

Hintergrundinformation

Computermodellierung von Dünnschicht-Solarzellen im Arbeitskreis Felser

Hochleistungsrechnungen bahnen den Weg zur optimalen CIGS-Solarzelle

Die Sonne ist die ergiebigste Quelle für erneuerbare Energien. Die Stromproduktion mit Solarzellen ist in Deutschland in den letzten Jahren stetig gestiegen und auch für die kommenden Jahre ist ein deutlicher Zuwachs an Solarenergienutzung geplant. Ziele bei der Weiterentwicklung von Solarzellen sind einerseits hohe Effizienzen, andererseits geringe Produktionskosten und ein geringer Energieaufwand bei der Herstellung.

Besonders interessant sind dabei CIGS-Solarzellen, wobei CIGS für $\text{Cu}(\text{In,Ga})(\text{S,Se})_2$ steht. Sie gehören zu den Dünnschicht-Solarzellen und sind nur wenige Mikrometer dick. Sie besitzen einen hohen Wirkungsgrad von derzeit bis zu 19,9% und lassen sich kostengünstig und mit geringem Energie- und Material-Bedarf herstellen. Durch ihre geringe Dicke sind sie leicht und flexibel und lassen sich auch auf Kleidungsstücken oder Zeltplanen aufbringen.

Das comCIGS-Projekt ist ein vom Bundesumweltministerium gefördertes Forschungsprojekt, an dem neben der Arbeitsgruppe von Prof. Claudia Felser an der Johannes Gutenberg-Universität Mainz auch die Firma IBM, die Schott AG, das Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie und die Universität Jena beteiligt sind. Ziel ist es, die Effizienz von CIGS-Zellen weiter zu erhöhen und den Anteil von umweltschädlichen und seltenen Stoffen wie Cadmium und Indium zu reduzieren. In der Theorie-Abteilung der Arbeitsgruppe von Prof. Felser werden die Eigenschaften der bisher verwendeten Materialien und möglicher Ersatz-Materialien mit Dichtefunktionaltheorie-(DFT)-Rechnungen (Elektronenstrukturechnungen) und Computersimulationen untersucht. Die daraus gewonnenen Erkenntnisse dienen dazu, den Aufbau der CIGS-Zellen und ihren Herstellungsprozess zu optimieren.

Ein Teilprojekt beschäftigt sich mit dem seit Jahren ungeklärten Indium-Gallium-Rätsel: Bisherige Rechnungen prognostizieren eine optimale Bandlücke für CIGS-Zellen mit einem Indium/Gallium-Verhältnis von 30:70. In der Praxis findet man aber die höchste Effizienz bei einem genau umge-



kehrten Verhältnis von 70:30. Für diese Diskrepanz gab es bisher keine schlüssige Erklärung. Das hängt damit zusammen, dass in den CIGS-Zellen sehr komplexe Strukturen auftreten, die sich nur bei Berücksichtigung von Tausenden von Atomen verstehen lassen – deutlich mehr, als sich mit den erforderlichen Elektronenstrukturrechnungen untersuchen lassen. Zur Untersuchung wurden daher klassische Monte-Carlo-Simulationen mit Ab-initio-DFT-Rechnungen verknüpft. Dieses Hybridverfahren gestattet es, Untersuchungen zur Thermodynamik des Systems mit quantenmechanischen Rechnungen zu verknüpfen. Die Ergebnisse zeigen, dass die Zellen mit Indium-Überschuss bei Raumtemperatur deutlich homogenere Materialverteilungen aufweisen als die mit einem Überschuss an Gallium. Die Analyse des Temperaturverhaltens liefert neue Anregungen für den Herstellungsprozess der Zellen, der zurzeit von anderen Mitarbeitern des comCIGS-Projekts im Labor optimiert wird.

Andere Rechnungen beschäftigen sich mit der sogenannten Pufferschicht in CIGS-Zellen, die einen optimalen Übergang von der p-dotierten Absorberschicht zu der n-dotierten Fensterschicht der Zelle gewährleisten soll. Zurzeit besteht die Pufferschicht aus Cadmiumsulfid, aber das giftige Schwermetall Cadmium soll in Zukunft ersetzt werden. Geeignete Materialien müssen u.a. gut zur Kristallgeometrie der Absorberschicht passen und möglichst wenig Licht absorbieren. Sie müssen umweltverträglich sein und aus hinreichend verfügbaren Materialien bestehen. Die Suche nach Materialien, die all diese Eigenschaften erfüllen, ist sehr aufwendig. In Mainz wurden mit DFT-Rechnungen über 650 Materialien untersucht und aus den Ergebnissen eine Zahl von 20 separiert, die als Ersatzmaterial in Frage kommen. Zwei dieser Materialien wurden bereits im Arbeitskreis Felser synthetisiert. Aus ihnen konnten im Helmholtz-Zentrum Berlin dünne Schichten gesputtert werden. Die theoretisch vorhergesagten guten Eigenschaften wurden bestätigt, aber die Materialien zeigten in der Praxis andere Nachteile, sodass die Suche nach dem idealen Puffermaterial noch nicht zu Ende ist.

DFT-Rechnungen erfordern in der Regel große Rechenkapazitäten. Der Rechenaufwand steigt vor allem mit der Zahl der betrachteten Atome erheblich an. Größere Systeme werden insbesondere benötigt, um räumlich inhomogene Materialien und Festkörpergrenzflächen zu untersuchen. Solche Rechnungen lassen sich nur durch Computercluster realisieren, bei denen viele CPUs durch möglichst schnelle Datenleitungen verbunden sind. Bei Systemen mit sehr großen räumlichen Strukturen werden Hybridverfahren verwendet, bei denen rechenintensive quantenmechanische Rechnungen und problemoptimierte Monte-Carlo-Simulationen eingesetzt werden.



Für ihre Rechnungen verwenden die Wissenschaftler in Mainz diverse Programme, teils kommerziell, teils selbst entwickelt, die miteinander kombiniert werden. Die Programmpakete wurden für die vorhandene Rechnerarchitektur optimiert, die zurzeit Intel Xeon-Prozessoren verwendet. Für einige Programme sind möglichst schnelle Prozessoren unabdingbar, bei anderen wird eine möglichst große Zahl gut vernetzter CPUs benötigt.

Der von IBM gestiftete Computercluster ist ein Blade-System mit Intel Xeon X5560 CPUs aus der Nehalem-Reihe, die im Vergleich zu Vorgängerprodukten einen erheblichen Performance-Zuwachs aufweist. Die verwendeten Xeon CPUs gehören zu den schnellsten Prozessoren, die es weltweit für derartige Rechencluster gibt. Die Blades sind mit 4x-DDR Infiniband-Anschlüssen ausgestattet, die einen Datenaustausch mit Raten bis zu 20Gb/s gestatten. Das System verfügt weiterhin über flexible Storage-Komponenten, komfortable Administrationsmöglichkeiten und ist besonders energiebewusst.

Mit den neuen Rechenmöglichkeiten kann die Mainzer Arbeitsgruppe nun zu komplexeren Fragestellungen übergehen, die bisher nicht behandelt werden konnten. Mit Hilfe von Car-Parinello-Simulationen sollen dynamische Effekte im Absorbermaterial untersucht werden, die Informationen zu Diffusions- und Umorganisationseffekten im Absorbermaterial liefern. Außerdem wird die Suche nach der optimalen Pufferschicht auf weitere Materialien ausgedehnt und diese als größeres System im Kontakt mit der CIGS-Schicht modelliert. Jede neue Erkenntnis führt einen Schritt näher zu einer optimalen Dünnschicht-Solarzelle, die hocheffizient, kostengünstig und umweltverträglich ist.