

Pressemitteilung

Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie GmbH

Dr. Antonia Rötger

29.10.2020

<http://idw-online.de/de/news756778>

Forschungs- / Wissenstransfer, Forschungsergebnisse
Energie, Physik / Astronomie, Werkstoffwissenschaften
überregional



Ordnung in der Unordnung: Dichtefluktuationen in amorphem Silizium entdeckt

Erstmals hat ein Team am HZB mit Röntgen- und Neutronenstreuung an BESSY II und BER II in amorphem Silizium mit einer Auflösung von 0,8 Nanometern atomare Substrukturen identifiziert. Solche a-Si:H-Dünnschichten werden bereits seit Jahrzehnten in Solarzellen, TFT-Displays und Detektoren eingesetzt. Die Ergebnisse zeigen, dass sich drei unterschiedliche Phasen innerhalb der amorphen Matrix bilden, die Qualität und Lebensdauer der Halbleiterschicht dramatisch beeinflussen. Die Arbeit wird auf dem Titel der aktuellen Ausgabe von Physical Review Letters hervorgehoben.

Silizium muss nicht kristallin sein, sondern lässt sich auch als amorphe Dünnschicht herstellen. Dabei ist der Atomverband ungeordnet wie in einer Flüssigkeit oder einem Glas. Wird bei der Herstellung dieser Dünnschichten zusätzlich Wasserstoff eingelagert, entstehen so genannte a-Si:H-Schichten. „Solche a-Si:H-Dünnschichten sind schon seit Jahrzehnten bekannt und werden für verschiedene Anwendungen eingesetzt, zum Beispiel als Kontaktschichten in unseren Weltrekord-Tandemsolarzellen aus Perowskit und Silizium“, erklärt Prof. Klaus Lips vom HZB. „Aber erst mit dieser Studie konnten wir zeigen, dass das a-Si:H-Netzwerk keineswegs homogen amorph ist, sondern dass die amorphe Matrix von nanometergroßen Bereichen durchsetzt ist, die unterschiedliche lokale Dichte aufweisen, von Hohlräumen bis hin zu Bereichen mit extrem hoher Ordnung“ kommentiert der Physiker.

In einer Kooperation mit den Technischen Universitäten Eindhoven und Delft haben Lips und sein Team es erstmals geschafft, diese Inhomogenitäten in unterschiedlich hergestellten a-Si:H-Dünnschichten experimentell zu beobachten und quantitativ zu vermessen. Dafür kombinierten sie die Ergebnisse aus komplementären Messmethoden zu einem Gesamtbild.

„Wir konnten mit Röntgenstreuung an BESSY II eine nanoskopische Ordnung in der Unordnung der a-Si:H Schichten identifizieren und quantifizieren. Die Verteilung der Wasserstoffatome im amorphen Netzwerk konnten wir dann mit Neutronenstreuung am früheren Forschungsreaktor BER II am HZB-Standort Wannsee bestimmen“, sagt Eike Gericke, Doktorand und Erstautor der Arbeit. Weitere Einsichten lieferten Untersuchungen unter dem Elektronenmikroskop am CCMS-Corelab sowie Messungen der Elektronenspinresonanz (ESR).

„Auf der Nanometerskala konnten wir zum einen Hohlräume entdecken, die durch etwas mehr als 10 fehlende Atome entstehen. Diese Hohlräume ordnen sich wiederum in einem Abstand von etwa 1,6 Nanometern zu Clustern“, erklärt Gericke. Diese Leerstellen sind in erhöhter Konzentration zu finden, wenn die a-Si:H-Schicht rasch abgeschieden wurde.

Außerdem fanden die Forscher nanometergroße Regionen, in denen Silizium-Atome besser geordnet vorlagen, verglichen mit dem umgebenden ungeordneten Material. Diese dicht geordneten Domänen (DOD) enthalten kaum Wasserstoff. „Die DOD bilden Aggregate mit bis zu 15 Nanometern im Durchmesser und finden sich weitgehend in allen hier betrachteten a-Si:H-Materialien“, erläutert Gericke.

„Die DOD-Regionen, die zum ersten Mal 2012 in der Fachzeitschrift Science theoretisch vorhergesagt wurden, können mechanische Spannungen im Material reduzieren und so zur Stabilität der a-Si:H-Dünnschicht beitragen. Die Leerstellen dagegen könnten die „Alterung“ der Halbleiterschichten begünstigen, darauf deuten die ESR-Messungen hin“, sagt Klaus Lips.

Gezielte Optimierungen der Herstellungsverfahren hinsichtlich der nun entdeckten Substrukturen könnten neue Anwendungen ermöglichen, beispielsweise in der Entwicklung von Lichtwellenleitern für programmierbare photonische Systeme und im Bereich der Silizium-Batterietechnologie. Die Erkenntnisse werden aber auch helfen, dem Mechanismus der lichtinduzierten Alterung der Solarzellen aus amorphem Silizium endlich auf die Spur zu kommen, der seit über 40 Jahren unverständlich ist.

wissenschaftliche Ansprechpartner:

Prof. Dr. Klaus Lips, Lips@helmholtz-berlin.de

Originalpublikation:

Phys. Rev. Letters (2020): Quantification of nanoscale density fluctuations in hydrogenated amorphous silicon; Eike Gericke, Jimmy Melskens, Robert Wendt, Markus Wollgarten, Armin Hoell, Klaus Lips

DOI: 10.1103/PhysRevLett.125.185501