

Thematische Zusammenfassung (GFBU-Preis)
Strukturuntersuchungen von Absorbermaterialien für die
Photovoltaik“
Justus Just

Für preisgünstige Solarzellen zur Stromerzeugung mit hohem Wirkungsgrad, die in großen Quantitäten hergestellt werden können, ist $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ (CZTS) ein neues, viel versprechendes Absorbermaterial für Dünnschicht-Solarzellen. Alle enthaltenen Elemente sind umweltverträglich und zur Genüge verfügbar. Es wurden schon Wirkungsgrade von über 10,1 % mit ähnlichen, Selen-haltigen Materialien erreicht, aber grundlegende Materialeigenschaften sind bisher kaum verstanden. Besonders der atomare Aufbau und die elektronischen Eigenschaften - die der Schlüssel zu hoher Effizienz sind - werfen noch Fragen auf. In dieser Arbeit steht daher die Erforschung von Struktur-Funktion-Korrelationen im Vordergrund.

Der Herstellungsprozess von CZTS-Solarzellen von Verdampfung der Elemente bis zur Fertigstellung wurde umfassend analysiert und weiterentwickelt:

Die Entwicklung eines Systems zur *in-situ* Kontrolle während des Herstellungsprozesses ermöglicht eine präzise Anpassung der Prozessparameter für eine optimierte Herstellung.

Die Komplexität des CZTS-Materialsystems bedingt, dass sich bei der Herstellung unerwünschte und für die Solarzelle schädliche so genannte Fremdphasen bilden können. Die wichtigsten Fremdphasen besitzen eine sehr ähnliche atomare Struktur wie CZTS und konnten mit bisherigen Techniken kaum erkannt oder quantifiziert werden. Deshalb wurde eine Methode auf Basis von Präzisionsmessungen der Röntgen-Absorptionsfeinstruktur (XANES) entwickelt, die erstmals die Identifizierung und Quantifizierung dieser Fremdphasen mit hoher Präzision ermöglicht. Hierzu wurden umfangreiche Messungen mit Synchrotron-Röntgenstrahlung an Elektronenspeicherringen in Großforschungseinrichtungen wie DESY in Hamburg, DELTA in Dortmund und der SLS in der Schweiz durchgeführt.

Durch quantitative Auswertung der Messdaten lässt sich die atomare Anordnung in der Kristallstruktur im Detail aufklären. In Kombination mit konventionellen Röntgenuntersuchungen konnte ein detailliertes Modell der Struktur von CZTS erstellt werden. Die Ergebnisse dieser Arbeit, die bereits teilweise publiziert wurden, bilden eine wichtige Basis für die zukünftige Erforschung von CZTS und können helfen, diesem Materialsystem für die Herstellung hocheffizienter, preisgünstiger und umweltfreundlicher Solarzellen zum Durchbruch zu verhelfen.