

## Kurzzusammenfassung

Die Atomlagenabscheidung gewinnt seit Beginn des neuen Jahrtausends sowohl in industrieller, als auch in akademischer Hinsicht zunehmend an Bedeutung. Die Möglichkeit, ultradünne, definierte Schichten in einem kontrollierten Verfahren auf eine Vielzahl von Substraten aufzubringen ist nicht allein für die Halbleiter-Industrie von immenser Bedeutung. Das Anwendungspotenzial reicht über biotechnologische und sensorische Anwendungen, wie Diffusionssperrschichten oder Gassensoren bis hin zur Erforschung von Solarzellen und Photohalbleitern für die nachhaltige Energiegewinnung. Die Komplexität dieses Verfahrens, welche aus den Anforderungen an die physikochemischen Eigenschaften der verwendeten Vorstufenverbindungen (Precursoren) resultiert, sowie die limitierte Zahl geeigneter Precursoren, führen jedoch zu einer begrenzten Anwendungsbreite.

Der erste Teil dieser Dissertation behandelt die Entwicklung neuer, luftstabiler Precursoren für die plasmaunterstützte Atomlagenabscheidung metallischer Cobalt- und Nickelschichten unter Verwendung tridentater Enaminon-Liganden, sowie metallischer Kupferschichten durch den Einsatz bidentater Heteroarylalkenolat-Liganden. Im Falle der Enaminon-Komplexe konnte durch die Modifikation der Ligandenstruktur eine Veränderung der Koordinationsisomerie, welche sich aufgrund veränderter Kristallpackungen unmittelbar auf die Flüchtigkeit auswirkt, erreicht werden. Ein speziell für das Zusammenspiel zwischen molekularer Stabilität und Reaktivität gegenüber funktionellen Gruppen der Substratoberfläche ausgelegtes Ligandenkonzept wurde auf seine selbstlimitierenden Eigenschaften und damit auf seine Eignung als ALD-Precursor getestet. Hierbei wurden insbesondere das Gasphasenverhalten der Precursoren bei Einleitung in den Reaktor und die Zersetzungsmechanismen bei der Reaktion mit radikalischem Wasserstoffplasma untersucht. Die molekulare Stabilität der vorgestellten ALD-Precursoren ermöglichte eine direkte spektroskopische Analyse der chemisorptiven Bindung an die funktionellen Gruppen der Substratoberflächen, führte jedoch bei der Umsetzung mit Wasserstoffradikalen zur Ausbildung des Metallhydroxids durch den im Ligandengerüst vorhandenen Sauerstoff. Eine kontrollierte Rekristallisation der abgeschiedenen Schichten unter Reduktion zum metallischen und ebenso zum hydridischen Zustand konnte durch eine unmittelbar nach der Abscheidung durchgeführte Nachbehandlung mit radikalischem H<sub>2</sub>-Plasma erreicht werden. Die metallischen Co-, Ni- und Cu-Schichten zeichneten sich durch ihre Homogenität und Konformität entlang der Oberflächen strukturierter Substrate aus.

Der zweite Teil dieser Dissertation beschäftigt sich mit der Herstellung von Titandioxid-Photoanodenmaterialien für die solare Wasserelektrolyse. Durch gezielte und reproduzierbare Modifikationen der Schichten sollten die spezifischen Einflüsse der Abscheideparameter auf die photokatalytische Aktivität bestimmt werden. Morphologische Untersuchungen zeigten einen direkten Zusammenhang zwischen Korngröße des polykristallinen Materials und der Abscheidetemperatur. Die nachträgliche Modifikation der Titandioxidschichten mit Wasserstoff- und/oder Stickstoffplasma führt zur Teilreduktion zu substöchiometrischem  $\text{TiO}_2$ . Bedingt durch einen von der Abscheidetemperatur abhängigen Kristallisationsgrad unbehandelter Titandioxidschichten, führt die Plasma-Modifikation zur Rekristallisation derselben unter Ausbildung definierter Defektstrukturen durch Sauerstoff-Fehlstellen und Dotierung mit Wasserstoff- und Stickstoffatomen. Diese wurden mit unterschiedlichen Plasmagaskompositionen erzeugt und in einem kombinierten Ansatz aus spektroskopischer Analytik und computergestützten Berechnungen untersucht. Dabei wurden die individuellen Beiträge der Dotieratome Wasserstoff und Stickstoff zur Defektstruktur und deren Einflüsse auf die photoelektrochemischen Eigenschaften der Titandioxidschichten ermittelt.