

AI) Bestimmung des Volumenanteils von ZnS im ILGAR-ZnS-Dünnsfilm

Annahme: Die zu betrachtenden ILGAR-ZnS-Schichten bestehen ausschließlich aus ZnS und ZnCl₂.

Aus den Stoffmengenanteilen Zn, S und Cl der Schichten, welche über EDX- und/oder RFA-Messungen bestimmt werden, ergeben sich die Stoffmengenanteile ZnS (c_s) und ZnCl₂ (c_{cl}).

Seien mit d_s die Dichte und mit m_s die molekulare Masse von ZnS, mit d_{cl} und m_{cl} Dichte und molekulare Masse von ZnCl₂ bezeichnet, so ergibt sich die molare Dichte n_s und n_{cl} der beiden Verbindungen über:

$$n_s = \frac{d_s}{m_s} \left[\frac{\text{mol}}{\text{cm}^3} \right] \quad (\text{A1})$$

$$n_{cl} = \frac{d_{cl}}{m_{cl}} \left[\frac{\text{mol}}{\text{cm}^3} \right] \quad (\text{A2})$$

Die Stoffmenge ZnCl₂ x_{cl} [mol] der Schicht steht mit der Stoffmenge ZnS x_s [mol] in folgender Relation:

$$c_{cl} = \frac{x_{cl}}{x_{cl} + x_s} \quad x_{cl} = \frac{c_{cl}}{1 - c_{cl}} x_s \quad (\text{A3})$$

Das Gesamtvolumen der Schicht V_{gesamt} ist:

$$V_{\text{gesamt}} = \frac{x_s}{n_s} + \frac{x_{cl}}{n_{cl}} \stackrel{(\text{A3})}{=} \frac{x_s}{n_s} + \frac{c_{cl}}{1 - c_{cl}} \frac{x_s}{n_{cl}} \quad (\text{A4})$$

Das ZnS nehme in der Schicht das Volumen V_s ein. Dann ist dessen Volumenanteil p an dem Gesamtvolumen der Schicht:

$$\begin{aligned} p &= \frac{V_s}{V_{\text{gesamt}}} = \frac{x_s/n_s}{\frac{x_s}{n_s} + \frac{c_{cl}}{1 - c_{cl}} \frac{x_s}{n_{cl}}} \\ &= \dots = \frac{1}{1 + \frac{1 - c_s}{c_s} \frac{n_s}{n_{cl}}} \quad (\text{A5}) \end{aligned}$$

AII) Funktionsprinzip des Spektrophotometers und Auswertung der Transmissions- und Reflexionsspektren

AII-a) Das Spektrophotometer

Transmissions- und Reflexionsmessungen wurden mit dem Spektrophotometer Cary500 (Varian Ltd.) durchgeführt: Die Intensität I_{Probe} eines monochromatischen, über Spiegel (M1, M2, Abbildung 58) umgelenkten und über Linsen auf die Probe fokussierten Lichtstrahls (Probenstrahl) wird hierbei nach Durchlaufen der Probe (Transmission) oder nach der Reflexion an der Probe mit einem

Die spektrale Reflexion R (Transmission T) einer Schicht ist nun definiert als das Verhältnis ihres Reflexions-(Transmissions)-

Reflexion :

$$R = \frac{r_{\text{Probe}}}{r_{\text{Standard}}} \quad (\text{A8})$$

Transmission :

$$T = \frac{t_{\text{Probe}}}{t_{\text{Standard}}} \quad (\text{A9})$$

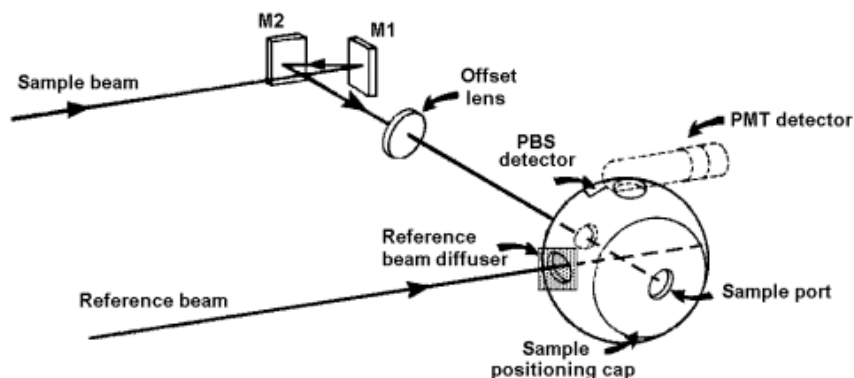


Abbildung 58: Schematischer Meßaufbau des Spektrophotometers mit Integrationskugel [102].

Referenzstrahl der Intensität I_0 verglichen. Beide Intensitäten werden zueinander ins Verhältnis gesetzt, was das Reflexions-(Transmissions)-vermögen ergibt:

Reflexion : (I_{Probe} ist die Intensität des reflektierten Probenstrahls)

$$r_{\text{Probe}} = \frac{I_{\text{Probe}}}{I_0} \quad (\text{A6})$$

Transmission : (I_{Probe} ist die Intensität des transmittierten Probenstrahls)

$$t_{\text{Probe}} = \frac{I_{\text{Probe}}}{I_0} \quad (\text{A7})$$

vermögens zu dem einer Standardoberfläche, bestimmt unter denselben geometrischen und spektralen Bedingungen.

Die Standardoberfläche bezüglich der Transmission ist Luft, wogegen die bezüglich der Reflexion ein Teflonstandard ist, welcher relativ zu einem perfekt reflektierenden Diffusor geeicht wurde. Vor der eigentlichen Charakterisierung der Proben werden daher beide Standards mit dem Cary500 vermessen; die Meßsoftware ordnet über Eichwerte das so ermittelte Reflexions-(Transmissions)-vermögen einer vollständigen Reflexion bzw. Transmission zu. Die Reflexion und die

Transmission der Proben ist deshalb relativ zu diesen Standards gemessen (Substitutionsmethode).

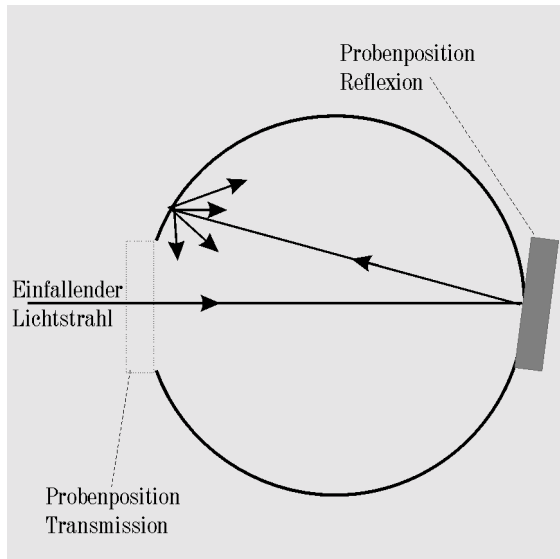


Abbildung 59: Funktionsprinzip der Integrationskugel.

Um das diffus gestreute Licht einer Probe in der Messung mitzuberechnen, wird eine Integrationskugel verwendet (Abbildung 59). Diese innen mit Teflon beschichtete Kugel sammelt möglichst vollständig das von der Probe kommende Licht, d.h. reflektiert dieses so oft total, bis es in den in der Kugel eingebauten Detektor eintritt.

Im sichtbaren und ultravioletten Wellenlängenbereich ist der Detektor ein Siliziumdetektor, im Nah-Infraroten und Infraroten ein Bleisulfiddetektor. Es kann daher in einem Wellenlängenbereich zwischen 150 nm und 3000 nm gemessen werden. Die Probe ist bei der Transmissionsmessung vor der Kugel positioniert bevor der Probenstrahl in die Kugel eintritt; bei der Reflexionsmessung tritt der Strahl zuerst in die Kugel, bevor er auf die Probe trifft.

AII-b) Auswertung der Transmissions- und Reflexionsspektren

Wird wie beim Cary500 die Transmission T und Reflexion R einer planparallelen Probe bei senkrechter Inzidenz eines monochromatischen

Lichtstrahls vermessen, so kann aus der Kenntnis der theoretischen Abhängigkeit von $T(n, k, d)$ und $R(n, k, d)$ bei bekannter Schichtdicke d auf die optischen Konstanten n und k des Dünnsfilms geschlossen werden, sofern die optischen Konstanten des Substrates bekannt sind. Hierbei ist der Brechungsindex n und der Extinktionskoeffizient k über die komplexe dielektrische Funktion $\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2$ miteinander verknüpft, für die folgende Relationen gelten:

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= n^2 - k^2 \\ \epsilon_2 &= 2nk \end{aligned} \tag{A10}$$

Sind die untersuchten Medien absorbierend, so wird im folgenden mit komplexen Brechungsindizes \bar{n} , $\bar{n} = n + ik$ gerechnet. Aus den Fresnel-Formeln [103] können die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten r und t für eine Grenzfläche zwischen zwei Medien mit unterschiedlichem, komplexen Brechungsindex \bar{n}_0 und \bar{n}_1 bei senkrechter Inzidenz hergeleitet werden:

$$r = \frac{\bar{n}_0 - \bar{n}_1}{\bar{n}_0 + \bar{n}_1}, \quad t = \frac{2 \cdot \bar{n}_0}{\bar{n}_0 + \bar{n}_1} \tag{A11}$$

Die Intensität des reflektierten Lichtes R ist durch $R=|r|^2$, die des durch die Grenzfläche transmittierten Lichts durch $T = 1 - R$ gegeben:

$$R = \frac{(n_0 - n_1)^2 + (k_0 - k_1)^2}{(n_0 + n_1)^2 + (k_0 + k_1)^2} \tag{A12}$$

$$T = 1 - R \tag{A13}$$

Für die Reflexion von Licht an der Oberfläche eines Mediums mit Brechungsindex \bar{n} , welches sich an Luft befindet ($n_0=1, k_0=0$) ergibt sich:

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \tag{A14}$$

AII-b-1) R und T an einer planparallelen Schicht ohne Interferenzeffekte

Bei der Gesamt-Reflexion und –Transmission einer planparallelen Schicht der Dicke d und mit Brechungsindex \bar{n}_1 , die sich zwischen zwei Medien mit \bar{n}_0 und \bar{n}_2 befindet, findet Vielfachreflexion an der Ober- und Unterseite der Schicht statt. Wegen des Absorptionsvermögens der Schicht wird die Amplitude

tätsverringern des Lichts hängt vom Absorptionskoeffizienten α ab. Treten, was hier nicht weiter untersucht wird, Vielfachinterferenzen auf, so wird die elektromagnetische Welle neben der Dämpfung um $\Delta\varphi=2\pi nd/\lambda$ in ihrer Phase geändert. Hier soll die Phase nicht beachtet werden; man geht von inkohärentem Licht aus. In diesem Fall werden bei der Vielfachreflexion die Intensitäten R_{ij} und T_{ij} aufsummiert (Gleichung (A15)). Für R_{ij} und T_{ij} wurde hierbei die

$$\begin{aligned}
 R &= R_{01} + T_{01}R_{12}T_{10} \exp(-2\alpha d) + T_{01}R_{12}^2R_{10}T_{10} \exp(-4\alpha d) + \dots \\
 &= R_{01} + T_{01}^2R_{12} \exp(-2\alpha d) \cdot \sum_{j=0}^{\infty} [R_{12}R_{10} \exp(-2\alpha d)]^j \\
 T &= T_{01}T_{12} \exp(-\alpha d) + T_{01}R_{12}R_{10}T_{12} \exp(-3\alpha d) + T_{01}R_{12}^2R_{10}^2T_{12} \exp(-5\alpha d) + \dots \\
 &= T_{01}T_{12} \exp(-\alpha d) \cdot \sum_{j=0}^{\infty} [R_{12}R_{10} \exp(-2\alpha d)]^j \\
 R &= R_{01} + \frac{T_{01}^2R_{12} \exp(-2\alpha d)}{1 - R_{12}R_{10} \exp(-2\alpha d)} \\
 T &= \frac{T_{01}T_{12} \exp(-\alpha d)}{1 - R_{12}R_{10} \exp(-2\alpha d)}
 \end{aligned}
 \tag{A15}$$

einer elektromagnetischen Welle beim einmaligen Durchdringen der Schicht um den Faktor $\exp(-2\pi kd/\lambda)$ gedämpft; somit verringert sich die Intensität des Licht, das Amplitudenquadrat, um den Faktor $\exp(-\frac{4\pi k}{\lambda} d) = \exp(-\alpha d)$ [104]. Die Intensi-

folgende Notation eingeführt: Das Licht kommt vom Medium i und wird am Medium j reflektiert bzw. dringt in Medium j ein. R_{ij} und T_{ij} sind nach den Gleichungen (A12) und (A13) zu bestimmen. Für eine absorbierende Schicht an Luft, welche keine Interferenzen zeigt, ergibt sich (A16):

$$\begin{aligned}
 R &= R_{01} + \frac{T_{01}^2R_{10} \exp(-2\alpha d)}{1 - R_{10}^2 \exp(-2\alpha d)} ; \quad T = \frac{T_{01}^2 \exp(-\alpha d)}{1 - R_{10}^2 \exp(-2\alpha d)} \\
 R_{01} = R_{10} &= \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} ; \quad T_{01} = 1 - R_{01} ; \quad \alpha = \frac{4\pi k}{\lambda}
 \end{aligned}
 \tag{A16}$$

AII-b-2) R und T eines Dünnsfilms auf einem dicken, planparallelen Substrat

Wiederum soll von einem Dünnsfilm ($d \leq 100$ nm, n_1 , k_1) ausgegangen werden,

unbeschichteten Substrates über Gleichung (A16) bestimmt; d und d_2 sind über Profilometer bzw. Mikrometerlehre gemessen. Mit Kenntnis dieser Daten und den Reflexions- und Transmissionspektren R_{mess} und T_{mess} der

$$\begin{aligned}
 R &= R_{02} + \frac{T_{02}^2 R_{23} \exp(-2\alpha_2 d_2)}{1 - R_{23} R_{20} \exp(-2\alpha_2 d_2)} & ; & \quad T = \frac{T_{02} T_{23} \exp(-\alpha_2 d_2)}{1 - R_{23} R_{20} \exp(-2\alpha_2 d_2)} \\
 \text{mit :} & & & \\
 R_{02} &= R_{01} + \frac{T_{01}^2 R_{12} \exp(-2\alpha_1 d)}{1 - R_{12} R_{10} \exp(-2\alpha_1 d)} & ; & \quad T_{02} = \frac{T_{01} T_{12} \exp(-\alpha_1 d)}{1 - R_{12} R_{10} \exp(-2\alpha_1 d)} \\
 R_{20} &= R_{21} + \frac{T_{21}^2 R_{10} \exp(-2\alpha_1 d)}{1 - R_{10} R_{12} \exp(-2\alpha_1 d)} & ; & \quad T_{20} = T_{02} \\
 R_{01} &= R_{10} = \frac{(n_1 - 1)^2 + k_1^2}{(n_1 + 1)^2 + k_1^2} & ; & \quad T_{01} = 1 - R_{01} \\
 R_{12} &= R_{21} = \frac{(n_1 - n_2)^2 + (k_1 - k_2)^2}{(n_1 + n_2)^2 + (k_1 + k_2)^2} & ; & \quad T_{12} = 1 - R_{12} \quad (A17) \\
 R_{23} &= \frac{(n_2 - 1)^2 + k_2^2}{(n_2 + 1)^2 + k_2^2} & ; & \quad T_{23} = 1 - R_{23} \\
 \alpha_1 &= \frac{4\pi k_1}{\lambda} & ; & \quad \alpha_2 = \frac{4\pi k_2}{\lambda}
 \end{aligned}$$

welcher keine Interferenzeffekte aufweist. Auch im dicken Substrat ($d_2 \geq 0.5$ mm, n_2 , k_2) soll keine Interferenz auftreten. Für die Berechnung von R und T wird nun in zwei Schritten vorgegangen: Zuerst wird R und T an einem Interferenz-freien Film zwischen zwei unendlich ausgedehnten Halbräumen aus Luft und Substrat berechnet (analog zu dem letzten Abschnitt). Die Bezeichnung sei R_{02} , R_{20} , T_{02} und T_{20} (anstelle von R_{01} , R_{10} , T_{01} und T_{10} in Gleichung (A15)). Es kann gezeigt werden, daß $T_{02} = T_{20}$ ist. Im zweiten Schritt wird das Gesamtsystem berechnet, indem der Film als Grenzfläche 0/2 betrachtet wird (A17). Um nun die optischen Konstanten n_1 und k_1 des Dünnsfilms zu bestimmen, müssen d , d_2 , n_2 und k_2 bekannt sein. n_2 und k_2 werden über Reflexions- und Transmissionsdaten des

Probe wird nun folgendes nichtlineare, zweidimensionale Gleichungssystem mit den Variablen n_1 und k_1 gelöst:

$$\begin{aligned}
 R_{\text{mess}} - R(n_1, k_1) &= 0 \\
 T_{\text{mess}} - T(n_1, k_1) &= 0 \quad (A18)
 \end{aligned}$$

Das System ist nicht analytisch lösbar und wird daher numerisch über das Newton-Raphson-Verfahren gelöst [16]. Jedoch ist das Ergebnis nicht eindeutig; vielmehr kann es zu einem $R_{\text{mess}}-T_{\text{mess}}$ -Paar bis zu vier Lösungen von n_1 und k_1 geben [105]. Das Ergebnis muß daher kritisch analysiert und die einzige physikalisch sinnvolle Lösung herausgefunden werden.

AIII) Standardbedingungen der Pufferschichtabscheidung

Die Abscheidung einer ILGAR-Sulfid-Pufferschicht auf einen Chalkopyritabsorber teilt sich in zwei, bisher noch voneinander getrennte Prozeßschritte auf:

1. Die chemische Vorbehandlung des Absorbers in einem wäßrigen Metallsalzbad.
2. Die eigentliche Abscheidung des Sulfid-Puffers über den ILGAR-Prozeß.

Die Prozeßbedingungen beider Schritte sind für die Verwendung des ILGAR-Puffers auf Cu(In,Ga)(S,Se)₂-Absorber der Firma Siemens Solar Industries, Camarillo, USA und Siemens Solar GmbH, München, Deutschland abgestimmt. Bei Verwendung anderer Absorber, die sich in Morphologie und chemischer Zusammensetzung von den hier benutzten unterscheiden, muß sowohl Schichtdicke des Puffers, so wie auch dessen chemische Zusammensetzung erneut auf den Absorber abgestimmt werden.

Vor der ILGAR-CdS-Pufferabscheidung durchläuft der Absorber eine chemische Vorbehandlung in einem wäßrigen, Ammoniak-haltigen Cadmiumsalzbad; bei der Abscheidung von ILGAR-ZnS-Pufferschichten wird entsprechend ein Zinksalzbad verwendet:

Cadmiumsalzbad:

0.5 mM 3·CdSO₄·6 H₂O (99.0 %, Merck) wird gelöst in 1.5 M Ammoniaklösung (p.a., Merck) und bi-distilliertem Wasser. Es werden 100 ml dieses Lösungsansatzes für zwei Absorber der Standardgröße inch x inch angesetzt. Für zehn Minuten kommen die in der kalten Lösung sich schon befindenden Proben in ein 80°C heißes Wärmebad. Im Anschluß werden sie in Wasser gespült, um Metallsalzreste zu entfernen. Danach werden sie im Stickstoffstrom getrocknet.

Zinksalzbad:

40 mM ZnCl₂ (99.999%, Aldrich) sind in 5 M Ammoniaklösung und bi-distilliertem Wasser gelöst. Die Menge an Lösungsansatz je Absorber und die Vorbehandlung an sich entspricht der Cd-Behandlung.

Die ILGAR-Pufferschichtabscheidung ohne Hydroxidzwischenschritt, die M1 genannt werden soll, geht für CdS und ZnS von folgender Standardprozessierung aus (auf Abweichungen von diesen Rezepten wird innerhalb der Arbeit verwiesen):

M1-ILGAR-CdS-Pufferabscheidung:

Die Precursorlösung besteht aus 7 mM Cd(ClO₄)₂ (99.999%, Aldrich) gelöst in Acetonitril (p.a., Merck). Nach Herausziehen aus der Precursorlösung (Ziehgeschwindigkeit 1 mm/s) wird die Probe bei einer Temperatur von 125°C in jedem Prozeßzyklus für 10 s mit 100 % H₂S (Messer-Griesheim) begast, danach für weitere 10 s im Ofen aufbewahrt und anschließend in H₂O und THF gespült. Die Gesamtzahl der Prozeßwiederholungen beläuft sich auf sechs.

M1-ILGAR-ZnS-Pufferabscheidung:

Ziehgeschwindigkeit, Ofentemperatur, Begasungszeit und Spülschritte entsprechen der M1-ILGAR-CdS-Pufferabscheidung. Die Precursorlösung enthält 4 mM Zn(ClO₄)₂ (99.999%, Aldrich) gelöst in Acetonitril. Die Gesamtzahl der Prozeßwiederholungen beläuft sich auf drei.

Die ILGAR-Pufferschichtabscheidung M2, die einen Hydroxidzwischenschritt enthält und somit zu hocheffizienten Dünnschichtsolarzellen führt, unterscheidet sich nur im Begasungsschritt. Alle anderen Prozeßparameter

werden von der Abscheidung M1 übernommen.

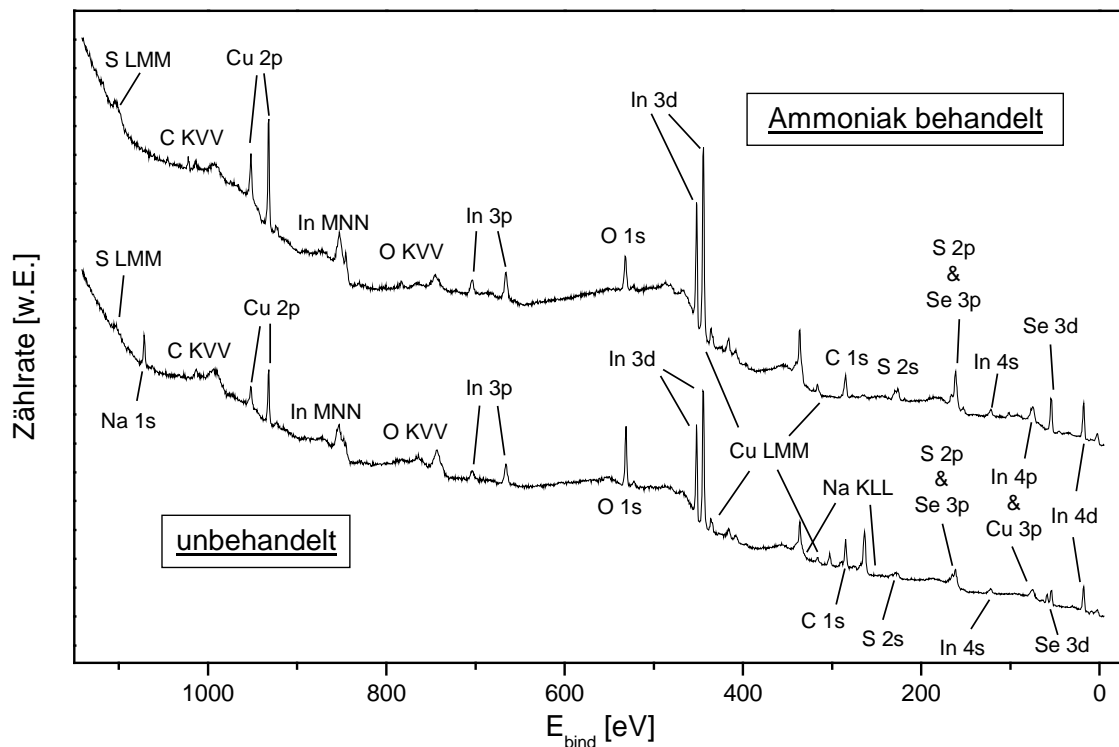
**M2-ILGAR-Abscheidung von Cd(OH, O)S
und Zn(OH, O)S Pufferschichten:**

Bei zwei Prozeßzyklen wird die Probe im Ofen 20 s einem $\text{NH}_3/\text{H}_2\text{O}/\text{N}_2$ -Gasgemisch ausgesetzt (wie in Kapitel 2.2.5 beschrieben) und anschließend für weitere 20 s im Ofen belassen. In diesen zwei Schritten wird nur eine Hydroxid/Oxid-

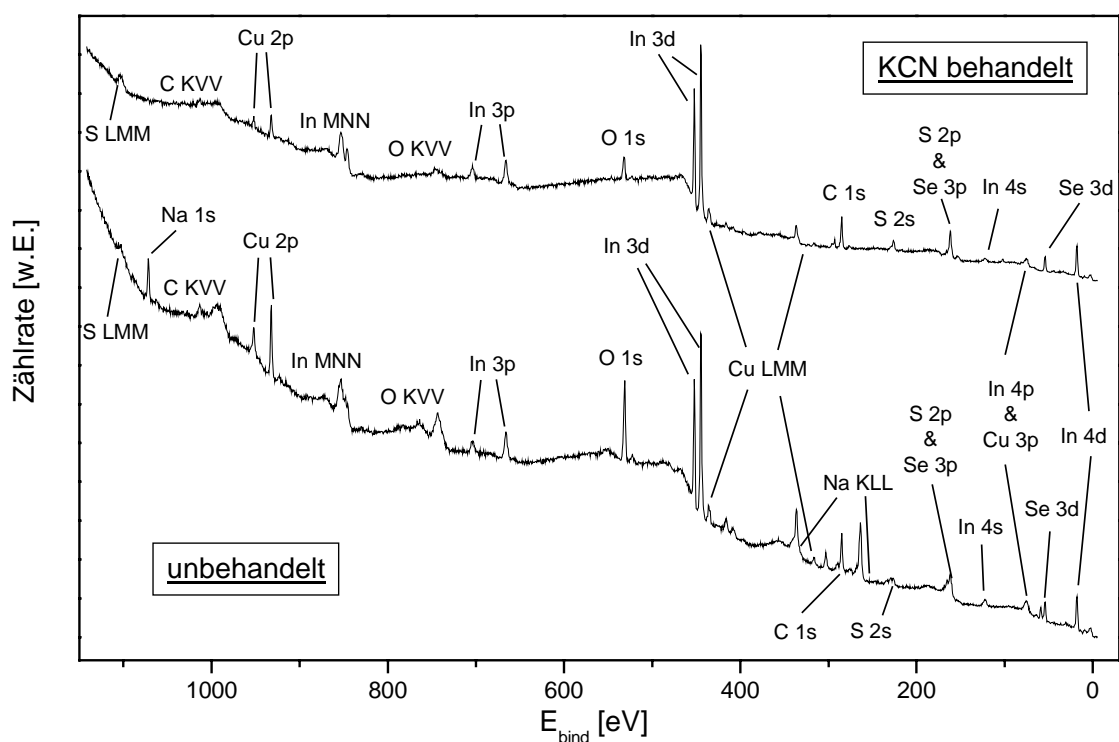
Schicht auf dem Absorber abgeschieden. Beim dritten Prozeßzyklus wird nach der zwanzig sekundigen Begasung mit $\text{NH}_3/\text{H}_2\text{O}/\text{N}_2$ für 5 s H_2S eingeleitet und die Probe anschließend nur noch 10 s im Ofen aufbewahrt. Die Standard-Pufferabscheidung von Cd(OH, O)S durchläuft mit einer Zyklenzahl von $dZ=6$ diesen Begasungsablauf zweimalig, die Deposition von Zn(OH, O)S mit einer Zyklenzahl von $dZ=3$ diese nur ein einziges Mal.

AIV) Photoelektronenspektroskopie – Übersichtsspektren von $\text{Cu(In, Ga)(S, Se)}_2$, Mess- und Literaturdaten

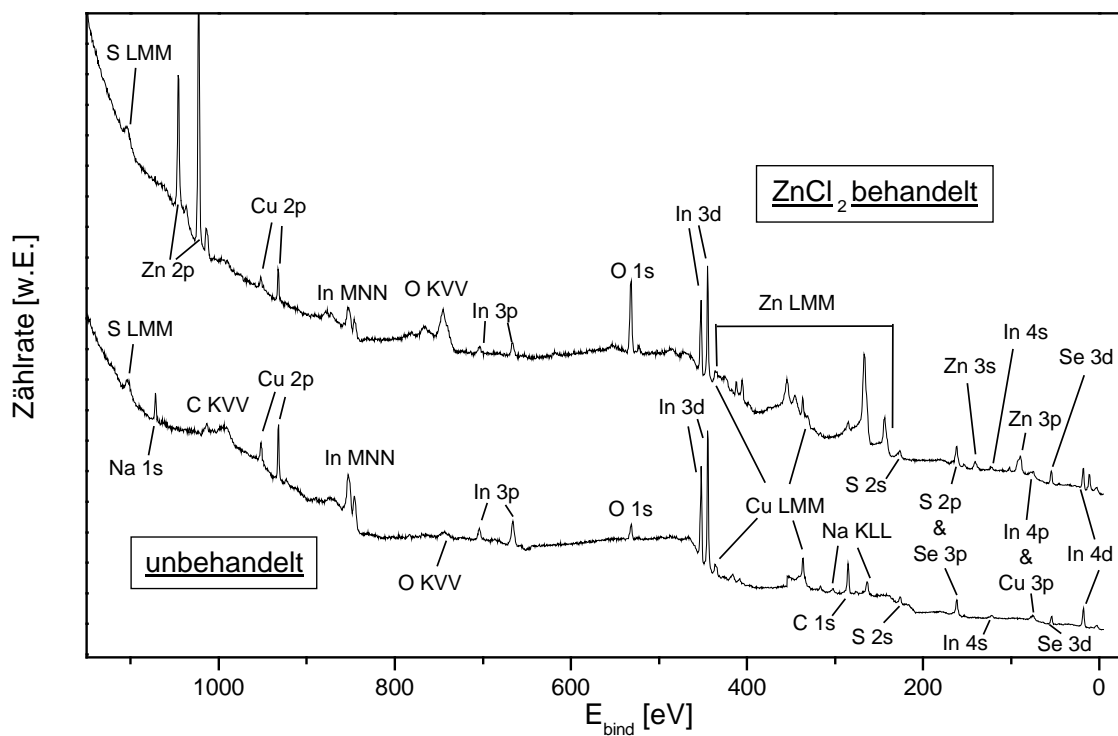
AIV-a) Vergleich unbehandelter – Ammoniak behandelter Camarillo-Absorber



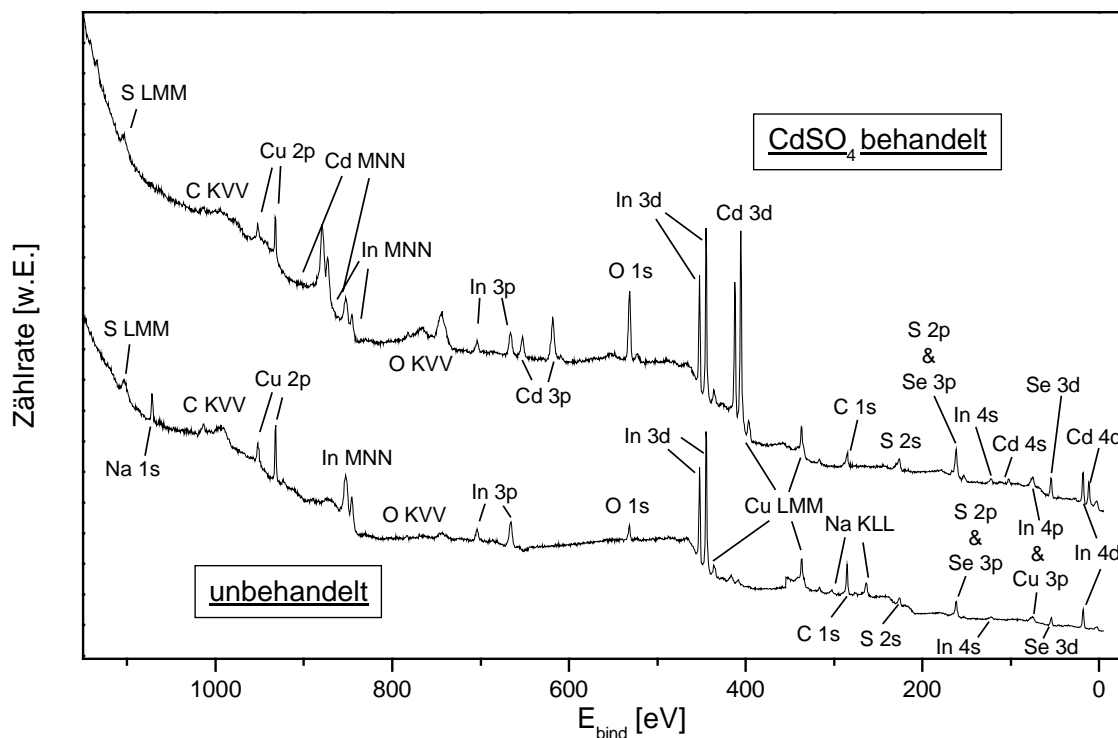
AIV-b) Vergleich unbehandelter – KCN behandelter Camarillo-Absorber



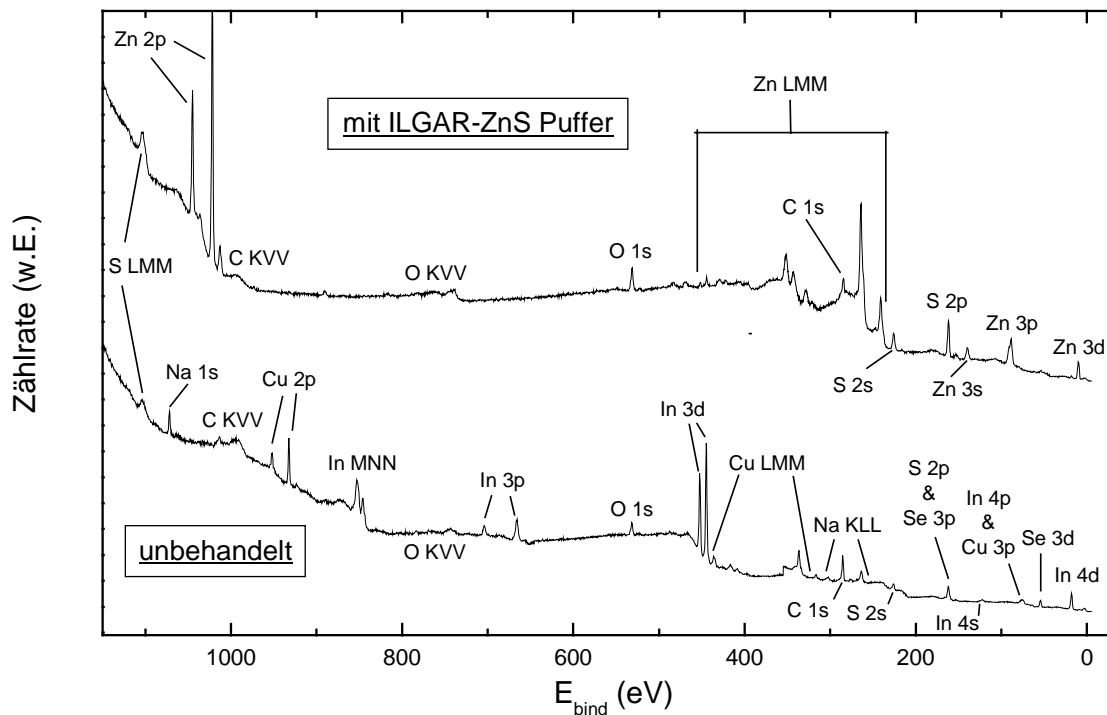
AIV-c) Vergleich unbehandelter – ZnCl₂ behandelter München-Absorber



AIV-d) Vergleich unbehandelter – CdSO₄ behandelter München-Absorber



AIV-e) Vergleich unbehandelter – ILGAR-ZnS beschichteter München-Absorber



AIV-f) Linienpositionen bei verschiedenen Natriumverbindungen im Vergleich zum XPS-Signal eines unbehandelten CIGS_{Se}-Camarillo-Absorbers.

Tabelle 16: Linienpositionen einzelner Elemente im XPS-Spektrum des unbehandelten Camarillo-Absorbers im Vergleich zu den Linien-Positionen der in verschiedenen Natriumverbindungen vorkommenden Elemente.

	Bindungsenergie (bei Auger kin. Energie) [eV] (* Fehler: $\Delta E \approx \pm 0.3$ eV)				
	Na 1s	Na KLL	O 1s	C 1s	Se 3d
Camarillo*	1071.8	990.1	531.4	289.6	59.1
Na ₂ CO ₃ *	1071.7	989.8	531.6	289.4	-
NaHCO ₃ *	1071.3	989.8	k.A.	290.0	-
Na ₂ SeO ₃ *	1070.8	991.0	k.A.	-	59.1
Na ₂ Se*	k.A.	k.A.	k.A.	-	k.A.
Na ₂ O*	1072.5	989.8	529.7	-	-

k.A. = keine Angaben in der Literatur; *Referenz: [89]

AIV-g) Linienpositionen bei verschiedenen Kupferverbindungen im Vergleich zum XPS-Signal eines unbehandelten, NH₃-behandelten und KCN-behandelten CIGSSe-Camarillo-Absorbers.

Tabelle 17: Gefittete, energetische Linienpositionen von Cu 2p und Cu-Auger verschieden behandelter Camarillo-Absorber. Dazu im Vergleich die entsprechenden Linien-Positionen verschiedener Kupferverbindungen.

Probe/ Literatur	Bindungsenergie (bei Auger kin. Energie) [eV] (*Fehler: $\Delta E \approx \pm 0.2$ eV)			
	Cu 2p _{3/2}		Cu L ₃ M ₄₅ M ₄₅	
	Linie 1	Linie 2	Linie 1	Linie 2
Unbehandelt	932.1*	933.4*	917.1*	918.3*
NH ₃	932.1*	933.3*	917.0*	918.7*
KCN	932.1*	933.2*	916.8*	918.5*
CIGSSe	932.2	-	916.9 - 917.1	-
Cu _x Se	932.0	-	-	918.4
Cu _x O	-	933.4	-	918.3
Cu _x S	932.2	-	917.1	-

Referenzen: CIGSSe [95]; Cu_xSe, Cu_xO, Cu_xS [92]

AIV-h) Linienpositionen bei verschiedenen Zinkverbindungen im Vergleich zum XPS-Signal eines ILGAR-Zn(OH,O)S-Puffers auf CIGSSe

Tabelle 18: Ermittelte, energetische Linienpositionen von Zn 2p und Zn-Auger des ILGAR-Zn(OH,O)S-Puffers auf CIGSSe. Dazu im Vergleich die entsprechenden Linien-Positionen verschiedener Zinkverbindungen.

Probe	Bindungsenergie (bei Auger kin. Energie) [eV] (*Fehler: $\Delta E \approx \pm 0.2$ eV)					
	Linie 1		Linie 2		Linie 3	
	Zn 2p _{3/2}	Zn L ₃ M ₄₅ M ₄₅	Zn 2p _{3/2}	Zn L ₃ M ₄₅ M ₄₅	Zn 2p _{3/2}	Zn L ₃ M ₄₅ M ₄₅
ILGAR-Zn(OH,O)S-Puffer	1021.9*	-	1021.6*	-	1022*	989.4*
Zn(OH) ₂	1021.9	987.8	-	-	-	-
ZnO	-	-	1021.7	988.8	-	-
ZnS	-	-	-	-	1022	989.7

Referenzen: Zn(OH)₂ [97]; ZnO, ZnS [92]

AV) Materialeigenschaften der betrachteten Sulfid-Verbindungen

Cadmiumsulfid, CdS

Elektronische Eigenschaften:

	<u>kubisch</u> <u>flächenzentriert</u>	<u>Referenz</u>
Bandlückenenergie E_g [eV] [T=300°K] * CdS mit hexagonaler Kristallitstruktur identisch	2.48	[19]
Exzitonengrundzustands- übergangsenergie E^{bulk} [eV] [T=0°K]	2.58	[20]
effektive Masse des Elektrons m_e^* [m_0]	0.19	[20]
effektive Masse des Lochs m_h^* [m_0]	0.8	[20]

Gittereigenschaften:

Dichte d [g/cm ³]	4.82	[106]
Molekulare Masse m [g/mol]	144.46	[106]

Optische Eigenschaften:

Dielektrizitätskonstante ϵ [ϵ_0]	5.7	[20]
---	-----	--------

Zinksulfid, ZnS**Elektronische Eigenschaften:**

	<u>kubisch</u> <u>flächenzentriert</u>	<u>Referenz</u>
Bandlückenenergie E_g [eV] [T=300°K]	3.68	[19]
Exzitonengrundzustands- übergangsenergie E^{bulk} [eV] [T=1.6°K]	3.8	[19]
effektive Masse des Elektrons m_e^* [m_0]	0.27	[107]
effektive Masse des Lochs m_h^* [m_0]	0.58	[107]
Energie der Spin-Bahn-Aufspaltung [eV]	0.067	[19]

Gittereigenschaften:

Dichte d [g/cm ³]	3.98	[106]
Molekulare Masse m [g/mol]	97.43	[106]

Optische Eigenschaften:

Dielektrizitätskonstante ϵ [ϵ_0]	8.1	[107]
---	-----	---------

AVI) Formelzeichen und Abkürzungen

AVI-a) Formelzeichen

α	[cm ⁻¹]	Absorptionskoeffizient
α_{exp}	[cm ⁻¹]	Absorptionskoeffizient aus Reflexions- und Transmissionsdaten bestimmt
$\alpha_{\text{gesamt}}(\omega)$	[cm ⁻¹]	Gesamtabsorptionskoeffizient
α_{max}	[cm ⁻¹]	lokales Maximum des Absorptionskoeffizienten
$(\alpha+h\nu)$	[eV]	„modifizierter“ Augerparameter
a_0	[Å]	Gitterkonstante
a_B	[m]	Bohr Radius
A_i		Diodenfaktor des i-ten Rekombinationspfades
A_P	[m ²]	Beleuchtete Probenfläche bei der Spektrophotometrie
A_{total}	[m ²]	Gesamtfläche der Solarzelle
c	[m/s]	Lichtgeschwindigkeit im Vakuum ($2.998 \cdot 10^8$)
Δ	[eV]	Energie der Spin-Bahn-Aufspaltung
d	[m]	Probendicke
dZ		Anzahl der Prozeßzyklen
ϵ	[ϵ_0]	Dielektrizitätskonstante
ϵ_0	[As/Vm]	Influenzkonstante ($8.854 \cdot 10^{-12}$)
ϵ_{kri}	[ϵ_0]	Dielektrizitätskonstante eines Kristalliten
e	[C]	Elementarladung ($1.602 \cdot 10^{-19}$)
$E(R)$	[eV]	exzitonische Übergangsenergie bei Nanoteilchen
E_{bind}	[eV]	Bindungsenergie
E^{bulk}	[eV]	‘bulk’-Exzitonenergie im Grundzustand und am absoluten Temperatur-Nullpunkt
E_F	[eV]	Fermi-Energie
E_{gap}	[eV]	Optische Bandlückenenergie
E_K, E_L	[eV]	Bindungsenergie des Elektrons in K- bzw. L-Schale
E_{kin}	[eV]	kinetische Energie
$E_{\text{paß}}$	[eV]	Analysatorpaßenergie
E^{Vol}	[eV]	Volumen-Exzitonenergie im Grundzustand und am absoluten Temperatur-Nullpunkt
Φ_P	[eV]	Austrittsarbeit
Φ^P	[eV]	Barrierrhöhe für Löcher
FF		Füllfaktor
η		Wirkungsgrad einer Solarzelle
h	[Js]	Planck’sches Wirkungsquantum ($6.626 \cdot 10^{-34}$)
$\hbar \Gamma$	[eV]	Phonon-Photon-Kopplungskonstante
$h\nu, \hbar\omega$	[eV]	Photonenergie
I_m	[A]	maximale Stromstärke einer Solarzelle
J	[A/m ²]	Stromdichte
J_{0i}	[A/m ²]	Sperr sättigungsstromdichte des i-ten Rekombinationspfades
J_m	[A/m ²]	maximale Stromdichte einer Solarzelle
J_{Ph}	[A/m ²]	Photostromdichte
J_{SC}	[A/m ²]	Kurzschlußstromdichte
k		Extinktionskoeffizient
k_B	[J/K]	Boltzmannkonstante ($1.381 \cdot 10^{-23}$)
λ	[m]	Lichtwellenlänge

μ	$[m_0^{-1}]$	inverse reduzierte Masse
m_0	$[kg]$	Ruhemasse des Elektrons ($9.11 \cdot 10^{-31}$)
m_e	$[m_0]$	effektive Masse des Elektrons
m_h	$[m_0]$	effektive Masse des Lochs
m_{RFA}	$[ng/m^2]$	über RFA ermittelte Massenbelegung
ν	$[s^{-1}]$	Lichtfrequenz
n		Brechungsindex
n_{kri}		Brechungsindex eines Kristalliten
N_V	$[m^{-3}]$	Effektive Zustandsdichte im Valenzbandmaximum
p		ZnS-Volumenanteil einer ILGAR-ZnS-Schicht
$ p_{cv} $	$[(eV)^2/c^2]$	Übergangsmatrixelement
P	$[m^{-1}]$	Kristallitgrößen-Verteilungsfunktion
P_m	$[W]$	maximale Leistung einer Solarzelle
P_{max}	$[m^{-1}]$	Maximum der Kristallitgrößen-Verteilungsfunktion
P_V	$[m^{-1}]$	Kristallitgrößen-Verteilungsfunktion angepaßt auf das Gesamtvolumen der Kristallite
ρ	$[g/cm^3]$	Dichte
q	$[C]$	Elementarladung
R	$[m]$	Kristallitradius
R_∞	$[m]$	minimaler Kristallitradius
R_Ω	$[\Omega]$	Schichtwiderstand
R_{max}	$[m]$	maximaler Kristallitradius
R_{min}	$[m]$	minimaler Kristallitradius
R_p	$[\Omega m^2]$	Parallelwiderstand
R_s	$[\Omega m^2]$	Serienwiderstand
σ	$[m]$	Standardabweichung
S_p	$[m/s]$	Grenzflächen-Rekombinations-Geschwindigkeit
T	$[^\circ K]$	Temperatur
T_{H2S}	$[^\circ C]$	Sulfurisierungstemperatur
U	$[V]$	Spannung
U_m	$[V]$	maximale Spannung einer Solarzelle
U_{OC}	$[V]$	Leerlaufspannung
V	$[m^3]$	Kristallitvolumen
V_{ges}	$[m^3]$	Gesamtvolumen aller absorbierenden Kristallite

AVI-b) Abkürzungen

CBD	<u>C</u> hemical <u>B</u> ath <u>D</u> eposition
CVD	<u>C</u> hemical <u>V</u> apour <u>D</u> eposition
EDX	<u>E</u> nergy <u>D</u> ispersive <u>X</u> -Ray Analysis
EMA	<u>E</u> ffective- <u>M</u> ass- <u>A</u> pproximation
HOMO	<u>H</u> ighest <u>O</u> ccupied <u>M</u> olecular <u>O</u> rbital
ILGAR	<u>I</u> on <u>L</u> ayer <u>G</u> as <u>R</u> eaction
LCAO	<u>L</u> inear <u>C</u> ombination of <u>A</u> tomie <u>O</u> rbital
LUMO	<u>L</u> owest <u>U</u> noccupied <u>M</u> olecular <u>O</u> rbital
MBE	<u>M</u> olecular <u>B</u> eam <u>E</u> pitaxy
MOCVD	<u>M</u> etal <u>O</u> rganic <u>C</u> hemical <u>V</u> apour <u>D</u> eposition
PVD	<u>P</u> hysical <u>V</u> apour <u>D</u> eposition
RFA	<u>R</u> öntgen <u>f</u> luoreszenz <u>a</u> nalyse
SILAR	<u>S</u> uccessive <u>I</u> on <u>L</u> ayer <u>A</u> dsorption <u>R</u> eaction
TEM	<u>T</u> ransmissions- <u>E</u> lektronen- <u>M</u> ikroskop
THF	<u>T</u> etrahydrofuran
XRD	<u>X</u> - <u>R</u> ay <u>D</u> iffraction Analysis