



Einführung in die PV-Entwicklung

Geschichte • Physik • Materialien • Messtechnik • Forschung

Impressum und Anmerkungen für den Leser

Alper Ferudun · Mercury Software GmbH

Deutsche Lehrausgabe · 9. September 2026

Dieses Buch wurde entwickelt, um Leser, die keine Vorkenntnisse im Bereich der Fotovoltaik haben, von grundlegenden Konzepten zu Forschungsfragen zu führen. In historischen Experimenten werden Aufbau und Beobachtung erläutert; bei technischen Themen werden Mechanismus, Einheit, Beispiel und Modellgrenzen gemeinsam erklärt. Nach den einführenden Erklärungen werden detailliertere Aspekte behandelt.

CC BY 4.0 · Lizenz und Quellenangabe

Sofern nicht anders angegeben, werden die Urheber- und ähnlichen Rechte, zu deren Lizenzierung der Herausgeber berechtigt ist, unter der Creative Commons Attribution 4.0 International Lizenz bereitgestellt. Die kommerzielle Nutzung, Weitergabe, Übersetzung und Bearbeitung sind erlaubt. Behalten Sie die Nennung von Alper Ferudun und Mercury Software GmbH, den Link zur Quelle und zur Lizenz sowie die Urheberrechts- und Garantiehinweise bei; geben Sie Änderungen an. Geben Sie nicht den Eindruck, dass der Herausgeber Ihre Nutzung unterstützt; wenden Sie keine zusätzlichen Bedingungen oder digitalen Sperren an, die die zulässigen Nutzungsarten einschränken.

Creative-Commons-Lizenztext BY 4.0 · EulerSolve-Bibliothek

Die in der Bibliografie aufgeführten Werke Dritter, Marken- und Patentrechte sowie Schriftarten-Software werden durch diese Erklärung nicht erneut lizenziert. Die Freiheiten für gemeinfreie Elemente bleiben erhalten. In Bezug auf Elemente der künstlichen Intelligenz schafft diese Erklärung keine neuen Rechte, sofern keine Urheberrechte entstehen. Das Werk wird im Umfang, der durch das Gesetz zulässig ist, „wie besehen“ bereitgestellt; es werden keine Zusicherungen hinsichtlich Richtigkeit oder bestimmter Ergebnisse gegeben.

Redaktionelle Leitung und Veröffentlichung: Alper Ferudun. Für die Erstellung von Text und Bildmaterial wurden Tools von OpenAI verwendet. Die konzeptionellen Illustrationen sind keine Fotos von realen Proben; numerische Beispiele sind synthetisch, sofern nicht anders angegeben. Das Werk erhebt keinen Anspruch auf eine begutachtete Veröffentlichung oder experimentelle Validierung. Es wird nicht behauptet, dass die gesamte verfügbare Literatur durchsucht wurde; die Einschränkungen beim Zugriff auf die Quellen werden in den entsprechenden Angaben erläutert.

Zitierempfehlung: Ferudun, A. (Hrsg.). (2026). Einführung in die PV-Entwicklung. Übersetzung der türkischen Lehrbuchrevision vom 9. September 2026. Institutionelle Zugehörigkeit: Mercury Software GmbH. Geben Sie das verwendete Kapitel und die gedruckte Seite an.



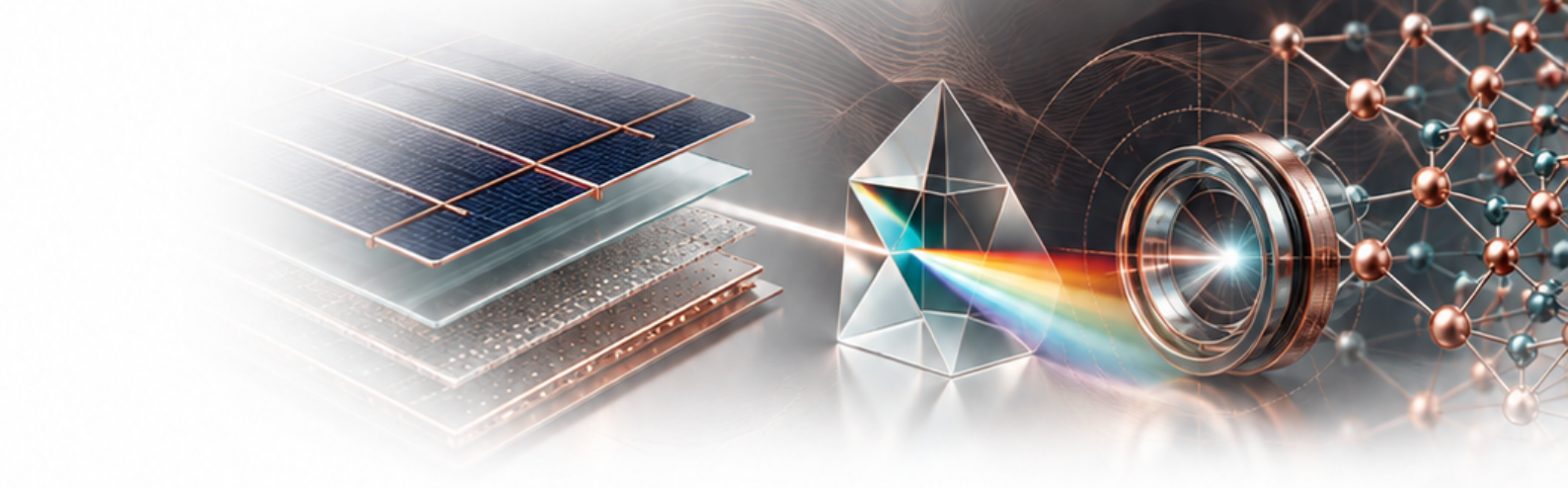
Inhaltsverzeichnis

Kapiteltitel und Seitenzahlen sind anklickbar. Dieser Band ist ein eigenständiges Buch einer zweibändigen Reihe.

BUCH I • Einführung in die PV-Entwicklung	1
I.01 An die Leserinnen und Leser: vom Verständnis des Lichts zur Planung von Forschung	8
I.02 Von Licht zu Elektrizität: Die Entstehung der Photovoltaik und ihre Forschungskultur	15
I.03 Solare Quelle, Spektrum und Photonbilanzierung	29
I.04 Das Innenleben des Halbleiters: Bandstrukturen, statistische Betrachtungen und optische Übergänge	37
I.05 Übergang und selektiver Kontakt: Wie wird die durch Licht erzeugte Ladung in nutzbare Energie umgewandelt?	45
I.06 Rekombination: wo Strom und Spannung verloren gehen	55
I.07 Strom-Spannungs-Kennlinie: zur Auswertung der Leistung einer Zelle	64
I.08 Detailliertes Gleichgewicht und Spannungsverluste: Was begrenzt die theoretische Grenze?	72
I.09 Mehrfachübergangszellen: Die Physik der spektralen Aufteilung	81
I.10 Kristallines Silizium: Die Umwandlung eines guten Halbleiters in ein hochwertiges Produkt	90
I.11 Dünnschichten: geringer Materialbedarf, ausgeprägte Grenzflächenphysik	99
I.12 III-V-Halbleiter und Mehrfachübergangs-Solarzellen: Die Kosten der spektralen Aufteilung	106
I.13 Halogenid-Perowskite: starke Optoelektronik, dynamische Chemie	112
I.14 Perowskit-Tandemzelle: Warum reicht es nicht aus, einfach zwei gute Zellen zu kombinieren?	123
I.15 Organische, farbstoffbasierte, Quantenpunkt- und neuartige Absorber	131
I.16 Optik, Kontakt- und Grenzflächentechnik: die gemeinsame Sprache aller Technologien	138
I.17 Vom Labor zum Modul: Fläche, Verkapselung und nachhaltige Produktion	145



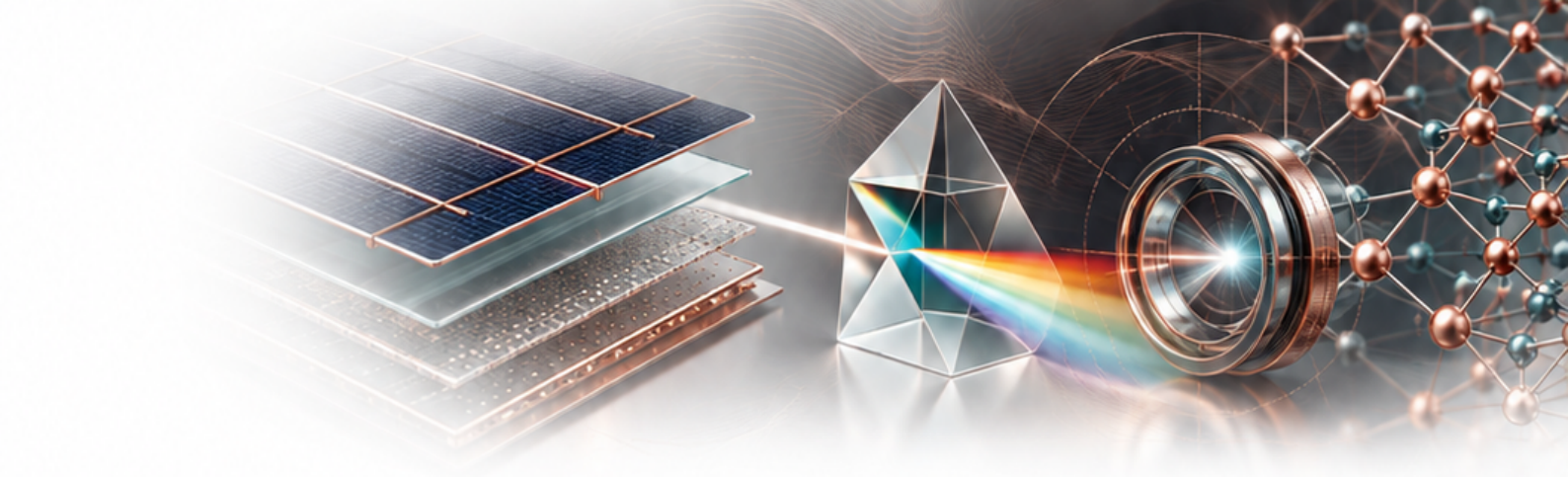
I.18 Photovoltaische Messung: wie der richtige Wert zustande kommt	154
I.19 Charakterisierung: Welche Frage beantwortet welches Werkzeug?	164
I.20 Beständigkeit: Von der Stundenkurve zur Lebensdauer	173
I.21 Materialforschung aus ersten Prinzipien: Stärken und Grenzen der DFT	181
I.22 Vom Material zur Zelle: Optische und elektrische Modellierung	190
I.23 Materialsuche mit maschinellem Lernen: von der Vorhersage zum Nachweis	199
I.24 Versuchsplanung und Statistik: Wie erkennt man eine wirksame Änderung?	206
I.25 Von der Zelle zum Modul, zum Standort und über den gesamten Lebenszyklus	213
I.26 Aus der Literatur zur Forschungsfrage	221
I.27 Wie wird ein Forschungsprogramm eingerichtet?	226
I.28 Ein zwölfwöchiger Lernpfad für Forschende	233
I.29 Die klaren Grenzen der Forschung und der Ausblick auf die Zukunft	237
I.30 Ein Bauelement von Anfang bis Ende analysieren	241
I.31 Gelöste Übungsaufgaben	246
I.32 Symbole, Einheiten und ein Türkisch-Englisch-Wörterbuch	252
I.33 Literaturverzeichnis und Zugangshinweise	258



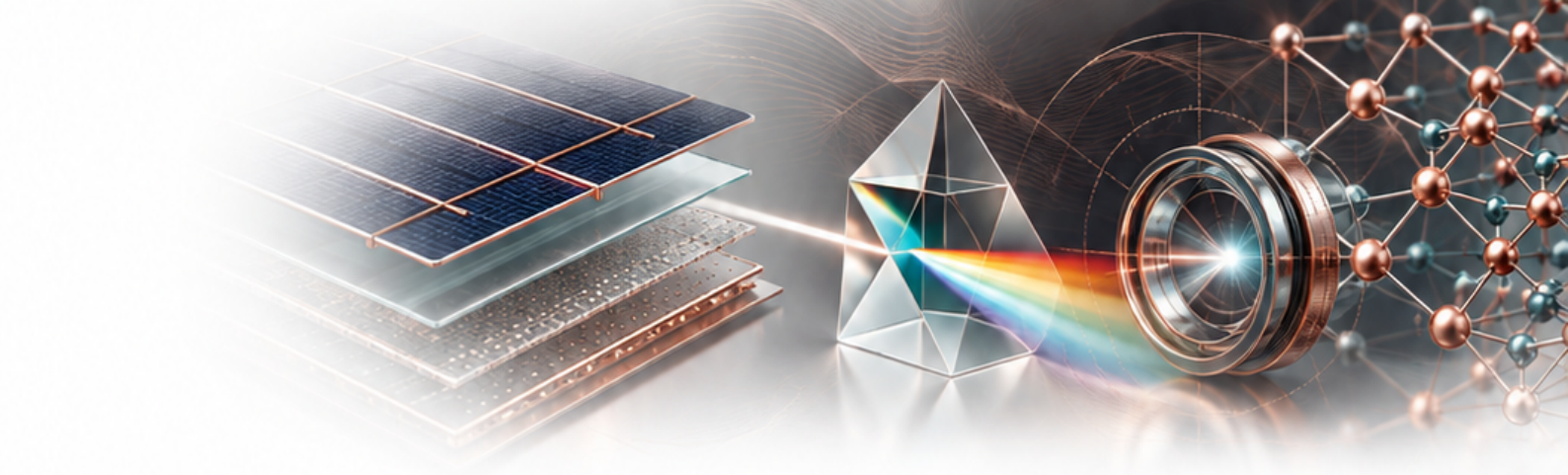
Abbildungsverzeichnis

Abbildungen und berechnete Diagramme im Text. Unter jeder Abbildung ist die konzeptionelle Erläuterung, das Modell oder die Datenquelle angegeben.

01 Vier Maßstäbe vom Photon bis zum Energieertrag über die gesamte Lebensdauer	10
02 Eine schematische Darstellung der zweikammerartigen Anordnung aus Becquerels Aufsatz von 1839	17
03 Der obere Schaltkreis untersucht die Leitfähigkeitsänderung unter externer Vorspannung, während der untere Schaltkreis den durch die Beleuchtung verursachten Strom ohne externe Batterie untersucht	20
04 Die historische Entwicklung des photovoltaischen Konzepts und seiner Bauelemente	22
05 Die Logik der drei verschiedenen Experimente	27
06 Vom Referenzspektrum zur Photonen-zählung	31
07 Die Absorptionslänge und die Energie der Photonen sind unterschiedliche Größen	32
08 Die Bandstruktur und die Besetzungsverteilung sind getrennte Informationen	39
09 Ladung, Feld und Potential sind drei Ansichten derselben Lösung	47
10 Ein einziges Fermi-Niveau im Gleichgewicht; getrennte Quasi-Fermi-Niveaus im idealen beleuchteten Leerlaufgrenzfall	50
11 Generierung und Sammlung sind nicht dasselbe Profil	52
12 Drei Rekombinationsmechanismen und der Ort, an dem die Energie verloren geht	57
13 Verschiedene Injektionsregime bei gleichen Materialparametern	61
14 Von der physikalischen Solarzelle zum äquivalenten Ein-Dioden-Schaltkreis	66
15 Die unterschiedlichen Auswirkungen von Serien- und Parallelverlusten auf die Kurve	70
16 Neuberechnung der idealen Wirkungsgradgrenze eines einzelnen Übergangs	73
17 Die Spannungsverluste aufschlüsseln	78
18 Optische Aufteilung und elektrische Verbindung im Tandem	83



19 Querschnitte von vier gängigen Silizium-Designkonzepten	92
20 Typische Schichtanordnungen der CdTe-, CIGS- und amorphe-Silizium-Familien	100
21 Spektrale und elektrische Kopplung in einem III-V-Bauelement mit drei Übergängen	107
22 Die Perowskit-Strukturfamilie und zwei Bauelementorientierungen	114
23 Übergang von einem nassen Vorläufer zu einem polykristallinen Film	119
24 Beispielhafte Darstellung der langsamen ionischen Umverteilung unter angelegter Vorspannung	121
25 Repräsentative Schichtquerschnittsansicht für ein monolithisches Perowskit-Silizium-Tandem	125
26 Grenzfläche und zugehörige Transportwege in einer organischen Volumen-Heteroübergangsstruktur	133
27 Reflexionsminderung durch Interferenz	143
28 Passivierung und Leitfähigkeit sind zwei unterschiedliche Designziele	144
29 Zellstreifen und Verbindungslinien in einem monolithischen Dünnschichtmodul	147
30 Zwei komplementäre Messanordnungen	156
31 Der Ursprung der spektralen Fehlanpassung	162
32 Das Auslesen eines Signals erfordert ein physikalisches Vorwärtsmodell	165
33 Die Stabilität kann anhand der Zeit und des zugrunde liegenden Mechanismus analysiert werden	174
34 DFT-Ergebnisse auf zwei unterschiedlichen Skalen prüfen	182
35 Die Defektbildungsenergie und die kinetische Barriere haben unterschiedliche Funktionen	188
36 Von der kontinuierlichen Bauelementbeschreibung zur erhaltenden Finite-Volumen-Berechnung	191
37 Beispiel für eine optimale Schichtdicke bei ausdrücklich angegebener Geometrie	197
38 Die Datenaufteilung muss zur Forschungsfrage passen	200
39 Anschauliche Beispiele für Blockierung und Interaktion	207
40 Von der anfänglichen Leistung bis zur Lebenszeitenergie	214
41 Der Forschungszyklus, der den Mechanismus testet	228



42 Gleicher Wirkungsgrad, unterschiedliche Physik

243

An die Leserinnen und Leser: vom Verständnis des Lichts zur Planung von Forschung

Zum Einstieg: Zelle, Stromkreis und Energie

Die große, verglaste Fläche, die wir auf einem Dach sehen, ist in der Regel ein **Modul**. Innerhalb des Moduls befinden sich zahlreiche miteinander verbundene Solarzellen. Eine Zelle ist das kleinste funktionelle Bauelement, das Licht in elektrische Energie umwandelt. Viele Module bilden zusammen mit Kabeln, einer Trägerstruktur und Geräten, die den Strom in eine für die Nutzung geeignete Form umwandeln, ein **System**. Ein Wechselrichter ist ein Leistungselektronikgerät, das den von den Zellen erzeugten Gleichstrom in Wechselstrom umwandelt, der in das Stromnetz eingespeist werden kann. Eine Batterie speichert Energie; nicht jedes System benötigt eine Batterie, damit die Zelle funktioniert. [B16]

Lassen Sie uns zunächst die drei grundlegenden Begriffe der Elektrizität definieren. **Ladung** ist die Eigenschaft von Teilchen, elektrisch zu interagieren; ein Elektron ist negativ geladen. Die Menge an Netto-Ladung, die in einer Sekunde durch einen Querschnitt eines Leiters fließt, ergibt den **Strom**. **Spannung** ist die Energiedifferenz, die pro Ladungseinheit zwischen zwei Punkten übertragen werden kann. So wie der Wasserstand eines Speichers, der Wasser sammelt, und die Wassermenge, die durch ein Rohr fließt, unterschiedlich sind, sind auch Spannung und Strom unterschiedlich. Diese Analogie soll lediglich die Beziehung veranschaulichen; in einem elektrischen Stromkreis werden Elektronen nicht wie Wasser verbraucht, und die Energieübertragung wird durch das elektromagnetische Feld erklärt.

Die Einheit des Stroms ist Ampere, die Einheit der Ladung ist Coulomb, die Einheit der Spannung ist Volt. 1 Ampere entspricht 1 Coulomb pro Sekunde; 1 Volt entspricht 1 Joule pro Coulomb. **Leistung** ist die Rate, mit der Energie übertragen wird. Ihre Einheit ist Watt, also Joule pro Sekunde. In einem Gleichstromkreis gelten die folgenden zwei grundlegenden Beziehungen:

$$P = VI, \quad E = Pt. \quad (\text{I.1.1})$$

Hierbei steht P für Leistung, V für Spannung, I für Strom, E für Energie und t für die Zeit. In dem Lehrbeispiel liefert eine Zelle, die bei einer Spannung von 0,5 V einen Strom von 2 A erzeugt, eine Leistung von 1 W. Wenn diese Bedingungen zwei Stunden lang

anhalten, wird eine Energie von 2 Wh geliefert. Dies entspricht 7200 J, da eine Stunde 3600 Sekunden beträgt. Wenn sich die Leistung im Laufe der Zeit ändert, werden die Energien für jedes kleine Zeitintervall aufsummiert. Das Integralsymbol wird später als Kurzschreibweise für diese Summation verwendet.

Was verändert das Licht im Inneren?

Wir können Licht anhand der **Photonen** betrachten, die Energie tragen. Ein **Halbleiter** ist ein Material, dessen Eigenschaften durch die Energieniveaus seiner Elektronen und deren Beweglichkeit bestimmt wird. Wenn ein Photon mit der entsprechenden Energie absorbiert wird, kann das Elektron in einen Zustand mit höherer Energie übergehen. Der verbleibende, fehlende Elektronenplatz wird als **Loch** bezeichnet. Ein Loch ist keine physische Vertiefung im Kristall; es ist eine elektronische Defizienz, deren Bewegung wir wie die eines positiven Ladungsträgers verfolgen.

Die Erzeugung dieser beweglichen Ladungsträger durch Licht ist der Ausgangspunkt. Die **Kontakte** auf beiden Seiten der Zelle stellen eine elektrische Verbindung zu den externen Kabeln her. In einer guten Zelle sammelt ein Kontakt bevorzugt Elektronen, während der andere bevorzugt Löcher sammelt. Diese Präferenz wird als **Selektivität** bezeichnet. Wenn die Ladungsträger ohne Arbeit zu verrichten in einen Zustand niedriger Energie zurückkehren, wird dies als **Rekombination** bezeichnet. Wir werden diese Konzepte nacheinander erläutern; vorerst sollte man sich merken, dass die Lichtabsorption, die Erzeugung von Ladungsträgern, das Erreichen des entsprechenden Anschlusses und die Verrichtung von Arbeit in einem externen Stromkreis vier separate Schritte sind. [B16]

Prozentualer Anteil, Fläche und Berechnung des anfänglichen Wirkungsgrads

Der Wirkungsgrad ist das Verhältnis der elektrischen Ausgangsleistung zur einfallenden Lichtleistung. In dem Lehrbeispiel beträgt die Fläche einer 10 cm × 10 cm Zelle 100 cm², also 0,01 m². Wenn auf eine Flächeneinheit 1000 W/m² Licht einfällt, erhält die Zelle 10 W. Wenn die Zelle 2 W elektrische Leistung abgibt, beträgt der Wirkungsgrad $2/10 = 0,20$, also 20 %. Die restliche Energie verschwindet nicht; ein Teil wird reflektiert, transmittiert oder in Wärme umgewandelt. Der Anstieg von „20 %“ zu „22 %“ beträgt 2 Prozentpunkte, was einer relativen Zunahme von 10 % gegenüber dem Ausgangswert entspricht. Diese beiden Angaben in Forschungsarbeiten sind nicht identisch.

Dieses Buch setzt keine Vorkenntnisse im Bereich der Photovoltaik voraus. Die verwendeten Werkzeuge, wie das Aufstellen von Verhältnissen, die wissenschaftliche Notation, die grafische Steigung und die Fläche unter einer Kurve, werden an den

Stellen erklärt, an denen sie verwendet werden. Komplexere Ableitungen können beim ersten Lesen etwas Zeit in Anspruch nehmen. Zuerst werden wir verstehen, was die Größe beschreibt, dann ihre Einheit und schließlich die Annahme der Gleichung. Das Ziel ist nicht, die Formel auswendig zu lernen, sondern zu verstehen, was sie mit selbst gewählten Zahlen aussagt.

Verständniskontrolle: Haben wir Strom erzeugt?

Beweist die Tatsache, dass eine Zelle im Leerlauf 0,6 V anzeigt, dass sie zu diesem Zeitpunkt Leistung liefert? **Nein.** Wenn der Strom in einem externen Stromkreis Null ist, ist die abgegebene Leistung ebenfalls Null, auch wenn eine Spannung vorhanden ist. Wenn eine Last angeschlossen wird, müssen Spannung und Strom gleichzeitig gemessen werden. Für 0,5 V und 0,1 A beträgt die Leistung 0,05 W. Diese Unterscheidung ist der erste Schlüssel zum Verständnis der nachfolgenden experimentellen Ergebnisse.

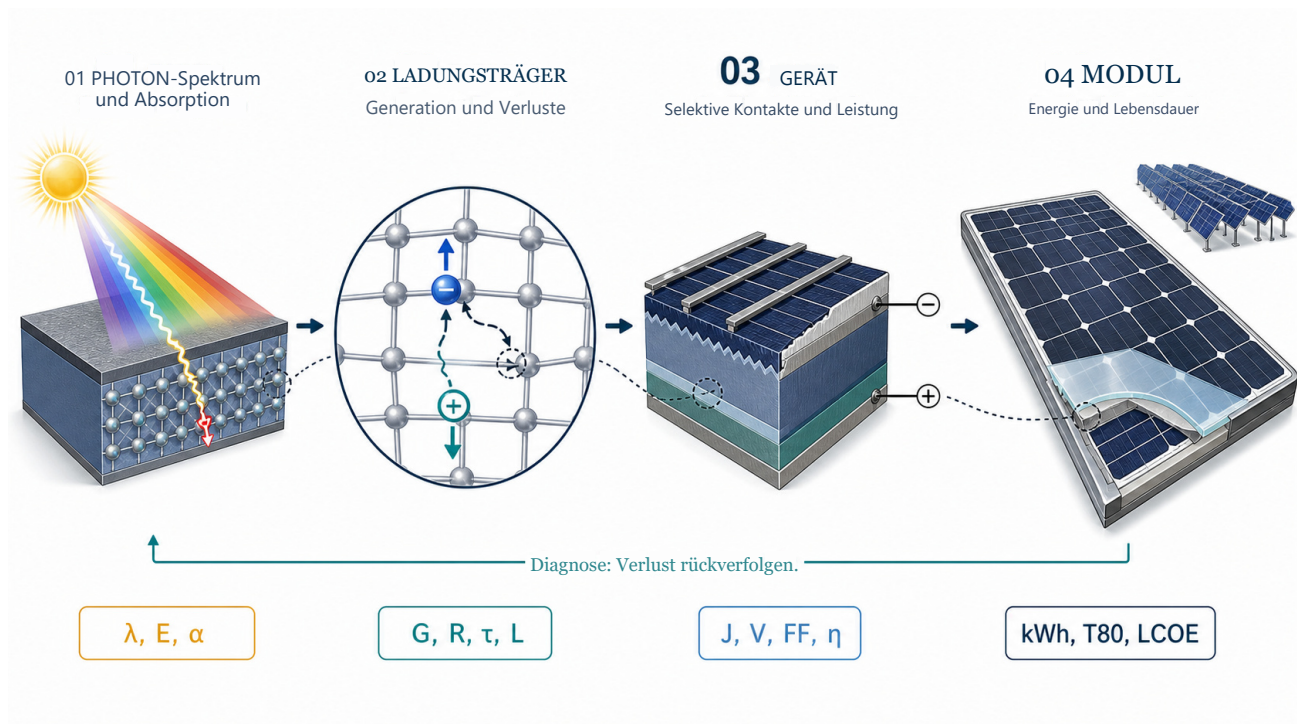


Abbildung 01. Vier Maßstäbe vom Photon bis zum Energieertrag über die gesamte Lebensdauer. Die Lichtabsorption bestimmt die Ladungsträgergeneration; Generation und Rekombination bestimmen den sammelbaren Strom; selektive Kontakte bestimmen die Leistung des Bauelements; Verkapselung und Beständigkeit bestimmen die Nutzungsdauer. Der Rückweg in der unteren Reihe zeigt, wie ein Verlust im Modul auf Mechanismen auf kleineren Maßstäben zurückgeführt werden kann. Die Abmessungen der Struktur, Ladungen und Schichten sind schematisch. Mit einem Bildgenerierungswerkzeug erstellte konzeptionelle Illustration; keine Messaufnahme.

Wenn wir eine Solarzelle betrachten, sehen wir zwei unterschiedliche Gegenstände. Der erste ist eine wenige Mikrometer oder einige Hundert Mikrometer dicke Struktur, die bei Beleuchtung Strom erzeugt. Der zweite ist das gesammelte Wissen aus fast zwei Jahrhunderten Experimenten, Quantenphysik, Chemie, Präzisionsmesstechnik und

Fertigungstechnik. Dieses Buch wurde geschrieben, um den zweiten Gegenstand sichtbar zu machen. Es soll nicht lediglich die Namen der Technologien vermitteln, sondern eine Denkweise aufbauen, mit der du selbstständig beantworten kannst, warum eine Zelle funktioniert, warum sie schlechter als erwartet arbeitet und woran wir erkennen, dass wir sie verbessert haben.

Photovoltaik, kurz PV, ist die direkte Umwandlung von Licht in elektrische Energie. Solarthermische Systeme erzeugen zunächst Wärme; PV-Zellen nutzen die Wechselwirkung zwischen Photonen und elektronischen Zuständen. Ein System ist nicht automatisch photovoltaisch, nur weil es mit Sonnenlicht arbeitet. Auch bedeutet die Lichtabsorption eines Materials nicht, dass es eine gute Solarzelle ergibt. Ein Teil der absorbierten Energie muss über selektive Kontakte an den äußeren Stromkreis übertragen werden, ohne die Ladungsträger zu verlieren. Die Kapitel dieses Buches erläutern die verschiedenen Glieder dieser Kette.

Was behandelt dieses Buch?

Geschichte und grundlegende Physik, Sonnenspektrum, Halbleiter, Ladungsträgertransport, Rekombination, Strom-Spannungs-Kennlinien, thermodynamische Grenzen, die wichtigsten Materialfamilien, Tandems, optische Entwicklung und Grenzflächenentwicklung, Fertigung, Charakterisierung, Messunsicherheit, Zuverlässigkeit, rechnergestützte Materialsuche, maschinelles Lernen und Leistung im Feldeinsatz werden gemeinsam behandelt. Der letzte Teil enthält eine Methode zur Literaturarbeit, Beispiele für die Forschungsplanung, ein Lernprogramm und ein türkisch-englisches Fachglossar.

Diese Breite ersetzt nicht sämtliche Einzelheiten eines Spezialgebiets. Forschende sind meist keine Fachleute für das gesamte PV-Gebiet; wer sich beispielsweise auf Defektberechnungen spezialisiert, bearbeitet die Modulalterung gemeinsam mit Kolleginnen und Kollegen. Das Ziel ist hier, die Sprache zwischen den Gebieten zu verstehen, die eigene Spezialisierung einordnen zu können und bei der Bewertung fremder Ergebnisse nach kritischen Annahmen zu fragen.

Drei Lesewege

Für den Einstiegsweg liest du nacheinander die Kapitel zu Geschichte, Spektrum, grundlegender Halbleiterphysik und J-V. Vergleiche anschließend die Kapitel zu Silizium und Perowskiten. Gehe zuletzt zum Messkapitel über. Auf diesem Weg lernst du, was die Werte J_{sc} , V_{oc} , FF und PCE in einer Veröffentlichung bedeuten, wie sie ermittelt werden und wann sie Anlass zu Zweifeln geben.

Für den Forschungsweg arbeitest du zunächst alle Physik- und Messkapitel durch und wählst anschließend eine Materialfamilie aus. Analysiere anhand der Fragen dieses Buches die ergänzenden Informationen, Charakterisierungsdaten und den Methodenteil einer Originalarbeit zu dieser Familie. Führe danach eine rechnergestützte oder experimentelle Reproduktionsstudie durch. Der verlässlichste Test dafür, eine Veröffentlichung verstanden zu haben, besteht darin, erläutern zu können, welche Alternativen du anstelle der Entscheidungen der Autoren hättest wählen können.

Im Rahmen der rechnergestützten Forschung konzentriert sich die rechnergestützte Exploration besonders auf die Bereiche Grenzfläche, Bauelementmodellierung, Unsicherheit und Forschungsdesign. Es ist wichtig, sich stets bewusst zu machen, dass die Validierung einer chemischen Formel und die Validierung einer Zelle unterschiedliche Aufgaben sind. Die berechnete Bandlücke ist nicht die Leistung des gesamten Systems. Dies wird anhand von Beispielen in den letzten Forschungsabschnitten veranschaulicht, in denen Material, Grenzfläche, Bauelement und Produkt unterschiedliche Arten von Nachweisen erfordern.

Wissensarten unterscheiden

Das Buch enthält vier Wissensarten. Etablierte Physik umfasst Ladungserhaltung, Energieerhaltung und die Gleichungen klar definierter Modelle. Eine modellabhängige Schlussfolgerung ist ein Ergebnis unter bestimmten Annahmen zu Spektrum, Temperatur und Verlusten. Ein experimenteller Befund gehört zu einer bestimmten Probe und Messanordnung. Ein Forschungsvorschlag ist eine bislang ungeprüfte Idee. Wird innerhalb eines Absatzes zwischen diesen Arten gewechselt, wird der Übergang ausdrücklich benannt.

Die meisten Abbildungen sind Grafiken, die mit Original-Lehrschemata und übersichtlichen Gleichungen erstellt wurden. Das Referenz-Sonnenlichtspektrum wurde aus numerischen Daten neu gezeichnet, wobei die Quelle angegeben ist. Die in den Beispielrechnungen verwendeten Zahlen sind, sofern nicht anders angegeben, synthetische Werte, die für Lehrzwecke ausgewählt wurden; es handelt sich nicht um Messungen an realen Proben oder um validierte Schätzungen für ein neues Material. In den Quellen aufgeführte historische Erfolge werden nicht als aktueller Weltrekord präsentiert. Unabhängige Leistungstabellen sind der Ausgangspunkt für einen aktuellen Rekordvergleich; die Probenfläche und die Messbedingungen müssen jedoch weiterhin überprüft werden. [B03]

Umfang und Methode der Literaturrecherche

Der Stichtag für die Zusammenstellung der grundlegenden Literatur ist der 7. September 2026. In dieser überarbeiteten türkischen Lehrversion wurden neue historische Quellenprüfungen am 8. September 2026 durchgeführt. Die Arbeit ist keine systematische Meta-Analyse oder eine umfassende Durchsicht aller Veröffentlichungen, sondern eine breit angelegte Literatursynthese für die Ausbildung von Forschern. Die Quellen wurden anhand historischer Meilensteine, Originalarbeiten, die Mechanismen aufzeigen, Mess- und Zuverlässigkeitsprotokolle, institutionelle Datenquellen und weiterführende Literatur ausgewählt. Verlage, DOI-Einträge, Universitäten und öffentliche Forschungseinrichtungen wurden priorisiert. Aus nicht zugänglichen Volltexten wurden keine detaillierten Ergebnisse oder einzelne Normbestimmungen extrahiert.

Die Suchgruppen umfassten: photovoltaic history und solar battery; semiconductor recombination und selective contacts; detailed balance und tandem current matching; silicon PERC TOPCon heterojunction; CdTe CIGS III-V; halide perovskite ion migration; organic DSSC quantum dot; JV EQE stabilized efficiency; ISOS IEC reliability; DFT defects convex hull phonons; machine learning materials leakage; photovoltaic energy yield LCA recycling. Rückwärts- und Vorwärtszitate der grundlegenden Quellen wurden genutzt, um diese Gruppen miteinander zu verbinden. Diese Methode erfasst das Grundgerüst des Gebiets; sie erhebt keinen Anspruch darauf, alle Sprachen und Patentdatenbanken lückenlos durchsucht zu haben.

Die Buchstaben H, T, R und B in der Quellenliste stehen für die Kategorien „Grundlegende Physik/Geschichte“, „Technologie“, „Forschung/Messung“ und „Redaktionelle Referenzen“. Dieselbe Quelle kann in verschiedenen Abschnitten wiederverwendet werden. DOI- oder institutionelle Links sind anklickbar. Bei einigen Büchern wurden lediglich der Verlag und die bibliografischen Angaben überprüft; diese werden nicht als vollständig gelesene Werke gekennzeichnet.

Die Größenordnung des Gebiets richtig einordnen

Der Snapshot-Bericht 2026 von IEA PVPS gibt an, dass die weltweit installierte PV-Leistung Ende 2025 ungefähr 3 TW erreicht hatte. Die Übersichtsgrafik des Hauptberichts nennt für den Zubau 2025 eine Spanne von 607-698 GW; die Zusammenfassungsseite hebt die obere Schätzung von ungefähr 698 GW hervor. Dabei ist 2026 das Veröffentlichungsjahr und 2025 das Datenjahr; die Werte sind im Zusammenhang mit den Schätzungen und Revisionen des Berichts zu lesen. Installierte Leistung ist keine Energiemenge: Die jährliche Erzeugung einer 1-GW-Anlage hängt von Bestrahlungsstärke, Temperatur, Verlusten und Verfügbarkeit ab. [\[B02\]](#)

Der am 14. Juli 2026 aktualisierte Bericht von Fraunhofer ISE stellt Kennzahlen zu Zellen, Modulen, Fertigung, Kosten und Nachhaltigkeit gemeinsam dar. Solche Berichte eignen sich für einen Überblick über die Technologie; Einzelheiten zu einem Forschungsrekord sollten im Originalzertifikat oder in der Primärtabelle nachgeschlagen werden. Nicht alle Zahlen eines Berichts müssen sich auf denselben Zeitpunkt beziehen oder dieselbe Definition des Nenners verwenden. [B01]

Der Forschungsreflex

Vervollständige beim Lesen eines Ergebnisses zunächst diesen Satz: „Dieses Material oder diese Struktur zeigte unter diesen Bedingungen im Vergleich zu dieser Kontrolle bei dieser beobachtbaren Größe einen Unterschied mit dieser Unsicherheit.“ Wenn du den Satz nicht vervollständigen kannst, ist das Ergebnis noch nicht vollständig verstanden. Dieser Reflex ist ein Werkzeug, das selbst die Gleichungen dieses Buches überdauert.

Von Licht zu Elektrizität: Die Entstehung der Photovoltaik und ihre Forschungskultur

Zuerst wollen wir uns mit dem Experimentiertisch vertraut machen

Hinter der Aussage „1839: Becquerel“ in der Zeitleiste steht folgende Frage: Erwärmt Licht ein Material lediglich oder kann es auch eine elektrische Veränderung hervorrufen? Der hier untersuchende Forscher ist **Edmond Becquerel**. Wir werden seine Arbeit aus dem Jahr 1839 nicht so lesen, als ob er das heutige Konzept eines Solarpanels bereits gekannt hätte. Zuerst müssen wir die Funktion der von ihm verwendeten Komponenten verstehen, dann die veränderte Bedingung und schließlich das beobachtete Ergebnis.

Eine **Elektrode** ist ein Leiter, der eine elektrische Verbindung zwischen einem Stromkreis und der untersuchten Umgebung herstellt. Ein Beispiel hierfür ist das Eintauchen einer Metallplatte in eine Flüssigkeit. Ein **Elektrolyt** ist ein Medium, das durch die Bewegung von geladenen Atom- oder Molekülgruppen, den sogenannten Ionen, Strom leiten kann. Während der Strom in einem Metalldraht hauptsächlich durch Elektronen transportiert wird, ist die Ionenbewegung in einer Lösung von Bedeutung. An der **Grenzfläche**, wo Metall und Flüssigkeit zusammenkommen, können chemische Reaktionen stattfinden, die einen Elektronenaustausch beinhalten. Die gemeinsame Untersuchung von Elektrizität und Chemie wird als **Elektrochemie** bezeichnet.

Ein **Galvanometer** ist ein Messgerät, das die magnetische Wirkung sehr kleiner Ströme durch die Auslenkung eines Zeigers sichtbar macht. In älteren Texten findet man es auch unter dem Namen „Multiplikator“. Eine Zeigerauslenkung von 10 Grad bedeutet weder 10 Ampere noch 10% Wirkungsgrad. Um den Winkel in einen Stromwert umzurechnen, müssen die Kalibrierung des Geräts, der Widerstand der Schaltung und die Art der Ablesung bekannt sein. Die **Kalibrierung** besteht darin, eine Beziehung zwischen der Anzeige des Messgeräts und einer bekannten Referenzgröße herzustellen. So können wir unterscheiden, was die ursprüngliche Messung tatsächlich gemessen hat und welches Ergebnis sie allein nicht liefern konnte.

1839: Was genau hat Becquerel gemacht?

Becquerels Text vom November 1839 beginnt mit der Erwähnung seiner im Juli durchgeführten Untersuchung über den Kontakt zweier Flüssigkeiten; er möchte herausfinden, ob auch die Elektroden auf Licht reagieren. In der von ihm beschriebenen Anordnung befindet sich eine abgedunkelte Kiste, die durch eine dünne Membran in zwei Kammern unterteilt ist. In jeder Kammer befinden sich die zu testende Lösung und eine Platinplatte. Die Platten sind mit einem empfindlichen Galvanometer verbunden. Die Kammern werden mit separaten Abdeckungen im Dunkeln gehalten; die Abdeckungen werden nacheinander geöffnet, um zu variieren, welche Seite beleuchtet wird. Mit farbigen Filtern versucht er, den Lichteffekt vom thermischen Effekt zu trennen. Die Abschwächung des Effekts auf sehr sauberen Platinoberflächen zeigt die Bedeutung des Oberflächenzustands. [H31]

Betrachten Sie beim Lesen dieser Anordnung die vier Schritte in der Reihenfolge. **Zuerst** bestimmen Sie das Verhalten beider Seiten im Dunkeln als Ausgangswert. **Anschließend** ändern Sie nur die Beleuchtung einer Seite, während Sie die anderen Teile der Schaltung gleich lassen. **Daraufhin** beobachten Sie die Beziehung zwischen dem An- und Ausschalten der Beleuchtung der anderen Seite und der Anzeige. **Zum Schluss** wählen Sie einen Kontrollversuch aus, um eine andere mögliche Ursache für die beobachtete Veränderung zu testen. Diese vier Sätze stellen die historische Beschreibung in der Sprache der heutigen statistischen Versuchsplanung dar; es handelt sich nicht um eine Datentabelle, in der nachträglich fehlende historische Messwerte hinzugefügt wurden.

Becquerel: Beleuchtung gezielt ändern

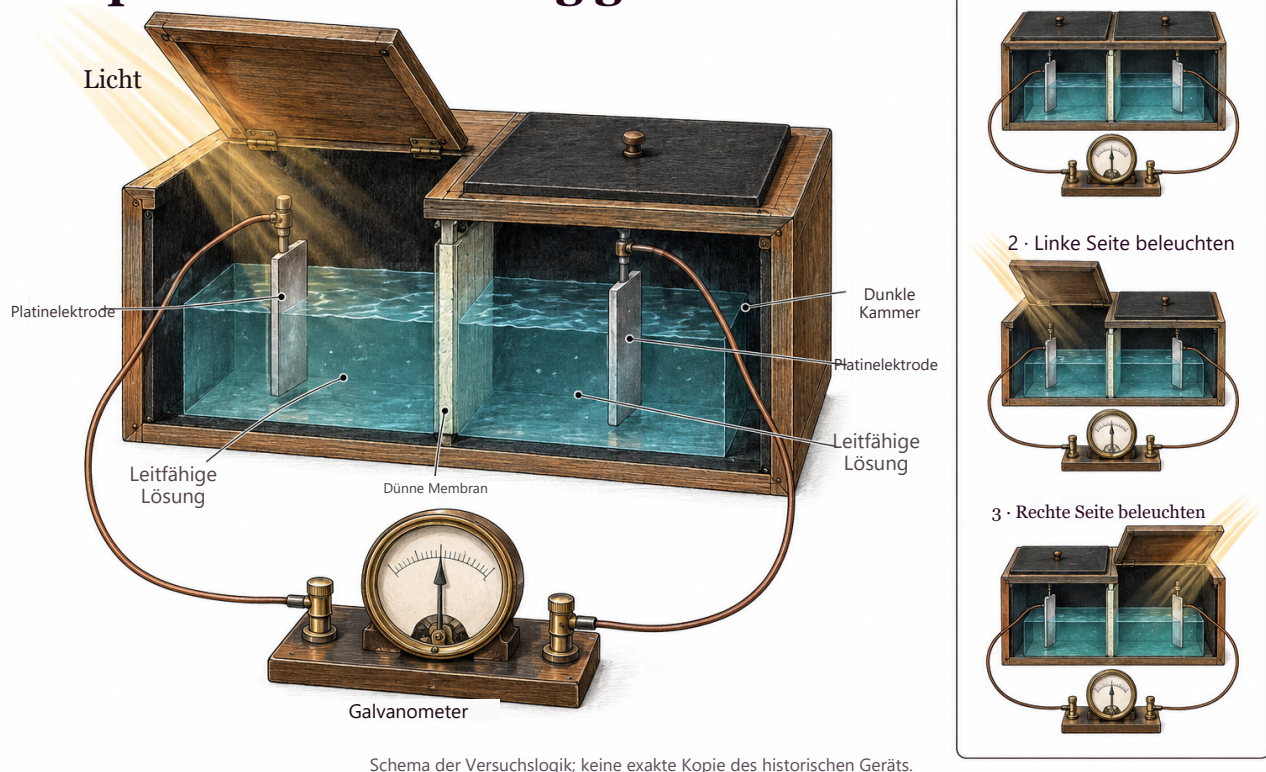


Abbildung 02. Eine schematische Darstellung der zweikammerartigen Anordnung aus Becquerels Aufsatz von 1839. Die Platten sind außen mit einem Galvanometer verbunden, die Flüssigkeiten sind innen über eine Membran ionisch miteinander verbunden. Die Funktion der Abdeckungen besteht darin, zu bestimmen, welche Seite dem Licht ausgesetzt ist; die Quelle gibt in dieser Abbildung keine genauen Abmessungen des historischen Bauelements an. [H31] Mit einem Bildgenerierungswerkzeug erstellte konzeptionelle Illustration; keine Messaufnahme.

Warum sollte das Experiment mit Silberchlorid gesondert beschrieben werden?

Im folgenden Teil desselben Textes wird eine frisch hergestellte, dünne Schicht aus Silberchlorid auf eine Platinplatte aufgebracht; die Platte wird in Wasser getaucht, dem Säure zugesetzt wird, um sie leitfähig zu machen. Bei Beleuchtung wird die Schicht dunkel, und der Zeiger des Galvanometers bewegt sich. Auf diese Weise werden die sichtbare chemische Veränderung und die elektrische Reaktion gleichzeitig beobachtet. [H31] Diese Beschreibung ist kein Anwendungsrezept, sondern die experimentelle Logik der ursprünglichen Arbeit; die historischen Chemikalien müssen nicht exakt in einem modernen Unterrichtsexperiment verwendet werden.

Die Formel für Silberchlorid ist **AgCl**: Ag steht für Silber, Cl für Chlor. Die chemische Formel gibt die Elemente und das ideale Zusammensetzungsverhältnis an. Eine **photochemische Reaktion** ist ein chemischer Prozess, der durch Lichtenergie initiiert oder verändert wird. Die Veränderung von fotografischen Materialien im Licht ist ein bekanntes Beispiel für dieses Konzept. Hier sollte die Metallplatte nicht nur als „elektrisch leitfähiges Material“ betrachtet werden; sie sorgt auch für elektrischen

Kontakt und mechanische Unterstützung der lichtempfindlichen Schicht. Die Flüssigkeit ist Teil des elektrochemischen Prozesses.

Aus diesem Versuch lässt sich vorsichtig folgern, dass Licht das elektrische Verhalten einer bestimmten Elektroden-Lösungs-Anordnung verändern kann. Daraus lassen sich weder ein heutiger Silizium-p-n-Übergang noch langfristig stabile Leistung oder ein bestimmter Energieumwandlungswirkungsgrad unmittelbar ableiten. **Photospannung** bezeichnet eine lichtabhängige Spannungsdifferenz; **Photostrom** bezeichnet einen lichtabhängigen Stromanteil. Für eine fortlaufende Energiebilanz einer Anordnung, in der auch eine chemische Reaktion stattfindet, müssen Licht, chemische Veränderung und elektrische Abgabe getrennt berücksichtigt werden. Wer einen Zeigerausschlag als “unendlich langlebige Solarzelle” interpretiert, verliert diese Unterscheidung.

1873: Wie wurde ein Problem mit einem Telegraphen mit Selen in Verbindung gebracht?

Willoughby Smith suchte nach einem Material mit hohem elektrischen Widerstand, das bei der Verlegung von Unterseekabeln für Test- und Signalanwendungen eingesetzt werden konnte. In einer kurzen Notiz, die am 20. Februar 1873 veröffentlicht wurde, beschrieb er Selenstäbe mit einer Länge von 5-10 cm und einem Durchmesser von etwa 1-1,5 mm. Die Stäbe waren in Glasröhren eingeschlossen, und an ihren Enden ragten Platin-Drähte heraus, die für elektrische Verbindungen dienten. Der lichtabhängige elektrische Widerstand von Selen wurde zu einem unerwartet wichtigen Forschungsthema. [H02]

Selen, ein chemisches Element mit dem Symbol Se. Es kann in verschiedenen strukturellen Formen vorkommen, wie beispielsweise amorph und kristallin; daher reicht es nicht aus, nur den Namen des Elements zu kennen, um alle elektrischen Eigenschaften einer Probe zu bestimmen. **Widerstand** ist ein Maß dafür, wie viel Strom bei einer gegebenen Spannung unter bestimmten Bedingungen fließt. Die Einheit ist Ohm. In einem einfachen ohmschen Element gilt folgende Beziehung:

$$I = \frac{V}{R}. \quad (I.2.1)$$

I ist der Strom, V ist die Spannung an den Anschlüssen des Elements, und R ist der Widerstand. Der Satz „Der Widerstand hat sich im Licht verringert“ bedeutet, dass bei gleicher Spannung ein größerer Strom fließen kann. Diese Zunahme wird als **Photoleitfähigkeit** bezeichnet. Hierbei steht „Photo“ für Licht und „Leitfähigkeit“ für die Fähigkeit, elektrische Ladungen zu transportieren. Wenn sich die Leitfähigkeit eines Materials durch Licht ändert, kann es als Lichtsensor verwendet werden; allein diese Beobachtung beweist jedoch nicht, dass es sich bei dem Material um eine Solarzelle handelt, die einen externen Stromkreis mit Energie versorgt.

Betrachten wir das gleiche Phänomen anhand von Zahlen

Synthetisches Beispiel, keine Messung von Smith: Ein Senelement habe im Dunkeln einen Widerstand von 10 Megaohm und bei Beleuchtung von 2 Megaohm. "Mega" bedeutet eine Million. Legen wir mit einer externen Batterie konstant 10 V an die Anschlüsse, beträgt der Dunkelstrom 1 Mikroampere und der Strom bei Beleuchtung 5 Mikroampere. "Mikro" bedeutet ein Millionstel. Das Messgerät erfasst eine Zunahme um 4 Mikroampere. Die Batterie liefert die elektrische Leistung; das Licht hat die Bedingungen verändert, unter denen das Material diese Leistung leitet. Die Rechnung besagt nicht, dass nach Entfernen der Batterie derselbe Strom weiterfließt.

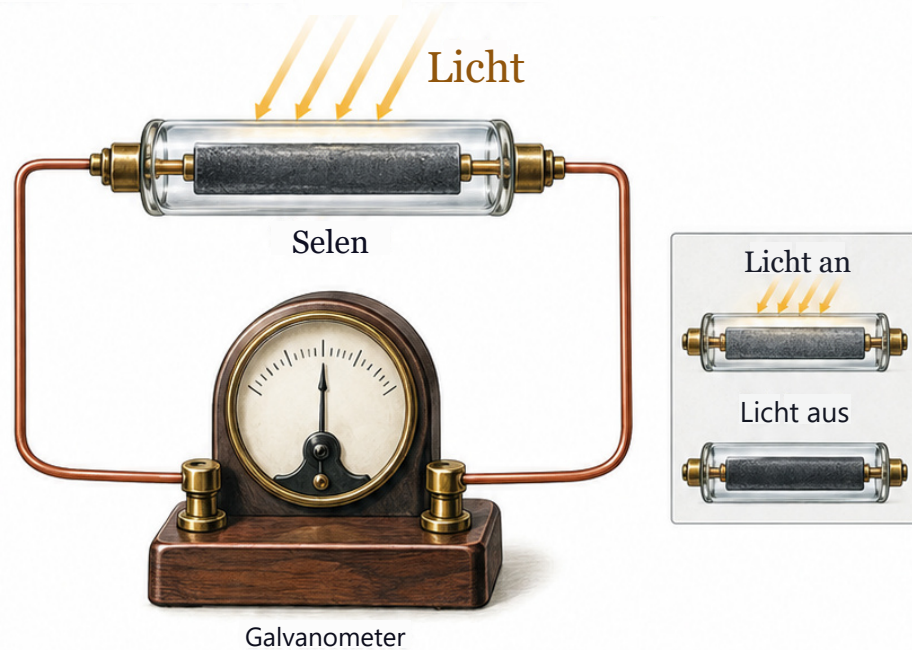
Ausgedrückt in der heutigen Sprache der Halbleiterphysik kann Licht die Anzahl der beweglichen Ladungsträger erhöhen. Die Lebensdauer der Ladungsträger, ob sie in Defekten gebunden sind und wie leicht sie sich bewegen können, beeinflusst die Leitfähigkeit. In einem einfachen Kristallmodell hängt die Leitfähigkeit von der Summe der mit ihren jeweiligen Beweglichkeiten gewichteten Elektronen- und Lochdichten ab. Dies ist nicht die Behauptung, dass Smith im Jahr 1873 bereits die heutige Bandtheorie verwendet hat; es geht darum, einer historischen Beobachtung mit der später entwickelten physikalischen Sprache eine Bedeutung zu verleihen.

Darüber hinaus ist nicht jedes Selen-Bauelement ein ideales, spannungsunabhängiges Widerstandselement. Die Kontakte und die vorherige elektrische Behandlung können das Verhalten beeinflussen. Das obige Beispiel des Ohmschen Gesetzes wurde ausgewählt, um die Bedeutung der Widerstandsabnahme bei Lichteinfall zu veranschaulichen; es wird nicht davon ausgegangen, dass alle Selenproben bei jeder Spannung linear reagieren.

Licht verändert den Widerstand von Selen



Licht erzeugt Strom in einem Kreis ohne Batterie



Oben: Photoleitfähigkeit. Unten: photovoltaische Reaktion.

Lehrschema; keine Messung an einer historischen Probe.

Abbildung 03. Der obere Schaltkreis untersucht die Leitfähigkeitsänderung unter externer Vorspannung, während der untere Schaltkreis den durch die Beleuchtung verursachten Strom ohne externe Batterie untersucht. Die Diagramme veranschaulichen die Logik der Experimente. Die Geometrie, der Kontaktzustand und die Kalibrierung der tatsächlichen historischen Proben können aus diesem Schema nicht abgeleitet werden. [H02] [H32] Mit einem Bildgenerierungswerkzeug erstellte konzeptionelle Illustration; keine Messaufnahme.

1876-1877: Welche zusätzliche Frage stellten Adams und Day?

William Grylls Adams und Richard Evans Day behandelten das Verhalten von Selen im Dunkeln und die Frage, ob Licht einen Strom erzeugen kann, als getrennte Fragestellungen. Sie verwendeten getemperte Proben mit Platinkontakten. Beim entscheidenden Versuch ihres Berichts war das Selen direkt mit einem Galvanometer verbunden: Im Dunkeln gab es keinen Ausschlag, bei Kerzenlicht trat ein Ausschlag auf, der beim Abschalten des Lichts zurückging. Außerdem prüften sie drei ähnliche Proben, durch die zuvor kein Batteriestrom geflossen war; zwei reagierten auf Licht, eine nicht. Die kurze Mitteilung ging 1876 ein, die ausführliche Untersuchung wurde 1877 veröffentlicht. [H32] [H03]

Glühen ist ein Prozess, bei dem die Struktur eines Materials durch das Durchlaufen einer bestimmten Temperaturhistorie verändert wird. Der **Kontakt** ist der Bereich, in dem der Platin-Draht mit dem Selen in Berührung kommt. Warum sind diese beiden Begriffe wichtig? Weil nicht nur der Name des Elements gemessen wird, sondern ein Bauelement, das aus der Struktur, der Oberfläche, den Kontakten und der Verarbeitungshistorie des Elements besteht. Die unterschiedliche Reaktion der Proben erfordert, dass der Forscher von Anfang an die Unterschiede zwischen der „gleichen Rezeptur“ und dem „gleichen Ergebnis“ hinterfragt.

Ein Experiment ohne externe Spannungsquelle liefert einen anderen Beweis als die bloße Übertragung des von einer externen Batterie gelieferten Stroms. Um eine elektrische Reaktion in eine nützliche Stromquelle umzuwandeln, müssen jedoch Spannung und Strom unter Last, Lichtintensität, Fläche und zeitliche Stabilität gemessen werden. Daher umfasst die Geschichte verschiedene Beweisschritte, die zunächst mit der Photoleitfähigkeit beginnen und später zum photovoltaischen Bauelement übergehen. Ein einzelner Satz wie „Licht erzeugt Elektrizität“ lässt diese Entwicklung unsichtbar erscheinen.

1883 und 1905: Oberflächengestaltung und die Quantenidee

Die frühe Zelle von Charles Fritts, die aus Selen und einer sehr dünnen Goldschicht bestand, ist ein Beispiel für den Übergang von der Wirkungsweise zum Bauelementdesign. Die Möglichkeit, dass Licht eindringen kann, und die Herstellung eines elektrischen Kontakts müssen auf derselben Oberfläche gelöst werden. Dickes Metall kann das Licht blockieren, während ein unzureichender Kontakt den Ladungsausgang erschwert. Das Problem bei den heutigen transparenten Kontakten und Metallgitterdesigns besteht ebenfalls darin, diese beiden Anforderungen gleichzeitig zu erfüllen. [H01]

In Einsteins Ansatz von 1905 wird der Energieaustausch von Licht durch Quanten erklärt. Beim **äußeren photoelektrischen Effekt** kann Licht mit ausreichender

Energie Elektronen aus einer Oberfläche herauslösen. Die für die Elektronenemission aus einem Metall benötigte Energie wird als **Austrittsarbeit** bezeichnet. Ein einzelnes Photon unterhalb dieser Schwelle wird nicht energiereicher, nur weil wir die Lichtintensität erhöhen; eine Intensitätssteigerung erhöht hauptsächlich die Anzahl der Photonen. In einer Solarzelle muss das Elektron jedoch nicht ins Vakuum austreten. Die innerhalb eines Halbleiters erzeugten Ladungen werden durch selektive Kontakte genutzt, was ein anderer Bauelementbetrieb ist. [H06]

Heutzutage lassen sich diese Beobachtungen als drei getrennte Phänomene interpretieren: Licht kann die **Leitfähigkeit** eines Schaltkreises **verändern**, in einer Anordnung **Photospannung und Photostrom erzeugen** und **Elektronen von einer Oberfläche emittieren**. Wenn wir die Energiequelle, den Messschaltkreis und das Ergebnis separat betrachten, sind wir bereit zu verstehen, warum die Siliziumzelle von 1954 eine neue technische Entwicklungsstufe darstellte.

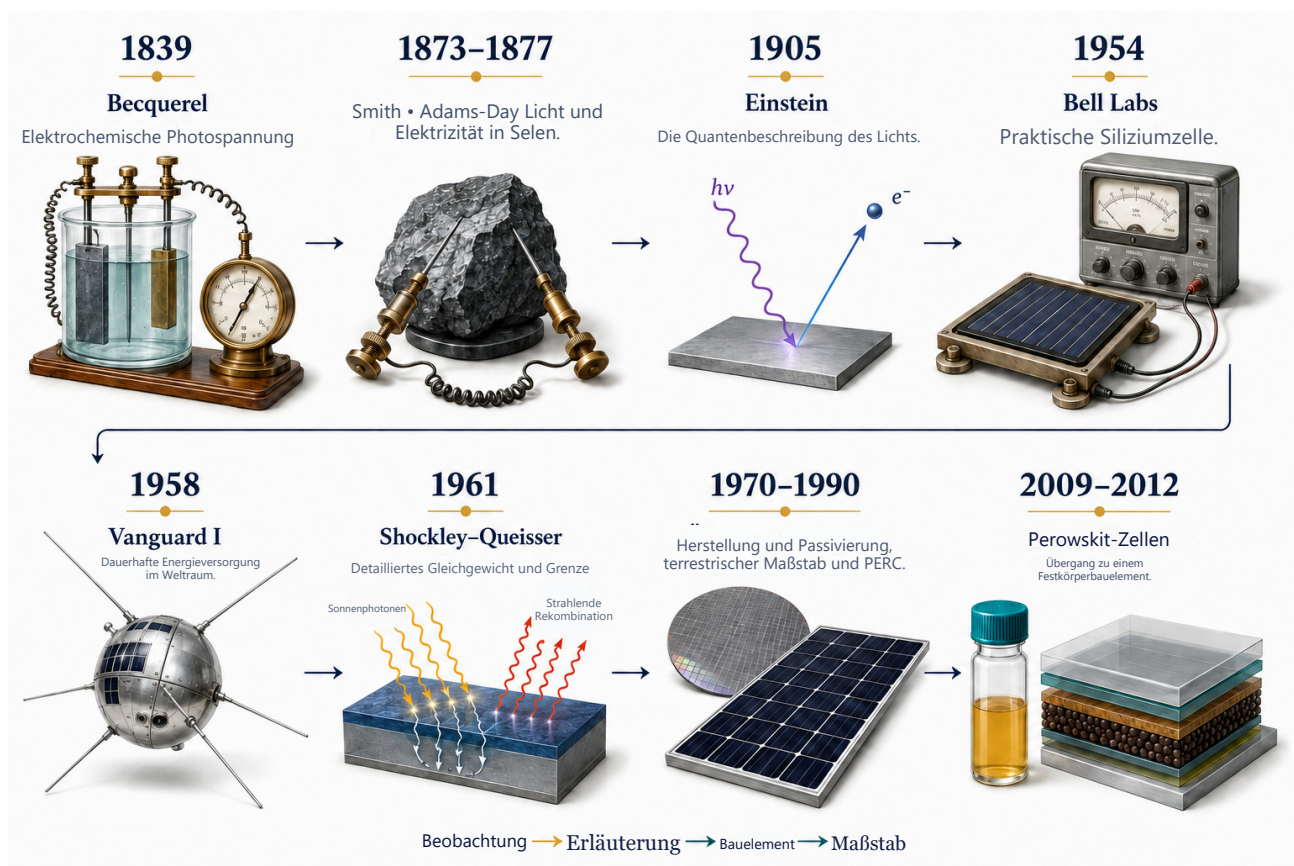


Abbildung 04. Die historische Entwicklung des photovoltaischen Konzepts und seiner Bauelemente. Die obere Reihe wird von links nach rechts gelesen, der Verbindungspfeil führt zur linken Seite der unteren Reihe. Die Wendepunkte zeigen gemeinsam die Beobachtung, die Quantenbeschreibung, die Halbleitertechnik und den Bedarf an Anwendungen. Die Abstände sind nicht proportional zur Zeit; die Darstellungen sollten nicht als exakte Rekonstruktionen historischer Objekte verwendet werden. [H01] [H02] [H03] [H04] [H07] [H25] [T10] [T11] Mit einem Bildgenerierungswerkzeug erstellte konzeptionelle Illustration; keine Messaufnahme.

Verständniskontrolle: Erkläre dein Experiment einer anderen Person

Beschreiben Sie bei der Darstellung von Becquerel nicht, dass er „das Licht einfing“, sondern erläutern Sie stattdessen die Elektrode, die Lösung, das Galvanometer und die nacheinander geöffneten Abdeckungen. Erläutern Sie bei der Darstellung von Smith anhand eines Beispiels von 10 V, warum die Lichtintensität den Strom bei konstanter Spannung erhöht. Erklären Sie für Adams-Day, warum die Entfernung der externen Batterie einen separaten Beweis darstellt. Wenn Sie die drei voneinander unterscheiden können, haben Sie die historischen Ereignisse nicht nur anhand ihrer Namen, sondern auch anhand der Logik der Experimente gelernt.

1954: Die Materialreinheit trifft auf die Physik der Bauelemente

Die Halbleiterforschung des zwanzigsten Jahrhunderts entwickelte Verfahren zur gezielten Einbringung von Atomen in Kristalle, um die Anzahl der Ladungsträger zu steuern (Dotierung), die gleiche atomare Ordnung auf ein großes Volumen auszudehnen (Einkristallzüchtung) und Bereiche zu schaffen, in denen der Strom je nach Richtung unterschiedlich fließt (Gleichrichterübergang). Ohne diese Fortschritte wäre es nicht ausreichend gewesen, lediglich nach einem „guten Licht absorbierenden Material“ zu suchen. Der Artikel von Chapin, Fuller und Pearson aus dem Jahr 1954 präsentierte eine Silizium-p-n-Übergangs-Photovoltaikzelle zur Stromerzeugung. Die bibliografische Kennung des Artikels ist eine zuverlässige Primärquelle, um den Beginn einer Geräteklasse zu verfolgen. [\[H04\]](#)

Die Aufzeichnungen über die experimentellen Zellen in der Smithsonian-Sammlung zeigen, dass Chapin bei Bell Labs begann, sich der Stromerzeugung aus Sonnenlicht zu widmen, und dass Russells frühere Arbeiten mit Silizium eine Rolle in dieser Entwicklung spielten. Laut den Aufzeichnungen der Einrichtung entstand die praktische Zelle durch die gemeinsame Arbeit von Chapin, Fuller und Pearson. [\[H05\]](#) Die bei Bell Labs entwickelte, etwa 6 % effiziente Zelle verdankt ihre historische Bedeutung nicht nur ihrer Zahl: Es gab nun einen Wandler, der eine bestimmte Last betreiben konnte und der zu technischen Zwecken weiterentwickelt werden konnte. Die Leistung dieser Zelle sollte nicht als ein Rekordwert betrachtet werden, der den heutigen Zertifizierungs- und Feldanforderungen entspricht. [\[H08\]](#)

Die aus diesem Übergang zu ziehende Lehre ist offensichtlich: Ein Material, das zwar eine vielversprechende Bandlücke aufweist, aber nicht elektrisch rein hergestellt werden kann, ist möglicherweise nicht für die Verwendung in einer Zelle geeignet. Selbst ein perfekter Kristall kann ohne geeignete Kontakte nutzlos sein. Ein erfolgreiches Bauelement erfordert, dass die gewünschten Eigenschaften in derselben Probe und nach derselben Prozessfolge zusammen auftreten.

Warum waren Reinheit, Übergänge und die Idee einer Wirkungsgradgrenze Wendepunkte?

Reinheit bedeutet, dass in einem Kristall nur wenige unerwünschte Atome vorhanden sind; Dotierung hingegen ist das gezielte Einbringen bestimmter Atome. Diese beiden Aspekte schließen sich nicht aus: Wir können die zufällige Verunreinigung reduzieren und gleichzeitig eine nützliche Dotierung kontrollieren. In einem **n-Typ**-Bereich sind bewegliche Elektronen vorherrschend, während in einem **p-Typ**-Bereich Löcher, die einen Elektronenmangel darstellen, vorherrschen. Die Grenze zwischen diesen beiden Bereichen wird als **p-n-Übergang** bezeichnet. Die durch die Neuordnung der Ladungen an der Grenze entstehende innere Struktur hilft dabei, dass Elektronen und Löcher bei der Beleuchtung von verschiedenen Kontakten aus gesammelt werden. „n“ und „p“ bedeuten nicht, dass die gesamte Platte eine eindeutige negative oder positive Ladung aufweist. In elektrisch neutralen Bereichen wird die Ladung der beweglichen Ladungsträger durch die anderen Ladungen im Kristall ausgeglichen.

Dieser kurze Mechanismus erklärt, warum das Bauelement von 1954 sich von einer einfachen Stange unterscheidet, deren Widerstand sich nur im Licht ändert. Um die durch Photonen erzeugten Ladungsträger nutzen zu können, müssen sowohl die innere Struktur als auch die äußeren elektrischen Kontakte optimiert werden. In späteren Entwicklungsphasen ermöglichte die **Passivierung**, durch die die Anzahl der Defekte, die an der Oberfläche zu Ladungsträgerverlusten führen, reduziert oder der Zugang zu diesen Defekten erschwert wird, eine höhere Spannung und Leistung aus derselben Zelle zu gewinnen. Hierbei geht es nicht darum, das Licht zu verstärken, sondern den frühen Verlust der erzeugten Anregung zu minimieren. [H04] [T01]

1961 stellten Shockley und Queisser eine weitere Frage: Selbst wenn wir die Produktionsdefekte idealerweise beseitigen, warum kann ein einzelner Übergang nicht die gesamte Sonnenenergie in Elektrizität umwandeln? Die Unfähigkeit, niederenergetische Photonen zu nutzen, der Verlust von überschüssiger Energie von hochenergetischen Photonen in Form von Wärme und die Tatsache, dass das Bauelement selbst Licht emittiert, werden hierbei berücksichtigt. Das **detaillierte Gleichgewicht** ist die Grundlage dieser Berechnung, die die Absorption und die Rückwärtsrichtung der Emission auf konsistente Weise berücksichtigt. Das Ergebnis ist eine Obergrenze, die von bestimmten Annahmen abhängt; es ist kein unveränderlicher Wirkungsgrad für alle Technologien. Die Markierung „1961“ in der Zeitleiste zeigt somit nicht den Verkauf eines neuen Bauelements, sondern die Art und Weise, wie die unvermeidlichen Verluste des Bauelements berechnet werden. [H25]

Vom Weltraum zur Erde

Vanguard 1, das am 17. März 1958 gestartet wurde, war der erste Satellit, der Solarenergie nutzte. In Weltraumanwendungen waren geringes Gewicht und lange Betriebsdauer von größerer Bedeutung als die Kosten pro erzeugter elektrischer Energie. Die historischen Aufzeichnungen der NASA bestätigen diese frühe Anwendung. [H07] Eine Technologie kann in ihrem ersten Marktsegment teuer sein, aber sie ist dennoch sinnvoll, wenn keine andere Lösung die gleiche Aufgabe bei ähnlicher Masse und unter ähnlichen Wartungsbedingungen erfüllen kann.

Die Anforderungen an den Einsatz auf der Erde haben sich geändert. Fernkommunikationsstandorte, unabhängige Stromquellen und später die netzgekoppelte Stromerzeugung führten zu neuen Anforderungen in Bezug auf Beständigkeit und Kosten. Das US-Energieministerium untersucht historisch die Rolle, die föderale Forschungs- und Entwicklungsprogramme in den 1970er Jahren bei der Entwicklung der Solartechnologie spielten. [H08] Die Forschung musste nun nicht nur die Erhöhung des Wirkungsgrads berücksichtigen, sondern auch den Materialverbrauch pro Wafer, die Produktionsgeschwindigkeit, die Aussonderung von defekten Zellen, die Verkapselung und den jahrelangen Betrieb vor Ort.

Dieses Datum bedeutet nicht, dass ein einzelnes Material für immer die Nase vorn haben wird. Der Vorteil einer Materialfamilie kann sich im Laufe der Zeit ändern. Dünnschichtmaterialien können dank ihrer direkten Bandlücke eine hohe Absorption mit geringem Materialeinsatz ermöglichen. Silizium kann eine verbesserte Produktionsinfrastruktur und eine hohe elektronische Qualität bieten.

Mehrfachübergangs-Bauelemente können zwar einen höheren Wirkungsgrad erzielen, erfordern aber auch eine komplexere optische und elektrische Abstimmung. Die Aufgabe des Forschers besteht darin, zu bestimmen, welches Problem jeder Ansatz löst und welches neue Problem er aufwirft.

Ein historischer Vergleich: Die benötigte Fläche für die gleiche elektrische Leistung

Dies ist ein didaktisches Beispiel und keine historische Messung. Nehmen wir an, die Strahlungsleistung beträgt 1000 W/m^2 und die angestrebte elektrische Leistung 100 W . Die erforderliche Fläche ist dann $A = P/(\eta G)$. Bei einem Wirkungsgrad von 6% beträgt $A = 100/(0,06 \times 1000) = 1,67 \text{ m}^2$; bei einem Wirkungsgrad von 20% sind $0,50 \text{ m}^2$ erforderlich. Der Wirkungsgrad hat sich um 14 Prozentpunkte erhöht; die erforderliche Fläche hat sich um etwa 70% verringert. Ohne Kenntnis der Zellkosten, der Trägerstruktur und der Wartungskosten kann jedoch nicht gesagt werden, dass sich auch die Stromkosten um 70% verringert haben. Die gleiche Gleichung lehrt, wie man herausfindet, welche wirtschaftliche Variable direkt von einer historischen Entwicklung beeinflusst wird.

Geschichte als Kette von Ursache und Wirkung lesen

Das bloße Auswendiglernen von Namen und Daten, um die Geschichte eines Fachgebiets zu verstehen, reicht nicht aus, um nachfolgende technische Entscheidungen nachzuvollziehen. In der Geschichte der Photovoltaik treten nacheinander vier unterschiedliche Herausforderungen auf. Die erste Herausforderung besteht darin, zuverlässig nachzuweisen, dass Licht eine elektrische Veränderung hervorruft. Die zweite Herausforderung besteht darin, zu unterscheiden, ob es sich bei dieser Veränderung um einen Leitfähigkeitseffekt handelt, der von einer externen Quelle abhängt, oder um eine Energieumwandlung, die eine elektrische Last versorgen kann. Die dritte Herausforderung besteht darin, den Energie- und Ladungsfluss innerhalb des Bauelements quantitativ zu beschreiben. Die vierte Herausforderung besteht darin, dieses Bauelement wiederholt, über eine große Fläche und mit einer langen Lebensdauer herzustellen. Ein und dieselbe wissenschaftliche Idee kann nicht alle diese Herausforderungen allein bewältigen.

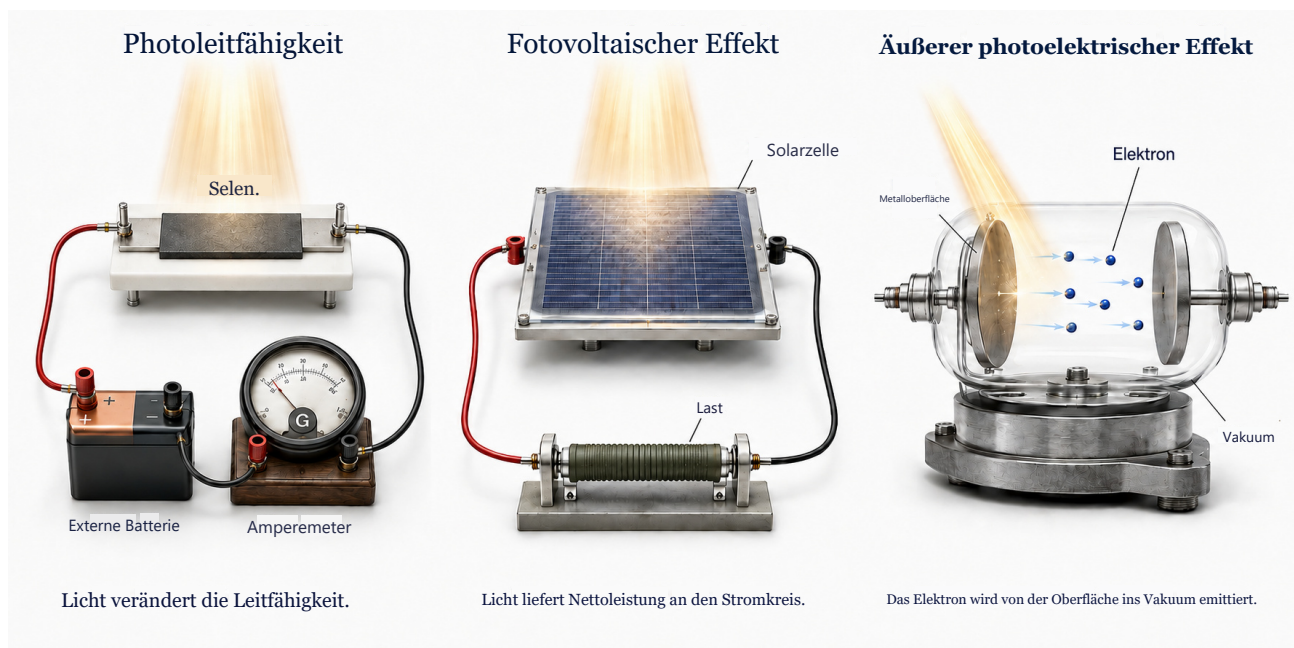


Abbildung 05. Die Logik der drei verschiedenen Experimente. Links wird die Energie des Stroms von einer externen Batterie bereitgestellt; das Licht verändert die Leitfähigkeit der Probe. In der Mitte stammt die im Verbraucher verbrauchte Energie von der Beleuchtung. Rechts werden Elektronen von der Oberfläche ins Vakuum emittiert. Diese Unterscheidung ermöglicht es, die Selen-Experimente nicht mit der modernen Solarzelle unter einem gemeinsamen Begriff zu verwechseln. Originale Lehrzeichnung. [H01] [H02] [H03] [H06] Mit einem Bildgenerierungswerkzeug erstellte konzeptionelle Illustration; keine Messaufnahme.

Die historische Bedeutung von Selen liegt in dieser Unterscheidung. Die Änderung des Stroms, wenn ein Material Licht ausgesetzt wird, zeigt, dass das Licht mit den Elektronen interagiert; jedoch muss die Energiequelle der sich ändernden Stromstärke zusätzlich untersucht werden. In der modernen Forschung wird dies ähnlich interpretiert, indem ein Detektor, bei dem die photoelektrische Verstärkung dazu führt, dass die externe Quanteneffizienz einen Wert von eins überschreiten kann, wie eine Solarzelle betrachtet wird, die die gleiche Verstärkung als kostenlose Energie liefert. Bei der Verstärkung des Detektors spielt auch die externe Polarisation eine Rolle. Ohne eine Energiebilanz kann die Anzahl der Elektronen pro Photon nicht als Maß für den Wirkungsgrad der Energiewandlung verwendet werden.

Das Lehrmoment der Siliziumzelle von 1954 besteht nicht darin, dass sie ein zuvor unbekanntes Naturgesetz aufdeckte. Vielmehr liegt es darin, dass in einem einzigen Bauelement eine ausreichende Kristallqualität, eine kontrollierte Dotierung, die Bildung eines Übergangs und ein elektrischer Kontakt zusammengebracht wurden. Die Produktionstechnologien der Halbleitertechnologie ermöglichten die Umwandlung des physikalischen Effekts in ein nutzbares Produkt. Die Vanguard-Anwendung von 1958 zeigt die Priorität der Forschung: In einer Umgebung, in der die begrenzte Lebensdauer der Batterie ein Problem darstellt, ist die Möglichkeit der Wiederverwendung des auf die Oberfläche fallenden Lichts von hohem Wert. Der erste Kunde einer Technologie ist nicht immer derjenige, der nach der billigsten Elektrizität sucht. [H04] [H05] [H07]

Die terrestrische Verbreitung hat diese Prioritäten verändert. Während das Verhältnis von Leistung zu Masse und die Strahlungsbeständigkeit für ein Bauelement im Weltraum entscheidend sein können, gewinnen auf der Erde die Produktionskosten, die Fläche, die Montage, die Materialverfügbarkeit und die langfristige Energieerzeugung zusammen an Bedeutung. Die in der Forschung verfolgte Linie des „höheren Wirkungsgrads“ ist daher allein nicht ausreichend. Im selben Zeitraum können sich der Zellwirkungsgrad, der Modulwirkungsgrad, die Fertigungsausbeute und die Lebensdauer im Feld in unterschiedlichem Tempo entwickeln. In den folgenden Kapiteln des Buches werden wir untersuchen, wie die Passivierung den Spannungsgewinn, die Tandemtechnologie den spektralen Gewinn und das Moduldesign den Flächenverlust beeinflussen, und dies anhand einer einheitlichen Energiebilanz betrachten.

Historisches Analyseexperiment: Wählen Sie einen Wendepunkt aus und verfassen Sie drei Sätze: Welche Herausforderung lag vor? Welches Werkzeug oder welches physikalische Verständnis hat diese Herausforderung überwunden? Welche Herausforderung blieb ungelöst? Diese Übung wandelt historisches Wissen in ein Forschungsdesign um.

Häufige Fehler und Übungsaufgaben

Die Aussage „Fotovoltaik, Fotokonduktivität und Photoeffekt sind dasselbe“ ist falsch. In einem Fall ändert sich die Leitfähigkeit unter externer Anregung, in einem anderen Fall entsteht nutzbare Photospannung und -leistung, und beim äußeren Photoeffekt werden Elektronen aus der Oberfläche herausgelöst. Auch die Aussage „Das Erfindungsdatum erklärt alles“ ist falsch; wissenschaftliche Beobachtung, funktionierender Prototyp und skalierbares Produkt sind separate Schritte.

1. Gilt eine Selenprobe, deren Widerstand sich unter Beleuchtung halbiert, als Leistungsquelle ohne externe Batterie? **Antwort:** Nein; eine gesonderte Messung der Photospannung und eine Messung der Nettoleistung unter Last sind erforderlich.
2. Um wie viele Prozentpunkte und wie viel Prozent steigt der Wirkungsgrad von 10 % zu 15 %? **Antwort:** 5 Prozentpunkte; der relative Anstieg beträgt 50 %.
3. Warum ist eine für den Weltraum geeignete Solarzelle nicht automatisch auch für den Einsatz in Dachmodulen geeignet? **Antwort:** Die Anforderungen an das Spektrum, die Strahlung, die Fläche und die Masse sowie die Kosten, die Verkapselung und die Einsatzbedingungen sind unterschiedlich.

Lesepfad: Lesen Sie zuerst die kurze Zeitleiste ([H01]), dann die Identität und den Umfang des Artikels von 1954 ([H04]) und anschließend die Daten zu Objekt und Anwendungsdatum ([H05] [H07]). Fügen Sie historische Wirkungsgradwerte nicht direkt in die moderne Zertifizierungstabelle ein.

Solare Quelle, Spektrum und Photonbilanzierung

Wie zählen wir die Photonen in einem Lichtstrahl?

Dass wir Sonnenlicht als weiß wahrnehmen, bedeutet nicht, dass alle darin enthaltenen Photonen identisch sind. Ein Prisma macht dies durch die Erzeugung eines Farbspektrums sichtbar. Die **Wellenlänge** ist die Entfernung zwischen zwei aufeinanderfolgenden äquivalenten Punkten einer Welle; sie wird mit λ bezeichnet. Die **Frequenz** ist die Anzahl der Schwingungen pro Sekunde; sie wird mit ν bezeichnet. Da die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum c ist, gilt die Beziehung $c = \lambda \nu$. Eine kurze Wellenlänge bedeutet eine höhere Frequenz und eine höhere Energie pro Photon. Der Unterschied zwischen Violett und Rot ist nicht nur eine Frage der Farbwahrnehmung unseres Auges.

Spektrum zeigt, wie sich die Lichtleistung auf die verschiedenen Wellenlängen verteilt. In der Grafik ist die horizontale Achse in Nanometern (nm) und die vertikale Achse in $\text{W}/(\text{m}^2 \cdot \text{nm})$ angegeben. Der Wert auf der vertikalen Achse stellt jedoch nicht die Gesamtleistung für diese spezielle Wellenlänge dar. Er gibt die Leistungsdichte für jedes Nanometer-Intervall an. Durch Multiplikation des vertikalen Werts mit der Intervallbreite erhält man die Leistung in W/m^2 . Das bloße Addieren der Höhen verschiedener Intervalle ist daher falsch, wenn man die Gesamtleistung berechnen möchte.

Lehrbeispiel: Nehmen wir an, die spektrale Strahlung im Bereich von 500-510 nm beträgt konstant $1 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{nm})$. Da der Bereich 10 nm beträgt, beträgt die einfallende Leistung $10 \text{ W}/\text{m}^2$. Die Photonenenergie kann näherungsweise mit 505 nm, dem Mittelwert dieses engen Bereichs, berechnet werden. Da $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$, beträgt die Energie pro Photon ungefähr $3,93 \times 10^{-19} \text{ J}$. Wenn wir den Wert 10 J/s durch diese Energie teilen, erhalten wir ungefähr $2,54 \times 10^{19}$ Photonen pro Sekunde und pro Quadratmeter. Wir haben ein Leistungsmaß in eine Photonenzahl umgerechnet; wir haben noch keine elektrische Leistung berechnet.

Vom einfallenden Photon zum gesammelten Elektron

Wenn wir annehmen, dass jedes Photon zum Übergang eines Elektrons in der externen Schaltung beiträgt, multiplizieren wir den Photonenfluss mit der Größe der Elektronenladung. Das obige Beispiel ergibt ungefähr $4,07 \text{ A/m}^2$, also $0,407 \text{ mA/cm}^2$. In der Realität können Photonen reflektiert werden, nicht in der nützlichen Schicht absorbiert werden oder die erzeugte Ladung kann verloren gehen. Die **externe Quanteneffizienz** ist das Verhältnis der Anzahl der in der externen Schaltung gesammelten Ladungsträger pro einfallendem Photon unter geeigneten Messbedingungen; sie wird mit der Abkürzung EQE bezeichnet. Wenn EQE 80 % beträgt, beträgt der resultierende Strom beispielsweise ungefähr $0,326 \text{ mA/cm}^2$. Dies ist keine Energieeffizienz: um von der Flussrate zur Leistung zu gelangen, ist auch die Betriebsspannung erforderlich.

Während das Sonnenlicht die Atmosphäre durchdringt, werden einige Wellenlängen von den Gasen absorbiert, und ein Teil des Lichts wird gestreut. **Direktes Licht** kommt aus der Richtung der Sonne, während **diffuses Licht** aus verschiedenen Richtungen des Himmels kommt. AM (Air Mass) ist ein Maß für das Verhältnis des Weges, den das Licht in der Atmosphäre zurücklegt, zu einem Referenzweg. AM1.5G ist ein Referenzspektrum für Laborvergleiche; es bedeutet nicht „jeden Tag 1,5 Stunden“ oder „das 1,5-fache der Sonnenleistung“. Das Spektrum, die gesamte Strahlung und die Proben temperatur werden separat angegeben.

Große Zahlen und das Integralzeichen

10^{-3} ist 1000, 10^{-3} ist 0,001. Diese **wissenschaftliche Notation** ermöglicht es, sehr große Photonenanzahlen und sehr kleine Energien im atomaren Maßstab in einer einzigen Berechnung zu verarbeiten. Zum Beispiel: Wenn 2×10^{-3} mit 3×10^{-2} multipliziert wird, wird zuerst $2 \times 3 = 6$ berechnet, und dann werden die Zehnerpotenzen addiert: das Ergebnis ist $6 \times 10^{-1} = 60$. In Formeln werden wir diese Exponenten als echte hochgestellte Zahlen sehen.

Σ ist die Summe diskreter Terme. $\int$ ist das Integralsymbol für die kontinuierliche Summe, die durch Verkleinerung der Intervalle berechnet wird. Die Berechnung der Fläche unter einem Spektrum erfolgt durch Multiplikation der Breite und Höhe schmaler Bereiche und anschließende Summation. $d\lambda$ bezeichnet ein sehr kleines Wellenlängenintervall in einer kontinuierlichen Darstellung; $\Delta\lambda$ bezeichnet die endliche Differenz zwischen zwei Wellenlängen in einer Tabelle. Wenn eine Kurve durch eine lineare Approximation dargestellt wird, ist die Multiplikation des Durchschnitts benachbarter Höhen mit der Intervallbreite die **Trapezregel**. Die folgenden Integralformeln sind eine Kurzschreibweise für diese Zähloperation.

Verständniskontrolle: Welcher Bereich des Diagramms?

Wenn in einem Band eine Strahlungsleistung von $2 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{nm})$ über eine Wellenlänge von 20 nm konstant ist, trägt dieses Band $40 \text{ W}/\text{m}^2$ bei. Wenn die gleiche Leistung zu einer längeren Wellenlänge verschoben wird, erhöht sich die Anzahl der Photonen, da jedes Photon weniger Energie trägt. Wenn jedoch die Absorptionsschwelle der Zelle unterschritten wird, liefern auch mehr Photonen nicht zwangsläufig mehr Strom. Bei der Interpretation des Spektrums müssen wir sowohl die Anzahl als auch die Photonenenergie als auch die EQE (External Quantum Efficiency) zusammen betrachten.

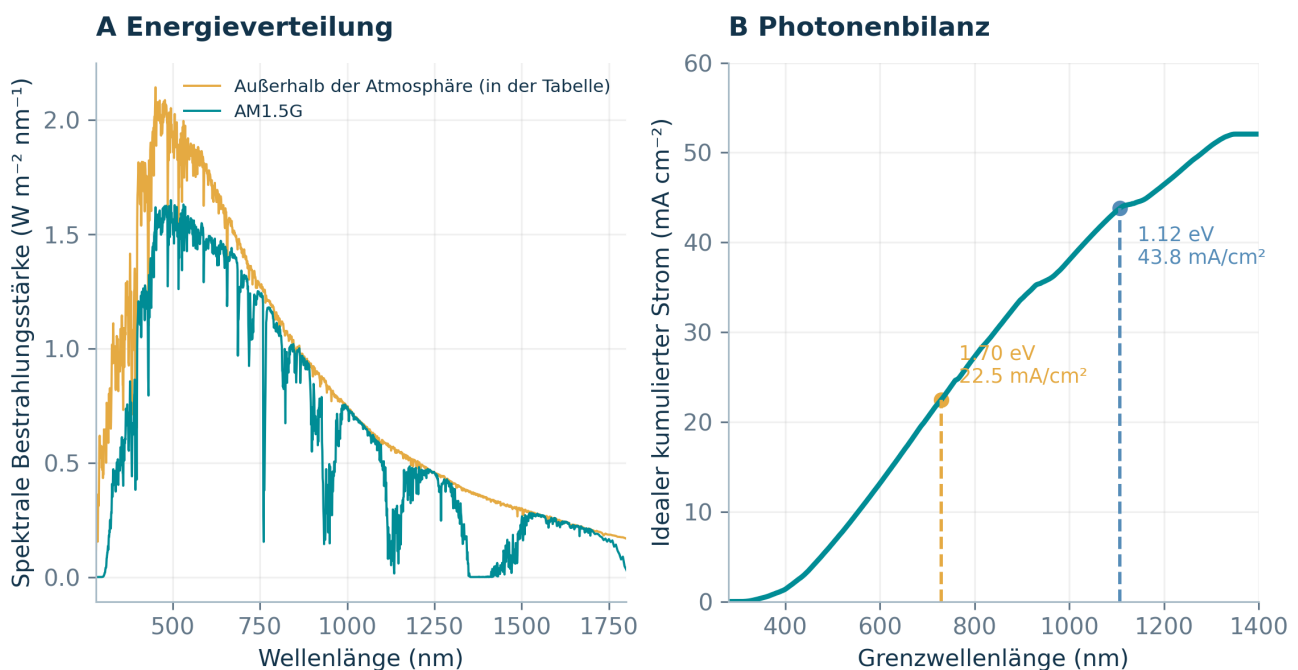


Abbildung 06. Vom Referenzspektrum zur Photonenzählung. Panel A zeigt die extraterrestrischen und globalen Spektren gemäß der ASTM G173-Tabelle, Panel B zeigt das ideale Stromintegral des globalen Spektrums. Die Schwellenwertlinien wurden für 1,12 und 1,70 eV gezeichnet. Die Daten stammen aus dem pvlib-Repository; die Kurven und Integrale wurden für dieses Buch neu erstellt. [H09] [B10]

Leistungsdichte und Energie müssen voneinander getrennt betrachtet werden

Der erste Input für die Zellforschung ist nicht „es gibt Sonne“; es ist die Verteilung des auf die Oberfläche fallenden Lichts in Bezug auf Zeit, Wellenlänge, Einfallswinkel und Polarisation. Die Strahlungsintensität G ist die Leistung pro Flächeneinheit, die in einer bestimmten Zeit auf die Oberfläche trifft, und wird in W/m^2 angegeben. Die Strahlungsenergie $H = \int G(t) dt$ wird in J/m^2 oder kWh/m^2 angegeben. $1 \text{ kWh} = 3,6 \text{ MJ}$. Die momentane Leistung eines Moduls wird in Watt angegeben, die in einem Tag erzeugte elektrische Energie in Kilowattstunden. Das Vermischen beider Größen ist einer der häufigsten Fehler, der von der Zellmessung zur Berechnung der Leistung einer Anlage übertragen wird.

Die spektrale Strahlung $E\lambda$ gibt die Verteilung der Leistung über die Wellenlängen an. Wenn man beispielsweise eine Tabelle mit der Einheit $\text{W m}^{-2} \text{ nm}^{-1}$ über die Wellenlängen aufsummiert, erhält man W/m^2 . Eine hohe Intensität an einem bestimmten Punkt in der Tabelle bedeutet nicht, dass diese Wellenlänge allein eine große Leistung trägt; auch die Bandbreite wird berücksichtigt. Das Maß im Integral ist ein Teil der physikalischen Größe.

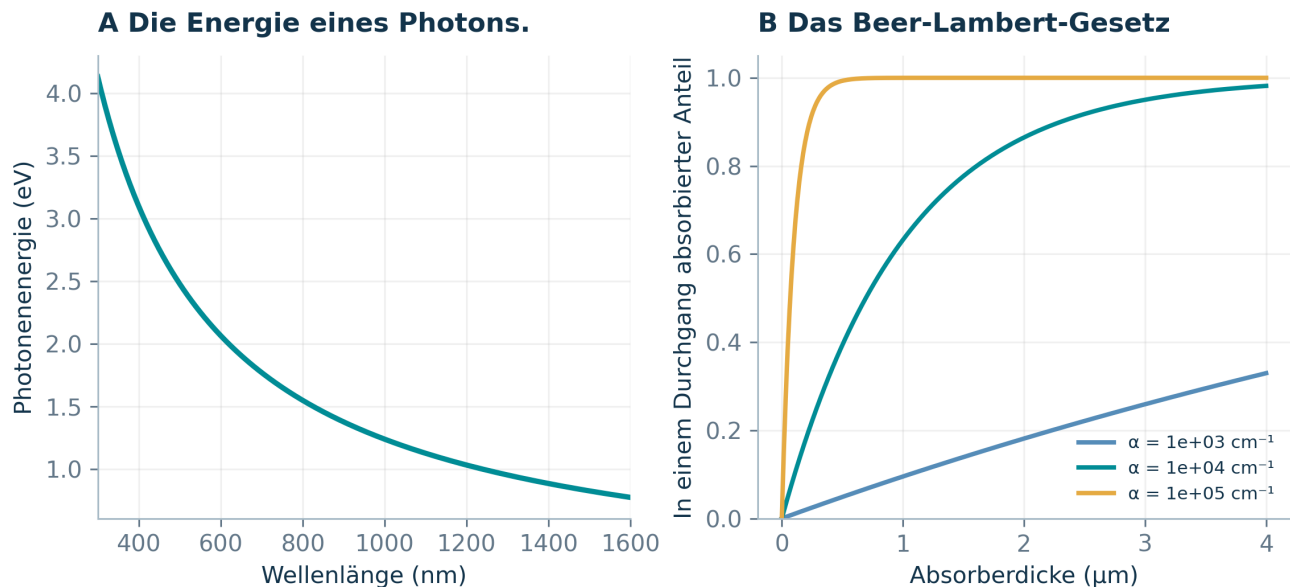


Abbildung 07. Die Absorptionslänge und die Energie der Photonen sind unterschiedliche Größen. Auf der linken Seite wird hc/λ berechnet, auf der rechten Seite $1 - \exp(-\alpha d)$ für ein konstantes α . Es wird nicht davon ausgegangen, dass ein Material bei allen Wellenlängen denselben α -Wert aufweist; das rechte Diagramm dient dazu, den Einfluss der Schichtdicke bei einer einzelnen Wellenlänge zu ermitteln. [H10] [H13]

Die Energie eines Photons und die Anzahl der Ladungsträger

Die Energie eines Photons ist $E = h\nu = hc/\lambda$. In der SI-Definition sind $h = 6,62607015 \times 10^{-34} \text{ J s}$, $c = 299792458 \text{ m/s}$, $q = 1,602176634 \times 10^{-19} \text{ C}$ und $k_B = 1,380649 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ die exakten Werte. [H10] In der Praxis lautet die Umrechnung $E[\text{eV}] \approx 1239,842/\lambda[\text{nm}]$. Daher trägt ein 500 nm Photon etwa 2,480 eV, und ein 1000 nm Photon trägt etwa 1,240 eV.

Die Anzahl der Photonen und die Energie sind nicht dasselbe. Zwei schmalbandige Lichtquellen mit der gleichen optischen Leistung erzeugen unterschiedliche Photonenströme; die Quelle mit der längeren Wellenlänge erzeugt mehr Photonen, da jedes Photon eine geringere Energie besitzt. Der einfallende Photonenfluss ist $\phi\lambda = E\lambda/(hc/\lambda)$. Hierbei muss λ konsistent mit hc in Meter umgerechnet werden; die Angabe von $E\lambda$ in „Nanometern“ bezieht sich lediglich auf die spektrale Bandbreite. Die Einheit des resultierenden $\phi\lambda$ ist $\text{Photonen m}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ nm}^{-1}$.

Für ein herkömmliches Bauelement, bei dem ein Photon maximal ein angeregtes Elektron erzeugt, wird die Kurzschlussstromdichte J_{sc} mit der Formel $J_{sc} = q \int \phi\lambda \text{EQE}(\lambda) d\lambda$ berechnet. EQE steht für externe Quanteneffizienz: die Anzahl der in der externen Schaltung gesammelten Elektronen pro einfallendem Photon. Diese Definition

berücksichtigt auch den Verlust von Photonen aufgrund von Reflexion oder parasitären Absorptionen. Die interne Quanteneffizienz verwendet hingegen im Nenner die entsprechend definierten absorbierten Photonen. [H24]

Was bedeuten AM0, AM1.5G und AM1.5D?

AM steht für „Air Mass“, also Luftmasse, und ist ein Maß für die optische Weglänge, die das Licht in der Atmosphäre zurücklegt. Bei einer vereinfachten Annahme einer ebenen Atmosphäre und für die Sonne, wenn sie nicht sehr nahe am Horizont steht, gilt $AM \approx 1/\cos\theta_z$, wobei θ_z der Zenitwinkel ist. Das AM0-Spektrum außerhalb der Atmosphäre ist nicht identisch mit dem Standardspektrum auf der Erdoberfläche. AM1.5G bezieht sich auf die globale Referenz, die sowohl die direkte als auch die diffuse Komponente enthält, während AM1.5D die Referenz für die direkte Strahlung darstellt.

Die ASTM G173-Referenz stellt eine gemeinsame Vergleichsbasis dar, die unter bestimmten Annahmen bezüglich Atmosphäre und Oberflächenausrichtung berechnet wird. Das Referenzdokument von NREL, das unter der alten NREL-Adresse verfügbar ist, beschreibt eine Oberfläche mit einer Neigung von 37° , spezifizierte Wasserdampf- und Ozonmengen sowie die Luftmasse und die Erzeugung des Spektrums mit dem SMARTS-Modell. Dieses Spektrum ist nicht identisch mit dem tatsächlich auftretenden Licht zu jedem Zeitpunkt und an jedem Ort. [H09]

Eine Gesamtleistung von 1000 W/m^2 bedeutet nicht, dass das Spektrum korrekt ist. Zwei Lampen können die gleiche Gesamtstrahlung abgeben, aber eine kann die obere Tandemzelle stärker und die andere die untere Zelle stärker anregen. Das Einstellen einer Lampe mit einer Silizium-Referenzzelle garantiert nicht, dass ein neues Material mit einer anderen spektralen Empfindlichkeit fehlerfrei gemessen wird. Die erforderliche Korrektur erfolgt, indem das Spektrum der Lampe zusammen mit den spektralen Empfindlichkeiten der Test- und Referenzbauelemente bekannt ist.

Geometrie und reale Umgebung

Die gesamte Strahlung auf einer horizontalen Fläche wird idealisiert durch die Gleichung $GHI = DNI \cos\theta_z + DHI$ beschrieben. DNI bezeichnet die direkte Strahlung auf einer zur Sonne senkrechten Fläche, DHI die diffuse Strahlung, die auf die horizontale Fläche trifft. Beim Übergang zu einem geneigten Modul werden die direkte Komponente und ihre Projektion auf die Oberfläche sowie die Streuung am Himmel und die Reflexion vom Boden separat betrachtet. An einem bewölkten Tag nimmt die Gesamtleistung ab, während der Anteil der diffusen Komponente zunehmen kann. Konzentrierende Optik kann diffuses Licht nicht so effizient nutzen wie Flachfolienmodule; daher bietet die gleiche Wetterdatenbasis nicht den gleichen Produktionsvorteil für beide Technologien.

Wenn sich die Entfernung zur Sonne ändert, nimmt die Leistung im freien Raum ungefähr umgekehrt proportional zum Quadrat der Entfernung ab. Es wäre jedoch

nicht korrekt, dieses einfache Gesetz unverändert auf die reale Situation zu übertragen, da Atmosphäre, Wolken, Aerosole und die Oberflächengeometrie berücksichtigt werden müssen. Das Ziel des spektralen Modells ist es, diese Effekte nicht hinter einer einzigen „Sonnenkonstante“ zu verbergen.

Durchgerechnetes Beispiel: vom Spektralbereich zum Strom

Beispiel zur Veranschaulichung. Betrachten wir ein Band mit einer Breite von 20 nm um 600 nm, wobei $E\lambda = 1,50 \text{ W m}^{-2} \text{ nm}^{-1}$ als konstant angenommen wird. Die Bandleistung beträgt 30 W/m^2 . Unter Verwendung der Annäherung der zentralen Wellenlänge ergibt sich eine Photonenenergie von $3,31 \times 10^{-19} \text{ J}$ und ein Photonenfluss von etwa $9,06 \times 10^{19} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$. Wenn $\text{EQE} = 0,90$, beträgt die Stromdichte etwa $13,07 \text{ A/m}^2$, d. h. $1,307 \text{ mA/cm}^2$. In dieser letzten Umrechnung wird die Gleichung $1 \text{ mA/cm}^2 = 10 \text{ A/m}^2$ verwendet.

Wenn wir die gleiche Leistung von 30 W/m^2 auf 1200 nm verlagern, verdoppelt sich die Anzahl der Photonen. Ein idealer, einzelner Absorber mit einer Bandlücke von 1,12 eV kann jedoch die Photonen mit einer Energie von etwa 1,033 eV bei 1200 nm nicht für interbandartige Übergänge nutzen. Mehr Photonen bedeuten nicht automatisch mehr erzeugten Strom. Es sind sowohl die Photonenenergie als auch die Quantenausbeute erforderlich.

Es ist auch falsch, beim Umwandeln eines Spektrums von der Wellenlängenchse in die Energieachse lediglich die horizontale Achse umzubenennen. Da $E = hc/\lambda$ gilt, ist bei der Umwandlung der spektralen Dichte die Jacobi-Matrix erforderlich: $\phi E = \phi \lambda |d\lambda/dE|$. Das Sortieren einer Liste, die auf der Energieachse von hoher zu niedriger Energie verläuft, in aufsteigender Reihenfolge der Energie hilft dabei, das Integrationszeichen und die Datenanordnung korrekt beizubehalten. Wenn zwei numerische Codes, die mit unterschiedlichen spektralen Einheiten geschrieben sind, denselben Strom liefern, ist dies ein guter Test für die interne Konsistenz.

Das Spektralintegral tatsächlich berechnen

Um die Fläche unter einem Spektrumgraphen zu berechnen, müssen die Einheit der Achse und das Abtastintervall zusammen verwendet werden. Wenn die Wellenlängen nicht in gleichen Intervallen angeordnet sind, ist es falsch, die Strahlungswerte in den Zeilen direkt zu summieren. Die Gesamtleistung und der ideale Kurzschlussstrom werden aus der diskreten Tabelle mithilfe der Trapezregel wie folgt berechnet:

$$G \simeq \sum_i \frac{E_{\lambda,i} + E_{\lambda,i+1}}{2} (\lambda_{i+1} - \lambda_i). \quad (\text{I.3.1})$$

$$J_{\text{sc}} \simeq q \sum_i \frac{\phi_i Q_i + \phi_{i+1} Q_{i+1}}{2} (\lambda_{i+1} - \lambda_i), \quad \phi_i = \frac{E_{\lambda,i} \lambda_i}{hc}. \quad (\text{I.3.2})$$

Hierbei ist Q die externe Quanteneffizienz (EQE) an dem jeweiligen Punkt. In der zweiten Gleichung wird die Wellenlänge in Meter umgerechnet, um die Photonenenergie zu berechnen; in der Integrationsschritt wird jedoch Nanometer verwendet, um mit der Einheit „pro nm“ der spektralen Tabelle übereinzustimmen. Wenn das Ergebnis A/m^2 ist, wird es durch 10 geteilt, um in mA/cm^2 umzurechnen. Das explizite Aufschreiben dieser beiden Umrechnungen verhindert Fehler um den Faktor Tausend oder Zehntausend.

Das Spektrumdiagramm dieser Ausgabe wurde anhand der numerischen Darstellung von ASTM G173 mit 2002 Zeilen aus dem pvlib-Repository neu gezeichnet. Das Trapezintegral des globalen Spektrums ergab $1000,371 W/m^2$. Die geringfügige Abweichung von 1000 wurde beibehalten, statt sie durch eine Neuskalierung der Tabelle zu kaschieren; bei der detaillierten Gleichgewichtsrechnung wurde im Nenner das gleiche Integral verwendet. Diese Wahl stellt sicher, dass die Ergebnisse reproduzierbar sind. Das Integral der außermatmosphärischen Spalte in der Tabelle über den Bereich von 280-4000 nm beträgt etwa $1347,93 W/m^2$; es ist wichtig, das Integral des endlichen Wellenlängenbereichs nicht mit der gesamten Strahlung der Sonne über alle Wellenlängen zu identifizieren. Die Datenquelle und die Dateizusammenfassung werden im Zusatzmaterial des Buches aufbewahrt. [H09] [B10]

Das Diagramm der kumulierten Stromdichte ist besonders aussagekräftig. Ein ideales Bauelement, das alle Photonen bis zur Bandlücke von $E_g = 1,12 eV$ absorbieren kann, erzeugt etwa $43,8 mA/cm^2$; für $E_g = 1,70 eV$ sind es etwa $22,5 mA/cm^2$. Dies sind jedoch keine Materialrekorde. Es handelt sich um die Ergebnisse der Photonenanzählung, die auf vollständiger Absorption, vollständiger Sammlung und der Annahme basieren, dass aus einem Photon ein Elektron erzeugt wird. Die EQE-Kurve einer realen Zelle ist flacher und liegt unterhalb dieser Stufenfunktion.

Warum geben wir einen Verlust in mA/cm^2 an? Wenn eine Reduzierung der Reflexion um 3 % nicht über alle Wellenlängen gleichmäßig erfolgt, können wir nicht von einer Stromzunahme von 3 % ausgehen. Die Zunahme muss mit dem Photonenfluss an der Wellenlänge, bei der die Änderung stattfindet, gewichtet werden:

$$\Delta J_{sc} = q \int \phi_{\lambda} \Delta EQE(\lambda) d\lambda. \quad (I.3.3)$$

Diese Formel verknüpft eine Entscheidung im Bereich des optischen Designs mit einem messbaren elektrischen Ergebnis. Anstatt bei der Gegenüberstellung von zwei Beschichtungen lediglich den durchschnittlichen Reflexionsgrad zu verwenden, wird hier dieser gewichtete Integral verwendet, um zu verhindern, dass der Bereich, den das

menschliche Auge als hell empfindet, die numerische Bewertung übermäßig beeinflusst.

Häufige Fehler und Übungsaufgaben

„Da eine Sonne 1000 W/m^2 hat, ist das Spektrum irrelevant“ ist falsch. Auch die Aussage „Aus dem Lux-Wert kann für jede Lampe mit dem gleichen Koeffizienten W/m^2 berechnet werden“ ist falsch; Lux wird mit der Wellenlängenabhängigkeit der Empfindlichkeit des menschlichen Auges gewichtet. Für die fotovoltaische Messung sind radiometrische und photonische Größen erforderlich.

1. Wenn eine durchschnittliche Bestrahlungsstärke von 800 W/m^2 für 5 Stunden anhält, wie hoch ist die einfallende Energie? **Antwort:** 4 kWh/m^2 ; für die Stromerzeugung sind zusätzlich Wirkungsgrad und andere Verluste zu berücksichtigen.
2. Welche Wellenlänge entspricht idealerweise einer Bandlücke von $1,55 \text{ eV}$? **Antwort:** Ungefähr 800 nm .
3. Wenn in der Tabelle $E\lambda$ anstelle von $\text{W m}^{-2} \text{ nm}^{-1}$ die Einheit $\text{W m}^{-2} \mu\text{m}^{-1}$ verwendet wird, wie ändern sich die Zahlen? **Antwort:** Sie werden mit 1000 multipliziert; das korrekte Integral ergibt die gleiche Gesamtleistung.

Anleitung: Öffnen Sie die spektrale Tabelle [H09] und berechnen Sie zuerst die Gesamtleistung und dann den Photonenfluss. Lesen Sie die Definition des Quantenausbeutegrads in [H24]. Der MIT-Lehrplan bietet eine Lernsequenz, die von der Solarenergiequelle über die Optik bis zur Anregung von Ladungsträgern fortschreitet. [H11]

Das Innenleben des Halbleiters: Bandstrukturen, statistische Betrachtungen und optische Übergänge

Ein Energieband ist kein Streifen im Kristall

Die Elektronen eines einzelnen Atoms können sich nur in bestimmten Energiezuständen befinden. Wenn sich eine große Anzahl von Atomen zu einem geordneten **Kristall** zusammenfügt, interagieren diese Zustände miteinander, wodurch diskrete, eng beieinander liegende Energiezustandsgruppen entstehen. Diese Gruppen nennen wir **Bänder**. Die vertikale Achse eines Banddiagramms stellt nicht die Höhe eines Materials dar, sondern die Elektronenenergie. Das **Valenzband** enthält die besetzten Zustände, die an der chemischen Bindung beteiligt sind; das **Leitungsband** enthält die höheren Energiezustände, die die Bewegung angeregter Elektronen ermöglichen. Die Energiedifferenz zwischen den Rändern dieser beiden Gruppen ist die **Bandlücke**.

Die Bandlücke ist nicht einfach „der Raum zwischen zwei Schichten“. Sie bedeutet, dass in einem idealen Kristall in einem bestimmten Energiebereich keine erlaubten Elektronenzustände vorhanden sind. In einem realen Material können Defekte lokale Zustände in dieser Lücke hinzufügen. Die Anregung eines Elektrons vom Valenzband ins Leitungsband erzeugt ein Elektron und ein Loch. Die Gesamtladung bleibt erhalten: Da ein negativ geladenes Elektron und ein positiv geladenes Loch zusammen entstehen, wird der lichtabsorbierende Kristall nicht mit einer unbegrenzten negativen Ladung gefüllt.

Das Elektronvolt ist die Einheit, die der Energie entspricht, die ein einzelnes Elektron beim Durchlaufen einer Spannungsdifferenz von 1 V gewinnt. **Lehrbeispiel:** In einem idealen Absorber mit einer Bandlücke von 1,1 eV reicht ein Photon mit 1,0 eV nicht aus, um einen Übergang zwischen den Bändern zu verursachen. Ein Photon mit 2,0 eV kann einen Übergang verursachen; jedoch wird nicht die gesamte überschüssige Energie von 0,9 eV an den Anschlüssen als elektrische Energie gewonnen. In einer herkömmlichen Zelle wird die überschüssige Energie der heißen Ladungsträger hauptsächlich in Kristallschwingungen umgewandelt. Diese Relaxation wird als **thermische Relaxation** bezeichnet.

Warum sind die Konzepte „Loch“ und „Dotierung“ nützlich?

Stellen Sie sich eine fast vollständig besetzte Reihe vor, in der es nur einen leeren Platz gibt. Wenn sich die Leute nacheinander auf den leeren Platz setzen, bewegt sich die Leerstelle in die entgegengesetzte Richtung. Ein Loch bietet eine ähnliche Art der „Aufzeichnung“; die tatsächliche Bewegung besteht in der Änderung des Zustands vieler Elektronen. Die Analogie erklärt nicht die Energiebänder, sondern veranschaulicht lediglich die Logik, ein Defizit als Ladungsträger zu betrachten.

Dotierung ist der Prozess, bei dem eine sehr kleine und kontrollierte Menge anderer Atome zu einem Kristall hinzugefügt wird, um die Anzahl der Ladungsträger zu verändern. In Silizium führt eine geeignete Donor-Dotierung dazu, dass Elektronen leicht in das Leitungsband übergehen können: das Material wird **n-Typ**. Eine geeignete Akzeptor-Dotierung erleichtert die Bildung von Löchern im Valenzband: es wird **p-Typ**. Diese Bezeichnungen bedeuten nicht, dass das Material vollständig negativ oder positiv geladen ist; die beweglichen Ladungen werden durch die festen Dotierungsionen in einem großen Volumen annähernd ausgeglichen. Die Mehrheit der Ladungsträger sind in n-Typ-Materialien Elektronen und in p-Typ-Materialien Löcher.

Das **Fermi-Niveau** ist keine Oberfläche, sondern ein Energieparameter, der die Wahrscheinlichkeit der Besetzung von Elektronenzuständen bestimmt. Die **Beweglichkeit** beschreibt, wie stark ein elektrisches Feld die durchschnittliche Driftgeschwindigkeit eines Ladungsträgers beeinflusst. Die **Lebensdauer** bezieht sich auf die Dynamik eines überschüssigen Ladungsträgers, bevor er rekombiniert. Ein sich schnell bewegendes, aber schnell rekombinierendes Ladungsträgerpaar erreicht möglicherweise nicht den Kontakt. In den folgenden Gleichungen werden wir diese beiden unterschiedlichen Materialeigenschaften gemeinsam betrachten.

In statistischen Formeln ist **$\exp(x)$** die x-te Potenz der Eulerschen Zahl e ; e ist ungefähr 2,718. $\exp(0) = 1$ und $\exp(-1)$ ist ungefähr 0,368. Diese Funktion wird verwendet, um zu veranschaulichen, wie schnell die Wahrscheinlichkeit, dass höherenergetische Zustände besetzt werden, abnimmt, wenn die Energiedifferenz zunimmt. **kT** ist das Produkt der Boltzmann-Konstante k mit der absoluten Temperatur T und hat die Einheit der Energie. In der Kelvin-Skala beträgt die Raumtemperatur ungefähr 300 K, kT ist ungefähr 0,026 eV. Die Division einer Energiedifferenz durch kT ergibt eine dimensionslose Zahl; dieses Verhältnis kann in die Exponentialfunktion eingesetzt werden.

Verständniskontrolle: Bedeutet die gleiche Bandlücke, dass es sich um die gleiche Zelle handelt?

Die Bandlücke zweier Materialien kann 1,4 eV betragen; das bedeutet jedoch nicht, dass sie das gleiche Licht in der gleichen Dicke absorbieren. Die Wahrscheinlichkeit des Übergangs, die erforderliche Änderung des Impulses, die Defekte und die Transporteigenschaften sind unterschiedlich. Die Bandlücke ist die erste Schwelle. Für eine gute Zellkonstruktion müssen wir zusätzlich den Absorptionskoeffizienten, die Lebensdauer der Ladungsträger, die selektiven Kontakte und die Stabilität kennen.

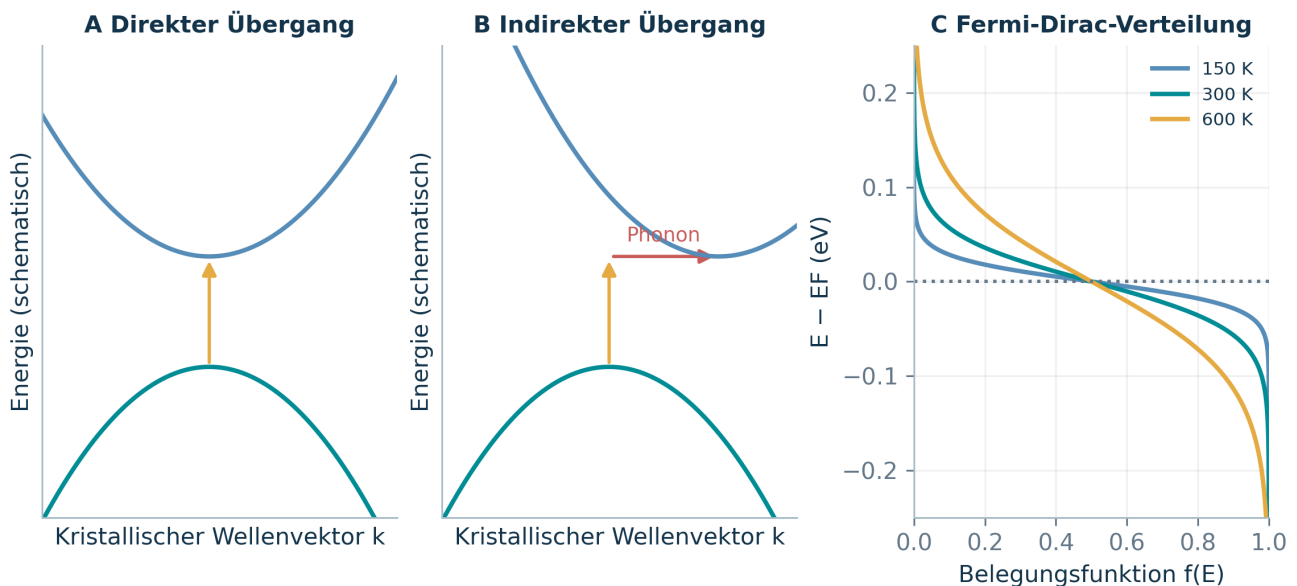


Abbildung 08. Die Bandstruktur und die Besetzungsverteilung sind getrennte Informationen. Die Diagramme A und B sind konzeptionelle Darstellungen eines direkten und eines indirekten Übergangs, der durch Phononen unterstützt wird; es handelt sich nicht um eine reale Bandstruktur eines Materials. Das Diagramm C zeigt die Fermi-Dirac-Verteilung: Die Temperatur erweitert den Übergang der Besetzungsverteilung um das Fermi-Niveau. [H12] [H14]

Vom Atom zum Kristall, vom Kristall zur Bandstruktur

Die Elektronen eines isolierten Atoms besetzen bestimmte Energieniveaus. Wenn sich eine große Anzahl von Atomen zu einem geordneten Festkörper verbinden, führt die Wechselwirkung der atomaren Orbitale zur Bildung einer Vielzahl von eng beieinander liegenden Energiezuständen. Diese betrachten wir als Energiebänder. Die Anzahl der Elektronen, die Symmetrie der Zustände und die Wechselwirkungen innerhalb des Kristalls bestimmen die Füllung der Bänder. Dieses Bild impliziert nicht, dass sich jeder Festkörper wie ein freies Elektronengas verhält; starke Korrelationen, Unordnung und die Elektron-Gitter-Kopplung können den einfachen Bandansatz einschränken.

Die Differenz zwischen der oberen Grenze des Valenzbandes, E_v , und der unteren Grenze des Leitungsbandes, E_c , ist die Bandlücke, $E_g = E_c - E_v$. Die Anregung eines Elektrons zwischen den Bändern erzeugt ein Elektron im Leitungsband und ein Loch im Valenzband. Ein Loch ist „kein reales, positives Elementarteilchen im Material“, sondern eine effektive Beschreibung, die die Ladung und Bewegung des fehlenden

Elektrons im fast vollen Band verfolgt. Die Bandlücke ist die erste Richtlinie dafür, welcher Teil des Lichts genutzt werden kann. [H12]

Es reicht jedoch nicht aus, nur E_g zu kennen. Wie sich die Bandstruktur mit dem Kristallimpuls k verändert, ob die Übergänge stark sind, wie leicht sich die Ladungsträger bewegen und wie sie mit Defekten interagieren, sind allesamt separate Fragen. Zwei Materialien können die gleiche Bandlücke aufweisen, aber dennoch sehr unterschiedliche Absorptionslängen und Ladungsträgerlebensdauern zeigen.

Direkte, indirekte und optisch schwache Übergänge

Bei einem optischen Übergang müssen Energie und Kristallimpuls erhalten bleiben. Aufgrund des geringen Impulses des Photons im Vergleich zu den Elektronen im Festkörper koppelt ein einfacher direkter Übergang Zustände in der Nähe des gleichen k -Wertes. Wenn das Minimum des Leitungsbandes und das Maximum des Valenzbandes an unterschiedlichen k -Punkten liegen, muss möglicherweise eine Gitterschwingung, ein Phonon, in den Prozess einbezogen werden, um einen indirekten Übergang zu ermöglichen. Dies kann insbesondere in der Nähe der Absorptionskante die Wahrscheinlichkeit verringern.

Eine direkte Bandlücke bedeutet nicht zwangsläufig, dass der Übergang sehr stark sein muss. Die Symmetrie der Anfangs- und Endzustände kann das Dipolmatrixelement klein oder sogar unzulässig machen. Im Gegenzug können bei höheren Energien starke Übergänge auftreten. Daher ist das Ergebnis „direktes $E_g = 1,4 \text{ eV}$ “ bei einer berechneten Analyse nicht als vollständige optische Bewertung ohne den Absorptionskoeffizienten $\alpha(E)$ zu betrachten.

In einem einfachen, nicht-reflektierenden Medium mit einem Durchgangspfad wird $I(x) = I_0 \exp(-\alpha x)$ geschrieben. Die Einheit von α ist m^{-1} oder cm^{-1} . Die Absorptionslänge ist $1/\alpha$. In einer echten, mehrschichtigen Zelle löst dieser Ausdruck aufgrund von Interferenz, Texturierung, Reflexion und Rückseitenreflektor nicht das gesamte optische Problem; er ist jedoch nützlich, um die Größenordnung der Dicke zu verstehen. Der Abschnitt über den Absorptionskoeffizienten von PVEducation zeigt die Bedeutung der Abhängigkeit von der Wellenlänge und der Materialart. [H13]

Die Ladungsträgerdichte ist ein Besetzungsproblem

Im Gleichgewichtszustand wird die Wahrscheinlichkeit, dass ein elektronischer Zustand besetzt ist, durch die Fermi-Dirac-Verteilung beschrieben: $f(E) = 1/[1 + \exp((E - E_F)/(kBT))]$. E_F ist das Fermi-Niveau, d. h. das elektronische chemische Potenzial. Betrachten Sie E_F nicht als die einzelne Energie, bei der sich alle Elektronen befinden; es ist die Besetzungsgröße der Verteilung. Die Dichte im Leitungsband ist das Integral der Zustandsdichte multipliziert mit $f(E)$.

Im nicht-degenerierten Grenzfall kann die folgende Gleichung verwendet werden: $n = N_c \exp[-(E_c - E_F)/(kBT)]$ und $p = N_v \exp[-(E_F - E_v)/(kBT)]$. N_c und N_v sind die

effektiven Zustandsdichten des Leitungs- bzw. Valenzbandes und haben die gleiche Einheit wie die Ladungsträgerdichte. Dieser Ansatz erfordert besondere Aufmerksamkeit in der Nähe der Bandkanten oder bei sehr hoher Dotierung. Die Gleichgewichtsbeziehung $n_p = n_i^2$ verknüpft die Konzentrationen von Elektronen und Löchern über die intrinsische Ladungsträgerdichte n_i . [H14]

Donor-Dotierungen erhöhen unter geeigneten Bedingungen die Elektronenzahl, während Akzeptor-Dotierungen die Lochkonzentration erhöhen. Ein n-Typ-Halbleiter ist nicht vollständig negativ geladen; die Ladung der freien Elektronen wird durch die positive Ladung der ionisierten Donoren ausgeglichen. Die Dotierstoffkonzentration und die Konzentration der freien Ladungsträger sind nicht immer gleich.

Unvollständige Ionisierung, die gegenseitige Kompensation von Dotierstoffen unterschiedlicher Art und Defekte, die das Fermi-Niveau fixieren, können dieses Gleichgewicht stören.

Effektive Masse, Beweglichkeit und Exziton

Am Bandrand kann die effektive Masse durch die nahezu parabolische Verteilung $E(k) \approx E_c + \hbar^2 k^2 / (2m)$ definiert werden. Mit zunehmender Krümmung nimmt m ab. In anisotropen Kristallen kann anstelle einer einzelnen Zahl ein Tensor erforderlich sein. Die effektive Masse bestimmt nicht allein die Ladungsträgerbeweglichkeit: In einem einfachen Modell gilt $\mu = q\tau m / m^*$, wobei τm die Impulsrelaxationszeit ist. Auch wenn leichte Ladungsträger sehr stark gestreut werden, kann eine geringe Beweglichkeit auftreten. Die Lebensdauer τ und die Impulsrelaxationszeit τm sind nicht von gleicher Größenordnung.

Elektronen und Löcher können durch die Coulomb-Anziehung ein Exziton bilden. Die Bindungsenergie beeinflusst die Bedingungen, unter denen eine optische Anregung in einen freien Ladungsträger übergeht. Eine hohe dielektrische Abschirmung und eine geringe reduzierte effektive Masse führen in einem einfachen, wasserstoffähnlichen Modell zu einer schwächeren Bindung. In molekularen Festkörpern oder in Systemen mit niedriger Dimensionalität kann sich dieses Bild ändern. Der Beginn der optischen Absorption, die Quasipartikel-Bandlücke und die DFT-Eigenwertdifferenz sollten nicht als dieselbe Größe betrachtet werden.

Betrachtetes Beispiel: Zwei separate Materialfilter

Beispiel zur Veranschaulichung. Die Reflexion wird vernachlässigt, und das Ziel ist eine Absorption von 90 % bei einem einzigen Durchgang. Aus der Bedingung $A = 1 - \exp(-\alpha d) = 0,90$ ergibt sich $d = \ln(10)/\alpha$. Für $\alpha = 10^5 \text{ cm}^{-1}$ ist $d \approx 0,230 \text{ }\mu\text{m}$; für $\alpha = 10^3 \text{ cm}^{-1}$ ist $d \approx 23,0 \text{ }\mu\text{m}$ erforderlich. Allein ein um den Faktor 100 unterschiedlicher Absorptionskoeffizient erfordert eine um den Faktor 100 unterschiedliche Dicke. Dieses Ergebnis ist wichtig für die Dünnschichtfertigung, den Materialverbrauch und die Ladungsträgersammelstrecke.

Als ein zweites Gedankenexperiment sei angenommen, dass $n_i = 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ und die vollständig ionisierte Nettoakzeptorkonzentration 10^{16} cm^{-3} beträgt. In der Annahme einer geringen Injektion und eines nicht-degenerierten Gleichgewichtszustands gilt: $p \approx 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $n \approx n_i^2/p = 10^4 \text{ cm}^{-3}$. Obwohl die Konzentration der wenigen vorhandenen Minoritätselektronen gering ist, kann sie unter Beleuchtung entscheidend für den sammelbaren Strom und die Rekombination sein. Diese Zahlen werden nicht als genaue Werte für eine bestimmte Siliziumprobe bei einer bestimmten Temperatur verwendet, sondern als Beispiel für eine Berechnung mit klaren Annahmen.

Von der Zustandsdichte zur Ladungsträgerdichte

In der Darstellung des Energiebanddiagramms stellt jede Linie nicht ein einzelnes Elektron dar. In einem großen Kristall gibt es eine große Anzahl von erlaubten Zuständen; die Zustandsdichte $g(E)$ gibt die Anzahl der Zustände pro Volumeneinheit und pro Energieintervall an. In einem dreidimensionalen parabolischen Band nimmt $g(E)$ mit der Quadratwurzel der Entfernung vom Bandrand zu. Die Anzahl der Ladungsträger ist die Summe der Produkte aus der Anzahl verfügbarer Zustände und deren Besetzungswahrscheinlichkeit:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} g_c(E) f(E) dE. \quad (1.4.1)$$

Wenn die Differenz zwischen dem Fermi-Niveau und dem Leitungsband größer als einige $k_B T$ ist, reduziert sich $f(E)$ auf die Boltzmann-Exponentialform. Das parabolische Bandintegral wird über die effektive Zustandsdichte N_c aufsummiert, und es ergibt sich das folgende Ergebnis. Für ein einfaches, isotropes, einzelnes Tal ist die Spin-Entartung berücksichtigt; mehrere Täler oder Anisotropie verändern die Definition der effektiven Masse.

$$N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_e^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2}, \quad n = N_c \exp \left[-\frac{E_c - E_F}{k_B T} \right]. \quad (1.4.2)$$

Für die Löcher im Valenzband ergibt sich eine ähnliche Beziehung, die N_v und p liefert. Wenn man beide Ausdrücke multipliziert, verschwindet das Fermi-Niveau:

$$np = N_c N_v \exp \left(-\frac{E_g}{k_B T} \right) = n_i^2. \quad (1.4.3)$$

Diese Ableitung zeigt, woher das Gesetz der Massenwirkung stammt. Sie erklärt auch, warum die Temperatur eine Rolle spielt: N_c und N_v ändern sich ungefähr proportional zu $T^{3/2}$, während die Bandlücke in den exponentiellen Term eintritt. Wenn eine stark degenerierte Dotierung, eine Verkleinerung der Bandlücke oder eine starke Störung vorliegt, muss der Anwendungsbereich dieser vereinfachten Ausdrücke neu

bewertet werden. Der Satz „Wenn die Dotierkonzentration verdoppelt wird, verdoppelt sich auch die Konzentration der freien Ladungsträger“ ist nicht unter allen Bedingungen korrekt.

Zwei Zeitskalen: Beweglichkeit und Lebensdauer

Die Beweglichkeit bezieht sich darauf, wie schnell sich ein Ladungsträger unter einem angelegten Feld bewegen kann. Die Lebensdauer bezieht sich darauf, wie lange eine überschüssige Ladungsträgerpopulation aufgrund von Rekombination existiert. Ein Elektron, das seinen Impuls verliert, muss nicht unbedingt rekombiniert haben; es kann lediglich seine Richtung oder Geschwindigkeit geändert haben. Daher werden hohe Beweglichkeit und lange Lebensdauer mit unterschiedlichen experimentellen Methoden untersucht.

Wenn wir die Einstein-Beziehung in die Diffusionslänge einsetzen, erhalten wir:

$$L = \sqrt{D\tau} = \sqrt{\mu \frac{k_B T}{q} \tau}. \quad (1.4.4)$$

Wenn wir bei 298,15 K $\mu = 10 \text{ cm}^2/(\text{V s})$ und $\tau = 1 \text{ } \mu\text{s}$ wählen, erhalten wir $D = 0,257 \text{ cm}^2/\text{s}$ und $L = 5,07 \text{ } \mu\text{m}$. Eine Vervierfachung der Beweglichkeit führt nur zu einer Verdopplung von L ; eine Vervierfachung der Lebensdauer ergibt das gleiche Ergebnis. Die Kontakt-, Material- und Temperaturabhängigkeiten dieser beiden Maßnahmen sind jedoch unterschiedlich. Für ein Forschungsprogramm ist nicht nur das Wachstum von L von Bedeutung, sondern auch, durch welche Reduzierung von Verlusten dies erreicht wird.

Die Ableitungstheorie: Die Bandlücke beeinflusst die Photonen-Schwellenenergie, die Mobilität beeinflusst den Ladungsträgertransport, die Lebensdauer beeinflusst die Rekombinationsverluste, und die dielektrische Antwort beeinflusst die elektrostatischen Wechselwirkungen. Eine einzelne „gute Material“ besitzt nicht alle vier dieser Eigenschaften gleichzeitig.

Streuung, Lebensdauer und Geometrie sollten gemeinsam betrachtet werden

Streuung ist die Änderung der Bewegungsrichtung und des Impulses eines sich bewegenden Ladungsträgers aufgrund von Kristallschwingungen, Defekten oder anderen Wechselwirkungen. Bei jeder Streuung muss sich das Elektron nicht rekombinieren. Daher sind die Impulsrelaxationszeit, die die Beweglichkeit begrenzt, und die Lebensdauer eines zusätzlichen Ladungsträgers vor der Rekombination getrennt. Die erste bestimmt, wie leicht sich die Bewegung vollzieht, die zweite, wie viel Zeit für die Sammlung zur Verfügung steht.

Die Geometrie umfasst die Filmdicke, die lateralen Abmessungen und den Abstand zu den Kontakten. Bei zwei aus dem gleichen Material hergestellten Bauelementen

können die Sammelstrecken unterschiedlich sein. Beispielsweise ist eine Diffusionslänge von 10 Mikrometern für das Erreichen eines Kontakts in einer Entfernung von 1 Mikrometer geeignet, bietet aber nicht die gleiche Zuverlässigkeit für eine Entfernung von 100 Mikrometern. Die Lebensdauer allein sagt nichts über die Qualität des Bauelements aus; Mobilität, Diffusion und die erforderliche Weglänge müssen zusammen betrachtet werden.

Häufige Fehler und Übungsaufgaben

„Wenn die Bandlücke korrekt ist, wurde ein geeignetes PV-Material gefunden“ ist eine falsche Schlussfolgerung. Ebenso kann man nicht sagen: „Eine hohe dielektrische Konstante macht alle Defekte harmlos“; die Defektenergie, die Einfangquerschnittsfläche, die Gitterrelaxation und die Konzentration müssen ebenfalls berücksichtigt werden. Die berechneten Bandkanten stellen nicht automatisch die tatsächliche chemische Zusammensetzung und die Grenzflächen nach der Herstellung dar.

1. Für $\alpha = 2 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$, welche Absorptionslänge entspricht $1/e$? **Antwort:** 0,50 μm .

2. Warum können zwei Materialien mit der gleichen Bandlücke unterschiedliche J_{sc} -Werte aufweisen? **Antwort:** Der Absorptionskoeffizient, die Dicke, die optischen Verluste und die Wahrscheinlichkeit der Ladungsträgersammlung können unterschiedlich sein.

3. Warum kann ein n-Typ-Kristall makroskopisch neutral sein? **Antwort:** Die freien Elektronen gleichen die positive Ladung der ionisierten Donoratome aus.

Anleitung: Lesen Sie die Abschnitte „Bandlücke [H12]“, „Absorption [H13]“ und „Gleichgewichtskonzentration [H14]“ durch und notieren Sie jeweils die Einheit der jeweiligen Formel. Erstellen Sie anschließend in separaten Spalten eine Liste, die angibt, welche Informationen die Bandstruktur bei der Materialanalyse liefert und welche Experimente noch erforderlich sind.

Übergang und selektiver Kontakt: Wie wird die durch Licht erzeugte Ladung in nutzbare Energie umgewandelt?

Wie entsteht ein Übergang?

Betrachten wir eine n-dotierte Region, in der die Elektronendichte hoch ist, und eine p-dotierte Region, in der die Lochdichte hoch ist, und bringen wir diese in einem einzigen Kristall in räumliche Nähe zueinander. Die **Dichteunterschiede** bestimmen das Nettoergebnis der zufälligen Bewegung der Ladungsträger: Elektronen diffundieren zunächst von der n-Region zur p-Region, während Löcher sich in die entgegengesetzte Richtung bewegen. Diese Ausbreitung wird als **Diffusion** bezeichnet. Die Ausbreitung von Parfüm von einem Bereich hoher Konzentration zu einem Bereich geringer Konzentration in einem Raum ist ein ähnliches statistisches Konzept; auch ein elektrisches Feld wirkt auf die Elektronen.

Wenn sich die beweglichen Ladungsträger vom Übergangsbereich entfernen, bleiben ionisierte Dotierstoffe zurück, die sich nicht verschieben können. Die Donor-Ionen auf der n-Seite sind positiv geladen, die Akzeptor-Ionen auf der p-Seite sind negativ geladen. Dadurch entsteht ein **elektrisches Feld**, das von der n-Seite zur p-Seite gerichtet ist. Das Feld übt eine Kraft auf die Elektronen in entgegengesetzter Richtung aus. Wenn die Tendenz der Ladungsträgerdichte, sich auszubreiten, mit der Tendenz des Feldes, sie zu verschieben, im Gleichgewicht ist, ist der Nettostrom im Dunkeln null. Die Bewegung hört nie auf; die entgegengesetzten durchschnittlichen Ströme gleichen sich aus.

In dieser Region wird der Begriff „**Verarmungszone**“ verwendet, da die Konzentration der Majoritätsladungsträger abnimmt. Die Region ist nicht vollständig von Atomen befreit. Das Atomgitter und die festen Ladungen sind dort vorhanden. Das **eingebaute Potenzial** ist die elektrostatische Potenzialdifferenz innerhalb des **Übergangs**; das Potenzial ist mit der Energie pro Ladungseinheit verknüpft. Wir sollten dies nicht mit der Spannung einer Batterie verwechseln, bei der wir im Dunkeln ein Voltmeter an beide Enden anschließen und kontinuierlich Energie beziehen könnten. Wenn alle Kontakte und Energiedifferenzen im Gleichgewicht berücksichtigt werden, entsteht keine kostenlose Energie.

Wie verändert die Beleuchtung das Gleichgewicht?

Licht erzeugt überschüssige Elektronen und Löcher. Das elektrische Feld in der Umgebung des Übergangs und die Diffusion in anderen Bereichen helfen diesen Ladungsträgern, die jeweils passenden selektiven Kontakte zu erreichen. Wenn Löcher am Elektronenkontakt oder Elektronen am Lochkontakt leicht verloren gehen können, wird die Energieumwandlung beeinträchtigt. Deshalb macht eine sehr gute elektrische Leitfähigkeit ein Metall für sich allein noch nicht zu einem guten Solarzellenkontakt. Ladung muss mit geringem Widerstand übertragen und der unerwünschte Ladungsträgertyp zugleich blockiert werden.

Im Leerlauf ist der äußere Stromkreis unterbrochen; die Ladungsakkumulation an den Anschlüssen erzeugt eine Spannung, aber im stationären Zustand rekombinieren die überschüssigen erzeugten Ladungsträger innerhalb des Bauelements. **Wenn eine Last angeschlossen ist**, übertragen einige der Ladungsträger Energie im äußeren Stromkreis. Die Zelle entlädt ihren Elektronenvorrat nicht. Der Rückweg über den äußeren Stromkreis, die Ladungserhaltung und die kontinuierliche Energiezufuhr durch Licht sorgen gemeinsam für die Aufrechterhaltung des Kreislaufs.

Unter Lichteinwirkung lassen sich die Elektronen- und Loch-Ansammlungen möglicherweise nicht mit einem einzigen Gleichgewichtsparameter beschreiben. Wir verwenden für jede von ihnen einen separaten **Quasi-Fermi-Niveau**. Ihre Trennung deutet darauf hin, dass in den Ladungsträgern freie Energie vorhanden ist, die in elektrische Arbeit umgewandelt werden kann. Die an den Enden gemessene Spannung kann diese Trennung mit idealen selektiven Kontakten verfolgen; schlechte Grenzflächen und Transportverluste führen zu zusätzlichen Differenzen. Die folgenden erweiterten Gleichungen werden wir verwenden, um die Größenordnung dieser physikalischen Beschreibung zu berechnen.

Das elektrische Feld und das Vorzeichen einer Ableitung lesen

In einem Diagramm ist die horizontale Achse die x-Position, die vertikale Achse das Potenzial, und die Steigung ist das Verhältnis der Potentialdifferenz zwischen zwei nahe beieinander liegenden Punkten zur Entfernung. Die **Ableitung** beschreibt den Grenzwert dieser Steigung für ein sehr kleines Intervall. Das elektrische Feld ist mit der negativen Ableitung des Potentials nach der Position verknüpft; das Minuszeichen gibt an, dass das Feld in Richtung des abnehmenden Potentials zeigt. **Beispiel:** Wenn das Potenzial über eine Strecke von $1\ \mu\text{m}$ um $0,1\ \text{V}$ ansteigt, beträgt das durchschnittliche Feld $-0,1\ \text{V}/\mu\text{m}$, d. h. $-100.000\ \text{V/m}$. Die Poisson-Gleichung verknüpft diese Feldstärke mit der lokalen Ladungsdichte und beschreibt, wie sich das Feld mit der Position ändert. Das Symbol ∂ bezeichnet die **partielle Ableitung**, bei der bei mehreren Variablen alle anderen konstant gehalten werden und nur die Änderung in Bezug auf die angegebene Variable betrachtet wird.

Verständniskontrolle: Ist ein stärkeres Feld immer besser?

Wenn die durch Licht erzeugten Ladungsträger in einiger Entfernung von der Übergangszone entstehen, müssen sie möglicherweise zunächst durch Diffusion in den entsprechenden Bereich gelangen. Allein die Verstärkung des elektrischen Feldes am Übergang beseitigt nicht automatisch die negativen Auswirkungen einer kurzen Lebensdauer oder einer schlechten Oberfläche. Es ist notwendig, die Fragen „Wo entstehen die Ladungsträger, welche Strecke legen sie zurück und wie lange dauert es, bis sie verschwinden?“ gemeinsam zu beantworten.

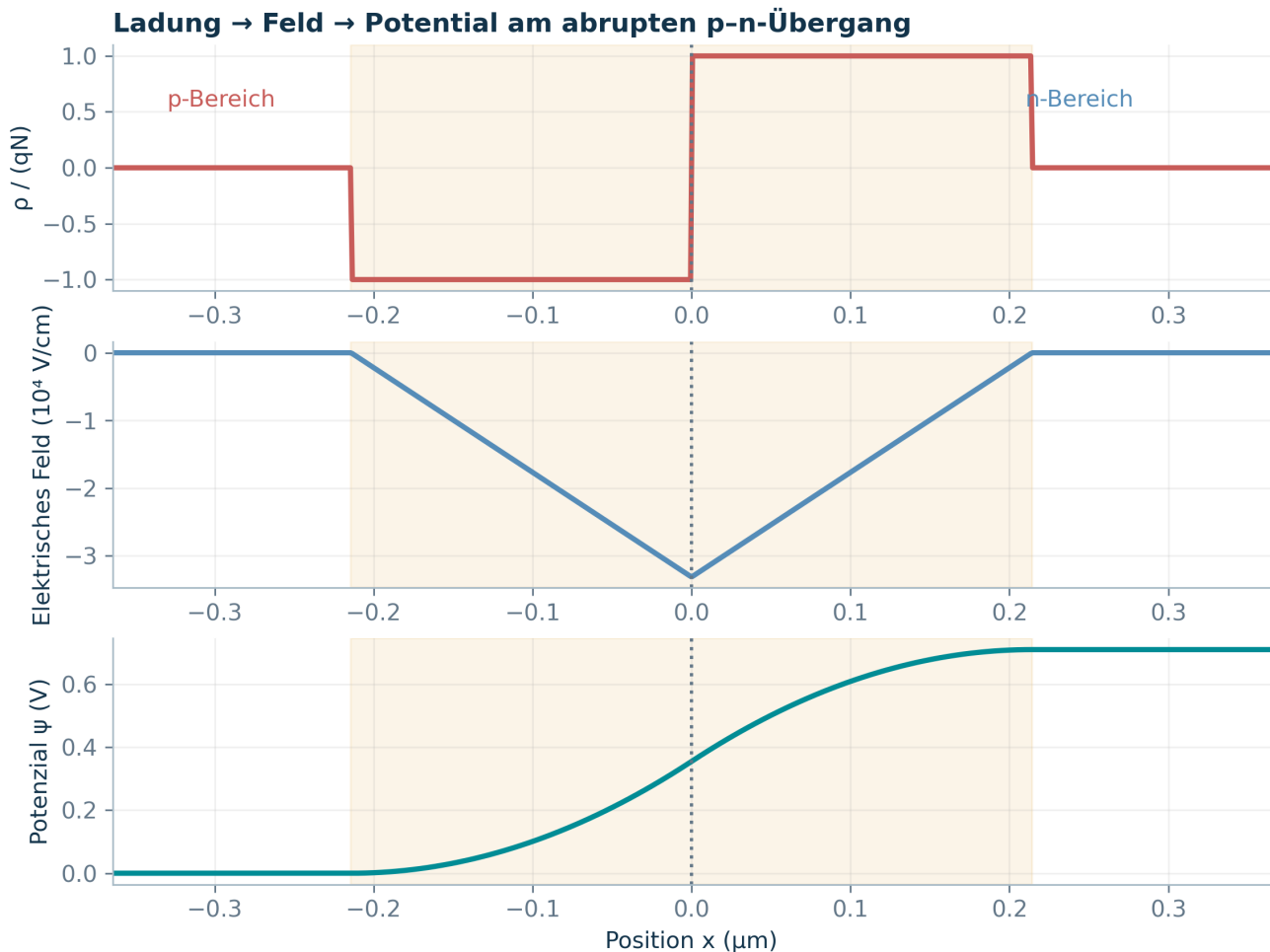


Abbildung 09. Ladung, Feld und Potential sind drei Ansichten derselben Lösung. Für einen abrupten Übergang mit gleich hoher Dotierung auf beiden Seiten wurden $N_a = N_d = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $n_i = 10^{10} \text{ cm}^{-3}$, $\epsilon_r = 11,7$ und $T = 298,15 \text{ K}$ verwendet. Der gelbe Bereich ist die Verarmungszone. Das Potential ist das negative Integral des elektrischen Feldes. Die Herleitung folgt später in diesem Kapitel. [H15]

Warum ist ein beleuchteter Kristall nicht immer eine Solarzelle?

Wenn wir einen homogenen Halbleiter dem Licht aussetzen, können wir Elektronen und Löcher erzeugen. Das zufällige Verbinden von Metallkontakten an beiden Enden führt jedoch nicht automatisch zu einer nützlichen Photospannung. Eine Struktur, in der Elektronen und Löcher an beiden Enden mit gleicher Leichtigkeit verloren gehen können, kann die erzeugte freie Energie durch Rekombination an den Kontakten verbrauchen. Ein Ende sollte Elektronen bevorzugt sammeln, das andere Löcher. Diese Selektivität wird durch unterschiedliche Ladungsträgerleitfähigkeiten und geeignete Grenzflächeneigenschaften erreicht.

Würfel, Cuevas und Würfel zeigen in ihrer selektiven Ladungsträgeranalyse, dass die Erklärung einer Solarzelle allein durch das Konzept, dass „ein inneres elektrisches Feld Elektronen und Löcher trennt“, unvollständig ist. Es ist allgemeiner, den Transport durch quasi-Fermi-Energiegradienten und die Selektivität durch unterschiedliche Transportwege der beiden Ladungsträger zu betrachten. [H21] Dieser Ansatz ermöglicht es, die Architekturen von p-n-, p-i-n-, Heteroübergangs- und passivierenden Kontakten in einer gemeinsamen Sprache zu betrachten.

Wie wird ein p-n-Übergang im Gleichgewichtszustand hergestellt?

Wenn die p- und n-Bereiche in Kontakt treten, führen die Konzentrationsunterschiede zu einer Diffusion von Elektronen und Löchern. Durch die Trennung eines Teils der beweglichen Ladungsträger bleiben ionisierte Dotierstoffe in der Raumladungszone zurück. Das entstehende elektrische Feld erzeugt einen Driftstrom, der der Diffusion entgegenwirkt. Im thermischen Gleichgewicht ist der Gesamtstrom Null, aber die mikroskopische Bewegung setzt sich nicht fort. Die Drift- und Diffusionsströme gleichen sich aus.

Für einen einfachen, abrupten, nicht-degenerierten Homoübergang gilt für das innere Potenzial: $V_{bi} = (kBT/q) \ln(NaNd/n_i^2)$. Dieses Potenzial ist keine versteckte Batterie, die bei Anschluss an ein Voltmeter kostenlos Energie liefert. Die Gleichgewichtskontaktpotentiale und ein einzelnes Fermi-Niveau ermöglichen keine Netto-Leistungsabgabe in einem geschlossenen Stromkreis. Shockleys Übergangstheorie von 1949 systematisierte die Beziehung zwischen der Potenzialverteilung und der Diffusion von Minoritätsladungsträgern im Zusammenhang mit dem Gleichrichterverhalten. [H15]

Im Rahmen der Verarmungszonen-Betrachtung werden die beweglichen Ladungsträger vernachlässigt, und die Poisson-Gleichung wird gelöst. Die Gesamtbreite beträgt $W \approx \sqrt{[(2\epsilon_s/q)(1/Na + 1/Nd)(V_{bi} - V)]}$, wobei V die Durchlassspannung der pn-Übergangsdioden ist. ϵ_s ist die absolute dielektrische Permittivität des Halbleiters. Wenn Na und Nd in m^{-3} angegeben sind, sollte ϵ_s in F/m angegeben werden. Die

Gleichung für das Netto-Raumladungsungleichgewicht lautet $n_a x_p = n_d x_n$, was zeigt, dass die Verarmungszone auf der Seite mit der geringeren Dotierung breiter ist.

Elektrisches Feld, Diffusions- und Kontinuitätsgleichungen

In einer Dimension haben die konventionellen Stromdichten die Form $J_n = q\mu_n nE + qD_n \frac{dn}{dx}$ und $J_p = q\mu_p pE - qD_p \frac{dp}{dx}$. Hierbei ist E das elektrische Feld in V/m, die Beweglichkeit μ in $\text{m}^2/(\text{V s})$ und der Diffusionskoeffizient D in m^2/s . Die Richtung des Elektronen-Teilchenflusses unterscheidet sich von der Richtung des konventionellen Elektronenstroms; ein Großteil der auftretenden Vorzeichenverwechslungen ergibt sich daraus. Im nicht-degenerierten Gleichgewicht gilt die Einstein-Beziehung $D/\mu = kBT/q$. Der Zusammenhang zwischen Diffusion und Dichtegradient wird in dem entsprechenden Abschnitt von PVEducation Schritt für Schritt behandelt. [H16]

Die Kontinuitätsgleichungen verbinden die lokale Erzeugung G und die Rekombination R mit der Ladungsträgerbilanz. Sie lauten: $\partial n/\partial t = (1/q)\partial J_n/\partial x + G - R$; $\partial p/\partial t = -(1/q)\partial J_p/\partial x + G - R$. Die Poisson-Gleichung verknüpft die Ladung mit dem elektrischen Feld durch $dE/dx = \rho/\epsilon_s$. Im stationären Zustand sind die zeitlichen Ableitungen Null. Dennoch muss nicht an jeder Position $G = R$ gelten; die Differenz wird durch die Änderung des Transportstroms ausgeglichen. Über die gesamte Zelle muss eine Bilanz der Erzeugung, der Rekombination und des abgeführten Stroms erstellt werden.

Diese drei Gleichungen allein stellen kein vollständiges Modell dar. Die Randbedingungen an den Kontakten, die mobilen Ionen, die Grenzflächenladungen, die Belegung der Fallen, das optische Erzeugungsprofil und die Temperatur müssen ebenfalls angegeben werden. Die Konvergenz des numerischen Solvers beweist nicht, dass die physikalischen Parameter korrekt gewählt wurden. Zuerst müssen die analytischen Grenzen, die Ladungserhaltung und das Erreichen des Dunkelgleichgewichts überprüft werden.

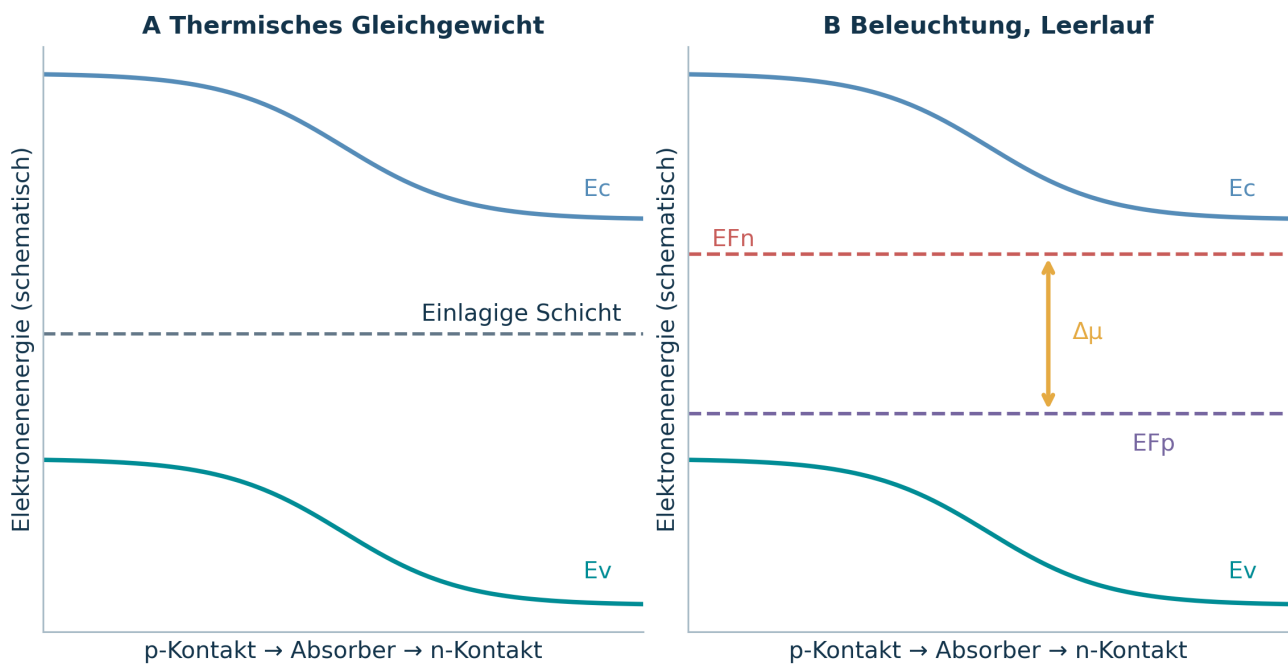


Abbildung 10. Ein einziges Fermi-Niveau im Gleichgewicht; getrennte Quasi-Fermi-Niveaus im idealen beleuchteten Leerlaufgrenzfall. Panel B zeigt einen konzeptionellen Grenzfall mit flachen Quasi-Fermi-Niveaus, kein selbstkonsistent gelöstes Poisson-Profil. $\Delta\mu$ beschreibt das nutzbare chemische Potential des Ladungsträgerpaares. [H21] [H27]

Quasi-Fermi-Aufspaltung und Klemmenspannung

Unter Beleuchtung können die Elektron- und Loch-Populationsdichten durch separate quasi-Fermi-Niveaus, E_{Fn} und E_{Fp} , beschrieben werden. Die lokale Aufspaltung $\Delta\mu = E_{Fn} - E_{Fp}$ stellt das verfügbare chemische Potenzial des Ladungsträgerpaares dar. In einem nicht-degenerierten lokalen Gleichgewicht gilt $n_p = n_i^2 \exp(\Delta\mu/kBT)$. Ideale, selektive und verlustfreie Kontakte spiegeln diese Aufspaltung unter geeigneten Bedingungen in der externen Schaltung als qV wider. Aufgrund von Rekombination oder Transportverlusten an realen Grenzflächen bedeutet eine hohe Aufspaltung innerhalb des Materials jedoch nicht, dass eine gleich große Leerlaufspannung V_{oc} erreicht wird.

Ein guter Kontakt erfüllt zwei Aufgaben gleichzeitig: Er minimiert den Durchgangswiderstand für die gewünschten Ladungsträger und begrenzt den Verlust der gegenteiligen Ladungsträger. Eine isolierende Schicht kann die Oberfläche perfekt passivieren und gleichzeitig den Ladungsträgertransport behindern. Ein sehr leitfähiges Metall kann Elektronen und Löcher schnell rekombinieren. Daher sollten bei der Kontaktforschung ein niedriger Kontaktwiderstand und eine geringe Rekombinationsrate auf derselben Probe bewertet werden.

Durchgerechnetes Beispiel: Verarmungszonenbreite und Sammelstrecke

Beispiel zur Veranschaulichung. Für 298,15 K sei $kBT/q \approx 25,693$ mV. Wenn $N_a = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $N_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ und $n_i = 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ verwendet werden, ergibt sich $V_{bi} \approx 0,828$ V. Mit $\epsilon_r = 11,7$ und $\epsilon_0 = 8,854 \times 10^{-14} \text{ F/cm}$ beträgt die Breite $W \approx 0,329 \text{ }\mu\text{m}$ bei angelegter Nullspannung. Da $x_p/x_n = N_d/N_a = 100$, befindet sich fast die gesamte Breite auf der p-Seite. Die Zahlen in diesem Beispiel sind lediglich Ergebnisse des angegebenen Modells.

Betrachten wir nun eine Zelle mit einer Dicke von $150 \text{ }\mu\text{m}$. Die Tatsache, dass die Verarmungszone $0,329 \text{ }\mu\text{m}$ beträgt, bedeutet nicht, dass alle Ladungsträger, die in der verbleibenden Dicke entstehen, verloren gehen. Ausreichend langlebige Minoritätsladungsträger können durch Diffusion den Übergang erreichen. Zum Beispiel ergibt sich für $D = 10 \text{ cm}^2/\text{s}$ und $\tau = 100 \text{ }\mu\text{s}$: $L = \sqrt{D\tau} \approx 316 \text{ }\mu\text{m}$. Die Reduzierung der Zellphysik auf lediglich die Region mit starkem Feld würde diesen wichtigen Sammelmechanismus übersehen.

Die Poisson-Gleichung an einem Übergang lösen

In einem abrupten homo-Übergang wählen wir die p-Seite als $x < 0$ und die n-Seite als $x > 0$. Im Rahmen der vollständigen Ionisierung und der Annäherung der Verarmungszone werden die beweglichen Ladungen vernachlässigt. Auf der p-Seite ist die verbleibende Akzeptorladung $-qN_a$, auf der n-Seite die Donorladung $+qN_d$. In den weit entfernten, neutralen Bereichen setzen wir das elektrische Feld auf Null und integrieren die Gleichung $dE/dx = \rho/\epsilon$ auf beiden Seiten separat:

$$E_p(x) = -\frac{qN_a}{\epsilon_s}(x + x_p), \quad -x_p \leq x \leq 0. \quad (I.5.1)$$

$$E_n(x) = \frac{qN_d}{\epsilon_s}(x - x_n), \quad 0 \leq x \leq x_n. \quad (I.5.2)$$

An der Übergangsstelle ergibt sich die Stetigkeit des Feldes in der Form $N_a x_p = N_d x_n$. Dies ist nicht nur eine Gleichung, die auswendig gelernt werden muss: Sie drückt aus, dass die Flächen unter den negativen und positiven Profilen der ortsfesten Ladung gleich groß sein müssen. Die Summe der Flächen der beiden Dreiecke im Diagramm des elektrischen Feldes ist die Potentialdifferenz; da $E = -d\psi/dx$ für ψ gilt, muss das Vorzeichen beibehalten werden.

$$V_{bi} - V = \frac{q}{2\epsilon_s} (N_a x_p^2 + N_d x_n^2). \quad (I.5.3)$$

Unter Verwendung der Ladungsbilanz und der Gleichung $W = x_p + x_n$ ergibt sich die zuvor angegebene Formel für die Verarmungsbreite. Für ein symmetrisch dotiertes Beispiel mit $N_a = N_d = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $n_i = 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ und $\epsilon_r = 11,7$ ergibt sich $V_{bi} = 0,710 \text{ V}$ und $W = 0,428 \mu\text{m}$. Das elektrische Feld sinkt in der Mitte auf etwa $-3,3 \times 10^{-4} \text{ V/cm}$. Wenn Sie die drei Diagramme der Abbildung nacheinander betrachten, sehen Sie, wie das rechteckige Ladungsdichteprofil ein dreieckiges elektrisches Feld und diese wiederum ein gekrümmtes Potenzial erzeugt. Das in der Abbildung dargestellte, symmetrisch dotierte Beispiel wurde speziell ausgewählt, um sich von dem vorherigen asymmetrischen, numerischen Beispiel zu unterscheiden.

Herleitung der Sammelwahrscheinlichkeit

Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Minderheitsladungsträger, der sich weit vom Übergang entfernt bildet, den Übergang erreicht, bezeichnen wir mit $P_{col}(x)$. In einem halb-unendlichen, neutralen Bereich mit konstanter Diffusionskonstante, konstanter Lebensdauer und vernachlässigtem elektrischem Feld ist diese Wahrscheinlichkeit durch die folgende Gleichung gegeben: $D P_{col}'' - P_{col}/\tau = 0$, mit den Randbedingungen $P_{col}(0) = 1$ und $P_{col} = 0$ für unendlich.

$$P_{col}(x) = \exp(-x/L), \quad L = \sqrt{D\tau}. \quad (I.5.4)$$

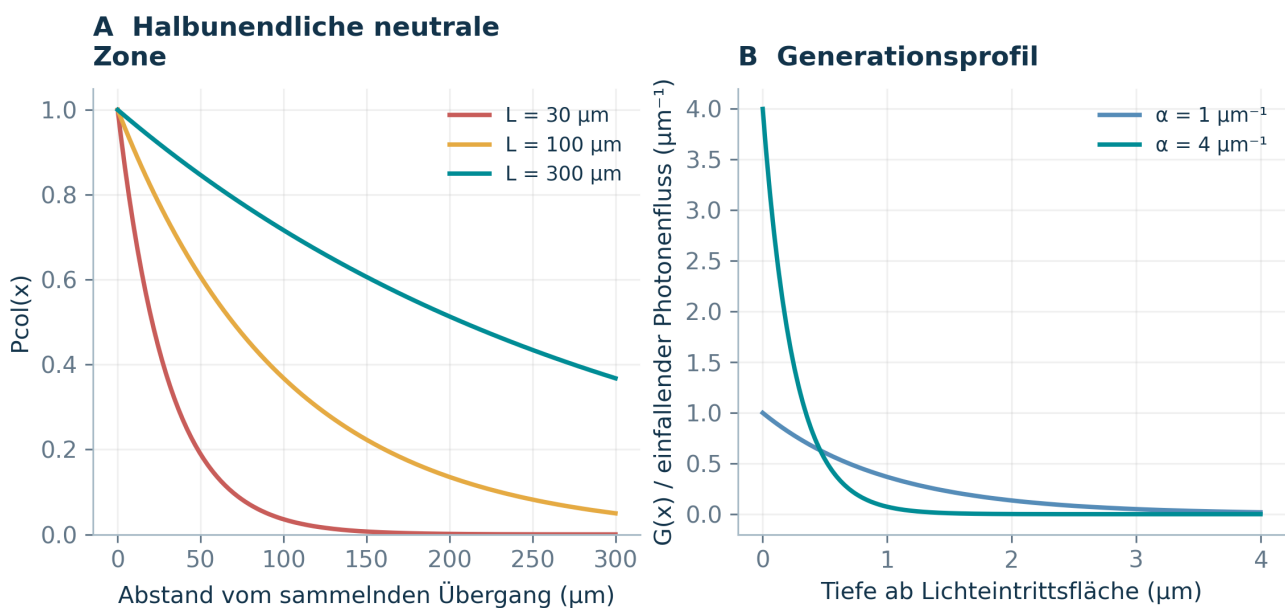


Abbildung 11. Generierung und Sammlung sind nicht dasselbe Profil. In Panel A sinkt die Wahrscheinlichkeit, dass ein Ladungsträger den Übergang erreicht, je weiter er sich vom Übergang entfernt; wenn L zunimmt, kann eine tiefere Generierung genutzt werden. In Panel B nimmt die optische Generierung ab, beginnend mit dem Lichteinfall. Der tatsächliche Strom ist das Integral des Produkts von $G(x)$ und $P_{col}(x)$ im gleichen Koordinatensystem. Analytische Darstellungen mit ausdrücklich angegebenen Annahmen. [H16]

Schreiben wir nun die Generationsrate pro Volumeneinheit als $G(x)$. Jede dünne Scheibe dx liefert einen möglichen Strombeitrag $qG(x)dx$; davon wird der Anteil $P_{col}(x)$ gesammelt. Somit:

$$J_{\text{ph}} = q \int_0^d G(x) P_{\text{col}}(x) dx. \quad (\text{I.5.5})$$

Diese Aussage führt den Optik-Ingenieur und den Bauelementphysiker in ein gemeinsames Betrachtungsfeld ein. Die Reduzierung der Vorderseitenreflexion erhöht G ; die Passivierung der Rückseite kann P_{col} verändern. Beide können J_{sc} erhöhen, aber sie bewirken nicht die gleiche Veränderung im Material. Vorder- und Rückseitenbeleuchtung sowie EQE- und Dickenreihenmessungen bei unterschiedlichen Wellenlängen können verwendet werden, um diese beiden Erklärungen zu unterscheiden. Die Lösung für eine endliche Dicke und eine endliche Rekombination an der Rückseite ist nicht nur eine einfache Exponentialfunktion; die beiden Randbedingungen werden gemeinsam gelöst.

Kontrollvolumen und Fluss an der Grenze

Die Ladungserhaltung lässt sich durch die Wahl eines kleinen **Kontrollvolumens** innerhalb des Bauelements untersuchen. Die Anzahl der Ladungsträger innerhalb dieses Volumens ändert sich durch die Erzeugung im Inneren, die Rekombination und den Fluss durch die Begrenzung. Die nach außen gerichtete **Oberflächennormale** gibt an, welche Richtung an jedem Punkt der Begrenzung als positive Ausgangsrichtung betrachtet wird. Das Volumen V in dieser Schreibweise, S als seine Oberfläche und der auf $\mathbf{n}$ gesetzte Zirkumflex ($\hat{}$) repräsentieren die Einheitsnormalenrichtung. Diese geometrische Größe $\mathbf{n}$ ist nicht dieselbe physikalische Größe wie die Elektronendichte n .

Der Vergleich von Wasser, das in ein Rohrstück einfließt, mit dem Wasser, das aus ihm herausfließt, ähnelt dieser Bilanz. Bei der Ladungsbilanz sind jedoch auch die Erzeugung und die Rekombination zu berücksichtigen. Die **Randbedingung** gibt an, wie die benachbarte Region oder der Kontakt diesen Fluss zulässt. Eine ideale, geschlossene Randbedingung, eine konstante Kontaktspannung und eine rekombinierende Oberfläche sind nicht die gleiche physikalische Bedingung.

Häufige Fehler und Übungsaufgaben

Man kann nicht sagen: „Je höher die Dotierung eines Übergangs, desto besser.“ Eine hohe Dotierung kann zwar bestimmte elektrische Vorteile bieten, führt aber auch zu Auger-Rekombination, einer Verkleinerung der Bandlücke und einer Verringerung der Beweglichkeit. Auch die Aussage „Ein dickerer Absorber erzeugt immer mehr Strom“ ist falsch; eine höhere Stromerzeugung kann durch eine erhöhte Rekombination ausgeglichen werden.

1. Warum ist der Netto-Strom in einem p-n-Übergang im Gleichgewichtszustand null, obwohl ein inneres elektrisches Feld vorhanden ist? **Antwort:** Die Drift- und Diffusionsströme gleichen sich gegenseitig aus.

2. Für $D = 2 \text{ cm}^2/\text{s}$ und $\tau = 5 \text{ }\mu\text{s}$, wie groß ist die Diffusionslänge? **Antwort:** Ungefähr $31,6 \text{ }\mu\text{m}$.

3. Auf welcher Seite ist die Verarmungszone breiter? **Antwort:** Auf der Seite mit der geringeren Dotierstoffkonzentration.

Lesepfad: Lesen Sie zuerst [H15], um die Grundlagen der Übergangstheorie zu verstehen, dann [H16], um das Konzept der Diffusion zu erfassen, und anschließend [H21], um eine allgemeine Beschreibung von selektiven Kontakten zu erhalten. Wenn Sie ein Bauelementschema zeichnen, markieren Sie nicht nur die Bandkanten, sondern auch, von welcher Seite Elektronen und Löcher passieren können.

Rekombination: wo Strom und Spannung verloren gehen

Was geht bei der Rekombination verloren?

Wenn ein Elektron von einem angeregten Zustand in einen unbesetzten Zustand mit niedrigerer Energie übergeht, kann dies das Elektron-Loch-Paar aufheben. Was dabei verschwindet, ist nicht die Substanz oder die Gesamtladung, sondern das **angeregte Paar**, das in der Lage ist, Energie zu transportieren. Die Energie wird auf ein Photon, Kristallschwingungen oder einen anderen Ladungsträger übertragen. Um die Rekombinationsverluste in der Zelle zu verstehen, müssen wir zunächst diesen Energiepfad verfolgen.

Bei der strahlenden Rekombination wird Energie durch ein Photon übertragen. Die Lichtemission einer LED ist ein bekanntes Beispiel für diesen Prozess. Das emittierte Photon kann innerhalb der Zelle erneut absorbiert werden; dies wird als Photon-Recycling bezeichnet. Allerdings kehren nicht alle emittierten Photonen zurück, und nicht jedes Recycling ist verlustfrei. Die bloße Beobachtung von Lichtemission beweist nicht zwangsläufig eine hohe Leistungseffizienz.

Bei der defektunterstützten Rekombination fungiert ein durch Atomlücken, Fremdatome oder gebrochene Bindungen erzeugter Energiezustand als Zwischenstation. Der Defekt kann zunächst einen Ladungsträger einfangen und anschließend den Zyklus mit einem Ladungsträger des entgegengesetzten Typs abschließen. Dadurch kann Energie an Gittervibrationen übertragen werden. Das Shockley-Read-Hall-Modell, kurz **SRH**, ist ein wichtiges Modell für dieses Einfang- und Freisetzungsgleichgewicht. Es reicht nicht aus, zu sagen: „Es gibt eine Falle“: Die Energieposition, die Anzahl und die Wahrscheinlichkeit des Einfangens von Ladungsträgern bestimmen die Wirkung.

Bei der **Auger-Rekombination** wird die Energie des Elektron-Loch-Paares an einen dritten Ladungsträger übertragen. Dieser Ladungsträger gibt seine überschüssige Energie anschließend meist in Form von Wärme ab. Da es sich um einen Prozess handelt, an dem drei Ladungsträger beteiligt sind, kann er bei hoher Konzentration von Bedeutung sein. An Oberflächen können gebrochene oder unvollständige Bindungen die Rekombination verstärken. **Passivierung** ist die allgemeine Bezeichnung für Verfahren, die diese aktiven Defekte oder den Zugang von unerwünschten Ladungsträgern zur Oberfläche reduzieren; sie ist nicht dasselbe wie das bloße mechanische Abdecken der Oberfläche.

Die Lebensdauer anhand einer Füll- und Entleerungsrechnung verstehen

Stellen wir uns die Ladungsträgererzeugung durch Licht als Wasser vor, das in einen Pool fließt, und die Rekombination als den Abfluss. In dieser Analogie repräsentiert die Wasserhöhe die Überschussladungsträgerdichte. In einem einfachen, einzeitkonstanten und homogenen Zustand besteht ein stabiles Verhältnis zwischen der Überschussdichte Δn , der Generationsrate G pro Volumeneinheit und der Lebensdauer τ , gegeben durch $\Delta n = G\tau$. Die Generation wird in $\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$ angegeben, die Zeit in Sekunden, und das Ergebnis ist cm^{-3} . In einer realen Zelle werden auch der durch den Kontakt gezogene Strom und der ortsabhängige Transport in die Gleichung einbezogen.

Synthetisches Beispiel: Für $G = 10^{20} \text{ cm}^{-3} \text{s}^{-1}$ und $\tau = 1 \mu\text{s}$ ergibt sich $\Delta n = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Wenn die Lebensdauer $10 \mu\text{s}$ beträgt, erhöht sich die Konzentration im selben einfachen Modell um den Faktor zehn. Die Effizienz erhöht sich jedoch nicht um den Faktor zehn: die Beziehung zwischen Konzentration und Spannung ist logarithmisch, und es gibt Strom-, optische und Kontaktverluste. Wir werden die folgenden Ratengleichungen betrachten, um herauszufinden, unter welchen Bedingungen die verschiedenen Entladungspfade vorherrschend sind.

Verständniskontrolle: Was bedeutet eine schnelle Lumineszenzabnahme?

Wenn die Lumineszenz eines Films schneller abklingt, sind zwei Möglichkeiten zu berücksichtigen: Entweder rekombinieren die Ladungsträger schneller an Defekten, oder ein guter Kontakt zieht die Ladungsträger schneller ab. Anhand der reinen Abklingzeit können Proben ohne Kontakt und mit Kontakt nicht ohne elektrische Messungen und Anregungsbedingungen als „gut“ oder „schlecht“ eingestuft werden.

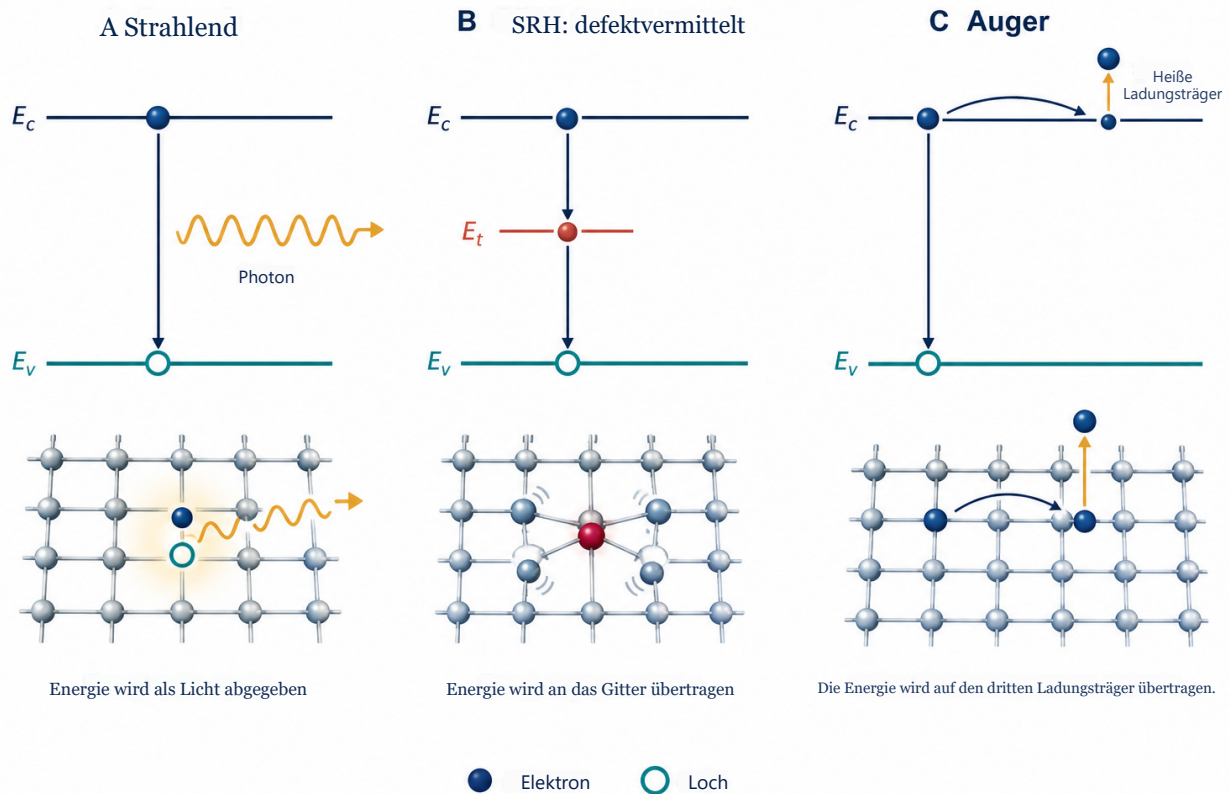


Abbildung 12. Drei Rekombinationsmechanismen und der Ort, an dem die Energie verloren geht. In den oberen Energieschemata ist E_c die Leitbandkante und E_v die Valenzbandkante. Bei einem Strahlungsprozess wird ein Photon emittiert; auf dem SRH-Pfad wird Energie über einen Defekt in das Gitter übertragen; bei einem Auger-Prozess wird ein anderer Ladungsträger angeregt. Die unteren Gitter sind eine schematische Darstellung. Die Pfeile zeigen die Reihenfolge der Ereignisse an, sie sind kein Maß für Geschwindigkeit oder Wahrscheinlichkeit. [H17] [H18] [H19] Mit einem Bildgenerierungswerkzeug erstellte konzeptionelle Illustration; keine Messaufnahme.

Warum ist die Lebensdauer ein zentraler Aspekt bei der Qualität von Materialien?

Nachdem ein absorbiertes Photon ein Elektron-Loch-Paar erzeugt hat, konkurrieren zwei Möglichkeiten: Die freie Energie des Paares kann in der äußeren Schaltung in Arbeit umgewandelt oder durch Rekombination verloren gehen. Während das Elektron das Loch im Valenzband auffüllt, wird Energie an ein Photon, Gittervibrationen oder andere Ladungsträger übertragen. Elektron und Loch verschwinden nicht einfach; das elektronische System geht in einen Zustand mit geringerer freier Energie über. Der „Ladungsträgerverlust“ ist der Verlust dieser nutzbaren Anregung.

Die Lebensdauer τ wird in den meisten Fällen als das Verhältnis der Überschussladungsträgerdichte zur Rekombinationsrate definiert: $\tau_{\text{eff}} = \Delta n / R$. Dies ist jedoch keine universelle Materialkonstante. Die scheinbare Lebensdauer kann sich ändern, wenn sich das Injektionsniveau, die Dotierung, die Temperatur, der Oberflächenzustand oder die Messmethode ändert. Die differentielle Abklingzeit nach einem kurzen Laserpuls muss nicht mit der effektiven Lebensdauer übereinstimmen,

die unter kontinuierlicher Sonneneinstrahlung gemessen wird, insbesondere bei nichtlinearer Rekombination.

Aus Sicht der Ladungsträgererfassung ist das Produkt aus $\mu\tau$ oder $D\tau$ von Bedeutung. Es ist vorteilhaft, wenn sich ein Ladungsträger schnell bewegen kann; jedoch kann eine zu kurze Lebensdauer auch dazu führen, dass der schnelle Ladungsträger verloren geht. Daher bestimmt eine Materialuntersuchung, die nur die Beweglichkeit oder nur die Photolumineszenz-Abklingzeit angibt, nicht vollständig die Qualität der Ladungsträgererfassung im Bauelement.

Strahlende Rekombination und wiederverwendbare Photonen

Bei der Strahlungsrekombination wird die Energie des Elektron-Loch-Paares in Form eines Photons abgegeben. Das einfache Volumenmodell hat die Form $R_{\text{rad}} = B(np - n_i^2)$. Wenn n und p in cm^{-3} angegeben sind, ist B in cm^3/s angegeben. Da bei Null-Beleuchtung und im thermischen Gleichgewicht $np = n_i^2$ gilt, ist die Netto-Rad gleich Null; dennoch finden mikroskopische Absorptions- und Emissionsprozesse statt. Das entstehende Photon kann innerhalb des Bauelements erneut absorbiert werden und ein weiteres Ladungsträgerpaar erzeugen. Dieser Prozess, der als Photonen-Recycling bezeichnet wird, kann unter Bedingungen einer bestimmten optischen Geometrie und hoher interner Lumineszenzeffizienz von Bedeutung sein. Ein Photon, das aus der Zelle entweicht, wird jedoch nicht in einen Strom im externen Stromkreis umgewandelt; eine hohe externe Lumineszenz kann jedoch auch ein Zeichen für geringe nicht-strahlende Verluste sein. Die Antwort auf die Frage „Warum emittiert eine gute Zelle Licht?“, ist, dass Absorption und Emission die Vorwärts- und Rückwärtsprozesse derselben optischen Übergänge sind.

Die interne Lumineszenzeffizienz und die externe Lumineszenzeffizienz sind nicht identisch. Der Photonen-Austrittskegel, die Reabsorption, die parasitäre Absorption am Metallkontakt und die hintere optische Grenze beeinflussen, welcher Anteil der internen Ereignisse von außen sichtbar ist. Eine hohe Photolumineszenz des Materials beweist nicht allein, dass ein fertiggestelltes Bauelement mit schlechtem Kontakt eine hohe Leerlaufspannung (V_{oc}) aufweist.

Der durch Fallen unterstützte Shockley-Read-Hall-Prozess

Ein lokaler Defektzustand in der Bandlücke kann die sukzessive Einfangung von Elektronen und Löchern ermöglichen. Zuerst wird ein Elektron eingefangen, gefolgt von der Rekombination mit einem Loch; auch die umgekehrte Reihenfolge ist möglich. Der statistische Ansatz von Shockley und Read aus dem Jahr 1952 sowie die Arbeit von Hall aus demselben Jahr bilden die klassische Grundlage für diesen Mechanismus.

[H17] [H18]

Für ein einzelnes Fallenniveau und den stationären Zustand wird die Gleichung $RSRH = (np - n_i^2)/[\tau_p(n + n_1) + \tau_n(p + p_1)]$ verwendet. Dabei sind $n_1 = N_c \exp[-(E_c -$

$E_t)/(kBT)]$ und $p_1 = N_v \exp[-(E_t - E_v)/(kBT)]$ und hängen mit der Fallenenergie E_t zusammen. In den Ausdrücken $\tau_n \approx 1/(\sigma_n v_{th} N_t)$ und $\tau_p \approx 1/(\sigma_p v_{th} N_t)$ sind σ_n und σ_p die Einfangquerschnitte, v_{th} die thermische Geschwindigkeit (Länge/Zeit), und N_t die Fallendichte, angegeben in Anzahl pro Volumeneinheit. Der Nenner ergibt letztendlich Dichte $\times$ Zeit, während der Bruch Dichte/Zeit liefert.

Aus dieser Gleichung lässt sich nicht die Schlussfolgerung ziehen, dass „jeder Defekt in der Mitte des Bandes gleichschlecht ist“. Die Asymmetrie der Einfangkernquerschnitte, die Ladungsträgerdichten und die Besetzung der Fallen haben ebenfalls einen Einfluss. Ein Defekt kann in großer Menge vorhanden sein, aber dennoch ein sehr schwacher Einfangort sein; ein anderer Defekt kann auch bei geringer Konzentration einen dominanten Verlust verursachen. Die rechnerische Defektuntersuchung kann daher nicht allein auf die Bildungsenergie oder das Übergangsniveau reduziert werden. Es sind auch die Einfangkinetik und die experimentellen Dichtegrenzen erforderlich.

Auger-Rekombination und Oberflächen

Im Auger-Prozess wird die Energie des Elektron-Loch-Paares auf einen dritten Ladungsträger übertragen; dieser Ladungsträger kann seine Energie dann an das Gitter abgeben. Ein einfaches Modell hat die Form $R_{Auger} = (C_n n + C_p p)(n p - n_i^2)$. Die Einheit der Koeffizienten C ist cm^6/s , wenn die Konzentration in cm^{-3} angegeben wird. Wenn bei hoher Injektion $n \approx p \approx \Delta n$ angenommen wird, wächst die Rate ungefähr mit Δn^3 . Im Vergleich zum Wachstum der Strahlungsrate, das ungefähr mit Δn^2 zunimmt, wird deutlich, warum der vorherrschende Mechanismus bei hoher Konzentration variieren kann.

Bei realem Silizium muss man möglicherweise über das einfache Modell mit konstanten Koeffizienten hinausgehen. Die Studie von Richter und seinen Kollegen aus dem Jahr 2012 untersucht die Dotierungs- und Injektionsabhängigkeit in passiviertem, hochreinem Silizium und stellt eine verbesserte Parametrisierung der intrinsischen Rekombination für 300 K vor. Die in dieser Quelle angegebenen Bedingungen von 300 K sollten nicht mit einem Parametersatz identifiziert werden, der bei 298,15 K perfekt übereinstimmt. [\[H19\]](#)

Die Oberfläche ist der Bereich, in dem die periodische Ordnung des Kristalls unterbrochen ist und sich die chemischen Bindungen ändern. Die Oberflächenrekombinationsrate S , angegeben in Einheiten von m/s oder cm/s , wird verwendet, um den Oberflächenverlust zu beschreiben. Diese „Rate“ ist nicht die Geschwindigkeit, mit der ein einzelnes Elektron zur Oberfläche wandert; sie ist der Koeffizient, der die Umwandlung der überschüssigen Ladungsträgerdichte in den Oberflächenfluss beschreibt. Die chemische Passivierung kann die Anzahl der vorhandenen Defekte reduzieren, während die feldinduzierte Passivierung die Rekombination begrenzt, indem sie eines der Ladungsträger (Elektron oder Loch) von

der Oberfläche entfernt. Der Gesamteffekt der Oberflächen auf die Lebensdauer ist in der Quelle [H20] beschrieben.

Betrachtetes Beispiel: Welche Vorteile bietet die Oberflächenoptimierung?

Beispiel zur Veranschaulichung. Betrachten wir eine Schicht mit einer Dicke von $d = 150 \mu\text{m} = 0,015 \text{ cm}$ und einer Lebensdauer von $\tau_{\text{bulk}} = 1 \text{ ms}$, bei der die Konzentration an überschüssigen Ladungsträgern annähernd gleichmäßig ist. Wenn beide Oberflächen die gleiche Größe S haben, gilt die folgende Gleichung: $1/\tau_{\text{eff}} \approx 1/\tau_{\text{bulk}} + 2S/d$. Für $S = 1000 \text{ cm/s}$ ergibt sich $\tau_{\text{eff}} \approx 7,44 \mu\text{s}$. Eine sehr gute Volumenqualität wird durch schlechte Oberflächeneigenschaften bei der Messung nicht mehr erkennbar. Wenn S auf 10 cm/s reduziert wird, beträgt $\tau_{\text{eff}} \approx 429 \mu\text{s}$. Die effektive Lebensdauer erhöht sich um das etwa 58-fache, während das Volumenmaterial selbst unverändert bleibt. Daher kann es in den meisten Experimenten kostengünstiger und aussagekräftiger sein, vor der Änderung der Dotiertechnik eine Oberflächen- und Kontaktanalyse durchzuführen. Wenn jedoch die Annahme einer gleichmäßigen Dotierungskonzentration nicht gültig ist, müssen anstelle dieser einfachen Beziehung die räumliche Diffusion und die Randbedingungen an der Oberfläche gemeinsam gelöst werden.

Die zweite einfache Berechnung: Für $D = 2 \text{ cm}^2/\text{s}$ und $\tau = 10 \text{ ns}$ ergibt sich $L = \sqrt{D\tau} \approx 1,41 \mu\text{m}$. Wenn im selben Material $\tau = 1 \mu\text{s}$ beträgt, dann ist $L \approx 14,1 \mu\text{m}$. Während sich die Lebensdauer um den Faktor 100 erhöht, erhöht sich die Diffusionslänge um den Faktor 10. Die lineare Intuition führt hier zu falschen Schlussfolgerungen; die Quadratwurzelbeziehung beeinflusst die Gestaltung der Gerätedicke direkt.

Den SRH-Ausdruck aus dem Gleichgewicht von Einfang und Emission verstehen

Betrachten wir einen Defekt als einen Zwischenzustand, der entweder mit einem Elektron besetzt oder leer sein kann. Eine leere Falle kann ein Elektron einfangen; eine besetzte Falle kann ein Elektron freisetzen oder ein Loch einfangen und so ein Elektron-Loch-Paar vernichten. Wenn sich in einem stabilen Zustand die Wahrscheinlichkeit der Besetzung der Falle nicht ändert, wird die Bilanz dieser Übergänge geschlossen. Die Einfangkraft für Elektronen und Löcher sowie die Defektdichte werden in den Zeitmaßstäben τ_n und τ_p zusammengefasst. Dieses Gleichgewicht führt für das Einzel-Niveau-Modell zu der folgenden Netto-Rekombinationsrate:

$$R_{\text{SRH}} = \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n + n_1) + \tau_n(p + p_1)}. \quad (\text{I.6.1})$$

$$n_1 = n_i \exp\left(\frac{E_t - E_i}{k_B T}\right), \quad p_1 = n_i \exp\left(-\frac{E_t - E_i}{k_B T}\right). \quad (1.6.2)$$

Der Nenner in der Gleichung $n p - n_i^2$ erklärt, warum der Nettoverlust dort Null ist. Die Einfangereignisse halten das Gleichgewicht aufrecht, aber die Erzeugung ist gleich der Rekombination. Der Nenner beinhaltet nicht nur die Existenz der Falle, sondern auch den Zugang zu beiden Arten von Ladungsträgern. Daher ist die Aussage „es gibt einen Defekt in der Mitte der Bandlücke“ allein keine Aussage über die Lebensdauer.

Zusätzlich werden die Defektdichte, die Einfangquerschnitte und die Belegung am Betriebspunkt benötigt. [H17] [H18]

Sei in einer symmetrischen, mittleren Bereichsfalle $\tau_n = \tau_p = \tau_0$. Bei p-Dotierung und niedriger Injektion, wenn p ungefähr p_0 und n ungefähr Δn ist, ist R ungefähr $\Delta n / \tau_0$. Bei hoher Injektion, wenn n ungefähr p ungefähr Δn ist, ist R ungefähr $\Delta n / (2\tau_0)$. Daher kann dasselbe Fallensystem bei veränderter Injektion unterschiedliche, scheinbar effektive Lebensdauern liefern. Die Tatsache, dass die Lebensdauerkurve nicht flach verläuft, bedeutet nicht automatisch, dass eine neue Art von Defekt aufgetreten ist.

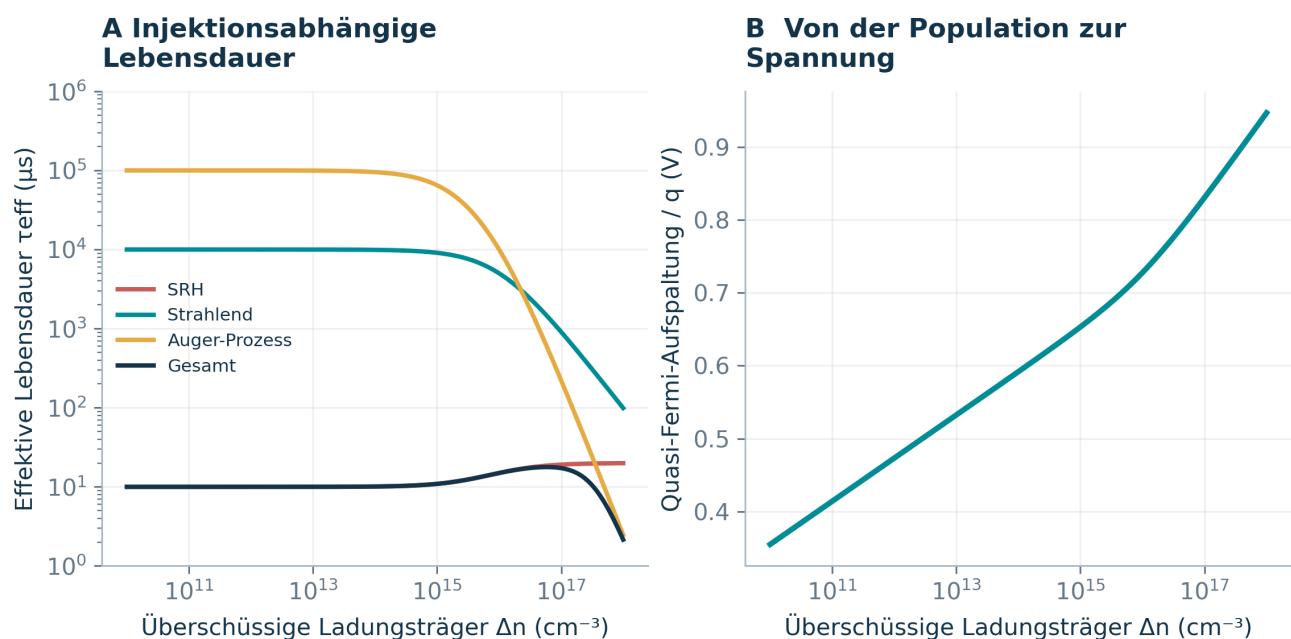


Abbildung 13. Verschiedene Injektionsregime bei gleichen Materialparametern. Die SRH-Lebensdauer beträgt bei geringer Injektion etwa $10 \mu s$, ändert sich jedoch beim Übergang zu hoher Injektion; bei starker Injektion nimmt der Auger-Beitrag zu. In Diagramm B ist die Quasi-Fermi-Aufspaltung dargestellt, die aus den gleichen Populationswerten berechnet wurde. Die Parameter dienen Lehrzwecken: $p_0 = 10^{16} cm^{-3}$, $n_i = 10^{10} cm^{-3}$, $\tau_n = \tau_p = 10 \mu s$, $B = 10^{-14} cm^3/s$, $C_n = 3 \times 10^{-31}$ und $C_p = 10^{-31} cm^6/s$. [H17] [H18] [H19]

Warum ist der Idealitätsfaktor kein eindeutiges Kennzeichen?

Bei einer hohen Vorwärtsspannung, wenn ein dominierender Rekombinationsstrom J_{rec} ungefähr die Form $J_0 \exp[qV/(n_{\text{id}} kBT)]$ annimmt, kann $n_{\text{id}} = (q/kBT) dV/d \ln J_{\text{rec}}$ definiert werden. Für die Diffusion in der neutralen Zone bei niedriger Injektion und für ein symmetrisches Verarmungszonen-SRH-Modell lassen sich unter bestimmten Annahmen bekannte Ergebnisse ableiten, wie etwa ein Wert von eins bzw. ungefähr zwei. In einer realen Heterostruktur verändern auch die spannungsabhängige Sammlung, die Kontaktbarriere, die ionische Umverteilung und mehrere Rekombinationskanäle die Steigung.

Wenn in einem Diagramm $n_{\text{id}} = 1,7$ gefunden wird, ist die Aussage auf Forschungsebene nicht „SRH ist bewiesen“. Zuerst wird gefragt, in welchem Spannungs- und Lichtbereich die Steigung berechnet wurde, ob sie vom Serienwiderstand beeinflusst wird und ob das gleiche physikalische Modell bei mehreren Temperaturen funktioniert. Eine aussagekräftigere Interpretation wäre, dass der gleiche Mechanismus auch mit PL, der Ladungsträgerdichteabhängigkeit und der Kontaktserien übereinstimmt. Der Idealitätsfaktor ist nützlich, wenn er mit anderen Beweisen kombiniert wird.

Was wird durch die Änderung der Messbedingungen getestet?

Vorspannung ist die Spannung, die einem Bauelement vor einer Messung angelegt wird; die Spannung während der Messung verändert ebenfalls die Konzentration und Verteilung der Ladungsträger. In demselben Material können bei niedriger und hoher Ladungsträgerkonzentration unterschiedliche Rekombinationswege vorherrschend sein. Daher sollte die Lebensdauer zusammen mit der Lichtintensität, der Temperatur und den elektrischen Bedingungen angegeben werden. Eine einzelne Lebensdauerzahl ist nicht der Name des vorherrschenden Mechanismus unter allen Betriebsbedingungen.

Bei der Optimierung lassen sich zwei verschiedene Maßnahmen unterscheiden. Die Reduzierung von Defekten zielt darauf ab, die Anzahl der effektiven Rekombinationszentren zu verringern. Die **Kontaktselektivität** hingegen soll den Verlust von Löchern am Elektronenkontakt und von Elektronen am Lochkontakt begrenzen und gleichzeitig den Durchtritt der gewünschten Ladungsträger ermöglichen. Eine stark isolierende Beschichtung kann die Rekombination reduzieren, aber auch den nützlichen Strom behindern. Daher ist es notwendig, den Erfolg nicht nur anhand der Lichtausbeute oder der Lebensdauer zu beurteilen, sondern auch anhand der Spannung und Leistung des fertigen Bauelements.

Häufige Fehler und Übungsaufgaben

„In einer fehlerfreien Zelle ist die Rekombination gleich Null“ ist falsch.

Strahlungsrekombination ist ein notwendiges Korrelat der Absorption in reziproken optischen Systemen. Auch die Aussage „Die Probe mit der längsten Impulslebensdauer liefert die beste Zelle“ ist nicht zuverlässig; die Injektionsbedingungen und die Kontakte müssen übereinstimmen. In einem Experiment kann ein ansteigendes Photolumineszenzsignal gleichzeitig ein abnehmendes Extraktionsvermögen zeigen; die Messgeometrie und der Arbeitspunkt müssen angegeben werden.

1. Wie ändert sich der einfache SRH-Lebensdauerparameter, wenn N_t um den Faktor zehn erhöht wird, während alle anderen Einfangparameter konstant bleiben? **Antwort:** Er verringert sich um den Faktor zehn.
2. Wenn die Ladungsträgerdichte bei hoher Injektion verdoppelt wird, wie verändern sich die Geschwindigkeiten der einfachen strahlenden Rekombination und der Auger-Rekombination? **Antwort:** Sie erhöhen sich um den Faktor vier bzw. acht.
3. Warum hat die Oberflächengeschwindigkeit S die Einheit cm/s, obwohl sie keine Teilchendriftgeschwindigkeit ist? **Antwort:** S ist ein effektiver Randkoeffizient, der den Teilchenverlustfluss an der Oberfläche mit der Ladungsträgerdichte verknüpft.

Lesepfad: Untersuchen Sie zunächst die ursprünglichen Grundlagen des SRH-Modells ([H17] [H18]) und anschließend, wie die Parameter für ein bestimmtes Material gemessen werden ([H19]). Führen Sie keine Vergleiche durch, ohne neben jeder Lebensdauerangabe den Injektionspegel, die Temperatur, die Oberflächenbehandlung und die Methode anzugeben.

Strom-Spannungs-Kennlinie: zur Auswertung der Leistung einer Zelle

Wie entsteht die Strom-Spannungs-Kennlinie in der Realität?

Stellen wir uns vor, wir verbinden eine Zelle mit unterschiedlichen elektrischen Lasten. Bei sehr geringem Widerstand kann die Klemmenspannung niedrig und der Strom hoch sein. Bei sehr hohem Widerstand sinkt der Strom, während die Spannung steigt. Ein Messgerät tastet diese Arbeitspunkte kontrolliert ab. Wenn wir die Spannung auf der horizontalen Achse und den Strom auf der vertikalen Achse platzieren und die Punkte verbinden, entsteht die **I-V-Kurve**. Wenn wir den Strom durch die gemessene Fläche teilen, erhalten wir die Stromdichte J und zeichnen die **J-V-Kurve**. Auf diese Weise können wir Zellen mit unterschiedlicher Fläche unter Verwendung einer geeigneten Flächendefinition vergleichen.

Der **Kurzschlussstrom** ist der Strom, der fließt, wenn die Spannung null ist. Die **Leerlaufspannung** ist die Spannung, die auftritt, wenn der Stromfluss null ist. An beiden Extrempunkten ist die Leistung null, da die Leistung das Produkt aus Spannung und Strom ist. Der nützliche Betriebspunkt liegt dazwischen. An jedem Messpunkt berechnen wir dieses Produkt und wählen den größten Wert aus; dies wird als **Maximum-Power-Point** (MPP) bezeichnet. Die elektronische Steuerung, die die Zelle in der Nähe dieses Punktes hält, ist die Maximum-Power-Point-Regelung.

Vier Werte aus der Messtabelle entnehmen

Synthetische Messung: Bei einer 1 cm^2 großen Zelle betragen die Werte für die Kurzschlussstromdichte 40 mA/cm^2 und die Leerlaufspannung $0,70 \text{ V}$. Am besten gemessenen Betriebspunkt erhalten wir $0,58 \text{ V}$ und 36 mA/cm^2 . Die Leistungsdichte beträgt $0,58 \times 36 = 20,88 \text{ mW/cm}^2$. Eine Bestrahlungsstärke von 1000 W/m^2 entspricht 100 mW/cm^2 ; daher beträgt der Wirkungsgrad $20,88 \%$. In diesem Beispiel haben wir die elektrische und die Lichtleistung auf die gleiche Fläche bezogen.

Der **Füllfaktor** ist das Verhältnis des tatsächlichen maximalen Leistungsrechtecks zum größeren Rechteck, das durch den Kurzschlussstrom und die Leerlaufspannung gebildet wird. Im Beispiel ergibt sich $20,88 / (40 \times 0,70) = 0,746$, was ungefähr $74,6 \%$ entspricht. Die geometrische Vorstellung davon, wie „quadratisch“ die Form ist, ergibt sich daraus. Der Füllfaktor ist weder eine Spannung noch ein Strom; es handelt sich um eine dimensionslose Größe. Ein hoher Füllfaktor allein bedeutet nicht zwangsläufig einen hohen Wirkungsgrad: Wenn Strom und Spannung gering sind, kann die Leistung dennoch gering bleiben.

Was repräsentieren die einzelnen Komponenten in der Ersatzschaltung?

Die **Stromquelle** steht für die Erzeugung durch Licht; die **Diode** steht für den mit der Spannung stark ansteigenden internen Strom und das Rekombinationsverhalten des Modells. Der **Serienwiderstand** beschreibt den Verlust, den die nach außen gelangende Ladung entlang des Leitungs- und Kontaktwegs erfährt. Der **Parallelwiderstand** entspricht dem unerwünschten Leckpfad zwischen den beiden Anschlüssen. Ein kleinerer Serienwiderstand verringert den Transportverlust; ein größerer Parallelwiderstand verringert den Leckstrom. Das Diagramm bedeutet nicht, dass sich tatsächlich eine solche separate Batterie und ein Widerstand in der Zelle befinden; es bildet physikalische Vorgänge elektrisch ab.

Messsoftware verwendet unterschiedliche Konventionen für das Stromvorzeichen. In diesem Buch wird der Strom, der in den externen Stromkreis fließt, als positiv definiert. Wenn die Kennlinie derselben Zelle in einer anderen Veröffentlichung nach unten zeigt, bedeutet dies nicht unbedingt, dass das Gerät defekt ist; überprüfen Sie zunächst die Vorzeichenkonvention.

Verständniskontrolle: Warum genügt es nicht, Kurzschlussstrom und Leerlaufspannung zu multiplizieren?

Die Angabe von $0,70 \times 40 = 28 \text{ mW/cm}^2$ für die oben genannte Zelle gibt nicht die tatsächliche Leistung an. 40 mA/cm^2 wurde im Kurzschlusszustand und $0,70 \text{ V}$ im Leerlaufzustand gemessen; diese Zustände treten nicht gleichzeitig auf. Für die tatsächliche Leistung von $20,88 \text{ mW/cm}^2$ sollten die Werte $0,58 \text{ V}$ und 36 mA/cm^2 aus derselben Messreihe verwendet werden. Der Füllfaktor (FF) macht genau diesen Unterschied deutlich.

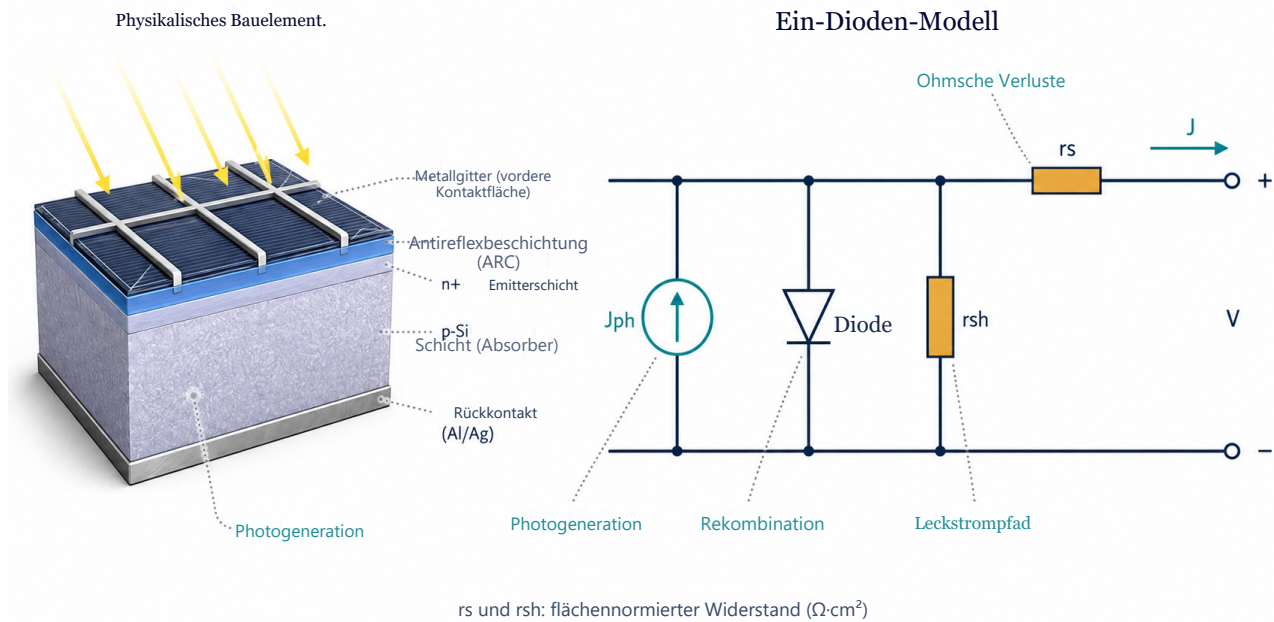


Abbildung 14. Von der physikalischen Solarzelle zum äquivalenten Ein-Dioden-Schaltkreis. Die Photostromquelle, die Diode und der Leckwiderstand sind an denselben zwei internen Knoten angeschlossen; der Serienwiderstand befindet sich zwischen dem internen Knoten und dem positiven externen Anschluss. Die gestrichelten Linien dienen lediglich der Veranschaulichung und stellen keine elektrische Verbindung dar. J ist die Stromdichte, die dem externen Stromkreis zugeführt wird; r_s und r_{sh} sind auf die Fläche normiert. Die Dicken der Zellquerschnitte sind nicht maßstabsgetreu dargestellt. [B06] [B11] Mit einem Bildgenerierungswerkzeug erstellte konzeptionelle Illustration; keine Messaufnahme.

Vier Zahlen und eine Kurve

Das elektrische Verhalten einer Solarzelle wird in der Strom-Spannungs-Kennlinie dargestellt, die unter bestimmten Licht- und Temperaturbedingungen gemessen wird. Der Strom I wird in Ampere angegeben, die Stromdichte J wird als $J = I/A$ in Ampere pro Quadratmeter oder Milliampere pro Quadratzentimeter angegeben. Ob die Fläche als aktive, transparente oder Gesamtfläche betrachtet wird, beeinflusst die Stromdichte J und den Wirkungsgrad; der Nenner ist kein rein deskriptiver Wert, sondern Teil der Messung.

Im Kurzschlussfall ist $V = 0$ und der Strom ist I_{sc} oder J_{sc} . Im Leerlauf ist $I = 0$ und die Spannung ist V_{oc} . An beiden Polen ist die elektrische Leistung $P = VI$ gleich Null. Die maximale Leistung wird an einem Punkt auf der Kurve erreicht: $P_{mpp} = V_{mpp} I_{mpp}$. Der Füllfaktor $FF = P_{mpp}/(V_{oc} I_{sc})$ misst, wie nahe die Kurve einem idealen Rechteck kommt. Der Wirkungsgrad $\eta = P_{mpp}/(GA) = V_{oc} J_{sc} FF/G$. Diese grundlegenden Definitionen müssen unabhängig davon angewendet werden, in welcher Richtung das Messsignal gewählt wird. [H23]

J_{sc} beschreibt die durch Photonen induzierte Ladungssammlung; V_{oc} das chemische Potenzial, das gegen Rekombination aufgebaut werden kann; und FF fasst die Aufrechterhaltung des Stroms bei der Betriebsspannung zusammen. Keiner dieser Parameter ist isoliert einem einzelnen Defekt zuzuordnen. Beispielsweise kann eine

schlechte Grenzfläche sowohl Voc als auch FF verringern; optische Verluste können Jsc verringern und gleichzeitig eine geringe logarithmische Änderung in Voc verursachen.

Das Ein-Dioden-Modell und der konsequente Umgang mit Einheiten

Wenn wir den erzeugten Strom als positiv definieren, hat das übliche äquivalente Schaltungsmodell die Form $J = J_{ph} - J_0 \{ \exp[(V + J R_s) / (n_{id} V_T)] - 1 \} - (V + J R_s) / R_{sh}$. Dabei ist V_T die thermische Spannung, $V_T = kBT/q$; n_{id} ist der Idealitätsfaktor, R_s ist der flächennormalisierte Serienwiderstand und R_{sh} ist der flächennormalisierte parallele Leckwiderstand. Wenn J in A/cm^2 angegeben ist, müssen R_s und R_{sh} in Ωcm^2 angegeben werden. In dem Modell, das mit dem Strom beschrieben wird, sind die Widerstände in Ω . Das Vermischen der beiden Darstellungen führt zu einem systematischen Fehler, der das Modell bei Änderung der Fläche verfälscht.

J_{ph} ist die durch Licht erzeugte Stromquelle, deren Strom im Modell als sammelbar angenommen wird. J_0 ist die Dunkelsättigungsstromdichte, und n_{id} ist die charakteristische Größe für das exponentielle Verhalten. Werte wie $n_{id} \approx 1$ oder 2 können mit bestimmten idealen Mechanismen in Verbindung gebracht werden; jedoch ist es nicht korrekt, sich nur den Wert anzusehen, der am besten zur Kurve passt, und daraus den vorherrschenden mikroskopischen Defektyp eindeutig zu bestimmen. Das Ein-Dioden-Modell ist eine vereinfachte Darstellung der räumlichen Halbleiterphysik. R_s kann den Widerstand von Metall- und transparenten leitfähigen Schichten, den Kontaktverlust und einen Teil der Transporteffekte zusammenfassend darstellen. R_{sh} kann hingegen Randleckströme, lokale Kurzschlüsse oder ähnliche parallele Pfade widerspiegeln. Auf einer Kurve können mehrere Parameter einander ausgleichen und so eine ähnliche Anpassung ergeben. Dieses Problem der Identifizierbarkeit zeigt, dass das Hinzufügen weiterer Parameter nicht automatisch zu einem besseren Verständnis der physikalischen Zusammenhänge führt.

Leerlaufzustand und Punkt maximaler Leistung

Wenn $R_s = 0$, R_{sh} unendlich ist und J_{ph} unabhängig von der Spannung ist, gilt $V_{oc} = n_{id} V_T \ln(J_{ph}/J_0 + 1)$. Wenn der Photostrom sich verdoppelt, beträgt die Zunahme von V_{oc} unter der Bedingung, dass J_{ph} sehr viel größer als J_0 ist, $n_{id} V_T \ln 2$. Daher wächst der Strom ungefähr linear mit dem Licht, während die Spannung logarithmisch wächst. Während der Erwärmung kann V_T zwar zunehmen, aber J_0 nimmt in der Regel stärker zu; daher ist die Schlussfolgerung „Wenn V_T zunimmt, muss V_{oc} zunehmen“ falsch. Für die ideale Diode werden die normierten Variablen $v = V / (n_{id} V_T)$ und $v_{oc} = V_{oc} / (n_{id} V_T)$ verwendet. Die Bedingung für die maximale Leistung wird durch das Setzen der Ableitung der Leistungsdichte $p = VJ$ auf Null erreicht, was zu $v_{mp} + \ln(1 + v_{mp}) = v_{oc}$ führt. Diese Gleichung lässt sich leicht durch eine einvariable Wurzelberechnung lösen. Die Näherungsformel für den Füllfaktor $FF_0 \approx [v_{oc} - \ln(v_{oc} +$

$0,72)]/(v_{oc} + 1)$ ist eine nützliche Berechnungsgrundlage für die ideale Diode; Greens Arbeit von 1981 behandelt den allgemeinen Füllfaktor als grafische Darstellung und empirische Formeln. [H22]

Diese vereinfachte Formel berücksichtigt nicht von Natur aus den Reihenwiderstand des realen Bauelements, das Verhalten mehrerer Dioden und die spannungsabhängige Ladungsträgersammlung. Die Tatsache, dass die Formel ein Ergebnis mit einigen Dezimalstellen liefert, bedeutet nicht, dass die Modellannahmen mit dieser Genauigkeit zutreffen. Die direkte numerische Bestimmung des Maximums der Leistungskurve ist in der Regel genauer, wenn Messdaten verfügbar sind; Rauschen und Scanverlauf müssen jedoch weiterhin berücksichtigt werden.

Betrachtetes Beispiel: Eine vollständige Berechnung für eine ideale Diode

Dies ist ein Lehrbeispiel, keine gemessene Zelle. Es sei $T = 298,15 \text{ K}$, $n_{id} = 1$, $J_{ph} = 0,040 \text{ A/cm}^2$, $J_0 = 10^{-13} \text{ A/cm}^2$, $R_s = 0$ und $R_{sh} = \text{unendlich}$. Daraus ergibt sich $V_T = 0,0256926 \text{ V}$ und $V_{oc} = 0,68637 \text{ V}$. Durch Lösen der obigen Gleichung für die maximale Leistung erhält man $V_{mpp} = 0,60417 \text{ V}$ und $J_{mpp} = 0,038368 \text{ A/cm}^2$. Der Füllfaktor beträgt 0,84434. Für $G = 0,100 \text{ W/cm}^2$ ergibt sich ein Wirkungsgrad von 23,181 %.

Diese Berechnung beinhaltet zwei nützliche Kontrollen. Erstens beträgt die maximale Leistungsdichte etwa $0,023181 \text{ W/cm}^2$, und da der Nenner $0,100 \text{ W/cm}^2$ beträgt, ergibt sich ein dimensionsloser Wert für den Wirkungsgrad. Zweitens wird bestätigt, dass FF kleiner als eins ist, V_{mpp} kleiner als V_{oc} und J_{mpp} kleiner als J_{sc} ist. Dies sind keine umfassenden Validierungen, können aber schnell Fehler in den Einheiten oder Vorzeichen aufdecken.

In einem separaten Beispiel seien die Werte $V_{oc} = 0,720 \text{ V}$, $J_{sc} = 40,0 \text{ mA/cm}^2$ und $FF = 0,800$ gegeben. Der Wirkungsgrad beträgt 23,04 %. Wenn FF auf 0,820 erhöht wird, während die anderen Werte konstant bleiben, beträgt der Wirkungsgrad 23,616 %: die Steigerung beträgt 0,576 Prozentpunkte. Es ist falsch, eine Erhöhung von FF um 0,02 direkt als „der Wirkungsgrad hat sich um zwei Punkte erhöht“ zu melden.

Von der Kennlinie zur Diagnose

Die Steigung in der Nähe des Kurzschlusses kann auf Leckströme hindeuten, während die Steigung in der Nähe des Leerlaufes empfindlich auf den Serienwiderstand und das Diodenverhalten reagieren kann; diese Beobachtungen stellen jedoch allein keinen Beweis für den Mechanismus dar. Eine S-förmige Kurve kann auf eine Transportbarriere oder einen ungeeigneten Kontakt hinweisen. Die Abhängigkeit von V_{oc} von der Lichtintensität, der temperaturabhängige Strom, das EQE, die Dunkelstromkurve und die stabile Leistungsverfolgung sollten zusammen interpretiert werden.

Insbesondere bei zeitabhängigen Bauelementen kann eine schnelle Abtastung Effekte der Energiespeicherung oder Ionenreorganisation als scheinbare Bauelementleistung darstellen. Die Abtastrichtung, -geschwindigkeit, die Vorbedingungen und die Wartezeit müssen angegeben werden. Der scheinbar hohe Wert zu einem bestimmten Zeitpunkt und die stabile Energieerzeugung sind unterschiedliche Beobachtungen. Das statische Modell in diesem Abschnitt geht davon aus, dass diese dynamischen Effekte nicht vorhanden sind.

Den Maximum-Power-Point mithilfe der Ableitung bestimmen

Im idealen Ein-Dioden-Modell sei $J = J_{ph} - J_0[\exp(V/V_T) - 1]$. Wir definieren die dimensionslose Spannung $v = V/V_T$. Im Leerlauf gilt $\exp(v_{oc}) = 1 + J_{ph}/J_0$. Die Leistungsdichte $p = VJ$ erreicht ihr Maximum, wenn $dp/dV = J + V dJ/dV$ gleich Null ist. Setzen wir die Dioden-Ableitung ein, erhalten wir:

$$\exp(v_m)(1 + v_m) = \exp(v_{oc}), \quad v_m + \ln(1 + v_m) = v_{oc}. \quad (I.7.1)$$

Da der Ausdruck auf der linken Seite für v monoton ansteigt, kann die Wurzel eindeutig bestimmt werden. Er kann auch in geschlossener Form mit der Lambert-W-Funktion ausgedrückt werden; für das Verständnis der physikalischen Bedeutung ist jedoch diese skalare Wurzel ausreichend. Für $J_{ph} = 40 \text{ mA/cm}^2$, $J_0 = 10^{-13} \text{ A/cm}^2$ und $298,15 \text{ K}$ ergeben sich $V_{oc} = 0,68637 \text{ V}$, $V_{mpp} = 0,60417 \text{ V}$ und $J_{mpp} = 38,368 \text{ mA/cm}^2$. Der Füllfaktor beträgt $84,43 \%$; bei einer einfallenden Leistungsdichte von 100 mW/cm^2 ergibt sich ein Wirkungsgrad von $23,18 \%$. Obwohl die Leerlaufspannung größer ist, ist die Leistung null, da der Strom null ist.

Serien- und Parallelwiderstände in derselben Gleichung berücksichtigen

Wenn der mit der Fläche normalisierte Serienwiderstand r_s und der Parallelwiderstand r_{sh} hinzugefügt werden, ergibt sich die interne Spannung der Diode zu $V + Jr_s$. Wenn der dem externen Stromkreis zugeführte Strom positiv gewählt wird:

$$J = J_{ph} - J_0 \left[\exp \left(\frac{V + Jr_s}{nV_T} \right) - 1 \right] - \frac{V + Jr_s}{r_{sh}}. \quad (I.7.2)$$

Da J sowohl auf der linken als auch auf der rechten Seite der Gleichung vorkommt, handelt es sich um eine implizite Gleichung. An dem Punkt der äußeren Spannung können wir J numerisch lösen. Wenn der Strom I verwendet würde, wäre der Widerstand in Ohm angegeben; da hier jedoch J in A/cm^2 angegeben ist, sind r_s und r_{sh} in $\Omega \cdot \text{cm}^2$ angegeben. Die Übertragung desselben numerischen Widerstandswertes zwischen den beiden Gleichungen ohne eine Einheitenumrechnung führt zu einem großen Fehler, der von der Probenfläche abhängt. [\[B06\]](#) [\[B11\]](#)

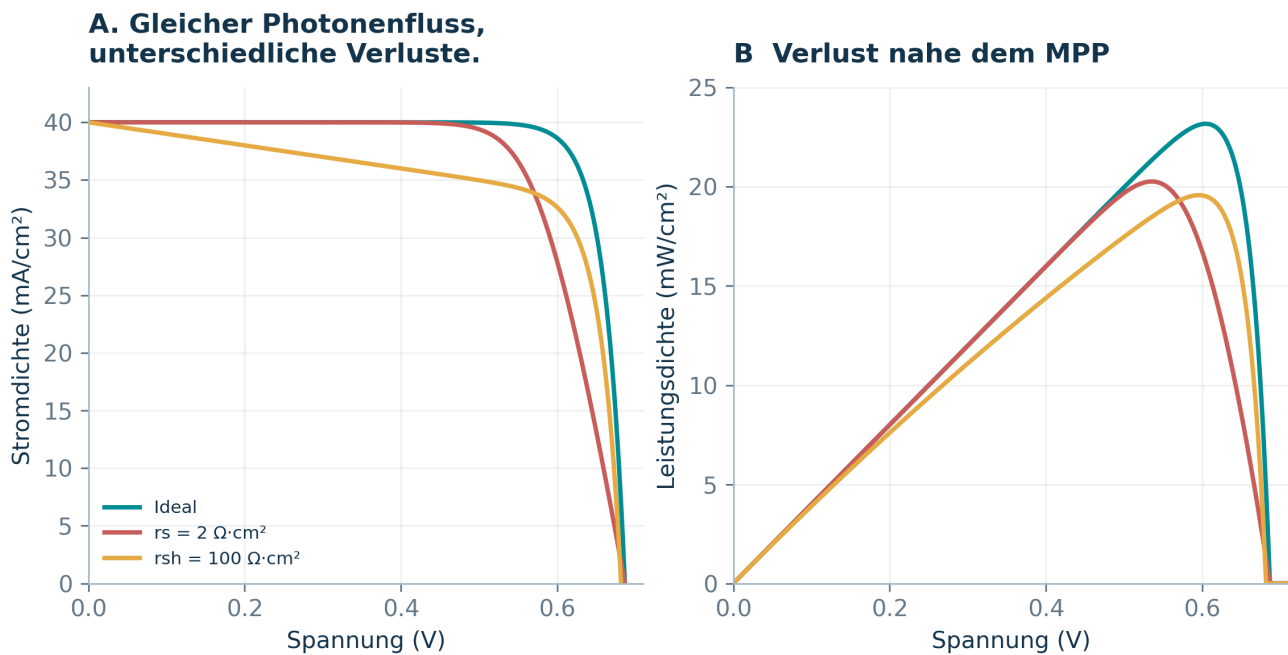


Abbildung 15. Die unterschiedlichen Auswirkungen von Serien- und Parallelverlusten auf die Kurve. Alle Kurven wurden mit denselben Werten für J_{ph} , J_0 , Temperatur und Idealitätsfaktor berechnet. Der Serienwiderstand verursacht insbesondere bei hohen Strömen einen inneren Spannungsverlust; der Parallelpfad führt zu einem spannungsabhängigen Leckstrom. Das Panel B zeigt direkt den Einfluss des Verlusts auf den Punkt maximaler Leistung. Die Kurven sind Lösungen der impliziten Gleichung und keine Messwerte. [B11]

Beschränken Sie sich nicht auf die einfache Regel „Rechte Steigung ist der Serienwiderstand, linke Steigung ist der Parallelwiderstand“. Diese Ansätze liefern nur eine ungefähre Charakterisierung in den entsprechenden Betriebsbereichen. Die gemeinsame Anpassung der Dunkel- und Lichtkennlinien, die Parameterstabilität bei variierender Bestrahlung und Temperatur, stellt die Gültigkeit des äquivalenten Schaltkreises noch stärker auf die Probe. Zwei Modelle, die mit einer sehr großen Parameterunsicherheit zur gleichen Kurve passen, bedeuten nicht, dass nur ein einziger physikalischer Mechanismus gemessen wird.

Schnelle Abschätzung: Bei $J_{mpp} = 20 \text{ mA/cm}^2$ ergibt sich $r_s = 1 \Omega \cdot \text{cm}^2$, was zu einem ohmschen Verlust von etwa $0,4 \text{ mW/cm}^2$ führt. Wenn J sich verdoppelt, vervierfacht sich dieser Verlust. Daher sollten konzentrationbasierte Zellen und Tandemkontakte unter den gleichen Strombedingungen bewertet werden.

Die Kurve mit dem Querschnitt der Zelle in Beziehung setzen

Die vordere Beschichtung der Zelle verringert das von der Oberfläche zurückgeworfene Licht; bei gleicher Beleuchtung können dadurch mehr Photonen den Absorber erreichen. Die n- und p-Bereiche haben unterschiedliche Majoritätsladungsträger. In der **Verarmungszone** dazwischen nimmt die Zahl beweglicher Ladungsträger ab, und das elektrische Feld der ortsfesten ionisierten Dotieratome gewinnt an Bedeutung. Die vorderen und hinteren Metallkontakte leiten den Strom in den äußeren Stromkreis. Jedes dieser Merkmale kann die Kennlinie beeinflussen; dieselbe Kennlinienänderung kann mehrere Ursachen haben.

Kreuzvalidierung ist die Überprüfung desselben physikalischen Ergebnisses durch eine andere Messmethode. Beispielsweise wird der aus einer spektralen Summenmessung berechnete Kurzschlussstrom mit dem Kurzschlusspunkt der Strom-Spannungs-Kennlinie verglichen. Übereinstimmung unterstützt die Interpretation; bei Abweichungen ist es erforderlich, Faktoren wie die Fläche, das Lichtspektrum, die Kalibrierung oder die Messhistorie erneut zu überprüfen.

Häufige Fehler und Übungsaufgaben

Die Aussage „ $V_{oc} \times I_{sc}$ ist die Leistung der Zelle“ ist unvollständig; diese beiden Größen beziehen sich auf unterschiedliche Betriebspunkte, und ihr Produkt wird mit dem Füllfaktor (FF) korrigiert. Auch die Aussage „Die beste Kurvenanpassung bedeutet korrekte Physik“ ist falsch. Mehr unabhängige Messungen liefern manchmal mehr Informationen als ein komplexeres äquivalentes Schaltbild.

1. Wenn in einer 1 cm^2 -Zelle 40 mA und in einer 4 cm^2 -Zelle 160 mA gemessen werden, wie hoch sind die Stromdichten? **Antwort:** In beiden Fällen 40 mA/cm^2 .
2. Wenn die Temperatur 298,15 K beträgt, der Faktor $n_{id} = 1$ ist und J_{ph}/J_0 groß ist, um wie viel erhöht sich die ideale Leerlaufspannung V_{oc} , wenn die Lichtintensität verdoppelt wird? **Antwort:** Ungefähr 17,81 mV.
3. Welchen Wirkungsgrad hat die Solarzelle bei $V_{oc} = 0,70 \text{ V}$, $J_{sc} = 35 \text{ mA/cm}^2$, $FF = 0,80$ und $G = 100 \text{ mW/cm}^2$? **Antwort:** 19,6 %.

Lesepfad: Untersuchen Sie zunächst die Geometrie der Kurve ([H23]) und anschließend die mathematische Annäherung des Füllfaktors ([H22]). Überprüfen Sie bei jedem neuen Modell, ob die Leistung erhalten bleibt, die Einheiten konsistent sind und die ideale Grenze wiederhergestellt wird.

Detailliertes Gleichgewicht und Spannungsverluste: Was begrenzt die theoretische Grenze?

Wie wird eine theoretische Grenze definiert?

„Wie hoch kann der Wirkungsgrad der besten Solarzelle sein?“ ist eine unvollständige Frage. Handelt es sich um einen einzelnen Absorber oder mehrere Absorber? Wird Sonnenlicht oder konzentriertes Licht verwendet? Welche Temperatur und welches Spektrum werden verwendet? Welche Verluste werden als unvermeidlich akzeptiert? Die **theoretische Grenze** ist das höchste Ergebnis innerhalb einer klar definierten Modellfamilie. Es ist nicht der Wert, den ein Material in der Fabrik erreichen wird, oder der einzige universelle Wert, den die Natur jedem Bauelement auferlegt.

Im traditionellen Modell einer einzelnen pn-Übergangszelle erzeugen niederenergetische Photonen, deren Energie unterhalb der Bandlücke liegt, keine nutzbaren Elektron-Loch-Paare. Hochenergetische Photonen geben nach der Erzeugung eines Elektron-Loch-Paares den Überschuss an Energie meist in Form von Wärme ab. Eine Verkleinerung der Bandlücke ermöglicht die Nutzung von mehr Photonen, reduziert aber die Spannung, die pro erzeugtem Elektron-Loch-Paar gewonnen werden kann. Eine Vergrößerung der Bandlücke wirkt sich entgegengesetzt aus. Die **Shockley-Queisser-Berechnung** quantifiziert diesen Kompromiss und berücksichtigt dabei auch die durch das Bauelement erzeugte Lichtemission. [H25]

Was wird im „detaillierten Gleichgewicht“ ausgeglichen?

Wenn ein Objekt im Dunkeln und bei der gleichen Temperatur wie seine Umgebung nur Licht absorbieren würde und niemals Licht emittieren würde, würde es durch die einseitige Entnahme von Energie aus seiner Umgebung das Gleichgewicht stören. Die gleiche Beziehung zwischen Absorption und Emission über optische Kanäle erfordert, dass berücksichtigt wird, dass eine Solarzelle auch ein Lichtemittierer ist. In einem Gleichgewichtszustand sind die Prozesse ausgeglichen. Wenn zusätzliches Licht von der Sonne eintrifft, gerät das Bauelement aus dem Gleichgewicht; die Erzeugung von Elektrizität, die erhöhte Ladungsträgerdichte und die Emission werden gleichzeitig gelöst. Die Aussage „Wenn wir die Emissionsverluste auf Null reduzieren, überschreiten wir die Grenze“ kann bedeuten, dass das Modell unter den gleichen Absorptionsbedingungen seine eigene Konsistenz verliert.

Beispielhafte Energieberechnung: Wenn ein Photon mit 2 eV in einem Material mit einer Bandlücke von 1,1 eV ein Elektron-Loch-Paar erzeugt, entsteht beim Übergang zu

den Bandrändern eine Energiedifferenz von etwa 0,9 eV. Wenn die Klemmenspannung 0,70 V beträgt, wird eine Energie von 0,70 eV pro Elektron im externen Stromkreis übertragen. Es ist auch die Differenz zwischen 1,1 eV und 0,70 eV zu berücksichtigen; die Bandlücke ist nicht direkt die Klemmenspannung. Dieses einzelne Photonbeispiel ist kein vollständiger Wirkungsgrad, sondern dient dazu, zu zeigen, welche Energiedifferenzen getrennt betrachtet werden müssen.

Auch der logarithmische Zusammenhang beim Spannungsverlust erfordert Anschauung. Der **natürliche Logarithmus** gibt an, mit welcher Potenz der Basis e eine Zahl erhalten wird; e beträgt ungefähr 2,718. Beispielsweise ist $\ln(10)$ ungefähr 2,303. In manchen idealisierten Beziehungen bringt eine Verringerung eines Verlustkanals um den Faktor zehn bei Raumtemperatur einen Spannungsgewinn von einigen zehn Millivolt. Das bedeutet keine Verzehnfachung der Leistung. Im Folgenden achten wir besonders darauf, dass die Verhältnisse im Logarithmus dimensionslos sind, und auf die verwendeten Reziprozitätsannahmen.

Verständniskontrolle: Grafik, die die Grenze überschreitet

Wenn ein Ergebnis über einer Grenzkurve liegt, sollte zunächst geprüft werden, ob es sich um dasselbe Modell handelt. Tandem-, Konzentrations-, unterschiedliche Spektrum- oder Flächendefinitionen können die Vergleichbarkeit beeinflussen. Auch Messfehler sind möglich. Ohne anzugeben, welche Annahme geändert wurde, dürfen keine Aussagen wie „die grundlegenden physikalischen Gesetze wurden verletzt“ oder „das Ergebnis ist definitiv falsch“ getroffen werden.

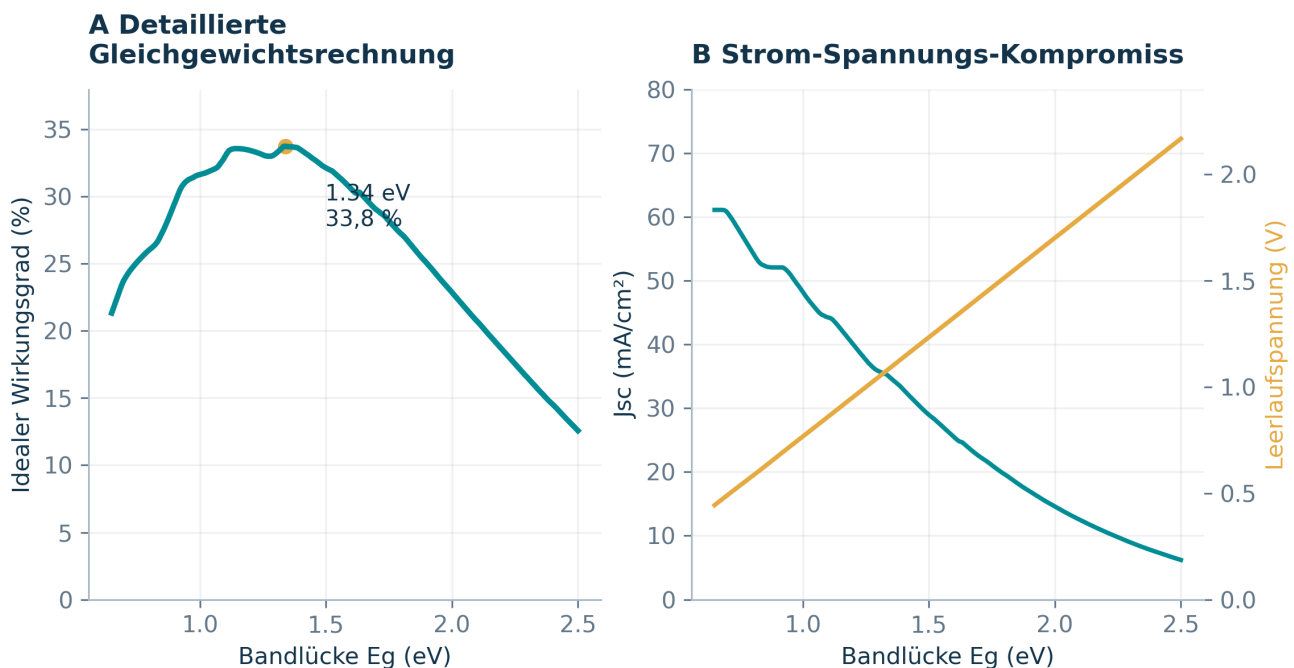


Abbildung 16. Neuberechnung der idealen Wirkungsgradgrenze eines einzelnen Übergangs. Eingangsdaten: globales ASTM-G173-Spektrum; Temperatur: 298,15 K; stufenförmige Absorption; idealer Rückspiegel; externe Emission in eine Halbkugel. Panel A zeigt das Wirkungsgradmaximum, Panel B den Stromverlust und den Spannungsgewinn bei zunehmender Bandlücke. Die Kurve ist keine Tabelle gemessener Weltrekorde. [H09] [H25] [H26] [B10]

Der Wert einer Obergrenze ergibt sich aus den zugrunde liegenden Annahmen

Die Leistungsgrenze ist nicht die einzige, unveränderliche Größe, die die Natur einem Bauelement auferlegt. Wenn definiert wird, welche Photonen absorbiert werden, wie viele Ladungsträger erzeugt werden, wie schnell die Ladungsträger abkühlen, wie viele unabhängige chemische Potentiale vorhanden sind und aus welchen Winkeln das Licht ein- und austritt, kann eine Grenze berechnet werden. Wenn diese Definition geändert wird, ändert sich auch die berechnete Grenze. Daher sollte vor der Präsentation eines Ergebnisses als „Überschreitung der Grenze“ geprüft werden, ob die beiden Berechnungen zur gleichen Kategorie gehören.

In ihrem Artikel aus dem Jahr 1961 legten Shockley und Queisser die Grenze für das detaillierte Gleichgewicht für einen p-n-Übergang-Solarwandler fest, wobei nur strahlungsinduzierte Rekombination berücksichtigt wurde. Die ursprüngliche Arbeit behandelte die Sonne mit einer Temperatur von 6000 K und die Zelle mit einer Temperatur von 300 K unter Verwendung der Annäherung eines schwarzen Körpers; das historische Näherungsergebnis 30 % ist an diese Bedingungen gebunden. [H25] Die Tatsache, dass die mit dem aktuellen AM1.5G berechneten Grenzen für einen einzelnen Übergang etwa ein Drittel kleiner sind, stellt ein weiteres spektrales Problem dar. In seiner Studie aus dem Jahr 2016 stellt Rühle tabellarisch die Strom-, Spannungs- und Maximalleistungswerte in Abhängigkeit von der Bandlücke dar. [H26]

Einfallende Photonen und unvermeidliche Strahlungsemission

In einem idealen Stufenabsorber wird angenommen, dass $a(E) = 0$ für $E < E_g$ und $a(E) = 1$ für $E \geq E_g$ gilt. Der Photostrom ist $J_{ph} = q \int a(E) \phi_{sun}(E) dE$. Photonen mit einer Energie, die unterhalb der Bandlücke liegt, erzeugen in diesem Einzelphotonenmodell keine Elektron-Loch-Paare. Photonen mit einer höheren Energie erzeugen jeweils ein Paar; die überschüssige Energie über E_g wird durch schnelle thermische Relaxation verloren. Die Spannung wurde noch nicht berechnet: Da die Energie eines Paares E_g beträgt, kann keine elektrische Arbeit von $qV = E_g$ extrahiert werden.

In einem isotropen äußeren Medium ist der in einen einzigen Halbraum austretende Photonenfluss eines schwarzen Körpers gegeben durch $\phi_{bb}(E, T) = [2\pi E^2 / (h^3 c^2)] / [\exp(E / (kBT)) - 1]$, wobei die Energie in Joule angegeben wird. Der Sättigungsstrom $J_{0,rad}$ wird durch $q \int a(E) \phi_{bb}(E, T) dE$ berechnet. Diese Formel setzt den Brechungsindex des äußeren Mediums auf 1; eine Emission von der Rückseite wird zusätzlich vernachlässigt. Wenn beide Oberflächen auf die gleiche Weise strahlen, muss ein entsprechender geometrischer Faktor hinzugefügt werden.

Bei Anlegen einer Spannung erhöht das chemische Potenzial der Ladungsträger die Emission. In der Boltzmann-Näherung für den hochenergetischen Verteilungsschwanz erhält man $J_{rad}(V) \approx J_{0,rad} [\exp(qV / (kBT)) - 1]$. Dadurch erreicht man im detaillierten

Gleichgewicht die bekannte ideale Diodenkennlinie: $J(V) = J_{ph} - J_{rad}(V)$. Das Maximum von V_i wird gefunden und durch die einfallende optische Leistung dividiert. Diese Herleitung zeigt, dass die Grenze sowohl eine Photonenzählung als auch eine Berechnung der freien Energie darstellt.

Im verallgemeinerten Planck-Ansatz geht $E - \mu_y$ in den exponentiellen Nenner des Emissionsausdrucks ein; μ_y steht in geeigneten Bedingungen im Zusammenhang mit der Quasi-Fermi-Aufspaltung von Elektronen und Löchern. Würfels Arbeit von 1982 behandelt die thermische und lumineszente Emission unter Berücksichtigung des chemischen Potentials der Photonen zusätzlich zur Temperatur des Emitters. [H27] Somit ist es nicht notwendig, eine lichtemittierende Zelle als tausende von Grad heiß anzunehmen, obwohl dies in Wirklichkeit nicht der Fall ist.

Die Spannungsverluste in ihre Bestandteile aufschlüsseln

Die gesamte Leerlaufspannung kann als $V_{oc} = E_g/q - V_{oc}$ definiert werden. Diese Größe beinhaltet die kumulative Wirkung aller strahlungsbedingten und nicht-strahlungsbedingten Ursachen; sie ist nicht nur auf Defektverluste beschränkt. Die optische Absorptionskante, die Winkelabhängigkeit der Emission, das Spektrum, die Temperatur und der Photonenfluss beeinflussen die strahlungsbedingte Referenz. Daher ist es wichtig, auch zu wissen, wie E_g bestimmt wurde, wenn die V_{oc} -Werte zweier Materialien verglichen werden.

Bei einer festen strahlenden Referenz lässt sich die externe Strahlungseffizienz ERE über $\Delta V_{nonrad} = -(kBT/q) \ln(ERE)$ mit dem nichtstrahlenden Spannungsverlust verknüpfen. ERE ist hier ein Bruchteil zwischen 0 und 1, kein Prozentwert; der Betriebspunkt und die Definition der externen optischen Auskopplung müssen angegeben werden. Raus Reziprozitätsarbeit von 2007 leitet den Zusammenhang zwischen photovoltaischer Quanteneffizienz und elektrolumineszenter Emission sowie zwischen Leerlaufspannung und Strahlungseffizienz her. [H28]

Wenden Sie diese Beziehung nicht blind auf eine beliebige Photolumineszenzintensität an. Eine absolute Kalibrierung, die Anregungsbedingungen, die Bauelementfläche, der Emissionswinkel und der entsprechende Injektionspunkt sind erforderlich. Die quasi-Fermi-Aufspaltung innerhalb des Materials, der Wert der Leerlaufspannung des fertigen Bauelements und der Elektrolumineszenzwirkungsgrad sind unterschiedliche Beobachtungen. Wenn die Ladungsträgersammlung stark von der Spannung abhängt, müssen die Annahmen für die Verwendung der einfachen Reziprozität zusätzlich überprüft werden.

Betrachtetes Beispiel: Prozent- und Logarithmus-Falle

Beispiel zur Veranschaulichung. Bei 298,15 K beträgt $V_T = 25,6926$ mV. Für $ERE = 1\% = 0,01$ ergibt sich $\Delta V_{\text{nonrad}} = 118,32$ mV. Für $ERE = 0,01\% = 0,0001$ beträgt der Verlust 236,64 mV. Eine hundertfache Verschlechterung von ERE führt nicht zu einer hundertfachen Erhöhung des Verlusts, sondern erhöht ihn um etwa 118,32 mV. Die physikalische Bedeutung des Logarithmus ist die exponentielle Beziehung zwischen der Ladungsträgerdichte und dem chemischen Potenzial.

Bei einer inversen Berechnung, bei der $\Delta V_{\text{nonrad}} = 200$ mV angegeben wird, ergibt sich $ERE = \exp(-0,200/0,0256926) \approx 0,0004162$, also 0,04162 %. Das direkte Schreiben von 0,0004162 als Prozentsatz würde zu einem hundertfachen Fehler führen. Wenn diese Größe die gesamte Woc darstellt, kann die gleiche inverse Transformation nicht durchgeführt werden; zuerst muss die strahlungsinduzierte Komponente getrennt werden.

Ein weiteres Beispiel für eine Geometrie: Wenn alle anderen Parameter konstant bleiben und die Anzahl der externen Strahlkanäle verdoppelt wird, wodurch $J_{0,\text{rad}}$ ebenfalls verdoppelt wird, sinkt die ideale Leerlaufspannung (V_{oc}) um etwa $V_T \ln 2 = 17,81$ mV. Diese Berechnung zeigt, dass der Rückreflektor nicht nur den Lichtweg verlängert, sondern unter geeigneten Bedingungen auch die externe Strahlgeometrie beeinflussen kann. Die parasitäre Absorption und die Effekte der Reabsorption des realen Reflektors müssen jedoch zusätzlich modelliert werden.

Ein Programm zur Berechnung der Wirkungsgradgrenze als Forschungswerkzeug nutzen

In einer detaillierten Gleichgewichtsrechnung müssen die Spektraldaten, die Einheiten und der Integrationsbereich gespeichert werden. Zuerst wird die gesamte einfallende Leistung unabhängig überprüft. Anschließend wird eine Bandlücken-Analyse durchgeführt; es wird geprüft, ob der Photostrom mit zunehmender Bandlücke abnimmt, die Spannungsskala plausibel ist und die maximale Leistung innerhalb der Grenzen liegt. Wenn das Energiegitter verfeinert wird, sollte das Ergebnis stabil bleiben. Zwei Berechnungen, die in Joule- und Elektronenvolt-Einheiten durchgeführt werden, sollten das gleiche Ergebnis liefern; der Faktor q bei der Variablenumrechnung darf nicht zweimal angewendet werden.

In der Ergebnistabelle werden $T = 298,15$ K und $T = 300$ K als getrennte Bedingungen angegeben. Optische Konzentration, einzelne oder doppelte Abstrahlhalbkugeln, stufenweise oder gemessene Absorption, Reflexion und die Anzahl der Anschlüsse werden erläutert. Eine solche Berechnung sagt nicht den Laborwirkungsgrad eines neuen Materials voraus, sondern zeigt, wie weit man kommen könnte, wenn die Verluste in der angegebenen Architektur eliminiert würden. Die tatsächliche

Herstellung des Materials und seine Funktionsfähigkeit als Bauelement erfordern einen separaten Nachweis.

Die Grenze numerisch rekonstruieren

Um eine theoretische Grenze nutzen zu können, müssen die Eingangsbedingungen und die optische Geometrie definiert werden. Hier wird ein einzelner Übergang betrachtet, wobei die Stufenabsorption $a(E) = 1$ ($E \geq E_g$) ist, ein Photon erzeugt ein Elektron-Loch-Paar, die Zelle hat eine Temperatur von 298,15 K, es wird das nicht-konzentrierte globale Spektrum nach ASTM G173 verwendet und ein idealer Rückreflektor ausgewählt. Die Zelle strahlt in eine äußere Halbkugel. Eine Geometrie, bei der auch die Rückseite strahlen kann, führt nicht zum gleichen Ergebnis.

Zunächst wird J_{sc} anhand des einfallenden Spektrums berechnet. Anschließend wird der äquivalente Strom bestimmt, der von der Zelle in Form von Photonen abgestrahlt wird, während sich die Zelle im Dunkeln in thermischem Gleichgewicht mit ihrer Umgebung befindet. Wenn die Energie E in Joule angegeben ist, wird der Photonfluss eines schwarzen Körpers auf einer Halbkugel verwendet:

$$J_{0,rad} = q \frac{2\pi}{h^3 c^2} \int_{E_g}^{\infty} \frac{E^2}{\exp(E/k_B T) - 1} dE. \quad (I.8.1)$$

In dieser Gleichung wird E_g in Joule umgerechnet. Die numerische Integration mit der Variablen $x = E/(k_B T)$ ist vorteilhafter. Bei angelegter Spannung steigt die Anzahl der emittierten Photonen mit dem Faktor $\exp(qV/k_B T)$ an, was der Boltzmann-Grenze entspricht. Die Spannungsabhängigkeit des Stroms ist hier keine „defektbedingte Reduktion“, sondern die inhärente strahlende Rekombination der idealen Zelle. Die Bilanz der ein- und austretenden Photonen bestimmt $J(V)$, und sein Maximum ergibt den idealen Wirkungsgrad. [H25] [H26] [H27]

Für $E_g = 1,34$ eV ergibt die Berechnung in diesem Buch $J_{sc} = 35,032$ mA/cm², $V_{oc} = 1,08350$ V und $V_{mpp} = 0,98905$ V. Bei $J_{mpp} = 34,145$ mA/cm² beträgt die Leistungsdichte etwa 33,77 mW/cm², was bei einer Eingangsleistung von 1000,371 W/m² einem Wirkungsgrad von etwa 33,76 % entspricht. Das Maximum der Bandlücken-Abtastung liegt bei etwa 1,34 eV. Die Zahlen nach dem zweiten Dezimalzeichen sind keine universellen Konstanten, sondern dienen der Reproduzierbarkeitsprüfung des angegebenen numerischen Modells.

Das Energiebudget in vier separate Fragen aufteilen

Photonen mit einer Energie unterhalb von E_g werden in diesem Modell nicht absorbiert. Die Energie eines Photons mit einer Energie oberhalb von E_g , die die Bandlücke E_g übersteigt, wird größtenteils an das Gitter übertragen, wenn die Ladungsträger zu den Bandrändern relaxieren. Nicht alle der verbleibenden Ladungsträgerpaare gelangen in den externen Stromkreis; ein Teil davon rekombiniert bei der Betriebsspannung strahlend. Die elektrische Arbeit, die jedes austretende Paar leistet, ist jedoch nicht E_g , sondern qV . Wenn man diese vier Schritte unterscheidet, wird klar, warum „ich habe das gesamte Licht absorbiert“ und „ich habe das gesamte Licht in Elektrizität umgewandelt“ zu unterschiedlichen Ergebnissen führen.

Betrachten Sie die Kurve zwischen J_{sc} und der Bandlücke als ein Diagnosewerkzeug. Während die Bandlücke abnimmt, steigt der Strom an, aber V_{oc} nimmt ab. Das Maximum liegt in der Mitte dieses Kompromisses. Eine Tandemzelle verändert diese Anforderung einer einzelnen Bandlücke; stattdessen wird eine optische und elektrische Abstimmung zwischen den Schichten erreicht. Wenn man davon spricht, die SQ-Grenze zu überschreiten, sollte klar angegeben werden, welche Annahme sich ändert. Die Überschreitung der Grenze einer Zelle mit einem einzelnen Übergang durch eine Zelle mit zwei Übergängen stellt keine Verletzung des Energieerhaltungssatzes dar.

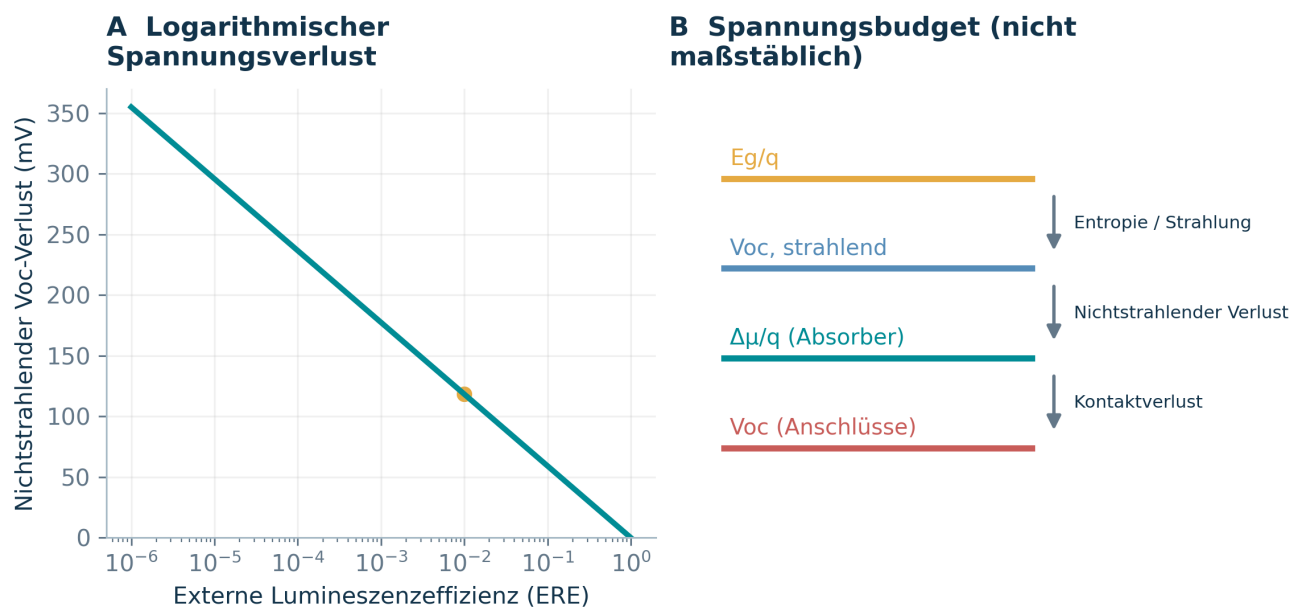


Abbildung 17. Die Spannungsverluste aufschlüsseln. In Panel A führt jede Abnahme der externen Lumineszenzeffizienz um den Faktor zehn zu einem Verlust von etwa 59,16 mV bei 298,15 K. Panel B stellt das theoretische Budget von E_g/q bis zur Klemmenspannung dar; die Abstände zwischen den Linien sind nicht skaliert. Wenn im Absorber eine hohe quasi-Fermi-Aufspaltung vorliegt, die Klemmenspannung V_{oc} jedoch niedrig ist, müssen die Kontakte und die Grenzflächen separat untersucht werden. [H28] [T26]

Wie kann man die Reziprozität nutzen?

Unter geeigneten Bedingungen linearer Transport- und Reziprozitätsannahmen ermöglicht die Beziehung zwischen den durch EQE bestimmten externen optischen Kanälen und der Elektrolumineszenz die Berechnung der Verluste innerhalb desselben Rahmens. Die Beziehung $\Delta V_{oc,nr} = -V_T \ln(ERE)$ über die externe Strahlungsquanteneffizienz (ERE) ist ein starkes Werkzeug für die Interpretation. Allerdings spiegelt die externe Strahlung nicht nur die interne Rekombinationswahrscheinlichkeit wider: Auch die Photonenauskopplung und die optische Geometrie sind von Bedeutung. Daher können die PLQY- oder ERE-Werte verschiedener optischer Stapel ohne eine einheitliche experimentelle Definition nicht direkt in ein Verhältnis von Defektdichten umgerechnet werden. [H28]

Was bedeutet chemisches Potenzial in diesem Zusammenhang?

Das chemische Potenzial beschreibt die Änderung der freien Energie, die mit der Zugabe eines Teilchens zu einem System unter gegebenen Gleichgewichtsbedingungen verbunden ist; die Bezeichnung „chemisch“ bedeutet nicht zwangsläufig, dass eine chemische Reaktion stattfindet. Für die Elektron- und Loch-Populationen in einem beleuchteten Halbleiter können separate Füllgrad-Maßstäbe verwendet werden. Die Quasi-Fermi-Niveaus repräsentieren diese Maßstäbe. Wenn die Aufspaltung dieser Niveaus zunimmt, erhöht sich die Fähigkeit des Bauelements, elektrische Arbeit zu verrichten; die tatsächliche Klemmenspannung wird jedoch auch durch Kontaktverluste begrenzt.

Thermalisierung ist der Prozess, bei dem hochenergetische Ladungsträger ihre überschüssige Energie an die Kristallschwingungen abgeben und sich so den Bandkanten nähern. Dieser Prozess ist nicht dasselbe wie Rekombination: Die Ladungsträger können auch nach der Abkühlung noch gesammelt werden. Eine **strahlungsbasierte Referenz** ist hingegen ein ideales Bauelement, das unter den gleichen optischen und elektrischen Annahmen ausschließlich durch Lichtemission rekombiniert. In einem realen Bauelement werden die zusätzlich vorhandenen, nicht-strahlenden Kanäle im Vergleich zu dieser Referenz separat betrachtet. Dadurch können die Begriffe „Energie“, „Spannung“ und „zusätzlicher Verlust“ nicht gegeneinander ausgetauscht werden. [H25] [H27] [H28]

Häufige Fehler und Übungsaufgaben

Die Schlussfolgerung „Wir haben eine obere Grenze für einen hohen Wirkungsgrad berechnet, daher ist der Kandidat hochwirksam“ ist ungültig. Auch die Aussage „Die SQ-Grenze begrenzt jede Art von Energiewandler“ ist falsch; eine Architektur, die über das Modell eines einzelnen Übergangs hinausgeht, wird mit neuen Annahmen bewertet. Dies bedeutet nicht, dass die Energieerhaltung überschritten wird.

1. Wenn ERE von 10 % auf 1 % sinkt, wie groß ist der zusätzliche Spannungsverlust bei 298,15 K? **Antwort:** $V_T \ln 10 \approx 59,16 \text{ mV}$.

2. Warum ist $E_g/q - V_{oc}$ nicht einfach ein direkter, nicht-strahlender Verlust? **Antwort:** Es beinhaltet auch unvermeidliche strahlungsbedingte und entropische Beiträge.

3. Warum liefert die alleinige Berechnung von J_{sc} nicht die Wirkungsgradgrenze?

Antwort: Es ist auch die Betriebsspannung und der durch die Rekombination bestimmte Maximum-Power-Point erforderlich.

Lesepfad: Zuerst die Annahmen des ursprünglichen Modells ([H25]), dann die spektrale Tabellierung desselben Problems ([H26]) und anschließend die Verbindung zwischen chemischem Potenzial und Reziprozität ([H27] [H28]) lesen. Die Fähigkeit, die Bedingungen vor einer numerischen Grenze in einem einzigen Absatz zusammenzufassen, ist wertvoller als das Auswendiglernen des Ergebnisses.

Mehrfachübergangszellen: Die Physik der spektralen Aufteilung

Wie teilen sich zwei Absorber das einfallende Licht?

Tandem ist ein Mehrfachübergangs-Bauelement, bei dem zwei Zellen gemeinsam in derselben Lichtbahn verwendet werden. Die obere Zelle hat meist eine größere Bandlücke; sie nutzt die energiereicheren Photonen und lässt einige der weniger energiereichen Photonen zur unteren Zelle durch. Die untere Zelle nutzt mit ihrer geringeren Bandlücke einen Teil dieses verbleibenden Lichts. Weder müssen die Schichten gleich dick sein, noch muss jede Farbe vollständig einer einzigen Zelle zugeordnet sein. Die tatsächliche Aufteilung wird durch die wellenlängenabhängige Absorption, Reflexion und Schichtdicke bestimmt.

Ziel dieses Ansatzes ist es, den Kompromiss zwischen „vielen Photonen, niedriger Spannung“ und „wenigen Photonen, hoher Spannung“ an einem einzelnen Übergang zu mildern. Die Auswertung von hochenergetischen Photonen mit einer höheren Spannung in der oberen Zelle kann den Energieverlust in Form von Wärme reduzieren. Die untere Zelle bietet zudem eine Nutzungsmöglichkeit für das Licht, das die obere Zelle durchlässt. Zusätzliche Schichten führen jedoch zu optischen und elektrischen Verlusten. Die Tatsache, dass beide Zellen einzeln betrachtet gut funktionieren, garantiert nicht, dass sich ihre Leistung bei der Kombination einfach addiert.

Die Anzahl der Anschlüsse gibt die Art der elektrischen Verbindung an

Anschluss, ist der Anschluss, der mit dem externen Stromkreis verbunden ist. Bei einem Zweianschluss-System, d.h. **2T**, sind die Unterzellen in einer Tandemzelle in Reihe geschaltet. Im stabilen Zustand fließt der gleiche Strom durch beide in Reihe geschalteten Zellen; ihre Spannungen addieren sich bei diesem gemeinsamen Strom. Bei einem Vieranschluss-System, d.h. **4T**, werden die optischen Stapel so konfiguriert, dass jede Zelle zwei separate Anschlüsse nach außen führt. Die Leistung der beiden Zellen kann unabhängig voneinander überwacht werden. Im Gegenzug können zusätzliche transparente Kontakte, Verkabelung und Leistungselektronik erforderlich sein.

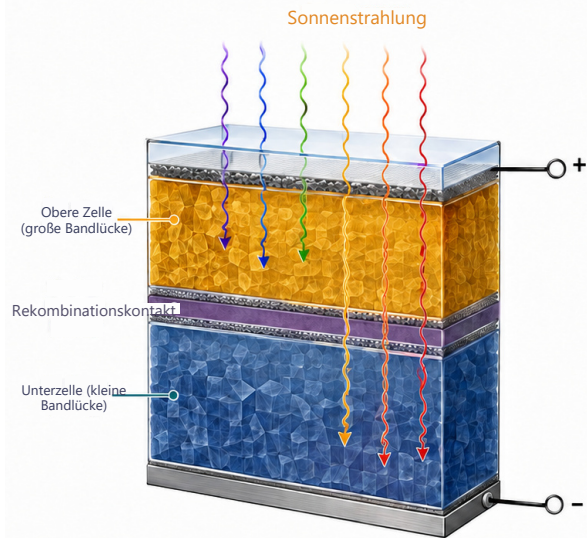
Synthetisches Beispiel: Zwei Teilzellen mit der gleichen Fläche liefern bei einem gewählten gemeinsamen Strom von 15 mA/cm^2 $1,00 \text{ V}$ bzw. $0,60 \text{ V}$. Die resultierende Leistungsdichte (**2T**) beträgt dann $15 \times (1,00 + 0,60) = 24 \text{ mW/cm}^2$. Dies ist jedoch nur

ein einzelner Betriebspunkt; um festzustellen, ob es sich um das Maximum handelt, müssen wir auch den Bereich um den gemeinsamen Strom durchsuchen. Wenn die maximale Leistung der oberen Zelle bei 18 mA/cm^2 und die der unteren Zelle bei 16 mA/cm^2 liegt, können wir diese beiden unterschiedlichen Ströme nicht gleichzeitig in einer Reihenschaltung verwenden.

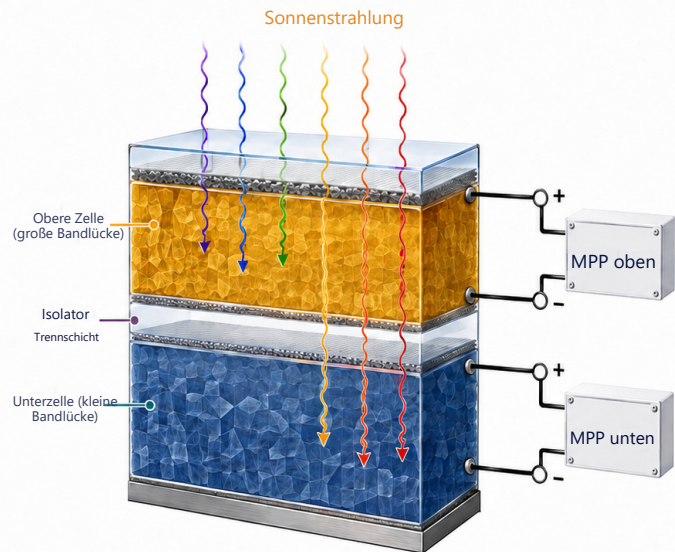
Bei einer 4T-Anordnung können die Leistungen an den getrennten Maxima addiert werden; die Leistung der unteren Zelle muss jedoch **unter dem durch die obere Zelle gefilterten Licht** gemessen werden. Wer die Leistung der unteren Zelle bei direkter Sonneneinstrahlung zur Leistung der oberen Zelle addiert, zählt die Energie mancher Photonen doppelt. **Stromanpassung** bedeutet, die nutzbaren Ströme der in Reihe betriebenen Teilzellen aufeinander abzustimmen. Wolken, Einfallswinkel und Spektrum können diese Abstimmung verändern. Ein einzelner Wirkungsgrad unter Standardbedingungen und der jährliche Energieertrag beantworten daher unterschiedliche Fragen.

Verständniskontrolle: Warum wurde die untere Zelle schwächer?

Wenn nach dem Hinzufügen der oberen Zelle der Strom der unteren Zelle sinkt, ist das nicht automatisch ein Herstellungsfehler; die obere Zelle hat einige Photonen genutzt. Um festzustellen, ob ein Fehler vorliegt, vergleichen Sie das gefilterte Spektrum, den darin erwarteten Strom der unteren Zelle und die tatsächliche Messung. So unterscheiden Sie die natürliche Folge der Energieaufteilung von einem neuen Verlustmechanismus.

A 2T: gemeinsamer Strom

Die Spannungen addieren sich; der Strom ist gemeinsam.

B 4T: autonomer Betrieb

Es werden zwei getrennte Maximalleistungspunkte ermittelt.

Abbildung 18. Optische Aufteilung und elektrische Verbindung im Tandem. Die links gezeigte 2T-Struktur hat zwei äußere Anschlüsse, einen gemeinsamen Strom und addierte Spannungen. In der rechten 4T-Struktur arbeiten zwei optisch übereinanderliegende Teilzellen über getrennte Anschlusspaare an getrennten Punkten maximaler Leistung. Die farbigen Strahlen sind qualitative Absorptionswege; die Zeichnung ist keine spektrale Messung. Der berechnete Leistungsvergleich folgt im nächsten Panel. [H29] Mit einem Bildgenerierungswerkzeug erstellte konzeptionelle Illustration; keine Messaufnahme.

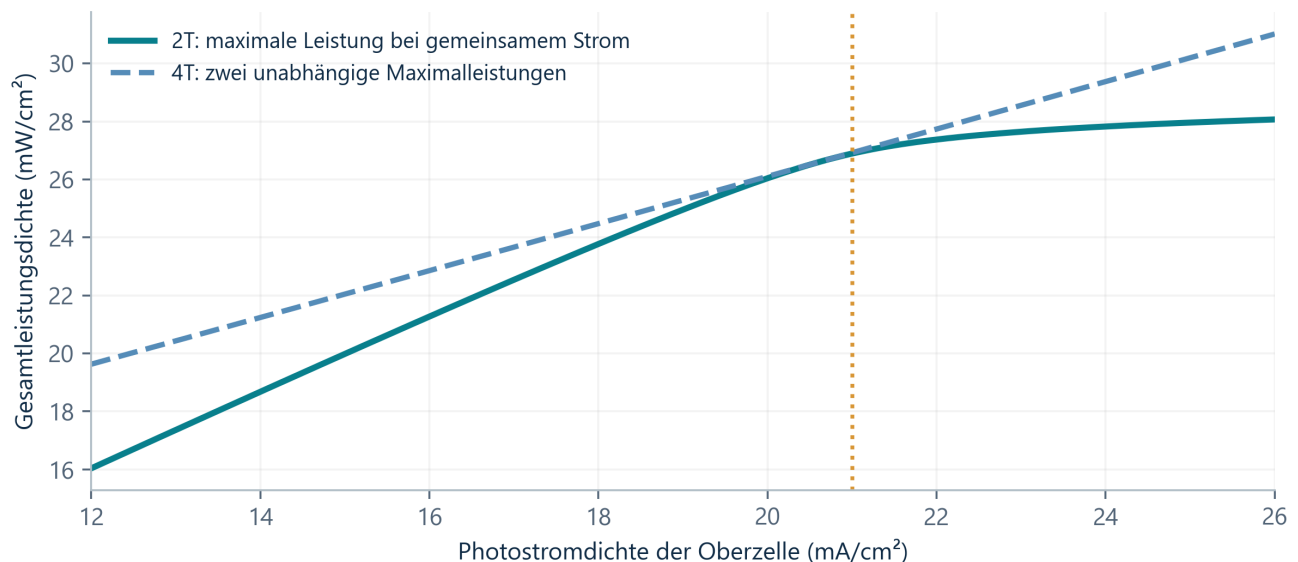
Leistungsverlust aufgrund von Stromungleichheit.

Abbildung 18 - berechnete ergänzende Teilabbildung. Vergleich, berechnet für die gleiche optische Eingangsleistung und zwei ideale Dioden. Der Photostrom der unteren Zelle ist mit 21 mA/cm^2 konstant; die Sättigungsströme der Teilzellen betragen oben 10^{-13} , unten $2 \times 10^{-8} \text{ A/m}^2$, die Temperatur ist auf $298,15 \text{ K}$ festgelegt. Die maximale Leistung bei 2T wird nicht nur mit dem kleinsten Kurzschlussstrom, sondern durch die gemeinsame Verwendung der beiden $V(J)$ -Kurven ermittelt. [H29]

Die Kompromisslösung für eine einzelne Bandlücke aufteilen

Bei einem einzelnen Übergang fängt eine geringe Bandlücke mehr Photonen ein, liefert aber eine geringere Spannung und wandelt einen größeren Teil der hochenergetischen Photonen in Wärme um. Eine hohe Bandlücke kann eine hohe Spannung liefern, aber einen Großteil der roten und nahinfraroten Photonen nicht nutzen. Das Ziel eines Mehrfachübergangs-Bauelements ist es, diesen Kompromiss, der bei einem einzelnen Absorber besteht, auf mehrere Absorber zu verteilen, die unterschiedliche Energiebereiche nutzen.

Das von vorne einfallende Licht erreicht zuerst die obere Zelle mit der größeren Bandlücke und anschließend die untere Zelle. Im Idealfall nutzt die obere Zelle Photonen mit $E \geq E_{g, \text{ober}}$, während die untere Zelle Photonen mit $E_{g, \text{unter}} \leq E < E_{g, \text{ober}}$ nutzt. In der Realität beeinflussen der transparente Leiter, die Transportschichten, die Kontakte und der Absorber der oberen Zelle auch das Licht, das zur unteren Zelle gelangt. Die Tatsache, dass eine obere Zelle für sich genommen gut ist, bedeutet nicht, dass sie auch optisch gut für eine Tandemzelle geeignet ist.

Die Arbeit von De Vos aus dem Jahr 1980 ist ein klassischer Ausgangspunkt, der sich mit dem detaillierten Gleichgewicht in einer Tandem-Solarzelle befasst und zeigt, dass die Teilzellen nicht nur durch die Sonne, sondern auch gegenseitig durch ihre Elektrolumineszenz beleuchtet werden können. [H29] Diese strahlungsbedingte Kopplung zeigt, dass das bloße Addieren der Ergebnisse unabhängiger Einzelzellenberechnungen nicht in jedem Fall ausreicht.

Zwei Anschlüsse: gleicher Strom, Gesamtspannung

Durch die in Reihe geschalteten Teilzellen fließt an beiden Anschlüssen der gleiche Strom. Die Gesamtspannung ist $V_{\text{total}}(J) = V_{\text{oben}}(J) + V_{\text{unten}}(J) - V_{\text{Verbindung}}(J)$. Die Tandem-Leistungsdichte ist das Maximum der Funktion $p(J) = J V_{\text{total}}(J)$ bei Optimierung über die gemeinsame Stromdichte. Wenn J in A/cm^2 angegeben ist, ist p in W/cm^2 . Die Gesamtleistung wird durch Multiplikation mit der gemeinsamen Messfläche ermittelt. Selbst wenn der Verlust des Verbindungselements vernachlässigt wird, ist es in der Regel nicht möglich, dass beide Zellen gleichzeitig ihren jeweiligen maximalen Leistungspunkt erreichen.

„Der Tandemstrom ist gleich dem kleinen J_{sc} “ ist eine nützliche erste Annahme, aber kein vollständiges Betriebsmodell. Wenn Effekte wie endlicher Shunt-Widerstand, strahlungsinduzierte Kopplung, spannungsabhängige Sammlung und das Verhalten bei umgekehrter Polarität auftreten, kann sich die Grenze ändern. Die korrekte Methode besteht darin, die Spannungen der beiden Teilzellen bei gemeinsamem Strom zu

verwenden. Die Stromanpassung wird nicht nur durch die Auswahl der Bandlücken erreicht; auch die Dicke und die optischen Reflexionen tragen zum gleichen Ziel bei.

Für eine Reihenschaltung muss der Elektronenstrom einer Unterzelle mit dem Lochstrom der anderen in einem geeigneten Übergang eine kontinuierliche Verbindung bilden. Ein Tunneleffekt-Übergang oder eine Rekombinationsverbindung muss diese elektrische Funktion erfüllen und gleichzeitig den Lichtverlust so gering wie möglich halten. Bei der Auswahl eines neuen Verbindungsmaterials werden optische Transparenz, Kontaktwiderstand, chemische Stabilität und Verarbeitungstemperatur gemeinsam berücksichtigt.

Vier Anschlüsse: unabhängige Leistungsverfolgung

Die beiden Teilzellen mit ihren vier Anschlüssen sind elektrisch voneinander unabhängig. Die ideale kombinierte Leistungsdichte ergibt sich als $p_{\text{gesamt}} = \max(V_{\text{oben}}J_{\text{oben}}) + \max(V_{\text{unten}}J_{\text{unten}})$ und wird mit der gemeinsamen Fläche multipliziert, um die Gesamtleistung zu erhalten. Die Kennlinie der unteren Zelle muss jedoch unter dem von der oberen Zelle gefilterten Licht gemessen werden. Das einfache Addieren der separat unter vollständigem AM1.5G gemessenen Wirkungsgrade der beiden Zellen entspricht einer Berechnung, bei der die gleichen Photonen zweimal verwendet würden.

Die unabhängige Leistungsverfolgung ermöglicht eine größere Flexibilität bei der Anpassung an Stromungleichgewichte; im Gegenzug kann dies zusätzliche Kontakte, transparente Elektroden, Verdrahtung und Leistungselektronik erfordern. In einigen Bauelementen sind dies geringfügige, in anderen jedoch entscheidende Verluste. Die Frage, welche Topologie besser ist, wird nicht nur anhand der Zellwirkungsgradzahl beurteilt, sondern auch im Vergleich zur Gesamtfläche, der optischen Stapelung und dem elektrischen Sammelprotokoll.

Auch Architekturen mit drei Anschlüssen sind möglich. Gemeinsame Kontakte oder unterschiedliche Verbindungsschemata verändern die Strom- und Spannungscharakteristiken. Der Begriff „drei Anschlüsse“ definiert allein noch nicht das Messprotokoll; es muss erläutert werden, welche Anschlüsse gemeinsam sind und wie die beiden Ausgangsklemmen verwendet werden. Dieser Bereich ist ein Forschungsthema, bei dem die Standardvorstellung einer einzelnen Diode sorgfältig erweitert werden muss.

Auswahl der Bandlücke und Prozesskompatibilität

Eine ideale spektrale Anpassung kann einen Bereich für die Bandlücke einer effizienten oberen Zelle vorschlagen. Das tatsächliche Optimum verschiebt sich jedoch mit dem Spannungsdefizit der oberen Zelle, der Absorptionsleistung, der optischen Reaktion der unteren Zelle, der spektralen Variabilität und den Fertigungsverlusten. Die Auswahl eines Materials allein aufgrund seiner Nähe zur idealen Bandlücke eines Tandem-Systems vernachlässigt die Kosten für Rekombination und die Herstellbarkeit.

Wenn die untere Zelle in einer monolithischen Struktur zuerst hergestellt wird, darf der nachfolgende Prozess für die obere Zelle diese nicht beschädigen. Hohe Temperaturen können die Dotierungsprofile verändern; Lösungsmittel können die darunter liegende organische oder anorganische Schicht beschädigen; Plasma- oder Sprühprozesse können Grenzflächenfehler verursachen. Eine mechanische Verbindung kann einige dieser Einschränkungen mildern, führt aber zu neuen optischen Eigenschaften und Problemen mit der Haftung und thermischer Ausdehnung. Es wäre falsch, die Materialauswahl und die Prozesssequenz als zwei völlig getrennte Bereiche zu betrachten.

Aus diesem Grund ist das Tandemdesign eine zweifache, miteinander verbundene Optimierung: ein optisches System, das das Spektrum aufteilt, und ein elektrisches System, das in derselben Produktionskette arbeitet. Es muss numerisch nachgewiesen werden, ob der Gewinn in einem der Systeme den Verlust im anderen aufwiegt. Die Bestimmung der wichtigsten Parameter vor einer umfassenden Parametersuche reduziert unnötige Simulationen.

Durchgerechnetes Beispiel: der Preis des gemeinsamen Stroms

Beispiel zur Veranschaulichung. Unter realen, gefilterten Betriebsbedingungen sei der maximale Leistungspunkt der oberen Zelle 1,00 V und 18 mA/cm², der der unteren Zelle 0,60 V und 20 mA/cm². An den vier Anschlüssen beträgt die ideale Gesamtleistung $18 + 12 = 30$ mW/cm², d. h. 100 mW/cm² am Eingang, was als 30 % bezeichnet wird. In dieser Berechnung werden beide Kennlinien unter derselben optischen Stapelkonfiguration definiert.

Betrachten wir als einfaches Gedankenexperiment für zwei Terminals, dass bei einem gemeinsamen Strom von 18 mA/cm² die Spannung der oberen Zelle 1,00 V und die Spannung der unteren Zelle 0,61 V beträgt. Die Leistung beträgt dann $18 \times 1,61 = 28,98$ mW/cm². Diese Zahl ist nicht die exakte Lösung für das tatsächliche Optimum; die tatsächlichen J-V-Kurven müssen bei einem gemeinsamen Strom durchlaufen werden. Sie zeigt jedoch lediglich, wie eine Fehlanpassung zu Leistungsverlusten führen kann. Bei einer zusätzlichen Spannungsabnahme von 20 mV in einer Reihenschaltung beträgt

der Verlust an diesem Punkt $0,018 \text{ A/cm}^2 \times 0,020 \text{ V} = 0,36 \text{ mW/cm}^2$, was 0,36 absoluten Prozentpunkten Wirkungsgrad entspricht.

Im gleichen Beispiel reduziert die obere optische Struktur den Strom der unteren Zelle von 20 auf 17 mA/cm², wodurch sich das ursprüngliche Problem umkehrt: Jetzt ist die untere Zelle der begrenzende Faktor. Daher ist es nicht ausreichend, die Transparenz einer Schicht mit „95 % lässt durch“ zu beschreiben; entscheidend ist, bei welchen Wellenlängen 5 % Verluste auftreten. Selbst wenn der Verlust in einem schmalen, für die untere Zelle nützlichen Bereich nur einen kleinen Teil der Gesamtoptikleistung ausmacht, kann er die Stromverteilung beeinträchtigen.

Verändertes Spektrum und tatsächliche Energieerzeugung

Eine im Labor perfekt stromangepasste Zweiterminalzelle kann diese Anpassung am Morgen oder bei feuchter Witterung verlieren. Wasserdampf, Aerosole und der Einfallswinkel verändern das Spektrum. Für den jährlichen Energieertrag müssen zeitabhängige spektrale Bestrahlungsstärke, Temperatur und Leistungsverfolgung berechnet werden, statt nur einen einzelnen AM1.5G-Punkt zu betrachten. Ein hoher Wirkungsgrad unter Standardtestbedingungen bleibt wertvoll, erklärt aber nicht den gesamten jährlichen Kilowattstundenenertrag.

Strahlungskopplung kann bestimmte Inkompatibilitäten mildern: Ein Teil der durch Rekombination in der oberen Zelle emittierten Photonen kann in der unteren Zelle absorbiert werden. Dies ist keine kostenlose Energieerzeugung, sondern eine Übertragung von Ladungsträgern und Photonen von der oberen zur unteren Zelle. Ohne Angabe der Richtung, des Winkels und des Wirkungsgrades, mit dem dies geschieht, ist es nicht zuverlässig, einen Kopplungskoeffizienten auf jedes Tandem zu übertragen.

Warum ist die Tandem-Leistung nicht gleich dem Produkt aus minimalem Strom und der Summe der Leerlaufspannungen?

Für jede der beiden idealen Teilzellen können wir die Stromgleichung nach der Spannung auflösen und $V(J)$ schreiben:

$$V_i(J) = n_i V_T \ln \left[1 + \frac{J_{\text{ph},i} - J}{J_{0,i}} \right]. \quad (\text{I.9.1})$$

Hier bezeichnet n_i in dieser Gleichung den Diodenidealitätsfaktor der Teilzelle i ; das Symbol darf nicht mit der intrinsischen Ladungsträgerdichte verwechselt werden. In einem 2T-Bauelement fließt derselbe Strom J durch beide Zellen, und die

Gesamtspannung beträgt $V_1(J) + V_2(J)$. Das Leistungsoptimum ist das Maximum des Produkts dieser Summe mit dem Strom:

$$p_{2T} = \max_J \{J[V_1(J) + V_2(J)]\}. \quad (I.9.2)$$

Das Produkt aus dem minimalen J_{sc} und dem gesamten V_{oc} definiert ein oberes Rechteck; am tatsächlichen Maximum ist die Spannung jeder einzelnen Zelle kleiner als V_{oc} . Wenn die Stromdiskrepanz zunimmt, begrenzt sie die Leistungskurve der schwächeren Zelle; jedoch ändert sich auch die Betriebsspannung der Zelle mit Stromüberschuss. Daher ist es unzureichend, den Verlust einfach als die „Differenz der beiden Ströme“ zu berechnen.

Der 4T-Vergleich optimiert die Leistungen von Ober- und Unterzelle getrennt unter derselben optischen Anordnung. Wenn sich nur die elektrischen Freiheitsgrade ändern, kann die Summe der unabhängigen Maxima nicht kleiner sein als das Maximum unter der Bedingung eines gemeinsamen Stroms. Zusätzliche transparente Kontakte in einem realen 4T-Stapel können jedoch parasitäre Absorption verursachen. Bei unterschiedlichen optischen Strukturen ist eine automatische Überlegenheit von 4T mathematisch nicht garantiert. Diese Unterscheidung ist die wichtigste Kontrolle beim Architekturvergleich.

Wenn sich das Spektrum ändert, verändert sich nicht nur die gesamte Strahlung, sondern auch die Verteilung der Photonen im oberen und unteren Bereich. Zwei Zellen, die in einem Laborspektrum übereinstimmen, können durch Wolken, atmosphärische Bedingungen und saisonale Veränderungen in ihrer Leistung abweichen. Daher sind die Optimierung der jährlichen Energieausbeute und die Verwendung eines einzelnen STC-Punktes (Standard Test Conditions) im Tandemdesign zwei unterschiedliche Probleme. Ein solider Forschungsansatz besteht darin, zunächst den Standardpunkt zu validieren und anschließend die Energieerzeugung mit orts- und zeitabhängigen Spektren zu modellieren.

Häufige Fehler und Übungsaufgaben

„Wenn ich die Wirkgrade zweier Einzel-Übergänge addiere, erhalte ich den Tandem-Wirkgrad“ ist falsch. Ebenso kann man nicht sagen: „Je mehr Übergänge, desto besser ist das Modul in jeder Hinsicht“, da der ideale thermische Gewinn mit zusätzlichen optischen und elektrischen Verlusten konkurriert. Ein Mehrfach-Übergang verändert die Annahme des detaillierten Gleichgewichts für einen Einzel-Übergang, verletzt aber nicht die Thermodynamik.

1. Bei in Reihe geschalteten Teilzellen, welche Größe ist gleich und welche wird addiert? **Antwort:** Der Strom ist gleich, die Spannungen werden mit den entsprechenden Vorzeichen addiert.

2. Unter welchen Beleuchtungsbedingungen ist die Summe der Vier-Kontakt-Wirkungsgrade aussagekräftig? **Antwort:** Die Leistungen der oberen und unteren Zelle müssen in derselben optischen Anordnung ermittelt werden, wobei die untere Zelle dem gefilterten Licht ausgesetzt ist und der gemeinsame Flächen-/Leistungsdenner verwendet wird.

3. Wie viel Leistung geht bei einer gemeinsamen Stromdichte von 20 mA/cm^2 durch einen Verbindungsverlust von 50 mV verloren? **Antwort:** 1 mW/cm^2 ; bei einer Eingangsleistung von 100 mW/cm^2 ein absoluter Prozentpunkt Wirkungsgrad.

Lesepfad: Untersuchen Sie zunächst den historischen Ursprung des detaillierten Gleichgewichts von Tandemzellen ([H29]) und anschließend die physikalische Klassifizierung der fortgeschrittenen Konzepte ([H30]). Stellen Sie für jeden Tandemzellen-Vorschlag die optische Anordnung, den Terminalkreis, die gemeinsame Fläche und die Methode zur maximalen Leistungserfassung mit vier separaten Diagrammen oder Gleichungen dar.

Kristallines Silizium: Die Umwandlung eines guten Halbleiters in ein hochwertiges Produkt

Die Siliziumzelle schichtweise betrachten

Silizium ist ein Element, das mit dem Symbol Si dargestellt wird; das in Sand vorkommende Siliziumdioxid ist nicht dasselbe wie elektronisch reines Silizium. Um Zellen herstellen zu können, werden unerwünschte Verunreinigungen reduziert, ein Kristall gebildet und der Kristall in sehr dünne Scheiben geschnitten. Diese Scheibe wird als **Wafer** bezeichnet. Ein **Einkristall** zeichnet sich dadurch aus, dass die Anordnung der Atome über ein großes Volumen hinweg die gleiche Ordnung aufweist. In einem **polykristallinen** Material gibt es unterschiedlich orientierte Bereiche, d. h. Körner. Die elektrische Wirkung der Grenzen, an denen sich die Körner treffen, hängt von der Struktur und den Verunreinigungen ab.

Beginnen wir mit der Betrachtung eines Zellquerschnitts, ausgehend von der Seite, auf die das Licht trifft. Oben kann sich eine dünne Schicht befinden, die die Reflexion reduziert. Die Oberfläche des Siliziums kann durch kleine Pyramiden strukturiert werden, um sicherzustellen, dass das reflektierte Licht erneut auf die Oberfläche trifft. Im Inneren ermöglichen Dotierung und Kontaktschichten die selektive Sammlung von Ladungsträgern. Metallfinger leiten den gesammelten Strom zu dickeren Leitlinien. Auf der Rückseite befinden sich Passivierung und elektrische Verbindungen. Dies sind nicht nur übereinander gelagerte Materialien, sondern Funktionen, die jeweils einen bestimmten Verlust minimieren.

Die verschiedenen Fragen, die sich hinter den Abkürzungen verbergen

PERC beschreibt eine Zellfamilie, bei der ein großer Teil der Rückseite passiviert wird und der elektrische Kontakt über lokale Öffnungen hergestellt wird. **TOPCon** ist ein Kontaktansatz, der die Passivierung mit sehr dünnen Oxidschichten und dotierten Siliziumschichten mit dem Ladungsträgertransport kombiniert. **SHJ** oder **HJT** ist ein Heteroübergangsansatz, bei dem dünne Siliziumschichten unterschiedlicher Struktur auf kristallinem Silizium aufgebracht werden. **IBC** ist die Anordnung von Elektronen- und Lochkontakten in Form von ineinandergreifenden Streifen auf der Rückseite. Die ersten drei Ansätze konzentrieren sich stärker auf die Kontakt- und Oberflächenphysik, während sich der letzte auf die Anordnung der Kontakte bezieht. In einer Architektur können mehrere dieser Konzepte kombiniert werden.

Synthetisches Gedankenexperiment: Wenn wir die Fläche, die vom Metallmuster beschattet wird, von 4 % auf 2 % reduzieren, kann mehr Licht eindringen. Wenn das Metall jedoch dünner ist, kann der Widerstand zunehmen. Der resultierende optische Gewinn kann durch elektrische Verluste zunichte gemacht werden. Daher können wir nicht allein anhand eines Oberflächenfotos oder des Kurzschlussstroms beurteilen, ob der Prozess gut ist; wir benötigen Spannung, Füllfaktor und die volle Leistung. Im Folgenden werden wir die Produktionsschritte mit diesem Wettlauf der Verluste in Verbindung bringen.

Eine **Referenzzelle** ist ein Kontrollbeispiel, das im gleichen Grundprozess hergestellt wurde, um Verbesserungen zu vergleichen. Eine **Charge** ist eine Gruppe von Proben, die eine gemeinsame Produktionshistorie aufweisen. Anstatt nur die beste Zelle auszuwählen, zeigt die Überwachung der Chargenverteilung, ob die erfolgreiche Idee ein reproduzierbarer Prozess ist.

Verständniskontrolle: Was hat die neue Bezeichnung verändert?

Die Bezeichnung „Rückkontakt“ für eine Zelle erklärt nicht allein, welche Halbleiter- oder Passivierungsschichten verwendet werden. Zeichnen Sie einen Querschnitt und beantworten Sie die folgenden drei Fragen: Woher kommt das Licht, zu welchem Kontakt gelangt jeder Ladungsträger, wo kann das Metall auf den falschen Ladungsträger treffen? Damit übersetzen Sie die architektonische Bezeichnung in den Funktionsmechanismus.

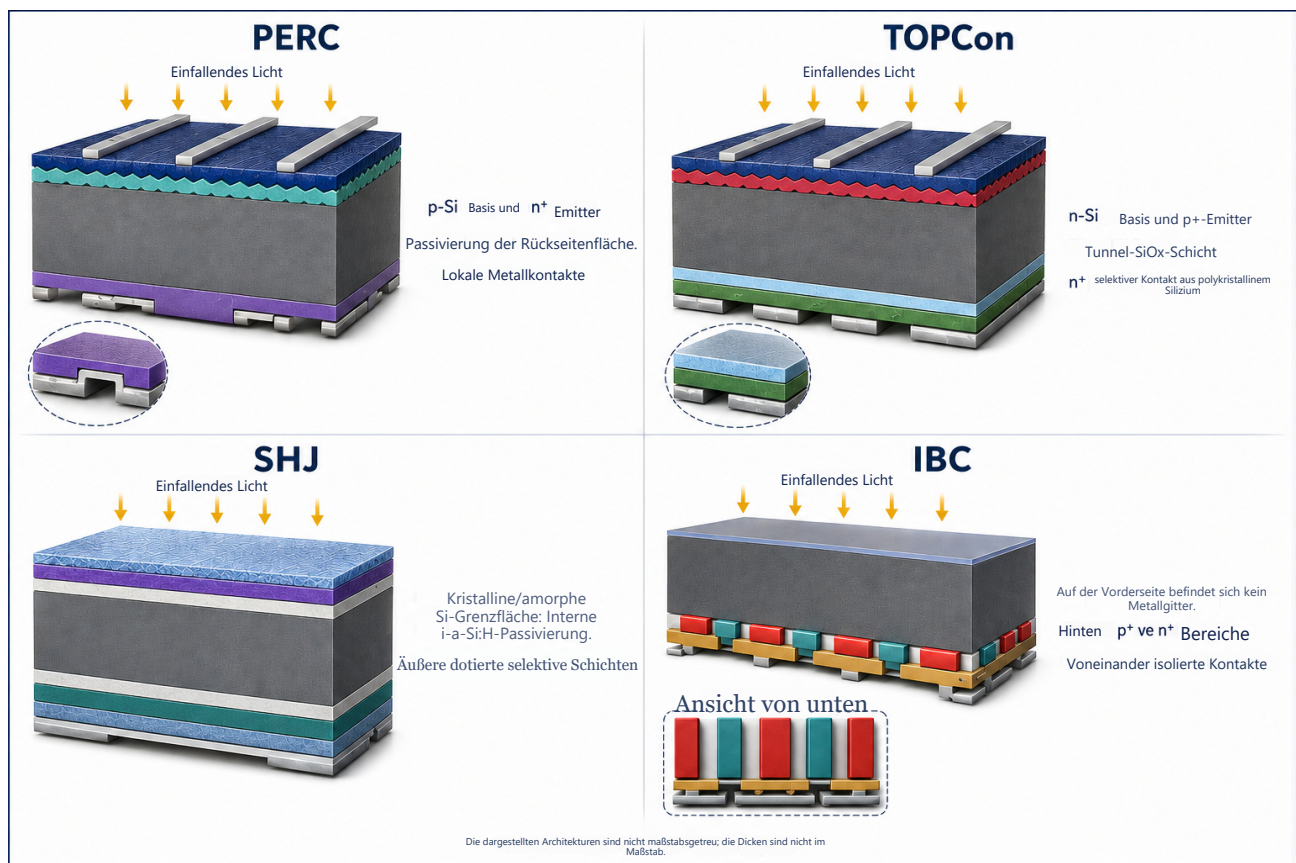


Abbildung 19. Querschnitte von vier gängigen Silizium-Designkonzepten. Die Dicken sind nicht maßstabsgetreu dargestellt. PERC hebt die hintere Passivierung, TOPCon den Tunneloxid-Kontakt und SHJ die amorphe/kristalline Heterostruktur hervor. IBC beschreibt die ineinandergreifende Anordnung der Kontakte auf der Rückseite und kann mit anderen Kontaktkonzepten kombiniert werden. Die Abbildungen zeigen repräsentative Architekturen. [T01] [T02] [T03] [T04] Mit einem Bildgenerierungswerkzeug erstellte konzeptionelle Illustration; keine Messaufnahme.

Was ist der Hauptvorteil von Silizium?

Eine photovoltaische Technologie besteht nicht nur aus einer gut lichtabsorbierenden Verbindung. Reinigung, Kristallzüchtung, Oberflächenbehandlung, Dotierung, Passivierung, Metallisierung, Kontaktierung und ein jahrelanger Betrieb müssen zusammen optimiert werden. Das ist die große Lektion, die Silizium dem Forscher lehrt: Die elektronischen Eigenschaften des Materials und das Produktionsökosystem verstärken sich gegenseitig. Aufgrund der indirekten Bandlücke absorbiert es Licht zwar schwächer als einige direkte Bandlücken-Halbleiter, dennoch bilden hochwertige, großflächige Wafer, eine bearbeitbare Oberflächenchemie und eine hochentwickelte Prozesskontrolle ein starkes Ganzes.

In einer Siliziumzelle bedeutet die Bandlücke von etwa 1,12 eV bei Raumtemperatur, dass ein erheblicher Teil der Energie sichtbarer Photonen in Wärme umgewandelt wird. Photonen mit einer Energie unterhalb der Bandlücke tragen nicht zur idealen interbandartigen Absorption bei. Diese grundlegenden Verluste können nicht durch eine bessere Passivierung der Oberfläche beseitigt werden. Zusätzliche Verluste, die durch Defekte, Oberflächen und Kontakte entstehen, können jedoch durch technische

Maßnahmen reduziert werden. Der Forscher muss zunächst ermitteln, welche Verluste thermodynamischen Ursprungs sind, welche auf das Material und welche auf den Herstellungsprozess zurückzuführen sind.

Es ist nützlich, die Produktionskette im Hinblick auf ihre physikalischen Auswirkungen zu betrachten. Die Reinigung reduziert metallische Verunreinigungen, die Ladungsträger einfangen. Das Kristallwachstum kontrolliert die Korngrenzen und Versetzungen. Das Schneiden der Wafer erzeugt zwar nutzbare Flächen, kann aber auch zu Schnittverlusten und Mikro-Rissen führen. Die Oberflächentextur erleichtert den Lichteinfall in die Zelle. Die Dotierung bestimmt die Art der Mehrheitsträger und den Übergang. Die Passivierung reduziert die elektronischen Zustände an der Oberfläche. Die Metallisierung leitet den elektrischen Strom mit geringen Verlusten nach außen. Jeder Prozess hinterlässt einen Ausgangszustand für den nächsten Prozess; daher ist es oft nicht erfolgreich, die Prozesse als unabhängige Einheiten zu optimieren.

PERC, TOPCon, SHJ und IBC bezeichnen nicht dasselbe

PERC steht für „Passivated Emitter and Rear Cell“ und beschreibt einen Ansatz zur Verbesserung von Solarzellen durch die Passivierung der Emitter- und Rückseitenfläche. Durch die großflächige Beschichtung der Rückseite mit einem Dielektrikum und die selektive Herstellung elektrischer Kontakte an bestimmten Stellen wird die durch direkten Metallkontakt verursachte Rekombination reduziert. Die von Blakers und seinen Kollegen im Jahr 1989 entwickelte Zelle ist ein bedeutendes frühes Beispiel für diese Entwicklung. Der konzeptionelle Fortschritt besteht darin, dass nach der Herstellung eines guten Übergangs berücksichtigt wird, dass auch die Rückseite eine Quelle für Verluste darstellen kann. [T01]

TOPCon ist eine Familie von passivierten Kontakten, bei denen eine sehr dünne, dotierte Siliziumschicht mit einer Oxidschicht kombiniert wird. Die Oxidschicht verbessert die elektronischen Eigenschaften; eine geeignete Dotierung und Bandbiegung erleichtern den Transport eines Ladungsträgertyps und unterdrücken den anderen. In einer Studie von Feldmann und Kollegen aus dem Jahr 2014 wurde gezeigt, dass in einem einzigen Bauelement eine gute Stromleitung mit einer geringen Kontakt-Rekombination kombiniert werden kann. Die Dicke, die Kontinuität, lokale Defekte und die thermische Vorgeschichte des realen Oxids sind wichtig; es wäre eine Übertreibung, den Transport in allen TOPCon-Kontakten ausschließlich durch Tunneln durch eine ideale, homogene Barriere zu erklären. [T02]

SHJ ist ein Heteroübergang, der kristallines Silizium mit dünnen, hydrierten amorphen oder geeigneten nanokristallinen Siliziumschichten kombiniert. Die dünne intrinsische Schicht sorgt für Passivierung; dotierte Schichten unterstützen die

Ladungsträgerselektivität. Der Vorteil von Niedertemperaturprozessen besteht darin, dass sie die Lebensdauer eines guten Siliziumwafers erhalten können. Andererseits begrenzen Lichtverluste, der spezifische Widerstand transparenter leitfähiger Oxide, der Kontaktwiderstand und der Temperaturbereich die Leistung. Eine Studie aus dem Jahr 2023 zeigte, dass die Verbesserung der elektrischen Eigenschaften eines nanokristallinen Silizium-Lochkontakts durch die Veränderung des Absorbers allein zu einer Leistungssteigerung führte. Dies zeigt, dass die Kontaktschicht keine passive Verbindung ist. [T04]

Bei IBC handelt es sich um die Anordnung der Elektroden: Die Elektronen- und Lochkontakte befinden sich auf der Rückseite in einer ineinandergreifenden Fingerstruktur. Die vordere Metallschattierung entfällt; stattdessen müssen die beiden Polaritäten auf der Rückseite isoliert und strukturiert werden, und die Ladungsträger müssen über horizontale Abstände hinweg gesammelt werden. IBC ist keine bestimmte Absorberchemie oder eine einzelne Passivierungsmethode; sie kann mit SHJ oder anderen selektiven Kontakten kombiniert werden. Die 2017 veröffentlichte Studie von Yoshikawa und Kollegen ist ein anschauliches Beispiel für die Kombination von SHJ mit einer Rückkontakttopologie. Die in der Veröffentlichung dargestellten großflächigen, auf Lebensdauer, Optik und Widerstand basierenden Analysen zeigen, warum der Technologievergleich nicht auf eine einzige Leistungszahl reduziert werden sollte. [T03]

Design	Primär adressierter Verlust	Gleichzeitig zu berücksichtigender Zielkonflikt
PERC	Rückseitenrekombination	Lokaler Kontaktwiderstand und Strukturierung
TOPCon	Verlust der Selektivität an der Metallkontaktfläche.	Oxidintegrität, Absorption der dotierten Schicht, thermisches Budget.
SHJ	Oberflächen- und Kontaktrekombination.	Dünnschichtoptik, TCO und Niedertemperatur-Metallisierung.
IBC	Verschattung der Frontmetallkontakte	Rückseitenstrukturierung, laterale Sammlung und Isolierung

Warum beeinflusst eine Lebensdauerberechnung die Architektur?

Ein didaktisches Modell für eine dünne Platte mit nahezu gleichmäßiger Überschussladungsträgerdichte auf beiden Oberflächen lautet wie folgt:

$$\frac{1}{\tau_{\text{eff}}} \approx \frac{1}{\tau_{\text{bulk}}} + \frac{2S}{W}. \tag{I.10.1}$$

Hierbei steht τ_{eff} für die effektive Lebensdauer der Ladungsträger, τ_{bulk} für die Volumenlebensdauer, S für die Oberflächenrekombinationsrate und V für die Schichtdicke. Diese Gleichung ist nicht für jeden Dotierungs- und Injektionsgrad gültig; sie dient dazu, die Größenordnung der Oberflächenbegrenzung zu erkennen. Die Einheiten müssen konsistent gewählt werden: Wenn S in cm/s angegeben ist, muss V in cm angegeben werden.

Gelöstes Beispiel. Für eine Platte mit einer Dicke von 150 μm und einer Volumenlebensdauer von 2 ms wird $W = 0,015 \text{ cm}$ verwendet. Für beide Oberflächen bei 500 cm/s beträgt die Gesamtgeschwindigkeit $500 + 667 = 1167 \text{ s}^{-1}$, die effektive Lebensdauer beträgt etwa 0,857 ms. Wenn die Geschwindigkeit 6667 cm/s beträgt, ist die Geschwindigkeit $500 + 6667 = 7167 \text{ s}^{-1}$ und die Lebensdauer beträgt 0,140 ms. Dasselbe Kristall mit gleicher Qualität kann aufgrund der Oberfläche eine über sechsfache Differenz in der effektiven Lebensdauer aufweisen. Der Kauf eines reineren Kristalls bringt keine erwarteten Vorteile, wenn das Oberflächenproblem nicht behoben wird.

Das Verringern der Foliendicke reduziert den Rohstoffverbrauch, erhöht aber gleichzeitig den Oberflächenterm bei gleichem S -Wert und erschwert die Absorption von langwelligem Licht. Daher sollte die Dünnschichttechnologie in Verbindung mit einer verbesserten Passivierung und Lichtabsorption betrachtet werden. Wenn die Wahrscheinlichkeit eines mechanischen Bruchs in der dünnen Folie zunimmt, führt die Siliziumeinsparung pro Kilogramm möglicherweise nicht zu einer Einsparung pro verkauften Watt.

Wie liest man ein Experiment zur Entwicklung einer Zelle?

Wenn eine neue Oberflächenbehandlung den Wert von V_{oc} erhöht, aber den Füllfaktor verringert, könnte dies darauf hindeuten, dass die Rekombination reduziert wurde, während die Transportbarriere oder der Serienwiderstand zugenommen hat. Ein Verlust der EQE bei kurzen Wellenlängen kann auf parasitäre Absorption in den vorderen Schichten hindeuten, während ein Verlust bei langen Wellenlängen auf eine unzureichende optische Weglänge, die Rückseitenoberfläche oder Probleme mit der Ladungsträgersammlung im Volumen hindeuten kann. Dies sind lediglich Hypothesen, die keine einzelnen Beweise darstellen. Reflexions-, Lebensdauer- sowie Dunkel- und Lichtstrommessungen sollten gemeinsam interpretiert werden.

Bei der Siliziumforschung beruht der Erfolg oft weniger auf der Zugabe eines neuen Elements als vielmehr auf der genauen Identifizierung der vorhandenen Verluste. Wenn die flächenbezogene Kontaktresistivität, die Sättigungsstromdichte, der Flächenwiderstand und die optische Absorption separat gemessen werden, kann beurteilt werden, welche Modifikation tatsächlich vorteilhaft ist. Neben der besten

Zelle sollte auch die Verteilung der Zellen, die mit dem gleichen Verfahren hergestellt wurden, dokumentiert werden.

Die einzelnen Produktionsschritte mit ihren physikalischen Funktionen in Verbindung bringen

Die Herstellung einer kristallinen Siliziumzelle beschränkt sich nicht nur auf die Herstellung eines p-n-Übergangs. Die Reinheit des Ausgangskristalls und die Kristallfehler bestimmen die Lebensdauer der Ladungsträger. Die Dicke der Wafer beeinflusst den Materialverbrauch und die mechanische Festigkeit. Die Oberflächenvorbereitung und -texturierung verändern die Reflexion und den Lichtweg und vergrößern gleichzeitig die Oberfläche. Durch Dotierung und die Bildung eines Übergangs werden die Ladungsträgerselektivität und der laterale Widerstand eingestellt. Passivierungsschichten reduzieren die Verluste an der Oberfläche. Die Metallisierung muss einen geringen optischen Schatten bei gleichzeitig niedrigem Widerstand gewährleisten. Da jeder Schritt die durch den vorherigen Schritt erzielten Verbesserungen beeinträchtigen kann, stellt die Prozessintegration einen eigenen Forschungsbereich dar.

Bei PERC-Struktur besteht das Ziel der Rückseitenpassivierung darin, zu verhindern, dass die gesamte Rückseite des Metalls zu einem Rekombinationsweg wird. Lokale Öffnungen erhalten den elektrischen Kontakt. Bei TOPCon wird durch eine sehr dünne Oxidschicht und dotiertes polykristallines Silizium versucht, eine gute Passivierung mit der Möglichkeit des Ladungstransports zu kombinieren. Bei SHJ werden eine dünne, intrinsische, amorphe Siliziumschicht auf der Kristalloberfläche und dotierte, selektive Schichten verwendet, um eine hohe elektronische Qualität mit einer Niedertemperatur-Kontaktstruktur zu verbinden. Bei IBC kann die Verlagerung der vorderen Metallisierung zur Rückseite die Verschattung reduzieren; jedoch werden die Isolierung der hinteren p- und n-Kontakte sowie die laterale Bewegung der Ladungsträger wichtiger. Dies sind keine sich gegenseitig ausschließenden, umfassenden Technologiebezeichnungen. [\[T01\]](#) [\[T02\]](#) [\[T03\]](#) [\[T04\]](#)

Warum stellt ein Metallgitter ein Optimierungsproblem dar?

Sei s der Abstand zwischen den vorderen Gitterfingern und R_{sheet} der Flächenwiderstand der Oberflächenschicht. In einem eindimensionalen Modell, bei dem eine uniforme vertikale Stromdichte J seitlich zu den Fingern auf beiden Seiten fließt, beträgt der durchschnittliche ohmsche Verlust pro Flächeneinheit zwischen den Fingern ungefähr $J^2 R_{\text{sheet}} s^2 / 12$. Wenn die Fingerbreite w ist, beträgt der ungefähre Anteil der Verschattung w/s . Einer dieser Werte nimmt zu, wenn s größer wird, der andere nimmt ab:

$$p_{\text{anal}} \simeq \frac{J^2 R_{\text{sheet}} s^2}{12}, \quad f_{\text{folge}} \simeq \frac{w}{s}. \quad (\text{I.10.2})$$

In dieser vereinfachten Ableitung wurden die Stromkonzentration, der Längswiderstand des Metallgitters und der Kontaktwiderstand vernachlässigt. Dennoch veranschaulicht sie die grundlegende Designlogik: Ein sehr dünnes Gitter, das keine Abschattung verursachen soll, verstärkt die lateralen Verlusteffekte. Ein zu dichtes Gitter hingegen blockiert das Licht und verbraucht mehr Metall. Für $J = 0,04 \text{ A/cm}^2$, $R_{\text{sheet}} = 80 \text{ } \Omega/\text{Quadrat}$ und $s = 0,15 \text{ cm}$ beträgt der laterale Verlust etwa $0,24 \text{ mW/cm}^2$. Wenn s verdoppelt wird, beträgt er im gleichen Modell $0,96 \text{ mW/cm}^2$. Diese Berechnung ermöglicht die Vorhersage des elektrischen Einflusses der Geometrie vor der Produktion.

Chemische Passivierung und Feldwirkung sind nicht dasselbe

Auf der Oberfläche befinden sich Atome, die anders gebunden sind als im Kristallinneren. Die durch diese Atome erzeugten elektronischen Zustände können Elektronen und Löcher einfangen und so die Rekombination erleichtern. Die **chemische Passivierung** reduziert diese aktiven Zustände beispielsweise durch die Vervollständigung geeigneter Bindungen. Die **Feldeffektpassivierung** verändert hingegen die Ladungsverteilung in der Nähe der Oberfläche und reduziert so die Wahrscheinlichkeit, dass sich zwei Ladungsträger im selben Verlustbereich befinden. Eine Beschichtung kann beide Effekte gleichzeitig aufweisen; allein die Kenntnis ihrer Dicke sagt nicht aus, welcher Effekt vorherrschend ist.

In der Abbildung sind **Al₂O₃** (Aluminiumoxid), **SiN_x:H** (wasserstoffhaltiges Siliziumnitrid) und **a-Si:H** (wasserstoffhaltiges amorphes Silizium) dargestellt. „Amorph“ bedeutet, dass keine langreichweitige, geordnete Kristallstruktur vorhanden ist. „i“ bezeichnet eine nahezu intrinsische Schicht, während „n“ und „p“ die jeweiligen Dotierungstypen angeben. Diese Bezeichnungen bedeuten nicht, dass in jeder Zelle exakt die gleiche Rezeptur verwendet wird; sie ermöglichen die Identifizierung von Schichtfamilien, die für die Passivierung, die Selektivität und die optische Funktion eingesetzt werden. [\[T01\]](#) [\[T02\]](#) [\[T03\]](#)

Das Verringern des Abstands zwischen den Metallfingern kann den Weg verkürzen, den der Strom auf der Oberfläche nimmt; erhöht aber auch die Fläche, die das Metall verdeckt. Der **Flächenwiderstand** der Oberfläche ist die Größe, die den Spannungsabfall bei diesem lateralen Stromfluss bestimmt. Ein Vergleich mit der gleichen Fläche, Lichtintensität und Temperatur unter Verwendung einer Kontrollzelle zeigt, ob der Vorteil der Passivierung durch den Metallschatten oder durch Leitungsverluste aufgehoben wird.

Selbsttest

1. Wenn die Dicke der Schicht halbiert wird und die Oberflächengeschwindigkeit unverändert bleibt, wie verändert sich dann der durch die Oberfläche verursachte Rekombinationsterm? **Antwort:** Er verdoppelt sich; eine dünnere Schicht bedeutet nicht automatisch eine bessere Zelle.
2. Kann eine IBC-Zelle auch eine SHJ-Zelle sein? **Antwort:** Ja. IBC beschreibt die Kontaktanordnung, während SHJ einen heterojunktiven Aufbau und eine Passivierungsmethode definiert; beide Konzepte schließen sich nicht gegenseitig aus.
3. Wenn ein Prozess J_{sc} um 1 % erhöht, während V_{oc} und FF konstant bleiben, um wie viel steigt der Wirkungsgrad? **Antwort:** Er steigt relativ um 1 %. Bei einem Ausgangswert von 24 % beträgt der neue Wert 24,24 %; der absolute Anstieg ist 0,24 Prozentpunkte.

Dünnschichten: geringer Materialbedarf, ausgeprägte Grenzflächenphysik

Was bedeutet „Dünnschicht“ und was bedeutet es nicht?

In einer **Dünnschichtzelle** wird das Licht absorbierende Material als dünne Schicht auf einem Trägermaterial wie Glas, Metall oder Polymer aufgebracht. Der Träger wird als **Substrat** bezeichnet. Das Substrat kann dick sein, während der eigentliche Absorber sehr dünn sein kann; „Dünnschicht“ bedeutet nicht immer, dass das Material biegsam ist oder dass es sich um ein insgesamt dünnes Modul handelt. Wie stark ein Material Licht pro Dickeneinheit absorbiert, bestimmt die erforderliche effektive Dicke.

Der **Absorptionskoeffizient** α gibt an, wie schnell die Lichtintensität innerhalb eines Materials abnimmt. In einem Modell ohne Reflexion, mit homogener Struktur und bei einmaligem Durchgang beträgt der absorbierte Anteil $1 - \exp(-\alpha d)$; d ist die Dicke und αd muss dimensionslos sein. **Synthetisches Beispiel:** Für $\alpha = 10^4 \text{ cm}^{-1}$ und $d = 1 \text{ }\mu\text{m} = 10^{-4} \text{ cm}$ ergibt sich $\alpha d = 1$, die Absorption beträgt ungefähr 63 %. Im selben Modell ergibt $3 \text{ }\mu\text{m}$ ungefähr 95 %. Eine erhöhte Absorption bedeutet jedoch nicht, dass alle erzeugten Ladungsträger den Kontakt erreichen. Die Transportlänge und die Rekombination setzen weiterhin Grenzen.

Wie übersetzt man den Namen eines Materials in die Chemie und in Bezug auf die Grenzfläche?

CdTe ist Cadmiumtellurid; in der idealen Form haben die Cadmium- und Tellur-Atome ein Verhältnis von 1:1. **CIGS** ist die Abkürzung für eine Familie von Verbindungen, die Kupfer, Indium, Gallium und Selen enthalten; die Schreibweise $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ zeigt, dass Indium und Gallium die gleichen Arten von Kristallpositionen einnehmen können. Die Wahl der Verhältnisse beeinflusst die Bandlücke und das Prozessverhalten. Bei **amorphem Silizium** sind die Atome über größere Entfernungen nicht so geordnet wie in einem Kristall; einige Bindungsdefekte können durch die Zugabe von Wasserstoff reduziert werden. Diese drei Beispiele können zur gleichen Gruppe der „Dünnschicht“-Herstellung gehören, haben aber nicht die gleiche Defektchemie.

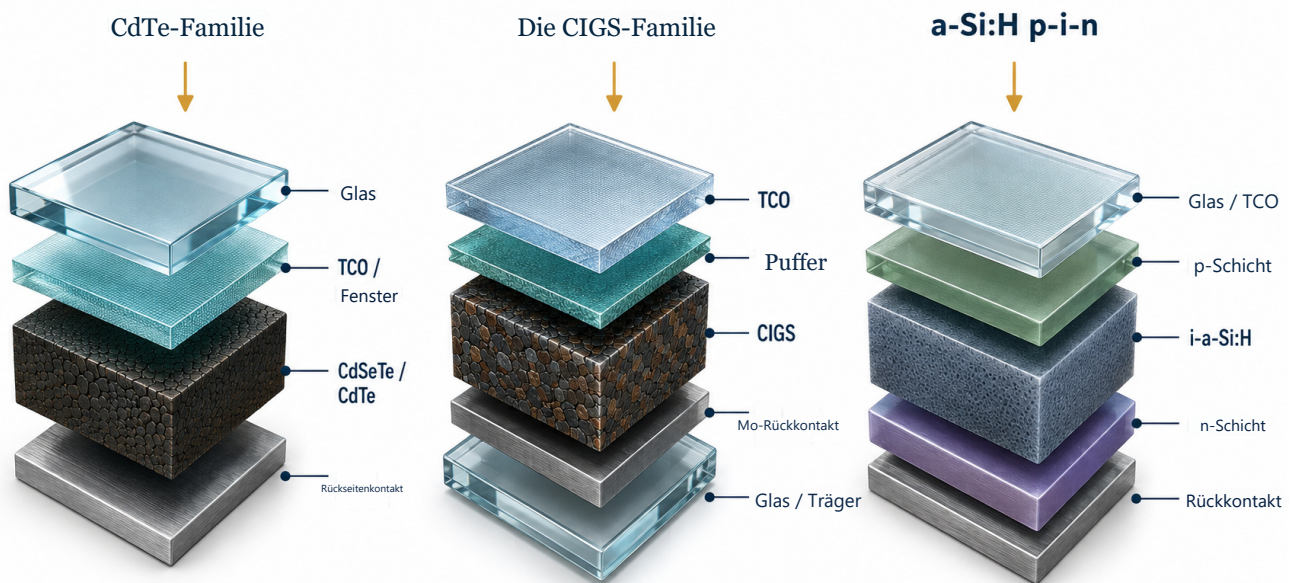
Die Bandkanten der benachbarten Schichten können unterschiedlich sein. Diese Differenz wird als **Bandabgleich** bezeichnet. Eine kleine Barriere für Elektronen kann manchmal den Verlust in die falsche Richtung reduzieren, während eine große Barriere einen nützlichen Übergang verhindert. In der Analogie einer Treppe ist nicht nur die Höhe der Stufe wichtig, sondern auch, wer in welcher Richtung sie überwindet. Ohne

die Energieachse von der physikalischen Positionsachse im Diagramm zu trennen, kann man nicht sagen, dass „das obere Band besser ist“.

Die **Fensterschicht** ist die Schicht, von der erwartet wird, dass sie einen wesentlichen Teil des Lichts zum Absorber leitet; sie ist jedoch nicht vollständig optisch verlustfrei. Die **Pufferschicht** unterstützt die chemische und elektrische Anpassung an der Grenzfläche. Die Bezeichnungen geben die Funktion an; die tatsächlichen Beiträge werden anhand der Dicke, der Zusammensetzung und der Verarbeitungshistorie gemessen.

Verständniskontrolle: Warum ist weniger Material nicht immer billiger?

Wenn die Dicke des Absorbers abnimmt, kann der Materialverbrauch reduziert werden, aber eine homogene Beschichtung, mehrschichtige Kontakte, eine geringe Fertigungsausbeute oder eine schwierige Verkapselung können die Kosten erhöhen. Um von „wenigen Gramm“ zu „günstigem Strom“ zu gelangen, müssen die akzeptierten Wattzahlen, die Prozesskosten und die Lebensdauer zusammen berechnet werden.



Schematische Schichtanordnungen; die Dicke ist nicht maßstabsgetreu dargestellt.

Abbildung 20. Typische Schichtanordnungen der CdTe-, CIGS- und amorphe-Silizium-Familien. Der Pfeil zeigt die Richtung des einfallenden Lichts. Fenster-, Puffer-, Absorber- und Rückkontaktschichten haben unterschiedliche Funktionen. Die Dicken sind nicht maßstabsgetreu dargestellt; alternative Puffer- und Kontaktschichten sind möglich. [T05] [T06] [T07] Mit einem Bildgenerierungswerkzeug erstellte konzeptionelle Illustration; keine Messaufnahme.

Allein die geringe Dicke ist kein Vorteil

Der Dünnschichtansatz ermöglicht die Herstellung eines Halbleiters, der Licht über eine große Fläche von Ladungsträgern bei einer Dicke von wenigen Mikrometern oder weniger absorbiert. Der Materialverbrauch kann reduziert und die Zellen durch Laser miteinander verbunden werden. Allerdings nimmt mit abnehmendem Volumen die Bedeutung von Grenzflächen, Korngrenzen und lokalen Dickenvariationen zu. Selbst bei gleicher durchschnittlicher chemischer Zusammensetzung können unterschiedliche Wachstumshistorien zu unterschiedlichen Bauelementen führen.

Die Beer-Lambert-Beziehung im Abschnitt über die Absorptionsphysik liefert die erste Schichtdickenbestimmung. Für die Bestimmung sind gemessene optische Konstanten und die vollständige Schichtanordnung für Interferenz, Reflexion, Streuung und Elektrodenverluste erforderlich.

Gelöstes Beispiel. Wenn bei einer bestimmten Wellenlänge $\alpha = 10^4 \text{ cm}^{-1}$ und $d = 2 \text{ }\mu\text{m}$ gelten, ist $\alpha \cdot d = 2$, und die Absorption beträgt ungefähr 86,5 %. Bei derselben Dicke werden für 10^3 cm^{-1} nur 18,1 % absorbiert. Die Aussage „Zwei Mikrometer genügen“ ist ohne Angabe eines Spektrums nicht sinnvoll. Eine größere Dicke kann die Absorption verbessern; bei kurzer Ladungsträgersammellänge rekombinieren jedoch die zusätzlich erzeugten Ladungsträger.

CdTe: Die Kombination von Bandlückensteuerung und Defektchemie

CdTe ist ein stark absorbierendes, direktes Halbleitermaterial mit einer direkten Bandlücke. In vielen Bauelementen wird eine Anordnung aus Glassubstrat, transparentem Leiter, Fenster- oder Pufferschicht, Absorber und Rückkontakt verwendet. Die vordere Schicht ist nicht nur eine lichtdurchlässige Beschichtung, sondern bestimmt auch die Bandausrichtung, die Rekombination am Übergang und unerwünschte Strompfade. Es ist auch nicht ausreichend, dass das Rückmetall eine geeignete Arbeitsfunktion aufweist; die Oberflächenstöchiometrie, Zwischenphasen und die zeitliche Elementwanderung können das Kontaktverhalten verändern.

Die Dotierung mit Selen ist ein lehrreiches Beispiel für die CdTe-Linie. Fiducia und Mitarbeiter beobachteten in ihrer Studie von 2019 eine stärkere Lumineszenz und eine größere Ladungsträgerdiffusionslänge in den selenhaltigen Bereichen. Das Ergebnis wurde nicht nur mit einer erhöhten Absorption von Photonen aufgrund der Verringerung der Bandlücke in Verbindung gebracht, sondern auch mit dem Beitrag der Defektpassivierung. Die daraus abzuleitende Forschungsmethode besteht darin, die optischen und elektronischen Auswirkungen der Zusammensetzungsänderung getrennt zu messen. [T05]

Chemische Aktivierungsprozesse können die Korngrenzen und die Defektpopulationen verändern. Die Regel „größere Körner sind besser“ ist jedoch nicht bedingungslos gültig. Die Rekombinationseffizienz einer Korngrenze ergibt sich nicht nur aus ihrer geometrischen Größe, sondern auch aus ihrer chemischen Zusammensetzung und ihrer elektrostatischen Struktur. Ein großes Korn mit wenigen Defekten, aber schlechtem Kontakt, kann schlechter funktionieren als ein Netzwerk gut passivierter kleiner Körner. Ebenso wird die Spannungsverstärkung begrenzt, wenn die Dotierung zwar die Lochdichte erhöht, aber gleichzeitig neue tiefe Defekte erzeugt.

CIGS: Zusammensetzung, Position und Vorgeschichte sind gleichermaßen wichtig

Bei $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$, einer Chalkopyrit-Verbindung, die als CIGS abgekürzt wird, bestimmt das Verhältnis von Indium zu Gallium die Bandlücke. Das gleiche durchschnittliche Verhältnis kann mit unterschiedlichen Profilen über die Tiefe hergestellt werden. Ein Leitungsband, das zur Rückseite hin ansteigt, kann den Verlust von Minoritätselektronen reduzieren, indem es verhindert, dass sie zum Rückkontakt gelangen; eine unerwünschte Anhebung kann sich jedoch in eine Sammelbarriere verwandeln. Um ein Banddiagramm zu erstellen, reicht es nicht aus, nur das Bandlückenprofil zu kennen: Man muss wissen, wie sich die Änderung auf das Leitungs- und das Valenzband aufteilt.

Eine gängige Näherungsdarstellung für den Legierungsbereich.

$$E_g(x) = (1 - x)E_{g,A} + xE_{g,B} - bx(1 - x) \quad (\text{I.11.1})$$

dabei ist x das Legierungsverhältnis, $E_{g,A}$, $E_{g,B}$ die Bandlücken der Endverbindungen und b der Krümmungsparameter. **Beispiel:** Wenn $E_{g,A} = 1,01 \text{ eV}$, $E_{g,B} = 1,68 \text{ eV}$, $b = 0,15 \text{ eV}$ und $x = 0,30$ angenommen werden, ergibt sich $E_g = 1,1795 \text{ eV}$. Dies sind Übungsparameter; in einem realen Beispiel müssten Zusammensetzung, Temperatur und Anordnung gemessen werden.

Geringe Mengen an Alkalimetallen beeinflussen die Leistung von CIGS-Solarzellen erheblich; ihre Auswirkungen lassen sich jedoch nicht durch eine allgemeingültige Aussage wie „Dotierung ist immer gut“ erklären. Eine Studie von Colombara und Kollegen aus dem Jahr 2018 zeigte, dass Natrium die gegenseitige Diffusion von Indium und Gallium beeinflussen kann. Bei der Interpretation des Alkalieffekts ist es wichtig, nicht nur die endgültige Ladungsträgerkonzentration, sondern auch die Veränderung des Zusammensetzungsprofils während des Wachstumsprozesses zu berücksichtigen.

[T06]

Ein CIGS-Forscher berücksichtigt auch die Kupferarmut an der Oberfläche, mögliche sekundäre Phasen, die Anpassung der Pufferschicht und die Grenzfläche des Rückkontakts. Das Zusammenfassen aller Elemente in einer einzigen durchschnittlichen EDS-Zahl führt zum Verlust wichtiger Informationen. Eine Tiefenprofilanalyse, die Unterscheidung zwischen Korngrenzen und Korngrößen sowie Messungen in verschiedenen Bereichen sind erforderlich. Die Verwendung von Indium und Gallium stellt zudem eine separate Frage der Materialversorgung dar, die über die Annahme „Dünnschichten benötigen wenig Material“ hinausgeht.

Amorphes Silizium: Von der anfänglichen Leistung zur stabilen Leistung

In hydriertem amorphem Silizium gibt es keine großräumige kristalline Ordnung. Die Ausbreitung der elektronischen Zustände an den Bandrändern und lokalisierte Defekte führen zu einer anderen Ladungsträgerbewegung als in kristallinem Silizium. Wasserstoff passiviert einen Teil der gebrochenen Bindungen. Die meisten Lehrmodule für Bauelemente erklären dies mit einem p-i-n-Design, bei dem hochdefektive dotierte Bereiche dünn gehalten werden, sodass das Licht hauptsächlich im intrinsischen Bereich absorbiert wird; das elektrische Feld unterstützt die Sammlung der Ladungsträger.

Die wegweisende Arbeit von Staebler und Wronski aus dem Jahr 1977 zeigte, dass es unter Lichteinwirkung zu reversiblen Veränderungen der Leitfähigkeit kommt. Dieses historische Ergebnis zeigte frühzeitig, dass eine an einem bestimmten Tag durchgeführte Messung möglicherweise nicht die tatsächliche Leistung des Bauelements widerspiegelt. Auf den vollständigen Text der Originalpublikation konnte im Rahmen dieser Recherche nicht zugegriffen werden; die historische Erkenntnis beschränkt sich auf die spätere Erklärung des ursprünglichen Autors und den bibliografischen Eintrag des Originalartikels. [T07] [T33]

In dieser Klasse führt eine dickere Filmschicht zwar zu einer stärkeren Absorption, kann aber auch zu Einbußen bei Ladungsträgersammlung und Stabilität führen. Mikrokristalline oder Mehrfachübergangskombinationen können diese Gleichgewichte verändern; jedoch sollten die Ergebnisse von a-Si:H, Dünnschicht-mikrokristallinem Silizium und plattenbasiertem c-Si nicht in eine einzige Kategorie eingeordnet werden, nur weil der Begriff „Silizium“ verwendet wird. Der Anfangswirkungsgrad, der unter Lichteinwirkung gemessene stabile Wirkungsgrad, die Zellfläche und die Modulfläche sollten separat angegeben werden.

Bandanpassung mit den richtigen Vorzeichen lesen

An einem Heteroübergang müssen die Leitungs- und Valenzbänder der beiden Materialien nicht unbedingt kontinuierlich sein. In Richtung des Übergangs des Elektrons vom Absorber zur elektronenselektiven Schicht kann eine Anhebung des Leitungsbandes eine Energiebarriere bilden. Eine sehr große Barriere schränkt bei niedrigen Temperaturen oder hohen Strömen den Ladungsträgertransport ein; in der J-V-Kurve kann eine Formverzerrung beobachtet werden. Eine starke Absenkung des Leitungsbands in umgekehrter Richtung kann an einigen Grenzflächen die Ladungsträgerdichte und die Wahrscheinlichkeit der Rekombination erhöhen. Eine geeignete Ausrichtung kann nicht zuverlässig allein durch die Subtraktion der Austrittsarbeiten der freien Oberflächen erreicht werden.

Wenn sich eine Grenzfläche bildet, können Dipole, chemische Bindungen, Fallenladung und die Angleichung des Fermi-Niveaus die Bänder beeinflussen. Daher ist eine Energieniveautabelle eine anfängliche Hypothese. Oberflächensensitive Messungen wie UPS/XPS, kontrollierte Dickenreihen und temperaturabhängige Bauelementdaten werden gemeinsam interpretiert. Bei der Photoelektronenmessung ist es besonders wichtig, die Energie-Referenz durch die Oberflächenvorbereitung explizit anzugeben.

[R07]

Bei CIGS ermöglicht der Zusammensetzungsgradient eine Tiefenabhängigkeit der Bandlücke. Allerdings bestimmt das Verhältnis, inwieweit die Zunahme der Bandlücke im Leitungsband bzw. im Valenzband auftritt, die Ladungsträgerbewegung. Allein durch die Darstellung von $E_g(x)$ lässt sich die Richtung des elektrischen Feldes nicht vollständig bestimmen. In der CdTe-Familie können Legierung, Rückkontakt und Defektchemie gleichzeitig verändert werden. Wenn ein Prozess sowohl die Absorptionskante als auch die Dotierstoffkonzentration und den Kontaktwiderstand verändert, ist ein aufschlussreicher Versuch erforderlich, um die Verbesserung auf einen einzelnen Mechanismus zurückzuführen. [T05] [T06]

Die Korngrenze spielt nicht immer die gleiche Rolle

In einem polykristallinen Film ist die Korngrenze nicht nur eine „schlechte Region“. Die Zusammensetzung, die lokale Ladung und das Potenzial an der Grenze können beeinflussen, wie Ladungsträger dorthin gelangen. Die an der Oberfläche sichtbaren großen Körner sind keine Garantie für die gleiche Kristallstruktur oder eine geringe Fallendichte über die gesamte Filmdicke. Eine sinnvollere Frage ist, unter welchen Bedingungen die Grenzen zu Ladungsverlusten führen. Räumlich aufgelöste PL-, EBIC-basierte Abbildungs- und chemische Kartierungsmethoden können untersuchen, ob die topografische Grenze mit der elektrischen Wirkung am selben Ort zusammenfällt.

Selbsttest

1. Warum muss die externe Quanteneffizienz (EQE) nicht 90 % betragen, wenn die Absorption 90 % ist? **Antwort:** Ein Teil der Absorption kann in inaktiven Schichten stattfinden; ein Teil der in dem Absorber erzeugten Ladungsträger kann rekombinieren, bevor sie gesammelt werden.
2. Warum können zwei CIGS-Schichten mit dem gleichen durchschnittlichen Ga-Verhältnis unterschiedliche Spannungen liefern? **Antwort:** Das Tiefenprofil, die Defekte, die sekundären Phasen, die Bandausrichtung an der Grenzfläche und die Vorgeschichte der Alkalibehandlung können unterschiedlich sein.
3. Wenn die durch Lichteinwirkung reduzierte Leistung im Dunkeln teilweise wiederhergestellt wird, wie sollte die Messung dokumentiert werden? **Antwort:** Der Licht-/Dunkelzyklus, die Temperatur, die elektrische Last und die Messzeiten sollten angegeben werden; die Wiederherstellung sollte nicht als dauerhafte Lebensdauerverbesserung dargestellt werden.

III-V-Halbleiter und Mehrfachübergangs-Solarzellen: Die Kosten der spektralen Aufteilung

Woher stammt die Bezeichnung III-V?

Der Ausdruck III-V bezeichnet Halbleiter, die aus Elementen der traditionellen Gruppen III und V des Periodensystems bestehen; die aktuellen Gruppenzahlen sind 13 und 15. **GaAs** ist Galliumarsenid, **InP** ist Indiumphosphid. Es handelt sich dabei um Verbindungen mit spezifischen kristallinen und optischen Eigenschaften. Durch das gemeinsame Einnehmen derselben Kristallposition durch mehrere Elemente kann eine **Legierung** gebildet werden; das Zusammensetzungsverhältnis wird zur Einstellung der Bandlücke verwendet.

Diese Materialien ermöglichen in vielen Designs eine sehr starke Lichtabsorption und hochwertige Emissionsprozesse. Allerdings sind geeignete elektronische Eigenschaften nicht die einzige Voraussetzung für die Herstellung. Bei der **Epitaxie** orientiert sich die wachsende Kristallschicht an der Struktur des darunterliegenden Kristalls. Wenn die Atomabstände der darunterliegenden und der darüber liegenden Gitterstrukturen unterschiedlich sind, entsteht eine **Gitterfehlanpassung**. Eine sehr dünne Schicht kann diese Differenz durch elastische Dehnung ausgleichen; abhängig von der Dicke und den Bedingungen können sich lineare Kristallfehler, sogenannte Dislokationen, bilden.

Lichtaufteilung und Gitteranpassung sind getrennte Entwurfsaufgaben

In einer Zelle mit drei Übergängen nutzen die oberen, mittleren und unteren Absorber unterschiedliche Energiebereiche. Der **Tunnelübergang** ist eine stark dotierte Halbleiterschicht, die eine elektrische Verbindung zwischen den in Reihe geschalteten Teilzellen herstellt. Quantentunnelung bezeichnet das Phänomen, bei dem ein Teilchen auch dann die Potentialbarriere überwinden kann, wenn seine Energie nicht ausreicht, um die klassische Energiebarriere zu überwinden. Von dieser Verbindung wird erwartet, dass sie den Stromfluss nicht behindert und keine unnötige Lichtabsorption verursacht. Daher ist die Zwischenschicht nicht nur eine Verbindungslinie in der Zeichnung.

Synthetisches Beispiel: Nehmen wir an, die Gitterparameter von zwei Materialien betragen 5,65 und 5,70 Angström. Ein Angström entspricht 10^{-10} Meter. Die relative Differenz $(5,70 - 5,65) / 5,65 \approx 0,885 \%$. Diese scheinbar kleine Zahl kann in einer epitaktischen Struktur von Bedeutung sein. Allein dieser Wert erlaubt keine Aussage darüber, ob die Materialien „herstellbar“ oder „nicht herstellbar“ sind; auch die

Schichtdicke, die Flexibilität und die Defektbildung spielen eine Rolle. Die Wahl einer geeigneteren Bandlücke kann die Kristallanpassung verschlechtern.

Ein Konzentrator bündelt das Licht von einer größeren Fläche mithilfe eines Spiegels oder einer Linse auf eine kleine Zelle. Die auf die Zelle einfallende Leistung steigt, aber auch der Bedarf an optischer Ausrichtung und Wärmeableitung nimmt zu. Ein Zellwirkungsgrad, der „unter 143 Sonnen“ gemessen wurde, ist nicht direkt mit dem Wirkungsgrad eines Moduls ohne Konzentration vergleichbar. Beim Lesen der III-V-Literatur sollten Lichtintensität, Zellfläche, Anzahl der Anschlüsse und Anwendungsbedingungen von Anfang an berücksichtigt werden. [T08]

Verständniskontrolle: Warum kann eine günstige Bandlücke als unerwünscht angesehen werden?

Wenn die gewählte obere Zelle zwar eine höhere Spannung verspricht, aber aufgrund von Inkompatibilitäten mit dem unteren Kristall Defekte entstehen, kann die Rekombination zunehmen. Damit das Design erfolgreich ist, muss die optische und elektrische Verstärkung größer sein als der durch die Gitterfehlانpassung verursachte Verlust. Das Diagramm der Bandlücke und das Diagramm der Gitteranpassung beantworten unterschiedliche Fragen.

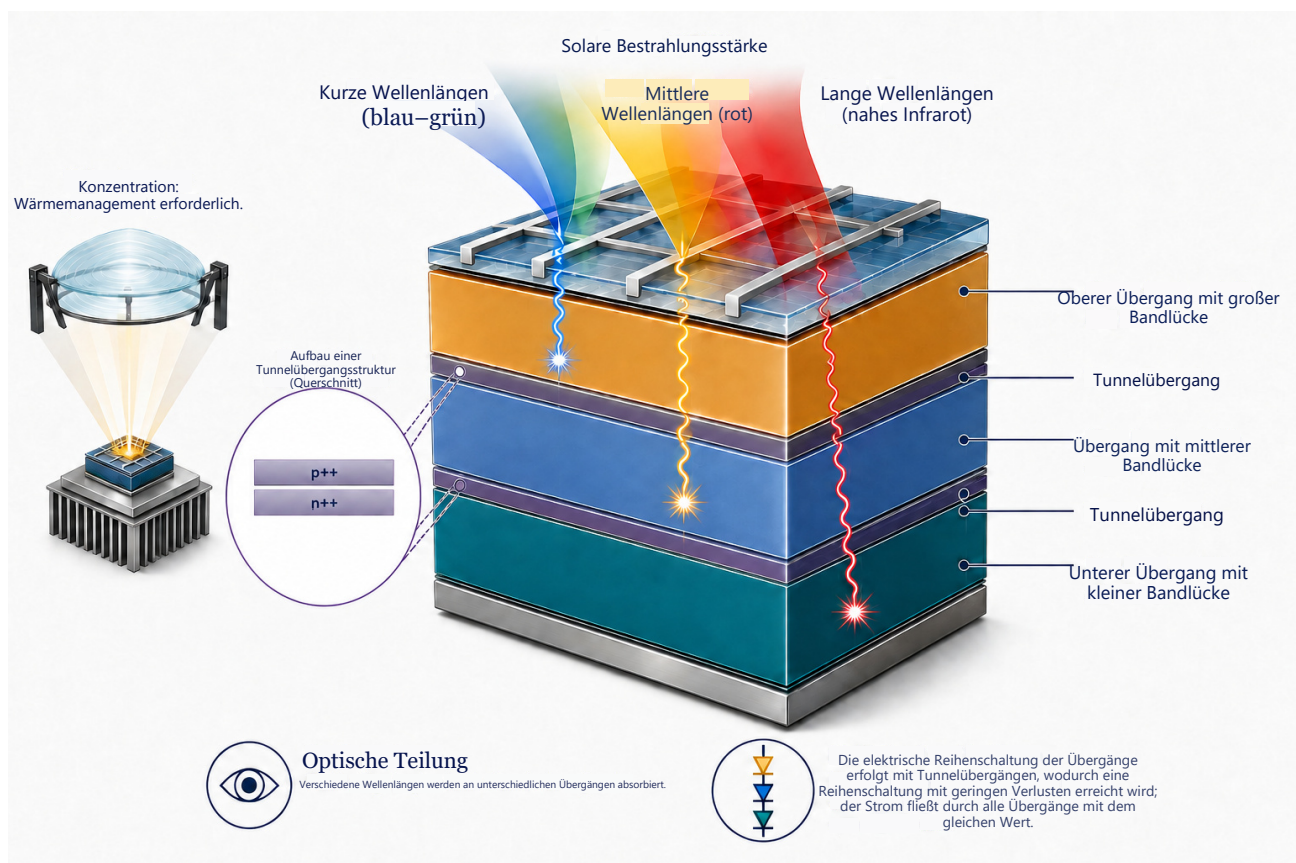


Abbildung 21. Spektrale und elektrische Kopplung in einem III-V-Bauelement mit drei Übergängen. Die Bandlücke nimmt von oben nach unten ab; sehr dünne und stark dotierte p++/n++-Tunnelübergänge verbinden die benachbarten Unterzellen in Reihe. Die optischen Pfade und Schichtdicken sind nicht maßstabsgetreu dargestellt. Das linke Beispiel eines Konzentrators erinnert an die Notwendigkeit des Wärmemanagements bei steigenden Strömen; der ideale Spannungsgewinn wird im nachfolgenden Berechnungspanel dargestellt. [T08] [T09] Mit einem Bildgenerierungswerkzeug erstellte konzeptionelle Illustration; keine Messaufnahme.

Idealer Spannungsverstärkungseffekt der Konzentration.

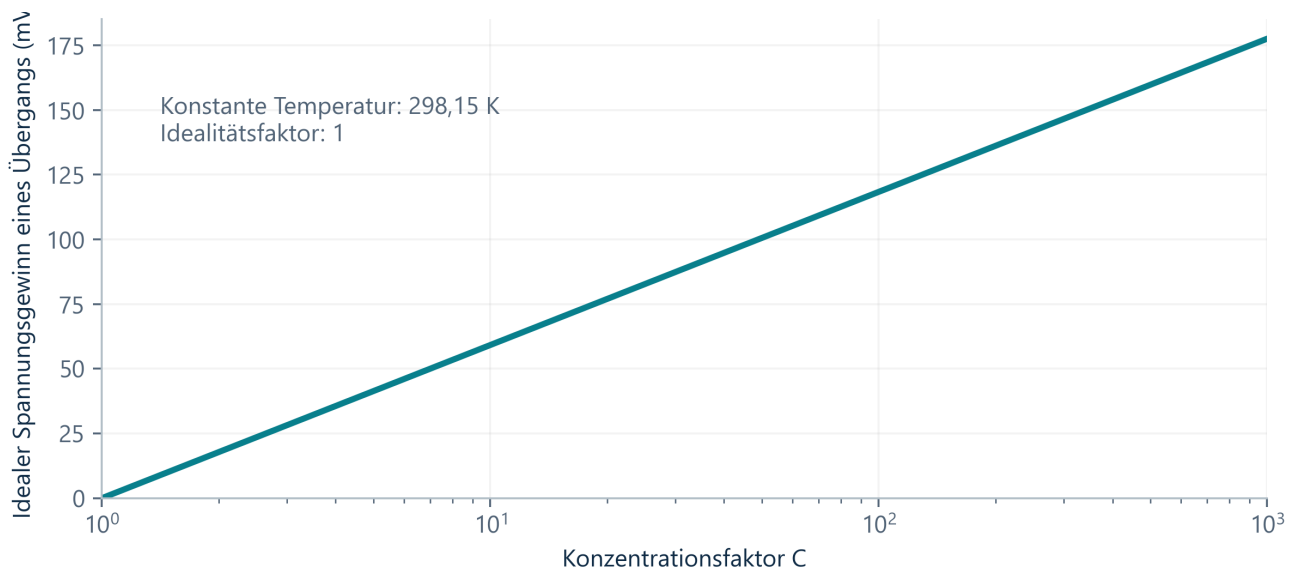


Abbildung 21 - berechnete ergänzende Teilabbildung. Die Grafik wurde für einen einzelnen idealen Übergang bei gleicher Temperatur anhand der Beziehung $\Delta V_{oc} = V_T \ln C$ berechnet. Die Zunahme des Stroms durch die Konzentration verstärkt auch die Kontakt- und Serienwiderstandsverluste. Da die Erwärmung hier nicht berücksichtigt wird, stellt die Kurve nicht die gemessene Leistung eines konzentrierenden Moduls dar. [T08] [T09]

Warum sollten wir uns mit nur einer Bandlücke begnügen?

Ein einzelner Übergang kann nicht die gesamte Energie eines hochenergetischen Photons in elektrische Energie umwandeln. Ladungsträger verlieren Energie, wenn sie sich zu den Bandrändern entspannen; Photonen mit niedriger Energie hingegen gehen ungenutzt. Durch die Anordnung von Absorbern mit breiter Bandlücke oben und schmaler Bandlücke unten wird das Spektrum aufgeteilt. Jede Zelle erzeugt ihre eigene Spannung. Dieses physikalische Prinzip ist auch dann noch wirksam, wenn die Materialien nicht perfekt sind; jedoch führt jeder zusätzliche Übergang zu neuen optischen, elektrischen und fertigungstechnischen Herausforderungen.

III-V bezeichnet Halbleiter, die aus den Elementen der Gruppe III und V des Periodensystems bestehen. GaAs, InGaP und InGaAs sind Beispiele für diese Materialklasse. Durch Legierungen können die Bandlücke und die Gitterkonstante verändert werden; diese beiden Eigenschaften werden jedoch in der Regel nicht unabhängig voneinander eingestellt. Die Wahl einer geeigneteren Bandlücke für eine obere Zelle kann zu einer Gitterfehlanpassung und einer höheren Versetzungsdichte im Substrat führen.

Epitaxie ist das Wachstum einer neuen kristallinen Schicht, die sich an der Kristallstruktur des darunterliegenden Substrats orientiert. Die Gitterfehlanpassung wird grob mit $f = (a_f - a_s)/a_s$ bezeichnet; a_f ist die Schicht, a_s ist die Gitterkonstante des Substrats. Eine sehr dünne Schicht kann die Spannung elastisch aufnehmen. Mit zunehmender Dicke und Fehlanpassung kann die Spannung durch Versetzungen abgebaut werden; diese Defekte können die Lebensdauer der

Ladungsträger verringern. Eine abgestufte Pufferschicht, eine inverse metamorphe Aufwachsung, Schichttransfer und Wafer-Bonding sind verschiedene Lösungsansätze. Jeder Ansatz ist mit zusätzlichen Material-, Oberflächenvorbereitungs- und Fertigungsausbeutekosten verbunden.

Die elektrische Funktionsweise einer Reihenverbindung

In einem zweipoligen Reihenbauelement fließt derselbe Strom durch alle einzelnen Zellen. Im idealisierten Fall.

$$V_{\text{tandem}}(J) = \sum_i V_i(J) - JR_{s,A} \quad (\text{I.12.1})$$

Dies kann in dieser Form geschrieben werden. J ist die Stromdichte, V_i die Spannung jeder Teilzelle bei diesem Strom und $R_{s,A}$ der flächennormierte Serienwiderstand. Die Leistungsdichte wird über $P(J) = JV_{\text{tandem}}(J)$ maximiert. Den Kurzschlussstrom einfach als den kleinsten Teilzellenstrom anzusetzen, ist eine grobe Schätzung; für die tatsächliche maximale Leistung werden sämtliche Strom-Spannungs-Kennlinien und eine mögliche Lumineszenzkopplung benötigt. Zwischen den Teilzellen muss ein Stromkreis geschlossen werden. Ein Tunnelübergang kann eine geeignete Rekombination von Ladungsträgern zwischen zwei stark dotierten Bereichen ermöglichen. Diese Rekombination erfüllt die gewünschte Funktion einer elektrischen Verbindung und gehört nicht zur gleichen Verlustklasse wie die nichtstrahlende Rekombination innerhalb des Absorbers. Wenn die Verbindung eine hohe Stromdichte nicht tragen kann oder Licht absorbiert, verringert sich der Tandem-Gewinn.

Um den Strom einer Unterzelle zu erhöhen, indem mehr Photonen absorbiert werden, die auf eine andere Unterzelle treffen, kann die Gesamtleistung reduziert werden. Daher sind die optimalen Dicken und Bandlücken nicht die optimalen Werte für einzelne Übergänge. Darüber hinaus verändern der Sonnenstand am Morgen und Mittag sowie das atmosphärische Wasserdampf- und Aerosolspektrum das Stromverhältnis der Unterzellen. Zellen, die im Standardspektrum übereinstimmen, stimmen nicht das ganze Jahr über in gleichem Maße überein.

Konzentratorwirkungsgrad und Wirkungsgrad bei einer Sonne sind getrennte Kategorien

In der bahnbrechenden Arbeit von Geisz und Kollegen aus dem Jahr 2020 wurde bei einem sechsfachen III-V-Bauelement unter einer Sonnenkonzentration von 143 eine Effizienz von 47,1 % berichtet. Dieses Experiment zeigt, welches Niveau durch die Kombination von Mehrfachsolarzellen und optischer Konzentration erreicht werden kann; es zeigt nicht, dass eine flache Solarzelle unter den gleichen Bedingungen die gleiche Effizienz aufweist. Die Konzentration, der Serienwiderstand und die Materialqualität werden gemeinsam betrachtet. [T08]

Die Konzentrationsstromdichte kann nicht nur erhöht, sondern auch die ideale Leerlaufspannung erhöht werden. Bei der idealen Diodenapproximation gilt, dass bei konstanter Temperatur für jeden Übergang ungefähr

$$\Delta V_{oc} \approx n \frac{kT}{q} \ln C \quad (I.12.2)$$

erhalten wird. n ist der Idealitätsfaktor, k die Boltzmann-Konstante, T die absolute Temperatur, q die Elementarladung und C die Konzentrationsrate.

Beispiel: Wenn $n = 1$, $T = 298,15,00$ angenommen werden, beträgt die Zunahme etwa 0,118 V. Der Serienwiderstand führt jedoch zu einem Leistungsverlust, der proportional zum Quadrat des Stroms ist; wenn sich die Zelle erwärmt, geht ein Teil der Spannungszunahme verloren. Diese Formel ist keine Vorhersage der Leistung einer konzentrierten Zelle.

Der thermische Maßstab sollte ebenfalls berücksichtigt werden. Unter der hypothetischen Annahme von 100 Sonnen würde auf eine Zelle von 1 cm^2 etwa 10 W optische Leistung einfallen. Bei einer angenommenen elektrischen Umwandlung von 45 % ergibt sich eine verbleibende Leistung von etwa 5,5 W; wobei Reflexion und Lumineszenz vernachlässigt werden, stellt dies größtenteils eine thermische Belastung dar. Die Ableitung dieser Last auf einer kleinen Fläche erfordert eine ebenso anspruchsvolle technische Lösung wie die optische Ausrichtung. Konzentrierende Optiken, ein Nachführsystem, Kühlung und der Anteil der direkten Strahlung des Himmels sind Teil des Systems.

Für Weltraumanwendungen ist AM0 nicht identisch mit AM1.5G oder dem direkten Strahlungsspektrum, das für Anwendungen am Boden verwendet wird. Die Leistung pro Masse, die Strahlungsbeständigkeit und die Zuverlässigkeit haben im Weltraum eine sehr hohe Bedeutung. Am Boden sind hingegen die Energiekosten, die Wartung und die Nutzung von diffusem Licht, gemessen an der Leistung pro Flächeneinheit, von Bedeutung. Die Tatsache, dass France und Mitarbeiter in ihrer Studie von 2022 die Spektren für den Einsatz am Boden und im Weltraum als getrennte Ergebnisse darstellen, ist ein gutes Beispiel für eine disziplinierte Vergleichsmethodik. [T09]

Gitteranpassung und spektrale Anpassung sind unterschiedliche Randbedingungen

Bei einem Mehrfachübergangsdesign könnten wir, wenn wir die Bandlücken nur auf das Sonnenspektrum abstimmen würden, Materialien übereinanderlegen, die die gewünschten Bandlücken erzeugen. Bei der epitaktischen Züchtung kann es jedoch zu Gitterfehlanspassungen kommen, die zu Spannungen und Versetzungen führen. Wenn Versetzungen die Rekombination erhöhen, geht der Vorteil einer idealen Photonenverteilung durch Spannungsverluste verloren. Metamorphe Pufferschichten und Ansätze wie inverse Züchtung oder Bauelementintegration gehen auf unterschiedliche Weise mit dieser Materialbeschränkung um. [T08] [T09]

Der dazwischenliegende Tunnelübergang ist auch kein gewöhnliches leitfähiges Kabel. Er ermöglicht die elektrische Verbindung, bei der Elektronen von der oberen Zelle und Löcher von der unteren Zelle mit geringen Verlusten rekombinieren können; gleichzeitig sollte er die Photonen, die zur unteren Zelle gelangen, so wenig wie möglich absorbieren. Eine Verbindung mit unzureichender Stromtragfähigkeit kann zu Spannungsverlusten oder einer instabilen Kennlinie im Betriebsstrom führen. Daher reicht es nicht aus, dass die Teilzellen einzeln gut sind, um den guten Betrieb der monolithischen Anordnung zu gewährleisten.

Bei der Konzentration erhöht sich die Leerlaufspannung (V_{oc}) eines einzelnen Übergangs bei einer C -fachen Erhöhung des Photonenflusses um etwa $V_T \ln C$, wenn eine ideale konstante Temperatur angenommen wird. Entsprechend wächst der Strom um etwa C , und der ohmsche Verlust bei gleicher Flächenleitfähigkeit wächst mit C^2 . Die optische Verstärkung steht auch in Beziehung zur Wärmeableitung: Wenn sich die Zelle erwärmt, ist die Annahme einer konstanten Temperatur nicht mehr gültig. Bevor man die in der Rekordtabelle aufgeführte konzentrierte Zelle mit einem unter Sonneneinstrahlung betriebenen Modul vergleicht, müssen diese physikalischen Bedingungen berücksichtigt werden.

Selbsttest

1. Kann man sagen, dass ein Material eindeutig überlegen ist, wenn die Leistung einer Zelle mit einem Konzentrator größer ist als die einer Zelle in einem flachen Panel?

Antwort: Nein. Das Spektrum, die Konzentration, die Temperatur, die Fläche, der Übergang und die Anzahl der Anschlüsse müssen aufeinander abgestimmt sein.

2. Wenn die Stromdichten am jeweiligen unabhängigen Maximum-Power-Point zweier Teilzellen 18 und 21 mA/cm² betragen, dürfen ihre unabhängigen Maximalleistungen nach einer Reihenschaltung addiert werden? **Antwort:** Nein. Unter der Bedingung des gemeinsamen Stroms muss die Gesamtleistung erneut maximiert werden.

3. Ist die Grenzfläche zwischen zwei Halbleitern mit identischer Gitterkonstante automatisch von guter Qualität? **Antwort:** Nein. Chemische Reaktionen, Bandausrichtung, Polarität, Oberflächenterminierung und Grenzflächendefekte müssen zusätzlich untersucht werden.

Halogenid-Perowskite: starke Optoelektronik, dynamische Chemie

Perowskit ist eine Familie von Kristallstrukturen

Obwohl der Begriff „Perowskit“ wie der Name einer einzelnen chemischen Verbindung verwendet werden kann, bezieht er sich im Kontext der Photovoltaik meist auf eine Familie von Materialien, die eine bestimmte Kristallstruktur aufweisen. In der idealen Formel **ABX₃** sind A und B verschiedene, unterschiedlich große positive Ionenpositionen, während X eine negative Ionenposition ist. Bei Halogenid-Perowskiten ist X typischerweise Iod, Brom oder Chlor. In gängigen bleihaltigen Beispielen befindet sich an der B-Position Pb^{2+} und an der A-Position ein insgesamt +1 geladenes Ion. Für ein A, ein B und drei X ergibt sich die Ladungsbilanz $+1 +2 -3 = 0$. Diese einfache Neutralitätsberechnung beweist jedoch nicht, dass jede aufgeführte Formel einen stabilen Kristall bildet.

FA steht für Formamidinium, **MA** für Methylammonium-Ionen; **Cs** ist die gängige Abkürzung für Cäsium. In der Zusammensetzung können die Positionen A oder X von verschiedenen chemischen Spezies eingenommen werden. Diese beeinflussen das Volumen, die optische Bandlücke, die Kristallisation und das Verhalten der beweglichen Ionen. Die Aussage „Wir haben etwas Brom hinzugefügt“ bedeutet daher nicht nur eine Farbänderung; sie kann mehrere physikalische und chemische Variablen beeinflussen.

Warum ist die Filmbildung aus einer Lösung ein eigenständiges wissenschaftliches Feld?

Die Vorstufe ist die Ausgangsverbindung, die zur Herstellung des Zielmaterials verwendet wird. Wenn die Mischung, in der die Vorstufen in einem **Lösungsmittel** dispergiert sind, auf die Oberfläche aufgetragen wird, entsteht zunächst ein feuchter Film. Während das Lösungsmittel verdunstet, steigt die Ionenkonzentration, es bilden sich kleine, geordnete Bereiche, die **keimbildend** wirken, und anschließend wachsen die Kristalle. Ein **Korn** ist ein Bereich mit einer gemeinsamen kristallinen Orientierung. Das Vorhandensein von **Hohlräumen** im Film, die Trennung einiger Komponenten oder die Beschädigung der **Grenzfläche** können den Nutzen großer, optisch ansprechender Körner zunichtemachen.

Die Ausdrücke **n-i-p** und **p-i-n** geben die Reihenfolge der Ladungsträger-selektiven Schichten an. Dabei bezeichnet „i“ die absorbierende Mittelschicht; dies garantiert jedoch nicht, dass der tatsächliche Film unter allen Umständen ein defektfreies,

intrinsisches Halbleitermaterial ist. Die **Elektronentransportschicht** unterstützt den Elektronentransport, die **Lochtransportschicht** den Lochtransport zum entsprechenden Kontakt. Jede Schicht wird zudem hinsichtlich Lichtabsorption, chemischer Verträglichkeit und Prozesstemperatur bewertet.

Wie beeinflusst die Bewegung von Ionen die Messung?

Eine **Leerstelle** in einem Kristall ist eine Position, an der ein Ion fehlt, das dort erwartet würde. Während sich benachbarte Ionen zu dieser Position bewegen, kann die Bewegung der Leerstelle selbst in der entgegengesetzten Richtung beobachtet werden. Die **Ionenwanderung** ist die Neuordnung von Ladung und Zusammensetzung durch solche atomaren Bewegungen. Sie muss nicht in der gleichen Zeitskala wie ein Elektronenstrom ablaufen.

Beim schnellen Durchlaufen der Spannung kann die Ionenverteilung den vorherigen Zustand teilweise beibehalten. Dadurch ergeben sich bei Vorwärts- und

Rückwärtsscans unterschiedliche Kurven; dies ist die **Hysterese**. **Synthetisches**

Beispiel: Wenn bei einem schnellen Scan 22 % und bei der Leistungsverfolgung nach einer Stabilisierungszeit 19 % beobachtet werden, können wir diese nicht mit derselben Leistungsbezeichnung verwenden. Dieser Unterschied beweist nicht allein die Existenz einer bestimmten Ionenart; es sind stabile Messungen und differenzierende Kontrollen erforderlich. [T12] [T14]

Verständniskontrolle: Bedeutet ein gleichmäßiger Film eine gute Zelle?

Ein im Mikroskop ohne erkennbare Pinholes erscheinender, grobkörniger Film zeigt allein nicht, dass es wenige elektrische Defekte oder selektive Kontakte gibt.

Korrelieren Sie das strukturelle Bild mit Lumineszenz-, Spannungs-, stationären Leistungs- und Zusammensetzungsmessungen. „Das Bild hat sich verbessert“ und „die Ursache für den Leistungsverlust wurde behoben“ sind getrennte Ergebnisse.

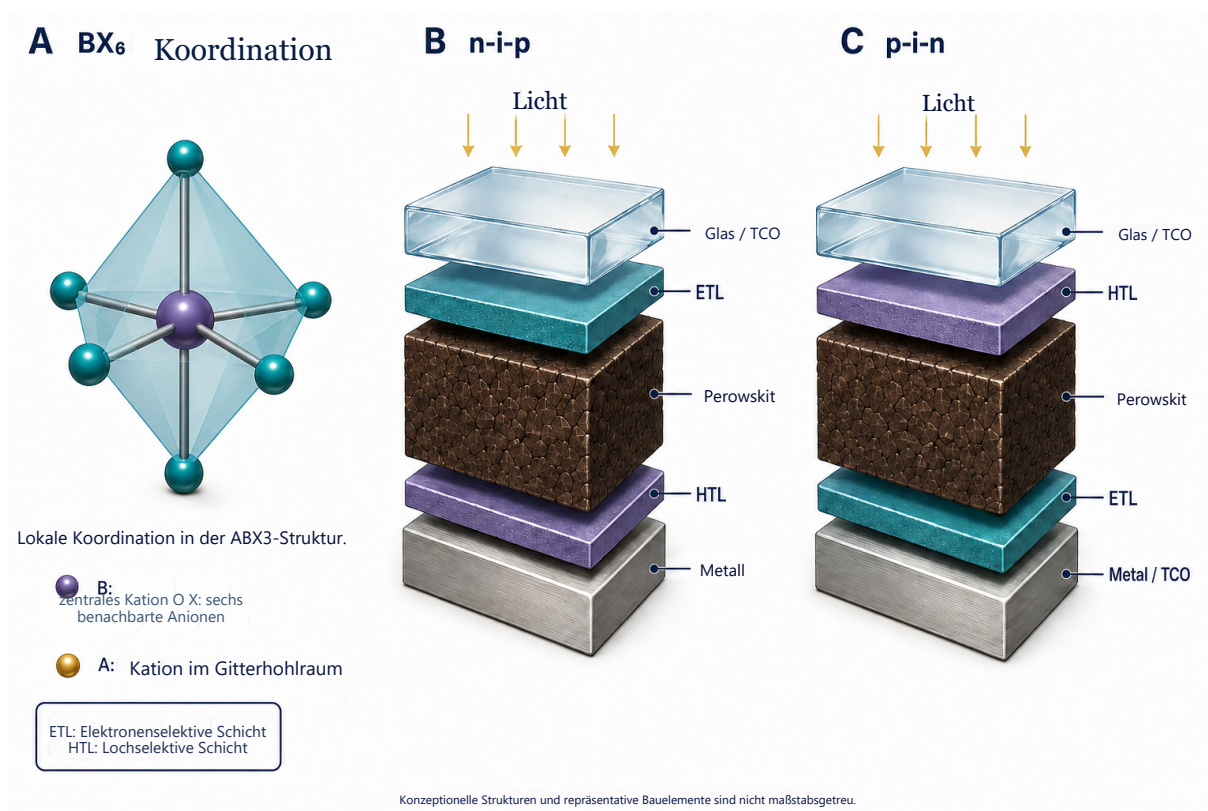


Abbildung 22. Die Perowskit-Strukturfamilie und zwei Bauelementorientierungen. Panel A ist eine Projektion der idealen lokalen ABX_3 -Umgebung; Drehungen in realen Phasen sind nicht dargestellt. Die Panels B und C zeigen die n-i-p- und p-i-n-Schichtfolge, beginnend auf der Lichteintrittsseite. ETL bezeichnet die elektronenselektive, HTL die lochselektive Schicht. Die Schichtdicken sind nicht maßstabsgetreu. [T10] [T11] Mit einem Bildgenerierungswerkzeug erstellte konzeptionelle Illustration; keine Messaufnahme.

Perowskit bezeichnet eine Strukturfamilie, keine einzelne Substanz

Der Begriff „Perowskit“ bezeichnet keine einzelne chemische Formel. In der Photovoltaik weit verbreitete Halogenid-Perowskite haben eine Struktur der Form ABX_3 : A ist meist ein einfachwertiges Kation, B ein zweiwertiges Metall wie Blei oder Zinn, und X kann Iodid, Bromid oder eine Mischung davon sein. Das B-X-Oktaeder-Netzwerk ist entscheidend für die Bildung der Bandkanten. Das A-Kation beeinflusst ebenfalls die Geometrie, die Phasenstabilität und die Dynamik des Netzwerks. Daher ist die Schlussfolgerung „A trägt wenig zur Bandkante bei, ist unbedeutend“ falsch.

MA steht für Methylammonium, FA für Formamidinium; Cs steht für Cäsium. Die teilweise Substitution von Iodid durch Bromid vergrößert in der Regel die Bandlücke. Blei-Zinn-Mischungen können zu Absorbern mit einer geringeren Bandlücke führen; die Mischungszusammensetzung muss jedoch nicht linear sein. Bei der Angabe der Zusammensetzung sollten die Summe der Koeffizienten, das Halogenverhältnis, die Frage, ob die Dotierung im Gitter oder an der Oberfläche erfolgt, und die tatsächlichen Phasen, die der Film enthält, klar angegeben werden.

Geometrischer Toleranzfaktor

$$t = \frac{r_A + r_X}{\sqrt{2}(r_B + r_X)} \quad (\text{I.13.1})$$

manchmal wird es für eine grobe Strukturanalyse verwendet. r_A , r_B und r_X sind die effektiven Ionenradien. Dieser Indikator berücksichtigt keine Bindung, Temperatur, molekulare Ausrichtung, Oxidation oder kinetische Dissoziation. Ein geeigneter t -Wert ist kein Beweis für einen unter Sonnenlicht stabilen Film oder eine synthetisierbare Verbindung. Der Forscher sollte diese Art von einfachen Indikatoren als ein Ausscheidungswerkzeug verwenden und sie nicht anstelle eines experimentellen Phasendiagramms einsetzen.

Wichtige Meilensteine in der Entwicklung

In der 2009 veröffentlichten Arbeit von Kojima und seinen Kollegen wurde gezeigt, dass organische Blei-Halogenid-Kristalle in lichtempfindlichen photoelektrochemischen Bauelementen verwendet werden können. Ihre historische Bedeutung liegt darin, dass sie einen der Ausgangspunkte für die heutigen Festkörper-Perowskit-Zellen darstellen. Die Architektur dieses Bauelements unterscheidet sich von der der heutigen Festkörper-Bauelemente; ein direkter Vergleich der anfänglichen Leistung mit der heutigen Modulleistung wäre daher nicht angemessen. [T10]

Die Studie von Lee und seinen Kollegen aus dem Jahr 2012 ist ein Meilenstein, da sie zeigt, dass Perowskit nicht nur als Sensibilisator fungieren muss, sondern auch die Funktionen der Lichtabsorption und des Ladungstransports in einem Festkörperbauelement übernehmen kann. Die in der ursprünglichen Zusammenfassung dieses Artikels präsentierten experimentellen Ergebnisse sind ein Beweis für die Zeit, in der sich das Gebiet sehr schnell entwickelte; sie bedeuten nicht, dass jede Perowskit-Formel automatisch eine gute Zelle ergibt. [T11]

Der wissenschaftliche Reiz dieser rasanten Entwicklung liegt in der Kombination aus starker Absorption, geeigneten Bandlücken und langen Ladungsträger-Sammelstrecken in gut präparierten Filmen. Die Herstellung einer kostengünstigen Lösung ist jedoch nicht dasselbe wie die Herstellung eines kostengünstigen und langlebigen Moduls. Kontakte, Lösungsmittelmanagement, kontrollierte Kristallisation, Verkapselung, die Bindung toxischer Elemente und die Reproduzierbarkeit der Produktion bestimmen die tatsächlichen Kosten des Produkts.

Baelementanordnung: n-i-p und p-i-n

Betrachtet man die Anordnung von der Seite, von der das Licht einfällt, so findet man in einer n-i-p-Struktur zuerst den elektronenselektiven Kontakt, dann den Absorber und anschließend den lochselektiven Kontakt. In einer p-i-n-Struktur ist die Reihenfolge umgekehrt. Hierbei bezeichnet „i“, dass der Absorber die Funktion einer effektiv schwach dotierten Zone erfüllt; es wird jedoch nicht garantiert, dass es sich um einen fehlerfreien, absolut intrinsischen Halbleiter handelt. Man kann sich dies als eine Schichtstruktur vorstellen, die aus Glas/TCO/selektiver Schicht/Perowskit/gegenselektiver Schicht/Elektrode besteht. Jede Schicht hat nicht nur eine elektrische Funktion, sondern auch eine optische und chemische Funktion. Für Elektronentransportschichten können SnO_2 , TiO_2 oder geeignete Fullerenderivate verwendet werden; für Lochkontakte eignen sich organische Moleküle, NiO_x oder selbstorganisierte molekulare Monoschichten - dies sind verschiedene Designansätze. Diese Liste stellt keine Kaufempfehlung dar. Die Eignung eines Materials wird durch die Arbeitsfunktion, die Bandausrichtung, die Kompatibilität der Beschichtung, die Oberflächenchemie sowie die Reaktionen unter Hitze und Lichteinfluss bestimmt. Eine dünne organische Schicht kann die Rekombination reduzieren, während eine zu dicke oder ungleichmäßige Schicht eine Transportbarriere bilden kann.

Die eingebettete Grenzfläche ist besonders anspruchsvoll, da sie nachträglich nicht direkt bearbeitet werden kann. Während des Aufwachsens des Perowskitfilms auf der darunterliegenden Oberfläche finden gleichzeitig Benetzung, Keimbildung und chemische Bindung statt. Eine in 2021 veröffentlichte Studie über eine atomar angepasste SnO_2 /Perowskit-Zwischenschicht ist ein anschauliches Beispiel dafür, dass die Optimierung der eingebetteten Grenzfläche zu einer Verbesserung der Bauelementeigenschaften führen kann. Solche Ergebnisse zeigen, dass es bei der Entwicklung „neuer Passivierungsmoleküle“ nicht nur darum geht, sondern auch darum, die Art und Weise zu kontrollieren, wie die Grenzfläche entsteht. [T32]

Kristallisation: Das größte Korn ergibt nicht immer die beste Schicht

Bei der Filmbildung folgen sich Lösungsmittelverlust, Übersättigung, Keimbildung, Wachstum und Phasenübergang. Eine zu schnelle Keimbildung kann eine große Anzahl kleiner Körner erzeugen, während eine zu geringe Keimbildung zu Löchern und unbeschichteten Bereichen im Film führen kann. Wenn man sich bei der Bewertung ausschließlich auf die großen Körner in einem SEM-Bild verlässt, werden versteckte Grenzflächenfehler und lokale Änderungen der Stöchiometrie übersehen.

Kontinuierliche Abdeckung, Phasenreinheit, Orientierung, Verspannung und elektronische Qualität müssen zusammen gemessen werden.

Eine Additivsubstanz kann gleichzeitig die Trocknungsgeschwindigkeit, die Defektbindung und die Kontaktarbeitsfunktion verändern. Wenn sich die Leistung verbessert, sind Kontrollexperimente erforderlich, um den Effekt auf einen einzigen Mechanismus zurückzuführen: ein ähnliches Molekül, das die gleiche Benetzung bewirkt, aber keine Bindung eingeht; ein Prozess, der nur auf dem unteren Kontakt angewendet wird; eine äquivalente Filmdicke; unterschiedliche Lichtintensitäten und Messungen mit Zeitauflösung. Die Hypothese über den Mechanismus erfordert mehr Experimente als die Analyse der besten Bauelementgrafik.

Ionenwanderung und Hysterese

Halogenid-Perowskite können neben elektronischen Ladungsträgern auch bewegliche ionische Defekte enthalten. Die Studie von Eames und Kollegen aus dem Jahr 2015 berechnete und experimentell untersuchte den Transport, der mit Iod-Leerstellen in MAPbI_3 verbunden ist. Dieses Ergebnis gilt für eine bestimmte Zusammensetzung und einen bestimmten Mechanismus; es ist nicht korrekt, eine einzige Aktivierungsenergie auf alle Perowskit-Bauelemente zu übertragen. Grenzflächen, Korngrenzen und Lichtverhältnisse können die effektiven Prozesse verändern. [T12]

Ein einfaches thermisches Aktivierungsmodell hat die Form $D = D_0 \exp[-E_a/(kT)]$.

ist der Diffusionskoeffizient, D_0 der Präfaktor und E_a die Aktivierungsenergie für die Wanderung. **Gelöstes Beispiel:** Nehmen wir an, der Präfaktor bleibt gleich, während die Barriere um 0,10 eV ansteigt. Bei 298,15 K beträgt das neue/alte Geschwindigkeitsverhältnis ungefähr $\exp(-0,10/0,02569) = 0,020$; es ist mit einer etwa 49-fachen Verlangsamung zu rechnen. Wenn der Prozess jedoch die Anzahl der beweglichen Defekte um das 100-fache erhöht, kann die gesamte ionische Leitfähigkeit dennoch zunehmen. Die Barriere allein ist kein ausreichendes Designziel.

Wenn sich Ionen in der Nähe des Kontakts ansammeln, können sich das interne elektrische Feld und die Rekombination an der Grenzfläche ändern. Die Messung wird dann von der Richtung und Geschwindigkeit des Ab tastens sowie vom vorherigen Spannungszustand beeinflusst. Eine geringe Hysterese beweist jedoch nicht, dass keine Ionenwanderung stattfindet. Das Experiment von Calado und Kollegen aus dem Jahr 2016 befasste sich direkt mit dieser Unterscheidung. Das Auftreten von Hysterese hängt von der kombinierten Wirkung der Ionenbewegung und der Kontakt- sowie Rekombinationsbedingungen ab. [T14]

Chemie unter Lichteinwirkung und tatsächliche Stabilität

In gemischten Iodid-/Bromid-Filmen kann unter Lichteinwirkung eine lokale Halogenzersetzung beobachtet werden. Die Studie von Hoke und Kollegen aus dem Jahr 2015 liefert eindeutige Beweise für strukturelle und optische Veränderungen, die durch Licht induziert und wieder rückgängig gemacht werden können. Selbst wenn jodreiche, schmalbandige Bereiche nur einen geringen Teil des Volumens einnehmen, können sie Ladungsträger sammeln und das Lumineszenzspektrum sowie die Spannung beeinflussen. Daher sollte das vorherrschende PL-Maximum nicht als ein homogenes Bandlückenprofil des gesamten Films interpretiert werden. [T13]

Feuchtigkeit und Sauerstoff wirken als äußere Einflüsse, während Licht, Temperatur und elektrische Spannung das Material innerhalb der Kapsel beeinflussen. Die Verwendung eines anorganischen A-Kations kann die organische Flüchtigkeit reduzieren, beseitigt jedoch nicht von selbst die Halogenwanderung, die Phasenänderung oder die Reaktion an der Metallelektrode. „Vollständig anorganisch“ ist nicht dasselbe wie „feldstabil“.

Die entscheidende Frage bei der Stabilität ist, bei welcher Spannung welche Eigenschaft über welchen Zeitraum erhalten bleibt. Der Konsensentwurf von Khenkin und Kollegen aus dem Jahr 2020 fordert eine klare Dokumentation von Licht, Temperatur, Feuchtigkeit, elektrischer Belastung, Verkapselung und reversiblen Veränderungen. Die MPP-Verfolgung ermöglicht einen elektrischen Zustand, der den Betriebsbedingungen nahekommt. Das Ergebnis eines Bauelements, das im Dunkeln gelagert wird, ist nicht die Lebensdauer eines Bauelements, das unter Lichteinwirkung Energie erzeugt. [T15]

Kristallisation als Funktion einer Energiebarriere und einer Zeitskala betrachten

Bei einer einfachen, homogenen Keimbildung ist die Änderung der freien Energie eines sphärischen Keims der neuen Phase mit dem Radius r die Summe aus der Oberflächenenergie und dem Volumenbeitrag. Wenn die Grenzflächenenergie γ positiv und die Volumenänderung der freien Energie Δg_v der neuen Phase negativ ist:

$$\Delta G(r) = 4\pi r^2 \gamma + \frac{4\pi}{3} r^3 \Delta g_v. \quad (I.13.2)$$

Durch das Nullsetzen der Ableitung erhält man den kritischen Radius $r = -2\gamma/\Delta g_v$ und die Barriere $\Delta G = 16\pi\gamma^3/(3\Delta g_v^2)$. In kleinen Keimen unterhalb der kritischen Größe ist die Oberflächenenergie dominant; oberhalb davon wird das Wachstum vorteilhafter. Die Übersättigung in der Lösung, die Bildung von Zwischenphasen und die heterogene Keimbildung auf der Oberfläche verändern dieses Bild im resultierenden Film. Dieses

Modell ist keine Produktionsanweisung, sondern ein Ausgangspunkt, der erklärt, wie Prozessvariablen Ursache-Wirkungs-Beziehungen erzeugen.

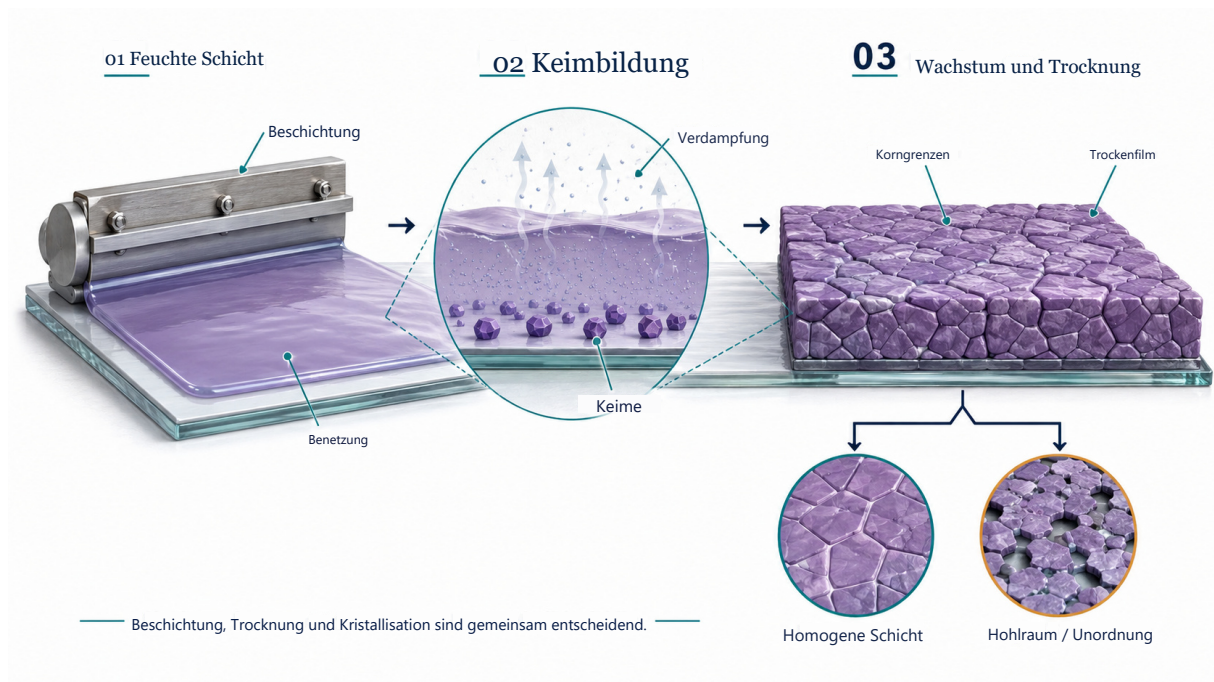


Abbildung 23. Übergang von einem nassen Vorläufer zu einem polykristallinen Film. Beschichtung, Lösungsmittelverlust, Keimbildung und Wachstum sind miteinander verbunden. Nahaufnahmen veranschaulichen den Unterschied zwischen Filmdurchgängigkeit und Löchern sowie Unregelmäßigkeiten; es handelt sich nicht um eine echte Mikroskopie oder Größenmessung der Kristallite. Das nachfolgende Berechnungspanel zeigt zusätzlich die klassische Energiebarriere eines homogenen, kugelförmigen Keims. [T11] [T32] Mit einem Bildgenerierungswerkzeug erstellte konzeptionelle Illustration; keine Messaufnahme.

Energiebarriere des kritischen Kerns.

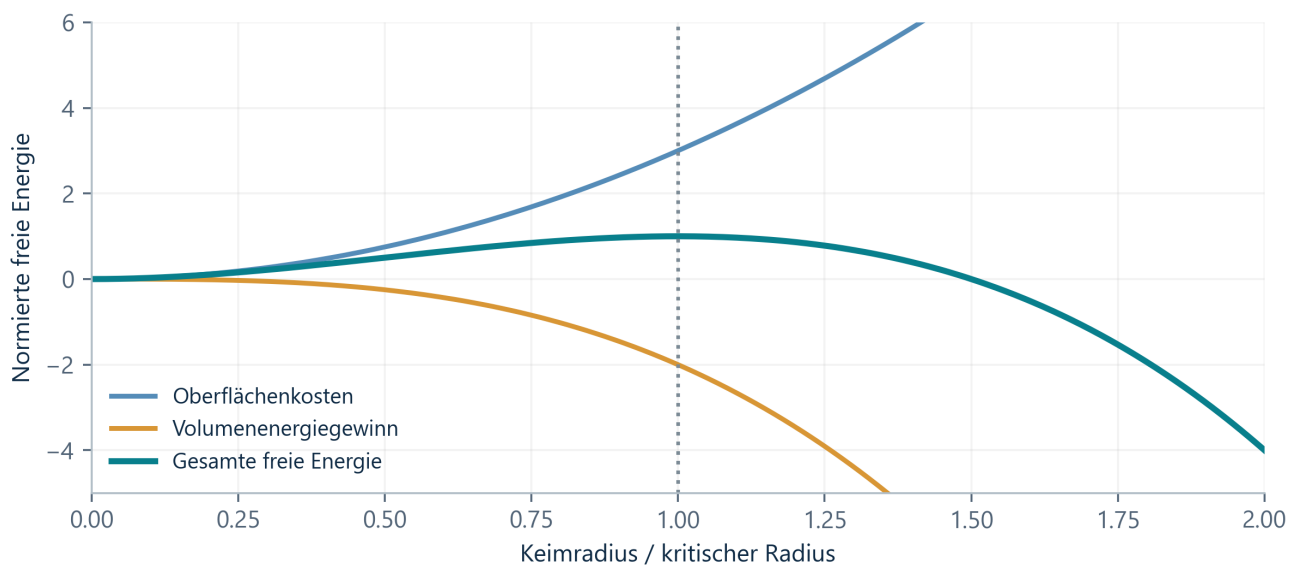


Abbildung 23 - berechnete ergänzende Teilabbildung. Im globalen und homogenen Keimbildungsmodell variiert der Oberflächenterm mit dem Quadrat des Radius, während der Volumenbeitrag mit der dritten Potenz variiert. Für die normalisierte Gesamtfunktion $3x^2 - 2x^3$ liegt die Barriere bei $x = 1$. Bei realen, beschichteten Filmen sind die heterogene Keimbildung auf dem Substrat und die Prozesskinetik von besonderer Bedeutung. [T11] [T32]

Eine schnelle Keimbildung kann eine große Anzahl von Keimbildungszentren erzeugen; langsames Wachstum in Kombination mit einer schnellen Entfernung des Lösungsmittels führt zu unterschiedlichen Mikrostrukturen. Aber „wenige Keime, große Körner, hoher Wirkungsgrad“ ist keine lineare Regel. Nicht-beschichtete Bereiche, Restphasen, die Oberflächenzusammensetzung und die Verbindung mit der Trägerschicht sind ebenfalls wichtig. Zwei Filme, die die gleiche optische Absorption aufweisen, können aufgrund unterschiedlicher Grenzflächenverluste sehr unterschiedliche Werte für Voc liefern. Die Filmbewertung sollte mindestens die Integrität der Oberflächenbeschichtung, die Phase/Zusammensetzung, die optische Reaktion und die elektronische Qualität umfassen.

Die Ionenwanderung in die Transportgleichung einbeziehen

Für eine einzelne Art von beweglichen Ionen ist der Teilchenfluss die Summe aus Diffusion und elektrischer Drift im Rahmen der verdünnten und isothermen Nernst-Planck-Näherung. Sei z die Anzahl der Ladungen des Ions, c_i die Konzentration und D_i der Diffusionskoeffizient:

$$F_i = -D_i \frac{\partial c_i}{\partial x} + \frac{zqD_i}{k_B T} c_i E, \quad \frac{\partial c_i}{\partial t} = -\frac{\partial F_i}{\partial x}. \quad (\text{I.13.3})$$

Die ionische Ladung $zqci$ trägt zur Gesamtladung in der Poisson-Gleichung bei. Daher erzeugen Ionen nicht nur einen langsamen Strom, sondern verändern auch das Potenzial, dem Elektronen und Löcher ausgesetzt sind. An einem Kontakt, der keine Ionen durchlässt, kann der normale Ionenfluss auf Null gesetzt werden; wenn jedoch an der Grenzfläche eine Reaktion stattfindet, ist diese Randbedingung nicht ausreichend. Die tatsächliche mobile Spezies, der Ladungszustand und der Reaktionsweg müssen durch unabhängige chemische Beweise bestimmt werden. [T12] [T14]

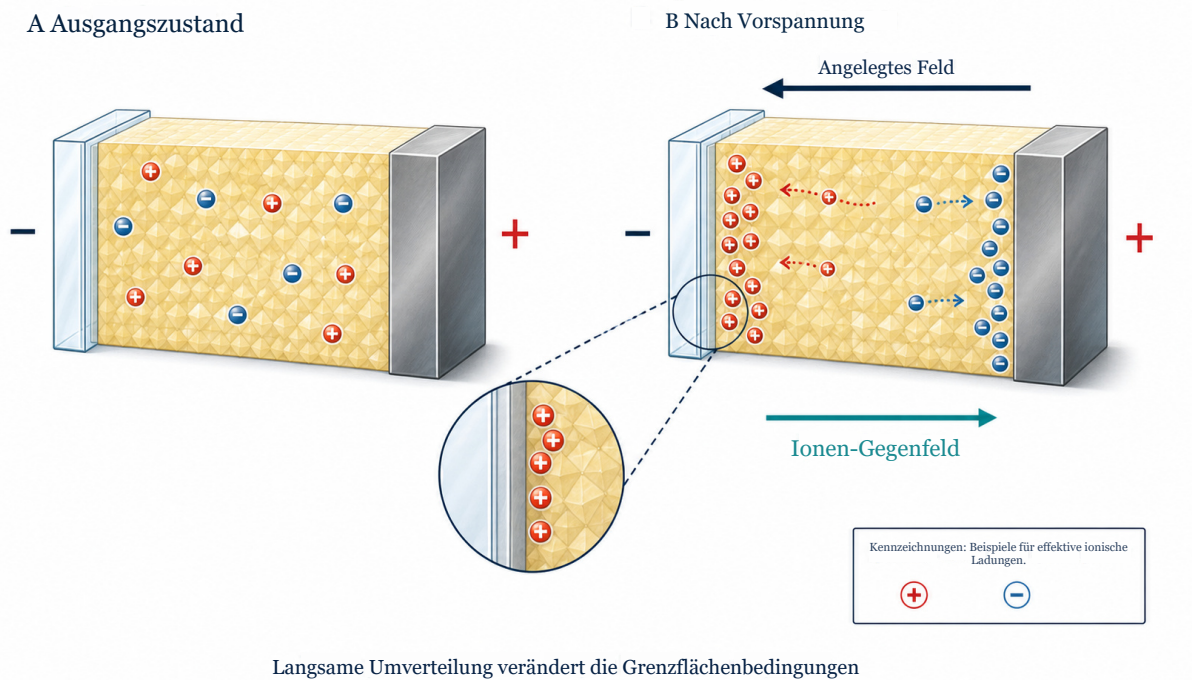


Abbildung 24. Beispielhafte Darstellung der langsamen ionischen Umverteilung unter angelegter Vorspannung. Das nach links gerichtete angelegte Feld zieht positive effektive ionische Ladungen nach links und negative nach rechts an die Grenzfläche; das durch die Ansammlung erzeugte Gegenfeld hat die entgegengesetzte Richtung. Die Symbole geben nicht die Menge einer bestimmten Ionensorte oder die Anzahl der Teilchen an. In einem realen Bauelement müssen die beweglichen Spezies, die Randbedingungen und die elektronische Reaktion zusätzlich bestimmt werden. [T12] [T14] Mit einem Bildgenerierungswerkzeug erstellte konzeptionelle Illustration; keine Messaufnahme.

Zeitmaßstab der Messung durch interne Relaxation.

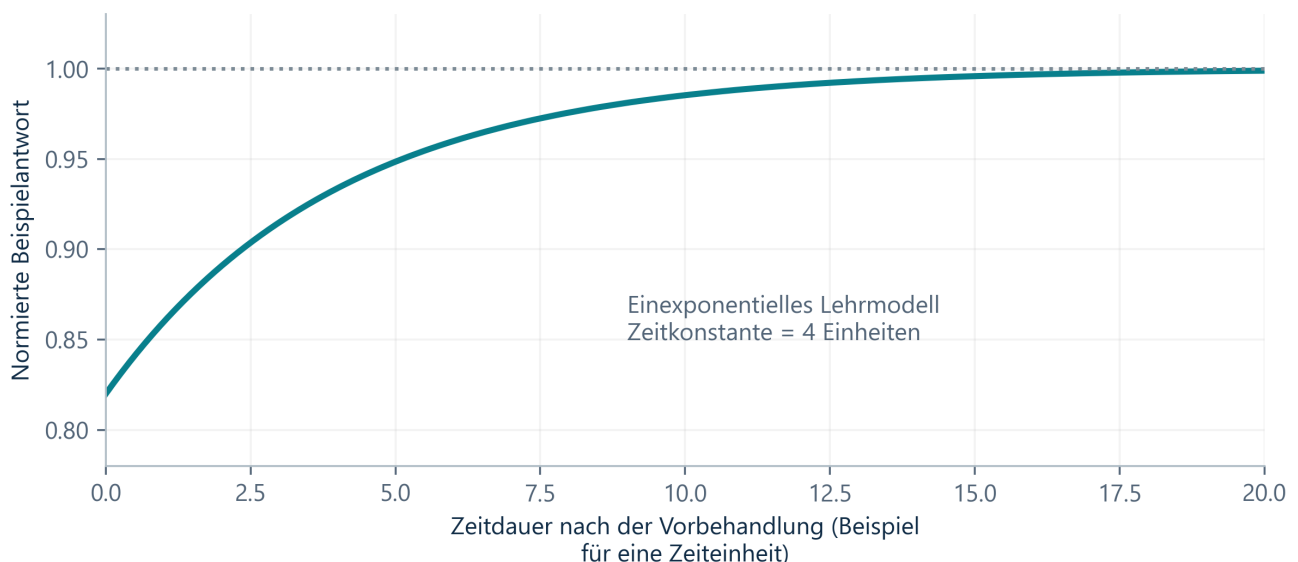


Abbildung 24 - berechnete ergänzende Teilabbildung. Die synthetische Antwort $y(t)$ ist durch die Gleichung $y(t) = 1 - 0,18 \exp(-t/4)$ gegeben; die Zeitkonstante beträgt vier Einheiten. Wenn die Dauer einer Messung nahe an der inneren Relaxationszeit liegt, können die Vorbedingungen und die Scan-Historie das Ergebnis beeinflussen. Diese Kurve dient nicht zur Diagnose eines bestimmten Ions oder der Kinetik einer realen Probe. [T12] [T14]

Wenn wir die Filmdicke mit d bezeichnen, beträgt die Diffusionszeit ungefähr d^2/D_i ; die Driftzeit unter dem Einfluss eines Feldes kann unterschiedlich sein. Wenn dieser

Maßstab im Vergleich zur Spannungsraasterung zu lang oder zu kurz ist, kann die Hysterese gering erscheinen. Daher beweist eine geringe Hysterese allein nicht, dass die Ionen unbeweglich sind. Vorbedingungen, Wartezeit, Rasterrichtung und eine stabile MPP-Messung sind Teile derselben physikalischen Geschichte.

Selbsttest

1. Ist die Hysterese verschwunden, bedeutet das, dass die Ionenwanderung beendet ist? **Antwort:** Nein; die elektrische Wirkung der Ionen kann durch die Gestaltung der Kontakte unterdrückt worden sein.
2. Wenn ein Bauelement 1000 Stunden im Dunkeln und das andere 300 Stunden unter MPP-Bedingungen stabil ist, welches ist dann haltbarer? **Antwort:** Mit den gegebenen Informationen lässt sich keine Aussage treffen, da die Belastungsbedingungen nicht übereinstimmen.
3. Wenn sich die PL-Emission ins Rote verschiebt und die Absorptionskante nahezu konstant bleibt, ist die einzige Erklärung dann eine homogene Verringerung der Bandlücke? **Antwort:** Nein; kleine, volumenbegrenzte Bereiche mit niedriger Bandlücke können Ladungsträger sammeln und die PL-Emission verstärken.

Perowskit-Tandemzelle: Warum reicht es nicht aus, einfach zwei gute Zellen zu kombinieren?

Bei Perowskit-Silizium-Tandemzellen ist die Reihenfolge der Verarbeitungsschritte von Bedeutung

Nach der Herstellung der Silizium-Unterzelle besteht die Herstellung einer Perowskit-Oberzelle darin, ein fertiges Bauelement neuen chemischen und physikalischen Prozessen auszusetzen. Das Lösungsmittel der Oberzelle kann die darunterliegende Schicht auflösen, das Erhitzen kann die vorherige Passivierung beeinträchtigen und die Oberflächenstruktur kann eine gleichmäßige Beschichtung des feuchten Films erschweren. Die **Integration** geht über das bloße Übereinanderlegen von Teilen hinaus und umfasst die Koordination dieser Prozesse und Funktionen.

Die **große Bandlücke** der oberen Zelle zielt darauf ab, hochenergetische Photonen mit einer höheren Spannung zu nutzen. Allerdings ist „größer“ nicht immer „besser“. Wenn in der oberen Zelle nur wenige Photonen absorbiert werden, wird der Strom der Reihenschaltung begrenzt. Wenn zu viele absorbiert werden, bleibt möglicherweise nicht genügend Licht für die untere Zelle übrig. Die Schichtdicke und die Zusammensetzung bestimmen gemeinsam die Stromverteilung. Bei gemischten Halogenidzusammensetzungen wird auch die Zusammensetzungsänderung unter Lichteinwirkung untersucht.

Welche Ladungen treffen an der Zwischenverbindung aufeinander?

In einer 2T-Tandemzelle vervollständigt eine Art von Ladungsträger einer Unterzelle den elektrischen Kreislauf in der Übergangszone mit dem Ladungsträger der benachbarten Zelle, der das Gegenteil davon ist. Der **Rekombinationskontakt** ist hierfür erforderlich und dient als gezielte Verbindung. Er hat nicht die gleiche Designfunktion wie die unerwünschte Rekombination, die innerhalb des Absorbers stattfindet, bevor der Kontakt erreicht wird. Ein Prozess kann nicht einfach als „immer schlecht“ eingestuft werden, ohne seinen Namen, seinen Ort und seine Funktion zu kennen.

Schematische optische Bilanz: Von 100 Photonen, die in ein bestimmtes Wellenlängenband eintreten, sollen 45 im oberen Absorber, 5 in der nicht zur

nutzbaren Ladungsträgererzeugung beitragenden Kontaktschicht absorbiert werden, 10 reflektiert und 40 durchgelassen werden. Wenn die untere Zelle 75 % dieser 40 Photonen auf nützliche Weise einfängt, liefert sie einen Beitrag von 30 Elektronen aus diesem Band. Hierbei stellt die Absorption von 5 Photonen eine **parasitäre Absorption** dar, die zu Verlusten führt, ohne einen nützlichen Beitrag zur oberen oder unteren Zelle zu leisten. Da diese einfache Zählung keine Spannung berücksichtigt, liefert sie keine Aussage über den Tandemwirkungsgrad; sie zeigt lediglich, welche Schicht Photonen verliert.

Transparente leitfähige Oxide sind Oxidschichten, die dazu dienen, einen Großteil des Lichts durchzulassen, während sie gleichzeitig elektrischen Strom leiten; sie werden als TCO abgekürzt. Tatsächlich treten Absorption, Reflexion und Schichtwiderstand gemeinsam auf. Dünnere TCO-Schichten können zwar die Lichtdurchlässigkeit erhöhen, aber auch den lateralen Widerstand. Der Erfolg der Grenzfläche kann daher nicht allein anhand des Durchlässigkeitsgrads beurteilt werden.

Verständniskontrolle: Nach welchem Prozessschritt ging der Zugewinn verloren?

Wenn die untere Zelle gut ist und die obere Zelle in einem separaten Test gut funktioniert, aber die Tandemzelle schlecht ist, werden die Prozesse schrittweise durchgeführt. Die untere Zelle wird den Lösungsmittel-, Temperatur- und Abscheidungsbedingungen der oberen Schichten ausgesetzt, ohne dass ein Absorber hinzugefügt wird, und dann erneut gemessen. Diese Kontrollen helfen dabei, Schäden durch den Prozess von optischer Kopplung und Verlusten durch die Verbindung zu unterscheiden.

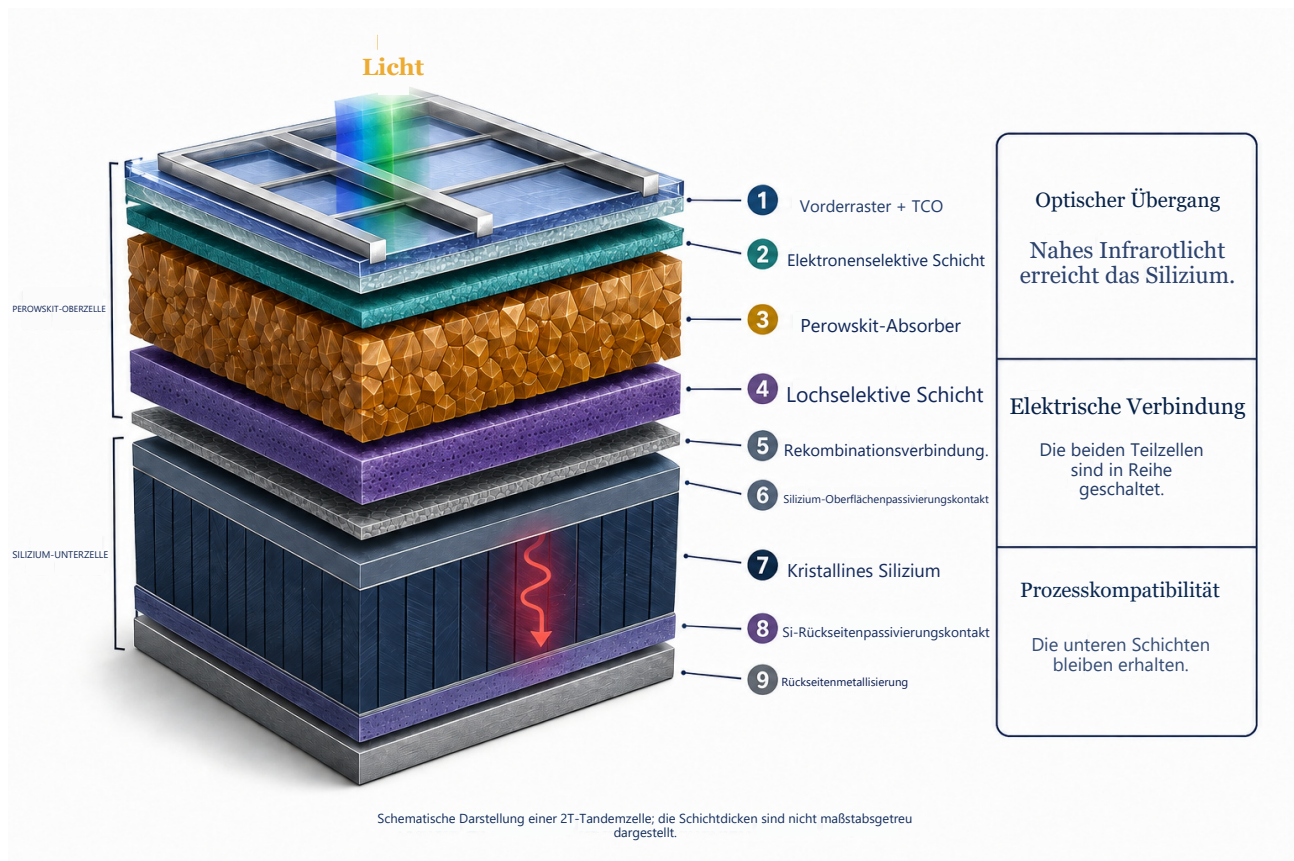


Abbildung 25. Repräsentative Schichtquerschnittsansicht für ein monolithisches Perowskit-Silizium-Tandem. Die gemeinsame Zwischenschicht muss eine optische Durchlässigkeit, eine elektrische Verbindung und eine prozessuale Kompatibilität gewährleisten. Die gezeichnete p-i-n-Oberzelle ist lediglich ein architektonisches Beispiel; die angegebenen Dicken und Farben stellen keine physikalischen Messwerte dar. [T16] [T17] Mit einem Bildgenerierungswerkzeug erstellte konzeptionelle Illustration; keine Messaufnahme.

Die Silizium-Unterzelle neu betrachten

In einer Perowskit/Silizium-Tandemzelle absorbiert die obere Zelle hochenergetische Photonen, während Silizium die durchtretenden, niederenergetischen Photonen nutzt. Die Transparenz der oberen Zelle ist ebenso wichtig wie ihr Wirkungsgrad. Wenn die obere Elektrode, die Ladungsträgerschicht oder ein Metallgitter nahes Infrarotlicht absorbiert, sinkt der Strom in der Siliziumschicht. Dieser Verlust ist möglicherweise nicht bei einer separaten Messung der oberen Zelle unter Beleuchtung erkennbar.

Die untere Zelle hat nicht das gleiche Optimum wie eine Standard-Ein-Übergangs-Siliziumzelle. In einer Tandemzelle wird das Spektrum gefiltert, der Strom wird in der Regel reduziert, die Vorderseite wird mit einer anderen Schicht verbunden und sie wird während der Herstellung zusätzlichen Prozessen unterzogen. Eine Textur, die in einer Ein-Übergangszelle ideal wäre, kann sich als problematisch erweisen, wenn es darum geht, einen dünnen oberen Film kontinuierlich zu beschichten. Eine glatte Oberfläche erleichtert zwar die Beschichtung des oberen Films, kann aber optische Verluste verursachen; eine Textur verbessert

zwar die Lichteinstrahlung, birgt aber das Risiko einer Ausdünnung oder eines Kurzschlusses an den Spitzen.

Die Studie von Sahli und Kollegen aus dem Jahr 2018 zeigte, dass in einem vollständig texturierten, monolithischen Perowskit/Silizium-Bauelement die obere Schicht mit der vorhandenen Silizium-Oberflächengeometrie kombiniert werden kann. Das wichtige Ergebnis hierbei ist, dass der Fortschritt bei Tandemzellen nicht nur durch die Auswahl der Bandlücke, sondern auch durch die tatsächliche Oberflächenbeschaffenheit und die Rekombinationsverbindungen erreicht wird. [T16]

Eine faire Gegenüberstellung von Zwei- und Vier-Kontakt-Anordnungen

Ein Zweiterminal-Tandem, kurz 2T, ist ein einziger Reihenschaltkreis. Ober- und Unterzelle führen denselben Strom; ihre beiden Spannungen addieren sich. Eine Vierterminal-Anordnung, kurz 4T, besteht aus zwei unabhängigen Zellstromkreisen. Die Oberzelle ist halbdurchsichtig; die maximale Leistung jeder Zelle wird getrennt bestimmt, wobei das Spektrum an der Unterzelle berücksichtigt wird. Bei korrekt definierter Fläche und Lichteinstrahlung können die Leistungen addiert werden:

$$\eta_{4T} = \frac{P_{\text{mpp,oben}} + P_{\text{mpp,unten,gefiltert}}}{P_{\text{in}}} \tag{I.14.1}$$

Am gemeinsamen Anschluss befindet sich eine einzige Lichtquelle. Wenn man die Leistung der unteren Zelle ohne Filter allein betrachtet, werden die Photonen doppelt gezählt. Wenn sich die beiden Zellen zudem in unterschiedlichen Bereichen befinden, kann man nicht einfach ihre Leistungen addieren; stattdessen muss man über die gemeinsame Öffnungsfläche und die optische Überlappung rechnen. Die zusätzlichen Kosten für die Verbindung und die Leistungselektronik von zwei unabhängigen MPP-Schaltungen müssen ebenfalls angegeben werden.

Frage	2T	4T
Ist ein gemeinsamer Strom erforderlich?	Ja.	Nein.
Können die Leistungen von Ober- und Unterzelle unabhängig maximiert werden?	Nein.	Ja, mit dem gefilterten Spektrum an der Unterzelle
Sind optische Zwischenschichten wichtig?	Ja.	Ja, es können zusätzliche transparente Elektroden vorhanden sein.

Frage	2T	4T
Fertigungskompatibilität	Stärkere Randbedingungen im gemeinsamen Schichtstapel	Separate Herstellung und optische Stapelung sind möglich.
Bewertung des jährlichen Energiegewinns	Die spektrale Stromanpassung ist von entscheidender Bedeutung.	Flexibler bei spektralen Veränderungen; Systemverluste bleiben bestehen.

Die Studie von Bailie und Kollegen aus dem Jahr 2015 untersuchte den Tandem-Effekt, indem sie eine halbtransparente Perowskit-Oberzelle mechanisch mit Silizium- und CIGS-Unterzellen stapelten. Diese Studie ist ein praktisches Lehrbeispiel für das 4T-Konzept. Die grundlegende Frage ist nicht: „Wie gut ist die Oberzelle?“, sondern: „Wie viel zusätzliche Leistung wird erzeugt, wenn die Oberzelle hinzugefügt wird und beide Zellen das einfallende Licht gemeinsam nutzen?“ [T18]

Eine numerische Photonenbilanz

Gelöstes Beispiel. Nehmen wir an, die gemeinsame optische Leistung beträgt 100 mW/cm^2 . Die obere Zelle erzeugt bei ihrem MPP $20 \text{ mA/cm}^2 \times 1,05 \text{ V} = 21,0 \text{ mW/cm}^2$. Wenn die untere Zelle mit Filter $18 \text{ mA/cm}^2 \times 0,65 \text{ V} = 11,7 \text{ mW/cm}^2$ erzeugt, beträgt die idealisierte Summe der 4 Zellen $32,7 \text{ mW/cm}^2$, der Wirkungsgrad ist 32,7 %. Dieser Wert ist kein gemessener Rekord, sondern eine Übung zur Untersuchung von Einheiten und Topologien.

Wenn die gleichen Bauelemente in Reihe geschaltet werden, können die Werte von 20 und 18 mA/cm^2 nicht gleichzeitig verwendet werden. Wenn beispielsweise angenommen wird, dass an einem gemeinsamen Punkt von 18 mA/cm^2 die obere Spannung 1,08 V und die untere Spannung 0,65 V beträgt, beträgt die Leistung $18 \times 1,73 = 31,14 \text{ mW/cm}^2$. Es wurde noch nicht nachgewiesen, dass dieser Punkt das tatsächliche Maximum darstellt; die gesamte Gesamtkurve muss untersucht werden. Das Beispiel zeigt, warum es falsch ist, unabhängige maximale Leistungen in einer Reihenschaltung zu addieren.

In einem Tandemdesign ist eine geringe Spannungssteigerung der oberen Zelle von Vorteil; die damit verbundenen Stromverluste dürfen jedoch nicht außer Acht gelassen werden. Nehmen wir an, eine neue Passivierung führt zu einer Steigerung von 30 mV, reduziert aber den gemeinsamen Strom von 19 auf 18 mA/cm^2 . Bei einer Tandemspannung von etwa 1,8 V kann der Leistungseffekt des Stromverlusts größer sein als der Gewinn von 30 mV. Die Entscheidung für eine Verbesserung sollte nicht allein auf der Grundlage von V_{oc} getroffen werden.

Grenzflächen und Perowskite mit geringer Bandlücke

Die bahnbrechende Studie von Al-Ashouri und Kollegen aus dem Jahr 2020 zeigte, dass durch die Verwendung einer Loch-selektiven molekularen Monoschicht eine schnelle Loch-Extraktion und eine geringe nichtstrahlende Rekombination gleichzeitig erreicht werden können. In einem Perowskit/Silizium-Tandem-Solarzelle mit breiter Bandlücke führte diese Grenzflächenmodifikation zu einer historischen Leistungssteigerung. Das Ergebnis zeigt, dass der selektive Kontakt die Leistung begrenzen kann, während das Perowskit-Volumen innerhalb derselben Materialfamilie bleibt. [T17]

In einer reinen Perowskit-Tandemzelle besteht die untere Zelle meist aus einer Mischung aus Blei und Zinn mit einer geringeren Bandlücke. Die Neigung von Zinn(II) zur Oxidation erschwert die Kontrolle von Defekten und die Dotierung. Die Kristallisationsraten der oberen und unteren Schichten können ebenfalls unterschiedlich sein. Ein dickerer unterer Film absorbiert zwar mehr nahes Infrarotlicht, verstärkt aber auch den durch die kurze Lebensdauer der Ladungsträger verursachten Verlust bei der Ladungssammlung. Daher ist ein „gutes Bandlückenpaar“ nur eine der ersten Designanforderungen.

Die Studie von Zhou und seinen Kollegen aus dem Jahr 2024 untersuchte die gleichzeitige Steuerung der Kristallisation und Oxidation in gemischten Zinn-Blei-Schichten. Als Fortsetzung der aktuellen Forschungslinie konzentrierte sich die im Jahr 2026 geplante Studie zur Oberflächenmodifizierung auf den Schutz der reaktiven Zinn-Blei-Oberfläche unter kombinierter Licht- und Wärmebelastung. Beide Quellen zeigen, dass das Problem nicht nur in der anfänglichen Defektdichte liegt, sondern dass die chemischen Prozesse während des Betriebs kontrolliert werden müssen. Diese kurze Zusammenfassung beansprucht nicht, die vollständigen experimentellen Methoden der beiden Artikel zu reproduzieren. [T19] [T31]

Die Zwischenschicht nicht auf eine einzige Verlustkennzahl reduzieren

Der mittlere Bereich der Tandemzelle stellt gleichzeitig drei Grenzflächen dar: eine optische Übergangsschicht, eine elektrische Rekombinationsschicht und eine chemische Oberfläche, an der sich zwei Herstellungsprozesse treffen. Wenn die unter der oberen Zelle befindliche Schicht Infrarotphotonen absorbiert, sinkt der Strom der unteren Zelle. Wenn diese Schicht einen hohen Widerstand aufweist, sinkt der Füllfaktor (FF) der in Reihe geschalteten Struktur. Wenn die Oberflächenbehandlung die Silizium-Passivierung beeinträchtigt, kann sich auch die Leerlaufspannung (Voc) der unteren Zelle ändern. Diese Effekte werden nicht durch ein einziges „Zwischenschicht erfolgreich“-Kriterium gemessen.

Eine gute Experimentreihe überprüft die elektronische Qualität der Silizium-Unterzelle vor und nach der Zugabe der Zwischenschicht. Anschließend werden die Transmission des optischen Stapels und die spektrale Charakteristik jeder Unterzelle gemessen. Im fertigen Bauelement werden die Stabilität der Leistung, die Stromanpassung der Unterzellen und die Temperaturabhängigkeit bewertet. Wenn die Prozesstemperatur oder die Plasmabedingungen geändert werden, ist eine Kontrollprobe mit der gleichen thermischen Gesamtbelastung erforderlich; andernfalls können die Auswirkungen der chemischen Schicht und der Prozessschäden nicht voneinander getrennt werden.

Lumineszenzkopplung und Messgrenzen

Ein durch Rekombination in der Oberzelle emittiertes Photon kann in der Unterzelle absorbiert werden und zum Strom beitragen. Dies heißt Lumineszenzkopplung. Bei Zellen mit sehr effizienter Strahlungsemission kann dieser Beitrag übersehen werden, wenn die Unterzelle als unabhängiges, gefiltertes Bauelement betrachtet wird, das nur von den durch die Oberzelle hindurchtretenden Sonnenphotonen gespeist wird. Umgekehrt wäre es falsch, bei einer Struktur mit schwacher externer Emission einen sehr großen Kopplungsgewinn anzunehmen. Optische Auskopplung, Emissionsspektrum und Absorption der Unterzelle werden gemeinsam modelliert.

Bei den EQE-Messungen der einzelnen Zellen muss sichergestellt werden, dass die andere Zelle mit geeigneter Vorspannungslichtquelle und unter den entsprechenden elektrischen Bedingungen den Strom nicht begrenzt. Es wird dokumentiert, welche einzelne Zelle in welchem Wellenlängenbereich ausgewählt wurde, welche Lichtbedingungen verwendet wurden und welche Stromkorrekturen vorgenommen wurden. Eine einzelne J-V-Kurve des gesamten Bauelements ersetzt nicht die schichtbasierte Diagnose. [T28]

Selbsttest

1. Ergibt eine Einzelübergangs-Oberzelle mit 23 % und eine Einzelübergangs-Siliziumzelle mit 25 % zusammen einen 4T-Wirkungsgrad von 48 %?

Antwort: Nein; die Siliziumzelle muss unter dem durch die Oberzelle gefilterten Spektrum erneut gemessen werden.

2. Beweist die Darstellung der 2T-Strom-Anpassung ausschließlich im Standard-Spektrum die Überlegenheit beim jährlichen Energieertrag? **Antwort:** Nein; Temperatur und Spektrum ändern sich im Laufe der Zeit, und es gibt Systemverluste.

3. Ist ein vollständig auf Perowskit basierendes Tandem-Solarzellenkonzept, das weniger Silizium verwendet, definitiv nachhaltiger? **Antwort:** Nein; es ist der gesamte Lebenszyklus zu berücksichtigen, einschließlich Lebensdauer, Fertigungsausbeute, Kontakte, Lösungsmittel, Verkapselung und Recycling.

Organische, farbstoffbasierte, Quantenpunkt- und neuartige Absorber

Die Absorption von Licht und die Erzeugung freier Ladungsträger sind voneinander trennbar

Die bei Silizium gelernten Prinzipien sollten nicht unverändert auf alle Materialien übertragen werden. In einigen Materialien erzeugt das Licht zunächst eine Anregung, bei der Elektron und Loch aneinander gebunden bleiben. Dieses gebundene Elektron-Loch-Paar wird als **Exziton** bezeichnet. Die **Bindungsenergie** ist die zusätzliche Energie, die benötigt wird, um das Paar zu trennen. Die dielektrische Abschirmung beeinflusst, wie stark sich die Ladungen gegenseitig beeinflussen. Die Bewegung eines Exzitons zum Kontakt ist nicht dasselbe Transportphänomen wie die Bewegung eines freien Elektrons.

Organische Halbleiter können aus kohlenstoffbasierten Molekülen oder Polymeren hergestellt werden, deren elektronische Eigenschaften gezielt verändert wurden. An der **Grenzfläche** zwischen **Donator**- und **Akzeptor**-Komponenten kann die Ladungstrennung erleichtert werden. Das durch Licht erzeugte Exziton muss diese Grenzfläche erreichen, ohne zu verschwinden; die entstehenden getrennten Ladungsträger müssen dann ihren jeweiligen, ununterbrochenen Pfaden zu den Kontakten folgen. Die mikroskopische Anordnung der Mischung wird als **Morphologie** bezeichnet. Allein das Vermischen von zwei Materialien in einem Behälter garantiert nicht die Bildung dieser Transportwege.

Beispiel für die Länge: Wenn die typische Diffusionslänge eines Exzitons 10 nm beträgt und der Abstand von einem Punkt in der Donatorregion zur nächsten Grenzfläche 100 nm beträgt, können viele Anregungen verloren gehen, bevor sie die Grenzfläche erreichen. Eine sehr fein durchmischte Morphologie kann dies reduzieren, aber sie kann auch die Transportwege der getrennten Ladungen stören. Das Design muss beide Abstände gleichzeitig berücksichtigen; es gibt keine Regel, dass „die kleinste Region die beste ist“.

Farbstoffe und Quantenpunkte etablieren unterschiedliche Aufgabenverteilungen

In einer farbstoffsensibilisierten Zelle absorbiert das molekulare Farbstoffmolekül Licht. Die angeregten Elektronen werden unter geeigneten Energiebedingungen auf das poröse Halbleitermaterial übertragen; der elektrische Zustand des verbleibenden Farbstoffs wird durch eine andere Transportumgebung wiederhergestellt. Ein **Redox-Paar** ist der Zyklus zwischen zwei chemischen Zuständen, die Elektronen aufnehmen und abgeben können. Der Farbstoff, das elektronentransportierende Gerüst und die Ladungsträgerrückführungs-Umgebung übernehmen unterschiedliche Funktionen. An jeder Grenzfläche ist eine Angleichung der Energie- und Geschwindigkeitsverhältnisse erforderlich. [T20]

Ein **Quantenpunkt** ist ein Halbleiterpartikel, dessen Größe so klein ist, dass sie das elektronische Wellenverhalten einschränkt. Diese **Quanteneinschränkung** kann die optischen Übergangsenergien bei unterschiedlichen Größen desselben Materials verändern. Ein **Ligand** an der Oberfläche ist ein Molekül, das an das Partikel bindet und dazu beiträgt, dass es in Lösung stabil bleibt. Lange organische Liganden können jedoch den elektrischen Übergang zwischen benachbarten Punkten erschweren. Ein Partikel, das bei der Synthese gut dispergiert, benötigt möglicherweise nicht die gleichen Bedingungen wie ein Partikel, das in einem Film gut Strom leitet.

Auch andere Absorbermaterialien wie Kesterit oder Antimon-Selenid bringen eigene kristalline und Defektprobleme mit sich. Die reichliche Verfügbarkeit des Materials ist ein wichtiger Faktor; jedoch muss gleichzeitig die gewünschte Bandlücke, ein geringer Defektverlust und ein geeigneter Kontakt gewährleistet sein. Diese Materialfamilien werden wir im Folgenden anhand ihrer gemeinsamen Funktionen in Solarzellen vergleichen.

Verständniskontrolle: Dasselbe Wort kann einen anderen Schritt bezeichnen

Wenn gesagt wird, dass die „Ladungserzeugung zugenommen hat“, bezieht sich dies auf die Lichtabsorption, die Exzitonenbildung, die Exzitonen-Dissoziation oder die Sammlung in der externen Schaltung? In organischen und farbstoffsensibilisierten Systemen sollten diese Schritte besonders differenziert betrachtet werden. Allein die Messung einer stärkeren Absorption beweist nicht, dass sich an der Grenzfläche mehr freie Ladungsträger angesammelt haben.

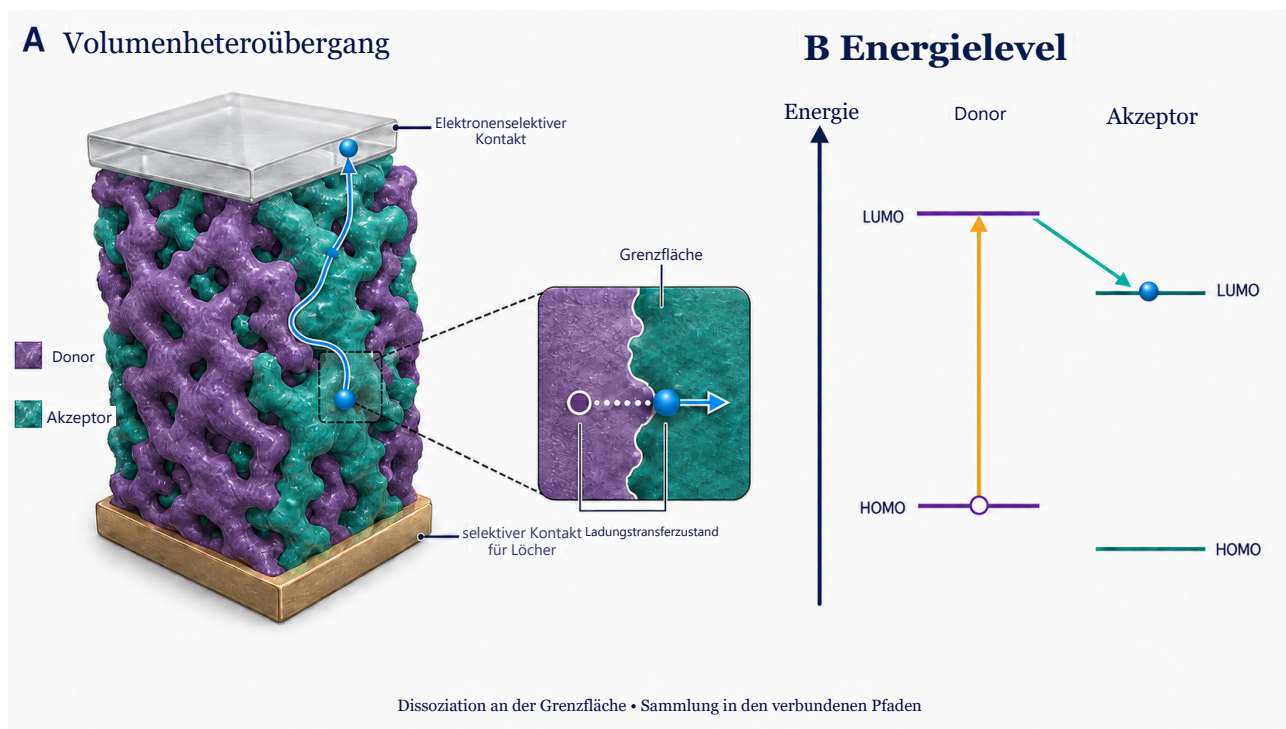


Abbildung 26. Grenzfläche und zugehörige Transportwege in einer organischen Volumen-Heteroübergangsstruktur. Die Donor- und Akzeptorphasen sollten Wege bilden, über die die getrennten Ladungsträger ihre jeweiligen selektiven Kontakte erreichen können. Das Elektron-Loch-Paar in den gegenüberliegenden Phasen in der Nahaufnahme stellt einen Ladungsübertragungszustand dar. Die rechts dargestellte HOMO/LUMO-Anordnung und die Übergangspfeile sind eine qualitative Darstellung der Energie; die tatsächlichen Energiedifferenzen und die Morphologie hängen vom Material ab. [T20] Mit einem Bildgenerierungswerkzeug erstellte konzeptionelle Illustration; keine Messaufnahme.

Organische Fotovoltaik: Erzeugung der Anregung und Ladungstrennung

In organischen Halbleitern führt Licht meistens zu einer gebundenen Elektronen-Loch-Anregung, d. h. zur Bildung von Exzitonen. Die Art der dielektrischen Abschirmung und der intermolekularen Kopplung beeinflusst, wie diese Anregung in freie Ladungsträger übergeht. Die Grenzfläche zwischen den Donor- und Akzeptorkomponenten unterstützt die Ladungstrennung. Ein organisches Bauelement lediglich als eine Art miniaturisierte klassische anorganische p-n-Übergangsdioden zu betrachten, lässt viele wichtige Verluste außer Acht.

In einem Volumen-Heteroübergang werden Donoren und Akzeptoren im Nanometerbereich vermischt. Ziel ist es, dass die Exzitonen die Grenzfläche erreichen, an der sie sich aufspalten, und anschließend die Elektronen und Löcher über ihre jeweiligen, zusammenhängenden Netzwerke zur Elektrode transportiert werden. Wenn die Phasen zu stark getrennt sind, können die Exzitonen verschwinden, bevor sie die Grenzfläche erreichen; wenn sie zu stark vermischt sind, können die Ladungstransportwege und die geordnete Molekülanordnung gestört werden. Neben der durchschnittlichen Zusammensetzung sind auch Morphologie, Ausrichtung und Stabilität von Bedeutung.

Fulleren-freie Akzeptoren ermöglichten die Verbesserung der Absorption und der Energieniveaus durch molekulares Design. Die Veröffentlichung von Yuan und Kollegen aus dem Jahr 2019 mit dem Titel „Y6“ ist ein bedeutendes Beispiel für diese Entwicklung. Die Ergebnisse zeigen, dass die Absorption des Moleküls selbst, die Mischung mit einem komplementären Donor und die Filmmorphologie zusammen die Leistung des Bauelements bestimmen. Bei Verwendung desselben Moleküls mit einem anderen Lösungsmittel oder Kontakt kann nicht das gleiche Ergebnis erwartet werden. [T21]

Die Attraktivität organischer Zellen liegt in ihren vielfältigen Gestaltungsmöglichkeiten, wie Flexibilität, geringe Masse, Farbe und teiltransparente Eigenschaften. Im Gegensatz dazu können Sauerstoff, Licht, Temperatur, molekulare Diffusion und Elektrodenreaktionen die Langzeitstabilität beeinträchtigen. Für den Innenbereich stellt dies eine eigene Kategorie dar, die sich durch hohen Wirkungsgrad, ein enges Spektrum und niedrige Lichtintensität auszeichnet; Lux ist keine Einheit der optischen Leistung, und von einem Lux-Wert kann man nicht ohne Kenntnis des Spektrums mit einem einzigen Koeffizienten auf W/m^2 umrechnen.

Farbstoffsensibilisierte Zelle: Trennung von Lichtabsorption und Ladungstransport

In einer farbstoffsensibilisierten Solarzelle absorbiert das molekulare Farbstoffmolekül Licht; das angeregte Elektron wird auf ein geeignetes Halbleiternetzwerk übertragen. Der Farbstoff wird anschließend durch ein Redox-Medium oder einen festen Lochträger regeneriert. Das mesoporöse TiO_2 bietet eine große innere Oberfläche und ermöglicht so die Aufnahme einer großen Anzahl von Farbstoffmolekülen. Die 1991 von O'Regan und Grätzel veröffentlichte Arbeit stellt einen historischen Wendepunkt für diese Architektur dar. Der in dieser Veröffentlichung dargestellte Kosten- und Energiemarktkontext bezieht sich auf das Jahr 1991; die gleichen wirtschaftlichen Aussagen sollten heute nicht wiederholt werden. [T20]

Die starke Absorption von sichtbarem Licht durch einen Farbstoff allein ist nicht ausreichend. Die Elektroneninjektion, die Farbstoffregeneration und die Sammlung müssen schnell erfolgen; die Rückelektronenübertragung muss langsam sein. Das klassische Energieschema sollte die Elektronenübertragung vom angeregten Farbstoff zum Leitungsband des Halbleiters ermöglichen. Eine übermäßige Antriebsenergie kann jedoch bedeuten, dass auf einen Teil der erreichbaren Spannung verzichtet werden muss. Das Gleichgewicht zwischen der chemischen Geschwindigkeit und dem Energieverlust ist die zentrale Frage.

Eine beispielhafte Faktorzerlegung hat die Form $EQE \approx \eta_{\text{abs}} \eta_{\text{inj}} \eta_{\text{coll}}$. Jeder Term ist eine definierte Wahrscheinlichkeit; wenn die Prozesse stark gekoppelt sind, ist diese

einfache Zerlegung möglicherweise nicht ausreichend. **Gelöstes Beispiel:** Für die Absorption (90 %), die Injektion (95 %) und die Sammlung (85 %) beträgt die externe Quanteneffizienz (EQE) ungefähr $0,90 \times 0,95 \times 0,85 = 0,727$, also 72,7 %. Es ist nicht möglich, die Summe allein durch Verdunkeln des Farbstoffs auf 95 % zu erhöhen, ohne diese anderen Verluste zu beheben.

Quantenpunkte: Die Größe ist eine Designvariable

In Quantenpunkten kann die geringe kristalline Größe die elektronischen Energieniveaus verändern. Unterschiedliche Größen desselben chemischen Materials können zu unterschiedlicher spektraler Absorption führen. Allerdings ist das Verhältnis von Oberfläche zu Volumen groß; Liganden und Oberflächenfehler sind entscheidend. Ein langer Ligand, der den Kristall in Lösung stabilisiert, kann die elektronische Übertragung zwischen benachbarten Quantenpunkten in einem Festkörperfilm erschweren. Der Ligandenaustausch, die Oberflächenpassivierung und die Leitfähigkeit müssen gleichzeitig gesteuert werden.

Die Erzeugung von mehr als einem Elektron-Loch-Paar durch ein hochenergetisches Photon ist einer der untersuchten Wege. Die Messung einer externen Quanteneffizienz, die in einem PbSe-Quantenpunkt-Bauelement von Semonin und Kollegen im Jahr 2011 in einem bestimmten Spektralbereich 100 % übersteigt, ist ein wichtiger experimenteller Beweis für diese Physik. Dieses Ergebnis ist keine Energieumwandlungseffizienz, die 100 % übersteigt: Die externe Quanteneffizienz (EQE) misst die Anzahl der pro Photon gesammelten Ladungsträger, während die Leistungseffizienz das Verhältnis der Ausgangsenergie zur Eingangsenergie misst.

[T22]

Diese Unterscheidung ist oft erforderlich, wenn man Nachrichten über neue Materialien liest. Die Energie eines Photons kann deutlich größer sein als die zweifache Bandlücke; die Erzeugung von zwei Elektron-Loch-Paaren stellt keine Verletzung des Energieerhaltungssatzes dar. Andererseits muss die Ladungsträgervielfachung in einem ausreichenden Teil des Sonnenspektrums stattfinden, und die erzeugten zusätzlichen Ladungsträger müssen schnell abgeführt werden. Eine beeindruckende Quanteneffizienz bei einer schmalen Wellenlänge ist kein Ersatz für einen hohen Modulwirkungsgrad über ein breites Spektrum.

Kesterite und Antimonchalkogenide: Häufigkeit versus elektronische Qualität

Kesterite wie $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S,Se})_4$ werden aufgrund ihrer chemischen Zusammensetzung untersucht, da sie den Bedarf an Indium/Gallium reduzieren. Die komplexe, mehrkomponentige Struktur führt jedoch zu einer Vielzahl von Möglichkeiten, bei denen Atome in falsche Gitterpositionen gelangen und sekundäre Phasen entstehen. In einer hybriden Funktionsstudie aus dem Jahr 2013 untersuchten Han und seine Kollegen rechnerisch bestimmte tiefe Defektzustände und Dotierungsquellen in CZTS. Dies ist eine Vorhersage eines Defektmechanismus; es handelt sich nicht um eine eigenständige Messung der Defektverteilung in einem realen Film. [T23]

Bei bandförmigen Kristallen wie Sb_2Se_3 sind richtungsabhängiger Transport und die Kristallorientierung von Bedeutung. Die Studie von Zhou und Kollegen aus dem Jahr 2015 zeigte den Zusammenhang zwischen der gerichteten Kristallisation und dem Verhalten des Bauelements und deutete darauf hin, dass bestimmte Korngrenzen weniger schädlich sein könnten. Die positiven Materialeigenschaften, die in der Veröffentlichung genannt werden, sollten nicht pauschal in Sicherheitsrichtlinien für alle Anwendungs- und Expositionsbedingungen umgewandelt werden. Die Elementhäufigkeit, die Toxizität, die Prozessgefahren und die Emission aus dem Bauelement sind jeweils separate Aspekte. [T24]

Es ist sinnvoll, bei der Auswahl eines verbesserten Absorbers nacheinander drei Fragen zu stellen: Kann eine reale und definierte Phase erzeugt werden? Werden die Ladungsträger ausreichend lange erhalten, während ausreichend Licht absorbiert wird? Bleiben diese Eigenschaften unter Kontakt, bei großer Fläche und unter Betriebsspannung erhalten? Allein eine berechnete, geeignete Bandlücke beantwortet nur einen kleinen Teil dieser Kette. Der Fortschritt besteht darin, sichtbar zu machen, in welchem Glied der Kette das Problem liegt.

Die Geometrie zwischen Exzitonendiffusion und Ladungstransport

In einem organischen Absorber kann die durch Licht erzeugte Anregung zunächst ein gebundenes Exziton sein, bevor es sich in ein freies Elektron und ein Loch aufspaltet. Innerhalb der Lebensdauer des Exzitons muss es eine geeignete Donator-Akzeptor-Grenzfläche erreichen. Hierfür wird eine charakteristische Länge $L_{\text{ex}} = \sqrt{(\text{D}_{\text{ex}} \tau_{\text{ex}})}$ betrachtet. Wenn die Bereiche sehr groß sind, können einige Anregungen ausklingen, bevor sie die Grenzfläche erreichen. Wenn die Bereiche sehr klein und unregelmäßig sind, können die verbundenen Transportwege der freien Ladungsträger zu den Elektroden unterbrochen werden.

Daher ist die optimale Morphologie nicht einfach „maximale Grenzflächenfläche“. Für die Exzitonendissoziation sind ausreichende Nähe, getrennte Wege mit Kontinuität für Elektronen und Löcher sowie eine geringe Rekombination erforderlich. Auch die Erleichterung des Ladungstransfers durch Vergrößerung der Energiepegeldifferenz ist nicht ohne Kosten verbunden; die verfügbare Spannung kann reduziert werden. Bei der Bewertung aktueller organischer Bauelemente werden Energieverluste, Morphologie, nicht-strahlende Übergänge und Stabilität daher gemeinsam diskutiert. [T20]

In einer farbstoffsensibilisierten Zelle erfolgt die grundlegende Unterscheidung anders: Die Absorption von Licht durch den Farbstoff, die Injektion von Elektronen in das Oxid-Transportnetzwerk und die anschließende Reduktion des Farbstoffs erfolgen nacheinander. Die Regeneration konkurriert mit einer unerwünschten Rückübertragung. In einem Quantenpunktfilm werden hingegen die durch die Nanokristallgröße festgelegten Energieniveaus zusammen mit der elektronischen Kopplung zwischen benachbarten Punkten und den Oberflächenliganden betrachtet. Ein Punkt, der in einer Lösung eine hohe Lumineszenzeffizienz aufweist, gewährleistet in einem festen Bauelement nicht automatisch eine gute Ladungstransportfähigkeit. [T21] [T22]

Selbsttest

1. Warum führt eine kontinuierliche Vergrößerung der Donator/Akzeptor-Grenzfläche in einem organischen Film nicht zu einer unbegrenzten Leistungssteigerung? **Antwort:** Die Transportnetzwerke, die molekulare Ordnung und die Rekombination ändern sich ebenfalls; die Ankunft an der Grenzfläche und die Ankunft an der Elektrode werden gemeinsam betrachtet.
2. Bedeutet eine EQE von 110 % auch einen energetischen Wirkungsgrad der Zelle von 110 %? **Antwort:** Nein. Die erste Größe beschreibt die Ladungserzeugung bezogen auf die Photonenzahl, die zweite ein Energieverhältnis.
3. Wenn ein Absorber aus häufig vorkommenden Elementen besteht, warum kann er dann nicht kostengünstig sein? **Antwort:** Die Kosten können durch die Notwendigkeit der Reinigung, die schwierige Phasensteuerung, die geringe Fertigungsausbeute, teure Kontakte, eine kurze Lebensdauer oder komplexe Prozessschritte dominiert werden.

Optik, Kontakt- und Grenzflächentechnik: die gemeinsame Sprache aller Technologien

Für ein Photon gibt es drei grundlegende Wege

Wenn Licht auf eine Schicht trifft, kann es **reflektiert**, **durchgelassen** oder **absorbiert** werden. Die Energieerhaltung bei einer konstanten Wellenlänge erfordert, dass die Summe dieser Anteile gleich eins ist. In einem Schichtstapel wird die Absorption jeder Schicht separat aufsummiert. Die in einem Absorber erzeugten Ladungen können nützlich sein; die Absorption, die in einem Metall oder Kontakt in Wärme umgewandelt wird, ist jedoch meist unerwünscht. Daher ist die Tatsache, dass eine Zelle dunkel erscheint, kein ausreichender Beweis für einen hohen Wirkungsgrad.

Der **Brechungsindex** ist eine optische Größe, die die Phasengeschwindigkeit des Lichts in einem Material und sein Verhalten an der Grenze bestimmt. In dünnen Schichten können sich von verschiedenen Oberflächen reflektierte Wellen gegenseitig verstärken oder abschwächen. Dieses Phänomen wird als **Interferenz** bezeichnet. Eine antireflexbeschichtete Schicht kann darauf abzielen, die gegenseitige Abschwächung der Reflexionen bei einer geeigneten Wellenlänge und einem geeigneten Einfallswinkel zu erreichen. Wenn das gesamte Sonnenspektrum, alle Winkel und die tatsächliche Absorption berücksichtigt werden, löst eine einzige ideale Dicke nicht alle Bedingungen.

Wie werden Passivierung und Ladungsträgertransport gemeinsam realisiert?

Chemische Passivierung reduziert die Anzahl aktiver Bindungsdefekte. Die **Feldeffektpassivierung** erzeugt ein elektrisches Feld, das den Zugang eines bestimmten Ladungsträgertyps zu defekten Oberflächen reduziert. Beide Methoden können kombiniert werden. Der **Kontaktwiderstand** beschreibt den elektrischen Aufwand, der für den Übergang durch die Grenzfläche erforderlich ist, im Gegensatz zum Volumenwiderstand innerhalb des Materials. Ein Kontakt mit kleiner Fläche kann eine sehr gut passivierte Oberfläche hinterlassen; in den verbleibenden Lücken kann es jedoch zu einer Anreicherung von Strom und einem erhöhten Widerstandsverlust kommen.

Synthetisches Beispiel: Wenn eine Änderung der Beschichtung den Kurzschlussstrom 2 % erhöht, während andere Auswirkungen auf die Spannungs-Strom-Kennlinie bei maximaler Leistung insgesamt 3 % reduziert werden, sinkt die Leistung auf etwa $1,02 \times 0,97 = 0,9894$. Das Ergebnis ist ungefähr 1,06 % Verlust. Die Aussage „Wir haben eine optische Verbesserung erzielt“ mag zwar stimmen, bedeutet aber nicht dasselbe wie „Wir haben die Zelle verbessert“. Wir müssen jedes Mal angeben, in welchem Maße die Verbesserung erzielt wurde.

Die Eingabeparameter der in diesem Kapitel beschriebenen Modelle sind der Real- und Imaginärteil des Brechungsindex, die Dicke, die Oberflächenbeschaffenheit und die Kontakteigenschaften. Der **Imaginärteil** des Brechungsindex ist eine mathematische Größe, die die Dämpfung des Lichts beschreibt; sie impliziert nicht, dass die Messung eine reine Fiktion ist. Das berechnete elektrische Feldprofil gibt an, wo die Absorption stattfindet, und die Absorption bestimmt den Ort der Ladungsträgergeneration. Das nachfolgende elektrische Modell berechnet, welcher Anteil dieser Ladungsträger gesammelt werden kann.

Verständniskontrolle: Die gesamte Absorption hat zugenommen

Wenn die gesamte Absorption von 90 % auf 94 % ansteigt, stellt sich die Frage, in welcher Schicht die neuen vier Punkte liegen. Wenn die Absorption in der Metall- oder Transportschicht stattfindet, kann es sein, dass der Strom nicht ansteigt. Durch die gemeinsame Betrachtung des spektralen EQE, der Reflexion und der optischen Berechnung auf Schichtbasis lässt sich eine Unterscheidung zwischen nützlicher Absorption und unerwünschter Wärme treffen.

Erstelle eine Bilanz darüber, wohin das Photon gelangt

Die auf eine Zelle einfallende optische Leistung bei jeder Wellenlänge wird auf Reflexion, Transmission und Absorption in den Schichten verteilt. Die ungefähre Energiebilanz hat die Form $R + T + \sum_j A_j = 1$. R steht für die Reflexion, T für die Transmission und A_j für den in der j-ten Schicht absorbierten Anteil. Der nützliche Anteil ist derjenige, der in den Absorbern in elektrische Energie umgewandelt werden kann; die Absorption in Metallen oder TCO ist meist eine unerwünschte Verlustquelle.

Wenn eine vordere Beschichtung die Reflexion verringert, muss der Zellstrom nicht im gleichen Verhältnis steigen. Die neue Beschichtung kann bei kurzen Wellenlängen absorbieren oder mehr Photonen zu Bereichen mit geringerer Sammlungseffizienz leiten. Die erste experimentelle Validierung besteht darin, dass die folgenden drei Messungen konsistent sind: spektrale Reflexion/Transmission, EQE und Kurzschlussstrom unter Beleuchtung. Die Differenz zwischen dem aus der Integration

der EQE mit dem Sonnen-Photonenfluss berechneten Strom und der elektrischen Messung sollte untersucht werden, einschließlich Kalibrierungs- und Flächenproblemen.

Der komplexe Brechungsindex einer Schicht wird als $\tilde{n} = n + i\kappa$ geschrieben. n bestimmt die Phasenverschiebung, κ die Absorption; in der Beziehung $\alpha = 4\pi\kappa/\lambda$ müssen die Wellenlängen- und Längeneinheiten konsistent sein. Für dünne und gleichmäßige Schichten ist die Transfermatrix geeignet; für komplexe Texturen sind elektromagnetische oder Strahlverfolgungsansätze geeignet. Die bloße Entnahme optischer Konstanten aus einem Katalog kann die tatsächlichen Unterschiede in Dichte, Zusammensetzung und Rauheit des Films verbergen.

Lichteinfang und der Preis der Oberfläche

Die Analyse von Yablonovitch und Cody aus dem Jahr 1982 ist eines der grundlegenden Modelle, das die Erhöhung des optischen Wegs in einem dünnen Absorber unter geeigneten Annahmen zur Strahloptik und Randomisierung erklärt. Die weit verbreitete Formel $Q_{\text{max}} = 4/n^2$ ist das Ergebnis bestimmter idealer Bedingungen für die Lichtabscheidung. Ein bedingungsloser Verstärkungsfaktor für jedes Nanomuster ist nicht gleichbedeutend mit einer universellen Grenze für jede Dicke oder einem direkten Wirkungsgradfaktor. [T25]

Die Texturierung kann dazu führen, dass das Licht eine längere Strecke innerhalb des Materials zurücklegt; gleichzeitig kann sie die tatsächliche Oberfläche vergrößern und die Passivierung erschweren. Wenn eine Nanostruktur die Reflexion von Kurzwellen sehr gut reduziert, aber gleichzeitig die Oberflächenrekombination erhöht, kann der elektrische Gewinn auf Null reduziert werden. Es ist daher irreführend, bei der optischen Optimierung lediglich die Anzahl der absorbierten Photonen als Ziel anzugeben. Das Ziel sollte die maximale Leistung sein, die mit dem Transport- und Rekombinationsmodell verbunden ist.

Gelöstes Beispiel. Eine Oberflächenmodifikation soll den Wert von J_{sc} von 40 auf 41 mA/cm^2 erhöhen, während der Wert von V_{oc} von 0,72 auf 0,70 V gesenkt wird; $\text{FF} = 0,82$ und die Eingangsleistung beträgt konstant $100 \text{ mW}/\text{cm}^2$. Die anfängliche Leistung beträgt $40 \times 0,72 \times 0,82 = 23,616 \text{ mW}/\text{cm}^2$; die zweite Leistung beträgt $41 \times 0,70 \times 0,82 = 23,534 \text{ mW}/\text{cm}^2$. Eine bessere optische Qualität bedeutet in diesem Beispiel nicht unbedingt eine bessere Zelle. Der Wirkungsgrad sinkt um etwa 0,082 Prozentpunkte.

Kontaktselektivität: unterschiedliche Zugänge für die beiden Ladungsträger

Ein guter Elektronenkontakt ermöglicht es den Elektronen, mit geringem Widerstand auszutreten, und verhindert die Rekombination von Löchern an dieser Stelle. Ein guter Löcherkontakt bewirkt das Gegenteil. Ein geeigneter Wert für die Austrittsarbeit eines Metalls ist ein erster Hinweis; an der tatsächlichen Grenzfläche können chemische Bindungen, Dipole, Defekte und die Fixierung des Fermi-Niveaus die einfache Vakuumausrichtung verändern. Darüber hinaus kann die Grenzfläche unter Betriebsbedingungen durch Ionenwanderung oder Diffusion mit der Zeit zu einer anderen Grenzfläche werden.

Ein Bandversatz an sich ist weder gut noch schlecht. Eine Barriere für Minderheitsladungsträger kann vorteilhaft sein, während eine übermäßige Barriere für Mehrheitsladungsträger schädlich sein kann. Eine dicke thermische Barriere mit einer dünnen Tunnelbarriere leitet nicht den gleichen Strom. Die Bewertung eines elektrischen Kontakts erfordert die gleichzeitige Berücksichtigung des spezifischen Widerstands des Kontakts und der Rekombinationseffizienz. Allein die Messung eines niedrigen Widerstands beweist nicht, dass der Kontakt selektiv ist.

Die Korrelation zwischen Spannungsverlust und Lumineszenz schafft eine starke Verbindung zwischen Material und Bauelement. Rau's Reziprozitätsstudie aus dem Jahr 2007 etablierte unter geeigneten Annahmen eine Beziehung zwischen dem photovoltaischen Quantenausbeutegrad und der Elektrolumineszenz. Der strahlungslose Verlust bei einer konstanten Strahlungsreferenz wird durch

$\Delta V_{nr} = -(kT/q) \ln \eta_{ext}$ ausgedrückt; η_{ext} ist die entsprechende externe Lumineszenzausbeute. Die verwendete optische Referenz und die Betriebsbedingungen müssen angegeben werden. [T26]

Bei 298,15 K entspricht ein Anstieg der externen Lumineszenzeffizienz von 10^{-4} auf 10^{-3} bei sonst gleichen Bedingungen einem um etwa 59 mV geringeren nichtstrahlenden Spannungsverlust. Daraus allein folgt nicht, dass die Leerlaufspannung der Zelle genau um 59 mV zunimmt; auch Kontaktverluste, Injektionsniveau und optische Referenz können sich geändert haben. Die im Film gemessene Quasi-Fermi-Niveauaufspaltung muss vom Wert qV_{oc} des fertigen Bauelements unterschieden werden. Die Differenz kann Hinweise auf Probleme bei der Ladungsträgerextraktion und an den Kontakten geben.

Sich bei der Diagnose nicht auf eine einzige Grafik verlassen

Eine S-förmige Strom-Spannungs-Kennlinie kann auf eine Barriere für die Ladungsträgerextraktion hindeuten; ein hoher Serienwiderstand sollte in Verbindung mit nicht-photoaktiven Bereichen oder komplexem Verhalten an der Grenzfläche betrachtet werden. Ein niedriger Shunt-Widerstand deutet auf einen kurzschlussähnlichen Pfad hin; die räumliche Verteilung kann durch bildgebende Verfahren aufgezeigt werden. Eine Zunahme der Photolumineszenz spiegelt manchmal eine Reduzierung von Defekten wider, manchmal die Verhinderung der Ladungsträgerentnahme. Die Untersuchung derselben Probe in der Nähe des Leerlaufpunkts und unter Last unterstützt diese Unterscheidung.

Die stärkste Bestätigung ist, wenn eine Variable bei verschiedenen Beobachtungen ein konsistentes Verhalten zeigt. Beispielsweise kann die Passivierungshypothese durch eine erhöhte Lebensdauer, eine Zunahme der Lumineszenz und eine Spannungssteigerung bei geeigneter Injektion gestützt werden. Andererseits reicht eine einzelne Messung der Oberflächenchemie nicht aus, um den Mechanismus des Bauelements vollständig zu erklären. Statistische Wiederholungen und eine unabhängige Kalibrierung sind besonders wichtig, wenn es um Behauptungen geht, die sich nur um einige zehn Millivolt oder einige Zehntelprozentpunkte unterscheiden.

Berechnung einer Antireflexionsschicht

Betrachten wir für den Normalfall drei verlustfreie Medien: Luft mit dem Brechungsindex n_0 , eine Schicht mit der Dicke d und dem Brechungsindex n_1 sowie ein halbumendliches Substrat mit dem Brechungsindex n_2 . An einer einzelnen Grenzfläche ist die Amplitude der elektrischen Feldreflexion $r_{ij} = (n_i - n_j)/(n_i + n_j)$. Die Phasenverschiebung bei einem einzelnen Durchgang durch die Schicht beträgt $\delta = 2\pi n_1 d / \lambda$. Wenn wir die wiederholten Reflexionen als geometrische Reihe summieren, erhalten wir die Gesamtamplitude und die gesamte reflektierte Leistung:

$$r = \frac{r_{01} + r_{12} \exp(2i\delta)}{1 + r_{01} r_{12} \exp(2i\delta)}, \quad R = |r|^2. \quad (I.16.1)$$

Wenn die Viertelwellenbedingung $d = \lambda_0 / (4n_1)$ erfüllt ist, beträgt die Phasendifferenz der beiden Reflexionen π . Um auch die Amplituden auszugleichen, wird ein ideales n_1 von etwa $\sqrt{n_0 n_2}$ gewählt. In dem Beispiel wurden $n_0 = 1$, $n_1 = 2$, $n_2 = 3,5$ und $d = 75 \text{ nm}$ verwendet. Bei 600 nm beträgt die Reflexion ohne Beschichtung etwa $30,86 \%$, während die Reflexion mit Beschichtung etwa $0,444 \%$ beträgt. Dies ist das Ergebnis einer einzelnen Wellenlänge und der angegebenen konstanten Brechungsindizes; die tatsächlichen Brechungsindizes ändern sich mit der Wellenlänge.

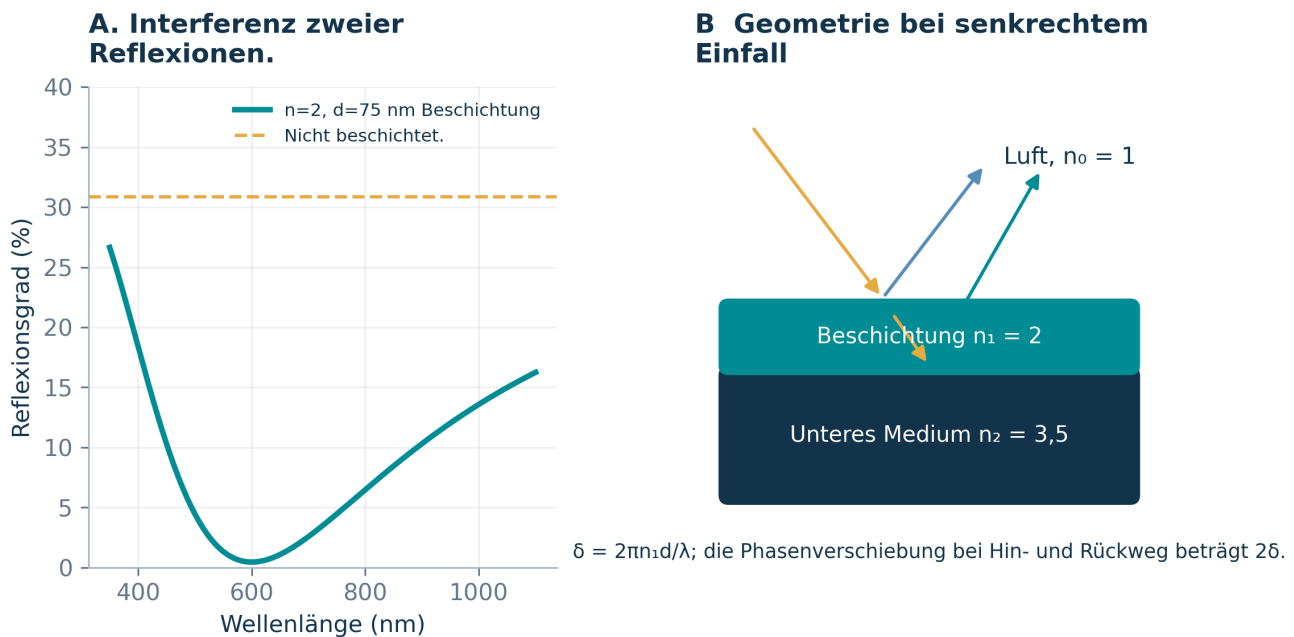


Abbildung 27. Reflexionsminderung durch Interferenz. Die Kurve wurde anhand der angegebenen Amplitudenformel neu berechnet. Die Tatsache, dass die Reflexion bei einer bestimmten Wellenlänge sehr gering ist, bedeutet nicht, dass dies für das gesamte Sonnenspektrum gilt. Das Diagramm B zeigt die Schichtgeometrie; die schrägen Pfeile dienen der besseren Lesbarkeit, die Berechnung erfolgt für senkrechten Einfall. [B09]

In einer Multischichtstruktur sind die Vorwärts- und Rückwärtswellenamplituden jeder Schicht durch Randbedingungen und Ausbreitungsphasen miteinander verbunden. Dieser Ansatz bildet die Grundlage der Transfermatrixmethode. Anstatt in optisch dicken oder phasenrandomisierten Schichten eine kohärente Interferenz aufrechtzuerhalten, ist eine geeignete inkohärente Verarbeitung erforderlich. Es ist auch nicht korrekt, die Leistungsübertragung in absorbierenden Medien allein durch das Quadrat der Feldamplitude zu beschreiben; der optische Fluss des Mediums wird berücksichtigt. [B09]

Die vom optischen Modell generierte Ausgabe für das Bauelementmodell

Wenn die lokal absorbierte Leistungsdichte in einem Film bekannt ist, kann die volumetrische Erzeugung ermittelt werden, indem man sie durch die entsprechende Photonenenergie teilt. Dieser Vorgang wird über alle Wellenlängen integriert. Das Ergebnis, $G(x)$, ist die Eingangsgröße des Drift-Diffusions-Modells. Es wäre jedoch falsch, die in der Transportschicht absorbierten Photonen zur aktiven Absorbererzeugung hinzuzuzählen. Die optische Energiebilanz sollte $R + T +$ die Summe aller $A_j = 1$ sein; es wird separat angegeben, welche A_j zur elektrischen Energieerzeugung beiträgt.

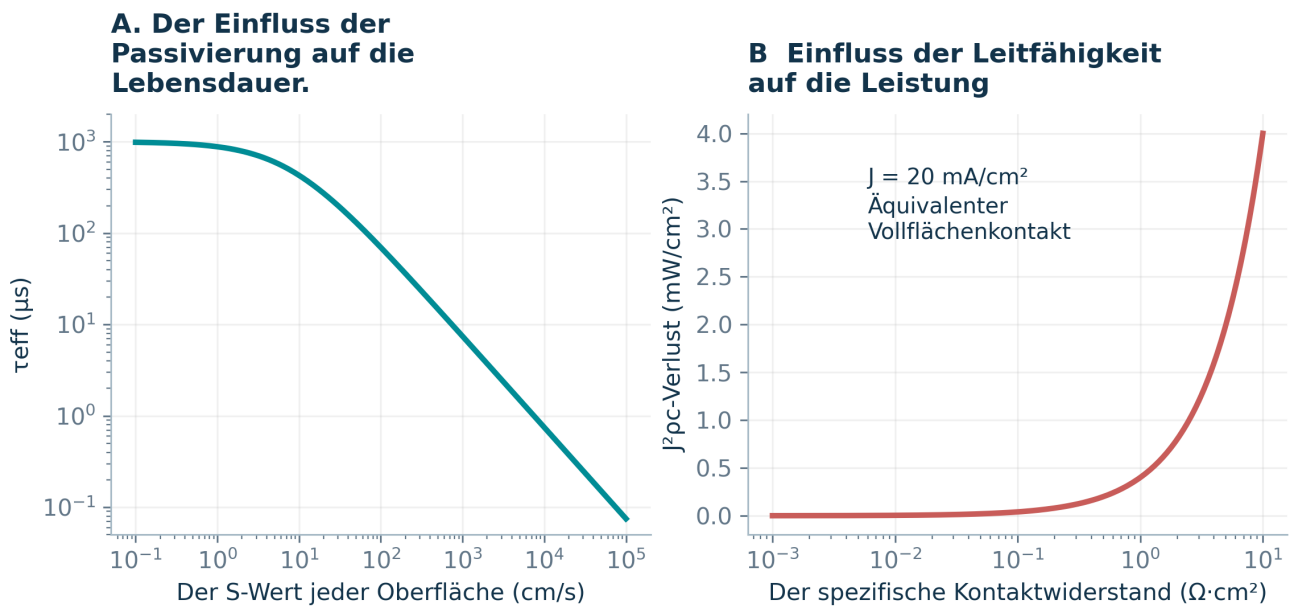


Abbildung 28. Passivierung und Leitfähigkeit sind zwei unterschiedliche Designziele. Auf der linken Seite nähert sich die effektive Lebensdauer bei abnehmendem S dem Volumenlimit einer 150 µm dicken Scheibe mit zwei äquivalenten Oberflächen. Auf der rechten Seite wird der Leistungsverlust durch den Kontaktwiderstand bei konstantem Strom dargestellt. Ein guter Kontakt sollte auf beiden Achsen geeignet sein. Analytische Lehrmodelle. [H20] [H21]

Selbsttest

1. Die neue Beschichtung erhöhte die gesamte Absorption; der Strom blieb jedoch unverändert. Was ist die erste Maßnahme zur Überprüfung? **Antwort:** Überprüfen, in welcher Schicht die zusätzliche Absorption stattfindet und ob Ladungsträger aus diesem Bereich gesammelt werden.
2. Der Kontaktwiderstand ist sehr gering, ebenso die Spannung. Ist der Kontakt gut? **Antwort:** Nicht unbedingt; er könnte zwar die Mehrheit der Ladungsträger passieren lassen, aber die Minderheit der Ladungsträger stark rekombinieren.
3. Wenn bei derselben strahlenden Referenz die externe Lumineszenzeffizienz um den Faktor 100 steigt, um wie viel sinkt der nichtstrahlende Spannungsverlust bei 25 °C? **Antwort:** Um ungefähr $25,69 \ln 100 = 118,3$ mV.

Vom Labor zum Modul: Fläche, Verkapselung und nachhaltige Produktion

Was wird beim Übergang von der Zelle zum Modul zusätzlich hinzugefügt?

Eine einzelne Zelle ist kein fertiges Produkt, das jahrelang den äußeren Bedingungen standhält. Ein **Modul** fasst elektrisch verbundene Zellen, eine Glas- oder andere Deckschicht, Zwischenpolymere, eine Rückseitenabdeckung und eine Anschlussdose zusammen. Die **Verkapselung** ist der Prozess, bei dem das aktive **Bauelement** in diesem Paket geschützt wird. Die **Laminierung** ist die Integration der Schichten in einem Prozess, der von Temperatur, Druck und Zeit abhängt. Neben der optischen Durchlässigkeit sind auch die elektrische Isolation, die mechanische Haftung und die Feuchtigkeitsdurchlässigkeit von Bedeutung.

In einer **Reihenschaltung** fließt der gleiche Strom durch die Zellen; die Spannungen addieren sich. In einer **Parallelschaltung** ist die Klemmenspannung gleich, die Summe der Teilströme ergibt den Gesamtstrom. Wenn ungleiche Zellen miteinander verbunden sind, kann der schwächere oder beschattete Teil die Leistung der anderen Zellen begrenzen. Eine **Bypass-Diode** leitet in einer geeigneten Auslegung bei Bedarf den Strom um eine bestimmte Zellengruppe. Es handelt sich nicht um ein Material, das den Wirkungsgrad der Zelle erhöht; es ist ein Schaltungselement, das dazu dient, die Auswirkungen von Verschattung und umgekehrter Polarität zu minimieren.

Auf welche Fläche bezieht sich der Wirkungsgrad?

Aktive Fläche ist der definierte Bereich, der Licht für die elektrische Energieerzeugung nutzt. Die **Aperturfläche** ist die Öffnung in einer Maske, durch die Licht hindurchtritt und die den Nenner der Messung bestimmt. Die **Gesamtfläche** ist die definierte Außenfläche des Produkts, einschließlich der Ränder und funktionslosen Bereiche. Die Flächen können von Artikel zu Artikel variieren. Wenn der Nenner verkleinert wird, erhöht sich der angegebene Prozentsatz für die gleiche Leistung; die tatsächliche Leistung wird dadurch nicht erhöht.

Synthetisches Beispiel: Auf einer Zellfläche von $0,04 \text{ m}^2$ werden 8 W gemessen. Wenn die Bestrahlung 1000 W/m^2 beträgt, beträgt der Wirkungsgrad in Bezug auf die Zellfläche 20% . Wenn die Verbindungsabstände und die Rahmenkonstruktion die

Gesamtfläche des Produkts auf $0,05 \text{ m}^2$ erhöhen, liefert das gleiche Produkt in Bezug auf die Gesamtfläche 16 %. Zusätzliche elektrische oder optische Verluste wurden noch nicht berücksichtigt; der Unterschied ergibt sich ausschließlich aus der Geometrie.

Wasserdampfdurchlässigkeit ist eine Eigenschaft, die angibt, wie schnell Wasser durch das Verpackungsmaterial diffundieren kann; es handelt sich nicht um eine absolute Kennzeichnung wie „wasserdicht“. Die Randabdichtung, die Temperatur und der Feuchtigkeitsunterschied beeinflussen ebenfalls die Diffusion. Bei unterschiedlichen Wärmeausdehnungskoeffizienten der Schichten können tägliches Erwärmen und Abkühlen mechanische Spannungen erzeugen. Das Paket ist daher nicht nur eine Abdeckung, sondern ein mechanisches und chemisches System, das die Lebensdauer des Bauelements beeinflusst.

Bei der Bewertung der Nachhaltigkeit sind die in der Zelle enthaltenen Elemente, die bei der Herstellung verwendeten Energie- und Lösungsmittel, die Emissionen im Fehlerfall, die Demontage und das Recycling als separate Schritte zu betrachten. Die Verwendung einer geringen Menge eines Materials führt nicht automatisch zu der Schlussfolgerung, dass die gesamten Umweltauswirkungen gering sind.

Verständniskontrolle: Einzelzelle erfolgreich, Modul fehlgeschlagen

Betrachten Sie Aperturfläche, Zellabstände, Verbindungswiderstand, Zellabstimmung und optische Veränderungen im Aufbau getrennt. Diese können sich verschlechtern, während der Wirkungsgrad der einzeln gemessenen Zelle gleich bleibt. Wer das Modul allein durch eine andere Absorberchemie verbessern will, kann die Ebene übersehen, auf der der Verlust entsteht.



Abbildung 29. Zellstreifen und Verbindungslinien in einem monolithischen Dünnschichtmodul. Die Draufsicht erinnert an die unterschiedlichen Funktionen der Schritte P1, P2 und P3 sowie an die inaktive Verbindungsfläche; es handelt sich nicht um einen Produktionsquerschnitt, der die Ritzentiefen der Schichten zeigt. Die Linien und Streifenbreiten sind schematisch dargestellt. Im folgenden Panel wird der quantitative Zielkonflikt zwischen geometrischem Füllfaktor und lateralem Widerstand berechnet. [T29] [R34] Mit einem Bildgenerierungswerkzeug erstellte konzeptionelle Illustration; keine Messaufnahme.

Streifenbreite, Flächenverlust und Widerstandsverlust

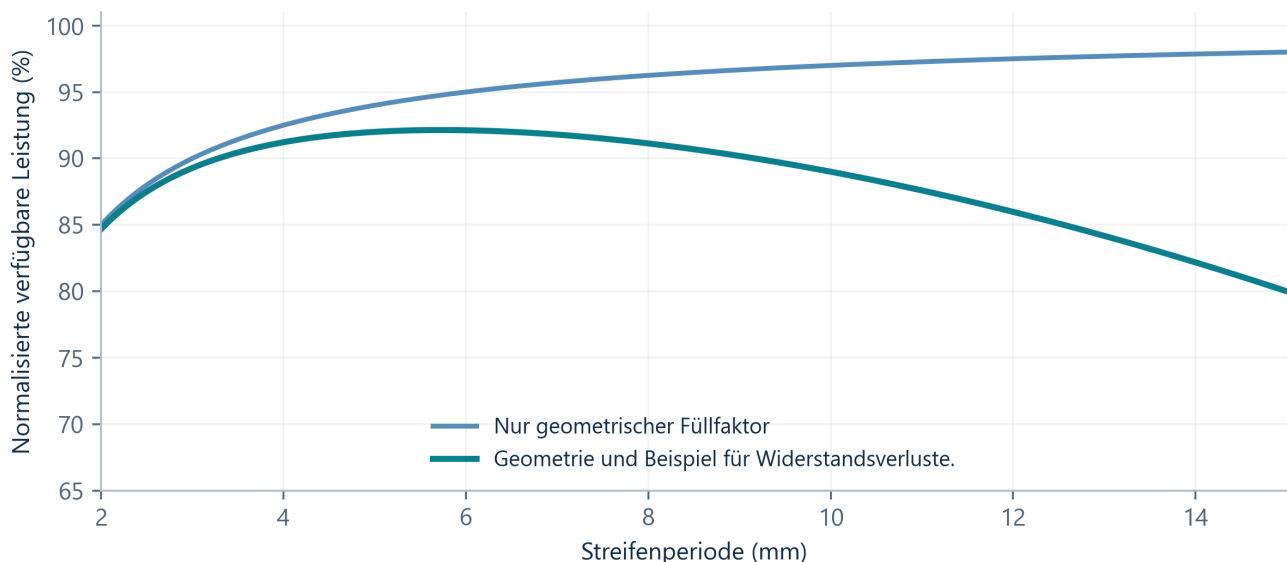


Abbildung 29 - berechnete ergänzende Teilabbildung. Die inaktive Breite beträgt 0,3 mm, und der beispielhafte Widerstandsverlust wurde proportional zum Quadrat der Periode angenommen. Eine breitere Streifenform erhöht zwar die geometrische Füllrate, verstärkt aber auch den lateralen Verlust. Eine numerisch optimale Lösung stellt keine allgemeingültige Produktionsrezeptur oder universelle Designgröße dar. [T29] [R34]

Die Vergrößerung des Maßstabs bedeutet nicht einfach, eine größere Schicht aufzutragen

In einer kleinen Zelle kann ein einzelner, sauberer Bereich ausgewählt werden; bei einer größeren Fläche steigt die Wahrscheinlichkeit, auf Dickenvariationen, Staub, Kratzer, unbeschichtete Stellen, Kanten und Verbindungslinien zu stoßen. Wenn sich die Zellfläche vergrößert, verlängert sich der horizontale Strompfad, wodurch der Widerstandsverlust in der transparenten Elektrode zunehmen kann. Aus diesem Grund werden Dünnschichtmodule mit Mustern hergestellt, die schmalere Unterzellen in Reihe schalten. Das Muster reduziert den elektrischen Verlust, verbraucht aber auch einen Teil der aktiven Fläche.

Spin-Coating ist ein leistungsstarkes Werkzeug für die Untersuchung kleiner Proben; es ist jedoch hinsichtlich des Materialverbrauchs und der Flächengeometrie kein natürliches Äquivalent zur Serienproduktion. Blade-Coating, Slot-Die-Verfahren und Dampfphasenprozesse führen zu unterschiedlichen Steuerparametern. Bei Flüssigkeitsbeschichtungsverfahren werden Benetzung, Fluss, Trocknung und Kristallisation gemeinsam gesteuert. Bei Vakuumverfahren werden Quellenfluss, Zusammensetzungskontrolle, Substrattemperatur und Flächenhomogenität kritisch. Kein Verfahren ist in jeder Hinsicht einem anderen überlegen.

Die Studie von Deng und Kollegen aus dem Jahr 2018 zeigte, dass eine geringe Menge an oberflächenaktiven Komponenten den Trocknungsfluss und das Beschichtungsverhalten verändern kann. In derselben Studie wurden die Ergebnisse für kleine Zellen und größere Module in getrennten Abschnitten dargestellt. Dieses Beispiel verdeutlicht, dass anstatt das Laborrezept direkt zu skalieren, die Physik des Flusses und der Filmbildung neu betrachtet werden muss. [T27]

Aktive Fläche und Aperturfläche

In einer monolithischen Verbindung kann die idealisierte geometrische Abdeckung mit $GFF = w/(w + s)$ beschrieben werden. w ist die effektive Breite der Zellstreifen, und s ist die gesamte Breite, die für die Verbindung und Isolierung verloren geht. Eine schmalere Zellstreifenbreite kann den horizontalen Widerstandsverlust reduzieren, erhöht aber bei gleicher Verbindungsbreite den geometrischen Verlust. Das Optimum ergibt sich aus der gemeinsamen Betrachtung beider Faktoren.

Gelöstes Beispiel. Für $w = 5$ mm und $s = 0,5$ mm ergibt sich $GFF = 0,909$. Wenn in den aktiven Bereichen ein Zellwirkungsgrad von 25 % angenommen wird, beträgt der Öffnungswirkungsgrad unter Berücksichtigung dieses geometrischen Effekts maximal etwa 22,73 %. Zusätzliche optische und elektrische Modulverluste wurden noch nicht berücksichtigt. Daher führt die Anwendung eines kleinen

Wirkungsgrads der aktiven Fläche auf die äußeren Abmessungen des Produkts zu einer Überschätzung der Leistung.

Auch die Defektstatistik variiert mit der Fläche. In einem einfachen Poisson-Modell für unabhängig und gleichmäßig verteilte, kritische Defekte beträgt die Wahrscheinlichkeit für ein fehlerfreies Bauelement $Y = \exp(-DA)$. D ist die Dichte der kritischen Defekte pro Flächeneinheit, und A ist die Fläche des Bauelements. Wenn $D = 0,001 \text{ cm}^{-2}$ angenommen wird, erhält man für 100 cm^2 den Wert $Y \approx 0,905$ und für 1000 cm^2 den Wert $Y \approx 0,368$. Reale Defekte können sich zu Clustern zusammenlagern, und einige davon sind reparaturfähig; dieses Modell ist kein Produktionsvorhersagemodell, sondern ein Ausgangspunkt, der den Flächeneffekt verdeutlicht.

Verkapselung hält die Umgebung fern; die Physik im Inneren kann sie dennoch verändern

Glas, Polymere, Randabdichtungen und Barrierebeschichtungen reduzieren den Feuchtigkeits-/Sauerstoffeintritt. Während der Verkapselung werden dem Bauelement jedoch auch Temperatur, Druck und thermische Ausdehnung ausgesetzt. Die schwache Grenzfläche zwischen Absorber und Elektrode kann sich lösen, die optischen Eigenschaften können sich ändern, und flüchtige Produkte, die im Inneren entstehen, können in dem geschlossenen Volumen eingeschlossen bleiben. Eine bessere äußere Barriere ist nicht die Lösung für alle inneren Abbauprozesse.

Die Originalarbeit von Mariani und Kollegen aus dem Jahr 2024 untersuchte die Bedeutung einer Verkapselung mit niedriger Temperatur und geringer Spannung für die Zuverlässigkeit von Zellen und Modulen durch verschiedene beschleunigte Alterungstests. Eine solche Schlussfolgerung ist jedoch nur für bestimmte Chargen, Verkapselungsmethoden und Testbedingungen gültig. Das Bestehen eines beschleunigten Tests beweist nicht allein eine Lebensdauer von Jahrzehnten unter anderen klimatischen Bedingungen. [T30]

Die freie Längenänderung aufgrund thermischer Ausdehnung hat die Form $\Delta L = \alpha_T L \Delta T$. α_T ist der thermische Ausdehnungskoeffizient. Wenn zwei Schichten miteinander verklebt sind, erzeugt die unterschiedliche freie Ausdehnung eine Grenzflächenspannung. Daher sind bei der Materialauswahl nicht nur die Wasserdampfdurchlässigkeit, sondern auch die elastischen Eigenschaften, die Haftenergie, die Temperaturabhängigkeit und die Veränderung unter UV-Einwirkung von Bedeutung. Ein wiederholter Biegetest kann auch den kombinierten Effekt von Rissbildung und chemischer Zersetzung in einem flexiblen Produkt aufzeigen.

Toxisches Element, Freisetzung und Rückgewinnung

Die Gesamtmasse eines gefährlichen Elements in einem Bauelement ist nicht die eigentliche Exposition, aber es handelt sich auch nicht um eine Information, die ignoriert werden kann. In normalen Betriebs-, Bruch-, Brand-, Kontakt-mit-Wasser- und End-of-Life-Szenarien wird untersucht, wo und mit welcher Geschwindigkeit die Freisetzung stattfindet. Bevor ein Material als „umweltfreundlich“ gekennzeichnet wird, müssen die verschiedenen Wege in der Produktions-, Benutzer- und Entsorgungskette getrennt werden.

Die Studie von Li und seinen Kollegen aus dem Jahr 2020 untersuchte experimentell, ob einem Perowskit-Bauelement eine blei-rückhaltende Funktion hinzugefügt werden kann. Dies stellt einen anderen technischen Ansatz dar, der über die bloße Reduzierung der Gesamtbleimenge hinausgeht. Der Erfolg der Rückhaltung in einem bestimmten Schadentest ist keine Lösung für alle möglichen Schadens- und Abfallszenarien; die freigesetzte Masse, die Rückhaltekapazität, die Zeit und die Testumgebung müssen dokumentiert werden. [T28]

Bei der Wiederverwertung sind das Rückgewinnen großer Glasmengen und das Rückgewinnen kleiner, aber wirtschaftlich oder ökologisch wichtiger Metallmengen unterschiedliche Ziele. Eine starke Haftung kann zwar die Lebensdauer verlängern, erschwert aber möglicherweise die Trennung der Schichten am Ende der Nutzungsdauer. Wenn bei der Konstruktion von Anfang an abnehmbare Verbindungen, Materialrückverfolgbarkeit und die Möglichkeit der Trennung wertvoller Schichten berücksichtigt werden, erweitern sich die Optionen für das Ende der Lebensdauer. Andererseits kann sich das Gesamtergebnis verschlechtern, wenn die Lebensdauer auf dem Feld verkürzt wird, um die Wiederverwertung zu erleichtern.

Anstatt die Kosten pro Watt zu betrachten, sollte man die über die gesamte Lebensdauer erzeugte Energiemenge berücksichtigen

Eine einfache Berechnung der Materialdichte stellt die Behauptungen bezüglich des Maßstabs auf die Probe. Wenn der hypothetische Silberverbrauch 10 mg/W beträgt, würde die jährliche Produktion von 1 TW Zellen 10.000 Tonnen Silber erfordern. Dies ist keine aktuelle Messung des industriellen Verbrauchs, sondern lediglich eine Umrechnung der Einheiten. Dass ein Kandidat in einem Experiment mit wenigen Gramm kostengünstig ist, bedeutet nicht, dass er im Terawatt-Maßstab die gleiche Beschaffungslogik aufweist. Die Reduzierung des Silberverbrauchs oder die Verwendung von Kupfer wird zusammen mit der Kontaktqualität, der Diffusion, der Korrosion und den Prozesskosten bewertet.

In den meisten Fällen ist die funktionelle Einheit der Lebenszyklusanalyse die gelieferte Kilowattstunde (kWh). Die Herstellung von Strom, die Materialeingänge, der Transport, die Installation, die Wartung, die Verschlechterung, die Lebensdauer und die End-of-Life-Aspekte müssen beschrieben werden. Der Methodenleitfaden 2020 der IEA PVPS betont die Bedeutung solcher gemeinsamen Definitionen, um verschiedene Photovoltaik-Technologien unter konsistenten Annahmen zu bewerten. Ein guter Umweltvergleich berücksichtigt nicht nur die Produktionstemperatur der Zelle. [T29]

Beispiel für eine Entscheidungsfindung. Modul A soll im ersten Jahr in derselben Fläche 10 % mehr Energie liefern, jedoch mit höheren Produktionskosten und einer größeren Unsicherheit bezüglich der Lebensdauer. Modul B soll eine geringere Anfangsleistung, aber eine längere, nachgewiesene Betriebshistorie aufweisen. Die Entscheidung kann nicht allein auf der anfänglichen Leistung basieren: Es ist eine Sensitivitätsanalyse erforderlich, die den jährlichen Energieverlust, den Bedarf an Austausch und die gemeinsame Nutzungsdauer berücksichtigt. Die Forschungsrelevanz der neuen Technologie kann hoch sein, während ihre kommerzielle Überlegenheit noch nicht nachgewiesen ist.

Der Zielkonflikt zwischen Streifenbreite und Serienverlust

In einem monolithischen Dünnschichtmodul werden die Zellen in Streifen unterteilt, die in Reihe geschaltet sind. P1 trennt die untere Elektrode elektrisch; P2 schafft den Pfad, über den die Verbindung zwischen den Schichten hergestellt wird; P3 trennt die obere Elektrode und den aktiven Schichtstapel vom benachbarten Streifen. Die tatsächliche Reihenfolge der Strukturierung und der Laserprozess hängen vom Materialsystem ab. Das Hauptziel ist es, die hintere Elektrode eines Streifens mit der vorderen Elektrode des benachbarten Streifens zu verbinden und einen unerwünschten Kurzschluss zu verhindern.

Die Breite der Totzone ist b , die Periodenlänge der Streifen ist s , und die geometrische Füllrate beträgt ungefähr $1 - b/s$. Wenn s zunimmt, nimmt der Anteil der Totfläche ab; jedoch legt die Ladung eine längere Strecke innerhalb der transparenten Elektrode zurück. Der laterale Widerstandsverlust wächst in einfachen Modellen mit s^2 . Das Maximum der Form ergibt sich aus dem Wettbewerb dieser beiden Effekte. Aus dem Diagramm darf kein Fertigungsmaß gewählt werden, bevor beide Koeffizienten für den tatsächlichen optischen/elektrischen Schichtaufbau erneut gemessen wurden.

Die Verkapselung ist ein mechanisches und chemisches System

Obwohl die Reduzierung des Wasser- und Sauerstoffdurchtritts wichtig ist, ist die Verkapselung nicht nur eine „luftdichte Abdeckung“. Glas, Klebstoff, Zelle und Rückseitenfolie haben unterschiedliche Wärmeausdehnungskoeffizienten. Temperaturwechsel können zu Schubspannungen und Ermüdung der Verbindungen führen. Die Geometrie der Randabdichtung beeinflusst den Weg, den das Wasser nimmt. Einige Abbauprodukte oder Ionen können sich unter elektrischer Polarisierung bewegen. Daher sind bei einem Stabilitätstest die Verkapselung, das Randdesign und der elektrische Betriebspunkt Teil des Bauelements. [T30] [R15]

Wenn ein Laborergebnis auf ein Modul übertragen wird, ändern sich auch die Prozesswiederholbarkeit und die Defektstatistik. Ein Kurzschlussdefekt, der in einer 1 cm² großen Probe selten ist, wird in einer Fläche von Hunderten von cm² wahrscheinlicher. Selbst wenn die durchschnittliche Beschichtungsdicke korrekt ist, kann der Randbereich der Verteilung die Ausbeute oder die Zuverlässigkeit bestimmen. Eine Untersuchung zur Maßstabsvergrößerung verfolgt daher nicht nur die durchschnittliche Leistung, sondern auch die räumlichen Karten, die Ausfallraten und die Variationen zwischen Produktionschargen.

Was bewirken P1, P2 und P3 in einem Dünnschichtmodul?

P1, P2 und P3 sind die Bezeichnungen für drei Strukturierungsprozesse, die bei der gängigen monolithischen Dünnschichtmodulherstellung verwendet werden. In einer typischen Aufbaustruktur auf Glas trennt P1 die untere leitfähige Schicht zwischen den benachbarten Zellstreifen. Nachdem die Absorberschichten aufgebracht wurden, öffnet P2 die Kontaktzone, sodass das nachfolgende Metall die darunterliegende leitfähige Schicht erreichen kann. Nachdem die obere leitfähige Schicht aufgebracht wurde, trennt P3 die oberen Kontakte der benachbarten Streifen. Dadurch wird der obere Kontakt eines Streifens mit dem unteren Kontakt des benachbarten Streifens verbunden, und die Spannungen werden in Reihe addiert. Die Details können je nach Stapelrichtung variieren; diese Beschreibung ist keine allgemeingültige Anleitung für alle Technologien.

Trennlinien und Ausrichtungstoleranzen wandeln einen Teil der beleuchteten Fläche in einen **nicht-stromerzeugenden Bereich** um. Ein engeres Muster kann mehr aktive Fläche freilegen; jedoch muss auch das Risiko von Ausrichtungstoleranzen, unerwünschten Kurzschlüssen oder unvollständiger Trennung berücksichtigt werden. Daher ist es notwendig, nicht nur das Foto des Moduls, sondern auch die Musterbreite und die elektrische Verbindungsfunktion zu analysieren. [T34]

In der Abbildung der Verpackung ist **EVA** ein Polymer-Verkapselungsmaterial, genauer gesagt Ethylen-Vinylacetat; es ist nicht das einzige verwendete Verkapselungsmaterial. Es sorgt für eine mechanische Verbindung und eine optische Übertragung zwischen dem Glas und der Zelle. Feuchtigkeit, Hitze und chemische Reaktionen können dazu führen, dass sich diese Verbindung und die Durchlässigkeit im Laufe der Zeit verändern. Die **Randabdichtung** ist eine Struktur, die das Eindringen aus der Umgebung, insbesondere über die Ränder, reduziert. „Homogenität“ gibt an, wie ähnlich die Dicke und die Eigenschaften über die Fläche verteilt sind; eine hohe durchschnittliche Qualität schließt jedoch nicht aus, dass ein einzelner schwacher Bereich einen Defekt verursacht.

Selbsttest

1. Der Wirkungsgrad der aktiven Zelle beträgt 24 %, der geometrische Füllfaktor 95 %. Was ist der Aperturwirkungsgrad nach Berücksichtigung der geometrischen Verluste?

Antwort: 22,8 %; weitere Verluste wurden noch nicht berücksichtigt.

2. Wenn eine verkapselte Zelle den Feuchtigkeitstest besteht, bedeutet das, dass das Ionenwanderungsproblem gelöst ist? **Antwort:** Nein. Ionische Prozesse können auch innerhalb der Verkapselung durch Licht, Temperatur und Spannung fortgesetzt werden.

3. Bei einem Materialverbrauch von 5 mg/W, wie viele Tonnen werden für eine Produktion von 2 TW benötigt? **Antwort:** 10.000 Tonnen. mg/W wird mit Watt multipliziert; 1 Tonne = 10^9 mg.

Quellenumfang dieser Technologiekapitel

Diese Kapitel stellen eine Zusammenstellung von Lehrmaterialien dar, die aus Original-Experiment- und Theoriearbeiten sowie aus unternehmensinternen Methodenhandbüchern ausgewählt wurden; es handelt sich nicht um eine vollständige Durchsicht der gesamten PV-Literatur. Das Datum des letzten Zugriffs auf die Quellen ist der 7. September 2026. Verlagszusammenfassungen, frei zugängliche Volltexte und unternehmensinterne Autorenexemplare wurden gemeinsam verwendet; es wurde jedoch nicht so dargestellt, als ob die nicht zugänglichen Methoden oder zusätzlichen Daten von Artikeln, auf die nur die Zusammenfassung zugänglich ist, untersucht worden wären. Die Ergebnisse von Artikeln aus einem bestimmten Zeitraum wurden nicht als aktuelle Weltrekorde gekennzeichnet. Die numerischen Übungen sind Lehrmaterialien, die sich aus explizit angegebenen Annahmen ableiten; sie stellen keine Vorhersage der Leistung von potenziellen Materialien oder realen Produkten dar.

Photovoltaische Messung: wie der richtige Wert zustande kommt

Eine Messung ist zunächst ein Vergleich, bevor sie eine Zahl liefert

Eine Zelle zu beleuchten und am Computer 24% zu sehen, ist für sich allein noch keine abgeschlossene Messung. Das angezeigte Verhältnis hängt von Strom- und Spannungssensoren, Lichteinstellung, Temperatur und eingegebener Fläche ab.

Kalibrierung setzt die Geräteanzeige zu einer bekannten Referenz in Beziehung.

Rückführbarkeit ist die dokumentierte Verbindung dieser Referenz zu übergeordneten Referenzen. **Messunsicherheit** beschreibt quantitativ den Wertebereich, der der Messgröße vernünftigerweise zugeordnet werden kann. Die Annahme "Das Gerät ist richtig, weil es teuer ist" ersetzt nicht die von diesen drei Konzepten verlangte Überprüfung.

Ein **Solar-Simulator** ist eine Lichtquelle, die im Labor dazu dient, ein bestimmtes Spektrum und eine bestimmte Strahlung zu erzeugen. Eine **Referenzzelle** hilft bei der Einstellung des Lichts mit einem Bauelement, dessen Empfindlichkeit bekannt ist. Wenn jedoch die Testzelle im Vergleich zur Referenzzelle auf unterschiedliche Wellenlängen unterschiedlich reagiert, garantiert der gleiche Strahlungsindikator nicht den gleichen Photostrom. Dieser Unterschied erfordert die Berücksichtigung der **spektralen Fehlanpassung**. Die zeitliche Stabilität der Lampe und die Lichtverteilung über die Probenfläche werden ebenfalls separat kontrolliert.

Werden Spannung und Strom mit derselben Verbindung gemessen?

Quell-Messgerät: Wendet die gewählte Spannung oder den Strom an und misst den entsprechenden Wert; die Abkürzung SMU wird verwendet. Während einer Spannungsmessung kann es sein, dass die Zelle nicht sofort in jedem Punkt stabil ist. Die **Wartezeit** kann durch die Richtung der Messung und die vorherigen Lichtverhältnisse beeinflusst werden. Bei der Vier-Leiter-Messung werden die Strom führenden Kabel von den spannungserfassenden Kabeln getrennt, wodurch bestimmte Spannungsabfälle in den Kabeln und Kontaktwegen weniger die gemessene Spannung des Bauelements beeinflussen.

Synthetisches Beispiel: Wenn die Zelle 0,60 V und 1 A liefert, erzeugt der unerwünschte Gesamtwiderstand von 0,02 Ohm im Stromkreis einen Spannungsabfall

von 0,02 V. Wenn wir die Spannung an der falschen Stelle messen, können wir die Leistung der Zelle um einige Prozent falsch berechnen. Dieser kleine Spannungsunterschied kann größer sein als der angegebene Gewinn des neuen Materials. Daher ist es riskant, die Ergebnisse zu interpretieren, ohne die Messgeometrie zu verstehen.

Wiederholpräzision ist die Ähnlichkeit von Messungen unter identischen Bedingungen. Ein Gerät kann jedes Mal denselben Fehler anzeigen; ähnliche Ergebnisse sind allein kein Beweis für die Genauigkeit. **Systematischer Fehler** ist ein Effekt, der die Messung systematisch in eine bestimmte Richtung verschiebt. Das fünfmalige Messen derselben Zelle untersucht die Wiederholpräzision, während die Herstellung und Messung von fünf unabhängigen Zellen die Prozessvariabilität untersucht. Das folgende Budget für Unsicherheiten wird erläutern, wie diese verschiedenen Quellen in die Gesamtzahl einfließen.

Verständniskontrolle: Handelt es sich um eine Effizienzsteigerung oder um eine Veränderung des Nennerwerts?

Wenn bei identischen Strom-Spannungs-Daten in der Software eine kleinere Fläche eingegeben wird, steigt der Wirkungsgrad. Die physikalische Leistung hat sich nicht verändert. Vergleichen Sie beim Abgleich alter und neuer Ergebnisse die Rohleistung, die Flächenmaske, die Strahlung und die Probertemperatur. Der Nenner der Messung ist ebenso ein Teil des Experiments wie der Zähler.

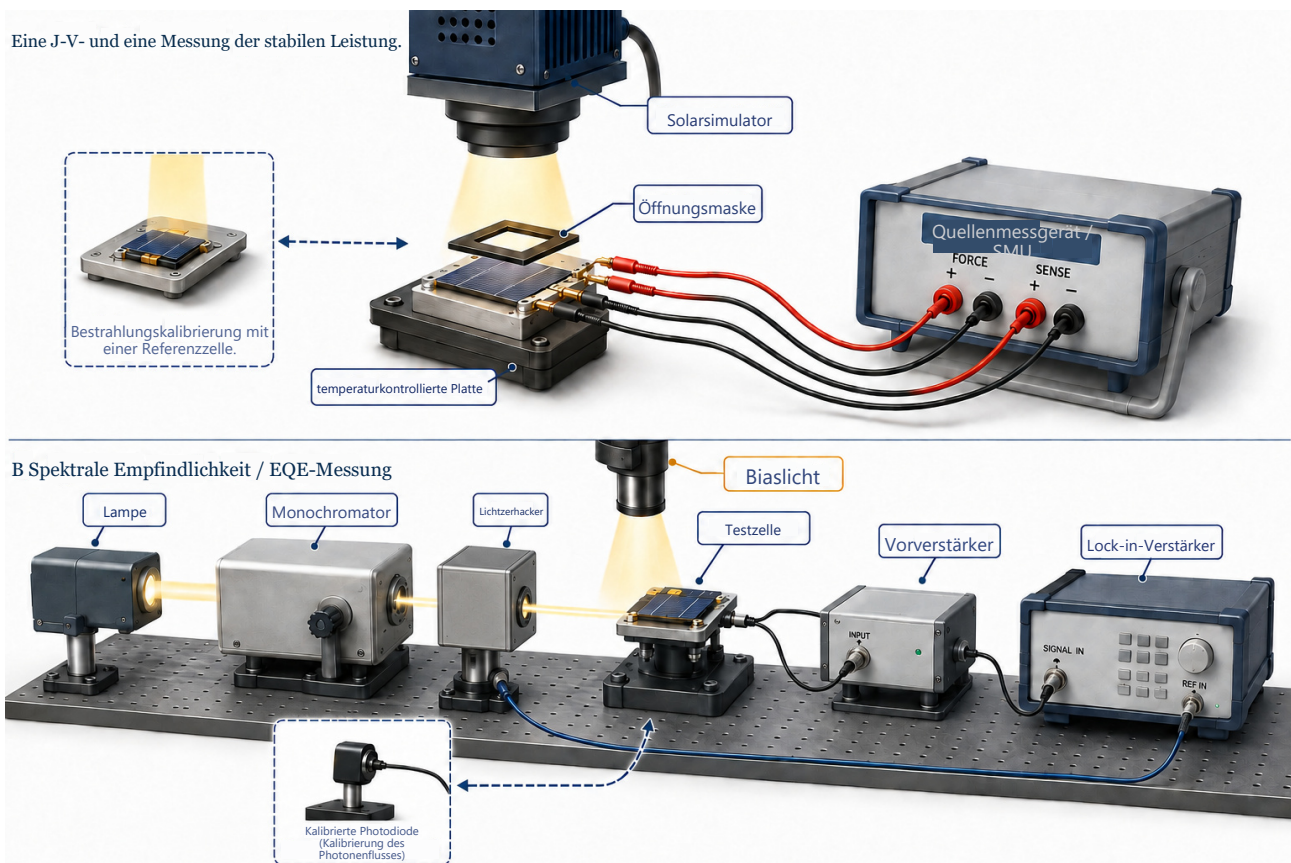


Abbildung 30. Zwei komplementäre Messanordnungen. Die J-V- und MPP-Messung liefert die Leistung des gesamten Bauelements; die EQE-Messung untersucht, woher der Strom kommt, indem sie den Photonenfluss nach Wellenlängen aufteilt. Die Referenzkalibrierung, die Temperatur, die Fläche und die Vorspannungsbedingungen sind Teil der Anordnung. Originale Funktionsschemata. [R01] [R02] Mit einem Bildgenerierungswerkzeug erstellte konzeptionelle Illustration; keine Messaufnahme.

Der Wirkungsgrad einer Solarzelle ist nicht nur eine Eigenschaft des Bauelements; er ist das Ergebnis, das durch die Kombination von klar definierten Beleuchtungsbedingungen, Fläche, Temperatur, elektrischer Vorgeschichte und der verwendeten Messmethode erzielt wird. Daher sollte die erste Frage des Forschers nicht „Wie viel Prozent?“ sein. Stattdessen sollten die Fragen „Welches Bauelement, unter welchen Bedingungen, mit welcher Flächendefinition, über welchen Zeitraum und mit welcher Unsicherheit?“ zuerst beantwortet werden. Die optische Absorption eines Materials, die Photolumineszenz eines Films und der elektrische Wirkungsgrad eines fertigen Bauelements sind unterschiedliche, beobachtbare Größen. Ihre Darstellung in derselben Grafik bedeutet nicht, dass sie austauschbar sind.

Die Strom-Spannungs-Kennlinie als physikalische Messgröße auslesen

Die Strom-Spannungs-Kurve wird als I-V-Kurve und die Stromdichte-Spannungs-Kurve als J-V-Kurve dargestellt. Im Kurzschlusszustand ist die Spannung null und die gemessene Größe ist I_{sc} oder J_{sc} . Im Leerlaufzustand ist der externe Strom null und V_{oc} wird gemessen. Der Maximum-Power-Point (MPP) ist der Arbeitspunkt, bei dem das Produkt aus Spannung und Strom im Generatorbetrieb maximal ist. Es sollte beachtet werden, dass der erzeugte Strom bei einigen Geräten negativ gemessen wird; die folgenden Gleichungen verwenden die positive Größe der erzeugten Leistung.

$$P_{\max} = V_{\text{mpp}} I_{\text{mpp}} \quad [\text{W}] \quad (1.18.1)$$

$$FF = \frac{P_{\max}}{V_{oc} I_{sc}} \quad (\text{dimensionslos}) \quad (1.18.2)$$

$$\eta = \frac{P_{\max}}{GA} \quad (\text{dimensionslos}) \quad (1.18.3)$$

Hierbei steht G für die Bestrahlungsstärke [W/m^2], A für die angegebene Messfläche [m^2] und η für den Leistungsumwandlungswirkungsgrad. Wenn J_{sc} verwendet wird, muss die Flächendefinition während der gesamten Berechnung gleich bleiben. IEC 60904-1 definiert den I-V-Messbereich für Photovoltaikgeräte unter natürlicher oder simulierter Sonneneinstrahlung; in dieser Quelle werden Zelle, Zellverbund und Modul zusammen betrachtet. Die klare Beschreibung des Standardkatalogs gibt an, dass auch die Flächenmessung, kapazitive Geräte, das dunkle I-V-Verhalten und die räumliche Beleuchtungsungleichmäßigkeit behandelt werden. Die hier bereitgestellte erläuternde Beschreibung ersetzt nicht den lizenzierten Volltext des Standards. [\[R01\]](#)

Nehmen wir zum Beispiel an, $V_{oc} = 1,10 \text{ V}$, $J_{sc} = 24,0 \text{ mA}/\text{cm}^2$ und $FF = 0,80$. Wenn die einfallende Leistungsdichte $100 \text{ mW}/\text{cm}^2$ beträgt, beträgt die Ausgangsleistung $1,10 \times 24,0 \times 0,80 = 21,12 \text{ mW}/\text{cm}^2$, und somit beträgt der Wirkungsgrad 21,12 %. Dieses Produkt stellt eine messbare Konsistenzprüfung dar: Wenn die vier Zahlen in der Veröffentlichung nicht miteinander übereinstimmen, sollten Rundungsfehler, Flächenumrechnungen oder Datenübertragungsfehler untersucht werden. Es sollte auch beachtet werden, dass das Maximum, das aus einigen guten Punkten in der Kurve ausgewählt wird, durch Rauschen nach oben verschoben werden kann; eine angemessene Auflösung, Wiederholbarkeit und eine stabile Messung sind erforderlich.

Warum sind Fläche, Spektrum und Temperatur gleichermaßen wichtig?

Die aktive Fläche, der Bereich, der durch die Elektroden definiert wird, die Maskenöffnung und die Gesamtfläche des Bauelements sind nicht dasselbe. Die Sammlung von Licht, das von den maskenlosen Rändern kommt, die Neigung, die Dicke und der Abstand der Maske zum Bauelement können bei kleinen Bauelementen zu erheblichen Fehlern führen. Die vom Hersteller angegebene nominale Elektrodengröße sollte nicht anstelle der gemessenen Öffnungsfläche verwendet werden. Der Messprotokoll sollte das Bild der Maske, ihre Abmessungen, die Messmethode und die Angabe enthalten, welche Fläche als Bezugsfläche verwendet wurde. Die Unterscheidung zwischen der Gesamtfläche, der Öffnungsfläche und der definierten Beleuchtungsfläche ist auch bei den Vergleichsregeln für validierte Wirkungsgradtabellen von zentraler Bedeutung. [\[R37\]](#)

Beispielrechnung: Die tatsächliche Öffnungsfläche beträgt $0,100 \text{ cm}^2$, die fälschlicherweise verwendete Fläche $0,095 \text{ cm}^2$ und die gemessene maximale Leistung beträgt $2,00 \text{ mW}$. Der korrekte Wirkungsgrad ist $20,0 \%$, während mit der falschen Fläche $21,05 \%$ ermittelt wird. Allein die Flächenverkleinerung von 5% hat zu einer Verbesserung von etwa $1,05$ absoluten Prozentpunkten geführt. Eine höhere Stromdichte allein bedeutet nicht zwangsläufig ein besseres Halbleitermaterial.

AM1.5G ist eine spektrale Referenz; der Ausdruck „1 Sonne“ allein gibt keine Auskunft über die spektrale Form. Eine Lampe kann insgesamt 1000 W/m^2 abgeben, aber in einem Bereich mehr und in einem anderen Bereich weniger Licht erzeugen, das von dem Gerät absorbiert wird. Wenn die Kalibrierzelle und das Testgerät unterschiedliche spektrale Empfindlichkeiten aufweisen, garantiert die gleiche Gesamtstrahlung keine korrekte Vergleichbarkeit. Die Korrektur der spektralen Abweichung verwendet das Referenzspektrum, das Simulatorspektrum sowie die spektralen Empfindlichkeiten der Referenzzelle und des Testgeräts. Es sollte angegeben werden, ob der Korrekturfaktor als Multiplikator oder Divisor definiert ist; ein Faktor aus einer anderen Software sollte nicht blind angewendet werden. Der spektrale Fehlerbericht von NREL untersucht dieses Problem im Zusammenhang mit GaInAs-basierten Zellen mit Konzentrator; das hier verwendete Prinzip ist das allgemeine Prinzip der spektralen Abweichung. [\[R03\]](#)

Beispielsweise kann die Temperatur in der Ebene des Bauelements von der Temperatur des Halters abweichen. Die Erwärmung der Probe durch die Lampe, eine schlechte thermische Verbindung und die Position des Temperatursensors beeinflussen die Messung. Wenn die Referenz 25 °C beträgt, ist eine Messung von 300 K nicht unter den gleichen Bedingungen: 25 °C entspricht genau $298,15 \text{ K}$. Wenn eine Temperaturkorrektur verwendet wird, muss der Koeffizient innerhalb derselben

Technologie und im entsprechenden Temperaturbereich validiert werden. Insbesondere bei Mehrfachübergangsstrukturen beeinflusst die spektrale Verteilung den Strom jeder einzelnen Unterzelle unterschiedlich; eine einzelne Referenzzelle liefert möglicherweise nicht genügend Kalibrierungsinformationen.

Kreuzvalidierung mit EQE und Maximum-Power-Tracking

Die externe Quanteneffizienz $\text{EQE}(\lambda)$ ist das Verhältnis der Anzahl der Elektronen, die aus dem externen Stromkreis pro einfallendem Photon bei einer bestimmten Wellenlänge gewonnen werden. Die Beziehung zur spektralen Empfindlichkeit SR $[\text{A/W}]$ ist wie folgt: $\text{EQE} = \text{SR} \times h \times c / (q \times \lambda)$, wobei λ in Metern angegeben wird. Der mit dem Referenz-Photonenfluss integrierte Strom wird wie folgt berechnet:

$$J_{\text{sc,EQE}} = q \int \text{EQE}(\lambda) \Phi_{\lambda}(\lambda) d\lambda \quad [\text{A/m}^2] \quad (\text{I.18.4})$$

Φ_{λ} ist der Photonenfluss pro Wellenlänge, Zeit und Fläche. Wenn spektrale Daten auf Nanometer- und Meterbasis gemischt werden, kann ein Fehler in der Größenordnung von Milliarden auftreten. Bei der EQE-Messung werden Lichtvorspannung, elektrische Vorspannung, Strahlengröße und die Bedingung für eine lineare Antwort aufgezeichnet. Bei seriellen Tandemzellen müssen die einzelnen Zellen mit geeignetem Licht vorgespannt werden, um die anderen Übergänge zu messen. Der offene Anwendungsbereich von IEC 60904-8 umfasst die spektrale Charakteristik linearer und nichtlinearer PV-Bauelemente. [\[R02\]](#)

Wenn $J_{\text{sc,EQE}}$ und der J-V-Strom nicht übereinstimmen, ist die erste Erklärung nicht unbedingt „neue Physik“. Zuerst werden Fläche, Spektrum, Kalibrierung, Wellenlängenbereich, Probenhistorie und Veränderungen unter Lichteinwirkung überprüft. Eine geringere EQE-Stromstärke kann auf einen im Messprozess nicht erfassten nahen Infrarotbereich, einen anderen Betriebspunkt oder eine zeitliche Veränderung des Bauelements zurückzuführen sein. Die EQE zeigt auch, in welchem spektralen Bereich der Verlust auftritt, aber sie allein kann nicht eindeutig bestimmen, ob es sich um einen Absorptions- oder einen Sammelverlust handelt.

Bei Geräten mit langsamen ionischen und kapazitiven Prozessen beeinflussen die Scanrichtung, die Schrittgröße, die Wartezeit bei jedem Schritt, die Anfangsspannung und die Vorbehandlung die J-V-Kurve. Die scheinbare Symmetrie von Vorwärts- und Rückwärtsscans beweist nicht das Fehlen von Ionenbewegung; in Perowskiten mit geringer Hysterese wurde die Ionenwanderung experimentell nachgewiesen. [\[R14\]](#) Daher wird die Leistung über die Zeit unter einer geeigneten Maximum-Power-Point-Verfolgung überwacht. Eine konstante Spannung, bei der ein stabiler Strom fließt, ist zwar eine nützliche Unterstützung, aber wenn sich der

tatsächliche Maximum-Power-Point verschiebt, ist eine einzelne konstante Spannung nicht ausreichend. Die Verzögerung des Verfolgungsalgorithmus muss von der Relaxation des Geräts unterschieden werden.

Die Unsicherheit zusammen mit dem Ergebnis berechnen

Die Wiederholpräzision ist die Streuung wiederholter Messungen eines Geräts; der Kalibrierfehler ist möglicherweise nicht darin enthalten. Die Unsicherheit der Messung umfasst die Leistungsmessung, die Fläche, die Strahlung, die spektrale Korrektur, die Temperatur und die entsprechenden Korrelationen. Für unabhängige, kleine relative Unsicherheiten gilt näherungsweise $u_r(\eta)^2 = u_r(P)^2 + u_r(G)^2 + u_r(A)^2$. Wenn keine Unabhängigkeit besteht, werden Kovarianzterme hinzugefügt. Die Beschreibung der Unsicherheitskombination des NIST definiert diese Näherung erster Ordnung und die Sensitivitätskoeffizienten. [R04]

Im ursprünglichen Beispiel seien die relativen Standardunsicherheiten für die Leistung 0,5 %, für den Bestrahlungsstärke 1,0 % und für die Fläche 0,7 %. Die Summe der Quadrate innerhalb der Wurzel ergibt 1,319 %. Die absolute Standardunsicherheit für den Wirkungsgrad beträgt ungefähr 0,264 Prozentpunkte (20,0 %). Wenn die Annäherung $U = 2u$ angemessen ist, beträgt die erweiterte Unsicherheit ungefähr 0,53 Prozentpunkte; der Erweiterungsfaktor und die Begründung werden ebenfalls angegeben. In diesem Fall kann der Unterschied zwischen 20,2 % und 20,0 % nicht allein anhand der Betrachtung der Einzelwerte als Verbesserung deklariert werden. Wenn die beiden Geräte die gleiche Kalibrierung verwenden, wird die Unsicherheit des Unterschieds zusätzlich berechnet; es kann auch falsch sein, jeden systematischen Beitrag wie zwei unabhängige Fehler zu addieren.

Eine Messung von Anfang bis Ende planen

Bei einer J-V-Messung sollte man vor der Datenerfassung das physikalische Objekt definieren: Probenidentifikation, aktive Fläche, Aperturmaske, Elektrodengeometrie und Einfallswinkel des Lichts. Der Schatten der Maske, das gestreute Licht und die von außerhalb der Apertur gesammelten Ladungsträger können bei kleinen Proben eine Rolle spielen. Anstatt die Fläche allein aus dem nominalen Maskendesign zu übernehmen, sollte man die Größe und Unsicherheit der tatsächlich verwendeten Apertur erfassen. Für die Temperatur sollte man nicht die Umgebungslufttemperatur, sondern eine geeignete Messung der Zelltemperatur verwenden.

Nachdem die Bestrahlung mit der Referenzzelle eingestellt wurde, wird beurteilt, ob die spektrale Antwort des Bauelements von der Referenz abweicht. Eine Vier-Punkt-Verbindung reduziert den Einfluss der Spannungsabfälle in den Stromleitungen auf die Spannungsmessung; sie eliminiert jedoch nicht den

Eigenkontaktwiderstand der Zelle. Der Spannungsbereich, die Scanrichtung, die Verweilzeit an einem Punkt und die Auswahl der Vorvoreinstellung sind Teil der Datendatei. Bei einem Bauelement, dessen Eigenschaften sich im Laufe der Zeit ändern, ist anstelle des höchsten Punkts eines einzelnen Scans eine stabile Verfolgung um den MPP erforderlich. [R01] [R02]

Die Richtung der Korrektur der spektralen Fehlanpassung ableiten

Bezeichnen wir die spektrale Stromempfindlichkeit für das Testbauelement mit t und für das Referenzbauelement mit r als $S(\lambda)$. Das Referenzspektrum sei E_{ref} , und das nicht skalierte Spektrum der Lampe sei E_{lamp} . Wenn wir die Lampe so einstellen, dass sie im Referenzbauelement den gleichen Strom wie das Standardspektrum erzeugt, dann gilt: $k = \int E_{\text{ref}} S_r d\lambda / \int E_{\text{lamp}} S_r d\lambda$. Das Verhältnis des Stroms des Testbauelements zur Lampe zum Strom im Referenzspektrum ist somit:

$$M = \frac{\int E_{\text{lamp}} S_t d\lambda}{\int E_{\text{ref}} S_t d\lambda} \frac{\int E_{\text{ref}} S_r d\lambda}{\int E_{\text{lamp}} S_r d\lambda}. \quad (\text{I.18.5})$$

Gemäß dieser Definition wird das Lampen-Testbauelement bei $M > 1$ im Vergleich zu den Referenzbedingungen überlastet; der der Referenzspektrum entsprechende Strom wird durch Division des unter geeigneten linearen Bedingungen gemessenen Stroms durch M ermittelt. Einige Quellen definieren den Korrekturfaktor als dessen Kehrwert. Anstatt das Symbol zu kopieren, vermeidet die Beschreibung des Verhältnisses in Worten Fehler bei Vorzeichen und Richtung. Um die Empfindlichkeit S aus der EQE zu berechnen, wird die Formel $S = q\lambda \text{EQE}/(hc)$ verwendet; die direkte Multiplikation der EQE mit dem Energiespektrum lässt die Photonenenergie außer Acht.

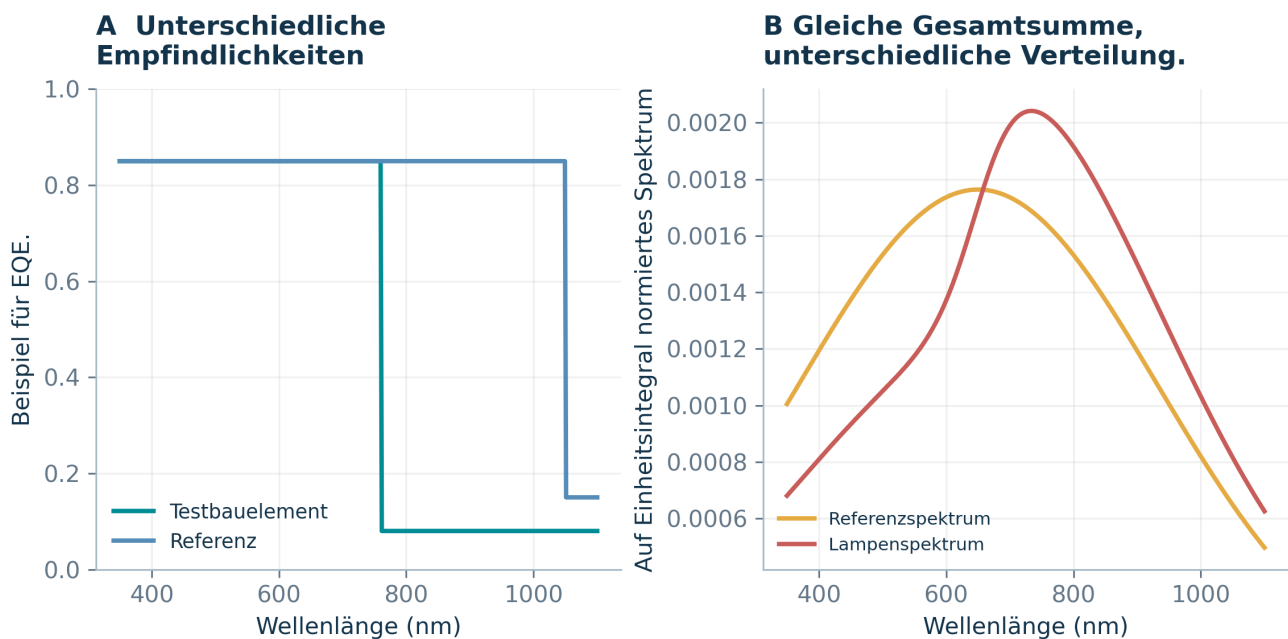


Abbildung 31. Der Ursprung der spektralen Fehlanpassung. Zum roten Ende des Spektrums hin verliert das Testbauelement seine Empfindlichkeit früher als die Referenz. Eine Rotverschiebung des Lampenspektrums verändert Test- und Referenzstrom in unterschiedlichen Verhältnissen, auch wenn die gesamte Bestrahlungsstärke gleich bleibt. Die Kurven wurden für Lehrzwecke erstellt; das reale Referenzspektrum steht im vorhergehenden Physikkapitel.

Die Korrelation bei Unsicherheiten darf nicht übersehen werden

Daher gilt für die Effizienz $\eta = P_{\max}/(GA)$, dass eine logarithmische, kleine Änderung $d\eta/\eta = dP/P - dG/G - dA/A$ ist. Bei Unabhängigkeit addieren sich die Varianzen; bei gemeinsamer Kalibrierung oder gemeinsamer geometrischer Methode sind auch Kovarianzterme vorhanden. Der allgemeine Ausdruck lautet: für eine Ausgabe $y = f(x)$ und eine Kovarianzmatrix U_x ist $u_y^2 = \text{Gradient}(f) \text{ transponiert} \times U_x \times \text{Gradient}(f)$.

[R04]

Der Vergleich von zwei Messungen, die mit derselben Lampe am selben Tag durchgeführt werden, kann dazu führen, dass sich einige gemeinsame Fehler bei der Berechnung der Differenz teilweise aufheben; bei der absoluten Effizienz bleibt derselbe Fehler bestehen. Daher sind die Aussagen „die Differenz zwischen den beiden Zellen ist sehr gut bekannt“ und „beide wurden mit der gleichen Genauigkeit auf internationaler Ebene kalibriert“ unterschiedlich. Die Standardabweichung der Wiederholungen repräsentiert nicht die gesamte Unsicherheit der Gerätekalibrierung.

Selbsttest

1. Erhöht die Normalisierung derselben Zelle mit einer kleineren Fläche die physikalische Leistung? Nein. Die Leistung bleibt gleich; J und der berechnete Wirkungsgrad werden künstlich erhöht. Die Flächendefinition der Messung muss korrigiert werden.

2. Welche der folgenden Kennwerte stellt die grundlegende Leistung für das Gerät dar, bei dem im Rückwärtsscan 24 % und bei der MPP-Verfolgung 21 % gemessen wurde? Die Bedingungen und die Dauer werden angegeben, und das Ergebnis wird auf der Grundlage eines stabilen MPP-Wertes ermittelt; das Ergebnis des Scans wird zusätzlich als dynamisches Verhalten dargestellt.

3. Kann man sagen, dass es sich um einen unmittelbar festgestellten Sammelverlust handelt, wenn der EQE-Strom um 8 % niedriger ist als der J-V-Strom? Nein. Zuerst werden die spektrale Kalibrierung, die Fläche, der Wellenlängenbereich, die Vorspannung und die Gerätehistorie abgeglichen; anschließend werden die optischen und elektrischen Verluste analysiert.

Warum werden Vorspannung und Verkabelung dokumentiert?

Das Anlegen einer bestimmten Spannung an ein Bauelement vor der Messung wird als **Vorspannung** bezeichnet. Insbesondere bei Strukturen, die eine langsame Ladung oder Ionenbewegung aufweisen, kann diese Vorbereitung den internen Zustand zu Beginn des Messvorgangs verändern. Auch die Verweilzeit unter Licht sollte auf ähnliche Weise erfasst werden. Die Verwendung derselben Messgeschwindigkeit führt nicht automatisch zu einer Angleichung unterschiedlicher Anfangszustände.

Die Verkabelung beeinflusst, ob die vom Messgerät angezeigte Spannung tatsächlich der Spannung an den Anschlüssen der Zelle entspricht. Das Ziel einer Vierleiter-Verbindung ist es, den Spannungsabfall aufgrund des Widerstands im stromführenden Kabel mithilfe separater Spannungsmessanschlüsse zu isolieren. Das Ändern der Temperatur, der Fläche und der Verbindung der Probe nach der Kalibrierung des Lichts mit einer Referenzzelle kann andere Glieder der Messkette beeinflussen. Daher besteht die Kalibrierung nicht nur aus einem einzelnen Zertifikat; sie wird durch die Einhaltung der korrekten Einsatzbedingungen vervollständigt.

Charakterisierung: Welche Frage beantwortet welches Werkzeug?

Die Charakterisierung ist eine indirekte Messung einer nicht direkt beobachtbaren Größe

Charakterisierung ist die Definition der Struktur, Zusammensetzung und Funktionsweise einer Probe anhand messbarer Signale. Die Geräte liefern meist keine direkte Antwort wie „Defektdichte“ oder „gute Grenzfläche“. Stattdessen werden Lichtintensität, Elektronenenergie, Beugungswinkel oder elektrische Reaktion gemessen. Mithilfe eines Modells verknüpfen wir dieses Signal mit einer physikalischen Eigenschaft. Wenn dasselbe Signal durch mehrere verschiedene Mechanismen erzeugt werden kann, spricht man von einem **Umkehrproblem**.

XRD ist die Röntgenbeugung. Die Anordnung der Kristallatome verstärkt Wellen, die in bestimmten Winkeln gestreut werden; die Positionen und Formen der Peaks liefern Informationen über die Struktur. **SEM** ist ein Rasterelektronenmikroskop, das die Morphologie mithilfe von Signalen, die von der Oberfläche emittiert werden, abbildet. **AFM** ist ein Rasterkraftmikroskop, das die Oberfläche mit einer Sonde abtastet. Wir können die hellen Bereiche im Mikroskopbild nicht automatisch verschiedenen chemischen Substanzen zuordnen; die Art des Signals, die Ladung und die Topographie können das Bild ebenfalls beeinflussen.

Energie, Lumineszenz und elektrische Reaktion

XPS ist die Röntgenphotoelektronenspektroskopie: Durch die Analyse der Energien der emittierten Elektronen werden insbesondere Informationen über die elementare Zusammensetzung und den chemischen Zustand der Oberfläche gewonnen. **UPS** konzentriert sich, in ähnlicher Weise unter Verwendung von ultravioletterem Licht, auf Eigenschaften wie Valenzzustände und die Austrittsarbeit. Die Tiefe, die mit diesen Methoden untersucht wird, und die Vorbereitung der Oberfläche sind von Bedeutung; die Oberflächenzusammensetzung ist möglicherweise nicht repräsentativ für den gesamten Film.

PL (Photolumineszenz) ist die Lichtemission eines durch Licht angeregten Materials. **EL** (Elektrolumineszenz) ist die Lichtemission, die durch einen elektrischen Strom angeregt wird. **Zeitaufgelöste PL** verfolgt, wie sich das Signal nach einer kurzen Anregung verändert. **Impedanzspektroskopie** misst die frequenzabhängige Antwort auf eine kleine, variable elektrische Anregung; Modelle werden verwendet, um

Widerstand, Ladungsakkumulation und langsame Prozesse zu trennen. Die Frequenz ist die Anzahl der Zyklen pro Sekunde. Die Anpassung eines äquivalenten Schaltkreises an die Daten beweist nicht, dass jedes Element darin einem einzelnen, realen Mechanismus entspricht.

Synthetische Diagnose: Nach einer Oberflächenbehandlung verdoppelt sich die PL. Eine mögliche Erklärung ist eine geringere nichtstrahlende Rekombination. Allerdings können auch eine stärkere Absorption des Anregungslichts oder eine größere Emission von Licht, das den Detektor erreicht, das Signal verstärken. Wenn wir die absorbierte Anregungsleistung und die optische Geometrie kontrollieren und mit einer geeigneten elektrischen Messung in Beziehung setzen, wird die Interpretation verbessert. Das Aufschreiben der beiden Erklärungen, die wir vor der Auswahl des Instruments unterscheiden möchten, verwandelt die Messliste in eine wissenschaftliche Fragestellung.

Verständniskontrolle: Ein einziger Peak, ein einziges Ergebnis?

Eine Zunahme der Intensität eines XRD-Peaks bedeutet nicht immer eine größere Menge an Zielmaterial; die Kristallorientierung kann ebenfalls eine Rolle spielen. Eine Verbesserung der Bildqualität in einem SEM-Bild allein gibt keine Auskunft über die Einfangrate der Defekte. Fügen Sie jeder Aussage die Frage hinzu: „Welches Signal wurde mit dem Gerät gemessen, und welche Eigenschaft wurde mit welchem Modell extrahiert?“

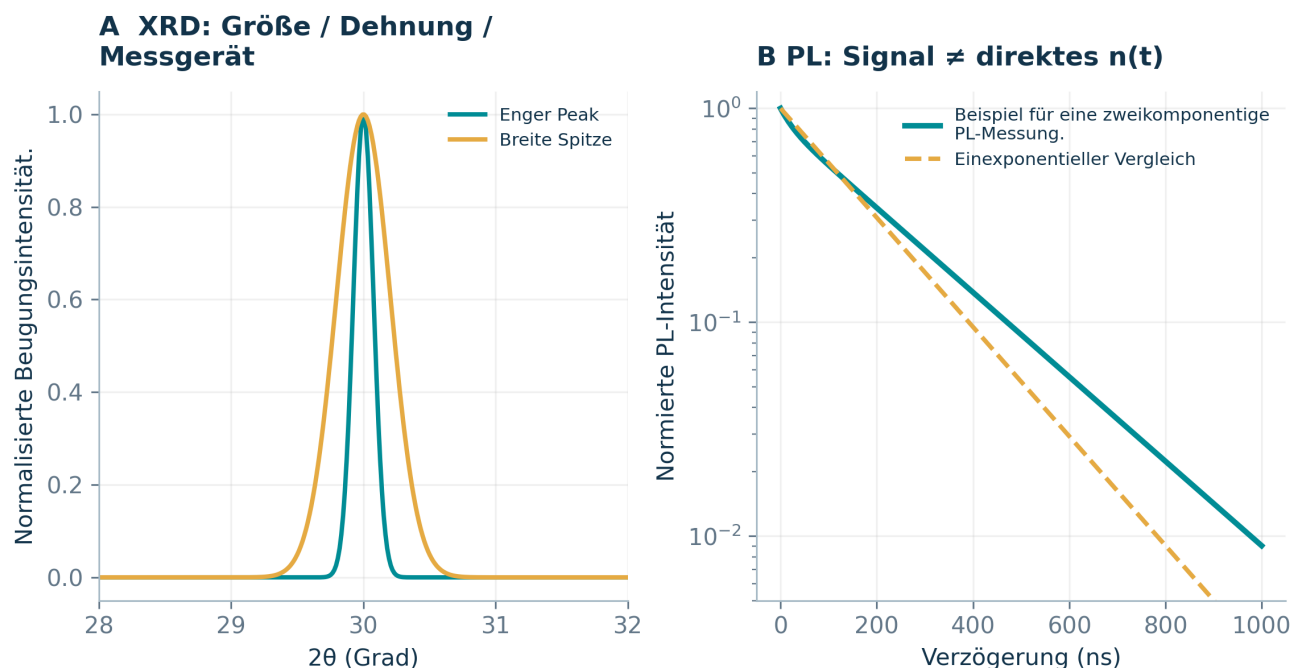


Abbildung 32. Das Auslesen eines Signals erfordert ein physikalisches Vorwärtsmodell. Die synthetischen XRD-Peaks in Panel A haben unterschiedliche Breiten; sie bestimmen nicht allein die Korngröße. Die synthetischen PL-Kurven in Panel B vergleichen ein- und zweikomponentielle Formen. Es ist nicht zwingend erforderlich, dass die PL-Intensität und die überschüssige Ladungsträgerdichte die gleiche Zeitkonstante aufweisen. [R08]

Die Leistungsfähigkeit eines Forschungsprogramms wird nicht allein an der Anzahl der verwendeten Bauelemente gemessen. Die Leistungsfähigkeit ergibt sich aus der gegenseitigen Ergänzung von Messungen, die dieselbe Hypothese über verschiedene physikalische Kanäle hinweg überprüfen. Aussagen wie „größere Korngröße“, „längere Lebensdauer“ oder „höhere Bindungsenergie“ werden erst dann zu wissenschaftlicher Information, wenn klar definiert ist, was gemessen wird, was aus dem Modell abgeleitet wird und welche alternativen Erklärungen noch offen sind. Material, halbes Bauelement, vollständiges Bauelement und gealtertes Bauelement sind verschiedene Beispielklassen; zwischen diesen wird nicht einfach verglichen.

Kristallstruktur und Morphologie

Die Röntgenbeugung (XRD) misst das Beugungsmuster, das auf die periodische Anordnung der Atome zurückzuführen ist. Die Bragg-Gleichung, $n\lambda = 2d \sin\theta$, stellt eine Beziehung zwischen dem Beugungswinkel und dem interplanaren Abstand her. Die Peakposition ist ein Maß für die Gitterabstände, die Intensitätsverteilung ist empfindlich gegenüber der atomaren Anordnung und der Textur, und die Breite hängt von Faktoren wie der Geräteauflösung, der Größe des kohärenten Bereichs und der Mikrospannung ab. Eine Verengung eines Peaks bedeutet nicht automatisch, dass „die Defekte reduziert wurden“. In der Scherrer-Näherung ist die Größe der kohärente Beugungsbereich; sie wird nicht automatisch mit der geometrischen Korngröße gleichgesetzt, die im SEM beobachtet wird.

In Dünnschichten kann eine bevorzugte Orientierung zu einer Abschwächung bestimmter erwarteter Peaks führen. Das Ergebnis „kein zusätzlicher Peak“ beweist nicht, dass keine sekundäre Phase unterhalb der Nachweisgrenze vorhanden ist oder dass keine amorphe Komponente existiert. Eine gute Analyse umfasst Substrat-, Elektroden- und Leerladungsträgermessungen; gegebenenfalls werden diese durch eine vollständige Musteranpassung, Standardproben und unabhängige Messungen der chemischen Zusammensetzung ergänzt. Bei der Auswahl eines strukturellen Modells ist es möglich, eine Musteranpassung mit einer großen Anzahl von freien Parametern durchzuführen, wobei auch die chemische Plausibilität und die parametrische Unsicherheit kontrolliert werden.

GIWAXS ermöglicht die Bestimmung der Orientierungsverteilung und des Bildungsprozesses von Dünnschichten, indem die breitwinkelige Streuung mit einem kleinen Einfallswinkel auf die Oberfläche gemessen wird. Die Differenz zwischen einem Ring und einem Bogen enthält Informationen über die Orientierung; eine auf eine einzelne Richtung reduzierte Kurve stellt nicht das vollständige zweidimensionale Muster dar. In-situ-Messungen können zeigen, wann während des Lösungsmittelentfernens, der Bildung von Zwischenphasen und des Ausglühens die

Kristallisation stattfindet. Eine Studie, in der Vorläufer mit einem Überschuss an PbI_2 untersucht wurden, ist ein konkretes Beispiel dafür, wie GIWAXS mit Mikroskopie und Informationen über die Ladungsträgererfassung kombiniert wird, um die Leistungsänderung zu verstehen. Die methodische Lehre hier ist, dass die Auswirkungen eines Zusatzes nicht nur anhand des endgültigen XRD-Musters des fertigen Films abgelesen werden sollten. [R11]

Das SEM zeigt die Oberflächenmorphologie und die Schichten im Querschnitt. Die Probenvorbereitung, Querschnittsschäden, die durch den Elektronenstrahl verursachte Degradation und die Bildgebungsschwellenwerte können die Ergebnisse beeinflussen. Das AFM misst die Höhen topografie; die Scanfläche, die Form der Spitze und die Glättungsmethode können die RMS-Rauheit verändern. Ein einzelnes „gutes“ SEM-Bild repräsentiert nicht die gesamte Probe. Der Forscher nimmt mehrere Bilder von zufälligen oder vordefinierten Positionen auf, erfasst die Größenverteilung und wendet dieselben Analyseparameter auf die Kontrollgruppe an. In einem Querschnitt, in dem ein Film mit einer Dicke von 500 nm sichtbar ist, können lokale Dünnstellen und die Statistik der Nadellöcher aussagekräftiger sein als die durchschnittliche Dicke.

Oberflächenchemie und Energieniveaus

XPS (Röntgenphotoelektronenspektroskopie) ermöglicht die Bestimmung der Element- und chemischen Zusammensetzung anhand der kinetischen Energie der Photoelektronen. Das Signal ist oberflächenempfindlich; diese Eigenschaft ist ein Vorteil bei der Untersuchung von Grenzflächen, stellt aber eine Einschränkung bei der Bestimmung der Volumen-Zusammensetzung dar. Das Vorhandensein einer oxidierten Schicht auf der Oberfläche bedeutet nicht, dass der gesamte Film oxidiert ist. Die Ladungskorrektur, die Energie-Referenz, der Hintergrund, die Peak-Form und die Einschränkungen der Spin-Bahn-Kopplung müssen explizit angegeben werden. Da während der Ionenätzung Reduktion oder eine bevorzugte Abtragung stattfinden kann, ist auch das Tiefenprofil nicht ausschließlich eine passive Beobachtung. Das praktische XPS-Handbuch des NIST wurde entwickelt, um diese Art der Interpretationsdisziplin von der Messplanung bis zur Berichterstattung zu etablieren. [R07]

Methoden wie die UPS-Methode und die Kelvin-Sonde liefern Informationen über die Arbeitsfunktion und die Energielevel der Oberfläche. Alle Werte, die bei der Erstellung eines Energiediagramms verwendet werden, müssen auf dieselbe Referenz bezogen werden. Es ist nicht zuverlässig, die Arbeitsfunktion eines in Luft hergestellten, einzelnen Films direkt auf eine in Vakuum hergestellte, eingebettete Grenzfläche zu übertragen. Bei Kontakt können Dipole, chemische Reaktionen, Bandbiegungen und die Ausrichtung des Fermi-Niveaus entstehen. Daher ist die Schlussfolgerung „wenn die elektronischen Affinitäten übereinstimmen, ist die Grenzfläche verlustfrei“ ungültig.

Wenn möglich, wird die Grenzflächenbildung bei zunehmender Deckschichtdicke beobachtet; die Messung vor und nach dem Kontakt wird zusammen mit dem Verhalten des Bauelements interpretiert.

Von der Lichtemission zur Ladungsträgerdynamik

PL ist die lumineszierende Rekombination nach optischer Anregung. Die PL-Quantenausbeute ist das Verhältnis der Anzahl der emittierten Photonen zur Anzahl der absorbierten Anregungsphotonen; die Division durch die Anzahl der einfallenden Photonen ergibt eine andere Größe. Die spektrale Detektorantwort, die absorbierte Leistung, die Reabsorption und die Photonenaustrittsgeometrie sind Teil der Messung. Eine Zunahme der rohen PL-Intensität kann auch auf eine stärkere Absorption zurückzuführen sein. Ein nicht normalisierter PL-Vergleich von zwei Proben mit unterschiedlicher Dicke oder optischer Stapelung ist nicht ausreichend.

TRPL verfolgt die Lumineszenz zeitaufgelöst. In einem einfachen, homogenen Hochinjektionsbeispiel können die Elektronen- und Lochdichten, wenn sie ungefähr gleich sind, mit der Lumineszenzrate Bn^2 , der durch Fallen vermittelte Verlust mit n/τ und der Auger-Verlust mit Cn^3 skaliert werden. Daher kann die Anwendung eines stärkeren Laserpulses auf dasselbe Material die beobachtete Abklingrate verändern. Es ist falsch, die aus einer monoexponentiellen Anpassung resultierende Zeitdauer bedingungslos als „Lebensdauer der Ladungsträger im Material“ zu bezeichnen. Anregungsdichte, Pulsrepetitionsrate, Zeitauflösung des Geräts, Diffusion und Oberflächenrekombination werden gemeinsam betrachtet. Eine methodische Studie zur PL-basierten Perowskit-Charakterisierung beschreibt die Bedingungsabhängigkeit dieser Messungen. [R08]

Beispielhafte Diagnose: Bei einem ungeschützten Film wird eine lange TRPL-Zeit beobachtet, während bei Zugabe einer Elektronentransportschicht eine kurze TRPL-Zeit beobachtet wird. Eine Erklärung ist ein schneller und effizienter Elektronentransport; die andere Erklärung ist ein erhöhter, nicht-strahlender Verlust an der Grenzfläche. Kurz gesagt, welche Erklärung ist die richtige? Unter Leerlaufbedingungen werden die absolute PL/QFLS, die V_{oc} der fertigen Zelle, die Ladungsextraktion im Kurzschluss und die Kontrolle der Oberflächenpassivierung gemeinsam verwendet. Wenn die PL sinkt, wenn ein Kontakt hinzugefügt wird, und gleichzeitig die V_{oc} des Bauelements sinkt, sollte die Erklärung „erfolgreiche Extraktion“ besonders sorgfältig hinterfragt werden.

Elektrolumineszenz (EL) ist die Emission von Licht unter elektrischer Injektion. Unter geeigneten Annahmen der Reziprozität kann eine Beziehung zwischen optischer Sammlung und Emission hergestellt werden; diese steht auch mit dem externen Emissionswirkungsgrad und dem nichtstrahlenden Spannungsverlust zusammen. Rau

etablierte diese Beziehung in seiner Arbeit über Reziprozität mathematisch. [R09] Mit einer konstanten, radiativen Referenz wird $\Delta V_{\text{nonrad}} = -(kT/q) \ln(\eta_{\text{ext}})$ geschrieben. Bei 298,15 K beträgt kT/q ungefähr 25,69 mV: Für $\eta_{\text{ext}} = 1\%$ beträgt der Verlust ungefähr 118 mV, für 0,1 % ungefähr 177 mV. Hierbei ist η_{ext} der im Kontext angegebene externe Emissionswirkungsgrad; die PL-Quantenausbeute des unkontaktierten Films ersetzt diesen Wert nicht automatisch. QFLS ist die Differenz der quasi-Fermi-Niveaus für Elektronen und Löcher im Material; sie muss nicht mit der an den externen Kontakten gemessenen qV_{oc} übereinstimmen.

Elektrische Spektroskopie und falsche Genauigkeit

DLTS verfolgt das thermische Entspannungsverhalten von Fallen nach einem Ladungsimpuls. Aus den temperaturabhängigen Zeitkonstanten werden Aktivierungsenergien und Informationen über die Fallen unter einem geeigneten Modell abgeleitet. Langs ursprüngliche Arbeit etablierte diesen Ansatz anhand von hochfrequenten Kapazitätstransienten. [R10] Die Aktivierungsenergie ist jedoch nicht zwangsläufig die direkte Identifizierung eines einzelnen atomaren Defekts. Mehrere Defekte, Dispersion, Grenzflächeneffekte und Ionenbewegungen können ähnliche Zeitskalen aufweisen. Für die Identifizierung sind Beweise in Form von Temperatur-, Vorspannungs-, Probenvorbereitungs- und unabhängigen Berechnungs-/chemischen Interventionsdaten erforderlich.

Die Impedanzspektroskopie misst $Z(\omega) = \delta V(\omega) / \delta I(\omega)$. Es ist nützlich, die frequenzabhängige komplexe Antwort an ein äquivalentes Schaltbild anzupassen, aber ein einzelner Halbkreis entspricht nicht zwangsläufig einem einzigen physikalischen Mechanismus. Die Anregung sollte gering sein, das Bauelement sollte während der Messung stabil bleiben und die Spannungs-/Lichtgeschichte sollte erhalten bleiben. Die in Perowskiten beobachtete große oder negative Kapazität kann auf die Modulation der elektronischen Injektion durch langsame ionische Veränderungen zurückzuführen sein; daher kann es irreführend sein, den Schaltparameter direkt als eine große dielektrische Konstante zu interpretieren. Ebadi und seine Kollegen haben diese Unterscheidung durch transiente Strommessungen aufgezeigt. [R12]

Beim Übergang vom Signal zum Mechanismus tritt das inverse Problem auf

Ein Charakterisierungsinstrument misst nicht direkt ein „gutes Material“. Die Röntgenbeugung (XRD) erfasst die Streuung von Photonen an der Kristallstruktur, die Röntgenphotoelektronenspektroskopie (XPS) die Energien von Elektronen, die aus der Nähe der Oberfläche emittiert werden, die Photolumineszenz (PL) die Strahlungsrekombination, und die elektrische Messung betrachtet die Ladungsträger- und Verlustkomponente des gesamten Bauelements. Dasselbe mikrophysikalische Phänomen kann mehrere Signale beeinflussen; dasselbe Signal kann von mehreren mikrophysikalischen Phänomenen erzeugt werden.

Bei der Bestimmung einer Scherrer-Kohärenzlänge aus der XRD-Pikbreite ist es wichtig, dass β in Radiant angegeben wird, die Unterscheidung der Geräteausdehnung, die Auswahl des Formfaktors und die Berücksichtigung von Mikrodehnungen erfolgen. Diese Länge muss nicht unbedingt der Größe aller im Mikroskop sichtbaren Körner entsprechen. Die Pikintensität ist nicht nur ein Maß für die Phasenmenge; die bevorzugte Orientierung und die Messgeometrie können variieren. Daher ist es unzureichend, das Wachstum einer einzelnen Pike automatisch in den Satz „Die Kristallinität hat zugenommen“ zu übersetzen.

Warum lässt sich die Lebensdauer nicht direkt aus dem PL-Abklingen ablesen?

Nehmen wir an, in einem homogenen Volumen ist das momentane PL-Signal bei einer einzelnen Injektionsebene proportional zur strahlenden Rekombination: $I_{PL} \approx Bnp$. Da bei geringer Dotierung und geringer Injektion $p \approx p_0$ ist, ist das Signal proportional zu Δn . Wenn $\Delta n = \Delta n_0 \exp(-t/\tau)$, dann klingt auch das PL mit der gleichen Zeitkonstante ab. Bei hoher Injektion, wenn $n \approx p \approx \Delta n$, ist $I_{PL} \approx \Delta n^2$; die gleiche Ladungsträger-Abklingrate ergibt diesmal $\exp(-2t/\tau)$ im PL. Die gemessene exponentielle Zeit kann die halbe Lebensdauer der Ladungsträger sein.

In der Realität beeinflussen Transport, Oberflächenverluste, Photon-Rekombination und die injektionsabhängige Rekombination auch dieses vereinfachte Modell. Ziel dieser Ableitung ist es nicht, jede PL-Kurve mit zwei zu multiplizieren, sondern ein klares Modell für die Beziehung zwischen dem Signal und der gesuchten physikalischen Größe zu entwickeln. Unterschiedliche Anregungsintensitäten, Vorder-/Rückseitenbeleuchtung und die Kontrolle der Passivierung ermöglichen die Validierung dieses Modells. [\[R08\]](#)

Auswahl einer Messung zur Unterscheidung eines Mechanismus

Beobachtung	Mindestens zwei mögliche Erklärungen.	Kontrolle zur Unterscheidung
Die Leerlaufspannung hat zugenommen.	Volumenverlust verringert; Kontaktverlust verringert	PL/QFLS-Vergleich von nacktem Film und Schichtstapel mit Kontakten
FF hat zugenommen.	Der Serienwiderstand wurde reduziert; die Rekombination hat sich verändert.	Suns-Voc/Pseudo-JV und stabiles J-V zusammen
Jsc hat zugenommen.	Optische Generation gestiegen; Sammlung verbessert	EQE, Reflexion und wellenlängenabhängige Sammlung
Die PL-Emission ist erloschen.	Schnellere Ladungsextraktion; ein neuer Verlustpfad	Kontrolle mit selektiven und blockierenden Kontakten; Bauelement-Voc
Das XRD-Peak wurde schmaler.	Die kohärente Zone hat sich vergrößert; die Dehnung hat abgenommen.	Instrumentenkorrektur und Analyse mehrerer Peaks

Die in der Tabelle aufgeführten Messungen sind nicht austauschbar. Beispielsweise führt das Entfernen einer Ladung in einer offenen Schaltung nicht zur Erzeugung eines externen Stroms; die PL-Löschung eines kontaktierten Films sollte nicht direkt als Beweis für eine hohe Leistung interpretiert werden. Der Forscher legt zunächst die Randbedingungen der Messung fest und interpretiert dann das Signal.

Selbsttest

- 1. Kann man sagen, dass mit der Verengung des XRD-Peaks die Lebensdauer der Ladungsträger zunimmt?** Nein. Die Peakbreite beinhaltet strukturelle und gerätespezifische Beiträge; die Ladungsträgerdynamik wird separat gemessen.
- 2. Ist das Abklingen des PL-Signals nach dem Anbringen eines Kontakts ein gutes Zeichen?** Das lässt sich nicht allein beurteilen. Es muss zwischen einer nützlichen Ladungsträgerübertragung und einer schädlichen Rekombination an der Grenzfläche unterschieden werden.
- 3. Beweist eine sehr gute Impedanzanpassung die Funktionsweise des Mechanismus?** Nein. Alternative Schaltkreise und physikalische Modelle müssen getestet und anhand unabhängiger Daten im Zeitbereich und unter verschiedenen Betriebsbedingungen unterschieden werden.

Bildgebung, Ladungsextraktion und kontrollierte Intervention

Heterogenität bedeutet, dass nicht alle Bereiche einer Probe die gleichen Eigenschaften aufweisen. Dicke, chemische Zusammensetzung oder elektrische Eigenschaften können variieren; die lokale Information, die durch Mikroskopie gewonnen wird, wird daher durch die Messung der gesamten Fläche ergänzt.

Ladungsträgerextraktion ist die Übertragung des erzeugten Ladungsträgers vom Absorber zu einer benachbarten Schicht oder zu einem externen Stromkreis. Wenn die Extraktionsrate zunimmt, kann die Lumineszenz abnehmen; die gleiche Abnahme kann jedoch auch durch eine erhöhte Rekombination verursacht werden. Eine einzelne PL-Kurve kann diese beiden Erklärungen nicht unterscheiden.

Mit **Intervention** ist eine kontrollierte Veränderung gemeint, die eine der folgenden Annahmen speziell testet. Beispielsweise wird bei einem der Filme eine Passivierung durchgeführt, während die optischen Bedingungen des anderen Films angepasst werden, um ihn als Kontrollprobe zu verwenden. Anschließend werden Lumineszenz, Spannung und die extrahierte Ladung gemeinsam verglichen. Das **Vorwärtsmodell** berechnet das erwartete Signal basierend auf dem angenommenen Mechanismus; das **inverse Problem** untersucht, welche Mechanismen anhand des gemessenen Signals möglich sind. Eine konzeptionelle Beispielkurve ersetzt keine Messdaten einer realen Probe.

Beständigkeit: Von der Stundenkurve zur Lebensdauer

Lebensdauer ist eher eine Definition eines Maßstabs als ein konkretes Datum

Ob ein Modul als „langlebig“ bezeichnet werden kann, hängt davon ab, wie gut es seine jeweilige Funktion aufrechterhält. Die anfängliche maximale Leistung kann im Laufe der Zeit abnehmen, die Isolierung kann sich verschlechtern, und die Schichten können sich trennen. Die Grenzwerte für diese Ergebnisse sind unterschiedlich. **Degradation** ist die zeitliche Veränderung der Eigenschaften; ein **Ausfall** liegt vor, wenn ein definierter Funktions- oder Sicherheitsstandard nicht mehr erfüllt wird. Ein langsamer Leistungsverlust und ein plötzlicher elektrischer Ausfall können zu unterschiedlichen Lebensdauerverteilungen führen.

T80 ist die Zeit, die benötigt wird, um auf 80 % der gewählten Anfangsleistung abzusinken. Es sollte angegeben werden, ob es sich bei dem Anfang um die erste Messung oder um das Ende einer Anlaufphase handelt. **Synthetisches Beispiel:** Wenn der Anfangswert 10 W beträgt, beträgt der Schwellenwert 8 W. Wenn nach 200 Stunden 8,5 W und nach 300 Stunden 7,5 W gemessen werden und wir eine lineare Änderung zwischen den beiden Punkten annehmen, beträgt T80 ungefähr 250 Stunden. Wenn die tatsächliche Änderung nicht linear ist, handelt es sich hierbei nur um eine Schätzung; es sind häufigere Daten oder ein geeignetes Modell erforderlich.

Was schreiben wir, wenn nach dem Test kein Fehler aufgetreten ist?

Wenn eine Probe nach einem 1000-stündigen Test immer noch 90 % Leistung liefert, wird nicht „T80 = 1000 Stunden“ angegeben. Der Schwellenwert wurde innerhalb dieser Zeit nicht erreicht; man könnte sagen: „Bei diesen Testbedingungen ist T80 länger als 1000 Stunden“. Solche Aufzeichnungen, bei denen wir den Wert nicht als exakte Lebensdauer, sondern als Grenze betrachten, werden als **zensierte Daten** bezeichnet. Das stille Entfernen einer Probe, die vorzeitig aus dem Test genommen wurde, aus dem Datensatz kann die Haltbarkeit überbewerten.

Beschleunigte Alterung ist die Untersuchung eines Degradationsprozesses in kürzerer Zeit durch hohe Temperaturen, Feuchtigkeit, Licht oder elektrische Beanspruchung. Die **Aktivierungsenergie** ist ein Modellparameter, der die Temperaturabhängigkeit der gewählten Prozessgeschwindigkeit beschreibt. Wenn der

gleiche Mechanismus wirksam ist, können die Geschwindigkeiten bei verschiedenen Temperaturen in Beziehung gesetzt werden. Wenn jedoch bei hoher Temperatur eine neue Reaktion einsetzt, beschleunigen wir möglicherweise nicht mehr denselben Degradationsprozess, sondern lösen einen anderen Fehler aus. Es ist nicht korrekt, eine Teststunde mit einem universellen Koeffizienten in ein Feldjahr umzurechnen.

ISOS ist eine Familie definierter Forschungsprotokolle, die insbesondere bei der Stabilitätsbewertung von sich entwickelnden Zellen verwendet werden. Die **IEC-Qualifikationstests** bewerten, ob ein bestimmtes Design die in den jeweiligen Standards festgelegten Bedingungen erfüllt. Diese Tests stellen unterschiedliche Anforderungen. Das Bestehen eines Qualifikationstests allein ist keine Garantie für eine bestimmte Lebensdauer unter bestimmten Feldbedingungen. Im Folgenden werden der Zweck des Tests, die Stressbedingungen und der gemeldete Schwellenwert getrennt voneinander betrachtet. [R05] [R06]

Verständniskontrolle: Kann eine Erholung einen Ausfall verdecken?

Wenn nach einer Ruhephase im Dunkeln ein Teil der Leistung wiederhergestellt wird, unterscheidet zwischen reversiblen Veränderungen und irreversiblen Verlusten. Wenn nur Messungen nach der Ruhephase dokumentiert, kann die tatsächliche Leistung während des Betriebs verschleiern. Der Betrieb, die Ruhephasen und die Messhistorie sollten in derselben Zeitachse erfasst werden.

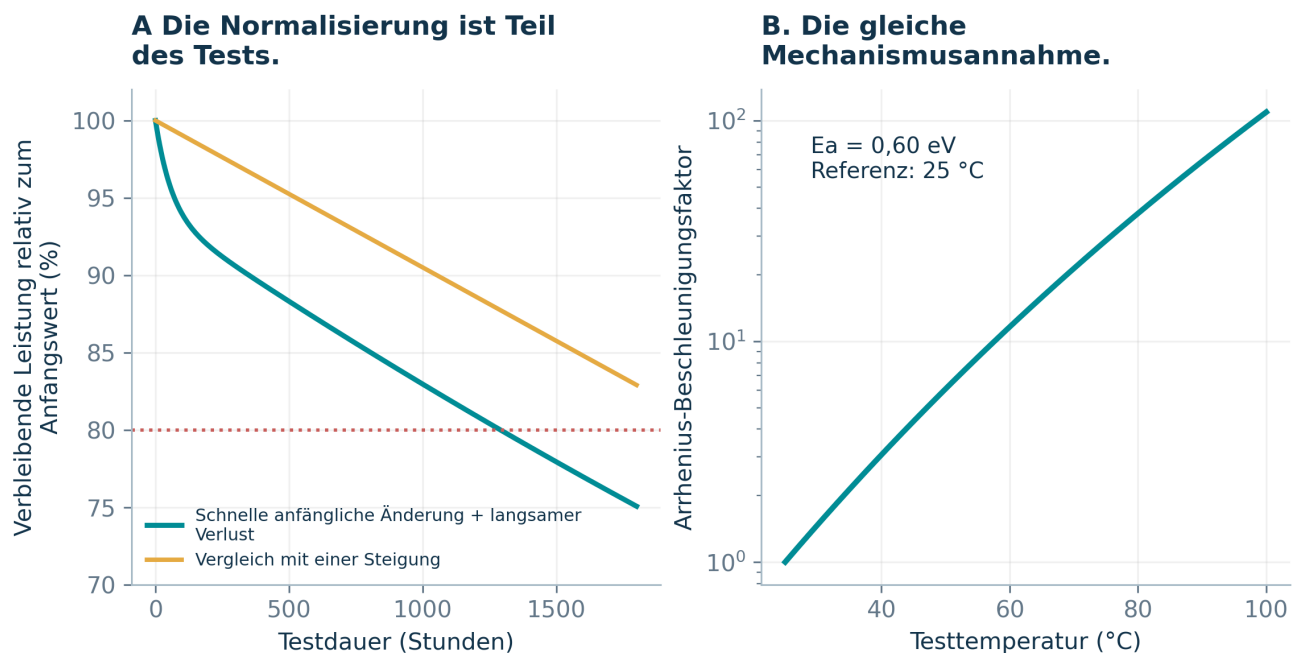


Abbildung 33. Die Stabilität kann anhand der Zeit und des zugrunde liegenden Mechanismus analysiert werden. Panel A zeigt zwei synthetische Leistungskurven, eine mit und eine ohne anfängliche Änderung; Panel B zeigt den Arrhenius-Faktor mit einer Aktivierungsenergie von 0,60 eV. Die bei 25 °C referenzierte Beschleunigungskurve basiert auf der Annahme, dass der gleiche Mechanismus anhält. [R05] [R16]

Die Leistung eines Bauelements beschreibt, was es zu einem bestimmten Zeitpunkt leistet; die Beständigkeit gibt an, inwieweit es diese Leistung über die Zeit aufrechterhalten kann. Bei der Entwicklung von Solarzellen vereinen sich ein hoher anfänglicher Wirkungsgrad und eine langsame Degradation in einer gemeinsamen Zielfunktion: die gesamte erzeugte Energie. Ein Bauelement, das anfangs eine höhere Leistung aufweist, aber schnell abbaut, kann weniger Strom erzeugen als ein bescheidenes, aber stabileres Bauelement. Daher sollte die Untersuchung der Beständigkeit nicht als ein „zusätzlicher Test“ betrachtet werden, der am Ende durchgeführt wird, sondern sollte in die Gestaltung von Material, Grenzfläche, Metallkontakt, Verkapselung und Betriebsbedingungen einbezogen werden.

Es gibt nicht nur eine Ursache für den Abbau

Feuchtigkeit und Sauerstoff können die aktive Schicht erreichen, die Grenzflächenchemie verändern oder die Metallkorrosion beschleunigen. Die Wärmediffusion beeinflusst die Ionenbewegung, die Reaktionsgeschwindigkeiten und die mechanische Spannung. Licht kann durch die Erzeugung neuer Ladungsträger photochemische Prozesse ermöglichen, die im Dunkeln nicht sichtbar sind. Eine elektrische Vorspannung kann die Verteilung geladener Defekte und die Grenzflächenreaktionen verändern. Eine Komponente, die unter bestimmten Bedingungen für sich genommen sicher ist, kann in Kombination mit anderen Belastungen unsicher werden: Das Ergebnis „temperaturstabil im Dunkeln“ bedeutet nicht, dass sie auch „stabil im Betrieb unter Lichteinwirkung“ ist.

Bei Siliziummodulen werden Zellrisse, Verbindungsprobleme, Degradation der Verkapselung und der Rückseitenfolie, Korrosion und potenziell bedingte Effekte untersucht; bei Dünnschicht- und aufkommenden Technologien werden zusätzlich verschiedene Migrations- und Grenzflächenmechanismen erforscht. Ihre Häufigkeit variiert je nach Technologie, Produktionscharge und Umgebung. Die Studie über Modulfehler der IEA PVPS stellt einen umfassenden institutionellen Rahmen dar, der zeigt, dass Fehler nicht nur anhand der elektrischen Kennlinie, sondern auch durch visuelle Inspektion und Bildgebung untersucht werden sollten. Daraus wird keine universelle, einheitliche Degradationsrate abgeleitet. [\[R15\]](#)

Es muss ein Mechanismus eingeführt werden, der die Korrelation zwischen der Existenz ionischer Beweglichkeit in Perowskiten und dem Ausfall des Bauelements erklärt. Mobile Spezies können das lokale Feld verändern, sich an den Grenzflächen anreichern oder an chemischen Reaktionen teilnehmen. Die Berechnung der Ionenbewegung und die experimentelle Untersuchung der Kinetik durch Eames und seine Kollegen stellen frühe Beispiele für die Verknüpfung der atomaren Barriere mit der Zeitachse des Bauelements dar. Allerdings bestimmt eine einzelne

Migrationsbarriere nicht die Lebensdauer des gesamten Bauelements: Die Dichte mobiler Defekte, die Konnektivität des Pfades und die tatsächlichen Randbedingungen sind ebenfalls erforderlich. [R13]

ISOS und IEC verfolgen nicht dasselbe Ziel

Der ISOS-Ansatz zielt darauf ab, dass Forschungsproben unter verschiedenen Stressbedingungen wie Lagerung, Licht, Temperatur und Umgebungsbedingungen auf vergleichbarere Weise bewertet werden. Es reicht nicht aus, nur den Namen des Tests anzugeben; es müssen auch die Atmosphäre, die relative Luftfeuchtigkeit, die Probenstemperatur, das Lichtspektrum, die elektrische Last, die Verkapselung, der Messbereich und die Anzahl der Proben angegeben werden. Der für Perowskite angepasste Konsens-Text befasst sich insbesondere mit den spezifischen Problemen dieser Materialien, wie z. B. dynamischem Verhalten und Rückgewinnung. Das Altern eines funktionierenden Geräts unter MPP ist ein anderes Experiment als das Halten im Leerlauf. [R05]

IEC 61215 ist eine Familie von Normen, die sich auf die Konstruktionsfähigkeit und die Typgenehmigung von bodengebundenen Photovoltaikmodulen bezieht. Der offene IEC-Katalog stellt klar, dass diese Tests nicht als quantitative Schätzung der Modullebensdauer interpretiert werden dürfen. Daher bedeutet das Bestehen einer Testreihe nicht, dass „diese Technologie so viele Jahre funktionieren wird“. Ein bestimmtes Moduldesign, eine Materialliste und Änderungen in der Produktion sind im Kontext der Eignung von Bedeutung. In diesem Buch wird der explizite Umfang der Norm bestätigt; es werden keine nicht in der vollständigen Fassung enthaltenen Artikelnummern, obligatorischen Testschwellenwerte oder Zertifizierungsanforderungen erfunden. [R06]

Ein gutes Forschungsprogramm untersucht zunächst den Mechanismus auf Zellebene und testet ihn anschließend in einem verpackten Mini-Modul und einem vollständigen Modul. Eine kleine Zelle mit offenen Kanten und ein gut verkapseltes Modul weisen unterschiedliche Wege für das Eindringen von Feuchtigkeit auf. Eine Verkapselung, die in einem kleinen Beispiel gut funktioniert, kann in einem großen Panel hinsichtlich des Verhältnisses von Kantenlänge zu Fläche, der thermischen Ausdehnung und der mechanischen Belastung anders abschneiden. Glas, Klebstoff und Dichtungsmaterial sind ebenfalls Teil des Designs in Bezug auf optische Verluste, chemische Wechselwirkungen und Recycling.

T80, Erholung und zensierte Daten

T80 gibt den Zeitpunkt an, zu dem die Leistung auf den Wert der ausgewählten anfänglichen Referenz, 80 %, sinkt. Es sollte klar angegeben werden, ob sich „Anfang“ auf die erste Messung, das erste stabile Plateau oder den Wert nach dem ersten starken Abfall bezieht. Unterschiedliche Definitionen des Anfangs können zu unterschiedlichen T80-Werten für dasselbe Gerät führen. Wenn die tatsächliche Anfangsleistung verborgen und nur eine normalisierte Kurve dargestellt wird, wird die Energiebewertung beeinträchtigt. Sowohl die absolute Leistung/der Wirkungsgrad als auch die normalisierte Leistung sollten dargestellt werden; Pausen, Messunterbrechungen und die Rückgewinnung im Dunkeln sollten sichtbar bleiben.

Wenn ein Gerät nach 1000 Stunden noch 92 % seiner anfänglichen Leistung aufweist und während der Beobachtungszeit den in der gewählten T80-Definition festgelegten Schwellenwert nicht erreicht, kann man sagen: „T80 > 1000 Stunden unter diesen Testbedingungen“; der genaue Wert von T80 wird jedoch nicht gemessen. Es reicht nicht aus, nur den Endpunkt zu kennen: Das Gerät könnte zuvor unter den Schwellenwert gefallen und sich dann wieder erholt haben. Wenn das Experiment endet, bevor der Schwellenwert erreicht wird, ist die Zeitbeobachtung rechtsseitig zensiert. Das Entfernen der schlechtesten Beispiele aus der Messung und das anschließende Berechnen des Durchschnitts der verbleibenden Werte erzeugt eine künstliche Beständigkeit. Es muss dokumentiert werden, wann und aus welchem Grund Geräte, die ausfallen, aus dem Datensatz entfernt wurden. Wenn ein Gerät vollständig elektrisch ausgefallen ist, ist es nicht korrekt, dies einfach als einen fehlenden Wert in einer normalen Leistungsmessung darzustellen.

Beispiel für die Energieerzeugung: Zelle A soll über 1000 Stunden linear von 24 % zu 18 % und Zelle B von 22 % zu 21 % absinken. Bei einer konstanten Bestrahlungsstärke von 1000 W/m^2 betragen die durchschnittlichen Wirkungsgrade jeweils 21 % und 21,5 %. Die Energie pro Quadratmeter beträgt ungefähr 210 bzw. 215 kWh. Die anfänglich leistungsstärkere Zelle A hat in diesem begrenzten Szenario weniger Energie erzeugt. Wenn die tatsächliche Kurve nichtlinear ist, ist eine numerische Berechnung des Zeitintegrals erforderlich, wobei auch Dunkelphasen und Änderungen der Strahlungsintensität berücksichtigt werden.

Valide Übertragung beschleunigter Tests

Für einen einfachen thermischen Prozess kann die Geschwindigkeit mit $k(T) = k_0 \exp[-E_a/(k_B T)]$ modelliert werden. Wenn derselbe Mechanismus vorherrscht, beschleunigt ein hoher Temperaturprozess die Reaktion. Das Überwinden eines Phasenübergangs, das Versetzen des Verkapselungsmaterials in einen anderen Zustand oder das Auslösen einer neuen Reaktion kann jedoch die Ergebnisse von Labortests von den Mechanismen im Feld abkoppeln. Es ist nicht möglich, die Aktivierungsenergie aus einem einzigen Temperaturpunkt zu bestimmen. Bei mehreren Temperaturen sollte das Modell mit ausreichender Anzahl von Proben und ähnlichen Fehlerbildern getestet werden; die Auswirkungen von Feuchtigkeit, Licht und Spannung werden separat bewertet.

In der ursprünglichen Berechnung sei $E_a = 0,60$ eV, die Umgebungstemperatur 298,15 K und die Testtemperatur 358,15 K. $AF = \exp[(E_a/k_B) \times (1/298,15 - 1/358,15)]$ ist ungefähr 50. Dies ist jedoch nur der Geschwindigkeitsfaktor, wenn der angenommene einzelne Mechanismus gültig ist. Die automatische Umrechnung von 1000 Stunden in eine Betriebsdauer von 50.000 Stunden ignoriert den unbekannten Einsatzzyklus und andere Ausfallursachen. Wenn E_a selbst eine Unsicherheit aufweist, ändert sich AF exponentiell; die Lebensdauer sollte daher nicht als einzelne Zahl, sondern als Modell mit der entsprechenden Unsicherheit angegeben werden.

Feldversuche sind notwendig, um das Labormodell zu testen. Der Tag-Nacht-Zyklus, die saisonalen Temperaturen, die Verschmutzung, die Niederschlagsmenge, das Lichtspektrum und die tatsächliche elektrische Last wirken zusammen. Der IEA PVPS-Bericht über die Lebensdauer behandelt die technischen, wirtschaftlichen und benutzerbezogenen Aspekte der Definition des „Endes der Lebensdauer“ sowie die Beziehung zwischen physikalischen Modellen und der Systemenergiebilanz. [R16] Als didaktische Übung wird zunächst die Fehlerdefinition festgelegt, und anschließend wird verglichen, ob in Labor- und Feldproben die gleiche chemische/elektrische Signatur auftritt. Der Beschleunigungsfaktor wird erst dann übertragen, wenn eine Übereinstimmung nachgewiesen wurde.

Wahl von Ausgangswert und Schwelle bei der T80-Berechnung

Sei $P(t)$ die Zeitreihe der Leistung. Wenn $p(t) = P(t)/P(0)$ relativ zum Anfangswert definiert wird, kann T80 als die Zeit angegeben werden, zu der $p(t)$ zum ersten Mal den Wert 0,8 erreicht. Eine erneute Normalisierung nach einer schnellen anfänglichen Änderung führt zu einem anderen Messwert; diesem sollte nicht der gleiche Name gegeben und der Anfangswert nicht verschleiert werden. Wenn die Probe am Ende des Tests immer noch über dem Schwellenwert liegt, stellt der Endwert keine Lebensdauerabschätzung dar. Wenn der Schwellenwert nie überschritten wurde, kann nur gesagt werden, dass T80 größer als die Beobachtungsdauer ist.

Wenn eine Probe im Dunkeln teilweise wiederhergestellt wird, erzeugt ein kontinuierlicher Beleuchtungszyklus (Tag-Nacht-Zyklus) nicht die gleichen Daten. Temperatur, Feuchtigkeit und elektrische Ladung sind ebenfalls keine unabhängigen Teile des Tests; eine kann die Wirkung der anderen beeinflussen. ISOS-Bedingungen sind nützlich für vergleichbare Forschungsberichte; der Zweck und der Umfang der IEC-Modulqualifikationstests sind jedoch unterschiedlich. Die Standardüberschrift im Katalog ersetzt nicht die nicht gelesenen normativen Abschnitte. [R05] [R06]

Die Arrhenius-Kurve sollte nicht zu einem falschen Gefühl der Sicherheit führen

Für einen einzelnen effektiven Mechanismus sei die Rate $k_{deg} = k_0 \exp[-E_a/(k_B T)]$. Der Beschleunigungsfaktor zwischen zwei Temperaturen ergibt sich durch Subtraktion der Logarithmen:

$$AF = \frac{k_{test}}{k_{use}} = \exp \left[\frac{E_a}{k_B} \left(\frac{1}{T_{use}} - \frac{1}{T_{test}} \right) \right]. \quad (I.20.1)$$

Für $E_a = 0,60$ eV, eine Betriebstemperatur von 25 °C und eine Testtemperatur von 85 °C wird ein Faktor von etwa 50 gefunden. Bevor jedoch eine Lebensdauer angegeben wird, muss geprüft werden, ob bei beiden Temperaturen der gleiche Abbauprozess vorherrscht, da dieser Faktor im Laufe der Zeit multipliziert wird. Wenn bei hoher Temperatur eine neue Phase, eine andere Elektrodenreaktion oder ein anderer Feuchtigkeitsspfad auftritt, kann die Annahme einer einzigen E_a -Übertragung ungültig werden. Selbst wenn bei mindestens drei Temperaturen eine konsistente Steigung beobachtet wird, repräsentiert dies nicht alle Feldbedingungen; eine Mechanismenanalyse und die Verknüpfung mit realen Felddaten sind erforderlich. [R16]

Bei der Lebensdauer ist nicht nur der Mittelwert, sondern auch die Verteilung von Bedeutung. Eine geringe Anzahl von frühen Ausfällen kann in der durchschnittlichen

Leistungskurve verborgen bleiben. Die detaillierte Aufzeichnung der Seriennummern pro Probe, die Dokumentation der aus dem Test ausgeschlossenen oder deren Messung abgebrochenen Proben sowie die Klassifizierung der Ausfallmuster bestimmen die Reproduzierbarkeit der Forschung.

Selbsttest

1. **Beweist ein Leistungserhalt von 95 % nach 1000 Stunden eine Lebensdauer von 25 Jahren?** Nein. Dies ist nur eine Beobachtung unter den angegebenen Prüfbedingungen; für die Übertragung auf den Feldeinsatz müssen Mechanismus und Beschleunigungsmodell validiert werden.
2. **Warum sollte T80 mit einer Anfangsdefinition angegeben werden?** Eine erneute Normalisierung nach dem ersten Abfall kann die Dauer und den tatsächlichen Energieverlust verändern.
3. **Wenn der Dunkeltest gut ausfällt, der MPP-Lichttest jedoch schlecht, liegt dann ein Widerspruch vor?** Nicht unbedingt. Licht und elektrische Belastung können unterschiedliche oder kombinierte Abbauprozesse aktivieren.

Die Unterscheidung zwischen anfänglicher Degradation und dauerhafter Degradation

In der Fachliteratur bezeichnet der Begriff **Burn-in** die anfängliche Veränderung, die während des ersten Betriebs oder der Vorkonditionierung auftritt. Anfangs kann die Leistung schnell abfallen und sich dann langsamer verändern; einige Effekte können durch eine Ruhephase im Dunkeln oder eine erneute Konditionierung teilweise rückgängig gemacht werden. Dies bedeutet jedoch nicht, dass jeder anfängliche Leistungsabfall harmlos oder reversibel ist. Bei der Messung werden die anfängliche Leistung, die gewählte Referenzleistung und gegebenenfalls die Rückgewinnung separat erfasst.

Schwellenwert ist die Grenze, die als Kriterium für die Lebensdauer ausgewählt wird. Daher beeinflusst die zugrunde gelegte Ausgangsbasis für die Berechnung von 80 % in T80 das Ergebnis. Für eine Probe, die am Ende des Experiments den Schwellenwert noch nicht erreicht hat, liegt lediglich eine Information über die Lebensdauer vor, die die Beobachtungsdauer überschreitet. Es wäre falsch, diese Probe so zu behandeln, als wäre sie an diesem Tag ausgefallen, und sie in den Durchschnitt einzubeziehen, oder sie als unendlich langlebig zu betrachten.

Materialforschung aus ersten Prinzipien: Stärken und Grenzen der DFT

Was versucht die DFT zu berechnen?

Die Eigenschaften eines Kristalls ergeben sich aus den Quantenwechselwirkungen zwischen den Atomkernen und den Elektronen. Die direkte Verfolgung der gesamten Bewegung aller Elektronen ist für die meisten realen Festkörper zu aufwendig. Die **Dichtefunktionaltheorie** (DFT) formuliert das Problem neu, indem sie die Grundzustandsenergie mit der Elektronendichte in Beziehung setzt. Die **Elektronendichte** gibt an, wie viele Elektronen sich in jedem kleinen Bereich des Raums befinden. In diesem Buch wird die DFT nicht als eine Art „Schreibe die chemische Formel auf, erhalte den Wirkungsgrad“-Maschine verwendet.

Funktionale sind mathematische Regeln, die anstelle einer Zahl eine ganze Funktion als Eingabe akzeptieren. Für praktische Berechnungen der Austausch- und Korrelationseffekte von Elektronen werden approximative Funktionale ausgewählt. **PBE** ist der Name eines solchen weit verbreiteten Ansatzes. **Selbstkonsistenz** ist der iterative Prozess, bei dem das aus der berechneten Dichte resultierende Potenzial so angepasst wird, dass es die gleiche Dichte liefert. **Geometrieoptimierung** ist die Veränderung der Atompositionen und gegebenenfalls der Zellgröße, um die Kräfte zu minimieren. Dieser Prozess kann in einem lokalen Minimum enden und garantiert nicht, dass das beste Ergebnis unter allen möglichen Strukturen in der Natur gefunden wird.

Warum scheinen numerische Einstellungen wie physikalische Ergebnisse?

Wir repräsentieren den Kristall in der numerischen Simulation mit einer endlichen Anzahl von Wellen oder räumlichen Punkten. Die **Abschneideenergie** bestimmt, wie viele Details in der Darstellung ebener Wellen beibehalten werden. Das **k-Punkt-Gitter** ist eine Abtastung der periodischen elektronischen Zustände des Kristalls bei verschiedenen Wellenvektoren. Das **Pseudopotenzial** fasst einige der Effekte in der Nähe des Kerns in einer ökonomischeren Darstellung zusammen. Wenn diese Einstellungen unzureichend sind, kann die geringe Energiedifferenz zwischen den Materialien auf numerische Fehler zurückzuführen sein.

Beispiel für synthetische Konvergenz: Die Energiedifferenz zwischen denselben beiden Strukturen soll bei detaillierteren Einstellungen die Werte 40, 28, 25 und 24 meV/Atom annehmen. Da die letzten beiden Werte konvergieren, nimmt die numerische Empfindlichkeit dieser Observable in diesem Bereich ab. Es ergibt sich nicht das Ergebnis „Die tatsächliche Energiedifferenz beträgt genau 24“; der Fehler der

gewählten Funktionalform und das Vorhandensein weiterer konkurrierender Phasen sind weiterhin vorhanden. **Konvergenz** ist die numerisch konsistente Lösung des Modells; dass das Modell die Natur korrekt darstellt, ist eine andere Anforderung. Die **Bildungsenergie** vergleicht eine Verbindung mit ausgewählten elementaren Referenzzuständen. Die **konvexe Hülle** ist die untere Energiegrenze konkurrierender Phasengemische, die dieselbe Gesamtzusammensetzung ergeben können. Eine Lage oberhalb der Hülle zeigt, dass innerhalb des gewählten Phasenpools und Modells durch Zersetzung Energie gewonnen werden kann. Ein **Phonon** ist eine quantisierte Mode der Kristallschwingungen; eine Schwingungsrechnung untersucht die Reaktion der Struktur auf kleine Auslenkungen. Diese drei Prüfungen stellen unterschiedliche Fragen; keine von ihnen ist für sich allein ein experimenteller Syntheserfolg.

Verständniskontrolle: Die Berechnung wurde „erfolgreich“ abgeschlossen

Wenn ein Programm fehlerfrei ausgeführt wird, bedeutet das nicht, dass das physikalische Ergebnis korrekt ist. Die chemische Beschreibung der Struktur, die beteiligten Kräfte, die Konvergenz der Energiedifferenz, konkurrierende Phasen und die Grenzen der verwendeten Näherung müssen separat untersucht werden. Unterscheiden Sie zwischen der Erzeugung einer Datei und der Erzeugung eines wissenschaftlichen Beweises.

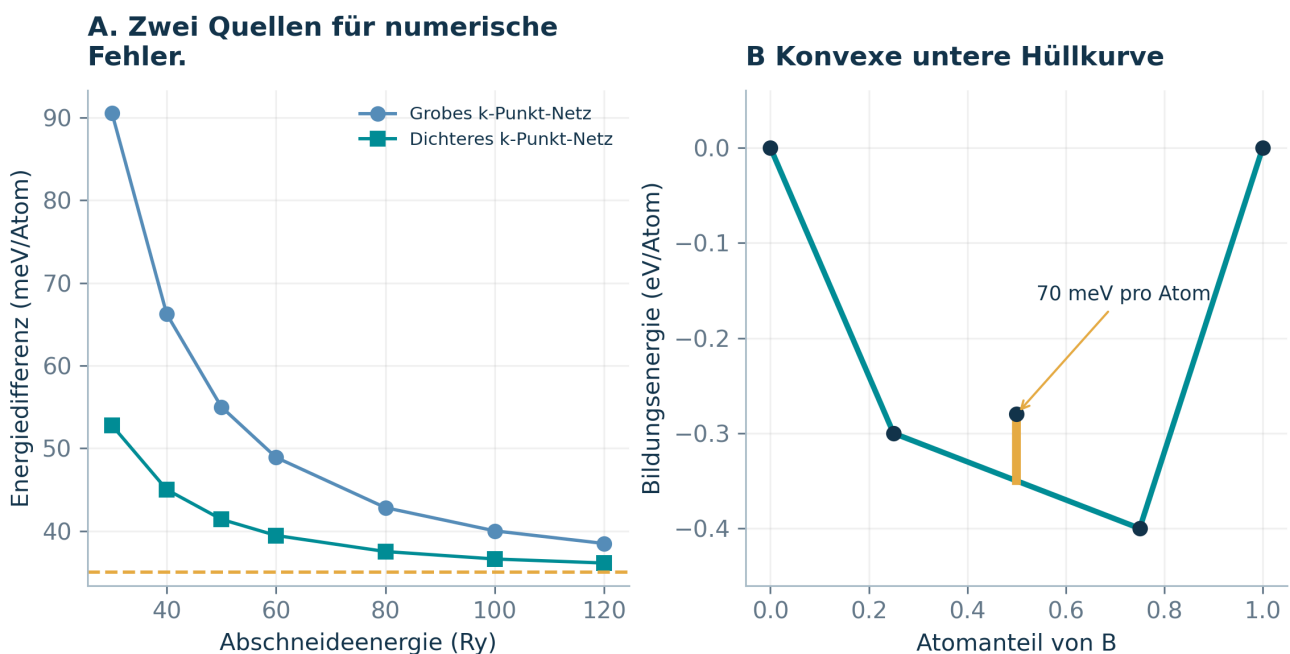


Abbildung 34. DFT-Ergebnisse auf zwei unterschiedlichen Skalen prüfen. Panel A zeigt den Einfluss der Abschneideenergie und des k-Punkt-Netzes, Panel B die Beziehung zwischen Energie und unterer Einhüllenden. Alle Zahlen sind synthetisch. Der Kandidat in Panel B liegt 70 meV/Atom über der Einhüllenden; dies ist keine Zersetzungsdauer. [R18] [R19] [R20]

Die rechnergestützte Erforschung ist eine anspruchsvollere Aufgabe, als einfach eine große Anzahl von Formeln aufzuschreiben und die Bandlücke zu berechnen. Eine Formel sagt nicht, wo sich die Atome befinden, welche Anordnung vorliegt, mit

welchen Phasen sie konkurrieren oder welche Defekte die Ladungsträger vernichten. Die DFT liefert ein physikalisches Modell für einen wichtigen Teil dieser Fragen; dennoch hat jedes Ergebnis eine Grenze in Bezug auf die Methode, die Struktur, die Konvergenz und die Temperatur. Die einwandfreie Durchführung einer elektronischen Strukturberechnung bedeutet nicht, dass die berechnete Struktur im Labor hergestellt werden kann.

Definieren Sie zunächst die Struktur und betrachten Sie dann die Energie

In der Ausgangsstruktur müssen die chemische Formel, die Anzahl der Atome, die Zellektoren, die Koordinaten, die Besetzungen, der Ladungszustand und der magnetische Zustand klar definiert sein. Eine kristallographische Datei, die eine partielle Besetzung aufweist, wandelt sich bei einer Standard-periodischen DFT-Berechnung nicht automatisch in eine physikalisch ungeordnete Legierung um. Es sind geordnete Superzellen, abgetastete Konfigurationen oder geeignete Ansätze zur Modellierung von Unordnung erforderlich. SQS zielt darauf ab, ausgewählte Korrelationen einer zufälligen Legierung in einer kleinen Zelle darzustellen; eine einzelne SQS stellt nicht die garantierte Repräsentation des gesamten Konfigurationsraums dar. Die Zellgröße und die Auswahl der Abtastpunkte werden untersucht. [R24]

Die geometrische Relaxation sucht ein lokales Minimum. Eine Konvergenz von einem bestimmten Ausgangspunkt aus beweist nicht, dass die global niedrigste Energiekonfiguration gefunden wurde. Verschiedene Ausgangsvolumina, Symmetrien, atomare Anordnungen und physikalisch plausible magnetische Konfigurationen können ausprobiert werden. Für eine nicht konvergierende Berechnung wird nicht von einem „instabilen Material“ gesprochen: Die elektronische Lösung, der Geometriealgorithmus oder die gewählte Methode könnten versagt haben. Die Konvergenz von Kraft und Spannung zeigt allein, dass in den betrachteten Freiheitsgraden ein stationärer Punkt erreicht wurde; für die Bewertung eines lokalen Minimums sind die entsprechende Energiekrümmung und eine geeignete Phonon-Kontrolle in Bezug auf relevante strukturelle Verzerrungen erforderlich. Der Syntheseweg und die konkurrierenden Phasen sind weiterhin separate Fragestellungen.

Semilokale Austausch-Korrelationsfunktionale wie PBE stellen aufgrund ihrer Rechenkosten und Anwendbarkeit einen gängigen Ausgangspunkt dar. Die ursprüngliche Formulierung von PBE basiert auf der allgemeinen Gradientenapproximation. [R17] Die Kohn-Sham-Eigenwertdifferenz entspricht jedoch nicht automatisch der gemessenen optischen oder Quasiteilchen-Bandlücke. Hybridfunktionale oder andere geeignete Methoden wie GW können verschiedene Fehlerquellen reduzieren; keine dieser Methoden garantiert jedoch in allen chemischen Systemen das korrekte Ergebnis. Bei schweren Elementen, Übergangsmetallen und

schwach gebundenen Systemen sind Spin-Bahn-Wechselwirkungen, magnetische Ordnung und Korrelation sowie Dispersionskräfte zu berücksichtigen.

Konvergenz und vergleichbare Energie

Die Konvergenz der planaren Wellenabschneidung, des k-Punkt-Netzes, der elektronischen Schwellenwerte, der Krafttoleranz, der Smearing-Methode, des Pseudopotenzials und der Zellgröße erfolgt in Abhängigkeit von der Zielgröße. Auch wenn die Änderung der Gesamtenergie gering ist, können sich Spannung oder Phononen noch ändern. Die SSSP-Studie zeigt, wie wichtig es ist, anstelle der Bewertung von Pseudopotenzialen mit nur einem Energietest, Phononen, Druck, Bandstrukturen und andere Kriterien gemeinsam zu betrachten. [R19] Das Konvergenzbudget sollte strenger sein als die berechnete kleinste signifikante Differenz; bei einer Ordnung von 5 meV/Atom kann mit einer Methodenunsicherheit von 20 meV/Atom keine definitive Aussage getroffen werden.

Die vergleichende Analyse verschiedener Codes durch Lejaeghere und seine Kollegen hat gezeigt, dass die numerische Konvergenz verschiedener DFT-Implementierungen bei einem definierten Problem systematisch getestet werden kann. Eine solche Validierung ist jedoch kein Beweis dafür, dass dieselbe funktionelle Form die experimentelle Realität vollständig repräsentiert. [R18] Es ist möglich, dass zwei Codes unter derselben fehlerhaften physikalischen Annahme übereinstimmen. Die wissenschaftliche Dokumentation unterscheidet daher zwischen numerischer Reproduzierbarkeit und physikalischer Validierung; eine unabhängige Überprüfung beschränkt sich nicht nur auf die Ausführung derselben Eingabe auf verschiedenen Computern.

Bildungsenergie, Phasendiagramm und freie Energie

Die Bildungsenergie misst den Energiegewinn relativ zu den Elementreferenzen. Eine negative Bildungsenergie bedeutet nicht, dass sich die Verbindung nicht in andere Verbindungen zersetzt. Die konvexe Hülle repräsentiert die niedrigste Energie innerhalb von Phasenmischungen, die die gleiche Gesamtzusammensetzung aufweisen. $E_{\text{hull}} = E_{\text{Kandidat}} - E_{\text{beste_Mischung}}$, berechnet pro Atom in derselben Einheit. Eine unvollständige Menge an konkurrierenden Phasen kann die Hülle fälschlicherweise erhöhen und den Kandidaten besser darstellen, als er tatsächlich ist. Daher werden mögliche binäre, ternäre und höhere Verbindungen, alternative Polymorphe und die Berechnungsmethoden der Referenzen untersucht.

Originalbeispiel: Der Energiewert des AB₂-Kandidaten beträgt -0,80 eV/Atom, und die beste A-B-Phasenmischung, die die gleiche Zusammensetzung ergibt, beträgt -0,86 eV/Atom. Die Energie des Kandidaten oberhalb der konvexen Hülle beträgt 0,06 eV/Atom = 60 meV/Atom. Da eine Formeleinheit drei Atome enthält, beträgt die Differenz, die die Dissoziation begünstigt, 0,18 eV/Formeleinheit. Trotz der negativen Bildungsenergie gehört der Kandidat nicht zum thermodynamischen Grundzustand.

Dieses Ergebnis beweist nicht allein die Unmöglichkeit der Synthese; es gibt metastabile Phasen, die kinetisch stabilisiert werden können. Die Metastabilitätsuntersuchung von Sun und seinen Kollegen zeigt, dass die beobachtete Metastabilitätsgröße von der Chemie abhängt; es kann keine universelle Regel abgeleitet werden, dass „alles unter X meV definitiv synthetisiert werden kann“. [R20] Die bei Null Kelvin vorhandene Gesamtenergie ist nicht die freie Energie bei Betriebstemperatur. Schwingungs-, Konfigurations-, magnetische und gegebenenfalls elektronische Entropiebeiträge können an Bedeutung gewinnen. G wird als Summe von Komponenten wie $G \approx E + F_{\text{vib}} - T S_{\text{config}} + pV$ betrachtet; dabei darf derselbe Beitrag nicht zweimal gezählt werden. Bei der Synthese im Gleichgewicht mit einem offenen Gasreservoir sind das chemische Potenzial, die Temperatur und der Partialdruck entscheidend. Da das Gleichgewicht gegenüber der Phasentrennung und die während des Prozesses auftretende Wahrscheinlichkeit unterschiedliche Probleme darstellen, wird das Synthesefenster nicht allein aus der Bandstruktur bei Raumtemperatur abgeleitet.

Phononen und endliche Temperatur

Die Phononberechnung untersucht die Kraftantwort auf kleine atomare Verschiebungen. Imaginäre Frequenzen deuten darauf hin, dass die gewählte Struktur in der harmonischen Näherung möglicherweise instabil gegenüber der entsprechenden Verzerrung ist. Zunächst werden numerische Aspekte wie die Superzelle, das k/q -Netz, die Kraftgenauigkeit und die akustische Summenregel untersucht. Die Stabilität nur am Γ -Punkt erstreckt sich nicht über die gesamte Brillouin-Zone. Wenn der weiche Modus real ist, können die Atome entlang dieses Modus verschoben und eine Struktur mit geringerer Symmetrie gesucht werden. Die Arbeit von Togo und Tanaka zur Phononberechnung beschreibt die grundlegenden Werkzeuge für solche Berechnungen bei der Untersuchung von Struktur und Thermodynamik. [R21] Eine harmonisch instabile Hochtemperaturphase kann durch anharmonische Effekte stabilisiert werden; umgekehrt kann eine harmonisch stabile Struktur unter Lichteinwirkung chemisch abgebaut werden. Dass ein Molekül in der molekularen Dynamik über 10 oder 20 Pikosekunden nicht zerfällt, ist kein Beweis für eine langfristige Beständigkeit. Für die Beobachtung seltener Ereignisse müssen die Zeitskala, das Probenvolumen und die Barrieren berücksichtigt werden. Der Simulationsthermostat, die Zeitschrittgröße und die Anfangskonfiguration werden ebenfalls aufgezeichnet. Anstatt „AIMD-stabil“ zu schreiben, ist es informativer, die Dauer, die Temperatur, die Zelle und die beobachteten strukturellen Kennwerte anzugeben.

Defekte, Ionenwanderung und die tatsächliche Grenzfläche

Die typische Schreibweise der Defektbildungsenergie lautet:

$$\Delta H_f(D^q) = E_{\text{Defekt}} - E_{\text{ideal}} - \sum_i n_i \mu_i + q(E_F + E_{\text{VBM}}) + E_{\text{Korrektur}} \quad [\text{eV}] \quad (\text{I.21.1})$$

In dieser Gleichung ist q eine dimensionslose, ganzzahlige Defektladung in der Einheit der Elementarladung; sie unterscheidet sich von dem in anderen Abschnitten für die Elementarladungskonstante verwendeten Symbol q . E_F ist die Fermi-Energie, gemessen relativ zum oberen Rand des Valenzbandes, und E_{VBM} ist der obere Rand des Valenzbandes in Bezug auf eine gemeinsame Energienulllinie. n_i ist hier als positive Zahl für die Anzahl der dem Supergitter hinzugefügten Atome gewählt; andere Vorzeichenkonventionen sind möglich, müssen aber erklärt werden. Die Ladung des Defekts beeinflusst die chemischen Potentiale und das Fermi-Niveau. Bei geladenen Supergittern sind Korrekturen für endliche Größe und Potentialausrichtung erforderlich. Übergangsniveau, Einfangkoeffizient und Defektdichte sind unterschiedliche Größen; allein das Auffinden eines tiefen Niveaus liefert nicht die Rekombinationsrate. Freysoldt und seine Kollegen fassen die theoretischen und numerischen Grundlagen für punktförmige Defektberechnungen zusammen. [R22] Für die Migration sind nicht nur die Anfangs- und Endenergien ausreichend; der höchste Punkt des Pfades dazwischen wird bestimmt. Methoden wie die Climbing-Image NEB suchen nach den Sattelpunkten des gewählten Pfades. Alternative Pfade, Ladungszustände und Defektdichte müssen ebenfalls untersucht werden. [R23] Bei der ursprünglichen Skalenberechnung, wenn eine Übergangsrate von 10^{13} s^{-1} , eine Barriere von 0,50 eV und eine Temperatur von 300 K gewählt werden, beträgt die Arrhenius-Geschwindigkeitsskala für eine einzelne Rate etwa $4 \times 10^4 \text{ s}^{-1}$. Dies ist die atomare Sprungrate; es ist nicht die Übergangszeit eines Ions über den Film oder die Lebensdauer des Bauelements. Für die Langstreckenbewegung sind die Pfadgeometrie, die zufällige Bewegung und die Anzahl der mobilen Spezies erforderlich. Im Grenzflächenmodell werden Oberflächenterminierung, Gitterfehlpassung, induzierte Spannung, Ladungstransport, Dipole und chemische Reaktionen beschrieben. Das nebeneinander liegende Betrachten der Bandkanten einzelner Materialien in Bezug auf das Vakuum stellt lediglich eine erste Untersuchung dar. Das Festlegen optimistischer Grenzwertparameter für das Bauelement, ohne die Grenzflächenfehler und das Verhalten des selektiven Kontakts zu berücksichtigen, unterbricht die Beweiskette. Alle Eingaben, die Softwareversion, die Pseudopotenzial-ID, die Rohausgabe und das Analyse-Skript werden gespeichert; die Ergebnistabelle allein stellt keine Reproduzierbarkeit dar.

Die Unterscheidung zwischen numerischer Konvergenz und Modellgenauigkeit

In der DFT-Berechnung bedeutet die Tatsache, dass sich das Ergebnis nicht ändert, wenn die Cutoff-Energie oder das k-Gitter erhöht wird, dass der gewählte Ansatz numerisch gelöst wurde. Dies zeigt jedoch nicht allein, dass das gleiche Ergebnis eine Eigenschaft des realen Materials ist. Der Austausch-Korrelations-Ansatz, die Spin-Bahn-Kopplung, die Temperatur, die Unordnung und die Defektstruktur sind separate physikalische Parameter. Insbesondere bei der Durchführung von Bandstrukturberechnungen für Absorber mit schweren Elementen sollten diese Parameter konsistent gehalten werden. [R17] [R18] [R19]

Wenn die zu vergleichende Größe die gesamte Energiedifferenz ist, sollte der Konvergenztest direkt auf dieser Differenz durchgeführt werden. Es kann vorkommen, dass es bei der gesamten Energie jeder Phase einen großen gemeinsamen Fehler gibt, während die Differenz klein bleibt; umgekehrt können einzelne Energien ruhig erscheinen, während sich die Ordnung im Bereich von wenigen meV/Atom ändert. Die Berechnung von Referenzphasen mit unterschiedlichen numerischen Einstellungen führt zu einer physikalisch unplausiblen Verschiebung im Phasendiagramm. Für den gleichen Atomtyp sollten konsistente Potentiale und eine ausreichende Konvergenz die gemeinsame Grundlage des Phasenraums bilden.

Von der Geometrie der unteren konvexen Hülle zur Zersetzungsreaktion

In einem binären A-B-System betrage die Energie eines Kandidaten mit der Zusammensetzung $x_B = 0,50$ $-0,28$ eV/Atom. Wenn bei $x_B = 0,25$ $-0,30$ und bei $x_B = 0,75$ $-0,40$ eV/Atom vorliegen, dann liefert eine Mischung mit gleichem atomaren Verhältnis dieselbe Gesamtzusammensetzung bei $-0,35$ eV/Atom. Die Energie des Kandidaten oberhalb der Hülle beträgt $0,07$ eV/Atom. Diese Differenz deutet auf die Existenz einer Kombination mit niedrigerer Energie bei der gleichen Zusammensetzung hin; sie gibt jedoch nicht an, mit welcher Geschwindigkeit der Kandidat dissoziieren wird.

Im Fall eines Mehrkomponentensystems gilt das gleiche Prinzip der linearen Programmierung: Wählen Sie nicht-negative Mengen der Referenzphasen aus, erhalten Sie die Elementmengen und minimieren Sie die Gesamtenergie. Wenn eine fehlende Konkurrenzphase hinzugefügt wird, kann die untere Hüllkurve sinken; daher ist eine Null-Differenz in einem eingeschränkten Phasenpool keine Garantie für Stabilität im vollständigen chemischen System. Wenn die Entropie und die chemischen Potentiale der Umgebung berücksichtigt werden, ändert sich auch das entsprechende thermodynamische Potential. [R20]

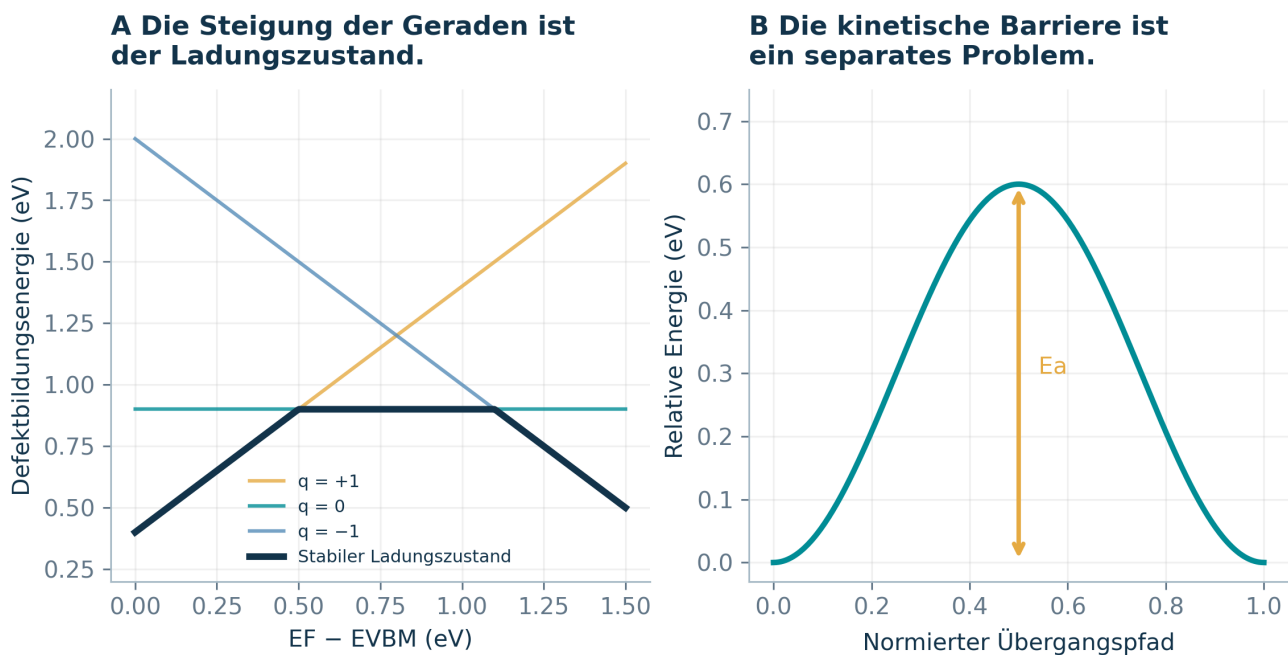


Abbildung 35. Die Defektbildungsenergie und die kinetische Barriere haben unterschiedliche Funktionen. In Panel A ist die Steigung der Bildungsenergie in Bezug auf den Fermi-Pegel die Anzahl der Ladungen des Defekts; die untere Hülle gibt den stabilen Ladungszustand an. In diesem synthetischen Beispiel liegen die Übergänge bei 0,50 und 1,10 eV. Panel B zeigt ein Beispiel für einen Pfad mit einer Barriere von 0,60 eV; es handelt sich nicht um die Ausgabe einer realen NEB-Berechnung. [R22] [R23]

Phononenstabilität und Defektladungszustände

Die Abnahme der Kräfte bei der Strukturrelaxation deutet darauf hin, dass ein stationärer Punkt erreicht wurde. Die Eigenwerte der Krümmungsmatrix in Bezug auf kleine Verschiebungen stehen in Beziehung zum Quadrat der Schwingungsfrequenzen. Eine negative Krümmung erscheint im harmonischen Modell als imaginäre Frequenz. Ein solcher Modus deutet darauf hin, dass die gewählte Struktur in dieser Richtung relaxieren kann; numerisches Rauschen, unzureichende Superzellen und anharmonische Stabilität bei endlicher Temperatur werden jedoch separat untersucht. Die harmonische Analyse bei Nulltemperatur ist nicht allein aussagekräftig für die Lebensdauer bei der Betriebstemperatur. [R21]

Die Defektbildungsenergie addiert die atomaren und elektronischen Reservoirs zur Energiedifferenz zwischen defektbehafteten und defektfreien Zellen. Aufgrund des linearen EF-Terms, der mit dem elektronischen Reservoir verbunden ist, weisen die Ladungszustände unterschiedliche Steigungen auf. Das thermodynamische Übergangsniveau liegt dort, wo zwei Ladungszustände die gleiche Bildungsenergie haben; sie hat nicht die gleiche Größe wie die optische Übergangs- oder Ladungsträgerfangbarriere. Es ist möglich, dass ein Defekt mit niedriger Bildungsenergie häufig gebildet wird, aber um seinen Einfluss auf die Rekombination zu bestimmen, ist auch die Fangphysik erforderlich. [R22]

Selbsttest

1. **Beweist eine negative Bildungsenergie die Phasenstabilität?** Nein. Es ist notwendig, sie mit allen relevanten Phasenmischungen zu vergleichen, die die gleiche Zusammensetzung aufweisen.
2. **Wird die experimentelle Bandlücke bestätigt, wenn zwei DFT-Codes die gleiche Bandlücke liefern?** Nein. Es wird lediglich eine numerische Übereinstimmung gezeigt; ein systematischer Modellfehler kann weiterhin vorhanden sein.
3. **Sind wir bereit für das Labor, wenn die Phononen bei einer sauberen, kurzen AIMD-Simulation keine Probleme aufweisen?** Allein das reicht nicht aus. Konkurrierende Phasen, Defekte, das Synthesefenster, die Grenzfläche und praktische Einschränkungen müssen ebenfalls berücksichtigt werden.

Die Konzepte des magnetischen Zustands und der Anharmonizität erläutern

Das Quantenmerkmal des Elektrons, das als **Spin** bezeichnet wird, trägt zum magnetischen Verhalten bei. In einer Struktur kann die Anordnung lokaler magnetischer Momente in der gleichen, entgegengesetzten oder einer anderen Konfiguration die Gesamtenergie verändern. Die Warnung „Magnetischen Zustand definieren“ bedeutet, dass man, insbesondere bei Materialien, bei denen solche Optionen physikalisch möglich sind, nicht eine einzige Anfangskonfiguration anstelle aller Möglichkeiten verwenden sollte. Es wird nicht behauptet, dass in jedem photovoltaischen Material eine starke Magnetisierung vorhanden ist.

Der harmonische Ansatz geht davon aus, dass die Energie bei kleinen Verschiebungen der Atome annähernd wie eine Parabel zunimmt. In diesem Fall können die Normalmoden, bei denen die Atome gemeinsam schwingen, und ihre Frequenzen berechnet werden; die Quanten dieser Schwingungen werden als **Phononen** bezeichnet. **Anharmonizität** bedeutet, dass diese einfache Parabel bei größeren Bewegungen oder in bestimmten weichen Strukturen nicht mehr ausreichend ist. Die Schwingungen können sich gegenseitig beeinflussen und die wirksamen Kräfte können sich mit der Temperatur ändern. Daher ist ein harmonisches Verhalten bei Nulltemperatur nicht dasselbe wie das strukturelle Verhalten bei hoher Temperatur; es handelt sich nicht um die gleiche Antwort auf das gleiche Problem.

[R21]

Die **Konvergenz** im numerischen Sinne bedeutet, dass sich das Ergebnis, an dem wir interessiert sind, nur noch geringfügig ändert, wenn das Netz, die Abschneideenergie oder die Toleranz enger gewählt werden. Dies bedeutet nicht, dass das Modell die Natur korrekt beschreibt. Ein fehlerhafter physikalischer Ansatz kann sich einer sehr präzisen Zahl annähern. Modellfehler, Syntheseverhalten und experimentelle Validierung müssen zusätzlich zur numerischen Konvergenz gesondert untersucht werden.

Vom Material zur Zelle: Optische und elektrische Modellierung

Welche Komponenten werden in einem Bauelementmodell zusammengefasst?

Das optische Modell berechnet zunächst, wie das Licht in die Schichten eindringt und an welcher Position es absorbiert wird. Dieses Ergebnis bildet das **Erzeugungsprofil** für die Anzahl der Elektron-Loch-Paare pro Volumeneinheit und Zeiteinheit. Das elektrische Modell löst anschließend die Ladungsdichten, das elektrische Feld, den Ladungsträgerfluss und die Rekombination gemeinsam. **Drift** ist die durch das elektrische Feld verursachte Bewegung, während **Diffusion** die durch den Ladungsträgerdichtegradienten verursachte Nettobewegung ist. Die Berechnung der ein- und austretenden, erzeugten und verloren gehenden Ladungen an jedem Punkt wird durch die **Kontinuitätsgleichung** erfasst.

Die **Poisson-Gleichung** verknüpft die Ladungsverteilung mit dem elektrostatischen Potenzial. Die **Randbedingung** gibt an, was an den Rändern des Modells passiert, z. B. Kontaktspannung, Ladungsträgerübergang oder Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit. Die gleichen inneren Materialparameter können unter verschiedenen Kontaktbedingungen unterschiedliche Leistungen erbringen. Daher ist die Eingabe der Bandlücke und der Lebensdauer nicht ausreichend, um die Zelle vollständig zu beschreiben.

Wie löst ein Computer das Modell eines kontinuierlichen Films?

Das Netz besteht aus diskreten Berechnungspunkten, die über die Dicke oder auf der Oberfläche verteilt sind. **Die Diskretisierung** ist der Prozess, bei dem kontinuierliche Gleichungen in Beziehungen zwischen diesen endlichen Punkten umgewandelt werden. **Synthetisches Beispiel:** Wenn wir einen 1 μm dicken Film zunächst in 10 gleiche Abschnitte unterteilen, beträgt jeder Abschnitt 100 nm. Wenn eine signifikante Änderung in der Nähe des Kontakts innerhalb von 5 nm auftritt, kann dieses Netz dies nicht auflösen. Wir verfeinern das Netz und überprüfen, ob sich die Ergebnisse für Strom, Spannung und Ladungserhaltung nicht ändern. Es wird nicht davon ausgegangen, dass die Lösung ausreichend ist, nur weil die Grafik glatt aussieht.

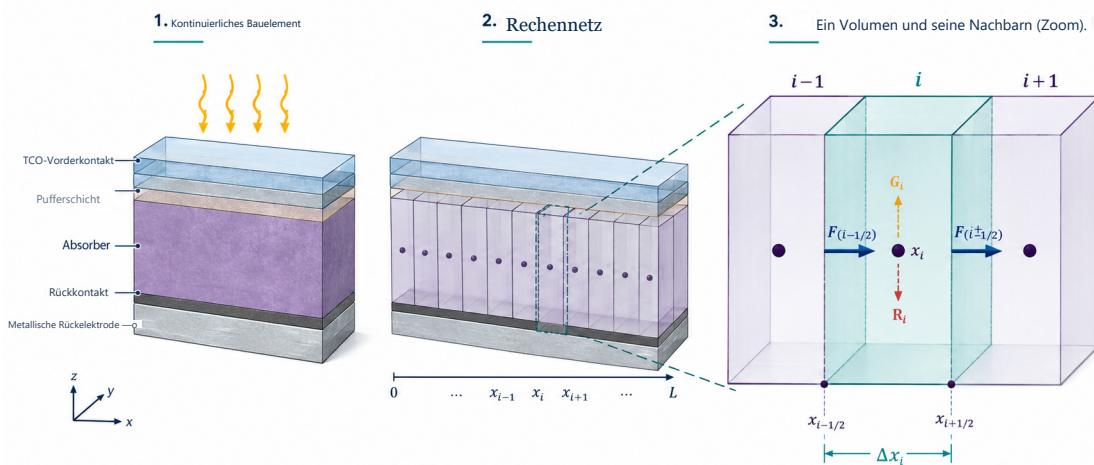
Parameter ist eine Material- oder Grenzflächeneigenschaft, die in das Modell eingegeben wird. **Sensitivität** ist das Maß, in dem eine kleine Änderung eines Parameters die Ausgabe beeinflusst. **Identifizierbarkeit** bezieht sich darauf, ob verschiedene Parameter getrennt voneinander aus den Messungen extrahiert werden

können. Beispielsweise können ein besserer Kontakt mit einer schlechteren Ladungsträgerlebensdauer und ein Kontakt mit einer besseren Ladungsträgerlebensdauer eine einzelne J-V-Kurve auf ähnliche Weise erklären. In diesem Fall reicht eine sehr gute Anpassung der Kurve nicht aus, um zu bestimmen, welcher Mechanismus korrekt ist.

Die „Kalibrierung“ eines Modells besteht darin, seine Parameter an bestimmte Daten anzupassen. Die **Validierung** prüft, ob das Modell auch für andere Bedingungen und Daten, die nicht zur Kalibrierung verwendet wurden, gültig ist. Ein an eine bestimmte Temperatur angepasstes Modell bei unterschiedlicher Lichtintensität und Temperatur zu testen, ist eine aussagekräftige Überprüfung. Die vom Modell vorgeschlagene Leistungssteigerung sollte als ein Bereich innerhalb der Parameterunsicherheiten interpretiert werden.

Verständniskontrolle: Gibt es nur einen richtigen Parametersatz?

Wenn zwei unterschiedliche Parametersätze dieselbe Kurve beschreiben, löst die Auswahl der besten Anpassung mit einer größeren Anzahl von Dezimalstellen das Problem nicht. Finden Sie eine Messbedingung, bei der sich die beiden Modelle unterscheiden: unterschiedliche Strahlung, Temperatur oder zeitliche Abhängigkeit. Die Auswahl einer neuen Messung, um diese Unterscheidung zu ermöglichen, verknüpft die Modellierung mit dem Experiment.



Der Austrittsfluss eines Volumens ist gleich dem Eintrittsfluss des benachbarten Volumens.

Abbildung 36. Von der kontinuierlichen Bauelementbeschreibung zur erhaltenden Finite-Volumen-Berechnung. Das mittlere Netz ist rechts auf das Volumen i und seine Nachbarn vergrößert. F bezeichnet den Teilchenfluss durch die Flächen, G_i und R_i die Generation und Rekombination innerhalb des Volumens. Der Einstrom durch die linke Fläche und der Ausstrom durch die rechte Fläche werden gemeinsam bilanziert. Dieses Panel ist anhand der Teilchenenerhaltung statt anhand einer Stromvorzeichenkonvention zu lesen. [R25] [R26] [R27] Mit einem Bildgenerierungswerkzeug erstellte konzeptionelle Illustration; keine Messaufnahme.

In der Abbildung ist F der Teilchenfluss; er sollte nicht mit dem Vorzeichen des elektrischen Stroms verwechselt werden. In einem eindimensionalen Netzwerk ändert

sich die durchschnittliche Elektronendichte im Volumen i mit dem Flussunterschied zwischen den beiden Flächen und der Volumenproduktion bzw. -verlust:

$$\frac{dn_i}{dt} = \frac{F_{i-1/2} - F_{i+1/2}}{\Delta x_i} + G_i - R_i, \quad J_n = -qF_n. \quad (I.22.1)$$

Wenn benachbarte Volumina denselben Flächenstrom verwenden, heben sich die Beiträge der inneren Flächen auf, wenn die Gleichungen aller Volumina addiert werden. Somit bleiben nur der Ein- und Ausfluss an der Grenze sowie die Gesamtproduktion und -verluste übrig. Die Grundlage für die numerische Erhaltung ist diese gemeinsame Flächenberechnung, die stärker ist, als in jedem Knoten einzeln eine glatte Kurve zu erhalten. [R25] [R27]

Dass ein Halbleiter, der gut Wärme abführt, zwangsläufig eine gute Solarzelle ist, ist nicht gegeben. Die Photonen müssen in der aktiven Schicht absorbiert werden, die Ladungen müssen getrennt werden, die Rekombination muss vermieden und die Ladungen müssen die selektiven Kontakte erreichen und Arbeit an den externen Stromkreis leisten können. Wenn in dieser Kette ein einzelnes Glied als ideal angesehen wird, kann dies die Leistung der anderen Elemente verschleiern. Das Ziel der Bauelementmodellierung ist nicht die Erzeugung eines gewünschten Wirkungsgrads, sondern die Darstellung, welcher Verlustmechanismus bei gegebenen, gemessenen oder begründeten Parametern vorherrschend ist und welche Experimente diesen Mechanismus aufzeigen können.

Zuerst die optische Energiebilanz

In einem passiven optischen Stapel muss die Reflexion R , die Transmission T und die Summe der Absorptionen in allen Schichten bei jeder Wellenlänge die Energieerhaltung gewährleisten: $R + T + \sum A_i = 1$. Das in der aktiven Schicht absorbierte Licht ist potenziell für eine nützliche Energieerzeugung geeignet; das in der Metallschicht oder der Trägerschicht absorbierte Licht ist in der Regel eine parasitäre Verlustquelle. Der Ausdruck „Gesamtabsorption 95 %“ liefert ohne Angabe der Schicht, in der sie stattfindet, keine ausreichenden Informationen über den Bauelementstrom. Wenn eine diffuse Streuung vorliegt, sind die Messgeometrie und die verwendeten Geräte, wie z. B. ein sphärischer Integrator, von besonderer Bedeutung.

In einer einzelnen, reflexionsfreien und homogenen Schicht kann $A \approx 1 - \exp(-\alpha d)$ geschrieben werden. Im ursprünglichen Beispiel ist $\alpha = 10^5 \text{ cm}^{-1}$ und $d = 300 \text{ nm} = 3 \times 10^{-5} \text{ cm}$, wodurch $\alpha d = 3$ und A ungefähr 95,0 % ergibt. Bei der gleichen Dicke und $\alpha = 10^3 \text{ cm}^{-1}$ beträgt A ungefähr 2,96 %. Dieser Vergleich erklärt, warum die schwache Absorption in der Nähe des Bandrands die Dicke und das Design der Lichtfalle bestimmt. In einem realen Bauelement ist diese einfache Gleichung nicht ausreichend, wenn multiple Reflexionen und Interferenz auftreten.

Bei planaren Schichten kann die Transfermatrixmethode verwendet werden, während bei strukturierten oder nanostrukturierten Systemen ein geeigneter Ansatz der Wellenoptik oder der Strahlverfolgung angewendet werden kann. Der Brechungsindex $n(\lambda)$, der Extinktionskoeffizient $\kappa(\lambda)$, die Dicke und die Oberflächengeometrie stammen aus Messungen oder explizit angegebenen Berechnungen. Bei dicken und unregelmäßigen Schichten wird die Kohärenzannahme überprüft. Solcore ist ein Beispiel für ein Open-Source-Tool, das entwickelt wurde, um Material- und Solarzellenmodelle in verschiedenen Maßstäben zu kombinieren; bei der Verwendung wird berichtet, welches Submodell ausgewählt wurde und welche Grenzen gelten.

[R26]

Generation, Transport und Rekombination

Aus der lokalen Absorption des optischen Modells wird das Erzeugungsprofil $G(x)$ [$\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$ oder $\text{m}^{-3} \text{s}^{-1}$] abgeleitet. Das elektrische Modell muss das gleiche Einheitensystem verwenden. In einem eindimensionalen Drift-Diffusions-Modell werden das elektrostatische Potenzial durch die Poisson-Gleichung und die Elektronen- und Lochströme durch die Transportgleichungen bestimmt:

$$\frac{d}{dx} \left(\varepsilon \frac{d\psi}{dx} \right) = -\rho. \quad (1.22.2)$$

$$J_n = q\mu_n n E + q D_n \frac{dn}{dx}. \quad (1.22.3)$$

$$J_p = q\mu_p p E - q D_p \frac{dp}{dx}. \quad (1.22.4)$$

$E = -d\psi/dx$; μ ist die Beweglichkeit, D ist der Diffusionskoeffizient. Die Kontinuitätsgleichungen verknüpfen die räumliche Änderung des Stroms über G und die Rekombination R . Die Vorzeichenkonvention muss von Anfang an festgelegt werden. Die Erhaltung des Gesamtstroms über das gesamte Bauelement im stationären Zustand ist eine starke Kontrolle für die Netz- und Lösungsverifikation. Wenn die Randbedingungen an den Kontakten nicht physikalisch korrekt gewählt werden, reicht die genaue Modellierung des Bauelements nicht aus, um eine sehr genaue Lösung im inneren Bereich zu erhalten.

Die strahlungsinduzierte Rekombination kann in der Form $R_{\text{rad}} = B(np - n_i^2)$ geschrieben werden. Das SRH-Modell berücksichtigt die Auswirkungen der durch Fallen vermittelten Einfang- und Freisetzungsprozesse; die Auger-Rekombination kann bei hohen Ladungsträgerdichten an Bedeutung gewinnen. Die Rekombination an der Grenzfläche sollte nicht willkürlich an die volumetrische Defektdichte gekoppelt werden. Die Selektivität der Transportschichten, die Energiebarrieren, der Kontaktwiderstand und die Shunt-Pfade sind separate physikalische Beiträge. Die

ursprüngliche Arbeit von SCAPS befasst sich mit der Modellierung von polykristallinen Halbleiterzellen; SIMSalabim ist ein Beispiel für ein Tool, das Open-Source-Drift-Diffusions-Lösungen repräsentiert. Der Name des Tools ersetzt nicht die Modellvalidierung. [R27] [R25]

Eine Erhöhung der Dicke führt nicht immer zu einer Verbesserung

Die Diffusionslänge $L = \sqrt{D\tau}$ gibt eine grobe Abschätzung für die Ladungsträgersammlung an. Unter klassischen, nicht-degenerierten Bedingungen gilt die Einstein-Beziehung $D = \mu kT/q$. In dem gegebenen Beispiel ist $\mu = 10 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, $T = 298,15 \text{ K}$ und $\tau = 100 \text{ ns}$, wodurch sich D auf etwa $0,257 \text{ cm}^2/\text{s}$ und L auf etwa $1,60 \text{ }\mu\text{m}$ ergibt. Wenn die Lebensdauer auf 1 ns sinkt, beträgt L etwa $0,160 \text{ }\mu\text{m}$. Unter ansonsten gleichen Bedingungen könnte ein 500 nm dicker Film im ersten Fall vielversprechend für die Ladungsträgersammlung sein, im zweiten Fall jedoch schwieriger. Da das elektrische Feld und die Kontaktgrenzen die tatsächliche Ladungsträgersammellänge beeinflussen, ist diese Berechnung jedoch eher eine Dimensionsabschätzung und ersetzt keine Bauelement-Simulation.

Eine Zunahme der Dicke kann die Lichtabsorption erhöhen, während sie die volumetrische Rekombination, die Transportlänge und die Herstellungsschwierigkeiten verstärken kann. Bei sehr dünnen Schichten können Nadelstiche, Shunt-Effekte und optische Verluste entscheidend sein. Daher wird die optimale Dicke nicht nur anhand von α ausgewählt. Wenn eine Designstudie die Dicke variiert, während sie die Mobilität und die Defektdichte unrealistisch konstant hält, wird das Ergebnis als „optimal unter diesen Parametern“ bezeichnet. Wenn die Änderung der Dicke im Experiment auch die Morphologie und die Grenzfläche verändert, werden die Effekte getrennt betrachtet.

Das inverse Problem: verschiedene Modelle, die dieselbe Kurve beschreiben

In einem Vorwärtsproblem werden Parameter vorgegeben und die J-V-Kennlinie berechnet. Beim inversen Problem wird versucht, die Parameter aus der gemessenen Kennlinie zu ermitteln. Dieser Prozess ist oft nicht eindeutig: eine höhere Beweglichkeit bei kürzerer Lebensdauer kann unter bestimmten Bedingungen ein ähnliches Sammelverhalten ergeben; Grenzflächenverluste und volumetrische Fallen können denselben Abfall der Leerlaufspannung V_{oc} erklären. Das Anpassen von fünf freien Parametern an vier zusammenfassende Kennwerte mag scheinbar einwandfrei sein, ist aber wissenschaftlich möglicherweise nicht aussagekräftig. Wichtiger als die Anzahl der Parameter ist die unabhängige Empfindlichkeit der Messung gegenüber jedem Parameter.

Ein Beispiel für eine nicht eindeutige Lösung: Nehmen wir an, das Experiment beschränkt sich nur auf das Produkt $L^2 = D\tau$. Die Werte $D = 0,10 \text{ cm}^2/\text{s}$, $\tau = 100 \text{ ns}$ und $D = 1,0 \text{ cm}^2/\text{s}$, $\tau = 10 \text{ ns}$ ergeben denselben Wert für L^2 . Es ist nicht möglich, die beiden durch eine einzelne Messung zu unterscheiden. Eine unabhängige Mobilitätsmessung oder eine Messung mit Zeitauflösung könnte diese Äquivalenz aufheben. Wenn die Fehlerfunktion eines Modells ein langes, flaches Tal aufweist, führt die mehrfache Angabe des besten Punktes nicht zu zusätzlichen Informationen. Der Konfidenzbereich, die Parameterkorrelationen und alternative Anpassungen sollten dargestellt werden. Eine praktische Lösung besteht darin, die J-V-Kurven in Dunkelheit und bei Beleuchtung, verschiedene Lichtintensitäten, die Temperatur, die externe Quanteneffizienz (EQE), die absolute Photolumineszenz (PL) und die transiente Antwort mit gemeinsamen physikalischen Parametern zu beschreiben. Das erneute Freigeben aller Parameter für jeden neuen Datentyp reduziert die Aussagekraft der Analyse. Zuerst wird eine Kalibrierung mit einer Teilmenge der Daten durchgeführt; die Kurve unter anderen Bedingungen wird vorhergesagt und anschließend gemessen. Die Validierung erfordert, dass das Modell erfolgreich Verhaltensweisen vorhersagt, die ihm zuvor nicht gezeigt wurden.

Tandem- und Modulverbindung

Bei einer in Reihe geschalteten Tandemzelle mit zwei Anschlüssen stellt die Stromanpassung eine wesentliche Einschränkung dar; die Addition der maximalen Leistung der einzelnen Unterzellen ergibt nicht die Leistung der gesamten Reihenschaltung. Bei einer vereinfachten Betrachtung werden die Spannungen der Unterzellen bei gemeinsamem Strom addiert, und die Gesamtleistung wird über diesen gemeinsamen Strom maximiert. Bei einer Vier-Anschluss-Konfiguration ist ein unabhängiger elektrischer Betrieb möglich, jedoch müssen auch hier optische Filterung, Verbindungsverluste und Verluste in der Leistungselektronik berücksichtigt werden. Der Vergleich sollte die Anzahl der Anschlüsse und die Anzahl der unabhängigen MPP-Schaltungen klar angeben.

Anstelle eines einzelnen „idealen“ Parametersatzes bei der Unsicherheitsausbreitung werden physikalisch mögliche gemeinsame Verteilungen verwendet. Wenn die Bandlücke, die Absorption und die Beweglichkeit durch dieselbe chemische Veränderung korreliert sind, sollten sie nicht unabhängig voneinander zufällig ausgewählt werden. Das Ergebnis zeigt, welcher Parameter neben der Wirkungsgradverteilung die Entscheidung beeinflusst. So wird eine kostspielige Neuberechnung oder -messung auf den Bereich gelenkt, in dem sie die Unsicherheit am stärksten reduziert. Die Priorität liegt nicht auf der schönsten Simulationskurve, sondern auf Informationen, die das Ergebnis beeinflussen können.

Ein numerisches Bauelementmodell in ein lösbares Problem umwandeln

Es ist nicht ausreichend, ein eindimensionales Bauelement lediglich durch seine Dicke, Bandlücke und die Liste der Beweglichkeiten zu beschreiben. Zuerst werden die Koordinaten, Kontakte, Bandkanten, die dielektrische Permittivität, die Dotierung und die konstante Ladung bestimmt. Anschließend werden $G(x)$ aus dem optischen Modell und $R(n,p,x)$ aus den ausgewählten Mechanismen erstellt. Die Gleichungen von Poisson und der Kontinuität werden zusammen mit den Elektron- und Lochströmen gelöst. Die Ladungsträgerdichte oder die Flussgrenzen an den Kontakten bestimmen die physikalische Bedeutung des Modells.

Bei der endlichen Volumendiskretisierung ist die Stromdifferenz zwischen den beiden Flächen jeder kleinen Zelle gleich der Nettoerzeugung im Volumen. Für ein Elektron im stationären Zustand ist $J_{n,i+1/2} - J_{n,i-1/2}$ ungefähr $q(R_i - G_i)\Delta x_i$. Benachbarte Zellen teilen sich den gleichen Grenzflächenstrom. Wenn alle Zellen zusammengefasst werden, heben sich die inneren Flächenströme gegenseitig auf; es bleiben nur die äußeren Kontakte und die Gesamtproduktion/der Gesamtverlust übrig. Dies ist die Quelle der Erhaltungskontrolle. [R25] [R26] [R27]

Das Modell muss mindestens die folgenden Bedingungen erfüllen: Null-Netto-Strom im Dunkeln bei thermischem Gleichgewicht; optische Leistungsbilanz; stabiler Betrieb bei Verringerung der Gitterdichte; der gesamte elektrische Strom darf nicht von der Position abhängen; erwartetes analytisches Verhalten bei einfachen Randbedingungen wie Null-Verlust oder geringer Fläche. Eine numerische Konvergenzmitteilung ersetzt diese Kontrollen nicht.

Das Optimum der Schichtdicke anhand eines analytischen Beispiels veranschaulichen

Das Licht soll bei $x = 0$ einfallen, die Elektronensammelfläche soll bei $x = d$ liegen. Wir wählen eine reflexionsfreie Funktion $G(x) = \alpha \varphi \exp(-\alpha x)$ und ein beispielhaftes Sammelmodell $P_{col}(x) = \exp[-(d - x)/L]$. Der pro einfallendem Photon gesammelte Anteil ist das Integral dieser beiden Funktionen:

$$F(d) = \frac{\alpha \exp(-d/L)}{\alpha - 1/L} [1 - \exp(-[\alpha - 1/L]d)] . \quad (I.22.5)$$

Dieser Ausdruck ist in der Form $\alpha = 1/L$ angegeben; an diesem Punkt ist der Grenzwert $\alpha d \exp(-d/L)$. Für $\alpha = 2 \mu\text{m}^{-1}$ und $L = 1 \mu\text{m}$ ergibt sich $F(d) = 2[\exp(-d) - \exp(-2d)]$.

Wenn wir die Ableitung gleich Null setzen, erhalten wir $d = \ln 2 \mu\text{m} = 0,693 \mu\text{m}$, und das Maximum ist $F = 0,5$. Die optische Absorption nimmt mit der Dicke kontinuierlich zu. Es wird deutlich, wie in demselben Bauelement eine größere Absorption zu einer größeren Strommenge führen kann, die sich dann auf verschiedene Weise manifestiert.

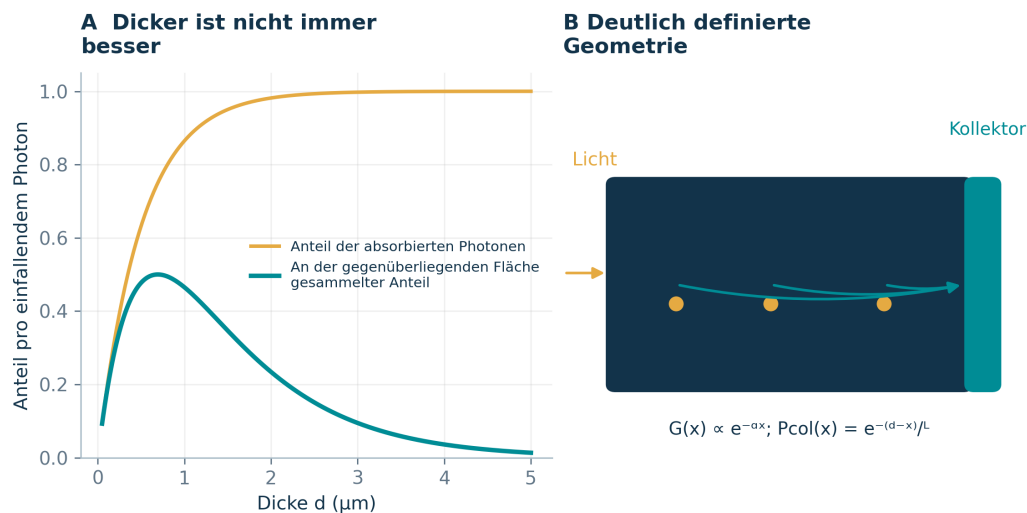


Abbildung 37. Beispiel für eine optimale Schichtdicke bei ausdrücklich angegebener Geometrie. Links nimmt die Absorption monoton zu, während der Anteil, der die gegenüberliegende Elektrode erreicht, ein Maximum durchläuft. In der rechten Abbildung und Formel werden $\alpha = 2 \mu\text{m}^{-1}$ und $L = 1 \mu\text{m}$ verwendet. Die exponentielle Sammelwahrscheinlichkeit ist ein didaktisches Modell und ersetzt nicht die Poisson-Transportlösung einer realen Heterostruktur.

Hätten wir in einem halb-unendlichen Modell mit einem Kollektor auf der Vorderseite $P_{\text{col}} = \exp(-x/L)$ gewählt, hätten wir eine andere Abhängigkeit von der Schichtdicke erhalten. Dieser Vergleich vermittelt eine wichtige Forschungsgewohnheit: Bevor man an ein Optimum glaubt, sollte man die Geometrie, Randbedingungen und Verlustmechanismen zeichnen, die dieses Optimum erzeugen.

Selbsttest

- 1. Wenn die gesamte Absorption 95 % beträgt, ist dann auch die externe Quanteneffizienz (EQE) 95 %?** Nein. Es ist wichtig, in welcher Schicht die Absorption stattfindet und welcher Anteil der erzeugten Ladungsträger gesammelt wird.
- 2. Bestimmt eine einzige J-V-Kurve die physikalischen Parameter eindeutig?** In der Regel nicht. Es sind zusätzliche Messungen erforderlich, die eine unabhängige Sensitivität aufweisen.
- 3. Werden bei einer seriellen Tandem-Anordnung die maximalen Leistungen der einzelnen Teilzellen addiert?** Nein. Unter der Bedingung eines gemeinsamen Stroms müssen die Gesamtspannung und die Gesamtleistung berechnet werden.

Was repräsentieren die optische Konstante, das Gitter und die Validierung?

Die **optischen Konstanten** einer Schicht beschreiben die Ausbreitung und die Dämpfung von Licht innerhalb des Materials. Der Brechungsindex steht in Beziehung zur Phasenverschiebung des Lichts, der Dämpfungskoeffizient zur Absorption; beide können von der Wellenlänge abhängen. Zwei Filme gleicher Dicke, aber unterschiedlicher optischer Eigenschaften, können möglicherweise nicht die gleiche Anzahl an Ladungsträgern erzeugen. Daher ist es notwendig, das Generationsprofil als Eingangsgröße für das elektrische Modell zu verwenden.

Das numerische Netz unterteilt den kontinuierlichen Raum in diskrete, berechenbare Bereiche. Der Strom, der von der gemeinsamen Oberfläche zweier benachbarter Volumina ausgeht, muss mit dem Strom übereinstimmen, der in das andere Volumen einfließt; andernfalls verhält sich die Berechnung so, als ob Ladung erzeugt oder vernichtet würde. Netzverfeinerungs-, Einheits- und Konservierungskontrollen prüfen die numerische Konsistenz. Die **unabhängige Validierung** besteht darin, die Vorhersage des Modells mit einer Messung zu vergleichen, die nicht zur Anpassung verwendet wurde. Ein Parametersatz, der eine einzelne Kurve sehr gut beschreibt, kann bei einer anderen Temperatur versagen; die Qualität der Anpassung ist allein kein Beweis für den Mechanismus.

Lassen Sie uns auch die Symbole an der Grenze erläutern. Die **Dirichlet-Bedingung** besteht beispielsweise darin, das Kontaktpotential auf einen bestimmten Wert zu halten. Die **Neumann-Bedingung** gibt die normale Ableitung oder den zugehörigen Fluss an der Grenze an; in einem geeigneten Modell kann ein Nullfluss eine isolierte Grenze darstellen. Die **Robin-Bedingung** verknüpft den Wert mit der normalen Ableitung; ein physikalisches Beispiel hierfür ist der Rekombinationsfluss, der proportional zur Überschusskonzentration der Ladungsträger an der Oberfläche ist. Γ_D , Γ_N und Γ_R sind die Bezeichnungen für die Randabschnitte, an denen diese verschiedenen Bedingungen angewendet werden. Dies sind keine neuen Materialsichten; sie beschreiben, wie der Berechnungsbereich mit der Außenwelt interagiert.

Materialsuche mit maschinellem Lernen: von der Vorhersage zum Nachweis

Was lernt maschinelles Lernen?

Maschinelles Lernen umfasst Methoden, die auf der Grundlage von Eingangs-Ausgangs-Beziehungen in den Trainingsdaten Vorhersagen für neue Eingaben generieren. Die Eingabe wird als **Merkmal** und der Wert, der vorhergesagt werden soll, als **Ziel** bezeichnet. Beispielsweise können Zusammensetzung und bestimmte Strukturinformationen als Eingabe dienen, während die berechnete Bandlücke das Ziel sein kann. Das Modell lernt dieses Ziel. Wenn das Ziel ausschließlich die berechnete Bandlücke ist, ist die Ausgabe des Modells nicht direkt die Synthetisierbarkeit, das tatsächliche Defektverhalten oder der Zellwirkungsgrad. Das **Trainingsset** ist der Datensatz, der zum Erlernen der Parameter verwendet wird. Das **Validierungsset** dient der Unterstützung bei der Modellauswahl und der Parametereinstellung. Das **Testset** wird getrennt vom Auswahlprozess gehalten, um die endgültige Leistung zu messen. **Überanpassung** bedeutet, dass die Details der Trainingsbeispiele gelernt werden, was zu schlechten Ergebnissen bei neuen Beispielen führt. Ein Maß für erfolgreiches Lernen ist nicht nur die Erklärung bekannter Daten, sondern auch die erfolgreiche Anwendung auf neuartigen, angemessen getrennten Daten.

Warum scheint ein Datenleck wie ein positives Ergebnis?

Datenleckage bezeichnet das indirekte Einfließen von Informationen, die während der Vorhersage nicht bekannt sein sollten, in die Modellauswahl oder die Eingabedaten.

Synthetisches Beispiel: Wir nehmen Messungen von zehn verschiedenen Bereichen desselben Films vor und teilen die Zeilen zufällig in Trainings- und Testdaten auf. Das Modell hat bereits Trainingsbereiche gesehen, die dem Film im Testdatensatz sehr ähnlich sind. Das Ergebnis kann die Fähigkeit zur Vorhersage einer neuen Produktionscharge besser darstellen, als sie tatsächlich ist. Die Aufteilung sollte nicht auf Zeilenbasis erfolgen, sondern auf der Basis echter, unabhängiger Proben oder Chargen.

Bei den berechneten Materialien können sehr ähnliche Zusammensetzungen derselben Familie oder unterschiedliche Berechnungsparameter für dieselbe Struktur ähnliche Probleme verursachen. Wir müssen im Voraus festlegen, auf welche „neue“ Situation wir die Ergebnisse übertragen möchten: handelt es sich um einen neuen Messpunkt,

eine neue Charge, eine neue Zusammensetzung oder eine völlig neue Strukturfamilie? Dies sind unterschiedliche Testverfahren. [R29]

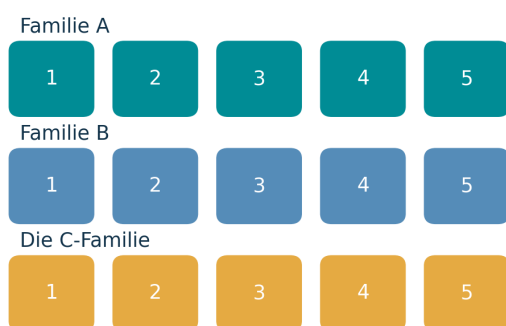
Die **Unsicherheitsschätzung** versucht, das Vertrauen in ein Modell durch einen Wertebereich auszudrücken; die Übereinstimmung dieses Vertrauens mit der tatsächlichen Fehlerhäufigkeit muss zusätzlich überprüft werden. Eine **Probe außerhalb der Trainingsverteilung** stellt eine Bedingung dar, die sich signifikant von den Trainingsdaten unterscheidet. Wenn ein Modell bei einer solchen Probe ein hohes Vertrauen zeigt, bedeutet dies nicht unbedingt, dass es zuverlässig ist.

Aktives Lernen wählt die nächste Berechnung oder das nächste Experiment basierend auf den Informationen aus, die die Ergebnisse liefern werden. Der Kandidat mit dem höchsten vorhergesagten Zielwert ist nicht unbedingt derjenige, der die größte Unsicherheit reduziert. Die Aufteilung des Forschungsbudgets, wobei ein Teil zur Verbesserung eines bekannten Bereichs und ein Teil zur Untersuchung eines unsicheren Bereichs verwendet wird, ist eine Designfrage. Die vorhergesagten Kandidaten werden geordnet, ersetzen aber nicht den experimentellen Beweis.

Verständniskontrolle: Welcher Erfolg wurde gemeldet?

Wenn ein Modell die Bandlücke gut vorhersagt, können wir dann sagen, dass es eine „gute Solarzelle gefunden“ hat? Nein. Die Bandlücke ist einer der Eingangsparameter für die Absorption und die Energieverteilung. Wenn es keine Ziele für die Phase, Defekte, die Grenzfläche, die Herstellung und die Stabilität gibt, wurde der Erfolg in Bezug auf diese Aspekte nicht gemessen.

A. Aufteilung nach chemischer Familie



A und B: Training • C: zurückgehaltener Test

B. Punktschätzung + Unsicherheit

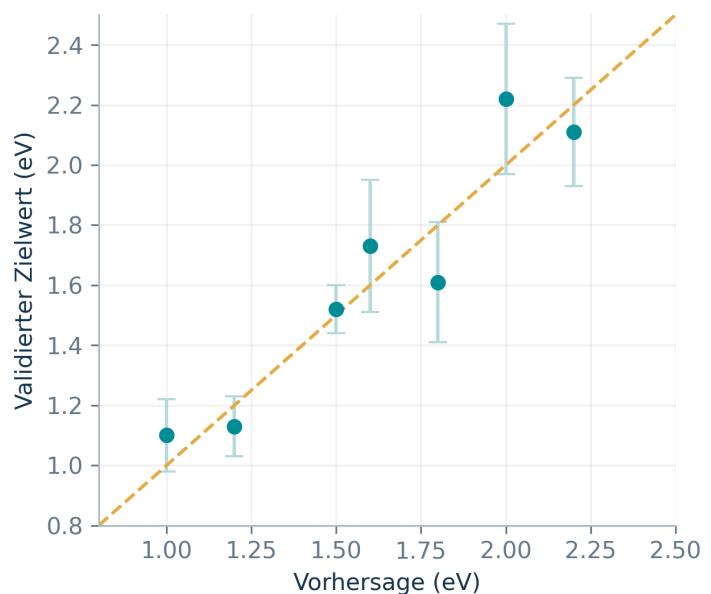


Abbildung 38. Die Datenaufteilung muss zur Forschungsfrage passen. Panel A zeigt, wie eine ganze chemische Familie für den Test zurückgehalten wird. Panel B stellt eine Vorhersage und ihre Unsicherheit dar; die Zahlen sind synthetisch. Die Zuverlässigkeit eines Intervalls wird durch einen Überdeckungstest an zurückgehaltenen Daten geprüft. [R28] [R29]

Maschinelles Lernen kann die Reihenfolge optimieren, in der kostspielige Berechnungen und Experimente durchgeführt werden. Diese Rolle ist wichtig, da der Suchraum sehr groß ist. Allerdings ist die Aufgabe des Modells nicht identisch mit der letztendlichen Forschungszielsetzung. Ein Modell kann beispielsweise die Formierungsenergie vorhersagen, während der Forscher eine synthetisierbare, stabile Solarzelle mit wenigen Defekten und einer geeigneten Grenzfläche anstrebt. Dazwischen gibt es viele Möglichkeiten. Eine der häufigsten semantischen Verschiebungen in der rechnergestützten Forschung besteht darin, die einzige Aufgabe, die das Modell gut löst, auf die gesamte Kette zu übertragen.

Was repräsentiert der Datensatz tatsächlich?

Sowohl die chemische Formel als auch die Quelle einer Datenzeile sind von Bedeutung. Wurde die Energie experimentell ermittelt oder berechnet? Welche funktionale, Pseudopotenzial-, Spin- und Geometrieinstellungen wurden verwendet? Wie wurden Konvergenzprobleme behandelt? Verschiedene Strukturen derselben Verbindung stellen unterschiedliche physikalische Beispiele dar; wiederholte Kopien derselben Struktur sind keine unabhängigen Beispiele. Wenn die Spalte „Bandlücke“ eine Mischung aus optischen Messungen, PBE-Eigenwertdifferenzen und hybriden Berechnungen enthält, wird das Ziel des Modells unklar. Es ist nicht möglich, Rauschen in den Labels durch ein größeres Netzwerk zu beseitigen.

Negative Ergebnisse sollten im Datensatz sichtbar sein. Fehlgeschlagene Synthesen, instabile Relaxationen, Proben, die außerhalb des Messbereichs liegen, und das Nicht-Einhalten von Prozessbedingungen führen dazu, dass das Modell nur die Welt erfolgreicher Veröffentlichungen lernt. „Mit dieser Methode kann es nicht hergestellt werden“ und „das Material ist nicht verwendbar“ sind nicht dasselbe. Ein Fehlschlag in der Laboraufzeichnung kann auf das Lösungsmittel, die Atmosphäre, die Ausrüstung oder das Prozessfenster zurückzuführen sein. Das nutzbare Lernziel sollte das Ergebnis und die zugehörigen Bedingungen zusammenfassen.

Datenleck und falsche Verallgemeinerung

Datenlecks entstehen, wenn Informationen, die nicht im Testdatensatz enthalten sein sollten, in den Trainings- oder Modellselektionsprozess einfließen. Das zufällige Aufteilen leicht veränderter Kopien derselben Datenstruktur, das Verteilen von Beispielen derselben Stichprobe auf Trainings- und Testdatensätze oder das Anwenden der Normalisierung auf den gesamten Datensatz können zu überoptimistischen Ergebnissen führen. Auch die wiederholte Betrachtung der Testergebnisse zur Auswahl von Merkmalen und Modellen beeinträchtigt die Unabhängigkeit des Tests. Kapoor und Narayanan haben systematisch untersucht, dass dieses Problem in der auf maschinellern Lernen basierenden Wissenschaft weit verbreitet und vielgestaltig ist.

[R29]

Bei der Forschung im Bereich der Photovoltaik sollte die Aufteilung so erfolgen, dass sie für die Anwendung geeignet ist. Für die Verallgemeinerung auf eine neue Laborcharge ist eine auf Charge basierende Bewertung sinnvoll; für die Verallgemeinerung auf eine neue Chemie ist eine auf chemische Familie basierende Bewertung sinnvoll; für die Verallgemeinerung auf zukünftige Kandidaten ist eine auf Zeit basierende Bewertung sinnvoll. Das vollständige Entfernen aller neuen Elemente aus der Analyse ist zwar sehr restriktiv, aber in einigen Fällen eine notwendige Einschränkung. Das Ergebnis einer zufälligen Aufteilung ist dennoch nützlich, liefert aber nur Informationen über neue Beispiele mit ähnlicher Verteilung. Die Formulierung „für allgemeine Zwecke“ ist keine Garantie für die Genauigkeit außerhalb der betrachteten Verteilung.

Als Beispiel: Wenn für jede der 100 Hauptstrukturen 20 kleine Perturbationen erzeugt werden, entstehen 2000 Zeilen. Bei einer zufälligen Aufteilung in 80 %/20 % befinden sich die meisten Geschwister der Teststrukturen in der Trainingsmenge. Das Modell kann hohe Erfolge erzielen, ohne die neue Hauptstruktur zu lernen. Das Trennen der Hauptstrukturen in ihre jeweiligen Gruppen ermöglicht eine bessere Untersuchung der eigentlichen Generalisierungsfrage. Die gleiche Logik gilt für eine große Anzahl von Solarzellen, die aus demselben Substrat geschnitten wurden, und für wiederholte Daten, die aus derselben Studie stammen.

Ein guter Regressionswert ist kein Entdeckungserfolg

Der mittlere absolute Fehler gibt an, wie stark das Ziel im Durchschnitt falsch vorhergesagt wird. Wenn jedoch eine Entscheidung anhand eines Schwellenwerts getroffen wird, können falsch-positive Ergebnisse wichtiger sein. Die Matbench Discovery-Studie unterscheidet zwischen der Vorhersage der Bildungsenergie, der thermodynamischen Stabilitätsklassifizierung und der retrospektiven Prüfung im Vergleich zur prospektiven Suche; sie zeigt, dass ein geringer Regressionsfehler möglicherweise nicht verhindern kann, dass in der Nähe des Schwellenwerts hohe falsch-positive Ergebnisse auftreten. [R28] Daher werden Präzision, Trefferquote, falsch-positive Rate, die Kosten pro erfolgreicher Berechnung und die Top-k-Anreicherung zusammen mit der jeweiligen Aufgabe ausgewählt.

Beispiel für die Bayes-Analyse: Von 10.000 Kandidaten erfüllen nur 1 % das Ziel. Wenn die Sensitivität 90 % beträgt, werden von 100 tatsächlichen Positiven 90 erkannt. Wenn die Spezifität 95 % beträgt, werden von 9900 Negativen 5 % als falsch positiv eingestuft, d. h. 495. Von den ausgewählten 585 Kandidaten sind nur 90 korrekt: Der positive prädiktive Wert beträgt 15,4 %. Obwohl die „Genauigkeit sehr hoch“ erscheint, kann der Großteil des experimentellen Budgets für erfolglose Kandidaten aufgewendet werden. Wenn die Spezifität auf 99 % ansteigt, bleiben 99 falsch positive Ergebnisse,

und die Rate steigt auf 47,6 %. Bei seltenen Zielen kann die Grundrate nicht vernachlässigt werden.

Unsicherheit kann konzeptionell in epistemische Unsicherheit, d. h. Informations- oder Modellmangel, und aleatorische Unsicherheit, d. h. natürliche Variabilität in den Daten oder im Prozess, unterteilt werden. Die Ensemble-Streuung oder die vom Modell gelieferte Standardabweichung stellt nicht automatisch ein kalibriertes Konfidenzintervall dar. Ob die angegebenen Abdeckungsraten für die Vorhersageintervalle tatsächlich erreicht werden, wird anhand unabhängiger Daten gemessen. Wenn mehrere Modelle dasselbe Trainingsset und eine ähnliche Architektur verwenden, können sie gemeinsam in die gleiche Richtung falsch liegen. Ansätze wie konforme Methoden haben ebenfalls eigene Annahmen bezüglich ihrer Veränderbarkeit und Verteilung; ihre Garantien sind unter Verteilungsverschiebung nicht unbegrenzt.

Die angemessene Rolle universeller interatomarer Potenziale

Ein interatomares Potential sagt Energie, Kräfte und manchmal mechanische Spannungen voraus. Damit können die Kosten für Strukturrelaxationen oder molekulardynamische Rechnungen gesenkt werden. In seiner Standardform liefert das Modell keine Bandlücke, optische Übergangsstärke, Defektfangkoeffizienten oder PV-Wirkungsgrad. Die Ausgaben eines Energiemodells als diese elektronischen Größen zu interpretieren, ist ein kategorischer Fehler. Die Koordination, der Oxidationszustand, die Ladung, die Oberfläche und die Grenzflächen, die nicht zum Trainingsbereich gehören, müssen ebenfalls untersucht werden. Der Erfolg bei dreidimensionalen Kristallen garantiert nicht den gleichen Erfolg bei spärlich abgedeckter Oberflächenchemie.

Die praktische Vorgehensweise ist wie folgt: Zuerst werden die Formel und die Struktur chemisch überprüft; anschließend werden die Trainingsähnlichkeit und die Unsicherheit des Modells bewertet; eine kostengünstige Sortierung wird durchgeführt; die ausgewählten Kandidaten werden durch unabhängige und konvergente Berechnungen überprüft. Das Schreiben der Modellausgabe als „Prioritätskandidat mit dieser Punktzahl unter diesem Modell“ anstelle von „stabiles Material“ erhält das Evidenzniveau. Eine DFT-Überprüfung ist ebenfalls kein Beweis für die Synthese. Wenn die Etikettenkette bei jedem Schritt beibehalten wird, werden negative Ergebnisse zu wertvollen Daten für das nächste Modell.

Aktives Lernen und Reproduzierbarkeit

Beim aktiven Lernen wählt das Modell den Kandidaten aus, von dem die nächste Berechnung oder das nächste Experiment am meisten profitieren würde. Allein die Auswahl des Kandidaten mit dem höchsten geschätzten Wirkungsgrad könnte dazu führen, dass immer wieder derselbe chemische Bereich untersucht wird. Unsicherheit, Vielfalt, Kosten und praktische Umsetzbarkeit werden gemeinsam berücksichtigt. Das Lernziel kann auf eine Entscheidung ausgerichtet sein: Die Frage „Welcher kostengünstige Test wird diese Gruppe eliminieren?“ ist manchmal wertvoller als die Frage „Welcher Kandidat hat die höchste Punktzahl?“. Die Identität der Proben, die Vorbereitungsbedingungen und die Ursachen für das Scheitern werden für das experimentelle Feedback maschinenlesbar gespeichert.

Die FAIR-Prinzipien zielen darauf ab, dass Daten auffindbar, zugänglich, interoperabel und wiederverwendbar sind. Sie sind nicht identisch mit offenem Zugang; auch eingeschränkte Daten können definierte Zugriffsbedingungen und ausreichende Metadaten haben. [R30] Das Forschungspaket speichert die Datenversion, die Liste der Partitionen, die Vorverarbeitungsschritte, die Zufallszahlen, die Softwareversionen, die Modellgewichte, die Hardwarekonfiguration und das Datum der letzten Auswertung. Die SHA-256-Prüfsumme einer Datei dient dazu, zu überprüfen, ob sich die Datei nicht verändert hat; sie beweist jedoch nicht, dass die darin enthaltenen Informationen korrekt sind. Die Erzeugung des gleichen Ergebnisses aus der gleichen Eingabe ist Reproduzierbarkeit; der Erfolg in einem unabhängigen Labor stellt ein höheres Evidenzniveau dar.

Die Frage nach der Generalisierung sollte vor der Datenaufteilung formuliert werden

Die Frage „Findet das Modell das unbekannte Material?“ kann auf verschiedene Arten interpretiert werden. Das Vorhersagen einer neuen Zusammensetzung innerhalb derselben chemischen Familie, das Übergreifen zu einem neuen kristallinen Prototyp und das Vorhersagen einer völlig neuen Elementkombination sind nicht dasselbe. Während die zufällige Aufteilung in Zeilen bei der ersten Aufgabe gute Ergebnisse liefert, da sie ähnliche Varianten desselben Materials für das Training und die Tests verteilt, kann sie bei der dritten Aufgabe wenig Informationen liefern. Die Art der Aufteilung für die Tests sollte anhand der Art der Verallgemeinerung ausgewählt werden, die in der Forschung verwendet wird. [R28] [R29]

Die Skalierung, die Merkmalsauswahl und die Hyperparameteroptimierung werden durchgeführt, ohne die Testgruppe zu berücksichtigen. Wenn die Struktur entspannt wurde, wird auch untersucht, ob während der Entspannung Informationen aus dem Testlabel verwendet wurden. Mehrere Modelle, die aus derselben Quelle stammen, sollten nicht als unabhängige Stichproben betrachtet werden. Die Erkennung von

Duplikaten anhand der Zusammensetzung, der Struktur und der Quell-ID ist ein wissenschaftlicher Bestandteil der Datenbereinigung.

Vorhersageunsicherheit mit der Auswahl verknüpfen

Wenn ein Modell zwei Schätzwerte liefert, beispielsweise $1,40 \pm 0,05$ eV und $1,45 \pm 0,40$ eV, dann ignoriert die Auswahl allein anhand der Nähe zum Mittelwert die Unsicherheit. Die Wahrscheinlichkeit, dass der Zielwert in den Bereich fällt, die Rechenkosten und die Entfernung zu unbekannter Chemie können gemeinsam bewertet werden. Dazu sollte die Abdeckung der Fehlerbalken an zurückgehaltenen Daten geprüft werden: Decken beispielsweise die als 90 % bezeichneten Bereiche tatsächlich die ungefähren 90 % der Ergebnisse ab? Ein nicht kalibrierter, enger Bereich vermittelt lediglich den Eindruck hoher Sicherheit.

Beim aktiven Lernen kann die wiederholte Berechnung der vom Modell bevorzugten Kandidaten dazu führen, dass der bekannte Bereich eingeschränkt wird. Eine Auswahl von Beispielen, die eine hohe erwartete Leistung, hohe Unsicherheit und eine große chemische Vielfalt aufweisen, kann einer Auswahlgruppe hinzugefügt werden. Ziel ist es nicht nur, die Vorhersagegenauigkeit zu verbessern, sondern auch Informationen zu sammeln, die die Entscheidung für die Forschung beeinflussen. Nach jeder neuen Berechnung werden die Datenversion, die Auswahlregel und die validierten Ergebnisse gespeichert, sodass eine Unterscheidung zwischen der retrospektiven Auswahl erfolgreicher Kandidaten und der prospektiven Vorhersage getroffen werden kann.

[R30]

Selbsttest

1. **Wählt ein Modell mit geringem durchschnittlichen Energiefehler alle stabilen Kandidaten korrekt aus?** Nein. Fehler in der Nähe des Schwellenwerts und die Grundrate der Kandidaten führen zu falsch-positiven Ergebnissen.
2. **Können verschiedene Perturbationen derselben Struktur beim Training und Testen auftreten?** Wenn das Ziel darin besteht, auf eine neue Struktur zu generalisieren, sollten sie zusammengefasst und getrennt behandelt werden; andernfalls kann es zu einer Überanpassung kommen.
3. **Wenn das universelle Potenzial gut entspannt ist, wurde dann ein PV-Material gefunden?** Nein. Es fehlen noch elektronische, defektbezogene, grenzflächenbezogene, synthesebezogene und bauelementbezogene Nachweise.

Versuchsplanung und Statistik: Wie erkennt man eine wirksame Änderung?

Warum dürfen wir einen Unterschied nicht sofort als einen Effekt deuten?

Wenn die Wirkungsgrade zweier Zellen unterschiedlich sind, kann dies auf die veränderte Prozedur, das Ausgangsmaterial, die Tagesbedingungen oder Unterschiede bei der Messung zurückzuführen sein. Die **Experimentelleinheit** ist die kleinste Einheit, auf die die Prozedur unabhängig angewendet wird. Eine große Anzahl von Messpunkten auf demselben Wafer bedeutet nicht, dass es sich um eine große Anzahl unabhängiger Wafer handelt. Die **Kontrollgruppe** ist eine möglichst gut angepasste Referenz, die die Bedingungen außerhalb der Prozedur für den Vergleich darstellt. Der **Faktor** ist die Bedingung, die wir verändern; die **Antwort** ist das Ergebnis, das wir messen.

Randomisierung reduziert die Auswirkungen von sequenziellen Effekten, indem die Reihenfolge der Verarbeitung oder Messung für die Gruppen zufällig bestimmt wird, wodurch verhindert wird, dass sich diese Effekte auf eine einzelne Gruppe konzentrieren. **Blockierung** beinhaltet den Vergleich innerhalb einer bekannten Quelle der Variabilität, wie z. B. Tag, Charge oder Gerät. Ziel beider Methoden ist es nicht, die Proben zufällig zu erzeugen, sondern die Quellen zu kontrollieren, die den interessierenden Effekt beeinflussen. [R31]

Mittelwert, Streuung und unabhängige Wiederholung

Der Mittelwert ist die Summe der Werte geteilt durch die Anzahl der Werte. **Die Standardabweichung** beschreibt die typische Streuung der Messwerte um den Mittelwert. **Synthetisches Beispiel:** Es werden die Wirkungsgrade von drei unabhängigen Zellen, 20 %, 21 % und 22 %, betrachtet. Der Mittelwert ist 21 %, die Standardabweichung der Stichprobe beträgt 1 Prozentpunkt. Diese Abweichung bedeutet nicht, dass die Daten 1 % fehlerhaft sind; sie fasst zusammen, wie stark die drei Zellen voneinander abweichen. Die Unsicherheit der Mittelwertschätzung hängt auch von der Anzahl der Stichproben und der Unabhängigkeit ab.

Das **Konfidenzintervall** ist ein Bereich, der auf der Abdeckungseigenschaft wiederholter Stichproben der gewählten statistischen Methode basiert. Allein die Angabe eines Mittelwerts mit mehr Dezimalstellen erhöht nicht die Aussagekraft. Der **p-Wert** bezieht sich auf die Wahrscheinlichkeit, die beobachteten oder noch extremeren Daten unter einer bestimmten Nullhypothese und unter den gegebenen Annahmen zu erhalten; er ist nicht die Wahrscheinlichkeit, dass die Hypothese korrekt

ist. Die **Effektstärke** beschreibt das Ausmaß des Unterschieds. Ein sehr kleiner, aber statistisch signifikanter Unterschied kann in der Praxis irrelevant sein; ein großer, aber unsicherer Unterschied kann neue Daten erfordern.

Interaktion bedeutet, dass die Wirkung eines Faktors von der Höhe eines anderen Faktors abhängt. Beispielsweise kann eine Dotierung bei niedriger Glühtemperatur vorteilhaft sein, bei hoher Temperatur jedoch schädlich. Das Testen der Dotierung nur bei einer einzigen Temperatur zeigt nicht das Gesamtbild. Ein **faktorielles Design** testet systematisch Kombinationen von Faktorebenen. Im Folgenden werden wir die Zahlen in ein vordefiniertes experimentelles Design einfügen, um die Entscheidungen zu treffen.

Verständniskontrolle: Sind es zwanzig Messungen oder zwei Experimente?

Wenn auf einem Kontrollwafer und einem Prozesswafer jeweils zehn Messpunkte erfasst werden, liegen keine zwanzig unabhängige Prozesswiederholungen vor. Die Messpunkte zeigen die Variation innerhalb des Wafers. Um die Wiederholbarkeit des Prozesses auf verschiedenen Wafern zu bewerten, sind unabhängige Waferproduktionen erforderlich. In der Statistik ist die korrekte Einheit, die gezählt werden muss, nicht die Anzahl der Zeilen in der Tabelle.

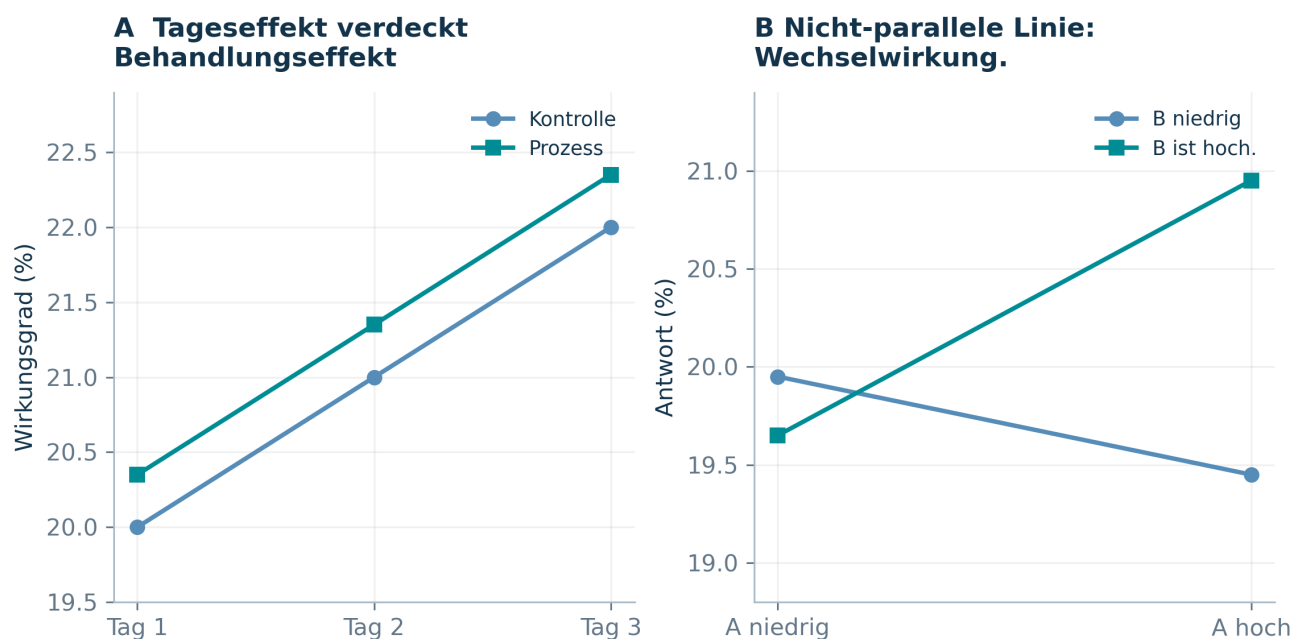


Abbildung 39. Anschauliche Beispiele für Blockierung und Interaktion. In Panel A ist der Tageseffekt groß, der Unterschied zwischen den Behandlungen innerhalb desselben Tages beträgt +0,35 Prozentpunkte. In Panel B ändert ein Faktor seine Wirkung in Abhängigkeit vom Niveau eines anderen Faktors. Alle Ergebnisse sind mit expliziten Formeln erzeugt. [R31]

Der kostspielige Teil einer Laboruntersuchung ist nicht nur die Geräteausstattung, sondern auch die Wochen, die für die Fehlersuche aufgewendet werden, wenn eine falsche kausale Schlussfolgerung gezogen wird. Wenn durch eine neue Dotierung eine

höhere Effizienz erzielt wird, kann dies tatsächlich auf die Wirksamkeit der Dotierung zurückzuführen sein. Es ist jedoch auch möglich, dass am selben Tag die Luftfeuchtigkeit gesunken ist, sich die Alterung der Lösung verändert hat, sich das Verhalten der Temperplatte geändert hat oder der Bediener eine bessere Filmbeschichtung durchgeführt hat. Die Statistik sollte nicht als ein nachträglich einsetzbares Werkzeug zur Erzielung eines guten p-Wertes betrachtet werden, sondern als eine Denkweise, die bereits bei der Planung des Experiments diese alternativen Faktoren berücksichtigt.

Versuchseinheit und Messwiederholung unterscheiden

Die acht Pixel auf einem Substrat stellen in der Regel nicht acht vollständig unabhängige Fertigungsexperimente dar. Sie verwenden dieselbe Lösung, denselben Beschichtungsschritt und denselben Temperprozess. Die Erfassung von 50 J-V-Kurven aus derselben Zelle misst nicht die Fertigungsvariabilität, sondern das Mess- und Zeitverhalten des Bauelements. Bei der Angabe der Stichprobengröße wird separat angegeben, wie viele unabhängige Lösungen, Substrate, Fertigungspartien und Bauelemente vorhanden sind. Andernfalls werden technische Wiederholungen so behandelt, als handele es sich um unabhängige Proben, wodurch die Unsicherheit verringert wird.

Originalbeispiel: Die durchschnittliche Leistung von 12 dotierten Pixeln 23,0 % auf einem einzigen Substrat soll mit der durchschnittlichen Leistung von 12 Kontrollpixeln 22,0 % verglichen werden, die an einem anderen Tag hergestellt wurden. Obwohl insgesamt „n = 24“ vorliegt, sind der Dotierungseffekt und der Substrateffekt miteinander verknüpft. An demselben Tag und unter denselben kontrollierten Bedingungen sind mehrere unabhängige Substrate erforderlich, auf denen die dotierten und Kontrollpixel zufällig verteilt werden. Die Wiederholung über mehrere Tage zeigt, ob die Ergebnisse die Produktionsvariabilität widerspiegeln. Wenn eine Analyse auf Pixelebene durchgeführt wird, wird die hierarchische Struktur berücksichtigt.

Randomisierung, Blockierung und Blindanalyse

Die Randomisierung reduziert die systematische Anhäufung unbekannter Einflussfaktoren in einer Gruppe. Die Blockierung ordnet bekannte Störfaktoren: Tag, Charge der Lösung oder Ofenposition, in Blöcke ein. Innerhalb jedes Blocks werden sowohl Kontroll- als auch Interventionsproben hergestellt, was dazu beiträgt, die tagesbedingten Veränderungen von den Gruppendifferenzen zu trennen. Die Ressourcen zur statistischen Versuchsplanung des NIST behandeln zufällige Block- und faktoriellen Designs für diesen Zweck. [R31] Randomisierung bedeutet nicht, alle Bedingungen zufällig und ungeordnet zu lassen; sie bezieht sich auf die Neutralisierung der Zuweisungsreihenfolge innerhalb einer definierten Ordnung.

Wenn eine blinde Analyse möglich ist, können die Probenkennzeichnungen, die Bildsegmentierung oder die Entscheidung über die Ausgrenzung von Datenpunkten vor der Person verborgen werden, die diese vornimmt. Die Kriterien für die Akzeptanz/Ausgrenzung werden ohne Kenntnis der Daten festgelegt: beispielsweise ein defekter Messkontakt, ein offensichtlicher physikalischer Kurzschluss oder ein Kalibrierungsfehler. Allein die Feststellung, dass die „der Wirkungsgrad gering“ ist, ist kein ausreichender Grund für die Ausgrenzung. Die ausgeschlossenen Daten und die Begründung werden in einer separaten Datei gespeichert. Die vor der Probenherstellung festgelegten Kriterien sind stärker als Regeln, die nachträglich an die Ergebnisse angepasst werden.

Das Ändern einzelner Variablen kann dazu führen, dass Wechselwirkungen übersehen werden

In einem zweifaktoriellen Experiment werden die vier Kombinationen aus niedrigen/hohen Werten für die Faktoren A und B gemeinsam gemessen. Wenn der Einfluss eines Faktors von dem des anderen abhängt, liegt eine Interaktion vor. Das am Ende des Abschnitts dargestellte, kodierte Modell und das Liniendiagramm führen diese Berechnung Schritt für Schritt durch.

Wenn drei oder vier Faktoren vorliegen, kann ein vollständiges faktorielles Experiment kostspielig sein. Fraktionelle Designs können verwendet werden, wenn bekannt ist, welche Effekte miteinander interagieren; die interagierenden Effekte werden anschließend durch ein Unterscheidungsexperiment überprüft. Nach der Screening-Phase kann die optimale Umgebung mithilfe der Response-Oberfläche untersucht werden. Allerdings kann der Punkt, der in einem anfänglichen, kleinen Datensatz als optimal erscheint, durch Rauschen beeinflusst sein. Die ausgewählte Bedingung wird in neuen und unabhängigen Produktionschargen validiert. Die für die Optimierung verwendeten Beispiele und die Validierungsbeispiele haben unterschiedliche Aufgaben.

Effektstärke, Unsicherheit und Selektionsbias

Wenn man für eine Gruppe nur die beste Zelle angibt, werden die Schwankungen verschleiert. Mittelwert/Median, Streuung, alle Datenpunkte, Wirkungsgrad, V_{oc} , J_{sc} , FF und Produktionserfolg sind zusammen betrachtet nützlich. Die „beste“ Zelle ist ein möglicher Ausreißer; eine größere Gruppe, in der mehr Zellen produziert werden, kann aufgrund der höheren Stichprobenzahl eine noch bessere Zelle finden. „Die besten von 8 Zellen in der Kontrollgruppe und 80 Zellen in der Interventionsgruppe“ ist kein fairer Prozessvergleich. Eine unabhängige, zertifizierte Bestleistung ist eine andere Frage, und der Vorteil eines reproduzierbaren Prozesses ist eine weitere Frage.

In einer hypothetischen unabhängigen Zwei-Gruppen-Analyse sollen in jeder der beiden Gruppen 10 unabhängige Stichproben vorliegen, wobei die

Standardabweichungen 0,5 Prozentpunkte und die Differenz zwischen den Mittelwerten 0,6 Punkte beträgt. Der Standardfehler der Differenz beträgt $\sqrt{(0,5^2/10 + 0,5^2/10)} \approx 0,224$ Punkte. In einem geeigneten, approximierten t-Intervall beträgt das Konfidenzintervall 95 % ungefähr $0,6 \pm 0,47$ Punkte. Dies ist ein Lehrbeispiel, bei dem die Stichproben unabhängig sind und die Modellannahmen plausibel sind; es kann nicht direkt auf die Pixel eines einzelnen Substrats angewendet werden. Bei einem gepaarten Design sollte stattdessen die Variabilität der Unterschiede innerhalb der Blöcke verwendet werden.

Der p-Wert bewertet, inwieweit die Daten unter der Nullhypothese und dem Modell unerwartet sind; er ist nicht das Maß für die praktische Bedeutung des Effekts oder die Wahrscheinlichkeit, dass die Hypothese korrekt ist. Wenn eine große Anzahl von Variablen, Anneilungsverfahren, Lösungsmitteln und Kriterien getestet und nur der niedrigste p-Wert ausgewählt wird, steigt das Risiko einer fehlerhaften Entdeckung. Der primäre Endpunkt wird im Voraus festgelegt, und multiple Vergleiche sowie explorative Analysen werden explizit angegeben. Ein Effekt kann statistisch signifikant sein, aber aufgrund der Produktionskosten und des Verlusts der Lebensdauer irrelevant; das Entscheidungskriterium sollte sowohl wissenschaftliche als auch praktische Ziele berücksichtigen.

Interventionskette für den kausalen Mechanismus

Die Kette „Dotierung → große Kristallite → hoher Wirkungsgrad“ beinhaltet drei separate Annahmen. Es muss separat untersucht werden, ob die Dotierung die Kristallitgröße verändert, ob die Kristallitgröße den entsprechenden elektrischen Verlust beeinflusst und ob diese Veränderung den Wirkungsgrad beeinflusst. Wenn die Dotierung gleichzeitig die Oberflächenchemie, die Energieniveaus und die Kristallisationsgeschwindigkeit verändert, könnte die Kristallitgröße lediglich ein begleitendes Phänomen sein. Für das Verständnis des Mechanismus sind kontrollierte Dotierungen wertvoll, bei denen die Morphologie gleich bleibt, sich aber die Chemie, die Dosis, die Umkehrung oder die Herstellungsmethode unterscheidet.

Der Forscher kann für jede Hypothese eine alternative Erklärung formulieren und beobachtbare Unterscheidungsmerkmale zwischen beiden angeben. Zum Beispiel: Ist die Verbesserung von V_{oc} auf die Volumenpassivierung oder auf die Kontaktselektivität zurückzuführen? Ein Vergleich der absoluten PL/QFLS-Werte für den unbehandelten Film, den Einzelkontaktstapel und das vollständige Bauelement, gefolgt von einer Änderung der Kontakte, bietet einen Ansatz. Wenn dasselbe Modell nicht alle Ergebnisse erklären kann, wird die Hypothese nicht weiterverfolgt; die Unsicherheit und die fehlgeschlagene Erklärung werden dokumentiert. Ein negatives Ergebnis, das gut konzipiert ist, zeigt, welcher Ansatz verworfen werden sollte.

Auswahl kostengünstiger und aussagekräftiger Experimente

Die Antwort auf jede Frage ist nicht einfach ein größerer Datensatz. Wenn die Hauptthese die Existenz einer Phase ist, ist zunächst eine zuverlässige Phasenbestimmung erforderlich; wenn die These ein geringerer Verlust an der Grenzfläche ist, ist zunächst eine Messung erforderlich, die auf diesen Verlust reagiert; wenn die These die Lebensdauer ist, ist zunächst ein Betrieb unter der entsprechenden Belastung erforderlich. Der Wert eines Experiments wird anhand des erwarteten Informationsgewinns, der Kosten und der Fähigkeit zur Veränderung der Entscheidung bewertet. Eine vorab festgelegte Stopppregel verhindert endlose Anpassungen, wenn das Ergebnis negativ ist. Wenn eine plausible Reparaturhypothese vorliegt, wird ein neues Experiment als separate Hypothese eröffnet; das alte, fehlgeschlagene Ergebnis wird nicht gelöscht.

Differenz innerhalb eines Blocks: eine einfache, aber wirkungsvolle Berechnung

An drei Produktionstagen betragen die Wirkungsgrade der Kontrollzellen 20,00 %, 21,00 % bzw. 22,00 %; die bearbeiteten Proben desselben Tages seien 20,35 %, 21,35 % und 22,35 %. Der Tageseffekt beträgt eine Veränderung von 2 Prozentpunkten, während der Bearbeitungseffekt in jedem Block +0,35 Prozentpunkte beträgt. Wenn wir jedoch die Kontrolle des ersten Tages mit der bearbeiteten Probe des letzten Tages vergleichen, sehen wir einen Unterschied von +2,35 Punkten; der Großteil dieses Unterschieds ist nicht auf die Bearbeitung zurückzuführen. Der übereinstimmende Unterschied innerhalb des Blocks eliminiert teilweise die gemeinsame Tagesbedingung.

Im realen Experiment sind an jedem Tag unabhängige Fertigungswiederholungen erforderlich. Der Tagesterm im Modell $y_{ij} = \mu + \beta \text{Behandlung} + b \text{Tag} + \epsilon_{ij}$ beschreibt die Abhängigkeit zwischen Proben desselben Tages. Zehn Messdurchläufe an derselben Zelle zählen nicht als zehn unabhängige Fertigungswiederholungen.

Berechnung der Wechselwirkungseffekte bei einem zweifaktoriellen Experiment

Wir kodieren die Faktoren auf niedriger Stufe mit -1 und auf hoher Stufe mit +1. Das Modell $y = \beta_0 + \beta_A A + \beta_B B + \beta_{AB} AB$ beinhaltet, dass der Einfluss einer Variablen von der anderen abhängt. In der Abbildung wurden $\beta_0 = 20$, $\beta_A = 0,2$, $\beta_B = 0,3$ und $\beta_{AB} = 0,45$ gewählt. Wenn B niedrig ist und A erhöht wird, sinkt y um 0,5 Punkte; wenn B hoch ist, erhöht dieselbe Maßnahme y um 1,3 Punkte. Die einzelne Veränderung einer Variablen könnte diesen Widerspruch als einen Mechanismuswechsel interpretieren; das faktorielle Design macht die Interaktion sichtbar. [R31]

In diesem Beispiel betragen die Eckwerte nacheinander 19,95, 19,45, 19,65 und 20,95. Allein die Veröffentlichung des besten Eckwerts lehrt nicht, wie der Prozessparameterraum aussieht. Die Mittelpunkte liefern Informationen über die Krümmung, die Wiederholungen ermöglichen die Vorhersage von Rauschen, und die zufällige Reihenfolge reduziert die Vermischung von Drift mit den Faktoren im Laufe der Zeit. Die Forschungsfrage wandelt sich von „welches Rezept liefert den höchsten Wert?“ zu „welcher Effekt wiederholt sich unter welchen Bedingungen?“

Selbsttest

- 1. Stellt eine Anordnung von 20 Pixeln auf einem Substrat 20 unabhängige Fertigungsdurchläufe dar?** In den meisten Fällen nein. Aufgrund der gemeinsamen Fertigungshistorie werden Gruppen-/Hierarchieeffekte berücksichtigt.
- 2. Was wird gemeldet, wenn der Dotierungseffekt mit steigender Temperatur verschwindet?** Die Wechselwirkung und die Bedingungen, unter denen der Vorteil besteht; nicht eine allgemeine Verbesserung, die unter allen Bedingungen auftritt.

Von der Zelle zum Modul, zum Standort und über den gesamten Lebenszyklus

Es besteht eine Beziehung zwischen dem Wirkungsgrad der Zelle und der täglich erzeugten Energie

Die Leistung einer Zelle unter Standardbedingungen bedeutet nicht, dass sie draußen jederzeit mit der gleichen Leistung arbeitet. Die Position der Sonne, Wolken, Verschmutzung, Temperatur, Schatten und die Betriebsbereitschaft des Geräts beeinflussen das Ergebnis. Die **Nennleistung** ist die auf einem bestimmten Referenzwert basierende Leistungsangabe. Die **Energieerzeugung** ist die Summe der tatsächlichen Leistungskurve über die Zeit. Die Einheit ist kWh, was sich von der Leistungseinheit kW unterscheidet.

Synthetischer Tag: Ein System soll zwei Stunden lang durchschnittlich 1 kW, in den folgenden drei Stunden 2 kW und in der letzten Stunde 0,5 kW Leistung erbringen. Die tägliche Energie beträgt dann $2 \times 1 + 3 \times 2 + 1 \times 0,5 = 8,5$ kWh. Die Verwendung eines Durchschnittswertes über mehrere Stunden ist eine Annäherung an das Integral. Es sollte auch klar angegeben werden, wie diese Summe mit negativen Messwerten in der Nacht, Ausfallzeiten oder fehlenden Daten umgeht.

Was repräsentiert der Nenner der Performance Ratio?

Der **Referenzertrag** ist die äquivalente Stundenzahl, die sich ergibt, wenn die auf die Modulebene eingestrahlte Energie pro Fläche durch die gewählte Referenzbestrahlungsstärke geteilt wird. Der **spezifische Energieertrag** ist das Verhältnis der erzeugten Energie zur installierten Nennleistung; er wird beispielsweise in kWh/kWp angegeben. Die **Performance Ratio** vergleicht den tatsächlich erzielten spezifischen Ertrag mit einer strahlungsbasierten Referenz. Sie fasst viele Systemverluste zusammen und isoliert den einzelnen verantwortlichen Mechanismus nicht. Die verwendete Temperaturkorrektur und Messmethode müssen zusätzlich angegeben werden.

Ein **bifaziales Modul** kann auch das Licht nutzen, das von der Rückseite einfällt. Der Anteil des vom Boden reflektierten Lichts hängt von der Reflexionsfähigkeit der Oberfläche, der Montagehöhe und den Abständen ab. Das Verhältnis der Lichtreflexion der Oberfläche wird als **Albedo** bezeichnet. Die Tatsache, dass dasselbe Modul in verschiedenen Gebieten unterschiedliche Energiemengen erzeugt, bedeutet nicht, dass sich das Material verändert hat.

Die **Lebenszyklusanalyse** fasst die ausgewählten Umweltauswirkungen von der Rohstoffgewinnung über die Produktion, die Nutzung bis hin zum Recycling innerhalb definierter Grenzen zusammen. Die **funktionelle Einheit** ist der Bezugspunkt für den Vergleich, z. B. 1 kWh gelieferter Strom. Die **Energie-Amortisationszeit** gibt an, wie lange es dauert, bis die in der Produktion aufgewendete Energie unter bestimmten Rechenbedingungen durch die Nutzung kompensiert wird; sie ist nicht dasselbe wie die Amortisationszeit für materielle Investitionen. Die **LCOE (Levelized Cost of Energy)** verknüpft die Kosten über die gesamte Lebensdauer mit der Energieerzeugung in einem definierten ökonomischen Modell. Unterschiedliche Annahmen über die Nutzungsdauer, die Finanzierung und die Sonneneinstrahlung führen zu unterschiedlichen Ergebnissen für dieselbe Technologie.

Verständniskontrolle: Führt ein höherer Wirkungsgrad zu geringeren Auswirkungen?

Eine Erhöhung des Wirkungsgrads kann die für die gleiche Leistung benötigte Fläche reduzieren. Wenn sich jedoch der Energieaufwand für die Herstellung oder die Lebensdauer erheblich verschlechtert, kann sich die Umweltbelastung pro kWh erhöhen. Ohne den Wirkungsgrad, den Produktionsaufwand und die über die gesamte Lebensdauer erzeugte Energie innerhalb derselben Systemgrenzen zu vergleichen, kann man nicht beurteilen, ob ein System „nachhaltiger“ ist.

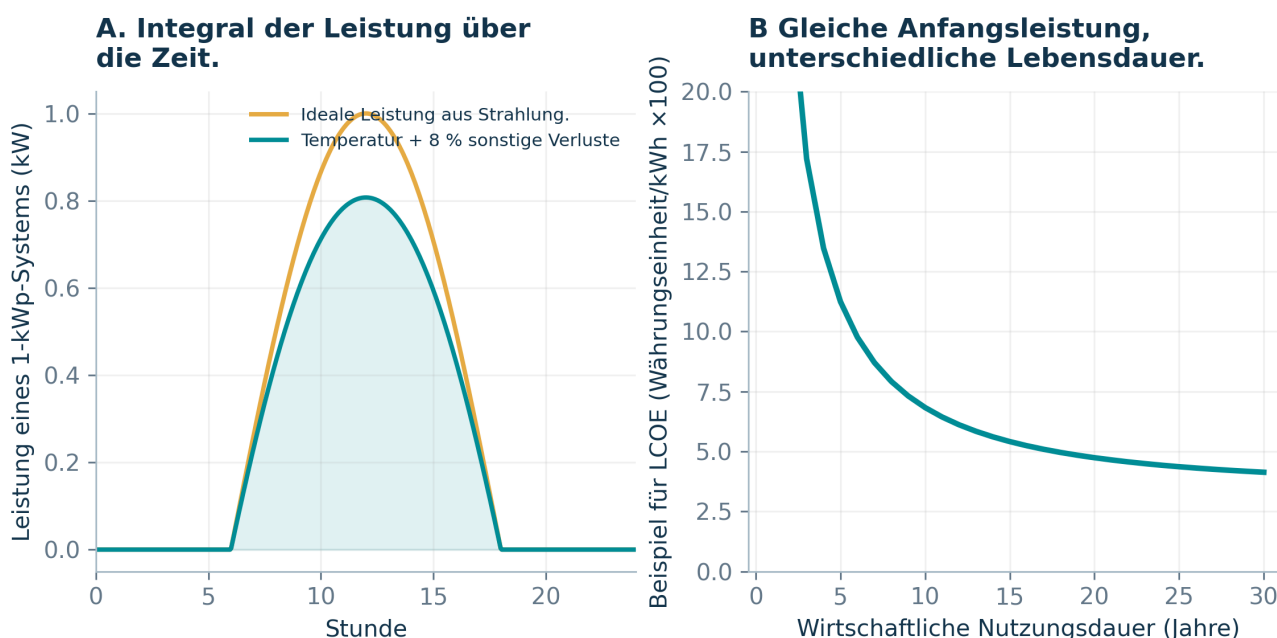


Abbildung 40. Von der anfänglichen Leistung bis zur Lebenszeitenergie. Panel A stellt die Temperatur- und Verlustberechnung für einen synthetischen Tag bei 1 kWp dar. Panel B zeigt den Einfluss der Lebensdauer auf die LCOE (Levelized Cost of Energy) bei ausgewählten Kosten-/Produktionsannahmen; es handelt sich nicht um eine Marktschätzung. Die Eingabeparameter für die Berechnung werden im entsprechenden Abschnitt detailliert aufgeführt. [R32] [R34]

Eine Zelle mit einer Fläche von einem Quadratcentimeter ist ein leistungsstarkes Werkzeug, mit dem physikalische Prinzipien getestet werden; sie ist weder ein Kraftwerk noch ein verkaufbares Panel. Die Vergrößerung des Maßstabs beschränkt sich nicht nur auf die geometrische Vergrößerung derselben Zelle. Die Stromabfuhrstrecke, die Verluste durch transparente Elektroden, die Metallabschattung, die Beschichtungshomogenität, die Randbereiche, die Verbindungen und die Produktionsdefekte ändern sich mit dem Maßstab. Daher sollten Materialwirkungsgrad, Zellwirkungsgrad, Modulwirkungsgrad, Energieertrag und wirtschaftliche Auswirkungen als separate Stufen betrachtet werden.

Verluste beim Übergang von der Zelle zum Modul

In Reihe geschaltete Zellen führen denselben Strom; eine schwache oder beschattete Zelle kann die Leistung des gesamten Moduls begrenzen. Bypass-Dioden bieten Schutz bei bestimmten Beschattungssituationen, eliminieren aber nicht den Energieverlust. Bei Dünnschichtmodulen reduzieren die für monolithische Verbindungen verwendeten Linien und die ungenutzten Flächen den geometrischen Füllfaktor. Bei kristallinen Siliziummodulen werden die Abstände zwischen den Zellen, die Verbindungsschienen und die Verkapselung optimiert. Beim Übergang von der Zelle zum Modul können auch optische Verbesserungen erzielt werden; die Darstellung des Gesamteffekts durch einen einzigen, festen Verlustprozentsatz ist jedoch nur eine grobe Annäherung.

Bei der Berechnung der effektiven Fläche sei der Wirkungsgrad der aktiven Zellfläche 25 %, die effektive geometrische Abdeckung 92 % und der übrige elektrische/optische Faktor 0,97. Mit einem einfachen, separierbaren Ansatz ergibt sich für das Modul $0,25 \times 0,92 \times 0,97 = 0,2231$, also 22,31 %. Dies ist keine Schätzung für ein reales Produkt, sondern eine Berechnung, die zeigt, wie Verluste kaskadierend multipliziert werden. Wenn sich die Flächendefinition ändert, muss der Zellwirkungsgrad mit der Gesamtfläche des Moduls verglichen werden. Wenn ein höherer Wirkungsgrad der aktiven Fläche auf Kosten einer größeren inaktiven Fläche erzielt wird, kann dies auf der Ebene des Panels den Vorteil zunichtemachen.

Im Produktionsmaßstab gewinnt das Prozessfenster an Bedeutung. Anstelle der optimalen Dicke eines einzelnen Bauelements werden die Dickenverteilung über eine große Fläche, Beschichtungslinien, die Dynamik des Lösungsmittel-Trocknungsprozesses, Partikel und die Defektdichte kontrolliert. Die Fertigungsausbeute ist das Verhältnis der Anzahl der akzeptierten Produkte zur Gesamtproduktion und sollte nicht mit dem elektrischen Wirkungsgrad verwechselt werden. Wenn eine geringe Leistungssteigerung zu sehr hohen Ausfallraten führt, bietet sie möglicherweise keinen Kostenvorteil. Prozesszykluszeit, Energieverbrauch,

Materialverbrauch pro Quadratmeter und die Menge des wiedergewonnenen Verschnitts werden zusammen erfasst.

STC-Leistung und jährliche Stromerzeugung sind unterschiedliche Größen

Standardisierte Testbedingungen sind erforderlich, um Geräte zu vergleichen. Im Feld hingegen ändern sich die Strahlung, das Spektrum, der Einfallswinkel, die Temperatur, der Wind, die Verschmutzung und die Verschattung kontinuierlich. Der Wirkungsgrad des Wechselrichters und die Leistungsbegrenzung, Kabelverluste und Wartungsunterbrechungen beeinflussen ebenfalls die gelieferte elektrische Energie. Bei bifazialen Modulen hängt die Rückseitenbestrahlung von der Reflexion vom Boden, der Höhe und der Anordnung der Module ab. Bei Tandemzellen kann ein verändertes Spektrum die Stromanpassung beeinflussen. Daher kann die jährliche Energieproduktion zweier Technologien nicht allein anhand der STC-Daten endgültig verglichen werden.

IEC 61724-1 definiert den Anwendungsbereich und umfasst die Begriffe, Geräte und Methoden, die bei der Leistungsüberwachung und -analyse von Photovoltaikanlagen verwendet werden. [R32] Die Erfassung von Forschungsdaten muss mit regelmäßigen Zeitstempeln, der Bestrahlung in der Ebene des Moduls, geeigneten Temperaturmessungen und dem Betriebszustand des Systems erfolgen. Fehlende Daten sind nicht gleichbedeutend mit einer Produktionsausgabe von Null. Sensorabweichungen, Wartungsarbeiten, Inverterabschaltungen und Datenkommunikationsprobleme werden separat gekennzeichnet. Um die genaue Ursache eines Ausfalls vor Ort zu ermitteln, müssen die Daten zur Stromerzeugung und die meteorologischen Messungen auf derselben Zeitskala erfasst werden.

Spezifischer Ertrag und Performance Ratio

Die tatsächliche Energieerzeugung $Y_f = E_{AC} / P_{STC}$ [kWh/kWp], die Referenzerzeugung $Y_r = H_{POA} / G_{STC}$ [h] und die Leistungsbilanz $PR = Y_f / Y_r$ [dimensionslos] können wie folgt definiert werden. H_{POA} ist das Zeitintegral der Strahlung in der Modulebene [kWh/m²]; G_{STC} wird auf 1 kW/m² gesetzt. Es wird klar angegeben, dass die angegebene Leistung eine Gleichstromleistung (DC) ist, die Energieabgabe jedoch in Wechselstrom (AC) erfolgt, und wo die Systemgrenze liegt. PR ist kein Zellwirkungsgrad; sie fasst das gesamte Verlustverhalten des Systems im Vergleich zur erwarteten Energie unter Referenzbestrahlung zusammen.

Beispiel: Ein 10-kWp-System soll jährlich 14.000 kWh Wechselstrom erzeugen, die jährliche Einstrahlung auf die Modulebene betrage 1700 kWh/m². Es ergibt sich: $Y_f = 1400$ kWh/kWp, $Y_r = 1700$ h und $PR = 1400/1700 \approx 82,35$ %. Die PR-Werte zweier

unterschiedlicher Klimazonen sollten nicht direkt in eine Qualitätsrangfolge umgewandelt werden; atmosphärische Bedingungen wie die Temperatur beeinflussen das Verhältnis. Der von NREL erstellte PR-Bericht, der auf atmosphärische Bedingungen korrigiert ist, beschreibt eine Methode zur Reduzierung dieser Verzerrung. [R33] Es darf nicht einfach nur „korrigierter PR“ angegeben werden, ohne die verwendete Korrektur und die Referenz-Wetterdatei anzugeben.

Um die Degradationsrate zu ermitteln, werden saisonale Veränderungen, Verschmutzung, Ausfallzeiten, die Kalibrierung der Sensoren und anfängliche Übergänge analysiert. Bevor eine geringe Produktionsleistung über ein Jahr auf Materialdegradation zurückgeführt wird, werden die Strahlung und die Betriebsdauer überprüft. Die lineare Extrapolation einer mehrjährigen Tendenz über Jahrzehnte kann unzuverlässig sein. Jährliche Energieprognosen sind aufgrund der Auswahl der Klimadatei, der Modellfehler und der langfristigen Variabilität mit Unsicherheiten behaftet. Wenn Begriffe wie P50 oder P90 verwendet werden, müssen die Wahrscheinlichkeitsdefinition und die abgedeckten Unsicherheiten klar angegeben werden.

LCOE: die Brücke vom Wirkungsgrad zu den Kosten

Die vereinfachte, gestaffelte Stromkostengleichung lautet:

$$\text{LCOE} = \frac{C_0 + \sum_t C_t / (1 + r)^t}{\sum_t E_t / (1 + r)^t}. \quad (1.25.1)$$

C_0 ist die anfängliche Investition, C_t die Kosten für Wartung/Austausch/Betrieb, E_t die gelieferte elektrische Energie und r der Diskontierungssatz. Die Einheiten sind Kosten in einer Währung und Energie in kWh, wodurch das Ergebnis in Währung/kWh angegeben wird. Die nominalen Preise sollten mit dem nominalen Zinssatz und die realen Preise mit dem realen Zinssatz verglichen werden. Der Preis des Moduls ist nur ein Teil der Systemkosten; eine höhere Flächenausnutzung kann die Kosten für Land und Installation senken, aber dieser Effekt hängt von der jeweiligen Anwendung ab. Da die Lebensdauer und die Energieerzeugung unsicher sind, ist es irreführend, eine einzige LCOE-Zahl anzugeben.

In dem beispielhaften Lehrbeispiel betragen die anfänglichen Kosten eines 10-kWp-Systems 10.000 Geldeinheiten, die jährlichen Wartungskosten 150, die Energieerzeugung im ersten Jahr 14.000 kWh, die Laufzeit 20 Jahre und der Abzinsungssatz 5 %. Unter der Annahme, dass es keine Verschlechterung und keinen Austausch gibt, beträgt der Annuitätsfaktor etwa 12,462. Die heutigen Kosten betragen $10.000 + 150 \times 12,462 \approx 11.869$; die heutige Energieerzeugung beträgt $14.000 \times 12,462$

≈ 174.468 kWh; die LCOE (Levelized Cost of Energy) beträgt etwa 0,0680 Geldeinheiten/kWh. Dies ist keine Preisstudie. Wenn Verschlechterung, Wechselrichterwechsel und Unsicherheit bezüglich der Lebensdauer berücksichtigt werden, ändern sich die Ergebnisse; die Annahmen werden in einer Tabelle gespeichert.

Lebenszyklus und Recycling

Die Lebenszyklusanalyse (LCA) bewertet die Umweltauswirkungen innerhalb der Systemgrenzen, von der Rohstoffgewinnung über die Produktion, den Transport, die Installations- und Nutzungsphase bis zum Ende der Lebensdauer. Die funktionelle Einheit kann ein Modul oder ein Watt sein; in den meisten Fällen ist die gelieferte kWh jedoch aussagekräftiger, um den elektrischen Dienst zu vergleichen. Der Energiemix in der Produktion, der Wirkungsgrad, die Sonneneinstrahlung am Standort, die Lebensdauer und die Annahmen zur Wiederverwertung beeinflussen das Ergebnis. Die Informationsbroschüre 2024 der IEA PVPS stellt diesen Bewertungsrahmen im Kontext aktueller Technologiebestände dar. Daraus wird nicht eine einzige Kohlenstoffintensität für jedes Land und jede Technologie abgeleitet. [R34]

Für die ursprüngliche Maßstabsberechnung werden eine Produktions- und Lebenszyklusbelastung von 1000 kg CO₂-Äquivalent/kWp und eine Lebenszeitproduktion von 30.000 kWh/kWp gewählt. Der Wert beträgt 0,0333 kg/kWh = 33,3 g CO₂-Äquivalent/kWh. Wenn die tatsächliche Lebensdauer halbiert wird und alle anderen Bedingungen gleich bleiben, verdoppelt sich die Belastung pro Energieeinheit in etwa. Dieses einfache Ergebnis verdeutlicht die ökologische Bedeutung der Haltbarkeit. Bei der Berechnung der Energie-Amortisationszeit muss berücksichtigt werden, ob es sich bei der Energieeingabe um Primärenergie oder Endenergie handelt, und die verglichene elektrische Umwandlung muss konsistent sein.

Eine hohe Massenrückgewinnungsrate beim Recycling bedeutet nicht, dass alle wertvollen oder gefährlichen Bestandteile zurückgewonnen werden. Obwohl Glas und Rahmen den größten Teil der Masse ausmachen können, ist der Verlust von Silber, Halbleitern oder Spurenelementen sowohl wirtschaftlich als auch ökologisch von Bedeutung. Die Reinheit der Rückgewinnung, das Maß der Wiederverwendung, der Energie- und Chemikalienverbrauch werden bewertet. Der LCA-Bericht zur Modulrecycling-Bewertung der IEA PVPS zeigt, dass diese Prozesse ein separates Thema für eine Umweltbewertung darstellen. [R36] Ein gutes Design berücksichtigt von Anfang an die Spannungen, die entstehen, wenn ein Gerät sowohl eine lange Lebensdauer haben als auch reparierbar und demontierbar sein soll; der Begriff

„recyclbar“ ist kein abgeschlossenes Ergebnis ohne eine funktionierende Sammel- und Prozesskette.

Temperatur und Bestrahlungsstärke in derselben Energieberechnung berücksichtigen

In einer einfachen ersten Näherung wird die momentane Leistung $P(t)$ als Produkt von PSTC, $[G(t)/GSTC]$ und $[1 + \gamma_P(T_c(t) - 25^\circ\text{C})]$ sowie weiteren Verlustfaktoren dargestellt. Hierbei ist γ_P der relative Temperaturkoeffizient. Zum Beispiel bedeutet $-0,35\text{ \%/K}$, dass der Wert $-0,0035$ pro Kelvin beträgt; die direkte Verwendung der Zahl $-0,35$ würde einen hundertfachen Fehler verursachen. Die Zelltemperatur T_c ist nicht die Umgebungstemperatur. Wind und Montagebedingungen beeinflussen die Differenz zwischen beiden.

In der Abbildung wurde für das 1-kWp-System die Tagesstrahlung zwischen 06:00 und 18:00 Uhr in Form einer Sinuswelle ausgewählt. Die durch reine Bestrahlung erzeugte tägliche Energie beträgt etwa 7,64 kWh. Unter Berücksichtigung der Zelltemperatur von $25 + 35G/GSTC$ und anderer Verluste (8 %) beträgt die erhaltene Energie etwa 6,35 kWh. Diese Differenz ist nicht einfach durch den Vergleich der Spitzenleistung am Mittag erkennbar; es ist eine Integration über den Tag erforderlich. Dies ist keine lokale Wettervorhersage, sondern ein synthetischer Tag, der die Berechnungsmethode veranschaulicht.

Zähler und Nenner der LCOE gemeinsam diskontieren

Bei der Berechnung der Stromkosten fallen die Investitionskosten zunächst an, gefolgt von den Betriebskosten und den Produktionskosten im Laufe der Jahre. Unter Anwendung derselben Diskontierungsregel:

$$\text{LCOE} = \frac{C_0 + \sum_{t=1}^N C_t / (1+r)^t}{\sum_{t=1}^N E_t / (1+r)^t}. \quad (\text{I.25.2})$$

Das in der Abbildung dargestellte Lehrszenario verwendet eine anfängliche Investition von 700 Geldeinheiten für 1 kWp, jährliche Kosten von 12 Geldeinheiten, eine Produktion von 1600 kWh im ersten Jahr, einen jährlichen Produktionsverlust von 0,5 % und einen Abzinsungssatz von 6 %. Für einen Zeitraum von 25 Jahren ergibt sich ein Wert von etwa 0,04364 Geldeinheiten/kWh. Diese Zahl stellt kein Investitionsangebot für ein bestimmtes Land oder eine bestimmte Zeit dar. Das Beispiel soll beispielsweise zeigen, wie die Verkürzung der Lebensdauer die Energiekosten erhöht, selbst bei gleicher anfänglicher Leistung.

Auch bei der Lebenszyklusanalyse spielt der Kontext eine wichtige Rolle. kg CO₂-Äquivalent/Modul und g CO₂-Äquivalent/kWh beantworten unterschiedliche Fragen. Für die zweite Größe sind Produktionsstandort, Strommix, Transport, Energiebedarf vor Ort, Nutzungsdauer und das Szenario für die Entsorgung erforderlich. Eine Technologie, die bei der Zellproduktion wenig Material verbraucht, bietet möglicherweise nicht denselben Vorteil pro kWh, wenn ihre Lebensdauer oder die Produktionsmenge gering ist. [R34] [R36]

Selbsttest

1. **Ist der Wirkungsgrad der 25 %-Zelle gleich dem Wirkungsgrad des 25 %-Moduls?** Nein. Die Flächenbelegung sowie optische und elektrische Effekte und die Verbindungen müssen berücksichtigt werden.
2. **PR = 82 %, bedeutet das, dass die Zelle bei 82 % einen hohen Wirkungsgrad aufweist?** Nein. PR ist das Leistungsverhältnis, das die Systemleistung in Bezug auf die Einstrahlung und die installierte Referenzleistung normalisiert.
3. **Zeigt die 90 %-Massenrückgewinnung im Recyclingprozess, dass alle wertvollen Materialien zurückgewonnen werden?** Nein. Die Rückgewinnung wird komponentenweise betrachtet, wobei Reinheit und die ökologischen/wirtschaftlichen Auswirkungen separat bewertet werden.

Verfügbarkeit und tägliche Integration

Verfügbarkeit gibt an, welcher Anteil der erwarteten Produktionszeit eines Systems tatsächlich genutzt werden kann. Während Sonnenschein kann die Produktion aufgrund von Verbindungsausfällen oder Wartungsarbeiten unterbrochen werden. Es ist irreführend, diese Zeitspanne ausschließlich durch Faktoren wie Wolkenbedeckung zu modellieren. Strahlung, Temperatur, Verschattung und Betriebsausfälle sind separate Eingabeparameter.

Das tägliche Integral ist die zeitliche Summation der über den Tag veränderten Leistung. Wenn die Leistung in Kilowatt und die Zeit in Stunden angegeben wird, ergibt sich die Energie in Kilowattstunden. Ein System, das in einer Stunde 2 kW und in der nächsten Stunde 3 kW erzeugt, liefert in diesen zwei Stunden 5 kWh; die Multiplikation des höchsten Wertes von 3 kW mit 24 Stunden ergibt nicht die tägliche Produktion. Die jährliche Energieberechnung wendet dieselbe Logik über die Jahreszeiten, Ausfallzeiten und den zeitlichen Abbau an. Diese Beispielrechnung erläutert die Summationsidee; sie ist keine Ertragsprognose für einen bestimmten Ort und ein bestimmtes Jahr.

Aus der Literatur zur Forschungsfrage

Welche Art von Informationen liefert der Artikel?

Originalforschungsartikel beantworten eine spezifische Frage durch neue Experimente, Berechnungen oder Analysen. Eine **Übersichtsarbeit** fasst viele Studien zusammen; sie ist wertvoll für die Erstellung einer thematischen Übersicht, muss aber nicht die Primärquelle für eine bestimmte Information sein. Ein **Vorabdruck** ist ein Text, der vor Abschluss des Begutachtungsprozesses veröffentlicht wird. **Ergänzende Informationen** enthalten Methoden, zusätzliche Messungen und Details, die nicht in den Hauptartikel passen. Ein **Patent** ist ein technisches Dokument, das einen rechtlichen Anspruch beinhaltet; es stellt keine unabhängige Leistungsbestätigung dar. Ein **Datenblatt** präsentiert die Eigenschaften eines Produkts unter bestimmten Bedingungen. Wir sollten diese Arten nicht unter einer einzigen Überschrift „Quelle“ zusammenfassen.

Allein anhand des Titels oder der Zusammenfassung einer Publikation lässt sich die Reproduzierbarkeit des Experiments nicht beurteilen. Die **DOI** ist eine eindeutige, dauerhafte digitale Objektkennung, die eine Publikation identifiziert und dabei hilft, die korrekte Version des Textes zu finden. Eine **Referenz** gibt an, auf welcher Quelle eine Behauptung oder Methode basiert; dies bedeutet nicht automatisch, dass das Ergebnis der Quelle korrekt ist. Die Behauptung des Autors, die dargestellten Daten und die von uns gezogenen Schlussfolgerungen sollten getrennt betrachtet werden.

Einen Fachartikel in drei Durchgängen lesen

Beim ersten Durchgang: Bestimmen Sie die Fragestellung, den Bauelementtyp und das Hauptergebnis. Beim zweiten Durchgang: Lesen Sie die Diagramme mit ihren Achsen: Welche Größe wurde gemessen, welche Bedingung ist konstant, was zeigen die Fehlerbalken, wie viele unabhängige Proben gibt es? Beim dritten Durchgang: Kehren Sie zur Methode zurück: Sind die Schichtreihenfolge, die Verarbeitungshistorie, die Fläche, das Licht, die Temperatur und die Analysebeschreibungen ausreichend, um das Ergebnis zu rekonstruieren? Wenn Informationen fehlen, ist dies kein Zeichen für ein fehlerhaftes Verständnis, sondern dient dazu, die Grenzen der Schlussfolgerung zu bestimmen.

Beispielhafte Behauptung: „Die neue Dotierung hat den Wirkungsgrad erhöht.“ Lassen Sie uns dies in eine überprüfbare Form umwandeln: Welche Dotierung, in welchem Absorber, in welcher Menge und im Vergleich zu einer nicht dotierten, aber mit der gleichen Lösungsmittelhistorie versehenen Kontrollprobe? Ist die

Verbesserung über die gesamte Verteilung oder nur in der besten Zelle zu beobachten? Handelt es sich um eine stabile Leistung oder um einen bei einer Spannungsabtastung ermittelten Wert? Durch die Beantwortung dieser Fragen wird die Behauptung zu einer messbaren und falsifizierbaren Aussage.

Eine Forschungslücke ist nicht einfach ein noch nie verwendetes Wort oder eine noch nie verwendete Formel. Es kann sich um ein spezifisches Problem handeln, das die vorhandenen Beweise nicht erklären oder differenzieren können. Zum Beispiel: Ist der Einfluss der Dotierung auf die Reduzierung von Defekten oder auf die Veränderung der Kristallisationsgeschwindigkeit zurückzuführen? Eine Kontrollprobe, die die beiden Erklärungen voneinander unterscheidet, kann eine wertvollere Forschungsfrage darstellen als das „Ausprobieren einer neuen Dotierung“.

Verständniskontrolle: Verfolgen Sie die Zitationskette

Bevor Sie einen in einer Zusammenfassung angegebenen Wert verwenden, konsultieren Sie das Originaldokument und gegebenenfalls das Zertifikat. Der in der Zusammenfassung angegebene Wert kann sich auf eine andere Fläche oder Lichtkategorie beziehen. Wenn Sie nur die Zusammenfassung der Quelle gelesen haben, können Sie nicht bestätigen, dass die Details der Methode korrekt sind.

Oft ist das Problem beim Beginn einer Recherche nicht, dass man keine Artikel findet, sondern dass man nicht erkennen kann, welcher von vielen Artikeln tatsächlich eine bestimmte Frage beantwortet. Eine Übersichtsarbeit gibt einem eine Übersicht über das Forschungsfeld; ein Originalartikel liefert den Beweis für eine bestimmte These; zusätzliche Informationen geben Details zu den Methoden; und offene Daten ermöglichen es, einige Behauptungen neu zu berechnen. Es ist ineffizient, diese verschiedenen Arten von Quellen als eine einzige Quelle zu betrachten.

Lies einen Artikel in drei Durchgängen

Lesen Sie in der ersten Runde den Titel, die Zusammenfassung, die wichtigsten Abbildungen und den Abschnitt mit den Schlussfolgerungen. Formulieren Sie eine These in einem einzigen Satz, zum Beispiel: „Der Grenzflächenprozess reduziert den nichtstrahlenden Verlust in bestimmten Zellen.“ Geben Sie gleichzeitig den Umfang der These an: Film, Teilstruktur, vollständige Zelle oder Modul. Entscheiden Sie in der ersten Runde nicht, ob der Mechanismus korrekt ist; bestimmen Sie lediglich, was der Autor zeigen möchte.

In der zweiten Runde wird die Methode und zusätzliche Informationen verwendet. Bestimmen Sie die Anzahl der Proben, die Anzahl der unabhängigen Produktionschargen, die Messreihenfolge, die Flächenmaske, das Lichtspektrum, die

Temperatur und die Statistik. Notieren Sie den Unterschied zwischen der „besten Zelle“ und der „durchschnittlichen Zelle“. Selbst wenn die Anzahl der Bauelemente $n = 30$ beträgt, werden diese Bauelemente nicht als dreißig unabhängige Experimente für die Produktionswiederholbarkeit gezählt, wenn sie aus einer einzigen Beschichtungspartie stammen.

Betrachten Sie die Abbildungen, die den Mechanismus in der dritten Runde untersuchen. Stützt sich die Behauptung über die Kontaktverbesserung ausschließlich auf eine höhere Photolumineszenz, oder wurden auch die Selektivität und die Transportverluste untersucht? Stützt sich die Behauptung über das Kristallwachstum ausschließlich auf die Oberflächenphotographie, oder wurden auch die Phase, die Textur und die Zusammensetzung gemessen? Überlegen Sie, ob es eine Alternative zum vom Autor vorgeschlagenen Mechanismus gibt, die die gleichen Daten erklären könnte.

Wenn man eine wissenschaftliche Arbeit beendet, sollten drei Dinge klar sein: was man gelernt hat, was unklar geblieben ist und was das nächste Experiment untersuchen wird. Das Zusammenfassen einer Arbeit ist nicht dasselbe wie ihre Bewertung. Eine Zusammenfassung erzählt die Geschichte des Autors noch einmal; eine Bewertung stellt die Frage, ob der gewählte Weg ausreicht, um das Ziel zu erreichen.

Stammbaum der Quellen

Wenn Sie in einer Zusammenfassung auf eine Tabelle stoßen, suchen Sie die Referenz der Tabelle für den kritischen Wert. Wenn der Wert in der Originalarbeit aus einer anderen Studie stammt, verfolgen Sie die Quelle weiter. In welcher Probe und mit welcher Methode wurde die Zahl ermittelt? Es ist einfach, zwei verschiedene Spalten einer Zusammenfassung zu kombinieren und so ein „Supermaterial“ zu erstellen, das in Wirklichkeit nie hergestellt wurde: Die beste Beweglichkeit kann aus einem Einkristall, die beste Lebensdauer aus einem anderen Film und die beste Bandlücke aus einer anderen Zusammensetzung entnommen werden. Dies sind jedoch nicht die kompatiblen Parameter eines einzelnen Bauelements.

Sekundäre Quellen spielen eine wichtige Rolle; wenn jedoch eine quantitative Schlussfolgerung getroffen werden soll, muss das Ende der Quellenkette festgelegt werden. Es ist nicht notwendig, jede grundlegende Gleichung neu zu entdecken. Für etablierte physikalische Konzepte ist ein zuverlässiges Lehrbuch eine bessere Ausgangsbasis als eine spezifische Originalarbeit für ein bestimmtes neues Bauelement. Das Handbuch von Luque und Hegedus ist für den Bereich Technologie und Ingenieurwesen geeignet, während das Buch von Würfel und Würfel eine ergänzende Lektüre für die Auseinandersetzung mit physikalischen Prinzipien bis hin zu fortgeschrittenen Konzepten darstellt. Hier werden sie lediglich anhand der Verlagsinformationen empfohlen. [B04] [B05]

Wie ist ein Rekordwirkungsgrad einzuordnen?

Ein „Rekord“-Diagramm gibt Aufschluss über die Geschwindigkeit der Forschung, ist aber allein kein Maßstab für Investitionen, Skalierbarkeit oder die Lebensdauer im Feld. Der Wettbewerb zwischen einer kleinen Forschungszelle und einem im Handel erhältlichen Modul ist nicht dasselbe. Eine Zellkategorie kann im Laufe der Jahre mehr Forscher und Investitionen angezogen haben. Bevor man die Steigung des Diagramms als Zeichen der inhärenten Überlegenheit des Materials interpretiert, sollte man den Forschungsaufwand und die Messkategorien berücksichtigen.

Unabhängige Leistungstabellen und Laborprotokolle sind wertvoll für die Auswahl von Referenzdaten. Der JRC-Eintrag für Version 68 gibt an, dass die Studie unabhängige, validierte Daten für Zellen und Module zusammenfasst und neue Daten nach Januar 2026 berücksichtigt. Dieser Satz impliziert nicht, dass alle Ergebnisse in einer bestimmten Tabelle unter identischen Bedingungen hinsichtlich Fläche, Topologie oder Lichtintensität erzielt wurden. Tabellenfußnoten sind Teil der Studie. [B03]

Innovation und Nutzen

Eine neue Formel bedeutet nicht automatisch, dass es sich um ein nützliches PV-Material handelt. Eine neue Anordnung einer bekannten Verbindung kann zwar wissenschaftlich interessant sein, aber es muss nachgewiesen werden, dass es sich tatsächlich um einen anderen physikalischen Zustand handelt. Für das gleiche chemische Verhältnis können Polymorphe, Gitteranordnungen, Defekte, Spannungen, Oberflächenterminierungen und Heterostrukturen unterschiedliche Objekte bilden. Eine Innovationsforschung kann nicht durchgeführt werden, ohne klar zu definieren, um welches dieser Objekte es sich handelt.

Bei der Suche sollten Synonyme, reduzierte und erweiterte Formeln, Prototypen, Festkörperlösungsgruppen, äquivalente Elementreihen und mögliche Zersetzungsprodukte verwendet werden. Das Fehlen von Ergebnissen bedeutet lediglich, dass unter den gespeicherten Suchanfragen keine Ergebnisse gefunden wurden. Der Umfang der Datenbank, die Sprache, die Verzögerung bei der Indexierung und die Zugriffsbeschränkungen führen zu Unsicherheiten. Die Patentierbarkeit und die freie Nutzung sind zudem unterschiedliche Fragen, die eine Expertenbewertung erfordern; sie sind kein natürliches Ergebnis einer Literaturrecherche.

Anwendung: einseitiges Artikelblatt

Füllen Sie für einen Artikel die folgenden Felder aus: vollständige Bibliografie; DOI; Datum des Zugriffs; Hauptaussage; Probenbeschreibung; nächste Kontrollmessung; Gerätefläche; Licht und Temperatur; Messmethode; Anzahl der unabhängigen Proben; Verteilung; aussagekräftigste Abbildung; schwächste Annahme; offene Daten; fehlende Informationen für die Reproduktion; abschließende Folgetests. Die Länge des Dokuments sollte eine Seite nicht überschreiten. Ziel ist es nicht, den Text zu komprimieren, sondern die entscheidenden Informationen auszuwählen.

Übung: Die Wirkungsgrade zweier Artikel betragen 24,0 % und 24,4 %. Ist der zweite Artikel besser? Antwort: Allein anhand dieser Zahlen lässt sich das nicht entscheiden. Es sind Angaben zur Fläche, Messung, Stabilisierung, Unsicherheit, Verteilung und den Kontrollbedingungen erforderlich. Je nachdem, ob das erste Ergebnis eine unabhängige Zertifizierung über eine große Fläche und das zweite Ergebnis eine einzelne Messung über eine kleine Fläche darstellt, ändert sich die Rangfolge je nach der wissenschaftlichen Fragestellung.

Wie wird ein Forschungsprogramm eingerichtet?

Ein Forschungsprogramm als Folge von Entscheidungen aufbauen

Ein Forschungsprogramm ist keine vollständige Liste aller möglichen Messungen. Das **Ziel** ist das konkrete Problem, das wir lösen wollen. Die **Hypothese** ist eine überprüfbare Erklärung für dieses Problem. Das **Kriterium** ist das beobachtbare Ergebnis, anhand dessen die Erklärung bewertet wird. Die **Entscheidungsschwelle** ist der Beweis, der erforderlich ist, bevor man zu einem nächsten, kostspieligen Schritt übergeht. Die Unterscheidung dieser vier Konzepte verhindert, dass das Ziel stillschweigend geändert wird, wenn keine Ergebnisse erzielt werden.

Synthetisches Beispiel: In einer Zelle ist die Spannung niedrig. Die erste Hypothese ist, dass die Oberflächenrekombination vorherrscht. Wir können die Oberflächenbehandlung bei gleichem Basismaterial ändern und gleichzeitig die Lebensdauer und die Spannung messen. Wenn sich auch der Kontaktwiderstand ändert, überprüfen wir die Leistung separat. Wenn keine Spannungsverbesserung erzielt wird, ändern wir das anfängliche Kriterium nicht und sagen: „Aber die Oberfläche ist heller“. Die anfängliche Hypothese wurde möglicherweise nicht bestätigt; dies ist das Ergebnis, das das nachfolgende Experiment steuert.

Eine Kontrollprobe kann manchmal wertvoller sein als eine neue Probe

Referenzprozess ist der Ausgangspunkt, von dem aus wir regelmäßig ähnliche Ergebnisse erzielen können. Wenn die eigene Variabilität der Referenz nicht bekannt ist, wird es schwierig, die Auswirkungen eines neuen Prozesses zu isolieren. Ein **diskriminierendes Experiment** wählt eine Bedingung aus, bei der konkurrierende Erklärungen unterschiedliche Ergebnisse vorhersagen. Ein **Stoppkriterium** definiert im Voraus den Zustand, in dem zusätzliche Arbeit keine weiteren Belege liefern kann, die den Zweck rechtfertigen. Das Stoppen bedeutet nicht das Löschen der Daten; es bedeutet, die negativen Ergebnisse zusammen mit der verwendeten Methode und dem Umfang zu speichern.

Für das neue Absorbermaterial werden zunächst die chemische Definition, dann die Phase und Struktur, die optischen und elektrischen Eigenschaften, die Grenzfläche und das Bauelement sowie anschließend die Fragen nach Maßstab und Lebensdauer

behandelt. Diese Reihenfolge ist nicht starr; eine kostengünstige und entscheidende Inkompatibilität der Grenzfläche kann frühzeitig überprüft werden. Aber ein in einer Stufe berechnetes Ergebnis kann nicht so präsentiert werden, als ob es in einer anderen Stufe experimentell ermittelt worden wäre. Das **Evidenzniveau** beschreibt, durch welche Berechnungen, Beobachtungen oder unabhängigen Validierungen die Aussage belegt wird.

Ein **wiederholbarer Arbeitsablauf** umfasst nicht nur das letzte Diagramm, sondern auch die Rohdaten, die Probenidentifikation, die Reihenfolge der Verarbeitungsschritte, die Analysebeschreibung und die Softwareversion. Kann eine andere Person mit denselben Eingabedaten das gleiche Ergebnis erzielen? Beobachtet sie mit einem anderen Gerät und einer anderen Probe einen ähnlichen physikalischen Effekt? Diese beiden Fragen stellen nicht die gleiche Art der Validierung dar; beide prüfen unterschiedliche Risiken der Forschung.

Verständniskontrolle: Was würde Sie dazu bringen, Ihre Idee aufzugeben?

Nachdem Sie Ihre Hypothese formuliert haben, notieren Sie auch eine Beobachtung, die diese nicht unterstützt. Wenn kein Ergebnis die Hypothese widerlegen kann, ist die experimentelle Fragestellung noch nicht ausreichend präzise formuliert. Ein im Voraus festgelegtes Kontroll- und Abbruchkriterium reduziert die Tendenz, nur positive Ergebnisse auszuwählen.

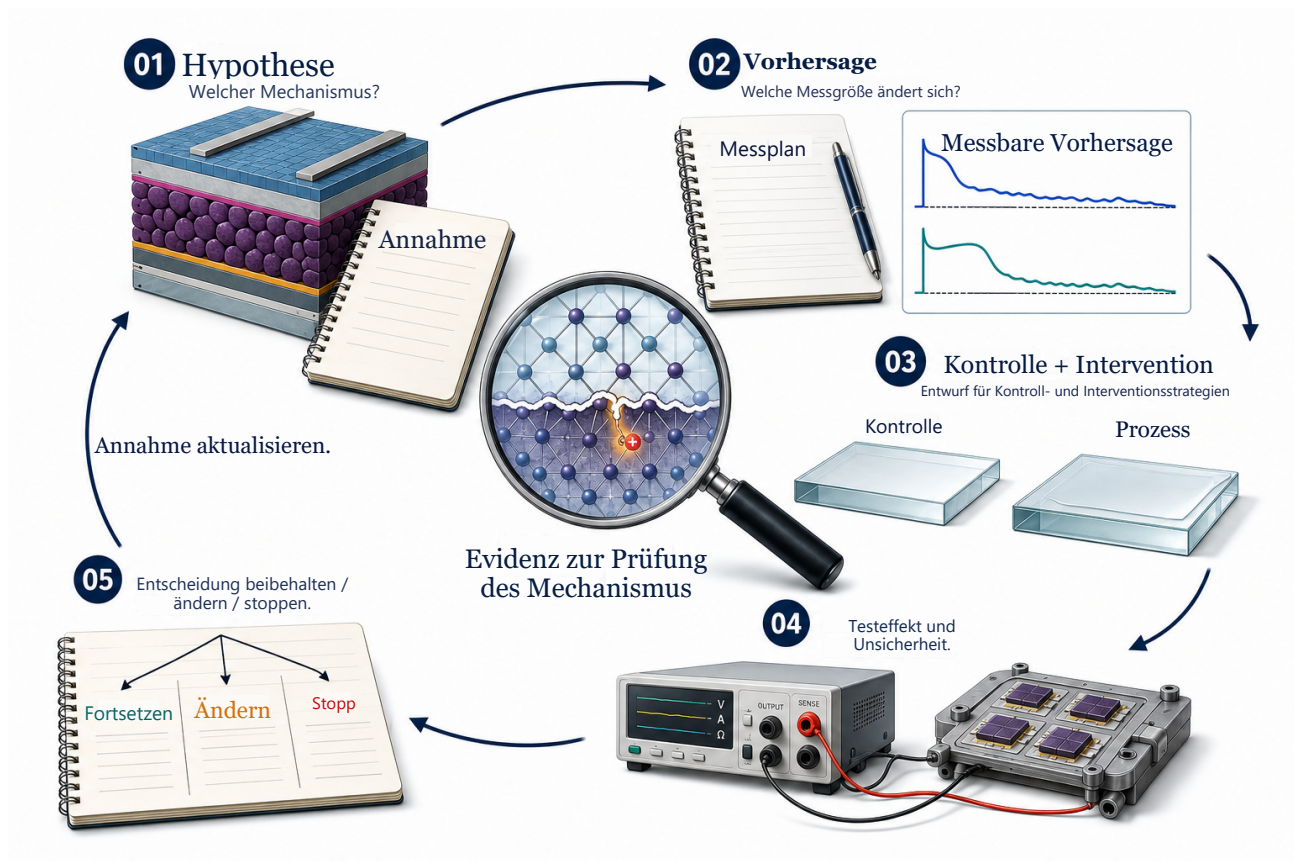


Abbildung 41. Der Forschungszyklus, der den Mechanismus testet. Die Hypothese wird in eine messbare Vorhersage umgewandelt; Kontroll- und Interventionsproben werden durch wiederholte Messungen verglichen; der Effekt wird unter Berücksichtigung seiner Unsicherheit bewertet. Das Ergebnis führt zu einer Entscheidung über Fortsetzung, Änderung oder Abbruch. Schematische Signale und Geräte sind keine realen Daten eines Experiments. [R30] [R31] Mit einem Bildgenerierungswerkzeug erstellte konzeptionelle Illustration; keine Messaufnahme.

Eine gute Forschungsfrage wird nicht so allgemein formuliert wie „Können wir den Wirkungsgrad erhöhen?“. Beispielsweise könnte die Frage „Reduziert diese Änderung in der oberen Transportschicht den strahlungsfreien Grenzflächenverlust, ohne den Transportwiderstand zu erhöhen, und das bei Verwendung desselben Absorbers und derselben Produktionscharge?“ getestet werden. Variable, Kontrolle, Mechanismus und Erfolgskriterium werden in einem Satz zusammengefasst. Der Versuch, einen nicht messbaren Mechanismus direkt zu optimieren, kann dazu führen, dass man sich in der Optimierung eines messbaren Indikators verliert.

Messen Sie den Engpass und wählen Sie anschließend die Methode aus

Ist der Kurzschlussstrom einer Zelle niedriger als erwartet, muss eine neue DFT-Kampagne nicht der günstigste erste Schritt sein. EQE sowie Messungen von Reflexion und parasitärer Absorption können optische und Sammelverluste direkter trennen. Bei niedrigem Voc können die lichtintensitätsabhängige Spannung, Lumineszenz und Strukturen mit kontrollierten Kontakten aufschlussreicher sein. Bei niedrigem FF werden Serienwiderstand, Shunts, Barrieren und Zeitabhängigkeit getrennt untersucht. Die Werkzeugwahl richtet sich nach der Unsicherheit, nicht nach der Lieblingssoftware des Forschers.

Die Erfolgsrate einer Studie anhand der Berechnungszeit oder der Anzahl der Messungen zu bemessen, ist nicht zielführend. Erfolg bedeutet, dass die Informationen, die zur Änderung einer Entscheidung benötigt werden, zuverlässig gewonnen werden. Zwanzig ähnliche Scans können denselben systematischen Fehler wiederholen; eine einzige, gut konzipierte Kontrollmessung kann diesen Fehler jedoch aufdecken. Zusätzliche Daten sind nur dann in gleichem Maße nützlich, wenn sie eine neue, unabhängige Variable, eine andere Bedingung oder eine andere Komponente der Unsicherheit untersuchen.

Beispielplanung: ein Passivierungsadditiv

Stellen Sie sich vor, eine hypothetische Dotierung erhöht die Leerlaufspannung (Voc). Die Hypothese ist, dass die Dotierung die Rekombination an der Grenzfläche reduziert. Alternativen wären, dass die Dotierung die Zusammensetzung des Absorbers verändert, die Optik verändert, die Ionenverteilung vorübergehend beeinflusst oder die Messvorbedingungen verändert. Wenn man diese Alternativen von vornherein aufschreibt, wird man nicht voreilig eine Erklärung für das beobachtete positive Ergebnis wählen.

In der Kontrollgruppe sollten das gleiche Lösungsmittel, die gleiche Dauer, die gleiche Temperatur und die gleiche Prozessreihenfolge verwendet werden. Die Proben werden in mehreren unabhängigen Chargen hergestellt, wobei jede Charge sowohl eine Kontroll- als auch eine Interventionsgruppe enthält. Die Messreihenfolge wird randomisiert. Die primäre Kennzahl wird im Voraus festgelegt, z. B. ein stabilisierter MPP-Wirkungsgrad nach einem bestimmten Protokoll. Voc, FF, EQE und Lumineszenz können sekundäre Kennzahlen sein. Defekte oder kurzgeschlossene Bauelemente werden nicht einfach verworfen; die Fertigungsausbeute ist ebenfalls ein Ergebnis.

Für die Hypothese des Mechanismus ist es nicht ausreichend, wenn lediglich die primäre Ergebnisgröße ansteigt. Die weitgehende Konstanz der EQE kann die optische

Alternative schwächen, beseitigt sie aber nicht vollständig. Die Spannungszunahme im vollständigen Bauelement wird zusammen mit der Aufspaltung des Quasi-Fermi-Niveaus in der Halbstruktur betrachtet. Die Aufrechterhaltung der Verstärkung nach der Stabilisierung stellt die Erklärung durch vorübergehende Konditionierung in Frage. Unterschiedliche Zusatzmengen geben Hinweise auf den Mechanismus, aber die Auswahl des optimalen Punktes nach einer großen Anzahl von Versuchen erfordert einen separaten Satz von Validierungsdaten.

Auch das Abbruchkriterium wird im Voraus festgelegt. Wirkt der Zusatz nur in einer Charge, verschwindet sein Vorteil bei stabilisierter Messung oder verursacht er starke Degradation unter Feuchtigkeit oder Wärme, reicht ein höherer Wirkungsgrad bei einer Kennlinienmessung nicht aus, um das Programm fortzusetzen. Eine andere Hypothese kann formuliert werden; damit ist die bisherige Hypothese jedoch nicht bestätigt.

Beispiel für ein Design: ein neuer Absorber

Die erste Entscheidung bei der Untersuchung einer neuen Verbindung muss nicht unbedingt die Berechnung der Elektronenbanden sein. Zunächst werden die atomare und Ladungsbilanz, die bekannten Hauptphasen, die Koordinationsverhältnisse, konkurrierende Verbindungen und die chemische Zugänglichkeit bewertet. Selbst wenn die Formel korrekt ist, definiert die Berechnung der Bandlücke für eine einzelne, zufällige Struktur das Zielobjekt nicht, wenn die Kristallstruktur unklar ist. Eine mehrstellige Zahl, die von einer Maschine ausgegeben wird, reduziert die Unsicherheit des Eingangsobjekts nicht.

Die kostengünstigste Unterscheidungsmethode ist manchmal ein ausgeglichener Aufspaltungskanal. Das Vorhandensein eines großen Energieverlusts in diesem Kanal kann die Priorität dieser Struktur verringern. Allerdings ist die Untersuchung eines einzelnen Kanals nicht die vollständige Analyse des Phasendiagramms. Vielmehr bestätigt auch das Fehlen von Problemen in einem Kanal nicht zwangsläufig die Synthetisierbarkeit. Anschließend folgen die systematische Untersuchung von konkurrierenden Phasen, die Strukturbildung, die Konvergenz, das dynamische Verhalten, die elektronische Qualität und die Defekte. In jedem Schritt sollte dokumentiert werden, mit welcher Begründung der nächste, kostspieligere Schritt durchgeführt wird.

Bei der Arbeit im Labor werden die zu liefernden Proben, die erwartete Phase, das Charakterisierungspaket, die Akzeptanzkriterien, die Rohdaten und die Wiederholungsbedingungen im Voraus definiert. Die Aussage „Synthetisieren Sie dieses Material und messen Sie seinen Wirkungsgrad“ lässt den Umfang unklar. Materialsynthese, Dünnschichtbildung, Kontaktherstellung und

Solarzellenoptimierung sind verschiedene Stufen. Die Erfolgskriterien sollten diese Unterscheidung widerspiegeln. Das Buch vermittelt diesen wissenschaftlichen Umfang und nicht ein Rezept für eine chemische Operation.

Nachweisstufen von der Idee zum Produkt

Eine Forschungsidee beginnt zunächst als klare Hypothese. Die rechnerische Untersuchung liefert Beweise für die Eigenschaften, die unter dem gewählten Modell und den gewählten Eingabeparametern untersucht werden. Die Materialuntersuchung betrachtet die Struktur, die Phasen, das optische Verhalten und das Transportverhalten; die Grenzflächenuntersuchung untersucht die Wechselwirkung benachbarter Schichten; die Bauelementuntersuchung prüft den Strom, die Spannung und die stationäre Leistung des fertigen Elements. Eine unabhängige experimentelle Wiederholung untersucht, ob ein Ergebnis auch mit anderen Proben und in einer anderen Messanordnung erzielt werden kann. Die Produktvalidierung umfasst zusätzlich die Untersuchung großer Flächen, die Wiederholbarkeit der Produktion, die Umgebungsbedingungen und die Haltbarkeit. Dies ist eine allgemeine Denkweise, die in diesem Buch verwendet wird; es handelt sich nicht um einen neuen Standard oder eine offizielle Zertifizierungsklassifizierung.

Machen wir diese Unterscheidung konkret. Auch bei einer Verbindung, für die eine geeignete Bandlücke berechnet wurde, kann der Syntheserfolg noch unbekannt sein. Gute Lumineszenz eines hergestellten Films liefert noch nicht den Wirkungsgrad einer kontaktierten Zelle. Ein unabhängig gemessener hoher Zellwirkungsgrad zeigt nicht, dass ein in Serie gefertigtes Modul denselben Wirkungsgrad oder dieselbe Lebensdauer besitzt. Auf jeder Stufe bleibt die Aussage auf den Umfang der vorhandenen Beobachtung begrenzt. [\[R18\]](#) [\[R30\]](#)

Das Ziel sollte nicht durch die Wahl eines universellen Prozentsatzes festgelegt werden, sondern durch die Bedingungen der Anwendung. Beim Vergleich müssen das Lichtspektrum und die Intensität, die Probentemperatur, ob es sich um eine Zelle oder ein Modul handelt, die Flächenangabe, die Konzentration, die Anzahl der Anschlüsse, die Methode zur Leistungserfassung und der stabile Messzustand angegeben werden. Aus zwei Zahlen aus nicht übereinstimmenden Kategorien darf kein direkter Schluss über die Überlegenheit gezogen werden. Erst wenn die Produktionsakzeptanz und die Lebensdauer unter Standardbedingungen zur Zielerreichung addiert werden, wird deutlich, ob das Ziel tatsächlich den Produktbedarf erfüllt. [\[R01\]](#) [\[R06\]](#)

Mindeststruktur des Abschlussberichts

Berichten Sie zusammenfassend über die Forschungsfrage, das Versuchs- oder Berechnungsprotokoll, die Herkunft der Eingangsdaten, den Vergleich, die Einheiten und Bedingungen, die Unsicherheit, die Verknüpfungen der Rohdaten und die Fehler. Für die Reproduzierbarkeit eines Ergebnisses ist allein der Code nicht ausreichend; es muss auch angegeben werden, mit welcher Datei, welcher Version und mit welchen Annahmen das Ergebnis erzielt wurde. Das Aufbewahren von negativen Ergebnissen verhindert, dass die wiederholte Untersuchung derselben fehlerhaften Hypothese unter einem anderen Namen erneut kostspielig wird.

Übung: Ein Modell zeigte bei 10 von 1.000 Kandidaten eine sehr hohe Effizienz. Welcher sollte der erste Schritt sein? Antwort: Überprüfen Sie, ob das Ziel tatsächlich die gemessene Zelleneffizienz ist, den Trainingsbereich, das Datenleck bei ähnlichen Kandidaten und die physikalische Konsistenz der Eingaben. Führen Sie anschließend einen kostengünstigen, unabhängigen Validierungstest durch. Wenn Sie direkt die teuren Berechnungen für die zehn Kandidaten starten, kann dies den Fehler des Modells vergrößern.

Ein zwölfwöchiger Lernpfad für Forschende

Lernziele vor dem Zeitplan auswählen

Die in diesem Abschnitt vorgesehenen zwölf Wochen garantieren keine sofortige Expertise. Sie dienen als Beispiel für die Gestaltung eines Lernplans. Eine Person, die zum ersten Mal Elektrotechnik und Halbleitertechnik studiert, benötigt möglicherweise mehr Zeit für die einzelnen Schritte; der Zugang zu einem Labor oder vorhandene mathematische Kenntnisse können die Dauer beeinflussen. Das Maß für den Abschluss einer Woche ist nicht die Anzahl der gelesenen Seiten, sondern die Menge an Arbeit, die man selbstständig erledigen kann.

Lernergebnis ist eine beobachtbare Kompetenzaussage, wie zum Beispiel: „Ich kann die Leistung aus einem J-V-Diagramm berechnen“ oder „Ich kann einen Fehler in der Flächendefinition in einem Artikel erkennen“. „Ich verstehe Perowskite“ ist zu allgemein. Wenn wir das Lernergebnis in kleinere Aufgaben aufteilen, können wir fehlende Vorkenntnisse erkennen. Wenn es beispielsweise einen Fehler bei der Berechnung des Wirkungsgrads gibt, liegt das Problem möglicherweise nicht in der Zellphysik, sondern in der Umrechnung von cm^2 in m^2 .

Drei Arbeitshefte

In einem **Begriffsbuch** definieren Sie den Begriff mit einem eigenen Satz und geben ein Gegenbeispiel an. Verwenden Sie als Gegenbeispiel zur Aussage „Hoher Strom bedeutet hohe Leistung“ die Tatsache, dass die Leistung bei einem Kurzschluss null ist. In einem **Rechenbuch** halten Sie die bekannten Größen, die gesuchten Größen, die Einheiten, die Annahmen, den Rechenweg und die Interpretation des Ergebnisses getrennt fest. In einem **Beweisbuch** notieren Sie die Quelle der gelesenen Aussage, ein Beispiel und unter welchen Bedingungen sie verallgemeinert werden kann. Die Wiederholung desselben Themas in diesen drei Formen verwandelt das Auswendiglernen in eine praktische Anwendung.

Beispiel für eine Übungseinheit: Zuerst die einseitige grundlegende Erklärung lesen; dann die Abbildung schließen und eine eigene Zeichnung anfertigen; anschließend die Zahlen im Buch leicht verändern und die Berechnung wiederholen; zum Schluss eine ähnliche Abbildung aus einer anderen Quelle interpretieren. Wenn ein falsches Ergebnis erzielt wird, sollte man nicht sofort die Lösung kopieren, sondern die

Einheiten und Annahmen nachvollziehen. Zu erkennen, in welchem Schritt der Lösung das unbekannte Konzept auftaucht, hilft dabei, ein neues Lernziel zu definieren.

Die folgende Tabelle zeigt die empfohlene Reihenfolge für die Entwicklung dieser Fähigkeiten. Bevor mit der fortgeschrittenen Modellierungsphase begonnen werden kann, muss eine einfache Energie- und Ladungsbilanz erstellt werden. Die Berechnungsübungen können ohne ein Labor beginnen; experimentelle Fähigkeiten werden durch entsprechende Schulungen, Ausrüstung und unter Aufsicht erworben. Das Buch bietet Erklärungen, ersetzt aber keine praktische Schulung in der tatsächlichen Verwendung eines Geräts.

Verständniskontrolle: Wohin sollte man sich wenden, wenn man Fragen hat?

Wenn eine Gleichung nicht verstanden wird, notieren Sie zunächst die Einheit jedes Symbols und anschließend die messbare Bedeutung der Variablen. Wenn dies geschehen ist, kehren Sie zum mathematischen Schritt zurück; wenn nicht, kehren Sie zum Abschnitt über die Konzepte zurück. Anstatt weitere Seiten zu lesen, erhöht das Beheben der fehlenden Verbindung die Geschwindigkeit beim Verständnis der folgenden Abschnitte.

Dieses Programm ist keine Garantie für Lernerfolg, sondern eine Lernstrategie, die das Buch in ein aktives Lernmittel verwandelt. Es ist ein erster Vorschlag für einen Leser, der etwa acht bis zwölf Stunden pro Woche investiert. Es reicht nicht aus, das Buch einfach nur zu lesen, ohne die Gleichungen erneut zu berechnen und eine echte wissenschaftliche Arbeit auf Methodenebene zu analysieren. Den Fortschritt sollte man nicht anhand der Anzahl der gelesenen Seiten messen, sondern anhand der kleinen Forschungsergebnisse, die man dabei erzielt.

Woche	Fokus	Konkretes Ergebnis
1	Geschichte, Unterscheidung zwischen Energie und Leistung, Spektrum.	Erläuterte Zeitleiste; Tabelle zur Umrechnung von eV in nm.
2	Bänder, Fermi-Niveau, pn-Übergänge und Kontakte.	Banddiagramme im Gleichgewicht und unter Beleuchtung mit eigenen Zeichnungen erklären
3	Transport, Rekombination, J-V-Kennlinie	Aus der synthetischen Diodenkennlinie lassen sich Voc, Jsc, FF und der Wirkungsgrad bestimmen.
4	Detailliertes Gleichgewicht und Spannungsverlust.	Erläutern Sie die Annahmen einer idealen Obergrenze auf einer Seite.
5	Silizium und Dünnschichten	Verluste und Fertigung zweier Zellarchitekturen vergleichen

Woche	Fokus	Konkretes Ergebnis
6	Perowskit und Tandem	Optische und elektrische Schaltpläne für 2T und 4T.
7	Messung und Charakterisierung	Vollständige Messbedingungen und Unsicherheitsangaben für eine Publikation.
8	Beständigkeit und Modul	Beschreiben Sie, welche Aussage über die Lebensdauer durch ein Alterungsexperiment nicht bestätigt wurde.
9	DFT, Defekte, Phasenstabilität.	Konkurrierende Erklärungen und ein Konvergenzplan für einen Kandidaten.
10	Bauelementmodellierung und maschinelles Lernen (ML)	Analyse der Parameterempfindlichkeit und Datenlecks
11	Statistische Versuchsplanung und Feldversuche	Ein kontrollierter Forschungsantrag mit definierten Abbruchkriterien.
12	Unabhängige Reproduktion	Ein begrenztes Ergebnis einer frei zugänglichen Arbeit nachrechnen; Unterschiede berichten

Drei Abschlussarbeiten

Die erste Option ist die Bauelementphysik: Bewerten Sie die Stromkonsistenz in einem öffentlich verfügbaren J-V- und EQE-Datensatz. Wenn keine spektralen Daten vorhanden sind, geben Sie nicht an, dass der Strom eindeutig bestätigt wird; geben Sie an, welche Daten benötigt werden. Untersuchen Sie, inwieweit verschiedene Parametersätze zu derselben J-V-Kurve passen, und berichten Sie über die Grenze der Bestimmbarkeit.

Die zweite Option ist die Materialforschung: Für einen bekannten PV-Absorber werden Struktur, konkurrierende Phasen, Bandlücke und Defektliteratur in einer Evidenzkarte zusammengetragen. Anstatt widersprüchliche Werte zu erzwingen, werden diese durch Unterschiede in Methode, Temperatur, Probe und Zusammensetzung erklärt. Es ist nicht erforderlich, eine neue Struktur vorzuschlagen; die präzise Eingrenzung einer bekannten Unsicherheit ist bereits eine Forschungsleistung für sich.

Die dritte Option ist die Zuverlässigkeit: Führen Sie eine erneute Analyse einer umfassenden Alterungsstudie durch. Extrahieren Sie den anfänglichen Wirkungsgrad, die Konditionierung, die Belastung durch Licht/Wärme/Feuchtigkeit/Last, die Unterbrechungen, die Anzahl der Proben und die Definition von T80. Zeigen Sie, wie verschiedene Ausgangspunkte die T80-Werte für denselben Datensatz beeinflussen. Listen Sie die fehlenden Variablen auf, um die Ergebnisse auf die Lebensdauer im Feld zu übertragen.

Lesereihenfolge und die Rolle der Werkzeuge

Verwende das Physik-Lehrbuch, eine aktuelle Zusammenfassung zu einer bestimmten Technologie, das Originalpapier zum gewählten Mechanismus und zusätzliche Daten für die numerischen Ergebnisse zusammen. Rechner wie PV Lighthouse sind nützlich, um grundlegende Trends zu untersuchen; die Ergebnisse, die ohne Kenntnis der Annahmen erzielt werden, stellen jedoch keine unabhängige Validierung dar. Überprüfe den Rechner zunächst an einem bekannten Randfall. [B06]

Wenn Sie mit einem Experten sprechen, stellen Sie vor der Frage „Welche Software soll ich lernen?“ zunächst die Frage: „Welche messbare Größe und deren Unsicherheit behindert unsere Entscheidung?“ Die Software kann sich ändern; die Fähigkeit, die Frage korrekt zu formulieren, bleibt jedoch bestehen. In einer späteren Phase sollten Sie die Literaturrecherche in regelmäßigen Abständen aktualisieren; Studien, die nach dem Datum der Fertigstellung dieses Buches veröffentlicht wurden, sind hier nicht enthalten.

Die klaren Grenzen der Forschung und der Ausblick auf die Zukunft

„Welches Problem löst die ‚neue‘ Lösung?“

Die offenen Forschungsfragen der Photovoltaik lassen sich in verschiedenen Maßstäben betrachten. Ein Material kann weniger Spannungsverluste aufweisen; ein Kontakt kann weniger Metall verwenden; eine Beschichtung kann schneller hergestellt werden; ein Modul kann eine längere Lebensdauer haben. Jedes dieser Elemente kann eine Verbesserung darstellen. Der Erfolg in einem Bereich garantiert jedoch nicht automatisch den Erfolg in den anderen. Um eine Aussage über die Zukunft treffen zu können, müssen wir zunächst festlegen, welcher Verlust oder welche Kosten reduziert werden sollen.

Eine **Solarzelle mit heißen Ladungsträgern** zielt darauf ab, die überschüssige Energie eines durch Licht angeregten Ladungsträgers zu nutzen, bevor diese an das Gitter abgegeben wird. **Ladungsträgervermehrung** ist der Mechanismus, bei dem aus einem einzelnen, ausreichend energiereichen Photon mehrere Elektron-Loch-Paare entstehen. Ein **Zwischenband** ist die Idee, niederenergetische Photonen in mehreren Schritten unter Verwendung geeigneter elektronischer Zustände innerhalb der normalen Bandlücke zu nutzen. Diese Konzepte stellen keine eigenständigen Technologien dar; ihre Prozessgeschwindigkeiten, Selektivität, Verluste und die gesamte Leistungsbilanz müssen untersucht werden.

Warum ist die Quantenausbeute nicht der energetische Wirkungsgrad?

Lehrbeispiel: Nehmen wir an, ein 3 eV-Photon erzeugt zwei Elektron-Loch-Paare. Wenn jedes Paar im externen Stromkreis 0,5 eV Energie übertragen kann, beträgt die gesamte elektrische Energie 1 eV; das Energieverhältnis für dieses Photon beträgt ungefähr 33 %. Zwei Paare bedeuten zwei Ladungsträgerzyklen pro Photon; dies ist nicht der „200 %-Energiewirkungsgrad“. Darüber hinaus sind die Erzeugung zusätzlicher Paare und deren Sammlung am Kontakt separate Wirkungsgradstufen. Diese Unterscheidung ist besonders wichtig bei ungewöhnlichen Umwandlungsmechanismen.

Technologische Reife beschreibt, in welchem Maßstab und unter welchen Bedingungen eine Idee demonstriert wird. Die Stufen reichen von einer einzelnen Probe über eine unabhängig gemessene Zelle, eine Pilotproduktion bis hin zu einer

kontinuierlichen kommerziellen Produktion. Ein **Kompromiss** liegt vor, wenn die Verbesserung eines Kriteriums zur Verschlechterung eines anderen Kriteriums führt. Ein Beispiel hierfür ist, dass eine höhere Effizienz einen engeren Prozessbereich oder teurere Ausrüstung erfordert.

Anstatt die nächste Forschungsfrage auf den „höchsten Prozentsatz“ zu beschränken, können wir sie bedingt formulieren: Für eine bestimmte Fläche, mit einer bestimmten Produktionszeit und einem bestimmten Materialbudget, soll eine bestimmte stabile Leistung und ein bestimmtes Beständigkeitsmaß erreicht werden. Obwohl dieser Satz weniger auffällig erscheint, bestimmt er, wie das Experiment konzipiert wird und ob ein Ergebnis tatsächlich einen Fortschritt darstellt.

Verständniskontrolle: Welche Modellklasse hat sich geändert?

Wenn das neue Modell eine andere Annahme verwendet als das Modell mit einem einzelnen Übergang, sollte dies explizit angegeben werden. Berechnen Sie anschließend die zusätzlichen Verluste und die tatsächliche Nettoleistung des neuen Modells. Die Änderung einer Annahme bezüglich einer theoretischen Grenze bedeutet nicht, dass dieser Vorteil in der Produktion realisiert wurde.

In der Photovoltaik gibt es kein einzelnes, abschließendes Problem. Während sich eine Technologie in Bezug auf den Wirkungsgrad verbessert, können neue Probleme in Bezug auf den Maßstab, die Fertigungstoleranz, die Materialdichte, die Lebensdauer oder das Recycling auftreten. Die zukünftige Forschung auf den höchsten Zellwirkungsgrad zu reduzieren, verschleiert diese gegenseitigen Abhängigkeiten. Die folgenden Fragen dienen nicht der Vorhersage oder der Versprechung von Erfolg, sondern stellen eine Art Leitfaden zur Formulierung von Forschungsproblemen dar.

Jenseits von Silizium, zusammen mit Silizium

Die Akkumulation von Wissen in der siliziumbasierten Industrie erfordert, dass ein neues Material nicht nur physikalisch, sondern auch in Bezug auf die Fertigung wettbewerbsfähig ist. Das Konzept der Tandemzelle bietet die Möglichkeit, den Verlust hochenergetischer Photonen durch die Nutzung der vorhandenen Unterzelle zu reduzieren. Allerdings muss die höhere Spannung, die von der Oberzelle erzeugt wird, die Verluste durch zusätzliche optische Schichten und Verbindungen überwiegen. Die Anpassung des Stroms, das saisonale Spektrum, die Temperaturkoeffizienten, die Fertigungsausbeute und die Alterung des Tandemmoduls müssen gemeinsam berücksichtigt werden.

Theoretisch könnten drei oder mehr pn-Übergänge das Spektrum besser ausnutzen; im Gegenzug würden jedoch die Materialkompatibilität, die Verbindung und die

Herstellung erschwert. Der wissenschaftliche Wert einer Architektur ergibt sich nicht aus der Anzahl der pn-Übergänge, sondern aus dem, was sie bei minimalen Verlusten leistet. Für jede neue Schicht sollte die Frage formuliert werden: „Welchen Verlust reduziert sie, welchen Verlust verursacht sie?“ Dies trägt zu einer klareren Gestaltung bei.

Der tatsächliche Forschungsbedarf bei neuen Absorbern

Damit die Erforschung eines neuen Materials sinnvoll ist, muss es nicht in jeder Hinsicht das Beste sein. Eine kostengünstige Herstellung, die Anpassung an ein bestimmtes Spektrum, eine geringe Toxizität, Flexibilität oder ein besonderer Integrationsvorteil können unterschiedliche Ziele darstellen. Das Ziel muss jedoch von Anfang an definiert werden. Die für eine Stromversorgung eines Innenraumsensors geeignete Bandlücke und die optische Umgebung unterscheiden sich von denen einer Freiluft-Energieanlage. Es ist nicht sinnvoll, eine in Lux angegebenen Beleuchtung ohne Kenntnis des Spektrums direkt mit AM1.5G zu vergleichen.

Es ist nicht ausreichend, die Toxizität allein anhand des Namens eines Elements zu bestimmen; die Form der Verbindung, die Verwendungsmenge, der Ausweg für Leckagen und der Lebenszyklus sind von Bedeutung. Das Gegenteil ist ebenfalls der Fall: eine hohe Leistung beseitigt nicht die Umweltprobleme. Studien, die den Bedarf an Metallen und Transportschichten im Terawatt-Bereich untersuchen, zeigen, dass die Materialauswahl und das Recycling bereits zu Beginn des Designs berücksichtigt werden müssen. Diese Quelle wurde hier lediglich verwendet, um die Bedeutung der Frage nach dem Ressourcenbedarf zu verdeutlichen. [B07]

Alternative Umwandlungsmechanismen

Konzepte wie das Zwischenband, heiße Ladungsträger, die Erzeugung multipler Exzitonen, Singulett-Fission und der volumetrische photovoltaische Effekt sind aus grundphysikalischer Sicht von Bedeutung. In jedem Fall wird angestrebt, die Energie- oder Ladungsträgerverteilung anders als in einem Standard-Einzelübergangs-Bauelement zu nutzen. Die Beobachtung eines mikroskopischen Mechanismus bedeutet nicht zwangsläufig, dass im vollständigen Bauelement ein klarer Energiegewinn erzielt wird. Absorption, selektive Extraktion, Verlustkanäle, die Intensität des Sonnenlichts und die gesamte Leistungsbilanz des Bauelements werden zusammen betrachtet.

Dieses Buch ist keine detaillierte Monografie dieser Fachgebiete. Der Abschnitt über die physikalischen Grenzen dient als Ausgangspunkt für weiterführende Studien. Wenn Sie einen neuen Mechanismus betrachten, bestimmen Sie, welche detaillierte Gleichgewichtsvoraussetzung geändert wurde, welche zusätzlichen

Gerätebedingungen diese Änderung erfordert und ob das Experiment bei der tatsächlichen Betriebsdichte durchgeführt wurde. Der Satz „Überschreitet die SQ-Grenze“ ist alleinstehend keine ausreichende Beschreibung einer Forschungsarbeit.

Das System als Ganzes betrachten

Die kombinierte Nutzung mit landwirtschaftlichen Flächen, Gebäudeoberflächen, schwimmende Systeme und Anwendungen bei schwachem Licht erfordern unterschiedliche Designkriterien. Neben der Leistung pro Flächeneinheit können auch Durchlässigkeit, Farbe, Belastbarkeit, Wartung, Zugänglichkeit und ökologische Bedingungen von Bedeutung sein. Der Zellforscher muss nicht die gesamte Systemtechnik selbst durchführen, sondern er muss wissen, welche Einschränkungen die Zielanwendung mit sich bringt.

Leistungselektronik, Netzflexibilität und Energiespeicherung beeinflussen den Energiewert bei hoher PV-Einspeisung. Dieses Buch ist kein Lehrbuch für die Auslegung von Leistungselektronik oder ein Handbuch für Netzanschlussbestimmungen. Aus materialwissenschaftlicher Sicht ist die Lektion folgende: Ein höherer Wirkungsgrad im Test bedeutet nicht zwangsläufig, dass pro Stunde mehr wertvolle Energie erzeugt wird. Der Zeitpunkt der Energieerzeugung, die Verfügbarkeit und die Systemverluste bestimmen den endgültigen Nutzen.

Abschlussaufgabe: die eigene Forschungsfrage formulieren

Sobald du das Buch durchgelesen hast, schreibe die folgenden fünf Sätze auf: Welches physikalische Objekt untersuche ich? Welche beobachtbare Größe möchte ich verbessern? Welche ist die überzeugendste alternative Erklärung? Welcher ist der kostengünstigste Unterscheidungstest? Bei welchem Ergebnis werde ich die Arbeit stoppen? Wenn diese Sätze durch quantitative Bedingungen und Kontrollen ergänzt werden können, hast du nicht nur ein Thema definiert, sondern eine anwendbare Forschungsfrage formuliert.

Ein Bauelement von Anfang bis Ende analysieren

Die ersten zehn Minuten mit einem Bauelementdossier

In diesem Abschnitt werden wir ein einzelnes Beispiel von Anfang bis Ende untersuchen. Zuerst benötigen wir die **Proben-ID**: Welcher Film oder welche Zelle, welcher Produktionstag, welche Schichtreihenfolge? Dann folgt die **Mess-ID**: Welche Lichtquelle, welche Temperatur, welche Fläche, welche Abtastung und welches Gerät? Wenn wir die Probe und die Messung nicht voneinander trennen, könnten wir die Aufzeichnungen derselben Zelle unter verschiedenen Bedingungen fälschlicherweise als unterschiedliche Proben betrachten.

Rohdaten sind die vom Gerät aufgezeichneten Zahlenwerte. **Verarbeitete Daten** sind aufgezeichnete Werte, bei denen Korrekturen, Normalisierungen oder Modelle angewendet wurden. Die Tatsache, dass die Werte einer Kurve durch eine Fläche geteilt wurden, beweist nicht, dass die Fläche korrekt eingegeben wurde. Eine **abgeleitete Größe** ist ein Ergebnis, wie z. B. der Wirkungsgrad, der FF-Wert oder die Lebensdauer, das aus den Rohmessungen berechnet wird. Es muss möglich sein, die Herkunft des Ergebnisses aus den jeweiligen Eingabedaten nachzuvollziehen.

Die Übereinstimmung der Zahlen stellt das erste Filterkriterium dar

Synthetische Vorabprüfung: Bei einer Öffnungsfläche von $0,25 \text{ cm}^2$ wurde eine maximale Leistung von 6 mW gemessen. Die Leistungsdichte beträgt 24 mW/cm^2 . Wenn die Bestrahlungsstärke 100 mW/cm^2 beträgt, dann ist der Wirkungsgrad 24% . Wenn im Text 26% steht, gibt es dann eine andere Fläche, eine andere Bestrahlungsstärke oder eine andere Messung, die diese Differenz erklären könnte? Zuerst werden die Definitionen und die arithmetische Berechnung überprüft. Die Suche nach neuer Physik ist eine nachfolgende Aufgabe.

Anschließend führen wir eine **Kreuzvalidierung** durch: Stimmt der aus dem Spektrum und der EQE erwartete Kurzschlussstrom mit dem durch die J-V-Messung ermittelten Wert überein? Unterstützt die stabile Leistung das Maximum der schnellen Abtastung? Die Übereinstimmung einer Messung mit einer auf anderem physikalischen Wege erhaltenen Größe bietet eine höhere Zuverlässigkeit als die alleinige Betrachtung eines einzelnen Diagramms. Die Verwendung derselben fehlerhaften Daten in beiden Berechnungen stellt jedoch keine unabhängige Validierung dar.

Im letzten Schritt ordnen wir die Erklärungen. Bei einem niedrigen Füllfaktor kann der Serienwiderstand, ein Shunt oder eine Transportbarriere vorliegen. Welche zusätzliche

Messung kann diese Möglichkeiten mit den geringsten Kosten unterscheiden? Bei dieser Auswahl wird der Gedanke des **Informationswerts** berücksichtigt: Es wird zunächst die Messung ausgewählt, die die Entscheidung beeinflusst, und nicht das detaillierteste Gerät. Der folgende Fall wird zeigen, wie von diesen Vorabprüfungen zum Forschungsprogramm übergegangen wird.

Verständniskontrolle: Verfolge eine Zahl rückwärts

Gehen Sie vom Wirkungsgrad in einem bestimmten Fall zur maximalen Leistungsabgabe, von der Leistung zu Strom und Spannung am gleichen Betriebspunkt und von der Stromdichte zurück zu Fläche und Strom. Wenn jeder Schritt mit derselben Probe und denselben Bedingungen verknüpft werden kann, ist die Berechnungsfolge nachvollziehbar. Wenn eine Verbindung fehlt, muss diese vor der Auswertung des Ergebnisses ergänzt werden.

Zu sehen, dass der Wirkungsgrad einer Zelle steigt, ist erst der Anfang. Die Forschung zielt darauf ab, herauszufinden, welcher Mechanismus für die Steigerung verantwortlich ist und ob sich dies an anderen Proben wiederholen lässt. In diesem Abschnitt werden wir drei synthetische Bauelemente innerhalb derselben Berechnung vergleichen. Bei einem davon nimmt die Rekombinationsrate ab, bei dem anderen sinkt der Kontaktwiderstand. Beide erreichen nahezu den gleichen Wirkungsgrad; dennoch sollte das nächste Experiment des Forschers anders ausfallen.

Daten und Annahmen definieren

Bei allen drei Bauelementen sei die Temperatur 298,15 K, $J_{ph} = 40 \text{ mA/cm}^2$, der Idealitätsfaktor der Diode 1, $r_{sh} = 3000 \text{ } \Omega \cdot \text{cm}^2$ und die Bestrahlungsstärke 100 mW/cm^2 . In der Kontrollgruppe werden $J_0 = 10^{-12} \text{ A/cm}^2$ und $r_s = 1,5 \text{ } \Omega \cdot \text{cm}^2$ gewählt. Im Passivierungsszenario wird nur J_0 um den Faktor fünf reduziert. Im Kontaktszenario wird nur r_s auf $0,4 \text{ } \Omega \cdot \text{cm}^2$ reduziert. Diese Parameteränderungen sollen nicht bedeuten, dass ein realer Prozess nur diese eine Variable beeinflusst; sie sind dazu gedacht, die Mechanismen getrennt voneinander zu untersuchen.

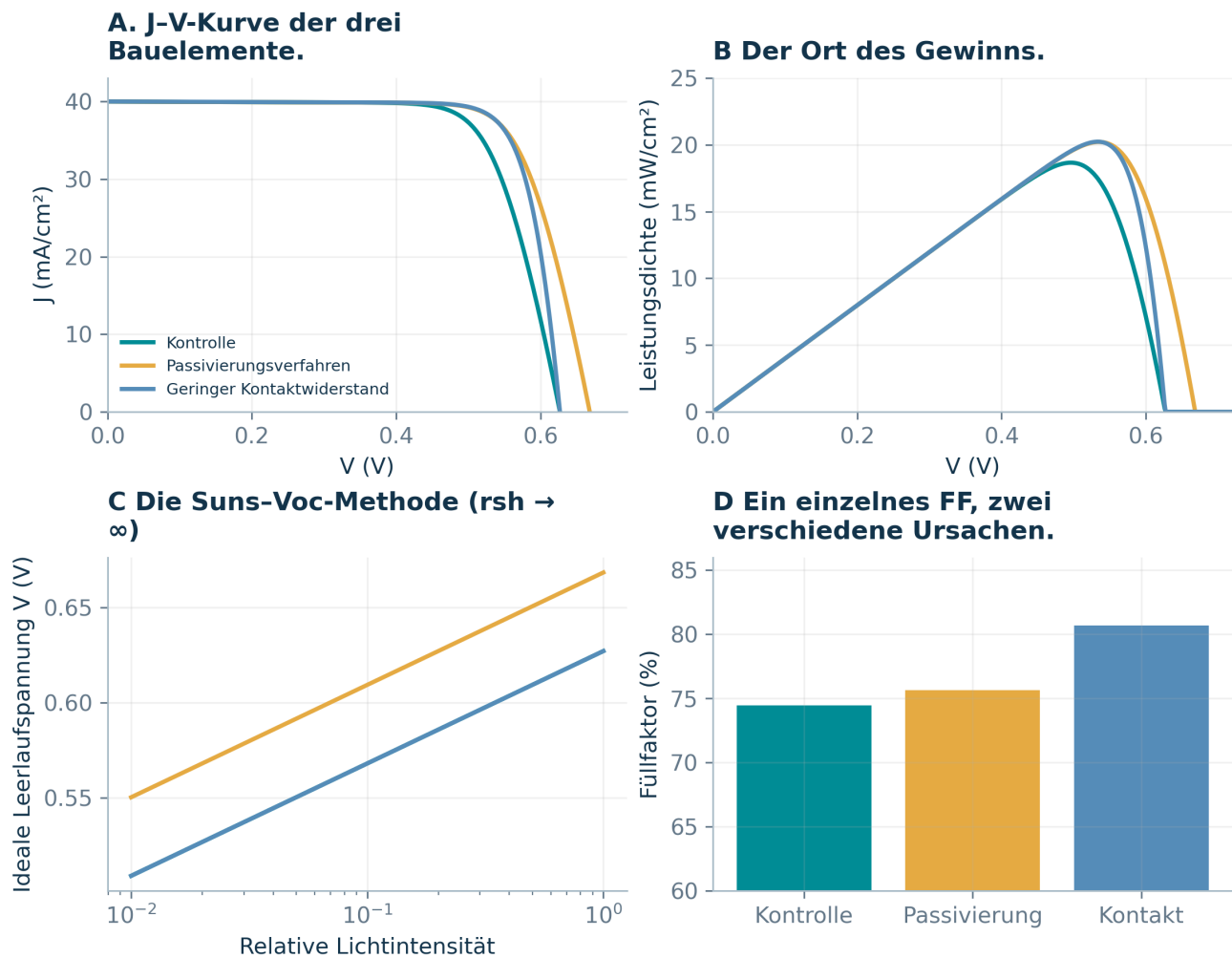


Abbildung 42. Gleicher Wirkungsgrad, unterschiedliche Physik. Die Paneele A und B sind vollständige Ein-Dioden-Lösungen für drei Bauelemente. Das Panel C ist ein Gedankenexperiment vom Typ Suns-Voc, bei dem der parallele Leckstrom vernachlässigt wird; die Passivierung erhöht die Spannung, während eine reine Änderung des Serienwiderstands die Leerlaufspannung nicht verändert. Das Panel D zeigt, dass der Füllfaktor durch beide Mechanismen beeinflusst werden kann. Alle Kurven sind synthetisch. [B11]

Bauelement	Leerlaufspannung (V)	FF (%)	Wirkungsgrad (%)
Kontrolle	0,62708	74,46	18,668
Passivierungsszenario	0,66842	75,67	20,220
Kontaktszenario	0,62708	80,70	20,239

Die mehrstelligen Zahlen in der Tabelle sind nicht die Messgenauigkeit, sondern die Kontrollwerte des numerischen Modells. In allen drei Fällen bleibt J_{sc} bei etwa 40 mA/cm². Im Passivierungsszenario steigt V_{oc} um etwa 41,34 mV. Die einfache logarithmische Erwartung ist $V_T \ln 5 = 41,35$ mV; in der vollständigen Lösung gibt es eine geringfügige Abweichung aufgrund von endlichen parallelen Leckströmen. Im Kontaktszenario ist die externe Stromdichte im Leerlauf Null, daher ist der J_{rs} -Abfall

Null; Voc bleibt unverändert. Wenn Strom gezogen wird, nimmt der interne Spannungsverlust ab, wodurch sich MPP und FF verbessern.

Wie würden wir die erste These des Artikels überprüfen?

Wenn ein Autor sagt, dass die „Passivierung der Grenzfläche den Wirkungsgrad um fast zwei Punkte erhöht hat“, beweist allein die Verbesserung des Endergebnisses nicht den Mechanismus. In diesem Beispiel würde auch eine reine Verbesserung des Kontakts ein ähnliches Ergebnis liefern. Für die erste Unterscheidung betrachten wir Voc und FF gemeinsam. Eine Erhöhung von Voc kann mit einer Verringerung der Rekombination übereinstimmen; jedoch können auch eine erhöhte optische Erzeugung oder eine Temperaturdifferenz die Spannung beeinflussen. Daher werden die gleichen Jsc- und die gleichen Temperaturbedingungen kontrolliert.

Im zweiten Schritt werden die kontaktlose Schicht, die Halbzellenanordnung und das vollständige Bauelement verglichen. Wenn sich die PL/QFLS-Leistung verbessert, sich die Leerlaufspannung (Voc) jedoch nicht verbessert, ist es wahrscheinlich, dass der Materialgewinn am Kontakt verloren geht. Wenn sich die Füllfaktor (FF) verbessert, ohne dass sich die Leerlaufspannung (Voc) ändert, wird die Erklärung durch Kontakt- oder Transportphänomene wahrscheinlicher. Diese Schlussfolgerung ist jedoch nur ein Vorschlag für eine neue Messung und stellt keine endgültige Diagnose dar. Durch mehrere, gegenseitig konsistente Messungen kann die Erklärung eingegrenzt werden.

Im dritten Schritt wird die Leistung bei verringertem Widerstandseinfluss mithilfe von Suns-Voc oder einem geeigneten Pseudo-JV-Ansatz untersucht. Ein großer Unterschied zwischen der vollständigen J-V- und der Pseudo-JV-Kurve kann auf Transportverluste hindeuten. Hier werden auch die Modellbedingungen wie Spannungsabhängigkeit der Ladungsträgersammlung unter Beleuchtung, ionische Effekte und parallele Leckströme überprüft. Nicht alle Messtechniken basieren auf denselben Annahmen; die Tatsache, dass verschiedene Techniken unterschiedliche Werte liefern, muss nicht unbedingt auf einen Gerätefehler zurückzuführen sein.

Bei einem begrenzten Budget, welche Experimente sollten zuerst durchgeführt werden?

Zuerst wählen wir eine kostengünstige Messung, die die beiden Erklärungen unterscheidet. Bevor ein neues Material synthetisiert wird, können auf demselben Bauelement temperaturkontrollierte, stabile J-V-Messungen, EQE-Integralmessungen und reproduzierbare Voc-Messungen durchgeführt werden. Anschließend wird eine Filmbzw. Kontakt Diagnose eingerichtet, die dem gewählten Mechanismus entspricht. Wenn beide Erklärungen dieselben Daten liefern, suchen wir nach Bedingungen, unter denen sie unterschiedliche Ergebnisse vorhersagen: wie z. B. Lichtintensität, Temperatur, Schichtdicke oder Kontaktänderung.

Hypothese	In diesem Beispiel ist die erwartete Änderung.	Eine Beobachtung, die dazu dient, eine Hypothese zu widerlegen.
Nur J_0 wurde reduziert.	Voc nimmt zu; Jsc bleibt nahezu konstant.	Unverändertes Voc bei kalibrierter Temperatur
Nur r_s verringerte sich	FF steigt an; Voc bleibt gleich.	Signifikante und wiederholte Zunahme von Voc.
Nur die optische Generation nahm zu	Das EQE-Integral und Jsc nehmen zu.	Bei gleicher EQE/Jsc wird nur die FF verbessert.
Falsche Messfläche	Die Werte für J und die Skala für den Wirkungsgrad verschieben sich.	Unterschied verschwindet nach unabhängiger Masken-/Flächenmessung

Diese Tabelle schließt nicht aus, dass die Effekte in einem realen Bauelement gleichzeitig auftreten können. Im Gegenteil, sie zeigt, wann von einer Erklärung mit nur einem Effekt abgewichen werden sollte. Mit fortschreitender Forschung sollte die Komplexität des Modells entsprechend den Daten, die seine Anwendung erforderlich machen, zunehmen.

Inhalt eines reproduzierbaren Arbeitspakets

Die Rohdaten der J-V-Kurven und Zeitreihen, die Aufzeichnungen der verwendeten Flächengröße, der Strahlung und der Temperatur, die Probenkennungen und die Produktionschargen werden zusammen gespeichert. Die Analyse wird in einer separaten Datei durchgeführt, ohne die Rohdaten zu verändern. Für jede Grafik wird aufgezeichnet, welche Proben ausgeschlossen wurden und warum. Die wichtigsten Ergebnisse basieren nicht nur auf der besten Zelle, sondern auch auf der Verteilung der einzelnen Produktionswiederholungen. Fehlerhafte Proben sind, um das zugrunde liegende Prinzip zu verstehen, genauso wertvoll wie die erfolgreichsten Proben.

In diesem Buch wurde im numerischen Beispiel das gleiche Prinzip angewendet: Das Datenspektrum, der Formgenerierungscode, die verwendeten Parameter und die Berechnungsergebnisse wurden getrennt behandelt. Die Grafiken wurden nicht nachträglich manuell zur Korrektur von Zahlen verwendet; die Tabellen wurden aus den Lösungen derselben Gleichung generiert. Die Reproduktion einer Kurve und der Nachweis eines realen Materialmechanismus sind unterschiedliche Schritte; dazwischen liegt ein kontrolliertes Experiment.

Gelöste Übungsaufgaben

Bevor die Gleichung gelöst wird, muss das Problem formuliert werden

Die gelösten Aufgaben sind nicht nur Übungen zum Finden der richtigen Zahl. In jeder Aufgabe sollten Sie zuerst die **bekannten Größen** und die **gesuchten Größen** notieren. Beschreiben Sie dann, welche Bedingungen die von Ihnen verwendete Gleichung erfordert. Wandeln Sie alles in ein einheitliches Einheitensystem um, führen Sie die Berechnung durch und überlegen Sie, in welchem Bereich das Ergebnis plausibel sein sollte. Geben Sie das Ergebnis schließlich mit der relevanten Anzahl signifikanter Stellen an. Die **signifikanten Stellen** sind ein Maß für die Genauigkeit, die die Disziplin erfordert, keine künstliche Genauigkeit anzugeben, die durch die Eingabedaten nicht gestützt wird.

Beispiel für eine Einheitenkette: 500 nm, 0,5 μm und 5×10^{-5} cm haben die gleiche Länge. Wenn der Absorptionskoeffizient in cm^{-1} angegeben ist, muss die Dicke in Zentimeter umgerechnet werden. In der exponentiellen Form muss αd dimensionslos sein. Das direkte Einsetzen des μm -Wertes kann einen um den Faktor Zehntausend großen Fehler in der Einheit verursachen; selbst wenn das Ergebnis zwischen 0 und 1 liegt, kann die Berechnung physikalisch falsch sein.

Die Bedeutung mathematischer Werkzeuge

Die Ableitung ist die lokale Änderungsrate einer Größe in Bezug auf eine andere. Wenn die Spannung von 0,50 auf 0,51 V ansteigt und der Strom von 30 auf 29 mA sinkt, beträgt die Steigung in diesem kleinen Bereich ungefähr -100 mA/V. Diese endliche Differenz soll sich der lokalen Ableitung annähern, wenn der Bereich verkleinert wird.

Das Integral ist die Summe kleiner Beiträge. Das Integral der Leistung über die Zeit ist die Energie, das Integral des Stroms über die Zeit ist die Ladung. **Die Quadratwurzel** fragt, welche Zahl, mit sich selbst multipliziert, den gegebenen Wert ergibt. Das Auftreten einer Quadratwurzel in der Diffusionslänge hängt damit zusammen, dass sich die Ausbreitungsstrecke bei doppelter Zeit in der Regel nicht verdoppelt, sondern um den Faktor Wurzel 2 erhöht.

Logarithmen wandeln Multiplikationen in Additionen um. Die Gleichung $\ln(ab) = \ln(a) + \ln(b)$ beschreibt diese Eigenschaft. Das physikalische Verhältnis innerhalb eines Logarithmus muss dimensionslos sein; „ $\ln(5 \text{ Volt})$ “ ist alleinstehend keine sinnvolle Angabe. In der korrekten Formulierung kann die Spannung durch eine

Referenzspannung geteilt werden. Diese Kontrollgleichung ermöglicht es, beim Kopieren, verlorene Maßstäbe zu erkennen.

Anstatt am Ende einer Aufgabe einfach „24“ zu schreiben, geben Sie an: „Dies ist der Strom im gewählten reflexionsfreien Modell mit einfachem Lichtdurchgang.“ Die Begrenzung des Modells ist Teil der Lösung. Bei nachfolgenden Lösungen wird diese Vorgehensweise bei unterschiedlichen Materialien, Messungen und Forschungsansätzen wiederholt.

Verständniskontrolle: Einen Grenzfall prüfen

Im Absorptionsmodell sollte der absorbierte Anteil gegen Null gehen, wenn die Dicke gegen Null geht, und sich einem Wert von Eins annähern, wenn die Dicke sehr groß wird. Wenn eine Formel oder Berechnung diese einfachen Grenzen nicht erfüllt, deutet dies auf einen Fehler bei der Definition der Einheit oder des Modells hin. Die Grenzfälle dienen als unabhängige Kontrollmechanismen, die nicht von der verwendeten Rechenmethode abhängen.

In diesem Abschnitt geht es darum, über die reine Berechnung einer Zahl hinauszugehen. Bei jeder Lösung wird zunächst ein Modell ausgewählt, die Einheiten werden festgelegt und das Ergebnis wird physikalisch interpretiert. Die Zahlen dienen lediglich zu Lehrzwecken. Wenn Sie für ein Problem ein anderes Modell wählen, können Sie zu einem anderen Ergebnis gelangen; Sie müssen den Unterschied anhand der zugrunde liegenden Annahmen erklären.

Problem 1 - Stehen die Absorptionsdicke und die Sammellänge in einem angemessenen Verhältnis zueinander?

Nehmen wir an, der Absorptionskoeffizient α eines Absorbers bei der entsprechenden Wellenlänge beträgt $2 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$. Berechnen Sie die Dicke, die bei einem einzigen Durchgang eine Absorption von 95 % ermöglicht. Berechnen Sie die Diffusionslänge, wenn $D = 0,5 \text{ cm}^2/\text{s}$ und $\tau = 20 \text{ ns}$. Lassen sich aus diesen Werten Rückschlüsse auf die Qualität der Zelle ziehen?

Lösung: Aus der Gleichung $1 - \exp(-\alpha d) = 0,95$ ergibt sich $d = \ln 20 / \alpha = 1,498 \text{ } \mu\text{m}$. $L = \sqrt{(D\tau)} = \sqrt{(0,5 \times 20 \times 10^{-9}) \text{ cm}} = 1 \text{ } \mu\text{m}$. Die optisch erforderliche Dicke ist größer als die Diffusionslänge in diesem Modell. Dies deutet darauf hin, dass es zu Sammelverlusten in der neutralen Zone kommen könnte. Ohne Angabe des inneren Feldes, der Kontaktrichtung, des Generationsprofils und der Oberflächenverluste kann der Wirkungsgrad des Bauelements jedoch nicht berechnet werden. Der kostengünstigste nächste Schritt ist der Vergleich der externen Quanteneffizienz (EQE) und der spannungsabhängigen Sammlung für eine Reihe von Dicken.

Aufgabe 2 - Wie stark verändert ein Fehler der Aperturfläche den Wirkungsgrad?

Es seien $P_{\max} = 20 \text{ mW}$ und $G = 100 \text{ mW/cm}^2$ gemessen. Die Fläche wurde fälschlicherweise mit $0,90 \text{ cm}^2$ angegeben, während sie tatsächlich $1,00 \text{ cm}^2$ beträgt. Was sind die gemeldeten und die tatsächlichen Werte?

Lösung: Der falsche Wirkungsgrad beträgt $20/(100 \times 0,90) = 22,22 \%$; der richtige Wirkungsgrad ist $20,00 \%$. Der Fehler beträgt $+2,22$ Prozentpunkte beziehungsweise ungefähr $11,11 \%$ relativ. Aus einer um 10% zu klein angegebenen Fläche folgt nicht ein Wirkungsgradfehler von genau 10% , denn die Fläche steht im Nenner. Dieses Beispiel zeigt, weshalb aktive Fläche, Aperturfläche und Gesamtfläche des Bauelements getrennt definiert werden.

Aufgabe 3 - Aus dem nichtstrahlenden Spannungsverlust auf ERE schließen

Wenn die spannungslose Verlustspannung bei $298,15 \text{ K}$ 150 mV beträgt, wie hoch ist dann die ERE (reversible Verlustspannung)? Um welchen Faktor erhöht sich die ERE, wenn dieser Verlust auf 100 mV sinkt?

Lösung: $\text{ERE} = \exp(-\Delta V/VT)$. Für 150 mV ergibt sich $\exp(-0,150/0,0256926)$ ungefähr $0,002914$, also $0,2914 \%$. Eine Verbesserung von 50 mV entspricht einer etwa $7,00$ -fachen Zunahme von ERE, was durch $\exp(0,050/VT)$ gegeben ist. Diese logarithmische Beziehung erklärt, warum eine große relative Verbesserung der Strahlungsemission nur einigen zehn Millivolt Spannungsgewinn entsprechen kann. Wenn sich die optischen Auskopplungsbedingungen im Vergleich ändern, kann nicht direkt dasselbe Verhältnis für die interne Rekombination abgeleitet werden.

Aufgabe 4 - Kosten für den Abstand zwischen den vorderen Gitterlinien

Sei $J = 35 \text{ mA/cm}^2$, $R_{\text{sheet}} = 100 \text{ } \Omega/\text{Quadrat}$ und $s = 1,2 \text{ mm}$. Was ist der laterale Verlust in einem eindimensionalen Modell zwischen den Fingern? Wie ändert sich das Verhältnis, wenn $s = 1,8 \text{ mm}$?

Lösung: In Zentimetern ist $s = 0,12$. $J^2 R_{\text{sheet}} s^2/12 = 0,000147 \text{ W/cm}^2$, also $0,147 \text{ mW/cm}^2$. Steigt der Abstand auf das $1,5$ -Fache, wächst der Verlust auf das $2,25$ -Fache, also auf $0,331 \text{ mW/cm}^2$. Bei gleicher Fingerbreite sinkt dagegen der verschattete Flächenanteil um ein Drittel. Für das Gesamtoptimum müssen beide Verluste in derselben Leistungseinheit verglichen werden.

Aufgabe 5 - Vorzeichen der Steigung der Energie für die Defektbildung

Es seien die Bildungsenergien der beiden Ladungszustände gegeben durch $H^+(EF) = 0,4 + EF$ und $H^0(EF) = 0,9$ eV. EF wird in Elektronenvolt (eV) relativ zum oberen Rand des Valenzbandes gemessen. Welcher thermodynamische Übergangspegel und welcher stabile Ladungszustand liegen bei $EF = 0,2$ eV vor?

Lösung: Da die Gleichung $0,4 + EF = 0,9$ lautet, liegt der Übergang bei 0,5 eV. Für $EF = 0,2$ gilt: $H^+ = 0,6$, $H^0 = 0,9$ eV; der Zustand mit +1 Ladung hat eine niedrigere Energie. Die positive Steigung zeigt, dass die Kosten für die Bildung des positiven Ladungszustands zunehmen, wenn sich das Elektronenreservoir ändert. Diese Ebene stellt weder eine direkte PL-Peak-Energie noch eine Barriere für die Ladungsträgerabfangung dar.

Aufgabe 6 - Energie oberhalb der konvexen Hülle und kinetische Stabilität

Es sei angenommen, dass die Bildungsenergien der Phasen $x_B = 0,25$ und $x_B = 0,75$ -0,30 bzw. -0,40 eV/Atom betragen. Der Kandidat $x_B = 0,50$ liegt bei -0,28 eV/Atom. Berechnen Sie die Energiedifferenz oberhalb der unteren Einhüllenden; lässt sich aus dieser Differenz die Zerfallszeit bei Raumtemperatur bestimmen?

Lösung: Die Zusammensetzungsbilanz wird durch eine Mischung mit gleichen Anteilen erreicht. Die Mischungsenergie beträgt -0,35 eV/Atom, die Differenz des Kandidaten beträgt 70 meV/Atom. Dies ist die thermodynamische Triebkraft im ausgewählten Phasenpool. Für die Zerfallszeit sind Diffusions-, Keimbildungs- und Reaktionsbarrieren erforderlich; allein der Vergleich der Differenz mit $k_B T$ führt nicht zu einer Zeitskala von Stunden oder Jahren.

Aufgabe 7 - Unsicherheit und signifikante Stelle

Seien die unabhängigen relativen Standardunsicherheiten von Strom, Spannung, Fläche und Strahlung jeweils 0,5 %, 0,2 %, 0,7 % und 1,0 %. Wenn der Wirkungsgrad 25 % ist, wie lautet dann die kombinierte Standardunsicherheit und die erweiterte Unsicherheit mit $k = 2$?

Lösung: $\sqrt{(0,5^2 + 0,2^2 + 0,7^2 + 1,0^2)} = 1,334$ % ist die relative Standardunsicherheit. In Einheiten des Wirkungsgrads entspricht dies $25 \times 0,01334 = 0,334$ Prozentpunkten. Mit $k = 2$ ergibt sich ungefähr 0,667 Prozentpunkte. Der ungefähre Bericht kann in der Form $25,0 \% \pm 0,7$ angegeben werden, zusammen mit dem Überdeckungsansatz und dem Wert von k . Wenn gemeinsame Fehler oder Korrelationen vorliegen, muss die Summe der unabhängigen Quadrate angepasst werden.

Aufgabe 8 - Tagesenergie und Performance Ratio

Bei einem System mit einer Nennleistung von 5 kWp betrage die tägliche globale Strahlung 6 kWh/m^2 und die Wechselstromleistung 24 kWh. Berechnen Sie den Leistungsfaktor unter Verwendung der Referenzstrahlung $\text{GSTC} = 1 \text{ kW/m}^2$.

Lösung: Der Endertrag $Y_f = 24/5 = 4,8 \text{ kWh/kWp}$. Der Referenzertrag $Y_r = 6/1 = 6$ Stunden. $\text{PR} = 4,8/6 = 0,80$, also 80 %. Diese Zahl beinhaltet gleichzeitig die optischen, thermischen, elektrischen und Verfügbarkeitseffekte. Interpretieren Sie die PR-Werte verschiedener Jahreszeiten nicht direkt als Geräteverschlechterung, ohne die Temperatur und die Datenauswahl zu berücksichtigen.

Aufgabe 9 - Wechselwirkung zwischen zwei Faktoren

Im Modell $y = 20 + 0,2A + 0,3B + 0,45AB$ nehmen A und B die Werte -1 oder +1 an. Ist der Effekt, A von einem niedrigen zu einem hohen Wert zu erhöhen, von B abhängig?

Lösung: Die durch eine Änderung von A verursachte Antwortdifferenz beträgt $\Delta y = 2(0,2 + 0,45B)$. Für $B = -1$ ergibt sich -0,5 Punkte, für $B = +1$ ergibt sich +1,3 Punkte. Daher ist die Aussage „Eine Erhöhung von A ist schädlich“ oder „Eine Erhöhung von A ist vorteilhaft“ alleinstehend unvollständig. Das Ergebnis hängt von dem gewählten Wert für B ab. Die physikalische Entsprechung könnte beispielsweise darin bestehen, dass die Prozesstemperatur bei unterschiedlichen Oberflächenchemien unterschiedliche Reaktionen hervorruft; diese Interpretation muss experimentell überprüft werden.

Problem 10 - Von der Messung zur Entscheidung in der Forschung

Nach dem neuen Kontakt stieg der Füllfaktor (FF) um drei Punkte; Voc und das EQE-Integral blieben unverändert. Die erste Hypothese besagt, dass der Kontaktwiderstand abgenommen hat, die zweite Hypothese besagt, dass die Lichtabsorption zugenommen hat. Welche Beobachtung ermöglicht die Unterscheidung zwischen den beiden Hypothesen?

Lösung: Da sich das EQE-Integral nicht verändert, wird die Erklärung „nur die Absorption hat zugenommen“ unwahrscheinlicher. Das unveränderte Voc und das ansteigende FF deuten eher auf eine Verbesserung der Kontaktqualität beziehungsweise des Ladungstransports hin. Ein nachfolgendes Experiment könnte die Messung des Kontaktwiderstands oder ein geeigneter Pseudo-JV-Vergleich sein. Ohne Bestätigung gleicher Bestrahlungsstärke und Temperatur, unabhängiger Wiederholungen zwischen Proben und eines stabilen MPP kann der Mechanismus nicht abschließend bestimmt werden. Eine gute Antwort wählt nicht nur eine Hypothese aus, sondern gibt auch an, welches Experiment diese widerlegen würde.

Eine Vorlage für das strukturierte Lesen eines Artikels

Sobald Sie den Artikel fertig gelesen haben, erstellen Sie eine einseitige Zusammenfassung: Hauptphysikalische These; untersuchter Bauelementschnitt; Definition von Probe und Kontrollgruppe; primäres Leistungsmerkmal; wichtigste Rohdaten; vom Autor verwendetes Vorwärtsmodell; alternative Erklärung; differenzierendes Experiment; fehlende Informationen zur Reproduktion. Aktualisieren Sie anschließend diese Zusammenfassung mit den zusätzlichen Informationen aus dem Artikel. Der Titel und die Zusammenfassung dienen lediglich als Einführung in diese Arbeit.

Wenn Sie eine neue Methode aus der Literatur in Ihre eigene Arbeit übernehmen, reproduzieren Sie zunächst die Kontrollbedingungen. Wenn die Kontrolle nicht funktioniert, ist es schwierig, den Erfolg oder Misserfolg des neuen Verfahrens zu beurteilen. Dokumentieren Sie die Änderungen der Parameter einzeln; das Verständnis, warum negative Ergebnisse negativ sind, liefert übertragbarere Informationen, als die besten Zellen durch zufällige Änderung der Bedingungen zu suchen.

Symbole, Einheiten und ein Türkisch-Englisch-Wörterbuch

Das Glossar von einer Wortliste zu einem Arbeitsmittel machen

Ein Symbol hat keine einzelne und universelle Bedeutung. **G** kann in einem Abschnitt die auf eine Oberfläche fallende Strahlung in der Einheit W/m^2 darstellen, an einer anderen Stelle die volumetrische Ladungsträgererzeugungsrate in der Einheit $\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$. **R** kann für Widerstand, Reflexionsgrad oder Rekombinationsrate stehen. Anstatt den Buchstaben isoliert auswendig zu lernen, sollte man ihn zusammen mit seiner Definition und Einheit speichern. Wenn in derselben Gleichung ähnliche Buchstaben verwendet werden, sorgen Unterindizes und der Kontext für eine Unterscheidung.

Der tiefgestellte Index gibt die Art der Größe an: sc für Kurzschluss, oc für Leerlauf, mpp für den Maximum-Power-Point. **Der hochgestellte Index** kann manchmal eine Potenz, manchmal einen Ladungszustand oder eine beschreibende Kennzeichnung sein. Die hochgestellte 2 in cm^2 kennzeichnet eine Flächeneinheit; $2+$ in Pb^{2+} kennzeichnet den Ladungszustand des Ions. Diese sollten nicht wie eine einzelne Operation gelesen werden. Griechische Buchstaben sind ebenfalls nur Symbole: η steht für den Wirkungsgrad, τ für die Lebensdauer und λ für die Wellenlänge, und diese werden in diesem Buch häufig verwendet.

Einheiten zeilenweise umrechnen

Da $1 \text{ m} = 100 \text{ cm}$ gilt, ist $1 \text{ m}^2 = 10\,000 \text{ cm}^2$. Deshalb gilt $1 \text{ A}/\text{m}^2 = 0,1 \text{ mA}/\text{cm}^2$: Bei der Umrechnung von Ampere in Milliampere multiplizieren wir mit 1000; bei der Umrechnung der Fläche im Nenner von Quadratmetern in Quadratzentimeter dividieren wir anschließend durch 10 000. Die Umrechnung $1000 \text{ W}/\text{m}^2 = 100 \text{ mW}/\text{cm}^2$ folgt derselben Logik. Bei einer Flächeneinheit den Längenumrechnungsfaktor nur einmal anzuwenden, gehört zu den häufigsten Fehlern.

Das Wort „Dichte“ benötigt ebenfalls einen Nenner. Die Stromdichte ist der Strom pro Flächeneinheit, die Trägerdichte ist die Anzahl pro Volumeneinheit. Die Massendichte ist die Masse pro Volumeneinheit. Die Aussage „Die Dichte hat zugenommen“ ist ohne Angabe der jeweiligen Größe und des Nenners unvollständig.

Ordnen Sie beim Lernen der englischen Entsprechungen die Konzepte einander zu, statt nur einzelne Wörter zu übersetzen. „Yield“ kann in der Produktion die Akzeptanzrate oder in Bezug auf Energie die Produktion innerhalb eines bestimmten Zeitraums bedeuten. „Lifetime“ kann die mikroskopische Lebensdauer von

überschüssigen Ladungsträgern oder die Nutzungsdauer eines Produkts über viele Jahre sein. Die Verwendung der im Wörterbuch angegebenen Entsprechung zusammen mit dem Maßstab und der Einheit im Text verhindert diese Verwirrung beim Übersetzen und beim Lesen von Fachliteratur.

Verständniskontrolle: Finden Sie die falsche Gleichung

40 mA/cm^2 ist nicht gleich 40 A/m^2 ; es ist 400 A/m^2 . Ebenso ist 1 cm^2 nicht $0,01 \text{ m}^2$, sondern $0,0001 \text{ m}^2$. Wenn man die Einheitenumrechnung bei jedem Schritt explizit angibt, können Fehler in der Größenordnung von mehreren Größenordnungen bereits vor dem Erstellen von Diagrammen erkannt werden.

Einheitenverzeichnis

$1 \text{ eV} = 1,602176634 \times 10^{-19} \text{ J}$; $q = 1,602176634 \times 10^{-19} \text{ C}$; $h = 6,62607015 \times 10^{-34} \text{ J s}$; $c = 299792458 \text{ m/s}$. Mit diesen SI-Definitionswerten ergibt sich für hc ungefähr $1239,841984 \text{ eV nm}$. Die Boltzmann-Konstante $k = 1,380649 \times 10^{-23} \text{ J/K}$; k/q beträgt ungefähr $8,617333262 \times 10^{-5} \text{ V/K}$. $25 \text{ }^\circ\text{C} = 298,15 \text{ K}$ und kT/q beträgt ungefähr $25,693 \text{ mV}$. [B08]

$1 \text{ cm}^2 = 10^{-4} \text{ m}^2$; $1 \text{ mA/cm}^2 = 10 \text{ A/m}^2$. $1000 \text{ W/m}^2 = 100 \text{ mW/cm}^2$. Für $J_{\text{sc}} = 40 \text{ mA/cm}^2$, $V_{\text{oc}} = 0,70 \text{ V}$ und $\text{FF} = 0,80$ beträgt die maximale Leistungsdichte $22,4 \text{ mW/cm}^2$; der Wirkungsgrad bei dieser Bestrahlungsstärke beträgt 22,4 Prozent. Diese numerische Vereinfachung setzt eine Bestrahlungsstärke von 100 mW/cm^2 voraus. Bei einer anderen Bestrahlungsstärke gilt diese Abkürzung nicht.

Unterscheiden Sie zwischen Prozent und Prozentpunkten: Die Steigerung des Wirkungsgrads von 20 % auf 22 % entspricht einer Zunahme von 2 Prozentpunkten, was einer relativen Steigerung von 10 % gegenüber dem Ausgangswert entspricht. Der Ausdruck „Verbesserung um 2 %“ ist unklar, wenn nicht angegeben wird, welche der beiden Bedeutungen gemeint ist. Energiedichte, Leistungsdichte, Leistung pro Masse und Leistung pro Fläche sind ebenfalls unterschiedliche Leistungsmaße.

Grundlegende Symbole

Symbol	Bedeutung	Häufig verwendete Einheit
E, E_g	Photonenenergie, Bandlücke	eV oder J
λ , ν	Wellenlänge, Frequenz	nm; Hz
G	Je nach Kontext Bestrahlungsstärke oder volumetrische Generationsrate	W/m^2 oder $\text{cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$; unbedingt definieren.

Symbol	Bedeutung	Häufig verwendete Einheit
Φ	Photonenfluss oder spektraler Photonfluss.	$\text{m}^{-2} \text{s}^{-1}$; Bezug auf Energie- oder Wellenlängenintervall gesondert angeben
J, I	Stromdichte, Strom	mA/cm^2 ; A
V, Voc	Spannung, Leerlaufspannung	V
P, η	Leistung, Leistungsumwandlungswirkungsgrad	W; dimensionslos oder in Prozent.
n, p	Elektronen- und Lochdichte	cm^{-3}
μ , D, τ , L	Beweglichkeit, Diffusionskoeffizient, Lebensdauer, Diffusionslänge.	cm^2/Vs ; cm^2/s ; s; cm
α , d	Absorptionskoeffizient, Dicke.	cm^{-1} ; cm
Rs, Rsh	Serien- und Shuntwiderstand	Ω ; bei flächennormiertem Widerstand $\Omega \text{ cm}^2$
ϵ , ψ	Dielektrische Permittivität, elektrostatisches Potential	F/cm; V
u, U	Standardunsicherheit, erweiterte Unsicherheit	Gleiche Einheit wie das Ergebnis

Zweisprachiges Glossar

Türkisch / Abkürzung	Englisch	Bedeutung in der Forschung
Fotovoltaik	Photovoltaic	Direkte Umwandlung von Licht in elektrische Energie
Soğurucu	Absorber	Schicht, die nutzbare Photonen absorbieren soll
Bant aralığı	Band gap	Energiedifferenz zwischen den elektronischen Bandkanten
Doğrudan / dolaylı aralık	Direct / indirect gap	Unterscheidet die Impulsbedingung für den Übergang
Eksiton	Exciton	Gebundenes Elektron-Loch-Paar
Taşıyıcı	Charge carrier	Elektron oder Loch, das am Strom teilnimmt.
Katkılama	Doping	Verunreinigung, die die Ladungsträgerkonzentration und -art steuert.
Fermi seviyesi	Fermi level	Elektronisches chemisches Potential im Gleichgewicht
Kuazi-Fermi ayrışması	Quasi-Fermi level splitting	Potentialdifferenz zwischen Elektronen und Löchern im Nichtgleichgewichtszustand.
Yeniden birleşme	Recombination	Verlust der Elektron-Loch-Population.

Türkisch / Abkürzung	Englisch	Bedeutung in der Forschung
Işınımsal yeniden birleşme	Radiative recombination	Rekombinationskanal mit Photonenemission
Işınımsız yeniden birleşme	Non-radiative recombination	Energie, die über andere Kanäle als Photonen abgeführt wird.
SRH	Shockley-Read-Hall	Modell der defektvermittelten Rekombination.
Auger	Auger recombination	Kanal, in dem Energie auf einen anderen Ladungsträger übertragen wird.
Pasivasyon	Passivation	Verringerung der Wirkung elektrisch schädlicher Zustände
Seçici kontak	Selective contact	Einen Ladungsträger leiten und den anderen blockieren.
Bant hizalanması	Band alignment	Elektronische Energiebeziehungen zwischen den Schichten
Arayüz	Interface	Der Bereich, in dem sich zwei Materialien verbinden.
Tane sınırı	Grain boundary	Bereich, der verschiedene Kristallorientierungen voneinander trennt.
Boşluk kusuru	Vacancy	Fehlendes Atom an einem Kristallgitterplatz
Antisite	Antisite defect	Ein Atom besetzt eine Gitterstelle, die eigentlich für einen anderen Atomtyp vorgesehen ist.
İyon göçü	Ion migration	Die Bewegung von Ionen oder ionischen Defekten.
Kısa devre akımı	Short-circuit current	Strom bei einer Klemmenspannung von null
Açık devre gerilimi	Open-circuit voltage	Spannung bei einem Nettoklemmenstrom von null
Dolum faktörü, FF	Fill factor	$p_{max}/(V_{oc} I_{sc})$; wenn es als Leistungsdichte ausgedrückt wird, lautet es $p_{max}/(V_{oc} J_{sc})$.
MPP / MPPT	Maximum power point / tracking	Punkt maximaler Leistung und dessen Verfolgung
PCE	Power conversion efficiency	Verhältnis der abgegebenen elektrischen Leistung zur einfallenden Lichtleistung.
EQE	External quantum efficiency	Verhältnis der gesammelten Elektronen zu den einfallenden Photonen
IQE	Internal quantum efficiency	Quanteneffizienz bezogen auf die definierte Population absorbiert Photonen
PL / TRPL	Photoluminescence / time-resolved PL	Lichtinduzierte Emission und Zeitverhalten
EL	Electroluminescence	Lichtemission durch elektrische Anregung
PLQY	Photoluminescence quantum yield	Das Verhältnis der emittierten Photonen zur Anzahl der absorbierten anregenden Photonen.

Türkisch / Abkürzung	Englisch	Bedeutung in der Forschung
ERE	External radiative efficiency	Externer strahlender Rekombinationsanteil; nicht identisch mit PLQY
Histerezis	Hysteresis	Das Ergebnis hängt von der Messhistorie ab.
Spektral uyumsuzluk	Spectral mismatch	Fehlanpassung von Quelle und Bauelementantwort an die Referenz
Aperture alanı	Aperture area	Durch eine optische Apertur definierte Messfläche
Aktif alan	Active area	Die Definition einer bestimmten aktiven Zone umfasst möglicherweise nicht die gesamte Fläche des Bauelements.
STC	Standard test conditions	Definiertes Referenzspektrum, Bestrahlungsstärke und Temperatur
AM1.5G	Air mass 1.5 global	Terrestrische globale Referenzspektralverteilung
AM1.5D	Air mass 1.5 direct	Direkte Referenzspektralverteilung
Tandem	Tandem	Übereinander angeordnete Teilzellen, die unterschiedliche Spektralbereiche nutzen
2T / 4T	Two / four terminal	Unterscheidung nach elektrischen Anschlüssen und Schaltungstopologie
Akım eşleme	Current matching	Bedingung eines gemeinsamen Stroms für in Reihe geschaltete Teilzellen
Şönt	Shunt	Unerwünschter paralleler Leckstrompfad.
TCO	Transparent conducting oxide	Transparentes leitfähiges Oxid
ETL / HTL	Electron / hole transport layer	Elektron-/Loch-Transportschicht
PERC	Passivated emitter and rear cell	Siliziumarchitektur mit Rückseitenpassivierung.
TOPCon	Tunnel oxide passivated contact	Passivierter Kontakt mit einer dünnen Oxidschicht
SHJ	Silicon heterojunction	Silizium-Heteroübergangsarchitektur
IBC	Interdigitated back contact	Geometrie ineinandergreifender Rückseitenkontakte
DSSC	Dye-sensitized solar cell	Farbstoffsensibilisierte Solarzelle.
BHJ	Bulk heterojunction	Organisches Donator-Akzeptor-Mischungsnetzwerk
DFT	Density functional theory	Rahmen zur Berechnung des elektronischen Grundzustands
SOC	Spin-orbit coupling	Wechselwirkung zwischen Spin- und Orbitalbewegung.
Konveks zarf	Convex hull	Hüllkurve der energetisch günstigsten Phasemischungen

Türkisch / Abkürzung	Englisch	Bedeutung in der Forschung
Fonon	Phonon	Kristallschwingungsmodus
Metastabilite	Metastability	Lokal stabiler Zustand außerhalb des globalen Gleichgewichts
SQS	Special quasirandom structure	Darstellung von Unordnung durch ausgewählte Korrelationsfunktionen.
NEB	Nudged elastic band	Methode der Übergangspfad- und Energiebarriere
Sürüklenme-difüzyon	Drift-diffusion	Transportmodell durch elektrische Felder und Dichteunterschiede
TMM	Transfer matrix method	Lösungsverfahren für schichtförmige optische Strukturen.
UQ	Uncertainty quantification	Quantitative Berechnung der Unsicherheit.
OOD	Out of distribution	Außerhalb der Trainingsverteilung
Veri sızıntısı	Data leakage	Unzulässige Übertragung von Testinformationen in das Modelltraining
Tanımlanabilirlik	Identifiability	Fähigkeit der Daten, Parameter voneinander zu unterscheiden
Tasarım yeterliliği	Design qualification	Eignung eines Designs unter festgelegten Prüfungen
T80	Time to 80 percent	Zeit, bis die definierte Anfangsleistung auf 80 % abfällt.
PR	Performance ratio	Auf die Referenzbestrahlungsstärke normierte Systemleistung
LCOE	Levelized cost of electricity	Das Verhältnis der diskontierten Kosten zu der diskontierten Energie.
LCA	Life cycle assessment	Berechnung der Umweltauswirkungen über den Lebenszyklus
EPBT	Energy payback time	Zeitraum, in dem der Energieaufwand durch die Produktion wieder ausgeglichen wird.

Literaturverzeichnis und Zugangshinweise

Wie verwendet man die Bibliografie?

Die in diesem Abschnitt aufgeführten Einträge stellen keine Namensliste dar, sondern eine Nachverfolgung der im Text genannten Behauptungen. Der in eckigen Klammern stehende Code führt Sie zum Eintrag, und der Eintrag wiederum zu einer DOI oder einem institutionellen Link. Das **Erscheinungsjahr** gibt an, wann die Arbeit veröffentlicht wurde; das **Zugriffsdatum** gibt an, wann der Link bei der Erstellung dieser Zusammenstellung überprüft wurde. Da sich aktuelle Webseiten ändern können, sollten wir diese beiden Daten nicht als identisch betrachten.

Ein Vermerk in einem Datensatz gibt die Zugriffsbeschränkungen für den Beschreibungstext an. Wenn angegeben ist, dass die „Zusammenfassung geprüft“ wurde, bedeutet dies nicht, dass der vollständige Methodenteil gelesen wurde. Ein „Standard-Katalogeintrag“ dient dazu, den Umfang und die Version des Standards zu bestätigen; er bedeutet nicht, dass alle obligatorischen Elemente hier wiedergegeben werden. Die Auflistung eines Buches für weiterführende Lektüre bedeutet auch nicht, dass alle Kapitel in diesem Werk erneut präsentiert werden.

Wenn Sie eine Quelle angeben, unterscheiden Sie die Beschreibung dieses Buches von den ursprünglichen experimentellen Ergebnissen. Wenn Sie sich auf die Art und Weise beziehen, wie ein Konzept erklärt wird, zitieren Sie das Buch; wenn Sie sich auf die ursprünglichen Daten zur Leistung einer bestimmten Zelle oder auf den Nachweis eines Mechanismus beziehen, zitieren Sie die Originalarbeit. Beide können zusammen verwendet werden. Auf diese Weise bleibt sowohl die Synthese des Wissens als auch der Urheber der ersten Messung erkennbar.

In dieser Überarbeitung wurden die zugänglichen Seiten von Becquerels Text aus dem Jahr 1839 sowie die kurze Originalmitteilung von Adams-Day untersucht. Der Umfang dieser Untersuchung ist in den Quellenangaben klar definiert. Ziel ist es, die chemischen Prozessdetails nicht nur auf einer populären historischen Zeitleiste zu basieren, sondern auch zu klären, auf welches Experiment sich der Text bezieht. Es wird nicht behauptet, dass die gesamte PV-Literatur oder das gesamte historische Archiv vollständig durchsucht wurde.

Verständniskontrolle: Was belegt eine Quelle?

Eine Referenz überprüft nicht automatisch alle zugehörigen Sätze. Wenn Sie eine bestimmte Zahl verwenden, prüfen Sie, ob die Quelle diese Zahl unter den gleichen Bedingungen, mit der gleichen Definition und anhand des gleichen Beispiels tatsächlich angibt. Wenn die Quelle nicht gefunden werden kann, ist es eine bessere Forschungspraxis, dies unbestimmt zu lassen, als scheinbar eine weitere Verbindung hinzuzufügen, die eine Unterstützung suggeriert.

Historische Quellen, Originalarbeiten und institutionelle Referenzdokumente. Die Quellen der grundlegenden Zusammenstellung wurden am 7. September 2026 abgerufen; ergänzende historische Prüfungen folgten am 8. September 2026. Die Auflistung einer Quelle bedeutet nicht, dass der vollständige, nicht zugängliche Text geprüft wurde; Nutzungseinschränkungen sind in den folgenden Anmerkungen angegeben.

[B01] Photovoltaics Report, updated 14 July 2026

Fraunhofer ISE; PSE Projects GmbH (2026). Institutionsbericht

<https://www.ise.fraunhofer.de/content/dam/ise/de/documents/publications/studies/Photovoltaics-Report.pdf>

Das PDF-Dokument und das Datum der Aktualisierung wurden bestätigt; es handelt sich um eine kurze Übersicht über den Markt und die Ressourcennutzung. Es handelt sich nicht um ein eigenständiges, bestätigtes Rekordzertifikat.

[B02] Snapshot of Global PV Markets 2026

IEA PVPS (2026). Unternehmensmarktbericht

<https://iea-pvps.org/snapshot-reports/snapshot-2026/>

Das offizielle Zusammenfassungsblatt und die Haupt-PDF-Datei wurden überprüft. Das zusammenfassende Diagramm gibt 607-698 GW an, der Haupttext nennt einen Wert von etwa 608 GW; 698 GW ist die obere Schätzung. PDF: <https://iea-pvps.org/wp-content/uploads/2026/04/Snapshot-of-Global-PV-Markets-2026.pdf>

[B03] Solar cell efficiency tables: Version 68

M. A. Green; E. D. Dunlop; M. Yoshita; N. Kopidakis; K. Bothe; G. Siefer; J. Y. Jiang (2026). Tabelle mit unabhängig verifizierten Ergebnissen.

<https://doi.org/10.1016/j.joule.2026.102494>

Die offizielle Bibliografie und der Umfang des Eintrags JRC146451 wurden bestätigt:

<https://publications.jrc.ec.europa.eu/repository/handle/JRC146451>. Detaillierte Angaben zur Rekordzellfläche und zur Messunsicherheit wurden daraus nicht übernommen.

[B04] Handbook of Photovoltaic Science and Engineering, Second Edition

A. Luque; S. Hegedus (Herausgeber) (2011). Weiterführendes Lehrbuch

<https://doi.org/10.1002/9780470974704>

Die Bibliografie des Verlags und der Umfang wurden überprüft; es wird nicht behauptet, dass der vollständige Text durchsucht wurde.

[B05] Physics of Solar Cells: From Basic Principles to Advanced Concepts, Third Edition

P. Würfel; U. Würfel (2016). Weiterführendes Lehrbuch

https://www.wiley-vch.de/en?isbn=9783527413126&option=com_eshop&view=product

Die Bibliografie des Verlags und der Umfang wurden überprüft; es wird nicht behauptet, dass der vollständige Text durchsucht wurde.

[B06] PV Lighthouse: Equivalent circuit and research calculators

PV Lighthouse (Laufend aktualisierte Quelle). Offizielle Webseite des Forschungsinstruments.

<https://www.pvlighthouse.com.au/equivalent-circuit>

Der Anwendungsbereich wurde überprüft; die Ergebnisse ersetzen keine unabhängige Validierung.

[B07] The Resource Demand of Terawatt-Scale Perovskite Tandem Photovoltaics

L. Wagner; J. Suo; B. Yang; D. Bogachuk; E. Gervais; R. Pietzcker; A. Gassmann; J. C. Goldschmidt (2023). Aufzeichnung des Vorabdrucks der Originalarbeit.

<https://arxiv.org/abs/2306.13375>

Der Titel der Vorabversion und der Umfang der Quellenanfrage wurden bestätigt; die digitale Quellenanfrage wurde nicht weitergeleitet.

[B08] The International System of Units (SI), 9th edition

BIPM (2019; aktualisierte Online-Ausgabe.). Offizielle SI-Referenzquelle

<https://www.bipm.org/en/publications/si-brochure>

Quelle für die SI-Einheitenkonstanten.

[B09] Multilayer optical calculations

Steven J. Byrnes (2016; v5 (2020)). Explizite technische Ableitung.

<https://arxiv.org/abs/1603.02720>

Im HTML-Text von v5 wurden die normale Einfallswinkel, die Fresnel-Amplituden, die Phase und der kohärente/inkohärente Bereich verifiziert. Das verlustfreie, einschichtige Beispiel im Buch ist eine originale numerische Neuberechnung.

[B10] ASTM G173 reference spectra: pvlib data representation and get_reference_spectra

pvlib python contributors; ASTM G173 reference data (Abgerufen 2026). Offene Referenzdaten

https://pvlib-python.readthedocs.io/en/stable/reference/generated/pvlib.spectrum.get_reference_spectra.html

Eine CSV-Datei mit 2002 Zeilen wurde verwendet:

<https://raw.githubusercontent.com/pvlib/pvlib-python/main/pvlib/data/ASTMG173.csv>. Lokaler SHA-256-Hashwert: 91964ac23c0ec82dbbda4a7f160a5f5faf551dfe18ffae7e2446d74b57ee7859. Die Spektrumsdefinition der Institution wurde mit H09 verglichen.

[B11] pvlib.pvsystem.singlediode - single diode equation

pvlib python contributors (Abgerufen 2026). Offizielle Fahrzeugdokumentation.

<https://pvlib-python.readthedocs.io/en/stable/reference/generated/pvlib.pvsystem.singlediode.html>

Die Parameter und der Anwendungsbereich des ein-Dioden-Ersatzschaltkreises wurden überprüft. Die in dem Buch verwendete Form der Stromdichte und die Kurven wurden durch unabhängige Wurzelberechnung erzeugt.

[B16] Solar Photovoltaic Cell Basics

U.S. Department of Energy (Abgerufen 2026). Einführendes Lehrmaterial einer Institution

<https://www.energy.gov/cmei/systems/solar-photovoltaic-cell-basics>

Zugriff auf grundlegende Zellfunktionen und Technologiearten. Nicht alle in der aktualisierten Seite enthaltenen Rekord-/Marktwerte wurden in diese Überarbeitung übernommen. Zugriff: 8. September 2026.

[B17] Solar Photovoltaic Performance and Efficiency Basics

U.S. Department of Energy (Abgerufen 2026). Einführendes Lehrmaterial einer Institution

<https://www.energy.gov/cmei/systems/solar-photovoltaic-performance-and-efficiency-basics>

Zur Prüfung der Wirkungsgraddefinition und der Beziehung zwischen Strom, Spannung und Leistung verwendet. Die quantitativen Beispiele wurden als Lehrbeispiele für dieses Buch erstellt. Zugriff: 8. September 2026.

[H01] The History of Solar

U.S. Department of Energy, Energy Efficiency and Renewable Energy (Jahr nicht angegeben). Zeitlicher Ablauf der Entwicklung der Institution.

https://www1.eere.energy.gov/solar/pdfs/solar_timeline.pdf

Das öffentlich zugängliche PDF-Dokument mit 12 Seiten wurde verifiziert. Es wurde für die historischen Wendepunkte der Jahre 1839 und 1883 verwendet; das genaue Erscheinungsjahr konnte im Dokument nicht bestätigt werden. Die darin enthaltenen historischen Zukunftsprognosen und Rekordtabellen wurden nicht als aktuelle Informationen verwendet.

[H02] Effect of Light on Selenium During the Passage of an Electric Current

Willoughby Smith (1873). Primäre historische Veröffentlichung.

<https://doi.org/10.1038/007303e0>

Nature 7, 303; 20. Februar 1873. Titel, Datum und DOI wurden anhand des Verlagsverzeichnisses und der bibliografischen Aufzeichnungen überprüft. Kurze historische Einordnung zur Unterscheidung von Bauelementen, die durch Photokonduktivität Energie erzeugen; eine vollständige Analyse des Artikels wird nicht beansprucht.

[H03] Referee's report on The action of light on selenium by William Grylls Adams and R. E. Day

Henry Enfield Roscoe; The Royal Society Archives (1876). Primärer Archivdatensatz

https://makingscience.royalsociety.org/items/rr_7_429/referees-report-by-henry-enfield-roscoe-on-a-paper-the-action-of-light-on-selenium-by-william-grylls-adams-and-r-e-day

Der Eintrag im Gutachten vom 7. August 1876 bestätigt die Veröffentlichung der entsprechenden Arbeit im Jahr 1877 in den „Philosophical Transactions“ und verweist auf die DOI 10.1098/rstl.1877.0009. Er wurde zur Unterscheidung zwischen dem Datum der Durchführung/Präsentation und dem Datum der Veröffentlichung verwendet.

[H04] A New Silicon p-n Junction Photocell for Converting Solar Radiation into Electrical Power

D. M. Chapin; C. S. Fuller; G. L. Pearson (1954). Artikel über das primäre Bauelement.

<https://doi.org/10.1063/1.1721711>

Journal of Applied Physics 25(5), 676-677; Mai 1954. Autoren, Institution, Titel, Seiten und DOI wurden anhand des bibliografischen Eintrags überprüft. Der automatische Zugriff auf den vollständigen Text des Verlags konnte nicht hergestellt werden; 6 %, der historische Kontext wird durch H08 unterstützt.

[H05] Experimental silicon solar cell

Smithsonian Institution, National Museum of American History (Jahr nicht angegeben). Museumsobjekt und historische Aufzeichnung.

https://www.si.edu/object/nmah_713146

Die indexierte Beschreibung des Smithsonian-Kollektionseintrags wurde bestätigt. Der Kontext von Chapin, Fuller, Pearson und Ohl wurde verwendet; beim direkten automatischen Öffnen der Seite trat ein vorübergehender Fehler auf.

[H06] The 1905 Papers - Annus Mirabilis of Albert Einstein

Library of Congress (Jahr nicht angegeben). Archiv und Leseverzeichnis der Institution.

<https://guides.loc.gov/einstein-annus-mirabilis/1905-papers>

Die institutionelle Aufzeichnung, die Einsteins Artikel von 1905 über das Lichtquanten-/photoelektrische Phänomen und die Princeton-Übersetzung beschreibt, wurde bestätigt. Sie wurde für einen kurzen historischen Kontext verwendet; die Unterscheidung zwischen dem photovoltaischen Bauelement und dem externen photoelektrischen Effekt stellt die ursprüngliche erläuternde Beschreibung dar.

[H07] Vanguard Satellite, 1958

NASA (2015). Institution - Datum der Aufzeichnung

<https://www.nasa.gov/image-article/vanguard-satellite-1958/>

Das Startdatum 17. März 1958 und die Informationen zum ersten solarbetriebenen Satelliten wurden auf der NASA-Website bestätigt. Es wurden keine zusätzlichen Behauptungen zum aktuellen Orbitstatus aufgestellt.

[H08] Deployment of Solar Photovoltaic Generation Capacity in the United States

David Hart; Kurt Birson (2016). Akademischer Bericht für das DOE.

<https://www.energy.gov/sites/prod/files/2017/01/f34/Deployment%20of%20Solar%20Photovoltaic%20Generation%20Capacity%20in%20the%20United%20States.pdf>

George Mason University, Juni 2016; eine 48-seitige PDF-Datei wurde veröffentlicht. Die frühe Einführung der Technologie von der Raumfahrt zur Anwendung auf der Erde, die Bell Labs um das Jahr 6 %, und der föderale Forschungs- und Entwicklungsrahmen werden kurz behandelt. Dies ist keine aktuelle Quelle für Kosten- oder Marktdaten.

[H09] Reference Air Mass 1.5 Spectra

National Laboratory of the Rockies, formerly NREL (Jahr nicht angegeben). Referenzspektrum und Datenbeschreibung der Institution.

<https://www.nrl.gov/grid/solar-resource/spectra-am1.5>

Auf der interaktiven Seite wurden ASTM G173, eine 37-Grad-Oberfläche, definierte atmosphärische Bedingungen, spektrale Einheiten und das SMARTS-Modell validiert. Die Quelldatei wurde unter dem Namen NLR und an der Adresse, zu der die alten NREL-Links weitergeleitet werden, bereitgestellt. Sie wurde verwendet, um zu erläutern, dass das Standardspektrum nicht für alle Wetterbedingungen gilt.

[H10] The International System of Units - SP 330, Section 2

National Institute of Standards and Technology (2019). Offizielle SI-Definitionen

<https://www.nist.gov/pml/special-publication-330/sp-330-section-2>

Die exakten SI-Werte für die Lichtgeschwindigkeit, die Planck-Konstante, die Elementarladung und die Boltzmann-Konstante wurden bestätigt. Die in den beispielhaften numerischen Aufgaben verwendete thermische Spannung wurde unabhängig von diesen Konstanten berechnet.

[H11] Fundamentals of Photovoltaics - Calendar and Readings

MIT OpenCourseWare (2013). Universitätslehrplan

<https://ocw.mit.edu/courses/2-627-fundamentals-of-photovoltaics-fall-2013/pages/calendar-readings/>

Die Abfolge der Lektionen zu den Themen Quelle, optisches Management, Anregung, Ladungstrennung und fortgeschrittene Themen wurde bestätigt. Die Lektüreempfehlungen wurden nicht für aktuelle Technologie-Rekorde verwendet.

[H12] Band Gap

PVEducation (Jahr nicht angegeben). Einzigartige Lehrmaterialien

<https://www.pveducation.org/pvcdrom/pn-junctions/band-gap>

Der Inhalt der Seite zu Bandlücke, Valenz-/Leitungsband und Elektron/Loch-Definitionen wurde gelesen. Weiterführende Theorien und numerische Beispiele stellen eine originelle Synthese des Lehrstoffs dar.

[H13] Absorption Coefficient

PVEducation (Jahr nicht angegeben). Einzigartige Lehrmaterialien

<https://www.pveducation.org/pvcdrom/pn-junctions/absorption-coefficient>

Die wellenlängen- und materialabhängige Definition des Absorptionskoeffizienten wurde bestätigt. Das Beispiel für die Absorptionsdicke, 90 %, wurde mit hypothetischen Zahlen berechnet, die für dieses Buch ausgewählt wurden.

[H14] Equilibrium Carrier Concentration

PVEducation (Jahr nicht angegeben). Einzigartige Lehrmaterialien

<https://www.pveducation.org/pvcdrom/pn-junctions/equilibrium-carrier-concentration>

Das grundlegende Kapitel zur Gleichgewichtsträgerkonzentration und der Beziehung zur Massenwirkung wurde gelesen. Die im Buch verwendeten Werte für n_i und die Dotierstoffkonzentration stellen eine klare didaktische Annahme dar.

[H15] The Theory of p-n Junctions in Semiconductors and p-n Junction Transistors

William Shockley (1949). Primärer theoretischer Artikel

<https://doi.org/10.1002/j.1538-7305.1949.tb03645.x>

Bell System Technical Journal 28(3), 435-489; die Zusammenfassung und die bibliografischen Angaben auf der Verlagsseite wurden überprüft. Dies wurde als Grundlage für die historische Betrachtung des Übergangspotenzials, der Diffusion von Minoritätsladungsträgern und der Beziehung zur Gleichrichtung verwendet.

[H16] Diffusion

PVEducation (Jahr nicht angegeben). Einzigartige Lehrmaterialien

<https://www.pveducation.org/pvcdrom/pn-junctions/diffusion>

Die Definition von Dichtegradienten und Diffusion wurde behandelt. Die im Buch enthaltenen Abschnitte über Kontinuität, Randbedingungen und Berechnungen stellen eine erweiterte, originelle pädagogische Herangehensweise dar.

[H17] Statistics of the Recombinations of Holes and Electrons

William Shockley; W. T. Read Jr. (1952). Primärer theoretischer Artikel

<https://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRev.87.835>

Physical Review 87, 835-842. Die Seite mit den Verlagsinformationen und der Zusammenfassung wurde geöffnet. Es wurde für die ursprüngliche Herleitung des SRH-Mechanismus verwendet; das Buch ist keine Übersetzung eines Artikels.

[H18] Electron-Hole Recombination in Germanium

R. N. Hall (1952). Primäre theoretische Veröffentlichung.

<https://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRev.87.387>

Physical Review 87, 387; 15. Juli 1952. Die bibliografischen Angaben und die DOI wurden beim Verlag verifiziert; der vollständige Text war nicht frei zugänglich. Verwendet zur Darstellung des historischen Ursprungs der SRH-Nomenklatur.

[H19] Improved quantitative description of Auger recombination in crystalline silicon

Armin Richter; Stefan W. Glunz; Florian Werner; Jan Schmidt; Andrés Cuevas (2012). Registrierung der Originalforschungsarbeit bei der Institution.

<https://publica.fraunhofer.de/entities/publication/80c799ad-9546-4dc3-8a7c-b24c4c1ccfe7>

Physical Review B 86, 165202; DOI 10.1103/PhysRevB.86.165202. Die in der Fraunhofer-Datenbank gefundene Zusammenfassung und die Autoren wurden verifiziert. Für die temperaturabhängige (300 K)

Injektions-/Dotierungsparametrisierung wurden die entsprechenden Werte verwendet; die Koeffizienten wurden nicht auf eine andere Temperatur übertragen.

[H20] Surface Recombination

PVEducation (Jahr nicht angegeben). Einzigartige Lehrmaterialien

<https://www.pveducation.org/pvcdrom/pn-junctions/surface-recombination>

Die Definition der Oberflächenrekombination und ihre Beziehung zur Lebensdauer wurde erläutert. Die Berechnung für eine zweiflächige Platte wurde für dieses Buch unter der Annahme einer gleichmäßigen Ladungsträgerdichte erstellt.

[H21] Charge Carrier Separation in Solar Cells

Uli Würfel; Andres Cuevas; Peter Würfel (2015). Registrierung des ursprünglichen theoretischen Artikels.

<https://publikationen.bibliothek.kit.edu/1000058630>

IEEE Journal of Photovoltaics 5(1), 461-469; DOI 10.1109/JPHOTOV.2014.2363550. Die KIT-Registrierung wurde bestätigt; der Autor hat die Beschreibung der selektiven Leitfähigkeit und des Quasi-Fermi-Gradienten in der offenen Kopie seines Artikels gelesen. Die quellenspezifische Zusammenfassung wurde kurz gehalten.

[H22] Solar cell fill factors: General graph and empirical expressions

Martin A. Green (1981). Primärer theoretischer Artikel

[https://doi.org/10.1016/0038-1101\(81\)90062-9](https://doi.org/10.1016/0038-1101(81)90062-9)

Solid-State Electronics 24(8), 788-789. Die bibliografischen Angaben und die PDF-Kopie des Originalartikels, die in einer akademischen Einrichtung verfügbar ist, wurden überprüft. Sie dienen als Grundlage für die Herleitung des idealen FF-Ansatzes; ein vollständiges MPP-Beispiel wurde mithilfe einer unabhängigen Wurzelberechnung ermittelt.

[H23] IV Curve

PVEducation (Jahr nicht angegeben). Einzigartige Lehrmaterialien

<https://www.pveducation.org/pvcdrom/solar-cell-operation/iv-curve>

Die Definitionen für Kurzschluss, Leerlauf und Maximum-Power-Point wurden erläutert. Die numerischen Zelldaten im Buch dienen als Lehrbeispiel und stellen keine experimentellen Aufzeichnungen dar.

[H24] Quantum Efficiency

PVEducation (Jahr nicht angegeben). Einzigartige Lehrmaterialien

<https://www.pveducation.org/pvcdrom/solar-cell-operation/quantum-efficiency>

Die Definitionen für externe und interne Quanteneffizienz wurden gelesen. Das Beispiel für die Berechnung des Stroms aus dem spektralen Band ist ein unabhängiges Lernbeispiel.

[H25] Detailed Balance Limit of Efficiency of p-n Junction Solar Cells

William Shockley; Hans J. Queisser (1961). Primärer theoretischer Artikel

<https://doi.org/10.1063/1.1736034>

Journal of Applied Physics 32(3), 510-519. Der Titel und die Zusammenfassung der Kopie des Originalartikels im öffentlichen Archiv des USPTO sowie die Annahmen von 6000 K/300 K wurden überprüft. Im Buch wird kurz auf das ursprüngliche historische Ergebnis verwiesen; ausführliche Erklärungen stellen die ursprüngliche, didaktische Ableitung der allgemeinen Gleichgewichtsphysik dar.

[H26] Tabulated values of the Shockley-Queisser limit for single junction solar cells

Sven Rühle (2016). Primäre Berechnungsmethode

<https://doi.org/10.1016/j.solener.2016.02.015>

Solar Energy 130, 139-147. Die Zusammenfassung, einschließlich Titel, DOI und Verlag, wurde überprüft. AM1.5G wurde für die Tabellen verwendet, die den Bereich der Bandlücke abdecken; vollständige Tabellen wurden in dieser Sitzung nicht als neu berechnete oder verifizierte Rekordwerte präsentiert.

[H27] The chemical potential of radiation

Peter Würfel (1982). Universitätsausgabe des ursprünglichen theoretischen Artikels.

<https://www.unife.it/scienze/astro-fisica/insegnamenti/ottica-applicata/materiale-didattico/sorgenti-assolute/Wurfel.pdf>

Journal of Physics C: Solid State Physics 15, 3967-3985; DOI 10.1088/0022-3719/15/18/012. Die Universitätskopie und die vom Verlag bereitgestellte Zusammenfassung wurden verifiziert. Sie wurde für eine kurze Erläuterung des verallgemeinerten Planck-Ansatzes verwendet.

[H28] Reciprocity relation between photovoltaic quantum efficiency and electroluminescent emission of solar cells

Uwe Rau (2007). Primärer theoretischer Artikel

<https://arxiv.org/abs/0708.3174>

Physical Review B 76, 085303; der Herausgeber hat die Volltext-Endpunkt-Validierung bestätigt. Kurze Referenz für Reziprozität und die Beziehung zwischen Voc und Elektrolumineszenz; die Anzahl der ERE-Proben wurde bei 298,15 K unabhängig berechnet.

[H29] Detailed balance limit of the efficiency of tandem solar cells

Alexis De Vos (1980). Registrierung des ursprünglichen theoretischen Artikels.

<https://biblio.ugent.be/publication/207802>

Journal of Physics D: Applied Physics 13(5), 839-846; DOI 10.1088/0022-3727/13/5/018. Der Autor bestätigte das Datum und die Bibliografie der UGent-Registrierung; die vom Verlag bereitgestellte Zusammenfassung bestätigte den Umfang der elektrolumineszenten Kopplung zwischen den Unterzellen. Ältere theoretische Wirkungsgradwerte wurden nicht wie der moderne AM1.5G-Rekordwert übertragen.

[H30] Advanced Concepts, Part 1 - Lecture 15, MIT Fundamentals of Photovoltaics

Joseph T. Sullivan; MIT OpenCourseWare (2011). Vorlesungsnotizen (Universität)

https://ocw.mit.edu/courses/2-627-fundamentals-of-photovoltaics-fall-2013/54a21db9c8e8a6a5b181807080da4f20_MIT2_627F13_lec15.pdf

Das 44-seitige PDF-Dokument wurde am 3. November 2011 erstellt und im Jahr 2013 im Rahmen des Kurses präsentiert. Es diene als Grundlage für die Einführung in fortgeschrittene Konzepte. Die in den Notizen enthaltenen alten Tabellen zu Leistung und Kosten wurden nicht als aktuelle Informationen betrachtet.

[H31] Mémoire sur les effets électriques produits sous l'influence des rayons solaires

Edmond Becquerel (1839). Exaktes Faksimile/Transkriptionspaket des Originaldokuments.

https://www.becquerel-prize.org/pdf/2020_02_10_History_PV_BECQUEREL_prize.pdf

C. R. Acad. Sci. Paris 9, 561 und folgende. In dem abgerufenen Paket wurden die Originalseiten 561-565 visuell untersucht: Zweikammeranordnung, Abdeckung und Lichtsteuerung, Oberflächenreinigung, Platin-Experiment mit AgCl-Beschichtung. Dieser Zugriff auf das Paket bedeutet nicht, dass das gesamte Archiv von 1839 untersucht wurde. Zugriff: 8. September 2026.

[H32] The action of light on selenium (Abstract)

W. G. Adams; R. E. Day (1876-1877). Originale Kurzforschungsarbeit

https://ese.nju.edu.cn/_upload/article/files/1a/d6/bd70f7454528b852ea0fd22758b6/e30147ef-ddc7-45a1-ae41-29fdbab6cfd6.pdf

Proceedings of the Royal Society of London 25, 113-117. Im Text steht: Eingegangen am 18. Mai 1876; Archivband-Eintrag 1876-1877. Der vollständige Text der kurzen Mitteilung wurde überprüft; es wird nicht behauptet, dass der gesamte 37-seitige Artikel aus den Philosophical Transactions gelesen wurde. Das Experiment mit dem batterielosen Galvanometer und die Überprüfung von drei Proben, denen zuvor kein Strom zugeführt wurde, finden sich auf den Seiten 115-116. Zugriff: 8. September 2026.

[T01] 22.8% efficient silicon solar cell

Andrew W. Blakers; Aihua Wang; Adele M. Milne; Jianhua Zhao; Martin A. Green (1989). Originale, experimentelles Artikel; bibliografische Angaben der Autoreninstitution.

<https://researchportalplus.anu.edu.au/en/publications/228-efficient-silicon-solar-cell/>

Historische Entwicklung von PERC-Zellen. Die ANU-Aufzeichnung wurde durch Live-Daten bestätigt; es wurden keine vollständigen experimentellen Methoden angegeben. Die im Titel genannten Wirkungsgrade beziehen sich auf eine ältere Studie und stellen keinen aktuellen Rekordwert dar.

[T02] Carrier-selective contacts for Si solar cells

F. Feldmann; M. Simon; M. Bivour; C. Reichel; M. Hermle; S. W. Glunz (2014). Originale experimentelle Arbeit

<https://doi.org/10.1063/1.4875904>

Applied Physics Letters 104, 181105. Die Zusammenfassung des Verlags und die bibliografischen Daten wurden überprüft; historischer Nachweis der Passivierung und des Ladungsträgertransportgleichgewichts an TOPCon-Kontakten.

[T03] Silicon heterojunction solar cell with interdigitated back contacts for a photoconversion efficiency over 26%

Kunta Yoshikawa und seine Kollegen. (2017). Originale experimentelle Arbeit

<https://www.nature.com/articles/nenergy201732>

Nature Energy 2, 17032. Die Zusammenfassung des Verlags und die Bildunterschriften wurden eingesehen; Kombination der SHJ- und IBC-Topologien und Berichterstattung über die Fläche. Es wird nicht behauptet, dass der vollständige, kostenpflichtige Text gelesen wurde.

[T04] Silicon heterojunction solar cells with up to 26.81% efficiency achieved by electrically optimized nanocrystalline-silicon hole contact layers

Hao Lin, Miao Yang, Xiaoning Ru und Mitarbeiter. (2023). Originale experimentelle Arbeit

<https://www.nature.com/articles/s41560-023-01255-2>

Nature Energy 8, 789-799. Die Ergebnisse, Methoden und die entsprechenden Abschnitte zur elektrischen Analyse, die im Verlag veröffentlicht wurden, wurden eingesehen. Im Text wurde lediglich der Mechanismus des Nanokristall-Lochkontakts kurz erwähnt; die in der Überschrift angegebene Zahl stellt nicht den aktuellen Rekordwert dar.

[T05] Understanding the role of selenium in defect passivation for highly efficient selenium-alloyed cadmium telluride solar cells

Thomas A. M. Fiducia, Budhika G. Mendis, Kexue Li und Mitarbeiter. (2019). Originale experimentelle Arbeit

<https://www.nature.com/articles/s41560-019-0389-z>

Nature Energy 4, 504-511. Zusammenfassung des Verlags und Bildunterschriften; Einfluss der Defektpassivierung von Selen außerhalb des optischen Bereichs. Auf der Seite wurde ein Link zur Autorkorrektur vom 28. Mai 2019 gefunden; der Text gibt lediglich die zusammenfassenden Ergebnisse der aktuellen Seite wieder.

[T06] Sodium enhances indium-gallium interdiffusion in copper indium gallium diselenide photovoltaic absorbers

Diego Colombara, Florian Werner, Torsten Schwarz und Kollegen. (2018). Originale, experimentelles Fachartikel; Open Access

<https://www.nature.com/articles/s41467-018-03115-0>

Die Beziehung zwischen dem Natrium-Effekt, der Zusammensetzungsdiffusion und der Prozesshistorie. Der offene Veröffentlichungstext wurde eingesehen; es wurde keine allgemeine „All-Alkalien“-Mechanismus-Theorie aufgestellt.

[T07] Reversible conductivity changes in discharge-produced amorphous Si

David L. Staebler; Christopher R. Wronski (1977). Originale, experimentelles Fachartikel; Volltextzugriff eingeschränkt.

<https://doi.org/10.1063/1.89674>

Applied Physics Letters 31, 292-294. Bei der DOI-Abfrage trat ein Fehler auf; Titel, Autor, Jahr und DOI wurden anhand der bibliografischen Daten überprüft. Die historische Tatsache wird zusätzlich durch die Erklärung T33 des ursprünglichen Autors belegt; der nicht zugängliche Volltext wurde nicht berücksichtigt.

[T08] Six-junction III-V solar cells with 47.1% conversion efficiency under 143 Suns concentration

John F. Geisz, Ryan M. France, Kevin L. Schulte und Mitarbeiter. (2020). Originale experimentelle Arbeit

<https://www.nature.com/articles/s41560-020-0598-5>

Nature Energy 5, 326-335. Die Angaben der Verlagsseite wurden überprüft. Es wurde ausschließlich verwendet, um das Ergebnis und die Kategorisierung von sechs konzentrierenden Übergängen aus dem Jahr 2020 zu veranschaulichen; es handelt sich nicht um eine Aussage über den Wirkungsgrad einer Solarzelle oder einen aktuellen Rekord.

[T09] Triple-junction solar cells with 39.5% terrestrial and 34.2% space efficiency enabled by thick quantum well superlattices

Ryan M. France; John F. Geisz; Tao Song; Waldo Olavarria; Michelle Young; Alan Kibbler; Myles A. Steiner (2022). Originale experimentelle Arbeit

<https://doi.org/10.1016/j.joule.2022.04.024>

Joule, Verlagszusammenfassung und Autorenvorabdruck, abgerufen unter arxiv.org/abs/2203.15593. Unterstützt die separate Berichterstattung der AM1.5G- und AM0-Ergebnisse sowie die Quantenwellen-Bandbreitenanpassung. Die in der Überschrift angegebenen Zahlen beziehen sich auf die jeweiligen Ergebnisse.

[T10] Organometal Halide Perovskites as Visible-Light Sensitizers for Photovoltaic Cells

Akihiro Kojima; Kenjiro Teshima; Yasuo Shirai; Tsutomu Miyasaka (2009). Originale experimentelle Arbeit

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ja809598r>

Journal of the American Chemical Society 131, 6050-6051. Zusammenfassung des Verlags, Autoren und Erscheinungsdatum abgerufen; begrenzte Anwendung auf historische photoelektrochemische Sensibilisierungsarchitekturen.

[T11] Efficient hybrid solar cells based on meso-superstructured organometal halide perovskites

Michael M. Lee; Joël Teuscher; Tsutomu Miyasaka; Takuro N. Murakami; Henry J. Snaith (2012). Originale, experimentelles Paper; Originalzusammenfassung über PubMed.

<https://doi.org/10.1126/science.1228604>

Science 338, 643-647. Die Originalzusammenfassung des Autors und der bibliografische Datensatz wurden über pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/23042296/ verifiziert; es wird kein vollständiger Zugriff auf die Methodik beansprucht.

[T12 / R13] Ionic transport in hybrid lead iodide perovskite solar cells

Christopher Eames; Jarvist M. Frost; Piers R. F. Barnes; Brian C. O'Regan; Aron Walsh; M. Saiful Islam (2015). Originales, sowohl berechnungsgestütztes als auch experimentelles, wissenschaftliches Werk; frei zugänglich.

<https://www.nature.com/articles/ncomms8497>

Nature Communications 6, 7497. Loch-unterstützter Ionen-transport für ein spezifisches MAPbI₃-System; Korrelation zwischen Berechnungen und kinetischen Experimenten. Es wurde nicht als einzige universelle Barriere für alle Perowskite verwendet. Nature Communications 6, 7497; eine bahnbrechende Studie, die erstmals grundlegende Prinzipien und experimentelle Kinetik zur Untersuchung der Ionenwanderung kombiniert.

[T13] Reversible photo-induced trap formation in mixed-halide hybrid perovskites for photovoltaics

Eric T. Hoke; Daniel J. Slotcavage; Emma R. Dohner; Andrea R. Bowring; Hemamala I. Karunadasa; Michael D. McGehee (2015). Originales, experimentelles Fachartikel; Open Access

<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2015/sc/c4sc03141e>

Chemische Wissenschaft. Zusammenfassung des Verlags und Suchtext der Artikel-PDF abgerufen; Beispiel für eine durch Licht reversible Dissoziation und optische Veränderung in gemischten Halogeniden.

[T14 / R14] Evidence for ion migration in hybrid perovskite solar cells with minimal hysteresis

Philip Calado; Andrew M. Telford; Daniel Bryant; Xiaoe Li; Jenny Nelson; Brian C. O'Regan; Piers R. F. Barnes (2016).

Originalartikel über experimentelle Studien und die Modellierung von Bauelementen; Open Access

<https://www.nature.com/articles/ncomms13831>

Nature Communications 7, 13831. Herausgeber und PMC-Volltext bestätigt; die Ergebnisse unterstützen die Annahme, dass eine geringe Hysterese nicht unbedingt das Fehlen von Ionenwanderung bedeutet. Nature Communications 7, 13831; ein bahnbrechendes Experiment, das zeigt, dass eine geringe Hysterese nicht unbedingt den Ausschluss von Ionenwanderung bedeutet.

[T15 / R05] Consensus statement for stability assessment and reporting for perovskite photovoltaics based on ISOS procedures

Mark V. Khenkin und seine Kollegen. (2020). Dokument zur Forschungsvereinbarung und Methodik.

<https://www.nature.com/articles/s41560-019-0529-5>

Nature Energy 5, 35-49. Open-Access-Publikationen; Berichterstattung über Licht, Wärme, Feuchtigkeit, Last, MPP und reversible Veränderungen. Es wurde nicht als Rechtsvorschrift oder als präzises Modell für die Lebensdauer im Feld präsentiert. Nature Energy 5, 35-49; der ISOS-Kontext dient als Methodengrundlage für die Analyse der Arbeitslast, des maximalen Leistungspunktes (MPP) und der Übertragung auf die Außenumgebung. Nicht der gesamte Abschnitt stammt aus dieser einen Quelle.

[T16] Fully textured monolithic perovskite/silicon tandem solar cells with 25.2% power conversion efficiency

Florent Sahli und seine Kollegen. (2018). Originale experimentelle Arbeit

<https://www.nature.com/articles/s41563-018-0115-4>

Nature Materials 17, 820-826. Die Zusammenfassung des Verlags und die Seitenzahl wurden überprüft; es handelt sich um ein historisches Beispiel für die Rekombinationsverbindung in einer texturierten, monolithischen Struktur. Es gibt keine aktuellen Rekordansprüche.

[T17] Monolithic perovskite/silicon tandem solar cell with >29% efficiency by enhanced hole extraction

Amran Al-Ashouri und seine Kollegen. (2020). Originales, experimentelles Manuskript; Originalzusammenfassung und institutionelle Autorenkopie.

<https://doi.org/10.1126/science.abd4016>

Science 370, 1300-1309. Die Originalzusammenfassung ist unter pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/33303611/ einsehbar, und die Authentizität der institutionellen Autorenkopie wurde bestätigt. Die Beziehung zwischen molekularer Monoschicht und dem Verlust von Löchern/Kontakt wurde nicht anhand der aktuellsten verfügbaren Daten untersucht.

[T18] Semi-transparent perovskite solar cells for tandems with silicon and CIGS

Colin D. Bailie und seine Kollegen. (2015). Originale experimentelle Arbeit

<https://pubs.rsc.org/en/content/articlehtml/2015/ee/c4ee03322a>

Energy & Environmental Science 8, 956-963. Der Verlagstext wurde eingesehen; 4T-Konzept durch eine halbtransparente Deckschicht und mechanische Stapelung.

[T19] Mixed tin-lead perovskites with balanced crystallization and oxidation barrier for all-perovskite tandem solar cells

Jin Zhou, Shiqiang Fu, Shun Zhou und Mitarbeiter. (2024). Originales, experimentelles Fachartikel; Open Access <https://www.nature.com/articles/s41467-024-46679-w>

Nature Communications 15, 2324. Zusammenfassung des Verlags und freier Zugriff auf den Volltext; gemischte Zinn-Blei-Kristallisation und Sn(II)-Oxidation. Die detaillierte Beschreibung der chemischen Synthese wurde nicht wiederholt.

[T20] A low-cost, high-efficiency solar cell based on dye-sensitized colloidal TiO₂ films

Brian O'Regan; Michael Grätzel (1991). Originale experimentelle Arbeit

<https://www.nature.com/articles/353737a0>

Nature 353, 737-740. Die Zusammenfassung des Verlags und die bibliografischen Daten wurden überprüft; es handelt sich um einen historischen Beleg für die farbstoffsensibilisierte poröse TiO₂-Architektur. Der wirtschaftliche Kontext von 1991 wurde nicht aktualisiert.

[T21] Single-Junction Organic Solar Cell with over 15% Efficiency Using Fused-Ring Acceptor with Electron-Deficient Core

Jun Yuan, Yunqiang Zhang, Liuyang Zhou und Mitarbeiter. (2019). Originale experimentelle Arbeit

<https://doi.org/10.1016/j.joule.2019.01.004>

Joule 3, 1140-1151. Der vollständige Artikeltext und die Zusammenfassung des Verlags wurden eingesehen; Y6, ein Nicht-Fulleren-Akzeptor, und der Zusammenhang zwischen Morphologie und Absorption. Es wurden keine spezifischen Syntheseverfahren oder detaillierte Ergebnisse der Langzeitstudie angegeben.

[T22] Peak external photocurrent quantum efficiency exceeding 100% via MEG in a quantum dot solar cell

Octavi E. Semonin; Joseph M. Luther; Sukgeun Choi; Hsiang-Yu Chen; Jianbo Gao; Arthur J. Nozik; Matthew C. Beard (2011). Originales, experimentelles Paper; Originalzusammenfassung über PubMed.

<https://doi.org/10.1126/science.1209845>

Science 334, 1530-1533. Die Originalzusammenfassung des Autors wurde über pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/22174246/ verifiziert. Unterscheidung zwischen Energieausbeute und EQE; aus der engbandigen spektralen Analyse konnte kein Modulrekord abgeleitet werden.

[T23] Deep electron traps and origin of p-type conductivity in the earth-abundant solar-cell material Cu₂ZnSnS₄

Dong Han; Y. Y. Sun; Junhyeok Bang; Y. Y. Zhang; Hong-Bo Sun; Xian-Bin Li; S. B. Zhang (2013). Originales, berechnungsbasiertes Papier/Artikel.

<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.87.155206>

Physical Review B 87, 155206. Die Zusammenfassung des Verlags wurde bestätigt. Es wurde explizit als hybride, funktionale Defektvorhersage klassifiziert; es wurde nicht als direkte Defektmessung des realen Films präsentiert.

[T24] Thin-film Sb₂Se₃ photovoltaics with oriented one-dimensional ribbons and benign grain boundaries

Ying Zhou, Liang Wang, Shiyu Chen und Mitarbeiter. (2015). Originale experimentelle und theoretische Arbeit.

<https://www.nature.com/articles/nphoton.2015.78>

Nature Photonics 9, 409-415. Die Zusammenfassung des Verlags und die Bildunterschriften wurden eingesehen; es wurde auf die Ausrichtung der Streifen und die Physik der Korngrenze eingegangen. Die im Originaltext enthaltene Beschreibung der Toxizität wurde nicht als allgemeingültige Sicherheitsbestimmung übernommen.

[T25] Intensity Enhancement in Textured Optical Sheets for Solar Cells

Eli Yablonovitch; George D. Cody (1982). Originales theoretisches Werk; im Universitätsarchiv des Autors.

<https://optoelectronics.eecs.berkeley.edu/ey1982ieeed292.pdf>

IEEE Transactions on Electron Devices 29, 300-305. Der indexierte Inhalt des institutionellen PDFs wurde verifiziert; es wurde betont, dass die Annahme einer optischen Grenze für die $4n^2$ -Näherung gilt. Es wird keine allgemeingültige Grenze für die Nanophotonik beansprucht.

[T26 / R09] Reciprocity relation between photovoltaic quantum efficiency and electroluminescent emission of solar cells

Uwe Rau (2007). Originale theoretische Arbeit

<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.76.085303>

Physical Review B 76, 085303. Zusammenfassung des Verlags und der Autorentext von APS eingesehen. Reziprozität, externe Quanteneffizienz und Spannungsverluste; die Formel wurde mit einer festen optischen Referenz und unter Annahme der Gültigkeit verwendet. Physical Review B 76, 085303; die Veröffentlichung und die Authentizität des Originaltextes wurden bestätigt. Es wurden Annahmen über die Reziprozitätsbeziehung verwendet.

[T27] Surfactant-controlled ink drying enables high-speed deposition of perovskite films for efficient photovoltaic modules

Yehao Deng; Xiaopeng Zheng; Yang Bai; Qi Wang; Jingjing Zhao; Jinsong Huang (2018). Originale experimentelle Arbeit

<https://www.nature.com/articles/s41560-018-0153-9>

Nature Energy 3, 560-566. Die Zusammenfassung des Verlags, die Ergebnisse und die Informationen zum Autor wurden durch eine Online-Suche verifiziert; ein direkter Link führte zu einem Fehler. Es wurde zur Unterscheidung zwischen kleinen Zellen und großen Modulen sowie zur Durchführung einer Fluss-Trocknungs-Kontrolle verwendet.

[T28] On-device lead sequestration for perovskite solar cells

Xun Li; Fei Zhang; Haiying He; Joseph J. Berry; Kai Zhu; Tao Xu (2020). Originale experimentelle Arbeit

<https://www.nature.com/articles/s41586-020-2001-x>

Nature 578, 555-558. Zusammenfassung des Verlags und Artikelinformationen abgerufen; Bauelement-basierter Ansatz zur Bleirückhaltung. Es wird keine vollständige Schadensvermeidung oder absolute Sicherheit in allen Schadensszenarien beansprucht.

[T29] Methodology Guidelines on Life Cycle Assessment of Photovoltaic 2020

IEA PVPS Task 12 uzman grubu (2020). Unternehmensrichtlinienhandbuch

<https://iea-pvps.org/key-topics/methodology-guidelines-on-life-cycle-assessment-of-photovoltaic-2020/>

Offizielle Seite aufgerufen. Funktionelle Einheit, Systemgrenzen, Produktionsstandort, Lebensdauer, Degradation und Annahmen zur Energieerzeugung müssen klar dokumentiert werden. Nicht als aktuelle Preis- oder Marktanteilsquelle verwendet.

[T30] Low-temperature strain-free encapsulation for perovskite solar cells and modules passing multifaceted accelerated ageing tests

Paolo Mariani, Miguel Ángel Molina-García, Jessica Barichello und Kollegen. (2024). Originale, experimentelles Fachartikel; Open Access

<https://www.nature.com/articles/s41467-024-48877-y>

Nature Communications 15, 4552. Der Verlag stellt den vollständigen Text zur Verfügung; es werden Niedertemperatur-Verkapselung, thermomechanische Anpassung und Mehrfachtests durchgeführt. Die beschleunigten Tests korrelieren nicht mit einer Lebensdauer von mehreren Jahrzehnten im Feld.

[T31] Highly stable all-perovskite tandem solar cells with targeted conversion of tin-lead surfaces

Nannan Sun, Sheng Fu, Yunfei Li und Mitarbeiter. (2026). Originale experimentelle Arbeit

<https://www.nature.com/articles/s41566-025-01815-w>

Nature Photonics 20, 273-279; veröffentlicht am 5. Februar 2026. Die Zusammenfassung des Verlags und die Angaben zum institutionellen Autor wurden bestätigt. Es handelt sich lediglich um einen kurzen Nachweis für den Schutz einer reaktiven Zinn-Blei-Oberfläche unter Lichteinwirkung; es handelt sich nicht um den aktuellen Rekordwert oder eine detaillierte Beschreibung der chemischen Anwendung.

[T32] Perovskite solar cells with atomically coherent interlayers on SnO2 electrodes

Hanul Min, Do Yoon Lee, Junu Kim und Kollegen. (2021). Originale experimentelle Arbeit

<https://www.nature.com/articles/s41586-021-03964-8>

Nature 598, 444-450. Die Zusammenfassung des Verlags und die bibliografischen Angaben des Artikels wurden überprüft; es handelt sich um ein Beispiel für die Anwendung von Grenzflächentechnik. Es wurde nicht behauptet, dass die vollständige Methode und alle zusätzlichen Daten geprüft wurden.

[T33] Optically Induced Conductivity Changes in Amorphous Silicon: A Historical Perspective

David L. Staebler (1997). Die historische Darstellung des ursprünglichen Forschers.

<https://www.cambridge.org/core/journals/mrs-online-proceedings-library-archive/article/abs/optically-induced-conductivity-changes-in-amorphous-silicon-a-historical-perspective/834195C6D952A5863FDD22BE4F63D58>

MRS Online Proceedings Library 467, 3; Konferenzpublikation von 1997, Cambridge, online verfügbar seit dem 15. Februar 2011. Die vom Autor beschriebene Entdeckungsgeschichte und die Erklärung zur Reversibilität ergänzen die Einschränkung T07. Die Zusammenfassung des Verlags wurde abgerufen.

[T34] Inverted perovskite solar modules with 99.3% geometrical fill factor via nanosecond single laser patterning

Andrés E. R. Soto; Vera C. M. Duarte; Adélio Mendes; Luísa Andrade (2025). Originalforschung

<https://www.nature.com/articles/s44172-025-00512-4.pdf>

Communications Engineering 4, 198. doi:10.1038/s44172-025-00512-4. Die in den ersten beiden Seiten beschriebenen Funktionen P1, P2 und P3 sowie die Erklärung der aktiven/inaktiven Flächen wurden überprüft; die numerischen Leistungsergebnisse wurden nicht in diese ergänzende Beschreibung übernommen. Zugriff: 8. September 2026.

[R01] IEC 60904-1:2020 - Photovoltaic devices - Part 1: Measurement of photovoltaic current-voltage characteristics

International Electrotechnical Commission (2020). Eintrag im Normenkatalog

<https://webstore.iec.ch/en/publication/32004>

Der Umfang des offenen IEC-Katalogs wurde bestätigt; die Volltext- und artikelbezogene Konformitätsprüfung wurde nicht durchgeführt.

[R02] IEC 60904-8:2014 - Photovoltaic devices - Part 8: Measurement of spectral responsivity of a photovoltaic device

International Electrotechnical Commission (2014). Eintrag im Normenkatalog

<https://webstore.iec.ch/en/publication/3879>

In dem öffentlichen Katalog wurde der spektrale Ansprechbereich linearer und nichtlinearer Geräte verifiziert; der vollständige Standardtext wurde nicht geprüft.

[R03] Effects of Spectral Error in Efficiency Measurements of GaInAs-Based Concentrator Solar Cells

C. R. Osterwald, M. W. Wanlass, T. Moriarty, M. A. Steiner, K. A. Emery (2014). Institutionsbericht

<https://www.nrel.gov/docs/fy14osti/60748.pdf>

NREL/TP-5200-60748; der indizierte Titel, der Autor und der Text zur spektralen Fehleranalyse des Berichts wurden überprüft. Beim direkten Öffnen der PDF-Datei trat in diesem Durchlauf ein Fehler auf; die spezifischen Daten des Konzentrators wurden nicht übertragen.

[R04] Combining uncertainty components

National Institute of Standards and Technology (Jahr nicht angegeben). Institutionelle Methodenquelle

<https://physics.nist.gov/cuu/Uncertainty/combo.html>

Die Ausbreitung der Unsicherheit, die Sensitivitätskoeffizienten und eine explizite Beschreibung der Kovarianz; eine zeitlos zugängliche Seite.

[R06] IEC 61215-1:2021 - Terrestrial photovoltaic modules - Design qualification and type approval - Part 1: Test requirements

International Electrotechnical Commission (2021). Eintrag im Normenkatalog

<https://webstore.iec.ch/en/publication/61345>

Das offene Datenblatt wurde bestätigt; es wird darin angegeben, dass die Datenblatt-Tests keine quantitative Abschätzung der Modullebensdauer ermöglichen. Es wird keine Konformität mit vollständigen Standards oder Testschwellenwerten beansprucht.

[R07] Practical Guides for X-Ray Photoelectron Spectroscopy: First Steps in Planning, Conducting, and Reporting XPS Measurements

D. R. Baer et al. (2019). Methodenartikel

<https://www.nist.gov/publications/practical-guides-x-ray-photoelectron-spectroscopy-first-steps-planning-conducting-and-reporting>

NIST-Veröffentlichung; DOI 10.1116/1.5065501. Der Rahmen für die Planung und Berichterstattung von XPS-Messungen wurde validiert.

[R08] Photoluminescence-Based Characterization of Halide Perovskites for Photovoltaics

T. Kirchartz, J. A. Márquez, M. Stolterfoht, T. Unold (2020). Methodenübersicht

<https://advanced.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aenm.201904134>

Advanced Energy Materials, 1904134; die Angaben zur Veröffentlichung und Indexierung sowie die Beschreibung der Messung wurden bestätigt. Ausgewählte Methode als Referenz für die PL/TRPL-Bedingungsabhängigkeit.

[R10] Deep-level transient spectroscopy: A new method to characterize traps in semiconductors

D. V. Lang (1974). Bibliografische Angaben des Originalartikels.

<https://doi.org/10.1063/1.1663719>

Journal of Applied Physics 45, 3023–3032. Die DOI und der Original-Bibliografieeintrag wurden überprüft; der direkte Zugriff auf den Volltext beim Verlag war nicht möglich.

[R11] Understanding how excess lead iodide precursor improves halide perovskite solar cell performance

B.-W. Park et al. (2018). Originalarbeit

<https://www.nature.com/articles/s41467-018-05583-w>

Nature Communications 9, 3301. Beispiel für eine Methode, bei der GIWAXS, Elektronenmikroskopie und Ladungsträgererfassung kombiniert werden.

[R12] Origin of apparent light-enhanced and negative capacitance in perovskite solar cells

F. Ebadi, N. Taghavinia, R. Mohammadpour, A. Hagfeldt, W. Tress (2019). Originalarbeit

<https://www.nature.com/articles/s41467-019-09079-z>

Nature Communications 10, 1574; die beobachtbare Kapazitätstrennung bei langsamer ionischer/elektronischer Reaktion wurde von den Autoren und im Klartext bestätigt.

[R15] Review of Failures of Photovoltaic Modules

M. Köntges et al.; IEA PVPS Task 13 (2014). Institutionsbericht

https://iea-pvps.org/wp-content/uploads/2020/01/IEA-PVPS_T13-01_2014_Review_of_Failures_of_Photovoltaic_Modules_Final.pdf

IEA-PVPS T13-01:2014; Unternehmensbericht über die Ausfallmechanismen von Modulen; es wurde keine einzelne, universelle Ausfallrate für eine bestimmte Technologie festgelegt.

[R16] Service Life Estimation for Photovoltaic Modules

IEA PVPS Task 13 (2021). Institutionsbericht

<https://iea-pvps.org/key-topics/service-life-estimation-for-photovoltaic-modules/>

IEA-PVPS T13-16:2021; Definitionen für das Lebensende, Abbau-Modelle und der Zusammenhang zwischen der Nutzungsdauer und der Energieerzeugung.

[R17] Generalized Gradient Approximation Made Simple

J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof (1996). Originalarbeit

<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.77.3865>

Physical Review Letters 77, 3865; die Originalpublikation der PBE-Funktionalität.

[R18] Reproducibility in density functional theory calculations of solids

K. Lejaeghere et al. (2016). Institutionelle Registrierung des Originalartikels.

<https://www.nist.gov/publications/reproducibility-density-functional-theory-calculations-solids>

Science, DOI 10.1126/science.aad3000; die institutionellen Aufzeichnungen von NIST wurden überprüft und bestätigt. Die numerische Reproduktion wich von der physikalischen Genauigkeit ab.

[R19] Precision and efficiency in solid-state pseudopotential calculations

G. Prandini, A. Marrazzo, I. E. Castelli, N. Mounet, N. Marzari (2018). Originalarbeit

<https://www.nature.com/articles/s41524-018-0127-2>

npj Computational Materials 4, 72; SSSP-Multikonvergenzkriterien.

[R20] The thermodynamic scale of inorganic crystalline metastability

W. Sun et al. (2016). Originalartikel, Autorenexemplar.

<https://perssongroup.lbl.gov/papers/sun-2016-metastability.pdf>

Science Advances 2, e1600225; die vom Autor erstellte LBL-Version, die eine Skala für die metastabile Natur chemischer Verbindungen darstellt.

[R21] First principles phonon calculations in materials science

A. Togo, I. Tanaka (2015). Methodenartikel, Autorenversion.

<https://arxiv.org/abs/1506.08498>

Scripta Materialia, DOI 10.1016/j.scriptamat.2015.07.021; die Bibliografie und der Inhalt der Autorenversion wurden überprüft.

[R22] First-principles calculations for point defects in solids

C. Freysoldt, B. Grabowski, T. Hickel, J. Neugebauer, G. Kresse, A. Janotti, C. G. Van de Walle (2014). Methodenübersicht

<https://doi.org/10.1103/RevModPhys.86.253>

Reviews of Modern Physics 86, 253; Defektbildungsenergie und das Konzept der endlichen Größe/chemischen Potenzial.

[R23] A climbing image nudged elastic band method for finding saddle points and minimum energy paths

G. Henkelman, B. P. Uberuaga, H. Jónsson (2000). Bibliografische Angaben des Originalartikels.

<https://doi.org/10.1063/1.1329672>

Journal of Chemical Physics 113, 9901-9904; bibliografischer Eintrag und Original-Methodentitel wurden verifiziert, die direkte Veröffentlichung beim Verlag ist fehlgeschlagen.

[R24] Special quasirandom structures

A. Zunger, S.-H. Wei, L. G. Ferreira, J. E. Bernard (1990). Originalarbeit

<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.65.353>

Physical Review Letters 65, 353; die ursprüngliche SQS-Methode, die die Korrelationen in einer zufälligen Legierung durch eine kleine Struktur repräsentiert.

[R25] SIMsalabim: An open-source drift-diffusion simulator for semiconductor devices

M. Koopmans, V. M. Le Corre, L. J. A. Koster (2022). Artikel über Forschungssoftware.

<https://joss.theoj.org/papers/10.21105/joss.03727>

Journal of Open Source Software 7(70), 3727; eine Open-Source-Software und eine zugehörige Publikation, die ein eindimensionales Drift-Diffusions-Modell implementiert.

[R26] Solcore: A multi-scale, python-based library for modelling solar cells and semiconductor materials

D. Alonso-Álvarez et al. (2017). Preprint zur Forschungssoftware

<https://arxiv.org/abs/1709.06741>

Autorenvorabdruck 2017; Veröffentlichung in einer Fachzeitschrift 2018. Ein Beispiel für ein multiskaliges optisches/elektrisches Messgerät garantiert nicht die Genauigkeit einer bestimmten Version.

[R27] Modelling polycrystalline semiconductor solar cells

M. Burgelman, P. Nollet, S. Degraeve (2000). Originalartikel, Autorenexemplar.

<https://users.elis.ugent.be/ELISgroups/solar/projects/scaps/Burgelman%20TSF%202000a.pdf>

Thin Solid Films 361-362, 527-532; Originalmanuskript des Autors, verfügbar auf der SCAPS-Seite der Universität Gent.

[R28] A framework to evaluate machine learning crystal stability predictions

J. Riebesell et al. (2025). Originalarbeit

<https://www.nature.com/articles/s42256-025-01055-1>

Nature Machine Intelligence 7, 836-847; Matbench Discovery. Unterscheidung zwischen Formierungsenergie/Stabilität, Regression/Klassifizierung und Vorhersage; Korrelationsbeziehung festgestellt.

[R29] Leakage and the reproducibility crisis in machine-learning-based science

S. Kapoor, A. Narayanan (2023). Forschungsübersicht

<https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC10499856/>

Patterns 4, 100804; DOI 10.1016/j.patter.2023.100804. Typologie von Datenlecks und Probleme der wissenschaftlichen Reproduzierbarkeit.

[R30] The FAIR Guiding Principles for scientific data management and stewardship

M. D. Wilkinson et al. (2016). Artikel zu grundlegenden Prinzipien

<https://www.nature.com/articles/sdata201618>

Wissenschaftliche Daten 3, 160018; Die FAIR-Prinzipien für das Datenmanagement werden nicht bedingungslos mit Open Access gleichgesetzt.

[R31] NIST/SEMATECH e-Handbook of Statistical Methods - Choosing an experimental design

NIST/SEMATECH (Jahr nicht angegeben). Institutionelles Handbuch

<https://www.itl.nist.gov/div898/handbook/pri/section3/pri3.htm>

Offene, unternehmensinterne Methodik für die Anwendung von Zufallsblock-, Faktoriellen- und Response-Surface-Designs. Die in diesem Abschnitt enthaltenen numerischen Beispiele sind originelle, didaktisch aufbereitete Berechnungen.

[R32] IEC 61724-1:2021 - Photovoltaic system performance - Part 1: Monitoring

International Electrotechnical Commission (2021). Eintrag im Normenkatalog

<https://webstore.iec.ch/en/publication/70170>

Der Umfang des offenen Katalogs wurde bestätigt; darin enthalten sind Terminologie, Ausrüstung und Analysemethoden für die Überwachung. RLV-Katalogeintrag; es wird keine vollständige Übereinstimmung mit dem Volltext der Artikel behauptet.

[R33] Weather-Corrected Performance Ratio

T. Dierauf, A. Growitz, S. Kurtz, J. L. Becerra Cruz, E. Riley, C. Hansen (2013). Institutionsbericht

<https://www.nrel.gov/docs/fy13osti/57991.pdf>

NREL/TP-5200-57991, April 2013; Bericht über eine unternehmensinterne Methode, die den Einfluss der Wetterbedingungen auf den PR-Vergleich reduziert.

[R34] Fact Sheet: Environmental Life Cycle Assessment of Electricity from PV Systems

IEA PVPS Task 12 (2024). Institutionelles Informationsblatt

<https://iea-pvps.org/fact-sheets/fact-sheet-environmental-life-cycle-assessment-of-electricity-from-pv-systems/>

Informationsblatt vom Mai 2024; im Kontext der LCA-Grenzen und der Technologiebestandsaufnahme. Es wurden keine aktuellen Marktpreise oder allgemeingültigen Angaben zur Kohlenstoffintensität verwendet.

[R36] Life Cycle Assessment of Current Photovoltaic Module Recycling

IEA PVPS Task 12 (2018). Institutionsbericht

https://iea-pvps.org/wp-content/uploads/2020/01/Life_Cycle_Assesment_of_Current_Photovoltaic_Module_Recycling_by_Task_12.pdf

IEA-PVPS T12-13:2018; Umweltbewertung des Recyclings. Das Konzept der Wertschöpfung von Komponenten wurde von der Wiederverwertung von Materialien getrennt.

[R37] Solar cell efficiency tables (Version 60)

M. A. Green, E. D. Dunlop, J. Hohl-Ebinger, M. Yoshita, N. Kopidakis, K. Bothe, D. Hinken, M. Rauer, X. Hao (2022).

Vergleichs- und Messmethodenstudie.

<https://doi.org/10.1002/pip.3595>

Die Definitionen und Mess-/Vergleichsmethoden wurden verwendet; es wurde jedoch keine aktuelle Rekordtabelle präsentiert. Die Veröffentlichung und die institutionelle Aufzeichnung durch JRC wurden bestätigt.