

# Anomalous Grain Boundary Physics in Polycrystalline CuInSe<sub>2</sub>: The Existence of a Hole Barrier

Ca Pe ... a d A e Z ... e

National Renewable Energy Laboratory, Golden, Colorado 80401, USA

(Received 15 July 2003; published 24 December 2003)

F ... c ... e ... de ... f ... a ... b ... d ... e (GB) ... CuInSe<sub>2</sub> ... e ... c ... d ... c ... e ... e ... a ... a ...  
e ... e ... c ... b ... a ... e ... e ... f ... e ... a ... f ... e ... a ... e ... (GI) ... e ... GB ... C ... e ... e ... e ...  
a ... b ... c ... f ... e ... de ... e ... GB ... e ... GB ... e ... c ... f ... e ... c ... b ... A ... e ... a ... e ... e ... e ... GI ...  
r ... e ... a ... e ... a ... a ... e ... c ... a ... c ... e ... e ... e ... a ... ed ... e ... GB ... T ... e ... a ... e ...  
r ... e ... f ... e ... e ... f ... c ... a ... e ... CuInSe<sub>2</sub> ... a ... c ... e ... e ... c ... a ... e ... c ... e ... a ... We ...  
de ... f ... a ... e ... a ... d ... e ... a ... e ... c ... a ... f ... e ... b ... a ... e ... a ... f ... ed ... ced ... - ... e ... d ... e ...  
G ... - ... a ... c ... i ... face ... ec ... i ... c ... T ... d ... c ... e ... e ... i ... b ... e ... f ... e ... fi ... e ... de ... f ...

e a a ba ed e ec a e  
b c a ace c f a GB, be d a ec c f  
c e, a d de a ed defec c e,  
a fe a f i face e c i e [2]. U c a  
e b a e c d c, e abe i face f c a c -  
e a [17]. P a i face e b [18], e a  
ec i c a e f aca ce [17].  
We e e a c e ca a a f de  
CuInSe<sub>2</sub> GB a e G - aca c ec i c a a  
de e e e a e ce ba da e GB, i ed e  
f e e W e ea i c ba e f e a  
f e GI GB a e a a e e  
ad e e effec f ed a - a a  
[17,19] b de e GB f e, a d  
e e ec - e ec b a a e ce ca a  
a e e a e e GB, e a ead i -  
eded *electron* a e GB. We c c, de

a e ca ec i c a e GB e e e, i  
c ea a "f ee e" f fa e ec a e F i e  
de f ec b a - f ee e a e ee f a  
ba e e ca e e ca e e a e

fi c... a e deca e a... de e ad...  
 T e f e, a e e a e F . 2(a) a e a e... a.  
 T e d f f e e c e, e e, a e e e, a e f i c -  
 a E, a d e e e, e, G - i, face  
 a e c a, e, a e f i c a E, - 1 eV.  
 T e c e a f e a e f a b e a face c a c -  
 e GB e d a e a c e f e a, de f  
 e a e c e - b a d - e d e e, a e f i c f, e GB  
 a d d a c e, e e G I. H e c e, e e a  
 e f f e c t e b a e f e e e f e G I  
 e GB.  
 T e e a f e e e, f e f, e GB  
 e face e e e e c e f a G a c a c b a e d  
 e c, i c. T e V B M f b, CuInSe<sub>2</sub> c f G  
 b a ( 2 e ), c e a c e  
 S e b a ( a 2 e ), f b e b d -  
 a d a b d a e e a e c e b a d. T e  
 C u, S e, e, d a c e e f e e a b d  
 V B M, a d [24]. R e a f G a, f e GB/  
 i face e d, e e, a d, e  
 e V B M. T e f e, e c, i c, f e GB e face  
 a G a c a c e e V B M a e GB, e e b e e -  
 e e f e e. T e e b a e a e  
 d e e a c f

... e Cu- e f- e ac... e ... a ... effec...  
... c...  
We c... c... de ... a ... e c ea... f a... e ... a ba ... e a  
e GB f... e ... e f ca ... e ... ede e ec... -... e  
ec ... b ... a ... a ... e GB de ... e ... e fac ... a ... e ...