

Materialparameter

Dichten

Tab. 6.5: Dichten der verwendeten Materialien

Material	Dichte [g/cm ³]	atomare Dichte [10 ²² At/cm ³]	Umrechnung 10 ¹⁵ At/cm ² je nm	Umrechnung nm je 100 · 10 ¹⁵ At/cm ²
CdS	4.82	4.02	4.02	24.9
CuGaSe ₂	5.61	4.64	4.64	21.6
CuInS ₂	4.79	4.77	4.77	21.0
In	7.31	3.83	3.83	26.1
Mo	10.20	6.40	6.40	15.6
ZnO	5.47	8.10	8.10	12.3
ZnSe	5.42	4.52	4.52	22.1

Abkürzungen und Symbole

Abkürzungen

ADC	Analog-Digital-Konverter (engl.: analog digital converter)
AFM	Atomkraftmikroskop (engl.: atomic force microscope)
CGSe	chem. Verbindung CuGaSe_2
CIGSSe	chem. Verbindung Cu(In,Ga)(S,Se)_2
CBD	Abscheidung im chemische Bad (engl.: Chemical Bath Deposition)
CSVT	Close-Spaced Chemical Vapor Transport
CVD	Chemische Gasphasendeposition (engl.: Chemical Vapor Deposition)
ERDA	Elastische Rückstreu-Detektionsanalyse (engl.: Elastic Recoil Detection Analysis)
HI	Schwere (Projektil-)Ionen (engl.: heavy ion) $[M_{\text{Projektil}} > M_{\text{Sauerstoff}} \approx 16u]$
HMI	Hahn-Meitner-Institut
ISL	Ionenstrahllabor am HMI
MOCVD	Metallorganische Chemische Gasphasendeposition (engl.: Metal Organic Chemical Vapor Deposition)
PAG	Photoassistiertes Wachstum (engl.: photo assisted growth)
PL	Photolumineszenz
QE	Quanteneffizienzmessung
RBS	Rutherford Rückstreuexperiment (engl.: Rutherford Backscattering)
TAC	Zeit zu Amplituden Konverter (engl.: time to amplitude converter)
TOF	Flugzeit- (engl.: time of flight)
XRD	Röntgendiffraktometrie (engl.: X-Ray Diffraction)

Naturkonstanten

a_0	$0.529 \cdot 10^{-10}$	m	Bohrscher Radius
c	$2,997925 \cdot 10^8$	m/s	Lichtgeschwindigkeit
ϵ_0	$8,85419 \cdot 10^{-12}$	As/(Vm)	Elektrische Feldkonstante
e bzw. q	$1,60219 \cdot 10^{-19}$	As	Elementarladung
h	$6,62618 \cdot 10^{-34}$	Js	Plancksche Konstante
k	$1,38066 \cdot 10^{-23}$	J/K	Boltzmann-Konstante
u	$1.66057 \cdot 10^{-27}$	kg	Atomare Masseneinheit

Nicht Si-konforme Einheiten

TnA		Teilchen-Nanoampere	Strahlstrom / Ladung des Ion's
in	2.54cm	Inch	Längeneinheit
eV/amu	$9.7 \cdot 10^7$ J/kg	Elektronenvolt je atomarer Masseneinheit	Energie / Masse
At/cm ²		Atome je Quadratzentimeter	atomare Flächendichte
barn	10^{-28} m ²	Barn	Fläche, für Streuquerschnitte verwendet

Symbole

Symbol	Einheiten	Bezeichnung
$\alpha(\lambda)$	[1/cm]	Absorptionskoeffizient
α_c	[°]	kritischer Winkel
α	[°]	Eintrittswinkel des Projektils relativ zur Probenoberfläche
β	[°]	Austrittswinkel des Ejektils relativ zur Probenoberfläche
γ	[°]	Winkel der Flugrichtung des Projektils / Ejektils
ϵ		Dielektrizitätszahl
η	[%]	Wirkungsgrad
θ	[°]	Streuwinkel des Projektils beim elastischen Stoß
κ	[nm]	Korrelationslänge
λ	[nm]	Wellenlänge
ξ	[eV]	Abstand Valenzband - Fermi-niveau

σ_{Ges}	[MeV]	Gesamtenergieauflösung der Ejektile am Detektor
σ_{E_0}	[MeV]	Energieauflösung aus Energieverteilung der Projektile
σ_{ELS}	[MeV]	Energieauflösung aus Energieverluststreuung
σ_{TOF}	[MeV]	Energieauflösung, resultierend aus der Zeitmessung des Detektors
σ_K	[MeV]	Energieauflösung, resultierend aus der Winkelabhängigkeit des kinematischen Faktors
Σ	[m ²],[barn]	Streuquerschnitt (mittlerer differentieller \sim)
ς	[At/cm ²],[nm]	mittlere Rauigkeit; ς^2 entspricht der Varianz
τ	[nm]	lateraler Abstand zwischen Ein- und Austrittspunkt der Ionen
ϕ	[°]	Streuwinkel des Ejektils beim elastischen Stoß
$\phi(\lambda, x)$	[W/cm ²]	Photonenflußdichte im Absorber
$\phi_0(\lambda)$	[W/cm ²]	an der Oberfläche des Absorbers eindringende Photonflußdichte
ϕ_P	[eV]	Potentialabfall in der Pufferschicht
ϕ_A	[eV]	Potentialabfall im Absorber
Ω	[msr]	Raumwinkel des Detektors
A		Anzahl der gestreuten Ejektile
C_1		Ausgangskonzentration im Absorber
$C(d, t)$		positions- und zeitabhängige Konzentration
d	[At/cm ²],[nm]	Streutiefe des elastischen Streuprozesses (glatte Schichten)
\bar{d}	[At/cm ²],[nm]	mittlere Streutiefe des elastischen Streuprozesses (rauhe Schichten)
d_0		Position der Schichtgrenze
d_{max}	[At/cm ²],[nm]	Maximale Tiefe, aus der Ejektile aus der Probe austreten können.
d_P	[μ m]	Dicke der Pufferschicht
$\Delta d_{in}(x)$	[At/cm ²],[nm]	relative Höhe am Eintrittspunkt x eines Projektils
$\Delta d_{out}(x + \tau)$	[At/cm ²],[nm]	relative Höhe am Austrittspunkt $x + \tau$ eines Ejektils
$\Delta d(d)$	[At/cm ²],[nm]	Tiefenauflösung als Funktion der Tiefe d
D	[cm ² /s]	Diffusionskonstante
$erfc()$		komplementäre Error-Funktion ($1 - erf()$)
$\frac{dE}{dx}$	[keV/10 ¹⁵ At/cm ²]	Energieverlust pro Tiefeneinheit senkrecht zur Probenoberfläche
E	[J],[MeV]	aus der Zeitmessung resultierende Energie
E_0	[J],[MeV]	Kinetische Energie des Projektils vor dem Eindringen in die Probe
E_1	[J],[MeV]	Kinetische Energie des Projektils vor dem elastischen Stoß
E_2	[J],[MeV]	Kinetische Energie des Ejektils nach dem elastischen Stoß
E_3	[J],[MeV]	Kinetische Energie des Ejektils nach dem Verlassen der Probe
E_C	[eV]	Leitungsband

E_F	[eV]	Ferminiveau
E_{GA}	[eV]	Bandlücke im Absorber
E_V	[eV]	Valenzband
E'_{Proj}	[J],[MeV]	Energie des Projektils nach dem elastischen Stoß
ΔE_{C1}	[eV]	Leitungsbandoffset Fenster - Puffer
ΔE_{C2}	[eV]	Leitungsbandoffset Puffer - Absorber
ΔE_{in}	[J],[MeV]	Energieverlust des Projektils beim Durchgang durch die Probe
ΔE_{Out}	[J],[MeV]	Energieverlust des Ejektils beim Durchgang durch die Probe
FF		Füllfaktor
$G(x, \lambda)$		Generationsfunktion für Ladungsträgerpaare
$G(\tau)$		Autokorrelationsfunktion
h	[At/cm ²],[nm]	Höhe
h_0	[At/cm ²],[nm]	mittlere Höhe
$H(x, \lambda)$		Sammlungsfunktion für Ladungsträgerpaare
J_0	[mA/cm ²]	Sperrsättigungsstromdichte der Diode
J_{01}	[mA/cm ²]	Sperrsättigungsstromdichte von Diode 1
J_{02}	[mA/cm ²]	Sperrsättigungsstromdichte von Diode 2
J_D	[mA/cm ²]	spannungsabhängige Diodenstromdichte der Solarzelle
J_G	[mA/cm ²]	Gesamtstromdichte der Solarzelle
J_P	[mA/cm ²]	Photostromdichte
J_P^{Bahn}	[mA/cm ²]	Beitrag zur Photostromdichte aus dem restlichen Absorber
J_P^{RLZ}	[mA/cm ²]	Beitrag zur Photostromdichte aus der Raumladungszone
J_{RP}	[mA/cm ²]	Stromdichte durch den Parallelwiderstand
J_{SC}	[mA/cm ²]	Kurzschlußstromdichte
K		Kinematischer Faktor
L_{diff}	[nm]	mittlere Diffusionsweglänge der Minoritäten im Absorber
L_{eff}	[nm]	effektive Sammlungslänge
M_1	[kg],[amu]	Masse des Projektils
M_2	[kg],[amu]	Masse des Ejektils
n		Diodenfaktor
N	[1/m ³]	Zahl der Atome je Raumvolumen in der Probe
N_A	[1/cm ³]	Dotierkonzentration in der Absorberschicht
N_P	[1/cm ³]	Dotierkonzentration in der Pufferschicht
Nt	[1/m ²],[1/cm ²]	Zahl der Atome je Fläche in der Probe
P_{hv}	[mW/cm ²]	Lichtleistungsdichte
Q		Anzahl der einfallenden Projektile auf die Probe
$QE(\lambda)$		Quanteneffizienz der Solarzelle
$QE_{int}(\lambda)$		reflexionskorrigierte Quanteneffizienz
Q_i	[C]	Grenzflächenladungen Puffer - Absorber
Q_n	[C]	Grenzflächenladungen Fenster - Puffer
$R(\lambda)$		Reflexion

$R(\tau)$		normierte Autokorrelationsfunktion ($-1 \leq R \leq +1$)
R_P	$[\text{k}\Omega\text{cm}^2]$	Parallelwiderstand
R_S	$[\Omega\text{cm}^2]$	Serienwiderstand
s	$[\text{m}]$	Länge der Flugstrecke im Flugzeitleteleskop
S	$[\text{keV}/10^{15}\text{At}/\text{cm}^2]$	Abbremsvermögen (stopping power)
S_E	$[\text{keV}/10^{15}\text{At}/\text{cm}^2]$	Abbremsvermögen des Ejektils
S_P	$[\text{keV}/10^{15}\text{At}/\text{cm}^2]$	Abbremsvermögen des Projektils
S^e	$[\text{keV}/10^{15}\text{At}/\text{cm}^2]$	Abbremsvermögen durch Wechselwirkung mit den Hüllenelektronen der Probe
S^n	$[\text{keV}/10^{15}\text{At}/\text{cm}^2]$	Abbremsvermögen durch Wechselwirkung mit den Atomrümpfen der Probe
Δt_{TOF}		Auflösung der Flugzeit
t	$[\text{s}]$	Zeit
t	$[\text{At}/\text{cm}^2], [\text{nm}]$	Schichtdicke der Streuschicht parallel zum Strahl
t_{TOF}	$[\text{ns}]$	Flugzeit der Ejektile
t_0	$[\text{ns}]$	Zeitverschiebung des Stop-Zeitdetektors
T	$[\text{K}]$	Temperatur
U	$[\text{V}]$	Extern angelegte Spannung
V_{OC}	$[\text{V}]$	offene Klemmenspannung
w_A	$[\mu\text{m}]$	Raumladungszonenweite
x		Massenverhältnis von Ejektil zu Projektil ($\frac{M_2}{M_1}$)
x	$[\text{nm}]$	Eindringtiefe in den Absorber
Z_p		Kernladungszahl des Protons (1)
Z_1		Kernladungszahl des Projektils oder eines Ions allgemein
Z_2		Kernladungszahl des Ejektils

Abbildungsverzeichnis

1.1	Schematische Darstellung des Aufbaus einer Solarzelle auf Basis eines Chalkopyrit-Absorbers	5
1.2	Bandlücken und Gitterkonstanten der Halbleiter in der Solarzelle	5
1.3	Schematisches Banddiagramm von CIGSSe-Solarzellenstrukturen ohne externe Spannung	10
1.4	Sonnenspektrum und QE-Messung	14
1.5	Schaltbild zum 2-Dioden-Modell	16
1.6	SCAPS-Simulation nach [Rau01]	17
1.7	Solarzellenparameter nach [Sie02]	19
1.8	Solarzellenparameter nach	19
2.1	Solarzellenparameter V_{OC} , j_{SC} , FF und η von Solarzellen auf der Basis von Shell-Camarillo Absorbern als Funktion der thermischen Nachbehandlung für 3 Minuten	23
2.2	Quanteneffizienzspektren und effektive Sammlungslängen von MOCVD-ZnSe / Shell-Camarillo Solarzellen	25
2.3	Schrittweise Anpassung des 2 Dioden-Modelles an die IU-Kennlinie einer Referenzprobe	27
2.4	IU-Kennlinien von MOCVD-ZnSe/Camarillo-CIGSSe-Solarzellen für thermische Nachbehandlungen	28
2.5	Entwicklung der Sperrsättigungsstromdichte J_{02} als Funktion der Temperatur der thermischen Nachbehandlung	28
2.6	Offene Klemmenspannung V_{OC} , gemessen an MOCVD-ZnSe/Camarillo-CIGSSe-Solarzellen als Funktion der Temperatur der thermischen Nachbehandlung und Anpassung	29
3.1	Schematische Darstellung des Streuprozesses in der Probe	34
3.2	Kinematischer Faktor	36
3.3	Streuquerschnitt Σ für CIGSSe-Absorber	36
3.4	Schematische Aufsicht auf den ERDA-Meßplatz	42
3.5	Foto und schematische Darstellung der langen Flugzeitkammer (Detail aus Abbildung 3.4).	43

3.6	Scatterplot einer CVD-ZnSe/Camarillo-Absorber Struktur	47
3.7	Energiespektren der Elemente Jod, Schwefel und Molybdän	49
4.1	Maximale Informationstiefe für ein Cu(In,Ga)(S,Se) ₂ Target	52
4.2	Scatterplot Energie-Masse	54
4.3	Massenauflösung ERDA	54
4.4	Nachweisgrenze ERDA	55
4.5	Maximale Tiefenauflösung aus Energieverluststreuung	58
4.6	Gesamtiefenauflösung mit Detektorauflösung	60
4.7	Gesamtiefenauflösung einschließlich kinematischem Faktor	61
4.8	Entwicklung der Gesamtiefenauflösung für Schwefel, Zink und Indium	63
5.1	Schematische Darstellung des Streuprozesses für rauhe Oberflächen . .	65
5.2	AFM-Aufnahme und Histogramm	68
5.3	Autokorrelationsfunktion	71
5.4	Wahrscheinlichkeitsdichte-Matrizen	72
5.5	Fit einer Wahrscheinlichkeitsmatrix mit TableCurve 3D	74
5.6	Fit einer renormierten Häufigkeitsfunktion mit $\tau = 450nm$ durch das Produkt zweier Gauss-Funktionen in der Diagonalen und der Antidiagonalen (a) und Entwicklung der Breiten der Fitfunktionen als Funktion der Korrelation der Daten (b).	75
5.7	Schematische Darstellung des Streuprozesses für rauhe Oberflächen, Diskussion von Näherungen	77
5.8	Schritte bei der Simulation von rauhen Oberflächen	83
6.1	AFM-Bilder von CIGSSe-Absorbern Shell Camarillo (a) und München (b)	90
6.2	SEM-Aufnahme eines Querschnitts eines MOCVD-ZnSe/Camarillo- CIGSSe-Absorber Schichtsystemes	92
6.3	Scatterplot gemessen an einem CVD-ZnSe/Camarillo-CIGSSe-Absorber Schichtsystem	93
6.4	Scatterplot gemessen an einem MOCVD-ZnSe/Camarillo-CIGSSe- Absorber Schichtsystem	93
6.5	Detailausschnitt zum in Abbildung 6.3 dargestellten Scatterplot	94
6.6	Schwefel-Spektren als Referenz zu Abbildung 6.7	98
6.7	Qualitativer Nachweis der Indium-Diffusion im CVD-ZnSe/München- CIGSSe-Absorber Materialsystem	100
6.8	Qualitativer Nachweis der Indium-Diffusion im MOCVD- ZnSe/München-CIGSSe-Absorber Materialsystem	101
6.9	Simulation des Einflusses der Oberflächenrauigkeit ζ bei rauhen Oberflächen	104

6.10 Simulation des Einflusses der mittleren Schichtdicke \bar{d} bei rauhen Oberflächen	105
6.11 Simulation des Einflusses der Korrelationslänge κ bei rauhen Oberflächen	106
6.12 AFM-Bild zu Abbildung 6.13	108
6.13 ERDA-Messung einer thermisch unbehandelten Probe des Materialsystems In/ZnSe-Einkristall	108
6.14 AFM-Bild zu Abbildung 6.15	109
6.15 Quantitative Bestimmung der Diffusionskonstante des Indium am Materialsystem In/ZnSe-Einkristall	109
6.16 Vergleich der experimentell mit ERDA bestimmten Diffusionskonstanten mit den Daten von [Tak86]	111
6.17 Vergleich der Indium-Spektrums einer CVD-ZnSe/Camarillo-CIGSSe-Absorber Schicht mit einer theoretisch berechneten Konzentrationsverteilung für Indium	113
6.18 Vergleich der Indium-Spektrums einer MOCVD-ZnSe/München-CIGSSe-Absorber Schicht mit einer theoretisch berechneten Konzentrationsverteilung für Indium	114
6.19 Vergleich von Sperrsättigungsstromdichte J_{02} mit der Indium Konzentration bei der thermischen Nachbehandlung einer MOCVD-ZnSe/Camarillo-CIGSSe-Absorber Solarzelle	116
6.20 ERDA-Analytik Gruppe	147
6.21 CSVT-Gruppe	148

Tabellenverzeichnis

2.1	Mittlere Parameter für das 2 Dioden-Modell, bestimmt aus den IU-Messungen aller im Abschnitt - 2.4.2 diskutierter Proben einschließlich der Referenzprobe, die in Abbildung 2.3 gezeigt wird.	27
3.1	Vergleich der Parameter der Flugzeitleleskope	46
6.1	Verunreinigungen in CIGSSe- und CGSe-Absorberschichten für verschiedene Abscheideverfahren	89
6.2	Rauhigkeitsparameter der Absorber von Shell Solar	90
6.3	Rauhigkeitsparameter von dicken ZnSe-Schichten auf CIGSSe-Absorbern	92
6.4	Verunreinigungen in ZnSe-Schichten für verschiedene Abscheideverfahren	96
6.5	Dichten der verwendeten Materialien	121

Literaturverzeichnis

- [And77] H. Andersen und J. Biersack. *Hydrogen - Stopping Powers and Ranges in all Elements vol. 3 of The Stopping and Ranges of Ions in Matter*. Pergamon Press, New York, USA (1977).
- [And80] H. Andersen, F. Besenbacher, P. Loftager und W. Möller. *Large-angle scattering of light ions in weakly screened Rutherford region*. Physical review A: 21 (1980) (6), S. 1891–1901.
- [Arn77] P. Arndt, H. Bertschat, W. Jenter und H. E. Mahnke. *The new van de graff terminal for vicksi*. IEEE Transactions on nuclear science 21 (1977) (3), S. 1162–1164.
- [Ass94] W. Assmann, P. Hartung, H. Huber, P. Staat, H. Steffens und C. Steinhausen. *Setup for materials analysis with heavy ion beams at the munich MP tandem*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 85 (1994), S. 726–731.
- [Bar94] N. Barradas, J. Soares, M. da Silva, F. Paszti und E. Szilágyi. *Study of multilayer susstrate surface roughness using RBS with improved depth resolution*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 94 (1994), S. 266–270.
- [Bar01] N. Barradas. *Rutherford backscattering analysis of thin films and superlattices with roughness*. Journal of physics D: Applied physics 34 (2001) (14), S. 2109–2116.
- [Bau01] A. Bauknecht, S. Siebentritt, J. Albert und M. Lux-Steiner. *Radiative recombination via intrinsic defects in $Cu_xGa_ySe_2$* . Journal of Applied Physics 89 (2001) (9), S. 4391–4400.
- [Ber95] A. Bergmaier, G. Dollinger und C. Frey. *Quantitative elastic recoil detection*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 99 (1995), S. 488–490.
- [Boh15] N. Bohr. *On the Decrease of Velocity of Swiftly Moving Electrified Particles in the passing through Matter*. Philosophical Magazin 30 (1915), S. 581.
- [Boh85] W. Bohne, W. Galster, K. Grabisch und H. Morgenstern. *The influence of plasma effects on the timing properties of surface-barrier detectors for heavy*

- ions*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 240 (1985), S. 145–151.
- [Boh96] W. Bohne, S. Hessler und G. Röscher. *Beam current measurement based on residual gas ionization*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 113 (1996), S. 78–80.
- [Boh98a] W. Bohne, J. Röhrich und G. Röscher. *The Berlin time-of-flight ERDA setup*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 136-138 (1998), S. 633–637.
- [Boh98b] W. Bohne, J. Röhrich und G. Röscher. *The new time-of-flight ERDA setup at the HMI-Berlin*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 139 (1998), S. 219–224.
- [Boz91a] M. Bozoian. *Deviations from Rutherford backscattering for $Z=1, 2$ projectiles*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 58 (1991), S. 127–131.
- [Boz91b] M. Bozoian. *Thresholds of non-Rutherford nuclear cross sections for ion beam analysis*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 56/57 (1991), S. 740–743.
- [Bra99] S. Brandt. *Datenanalyse*. Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg (1999).
- [Bur00] M. Burgelmann, P. Nollet und S. Degrave. *Modelling polycrystalline semiconductor solar cells*. Thin Solid Films 361 (2000).
- [Bus75] W. Busse, B. Efken, D. Hilscher, H. Homeyer, H. Lettau, K. Lindenberger, H. Mahnke, K. Maier, K. Ziegler, B. Anderberg, P. Hansen, S. Holm, S. Lindbäck, B. Malm, L. Harms-Ringdahl, J. Rohlin und A. Susini. *Status of the vicksi heavy ion accelerator*. IEEE Transactions on nuclear science 22 (1975), S. 1643–1646.
- [Bus80] F. Busch, W. Pfeiffer, B. Kohlmeyer, D. Schüll und F. Pühlhoffer. *A position-sensitive transmission time detector*. Nuclear Instruments and Methods 171 (1980), S. 71.
- [Chu76] W. Chu. *Calculation of energy straggling for protons and helium atoms*. Physical review A: 13 (1976), S. 2057–2060.
- [Con02] M. Contreras, M. Romero, B. To, F. Hasoon, A. Noufi, S. Ward und K. Ramanathan. *Optimization of CBD CdS process in high-efficiency Cu(In,Ga)Se₂-based solar cells*. Thin Solid Films 403-404 (2002), S. 204–211.
- [Cra54] H. Cramer. *The elements of probability theory and some of its applications*. Almqvist and Wiksell, Stockholm (1954).

- [Dol92] G. Dollinger, T. Faestermann und P. Maier-Komor. *High resolution depth profiling of light elements*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 64 (1992), S. 422–427.
- [Edg80] R. Edge und U. Bill. *Surface topology using rutherford backscattering*. Nuclear Instruments and Methods 168 (1980), S. 157–162.
- [Eis02] Eisele. *Struktur und Funktion von ZnSe-Pufferschichten in Chalkopyritdünnschichtsolarzellen*. Dissertation (2002).
- [End92] T. Enders, M. Rilli und H. Carstanjen. *A high-resolution electrostatic spectrometer for the investigation of near surface layers in solids by high resolution Rutherford backscattering with MeV ions*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 64 (1992), S. 817–824.
- [Eva55] R. Evans. *The atomic nucleus*. McGraw-Hill Book Company, Inc., New York, Toronto, London (1955).
- [Gae59] W. Gaertner. *Depletion-layer photoeffects in semiconductors*. Physical Review 116 (1959), S. 84.
- [Gay97] R. Gay. *Status and prospects for CIS-based photovoltaics*. Solar Energy Materials and Solar Cells 47 (1997), S. 19–26.
- [Gei09] H. Geiger, J. Fellow und E. Marsden. *On a diffuse reflection of the α -particles*. Proceedings of the Royal Society (1909), S. 495–500.
- [Gop93] Goppelt. *Entwicklung einer elastischen Vorwärtsstreutechnik mit hochenergetischen schweren Ionen zur Messung von Tiefenprofilen*. Dissertation (1993).
- [Gra00] K. Granath, M. Bodegard und L. Stolt. *The effect of NaF on Cu(In,Ga)Se₂ thin film solar cells*. Solar Energy Materials and Solar Cells 60 (2000), S. 279–293.
- [Gre82] M. Green. *Solar cells*. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J. (1982).
- [Hah97] B. Hahn, M. Deufel, M. Meier, M. Kastner, R. Blumberg und W. Gebhardt. *Photoassisted growth and nitrogen doping of ZnSe* 170 (1997), S. 472–475.
- [Hen80] C. Henry. *Limiting efficiencies of ideal single and multiple energy gap terrestrial solar cells*. Journal of Applied Physics 51 (1980), S. 4494–4500.
- [Hob88] C. Hobbs, J. McMillian und D. Palmer. *The effects of surface topography in nuclear microprobe rutherford backscattering analysis*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 30 (1988), S. 342–348.
- [JW98] A. Jäger-Waldau, H.-J. Muffler, R. Klenk, M. Kirsch, C. Kelch und M. C. Lux-Steiner. *Gallium Doped ZnO for Thin Film Solar Cells*. In *25th Int. Symp. Compound Semiconductors*, S. 565–570. Inst. Phys. Conf. Ser. No 162, IOP Publishing Ltd, Nara, Japan (1998).

- [Kam98] T. Kampschulte. *MOCVD von ZnSe für Sperrkontakte in Heterosolarzellen auf der Basis von Chalkopyriten*. Dissertation (1998).
- [Kle94] R. Klenk und H. Schock. *Photocurrent collection in thin film solar cells - calculation and characterisation for CuGaSe₂/(Zn,Cd)S*. Proceedings of 12th E-PSEC (1994).
- [Kle01] R. Klenk. *Characterisation and modelling of chalcopyrite solar cells*. Thin Solid Films 387 (2001), S. 135–140.
- [L'E76] J. L'Ecuyer, C. Brassard, C. Cardinal, J. Chabbal, L. Deschênes, J. Labrie, B. Terreault, J. Martel und R. St.-Jacques. *An accurate and sensitive method for the determination of the depth distribution of light elements in heavy materials*. Journal of Applied Physics 47 (1976), S. 381–382.
- [LS00] M. Lux-Steiner, A. Ennaoui, C.-H. Fischer, A. Jäger-Waldau, J. Klaer, R. Klenk, R. Könenkamp, T. Mathes, R. Scheer, S. Siebentritt und A. Weidinger. *Processes for chalkopyrite-based solar cells*. Thin Solid Films 361-362 (2000), S. 533–539.
- [May97] M. Mayer. *SimNRA Users Guide*. Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, Garching, Germany (1997).
- [Mey00] N. Meyer. *Phasenbildung im Raum Cu-Ga-Se und halogenunterstützte Gasphasenabscheidung von CuGaSe₂-Absorberschichten für Solarzellen*. Dissertation (2000).
- [Mou78] J. Moulton, J. Stephenson, R. Schmitt und G. Wozniak. *A new method for calibrating the pulse-height defect in solid state detectors*. Nuclear Instruments and Methods 157 (1978), S. 325–331.
- [Nak97] T. Nakada, H. Otho, M. Fukuda und A. Kunioka. *Improved compositional flexibility of Cu(In,Ga)Se₂-based thin film solar cells by sodium control technique*. Solar Energy Materials and Solar Cells 49 (1997), S. 261–267.
- [Pel94] W. Pelzer und A. Schempp. *Matching of an RFQ to the Vicksi cyclotron*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 346 (1994), S. 24–30.
- [Phi91] J. Philibert. *Atom movements - diffusion and mass transport in solids*. Les Editions de Physique (1991).
- [Pro01] V. Probst, W. Stetter, J. Palm, S. Zweigert, M. Wendl, H. Vogt, L. Ufert, H. Calwer, B. Freienstein und F. Karg. . Proceedings 17th European Photovoltaic Solar Energy Conference, Munich (2001).
- [Pás90] F. Pászti, A. Manuaba, C. Hajdu, A. Melo und M. da Silva. *Current measurement on MeV Energy ion beams*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 47 (1990), S. 187–192.

- [Rau99a] U. Rau, D. Braunger, R. Heberholz, H. Schock, J.-F. Guillemoles, L. Kronik und D. Cahen. *Oxygenation and air-annealing effects on the electronic properties of Cu(In,Ga)Se₂ films and devices*. Journal of Applied Physics 86 (1999), S. 497–505.
- [Rau99b] U. Rau und H. Schock. *Electronic properties of Cu(In,Ga)Se₂ heterojunction cells - recent achievements, current understanding and future challenges*. Applied Physics A 69 (1999), S. 131–147.
- [Rau01] U. Rau und M. Schmidt. *Electronic properties of ZnO/CdS/Cu(In,Ga)Se₂ solar cells - aspects of heterojunction formation*. Thin Solid Films 387 (2001), S. 141–146.
- [Rib66] A. Riben und D. Feucht. *Electrical transport in nGe-pGaAs heterojunctions*. International Journal of Electronics (1966).
- [Rum00] A. Rumberg, C. Sommerhalter, M. Toplak, A. Jäger-Waldau und M. Lux-Steiner. *ZnSe thin films grown by chemical vapour deposition for application as buffer layer in CIGSS solar cells*. Thin Solid Films 361-362 (2000), S. 172–176.
- [Rum01] A. Rumberg. *Chemische Gasphasendeposition von ZnSe-Puffern für die Anwendung in Chalkopyrit-Dünnschichtszellern*. Dissertation (2001).
- [Rus03] M. Rusu, S. Wiesner, D. Fuertes-Marron, A. Meeder, W. Bohne, S. Lindner, P. Schubert-Bischoff, T. Schedel-Niedrig und M. Lux-Steiner. *CuGaSe₂ thin films prepared by a novel CCSVT technique for photovoltaic application*. Präsentation auf der EMRS 2003 / voraussichtliche Publikation in Thin Solid Films (2003).
- [Rut11] E. Rutherford. *The scattering of α and β Particles by Matter and the Structure of the Atom*. Philosophical Magazin 21 (1911), S. 669.
- [Saj00] T. Sajavaara, K. Arstila, A. Laakso und J. Keinonen. *Effects of surface roughness on results in elastic recoil detection measurements*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 161-163 (2000), S. 235–239.
- [Sch74] K. Schmid und H. Ryssel. *Backscattering measurements and surface roughness*. Nuclear Instruments and Methods 119 (1974), S. 287–289.
- [Sch98] O. Schelmer, G. Dollinger, C. Frey, A. Bergmaier und S. Karsch. *Energy straggling of 60MeV ⁵⁸Ni^{q+} ions in thin carbon foils and gases*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 145 (1998), S. 261–270.
- [Sch02] S. Schuler. *Transporteigenschaften und Defekte in polykristallinen CuGaSe₂-Schichten und Heterostrukturen*. Dissertation (2002).
- [Sha72] J. Shay, B. Tell, H. Kasper und L. Shiavone. *p-d Hybridization of the Valence Bands of I-III-VI₂ Compounds*. Physical review B: Condensed matter and materials physics 5 (1972) (12), S. 5003–5005.

- [Sho49] W. Shockley. *The Theory of p-n Junctions in Semiconductors and p-n Junction Transistors*. Bell System Technical Journal 28 (1949), S. 435.
- [Sho92] V. Shorin und A. Sosnin. *RBS spectra for thin films with surface roughness*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 72 (1992), S. 452–456.
- [Sie02] S. Siebentritt, T. Kampschulte, A. Bauknecht, U. Blieske, W. Harneit, U. Fiedeler und M. Lux-Steiner. *Cd-free buffer layers of CIGS solar cells prepared by a dry process*. Solar Energy Materials and Solar Cells 70 (2002), S. 447–457.
- [Sto89] J. Stoquert, G. Guillaume, M. Ali-Hage, J. Grob, C. Ganter und P. Siffert. *Determination of concentration profiles by elastic recoil detection bwith a Delta E - E gas telescope and high energy incident heavy ions*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 44 (1989) (2), S. 184–194.
- [Str03] E. Strub, W. Bohne, S. Lindner und J. Röhrich. *Possibilities and limitations of ERDA - Examples form the ERDA-TOF-Setup at the HMI*. to be published in Surface and Interface Analysis (2003).
- [Sze81] S. Sze. *Physics of semiconductor devices*. John Wiley & Sons, New York, USA (1981).
- [Tak86] H. Takenoshita, K. Kido und K. Sawai. *Cathodoluminescence study on diffusion coefficients of Al, Ga and In in ZnSe*. Japanese Journal of Applied Physics 25 (1986) (10), S. 1610–1611.
- [TCu97] TCurve. *Table Curve 3D - User's Manual*. SPSS Inc., Chicago, USA (1997).
- [Tes95] J. Tesmer, M. Nastasi, J. Barbour, C. Maggiore und J. Mayer. *Handbook of modern ion Beam materials analysis*. Materials Research society, Pittsburgh, USA (1995).
- [Tob99] S. Tober. *Herstellung und Charakterisierung von Dünnschichtsolarzellen auf der Basis von CuGaSe₂ und CuInSe₂*. Diplomarbeit (1999).
- [Top98] M. Toplak. *Chemische Gasphasendeposition von Zinkselenidschichten für die Anwendung als Pufferschicht in Chalkopyrit-Dünnschichtsolarzellen*. Diplomarbeit (1998).
- [Wal96] T. Walter, R. Heberholz und H. Schock. *Distribution and defects in polycrystalline chalkopyrite thin films*. Solid State Phenomena 51-52 (1996), S. 309.
- [Wie94] R. Wiesendanger. *Scanning Probe Microscopy and Spectroscopy: Methods and Applications*. Cambridge University Press, Cambridge, GB (1994).
- [Yes98] I. Yesil, W. Assmann, K. Huber und K. Löbner. *Simulation of surface roughness effects in ERDA*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 136-138 (1998), S. 623–627.

- [Zie85] J. Ziegler, J. Biersack und U. Littmark. *The stopping and range of Ions in solids vol. 1 of The stopping and ranges of Ions in matter*. Pergamon Press, New York, USA (1985).
- [Zie88] J. Ziegler und J. Manoyan. *The stopping of ions in compounds*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 35 (1988) (0), S. 215–228.

Index

- Abbremsvermögen, 34, **38**
- Absorber, **6**
- AFM, 56, 64, **66**
- Ausbeute
 - Normierung, 97
- Autokorrelationsfunktion, **69–71**
- Coulombfenster, **37**, 62
- Coulombwall, 35
- CVD, **8–9**
- Datenaufnahme, 45–48
- Datenauswertung, 49–50
- Datenverarbeitung, 48
- Dektak, 56
- Diffusion
 - Indium qualitativ, 96
 - Indium, qualitativ, 102
 - Indium, quantitativ, 107–110
- Eintrittshöhe
 - lokale, Ejektil, 66
 - lokale, Projektil, 66
- Ejektil, **34**
- Energieauflösung
 - Detektorsystem, 59–62
 - Halbleiterdetektor, 59
 - Primärstrahl, 58–59
- Energiespektren, **48**
- Energieverlust, **38**
- Energieverluststreuung, 34, **38–39**, 57–58
 - elektronische, 39
 - nukleare, 39
- ERDA, **33**
 - ΔE -E-Messung, 40
 - Aufbau, 39–45
 - elektrostatische Messung, 40
 - Flugzeitmessung, 40
 - magnetische Messung, 40
- Extremwertfunktion, 69
- Flanke
 - HE-, **48**
 - Hochenergie-, **48**
 - NE-, **48**
 - Niederenergie-, **48**
- Flugzeitmessung, **39**
- Flugzeitleteleskop, **41**
 - kurz, 41–42
 - lang, 42
- Flugzeitleteleskope, **41–45**
- HE-Flanke, 103
- In/ZnSe-Referenzsystem, 103
- Informationstiefe
 - maximale, **51–53**
- ISL, 40
- IU-Messungen
 - thermische Einflüsse, 26–30
- IV-Messungen, 16–18
- Kinematischer Faktor, 34, **35**
- Konzentration
 - Nachweisgrenze, **54–56**, 62
- Korrelationslänge, 70
- Massenast, 47
- Massenselektivität, **53–54**, 62
- Massenverhältnis x , **35**
- MOCVD, **9**
- NE-Flanke, 103
- Probenstabilität, **56**
- Projektil, **33**
- Projektile
 - Erzeugung, 40–41
- Pulsabstände, 40
- Pulslänge, 40

- QE-Messungen, 14–16
 - thermische Einflüsse, 24–25
- Rückkontakt, **6**
- Rauhigkeit
 - Absorber, 90
 - großflächige, **67**
 - Klassifizierung, 67, 70
 - lokale, **67**
 - mittlere, 68
 - Pufferschicht, 92
 - Simulation, **78–85**
- Rauhigkeitssimulation, 102–107
- Raumwinkel Ω , 36
- RBS, 39, **39**, 78
- Referenzsystem
 - Diffusion, 107–110
 - In/ZnSe, 103
- Scatterplot, **45–48**
- Solarzelle
 - Aufbau, **5–7**
 - Banddiagramm, 10–11
 - Funktionsweise, 9–14
 - Ladungsträgergeneration, 11–13
 - Stromtransport, 13–14
- Solarzellenparameter, **13–14**
 - thermische Einflüsse, 18–20, 23–24
- Strahlstrommessung, 41
- streifender Einfall, **35**
- Streuprozeß
 - elastischer, **35**
- Streuquerschnitt, **33**, **36–37**, 62
- Streutiefe, 65
 - mittlere, 65
- Streuwinkel ϕ , **34**
- Teilspektren
 - Gewichtung, 80, 81
- thermische Nachbehandlung, 96
- Tiefenauflösung, **56–62**
- Verunreinigungen
 - Absorber, **88–90**
 - Pufferschicht, **90–96**
- Wahrscheinlichkeitsdichte, **71–76**

Veröffentlichungen und Konferenzbeiträge

Veröffentlichungen

- [Lin-02] S. Lindner, W. Bohne, A. Jäger-Waldau, M.Ch. Lux-Steiner, J. Röhrich, G. Vogl *Investigations of atomic diffusion at CIGSSe/ZnSe interfaces with heavy ion elastic recoil detection analysis (HI-ERDA)* Thin Solid Films 403-404 (2002) S. 432-437
- [Boh-02] W. Bohne, S. Lindner, J. Röhrich *Study of In Diffusion in Chacopyrite Solar Cells by Means of ERDA Measurements* Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 188 (2002) S. 55-60
- [Strub02] E. Strub, W. Bohne, S. Lindner, J. Röhrich *Possibilities and limitations of ERDA - Examples form the ERDA-TOF-Setup at the HMI* to be published in Surface and Interface Analysis 2003
- [Hen-01] M.O. Henry, E. McGlynn, J. Fryar; S. Lindner, J. Bollmann *The evolution of point defects in semiconductors studied using the decay of implanted radioactive isotopes* Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 178 (2001) S. 256-259
- [Hen-99] M.O. Henry, E. Alves, J. Bollmann, A. Burchard, M. Deicher, M. Franculli, D. Forkel-Wirth, M.H. Knopf, S. Lindner, R. Magerle, E. McGlynn, K.G. McGuigan, J.C. Soares, A. Stotzler, G. Weyer *Radioactive isotope identifications of Au and Pt photoluminescence centres in silicon* Physica Status Solidi B 210 (1998) S. 853-858
- [Bol-99] J. Bollmann, S. Lindner, M.O. Henry, E. McGlynn, S. Knack *Deep level anomalies in silicon doped with radioactive Au Atoms* Physica B 273-274 (1999) S. 433-436

[Lei-99] J.P. Leitao, M.C. Carmo, M.O. Henry, E. McGlynn, J. Bollmann, S. Lindner
The 777meV photoluminescence band in Si:Pt Physica B 273-274 (1999) S.
420-423

[Bol-98a] J. Bollmann, S. Lindner, M.O. Henry, E. McGlynn, M.Deicher, M.H.
Knopf, A. Stötzler, A. Burchard *Properties of Tungsten related defects in Silicon*
Proceedings of ICPS 24 (1998)

[Bol-98b] J. Bollmann, S. Lindner, E. Alves, J. Soares, C.A.J. Ammerlaan, M.
Deicher, M.H. Knopf, R. Magerle, A. Stötzler, M.O. Henry, E. McGlynn, A.
Burchard, D. Forckel-Wirth, M. Franciulli, G. Weyer *Identification of deep States*
from Au/Pt/Ir/Os impurities from Silicon using radioactive transmutation
Proceedings of ICPS 24 (1998)

Konferenzbeiträge

EMRS 2003 bestätigter Vertrag in Strasbourg für Juni 2003 Titel "*Influence of*
In-Diffusion on solar cell parameters of cells using CVD or MOCVD grown
ZnSe-buffer layers"

ECAART 7 Vortrag zu [Boh-02] Surrey bei London 2001

EMRS 2001 Vortrag zu [Lin-02] Strasbourg 2001

DPG 2001 Poster *Untersuchung atomarer Diffusion in chalkopyrit-basierten*
Solarzellenstrukturen mittels ERDA Hamburg 2001

ICDS 20 Poster zu [Bol-99], [Lei-99] San Fransisco 1999

ICPS 24 Poster zu [Bol-98a], [Bol-98b] Jerusalem 1998

Lebenslauf

Swen Lindner

Geburtstag und -ort:	08. Mai 1975	in Potsdam
Schulbesuch:	1981-1989	POS 24 in Potsdam
	1989-1993	ESOS / Gymnasium in Kleinmachnow
Wehrpflicht	1993-1994	in Potsdam
Studium:	1994-1999	Diplomstudium der Physik an der Humboldt-Universität zu Berlin
Vordiplom	09/1996	Gesamturteil 1.9-2.1 (gut)
Diplomarbeit	1998-1999	Dublin City University (Irland)
Diplom	09/1999	Gesamturteil 1.6 (gut)
Doktorarbeit	02/2000-03/2003	Hahn-Meitner-Institut Berlin

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich all denen meinen Dank aussprechen, die mir auf vielfältigste Weise bei der Entstehung dieser Arbeit geholfen haben.

Frau Prof. Lux-Steiner, die mein "Wandeln zwischen den Welten" der jungen, quirligen Solarenergieforschung und der älteren, wissenden Strukturforschung des HMI erst ermöglichte und sich anschließend die Zeit genommen hat, dies konsequent zu fördern.

Dr. Wolfgang Bohne, dem "Papst der Flugzeit-ERDA" (Zitat Dr.M.Mayer), der mir mit seinem unendlichen Wissen zur ERDA immer zur Verfügung stand und selbst nach langen Strahlzeiten immer hilfsbereit war. Besonders die ausgezeichnete Betreuung bei der Erstellung und Korrektur der Arbeit hat vieles erleichtert.

Jörg Röhrich und Erik Strub, die gemeinsam mit Wolfgang und mir die ERDA-Analytik-Gruppe ausgemacht haben. Jörg mit seinem Wissen und seiner Liebe bis zum letzten Detail und Erik mit all seiner zusätzlichen Hilfe bei der Korrektur meiner Doktorarbeit.

Meinen direkten Betreuern in der Solarenergieforschung, Arnulf Jäger-Waldau und Thomas Schedel-Niedrig.

Susanne Siebentritt, die zu allen Fragen der Chalkopyrit-Solarzellen Rat weiß und das Gedächtnis der Solarenergieforschung für alle Publikationen etc. ist.

Thilo Glatzel für die ersten AFM-Messungen und Hendrik Zollondz für die Möglichkeit der betreuten Nutzung des Luft-AFM.

Matej Mayer für die schnelle und Anpassung von SimNRA einschließlich der Programmierung einer Visual-Basic Schnittstelle für den "Eingriff" meiner Simulation in sein Programm.

Sebastian Fiechter für die Hilfe bei der "thermischen Nachbehandlung" meiner Proben
Anne Rumberg für die Einführung in die CVD-Anlage

Jürgen Albert, der sich die Präparation der MOCVD-Schichten nicht nehmen ließ, sowie Michael Kirsch und Tim Münchenberg für die "restliche" Präparation der Solarzelle nach der ZnSe-Abscheidung.

Katja, Marin und Serge, meinen Zimmernachbarn für alle Ratschläge und die immer freundliche Atmosphäre.

Steffen und Christian für die Hilfe bei der Nachkorrektur der Arbeit.

Gregor für seinen Einsatz in höchster Zeitnot.

Meiner Mutter Brigitte, meinem Bruder Kai und Manfred für die permanente Unterstützung in der gesamten Zeit.

