

8 Messung und Modellierung im Vergleich

In diesem Kapitel werden die wichtigsten Simulationsergebnisse vorgestellt, die das Schichtenabsorptionsmodell unter den im letzten Kapitel beschriebenen Voraussetzungen erzielt hat. Zu Beginn wird an einer stöchiometrischen $Cu(In,Ga)Se_2$ -Probe, die keine tiefenabhängigen Zusammensetzungsgradienten enthält, gezeigt, dass die über die Apparatefunktion gegebene Form der Reflexe nicht nur am Al_2O_3 -Standard, sondern auch am $Cu(In,Ga)Se_2$ -Dünnsfilm zu den gemessenen Reflexen passt. Anschließend werden Zusammensetzungsgradienten untersucht, die sich über die gesamte Schichtdicke erstrecken. Dies erfolgt für solche im Anionengitter (S, Se) und solche im Kationen-Untergitter (Cu, Ga, In) getrennt. Schließlich werden Zusammensetzungsgradienten untersucht, die sich auf die Oberfläche des $Cu(In,Ga)Se_2$ -Dünnsfilmes beschränken. Mit Hilfe der Modellierung kann eine Cu -verarmte Oberfläche bei In -reichen Proben nachgewiesen werden.

8.1 Stöchiometrisches $Cu(In_{0.75}Ga_{0.25})Se_2$

Abb. 8.1 stellt die gemessenen und die simulierten Spektren des 112-Reflexes an stöchiometrischem $Cu(In_{0.75}Ga_{0.25})Se_2$ dar. Es handelt sich dabei um die im Abschnitt 7.2.7 beschriebene Cu -reich geätzte Referenzprobe. Aufgrund der homogenen Abscheidebedingungen während des Cu -reichen Schichtwachstums sind Zusammensetzungsgradienten in der Tiefe ausgeschlossen. Die Halbwertsbreite der Simulation ist konstant und wird nur durch die Auswahlregel in der Gleichung 7.8 bei einem Einfallswinkel unter 1.5° mit den in Tabelle 7.1 angegebenen Werten nach oben korrigiert. Zur Kompensation von Rauigkeiten und Brechung wurden die simulierten Profile für jeden Einfallswinkel der gemessenen Intensität angepasst und in die optimale 2θ -Position verschoben. Die simulierten Spektren wurden bei verkleinertem Schichtabstand zur Oberfläche hin über 100 Schichten berechnet. Die gemessenen und simulierten Spektren stimmen in der Form sehr gut überein. Der über alle zehn Spektren ermittelte GOF-Wert beträgt 4.5, was eine gute Übereinstimmung von Modell und Messung indiziert. Abb. 8.2 stellt die gemessenen und simulierten Halbwertsbreiten und integralen Intensitäten des 112-Reflexes dar. Die Halbwertsbreite der Simulation ist für den Einfallswinkel $\alpha \geq 2^\circ$ konstant (0.165°), steigt aber, wie oben beschrieben, für kleinere Einfallswinkel an, um die abnehmende Probentransparenz zu kompensieren. Da die Änderung der Halbwertsbreiten aufgrund des Transparenzeffektes durch Simulation zuvor an dem gemessenen Datensatz ermittelt wurde, kommt der Übereinstimmung von simulierten und gemessenen integralen Breiten die Bedeutung eines Selbstkonsistenztestes zu. Das Schichtenabsorptionsmodell simuliert die gemessenen Spektren einer Probe, bei der alle Tiefenprofile konstant und alle übrigen geometrischen und materialspezifischen Parameter bekannt sind, korrekt und in sehr guter Übereinstimmung.

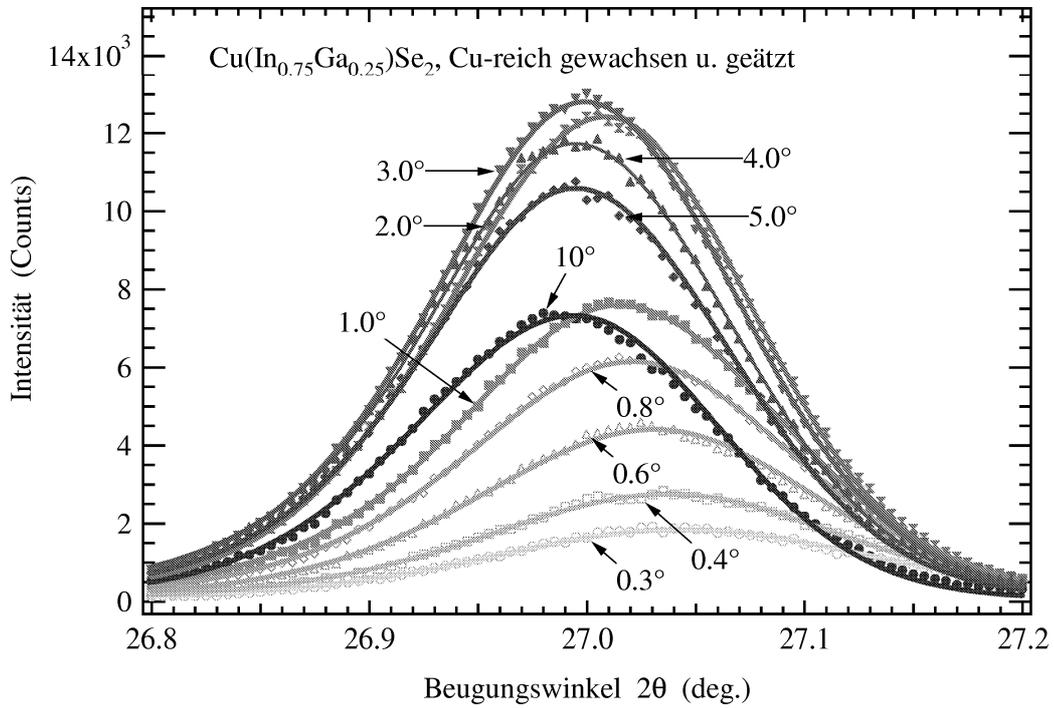


Abbildung 8.1: Gemessene und simulierte Spektren des 112-Reflexes an stöchiometrischem $\text{Cu}(\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25})\text{Se}_2$. Die Probe wurde unter Cu-Überschuss hergestellt und die Sekundärphase Cu_xSe anschließend durch KCN-Ätzen entfernt.

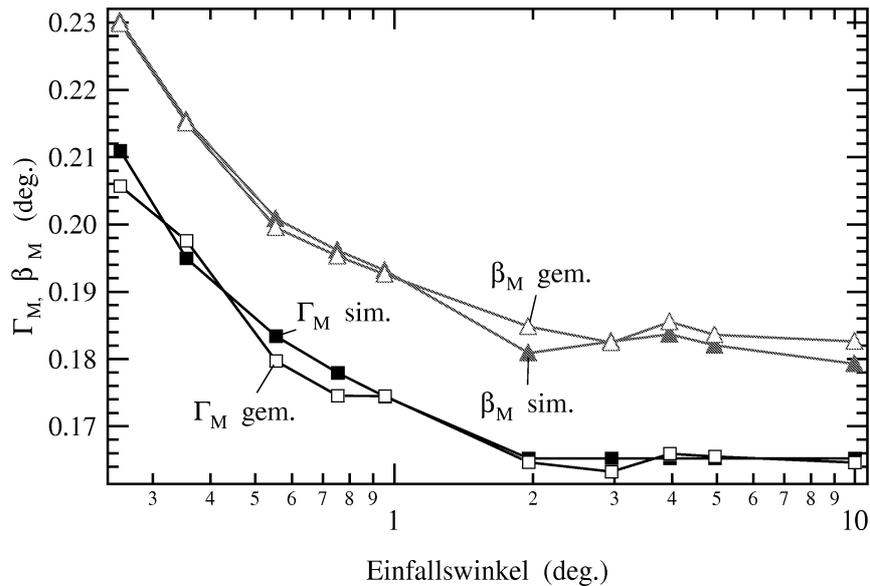


Abbildung 8.2: Gemessene und simulierte Halbwertsbreiten und integrale Breiten des 112-Reflexes an stöchiometrischem $\text{Cu}(\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25})\text{Se}_2$.

8.2 Gradierungen der gesamten Dünnschicht

Nachfolgend geht es um tiefenabhängige Zusammensetzungsänderungen, die sich über die gesamte Schichtdicke erstrecken. Die Empfindlichkeit der Simulation bezüglich Änderungen im Tiefenprofil wird in zwei unterschiedlichen Fällen getestet.

8.2.1 Gradierungen des Anionen-Untergitters

In Abschnitt 6.2 wurden die gemessenen GIXRD-Spektren eines stark gradierten $Cu(In,Ga)(S,Se)_2$ -Dünnschichtes vorgestellt. Aus dem in Abb. 6.5 wiedergegebenen SIMS-Tiefenprofil lässt sich ein stufenartiges Tiefenprofil im Anionen-Untergitter ableiten. Die Verteilung der Metalle in der Tiefe ist bis auf einen schwachen Ga -Gradienten konstant. Die gemessenen Spektren dieser Dünnschicht wurden simuliert. Grundlage der Simulation sind die mit SIMS gemessenen Tiefenprofile für Cu , Ga , In , Se und S sowie die mit dem S -Anteil korrelierte tiefenabhängige Halbwertsbreite. Letztere wurde proportional zum gemessenen S -Anteil gewählt. Die Halbwertsbreite für den S -armen Volumenanteil ($1.5 \mu m$ und tiefer) orientiert sich am Detailreichtum des gemessenen 10° -Spektrums und liegt bei 0.18° . Stufenweise wird die Halbwertsbreite zuerst auf 0.21° und dann auf 0.26° erhöht, was der Breite der Profile bei einem Einfallswinkel von 0.3° entspricht.

Simulation mit SIMS-Tiefenprofilen. Abb. 8.3 a) stellt die gemessenen und simulierten Spektren des 112-Reflexes dar. Die Übereinstimmung zwischen Simulation und Messung ist zwar qualitativ gegeben, aber nicht zufriedenstellend. Die Abfolge der Maxima und die sich mit dem Einfallswinkel verändernde Formgebung stimmt nur sehr grob überein. Auffallend ist auch, dass die integrale Breite *aller* simulierter Spektren die Breite der gemessenen nicht ausfüllt, was darauf hindeutet, dass der mit SIMS und EDX gemessene ‘Legierungshub’ der Gitterkonstanten zu klein ist.

Verfeinertes SIMS-Tiefenprofil. Wegen der nicht zufrieden stellenden Übereinstimmung wurde das gemessene SIMS-Tiefenprofil in vereinfachter Form, d.h. über acht Stützstellen, in einer Tabelle abgelegt und durch wiederholtes Berechnen der simulierten Spektren verfeinert. Aufgrund der in Kapitel 3 angesprochenen Matrixeffekte, die bei SIMS-Messungen an $Cu(In,Ga)(S,Se)_2$ -Schichten das Cu - und Ga -Verhältnis verfälschen können, wurden die *ggi*- und *cgi*-Tiefenprofile konstant gesetzt. Das entspricht auch den während der Aufdampfung konstant gehaltenen Cu - und Ga -Raten. Abb. 8.3 b) stellt das Ergebnis des Verfeinerungszyklus dar¹. Das verfeinerte $S/(S+Se)$ -Tiefenprofil und das Original gibt Abb. 8.4 wieder.

Die in Abb. 8.3 b) hervortretende ausgezeichnete Übereinstimmung zwischen Simulation und Messung ist fast ausschließlich auf das Verfeinern des $S/(S+Se)$ -Tiefenprofiles zurückzuführen. Ein Zwischenschritt (nicht dargestellt), bei dem die *cgi*- und *ggi*-Tiefenprofile konstant gesetzt wurden, aber das original SIMS-Tiefenprofil für *sse* Verwendung fand, ergab nur wenige, geringfügige Veränderungen gegenüber den in a) dargestellten simulierten Spektren. Dagegen ist die in b) erzielte Übereinstimmung bis in kleinste Details überzeugend, wobei zu bedenken ist, dass zur Simulation bis auf den Einfallswinkel für alle zehn Spektren identische Parameter verwendet wurden. Der

¹ Es waren rund 300 Simulations-Runs notwendig.

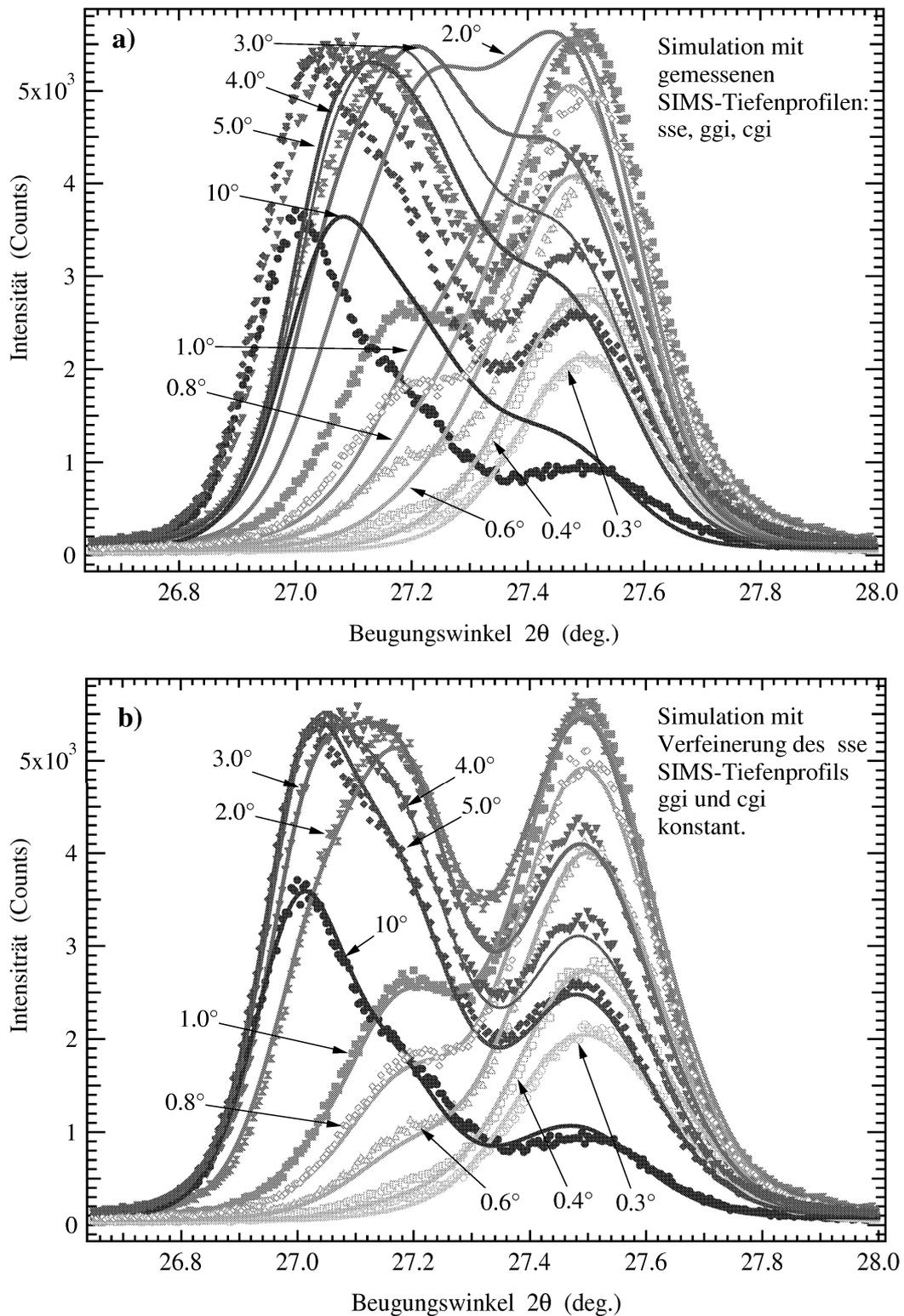


Abbildung 8.3: Gemessene und simulierte Spektren des 112-Reflexes einer in Stufen gradierten $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{-(S,Se)}_2$ -Schicht. a) Simulation unter Verwendung der gemessenen SIMS-Tiefenprofile aus Abb. 6.5. b) Simulation mit verfeinertem SIMS-Tiefenprofil für $\text{S}/(\text{S}+\text{Se})$ (= sse) aus Abb. 8.4 und konstanten $\text{Ga}/(\text{Ga}+\text{In})$ (= ggi) und $\text{Cu}/(\text{Ga}+\text{In})$ (= cgi).

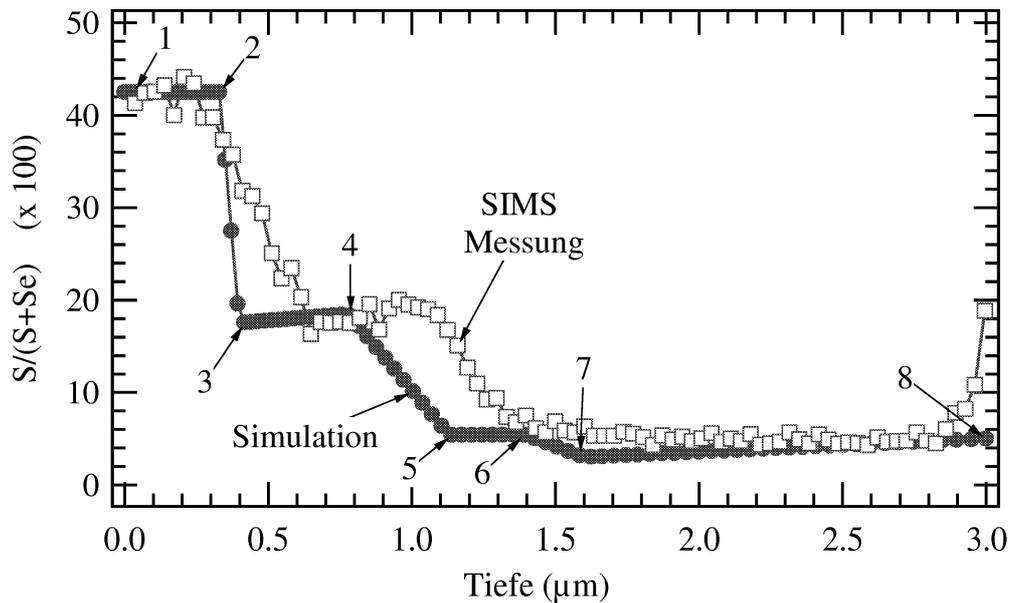


Abbildung 8.4: Gemessenes und verfeinertes $S/(S+Se)$ Tiefenprofil einer $Cu(In,Ga)(S,Se)_2$ -Dünnschicht. Das zugehörige komplette SIMS-Tiefenprofil ist in Abb. 6.5 dargestellt. Das verfeinerte Tiefenprofil wurde stark vereinfacht. Es ist über acht Stützstellen definiert, deren Position und S -Gehalt variiert wurde.

GOF dieser Simulation liegt bei einem sehr guten Wert von 2.2. Ein besonders wichtiges Indiz ist die Übereinstimmung der Intensitätsverhältnisse bei den Profilen, die zwei ausgeprägte Maxima aufweisen ($\alpha = 1^\circ$ - 5°). Die vorliegenden Abweichungen der maximalen Intensität bei $2\theta = 27.5^\circ$ und den Spektren bei 3° , 4° und 5° Einfallswinkel können wahrscheinlich durch eine Erhöhung der Zahl der Stützstellen des Verfeinerungsprofils mit etwas Geduld eliminiert werden.

Der Verfeinerung des sse -Tiefenprofils mag eine gewisse Willkür unterstellt werden. Dagegen sprechen aber eine ganze Reihe von Beobachtungen. Auffallend ist nämlich, dass die simulierten Spektren bei unverändertem maximalen und minimalen S -Gehalt an der Oberfläche und im Volumen die integrale Breite der gemessenen Spektren ausfüllen. Die im vorstehenden Abschnitt geäußerte Vermutung eines zu geringen ‘Legierungshubes’ trifft also nicht zu. Auch kann die nun korrekt simulierte integrierte Breite nicht auf Änderungen des Tiefenprofils der Halbwertsbreite zurückgeführt werden. Dieses wurde gegenüber der Simulation in Abb. 8.3 a) nur in Bezug auf die Tiefe der Stufen im Profil, nicht aber hinsichtlich des Wertes der Halbwertsbreite angepasst. Entscheidend ist hier die Position der Stufen zwischen Stützstellen 2 und 3 sowie 4 und 5 im sse -Tiefenprofil von Abb. 8.4. Diese sind gegenüber dem SIMS-Profil nach vorne zur Oberfläche hin verschoben. Damit ist der Anteil einer stark S -reichen Deckschicht geringer, und bei großen Einfallswinkeln tritt der S -arme Volumenanteil früher und weniger gedämpft hervor. Die in der Verfeinerung zum Zuge gekommenen Veränderungen des gemessenen Tiefenprofils lassen die charakteristischen Merkmale deutlicher hervortreten. Die Stufe von 2 nach 3 ist zudem steiler, und die S -reiche Deckschicht, die sich über die Stützstelle 1 und 2 erstreckt, ist ausgeprägter. Somit können die Veränderungen alle

einen durch SIMS gegebenen Verschleppungseffekt kompensieren. Die ‘Auswaschung’ von SIMS-Tiefenprofilen kann zum Beispiel durch präferentielles Sputtern auftreten. Auch ist die Definition der Sputtertiefe infolge von Oberflächenverunreinigungen gerade am Anfang des Sputterprozesses stark fehlerhaft.

Alle genannten Gründe legen die Schlussfolgerung nahe, dass es sich bei dem verfeinerten SIMS-Profil für S und Se auch wirklich um eine Verfeinerung handelt und nicht etwa um eine Anpassung beliebiger (und physikalisch bedeutungsloser) Fit-Parameter. Diese Schlussfolgerung wird im folgenden Abschnitt, der die Empfindlichkeit der Simulation gegenüber kleinen Änderungen des Tiefenprofils demonstriert, noch untermauert.

8.2.2 Gradierungen des Kationen-Untergitters

8.2.2.1 SIMS-Tiefenprofil mit starken Matrixeffekten. Analog zu der im letzten Abschnitt beschriebenen Probe mit stufenweisen S -Gradienten wurde eine Dünnschicht mit starkem Ga -Gradienten hergestellt und mit SIMS tiefenprofiliert. Während der Wachstumsphase wurde bis zur Halbzeit fast ausschließlich Ga und kein In verdampft. Während der zweiten Hälfte wurde die Ga -Rate kontinuierlich um zwei Drittel gesenkt und die In -Rate sehr zügig auf ein Maximum eingestellt. Es ist ein durch die Diffusion verstärkt ausgewaschener Gradient im ggi -Tiefenprofil zu erwarten. Die Cu -Rate wurde während des gesamten Abscheideprozesses konstant gehalten. Abb. 8.5 stellt

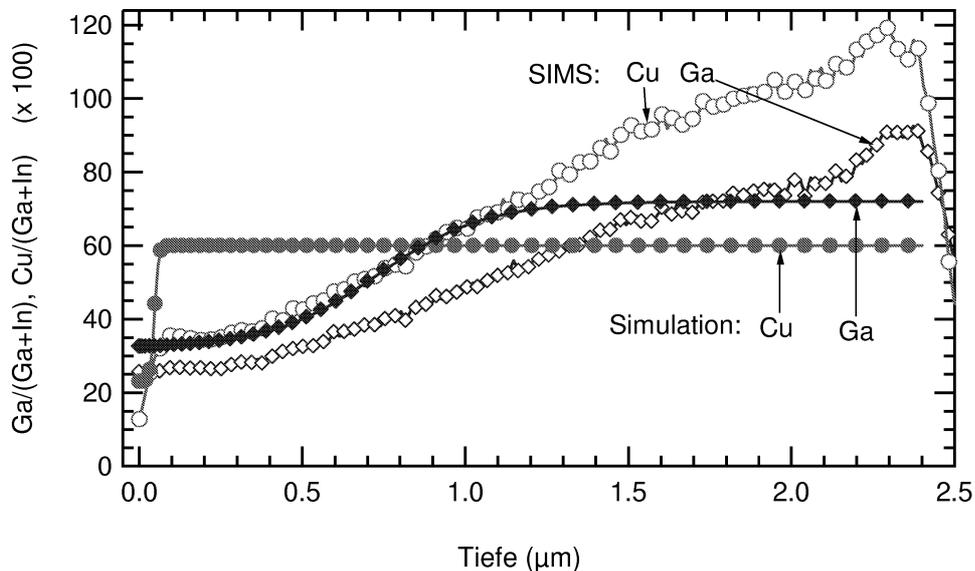


Abbildung 8.5: Gemessenes und simuliertes $Ga/(Ga+In)$ - und $Cu/(Ga+In)$ -Tiefenprofil einer gradierten $Cu(In,Ga)Se_2$ -Dünnschicht.

die gemessenen SIMS- und die durch Modellierung verfeinerten Tiefenprofile für Ga und Cu dar. Der zur Oberfläche hin abnehmende Ga -Gehalt ist deutlich erkennbar. Mit dem Ga -Gehalt nimmt allerdings auch der mit SIMS gemessene Cu -Gehalt stark ab. Der Gradient für Cu ist sogar stärker ausgeprägt als der Ga -Gradient. Dies steht nicht im Einklang mit experimentellen Erfahrungen und

ist mit Sicherheit auf die bereits beschriebenen Matrixeffekte zurückzuführen, die bei simultanem Abspüttern von Cu und Ga auftreten. Der Cu -Gehalt einer $Cu(In,Ga)(S,Se)_2$ -Verbindung ist im Volumen des Materials weitgehend konstant, was auf den Gesetzmäßigkeiten des Wachstums beruht, insbesondere der enorm hohen Mobilität von Cu bei Substrattemperaturen oberhalb 450°C [55]. Zusammensetzungsänderungen an der Oberfläche betreffen nur die obersten 30-60 nm, wie an In -reich gewachsenen $Cu(In,Ga)Se_2$ -Dünnschichten im nächsten Abschnitt gezeigt wird.

Modellierung des Ga -Gradienten. Für die Modellierung hat das gemessene SIMS-Tiefenprofil für Ga mithin nur qualitative Bedeutung. Der Cu -Gehalt wurde konstant gesetzt und in Übereinstimmung mit integralen EDX-Messungen auf 18 At% festgelegt. Das ggi -Diffusionsprofil wurde durch eine empirische Verteilungsfunktion

$$ggi_i = ggi_0 + \frac{ggi_{max}}{1 + \exp\left(\frac{z_m - z_i}{z_i}\right)^\nu} \quad (8.1)$$

simuliert, die symmetrisch zum Wendepunkt z_m ist. Das ggi -Verhältnis der i -ten Schicht mit Tiefe z_i ist damit durch ggi_i gegeben. Ein konstanter Untergrund des Ga -Gehaltes kann über ggi_0 , und der maximale Ga -Gehalt durch ggi_{max} beeinflusst werden. Die Steigung des Ga -Diffusionsprofils kann über den Exponenten ν eingestellt werden. Das ggi -Profil wurde mit den vier Parametern z_m , ggi_0 , ggi_{max} und ν durch wiederholte Berechnung simulierter Spektren und anschließender Prüfung auf Übereinstimmung mit den gemessenen Spektren optimiert.

Übereinstimmung von Simulation und Messung. Abb. 8.6 a) stellt die gemessenen und die mit dem optimierten Ga -Gradienten simulierten Spektren des 112-Reflexes eines $Cu(In,Ga)Se_2$ -Dünnschichtes dar. Die Übereinstimmung zwischen simulierten und gemessenen Spektren ist wiederum sehr gut. Kleine Abweichungen ergeben sich für die Nebenmaxima der 2°, 3°, 4°- und 5°-Spektren bei $2\theta = 27.56^\circ$ und für die rechten Peaktails der Messungen kleiner Einfallswinkel ($2\theta \leq 1^\circ$). Da das Ga -Diffusionsprofil einer genauen physikalischen Grundlage entbehrt und in diesem Falle rein empirisch angewendet wird, könnten sehr wahrscheinlich Verbesserungen in der Übereinstimmung zwischen Messung und Simulation durch eine erweiterte Profildfunktion mit mehr Freiheitsgraden erzielt werden. Hier geht es jedoch zunächst darum, die Zahl der freien Parameter möglichst klein und das Modell für das Tiefenprofil so einfach wie möglich zu halten.

Modellierung der Halbwertsbreite. Die Halbwertsbreite wurde dem Ga -Gradienten angepasst. Für Schichten, die tiefer als $0.5 \mu\text{m}$ liegen, wurde ein konstanter Wert von 0.24° eingesetzt. Für Schichten, die nahe der Oberfläche sind, nimmt die Halbwertsbreite zu. Das Profil der Halbwertsbreite hat einen dem Ga -Profil komplementären Verlauf, was mit den Legierungseigenschaften begründet werden kann. Nahe $ggi = 0.5$ besteht ein Minimum der Kristallitgröße. Nähert sich die Legierung den ternären Eckverbindungen $CuInSe_2$ oder $CuGaSe_2$, nimmt die Kristallitgröße wieder zu [92]. Dieser Zusammenhang wurde auch durch die Untersuchungen dieser Arbeit bestätigt, wie den integralen Breiten aus Tabelle 5.3 zu entnehmen ist.

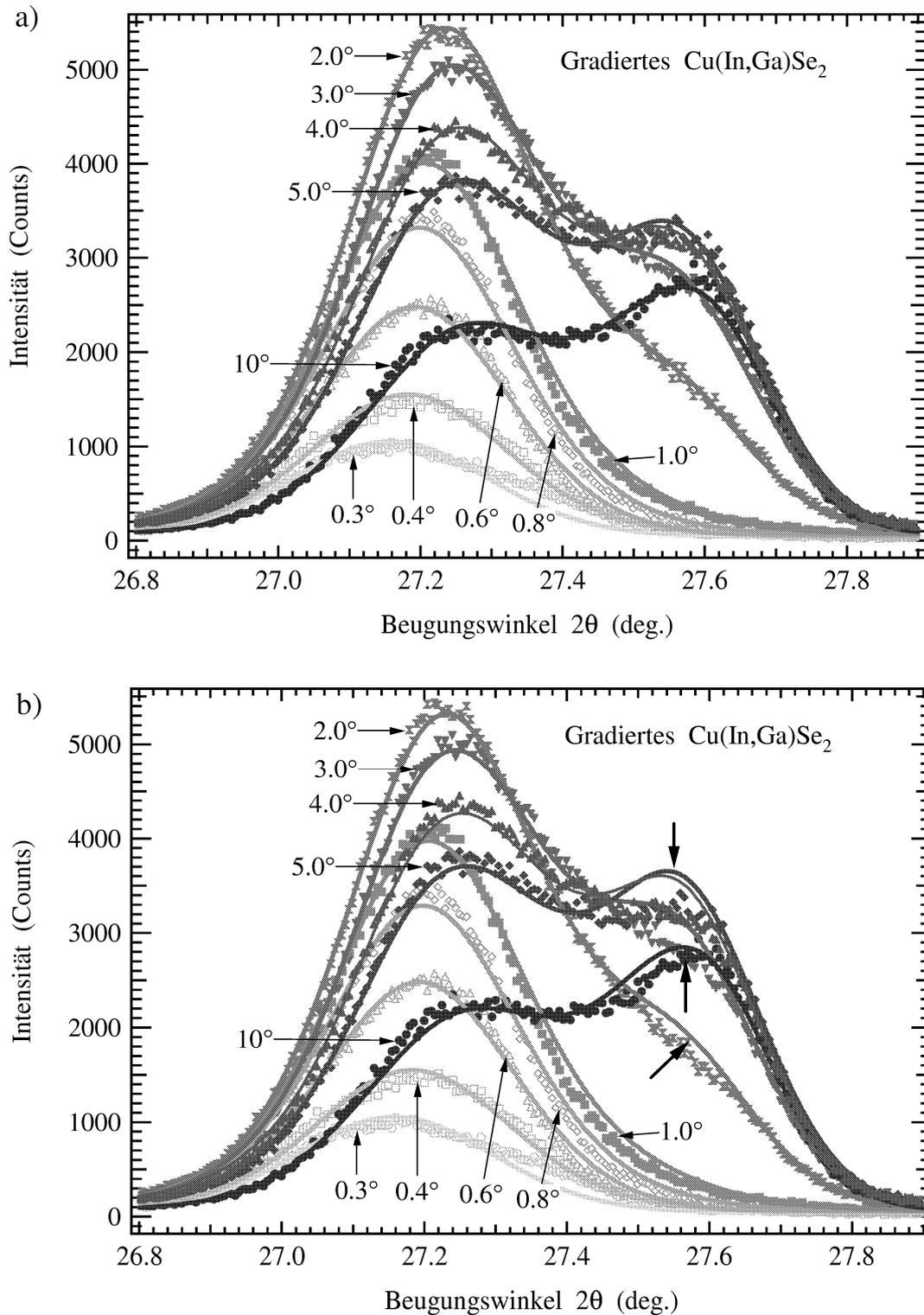


Abbildung 8.6: Gemessene und simulierte Spektren des 112-Reflexes eines Cu(In,Ga)Se_2 -Filmes mit einem Ga-Gradienten. a) Simulation mit optimiertem Ga-Profil. b) Simulation mit dem in der Form unveränderten Ga-Profil aus a), welches aber um 50 nm zur Oberfläche hin verschoben wurde. Die Pfeile bei $2\theta = 27.56^\circ$ deuten auf signifikante Änderungen in den Spektren.

Tiefenempfindlichkeit der Simulation. Um die hohe Empfindlichkeit der simulierten Spektren bezüglich des Verlaufs und der Tiefe des *Ga*-Gradienten zu demonstrieren, wurde eine Simulation mit dem optimierten *Ga*-Diffusionsprofil aus Abb. 8.5 gerechnet, bei welchem der Wendepunkt z_m um genau 50 nm zur Oberfläche hin verschoben ist. Die simulierten Spektren sind zusammen mit den gemessenen Spektren in Abb. 8.6 b) wiedergegeben. Die Übereinstimmung zwischen Simulation und Messung ist in guter Näherung noch gegeben. Es treten aber vor allem bei den Nebenmaxima ($2\theta = 27.56^\circ$) deutlich sichtbare, mit Pfeilen gekennzeichnete, Abweichungen auf.

Damit wird deutlich, dass das Schichtenabsorptionsmodell dazu geeignet ist, Zusammensetzungsänderungen in der Tiefe sehr genau zu lokalisieren. Bestehende SIMS-Tiefenprofile können quantitativ aussagekräftig verfeinert werden. Da der Wendepunkt der *Ga*-Verteilung mit $0.75 \mu\text{m}$ bereits relativ tief unter der Oberfläche liegt, ist die Empfindlichkeit der Modellierung durch den langen Absorptionweg herabgesetzt. Es ist davon auszugehen, dass Zusammensetzungsänderungen, die in kleineren Tiefen auftreten, noch genauer durch die Simulation erfasst werden können. Was das Schichtenabsorptionsmodell in dieser Hinsicht an *Cu(In,Ga)Se₂*-Dünnschichten zu leisten vermag, wird im folgenden Abschnitt ausgeführt.

8.3 Cu-Verarmung der *Cu(In,Ga)Se₂*-Oberfläche

Um das Auftreten einer an *Cu* verarmten Oberflächendefektschicht strukturell nachzuweisen, wurde eine Serie von vier Proben untersucht, die sich im Wesentlichen nur durch das Integral mit EDX bestimmte *cgi*-Verhältnis unterscheiden. In einem einzigen 3P-Prozess konnten reine *CuInSe₂*-Proben gewonnen werden, die ein *cgi*-Verhältnis von 0.87, 0.79 und 0.75 aufweisen (Proben A, B und C). Die Unterschiede der Stöchiometrie sind auf laterale Zusammensetzungsgradienten der bis zu $10 \times 7 \text{ cm}^2$ großen Dünnschicht zurückzuführen². Als stöchiometrische Probe, für die *cgi* = 1 ist, wurde die *Cu*-reich gewachsene und anschließend geätzte Probe aus Abschnitt 8.1 ausgewählt (Probe D). Das *cgi*-Verhältnis von 0.25 beeinträchtigt die Vergleichbarkeit mit den anderen drei reinen *CuInSe₂*-Dünnschichten nicht, da die *Ga*-Verteilung in der Tiefe konstant ist. Alle vier Proben wurden durch einfallswinkelabhängige GIXRD-Messungen untersucht. Mit dem Schichtenabsorptionsmodell wurde anschließend versucht, bei konstanter Halbwertsbreite einen über die Gleichung 8.1 definierten *Cu*-Gradienten an der Oberfläche (Tiefe < 100 nm) zu optimieren.

8.3.1 Morphologie der Oberflächen

Da ein Oberflächeneffekt untersucht werden soll, ist es notwendig die Oberflächenmorphologie der verschiedenen Proben auf Vergleichbarkeit zu überprüfen. Rasterelektronenmikroskopische Aufnahmen unter 10 000facher Vergrößerung von den Proben A, B, C und D sind in Abb. 8.7 einander gegenübergestellt. Die *In*-reichen Proben A, B und C weisen kaum Unterschiede in der Morphologie auf. Sowohl die Größe der Kristallitfacetten als auch die Rauigkeiten sind kaum verschieden. Die

² Der unterschiedliche *Cu*-Gehalt kommt durch laterale Abweichungen der *Cu*-Rate auf der Substratfläche während des Aufdampfens zustande. Diese Abweichungen sind bei punktförmigen Verdampferquellen unvermeidbar, aus materialwissenschaftlicher Sicht aber durchaus erwünscht.

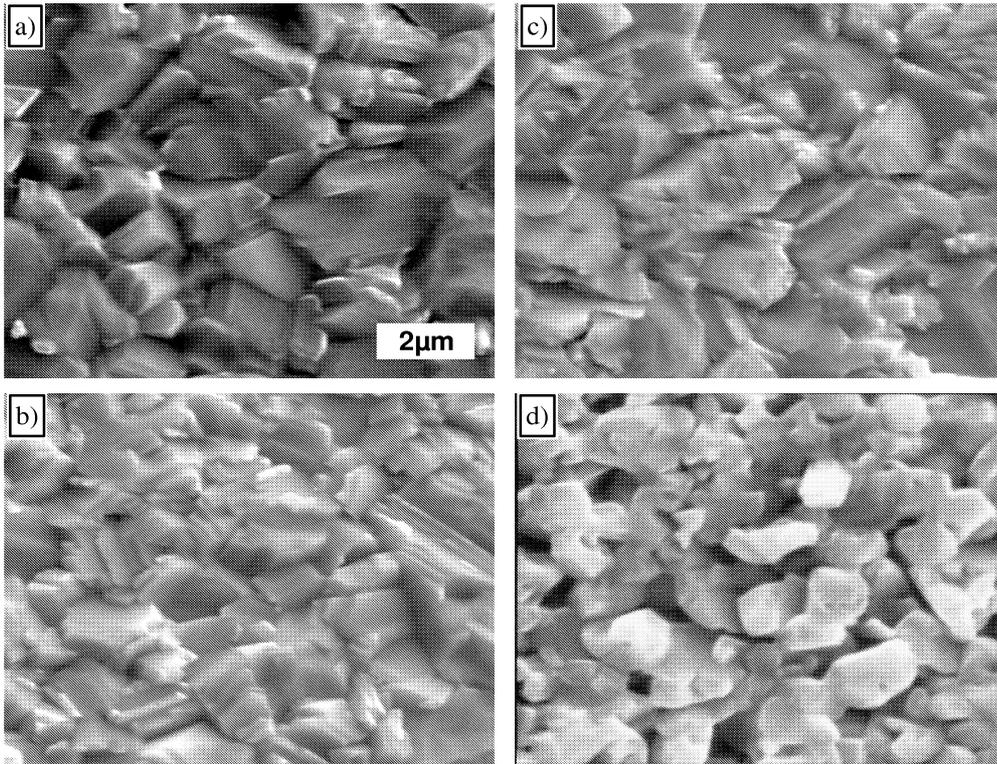


Abbildung 8.7: Oberflächenmorphologie verschieden *In*-reicher $CuInSe_2$ -Proben. a) $cgi = 0.87$, b) $cgi = 0.79$, c) $cgi = 0.75$ und d) $cgi = 1.0$. In d) ist zusätzlich $ggi = 0.25$; in den übrigen drei Proben ist $ggi = 0$.

Cu-reichste Probe A weist jedoch etwas glattere Facetten auf als die Proben B und C. Probe D zeigt jedoch deutlichere Unterschiede im Vergleich zu den Proben A-C. Die Oberfläche erscheint rauer und ist von kleinen Leerräumen unterbrochen, welche vermutlich durch das Ätzen der *Cu*-reichen Sekundärphasen Cu_xSe entstanden sind. Die Kristallite sind etwas kleiner, was auf einen *Ga*-Anteil von 0.25 beruhen kann. Insgesamt sind die Unterschiede aber bei weitem nicht so groß, wie die in Abb. 7.3 a)-c) gezeigten. Die Morphologien der Proben A-D lassen sich in Bezug auf Abb. 7.3 zwischen b) und c) kategorisieren. Dem Vergleich von GIXRD-Spektren sind aufgrund der Morphologie keine Grenzen gesetzt.

8.3.2 Gemessene und simulierte Spektren

In den Abb. 8.8 a)-b) und 8.9 a)-b) sind die gemessenen und simulierten Spektren der vier Proben D, A, C und B in dieser Reihenfolge abgebildet. Die Abszissen sind alle gleich skaliert, und zwar so, dass die Maxima der 10° -Spektren in Abb. 8.8 a)-b) ungefähr zur Deckung kommen. Bei Probe D sind die Reflexe aufgrund des *Ga*-Anteiles zu höheren Beugungswinkeln verschoben. Während die *In*-reichen Proben alle ungefähr gleiche Verhältnisse maximaler Reflexintensitäten aufzuweisen haben, sind signifikante Unterschiede nur bei der Probe D sichtbar. Allerdings bestätigt sich nicht, dass Probe D als entscheidend rauer einzustufen ist, wie ein Vergleich des Intensitätsverhältnisses $I_{10^\circ}/I_{0.3^\circ}$ auf einen Blick belegt. Im Gegensatz zur stöchiometrischen Probe sind bei allen *In*-reichen

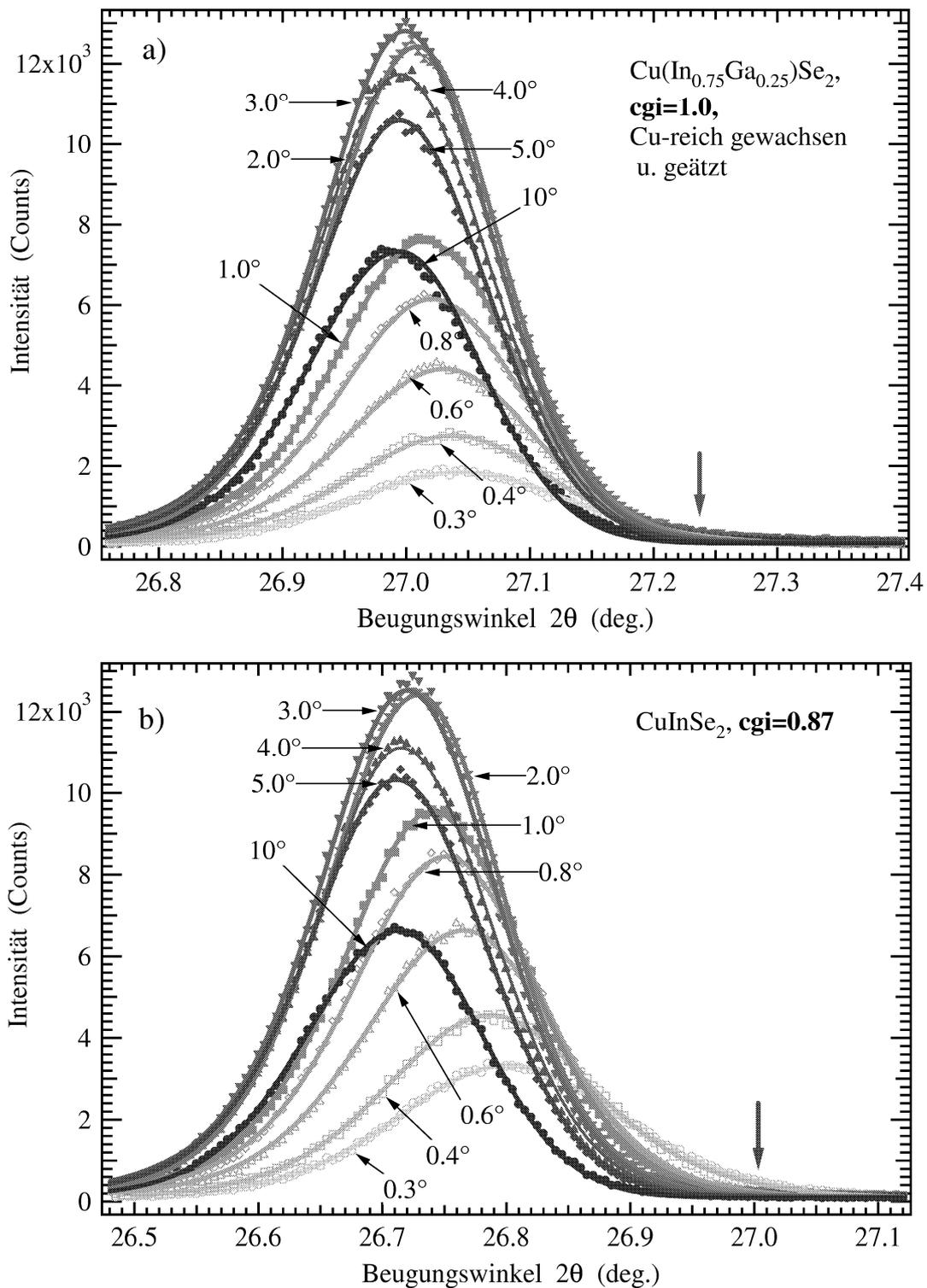


Abbildung 8.8: Gemessene und simulierte Spektren des 112-Reflexes von a) stöchiometrischem $\text{Cu}(\text{In},\text{Ga})\text{Se}_2$ ($\text{cgi} = 1$) und leicht In-reichem CuInSe_2 ($\text{cgi} = 0.87$). Die 2θ -Achsen sind gleich skaliert. Durch den Ga-Gehalt von $\text{ggi} = 0.25$ sind alle Spektren der stöchiometrischen Probe zu höheren Beugungswinkeln verschoben. Durch die Cu-Verarmung der Oberfläche sind die Reflexe der In-reichen Probe bei kleinen Einfallswinkeln nach rechts verschoben (Pfeile). Die integrale Breite nimmt ebenfalls zu.

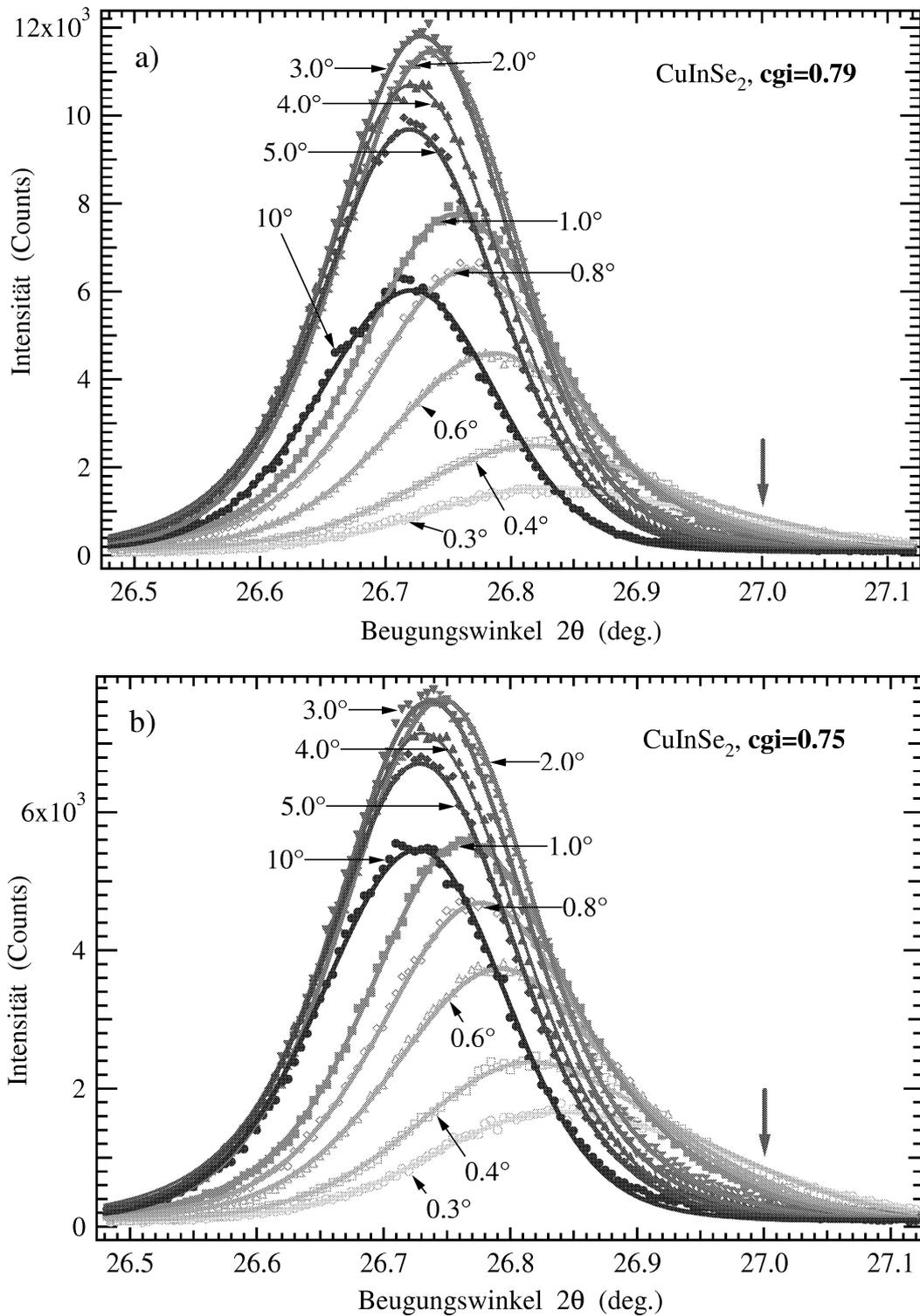


Abbildung 8.9: Gemessene und simulierte Spektren des 112-Reflexes von a) In-reichem CuInSe_2 ($\text{cgi} = 0.79$) und stark In-reichem CuInSe_2 ($\text{cgi} = 0.75$). Die 2θ -Achsen sind gleich skaliert. Durch die zunehmende Cu-Verarmung der Oberfläche sind die Reflexe stark verbreitert und die Spektren bei kleinen Einfallswinkeln sind ebenfalls zunehmend nach rechts verschoben (Pfeile).

Proben die Reflexe bei Einfallswinkeln von 0.3° - 0.8° deutlich zu höheren Beugungswinkeln verschoben. Wie unterhalb des Pfeiles bei $2\theta = 27.0^\circ$ sichtbar wird, nimmt die Reflexverschiebung mit abnehmendem integralen *Cu*-Gehalt zu. Die integrale Breite der Reflexe scheint ebenfalls mit abnehmendem *cgi*-Verhältnis stark zuzunehmen. Insgesamt steigt der Anteil gebeugter Röntgenstrahlung im Winkelbereich von 26.8° - 27.1° stark an. Da im Kapitel 3 die Überprüfung der Gültigkeit des Vegard'schen Gesetzes für das System *CuInSe₂* und *CuIn₃Se₅* erfolgte, liegt es nahe, aufgrund der in der Literatur vorliegenden Befunde [35, 24] die in den Beugungsspektren vorgefundenen Veränderungen alleine auf eine *Cu*-arme Oberfläche zurückzuführen.

***Cu*-Gradienten der Oberfläche.** Mit dem Schichtenabsorptionsmodell wurden *Cu*-Tiefenprofile durch sukzessive Verfeinerung der in Gleichung 8.1 definierten Profilfunktion gewonnen. Der einzige freie Parameter außer dem *Cu*-Tiefenprofil war die über die gesamte Tiefe konstant modellierte Halbwertsbreite³. Die übrigen Tiefenprofile für den *S*-Gehalt (*sse*) und den *Ga*-Gehalt (*ggi*) sind konstant Null, mit Ausnahme von Probe D mit *ggi* = 0.25 (konstant). Im weiteren Verlauf wurden nur die vorgegebenen geometrischen Parameter in die Simulation mit einbezogen, wie die Schichtdicke, die bei der Justage gemessene Probenverkipfung $\Delta\alpha$ und die Länge der Probe. Die Anzahl der simulierten Schichten war bei allen Proben 100, und die Dichte der Schichtung nahm zur Oberfläche hin zu. Die Abbildungen 8.8 a)-b) und 8.9 a)-b) zeigen die simulierten Spektren zusammen mit den gemessenen. Die Simulationen stimmen ausgezeichnet mit den gemessenen Daten überein, was auch durch sehr gute GOF-Werte bestätigt wird ($\text{GOF} \leq 4$). Neben der genauen Wiedergabe der mit einem Pfeil gekennzeichneten Reflexverbreiterung bei kleinen Einfallswinkeln (27.0° Beugungswinkel), ist insbesondere die durch das Modell genau reproduzierte Auffächerung der 2° -, 3° -, 4° - und 5° -Spektren bei Beugungswinkeln zwischen 26.8° und 26.9° hervorzuheben. Abb. 8.10 stellt die optimierten *cgi*-Tiefenprofile für alle vier Proben einander gegenüber. Das hohe Maß an Übereinstimmung zwischen Messung und Simulation ist im Wesentlichen auf die Ausprägung der *Cu*-Profile zurückzuführen. Die Tiefe der *Cu*-verarmten Oberflächendefektschicht nimmt mit abnehmendem und integral gemessenen *Cu*-Gehalt zu. Die Steigung im Wendepunkt der Verteilungen wird mit zunehmender *Cu*-Verarmung kleiner. Es ergibt sich ein konsistentes Bild: Je kleiner der integrale *Cu*-Gehalt, desto weiter und ausgeprägter reicht die Oberflächendefektschicht in die Tiefe. Für die *Cu*-reich gewachsene und anschließend geätzte Probe führt jeder noch so kleine *Cu*-Gradient an der Oberfläche zu einer Verschlechterung des Simulationsergebnisses.

8.3.3 Reflexverschiebung und integrale Breiten

8.3.3.1 Gemessene und simulierte Verschiebung der Maximums-Position

Gemessene Reflexverschiebungen. In Abb. 8.11 a) sind die gemessenen Positionen des Medians der vier Proben gegenüber dem Einfallswinkel aufgetragen. Zu beachten ist, dass die Auswertung des Medians an den gemessenen Daten und an den simulierten Spektren bei guter Übereinstimmung der Reflexform nahezu identische Ergebnisse liefert, da ein Minimierungsalgorithmus jedes einzelne Spektrum so verschiebt, dass die quadratische Abweichung zwischen Simulation und Mes-

³ Die Korrektur der abnehmenden Proben­transparenz wurde über die Auswahlregel 7.8 vorgenommen.

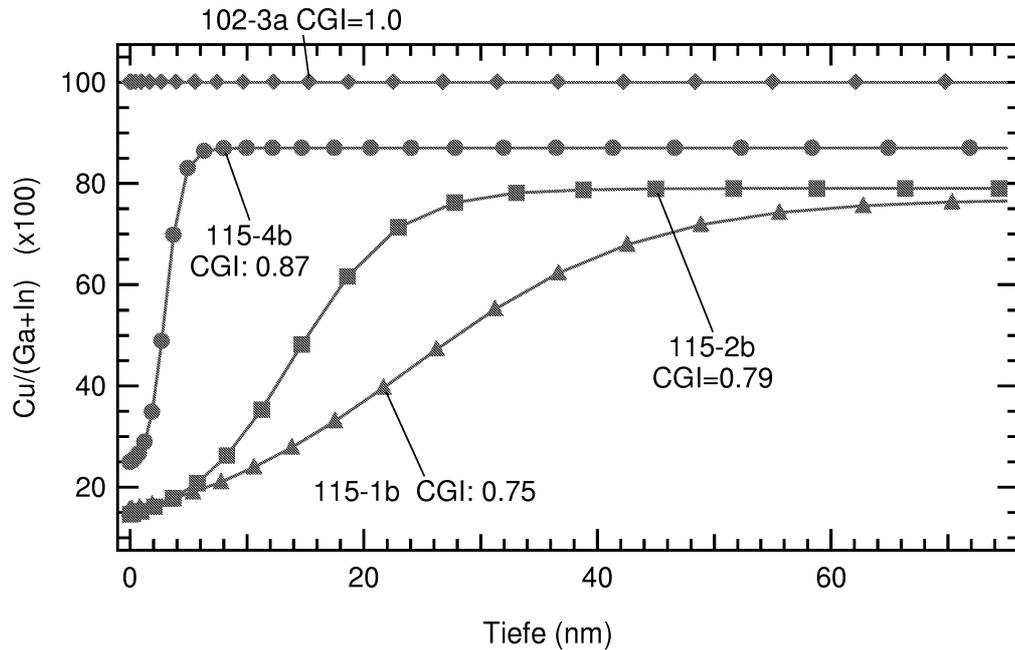
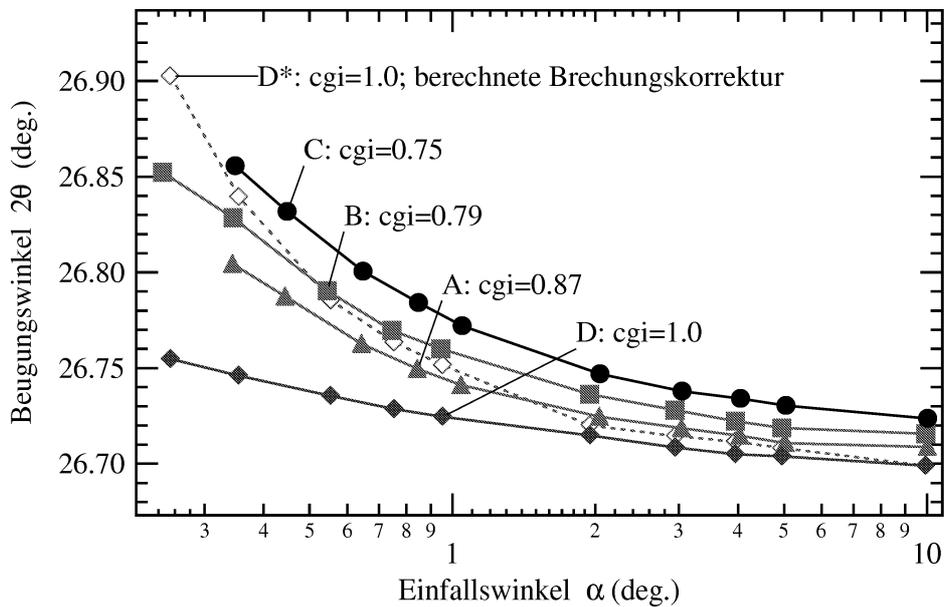


Abbildung 8.10: Verlauf der optimierten Cu-Tiefenprofile der obersten 75 nm von Simulationen verschiedener In-reicher Proben. Die Tiefe der Cu-verarmten Oberflächendefektschicht nimmt mit abnehmendem und integral gemessenen Cu-Gehalt zu. Nur bei der Cu-reich gewachsenen und anschließend geätzten Probe ($cgi = 1.0$) führt jeder noch so kleine Cu-Gradient an der Oberfläche zu einer Verschlechterung des Simulationsergebnisses.

sung minimal wird. Um die Kurven miteinander vergleichen zu können, wurden die Positionen der Cu-reich geätzten Probe um 0.35° zu kleineren Beugungswinkeln nach unten verschoben. Damit ist die Reflexverschiebung durch den Ga-Gehalt von 0.25 kompensiert, und die Ausgangsposition für das 10° -Spektrum entspricht der einer reinen $CuInSe_2$ -Probe mit $cgi = 1$ und $ggi = 0$. Nicht alle Messpunkte der Proben A-D haben gleiche Einfallswinkel. Durch die logarithmische Auftragung tritt bei kleinen Einfallswinkeln die bei der Justage ermittelte Verkippung $\Delta\alpha$ sehr deutlich in Erscheinung. Um komplizierte Umschreibungen bei den winkelabhängigen Messungen zu vermeiden, wird dennoch ein 0.3° -, 0.4° -Spektrum usw. referenziert. Aus Abb. 8.11 a) ergibt sich ein konsistentes Bild für alle einfallswinkelabhängigen Messungen: Je kleiner der integral gemessene Cu-Gehalt, desto stärker ist die relative Reflexverschiebung zwischen dem 0.3° - und dem 10° -Spektrum einer Probe. Die kleine absolut gemessene Reflexverschiebung der 10° -Spektren aller vier Proben befindet sich in Übereinstimmung mit dem Vegard'schen Gesetz für das $CuInSe_2$ - $CuIn_3Se_5$ -System. Der abnehmende integrale Cu-Gehalt hat eine kleinere Gitterkonstante und damit einen höheren Beugungswinkel zur Folge.

Effekt von Cu-Gradient und Brechung. Nachfolgend wird belegt, dass eine Cu-verarmte Oberfläche bei kleinsten Einfallswinkeln ($\alpha \leq 1^\circ$) mindestens ebenso starke Reflexverschiebungen verursachen kann wie die Brechung an einer rauen Oberfläche. In Kurve D* aus Abb. 8.11 a) sind

a)



b)

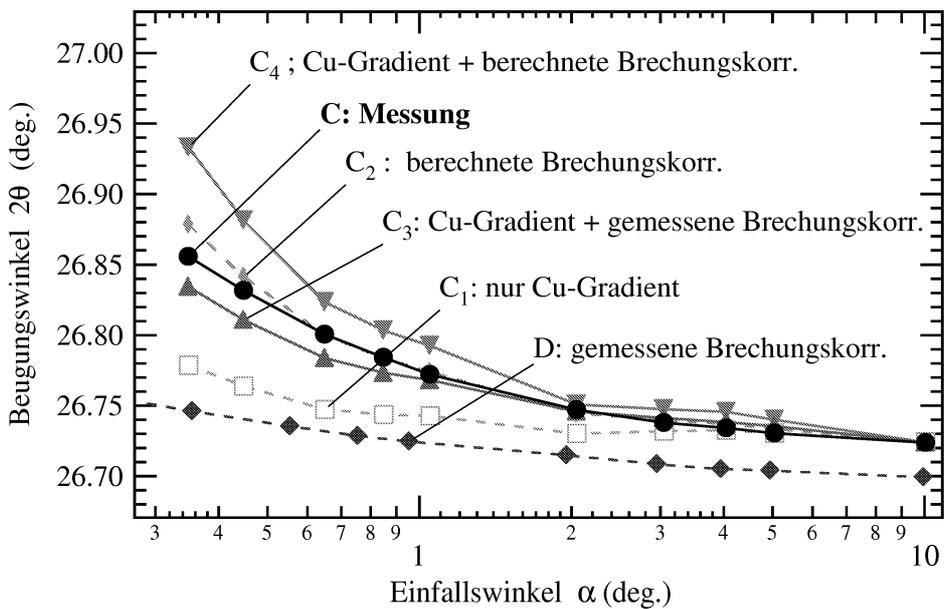


Abbildung 8.11: a) Gemessene Mediane von Proben A-D und nach Gleichung 4.17 berechnete Brechungskorrektur D^* für Probe D. b) Messung der Reflex-Positionen von Probe C mit verschiedenen Abschätzungen des Einflusses von Brechung und Cu-Gradient auf die Reflexverschiebung: C_1 = Simulation der Verschiebung durch den Cu-Gradienten ohne Brechungskorrektur. C_2 = berechnete Verschiebung durch Brechungskorrektur. C_3 = Verschiebung durch den simulierten Cu-Gradienten und die gemessene (teilweise) Brechungskorrektur ($C_1 + D$). C_4 = Verschiebung durch den simulierten Cu-Gradienten und berechnete (volle) Brechungskorrektur ($C_1 + C_2$). Die gemessene (teilweise) Brechungskorrektur ist durch die Kurve D ($cgi = 1.0$) gegeben.

zusätzlich die Mediane dargestellt⁴, die sich für die Probe D durch die Anwendung der Brechungskorrektur nach der Gleichung 4.17 ergeben, wenn man eine idealisierte glatte Oberfläche zugrunde legt⁵. Die Verschiebung der Mediane in Kurve D* wird aufgrund des konstanten Cu-Gehaltes ($cgi = 1.0$) also allein durch die Brechungskorrektur verursacht. Dicht oberhalb des Grenzwinkels der Totalreflexion ($\alpha_T = 0.324^\circ$) beträgt die Verschiebung bei einem Einfallswinkel von 0.355° $\Delta 2\theta = 0.14^\circ$. Die tatsächlich gemessene Verschiebung ist aber um den Faktor 3 kleiner ($\Delta 2\theta = 0.047^\circ$). Dies ist ein klarer Nachweis dafür, dass Oberflächenrauigkeiten (vgl. Abb. 8.7) den Brechungseffekt stark beeinträchtigen. Zusätzlich sind in Abb. 8.11 b) bezüglich der gemessenen Mediane der Probe C aus Abb. 8.11 a) Abschätzungen der Reflexverschiebung aufgrund der Brechung und des Cu-Gradienten gezeigt. Die bei Oberflächenrauigkeiten vorliegende unvollständige Verschiebung durch Brechung ergibt sich aus der gradientenfreien Probe in Kurve D ($cgi = 1.0$). Die Reflexverschiebung, welche allein dem Cu-Gradienten an der Oberfläche zugerechnet werden kann, wurde durch Simulation bestimmt und ist in Kurve C₁ für Probe C dargestellt. Analog zur Probe D kann auch für die exakten Einfallswinkel der Probe C die Brechungskorrektur nach Gleichung 4.17 bestimmt werden. Diese ist in Kurve C₂ wiedergegeben. Die an der Probe D gemessene Brechungskorrektur und der simulierte Effekt der Cu-armen Oberfläche ergeben die Kurve C₃. Die so abgeschätzte Gesamtverschiebung liegt nahe der gemessenen Kurve C, ist aber für alle Einfallswinkel kleiner als C selbst. Diese Abweichung ist jedoch so klein, dass sie durch Unterschiede der Oberflächenrauigkeit von Probe D und C erklärt werden kann (vgl. Abb. 8.7). Die für die Probe C berechnete Brechungskorrektur und der simulierte Effekt der Cu-armen Oberfläche ergibt die Kurve C₄. Alle Verschiebungen in Kurve C₄ sind größer als die Gemessenen der Probe C. Das muss so sein, denn die Verschiebung durch Brechung an einer idealen und glatten Oberfläche zusammen mit dem Effekt des Cu-Gradienten ist die unter diesen Voraussetzungen maximal mögliche.

Insgesamt wird deutlich, dass die Reflexverschiebungen durch eine Cu-arme Oberfläche in der selben Größenordnung liegen, wie die durch Brechung an einer rauen Oberfläche verursachte Reflexverschiebung. Außerdem liegt die gemessene Reflexverschiebung innerhalb der notwendigen Grenzen, die durch die zu kleine gemessene (C₃) und die zu große berechnete Brechungskorrektur (C₄) gesetzt sind. Weiterhin wird deutlich, dass für Reflexverschiebungen durch makroskopische Spannungseffekte bezüglich weiterer Effekte wenig Spielraum vorhanden ist.

Korrelation von Reflexverschiebung und Cu-Gehalt. Kapitel 7 versuchte, die Reflexverschiebung über das Intensitätsverhältnis $I_{max.}(3^\circ)/I_{max.}(0.3^\circ)$ mit der Oberflächenrauigkeit in einen Zusammenhang zu bringen. Dies gelang nur für Proben, die Cu-reich gewachsen und anschließend geätzt worden sind. Diese Dünnschichten weisen also, im Gegensatz zu den im vorangegangenen Abschnitt beschriebenen In-reichen Proben A, B und C, keine Zusammensetzungsgradienten an der

⁴ Da eine Totalreflexion unterhalb des Grenzwinkels ($\alpha_T = 0.324^\circ$) an Cu(In,Ga)Se₂-Dünnschichten nicht beobachtet wurde, ist die nach der Gleichung 4.17 bestimmte Brechungskorrektur auch unterhalb des Grenzwinkels der Totalreflexion angewandt worden. Damit können die vorgefundenen Reflexverschiebungen für alle kleinen Einfallswinkel diskutiert werden.

⁵ Die Reflexe wurden in diesem Fall nach der Berechnung nicht durch den Minimierungsalgorithmus auf die gemessenen Maximums-Positionen verschoben.

Oberfläche auf. Nun lässt sich aber belegen, dass einer an *Cu* verarmten Oberfläche bei *In*-reichen Proben ein universeller Charakter beizumessen ist, wobei die Ausprägung und Tiefe der Oberflächen-defektschicht über den integralen *Cu*-Gehalt gesteuert wird. Es ist sogar so, dass aus den einfallswinkelabhängigen GIXRD-Spektren tendenziell abgelesen werden kann, ob ein *Cu(In,Ga)Se₂*-Dünnsfilm eine ausgeprägte *Cu*-arme Oberflächendefektschicht hat oder nicht. Dies zeigt sich an den Reflexverschiebungen zwischen dem 3°- und dem 0.3°-Spektrum von *In*-reichen Proben, die keine zusätzlich eingebrachten Zusammensetzungsgradienten aufweisen. In Abb. 8.12 ist die Reflexverschiebung gegenüber dem Integral des mit EDX bestimmten *Ga*/*(Ga + In)*-Verhältnisses aufgetragen. Wie die

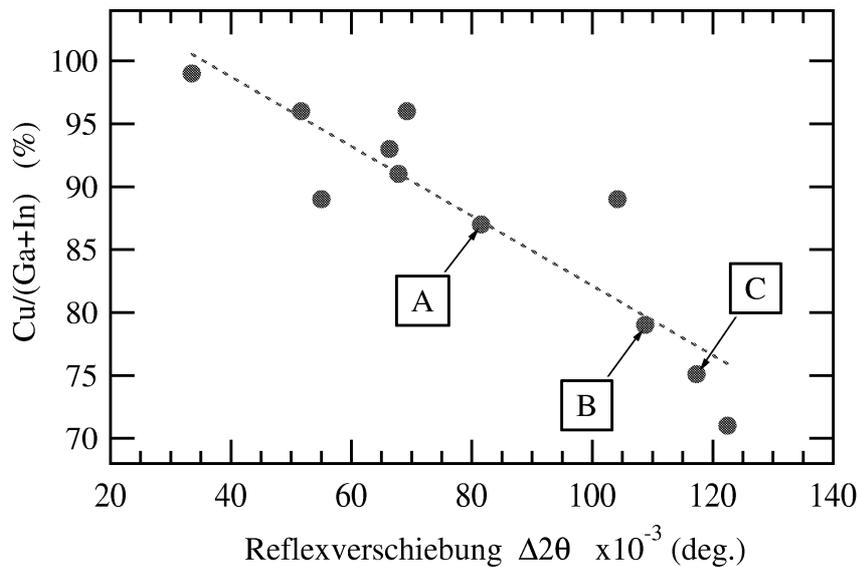


Abbildung 8.12: Korrelation zwischen integral mit EDX gemessenem *Cu*-Gehalt und der Reflexverschiebung an homogen gewachsenen *In*-reichen und *Cu*-reich geätzten Proben. Die drei in diesem Abschnitt beschriebenen *In*-reichen Proben A, B, C erfüllen die Voraussetzungen besonders gut und liegen auf der errechneten Ausgleichsgeraden.

Ausgleichsgerade andeutet, besteht zwischen den Parametern eine signifikante und eindeutige Korrelation. Die in den vorangegangenen Abschnitten beschriebenen *In*-reichen Proben A, B und C erfüllen die Voraussetzungen besonders gut und liegen auf der errechneten Ausgleichsgeraden. Damit ist belegt, dass die Reflexverschiebungen an *In*-reichen Proben ohne zusätzliche Gradienten der Zusammensetzung in engem Zusammenhang mit einer *Cu*-verarmten Oberflächendefektphase zu sehen sind.

8.3.3.2 Gemessene und simulierte integrale Breiten. Inhomogenitäten der Zusammensetzung haben, wie im Kapitel 7 herausgearbeitet wurde, auf die integrale Breite eines Reflexes einen starken Einfluss. Da die zunehmend *Cu*-verarmte Oberfläche auch eine zunehmend starke Inhomogenität der Zusammensetzung bedeutet, ist eine Abhängigkeit der integralen Breite vom Grad der *Cu*-Verarmung an der Oberfläche zu erwarten. Abb. 8.13 stellt die gemessenen und die an den simulierten Spektren ermittelten integralen Breiten einander wieder für alle vier Proben A-D gegenüber.

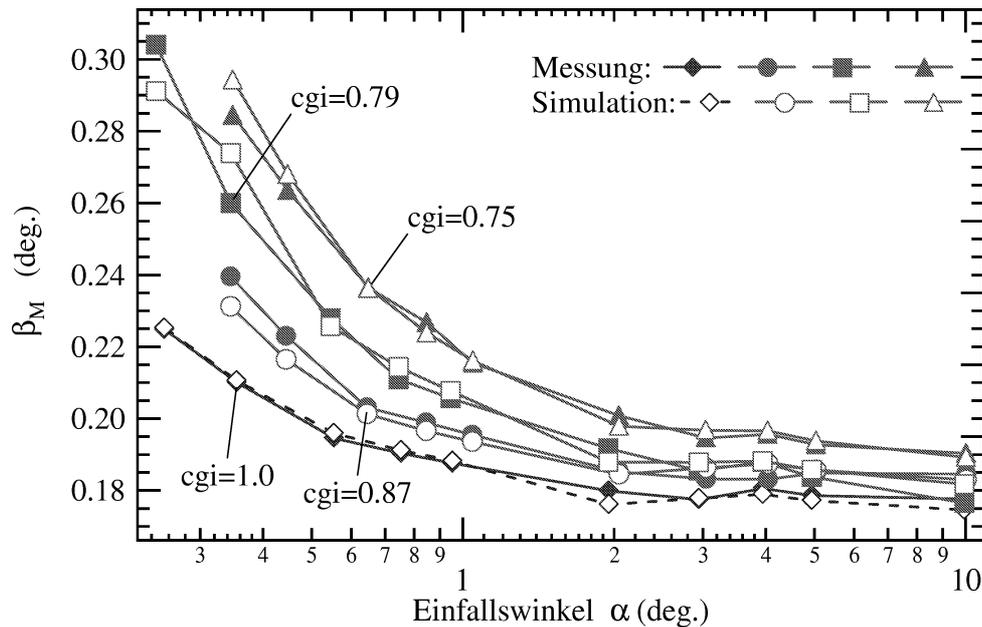


Abbildung 8.13: Gegenüberstellung von gemessenen und simulierten integralen Breiten der Proben A-D in Abhängigkeit vom Einfallswinkel. Für die In-reichen Proben wird der erwartete Zusammenhang zwischen Cu-Verarmung der Oberfläche und integraler Breite bestätigt: je ausgeprägter die Cu-Verarmung, desto größer die bei einem bestimmten Einfallswinkel gemessene integrale Breite der Beugungsreflexe.

Für Probe D ergibt sich gegenüber den in Abb. 8.2 dargestellten integralen Breiten nichts Neues. Die Kurve wurde zu Vergleichszwecken mit den In-reichen Proben A-C in Abb. 8.13 aufgenommen. Für die In-reichen Proben wird der erwartete Zusammenhang zwischen Cu-Verarmung der Oberfläche und integraler Breite bestätigt: je ausgeprägter die Cu-Verarmung, desto größer die bei einem bestimmten Einfallswinkel gemessene integrale Breite der Beugungsreflexe. Dieser Zusammenhang ist zwar nahezu unabhängig vom Einfallswinkel, tritt jedoch am deutlichsten bei kleinsten Einfallswinkeln hervor. Die aus den simulierten Spektren ermittelten integralen Breiten stimmen für die einzelnen Proben unterschiedlichen Cu-Gehaltes sehr gut überein. Alle In-reichen Proben (A-C) wurden mit einer über die Tiefe konstanten Halbwertsbreite modelliert, die kleiner als 0.170° ist. Damit sind die Halbwertsbreiten für Einfallswinkel $\alpha \leq 1.5^\circ$ durch die Auswahlregel aus der Gleichung 7.8 und den Werten in Tabelle 7.1 bestimmt. Das hohe Maß der Übereinstimmung zwischen den gemessenen und den simulierten integralen Breiten kann als weiterer Nachweis gewertet werden, dass das Schichtenabsorptionsmodell alle maßgeblichen Faktoren richtig erfasst. Abweichungen, die insbesondere bei kleinen Einfallswinkeln zu erkennen sind, können auf nicht berücksichtigte Effekte, wie mikroskopische Verspannungen, oder auf Fehler in der Kompensation einfallswinkelabhängiger Probenanparenz, die auf unterschiedlichen Oberflächenrauigkeiten beruhen, zurückgeführt werden.

8.3.4 Qualität der Modellierung

Zur quantitativen Beurteilung der Genauigkeit der Anpassung sind der R_p -Wert und der Goodness of Fit (GOF) nur bedingt brauchbar, da bei Einzelreflexanalysen der Anteil von Datenpunkten im Untergrund und der Anteil von Datenpunkten, die zum Reflex selbst gehören, stark schwanken können. Den genannten Werten kommt also nur für sukzessive Verfeinerungen an ein und demselben Messdatensatz eine Bedeutung zu. Veränderungen der Modellierungsparameter, die zu einer Vergrößerung der Gütefaktoren führen, werden verworfen. Veränderungen, die zu einer Verkleinerung der Gütefaktoren führen, können bei verbesserter visueller Übereinstimmung beibehalten werden. Mithin ist es nicht sinnvoll, die verschiedenen GOF-Werte der Simulationen zum Vergleich anzugeben. Um dennoch beurteilen zu können, ob die Anpassung gelungen ist und keine prinzipiellen oder systematischen Fehler vorliegen, ist es am besten, die Differenz zwischen simulierten und gemessenen Spektren direkt zu beurteilen. Da dies bei jeweils zehn einfallswinkelabhängigen Spektren und vier Simulationen eine sehr platzraubende Unterfangen ist, wurde auf die absolute Auftragung des Beugungswinkels verzichtet. Die gemessenen und simulierten Spektren wurden mit zunehmendem Einfallswinkel einfach aneinander gereiht. Bei dieser Art der Darstellung kann die Differenz direkt den jeweiligen Spektren zugeordnet werden. Abb. 8.14 a)-c) stellt die Spektren mit dreifach vergrößerter Differenz für die drei *In*-reichen Proben A, B und C für kleine Einfallswinkel bis 0.8° einander gegenüber. Die übrigen Messungen bei größeren Einfallswinkeln sind in Abb. 8.15 a)-c) nach demselben Schema aneinander gereiht. Die Differenz zwischen gemessenen und simulierten Spektren ist für alle drei Proben im Bereich kleiner Einfallswinkel sehr klein. Die Übereinstimmung der Form von simulierten und gemessenen Reflexen ist sehr gut. Es sind keine systematischen Abweichungen erkennbar, die auf einen signifikanten Fehler in der Beschreibung der Reflexform oder bei der Modellierung hinweisen. Lediglich bei den 0.4° -Spektren scheint die rechte Schulter der simulierten Reflexe zu stark zu sein. Bei den Spektren mit größeren Einfallswinkeln liegen erheblichere Abweichungen nur für die 3° - und 4° -Spektren vor. Es wird aber noch einmal betont, dass die Differenz im Vergleich zum Maßstab der simulierten und gemessenen Spektren in dreifacher Vergrößerung aufgetragen ist. Die durch den Pfeil markierte starke Abweichung an manchen Peaktails ist ein Artefakt der auf einen kleineren Winkelbereich eingeschränkten Simulation. Im Vergleich zur Rietveld-Verfeinerung eines Pulverspektrums sind die Abweichungen in dieser willkürlichen Auftragung eher gering.

8.3.5 Zusammenfassung

Dieser Abschnitt hat mit Hilfe des Schichtenabsorptionsmodells gezeigt, dass sich die Reflexverschiebungen und -verbreiterungen an *In*-reichen Proben durch eine *Cu*-verarmte Oberflächenschicht mit einer Ausdehnung von 5-50 nm in hervorragender Übereinstimmung mit den gemessenen Spektren erklären lassen. Werden die von Schmid *et al.* [35] an *In*-reich gewachsenen $Cu(In,Ga)Se_2$ -Dünnschichten nachgewiesenen *Cu*-armen Oberflächenstöchiometrien mit in Betracht gezogen, ergibt sich zwingend, dass die in den Beugungsspektren gefundenen Veränderungen als struktureller Nachweis einer *Cu*-armen Oberflächendefektphase zu bewerten sind.

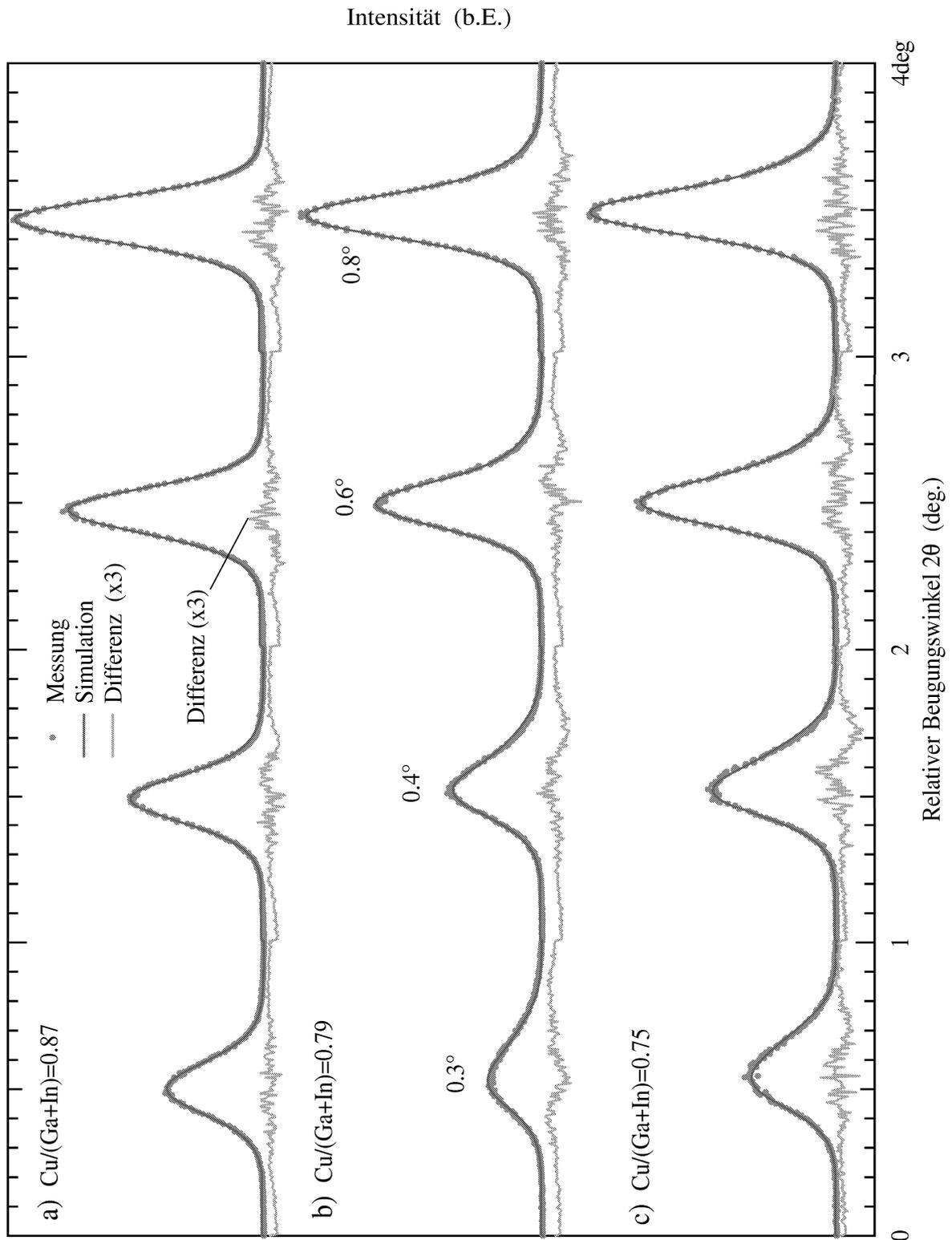


Abbildung 8.14: Gemessene und simulierte Beugungsspektren In-reicher Proben für Einfallswinkel $< 1^\circ$. a) $c_{\text{gi}} = 0.87$, b) $c_{\text{gi}} = 0.79$, c) $c_{\text{gi}} = 0.75$. Die Differenz zwischen Simulation und Messung ist gegenüber dem Maßstab der Messung dreifach vergrößert. Die aneinander gereihten Spektren sind gegenüber einem relativen Beugungswinkel aufgetragen.

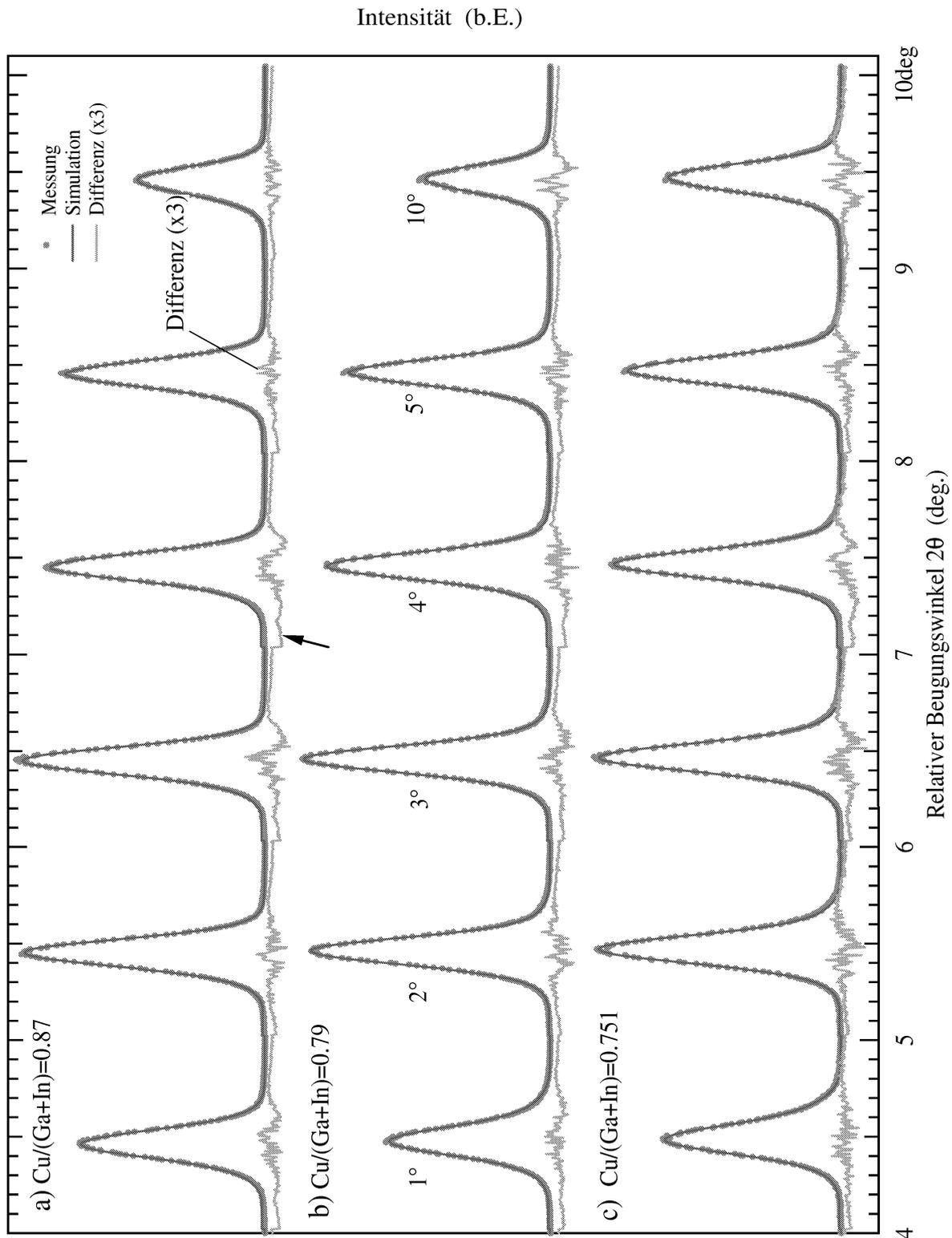


Abbildung 8.15: Gemessene und simulierte Beugungsspektren In-reicher Proben für Einfallswinkel $> 0.8^\circ$. a) $c_{qi} = 0.87$, b) $c_{qi} = 0.79$, c) $c_{qi} = 0.75$. Die Differenz zwischen Simulation und Messung ist gegenüber dem Maßstab der Messung dreifach vergrößert. Die durch den Pfeil markierte starke Abweichung an manchen Peaktails ist ein Artefakt der auf einen kleineren Winkelbereich beschränkten Simulation.

Ausblick

Die im letzten Kapitel beschriebenen Simulationen gemessener GIXRD-Spektren befassen sich ausschließlich mit dem $Cu(In,Ga)(S,Se)_2$ -Legierungssystem. Die Modellierungsmethode muss aber nicht auf $Cu(In,Ga)(S,Se)_2$ -Dünnschichten beschränkt bleiben. Die Erweiterung des Simulationsprogrammes auf mehrere Reflexe unterschiedlicher Phasen ist problemlos möglich. In der Simulation wird dann jeder Schicht zusätzlich noch eine Phasenzugehörigkeit zugeordnet. Damit kann eine qualitative und quantitative Erfassung von Schichtstapeln in Gegenwart verschiedener Materialien durchgeführt werden, wie es z.B. in Abb. 6.3 angedeutet ist. Hierbei handelt es sich in gewisser Weise sogar um den einfacheren Anwendungsfall, weil sich die quantitative Analyse auf die Auswertung integrierter Intensitäten von Reflexen ohne Überlappungsbereich beschränkt.

Die Einbeziehung mehrerer Phasen ist wiederum für die Modellierung von Beugungsspektren an $Cu(In,Ga)(S,Se)_2$ -Proben, die einem Herstellungsprozess mit Cu -reichem Wachstum entspringen, sehr nützlich, da es während des Schichtwachstums über längere Zeiträume eine Koexistenz mehrerer Phasen (In_2Se_3 , $Cu_{2-x}Se$ und $CuInSe_2$) geben kann. Diese Arbeit liefert also auch das notwendige Werkzeug, um beispielsweise die Dynamik des komplizierten Rekristallisationsprozesses, der zu qualitativ hochwertigen $Cu(In,Ga)Se_2$ -Solarzellen führt, systematisch in einer Reihe von Abbruchexperimenten zu untersuchen.

Eine weitere Anwendung des Modellierungsalgorithmus besteht in der eingehenden Untersuchung von Oberflächenrauigkeiten und deren Einfluss auf die Brechung von Röntgenstrahlen bei kleinen Einfallswinkeln. In dieser Arbeit konnte ja auf eine genaue Quantifizierung der Effekte verzichtet werden. Da zu diesem Thema bisher kaum Veröffentlichungen zu finden sind, wäre es aus wissenschaftlicher Sicht sehr nützlich, wenn Oberflächenrauigkeiten und Brechungseffekte in Zukunft genau quantifiziert werden könnten. Ebenso wäre auch die Untersuchung von Verspannungen an geeigneten polykristallinen Proben mit Hilfe der Modellierung eine interessante Aufgabe für die Zukunft. Allerdings setzen solche Untersuchungen genauer definierbare Oberflächenmorphologien voraus.

Schließlich ist es möglich, die Verfeinerung von strukturellen Tiefenprofilen zu automatisieren. Dies würde ganz analog zum Verfahren nach Rietveld verlaufen. Anstatt die Strukturdaten der Elementarzelle zu verfeinern, würden eben strukturelle Tiefenprofile der Zusammensetzung, der Orientierung oder der Halbwertsbreite usw. verfeinert. Prinzipiell erfolgt die Automatisierung dieses Vorganges durch die Minimierung der quadratischen Abweichung von simulierten und gemessenen Spektren. Dazu ist es jedoch notwendig, den bestehenden Algorithmus umzuprogrammieren, um ihn für diesen Zweck zu beschleunigen. Auf diese Weise ließe sich in der Produktion von $Cu(In,Ga)(S,Se)_2$ -Solarzellen eine hochwertige Qualitätskontrolle von in der Tiefe gradierten $Cu(In,Ga)(S,Se)_2$ -Dünnschichten realisieren.