



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
WIEN
Vienna University of Technology

DIPLOMARBEIT

Herstellung und Untersuchung von dünnen Schichten, basierend auf der Heusler-Verbindung Fe_2VAl , im Hinblick auf thermoelektrische Anwendungen

ausgeführt zum Zwecke der Erlangung des akademischen Grades eines

Diplom-Ingenieurs

im Rahmen des Studiums

Technische Physik

unter der Leitung von

Ao.Univ.Prof. Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Ernst Bauer
Dipl.-Ing. Bernhard Hinterleitner
Institut für Festkörperphysik, e138

eingereicht an der Technischen Universität Wien
Fakultät für Physik

von

Alexander Riss

Matrikelnummer 01325102
alexanderriss94@gmail.com

Wien, am 11. Februar 2019



Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Diplomarbeit ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar
The approved original version of this thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Zusammenfassung

In dieser Diplomarbeit wurden dünne Schichten, basierend auf der Heusler-Verbindung Fe_2VAl , mittels Magnetronspütern hergestellt und auf ihre thermoelektrischen Eigenschaften hin untersucht. Der Fokus lag dabei besonders auf dem Seebeck-Koeffizienten, da dieser ein gutes Maß für das Potential von thermoelektrischen Materialien für weitere Anwendungen ist. Es wurde die chemische Zusammensetzung der Schichten durch Substitutionen in der Heusler-Struktur, die Parameter der Beschichtung sowie Temperatur und Dauer der Nachbehandlung im Ofen variiert. Es konnten Seebeck-Koeffizienten über $-2000 \mu\text{V}/\text{K}$, basierend auf dem Schichtmaterial $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$, erreicht werden. Die höchsten Power-Faktoren erreichten etwa $240 \text{mW}/(\text{m} \cdot \text{K}^2)$ mit $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$ und $90 \text{mW}/(\text{m} \cdot \text{K}^2)$ mit $\text{Fe}_2\text{V}_{0,8}\text{W}_{0,2}\text{Al}$ auf Si-Wafern.

Für die Wärmebehandlung der Proben nach der Beschichtung stellte sich eine Temperatur im Bereich um 450°C als ideal für einen hohen Seebeck-Koeffizienten heraus. Die daraus resultierende kristalline und elektronische Struktur der Materialien scheint aber metastabil zu sein und kann durch weitere Wärmebehandlungen noch verändert werden.



Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Diplomarbeit ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar
The approved original version of this thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Abstract

In this thesis, thin films, based on the full Heusler compound Fe_2VAl , were produced using magnetron sputtering and tested for their thermoelectric properties. The focus was mainly on boosting the Seebeck coefficient, as it is related to the potential of thermoelectric materials for further applications. The chemical composition of the Heusler compounds through substitution, the parameters of the coating process and the temperature and duration of the heat treatment afterwards were varied. High Seebeck coefficients, exceeding $-2000 \mu\text{V}/\text{K}$ using $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$ as coating material, were obtained. The highest power factors reached a maximum of over $240 \text{mW}/(\text{m} \cdot \text{K}^2)$ with $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$ and $90 \text{mW}/(\text{m} \cdot \text{K}^2)$ with $\text{Fe}_2\text{V}_{0,8}\text{W}_{0,2}\text{Al}$ deposited on a silicon wafer.

For the heat treatment of the samples after the deposition, an ideal temperature around 450°C was found to boost the Seebeck coefficient. However, both the crystalline and electronic structure appear to be meta-stable and could be changed with further heat treatment at higher temperatures.



Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Diplomarbeit ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar
The approved original version of this thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	iii
Abstract	v
1 Einleitung	1
2 Thermoelektrische Größen	3
2.1 Boltzmann-Gleichung	3
2.2 Elektrische Leitfähigkeit	7
2.2.1 Anpassung an Dünnschicht-Systeme	10
2.3 Seebeck-Koeffizient	12
2.3.1 Anpassung an Dünnschicht-Systeme	13
2.4 Thermospannung	13
2.4.1 Seebeck-Effekt	16
2.5 Thermische Leitfähigkeit	17
2.5.1 Anpassung an Dünnschicht-Systeme	20
2.6 ZT -Wert	20
2.6.1 Wirkungsgrad	21
3 Kristallstruktur von Heusler-Materialien	23
4 Herstellungsprozess	27
4.1 Herstellung der Bulk-Materialien	27
4.2 Verwendete Substrate	28
4.3 Beschichtungsvorgang	29
5 Funktionsweise der Messgeräte	33
5.1 Messung der Schichtdicke	33

5.2	Bestimmung der Gitterstruktur	33
5.3	Messung des Seebeck-Koeffizienten	34
5.4	Messung des elektrischen Widerstands	36
6	Auswirkung der Wärmebehandlung der Schichten	37
7	Messergebnisse	43
7.1	Seebeck-Koeffizient	43
7.2	Spezifischer Widerstand	47
7.3	Power-Faktor	49
8	Herstellung und Messung eines thermoelektrischen Generators	55
9	Conclusio	59
10	Ausblick	61
A	Parameter der Beschichtung	63
	Abbildungsverzeichnis	69
	Literaturverzeichnis	73

1 Einleitung

Materialien mit guten thermoelektrischen Eigenschaften können für thermoelektrische Kühler und Generatoren verwendet werden [1]. Die Effizienz eines solchen Materials ist bestimmt durch den ZT -Wert, welcher wiederum vom Seebeck-Koeffizienten, der spezifischen Leitfähigkeit sowie der thermischen Leitfähigkeit abhängt. Auf der Suche nach Verbindungen mit immer besseren thermoelektrischen Eigenschaften werden seit vielen Jahren auch Heusler-Verbindungen, wie Fe_2VAl , untersucht [2]. Der Vorteil sind die relativ kleinen Bandlücken, sodass durch Substitutionen die elektronischen Eigenschaften an der Fermienergie leicht verändert werden können. Außerdem können durch gezielte Wahl der substituierenden Atome die einzelnen fcc-Untergitter verändert und die thermische Leitfähigkeit reduziert werden. Aufgrund der Abhängigkeit der thermoelektrischen Eigenschaften von der Dicke der Materialien werden auch Dünnschichtsysteme aus Heusler-Verbindungen untersucht [3].

In dieser Arbeit werden hauptsächlich Schichten aus $\text{Fe}_2\text{V}_{0,8}\text{W}_{0,2}\text{Al}$ und $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$ hinsichtlich ihres Seebeck-Koeffizienten und spezifischen Widerstands bei unterschiedlichen Substraten, Schichtdicken und unterschiedlichen Wärmebehandlungen nach der Beschichtung untersucht.



Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Diplomarbeit ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar
The approved original version of this thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

2 Thermoelektrische Größen

Im folgenden Kapitel werden die verschiedenen thermoelektrischen Größen diskutiert und deren Bedeutung für die Effizienz von thermoelektrischen Materialien erläutert.

Werden zwei Bereiche eines Körpers auf unterschiedliche Temperaturen gebracht, so tritt zwischen den Punkten eine Spannung aufgrund der Diffusion der dominierenden Ladungsträger auf. Die makroskopische Bewegung kann mit der Boltzmann-Gleichung beschrieben werden.

2.1 Boltzmann-Gleichung

Die Herleitung der Boltzmann-Gleichung wurde großteils aus [4] übernommen. Die Dynamik des Elektronensystems kann durch Betrachtung der elektronischen Verteilungsfunktion g verstanden werden. Die Verteilungsfunktion ist im Allgemeinen eine Funktion des Orts \mathbf{r} , des Impulses $\hbar\mathbf{k}$ und der Zeit t :

$$g = g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) . \quad (2.1)$$

Vernachlässigt man Stöße zwischen den Zeitpunkten $t - dt$ und t , so entwickeln sich Ort und Impuls der Elektronen gemäß der semiklassischen Bewegungsgleichungen

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}(\mathbf{k}) , \quad \hbar\dot{\mathbf{k}} = -e\left(\mathbf{E} + \frac{1}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{H}\right) = \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) , \quad (2.2)$$

wobei \mathbf{v} die Geschwindigkeit, e die Elementarladung, \mathbf{E} die elektrische Feldstärke, c die Lichtgeschwindigkeit, \mathbf{H} die magnetische Feldstärke und \mathbf{F} die Kraft ist. Für infinitesimale Zeiten dt folgt daher, dass alle Elektronen, die sich zum Zeitpunkt $t - dt$ im Zustand $(\mathbf{r} - \mathbf{v}(\mathbf{k}) dt, \mathbf{k} - \mathbf{F}/\hbar dt)$ befinden, zum Zeitpunkt t im Zustand

(\mathbf{r}, \mathbf{k}) sind. Daher gilt auch

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = g(\mathbf{r} - \mathbf{v}(\mathbf{k}) dt, \mathbf{k} - \mathbf{F}/\hbar dt, t - dt), \quad (2.3)$$

falls keine Stöße im Zeitintervall dt auftreten. Berücksichtigt man Stöße, so kommen zwei Korrekturterme dazu. Erstens muss der Anteil der Elektronen, die in der Zeit zwischen $t - dt$ und t Stöße erleiden, und damit nicht den Zustand $(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ erreichen, berücksichtigt werden. Hinzu kommt noch der Anteil der Elektronen, die sich zwar im Zustand $(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ befinden, allerdings infolge von Stößen und nicht aufgrund der semiklassischen Bewegungsgleichungen. Die korrigierte Gleichung für die Verteilungsfunktion ergibt sich damit zu

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = g(\mathbf{r} - \mathbf{v}(\mathbf{k}) dt, \mathbf{k} - \mathbf{F}/\hbar dt, t - dt) + \left(\frac{\partial g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right)_{\uparrow} dt + \left(\frac{\partial g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right)_{\downarrow} dt, \quad (2.4)$$

wobei

$$\left(\frac{\partial g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right)_{\uparrow} dt \quad (2.5)$$

den Anteil an zusätzlichen Elektronen im Zustand $(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ und

$$\left(\frac{\partial g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right)_{\downarrow} dt \quad (2.6)$$

den Anteil der Elektronen, die aus dem Zustand $(\mathbf{r} - \mathbf{v}(\mathbf{k}) dt, \mathbf{k} - \mathbf{F}/\hbar dt, t - dt)$ aufgrund von Stößen nicht in den Zustand $(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ gelangen, beschreibt.

Entwickelt man die Verteilungsfunktion $g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ zum Zeitpunkt t , ausgehend von der Verteilungsfunktion $g(\mathbf{r} - \mathbf{v}(\mathbf{k}) dt, \mathbf{k} - \mathbf{F}/\hbar dt, t - dt)$ zum Zeitpunkt $t - dt$, so erhält man in erster Näherung, also für kleine Zeitdifferenzen dt ,

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = g(\mathbf{r} - \mathbf{v}(\mathbf{k}) dt, \mathbf{k} - \mathbf{F}/\hbar dt, t - dt) + \mathbf{v} \frac{\partial g}{\partial \mathbf{r}} dt + \frac{1}{\hbar} \mathbf{F} \frac{\partial g}{\partial \mathbf{k}} dt + \frac{\partial g}{\partial t} dt. \quad (2.7)$$

Für $dt \rightarrow 0$ folgt daraus, eingesetzt in Gleichung 2.4, die *Boltzmann-Gleichung*

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial g}{\partial \mathbf{r}} + \frac{1}{\hbar} \mathbf{F} \frac{\partial g}{\partial \mathbf{k}} = \left(\frac{\partial g}{\partial t} \right)_{\text{Stoß}}. \quad (2.8)$$

Hier wurden die Abhängigkeiten der Verteilungsfunktion zugunsten der besseren Lesbarkeit weggelassen. Die Änderung der Verteilungsfunktion durch Stöße der Elektronen wird durch den Term

$$\left(\frac{\partial g}{\partial t}\right)_{\text{Stoß}} = \left(\frac{\partial g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t}\right)_{\uparrow} + \left(\frac{\partial g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t}\right)_{\downarrow} \quad (2.9)$$

beschrieben.

Dieser kann in der Relaxationszeitnäherung vereinfacht angegeben werden als

$$\left(\frac{\partial g}{\partial t}\right)_{\text{Stoß}} = \frac{[g(\mathbf{k}) - g^0(\mathbf{k})]}{\tau(\mathbf{k})}, \quad (2.10)$$

wobei $g^0(\mathbf{k})$ die lokale Gleichgewichtsverteilungsfunktion und $\tau(\mathbf{k})$ die Relaxationszeit ist. Die Bedeutung der Relaxationszeit wird deutlich, wenn man die Lösung von Gleichung 2.10 betrachtet:

$$g(\mathbf{k}) = g^0(\mathbf{k}) + C e^{-t/\tau(\mathbf{k})}. \quad (2.11)$$

C ist eine Konstante, die die Auslenkung aus der Ruhelage beschreibt. Die Relaxationszeit τ gibt also die Zeit an, die das System braucht, um nach einem Stoß aus der Ruhelage wieder in den Gleichgewichtszustand zu relaxieren.

Die Lösung von Gleichung 2.8 lautet

$$g(t) = g^0(t) - \int_{-\infty}^t dt' P(t, t') \frac{d}{dt'} g^0(t'), \quad (2.12)$$

mit

$$P(t, t') = \exp\left(-\int_{t'}^t \frac{d\bar{t}}{\tau(\bar{t})}\right). \quad (2.13)$$

Die Gleichgewichtsverteilungsfunktion der Elektronen $g^0(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ kann mit der Fermi-Verteilung angegeben werden:

$$g^0(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = g^0(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \frac{1}{e^{(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu(\mathbf{r}))/k_B T(\mathbf{r})} + 1}, \quad (2.14)$$

wobei ϵ die Energie, μ das chemische Potential und T die Temperatur ist. Für die totale zeitliche Änderung ergibt sich

$$\frac{dg^0(t')}{dt'} = \frac{\partial g^0}{\partial \epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{k}} \cdot \frac{d\mathbf{k}}{dt'} + \frac{\partial g^0}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt'} + \frac{\partial g^0}{\partial \mu} \frac{\partial \mu}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt'} \quad (2.15)$$

$$= \frac{\partial f}{\partial \epsilon} \mathbf{v} \cdot \left(-e\mathbf{E} - \nabla\mu - \left(\frac{\epsilon - \mu}{T} \right) \nabla T \right). \quad (2.16)$$

Hier wurde $H = 0$ gesetzt, das heißt, die Impulsänderung $\hbar\dot{\mathbf{k}}$ kommt nur durch ein elektrisches Feld \mathbf{E} zustande. f ist die Fermi-Verteilungsfunktion (siehe Gleichung 2.14). Eingesetzt in Gleichung 2.12 erhält man für die Verteilungsfunktion unter der Annahme schwacher, homogener, elektrischer Felder und Temperaturgradienten und orts- und energieunabhängiger Relaxationszeit

$$g(\mathbf{k}, t) = g^0(\mathbf{k}) + \int_{-\infty}^t dt' e^{-(t-t')/\tau(\epsilon(\mathbf{k}))} \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) \mathbf{v}(\mathbf{k}(t')) \cdot \left(-e\mathbf{E}(t') - \nabla\mu(t') - \left(\frac{\epsilon(\mathbf{k}) - \mu}{T} \right) \nabla T(t') \right). \quad (2.17)$$

Nimmt man das elektrische Feld, das chemische Potential und die Temperatur als zeitlich konstant an, lässt sich das Integral leicht lösen und man erhält

$$g(\mathbf{k}) = g^0(\mathbf{k}) + \tau(\epsilon(\mathbf{k})) \frac{\partial f}{\partial \epsilon} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \left(e\mathbf{E} + \nabla\mu + \left(\frac{\epsilon(\mathbf{k}) - \mu}{T} \right) \nabla T \right). \quad (2.18)$$

Da die Anzahl von Elektronen pro Einheitsvolumen im Volumenelement dk^3 durch $g(\mathbf{k}) dk^3/4\pi^3$ gegeben ist, ergibt sich für die Stromdichte

$$\mathbf{j} = -e \int \frac{dk^3}{4\pi^3} \mathbf{v}(\mathbf{k}) g(\mathbf{k}), \quad (2.19)$$

wobei das Integral über die 1. Brillouinzone läuft. Da im Gleichgewicht kein Strom fließt, trägt $g^0(\mathbf{k})$ nicht zur Stromdichte bei.

Setzt man Gleichung 2.18 in Gleichung 2.19 ein, erhält man, umgeformt auf das elektrische Feld,

$$\mathbf{E} = \frac{\mathbf{j}}{\sigma} + S\nabla T - \frac{1}{e} \nabla\mu. \quad (2.20)$$

Im Folgenden wird die Bedeutung der Koeffizienten σ und S erklärt.

2.2 Elektrische Leitfähigkeit

In einem homogenen Leiter mit konstanter Temperatur verschwinden die Gradienten des chemischen Potentials sowie der Temperatur und Gleichung 2.20 vereinfacht sich zu

$$\mathbf{E} = \frac{\mathbf{j}}{\sigma}. \quad (2.21)$$

Das ist das Ohmsche Gesetz mit der elektrischen Leitfähigkeit σ . Diese ist durch Gleichung 2.19 gegeben als

$$\sigma = -e^2 \int \frac{dk^3}{4\pi^3} \tau(\epsilon(\mathbf{k})) \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}) \frac{\partial f(\epsilon(\mathbf{k}))}{\partial \epsilon}. \quad (2.22)$$

Für Metalle lässt sich Gleichung 2.22 in guter Näherung bei $T = 0$ berechnen [4]. Daher kann $\tau(\epsilon(\mathbf{k}))$ an der Fermienergie ϵ_F angegeben und vor das Integral gezogen werden. Aufgrund der Beziehung

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) \left(\frac{\partial f(\epsilon(\mathbf{k}))}{\partial \epsilon} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial f(\epsilon(\mathbf{k}))}{\partial \mathbf{k}} \quad (2.23)$$

kann Gleichung 2.22 partiell integriert werden:

$$\begin{aligned} \sigma &= -e^2 \frac{\tau(\epsilon_F)}{4\pi^3} \int dk^3 \frac{1}{\hbar} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \frac{\partial f(\epsilon(\mathbf{k}))}{\partial \mathbf{k}} \\ &= e^2 \frac{\tau(\epsilon_F)}{4\pi^3} \int dk^3 \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{k}} f(\epsilon(\mathbf{k})) \\ &= e^2 \frac{\tau(\epsilon_F)}{4\pi^3} \int_{\text{besetzte Niveaus}} dk^3 \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (2.24)$$

Der erste Term der partiellen Integration liefert keinen Beitrag, da die Geschwindigkeit am Rand der Brillouinzone verschwindet. Der Tensor $\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{k})$ ist gegeben durch

$$M_{ij}^{-1}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial v_i}{\partial k_j} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \epsilon(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j} \quad (2.25)$$

und beschreibt die effektive Masse der Elektronen im Potential. Für den einfachen Fall freier Elektronen mit Masse m vereinfacht sich der Tensor zu $M_{ij}^{-1} = (1/m)\delta_{ij}$ und man erhält für die elektrische Leitfähigkeit die Form des Drude-

Modells

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}, \quad (2.26)$$

wobei n die Dichte der Elektronen ist. Der spezifische Widerstand folgt damit zu

$$\rho = \frac{m}{ne^2} \frac{1}{\tau}. \quad (2.27)$$

Der spezifische Widerstand unterscheidet sich stark für Metalle und Halbleiter, also je nachdem, ob die Fermienergie innerhalb des Leitungsbandes, oder zwischen dem Valenzband und dem Leitungsband liegt [5].

Elektronen unterliegen auf ihrem Weg vom hohen zum niedrigen Potential Streu- und Stoßprozessen, die sich makroskopisch zum elektrischen Widerstand aufsummieren. Nach der Mathiessen-Regel addieren sich die Kehrwerte der Stoßzeiten von verschiedenen Prozessen zu einer Gesamtstoßzeit

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{\text{ph}}} + \frac{1}{\tau_{\text{el-el}}} + \frac{1}{\tau_{\text{mag}}} + \dots \quad (2.28)$$

Der spezifische Widerstand setzt sich also aus mehreren Termen zusammen:

$$\rho = \rho_0 + \rho_{\text{ph}}(T) + \rho_{\text{el-el}}(T) + \rho_{\text{mag}}(T) + \dots \quad (2.29)$$

ρ_0 beschreibt die Streuung der Elektronen an Verunreinigungen und Defekten, ρ_{ph} die Streuung an Phononen, $\rho_{\text{el-el}}$ die Streuung der Elektronen untereinander und ρ_{mag} die Streuung der Elektronen an magnetischen Momenten. Da bei Temperaturen im Bereich der Raumtemperatur die Streuung an den Phononen dominiert, wird im Folgenden nur dieser Term betrachtet.

Bei Metallen ist der spezifische Widerstand durch Streuung an Phononen durch das Bloch-Grüneisen-Gesetz [6]

$$\rho_{\text{ph}}(T) = 4\mathcal{R} \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^5 \int_0^{\frac{\Theta_D}{T}} \frac{x^5 dx}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} \quad (2.30)$$

bestimmt, wobei \mathcal{R} die temperaturunabhängige Elektron-Phonon-Wechselwirkung beschreibt und Θ_D die Debye-Temperatur ist. Dabei werden Gitterschwingungen durch das Debye-Modell beschrieben. Bei hohen Temperaturen ($T \gg \Theta_D$) wird das

Integral wegen

$$\frac{x^5}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} \approx \frac{x^5}{x \cdot x} = x^3 \quad \text{für } x \ll 1 \quad (2.31)$$

proportional zu $\left(\frac{\Theta_D}{T}\right)^4$ und man erhält für den spezifischen Widerstand bei hohen Temperaturen

$$\rho_{\text{ph}}^{\text{hoch}}(T) \propto \frac{T}{\Theta_D}. \quad (2.32)$$

Bei niedrigen Temperaturen ($T \ll \Theta_D$) wird das Integral konstant und der spezifische Widerstand wird zu

$$\rho_{\text{ph}}^{\text{tief}}(T) \propto \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^5. \quad (2.33)$$

Der spezifische Widerstand steigt also in einem Metall mit der Temperatur an. Das liegt daran, dass in einem Metall die Anzahl der leitenden Elektronen konstant ist, während die Streuung an Phononen und Gitterfehlstellen aufgrund der thermischen Bewegung mit der Temperatur zunimmt und sich damit die mittlere freie Weglänge und mit ihr die Beweglichkeit und Leitfähigkeit verringern.

In einem Halbleiter liegt die Fermienergie zwischen dem Valenz- und dem Leitungsband. Das heißt, dass bei $T = 0\text{K}$ das Valenzband voll besetzt und das Leitungsband leer ist. Mit zunehmender Temperatur steigt nun die Ladungsträgerdichte exponentiell gemäß [5]

$$\begin{aligned} n_e(T) &= \int_{\epsilon_F}^{\infty} N(\epsilon) f(\epsilon, T) d\epsilon, \\ n_l(T) &= \int_{-\infty}^{\epsilon_F} N(\epsilon) [1 - f(\epsilon, T)] d\epsilon \end{aligned} \quad (2.34)$$

an. Dabei sind n_e und n_l die Dichten der Elektronen und Löcher, ϵ_F ist die Fermienergie, $N(\epsilon)$ die elektronische Zustandsdichte und $f(\epsilon, T)$ die Fermi-Verteilungsfunktion (siehe Gleichung 2.14). Für niedrige Temperaturen steigt die Verteilungsfunktion für Energien oberhalb des chemischen Potentials und damit die Elektronendichte im Leitungsband und die Dichte der Löcher im Valenzband

exponentiell an. Die gesamte Ladungsträgerdichte ist [5]

$$n(T) = \sqrt{n_e(T)n_l(T)}. \quad (2.35)$$

Da die Leitfähigkeit proportional zur Anzahl der Ladungsträger ist, steigt diese ebenfalls exponentiell an und der dazu inverse spezifische Widerstand sinkt exponentiell.

Ein Material, das sowohl metallische, als auch Halbleitereigenschaften besitzt, kann bei niedrigen Temperaturen einen geringen Widerstand haben, der darauf zurückzuführen ist, dass sich bereits Elektronen im Leitungsband befinden. Dieser steigt dann zuerst, wie für ein Metall typisch, mit der Temperatur aufgrund der zunehmenden Streuung an, verringert sich für höhere Temperaturen wegen der starken Zunahme an Ladungsträgern jedoch wieder. Bei noch höheren Temperaturen verhält sich ein Halbleiter ähnlich wie ein Metall und die Leitfähigkeit wird durch Streuungen an Phononen dominiert.

2.2.1 Anpassung an Dünnschicht-Systeme

Da keine Annahmen über die Ausdehnung des Körpers gemacht wurden, ist Gleichung 2.26 auch für dünne Schichten gültig. Allerdings kommt in der Stoßzeit τ in Gleichung 2.28 ein weiterer Term hinzu, der die Streuung an den Rändern der Schicht berücksichtigt:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{\text{ph}}} + \frac{1}{\tau_{\text{el-el}}} + \frac{1}{\tau_{\text{mag}}} + \frac{1}{\tau_o} + \dots, \quad (2.36)$$

wobei τ_o die Zeit zwischen zwei Stößen an der Oberfläche ist.

Neben der Schichtdicke D ist außerdem noch die Art der Streuung an den Rändern der Schicht von Bedeutung. Bei einer vollständig gerichteten Reflexion hat die Streuung keinen Einfluss auf die Leitfähigkeit, da die Bewegung in Stromrichtung nicht verändert wird. Bei einer vollständig diffusen Reflexion andererseits wird die Bewegung der Ladungsträger am meisten gestört. Im Realfall findet man eine Überlagerung der beiden Extremfälle. Bei einer teilweise gerichteten Reflexion (Anteil

p) ergibt sich für die spezifische Leitfähigkeit [7]

$$\frac{\sigma}{\sigma_0} = 1 - \frac{3(1-p)}{8k} + \frac{3}{4k} (1-p)^2 \sum_{n=0}^{\infty} p^{n-1} \left[E_1(kn) \left(k^2 n^2 - \frac{k^4 n^4}{12} \right) + e^{kn} \left(\frac{1}{2} - \frac{5kn}{6} - \frac{k^2 n^2}{12} + \frac{k^3 n^3}{12} \right) \right], \quad (2.37)$$

wobei σ_0 die spezifische Leitfähigkeit des ausgedehnten Körpers und $k = D/\lambda_0$ das Verhältnis von Schichtdicke zu mittlerer freier Weglänge der Elektronen λ_0 ist. Die Funktion $E_1(k)$ ist definiert als

$$E_1(k) = \int_k^{\infty} \frac{e^{-x}}{x} dx.$$

Für den Fall einer totalen diffusen Reflexion ($p = 0$) folgt daraus

$$\frac{\sigma}{\sigma_0} = 1 - \frac{3}{8k} + \frac{3k}{4} \left(1 - \frac{k^2}{12} \right) \int_k^{\infty} \frac{e^{-x}}{x} dx + \left(\frac{3}{8k} - \frac{5}{8} - \frac{k}{16} + \frac{k^2}{16} \right) e^{-k}, \quad (2.38)$$

während bei vollständig gerichteter Reflexion ($p = 1$),

$$\sigma = \sigma_0, \quad (2.39)$$

die spezifische Leitfähigkeit wie erwartet gleich der des ausgedehnten Körpers wird. Ist $k \ll 1$, so folgt für die spezifische Leitfähigkeit

$$\frac{\sigma}{\sigma_0} = \frac{3k}{4} \ln \frac{1}{k}. \quad (2.40)$$

Für $k \gg 1$ ergibt sich

$$\frac{\sigma}{\sigma_0} = 1 - \frac{3}{8k} (1-p). \quad (2.41)$$

Für große Schichtdicken verhält sich der Körper also wie das Bulkmaterial.

Im Realfall wird das Substrat nicht gleichmäßig beschichtet, sodass die Schichtdicke nicht konstant ist. Bei sehr kleinen Schichtdicken kann es durch Inselbildung vorkommen, dass verschiedene Bereiche galvanisch voneinander getrennt sind. Dadurch ist der Widerstand extrem erhöht. Erst bei weiterer Beschichtung verbinden sich die

Inseln, und die Leitfähigkeit steigt auf den durch die obigen Formeln angegebenen Wert an.

2.3 Seebeck-Koeffizient

Der Proportionalitätsfaktor S in Gleichung 2.20 wird Seebeck-Koeffizient genannt. Er ist ein Maß für die Stärke des elektrischen Feldes innerhalb eines Materials bei einem vorhandenen Temperaturgradienten. Aus Gleichung 2.19 erhält man

$$S = \frac{e}{\sigma} \int \frac{dk^3}{4\pi^3} \tau(\epsilon(\mathbf{k})) \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}) \frac{\partial f}{\partial \epsilon} \frac{\epsilon(\mathbf{k}) - \mu}{T}, \quad (2.42)$$

wobei σ die elektrische Leitfähigkeit des Systems ist. Verwendet man die Sommerfeldnäherung zur Entwicklung der Fermiverteilung um die Fermienergie, so ergibt sich nach kurzer Rechnung [4]

$$S = -\frac{\pi^2 k_B T}{3e} \left[\frac{d}{d\epsilon} \ln \sigma(\epsilon) \right]_{\epsilon=\epsilon_F}. \quad (2.43)$$

Da die spezifische Leitfähigkeit von der Teilchendichte, und diese von der Zustandsdichte abhängt (siehe Gleichung 2.26 und Gleichung 2.34), lässt sich der Seebeck-Koeffizient umschreiben in [8]

$$S = -\mathcal{A} T \left[\frac{d}{d\epsilon} \ln N(\epsilon) \right]_{\epsilon=\epsilon_F} = -\mathcal{A} T \left[\frac{1}{N(\epsilon)} \frac{d}{d\epsilon} N(\epsilon) \right]_{\epsilon=\epsilon_F}, \quad (2.44)$$

mit der Zustandsdichte $N(\epsilon)$ und einer Konstanten \mathcal{A} . Der Seebeck-Koeffizient ist also umso höher, je kleiner die Zustandsdichte und je größer die Steigung der Zustandsdichte an der Fermienergie ist. Im Grenzfall freier Elektronen ($N(\epsilon) \propto \epsilon^{1/2}$) ergibt sich daraus die einfache Form

$$S = -\frac{\pi^2 k_B}{2e} \frac{k_B T}{\epsilon_F}. \quad (2.45)$$

Diese gilt in guter Näherung für einfache Metalle.

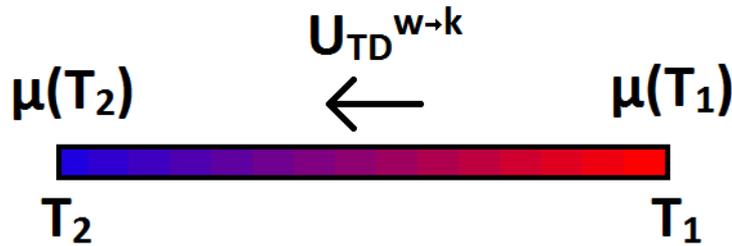


Abbildung 2.1: Homogener, linearer Leiter mit einem Temperaturgradienten zur Erklärung der Thermospannung.

2.3.1 Anpassung an Dünnschicht-Systeme

Da der Seebeck-Koeffizient von der spezifischen Leitfähigkeit abhängt, ändert sich dieser ebenfalls für dünne Schichten (siehe Unterabschnitt 2.2.1). Hinzu kommt noch, dass bei einem mehrlagigen System die Seebeck-Koeffizienten der einzelnen Komponenten mit der Dicke d_i sowie der spezifischen Leitfähigkeit σ_i gewichtet und zu einem totalen Seebeck-Koeffizienten S_{tot} addiert werden [9]:

$$S_{\text{tot}} = \frac{\sum_i d_i \sigma_i S_i}{\sum_i d_i \sigma_i} . \quad (2.46)$$

Für eine dünne Schicht mit Dicke d_1 und spezifischer Leitfähigkeit σ_1 auf einem Substrat mit der Dicke d_s spezifischer Leitfähigkeit σ_s erhält man daraus

$$S_{\text{tot}} = \frac{d_1 \sigma_1 S_1 + d_s \sigma_s S_s}{d_1 \sigma_1 + d_s \sigma_s} . \quad (2.47)$$

2.4 Thermospannung

Werden die zwei Enden eines Stabes auf unterschiedliche Temperaturen gebracht, führt das zu einer Thermospannung $U_{\text{TD}}^{w \rightarrow k}$ infolge der Temperaturabhängigkeit der Geschwindigkeitsverteilung der Ladungsträger, sowie des chemischen Potentials des Materials (siehe Abbildung 2.1). Die mathematische Beschreibung erfolgt durch die Boltzmann-Gleichung (vgl. Gleichung 2.20). Für einen Gradienten

in z -Richtung erhält man

$$E = \frac{j}{\sigma} + S \frac{dT}{dz} - \frac{1}{e} \frac{d\mu}{dz} . \quad (2.48)$$

Wie aus Gleichung 2.48 ersichtlich ist, führt also nicht nur ein Strom, sondern auch ein Gradient in der Temperatur und im chemischen Potential zum Aufbau eines elektrischen Feldes. Im Spezialfall konstanter Temperatur und konstantem chemischen Potential vereinfacht sich die Gleichung zum bekannten Ohmschen Gesetz $j = \sigma E$.

Betrachtet man die freien Ladungsträger näherungsweise als ideales Gas, so ist die Verteilung der Geschwindigkeitsdichte $p(v)$ durch die Maxwell-Boltzmann-Verteilung

$$p(v) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} 4\pi v^2 e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}} , \quad (2.49)$$

mit der Masse der Ladungsträger m und der Geschwindigkeit v gegeben. Die mittlere Geschwindigkeit kann berechnet werden durch das Integral

$$\bar{v} = \int_0^\infty v p(v) dv = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}} . \quad (2.50)$$

Die mittlere Geschwindigkeit ist also proportional zu $T^{1/2}$ und somit am wärmeren Ende des Leiters höher. Deshalb kommt es zu einem Nettofluss von Ladungsträgern vom Bereich höherer Temperatur zum Bereich niedrigerer Temperatur.

Für einfache Metalle nimmt der Seebeck-Koeffizient die Form (vgl. Gleichung 2.45)

$$S = -\frac{\pi^2 k_B}{2e} \frac{k_B T}{\epsilon_F} \quad (2.51)$$

an. Der Seebeck-Koeffizient ist also negativ und das elektrische Feld zeigt in Richtung niedrigerer Temperatur, wenn Elektronen die Majoritätsladungsträger sind. In einem von positiven Ladungsträgern dominierten Material ist der Seebeck-Koeffizient positiv und das elektrische Feld zeigt in Richtung höherer Temperatur.

Das chemische Potential ist im Sommerfeld-Modell, für hinreichend kleine Tempe-

raturen T ($k_B T \ll \epsilon_F$), gegeben durch [4, 10]

$$\mu = \epsilon_F \left(1 - \frac{\pi^2 k_B^2 T^2}{12 \epsilon_F^2} \right). \quad (2.52)$$

Das chemische Potential ist damit für $T = 0$ identisch mit der Fermienergie und wird mit zunehmender Temperatur kleiner. Da Gleichung 2.52 allerdings nur mit obiger Bedingung gilt, ist der zweite Term immer viel kleiner als der erste. Die Korrektur des chemischen Potentials liegt selbst bei Raumtemperatur nur in der Größenordnung von 10^{-4} [10].

Da die beiden Enden des Materials eine unterschiedliche Temperatur und somit ein unterschiedliches chemisches Potential haben, diffundieren die Elektronen vom Bereich höheren chemischen Potentials (niedrigerer Temperatur) in den Bereich niedrigeren chemischen Potentials (höhere Temperatur).

Die beiden Effekte konkurrieren also bei einem vorliegenden Temperaturgradienten. Allerdings überwiegt der Effekt der Diffusion aufgrund der unterschiedlichen mittleren Geschwindigkeiten der Ladungsträger, wodurch sich das Ende mit der niedrigeren Temperatur T_2 gegenüber dem Ende mit der höheren Temperatur T_1 bei einem Metall (also bei negativen Ladungsträgern) negativ auflädt. Die Diffusionsströme dauern so lange an, bis sich durch die Ladungsverschiebung ein elektrisches Feld aufgebaut hat, das der Diffusion die Waage hält. Im Gleichgewicht bewegen sich dann gleich viele Elektronen in beide Richtungen. Das dabei auftretende Feld wird als thermoelektrisches Feld bezeichnet. Das Integral von Gleichung 2.48 über den Leiter für $j = 0$ liefert die sogenannte Thermospannung

$$\begin{aligned} U_{\text{TD}}^{\text{w} \rightarrow \text{k}} &= \int_{\text{Leiter}} \left(S \frac{dT}{dz} - \frac{1}{e} \frac{d\mu}{dz} \right) dz = \int_{\text{Leiter}} \left(S dT - \frac{1}{e} d\mu \right) \\ &= S (T_2 - T_1) - \frac{1}{e} [\mu(T_2) - \mu(T_1)]. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Zu beachten ist, dass dieses Ergebnis für den Fall $S = \text{const.}$ gilt, also für kleine Temperaturdifferenzen. Bei höheren Temperaturdifferenzen muss die Temperaturabhängigkeit des Seebeck-Koeffizienten berücksichtigt werden.

2.4.1 Seebeck-Effekt

Werden zwei verschiedene metallische Leiter A und B (mit im Allgemeinen unterschiedlichen chemischen Potentialen $\mu_A(T)$ und $\mu_B(T)$ und Seebeck-Koeffizienten $S_A(T)$ und $S_B(T)$) kreisförmig zusammen geschlossen und die beiden Kontaktstellen auf den Temperaturen T_1 und $T_2 < T_1$ gehalten, entsteht ebenfalls eine Thermospannung. An der Kontaktstelle tritt wieder eine Änderung des chemischen Potentials auf, diesmal allerdings aufgrund der unterschiedlichen Materialeigenschaften. Dort ergibt sich die Kontaktspannung

$$\begin{aligned} U_K^{A|B}(T) &= -\frac{1}{e} \int_{\text{Kontakt}} d\mu = -\frac{1}{e} [\mu_B(T) - \mu_A(T)] \\ &= -\left[\frac{1}{e} (\epsilon_{F,B} - \epsilon_{F,A}) + \frac{\pi^2 k_B^2}{12e} \left(\frac{1}{\epsilon_{F,A}} - \frac{1}{\epsilon_{F,B}} \right) T^2 \right], \end{aligned} \quad (2.54)$$

wobei $\epsilon_{F,i}$ die Fermienergie des Leiters i ist. Aus Gleichung 2.54 ist ersichtlich, dass die Kontaktspannung höherer Temperatur betragsmäßig größer ist. Dies folgt aus der Tatsache, dass das chemische Potential zwar mit zunehmender Temperatur sinkt, die Differenz zwischen den chemischen Potentialen der beiden Leiter aber zunimmt. Mit diesen und den Ergebnissen für den einzelnen homogenen Leiter ergeben sich in Summe vier Teilspannungen (siehe Abbildung 2.2):

$$\begin{aligned} U_{\text{TD},A}^{w \rightarrow k} &= S_A (T_2 - T_1) - \frac{1}{e} [\mu_A(T_2) - \mu_A(T_1)] , \\ U_K^{A|B}(T_2) &= -\frac{1}{e} [\mu_B(T_2) - \mu_A(T_2)] , \\ U_{\text{TD},B}^{k \rightarrow w} &= -S_B (T_2 - T_1) + \frac{1}{e} [\mu_B(T_2) - \mu_B(T_1)] , \\ U_K^{B|A}(T_1) &= \frac{1}{e} [\mu_B(T_1) - \mu_A(T_1)] . \end{aligned} \quad (2.55)$$

Die Thermospannung ergibt sich dann durch Summation der vier Terme zu

$$U_{\text{TD}} = (S_A - S_B) (T_2 - T_1) = \Delta S \Delta T . \quad (2.56)$$

Die Beiträge des Diffusionsstroms aufgrund der Änderungen im chemischen Potential heben sich also genau auf. Die auftretende Spannung hängt nur mehr von der Differenz der Seebeck-Koeffizienten der beiden Leiter sowie der Differenz der

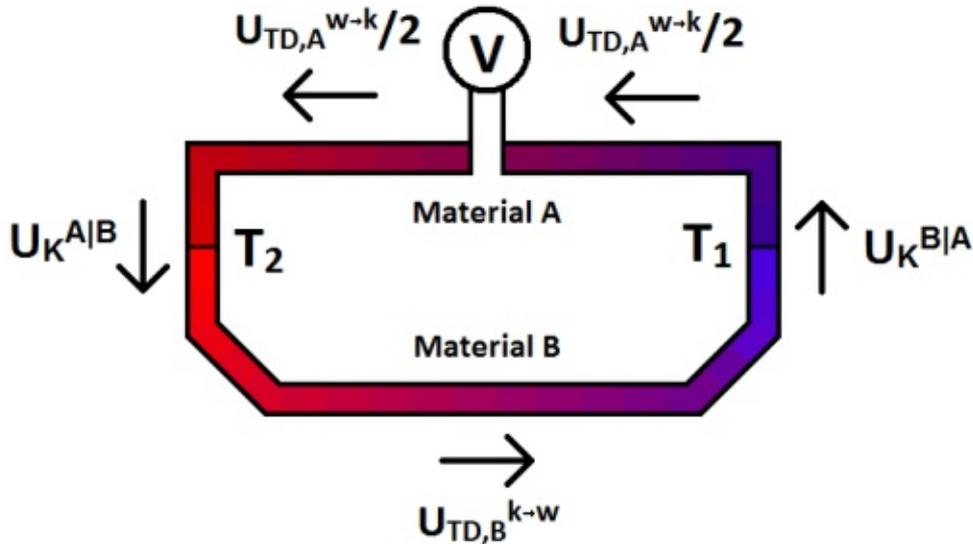


Abbildung 2.2: Auftretende Teilspannungen bei ringförmigem Zusammenschluss von zwei unterschiedlichen Materialien A und B und unterschiedlichen Temperaturen T_1 und T_2 an den Kontaktstellen.

Temperaturen an den Kontaktstellen ab. Dies wird als Seebeck-Effekt bezeichnet. Bei Kenntnis der Seebeck-Koeffizienten beider Leiter ist es also möglich, über die Messung der Thermospannung die Temperaturdifferenz zu messen, während bei Kenntnis des Seebeck-Koeffizienten eines Leiters, bei vorgegebener Temperaturdifferenz, der Seebeck-Koeffizient des anderen Leiters bestimmt werden kann.

Berücksichtigt man die Temperaturabhängigkeit des Seebeck-Koeffizienten, so ändert sich Gleichung 2.56 zu

$$U_{TD} = \int_{T_1}^{T_2} [S_A(T) - S_B(T)] dT . \quad (2.57)$$

2.5 Thermische Leitfähigkeit

Ein Temperaturgradient ∇T in einem Material führt zu einem Wärmestrom. Der Proportionalitätsfaktor κ zwischen dem Temperaturgradienten und der Wärmestromdichte \mathbf{j}_Q wird thermische Leitfähigkeit oder Wärmeleitfähigkeit genannt:

$$\mathbf{j}_Q = -\kappa \nabla T . \quad (2.58)$$

Die Wärmeleitfähigkeit ist immer positiv und setzt sich aus Beiträgen des Gitters (bzw. der Phononen) κ_{ph} und der Elektronen κ_e zusammen. Der Wärmestrom ist damit immer entgegen dem Temperaturgradienten gerichtet und zeigt in Richtung niedrigerer Temperatur. Analog zum Seebeck-Koeffizienten lässt sich dies mit der höheren mittleren Geschwindigkeit am warmen Ende beschreiben (vgl. Gleichung 2.50).

Für den Anteil der Wärmestromdichte der Phononen folgt aus dem Debye-Modell [4]

$$\mathbf{j}_Q = -\frac{1}{3}C_V v_s l \nabla T, \quad (2.59)$$

wobei C_V die Wärmekapazität, v_s die - im Debye-Modell konstante - Geschwindigkeit und l die mittlere freie Weglänge der Phononen ist. Daraus folgt aus Gleichung 2.58

$$\kappa_{\text{ph}} = \frac{1}{3}C_V v_s l = \frac{1}{3}C_V v_s^2 \tau, \quad (2.60)$$

mit der mittleren Stoßzeit τ . Da die Geschwindigkeit der Phononen unabhängig von der Temperatur ist, ist die Temperaturabhängigkeit der thermischen Leitfähigkeit durch $C_V(T)$ und $\tau(T)$ bestimmt.

Für hohe Temperaturen $T \gg \Theta_D$, wobei Θ_D die Debye-Temperatur des Materials ist, wird die Zahl der Phononen proportional zur Temperatur [4]. Daher wird mit zunehmender Temperatur durch die häufigere Streuung die mittlere Stoßzeit kleiner, während die Wärmekapazität nach dem Dulong-Petit-Gesetz ($C_V = 3R$ mit der Gaskonstanten R) konstant bleibt. Insgesamt gilt also

$$\kappa_{\text{ph}} \sim \frac{1}{T^x}, \quad (2.61)$$

wobei $x = 1$ bis 2 vom Streuprozess abhängt.

Bei tiefen Temperaturen $T \ll \Theta_D$ treten vorwiegend Normal-Prozesse (oder N-Prozesse) auf [11]. Hierbei bleibt jedoch, im Gegensatz zu Umklapp-Prozessen (oder U-Prozessen), der Gesamtimpuls erhalten, sodass kein Wärmetransport stattfinden kann. Die mittlere Zahl der Phononen, deren Impuls hinreichend groß für U-

Prozesse ist, ist gegeben durch [4]

$$n \sim e^{-\frac{\Theta_D}{T}} \quad (2.62)$$

und nimmt daher exponentiell ab. Daraus folgt für die mittlere Stoßzeit

$$\tau \sim e^{\frac{\Theta_D}{T}}. \quad (2.63)$$

Die mittlere Stoßzeit wird bei noch tieferen Temperaturen durch die Defekte oder die Dimensionen des Materials begrenzt und konstant. Die Temperaturabhängigkeit der thermischen Leitfähigkeit ist dann durch die Wärmekapazität gegeben, für die im Debye-Modell, für tiefe Temperaturen, gilt [4]:

$$C_V = \frac{12\pi^4 R}{5\Theta_D^3} T^3. \quad (2.64)$$

Die thermische Leitfähigkeit von Phononen lässt sich bis zu Temperaturen um 375 K [12] gut mit dem Callaway-Modell berechnen [13]:

$$\kappa_{\text{ph}} = \frac{k_B}{2\pi^2 v_s} \left(\frac{k_B}{\hbar} \right)^3 T^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{\tau x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx, \quad (2.65)$$

mit dem reduzierten Plank'schen Wirkungsquantum \hbar .

Da der Wärmetransport durch Elektronen auch zu einer Ladungsverschiebung führt, hängt die thermische Leitfähigkeit der Elektronen κ_e stark mit der elektrischen Leitfähigkeit σ zusammen. Der Zusammenhang wird durch das Wiedemann-Franz-Gesetz

$$\frac{\kappa_e}{\sigma} = LT, \quad (2.66)$$

mit der Lorenz-Zahl L , beschrieben. Für die meisten Metalle findet man in guter Näherung den Wert [4]

$$L = \frac{\pi^2 k_B^2}{3e^2} \approx 2,44 \cdot 10^{-8} \frac{\text{V}^2}{\text{K}^2}. \quad (2.67)$$

In einem Halbleiter ist die Beschreibung komplizierter und die Lorenz-Zahl hängt von vielen Parametern, wie der Dimension des Materials und der Art der Streuprozesse, ab [14]. Da in einem Halbleiter die Wärmeleitung durch Phononen allerdings bei weitem überwiegt, kann der Anteil der Elektronen oft vernachlässigt werden [15] und der Einfluss der Elektronen wird in der Stoßzeit der Phononen mit Elektronen berücksichtigt.

2.5.1 Anpassung an Dünnschicht-Systeme

Analog zur elektrischen Leitfähigkeit wird die Änderung des Phononenanteils der thermischen Leitfähigkeit bei dünnen Schichten in der Stoßzeit berücksichtigt [15]:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{\text{el}}} + \frac{1}{\tau_{\text{u}}} + \frac{1}{\tau_{\text{v}}} + \frac{1}{\tau_{\text{o}}} + \dots \quad (2.68)$$

τ_{el} beschreibt die Streuung der Phononen an Elektronen, τ_{u} den Anteil durch Umklappprozesse, τ_{v} die Streuung an Verunreinigungen und τ_{o} die Streuung an den Rändern der Schicht. Die thermische Leitfähigkeit wird durch die Begrenzungen der Schicht also kleiner. Wie bei der elektrischen Leitfähigkeit hängt die Stärke des Einflusses von der Art der Streuung ab (vgl. Unterabschnitt 2.2.1). Die Änderungen des Elektronenanteils werden sowohl in der Lorenz-Zahl [14], also auch durch die Änderungen der elektrischen Leitfähigkeit in Gleichung 2.66 berücksichtigt.

2.6 ZT -Wert

Die Effizienz eines thermoelektrischen Materials ist bestimmt durch den ZT -Wert [16–18]:

$$ZT = \frac{PF}{\kappa} = \frac{S^2 \sigma}{\kappa} T, \quad (2.69)$$

wobei PF der Power-Faktor, S der Seebeck-Koeffizient, σ die elektrische Leitfähigkeit und κ die thermische Leitfähigkeit ist. Der wichtigste Faktor für eine hohe Effizienz ist also der Seebeck-Koeffizient, da durch ihn im Wesentlichen die Thermospannung gegeben ist. Eine hohe elektrische Leitfähigkeit ist günstig, da ansonsten durch Joule'sche Wärme Energie auf die kältere Seite übertragen wird. Durch eine

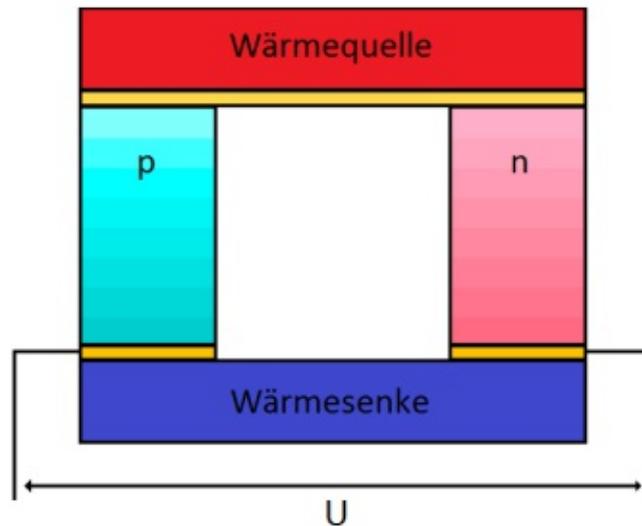


Abbildung 2.3: Kopplung eines p- und eines n-leitenden Materials zu einem thermoelektrischen Generator.

geringe thermische Leitfähigkeit bleiben die Bereiche unterschiedlicher Temperatur besser getrennt.

Werden ein p-leitendes Material und ein n-leitendes Material in Serie geschaltet, wobei die Kontaktstelle eine höhere Temperatur als die beiden Enden der Leiter hat, so erhält man einen thermoelektrischen Generator (siehe Abbildung 2.3). Der gesamte ZT -Wert lässt sich folgendermaßen berechnen, wenn man Verluste durch Kontaktwiderstände und thermische Abstrahlung vernachlässigt [18]:

$$ZT = \frac{(S_p - S_n)^2 T}{\left[(\rho_n \kappa_n)^{\frac{1}{2}} + (\rho_p \kappa_p)^{\frac{1}{2}} \right]^2}. \quad (2.70)$$

ρ ist der spezifische Widerstand.

2.6.1 Wirkungsgrad

Mithilfe des ZT -Werts lässt sich der Wirkungsgrad des thermoelektrischen Generators angeben [18]:

$$\eta = \frac{T_2 - T_1}{T_2} \left[\frac{\sqrt{1 + Z\bar{T}} - 1}{\sqrt{1 + Z\bar{T}} + \frac{T_1}{T_2}} \right]. \quad (2.71)$$

T_1 und T_2 sind die Temperaturen an der kalten und an der warmen Seite und \bar{T} ist die mittlere Temperatur des Systems. Der Wirkungsgrad des Carnot-Prozesses ist gegeben als

$$\eta_{\text{carnot}} = \frac{T_2 - T_1}{T_2} . \quad (2.72)$$

Man erkennt daraus, dass sich der Wirkungsgrad des thermoelektrischen Generators dem Wirkungsgrad des Carnot-Prozesses für $ZT \rightarrow \infty$ annähert.

3 Kristallstruktur von Heusler-Materialien

Im Folgenden wird die Kristallstruktur der Heusler-Verbindung Fe_2VAI beschrieben und die Auswirkungen auf die thermoelektrischen Eigenschaften erklärt. Die Informationen aus diesem Kapitel wurden zum Großteil aus [2] entnommen.

Heusler-Verbindungen bestehen aus einer 2:1:1 Stöchiometrie und haben die chemische Zusammensetzung X_2YZ . Dabei sind X und Y Übergangsmetalle und Z ein Element aus der Hauptgruppe. In manchen Fällen wird Y auch durch eine Seltene Erde ersetzt.

Heusler-Materialien kristallisieren in die kubische Raumgruppe $Fm\bar{3}m$ (Raumgruppe Nr. 225). Die X-Atome besetzen dabei die Wyckoff-Positionen 8c ($1/4, 1/4, 1/4$), die Y-Atome 4a (0,0,0) und die Z-Atome 4b ($1/2, 1/2, 1/2$) (siehe Abbildung 3.1). Teilt man die X-Atome auf, so kann man sich das entstehende Kristallgitter als 4 ineinander verschobene *fcc*-Strukturen vorstellen, wobei je ein *fcc*-Gitter von den Y- und Z-Atomen gebildet wird und zwei von den X-Atomen gebildet werden. Die Y- und Z-Atome gehen eine Ionenbindung ein und kristallisieren in die NaCl-Struktur, wobei das Y-Atom das Kation und das Z-Atom das Anion repräsentiert. Die Atome eines Elements sind darin oktaedrisch angeordnet. In den tetraedrischen Löchern dieser Struktur sitzen die X-Atome. Andererseits kann die Struktur auch so verstanden werden, dass ein X- und Z-Atom eine Zinkblenden-Struktur bilden und das andere X-Atom in den tetraedrischen Löchern sitzt, während das Y-Atom in den oktaedrischen Löchern sitzt.

Eine andere Möglichkeit, das Gitter zu betrachten, ist über eine CsCl-ähnliche Struktur (siehe Abbildung 3.2). Verschiebt man das Gitter um $(-1/4, -1/4, -1/4)$, sodass eines der X-Atome im Ursprung (0, 0, 0) sitzt, so lässt sich die Struktur so beschreiben, dass die X-Atome mit den Cs-Atomen identifiziert werden und die Y- und Z-Atome abwechselnd den Platz des Cl-Atoms, in den Zentren der kubischen

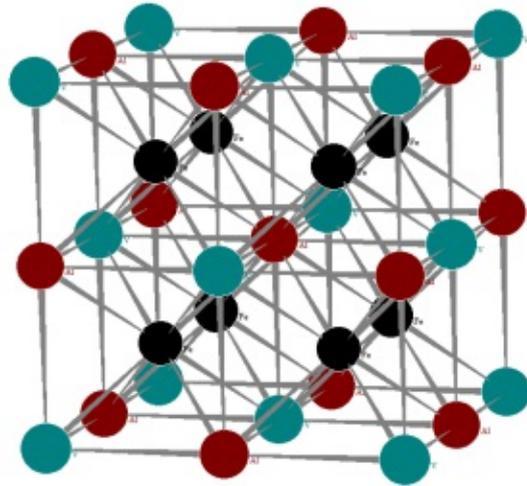


Abbildung 3.1: Kristallstruktur der Heusler-Verbindung Fe_2VAl . Die Fe-Atome sind in der Grafik schwarz eingezeichnet, die V-Atome blau und die Al-Atome rot.

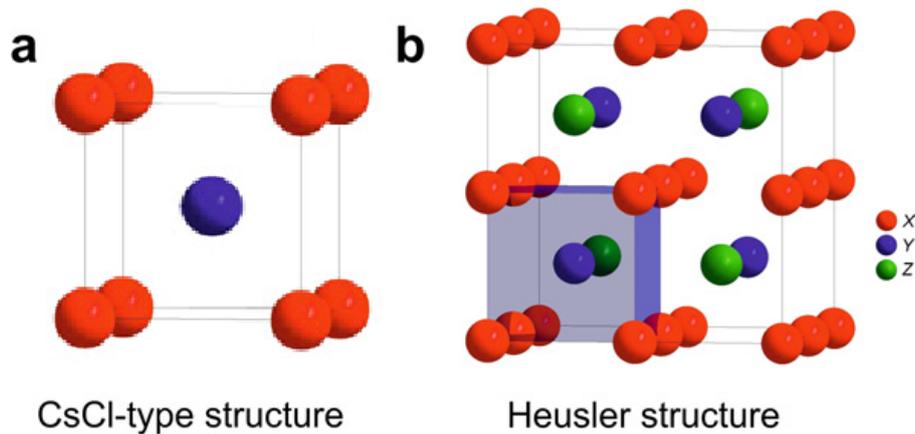


Abbildung 3.2: Beschreibung der Kristallstruktur von Heusler-Verbindungen mit der CsCl-Struktur. (a) CsCl-Struktur mit kubischer Anordnung der Cs-Atome (rote Kugeln) und den Cl-Atomen in den kubischen Löchern (blaue Kugeln). (b) Heusler-Struktur mit abwechselnder Besetzung der Y- und Z-Atome an den Positionen der Cl-Atome (blaue und grüne Kugeln). Mit freundlicher Genehmigung aus [2].

Struktur der Cs-Atome, einnehmen.

Bei Heusler-Verbindungen findet man die „24-Elektronen-Regel“: Besitzt die Heusler-Verbindung insgesamt 24 Valenzelektronen, wie das zum Beispiel bei Fe_2VAl der Fall ist (Fe: 8 Elektronen, V: 5 Elektronen, Al: 3 Elektronen), so ist das Material ein Halbleiter.

Ein V-Atom und ein Fe-Atom, die eine Zinkblenden-Struktur eingehen, bilden bindende und antibindende Hybridorbitale aus den s- und p-Orbitalen (siehe Abbildung 3.3). Aufgrund der tetraedrischen Anordnung der Fe-Atome kommt es nach der Ligandenfeldtheorie zu einer energetischen Aufspaltung der d-Orbitale in ungünstigere dreifach-entartete t_2 - und günstigeren zweifach entartete e-Orbitale. Da das zweite Fe-Atom in den tetraedrischen Löchern der Zinkblenden-Struktur sitzt, kommt es dort ebenfalls zu einer Aufspaltung der d-Orbitale. Die beiden e- und t_2 -Orbitale der Fe-Atome bilden wieder bindende und antibindende Zustände. Das V-Atom besetzt die oktaedrischen Löcher der Zinkblenden-Struktur, sodass es ebenfalls zu einer Aufspaltung der d-Orbitale kommt, wobei die t_{2g} -Orbitale nun günstiger sind. Diese sind in Folge dessen voll besetzt und die Verbindung ist nicht magnetisch. Die Fermienergie liegt zwischen den e- und t_{2g} -Orbitalen. Diese Energieaufspaltung der d-Orbitale ist verantwortlich für die Halbleitereigenschaften der Verbindung. Die Aufspaltung ist allerdings sehr klein und bereits kleine Änderungen der Struktur verändern die Zustandsdichte und können sowohl zum Verlust der Halbleitereigenschaften als auch zu Magnetisierungen führen.

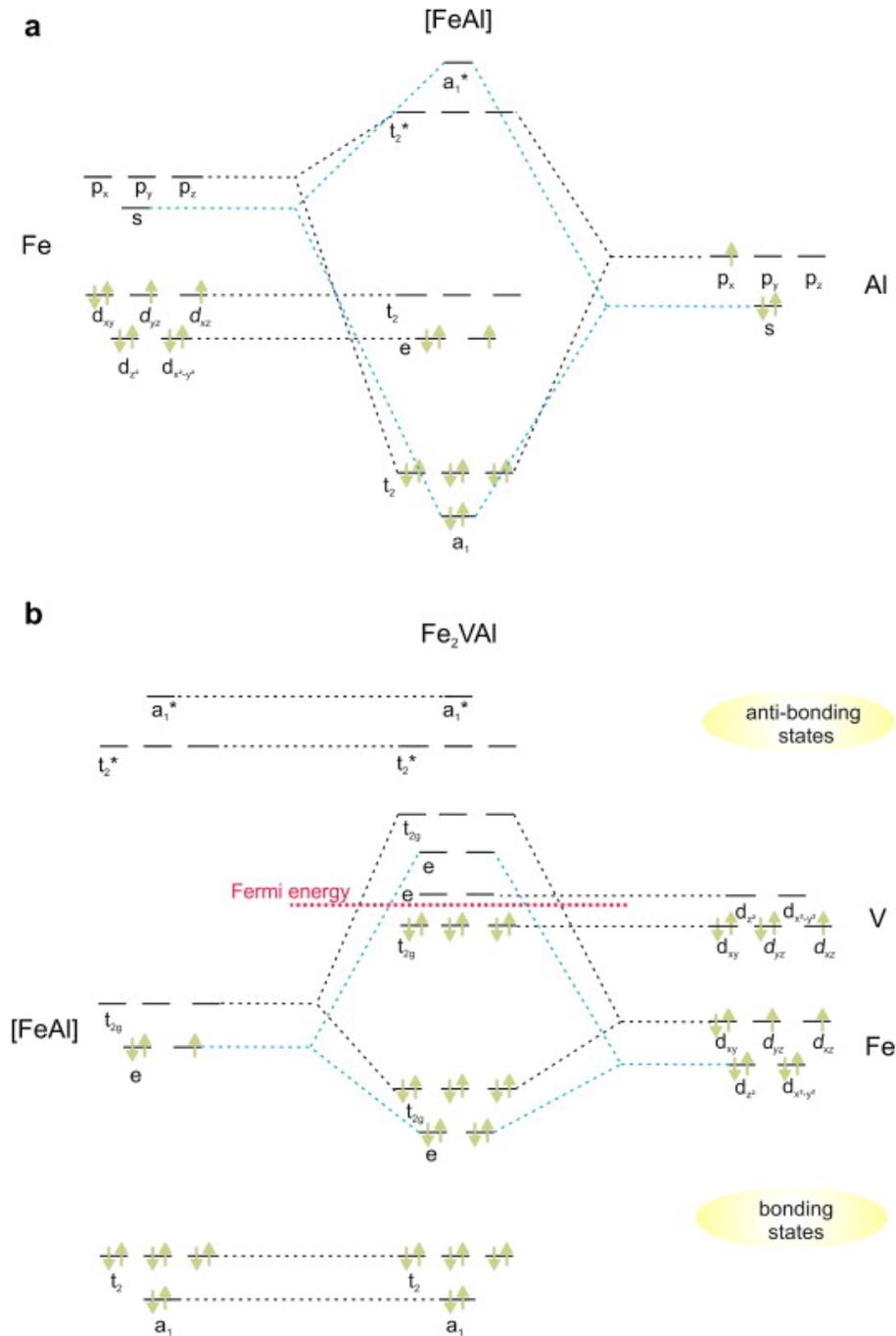


Abbildung 3.3: Illustration der Bindungen von Fe_2VAI . (a) Hybridisierung der s- und p-Orbitale von Fe und Al in der Zinkblenden-Struktur in bindende und antibindende Zustände. (b) Vollständige Bindung durch Hybridisierung und Umbesetzung der Elektronen mit eingezeichneter Fermi-Energie (rote Linie). Mit freundlicher Genehmigung aus [2].

4 Herstellungsprozess

Im folgenden Kapitel wird der Prozess zur Herstellung der Heusler-Materialien und anschließend die Beschichtung auf ein Substrat mittels Magnetronspütern erklärt.

4.1 Herstellung der Bulk-Materialien

Zur Herstellung der Bulk-Materialien werden die Massenanteile der Reinelemente für Proben mit einer Gesamtmasse von 35 g berechnet und eingewogen. Die Elemente werden anschließend in einem Kupfertiegel, mit Argon als Schutzgas, mit einem HF-Generator geschmolzen, der über den zeitlich veränderten magnetischen Fluss eine Spannung induziert. Der dadurch zustande kommende Strom erhitzt und schmilzt die Materialien über Joule'sche Wärme. Der Vorgang wird mehrmals unter Wenden der Probe wiederholt. Der fertige Festkörper hat etwa die Form eines oblaten Ellipsoids.

In dieser Arbeit wurden folgende Materialien, basierend auf der Heusler-Verbindung Fe_2VAl , untersucht:

- $\text{Fe}_2\text{V}_{0,8}\text{W}_{0,2}\text{Al}$,
- $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$,
- $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{76,5}\text{Al}_{23,5}$,
- $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{74,5}\text{Al}_{25,5}$,
- $\text{Fe}_{1,8}\text{Co}_{0,2}\text{VAl}$,
- $\text{Fe}_{1,8}\text{Mn}_{0,2}\text{VAl}$.

Die Herstellung und Untersuchung der Bulk-Materialien erfolgte bereits im Zuge anderer Arbeiten.

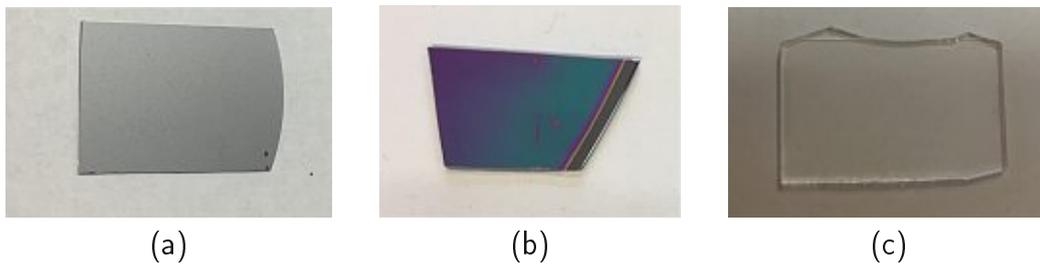


Abbildung 4.1: (a) Si-Wafer mit rauher Oberfläche. (b) SOI-Wafer mit glatter Oberfläche. (c) Glas-Plättchen mit glatter Oberfläche.

4.2 Verwendete Substrate

Die beschichteten Substrate sollen die Eigenschaften der Schicht im Idealfall nicht verändern. Das heißt, sie sollen elektrisch isolierend wirken. In dieser Arbeit wurden drei verschiedene Substrate untersucht (siehe Abbildung 4.1):

- Amorphes Glas,
- Si-Wafer,
- SOI-Wafer.

Die amorphen Glasplättchen haben eine Dicke von etwa $(1 \pm 0,1)$ mm. Die Si-Wafer haben eine Dicke von (279 ± 25) μm , weisen eine $\langle 100 \rangle$ Orientierung auf und sind undotiert. Die Oberfläche ist aufgeraut. Die SOI-Wafer bestehen aus einer 70 nm dicken Si-Schicht auf einer 2000 nm dicken SiO_2 -Schicht. Das Basismaterial ist ein (725 ± 25) μm dicker Si-Kristall. Der Kristall hat eine $\langle 100 \rangle$ Orientierung. Da die SiO_2 -Schicht isolierend wirkt und die beiden Si-Kristalle voneinander trennt, hat das Substrat eine effektive Dicke von 70 nm. Die obere Si-Schicht ist p-dotiert mit Bor und hat einen spezifischen Widerstand von $(1 - 20)$ Ωcm . Die Oberfläche ist glatt.

Die Substrate sind etwa 24 mm x 16 mm groß und werden aus größeren Stücken herausgebrochen. Die SOI-Wafer werden in Scheiben, mit einem Durchmesser von 200 mm, geliefert, die Si-Wafer in kleineren Scheiben, mit einem Durchmesser von 50,8 mm, und die Glasplättchen in Streifen, mit einer Abmessung von 21 mm x 76 mm.

Zum Herausbrechen kleinerer Stücke werden die Si- und SOI-Wafer entlang einer

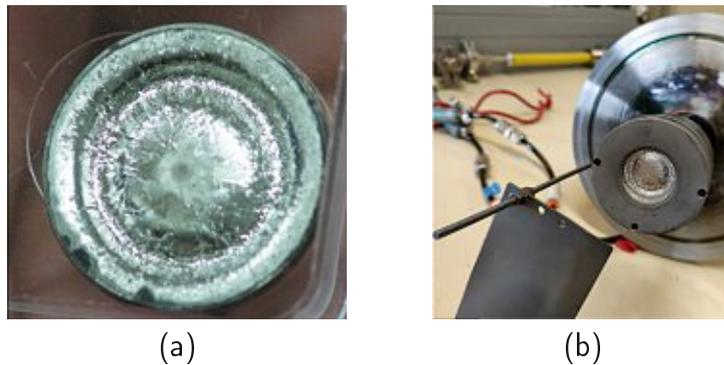


Abbildung 4.2: (a) Präpariertes Heusler-Material als Target zur Beschichtung mittels Magnetronspütern. Die Einkerbungen kommen durch den Magneten während der Beschichtung zustande. (b) Targethalter mit eingebautem Target und Shutter zur Regulierung der Beschichtungszeit.

Gitterebene mit einer Diamantspitze angeritzt und anschließend mit leichtem Druck gebrochen. Der Vorgang ist analog für die Glasplättchen. Da das Material allerdings amorph ist, ist das Brechen entlang der gewünschten Linie schwieriger. Die genaue Größe spielt allerdings für die Schichteigenschaften keine Rolle und ist vielmehr durch den Substrathalter vorgegeben.

4.3 Beschichtungsvorgang

Die zur Beschichtung verwendeten Heusler-Materialien werden zur Vorbereitung in Scheiben mit einer Dicke von etwa 3mm und einem Durchmesser von 24mm geschnitten (siehe Abbildung 4.2). Die Geometrie ist genau durch den Targethalter vorgegeben. Das zu beschichtende Substrat wird zuerst auf einem Substrathalter befestigt. Substrathalter und Targethalter werden anschließend in den Rezipienten geführt (siehe Abbildung 4.3) und dieser evakuiert. Das Substrat wird währenddessen auf 500°C erhitzt, um Verunreinigungen zu lösen. Bei einem Druck von etwa 10^{-6} mbar wird der Rezipient bis zu einem definierten Druck im mbar Bereich mit Argongas gefüllt und das Target auf eine negative Hochspannung gelegt. Zwischen dem geerdeten Substrat und dem Target entsteht dadurch ein elektrisches Feld und es kommt zu einer Gasentladung der Argonatome. Die geladenen Ionen werden auf das negative Target beschleunigt und schlagen beim Auftreffen Partikel aus dem



Abbildung 4.3: Verwendete Anlage zur Beschichtung der Substrate mittels Magnetron-sputtern. Das Substrat wird von oben in den Rezipienten eingeführt, das Target von der Seite. Der Pumpstand besteht aus einer Drehschiebepumpe mit vorangehender Turbomolekularpumpe.

Material heraus. Die Partikel können in Form von Atomen, Molekülen oder ganzen Clustern auftreten. Diese können sich frei im Raum ausbreiten und bleiben bei Kontakt am Substrat haften. Diesen Vorgang nennt man Sputtern. Die Schichtdicke kann durch viele Parameter variiert werden, wie zum Beispiel die Beschichtungsdauer, den Argongasdruck, die Spannung und den Abstand zwischen Substrat und Target und damit die elektrische Feldstärke. Auch die Schichtstruktur hängt von vielen Parametern ab. Um eine möglichst homogene und gleichmäßige Beschichtung zu ermöglichen, wird das Substrat während der Beschichtung auf 500°C erhitzt. Dadurch werden die auftreffenden Partikel thermisch angeregt und können leichter auf eine günstigere Position wandern. Ebenso wird mit einer relativ niedrigen Beschichtungsrate ($\sim 50\text{ nm/min}$) beschichtet, um den beschichteten Teilchen genügend Zeit zum Ausrichten zu geben und Löcher in der Schicht zu vermeiden.

Die Oberfläche des Substrats kann zusätzlich vor der Beschichtung durch Ionenätzen bearbeitet und von Oxiden gereinigt werden. Dafür wird das Substrat auf ein negatives Potential gelegt und das Target geerdet. Dadurch werden nun die Argonionen auf das Substrat beschleunigt und schlagen Partikel heraus. Um eine Beschichtung des Targets zu vermeiden, wird ein Shutter vor das Target geschoben. Ein niedriger Argondruck wird durch Magnetronsputtern erreicht. Dabei werden unter das Target mehrere Magnete so angeordnet, dass sich über dem Target ein

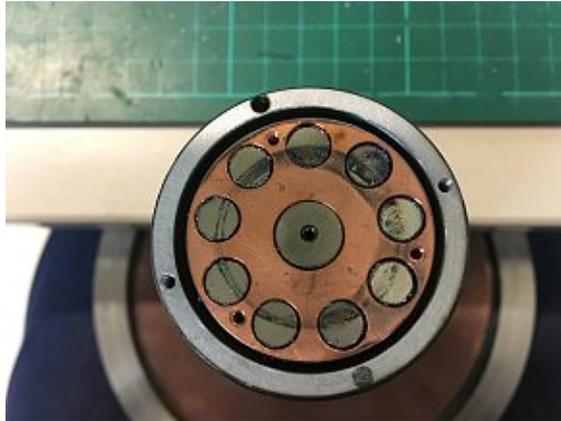


Abbildung 4.4: Magnetanordnung zum Magnetronspattern. Das Target befindet sich während der Beschichtung auf den Magneten, wie durch den dunklen Ring zu erkennen ist. Der Magnet in der Mitte ist anders gepolt als die Magnete außen, sodass sich ein radiales Feld bildet.

radiales Magnetfeld bildet (siehe Abbildung 4.4). Die vom Target emittierten Elektronen bewegen sich somit gemäß der Lorentzkraft auf Spiralbahnen Richtung Substrat. Dadurch verlängert sich der zurückgelegte Weg und die Elektronen ionisieren die Argonatome schon in Targetnähe, wodurch sich die Ionendichte erhöht. Der Effekt ist maximal an der Stelle, an der das Magnetfeld parallel zur Targetoberfläche ist (vgl. Abbildung 4.2a). Somit wird die Beschichtungsrate erhöht, beziehungsweise der Argondruck kann bei gleicher Beschichtungsrate verringert werden.

Die genauen Parameter des Beschichtungsvorgangs für die verschiedenen Proben sind in Tabelle A.1 aufgelistet.

Der große Vorteil des Sputterprozesses gegenüber der Beschichtung mittels Erhitzen und Verdampfen des Targets liegt darin, dass die Ausbeute der verschiedenen Elemente des Targetmaterials proportional zum relativen Anteil ist. Nach einer Einlaufphase, in der die Atome mit einer höheren Ausbeute vermehrt emittiert werden, stellt sich ein Gleichgewicht ein, bei der die Oberfläche so mit Atomen besetzt ist, dass das Verhältnis der Atome zueinander im Dampfstrahl gleich dem Verhältnis im Target ist. Dadurch kann gewährleistet werden, dass die Schichtzusammensetzung der Targetzusammensetzung entspricht.



Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Diplomarbeit ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar
The approved original version of this thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

5 Funktionsweise der Messgeräte

In diesem Kapitel werden die verschiedenen Geräte zur Messung der Proben beschrieben.

5.1 Messung der Schichtdicke

Die Dicke der Schichten wird aus der Beschichtungsrate und der Dauer der Beschichtung berechnet. Da die Beschichtungsrate zwischen den verschiedenen Targets variiert, muss diese bei Wechsel des Targets neu bestimmt werden. Dazu wird ein Substrat mit glatter Oberfläche für eine genau definierte Zeit beschichtet und die Dicke der Schicht anschließend mit einem Profilometer bestimmt (siehe Abbildung 5.1). Die Spitze des Profilometers wird über die Kante zwischen Schicht und Substrat gefahren und dabei der Niveauunterschied gemessen. Die Messung wird an verschiedenen Stellen durchgeführt, um eine eventuell vorhandene Ortsabhängigkeit der Beschichtungsrate wegzumitteln.

5.2 Bestimmung der Gitterstruktur

Die Gitterstruktur der Schichten wird mit dem Röntgendiffraktometer D5000 der Firma Siemens bestimmt. Das beschichtete Substrat wird in eine fixierte Halterung eingespannt (siehe Abbildung 5.2). Nach der Bragg-Bedingung erhält man konstruktive Interferenz der reflektierten Röntgenstrahlen, wenn der Wegunterschied der, an zwei verschiedenen Netzebenen, reflektierten Strahlen einem Vielfachen der Wellenlänge entspricht (siehe Abbildung 5.3):

$$n\lambda = 2d \sin(\theta) , \quad n \in \mathbb{N} , \quad (5.1)$$

wobei λ die Wellenlänge und d der Netzebenenabstand ist. Die Messung wird mit



Abbildung 5.1: Profilmeter zur Bestimmung der Schichtdicke. (a) Ansicht von oben mit teilweise beschichtetem Substrat. (b) Ansicht von der Seite.

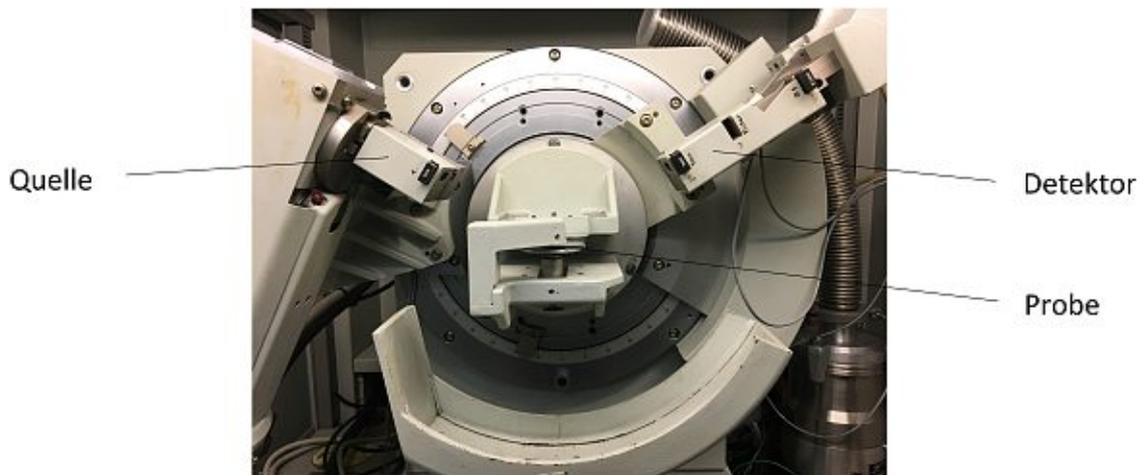


Abbildung 5.2: Innenraum des Röntgendiffraktometers D5000 von Siemens.

der θ - θ -Geometrie durchgeführt. Dabei bleibt die Probe waagrecht und Quelle und Detektor befinden sich in einem Winkel θ gegenüber der Ebene des Substrats. Somit werden die Netzebenen parallel zur Substratoberfläche gemessen. Die Messung läuft von $\theta = 0^\circ$ bis $\theta = 50^\circ$.

5.3 Messung des Seebeck-Koeffizienten

Zur Messung des Seebeck-Koeffizienten der Proben wird die Anlage ZEM3 der Firma ULVAC verwendet (siehe Abbildung 5.4). Das Substrat wird an einen Pro-

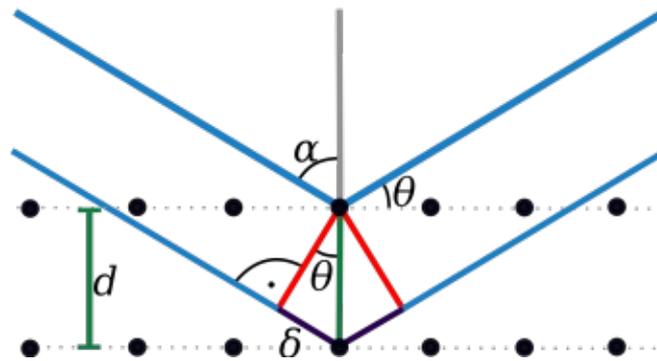
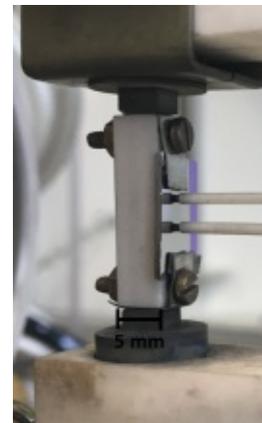


Abbildung 5.3: Zur Erklärung der Bragg-Bedingung aus [19].



(a)



(b)

Abbildung 5.4: ZEM3 der Firma ULVAC zur Messung des Seebeck-Koeffizienten und des elektrischen Widerstands. (a) Ansicht von außen. (b) Eingespanntes beschichtetes Substrat.

benhalter befestigt und dieser anschließend zwischen zwei Kontakten in der Anlage eingespannt. An die Schicht werden in einem Abstand von etwa 3,1 mm zueinander zwei weitere Kontakte angebracht. Die Anlage wird anschließend verschlossen und der Rezipient evakuiert. Für eine bessere Reinheit der umgebenden Atmosphäre wird zwischendurch dreimal mit Helium gespült. Danach wird die Temperatur schrittweise von Raumtemperatur bis 475 °C erhöht und anschließend wieder verringert. Bei jeder Messtemperatur werden nacheinander Temperaturdifferenzen $\Delta\tilde{T}$ zwischen dem oberen und dem unteren äußeren Kontakt zur Probe von 10 °C, 15 °C und 20 °C eingestellt. Zwischen den Messpunkten an der Schicht besteht dann eine Temperaturdifferenz $\Delta T < \Delta\tilde{T}$, die über die inneren Kontakte gemessen wird.

Über diese wird ebenfalls die Spannung U gemessen und der Seebeck-Koeffizient nach Gleichung 2.56 zu

$$S(T) = \frac{U(T)}{\Delta T} \quad (5.2)$$

berechnet, wobei T die mittlere Temperatur der Schicht ist.

5.4 Messung des elektrischen Widerstands

Der elektrische Widerstand oberhalb der Raumtemperatur wird ebenfalls mit der ZEM3, parallel zum Seebeck-Koeffizienten, gemessen. Dafür wird nach Erreichen der Messtemperatur T über die äußeren Kontakte ein konstanter Strom I durch die Schicht geschickt. Mittels Vierpunktmethode wird über die inneren Kontakte wieder die Spannung abgegriffen. Der Widerstand wird mit dem Ohmschen Gesetz

$$R(T) = \frac{U(T)}{I} \quad (5.3)$$

berechnet und aus der Schichtgeometrie der spezifische Widerstand bestimmt.

6 Auswirkung der Wärmebehandlung der Schichten

In diesem Kapitel wird der Einfluss der Wärmebehandlung auf die Struktur, Transporteigenschaften und den Seebeck-Koeffizienten der Schichten diskutiert.

Nach der Beschichtung können in den Schichten mechanische Spannungen vorhanden sein. Wird das Substrat beispielsweise beim Einspannen in den Substrathalter, durch zu festes Anziehen der Befestigungsschrauben oder durch Unregelmäßigkeiten in der Oberfläche des Substrathalters, leicht verformt und beschichtet, so wirken beim anschließenden Ausbauen und Entspannen des Substrats Kräfte auf die Schicht, die zu Rissen führen können. Je nach Richtung der Verformung des Substrats können Zug- oder Druckspannungen auftreten. Man spricht hier von mechanischen Spannungen.

Thermische Spannungen treten andererseits auf, wenn das Substrat während der Beschichtung erhitzt wird. Da die Schicht und das Substrat im Allgemeinen verschiedene thermische Ausdehnungskoeffizienten haben, treten beim Abkühlen nach der Beschichtung thermische Spannungen in der Schicht auf. Auch hier hängt das Vorzeichen davon ab, welches Material einen höheren thermischen Ausdehnungskoeffizienten hat.

Spannungen können außerdem während der Beschichtung, bei falsch gewählten Parametern, auftreten, da Strukturen in den Schichten entstehen können, die sich gegenseitig anziehen oder abstoßen.

Um diese Spannungen in den Schichten zu reduzieren, und außerdem die Anzahl an Fehlstellen im Kristall zu verringern, wurden die Proben unter Hochvakuumeinschluss für eine bestimmte Anzahl an Tagen in einem Ofen mit definierter Temperatur wärmebehandelt. Dafür wurden die Substrate in etwa 9 mm breite Streifen gebrochen und in eine, an einer Seite offene, Quarzglasröhre gegeben und an-

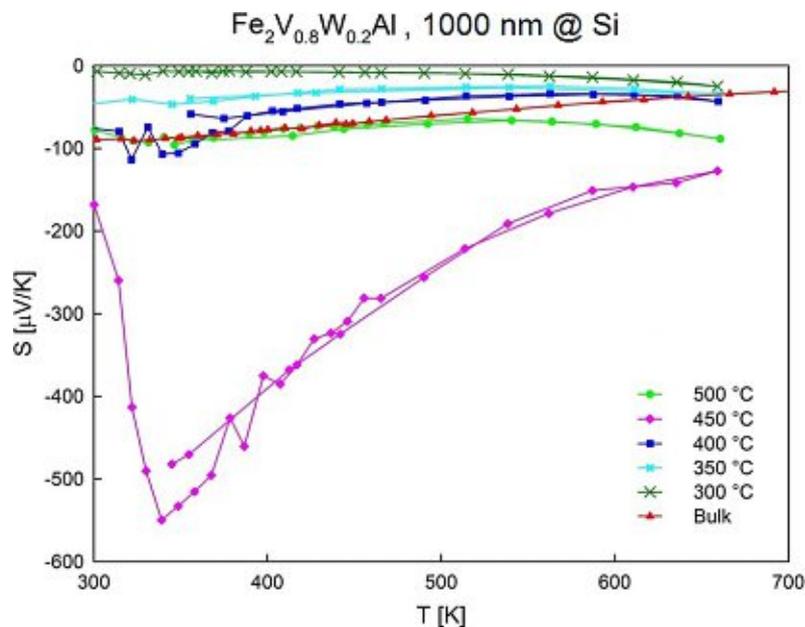


Abbildung 6.1: Gemessener Seebeck-Koeffizient von Raumtemperatur bis etwa 670 °C von Schichten mit $\text{Fe}_2\text{V}_{0.8}\text{W}_{0.2}\text{Al}$ für verschiedene Wärmebehandlungen sowie gemessener Seebeck-Koeffizient des Bulk-Materials. Bei einer Wärmebehandlung von 450 °C erkennt man eine deutliche Verbesserung des Seebeck-Koeffizienten.

schließend an einen Pumpstand angeschlossen. Nach einem erreichten Druck von etwa 10^{-5} mbar wurde das Quarzglas mit einem Autogenschweißgerät unter einer etwa 1300 °C heißen Acetylen-Flamme erweicht und durch Drehbewegungen vakuumdicht verschlossen. Es zeigte sich, dass eine Wärmebehandlung von 450 °C den Seebeck-Koeffizienten wesentlich gegenüber dem des Bulk-Materials sowie gegenüber Wärmebehandlungen bei anderen Temperaturen verbessert (siehe Abbildung 6.1). Um den Effekt der Wärmebehandlung besser zu verstehen, wurden in weiterer Folge Messungen verschiedener Schichten nach mehrfacher Wärmebehandlung durchgeführt (siehe Abbildung 6.2). Dabei stellte sich heraus, dass der hohe Seebeck-Koeffizient bei einer Wärmebehandlung bei 450 °C durch erneutes Wärmebehandeln bei höherer Temperatur (zum Beispiel 600 °C) wieder verringert werden kann. Erneutes Wärmebehandeln bei 450 °C führt wieder zu einem höheren Seebeck-Koeffizienten, in manchen Fällen sogar zu einem höheren als einen Zyklus zuvor (siehe Abbildung 6.2c und Abbildung 6.2d). Das zeigt, dass die Phase, die sich bei einer Wärmebehandlung von 450 °C bildet, nicht stabil ist und bei höheren Temperaturen wieder verändert werden kann. In Abbildung 6.3 sind die gemess-

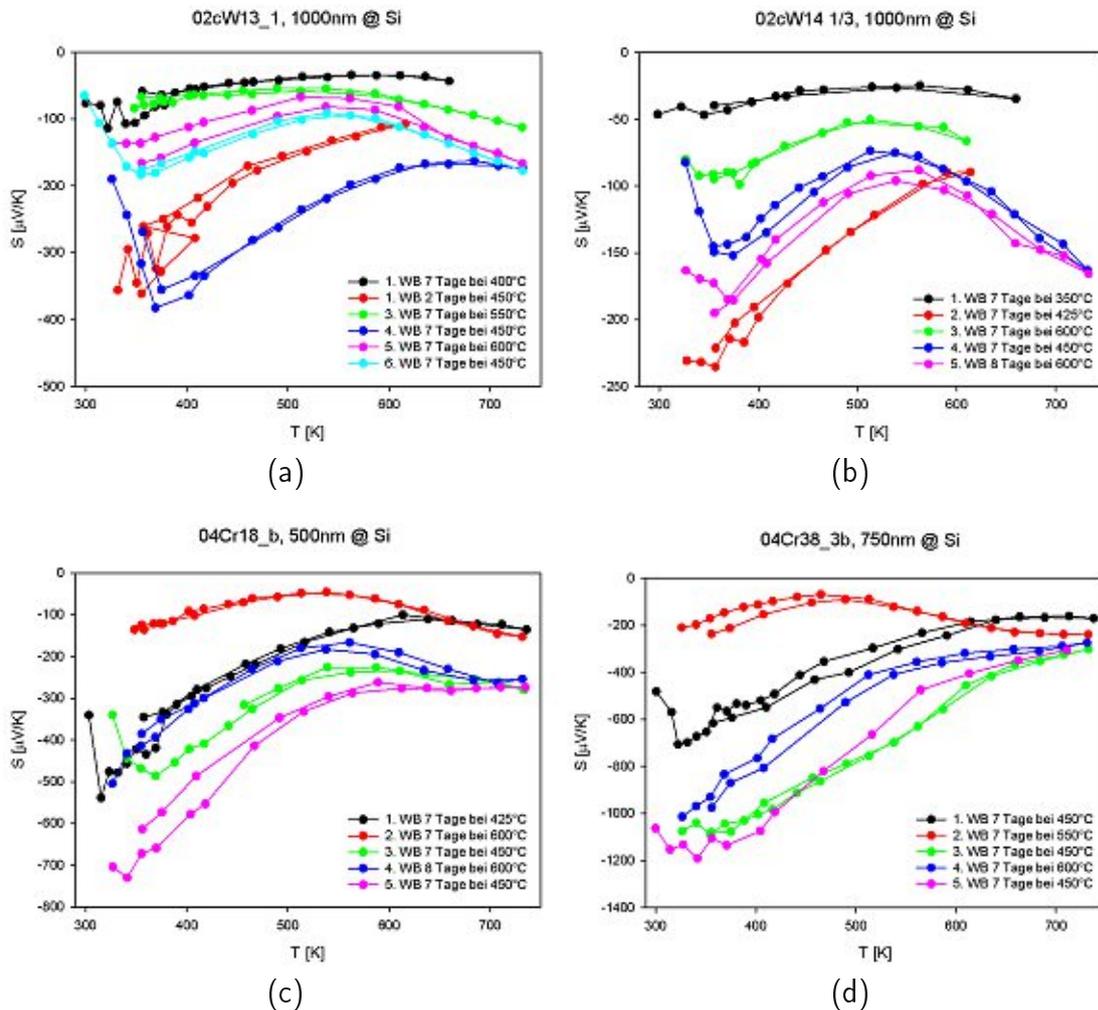


Abbildung 6.2: Gemessener Seebeck-Koeffizient von zwei Schichten mit $\text{Fe}_2\text{V}_{0,8}\text{W}_{0,2}\text{Al}$ („02cW13_1“ (a) und „02cW14 1/3“ (b)) und zwei Schichten mit $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$ („04Cr18_b“ (c) und „04Cr38_3b“ (d)) mit mehrmaliger Wärmebehandlung bei unterschiedlichen Temperaturen.

senen Strukturen der Schichten dargestellt. Jede Schicht enthält, unabhängig von der Wärmebehandlung, die charakteristischen Heusler-Peaks bei beispielsweise etwa 31° , 45° , 65° und 83° . Die mehrfach wärmebehandelten Proben enthalten weitere Peaks, wahrscheinlich aufgrund von Verunreinigungen, wie etwa durch Oxidation. Auf jeden Fall lassen sich keine, bei bestimmten Temperaturen auftretende, Peaks finden, die auf eine Abhängigkeit der Phase von der Temperatur der Wärmebehandlung schließen lassen.

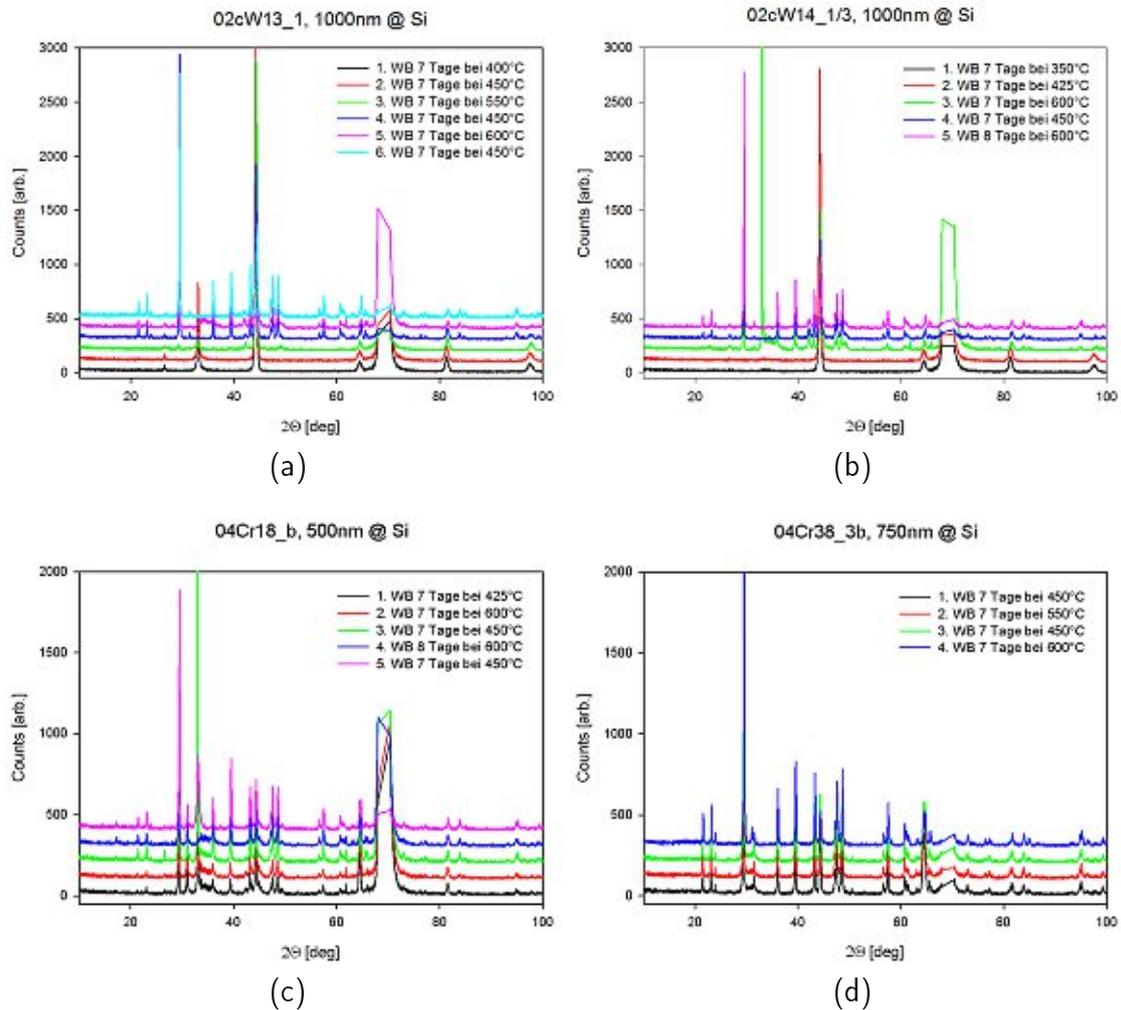


Abbildung 6.3: Gemessene Kristall-Struktur von zwei Schichten mit $\text{Fe}_2\text{V}_{0,8}\text{W}_{0,2}\text{Al}$ („02cW13_1“ (a) und „02cW14_1/3“ (b)) und zwei Schichten mit $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$ („04Cr18_b“ (c) und „04Cr38_3b“ (d)) mit mehrmaliger Wärmebehandlung bei unterschiedlichen Temperaturen. Die Werte wurden für verschiedene Wärmebehandlungen um einen beliebigen Wert auf der y-Achse verschoben, um die Linien sichtbar zu machen. Der breite Peak bei etwa 70° resultiert aus der Reflexion am Si-Substrat.

Ein höherer gemessener Seebeck-Koeffizient bedeutet allerdings nicht automatisch, dass die Schicht einen höheren Seebeck-Koeffizienten hat. Die Probe „02cW10_b“ wurde mehrere Male hintereinander in der ZEM3 gemessen (siehe Abbildung 6.4). Der Seebeck-Koeffizient nahm zwar bei jeder Messung zu, allerdings wurde auch der gemessene Widerstand höher. Gemäß Gleichung 2.47 kann der höhere Seebeck-

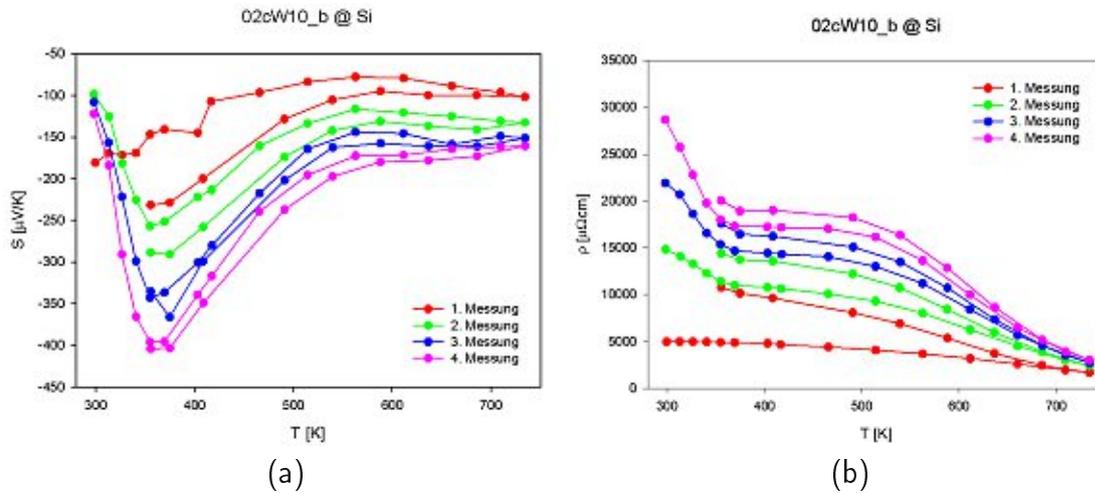


Abbildung 6.4: Gemessener Seebeck-Koeffizient (a) und spezifischer Widerstand (b) der Probe „02cW10_b“ bei mehrmaliger Messung in der ZEM3.



Abbildung 6.5: Teilweise abgelöste Schichten auf einem Si-Wafer (a) und einem SOI-Wafer (b). Die Proben wurden vor der Wärmebehandlung in kleinere Streifen, mit passender Breite für die Quarzglasröhren, gebrochen.

Koeffizient bei höherem Widerstand dadurch erklärt werden, dass das Substrat einen höheren Anteil am Seebeck-Koeffizienten trägt.

Einige der Schichten lösten sich während der Wärmebehandlung teilweise oder gänzlich vom Substrat (siehe Abbildung 6.5). Da die ZEM3 nur bis zu einem Grenzwiderstand messen kann, konnten der Seebeck-Koeffizient und der Widerstand dieser Schichten nicht bestimmt werden. Aus diesem Grund sind die Grafiken mit den gemessenen Seebeck-Koeffizienten, Widerständen und Power-Faktoren (siehe Kapitel 7) nicht vollständig.

Grundsätzlich konnte festgestellt werden, dass manche Heusler-Verbindungen auf

bestimmten Substraten besser haften als auf anderen. Zum Beispiel lösten sich viele Schichten mit $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$ auf SOI-Wafern während der Wärmebehandlung vom Substrat ab, während fast alle Schichten auf Si-Wafern haften blieben. Jedoch löste sich auch bei vielversprechenden Kombinationen von Substrat und Heusler-Verbindung gelegentlich eine Schicht ab.

7 Messergebnisse

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Untersuchungen der Schichten basierend auf $\text{Fe}_2\text{V}_{0,8}\text{W}_{0,2}\text{Al}$, $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$, $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{76,5}\text{Al}_{23,5}$ und $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{74,5}\text{Al}_{25,5}$ auf Si- und SOI-Wafern mit der ZEM3 diskutiert. Die Lücken in der Nummerierung der Proben in den Abbildungen kommen daher, dass sich einige der Schichten während der Wärmebehandlung vom Substrat ablösten und nicht gemessen werden konnten.

7.1 Seebeck-Koeffizient

Die gemessenen Seebeck-Koeffizienten für Schichten mit $\text{Fe}_2\text{V}_{0,8}\text{W}_{0,2}\text{Al}$ auf Si-Wafern sind in Abbildung 7.1 gezeigt. Bei diesem Material sind 20% Vanadium durch Wolfram substituiert. Da Wolfram ein d-Elektron mehr hat als Vanadium, wird für jedes substituierte Atom ein Valenzelektron mehr in das System gebracht. Das Bulk-Material ist daher ein n-Leiter. Dies spiegelt sich auch in den dünnen Schichten wider. Die besten Seebeck-Koeffizienten hatten jene Schichten, welche bei 450°C wärmebehandelt wurden (vgl. Kapitel 6).

Die Probe „02cW15“ wurde zuerst bei 300°C wärmebehandelt. Der Seebeck-Koeffizient wies dabei nur einen sehr geringen Wert auf. Ein Teil der Probe wurde anschließend für zwei Tage bei 450°C , ein anderer Teil für sieben Tage bei 450°C wärmebehandelt. Der Seebeck-Koeffizient nahm wie erwartet mit der Dauer der Wärmehandlung zu.

Die besten Schichten hatten einen Seebeck-Koeffizienten von etwa $-600\ \mu\text{V}/\text{K}$ knapp oberhalb der Raumtemperatur. Das ist etwa sechs mal so viel wie beim Bulk-Material. Die Schichtdicke selbst hat keinen sehr großen Einfluss auf den Seebeck-Koeffizienten. Die Proben „02cW07“ bis „02cW11“ haben unterschiedliche Schichtdicken von 1500 nm bis 3500 nm, der Seebeck-Koeffizient wird bei zunehmender Dicke aber nur leicht geringer.

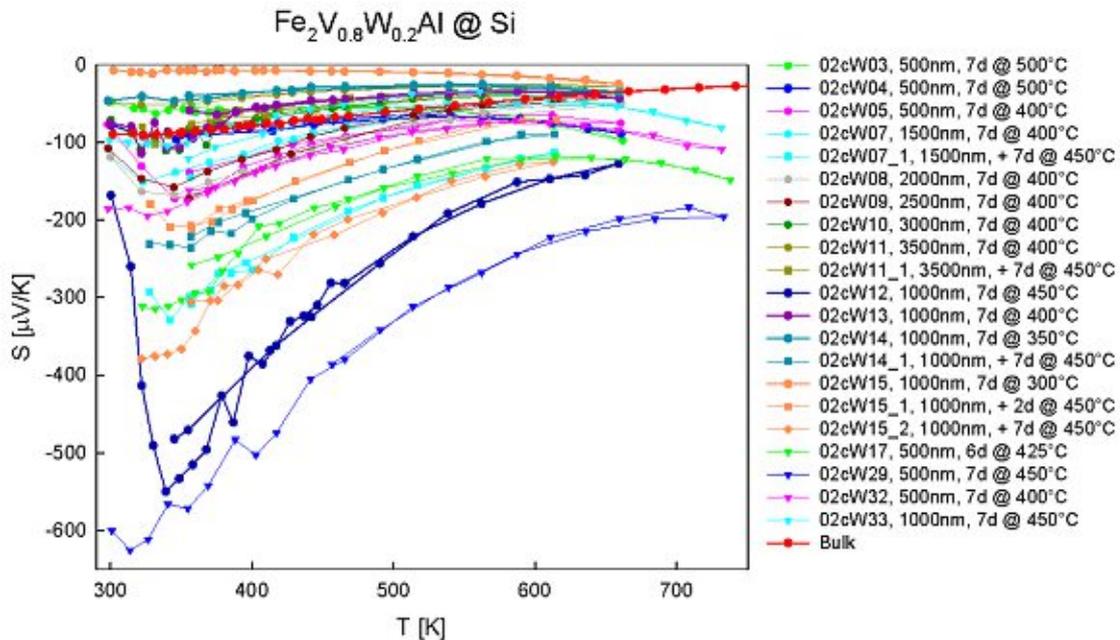


Abbildung 7.1: Gemessene Seebeck-Koeffizienten von Schichten mit $\text{Fe}_2\text{V}_{0.8}\text{W}_{0.2}\text{Al}$ auf Si-Wafern und gemessener Seebeck-Koeffizient des Bulk-Materials (rote Punkte). Die Legende enthält neben dem Probenamen die Schichtdicke, sowie Temperatur und Dauer der Wärmebehandlung.

Es wurden auch einige Proben mit $\text{Fe}_2\text{V}_{0.8}\text{W}_{0.2}\text{Al}$ auf SOI-Wafern hergestellt. Da sich diese allerdings bei der Wärmebehandlung von der Schicht ablösen, konnte der Seebeck-Koeffizient nicht gemessen werden.

In Abbildung 7.2 sind die Seebeck-Koeffizienten der Schichten basierend auf $\text{Fe}_{1.6}\text{Cr}_{0.4}\text{VAl}$ auf Si-Wafern abgebildet. $\text{Fe}_{1.6}\text{Cr}_{0.4}\text{VAl}$ enthält 20% Chrom statt Eisen. Chrom hat zwei Valenzelektronen weniger als Eisen, daher ist das Bulk-Material ein p-Leiter. Die Schichten jedoch haben einen negativen Seebeck-Koeffizienten. Es bildet sich also im Gegensatz zum Bulk eine andere Elektronenstruktur und die Steigung der Zustandsdichte an der Fermienergie ändert ihr Vorzeichen (vgl. Gleichung 2.44).

Anhand der Probe „04Cr41“ ist zu erkennen, dass die ideale Temperatur von etwa 450°C nur ein Richtwert für die Wärmebehandlung ist, da bei dieser Schicht eine Wärmebehandlung bei 425°C den Seebeck-Koeffizienten um bis zu $-300 \mu\text{V/K}$ gegenüber der Wärmebehandlung bei 450°C erhöht. Bei der Probe „04Cr25“ hingegen sind die Seebeck-Koeffizienten der Teile, die bei 425°C und 450°C wärmebehandelt

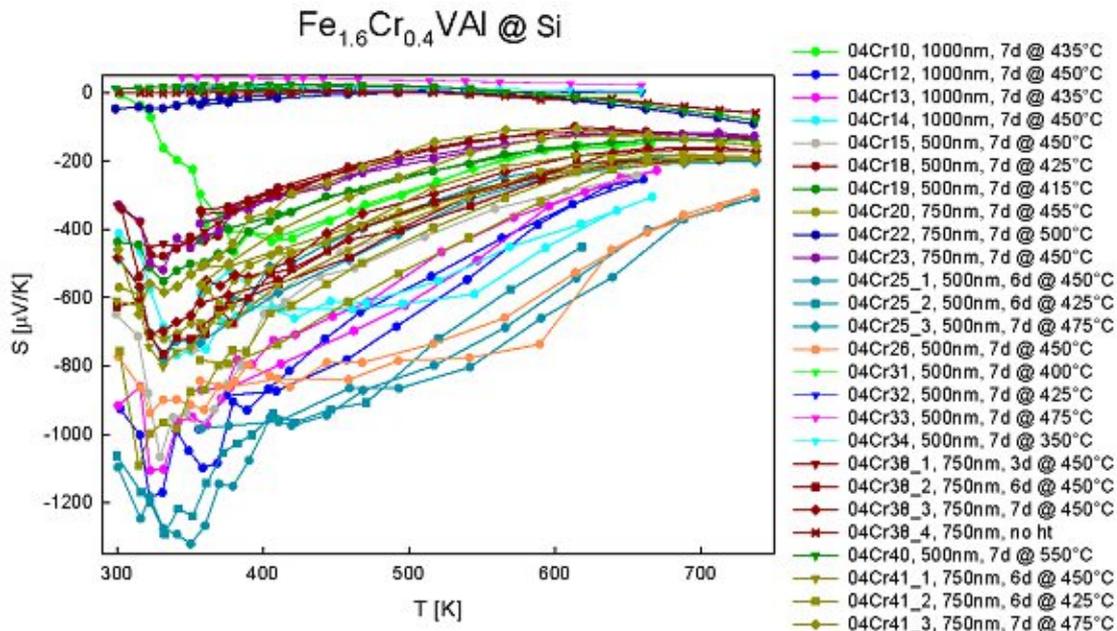


Abbildung 7.2: Gemessene Seebeck-Koeffizienten von Schichten mit $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAI}$ auf Si-Wafern. Die Legende enthält neben dem Probenamen die Schichtdicke, sowie Temperatur und Dauer der Wärmebehandlung.

wurden, etwa gleich groß. Lediglich der Teil, welcher bei 475 °C behandelt wurde, weist einen stark verringerten Wert auf.

Bei Schichten mit $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAI}$ auf Si-Wafern wurden die besten Seebeck-Koeffizienten von etwa $-1350 \mu\text{V/K}$ oberhalb der Raumtemperatur bei Wärmebehandlungen um 450 °C herum erreicht. Verglichen mit Schichten mit $\text{Fe}_2\text{V}_{0,8}\text{W}_{0,2}\text{Al}$ auf Si-Wafern ist der Seebeck-Koeffizient deutlich erhöht.

Schichten mit $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAI}$ auf SOI-Wafern hatten im Allgemeinen einen sehr niedrigen Seebeck-Koeffizienten (siehe Abbildung 7.3). Eine Ausnahme war die Probe „SOI22“ mit einer Schichtdicke von 500 nm und einer Wärmebehandlung von sieben Tagen bei 450 °C. Der maximale Seebeck-Koeffizient lag bei über $-2000 \mu\text{V/K}$ bei etwa 100 °C.

Während hauptsächlich Schichten mit den Materialien $\text{Fe}_2\text{V}_{0,8}\text{W}_{0,2}\text{Al}$ und $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAI}$ untersucht wurden, wurden auch einige wenige Schichten mit $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{76,5}\text{Al}_{23,5}$ und $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{74,5}\text{Al}_{25,5}$ auf SOI-Wafern hergestellt. Allerdings gab es bei diesen Targets große Probleme beim Aufrechterhalten der Gasentladung und die Leistung sowie der Gasdruck mussten erhöht werden (siehe Tabelle A.1).

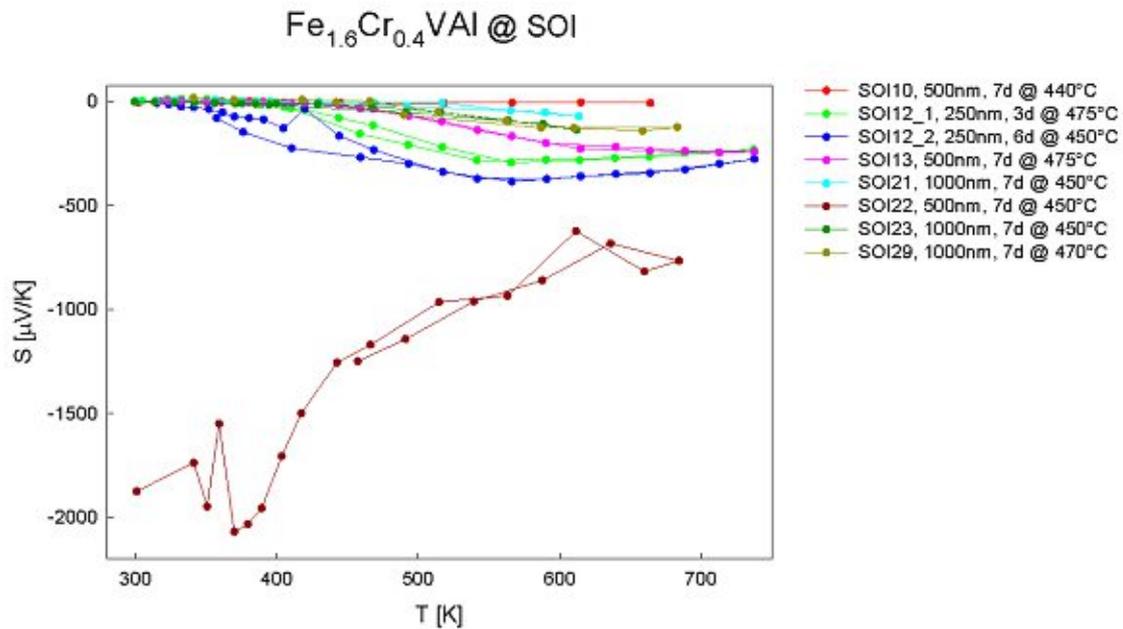


Abbildung 7.3: Gemessene Seebeck-Koeffizienten von Schichten mit $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAI}$ auf SOI-Wafern. Die Legende enthält neben dem Probenamen die Schichtdicke, sowie Temperatur und Dauer der Wärmebehandlung.

Der Grund war allerdings wahrscheinlich eine Verunreinigung des Targethalters. Dementsprechend konnten viele Proben anschließend nicht gemessen werden und waren unbrauchbar.

In $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{76,5}\text{Al}_{23,5}$ sind 1,5% Aluminium durch Eisen und Vanadium ersetzt. Da Aluminium mit drei Valenzelektronen zwei weniger als Vanadium und fünf weniger als Eisen hat, ist das Bulk-Material ein n-Leiter. $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{74,5}\text{Al}_{25,5}$ hat 0,5% mehr Aluminium und das Bulk-Material ist ein p-Leiter. In Abbildung 7.4 ist der gemessene Seebeck-Koeffizient für eine Probe mit $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{76,5}\text{Al}_{23,5}$ und für drei Proben mit $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{74,5}\text{Al}_{25,5}$ als Schichtmaterial gezeigt. Die Werte liegen bei Raumtemperatur zwischen $-5 \mu\text{V/K}$ und $-30 \mu\text{V/K}$ und damit weit unterhalb der Werte für andere Heusler-Verbindungen. Allerdings ist noch nicht geklärt, ob die Ursache in den Schichten oder in den Problemen bei der Beschichtung liegt.

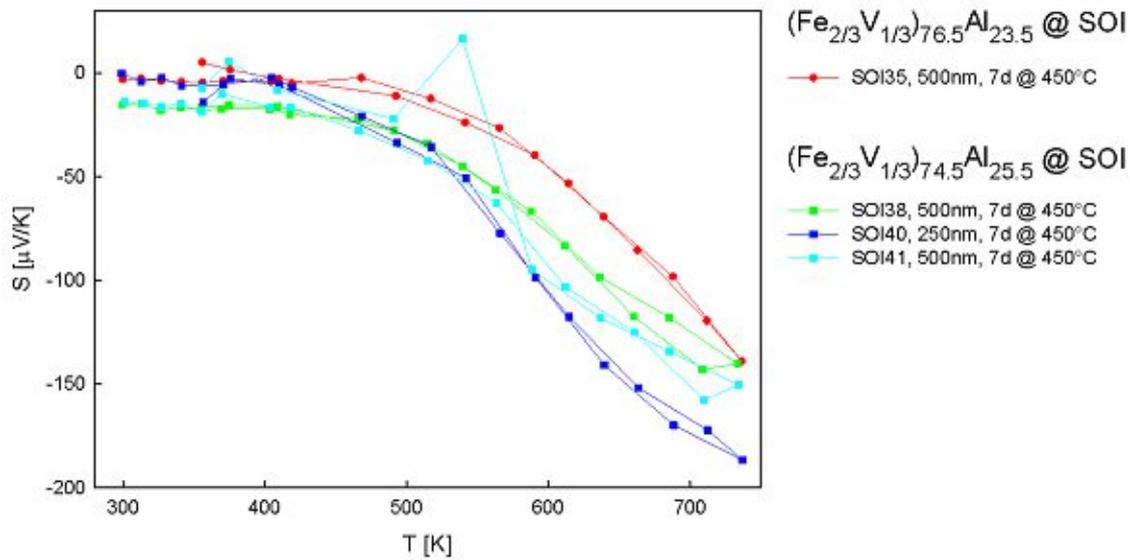


Abbildung 7.4: Gemessene Seebeck-Koeffizienten von Schichten mit $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{76,5}\text{Al}_{23,5}$ und $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{74,5}\text{Al}_{25,5}$ auf SOI-Wafern. Die Legende enthält neben dem Probenamen die Schichtdicke, sowie Temperatur und Dauer der Wärmebehandlung.

7.2 Spezifischer Widerstand

Die Messpunkte des spezifischen Widerstands unterscheiden sich in der Regel zwischen den Messungen bei aufsteigender und absteigender Temperatur, da sich bei den höheren Temperaturen, analog zur Wärmebehandlung, die Schichten partiell von den Substraten ablösen und der Widerstand somit während der Messung etwas steigt. In Abbildung 7.5 sind die spezifischen Widerstände der Proben mit $\text{Fe}_2\text{V}_{0,8}\text{W}_{0,2}\text{Al}$ abgebildet. Wie an der Probe „02cW15“ zu erkennen ist, nimmt der spezifische Widerstand bei längerer Wärmebehandlung leicht ab. Verglichen mit den Seebeck-Koeffizienten der Proben lässt sich ein Zusammenhang zwischen der Zunahme des Seebeck-Koeffizienten und der Abnahme des spezifischen Widerstands bei längerer Wärmebehandlung, wahrscheinlich bedingt durch die günstigere Kristallstruktur bei einer Wärmebehandlung im Bereich von 450°C , erkennen. Auch der Widerstand der Probe „02cW11“ nahm bei erneuter Wärmebehandlung ab.

Die spezifischen Widerstände der Proben mit $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$ auf Si-Wafern sind in Abbildung 7.6 gezeigt. Verglichen mit den Werten für $\text{Fe}_2\text{V}_{0,8}\text{W}_{0,2}\text{Al}$ sind die Widerstände deutlich höher. Wie an der Probe „04Cr41“ zu sehen ist, ist bei Schichten mit

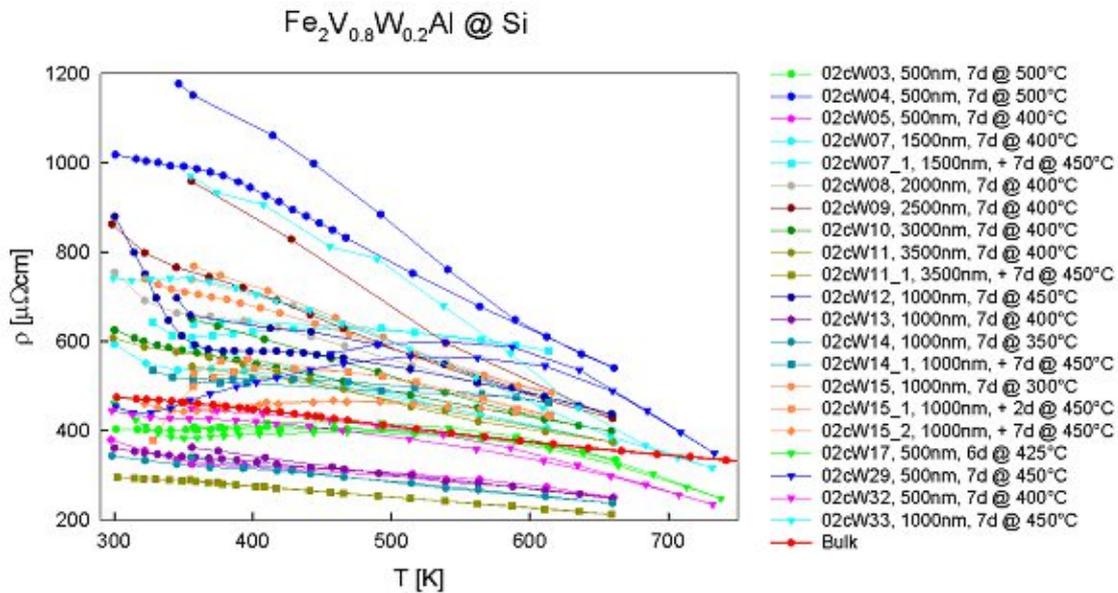


Abbildung 7.5: Aus gemessenen Widerständen und Abmessungen der Schichten berechnete spezifische Widerstände von Schichten mit $\text{Fe}_2\text{V}_{0,8}\text{W}_{0,2}\text{Al}$ auf Si-Wafern und gemessener Seebeck-Koeffizient des Bulk-Materials (rote Punkte). Die Legende enthält neben dem Probenamen die Schichtdicke, sowie Temperatur und Dauer der Wärmebehandlung.

$\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$ ein höherer Seebeck-Koeffizient nicht zwingend mit einem niedrigeren spezifischen Widerstand korreliert. Der Teil der Probe, welcher sechs Tage lang bei 425 °C wärmebehandelt wurde, hat, verglichen mit den anderen Teilen der Probe, den besten Seebeck-Koeffizienten. Der Widerstand liegt jedoch zwischen dem der anderen. Bei der Probe „04Cr25“ haben die Teile mit den höheren Seebeck-Koeffizienten auch den höheren spezifischen Widerstand. Allerdings liegen alle drei Widerstandswerte im Bereich der Raumtemperatur sehr nahe beieinander.

In Abbildung 7.7 sind die spezifischen Widerstände der Schichten auf SOI-Wafern gezeigt. Die Werte der Widerstände überstreichen, im Gegensatz zu den Schichten auf Si-Wafern, einen sehr großen Bereich. Die Schichten mit höherem spezifischen Widerstand haben in der Regel auch den höheren Seebeck-Koeffizienten. Allerdings lässt sich dies nicht damit erklären, dass bei höherem Widerstand das Substrat einen höheren Beitrag zum Seebeck-Koeffizienten, gemäß Gleichung 2.47, leistet, da die SOI-Wafer, durch die Dotierung mit Bor, p-Leiter sind und der Seebeck-Koeffizient demnach den der Schicht kompensieren würde.

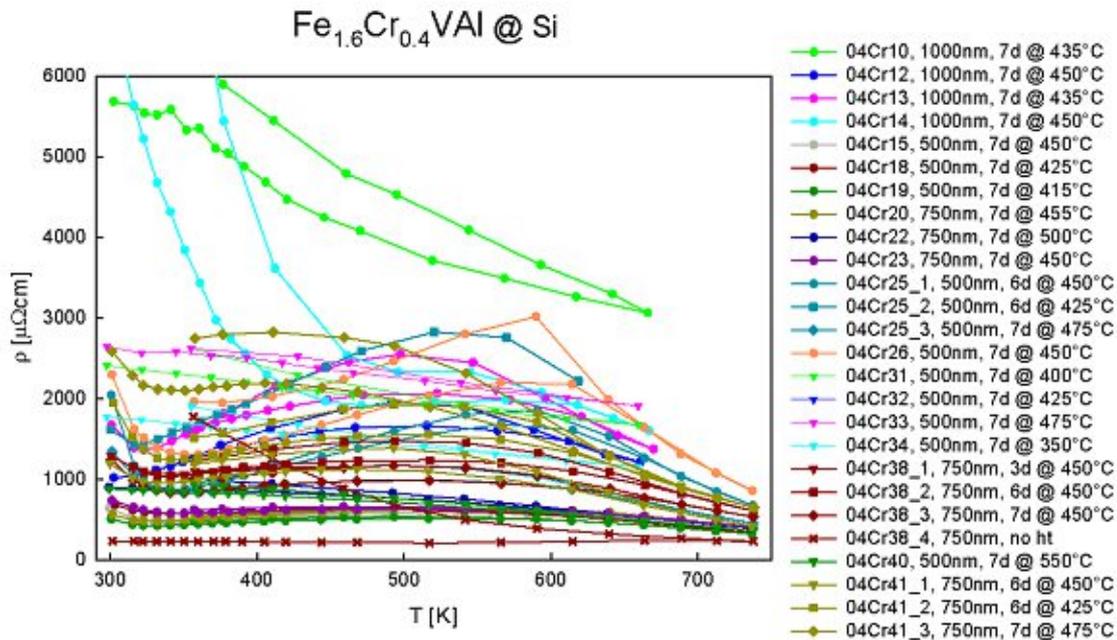


Abbildung 7.6: Aus gemessenen Widerständen und Abmessungen der Schichten berechnete spezifische Widerstände von Schichten mit $\text{Fe}_{1.6}\text{Cr}_{0.4}\text{VAl}$ auf Si-Wafern. Die Legende enthält neben dem Probenamen die Schichtdicke, sowie Temperatur und Dauer der Wärmebehandlung. Die Widerstandskurven der Proben „04Cr10“ und „04Cr14“ sind zur besseren Lesbarkeit der anderen Kurven abgeschnitten.

Auch die Schichten mit $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{76.5}\text{Al}_{23.5}$ und $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{74.5}\text{Al}_{25.5}$ auf SOI-Wafern haben spezifische Widerstände über einen größeren Bereich (siehe Abbildung 7.8). Aufgrund der, verglichen mit den Schichten mit $\text{Fe}_2\text{V}_{0.8}\text{W}_{0.2}\text{Al}$ und $\text{Fe}_{1.6}\text{Cr}_{0.4}\text{VAl}$ auf Si-Wafern, hohen spezifischen Widerstände und den geringen Seebeck-Koeffizienten, weisen diese Schichten schlechte thermoelektrische Eigenschaften auf. Wie bereits erwähnt, gab es allerdings bei der Beschichtung Schwierigkeiten, sodass noch unklar ist, woraus die niedrigen Seebeck-Koeffizienten und hohen spezifischen Widerstände resultieren.

7.3 Power-Faktor

Der Power-Faktor PF ist direkt proportional zum Quadrat des Seebeck-Koeffizienten und indirekt proportional zum spezifischen Widerstand. Das bedeutet, dass ein hoher Seebeck-Koeffizient für einen hohen Power-Faktor am Wichtigsten ist.

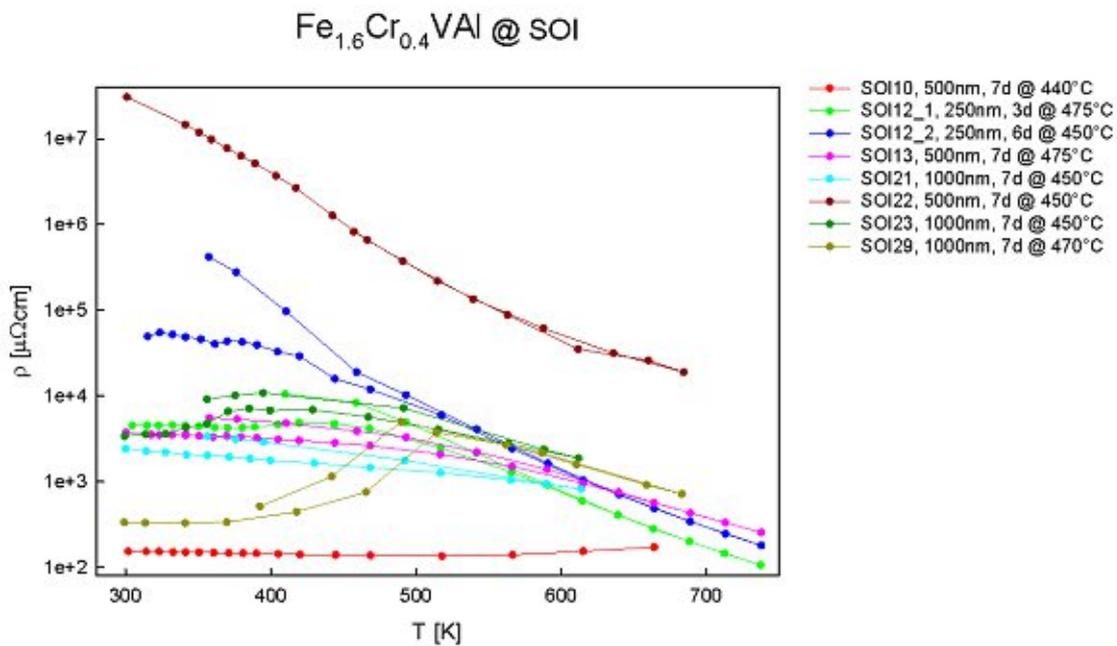


Abbildung 7.7: Aus gemessenen Widerständen und Abmessungen der Schichten berechnete spezifische Widerstände von Schichten mit $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$ auf SOI-Wafern. Die Legende enthält neben dem Probenamen die Schichtdicke, sowie Temperatur und Dauer der Wärmebehandlung.

Gemeinsam mit der thermischen Leitfähigkeit ist der Power-Faktor ein Maß für die Effizienz eines Materials (vgl. Gleichung 2.69).

In Abbildung 7.9 sind die Power-Faktoren für Schichten aus $\text{Fe}_2\text{V}_{0,8}\text{W}_{0,2}\text{Al}$ auf Si-Wafern dargestellt. Aufgrund des hohen Seebeck-Koeffizienten der Probe „02cW29“ ist auch der Power-Faktor mit etwa $90 \text{ mW}/(\text{m} \cdot \text{K}^2)$ am höchsten. Die Schicht hat eine Dicke von 500 nm und wurde für sieben Tage bei 450°C wärmebehandelt. Da der Seebeck-Koeffizient der Probe „02cW15“ mit der Dauer der Wärmebehandlung zu- und der spezifische Widerstand abnahm, ist der Unterschied der Power-Faktoren zwischen den Teilen sehr groß. Gegenüber dem Bulk-Material ist der Power-Faktor der Schichten bis um das 50-Fache erhöht.

Die Seebeck-Koeffizienten der Proben mit $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$ auf Si-Wafern waren zum Teil sehr hoch. Somit sind auch die Power-Faktoren am höchsten (siehe Abbildung 7.10). Die beste Probe „04Cr15“ hat einen Power-Faktor von über $240 \text{ mW}/(\text{m} \cdot \text{K}^2)$ bei etwa 330 K bei einer Schichtdicke von 500 nm und einer Wärmebehandlung von 450°C für sieben Tage. Das entspricht einer Verbesserung gegenüber dem Bulk-

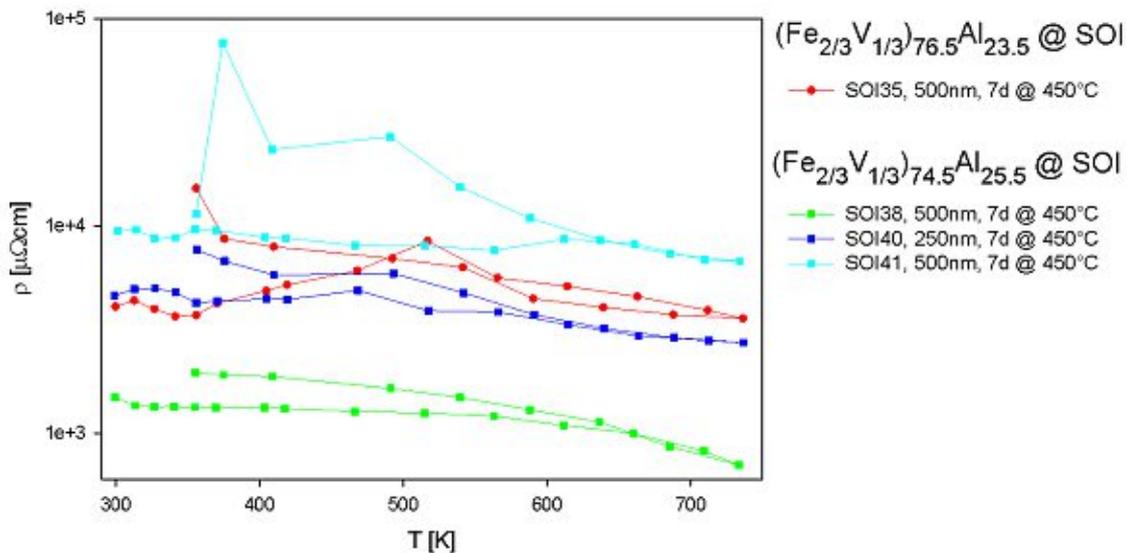


Abbildung 7.8: Aus gemessenen Widerständen und Abmessungen der Schichten berechnete spezifische Widerstände von Schichten mit $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{76.5}\text{Al}_{23.5}$ und $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{74.5}\text{Al}_{25.5}$ auf SOI-Wafer. Die Legende enthält neben dem Probenamen die Schichtdicke, sowie Temperatur und Dauer der Wärmebehandlung.

Material um das 1000-Fache. Der Seebeck-Koeffizient der Schicht ist zwar nicht der höchste, allerdings ist der spezifische Widerstand mit ungefähr $600 \mu\Omega\text{cm}$, verglichen mit anderen Schichten aus $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$, sehr gering. Bei der Probe „04Cr41“ haben die Teile, die bei 425°C und 450°C wärmebehandelt wurden, die höchsten Power-Faktoren und bei der Probe „04Cr25“ der Teil, der bei 450°C wärmebehandelt wurde. Dies bestätigt die Wichtigkeit des richtigen Temperaturbereichs bei der Wärmebehandlung.

In Abbildung 7.11 sind die Power-Faktoren der Schichten mit $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$ auf SOI-Wafern abgebildet. Obwohl der Seebeck-Koeffizient der Probe „SOI22“ mit über $-2000 \mu\text{V}/\text{K}$ extrem hoch ist, ist der Power-Faktor, wie auch für die anderen Proben, verschwindend gering. Dies liegt an den extrem hohen spezifischen Widerständen der Schichten. Die Zunahme der Power-Faktoren bei höheren Temperaturen resultiert aus der Abnahme der spezifischen Widerstände.

Auch die Proben mit $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{76.5}\text{Al}_{23.5}$ und $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{74.5}\text{Al}_{25.5}$ auf SOI-Wafern ergaben keine erfolgsversprechenden Ergebnisse bezüglich des Seebeck-Koeffizienten und auch die spezifischen Widerstände waren relativ hoch. Dadurch ist auch der Power-Faktor dieser Schichten extrem niedrig (siehe Abbildung 7.12).

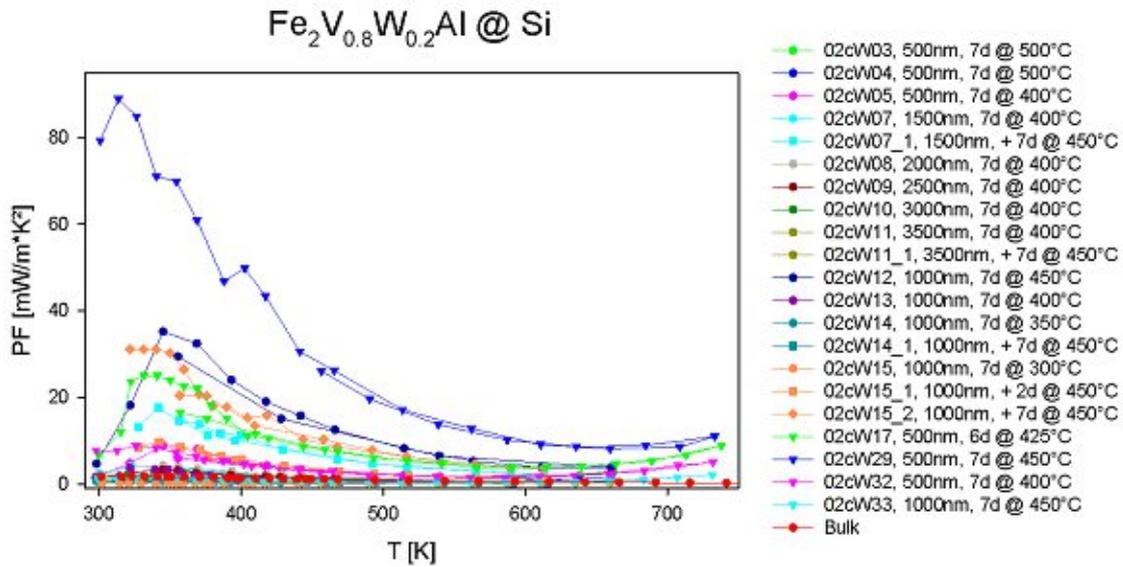


Abbildung 7.9: Aus Seebeck-Koeffizienten und spezifischen Widerständen berechnete Power-Faktoren von Schichten mit $\text{Fe}_2\text{V}_{0.8}\text{W}_{0.2}\text{Al}$ auf Si-Wafern und gemessener Seebeck-Koeffizient des Bulk-Materials (rote Punkte). Die Legende enthält neben dem Probenamen die Schichtdicke, sowie Temperatur und Dauer der Wärmebehandlung.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass der beste Seebeck-Koeffizient bei der Probe „SOI22“, mit 500 nm $\text{Fe}_{1.6}\text{Cr}_{0.4}\text{VAl}$ auf einem SOI-Wafer, bei einer Wärmebehandlung von sieben Tagen bei 450 °C, gefunden wurde. Da alle Schichten auf SOI-Wafern allerdings sehr hohe spezifische Widerstände aufwiesen, war der Power-Faktor trotzdem extrem niedrig. Die höchsten Power-Faktoren hatten Schichten auf Si-Wafern, wobei die Werte bei Proben mit $\text{Fe}_{1.6}\text{Cr}_{0.4}\text{VAl}$ mit fast $250 \text{ mW}/(\text{m} \cdot \text{K}^2)$ deutlich höher waren als bei Proben mit $\text{Fe}_2\text{V}_{0.8}\text{W}_{0.2}\text{Al}$ mit etwa $90 \text{ mW}/(\text{m} \cdot \text{K}^2)$. Bei beiden Materialien erwies sich eine Schichtdicke von 500 nm und eine Wärmebehandlung bei 450 °C als optimal für einen hohen Power-Faktor.

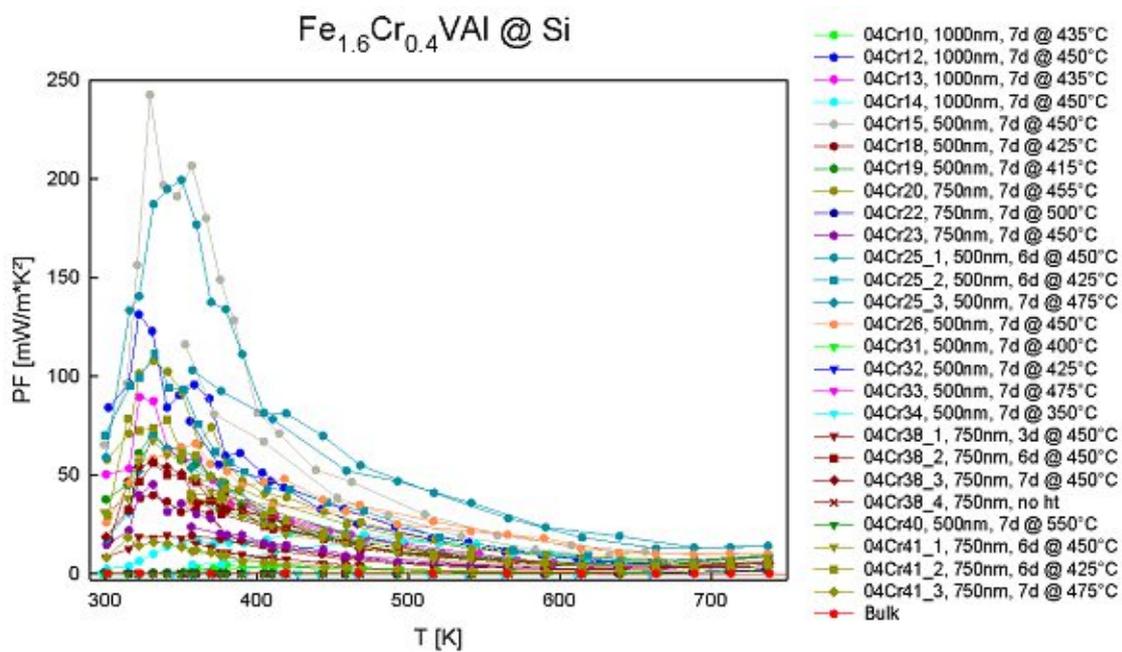


Abbildung 7.10: Aus Seebeck-Koeffizienten und spezifischen Widerständen berechnete Power-Faktoren von Schichten mit $\text{Fe}_{1.6}\text{Cr}_{0.4}\text{VAI}$ auf Si-Wafern und gemessener Seebeck-Koeffizient des Bulk-Materials (rote Punkte). Die Legende enthält neben dem Probenamen die Schichtdicke, sowie Temperatur und Dauer der Wärmebehandlung.

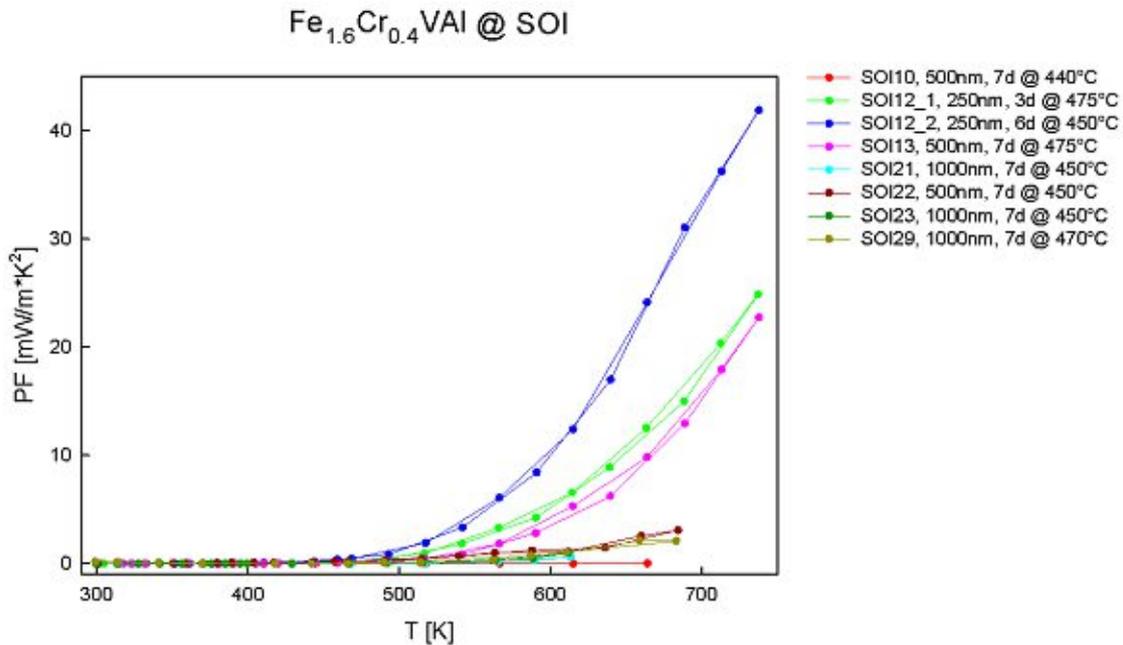


Abbildung 7.11: Aus Seebeck-Koeffizienten und spezifischen Widerständen berechnete Power-Faktoren von Schichten mit $\text{Fe}_{1.6}\text{Cr}_{0.4}\text{VAI}$ auf SOI-Wafern. Die Legende enthält neben dem Probenamen die Schichtdicke, sowie Temperatur und Dauer der Wärmebehandlung.

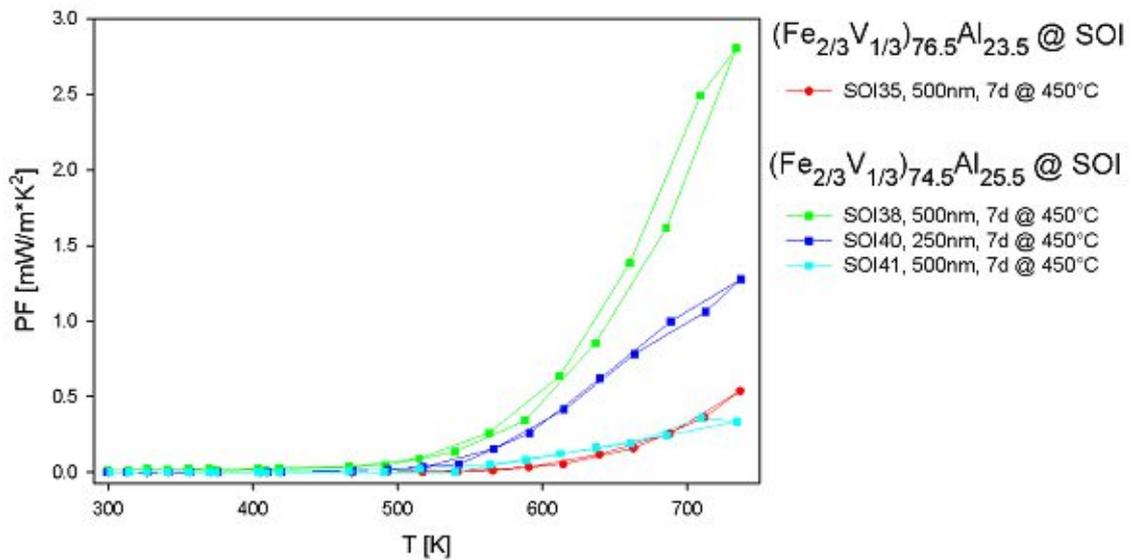


Abbildung 7.12: Aus Seebeck-Koeffizienten und spezifischen Widerständen berechnete Power-Faktoren von Schichten mit $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{76.5}\text{Al}_{23.5}$ und $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{74.5}\text{Al}_{25.5}$ auf SOI-Wafern. Die Legende enthält neben dem Probenamen die Schichtdicke, sowie Temperatur und Dauer der Wärmebehandlung.

8 Herstellung und Messung eines thermoelektrischen Generators

Im Folgenden wird die Herstellung und Messung eines thermoelektrischen Generators, bestehend aus einer p-leitenden und einer n-leitenden Schicht, vorgestellt. Der Messaufbau wurde mithilfe von Bernhard Hinterleitner und Michael Parzer, konstruiert.

Ein thermoelektrischer Generator besteht aus zwei, an einer Stelle verbundenen, Schichten mit Seebeck-Koeffizienten unterschiedlichen Vorzeichens. In Abbildung 8.1 ist eine Skizze einer Blendenanordnung zur Herstellung einer solchen Schichtstruktur gezeigt. Zuerst wird das Substrat so abgedeckt, dass noch eine L-förmige Fläche sichtbar ist. Diese wird mit dem p-leitenden Material beschichtet. Anschließend wird die Schicht ausgebaut und wieder so eingebaut, dass die vorhin abgedeckte Fläche des Substrats sowie ein kleiner, bereits beschichteter, Teil beschichtet wird. Dabei ist darauf zu achten, dass ein Bereich von etwa 1 mm zwischen den Schichten unbeschichtet bleibt, um einen elektrischen Kontakt an unerwünschten Stellen zu vermeiden. Durch die nun folgende Beschichtung des n-leitenden Materials erhält man zwei Schichten, die an einer Stelle, welche doppelt beschichtet wurde, verbunden sind. Ein Beispiel eines thermoelektrischen Generators auf einem Glas-Substrat ist in Abbildung 8.2 gezeigt. Da die in dieser und vorangegangenen Arbeiten hergestellten Schichten allerdings alle einen negativen Seebeck-Koeffizienten besitzen, also n-leitend sind, konnten nur Proben aus zwei n-leitenden Schichten mit unterschiedlichen Seebeck-Koeffizienten, zum Testen der Form der Schichten und des Messaufbaus, hergestellt werden.

Um den gesamten Seebeck-Koeffizienten eines thermoelektrischen Generators zu bestimmen, ist es günstig, das Substrat an der Seite, an der die Schichten verbunden sind, zu erwärmen und die Seite, an denen an den Endpunkten der Schichten die Spannung abgegriffen wird, auf Raumtemperatur zu halten, da die Enden der

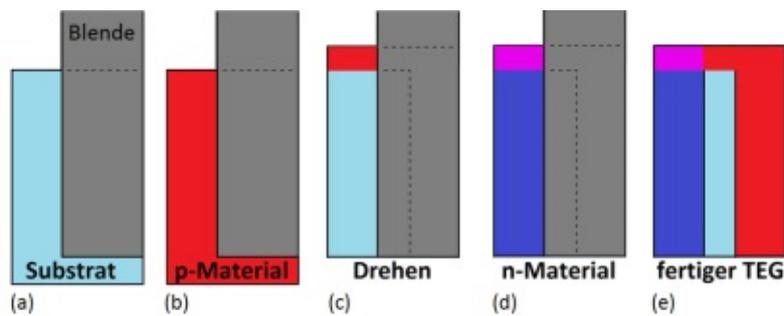


Abbildung 8.1: Zur Erklärung der Methode zur Herstellung eines thermoelektrischen Generators. (a) Blendenposition zur Bestimmung der Form des p-leitenden Materials. (b) Mit p-leitendem Material beschichtete, freie Fläche des Substrats. (c) Blendenposition zur Bestimmung der Form des n-leitenden Materials. (d) Mit n-leitendem Material beschichtete, freie Fläche des Substrats. (e) Fertiger thermoelektrischer Generator mit Überlappung der p- und n-leitenden Schichten (magenta-farbiger Bereich).



Abbildung 8.2: Doppelt beschichtetes Glas-Substrat mit einer $\text{Fe}_{1,8}\text{Co}_{0,2}\text{VAI}$ -Schicht und einer $\text{Fe}_{1,8}\text{Mn}_{0,2}\text{VAI}$ -Schicht mit einer Dicke von $0,25\ \mu\text{m}$.

Schichten ansonsten thermisch, aber nicht elektrisch, miteinander verbunden sein müssten, was einen größeren Aufwand bedeuten würde. In Abbildung 8.3 ist der verwendete Aufbau gezeigt. Das Substrat wird so eingespannt, dass je ein Kupferblock elektrisch und thermisch mit einer Schicht an der kalten Seite und der dritte Kupferblock mit dem Überlappungsbereich der beiden Schichten verbunden ist. Durch die Größe der Kupferblöcke wird sichergestellt, dass die Wärme an der kalten Seite gut abgeführt werden kann, ohne dass sich die Blöcke signifikant erwärmen. Durch zwei mit einer Leistung von je $24\ \text{W}$ betriebenen Heizmatten, die am zu erwärmenden Kupferblock angeklebt werden, wird eine Temperatur von etwa $100\ ^\circ\text{C}$ erreicht. Da sich die Blöcke auf der kalten Seite leicht während der Messung erwärmen, stellt sich eine Temperaturdifferenz von $70\ ^\circ\text{C}$ zwischen den Kupferblöcken ein. Aufgrund des nicht-idealen thermischen Kontakts zwischen Kupfer und

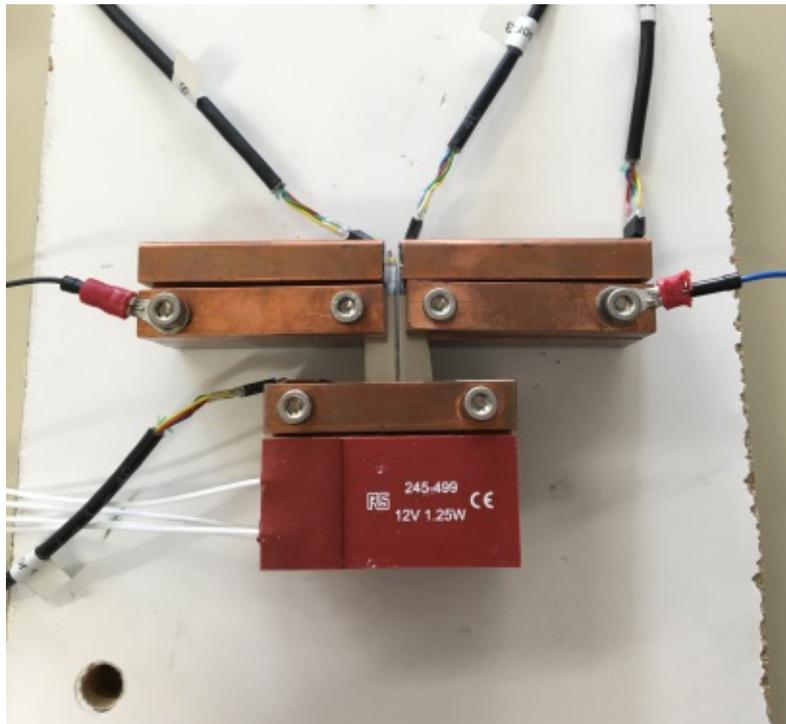


Abbildung 8.3: Verwendeter Messaufbau zur Bestimmung des Seebeck-Koeffizienten der doppelt beschichteten Proben. An den unteren Block sind zwei Heizmatten angeklebt (nur eine sichtbar). An den oberen Kupferblöcken ist jeweils ein Spannungskontakt angebracht. Vier Temperatursensoren (Kabel mit schwarzer Isolierung) messen die Temperaturen an unterschiedlichen Stellen.

Schicht, ist die Temperaturdifferenz auf der Probe etwas geringer. Die Temperaturen werden mit vier Temperatursensoren an unterschiedlichen Stellen gemessen und die Daten mit einem Raspberry Pi ausgewertet.



Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Diplomarbeit ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar
The approved original version of this thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

9 Conclusio

Die Substrate wurden nach der Beschichtung für eine definierte Anzahl an Tagen in einem Ofen unter Hochvakuum wärmebehandelt. Dabei stellte sich heraus, dass eine Temperatur im Bereich um 450°C den Seebeck-Koeffizienten und damit den Power-Faktor extrem erhöht. Ebenso zeigte sich, dass der Seebeck-Koeffizient mit der Dauer der Wärmebehandlung zunimmt. Die Struktur, die sich bildet, ist allerdings nicht stabil und kann bei erneuter Wärmebehandlung bei höherer Temperatur geändert werden.

Die Proben mit den höchsten Power-Faktoren hatten eine Dicke von 500 nm . Allerdings wurden auch hohe Werte bei dickeren Schichten gefunden. Es scheint also keine größere Abhängigkeit von der Schichtdicke zu geben.

Der größte Seebeck-Koeffizient wurde mit $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$ auf einem SOI-Wafer mit über $-2000\ \mu\text{V}/\text{K}$ gefunden. Die Probe wurde für sieben Tage bei 450°C wärmebehandelt. Allerdings waren die spezifischen Widerstände der Schichten auf SOI-Wafern extrem hoch, sodass der Power-Faktor trotzdem verschwindend gering war. $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$ -basierte Schichten auf Si-Wafern lieferten den höchsten Power-Faktor mit über $240\text{ mW}/(\text{m} \cdot \text{K}^2)$, ebenfalls mit einer Schichtdicke von 500 nm und einer Wärmebehandlung von sieben Tagen bei 450°C , obwohl der Power-Faktor des Bulk-Materials mit $0,2\text{ mW}/(\text{m} \cdot \text{K}^2)$ sehr gering ist. Der höchste Power-Faktor mit $\text{Fe}_2\text{V}_{0,8}\text{W}_{0,2}\text{Al}$ als Heusler-Material war etwa $90\text{ mW}/(\text{m} \cdot \text{K}^2)$. Auch hier waren Schichtdicke und Wärmebehandlung analog.

Messungen der Effusivität und Diffusivität von Schichten aus $\text{Fe}_2\text{V}_{0,8}\text{W}_{0,2}\text{Al}$ auf Si-Wafern am *National Institute for Materials Science, Tsukuba, Japan* ergaben thermische Leitfähigkeiten im Bereich von $2,5\text{ W}/\text{m} \cdot \text{K}$ bis $3\text{ W}/\text{m} \cdot \text{K}$. Dies entspricht einer Verminderung um über 25% gegenüber dem Bulk-Material. Gemeinsam mit den hohen erzielten Power-Faktoren ist zu erwarten, dass in näherer Zukunft Materialien mit sehr hohen ZT -Werten hergestellt werden können.

Interessant ist auch, dass alle Schichten, unabhängig vom Heusler-Material, einen

negativen Seebeck-Koeffizienten aufwiesen, also n-leitend waren, obwohl einige der Bulk-Materialien selbst p-leitend sind. Da die Zustandsdichte der Elektronen im Bereich der Fermienergie ausschlaggebend für den Seebeck-Koeffizienten ist, lässt sich daraus schlussfolgern, dass die Elektronenstruktur in Dünnschichtsystemen nicht mit denen in Bulk-Materialien zu vergleichen ist.

10 Ausblick

Aufgrund der großen Anzahl an Parametern der Beschichtung und der Auswahl an Heusler-Materialien und möglichen Substitutionen war es nur möglich, eine kleine Auswahl, wie beispielsweise die Schichtdicke, Temperatur und Dauer der Wärmebehandlung und die Substitutionen von Fe_2VAl vor allem durch Cr statt Fe und W statt V zu untersuchen. Weitere Messungen könnten Substitutionen, ausgehend von den untersuchten Verbindungen, und Variation anderer Parameter beinhalten. Obwohl Schichten mit sehr hohen Seebeck-Koeffizienten und Power-Faktoren hergestellt werden konnten, ist der Herstellungsprozess noch sehr instabil und minimale Veränderungen in den Parametern lieferten oft sehr unterschiedliche Ergebnisse. Ein weiterer Schritt wird deshalb sein, den Prozess soweit zu stabilisieren, dass die Ergebnisse reproduziert werden können.

Die mehrfache Wärmebehandlung der Proben bei unterschiedlichen Temperaturen zeigt ein interessantes Verhalten bezüglich des Seebeck-Koeffizienten. Auch hier gilt es, weitere Messungen durchzuführen, um den Vorgang besser verstehen zu können und die thermoelektrischen Eigenschaften weiter zu verbessern.



Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Diplomarbeit ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar
The approved original version of this thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

A Parameter der Beschichtung

In Tabelle A.1 sind die Parameter des Beschichtungsprozesses für die unterschiedlichen Proben gegeben. Einige der Proben wurden bereits im Zuge vorangehender Arbeiten von Michael Ponder und Bernhard Hinterleitner hergestellt und gemessen.

Während dieser Arbeit wurden die Proben 02cW20 bis 02cW36, SOI19 bis SOI41, TEG1 bis TEG18, F-p1, F-n1 sowie einige Testschichten, zur Bestimmung der Beschichtungsrate für verschiedene Targets, hergestellt. Einige Substrate wurden vor der Beschichtung durch Ionenätzen gereinigt. Bei diesen Proben stehen bei der Dauer t zwei Werte, wobei der erste für das Ionenätzen und der zweite für die Beschichtung gilt. Dasselbe gilt für den Druck p . Die Spannung U_1 und die Leistung P_1 sind die Werte während der Beschichtung. Die Leistung P_1 ergibt sich dabei aus dem Produkt aus der angelegten Spannung und dem Strom, der von Elektronen und Ionen getragen wird. Im Falle von Ionenätzen vor der Beschichtung stehen die Werte U_2 und P_2 für die angelegte Spannung und Leistung.

SOI-Wafer mit rauer Oberfläche wurden vor dem Einbau in den Substrathalter mit einem Schleifpapier mit einer Körnung von 800 mechanisch aufgeraut.

Einige TEG-Proben wurden zweimal, mit je einem Heusler-Material, beschichtet. In diesem Fall sind in der Tabelle die Parameter für beide Beschichtungen separat angegeben. Bei den Proben, die mehrere Male wärmebehandelt wurden, stehen die einzelnen Wärmebehandlungen in zeitlicher Reihenfolge untereinander.

Name	Target	Substrat	t [s]	T [°C]	U_1 [V]	P_1 [W]	U_2 [V]	P_2 [W]	p [mbar]	a [mm]	p_0 [mbar]	d [µm]	WB
04Cr01	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si glatt	1200/1200	150	364	25	530	30	0,2/1,2·10 ⁻²	62	4,5·10 ⁻⁶	?	-
04Cr02	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si glatt	3600	150	360	25	-	-	1,2·10 ⁻²	62	4,9·10 ⁻⁶	?	-
04Cr03	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si glatt	7200	150	348	25	-	-	1,2·10 ⁻²	62	5,6·10 ⁻⁶	?	-
04Cr04	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si glatt	1200	150	334	25	-	-	1,2·10 ⁻²	20	6,2·10 ⁻⁶	1,44	-
04Cr05	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si glatt	1800	150	332	25	-	-	1,2·10 ⁻²	20	8,9·10 ⁻⁶	?	-
04Cr06	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si glatt	600	150	328	25	-	-	1,2·10 ⁻²	20	7,7·10 ⁻⁶	0,66	7d @ 450 °C
04Cr07	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si glatt	1200/870	500	333	25	530	30	0,2/1,2·10 ⁻²	20	1,1·10 ⁻⁵	1	7d @ 450 °C
04Cr08	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si glatt	1200/870	500	329	25	530	30	0,2/1,2·10 ⁻²	20	6,2·10 ⁻⁶	1	-
04Cr09	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si glatt	1200/870	500	324	25	530	30	0,2/1,2·10 ⁻²	20	6,0·10 ⁻⁶	1	7d @ 420 °C
04Cr10	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si glatt	1200/870	500	324	25	530	30	0,2/1,2·10 ⁻²	20	4,6·10 ⁻⁶	1	7d @ 435 °C
04Cr11	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si glatt	1200/870	500	321	25	530	30	0,2/1,2·10 ⁻²	20	4,9·10 ⁻⁶	1	7d @ 465 °C
04Cr12	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si glatt	1200/870	500	327	25	530	30	0,2/1,2·10 ⁻²	20	4,6·10 ⁻⁶	1	7d @ 450 °C
04Cr13	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si glatt	1200/870	500	321	25	530	30	0,2/1,2·10 ⁻²	20	4,7·10 ⁻⁶	1	7d @ 435 °C
04Cr14	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si glatt	1200/870	500	319	25	530	30	0,2/1,2·10 ⁻²	20	4,1·10 ⁻⁶	1	7d @ 450 °C
04Cr15	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si glatt	1200/435	500	318	25	530	30	0,2/1,2·10 ⁻²	20	7,9·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 450 °C
04Cr16	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si glatt	1200/435	500	317	25	530	30	0,2/1,2·10 ⁻²	20	4,1·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 435 °C
04Cr17	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si glatt	1200/435	500	318	25	530	30	0,2/1,2·10 ⁻²	20	6,7·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 415 °C
04Cr18	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si rau	435	500	320	25	-	-	1,2·10 ⁻²	20	4,3·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 425 °C
04Cr18_b													+ 7d @ 600 °C
													+ 7d @ 450 °C
													+ 8d @ 600 °C
													+ 7d @ 450 °C
04Cr19	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si rau	435	500	317	25	-	-	1,2·10 ⁻²	20	5,9·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 415 °C
04Cr20	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si rau	435	500	318	25	-	-	1,2·10 ⁻²	20	4,1·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 455 °C
04Cr21	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si rau	652,5	500	318	25	-	-	1,2·10 ⁻²	20	3,7·10 ⁻⁶	0,75	7d @ 450 °C
04Cr22	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si rau	652,5	500	318	25	-	-	1,2·10 ⁻²	20	3,3·10 ⁻⁶	0,75	7d @ 500 °C
04Cr23	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si rau	652,5	500	316	25	-	-	1,2·10 ⁻²	20	4,4·10 ⁻⁶	0,75	7d @ 450 °C
04Cr24	-	Si rau	1800	25,5	-	-	655	25	1,2·10 ⁻²	20	2,6·10 ⁻⁶	-	-
04Cr24_1	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si rau	435	500	326	25	-	-	1,2·10 ⁻²	20	3,8·10 ⁻⁶	0,5	3d @ 450 °C
04Cr24_2													7d @ 550 °C
04Cr24_3													7d @ 450 °C
04Cr25_1	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si rau	435	500	324	25	-	-	1,2·10 ⁻²	20	3,8·10 ⁻⁶	0,5	6d @ 450 °C
04Cr25_2													6d @ 425 °C
04Cr25_3													7d @ 475 °C
04Cr26	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si rau	435	500	318	25	-	-	1,2·10 ⁻²	20	3,6·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 450 °C
04Cr27	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Glas rau	435	500	319	25	-	-	1,2·10 ⁻²	20	3,6·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 450 °C
04Cr28_1	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Si glatt	435	100	311	25	-	-	1,2·10 ⁻²	20	4,2·10 ⁻⁶	0,5	6d @ 450 °C
04Cr28_2													6d @ 425 °C
04Cr28_3													7d @ 475 °C
04Cr29	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Glas glatt	435	500	317	25	-	-	1,2·10 ⁻²	20	4,2·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 425 °C
04Cr30	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Glas glatt	435	500	314	25	-	-	1,2·10 ⁻²	20	9,6·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 350 °C
04Cr31	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Glas rau	435	500	313	25	-	-	1,2·10 ⁻²	20	3,4·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 400 °C
04Cr32	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Glas rau	435	500	314	25	-	-	1,2·10 ⁻²	20	3,6·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 425 °C
04Cr33	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Glas rau	435	500	313	25	-	-	1,2·10 ⁻²	20	3,7·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 475 °C
04Cr34	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAL	Glas rau	435	500	312	25	-	-	1,2·10 ⁻²	20	3,9·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 350 °C

Name	Target	Substrat	t [s]	T [°C]	U ₁ [V]	P ₁ [W]	U ₂ [V]	P ₂ [W]	p [mbar]	a [mm]	p ₀ [mbar]	d [µm]	WB
04Cr35	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	Glas rau	435	500	311	25	-	-	1,2 · 10 ⁻²	20	3,5 · 10 ⁻⁶	0,5	7d @ 375 °C
04Cr36	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	Glas rau	435	500	312	25	-	-	1,2 · 10 ⁻²	20	3,5 · 10 ⁻⁶	0,5	-
04Cr37	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	Glas rau	435	500	310	25	-	-	1,2 · 10 ⁻²	20	3,6 · 10 ⁻⁶	0,5	7d @ 500 °C
04Cr38_1	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	Si rau	652,5	500	311	25	-	-	1,2 · 10 ⁻²	20	3,8 · 10 ⁻⁶	0,75	3d @ 450 °C
04Cr38_2													6d @ 450 °C
04Cr38_3													7d @ 450 °C
04Cr38_3b													+ 7d @ 550 °C
													+ 7d @ 450 °C
													+ 7d @ 600 °C
													+ 7d @ 450 °C
04Cr38_4													-
04Cr39	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	Si rau	652,5	500	307	25	-	-	1,2 · 10 ⁻²	20	3,3 · 10 ⁻⁶	0,75	-
04Cr40	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	Si rau	652,5	500	308	25	-	-	1,2 · 10 ⁻²	20	3,4 · 10 ⁻⁶	0,75	7d @ 550 °C
04Cr41_1	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	Si rau	652,5	500	311	25	-	-	1,2 · 10 ⁻²	20	3,5 · 10 ⁻⁶	0,75	6d @ 450 °C
04Cr41_2													6d @ 425 °C
04Cr41_3													7d @ 475 °C
04Cr42	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	SiO ₂	435	500	310	25	-	-	1,2 · 10 ⁻²	20	4,1 · 10 ⁻⁶	0,5	-
02cW01	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si glatt	1200	150	347	25	-	-	1,2 · 10 ⁻²	30	3,8 · 10 ⁻⁶	1,544	-
02cW02	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si glatt	2400	150	345	25	-	-	1,2 · 10 ⁻²	30	5,3 · 10 ⁻⁶	3,06	-
02cW03	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	390	500	344	25	-	-	1,2 · 10 ⁻²	30	5,8 · 10 ⁻⁶	0,5	7d @ 500 °C
02cW04	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	780	500	339	25	-	-	1,2 · 10 ⁻²	30	4,6 · 10 ⁻⁶	1,0	7d @ 500 °C
02cW05	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si glatt	390	500	335	25	-	-	1,2 · 10 ⁻²	30	3,6 · 10 ⁻⁶	0,5	7d @ 400 °C
02cW06	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si glatt	780	500	337	25	-	-	1,2 · 10 ⁻²	30	3,8 · 10 ⁻⁶	1,0	7d @ 400 °C
02cW07	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	1170	500	330	25	-	-	1,2 · 10 ⁻²	30	4,5 · 10 ⁻⁶	1,5	7d @ 400 °C
02cW07_1													+ 7d @ 450 °C
02cW08	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	1560	500	332	25	-	-	1,2 · 10 ⁻²	30	3,6 · 10 ⁻⁶	2,0	7d @ 400 °C
02cW09	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	1950	500	328	25	-	-	1,2 · 10 ⁻²	30	3,5 · 10 ⁻⁶	2,5	7d @ 400 °C
02cW10	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	2340	500	321	25	-	-	1,2 · 10 ⁻²	30	3,6 · 10 ⁻⁶	3,0	7d @ 400 °C
02cW10_b													+ 7d @ 600 °C
02cW11	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	2730	500	320	25	-	-	1,2 · 10 ⁻²	30	5,0 · 10 ⁻⁶	3,5	7d @ 400 °C
02cW11_1													+ 7d @ 450 °C
02cW12	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	780	500	314	25	-	-	1,2 · 10 ⁻²	30	5,8 · 10 ⁻⁶	1,0	7d @ 450 °C
02cW13	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	780	500	314	25	-	-	1,2 · 10 ⁻²	30	4,0 · 10 ⁻⁶	1,0	7d @ 400 °C
02cW13_1													+ 2d @ 450 °C
													+ 7d @ 550 °C
													+ 7d @ 450 °C
													+ 7d @ 600 °C
													+ 7d @ 450 °C
02cW14	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	780	500	314	25	-	-	1,2 · 10 ⁻²	30	3,4 · 10 ⁻⁶	1,0	7d @ 350 °C
02cW14_1/3													+ 7d @ 425 °C
													+ 7d @ 600 °C
													+ 7d @ 450 °C
													+ 7d @ 600 °C
02cW14_1													+ 7d @ 450 °C
02cW15	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	780	500	309	25	-	-	1,2 · 10 ⁻²	62	3,2 · 10 ⁻⁶	1,0	7d @ 300 °C

Name	Target	Substrat	t [s]	T [°C]	U_1 [V]	P_1 [W]	U_2 [V]	P_2 [W]	p [mbar]	a [mm]	p_0 [mbar]	d [µm]	WB
02cW15_1													+ 2d @ 450 °C
02cW15_2													+ 7d @ 450 °C
02cW16	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	588	470	290	25	-	-	2,0 · 10 ⁻²	25	1,6 · 10 ⁻⁶	0,5	6d @ 450 °C
02cW17	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	?/588	470	287	25	493	15	0,35/2,0 · 10 ⁻²	25	1,4 · 10 ⁻⁶	0,5	6d @ 425 °C
02cW18	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	30/1176	470	288	25	537	15	0,35/2,0 · 10 ⁻²	25	1,4 · 10 ⁻⁶	1,0	-
02cW19	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si glatt	30/588	470	282	25	571	15	0,35/2,0 · 10 ⁻²	25	1,2 · 10 ⁻⁶	0,5	7d @ 450 °C
02cW20	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	30/1176	500	282	25	526	15	0,37/2,0 · 10 ⁻²	25	1,5 · 10 ⁻⁶	1,0	7d @ 470 °C
02cW21	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	588	500	283	25	-	-	2,0 · 10 ⁻²	25	1,5 · 10 ⁻⁶	0,5	7d @ 450 °C
02cW22	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	1176	500	283	25	-	-	2,0 · 10 ⁻²	25	1,5 · 10 ⁻⁶	1,0	8d @ 450 °C
02cW23	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	1764	500	282	25	-	-	2,0 · 10 ⁻²	25	1,2 · 10 ⁻⁶	1,5	7d @ 450 °C
02cW24	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	2352	500	281	25	-	-	2,0 · 10 ⁻²	25	1,0 · 10 ⁻⁶	2,0	7d @ 450 °C
02cW25	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	3528	500	280	25	-	-	2,0 · 10 ⁻²	25	9,1 · 10 ⁻⁷	3,0	7d @ 400 °C
02cW26	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	588	500	278	25	-	-	2,0 · 10 ⁻²	25	7,7 · 10 ⁻⁷	0,5	7d @ 470 °C
02cW27	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	1176	500	279	25	-	-	2,0 · 10 ⁻²	25	8,0 · 10 ⁻⁷	1,0	7d @ 425 °C
02cW28	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	2352	500	291	25	-	-	2,0 · 10 ⁻²	25	9,8 · 10 ⁻⁷	2,0	7d @ 425 °C
02cW29	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	20/588	500	275	25	570	15	0,35/2,0 · 10 ⁻²	26	1,6 · 10 ⁻⁶	0,5	7d @ 450 °C
02cW30	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	20/1764	500	273	25	588	15	0,35/2,0 · 10 ⁻²	26	1,4 · 10 ⁻⁶	1,5	7d @ 450 °C
02cW31	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	20/1176	500	?	25	530	15	0,35/2,0 · 10 ⁻²	26	1,2 · 10 ⁻⁶	1,0	7d @ 450 °C
02cW32	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	20/1176	500	?	25	530	15	0,35/2,0 · 10 ⁻²	26	1,2 · 10 ⁻⁶	0,5	7d @ 400 °C
02cW33	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	1176	500	273	25	-	-	?	26	?	1,0	7d @ 450 °C
02cW34	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	588	500	273	25	-	-	2,0 · 10 ⁻²	26	9,7 · 10 ⁻⁷	0,5	7d @ 470 °C
02cW35	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	294	500	287	25	-	-	2,0 · 10 ⁻²	26	1,0 · 10 ⁻⁶	0,25	-
02cW36	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	294	500	270	25	-	-	2,0 · 10 ⁻²	26	1,1 · 10 ⁻⁶	0,25	-
SO101_1	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	SOI glatt	1200/1671	500	288	25	607	35	0,35/2,0 · 10 ⁻²	30	5,0 · 10 ⁻⁶	0,5	6d @ 425 °C
SO101_2													6d @ 450 °C
SO101_3													6d @ 475 °C
SO102_1	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	SOI glatt	600/1671	500	285	25	607	35	0,4/2,0 · 10 ⁻²	30	3,9 · 10 ⁻⁶	0,5	7d @ 425 °C
SO102_2													7d @ 450 °C
SO102_3													7d @ 475 °C
SO103_1	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	SOI glatt	300/1671	500	282	25	645	35	0,39/2,0 · 10 ⁻²	30	2,9 · 10 ⁻⁶	0,5	7d @ 425 °C
SO103_2													7d @ 450 °C
SO103_3													7d @ 475 °C
SO104_1	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	SOI glatt	719	500	302	25	-	-	2,0 · 10 ⁻²	25	4,3 · 10 ⁻⁶	0,5	7d @ 425 °C
SO104_2													7d @ 450 °C
SO104_3													7d @ 475 °C
SO105_1	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	SOI glatt	719	?	302	25	-	-	2,0 · 10 ⁻²	25	4,1 · 10 ⁻⁶	0,5	7d @ 425 °C
SO105_2													7d @ 450 °C
SO105_3													7d @ 475 °C
SO106_1	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	SOI glatt	1420	500	300	25	-	-	2,0 · 10 ⁻²	25	3,8 · 10 ⁻⁶	0,25	7d @ 425 °C
SO106_2													7d @ 425 °C
SO106_3													6d @ 450 °C
SO107_1	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	SOI glatt	30/719	500	300	25	588	35	0,39/2,0 · 10 ⁻²	25	3,7 · 10 ⁻⁶	0,5	7d @ 425 °C
SO107_2													7d @ 450 °C
SO107_3													7d @ 475 °C
SO108_1	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	SOI glatt	15/719	500	296	25	588	35	0,38/2,0 · 10 ⁻²	25	3,5 · 10 ⁻⁶	0,5	7d @ 425 °C

Name	Target	Substrat	t [s]	T [°C]	U_1 [V]	P_1 [W]	U_2 [V]	P_2 [W]	p [mbar]	a [mm]	p_0 [mbar]	d [μm]	WB
SOI08_2													7d @ 450 °C
SOI08_3													7d @ 475 °C
SOI09_1	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	SOI glatt	15/1671	500	290	25	603	35	0,40/2,0·10 ⁻²	25	4,1·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 425 °C
SOI09_2													7d @ 450 °C
SOI09_3													7d @ 475 °C
SOI10	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	SOI glatt	15/1671	500	290	25	563	35	0,40/2,0·10 ⁻²	25	4,1·10 ⁻⁶	0,5	3d @ 440 °C
SOI11	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	SOI glatt	15/1671	500	290	25	563	35	0,40/2,0·10 ⁻²	25	3,7·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 440 °C
SOI12_1	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	SOI rau	15/836	500	290	25	?	35	0,40/2,0·10 ⁻²	25	3,8·10 ⁻⁶	0,25	3d @ 475 °C
SOI12_2													6d @ 450 °C
SOI13	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	SOI rau	15/1671	500	376	25	550	35	0,40/2,0·10 ⁻²	25	3,5·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 475 °C
SOI14	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	SOI rau	15/719	500	298	25	?	35	0,40/2,0·10 ⁻²	25	1,8·10 ⁻⁶	0,61	6d @ 475 °C
SOI15	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	SOI rau	588	465	291	25	-	-	2,0·10 ⁻²	25	1,3·10 ⁻⁶	0,5	6d @ 425 °C
SOI16	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	SOI rau	294	475	288	25	-	-	2,0·10 ⁻²	25	1,3·10 ⁻⁶	0,25	6d @ 450 °C
SOI17	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	SOI rau	15/1176	470	287	25	537	15	0,34/2,0·10 ⁻²	25	1,9·10 ⁻⁶	1,0	6d @ 425 °C
SOI18	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	SOI rau	52/588	470	286	25	575	15	0,35/2,0·10 ⁻²	25	1,9·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 425 °C
SOI19	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	SOI rau	30/588	500	283	25	575	15	0,34/2,0·10 ⁻²	25	1,7·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 450 °C
SOI20	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	SOI rau	1176	500	281	25	-	-	2,0·10 ⁻²	26	9,1·10 ⁻⁷	1,0	7d @ 450 °C
SOI21	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	SOI rau	10/2352	500	290	25	497	15	0,35/2,0·10 ⁻²	26	1,6·10 ⁻⁶	1,0	7d @ 450 °C
SOI22	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	SOI rau	10/1091	500	285	25	577	15	0,35/2,0·10 ⁻²	26	1,1·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 450 °C
SOI23	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	SOI rau	10/2183	500	284	25	540	15	0,36/2,0·10 ⁻²	26	1,3·10 ⁻⁶	1,0	7d @ 450 °C
SOI24	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	SOI rau	10/1091	500	284	25	551	15	0,35/2,0·10 ⁻²	26	1,2·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 400 °C
SOI25	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	SOI rau	20/1091	500	282	25	560	15	0,36/2,0·10 ⁻²	26	1,0·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 425 °C
SOI26	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	SOI rau	30/1091	500	281	25	551	15	0,35/2,0·10 ⁻²	26	1,0·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 400 °C
SOI27	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	SOI rau	20/2183	500	280	25	546	15	0,35/2,0·10 ⁻²	26	1,0·10 ⁻⁶	1,0	7d @ 425 °C
SOI28	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	SOI rau	20/1091	500	280	25	520	15	0,35/2,0·10 ⁻²	26	1,1·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 470 °C
SOI29	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	SOI rau	20/2183	500	277	25	545	15	0,35/2,0·10 ⁻²	26	8,6·10 ⁻⁶	1,0	7d @ 470 °C
SOI30	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	SOI rau	20/588	500	275	25	612	15	0,35/2,0·10 ⁻²	26	2,7·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 425 °C
SOI31	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	SOI rau	20/1120	500	276	25	640	15	0,35/2,5·10 ⁻²	25	1,9·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 450 °C
SOI32	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	SOI rau	20/1120	500	276	25	640	15	0,35/2,5·10 ⁻²	25	1,9·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 450 °C
SOI33	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	SOI rau	20/1120	500	275	25	582	15	0,35/2,5·10 ⁻²	25	1,5·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 450 °C
SOI34	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	SOI rau	20/1120	500	275	25	582	15	0,35/2,5·10 ⁻²	25	1,5·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 450 °C
SOI35	(Fe _{2/3} V _{1/3}) _{76,5} Al _{23,5}	SOI rau	20/3169	500	416	30	626	15	0,35/2,1·10 ⁻¹	25	?	0,5	7d @ 450 °C
SOI36	(Fe _{2/3} V _{1/3}) _{76,5} Al _{23,5}	SOI rau	20/1585	500	402	30	698	15	0,37/2,1·10 ⁻¹	25	1,5·10 ⁻⁶	0,26	-
SOI37	(Fe _{2/3} V _{1/3}) _{76,5} Al _{23,5}	SOI rau	20/6340	500	392	30	630	15	0,35/2,1·10 ⁻¹	25	1,2·10 ⁻⁶	1,0	7d @ 450 °C
SOI38	(Fe _{2/3} V _{1/3}) _{74,5} Al _{25,5}	SOI rau	20/1800	500	?	30	687	15	0,35/?	25	1,9·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 450 °C
SOI39	(Fe _{2/3} V _{1/3}) _{74,5} Al _{25,5}	SOI rau	2934	500	426	30	-	-	2,2·10 ⁻¹	25	1,3·10 ⁻⁶	0,5	7d @ 450 °C
SOI40	(Fe _{2/3} V _{1/3}) _{74,5} Al _{25,5}	SOI rau	1467	500	411	30	-	-	2,2·10 ⁻¹	25	1,2·10 ⁻⁶	0,25	7d @ 450 °C
SOI41	(Fe _{2/3} V _{1/3}) _{74,5} Al _{25,5}	SOI rau	1467	500	398	30	-	-	2,2·10 ⁻¹	25	9,5·10 ⁻⁷	0,5	7d @ 450 °C
TEG1	Fe _{1,8} Co _{0,2} VAI	Glas rau	1920	500	318	25	-	-	2,0·10 ⁻²	35	6,8·10 ⁻⁶	0,25	3d @ 445 °C
TEG1	Fe _{1,8} Mn _{0,2} VAI	Glas rau	1560	500	273	25	-	-	2,0·10 ⁻²	35	1,9·10 ⁻⁶	0,25	3d @ 445 °C
TEG2	Fe _{1,8} Co _{0,2} VAI	Glas rau	1920	500	318	25	-	-	2,0·10 ⁻²	35	6,8·10 ⁻⁶	0,25	3d @ 445 °C
TEG2	Fe _{1,8} Mn _{0,2} VAI	Glas rau	1560	500	273	25	-	-	2,0·10 ⁻²	35	1,9·10 ⁻⁶	0,25	3d @ 445 °C
TEG3	Fe _{1,8} Co _{0,2} VAI	Glas rau	30/3840	500	286	25	700	15	0,35/2,0·10 ⁻²	35	4,2·10 ⁻⁶	0,5	4h @ 445 °C
TEG3	Fe _{1,8} Mn _{0,2} VAI	Glas rau	3120	500	297	25	-	-	2,0·10 ⁻²	35	2,5·10 ⁻⁶	0,5	4h @ 445 °C
TEG4	Fe _{1,8} Co _{0,2} VAI	Glas rau	30/3840	500	286	25	700	15	0,35/2,0·10 ⁻²	35	4,2·10 ⁻⁶	0,5	4h @ 445 °C

Name	Target	Substrat	t [s]	T [°C]	U_1 [V]	P_1 [W]	U_2 [V]	P_2 [W]	p [mbar]	a [mm]	p_0 [mbar]	d [μm]	WB
TEG4	Fe _{1,8} Mn _{0,2} VAI	Glas rau	3120	500	297	25	-	-	$2,0 \cdot 10^{-2}$	35	$2,5 \cdot 10^{-6}$	0,5	4h @ 445 °C
TEG5	Fe _{1,8} Co _{0,2} VAI	Glas rau	30/3840	500	281	25	690	15	$0,35/2,0 \cdot 10^{-2}$	35	$2,5 \cdot 10^{-6}$	0,5	7d @ 450 °C
TEG5	Fe _{1,8} Mn _{0,2} VAI	Glas rau	3120	500	276	25	-	-	$2,0 \cdot 10^{-2}$	35	$3,5 \cdot 10^{-6}$	0,5	7d @ 450 °C
TEG6	Fe _{1,8} Co _{0,2} VAI	Glas rau	30/3840	500	281	25	690	15	$0,35/2,0 \cdot 10^{-2}$	35	$2,5 \cdot 10^{-6}$	0,5	7d @ 450 °C
TEG6	Fe _{1,8} Mn _{0,2} VAI	Glas rau	3120	500	276	25	-	-	$2,0 \cdot 10^{-2}$	35	$3,5 \cdot 10^{-6}$	0,5	7d @ 450 °C
TEG7	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	30/682	500	281	25	?	15	$0,35/2,0 \cdot 10^{-2}$	25	$5,5 \cdot 10^{-6}$	0,5	-
TEG8	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	30/682	500	281	25	?	15	$0,35/2,0 \cdot 10^{-2}$	25	$5,5 \cdot 10^{-6}$	0,5	-
TEG9	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	30/682	500	279	25	723	15	$0,35/2,0 \cdot 10^{-2}$	25	$3,4 \cdot 10^{-6}$	0,5	-
TEG10	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	30/682	500	279	25	723	15	$0,35/2,1 \cdot 10^{-2}$	25	$3,4 \cdot 10^{-6}$	0,5	-
TEG11	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	SOI rau	30/682	500	271	25	696	15	$0,35/2,5 \cdot 10^{-2}$	25	$1,7 \cdot 10^{-6}$	0,5	-
TEG12	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	SOI rau	30/793	500	270	25	533	15	$0,35/2,5 \cdot 10^{-2}$	25	?	0,5	-
TEG13	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	SOI glatt	793	500	270	25	-	-	$2,5 \cdot 10^{-2}$	25	?	0,5	-
TEG14	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	20/793	500	267	25	647	15	$0,35/2,5 \cdot 10^{-2}$	25	$1,8 \cdot 10^{-6}$	0,5	7d @ 450 °C
TEG14	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	Si rau	1120	500	280	25	-	-	$2,5 \cdot 10^{-2}$	25	$5,2 \cdot 10^{-6}$	0,5	7d @ 450 °C
TEG15	Fe ₂ V _{0,8} W _{0,2} Al	Si rau	20/793	500	267	25	647	15	$0,35/2,5 \cdot 10^{-2}$	25	$1,8 \cdot 10^{-6}$	0,5	7d @ 450 °C
TEG15	Fe _{1,6} Cr _{0,4} VAI	Si rau	1120	500	280	25	-	-	$2,5 \cdot 10^{-2}$	25	$5,2 \cdot 10^{-6}$	0,5	7d @ 450 °C
TEG16	(Fe _{2/3} V _{1/3}) _{76,5} Al _{23,5}	Si rau	20/3169	500	416	30	626	15	$0,35/2,1 \cdot 10^{-1}$	25	?	0,5	7d @ 450 °C
TEG16	(Fe _{2/3} V _{1/3}) _{74,5} Al _{25,5}	Si rau	2934	500	426	30	-	-	$2,2 \cdot 10^{-1}$	25	$1,3 \cdot 10^{-6}$	0,5	7d @ 450 °C
TEG17	(Fe _{2/3} V _{1/3}) _{76,5} Al _{23,5}	Si rau	20/1585	500	402	30	698	15	$0,37/2,1 \cdot 10^{-1}$	25	$1,5 \cdot 10^{-6}$	0,25	-
TEG17	(Fe _{2/3} V _{1/3}) _{74,5} Al _{25,5}	Si rau	1467	500	411	30	-	-	$2,2 \cdot 10^{-1}$	25	$1,2 \cdot 10^{-6}$	0,25	-
TEG18	(Fe _{2/3} V _{1/3}) _{74,5} Al _{25,5}	Si rau	20/1800	500	?	30	687	15	$0,35/?$	25	$1,9 \cdot 10^{-6}$	0,5	-
F-p1	(Fe _{2/3} V _{1/3}) _{74,5} Al _{25,5}	Glas rau	1467	500	398	30	-	-	$2,2 \cdot 10^{-1}$	25	$9,5 \cdot 10^{-7}$	0,5	7d @ 450 °C
F-n1	(Fe _{2/3} V _{1/3}) _{76,5} Al _{23,5}	Glas rau	20/6340	500	392	30	630	15	$0,35/2,1 \cdot 10^{-1}$	25	$1,2 \cdot 10^{-6}$	1,0	7d @ 450 °C

Tabelle A.1: Name der Probe, verwendetes Heusler-Material als Target, Substrat, Dauer des Ionenätzens und der Beschichtung t , Temperatur des Substrats T , am Target angelegte Spannung während der Beschichtung U_1 , Leistung während der Beschichtung P_1 , am Substrat angelegte Spannung während des Ionenätzens U_2 , Leistung während des Ionenätzens P_2 , Druck während des Ionenätzens und der Beschichtung p , Abstand zwischen Substrat und Target a , erreichter Druck vor der Beschichtung p_0 , Schichtdicke d sowie Dauer und Temperatur der Wärmebehandlung aller hergestellten Proben.

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 2.1	Homogener, linearer Leiter mit einem Temperaturgradienten.	13
Abbildung 2.2	Auftretende Teilspannungen bei ringförmigem Zusammenschluss von zwei unterschiedlichen Materialien.	17
Abbildung 2.3	Kopplung eines p- und eines n-leitenden Materials zu einem thermoelektrischen Generator.	21
Abbildung 3.1	Kristallstruktur der Heusler-Verbindung Fe_2VAl	24
Abbildung 3.2	Kristallstruktur von CsCl und Fe_2VAl in CsCl -Darstellung.	24
Abbildung 3.3	Energieniveaudiagramm von Fe_2VAl	26
Abbildung 4.1	Verwendete Substrate zur Beschichtung.	28
Abbildung 4.2	Präpariertes Heusler-Material als Target und Targethalter mit eingebautem Target.	29
Abbildung 4.3	Verwendete Anlage zur Beschichtung der Substrate mittels Magnetronsputtern.	30
Abbildung 4.4	Magnetanordnung zum Magnetronsputtern.	31
Abbildung 5.1	Profilometer zur Bestimmung der Schichtdicke.	34
Abbildung 5.2	Innenraum des Röntgendiffraktometers D5000 von Siemens.	34
Abbildung 5.3	Erklärung der Bragg-Reflexion an einem Gitter.	35
Abbildung 5.4	Messanlage ZEM3 der Firma ULVAC.	35
Abbildung 6.1	Seebeck-Koeffizienten von Schichten mit $\text{Fe}_2\text{V}_{0,8}\text{W}_{0,2}\text{Al}$ für verschiedene Wärmebehandlungen.	38
Abbildung 6.2	Seebeck-Koeffizienten von Schichten mit $\text{Fe}_2\text{V}_{0,8}\text{W}_{0,2}\text{Al}$ und $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$ bei mehrfacher Wärmebehandlung.	39

Abbildung 6.3	Kristallstruktur von Schichten mit $\text{Fe}_2\text{V}_{0,8}\text{W}_{0,2}\text{Al}$ und $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$ bei mehrfacher Wärmebehandlung.	40
Abbildung 6.4	Seebeck-Koeffizient und spezifischer Widerstand der Probe „02cW10_b“.	41
Abbildung 6.5	Teilweise abgelöste Schichten auf einem Si-Wafer und einem SOI-Wafer.	41
Abbildung 7.1	Seebeck-Koeffizienten von Schichten mit $\text{Fe}_2\text{V}_{0,8}\text{W}_{0,2}\text{Al}$ auf Si-Wafern.	44
Abbildung 7.2	Seebeck-Koeffizienten von Schichten mit $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$ auf Si-Wafern.	45
Abbildung 7.3	Seebeck-Koeffizienten von Schichten mit $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$ auf SOI-Wafern.	46
Abbildung 7.4	Seebeck-Koeffizienten von Schichten mit $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{76,5}\text{Al}_{23,5}$ und $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{74,5}\text{Al}_{25,5}$ auf SOI-Wafern.	47
Abbildung 7.5	Spezifische Widerstände von Schichten mit $\text{Fe}_2\text{V}_{0,8}\text{W}_{0,2}\text{Al}$ auf Si-Wafern.	48
Abbildung 7.6	Spezifische Widerstände von Schichten mit $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$ auf Si-Wafern.	49
Abbildung 7.7	Spezifische Widerstände von Schichten mit $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$ auf SOI-Wafern.	50
Abbildung 7.8	Spezifische Widerstände von Schichten mit $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{76,5}\text{Al}_{23,5}$ und $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{74,5}\text{Al}_{25,5}$ auf SOI-Wafer.	51
Abbildung 7.9	Power-Faktoren von Schichten mit $\text{Fe}_2\text{V}_{0,8}\text{W}_{0,2}\text{Al}$ auf Si-Wafern.	52
Abbildung 7.10	Power-Faktoren von Schichten mit $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$ auf Si-Wafern.	53
Abbildung 7.11	Power-Faktoren von Schichten mit $\text{Fe}_{1,6}\text{Cr}_{0,4}\text{VAl}$ auf SOI-Wafern.	54
Abbildung 7.12	Power-Faktoren von Schichten mit $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{76,5}\text{Al}_{23,5}$ und $(\text{Fe}_{2/3}\text{V}_{1/3})_{74,5}\text{Al}_{25,5}$ auf SOI-Wafern.	54
Abbildung 8.1	Erklärung der Methode zur Herstellung eines thermoelektrischen Generators.	56

Abbildung 8.2	Doppelt beschichtetes Glas-Substrat.	56
Abbildung 8.3	Verwendeter Messaufbau zur Bestimmung des Seebeck- Koeffizienten der doppelt beschichteten Proben.	57



Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Diplomarbeit ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar
The approved original version of this thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Literaturverzeichnis

- [1] L. E. Bell. *Cooling, Heating, Generating Power, and Recovering Waste Heat with Thermoelectric Systems*. Science **321**, 1457 (2008).
- [2] T. Graf, C. Felser, and S. S. Parkin. *Simple rules for the understanding of Heusler compounds*. Progress in solid state chemistry **39**, 1 (2011).
- [3] A. Boyer and E. Cissé. *Properties of thin film thermoelectric materials: application to sensors using the Seebeck effect*. Materials Science and Engineering: B **13**, 103 (1992).
- [4] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. *Festkörperphysik; Übersetzung von Dr. Jochen Greß; München/Wien* (2001).
- [5] I. Knapp, B. Budinska, D. Milosavljevic, P. Heinrich, S. Khmelevskiy, R. Moser, R. Podloucky, P. Prenninger, and E. Bauer. *Impurity band effects on transport and thermoelectric properties of Fe_{2-x}Ni_xVAI*. Physical Review B **96**, 045204 (2017).
- [6] A. Bid, A. Bora, and A. K. Raychaudhuri. *Temperature dependence of the resistance of metallic nanowires of diameter ≥ 15 nm: Applicability of Bloch-Grüneisen theorem*. Phys. Rev. B **74**, 035426 (2006).
- [7] W. Grellmann and S. Seidler. *Kunststoffprüfung*. Carl Hanser Verlag GmbH Co KG (2015).
- [8] M. C. Cadeville and L. B. *On the transport properties in concentrated Ni-Fe alloys at low temperatures*. Journal of Physics F: Metal Physics **3**, L115 (1973).
- [9] G. Chen *et al.* *Annual Review of Heat Transfer*. Phys. Rev. **16**, 12 (2013).

- [10] R. Pelster, I. Hüttl, and R. Pieper. *Thermospannungen-viel genutzt und fast immer falsch erklärt*. PhyDid A-Physik und Didaktik in Schule und Hochschule **1**, 10 (2005).
- [11] J. Callaway. *Model for Lattice Thermal Conductivity at Low Temperatures*. Phys. Rev. **113**, 1046 (1959).
- [12] M. Asen-Palmer, K. Bartkowski, E. Gmelin, M. Cardona, A. Zhernov, A. Inyushkin, A. Taldenkov, V. Ozhogin, K. M. Itoh, and E. Haller. *Thermal conductivity of germanium crystals with different isotopic compositions*. Physical review B **56**, 9431 (1997).
- [13] J. Callaway and H. C. von Baeyer. *Effect of Point Imperfections on Lattice Thermal Conductivity*. Phys. Rev. **120**, 1149 (1960).
- [14] P. Pichanusakorn and P. Bandaru. *Nanostructured thermoelectrics*. Materials Science and Engineering: R: Reports **67**, 19 (2010).
- [15] R. P. Tye. *Thermal conductivity*, vol. 1. Academic Press (1969).
- [16] G. Chen, M. Dresselhaus, G. Dresselhaus, J.-P. Fleurial, and T. Caillat. *Recent developments in thermoelectric materials*. International Materials Reviews **48**, 45 (2003).
- [17] J. Yang and F. R. Stabler. *Automotive applications of thermoelectric materials*. Journal of Electronic Materials **38**, 1245 (2009).
- [18] T. M. Tritt and M. A. Subramanian. *Thermoelectric Materials, Phenomena, and Applications: A Bird's Eye View*. MRS Bulletin **31**, 188 (2006).
- [19] Wikipedia. *Bragg-Gleichung* — *Wikipedia, Die freie Enzyklopädie* (2018). [Online; Stand 10. Januar 2019].