## **Abstrakt**

Obwohl CuGaSe<sub>2</sub> als breitbandiger direkter Halbleiter für die Anwendung in der Photovoltaik interessant ist, sind grundlegende Materialeigenschaften noch nicht erforscht. Insbesondere die Veränderungen der Grenzfläche und der Defektstruktur bei der Ausbildung des Heteroübergangs sind weitgehend unbekannt. Gerade aber diese Eigenschaften sind für die Funktionsweise der Solarzellen von entscheidender Bedeutung. Daher wurde in dieser Arbeit mittels Photolumineszenz der Einfluß der Solarzellen-Prozessierung auf die Defektstruktur von CuGaSe<sub>2</sub> untersucht.

Die Photolumineszenz bietet dabei die Möglichkeit, geringe Veränderungen in der Defektkonzentration zu detektieren. Für die Untersuchungen wurden epitaktische CuGaSez-Schichten auf GaAs mittels MOCVD unter Cu-Überschuß gewachsen. Dabei wurde ausgenutzt, daß sich während des Wachstums ein Kompositionsgradient der Schicht ausbildet. So konnte der Einfluß der Behandlungschritte für unterschiedliche Kompositionen simultan ermittelt werden. Dabei wurde festgestellt, daß das für Cu-reich präparierte Chalkopyritabsorber notwendige Entfernen einer Cuz Se-Sekundärphase zu einer partiellen Relaxation der CuGaSez-Schicht führt und die Oberflächenrekombination reduziert.

Anders als gegenwärtig für CuInSe<sub>2</sub>-Solarzellen diskutiert wird, hat die naßchemische Abscheidung von CdS- und ZnSe-Puffern auf CuGaSe<sub>2</sub> keinen signifikanten Einfluß auf die Defektstruktur von CuGaSe<sub>2</sub>. Dagegen führt eine ZnO-Beschichtung zu einer Erhöhung der Konzentration des flacheren Akzeptors im CuGaSe<sub>2</sub>. Hierbei konnte gezeigt werden, daß diese Erhöhung nicht durch Dotierung des CuGaSe<sub>2</sub> mit Zn verusacht wird, sondern aufgrund der sich ausbildenden Bandverbiegung bei der Bildung des *pn*-Übergangs. Dies bestätigt das Modell der Selbstkompensation.

Im Gegensatz zur naßchemischen Pufferabscheidung, führt die Beschichtung von ZnSe mittels MOCVD zu einer deutlichen Modifikation der Defektstruktur. Bedingt durch das Zn-Angebot während des Prozesses erhöht sich die Kompensation des CuGaSe<sub>2</sub>.

Desweiteren wurden polykristalline CuGaSe<sub>2</sub>-Absorber mittels MOCVD gewachsen. Die Schichten wurden mittels XRD- und Photolumineszenz-messungen charakterisiert. Cu<sub>2-x</sub>Se und MoSe<sub>2</sub> wurden bei Cu-reicher Prozessierung als Fremdphasen neben dem CuGaSe<sub>2</sub> abgeschieden. Die Photolumineszenz gleicht der von epitaktischen CuGaSe<sub>2</sub>-Schichten, was auf die hohe Kristallqualität der CuGaSe<sub>2</sub>-Schichten hinweist. Durch die Wahl geeigneter Prozeßparameter konnten zum ersten mal polykristalline Solarzellen mit MOCVD-gewachsenem CuGaSe<sub>2</sub>-Absorbern hergestellt werden. Sie erreichten eine Leerlaufspannung von bis zu 877mV, jedoch bei einer niedrigen Stromdichte von  $5,5mA/cm^2$ . Während bei Cu-reich prozessierten Absorbern nicht die Diffusionslänge der limitierende Faktor der Effizienz war, zeigte sich für Ga-reich prozessierte Absorber eine verschwindende Diffusionslänge von  $L_D = 10nm$ , was die niedrige Stromdichte erklärt.

Die naßchemische Pufferabscheidung führt, anders als vielfach diskutiert, nicht zur Dotierung der Absorberoberfläche.

Trotz der bisher schlechten Sammlungseigenschaften, konnte gezeigt werden, daß der MOCVD-Prozeß das Potential besitzt CuGaSe<sub>2</sub>-Absorber mit defektarmen Grenzflächen zu wachsen.