

## Kurzfassung

Mit Metallorganischer Gasphasenabscheidung (MOCVD) werden Schichten aus  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}_2$  mit  $x \leq 0.1$  auf Substraten aus Glas, Silizium und natürlichem Pyrit präpariert und charakterisiert. Verwendet werden als Precursor die Verbindungen t-Butyldisulfid, Eisenpentacarbonyl und Tricarbonyl-Nitrosyl-Cobalt. Mit Ausnahme einiger Schichten auf natürlichen, einkristallinen Pyritsubstraten wachsen die Schichten polykristallin mit Korngrößen im Bereich von 50 bis 500 nm. Die Messung der strukturellen und chemischen Zusammensetzung erfolgt mit Röntgen- und Ionenstrahlmethoden. Cobalt wird proportional zum Anteil in der Gasphase während der Abscheidung auf Eisengitterplätzen in die Kristallstruktur eingebaut. Neben der Pyritstruktur mit leicht vergrößerter Gitterkonstante werden keine anderen kristallographischen Phasen gefunden.

Die Schichten weisen bei hinreichend hohen Cobaltkonzentration ( $x \geq 3 \cdot 10^{-3}$ ) n-Leitung auf. Der Übergang von p-Leitung undotierter Schichten zur n-Leitung cobaltdotierter Schichten zeigt sich sowohl im Umschlag des Seebeckkoeffizienten als auch im Auftreten eines negativen Hallkoeffizienten. Hallmessungen ermöglichen die direkte Bestimmung der Ladungsträgerkonzentration im Bereich von etwa  $n = 6 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$  bis  $n = 6 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ . Die Schichten zeigen bei allen Cobaltkonzentrationen halbleitendes Verhalten, wobei sich die Bandlücke mit zunehmender Cobaltkonzentration um etwa 100 meV bei  $x = 0.1$  reduziert.

Die dotierten Schichten haben bei Raumtemperatur Ladungsträgerbeweglichkeiten von  $\mu_e = 0.1 \dots 5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ . Die Temperaturabhängigkeit der Beweglichkeit kann durch ein Modell der thermischen Emission von Ladungsträgern über Korngrenzenbarrieren interpretiert werden. Diese werden durch akzeptorartige Haftstellen an den Korngrenzen induziert. Die Dichte der Haftstellen, die erstmals für polykristallines n-dotiertes Pyrit bestimmt wurde, liegt im untersuchten Dotierungsbereich bei etwa  $N_t = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ . Das ist mindestens eine Größenordnung höher als bei anderen Halbleitern wie z. B. Silizium. Eine kleinere Trappedichte bei niedrigeren Dotierungskonzentrationen ist je nach energetischer Lage der Trappedzustände in der Bandlücke möglich, aber nach den XPS-Ergebnissen nicht zu erwarten.

Die Photoaktivität der dotierten Schichten zeigt sich in einem deutlichen Signalanstieg bei der Messung der Mikrowellenreflexion bei Anregung mit Laserlicht der Wellenlängen 1047 nm und 523 nm.

Thermische Nachbehandlung bei 600 °C unter Schwefelatmosphäre führt sowohl bei dotierten als auch bei undotierten Schichten neben einer Erhöhung der Korngröße zu einer Reduzierung der Ladungsträgerkonzentration und der Leitfähigkeit.

Die homoepitaktische Abscheidung n-dotierter Pyritschichten auf natürlichen, einkristallinen Substraten ist gelungen, durch den Mangel an geeigneten p-leitenden Substraten jedoch nur auf n-leitenden Substraten. pn-Übergänge aus (001)-texturierten  $\text{Fe}_{0.99}\text{Co}_{0.01}\text{S}_2$ -Schichten auf p-leitenden Substraten zeigen ein vorhandenes, aber nur schwach ausgeprägtes Sperrverhalten.