

Jasmin Seeger

Analyse der elektronischen  
Struktur von  $\text{Cu}(\text{In},\text{Ga})\text{Se}_2$ -  
Dünnschichtsolarzellen mittels  
Elektroreflektanz-Spektroskopie  
und Kelvin-Sonden-  
Rasterkraftmikroskopie

# Analyse der elektronischen Struktur von Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub>-Dünnschichtsolarzellen mittels Elektroflektanz-Spektroskopie und Kelvin-Sonden- Rasterkraftmikroskopie

Zur Erlangung des akademischen Grades eines  
DOKTORS DER NATURWISSENSCHAFTEN  
von der Fakultät für Physik  
des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT)

genehmigte

DISSERTATION

von

M.Sc. Jasmin Seeger  
aus Heilbronn

Tag der mündlichen Prüfung : 26.06.2020

Referent : Prof. Dr. Heinz Kalt

Korreferent : Priv.-Doz. Dr. Michael Hetterich

### **Prüfungskommission:**

Prof. Dr. Th. Müller (Vorsitz)

Prof. Dr. H. Kalt

Priv.-Doz. Dr. M. Hetterich

Prof. Dr. D. Hunger

Prof. Dr. J. Schmalian

Prof. Dr. G. Heinrich



Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

Institut für Angewandte Physik

Wolfgang-Gaede-Straße 1

76131 Karlsruhe

Deutschland

AG Kalt: <http://www.aph.kit.edu/kalt>

Jasmin Seeger

[jasmin.seeger@kit.edu](mailto:jasmin.seeger@kit.edu)

[seeger.jasmin@yahoo.de](mailto:seeger.jasmin@yahoo.de)

Diese Arbeit wurde vom Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) im Rahmen des EFFCIS-Projekts (FZK: 0324076E) und von der Karlsruhe School of Optics and Photonics (KSOP) finanziell unterstützt.



<http://www.ksop.de>



<https://www.bmwi.de/>

Berichte aus der Physik

**Jasmin Seeger**

**Analyse der elektronischen Struktur von  
Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub>-Dünnschichtsolarzellen mittels  
Elektroreflektanz-Spektroskopie und  
Kelvin-Sonden-Rasterkraftmikroskopie**

Shaker Verlag  
Düren 2021

**Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek**

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Zugl.: Karlsruhe, Karlsruher Institut für Technologie, Diss., 2020

Copyright Shaker Verlag 2021

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-7849-7

ISSN 0945-0963

Shaker Verlag GmbH • Am Langen Graben 15a • 52353 Düren

Telefon: 02421 / 99 0 11 - 0 • Telefax: 02421 / 99 0 11 - 9

Internet: [www.shaker.de](http://www.shaker.de) • E-Mail: [info@shaker.de](mailto:info@shaker.de)

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen der Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub>-Dünnschichtsolarzellen</b>	<b>5</b>
2.1	Der Cu(In,Ga)Se <sub>2</sub> -Absorber . . . . .	5
2.1.1	Strukturelle Eigenschaften des Cu(In,Ga)Se <sub>2</sub> -Absorbers . . . . .	6
2.1.2	Bandstruktur und Bandlücke . . . . .	8
2.2	Die Pufferschicht . . . . .	10
2.3	Die Cu(In,Ga)Se <sub>2</sub> -Dünnschichtsolarzelle . . . . .	12
2.3.1	Solarzellenarchitektur und Herstellung . . . . .	12
2.3.2	Banddiagramm und Funktionsweise . . . . .	15
<b>3</b>	<b>Experimentelle Methoden</b>	<b>17</b>
3.1	Elektroreflektanz-Spektroskopie (ER) . . . . .	17
3.2	Kelvin-Sonden-Rasterkraftmikroskopie (KPFM) . . . . .	20
3.2.1	Grundlagen der Rasterkraftmikroskopie . . . . .	20
3.2.2	Funktionsprinzip der KPFM . . . . .	23
<b>4</b>	<b>Charakterisierung von Pufferschichten in Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub>-Solarzellen mittels Elektroreflektanz-Spektroskopie</b>	<b>27</b>
4.1	Interferenzeffekte bei der Elektroreflektanz-Spektroskopie an Dünnschichtsolarzellen . . . . .	28
4.2	Übersicht über die bisher verwendeten Methoden der Elektroreflektanz-Spektroskopie . . . . .	30
4.3	Änderung der Interferenzeffekte durch Ätzen der ZnO-Fensterschicht . . . . .	34
4.4	Winkelaufgelöste ER zur Reduktion von Interferenzeffekten . . . . .	38
4.4.1	Prinzip der winkelaufgelösten ER . . . . .	39
4.4.2	Bestätigung der Funktionsweise der winkelaufgelösten ER . . . . .	40
4.5	Zusammenfassung und Diskussion . . . . .	50
<b>5</b>	<b>Nachweis von Sekundärphasen und Diffusionsprozessen in Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub>-Solarzellen</b>	<b>53</b>
5.1	Übersicht über bekannte Diffusionsprozesse und Sekundärphasen . . . . .	56
5.2	Bestimmung der Zn(O,S)-Bandlückenenergie und Nachweis von Sekundärphasen in Solarzellen mit Zn(O,S)-Pufferschichten . . . . .	60

5.3	Detektion weiterer Sekundärphasen und Untersuchung unterschiedlich hergestellter Solarzellen mit Zn(O,S)-Pufferschichten . . . . .	65
5.4	Bestimmung der CdS-Bandlückenenergie in Solarzellen mit CdS-Pufferschichten . . . . .	71
5.5	Bestimmung der $\text{In}_x\text{S}_y$ -Bandlückenenergie und Detektion von Sekundärphasen in Solarzellen mit $\text{In}_x\text{S}_y$ -Pufferschichten . . . . .	74
5.6	Zusammenfassung . . . . .	76
<b>6</b>	<b>Optimierung der Kelvin-Sonden-Rasterkraftmikroskopie an Querschnitten von <math>\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2</math>-Solarzellen</b>	<b>79</b>
6.1	Experimentelle Realisierung . . . . .	80
6.2	Problematik der an Luft durchgeführten KPFM an unbehandelten Querschnitten von geeigneten Solarzellen . . . . .	86
6.2.1	Fehlerbehaftete Interpretation von Schichtdicken . . . . .	86
6.2.2	Wahl eines geeigneten Referenzpotentials . . . . .	88
6.2.3	Abweichung des gemessenen Potentialverlaufs vom Potentialverlauf im Inneren der Solarzelle . . . . .	93
6.3	Skalenkorrektur . . . . .	96
6.4	Festlegung des Referenzpotentials durch Aufbringung einer Goldschicht	99
6.5	Zusammenfassung . . . . .	102
<b>7</b>	<b>Bestimmung der Austrittsarbeiten von Absorbern in <math>\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2</math>-Solarzellen mittels Kelvin-Sonden-Rasterkraftmikroskopie</b>	<b>105</b>
7.1	Einfluss des Puffermaterials auf die Austrittsarbeit des Absorbers . . . . .	106
7.2	Einfluss der Alkalifluorid-Nachbehandlung auf die Austrittsarbeit des Absorbers . . . . .	109
7.3	Zusammenfassung . . . . .	112
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>115</b>
<b>Anhang</b>		<b>119</b>
A	Probenverzeichnis . . . . .	119
B	Experimentelle Details . . . . .	124
C	Zusätzliche Daten zu Abschnitt 7.2 . . . . .	128
<b>Abbildungsverzeichnis</b>		<b>133</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>		<b>135</b>
<b>Publikationsliste</b>		<b>137</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>		<b>141</b>
<b>Danksagung</b>		<b>171</b>