

7 n-Dotierung von Pyritschichten

Dieses Kapitel beschreibt zuerst die Abscheidung von $Fe_{1-x}Co_xS_2$ -Schichten mittels MOCVD. In den weiteren Abschnitten werden die so erhaltenen Schichten auf ihre chemische und strukturelle Zusammensetzung untersucht.

7.1 Precursoreigenschaften

Für die Verwendung als Co-Precursor für die Dotierung wurde die Verbindung Tricarbonyl-Nitrosyl-Cobalt (TCNCo, Summenformel: $(CO)_3NOCo$, Fa. Aldrich, Reinheit > 97 %) verwendet. In der Literatur finden sich zwei Datensätze für die Temperaturabhängigkeit des Dampfdruckes (siehe Tab. 7.1).

Temp. / °C	Dampfdruck / Torr ^(*)	Temp. / °C	Dampfdruck / Torr ⁽⁺⁾
1	24	5	35.1
5	28	15	59.3
8	32	25	96.1
10	38	35	150.6
13	44	45	229.7
16	56	55	338.2
19	62	65	486.7
21	68		

Tab. 7.1: Gleichgewichtsdampfdruck von Tricarbonyl-Nitrosylcobalt nach [88] (*) und [89] (+).

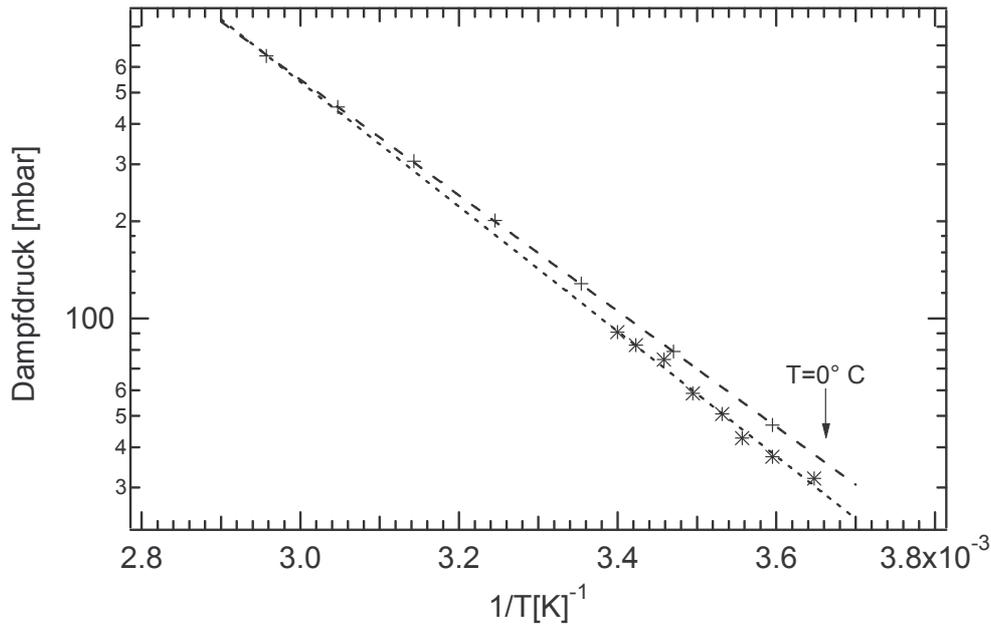


Fig. 7.1 Dampfdruckkurven von TCNCo nach [88] (*) und [89] (+).

Die Temperaturabhängigkeit des Dampfdruckes über der Flüssigkeit in einem geschlossenen System wird durch die Gleichung

$$\log p_{VCo}[\text{mbar}] = b - \frac{a}{T[\text{K}]} \quad (7.1)$$

beschrieben. Ein Fit der Daten aus Tab. 7.1 ergibt die Konstanten $b = 8.1104$ und $a = 1790.4 \text{ K}$ für die Meßwerte nach [89] bzw. $b = 8.5248$ und $a = 1930.8 \text{ K}$ für die Meßwerte nach [88].

Für die Einstellung der zur Dotierung benötigten kleinen Dampfdrücke sind die Dampfdruckwerte bei Temperaturen dicht über dem Gefrierpunkt relevant. Die Meßpunkte nach [89] lassen sich genauer und über einen größeren Temperaturbereich an Gleichung 7.1 anfitten (siehe Fig. 7.1). Es wurde deshalb der Datensatz von [89] verwendet. Die Dampfdrücke nach [88] liegen bei diesen Temperaturen etwa 20 % niedriger.

Der Schmelzpunkt von TCNCo liegt bei -1.05 °C . Über die thermische Zersetzung und die Zersetzungsprodukte ist wenig bekannt. In [88] wird eine Temperatur von 55 °C als Beginn der thermischen Zersetzung angegeben. Für den Eisenprecursor IPC ist ein Beginn der Zersetzung ab 60 °C bekannt, der bei Anwesenheit von Eisen autokatalytisch beschleunigt wird. Als Zerfallsprodukte entstehen Fe und Co. Die Zersetzung des Schwefelprecursors

TBDS beginnt bei deutlich höheren Temperatur von 375 °C. Als Zersetzungsprodukte entstehen Isobuten, Schwefelwasserstoff und elementarer Schwefel [90].

7.2 Prozessführung

Für die Schichtabscheidung von dotierten Pyritschichten wird der in 6.3 beschriebene Prozeß vollständig übernommen. In allen Prozeßschritten, in denen der Eisen-Precursor durch den Reaktor fließt, wird zusätzlich der Cobalt-Precursor eingeleitet. Sein Partialdruck im Reaktor ergibt sich nach Gl. 6.3. In der Nukleationsschicht und der Hauptschicht einer Abscheidung wird stets das Fe/Co-Verhältnis konstant gehalten.

Die Temperatur des TCNCo-Thermostatbades wurde für alle Dotierungsexperimente auf konstant $T_{Co} = 0$ °C gehalten, was nach Gl. 7.1 einem Dampfdruck von 36.1 mbar entspricht. Die Variation des Co-Partialdruckes im Reaktor für unterschiedliche Dotierungskonzentrationen erfolgte ausschließlich durch Variation der Flüsse durch den Bubbler bzw. die Verdünnerrußraten und den Fluß in den Prozeß. Auf diese Weise ist sichergestellt, daß sich ein Fehler aus der Bestimmung der Konstanten in Gl. 7.1 auf alle Dotierungskonzentrationen nur als konstanter Faktor auswirkt.

Tab. 7.2 gibt eine Übersicht über die Flußraten einer typischen Abscheidung mit einem Co/Fe-Verhältniss von 1/100.

Parameter	Nukleationsschicht	Hauptschicht
Heizertemperatur	$T_H = 300 \text{ °C}$	$T_H = 425 \text{ °C} - 475 \text{ °C}$
Reaktordruck	$P_{\text{tot}} = 50 \text{ mbar}$	$p_{\text{tot}} = 50 \text{ mbar}$
Thermostattemperatur.	$T_{\text{Fe}} = -11 \text{ °C}$ $T_S = 50 \text{ °C}$ $T_{\text{Co}} = 0 \text{ °C}$	$T_{\text{Fe}} = -11 \text{ °C}$ $T_S = 50 \text{ °C}$ $T_{\text{Co}} = 0 \text{ °C}$
Fluß durch Bubbler	$Q_{\text{BS}} = 180 \text{ sccm}$ $Q_{\text{Fe}} = 20 \text{ sccm}$ $Q_{\text{Co}} = 5 \text{ sccm}$	$F_{\text{BS}} = 180 \text{ sccm}$ $F_{\text{Fe}} = 20 \text{ sccm}$ $Q_{\text{Co}} = 5 \text{ sccm}$
Gesamtdruck im Bubbler	$P_{\text{BS}} = 220 \text{ mbar}$ $P_{\text{BFe}} = 230 \text{ mbar}$ $P_{\text{BCo}} = 1000 \text{ mbar}$	$P_{\text{BS}} = 220 \text{ mbar}$ $p_{\text{BFe}} = 190 \text{ mbar}$ $p_{\text{BCo}} = 1000 \text{ mbar}$
Verdünerfluß	$Q_{\text{VS}} = 70 \text{ sccm}$ $Q_{\text{VFe}} = 50 \text{ sccm}$ $Q_{\text{VCo}} = 910 \text{ sccm}$	$Q_{\text{VS}} = 70 \text{ sccm}$ $Q_{\text{VFe}} = 50 \text{ sccm}$ $Q_{\text{VCo}} = 750 \text{ sccm}$
Fluß in Prozeß	$Q_{\text{PS}} = 250 \text{ sccm}$ $Q_{\text{PFe}} = 70 \text{ sccm}$ $Q_{\text{PCo}} = 14 \text{ sccm}$	$Q_{\text{PS}} = 250 \text{ sccm}$ $Q_{\text{PFe}} = 70 \text{ sccm}$ $Q_{\text{PCo}} = 14 \text{ sccm}$
Hauptfluß	$Q_{\text{main}} = 3000 \text{ sccm}$	$Q_{\text{main}} = 3000 \text{ sccm}$
Gesamtfluß	$Q_{\text{tot}} = 3340 \text{ sccm}$	$Q_{\text{tot}} = 3340 \text{ sccm}$
Precursor-Dampfdruck im Bubbler	$p_{\text{VS}} = 5.0 \text{ mbar}$ $p_{\text{VFe}} = 3.2 \text{ mbar}$ $p_{\text{VCo}} = 36.1 \text{ mbar}$	$p_{\text{VS}} = 5.0 \text{ mbar}$ $p_{\text{VFe}} = 3.2 \text{ mbar}$ $p_{\text{VCo}} = 36.1 \text{ mbar}$
Partialdruck im Reaktor	$p_S = 6.1 \times 10^{-2} \text{ mbar}$ $p_{\text{Fe}} = 4.10 \times 10^{-3} \text{ mbar}$ $p_{\text{Co}} = 4.13 \times 10^{-5} \text{ mbar}$	$p_S = 6 \times 10^{-2} \text{ mbar}$ $p_{\text{Fe}} = 4.96 \times 10^{-2} \text{ mbar}$ $p_{\text{Co}} = 5.00 \times 10^{-5} \text{ mbar}$
Partialdruckverhältnisse	$p_S/p_{\text{Fe}} = 14.9$ $p_{\text{Fe}}/p_{\text{Co}} = 99.3$	$p_S/p_{\text{Fe}} = 12.3$ $p_{\text{Fe}}/p_{\text{Co}} = 99.2$

Tab. 7.2: Prozeßparameter für die Abscheidung einer Co-dotierten Schicht FeS_2 mit einem Cobaltanteil von ca. 1 % am Metallanteil. Die fett gedruckten Werte werden direkt eingestellt, die anderen Werte ergeben sich aus diesen Einstellungen.

7.3 Chemische Schichtzusammensetzung

Die ersten Untersuchungen zum chemischen Cobalt-Einbau erfolgten an einer Probenreihe, die ohne Verwendung der Sigradurplatte auf Si(100)-Substraten abgeschieden wurde. Die Suszeptortemperatur während der Abscheidung der Hauptschichten betrug 425 °C. Die nominelle Schichtdicke lag jeweils bei 50 nm, bestehend aus einer 20 nm dicken Nukleationsschicht und einer 30 nm dicken Hauptschicht.

Diese Schichten wurden mittels Hochenergie-RBS untersucht. Als Projektile dienten ^{14}N -Ionen mit einer Energie von 15 MeV. Fig. 7.2 zeigt das gemessene Energiespektrum für die cobaltreichste Probe. Die durchgezogene Linie gibt das Ergebnis einer Simulationsrechnung wieder. Die an Cobalt rückgestreuten Projektile erscheinen als kleiner Peak auf der energiereichen Seite des Eisenpeaks, da Cobalt eine um 3.1 amu größere Masse als Eisen besitzt.

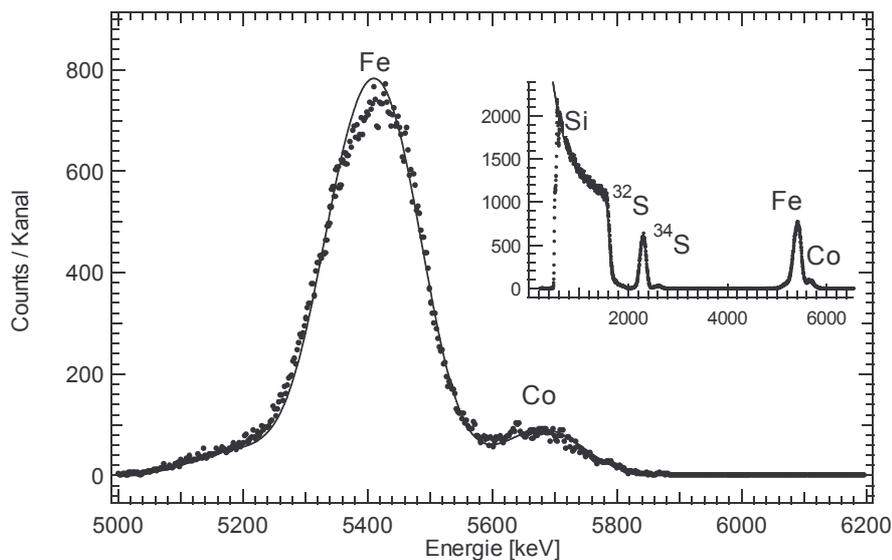


Fig. 7.2: RBS-Spektrum einer nominell 50 nm dicken $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}_2$ -Schicht auf (100)-orientiertem Si-Substrat mit $x = 0.10$. Die durchgezogene Linie ist das Ergebnis einer Simulation mit den Parametern 12 nm FeS_2 / 30 nm $\text{Fe}_{0,923}\text{Co}_{0,077}\text{S}_2$ / Si-Substrat. Der Einsatz zeigt das RBS-Übersichtsspektrum.

Fig. 7.3 zeigt die durch Anpassung der Simulation an die Messspektren bestimmten Cobaltgehalte in Abhängigkeit vom Verhältnis der Partialdrücke der Fe- und Co-Precursor während der Abscheidung. Es zeigt sich ein proportionales Verhalten, wie man es beim Fahren des Prozesses im transportbegrenztem Bereich erwartet. Ein linearer Fit ergibt eine Steigung von 0.81, was darauf hinweist, daß der nach Gl. 7.1 und den Meßwerten nach [89]

bestimmte Dampfdruck des Co-Precursors um ca. 20 % zu klein angesetzt ist. Verwendet man die Dampfdruckwerte nach [88] ergibt sich eine bessere Übereinstimmung, es kann aber auch nicht ausgeschlossen werden, daß bei hohen Partialdrücken des Cobaltprecursors nur ca. 80 % des angebotenen Cobaltprecursors in die Schichten eingebaut werden.

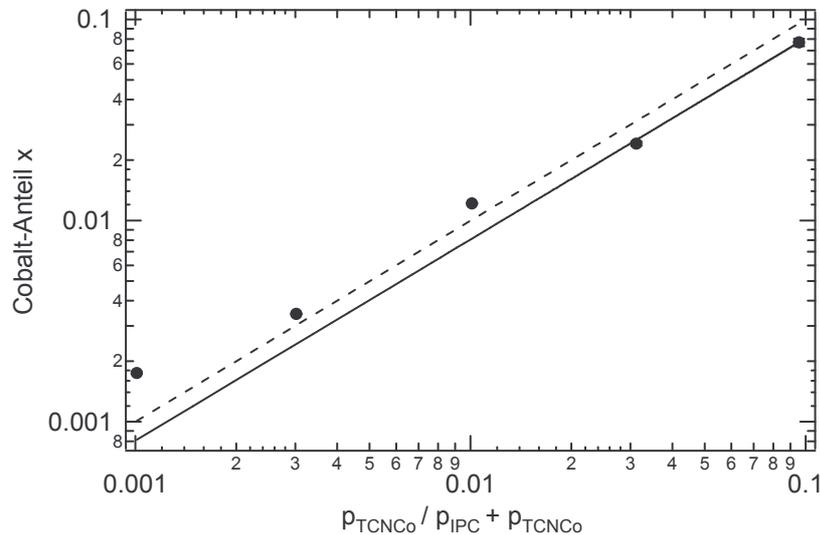


Fig. 7.3: Cobaltanteil x von 50 nm dicken $Fe_{1-x}Co_xS_2$ -Schichten in Abhängigkeit der Partialdruckquotienten von Eisen- und Cobaltprecursor im Reaktor. Durchgezogene Linie: linearer Fit; gestrichelte Linie: ideales Einbauverhalten.

Um eine gute Übereinstimmung mit dem gemessenen Spektrum zu erhalten, muß bei der Simulation eine ca. 12 nm dicke Deckschicht aus reinem FeS_2 angenommen werden. Auch bei den anderen Proben ist die Annahme einer solchen Deckschicht nötig, wobei die Unsicherheit über die Dicke der Deckschicht mit abnehmendem Cobaltgehalt steigt. Eine Abweichung vom Schwefel/Metall-Verhältnis vom stöchiometrischen Faktor Zwei konnte für keine Probe festgestellt werden.

Die Notwendigkeit, beim Modellieren des RBS-Spektrums eine cobaltfreie Deckschicht anzunehmen, wirft die Frage nach dem Einbauverhalten bei dickeren Schichten auf. Mit zunehmenden Schichtdicken werden die Peaks im RBS-Spektrum breiter, und der Cobalt-Peak überlagert sich dem intensiveren Eisenpeak. Dieses Problem läßt sich mittels ERDA-Untersuchungen umgehen, da sich dort die von Cobalt- und Eisen-Ionen erzeugten Signale trennen lassen. Fig. 7.4 zeigt als Beispiel die Rohmessung einer 460 nm dicken $Fe_{1-x}Co_xS_2$ -Schicht mit einem nominellen Cobaltgehalt $x = 0.10$. Die Cobaltionen haben bei gleichen Flugzeiten bzw. Geschwindigkeiten auf Grund ihrer gegenüber Eisenionen höheren Masse eine größere Energie und erscheinen damit im Bild nach rechts verschoben. Neben Silizium

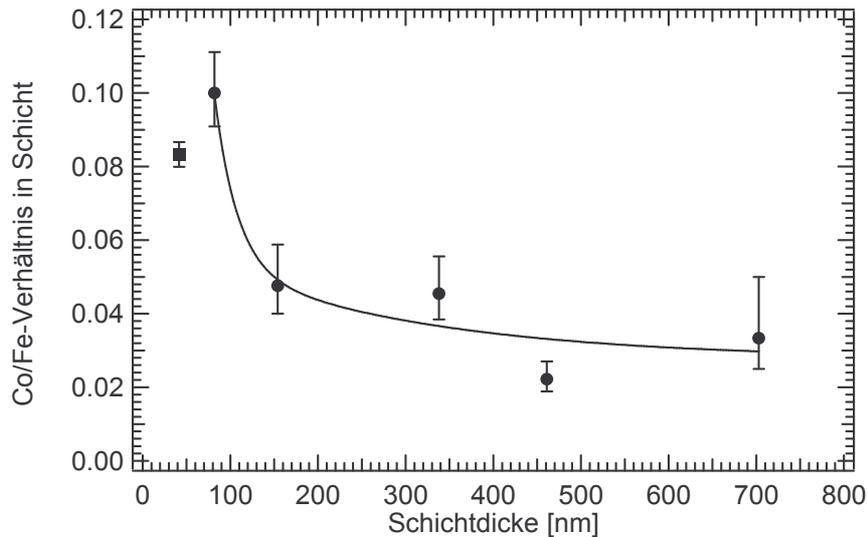


Fig. 7.5: Durchschnittliches Cobalt/Eisen-Verhältnis für Schichten unterschiedlicher Schichtdicke mit nominell gleichen Cobalt/Eisen-Verhältnis von 0.1, ermittelt aus ERDA-Messungen (●) bzw. RBS (◻).

Es zeigt sich ein sehr deutlicher Abfall der Cobaltkonzentrationen schon bei Schichtdicken ab 150 nm. Für eine Schicht mit einer Schichtdicke von 340 nm wurde in einer erneuten Messung überprüft, ob sich die Gesamt-Zählraten von Cobalt und Eisen vom Beginn der Messung bis zum Ende verändern. Dies war nicht der Fall, so daß eine Veränderung der Probenzusammensetzung durch die Messung ausgeschlossen werden kann.

Ein genauer Verlauf der Cobaltkonzentration über die Schichtdicke ließ sich wegen den geringen Zählraten nicht bestimmen. Ein einfaches 2-Schichtenmodell der 340 nm dicken Probe mit einer 60 nm dicken Schicht am Substrat und einer darüberliegenden 280 nm dicken Schicht, ergab für die tieferliegende Schicht ein Fe/Co-Verhältnis von 10.5 und für die darüberliegende Schicht ein Fe/Co-Verhältnis von 26.9.

Die Ergebnisse zeigen, daß die Cobaltkonzentration in der Schicht während des Wachstums nicht konstant blieb, sondern stark abnahm. Diese Abnahme trat bereits nach der Abscheidung der ersten 100 nm auf. Da nicht anzunehmen ist, daß das Einbauverhalten sich während der Abscheidung ändert, ist die wahrscheinliche Ursache eine Abnahme des Partialdruckes des Cobaltprecursors mit zunehmender Abscheidendauer. Gestützt wird diese Vermutung von der Beobachtung, daß während der Abscheidung das Linerrohr in dem Bereich, der vor dem Suszeptor liegt, zunehmend schwarz belegt wurde. Da das schwarze Linerrohr das Streulicht der Infrarotstrahler absorbiert, erwärmt sich dieser Bereich mit fortschreitender Abscheidung. Die Zersetzungstemperatur des Cobaltprecursors ist deutlich geringer, als die des

Eisenprecursors. Damit ist es wahrscheinlich, daß ein Großteil des aus dem Precursor freigesetzten Cobalts sich bereits vor dem Substrat an den Wänden des Linerrohrs absetzte und der eigentliche Abscheidebereich an Cobalt verarmt war. An die Meßdaten aus Fig. 7.5 wurde eine Funktion mit zwei Exponentialtermen angefitet. Der Wahl dieser Funktion liegt die oben motivierte Annahme zugrunde, daß der am Anfang der Schicht vorhandene Cobaltanteil sich gegen Ende der Abscheidung auf einen festen Bruchteil verringert. Die durchgezogene Linie in Fig. 7.5 entspricht der Funktion

$$(Co / Fe)(d) = 0.0277 + 0.0348e^{-0.004026*d[nm]} + 1.176e^{-0.03929*d[nm]} \quad (7.2)$$

Diese Funktion wurde in der weiteren Arbeit benutzt, um aus der Schichtdicke und der nominellen Cobalt-Konzentration die tatsächliche durchschnittliche Cobaltkonzentration der Schichten zu interpolieren.

7.4 Struktur dotierter Schichten

Für den Einbau von Cobalt in FeS₂-Schichten gibt es verschiedene theoretische Möglichkeiten:

- a) Cobalt wird auf Zwischengitterplätzen eingebaut.
- b) Cobalt sammelt sich in den Korngrenzen zwischen FeS₂-Körnern als metallischer Film an.
- c) Cobalt kristallisiert mit Schwefel in einer eigenen Phase aus, z. B. als CoS₂.
- d) Cobalt wird in FeS₂-Schichten auf Eisengitterplätzen eingebaut.

Neben diesen Möglichkeiten können auch alle denkbaren Mischungen dieser Fälle auftreten. Als weiterer Effekt ist gerade bei hohen Dotierungskonzentrationen mit einer Änderung von Korngröße und Textur zu rechnen. Damit Cobalt als Dotant wirkt, ist ein Einbau auf Eisengitterplätzen nötig. Nach [22, 91] bilden CoS₂, welches in der gleichen Raumgruppe wie Pyrit kristallisiert, und Pyrit ein Mischkristallsystem Fe_{1-x}Co_xS₂, das sich über den gesamten Bereich 0 < x < 1 erstreckt.

Fig. 7.6 zeigt XRD-Messungen von 150 nm dicken Schichten mit verschiedenen Cobaltanteilen.

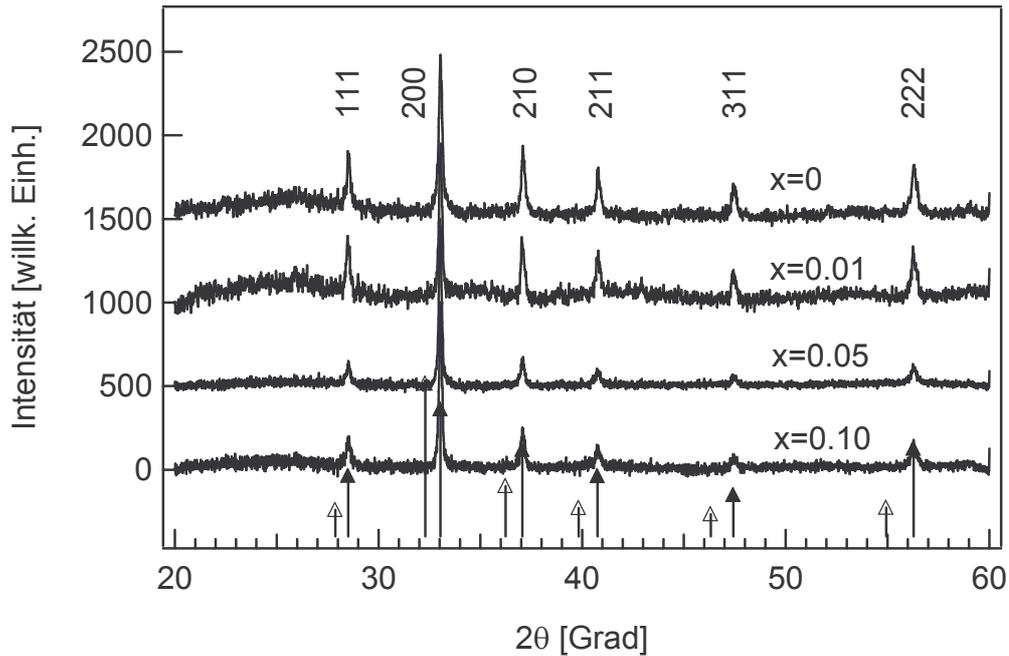


Fig. 7.6: XRD-Spektren von 150 nm dicken $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}_2$ -Schichten mit variablen Co-Anteilen x . Die eingezeichneten Pfeile geben Intensität und Position der Reflexe von CoS_2 (Δ) und Pyrit (\bullet) gemäß JCPDS-Datei wieder, Intensitäten korrigiert für 150 nm Schichtdicke nach Gleichung 5.1.

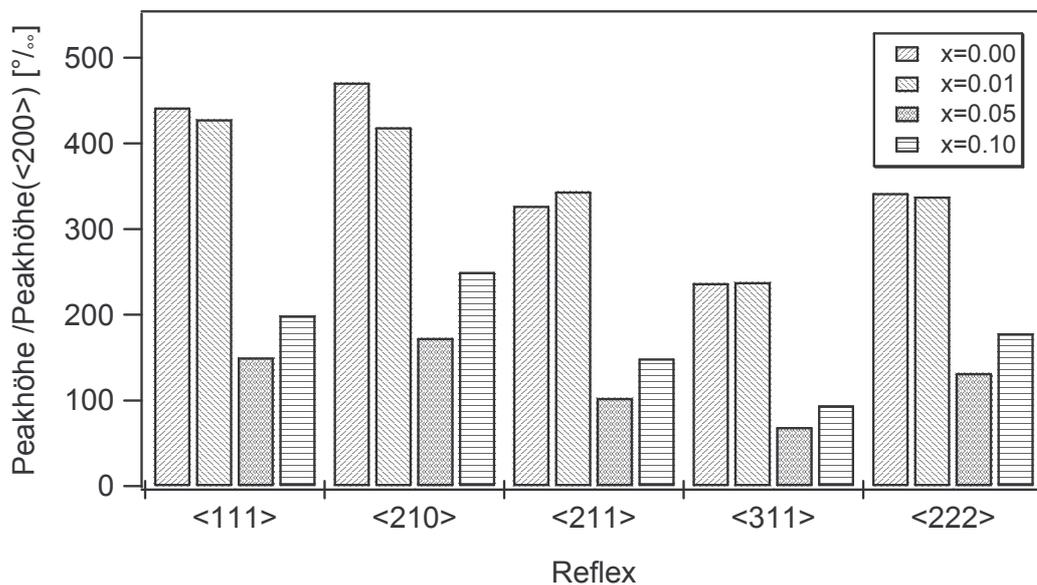


Fig. 7.7: Peakhöhen von von 150 nm dicken $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}_2$ -Schichten mit variablen Co-Anteilen x , bezogen auf die Intensität des <200>-Reflexes.

Es treten neben den Pyritreflexen keine weiteren Reflexe auf. Insbesondere finden sich keine Hinweise auf CoS_2 . Die auf den stärksten Peak – den 200-Reflex - bezogenen Intensitäten der anderen Reflexe verringern sich bei einem Cobaltanteil $x > 1\%$. Die Bevorzugung des

Wachstums von Körnern mit $\langle 100 \rangle$ -Orientierung nimmt also mit höherem Cobaltanteil zu, verstärkt sich aber für Cobaltanteile $x > 5\%$ nicht weiter (Fig. 7.7). Nach Gl. 5.2 läge der 200-Reflex von CoS_2 wegen dessen größerer Gitterkonstante $a_0 = 5.524 \text{ \AA}$ bei $2\Theta = 32.29^\circ$. Bei einem statistischen Einbau von Cobalt auf Eisenplätzen ist eine Erhöhung der Gitterkonstanten mit zunehmender Cobaltkonzentration nach der Vegardschen Regel zu erwarten. In erster Näherung führt dies zu einer in x proportionalen Verschiebung zu kleineren 2Θ -Winkeln für alle Reflexe. Für den 200-Reflex beträgt die theoretische Verschiebung $\Delta(2\Theta) = -x * 0,658^\circ$. Für die maximale Cobaltkonzentration von 10 % ($x = 0.10$) ist also mit einer Verschiebung um ca. 0.066° zu kleineren Winkeln zu rechnen. Es zeigte sich, daß auch bei undotierten Proben die Peaklage des 200-Reflexes um bis zu 0.05° variierte (Fig. 7.8 a+b). Um Fehler durch eine fehljustierte Probe (Präparathöhenfehler, siehe Kap. 5.1) während der Messung zu minimieren, wurden auf zwei Proben (eine undotierte FeS_2 -Schicht, eine nominell mit $x = 0.1$ dotierte $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}_2$ -Schicht) mittels einer Lochmaske ($\varnothing = 1 \text{ mm}$) 200 nm Gold aufgedampft. Der Reflex vom Gold wurde als Referenz benutzt und die XRD-Spektren so verschoben, daß der Goldreflex übereinstimmte (Fig. 7.8 b-d). Durch diese Korrektur verringert sich die Variation der Peaklage bei Wiederholungsmessungen für die Reflexe auf $\leq 0.02^\circ$. Als Ursache für den Restfehler muß ein Fehler in der mechanischen $2\Theta/\Theta$ -Kopplung angenommen werden.

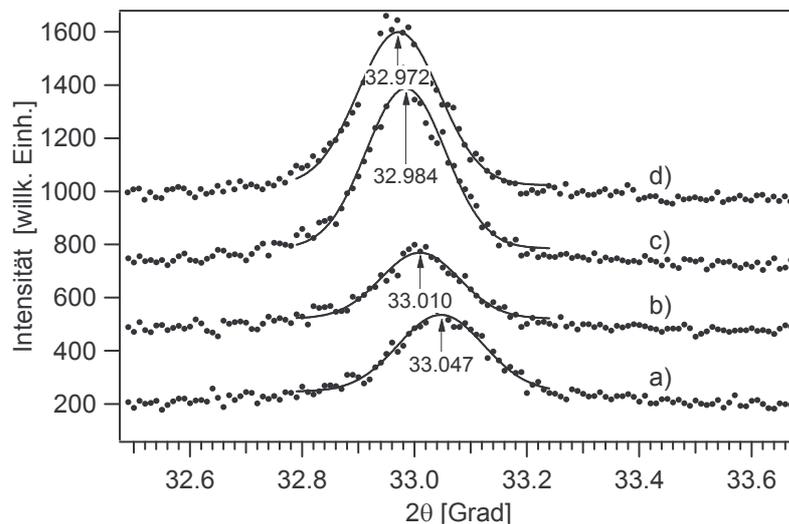


Fig. 7.8: XRD-Peak des (002)-Reflexes zweier undotierter FeS_2 -Proben bei einer Schichtdicke von 100 nm (a) bzw. 150 nm (b) ohne Korrektur und (002)-Reflex einer 150 nm $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}_2$ -Schicht mit nominell $x = 0.1$ (c) nach Korrektur durch Übereinanderlegen des Goldreflexes mit Probe (b). Spektrum (d) ist eine Wiederholungsmessung von (c).

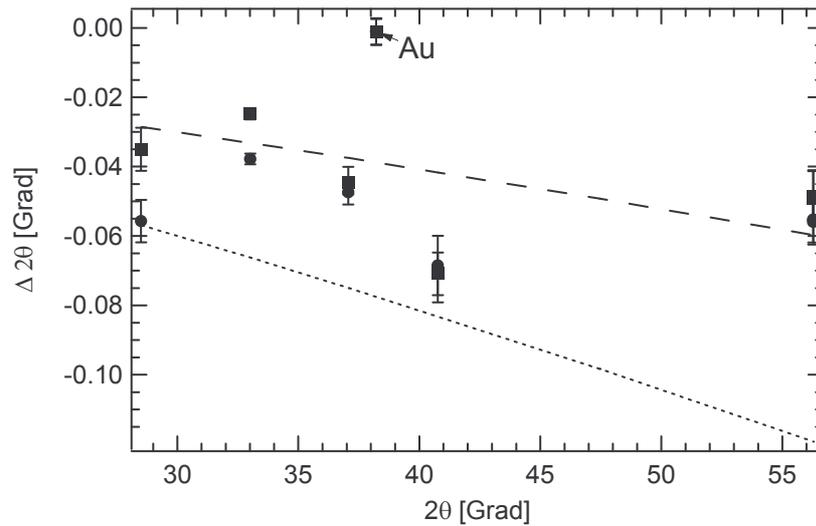


Fig. 7.9: Verschiebung der Peakpositionen einer 150nm $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}_2$ -Schicht mit nominell $x = 0.1$ bezüglich einer undotierten 150 nm FeS_2 -Schicht nach Korrektur mittels Goldreflex. (■) ist eine Wiederholungsmessung von (●). Die gestrichelte Linie entspricht der theoretischen Verschiebung für $x = 0.05$, die gepunktete Linie entspricht einer Cobaltkonzentration von $x = 0.1$.

Alle XRD-Reflexe der dotierten Schicht weisen eine negative Verschiebung, entsprechend einer größeren Gitterkonstante auf. Die Streuung ist jedoch für eine quantitative Bestimmung der Gitterkonstanten zu groß. Tendenziell liegen die Meßwerte aber näher an der für $x = 0.05$ errechneten Linie. Dies ist konsistent mit den Ergebnissen der ERDA-Messungen für Schichtdicken von 150 nm (Fig. 7.5).

REM-Bilder zeigen keinen wesentlichen strukturellen Unterschied zwischen undotierten und dotierten Schichten (Fig. 7.10). Die Korngröße der dotierten Schicht ist jedoch etwas geringer.

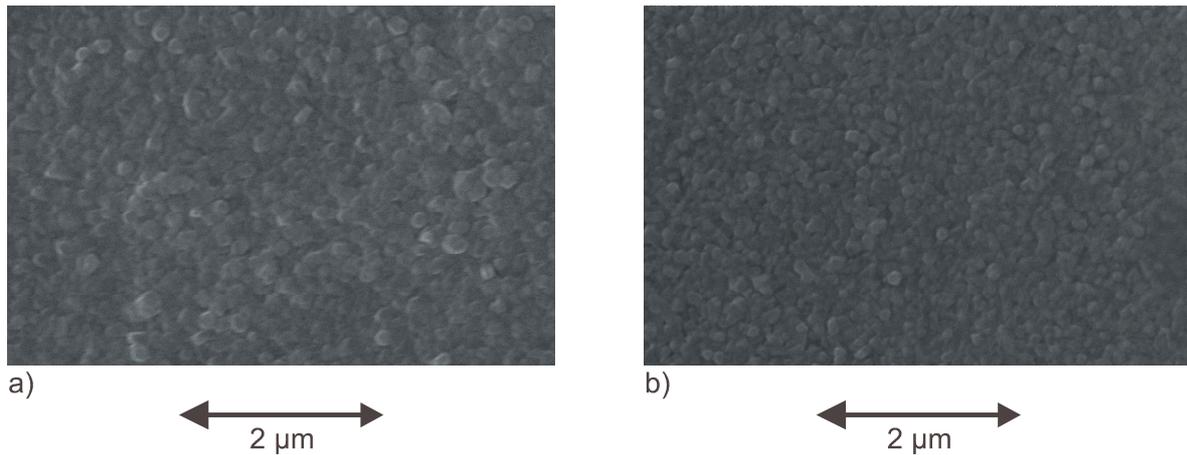


Fig. 7.10: REM-Bilder der Oberfläche von 100 nm dicken Schichten $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}_2$ mit $x = 0$ (a) und $x = 0.073$ (b).

Zur weiteren strukturellen Analyse wurde eine Probenreihe 50 nm dicker $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}_2$ -Schichten auf Si-Substraten mittels Infrarotspektroskopie untersucht. Die FTIR-Messungen wurden von B. Selle in der Abteilung SE1 des HMI durchgeführt. Von der Schwingungsabzählung erwartet man fünf IR-aktive Gitterschwingungen, von denen drei nur sehr schwach bzw. nur als Schulter zu beobachten sind [92]. Neben den beiden Phononenbanden des Pyrits bei 400 cm^{-1} und 348 cm^{-1} zeigt das FTIR-Spektrum nur noch die Si-Phononen bei 605 cm^{-1} . Fig. 7.11 zeigt die Peakpositionen der dem Pyrit zuzuordnenden Phononenbanden. Diese verschieben sich mit zunehmender Co-Konzentration stetig zu kleineren Wellenzahlen. Dies weist ebenfalls auf einen Einbau des Cobalts in das Pyritgitter hin.

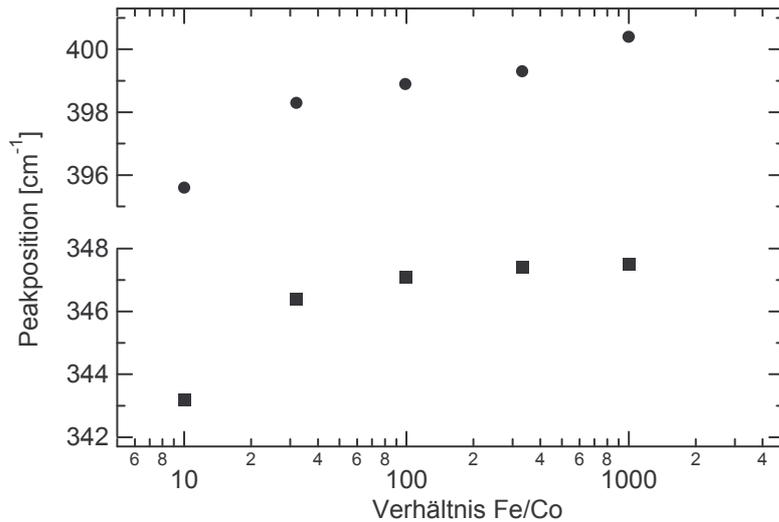


Fig. 7.11: Peakpositionen der Phononenbanden aus FTIR-Messungen 50 nm dicker $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}_2$ -Schichten auf Silizium.

7.5 Zusammenfassung

Die Ergebnisse aus den vorherigen Abschnitten zeigen, daß die Herstellung von $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}_2$ -Schichten mit dem Precursor Tricarbonyl-Nitrosyl-Cobalt möglich ist. Im untersuchten Bereich des Cobaltanteils von $1 \cdot 10^{-3} < x < 8 \cdot 10^{-2}$ entspricht der chemische Cobaltanteil in dünnen Schichten dem Anteil des Cobaltprecursors in der während der Abscheidung eingeleiteten Gasmischung. Für Schichtdicken oberhalb von ca. 50 nm ist die Cobaltverteilung vertikal inhomogen, die Cobaltkonzentration nimmt zur Oberfläche hin ab. Dies ist jedoch ein Problem, das nicht im verwendeten Precursor begründet ist, sondern aus den speziellen Bedingungen der verwendeten MOCVD-Anlage resultiert. Für eine homogene vertikale Dotierung muß dafür gesorgt werden, daß die Temperaturverteilung im Linerrohr während der Abscheidung konstant bleibt. Dies wäre z. B. durch eine direkte Heizung des Substrats mit in den Substrathalter eingebauten Heizelementen möglich. Eine andere Möglichkeit ist, rechnergesteuert während der Abscheidung die Menge des in den Reaktor eingeleiteten Co-Precursors kontinuierlich zu erhöhen, um so die Partialdruckverhältnisse von Eisen- zu Schwefelprecursor an der Substratoberfläche konstant zu halten.

Die Untersuchungen zur Struktur der $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}_2$ -Schichten zeigen, daß das Cobalt zumindest zum überwiegenden Teil auf Eisengitterplätzen in die Pyritstruktur eingebaut wird. Es wurden keine Anzeichen dafür gefunden, daß sich CoS_2 -Phasen bilden. Untersuchungen mit Ni-

Dotierungen zeigten, daß Ausscheidungen von Fremdphasen bevorzugt bei hohen Dotierkonzentrationen auftreten [57]. Für eine Anwendung in Solarzellen wären jedoch die nötigen Dotierkonzentrationen deutlich niedriger als die hier untersuchten (vergl. Kap. 3), so daß die Entstehung von Fremdphasen noch unwahrscheinlicher ist. Dies spricht für eine Eignung von Cobalt als Dotant für Pyrit. Es kann bei den verwendeten Untersuchungsmethoden jedoch prinzipiell nicht ausgeschlossen werden, daß die Co-Verteilung lateral innerhalb eines Kornes zu den Korngrenzen hin ab- oder zunimmt.

