

Kapitel 6

Abschließende Bemerkungen

In der vorliegenden Arbeit wurde der Ladungsträgertransport über Korngrenzen im Rahmen des Trapping-Modells und einer darauf basierenden semiklassischen Beschreibung des Elektronentransports untersucht.

Dafür wurde in Kap. 3 ein einheitlicher Formalismus entwickelt. Dieser umfaßt und erweitert vorangehende Beschreibungen, die meist nur auf die Untersuchung spezifischer Effekte ausgerichtet sind. Er erlaubt somit eine vergleichende Analyse des Verhaltens von polykristallinen Materialien unter dem Einfluß verschiedener Materialparameter, wie Korngröße, Dotierung, Trap-Zustandsdichten in der Korngrenze, und äußeren Parametern, wie Beleuchtung oder angelegte Spannung.

Die Beschreibung ist eindimensional, wie auch die meisten spezifischen Untersuchungen in der Literatur bei der Betrachtung realer Systeme effektiv auf eine solche reduziert werden. Es ist unmöglich, eine echt dreidimensionale Beschreibung in der hier angestrebten durchsichtigen halb-analytischen Form durchzuführen. Dennoch werden die in eindimensionalen Modellen gewonnenen Einsichten wesentlich auch für die praktische Anwendung sein.

Auf der Grundlage des entwickelten theoretischen Formalismus wurde ein Finite-Elemente-Algorithmus erstellt, mit Hilfe dessen numerische Rechnungen durchgeführt wurden, um quantitative Aussagen machen zu können. Hierbei wurden gleichzeitig einige gängige Näherungen, wie die Depletion-Näherung für die Berechnung des Bandkantenprofils oder die Einführung von flachen Quasi-Fermi-Niveaus infolge von Beleuchtung, auf ihre Anwendbarkeit untersucht und benutzt, um die numerisch erhaltenen Resultate auch analytisch interpretieren zu können.

Der in der vorliegenden Arbeit erarbeitete formale und rechnerische Apparat ist als Rüstzeug für eine systematische Analyse von Transportprozessen in photovoltaisch relevanten polykristallinen Materialien zu verstehen. Die in Kap. 4 behandelten Beispiele, die sich alle auf Silizium beziehen, sind dabei nur als punktuell anzusehen. So wurde gezeigt, daß Quantentunneln im Silizium nur einen geringen Einfluß auf die Leitfähigkeit hat, und daß die Annahme flacher

Quasi-Fermi-Niveaus oft zur Beschreibung des Effekts von Beleuchtung ausreicht.

Ein wesentlich neuer Aspekt des Formalismus ist, daß im Rahmen des Trapping-Modells Systeme nicht identischer Körner in Betracht gezogen werden, wenn auch zunächst nur in einer sehr beschränkten Form (Abweichung in der Größe eines von vier Körnern). Es zeigt sich aber schon an diesem Beispiel, daß die in der Praxis vorkommenden polykristallinen Materialien mit zufällig verteilten Korngrößen nicht allgemein als System identischer Körner mit mittleren Parametern behandelt werden können, wie das üblicherweise geschieht.

Eine weitere Erkenntnis aus den Rechnungen ist, daß der Transportmechanismus, der hier, wie auch überwiegend in der Literatur, als rein ballistisch oder rein diffusiv zugrunde gelegt wurde, einen wesentlichen Einfluß auf die berechnete Leitfähigkeit hat. Bei mikro- bis nanokristallinen Materialien, die jetzt zunehmend für photovoltaische Anwendungen in Betracht gezogen werden (und die in der vorliegenden Arbeit vornehmlich ins Auge gefaßt sind), ist jedoch der Transport weder rein ballistisch noch diffusiv. In der Literatur findet man geeignete Beschreibungen dieser Situation nur für ganz spezielle Fälle. Dies bot den Anlaß dafür, eigene theoretische Vorstellungen dazu zu entwickeln.

In Kap. 5 wird das Resultat dieser Bemühungen, eine einheitliche und physikalisch durchsichtigen Beschreibung von ballistischem und diffusivem Transport, vorgestellt. Diese ist für beliebige Bandkantenprofile und beliebige Werte der mittleren freien Weglänge gültig. Sie stellt einen grundlegenden Beitrag zur Transporttheorie allgemein dar. Anhand dieser Theorie wurde für ein Mehrkorn-System gezeigt, wie sich die Größe der mittleren freien Weglänge im Zusammenspiel mit der Struktur des Bandkantenprofils auf den Transportprozess und damit auf die Strom-Spannungs-Charakteristik, auswirkt.