

Kapitel 1

Einleitung

Um die Lebensqualität für zukünftige Generationen zu sichern, muß eine nachhaltige Energieerzeugung etabliert werden, die unseren Lebensraum so wenig wie möglich belastet. Jede Energieerzeugung ist zwingend mit Emissionen verbunden, sei es durch die Erzeugung selbst und die daraus entstehenden Abfallprodukte, oder durch die Herstellung der Stromgeneratoren an sich. Daher müssen für die einzelnen Energieträger die Prozesse hinsichtlich ihrer Einflußnahme auf unseren Lebensraum optimiert werden. Für den Photovoltaikbereich lautet daher das Ziel, neben einfachen Prozessen eine Herstellung mit hoher Materialausbeute, geringem Material- und Energieaufwand sowie einem Minimum an Abfallprodukten zu entwickeln.

Der Aspekt, der die Verteilung der Gesamtenergieversorgung auf unterschiedliche fossile und regenerative Energieträger bestimmt, zielt hauptsächlich auf die Gesamtkosten für die Energieerzeugung ab. So betrug im Jahr 1999 der Anteil der regenerativen Energieträger an der Energieerzeugung in Deutschland 5.4%, wovon wiederum 0.1% auf die Photovoltaik entfallen [BMW99, VDE99]. Nicht in Betracht gezogen werden in der Statistik allerdings netzungebundene Systeme wie z.B. Inselversorgungen für dezentrale Standorte, bei denen sich die Photovoltaik schon etabliert hat. Für die marktbeherrschenden Solarzellen aus kristallinem Silizium stehen den Gesamtherstellungskosten von etwa 1.5DM/kWh (1998) deutlich geringere Kosten von 0.1DM/kWh für Strom z.B. aus erdgasbetriebenen Kraftwerken gegenüber.

Dies bedeutet, daß marktwirtschaftliche Überlegungen eine drastische Verringerung der Prozeßkosten für die Photovoltaik erfordern, die nicht alleine über die Steigerung der Produktionskapazitäten erfolgen kann. Konkret wird das Ziel der Senkung der Produktionskosten in erster Linie über eine Weiterentwicklung bestehender Systeme bezüglich Wirkungsgrad, Langzeitstabilität und effektiver Herstellungsprozesse verfolgt. An dieser Stelle kann über rein empirische Materialwissenschaft hinaus oft nur das grundlegende Verständnis der in der Solarzelle ablaufenden Prozesse den Weg in Richtung gezielte Optimierung der Prozeßparameter weisen. Zu diesem Verständnis kann die Grundlagenforschung einen entscheidenden Beitrag liefern.

Der eigentliche Beitrag der Grundlagenforschung zur Photovoltaik liegt jedoch in der Verknüpfung bekannter physikalischer Prinzipien zur Entwicklung neuer innovativer Solarzellenkonzepte. Neue Konzepte ermöglichen, daß der Photovoltaik sowohl neue Materialien [O'R91, Bra99, Mar00] als auch neue Herstellungsprozesse [Kam00, Tur91, Suy91, Cle91] erschlossen werden.

In der Vergangenheit zeigte sich, daß die Verbesserung des Transports in den Halbleitermaterialien für die Weiterentwicklung bestehender Solarzellenkonzepte von zentraler Wichtigkeit ist. Die Sammlungslänge in einer Solarzelle, d.h. die Distanz, die die photogenerierten Ladungsträger im Absorber zurücklegen müssen, um in den Kontakten gesammelt zu

werden, bestimmt die maximale Obergrenze für die Absorberdicke. Die Untergrenze wird durch die optischen Absorptionseigenschaften des Absorbers vorgegeben: die minimale Schichtdicke muß vollständige Absorption der einfallenden solaren Strahlung gewährleisten. Die Verknüpfung zwischen Sammlungslänge und Absorptionslänge spiegelt sich in den unterschiedlichen Skalen für die Schichtdicke wider: Für Solarzellen aus kristallinem Si benötigt man einige $100\mu\text{m}$ Schichtdicke [Run65], während Dünnschicht solarzellen mit wenigen μm auskommen [Cas73, Bon92, Kle93].

Ein anderer Weg, um die für die optische Absorption benötigte Schichtdicke und die erzielbare Sammlungslänge einander anzunähern, wird mit der Verbesserung der Strahlungseinkopplung beschränkt: dabei wird die optische Weglänge in der Solarzelle über entsprechende Strukturierung erhöht. Die Technik der Oberflächenstrukturierung ist sowohl im Bereich der Si-Solarzellen [Arn75] als auch im Bereich der Dünnschicht solarzellen [Dec83] erfolgreich angewendet worden.

Ein innovativer Ansatz hat in jüngster Zeit eindrucksvoll demonstriert, daß es auch mit niedrigen Sammlungslängen im Absorber möglich ist, effiziente Solarzellen zu realisieren: Die sog. Farbstoffsensibilisierung solarzelle basiert auf einer Monolage von Farbstoffmolekülen als absorbierendem Material. Innerhalb des Farbstoffmoleküls betragen die Transportdistanzen nur etwa 10\AA . Trotzdem konnte mit Hilfe der Faltung der Absorberschicht mittels Nanostrukturierung eine ausreichende Absorption gewährleistet werden, so daß solche Solarzellen Wirkungsgrade von fast 11% [Grä97] erzielen konnten.

Die Herausforderung besteht nun darin, auch mit Halbleitermaterialien einen Weg zur Verkürzung der Transportdistanzen zu beschreiben. Mit einer Verringerung der Transportdistanz

im Absorber könnten die Qualitätsansprüche an die Herstellungsprozesse, die bei heutigen Produktionskapazitäten für einen Hauptteil der Produktionskosten verantwortlich zu machen sind, deutlich herabgesetzt werden. Zusätzlich würden die Auswahlkriterien für photovoltaische Materialien, die heute im wesentlichen neben der optischen Absorption durch die elektronische Qualität definiert werden, deutlich erweitert und der Photovoltaik damit neue Materialien erschlossen. Erste Versuche wurden in jüngster Zeit mit Selen [Ten98] oder CuInS_2 [Möl98, Kai99, Möl00] unternommen, wobei die realisierten Zellen stark an die beschriebene Farbstoffsolarzelle angelehnt sind. Die sich aus der Verwendung von Halbleitermaterialien ergebenden Vorteile, wie z.B. eine mögliche Transportdistanz von 100nm anstelle von 10\AA beim Farbstoff, wurden dabei nicht ausgenutzt. Die erzielten Ausbeuten blieben mit 0.13 % für Se bzw. 0.04% für CuInS_2 als Absorber sehr gering.

Die vorliegende Arbeit stellt eine neuartige Solarzelle mit extrem dünnem Absorber vor, die demonstriert, daß ein neues Solarzellenkonzept realisiert werden kann, um Halbleitermaterialien die nur eine geringe Sammlungslänge aufweisen, für die Photovoltaik nutzbar zu machen. Dieses neue Konzept beruht auf der Faltung einer dünnen Absorberschicht und damit auf der Entkopplung von Sammlungs- und Absorptionslänge.

In Kapitel 2 wird das Konzept der untersuchten Solarzelle zunächst grundsätzlich vorgestellt. Eine anschließende Vorauswahl aus den in diesem Konzept verwendbaren Halbleitermaterialien stellt den ersten Schritt zur Realisierung dar. Dabei stehen insbesondere die elektronischen Eigenschaften wie Bandlagen, Bandlücke und Leitungstyp, aber auch die Präparationsmöglichkeiten im Mittelpunkt.

Die für das Konzept wichtigen physikalischen Grundlagen werden in Kapitel 3.3 behandelt. Zunächst werden Überlegungen zur optimalen Einkopplung von Strahlung in ein absorbierendes Medium angestellt. Daraus resultieren erste Anforderungen an die Morphologie des zu wählenden Substratmaterials. Danach erfolgt eine Diskussion der Sammlungslänge, die für die vorgestellte Solarzelle eine zentrale Rolle spielt: Sie stellt die Obergrenze für die zu verwendende Schichtdicke dar und wird grob für Halbleiter von geringer elektronischer Qualität abgeschätzt. Aus der maximalen Absorberschichtdicke lassen sich weitere Aussagen über die optimale Faltung der zu realisierenden Struktur und damit über die Morphologie des Substratmaterials treffen. Außerdem wird in Kapitel 3.3 auf verschiedene Modelle zur Kontaktbildung von Halbleiter-Heterogrenzflächen eingegangen. Diese spielen bei der technologischen Umsetzung des vorgestellten Konzeptes aufgrund der Bandanpassung eine große Rolle.

In Kapitel 4 steht die experimentelle Realisierung des vorgestellten Konzeptes im Mittelpunkt: den größten Stellenwert nimmt dabei neben den eingesetzten Charakterisierungsmethoden die Präparation sowohl des Substrates als auch des Absorbers ein, wobei insbesondere die kritischen Prozeßparameter herausgearbeitet werden.

Nach der Vorstellung der relevanten Grundlagen und der Einführung in die Methodik geht Kapitel 5 auf den derzeitigen Wissensstand bezüglich zweier Materialien, TiO_2 und CdTe , ein, die später Kapitel 2 für die Umsetzung der η -Solarzelle ausgewählt werden..

In Kapitel 6 wird die Realisierung der angestrebten Solarzelle mit extrem dünnem Absorber vorgestellt. Dabei steht zunächst die weitere Einschränkung der Materialien der Vorausswahl mit Hilfe von gezielten Untersuchungen im Vordergrund. Das ausgewählte Materialsystem TiO_2/CdTe wird zunächst bezüglich der Präpa-

ration der gefalteten Struktur charakterisiert, so daß insbesondere Fragestellungen diskutiert werden, wie die Kenntnis der Präparation für planare Schichten auf die Präparation des Materials in der gefalteten Konfiguration angewendet werden kann. Anschließend wird die Heterogrenzfläche zwischen TiO_2 und CdTe untersucht: es werden sowohl die optischen Eigenschaften der TiO_2/CdTe -Grenzfläche mit in Abschnitt 3.1 angestellten theoretischen Überlegungen verglichen, als auch die Bandanpassung zwischen beiden Halbleitern diskutiert. Danach erfolgt die Charakterisierung der Solarzelle mit extrem dünnem Absorber, zunächst im Vergleich zu einer Solarzelle mit gleichen Materialien in planarer Konfiguration. Zum Abschluß werden die experimentellen photoelektrischen Ergebnisse unter Verwendung des zuvor erarbeiteten Modells und zusätzlicher geometrischer Überlegungen diskutiert.