

Literaturwerte

Zusammenstellung der in der Literaturübersicht (Abs. 5.1 (S. 54)) besprochenen PL Emissionen.

A.1 PL von CuInSe_2

Tabelle A.1: Literaturdaten zur Photolumineszenz von CuInSe_2 .

Autoren	Emission [eV]	Zuordnung	Kommentare
Chichibu et al.[Chi97]	1.0422	BB oder FX	ES MOVPE n-leitend [Cu]/[In] = 0.98 [Se]/([In] + [Cu]) = 1.08 Schulter von FB1 und FB2 wird nicht diskutiert.
Chatraphorn et al. [Cha98]	1.0446; 1.0416 1.0346; 1.0277 1.0048 1.0012 0.9975 0.9756; 0.9717 0.9679 0.9429 0.9001; 0.8707 0.8437	FX(n=2); FX(n=1) BX1; BX2 BX1-LO LB-A1(V_{Cu}); FB1? BX2-LO LB-A2(Cu_{In}); FB2? FB2-LO LB-A3(Se_i) FB3-LO FB3-LO2	EK p-leitend [Cu]/[In] = 0.98 A1(V_{Cu}) \approx 56meV A2(Cu_{In}) \approx 86meV A3(Se_i) \approx 158meV
Dagan et al.[Dag90]	0.98 0.96-0.97 0.95 0.935 0.92 0.89	LB-A1(V_{Cu}) D1(In_{Cu})A2(Cu_{In}) D1(In_{Cu})A2(V_{Cu}) D2(V_{Se})A2(Cu_{In}) D2(V_{Se})A1(V_{Cu}) D1(V_{Se})A3(V_{In})	EK p-leitend; Cu and In diffusion A1(V_{Cu}) \approx 40meV A2(Cu_{In}) \approx 30meV A3(V_{In}) \approx 80meV D2(In_{Cu}) \approx 50meV D2(V_{Se}) \approx 70meV
Masse et al. [Mas90]	1.01; 0.98; 0.97 0.95; 0.92	FB (LB-A1); FB2 (D-VB2); FB3 (D-VB3) DA; DA (Vib.)	EK n- und p-leitend annealing in Se, In A1(V_{Cu}) \approx 40meV D1(V_{Se}) \approx 60meV D2(V_{Se}) \approx 80meV
Matsushita et al. [Mat95]	1.04 0.99-1.00 0.97-0.98	NB D1(V_{Se})A1(Cu_{In}) D1(V_{Se})A2(V_{In})	EK: p- und n-leitend Cu-reich D1(V_{Se}) \approx 5-10meV A1(Cu_{In}) \approx 20-40meV A2(V_{In}) \approx 50-80meV

Tabelle A.1: Literaturdaten zur Photolumineszenz von CuInSe₂ .

Autoren	Emission [eV]	Zuordnung	Kommentare
	0.98 0.95-0.96 0.93	D1A1 D2A1 D3A1	EK: p-type Cu-arm; E_{Gap} 1.0eV(10K) $A(V_{Cu}) \approx 10$ -20meV $D1(V_{Se}) \approx 5$ -10meV; $D2(In_{Cu}) \approx 30$ meV; $D3 \approx 60$ meV
Mudryi et al. [Mud98]	1.0446; 1.0408 1.0387; 1.0349 1.005; 0.978 0.961; 0.933 0.899; 0.870 0.843 0.815	FX(n=2); FX(n=1) BX1; BX2 DA + LO	EK DA werden nicht näher bestimmt
Kinmura et al. [Kim01]	0.93 0.84	D1(V_{Se})A1(V_{Cu}) D2(V_{Cu-Se})A1(V_{Cu})	PS Cu-arm: D1A1 ($[Cu]/[In] = 0.99$) D2A2 ($[Cu]/[In] = 0.84$) A1(V_{Cu})=76meV; D1($V_{Se} \sim 130$ meV) D2($V_{Cu-Se} \sim 220$ meV) 'blue-shift' >15meV/dec. keine fluktuierenden Potenziale
Niki et al. [Nik94, Nik95b, Nik95a, Nik96, Nik97, Nik99a, Nik99b, Nik01, Nik02]	1.045;1.039 1.031;1.0115 0.9875 0.9689-0.97 0.959 0.9407 0.9126;0.8846 0.8567 0.828	FX(n=2);FX(n=1) BX1;BX2 D1A1 LB-A2(V_{Cu}) D2(V_{Se})A2(V_{Cu})2 LB-A2-LO D3A3;D3A3-LO D3A3-LO2 D3A3-LO3	MBE ES; Cu-reich $[Cu]/[In] > 1.0$: LB-A2(V_{Cu}) ≈ 70 meV; annealing in Vakuum LB-A2 \rightarrow D2A2 flacher Donator (V_{Se} ?) leicht Cu-arm $[Cu]/[In] \sim 0.97$: D1A1 Cu-arm $[Cu]/[In] < 0.9$: D2A2 dominant; annealing in Luft D2A2 \rightarrow LB-A2 passiviert V_{Se} ; DA2 und DA3 'blue shift' >15meV, hohe Kompensation, keine fluktuierenden Potenziale? DA2 und DA3 gleich ?
Rincón et al. [Rin96]	1.038-1.041 1.034-1.036 1.028-1.030 1.003; 0.996 0.973; 0.967 0.958; 0.944 0.934 0.900-0.902 0.87-0.875 0.84-0848	FX BX1(D1(In_{Cu})) D1(In_{Cu})-VB LB-A1(V_{Cu}); LB-A2(Cu_{In}) BX2(A2(Cu_{In})); LB-A3(V_{In}) D2(V_{Se})-VB; BX2(A2)-LO LB-A3-LO D2(V_{Se})A3(V_{In}) D2A3-LO1 D2A3-LO2	EK p-leitend Se-arm/reich D(In_{Cu}) ≈ 18 meV D2(V_{Se}) ≈ 90 meV A1(V_{Cu}) ≈ 40 meV A2(Cu_{In}) ≈ 54 meV A3(V_{In}) ≈ 82 meV
Schön, Alberts et al. [Alb00, Alb99, Sch99, Sch96a]	1.036-38 1.0375;1.0336 1.031 0.992-1.002 0.969-0.975 0.95-0.964 0.93-0.945 1.04 0.994-1.002 0.975 0.952-7; 0.93	FX BX1;BX2 BX3 VB-D(In_{Cu}, V_{In}, Cu_i) LB-A(Cu_{In}) D(In_{Cu})A(V_{Se})1 LB-A-LO FX VB-D(In_{Cu}) k.A. D(In_{Cu})A(V_{Se})1; D(V_{Cu})A(V_{Se})2	PS Cu-arm ($[Cu]/[In] \sim 0.92$): DA A(V_{In})=25-49meV A(V_{Se})=45meV A(Cu_{In})=68-75meV D(Cu_i)=53meV D(In_{Cu})=25meV EK A(V_{Cu})=60meV D(V_{Se})=45meV D(In_{Cu})=25meV
Shen et al. [She96]	0.93 0.97(>50K)	D(V_{Se})A(V_{Cu}) FB	aus temperaturabh. PL A(V_{Cu})=160meV D(V_{Se})=43meV

Tabelle A.1: Literaturdaten zur Photolumineszenz von CuInSe_2 .

Autoren	Emission [eV]	Zuordnung	Kommentare
Shirakata et al. [Shi98c]	1.04 0.98	FX LB-A(V_{Cu})	ES MOMBE $A(V_{Cu})=60\text{meV}$
Tseng et al. [Tse95]	1.036 0.995; 0.970 1.036 0.970; 0.95	BB LB-A(CuIn); D(InCu)A(CuIn) BB D(InCu)A(CuIn); D(InCu)A(V_{Cu})	ES MBE Cu-arm annealing in Se (400°C)
Dirnstorfer / Wagner /Ka et al. [Ka00, Dir00, Dir99, Dir98, Wag98a, Wag98b]	1.04; 1.036 0.985-1.006 0.96-0.97; 0.94 0.93; 0.90	EX; BX DA1 DA2; DA3 DA2-L0; DA4	PS annealing in Cu Atmosphäre (400°C) D(10meV)A($[\text{CuIn}-\text{Cu}_i]=40\text{meV}$)1 D(10meV)A(75meV)2 Cu-arm DA3; D(10meV)A(140meV)4
Zeaiter et al. [Zea01]	0.960 0.93; 0.85	LB-A(V_{Cu}) D(InCu)A(V_{Cu}); D(V_{Se})A(V_{Cu})	EK stöchiometrisch Cu-arm ($[\text{Cu}]/[\text{In}] \sim 0.72$)
Zott et al. [Zot96b, Zot96a, Zot97b]	1.035; 1.008 0.987; 0.970 0.943; 0.938 0.877	FX; BX NB; FB(80meV) FB(110meV); DA1 DA2	PS NB nur Cu-arm FB1 nur Cu-reich DA2 nur Cu-arm

A.2 PL von $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$

Tabelle A.2: Literaturdaten zur Photolumineszenz von $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$.

Autoren	Emission [eV]	Zuordnung	Kommentare
Schön Schoen00a,	für $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ nicht gezeigt	D1(V_{Se})A(V_{Cu})	EK $\text{CuIn}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{Se}_2$ $A(V_{Cu})=50\text{meV}$ D1(V_{Se})=70 D2($V_{Cu}-\text{III}_{Cu}$)=110meV
Wagner et al.	1.1 1.12 1.0 1.02 0.96 0.93 0.90 0.87	DA IIIa IIIb I(D1A1) I-LO II(D1A2) II-LO	PS $\text{CuIn}_{0.72}\text{Ga}_{0.28}\text{Se}_2$ Ga-Gradient 2. Emission nach Annealing $>400^\circ\text{C}$ annealing reduziert Blauverschiebung von $10\text{meV}/\text{Dekade}$ auf $4\text{meV}/\text{Dekade}$ und erhöht die Intensität um 4 Größen- ordnungen PS $\text{CuIn}_{0.90}\text{Ga}_{0.10}\text{Se}_2$ Ga-Gradient IIIa Vorderseite, IIIb Rückseite; sehr breit, fluktuierende Potenziale I und II wie CuInSe_2 II: D1 $\approx 10\text{meV}$, A1 $\approx 75\text{meV}$, A2 $\approx 140\text{meV}$
Yoshino et al.	~ 1.1 $\sim 1.35, 1.27$ $\sim 1.46, 1.42$	LB-A(CuIn) FE, LB-A(CuIn) LB-A(CuIn), LB-A(CuGa)	EK $\text{CuIn}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{Se}_2$ $\text{CuIn}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{Se}_2$ $\text{CuIn}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{Se}_2$
Miyake et al.	x=0: ~ 0.99 x=0.21 ~ 1.07 1.11 x=0.42 ~ 1.19 1.23 x=0.71 ~ 1.43 x=0.96 ~ 1.60	keine Angaben Spekulationen: $V_{Cu}, V_{Se}, \text{III}_{Cu}$	EK $\text{CuIn}_x\text{Ga}_x\text{Se}_2$ x=0, 0.21, 0.42, 0.71, 0.96

Tabelle A.2: Literaturdaten zur Photolumineszenz von Cu(In,Ga)Se₂ .

Autoren	Emission [eV]	Zuordnung	Kommentare
Choi and Yu [Cho99]	x=0.5 ~1.28 x=0.75~1.45 x=1.0~1.60	DAP E _A =27-30meV	EK CuIn _x Ga _x Se ₂ x=0,0.5,0.75,1.0 druckabhängig: 29,38,44,48meV/GaP $\frac{d\alpha}{dx} = 18.6meV/GPa$

Erklärung der Abkürzungen:

A	Akzeptor
BB	<i>band-band transition</i>
BX	<i>bound exciton emission</i>
D	Donator
DA	Donator-Akzeptor-Paar Übergang
EK	Einkristall
ES	epitaktische Schicht
EX	Exzitonische Emission
FB	<i>free-to-bound transition</i>
FX	<i>free exciton emission</i>
LB-A	Leitungsband-Akzeptor Übergang
LO	longitudinal-optische Phononreplik
MBE	<i>molecular beam epitaxy</i>
MOVPE	<i>metalorganic vapor phase epitaxy</i>
MOMBE	<i>metalorganic molecular beam epitaxy</i>
NB	<i>near band emission</i>
PL	Photolumineszenz
PS	polykristalline Schicht
VB-A	Valenzband-Donator Übergang

Messmethoden

B.1 Experimentelle Methoden zur Elementanalyse

Es sind drei verschiedene Methoden zur Bestimmung der Komposition der Cu(In,Ga)Se₂-Schichten verwendet worden, die hier kurz vorgestellt werden.

B.1.1 Energie-Disperive-Röntgenanalyse (EDX) und Raster-Elektronen-Mikroskop (REM)

Die EDX-Messungen sind an einem kommerziellen System der Firma *LEO Electron Microscopy A Carl Zeiss SMT AG Company* durchgeführt worden. Für die REM-Aufnahmen und EDX-Messung ist das LEO1530 Mikroskop benutzt worden. Das Mikroskop ist mit einer Schottky-Feldemissionskathode und einem Strahlengang mit sehr geringen chromatischen Fehlern ausgestattet. Das Auflösungsvermögen des Mikroskops beträgt 1nm bei 20 kV und 3nm bei 1 kV. Für EDX-Messungen wird ein Oxford ISIS System genutzt.

Die Kalibration der EDX-Messungen erfolgte an CuGaSe₂- und CuInSe₂-Einkristallen, sowie einer polykristallinen Cu(In,Ga)Se₂-Schicht. Diese Standards sind in regelmäßigen Abständen vermessen worden, um eventuelle Alterungseffekte der Kathode zu erkennen, die die Ergebnisse verfälschen.

Die Elektronenenergie zur Kompositionsbestimmung der Cu(In,Ga)Se₂-Schichten ist zu 7.5keV gewählt worden, da die Eindringtiefe der Elektronen dann nur 300 – 400nm beträgt und somit das GaAs-Substrat die Messung nicht beeinflusst. Diese Energie ist auch ausreichend, um die In-L-Linie nachzuweisen.

Der Fehler in der Kompositionanalyse wurde durch wiederholte Messungen an einer Probe zu maximal 2at.% abgeschätzt. In Tabelle B.1 ist der daraus resultierende Fehler für das $[Ga]/([Ga] + [In])$ -Verhältnis und die daraus nach Gleichung 5.2 berechnete Bandlücke angegeben.

Tabelle B.1: Fehlerangaben zum Ga-Gehalt ($GGI=[Ga]/([Ga] + [In])$, σ_{ggi}) und der Bandlücke (E_{Gap} , $\sigma_{E_{Gap}}$) berechnet aus dem Fehler der EDX-Messung in $[In]$ und $[Ga]$ (σ_{In} und σ_{Ga}).

[In]	[Ga]	σ_{in}	σ_{ga}	GGI	σ_{ggi}	E_{gap}	$\sigma_{E_{gap}}$
0.0	1.0	0.02	0.02	1	0.020	1.720	0.017
0.05	0.95	0.02	0.02	0.95	0.019	1.679	0.015
0.1	0.9	0.02	0.02	0.9	0.018	1.639	0.014
0.15	0.85	0.02	0.02	0.85	0.017	1.600	0.013
0.2	0.8	0.02	0.02	0.8	0.016	1.561	0.013
0.25	0.75	0.02	0.02	0.75	0.016	1.523	0.012
0.3	0.7	0.02	0.02	0.7	0.015	1.486	0.011
0.35	0.65	0.02	0.02	0.65	0.015	1.450	0.011
0.4	0.6	0.02	0.02	0.6	0.014	1.414	0.010
0.45	0.55	0.02	0.02	0.55	0.014	1.379	0.010
0.5	0.5	0.02	0.02	0.5	0.014	1.345	0.010
0.55	0.45	0.02	0.02	0.45	0.014	1.312	0.009
0.6	0.4	0.02	0.02	0.4	0.014	1.279	0.009
0.65	0.35	0.02	0.02	0.35	0.015	1.247	0.009
0.7	0.3	0.02	0.02	0.3	0.015	1.216	0.009
0.75	0.25	0.02	0.02	0.25	0.016	1.186	0.009
0.8	0.2	0.02	0.02	0.2	0.016	1.156	0.010
0.85	0.15	0.02	0.02	0.15	0.017	1.127	0.010
0.9	0.1	0.02	0.02	0.1	0.018	1.099	0.010
0.95	0.05	0.02	0.02	0.05	0.019	1.072	0.010
1.0	0.0	0.02	0.02	0	0.020	1.045	0.011

B.1.2 Punkt-EDX-Messung

Die Punkt-EDX-Messungen sind an einem Raster-Transmission-Elektronen-Mikroskop (*scanning transmission electron microscope* - STEM) an der *University of Illinois in Urbana-Champaign, Illinois, USA* von Changhui Lei in Arbeitsgruppe von Angus Rockett durchgeführt worden.

Die Proben wurden vor der Messungen auf etwa 20 – 80nm gedünnt. Der Elektronenstrahl ist für die EDX-Messungen auf eine Punktgröße von 1 – 2nm fokussiert worden. Dadurch konnten EDX-Tiefenprofile in Nanometerskala an der Cu(In,Ga)Se₂-GaAs-Grenzfläche der Schichten erstellt werden. Die Bestimmung der Elementverteilung über die gesamte Schichtdicke erfolgte durch Messungen im Abstand von 20 – 30nm. Die Genauigkeit der Komposition wird mit 0.5at.% angegeben.

technischen Daten

VG HB501 STEM:

- Beschleunigungsspannung der Elektronen: 100kV
- ±15° Drehungen um zwei Achsen
- kleinste Strahlfokussierung: 0.3nm (typisch: 0.6nm - 1.0nm - 1.5nm)
- Simultane Aufnahme von BF und ADF
- EDX - Oxford¹ ISIS System mit 30mm ATW Detektor

B.1.3 Röntgen-Fluoreszenz-Analyse (RFA)

Die RF-Messungen sind an einem Gerät (MagiX) der Firma PanAnalytical² durchgeführt worden. Die Auswertung der Messungen geschah mit dem Programm SuperQ.

Die RFA ist mit einem CuInSe₂-Einkristall und einer KCN geätzten Cu-reich präparierten CuInSe₂-Schicht, die stöchiometrisch sind, kalibriert worden.

Eine Analyse des Fehler der Kompositionsbestimmung erfolgt durch die statistische Mittelung über mehrere Messungen an verschiedenen Proben. Die Ergebnisse sind in Tabelle B.2 zusammengefasst. Wie man sieht ist der statistische Fehler der Analyse des Röntgen-Fluoreszenz-Spektrums kleiner als 0.3at.%. Der resultierende Fehler für das [Cu]/[In]-Verhältnis ist kleiner als 0.03.

B.2 Experimentelle Methoden zur Röntgenbeugung

Es sind drei verschiedene Röntgenbeugungsverfahren angewendet worden, die im Folgenden kurz skizziert werden.

B.2.1 θ -2 θ -Diffraktogramme

Die θ -2 θ -Diffraktogramme sind eine Standardmethode zur Kristallphasenanalyse von polykristallinen Schichten oder Pulverproben. Bei dieser Messmethode werden Quelle und Detektor gleichmäßig bewegt. Indem die Probe in Rotation versetzt wird und wegen der verschiedenen räumlichen Orientierung bei polykristallinen Proben, kann für alle erlaubten Gitter-Reflexe die Braggsche Reflektionsbedingung erfüllt werden. Damit ist eine Kristallphasen- und strukturanalyse möglich.

Bei epitaktischen Proben, die hoch orientiert sind, muss die Probe genau ausgerichtet werden, um die

¹www.oxinst.com

²www.panalytical.com

Tabelle B.2: Fehleranalyse der RFA-Messungen

Probe	p_{Cu}/p_{In}	Dicke nm	[Cu] Mol %	[In] Mol %	[Cu]/[In]
cis035-1	2.580	338.1 ± 0.450	24.563 ± 0.324	26.125 ± 0.686	0.940 ± 0.028
cis035-2	2.580	339.6 ± 0.450	24.459 ± 0.324	26.160 ± 0.686	0.935 ± 0.027
cis035-3	2.580	338.7 ± 0.450	25.290 ± 0.324	24.670 ± 0.686	1.025 ± 0.031
cis035-4	2.580	338.4 ± 0.450	25.030 ± 0.324	24.870 ± 0.686	1.006 ± 0.031
cis043-1	2.074	461.3 ± 5.775	26.055 ± 0.077	25.277 ± 0.196	1.031 ± 0.009
cis043-2	2.074	463.9 ± 5.775	26.292 ± 0.077	25.247 ± 0.196	1.041 ± 0.009
cis043-3	2.074	449.7 ± 5.775	26.190 ± 0.077	25.060 ± 0.196	1.045 ± 0.009
cis043-4	2.074	452.4 ± 5.775	26.120 ± 0.077	24.680 ± 0.196	1.058 ± 0.009
cis045-1	1.316	549.1 ± 2.475	24.130 ± 0.089	26.925 ± 0.100	0.896 ± 0.005
cis045-2	1.316	548.8 ± 2.475	24.266 ± 0.089	26.789 ± 0.100	0.906 ± 0.005
cis045-3	1.316	542.9 ± 2.475	24.390 ± 0.089	26.570 ± 0.100	0.918 ± 0.005
cis045-4	1.316	545.1 ± 2.475	24.170 ± 0.089	26.800 ± 0.100	0.902 ± 0.005
cis046-1	1.063	571.1 ± 3.325	23.431 ± 0.202	27.409 ± 0.212	0.855 ± 0.010
cis046-2	1.063	572.7 ± 3.325	23.521 ± 0.202	27.318 ± 0.212	0.861 ± 0.010
cis046-3	1.063	566.1 ± 3.325	24.010 ± 0.202	27.030 ± 0.212	0.888 ± 0.010
cis046-4	1.063	564.4 ± 3.325	23.750 ± 0.202	26.850 ± 0.212	0.885 ± 0.010
cis052-1	2.327	874.7 ± 1.500	25.464 ± 0.023	25.969 ± 0.027	0.981 ± 0.001
cis052-2	2.327	877.7 ± 1.500	25.510 ± 0.023	25.915 ± 0.027	0.984 ± 0.001

Reflektionsbedingung erfüllen zu können. Die Messungen am HMI sind an einem Pulver-Diffraktometer der Firma Bruker (D8)³ mit einer Cu-Kathode als Quelle für die Röntgenstrahlung durchgeführt worden. Es wird sowohl die $Cu(K\alpha_1)$ als auch die $Cu(K\alpha_2)$ Strahlung für die Messungen verwendet. Dies führt zu doppelten Maxima-Strukturen im Diffraktogramm, wobei die Intensität des durch die $K\alpha_2$ Strahlung verursachten Maximums, die Hälfte des Maximums der $K\alpha_1$ Strahlung beträgt.

Die Messungen an den epitaktischen Schichten sind ohne Rotation durchgeführt worden. Für die XRD-Messungen ist ein Austrittsspalt mit einer horizontale Breite von $b_1 = 2\text{mm}$ gewählt worden und von Eintrittsspalt vor dem Detektor mit einer horizontalen Breite von $b_2 = 1\text{mm}$. Als Detektor dient ein Szintillationszähler. Die Schrittweite der Messung betrug 0.02° , das Auflösungsvermögen der Messung ist dementsprechend genauso groß.

B.2.2 Hochauflösende Röntgenbeugungsmessungen (HR-XRD)

Für hochauflösende θ - 2θ -Diffraktogramme und *reciprocal space maps* ist ein speziell für epitaktische Schichten entwickeltes Diffraktometer (Xt'Pert) der Firma PanAnalytical verwendet worden. Als Röntgenquelle dient eine Cu-Kathode. Die Strahlung wird durch einen 4-Reflexionen-Ge-Monochromator gefiltert, so dass nur die $Cu(K\alpha_1)$ -Strahlung mit einer Wellenlänge von $\lambda_{K\alpha_1} = 1.54056\text{\AA}$ und einer Auflösung von $\Delta\theta = 12\text{arcsec}$ zur Messung genutzt wird. Die Probe wird in einer Eulerwiege befestigt. Quelle, Probe und Detektor sind somit voneinander unabhängig und können in allen Raumrichtungen bewegt werden.

In Abbildung B.1 ist eine Skizze des experimentellen Aufbaus dargestellt. Die Messungen wurden am *Center for Microanalysis of Materials* der *University of Illinois at Urbana-Champaign* in Zusammenarbeit mit Mauro Sardela⁴ durchgeführt.

Die θ - 2θ - Messungen werden jetzt als $\omega - 2\theta$ Messungen bezeichnet, da nicht nur symmetrische Reflexe untersucht werden. ω bezeichnet dabei den Winkel zwischen Quelle und Probe, während θ der Winkel

³www.bruker-axs.de

⁴sardela@uiuc.edu

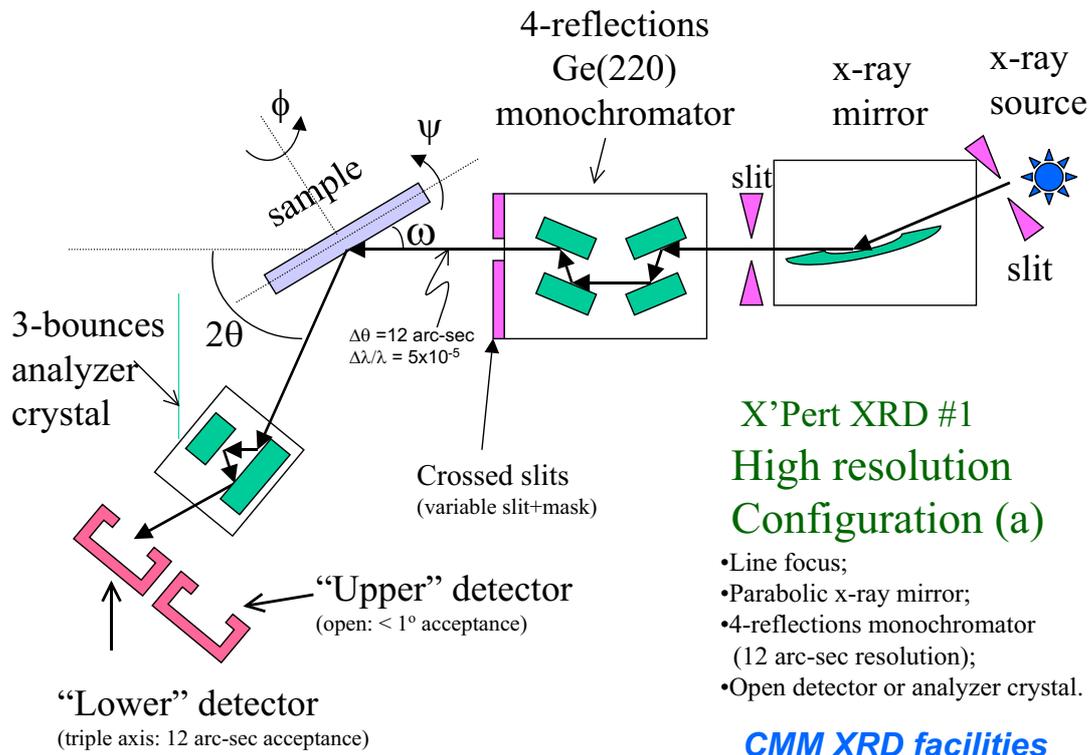


Abbildung B.1: Skizze des experimentellen Aufbaus der HRXRD-Messungen. Mit Dank an Mauro Sardela.

zwischen Probe und Detektor ist. Durch die frei Wahl des Einfallswinkels und durch Drehung der Probe lässt die Reflexionsbedingung für eine bestimmte (hkl) -Gitterebene exakt einstellen.

Der Austrittsspalt (*Crossed slits* in Abb. B.1) wird so gewählt, dass möglichst viel von der Probe bestrahlt wird, um eine hohe Intensität der Reflexe zu erzielen. Bei den in Kapitel 4.3 vorgestellten Messungen beträgt die horizontale Breite des Austrittsspalt $b_H = 1\text{mm}$ und die vertikale $b_V = 3\text{mm}$. Der Detektor hat bei diesen Messungen ein Öffnungswinkel $< 1^\circ$ (*'Upper' detector* in Abb. B.1). Die Probe wird so justiert, dass der GaAs $-(004)$ -Reflex maximale Intensität erreicht. Die Schrittweite der Messungen beträgt 0.0025° .

B.2.3 Reciprocal Space Map

Um eine Reciprocal Space Map aufnehmen zu können, ist es erforderlich einen kleinen Detektor-Öffnungswinkel zu verwenden. Im Gegensatz zu den vorher beschriebenen ω - 2θ -Messungen erfolgt die Detektion mittels eines Analysator-Kristall (*3-bounces analyzer crystal* in Abb. B.1), der einen Öffnungswinkel von 12 arcsec hat. Die Justage erfolgt wie bei den vorher beschriebenen $\omega - 2\theta$ -Messungen. Die Messungen aus Jena zeigen teilweise mehrere Maxima bei den GaAs-Reflexionen, was durch eine ungenaue Justage begründet wird.

Die RSM besteht aus einer Vielzahl $\omega - 2\theta$ -Messungen, wobei ω bei jeder Messung schrittweise erhöht wird. Diese können in eine Karte des reziproken Gitters in der ausgewählten Richtung nach Gleichung 2.24 umgerechnet werden. Die Achsen werden in reziproken Gittereinheiten (*reciprocal lattice units, rlu*) angegeben (vgl. Abs. 2.3.4).

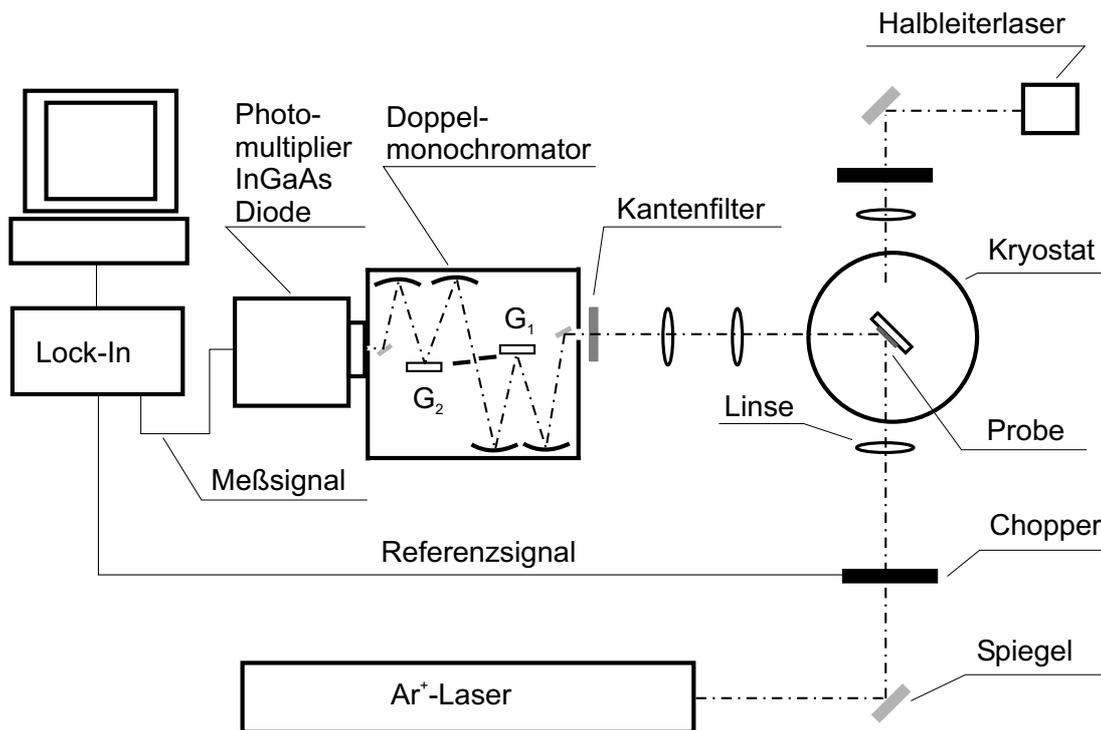


Abbildung B.2: Experimenteller Aufbau für Photolumineszenzuntersuchungen.

B.3 Experimenteller Aufbau und der Fehlerabschätzung der Photolumineszenz -Messung

Die Abbildung B.2 zeigt eine schematische Darstellung des verwendeten Photolumineszenz-Aufbaus. Als Anregungsquelle standen ein Argon-Ionen-laser (coherent innova 90) mit Emissionslinien im sichtbaren (450nm bis 514nm) und UV-Spektralbereich (330nm bis 360nm) sowie ein Halbleiterlaser (668nm) zur Verfügung. Untersuchungen in Abhängigkeit von der Anregungsleistungsdichte sind in der Regel unter Verwendung der 514.5nm -Linie des Ar^+ -Lasers durchgeführt worden, da diese die höchste Ausgangsleistung besitzt. Mit Hilfe von Graufiltern konnten so Variationen der Anregungsdichte im Bereich von etwa $1\text{mW}/\text{cm}^2$ bis zu einigen $1000\text{W}/\text{cm}^2$ erreicht werden. Die Proben sind in einem Helium-Durchflusskryostaten (Oxford) gekühlt worden. Das von der Probe emittierte Licht wird durch ein Linsensystem auf den Eintrittsspalt eines Doppelmonochromators mit 0.22m Brennweite (Spex 1680) abgebildet. Für den Messbereich zwischen 700nm und 1600nm wurde ein Gitter mit 600 Strichen/ mm und einer Blazewellenlänge von $\lambda_{\text{Blaze}} = 1000\text{nm}$ verwendet. Die lineare reziproke Dispersion beträgt $3.6\text{nm}/\text{mm}$, was zu einer spektralen Auflösung von 1.2nm bei einer Spaltbreite von $400\mu\text{m}$ führte.

Das spektral zerlegte Licht der $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ -Proben wird je Ga-Gehalt entweder mit einem Photomultiplier ($E_{\text{Gap}}^{\text{CIGS}} > 1.3\text{eV}$, $\lambda > 950\text{nm}$, $[\text{Ga}]/([\text{Ga}] + [\text{In}]) > 0.4$) oder einer Photodiode ($E_{\text{Gap}}^{\text{CIGS}} < 1.3\text{eV}$, $\lambda < 950\text{nm}$, $[\text{Ga}]/([\text{Ga}] + [\text{In}]) < 0.4$) detektiert. Der Photomultiplier (Hamamatsu R3236) ist stickstoffgekühlt. Die Photokathode besteht aus einer Ag-O-Cs-Verbindung (S1-Kathode), mit einer Empfindlichkeit im Bereich zwischen 380nm und 1050nm . Für die Messungen im infrarotem Spektralbereich kommt eine *InGaAs*-Photodiode zum Einsatz. Diese wird mit einer Piezo-Kühlung auf -25°C gekühlt. In Abbildung B.3 sind die spektralen Empfindlichkeiten der beiden Detektoren gezeigt. Man erkennt, dass die *InGaAs*-Photodiode um 1.5 Größenordnungen geringere Dynamik aufweist als der Photomultiplier.

Die Signalverarbeitung erfolgte mittels Lock-In-Technik. Die Ansteuerung des Monochromators und die Aufzeichnung der Messdaten erfolgte über Labview®-Programmrountinen. Die Spektren wurden anschließend mit der spektralen Empfindlichkeit der Messapparatur und der Apparatefunktion korrigiert,

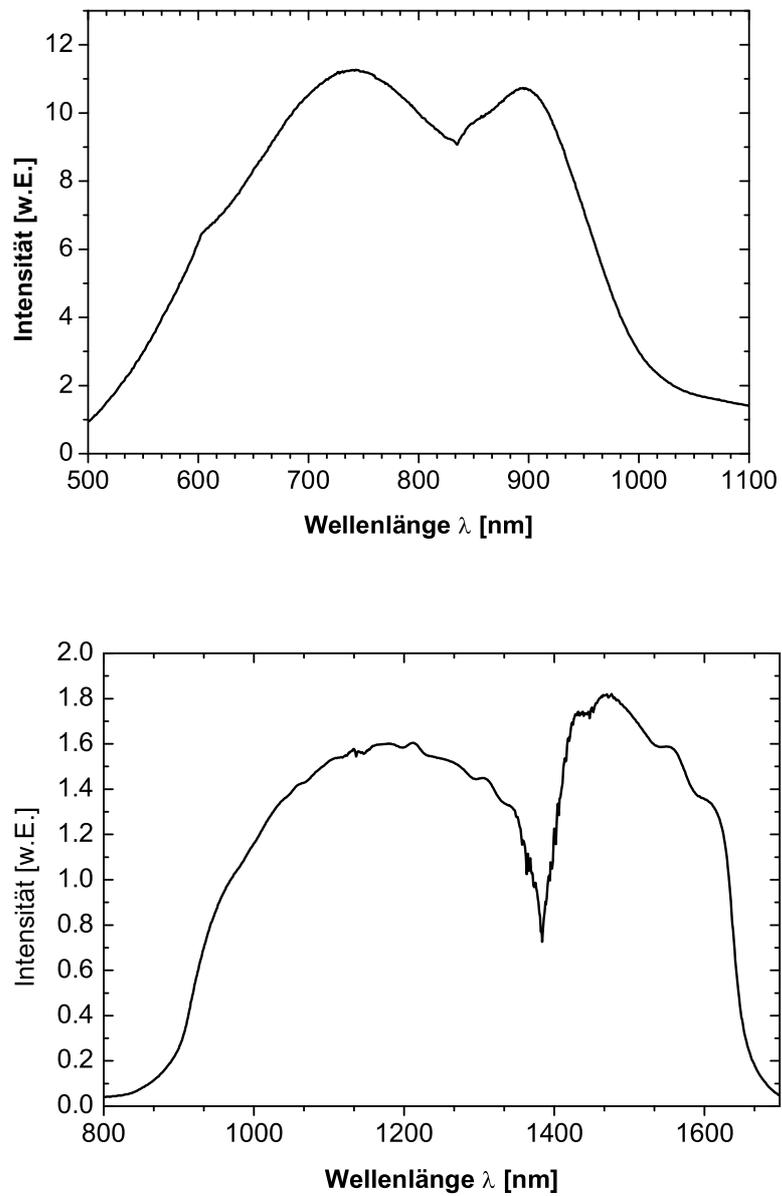


Abbildung B.3: Spektrale Empfindlichkeit des Photomultipliers und der *InGaAs*-Photodiode, einschließlich der Apparatfunktion des Monochromators.

die in Kalibrierungsmessungen bestimmt wurde.

Ergänzende Tabellen

Tabelle C.1: Gitterkonstanten a und c sowie Bandlückenenergie E_{Gap} für Cu(In,Ga)Se₂ bei ausgewählten Ga-Gehalten ($GGI=[Ga]/([Ga]+[In])$)

GGI	$E_{Gap}[eV]$	$c[\text{Å}]$	$a[\text{Å}]$
0.0	1.045	11.590	5.777
0.05	1.072	11.562	5.769
0.1	1.099	11.533	5.761
0.15	1.127	11.505	5.753
0.2	1.156	11.476	5.745
0.25	1.186	11.448	5.737
0.3	1.216	11.419	5.728
0.35	1.247	11.391	5.720
0.4	1.279	11.362	5.712
0.45	1.312	11.334	5.704
0.5	1.345	11.305	5.696
0.55	1.379	11.277	5.688
0.6	1.414	11.248	5.680
0.65	1.450	11.220	5.672
0.7	1.486	11.191	5.664
0.75	1.523	11.163	5.656
0.8	1.561	11.134	5.647
0.85	1.600	11.106	5.639
0.9	1.639	11.077	5.631
0.95	1.679	11.049	5.623
1.0	1.720	11.020	5.615

Tabelle C.2: Split-Pseudo-Voigt-Profil Anpassung an $\omega - 2\theta$ Diffraktogramme für Cu(In,Ga)Se₂ - Schichten mit unterschiedlichem $[Ga]/([Ga] + [In])$ -Verhältnis. Γ_L ist die Breite der Lorentz-Funktion und Γ_G die Breite der Gauss-Funktion. η_L und η_R geben die Mischung der Lorentz- und Gauss-Funktion auf der linken und rechten Seite der Maxima an.

GGI	$\theta[^\circ]$	Int	$\Gamma_L[^\circ]$	$\Gamma_G[^\circ]$	η_L	η_R
0	63.9290(67)	1659(14)	0.260(5)	0.315(10)	0.000(22)	0.789(34)
GaAs	66.0511(1)	10118(29)	0.006(0)	0.006(0)	0.904(17)	0.823(24)
0.08	64.3277(69)	2134(17)	0.253(5)	0.363(9)	0.000(21)	0.655(31)
GaAs	66.0471(1)	9270(33)	0.004(0)	0.005(0)	1.000(25)	0.916(40)
0.19	64.7736(68)	1829(23)	0.305(5)	0.327(9)	0.000(41)	0.788(37)
GaAs	66.0475(1)	9657(27)	0.011(0)	0.01(0)	0.600(11)	0.664(15)
0.29	65.3223(276)	29183(18534)	0.101(27)	0.243(128)	0.554(214)	0.042(1.915)
GaAs	66.0603(37)	163255(25168)	0.081(3)	0.076(15)	0.000(0.137)	0.009(333)
0.33	64.8306(852)	413(254)	0.147(92)	1.171(788)	0.825(876)	0.989(1.028)
CuGaSe ₂	68.4143(204)	317(236)	2.630(1.167)	0.240(251)	0.104(3.293)	1.000(1.068)
GaAs	66.0502(19)	9161(297)	0.059(2)	0.084(2)	0.168(121)	0.263(54)
0.36	65.4448(39)	18729(711)	0.102(5)	0.513(34)	0.958(54)	0.748(99)
GaAs	66.0264(11)	57729(1404)	0.064(1)	0.129(5)	0.035(43)	0.047(24)
0.5	65.3644(82)	1231(59)	0.318(6)	0.676(19)	0.000(28)	1.000(89)
CuGaSe ₂	68.213(39)	163(64)	0.752(119)	0.363(35)	0.929(65)	0.000(298)
GaAs	66.0459(1)	9296(16)	0.009(0)	0.009(0)	0.232(3)	0.274(4)
0.5	65.4225(87)	1533(49)	0.309(7)	0.545(18)	0.000(27)	1.000(67)
CuGaSe ₂	68.3419(428)	311(90)	0.875(106)	0.314(46)	1.000(413)	0.927(354)
GaAs	66.0536(1)	9082(22)	0.008(0)	0.004(0)	0.277(5)	0.776(27)
0.55	65.7684(166)	1191(330)	0.287(15)	0.992(80)	0.521(115)	0.067(864)
	67.2393(451)	110(117)	0.232(64)	0.291(121)	0.004(1.557)	0.807(983)
CuGaSe ₂	68.5179(738)	144(110)	0.506(170)	0.438(90)	0.001(1.891)	0.69(1.079)
GaAs	66.0400(1)	8162(19)	0.007(0)	0.005(0)	0.320(6)	0.618(21)
0.6	65.8713(179)	953(168)	0.307(14)	0.997(175)	0.334(169)	0.000(165)
	67.214(25)	204(114.4)	0.330(96)	0.205(27)	1.000(434)	0.000(635)
CuGaSe ₂	68.4765(425)	230(186)	0.592(260)	0.306(43)	1(1.071)	0.377(0.861)
GaAs	66.0442(1)	10866(20)	0.006(0)	0.005(0)	0.751(9)	0.97(2)
0.61	65.8664(349)	151(2)	0.158(4)	0.005(4)	1.000(33)	0.989(546)
	67.2034(239)	191(67)	0.363(49)	0.275(24)	0.000(1.102)	0.157(615)
CuGaSe ₂	68.5032(13)	132(23)	0.378(24)	0.274(12)	0.067(528)	0.000(128)
GaAs	66.0367(0)	9495(9)	0.006(0)	0.006(0)	0.855(5)	0.93(1)
0.73	66.4259(148)	602(102)	0.145(16)	0.454(30)	0.0(5)	0.268(386)
	67.3155(293)	601(62)	0.933(71)	0.215(27)	0.692(75)	0.600(342)
CuGaSe ₂	68.4723(80)	306(10)	0.153(11)	0.144(8)	1.000(95)	0.526(77)
GaAs	66.0510(1)	9552(22)	0.01(0)	0.008(0)	0.274(5)	0.586(12)
0.84	67.3302(46)	960(13)	0.105(4)	0.093(7)	0.183(28)	1.000(81)
CuGaSe ₂	68.4445(62)	279(7)	0.062(9)	0.087(5)	1.000(155)	0.044(69)
GaAs	66.0466(1)	6484(29)	0.005(0)	0.004(0)	0.375(11)	0.668(18)
0.89	67.9923(12)	1902(14)	0.051(1)	0.043(1)	0.431(21)	0.488(27)
GaAs	66.0463(1)	7606(28)	0.005(0)	0.006(0)	0.409(12)	0.402(12)

Symbolliste

Abkürzungen

A:	Akzeptor
BX:	gebundenes Exziton
CL:	Kathodolumineszenz
D:	Donator
DA1:	Donator-Akzeptor-Paar Übergang zwischen D und A1
DA2:	Donator-Akzeptor-Paar Übergang zwischen D und A2
ECP:	<i>electron channeling pattern</i>
EDP:	<i>electron diffraction pattern</i>
EDX:	Energie-dispersive Röntgenanalyse <i>energy dispersive x-ray analysis</i>
EX:	Exziton
FB:	<i>free-to-bound</i> Übergang
FX:	freies Exziton
HR-XRD:	<i>high resolution</i> XRD
PL:	Photolumineszenz
PV:	Pseudo-Voigt-Funktion
REM:	Raster-Elektronen-Mikroskop (<i>SEM: scanning electron microscopy</i>)
RFA:	Röntgen-Fluoreszenz-Analyse (<i>XRF: x-ray fluorescence analysis</i>)
RGP:	reziproker Gitterpunkt
RSM:	<i>reciprocal space map</i>
SPV:	Split-Pseudo-Voigt-Funktion
TEM:	<i>transmission electron microscopy</i>
WDX:	<i>wavelength dispersive x-ray analysis</i>
UPS:	<i>ultraviolet photo emission spectroscopy</i>
XPS:	<i>X-Ray photo emission spectroscopy</i>
XRD:	Röntgenbeugung <i>x-ray diffraction</i>
JCPDS:	Joint Committee of Powder Diffraction Standards

Naturkonstanten

c :	$2.99792458 \cdot 10^8 [m/s]$	Lichtgeschwindigkeit
e :	$1.60217733 \cdot 10^{-19} [C]$	Elementarladung
ϵ_0 :	$8.854187817 \cdot 10^{-12} [C^2/J \cdot m]$	Dielektrizitätskonstante des Vakuums
h :	$6.6260755 \cdot 10^{-34} [J \cdot s]$	Plancksche Wirkungsquantum
k_B :	$8.617385 \cdot 10^{-5} [eV/K]$	Boltzmannkonstante

m_0 : $9.1093897 \cdot 10^{-31} [kg]$ Elektronenruhemasse

Symbole

e :		Elektron
h :		Loch
a_e :	$[m]$	effektiver Bohr-Radius eines Elektrons
a_h :	$[m]$	effektiver Bohr-Radius eines Lochs
m_e :	$[m]$	effektive Elektronenmasse
m_e^{CIS} :	$[kg]$	effektive Elektronenmasse im CuInSe ₂
m_e^{CGS} :	$[kg]$	effektive Elektronenmasse im CuGaSe ₂
m_h :	$[kg]$	effektive Lochmasse
m_h^{CIS} :	$[kg]$	effektive Lochmasse im CuInSe ₂
m_h^{CGS} :	$[kg]$	effektive Lochmasse im CuGaSe ₂
m_r :		reduzierte Masse
m_r^{CIS} :		reduzierte Masse im CuInSe ₂
m_r^{CGS} :		reduzierte Masse im CuGaSe ₂
ϵ_r :		Dielektrizitätskonstante
ϵ_r^{CIS} :		Dielektrizitätskonstante im CuInSe ₂
ϵ_r^{CGS} :		Dielektrizitätskonstante im CuGaSe ₂
η :	$[\%]$	Wirkungsgrad einer Solarzelle

Präparation & MOVPE

$[Ga]$:	$[at.\%]$	Gallium-Gehalt in Atomgewichtsprozent
$[Se]$:	$[at.\%]$	Selen-Gehalt in Atomgewichtsprozent
$[In]$:	$[at.\%]$	Indium-Gehalt in Atomgewichtsprozent
$[Cu]$:	$[at.\%]$	Kupfer-Gehalt in Atomgewichtsprozent
$[As]$:	$[at.\%]$	Arsen-Gehalt in Atomgewichtsprozent
GGI :		$[Ga]/([Ga] + [In])$, integraler Ga-Gehalt
GGI_{sur} :		oberflächennaher Ga-Gehalt
GGI_{RSM} :		aus RSM bestimmter Ga-Gehalt
ΔGGI :		Differenz im Ga-Gehalt
p_{Cu} :	$[mbar]$	Partialdruck des In-Precursor
p_{In} :	$[mbar]$	Partialdruck des In-Precursor
p_{Ga} :	$[mbar]$	Partialdruck des In-Precursor
p_{Se} :	$[mbar]$	Partialdruck des In-Precursor
r_G :	$[nm/h]$	Wachstumsrate
δ_{Ga} :	$[[Ga]/nm]$	Ga-Gradient

Defekte

A^0 :		neutraler Akzeptor
A^- :		negativ geladener Akzeptor
D^0 :		neutraler Donator
D^+ :		negativ geladener Donator
E_A :	$[meV]$	Ionisierungsenergie des Akzeptors
E_D :	$[meV]$	Ionisierungsenergie des Donators

K :		Kompensationsgrad
N_A :	cm^{-3}	Akzeptorkonzentration
N_D :	cm^{-3}	Donatorkonzentration
N_t :	cm^{-3}	Defektdichte
V_{Cu} :		Kupfer Leerstelle
V_{In} :		Indium Leerstelle
V_{Ga} :		Gallium Leerstelle
V_{Se} :		Selen Leerstelle
Cu_{In} :		Kupfer auf Indium Vertauschung
Cu_{Ga} :		Kupfer auf Gallium Vertauschung
Cu_{Se} :		Kupfer auf Selen Vertauschung
In_{Cu} :		Indium auf Kupfer Vertauschung
In_{Ga} :		Indium auf Gallium Vertauschung
In_{Se} :		Indium auf Selen Vertauschung
Ga_{Cu} :		Gallium auf Kupfer Vertauschung
Ga_{In} :		Gallium auf Indium Vertauschung
Cu_{Se} :		Gallium auf Selen Vertauschung
Se_{Cu} :		Selen auf Kupfer Vertauschung
Se_{In} :		Selen auf Indium Vertauschung
Se_{Ga} :		Selen auf Gallium Vertauschung
Cu_i :		Kupfer auf Zwischengitterplatz
In_i :		Indium auf Zwischengitterplatz
Ga_i :		Gallium auf Zwischengitterplatz
Se_i :		Selen auf Zwischengitterplatz

Energien

ΔH :	[eV]	Bildungsenthalpie
Δ_{CF} :	[meV]	Kristallfeldaufspaltung des Valenzbandes im tetragonalen Kristall
Δ_{SO} :	[meV]	Spin-Orbit-Aufspaltung des Valenzbands im tetragonalen Kristall
$E_{1,2,3}$:	[meV]	Energieaufspaltung des Valenzband im quasi-kubischen System
E_a :	[eV]	Energie der kleinsten Bandlücke in der Chalcopyritstruktur
E_b :	[eV]	Energie der mittleren Bandlücke in der Chalcopyritstruktur
E_c :	[eV]	Energie der größten Bandlücke in der Chalcopyritstruktur
$[E_{FX}]$:	[meV]	Exzitonbindungsenergie
$[E_d]$:	[meV]	Defektenergie eines beliebigen Defekts
$[E_D]$:	[meV]	Defektenergie eines Donators
$[E_A]$:	[meV]	Defektenergie eines Akzeptors
$[E_{Gap}]$:	[meV]	Bandlückenenergie, Differenz zwischen Leitungsbandminimum und Valenzbandmaximum
$[E_{Gap}^{CIGS}]$:	[eV]	Bandlücke von $Cu(In,Ga)Se_2$, wenn nicht anders angegeben bei 10K
$[E_{Gap}^{CGS}]$:	[eV]	Bandlücke von $CuGaSe_2$, wenn nicht anders angegeben bei 10K
$[E_{Gap}^{CIS}]$:	[eV]	Bandlücke von $CuInSe_2$, wenn nicht anders angegeben bei 10K
$[E^{Akt}]$:	[meV]	thermische Aktivierungsenergie

Temperaturen

T :	[K]	Temperatur
T_G :	[°C]	Wachstumstemperatur

T_M^{CGS} :	[°C]	Schmelztemperatur von CuGaSe ₂
T_M^{CIS} :	[°C]	Schmelztemperatur von CuInSe ₂

strahlende Übergänge

α :	[cm ⁻¹]	Absorptionskoeffizient
Γ_{EX} :	[meV]	Halbwertsbreite einer exzitonischen Emission
$h\nu$:	[eV]	Photonenenergie
$[h\nu_{BB}]$:	[eV]	Band-Band Emissionsenergie
$[h\nu_{EX}]$:	[eV]	Exziton Emissionsenergie
$[h\nu_{FX}]$:	[eV]	Emissionsenergie des freien Exziton
$[h\nu_{BX}]$:	[eV]	Emissionsenergie des gebundenen Exziton
$[h\nu_d]$:	[eV]	defektkorrelierte Emissionsenergie
$[\lambda_{Exc}]$:	[nm]	Anregungswellenlänge des Laser bei PL-Messung
$[w]$:	[meV]	Halbwertsbreite einer Emission, bei gaussförmigen Emission Breite der Gaussfunktion
$[P_{Exc}]$:	[mW]	Anregungsleistung des Laser bei PL-Messung
$[\lambda_{Exc}]$:	[nm]	Anregungswellenlänge des Laser bei PL-Messung
$[I_{Exc}]$:	[A]	Elektronenstrom zur Anregung bei CL-Messung
$I(h\nu)$:	[w.E.]	Intensitätsverlauf eines PL-Speltrums
β :	[meV/Dek.]	Blauverschiebung des Emissionsmaximums bei DAP-Übergängen
$[k]$:		Exponent in Gl.2.31
j :	[meV/K]	Verschiebung des Emissionsmaximums mit der Temperatur
r_0 :	[nm]	Ausdehnung der Potenzialfluktuation
r_{DA} :	[nm]	Abstand eines DAP
γ :	[meV]	mittlere energetische Tiefe der Potenzialfluktuationen
γ_0 :	[meV]	charakteristische Energie des niederenergetischen Abfalls einer DAP-Emission in fluktuierenden Potenzialen
S :		Huang-Rhys-Faktor

Kristallstruktur & Röntgenbeugung

α_{mac} :		Massen-Absorptions-Koeffizient für die Absorption von Röntgenstrahlung
a :	[Å]	Gitterkonstante in [100]-Richtung
a^l :	[Å]	Gitterkonstante der Schicht in [100]-Richtung
a^s :	[Å]	Gitterkonstante des Substrats in [100]-Richtung
a_{str} :	[Å]	Gitterkonstante in [100]-Richtung unter Verspannung
c :	[Å]	Gitterkonstante in [001]-Richtung
c^l :	[Å]	Gitterkonstante der Schicht in [001]-Richtung
c^s :	[Å]	Gitterkonstante des Substrats in [001]-Richtung
c_{str} :	[Å]	Gitterkonstante in [001]-Richtung unter Verspannung
c_{str} :	[Å]	Gitterkonstante in [001]-Richtung unter Verspannung
C_{13} :	[GPa]	Element des Elastizitätstensor
C_{33} :	[GPa]	Element des Elastizitätstensor
d :	[m]	Abstand
d_c :	[m]	kritische Schichtdicke
d_{hkl} :	[m]	Abstand der (hkl)-Gitterebenen
d_l :	[m]	Schichtdicke (layer)

d_s	[m]	Substrat-Schichtdicke (substrate)
ϵ_{11} :		Element des Deformationstensors in x-Richtung
ϵ_{22} :		Element des Deformationstensors in y-Richtung
ϵ_{33} :		Element des Deformationstensors in z-Richtung
ϵ_{\perp} :		Verzerrung senkrecht zur Oberfläche
ϵ_{\parallel} :		Verzerrung parallel zur Oberfläche
η_{str} :		tetragonale Verzerrung der Chalkopyrit-Einheitszelle
ν_p :		Poisson-Verhältnis
R_{A-B} :	[nm]	Bindungslänge zwischen Anion und (B)-Kation
R_{A-C} :	[nm]	Bindungslänge zwischen Anion und (C)-Kation
u :	[nm]	Anionverschiebung in der Chalkopyrit-Einheitszelle
\vec{k}_0 :		Vektor der einfallenden Welle bei der Röntgenstreuung
\vec{k}_h^i :		Vektor der gestreuten Welle bei der Röntgenstreuung
\vec{Q} :		Streuvektor
θ :	[°]	Einfallswinkel bei XRD-Messungen in Bragg-Brentano-Geometrie
2θ :	[°]	Reflektionswinkel in XRD-Messungen mit Indices für Gitterebenen (hkl, subskript) und Verbindungen (CIS, CGS, CIGS, GaAs, super-skript)
ω :	[°]	Einfallswinkel bei HR-XRD-Messungen
Ω :	[°]	Breite einer RSM in ω -Richtung, parallel zum Umfang der Ewald-Kugel
F_{hkl} :		Strukturfaktor der Röntgenstreuung in [hkl]-Richtung
f_i :		Atomfaktor der Röntgenstreuung
ρ :	[g/cm ³]	Materialdichte
ρ_e :	[e/cm ³]	Elektronendichte
$eta_{l,r}$:		Mischungsfaktor bei SPV
$w_{l,r}$:		Halbwertsbreite der Lorentz- bzw. Gaussfunktion der SPV
R_{Ewald} :	1/Å	Radius der Ewald-Kugel
Q_x :	1/Å	Koordinate des reziproken Gitters in x-Richtung
Q_z :	1/Å	Koordinate des reziproken Gitters in z-Richtung

Veröffentlichungen und Konferenzbeiträge

Teile der Arbeit sind bereits veröffentlicht unter:

- Rega, N., S. Siebentritt, J. Albert and M. Lux-Steiner (2003). *Photoluminescence of Cu(In_{1-x}Ga_x)Se₂ epitaxial thin film grown by MOVPE*. MRS Spring Conference 2003, San Francisco, Materials Research Society.
- Rega, N., S. Siebentritt, I. Beckers, J. Beckmann, J. Albert and M. Lux-Steiner (2003). *MOVPE of epitaxial CuInSe₂ on GaAs*. Journal of Crystal Growth 248: 169-174.
- Rega, N., S. Siebentritt, I. E. Beckers, J. Beckmann, J. Albert and M. Lux-Steiner (2003). *Defect spectra in epitaxial CuInSe₂ grown by MOVPE*. Thin Solid Films 431-432: 186-189.

Weiter Veröffentlichung sind:

- Alvarez-García, J., E. Rudigier, N. Rega, B. Barcones, R. Scheer, A. Pérez-Rodríguez, A. Romano-Rodríguez and J. R. Morante (2003). *Growth process monitoring and crystalline quality assessment of CuInS(Se)₂ based solar cells by Raman spectroscopy*. Thin Solid Films 431 - 432: 122 - 125.
- Artaud-Gillet, M. C., S. Duchemin, R. Odedra, G. Orsal, N. Rega, S. Rushworth and S. Siebentritt (2003). *Evaluation of copper organometallic sources for CuGaSe₂ photovoltaic applications*. Journal of Crystal Growth 248: 163-68.
- Schuler, S., S. Nishiwaki, J. Beckmann, N. Rega, S. Brehme, S. Siebentritt and M. C. Lux-Steiner (2002). *Charge Carrier Transport in Polycrystalline CuGaSe₂ Thin Films*. 29th IEEE Photovoltaic Specialist Conference, New Orleans, IEEE.
- Schuler, S., S. Siebentritt, S. Nishiwaki, N. Rega, J. Beckmann, S. Brehme and M. C. Lux-Steiner (2004). *Self-compensation of intrinsic defects in the ternary semiconductor CuGaSe₂*. Phys. Rev. B 69: 45210-1 - 45210-9.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Niklas Rega
Prenzlauer Allee 35
10405 Berlin
E-Mail: niklas.rega@gmx.net
Geb. am 18. 10. 1973 in Hildesheim

Grundschule

08/1980–06/1986 Burgdorf und Hollenstedt

Gymnasium

08/1986–05/1993 Neu Wulmstorf

Mai 1993 Abitur (Leistungskurse Mathematik und Physik)

Zivildienst

11/1993–01/1995 Mobiler sozialer Hilfsdienst
bei der Johanniter Unfallhilfe eV Überlingen am Bodensee

Studium

04/1995–09/2000 Physikstudium an der Universität Hamburg

09/1999–09/2000 Diplomarbeit bei CENSIS, Prof. Spitzer
Klassifikation von hochauflösenden Multispektralbildern städtischer Gebiete mittels
Fuzzy-Methoden

September Diplom

Doktorarbeit

02/2001–02/2004 Doktorarbeit am HMI im Rahmen des Projektes Hochspannungsnetz

02/2003–05/2003 Forschungsaufenthalt an der University of Urbana-Champaign, Illinois, USA bei Prof.
Angus Rockett

26. Juli 2004

Danksagung

Danke!

Am Ende möchte ich mich bei folgenden Menschen bedanken, die ihren Teil am Gelingen dieser Doktorarbeit beigetragen haben:

Frau Prof. M. Ch. Lux-Steiner hat mir die Möglichkeit gegeben diese Doktorarbeit in ihrer Abteilung anzufertigen. Ohne ihr Engagement für die Solarenergieforschung stünde am HMI nicht eine so gute Ausstattung für die Erforschung und Entwicklung neuer Solarzellen zur Verfügung.

Herrn Prof. W. Brewer war so freundlich sich als Zweitgutachter zur Verfügung zu stellen.

Susanne Siebentritt, ohne Dich wäre die Arbeit wahrscheinlich nicht zustande und geschweige denn zu einem (guten) Ende gekommen. Zitat:

Eine Doktorarbeit besteht nicht nur darin selbstständig zu arbeiten, sondern auch selbstständig zum Ende zu kommen

Jürgen Albert hat so gut wie alle epitaktischen Schichten präpariert. Ihm gebührt der Titel 'Master of the MOCVD-System'. Darüber hinaus hat er die schönsten REM Bilder aufgenommen, ich sagt' nur Würmer! Achja, die Jahre mit Dir im Büro waren sehr gut, insbesondere der Kaffee ...

Ulrich Fiedeler, ohne ihn hätte von dieser Stelle niemals gehört und wüsste bis heute nicht, wie spannend Photolumineszenzmessungen an Chalkopyriten wären.

Angus Rockett für die nette Gastfreundschaft in seiner Arbeitsgruppe, während meines Forschungsaufenthaltes an der University of Urbana-Champaign, Illinois und dafür, dass er jede Bitte und Frage prompt beantwortet.

Dem gesamten Team des Materials Research Laboratory in Urbana-Champaign für die freundliche Unterstützung, insbesondere Mauro Sardela.

Changhui Lei aus der Arbeitsgruppe von Angus Rockett für die Geduld mit mir bei der TEM Präparation und die vielen guten Punkt-EDX-Messungen.

Manuel Romero vom NREL für die Kathodolumineszenzmessungen am Querschnitt der Cu(In,Ga)Se₂-Schichten.

Franz Haug von der ETH Zürich für die ElectronChanneling Messungen.

Jürgen Kräußlich von der Universität Jena für die Reciprocal Space Maps.

Allen Menschen vom Hochspannungsnetz, in dessen Rahmen ich diese Arbeit angefertigt habe (tut mir leid, dass ich nicht alle namentlich erwähne, aber es ist schon so spät).

Jörg Beckmann für jedes 'Mausiiiiit' und das beste Hall-System der Welt, auch wenn ich es für meine Arbeit nicht genutzt habe. Es ist großartig!

Timmi Münchenberg für die Zeichnungen zum Hall-probenstab. Ich hoffe, dass es Dir auch etwa Spaß gemacht aht.

Karsten Höhn fürs Aufschrauben des PL-Kryostaten und die gute Betreuung des PL-Messplatzes, auch wenn wir nicht immer einer Meinung waren.

Inge Beckers, die mir all die Dinge über den PL-Messplatz erzählt hat, die Ulli nicht mehr wusste.

Shiro für die epitaktischen Schichten aus der PVD.

Alexander Zajogin für die letzten PL-Messungen und das Lesen des PL-Kapitels.

Phillip Walk fürs Lesen und die nette Musik. Viel Spaß beim Basteln!

Roland Würz auch ein großes DANKSCHÖN fürs Lesen.

Den Kollegen aus der Abteilung und darüber hinaus, die das HMI zu einem sehr netten Arbeitsumfeld machen: Alexander (ich habe es nicht mehr geschafft, Dir etwas zum Lesen zu geben), David, Steffen, Stefan, Thilo, Sascha (tut mit leid, dass ich schnarche), Evi (nicht nur fürs Auto), Jovana, Joachim, Axel, Christian (dessen Laune am Morgen immer wieder bewundernswert ist), Nic, Rocio, Tobias, Serge, Kostas, Mirco, Wolfgang, Hans, Marcus, ... sowie allen Mitarbeitern am HMI die mir geholfen haben.

Meiner Mutter fürs Korrekturlesen.

Meiner Schwester, die schon immer meinte, dass ich doch einen Doktor machen sollte.

Meinem Bruder für die Tastatur.

Lars, der mir gut zugeredet hat, gleich nach der Abgabe Urlaub zu machen.

Roland für die letzten L^AT_EX Layout Hilfen.

Und natürlich Olga. Danke, dass Du es mit mir die letzten Wochen ausgehalten hast. Ich liebe Dich!