

# Kapitel 10

## Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit den elektrischen Transporteigenschaften von Ladungsträgern in epitaktischem und polykristallinem  $\text{CuGaSe}_2$ . An dieser Stelle sollen kurz die wichtigsten Ergebnisse zusammengefasst werden und Vorschläge für weitere Untersuchungen gemacht werden.

### 10.1 Wachstum und Probenpräparation

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein vorhandener Messaufbau für Hall-Messungen modifiziert, um Messungen unter Beleuchtung zu ermöglichen. Die benötigte Software wurde komplett neu geschrieben.

Es zeigte sich, dass Hall-Messungen an  $\text{CuGaSe}_2$ -Schichten durch zeitabhängige Effekte erschwert werden. Es wurden spannungsinduzierte Diffusion von Kupfer (Abschnitt 7.1.1) und persistente Photoleitfähigkeit (Abschnitt 2.2.6) beobachtet. Durch Erhitzen von  $\text{CuGaSe}_2$ -Proben an Luft wird Zweipfad-Leitung ausgelöst (Abschnitt 6.1). Durch Beschichtung mit CdS und Verwendung von kupferreichem Material gelang es, mittels Hall-Effekt untersuchbare Proben herzustellen.

Eine interessante Aufgabenstellungen für weitere Arbeiten ist das Wachstum epitaktischer Schichten auf  $\text{ZnSe}$ -Substraten. Die Verwendung von  $\text{ZnSe}$  als Substrat hat einige Vorteile: Erstens kann eine Diffusion von Ga aus dem Substrat ausgeschlossen werden, was für Untersuchungen an  $\text{CuInSe}_2$  von Interesse ist. Zweitens ist die Bandlücke von  $\text{ZnSe}$  größer als die von  $\text{CuGaSe}_2$ , wodurch Photogeneration von Ladungsträgern im Substrat durch die Verwendung von Kantenfiltern ausgeschlossen werden kann. Drittens kann bei  $\text{GaAs}$ -Substraten eine Diffusion von Ladungsträgern in das Substrat nicht komplett ausgeschlossen werden. Da das Valenzband von  $\text{ZnSe}$  energetisch um ca. 1,3eV tiefer liegt, ist eine Diffusion von Löchern in  $\text{ZnSe}$ -Substrate nicht möglich.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde das erste Mal der Versuch unternommen, epitaktisches  $\text{CuGaSe}_2$  auf  $\text{ZnSe}$ -Wafeln wachsen zu lassen. Dieser Versuch lieferte von tiefen Gräben durchzogene Schichten, die für die Untersuchung mittels Hall-Effekt ungeeignet waren. Andererseits wurden keine umfassenden Versuchsreihen unternommen. Möglicherweise kann mit anderen Temperaturen oder einer im gleichen MOCVD-Lauf gezüchteten  $\text{ZnSe}$ -Pufferschicht epitaktisches Wachstum geschlossener  $\text{CuGaSe}_2$ -Schichten erreicht werden.

Weiterhin interessant sind elektrische Transportmessungen an  $\text{Cu(In,Ga)Se}_2$ . Der Einfluss des Indiumgehalts ist noch nicht hinreichend erforscht. Allerdings sind Proben aus  $\text{Cu(In,Ga)Se}_2$  elektrisch noch instabiler als die aus  $\text{CuGaSe}_2$ . Messungen an  $\text{Cu(In,Ga)Se}_2$  stellen daher eine große Herausforderung dar. Dafür bestehen industriell hergestellte Chalkopyrit-Dünnschicht-Solarzellen aus diesem Mischmaterial, so dass die Untersuchung der elektrischen Transporteigenschaften eine hohe Priorität hat.

### 10.2 Transport in polykristallinen $\text{CuGaSe}_2$ -Schichten

An polykristallinen  $\text{CuGaSe}_2$ -Schichten auf Glas wurde beobachtet, dass sich natriumhaltige Substrate günstig auf die Leitfähigkeit der Schichten auswirken. Dies war schon vorher bekannt[Hol94][Sch97]

[Con97] und konnte wieder bestätigt werden. Es zeigte sich, dass die Aktivierungsenergie der Leitfähigkeit von natriumfreien Schichten wesentlich höher ist als die von natriumhaltigen. Gleichzeitig ist die Beweglichkeit in den natriumfreien Schichten geringer. Damit ist klar, dass Natrium nicht nur durch seinen, ebenfalls deutlich gezeigten, Einfluss auf die Korngrößen des Materials die Leitfähigkeit verändert, sondern auch eine direkte Wirkung auf die elektrischen Eigenschaften besitzt. Hierbei zeigt sich besonders ein günstiger Einfluss auf die Beweglichkeit. Der Einfluss ist besonders stark bei der Verwendung von Substraten aus Soda-Lime-Glas. Die Ursache hierfür ist unbekannt. Es scheint naheliegend, dass die Beweglichkeit durch Barrieren an den Korngrenzen beschränkt wird. Das Natrium bewirkt demzufolge eine Passivierung der Korngrenzen. Auf Soda-Lime-Glass gewachsene polykristalline  $\text{CuGaSe}_2$ -Schichten weisen eine ungewöhnlich hohe Beweglichkeit auf, die wesentlich größer ist als die von auf NaF beschichteten, natriumfreien Glas gewachsener Schichten. Da diese Frage auch eine hohe technologische Bedeutung hat, sollte ihr weiter auf den Grund gegangen werden. Möglicherweise spielt die Kristalltextur hierbei eine Rolle [Ott04]. Mittels XRD oder Elektronen-Rückstreuung (engl.: *Electron Backscatter Diffraction, EBSD*) ließe sich dies näher untersuchen.

Messungen unter Beleuchtung, die dazu dienen sollten, die Natur der Korngrenzen zu klären (siehe Abschnitt 2.4), lieferten keine klaren Ergebnisse, da eine thermische Aktivierung der Beweglichkeit, wie sie in [Sch02a] gefunden wurde, nicht festgestellt werden konnte. In der Zwischenzeit wurden Untersuchungen an einzelnen Korngrenzen von auf Bikristallen gewachsenen Schichten durchgeführt [Sie06b], die das Modell neutraler ( $\Sigma 3$ -)Korngrenzen von Persson [Per05][Per03] bestätigten.

### 10.3 Transport in epitaktischen $\text{CuGaSe}_2$ -Schichten

Die Möglichkeit der epitaktischen Abscheidung von  $\text{CuGaSe}_2$  auf GaAs erlaubte es, Transport-Messungen ohne den störenden Einfluss von Korngrenzen durchzuführen. Hierbei zeigte sich einmal mehr, dass es sich bei  $\text{CuGaSe}_2$  um ein stark kompensiertes Material handelt. In Photo-Hall-Messungen an epitaktischem  $\text{CuGaSe}_2$  wurde beobachtet, dass die im Dunkeln festgestellte Kompensation unter Beleuchtung aufgehoben wird. Eine Modellierung dieses Verhaltens liefert eine bessere Anpassung an die experimentellen Messwerte, wenn der im Material vorhandene tiefe Akzeptor mit einer Aktivierungsenergie von 250meV (siehe [Tur01]) mitberücksichtigt wird. Die Theorie der Selen-Fehlstellen von Lany [Lan05] liefert eine mögliche Erklärung. Eine zukünftige Aufgabe wäre es, diese mit komplementären Methoden zu überprüfen. Hierfür seien EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure), XANES (X-ray Absorption Near Edge Structure) oder DLTS (Deep Level Transient Spectroscopy) als Beispiele genannt.