phi_p(z) = a_p + b_p z + \frac{eN_a}{2\varepsilon} z^2 \quad (1.28)$$

***n*-type** In het *n*-type gebied is de doperingsconcentratie een onbekende functie $N(z)$. Dit wil zeggen dat we de Poissonvergelijking met bronterm moeten oplossen. We beschouwen eerst de homogene vergelijking en nadien de particuliere oplossing.

Homogene oplossing

$$\nabla^2 \phi = 0 \quad (1.29)$$

Dus geldt:

$$\phi_h(z) = a_n + b_n z \quad (1.30)$$

Particuliere oplossing De particuliere oplossing verkrijgt men vanuit de homogene via de 'variatie van de parameters' methode. Definieer:

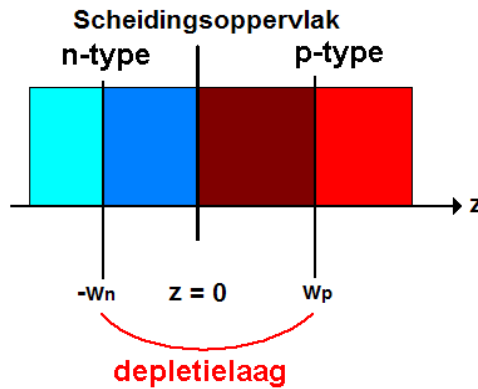
$$\phi_h = a_n f_1 + b_n f_2 \quad (1.31)$$

Dan geldt:

$$\begin{cases} f_1 = 1 \\ f_2 = z \end{cases} \quad (1.32)$$

We zoeken nu (deze methode wordt de 'variatie van de parameters' genoemd):

$$\phi_{part}(z) = c_1(z) f_1(z) + c_2(z) f_2(z) \quad (1.33)$$



Figuur 1.13: Schematische voorstelling van de zonnecel en de gebruikte conventies in de berekeningen.

door volgend stelsel op te lossen (waarbij ' duidt op de afgeleide naar z):

$$\begin{cases} c_1' f_1 + c_2' f_2 = 0 \\ c_1' f_1' + c_2' f_2' = -\frac{eN(z)}{\varepsilon} \end{cases} \quad (1.34)$$

Of nog:

$$\begin{cases} c_2' = -\frac{eN(z)}{\varepsilon} \\ c_1' = -c_2' z \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} c_2 = -\int \frac{eN(z)}{\varepsilon} dz \\ c_1 = \int \frac{eN(z)}{\varepsilon} z dz \end{cases} \quad (1.35)$$

Totale oplossing De totale oplossing is nu de combinatie van de homogene en de particuliere oplossing:

$$\phi_n(z) = a_n + b_n z + \frac{e}{\varepsilon} \int N(z) z dz - \frac{e}{\varepsilon} z \int N(z) dz \quad (1.36)$$

1.5.1.3 Randvoorwaarden

Ter conventie leggen we het nulpunt van de z -as op de interface tussen het n - en p -gebied. We stellen dan dat de depletielaag zich in het p -gebied uitstrekt tot een (gezochte) afstand w_p . Gelijkaardig stellen we dat de depletielaag zich in het n -type gebied tot $-w_n$ uitstrekt. Dit wordt schematisch voorgesteld op figuur 1.13. Deze conventie wordt enkel volgehouden in de berekening van de depletielaag. De overige berekeningen in dit hoofdstuk vlogen de conventie dat het nulpunt op het oppervlak van de zonnecel ligt.

Dit geeft de volgende randvoorwaarden:

$$\begin{cases} \phi_n(-w_n) = 0 \\ \phi_p(w_p) = -V \end{cases} \quad (1.37)$$

$$\begin{cases} \phi'_n(-w_n) = 0 \\ \phi'_p(w_p) = 0 \end{cases} \quad (1.38)$$

$$\phi_n(0) = \phi_p(0) \quad (1.39)$$

$$\phi'_n(0) = \phi'_p(0). \quad (1.40)$$

Hierbij is $\phi_p(w_p) = -V$ gedefinieerd zodat V een positieve waarde is. Deze V staat voor de potentiaalval over de depletie laag en werd uitgerekend in sectie 1.5.1.1 ($V = 0.89 \frac{J}{C}$).

Aan het scheidingsoppervlak ($x = 0$) We lossen eerst de randvoorwaarden aan het scheidingsoppervlak op:

$$\phi_n(0) = \phi_p(0) \Rightarrow a_n = a_p \quad (1.41)$$

$$\phi'_n(0) = \phi'_p(0) \Rightarrow b_n = b_p. \quad (1.42)$$

Aan de randen van de depletie laag

Aan w_p Hier geldt:

$$\begin{cases} \phi_p(w_p) = -V \\ \phi'_p(w_p) = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a_p = -V + \frac{eN_a}{2\varepsilon} w_p^2 \\ b_p = -\frac{eN_a}{\varepsilon} w_p \end{cases}. \quad (1.43)$$

Aan w_n Hier moet gelden:

$$\begin{cases} \phi_n(-w_n) = 0 \\ \phi'_n(-w_n) = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a_n = -\frac{e}{\varepsilon} \int_0^{-w_n} N(x) x dx \\ b_n = \frac{e}{\varepsilon} \int_0^{-w_n} N(x) dx \end{cases}. \quad (1.44)$$

1.5.1.4 Algemene eindoplossing met randvoorwaarden

De potentialen in de twee gebieden worden gegeven door:

$$\begin{aligned} \phi_n(z) &= -\frac{e}{\varepsilon} \int_0^{-w_n} N(z) z dz + \frac{e}{\varepsilon} z \int_0^{-w_n} N(z) dz + \frac{e}{\varepsilon} \int_0^z N(z) z dz - \frac{e}{\varepsilon} z \int_0^z N(z) dz \\ &= \frac{e}{\varepsilon} \int_{-w_n}^z N(z) z dz - \frac{e}{\varepsilon} z \int_{-w_n}^z N(z) dz \end{aligned} \quad (1.45)$$

$$\begin{aligned} \phi_p(z) &= -V + \frac{eN_a}{2\varepsilon} w_p^2 + -\frac{eN_a}{\varepsilon} w_p z + \frac{eN_a}{2\varepsilon} z^2 \\ &= \frac{eN_a}{2\varepsilon} (w_p - z)^2 - V. \end{aligned} \quad (1.46)$$

1.5.1.5 Dikte van de depletielaag

We combineren nu de vergelijkingen die uit de randvoorwaarden zijn gekomen om w_n en w_p te bepalen.

$$\begin{cases} a_n = a_p \\ b_n = b_p \\ -\frac{e}{\varepsilon} \int_0^{-w_n} N(z) z dz = -V + \frac{eN_a}{2\varepsilon} w_p^2 \\ \frac{e}{\varepsilon} \int_0^{-w_n} N(z) dz = -\frac{eN_a}{\varepsilon} w_p \end{cases} .$$

De laatste vergelijking geeft:

$$w_p = -\frac{1}{N_a} \int_0^{-w_n} N(z) dz. \quad (1.47)$$

We substitueren dit in de derde vergelijking en verkrijgen zo de functie:

$$f(w_n) = V - \frac{eN_a}{2\varepsilon} \left(-\frac{1}{N_a} \int_0^{-w_n} N(z) dz \right)^2 - \frac{e}{\varepsilon} \int_0^{-w_n} N(z) z dz = 0. \quad (1.48)$$

De waarde van w_n kan nu gevonden worden door het nulpunt van deze functie te zoeken.

1.5.2 De transportvergelijkingen

1.5.2.1 Opstellen van de transportvergelijkingen

De transportvergelijkingen geven de regels waaraan de concentratie aan ladingsdragers (elektronen (n) of gaten (p)) in een halfgeleider, maar buiten de depletielaag, moeten gehoorzamen. In elk gebied zijn het steeds de minderheidsladingsdragers die belangrijk zijn voor de werking van een zonnecel. Het zijn immers de minderheidsladingsdragers die tot aan de depletielaag moeten diffunderen voordat er ladingsscheiding kan optreden. In het n-gebied zullen de gaten belangrijk zijn en zullen de vergelijkingen met onderindex p gelden. In het p-gebied zullen de vergelijkingen met onderindex n volgen. De continuïteitsvergelijkingen waaraan de concentraties moeten gehoorzamen zijn:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{|e|} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n + G_n - U_n \text{ in het n-gebied} \quad (1.49a)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{|e|} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p + G_p - U_p \text{ in het p-gebied} \quad (1.49b)$$

Hierbij staat $G_{n/p}$ voor het aantal gegenereerde elektronen/gaten per volume en per tijdseenheid en $U_{n/p}$ voor het aantal gerecombineerde elektronen/gaten per volume en per tijdseenheid. $\vec{J}_{n/p}$ duidt op de ladingsstroomdichtheid ($\frac{A}{m^2}$). Wat deze vergelijkingen eigenlijk willen zeggen is dat de verandering van de deeltjesconcentratie in de tijd in een bepaald volume evenredig is met de generatie en de recombinatie in dat volume, plus de netto stroom in of uit dat volume. Het symbool $|e|$ geeft de lading van 1 ladingsdrager ($|e| = 1.602 \times 10^{-19} C$).

De vraag die zich nu stelt is wat de waarden van $\vec{J}_{n/p}$, $G_{n/p}$ en $U_{n/p}$ zijn. Er zijn vele effecten die hierin meespelen. We geven een kort overzicht.

De stroomdichtheid ($\vec{J}_{n/p}$) Voor de stroomdichtheid in het n- en het p-gebied gebruiken we het drift-diffusie model. Dit veelgebruikte model zegt:

$$\vec{J}_n(\vec{r}) = |e| D_n \vec{\nabla} n + \mu_n n |e| \vec{F} \quad (1.50a)$$

$$\vec{J}_p(\vec{r}) = -|e| D_p \vec{\nabla} p + \mu_p p |e| \vec{F} \quad (1.50b)$$

Hierbij staat $D_{n/p}$ voor de diffusieconstante, $\mu_{n/p}$ voor de mobiliteit van de ladingsdragers en \vec{F} voor een elektrisch veld (ongeacht de oorsprong hiervan). Typische waarden voor de diffusieconstante en de mobiliteit worden gegeven in tabel 1.2 op pagina 48. In onze situatie gaan we er echter vanuit dat er geen extern aangelegd veld aanwezig is en dus is \vec{F} gelijk aan nul. Dit zal niet gelden binnen de depletielaag omdat daar een elektrisch veld wordt gegenereerd door de ladingen in de depletielaag. Het is dit elektrisch veld dat er juist voor zal zorgen dat er ladingsscheiding optreedt.

Het is belangrijk te onthouden dat in het drift-diffusie model enkele aannames gemaakt worden. Deze zijn:

1. De bezetting van de elektronen en de gaten vormen elk een quasi thermisch evenwicht met hun eigen Fermi-niveau $E_{Fn/p}$ en -temperatuur $T_{Fn/p}$.
2. De elektron- en gat-temperaturen zijn steeds hetzelfde als de rooster temperatuur (dit geldt niet in bijzijn van sterke elektrische velden).
3. Veranderingen in de bezettingsgraad van een toestand zijn het gevolg van verstrooiingen binnenin een band. Recombinaties, generatie (tussen verschillende banden) of het vangen van gedelocaliseerde ladingsdragers zijn veel minder voorkomend. Dit wordt ook de relaxatietijdbenadering genoemd.
4. Elektron- en gattoestanden kunnen beschreven worden door golfvector \vec{k} en spin op of neer (met de spin wordt niet expliciet rekening gehouden).
5. De parabolische band benadering wordt gebruikt om de bandenstructuur wiskundig te beschrijven.
6. De Boltzmann benadering is voldaan. Dit komt wiskundig overeen met (dit geldt niet in degeneratieve halfgeleiders):

$$E_c - E_{Fn} \gg k_b T$$

$$E_{Fp} - E_v \gg k_b T$$

De generatieterm ($G_{n/p}$) De generatieterm beschrijft hoe de creatie van gaten en elektronen plaatsvindt. Strikt gezien zijn er meerdere creatieprocessen waarmee rekening gehouden moet worden.

Een eerste creatieproces is 'thermische generatie'. Dit proces beschrijft de excitatie van elektronen door thermische vibraties van het rooster. Hoe hoger de temperatuur van het rooster, hoe hoger de thermische generatie. In zuiver silicium is de thermische generatie bij kamertemperatuur verwaarloosbaar. Voor de thermische excitatie van een elektron naar de bandkloof energie van 1.11 eV is immers een temperatuur van 12881 K nodig. Dit is echter anders voor gedopeerde halfgeleiders. Bij kamertemperatuur zal er al voldoende energie aanwezig zijn om veel ladingsdragers te exciteren. Voor elk generatieproces is er echter ook een equivalent recombinatie proces. De thermische recombinatie processen zullen het aantal ladingsdragers doen afnemen. In evenwicht zullen deze twee processen elkaar opheffen. We zullen enkel de verstoring ten opzichte van het evenwicht bestuderen en de thermische processen niet meenemen in de berekeningen.

Een ander, en in ons geval veel belangrijker, creatieproces is de 'fotogeneratie'. Fotogeneratie beschrijft hoe een foton een elektron-gat paar kan exciteren. De ladingsdragers zullen steeds in paren gecreëerd worden. Vandaar dat de generatieterm voor alle ladingsdragers hetzelfde zal zijn.

Een extra opmerking is dat fotonen ook voor andere processen kunnen zorgen in zonnecellen. Zo kan een foton ook gebruikt worden om de kinetische energie van een reeds geëxciteerde ladingsdrager te verhogen. Ook kan een foton verantwoordelijk zijn voor een fonon. Deze twee processen zijn vooral belangrijk bij fotonen met energie lager dan de bandkloof en beschouwen we dus verder niet.

De fotogeneratiesnelheid hangt af van de intensiteit (of de flux) van het licht in de zonnecel. De term 'snelheid' komt misschien vreemd over, maar duidt aan dat het gaat over het aantal gegenereerde fotonen per seconde. Voor een eerste aanname kan men de wet van Beer-Lambert hiervoor gebruiken (zie sectie 1.5.4 op pagina 40). Er zijn echter extra opmerkingen waarmee men rekening moet houden. Zo zal een deel van de ingestuurde lichtbundel reflecteren op het oppervlak. Deze energie zijn we kwijt. Bij een niet-homogeen materiaal kan de generatie ook met een andere factor verlopen op andere plaatsen of diepten in het materiaal. We zullen in dit werk echter van een homogeen medium uit gaan.

De generatiesnelheid zal afhangen van de omgevingsfactoren. Daarom zullen we deze nu nog niet invullen, maar zullen we een onbekende factor meenemen in de berekeningen:

$$G_{n/p} = g(z, \omega) \tag{1.51}$$

waarbij $g(z, \omega)$ duidt op het aantal geabsorbeerde fotonen per volume-eenheid en per seconde op een positie z onder het oppervlak van de zonnecel door een foton met pulsatie ω .

Merk op dat we toestaan dat deze generatieterm afhankelijk is van de positie en van de energie van het ingezonden foton. We staan niet toe dat de generatieterm expliciet afhankelijk is van de concentratie aan ladingsdragers in het materiaal. Dit wil zeggen dat we aannemen dat de voorraad aan elektronen die kunnen geëxciteerd worden zodanig

groot is dat veranderingen van deze voorraad verwaarloosbaar zijn.

De recombinatieterm ($U_{n/p}$) Recombinatieprocessen zijn alle processen waarbij het aantal mobiele (vrije) ladingsdragers afneemt. Deze processen worden in eerste instantie opgedeeld in twee categorieën: vermijdbare en onvermijdbare.

- Onvermijdbare recombinatieprocessen hebben fundamenteel fysische processen ten grondslag. Zo zijn er de processen van spontane en gestimuleerde emissie. Spontane emissie zal in ons geval het belangrijkste van de twee zijn en wordt ook wel als 'radiative recombination' aangeduid. Ook is er de interactie tussen gelijkaardige ladingsdragers. Hierdoor bestaat de kans dat één van de twee vervalt terwijl de andere extra kinetische energie krijgt. Dit noemt men Auger Recombinatie. Dit zal belangrijk zijn in materialen met een lage of indirecte bandkloofenergie en een hoge dichtheid aan ladingsdragers en is dus belangrijk voor het beschouwde systeem.
- Vermijdbare recombinatie processen kunnen ontstaan door fouten in het materiaal. Hiernaar wordt verwezen met de naam 'non-radiative recombinations' (al valt Auger ook niet onder radiatieve recombinaties). Deze non-radiatieve processen zijn de belangrijkste in halfgeleiders.

Voor gedopeerde halfgeleiders gaan berekeningen vaak uit van de relaxatietijdbenadering wat leidt tot een recombinatieterm van de vorm:

$$U_n \approx \frac{n(z) - n_0}{\tau} \quad (1.52)$$

waarbij τ verschilt per soort recombinatie en materiaalspecifiek is. Nu zal de totale recombinatie term een cumulatie van al de verschillende effecten zijn. De uiteindelijke term zal dezelfde vorm hebben waarbij de algemene τ een combinatie van de τ 's van de verschillende effecten is.

$$\begin{aligned} U_n &\approx \frac{n(z) - n_0}{\tau} \\ &= (n(z) - n_0) \left(\frac{1}{\tau_{\text{spontane emissie}}} + \frac{1}{\tau_{\text{gestimuleerde emissie}}} + \frac{1}{\tau_{\text{auger}}} + \dots \right) \end{aligned}$$

Deze algemene τ kan experimenteel bepaald worden. Voor τ zijn de volgende waarden gebruikt [22]:

$$\begin{aligned} \tau_n &= 5 \times 10^{-6} \text{ s} \\ \tau_p &= 10^{-6} \text{ s} \end{aligned}$$

Oppervlakterecombinaties Er zijn echter ook recombinaties die enkel op specifieke plekken doorgaan. De belangrijkste hiervan zijn oppervlakterecombinaties die, zoals de naam al doet vermoeden, zich afspelen aan een oppervlak van het systeem. Aan oppervlakten of interfaces zal er namelijk een verhoogde kans op recombinatie zijn. De grootste oorzaak hiervan zijn defecten die met een grotere kans voorkomen aan deze oppervlakten.

De theorie achter de oppervlakte recombinaties geeft dat voor een gedopeerde halfgeleider deze recombinaties worden gegeven door [22]:

$$U_{opp}\delta z \approx S_n(n(z) - n_0) \quad (1.53)$$

Hierbij staat S_n voor de oppervlakte recombinatiesnelheid (met als eenheid $\frac{1}{\text{m}^2\text{s}}$). Typische waarden voor S_n staan gegeven in tabel 1.2 op pagina 48. De term δz duidt op een kleine variatie in de z -richting. We zullen deze oppervlakterecombinaties meenemen in de berekeningen door ze via de randvoorwaarden in rekening te brengen. Merk dus op dat er wordt aangenomen dat er in het inwendige van het materiaal geen imperfectheden voorkomen waaraan oppervlakterecombinaties kunnen gebeuren. In reële systemen zullen er wel fouten in het materiaal aanwezig zijn waardoor er extra oppervlakten ontstaan om aan te recombineren.

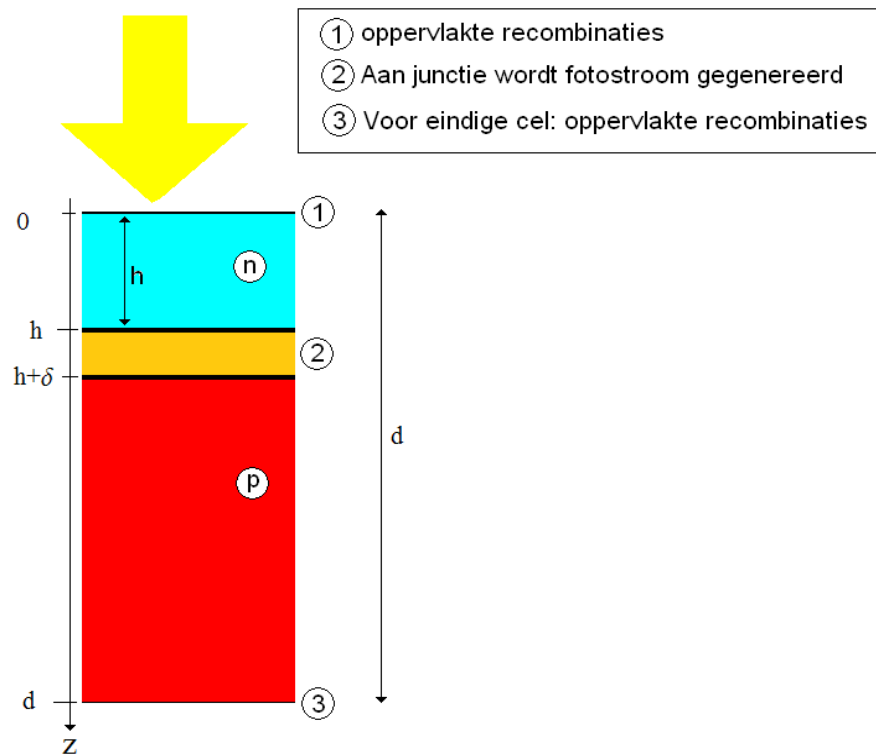
Conventies Voordat de berekeningen worden aangevat moeten eerst de nodige conventies gemaakt worden. We kiezen de conventie zoals deze voorgesteld wordt op figuur 1.14. Dit wil zeggen dat we het nulpunt van de z -as op het begin van de zonnecel leggen en we laten de positieve z -as naar het p-gebied wijzen zoals aangeduid op de figuur. Het n-gebied heeft een dikte h en ligt dus in het interval $[0, h]$. Nadien hebben we de depletielaag met dikte δ . Tenslotte volgt het p-gebied dat in het interval $[h + \delta, d]$ ligt. Hierbij is d de totale dikte van de zonnecel.

De transportvergelijkingen ingevuld We combineren nu de bovenstaande informatie met de transportvergelijkingen. Dit geeft het volgende resultaat:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D_p \nabla^2 p + g_p(z, \omega) - \frac{p(z) - p_0}{\tau} \quad \text{in het n-gebied} \quad (1.54a)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_n \nabla^2 n + g_n(z, \omega) - \frac{n(z) - n_0}{\tau} \quad \text{in het p-gebied} \quad (1.54b)$$

Voor de eenvoud definiëren we nu de functie $f_n(z) = n(z) - n_0$, en analoog: $f_p(z) = p(z) - p_0$. Deze functie geeft dus de afwijking van de concentratie ten opzichte van de evenwichtsconcentratie n_0, p_0 . Verder gebruiken we het feit dat we op zoek zijn naar een stationaire toestand omdat we ervan uitgaan dat de zonnecel gedurende lange tijd belicht zal worden. De afgeleide naar de tijd in zo'n toestand zal dan gelijk aan nul zijn. Brengen we deze twee stappen in rekening, dan krijgen we de volgende twee



Figuur 1.14: Deze figuur schetst het systeem van de np-junctie. Bovenaan schijnt het zonlicht in. Nadien volgt het n-gebied, dan de depletielaag en uiteindelijk het p-gebied. Links staat de z-as weergegeven. Het nulpunt is gekozen op het begin van het n-gebied. De totale dikte van de zonnecel wordt d genoemd. De dikte van de depletielaag duiden we met δ aan. De dikte van het n-gebied is h .

transportvergelijkingen die we moeten oplossen:

$$-D_p \frac{d^2 f_p}{dz^2} + \frac{f_p(z)}{\tau} = g_p(z, \omega) \quad \text{in het n-gebied} \quad (1.55)$$

$$-D_n \frac{d^2 f_n}{dz^2} + \frac{f_n(z)}{\tau} = g_n(z, \omega) \quad \text{in het p-gebied} \quad (1.56)$$

Merk op dat hierbij reeds de conversie naar 1 dimensie is gemaakt. Merk verder ook op dat beide vergelijkingen van dezelfde vorm zijn. De algemene oplossing zal in beide situaties dus dezelfde zijn. Het verschil tussen de twee gebieden verschuilt zich in de randvoorwaarden.

De randvoorwaarden De op te lossen vergelijkingen zijn tweede orde differentiaalvergelijkingen. We hebben dus twee randvoorwaarden per gebied nodig. We kunnen deze afleiden uit de fysica van het probleem:

1. Ten eerste bekijken we de rand met de depletielaag. In bovenstaande vergelijkingen zit de impliciete aanname dat in het geval van de stationaire beginsituatie n_0 en p_0 steeds constant zijn doorheen het bekeken materiaal. Dit zal NIET gelden in de depletielaag. Wat er dus gebeurt is dat de depletielaag buiten beschouwing wordt gelaten in deze berekeningen. In plaats daarvan nemen we aan dat we de fysica van de depletielaag voldoende kennen en implementeren we deze fysica via de randvoorwaarden. Herbekijk namelijk figuur 1.3. Hierin zien we dat een elektron dat in het p-gebied aan de rand van de depletiezone komt, automatisch zal doervloeien naar het n-gebied. Dit houdt in dat er aan deze rand geen extra elektronen zullen zijn. Met andere woorden: de concentratie aan de rand van de depletielaag zal steeds overeen komen met de initiële stationaire concentratie n_0 . Voor de gaten in het n-gebied geldt een volledig analoge redenering. Dit geeft de volgende (Dirichlet) randvoorwaarden:

$$f_p(h) = 0 \quad (1.57)$$

$$f_n(h + \delta) = 0 \quad (1.58)$$

2. Ten tweede bekijken we ook de andere oppervlakten. Deze zijn de uiterste grenzen van de zonnecel. Deze oppervlakten zullen gedomineerd worden door oppervlakte recombinaties. Hier stellen we de volgende (Cauchy) randvoorwaarden in:

$$D_p \left. \frac{df_p}{dz} \right|_{z=0} = S_p f_p(0) \quad (1.59)$$

$$-D_n \left. \frac{df_n}{dz} \right|_{z=d} = S_n f_n(d) \quad (1.60)$$

Waar komt nu het verschil in teken vandaan bij de laatste twee uitdrukkingen? Dit kunnen we verklaren met de volgende redenering. De initiële beginconcentratie n_0

(of p_0) zal steeds zeer klein zijn. De concentratie aan ladingsdragers n (of p) ten gevolge van de fotogeneratie is typisch veel groter. Daardoor zal $f_n(x) = n - n_0$ ($f_p(x) = p - p_0$) steeds groter dan nul zijn. De extra recombinaties aan het oppervlak zullen deze concentratie naar omlaag trekken. Dit wil zeggen dat de concentratie $f_{n/p}$ steeds lager zal zijn als men dichter tegen het oppervlak komt. De constanten $D_{n/p}$ en $S_{n/p}$ zullen echter steeds positief zijn. Dit wil zeggen dat het teken van de afgeleide zal gecompenseerd moeten worden. In het n-gebied ligt deze afgeleide aan de bovenkant van het systeem en zal de afgeleide steeds positief zijn. Dit is niet zo voor het p-gebied, hier zal de afgeleide negatief zijn en moet dit teken opgeheven worden om het geheel positief te maken.

1.5.2.2 Oplossen van de transportvergelijkingen

We lossen de transportvergelijkingen eerst op voor een onbekende generatieterm. De op te lossen differentiaalvergelijking is dus van de vorm:

$$-D \frac{d^2 f(z, \omega)}{dz^2} + \frac{f(z, \omega)}{\tau} = g(z, \omega) \quad (1.61)$$

Pas in een later stadium zullen we een keuze voor $g(z, \omega)$ maken. In eerste instantie zal dat neerkomen op de Beer-Lambert wet. Nadien zal deze functie het effect van de nanoschillen in rekening brengen.

We vormen vergelijking (1.61) eerst om door middel van de volgende definitie:

$$L = D\tau \quad (1.62)$$

Hierbij staat L voor de diffusielengte van het materiaal. Zo kan de vergelijking omgevormd worden tot:

$$\frac{d^2 f(z)}{dz^2} - \frac{f(z)}{L^2} = \frac{-\tau}{L^2} g(z) \quad (1.63)$$

De frequentieafhankelijkheid zal voor de rest van deze berekeningen niet meer geschreven worden.

De homogene oplossing wordt eenvoudig gevonden door de volgende substitutie te maken:

$$f(z) = e^{cte \cdot z} \quad (1.64)$$

Dit geeft namelijk:

$$\begin{aligned} cte^2 - \frac{1}{L^2} &= 0 \\ cte &= \pm \frac{1}{L} \end{aligned} \quad (1.65)$$

De homogene oplossing is dan:

$$f(z) = Ae^{\frac{z}{L}} + Be^{-\frac{z}{L}} \quad (1.66)$$

De particuliere oplossing kunnen we vinden via de 'variatie van de parameters' methode:

$$\begin{cases} C'e^{\frac{z}{L}} + D'e^{-\frac{z}{L}} = 0 \\ C'e^{\frac{z}{L}} - D'e^{-\frac{z}{L}} = \frac{-\tau}{L}g(z) \end{cases}$$

Som en verschil geeft:

$$\begin{cases} C' = \frac{-\tau}{2L}g(z)e^{-\frac{z}{L}} \\ D' = \frac{\tau}{2L}g(z)e^{\frac{z}{L}} \end{cases} \implies \begin{cases} C = \frac{-\tau}{2L}\int_0^z g(u)e^{-\frac{u}{L}} du \\ D = \frac{\tau}{2L}\int_0^z g(u)e^{\frac{u}{L}} du \end{cases}$$

De totale oplossing is dan:

$$f(x) = Ae^{\frac{z}{L}} + Be^{-\frac{z}{L}} - \frac{\tau}{2L}e^{\frac{z}{L}}\int_0^z g(u)e^{-\frac{u}{L}} du + \frac{\tau}{2L}e^{-\frac{z}{L}}\int_0^z g(u)e^{\frac{u}{L}} du \quad (1.67)$$

Vanaf hier moet er een opsplitsing gemaakt worden tussen de verschillende gebieden. In elk gebied zullen immers andere randvoorwaarden van toepassing zijn.

Het n-gebied De randvoorwaarden in het n-gebied zijn:

$$f(h) = 0 \quad (1.68)$$

$$f'(0) = \frac{S}{D}f(0) \quad (1.69)$$

Dit geeft:

$$\begin{aligned} Ae^{\frac{h}{L}} + Be^{-\frac{h}{L}} - \frac{\tau}{2L}e^{\frac{h}{L}}\int_0^h g(u)e^{-\frac{u}{L}} du + \frac{\tau}{2L}e^{-\frac{h}{L}}\int_0^h g(u)e^{\frac{u}{L}} du &= 0 \\ A - B &= \sigma(A + B) \end{aligned}$$

We definiëren de eenheidsloze constante:

$$\sigma = \frac{LS}{D} \quad (1.70)$$

en schrijven de randvoorwaarden om naar A :

$$\begin{aligned} Ae^{\frac{h}{L}} &= -Be^{-\frac{h}{L}} + \frac{\tau}{2L}e^{\frac{h}{L}}\int_0^h g(u)e^{-\frac{u}{L}} du - \frac{\tau}{2L}e^{-\frac{h}{L}}\int_0^h g(u)e^{\frac{u}{L}} du \\ A &= \frac{(1+\sigma)}{(1-\sigma)}B \end{aligned}$$

Combinatie geeft de coëfficiënt B :

$$\frac{(1+\sigma)}{(1-\sigma)}Be^{\frac{h}{L}} = -Be^{-\frac{h}{L}} + \frac{\tau}{2L}e^{\frac{h}{L}}\int_0^h g(u)e^{-\frac{u}{L}} du - \frac{\tau}{2L}e^{-\frac{h}{L}}\int_0^h g(u)e^{\frac{u}{L}} du$$

$$B = \frac{\tau}{2L} \frac{(1-\sigma)}{(1+\sigma)e^{\frac{h}{L}} + (1-\sigma)e^{-\frac{h}{L}}} \left[e^{\frac{h}{L}} \int_0^h g(u) e^{-\frac{u}{L}} du - e^{-\frac{h}{L}} \int_0^h g(u) e^{\frac{u}{L}} du \right]$$

En dan wordt de andere onbekende:

$$A = \frac{\tau}{2L} \frac{(1+\sigma)}{(1+\sigma)e^{\frac{h}{L}} + (1-\sigma)e^{-\frac{h}{L}}} \left[e^{\frac{h}{L}} \int_0^h g(u) e^{-\frac{u}{L}} du - e^{-\frac{h}{L}} \int_0^h g(u) e^{\frac{u}{L}} du \right]$$

We vatten samen:

$$\begin{aligned} f_p(z) &= A e^{\frac{z}{L_p}} + B e^{-\frac{z}{L_p}} - \frac{\tau_p}{2L_p} e^{\frac{z}{L_p}} \int_0^z g(u) e^{-\frac{u}{L_p}} du + \frac{\tau_p}{2L_p} e^{-\frac{z}{L_p}} \int_0^z g(u) e^{\frac{u}{L_p}} du \\ A &= (1 + \sigma_p) \cdot \mathcal{C} \\ B &= (1 - \sigma_p) \cdot \mathcal{C} \\ \mathcal{C} &= \frac{\tau_p}{2L_p} \frac{1}{(1+\sigma_p)e^{\frac{h}{L_p}} + (1-\sigma_p)e^{-\frac{h}{L_p}}} \left[e^{\frac{h}{L_p}} \int_0^h g(u) e^{-\frac{u}{L_p}} du - e^{-\frac{h}{L_p}} \int_0^h g(u) e^{\frac{u}{L_p}} du \right] \end{aligned} \quad (1.71)$$

Dit is de oplossing in het n-gebied. Dit wil zeggen dat hier de concentratie aan gaten staat weergegeven.

Het p-gebied In het p-gebied zijn de randvoorwaarden anders:

$$f_n(h + \delta) = 0 \quad (1.72)$$

$$-D_n \left. \frac{df_n(z)}{dz} \right|_{z=d} = S_n f_n(d) \quad (1.73)$$

Maar de algemene oplossing van de differentiaal vergelijking is wel hetzelfde:

$$f(z) = A e^{\frac{z}{L}} + B e^{-\frac{z}{L}} - \frac{\tau}{2L} e^{\frac{z}{L}} \int_0^z g(u) e^{-\frac{u}{L}} du + \frac{\tau}{2L} e^{-\frac{z}{L}} \int_0^z g(u) e^{\frac{u}{L}} du$$

Op zich is het oplossen van deze situatie niet ingewikkelder dan voor het n-gebied. Maar de notatie wordt bemoeilijkt doordat de randvoorwaarden zich niet meer op positie $z = 0$ afspeelen, maar op positie $z = d$. Hierdoor vallen er slechts weinig termen weg en wordt de hele uitrekening eerder een oefening in boekhouden.

We zullen daarom de volgende notationale conventie aannemen:

$$G_-(z) = \int_0^z g(u) e^{-\frac{u}{L}} du \quad (1.74)$$

$$G_+(z) = \int_0^z g(u) e^{\frac{u}{L}} du \quad (1.75)$$

Dit met het oog op meer overzichtelijke formules. Onthoud verder dat:

$$\frac{d}{dz}G_{\pm}(z) = g(z) e^{\frac{\pm z}{L}} \quad (1.76)$$

De op te lossen vergelijking is nu:

$$f(z) = Ae^{\frac{z}{L}} + Be^{\frac{-z}{L}} - \frac{\tau}{2L}e^{\frac{z}{L}}G_{-}(z) + \frac{\tau}{2L}e^{\frac{-z}{L}}G_{+}(z)$$

We lossen de randvoorwaarden op:

$$\begin{aligned} 0 &= Ae^{\frac{h+\delta}{L}} + Be^{\frac{-(h+\delta)}{L}} - \frac{\tau}{2L}e^{\frac{h+\delta}{L}}G_{-}(h+\delta) + \frac{\tau}{2L}e^{\frac{-(h+\delta)}{L}}G_{+}(h+\delta) \\ &\quad \downarrow \\ &= Ae^{\frac{d}{L}} + Be^{\frac{-d}{L}} - \frac{\tau}{2L}e^{\frac{d}{L}}G_{-}(d) + \frac{\tau}{2L}e^{\frac{-d}{L}}G_{+}(d) \\ &= -\sigma \left(Ae^{\frac{d}{L}} + Be^{\frac{-d}{L}} - \frac{\tau}{2L}e^{\frac{d}{L}}G_{-}(d) + \frac{\tau}{2L}e^{\frac{-d}{L}}G_{+}(d) \right) \end{aligned}$$

We werken dit om naar B :

$$\begin{aligned} Ae^{\frac{h+\delta}{L}} &= -Be^{\frac{-(h+\delta)}{L}} + \frac{\tau}{2L}e^{\frac{h+\delta}{L}}G_{-}(h+\delta) - \frac{\tau}{2L}e^{\frac{-(h+\delta)}{L}}G_{+}(h+\delta) \\ &\quad \downarrow \\ (1-\sigma)Be^{\frac{-d}{L}} &= (1+\sigma)Ae^{\frac{d}{L}} \\ &\quad - \frac{\tau}{2L} \left[(1+\sigma)e^{\frac{d}{L}}G_{-}(d) + (1-\sigma)e^{\frac{-d}{L}}G_{+}(d) \right] \end{aligned}$$

En dus:

$$\begin{aligned} B &= \frac{1}{(1-\sigma)e^{\frac{h+\delta-d}{L}} + (1+\sigma)e^{\frac{-(h+\delta-d)}{L}}} \frac{\tau}{2L} \\ &\quad \times \left[\begin{array}{l} (1+\sigma)e^{\frac{d}{L}} \left[e^{\frac{h+\delta}{L}}G_{-}(h+\delta) - e^{\frac{-(h+\delta)}{L}}G_{+}(h+\delta) \right] \\ -e^{\frac{(h+\delta)}{L}} \left[(1+\sigma)e^{\frac{d}{L}}G_{-}(d) + (1-\sigma)e^{\frac{-d}{L}}G_{+}(d) \right] \end{array} \right] \end{aligned}$$

We berekenen ook A :

$$\begin{aligned} Ae^{\frac{h+\delta}{L}} &= \frac{-e^{\frac{-(h+\delta)}{L}}}{(1-\sigma)e^{\frac{h+\delta-d}{L}} + (1+\sigma)e^{\frac{-(h+\delta-d)}{L}}} \frac{\tau}{2L} \\ &\quad \times \left[\begin{array}{l} (1+\sigma)e^{\frac{d}{L}} \left[e^{\frac{h+\delta}{L}}G_{-}(h+\delta) - e^{\frac{-(h+\delta)}{L}}G_{+}(h+\delta) \right] \\ -e^{\frac{(h+\delta)}{L}} \left[(1+\sigma)e^{\frac{d}{L}}G_{-}(d) + (1-\sigma)e^{\frac{-d}{L}}G_{+}(d) \right] \end{array} \right] \\ &\quad + \frac{\tau}{2L}e^{\frac{h+\delta}{L}}G_{-}(h+\delta) - \frac{\tau}{2L}e^{\frac{-(h+\delta)}{L}}G_{+}(h+\delta) \end{aligned}$$

We zetten de laatste twee termen op dezelfde noemer en rekenen verder uit. Dit geeft:

$$A = \frac{\tau}{2L} \frac{e^{-\frac{(h+\delta)}{L}}}{(1-\sigma)e^{\frac{h+\delta-d}{L}} + (1+\sigma)e^{-\frac{(h+\delta-d)}{L}}} \times \left[(1+\sigma)e^{\frac{d}{L}} G_-(d) + (1-\sigma)e^{-\frac{d}{L}} \left(G_+(d) - G_+(h+\delta) + e^{\frac{h+\delta}{L}} G_-(h+\delta) e^{\frac{h+\delta}{L}} \right) \right]$$

We vatten samen:

$$\begin{aligned} f_n(z) &= \frac{\tau_n}{2L_n} A e^{\frac{z}{L_n}} + \frac{\tau_n}{2L_n} B e^{-\frac{z}{L_n}} + \frac{\tau}{2L_n} \left(e^{\frac{-z}{L_n}} G_+(z) - e^{\frac{z}{L_n}} G_-(z) \right) \\ A &= \frac{1}{(1-\sigma_n)e^{\frac{h+\delta-d}{L_n}} + (1+\sigma_n)e^{-\frac{(h+\delta-d)}{L_n}}} \times \\ &\left[(1-\sigma_n)e^{-\frac{d}{L_n}} \left(G_+(d)e^{-\frac{(h+\delta)}{L_n}} - G_+(h+\delta)e^{-\frac{(h+\delta)}{L_n}} + G_-(h+\delta)e^{\frac{h+\delta}{L_n}} \right) \right. \\ &\quad \left. + (1+\sigma_n)G_-(d)e^{\frac{d}{L_n}} e^{-\frac{(h+\delta)}{L_n}} \right] \\ B &= \frac{1}{(1-\sigma_n)e^{\frac{h+\delta-d}{L_n}} + (1+\sigma_n)e^{-\frac{(h+\delta-d)}{L_n}}} \times \\ &\left[(1+\sigma_n)e^{\frac{d}{L_n}} \left(G_-(h+\delta)e^{\frac{h+\delta}{L_n}} - G_-(d)e^{\frac{(h+\delta)}{L_n}} - G_+(h+\delta)e^{-\frac{(h+\delta)}{L_n}} \right) \right. \\ &\quad \left. - (1-\sigma_n)G_+(d)e^{-\frac{d}{L_n}} e^{\frac{(h+\delta)}{L_n}} \right] \end{aligned} \quad (1.77)$$

Merk op dat we hierbij de term $\frac{\tau_n}{2L_n}$ uit de coëfficiënten hebben genomen en in de formule voor f_n hebben gestoken.

Analoog aan de het n-gebied zijn de elektronen van belang in het p-gebied. Bovendien is het ook goed op te merken dat de functie $g(z, \omega)$ nog steeds energie afhankelijk is. Deze afhankelijkheid is in bovenstaande vergelijkingen niet geschreven, maar moet wel onthouden worden.

1.5.3 De kwantumefficiëntie

Een volgende stap is de berekening van de kwantumefficiëntie (QE). De QE is eigenlijk een getal dat de kans aangeeft dat een foton met een gegeven energie een nuttige generatie oplevert. Hierbij duidt 'nuttige generatie' op het creëren van een ladingsdrager die ook daadwerkelijk over de depletielaag gaat en dus energie oplevert die bruikbaar is in een extern circuit.

De QE is gedefinieerd door:

$$QE = \frac{\# \text{ ladingsdragers voor de fotostroom} / (\text{m}^2 \text{ s})}{\# \text{ fotonen} / (\text{m}^2 \text{ s})} \quad (1.78)$$

Het aantal fotonen per oppervlakte en per seconde komt overeen met de ingezonden deeltjesfluxdichtheid $\dot{n}_0(\omega)$. Of in het algemeen met:

$$\# \text{ fotonen} / (\text{m}^2 \text{ s}) = \int_0^\infty g(z, \omega) dz = \dot{n}_0(\omega) \quad (1.79)$$

Het aantal elektronen of gaten per oppervlakte en per seconde volgt uit de ladingsstroomdichtheid $J_{n/p}(z, \omega)$. Het aantal deeltjes per oppervlakte en per seconde is gelijk aan de ladingsstroomdichtheid gedeeld door de lading per ladingsdrager. Dit geeft:

$$QE_p(z, \omega) = \frac{J_p(z, \omega)}{|e| \dot{n}_0(\omega)} \quad (1.80)$$

$$QE_n(z, \omega) = \frac{J_n(z, \omega)}{|e| \dot{n}_0(\omega)} \quad (1.81)$$

De totale QE is de som van de QE aan de randen tussen het n/p-gebied en de depletie laag plus de QE in de depletie laag:

$$QE_{tot}(\omega) = QE_p(h, \omega) + QE_{depl}(\omega) + QE_n(h + \delta, \omega) \quad (1.82)$$

Eerst berekenen we de kwantumefficiëntie voor een algemene, onbekende bronterm. Nadien zal de bronterm ingevuld worden.

Om de notatie doorheen de berekeningen niet nog meer te verzwaren zullen we vaak de frequentieafhankelijkheid weglaten.

1.5.3.1 Het n-gebied

Eens de concentratie aan ladingsdragers gekend is kan men hieruit de kwantumefficiëntie (QE) berekenen. We gebruiken hiervoor:

$$QE(z, \omega) = \frac{J(z, \omega)}{|e| \dot{n}_0(\omega)} \quad (1.83)$$

$$= \frac{-D \nabla f(z, \omega)}{\dot{n}_0(\omega)} \quad (1.84)$$

We rekenen de QE uit door de afgeleide naar z te nemen en uitdrukking (1.71) te gebruiken:

$$\begin{aligned} QE(z, \omega) &= \frac{-D}{\dot{n}_0} \frac{d}{dz} \left[-\frac{\tau}{2L} e^{\frac{z}{L}} \int_0^z g(u) e^{-\frac{u}{L}} du + \frac{\tau}{2L} e^{-\frac{z}{L}} \int_0^z g(u) e^{\frac{u}{L}} du \right] \\ &= \frac{-L}{\dot{n}_0} \left[\frac{c}{\tau} \left[(1 + \sigma) e^{\frac{z}{L}} - (1 - \sigma) e^{-\frac{z}{L}} \right] \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2L} \left[e^{\frac{z}{L}} \int_0^z g(u) e^{-\frac{u}{L}} du + e^{-\frac{z}{L}} \int_0^z g(u) e^{\frac{u}{L}} du \right] \right] \end{aligned} \quad (1.85)$$

Maar eigenlijk zijn we enkel geïnteresseerd in de bijdrage aan de QE op de rand met de depletie laag h . Dit geeft:

$$QE(h, \omega) = \frac{-L}{\dot{n}_0} \left[\frac{c}{\tau} \left[(1 + \sigma) e^{\frac{h}{L}} - (1 - \sigma) e^{-\frac{h}{L}} \right] \right. \\ \left. - \frac{1}{2L} \left[e^{\frac{h}{L}} \int_0^h g(u) e^{-\frac{u}{L}} du + e^{-\frac{h}{L}} \int_0^h g(u) e^{\frac{u}{L}} du \right] \right]$$

We vullen de constante term \mathcal{C} uit vergelijking (1.71) in om te kunnen vereenvoudigen:

$$\begin{aligned} QE(h, \omega) &= \frac{-1}{2\dot{n}_0} \left[\frac{(1+\sigma)e^{\frac{h}{L}} - (1-\sigma)e^{-\frac{h}{L}}}{(1+\sigma)e^{\frac{h}{L}} + (1-\sigma)e^{-\frac{h}{L}}} \left[e^{\frac{h}{L}} \int_0^h g(u) e^{-\frac{u}{L}} du - e^{-\frac{h}{L}} \int_0^h g(u) e^{\frac{u}{L}} du \right] \right. \\ &\quad \left. - \left[e^{\frac{h}{L}} \int_0^h g(u) e^{-\frac{u}{L}} du + e^{-\frac{h}{L}} \int_0^h g(u) e^{\frac{u}{L}} du \right] \right] \\ &= \frac{1}{\dot{n}_0} \frac{\left[(1+\sigma) \int_0^h g(u) e^{\frac{u}{L}} du + (1-\sigma) \int_0^h g(u) e^{-\frac{u}{L}} du \right]}{(1+\sigma)e^{\frac{h}{L}} + (1-\sigma)e^{-\frac{h}{L}}} \end{aligned}$$

En dus is de kwantumefficiëntie voor het n-gebied met een algemene bronterm:

$$QE(h, \omega) = \frac{1}{\dot{n}_0} \frac{\left[(1+\sigma) \int_0^h g(u) e^{\frac{u}{L}} du + (1-\sigma) \int_0^h g(u) e^{-\frac{u}{L}} du \right]}{(1+\sigma)e^{\frac{h}{L}} + (1-\sigma)e^{-\frac{h}{L}}} \quad (1.86)$$

1.5.3.2 Het p-gebied

We berekenen de QE via:

$$QE(z, \omega) = \frac{D}{\dot{n}_0(\omega)} \nabla f(z) \quad (1.87)$$

Dit geeft:

$$\begin{aligned} QE(z, \omega) &= \frac{D}{\dot{n}_0} \frac{\tau}{2L^2} \left[\begin{array}{c} Ae^{\frac{z}{L}} - Be^{-\frac{z}{L}} \\ -e^{-\frac{z}{L}} G_+(z) - e^{\frac{z}{L}} G_-(z) \\ +Le^{-\frac{z}{L}} g(z) e^{\frac{z}{L}} - Le^{\frac{z}{L}} g(z) e^{-\frac{z}{L}} \end{array} \right] \\ &= \frac{1}{2\dot{n}_0} \left[(A - G_-(z)) e^{\frac{z}{L}} - (B + G_+(z)) e^{-\frac{z}{L}} \right] \end{aligned}$$

Ook hier zijn we enkel geïnteresseerd in de QE aan de rand van de depletiezone. Dit wil zeggen op positie $x = h + \delta$.

$$QE(h + \delta, \omega) = \frac{1}{2\dot{n}_0} \left[(A - G_-(h + \delta)) e^{\frac{h+\delta}{L}} - (B + G_+(h + \delta)) e^{-\frac{(h+\delta)}{L}} \right]$$

De eerste term geeft:

$$\begin{aligned} A - G_-(h + \delta) &= \frac{1}{(1-\sigma)e^{\frac{h+\delta-d}{L}} + (1+\sigma)e^{-\frac{(h+\delta-d)}{L}}} \\ &\quad \times \left[\begin{array}{c} (1-\sigma)[G_+(d) - G_+(h + \delta)] e^{-\frac{d}{L}} e^{-\frac{(h+\delta)}{L}} \\ + (1-\sigma)G_-(h + \delta) e^{-\frac{d}{L}} e^{\frac{h+\delta}{L}} \\ + (1+\sigma)G_-(d) e^{\frac{d}{L}} e^{-\frac{(h+\delta)}{L}} \\ -G_-(h + \delta) \left[(1-\sigma)e^{\frac{h+\delta-d}{L}} + (1+\sigma)e^{-\frac{(h+\delta-d)}{L}} \right] \end{array} \right] \\ &= \frac{e^{-\frac{(h+\delta)}{L}}}{(1-\sigma)e^{\frac{h+\delta-d}{L}} + (1+\sigma)e^{-\frac{(h+\delta-d)}{L}}} \\ &\quad \times \left[\begin{array}{c} [G_+(d) - G_+(h + \delta)] (1-\sigma) e^{-\frac{d}{L}} \\ + [G_-(d) - G_-(h + \delta)] (1+\sigma) e^{\frac{d}{L}} \end{array} \right] \end{aligned}$$

En de andere term

$$\begin{aligned}
B + G_+(h + \delta) &= \frac{1}{(1 - \sigma) e^{\frac{h+\delta-d}{L}} + (1 + \sigma) e^{\frac{-(h+\delta-d)}{L}}} \\
&\times \left[\begin{array}{l} (1 + \sigma) [G_-(h + \delta) - G_-(d)] e^{\frac{d}{L}} e^{\frac{h+\delta}{L}} \\ - (1 + \sigma) G_+(h + \delta) e^{\frac{d}{L}} e^{\frac{-(h+\delta)}{L}} \\ - (1 - \sigma) G_+(d) e^{\frac{-d}{L}} e^{\frac{(h+\delta)}{L}} \\ + G_+(h + \delta) \left[(1 - \sigma) e^{\frac{h+\delta-d}{L}} + (1 + \sigma) e^{\frac{-(h+\delta-d)}{L}} \right] \end{array} \right] \\
&= \frac{e^{\frac{h+\delta}{L}}}{(1 - \sigma) e^{\frac{h+\delta-d}{L}} + (1 + \sigma) e^{\frac{-(h+\delta-d)}{L}}} \\
&\times \left[\begin{array}{l} [G_+(h + \delta) - G_+(d)] (1 - \sigma) e^{\frac{-d}{L}} \\ + [G_-(h + \delta) - G_-(d)] (1 + \sigma) e^{\frac{d}{L}} \end{array} \right]
\end{aligned}$$

En dus is de kwantumefficiëntie voor het p-gebied voor een algemene generatieterm:

$$\boxed{QE(h + \delta, E) = \frac{1}{\tilde{n}_0} \frac{[G_+(d) - G_+(h+\delta)](1 - \sigma) e^{\frac{-d}{L}} + [G_-(d) - G_-(h+\delta)](1 + \sigma) e^{\frac{d}{L}}}{(1 - \sigma) e^{\frac{h+\delta-d}{L}} + (1 + \sigma) e^{\frac{-(h+\delta-d)}{L}}}} \quad (1.88)$$

1.5.3.3 Het depletiegebied

We moeten ook de kwantumefficiëntie voor de depletielaag uitrekenen. Nu geldt dat elk elektron dat in de depletielaag gegenereerd wordt bijdraagt aan de fotostroom en dus nuttige energie oplevert. Dit wil zeggen dat:

$$\boxed{QE_{depl}(\omega) = \frac{1}{\tilde{n}_0} \int_h^{h+\delta} g(z, \omega) dz} \quad (1.89)$$

1.5.4 De generatieterm: De Beer-Lambert wet

1.5.4.1 Theoretische achtergrond: De Beer-Lambert wet

In de vorige secties is de kwantumefficiëntie van de zonnecel berekend. In deze gehele afleiding is er echter nog een grote onbekende overgebleven. De generatieterm $g(z, \omega)$ omvat immers de invloed van de omgeving op het systeem en zal dan ook afhangen van de omstandigheden. De generatieterm $g(z, \omega)$ geeft het aantal vrije gat-elektronparen dat op een bepaalde diepte z wordt gecreëerd. Er is aangenomen dat een paar enkel gecreëerd kan worden door de absorptie van een foton met energie boven de bandkloof. We nemen ook aan dat elk geabsorbeerd foton een gat-elektron paar exciteert. Processen zoals 2 foton absorptie worden dus buiten beschouwing gelaten. De generatieterm wordt op deze manier rechtstreeks verbonden met de absorptie $\mathcal{A}(z, \omega)$ in de zonnecel.

Het probleem is dus verschoven naar het berekenen van de absorptie op een diepte z in de zonnecel. De absorptie is gegeven door het verschil tussen het aantal fotonen per seconde dat een volume binnen gaat met het aantal fotonen dat terug uit het volume

komt. Beschouwen we een laag die zicht oneindig uitstrekt loodrecht op de z -as met een dikte dz , dan kunnen we schrijven:

$$\mathcal{A}(z, \omega) dz = \dot{n}(z, \omega) - \dot{n}(z + dz, \omega), \quad (1.90)$$

waarbij de deeltjesfluxdichtheid $\dot{n}(z, \omega)$ het aantal fotonen voorstelt dat per seconde en per oppervlakte-eenheid doorheen een vlak op positie z stroomt.

We moeten nu berekenen hoeveel fotonen er op een bepaalde diepte z in het materiaal nog aanwezig zijn. We baseren ons hierbij op de wet van Beer-Lambert. De wet van Beer-Lambert beschrijft het verloop van de intensiteit van licht dat doorheen een absorberend materiaal loopt. We gebruiken dezelfde redenering, maar in plaats van met intensiteiten $I(z, \omega)$ werken we met deeltjesfluxdichtheden $\dot{n}(z, \omega)$. Het verband tussen de twee wordt gegeven door:

$$\dot{n}(z, \omega) = \frac{I(z, \omega)}{\hbar\omega},$$

waarbij $\hbar\omega$ de energie van een foton voorstelt.

De Beer-Lambert wet zegt dat de deeltjesfluxdichtheid exponentieel daalt als functie van de afstand afgelegd in het materiaal. De constante die de steilheid van de exponentiële daling weergeeft is de absorptiecoëfficiënt $\alpha(\omega)$. Deze kan men halen uit tabellen. Hier is de waarde voor silicium gebruikt zoals deze gegeven wordt door het 'CRC handbook of Chemistry and Physics' [24] en staat weergegeven in figuur 1.15. Door een afleiding analoog aan de Beer-Lambert wet te volgen verkrijgen we dat voor een zonnecel zonder nanoschillen de deeltjesfluxdichtheid op een diepte z overeenkomt met:

$$\dot{n}(z, \omega) = \dot{n}_0(\omega) e^{-\alpha(\omega)z}. \quad (1.91)$$

Hierbij is $\dot{n}_0(\omega) = \dot{n}(0, \omega)$.

We willen echter niet weten hoeveel fotonen er op een bepaalde diepte in het materiaal aanwezig zijn, maar wel hoeveel fotonen er geabsorbeerd worden op die diepte. De absorptie komt overeen met het verschil in de deeltjesfluxdichtheid $\dot{n}(z, \omega)$ op posities $z + dz$ en z . Of wiskundig:

$$\begin{cases} \dot{n}(z, \omega) = \dot{n}_0(\omega) e^{-\alpha(\omega)z} \\ \dot{n}(z + dz, \omega) = \dot{n}_0(\omega) e^{-\alpha(\omega)(z+dz)} \end{cases} \\ \Rightarrow [\dot{n}(z, \omega) - \dot{n}(z + dz, \omega)] dz = \dot{n}_0(\omega) e^{-\alpha(\omega)z} (1 - e^{-\alpha(\omega)dz}),$$

wat tot op eerste orde kan benaderd worden met:

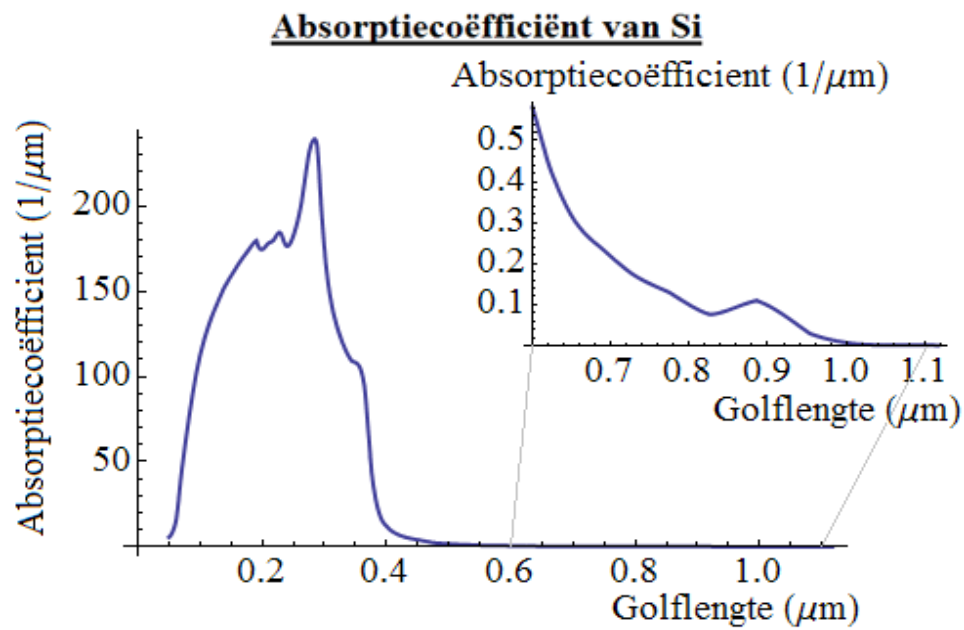
$$[\dot{n}(z, \omega) - \dot{n}(z + dz, \omega)] dz = \dot{n}_0(\omega) e^{-\alpha(\omega)z} (1 - [1 - (-\alpha(\omega) dz)]).$$

De absorptie $\mathcal{A}(z, \omega)$ is dus:

$$\mathcal{A}(z, \omega) dz = \dot{n}(z, \omega) - \dot{n}(z + dz, \omega) = \alpha(\omega) \dot{n}_0(\omega) e^{-\alpha(\omega)z}. \quad (1.92)$$

Waardoor ook de generatieterm voor een zonnecel zonder nanoschillen gekend is:

$$\boxed{g(z, \omega) = \dot{n}_0(\omega) \alpha(\omega) e^{-\alpha(\omega)z}} \quad (1.93)$$



Figuur 1.15: De absorptiecoëfficiënt van Si voor golflengten kleiner dan 1117 nm. Dit is het deel van het spectrum met een energie groter dan de bandkloof. De inset geeft een uitvergroting van de grotere golflengten.

1.5.4.2 Invulling: de zonnecel zonder nanoschillen

We gebruiken nu de Beer-Lambert wet om de QE van een standaard zonnecel uit te rekenen. Als controle werd de transportvergelijkingen ook opgelost met de exponent rechtstreeks ingevuld. Door de eenvoudige vorm van de bronterm is het dan niet meer nodig om variatie van de parameters toe te passen maar kan de partiële oplossing heel eenvoudig gevonden worden door de substitutie $f = Ce^{-\alpha z}$. Beide berekeningen geven dezelfde resultaten.

Het n-gebied We rekenen eerst de integralen uit die voorkomen in vergelijking (1.86)

$$\begin{aligned} \frac{1}{\dot{n}_0(\omega)} \int g(u, \omega) e^{\frac{-u}{L}} du &= \alpha \int_0^z e^{-\alpha u} e^{\frac{-u}{L}} du = \alpha \int_0^z e^{\frac{-u}{L} - \alpha u} du \\ &= \alpha \left[\frac{e^{\frac{-u}{L} - \alpha u}}{-\alpha - \frac{1}{L}} \right]_0^z = -\alpha L \left[\frac{e^{\frac{-z}{L}} e^{-\alpha z} - 1}{1 + \alpha L} \right] \\ \frac{1}{\dot{n}_0(\omega)} \int g(u, \omega) e^{\frac{u}{L}} du &= \alpha \int_0^z e^{-\alpha u} e^{\frac{u}{L}} du = \alpha \int_0^z e^{\frac{u}{L} - \alpha u} du \\ &= \alpha \left[\frac{e^{\frac{u}{L} - \alpha u}}{-\alpha + \frac{1}{L}} \right]_0^z = \alpha L \left[\frac{e^{\frac{z}{L}} e^{-\alpha z} - 1}{1 - \alpha L} \right]. \end{aligned}$$

We rekenen dan de QE uit voor de Beer-Lambert wet:

$$\begin{aligned} QE(h, \omega) &= \frac{\left[(1 + \sigma) \alpha L \left[\frac{e^{\frac{h}{L}} e^{-\alpha h} - 1}{1 - \alpha L} \right] - (1 - \sigma) \alpha L \left[\frac{e^{\frac{-h}{L}} e^{-\alpha h} - 1}{1 + \alpha L} \right] \right]}{(1 + \sigma) e^{\frac{h}{L}} + (1 - \sigma) e^{\frac{-h}{L}}} \\ &= \frac{\alpha L}{1 + \alpha^2 L^2} \frac{e^{-\alpha h}}{(1 + \sigma) e^{\frac{h}{L}} + (1 - \sigma) e^{\frac{-h}{L}}} \\ &\times \left\{ \left[(1 + \sigma \alpha L) \left(e^{\frac{h}{L}} - e^{\frac{-h}{L}} \right) + (\sigma + \alpha L) \left(e^{\frac{h}{L}} + e^{\frac{-h}{L}} \right) \right] \right. \\ &\quad \left. - 2(\sigma - L\alpha) e^{\alpha h} \right\} \end{aligned} \quad (1.94)$$

Het p-gebied De benodigde integralen zijn dan:

$$\begin{aligned} \alpha \int_0^z e^{-\alpha u} e^{\frac{-u}{L}} du &= \frac{-\alpha L}{1 + \alpha L} \left[e^{(\frac{-1}{L} - \alpha)z} - 1 \right] \\ G_+(d) &= \frac{\alpha L}{1 - \alpha L} \left[e^{-\alpha d} e^{\frac{d}{L}} - 1 \right] \\ G_-(d) &= \frac{-\alpha L}{1 + \alpha L} \left[e^{-\alpha d} e^{-\frac{d}{L}} - 1 \right] \\ G_+(h + \delta) &= \frac{\alpha L}{1 - \alpha L} \left[e^{-\alpha(h+\delta)} e^{\frac{h+\delta}{L}} - 1 \right] \\ G_-(h + \delta) &= \frac{-\alpha L}{1 + \alpha L} \left[e^{-\alpha(h+\delta)} e^{\frac{-(h+\delta)}{L}} - 1 \right] \end{aligned}$$

En dus krijgen we voor de kwantumefficiëntie, vertrekkende van vergelijking (1.88):

$$\begin{aligned}
QE(h + \delta, \omega) &= \frac{\alpha L}{1 - L^2 \alpha^2} \frac{1}{(1 - \sigma) e^{\frac{h+\delta-d}{L}} + (1 + \sigma) e^{-\frac{(h+\delta-d)}{L}}} \times \\
&\quad \left[\begin{array}{l} (1 + \alpha L)(1 - \sigma) e^{-\frac{d}{L}} \left[e^{-\alpha d} e^{\frac{d}{L}} - e^{-\alpha(h+\delta)} e^{\frac{h+\delta}{L}} \right] \\ - (1 - \alpha L)(1 + \sigma) e^{\frac{d}{L}} \left[e^{-\alpha d} e^{-\frac{d}{L}} - e^{-\alpha(h+\delta)} e^{-\frac{(h+\delta)}{L}} \right] \end{array} \right] \\
&= \frac{\alpha L}{1 - L^2 \alpha^2} \frac{1}{(1 - \sigma) e^{\frac{h+\delta-d}{L}} + (1 + \sigma) e^{-\frac{(h+\delta-d)}{L}}} \times \\
&\quad \left[\begin{array}{l} (1 - \sigma \alpha L) e^{-\alpha(h+\delta)} \left(e^{-\frac{(h+\delta-d)}{L}} - e^{\frac{h+\delta-d}{L}} \right) \\ + (\sigma - \alpha L) \left[e^{-\alpha(h+\delta)} \left(e^{-\frac{(h+\delta-d)}{L}} + e^{\frac{h+\delta-d}{L}} \right) - 2e^{-\alpha d} \right] \end{array} \right] \quad (1.95)
\end{aligned}$$

Het depletiegebied In de depletielaag zelf krijgen we:

$$\begin{aligned}
QE_{depl}(\omega) &= \frac{1}{\dot{n}_0} \int_h^{h+\delta} \alpha \dot{n}_0 e^{-\alpha z} dz \\
&= e^{-\alpha h} - e^{-\alpha(h+\delta)} \quad (1.96)
\end{aligned}$$

Het verloop van deze kwantumefficiënties voor een kristallijne Si-zonnecel staat in figuur 1.23 op pagina 51 weergegeven.

1.6 De standaard kristallijne Si-zonnecel

In bovenstaande afleidingen is de theorie van de zonnecel beter bestudeerd. We kunnen dit nu toepassen op een standaard Si zonnecel. Voor een standaard zonnecel zullen we de Beer-Lambert wet gebruiken. We berekenen de concentratie van de minderheids-ladingsdragers, de kwantumefficiëntie en uiteindelijk een realistischere waarde voor het rendement van een Si zonnecel.

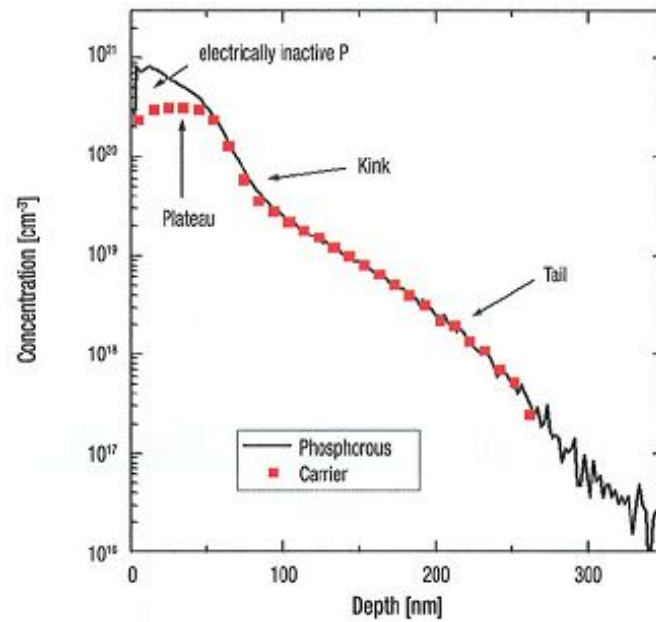
1.6.1 Dikte van de depletielaag voor niet-constante dopering

We beschouwen een zonnecel met een totale dikte van $160 \mu\text{m}$. De dikte van het n-gebied is 300 nm [3]. Uit deze twee waarden en de doperingsconcentratie kan men de dikte van de depletielaag berekenen en hoever deze uitstrekt in beide gebieden. We gebruiken hiervoor de formules die bekomen zijn in sectie 1.5.1.5 (op pagina 26).

Vanuit IMEC ontvingen we een schets voor de doperingsconcentratie voor het n-type gebied, deze staat afgebeeld in figuur 1.16.

We beschouwen dit als een rechte op de logaritmische schaal. We zullen de doperingsconcentratie benaderen met de functie:

$$N_d(x) = 10^{27+1.33*10^7(z+3*10^{-7})} \quad (1.97)$$



Figuur 1.16: Het verloop van de dopering van het n-gebied in een typische Si zonnecel. [3]

Het gedeelte tussen haakjes stelt een verschuiving voor. Herinner immers dat we in de berekeningen van de dikte van de depletielaag het nulpunt van de z -as op de interface tussen de twee gebieden hadden gekozen zoals stond voorgesteld in figuur 1.13. Deze functie staat afgebeeld in figuur 1.17.

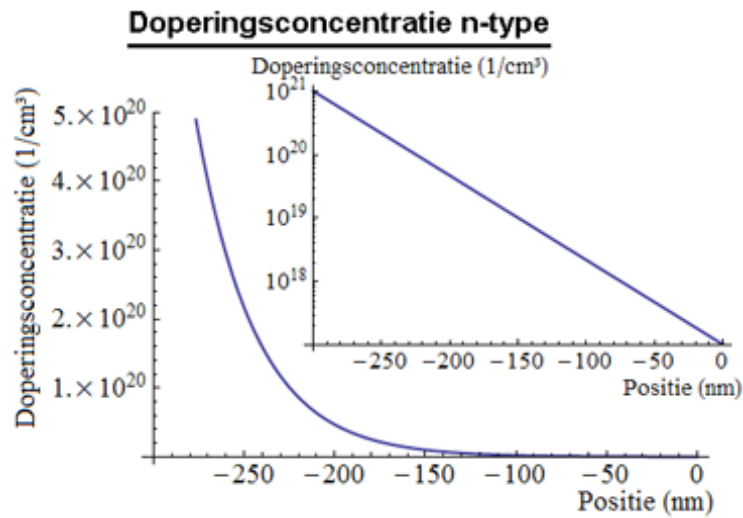
We gebruiken dit in vergelijking (1.48). Numerieke (in dit geval zou dit ook analytisch te doen zijn) bepaling van het nulpunt van deze functie kan ons dan een waarde voor de grootte van de depletielaag in het n-gebied geven. Uit vergelijking (1.47) kan dan een waarde voor de grootte van de depletielaag in het p-gebied gehaald worden. In dit geval geeft dit:

$$w_n = 2.25786 \times 10^{-8} \text{ m} = 22.58 \text{ nm} \quad (1.98)$$

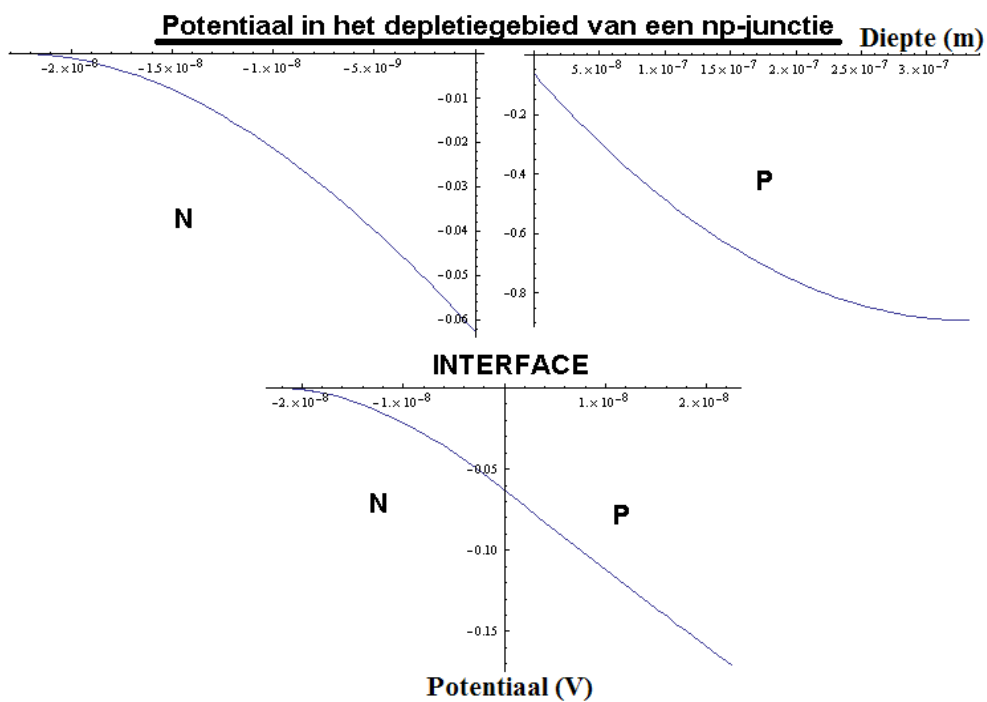
$$w_p = 3.33014 \times 10^{-7} \text{ m} = 333.01 \text{ nm} \quad (1.99)$$

$$w = 355.59 \text{ nm} \quad (1.100)$$

In figuur 1.18 staat de potentiaal voor dit systeem afgebeeld berekend met vergelijkingen (1.45) en (1.46).



Figuur 1.17: De functie die gebruikt wordt om het profiel van de doping in het n-type te simuleren. De inzet toont dezelfde functie op een linlog schaal.



Figuur 1.18: De potentiaal in de depletielaag van een np-junctie voor een niet constante doperingsconcentratie in het n-type.

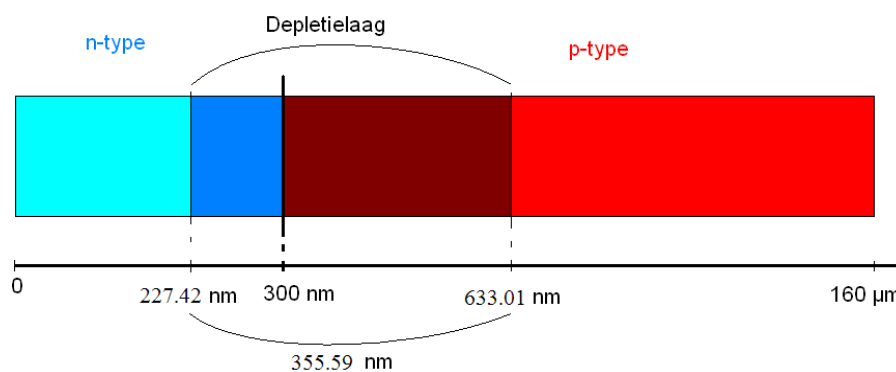
Tabel 1.1: De afmetingen van een standaard kristallijne-Si-zonnecel.

h	$0.277 \mu\text{m}$
δ	$0.355 \mu\text{m}$
$h + \delta$	$0.633 \mu\text{m}$
d	$160 \mu\text{m}$

1.6.2 Parameters van een standaard zonnecel

De afmetingen van typische kristallijne-Si-zonnecel staan weergegeven in tabel 1.1. Deze zijn gebaseerd op de gegevens uit IMEC en de uitkomst van de berekening van de dikte van de depletielaag.

Een grafisch overzicht van de zonnecel staat weergegeven in figuur 1.19.



Figuur 1.19: Schematisch overzicht van de afmetingen van een Si zonnecel zoals deze volgen uit de berekeningen met de gegevens van een standaard zonnecel.

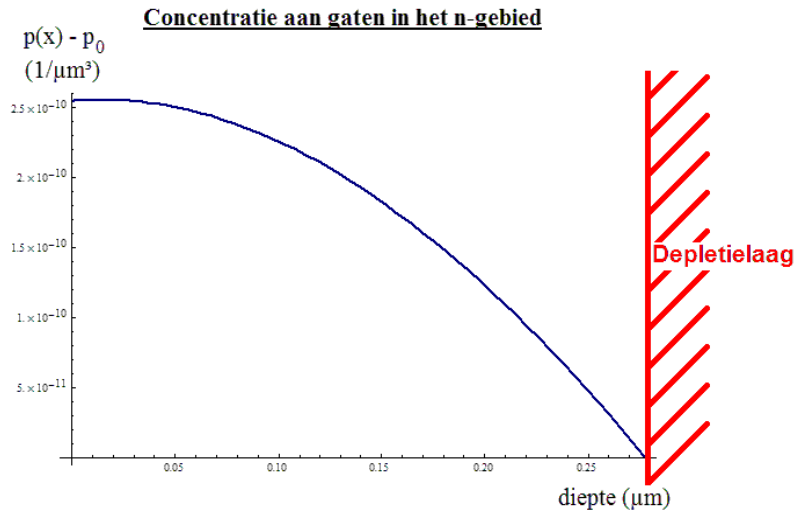
In tabel 1.2 staan de materiaalconstanten van de gedopeerde Si-gebieden van de zonnecel [22].

1.6.3 Het verloop van de concentratie

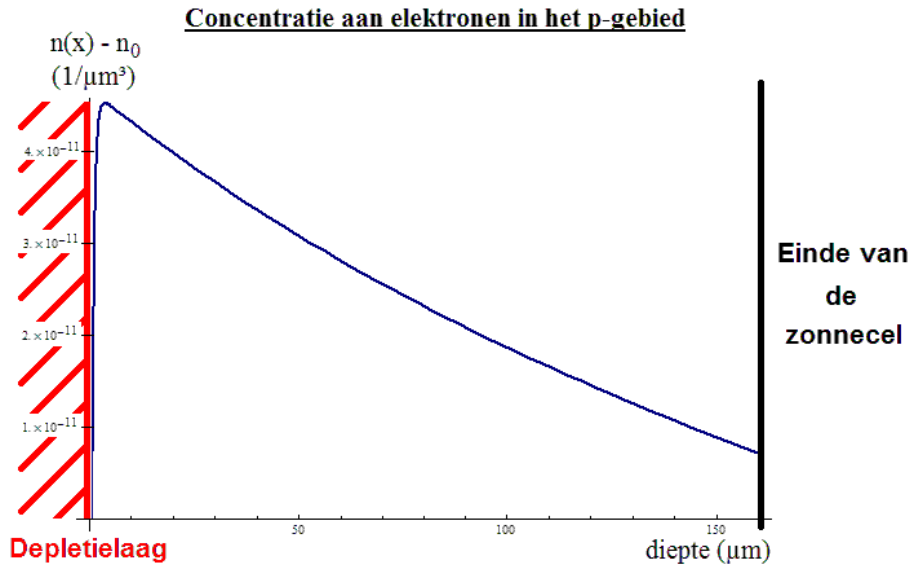
Nu de nodige waarden van de parameters gekend zijn kunnen we het verloop van de concentraties doorheen de np-junctie bekijken. We plotten de vergelijkingen (1.71) en (1.77) voor een welbepaalde golflengte. We kiezen de golflengte op 500 nm, deze keuze is puur arbitrair. De concentratie in het n-gebied staat afgebeeld in figuur 1.20, die in het p-gebied staat afgebeeld in figuur 1.21.

Tabel 1.2: Materiaal constanten in de verschillende gebieden van een Si-np-junctie. Van boven naar onder: de oppervlakte recombinatie snelheid, de diffusieconstante, de gemiddelde levenstijd, de diffusie lengte en de eenheidsloze grootheid σ zoals gedefinieerd door vergelijking 1.70. Dit zowel voor de gaten in het n-gebied, als voor de elektronen in het p-gebied [22].

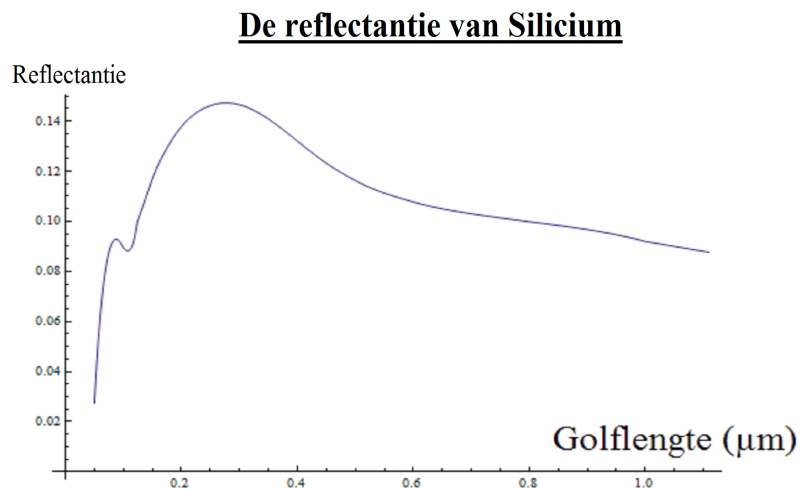
n-gebied			p-gebied		
S_p	10^8	$\frac{\mu\text{m}}{\text{s}}$	S_n	10^8	$\frac{\mu\text{m}}{\text{s}}$
D_p	2×10^8	$\frac{\mu\text{m}^2}{\text{s}}$	D_n	40×10^8	$\frac{\mu\text{m}^2}{\text{s}}$
τ_p	10^{-6}	s	τ_n	5×10^{-6}	s
L_p	14.14	μm	L_n	141.42	μm
σ_p	7.07		σ_n	3.53	



Figuur 1.20: Het verloop van de concentratie aan gaten in het n-gebied voor een standaard zonnecel. Dit is de concentratie ten opzichte van de initiële concentratie p_0 . Aan de rechter kant van de grafiek kan men opmerken hoe de depletiezone alle gaten wegzuigt. In tegenstelling tot de concentratie in het p-gebied is hier de invloed van de Beer-Lambert wet niet te zien. Dit komt door de invloed van de oppervlakte recombinaties aan het oppervlak, de invloed van de depletiezone en omdat in het relatief kleine gebied (slechts 277 nm) het exponentieel gedrag overeenkomstig met een absorptiecoëfficiënt van ongeveer $1.7 \frac{1}{\text{m}}$ (dit is de waarde voor licht met een golflengte van 500 nm) niet zichtbaar is.



Figuur 1.21: De concentratie aan elektronen in het p-gebied van een standaard zonnecel. Dit is steeds ten opzichte van de initiële stationaire concentratie n_0 . Merk op dat de depletiezone aan de linker kant de elektronen wegtrekt uit het gebied. Op de rechterhelft van de grafiek kan men het exponentiële verloop van de Beer-Lambert wet herkennen.



Figuur 1.22: De reflectantie $R(\omega)$ van Si in het interessante golflengtegebied, gebaseerd op gegevens van het CRC Handbook of Chemistry and Physics [24].

1.6.4 De totale kwantumefficiëntie met reflectie

De QE omvat eigenlijk de alle beschreven microscopische processen in de zonnecel. De enige onbekende die nog nodig is om de transportvergelijkingen op te lossen en de QE te berekenen is de generatieterm. Deze term omvat de invloed van de omgeving op de zonnecel. Voor een zonnecel zonder nanoschillen gebruiken we in deze thesis de wet van Beer-Lambert om de generatieterm uit te rekenen. Dit werd uitgelegd en berekend in sectie 1.5.4 op pagina 40.

We kunnen nu deze drie bijdragen (1.94), (1.95) en (1.96) combineren om de totale kwantumefficiëntie te berekenen:

$$QE_{tot}(\omega) = QE_{p\text{-gebied}}(h + \delta, \omega) + QE_{n\text{-gebied}}(h, \omega) + QE_{depl}(\omega). \quad (1.101)$$

De factor $\dot{n}_0(\omega)$ uit vergelijking (1.93) geeft het aantal fotonen per oppervlakte-eenheid en per seconde dat binnenkomt in de zonnecel. Concreet komt dit overeen met het aantal fotonen dat door de zon wordt ingestraald, verminderd door het verlies wegens reflectie aan het oppervlak van de zonnecel. Om dit te benadrukken herdefiniëren \dot{n}_0 als de fotonfluxdichtheid die aan de zonnecel aankomt en trekken we de reflectie buiten de term zodat we deze expliciet kunnen neerschrijven:

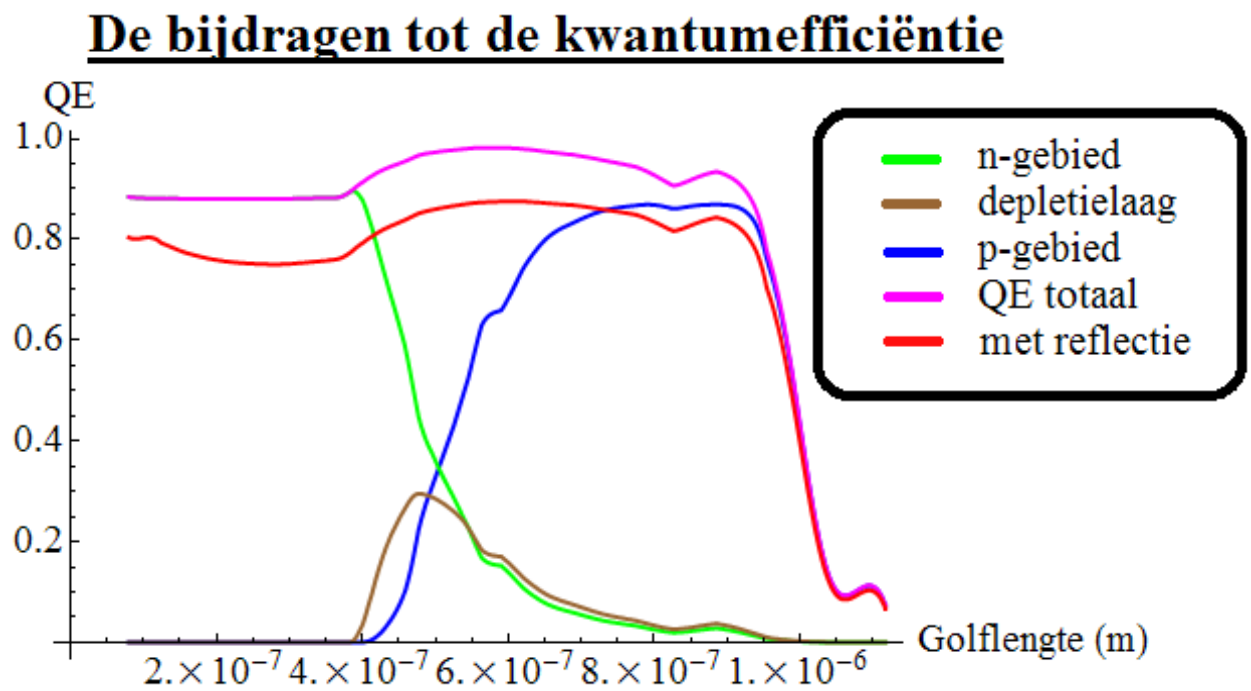
$$g(z, \omega) = (1 - R(\omega)) \dot{n}_0(\omega) \alpha(\omega) e^{-\alpha(E)z}.$$

De reflectantie $R(\omega)$ die hierbij in rekening is gebracht is berekend via de gegevens voor de brekingsindex $n(\omega)$ en de extinctiecoëfficiënt $\kappa(\omega)$ [24]. Het verloop van de reflectiecoëfficiënt is weergegeven in figuur 1.22.

De verschillende bijdragen, de totale QE en de totale QE met de reflectie in rekening gebracht staan weergegeven in figuur 1.23.

Merk op dat de kleinere golflengten vooral in het n-gebied worden geabsorbeerd, terwijl de grotere golflengten eerder in het p-gebied opgenomen worden. We kunnen dit begrijpen door de figuur van de absorptiecoëfficiënt te herbekijken (figuur 1.15). Hierop zien we duidelijk dat licht met een golflengte tussen 100 en 400 nm veel sterker geabsorbeerd wordt dan de langere golflengten. Hieruit kunnen we afleiden dat de kleinere golflengten heel snel na het binnendringen in het materiaal zullen geabsorbeerd worden en dat er dus weinig van deze golflengten tot in het p-gebied raken. Een analoge redenering kan verklaren waarom de grotere golflengten, die veel minder geabsorbeerd worden, wel overleven tot in het p-gebied.

Merk op dat vanwege de eindigheid van de zonnecel het dus mogelijk is dat fotonen met een grotere golflengte doorheen het materiaal propageren zonder geabsorbeerd te worden. Een techniek waarnaar onderzoek wordt gedaan is om deze fotonen via een reflectie aan het eind van de zonnecel terug te kaatsten zodat hun weglente in de zonnecel vedubbelt wordt. Deze technieken worden niet meegerekend in deze thesis, maar zijn wel compatibel met het huidige concept.



Figuur 1.23: De kwantumefficiëntie van de np-junctie (paars), de bijdragen van de verschillende gebieden (blauw, groen en bruin) en het effect van de reflectie (rood). De rode lijn is de uiteindelijke uitkomst van deze berekening.

1.6.5 Het rendement

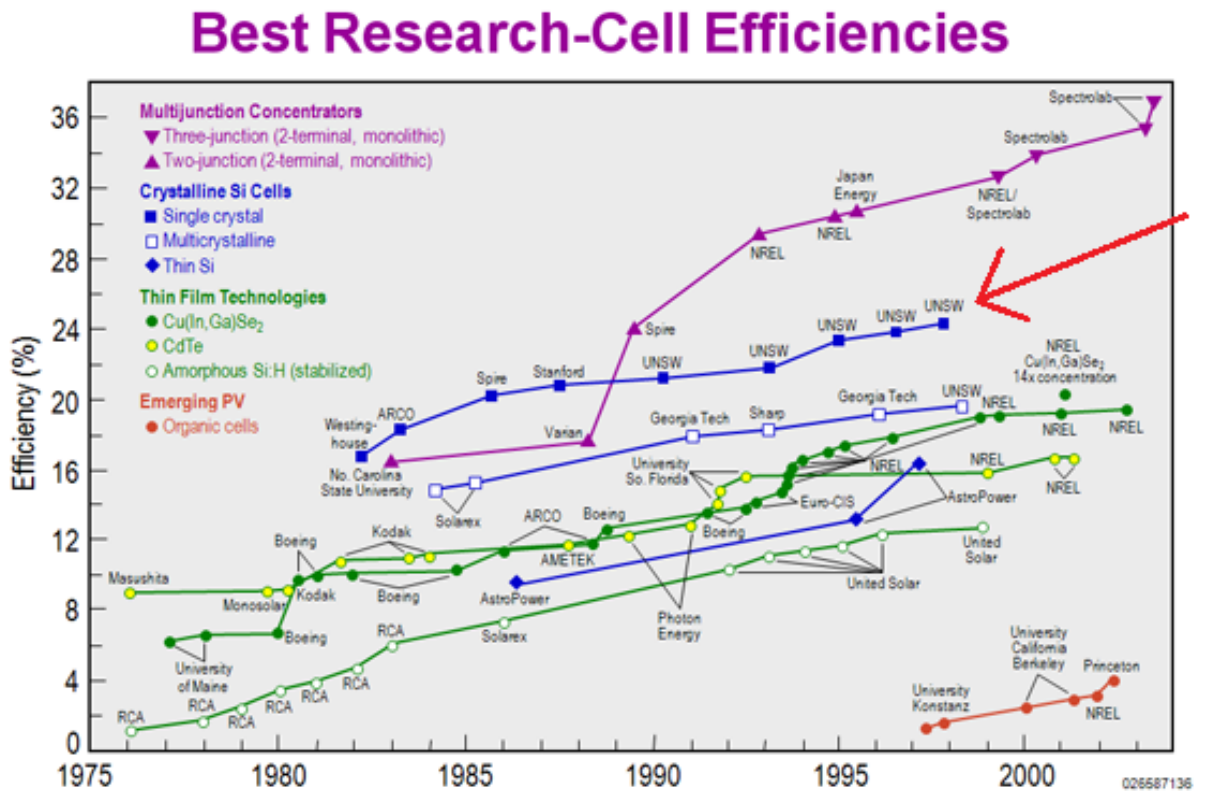
We kunnen de QE nu gebruiken om onze vroegere berekeningen van de maximale efficiëntie van een Si-zonnecel aan te passen. Dit doen we door de bruikbare energie (herbijk vergelijking (1.17)) te vermenigvuldigen met de verkregen QE. De inputenergie blijft dezelfde. Hierdoor verlaagt het rendement.

$$\epsilon = \frac{P_{uit}}{P_{in}} = \frac{\sum_{\lambda=200\text{ nm}}^{4000\text{ nm}} QE_{tot}(\omega) \Theta_{\lambda}(E(\lambda) - E_b) n_{\lambda} \Delta\lambda h\nu_b}{\sum_{\lambda=200\text{ nm}}^{4000\text{ nm}} f_{\lambda} * \Delta\lambda}. \quad (1.102)$$

De berekeningen geven dat de maximale efficiëntie voor beschijning onder het AM1.5 zonnenspectrum neerkomt op:

$$\boxed{\epsilon = 35.82\%}. \quad (1.103)$$

Vergelijken we dit met het rendement zonder de microscopische berekeningen, 48.9% (zie vergelijking (1.20)) dan kunnen we besluiten dat de microscopische processen verantwoordelijk zijn voor een daling van meer dan 25%. Ter vergelijking kan men figuur 1.24 bestuderen. De hoogste experimenteel bereikte efficiëntie voor een silicium zonnecel staat genoteerd op 25%. Dit is ruim 30% lager dan het theoretisch maximum dat net berekend werd. De oorzaak van dit verschil is waarschijnlijk te zoeken bij de aanwezigheid van een 'dark current'. De dark current is een effect ten gevolge van het opbouwen van ladingen aan de contacten van de zonnecel waarlangs verbinding wordt gemaakt met het externe circuit. Deze ladingsopbouw geeft een veld dat de werking van de zonnecel zal tegenwerken. Deze contacten en het externe circuit zijn niet meegenomen in onze berekeningen, dus zit de dark current niet vervat in het resultaat.



Figuur 1.24: Een overzicht van de bereikte efficiënties voor zonnecellen in het recente verleden [5]. Voor deze thesis zijn vooral de volle blauwe vierkanten interessant ter vergelijking.

Hoofdstuk 2

Nanoschillen

2.1 Overzicht

In het vorige deel hebben we de zonnecellen als een geheel op zich bekeken. Nu zullen we hetzelfde doen voor de nanoschillen.

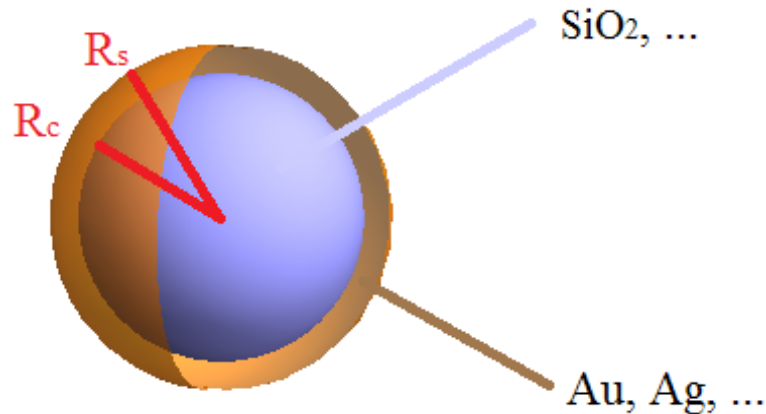
Eerst volgt een korte introductie in het thema van de nanoschil. Nadien zullen bepaalde aspecten die nuttig zijn voor het huidige onderzoek dieper bestudeerd worden. Meer specifiek zal er gekeken worden naar de verstrooiing van een elektromagnetische golf rondom een nanoschil. Het idee is namelijk dat de nanoschil een elektromagnetische golf zal verstrooien, zoals reeds beschreven was in de doelstelling.

2.2 Nanoschillen: een introductie

Het idee van structuren ter grootte van enkele nanometer is niet nieuw. Wel nieuw is de enorme zoo aan nanodeeltjes en nanostructuren die de mensheid heeft kunnen bedenken en verwezenlijken gedurende de afgelopen jaren. Vaak bestonden deze ideeën op papier al veel langer. Dit is ook zo in het geval van de nanoschil. Reeds een halve eeuw geleden bestonden er al ideeën rondom gelaagde structuren met afmetingen kleiner dan de golflengte van het licht waarmee ze bekeken worden, maar de praktische verwezenlijking moest wachten tot midden jaren 90 [10].

2.2.1 Opbouw en eigenschappen

De term 'nanoschillen' is eigenlijk zeer algemeen. In deze thesis gaat het over wat men "metallische nanoschillen" noemt. Deze deeltjes bestaan uit een diëlektrische kern (meestal SiO_2) met daar rond een dunne laag metaal (bijvoorbeeld Au, Ag,...). In figuur 2.1 staat een schematische weergave van een nanoschil. Andere samenstellingen



Figuur 2.1: Schematische weergave van een nanoschil zoals deze in dit werk wordt gebruikt. De blauwe kern met straal R_c is een diëlektricum zoals bijvoorbeeld SiO_2 . Daar rond bevindt zich een dunne metalen schil met dikte $R_s - R_c$. Deze schil bestaat typisch uit goud of zilver.

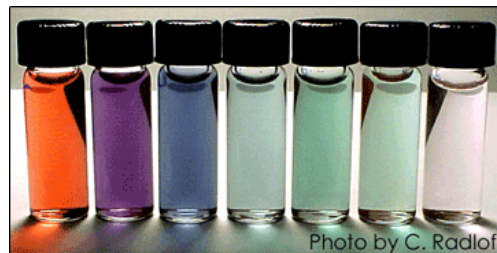
zijn echter ook mogelijk. Zo wordt er ook volop geëxperimenteerd met halfgeleiders in de kern, of als schil, of allebei. Ook is het mogelijk meerdere lagen aan te brengen. Deze structuren worden met de term 'matroesjka' aangeduid om hun gelaagdheid weer te geven. Ook met de vorm wordt vaak gespeeld. In dit werk worden steeds sferische deeltjes beschouwd, maar er bestaan ook vele andere vormen [20]: eieren, balken, kubussen, piramiden, rijst-achtig, ...

Wat maakt deze nanoschillen nu zo speciaal? Eigenlijk is dit een combinatie van twee effecten. Ten eerste de Localized Surface Plasmon Polaritons. Ten tweede de afstelbaarheid.

1. 'Localized Surface Plasmon Polaritons' (afgekort als LSPP's) zijn een soort quasi-deeltjes die gecreëerd worden door licht in te schijnen op een metaal-diëlektricum interface. Een polariton is de combinatie van een elektron en een foton. De term plasmon duidt op een collectieve oscillatie van de ladingsdragers van het metaal. Een SPP is dus een collectieve oscillatie van de geleidingselektronen aan de interface tussen een metaal en een diëlektricum in resonantie met een elektromagnetische golf. In nanoschillen spreekt men vaak over LSPP's vanwege de lokalisatie van deze oscillatie in het volume van de nanoschil omdat de dimensie van de nanoschil

typisch kleiner is dan de golflengte van het licht. De door licht geëxciteerde elektronoscillaties in nanoschillen hebben dus geen propagerend karakter zoals diegene die ontstaan aan een vlak oppervlak wanneer daar licht wordt op ingestuurd.

2. De buitenstraal van de metallische nanoschil zal, net zoals bij homogene nanosferen, een belangrijke rol spelen in de positie van de resonantiefrequenties. In de nanoschil zoals deze hier bekeken is, zijn 2 interfaces aanwezig: een eerste tussen het metaal en de kern en een tweede tussen het metaal en de omgeving. Beide interfaces zullen LSPP's kunnen ondersteunen. De schil zelf zal echter slechts enkele nanometer dik zijn (± 20 nm). De LSPP's zullen dus een invloed ondervinden van de LSPP's aan de andere interface. De aanwezigheid van LSPP's in combinatie met de geometry van de nanoschil geeft een aantal positieve eigenschappen: ten eerste zal het resonantiespectrum zeer uitgesproken en duidelijk zichtbaar zijn. Ten tweede zal de nanoschil afstelbaar en gevoelig zijn. Door slechts een kleine verandering in de materiaalparameters, de diëlektrische functies van de verschillende media of de stralen van de nanoschil kan reeds een grote verandering in het resonantiespectrum worden opgemeten. Dit wordt aangetoond door de foto in figuur 2.2. Hierop zijn verschillende flesjes met oplossingen van nanoschillen met verschillende diameter te zien. Aan het kleurverschil is heel duidelijk te zien hoe een verandering van de binnen- en buitendiameters van de nanoschillen een andere absorptie kan geven.

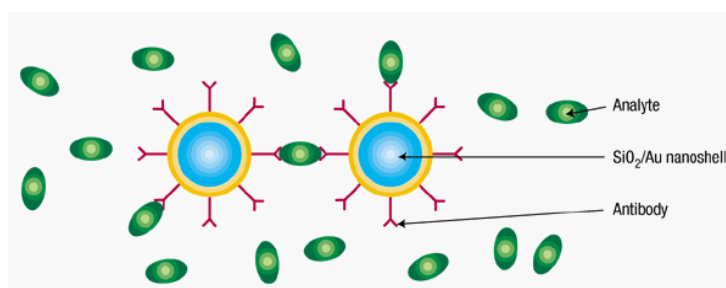


Figuur 2.2: Het meest linkse flesje is een oplossing van volle gouden nanosferen. De andere zijn oplossingen van gouden nanoschillen met verschillende kern en schil stralen. Het meest rechtse is IR absorberend [11].

2.2.2 Toepassingen

Het onderzoek rondom nanoschillen is de laatste jaren explosief toegenomen [7]. Dit is vooral te danken aan de vele toepassingen die recent bedacht werden.

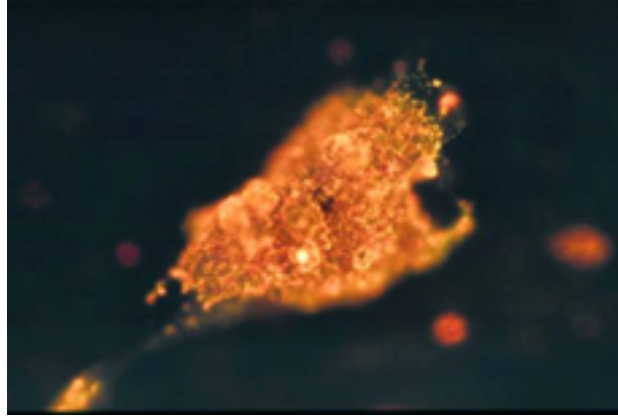
Vooraf het maken van biosensoren door middel van nanoschillen is een zeer interessante toepassing. Zo'n biosensor werkt door middel van antilichamen die vastgemaakt worden aan de nanoschillen (dit staat schematisch weergegeven in figuur 2.3). Antilichamen binden enkel aan een unieke molecule waar ze voor gemaakt zijn. Eens de binding volledig is zullen de eigenschappen van het medium rondom de nanoschil veranderd zijn vanwege deze extra bindingen. Dit wordt eenvoudig merkbaar in het absorptiespectrum. Meer zelfs, men kan het absorptiespectrum gebruiken om bepaalde eigenschappen van het medium op te meten. Zo kan men aan de hand van de verplaatsing van resonantiepieken de concentratie van opgeloste stoffen in het medium bepalen, zoals bijvoorbeeld de hoeveelheid suiker in het bloed.



Figuur 2.3: Schematische voorstelling van nanoschillen met antilichamen voor het opsporen van analyten in biosensoren [12]. De antilichamen zullen de analyten opsporen en vasthouden. Hierdoor zal de diëlektrische constante van de omgeving van de nanoschil veranderen en dus ook de optische respons. Hierdoor zijn de gebonden nanoschillen onderscheidbaar van de ongebonden nanoschillen.

Eén van de meest veelbelovende toepassingen van deze nanodeeltjes is de detectie en neutralisatie van kankercellen [13, 14]. Door een leger van deze nanoschillen met de gepaste antilichamen in de bloedstroom te brengen zal men ervoor zorgen dat de nanodeeltjes zich, via de antilichamen, aan de ongewenste kankercellen gaan binden (andere cellen zullen ze afstoten). De gebonden nanodeeltjes zullen andere optische eigenschappen hebben dan de vrije nanodeeltjes. Dit effect stelt artsen in staat de gebonden deeltjes te detecteren en zo te vinden hoeveel kankercellen er op welke plaats in het lichaam aanwezig zijn. Eén van de voordelen van de nanoschillen is dat de dikte van de goudlaag zeer nauwkeurig geconstrueerd kan worden zodat ze licht verstrooien en/of absorberen in een frequentievenster van infrarood licht waarvoor het menselijk weefsel het meest transparant is. Een voorbeeld van deze techniek staat weergegeven in figuur 2.4. Hierop is een vals-kleurenfoto van een kanker cel in beeld gebracht door middel van gouden nanorods bij IR licht. Een mogelijke volgende stap is dat de arts de deeltjes nogmaals maar langer belicht met IR licht. Hierdoor gaan de gouden schillen

opwarmen en kunnen ze zo de kanker doden die aan hen gebonden is. Dit met minder schade aan de gezonde cellen dan met bijvoorbeeld chemotherapie. Zoals in [13] staat uitgelegd blijft dit niet bij een theoretisch concept, maar is deze techniek al succesvol toegepast op muizen.



Figuur 2.4: Valsekleurenfoto van een kankercel in beeld gebracht door middel van nanorods. Afbeelding door Mostafa El-Sayed, Georgia Tech [15].

Een ander voorbeeld van een interessante toepassing is het inplanten van deze nano-deeltjes in temperatuur gevoelige stoffen. Een voorbeeld van zo'n materiaal is NIPAAm-co-AAm (Ni-Isopropylacrylamide-co-acrylamide) [16, 17]. Deze hydrogel heeft de eigenschap vocht op te nemen bij temperaturen lager dan een bepaalde kritische temperatuur en uit te stoten boven deze temperatuur. Voor NIPAAm-co-AAm ligt de kritische temperatuur op 40°C . Door gouden nanoschillen in te planten kan men via licht de hydrogel opwarmen tot boven de kritische temperatuur waardoor het vocht (bijvoorbeeld een medicijn) wordt uitgestoten. Dit kan worden toegepast om zeer lokaal medicijnen toe te dienen.

Buiten de medische wereld wordt ook veel onderzoek verricht naar de optische eigenschappen van nanoschillen. Vooral in het kader van plasmonica is men zeer geïnteresseerd in deze structuren. Plasmonen combineren immers de hoge snelheid waarmee licht informatie overdraagt met de kleine afmetingen die nodig zijn om elektronen te vervoeren. Op die manier wordt een brug geslagen tussen (snelle) fotonica en (kleine) elektronica.

De lijst met (mogelijke) toepassingen gaat nog een eindje door en groeit nog dagelijks. Voor verdere informatie wordt dan ook naar de literatuur verwezen [19, 20].

2.3 Verstrooiingstheorie

Het vraagstuk dat in dit deel van het thesis beantwoord wordt is hoe een elektromagnetische golf wordt beïnvloed door de aanwezigheid van een nanoschil. Veronderstel dat er een vlakke golf op een nanoschil wordt ingestraald. Wat gebeurt er dan? Intuïtief weten we dat er een deel geabsorbeerd zal worden, een deel zal verstrooid worden en een deel van de golf zal passeren alsof er niets aan de hand is. Maar we zullen nu uitrekenen hoe dit exact in zijn werk gaat. Hoeveel wordt er geabsorbeerd? Als er teveel geabsorbeerd wordt dan vormen de nanoschillen een storend element dat energie opsloopt als we ze gaan combineren met de zonnecel. Het deel dat ongestoord de nanoschil voorbij gaat levert dezelfde bijdrage als bij een zonnecel zonder nanoschil. Het gunstig effect van de nanoschillen is dus te zoeken bij het verstrooide licht. Het is dit verstrooide licht dat een ander pad door de zonnecel zal volgen. Anderzijds zal er ook een deel fotonen terugverstrooid worden waardoor er minder fotonen in de zonnecel binnendringen. Zoals de lezer nu alvast kan aanvoelen zal vooral het evenwicht tussen al deze voor- en nadelen bepalen of het concept van nanoschillen op zonnecellen een toekomst heeft.

2.3.1 EM-veld rondom een nanoschil

2.3.1.1 Het concept

Om de verstrooiing van het licht te berekenen moeten we in feite de Maxwell vergelijkingen oplossen in alle gebieden. In onze situatie zijn er drie gebieden:

1. de kern van de nanoschil ($r < R_c$)
2. de schil van de nanoschil ($R_c < r < R_s$)
3. het medium rondom de nanoschil ($R_s < r$).

We sturen circulair gepolariseerd licht op de nanoschil in langsheen de z -as van $-\infty$ naar $+\infty$. We kiezen de fase van het veld zodanig dat het elektrische veld langsheen de positieve x richting op $t = 0$ en $z = 0$. Het magnetisch veld ligt dan langsheen de positieve y -as op dit tijdstip en op $z = 0$. De oorsprong van het systeem ligt in het centrum van de nanoschil. Dit staat schematisch weergegeven op figuur 2.5. We geven hier een kort overzicht van het basisconcept van verstrooiingstheorie.

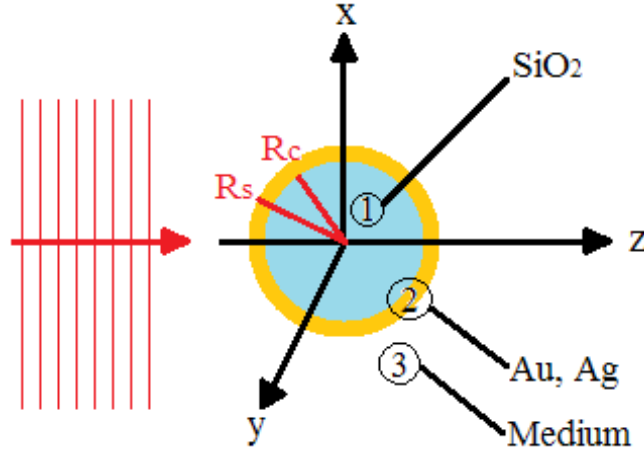
We vertrekken van de macroscopische Maxwell vergelijkingen [26]:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D}(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}, t), \quad (2.1)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = 0, \quad (2.2)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{\partial \vec{B}(\vec{r}, t)}{\partial t}, \quad (2.3)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{J}(\vec{r}, t) + \frac{\partial \vec{D}(\vec{r}, t)}{\partial t}, \quad (2.4)$$



Figuur 2.5: Schematische voorstelling van de keuze van de oorsprong voor de berekening van de verstrooiing van een elektromagnetische golf op een nanoschil. Er wordt een circulair gepolariseerde vlakke golf langsheen de positieve z -as ingestuurd vanop $z = -\infty$.

waarbij $\vec{D} = \epsilon\epsilon_0\vec{E}$ en $\vec{B} = \mu\mu_0\vec{H}$, met \vec{D} het elektrisch verplaatsingsveld, \vec{E} het elektrisch veld, \vec{B} de magnetische inductie en \vec{H} het magnetisch veld. Voor het sferische probleem van bollen en nanoschillen is een oplossingsmethode uitgewerkt door G. Mie [21] ('Mietheorie' genoemd). Het is namelijk nodig om een oplossing te vinden van deze Maxwell vergelijkingen in elke regio van het systeem. De berekening wordt uitgevoerd door de oplossing te ontbinden in vector bolfuncties [27]. In de buitenste regio moet men daarbij rekening houden met de inkomende golf. Dit is immers een voorwaarde die aan het systeem wordt opgelegd. De ontbinding van een circulair gepolariseerde vlakke golf in vector bolfuncties is:

$$\vec{E}_{in}(\vec{r}) = \sum_{l,m} E_{0l} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{2} (\delta_{m,1} + \delta_{m,-1}) j_l(q_3 r) \vec{Y}_{l,m}(\theta, \varphi) \\ + \frac{1}{2i} (\delta_{m,1} - \delta_{m,-1}) \sqrt{\frac{l}{2l+1}} j_{l+1}(q_3 r) \vec{Y}_{l,l+1,m}(\theta, \varphi) \\ - \frac{1}{2i} (\delta_{m,1} - \delta_{m,-1}) \sqrt{\frac{l+1}{2l+1}} j_{l-1}(q_3 r) \vec{Y}_{l,l-1,m}(\theta, \varphi) \end{array} \right\} \quad (2.5)$$

$$\vec{H}_{in}(\vec{r}) = k_3 \sum_{l,m} E_{0l} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{2i} (\delta_{m,1} - \delta_{m,-1}) j_l(q_3 r) \vec{Y}_{l,m}(\theta, \varphi) \\ - \frac{1}{2} (\delta_{m,1} + \delta_{m,-1}) \sqrt{\frac{l}{2l+1}} j_{l+1}(q_3 r) \vec{Y}_{l,l+1,m}(\theta, \varphi) \\ + \frac{1}{2} (\delta_{m,1} + \delta_{m,-1}) \sqrt{\frac{l+1}{2l+1}} j_{l-1}(q_3 r) \vec{Y}_{l,l-1,m}(\theta, \varphi) \end{array} \right\}, \quad (2.6)$$

waarbij $j_l(r)$ de sferische Besselfuncties van de eerste soort voorstellen en $\vec{Y}_{l,m}(\theta, \varphi)$ de vector bolfuncties zijn (bekijk voor de bolfuncties ook de appendix op pagina 98). Verder is:

$$E_{0l} = E_0 \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l, \quad (2.7)$$

en k_3 is de impedantie, dit is de verhouding tussen het elektrisch en het magnetisch veld van de ingestuurde vlakke golf. Deze factor volgt uit de Maxwell vergelijkingen en is

gelijk aan:

$$k_3 = \sqrt{\frac{\varepsilon\varepsilon_0}{\mu\mu_0}}. \quad (2.8)$$

Zodra de oplossing in elk van de regio's verkregen is worden de verschillende regio's aan elkaar geknoopt om de totale oplossing te krijgen. Indien er geen oppervlakteladingen of -stromen aanwezig zijn moeten aan elke interface de volgende randvoorwaarden voldaan zijn [26]:

$$\begin{cases} \vec{n} \cdot \vec{B}_1 = \vec{n} \cdot \vec{B}_2 \\ \vec{n} \cdot \vec{D}_1 = \vec{n} \cdot \vec{D}_2 \end{cases} \quad (2.9)$$

$$\begin{cases} \vec{n} \times \vec{E}_1 = \vec{n} \times \vec{E}_2 \\ \vec{n} \times \vec{H}_1 = \vec{n} \times \vec{H}_2 \end{cases}. \quad (2.10)$$

Behalve deze randvoorwaarden zijn er ook nog de natuurlijke randvoorwaarden die eindigheid eisen in speciale punten zoals de oorsprong en op oneindig. Uit de randvoorwaarde en de oplossingen in elke regio kan een unieke eindoplossing bekomen worden voor de elektrische en magnetische componenten van het totale systeem. Deze componenten kunnen dan gebruikt worden om de werkzame doorsnede en de Poyntingvector te berekenen.

2.3.1.2 De totale oplossing

De berekeningen achter Mie heorie worden hier niet gedaan, maar kunnen in de literatuur terug gevonden worden. De oplossing voor een homogene bol staat uitgewerkt in Stratton [25]. Het systeem van twee concentrische bollen is opgelost door Aden en Kerker in 1951 [9]. Hier zullen we gebruik maken van de resultaten die verkregen zijn door Aden en Kerker en uit interne berekeningen [4].

Voor het beschouwde systeem van de nanoschil wordt het totale elektromagnetisch veld rond de nanoschil gegeven door (met een iets andere notatie dan in [9]):

$$\begin{cases} E_r^{(3)}(\vec{r}) = 2 \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^{\infty} \frac{-E_{0l}}{2i} \frac{\sqrt{l(l+1)}}{q_3 r} \left[a_{3l}^{el} h_l^{(1)}(q_3 r) + j_l(q_3 r) \right] Y_{1l}(\theta, \varphi) \right] \\ E_\theta^{(3)}(\vec{r}) = 2 \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^{\infty} \left[-\mathcal{E}_l^{mag(3)}(r) \frac{iY_{1l}(\theta, \varphi)}{\sin(\theta)} + \mathcal{E}_l^{el(3)}(r) \frac{\partial Y_{1l}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right] \right] \\ E_\varphi^{(3)}(\vec{r}) = 2 \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^{\infty} \left[\mathcal{E}_l^{mag(3)}(r) \frac{\partial Y_{1l}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} + \mathcal{E}_l^{el(3)}(r) \frac{iY_{1l}(\theta, \varphi)}{\sin(\theta)} \right] \right] \end{cases} \quad (2.11)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} H_r^{(3)}(\vec{r}) = 2 \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^{\infty} \left[\frac{k_3 E_{0l}}{2} \frac{\sqrt{l(l+1)}}{q_3 r} \left[a_{3l}^{mag} h_l^{(1)}(q_3 r) + j_l(q_3 r) \right] Y_{11}(\theta, \varphi) \right] \right] \\ H_\theta^{(3)}(\vec{r}) = 2 \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^{\infty} \left[k_3 \left[-\mathcal{H}_l^{el(3)}(r) \frac{i Y_{11}(\theta, \varphi)}{\sin(\theta)} + \mathcal{H}_l^{mag(3)}(r) \frac{\partial Y_{11}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right] \right] \right] \\ H_\varphi^{(3)}(\vec{r}) = 2 \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^{\infty} \left[k_3 \left[\mathcal{H}_l^{el(3)}(r) \frac{\partial Y_{11}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} + \mathcal{H}_l^{mag(3)}(r) \frac{i Y_{11}(\theta, \varphi)}{\sin(\theta)} \right] \right] \right] \end{array} \right. \quad (2.12)$$

Dit omvat het ongestoorde en het verstrooide veld buiten de nanoschil. Deze ogenschijnlijk eenvoudige notatie stelt de zeer gecompliceerde oplossing van het systeem voor. Dit zijn de componenten van het elektrisch en het magnetisch veld in het medium rond de schil in bolcoördinaten. Het is bovendien ook nog belangrijk te weten dat de voorfactoren gegeven zijn door:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{E}_l^{el(3)}(r) = \frac{E_{0l}}{\sqrt{l(l+1)}} \frac{1}{2i} \left[a_{3l}^{el} \bar{\mathcal{H}}_l^{(1)}(q_3 r) + \bar{\mathcal{J}}_l(q_3 r) \right] \\ \mathcal{E}_l^{mag(3)}(r) = \frac{E_{0l}}{\sqrt{l(l+1)}} \frac{1}{2i} \left[a_{3l}^{mag} h_l^{(1)}(q_3 r) + j_l(q_3 r) \right] \end{array} \right. , \quad (2.13)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}_l^{mag(3)}(r) = -\frac{E_{0l}}{\sqrt{l(l+1)}} \frac{1}{2} \left[a_{3l}^{mag} \bar{\mathcal{H}}_l^{(1)}(q_3 r) + \bar{\mathcal{J}}_l(q_3 r) \right] \\ \mathcal{H}_l^{el(3)}(r) = -\frac{E_{0l}}{\sqrt{l(l+1)}} \frac{1}{2} \left[a_{3l}^{el} h_l^{(1)}(q_3 r) + j_l(q_3 r) \right] \end{array} \right. , \quad (2.14)$$

De factoren E_{0l} en k_3 waren reeds uitgelegd in vergelijkingen (2.7) en (2.8). De rest van de notaties verbannen we naar de appendix (pagina 96). De functies j_l en $h_l^{(1)}$ zijn de sferische Bessel- en Hankelfuncties van de eerste soort, $\bar{\mathcal{H}}_l^{(1)}$ en $\bar{\mathcal{J}}_l$ zijn aangepaste versies van deze functies (bekijk ook vergelijkingen (A.3) en (A.5)).

Verder is het nog noodzakelijk om te weten dat de functies $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ de bolfuncties voorstellen. De waarde van m is echter reeds bepaald. Herinner namelijk dat voor een foton $m = 1$ of $m = -1$ de enige fysische oplossingen zijn, wat ook rechtstreeks uit de berekeningen volgt. Deze twee waarden stellen de twee polarisatierichtingen van het licht voor. We moeten in theorie de som over de twee nemen, maar omdat dit gelijk zou zijn aan het sommeren van een complex getal met zijn complex toegevoegde nemen we 2 maal het reële deel van het geheel ($c + c^* = 2 \operatorname{Re}(c)$). Dit verklaart de factor 2 in vergelijkingen (2.15) en (2.16).

2.3.1.3 De ongestoorde golf

Er is voor de bovenstaande notatie gekozen omdat deze meer inzicht geeft in de fysica van de berekening dan de formulering die door Aden en Kerker gevolgd wordt. Het is namelijk heel intuïtief duidelijk dat we een verschillende betekenis kunnen geven aan de Besselfuncties en de Hankelfuncties in de velden. Merk op dat enkel de coëfficiënten a_{3l}^{mag} en a_{3l}^{el} de invloed van het systeem in rekening brengen. Deze coëfficiënten zijn namelijk het gevolg van randvoorwaarden. Stellen we deze coëfficiënten nu gelijk aan nul dan schakelen we alle invloed van de nanoschil uit. Doen we dit in de vergelijkingen (2.13) en (2.14) en steken we dit in vergelijkingen (2.11) en (2.12), dan houden we over:

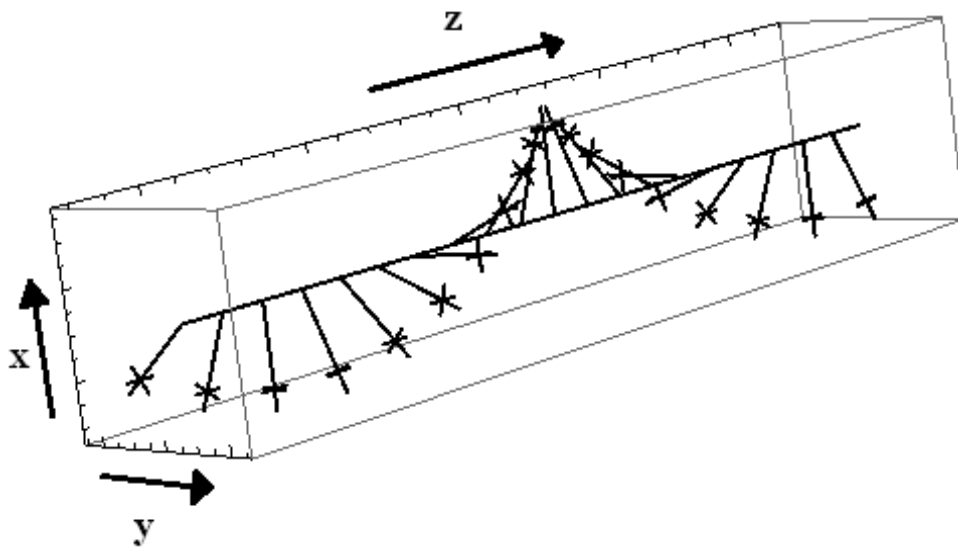
$$\left\{ \begin{array}{l} E_r^3(\vec{r}) = 2 \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^{\infty} \frac{-E_{0l}}{2i} \frac{\sqrt{l(l+1)}}{q_3 r} j_l(q_3 r) Y_{l,1}(\theta, \varphi) \right] \\ E_{\theta}^3(\vec{r}) = 2 \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^{\infty} \frac{-E_{0l}}{2i\sqrt{l(l+1)}} \left[j_l(q_3 r) \frac{iY_{l,1}(\theta, \varphi)}{\sin(\theta)} - \bar{J}_l(q_3 r) \frac{\partial Y_{l,1}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right] \right] \\ E_{\varphi}^3(\vec{r}) = 2 \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^{\infty} \frac{E_{0l}}{2i\sqrt{l(l+1)}} \left[\bar{J}_l(q_3 r) \frac{iY_{l,1}(\theta, \varphi)}{\sin(\theta)} + j_l(q_3 r) \frac{\partial Y_{l,1}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right] \right] \end{array} \right. \quad (2.15)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} H_r^3(\vec{r}) = 2 \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^{\infty} \frac{k_3 E_{0l}}{2} \frac{\sqrt{l(l+1)}}{q_3 r} j_l(q_3 r) Y_{l,1}(\theta, \varphi) \right] \\ H_{\theta}^3(\vec{r}) = 2 \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^{\infty} \frac{k_3 E_{0l}}{2\sqrt{l(l+1)}} \left[j_l(q_3 r) \frac{iY_{l,1}(\theta, \varphi)}{\sin(\theta)} - \bar{J}_l(q_3 r) \frac{\partial Y_{l,1}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right] \right] \\ H_{\varphi}^3(\vec{r}) = 2 \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^{\infty} \frac{-k_3 E_{0l}}{2\sqrt{l(l+1)}} \left[\bar{J}_l(q_3 r) \frac{iY_{l,1}(\theta, \varphi)}{\sin(\theta)} + j_l(q_3 r) \frac{\partial Y_{l,1}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right] \right] \end{array} \right. \quad (2.16)$$

We merken op dat enkel de Besselfuncties nog overblijven. Deze velden zijn dus onafhankelijk van het systeem omdat alle factoren a_{3l}^{mag} en a_{3l}^{el} weg zijn. Deze velden hebben dezelfde vorm als het inkomend veld uit vergelijkingen (2.5) en (2.6) en noemen we daarom de ongestoorde golf. Het elektrisch veld van deze EM golf staat afgebeeld in figuur 2.6 Om een duidelijk beeld te geven zijn de vectoren op deze figuur herschaald.

Wat zien we hierop? Deze figuren geven bovenstaande vergelijkingen weer met een pulsatie gelijk aan 10^{15} Hz. Verder zijn enkel de eerste 20 termen van de som over l meegenomen in de berekening. Voor figuren van deze afmetingen (ongeveer $400 \times 400 \times 400$ nm) is gebleken dat de eerste 20 termen voldoende waren door de convergentie te vergelijken met berekeningen waarbij meer termen werden meegenomen. Om de velden op een grotere afstand van de nanoschil te berekenen moet men meer termen meenemen.

Het magneet is volledig analoog aan het elektrisch veld behalve dat in elk punt \vec{H} vector loodrecht de \vec{E} vector staat. De propagatierichting van het licht staat loodrecht op de vectoren \vec{E} en \vec{H} en wijst dus in de z -richting.



Figuur 2.6: Het elektrisch veld van de ongestoorde golf. Op de figuur is te zien dat deze golf inderdaad hetzelfde karakter heeft als de ingestuurde golf: een circulair gepolariseerde vlakke golf. Dit is voor een golf met een pulsatie van 10^{15} Hz.

Tabel 2.1: De voorbeeld parameters van de nanoschil die worden gebruikt in alle figuren tenzij anders vermeld in de caption.

$R_c =$	96 nm
$R_s =$	116 nm
medium 1 =	SiO ₂
medium 2 =	Au
medium 3 =	vacuüm

2.3.1.4 Het verstrooide veld

Anderzijds zouden we kunnen kijken naar de Hankelfuncties terwijl we de Besselfuncties gelijk aan nul stellen. Dit geeft het verstrooide veld. Analytisch kunnen we dit neerschrijven als:

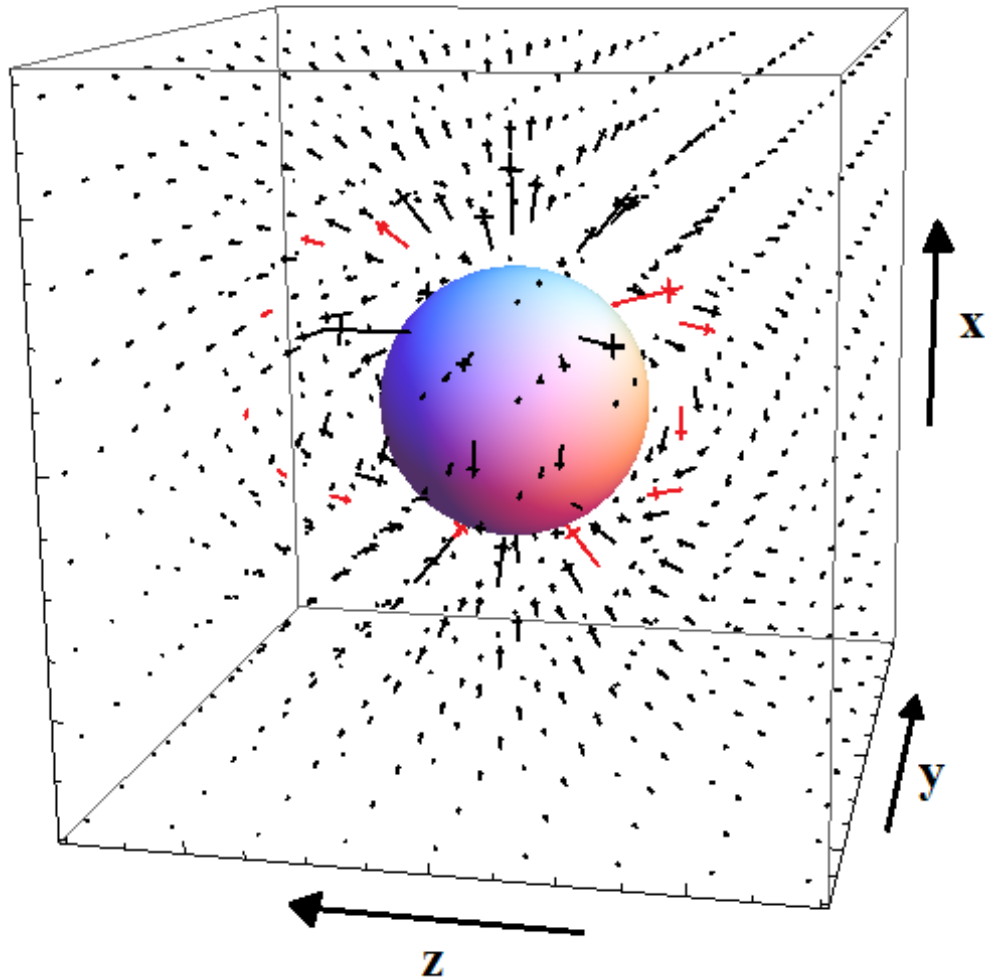
$$\left\{ \begin{array}{l} E_r^{(3)}(\vec{r}) = 2 \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^{\infty} \frac{-E_{0l}}{2i} \frac{\sqrt{l(l+1)}}{q_3 r} Y_{l1}(\theta, \varphi) a_{3l}^{el} h_l^{(1)}(q_3 r) \right] \\ E_{\theta}^{(3)}(\vec{r}) = 2 \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^{\infty} \frac{E_{0l}}{\sqrt{l(l+1)}} \frac{-1}{2i} \left[a_{3l}^{mag} h_l^{(1)}(q_3 r) \frac{iY_{l1}(\theta, \varphi)}{\sin(\theta)} - a_{3l}^{el} \bar{\mathcal{H}}_l^{(1)}(q_3 r) \frac{\partial Y_{l1}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right] \right] \\ E_{\varphi}^{(3)}(\vec{r}) = 2 \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^{\infty} \frac{E_{0l}}{\sqrt{l(l+1)}} \frac{1}{2i} \left[a_{3l}^{mag} h_l^{(1)}(q_3 r) \frac{\partial Y_{l1}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} + a_{3l}^{el} \bar{\mathcal{H}}_l^{(1)}(q_3 r) \frac{iY_{l1}(\theta, \varphi)}{\sin(\theta)} \right] \right] \end{array} \right. \quad (2.17)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} H_r^{(3)}(\vec{r}) = 2 \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^{\infty} \left[\frac{k_3 E_{0l}}{2} \frac{\sqrt{l(l+1)}}{q_3 r} \left[a_{3l}^{mag} h_l^{(1)}(q_3 r) + j_l(q_3 r) \right] Y_{l1}(\theta, \varphi) \right] \right] \\ H_{\theta}^{(3)}(\vec{r}) = 2 \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^{\infty} \left[\frac{k_3}{2} \frac{E_{0l}}{\sqrt{l(l+1)}} \left[a_{3l}^{el} h_l^{(1)}(q_3 r) \frac{iY_{l1}(\theta, \varphi)}{\sin(\theta)} - a_{3l}^{mag} \bar{\mathcal{H}}_l^{(1)}(q_3 r) \frac{\partial Y_{l1}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right] \right] \right] \\ H_{\varphi}^{(3)}(\vec{r}) = 2 \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^{\infty} \left[\frac{-k_3}{2} \frac{E_{0l}}{\sqrt{l(l+1)}} \left[a_{3l}^{el} h_l^{(1)}(q_3 r) \frac{\partial Y_{l1}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} + a_{3l}^{mag} \bar{\mathcal{H}}_l^{(1)}(q_3 r) \frac{iY_{l1}(\theta, \varphi)}{\sin(\theta)} \right] \right] \right] \end{array} \right. \quad (2.18)$$

Het verstrooide veld hangt natuurlijk wel af van de eigenschappen van de nanoschil. Deze zitten namelijk verborgen in de factoren a_{3l}^{mag} en a_{3l}^{el} . Het elektrisch en magnetisch veld voor een nanoschil met de voorbeeldparameters uit tabel 2.1 staan weergegeven in figuren 2.7 en 2.8 (ook weer voor een pulsatie van 10^{15} Hz).

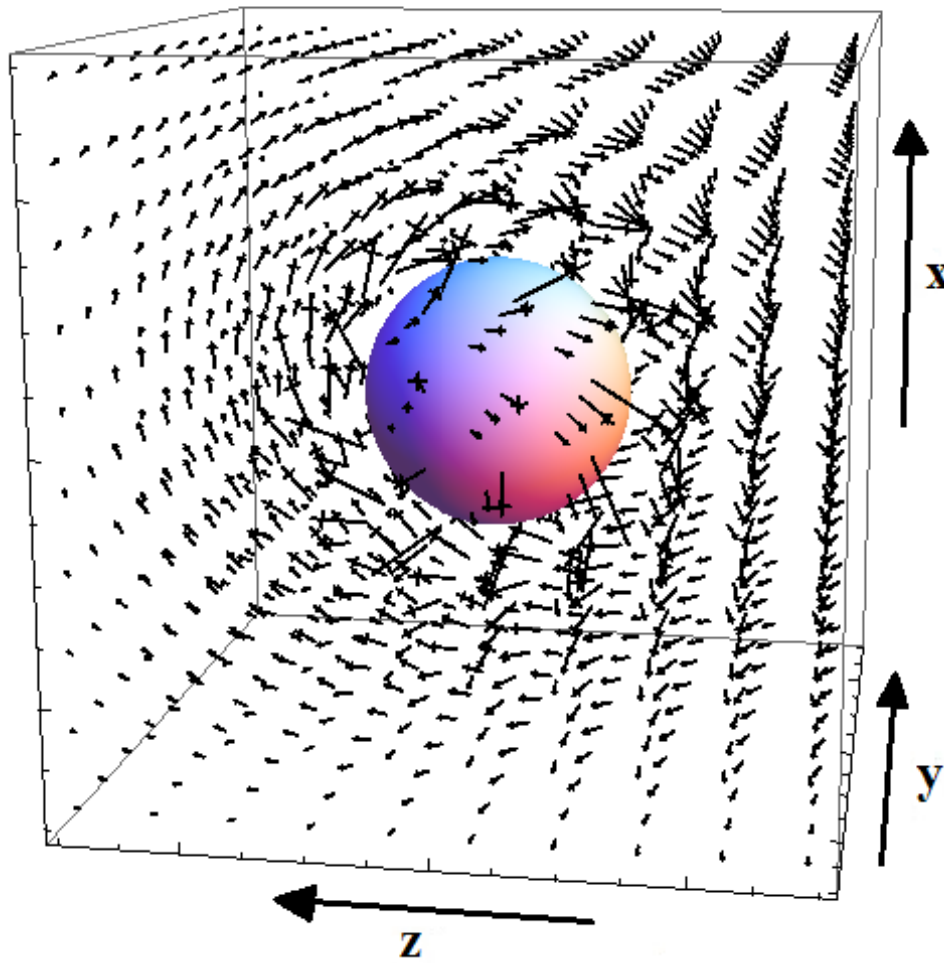
Deze pulsatie is puur arbitrair gekozen omdat deze in het midden van het frequentiegebied ligt waarvoor de parameters van de verschillende materialen gekend zijn. Bekijken we het elektrisch veld, dan kunnen we zien dat deze pulsatie in het gebied van de dipoolresonantie ligt. De vectoren op figuur 2.7 geven immers aan hoe het veld in elk punt gericht is en met welke sterkte. Deze vectoren vormen eigenlijk de raaklijnen aan de veldlijnen in een welbepaald punt. Dan is het duidelijk dat de veldlijnen van het elektrisch veld overeen komen met die van een dipoolveld. Het magnetisch veld is moeilijker te interpreteren.

Het verstrooid elektrisch veld



Figuur 2.7: Het elektrisch veld van de verstrooide golf rondom de nanoschil bij een pulsatie 10^{15} Hz. Deze pulsatie ligt iets lager dan de dipool resonantie. Deze dipool resonantie is te zien op de figuur. Als hulpmiddel zijn er een aantal vectoren gekleurd.

Het verstrooid magnetisch veld



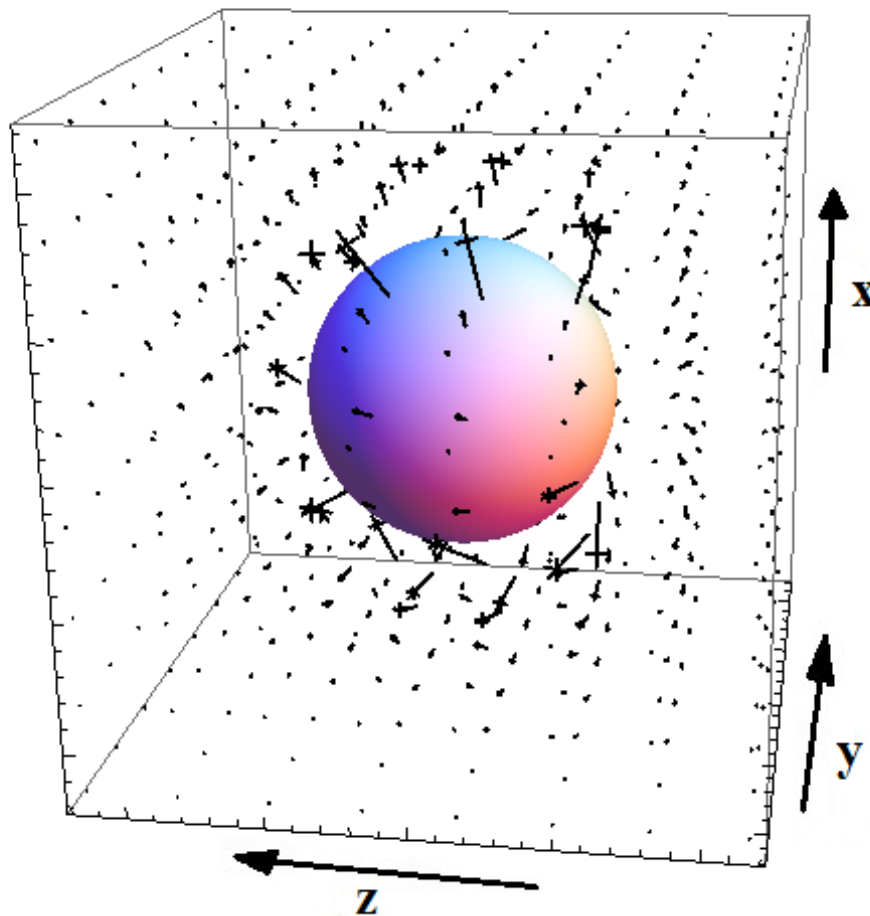
Figuur 2.8: Het magnetisch veld van de verstrooide golf rondom een nanoschil op een pulsatie van 10^{15} Hz.

Via het elektrisch en magnetisch veld is het mogelijk de Poynting vector uit te rekenen. De Poynting vector \vec{S} (in $\frac{\text{W}}{\text{m}}$) geeft de energieflex. Deze is gedefinieerd als:

$$\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H} \quad (2.19)$$

Aangezien de energie rechtstreeks gelinkt is aan het aantal fotonen geeft de Poynting vector ook de richting aan waarin de fotonen stromen. De Poynting vector van het verstrooide veld staat afgebeeld in figuur 2.9.

Poynting vector van het verstrooide veld

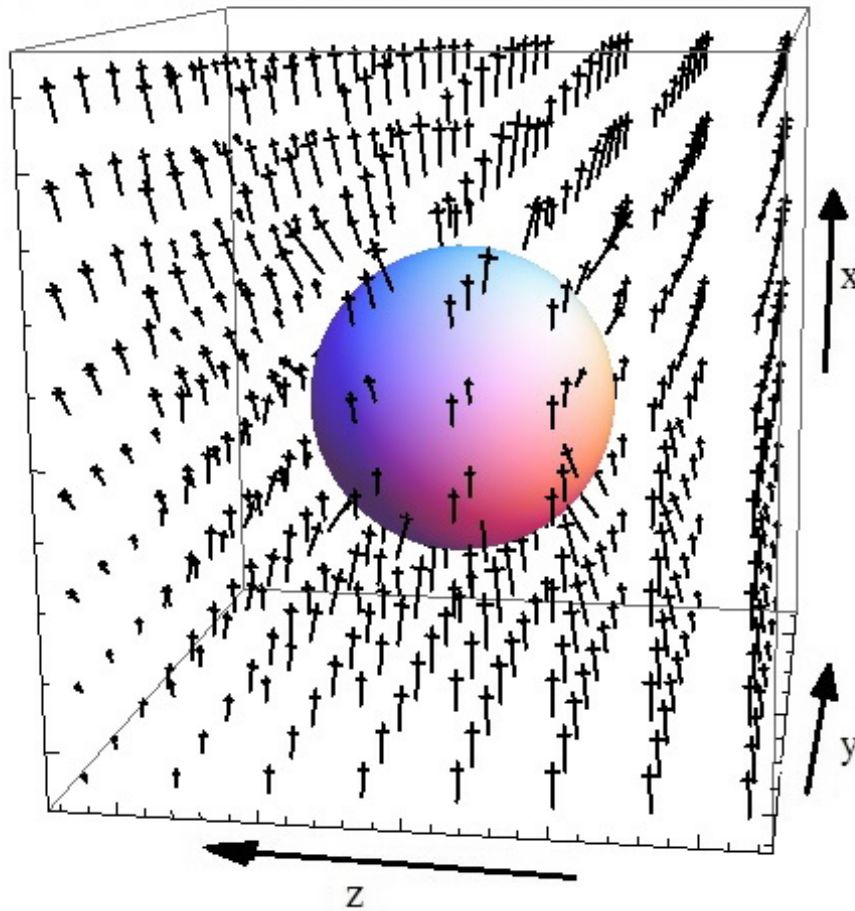


Figuur 2.9: De Poynting vector in een aantal punten rondom de nanoschil bij een pulsatie van 10^{15} Hz. Dit is enkel de Poynting vector van het verstrooide veld. Er is te zien hoe de energie rondom de nanoschil lijkt te wervelen.

2.3.1.5 Het totale veld

Neemt men zowel de Hankel- als de Besselfuncties mee, dan verkrijgt men het totale veld rondom de nanoschil zoals vermeld in vergelijkingen (2.11) en (2.12). Ook deze velden geven we weer voor een duidelijk beeld van de situatie. We gebruiken dezelfde parameters als hierboven. Het elektrisch veld is te zien in figuur 2.10 en de Poynting vector is te zien in figuur 2.11.

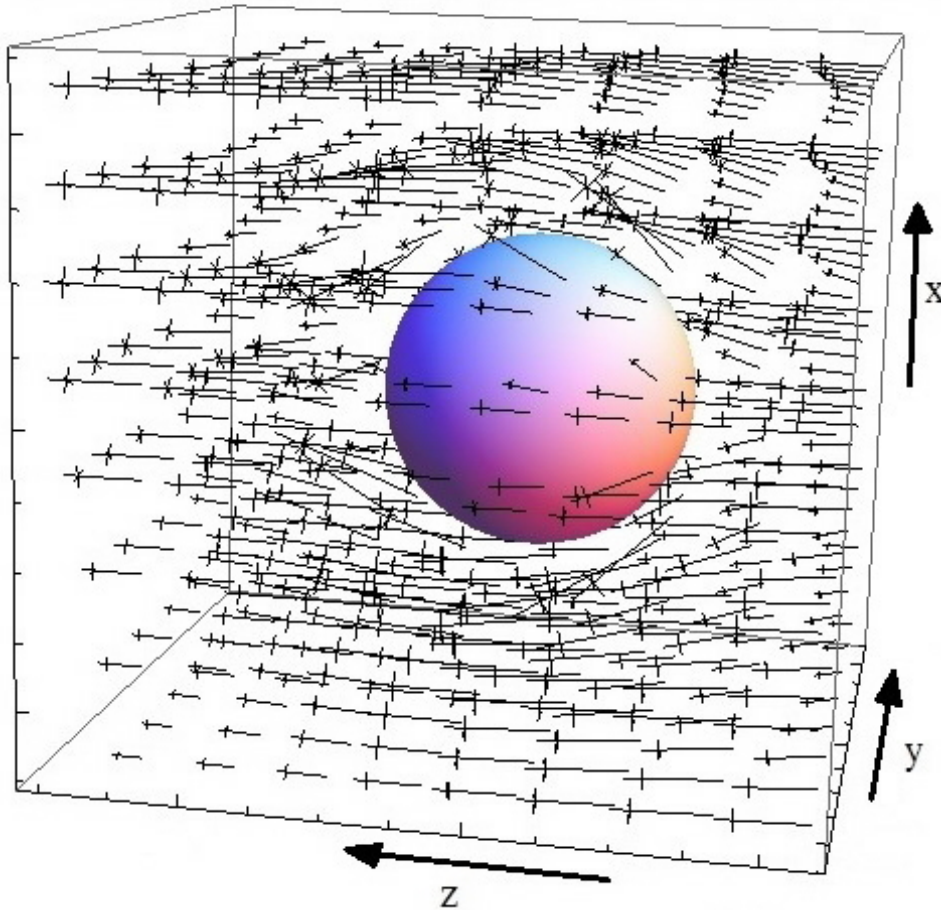
Het totaal elektrisch veld rondom de NS



Figuur 2.10: Het totaal elektrisch veld rondom de nanoschil bij een pulsatie van 10^{15} Hz.

Vooraf de figuur van de totale Poynting vector rondom de nanoschil geeft een zeer goede overeenkomst met wat men intuïtief verwacht. Zolang de nanoschil niet op resonantie zit zal ze slechts een kleine invloed uitoefenen op het elektromagnetisch veld dat passeert. En inderdaad kan men zien hoe de energiestroom, dewelke equivalent is met de fotonstroom, zich rondom de nanoschil beweegt. Eens men op een resonantie frequentie

Totale Poynting vector rond nanoschil



Figuur 2.11: De Poynting vector van het totale veld rondom de nanoschil bij een pulsatie van 10^{15} Hz. In deze niet-resonantie situatie is de energiestroom van de vlakke golf is te herkennen. De energie lijkt rondom de nanoschil te stromen.

gaat kijken is dit volledig anders. Dan gaat de nanoschil wel een grote invloed uitoefenen op de elektromagnetische golf.

Merk op dat het binnen het kader van het onderzoek dat men hier voor ogen heeft het eigenlijk niet noodzakelijk is deze resonantiefrequenties te berekenen en het veld rondom de nanoschil te bestuderen bij die frequenties. We zullen immers gebruik maken van alle frequenties van het zonlicht, ongeacht of ze een resonantie geven of niet.

Voordat we verder gaan is het belangrijk nog een opmerking te maken rondom de totale Poynting vector. Zo hebben we in het begin de opsplitsing gemaakt tussen de ongestoorde golf, die we met de Besselfuncties in verband brachten, en met de verstrooide golf, waarmee we de Hankelfuncties in verband brengen. Het totaal elektrisch en het magnetisch veld zijn eenvoudig de som van de termen van beide functies, maar als we naar de Poynting vector gaan kijken komt er een extra bijdrage bij. Bij de berekening van de Poynting vector zullen deze termen immers opmengen. We zullen termen krijgen die een combinatie zijn van Besselfuncties, de ongestoorde golf, en combinaties van Hankelfuncties, de verstrooide golf. Maar we zullen ook termen krijgen die combinaties vormen van Hankel en Besselfuncties! Ze zijn een interactie tussen de verstrooide golf en het ongestoorde veld.

2.3.2 De werkzame doorsnede

De verstrooiingstheorie stopt echter niet na de berekening van de velden van het systeem. Eens men deze velden heeft is het mogelijk om vele andere eigenschappen van het systeem te bestuderen. Eén voorbeeld hiervan is de werkzame doorsnede.

De werkzame doorsnede $Q(r, \omega)$ wordt gedefinieerd als het vermogen dat doorheen een sfeer rondom de nanoschil stroomt gedeeld door het ingezonden vermogen per oppervlak. Op deze manier verkrijgt men een door de ingezonden energieflex (het vermogen per oppervlak van de inkomende bundel) grootte die de eenheden van een oppervlak heeft. De interpretatie hiervan is dat men de nanoschil zou kunnen vervangen door een solied oppervlak met dezelfde grootte als de werkzame doorsnede. Elk foton dat op deze oppervlakte valt zal interageren met de nanoschil. De werkzame doorsnede kan worden uitgerekend met behulp van de Poynting vector.

Eerst berekenen we de energieflex door een boloppervlak rondom het gehele systeem. Dit geeft eigenlijk het verschil tussen de hoeveelheid energie die het oppervlak binnen stroomt en hoeveel er terug buiten stroomt. Door de Poynting vector te integreren overheen een sferisch oppervlak met straal r krijgt men de flux $\mathcal{F}_{l,m}^{opp}(r, \omega)$ doorheen het oppervlak:

$$\mathcal{F}_{l,m}^{opp}(r, \omega) = \int \vec{S}_{l,m}(\vec{r}, \omega) \cdot \vec{n} r^2 d\Omega. \quad (2.20)$$

Als men dit uitrekent voor $r > R_s$ zal men vinden dat alle onderdelen van de Poynting vector die afkomstig zijn van de vlakke golf zullen wegvallen. Wat intuïtief ook logisch is omdat men integreert over een bolvormig oppervlak. De vlakke golf zal hierbij evenveel insturen als er aan de andere kant van de bol terug uit komt. De totale energie doorheen een boloppervlak op $r \gg R_s$ en in de far-field¹ aanname $q_3 r \gg 1$ wordt gegeven door:

$$\lim_{q_3 r \gg 1} \left(\mathcal{F}_{l,m}^{opp}(\omega) \right) = \frac{k_3 |E_{0l}|^2}{q_3^2 8} \left[|a_{3l}^{el}|^2 + |a_{3l}^{mag}|^2 + \text{Re} \left(a_{3l}^{el} + a_{3l}^{mag} \right) \right]$$

De r afhankelijkheid is weggefallen vanwege het far-field regime en de daarbij horende limiet.

De factoren $\text{Re} \left(a_{3l}^{el} + a_{3l}^{mag} \right)$ zullen allemaal negatief zijn, in tegenstelling tot $|a_{3l}^{el}|^2 + |a_{3l}^{mag}|^2$. In absolute waarde zullen de factoren $\text{Re} \left(a_{3l}^{el} + a_{3l}^{mag} \right)$ echter groter zijn dan de factoren $|a_{3l}^{el}|^2 + |a_{3l}^{mag}|^2$ waardoor het geheel negatief is. Een negatieve $\mathcal{F}_{l,m}^{opp}(r, \omega)$ wil zeggen dat de energie naar binnen stroomt en verdwijnt in de nanoschil omdat in vergelijking (2.20) de normaal loodrecht op het boloppervlak naar buiten gericht is. Energie kan natuurlijk niet verdwijnen, maar wordt omgezet in andere vormen van energie, in dit geval warmte. Omdat deze flux geassocieerd wordt met met de omzetting in warmte zal deze term overeen komen met de absorptie van de nanoschil.

¹Het far-field regime wordt gedefinieerd als de regio waarin $r \gg \lambda$, met r de afstand tot aan de bron (in deze context de nanoschil) en λ de golflengte van het licht. Voor de nanoschillen komt dit neer op de eis dat: $q_3 r \gg 1$. Wiskundig gezien is dit de regio waarin het toegestaan is de Bessel- en Hankelfuncties te benaderen door middel van de asymptotische expansie in exponentiële en geometrische functies.

Om de werkzame doorsnede te berekenen is het nog nodig om de invallende energie weg te delen. Hiervoor berekent men de Poynting vector van de oorspronkelijke ingestuurde vlakke golf. Bovendien wordt de werkzame doorsnede gedefinieerd als de grootte van deze energiestroom ongeacht de richting. Daarom dat de werkzame doorsnede altijd een positieve grootte zal zijn. De werkzame doorsnede van de absorptie in het far-field regime wordt dan:

$$Q_{abs}(\omega) = \frac{-2\pi}{q_3^2} \sum_{l=1}^{\infty} (2l+1) \left[|a_{3l}^{el}|^2 + |a_{3l}^{mag}|^2 + \operatorname{Re} \left(a_{3l}^{el} + a_{3l}^{mag} \right) \right] \quad (2.21)$$

Analoog aan de redenering in Stratton [25] kunnen we ook hier een opsplitsing maken. Doet men namelijk dezelfde berekening opnieuw, maar enkel voor de Hankelfuncties, dan verkrijgt men de werkzame doorsnede voor de verstrooide fotonen:

$$Q_{scatt}(\omega) = \frac{2\pi}{q_3^2} \sum_{l=1}^{\infty} (2l+1) \left[|a_{3l}^{el}|^2 + |a_{3l}^{mag}|^2 \right] \quad (2.22)$$

Wat ook hetzelfde is als in referentie [9]. De energiestroom die hiermee overeen komt is wel positief en is dus van binnen naar buiten gericht en stroomt dus uit het boloppervlak. Uiteindelijk kunnen we besluiten dat de som van beide de totale werkzame doorsnede moet geven:

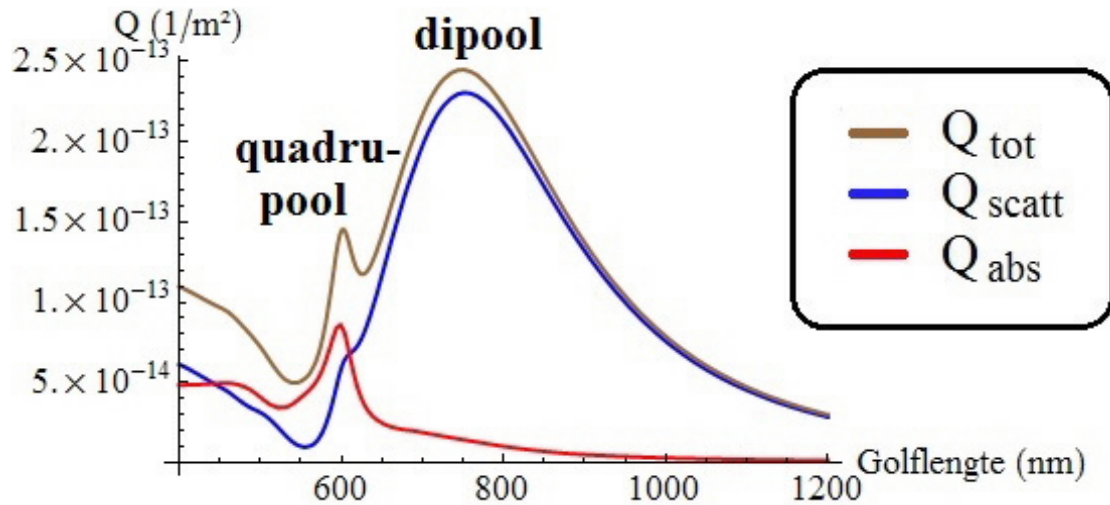
$$Q_{tot}(\omega) = \frac{-2\pi}{q_3^2} \sum_{l=1}^{\infty} (2l+1) \operatorname{Re} \left(a_{3l}^{el} + a_{3l}^{mag} \right) \quad (2.23)$$

Deze drie werkzame doorsneden, voor een nanoschil zoals deze beschreven staat in sectie 2.4, staat weergegeven in figuur 2.12.

Merk hierbij op dat de werkzame doorsnede van de absorptie klein is voor grotere golflengten. Dit wil zeggen dat de nanoschil minder licht zal absorberen dan verstrooien bij deze golflengten. Dit is een aanwijzing dat het concept van het nanoschil-zonnel systeem voordelen kan bieden ten opzichte van een alleenstaande zonnel. Het is immers belangrijk dat er zo weinig mogelijk energie geabsorbeerd worden. Geabsorbeerde energie is verloren energie.

Vergelijk dit met het AM1.5 zonnenspectrum uit figuur 1.11. Het belangrijkste deel van het zonnenspectrum voor de zonnel is het gebied tussen 400 en 1000 nm. Een groot deel van dit spectrum komt inderdaad overeen met het gebied waarin de werkzame doorsnede van de verstrooiing groot is en die van de absorptie klein. De overlap is echter nog niet ideaal, maar dankzij de afstelbaarheid van de nanoschil kan de werkzame doorsnede gemanipuleerd worden zodat een betere overlap verkregen wordt. Het is de gevoeligheid van de nanoschillen die dit mogelijk maakt. Dat is de reden waarom de nanoschilstructuur verkozen is boven andere nanostructuren.

Werkzame doorsnede van de nanoschil



Figuur 2.12: De werkzame doorsnede van een nanoschil met de voorbeeldparameters $R_c = 96$ nm, $R_s = 116$ nm. De pieken representeren de resonanties.

2.4 De gebruikte gegevens

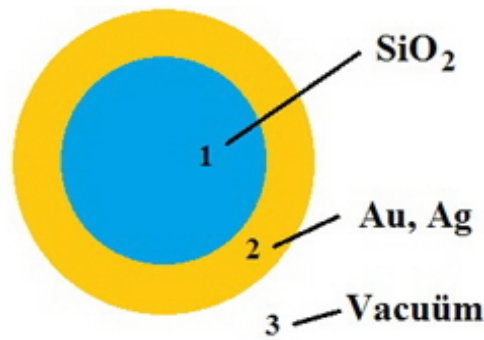
Het is reeds vermeld dat het systeem van de nanoschil bestaat uit drie regio's. Deze drie regio's stellen elk een ander materiaal voor, met andere parameters en andere eigenschappen. Op figuur 2.13 staan nogmaals kort deze regio's weergegeven en hun desbetreffende materiaalkeuzes.

Regio 3 Het eenvoudigste van de drie is de buitenste regio. Deze wordt als vacuüm aanzien. Dit wil zeggen dat $\epsilon_3 = 1$, $\mu_3 = 1$ en dus $k_3 = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} = 2.6544 \times 10^{-3} \frac{\text{Å}}{\text{V}}$. De reciproke golfvector q_3 is dan (voor ϵ_0 en μ_0 zie vergelijkingen (A.13) en (A.14)):

$$q_3 = \omega \sqrt{\epsilon_3 \epsilon_0 \mu_3 \mu_0} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon_3 \mu_3} \quad (2.24)$$

met ω de pulsatie van het licht. Alle materialen zijn homogeen en isotroop verondersteld werden.

Regio 2 De metalen schil is de tweede regio. De schildikte ligt tussen de 5 en de 50 nm, maar kan arbitrair dik gemaakt worden. Vaak bestaat deze metalen laag uit goud of zilver. Dit komt enerzijds vanwege de goede geleiding die beide metalen voorzien en anderzijds vanwege de goede biocompatibiliteit voor biofysische toepassingen zoals biosensoren en labeling.

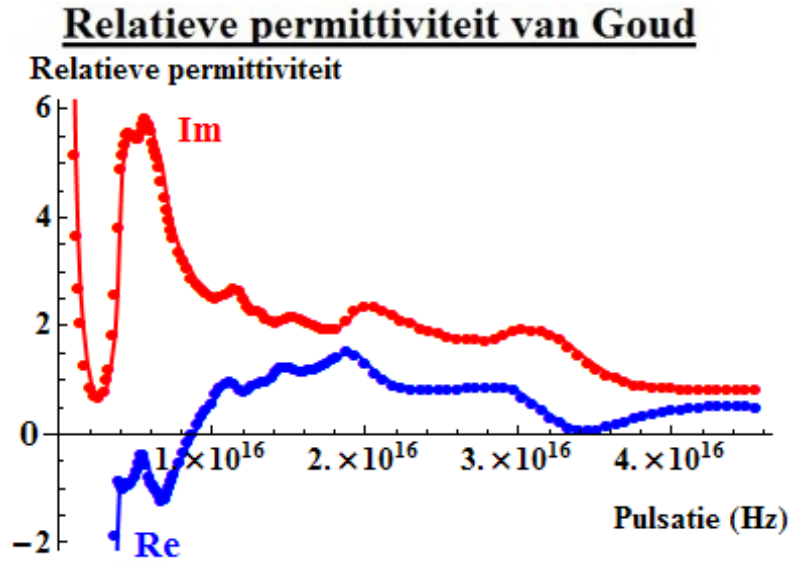


Figuur 2.13: Schematische weergave van de drie regio's van de nanoschil. Regio 1 staat voor de kern en is vaak een diëlectricum (in dit geval SiO_2). Regio 2 is de schil zelf en is van metaal zoals bijvoorbeeld goud of zilver. Regio 3 is het medium rondom de nanoschil. Deze zal vaak als vacuüm aanzien worden.

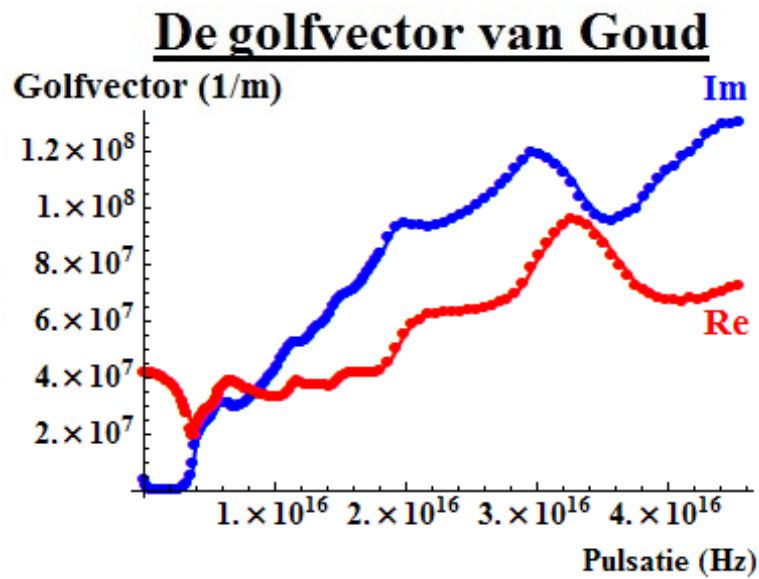
In eerste instantie zullen we een gouden laag beschouwen. De relatieve permeabiliteit μ wordt gelijk gesteld aan 1. De permittiviteit ε is afhankelijk van de frequentie van het ingestuurde licht. De complexe permittiviteit van goud zoals deze gebruikt is in de berekeningen staat weergegeven in figuur 2.14 [24]. De waarden tussen de punten uit de tabellen zijn geïnterpoleerd. De reciproke golfvector q_2 staat afgebeeld in figuur 2.15 en werd berekend analoog aan vergelijking (2.24).

Regio 1 De kern van de nanoschil is gemaakt van SiO_2 . Ook hiervoor kunnen we de gegevens gaan opzoeken. We gebruiken dat $\mu_1 = 1$. De relatieve permittiviteit ε_3 staat weergegeven in figuur 2.16. Merk op dat hierbij bewust voor een lagere interpolatieorde is gekozen omdat de standaard interpolatieorde onbetrouwbare oscillaties vertoonde.

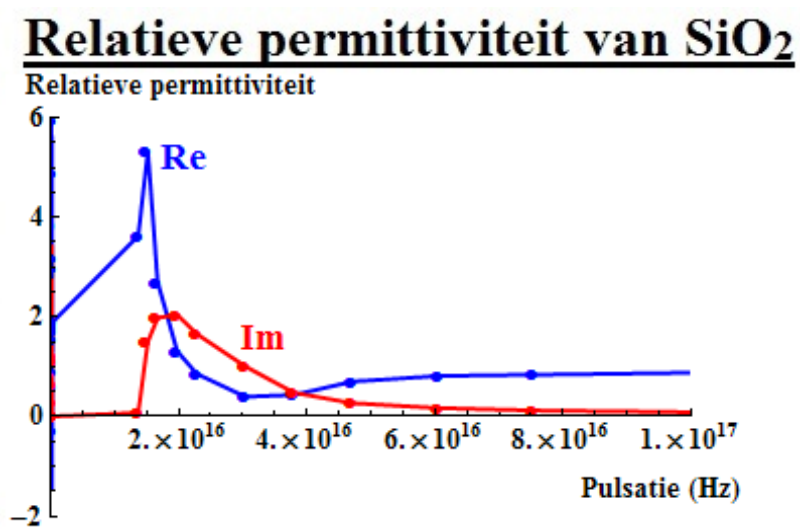
Verder is het nodig te weten dat, tenzij anders vermeld, de figuren steeds zijn gemaakt voor een nanoschil met bovenstaande data en met stralen: $R_c = 96$ nm en $R_s = 116$ nm. De schil is dus slechts 20 nm dik. Ook werd er in dit hoofdstuk standaard gekozen voor een pulsatie van 10^{15} Hz (ongeveer 1880 nm). Deze pulsatie ligt nog steeds in het regime waarbij de nanoschil een dipool respons vertoont. Het grootste nadeel aan al deze waarden is dat het bulk waarden zijn. In de literatuur zijn immers geen waarden voor nanodeeltjes terug te vinden. Het is best plausibel dat deze waarden niet meer geldig zijn op nanometerschaal. Dit is een punt waarop de afleiding nog kan verfijnd worden.



Figuur 2.14: De complexe relative permittiviteit van goud. Bron: CRC handbook of Chemistry and Physics [24].



Figuur 2.15: Het imaginair (rood) en reëel (blauw) deel van de reciproke golfvector q_2 voor goud.



Figuur 2.16: Het reëel (blauw) en imaginair (rood) deel van de relatieve permittiviteit van SiO₂ [24].

Hoofdstuk 3

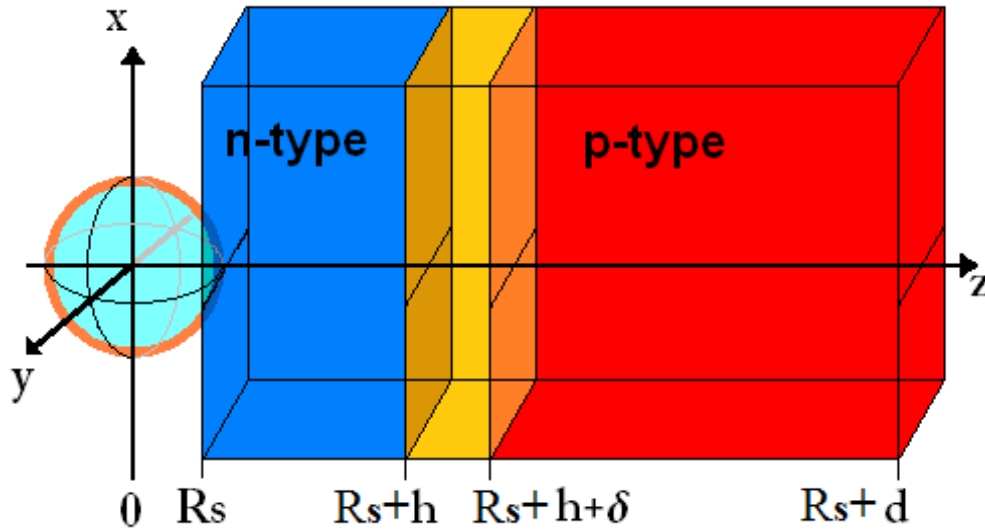
De combinatie

3.1 Overzicht

In de vorige twee hoofdstukken hebben we gekeken naar de zonnecel en de nanoschil als aparte structuren. Nu wordt het tijd de structuren te combineren om het beoogde doel te bereiken: nagaan wat de invloed is van nanoschillen op het rendement van een zonnecel. De connectie tussen de twee structuren is de generatieterm. Deze term geeft immers het verband tussen de ingestuurde fotonen en de creatie van ladingsdragers. Dit verband is analoog aan de uitleg in sectie 1.5.4 op pagina 40.

In de generatieterm zullen we rekening houden met de ongestoorde en de verstrooide golf via de werkzame doorsnedes uit de berekening van de nanoschil. Behalve R_c en R_s zullen we nog een extra parameter aan het systeem toevoegen omdat we meerdere nanoschillen op de zonnecel zullen beschouwen. We gebruiken de parameter n_{NS} die het aantal nanoschillen per oppervlakte-eenheid weergeeft. Hierbij nemen we aan dat de verschillende nanoschillen elkaar niet zullen beïnvloeden.

Zowel in de berekeningen omtrent de nanoschil als in de berekeningen rond de zonnecel werd een keuze gemaakt voor de positie van de oorsprong en de oriëntatie van het assenstelsel. De keuze was echter anders in elke situatie. Bij de zonnecel is de oorsprong aan het oppervlak van de zonnecel gelegd waar het licht op invalt. Bij de nanoschillen lag de oorsprong in het centrum van de nanoschil. De voorkeur wordt gegeven aan het assenstelsel dat ook bij de nanoschillen is gebruikt. Het systeem en de gekozen conventies staan weergegeven op figuur 3.1.



Figuur 3.1: Schematische voorstelling van de nanoschil-zonnecel structuur samen met de keuze van het assenstelsel. De oorsprong wordt in het centrum van de nanoschil gelegd. Merk op dat het oppervlak van de zonnecel op positie $z = R_s$ komt te liggen.

3.2 De generatieterm

We gaan nu de generatieterm berekenen. De generatieterm is de onbekende functie $G_{n,p} = g(z, \omega)$ uit vergelijkingen (1.49) en geeft het aantal vrije ladingsdragers dat voor een bepaalde pulsatie ω op een bepaalde diepte in de zonnecel per volume-element en per seconde wordt gegenereerd (eenheden $\frac{\#}{\text{m}^3 \text{s}}$). We nemen aan dat elk geabsorbeerd foton een gat-elektron paar vrij maakt en dus een vrije ladingsdrager creëert. We moeten dus berekenen hoeveel fotonen er per volume-elementje en per seconde op een bepaalde diepte in de zonnecel worden geabsorbeerd.

Er zijn twee soorten fotonen die kunnen geabsorbeerd worden in de zonnecel. Ten eerste zijn er de ongestoorde fotonen. Dit zijn fotonen van de inkomende vlakke golf die geen invloed ondervinden van de nanoschil. Ze zullen zich dus gedragen alsof er geen nanoschil aanwezig is. Ten tweede zijn er de verstrooide fotonen. Dit zijn fotonen die de invloed van de nanoschil wel voelen en daardoor verstrooid worden.

3.2.1 De ongestoorde fotonen

De ongestoorde fotonen ondervinden geen invloed van de nanoschil en blijven dus een vlakke golf karakter houden. Al deze fotonen propageren evenwijdig met de z -as. De absorptie voldoet aan de Beer-Lambert wet zoals deze in vergelijking (1.93) beschreven staat. De generatieterm voor de ongestoorde fotonen is dus analoog aan deze van de zonnecel zonder nanoschillen:

$$g(z, \omega) = \dot{n}_0(\omega) \alpha(\omega) e^{-\alpha(\omega)z}, \quad (3.1)$$

maar het aantal initiële fotonen $\dot{n}_0(\omega)$ is nu anders. Er zullen immers fotonen door de nanoschillen geabsorbeerd zijn uit de bundel of verstrooid worden.

Beschouwen we een dichtheid van n_{NS} nanoschillen per oppervlakte-eenheid op de zonnecel dan zal het aantal geabsorbeerde fotonen door de nanoschillen overeen komen met $n_{NS}Q_{abs}(\omega)\dot{n}_0(\omega)$. De factor $Q_{abs}(\omega)$ is de werkzame doorsnede zoals deze uitgerekend werd in hoofdstuk 2. Deze werkzame doorsnede staat gegeven in vergelijking (2.21).

De fractie aan fotonen die verstrooid wordt is gegeven door $n_{NS}Q_{scatt}(\omega)\dot{n}_0(\omega)$, waarbij $Q_{scatt}(\omega)$ staat gegeven in vergelijking (2.22). De som van deze twee geeft de totale fractie aan door nanoschillen verwijderde fotonen. De generatieterm wordt dus:

$$g_{ongestoord}(z, \omega) = (1 - n_{NS}Q_{tot}(\omega))\dot{n}_0(\omega) \alpha(\omega) e^{-\alpha(\omega)z}. \quad (3.2)$$

Hierbij is $Q_{tot} = Q_{scatt} + Q_{abs}$ en staat gegeven in vergelijking (2.23).

3.2.2 De verstrooide fotonen

De behandeling van de verstrooide fotonen is iets ingewikkelder. We zullen aannemen dat de verstrooide fotonen radiaal vanuit de nanoschil wegpropageren. Hierdoor begaan we een onnauwkeurigheid. Deze onnauwkeurigheid zou kunnen vermeden worden door rekening te houden met de (near-field) Poynting vector. De Poynting vector geeft immers de stroming van de energie en dus ook van de fotonen weer. De berekeningen zouden echter veel ingewikkelder worden omdat het achterhalen van de weglengte van een foton dan alles behalve triviaal wordt. Deze weglengte is nodig om de absorptie correct in rekening te kunnen brengen.

Tevens zullen we ook aannemen dat in alle richtingen evenveel fotonen worden verstrooid. Dit wil zeggen dat als er $Q_{scatt}\dot{n}_0$ fotonen per seconde worden verstrooid er $\frac{Q_{scatt}\dot{n}_0}{4\pi r^2}$ fotonen per seconde doorheen een eenheidsoppervlak op een sfeer met straal r gaan. Ook dit is een vereenvoudigde aanname. In de realiteit zullen de fotonen niet gelijkmatig over alle richtingen verstrooid worden. In plaats daarvan zou men rekening moeten houden met de symmetrie van het veld. Bij frequenties die in het gebied van de dipoolresonantie liggen zal het veld een haltervormige symmetrie hebben. Deze symmetriën zitten wiskundig vervat in de bolfuncties.

Merk op dat we vanaf nu expliciet moeten rekening houden met de richting waarin de fotonen stromen omdat het probleem 3 dimensionaal is. Definieer daarom de vector

$\vec{n}(\vec{r}, \omega)$ het aantal fotonen dat per seconde en per oppervlakte-eenheid langsheen een welbepaalde richting stromen (met de eenheden $\frac{\#}{\text{m}^2 \text{s}}$). Indien we de absorptie van de zonnecel even buiten beschouwing laten kunnen we nu het aantal verstrooide fotonen dat op een bepaalde plaats langs komt door verstrooiing aan 1 nanoschil beschrijven met (in bolcoördinaten (r, θ, φ) , voor $r > R_s$):

$$\vec{n}(\vec{r}, \omega) = Q_{scatt}(\omega) \dot{n}_0(\omega) \frac{1}{4\pi r^2} \vec{e}_r \quad (3.3)$$

3.2.2.1 Met absorptie

Brengen we de absorptie in rekening dan weten we dat het aantal fotonen exponentieel zal dalen met de afgelegde weg. Het aantal overblijvende fotonen is:

$$\vec{n}(\vec{r}, \omega) = Q_{scatt}(\omega) \dot{n}_0(\omega) \frac{e^{-\alpha f(\vec{r})}}{4\pi r^2} \vec{e}_r, \quad (3.4)$$

met $f(\vec{r})$ de afgelegde afstand in het medium. Beschouwen we de nanoschil als een puntbron op positie $(0, 0, 0)$ en nemen we aan dat het absorberend medium de hele ruimte vult, dan is de afgelegde afstand in cilindercoördinaten (ρ, φ, z) :

$$f(\vec{r}) = \sqrt{\rho^2 + z^2}, \quad (3.5)$$

zodat:

$$\vec{n}(\vec{r}, \omega) = Q_{scatt}(\omega) \dot{n}_0(\omega) \frac{e^{-\alpha \sqrt{\rho^2 + z^2}}}{4\pi (\rho^2 + z^2)^{3/2}} (\rho \vec{e}_\rho + z \vec{e}_z). \quad (3.6)$$

Hierbij is er ook gebruik gemaakt van de transformatie van bol- naar cilindercoördinaten:

$$\vec{e}_r = \sin(\theta) \vec{e}_\rho + \cos(\theta) \vec{e}_z = \frac{\rho}{r} \vec{e}_\rho + \frac{z}{r} \vec{e}_z.$$

3.2.2.2 Uitmiddeling over het vlak

We weten nu het aantal fotonen dat in een bepaalde richting doorheen het materiaal stroomt op elk punt in de ruimte. We beperken ons echter tot de absorptie in de diepte omdat ook de microscopische studie van de zonnecel enkel in de diepte gedaan is. We gaan dus een soort uitmiddeling doen. We zullen berekenen hoeveel energie er doorheen een vlak loodrecht op de z -as gaat. Berekenen we dit voor een vlak op positie z en voor een vlak op positie $z + dz$, dan geeft het verschil tussen de twee het aantal fotonen dat in deze laag geabsorbeerd zijn. In de exacte positie in de x - en y -richting waar de absorptie plaats vindt zijn we niet geïnteresseerd. Voorlopig concentreren we ons enkel op de z -richting. We zullen dan ook aannemen dat de zonnecel zich oneindig uitstrekt in x - en y -richting.

De uitmiddeling geeft ons het aantal fotonen dat in een laag met dikte dz op een diepte z zullen geabsorbeerd worden door de verstrooiing aan 1 nanoschil. Dit geeft een soort gemiddelde bijdrage per nanoschil. We zullen dus ook vermenigvuldigen met de dichtheid aan nanoschillen op het oppervlak van de zonnecel.

We rekenen de uitmiddeling eerst apart uit in cilindercoördinaten:

$$int(z) = \iint_S \frac{e^{-\alpha\sqrt{\rho^2+z^2}}}{4\pi(\rho^2+z^2)^{3/2}} (\rho\vec{e}_\rho + z\vec{e}_z) \cdot \vec{n} \rho d\rho d\varphi.$$

De factor \vec{n} vertelt ons dat we enkel de componenten loodrecht op het vlak evenwijdig met het zonneloppervlak nodig hebben. We zijn immers enkel geïnteresseerd in de fotonflux door een vlak loodrecht op $\vec{n} = \vec{e}_z$. Er blijft dan over:

$$int(z) = \frac{z}{4\pi} \int_0^\infty \frac{e^{-\alpha\sqrt{\rho^2+z^2}}}{(\rho^2+z^2)^{3/2}} \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi.$$

De integraal over de hoek φ geeft een factor 2π . De integraal over ρ is iets ingewikkelder. Nemen we de substitutie $u(\rho) = \sqrt{\rho^2+z^2}$, dan verschijnt er:

$$int(z) = \frac{1}{2} z \int_z^\infty \frac{1}{u^2} e^{-\alpha u} du.$$

We brengen nu ook de absorptie in rekening door het verschil tussen twee opeenvolgende lagen z en $z+dz$ te berekenen (we doen eigenlijk wat in vergelijking (1.90) staat):

$$\begin{aligned} & int(z+dz) - int(z) \\ &= \frac{1}{2} \left[(z+dz) \int_{z+dz}^\infty \frac{e^{-\alpha u}}{u^2} du - z \int_z^\infty \frac{e^{-\alpha u}}{u^2} du \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[z \left(\int_{z+dz}^\infty \frac{e^{-\alpha u}}{u^2} du - \int_z^\infty \frac{e^{-\alpha u}}{u^2} du \right) + dz \int_{z+dz}^\infty \frac{e^{-\alpha u}}{u^2} du \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[-z \int_z^{z+dz} \frac{e^{-\alpha u}}{u^2} du + dz \int_{z+dz}^\infty \frac{e^{-\alpha u}}{u^2} du \right]. \end{aligned}$$

We benaderen de tweede term tot op eerste orde door de ondergrens op z te nemen. We rekenen beide integralen uit. De eerste wordt:

$$z \int_z^{z+dz} \frac{e^{-\alpha u}}{u^2} du = z \left(dz \frac{1}{z^2} e^{-\alpha z} \right) = \frac{dz}{z} e^{-\alpha z}$$

omdat voor een kleine dz de integraal kan benaderd worden als het oppervlak van een vierkant met breedte dz en hoogte $\frac{e^{-\alpha z}}{z^2}$.

De tweede integraal is:

$$\int_z^\infty \frac{e^{-\alpha u}}{u^2} du = \frac{1}{z} (e^{-z\alpha} - \alpha z \Gamma(0, \alpha z)).$$

Hierbij is gebruik gemaakt van de Plica functie (de incomplete gamma functie):

$$\Gamma(z, a) = \int_a^\infty t^{z-1} e^{-t} dt. \quad (3.7)$$

en dus:

$$\begin{aligned}
& \text{int}(z + dz) - \text{int}(z) \\
&= \frac{1}{2} \left[\frac{-dz}{z} e^{-\alpha z} + \frac{dz}{z} (e^{-z\alpha} - \alpha z \Gamma(0, \alpha z)) \right] \\
&= \frac{1}{2} [-dz\alpha \Gamma(0, \alpha z)].
\end{aligned}$$

Hiermee hebben we de gemiddelde bijdrage van de nanoschil berekend en kunnen we nu de generatieterm uitrekenen. We voegen ook de term n_{NS} toe die de oppervlakedichtheid aan elektronen in rekening brengt:

$$\begin{aligned}
-g_{scatt}(z, \omega) dz &= \frac{n_{NS} Q_{scatt} \dot{n}_0(\omega)}{2} [-dz\alpha \Gamma(0, \alpha z)] \\
\boxed{g_{scatt}(z, \omega) &= \frac{n_{NS} Q_{scatt} \dot{n}_0(\omega)}{2} \alpha \Gamma(0, \alpha z)}. \tag{3.8}
\end{aligned}$$

3.2.3 De totale generatieterm

De totale generatieterm is nu:

$$\begin{aligned}
g(z, \omega) &= g_{door}(z, \omega) + g_{scatt}(z, \omega) \\
&= (1 - n_{NS} Q_{tot}) \dot{n}_0(\omega) \alpha e^{-\alpha(z-z_0)} + \frac{n_{NS} Q_{scatt} \dot{n}_0(\omega)}{2} \alpha \Gamma(0, \alpha z).
\end{aligned}$$

We zijn echter nog 1 factor vergeten: de reflectantie. Deze voegen we nu toe en is hetzelfde voor beide bijdragen. De totale afgeschatte generatieterm is:

$$\boxed{g(z, \omega) = (1 - R) \dot{n}_0(\omega) \alpha \left[(1 - n_{NS} Q_{tot}) e^{-\alpha(z-z_0)} + \frac{n_{NS} Q_{scatt}}{2} \Gamma(0, \alpha z) \right]}. \tag{3.9}$$

Ter controle stellen we $n_{NS} = 0$. De generatieterm wordt dan:

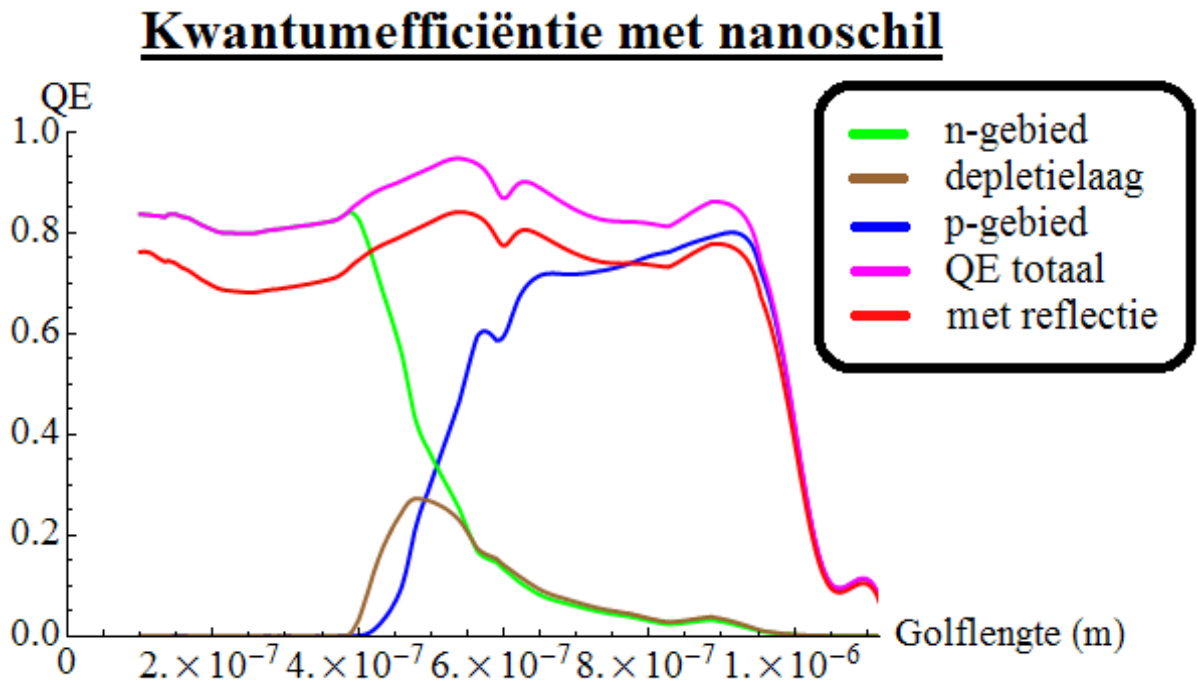
$$g(z, \omega) = (1 - R) \dot{n}_0(\omega) \alpha e^{-\alpha(z-z_0)}$$

en geeft hetzelfde resultaat als de generatieterm voor een zonnelcel zonder nanoschillen (vergelijking (1.93)).

3.3 Het rendement van het nanoschil-zonnecel systeem

Gebruik makend van de generatieterm worden de transportvergelijkingen opgelost en de kwantumefficiëntie van het systeem uitgerekend. Dit gebeurt door vergelijking (3.9) in vergelijkingen (1.86), (1.88) en (1.89) te steken.

Analoog aan figuur 1.23, is het ook hier mogelijk de kwantumefficiëntie weer te geven. Voor de voorbeeldafmetingen $R_c = 96$ nm en $R_s = 116$ nm en een verdeling van $n_{NS} = 1/\mu\text{m}^2$ staat de kwantumefficiëntie van de zonnecel met nanoschil weergegeven in figuur 3.2.



Figuur 3.2: De kwantumefficiëntie voor het nanoschil-zonnecel systeem voor een nanoschil met de afmetingen ($R_c = 96$ nm, $R_s = 116$ nm) en een spreiding van 1 nanoschil per μm^2 .

Gebruik makend van deze kwantumefficiëntie kan het rendement van het nanoschil-zonnecel systeem worden uitgerekend door middel van vergelijking (1.102). Voor de voorbeeldafmetingen is het rendement:

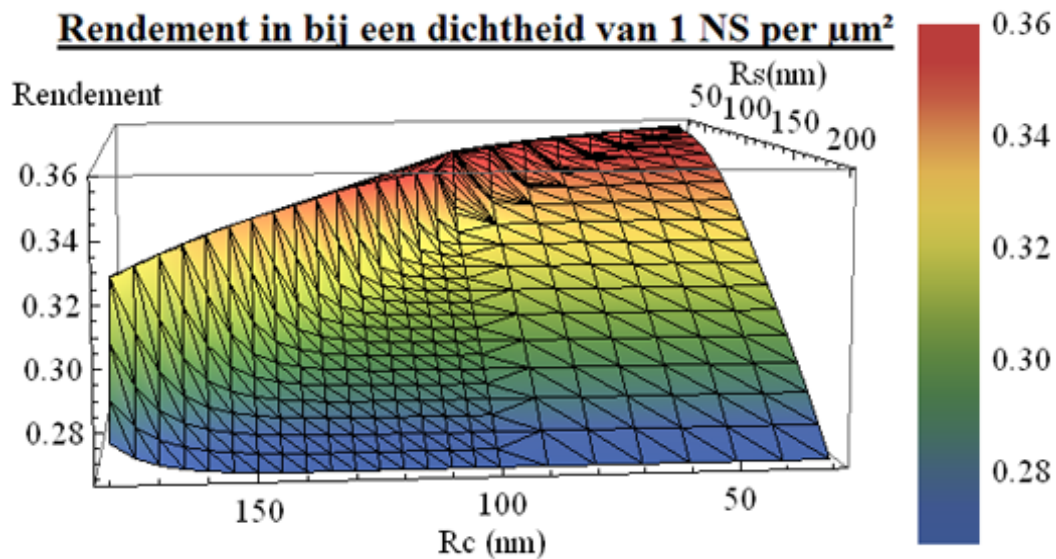
$$\epsilon = 32.9\%. \quad (3.10)$$

3.4 Optimalisatie

Nu de theorie op punt staat wordt het tijd om de parameters van het systeem te variëren. Er zijn een heel aantal parameters die gevarieerd kunnen worden: de straal van de kern R_c , de straal van de schil R_s , de dichtheid aan nanoschillen op de zonnecel n_{NS} en het materiaal dat voor de verschillende regio's van de nanoschil gebruikt wordt.

3.4.1 Bij verschillende stralen van de nanoschil

We beginnen met de meest voor de hand liggende parameters: R_c en R_s . De kern van de nanoschil is SiO_2 , de schil is Au en de omgeving is vacuüm. Laten we de stralen van de nanoschil variëren, dan kunnen we een plot maken van het rendement bij verschillende stralen. Dit staat afgebeeld in figuur 3.3.



Figuur 3.3: Het rendement van de nanoschil-zonnecel combinatie bij een dekking $n_{NS} = 1/\mu\text{m}^2$ met gouden nanoschillen van verschillende kern-straal R_c en schil-straal R_s .

Het maximale rendement dat voor dit systeem werd gevonden was:

$$\epsilon = 35.81\% \quad (3.11)$$

bij een nanoschil met ($R_c = 30 \text{ nm}$, $R_s = 31 \text{ nm}$). Een belangrijke opmerking is dat een nanoschil met een schildikte van 1 nm met de hedendaagse technologie nog niet gemaakt kan worden.

Herinner vergelijking (1.103) die vertelde dat het rendement zonder nanoschil 35.82% was. Het gevonden rendement met nanoschillen ligt dus lager dan het rendement zonder nanoschil. Het verschil is echter minimaal en niet voldoende om echt conclusies uit te trekken gezien de gemaakte benaderingen. Er is dus meer onderzoek nodig.

Tabel 3.1: Overzicht van de maximale rendementen verkregen bij een dichtheid n_{NS} nanoschillen op het oppervlak van een Si zonnecel.

n_{NS} ($1/\mu\text{m}^2$)	ϵ	R_s (nm)	R_s (nm)
0	35.816%	/	/
0.1	35.815%	40	41
1	35.811%	30	31
10	35.763%	30	31

3.4.2 Bij verschillende dichtheden aan nanoschillen

We doen nu eenzelfde studie voor een hogere dichtheid aan nanoschillen. Uit persoonlijke communicatie met personen van IMEC hebben we besloten dat een concentratie van 10 nanoschillen per μm^2 de haalbare limiet is met de hedendaagse depositie technieken voor nanoschillen met een diameter van ongeveer 100 nm [3]. Voor hogere dichtheden bestaat de kans dat de nanoschillen elkaar gaan raken. Dit brengt enkele complicaties met zich mee. Zo zal goud van nature met zichzelf reageren waardoor de deeltjes zullen agglomereren en de eigenschappen zullen aangepast worden. Maar ook twee nanoschillen die elkaar niet raken, maar wel dicht in de buurt van elkaar liggen zullen met elkaar reageren. Zo'n toestand waarin twee nanoschillen dicht bij elkaar in de buurt liggen, maar niet raken, en met elkaar intrageren noemt men een dimeer. Dimeren hebben de eigenschap een zogenoemde 'hotzone' te creëren tussen de twee nanoschillen in. In deze 'hotzone' vindt een concentratie van het licht plaats. Dimeren op zich hebben zeer nuttige toepassingen, ook in zonnecellen, maar vallen niet binnen het bereik van deze thesis.

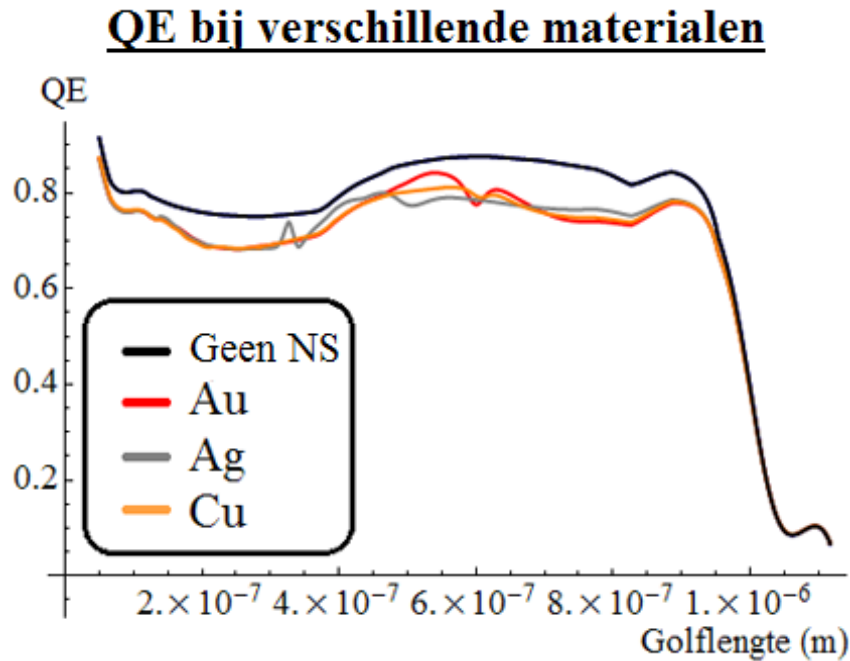
Er zijn berekeningen gedaan met $n_{NS} = 10/\mu\text{m}^2$ en $n_{NS} = 0.1/\mu\text{m}^2$. De maximale rendementen bij al deze waarden staan weergegeven in tabel 3.1.

3.4.3 Bij verschillende materiaalkeuzes

Het is ook mogelijk een ander metaal te kiezen voor de nanoschil. Elk metaal zal immers een andere werkzame doorsnede hebben bij dezelfde nanoschil parameters. Afhankelijk van de werkzame doorsnede zal het metaal zich op een andere manier gedragen ten opzichte van het licht dat met die frequentie wordt ingestuurd. Daarom kan een verandering van het materiaal een andere respons geven aan de nanoschil. Met name de verhouding tussen de verstrooiing en de absorptie is een belangrijke factor in dit gegeven.

Nemen we een ander materiaal voor de schil van de nanoschil, dan zal de kwantum-efficiëntie veranderen. De QE voor goud, zilver en koper staan afgebeeld in figuur 3.4. Hierbij is al wel rekening gehouden met de reflectie van het oppervlak. De waarden van de permittiviteit voor de verschillende materialen staan opgelijst in het CRC handboek [24].

We merken op deze figuur dat er eigenlijk toch niet zoveel verschil is in de QE door een verandering van het materiaal. We kunnen wel opmerken dat de gouden nanoschillen een



Figuur 3.4: De kwantumefficiëntie van het nanoschil-zonnecel systeem bij verschillende schil-materialen. De zwarte curve geeft de QE zonder nanoschillen. De rode, grijze en oranje curves geven respectievelijk de QE voor gouden, zilveren en koperen nanoschillen. Deze figuur is gemaakt voor de voorbeeldparameters: $R_c = 96$ nm, $R_s = 116$ nm en $n_{NS} = 1/\mu\text{m}^2$.

iets hogere QE hebben voor licht met een golflengte van 600 nm, terwijl zilver voordeliger zal zijn voor licht rondom 450 à 500 nm.

3.4.4 De optimale nanoschil

Natuurlijk is het mogelijk om steeds andere waarden voor de verschillende parameters te gebruiken en telkens het rendement van het systeem te berekenen hopen zo ooit het perfecte systeem te vinden. Er zijn echter intelligentere manieren om te zoeken naar het optimale systeem dat het hoogste rendement geeft. Zo zijn er 2 ingrediënten die belangrijk zijn in de zoektocht naar de beste nanoschil: de fractie aan verstrooide en ongestoorde fotonen én de bijdrage aan de kwantumefficiëntie van elk van deze twee. We leggen deze twee zeer verschillende concepten kort uit:

1. De fractie aan verstrooide en ongestoorde fotonen. De vraag is: indien we N fotonen op de nanoschil insturen, hoeveel daarvan zullen verstrooid worden en welke fractie zal ongestoord doorgaan. Dit kunnen we berekenen door middel van

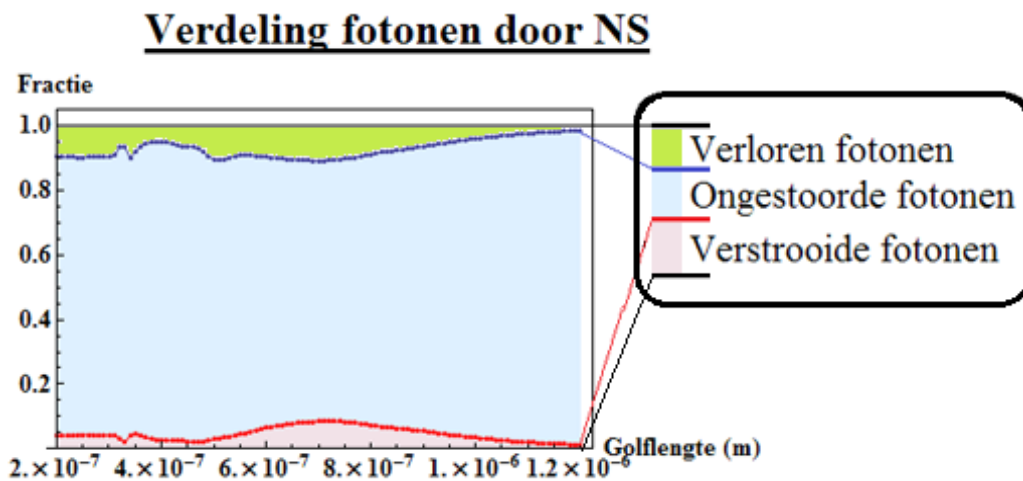
de werkzame doorsnede:

$$F_{ongestoord} = (1 - n_{NS}Q_{tot})$$

$$F_{scatt} = \frac{n_{NS}Q_{scatt}}{2}$$

De factor $\frac{1}{2}$ in de fractie aan verstrooide fotonen is gevolg van de isotrope benadering van het medium. Deze factor zegt dat slechts de helft van de verstrooide fotonen naar de zonnecel toe verstrooien. De andere helft zal terugverstrooien en zullen niet in de zonnecel terecht komen. De factor $\frac{1}{2}$ was het gevolg van de integraal over de ruimte en is reeds terug te vinden in vergelijking (3.8). In een niet isotrope benadering zou deze factor kunnen veranderen. Nog andere methoden om deze factor te veranderen staan in sectie 4.2 besproken.

De fotonen die geen deel uitmaken van F_{scatt} of $F_{ongestoord}$ zullen verloren zijn door absorptie of door terugverstrooiing. Deze fracties veranderen afhankelijk van de parameters van de nanoschil. De fracties staan afgebeeld in figuur 3.5 voor een zilveren nanoschil met de voorbeeldparameters: $R_c = 96$ nm, $R_s = 116$ nm en $n_{NS} = 1/\mu\text{m}^2$. Op deze figuur kunnen we zien dat slechts een zeer kleine fractie

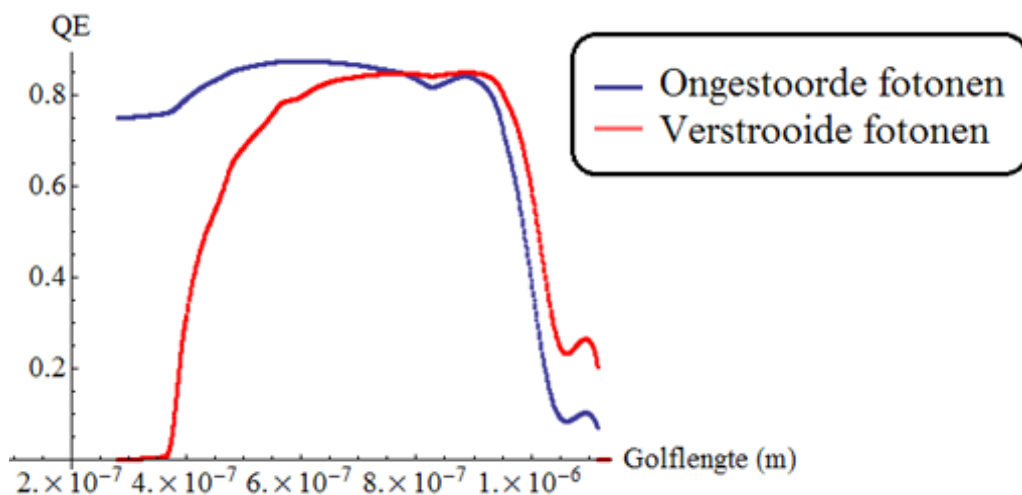


Figuur 3.5: De verdeling van de fotonen na interactie met de nanoschil. De rode regio duidt op de fractie aan fotonen die verstrooid wordt naar de zonnecel toe, de blauwe regio duidt op de fractie fotonen die ongestoord doorgaat en het groene gebied zijn de overgebleven fotonen die geabsorbeerd of terugverstrooid worden. Deze figuur is berekend voor een zilveren nanoschil met de voorbeeldparameters: $R_c = 96$ nm, $R_s = 116$ nm en $n_{NS} = 1/\mu\text{m}^2$.

van de fotonen verstrooid wordt (de rode regio). Gelukkig is ook de fractie aan verloren fotonen, door absorptie of door terugverstrooiing weg van de zonnecel, zeer klein (de groene regio). Het grootste deel van de fotonen zullen dus geen invloed ondervinden van de nanoschil en ongestoord verder gaan.

2. De bijdrage van de verstrooide en de ongestoorde fotonen aan de kwantumefficiëntie geeft aan in welke frequentiegebieden de verstrooide fotonen zullen bijdragen aan het rendement en in welke gebieden de ongestoorde fotonen het belangrijkste zijn. Hierbij is het de bedoeling alle invloeden van de nanoschil uit te schakelen zodat enkel de fysica van de zonnecel in rekening wordt gebracht. Praktisch berekenen we dit door één enkel foton van elke soort in te sturen op de zonnecel. Voor de ongestoorde fotonen wil dit zeggen dat we enkel de eerste term uit de generatieterm (zie vergelijking (3.9)) in rekening brengen. De verstrooide fotonen zullen onder een andere hoek invallen waardoor hun bijdrage aan de QE anders zal zijn dan die van de ongestoorde fotonen. Dit kunnen we in rekening brengen via de tweede term uit de generatieterm. We geven beide QE weer op figuur 3.6. Deze

Bijdrage aan de QE van verschillende soorten fotonen



Figuur 3.6: De bijdrage aan de QE van de verstrooide fotonen (rood) en de ongestoorde fotonen (blauw). Hierbij is rekening gehouden met reflectie. Merk op dat voor kleinere golflengten vooral de ongestoorde fotonen een grote bijdrage zullen hebben. Voor grotere golflengten is dit omgekeerd.

figuur maakt duidelijk dat in de kleinere golflengten vooral de ongestoorde fotonen belangrijk zullen zijn. Het is eerder in de grotere golflengten dat de verstrooide fotonen belangrijk zullen worden. Het wegvallen van de fotonen met een kleine golflengte kan begrepen worden door de absorptie van silicium te bestuderen (zie figuur 1.15). Hierop is te zien dat de kleinere golflengten veel beter geabsorbeerd worden dan de grotere golflengten. Door de schuine baan van de fotonen in het n-gebied zullen deze kortere golflengten heel dicht tegen het oppervlak van de zonnecel geabsorbeerd worden. In het gebied vlak onder de zonnecel zullen echter vooral de oppervlakte recombinaties heersen waardoor dit gebied in de zonnecel

bijna geen ladingsdragers zal leveren die bijdragen aan de fotostroom.

Dit geeft aan dat we moeten zoeken naar een structuur waarin: ten eerste de fotonen vooral verstrooid worden bij de grotere golflengten en ten tweede de fotonen zo weinig mogelijk worden verstrooid bij kleinere golflengten. En dit natuurlijk liefst in combinatie met een zo laag mogelijke absorptie. Het idee is nu dat nanoschillen, dankzij hun grote afstelbaarheid, een goede kandidaat vormen voor deze structuur.

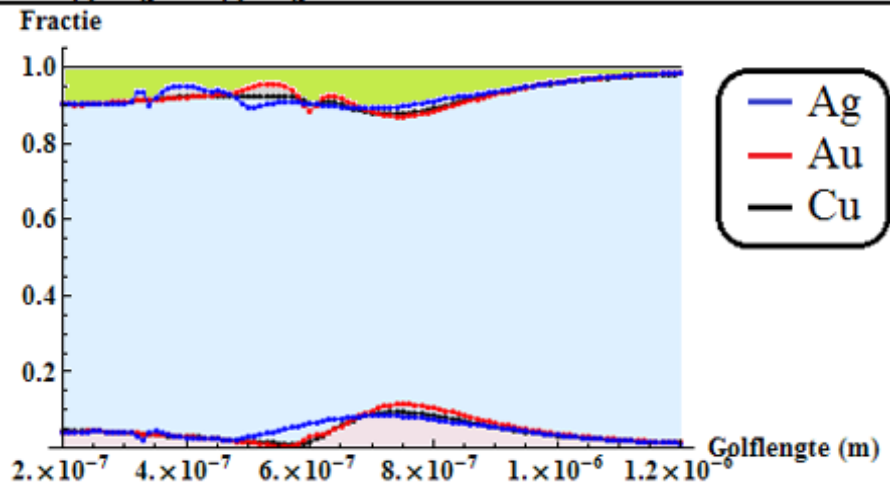
De bedoeling is nu een configuratie te vinden die het hoogste rendement geeft. Dit doen we door optimaal gebruik te maken van de informatie die we verkrijgen uit de twee bovenstaande concepten. Uit figuur 3.6 kunnen we het gedrag van de zonnecel beter begrijpen. We zien namelijk dat de zonnecel een hogere QE heeft indien er meer verstrooide fotonen zijn met een golflengte tussen 850 en 1100 nm. Voor kleinere golflengten hebben we liever zo weinig mogelijk verstrooide fotonen. Dit kunnen we nu combineren met figuur 3.5. Deze figuur vertelt ons immers de verhouding tussen verstrooide en ongestoorde fotonen. Deze figuur zal anders zijn voor elke nanoschil. Door de parameters te variëren is het doel nu om in deze figuur een zo groot mogelijk rood gebied te krijgen tussen 850 en 1100 nm en een zo klein mogelijk rood gebied voor lagere golflengten. Tegelijkertijd is het de bedoeling om het groene gebied, dat de verloren fotonen voorstelt, zo klein mogelijk te houden.

Eerst bekijken we deze fracties voor de voorbeeldparameters en bij verschillende materiaalkeuzes voor de schil. Deze vergelijking staat grafisch weergegeven in figuur 3.7. We zien op deze figuur dat de fracties bij deze materialen heel dicht bij elkaar liggen. Er is een piek waar te nemen in de fractie aan verstrooide fotonen rond een golflengte van 750 nm. Interessant om op te merken is dat zilver een bredere maar lagere piek heeft dan goud en koper.

Bij het variëren van de parameters zijn de volgende algemene tendensen opgemerkt:

- Een verhoging van de deeltjesdichtheid n_{NS} zal een vergroting van de fractie aan verstrooide fotonen geven overheen het hele frequentiegebied. Hiermee gaat ook een vergroting van de fractie aan verloren fotonen gepaard.
- Een kleinere schildikte zal leiden tot een grotere piek aan verstrooide fotonen bij grotere golflengten.
- Indien de straal van de kern verkleind wordt maar de schildikte hetzelfde blijft, zal de piek van het spectrum naar hogere golflengten verschuiven en daarbij groter worden.
- Analoog zien we dat indien de verhouding tussen de buiten- en kernstraal hetzelfde wordt gehouden, de piek nog steeds naar hogere golflengten verschuift als de buitenstraal van de nanoschil wordt vergroot.
- Vergroten van de zowel de buiten- als kernstraal op een zodanige manier dat de piek op dezelfde golflengte blijft zal een verhoging in de verstrooiing teweegbrengen, maar tevens een verhoging in de absorptie.

Vergelijking bij verschillende schilmaterialen



Figuur 3.7: Een vergelijking van de fracties voor verschillende schilmaterialen. De blauwe, rode en zwarte lijnen staan respectievelijk voor zilver, goud en koper. Dit is steeds met de voorbeeldparameters: $R_c = 96$ nm, $R_s = 116$ nm en $n_{NS} : 1/\mu\text{m}^2$. De onderste (rode) regio's zijn de verstrooide fotonen, de middelste (blauwe) regio zijn de ongestoorde fotonen en de bovenste (groene) regio zijn de verloren fotonen.

- We merken in het algemeen op dat als de fractie aan verstrooide fotonen verhoogt ook de fractie aan verloren fotonen zal verhogen. Dit is ook logisch wegens de sferische symmetrie die is meegenomen in de berekeningen van de verstrooide fotonen. Voor elk foton dat verstrooid wordt naar de zonnecel, zal er een ander foton zijn dat terugverstrooid wordt naar de zon en dus nooit de zonnecel zal bereiken.

Met deze kennis is het nu mogelijk op zoek te gaan naar een goede nanoschil om te combineren met de zonnecel. In een theoretisch kader zijn alle nanoschillen mogelijk, maar gezien toekomstige toepassingen is het mogelijk extra eisen op te leggen aan de nanoschillen. Zoals reeds vermeld is het voorlopig immers onmogelijk om nanoschillen te maken met een schildikte van 1 nm. Ook is er een ondergrens van ongeveer 40 nm voor de totale straal van de nanoschil. Tevens is het al vermeld dat er een limiet staat op de dichtheid aan nanoschillen op het oppervlak. Met deze limieten moet steeds rekening gehouden worden indien men praktische toepassingen wil bereiken.

Op het moment van dit schrijven is de zoektocht naar de ideale nanoschil nog niet voltooid. Er zijn ook nog geen nanoschillen gevonden waarvoor het rendement van het nanoschil-zonnecel systeem beter is dan in de situatie zonder nanoschillen. Vooral de absorptie van de nanoschil speelt hierin een grote rol, maar ook de teruggestrooide fotonen zijn een belangrijke factor. Een mogelijkheid waardoor het rendement wel boven dat van de naakte zonnecel zou kunnen stijgen is door gebruik te maken van de terugverstrooide

fotonen door middel van extra lagen op en rond de nanoschil. Over deze en andere mogelijke verbeteringen wordt in sectie 4.2 een korte toelichting gegeven.

Hoofdstuk 4

Conclusie

4.1 Het huidige model

In de vorige hoofdstukken hebben we de nanoschil-zonnecel structuur bestudeerd. Eerst is de zonnecel bekeken zonder nanoschillen. Door middel van de transportvergelijkingen en de Beer-Lambert wet voor de generatieterm zijn de microscopische processen van de np-junctie in rekening gebracht om de kwantumefficiëntie uit te rekenen. Op basis van de kwantumefficiëntie en het AM1.5 zonnenspectrum is het rendement van een standaard kristallijne Si zonnecel uitgerekend. Dit gaf een rendement van 35.82%, wat hoger is dan de 25% die in experimentele opstellingen bereikt wordt door het niet modelleren van contacten, een extern circuit en de dark current in de berekeningen. Deze effecten zullen echter dezelfde zijn met of zonder nanoschillen. Voor de studie van de verandering van de efficiëntie ten gevolge van nanodeeltjes is een rendement van 35.82% een goede richtlijn.

Nadien zijn de optische eigenschappen van de metallische nanoschil bestudeerd door gebruik te maken van Mietheorie. Door middel van de far-field werkzame doorsneden konden de optische eigenschappen van de nanoschil in rekening worden gebracht. Op deze manier werd berekend welke fractie van het licht verstrooid wordt, geabsorbeerd wordt of ongestoord verder propageert.

Uiteindelijk zijn de twee structuren gecombineerd door het aantal verstrooide en ongestoorde fotonen via de absorptie van de zonnecel te koppelen aan de generatieterm die een belangrijke rol speelt in de microscopische beschrijving van de zonnecel. Dit gaf de nodige theorie om het rendement van de nanoschil-zonnecel structuur uit te rekenen en te vergelijken met de standaard kristallijne Si zonnecel zonder nanoschil.

Verder is de bijdrage aan de kwantumefficiëntie ten gevolge van de verstrooide en de ongestoorde fotonen apart bestudeerd om hun invloed duidelijk te maken. Nadien is gekeken naar de fractie aan verstrooide en ongestoorde fotonen voor verschillende nanoschilstructuren. Op deze manier zijn de instrumenten bereikt om de zoektocht naar de ideale nanoschil voor het systeem aan te vangen.

Hoewel een pad waarlangs men kan zoeken naar de optimale nanoschil is uitgestippeld, is er nog geen configuratie gevonden die een hoger rendement biedt dan het systeem zonder nanoschil. De absorptie en vooral de terugverstrooide fotonen werken het hogere rendement tegen.

Ongeacht een hoger rendement nog niet bereikt is, hebben we wel degelijk bewezen dat het basisprincipe achter het nanoschil-zonnecelconcept werkt. Uit figuur 3.6 is het immers duidelijk dat in bepaalde delen van het spectrum de verstrooide fotonen een grotere bijdrage aan de fotostroom hebben dan de ongestoorde fotonen. Dit is een belangrijke conclusie omdat dit een methode geeft om het rendement van de zonnecel te verhogen. De hier onderzochte nanostructuren en materialen zijn echter nog niet optimaal om het versterkingseffect te benutten.

Uiteindelijk merken we nog een voordeel op van het voorgestelde nanoschil-zonnecel systeem. Indien het rendement inderdaad kan worden verhoogd zodat het systeem ook economisch voordelig wordt, is er nog het extra voordeel dat dit concept te combineren is met bijna alle andere technieken die tegenwoordig gebruikt worden om het rendement van de zonnecel te verhogen.

4.2 Mogelijke verbeteringen

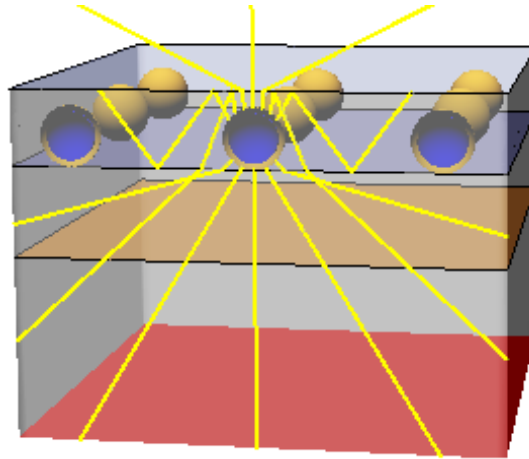
Om af te ronden geven we nog enkele pistes die, voortbouwend op dit werk, kunnen gevolgd worden.

Een eerste stap is het in rekening brengen van de afstand tussen de nanoschil en de absorberende zonnecel in vergelijking (3.8). In vergelijking (3.2) voor de ongestoorde fotonen is deze afstand wel degelijk in rekening gebracht, maar in de term voor de verstrooide fotonen is dit niet het geval. De interpretatie van de term voor de verstrooide fotonen is dat de verstrooide golf in de kern van de nanoschil vertrekt en reeds vanaf daar geabsorbeerd wordt door de zonnecel. Deze absorptie veroorzaakt een daling van de hoeveelheid licht dat aankomt aan het oppervlak van de zonnecel en dus ook een daling van de intensiteit die aankomt aan de depletie laag van de zonnecel. De berekening kan dus gecorrigeerd worden door dit eerste medium en de absorptie ervan mee te nemen.

Een andere verbetering bestaat erin om breking tussen de zonnecel en het medium waarin de nanoschil is ingebed in rekening te brengen. Dit vereist enerzijds de kennis van de hoekafhankelijke reflectie- en transmissiecoëfficiënt en anderzijds de brekingsindexen van de verschillende materialen en de vergelijkingen die deze breking beschrijven. De moeilijkheid van deze berekening is dat men voor elke positie de afgelegde weg van de fotonen moet berekenen, maar door de breking aan het oppervlak is dit niet meer voor de hand liggend.

Nog een uitbreiding is een eindige cladding-laag in rekening brengen. De cladding-laag is de laag bovenop de np-junctie die de nanoschillen vasthoudt. Een idee is ook dat deze laag nuttig gebruikt kan worden. Kies namelijk een laag die een lage absorptie heeft in het nuttige deel van het spectrum, maar die bovendien de juiste brekingsindex heeft. De juiste brekingsindex is een waarde die groter is dan de brekingsindex van het silicium van de np-junctie zodat het licht verder weg van de normaal breekt. Op deze manier

propageert het licht nog schuiner doorheen het materiaal. Anderzijds zou er ook voor gezorgd kunnen worden dat het licht dat terug naar boven verstrooid wordt door interne reflectie teruggekaatst wordt naar de zonnecel zodat de verloren energie ten gevolge van de terugverstrooide fotonen toch nog wordt gebruikt. Dit staat schematisch voorgesteld in figuur 4.1.



Figuur 4.1: Schematische voorstelling van de nanoschil in een geschikte cladding-laag zodat de breking aan het n -gebied in de geschikte richting gebeurt. Ook de interne reflectie in de cladding-laag kan bijdragen aan het rendement van de zonnecel. Het licht dat naar boven terug uit de cladding-laag breekt is steeds verloren. Het licht dat binnen de cladding-laag blijft door interne reflectie kan eventueel secundaire interacties aangaan met andere nanoschillen in de buurt of rechtstreeks naar de zonnecel gaan.

Een volgende verbetering ligt op een ander terrein: het gebruik van de near-field werkzame doorsneden in plaats van de far-field benadering zoals in deze thesis gedaan is. In het far-field regime wordt de aanname gemaakt dat men ver weg van de nanoschil is waardoor men gebruik kan maken van de asymptotische expansie van de sferische Bessel- en Hankelfuncties. Hierdoor kunnen deze functies vervangen worden door geometrische en exponentiële functies waardoor het systeem eenvoudiger oplosbaar wordt. De doorsnede van de nanoschil en de afstand tot aan de depletielaag zijn echter van dezelfde grootte-orde. Hoe groot de fout is die gemaakt wordt door in het far-field regime te werken is niet geweten, maar moet onderzocht worden.

Uiteindelijk is er ook nog verbetering mogelijk door de hoekafhankelijkheid van de verstrooide fotonen in rekening te brengen. In de huidige berekeningen is aangenomen dat de verstrooide fotonen gelijk verdeeld waren over alle hoeken rondom de nanoschil. Dit zal echter niet algemeen het geval zijn. In de dipoolresonantie zal de verdeling immers overeen komen met de welbekende haltervorm, zoals gegeven door de bolfuncties.

Appendix: De coëfficiënten van het veld rondom de nanoschil

In hoofdstuk 2.3.1 is het elektrisch en het magnetisch veld rondom de nanoschil bekeken. De oplossing is bekomen via Mietheorie waarin de vooropgestelde veldcomponenten met vector bolfuncties is opgelost waarbij aan de Maxwell vergelijkingen en de nodige randvoorwaarden (zie vergelijkingen (2.9) en (2.10)) voldaan is. Dit laatste komt praktisch overeen met het oplossen van een stelsel. De coëfficiënten die hierbij verkregen worden, zijn de coëfficiënten a_{3l}^{el} en a_{3l}^{mag} uit vergelijkingen (2.11), (2.12), (2.13), (2.14) en alle daar op volgende. Deze coëfficiënten zijn constanten voor het beschouwde systeem. In dit geval wordt het systeem bepaald door 2 parameters die de grenzen van de regio's aangeven: R_c en R_s , en door een drietal materiaalparameters: ε , μ en q , respectievelijk de relatieve permittiviteit, de relatieve permeabiliteit en de reciproke golfvector.

Voor de volledigheid geven we hier de volledige notatie van de oplossing die uit de Mietheorie volgt [4]:

$$a_{3l}^{el}(\omega) = \frac{\bar{\mathcal{J}}_l(q_3 R_s)}{\bar{\mathcal{H}}_l^{(1)}(q_3 R_s)} \quad (\text{A.1})$$

$$\times \left\{ \frac{\mathcal{P}_{11,l}(\omega)}{\det \mathcal{P}_l(\omega)} \frac{\varepsilon_3(\omega)}{q_3} \left[\frac{j_l(q_3 R_s)}{\bar{\mathcal{J}}_l(q_3 R_s)} - \frac{h_l^{(1)}(q_3 R_s)}{\bar{\mathcal{H}}_l^{(1)}(q_3 R_s)} \right] - 1 \right\}$$

$$a_{3l}^{mag}(\omega) = \frac{j_l(q_3 R_s)}{h_l^{(1)}(q_3 R_s)} \quad (\text{A.2})$$

$$\times \left\{ \frac{\mathcal{Q}_{11,l}(\omega)}{\det \mathcal{Q}_l(\omega)} \frac{\varepsilon_3(\omega)}{q_3} \left[\frac{\bar{\mathcal{J}}_l(q_3 R_s)}{j_l(q_3 R_s)} - \frac{\bar{\mathcal{H}}_l^{(1)}(q_3 R_s)}{h_l^{(1)}(q_3 R_s)} \right] - 1 \right\}$$

Hierbij staan \mathcal{P} en \mathcal{Q} voor de matrices:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{P}_{l,1,1}(\omega) &= \frac{\varepsilon_2(\omega)}{q_2 \bar{\mathcal{D}}_l(R_c, R_s)} [\bar{\mathcal{Y}}_l(q_2 R_s) j_l(q_2 R_c) - \bar{\mathcal{J}}_l(q_2 R_s) y_l(q_2 R_c)] - \frac{\varepsilon_1(\omega)}{q_1} \frac{j_l(q_1 R_c)}{\bar{\mathcal{J}}_l(q_1 R_c)} \\
 \mathcal{P}_{l,1,2}(\omega) &= \frac{\varepsilon_2(\omega)}{q_2 \bar{\mathcal{D}}_l(R_c, R_s)} [\bar{\mathcal{J}}_l(q_2 R_c) y_l(q_2 R_c) - \bar{\mathcal{Y}}_l(q_2 R_c) j_l(q_2 R_c)] \\
 \mathcal{P}_{l,2,1}(\omega) &= \frac{\varepsilon_2(\omega)}{q_2 \bar{\mathcal{D}}_l(R_c, R_s)} [l(q_2 R_s) j_l(q_2 R_c) - \bar{\mathcal{J}}_l(q_2 R_s) y_l(q_2 R_s)] \\
 \mathcal{P}_{l,2,2}(\omega) &= \frac{\varepsilon_2(\omega)}{q_2 \bar{\mathcal{D}}_l(R_c, R_s)} [\bar{\mathcal{J}}_l(q_2 R_c) y_l(q_2 R_s) - \bar{\mathcal{Y}}_l(q_2 R_c) j_l(q_2 R_s)] - \frac{\varepsilon_3(\omega)}{q_3} \frac{h_l^{(1)}(q_3 R_s)}{\bar{\mathcal{H}}_l^{(1)}(q_3 R_s)} \\
 \mathcal{Q}_{l,1,1}(\omega) &= \frac{\varepsilon_2(\omega)}{q_2 d_l(R_c, R_s)} [y_l(q_2 R_s) \bar{\mathcal{J}}_l(q_2 R_c) - j_l(q_2 R_s) \bar{\mathcal{Y}}_l(q_2 R_c)] - \frac{\varepsilon_1(\omega)}{q_1} \frac{\bar{\mathcal{J}}_l(q_1 R_c)}{j_l(q_1 R_c)} \\
 \mathcal{Q}_{l,1,2}(\omega) &= \frac{\varepsilon_2(\omega)}{q_2 d_l(R_c, R_s)} [j_l(q_2 R_c) \bar{\mathcal{Y}}_l(q_2 R_c) - y_l(q_2 R_c) \bar{\mathcal{J}}_l(q_2 R_c)] \\
 \mathcal{Q}_{l,2,1}(\omega) &= \frac{\varepsilon_2(\omega)}{q_2 d_l(R_c, R_s)} [y_l(q_2 R_s) \bar{\mathcal{J}}_l(q_2 R_s) - j_l(q_2 R_s) \bar{\mathcal{Y}}_l(q_2 R_s)] \\
 \mathcal{Q}_{l,2,2}(\omega) &= \frac{\varepsilon_2(\omega)}{q_2 d_l(R_c, R_s)} [j_l(q_2 R_c) \bar{\mathcal{Y}}_l(q_2 R_s) - y_l(q_2 R_c) \bar{\mathcal{J}}_l(q_2 R_s)] - \frac{\varepsilon_3(\omega)}{q_3} \frac{\bar{\mathcal{H}}_l^{(1)}(q_3 R_s)}{h_l^{(1)}(q_3 R_s)}
 \end{aligned}$$

Verder is er gebruik gemaakt van de verkorte notatie:

$$\bar{\mathcal{J}}_l(x) = \frac{1}{2l+1} \mathcal{J}_l(x) \quad (\text{A.3})$$

$$\bar{\mathcal{Y}}_l(x) = \frac{1}{2l+1} \mathcal{Y}_l(x) \quad (\text{A.4})$$

$$\bar{\mathcal{H}}_l^{(1)}(x) = \frac{1}{2l+1} \mathcal{H}_l^{(1)}(x) \quad (\text{A.5})$$

Met:

$$\mathcal{J}_l(x) = l j_{l+1}(x) - (l+1) j_{l-1}(x) \quad (\text{A.6})$$

$$\mathcal{Y}_l(x) = l y_{l+1}(x) - (l+1) y_{l-1}(x) \quad (\text{A.7})$$

$$\mathcal{H}_l^{(1)}(x) = \mathcal{J}_l(x) + i \mathcal{Y}_l(x) \quad (\text{A.8})$$

$$h_l^{(1)}(x) = j_l(x) + i y_l(x) \quad (\text{A.9})$$

De kleine letters duiden op de welbekende functies:

$j_l(x)$ = de sferische Besselfuncties van de 1^{ste} soort

$y_l(x)$ = de sferische Besselfuncties van de 2^{de} soort (Neumann functies)

$h_l^{(1)}(x)$ = de sferische Hankelfuncties van de 1^{ste} soort

Verder zijn er nog de functies d en \bar{D} :

$$d_l(R_c, R_s) = j_l(q_2 R_c) y_l(q_2 R_s) - y_l(q_2 R_c) j_l(q_2 R_s) \quad (\text{A.10})$$

$$\bar{D}_l(R_c, R_s) = \bar{J}_l(q_2 R_c) \bar{Y}_l(q_2 R_s) - \bar{Y}_l(q_2 R_c) \bar{J}_l(q_2 R_s) \quad (\text{A.11})$$

Herinner ook de relatie:

$$q = \omega \sqrt{\varepsilon \varepsilon_0 \mu \mu_0}, \quad (\text{A.12})$$

die in alle regio's moet gelden. De vacuüm permittiviteit en permeabiliteit worden gegeven door respectievelijk [2]:

$$\varepsilon_0 = 8.854187817 \times 10^{-12} \frac{\text{F}}{\text{m}} \quad (\text{A.13})$$

$$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} = 12.566 \times 10^{-7} \frac{\text{N}}{\text{A}^2} \quad (\text{A.14})$$

Voor de volledigheid worden ook de definities van de gebruikte vector bolfuncties meegegeven

$$\vec{Y}_{l,l,m} = \vec{Y}_{l,m}^{(0)} \quad (\text{A.15})$$

$$\vec{Y}_{l,l-1,m} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \left(\sqrt{l+1} \vec{Y}_{l,m}^{(1)} + \sqrt{l} \vec{Y}_{l,m}^{(-1)} \right) \quad (\text{A.16})$$

$$\vec{Y}_{l,l+1,m} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \left(\sqrt{l} \vec{Y}_{l,m}^{(1)} - \sqrt{l+1} \vec{Y}_{l,m}^{(-1)} \right), \quad (\text{A.17})$$

waarbij in bolcoördinaten:

$$\vec{Y}_{l,m}^{(0)} = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{-1}{i} \frac{1}{\sqrt{l(l+1)}} \frac{imY_{l,m}(\theta,\varphi)}{\sin(\theta)} \\ \frac{1}{i} \frac{1}{\sqrt{l(l+1)}} \frac{\partial Y_{l,m}(\theta,\varphi)}{\partial \theta} \end{bmatrix} \quad (\text{A.18})$$

$$\vec{Y}_{l,m}^{(1)} = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{l(l+1)}} \frac{\partial Y_{l,m}(\theta,\varphi)}{\partial \theta} \\ \frac{1}{\sqrt{l(l+1)}} \frac{imY_{l,m}(\theta,\varphi)}{\sin(\theta)} \end{bmatrix} \quad (\text{A.19})$$

$$\vec{Y}_{l,m}^{(-1)} = \begin{bmatrix} Y_{l,m} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{A.20})$$

Voor meer informatie over de bolfuncties wordt naar de literatuur doorverwezen [27]

Bibliografie

- [1] <http://rredc.nrel.gov/solar/spectra/> (geraadpleegd in 2010)
- [2] National Institute of Standards and Technology: <http://physics.nist.gov/cuu/Constants/index.html> (geraadpleegd in 2010)
- [3] IMEC, persoonlijke communicatie, (2009 – 2010)
- [4] Fomin V.M., Tempere J. en Devreese J.T.: interne werknota: Polaritons in nanoshells (2008)
- [5] National Renewable Energy Labotory: www.nrel.gov/ncpv/thin_film/docs/kaz_best_reseach_cells.ppt
- [6] Miro Zeman: Solar Cells, Delft University of Technology (2010)
- [7] <http://www.isiwebofknowledge> (geraadpleegd in 2010)

Artikels

- [8] **Chelikowsky J.R. en Cohen M.L.:** *Electronic structure of silicon*; Phys. Rev. B, Vol:10, nr:12, pag: 5095-5107. doi: 10.1103/PhysRevB.10.5095 (1974)
- [9] **Aden A.L. en Kerker M.:** *Scattering of electromagnetic waves from two concentric spheres*; J. App. Phys, Vol:22, nr:10, pag:1242-1246. doi: 10.1063/1.1699834 (1951)
- [10] **Zhou H.I., Honma I., Komiyama H. en Haus J.W.:** *Controlled synthesis and quantum-size effect in gold-coated nanoparticles*; Rev. B., Vol:50, nr:16, pag: 12052-12057. doi: 10.1103/PhysRevB.50.12052 (1994)
- [11] **Halas N.J.:** *Tiny but Mighty*; Spie's oe magazine, pag: 34-35. doi: 10.1117/2.5200112.0009 (2001)

- [12] **Brongersma M.L.:** *Nanoscale photonics: Nanoshells: gifts in a gold wrapper;* Nature Materials, Vol:2, pag 296-297. doi: 10.1038/nmat891 (2003)
- [13] **O'Neal D.P., Hirsch L.R., Halas N.J., Payne J.D. en West J.L.:** *Photothermal tumor ablation in mice using near infrared-absorbing nanoparticles;* Cancer Letters, Vol:209, pag: 171-176. doi: 10.1016/j.canlet.2004.02.004 (2004)
- [14] **Kelleher K.:** *Engineers light up cancer research: Emerging medicine: Scientists design gold "nanoshells" that seek and destroy tumors;* Popular Science, pag: 34-35. (2003)
- [15] **Huang X., El-Sayed I. H., Qian W., and El-Sayed M.A.:** *Cancer Cell Imaging and Photothermal Therapy in the Near-Infrared Region by Using Gold Nanorods;* J. Am. Chem. Soc., Vol:128, nr:6, pag: 2115-2120. doi: 10.1021/ja057254a (2006)
- [16] **Sershen S.R., Westcott S.L., West J.L. en Halas N.J.:** *An opto-Mechanical nanoshell-polymer composite;* Appl. Phys. B, Vol:73, nr:4, pag: 379-381. doi: 10.1007/s003400100689 (2001)
- [17] **Sershen S.R., Westcott S.L., Halas N.J. en West J.L.:** *Temperature-sensitive polymer-nanoshell composites for photothermally modulated drug delivery;* J. Biomed. Mater. Res., Vol:51, nr:3, pag: 293-298. doi: 10.1002/1097-4636(20000905)51:3<293::AID-JBM1>3.0.CO;2-T (2000)
- [18] **Halas N.J.:** *The optical properties of Nanoshells;* Optics & photonics news, Vol 13, nr 8, pag: 26-30. doi:10.1364/OPN.13.8.000026 (2002)
- [19] **Hirsch L.R., Gobin A.M., Lowery A.R., Tam F., Drezek R.A., Halas N.J. en West J.L.:** *Metal Nanoshells;* Annals of Biomedical Engineering, Vol 34, nr 1, pag: 15-22. doi: 10.1007/s10439-005-9001-8 (2006)
- [20] **Lal S., Link S. and Halas N.J.:** *Nano-Optics from sensing to waveguiding;* Nature photonics, Vol:1, pag: 641-648. doi: 10.1038/nphoton.2007.223 (2007)
- [21] **Mie G.:** *Beiträge zur optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen;* Annalen der physik, vol 4, nr 25, pag377-445. (1908)

Boeken

- [22] **Nelson J. :** *The Physics of Solar Cells;* Imperial College Press, Verenigd Koninkrijk. ISBN:1-86094-340-3 (2007)

- [23] **Kittel C.** : *Introduction to Solid State Physics 8th edition*; John Wiley & Sons, Inc, USA. ISBN: 0-471-41526-x (2005)
- [24] **Lide D.R., ed.**: *CRC Handbook of Chemistry and Physics*; Internet Version 2005, <<http://www.hbcpnetbase.com>>, CRC Press, Boca Raton, FL. (2005)
- [25] **Stratton J.A.**: *Electromagnetic theory*; McGraw-Hill Book company, New York en London. (1941)
- [26] **Jackson J.D.**: *Classical Electrodynamics*; John Wiley & Sons, Inc, USA. ISBN: 0-471-43132-x (1975)
- [27] **Arfken G.B. & Weber H.J.**: *Mathematical Methods for Physicists, Sixth Edition*; Elsevier Academic Press, Burlington MA, USA. ISBN: 0-12-088584-0 (2005)