

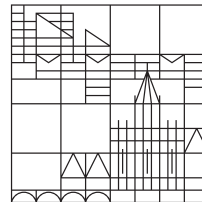
Ortsaufgelöste Korrelation struktureller und
elektrischer Eigenschaften von multikristallinem
Silizium

Bachelorarbeit

vorgelegt von
Fritz, Jakob Michael

an der

Universität
Konstanz



Mathematisch-Naturwissenschaftliche Sektion

Fachbereich Physik

1. Gutachter: Prof. Dr. Giso Hahn
2. Gutachter: Prof. Dr. Johannes Boneberg

Konstanz, August 2014

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen	3
2.1	Silizium	3
2.1.1	Mono- & multikristallines Silizium	3
2.1.2	Korngrenzentypen	4
2.1.3	Das verwendete multikristalline Silizium	6
2.2	Physik der Solarzelle	8
2.2.1	Der pn-Übergang	8
2.2.2	Aufbau einer Solarzelle	9
3	Experimentelles	13
3.1	Messungen	13
3.1.1	Bestimmung der Kornorientierung mittels EBSD	13
3.1.2	Bestimmung der lokalen Stromausbeute mittels LBIC	15
3.2	Verwendete Programme	16
3.2.1	Avizo Fire	16
3.2.2	Matlab	16
3.3	Datenanalyse	17
3.3.1	Entfernen der Finger	17
3.3.2	Import in Avizo und Zurechtschneiden der Bilder	18
3.3.3	Ausrichten der Bilder	19
3.3.4	Erstellen der Profile	20
3.3.5	Auswerten der Profile	24
3.3.6	Vergleichen der Kontrastwerte	29

4	Ergebnisse	31
4.1	Verteilung	31
4.2	Vergleich der Daten	32
4.2.1	Übersicht des Einflusses der H-Passivierung	32
4.2.2	Auswirkung der H-Passivierung auf Körner	35
4.2.3	Auswirkung der H-Passivierung auf Korngrenzen	38
5	Zusammenfassung	43
A	Matlab Code	45
A.1	Finger Entfernen	45
A.2	Linien Erstellen	46
A.3	Profile importieren	48
A.4	Kontrastwerte bestimmen	48
A.5	Minimum der Profile bestimmen	51
A.6	Ableiten eines Profils	53
A.7	Bestimmen des Plateauwerts der Körner und Veränderung derselben	53
A.8	Erstellen der Datei zur Darstellung der Änderung der Plateauwerte	55
	Literatur	59
	Danksagung	61

Kapitel 1

Einleitung

Die Bundesregierung hat sich zum Ziel gesetzt, den Anteil der erneuerbaren Energien bei der Stromerzeugung bis 2035 auf 55-60% zu erhöhen ([1]). Hierzu ist es nötig, die Anzahl der Kraftwerke für erneuerbare Energien zu erhöhen, sowie die Effizienz selbiger zu steigern. Einen großen Anteil an der regenerativen Stromerzeugung besitzt die Photovoltaik.

Solarzellen müssen effizienter und günstiger werden, um die Energiewende ihrem Ziel näher zu bringen. Die Funktionsweise von Solarzellen besser zu verstehen und die Ursache für die entstehenden Energieverluste genauer zu kennen, ist notwendig, um die Effizienz von Solarzellen zu steigern. Dabei gibt es zwei Arten von kristallinen Silizium-Solarzellen, die beide ihre Vor- und Nachteile besitzen. So sind die monokristallinen Solarzellen effizienter, jedoch durch den Herstellungsprozess teurer, wogegen multikristalline Solarzellen in der Regel günstiger sind, diese jedoch an den Korngrenzen Verluste aufweisen, die die Gesamteffizienz der Zelle herabsetzen.

Das Ziel dieser Arbeit ist deshalb, den Einfluss der Korngrenzen auf die Effizienz der Zelle zu untersuchen. Hierzu werden orts aufgelöste Messungen miteinander verglichen, die einerseits die Kristallographie und andererseits die Stromausbeute der Zelle wiedergeben. Des Weiteren wird der Einfluss der Wasserstoffpassivierung auf die verschiedenen Arten von Korngrenzen betrachtet. Diese Erkenntnisse sind wichtig, um einschätzen zu können, wie viel Aufwand gerechtfertigt ist, um den negativen Einfluss der Korngrenzen zu beheben.

Daher werden in dieser Arbeit mithilfe von Electron-Back-Scatter-Diffraction-Messungen die Korngrenzen in multikristallinem Float-Zone Silizium bestimmt und diese mit Werten der internen Quanten-Effizienz aus Light Beam Induced Current-Messungen überlagert. Daraus lässt sich der Kontrastwert einzelner Korngrenzen bestimmen.

Wurden bisher vor allem kleine Bereiche von Solarzellen auf das Verhalten von Korngrenzen untersucht, so soll in dieser Arbeit eine detaillierte und automatisierte Auswertung

von Korngrenzen einer gesamten $2 \times 2 \text{ cm}^2$ Solarzelle vorgenommen werden. Die Routinen zur Auswertung der Korngrenzen werden hierzu im Rahmen der Arbeit erstellt. Mithilfe der automatisierten Auswertung ist es möglich, eine statistisch relevante Anzahl von Korngrenzen auszuwerten und somit eine statistische Aussage treffen zu können.

Durch die Untersuchung zweier Nachbarzellen, von denen eine wasserstoffpassiviert ist, kann der Einfluss der Wasserstoffpassivierung betrachtet werden. Dies geschieht durch einen Vergleich der Aktivität der Korngrenzen vor und nach der Wasserstoffpassivierung. So wird diese Arbeit zeigen, dass diese Passivierung sowohl innerhalb der Körner als auch an Korngrenzen einen Effekt auf die interne Quanten-Effizienz besitzt. Dieser Einfluss ist an den Korngrenzen deutlich höher, sodass der Kontrastwert vieler Korngrenzen stark abnimmt.

Um dies zu zeigen, wird in dieser Arbeit im ersten Kapitel die Solarzelle in ihrem Aufbau und in ihrer Funktionsweise erklärt. Anschließend werden die genutzten Messmethoden sowie die Schritte zur Aufbereitung der Messdaten dargestellt. Diese Schritte sind nötig, um aus den Messdaten Erkenntnisse zu gewinnen. Danach werden in Kapitel 4 die gewonnenen Erkenntnisse vorgestellt, bevor in Kapitel 5 eine Zusammenfassung sowie ein kurzer Ausblick folgen.

Kapitel 2

Grundlagen

Im Folgenden sollen die Grundlagen erklärt werden, die zum Verständnis der Arbeit notwendig sind. Hierbei wird zuerst auf das Material Silizium, sowie anschließend auf die Solarzelle im Allgemeinen eingegangen.

2.1 Silizium

Das nachfolgende Kapitel orientiert sich an Standardliteratur wie beispielsweise [2], [3] oder [4].

Silizium ist ein indirekter Halbleiter mit einer Bandlücke von 1,12 eV ([4]). Da Photonen im sichtbaren Spektrum eine höhere Energie besitzen, als die Bandlücke von Silizium groß ist, eignet sich Silizium sehr gut als Material für Solarzellen. Silizium ist in der vierten Hauptgruppe angesiedelt und bildet wie seine Gruppennachbarn Kohlenstoff und Germanium eine diamantartige Kristallstruktur aus ([3]). Es ist als zweithäufigstes Element der Erdkruste in ausreichendem Maße vorhanden, allerdings in gebundener Form, weshalb die Reinigung des Siliziums energie- und somit kostenintensiv ist ([4]).

2.1.1 Mono- & multikristallines Silizium

Da Silizium eine Kristallstruktur bildet, ist es möglich, Silizium zu einem großen Kristall wachsen zu lassen (siehe bspw. CZOCHRALSKI(Cz)-Verfahren oder Float-Zone(FZ)-Verfahren). Dieser Kristall wird dann mithilfe einer Drahtsäge in Scheiben (sogenannte *Wafer*) mit einer Dicke von ca. 180 μm gesägt. Die entstandenen Wafer bestehen aus einem Einkristall und werden deshalb als *monokristallin* bezeichnet.

Die Czochralski- bzw. Float-Zone-Verfahren sind recht aufwändig und somit teuer, weshalb oftmals ein anderes Verfahren zur Herstellung von Siliziumwafern genutzt wird.

Hierbei wird Silizium geschmolzen, anschließend in einen Siliziumdioxid-Tiegel gegossen und erstarrt dort kontrolliert. Dieses Verfahren wird Gießverfahren genannt. Eine andere Methode stellt das BRIDGMAN-Verfahren dar. In diesem Verfahren wird das Silizium im selben Tiegel geschmolzen, in dem es später wieder kontrolliert erstarrt ([5]). Beim Erstarren bilden sich unterschiedlich orientierte Kristalle aus, die säulenartig nach oben wachsen. Wird ein solcher Block gesägt, so bestehen die Wafer nicht aus einem, sondern aus vielen verschiedenen orientierten Kristallen, weshalb dieses Material *multikristallin* genannt wird. Jeder einzelne dieser Einkristalle wird als *Korn* bezeichnet.

Natürlich gibt es bei einem solchen Wachstum von mehreren Einkristallen auf begrenztem Raum auch „Baufehler“. Diese können sich in Verspannungen oder Versetzungen zeigen. Eine weitere Art von „Baufehlern“ sind Korngrenzen. Diese Flächen sind dadurch definiert, dass sich dort zwei unterschiedlich orientierte Kristalle miteinander verbinden. Diese Art der Baufehler und ihr Einfluss auf die Effizienz einer Solarzelle wird in der folgenden Arbeit genauer betrachtet. Die verschiedenen Arten und Unterscheidungen von Korngrenzen werden im nächsten Kapitel erklärt.

2.1.2 Korngrenzentypen

Das nachfolgende Unterkapitel orientiert sich an [6], worin detailliert beschrieben ist, dass sich eine Korngrenze zwischen gleichen Kristallen (gleiche Struktur und gleiche Gitterkonstante) im dreidimensionalen Raum allgemein mithilfe von acht Parametern beschreiben lässt. Diese Parameter sind drei Winkel, welche die Verdrehung der Kristalle zueinander angeben, Translationen in den drei Raumrichtungen und zuletzt zwei Winkel, welche die Lage der Korngrenze zu den Kristallen angeben.

2.1.2.1 Definition Koinzidenzgitter (CSL)

Gibt es entlang der Grenzfläche Punkte, die Gitterpunkte beider Kristalle darstellen, so werden diese Punkte *Koinzidenzpunkte* genannt. Die auf diesen Gitterpunkten platzierten Atome werden entsprechend *Koinzidenzatom*e genannt. Da es für die Kristalle energetisch sehr günstig ist, möglichst viele Koinzidenzatome zu besitzen, gibt es einige Winkel, die besonders häufig auftreten. Aufgrund der Periodizität der Kristalle sind auch die auftretenden Koinzidenzpunkte periodisch.

Werden zwei Kristalle gedanklich ineinander geschoben (ohne sie zu drehen), so ergibt sich bei periodischen Korngrenzen eine neue Einheitszelle, welche die Punkte aus beiden Kristallen enthält. Dieses neu entstandene Gitter wird *Koinzidenzgitter* (Coincidence site lattice, CSL) genannt. Die Eckpunkte der neuen Einheitszelle sind häufig Koinzidenzatome der beiden Gitter. Dies ist in Abbildung 2.1 veranschaulicht.

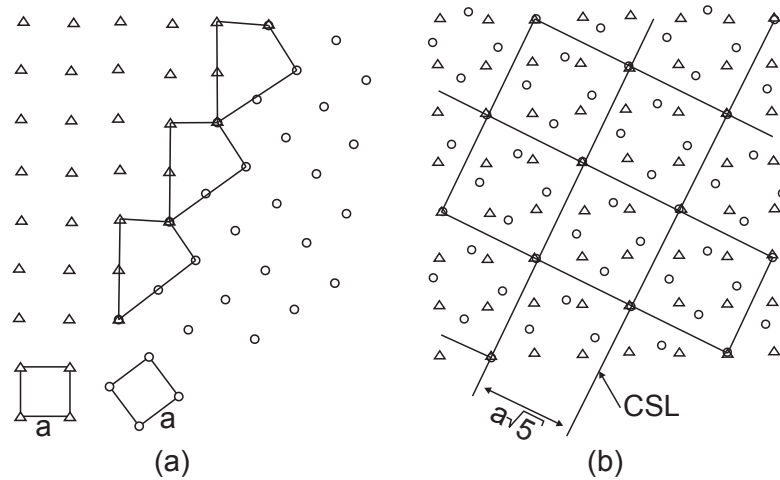


Abbildung 2.1: Die schematische und zweidimensionale Darstellung der Entstehung eines Koinzidenzgitters am Beispiel einer $\Sigma 5$ Korngrenze. Entnommen [7, S.8].

Diese neue Einheitszelle ist größer als die Einheitszelle der einzelnen Kristalle. Das Verhältnis des Volumens dieser Einheitszelle zu dem Volumen der Einheitszellen der einzelnen Gitter ist immer eine ganze Zahl Σ :

$$\Sigma = \frac{\text{Volumen der Einheitszelle des Koinzidenzgitters}}{\text{Volumen der Einheitszelle des ursprünglichen Gitters}} .$$

In Abbildung 2.1 ist die Elementarzelle des CSL in zwei Richtungen pro Kante $\sqrt{5}$ länger und in der dritten Richtung so groß wie vorher, sodass sie das fünffache Volumen besitzt. Daher wird diese Korngrenze als $\Sigma 5$ Korngrenze bezeichnet (kurz $\Sigma 5$).

Somit lässt sich in diesen besonderen Fällen die Korngrenze statt mit acht kontinuierlichen Parametern mit einer ganzen Zahl beschreiben. Diese Reduzierung der Parameter stellt natürlich auch eine Reduzierung der Information über die Korngrenze dar. Jedoch zeigen Untersuchungen wie in [8], dass sich Korngrenzen gleicher Σ -Werte aufgrund der gleichen Größe der CSL Einheitszellen im Mittel ähnlich verhalten. Daher wird diese Vereinfachung häufig gemacht und auch in dieser Arbeit verwendet. Die Rotationswinkel für ein kubisches Gitter und eine $\langle 100 \rangle$ -Drehachse sind in [6] zu finden.

Die Korngrenzen, die keine Koinzidenzgitter bilden, werden zusammengefasst unter dem Begriff *Random Angle* (RA). Somit kann jede Korngrenze in eine dieser beiden Kategorien eingeteilt werden. Entweder bildet eine Korngrenze ein Koinzidenzgitter und besitzt somit einen Σ Wert oder sie gehört in die Kategorie der Random Angle Grenzen.

2.1.2.2 Statistik

In dieser Arbeit werden die verschiedenen Korngrenzentypen statistisch untersucht. Hierbei werden deshalb nur wenige Parameter der Korngrenzen bestimmt. Diese Parameter werden jedoch bei vielen Korngrenzen bestimmt, um zu untersuchen, ob eine Abhängigkeit zwischen Korngrenzentyp und Parameter besteht.

Ein anderer Ansatz wurde beispielsweise in [9] gewählt. Hier wurden wenige Korngrenzen untersucht. Von diesen wurden jedoch aus einer Messung sehr viele Parameter extrahiert. Dieser Ansatz ist eine weitere Methode, Aussagen über einzelne Korngrenzen machen zu können. Beide Methoden besitzen ihre Vor- und Nachteile. In dieser Arbeit sollen möglichst allgemeingültige Aussagen über die Korrelation von Korngrenzentypen und deren elektrische Eigenschaften gemacht werden. Hierzu liegt es nahe, möglichst viele Korngrenzen zu betrachten, um eine allgemeingültige Aussage treffen zu können. Ziel der Betrachtung dieser vielen Korngrenzen ist, dass die anderen Parameter der Korngrenzen weit genug gestreut sind und somit der Hauptunterschied zwischen den betrachteten Korngrenzen ihr Typ ist.

Allerdings wird in dieser Arbeit aufgrund der Anzahl an untersuchten Korngrenzen nur ein Parameter bestimmt, sodass viele Informationen über die Korngrenzen unbekannt bleiben, was bei der intensiven Betrachtung weniger Korngrenzen nicht der Fall ist.

2.1.3 Das verwendete multikristalline Silizium

Im folgenden Abschnitt wird zwischen „multikristallin“ und „polykristallin“ unterschieden. Diese Unterscheidung bezieht sich auf die durchschnittliche Korngröße und ist [4] entnommen. „Polykristallin“ bezeichnet Korngrößen im Mikro- bis Millimeterbereich, wohingegen „multikristallin“ Korngrößen in der Größenordnung Millimeter bis 10 cm bezeichnet.

Zunächst wird die Herstellung von monokristallinem Float-Zone Silizium erklärt, um anschließend zu erläutern, wie das hier verwendete multikristalline Float-Zone Silizium hergestellt wird.

Mithilfe des SIEMENS-Verfahrens (siehe [4]) lassen sich polykristalline Stäbe herstellen. Wird an einen solchen Stab unten ein Einkristall (genannt *Impfkristall*) angeschmolzen und eine Induktionsheizung langsam entlang des Stabs von unten nach oben bewegt, so schmilzt im Bereich der Heizung das Silizium und rekristallisiert als Einkristall. Dieses Verfahren wird Float-Zone-Verfahren genannt, da hierbei die flüssige Phase des Siliziums langsam nach oben wandert. Der Ablauf ist schematisch in Abbildung 2.2 gezeigt. Mit diesem Verfahren lassen sich monokristalline Wafer herstellen, die besonders rein sind, da die Verunreinigungen aufgrund von Segregation in der flüssigen Phase bleiben und somit

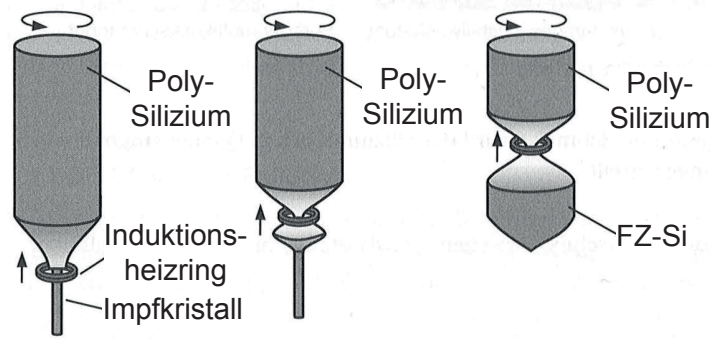


Abbildung 2.2: Die Herstellung von Float-Zone Silizium schematisch erklärt. Entnommen [4, S.115]

mit der flüssigen Phase nach oben wandern, sodass das obere Ende der Säule verunreinigt, der Rest der Säule jedoch relativ rein ist. Dieses Verfahren ist jedoch aufwändig und somit teuer, weshalb es nur für Hocheffizienzsolarzellen eingesetzt wird.

Aus [10] ist bekannt, wie multikristallines Float-Zone Material hergestellt wird. Hierzu wird die Vertikalbewegung der Induktionsheizung beschleunigt. Dadurch erstarrt die Schmelze zu schnell, um einen Einkristall zu bilden. Binnen weniger Zentimeter wird aus dem monokristallinen Silizium polykristallines Silizium, das sich in der Korngröße somit nicht mehr stark vom Ausgangsmaterial unterscheidet, jedoch reiner als das Ausgangsmaterial ist. Innerhalb dieser wenigen Zentimeter bildet sich auch multikristallines Silizium. Dieses Material ist jedoch zusätzlich noch sehr verspannt, weshalb es nach der Herstellung durch den Float-Zone-Prozess nicht direkt gesägt werden kann, da es dann zerspringen würde. Deshalb wird es vor dem Sägen mehrere Stunden in einen Ofen gelegt, um dort ausheilen zu können.

Die Herstellung von solchem multikristallinem Float-Zone Material (mc-FZ) ist jedoch sehr aufwändig, da nur wenige Zentimeter pro Säule polykristallines Silizium entstehen. Des Weiteren ist die Materialqualität geringer als bei monokristallinem FZ-Material, weshalb dieses Material nur für Forschungszwecke interessant ist. Dies rührt daher, dass das so hergestellte multikristalline Material von höherer Reinheit ist, als im Blockgußverfahren hergestelltes multikristallines Silizium. Somit wird der Einfluss der Kristallographie erhöht, da die Effekte, die durch Verunreinigungen hervorgerufen werden, geringer sind, als bei im Gießverfahren hergestelltem multikristallinem Silizium. Jedoch ist das hier untersuchte Material feinkristalliner als im Gießverfahren hergestelltes multikristallines Silizium. So liegt das arithmetische Mittel der Korngrößen hier bei $0,1 \text{ mm}^2$, das größte Korn besitzt eine Schnittfläche von $2,7 \text{ mm}^2$.

2.2 Physik der Solarzelle

Als nächstes wird die Solarzelle erklärt. Hierzu wird zuerst die Funktionsweise einer Solarzelle erläutert und anschließend der Aufbau und die Herstellung einer Solarzelle besprochen. Dies geschieht am Beispiel eines einfachen Solarzellenkonzepts. Es werden die Unterschiede zu den in dieser Arbeit verwendeten Solarzellen aufgezeigt.

Die nachfolgenden Kapitel sind an [4] angelehnt. Genauere Beschreibungen sind beispielsweise in [2] zu finden.

2.2.1 Der pn-Übergang

Damit eine Solarzelle funktioniert, ist es wichtig, dass verschiedene Ladungen getrennt werden können. Dies geschieht durch einen sogenannten pn-Übergang. Dieser ist als Grenzfläche zwischen Bereichen definiert, die für unterschiedliche Ladungsträger unterschiedlich leitfähig sind. In diesen Bereichen sind Siliziumatome durch Fremdatome ersetzt. Dieser Vorgang wird *dotieren* genannt. Hierbei kann ein Siliziumatom beispielsweise durch ein Phosphoratom ersetzt werden. Dieses besitzt fünf Valenzelektronen. Da nur vier dieser Elektronen für die Bindungen benötigt werden, ist das fünfte Elektron bei Raumtemperatur als Leitungselektron verfügbar. Da es in diesem Bereich einen Elektronenüberschuss gibt, werden diese dort Majoritätsladungsträger genannt.

Werden in einem Bereich allerdings Siliziumatome zum Beispiel durch Boratome ersetzt, so gibt es aufgrund der Dreiwertigkeit von Bor zu wenig Elektronen, sodass pro Boratom eine Bindung unvollständig bleibt. Diese Fehlstelle wird *Loch* genannt. Da es im bor-dotierten Bereich viele Löcher, jedoch nur wenige Leitungselektronen gibt, werden die Löcher dort als Majoritäts-, die Elektronen hingegen Minoritätsladungsträger bezeichnet.

Berühren sich solche Bereiche, so wird die Grenzfläche pn-Übergang genannt. Da in dem einen Bereich ein Elektronenüberschuss, auf der anderen Seite aber ein Elektronenmangel herrscht, bewegen sich einige freie Elektronen von der phosphordotierten auf die bor-dotierte Seite. Da die Atomrümpfe auf ihren Gitterpositionen bleiben, bildet sich ein Ladungsgradient aus. Dieser erzeugt ein elektrisches Feld, welches später die entstehenden verschiedenen Ladungen trennt. Trifft nun in einer Solarzelle ein Photon auf ein Elektron im Valenzband in der Nähe der Raumladungszone, so kann es durch den Photoeffekt das Elektron in das Leitungsband anheben. Dieses Elektron kann sich durch das Feld der Raumladungszone in den n-dotierten Bereich bewegen, von wo es über den Frontseitenemitter und die Kontaktierung die Solarzelle verlässt. Das entstandene Loch wird von dem Feld der Raumladungszone in die p-dotierte Basis gezogen, von der es über

den Rückseitenkontakt der Solarzelle einen Beitrag zum Photostrom leisten kann. Dies ist in Abbildung 2.3 dargestellt.

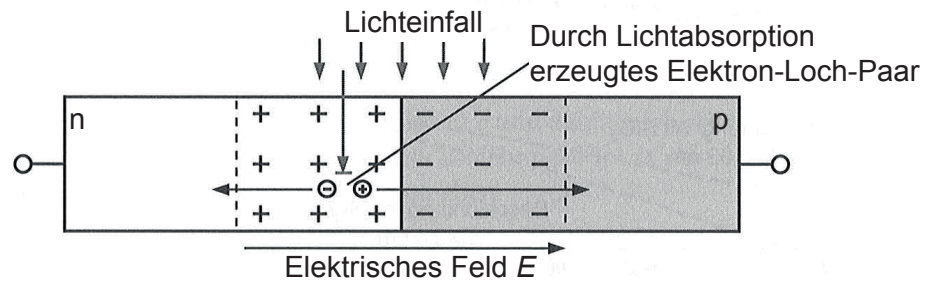


Abbildung 2.3: Ein beleuchteter pn-Übergang mit einem erzeugten Elektron-Loch-Paar. Gezeigt ist auch die Raumladungszone (elektrisches Feld) und die Bewegung von Elektron und Loch. Entnommen aus [4, S.82].

2.2.2 Aufbau einer Solarzelle

Ein einfaches Solarzellenkonzept ist ähnlich dem in Abbildung 2.4 gezeigten Schema aufgebaut.

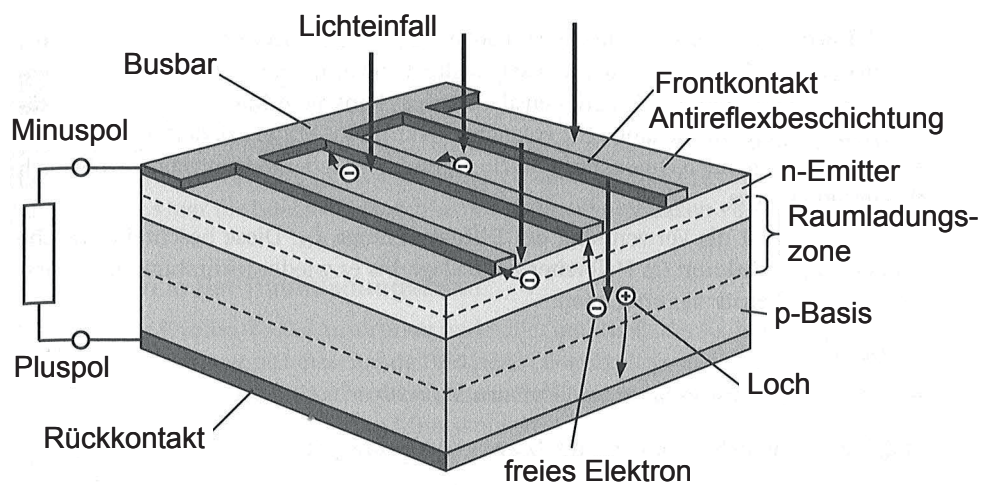


Abbildung 2.4: Der schematische Aufbau einer typischen Solarzelle. Entnommen und angepasst aus [4, S.85].

In den positiven Wafer (p-Basis) ist oben ein negativer Emitter eingetrieben, wodurch sich eine Raumladungszone bildet. Innerhalb dieser Raumladungszone werden die entstehenden Elektron-Loch-Paare getrennt und zu den jeweiligen Kontakten auf Ober- und Unterseite geführt. Auf der Unterseite ist hierzu ein großflächiger Rückkontakt aufgebracht. Die Vorderseite ist mit einem Netz aus Leitern überzogen, dem sogenannten *Grid*. Dieses besteht aus den Sammelleitungen, die auch Busbars genannt werden, und den dünneren Fingern, die zu den Busbars führen. Die Metallisierung der Vorderseite wird möglichst schmal gehalten, da diese Leitungen die Solarzelle abschatten und somit

ihren Wirkungsgrad herabsetzen. Damit möglichst wenig einfallendes Licht reflektiert wird und somit mehr Photonen in die Solarzelle eingekoppelt werden, wird auf der Solarzelle eine (oder mehrere) Antireflexschicht aufgebracht.

2.2.2.1 Prozessierung

Der nachfolgende Abschnitt basiert auf [4], wo der Herstellungsprozess einer Standard-solarzelle beschrieben ist. Des Weiteren werden die Unterschiede in der Herstellung einer Standardzelle im Vergleich zu der Herstellung der verwendeten Zellen aufgezeigt. Der Prozess der Herstellung der genutzten Zellen ist in Abbildung 2.5 zu sehen und in [11] beschrieben.

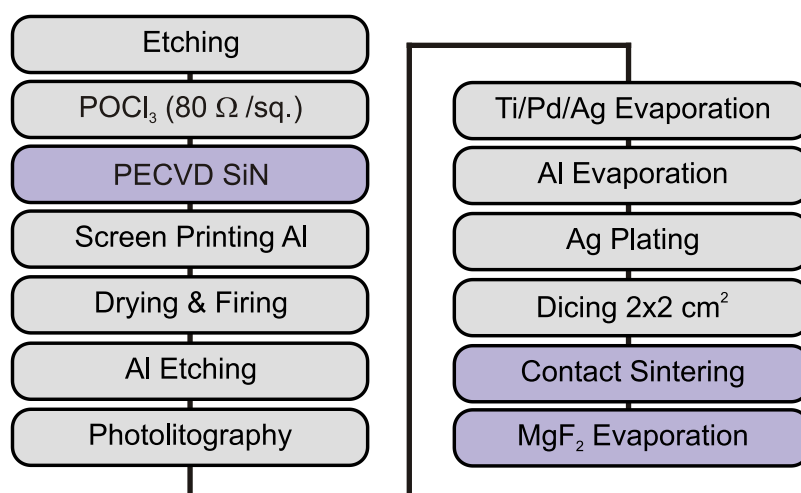


Abbildung 2.5: Die einzelnen Prozessschritte der verwendeten Solarzelle. Die eingefärbten Schritte wurden nicht auf beide Zellen angewandt. Entnommen [12]

Als erstes wird das positiv dotierte Ausgangsmaterial geätzt, um den Sägeschaden zu entfernen. Darauf folgt eine Phosphordiffusion, die den negativen Emitter erzeugt. Auf diesen Emitter wird Siliziumnitrid abgeschieden. Dieses bildet eine Antireflexschicht. Anschließend wird auf die Zelle im Siebdruckverfahren die Rückseitenkontaktierung aus Aluminium aufgebracht. Durch Feuern bildet sich ein stark positiver Bereich auf der Rückseite der Solarzelle aus. Dieser verhindert, dass Elektronen dort rekombinieren und erleichtert es Löchern, in den Rückseitenkontakt einzudringen. Dieser Bereich wird *Back-Surface-Field* (BSF) genannt. Außerdem wird durch das Feuern Wasserstoff aus der wasserstoffreichen $\text{SiN}_x\text{:H}$ Schicht von der Oberfläche in das Volumen getrieben, wo er passivierend wirkt. Dieser Vorgang wird *Wasserstoffpassivierung* genannt. Diese reduziert die Anzahl der Rekombinationszentren für Elektronen-Loch-Paaren, was sich positiv auf den Wirkungsgrad der Zelle auswirkt. Bei den verwendeten Proben ist dieser Schritt nur auf einer der beiden Zellen angewandt worden, um den Effekt dieses Schrittes untersuchen

zu können.

Nach der Rückseitenkontaktierung kommt die Frontseitenkontaktierung. Diese findet beim Standardverfahren ebenfalls durch Siebdruck statt. Bei den genutzten Zellen wird die Frontseitenkontaktierung durch selektives Öffnen der Siliziumnitridschicht und Aufdampfen von Titan-, Palladium- und Silberschichten mithilfe von Photolithographie realisiert, da dieses Vorgehen zu einem deutlich reduzierten Kontaktwiderstand und somit zu einem höheren Wirkungsgrad führt.

Diese Prozessschritte werden auf $5 \times 5 \text{ cm}^2$ Zellen durchgeführt. Diese werden jedoch anschließend jeweils in vier Zellen mit je $2 \times 2 \text{ cm}^2$ Größe gesägt. Die hier genutzten Zellen besitzen somit eine Abmessung von $20 \times 20 \text{ mm}^2$.

2.2.2.2 IQE

Die zwei nachfolgenden Abschnitte sind an [4] angelehnt.

Zur Optimierung einer Solarzelle ist es wichtig zu wissen, an welchen Stellen der Zelle Verluste auftreten. Hierzu ist eine orts aufgelöste Messung notwendig, damit punktuell bestimmt werden kann, wie gut die Zelle Licht in elektrischen Strom umwandeln kann. Dies wird über die interne Quanten-Effizienz (IQE) angegeben. Sie ist definiert als das Verhältnis der Elektron-Loch-Paare, die zur Stromerzeugung beitragen, zur Anzahl der Photonen, die in die Zelle eingekoppelt werden:

$$\text{IQE} = \frac{\text{Anzahl genutzter Elektron-Loch-Paare}}{\text{Anzahl eingekoppelter Photonen}} .$$

Da ein Photon nur ein Elektron-Loch-Paar erzeugen kann, aber nicht jedes dieser Paare genutzt wird, liegt dieses Verhältnis zwischen 0 und 1.

Um die interne Quanten-Effizienz zu berechnen, muss sowohl die Anzahl der genutzten Elektron-Loch-Paare als auch die Anzahl der eingekoppelten Photonen bestimmt werden. Die Anzahl der genutzten Paare ist recht einfach zu bestimmen, da der Strom, den die Solarzelle erzeugt, gut zu messen ist. Weil die Ladung eines Elektrons bekannt ist, kann die Anzahl der Elektron-Loch-Paare pro Zeit einfach berechnet werden.

Die Anzahl der eingekoppelten Photonen zu bestimmen ist allerdings schon schwieriger. Aus diesem Grund wird hierfür zuerst die externe Quanten-Effizienz (EQE) sowie die Reflexivität der Zelle orts aufgelöst bestimmt. Daraus kann die IQE berechnet werden.

Abbildung 2.6 zeigt die IQE-Bilder der beiden in dieser Arbeit detailliert untersuchten Solarzellen. Der positive Einfluss der Wasserstoffpassivierung ist offensichtlich. Diese Messdaten bilden die Grundlage für die in Kapitel 3 vorgestellten Auswertungsverfahren und den anschließenden Ergebnisteil.

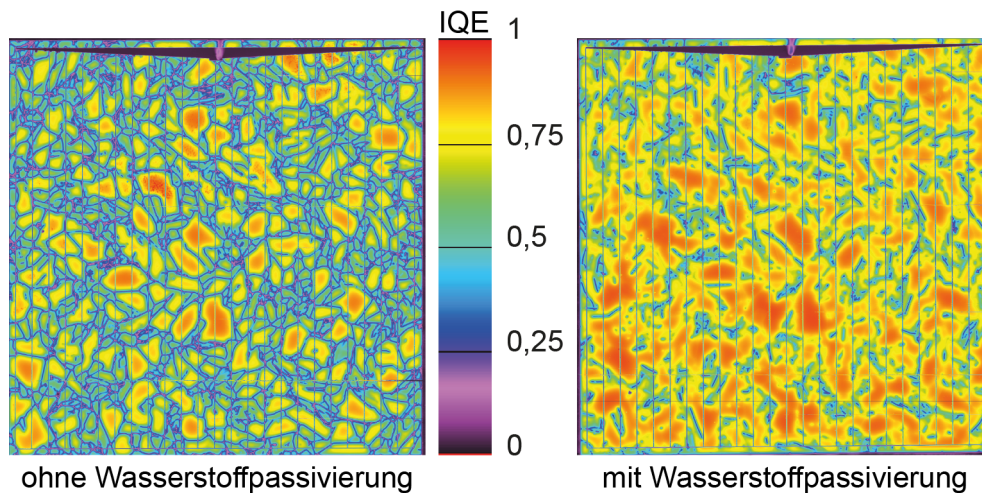


Abbildung 2.6: Die IQE-Messungen der beiden verwendeten $2 \times 2 \text{ cm}^2$ Solarzellen im Vergleich. Leicht zu sehen ist der starke, positive Einfluss der Wasserstoffpassivierung auf die IQE-Werte der Zellen. Messdaten entnommen aus [12]

2.2.2.3 Reflexivität & EQE

Die externe Quanten-Effizienz ist definiert als das Verhältnis der genutzten Elektron-Loch-Paare zu der Anzahl der auf die Solarzelle auftreffenden Photonen:

$$\text{EQE} = \frac{\text{Anzahl genutzter Elektron-Loch-Paare}}{\text{Anzahl auftreffender Photonen}} \quad .$$

Mithilfe einer Referenzzelle kann gemessen werden, wie viele Photonen pro Fläche und Zeit auf einer Solarzelle auftreffen. Ist die Größe der beleuchteten Fläche bekannt, kann aus der Anzahl der Photonen (pro Zeit) und der Anzahl der Elektronen (pro Zeit) die EQE berechnet werden.

Um aus der EQE die IQE zu berechnen, muss bestimmt werden, wie viele der auftreffenden Photonen auch in die Solarzelle eingekoppelt werden. Dieser Anteil wird durch eine Messung der Reflexivität ermittelt, da alle Photonen, die nicht reflektiert werden, in die Zelle einkoppeln:

$$\text{IQE} = \frac{\text{EQE}}{1 - \text{Reflexivität}} \quad .$$

Anhand dieser orts aufgelösten Messungen lässt sich ein Falschfarbenbild der Solarzelle erstellen, auf dem die IQE der einzelnen Messpunkte zu sehen ist. Diese Art der Darstellung erleichtert den Vergleich der Messdaten mit denen anderer Messmethoden und somit die Erkennung von Zusammenhängen zwischen einzelnen Messwerten. So wird im Folgenden der Zusammenhang zwischen strukturellen (kristallographischen) und elektrischen Eigenschaften untersucht. Dies wäre mit Messwerten in Listenform nur deutlich schwerer zu realisieren.

Kapitel 3

Experimentelles

Im Folgenden werden zuerst die Messmethoden erklärt. Anschließend wird auf die Verarbeitung der Messdaten eingegangen und es werden die einzelnen Schritte dargestellt, mithilfe derer die Ergebnisse gewonnen werden.

3.1 Messungen

In diesem Abschnitt soll es um die verwendeten Messmethoden gehen. Es wurden zwei Messmethoden genutzt, die zum einen Aufschluss über die kristallographische Beschaffenheit der Zellen und zum anderen Aufschluss über den lokalen Anteil zur Stromerzeugung der Zelle geben.

3.1.1 Bestimmung der Kornorientierung mittels EBSD

Bei der *Electron-Back-Scatter-Diffraction*-Messung (EBSD) wird im Rasterelektronenmikroskop (REM) ein Elektronenstrahl auf die geeignete Probe geschossen. Die Elektronen werden an den obersten Schichten der Probe reflektiert und zurück gestreut. Aus dem Rückstreuungsmuster kann die Kristallstruktur und -orientierung bestimmt werden. Hierzu wird mit einem Elektronenstrahl die Probe abgerastert. Da dies lateral sehr gut aufgelöst werden kann, können auch kleine Körner erkannt und bestimmt werden. Die verwendeten Messungen sind mit einer Schrittweite von $10\ \mu\text{m}$ aufgenommen, was für eine REM-Aufnahme grob ist. Diese grobe Schrittweite wurde gewählt, da die gesamte Probe abgerastert wird und es sich bei der EBSD-Messung um eine zeitintensive Messmethode handelt. Die gemessenen Daten können anschließend als Bilddaten ausgegeben werden, um bspw. die Kristallorientierungen zu sehen oder um die Art der Korngrenzen sichtbar zu machen. Hierbei können Bilddaten exportiert werden, die die Positionen eines

einzelnen Korngrenzentyps darstellen. Alle auf diesem Bild dargestellten Grenzen sind vom selben Typ. Diese Exportfunktion gibt es für sehr viele Korngrenzentypen sowie Zusammenfassungen selbiger. Solche Aufnahmen sind beispielhaft in Abbildung 3.1 zu sehen. Die dort genutzte IPF Farbdarstellung nutzt die gezeigte Farbskala um die Kornorientierungen anzuzeigen. So werden die Kristallrichtungen 001, 101, 111 durch die drei Hauptfarben rot, grün und blau dargestellt. Kornorientierungen dazwischen werden durch die entsprechenden Mischfarben angezeigt. Anhand dieser Darstellung sind die einzelnen Körner gut zu erkennen. Desweiteren kann so gut erkannt werden, welche Kornorientierungen an den Korngrenzen aneinander angrenzen.

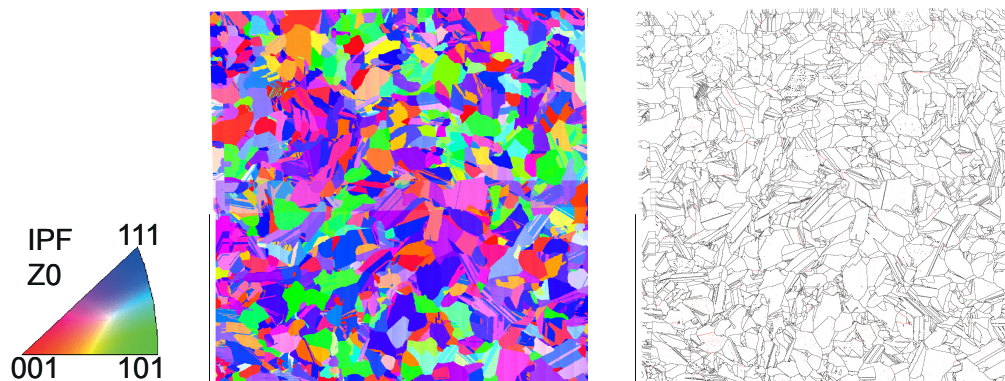


Abbildung 3.1: EBSD-Bilder in verschiedener Darstellung. So ist links die IPF Farbdarstellung gewählt, die die Orientierung einzelner Körner zeigt. Rechts ist ein Bild zu sehen, auf dem alle Korngrenzen gezeigt sind. Beide Bilder stellen die gesamte $2 \times 2 \text{ cm}^2$ Probe dar.

Da bei dieser Messmethode die Kristallographie der Oberfläche bestimmt wird, wurde nur die nicht-passivierte Probe gemessen. Die wasserstoffpassivierte Probe besitzt auf der Oberfläche eine Schicht aus Siliziumnitrid, weshalb die Kornorientierungen des darunter liegenden Siliziums nicht gemessen werden können.

Für die spätere Auswertung ist es notwendig, dass es keine Pixel gibt, deren Kornorientierung unbestimmt ist. Daher werden nach der eigentlichen Messung noch Bearbeitungsschritte auf das Messergebnis angewendet. Hierbei ist es möglich, dass sehr kleine Körner ($\sim 10 \mu\text{m}$), bei denen aufgrund der Größe keine Orientierung gemessen werden konnte, durch diese Bearbeitungsschritte überschrieben werden. Auch werden Messpunkte, die direkt an Korngrenzen liegen, überschrieben, da dort keine Orientierung bestimmbar ist. Im Laufe der Verarbeitung werden auch die Finger und die Busbars mit Werten gefüllt, sodass hinterher für die gesamte Probe Kornorientierungen angegeben sind. Unter den Fingern sowie unter der Busbar ist keine Kristallorientierung messbar, da lediglich die Orientierung der Oberfläche bestimmt werden kann.

Die Bearbeitungsschritte zum Füllen unbestimmter Pixel bestehen darin, die Pixel mit der Orientierung von Nachbarpixeln zu versehen. Dieser Vorgang beginnt damit, unbestimmte Pixel, die von acht Pixeln der gleichen Kornorientierung umgeben sind, mit

demselben Wert zu füllen. Sind diese Pixel alle retuschiert, wird dieser Vorgang für alle Pixel wiederholt, die sieben gleich gefüllte Nachbarn besitzen. Dieses Vorgehen wird wiederholt, bis alle Pixel mit vier gleichen Nachbarn bearbeitet sind.

Da bei dieser EBSD-Messung eine Zelle gemessen wurde, gibt es auch kleinere Messfehler, die auf die raue Oberfläche zurückzuführen sind. Normalerweise wird eine Probe, die mit EBSD gemessen werden soll, vorbereitet, indem sie maschinell glanzpoliert wird. Dies ist bei den vorliegenden Proben nicht möglich, da dies die Zellen zerstören würde. Daher werden bei der EBSD-Messung an einigen Stellen falsche Messwerte aufgenommen, die durch die Rauheit der Oberfläche bedingt sind. An diesen Stellen wird eine nicht korrekte Kristallorientierung bestimmt. Die Folge ist eine Korngrenze, die rund um den falschen Messwert eingezeichnet wird. Diese müssen zur korrekten Auswertung später noch herausgefiltert werden.

Eine genaue Beschreibung des EBSD Messverfahren und -aufbaus ist in [7] zu finden.

3.1.2 Bestimmung der lokalen Stromausbeute mittels LBIC

Der Name dieser Messmethode steht für *Light Beam Induced Current*. Hierbei wird eine Solarzelle punktuell mit einem Laserstrahl beleuchtet und der daraus entstehende Strom gemessen. Durch Bewegung des Probenstückes kann so die gesamte Solarzelle abgerastert werden. Da die Beleuchtung örtlich sehr begrenzt ist, kann gemessen werden, wie viel Strom an der jeweiligen Stelle entsteht. Diese Messung gibt wieder, wie gut die Zelle dort einfallende Photonen in elektrische Ladungsträger umwandeln kann (IQE). Die Messergebnisse können als Falschfarbenbild dargestellt werden. Dieses Falschfarbenbild hat den Vorteil, dass es besser mit anderen bildgebenden Verfahren verglichen werden kann als eine Liste von Messwerten.

Die verwendeten LBIC-Bilder wurden mit einer Rastergröße von $10\ \mu\text{m}$ erstellt. Sie besitzen somit die gleiche Auflösung wie die EBSD-Messungen. Bei der LBIC-Messung stehen Laser mit verschiedenen Wellenlängen zur Verfügung. Diese unterscheiden sich vor allem in der Eindringtiefe, was durch die verschiedenen Wellenlängen bedingt ist. Da in dieser Analyse das Verhalten des Volumens und nicht der Oberfläche untersucht wird, wird der Laser mit der größten Wellenlänge gewählt, da dieser die größte Eindringtiefe besitzt. Die Wellenlänge beträgt $980\ \text{nm}$, was einer Eindringtiefe von ca. $100\ \mu\text{m}$ entspricht ([11]). Eine detaillierte Beschreibung des LBIC Messverfahrens ist in [13] zu finden. Dort ist ebenfalls der Messaufbau erklärt, der später noch um den hier verwendeten Laser erweitert wurde.

3.2 Verwendete Programme

Für die Auswertungsschritte wurden Avizo Fire sowie Matlab verwendet. Im Folgenden soll kurz auf die Programme und die Vorteile, die sie bieten, eingegangen werden.

3.2.1 Avizo Fire

Avizo Fire ist ein Programm der Firma *FEI Visualization Sciences Group (vsg)* [14]. In dieser Arbeit wird das Programm in Version 8.0.1 verwendet und im Folgenden kurz „Avizo“ genannt. Dieses Programm ist zur Analyse von dreidimensionalen Bilddaten geeignet und ermöglicht viele Operationen auf Graustufen- und Falschfarbenbildern. Da in dieser Arbeit nur mit zweidimensionalen Daten gearbeitet wird, wird die Möglichkeit genutzt, mehrere zweidimensionale Messdaten als Stapel zu importieren und jede Schicht dieses Stapels, also jedes Bild, einzeln und unabhängig zu verarbeiten. So können viele Bilddaten gleich verarbeitet werden und die Übersichtlichkeit des Arbeitsablaufs wird stark erhöht.

Avizo arbeitet hierbei mit einer grafischen Programmiersprache. Diese besteht aus verschiedenen Modulen, die miteinander verknüpft werden. Es gibt Daten-, Verarbeitungs- und Anzeigemodule, wobei die Verarbeitungsmodule aus den Eingangsdatenmodulen neue Datenmodule erzeugen, die anschließend weiterverarbeitet werden können. Somit wird der Informationsfluss optisch dargestellt und dadurch besser verständlich.

Dieses Programm ist außerdem in der Lage, zusammenhängende Pixel als Objekte zu identifizieren und diese zu vermessen. Hierbei können Maße wie die Gesamtfläche eines Objekts oder seine Länge, Breite und Orientierung bestimmt werden. Die Orientierung wird bestimmt, indem die Hauptrotationsachse des Objekts berechnet wird. Die Länge und Breite eines Objekts wird durch das Maximum bzw. das Minimum der Feret-Durchmesser beschrieben ¹.

3.2.2 Matlab

Matlab ist ein Produkt der Firma *The Mathworks Inc.* [15] und wird hier in Version R2013a genutzt. Der Name kommt von *Matrix Laboratory* und lässt bereits vermuten, dass Matlab besonders für die Verwendung von Matrizen optimiert ist. Ein großer Vorteil von Matlab ist die Möglichkeit, Graustufenbilder als Matrizen importieren zu können.

¹Beim Feret-Durchmesser handelt es sich um ein Maß, das genutzt wird, um die Abmessungen unregelmäßiger Körper abzuschätzen. Hierzu werden zwei plan-parallele Flächen (in 2-D Linien) möglichst nah zueinander bewegt, sodass der Körper jedoch immer vollständig zwischen ihnen liegt. Der Abstand der Flächen ist der Feret-Durchmesser des Körpers in senkrechter Richtung zu den Flächen. Werden die Flächen um den Schwerpunkt des Körpers gedreht, so ergeben sich Maße, die die Außenabmessungen des Körpers nach oben abgeschätzt beschreiben.

So wird der Grauwert jedes Pixels in eine Zelle geschrieben. Dadurch sind die einzelnen Pixel gut adressierbar, was zu einfacheren Algorithmen führt. Ein weiterer Vorteil von Matlab ist die Möglichkeit, vieldimensionale Matrizen zu erstellen und zu nutzen. Im Rahmen dieser Arbeit wurden sehr viele dreidimensionale Matrizen verwendet, da sich somit Stapel von zweidimensionalen Informationen sehr einfach verarbeiten lassen. Auch ist es möglich, in Matlab eigene Routinen zu erstellen und die gewünschten Abläufe in Matlabcode umzusetzen, was dazu führt, dass fast jede Aufgabe in Matlab ausführbar ist.

3.3 Datenanalyse

Im Folgenden wird beschrieben, wie die Messdaten verarbeitet werden, um statistisch fundierte Ergebnisse zu erzeugen. Hierzu werden zuerst die Finger des Grids auf den LBIC-Bildern entfernt, anschließend werden diese Bilder so ausgerichtet, dass sie kristallographisch möglichst deckungsgleich sind, bevor aus diesen Bildern Messprofile extrahiert werden. Diese Profile werden danach ausgewertet und führen zu einer statistischen Aussage über die Aktivität der einzelnen Korngrenzentypen.

Es sind zwei Zellen ähnlich verarbeitet, allerdings ist nur eine der beiden Zellen wasserstoffpassiviert (wie bereits in Kapitel 2.2.2.1 beschrieben), sodass durch einen Vergleich der Zellen der Einfluss einer Wasserstoffpassivierung auf die Aktivität der Korngrenzen zu sehen ist. Damit die einzelnen Korngrenzen möglichst gut miteinander verglichen werden können, wurden zwei Nachbarzellen zur Untersuchung gewählt. Nachbarzellen sind Zellen, die im Block (oder der Säule) vor dem Sägen direkt übereinander waren. Daraus folgt, dass sie eine sehr ähnliche Kornstruktur besitzen. Da sich die Kristallographie beim Wachsen des Blocks jedoch dauerhaft verändert, sind auch Nachbarzellen nicht gleich, sondern nur ähnlich.

Die LBIC-Bilder sind mit einer Grauskala und nicht wie üblich mit einer Farbskala exportiert worden, wodurch die Messergebnisse besser verarbeitet werden können. Hierbei bedeutet schwarz einen kleinen Wert, weiß einen Großen.

3.3.1 Entfernen der Finger

Da die Finger des Grids die Solarzelle abschaten, werden an den Messpunkten, an denen Finger sind, kleine IQE-Werte gemessen. Diese kleinen Werte haben ihren Ursprung jedoch nicht in der Kristallographie, sondern nur in der Abschattung, die jedoch nicht Teil der Untersuchung sein soll. Daher werden diese Werte korrigiert, um näher an den wirklichen Werten der Kristallographie zu liegen. Hierzu werden Finger durch Gradienten ersetzt, die die Werte neben den Fingern miteinander verbinden. Dabei wird angenommen,

dass unterhalb der Finger keine kleinen Störstellen liegen, da diese nicht berücksichtigt werden. Vielmehr wird davon ausgegangen, dass die verdeckte Fläche linear von einem Nachbarwert zum anderen Nachbarwert verläuft. Als Fingerbreite wurden $110 \mu\text{m}$ angenommen, was etwas über der wirklichen Fingerbreite liegt, jedoch durch die Rasterung der Messung (in Pixel) notwendig ist, um die Finger vollständig zu korrigieren.

Dieser Verarbeitungsschritt wurde mithilfe eines selbst geschriebenen Matlab Codes umgesetzt. Dieser Code ist in Abschnitt A.1 zu finden.

In diesem Code werden die Positionen der Finger (inklusive der Steigung der Finger, bei nicht senkrechten Fingern) übergeben. Anschließend wird das Bild zeilenweise an den Stellen der Finger mit einem horizontalen Gradienten gefüllt, der links und rechts die Werte der angrenzenden Pixel übernimmt. Um glattere Ergebnisse zu erreichen, werden die Werte der Enden der Gradienten gebildet, indem das letzte Pixel nur 50% des Wertes ausmacht und zu je 25% die Pixel darüber und darunter mit berücksichtigt werden. Dies führt dazu, dass einzelne Messfehler kleinere Auswirkungen haben. Das Ergebnis dieses Schrittes ist in Abbildung 3.2 zu sehen. Wie gut zu erkennen ist, bleiben hierbei sowohl

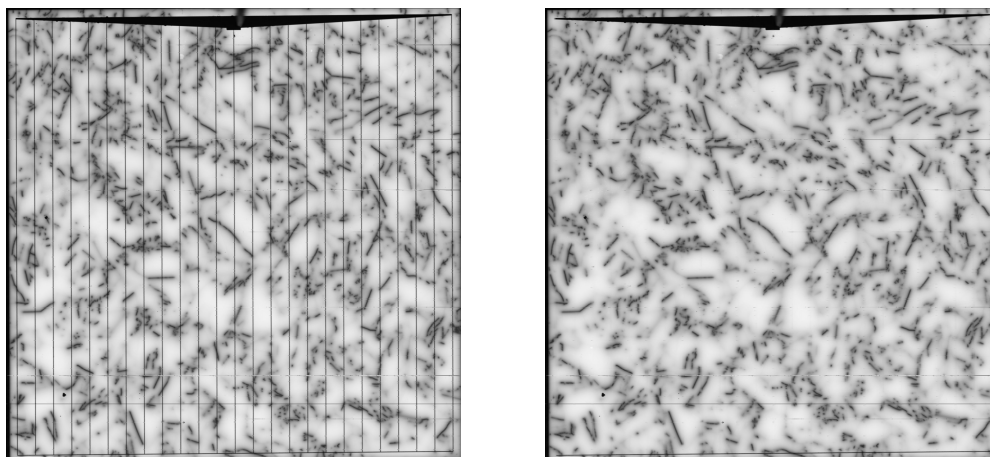


Abbildung 3.2: Die LBIC-Bilder vor (links) und nach (rechts) dem Entfernen der Finger anhand der Aufnahme der wasserstoffpassivierten $2 \times 2 \text{ cm}^2$ Zelle.

der Busbar erhalten, als auch der Finger, der unten quer liegt. Dieser Finger wird im späteren Verlauf einfach abgeschnitten und der Busbar ist breit genug, um als solcher bei der Auswertung erkannt zu werden. Des Weiteren würden bei Ersetzung des Busbars zu viele Werte künstlich generiert werden, da der Busbar sehr breit ist. Bei schmalen Fingern kann davon ausgegangen werden, dass die Näherung durch die Gradienten realistisch ist, was bei einem Busbar nicht mehr gegeben ist.

3.3.2 Import in Avizo und Zurechtschneiden der Bilder

Um den verbleibenden Finger zu entfernen, werden die Bilder in Avizo importiert und vor dem Ausrichten an die EBSD-Messungen zurechtgeschnitten. Dies hat den Grund,

dass der Zuschnittsrahmen nicht gedreht werden kann und somit bei einem gedrehten Bild mehr Information als notwendig abgeschnitten würde. Das Zurechtschneiden funktioniert über den eingebauten „Crop-Editor“, bei dem ein Rahmen gewählt werden kann und sämtliche Bild-Information außerhalb des Rahmens verworfen wird.

Beim Importieren der orts aufgelösten Messdaten (Bilder) ist darauf zu achten, die Luminanz der einzelnen Pixel zu importieren. Die Bilder bestehen zwar für den Betrachter nur aus Grauwerten, diese setzen sich technisch gesehen jedoch auch aus Rot-, Grün- und Blauanteilen zusammen. Daher ist es für die weitere Verarbeitung nötig, diese drei Angaben wieder auf einen linearen Wert zu projizieren. Die Werte werden als „unsigned Integer“ importiert. Dieses Datenformat kann Werte von 0 bis 255 darstellen. Hierbei entspricht die 0 einer IQE von 0; die 255 einer IQE von 1. Des Weiteren kann beim Importieren von Bildern angegeben werden, welche realen Abmessungen ein Pixel besitzt. Dies ist hilfreich, wenn Bilddaten miteinander verglichen werden sollen, die eine unterschiedliche Auflösung haben. Dies ist beispielsweise bei Messungen mit verschiedenen Schrittweiten der gleichen Zelle der Fall. Diese Messungen können dann entsprechend importiert werden und sind somit in Avizo gleich groß.

3.3.3 Ausrichten der Bilder

Der nächste Schritt in der Auswertung der Messungen ist, die Bilddaten so auszurichten, dass gleiche Bereiche der Zelle übereinander liegen. Die Nachbarzelle wird ebenfalls so ausgerichtet, dass die Kristallographie der beiden Zellen möglichst gut übereinstimmt. Dieser Schritt wird mithilfe von Avizo durchgeführt. In diesem Programm werden die LBIC-Messdaten der nicht-passivierten Zelle anhand des Grids mit der EBSD-Aufnahme der gleichen Zelle in Deckung gebracht. Hierzu werden Orientierungspunktpaare auf beiden Bildern gesetzt, die die gleiche Stelle der Zelle markieren. Als solche Markierungen eignen sich die Ecken des Grids sehr gut. Anschließend wird das LBIC-Bild automatisiert so verschoben und gedreht (nicht skaliert), dass die Orientierungspunkte möglichst nahe beieinander liegen (Methode der kleinsten Fehlerquadrate).

Da das Grid auf der wasserstoffpassivierten Zelle kristallographisch nicht an der gleichen Stelle liegt, wie bei der nicht-passivierten Zelle, kann das Ausrichten des LBIC-Bilds der passivierten Zelle an die EBSD-Messung der nicht-passivierten Zelle nicht anhand des Grids erfolgen. Deshalb wird dieses Bild von Hand an das andere LBIC-Bild ausgerichtet. Anschließend kann es mithilfe einer Automatisierung noch genauer angepasst werden. Dies funktioniert, indem dieses Bild noch leicht verschoben und gedreht werden kann und die Helligkeitsunterschiede der einzelnen Pixel minimiert werden. Hierzu werden die „übereinanderliegenden“ Pixel miteinander verglichen, die Differenz quadriert und über alle Pixel eine Summe gebildet. Diese muss möglichst klein werden, ähnlich zu

der gängigen Methode der kleinsten Fehlerquadrate. Da einige Grenzen vor und nach der Passivierung aktiv (also auf dem Bild dunkel) sind, lassen sich die Bilder an diesen recht gut ausrichten. Somit werden die Bilder genauer ausgerichtet, als es manuell möglich wäre.

In Abbildung 3.3 sind die LBIC-Messungen der beiden Zellen sowie eine EBSD-Aufnahme mit allen Korngrenzen abgebildet.

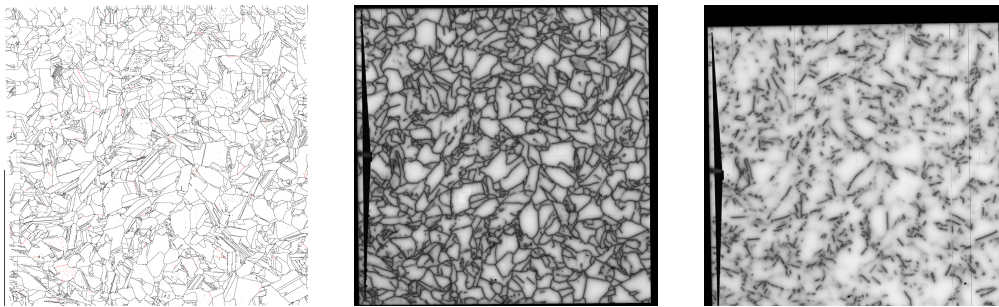


Abbildung 3.3: Die LBIC-Bilder nach dem Ausrichten an die EBSD-Messung. Links ist die EBSD-Messung mit allen Korngrenzen zu sehen. In der Mitte ist die LBIC-Aufnahme der nicht-passivierten Probe. Rechts folgt das LBIC-Bild der passivierten Probe. Alle Bilder zeigen eine $2 \times 2 \text{ cm}^2$ großen Ausschnitt. Im Vergleich der beiden LBIC-Messungen ist der positive Einfluss der Wasserstoffpassivierung klar zu sehen.

Wie hierbei gut zu erkennen ist, entstehen durch das Ausrichten der LBIC-Bilder an die EBSD-Messungen schwarze Ränder. Dies rührt daher, dass die Aufnahmen verschoben werden und daher an den schwarzen Stellen keine Messdaten vorliegen. Die Wafer decken sich kristallographisch nicht vollständig, da sie (wie bereits in 2.2.2.1 beschrieben) aus dem verarbeiteten $5 \times 5 \text{ cm}^2$ Wafer herausgesägt werden. Weil der Sägeprozess manuell geschieht, kann es hierbei zu leichten Verschiebungen kommen, weshalb die Wafer leicht zueinander verschoben sind.

Um die weitere Verarbeitung übersichtlicher zu gestalten, ist es hilfreich, die ausgerichteten Bilder zu exportieren, um sie bei den nachfolgenden Schritten wieder importieren zu können. Damit sind in dem jeweiligen Arbeitsschritt nur die hierzu nötigen Elemente enthalten und nicht zusätzliche Elemente der vorherigen Schritte.

3.3.4 Erstellen der Profile

In diesem Abschnitt geht es um die Bestimmung der Orte, an denen die LBIC-Bilder ausgewertet werden sollen. Für die Auswertung werden Profile erstellt, die später analysiert werden.

Da die Korngrenzen den Wafer wie ein Netz durchziehen und alle zusammenhängen, ist eine Erkennung von einzelnen Korngrenzen für den Computer schwierig. Einzelne Grenzen desselben Typs hängen jedoch selten zusammen, wie in Abbildung 3.4 zu sehen ist. Dadurch funktioniert die Objekterkennung auf Bildern mit nur einem Typ Korngrenze

sehr gut. Ebenfalls gut zu erkennen ist in dieser Abbildung, dass die Korngrenzen in stark unterschiedlicher Häufigkeit auftreten. So sind $\Sigma 3$ -Grenzen sehr häufig, $\Sigma 27$ b-, oder auch die anderen Typen CSL-Grenzen jedoch recht selten (vergleiche auch [7]).

Die LBIC-, sowie die Korngrenzen-Bilder werden in Avizo geladen, um die Positionen und Orientierungen der zu entnehmenden Profile zu bestimmen. Die Korngrenzen-Bilder können hierbei als Stapel von Bildern importiert werden. Dies birgt den Vorteil, dass die Schritte automatisch auf alle Bilder angewandt werden, die Schritte somit übersichtlicher sind und Fehler vermieden werden können.

Die Korngrenzen-Bilder werden zuerst in ein Binärbild umgewandelt. Dies geschieht mithilfe eines Schwellwerts, der alle nicht-weißen Pixel als Vordergrund und weiße Pixel als Hintergrund setzt. Anschließend werden zusammenhängende Pixel aus dem Vordergrund als Objekte erkannt und eine Liste dieser Objekte erstellt, die den Schwerpunkt der Objekte sowie die Länge und Breite der Objekte enthält. Anhand dieser Werte können nun Objekte aussortiert werden. Es werden im Nachfolgenden nur Objekte betrachtet, die länger als 20 Pixel (dies entspricht $200 \mu\text{m}$) sind. Kleinere Objekte sind schwer auszuwerten, da dort der Einfluss der Korngrenzen noch zu stark ist und somit der Plateauwert nicht erreicht wird. Des Weiteren sind viele der kleinen Objekte Messfehler aufgrund der Rauheit der Probe (wie bereits in 3.1.1 beschrieben). Nachdem die kleinen Objekte herausgefiltert sind, werden die Objekte noch einmal neu durchnummeriert. Dies ist für die spätere Auswertung notwendig.

Die Profile werden senkrecht zur Orientierung der Korngrenzen erstellt und bilden somit den Verlauf der IQE-Werte auf dem kürzesten Weg durch eine Korngrenze ab.

Da die Profile sowohl die Korngrenze als auch den Plateauwert der Körner beinhalten müssen, um die Daten richtig auswerten zu können, ist es nötig, dass die Profile eine gewisse Länge besitzen. Ist diese zu groß, werden mehrere Korngrenzen geschnitten und es lässt sich die Zugehörigkeit der Messung zur Korngrenze nicht mehr genau feststellen. Ein guter Kompromiss der Länge liegt bei 30 Pixeleinheiten (also $300 \mu\text{m}$). Dieser Wert kann durch Erstellen von Profilen mit verschiedenen Längen bestimmt werden. Bei diesen Profilen wird dann untersucht, ob die Plateauwerte bestimmt werden können und keine weiteren Korngrenzen auf dem Profil zu sehen sind. Ein weiteres Indiz dafür, dass die Länge von $300 \mu\text{m}$ gut gewählt ist, ist zu sehen, wenn die LBIC-Bilder voneinander abgezogen werden. Hierbei ist gut zu erkennen, auf welcher Breite sich die Korngrenzen ändern. Diese Breite beträgt ca. $200 \mu\text{m}$ bis $250 \mu\text{m}$, weshalb ein Profil mit einer Länge von $300 \mu\text{m}$ den Plateauwert enthält. Ein solches Differenzbild ist in Abbildung 4.4 zu sehen. Dort wird es im Zusammenhang mit der Auswirkung der Wasserstoffpassivierung auf die Probe gezeigt. Die Schritte zur Erstellung der Messprofile ist in Abbildung 3.5 schematisch gezeigt.

Um die Positionen der Profile zu ermitteln, werden die Schwerpunkte sowie die Orientierungen der Korngrenzen und die Senkrechten dazu ermittelt. Die Start- und Endpunkte

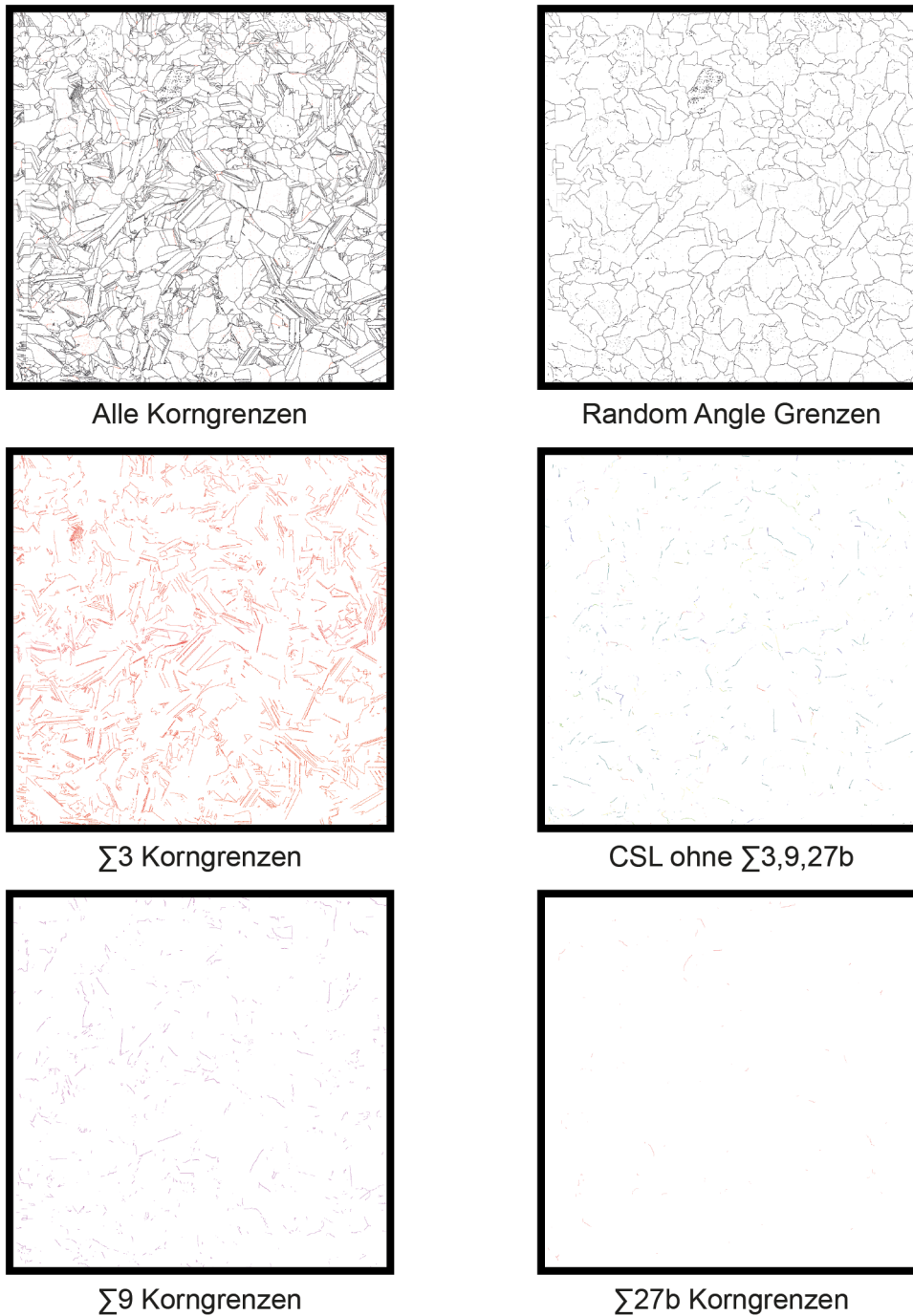


Abbildung 3.4: Die Korngrenzen-Bilder aus der EBSD-Messung der $2 \times 2 \text{ cm}^2$ großen Zelle. Abgebildet sind verschiedene Typen von Korngrenzen. So sind links oben als Überblick alle Korngrenzen zu sehen. Rechts daneben sind ausschließlich die Random Angle Grenzen gezeigt. Die unteren vier Bilder stellen verschiedene CSL-Korngrenzen dar. So sind auf je einem Bild nur $\Sigma 3$, $\Sigma 9$, $\Sigma 27b$ zu sehen. Auf dem Bild in der Mitte rechts sind sämtliche anderen CSL-Korngrenzen abgebildet. Wie gut zu erkennen ist, treten die Korngrenzen in stark unterschiedlicher Häufigkeit auf. So sind sehr viele $\Sigma 3$ -Grenzen zu sehen, jedoch bspw. sehr wenige $\Sigma 27b$ -Korngrenzen. Die hier dargestellten Korngrenzen-Bilder werden zur Erkennung der Position und Orientierung der einzelnen Korngrenzen verwendet. Eine Ausnahme ist das Bild mit allen Korngrenzen. Dieses wird nicht verwendet, da dort keine Unterscheidung des Korngrenzentyps möglich ist. Es dient lediglich Übersichtszwecken.

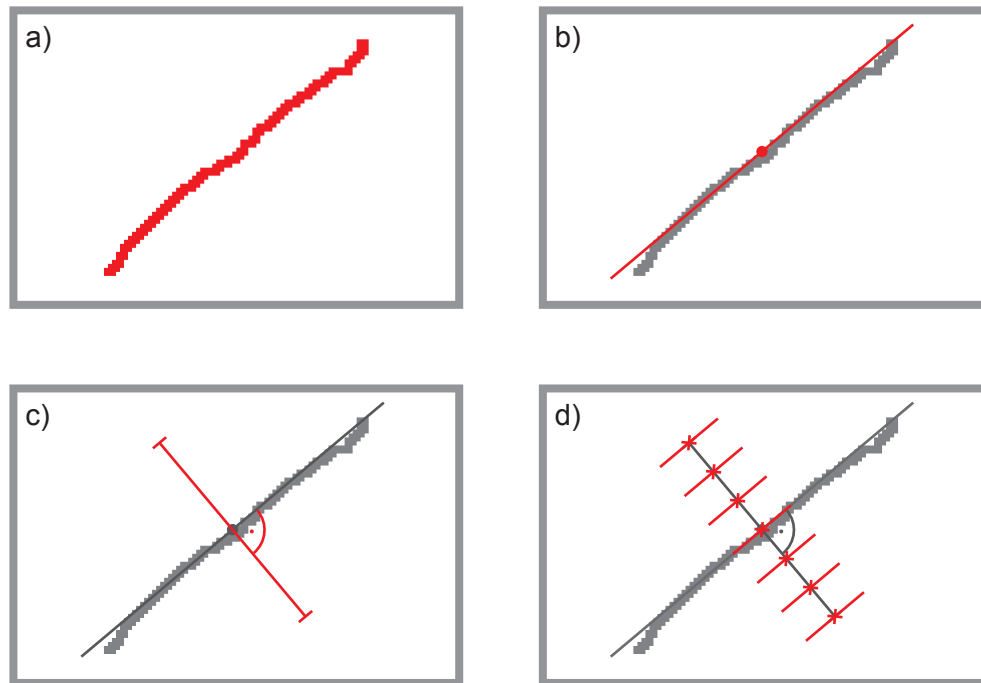


Abbildung 3.5: Die verschiedenen Schritte bei der Erstellung der Messprofile. Die neuen Objekte sind farblich hervorgehoben. In Bild a) ist eine detektierte Korngrenze aus dem mittels EBSD erstellten Korngrenzen-Bild zu sehen, von der in Bild b) die Orientierung sowie der Schwerpunkt bestimmt ist. Bild c) zeigt zusätzlich noch eine Senkrechte zur Orientierung mit einer festgelegten Länge ($300\ \mu\text{m}$). In Bild d) sind entlang der Senkrechten einige Punkte eingezeichnet, an denen die Werte der IQE-Messung entnommen werden. Hierzu werden die Werte entlang der rot eingezeichneten Linie gemittelt und als Messwert genutzt. Dies birgt den Vorteil, dass einzelne Messfehler oder Fehlstellen einen kleineren Anteil am Endergebnis besitzen. Es werden 51 solcher Messwerte entnommen. Dies entspricht einem Abstand von $6\ \mu\text{m}$ zwischen den einzelnen Messpunkten. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind in dieser Grafik nur sieben solcher Punkte eingezeichnet, die hier als Kreuze dargestellt sind.

der Profile liegen je $150\ \mu\text{m}$ entlang der Senkrechten der Orientierung. Die Positionen der Start- und Endpunkte werden anschließend für die weitere Verwendung exportiert. Der nächste Schritt ist, Linien zu erstellen, die die Start- und Endpunkte verbinden. Dieser Zwischenschritt wird in Matlab realisiert. Hierzu werden die X- und Y-Werte der Start- und Endpunkte in Matlab importiert. Das selbst geschriebene Skript `LinienErstellen` (siehe A.2) erzeugt eine Schar von Linien und schreibt diese in eine Avizo-kompatible Datei. Hierbei besteht jede der Linien aus insgesamt 51 Punkten. An diesen 51 Punkten werden später die Messwerte genommen. Diese Punkte besitzen einen Abstand von $6\ \mu\text{m}$. Somit ist der Abstand zwischen den Punkten kleiner als ein Pixel der LBIC-Messung. Eine Erhöhung dieser Anzahl resultiert nur in mehr Daten, jedoch nicht in besseren Ergebnissen, weshalb eine Anzahl von 51 Punkten gewählt wurde. Die Datei kann anschließend in Avizo importiert werden. Mithilfe eines Profilentnahme-Werkzeugs werden die LBIC-Bilder entlang der Linien ausgewertet und die Ergebnisse in ein Diagramm aufgetragen, das gespeichert werden kann.

Um das Risiko zu minimieren, dass das Profil durch eine für die Korngrenze untypische Stelle verläuft und somit die Ergebnisse verfälscht werden, werden senkrecht zum Profil (also parallel zur Korngrenze) in einem Bereich von $100\ \mu\text{m}$ die Werte gemittelt. Hierdurch besitzen kleinere Störstellen deutlich weniger Gewicht, was sich positiv auf die Ergebnisse auswirkt. Eine Mittelung über einen größeren Bereich ist ebenfalls möglich, allerdings werden dann sehr viele Werte gemittelt und die Ergebnisse werden verwaschen. Durch die Mittelung ergibt sich außerdem die Möglichkeit, mit mehr als einem Messpunkt pro Pixel der LBIC-Messung zu arbeiten. Da die benachbarten Pixel sich ebenfalls ändern, wird das Ergebnis auch bei einem Abstand der Messpunkte von nur 60% der Pixelgröße bei jedem Messpunkt anders und somit ergibt sich ein genaueres Bild der IQE-Werte entlang eines Profils.

Blendet man aus dem Bild aller Korngrenzen die CSL-Korngrenzen aus, so bleiben die Random Angle Korngrenzen übrig. Diese bilden allerdings noch ein zusammenhängendes Gitter, wie in Abbildung 3.4 zu sehen ist. Da ein zusammenhängendes Gitter vom Computer aber als ein Objekt wahrgenommen wird, ist es nicht möglich, die Schwerpunkte der einzelnen Grenzen und somit die Positionen für die Probenentnahme zu bestimmen. Aus diesem Grund wird ein Raster über die EBSD-Aufnahme gelegt und entlang dieses Rasters das Netz zerschnitten. Somit entstehen einzelne Grenzen, deren Schwerpunkte berechnet werden können.

Bei der Größe der einzelnen Felder des Rasters ist darauf zu achten, dass grobe Maschen einzelne Korngrenzen nicht teilen und diese somit nicht mehrfach gezählt werden. Allerdings bilden sich dann auch recht große zusammenhängende Bereiche, die mehr als eine Korngrenze darstellen und deren Schwerpunkt nicht auf einer Korngrenze liegt. Sind die Maschen zu fein gewählt, werden Korngrenzen zu oft geteilt. Dies bewirkt, dass lange Korngrenzen einen größeren Einfluss auf die Statistik besitzen. Um einen Mittelweg zwischen diesen beiden Seiten zu erreichen, wird eine Rastergröße von $800\ \mu\text{m}$ gewählt, was ungefähr dem Fingerabstand entspricht.

3.3.5 Auswerten der Profile

Sind diese Profile erstellt und exportiert, müssen sie noch ausgewertet werden. Hierzu werden die Profile in Matlab importiert. Dies geschieht mithilfe einer selbst geschriebenen Funktion. Diese heißt `ProfilImport_2` und ist in Anhang A.3 zu finden.

Danach wird aus den Profilen das Minimum der Messwerte sowie der Plateauwert bestimmt, um daraus den Kontrastwert zu berechnen. Der Kontrastwert ist wie folgt definiert:

$$\text{Kontrastwert} = \frac{\text{Plateauwert} - \text{Minimum der Messwerte}}{\text{Plateauwert}} .$$

Somit liegt der Kontrastwert immer zwischen 0 und 1 und stellt den Unterschied zwischen Minimum und Plateauwert in ein Verhältnis zum Plateauwert.

In diesen Zusammenhang sei die Dissertation von Gabriel Micard ([9]), oder auch [16] genannt. In diesen wird eine Formel zur Bestimmung vieler Parameter einer Korngrenze hergeleitet. Allerdings ist diese Formel auch sehr kompliziert und lässt sich somit nicht gut fiten. Deshalb wird sie im Rahmen dieser Arbeit nicht verwendet, da die Bestimmung der Kontrastwerte der Korngrenze aufgrund der hohen Anzahl an Korngrenzen automatisiert funktionieren muss. Auch [17] ist hier zu nennen. Hier wird auf LBIC-Profile eingegangen, bei denen die angrenzenden Körner unterschiedliche Plateauwerte besitzen. In dieser Arbeit wird in einem solchen Fall der höhere Plateauwert angenommen, sodass bei unterschiedlichen Plateauwerten der größere Kontrastwert verwendet wird.

Es müssen sowohl das Minimum des Profils, als auch der Plateauwert der angrenzenden Körner bestimmt werden, um den Kontrastwert automatisiert berechnen zu können. Für eine automatisierte Auswertung muss in dem Profil das Minimum klar erkennbar, sowie der Rand flach genug sein. In Abbildung 3.6 sind einige Profile schematisch dargestellt. Die Rahmenfarbe kennzeichnet, ob das jeweilige Profil die Anforderungen erfüllt und ausgewertet werden kann, was durch einen grünen Rahmen signalisiert wird. Die Fälle, in denen das Profil nicht automatisiert ausgewertet werden kann, sind mit einem roten Rahmen gekennzeichnet.

Der Matlabcode zur Auswertung der Profile ist in Anhang A.4 (`MinMax_4`) und A.5 (`minimumprofil_4`) zu sehen. Um diese Anforderungen zu überprüfen, werden mehrere Filter nacheinander von jedem Profil durchlaufen. Die durchschnittlichen Anteile, die pro Filter herausgefiltert werden sind in Abbildung 3.7 zu sehen. Besteht ein Profil einen Filter nicht, wird es nicht weiter verarbeitet und scheidet somit direkt aus den Schritten aus.

Der erste Filter prüft, ob das Profil zu mehr als 80% über einem Wert von 10 Einheiten ist. Dies entspricht einer IQE von 0,04. Solch kleine Messwerte treten nur außerhalb des Messbereichs und innerhalb der Busbar auf. Somit werden Profile, die durch die Busbar gehen oder außerhalb der LBIC-Messungen liegen, nicht ausgewertet. Der Anteil dieser Messungen beträgt bei den Proben 6% bis 13% und ist in Diagramm 3.7 in schwarz dargestellt.

Anschließend werden von den restlichen Profilen die Minima bestimmt. Hierzu werden die Profile der Funktion `minimumprofil_4` übergeben, die im Anhang A.5 abgedruckt ist. Diese benötigt die Ableitung der Profile, die mit der selbst geschriebenen Funktion `Ableiten` (siehe Anhang A.6) gebildet wird. Um die Minima des Profils zu bestimmen, werden die einzelnen Messpunkte auf mehrere Kriterien geprüft. Diese sind, ob die Ableitungen zur linken negativ und zur rechten positiv ist und ob die Werte im Abstand von

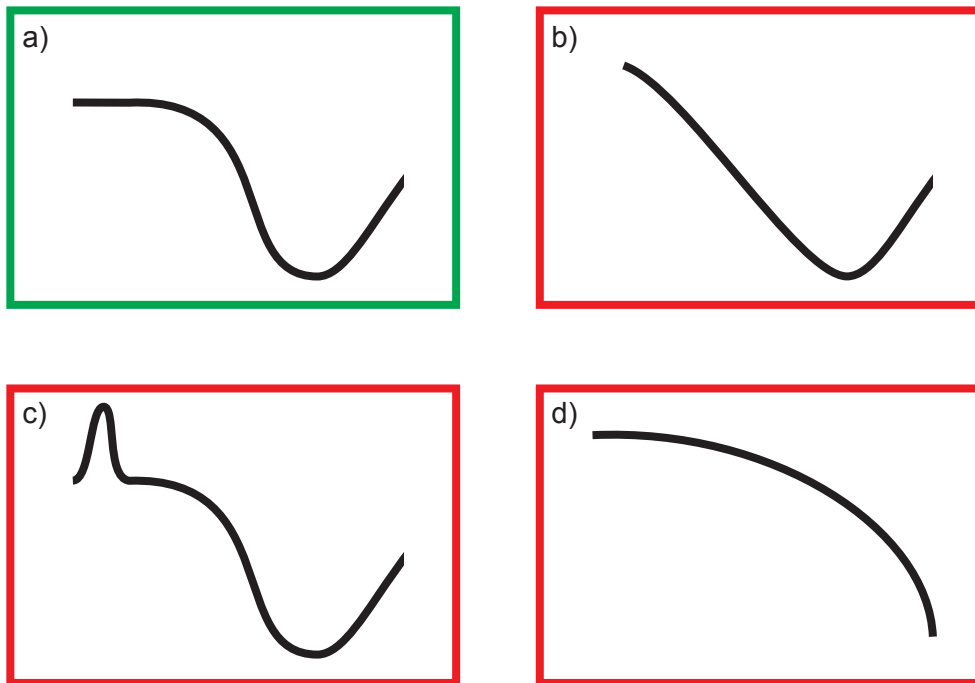


Abbildung 3.6: Einige verschiedenen Profilformen. Das grün umrandete Profil a) wird in das Ergebnis eingehen. Wohingegen die Profile b) bis d) (rot umrandet) verworfen werden. Profil b) geht nicht in die Auswertung ein, da kein Plateauwert bestimmt werden kann. Bei Profil c) kann ein Plateauwert bestimmt werden, allerdings gibt es innerhalb des Profils deutlich höhere Punkte, sodass der Plateauwert unrealistisch ist und deshalb verworfen wird. Daher kann dort kein Kontrastwert bestimmt werden. Bei Profil d) kann kein Minimum gefunden werden, weshalb dieses Profil nicht in die Auswertung eingehen kann.

zwei Messpunkten höchstens 30 Einheiten höher sind (dies sortiert Profile mit Messwerten aus, die zu schnell ansteigen). Ist mindestens auf einer Seite der IQE-Wert um mehr als 0,12 im Abstand von $12\ \mu\text{m}$ höher (was 30 Einheiten im Abstand von 2 Messpunkten entspricht), wird das Profil als „Finger“ markiert und im Folgenden aussortiert, da solch große Steigungen nicht natürlich auftreten. In diesem Filter bleiben auch Teile der Messfehler hängen oder die Enden der Busbar, die spitz zulaufen. Diese Profile haben einen Anteil von unter einem Prozent und sind in Abbildung 3.7 in pink dargestellt.

Anschließend wird geprüft, ob die Werte im Abstand von zwei Punkten (dies entspricht einem Abstand von $12\ \mu\text{m}$) höher als der zu prüfende Punkt sind. Dies schließt flache Bereiche aus, die nur aufgrund einer messbedingten Schwankung Minima ausbilden. Zuletzt wird noch geprüft, ob das fragliche Minimum zu den 15% der tiefsten Punkte des Profils gehört und das Minimum des gesamten Profils höchstens 10 Einheiten tiefer ist als der zu untersuchende Punkt. Dies entspricht einem Unterschied in der IQE von 0,04. Mit beiden Filtern wird sichergestellt, dass keine Minima auf Plateaus gefunden werden und trotzdem noch Minima erkannt werden können, auch wenn das Profil an anderer Stelle etwas tiefer ist.

Sind Profile sehr flach (Gesamthöhe kleiner 20), so können diese keine gesuchten Minima

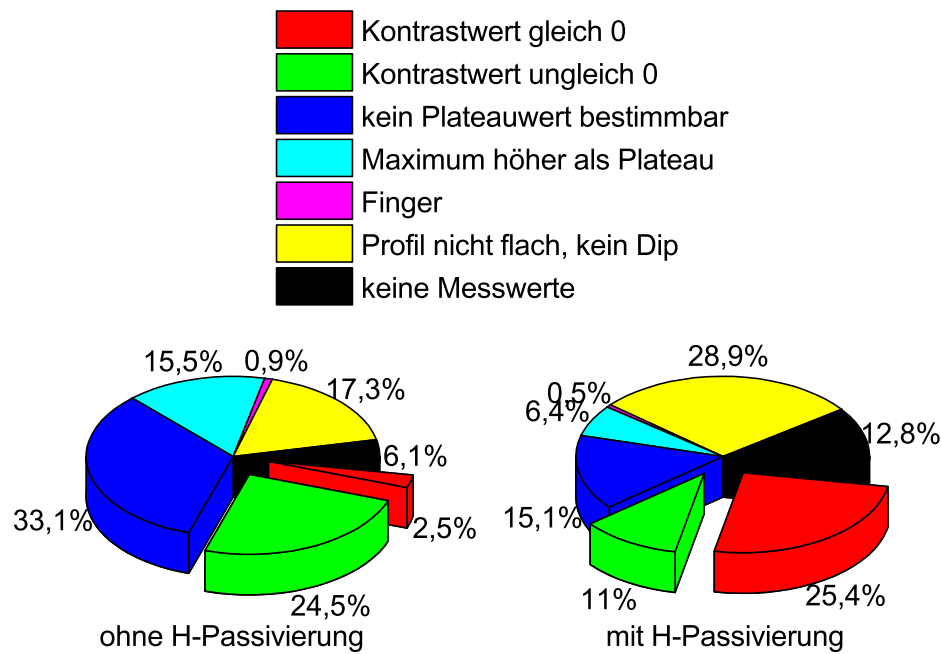


Abbildung 3.7: Die Anteile der einzelnen Stufen der Filter am Aussortieren der Profile. Die herausgestellten Anteile sind die übrig bleibenden Profile, die alle Filterschritte bestehen und die späteren Ergebnisse darstellen. Beide Kreisdiagramme stellen jeweils einen Probenumfang von 2554 Profilen dar. Zu beachten ist, dass es sich bei der hier verwendeten Probe um sehr feinkristallines Material (mc-FZ) handelt, bei dem das arithmetische Mittel der Korngrößen $0,1 \text{ nm}^2$ beträgt. Somit ist die Grafik nicht allgemein gültig, sondern nur auf das hier verwendete Silizium bezogen.

enthalten. Bei diesen Profilen ist der Unterschied im IQE-Wert zwischen dem größten und dem kleinsten Messwert höchstens 0,08. Aus diesem Grund werden die Profile auf ihre Gesamthöhe überprüft und eventuell gefundene Minima ignoriert, da es sich hierbei um Folgen des normalen Rauschens bei Messwerten handelt. Diese Profile besitzen einen Kontrastwert von 0, da sie keine Vertiefung enthalten. Sie sind in Grafik 3.7 in rot dargestellt. Der Unterschied der Anteile ist zwischen der passivierten und der nicht-passivierten Probe sehr groß. So sind nach der Passivierung zehn mal so viele Profile als ohne Minimum erkannt worden wie vor der Passivierung. Zum Schluss wird von jedem Profil das tiefste Minimum (sofern es mehrere gibt) zurück an die Hauptfunktion übergeben. Sofern sich innerhalb eines Schnittes zwei Korngrenzen befinden ist es wichtig, die tiefere zu übernehmen. Somit wird die aktivere Korngrenze ausgewertet.

Es gibt auch Profile, die nicht flach sind, bei denen allerdings auch keine Minima gefunden wurden. Diese Profile sind in Abbildung 3.6d schematisch gezeigt. Sie werden aussortiert, da nicht klar ist, ob bei einem größer gewählten Profil noch ein Minimum auftauchen würde, oder ob die untersuchte Korngrenze nicht aktiv ist und deshalb kein Minimum zu sehen ist. Sie stellen einen Anteil von 17% bis 29% und sind in Grafik 3.7 in gelb markiert.

Bei den Profilen, bei denen ein Minimum gefunden wurde, wird nun noch der Plateauwert

bestimmt, um daraus den Kontrastwert zu errechnen. Hierbei wird der höchste gefundene Plateauwert genutzt. Somit werden die Kontrastwerte nach oben abgeschätzt.

Hierzu werden die Ableitungen der Profile auf flache Bereiche untersucht. Als flach wird ein Bereich angesehen, wenn der Betrag seiner Steigung kleiner als 0,2 ist. Dies entspricht einer Änderung des IQE-Wertes um höchstens 0,0008 pro 10 μm . Der höchste Wert, der innerhalb flacher Bereiche angenommen wird, wird als Plateauwert gesehen.

Bei einigen Profilen ist kein Plateau bestimmbar. Dies bedeutet, dass diese Profile keine Bereiche aufweisen, die flach genug wären. Ein Beispiel für ein solches Profil ist in Abbildung 3.6b zu sehen. Der Anteil dieser Profile schwankt, wie in Abbildung 3.7 in dunkelblau gezeigt, bei den beiden Proben zwischen 15% und 33%. Auch wird der Plateauwert bei kleinen Körnern nicht erreicht, da die Korngrenzen dort auch in der Mitte des Kornes noch einen großen Einfluss auf den IQE-Wert besitzen und diesen somit negativ beeinflussen. Die Grenze der Steigung wurde so gewählt, dass einerseits der Plateaubereich möglichst flach sein muss, andererseits aber bei einer akzeptablen Anzahl von Profilen ein Plateauwert bestimmt werden kann, um keine zu kleine Stichprobe zu erhalten.

Nach Bestimmen des Plateauwerts wird auch das Maximum des Profils bestimmt und die Differenz zwischen beiden Werten errechnet. Ist diese zu groß, scheint der IQE-Wert noch nicht seinen Plateauwert erreicht zu haben. Dieser Fall ist in Abbildung 3.6c zu sehen. Der Plateauwert wird ab einem Abstand von 10 Einheiten (entspricht einem IQE-Unterschied von 0,04) zum Maximum nicht mehr als verlässlich angesehen. Daher werden diese 6% bis 16% der Profile ebenfalls verworfen. Diese Anteile sind in Abbildung 3.7 in türkis dargestellt. Zu beachten ist hierbei, dass örtlich beschränkte Messfehler durch die Mittelung mehrerer Messwerte zu einem Messpunkt in ihrem Einfluss eingeschränkt sind. Besitzen einige Messpunkte also einen deutlich höheren IQE-Wert ist dies nicht auf örtlich begrenzte Messfehler zurückzuführen, da über eine Linie mit einer Länge von 100 μm gemittelt wurde (wie in Kapitel 3.3.4 erklärt).

Aufgrund der zahlreichen Filterstufen werden nur ca. ein Drittel der Profile für das Endergebnis genutzt, die anderen Profile würden allerdings durch unsichere Werte in einer automatisierten Auswertung die Aussagekraft der Ergebnisse deutlich verringern. Jedoch ist hierbei zu beachten, dass bei allen Profilen, bei denen kein Plateauwert bestimmt werden konnte, bereits ein Minimum bestimmt wurde. Diese Grenzen sind also keinesfalls inaktiv. Ebenso ist es bei den Profilen, bei denen das Maximum des Profils deutlich höher als das Plateau liegt. Auch hier ist ein Minimum gefunden worden, nur konnte der Kontrastwert nicht bestimmt werden. Bei den gelb markierten Profilen war das Profil nicht flach genug, um ein Minimum auszuschließen, jedoch konnte kein Minimum gefunden werden. Es ist nicht klar, ob durch ein längeres Profil ein solches gefunden würde, oder ob dort kein Minimum zu finden ist. Jedoch ist der Anteil der inaktiven Korngrenzen (Kontrastwert=0) mit dieser Auswertung zu hoch eingeschätzt, da bei einigen

aktiven Korngrenzen kein Kontrastwert bestimmt werden konnte und sie somit nicht in die Auswertung eingehen.

3.3.6 Vergleichen der Kontrastwerte

Nachdem die Kontrastwerte der Korngrenzen aus beiden Bildern bestimmt wurden, geht es im nächsten Schritt darum, die Daten jeder Korngrenze vor und nach der Wasserstoffpassivierung miteinander zu vergleichen. Hierzu ist es notwendig, dass sowohl der Kontrastwert vor der H-Passivierung als auch der Kontrastwert nach der H-Passivierung bestimmt werden konnte. In Abbildung 3.8 ist zu sehen, wie groß die Anteile der Profile sind, die die späteren Ergebnisse bilden.

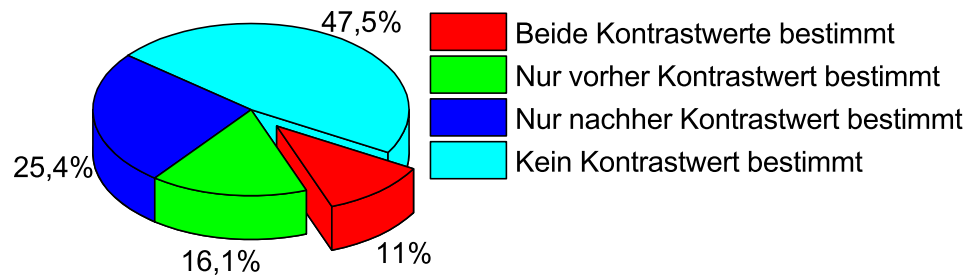


Abbildung 3.8: In dieser Abbildung ist der Anteil der ausgewerteten Profile an der Gesamtanzahl zu sehen. Viele Profile können nicht ausgewertet werden ($\sim 50\%$). Von den Profilen, die ausgewertet werden können, können viele nur auf einem der beiden Bilder ausgewertet werden ($\sim 40\%$), wodurch nur wenige Profile (11%) für den Vergleich genutzt werden können.

Wie gut zu erkennen ist, werden von den automatisiert erkannten Profilen viele nur in einem der beiden Bilder erkannt und somit nicht ins Ergebnis einbezogen. Dadurch verkleinert sich die betrachtete Menge erneut, allerdings ist dies notwendig, da sonst keine Aussagen über die Veränderung einzelner Grenzen getroffen werden könnten.

- Von den 27% der Korngrenzen der nicht-passivierten Probe, bei denen ein Kontrastwert bestimmbar ist, sind nur knapp die Hälfte Korngrenzen, von denen auch bei der passivierten Probe der Kontrastwert bestimmt werden konnte (11% aller Korngrenzen). Die restlichen 16% (in Abbildung 3.8 grün dargestellt) konnten bei der nicht-passivierten Probe bestimmt werden, nicht jedoch bei der passivierten. Somit sind diese 16% nicht für das Ergebnis verwendbar.

- Von den 36%, der Korngrenzen der passivierten Probe, bei denen ein Kontrastwert bestimmbar ist, sind nur ca. $\frac{1}{3}$ Korngrenzen, von denen auch bei der nicht-passivierten Probe der Kontrastwert bestimmt werden konnte (11% aller Korngrenzen). Die restlichen 25% (in Abbildung 3.8 dunkelblau dargestellt) konnten bei der passivierten Probe bestimmt werden, nicht jedoch bei der nicht-passivierten. Somit sind diese 25% nicht für das Ergebnis verwendbar.

Des Weiteren sind bei 48% der Korngrenzen weder für die nicht-passivierte noch für die passivierte Probe Kontrastwerte bestimmbar. Dieser Anteil ist in Abbildung 3.8 türkis dargestellt.

Werden die Ergebnisse der Auswertungen derselben Grenzen vor und nach der Passivierung miteinander verglichen, so lassen sich Aussagen zur Veränderung der Grenzen und somit zum Einfluss der H-Passivierung treffen. So können entweder die Kontrastwerte mithilfe von Boxplots dargestellt werden, oder die Kontrastwerte können durcheinander geteilt werden, um die relative Änderung zu erhalten. Somit kann bestimmt werden, wie viel Prozent der Grenzen durch die Passivierung elektrisch inaktiv werden oder sich wie stark verbessern.

Kapitel 4

Ergebnisse

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Arbeit vorgestellt. Hierbei wird zunächst auf die Verteilung der Korngrenzen eingegangen, bevor der Einfluss der Wasserstoffpassivierung auf die Körner und Korngrenzen dargestellt wird.

4.1 Verteilung

Zur Beschreibung der Verteilung der Korngrenzen werden sowohl die Anteile der verschiedenen CSL-Korngrenzen als auch die Anteile der Random Angle Grenzen betrachtet. Als Maß für den Anteil wird die Anzahl der Pixel jedes Korngrenzentyps auf den EBSD-Bildern genutzt.

Korngrenzen sind zweidimensionale Objekte, die geschnitten somit nur noch eindimensional sind. Deshalb ist ein Flächenmaß eigentlich nicht anwendbar. Bei der EBSD-Messung bedeutet ein eingefärbtes Pixel, dass innerhalb dieses Gebiets die Korngrenze verläuft und nicht, dass das gesamte Gebiet zur Korngrenze gehört. Somit verringert sich der Anteil der eingefärbten Pixel, wenn diese verkleinert werden. Die EBSD-Aufnahmen, die hier für den Vergleich der Anteile der Korngrenzentypen genutzt werden, sind jedoch mit der gleichen Auflösung erstellt worden, weshalb die Anzahl der eingefärbten Pixel ein gutes Maß für die Anteile der einzelnen Korngrenzen darstellt. Aufgrund der Art der Auswertung besitzen große (also im Schnitt lange) Korngrenzen größeres Gewicht in dieser Statistik als kleine Grenzen.

Die Anteile der einzelnen Typen an der Gesamtmenge der Korngrenzen ist in Abbildung 4.1 dargestellt.

Wie gut in der Grafik zu erkennen ist, stellen die $\Sigma 3$ -Grenzen einen großen Anteil.

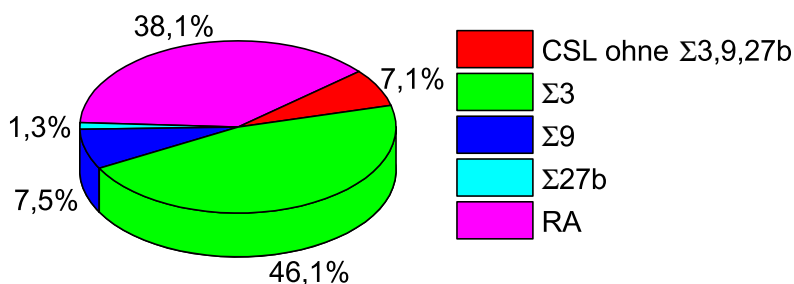


Abbildung 4.1: Die Anteile der einzelnen Grenztypen. Diese Anteile sind über die gefüllten Pixel gemessen. Somit haben große Korngrenzen größeres Gewicht als kleine Korngrenzen.

Ebenfalls einen sehr großen Anteil haben die Random Angle Korngrenzen. Die restlichen Grenztypen (alle restlichen Sigma Korngrenzen) besitzen lediglich einen Anteil von $\sim 15\%$.

In der weiteren Auswertung werden wie in Abbildung 4.1 die Korngrenzentypen $\Sigma 3$, $\Sigma 9$, $\Sigma 27b$ und Random Angle Korngrenzen einzeln betrachtet. Die anderen Σ -Korngrenzen werden gemeinsam betrachtet, da sie nur einen sehr kleinen Anteil stellen. Somit ist die Gesamtheit der Korngrenzen abgedeckt, da alle Σ -Grenzen betrachtet werden (je nach Typ zusammengefasst) und alle Grenzen, die keinen Σ -Wert besitzen, Random Angle Grenzen sind.

4.2 Vergleich der Daten

Vergleicht man die LBIC-Aufnahmen vor und nach der Wasserstoffpassivierung, so sieht man eine klare Verbesserung, die im Folgenden genauer betrachtet wird.

Da im Nachstehenden auch Boxplots zur Darstellung genutzt werden, ist in Abbildung 4.2 ein solcher exemplarisch dargestellt und kurz erklärt.

4.2.1 Übersicht des Einflusses der H-Passivierung

Trägt man die IQE-Werte der LBIC-Messungen nebeneinander auf, so sieht man eine starke Zunahme der Werte. Dies ist in Abbildung 4.3 gezeigt.

Wie in der Grafik gut zu erkennen ist, erhöhen sich der Mittelwert und der Median deutlich durch die Wasserstoffpassivierung. Jedoch fällt auch auf, dass sich die Verteilung der Werte ändert. Waren die Werte vor der Wasserstoffpassivierung über einen großen

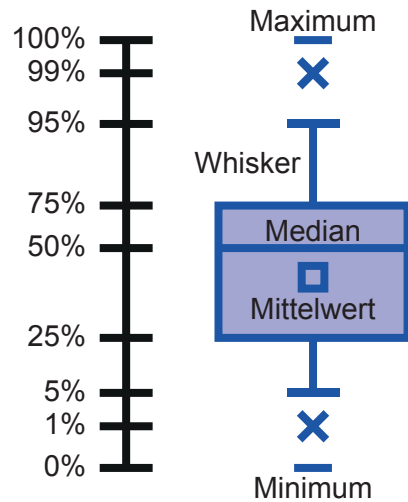


Abbildung 4.2: *Boxplots stellen die Verteilung von Daten dar. Innerhalb der Box sind 50% der Daten. Die horizontale Linie bildet den Median, wohingegen das Quadrat den Mittelwert darstellt. Innerhalb der Whiskers befinden sich 90% der Werte. Die Kreuze markieren das letzte Prozent, sodass sich zwischen den Kreuzen 98% der Werte befinden. Die kurzen horizontalen Linien markieren das Maximum bzw. Minimum. Diese Darstellung wird bei allen späteren Boxplots verwendet. Links neben den Boxplots sind dann zusätzlich die Datenpunkte selbst dargestellt. Jedoch ermöglichen die Boxplots die schnelle und einfache Erfassung der Verteilung von großen Datenmengen, weshalb sie hier verwendet werden.*

Bereich nahezu gleichverteilt, so bilden die Werte nach der Passivierung eine Verteilung, die von oben nach unten zuerst stark zu- und anschließend kontinuierlich abnimmt. Man sieht, dass es sehr viele gute Bereiche gibt und die Häufigkeit mit abnehmender Güte der Bereiche ebenfalls abnimmt.

Die Wasserstoffpassivierung verbessert die Güte der Zelle also wesentlich. Dies ist auch daran zu erkennen, dass sich der Median der IQE-Daten von 0,55 auf 0,75 ändert. Dies entspricht einem Zuwachs von ca. 35%. Außerdem ist auch gut zu erkennen, dass die Verteilung der Werte deutlich enger wird. So befinden sich in der nicht-passivierten Probe die mittleren 50% der Werte in einem Bereich von 0,29, wohingegen nach der Passivierung diese 50% der Werte in einem Bereich von 0,19 zu finden sind. An diesen beiden Verbesserungen (im Median und in der Streuung) ist zu erkennen, dass die Wasserstoffpassivierung verschieden stark auf verschiedenen gute Bereiche wirkt. So werden die schlechten Bereiche besonders stark verbessert, während sich bei den Bereichen, die bereits vor der Passivierung recht gut sind, weniger Effekt zeigt. Hieraus erklärt sich auch die Veränderung der Form der Verteilung der Messwerte.

Erstellt man ein Differenzbild der beiden Messungen, so werden die Bereiche sichtbar, in denen eine besonders große Änderung stattgefunden hat. Solch ein Differenzbild der beiden Zellen (vor- und nach der Wasserstoffpassivierung) ist in Abbildung 4.4 zu sehen.

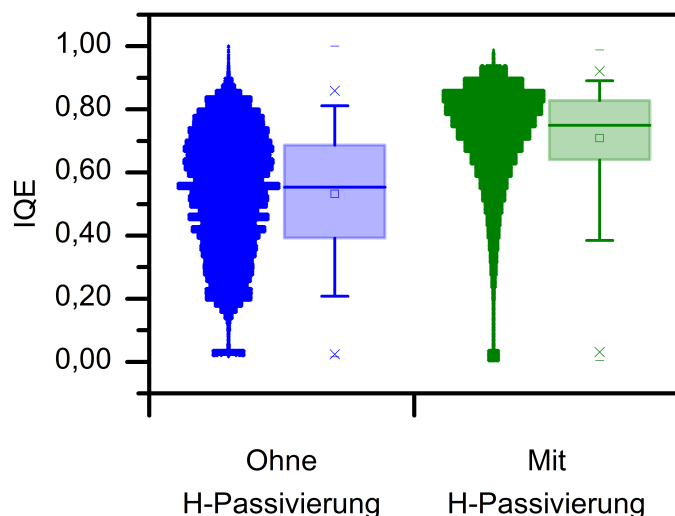


Abbildung 4.3: Die IQE Werte der LBIC Bilder im Vergleich vor und nach der Wasserstoffpassivierung. Es wurde hierfür nur der Bereich betrachtet, in dem Messdaten von beiden Wafern vorliegen. Dies trifft auf etwa 89% der Fläche zu, was $3,55 \text{ cm}^2$ entspricht.

Wie gut zu erkennen ist, werden viele Grenzen elektrisch inaktiv (gelblich-rötlich dargestellt). Bei genauer Betrachtung ist erkennbar, dass scheinbar neu entstehende Grenzen (bläulich) neben inaktiv werdenden Grenzen der gleichen Form zu finden sind. Diese Grenzen liegen nicht exakt aufeinander, da es sich bei den beiden Aufnahmen um Nachbarwafer handelt, die kristallographisch ähnlich, aber nicht gleich sind. Es handelt sich bei diesen Grenzen um die gleichen Grenzen, die sich nur leicht verschoben haben und sich deshalb nicht überlagern. Im linken Bereich des Differenzbilds sind ein roter und ein blauer Streifen zu erkennen. Diese Streifen resultieren aus dem Vergleich von Werten, die auf der einen Zelle auf und auf der anderen Zelle neben dem Busbar liegen. Somit ist dort der Unterschied sehr groß, weshalb die Streifen in starkem rot bzw. blau dargestellt sind. Die Verschiebung der Korngrenzen gegeneinander ist bei der hier verwendeten, automatisierten Auswertung jedoch kein Problem, da zur Auswertung Profile erstellt werden, die etwas länger sind, als notwendig wäre. Somit ist bei einem verschobenen Bild die Korngrenzen nicht mehr mittig in dem Profil zu sehen. Dies führt jedoch zu keinen Problemen, da das Minimum des Profils, sowie der Plateauwert (zumindest auf einer Seite) trotzdem noch bestimmt werden können.

Nachdem in dieser Abbildung die IQE-Werte der gesamten Messung betrachtet wurden, wird im nächsten Abschnitt besonders auf die Körner geschaut, bevor im darauf folgenden Abschnitt die Korngrenzen genauer untersucht werden.

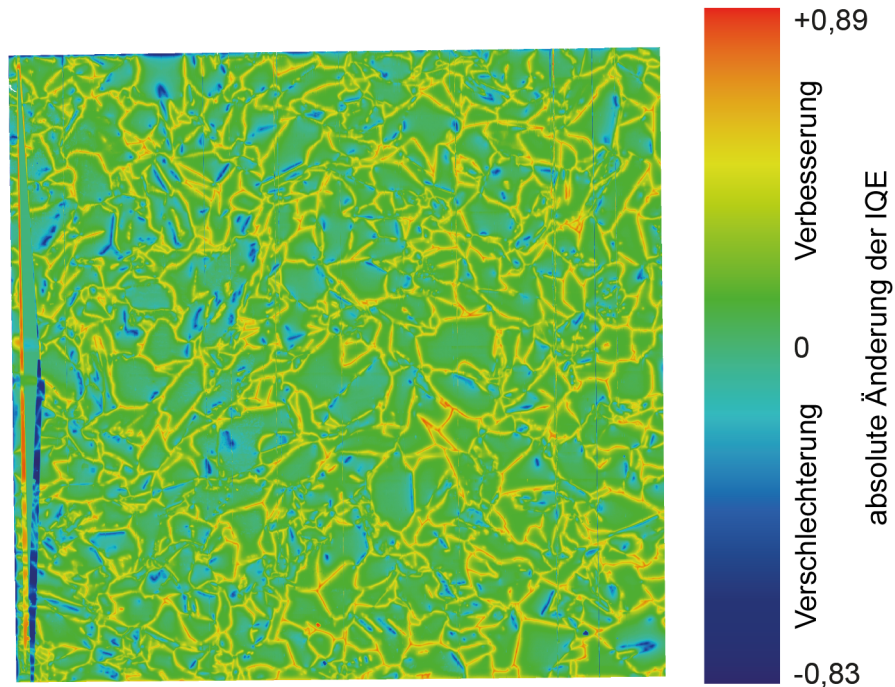


Abbildung 4.4: Die IQE-Werte aus den LBIC Bildern voneinander abgezogen. Korngrenzen, die inaktiver werden, sind gelblich-rötlich dargestellt. Aktiver werdende sind bläulich gekennzeichnet. Wie gut zu erkennen ist, werden sehr viele Grenzen inaktiv. Bereiche in denen nur Messungen von einem Wafer vorliegen sind ausgespart. Die Skala stellt Änderungen der IQE-Werte dar. Das Bild zeigt einen Bereich von $3,55 \text{ cm}^2$.

4.2.2 Auswirkung der H-Passivierung auf Körner

Auf dem Differenzbild (Abbildung 4.4) sind die gesamten Änderungen zu sehen, die zwischen der nicht-passivierten und der passivierten Probe bestehen. Um alle Unterschiede zu zeigen, ist die Skala recht groß gewählt. Dadurch sind vor allem die Korngrenzen hervorgehoben, die Körner ändern sich jedoch nicht so stark wie die Korngrenzen, weshalb die Änderungen dort bei dieser Skala nicht gut zu sehen sind. Daher werden nun die Schwerpunkte der Körner berechnet und dort der IQE-Wert vor und nach der Passivierung verglichen. Da die Korngrenzen sich jedoch (wie im Differenzbild zu sehen ist) stark ändern, werden nur Körner betrachtet, die breit genug sind (breiter als $0,4 \text{ mm}$). Die Mindestbreite ist darin begründet, dass der Einfluss der Korngrenzen ca. $120 \mu\text{m}$ weit noch merklich ist. Da der Schwerpunkt aber nicht von Korngrenzen beeinflusst werden soll, ist eine Mindestbreite von $0,4 \text{ mm}$ gewählt. Vergleicht man die IQE-Werte an diesen Stellen vor und nach der Passivierung, so sieht man, dass sich die Plateauwerte der Körner ändern. Die Änderungen sind in Abbildung 4.5 visualisiert.

Es werden zuerst die Schwerpunkte der einzelnen Körner mithilfe von Avizo errechnet und kleine Körner herausgefiltert, um dieses Bild zu erzeugen. An diesen Schwerpunkten werden nun mit dem in Anhang A.7 befindlichen Code `Kornanalyse_2` die Plateauwerte

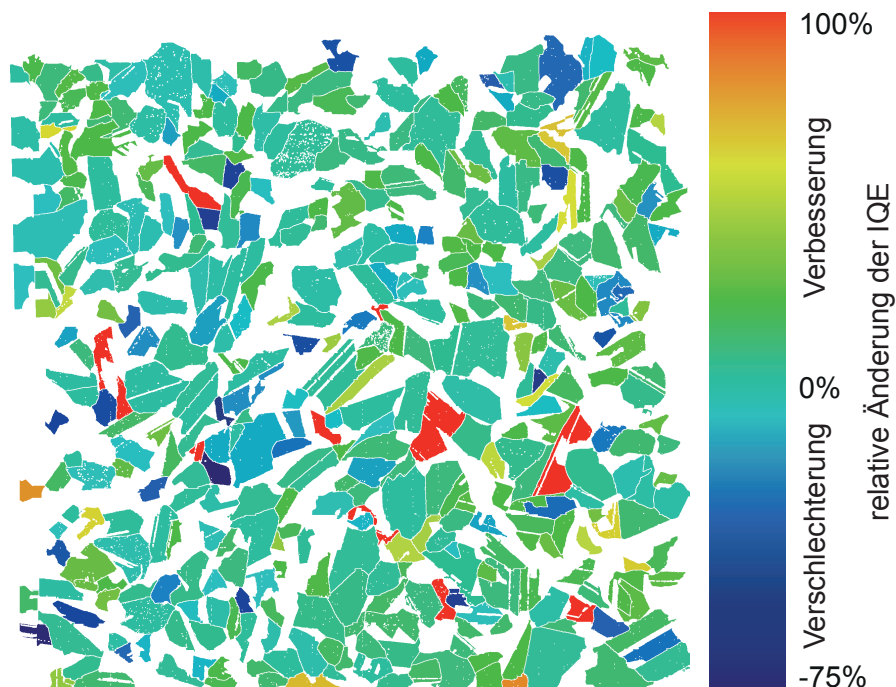


Abbildung 4.5: Die Änderungen der Körner visualisiert. Es sind die relativen Änderungen der IQE-Werte im Schwerpunkt der Körner aufgetragen. Blaue Bereiche zeigen eine negative Veränderung (Verschlechterung) während grüne bis rötliche Bereiche eine Verbesserung zeigen. Rote Bereiche stellen Verbesserungen über 100% dar. Die größte Verbesserung liegt bei 323% wohingegen die größte Verschlechterung bei -75% liegt. Die Körner, bei denen nur ein Plateauwert vorliegt, sind hier nicht angezeigt. Die Außenmaße der gezeigten Körner umschließen einen Bereich von $3,55 \text{ cm}^2$.

und Änderungen bestimmt und durch den Code aus Anhang A.8 `LabelFaerben` werden diese Werte in eine Datei geschrieben, die von Avizo geladen und dargestellt werden kann. So lassen sich die Änderungen der Körner gut darstellen und man sieht die Position der einzelnen Körner zueinander besser.

Um diese Werte weniger anfällig für lokale Messfehler zu machen, sind die Plateauwerte in einem Bereich um den Schwerpunkt bestimmt worden. Hierzu wurden die Werte innerhalb eines Quadrats mit einer Kantenlänge von 3 Pixeln um den Schwerpunkt herum gemittelt. Auch eine Mittelung über ein größeres Quadrat (Kantenlänge 5 oder 7 Pixel) ändert das Ergebnis nicht merklich.

Die in Abbildung 4.5 in rot zu sehenden großen Verbesserungen sind vor allem auf Messfehler zurückzuführen. Sind die Körner nicht konvex geformt, so kann es sein, dass der Schwerpunkt außerhalb des Kornes liegt. Wird jedoch am Schwerpunkt der Plateauwert bestimmt, so folgt daraus, dass dieser in der Nähe einer Korngrenze gemessen wird, wodurch sich solch große Verbesserungen erklären.

Für die anderen Änderungen lässt sich im Rahmen dieser Arbeit keine direkte Korrelation zu anderen Probenparametern finden. Ein Vergleich der Änderungen mit der Kornorientierung zeigt keine offensichtliche Korrelation. Mögliche Erklärungen für die

unterschiedlich ausgeprägten Änderungen, könnten in der Konzentration von interstitiellem Eisen liegen. Dieses ließe sich über eine Lebensdauerermessung bestimmen. Da hierzu die verwendeten Proben zerstört werden müssten, liegen diese Daten jedoch nicht vor. Die Auswirkung von interstitiellem Eisen sind in [8] untersucht worden. Des Weiteren könnte die Versetzungsdichte einen Einfluss auf die Änderung der Plateauwerte der Körner besitzen. Auch hier ergibt sich das Problem der notwendigen Zerstörung der Probe, weshalb auch hier die Messdaten nicht vorliegen und somit keine Korrelationen untersucht werden können.

Stellt man die IQE-Werte im Schwerpunkt der Körner als Boxplots dar, so erhält man die in Abbildung 4.6 dargestellte Grafik. Dort ist ebenfalls das Verhältnis der IQE-Werte nach der Passivierung zu den Werten vor der Passivierung dargestellt. Diese Abbildung besitzt eine logarithmische Skala, um den Wertebereich besser darzustellen.

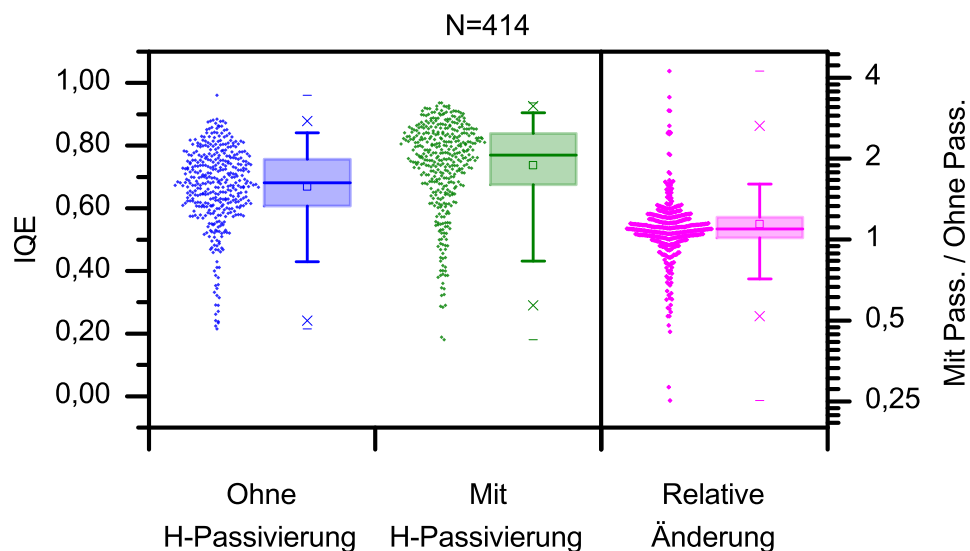


Abbildung 4.6: Die IQE-Werte im Schwerpunkt der Körner statistisch dargestellt. Im linken Teil sind die Plateauwerte der Körner gezeigt. Im rechten Bereich ist die Änderung der Plateauwerte als Verhältnis der Werte vor und nach der Wasserstoffpassivierung gezeigt. Aufgrund des großen Wertebereichs ist eine \log_2 -Skala gewählt. Alle Boxplots beschreiben dieselbe Probe mit einem Umfang von 414 Elementen.

Vergleicht man Abbildung 4.6 mit Abbildung 4.3, so fällt auf, dass die niedrigeren Werte in Abbildung 4.6 deutlich weniger vertreten sind, als in 4.3. Auch ändert sich der Median sowie der Mittelwert bei den IQE-Plateauwerten nur um 13% bzw. 10%, im Gegensatz zu den 35%, die in Abbildung 4.3 zu sehen sind. In Abbildung 4.6 ist ebenfalls gut zu sehen, dass ein Großteil der Plateauwerte (50%) einen leichten Zuwachs zwischen 1% und 20% besitzen. Die Plateauwerte verbessern sich also deutlich weniger als die Gesamtheit der Zelle. Die Korngrenzen müssen sich also deutlich stärker verbessern, da sonst die durchschnittliche Verbesserung um 35% nicht möglich wäre.

4.2.3 Auswirkung der H-Passivierung auf Korngrenzen

Im Folgenden wird die Auswirkung der Wasserstoffpassivierung auf die Korngrenzen untersucht. Hierzu werden die Korngrenzen in verschiedene Kategorien unterteilt, um zu überprüfen, ob es systematische Verhaltensweisen gibt. Die Kategorien werden so gewählt wie bereits bei der Betrachtung der Anteile der Korngrenzen in Kapitel 4.1 geschehen. Es bilden sich somit die Gruppen der $\Sigma 3$ -, $\Sigma 9$ - und $\Sigma 27b$ -Korngrenzen, sowie die restlichen Σ -Korngrenzen zusammengefasst. Des Weiteren bilden die Random Angle Korngrenzen eine Gruppe. Zur besseren Übersicht werden zusätzlich die Gesamtheit der Σ -Korngrenzen sowie die Gesamtheit aller untersuchten Korngrenzen angezeigt. Diese setzen sich jeweils aus den einzelnen Kategorien zusammen. Zu beachten ist hierbei, dass es sich bei den untersuchten Proben nicht um industrielles, multikristallines Material handelt, sondern dass multikristallines Float-Zone Material untersucht wird. Dieses Material ist sauberer als gegossenes multikristallines Silizium, jedoch auch feinkristalliner.

Die Kontrastwerte der einzelnen ausgewerteten Korngrenzen vor und nach der Passivierung werden aufgetragen, um die Änderungen der Aktivität der einzelnen Korngrenzentypen zu untersuchen. Dies ist in Abbildung 4.7 gezeigt. Mithilfe von Boxplots lassen sich die Verteilungen klarer und schneller erfassen. Zur besseren Einschätzbarkeit der Gewichtung der einzelnen Boxplots ist über den Boxplots der jeweilige Probenumfang N angegeben. Daran lässt sich auch gut erkennen, wie allgemein gültig der jeweilige Boxplot ist. Dabei ist zu beachten, dass die Verteilung der Korngrenzentypen nicht gleichmäßig ist, wie in Kapitel 4.1 beschrieben und in Abbildung 4.1 gezeigt ist.

In Grafik 4.7 ist gut zu sehen, wie stark sich die einzelnen Korngrenzen durch die Wasserstoffpassivierung verbessern. So nimmt der Median und Mittelwert vor der Passivierung mit steigender Σ -Zahl zu. Die Σ -Korngrenzen, die zusammengefasst sind, besitzen ebenfalls einen hohen Kontrastwert, der ungefähr auf Höhe der Kontrastwerte der Random Angle Grenzen ist. Diese besitzen vor der Passivierung ebenfalls einen sehr hohen Kontrastwert. Umso mehr zeigt sich der Effekt der Passivierung, da nach dieser der Kontrastwert bei allen Grenztypen stark abnimmt. So sind bei allen Typen hinterher mindestens die Hälfte der Werte bei 0, wie gut zu sehen ist, da der Median auf den Nulllinie liegt. Über 50% der ausgewerteten Korngrenzen sind somit nach der Wasserstoffpassivierung inaktiv. Wie in der Grafik ersichtlich, sind auch Grenztypen, die vor der Passivierung unterschiedlich aktiv waren, nach der Passivierung sehr ähnlich, was die Rekombinationsaktivität betrifft. So unterscheiden sich die einzelnen Boxplots nach der Passivierung nicht mehr stark voneinander. Die Passivierung ist somit bei unterschiedlichen Grenztypen unterschiedlich effektiv, allerdings ist das Verbesserungspotential bei Grenzen, die vorher bereits recht gut waren, auch nicht mehr so groß. Hier kann sich lediglich der gesamte Bereich verbessern. Dies ändert aber den Kontrastwert nicht stark,

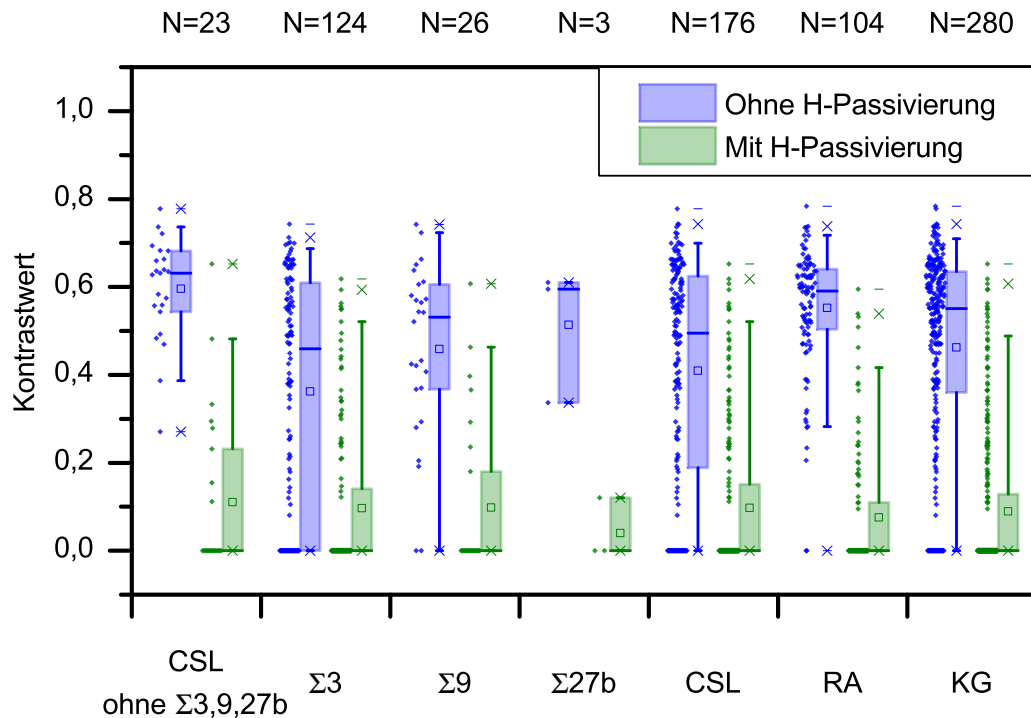


Abbildung 4.7: Die Kontrastwerte der Grenzen vor und nach der Passivierung nach Korngrenzentypen aufgeschlüsselt. Über den Boxplots ist der Umfang der jeweils dargestellten Probe angegeben. Wie gut zu erkennen ist, verringert sich der Kontrastwert durch die Wasserstoffpassivierung in allen Kategorien stark, wie auch in der Gesamtheit aller untersuchten Korngrenzen (KG) zu sehen ist. Sind die einzelnen Arten von Korngrenzen vor der Passivierung noch sehr unterschiedlich aktiv, so verkleinert sich dieser Unterschied durch die Passivierung deutlich.

da dieser das Verhältnis zwischen Aktivität der Korngrenze und Plateauwert des Korns beschreibt.

Es fällt auf, dass einige Grenzen bereits vor der Passivierung nicht aktiv sind und auch nach der Passivierung inaktiv bleiben. Filtert man diese Korngrenzen heraus, so sieht man das Verhalten der Korngrenzen, bei denen sich etwas ändert, besser. In Abbildung 4.8 sind deshalb gegenüber Abbildung 4.7 die Grenzen herausgefiltert, die vorher und nachher inaktiv sind.

Dort sieht man den Einfluss der Passivierung noch besser, da bei inaktiven Korngrenzen der Kontrastwert nicht mehr verbessert werden kann. Die Plateauwerte der angrenzenden Körner können jedoch trotzdem erhöht werden. Anhand des Unterschieds im angegebenen Probenumfang lässt sich der Anteil der vorher und nachher inaktiven Grenzen erkennen. So sind es bei den $\Sigma 3$ Korngrenzen recht viele, wohingegen es bei den Random Angle Grenzen nur knapp 2% sind. In diesen Grafiken ist klar ersichtlich, dass die Passivierung an den Korngrenzen stärker wirkt, als an den Körnern selbst. Dadurch verkleinert sich der Kontrastwert. Dies ist vermutlich darauf zurückzuführen, dass die Körner sauberer sind als die Korngrenzen. Die Verschiebung von Verunreinigungen vom

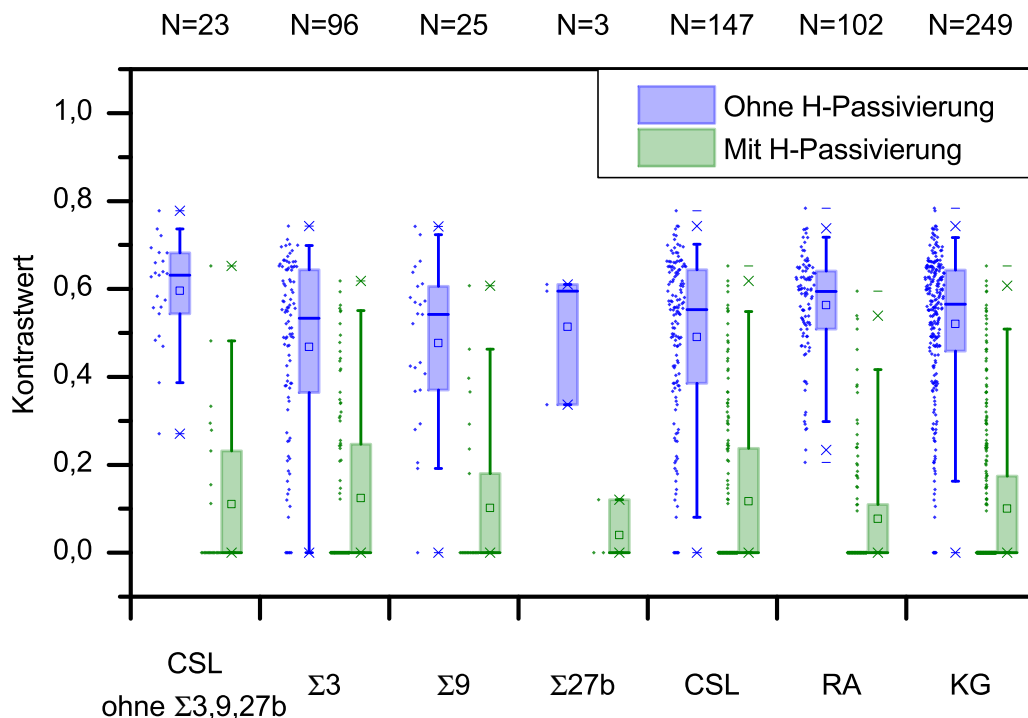


Abbildung 4.8: Die Kontrastwerte der Grenzen vor und nach der Passivierung nach Korngrenzentypen aufgeschlüsselt. In diesem Plot sind Grenzen, die vorher und nachher inaktiv waren nicht abgebildet. In dieser Grafik sieht man, dass die Korngrenzen, die vor der Passivierung aktiv sind, durch die Passivierung deutlich inaktiver werden. Dies ist auch gut daran zu erkennen, dass der Median bei allen Boxplots nach der Passivierung bei 0 liegt. Somit sind mindestens 50% der Korngrenzen nach der Passivierung inaktiv.

Korn in die Korngrenze wird *internes Gettern* genannt. Dies ist auch in [18] beschrieben. Dort wurde untersucht, wo sich Verunreinigungen in verschiedenen Materialien ablagern. Ergebnis der Untersuchung ist, dass sich Metalle wie Kupfer oder Eisen sehr stark an Korngrenzen ablagern. Das dort untersuchte Material wurde für die Untersuchung absichtlich verunreinigt. Jedoch tritt dieser Effekt vermutlich auch bei kleineren Konzentrationen auf, wie sie natürlich in mc-FZ vorkommen. Daher finden sich innerhalb der Körner wenig Rekombinationszentren, an denen Elektronen und Löcher wieder rekombinieren können und somit die elektrische Leistung der Zelle sinkt. An den Korngrenzen finden sich zwar auch verhältnismäßig wenig Verunreinigungen, verglichen mit gegossenem Material, jedoch ist die Art und Konzentration der Verunreinigungen sowohl im Korn, als auch an der Korngrenze nicht bestimmt. Geht man davon aus, dass die Aktivität der Korngrenzen nicht alleine auf Verunreinigungen zurückzuführen ist, so müssen die Korngrenzen selbst aktiv sein, sodass dort Elektron-Loch-Paare rekombinieren.

In [8] wurde unter anderem der Zusammenhang zwischen Korngrenzentypen und Lebensdauerkontrastwerten in multikristallinem Silizium (nicht mc-FZ) untersucht. Dort wurden die Korngrenzen in die Gruppen $\Sigma 3$, $\Sigma 9$, $\Sigma 27$, sowie *Random Angle* eingeteilt.

Hierbei zeigt sich ein ähnliches Bild, wie es sich auch in dieser Arbeit bei der Untersuchung von IQE-Kontrastwerten ergibt. So steigt auch dort der Kontrastwert mit steigendem Σ -Wert vor der Passivierung an, während die verschiedenen Korngrenzentypen nach der Passivierung einen ähnlichen Kontrastwert besitzen.

Diese Aktivität der Korngrenze könnte auch teilweise von ungesättigten Bindungen (sogenannten *dangling bonds*) herrühren. Dies sind Elektronen, die zu einem Siliziumatom gehören, allerdings durch die Unregelmäßigkeit der Korngrenze keinen Bindungspartner besitzen (in [4] anhand von amorphem Silizium erklärt). Durch die Passivierung werden diese ungesättigten Bindungen mit Wasserstoff abgesättigt (sie bilden eine Bindung mit dem Wasserstoff), weshalb sie keine Rekombinationszentren mehr darstellen. Dadurch steigt die interne Quanten Effizienz in der Nähe der Grenzen und somit auch der Kontrastwert, der aus den Schnitten bestimmt ist.

Jedoch wurde in [19] gezeigt, dass auch Verunreinigungen (im genannten Paper für Eisen und Kupfer untersucht) teilweise auf die Wasserstoffpassivierung reagieren. So werden Kupferpräzipitate durch die Wasserstoffpassivierung deutlich kleiner, weshalb die Korngrenze weniger dekoriert ist. Somit gibt es weniger Rekombinationszentren, was zu einer weniger rekombinationsaktiven Korngrenze führt. Des Weiteren ist in [20] anhand einiger Korngrenzen der Anteil an Metallpräzipitaten für verschiedene Korngrenzentypen bestimmt worden. Die Tendenz, die sich dort abzeichnet, passt sehr gut mit den Kontrastwerten vor der Passivierung überein. So steigt dort mit zunehmendem Σ -Wert der Präzipitatanteil an den Korngrenzen an. Auch in [7] wurde die Aktivität verschiedener Korngrenzentypen untersucht. Bei den wasserstoffpassivierten Proben zeigt sich dort ebenfalls das Bild, dass die Random Angle Grenzen sich sehr gut passivieren lassen. Auch sieht man dort, dass bei den nicht-passivierten Proben die Kontrastwerte mit zunehmendem Σ -Wert ebenfalls zunehmen. Die hier gewonnenen Ergebnisse passen gut zu den zitierten Untersuchungen. Gemeinsam ergeben sie ein stimmiges Bild.

In den Grafiken bisher ist das statistische Verhalten der Korngrenzen gezeigt. Die wirkliche Änderung einzelner Korngrenzen kann dort hingegen nicht erfasst werden. Aus diesem Grund sind in Abbildung 4.9 die Änderungen der einzelnen Korngrenzen gezeigt.

Es werden hier verschiedene Kategorien unterschieden. Zum einen gibt es die Korngrenzen, die vorher und nachher inaktiv sind. Diese sind in der Abbildung mit dem schwarzen Balken ganz unten dargestellt. Der darauf folgende rote Balken zeigt den Anteil der Korngrenzen, die durch die Wasserstoffpassivierung vom LBIC-Bild verschwinden, also inaktiv werden. Die Abschnitte darüber unterscheiden sich im Grad der Verbesserung durch die Passivierung. So gibt es die Gruppe von Grenzen, die sich um bis zu 20% verbessert, die Gruppe, die sich zwischen 20% und 50% verbessert und die Gruppe, die sich um mehr als 50% verbessert, aber nicht durch die Passivierung inaktiv wird. Des Weiteren gibt es einen sehr kleinen Anteil von Grenzen, die sich durch die Passivierung verschlechtern, beziehungsweise erst durch die Passivierung aktiviert werden. Dieses Verhalten verblüfft

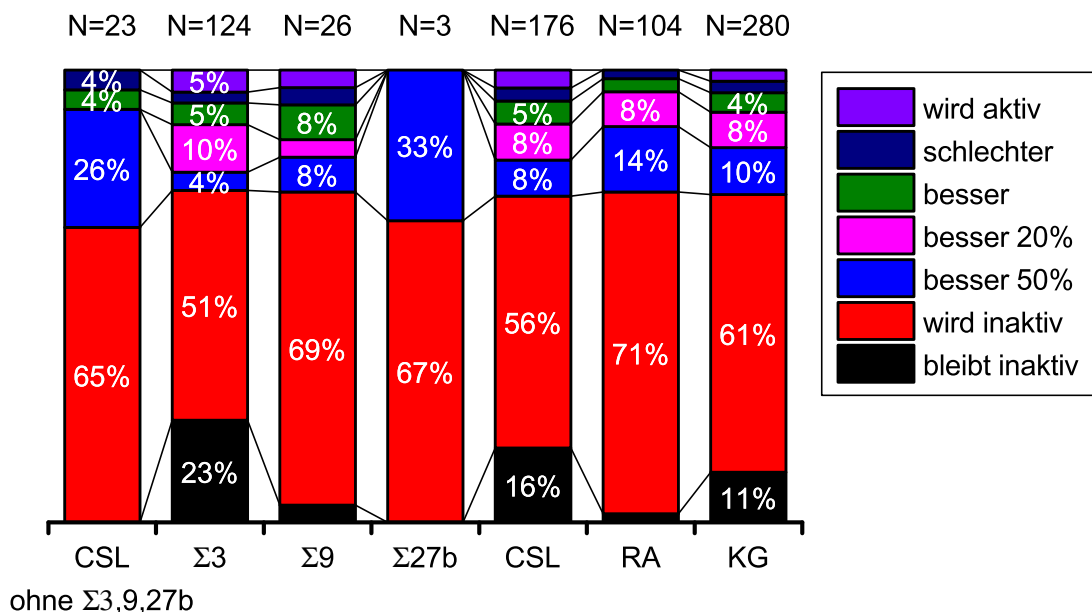


Abbildung 4.9: Die Veränderung der einzelnen Profile durch die Wasserstoff-Passivierung. Werte kleiner 4% sind aus Gründen der Lesbarkeit nicht angezeigt. Die Veränderung der Grenzen ist in die Kategorien inaktiv (ist vorher und nachher inaktiv), wird inaktiv (ist vorher aktiv, nachher inaktiv), besser 50% (Verbessert sich um mehr als 50%), besser 20% (Verbessert sich um mehr als 20%), besser (Verbessert sich um höchstens 20%), schlechter (Verschlechtert sich durch die Passivierung) und wird aktiv (Ist vorher inaktiv, nachher aktiv). Es zeigt sich bei allen Grenztypen, dass nach der Passivierung ca. 70% der Grenzen inaktiv sind.

und entpuppt sich bei manueller Kontrolle der Messergebnisse in allen aufgetretenen Fällen als Auswertungsfehler. Dort wurde die aktive Korngrenze auf der nicht-passivierten Probe nicht erkannt. Dies ist teilweise auf einen Fehler in der automatisierten Auswertung, teilweise auf einen Fehler in der Profilentnahme zurückzuführen.

Ansonsten sieht man in dieser Grafik gut, dass der Anteil der inaktiven Grenzen nach der Passivierung bei über 70% liegt. Die einzige Ausnahme bilden hier die Sigma Korngrenzen, die nicht $\Sigma 3$ oder $\Sigma 9$ sind. Dort liegt der Anteil mit ca. 65% etwas niedriger. Die Wasserstoffpassivierung ist somit bei diesen Proben unabhängig von dem Korngrenzentyp sehr effektiv, was darauf zurückzuführen ist, dass es an allen Korngrenzen ungesättigte Bindungen gibt, die bei der Passivierung mit Wasserstoff abgesättigt werden.

Kapitel 5

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde das elektrische Verhalten verschiedener Arten von Korngrenzen untersucht. Hierzu wurden an relativ sauberem multikristallinem Material (mc-FZ) IQE-Werte aus LBIC-Aufnahmen mit EBSD-Aufnahmen verglichen. Auf diese Weise wurden Kontrastwerte für Korngrenzen verschiedener Typen bestimmt. Diese Auswertung wurde für zwei Nachbarproben durchgeführt, von denen eine wasserstoffpassiviert ist. Auf diese Weise konnte der Einfluss der Wasserstoffpassivierung auf die verschiedenen Korngrenzen untersucht werden.

Hierzu wurde ein automatisiertes Auswertungssystem entwickelt. Damit dieses die entnommenen Profile korrekt auswertet, müssen diese gewisse Bedingungen erfüllen, was nur auf ca. 10% der Profile zutrifft. Eine Auswertung von Hand wäre jedoch sehr aufwändig, weshalb das System zur Auswertung entwickelt werden sollte. Die Entwicklung dieses Systems legt zusätzlich eine Grundlage, auf der in späteren Arbeiten aufgebaut werden kann. So kann dieses System erweitert werden, um mehr Parameter vieler Korngrenzen zu bestimmen und dadurch mehr mögliche Korrelationen zu untersuchen. Somit kann die Lücke zu dem Ansatz wenige Korngrenzen sehr genau zu vermessen langsam geschlossen werden, wenn auch automatisiert viele Parameter bestimmt werden können. Des Weiteren ist dieses Programm ohne Änderungen auf weitere Messungen von anderen multikristallinen Proben anwendbar. Somit kann der Zusammenhang zwischen Materialeigenschaften oder Herstellungsmethoden und elektrischen Eigenschaften schneller und einfacher untersucht werden. Auch ist es möglich, statt IQE-Messungen andere Messmethoden zu nutzen, um andere Eigenschaften zu bestimmen.

Bei der Auswertung der Messungen wurde festgestellt, dass der Kontrastwert der Korngrenzen mit zunehmendem Σ -Wert steigt. Auch sind die Random Angle Grenzen vor der Passivierung sehr aktiv. Durch die Wasserstoffpassivierung werden die Kontrastwerte der Korngrenzen jedoch alle sehr niedrig und unterscheiden sich nicht mehr stark

voneinander. Eine andere Arbeit, in der Kontrastwerte aus Lebensdauermessungen bestimmt wurden ([8]), zeichnet ein sehr ähnliches Bild. Auch zeigt eine Untersuchung von Kontrastwerten verschiedener Korngrenzentypen mithilfe von EBIC-Messungen ([7]) die gleiche Tendenz. Dort wurde unter anderem der Einfluss von Wasserstoffpassivierung untersucht. Diese Ergebnisse decken sich mit den in dieser Arbeit gewonnenen Ergebnissen. Des Weiteren wurde der Einfluss der Wasserstoffpassivierung auf die Körner untersucht. So verbessern sich die IQE-Plateauwerte von 50% der Körner um 1% bis 20%. Allerdings gab es bei dieser Untersuchung auch Körner, die sich teilweise deutlich verschlechterten (um bis zu 75%). Für dieses Verhalten konnte in der Arbeit keine eindeutige Erklärung gefunden werden. Eine Korrelation mit der Größe der Körner, oder der Kornorientierung wurde nicht gefunden. Mögliche Erklärungen sind die Konzentration von interstitiellem Eisen oder die Versetzungsdichte der Körner. Von beiden Parametern liegen leider keine Werte vor und konnten nicht gemessen werden, da dazu die Probe hätte zerstört werden müssen.

Weitere Untersuchungen des Verhaltens von multikristallinem Silizium vor und nach Wasserstoffpassivierung sind interessant, da so beispielsweise der Einfluss verschiedener Konzentrationen von Unreinheiten auf die Auswirkungen der Passivierung festgestellt werden könnte. Diese Auswirkungen könnten sowohl für die Korngrenzen, als auch für die Körner und die Entwicklung der Plateauwerte untersucht werden.

Anhang A

Matlab Code

In diesem Anhang sind alle verwendeten, selbst geschriebenen Matlabcodes aufgelistet.

A.1 Finger Entfernen

Diese Funktion berechnet Gradienten an Stellen, wo sonst Finger auf LBIC-Bildern waren. Dadurch können die Bilder besser analysiert werden.

Diese Funktion wird in Kapitel 3.3.1 verwendet.

```
1 function [ ohneFinger ] = FingerWeg_1( Bild, Startposition )
2
3 BreiteFinger=11; %Breite der Finger (als konstant angenommen)
4 HoheStartposition=30; %Y-Wert der Startpositionen der Finger
5 NeigungFingerPixel=7; %Anzahl Pixel, die die Finger unten weiter rechts sind, als
   oben
6 HoheEndposition=1966; %Y-Wert der Endposition der Finger (Daraus errechnet sich
   die Höhe, auf die die Neigung verteilt werden muss)
7 NeigungFinger=NeigungFingerPixel/(HoheEndposition-HoheStartposition); %Neigung
   der Finger
8
9 AnzFinger=size(Startposition,1); %Anzahl der Reihen der Variablen "Startposition"
10
11 ohneFinger=ones(size(Bild)); %Das Ergebnis-Bild wird erstellt und mit "1" gefüllt
12 ohneFinger=-ohneFinger; %und aus der "1" wird eine "-1" gemacht
13
14 for i=1:AnzFinger %Es werden die Stellen, an denen Finger sind, neu gefüllt
15     for j=HoheStartposition:HoheEndposition
16         xl=round(Startposition(i)+NeigungFinger*(j-HoheStartposition)-(
           BreiteFinger/2)); %Position des linken Rands des Fingers (auf ganze Zahlen
           gerundet)
17         xr=round(Startposition(i)+NeigungFinger*(j-HoheStartposition)+(
           BreiteFinger/2)); %Position des rechten Rands des Fingers (auf ganze Zahlen
           gerundet)
```

```
18     WertLinks=double(0.5*Bild(j,xl)+0.25*Bild(j-1,xl)+0.25*Bild(j+1,xl));
19     %Der Wert links errechnet sich zur Hälfte aus dem Wert des linken
20     %Pixels und zu je 25% aus den Werten der Pixel darüber und darunter
21     %somit haben Fehler der angrenzenden Pixel keine so großen
22     %Auswirkungen
23     WertRechts=double(0.5*Bild(j,xr)+0.25*Bild(j-1,xr)+0.25*Bild(j+1,xr));
24     %Analog zu WertLinks, allerdings mit einer geänderten x-Komponente
25     for k=xl+1:xr-1
26         ohneFinger(j,k)=round(WertLinks+((k-xl)/(xr-xl)*(WertRechts-WertLinks
27         )));
28     end %k=xl+1:xr-1
29 end %j=HoheStartposition:HoheEndposition
30
31
32 %Anschließend werden alle Pixel, die nicht Finger waren, übernommen
33 for i=1:size(Bild,1) %Y-Komponente
34     for j=1:size(Bild,2) %X-Komponente
35         if ohneFinger(i,j)==-1
36             ohneFinger(i,j)=Bild(i,j);
37             %Falls die Zelle nicht berechnet wurde (weil dort ein Finger
38             %war) wird sie einfach aus dem alten Bild übernommen
39         end %if ohneFinger(i,j)==-1
40     end %X-Komponente
41 end %Y-Komponente
42
43
44
45 end
```

A.2 Linien Erstellen

Dieses Skript ist dazu gemacht, eine beliebige Anzahl von Punkten auf einer direkten Verbindungslinie zwischen zwei Endpunkten zu erzeugen. Hierzu werden die Endpunkte aus Avizo exportiert und als „Input“ bezeichnet. Dieses Skript erzeugt nun eine Anzahl „AnzPunkte“, die genau auf der Verbindungslinie zwischen den beiden Endpunkten liegen und fasst diese Punkte (inklusive der Endpunkte) als eine Linie zusammen. Diese Liste (Set) von Linien wird dann in eine Datei geschrieben, sodass sie mit Avizo importiert werden kann. Dort ist diese Liste durch ein „LineSet“-Modul dargestellt. Entlang dieser Linien (an den Punkten) können dann bspw. Werte aufgenommen werden, diese werden in eine zusätzliche Spalte eingetragen und stehen somit direkt bei den Punkten.

Das Skript wird in Kapitel 3.3.4 genutzt.

```
1 %LINIENERSTELLEN Erzeugt Zwischenpunkte zwischen zwei Endpunkten
2
3 AnzPunkte=51; %Inklusive der Endpunkte; Bei einer ungeraden Anzahl wird auch der
  Mittelpunkt (Schwerpunkt des Objekts) durch einen Punkt dargestellt.
```

```

4  %Name der Ausgabedatei muss noch unten im Befehl "fopen" geändert werden.
5
6  %%Daten importieren: muss vorher separat gemacht werden
7
8  if(length(StartPunkt_X)~=length(StartPunkt_Y)||length(StartPunkt_X)~=length(
    EndPunkt_X)||length(StartPunkt_X)~=length(EndPunkt_Y))
9      disp('FEHLER: Die Spalten sind unterschiedlich lang.')
10     return;
11 end
12
13 AnzLinien=length(StartPunkt_X); %Anzahl der zu erstellenden Linien
14
15 Punkte=zeros(AnzLinien*AnzPunkte,3); %Koordinaten in x-y-z-Richtung der einzelnen
    Punkte
16
17 for i=1:AnzLinien
18     for t=0:AnzPunkte-1
19         Punkte((i-1)*AnzPunkte+t+1,1)=(t/(AnzPunkte-1)*(EndPunkt_X(i)-
    StartPunkt_X(i))+StartPunkt_X(i)); %X-Koordinate der Zwischenpunkte
20         Punkte((i-1)*AnzPunkte+t+1,2)=(t/(AnzPunkte-1)*(EndPunkt_Y(i)-
    StartPunkt_Y(i))+StartPunkt_Y(i)); %Y-Koordinate der Zwischenpunkte
21         Punkte((i-1)*AnzPunkte+t+1,3)=indeximage(i)-1; %Z-Koordinate der
    Zwischenpunkte
22
23     end
24 end
25
26
27 fileID = fopen('linien.am','w'); %Name der Datei und die Berechtigung zu
    schreiben (Write)
28 fprintf(fileID,'# Avizo 3D ASCII 2.0 \n');
29 fprintf(fileID,'define Lines %d\n',AnzLinien*(AnzPunkte+1));
30 fprintf(fileID,'define Vertices %d\n',AnzPunkte*AnzLinien);
31 fprintf(fileID,'Parameters {\nContentType "HxLineSet"\n} \n');
32 fprintf(fileID,'Vertices { float[3] Coordinates } = @1 \n');
33 fprintf(fileID,'Vertices { float Data } = @2 \n');
34 fprintf(fileID,'Lines { int LineIdx } = @3 \n\n');
35 fprintf(fileID,'@1 # %d xyz coordinates \n',AnzPunkte*AnzLinien);
36 fprintf(fileID,'%f %f %f\n',Punkte. ');
37 fprintf(fileID,'\n@2 # %d data values \n',AnzPunkte*AnzLinien);
38 fprintf(fileID,'%d ',ones(AnzPunkte*AnzLinien,1));
39 fprintf(fileID,'\n\n@3 # %d indices, defining %d line segments\n',(AnzPunkte+1)*
    AnzLinien,AnzLinien);
40
41 for i=1:AnzLinien
42     for t=0:AnzPunkte-1
43         fprintf(fileID,'%d ',(i-1)*AnzPunkte+t);
44     end
45     fprintf(fileID,'-1\n');
46 end
47
48 fclose(fileID);
49
50 clear i t AnzLinien AnzPunkte fileID ans Punkte

```

A.3 Profile importieren

Diese Funktion dient dazu, die von Avizo erstellten Profile in Matlab zu importieren, um sie auswerten zu können. In der CSV-Datei sind mehrere Profile gespeichert, die sich nacheinander in der selben Datei befinden. Diese Profile werden in verschiedene Ebenen des output-array gespeichert, sodass jede Ebene (dritte Koordinatenzahl) einem Profil entspricht.

Die Funktion wird in Kapitel 3.3.5 eingesetzt.

```
1 function [ output ] = ProfilImport_2(dateiname,trenner,lange)
2 %PROFILIMPORT Diese Funktion soll Daten aus einer csv-Datei importieren
3
4 import=csvread(dateiname);
5 anzahlprofile=sum(import(:,1)==0); %Anzahl der Profile ist die Anzahl, die die
   Profile anfangen (mit 0)
6 % Diese Methode funktioniert nicht immer. Dann ist eine manuelle Eingabe
7 % der Anzahl Profile notwendig. Bspw:
8 %anzahlprofile=3619;
9
10 output=zeros(lange,2,anzahlprofile);
11 for i=1:anzahlprofile
12     bereich=sprintf('A%d..B%d',(i-1)*(lange+1)+1,(i-1)*(lange+1)+lange);
13     output(:,:,i)=dlmread(dateiname,trenner,bereich);
14
15     time=clock; %Überträgt die aktuelle Uhrzeit (Jahr,Monat,Tag,Stunde,Minute,
   Sekunde) in die Variable "time"
16     fprintf('Bereits %d Prozent bearbeitet (Nr. %d von %d) um %02d:%02d:%02d\n',
   floor(i/anzahlprofile*100),i,anzahlprofile,time(4),time(5),floor(time(6)))
17 end
18
19 end
```

A.4 Kontrastwerte bestimmen

Diese Funktion ist das eigentliche Herzstück der Auswertung. Von ihr werden einige andere Funktionen aufgerufen und die Profile automatisch ausgewertet.

Bei dieser Funktion wird die Ableitung der Profile gebildet und in dieser Ableitung nach Stellen gesucht, an denen die Ableitung von negativ nach positiv wechselt. Diese Stellen müssen Minima sein. Alle so gefundenen Minima werden in eine Liste geschrieben und das tiefste Minimum des Profils als Ergebnis angesehen. Anschließend wird im Profil nach flachen Stellen (kleine Ableitung) gesucht und der höchste Punkt der flachen Stellen als Plateau-wert angesehen, sofern im Profil keine deutlich höheren Punkte zu finden sind. Diese Funktion wird ebenfalls in Kapitel 3.3.5 aufgerufen.

```

1 function [ ergebnis, Statistik ] = MinMax_4( input )
2 %MINMAX Diese Funktion sucht nach Minima und Maxima in den Profilen und
3 %berechnet daraus den Kontrastwert
4
5 Anz=size(input,3); %Anzahl der Profile
6 length=size(input,1); %Anzahl der Punkte pro Profil
7 grenze=0.2; %Grenze der Steigung (Betrag), ab der ein Punkt zum Bestimmen des
   Plateau-Werts betrachtet wird
8 AbstandZumMin=3; %Abstand vom Minimum (In Punkten) ab dem geschaut wird, ob die
   Steigung kleiner als "grenze" ist, damit nicht die flache Stelle des Minimums
   betrachtet wird.
9 AbstandPlateauMax=10; %Abstand der zwischen dem Plateau-Wert und dem Maximum des
   Profils bestehen darf, bevor das Profil aussortiert wird
10 fingergefunden=zeros(Anz,1); %Variable, um zu speichern, ob das Profil einen
   Finger enthält
11 flach=zeros(Anz,1); %Variable, um zu speichern, ob das Profil zu flach für eine
   GB ist
12
13
14 Statistik=[0 0 0 0 0 0 0]; %Zähler für verschiedene Fälle, um zu sehen, wie die
   Verteilung des Vorgehen mit den Profilen ist
15 % Erste Zahl: Null-Profile
16 % Zweite Zahl: flache Profile; Kontrastwert=0
17 % Dritte Zahl: Profile die bestimmbar sind; Kontrastwert !=0
18 % Vierte Zahl: Plateauwert nicht bestimmbar
19 % Fünfte Zahl: Maximum viel höher als Plateauwert
20 % Sechste Zahl: Es wurde ein Finger gefunden und das Profil deshalb aussortiert
21 % Siebte Zahl: Kein flaches Profil und kein Minimum gefunden
22
23
24 minima_profil=zeros(Anz,2); %Eine Liste mit den Minima der Profile
25 maxima_profil=zeros(Anz,2); %Eine Liste mit den Maxima der Profile
26 kontrast=ones(Anz,1); %Eine Liste mit den Kontrastwerten der Profile
27 KontrastBestimmen=zeros(Anz,1); %Eine Liste, in der vermerkt wird, ob dieses
   Profil zu fitten ist.
28 plateau=zeros(Anz,1); %Eine Liste, die die Plateau-Werte der Profile enthalten
   soll
29
30 Ableitung=Ableiten(input); %Die Ableitung der Profile
31
32
33 for i=1:Anz %Schleife fürs Minima des Profils suchen
34     if sum(input(:,2,i)<=10)>0.2*size(input,1)
35         minima_profil(i,:)=-1;
36         maxima_profil(i,:)=-1;
37         kontrast(i,1)=-1;
38         %Falls im Profil mehr als 20% der Werte unter 10 sind (kommen nur in
   Busbars etc vor), wird der Fit nicht gemacht,
39         %sondern auf -1 gesetzt, damit er hinterher aussortiert wird.
40         Statistik(1)=Statistik(1)+1;
41
42     else

```

```
43     [minima_profil(i,1),minima_profil(i,2),fingergefunden(i),flach(i)]=
minimumprofil_4(input(:, :, i)); %Bestimmen des tiefsten Punkts des Profils und
    Übergabe in die Tabelle "Minima"
44     %Der erste Wert, der von der Funktion minimumprofil zurückgegeben wird,
    ist
45     %die Position (index) des Minimums, der zweite Wert ist die Höhe des
46     %Minimums
47
48     [maxima_profil(i,2),maxima_profil(i,1)]=max(input(:, 2, i)); %Bestimmen des
    höchsten Punkts des Profils und übergabe in die Tabelle "Maxima"
49
50     if fingergefunden(i)==1
51         kontrast(i,1)=-1;
52         Statistik(6)=Statistik(6)+1;
53     elseif flach(i)==1
54         kontrast(i,1)=0; %Da da Profil flach ist, wird der Kontrastwert auf 0
    gesetzt
55         Statistik(2)=Statistik(2)+1;
56     elseif minima_profil(i,2)==-1
57         kontrast(i,1)=-1; %Da kein Minimum gefunden wurde, das Profil jedoch
    nicht flach ist, wird der Kontrastwert auf -1 gesetzt
58         Statistik(7)=Statistik(7)+1;
59     else
60         %Da ein Minimum innerhalb des Profils (nicht an den Grenzen)
61         %vorliegt, wird der Plateauwert bestimmt
62         KontrastBestimmen(i,1)=1;
63     end %if minima nahe am Rand
64
65     end %if any(input(:, 2, i)==0)
66
67 end %Schleife fürs Minima des Profils suchen
68
69 for i=1:Anz %Schleife fürs Bestimmen des Plateaus
70     if KontrastBestimmen(i,1)==1
71         Ableitung(max(minima_profil(i,1)-AbstandZumMin,1):min(minima_profil(i,1)+
    AbstandZumMin,length),2,i)=grenze+1;
72         %Die Werte der Steigung um das Minimum werden über den Grenzwert
73         %gesetzt, damit sie später nicht mit ausgewertet werden
74         %Damit keine Fehler durch Zugriff auf nicht existierende Zellen
75         %entstehen (bspw. Minima_Profil=2 und AbstandZumMin=3, dann würde
76         %die Funktion auf Zelle -1 zugreifen wollen, die es nicht gibt),
77         %sind die max(...,1) und min(...,length) eingefügt
78
79         Ableitung(1,2,i)=grenze+1;
80         %Der erste Wert wird nicht berechnet und ist deshalb immer "0",
81         %weshalb er immer flacher als die Grenze wäre und somit oftmals
82         %als Plateau-Wert angenommen würde.
83
84         if any(abs(Ableitung(:, 2, i))<grenze) %Falls mindestens eine Ableitung
    kleiner als der Grenzwert ist, wird der Kontrastwert berechnet
85             plateau(i,1)=max(input(:, 2, i).*(abs(Ableitung(:, 2, i))<grenze));
86             %Der Plateau-Wert wird als der größte Wert, der in einem
87             %genügend flachen Areal ist, angenommen
88
89             if plateau(i)<maxima_profil(i,2)-AbstandPlateauMax
```

```

90         kontrast(i)=-1;
91         %Da das Plateau scheinbar deutlich niedriger ist, als Teile
92         %des Profils, wird es verworfen
93         Statistik(5)=Statistik(5)+1;
94     else
95         kontrast(i,1)=(plateau(i)-minima_profil(i,2))/plateau(i);
96         Statistik(3)=Statistik(3)+1;
97     end
98 else
99     plateau(i)=-1;
100    kontrast(i,1)=-1;
101    %Da kein Plateau bestimmt werden konnte, wird der Kontrastwert
102    %auf "-1" gesetzt (Fehler)
103    Statistik(4)=Statistik(4)+1;
104 end %Falls eine Ableitung kleiner als der Grenzwert ist
105
106 end %if KontrastBestimmen==1
107
108 end %Schleife KontrastBestimmen
109
110
111 ergebnis=zeros(Anz,17);
112 %Eine Liste mit allen Ergebnissen der Profile (minima des Profils(14-15),
113 %Plateau (3), kontrastwerte(13))
114
115 ergebnis(:,3)=plateau(:);
116 ergebnis(:,13)=kontrast(:,1);
117 ergebnis(:,14:15)=minima_profil(:,:);
118
119 end %Funktion

```

A.5 Minimum der Profile bestimmen

Diese Funktion ist eine ausgelagerte Funktion, die von der Funktion `MinMax_4` aufgerufen wird. Somit wird auch diese Funktion in Kapitel 3.3.5 verwendet. Die Funktion `MinMax_4` ist in Abschnitt A.4 zu sehen.

Diese Funktion sucht das tiefste Minimum eines Profils. Hierzu wird die Ableitung des Profils gebildet und dort nach einem Vorzeichenwechsel von „-“ nach „+“ gesucht. Diese Funktion basiert auf `Minimumprofil_2` (nicht `Minimumprofil_3`), da die Verbesserungen in Version 3 sich auf das Erkennen und Ausschließen von Fingern konzentriert haben, was nicht nötig ist, wenn diese im Vorfeld wegetuschiert wurden.

```

1 function [ stelle, hoehe, finger, flach] = minimumprofil_4( profil )
2 %MINIMUMPROFIL Diese Funktion sucht das tiefste Minimum eines Profils
3
4 Abstand=2; %Abstand für den der Schwellwert gilt
5 schwellwert=30; %Schwellwert, den die Punkte im "Abstand" neben dem Minimum
   höchstens höher sein müssen

```

```
6 % Damit werden Minima, die nur durch die Finger kommen, herausgefiltert.
7 untereProzent=15; %Das Minimum muss zu den 10 Prozent niedrigsten Punkten gehören
8 untergrenze=10; %Wert den der tiefste Punkt des Profils höchstens tiefer sein
   darf, als das Minimum
9 Gesamthöhe=20; %Wenn das gesamte Profil nicht höher (Max-Min) als "Gesamthöhe"
   ist, wird es aussortiert, da dort kein nennenswerter Dip sein kann
10 finger=0; %Variable, um anzugeben, ob es sich um ein Minimum handelt, oder es
   aussortiert wurde (bspw. Finger, flache Profile)
11 flach=0; %variable, um anzugeben, ob das Profil flacher als "Gesamthöhe" ist
12
13 Ableitung=Ableiten(profil); %Erste Ableitung
14
15 lokaleMinima=[0 -1]; %Die Variable "lokaleMinima" erstellen
16
17 j=1; %Zähler für lokale Minima
18
19 for i=1+Abstand:size(profil,1)-Abstand
20     if Ableitung(i,2)<0 && Ableitung(i+1,2)>0
21         % Wenn die Steigung vorher negativ war und nachher positiv ist
22             if profil(i-Abstand,2)-profil(i,2)<schwellwert && profil(i+Abstand,2)-
   profil(i,2)<schwellwert
23                 % Wenn die Punkte im "Abstand" um höchstens "Schwellwert" höher
24                 % sind als das potentielle Minimum (mindestens auf einer Seite)
25                 if profil(i-Abstand,2)-profil(i,2)>0 && profil(i+Abstand,2)-profil(i
   ,2)>0
26                     % Wenn die Punkte im "Abstand" um höchstens "Schwellwert" höher
27                     % sind als das potentielle Minimum (mindestens auf einer Seite)
28                     if sum(profil(:,2)<=profil(i,2))<(untereProzent/100*size(profil
   ,1))
29                         %Das Minimum muss zu den untersten 10% des Profils gehören (in
30                         %Bezug auf Punkte, nicht Absoluthöhe)
31                         if profil(i,2)-min(profil(:,2))<untergrenze
32                             lokaleMinima(j,1)=i; %Index des Minimums
33                             lokaleMinima(j,2)=profil(i,2); %Höhe des Minimums
34                             j=j+1; %Zähler um eins erhöhen
35                         end %if (Abstand zur Untergrenze des Profils)
36                     end %if (untere X-Prozent)
37                 end %if (Nachbarn-Änderung größer 0)
38             else
39                 finger=1;%Finger wird auf 1 gesetzt, damit das Profil später
   aussortiert wird
40             end %inneres if (Nachbarn-Änderung kleiner Schwellwert)
41         end %äusseres if (Ableitungen)
42     end %For-Schleife
43
44     if max(profil(:,2))-min(profil(:,2))<Gesamthöhe
45         flach=1;
46     end
47     %Ist das Profil zu flach, kann kein wirklicher Dip drin sein, weshalb
48     %eventuell gefundene überschrieben (gelöscht) werden, damit "Kein Dip"
49     %zurückgegeben wird
50
51
52 [hoehe,index]=min(lokalMinima(:,2)); %Das tiefste Minimum des Profils wird
   übernommen
```

```

53 stelle=lokaleMinima(index,1); %Die Stelle im Profil, an der das Minimum
    angenommen wird
54
55 end

```

A.6 Ableiten eines Profils

Diese Funktion ist ebenfalls eine Hilfsfunktion, welche die recht einfache Arbeit der Bildung von Ableitungen übernimmt. Hierbei werden Sekanten zwischen den einzelnen Messpunkten benutzt. Sie wird ebenfalls in Kapitel 3.3.5 genutzt.

Die Funktion berechnet die Differenz zwischen den einzelnen Y-Werten und teilt diesen durch den X-Abstand, sodass die Steigung berechnet wird. Die Ableitung ist dementsprechend nicht glatt (2. Ableitung ist nicht stetig).

```

1 function [ output ] = Ableiten( input )
2 %ABLEITEN Diese Funktion leitet Profile ab
3
4 AnzProf=size(input,3); %Anzahl der Profile
5 length=size(input,1); %Länge der Profile
6
7 output=zeros(size(input)); %Der Output hat die gleichen Abmessungen wie der Input
8
9 for i=1:AnzProf %Durchlauf für jedes Profil
10     for j=2:length %Da die Steigung immer zum vorherigen Punkt berechnet wird,
        wird bei Punkt 2 angefangen
11         output(j,1,i)=input(j,1,i); %Die Position (index) des Endpunktes des
            Streckenabschnitts wird in die erste Spalte des Outputs geschrieben
12         output(j,2,i)=(input(j,2,i)-input(j-1,2,i))/(input(j,1,i)-input(j-1,1,i))
            ; %Die Steigung (Y1-Y2)/(X1-X2) wird in die 2. Spalte des Outputs geschrieben
13     end %j=2:length
14 end %i=1:AnzProf
15
16
17 end

```

A.7 Bestimmen des Plateauwerts der Körner und Veränderung derselben

Diese Funktion vergleicht die Helligkeitswerte des gleichen Punkts in verschiedenen Bildern miteinander. Diese Punkte sind durch die X- und Y-Werte gegeben und werden über mehrere Pixel gemittelt, um ein besseres Ergebnis zu erzielen. Diese Funktion wird verwendet, um die Ergebnisse für Kapitel 4.2.2 zu erstellen.

```
1 function [ ergebnis ] = Kornanalyse_2( X_Werte, Y_Werte, Bild1, Bild2, Anzahl )
2 %KORNANALYSE Diese Funktion vergleicht die Helligkeitswerte an verschiedenen
3 %Punkten in zwei Bildern miteinander
4
5 lange=length(X_Werte);
6
7 if(length(X_Werte)~=length(Y_Werte))
8     disp('FEHLER: Die Schwerpunkt-Listen sind unterschiedlich lang.')
9     return;
10 end
11
12 if(size(Bild1)~=size(Bild2))
13     disp('FEHLER: Die Bilder sind unterschiedlich groß.')
14     return;
15 end
16
17 ergebnis=zeros(lange,5);
18
19 for i=1:lange
20     ergebnis(i,1)=X_Werte(i); %X-Position des Punktes
21     ergebnis(i,2)=Y_Werte(i); %Y-Position des Punktes
22
23     s=0; %Summe der Werte der Umgebungspixel
24     a=0; %Anzahl der Pixel, die addiert werden
25     for k=-Anzahl:Anzahl
26         for l=-Anzahl:Anzahl
27             if Bild1(round(Y_Werte(i))+k,round(X_Werte(i))+l)>20;
28                 s=s+uint32(Bild1(round(Y_Werte(i))+k,round(X_Werte(i))+l));
29                 a=a+1;
30             end
31         end
32     end
33
34     %Wenn a=0 gilt, wird das Ergebnis auf "0" gesetzt, andernfalls wird die
35     %Summe der Pixel durch die Anzahl der Pixel geteilt, um einen
36     %Mittelwert zu erhalten.
37     if a==0
38         ergebnis(i,3)=0;
39     else
40         ergebnis(i,3)=double(s)/double(a);
41     end
42
43
44     s=0; %Summe der Werte der Umgebungspixel
45     a=0; %Anzahl der Pixel, die addiert werden
46     for k=-Anzahl:Anzahl
47         for l=-Anzahl:Anzahl
48             if Bild2(round(Y_Werte(i))+k,round(X_Werte(i))+l)>10;
49                 s=s+uint32(Bild2(round(Y_Werte(i))+k,round(X_Werte(i))+l));
50                 a=a+1;
51             end
52         end
53     end
54     if a==0
```

```

55     ergebnis(i,4)=0;
56     else
57         ergebnis(i,4)=double(s)/double(a);
58     end
59
60     if(ergebnis(i,3)==0 || ergebnis(i,4)==0) %Wenn beide Bilder ein Ergebnis
        geliefert haben, wird diese Abfrage negativ
61         ergebnis(i,5)=0; %Wenn einer der Werte 0 ist, kann nichts verglichen
        werden, weshalb die Änderung auf "0" gesetzt wird. Somit wird die
        Zeilenreihenfolge beibehalten und die Zuordnung gewährleistet
62     else
63         ergebnis(i,5)=(ergebnis(i,4)/ergebnis(i,3))-1)*100; %Verhältnis des
        Wertes nachher/vorher; also der Verbesserung prozentual
64     end
65
66 end
67
68
69 end

```

A.8 Erstellen der Datei zur Darstellung der Änderung der Plateauwerte

Dieses Skript wird dazu genutzt, die Ergebnisse der Funktion `Kornanalyse_2` darzustellen. Es wird genutzt, um das Bild in Abbildung 4.5 zu erstellen.

Wobei einem Label ein Wert zugeordnet wird, der auf das gesamte Objekt angewendet wird. Somit besitzt hinterher das gesamte Objekt vollflächig den gleichen Grauwert, der später mithilfe einer Farbskala eingefärbt werden kann.

```

1  %LABELFAERBEN Färbt Label-Bilder mit Werten ein.
2
3  % Die einzusetzenden Werte müssen in der Tabelle "Werte" in der jeweiligen
4  % Zeile stehen
5
6  filename='labels.am'; %Dateiname der Avizodatei, die die Label enthält
7
8  %Importieren des Headers der Label-Datei von Avizo
9  Header_Input=import_header(filename,1,50);
10
11 fprintf('Fertig mit Label importieren\n')
12
13 %Extrahiert die Werte von Breite, Höhe, Tiefe aus dem Header
14 Breite=regexp(Header_Input, '(?<=define Lattice )\d+', 'match');
15 Hohe=regexp(Header_Input, '(?<=define Lattice \d+ )\d+', 'match');
16 Tiefe=regexp(Header_Input, '(?<=define Lattice \d+ \d+ )\d+', 'match');
17
18 %Löscht die leeren Zeilen aus den Arrays
19 Breite( all(cellfun(@isempty, Breite),2), : ) = [];

```

```
20 Hohe( all(cellfun(@isempty,Hohe),2), : ) = [];
21 Tiefe( all(cellfun(@isempty,Tiefe),2), : ) = [];
22
23 %Wandelt die Cell-Arrays in numerische Werte um
24 Breite=cellfun(@(x)str2double(x(:)),Breite);
25 Hohe=cellfun(@(x)str2double(x(:)),Hohe);
26 Tiefe=cellfun(@(x)str2double(x(:)),Tiefe);
27
28 fprintf('Abmessungen bestimmt\n')
29
30 %Umwandeln der Werte aus dem Array in numerische Werte in einer Matrix
31 LetzteReihe=strcmp('@1',Header_Input); %Findet die letzte Zeile vor den Werten
32 [Muell, Startpunkt]=max(LetzteReihe); %Bestimmt die Position der letzten Zeile
   vor den Werten
33 %Die Variable "Muell" wird nicht benötigt
34
35 fprintf('Startpunkt gefunden\n')
36
37 %Importieren der Werte der Label-Datei von Avizo
38 Label_Input=import_values(filename,Startpunkt+1,inf);
39
40 Label=uint32(Label_Input);
41 %Label=uint32(Label); %Ändern der extrahierten Werte in Integer
42
43
44
45 fprintf('Labelwerte extrahiert\n')
46
47 Lange=size(Label,1); %Länge der Liste mit Pixeln
48 maximum=max(Label); %Der größte Wert der Label
49 Anzahl=size(Werte,1); %Anzahl der Werte
50 minWerte=min(Werte); %Kleinster angenommener Wert. Der Hintergrund wird zur
   besseren Darstellung auf einen kleineren Wert gesetzt.
51
52 if maximum>Anzahl
53     fprintf('Zu wenig Werte')
54     break
55     %Wenn es weniger Werte als Objekte gibt, wird abgebrochen
56 end
57
58 %Ab hier wird die Ausgabedatei geschrieben
59 fileID = fopen('Werte.am','w'); %Name der Datei und die Berechtigung zu schreiben
   (Write)
60 fprintf(fileID,'# Avizo 3D ASCII 2.0 \n\n');
61 fprintf(fileID,'define Lattice %d %d %d\n\n',Breite,Hohe,Tiefe);
62 fprintf(fileID,'Parameters {\n\t ContentType "%dx%d float, uniform coordinates'
   '\n',Breite,Hohe,Tiefe);
63 fprintf(fileID,'\t BoundingBox 0 %d 0 %d 0 %d,\n',Breite-1,Hohe-1,Tiefe);
64 fprintf(fileID,'\t CoordType "uniform"\n');
65 fprintf(fileID,'}\n\n');
66 fprintf(fileID,'Lattice { float Data } @1\n\n');
67 fprintf(fileID,'# Data section follows\n');
68 fprintf(fileID,'@1\n');
69
70 for i=1:Lange
```

```
71     if Label(i,1)==0
72         fprintf(fileID,'%d \n',floor(minWerte)-1);
73         %Wenn das Pixel zu keinem Objekt gehört, so soll der Wert auf 1
74         %weniger als der kleinste angenommene Wert gesetzt werden. Somit
75         %kann die "0" besser dargestellt werden.
76     elseif Werte(Label(i,1))==0
77         fprintf(fileID,'%d \n',floor(minWerte)-1);
78         %Wenn das Korn eine Änderung von exakt "0" besitzt, so ist nur
79         %einer der beiden Messwerte vorhanden. Daher wird auch dieser Pixel
80         %auf "Hintergrund" gesetzt, um nur Ergebnisse anzuzeigen, die auf
81         %korrekten Daten basieren
82     else
83         fprintf(fileID,'%d \n',Werte(Label(i,1)));
84         %Wenn das Pixel die Nummer eines Labels trägt, so wird der Wert,
85         %der in der Liste "Werte" in der entsprechenden Zeile steht
86         %eingesetzt.
87     end
88 end
89
90 fprintf(fileID,'\n');
91 fclose(fileID);
92
93 clear i fileID filename Breite Hohe Tiefe Muell Startpunkt LetzteReihe maximum
94     Anzahl Lange ans Header_Input Label minWerte Label_Input
95 %Löscht die benutzten Variablen, damit diese den Workspace nicht füllen
```

Literatur

- [1] Bundesministerium für Wirtschaft und Energie. *Die Energiewende zum Erfolg führen*. URL: <http://www.bmwi.de/DE/Themen/Energie/energiewende.html>. abgerufen am 04.08.2014
- [2] A. Goetzberger u. a. *Sonnenenergie: Photovoltaik, Physik und Technologie der Solarzelle*. Teubner Verlag, 1997
- [3] R. Gross und A. Marx. *Festkörperphysik*. Oldenbourg Verlag, 2012
- [4] K. Mertens. *Photovoltaik. Lehrbuch zu Grundlagen, Technologie und Praxis*. München: Hanser Verlag, 2011
- [5] C. Weißmantel und C. Hamann. *Grundlagen der Festkörperphysik*. Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag, 1980
- [6] G. Gottstein. *Physikalische Grundlagen der Materialkunde*. 3. Aufl. Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 2007
- [7] H. Morhenn. *Elektronenmikroskopische Analysen zur Rekombinationsaktivität in multikristallinem Silizium*. Dipl. Universität Konstanz, Jan. 2010
- [8] P. Karzel. *Analysis and reduction of lifetime-limiting defects in multicrystalline silicon*. Diss. Universität Konstanz, Feb. 2014
- [9] G. Micard. *Quantitative investigation of grain boundary recombination activity in multicrystalline silicon using Light Beam Induced Current contrast profiles*. Diss. Universität Konstanz, Apr. 2011
- [10] G. Hahn. *Herstellung von mc-FZ*. Persönliche Mitteilung. Juli 2014
- [11] J. Junge. *High efficiency process development for defect-rich silicon wafer materials*. Diss. Universität Konstanz, 2012
- [12] A. Zuschlag u. a. *Extraction of the surface recombination velocity and diffusion length from LBIC and EBIC measurements at grain boundaries in mc silicon* Proc. 23. EU PVSEC, 2008, Valenica
- [13] T. Pernau. *Lebensdauerbestimmung und orts aufgelöste Messung der Quantenausbeute an kristallinem Silizium*. Dipl. Universität Konstanz, 1999

- [14] FEI Visualization Sciences Group (vsg). *Avizo Fire*. 8.0.1. <http://www.vsg3d.com/avizo/fire>
- [15] The Mathworks Inc. *Matlab*. R2013a. <http://www.mathworks.de/products/matlab/>
- [16] G. Micard u. a. *Quantitative interpretation of light beam induced current contrast profiles: evaluating the influence of a near grain boundary* Proc. 24. EU PVSEC, 2009, Hamburg
- [17] G. Micard u. a. *Quantitative interpretation of light beam induced current contrast profiles for differing diffusion lengths on either side of a grain boundary* Proc. 23. EU PVSEC, 2008, Valenica
- [18] T. Bounassisi u. a. *Chemical natures and distributions of metal impurities in multicrystalline silicon materials*. In: *Progress in Photovoltaics: Research and Applications* 14 (2006), S. 513–531
- [19] A. Zuschlag u. a. *μ XRF investigations on the influence of solar cell proprocess steps on iron and copper precipitates in multicrystalline silicon* Proc. 35. IEEE PVSC, 2010, Honolulu
- [20] T. Bounassisi u. a. *Metal precipitation at grain boundaries in silicon: Dependence on grain boundary character and dislocation decoration*. In: *Applied Physics Letters* 89.042102 (2006)

Danksagung

Ich danke allen, die mich während meiner Zeit in der Photovoltaik Gruppe so tatkräftig unterstützt haben.
Besonderer Dank geht an:

- **Prof. Dr. Giso Hahn** für die Vergabe dieses interessanten Themas, sowie die freundliche Aufnahme in die Arbeitsgruppe.
- **Prof. Dr. Johannes Boneberg** für die unkomplizierte Übernahme des Zweitgutachtens.
- **Annika Zuschlag** für die freundliche Betreuung, die Bereitstellung der Messdaten sowie das Korrekturlesen der Arbeit.
- **Sabine Groß-Buitenwerf** für die Unterstützung in allen organisatorischen Fragen.
- **David Kohberger** für die Unterstützung bei Problemen mit Avizo.
- Meine Bürokollegen **Thomas Lautenschläger**, **Sebastian Ebert** und **Dietmar Kohler** für die gute Arbeitsatmosphäre.
- **Lukas Siedentop** für die Unterstützung bei allgemeinen Fragen der Bild- und Datenverarbeitung.
- **Martin Käs** für die Herstellung der Proben.
- Meine **Eltern** für die finanzielle und sonstige Unterstützung, ohne die mein Studium nicht möglich wäre.
- Meine Freundin **Annabel Schöllhorn**, die immer ein offenes Ohr für mich hat.