

Stromverluste in Siliziumsolarzellen aufklären

Defektnachweis durch magnetischen Fingerabdruck

Von Wolf Gero Schmidt
und Uwe Gerstmann



Prof. Dr. rer. nat. habil. Wolf Gero Schmidt leitet seit 2006 die Arbeitsgruppe für Theoretische Materialphysik an der Universität Paderborn. Optische und elektronische Anregungen in Halbleitern und Ferroelektrika, quantenmechanische Vielteilcheneffekte, Elektronentransport sowie Phasenübergänge in niederdimensionalen Systemen sind seine aktuellen Forschungsschwerpunkte.

Solarzellen aus Silizium, wie in Abbildung 1 gezeigt, könnten theoretisch 30 Prozent des Sonnenlichts in Strom umwandeln, doch tatsächlich sorgen unter anderem Grenzflächendefekte dafür, dass bisher selbst unter idealen Laborbedingungen nur etwa 25 Prozent Wirkungsgrad erreicht werden. Durch Elektronenspinresonanz-Spektroskopie in Verbindung mit aufwendigen Computersimulationen am Paderborner PC² wurden an siliziumbasierten Heterokontakt-Solarzellen erstmals Defektzustände mit atomarer Genauigkeit nachgewiesen, die zur Rekombination optisch angeregter Elektronen beitragen und somit den Wirkungsgrad verringern. Die Defekte bilden sich genau an der Grenze zwischen dem kristallinen Material des Siliziumwafers und der nur wenige Nanometer dünnen Schicht aus amorphem Silizium.

Photovoltaik auf der Überholspur

Am 9. Juni 2014 war es erstmalig soweit: Mit rund 180 Gigawattstunden lieferten Solarkraftwerke mehr als die Hälfte, genauer gesagt 50,6 Prozent der elektrischen Energie, die in Deutschland verbraucht wurde. Sowenig diese Zahl über die mit der Energiewende verbundenen technischen Herausforderungen und ökonomischen Probleme aussagt, so illustrativ ist sie für den enormen Zuwachs des Anteils am Nettostromverbrauch, der inzwischen durch Photovoltaik gedeckt wird. Lag dieser Anteil 2004 noch bei kaum messbaren 0,1 Prozent, so werden inzwischen im Mittel 6,9 Prozent unseres Strombedarfs durch Photovoltaik

erbracht. Dies ist vergleichbar mit dem Beitrag der Windenergie, wobei die Zuwachsrate bei der Photovoltaik derzeit deutlich größer ist, vgl. Abbildung 2. An sonnigen Wochentagen kann die Photovoltaik zeitweise bis zu 35 Prozent, an Feiertagen, wie dem oben erwähnten Pfingstmontag 2014, bis zur Hälfte des momentanen Stromverbrauchs abdecken. Damit die Photovoltaik jedoch nicht nur in Bezug auf Umweltschutz und Nachhaltigkeit, sondern auch unter ökonomischen Aspekten ein Erfolg wird, muss sich u. a. der Quotient aus Wirkungsgrad und Herstellungskosten der Solarzellen-Module verbessern. Das Ziel besteht daher darin, möglichst wenig und dabei kostengünstig herstellbares Material einzusetzen, und zugleich das Sonnenlicht möglichst vollständig auszunutzen.

Wie entsteht der Strom in der Solarzelle?

Strom ist die Bewegung von freien Ladungsträgern. Damit eine Solarzelle überhaupt Strom liefert, müssen also zunächst freie Ladungsträger erzeugt, separiert und an den elektrischen Polen der Solarzelle gesammelt werden. Das Sonnenlicht besteht aus Photonen, die je nach Wellenlänge unterschiedliche Energien enthalten. Trifft ein solches Photon auf eine Solarzelle, so können gebundene Elektronen aus dem Kristallverbund des Halbleiters gelöst werden. Dieser Photoeffekt führt zur Generierung von sogenannten Elektron-Loch-Paaren, d. h. frei beweglichen Ladungsträgern. Bevor aus ihnen Solarstrom gewonnen werden kann, muss jedoch noch ein Hindernis



Foto: Jörn Hannemann/WESTFALEN-BLATT

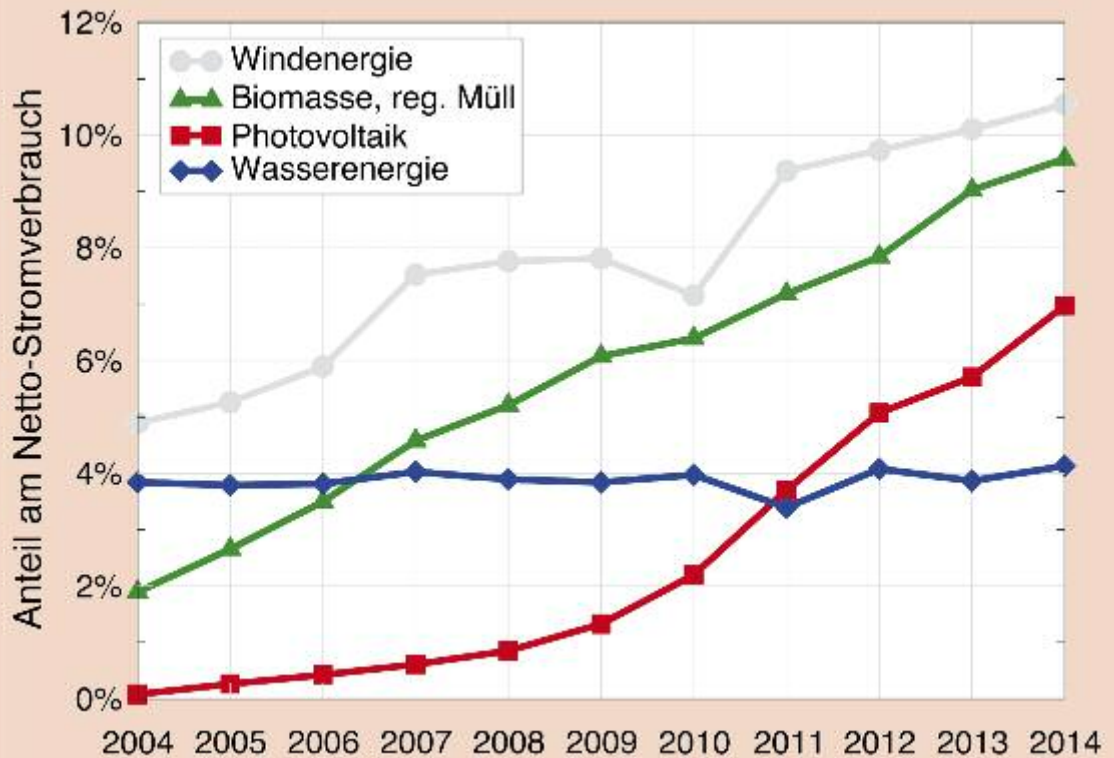
Abb. 1: Strom aus Dachanlagen. Die 4 570 Quadratmeter große Photovoltaikanlage auf dem Dach der Benteler-Arena in Paderborn kann mit bis zu 600 Megawattstunden den jährlichen Elektroenergieverbrauch von fast zweihundert Haushalten decken. Viele dieser Anlagen könnten zukünftig durch noch effizientere ersetzt werden.

überwunden werden: Die erzeugten Ladungsträger sind nämlich nur kurzzeitig frei beweglich. Elektronen und Löcher neigen dazu, sich rasch wieder zu vereinen, ein Prozess, der Rekombination genannt wird und durch den der für die Solarstromgewinnung grundlegende Photoeffekt wieder rückgängig gemacht wird. Jede Solarzelle braucht daher einen wirkungsvollen Mechanismus, der diese Rekombination auf effiziente Art und Weise verhindert. Benötigt wird eine Grenzschicht, die ähnlich einer halbdurchlässigen Membran fungiert und Elektronen und Löcher voneinander trennt. In Halbleitern kann dies zum Beispiel durch einen pn-Übergang realisiert werden, bei dem sich die Löcher im p-dotierten Bereich und Elektronen im n-dotierten Bereich ansammeln, bevor der Stromkreis durch den Anschluss eines Verbrauchers geschlossen wird und der Solarstrom zu fließen beginnt.

Siliziumtechnologie anhaltend dominant

Mit einem Marktanteil von über 85 Prozent werden in der Photovoltaik derzeit immer noch überwiegend Module auf der Basis von Silizium eingesetzt, obwohl in den letzten Jahren große Anstrengungen unternommen wurden, alternati-

ve, z. B. organische Materialien für die Photovoltaik nutzbar zu machen. Dem Vorteil potentiell vielseitiger und kostengünstiger Herstellungsprozesse organischer Solarzellen steht jedoch ein noch relativ niedriger Wirkungsgrad von knapp über 10 Prozent sowie eine vergleichsweise geringe Lebensdauer von typischerweise nur einigen tausend Stunden gegenüber. Silizium dominiert daher nach wie vor den Markt für Photovoltaik. Es ist ungiftig und hat einen Masseanteil von 26 Prozent an der Erdhülle, d. h. es ist praktisch unbegrenzt verfügbar, genau wie der sprichwörtliche Sand am Meer. Es lässt sich hochrein und einkristallin herstellen und routinemäßig als n- und p-Halbleiter dotieren – eine wichtige Voraussetzung für den Einsatz in Solarzellen. Durch Oxidation können zudem dünne Isolationsschichten erzeugt werden. Demgegenüber steht jedoch sein Materialcharakter als indirekter Halbleiter, d. h. Photonen mit der Energie der fundamentalen Bandlücke können nicht direkt absorbiert werden. Das erfordert für siliziumbasierte kristalline Solarzellen Schichtdicken von 100 Mikrometer und mehr, um das Licht möglichst vollständig zu absorbieren. Einfachsolarzellen aus Silizium könnten theoretisch 30 Prozent des Sonnenlichts in Strom



Quelle: Datensammlung [1]

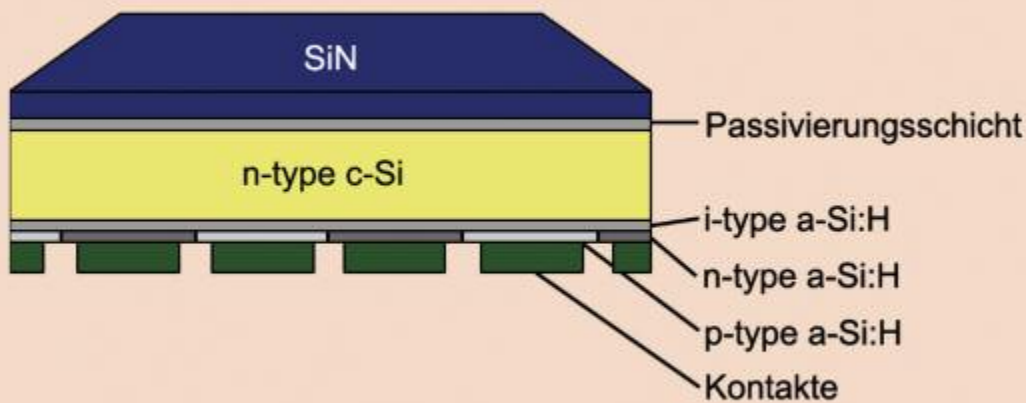
Abb. 2: Entwicklung des Anteils erneuerbarer Energie zur Deckung des Netto-Stromverbrauchs in Deutschland.

umwandeln. Neben anderen Verlustmechanismen sorgen jedoch unter anderem Grenzflächendefekte, an denen Rekombination der durch Licht getrennten Ladungsträger stattfindet, dafür, dass dieser Wirkungsgrad selbst unter idealen Laborbedingungen noch nicht realisiert werden konnte: Rekombination, d. h. die neutralisierende Vereinigung der zuvor durch den Photoeffekt optisch angeregten Elektronen und Löcher verringert die Ladungsträgerkonzentration in der Solarzelle und mindert somit die abgreifbare elektrische Leistung.

Die gebräuchlichsten Typen von Silizium-Solarzellen sind:

- (i) Polykristalline Zellen bestehend aus Siliziumkristalliten, die nicht überall die gleiche Kristallorientierung aufweisen. Sie können z. B. durch Gießverfahren hergestellt werden und dominieren gegenwärtig aufgrund der vergleichsweise geringen Herstellungskosten den großtechnischen Einsatz. Der nominelle Wirkungsgrad kommerzieller Module ist dabei in den letzten Jahren ziemlich gleichmäßig um etwa 0,3 Prozent pro Jahr gestiegen und liegt zur Zeit bei ungefähr 16 Prozent.
- (ii) Demgegenüber haben kristalline Zellen bestehend aus einkristallinem Material, wie es auch in der Halbleiterelektronik verwendet wird, einen höheren Wirkungsgrad von über 20 Prozent, sind aber deutlich teurer.
- (iii) Amorphe Solarzellen, auch Dünnschichtzellen genannt, werden dagegen sehr preiswert durch Aufdampfen einer wenige Mikrometer dünnen, nichtkristallinen Siliziumschicht hergestellt. Sie haben allerdings nur einen geringen Wirkungsgrad von ca. 7 Prozent und sind vor allem von Kleinanwendungen wie Taschenrechnern oder Uhren bekannt.
- (iv) Als Tandem-Zellen werden übereinander geschichtete Solarzellen bezeichnet, beispielsweise bestehend aus einer Kombination von polykristallinen und amorphen Zellen. Da die beteiligten Zelltypen auf unterschiedliche Wellenlängenbereiche empfindlich sind, erlauben diese Mehrfachsolarzellen eine vollständigere Ausnutzung des Spektrums des Sonnenlichts, sind aber überproportional teurer.

Mit der Siliziumheterosolarzelle ist eine Kombination der oben verfolgten Ansätze (ii) und (iii) seit



Quelle: Schema nach Ref[2]

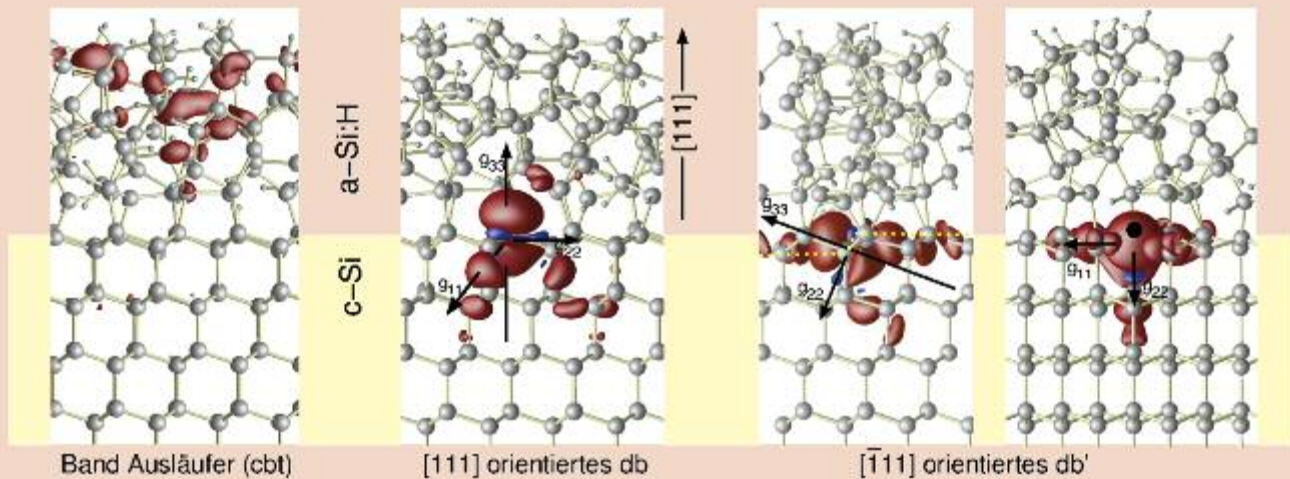
Abb. 3: Aufbau einer a-Si:H/c-Si-Heterosolarzelle mit rückseitigen interdigitierenden Kontakten.

einigen Jahren Gegenstand intensiver Forschung. Dabei werden als Absorber monokristalline Silizium-Wafer (c-Si) genutzt, worauf hydrogenisiertes amorphes Silizium (a-Si:H) mittels Gasphasenabscheidung aufgebracht wird. Das amorphe Silizium, dessen nicht abgesättigte Bindungen mit Wasserstoff saturiert sind, ist dabei flexibel genug, um die Defekte an der Oberfläche des kristallinen Materials zumindest teilweise zu passivieren. Zudem ermöglicht es eine effiziente Separierung der Ladungsträger an der Grenzschicht und die Ableitung des Stroms aus der Solarzelle. Mit einer ausschließlich rückseitig kontaktierten a-Si:H/c-Si-Heterosolarzelle, siehe Schema in Abbildung 3, wurde im April 2014 mit 25,6 Prozent ein neuer Weltrekord für den Wirkungsgrad von siliziumbasierten Einfachsolarzellen aufgestellt [2]. Entscheidend für die Effizienz und somit für das große technologische Potenzial der Siliziumheterosolarzelle ist eine hervorragende Passivierung der Oberfläche des kristallinen Siliziums mit a-Si:H. Durch die weitgehende Absättigung der freien Si-Bindungen an der Grenzfläche wird die Zahl möglicher Rekombinationszentren reduziert und eine hohe Leerlaufspannung ermöglicht. Der Grenzfläche zwischen a-Si:H und c-Si kommt demnach eine zentrale Bedeutung für die Zelleffizienz zu. Man sucht daher nach geeigneten chemischen Vorbehandlungen der Siliziumkristalloberfläche und optimierten Depositionsbedingungen für die darauf aufzubringende amorphe Siliziumschicht, um die Dichte an elektrisch aktiven Grenzflächendefekten auf ein Minimum zu reduzieren. Eine in diesem Zusammenhang offensichtliche und ganz zentrale Frage ist die nach der Bestimmung der parasitären Grenzflächenzustandsdich-

te: Wie kann man überhaupt ermitteln, welche Grenzflächenzustände die Effizienz der Solarzelle während des Betriebs entscheidend beeinflussen?

Nachweis von Grenzflächendefekten

Idealerweise benutzt man für den Nachweis der Rekombinationszentren die rekombinierenden Elektronen selbst als Sonde: Jedes Elektron besitzt ein magnetisches Moment, welches neben der Spin-Quantenzahl auch vom sogenannten g-Tensor abhängt. Bei einfachen, isotropen Systemen ist der g-Tensor durch eine einzige Zahl gegeben. Man spricht dann auch vom gyromagnetischen Verhältnis oder vom Landéschen g-Faktor. Für komplexere Materialien wird er richtungsabhängig und zu einer charakteristischen tensoriellen Größe, die sich durch komplizierte Kopplungsmechanismen zwischen den Bahn- und Spin-Drehimpulsen der umgebenden Teilchen ergibt, wie z. B. den Leitungselektronen in einer Solarzelle. Wenn sich Elektronen an den Defekten der Grenzfläche anlagern, läßt die Messung des g-Tensors somit Rückschlüsse auf die chemische Umgebung der Elektronen zu. Mittels Elektronenspinresonanz werden durch Einstrahlung elektromagnetischer Energie im Mikrowellenbereich Übergänge zwischen den verschiedenen Energieniveaus eines Systems von schwach gekoppelten magnetischen Momenten von Elektronen in einem äußeren Magnetfeld induziert. Durch die Detektion dieser Übergänge können dann auch kleinste Abweichungen des g-Tensors vom Wert des freien Elektrons $g_e = 2.002319$ bestimmt werden. Physiker des Instituts für Silizium-Photovoltaik am Helmholtz-Zentrum Berlin haben diesen Mechanismus ausgenutzt und konnten mittels elektrisch detek-



Quelle: Ref. [3]

Abb. 4: Berechnete atomare Struktur und elektronische Magnetisierungsdichte von rekombinationsaktiven a-Si:H/c-Si-Grenzflächenstrukturen (für weitere Details siehe Text). Im unteren Teil der Strukturen erkennt man jeweils die wohlgeordnete Struktur des kristallinen Siliziums, wohingegen das amorphe a-Si:H Material eine relativ große Unordnung auszeichnet. Freie Bindungen sind hier weitestgehend durch Wasserstoff (H-Atome) passiviert.

tierter Elektronenspinresonanz winzige magnetische Signaturen im Strom von Siliziumheterosolarzellen nachweisen. Dazu wurde die Solarzelle im Magnetfeld einer Mikrowellenstrahlung ausgesetzt [3]. Dabei wurden neben zwei isotropen Resonanzen, welche g-Werten von 1,998 und 2,004 entsprechen, auch zwei deutlich winkelabhängige Signale gemessen. Während der Wert von 1,998 den Leitungsbandelektronen in kristallinem Silizium zugeordnet werden kann, sind die anderen Signale Signaturen von Grenzflächendefekten. Wie aber kann man jetzt ausgehend von diesen Signalen auf die chemische Umgebung und atomare Struktur der Grenzflächendefekte schließen?

Dazu bedient man sich einer Fingerprint-Methode und vergleicht die gemessenen Daten mit den Spektren bekannter Systeme. Numerische Simulationen helfen entscheidend bei der Charakterisierung neuer, bisher noch nicht vermessener Systeme. Insbesondere die Dichtefunktionaltheorie – für deren Entwicklung Walter Kohn 1998 mit dem Nobelpreis für Chemie ausgezeichnet wurde – hat sich in den letzten Jahrzehnten zu einem leistungsfähigen und sehr zuverlässigen Werkzeug der Theoretischen Materialphysik entwickelt, mit dessen Hilfe der quantenmechanische Grundzustand komplexer Systeme mit bis zu einigen tausend Atomen sehr präzise bestimmt werden kann. Die numerische Effizienz und somit der Erfolg der Dichtefunktionaltheorie beruht darauf, dass es mit ihr nicht notwendig ist, die vollständige Schrödingergleichung für das Vielelektronensystem zu lösen. Grundlegende Eigenschaften von Molekülen und Festkörpern, wie beispielsweise Bindungslängen und -energien, können bereits

auf Basis der ortsabhängigen Elektronendichte bestimmt werden. Programmpakete mit verschiedenartigen numerischen Implementierungen der Dichtefunktionaltheorie werden weltweit in zahlreichen akademischen und industriellen Arbeitsgruppen zur Materialcharakterisierung eingesetzt. In der Arbeitsgruppe Theoretische Materialphysik der Universität Paderborn wird die Dichtefunktionaltheorie nicht nur zur Berechnung von Grundzustandseigenschaften genutzt, sondern auch zur Bestimmung von elektronischen Anregungseigenschaften. Die Modellierung von Grenzflächen und deren elektronischer und optischer Eigenschaften bildet dabei einen besonderen Forschungsschwerpunkt dieser Arbeitsgruppe. Da die Wechselwirkung eines Moleküls oder Festkörpers mit elektromagnetischen Feldern im wesentlichen durch die Elektronen bestimmt wird, kann mittels Dichtefunktionaltheorie auch die Antwort eines Systems auf solche Felder berechnet werden. Uwe Gerstmann von der Universität Paderborn hat gemeinsam mit der Arbeitsgruppe von Francesco Mauri an der Université Pierre et Marie Curie in Paris explizite analytische Ausdrücke für die Berechnung des g-Tensors abgeleitet [4] und in eines der weltweit führenden Dichtefunktionalprogramme – QUANTUM ESPRESSO – implementiert [5]. Damit wurden die numerischen Simulationswerkzeuge geschaffen, um die Fragen nach dem mikroskopischen Ursprung der in den Siliziumheterosolarzellen gemessenen Spinresonanzen zu beantworten: Dichtefunktionalrechnungen liefern unmittelbar die Gesamtenergie vorgegebener Atomkonfigurationen und erlauben es daher, von mehreren möglichen strukturellen Anordnungen die energetisch günstigste zu bestimmen. Darüber hinaus

Defekt	Methode	g_{11}	g_{22}	g_{33}	Orientierung bzgl. [111]
cbt	Theorie	2,005	2,005	2,004	isotrop
	Experiment	2,004	2,004	2,004	isotrop
db	Theorie	2,008	2,009	2,002	anisotrop, 2°
	Experiment	2,008	2,008	2,001	anisotrop, 0°
db'	Theorie	2,008	2,009	2,002	anisotrop, 110°
	Experiment	2,008	2,008	2,001	anisotrop, 106°

Quelle: Ref. [3]

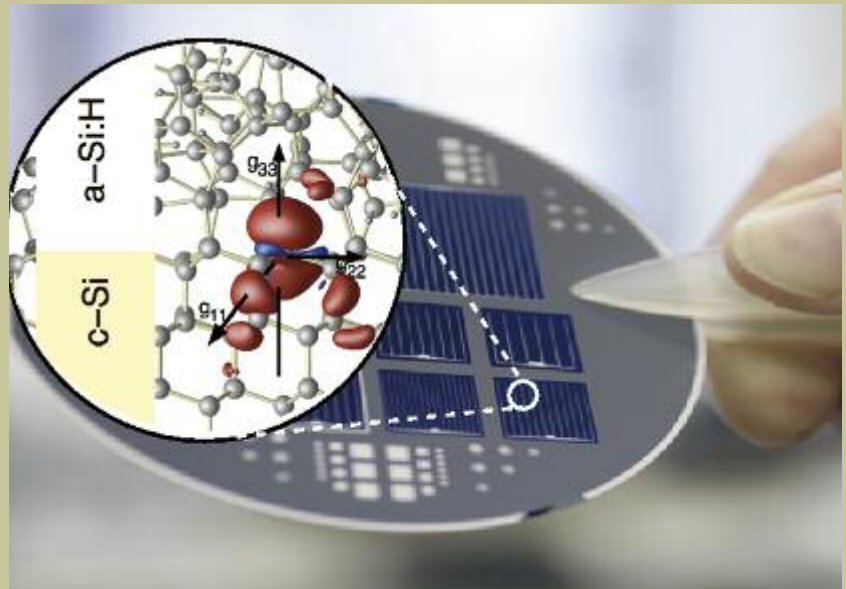
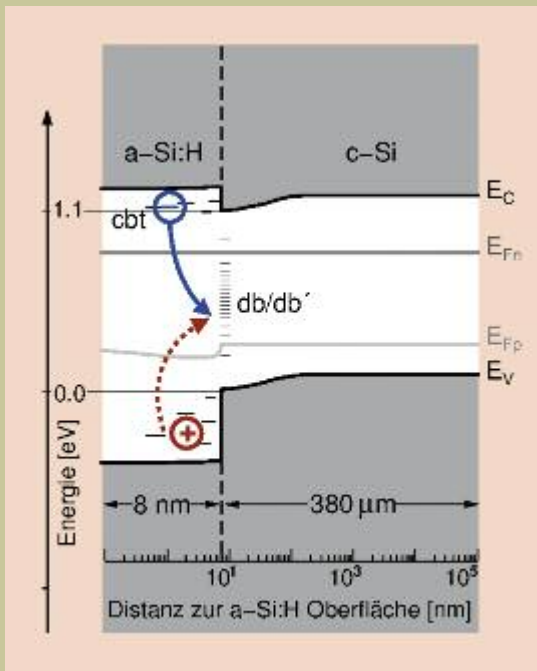
Tab. 1: Vergleich gemessener mit den für die in Abb. 4 gezeigten Grenzflächendefekte berechneten g-Tensoren sowie deren Orientierung in Bezug auf die Si[111]-Richtung der c-Si/a-Si:H Grenzschicht.

kann die Geometrie einer vorgegebenen Anordnung energetisch optimiert werden; d. h., es werden die Atome so lange verschoben, bis die auf sie wirkenden Kräfte verschwinden und ein Minimum der Energie gefunden ist. Auf diese Weise ist es möglich, die energetisch besonders vorteilhaften, und daher besonders häufig vorkommenden lokalen atomaren Strukturen der a-Si:H/c-Si-Grenzfläche einer Siliziumheterosolarzelle zu bestimmen. In einem darauffolgenden Schritt wird dann die Magnetisierungsdichte zu dieser Struktur bestimmt (siehe Abbildung 4) und zur Simulation von g-Tensoren benutzt. Da es sich bei dem untersuchten System um die Grenzfläche zwischen einem amorphen und einem kristallinen Material handelt, sind jedoch zum einen sehr viele Konfigurationen denkbar und müssen systematisch untersucht werden. Zum anderen erfordert die Beschreibung des amorphen Materials, bei dem die Silizium- und Wasserstoff-Atome nur ein unregelmäßiges Muster bilden und lediglich über Nahordnung, nicht aber über Fernordnung verfügen, sehr große Simulationszellen. Die Berechnung möglicher Strukturmodelle der a-Si:H/c-Si-Grenzfläche erfordert daher eine besonders leistungsfähige Parallelrechenstechnik. Diese steht im Paderborner Rechenzentrum PC² in Form des OCuLUS-Clusters mit mehr als 10 000 Prozessorkernen und einer Peak-Performance von 200 Teraflops zur Verfügung.

Rekombinationsprozesse an der Grenzfläche

In Abbildung 4 sind berechnete atomare Strukturen an der Grenzfläche von kristallinem und amorphem Silizium dargestellt, die nicht nur energetisch günstig sind, sondern auch – wie im folgen-

den gezeigt wird – die gemessenen magnetischen Signaturen erklären können. Rote und blaue Ladungsdichtewolken zeigen dabei die Magnetisierungsdichte ungepaarter, defektlokalisierter Elektronen. Ebenfalls angedeutet sind die Hauptachsen der jeweiligen berechneten g-Tensoren, die in Tab. 1 mit den experimentell bestimmten Werten verglichen werden. Offensichtlich lassen sich die gemessenen Signale eindeutig den drei gezeigten Defektstrukturen zuordnen (Tabelle 1). Experimentell wurde insbesondere nachgewiesen, dass die Spinresonanzsignale der cbt- und db-/db'-Defekte mit dem Photostrom ansteigen, was deren unmittelbare Beteiligung am Rekombinationsprozess belegt. Somit wurden zwei unterschiedliche Arten von Grenzflächendefekten gefunden: Während eine Art von Defekten (cbt) eher schwach lokalisiert in der amorphen Schicht sitzt, befindet sich die zweite Defektspezies (db, db') in der Kristall-Matrix direkt an der Grenzfläche. Das Kürzel db steht dabei für dangling bond (engl. hängende Bindung). Ein normalerweise vierfach koordiniertes Si-Atom besitzt hier nur drei Bindungspartner. Eine Bindung bleibt frei und hängt quasi in der Luft. Das zugehörige Orbital ist mit nur einem Elektron also nur halb besetzt und wirkt als parasitäres Rekombinationszentrum. Die energetische Lage dieser Defekte in Bezug auf die Valenz- und Leitungsbandkanten an der a-Si:H/c-Si-Grenzfläche ist in Abbildung 5 schematisch gezeigt. Ebenfalls in Abbildung 5 angedeutet ist der an der Grenzfläche ablaufende Rekombinationsprozess: Ein optisch angeregtes Elektron lokalisiert zunächst in einem cbt-Defektzustand der amorphen Siliziumschicht bevor es in die Grenzflächendefekte db bzw. db' tunnelt und dort



Quelle: Ref. [3]

Abb. 5: Schematische Darstellung der c-bt- und db/db'-Grenzflächendefekte im Energiediagramm der a-Si:H/c-Si-Grenzfläche (links) simuliert für die untersuchte Miniatur-Solarzelle (rechts). E_C , E_V , E_{Fn} und E_{Fp} bezeichnen dabei die Lage von Leitungs- und Valenzband sowie die Fermi-Niveaus für Elektronen und Löcher an den Kontakten. Mit Pfeilen ist der Rekombinationsprozess angedeutet, siehe Text.

mit einem Loch zerstrahlt. Obwohl der delokalisierte c-bt-Defektzustand am Rekombinationsprozess beteiligt ist, bedeutet dies nicht zwangsläufig, dass er sich insgesamt negativ auf den Wirkungsgrad auswirkt. So gibt es Hinweise, dass diese Art von delokalisierten Grenzflächenzuständen eine wichtige Rolle bei der Ladungsträgerseparation an der c-Si/a-Si:H Grenzfläche spielt. Die Rolle der lokalisierten db-/db' Zentren ist dagegen eindeutig wirkungsgradbegrenzend. Offen ist jedoch noch die Frage, ob sich dabei einer der Defekttypen stärker auswirkt als der andere. Wäre dies der Fall, so könnte man durch gezielte Anpassung der Depositionsbedingungen den schwächer parasitären Defekt gezielt präparieren und so die Effizienz der Siliziumheterosolarzelle verbessern. Durch die Kombination von hochauflösender elektrisch detektierter Elektronenspinresonanz mit parameterfreien, quantenmechanischen Materialsimulationen ist es somit möglich, parasitäre Grenzflächendefekte an Siliziumhochleistungs-solarzellen nachzuweisen, auf atomarer Skala zu charakterisieren und deren Verknüpfung mit wirkungsgradbegrenzenden Rekombinationsprozessen aufzuzeigen. Damit ist es erstmals gelungen Prozesse die den Wirkungsgrad in einer Vielzahl von Silizium-Solarzellen mindern, direkt zu detektieren und mit atomarer Auflösung darzustellen. Das so gewonnene, mikroskopische Verständnis der Rolle von Grenzflächendefekten für die Produktion effizienterer Solarzellen-Module nutzbar zu machen bleibt eine spannende Aufgabe, nicht nur für die Paderborner Arbeits-

gruppe Schmidt. Die in diesem Artikel diskutierten Solarzellen wurden am Helmholtz-Zentrum Berlin hergestellt und auch dort vermessen. Die theoretischen Methoden wurden an der Universität Paderborn entwickelt und in numerischen Simulationen im Paderborner PC² eingesetzt.

Quellen

- [1] AKTUELLE FAKTEN ZUR PHOTOVOLTAIK IN DEUTSCHLAND, HERAUSGEGEBEN VON H. WIRTH, FRAUNHOFER-INSTITUT FÜR SOLARE ENERGIESYSTEME ISE (2015).
- [2] K. MASUKO, M. SHIGEMATSU, T. HASHIGUCHI, D. FUJISHIMA, M. KAI, N. YOSHIMURA, T. YAMAGUCHI, Y. ICHIHASHI, T. YAMANISHI, T. TAKAHAMA, M. TAGUCHI, E. MARUYAMA UND S. OKAMOTO, ACHIEVEMENT OF MORE THAN 25 % CONVERSION EFFICIENCY WITH CRYSTALLINE SILICON HETEROJUNCTION SOLAR CELL, IN PHOTOVOLTAIC SPECIALISTS CONFERENCE (PVSC), 40TH IEEE (2014).
- [3] B.M. GEORGE, J. BEHREND, A. SCHNEGG, T.F. SCHULZE, M. FEHR, L. KORTE, B. RECH, K. LIPS, M. ROHRMÜLLER, E. RAULS, W.G. SCHMIDT UND U. GERSTMANN, ATOMIC STRUCTURE OF INTERFACE STATES IN SILICON HETEROJUNCTION SOLAR CELLS, PHYS. REV. LETT. 110, 136803 (2013).
- [4] D. CERESOLI, U. GERSTMANN, A. P. SEITSONEN, UND F. MAURI, FIRST-PRINCIPLES THEORY OF ORBITAL MAGNETIZATION, PHYS. REV. B 81, 060409(R) (2010).

[5] P. GIANNOZZI, U. GERSTMANN, ET. AL., QUANTUM ESPRESSO: A MODULAR AND OPEN-SOURCE SOFTWARE PROJECT FOR QUANTUM SIMULATIONS OF MATERIALS, J. PHYS. CONDENS. MATTER 21, 395502 (2009).



Dr. Uwe Gerstmann ist seit 2010 als Akademischer Rat Mitglied der Arbeitsgruppe für Theoretische Materialphysik an der Universität Paderborn. Seine Forschungsinteressen betreffen vor allem Störstellen und Defekte in Halbleitern und die Berechnung relativistischer Effekte in der Elektronenstruktur von Halbleitern und Metallen.

Kontakt

Prof. Dr. Wolf Gero Schmidt

Fakultät für Naturwissenschaft

Theoretische Physik

05251 60-2335

W.G.Schmidt@upb.de