

7 Banddiskontinuitäten an der ZnSe/CuGaSe₂(001)-Heterogrenzfläche

Halbleiter-Heteroübergänge entstehen bei der Kontaktbildung zweier unterschiedlicher halbleitender Materialien über eine gemeinsame Grenzfläche. Eine wesentliche Einflußgröße, welche die elektronischen Eigenschaften des Heteroübergangs bestimmt, ergibt sich aus der gegenseitigen energetischen Anpassung der Valenz- und Leitungsbandkanten beider Halbleiter.

In Abschnitt 2.3.2 wurden bereits einige Folgerungen aus den bisher vorhandenen experimentellen Daten zu II-VI/I-III-VI₂-Heteroübergängen sowie aus numerischen Simulationen der Kenngrößen des resultierenden Bauteils Heterosolarzelle gezogen. Danach sollte ZnSe als Pufferschicht für Heterosolarzellen auf der Basis von CuGaSe₂ hinsichtlich der Bandanpassung besser geeignet sein als das üblicherweise verwendete CdS. Die Transitivitätsregel (Gleichung (2.11), Abschnitt 2.3.2) läßt für den ZnSe/CuGaSe₂-Heteroübergang eine Typ-I-Anpassung ($\Delta E_L > 0$) erwarten; experimentelle Daten standen zum Zeitpunkt dieser Arbeit noch nicht zur Verfügung.

Ziel war daher die in situ-Untersuchung der Grenzflächenausbildung am ZnSe/CuGaSe₂-Heteroübergang mittels Röntgenphotoelektronenspektroskopie (XPS) zur Bestimmung der Banddiskontinuitäten.

7.1 Bestimmung der Bandanpassung mittels Photoelektronenspektroskopie

7.1.1 Beschreibung der Methode

Bei der Photoelektronenspektroskopie (PES) von Festkörpern wird die spektrale Verteilung von Elektronen bestimmt, die als Folge der Anregung mittels monochromatischer Photonen aus einem Kristall freigesetzt werden. Je nach der Wahl der Anregungsenergie wird zwischen Ultraviolett- und Röntgenphotoelektronenspektroskopie (UPS und XPS) unterschieden. Als Sonde für besetzte elektronische Zustände in Halbleitern bietet

die Photoelektronenspektroskopie einen direkten Zugang zur Bestimmung des Valenzbandoffsets ΔE_V . Bezüglich der Grundlagen der PES sei auf die Literatur verwiesen (z. B. [91,179,180]). Der folgende Abschnitt beschränkt sich auf die Darstellung der XPS hinsichtlich ihrer Möglichkeiten zur Untersuchung von Valenzbanddiskontinuitäten an Heterogrenzflächen sowie der Vorgehensweise bei ihrer Bestimmung.

Die Oberflächenempfindlichkeit der XPS ist die grundlegende Eigenschaft, welche eine direkte Beobachtung der Grenzflächenausbildung gestattet. Sie beruht auf der geringen mittleren freien Weglänge λ_e der Elektronen im Festkörper. Bei einer kinetischen Energie der Elektronen von 50-70 eV besitzt λ_e als Funktion von E_{kin} ein Minimum von etwa

5 Å. Für kinetische Energien um 1000 eV steigt λ_e auf etwa 20 Å an [179]. So wird – durch in situ-Präparation und -Charakterisierung des Heteroübergangs – die Untersuchung der Grenzflächenbildung und des Bandverlaufs möglich. Wird eine sehr dünne Schicht (5-10 Å) eines Halbleiters auf einer Substratoberfläche abgeschieden, so können im Spektrum der photoemittierten Elektronen beide Valenzbandkanten von Schicht und Substrat spektral aufgelöst werden. Der Wert für ΔE_V kann dann durch lineare Extrapolation der Anstiegsflanken beider Valenzbandemissionen auf die Energieachse bestimmt werden (siehe als Beispiel hierfür den Heteroübergang Ge/ZnSe [181]). Als einschränkende Bedingung für die Anwendbarkeit dieser Methode gilt

$$|E_{\text{VBM}} - E_F|^{\text{Substrat}} > |E_{\text{VBM}} - E_F|^{\text{Schicht}},$$

damit die Valenzbandeinsatzkante E_{VBM} der Schicht nicht von der Intensität der Energieverteilungskurve des Substratmaterials überlagert wird. Energienullpunkt bei der Messung ist das Fermienergie E_F . Aufgrund der geringen Informationstiefe der detektierten Elektronen sind bei dieser Bestimmung von ΔE_V aus einem einzigen Spektrum Energieänderungen durch Bandverbiegungen ΔV_{bb} vernachlässigbar.

In vielen Fällen ist dieser direkte Zugang jedoch nicht möglich. Die Valenzbandmaxima von Substrat und Schicht müssen dann aus unterschiedlichen Spektren von a) der unbedeckten Substratoberfläche und b) einer hinreichend dicken Schicht ermittelt werden. Zur Bestimmung von ΔE_V ist nun jedoch zu berücksichtigen, daß im Verlauf des Schichtwachstums Bandverbiegungen ΔV_{bb} an der Grenzfläche auftreten können:

$$\Delta E_V = E_{\text{VBM}}(\text{Substrat}) - E_{\text{VBM}}(\text{Schicht}) - \Delta V_{\text{bb}} \quad (7.1).$$

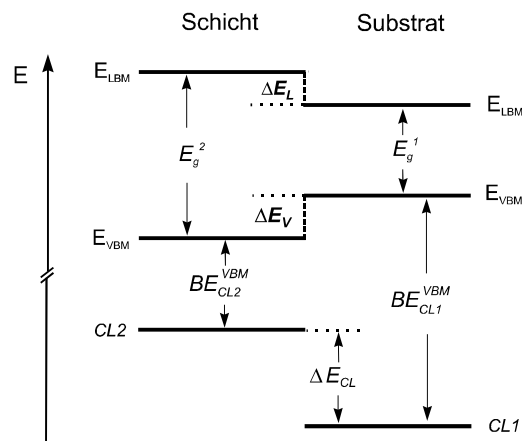


Abb. 7.1: Schematische Darstellung der Meßgrößen bei der Bestimmung der Valenzbanddiskontinuität mittels XPS: Rumpfniveau-Bindungsenergien bezüglich der Valenzbandmaxima $E_{\text{CL},2}^{\text{VBM}}$ und Energiedifferenz zwischen den beiden Rumpfniveaus ΔE_{CL} .

Bandverbiegungen zeigen sich besonders deutlich in den Rumpfniveauspektren. Sie eignen sich daher als Referenz, um die Bandverbiegung aus Gl. (7.1) zu eliminieren. Die Valenzbanddiskontinuität folgt dann aus der Beziehung [182]

$$\Delta E_V = BE_{\text{CL1}}^{\text{VBM}}(\text{Substrat}) - BE_{\text{CL2}}^{\text{VBM}}(\text{Schicht}) - \Delta E_{\text{CL}} \quad (7.2)$$

mit den Bindungsenergien zweier Rumpfniveaus (engl.: core levels, CL1,2) von Schicht und Substrat bezüglich der jeweiligen Bandkante $BE_{\text{CL},2}^{\text{VBM}}$ und der Energiedifferenz zwischen den beiden Rumpfniveaus ΔE_{CL} .

In Abb. 7.1 sind die Meßgrößen in einem schematischen Bänderdiagramm dargestellt. Die Energien $BE_{\text{CL1}}^{\text{VBM}}$ und $BE_{\text{CL2}}^{\text{VBM}}$ werden an der unbedeckten Substratoberfläche bzw. der vollständig ausgebildeten Schicht bestimmt. ΔE_{CL} ergibt sich aus Bedeckungssequenzen, in denen beide Rumpfniveaus im Röntgenphotoelektronenspektrum (XP-Spektrum) zu sehen sind. Die Meßgenauigkeit bei der Auswertung von ΔE_V wird von

der Genauigkeit der Bestimmung der jeweiligen Valenzbandmaxima dominiert und überwiegt im allgemeinen gegenüber dem Fehler bei der Bestimmung der Rumpfniveau-Linienlagen; sie liegt etwa bei ± 0.1 eV. Im Einzelfall ist zu prüfen, ob eine Verschiebung der Bindungsenergie der Rumpfniveaus aufgrund chemischer Reaktionen ausgeschlossen werden kann. Die gemessenen Energieverschiebungen wären dann Ausdruck einer veränderten Elektronenverteilung der an der Reaktion beteiligten Atome und nicht mehr ein Maß für die Bandverbiegung allein.

Im Falle von Verbindungshalbleitern hat sich gezeigt, daß die Rumpfniveaus der beteiligten Kationen weniger von chemischen Reaktionen beeinflusst werden, als die Anionen [183,184]. Damit eignen sich in der ersten Phase der Bildung der Heterogrenzfläche vor allem die Signale der Kationen dazu, eine Veränderung der Bandverbiegung an der Oberfläche nachzuweisen.

7.1.2 Experimentelle Vorgehensweise

Die Oberflächenempfindlichkeit der XPS ist einerseits eine der grundlegenden Eigenschaften, die die Bestimmung von ΔE_V ermöglicht, andererseits ergibt sich daraus eine wesentliche Herausforderung bei der experimentellen Umsetzung hinsichtlich der erforderlichen Reinheit. Bereits geringste Verunreinigungen der Oberfläche können Photoemissionsspektren stören und eine exakte Bestimmung insbesondere der Valenzbandkanten unmöglich machen. Die untersuchten CuGaSe₂-Oberflächen wurden für diese Untersuchungen, wie in Kapitel 4 beschrieben, mittels MOVPE hergestellt, also ex situ präpariert. Dadurch wird ein Proben transfer in das UHV-System nötig, wobei die Oberfläche so wenig wie möglich Sauerstoff und Feuchtigkeit aus der Luft ausgesetzt sein sollte. Zu diesem Zweck wurden die

CuGaSe₂-Schichten direkt nach dem Ausbau aus dem Reaktor in der trockenen N₂-Atmosphäre der Handschuhbox der MOVPE-Anlage (vgl. Kapitel 4.4) in eine Transferkammer eingesetzt, die anschließend verschlossen wurde.

Das verwendete UHV-System (VG-ESCALab MK-II [185]) besteht aus verschiedenen Kammern, die durch Ventile voneinander getrennt sind. Die Analysatorkammer, deren Enddruck typischerweise bei 10^{-11} - 10^{-10} mbar liegt, wird ausschließlich für die Photoelektronenspektroskopie verwendet. Zur Präparation der ZnSe-Schichten wurde die Probe über ein Transfersystem in eine getrennte Kammer umgesetzt, damit die Analysatorkammer frei von ausgasenden Verunreinigungen bleibt. An die Präparationskammer war eine kleine Schleusenkammer angeflanscht, die in etwa 15 min auf ca. 10^{-6} mbar abgepumpt werden konnte; über diese Schleuse erfolgte der Proben transfer aus der N₂-Atmosphäre innerhalb etwa einer halben Stunde von Normaldruck in das UHV.

Nach dem Transfer ins UHV und dem Ausheizen der Probe (1 h, 200 °C) erfolgte zunächst die Vorcharakterisierung der CuGaSe₂(001)-Oberfläche. Als Anregungsquelle für die XPS-Untersuchungen diente Mg K α -Strahlung (1253.6 eV). Die Elektronen wurden mit Hilfe eines Halbkugelanalysators spektral gemessen, der bei einer Passenergie von 20 eV (Auflösung etwa $\Delta E = 200$ meV) betrieben wurde.

Die XP-Rumpfniveauspektren der Probenoberfläche zeigten nach dem Ausheizschritt nur noch geringe Spuren von an der Oberfläche adsorbierten Sauerstoff- und Kohlenstoffverbindungen. In den XP-Valenzbandspektren der CuGaSe₂-Oberfläche konnten nach der Desorption von Oberflächenadsorbaten strukturierte Emissionen des Valenzbandes beobachtet werden, die eine Bestimmung von E_{VBM} erlaubten (siehe Kapitel 7.2).

Für die Bestimmung der Bandanpassung zwischen ZnSe und CuGaSe₂ wurden die Rumpfniveaus Zn 3d und Ga 3d gewählt. Die Untersuchung der Grenzflächenausbildung begann mit der Aufnahme eines XP-Spektrums des Valenzbandbereich und des Ga 3d-Rumpfniveaus des Substrates (Abb. 7.2, unten). Danach folgt der erste ZnSe-Aufdampfschritt.

ZnSe wurde aus einer Knudsenzelle thermisch verdampft. Bei einer Betriebstemperatur von 765 °C lag die Aufdampftrate etwa bei 5 Å/min. Bei allen Aufdampfschritten befand sich das Substrat auf Raumtemperatur. Nach jedem Präparationsschritt wurden XP-Spektren aufgenommen, um die beiden Rumpfniveaus im Verlauf der Bildung des Heteroübergangs zu beobachten. Die Filmabscheidung wurde bei Raumtemperatur durchgeführt, um Grenzflächenreaktionen zu vermeiden. Dies geschah aus der Kenntnis, daß z. B. bei den Untersuchungen der CdS/CuInSe₂-Heterogrenzfläche bereits bei einer Substrattemperatur von 120 °C die Bildung einer reagierten Phase beobachtet wurde [85]. Die Bestimmung des Valenzbandoffsets erfolgte daher in der zitierten Arbeit auf der Grundlage der Meßdaten aus der Raumtemperatur-Abscheidung des CdS-Films. Außerdem wird bei der Abscheidung des Heteroübergangs bei Raumtemperatur polykristallines, relaxiertes Wachstum erwartet, so daß keine Verspannungseffekte zu berücksichtigen sind [94].

7.2 ZnSe/CuGaSe₂(001)-Heterogrenzfläche: Bandanpassung

Um eine Wachstumsoberfläche mit möglichst geringer Rauigkeit anbieten zu können, wurde für diese Untersuchungen eine CuGaSe₂-Epitaxieschicht mit leicht Ga-reicher Komposition präpariert (vgl. Abschnitt 5.2.1). Der Epitaxieprozeß wurde auf

zwei GaAs-Substraten durchgeführt, um neben der zu transferierenden Schicht noch ein zweites Probenstück für begleitende Charakterisierungsmethoden bereitzustellen. Die mittels EDX bestimmte Volumenzusammensetzung der Schicht betrug Cu:Ga:Se = 24 : 25 : 51 [at.%].

Die Photoelektronenspektren in Abb. 7.2 geben die Entwicklung der Rumpfniveaumissionen von Substrat (Ga 3d) und Schicht (Zn 3d) sowie der Valenzbänder im Verlauf der Abscheidung von ZnSe auf CuGaSe₂ wieder. Das untere Spektrum wurde an der unbedeckten CuGaSe₂-Oberfläche aufgenommen, nachdem die Probe für 1 h bei 200 °C ausgeheizt worden war. Mit zunehmender ZnSe-Bedeckung nimmt die Intensität der Ga 3d-Rumpfniveaumission des Substrats ab, während das Zn 3d-Signal

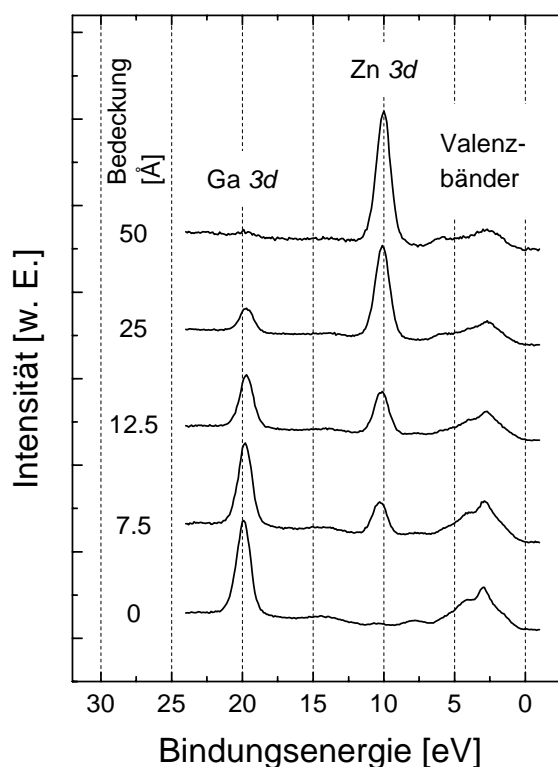


Abb. 7.2: XP-Spektren der Ga 3d und Zn 3d-Rumpfniveaus und des Valenzbandbereichs im Verlauf der ZnSe-Abscheidung auf CuGaSe₂(001). Der Energienullpunkt ist durch das Fermi-niveau festgelegt.

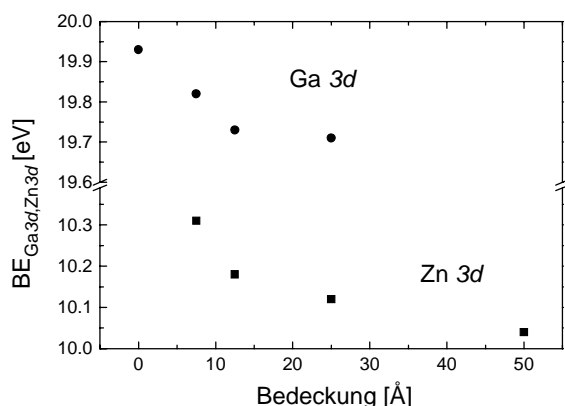


Abb. 7.3: Auf das Fermi-niveau bezogene Bindungsenergien der Rumpfniveaumissionen als Funktion der ZnSe-Bedeckung.

immer deutlicher hervortritt. Abb. 7.3 zeigt die bezüglich des Fermi-niveaus bestimmten Bindungsenergien $BE_{\text{Ga } 3d, \text{Zn } 3d}$ als Funktion der Bedeckung. Das Ga 3d-Rumpfniveau verschiebt sich mit steigender ZnSe-Filmdicke um etwa 200 meV zu niedrigeren Energien. Das Zn 3d-Niveau folgt dieser Verschiebung. Es wurden außerdem keine Veränderungen der Linienform, wie Asymmetrien oder zusätzliche verschobene Emissionen beobachtet. Daher gibt es keine Hinweise auf Grenzflächenreaktionen und damit verbundene chemische Verschiebungen. Die parallele Energieverschiebung der beiden Rumpfniveaus weist somit auf eine Änderung der Bandverbiegung ΔV_{bb} von etwa -200 meV hin.

Für jeden der Aufdampfschritte, bei dem beide Rumpfniveaus zu sehen sind, läßt sich mit sehr geringer Streuung ein Energieunterschied zwischen Ga 3d- und Zn 3d-Niveau von

$$\Delta E_{\text{CL}} = (9.55 \pm 0.05) \text{ eV}$$

bestimmen.

Die Lage der Valenzbandkante wurde unter Berücksichtigung der instrumentellen Verbreiterung durch lineare Extrapolation der Anstiegsflanke der Valenzbandemissionen

bestimmt (Abb. 7.4). Die Rumpfniveaumissionen wurden mit Hilfe von Gauß-Lorentz-Kurven angepasst [186].

Für die Valenzbandkante im CuGaSe₂ ergibt sich aus der in Abb. 7.4 dargestellten Anpassung ein Wert von $(0.57 \pm 0.05) \text{ eV}$. Mit der Energielage des Ga 3d-Rumpfniveaus von $(19.91 \pm 0.05) \text{ eV}$ folgt hieraus eine auf die Valenzbandkante bezogene Bindungsenergie von

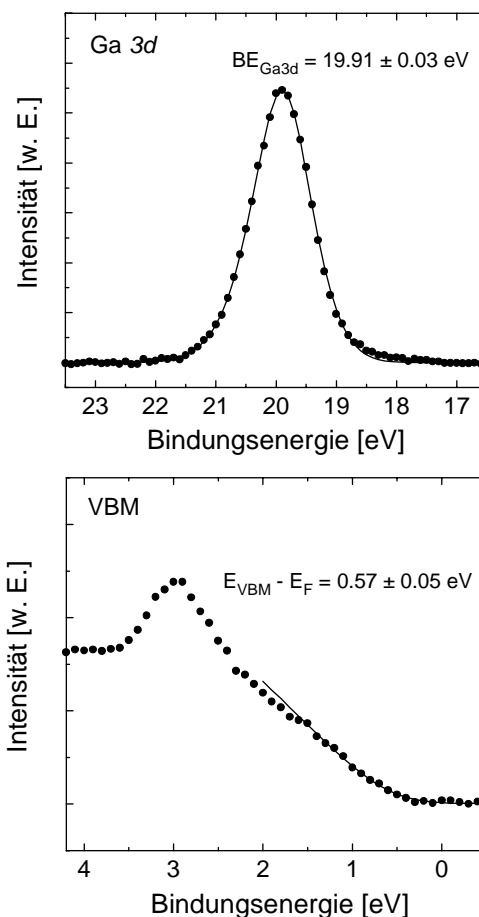


Abb. 7.4: Ga 3d-Rumpfniveau und Valenzbandbereich der unbedeckten CuGaSe₂-Oberfläche (Punkte: XPS-Meßdaten, Linien: Anpassungskurven). Die Anpassung der Rumpfniveaumission erfolgte mit Hilfe einer Gauß-Lorentz-Kurve. Zur Bestimmung der Valenzbandkante E_{VBM} relativ zum Fermi-niveau E_{F} wurden die Meßdaten unter Berücksichtigung der instrumentellen Verbreiterung linear extrapoliert.

$$BE_{\text{Ga}3d}^{\text{VBM}} = (19.34 \pm 0.05) \text{ eV}.$$

Dieser Wert ist in sehr guter Übereinstimmung mit der von Turowski et al. ermittelten Bindungsenergie von 19.35 eV [187].

Für eine zuverlässige Bestimmung der Bindungsenergie des Zn 3d-Rumpfniveaus relativ zum Valenzbandmaximum des ZnSe war die Schichtdicke des ZnSe-Films aus der hier gezeigten Meßreihe zu gering. Außerdem werden im Falle der XPS von ZnSe die Photoelektronensignale des Valenzbandbereichs von Satellitenanregungen des Zn 3d-Zustandes überlagert. Daher wurden weitere Meßdaten von dicken ZnSe-Schichten auf verschiedenen Schichtgitterhalbleitern hinzugezogen, die mittels Synchrotronstrahlung mit Anregungsenergien von 40 eV bzw. 80 eV bestimmt worden waren [188]; aus diesen Daten wurde eine Bindungsenergie des Zn 3d-Rumpfniveaus von

$$BE_{\text{Zn}3d}^{\text{VBM}} = (9.20 \pm 0.05) \text{ eV}$$

ermittelt. In der Literatur werden Werte von 9.25 eV [86] und 9.13 eV [189] angegeben. Die Präparation des ZnSe-Films erfolgte dabei in der ersten zitierten Arbeit bei 200 °C durch thermisches Verdampfen aus einer binären Quelle; in der zweiten durch Raumtemperatur-Abscheidung mittels MBE aus den Elementen.

Die Valenzbanddiskontinuität läßt sich nun nach Gl. (7.2) berechnen:

$$\Delta E_V = (19.34 - 9.20 - 9.55) \text{ eV} = (0.6 \pm 0.1) \text{ eV}.$$

Für den Offset im Leitungsband folgt aus den Bandlückenenergien $E_g(\text{ZnSe}) = 2.7 \text{ eV}$ und $E_g(\text{CuGaSe}_2) = 1.7 \text{ eV}$

$$\Delta E_L = (2.7 - 1.7 - 0.6) \text{ eV} = (0.4 \pm 0.1) \text{ eV}.$$

Abb. 7.5 faßt die experimentell bestimmten Energien sowie die resultierenden Banddiskontinuitäten zusammen.

Es ergibt sich ein Typ-I-Heteroübergang. Sowohl das Valenzbandmaximum als auch

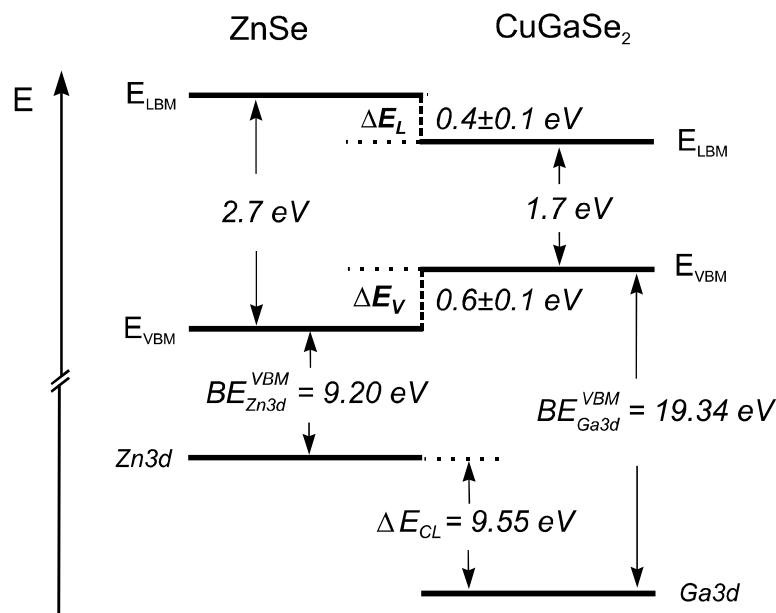


Abb. 7.5: Schematisches Energieniveaudiagramm des ZnSe/CuGaSe₂-Heteroübergangs. Die experimentell bestimmten auf die Valenzbandkante bezogenen Rumpfniveau-Bindungsenergien sowie die Ga 3d-Zn 3d-Energiedifferenz ΔE_{CL} sind angegeben. Die resultierenden Banddiskontinuitäten betragen $\Delta E_V = (0.6 \pm 0.1) \text{ eV}$ und $\Delta E_L = (0.4 \pm 0.1) \text{ eV}$.

das Leitungsbandminimum befinden sich auf der Seite des Absorbers CuGaSe₂. Mehr als die Hälfte des Bandlückenunterschieds ΔE_g zwischen Fenster und Absorber äußert sich als Valenzbanddiskontinuität an der ZnSe/-CuGaSe₂-Grenzfläche.

Der hier untersuchte Heteroübergang ist daher ein Beispiel für das Scheitern der „common-anion rule“ [190,191]. Diese gehört zu einer Reihe semi-empirischer Regeln, die als qualitative Leitlinien zur Vorhersage von Banddiskontinuitäten aufgestellt wurden. Danach werden bei Heterosystemen zwischen Verbindungshalbleitern mit gleichem Anion verschwindende Valenzbandoffsets $\Delta E_V \approx 0$ erwartet, da die Valenzbandkante in Kristallen mit sp^3 -Hybridisierung im wesentlichen aus bindenden Anion-p-Zuständen gebildet werden sollte. Bereits bei den binären Paaren AlAs/GaAs und CdTe/HgTe wurde jedoch ein hiervon abweichendes Verhalten beobachtet, welches auf unterschiedlich stark ausgeprägte Beiträge der Kation-d-Elektronen zur Valenzbandstruktur auf der jeweiligen Seite der Grenzfläche zurückgeführt wurde [191].

Im Falle der Beteiligung von Chalkopyriten in II-VI/I-III-VI₂-Heteroübergängen ist ebenfalls durch die Hybridisierung zwischen Edelmetall-d- und Anion-p-Zuständen eine starke Abweichung von der „common-anion rule“ zu erwarten. Dies wurde von Nelson et al. [86] am Beispiel ZnSe/CuInSe₂ gezeigt. Mit $\Delta E_V = 0.7$ eV wurde in diesem System die bis dahin größte Abweichung von der „common-anion rule“ nachgewiesen. Die Cu 3d-Zustände des CuInSe₂ besitzen eine deutlich geringere Bindungsenergie als die Zn 3d-Zustände im ZnSe. Dementsprechend ist die Kopplung (Cu 3d)-(Se 4p) stärker als die (Zn 3d)-(Se 4p)-Wechselwirkung in ZnSe. Die Energieverschiebung der Valenzbandkante durch p-d-Hybridisierung ist invers proportional zum Abstand der beteiligten Niveaus. Die Valenzbandkante wird da-

her auf der Seite des CuInSe₂ stärker energetisch angehoben als im ZnSe.

Dasselbe Verhalten konnte im Rahmen dieser Arbeit erstmals für das hier untersuchte „common-anion“-Paar ZnSe/CuGaSe₂ gezeigt werden. Die um etwa 100 meV niedrigere Valenzbanddiskontinuität von $\Delta E_V = 0.6$ eV (gegenüber dem System ZnSe/-CuInSe₂) stimmt gut mit den theoretischen Berechnungen von Wei et al. [90] zur relativen Lage der Valenzbandkanten zwischen CuInSe₂ und CuGaSe₂ überein. Danach sollte das Valenzbandmaximum von CuGaSe₂ 40 meV unterhalb der des CuInSe₂ liegen. Aus den experimentellen Daten ergibt sich mit Hilfe der Transitivitätsregel eine Energiedifferenz von 100 meV (Abb. 7.6).

Die in dieser Arbeit bestimmte Bandanpassung zwischen ZnSe und CuGaSe₂ fügt

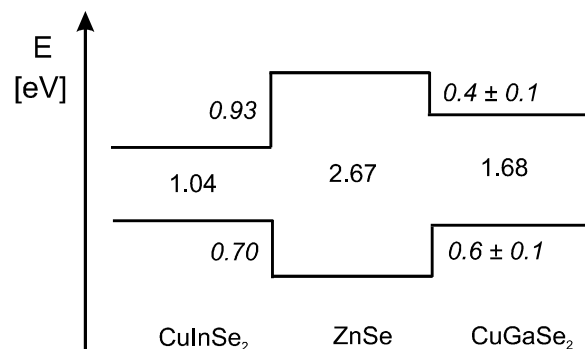


Abb. 7.6: Schema der experimentell bestimmten Bandanpassungen für ZnSe/CuInSe₂ [86] und ZnSe/CuGaSe₂ (diese Arbeit).

sich schlüssig in die bisherigen Arbeiten zu II-VI/CuIn_{1-x}Ga_xSe₂-Grenzflächen ein (vgl. Abschnitt 2.3.2). Die Erhöhung der Bandlücke durch steigenden Ga-Gehalt führt hauptsächlich zu einer Anhebung der Leitungsbandkante, da Ga- und In-Zustände in erster Linie zum Aufbau des Leitungsbands beitragen [90]. Daher sind Valenzbandoffsets zwischen derselben II-VI-Verbindung und CuInSe₂ bzw. CuGaSe₂ etwa gleich groß. Beim Übergang von CdS/

CuInSe₂ zu CdS/CuGaSe₂ kommt es daher zu einem Vorzeichenwechsel der Leitungsbanddiskontinuität [5]. Um diesen Effekt eines negativen Leitungsbandoffsets $\Delta E_L < 0$, der die Leerlaufspannung einer Heterosolarzelle reduziert (vgl. Abschnitt 2.3.1), zu vermeiden, ist ein Fenstermaterial mit kleinerem Valenzbandoffset und/oder größerer Bandlücke erforderlich. ZnSe erfüllt

diese Anforderung und ist somit nicht nur wegen seiner höheren Transmission im Spektralbereich der Solarstrahlung gegenüber dem CdS vorzuziehen, sondern auch hinsichtlich der Bandanpassung und dem damit verbundenen Potential, als Pufferschicht in CuGaSe₂-Heterosolarzellen höhere Leerlaufspannungen zu erreichen.

Zusammenfassung von Kapitel 7

- Im Rahmen dieser Arbeit wurde erstmals die Bandanpassung an der ZnSe/CuGaSe₂(001)-Heterogrenzfläche mittels XPS experimentell bestimmt.
- Im Gegensatz zum Heterosystem CdS/CuGaSe₂, in dem eine Typ-II-Bandanpassung vorliegt, wird die Ausbildung eines Typ-I-Heteroübergangs mit Valenz- und Leitungsbanddiskontinuitäten von $\Delta E_V = (0.6 \pm 0.1)$ eV und $\Delta E_L = (0.4 \pm 0.1)$ eV beobachtet.
- Unter dem Gesichtspunkt der Bandanpassung sollte daher ZnSe als Puffermaterial für CuGaSe₂-Heterosolarzellen gegenüber dem standardmäßig verwendeten CdS Vorteile haben.
- Das in der Literatur am Beispiel verschiedener Heterosysteme diskutierte Scheitern der „common-anion rule“ konnte auch in dem in dieser Arbeit untersuchten Heteroübergang ZnSe/CuGaSe₂ bestätigt werden.