

Poster

Mie-Streuung in a-Si:H Solarzellen

J. Daey Ouwens,
 J. Löffler und
 R.E.I. Schropp
 Debye Institut, Universität
 Utrecht
 J.DaeyOuwens@phys.uu.nl

Um eine effektive Absorption in Dünnschicht-Solarzellen zu erzielen, werden verschiedene Techniken zur Lichteinkopplung angewandt. In verschiedenen Solarzellentypen (z.B. a-Si:H, CdTe, organische Solarzellen) wird das Licht aufgrund der rauen Natur des texturierten transparenten leitfähigen Oxids (TCO), meistens dotiertes Zinn- oder Zinkoxid, gestreut. Die Oberfläche dieser TCO Filme besteht meist aus einer Anordnung von Pyramiden, deren Größe in Abhängigkeit von Schichtdicke und Depositionstechnik zwischen ca. 40 nm und 400 nm variiert. Aufgrund des Brechungsindex der verwendeten TCO Materialien von ungefähr 2, liegen damit die Abmessungen dieser Teilchen im für Solarzellen interessanten Bereich ($350 \text{ nm} < \lambda < 800 \text{ nm}$) in der Größenordnung der Wellenlänge des Lichts im Medium. Verschiedene Theorien wurden vorgestellt, um die Wellenlängenabhängigkeit des Streuverhaltens zu beschreiben. Rayleigh-Streuung sagt eine λ^{-4} -Abhängigkeit voraus, während in der skalaren Theorie die Streuintensität proportional mit λ^{-2} abnimmt. Wir verwendeten die Mie-Theorie [1] zur Ableitung der diffusen Transmission unserer TCO Filme. Wir nahmen dabei nicht eine feste Größe der streuenden Teilchen an, sondern eine gaußförmige Verteilung. Es zeigte sich, dass die Breite der Verteilung entscheidenden Einfluss auf die Streueigenschaften der Schicht hat. Zwei verschiedene Typen Asahi-U TCO wurden charakterisiert ($d \approx 640 \text{ nm}$, $\text{haze} \approx 6.5 \%$, $R \approx 9 \Omega/\text{sq.}$ und $d \approx 980 \text{ nm}$, $\text{haze} \approx 10.5 \%$, $R \approx 6 \Omega/\text{sq.}$). Aus Transmissions-Reflexionsmessungen mit integrierender Sphäre (Ulbrichtkugel) finden wir, dass der haze in Transmission eine λ^{-3} -Abhängigkeit aufweist. Rayleigh-Streuung und skalare Theorie sind hier also nicht anwendbar. Aus der Anpassung der simulier-

ten an die gemessenen Spektre folgte eine Breite der Verteilung der Teilchengröße von 50 ± 1 nm für die 10.5 % haze Probe. Für die 6.5 % haze Probe fanden wir 42 ± 1 nm. Diese Werte wurden durch Messungen an einem Rasterkraftmikroskop (AFM) verifiziert. Damit wurde gezeigt, dass Mie-Streuung tatsächlich die geeignete Theorie zur Beschreibung der hier auftretenden Streuphänomene ist.

Eine sehr interessante Anwendung ist die Berechnung des Streuverhaltens des Lichts in der Solarzelle, allein aus der gemessenen Verteilung der Teilchengrößen. Zum Beispiel sind die TCO Teilchen in einer a-Si:H Solarzelle in der p+-Schicht eingebettet, wodurch die Streuintensität im Vergleich zur Messung an Luft für kurze Wellenlängen reduziert, für lange Wellenlängen hingegen erhöht wird. Außerdem konnten wir die Lichtstreuung an der Rückseite der Solarzelle berechnen, wo kleine Silberpartikel in amorphem Silizium eingebettet sind. Diese Berechnungen sind

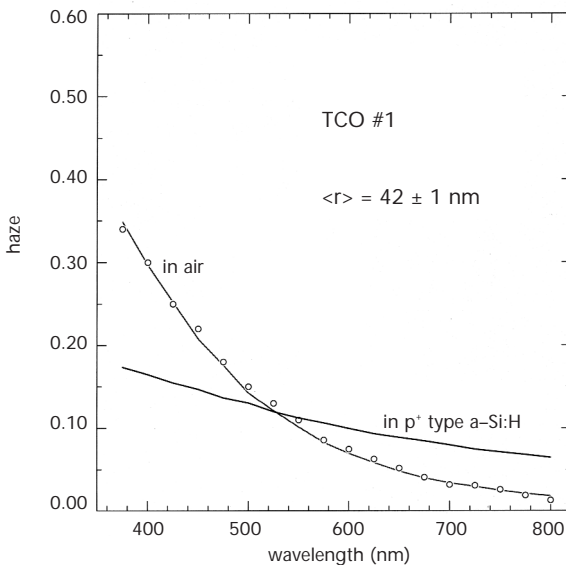
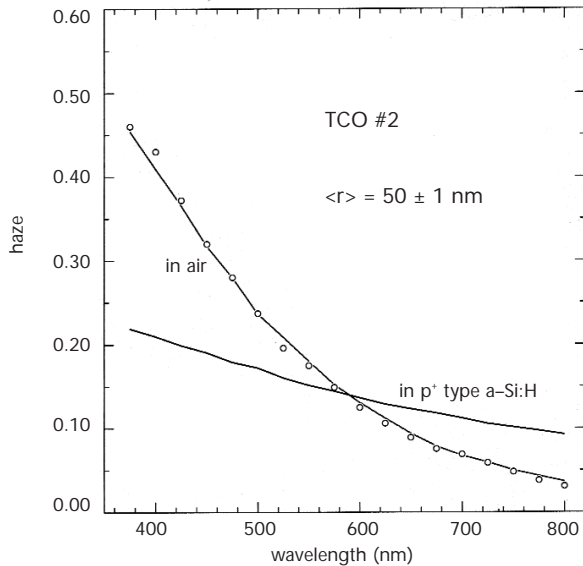


Abbildung 1
Gemessene (Punkte) und
berechnete (Linie) haze-
Werte für TCO #1.

von großer technologischer Bedeutung für die Optimierung der TCO-Morphologie mit Hinblick auf die Wirkungsgraderhöhung von Solarzellen.

Abbildung 2
Gemessene (Punkte) und berechnete (Linie) haze-Werte für TCO #2.



Wir danken Roland Groenen, TNO Eindhoven, für die vielen AFM-Messungen und der Asahi Glass Co., Ltd., für die Proben. Diese Arbeit wurde unterstützt durch NWO (niederländische Organisation für wissenschaftliche Forschung) und NOVEM (niederländische Organisation für Energie und Umwelt).

Literatur

[1] H. Schade and Z. E. Smith, Appl. Opt. 24(19) (1085) 3221-26.

Optische Eigenschaften von lateral strukturierten Dünnschichtsolarzellen

Photonen mit geringer Energie werden aufgrund eines kleinen Absorptionskoeffizienten bei einfachem Durchgang nur unzureichend in Dünnschichtsolarzellen auf der Basis von Silizium absorbiert. Als Folge einer beschränkenden Ladungsträgerlebensdauer stellt die Erhöhung der Absorption in der i-Schicht einer pin Solarzelle ein großes Potential zur Wirkungsgradsteigerung dar. Mit Hilfe rauer Grenzflächen verbessert sich die Lichteinkopplung aufgrund von Streuung. Eine effektive Wegverlängerung in der Absorberschicht und die größere Wahrscheinlichkeit von Totalreflexion sind die maßgeblichen physikalischen Gründe hierfür.

Messungen an rauen Schichtsystemen zeigen, dass einfach konstruierte Transmissions- und Reflexionskoeffizienten, die aus der skalaren Streutheorie abgeleitet wurden, nicht übertragbar sind auf die Bedingungen, wie sie in Solarzellen üblicherweise vorgefunden werden. Es erscheint vielmehr notwendig, eine rigorose Beschreibung des Vielschichtsystems mit rauen Grenzflächen anzustreben.

Als eine Möglichkeit bietet sich dazu die mode-coupling Methode an, in der, ausgehend von den Maxwellgleichungen, wie in einem Wellenleiter die verschiedenen Moden bestimmt werden. Unter der Annahme von periodischen Randbedingungen und der Beschränkung auf die TE-Mode wurde damit der Einfluss der lateralen und horizontalen charakteristischen Strukturgrößen untersucht. Je nach Absorbermaterial, Wellenlängenbereich und Strukturform gibt es eine optimale vertikale Modulationstiefe und Periode. Mit Hilfe der durchgeführten Simulationen wird die Bedeu-

T. Brammer,
J. Zimmer, H. Stiebig
und H. Wagner
Institut für Photovoltaik
(IPV), Forschungszentrum
Jülich GmbH
t.brammer@fz-juelich.de



tung der vorderseitigen und rückseitigen streuenden Grenzfläche deutlich. So kommt es z.B. im Falle eines unstrukturierten Reflektors auf einen großen Unterschied in der dielektrischen Funktion am rauen vorderseitigen Kontakt einer Solarzelle an. Am Beispiel einer Solarzelle aus amorphem Silizium-Germanium wird zudem auch der Einfluss eher statistisch rauer Grenzflächen auf das Generationsprofil und somit der Quanteneffizienz diskutiert. Es zeigt sich, dass der Gewinn in der Absorption durch eine Texturierung im Vergleich zum untexturierten Fall analog den experimentellen Daten verläuft. Eine Variation der Mikrostruktur bei gleicher durchschnittlicher Periode und vertikaler Vertiefung führt nur noch zu minimalen Veränderungen.

Untersuchungen zur Mikrostruktur von Indium-Zinn Oxid (ITO)

ITO-Frontkontakte spielen eine große Rolle bei der Verbesserung von Solarzellen. Ihre Deposition erfolgt unter anderem auf Glas oder Silizium Wafern. Aus diesem Grunde wurde der Einfluss der Substrate auf die ITO-Mikrostruktur in Abhängigkeit von der Substrattemperatur untersucht. Hierzu wurden kristalline ITO-Schichten mit Hilfe des reaktiven DC-Magnetron Sputterns von einem keramischen Target ($\text{In}_2\text{O}_3/\text{SnO}_2$ 90/10 wt%; relative Dichte: 94%) abgeschieden. Messungen der optischen und elektrischen Eigenschaften auf Glas zeigen, dass im sichtbaren Spektralbereich eine mittlere Transparenz von 83% und ein spezifischer Widerstand von $\rho = 1.6 \cdot 10^{-4} \Omega\text{cm}$ erreicht wird. Zur Charakterisierung der Mikrostruktur wurden REM-Aufnahmen, XRD- und spektroskopische Ellipsometriemessungen herangezogen.

Wie nach dem Modell von Thornton [1] zu erwarten ist, zeigen REM-Aufnahmen von ITO-Filmen innerhalb des einstellbaren Temperaturbereiches (RT bis 300 °C) sowohl auf Glas- wie auf c-Si Substraten zwei Strukturzonenwechsel (Zone 1 → Zone T → Zone 2). Allerdings finden diese Übergänge bei jeweils unterschiedlichen Substrattemperaturen statt. Bei Schichten, die auf c-Si abgeschieden wurden, liegt der Übergang von reinem Stängelwachstum (Zone 1) zum Wachstum von Körnern (Zone 2) zwischen einer Temperatur von 50°C und 150°C (siehe Abb.: 1 und 3). Abbildung 2 zeigt die Übergangsstruktur der Zone T bei $T_S = 100^\circ\text{C}$. Das gleiche Verhalten kann man bei Schichten auf Glas-Substraten erkennen, mit dem Unterschied, dass sich der beschriebene Strukturwechsel erst

C. Ochotzki, H. Seitz,
B. Schröder
Fachbereich Physik und
Forschungsschwerpunkt
Materialwissenschaften der
Universität Kaiserslautern
ochotzki@student.rhrk.
uni-kl.de

zwischen 225°C und 275°C vollzieht. Dies könnte an der größeren Rauheit des Glas-Substrates liegen.

Abb. 1

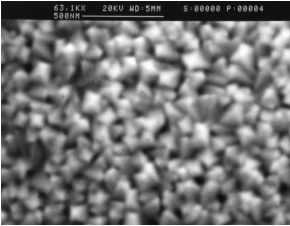


Abb. 2

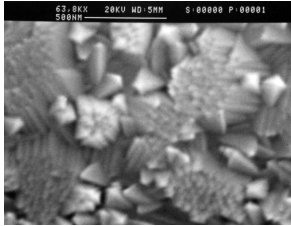


Abb. 3

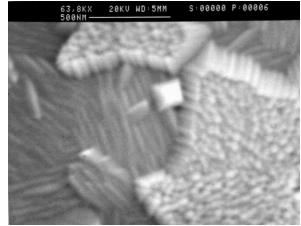


Abbildung 1
ITO auf c-Si (50°C)

Abbildung 2
ITO auf c-Si (100°C)

Abbildung 3
ITO auf c-Si (150°C)

XRD-Messungen zeigen, dass mit den beobachteten Strukturwechseln auch eine Änderung der Kristallorientierung stattfindet. Proben der Strukturzone 1 zeigen eine ausgeprägte $\langle 100 \rangle$ -Textur. Für Schichten der Zone 2 ist diese Kristallausrichtung deutlich reduziert. Im Bereich des Zonenüberganges weisen ellipsometrische Messungen auf Änderungen der optischen Eigenschaften des Schichtsystems hin. Sie können durch eine Verminderung der Oberflächenrauheit beschrieben werden. Für Substrattemperaturen zwischen 125°C und 250°C besitzen die Schichten auf c-Si eine dichtere Struktur und auch eine bessere Leitfähigkeit.

Literatur

[1] J.A. Thornton, J. Vac. Sci. Technol., 11, p. 666 (1974)

Investigation of Diffusion and Crystal Growth in Plasma Deposited Thin ITO Films

Abstract

Tin-doped indium oxide (ITO) films were deposited on Si(100) substrates by means of DC-planar magnetron sputtering. A metallic In/Sn (90/10) target and an Ar/O₂ gas mixture were used. The oxygen flow was varied between 0 and 2 sccm. Substrate voltages between 0 and -100 V were used.

With increasing oxygen flow film structure and composition change from crystalline metallic In/Sn to amorphous ITO. Simultaneously the deposition rate decreases and the film density increases. In principle the negative substrate voltage leads to the same film properties but it works like a diminished oxygen flow.

The diffusion of oxygen into metallic In/Sn films and the amorphous-to-crystalline transformation of ITO were studied using in situ grazing incidence X-ray diffractometry (GIXRD), grazing incidence reflectometry (GIXR), and AFM. In situ measurements of GIXRD were made during annealing in vacuum at temperatures between 100°C and 300°C. Two processes determine the ITO crystal growth: the diffusion of oxygen into the metallic film and a fast crystallisation of amorphous ITO. From the X-ray integral intensities the following kinetic parameters were extracted: diffusion constant, activation energy of the diffusion, reaction order and activation energy of the crystal growth process.

The diffusion constants depend on the bias voltage in the following manner: $D(0V) < D(-100V) < D(-50V)$. The oxygen flow during deposition does not influence the diffusion constant. The activation energy of the diffusion was deter-

Dr. Hartmut Steffen¹,
H. Wulff²,
M. Quaas²,
Tin Maung Tun²,
R. Hippler²
University of Greifswald,
¹Dept. of Physics,
²Dept. of Chemistry and
Biochemistry
steffen@physik.
uni-greifswald.de

mined in films deposited without oxygen. Two activation energies were found: 25 kJ/mol for processes below 150°C and 12.4 kJ/mol for diffusion higher than 150°C. The bias voltage does not influence the activation energy. Crystallisation of amorphous ITO occurs via classical nucleation and growth mode parameter as described by the JOHNSON-MEHL-AVRAMI equation. Reaction orders between 2.4 and 3.0 were estimated. That is consistent with a two-dimensional transformation geometry. The activation energy is 74 kJ/mol.

Introduction

Tin doped indium oxide (ITO) films are an integral part of sophisticated opto-electronic devices, e.g. solar cells, heat mirrors, LCDs etc. The macroscopic film properties such as conductivity and transmission strongly depend on microstructure, stoichiometry and crystallinity and can be influenced by the deposition conditions. Magnetron sputtering is a mature and often used technology for ITO film formation.

In this article we present a study of the influence of oxygen flow and low energy ion bombardment to DC-magnetron sputtered ITO film growth processes and film properties like composition and structure degradation. In addition oxygen diffusion and solid state crystallisation of amorphous ITO in thin films were investigated.

Experimental

In/Sn as well as ITO films were deposited on Si (100) wafer by means of DC planar magnetron sputtering. A metallic In/Sn target was used. Power, pressure and Ar flow were kept constant. The standard deposition conditions were DC power: 30 W, inert gas flow: 15 sccm Ar (5N), sputter

pressure: 5.6×10^{-3} mbar. The oxygen flow was varied between 0 and 2 sccm. Bias voltages between 0 and -100 V were used. The film thickness was between 5 and 50 nm [1,2,3].

The films were investigated by grazing incidence X-ray diffractometry (GIXRD) and grazing X-ray reflectometry (GIXR) with a Θ - Θ diffractometer. For *in situ* GIXRD measurements the diffractometer was equipped with a special parallel beam attachment and with a high temperature chamber. For diffusion studies X-ray patterns were recorded isothermally in a vacuum of 10^{-6} mbar between 100°C and 300°C. The crystallization process was investigated using the integral intensity of the In_2O_3 (222) reflection. Film thickness and density were determined by GIXR at room temperature before and after annealing. The composition of the films was determined by means of XPS. Surface morphology investigations were carried out with AFM.

To calculate the diffusion coefficients a model for the time dependence of the X-ray integral peak intensity during diffusion of oxygen and crystallization was developed [3]. Reaction order and rate constant of the crystallization process were estimated by the JOHNSON-MEHL-AVRAMI equation [5,6]. The activation energies for both the diffusion and the crystallization were determined from ARRHENIUS plots.

Results and Discussion

Film deposition

During the deposition the oxygen flow influences the chemical and phase composition, film density, growth rate and coating morphology. Deposition without oxygen forms crystalline metallic In/Sn films. No preferred orientation was observed. The intensity ratios are similar to

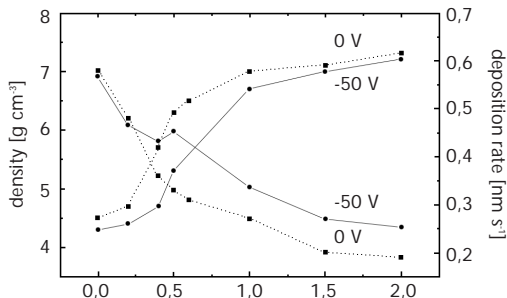
the pattern of polycrystalline bulk in [4]. With increasing oxygen flow the observable particle sizes of crystalline metallic In/Sn decreases (Tab. 1). XPS measurements support this result.

O ₂ -flow [sccm]	domain sizes In(101) [nm]	
	0 V	-50 V
0.0	26.4	24.6
0.5	6.9	25.2
1.0	-	16.6
1.5	-	14.3
2.0	-	-

Table 1
Domain sizes of metallic In/Sn for films deposited at 0 V and -50 V substrate voltage

In Fig. 1 the film density and the growth rate in dependence on the oxygen flow are shown. The deposition rate decreases with increasing oxygen partial pressure. Oxygen flows over 1 sccm led to film densities similar to the x-ray density of In and In₂O₃ (7.28 g cm⁻³ and 7.12 g cm⁻³ respectively). The low density suggests a high amount of voids in the metallic films. Increasing oxygen flows result in more compact layers. From GIXR measurements and AFM images additionally a drop of the substrate roughness follows. The metallic films show large particles forming a rough film surface. Increasing oxygen flow causes a smooth surface without clearly observable particles.

Figure 1
Density (■) and deposition rate (●) of samples deposited at 0 V (----) and -50 V (—) substrate voltage vs. oxygen flow



The layer growth is determined by the sputter yield on the target and by the reaction of indium and oxygen on the substrate surface, too. As the oxygen flow is increased the cathode is partially covered by an oxide layer which results in a drop of the sputter yield [12]. Another reason for the drop of the deposition rate is the different crystal growth. Indium grows in crystallites which include a lot of voids particularly in the initial stage. In_2O_3 grows presumably amorphous (x-ray amorphous), i.e. in very small particles, which are closely packed [1,2].

To obtain further information on the effect of energy flux due to ion energy, the substrate potential U_{sub} was varied from 0 V to -50 V. There are appreciable differences in the microstructure. An increased amount of metallic In/Sn was detected in films deposited with -50 V substrate voltage (*Tab. 1*). Film density and growth rate show a diverge behavior from the 0 V films (*Fig. 1*). In principle the slopes of the curves are similar. However, the densities are smaller and the growth rates higher for -50 V substrate voltage. XPS measurements show that the amount of oxygen in the layer is decreased. We assume that the additional energy flux to the growing film causes more frequently resputtering of oxygen. The growth of In is preferred although the oxygen flow is unchanged.

Diffusion

Two sets of annealing experiments were carried out. At first, films deposited with oxygen flows of 0, 0.5, 1.0, 1.5 and 2 sccm and bias voltages of 0, -50V and -100V were annealed at 250°C. Table 2 contains the oxygen flows, the bias voltages, the diffusion constants D and the factors f , which represent the amorphous ITO fraction in the investigated films. It is obvious that D is depending on the bias voltage but not on the oxygen flow and the amorphous

ITO fraction. The diffusion constants increase considerably from 0 to -50V reaching a maximum at -50 V and diminishing again at -100V.

Table 2
Diffusion constants D
and fractions f of
amorphous ITO films

O ₂ -flow [sccm]	U _{sub} [V]					
	0		-50		-100	
	D [cm ² s ⁻¹]	f	D [cm ² s ⁻¹]	f	D [cm ² s ⁻¹]	f
0.0	6.0·10 ⁻¹⁶	0	1.3·10 ⁻¹⁵	0	9.4·10 ⁻¹⁶	0
0.5	5.5·10 ⁻¹⁶	0.5	1.7·10 ⁻¹⁵	0	9.1·10 ⁻¹⁶	0
1.0	6.0·10 ⁻¹⁶	0.75	1.4·10 ⁻¹⁵	0.3	9.6·10 ⁻¹⁶	0.5
1.5	-	1	1.5·10 ⁻¹⁵	0.5	9.6·10 ⁻¹⁶	0.65
2.0	-	1	1.6·10 ⁻¹⁵	0.7	9.6·10 ⁻¹⁶	0.8

The D values of thin films are strongly influenced by the film microstructure. Thus films with identical chemical composition have a wide spread of D values if different microstructures or defect structures are present [7]. Especially imperfections of the second type such as domain sizes or dislocations modify the diffraction line shape. In the near future we are going to investigate the lattice defects in more detail. With these results it will be possible to discuss the influence of the plasma on film growth and diffusion mechanism in more detail.

In a second set of experiments the activation energy of the diffusion process was determined in metallic In/Sn layers. Films deposited with substrate voltages of 0 V, -50 V and -100 V were annealed in the temperature range from 100°C to 300°C. Two activation energies were estimated: 25 kJ/mol for $T < 150^\circ\text{C}$ and 12.4 kJ/mol for $T > 150^\circ\text{C}$. This suggests that, depending on the temperature, two different diffusion mechanisms occur, which were not changed by the bias voltage.

Grain boundary diffusion dominates at practically all temperatures in polycrystalline metal films with domain sizes of 0.5 μm or less. An activation energy of 25 kJ/mol for temperatures lower than 150°C fits well into this assumption [8]. The melting point of indium is 156°C. We assume that the layer is partially molten during annealing at higher temperatures. The activation energy for diffusion in liquids is expected to be smaller than in solids thus an activation energy of 12.4 kJ/mol was found for $T > 150^\circ\text{C}$. Film thickness and film density do not change during annealing. That means the grain distributions in the thin film remain preserved also at temperatures higher than 150°C. We assume thin ITO layers surround the metallic In drops and prevent the formation of large liquid regions. The AFM images confirm this assumption. [3]

Crystallization

The crystallization process was investigated in complete amorphous ITO films deposited without negative substrate voltage (*Tab. 2*). The time for a total amorphous to crystalline transformation is about 1/30 of the time necessary for the whole diffusion process. To determine the activation energy, experiments at three different temperatures 220, 230 and 240°C were made. Reaction orders between 2.4 and 3.0 were found representing a two-dimensional growth. An activation energy of 74 kJ/mol was estimated for the crystallization process.

In all annealing experiments the finally formed films consist of crystalline ITO in the bixbyite structure type. However, corresponding AFM images show differences in surface morphology. Large grain sizes with rounded edges are observed if the ITO growth is diffusion limited. Whereas cubic grains were formed in the fast crystallization process. The surface is very smooth [3].

Acknowledgement

The authors wish to express their thanks for grants from Deutsche Forschungsgemeinschaft (SFB 198 / A 11).

References

- [1] H. Wulff, M. Quaas, H. Steffen, *Thin Solid Films*, 355-356 (1999) 395.
- [2] M. Quaas, H. Steffen, H. Wulff, *Surface Science*, in print.
- [3] H. Wulff, M. Quaas, H. Steffen, R. Hippler, In situ studies of diffusion and crystal growth in plasma deposited thin ITO films, *Thin Solid Films*, submitted.
- [4] M. Murakami, A. Segmüller, K.-N. Tu, *Treatise On Materials Science and Technology*, 27 (1988) 201.
- [5] M. Avrami, *J. Chem. Physics*, 8 (1949) 212.
- [6] Y. Shigesato, D.C. Paine, *Thin Solid Films* 238 (1994) 44.
- [7] H. Wulff, *C. Eggs, J. Vac. Sci. Techn. A*, 15 (1997) 2938.
- [8] M. Ohring, *Material Science of Thin Films*, Academic Press, Inc., Harcourt Brace Jovanovich, Publishers, (1992) 361.

Transparente Silberschichten

Bei vielen elektro-optischen Anwendungen sind transparente Elektroden mit sehr hohen Leitfähigkeiten gefordert. Ein Anwendungsfall sind photovoltaische Zellen, in denen die Leitfähigkeit der Elektroden einen entscheidenden Einfluss auf den Füllfaktor der Stromspannungskennlinie hat. Zur Optimierung der Elektroden - Grid - Abschattung, elektrischer Schichtwiderstand, Transparenz der Elektroden-schicht im empfindlichen Wellenlängenbereich – kann es sinnvoll sein, transparente Silberschichten zu verwenden, vor allem, wenn diese Schichten sich optimal in das Entspiegelungssystem der Photovoltaikzelle einpassen lassen. Ein weiteres Anwendungsfeld sind elektrochrome Fenster, bei denen wegen der gewünschten niedrigen Schaltzeit und der geforderten lateralen Schalthomogenität ein niedriger Schichtwiderstand gefordert ist. In beiden Bereichen können sich deutliche Vorteile der Silberschichten gegenüber konventionellen TCO-Schichten ergeben.

Transparente Silber- oder Metallschichten sind auf zwei Weisen herzustellen. Zum einen können nichttransparente Metallschichten durch ein zweidimensionales Lochraster spektral selektiv transparent gemacht werden. Dieser Effekt der resonanten Filter wird im langwelligeren Bereich bereits technisch genutzt. Moderne holographische Belichtungsverfahren erlauben die Übertragung des Effektes auch in den solaren Spektralbereich.

Eine andere Möglichkeit bietet die Kombination dünner Metallschichten mit verschiedenen transparenten Halbleitermaterialien und Dielektrika. Hierbei zeigt sich, dass mit Silber eine gute Transparenz im geforderten Wellenlängenbereich mit niedrigen Widerständen erreicht werden kann. Ein weiterer hilfreicher Punkt ist die Möglichkeit zur Anbin-

W. Graf, V. Wittwer
Fraunhofer Institut für
Solare Energiesysteme ISE
graf@ise.fhg.de



derung von hochleitfähigen Gridmaterialien, so dass sich hier weitere Perspektiven öffnen. Vorteilhaft ist hierbei auch, dass die Beschichtungstechnologien zur wirtschaftlichen Darstellung dieser Elektroden im wesentlichen entwickelt sind.

n^+ -ZnO/c-Si Heterokontakte: Struktur und Transport

Wir haben Heterostrukturen des Typs n^+ -ZnO/c-Si untersucht mit dem Ziel, grundlegende Fragestellungen der Bandanpassung und des Transports in Hetero-Übergängen zu klären.

Die Mehrzahl der untersuchten Proben wurden durch reaktives und nicht-reaktives Sputtern von ZnO auf c-Si hergestellt. Einige Proben stammen aus MOCVD- und Spray-Pyrolyse-Verfahren. I-V- und C-V-Messungen im Temperaturbereich 80-300 K, sowie SPV-Messungen dienten zur Untersuchung von Transport und Bandanpassung. Mit REM, EDX und TEM wurde die Struktur der ZnO-Schichten und der Grenzfläche charakterisiert.

Beim Transport über die Grenzfläche dominiert thermionische Emission; sowohl für n- als auch p-Si verhalten sich die Dioden wie (fast-) ideale Metall-Halbleiter-Kontakte. Es wurden Versuche mit variiertem Sputterleistung bei der Deposition durchgeführt. Dabei zeigt sich, dass die Leistungsdichte des Sputterplasmas die Bandanpassung (Barrierenhöhe) wesentlich mitbestimmt. Die Ursache hierfür sind Sputterdefekte, die im Silizium Zustände mit Dichten um $10^{12}/\text{cm}^2\text{eV}$ erzeugen. Dies wird auch durch nachträgliche Temper- und Ätz-Versuche bestätigt. Zusätzlich bildet sich im Sputterprozess ein defektreiches Oxid von einigen nm Dicke an der Grenzfläche, welches die I-V- und C-V-Charakteristik beeinflusst. Rechnungen zum Effekt eines Grenzflächenoxids wurden nach [1] durchgeführt und stimmen mit Ergebnissen aus TEM-Untersuchungen überein.

Der Sputterprozess beeinträchtigt die Bandanpassung und auch die photovoltaische Funktion des ZnO/c-Si Kontaktes durch Beschädigung der Si-Oberfläche. Jedoch ist auch bei

M. Poschenrieder,
K. Kliefoth, I. Sieber,
W. Fuhs
Hahn-Meitner-Institut
poschenrieder@hmi.de



Minimierung solcher Schäden bisher für gesputterte ZnO/c-Si-Kontakte keine ausreichende Bandverbiegung im c-Si erzielbar. Alternative Verfahren wie MOCVD oder Spray-Pyrolyse stellen sanftere Abscheidemethoden dar und führen deshalb zu kontrollierbareren Grenzflächenreaktionen mit vorteilhafterer Bandanpassung.

Literatur

- [1] S.J. Fonash, J.Appl.Phys. 54 (1983)