

Kapitel 7

Zusammenfassung

Chalkopyrite sind als Grundlage für die Herstellung hocheffizienter Dünnschichtsolarzellen seit einiger Zeit kommerziell erfolgreich. Gleichzeitig weist das Wissen um ihre physikalischen Eigenschaften, die diesen Erfolg ermöglichen, erhebliche Lücken auf, was die Verbesserung der Zellen behindert. Die Aufklärung grundlegender Materialparameter, wie die Dotierung und die Konzentration tiefer Defekte einerseits, sowie ihr Verhalten in einer Heterostruktur andererseits können wertvolle Hinweise auf Verbesserungsmöglichkeiten geben.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden einige der charakteristischen metallurgischen und elektrischen Eigenschaften am Beispiel des Kupfergalliumdiselenids (CuGaSe_2) untersucht. Dazu wurden untersucht:

- Der morphologisch-chemische Aufbau von Heterogrenzflächen durch ortsaufgelöste Augerelektrolysen an vollständigen Solarzellenstrukturen.
- Der Zusammenhang zwischen der Verteilung elektrisch aktiver Defekte und der Funktion von Solarzellen durch Admittanzmessungen.
- Die grundlegenden Mechanismen der Dotierung und des Ladungstransportes durch Messungen des Hall-Effekts in epitaktischen Modellschichten.

Der Diffusionskoeffizient von Kupfer $D_{\text{GaAs}}^{\text{Cu}} = (3 \pm 1)10^{-15} \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$ und Selen $D_{\text{GaAs}}^{\text{Se}} = (2 \pm 1)10^{-15} \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$ in GaAs konnte aus Tiefenprofilen mittels AES bestimmt werden. Die Diffusion von Gold spielt bei der Formierung von Kontakten für elektrische Messungen eine wichtige Rolle und wurde zu $D^{\text{Au}} = (8.7 \pm 0.8)10^{-13} \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$ in CuGaSe_2 bestimmt.

Aus den Messungen der Admittanz als Funktion der Frequenz und Temperatur konnten eine Reihe von qualitativen Korrelationen zwischen Defektdichten bei verschiedenen Energien und den Leerlaufspannungen der Zellen gefunden werden: Werden sowohl flache als auch tiefe Defekte in einer Reihe vergleichbarer Zellen beobachtet, so steigt die Leerlaufspannung mit zunehmender Dichte des flacheren Defekts an. Dies kann mit einer Modifikation der Bandverbiegung an der Grenzfläche erklärt werden, die spannungsbegrenzende Effekte vermindert. Eine allgemein gültige Grenzenergie zur Unterscheidung dieser beiden Defektzustände kann aufgrund individuell zu bestimmender Energieskalen in unterschiedlichen Materialien nicht angegeben werden.

Der Hall-Effekt in epitaktischen Dünnschichten aus CuGaSe_2 auf GaAs erlaubt die Bestimmung der Ladungsträgerdichte und zusammen mit der Leitfähigkeit die Ermittlung der Ladungsträgerbeweglichkeit. Die ho-

hen Beweglichkeiten der kupferreichen Proben von $250 \text{ cm}^2/(\text{Vs})$ bei Raumtemperatur unterstreichen die hohe Schichtqualität und damit ihre Eignung als Modell für die Untersuchung der grundlegenden Materialeigenschaften. Aus den temperaturabhängigen Beweglichkeitsverläufen konnten Rückschlüsse auf die Ladungstransportmechanismen gezogen werden. Bei den kupferreichen Proben dominiert die Streuung an akustischen Phononen, was ebenfalls ein Ausdruck der hohen kristallinen Qualität ist. Bei quasi stöchiometrischen Proben geht dieser Streuprozeß mit sinkender Temperatur in die Streuung an ionisierten Defekten über. Bei Galliumüberschuß zeigt sich eine dominierende Störbandleitung mit sehr niedrigen Beweglichkeiten.

Aus der Temperaturabhängigkeit der Ladungsträgerdichte konnte die Anregungsenergie des Majoritätsdotanden in CuGaSe_2 zu $E_A = 134 \text{ meV}$ bestimmt werden. Durch die genaue Analyse der Temperaturverläufe wurde die effektive Masse von Löchern in CuGaSe_2 , für die bislang nur eine ungefähre Abschätzung aufgrund von Messungen an verwandten Materialien vorlag, mit $m_h = (1.5 \pm 0.2)m_0$ präzisiert. Außerdem konnten Anhaltspunkte für ein zweites Akzeptorniveau bei etwa 80 meV gefunden werden. Die Existenz zweier Akzeptorniveaus wird von Photolumineszenzmessungen an denselben Schichten untermauert.

Bei dieser Analyse wurde eine erhebliche Kompensation des Materials durch donatorische Zustände zwischen 50 und 96 % der Akzeptorkonzentration gefunden, die mit zunehmendem Galliumüberschuß ansteigt. In umgekehrter Richtung steigt die Nettoladungsträgerkonzentration von 10^{15} bei galliumreichen Schichten bis 10^{17} cm^{-3} bei kupferreichen Schichten an.

An polykristallinen Schichten werden Hall-Messungen durch Vorgänge an Korngrenzen so stark beeinflusst, daß sich die Materialparame-

ter nicht aus den Ergebnissen ableiten lassen. Kapazitätsmessungen als Funktion der Spannung sind dagegen sowohl an epitaktischen wie auch an polykristallinen Solarzellenstrukturen möglich, wenn auch die Messungen an epitaktischen Zellen von ihrem hohen Serienwiderstand überlagert werden. Sie bestätigen insgesamt die Ergebnisse der Hall-Messungen an den epitaktischen Schichten und damit die Übertragbarkeit von Messungen an Modellsystemen auf das industrielle Endprodukt.