Abschlussbericht

Zuwendungsempfänger: Förderkennzeichen:

Forschungsverbund Berlin e. V. **0329745H**

Vorhabenbezeichnung:

Verbundprojekt
„Entwicklung von multikristallinem Solarsilicium mit hohem photovoltaischen Wirkungsgrad und verbesserter Prozessausbeute“
(GESSICA II)

Teilprojekt
„Strukturelle Charakterisierung von Defekten in Randschichten von im Blockgussverfahren hergestellten Solarsilicium“

Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2001 – 31.12.2004

Ausführende Stelle: Institut für Kristallzüchtung
Max-Born-Str. 2
12489 Berlin

Projektleiter: Dr. Klaus Irmscher Tel.: 030-6392-3090
Fax: 030-6392-3003
e-mail: irmscher@ikz-berlin.de

Bearbeiter: Dr. Jürgen Doerschel
Dr. Uta Juda
Dipl.-Ing. Martin Naumann
Dr. Matthias Roßberg

I. Kurze Darstellung

1. Aufgabenstellung

Kristallines Silicium ist derzeit das wichtigste Ausgangsmaterial zur Herstellung von Solarzellen. Die Gründe dafür liegen unter anderem in der erfolgreichen Forschung zur Steigerung des Wirkungsgrades und in den zu anderen Verfahren vergleichbar niedrigen Herstellungskosten. Gegenüber herkömmlichen Energieträgern sind jedoch die Energiekosten je produzierter Kilowattstunde Solarstrom noch erheblich höher, was vor allem aus dem gegenwärtig noch zu niedrigen Wirkungsgrad und den hohen Produktionskosten resultiert.

Gegenwärtig werden Solarzellen vorrangig aus multikristallinem (mc) Silicium hergestellt. Dabei spielt das durch gerichtete Erstarrung in Form großer Blöcke gewonnene mc-Si eine dominierende Rolle. Den geringen Produktionskosten stehen hier jedoch Nachteile in den photovoltaischen Eigenschaften gegenüber. Der geringere Wirkungsgrad im Vergleich zu den aus einkristallinem Silicium gefertigten Solarzellen ergibt sich aus der verfahrensbedingten höheren Dichte kristallografischer Defekte und bisher nicht vermeidbarer Verunreinigungen, die die Ursache für eine erhöhte Konzentration an effektiven Rekombinationszentren darstellen. Diese Defekte sind innerhalb eines mc-Si-Blockes und der daraus geschnittenen Scheiben sehr stark inhomogen verteilt.

Halbleitersilicium ist eines der am meisten und besten untersuchten Materialien mit technischer Bedeutung. Einzelne Defekte und deren Auswirkungen auf das elektrische Verhalten des Materials sind detailliert untersucht worden, zumeist an einkristallinem Silicium für Anwendungen in der Elektronik. Für den Einsatz des Materials für Solarzellen ergeben sich jedoch andere Qualitätskriterien als für die Mikroelektronik.
Vor allem beim multikristallinen Silicium liegt ein kompliziertes Zusammenspiel verschiedener Defekte untereinander und mit Verunreinigungen vor. Art und Verteilung der Defekte werden vorwiegend durch die Verunreinigungen des Ausgangsmaterials und durch den Kristallisationsprozess bestimmt. Darüber hinaus sind Zusammenhänge zwischen Defektstruktur und den Einflüssen des Erstarrungsprozesses nicht vollständig geklärt. Die Kenntnis dieser Zusammenhänge soll unmittelbare Verbesserungen der Produktionstechnologien nach sich ziehen und so zum Fortschritt beitragen. Eine produktionsbegleitende flexible Diagnostik ist daher unerlässlich für die Erfüllung der Arbeitsziele.

Die Untersuchungen an den Siliciumblöcken, vor allem der Randbereiche hatten das Ziel, die wichtigsten wirkungsgradbegrenzenden Defekte in den Randbereichen aufzuspüren, sie chemisch, physikalisch und kristallografisch zu charakterisieren, ihre Entstehung aufzuklären und die Erkenntnisse mit bereits vorhandenen Ergebnissen zu vergleichen. Hierdurch sollte es möglich sein, einen Beitrag zu liefern, um gestörte Zonen im Boden- und Randbereich des Erstarrungsblockes so gering wie möglich zu halten und damit die Materialqualität und letztendlich die Produktionsausbeute zu verbessern.

2. Voraussetzung, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde

Erfahrungen auf dem Gebiet der Untersuchung multikristallinen Siliciums für die Photovoltaik lagen bei Mitarbeitern aus der Arbeitsgruppe Charakterisierung des IKZ durch Mitwirkung an Vorgänger-Projekten zu dieser Thematik vor. Ein weiterer Vorteil für die Durchführung des Vorhabens ergab sich aus der Möglichkeit, gezielt mehrere verschiedene Messmethoden einsetzen zu können. Die ausgewählten Verfahren, die im folgenden Punkt aufgeführt sind und später noch ausführlich beschrieben werden, wurden von erfahrenen Mitarbeitern betrieben, die in engem fachlichen Kontakt miteinander die gewonnenen Ergebnisse austauschen und diskutieren konnten. Diese unmittelbare Wechselwirkung der Kollegen sowohl innerhalb der Arbeitsgruppe Charakterisierung als auch mit weiteren Mitarbeitern des IKZ, trug wesentlich zur effektiven und zügigen Bearbeitung der Aufgabenstellung bei.

3. Planung und Ablauf des Vorhabens

Die Arbeiten sollten mit den unten angeführten Methoden an den im jeweiligen Zeitraum von den Projektpartnern bereitgestellten Proben durchgeführt werden: in der Einleitungsphase (2. Halbjahr 2001) an Probenmaterial der bisherigen Produktion, danach in der Entwicklungsphase (1. Halbjahr 2002 – 1. Halbjahr 2003) an Modell-Proben der TU Bergakademie Freiberg und an Industriematerial, hergestellt unter verschiedenen Kristallisationsbedingungen (siehe Teilprojekt der Deutschen Solar GmbH), und schließlich in der Endphase (1. Halbjahr 2003 - Ende 2004) an Material der geplanten neuen Produktionsserie.
Für die Modell-Proben der TU Bergakademie Freiberg zeigte sich jedoch, dass ihre Einbeziehung in die im IKZ-Teilprojekt bearbeiteten Fragestellungen nicht sinnvoll war. Der betreffende Projektpartner hatte an den Proben drastisch reduzierte Lebensdauern der Minoritätsladungsträger festgestellt, die wahrscheinlich auf einen erhöhten Eintrag von metallischen Verunreinigungen während der Kristallisationsversuche zurückzuführen waren. Dadurch waren keine Beiträge zur Aufklärung des Zusammenhangs der elektrischen Eigenschaften mit strukturellen Defekten und nichtmetallischen Verunreinigungen im technologisch relevanten Blockgussmaterial zu erwarten. (Diese Aussage berührt nicht die Relevanz der Kristallisationsversuche für die Fragestellung geeigneter Kokillenwandbeschichtungen, die jedoch nicht Gegenstand der IKZ-Untersuchungen war.)

Folgende methodische Arbeitsschwerpunkte waren geplant und wurden durchgeführt:

Mikroskopische Untersuchung angeätzter Defekte und Infrarot(IR)-Mikroskopie
Die Anwendung verschiedener Ätzmittel und –techniken ist seit langem als geeignete Methode zur Sichtbarmachung von Defekten in Silicium bekannt und wird z.Z. weiterentwickelt. Unterstützt wird dieser Punkt durch die bereits in den o.a. Projekten gewonnenen Erkenntnisse. Für die Betrachtungen stand ein konventionelles Lichtmikroskop (Auflicht, Durchlicht, IR, Hell- und Dunkelfeld, Differenzieller Interferenzkontrast) mit einem AFM (Atomic Force Microscopy)-Zusatzmodul zur Verfügung. Leistungsfähige Bildverarbeitungssoftware, die auch zur Auswertung makroskopischer Defektverteilungen eingesetzt werden kann, ermöglichte eine schnelle Auswertung der Ergebnisse.

Laser Scattering Tomographie (LST)
Ein LST-Messplatz wurde im IKZ aufgebaut und hat sich bereits für Untersuchungen an Halbleitern bewährt. Diese Methode ermöglicht ortsaufgelöste Aussagen zum Auftreten submikroskopischer Teilchen von Fremdphasen. Solche Ausscheidungsvorgänge stehen oftmals in Zusammenhang mit Strukturdefekten und elektrisch wirksamen Störungen.

Ladungsträgerlebensdauermessung
Die Bewertung der elektrischen Eigenschaften des mc-Si wurde mit Hilfe der Messung der Minoritätsladungsträgerlebensdauer vorgenommen. Die ortsaufgelöste Messung ermöglichte die Aufnahme von Ladungsträgerlebensdauer-Verteilungen (τ-Maps) und deren Korrelation mit den Verteilungen struktureller Defekte.
Es stand eine Apparatur zur Verfügung, die das Abklingen der Fotoleitung nach Laserpulsanregung kontaktlos an Hand der zeitlichen Änderung der Reflexion einer auf die Probe eingestrahlten Mikrowelle misst (µPCD).

Im Verlaufe des Projektes zeigte sich, dass es nützlich und wichtig war, auch andere im IKZ zur Verfügung stehende Charakterisierungsmethoden einzusetzen. Dazu zählten *FTIR-Spektroskopie* zur Bestimmung von Konzentrationsprofilen von Verunreinigungen (Sauerstoff, Kohlenstoff, Stickstoff), *Rasterelektronenmikroskopie*, speziell *Energiedispersive Röntgenspektroskopie (EDX)* zur chemischen Analyse von Fremdstoffphasen (Ausscheidungen) im Material, *DLTS-Messungen* zur Bestimmung von Übergangsmetall-Verunreinigungen und die *Lateral Photovoltage Scanning (LPS)-Methode* zur Sichtbarmachung von Dotierstreifungen, die den Phasengrenzverlauf im wachsenden Kristall wiedergeben. Die Ergebnisse vor allem der letztgenannten Methode (LPS) stießen auf ein großes Interesse von Seiten der anderen Verbundpartner (vor allem bei der Deutsche Solar AG als Materialhersteller und der Access e.V., die den Kristallisationsprozess modellieren). Diese Untersuchungen sind sicherlich auch für künftige Projekte von großem Nutzen.

4. Wissenschaftlicher und technischer Stand, an dem angeknüpft wurde

Im Rahmen verschiedener Forschungsprojekte zur Materialentwicklung für photovoltaische Anwendungen ist es in den letzten Jahren möglich geworden, den Wirkungsgrad von multikristallinem Solarsilicium dem von einkristallinem Silicium anzunähern. Der Einfluss von Materialeigenschaften auf den Wirkungsgrad wurde intensiv untersucht und publiziert [1-5]. Projekte auf diesem Gebiet, an denen Mitarbeiter der Arbeitsgruppe Charakterisierung des IKZ beteiligt waren, sind in [6-8] zitiert.
Im wesentlichen sind die wirkungsgradbeeinflussenden Defekte in multikristallinem Material die folgenden: Versetzungen, Korngrenzen, metallische und nichtmetallische Verunreinigungen und Präzipitate. Korngrenzen und Versetzungen werden gegenwärtig als die wesentlichsten, den Wirkungsgrad beeinflussenden, Kristalldefekte angesehen. Die Korngrößen der Einzelkristallite im multikristallinen Silicium betragen einige Millimeter bis zu wenigen Zentimetern. Die Korngröße hat in diesem Bereich im allgemeinen keinen Einfluss auf den Wirkungsgrad. Von Bedeutung sind hierbei die kristallografische Struktur und die Dekoration der Korngrenzen [2]. In diesen Bereichen können freie Ladungsträger rekombinieren. Es wurde jedoch festgestellt, dass nicht alle Korngrenzen rekombinationsaktiv sind. Mit Ausscheidungen dekorier-

te Korngrenzen besitzen meist eine erhöhte Rekombinationsaktivität.
Neben den elektrisch aktiven Korngrenzen tragen Versetzungen innerhalb der Körner zu einer wesentlichen Herabsetzung der Ladungsträgerlebensdauer bei. Die Versetzungsdichte in multikristallinem Silicium liegt bei etwa 10^4 bis 10^6 cm^{-2}, also etwa 1000-mal höher als im einkristallinen Material für die Photovoltaik (< 100 cm^{-2}). In Gebieten mit erhöhter Versetzungsdichte nimmt die Ladungsträgerlebensdauer beträchtlich ab. In blockgegossenem Silicium treten sogenannte „Defektschläuche" auf, die sich durch den gesamten Block entlang der Erstarrungsrichtung ziehen können und aus einem Gewirr sehr vieler Versetzungen bestehen. In solchen Gebieten ist die Ladungsträgerlebensdauer auf wenige Mikrosekunden reduziert. Die Struktur dieser Versetzungsschläuche scheint im wesentlichen bekannt zu sein, während die Ursachen ihrer Entstehung noch nicht geklärt werden konnten [6].
Verunreinigungen haben nicht nur als Dekoration von Versetzungen und Korngrenzen sondern auch als Störstellen in Form von Punktdefekten starken Einfluss auf den Wirkungsgrad. Man unterscheidet grundsätzlich zwischen metallischen (z.B. Eisen, Kupfer, Chrom) und nichtmetallischen (z.B. Sauerstoff, Wasserstoff, Stickstoff, Kohlenstoff) Verunreinigungen. Sie können sowohl isoliert als auch nach der Bildung von Komplexen die Lebensdauer beträchtlich herabsetzen. Insbesondere Übergangsmetalle rufen tiefe Störstellen hervor, die meist effektive Rekombinationszentren für freie Ladungsträger darstellen. Elektrisch aktive Übergangsmetallkonzentrationen über 10^{12} cm^{-3} sollten unbedingt vermieden werden. Dies stellt hohe Anforderungen an die bei der Herstellung verwendeten Gießtechnologien.

Bisher stand die Effektivität der nach dem Blockgussverfahren hergestellten Solarzellen in Bezug auf den zentralen Teil des Blocks im Mittelpunkt des Interesses. Üblicherweise werden Boden-, Kappen- und Seitenwandbereiche der erstarrten Siliciumblöcke verworfen, da ihre Qualität aufgrund hoher Defektdichte und möglicher Verunreinigung durch die Tiegelwand nicht für die Solarzellenproduktion geeignet war. Durch Variation der Gießtechniken (Projektpartner) sollten die Einflussgrößen festgestellt werden, die die Qualität der Randstücke herabsetzen.
Für die Untersuchungen der Randbereiche bot es sich an, das gleiche Methodenspektrum einzusetzen, das in den Berichten [6-8] angewandt wurde. Inzwischen erzielte Fortschritte in den Messmethoden sollten dabei ausgenutzt werden.

[1] A.Voigt
Blockgegossenes Silicium für die Photovoltaik: Struktur und elektrische Eigenschaften von Defekten
Mikrostrukturelle Materialforschung 2 (1996)

[2] A. Voigt, E. Wolf, H.P. Strunk
Grain Orientation and Grain Boundaries in Cast Multicrystalline Silicon
Material Science and Engineering **B54** (1998) 202

[3] O. Krüger, M. Kittler, C. Hässler, W. Koch
Interaction of Crystal Defects with p-n junctions in Multicrystalline Silicon Solar Cells
Solid State Phenomena **69-70** (1999)

[4] H.J. Möller, D. Yang, S. Riedel, M. Werner, D. Wolf
Oxygen, Carbon and Nitrogen in Multicrystalline Silicon
NREL Report SP-413-21551 (1996)

[5] Abschlussbericht zum Verbundprojekt GESSICA: Entwicklung von multikristallinem Solarsilicium mit hohem photovoltaischen Wirkungsgrad und verbesserter Prozessausbeute mittels semikontinuierlichem Blockguss (BMBF Förderkennzeichen 0329745A, Laufzeit 01.10.1996 - 31.12.2000)

[6] Abschlussbericht zum Verbundprojekt: Multikristalline Siliciummaterialien für effiziente Solarzellen: Erarbeitung von Handlungsstrategien mittels Experiment und Modellbildung (BMBF Förderkennzeichen 0329743 A, B, C, D, Laufzeit 01.10.1996 - 03.09.1999)
Teilprojekt 2B Unterprojekt: Kristallographische Analytik, S. 9-16 bis 9-31

[7] Verbundprojekt: Defekte in multikristallinem Silicium für Solarzellen (Förderkennzeichen des BMBF 0329107 A-H) Abschluss 1994
Teilprojekt : Hochreines multikristallines Silizium (0329107 G), S. 2-2 bis 2-25

[8] Verbundprojekt: Verbesserung des Materialverständnisses von multikristallinem Silicium für Solarzellen: Defekte in Silicium (Förderkennzeichen des BMBF 0329536A – 1) Abschluss 1997
Teilprojekt 9 : Realstruktur und Defektverhalten, S. 9-1 bis 9-21

Weitere verwendete Fachliteratur:

A. Lüdge, H. Riemann
Doping inhomogeneities in silicon crystals detected by the Lateral Photovoltage Scanning (LPS) method
Inst. Phys. Conf. Ser. No **160** (IOP Publishing Ltd, 1997) 145

C. Schmidt,
Orientation analysis of polycrystalline silicon
Materials Research Bulletin vol.**13**, no.9 (1978) 873

C. Ferrara
Kohlenstoff, Sauerstoff und Stickstoff in Silicium für Solarzellen
Diplomarbeit, Uni Göttingen/Frauenhofer Institut für Solare Energiesysteme, 1994

D. Helmreich
The Wacker Ingot Casting Process
In: Silicon Processing for Photovoltaics II (Elsevier, ed. C.P. Khattak and K.V. Ravi 1987) p.97

F. Köhl
Kernreaktionsanalyse zur Bestimmung des Stickstoffgehaltes im Silicium und des Umrechnungsfaktors für den Stickstoffabsolutwert aus Infrarot spektroskopischen Relativmessungen.
Dissertation JWG-Uni Frankfurt am Main 1988

H.J. Möller
Multicrystalline Silicon for Solar Cells
Solid State Phenomena Vols. **47-48** (1996) 127

H.J. Stein
Oxygen, Carbon, Hydrogen, and Nitrogen in Crystalline Silicon
In: Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 59 (ed. by J.W. Corbett, I.C. Mikkelsen, S.J. Pearton, and S.J. Pennycook, MRS 1986) p.523

H.J. Stein:
J. Electrochem. Soc.: Solid state science and Technology 134 (10), 2592 (1987)

J. Donecker, M. Naumann
Laser Scattering Tomography for crystal characterization: quantitative approaches
Cryst. Res. Technol. **37** (2002) 147

J.P. Kalejs
Point defect, carbon and oxygen complexing in polycrystalline silicon (OS 107)
J. of Crystal Growth 128 (1993) 298

N. Inoue, A. Hashimoto, K. Shingu, K. Masumoto
Measurement of nitrogen concentration in Cz Silicon Crystals
Solid State Phenomena Vols. 95-96 (2004) 489

Properties of crystalline silicon
emis Datareviews Series No. 20 (ed. by R. Hull, Inspec Pub., 1999)

W. Koch, W. Krumbe, I.A. Schwirtlich
Solidification by Planar Interface (SOPLIN) – A Way to more efficient Multicrystalline Silicon for Photovoltaics
Proceedings of the 11th European PVSEC, Montreux (Harwood Ac. Publ., 1992), 518

W. Koch, C. Häßler, H.-U. Höfs, A. Müller, I.A. Schwirtlich
Planar Solidification of multicrystalline Silicon for Photovoltaic Applications
Solid State Phenomena Vols. **57-58** (1997) 401

5. Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Für eine erfolgreiche Lösung der Gesamtaufgabe war die Zusammenarbeit verschiedener Einrichtungen in Industrie und Forschung im Rahmen eines Verbundprojektes vorgesehen. Es wurden Untersuchungen zu den Auswirkungen der Kristallisationsprozessführung auf den Einbau von Fremdstoffen, die Entstehung von strukturellen Defekten und mechanischen Restspannungen sowie zu den resultierenden photovoltaischen Eigenschaften der aus Wafern der mc-Siliciumblöcke hergestellten Solarzellen durchgeführt. Dabei wurden parallel Erkenntnisse im Labor- und im technischen Maßstab erzielt.

Diese Arbeiten wurden im Verbundprojekt von den Projektpartnern wie folgt durchgeführt:
TU Bergakademie Freiberg, Institut für NE-Metallurgie und Reinststoffe:
Experimentelle Untersuchungen zur Keimbildung und zur Kristallisation von multikristallinem Silicium

TU Bergakademie Freiberg, Institut für Experimentelle Physik:
Elektrische und optische Defektanalyse in multikristallinem Solarsilicium

ACCESS e.V.:
Numerische Makro- und Mikrosimulation der Kristallisation

FhG ISE:
Technologie für mc-Siliziumsolarzellen für erhöhte Blockguss-Ausbeuten

Deutsche Solar AG:
Untersuchungen an multikristallinem Silicium im technischen Maßstab

Sowohl auf den halbjährlichen Projekttreffen als auch bei Bedarf fand ein kontinuierlicher Austausch der Ergebnisse und deren Diskussion statt.

II. Eingehende Darstellung

1. Ergebnisse

Gliederung

1. Einleitung
2. Eingesetzte Messmethoden
2.1 Defektätzung/Lichtmikroskopie
2.2 Fourier-Transformations-Infrarot-Spektroskopie (FTIR)
2.3 Laser Scattering Tomographie (LST)
2.4 Lateral Photovoltage Scanning (LPS)
2.5 Mikrowellendetektiertes Abklingen der Photoleitfähigkeit (µPCD)
2.6 Sonstiges
3. Untersuchte Proben und deren Präparation
4. Ergebnisse und Diskussion
4.1 Charakterisierung der Randbereiche
4.1.1 Kappenbereich
4.1.2 Seitenränder und Bodenbereich
4.2 Ausscheidungen und Einschlüsse
4.2.1 Bodenbereich
4.2.2 Blockinneres und Kappenbereich
5. Zusammenfassung
6. Literaturverzeichnis
Anhang

1. Einleitung

Im Rahmen des von der Deutschen Solar AG Freiberg koordinierten Verbundprojektes "Entwicklung von multikristallinem Solarsilicium mit hohem photovoltaischen Wirkungsgrad und verbesserter Prozessausbeute" hatten wir uns mit der strukturellen Charakterisierung des multikristallinen Siliciums unmittelbar nach dem Erstarrungsprozess, d. h. im sogenannten *as grown* Zustand, beschäftigt. Durch den Einsatz gezielt ausgewählter Messmethoden war es möglich, die beobachteten Verteilungen der strukturellen Defekte mit denen elektrischer Eigenschaften und der wesentlichen nichtmetallischen Verunreinigungen (Sauerstoff, Kohlenstoff und Stickstoff) unmittelbar zu korrelieren.
Die zur Beurteilung der elektrischen Eigenschaften herangezogene ortsaufgelöste Messung der Minoritätsladungsträgerlebensdauer zeigt für das *as grown* Blockguss- und Bridgman-Material die bekannte inhomogene Verteilung mit stark verminderten Lebensdauern in kleineren, lokal begrenzten Bereichen im Blockvolumen sowie in relativ breiten Randzonen an Boden, Seitenwänden und Kappe des Blocks. Ein Teil des Materials aus diesen kritischen Gebieten, insbesondere aus dem sehr breiten Bodenbereich, kann noch für die Solarzellenproduktion genutzt werden, da Temperungen und bewusste Getterschritte bei der Prozessierung zu einer Erhöhung der Lebensdauer und damit zu einem akzeptablen Wirkungsgrad führen. Trotzdem bleibt noch ein erheblicher Materialanteil, für den die üblichen Getterverfahren keine ausreichende Wirkung haben. Hier hilft folglich nur eine Verbesserung des *as grown* mc-Siliciums. Dazu muss zunächst aus der Vielzahl der bekannten lebensdauervermindernden Defekte die für das jeweilige Gebiet maßgebende Ursache herausgefunden werden.
Im Vordergrund unserer Untersuchungen standen die Randbereiche der Siliciumerstarrungsblöcke, die bisher wegen ihrer hohen Defektdichten nicht für die Solarzellenherstellung verwendet werden können. Ziel war es, technologisch relevante Änderungen des Erstarrungsprozesses, die zu einer Verringerung der Breite der nicht verwertbaren Randzonen führen können, vorzuschlagen.
In einem zweiten Aufgabenkomplex befassten wir uns mit Ausscheidungen und Einschlüssen, deren Ursache und chemische Natur ergründet werden sollte. Dazu wurden im Blockvolumen gelegentlich auftretende Ausscheidungen und Einschlüsse mit denen in Randbereichen beobachteten verglichen, um sowohl Unterschiede als auch Gemeinsamkeiten in Bildung und Natur herauszufinden.

2. Eingesetzte Messmethoden

2.1 Defektätzung und Licht- bzw. Infrarotmikroskopie

Beim Ätzen der Proben wurde je nach Problemstellung auf die umfangreiche Literatur zu diesem Thema und Erfahrungen aus früheren Solarsilicium-Projekten zurückgegriffen.
Zur Sichtbarmachung der Korntopographie wurden die Scheiben mit Standard-KOH - Lösung geätzt.
Ätzmittel zur Sichtbarmachung der Versetzungsstruktur wirken oft orientierungsabhängig. Die gängigsten defektselektiven Ätzmittel für Silicium sind Sirtl- und Secco-Ätze. Während die Sirtl-Ätze sehr gut auf {111}-, {110}-Flächen wirkt, versagt sie auf {100}-Flächen völlig. Daher wird bei mc-Silicium meist die Ätzlösung nach Secco verwendet, die für alle Orientierungen einen annähernd gleichen Ätzangriff zeigen soll. Erfahrungen aus früheren Projekten und unsere jetzigen Arbeiten zeigten jedoch, dass dies nicht immer der Fall ist.
An Proben, an denen nur ein qualitativer Überblick über die Versetzungsstruktur gegeben werden sollte, hat sich die Sirtl-Ätze bewährt, die den Großteil an Versetzungen und vor allem die massiv im mc-Si auftretenden Versetzungsbündel (Tangles) sichtbar macht.
Für die IR-Mikroskopie wurden doppelseitig polierte Scheiben mit einer Dicke von 1-2 mm verwendet.
Zur Untersuchung der Strukturen standen die Mikroskope Polyvar 2 der Fa. Reichert/Leica und E600Pol der Fa. Nikon zur Verfügung. Beide Mikroskope sind u.a. mit DIC und der Möglichkeit zur IR-Mikroskopie ausgestattet.

2.2 Fourier-Transformations-Infrarot-Spektroskopie (FTIR)

Die FTIR-Spektroskopie wurde eingesetzt zum Nachweis von Punktdefekten insbesondere der nichtmetallischen Verunreinigungen Sauerstoff, Kohlenstoff und Stickstoff anhand ihrer lokalen Schwingungsmoden (local vibrational modes, LVM) oder zum Nachweis von Ausscheidungen durch deren spezifische Absorptionsbanden.
Das eingesetztes Gerät IFS66v der Fa. BRUKER war für diese Untersuchungen fogendermaßen konfiguriert: Strahlquelle Globar / Strahlteiler KBr / Detektor DTGS. Die Auflösung betrug in der Regel 1 cm^{-1}. Für Messungen, bei denen nur interstitieller Sauerstoff nachgewiesen werden sollte, kam auch der Detektor MCT (Quecksilber-Cadmium-Tellurid) zum Einsatz.
Zur Identifizierung der o. g. Verunreinigungen und Konzentrationsbestimmung aus den gemessenen Absorptionskoeffizienten wurden die folgenden Absorptionsbanden bzw. zugehörigen Eichfaktoren verwendet [1]:

- Interstitieller Sauerstoff (O_i):
  Absorptionsbande bei 1108 cm^{-1}, Eichfaktor $3.14\times10^{17}cm^{-2}$
- Gelöster Stickstoff (NN):
  Absorptionsbande bei 963 cm^{-1}, Eichfaktor $1.83\times10^{17}cm^{-2}$
- Substituierter Kohlenstoff (C_s):
  Absorptionsbande bei 605 cm^{-1}, Eichfaktor $1.0\times10^{17}cm^{-2}$

Die Messungen wurden bei Raumtemperatur durchgeführt. Zur quantitativen Bestimmung der Verunreinigungen wurden Si-Referenzproben mit vernachlässigbaren Verunreinigungskonzentrationen (FZ-Si-Wafer der Dicke 1 mm) zu Hilfe genommen,

um den Untergrund durch intrinsische phononische Absorption abziehen zu können. Die Proben mussten beidseitig poliert sein und waren in der Regel 1.0 bis 1.1 mm dick. In einigen Fällen wurde für die Bestimmung von Stickstoff eine Probendicke von 6 mm benutzt. Die örtliche Auflösung war durch die Wahl des Strahldurchmessers mit 3 mm vorgegeben.
Mit Hilfe eines Makros wurden für eine Messung gleichzeitig O_i, NN und C_s durch die Amplitude des Absorptionskoeffizienten bei den oben angegebenen Wellenzahlen bestimmt.

2.3 Laser Scattering Tomographie (LST)

Die Laser Scattering Tomography (LST) wurde im IKZ hauptsächlich zur Charakterisierung von Präzipitaten und der Anordnung von Versetzungen in GaAs entwickelt und eingesetzt [2]. Durch Tiefenintegration und durch Zusammensetzen von Bildern können mit mikroskopischer Auflösung auch größere Bereiche (cm) dargestellt werden. Da das Streulicht der Präzipitate (oder anderer Kristalldefekte mit zum Wirtsmaterial abweichenden Brechungsindizes) detektiert wird, kann deren Größe deutlich unterhalb der Auflösung von Lichtmikroskopen, also im Submikrometerbereich, liegen. Zur Untersuchung von Silicium wurde die Messanordnung erweitert [3].
Die gleichzeitige Erfassung von Streuung und der durch den Laserstrahl erzeugten Photolumineszenz (PL) ermöglicht insbesondere in Solar-Silicium die Unterscheidung von Defekten bezüglich ihrer Aktivität als nichtstrahlende Rekombinationszentren. Zur separaten Aufzeichnung von Streulicht und PL werden optional ein Interferenz-Filter bzw. ein Notch-Filter für die Laserwellenlänge (1064 nm) eingesetzt.
Es werden sowohl Linienfokus (dargestellt in Abb. 1) als auch Punktfokus verwendet.

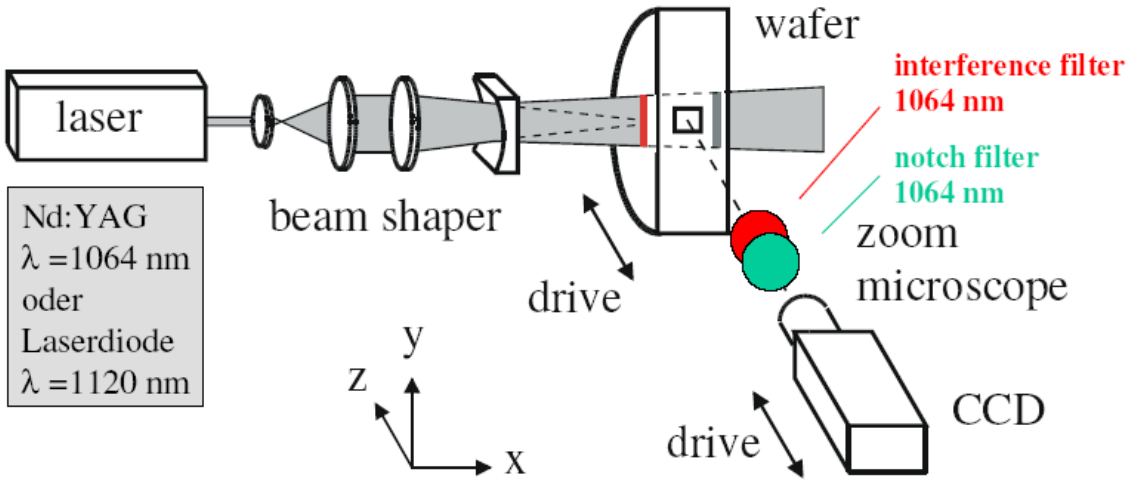


Abb. 1: Schematischer Aufbau des LST-/PL-Messplatzes

Ein Punktfokus erzeugt einen schmalen Kanal mit hoher Lichtintensität. In diesem Fall kann die laterale Diffusion der durch das Laserlicht erzeugten Ladungsträgerpaare anhand der räumlichen Variation der Lumineszenzintensität untersucht werden.
Das Spektrum der PL kann durch Umlenken des Kamerabildes auf einen Gitter-Monochromator mit einem Ge-Detektor aufgezeichnet werden. Es zeigt bei Solar-Si den typischen Band-Band-Übergang bei Raumtemperatur mit einem Maximum bei

etwa 1140 nm.
Bei Verwendung einer Laserdiode (1120 nm) statt des Nd:YAG Lasers (1064 nm) wird eine höhere Eindringtiefe (einige mm) bei noch ausreichender Empfindlichkeit der gekühlten Si-CCD Kamera erreicht.

2.4 Lateral Photovoltage Scanning (LPS)

Wie die im vorigen Abschnitt beschriebene LST gehört auch die Lateral-Photovoltage-Scanning-Methode (LPS) nicht zu den konventionellen Charakterisierungsmethoden für mc-Si. Deshalb wird das zugrundeliegende Messprinzip im Folgenden kurz dargelegt. Abb. 2 zeigt schematisch den im IKZ aufgebauten LPS-Messplatz [4].

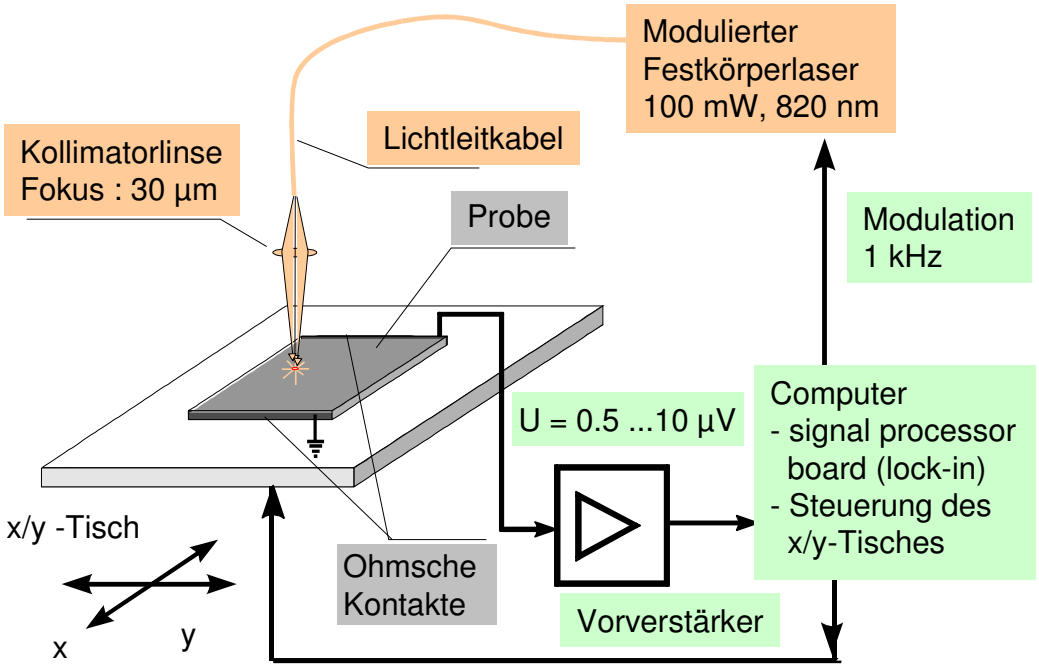


Abb. 2: Schematischer Aufbau des LPS-Messplatzes

Mittels eines fokussierten Laserstrahls, dessen Photonenenergie größer als die Bandlücke von Si ist, werden in der Probe Elekron-Loch-Paare erzeugt. Liegen im angeregten Volumen lokale elektrische Felder vor, so kommt es zur Trennung der positiven von den negativen Überschussladungsträgern, was mit einem Verschiebungsstrom und dem Aufbau einer Potentialdifferenz zwischen unterschiedlichen Punkten an der Probenoberfläche verbunden ist. Mit geeignet angebrachten ohmschen Kontakten kann diese Photospannung (bzw. können Spannungskomponenten in Bezug auf die Richtung des inneren elektrischen Feldes) gemessen werden. Ursache für interne lokale elektrische Felder sind beispielsweise Dotierungsinhomogenitäten wie Dotierstreifen (Striations) oder strukturelle Defekte wie elektrisch aktive Korngrenzen. Durch Rastern des Laserstrahls in x- und y-Richtung und Messung der zugehörigen Photospannung erhält man ein Abbild dieser Inhomogenitäten.
Besonders interessant ist dabei der Nachweis von Dotierstreifen. Ihre Entstehung resultiert aus (meist unvermeidlichen) Fluktuationen der Kristallisationsgeschwindig-

keit, die zu Änderungen beim Einbau von Dotierstoffen (oder ungewollten Verunreinigungen) führen. Deshalb stimmt der Verlauf der Dotierstreifen mit dem der Phasengrenze fest-flüssig im erstarrenden Kristall überein. Diese Möglichkeit zur Rekonstruktion des Phasengrenzverlaufs mittels LPS-Messung wurde in der vorliegenden Arbeit genutzt, um qualitative Aussagen über die während des Erstarrungsprozesses vorliegenden Temperaturgradienten zu erhalten.

2.5 Mikrowellendetektiertes Abklingen der Photoleitfähigkeit (µPCD)

Für die Messung der Lebensdauer der Minoritätsladungsträger stand ein kommerzielles Gerät (Phoenicon) zur Verfügung, das nach dem Prinzip des mikrowellendetektierten Abklingens der Photoleitfähigkeit (Microwave Detected Photoconductivity Decay, µPCD) arbeitet. Als Anregung wurde ein Nd:YLF-Laser mit einer Wellenlänge von 1047 nm und einer Impulsdauer von 25 ns eingesetzt.
In der Regel waren die Probenoberflächen für die Messung nicht passiviert. Vorversuche hatten gezeigt, dass die Passivierung der Oberflächen nur zu einer unwesentlichen Erhöhung der gemessenen Lebensdauer führt, was in Einklang mit der großen Eindringtiefe des Lichtes (ca. 300 µm) und der damit verbundenen Unempfindlichkeit der Messung gegenüber der Oberflächenrekombination bei den hier vorliegenden relativ niedrigen Volumenlebensdauern ist.
Die Intensität der Laserimpulse wurde so weit herabgesetzt, dass bei akzeptablem Signal-Rausch-Verhältnis eine möglichst geringe Konzentration an Überschussladungsträgern erzeugt wird, um den Fall hoher Injektion zu vermeiden.

2.6 Sonstiges

Die chemische Analyse von Einschlüssen und Ausscheidungen wurde mittels energiedispersiver Röntgenspektroskopie (EDX, Oxford Instruments) am Rasterelektronenmikroskop (REM, Zeiss DSM 962) vorgenommen.
Ein im IKZ aufgebauter orthoskopischer Messplatz kam für die Infrarot-Transmissionsmessungen zum Einsatz.
Einige Proben waren mit Schottky-Kontakten (Al) versehen und mittels Kapazitätsspektroskopie (Deep Level Transient Spectroscopy, DLTS) untersucht worden, ohne jedoch Resultate zu erzielen, die Eingang in den folgenden Bericht fanden. (Die DLTS-Nachweisempfindlichkeit von etwa 10^{-4} der flachen Störstellenkonzentration war hier nicht ausreichend.)
In wenigen Fällen wurden auch Analysen mittels Sekundärionen-Massenspektroskopie (SIMS) in Auftrag (Fa. RTG Berlin) gegeben.

3. Untersuchte Proben und deren Präparation

Es wurden ausschließlich die von der Deutschen Solar AG Freiberg bereitgestellten Proben untersucht. Die in der ursprünglichen Planung vorgesehene Einbeziehung von im stark verkleinerten Maßstab kristallisierten Proben des Projektpartners TU Bergakademie Freiberg, Institut für NE-Metallurgie und Reinststoffe, war nicht sinnvoll, da die Modellkristalle bezüglich ihrer elektrischen Eigenschaften nicht repräsentativ für den großtechnischen Prozess waren.

In Tabelle A1 des Anhangs sind alle Proben mit den jeweils näher untersuchten Probenbereichen und den eingesetzten Messverfahren zusammengestellt. Aus der ersten Ziffer der Probennummer geht hervor, ob es sich um einen nach dem Blockguss- oder Bridgman-Verfahren hergestellten mc-Si-Block handelt: "2" steht für Blockguss, "3" für Bridgman. Die an die Blocknummern angehängte Kombination aus Buchstabe und Ziffer kennzeichnet die Position der Säule im Block und kann der Abbildung A1 im Anhang entnommen werden.
Tabelle A2 (Anhang) gibt Aufschluss über die Präparationen, die vorgenommen wurden, um den Messmethoden angepasste Proben zu erhalten. Die bei diesen Arbeitsgängen auftretenden Erwärmungen der Proben blieben unterhalb von 150 °C, so dass die hier gemessenen Parameter tatsächlich im *as grown* Zustand bestimmt wurden.

4. Ergebnisse und Diskussion

4.1 Charakterisierung der Randbereiche

4.1.1 Kappenbereich

Für den Bridgman-Block 320101 konnte der Kappenbereich über die gesamte Blockbreite erfasst werden. In Abb. 3 ist das aus µPCD-Messungen an einzelnen Vertikal-Wafern zusammengesetzte Map der Minoritätsladungsträgerlebensdauer dargestellt. Es zeigt die bekannte starke Verminderung der Lebensdauer in einer 2 bis 3 cm dicken Schicht an der Blockdeckfläche.

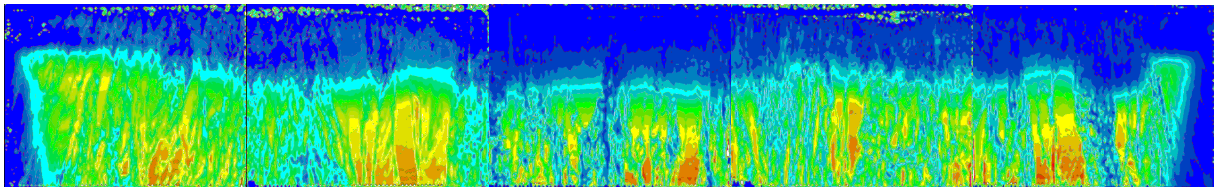


Abb. 3: µPCD-Messung der Minoritätsladungsträgerlebensdauer im Kappenbereich über die gesamte Blockbreite (Bridgman 320101, Säulenkappen A2 bis E2).
Farbskalierung: von blau bis rot entspricht ≤ 1 µs bis 40 µs. Bildbereich: 625×90 mm^2.

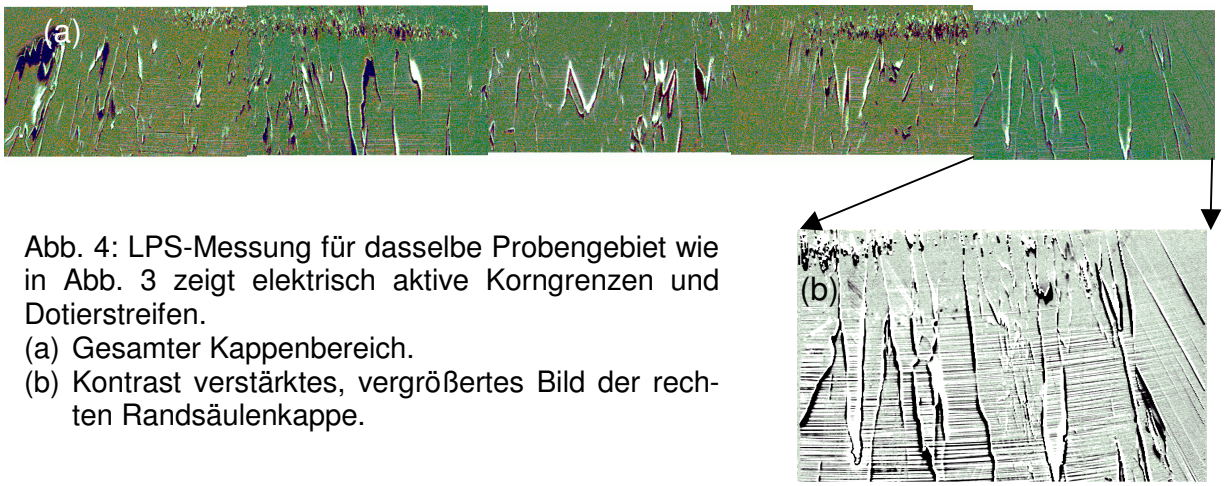


Abb. 4: LPS-Messung für dasselbe Probengebiet wie in Abb. 3 zeigt elektrisch aktive Korngrenzen und Dotierstreifen.
(a) Gesamter Kappenbereich.
(b) Kontrast verstärktes, vergrößertes Bild der rechten Randsäulenkappe.

Abb. 4a gibt die für dasselbe Probengebiet durchgeführte Lateral-Photovoltage-Scanning-Messung wieder. Die einen hohen LPS-Kontrast erzeugenden elektrisch aktiven Korngrenzen sind auch, mit geringerer Ortsauflösung, im Lebensdauerbild (Abb. 3) zu erkennen. Wesentlich ist aber hier, dass sich Dotierstreifen (Striations) sichtbar machen lassen und damit der Verlauf der Phasengrenze fest-flüssig rekonstruiert werden kann. Für das untersuchte Gebiet lässt sich folgendes feststellen: Die Phasengrenze ist über einen weiten Bereich nahezu planar. In einer Entfernung von etwa 100 mm von den Seitenwänden nimmt sie jedoch eine konkave Krümmung an, wie das deutlich im Kontrast verstärkten, leicht vergrößerten Teilbild der Abb. 4b zu erkennen ist. Dieser Phasengrenzverlauf ist in qualitativer Übereinstimmung mit den beim Projektpartner ACCESS Aachen durchgeführten numerischen Simulationen des Erstarrungsprozesses. Aus der Konkavität der Phasengrenze in der Nähe der Seitenwände kann man schlussfolgern, dass neben dem gewünschten vertikalen Tem-

peraturgradienten dort auch ein nicht zu vernachlässigender horizontaler T-Gradient vorhanden ist. Das hat einerseits zur Folge, dass die Richtung des bevorzugten Längswachstums der Körner im Seitenbereich nicht mehr senkrecht wie im Blockinneren ist und damit zusätzliche mechanische Spannungen im kristallisierenden Si-Block hervorgerufen werden. Diese können dann Ursache für eine verstärkte Versetzungsbildung bis hin zu Versetzungsbündelungen („tangles“) sein, deren Ausgangspunkt sonst meist an bzw. in der Nähe der Kokillenwand beobachtet wird. Andererseits treibt ein horizontaler Temperaturgradient die Konvektion in der Schmelze an, was unter anderem Einfluss auf den Eintrag und die Verteilung von Fremdstoffen in der Schmelze und letztlich im Kristall hat.

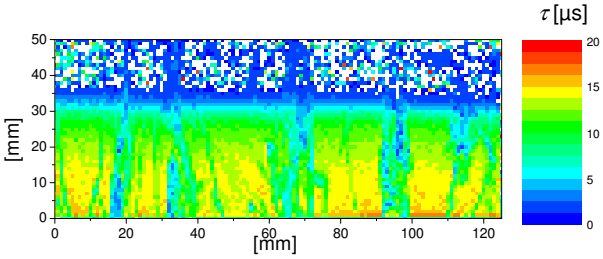


Abb. 5: µPCD-Messung des Kappenbereiches einer Mittelsäule (C3) des Bridgman-Blocks 330929.

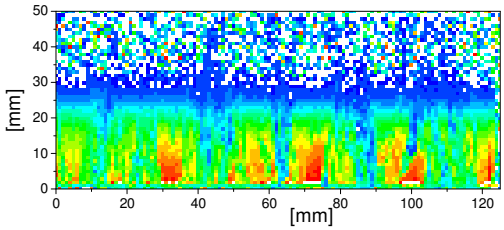


Abb. 6: µPCD-Messung des Kappenbereiches einer Mittelsäule (B3) des Blockguss-Materials 230478.

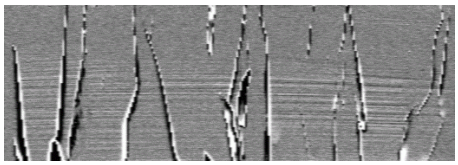


Abb. 7: LPS-Messung des Kappenbereiches einer Mittelsäule (C3) des Bridgman-Blocks 330929 (vgl. Abb. 5).

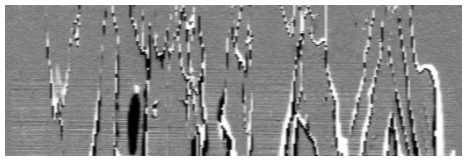


Abb. 8: LPS-Messung des Kappenbereiches einer Mittelsäule (B3) des Blockguss-Materials 230478 (vgl. Abb. 6).

Sowohl vom Bridgman-Block 330929 als auch vom Guss-Block 230478 standen die Kappenbereiche von Mittelsäulen (C3 bzw. B3) für verfahrensvergleichende Untersuchungen zur Verfügung. Die Minoritätsladungstägerlebensdauermessungen an Längsscheiben sind in Abb. 5 (Bridgman) und Abb. 6 (Blockguss) gegenübergestellt. Es fällt auf, dass der schlechte Kappenbereich beim Blockgussmaterial breiter ist (vgl. auch Abb. 9 und 10). Da die Breite dieser schlechten Zone mit der Füllhöhe skaliert - beim Blockguss lag eine entsprechend größere Füllhöhe vor – wird folgende Erklärung vermutet: Man kann eine Anreicherung der Verunreinigungen mit sehr kleinen Segregationskoeffizienten, vor allem der besonders schädlichen Metalle, in einer mit der Füllhöhe skalierenden Breite der Kappenzone erwarten, wenn die Konzentration der betreffenden Verunreinigungen in den Ausgangsschmelzen übereinstimmt und kein wesentlicher zusätzlicher Verunreinigungseintrag während des Prozesses stattfindet.
Elektrisch aktive Korngrenzen und Dotierstreifen sind wieder in den LPS-Bildern (Abb. 7 und 8) zu erkennen. Hier ist als Unterschied (im mittleren Blockbereich) vor allem die leicht konvexe Phasengrenze bei der Bridgman-Probe gegenüber dem planaren Verlauf beim Blockguss hervorzuheben.

Für beide Proben sind die mit FTIR bestimmten Sauerstoff- und Kohlenstoffkonzentrationsprofile in den Abbildungen 9 bzw. 10 den µPCD-Messungen der Lebensdauerprofile gegenübergestellt. Es lässt sich keine Korrelation zwischen dem drastischen Abfall der Lebensdauer und den O_i- bzw. C_s-Konzentrationen feststellen. Das ist in Übereinstimmung mit der allgemein akzeptierten Annahme, dass im Kappenbereich die durch Segregation angereicherten Metallverunreinigungen Lebensdauer bestimmend sind.

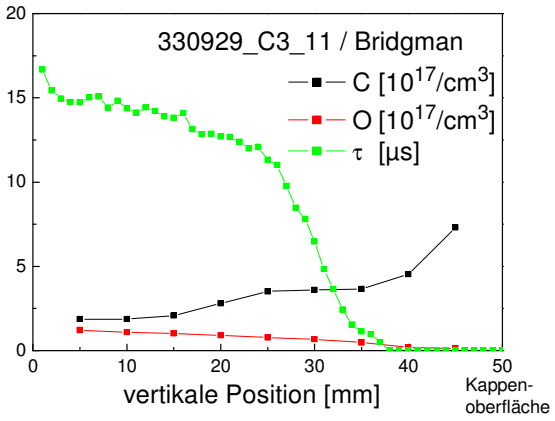


Abb. 9: Sauerstoff- und Kohlenstoffkonzentrationsprofile (FTIR-Messung von O_i bzw. C_s) im Vergleich zur Lebensdauer für den Kappenbereich der Mittelsäule C3 des Bridgman-Blocks 330929.

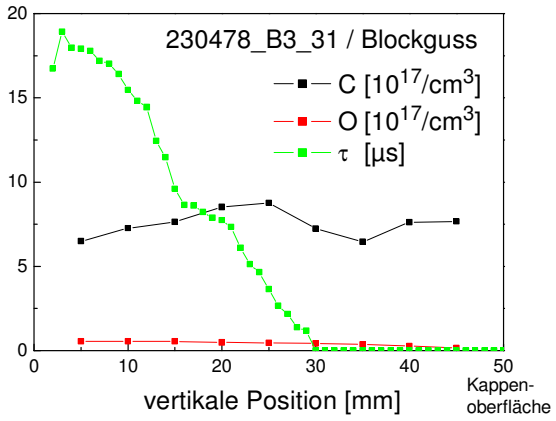


Abb. 10: Sauerstoff- und Kohlenstoffkonzentrationsprofile (FTIR-Messung von O_i bzw. C_s) im Vergleich zur Lebensdauer für den Kappenbereich der Mittelsäule B3 des Blockguss-Materials 230478.

4.1.2 Seitenränder und Bodenbereich

Aus dem Bridgman-Block 331904 wurde im Gebiet zwischen den Säulen A1 und A2 ein ca. 160 mm breiter Längsschnitt über die gesamte Blockhöhe einschließlich des vollständigen Seitenrandes herauspräpariert (vom Projektpartner Dt. Solar durchgeführt). Das Ladungsträgerlebensdauer-Map ist in Abb. 11 dargestellt. Vom Blockguss 221150 lag die Säule C1 ebenfalls mit komplettem Seitenrand vor, so dass auch hier Längsscheiben präpariert werden konnten, die die Messung der Lebensdauer einschließlich der Randbereiche erlaubten; das entsprechende Map ist in Abb. 12 dargestellt. Die Randbereiche schlechter Lebensdauer sind im *as grown* Bridgman-Material wesentlich ausgedehnter als beim Blockguss. Hauptgrund dafür ist der mit der längeren Bridgman-Prozesszeit verbundene höhere Eintrag von Verunreinigungen in die Schmelze und damit auch in den wachsenden mc-Block. Um herauszufinden, welche nichtmetallischen Verunreinigungen im Boden- und Seitenbereich für die Lebensdauerabsenkung relevant sind, wurden mittels FTIR an verschiedenen Proben Sauerstoff-, Kohlenstoff- und in einigen Fällen auch Stickstoff-Konzentrationsprofile aufgenommen. Es zeigte sich, dass lediglich die O_i-Konzentrationen in diesem Zusammenhang von Bedeutung waren. Im Folgenden werden deshalb nur die O_i-Konzentrationsprofile angegeben und diskutiert. In Abb. 13 sind in verschiedenen Höhen gemessene, vom Seitenrand ausgehende horizontale Profile und ein am Boden beginnendes vertikales Profil für den o. g. Bridgman-Block dargestellt. Während die O_i-Maximalkonzentrationen für die horizontalen Profile etwa das gleiche Niveau in der Nähe des Seitenrandes erreichen (1 bis 1.2×10^{18} cm^{-3}), ist die höchste Konzentration des vertikalen Profils in Bodennähe nur halb so hoch.

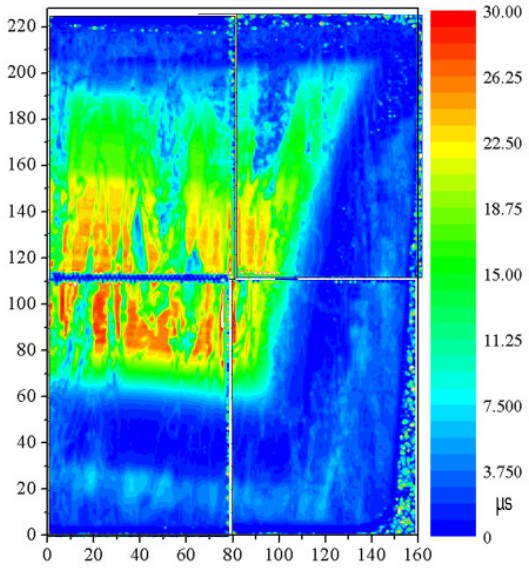


Abb. 11: µPCD-Messung eines Längsschnittes vom Bridgman-Block 331904 zwischen A1 und A2 über die gesamte Blockhöhe einschließlich des kompletten Seitenrandes.

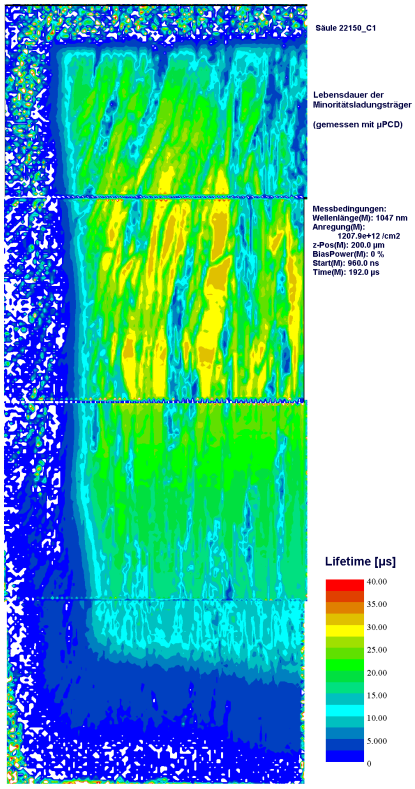


Abb. 12: µPCD-Messung von zusammengehörigen Längsscheiben der Säule C1 vom Blockguss 221150 mit komplettem Seitenrand.

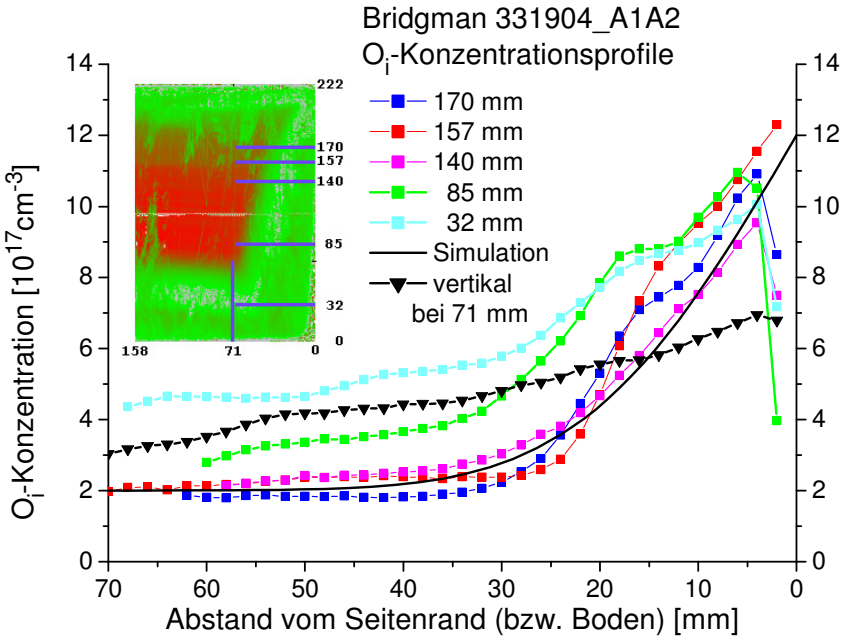


Abb. 13: In verschiedenen Höhen gemessene, vom Seitenrand ausgehende horizontale O_i-Konzentrationsprofile und ein am Boden beginnendes vertikales Profil für den Bridgman-Block 331904. Die Kurve ohne Symbole ist ein berechnetes Diffusionsprofil für eine unendliche Quelle mit $D = 10^{-5}$ cm^{2}s^{-1} und $t = 20$ h.

Quelle für den Sauerstoff ist die Quarzkokille [Abschlussbericht GESSICA I]: Das flüssige Silicium reagiert mit der Quarzwand und bildet Siliciummonoxid, das in die Schmelze übergeht, an der Schmelzenoberfläche als Gas entweicht und durch Inertgasspülung abtransportiert werden kann. In der Nähe der Kokillenwände kann jedoch die Sauerstoffkonzentration je nach Dauer des Kontaktes Schmelze-Kokille und der Wirksamkeit der diesen Kontakt behindernden Siliciumnitrid-Beschichtung die Löslichkeitsgrenze erreichen.
Ebenfalls in Abb. 13 eingezeichnet ist eine mit der Lösung der Diffusionsgleichung für eine unendliche Quelle (komplementäre Fehlerfunktion) berechnete Kurve, die die horizontalen Profile in größeren Blockhöhen gut beschreibt. Der für diese Anpassung notwendige Diffusionskoeffizient D ist bei einer angenommenen Diffusionszeit von t = 20 h um 4 Zehnerpotenzen größer als der für die (normale) Sauerstoffdiffusion im festen Silicium akzeptierte Wert von $D \approx 10^{-9}$ cm^2s^{-1} bei ca. 1600 K (Si-Schmelzpunkt 1683 K) [5]. Folglich kann man für das Zustandekommen der O_i-Konzentrationsprofile die Sauerstoffdiffusion im kristallisierten Si ausschließen.
Berücksichtigt man, dass der Segregationskoeffizient für O in Si der neueren Literatur zufolge nahe 1 liegt [6], so werden die in der Schmelze vorliegenden Sauerstoff-Konzentrationsverteilungen im Kristall eingefroren. Die O-Verteilung in der Schmelze wird aber wahrscheinlich nicht nur durch den SiO-Eintrag (Auflösung der Quarz-Kokillenwand) und die SiO-Entgasung bestimmt. Die LPS-Messungen an den beiden Längsschnittproben bestätigen wiederum (vgl. Abschn. 4.1.1), dass in der Nähe der Seitenwände die Phasengrenze konkav verläuft, wie für den Bridgman-Block 331904 in Abb. 14 gezeigt. Die demnach vorhandene Horizontalkomponente des Temperaturgradienten treibt konvektive Strömungen an, die ebenfalls die O-Verteilungen beeinflussen können.

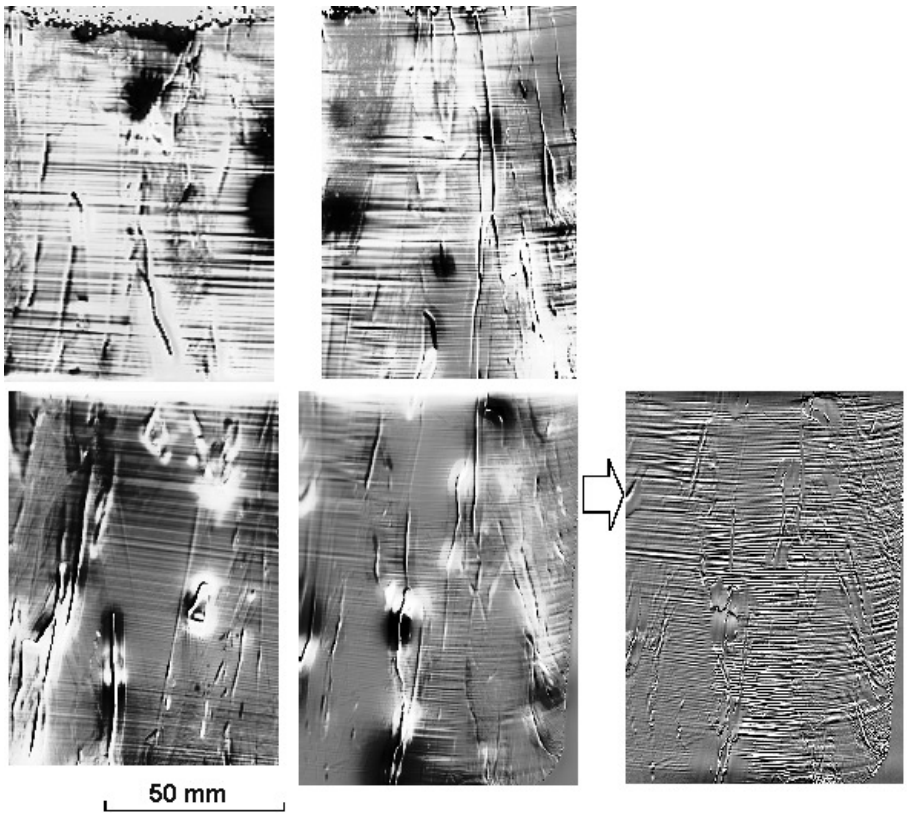


Abb. 14: LPS-Messung der vier Teilproben des Längsschnittes vom Bridgman-Block 331904. Für die rechte untere Teilprobe ist zusätzlich ein im Kontrast verstärktes Bild (durch Differenzieren des ortsabhängigen Photospannungssignals) gezeigt.

In Abb. 15 sind die horizontalen O_i-Konzentrationsprofile für zwei ausgewählte Blockhöhen gemeinsam mit den entsprechenden Lebensdauermessungen dargestellt. Qualitativ wird für die Seitenbereiche der bereits erwähnte Zusammenhang zwischen O-Gehalt und Lebensdauer, der auch im Bodenbereich besteht [7], bestätigt: In Gebieten hoher O_i-Konzentrationen ist die Lebensdauer stark erniedrigt. Es ist jedoch klar, dass die isolierten interstitiellen Sauerstoffatome, die bekanntlich elektrisch inaktiv sind, keinen wesentlichen Einfluss auf die Ladungsträgerrekombination haben können. Die gemessenen O_i-Konzentrationsprofile geben deshalb nur indirekt einen Hinweis auf den Einfluss von Sauerstoff auf die Lebensdauer. Ob Sauerstoff Bestandteil der effektiven Rekombinationszentren, die die Lebensdauerverminderung bewirken, ist oder ob er lediglich deren Bildung begünstigt, kann hier nicht geschlussfolgert werden. Es ist in diesem Zusammenhang auch zu bedenken, dass bereits Zentrenkonzentrationen um 10^{13} cm^{-3} ausreichend sind, um eine Lebensdauerverminderung auf 1 µs zu bewirken, wenn man einen (realistischen) Einfangkoeffizienten von 10^{-7} cm^3s^{-1} für Minoritätsladungsträger annimmt. Das heißt, dass die Konzentration der im Randbereich relevanten Rekombinationszentren um mehr als 4 Größenordnungen unter der dort vorliegenden interstitiellen Sauerstoffkonzentration liegt. Zieht man die Möglichkeit der beschleunigten O-Diffusion [8], insbesondere die infolge des Vorhandenseins von Sauerstoffdimeren, in Betracht, so kann Sauerstoff in geringen Konzentrationen über wesentlich größere Distanzen diffundieren als es im Normalfall möglich wäre (s. o.). Das könnte erklären, warum bei Annäherung an die Seitenwand die Lebensdauer früher abfällt als das O_i-Profil ansteigt: O_2-Dimere diffundieren über Entfernungen von mehreren Millimetern aus dem Bereich hoher O_i-Konzentration ins Blockinnere und bewirken (bzw. begünstigen) dort bereits die Bildung effektiver Rekkombinationszentren in einer die Lebensdauer herabsetzenden Konzentration.
Die in unmittelbarer Seitenwandnähe auftretende Abnahme der O_i-Konzentration (vgl. Abb. 13, 15) ist wahrscheinlich auf die einsetzende Sauerstoffpräzipitation oberhalb 10^{18} cm^{-3} zurückzuführen. Die O-Präzipitate könnten als Getterzentren wirken und für den Bereich mit leicht erhöhter Lebensdauer (in ca. 10 mm Abstand vom Rand, Abb. 15), der dem Ausscheidungsgebiet vorgelagert ist, verantwortlich sein.
Die hier geäußerten Hypothesen zum Sauerstoffeinfluss auf die Lebensdauer bedürfen natürlich noch weiterer Untersuchungen.

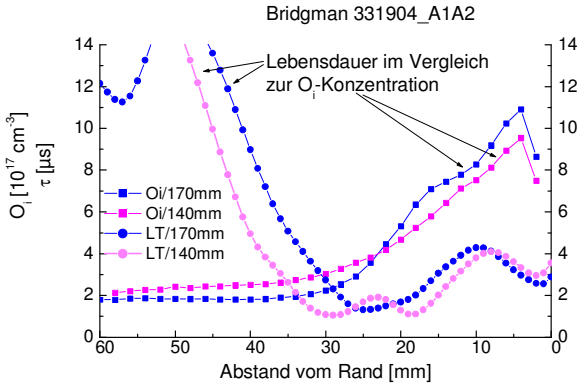


Abb. 15: Horizontale O_i-Konzentrationsprofile für zwei ausgewählte Höhen des Bridgman-Blocks 331904 im Vergleich zum Verlauf der Lebensdauern.

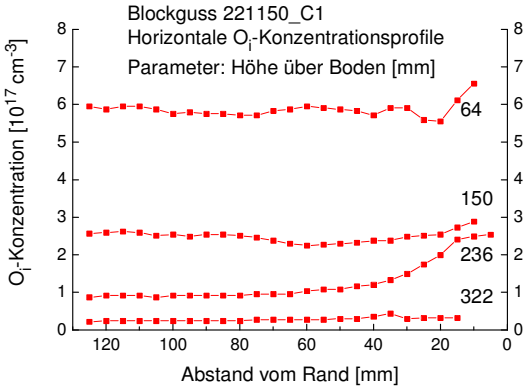


Abb. 16: Horizontale O_i-Konzentrationsprofile für ausgewählte Höhen des Blockguss-Materials 221150.

Die horizontalen O_i-Konzentrationsprofile der Blockguss-Säule (Abb. 16) unterscheiden sich von denen des Bridgman-Kristalls (Abb. 13) vor allem dadurch, dass die O_i-Konzentration in Seitenwandnähe nicht so stark ansteigt. Grund dafür könnte eine bessere Wirksamkeit der Si_3N_4-Beschichtung als Barriere für die O-Diffusion durch die kürzere Prozesszeit beim Blockgussverfahren sein.

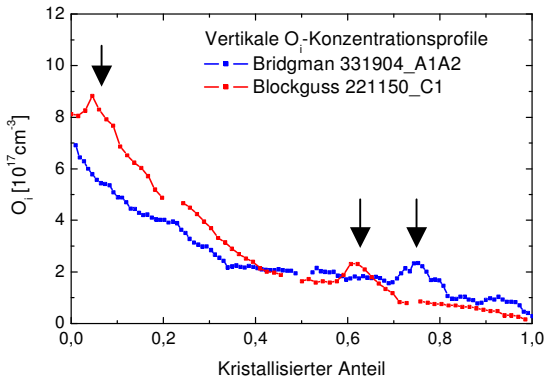


Abb. 17: Vertikale O_i-Konzentrationsprofile für Bridgman 331904 und Blockguss 221150. Pfeile kennzeichnen Abweichungen vom erwarteten Verlauf.

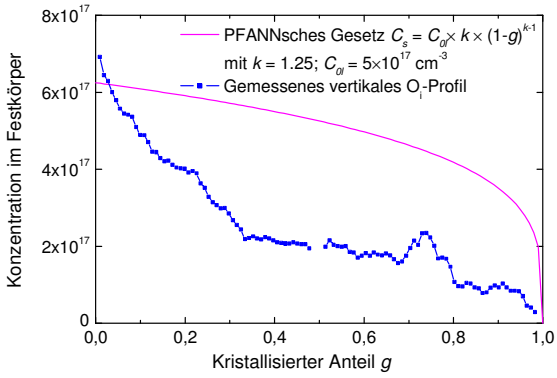


Abb. 18: Vertikales O_i-Konzentrationsprofil (Bridgman-Block 331904) im Vergleich zum Segregationsprofil nach dem PFANNschen Gesetz.

Für den Bodenbereich sind in Abb. 17 die vertikalen O_i-Konzentrationsprofile der beiden Testblöcke miteinander verglichen. Beim Blockguss fällt auf, dass die O_i-Maximalkonzentration nicht direkt am Boden, sondern etwas oberhalb gemessen wird. Das stimmt mit Beobachtungen im Rahmen des Vorgängerprojektes überein [7]. Eine Erklärung steht noch aus. Für beide Krstallisationsverfahren wird ein lokales Maximum der O_i-Konzentration in etwa zwei Dritteln der Blockhöhe beobachtet. Das könnte durch eine Diskontinuität in der Kristallisationsgeschwindigkeit hervorgerufen werden.
Der allgemeine Trend der O_i-Konzentrationsabnahme mit der Blockhöhe lässt sich nicht mit Segregation und einem Segregationskoeffizienten größer als 1 erklären, wie Abb. 18 durch Vergleich eines experimentellen Profils mit dem aus dem PFANNschen Gesetz berechneten verdeutlicht. Der für die Rechnung verwendete Segregationskoeffizient k = 1.25 für Sauerstoff ist früher häufig in der Literatur verwendet worden, wird aber nicht mehr als zutreffend angesehen [6]. Wie für die horizontalen O_i-Konzentrationsprofile (s. o.) ist anzunehmen, dass die vertikale O-Verteilung ebenfalls im Wesentlichen durch den Sauerstoffeintrag (Auflösung der Quarzkokille) bzw. -abtransport (SiO gasförmig) in Verbindung mit der Konvektion bestimmt wird.

4.2 Ausscheidungen und Einschlüsse

4.2.1 Bodenbereich

Vom Projektpartner Deutsche Solar wurde gelegentlich eine starke Verminderung der Infrarot-Transmission im Bodenbereich von mc-Blöcken festgestellt (sogenannte "Bodenverschattung"). Zur Ursachenfindung wurden vom Blockguss 240546_B2 Horizontal-Wafer in Bodennähe präpariert und zunächst mikroskopisch sowie mit

LST/PL untersucht. In Abb. 19 sind das IR-Mikroskopiebild (a), die Photolumineszenzintensität (b) und die Streuintensität (c) für dasselbe Probengebiet wiedergegeben. In allen drei Bildern lassen sich übereinstimmend die dekorierten Korngrenzen erkennen. Im Gebiet mit der stärksten Streuung (Abb.19c, unten) ist offenbar auch die nichtstrahlende Rekombination am höchsten (vgl. Abb. 19b, unten, geringe PL-Intensität).

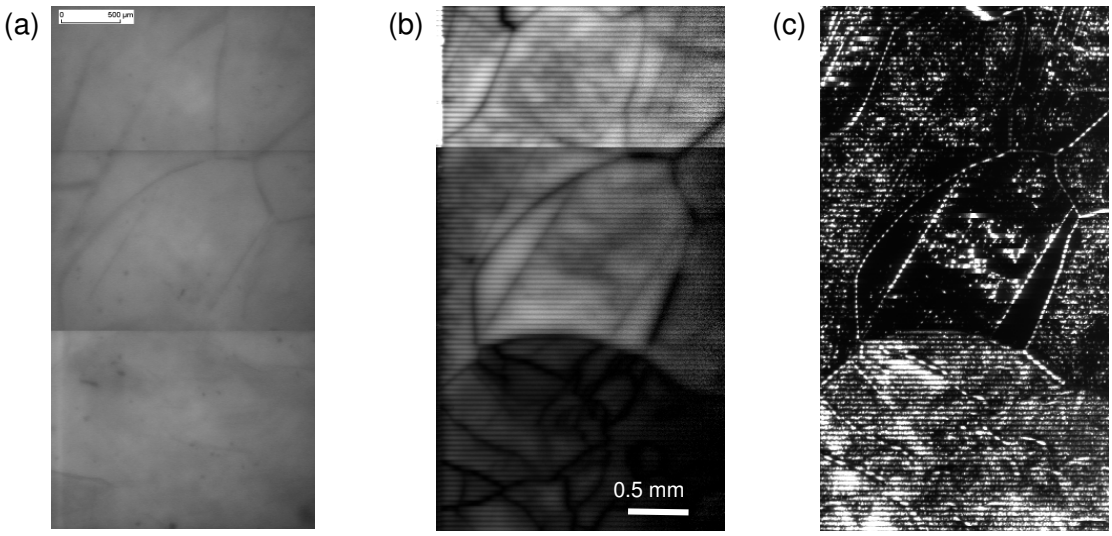


Abb. 19: IR-Mikroskopiebild (a), Photolumineszenzintensität (b) und Streuintensität (c) für denselben Bereich eines Horizontal-Wafers in Bodennähe der Blockguss-Säule 240546_B2.

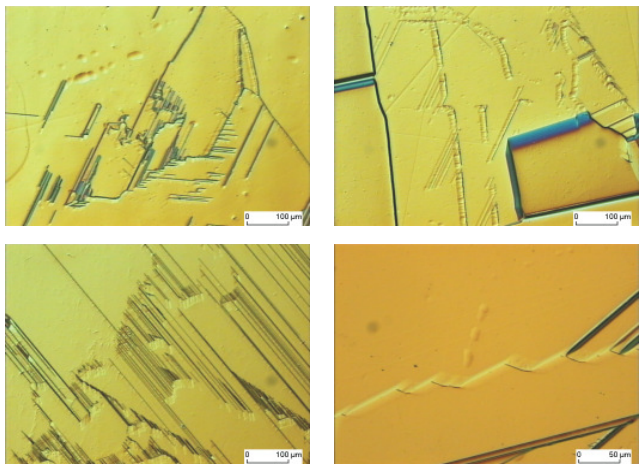


Abb. 20: Lichtmikroskopische Bilder (DIC) verschiedener Oberflächenbereiche eines bodennahen Horizontal-Wafers nach SIRTL-Ätzung (Blockguss-Säule 240546_B2).

Aus den IR-mikroskopischen und LST-Aufnahmen (Abb. 19a, c) kann man schließen, dass sehr kleine Ausscheidungen vorliegen, die jedoch nach einer SIRTL-Ätzung an der Oberfläche nicht mehr sichtbar sind (Abb. 20). Ein Versuch der chemischen Identifikation der Ausscheidungen mittels EDX am Rasterelektronenmikroskop war nicht erfolgreich. Die FTIR-Analyse ergab jedoch extrem hohe O_i-Konzentrationen um 1.2×10^{18} cm^{-3}, so dass die Bildung von SiO_x-Ausscheidungen zu vermuten ist.

4.2.2 Blockinneres und Kappenbereich

Eine verminderte IR-Transmission wurde auch in einigen Fällen für Bereiche im Blockinneren beobachtet. Bei den betroffenen Blöcken zog sich die sogenannte IR-Trübung als ca. 1 cm dicke Schicht in etwa 2/3 Höhe horizontal durch den gesamten Block. Dieser Materialanteil musste für die weitere Prozessierung verworfen werden; eine Ursachenaufklärung war deshalb besonders wichtig.

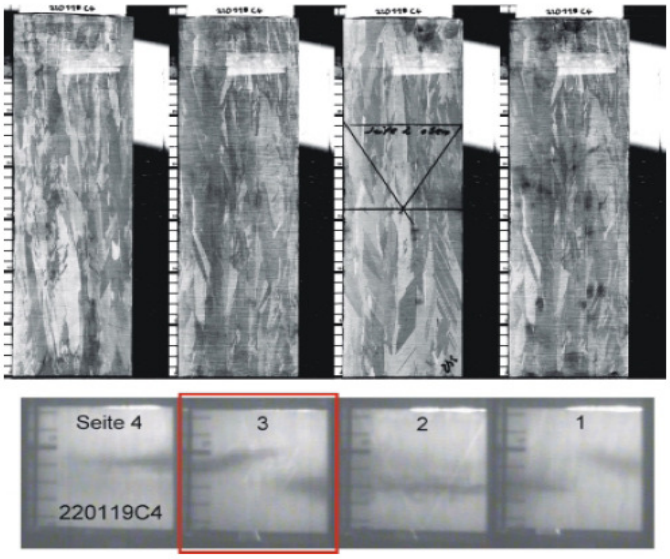


Abb. 21: Vierseitenansicht der Blockguss-Säule 220119_C4 und des in Zweidritteln der Höhe herausgeschnittenen Probenwürfels mit verminderter IR-Transmission.

Aus der Säule C4 des Blockgusses 220119, der ein solches IR-Trübungsgebiet aufwies, war vom Projektpartner Deutsche Solar ein Probenwürfel mit Übersichtsbildern (s. Abb. 21) zur Verfügung gestellt worden. Von der Probe waren Längsscheiben geschnitten worden. Die Abb. 22(a, b) zeigen IR-Durchstrahlungsaufnahmen einer

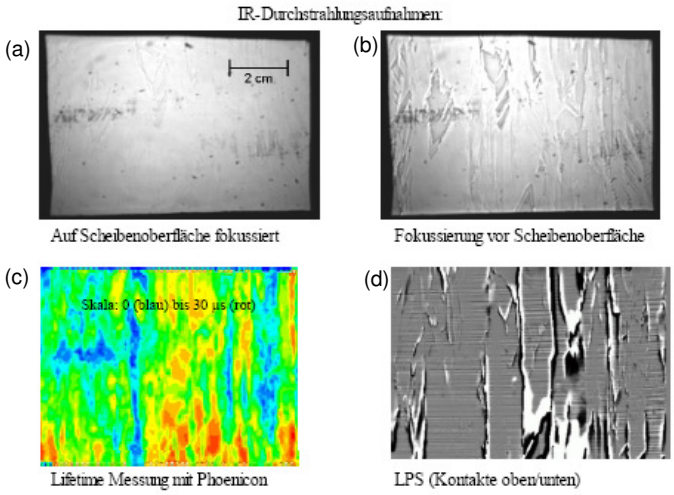
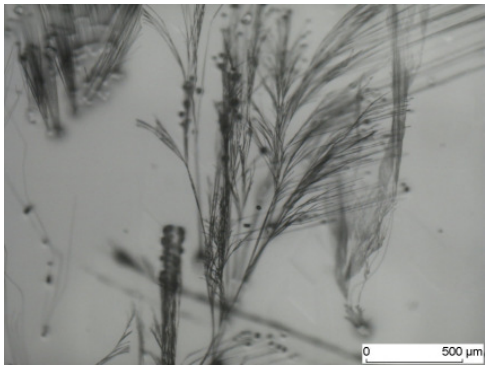


Abb. 22: Längsscheibe aus Probenwürfel der Blockguss-Säule 220119_C4 (s. Abb. 21). (a, b) IR-Durchstrahlungsaufnahmen bei unterschiedlicher Fokussierung, (c) µPCD- und (d) LPS-Messung.

Längsscheibe mit den charakteristischen dunklen Bereichen. Im Vergleich dazu sind in den Abb. 22(c, d) die Maps der µPCD- bzw. LPS-Messungen gegenübergestellt. Die Lebensdauer ist im Trübungsgebiet stark reduziert (Abb. 22(c)). Eine Bewertung der Dotierstreifenabstände im LPS-Bild (Abb. 22(d)) ist nicht möglich. Es sind aber keine Abweichungen vom horizontalen Verlauf der Phasengrenze erkennbar. Die naheliegende Vermutung, dass für die IR-Trübungsgebiete Ausscheidungen bzw. Einschlüsse verantwortlich sind, wird durch die IR-Mikroskopieaufnahmen bestätigt: Abb. 23 zeigt büschelförmig angeordnete, filamentartige Ausscheidungen bzw. Einschlüsse. Die LST-Bilder (Abb. 24) geben einen guten Überblick über die Anordnung der Streuzentren. Demnach sind große Streuer nicht an Korngrenzen, die durch verminderte PL-Intensität in Abb. 24(b) abgebildet sind, angeordnet , was beim Vergleich der Abb. 24(c) mit Abb. 24(b) offenbar wird. Eine waagerechte, mit der Phasengrenze einhergehende Modulation der Streueranordnung lässt sich in Abb. 24(a) erkennen.

Abb. 23: Typische IR-Mikroskopieaufnahme an einer Längsscheibe aus dem Gebiet verminderter IR-Transmission der Blockguss-Säule 220119_C4. Kristallisationsrichtung nach oben.



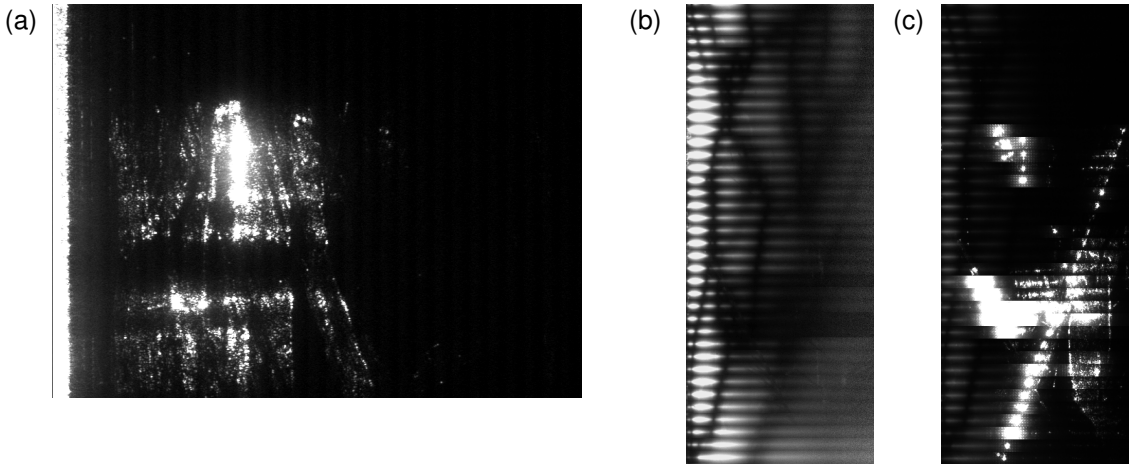


Abb. 24: Typische LST/PL-Aufnahmen aus dem Gebiet verminderter IR-Transmission der Blockguss-Säule 220119_C4. (a) Streubild 6.3×4.7 mm^2, (b) Photolumineszenz sowie (c) Photolumineszenz und Streuung gleichzeitig vom selben Probenausschnitt (1.9×4.6 mm^2)

Da die Ausscheidungen bzw. Einschlüsse nicht von den Si-Ätzmitteln aufgelöst wurden, war es möglich, Proben in einfacher Weise für Untersuchungen am Rasterelektronenmikroskop zu präparieren. Abb. 25(a, b) gibt REM-Aufnahmen von Ausscheidungen/Einschlüssen im Korninneren im Sekundärelektronen (SE)- bzw. Rückstreuelektronen (BSE)-Kontrast wieder. Die Analyse mit energiedispersiver Röntgenspektroskopie (EDX) ergab eindeutig, dass es sich bei den Fremdphasenpartikeln um

Si_3N_4 handelt. Ebenso konnte das für die an Korngrenzen ausgeschiedenen, kleineren Partikel (Abb. 26) bewiesen werden.

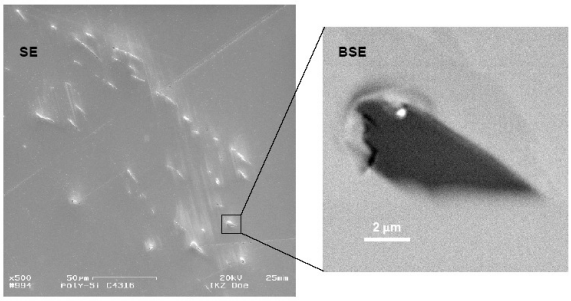


Abb. 25: REM-Aufnahmen von Einschlüssen im Korninneren (Gebiet verminderter IR-Transmission der Blockguss-Säule 220119_C4). Links: Sekundärelektronenkontrast. Rechts: Vergrößerter Ausschnitt im Rückstreuelektronenkontrast.

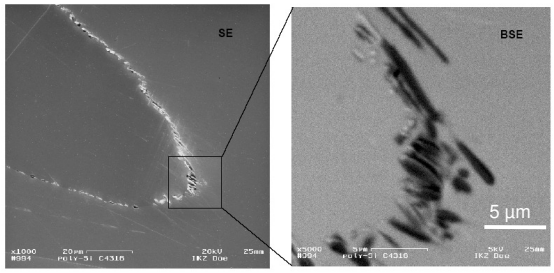


Abb. 26: REM-Aufnahmen von Ausscheidungen an Korngrenzen (Gebiet verminderter IR-Transmission der Blockguss-Säule 220119_C4). Links: Sekundärelektronenkontrast. Rechts: Vergrößerter Ausschnitt im Rückstreuelektronenkontrast.

Der Bridgman-Block 320568 war ohne Si_3N_4-Kokillenbeschichtung kristallisiert worden. Erst in Kappennähe ließen sich Ausscheidungen finden: Die IR-mikroskopischen Bilder (Abb. 27) zeigen nadel- und punktförmige Strukturen, die feiner sind als die oben beschriebenen in 2/3 der Blockhöhe. Die EDX-Analyse an Ausscheidungspartikeln (vgl. BSE-Aufnahme Abb. 28) ergab SiC als chemische Identität der Fremdphase. Es konnte kein Stickstoff nachgewiesen werden. Diese Fremdstoffanalyse wurde qualitativ auch noch durch SIMS- und FTIR-Messungen bestätigt. Damit legt diese Testkristallisation ohne Si_3N_4-Kokillenbeschichtung nahe, dass die Hauptquelle für das Entstehen von Si_3N_4-Ausscheidungen und Einschlüssen durch die entsprechende Kokillenbeschichtung gegeben ist. Andererseits muss für die im Kappenbereich nachgewiesenen SiC-Ausscheidungen angenommen werden, dass ein Kohlenstoffeintrag aus der Graphitstützkokille stattfindet. Eine C-Anreicherung zur Kappe hin, wie sie mittels FTIR auch gemessen wurde, kann außerdem durch Segregation (k = 0.07 [9]) verstärkt werden.

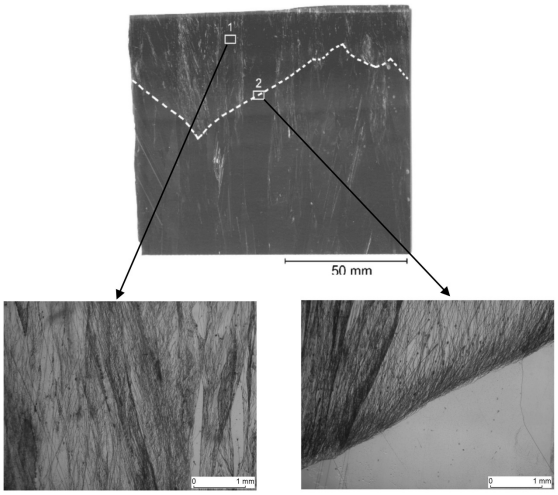


Abb. 27: IR-Mikroskopie an den auf der geätzten Längsscheibe (oberes Bild) eingezeichneten Stellen. Kappenbereich der Bridgman-Säule 320568_C3.

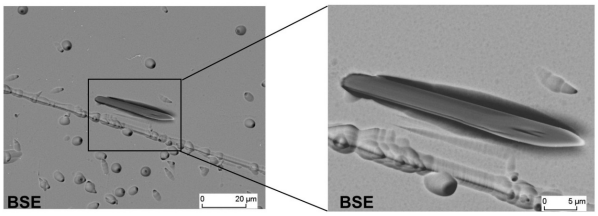


Abb. 28: REM-Aufnahme (Rückstreuelektronen-Kontrast) einer SiC-Ausscheidung im Kappenbereich der Säule 320568_C3.

Beim Bridgman-Block 330133 konnten die Ausscheidungen und Einschlüsse sowohl im Kappenbereich als auch in einer wenige Zentimeter darunter liegenden Schicht, also einem mehr dem Blockinneren zuzuordnenden Gebiet, direkt miteinander verglichen werden. Abb. 29 zeigt die IR-Transmissionsaufnahme der untersuchten Längsscheibe gemeinsam mit zwei IR-Mikroskopiebildern von Ausschnitten der beiden Gebiete. Während feine nadel- und punktförmige Strukturen direkt unter der Kappe beobachtet werden (Abb. 29(b)), sind in der Schicht des Blockinneren gröbere Nadeln zu sehen (Abb. 29(c)). Die chemische Analyse mittels EDX, qualitativ unterstützt durch Ergebnisse der FTIR-Messungen, ergab, dass im Kappenbereich SiC- und Si_3N_4-Ausscheidungen vorliegen. Dagegen konnte in der darunterliegenden Schicht nur Si_3N_4 als Fremdphase identifiziert werden.

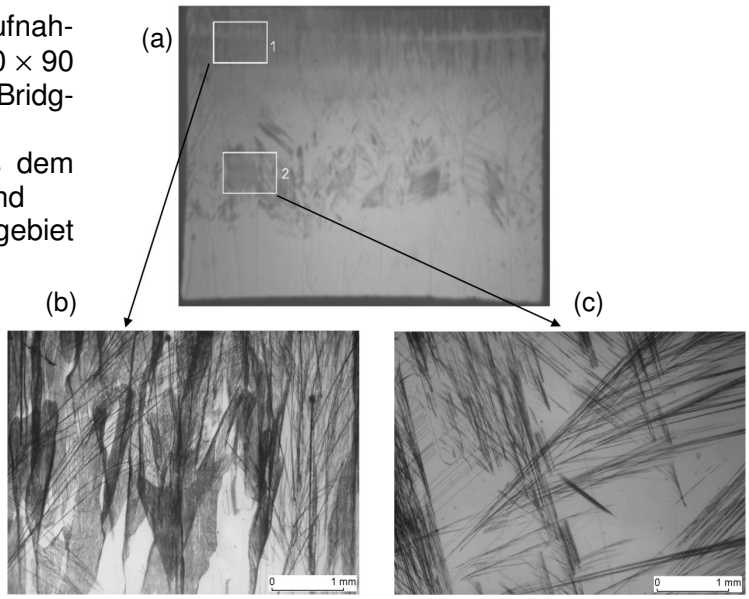


Abb. 29: (a) IR-Transmissionsaufnahme einer Längsscheibe (ca. 100 × 90 mm^2) aus dem Kopfstück der Bridgman-Säule 330133_D4.
(b) IR-Mikroskopaufnahme aus dem unmittelbaren Kappenbereich und
(c) aus einem Ausscheidungsgebiet einige Zentimeter darunter.

Die für den Bridgman-Block 331904 im Kappenbereich mittels Mikroskopie nachgewiesenen Ausscheidungen sind in Abb. 30 dargestellt. Nach den oben dargelegten Untersuchungen werden sie als Si_3N_4-Nadeln mit SiC-Anlagerungen interpretiert.

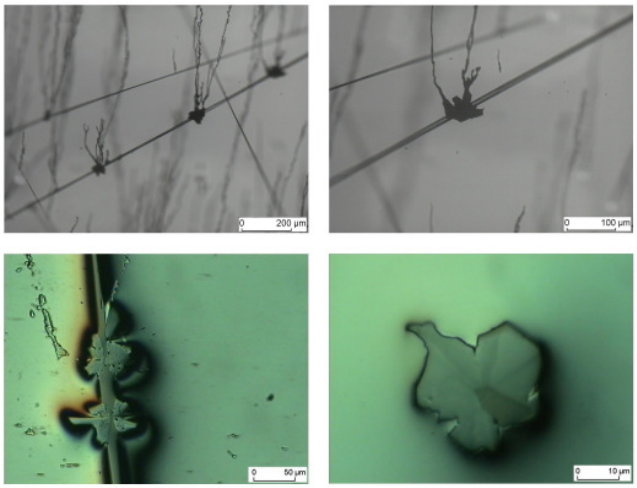


Abb. 30: Mikroskopische Aufnahmen der Einschlüsse und Ausscheidungen im Kappenbereich des Bridgman-Blocks 331904.
Oben: IR-Mikroskopie.
Unten: Differentieller Interferenz-Kontrast im Auflicht.

5. Zusammenfassung

Zwischen der Abnahme der Minoritätsladungsträgerlebensdauer und dem Anstieg der interstitiellen Sauerstoffkonzentration in Boden- und Seitenwandnähe wurde ein qualitativer Zusammenhang festgestellt. Im Kappenbereich überwiegt jedoch, der allgemein anerkannten Auffassung folgend, der Einfluss der durch Segregation angereicherten Metalle. Der Seiten- und Bodenbereich mit schlechter Lebensdauer war beim Bridgman-Material breiter als beim Blockguss. Die Sauerstoffkonzentrationsprofile zeigten bei Bridgman-Blöcken eine stärkere örtliche Variation mit höheren maximalen Randkonzentrationen. Als Hauptquelle für den Sauerstoffeintrag wird die Quarzkokille angesehen. Somit lassen sich die Beobachtungen sowohl zur Lebensdauer als auch zu den Sauerstoffprofilen in den Seitenbereichen qualitativ mit der längeren Bridgman-Prozesszeit erklären.

Für den mittels LPS-Messungen aus der Abbildung von Dotierstreifen ermittelten Phasengrenzverlauf lässt sich Folgendes feststellen: Während im mittleren Blockbereich beim Gießmaterial eine nahezu planare Phasenfront vorlag, konnte beim Bridgman-Material eine schwach konvexe Krümmung beobachtet werden. Unabhängig vom Kristallisationsverfahren lag aber in der Nähe der Seitenwände eine konkave Phasengrenze vor. Die konkave Krümmung setzte in einer Entfernung von etwa 100 mm von den Seitenwänden ein. Sie ist Beweis für das Vorliegen horizontaler Komponenten des Temperaturgradienten in Seitenwandnähe. Folglich liegt die Vermutung nahe, dass eine nicht vernachlässigbare Konvektionsströmung in der Schmelze angetrieben wird, die einen erheblichen Einfluss auf den Eintrag und die Verteilung von Verunreinigungen haben kann.

Die Sauerstoffprofile im Seiten- und Bodenbereich sind nicht mit Diffusion und Segregation allein zu erklären: Das Zusammenspiel von Sauerstoffeintrag durch Auflösung der Quarzkokille, die Konvektion in der Schmelze und der Abtransport von Siliciummonoxid über die Inertgasatmosphäre haben einen wesentlichen Einfluss.

Bei den Ausscheidungen und Einschlüssen wurde folgender allgemeiner Trend festgestellt: Unterhalb des Kappenbereiches konnte nur Siliciumnitrid als Fremdphasenpartikel nachgewiesen werden. In den Kappenbereichen trat zusätzlich noch Siliciumcarbid als Ausscheidung auf, häufig als Anlagerung an Siliciumnitrid-Einschlüssen.

Die Siliciumnitrid-Kristallitbildung findet wahrscheinlich durch Stickstoff-Übersättigung in der Nähe der Phasengrenze in der Schmelze statt. Die höhere Dichte von Siliciumnitrid und Diskontinuitäten der Kristallisationsgeschwindigkeit begünstigen dann den Einschluss der Kristallite. Daneben kommen aber auch Ausscheidungen von Siliciumnitrid an Korngrenzen und Versetzungen vor. Die Quelle für den Stickstoffeintrag ist die Siliciumnitridbeschichtung der Kokille.

6. Literaturverzeichnis

[1] *Properties of crystalline silicon*, emis Datareviews Series No. 20 (ed. by R. Hull, Inspec Pub., 1999)

[2] J. Donecker, M. Naumann, Cryst. Res. Technol. **37** (2002) 147

[3] M. Naumann, F. Kirscht, Thin Solid Films (2005) in press

[4] A. Lüdge, H. Riemann, Inst. Phys. Conf. Ser. No **160** (IOP Publishing Ltd, 1997) 145

[5] B. Pajot, in Ref. [1], 480

[6] B. Pajot, in Ref. [1], 485

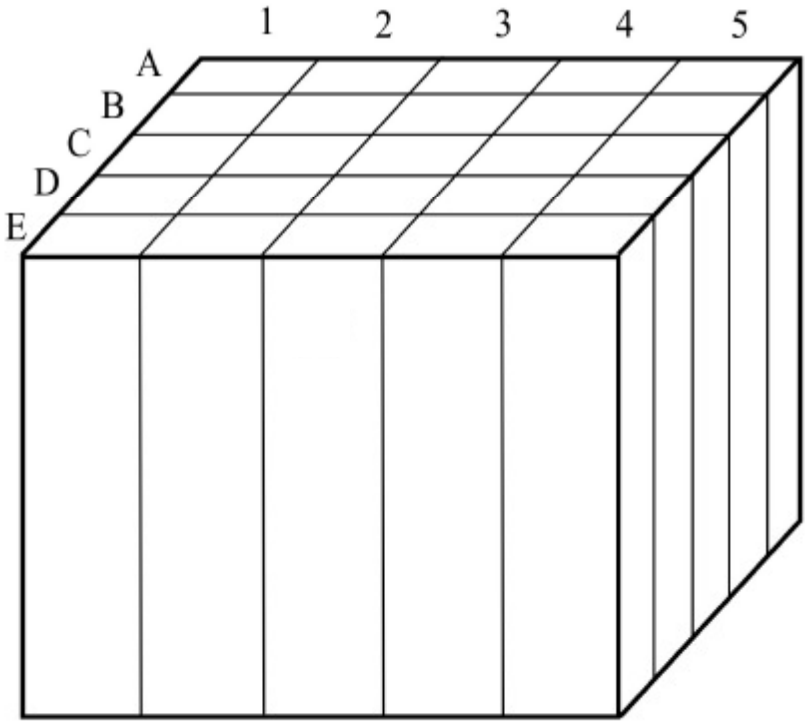
[7] Abschlussbericht zum Verbundprojekt GESSICA: Entwicklung von multikristallinem Solarsilicium mit hohem photovoltaischen Wirkungsgrad und verbesserter Prozessausbeute mittels semikontinuierlichem Blockguss (BMBF Förderkennzeichen 0329745A, Laufzeit 01.10.1996 - 31.12.2000)

[8] B. Pajot, in Ref. [1], 481

[9] S.J. Pearton, in Ref. [1], 503

Anhang

Abbildung A1:
Probennomenklatur entsprechend dem Sägeschema für den Gesamtblock



Anhang Tabelle A1: Proben - Messverfahren

Probennummer	Bemerkungen	untersucht	Methoden									
			Ätzen/LM	IRM	µPCD	LPS	FTIR	LST(PL)	REM (EDX)	IR-Transm.	DLTS	SIMS
210954_E1	Ecksäule ohne Seitenränder	B, K, G	x		x	x		x			x	
221150_C1	Seitensäule mit Seitenrand	B, K, S, G	x		x	x	x					
220119_C4	Säulenstück mit IR-Trübung aus "2/3-Höhe"	G, A	x	x	x	x	x	x	x	x		
240546_B2	Wafer aus Bodenbereich mit IR-Trübung	B, A	x	x	x		x	x	x	x		
320101_A2-E2	Kappenstücke über gesamte Blockbreite	K, S			x	x						
320568_C3	Säule aus Block, der in Kokille ohne Si_3N_4-Auskleidung erstarrt ist	K, G, A	x	x	x	x	x		x	x		x
330133_D4	Einzelscheibe (Längsschnitt aus) oberem Teil der Säule mit Ausscheidungen	K, G, A	x	x	x	x	x		x	x		
230478_B3	Kappenstücke (evt. Einschlüsse und	K			x	x	x	x		x	x	
330929_C3	Ausscheidungen direkt unter dem Deckel?)				x	x	x	x		x		
331904_A1/A2	Randscheibe (Längsschnitt) zwischen Säule A1 und A2 mit Seitenrand	B, K, S, G,A	x	x	x	x	x	x		x		

B.... Bodenbereich
K.... Kappenbereich
S.... Seitenränder
G.... Gesamtvolumen
A.... Ausscheidungen

Anhang Tabelle A2: Probenpräparation

Probennummer	Bemerkungen	Präparation / Methode
210954_E1	Ecksäule ohne Seitenränder	Längsschnitte einseitig poliert für Ätzen/LM, µPCD, LPS Waferschnitte aus Bodenbereich einseitig poliert für Ätzen/LM, µPCD ca. 10x10x(50-80)mm^3 - Proben poliert für LST
221150_C1	Seitensäule mit Seitenrand	Längsschnitte einseitig poliert für Ätzen/LM, µPCD, LPS, FTIR
220119_C4	Säulenstück mit IR-Trübung aus "2/3-Höhe"	Längsschnitte einseitig poliert für Ätzen/LM, µPCD, LPS, FTIR Längsschnitte beidseitig poliert für IRM, IR-Transmission, Orthoskopie Längsschnitte 50x50mm^2 einseitig poliert aus Trübungsbereich für REM (EDX) ca. 10x10x80mm^3 - Proben poliert für LST Längsschnitt beidseitig poliert für TUBA Freiberg (Frau Kremmer) Proben 5x5mm^2 einseitig poliert aus getrübtem und ungetrübtem Bereich für TUBA (Prof. Möller)
240546_B2	Wafer aus Bodenbereich mit IR-Trübung	beidseitig poliert für IRM, IR-Transmission, Ätzen/LM, µPCD, FTIR, REM (EDX), PL, LST
320101_A2-E2	Kappenstücke über gesamte Blockbreite	Längsschnitte einseitig poliert für µPCD, LPS (Phasengrenze)
320568_C3	Säule aus Block, der in Kokille ohne Si_3N_4-Auskleidung erstarrt ist	Längsschnitte einseitig poliert für Ätzen/LM, µPCD, LPS, FTIR Längsschnitte beidseitig poliert für IRM, IR-Transmission, Orthoskopie Proben 5x5mm^2 einseitig poliert aus Trübungsbereich (Kappe) für SIMS Längsschnitte 50x50mm^2 einseitig poliert aus Trübungsbereich (Kappe) für REM (EDX)
330133_D4	Einzelscheibe (Längsschnitt aus) oberem Teil der Säule mit Ausscheidungen	beidseitig poliert für IRM, IR-Transmission, Ätzen/LM, µPCD, LPS, FTIR 50x50mm^2 einseitig poliert aus Trübungsbereich und Kappe für REM (EDX)
230478_B3 330929_C3	Kappenstücke (evt. Einschlüsse und Ausscheidungen direkt unter dem Deckel?)	Längsschnitte einseitig poliert für µPCD, LPS, FTIR Längsschnitte beidseitig poliert für IR-Transmission, Orthoskopie ca. 10x10x60mm^3 - Proben poliert für LST
331904_A1/A2	Randscheibe 6mm(Längsschnitt) zwischen Säule A1 und A2 mit Seitenrand	Längsschnitt (1mm) beidseitig poliert für IRM, IR-Transmission, Orthoskopie, µPCD, LPS, FTIR ca. 4x70x10mm^3 - Probe poliert für LST

2. Voraussichtlicher Nutzen, insbesondere der Verwertbarkeit des Ergebnisses im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplanes

Die Verwertung der Ergebnisse des Gesamtprojektes erfolgt durch die Deutsche Solar AG. Die gesammelten Erkenntnisse zu den kritischen Bereichen eines Siliciumblockes werden dort produktionstechnisch umgesetzt, um die nutzbare Kristallausbeute wirkungsvoll zu erhöhen und den Wirkungsgrad zu verbessern. Dabei soll zusätzlich der Kostenfaktor in der Herstellung gesenkt werden.

Wissenschaftliche und/oder technische Erfolgsaussichten nach Projektende: Die Ergebnisse zur Aufklärung von Struktur, Natur und der Entstehungsursache verschiedenster Defekte können auch für die Untersuchungen anderer Materialien mit ähnlichen Problemen genutzt werden.

Wissenschaftliche und wirtschaftliche Anschlussfähigkeit für eine mögliche nächste Phase: Aufgrund der Komplexität der Zusammenhänge zwischen den wirkungsgradbegrenzenden Defekten in den Randbereichen, der zu erreichenden Verbesserung der Materialqualität und den damit einhergehenden neuen Problemen bei der Produktion schien aus unserer Sicht eine Verlängerung des Projektes bzw. ein Nachfolgeprojekt sehr sinnvoll.
Eine kostenneutrale Verlängerung um 6 Monate wurde genehmigt, um dringende Arbeiten erfolgreich abschließen zu können.

3. Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Eigene Untersuchungen an Versetzungsstrukturen in GaAs deuten darauf hin, dass die Bildungs- und Bewegungsmechanismen von Versetzungsschläuchen in GaAs ähnlich denen in Solarsilicium sein könnten (diese gehören dort zu den ladungsträgerlebensdauerbegrenzenden Defekten). Vor allem das Verständnis des Zusammenhanges zwischen Form und Verlauf der Phasengrenze und der Versetzungsbündelung könnte beim blockgegossenen Solar-Silizium eventuell zur Verbesserung des Materials in den Randbereichen des Blockes beitragen. Dieser Punkt ist noch nicht umfassend geklärt und sollte weiter verfolgt werden.

4. Veröffentlichungen

M. Rossberg[1], M. Naumann[1], K. Irmscher[1], U. Juda[1], A. Lüdge[1], M. Ghosh[2], A. Müller[2]
[1]*Institute for Crystal Growth, Max-Born-Str. 2, D-12489 Berlin, Germany*
[2]*Deutsche Solar AG, Berthelsdorfer Str. 111A, D-09599 Freiberg, Germany*
Investigation of defects in the edge region of multicrystalline solar silicon ingots
Solid State Phenomena (Proceedings of the 11th GADEST Conference, 2005) accepted

M. Naumann, F. Kirscht
Institute for Crystal Growth, Max-Born-Str. 2, D-12489 Berlin, Germany
Investigation of Defect Structures in Multi-crystalline Silicon by Laser Scattering Tomography
Thin Solid Films (2005) in press