

UNTERSUCHUNGEN ZU LEERSTELLENARTIGEN KRISTALLDEFEKTEN
NACH IONENIMPLANTATION IN HALBLEITERN



DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

vorgelegt der

MATHEMATISCH-NATURWISSENSCHAFTLICH-TECHNISCHEN FAKULTÄT
(MATHEMATISCH-NATURWISSENSCHAFTLICHER BEREICH)
DER MARTIN-LUTHER-UNIVERSITÄT HALLE-WITTENBERG

von Diplom-Physiker Stefan Eichler
geb. am 24.06.1968 in Halle (Saale)

Gutachter:

1. Priv. Doz. Dr. habil. R. Krause-Rehberg
2. Prof. Dr. W. Wesch
3. Prof. Dr. K. Maier

Halle(Saale), 18. Dezember 1997

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
Kapitel 1. Kristalldefekte nach Ionenimplantation	3
1.1. Theorie zur Ionenimplantation	3
1.1.1. Elastische Kernwechselwirkung	4
1.1.2. Streuung an Elektronen	5
1.1.3. Reichweiteverteilung von Ionen und Implantationsdefekten	6
1.2. Bestrahlungsdefekte	8
1.3. Modelle der Defekterzeugung	13
1.3.1. Modell der Defektnukleation (nach L.T. CHADDERTON)	13
1.3.2. Temperaturabhängigkeit der amorphisierenden Dosis (nach MOREHEAD und CROWDER)	16
1.3.3. Koexistenz amorpher und kristalliner Gebiete (nach HECKING)	17
1.4. Defektausheilung	18
Kapitel 2. Ionenimplantation und Untersuchungsmethoden	21
2.1. Technik der Ionenimplantation	21
2.2. Annihilationsspektroskopie mit langsamen Positronen	22
2.2.1. Grundlagen	22
2.2.2. Positronenimplantation	24
2.2.3. Positronendiffusion	25
2.2.4. Positroneneinfang in leerstellenartige Defekte	26
2.2.5. Annihilationsparameter	27
2.2.6. Bestimmung von Defektprofilen	31
2.2.7. Technische Details	33
2.3. RUTHERFORD-Rückstreuung	36
2.3.1. Methodik	36
2.3.2. Defektprofilanalyse mit RBS	38
2.3.3. Technik	39
2.4. Monte-Carlo-Simulation der Ionenimplantation- TRIM	39
2.5. Infrarot-Absorptionsspektroskopie	39
2.5.1. Dispersion und Absorption	40
2.5.2. IR -Spektrometer	42
2.6. RAMAN-Streuung	43
Kapitel 3. Ergebnisse und Diskussion	44
3.1. Ionenimplantation in Silizium	44
3.1.1. Präparation der Silizium-Proben und TRIM -Simulation	44
3.1.2. Bor-Implantation	45

3.1.3.	Dosisabhängigkeit von B-, P-, Si- und As-Implantationen	50
3.1.4.	Richtungsabhängigkeit der Bor-Implantation	56
3.1.5.	Dickenbestimmung an den Ionen-implantierten Schichten	58
3.1.6.	Ausheilverhalten leerstellenartiger Defekte und amorpher Schichten	60
3.2.	Experimente zur Ionenstrahlinduzierten Rekristallisation in Germanium	74
3.3.	Ionenimplantation in Galliumarsenid	79
3.3.1.	Präparation der GaAs-Proben und TRIM -Simulation	79
3.3.2.	Schwache Schädigung	81
3.3.3.	Starke Schädigung	83
3.3.4.	Zusammenfassung der Experimente am GaAs	89
Zusammenfassung und Ausblick		90
Literaturverzeichnis		93
Abbildungsverzeichnis		100
Tabellenverzeichnis		103
Erklärung		104
Lebenslauf		105
DANKSagung		106

Einleitung

Die Ionenimplantation in Halbleiter ist ein übliches Verfahren der oberflächennahen Dotierung in der planaren Halbleitertechnologie. Die in das Material eingebrachten Fremdatome können seine elektrischen und optischen Eigenschaften stark beeinflussen. Die technologische Anwendung der Ionenstrahlmodifikation von halbleitenden Materialien und insbesondere die Möglichkeit solche Modifikationen räumlich zu strukturieren haben zu rasanten Fortschritten beim Aufbau integrierter elektronischer Schaltkreise geführt.

Der hochenergetische Ionenbeschuß eines Targets führt allerdings zu Strahlenschäden, die den beabsichtigten Dotierungseffekten entgegen wirken. Es wird deshalb nach Verfahren gesucht, die Entstehung von Bestrahlungsschäden zu verhindern oder die entstandenen Defekte auszuheilen, ohne die gewünschten Eigenschaften der ionenimplantierten Materialien zu stören.

Seit der Entwicklung des Verfahrens der Ionenimplantation in den fünfziger Jahren sind die Wechselwirkungen hochenergetischer Ionen mit Festkörpern und der resultierenden Nichtgleichgewichtsdefekte untersucht worden. Die Komplexität der Vorgänge und die große Anzahl von veränderlichen Parametern, wie Implantationsenergie, Ionendosis, Flußdichte, Einschußwinkel, Targettemperatur, Atommassen, Struktur des Targets, Verunreinigungen des Targets usw., hat dazu geführt, daß auch heute noch nicht alle Phänomene verstanden sind.

Mit der Positronenstrahltechnik steht seit ca. 10 Jahren eine Methode zur Verfügung, die ausschließlich oberflächennahe leerstellenartige Kristalldefekte in einem Konzentrationsbereich von 10^{16} - 10^{20} cm^{-3} detektiert. Die Entstehung und das Verhalten leerstellenartiger Nichtgleichgewichtsdefekte nach Ionenimplantation läßt sich mittels dieser Methode studieren, zumal es auf diesem Gebiet noch offene Fragen gibt. Es existieren zu diesem Thema einige Publikationen von verschiedenen Gruppen, die mehr oder weniger systematische Beobachtungen zu Implantationsdefekten mit der Methode der Annihilationsspektroskopie enthalten.

In der vorliegenden Arbeit wurde versucht, die Defektentstehung und die Ausheilung der erzeugten Schäden für verschiedene Implantationen in Silizium und Galliumarsenid als Funktion der Ionenmasse und der Dosis im Bereich der amorphisierenden Dosis und zwei Größenordnungen darunter systematisch zu untersuchen. Dabei wurden neue Entwicklungen zur Interpretation von DOPPLER-Spektren konsequent genutzt und Anknüpfungspunkte zu anderen Methoden gesucht. Für einige experimentelle Resultate konnten qualitative und teilweise sogar quantitative Modelle entwickelt werden.

Im ersten Kapitel werden die physikalischen Grundlagen der Ionenimplantation in Festkörper dargestellt, die Eigenschaften verschiedener Kristalldefekte in Silizium und Galliumarsenid zusammengefaßt und einige phänomenologische Modelle zur Defektentstehung während und nach der Implantation diskutiert.

Die Grundlagen der verwendeten Untersuchungsmethoden (Annihilationsspektroskopie mit langsamen Positronen, RUTHERFORD-Rücksteuerung, Infrarot-Absorptionsspektroskopie und RAMAN-Streuung) werden im zweiten Kapitel dargestellt.

Die Ergebnisse dieser Arbeit sind im Kapitel 3 geordnet nach Substratmaterialien (Silizium, Germanium und Galliumarsenid) dargestellt und diskutiert. Nach der Implantation von leichten Bor-Ionen in Silizium konnten verschiedene isolierte Kristalldefekte beobachtet werden, amorphe Bereiche entstanden erst durch die Implantation schwererer Ionen wie Silizium und

Arsen. Die gewonnenen experimentellen Daten konnten mit existierenden Modellen verglichen werden und Abweichungen führten zur Erweiterung von Modellvorstellungen. Das Wechselspiel zwischen Agglomeration und Rekombination während der Ausheilung der Nichtgleichgewichtsdefekte konnte vor allem an stärker geschädigten Proben untersucht werden. In Germanium wurden leerstellenartige Defekte studiert, die nach Ionenstrahlgestützter epitaktischer Rekristallisation von amorphen Schichten im Material verbleiben bzw. neu erzeugt werden. In Verbindungshalbleitern sind die Prozesse von Defektentstehung und -ausheilung nach Ionenimplantation noch komplizierter zu verstehen, weil Defekte mit unterschiedlichen Eigenschaften in verschiedenen Untergittern erzeugt werden können. Hier wurden ebenfalls systematische Untersuchungen zur Dosisabhängigkeit der Implantationsschädigung sowie zum Ausheilverhalten von Defekten und amorphen Schichten in Galliumarsenid durchgeführt.

Am Ende der Arbeit werden die Ergebnisse zusammengefaßt und ein Ausblick auf einige Möglichkeiten zukünftiger Untersuchungen gegeben.

Kristalldefekte nach Ionenimplantation

Defekte nach Ionenimplantation beeinflussen die Materialeigenschaften von Halbleitersubstraten nachhaltig. Der Entstehung von einfachen Defekten nach primären und sekundären Stoßprozessen von Ionen und Targetatomen folgen Prozesse wie Defekt-Diffusion und -Reaktionen, die zu komplizierteren Defektstrukturen führen. Die Natur dieser Nichtgleichgewichtsdefekte ist von Parametern wie Massenverhältnis von Implantat- zu Targetatom, Implantationsdosis, Ionenstromdichte und Temperatur abhängig. Weiterhin spielen strukturelle Defekte, Dotierungsatome oder Verunreinigungen, die vor der Implantation vorhanden sind, eine Rolle bei der Bildung von Defektkomplexen. Bei genügend hohen implantierten Energiedichten kann es zur vollständigen Zerstörung der Fernordnung im Kristall und zur Ausbildung von amorphen Schichten kommen. In diesem Kapitel sollen einige Ausführungen zur Theorie der Ionenimplantation und zum Stand der Literatur zu Implantationsdefekten behandelt werden.

1.1. Theorie zur Ionenimplantation

Nachdem das Verfahren der Ionenimplantation als Methode der Materialuntersuchung und der Materialmodifizierung in der Mitte der fünfziger Jahre entwickelt wurde, erarbeiteten LINDHARDT, SCHARFF und SCHIØTT 1963 die theoretischen Grundlagen zur Reichweiteverteilung niederenergetischer Ionen in Festkörpern (LSS-Theorie) [Lin63]. Diese Theorie beschränkt sich auf die Wechselwirkung der Ionen mit amorphen Festkörpern. Die besonderen Eigenschaften der Gitterstruktur, wie sie Halbleiter im allgemeinen besitzen, wird nicht berücksichtigt. Es gibt Ansätze, die z.B. das sogenannte Channeling¹ für die Reichweiteverteilung der Ionen in Kristallen einbeziehen. Hier spielen aber Parameter, wie Temperatur, Fehlorientierung des Gitters und Oberflächenbedeckung des Targetkristalls, eine Rolle, und die quantitative Behandlung ist sehr komplex. Außerdem werden in der LSS-Theorie sekundäre Effekte wie z.B. Diffusion von Implantaten und Defekten im Targetmaterial nicht behandelt. Die Vorhersagen der LSS-Theorie sind deshalb nur in erster Näherung richtig, was aber für die Lösung vieler praktische Probleme ausreicht [Rys78].

Geladene Teilchen erleiden nach der Implantation in den Festkörper durch verschiedene Mechanismen Energieverluste, die zu ihrer Abbremsung führen. Für die relativ massereichen Ionen sind hauptsächlich elastische Kernstöße und inelastische Stöße mit Elektronen (elektronische Abbremsung) von Bedeutung [Rys78]. Zur Berechnung werden Bremsquerschnitte für die elektronische und die nukleare Abbremsung $S_{e,n}$ definiert:

$$S_{e,n} = -\frac{1}{N} \left[\frac{dE}{dz} \right]_{e,n} . \quad (1.1.1)$$

N ist darin die atomare Dichte, E die Energie und z der zurückgelegte Weg. In Abbildung 1.1 ist der prinzipielle Verlauf beider Bremsquerschnitte dargestellt, wobei die Energien E_1 , E_2 und E_3 markante Energiewerte repräsentieren. Für die Ionenimplantation liegen die interessierenden Energien meist unterhalb der Energie E_3 , bei der die elektronische Abbremsung ein Maximum besitzt. Im Bereich oberhalb E_3 ist die BETHE-BLOCH Theorie für den Energieverlust bei Streuung an Elektronen anzuwenden. Eine klassische Rechnung ist dort nicht mehr zulässig. Der Anstieg zu hohen Energien ergibt sich aus einer relativistischen Korrektur [Rys78]. Weiterhin ist zu erkennen, daß für hohe Energien die elektronische Wechselwirkung dominiert. Es kommt in diesem Energiebereich zu relativ wenigen Atomverlagerungen. Erst wenn die Ionen kinetische

¹die wechselwirkungsarme Bewegung der Ionen in Gitterkanälen

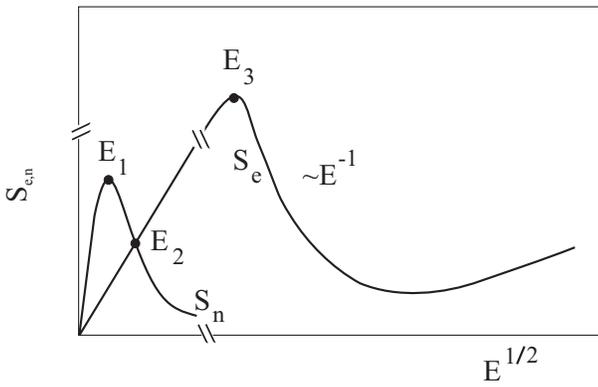


Abbildung 1.1: Qualitativer Verlauf der Bremsquerschnitte S_e und S_n . Die markanten Energien E_1 , E_2 und E_3 sind z.B. 3, 17 und 1000 keV für B in Si und 73, 800 und 10^5 keV für As in Si. (nach [Rys78])

Energien besitzen, bei denen die elastische Wechselwirkung mit Targetatomen effektiv wird, werden Defekte in höheren Konzentrationen erzeugt (siehe Abschnitt 1.2).

Im folgenden werden die Grundzüge der LSS-Theorie für die Abbremsung und Verteilung von Ionen und Implantationsdefekten im Festkörper dargestellt (nach [Rys78] und [Goe88]). Mit der Annahme, daß die Energieverlustmechanismen unabhängig voneinander sind, läßt sich der Energieverlust pro Wegeinheit wie folgt angeben:

$$\frac{dE}{dz} = N [S_n(E) + S_e(E)] . \quad (1.1.2)$$

Bei bekannten Bremsquerschnitten $S_{n,e}(E)$ kann Gl. (1.1.2) integriert werden:

$$R = \frac{1}{N} \int_0^\infty \frac{dE}{S_n(E) + S_e(E)} , \quad (1.1.3)$$

wobei R die mittlere Gesamtweglänge eines Teilchens der Anfangsenergie E im amorphen Medium ist.

1.1.1. Elastische Kernwechselwirkung

In guter Näherung kann die Berechnung der Kernabbremsung unter Verwendung der klassischen Streutheorie erfolgen. Der Bremsquerschnitt S_n berechnet sich allgemein zu:

$$NS_n(E) = - \left(\frac{dE}{dz} \right)_n = N \int_0^{T_m} T_n(E, p) d\sigma(E, T_n) . \quad (1.1.4)$$

Hier ist T_n die in einem Stoßprozeß übertragene Energie, $d\sigma$ der differentielle Wirkungsquerschnitt ($d\sigma = 2\pi p dp$), p der Stoßparameter² und T_m die maximal übertragbare Energie bei einem Zentralstoß. Die Geometrie eines Streuprozesses wird in Abbildung 1.2 schematisch dargestellt. Das einfallende Ion der Masse M_1 wird um Θ_1 abgelenkt und überträgt dabei elastisch

²Der Stoßparameter charakterisiert die Abweichung vom Zentralstoß.

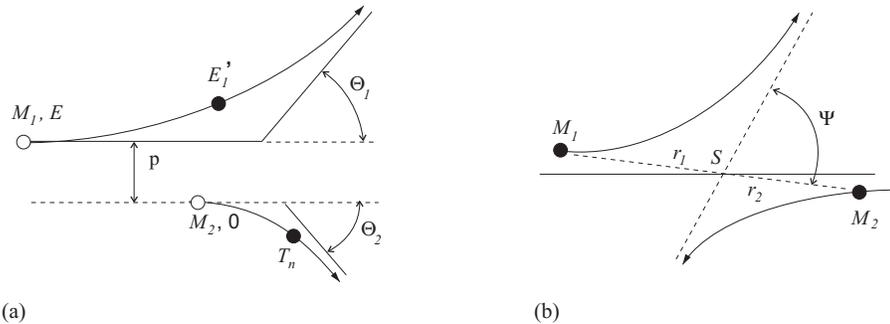


Abbildung 1.2: Geometrie bei Zweikörperstreuung zwischen zwei Teilchen der Masse M_1 und M_2 im Labor- (a) und Schwerpunktsystem (b) (nach [Rys78])

die Energie T_n auf das Targetatom der Masse M_2 . Dieses verläßt seinen Ort unter dem Winkel Θ_2 . Die beim elastischen Stoß maximal übertragbare Energie T_m ergibt sich allgemein lediglich aus Energie- und Impulserhaltungssatz :

$$T_m = 4 \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E . \quad (1.1.5)$$

Das heißt, bei kleiner Masse des Stoßteilchens M_1 im Verhältnis zur Masse der Targetatome (z.B. für Elektronen³) ist die für die Erzeugung von Strahlenschäden nötige Verlagerungsenergie T_d nur durch eine hohe kinetische Teilchenenergie aufzubringen (siehe Abschnitt 1.2). Die im dezentralen Stoß übertragene Energie ist vom Ablenkwinkel im Schwerpunktsystem Ψ^4 wie folgt abhängig (siehe z.B. [Goe88]):

$$T_n(E, p) = E \frac{2M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} (1 - \cos \Psi) . \quad (1.1.6)$$

Für schwere Teilchen kleiner Geschwindigkeit und bei relativ fernen Stößen (großen Stoßparametern) ist der Abschirmeffekt der Elektronen nicht mehr vernachlässigbar. Das Wechselwirkungspotential ist dann kein reines Coulomb-Potential⁵ mehr. Die beste Übereinstimmung mit experimentellen Resultaten ergibt sich für das Potential nach THOMAS und FERMI (siehe [Rys78]). Damit kann der differentielle Wirkungsquerschnitt für die Kernwechselwirkung in normierter Darstellung berechnet werden:

$$d\sigma = \pi a^2 d(t^{1/2}) \frac{f(t^{1/2})}{t} , \quad (1.1.7)$$

a ist die THOMAS-FERMI-Abschirmlänge und $f(t^{1/2})$ die LINDHARD-sche Streufunktion, abhängig vom universellen Parameter $t^{1/2}$ und der reduzierten Energie ε_r . Eine detailliertere Darstellung des Problems der elastischen Kernwechselwirkung wird unter besonderer Berücksichtigung der Methodik der RUTHERFORD-Rückstreuung (**RBS**) in [Goe88] gegeben.

1.1.2. Streuung an Elektronen

Streuung im Bereich hoher Energien. Die elektronische Wechselwirkung für hohe Ionenenergien wird quantenmechanisch beschrieben (nach BETHE und BLOCH). Der Bremsquerschnitt S_e ergibt sich aus dem Integral über den differentiellen Wirkungsquerschnitt für Elektronen $d\sigma_e$ multipliziert mit dem Energieverlust $T_{e,n}$ zu:

$$S_e(E) = \int d\sigma_e T_{e,n} = \frac{4\pi Z_1^2 Z_2}{m_e v^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \ln \left(\frac{2m_e v^2}{I} \right) , \quad (1.1.8)$$

mit der Elektronenmasse m_e und der Geschwindigkeit des stoßenden Ions v . I ist die mittlere Anregungsenergie der Elektronen, bestimmt durch die Elektronenstruktur des Target-Atoms:

$$\ln I = \sum_n f_{nn_0} \ln (E_n - E_0) . \quad (1.1.9)$$

Hier bezeichnet f_{nn_0} die Oszillatorstärke für den Übergang aus dem Grundzustand n_0 in den Zustand n . Die so errechnete Anregungsenergie I hängt monoton von der Kernladungszahl des Targets ab, $I = I_0 Z_2$ mit $I_0 \approx 10$ eV [Goe88]. Eine genauere Beschreibung des Formalismus ist in [Goe88] zu finden.

³Für Elektronen müssen in Gl. 1.1.5 relativistische Korrekturen eingefügt werden.

⁴entsprechend der Abbildung 1.2

⁵Coulomb-Potential der Kern-Kern-Wechselwirkung

Streuung bei geringen Energien. Für geringe Energien ist die BETHE-BLOCH-Formel (1.1.8) nicht mehr gültig. Die Ursache dafür ist, daß Zustände hoher Energie E_n mit niedrigen Ionenenergien nicht mehr angeregt werden können. Die Anregung des Elektronensystems der Targetatome spielt für geringe Energien also nur eine untergeordnete Rolle. Auf Grund der geringen Geschwindigkeit des Projektils kann sich jedoch während der Kollision ein Quasi-Molekül bilden. Die Kollisionszeit ist lang genug, so daß ein Elektronenaustausch zwischen Ion und Targetatom in beiden Richtungen stattfinden kann. Der Energieverlust $T_{e,\phi}$ berechnet sich dann aus dem Elektronenfluß ϕ_e vom Ion zum Targetatom:

$$T_{e,\phi} = mv \int_{-\infty}^{\infty} dr \phi_e(r) . \quad (1.1.10)$$

FIRSOV [Fir59] konnte mit dieser Annahme und unter Verwendung eines Atommodells von THOMAS und FERMI für die Berechnung von ϕ_e heraus den Bremsquerschnitt S_e berechnen:

$$S_e(E) = 1.03 (Z_1 + Z_2) \left(\frac{E}{M_1} \right)^{1/2} \cdot 10^{-15} \text{ eV cm}^2 . \quad (1.1.11)$$

LINDHARD, SCHARFF und SCHIØTT berechneten dagegen den Energieverlust von geladenen Teilchen in einem freien Elektronengas. Die Geschwindigkeit des Ions soll dabei klein gegenüber der FERMI-Geschwindigkeit v_F sein. S_e ist dann:

$$S_e(E) = 3.83 \frac{Z_1^{7/6} Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{1/3})^{3/2}} \left(\frac{E}{M_1} \right)^{1/2} \cdot 10^{-15} \text{ eV cm}^2 . \quad (1.1.12)$$

Beide Gleichungen (1.1.11) und (1.1.12) stimmen prinzipiell mit experimentellen Daten überein. Die Formel nach der LSS-Theorie zeigt eine bessere quantitative Übereinstimmung, der Zugang von FIRSOV ist aber besser zur Erweiterung der Theorie geeignet [Goe88].

1.1.3. Reichweiteverteilung von Ionen und Implantationsdefekten

Mit den Werten für die Bremsquerschnitte S_n und S_e gemäß den Abschnitten 1.1.1 und 1.1.2 läßt sich die mittlere Reichweite R nach Gl. (1.1.3) berechnen. Der Gesamtweg R und die Standardabweichung ΔR sind im Experiment nicht direkt meßbar. Praktisch interessant und meßbar sind die Projektionen des Gesamtweges auf die Einfallrichtung des Ionenstrahls, die mittlere projizierte Reichweite R_p und die ebenso projizierte Standardabweichung ΔR_p . Im folgenden wird sich ausschließlich auf diese projizierten Größen bezogen. Die Bestimmung von R_p erfordert die Lösung von Integro-Differentialgleichungen, was hier nicht weiter betrachtet werden soll. Die Reichweiteverteilung $N(z)$ ergibt sich nach der LSS-Theorie zu:

$$N(z) = \frac{\Phi}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \exp\left(-\frac{(z - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right) . \quad (1.1.13)$$

Φ ist hier die implantierte Dosis. Die maximal erreichbare Dotierung ist dann:

$$N_{max} = \frac{\Phi}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} . \quad (1.1.14)$$

Gl. (1.1.13) ist unter der Annahme abgeleitet, daß das Integral von $-\infty$ bis $+\infty$ über $N(z)$ gleich Φ ist und der Anteil rückgestreuter Ionen vernachlässigt wird. Dieser Anteil kann nur durch Monte-Carlo-Simulationen bestimmt werden und in theoretischen Betrachtungen wird er meist vernachlässigt. Praktisch sind theoretische Reichweiteverteilungen nur grobe Näherungen, wegen des starken Einflusses sekundärer Effekte wie Diffusion und Channeling. Zur Bestimmung der Reichweite ist die Näherung der Gaußverteilung in den meisten Fällen ausreichend [Rys78]. Gemessene Verteilungen von Ionen im Festkörper sind im allgemeinen in guter Übereinstimmung mit der LSS-Theorie, insbesondere wenn experimentelle Werte für die Bremsquerschnitte

verfügbar sind. Werte für die Reichweiteparameter in verschiedenen Materialien sind unter anderem in [Rys78] tabelliert. Die Abbildung 1.3 zeigt mit diesen Werten berechnete Reichweiteverteilungen für Bor und Arsen in Silizium. Höherenergetische Ionen geben ihre Energie zunächst

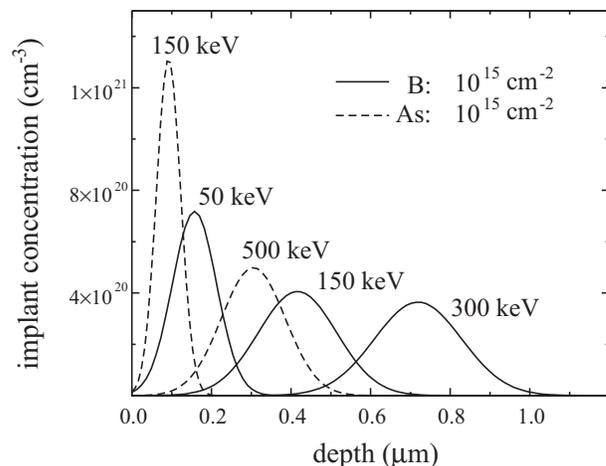


Abbildung 1.3: Reichweiteverteilung nach der LSS-Theorie bei Implantation von Bor und Arsen in Silizium (aus [Geb96]).

durch elektronische Wechselwirkung ab. Kernwechselwirkungen finden hauptsächlich am Ende der Ionenbahnen statt. So kommt es zu ungleichmäßigen Verteilungen der Kristalldefekte. Aus der Tiefenabhängigkeit der deponierten Energie kann das Profil der erzeugten Leerstellen unter der Annahme einer bestimmten Bildungsenergie (Schwellenergie T_d) bestimmt werden (siehe Abschnitt 1.2). Theoretische Berechnungen fußen auf der LSS-Theorie und beschränken sich auf amorphe Medien. Grundlegende Arbeiten dazu gibt es z.B. von D. K. BRICE [Bri75]. Danach hat die Verteilung von Strahlenschäden ein unsymmetrisches Profil, entsprechend einer Gaußverteilung mit einem flachen Ausläufer zur Targetoberfläche hin. In Abschnitt 1.1.1 wurde gezeigt, daß elastische Stöße erst in einem bestimmten Energiebereich zum Tragen kommen. Im Tiefenbereich, in dem die Ionen diese Energien besitzen, liegt das Maximum der Strahlenschädendichte stets näher zur Targetoberfläche als das Maximum der implantierten Ionen. D.h., R_p ist stets größer als die mittlere projizierte Reichweite X_D der Strahlenschäden. Die Abbildung 1.4 zeigt berechnete Beispiele der Verteilung der Energieabgabe in atomare Verlagerungsprozesse nach [Bri75]. Alle so erhaltenen Verteilungsfunktionen sind jedoch nur Funktionen der Energieabgabe

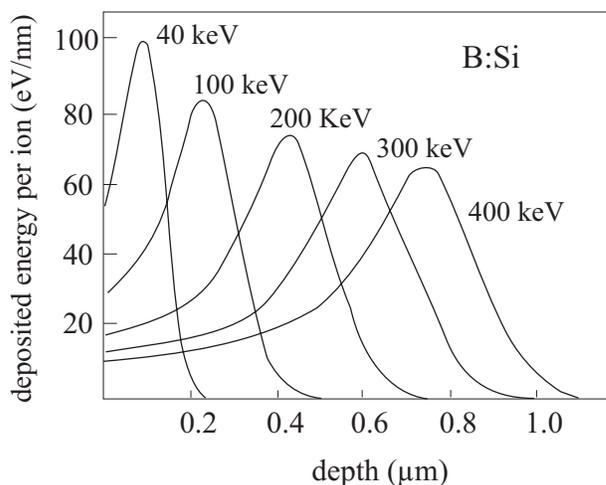


Abbildung 1.4: Tiefenverteilung der Energieabgabe in atomare Deplazierungen für Bor in Silizium [Bri75].

an den Festkörper, entsprechen aber meist nicht der wirklichen Verteilung von Defekten nach der Implantation. Die Ursache ist, wie schon bei der Verteilung der Implantate, in sekundären Effekten zu sehen, die nicht in den theoretischen Rechnungen berücksichtigt werden. Das sind vor allem Diffusion von Defekten sowie abweichende Verteilungen durch Channeling-Effekte und die Gitteranisotropie.

1.2. Bestrahlungsdefekte

Die bisher dargestellte Theorie der Ionenimplantation hat die Möglichkeit der Verlagerung von Gitteratomen durch die Wechselwirkung mit den Ionen nicht einbezogen. Die Entstehung von Gitterdefekten ist jedoch ein wichtiger Punkt, der die Eigenschaften ionenimplantierter Schichten entscheidend mitbestimmt. Sowohl die optischen als auch die elektrischen Parameter werden verändert. Im technologischen Prozeß der Halbleiterdotierung durch Ionenimplantation ist die Ausheilung der Defekte notwendig. Durch Ionenimplantation entstehen meist Punktdefekte, die nach Diffusion und Agglomeration auch zu ausgedehnteren Objekten bis hin zu Versetzungsringen wachsen können. Für hohe Bestrahlungsdosen bilden sich amorphe Schichten. Alle diese Konfigurationen existieren weit ab vom thermodynamischen Gleichgewicht, man spricht deshalb auch von Nichtgleichgewichtsdefekten. Trotzdem sind die Zustände metastabil und existieren mit Bindungsenergien von einigen eV. Sie heilen also nur unter Energiezufuhr aus. Im Gegensatz zu Defekten nach Elektronenbestrahlung im MeV-Bereich, die nahezu homogen über Targets üblicher Dicke (0.5 mm) verteilt sind, werden durch Ionenimplantation Schichten von Strahlenschäden erzeugt. Diffusionsprozesse können dann das lokale Gleichgewicht von Defekten stören, was wiederum das Ausheilverhalten beeinflusst. Man kann von einem offenem Nichtgleichgewichtssystem sprechen. Im folgenden sollen die Erzeugung und die Eigenschaften von Bestrahlungsdefekten in Halbleitern diskutiert werden.

Verlagerung. Definiert man eine Verlagerungsenergie eines Gitteratoms T_d , so kommt es nach elastischen Stößen (siehe Abschnitt 1.1) für alle Energieüberträge $T_n > T_d$ zu Verlagerungen der gestoßenen Gitteratome. Die Schwellenergie für die Verlagerung eines Atoms aus dem Kristallverband liegt für Halbleiter im Bereich von 10 - 40 eV. Verlagerungen, die durch das implantierte Ion bewirkt werden, nennt man primär, solche die von gestoßenen Gitteratomen herrühren sekundär. Liegt die übertragene Energie T im Bereich $T_d \leq T \leq 2T_d$, wird nur ein einzelnes FRENKEL-Paar⁶ erzeugt. Typisch ist dabei die Entstehung von Ersetzungsstoßfolgen. In Abbildung 1.5 ist der Verlagerungsprozeß, der zur Erzeugung eines FRENKEL-Paares führt, schematisch gezeigt. Nach der primären Verlagerung stößt jeweils das verlagerte Atom sukzessive

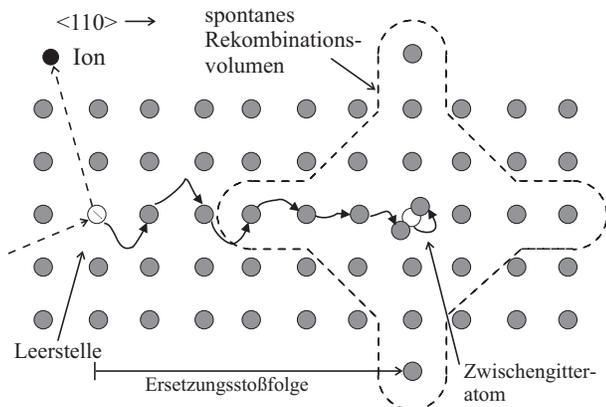


Abbildung 1.5: Schematische Darstellung der Erzeugung eines FRENKEL-Paares (nach [Ber92]). Das FRENKEL-Paar ist nur stabil, wenn die Leerstelle außerhalb des spontanen Rekombinationsvolumens des Zwischengitteratoms liegt. Die Größe des spontanen Rekombinationsvolumens ist temperaturabhängig. Das Zwischengitteratom nimmt eine Hantelkonfiguration ein.

entlang einer dicht gepackten Gitterrichtung seinen Nachbarn aus seiner regulären Gitterposition und nimmt dessen Platz ein. Die Stoßfolge ist beendet, wenn die Energie des letzten Atoms kleiner als T_d ist. Es verbleiben Leerstelle und Zwischengitteratom. Die Entfernung zwischen den FRENKEL-Partnern ist entscheidend für die Stabilität dieser Konfiguration. Liegen beide im sogenannten Rekombinationsvolumen, so kommt es unmittelbar nach der Bildung des FRENKEL-Paares zu seiner spontanen Rekombination. Das so definierte Volumen ist hauptsächlich eine Funktion der lokalen Temperatur. Hohe Temperaturen erhöhen die Diffusivität der Defekte und das spontane Rekombinationsvolumen wächst. Bei geringen Abständen der FRENKEL-Partner außerhalb des spontanen Rekombinationsvolumens spricht man von nahen FRENKEL-Paaren, die in einer Art gebundenen Konfiguration vorliegen. Die Bindung wird durch die Gitterverzerrung

⁶FRENKEL-Paar heißt das Paar aus Leerstelle und Zwischengitteratom.

um die Einzeldefekte vermittelt. Weiter auseinanderliegende Einzeldefekte spüren nichts mehr voneinander, sie haben ihre Herkunft “vergessen“.

Monte-Carlo-Simulationen der Energiedeposition mittels des **TRIM**-Codes (siehe Abschnitt 2.4), ergeben eine mittlere Erzeugungsrate in der Größenordnung von einer Leerstelle pro Å und Ion. Man würde die Bildung größerer Defektagglomerate schon durch ein einzelnes Ion erwarten. Jedoch ist bei Raumtemperatur die Wahrscheinlichkeit der spontanen Rekombination von FRENKEL-Paaren in Halbleitern so groß, daß lediglich wenige Prozent der Leerstellen und Zwischengitteratome nicht rekombinieren und quasi-stabile Defekte bilden [Sve97]. Erst die Überlagerung von vielen Kollisionskaskaden führt zu einer Vielzahl von Nichtgleichgewichtsdefekten unterschiedlicher Konzentrationen bis hin zur Amorphisierung.

Ist $T \gg T_d$, wie es bei Ionenimplantation der Regelfall ist, verzweigen sich die Defektkaskaden in Subkaskaden und es bleibt ein stark gestörtes Gittergebiet zurück. Die reale Dichte der Schädigung hängt ab von den Massenverhältnissen von Ion zu Targetatomen, von der Dosis, der Dosisleistung und der Temperatur. Die Massenverhältnisse geben den maximalen Energieübertrag an (siehe Gl. (1.1.5)). In Abbildung 1.6 ist die Bildung der Kaskaden für unterschiedliche Ionenmassen schematisch dargestellt. Die deponierte Energiedichte ist für massereiche Ionen

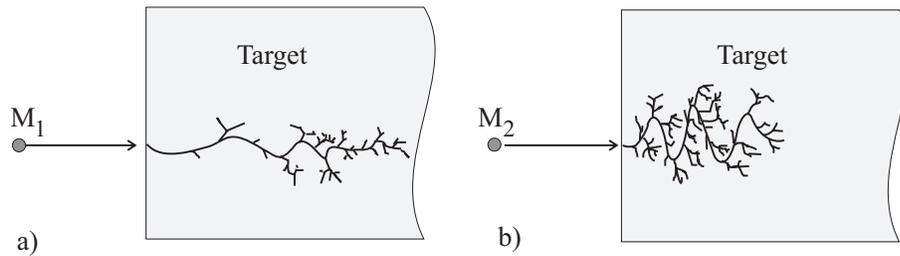


Abbildung 1.6: Schematische Darstellung der Kaskadenbildung. a) $M_{Ion} < M_{Target}$ (leichtes Ion, z.B. Bor in Silizium); b) $M_{Ion} > M_{Target}$ (schweres Ion, z.B. Arsen in Silizium) (nach [Rys78])

größer, und die Reichweite bei gleicher Implantationsenergie ist geringer als für leichtere Ionen.

Einige leerstellenartige Defekte in Silizium. In Elementhalbleitern werden nach Teilchenbestrahlung Leerstellen, Zwischengitteratome, Agglomerate von Leerstellen sowie Zwischengitteratome und Komplexe dieser beiden Grundspezies mit Verunreinigungen oder Dotierungselementen (E-Zentren) gefunden. Unter Umständen liegen diese Defekte in verschiedenen Ladungszuständen vor. Die Targetverunreinigungen spielen genauso wie die Implantationstemperatur eine große Rolle für die Entstehung sekundärer Defekte, da die Einfachleerstelle in Silizium schon unterhalb der Raumtemperatur ausheilt [Wat64]. Oberhalb Raumtemperatur sind größere Komplexe wie z.B. Leerstelle-Sauerstoffatom (A-Zentrum) in Cz-Silizium [New65b, New65a, Wat61] oder die Doppelleerstelle (V_2) stabil. Sie entstehen meist aus den primär gebildeten Leerstellen, wenn diese beweglich werden. Die Doppelleerstelle ist einer der am besten untersuchten leerstellenartige Defekte in Silizium, was nicht bedeutet, daß alle ihre Eigenschaften völlig aufgeklärt sind. Die Abbildung 1.7 zeigt die Struktur der Doppelleerstelle in Silizium, wie sie aus **EPR**⁷-Messungen bestimmt wurde. Die Literaturwerte für die Ausheiltemperatur schwanken sehr stark von 465-570 K [Che68, Sim91, Rys78, Che66]. Sie sind von der Art der Bestrahlung und vom Ladungszustand der Doppelleerstelle abhängig. Offenbar liegen hier unterschiedlich stabile Konfigurationen vor. Es existieren die Ladungszustände V_2^{2-} , V_2^- , V_2^0 und V_2^+ , denen drei Umladungsniveaus in der Bandlücke von Silizium entsprechen. Die Ladung der Doppelleerstelle ist dann von der Lage des FERMI-Niveaus in der Probe abhängig. Die elektronischen Eigenschaften führen zu vielfältigen Möglichkeiten der Anregung, die zum Nachweis des Defektes genutzt werden. So ist die Doppelleerstelle **IR**⁸-aktiv, sie reagiert auf magnetische

⁷Electron Paramagnetic Resonance

⁸InfraRed Absorption Spectroscopy

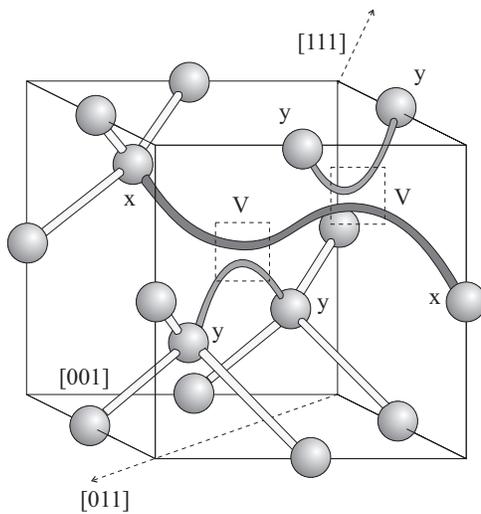


Abbildung 1.7: Struktur der Doppelleerstelle in Silizium (nach [Ber92] und [Wat65]).

Anregungen der **EPR**, und die Niveaus können mittels **DLTS**⁹ nachgewiesen werden. In Abbildung 1.8 sind die entsprechend bestimmten Umladungsniveaus in der Bandlücke von Silizium dargestellt. Es gibt drei mögliche Absorptionsbänder im **IR**-Spektrum, die den vorliegenden Ladungszustand charakterisieren. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die **IR**-Spektroskopie genutzt, um verschiedene leerstellenartige Defekte unterscheiden zu können (siehe Kap. 3).

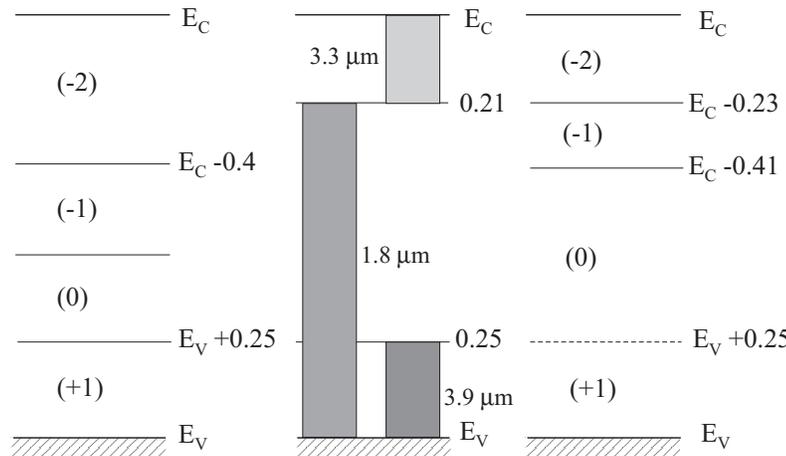


Abbildung 1.8: Energieniveaus der Doppelleerstelle in Silizium. Links bestimmt mittels **EPR** (nach [Wat65]), die in der Mitte dargestellten Werte wurden aus **IR**-Absorption abgeleitet (nach [Fan59]) und rechts sind die **DLTS**-Daten gezeigt (nach [Evw76]).

Nach Implantation von Wasserstoff-Ionen (Protonen) unterschiedlicher Energien entstehen hauptsächlich Doppelleerstellen, die durch ihre Ausheilung unter 600 K zu identifizieren sind [Hau88, Kei88, Kau97]. Welche Rolle die Passivierung der leerstellenartigen Defekte mit dem implantierten Wasserstoff spielt ist noch unklar.

Neben der beabsichtigten Dotierung mit Fremdatomen ist Sauerstoff die am häufigsten auftretende Verunreinigung in Silizium. Im Czochralski-gezogenem¹⁰ Material (Cz-Si) kann die Konzentration bis zu $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ betragen, im Float-Zone-Silizium¹¹ (FZ-Si) sind es ca. zwei Größenordnungen weniger. Die Löslichkeitsgrenze von Sauerstoff am Schmelzpunkt von

⁹Deep Level Transient Spectroscopy

¹⁰Beim Czochralski-Verfahren wird ein kristalliner Keim langsam und unter Rotation aus der Schmelze gezogen.

¹¹Beim Zonenschmelzverfahren wird polykristallines Material mehrmals in einer sich bewegenden Zone aufgeschmolzen, wodurch ein relativ reiner Einkristall wächst.

Silizium beträgt $1.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Nach der Züchtung verbleibt der größte Teil des Sauerstoffs in atomar gelöster Form in der Siliziummatrix auf Zwischengitterplatz. Dort können Defekte unterschiedlicher Art gebildet werden. Der einfachste Defektkomplex ist das sog. A-Zentrum (VO), das z.B. nach Elektronenbestrahlung durch Anlagerung von mobilen Einfachleerstellen bei ca. 170 K entsteht. Dieses A-Zentrum wird auch schon nach Bestrahlung mit leichten Io-

Tabelle 1.1: *Ausheiltemperaturen von verschiedenen Sauerstoff-Leerstellen-Komplexen.*

Defekt	Ausheiltemperatur (isochron)	Methode
VO	570-670 K	IR, DLTS, EPR [Ued92a, Kim77]
VO ₂	770 K	IR [Ued92a]
V ₂ O	620 K	EPR [Lee76]
V ₃ O	670 K	EPR [Lee76]
V ₂ O ₂	670 K	EPR [Lee76]
V ₃ O ₃	870 K	EPR [Lee76]

nen in niedrigen Dosen [Sve97] gebildet. Viele Autoren haben nach der Ausheilung der Doppelleerstellen und der A-Zentren die Bildung größer Leerstellenkomplexe mit Sauerstoffatomen beobachtet [Tra95a, Tra95b, Sve86]. FUJINAMI et al. haben in mehreren Arbeiten V_xO- und V_xO_y-Komplexe beobachtet [Fuj95a, Fuj96a]. Je größer die Komplexe werden, um so größer ist auch ihre thermische Stabilität. In Tabelle 1.1 sind die entsprechenden Ausheiltemperaturen zusammengefaßt. Es gibt auch Vorstellungen zur mikroskopischen Struktur solcher V_xO_y-Defekte [Lee76, Ewe95, Shi94], die hier aber nicht näher erläutert werden sollen.

Auch einfache Leerstellen-Agglomerate sind meist stabiler mit zunehmender Größe. Sie entstehen durch Zusammenlagerung von beweglichen Defekten, wie Einfach- und Doppelleerstelle. Die Identifizierung solcher Defekte ist schwierig, da sie nur in stark geschädigten Schichten auftreten. Die Zuordnung elektrischer Niveaus ist kaum möglich, und die Objekte sind zu klein, um mit abbildenden Methoden wie Elektronenmikroskopie detektiert werden zu können. Die Positronenannihilationsspektroskopie bietet hier Nachweismöglichkeiten über die Positronenlebensdauer und das Ausheilverhalten der Agglomerate. SIMPSON et al. und FUJINAMI et al. haben bei der Ausheilung von implantierten Silizium-Proben die Bildung von Leerstellenagglomeraten (V_n, n < 2) beobachtet [Sim91, Fuj96b]. Es gibt auch zahlreiche theoretische Ergebnisse zu Bindungsenergien solcher Leerstellenagglomerate. Einige davon sind in Tabelle 1.2 aufgelistet. Als Bindungsenergie eines Leerstellenagglomerates soll hier der Energiegewinn beim Hinzufügen

Tabelle 1.2: *Bindungsenergien von verschiedenen Leerstellen-Agglomeraten nach theoretischen Berechnungen.*

Defekt	V ₂	V ₃	V ₄	V ₅	V ₆
Energie (eV) [Gil95]	0.62	0.59	1.39	1.37	
Energie (eV) [Est97]	1.6	2.1	1.9	3.1	3.7
Energie (eV) [Cha88]	1.17	1.57	1.76	1.88	2.35

einer Einfachleerstelle zum nächstkleineren Defekt definiert sein. Die theoretischen Energien sind unter Anwendung verschiedener Modelle mit unterschiedlichen Ansätzen und Näherungen berechnet worden. Die relativ großen Abweichungen verwundern daher nicht. Es sei hier bemerkt, daß die energetische Stabilität nur ein Aspekt ist, der die Bildung solcher Agglomerate beschreibt. Auch die Kinetik der Defektreaktionen spielt eine entscheidende Rolle.

Natürlich existieren auch Komplexe von Leerstellen und Dotierungsatomen. Hier sind viele Konfigurationen vorstellbar. Wichtig in bezug auf diese Arbeit sind Bor- [Fuj95a] und Arsen-Leerstellen-Komplexe [Rou94, Law95, Myl96]. Im Kapitel 3 wird näher darauf eingegangen.

Einige Defekte mit offenem Volumen in Galliumarsenid. Weitaus komplizierter stellt sich die Situation in Verbindungshalbleitern dar, bei denen sich die Defekte beider Untergitter unterscheiden. In GaAs gibt es beispielsweise die Gallium-Leerstelle (V_{Ga}) und die Arsen-Leerstelle (V_{As}) als einfachste Defekte mit offenem Volumen. Die Ladungszustände der einfachsten Punktdefekte sind in verschiedenen theoretischen Arbeiten berechnet worden [Bar85, Pus89, Jan89, Xu90, Zha91, Seo95]. Weiterhin gibt es theoretische Rechnungen zu Gleichgewichtskonzentration der Punktdefekte von TAN und GÖSELE in Abhängigkeit der Temperatur, der Stöchiometrieabweichung und der Dotierung [Gös91, Tan94]. In undotiertem und n-leitendem Material ist die Gallium-Leerstelle dreifach negativ geladen. Alle Umladungsniveaus befinden sich in der unteren Hälfte der Bandlücke. Die dreifach negativ geladene Gallium-Leerstelle ist verantwortlich für die Gallium-Selbstdiffusion, sowie für die Silizium- und Chrom-Diffusion [Tan93, Dab94]. Im hoch n-leitendem GaAs weist die Gallium-Leerstelle ein negatives Temperaturverhalten auf, d.h. im Gegensatz zur Normalität wächst die Gleichgewichtskonzentration bei sinkender Temperatur. Die Bildungsenthalpie der V_{Ga}^{3-} nimmt negative Werte an, weil die Konfigurationsenthalpie für die neutrale Leerstelle durch den Enthalpiegewinn aus der Besetzung des Defektes mit 3 Elektronen mehr als kompensiert wird [Tan93]. Lediglich im hoch p-dotierten GaAs ist V_{Ga} neutral oder gar positiv geladen. Die Leerstelle im Arsen-Untergitter ist meist positiv geladen, nur in hoch n-leitendem Material kann sich ihr Ladungszustand ändern, und sie kann mittels Positronen detektiert werden.

Wie auch für Silizium bilden sich Leerstellen-Dotierungsatom-Komplexe und Leerstellenagglomerate. Die meisten dieser Defekte treten in verschiedenen Ladungszuständen auf. Die Ansichten über die Existenz und thermische Stabilität sowohl der eingewachsenen als auch induzierten Defekte im GaAs sind heute noch kontrovers. Isolierte Leerstellen, deren Konzentration über der im Gleichgewicht liegt, sollten bei Raumtemperatur ausgeheilt sein. Es gibt aber eine Vielzahl von Möglichkeiten der Komplexbildung, die zur Stabilisierung der Leerstellen beitragen [Pol97].

Einige Autoren haben in Ionen-implantiertem GaAs mit Hilfe von langsamen Positronen die Leerstelle im Gallium-Untergitter beobachtet [Ued92a, Fuj92]. Eine Komplex-Bildung mit Dotierungsatomen, Implantatatomen oder Antistrukturdefekten kann hier nicht ausgeschlossen werden. Im Verlaufe der Ausheilung sind größere leerstellenartige Defekte beobachtet worden [Fuj92].

Andere Kristalldefekte in Halbleitern. Neben leerstellenartigen Defekten entstehen schon aus Bilanzgründen auch Defekte, die im Zwischengitter sitzen. Das einfache Zwischengitteratom liegt häufig in der Hantel-Konfiguration vor, bei der sich z.B. zwei Siliziumatome einen regulären Gitterplatz teilen. Zwischengitteratome können sich ebenfalls zu Agglomeraten zusammenlagern, wobei Verunreinigungen und Dotierungsatome (z.B. Sauerstoff und Bor) eine entscheidende Rolle als Nukleationszentren spielen. Solche Agglomerate können wachsen bis sie schließlich ausgedehntere Versetzungsringe oder Stapelfehler¹² bilden. In Verbindungshalbleitern bilden sich außerdem noch Antistrukturdefekte. Einer der bekanntesten ist das EL2-Zentrum in GaAs [Man89], ein Arsen-Atom auf Gallium-Platz [Kra90], welches für semiisolierende Eigenschaften in GaAs sorgt. Interessant ist auch seine Umwandlung in einen metastabilen Zustand bei tiefen Temperaturen, der auch seine optischen und elektrischen Eigenschaften beeinflusst [Man89, Kra90]. Im Gegensatz zum Antistrukturdefekt As_{Ga} kann das Gallium-Atom auf dem Arsen-Platz eine negative Ladung tragen, und als flache Positronenfalle wirken (siehe Abschnitt 2.2.4).

Ein- und zweidimensionale Defekte wie z.B. Versetzungen spielen kaum eine Rolle in ionenimplantierten Halbleitern. Eine Ausnahme sind jedoch Versetzungsringe, die durch Kondensation von Punktdefekten entstehen. Wenn das zu bestrahlende Target allerdings schon in relevanten Konzentrationen Versetzungen enthält, dann kann die Wechselwirkung mit Punktdefekten deren Verhalten beeinflussen.

¹²in einem begrenzten Gebiet eingeschobene Lage von Atomen

Ausscheidungen des Implantatelements als dreidimensionale Defekte bilden sich immer dann, wenn die Löslichkeitsgrenze im Substratmaterial deutlich überschritten wird. In hoch Arsen-implantiertem GaAs können sich Arsen-Ausscheidungen bilden (ähnlich wie bei Low-Temperature-GaAs¹³), die den Stöchiometrieüberschuß abbauen [LW95].

1.3. Modelle der Defekterzeugung

Die im Abschnitt 1.1 beschriebene Theorie der Ionenimplantation ist nicht in der Lage, den Zustand eines Festkörpers nach der Implantation exakt zu beschreiben, da sie sekundäre Prozesse wie Diffusion, Defektausheilung und Defektreaktionen nicht berücksichtigt. Daß diese Prozesse ablaufen müssen, liegt auf der Hand, denn die Implantation mehr oder weniger massereicher Teilchen in einen Festkörper stört das thermodynamische Gleichgewicht des Systems, und seine Relaxation ist zu erwarten. Die Beschreibung der Dynamik dieser Vorgänge ist kompliziert, da sich der Implantationsprozeß selbst über eine gewisse Zeit erstreckt und weil die ersten Stadien der exponentiell abklingenden Relaxation experimentell nicht zugänglich sind. In letzter Zeit gibt es mehrere Veröffentlichungen zu molekulardynamischen Simulationen der Prozesse, die in den ersten Nanosekunden nach der Ionenimplantation ablaufen [Cat96, Jar95].

Den Experimentatoren (langsame Positronen, **RBS**¹⁴, **SNMS**¹⁵, **DLTS**, **EPR** usw. (siehe auch Kapitel 2)) liegen jedoch bereits relaxierte Systeme vor. Die Lücke zwischen den hier gewonnenen Ergebnissen zu Implantationsschäden und den theoretischen Vorhersagen müssen Modelle zur Dynamik von Strahlenschäden während und nach der Implantation schließen. Im folgenden sollen einige solcher Modelle diskutiert werden.

1.3.1. Modell der Defektnukleation (nach L.T. CHADDERTON)

CHADDERTON entwickelte in den 70-iger Jahren ein in sich konsistentes Modell, welches die Abhängigkeit der nach der Implantation verbleibenden Defekte von der Bestrahlungsdosis beschreibt [Cha71]. Hierbei wird unter bestimmten Voraussetzungen ein Differentialgleichungssystem aufgestellt und für Spezialfälle gelöst. Die wesentlichen Stützen des Modells sind folgende Annahmen:

- Die Erzeugungsrate homogen verteilter Punktdefekte (Frenkelpaare) ist konstant für eine bestimmte Dosis.
- Zwischengitteratome können mit homogen verteilten Einfangzentren mit unterschiedlichen Wirkungsquerschnitten wechselwirken.

Die erste Annahme ist besonders im Falle der Implantation leichter Ionen (Bor, Kohlenstoff, usw.) oder im allgemeinen für geringe Dosen gerechtfertigt, wo die Stoßkaskaden noch nicht so dicht liegen. Für schwerere Ionen im technologisch relevanten Dosisbereich ist diese Annahme nur in erster Näherung erfüllt, hier überlappen die Stoßkaskaden und amorphe Strukturen werden gebildet. Weiter definiert CHADDERTON mögliche Einfangzentren für Zwischengitteratome:

- **saturable traps**: Einfang eines Zwischengitteratoms und Vernichtung des Traps (z.B. Leerstellen),
- **unsaturable traps**: Einfang von Zwischengitteratomen ohne Änderung des Einfangquerschnitts (z.B. Versetzungen, Agglomerate),
- **nucleation traps**: Einfangquerschnitt erhöht sich mit dem Einfang von Zwischengitteratomen um den Faktor $\gamma > 1$ (z.B. Agglomerate).

Die Konzentrationen der Einfangzentren wird entsprechend ihrer Anfangsbuchstaben indiziert: N_s, N_u, N_n . Die Anzahl der pro Einheitsvolumen eingefangenen Zwischengitteratome ist dann n_s, n_u, n_n und die Konzentration der Leerstellen n_v . Die Verbindung zum Experiment¹⁶ wurden durch folgende Annahmen geknüpft:

- Alle agglomerierten und freien Zwischengitteratome tragen zum RBS-Signal bei.
- Die integralen Konzentrationen von Leerstellen und Zwischengitteratomen sind gleich.

¹³bei tiefen Temperaturen (200-300°C) Arsen-reich **MBE**-gewachsen

¹⁴**R**UTHERFORD **B**ackscattering **S**pectroscopy

¹⁵**S**econdary **N**eutral **M**ass **S**pectroscopy

¹⁶CHADDERTON bezog sich damals auf **RBS**-Ergebnisse an Bor-implantiertem Silizium

Später übertragen wir die erste Annahme bezüglich der Leerstellen auch auf das Positronensignal. Die zweite Annahme ist sicher dann richtig, wenn als einziger Vernichtungspfad die Rekombination mit dem FRENKEL-Partner in Frage kommt. Rekombination an der Oberfläche oder die Ausdiffusion von Defekten in Regionen, die der Messung nicht mehr zugänglich sind, werden nicht berücksichtigt. Für breite Implantationsprofile, die bei Raumtemperatur erzeugt werden, ist diese Näherung zulässig.

Den Kern des Modells bilden 4 Differentialgleichungen, die die Änderung der Anzahl der eingefangenen Zwischengitteratome mit der Dosis Φ beschreiben:

$$\begin{aligned}\frac{d n_s}{d \Phi} &= \frac{\nu N_s(\Phi)}{D} = \frac{\nu (N_s(0) - n_s)}{D} \\ \frac{d n_u}{d \Phi} &= \frac{\nu N_u(\Phi)}{D} = \frac{\nu N_u(0)}{D} \\ \frac{d n_n}{d \Phi} &= \frac{\nu (N_n(0) + \gamma n_n)}{D} \\ \frac{d n_v}{d \Phi} &= \nu \left(1 - \frac{n_v}{D}\right)\end{aligned}\tag{1.3.1}$$

$$\text{mit } D = N_s + N_u + n_v + (N_n(0) + \gamma n_n)$$

ν ist dabei die Anzahl der erzeugten Defekte pro Ion und Weglänge nach erfolgter spontaner Rekombination der Punktdefekte. Die Grundlage für die Formulierung dieser Differentialgleichungen ist die Annahme, daß die Änderung der Zahl der in verschiedenen Zentren eingefangenen Zwischengitteratome mit der Dosis Φ proportional zur Einführrate und zum Verhältnis der Konzentration des speziellen Einfangzentrums zur Gesamtkonzentration aller Einfangzentren ist. Außerdem findet die Änderung des Einfangquerschnitts Berücksichtigung. Für bestimmte Spezialfälle und Näherungen können die Differentialgleichungen analytisch gelöst werden. Dabei läßt man jeweils nur einen Typ von Einfangzentren neben den Leerstellen zu.

Näherung der homogenen Nukleation. Hier wird ausschließlich der Einfang in unerschöpfliche Senken (unsaturable traps) und Leerstellen betrachtet. Physikalisch ist dieser Fall äquivalent zur Annahme, daß die Zwischengitteratome sehr beweglich sind und die Vakanzen als unbeweglich gelten. Es kommt dann zur Rekombination, wenn Zwischengitteratome auf Leerstellen treffen, oder zur Agglomeration, wenn sich Zwischengitteratome treffen. Das Gleichungssystem (1.3.1) reduziert sich auf:

$$\begin{aligned}D &= N_u + n_v, \\ \frac{d n_u}{d \Phi} &= \frac{\nu N_u}{N_u + n_v}, \\ \frac{d n_v}{d \Phi} &= \nu \left(1 - \frac{n_v}{N_u + n_v}\right) = \frac{\nu N_u}{N_u + n_v}.\end{aligned}\tag{1.3.2}$$

Die Bedingung $n_v = n_u$ ist hier automatisch erfüllt. Die einfache Integration ergibt:

$$n_v = N_u \left[\left(\frac{2 \nu \Phi}{N_u} + 1 \right)^{1/2} - 1 \right].\tag{1.3.3}$$

Ist die Konzentration der erzeugten Primärdefekte $\nu\Phi$ viel größer als die Konzentration der Einfangzentren N_u ($2 \nu \Phi \gg N_u$), dann erhält man:

$$n_u = n_v \approx (2 N_u \nu \Phi)^{1/2}.\tag{1.3.4}$$

Die Näherung aus (1.3.4) sollte für Implantationen von mittleren Dosen ab gelten. Ein Ergebnis der vorgelegten Arbeit wird sein, diese sogenannte Wurzelabhängigkeit der Implantationsschädigung von der Dosis zu prüfen und Abweichungen durch eine Erweiterung des Modells zu erklären.

Näherung der heterogenen Nukleation. Es werden nun nur Nukleationszentren (nucleation traps) und Leerstellen betrachtet, wobei $N_n(0)$ die Anfangskonzentration der Nukleationszentren ist. Aus (1.3.1) folgt:

$$\begin{aligned} D &= (\gamma + 1)n_n + N_n(0), \\ \frac{d n_n}{d \Phi} &= \frac{\nu (N_n(0) + \gamma n_n)}{(\gamma + 1)n_n + N_n(0)}, \\ \frac{d n_v}{d \Phi} &= \nu \left(1 - \frac{n_v}{(\gamma + 1)n_n + N_n(0)} \right) = \frac{\nu (N_n(0) + \gamma n_n)}{(\gamma + 1)n_n + N_n(0)}. \end{aligned} \quad (1.3.5)$$

Durch partielle Integration folgt:

$$n_n \frac{1 + \gamma}{\gamma} - \frac{N_n(0)}{\gamma^2} \ln \left(1 + \frac{\gamma n_n}{N_n(0)} \right) = \nu \Phi. \quad (1.3.6)$$

Für große Φ ist $n_n \gg N_n(0)$ und in Gl. (1.3.6) kann der zweite Term der linken Seite vernachlässigt werden. Die Lösung vereinfacht sich dann zu:

$$n_n = n_v \approx \frac{\gamma \nu \Phi}{1 + \gamma}. \quad (1.3.7)$$

Die Dosisabhängigkeit wird also im gleichen Grenzfalle für große Φ durch die Charakteristik der Einfangzentren verändert. Ein solches Verhalten ist für den Fall denkbar, daß die Diffusion von Zwischengitteratomen zu kleinen Agglomeraten gegenüber der Generation neuer Dimere von Zwischengitteratomen überwiegt und daß der Einfangquerschnitt mit der Anzahl der eingefangenen Zwischengitteratome wächst. Die relative Wahrscheinlichkeit der Agglomeration und der Rekombination ist dann konstant, und die effektive Erzeugungsrate für Defekte ist linear mit der Dosis.

Näherung für niedrige Dosen. Für kleine Φ hingegen gilt für die homogene Nukleation $\nu \Phi \ll N_u$ und für die heterogenen Nukleation $n_n \ll N_n(0)$. Durch Entwicklung des entsprechenden Wurzel- bzw. Logarithmus-Terms ergibt sich aus den Gleichungen (1.3.3) und (1.3.6) der gleiche Ausdruck:

$$n_v \approx \nu \Phi. \quad (1.3.8)$$

Für eine geringe Anzahl an eingeführten Defekten spielt die über die spontane Rekombination hinausgehende Rekombination kaum eine Rolle im Vergleich zum Einfang in entsprechenden Zentren. Die Folge ist ein mit der Dosis proportionaler Anstieg der integralen Konzentration der Zwischengitteratome. Ein solches Verhalten wird in entsprechenden Dosisbereichen auch experimentell beobachtet [Sve97]. Nach Implantation verschiedener Ionen in Silizium im Dosisbereich von $10^7 - 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ haben SVENSSON et al. mittels **DLTS** eine lineare Abhängigkeit der Konzentration der Doppelleerstellen und der A-Zentren von der Dosis gefunden. Hier wurde das Überlappen der Ionenspuren verhindert, und es konnten Defekte aus einzelnen Kollisionskaskaden beobachtet werden.

Näherung der Sättigung. Hier sollen nur Einfangzentren mit sinkendem Einfangquerschnitt (saturable traps) und Leerstellen als Reaktionspartner für die Zwischengitteratome betrachtet werden. Aus dem Gleichungssystem (1.3.1) folgt dann:

$$\begin{aligned} D &= N_s(0), \\ \frac{d n_s}{d \Phi} &= \frac{\nu (N_s(0) - n_s)}{N_s(0)}, \\ \frac{d n_v}{d \Phi} &= \nu \left(1 - \frac{n_v}{N_s(0)} \right) = \frac{\nu (N_s(0) - n_s)}{N_s(0)}. \end{aligned} \quad (1.3.9)$$

Die Lösung der Differentialgleichung erfolgt durch einfache Integration und man erhält:

$$n_s = N_s(0) \left(1 - e^{-\frac{\nu \Phi}{N_s(0)}} \right). \quad (1.3.10)$$

Wiederum für große Φ gilt $\nu \Phi \gg N_s(0)$ und aus Gl. (1.3.10) wird:

$$n_s = n_v \approx N_s(0). \quad (1.3.11)$$

Hier wird der Fall der Defektsättigung beschrieben. Der Einfang von Zwischengitteratomen kommt wegen der hohen Dichte der Einfangzentren und des daraus resultierenden geringen Einfangquerschnittes zum Erliegen. Die Rekombination der Primärdefekte dominiert. Experimentell ist dann die Amorphisierung zu beobachten. Andere Modelle gehen davon aus, daß in ein amorphes Volumen kein Punktdefekt eingebracht werden kann, und daß mit zunehmender Amorphisierung die Defektproduktion gegen Null geht.

Zusammenfassend kann man sagen, daß das Modell von CHADDERTON mit der Lösung von einigen Spezialfällen bestimmte experimentelle Gegebenheiten erklären kann. In den Übergangsbereichen der Dosisabhängigkeiten sind die Näherungen jedoch unzulässig und analytische Ausdrücke sind nur schwerlich zu erhalten. Hier wäre noch die numerische Behandlung des Ausgangsgleichungssystems (1.3.1) möglich. Die vereinfachende Modellierung des Einfangs von Zwischengitteratomen und die Vernachlässigung der Leerstellendiffusion würden an dieser Stelle keine vernünftige Ergebnisse liefern. Andererseits würde die Einführung weiterer Parameter in das Modell dazu führen, daß keine eindeutigen Lösungen mehr existieren.

1.3.2. Temperaturabhängigkeit der amorphisierenden Dosis (nach MOREHEAD und CROWDER)

Einen gänzlich anderen Ansatz haben MOREHEAD und CROWDER 1970 gewählt, um die Temperaturabhängigkeit der amorphisierenden Dosis zu modellieren [Mor71]. Sie gehen davon aus, daß:

- die Querschnittsfläche der Kollisionskaskade umgekehrt proportional zur amorphisierenden Dosis ist und
- die Ausdiffusion von Vakanzen aus dem Gebiet der primären Kollisionskaskade den Radius derselben verringert.

Die amorphisierende Dosis $\Phi^{am}(T_I)$ bei einer Implantationstemperatur T_I ist also umgekehrt proportional zum Quadrat des Radius der verbleibenden Defektkaskade $R(T_I)$. Für das Verhältnis der amorphisierenden Dosis bei T_I und der am Temperaturnullpunkt gilt dann:

$$\frac{\Phi^{am}(T_I)}{\Phi^{am}(0)} = \frac{R_0^2}{(R_0 - \delta R)^2} = \left[1 - \frac{\delta R}{R_0} \right]^{-2}, \quad (1.3.12)$$

wobei R_0 der Kaskadenradius ohne Vakanzenausdiffusion ist und δR die Verringerung durch Vakanzenausdiffusion repräsentiert:

$$\delta R = 2 \left[D_v^0 \tau e^{(-E/k_B T_I)} \right]^{1/2}, \quad (1.3.13)$$

mit D_v^0 als temperaturunabhängigem Diffusionsterm, τ als Diffusionszeit oder auch als Relaxationszeit der Kaskade und E als Aktivierungsenergie der Diffusion. Für die Temperaturabhängigkeit der amorphisierenden Dosis ergibt sich dann:

$$\Phi^{am}(T_I) = \Phi^{am}(0) \left[1 - C e^{(-E/2k_B T_I)} \right]^{-2}. \quad (1.3.14)$$

C ist hierbei ein anzupassender Faktor. Das Modell kann experimentelle Daten recht gut beschreiben. In Abbildung 1.9 sind experimentelle Daten für einige Implantate im Silizium mit dem Modell verglichen. Die Daten sind mit konstanter Migrationsenergie von 0.2 eV angepaßt worden, einem Wert, der eine Größenordnung unter der aus der Literatur bekannten Energie

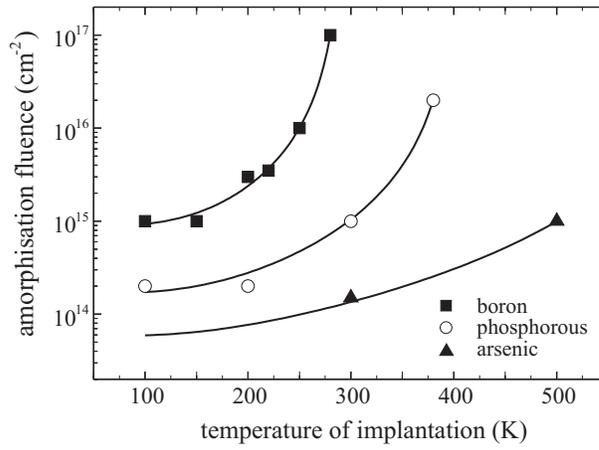


Abbildung 1.9: Die Temperaturabhängigkeit der amorphisierenden Dosis für Bor-, Phosphor- und Arsen-Implantation in Silizium (nach [Rys78]). Die Kurven entsprechen dem Modell von MOREHEAD und CROWDER (siehe Text).

von 2.0 eV liegt [Tan85]. Obwohl die experimentellen Daten zur Punktdefektdiffusion insgesamt sehr unsicher sind, ist dies ein Hinweis darauf, daß in der Stoßkaskade selbst lokal höhere Temperaturen herrschen als im übrigen Gitter. Zum anderen sind die Diffusionsdaten von Eigenpunktdefekten in Silizium nur aus indirekten Messungen mit bestimmten Annahmen über Diffusionsmechanismen zugänglich und daher nicht sehr zuverlässig.

1.3.3. Koexistenz amorpher und kristalliner Gebiete (nach HECKING)

Hier wird die Koexistenz von amorphen Phasen und kristallinen Zonen, die Punktdefekte enthalten, vorausgesetzt [Hec86]. Ein gekoppeltes Differentialgleichungssystem beschreibt die Änderung der relativen Volumenanteile der amorphen Phasen n_a und der Punktdefekte n_d bei einer Änderung der Dosis Φ :

$$\begin{aligned} \frac{d n_d}{d \Phi} &= P_d \left(e^{-R^2 \Phi^2} \right) (1 - n_a) \\ &+ C n_d \left(1 - \frac{n_d}{n_d^* (1 - n_a)} \right) \\ &- \frac{d n_a}{d \Phi} \frac{n_d}{(1 - n_a)}, \end{aligned} \quad (1.3.15)$$

$$\frac{d n_a}{d \Phi} = (P_a + A_s n_a) (1 - n_a). \quad (1.3.16)$$

Der erste Term in Gl. (1.3.15) charakterisiert die Produktion von Punktdefekten. Dabei ist P_d die Proportionalitätskonstante der Punktdefekterzeugung¹⁷. Im exponentiellen Ausdruck wird berücksichtigt, daß für hohe Dosen (mit der Konstanten R skaliert) die Wahrscheinlichkeit der spontanen Rekombination steigt. Der Faktor $(1 - n_a)$ berücksichtigt, daß nur im Volumen, welches noch nicht amorphisiert ist, Punktdefekte erzeugt werden können. Im zweiten Term wird die Möglichkeit der Agglomeration von Punktdefekten beschrieben. Der Agglomerationsbeitrag ist proportional zum Anteil der Punktdefekte (Proportionalitätskonstante C). Dieser Beitrag wird geringer, wenn man noch weit von der Punktdefektsättigung n_d^* entfernt ist oder wenn das amorphe Volumen gegenüber dem kristallinen Volumen überwiegt. Der letzte Term in Gl. (1.3.15) beschreibt das Schwinden kristalliner Bereiche zugunsten der amorphen Phase. In Gl. (1.3.16) ist das Anwachsen der amorphen Phase mit der Dosis charakterisiert durch die Konstante der Erzeugung amorpher Kerne P_a und durch die Konstante der stimulierten Amorphisierung A_s , die die Prozesse der Phasenumwandlung an Grenzflächen, unterstützt durch den Energieeintrag der implantierten Ionen, beschreibt.

Das Gleichungssystem kann numerisch gelöst werden und die offenen Parameter sind Ergebnisse einer Anpassung. Experimentelle Daten der Dosisabhängigkeit von **RBS**-Messungen in III-V Halbleitern können durch dieses Modell sehr gut reproduziert werden [Wen95]. In einer

¹⁷Einführtrate (Defekte pro Ion)

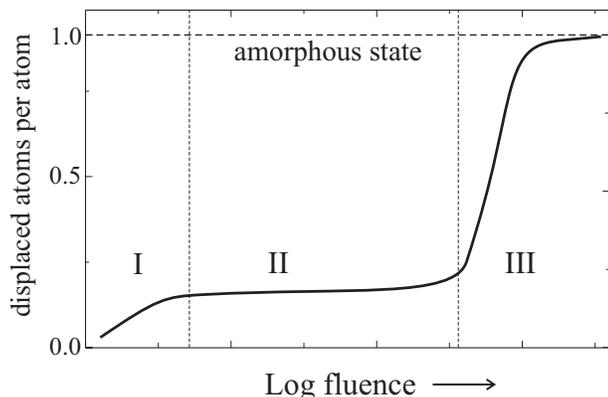


Abbildung 1.10: Die Defektentwicklung nach HECKING ist schematisch dargestellt. Das Zustandsdiagramm der drei verschiedenen Dosisbereiche wird im Text erläutert (siehe z.B. [Wen95]).

schematischen Darstellung in Abbildung 1.10 ist die Defektentwicklung nach HECKING gezeigt. Im Bereich schwacher Schädigung (I) steigt die Defektkonzentration stetig an. Es werden mit zunehmender Dosis mehr Punktdefekte erzeugt. Abhängig von der Implantationstemperatur bildet sich ein mehr oder weniger ausgeprägtes Plateau konstanter Defektkonzentration aus, das durch das Gleichgewicht von Defekterzeugung und -rekombination zustande kommt. Bei genügend geringen Implantationstemperaturen spielt die Rekombination der Defekte eine untergeordnete Rolle. Anderenfalls kommt es bei einer bestimmten Dosis zu einem kollapsartigen Amorphisierungsprozeß [Wes93].

1.4. Defektausheilung

Das Verschwinden von Nichtgleichgewichtsdefekten nach Temperaturbehandlung der Proben bezeichnet man allgemein als Ausheilung. Die Ursache dafür ist das Streben nach dem thermodynamischen Gleichgewicht oder zumindest nach energetisch günstigeren Konfigurationen. Die folgenden Mechanismen tragen zur Ausheilung bei (nach [Bou83]):

- Wanderung zu Defektsenken (z.B. Oberflächen, Versetzungslinien oder Korngrenzen),
- Rekombination von Defekten (z.B. Rekombination einer Leerstelle mit einem Zwischengitteratom) und
- Reaktion mit anderen Defekten und Bildung eines neuen Defektyps (z.B. Agglomeration, Bildung von Leerstellen-Dotierungs-Komplexen, Bildung von Leerstellenringen).

Die Dissoziation von Defekten wird durch Temperung thermisch aktiviert. Auch die Diffusivität von Defekten nimmt mit Erhöhung der Temperatur zu. Das Ausheilverhalten wird durch eine Ratengleichung beschrieben [Bou83], in der die zeitliche Änderung der Defektkonzentration proportional zu einer Potenz der Defektkonzentration ist:

$$\frac{d C_j}{d t} = -K C_j^\alpha. \quad (1.4.1)$$

Hier ist C_j die Konzentration des Defektes j . Die Reaktionsordnung α ist abhängig von der Anzahl der an der geschwindigkeitsbestimmenden Reaktion beteiligten Partner. Für einfache Reaktionen ist $\alpha = 1$, in komplizierteren Fällen kann α auch gebrochene Zahlen annehmen. Die Proportionalitätskonstante K heißt Geschwindigkeitskonstante der Defektreaktion und berücksichtigt die Änderung der freien Energie des Systems in einem ARRHENIUS-Gesetz:

$$K = K_G \exp\left(\frac{-\Delta G}{k_B T}\right), \quad (1.4.2)$$

k_B ist die BOLTZMANN-Konstante und T die Temperatur. Die freie Energie ΔG kann zerlegt werden in:

$$\Delta G = \Delta E - \Delta S T, \quad (1.4.3)$$

mit ΔE für die Enthalpieänderung, ΔS für die Entropieänderung und T für die Temperatur. Im allgemeinen ist die Entropieänderung eine Funktion der Schwingungsfrequenzen, die das System

mit (ν^d) und ohne Defekt (ν^0) ausführt. Für den einfachen Fall einer Sattelpunktskonfiguration¹⁸ ist die Entropieänderung beispielsweise [Vin54]:

$$\Delta S = k_B \sum_j \ln \frac{\nu_j^0}{\nu_j^d} . \quad (1.4.4)$$

j bezeichnet hier die verschiedenen Schwingungsmoden. Für komplizierte Defektstrukturen sind weder die Schwingungsmoden noch die am Ausheilen beteiligten Einzelprozesse genau bekannt. Es wird also die temperaturunabhängige Konstante K_0 definiert, die den Entropieterm und zusätzlich Sprungfrequenzen enthält. Aus den Gleichungen (1.4.2) und (1.4.3) folgt dann:

$$K = K_0 \exp \left(\frac{-\Delta E}{k_B T} \right) . \quad (1.4.5)$$

ΔE wird auch Aktivierungsenergie des betrachteten Prozesses genannt.

Der Wert der Aktivierungsenergie ΔE charakterisiert den ausheilenden Defekt und kann durch isochrone oder isotherme Ausheilexperimente bestimmt werden. So ist eine Möglichkeit der Defektidentifizierung gegeben. Isotherme Experimente sind relativ aufwendig und für Methoden ungeeignet, die lange Meßzeiten benötigen. Isochrone Ausheilungen sind einfacher durchzuführen, die Bestimmung der Aktivierungsenergie ist jedoch schwieriger.

Isochrones Ausheilexperiment. Beim isochronen Ausheilen wird die Probe sukzessive für eine bestimmte Zeit Δt erwärmt und jeweils die Defektkonzentration gemessen. Zunächst bleibt $|dC/dt|$ sehr klein und erst bei Annäherung bzw. Erreichen der typischen Ausheiltemperatur steigt dieser Wert stark an.

Wegen der temperaturabhängigen Effekte bei der Positronenannihilationsspektroskopie (siehe Abschnitt 2.2) und der im Vergleich zur Temperzeit langen Meßzeiten wird folgendes Temperaturregime genutzt. Die Probe wird in isothermen Stufen der Dauer Δt auf die Temperatur T erhitzt und danach die Defektkonzentration bei Raumtemperatur gemessen. In Abbildung 1.11

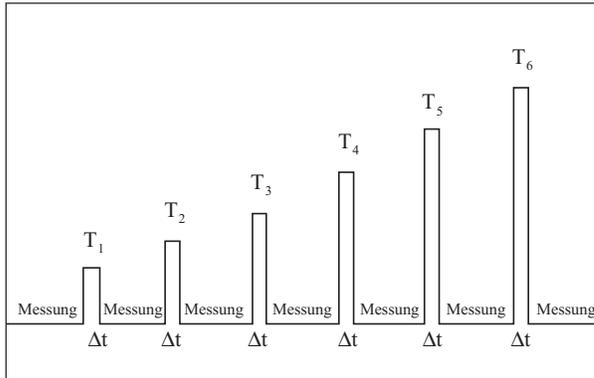


Abbildung 1.11: *Schema der isochronen Ausheilungen für Messungen bei Raumtemperatur*

ist ein entsprechendes Schema dargestellt. Für Reaktionen erster Ordnung ergibt die Lösung der Differentialgleichung (1.4.1) unter Verwendung des ARRHENIUS-Gesetzes (1.4.5):

$$\ln \left(\frac{C_e(T)}{C_a(T)} \right) = -K_0 \exp \left(\frac{-\Delta E}{k_B T} \right) \Delta t . \quad (1.4.6)$$

$C_a(T)$ und $C_e(T)$ sind die Defektkonzentrationen am Anfang bzw. am Ende der Temperung bei der Temperatur T . Nochmalige Logarithmierung liefert:

$$\ln \left(\ln \left(\frac{C_e(T)}{C_a(T)} \right) \right) = \ln(K_0 \Delta t) - \frac{\Delta E}{k_B T} . \quad (1.4.7)$$

Aus einer Anpassung im entsprechenden ARRHENIUS-Plot ist die Aktivierungsenergie ΔE und die Ratenkonstante K_0 bestimmbar.

¹⁸Das Potential besitzt zwischen zwei Stabilitätsminima genau einen Sattelpunkt

Für Reaktionen beliebiger Ordnungen ist es günstiger, die Differentialgleichung (1.4.1) durch die entsprechende Differenzgleichung zu approximieren:

$$\left(\frac{C_e(T) - C_a(T)}{C_a(T)^\alpha} \right) = -K_0 \Delta t \exp\left(\frac{-\Delta E}{k_B T} \right). \quad (1.4.8)$$

Ist die Reaktionsordnung α bekannt, können die Konstanten K_0 und E_A angepaßt werden.

Ionenimplantation und Untersuchungsmethoden

2.1. Technik der Ionenimplantation

Die Ionenimplantation ist eine Standardmethode zur Dotierung von Halbleitern. Die zu implantierenden Atome oder Moleküle werden ionisiert, in einem elektrostatischen Feld beschleunigt und in das Halbleitertarget geschossen. Dabei sind beliebige Energien, Ion-Substrat-Kombinationen und auch Implantationsdosen möglich. Gegenüber anderen Dotierverfahren (z.B. Epitaxie, Dotandeneindiffusion, Legieren) hat sie eine Reihe von Vorzügen (nach [Rys78]):

- Schnelligkeit, Homogenität und Reproduzierbarkeit des Dotiervorgangs,
- exakte Kontrollierbarkeit der eingebrachten Dotandenmenge,
- geringe Anforderungen an die Reinheit der Dotierstoffe (Massenseparation),
- Vermeidung hoher Prozeßtemperaturen,
- einfache Maskierungsverfahren und geringe laterale Streuung,
- Implantation durch dünne Schichten hindurch,
- freie Wahl der Dotierungsprofile auch mit steilen Dotierungsgradienten.

Es gibt aber auch eine Reihe von Nachteilen, die die Anwendbarkeit einschränken. So ist die Ionenimplantation auf oberflächennahe Schichten begrenzt, und Effekte wie Channeling und Diffusion beeinflussen das Dotierungsprofil. Theoretische Profilberechnungen sind meist unexakt. Der schwerwiegendste Nachteil ist jedoch die Erzeugung von Strahlenschäden durch die Energieabgabe der implantierten Ionen an das Kristallgitter des Targets (siehe auch Abschnitt 1.2). Die angestrebten Eigenschaften des Halbleiters werden negativ beeinflusst, z.B. wird die Beweglichkeit und Lebensdauer der Ladungsträger vermindert. Die eingebrachten Dotanden kommen meist auf Zwischengitterplätzen zur Ruhe und sind deshalb elektrisch nicht aktiv. Eine Temperaturbehandlung ist nötig, um zum einen das Kristallgitter wiederherzustellen und zum anderen die Dotierungsatome auf elektrisch aktive Gitterplätze zu bringen.

Trotzdem gewinnt die Ionenimplantation nicht nur für die Dotierung von Halbleitern sondern auch auf anderen Gebieten der Materialmodifizierung an Bedeutung. Stellvertretend seien hier die Ionenstrahlsynthese von Siliziumcarbid durch Kohlenstoffimplantation in Silizium und die Oberflächenpassivierung von Metallen genannt.

Ein Überblick über die Technologie der Ionenimplantation wird in [Rys78] gegeben, im folgenden sollen nur die wichtigsten Punkte dargestellt werden.

Ionenquellen. Die bei der Ionenimplantation benötigten Strahlströme liegen zwischen einigen μA und mehreren mA. Der Strahlstrom wird hauptsächlich durch die Ionisationsrate der Ionenquelle bestimmt. Die bekanntesten Ionenquellen sind Glühkathoden-, Hochfrequenz-, PENNING- und Sputterquellen. Sie unterscheiden sich in Ionisationsrate, Anteil der Mehrfachionisation, Energieunschärfe, Konsistenz der Implantatsubstanz und Lebensdauer der Quelle.

Die weit verbreiteten Glühkathodenquellen sind sehr flexibel in Bezug auf die ionisierbaren Ionenarten und auf die hohen erzielbaren Strahlströme. Zwischen einer direkt geheizten Wolframkathode und der Anode entsteht durch eine Hochspannung eine ionisierende Entladung. Der Weg der Elektronen wird in einem Magnetfeld verlängert und so die Quelleffektivität erhöht. Die Energieunschärfe beträgt ca. 10 eV und der Arbeitsdruck 10^{-4} bis 1 Pa. Das Quellmaterial kann gasförmig eingelassen, in einem Ofen verdampft oder durch Sputtern abgespalten werden.

Hochfrequenzquellen sind in praktisch allen VAN-DE-GRAAFF-Beschleunigern eingebaut und sind besonders für die Ionisierung inerte Gase geeignet. Ein Hochfrequenzfeld im MHz-Bereich sorgt für die Ionisierung des Quellgases.

PENNING- oder Kaltkathodenionenquellen arbeiten nach dem von Vakuummeßröhren bekannten PENNING-Prinzip. Die das Quellgas ionisierenden Elektronen werden durch Feldemission aus einer Kathode erzeugt. Allerdings lassen sich Edelgase nur sehr schwer ionisieren.

Beschleuniger. Die potentielle Energie der erzeugten Ionen wird im elektrostatischen Feld eines Linearbeschleunigers erhöht. Am weitesten verbreitet sind Beschleuniger, deren Hochspannung mittels einem Bandgenerator nach VAN DE GRAAFF erzeugt wird. Die sogenannten VAN-DE-GRAAFF-Beschleuniger liefern Ionen mit bis zu 10 MeV Energie mit Strahlströmen von 10 bis 100 μA bei einer Energieunschärfe von nur einigen hundert eV. Technisch nachteilig ist jedoch, daß sich die Ionenquelle auf hohem Potential befindet. Bei einem zweistufigen VAN-DE-GRAAFF-Beschleuniger, dem sogenannten Tandembeschleuniger, wird dieses Problem umgangen, indem man die Ionen von Erdpotential auf hohes Potential beschleunigt und dort umlädt. Die umgeladenen Ionen werden von der Hochspannungselektrode abgestoßen und in Richtung Erdpotential abermals beschleunigt. Mit einem Tandembeschleuniger erreicht man Maximalenergien von 30 MeV für einfach geladene Teilchen. Die Strahlströme sind allerdings wegen der Verluste bei der Umladung kleiner als für einstufige VAN-DE-GRAAFF-Beschleuniger.

2.2. Annihilationsspektroskopie mit langsamen Positronen

Die Positronenannihilationsspektroskopie hat sich in den letzten Jahren als geeignet erwiesen, leerstellenartige Defekte in Halbleitern zu untersuchen (siehe z.B. *Proceedings of the 11th ICPA (Mater. Sci. For., Vol.255-257,1997)* und *Proceedings of the 10th ICPA (Mater. Sci. For., Vol. 175-178,1994)*). Wenn Positronen in einem Defekt mit offenem Volumen lokalisiert werden und dort mit Elektronen annihilieren, so ändern sich die Annihilationsparameter in Abhängigkeit von der existierenden Elektronenstruktur. Diese Parameter sind spezifisch für die verschiedenen Defekttypen. Die Annihilationsspektroskopie gestattet so Aussagen zur Natur leerstellenartiger Defekte.

Bei der Methode der konventionellen Positronenlebensdauerspektroskopie wird die Annihilationswahrscheinlichkeit von Positronen und damit die Elektronendichte in einem bestimmten Defekt gemessen. Die resultierende Positronenlebensdauer ist spezifisch für einen bestimmten Defekt und kann inzwischen auch gut mit theoretischen Rechnungen verglichen werden. Die verwendeten Positronen besitzen jedoch eine sehr breite Energieverteilung und dringen demnach unterschiedlich tief bis zu 0.5 mm in den Kristall ein. Zur Untersuchung relativ oberflächennaher Defekte, wie sie nach Ionenimplantation entstehen, ist diese Methode ungeeignet. Die deshalb entwickelte Positronenstrahltechnik ist eine vergleichsweise junge Technik, die auf der Verwendung langsamer monoenergetischer Positronen basiert. Mit dieser Methode sind entscheidende Vorteile verbunden, die den Anwendungsbereich der Annihilationsspektroskopie auch auf oberflächennahe Phänomene erweitert haben. Allerdings läßt sich die Fingerprinttechnik der Positronenlebensdauerspektroskopie, die sich bei der Identifizierung von Defekten mit offenem Volumen bewährt hat, nur unter großen Schwierigkeiten adaptieren. Der für die Lebensdauerspektroskopie nötige Startimpuls¹ geht bei der Erzeugung monoenergetischer Positronen verloren. Es gibt momentan weltweit nur zwei stabil arbeitende Lebensdauerstrahlensysteme [Wil94, Suz94], die den Positronenfluß elektronisch choppen, um so ein künstliches Startsignal zu erzeugen. Bei Standardsystemen beschränkt man sich auf die Messung der Dopplerverbreiterung der Annihilationsstrahlung. Bestrahlungsdefekte nach Ionenimplantation sind auch für solche einfachen Positronenstrahlensysteme ein ideales Untersuchungsfeld. Sowohl die Tiefe als auch die Konzentrationen der Implantationsdefekte liegen genau im Sensitivitätsbereich der langsamen Positronen (siehe auch Kapitel 1). Hier soll diese Methode kurz eingeführt werden.

2.2.1. Grundlagen

Positronen entstehen beim β^+ Zerfall künstlicher Radionuklide oder durch Paarerzeugung. Sie annihilieren mit ihren Antiteilchen den Elektronen, und die Gesamtmasse $2m_e$ wandelt sich in Energie in Form von γ -Quanten um. Es gibt mehrere Annihilationspfade, z.B. auch die Bildung

¹z.B. 1.2 MeV- γ -Quant beim β^+ -Zerfall von ^{22}Na

von Para- und Orthopositronium [Sch88]. Im Festkörper annihilieren die Positronen aber innerhalb einiger 100 ps mit Elektronen, die einen entgegengesetzten Spin besitzen (Spinerhaltung). Nach der Annihilation

$$e^+(\uparrow) + e^-(\downarrow) \rightarrow 2\gamma \quad (2.2.1)$$

entstehen zwei γ -Quanten der Energie $m_e c^2 = 510.99$ keV. Die Annihilationsrate λ ist eine Funktion der lokalen Elektronendichte n_e . Innerhalb von Defekten mit offenem Volumen (z.B. Leerstellen) ist die Elektronendichte n_e geringer als im Kristallvolumen. Dadurch unterscheidet sich die Lebensdauer (die zur Annihilationsrate reziproke Größe) eines im Defekt eingefangenen Positrons (siehe auch Kap. 2.2.4) von der Lebensdauer im Kristallvolumen. Dieser Effekt wird mittels der Methode der Positronenlebensdauerspektroskopie gemessen. Eine Beschreibung dieser Methode findet man z.B. in [Hau79].

Die γ -Quanten tragen Informationen über den Gesamtimpuls des Elektron-Positron-Paars vor der Annihilation. Thermalisierte Positronen besitzen nur geringe Energien, so daß die DOPPLER-Verbreiterung der Annihilationslinie im wesentlichen von den Elektronenimpulsen am Annihilationsort bestimmt wird. Die Impulskomponente p_t senkrecht zur Ausbreitungsrichtung der Annihilations-Quanten führt zur Abweichung von der Kolinearität um $\theta = p_t/(m_e c)$. Die Impulskomponente p_l in Ausbreitungsrichtung verursacht eine DOPPLER-Verbreiterung der 511-keV-Annihilationslinie um $\Delta E = c p_l/2$. Die Winkelabweichung wird hochaufgelöst mittels Winkelkorrelationstechnik bestimmt, und so kann u.a. die Impulsverteilung der Elektronen im Impuls-Raum gemessen werden [Has95, Tan95]. Die Tatsache, daß sich die Verteilung der Elektronen in Defekten von derjenigen im Volumen unterscheidet, ist die Grundlage für Defektuntersuchungen mittels DOPPLER-Spektroskopie der Annihilationsstrahlung.

Der Annihilationsort bzw. -zustand der Positronen wird durch ihre Wechselwirkungen in der Probe bestimmt. Die wichtigsten Wechselwirkungen von Positronen in Festkörpern sind in Abbildung 2.1 schematisch dargestellt. Die monoenergetischen Positronen dringen, bis auf einen Anteil

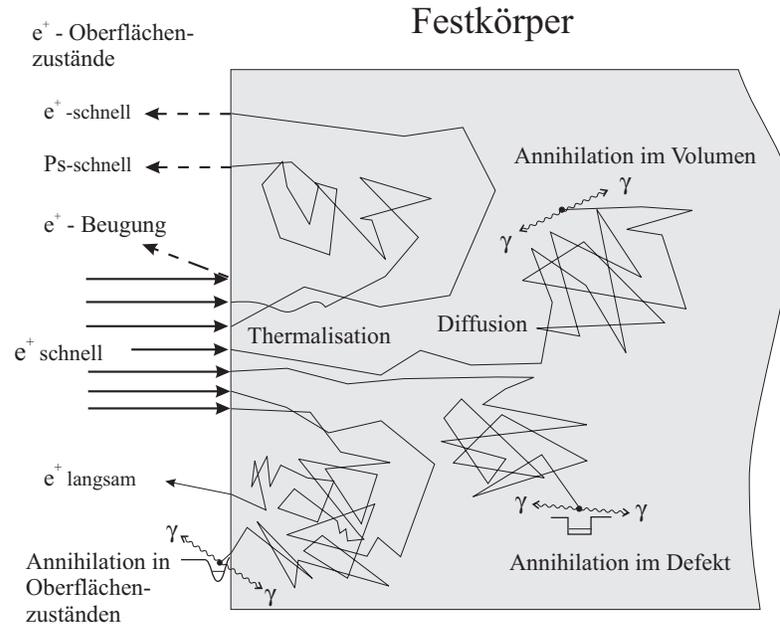


Abbildung 2.1: Wechselwirkungen von Positronen im Festkörper (schematisch)

rückgestreuter Positronen [Ros80], in den Festkörper ein und werden auf thermische Energien² abgebremst (siehe Kap. 2.2.2). Quantenmechanisch betrachtet besetzt das delokalisierte Positron

² $k_B T = 0.025$ eV bei T=273 K

den tiefsten energetischen Zustand im Festkörper. Es ist zwar ein FERMI-Teilchen³ aber seine Lebensdauer ist so kurz, daß sich unter Verwendung der üblichen Quellaktivitäten immer nur ein einziges Positron in der Probe aufhält. Halbklassisch ordnet man dem Positron jedoch einen Ort zu und beschreibt seine Bewegung bis zum Zeitpunkt der Annihilation als Diffusion (siehe Abschnitt 2.2.3). Auf seinem Diffusionsweg kann es in einem Defekt eingefangen⁴ werden, wo es bis zur Annihilation verbleibt. Quantenmechanisch bezeichnet man diesen Zustand als lokalisiert. Bei genügend großer Diffusionsweglänge kann das Positron zur Oberfläche zurückgelangen, wo es als freies Positron oder unter Positroniumbildung emittiert bzw. in Oberflächendefekten oder zweidimensionalen Oberflächenzuständen eingefangen werden kann [Sch88, Hut90]. Bei Implantation in Oberflächennähe (bei niedrigen kinetischen Positronenenergien) können Positronen vor der vollständigen Thermalisation als sog. *epithermische* Positronen zur Oberfläche zurückgelangen [Huo87, Nie86] und die Probe verlassen. Das Verständnis der drei Stadien des Positronenlebens im Festkörper (Implantation, Diffusion, Annihilation) ist für die Interpretation der Annihilationsdaten grundlegend. Im folgenden sollen die relevanten Prozesse dargestellt werden.

2.2.2. Positronenimplantation

Die Positronen verlieren ihre Energie im Festkörper durch verschiedene Streumechanismen innerhalb weniger Pikosekunden. Die Energieverlustmechanismen sind prinzipiell dieselben wie für Elektronen. Wegen der entgegengesetzten Ladung und dem Fehlen besetzter Positronenzustände ergeben sich jedoch quantitative Differenzen zu Elektronen [Sch88, Hak93]. Im Bereich unterhalb 100 keV wird der Energieverlust hauptsächlich durch Streuung an Elektronen verursacht. Die Energie fällt innerhalb 10^{-13} s auf einige Zehntel eV ab [Per70]. Die letzte Stufe der Thermalisation ist durch die Positron-Phonon-Wechselwirkung dominiert.

Die Verteilung der Positronen nach der Thermalisation wird mit einer Verteilungsfunktion $P(E, z)$ (Implantationsprofil) beschrieben. Ausgehend von der allgemeinen Elektronentransmissionskurve nach MAKHOV erhält man das Implantationsprofil [Val83, Val84]:

$$P(E, z) = \frac{m z^{m-1}}{z_0^m} \exp \left[- \left(\frac{z \Gamma \left(1 + \frac{1}{m} \right)}{\bar{z}(E)} \right)^m \right]. \quad (2.2.2)$$

$P(E, z) dz$ ist dann der Teil der Positronen, der in einer Tiefe zwischen z und $z + dz$ stoppt. \bar{z} ist die mittlere Eindringtiefe der Positronen, die von der Positronenenergie E abhängt:

$$\bar{z} = \frac{A}{\rho} E^n. \quad (2.2.3)$$

Dabei bedeuten:

- E ... Implantationsenergie in [keV] ,
- ρ ... Dichte des Targetmaterials in [g/cm³] ,
- \bar{z} ... mittlere Eindringtiefe in [Å] ,
- m, n ... empirische Parameter ,
- A ... empirische Konstante in [$\mu\text{gcm}^{-2}\text{keV}^{-n}$] .

Die Bestimmung der empirischen Parameter ist für eine quantitative Auswertung der Meßdaten unabdingbar, insbesondere wenn absolute Aussagen zu Schichtdicken und Defektprofilen gemacht werden sollen. Lange Zeit wurden $m = 2$, $n = 1.6$ und $A = 4 \mu\text{gcm}^{-2}\text{keV}^{-n}$ als universelle Konstanten angenommen [Sch88, vV90, Hak93, AK94]. Monte-Carlo-Simulationen der Positronen-Festkörper-Wechselwirkung haben gezeigt, daß die Parameter m, n und A materialabhängig sind [Gho95]. Außerdem liefern verschiedene theoretische Beschreibungen der inelastischen Positron-Elektron-Streuung (nach VALKEALAHTI und NIEMINEN [Val83], JENSEN und

³Spin = 1/2

⁴Oft wird der Einfang als Trapping von englisch trap = Falle bezeichnet.

WALKER [Jen90] und MCKEOWN und LYNN [Rit90]) unterschiedliche Profile. Eine experimentelle Verifizierung der Implantationsprofile ist deshalb notwendig. Für Metalle gibt es eine Reihe von Arbeiten an dünnen Folien ([Mil82] mit $A = 3.32 \mu\text{gcm}^{-2}\text{keV}^{-n}$ $m = 2$ und $n = 1.6$ für Aluminium sowie $n = 1.43$ für Kupfer). In Silizium wurden durch **MBE**-Präparation von amorphen Schichten auf Siliziumoxid die Parameter bestimmt zu $A = 2.75 \mu\text{gcm}^{-2} \text{keV}^{-n}$, $m = 2$ und $n = 1.7$ [Geb96]. Diese Werte sind in hervorragender Übereinstimmung mit entsprechenden Monte-Carlo-Simulationen nach dem Schema von JENSEN und WALKER [Gho95]. In Galliumarsenid und Germanium fehlen solche Experimente, und man benutzt weiterhin die Standardwerte [Sha96]. Relative Aussagen zu Defektprofilen sind hier möglich, Vergleiche mit Ergebnissen anderer Methoden (z.B. **TRIM**, **RBS**) sollten wegen der u.U. geringen Tiefenauflösung und der Unsicherheit des Positronenimplantationsprofiles nur vorsichtig gezogen werden.

Eine Analyse des MAKHOV-Profiles (2.2.2) zeigt, daß die Verteilung mit zunehmender Energie immer breiter wird. Die Tiefenauflösung verschlechtert sich. Die Positronenstrahltechnik ist nur zur Untersuchung relativ oberflächennaher Strukturen bis in eine Tiefe von einigen μm geeignet. Eine Defektprofilbestimmung mit Tiefenaufösungen unter 50 nm ist nur bis zu einer Tiefe von 500 - 1000 nm möglich, wobei für die Auflösung zusätzlich noch die Positronendiffusion eine Rolle spielt. Im Vergleich zu anderen Methoden ist die Tiefenauflösung der Positronenstrahltechnik eher schlecht (siehe z.B. Abschnitt 2.3).

2.2.3. Positronendiffusion

Die Bewegung thermalisierter Positronen ist als Diffusion beschreibbar. Mit den Annahmen, daß die zu untersuchenden Objekte lateral homogen verteilt sind, daß die laterale Ausdehnung des untersuchten Gebietes (wenige mm) groß ist gegen die Diffusionsweglänge der Positronen (einige 100 nm) und daß die Strukturen der Probe größer sind als der mittlere freie Weg der Positronen [Sch88], reicht die Betrachtung der eindimensionalen Diffusionsgleichung aus:

$$D_+ \frac{\partial^2}{\partial z^2} c(z, t) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{eD_+}{k_B T} \mathcal{E}(z) c(z, t) \right) - \lambda_{\text{eff}}(z) c(z, t) = \frac{\partial}{\partial t} c(z, t) . \quad (2.2.4)$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Positrons $c(z, t)$ zur Zeit t am Ort z wird bestimmt durch die Diffusionskonstante D_+ , durch das lokale elektrische Feld $\mathcal{E}(z)$ im Driftterm und durch die effektive Annihilationsrate $\lambda_{\text{eff}}(z)$ im Vernichtungsterm (siehe Abschnitt 2.2.4). Die Einführung eines Quellterms $I(E, z)$, der die Positronenstopprate in der Tiefe z für Positronen der Energie E beschreibt und aus dem Implantationsprofil $P(E, z)$ folgt, kann Gleichung (2.2.4) auch zeitunabhängig geschrieben werden:

$$D_+ \frac{d^2}{dz^2} c(z) - \frac{d}{dz} \left(\frac{eD_+}{k_B T} \mathcal{E}(z) c(z) \right) - \lambda_{\text{eff}}(z) c(z) + I(E, z) = 0 . \quad (2.2.5)$$

Die Temperaturabhängigkeit der Diffusionskonstanten D_+ ist durch Streuung an longitudinalakustischen Phononen bestimmt ($T^{-1/2}$ -Abhängigkeit) [Mäk91]. In Si wurden bei 300 K Werte von $2.7\text{-}3.0 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$ [Mäk91, Hak93] gemessen. In GaAs beträgt D_+ bei 300 K $1.6\text{-}1.8 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$ [Soi92, Sha96]. Die mittlere Diffusionsweglänge L_+ von Positronen im defektfreien Material während ihrer Lebensdauer τ_b ist als

$$L_+ = \sqrt{2d D_+ \tau_b} \quad (2.2.6)$$

definiert. Der Dimensionsfaktor ($2 \cdot$ Dimensionalität der Diffusion d) wird üblicherweise sehr lax behandelt. Von SOININEN et al. wurde die Positronendiffusion fälschlicherweise als eindimensionaler Prozeß betrachtet. Der entsprechende Faktor ($d = 3$) ist dort in der Diffusionskonstanten enthalten. Mit $\tau_b = 218$ ps in Si [AK94] folgt die Diffusionsweglänge in Si zu $L_+ = 245 \pm 10$ nm (siehe auch [Hak93]). In GaAs ($\tau_b = 228$ ps) ergibt sich ein Wert um $L_+ = 200 \pm 10$ nm.

Die effektive Annihilationsrate $\lambda_{\text{eff}}(z)$ enthält die Defektdichte (siehe Abschnitt 2.2.4) und die Lösung der Gleichung (2.2.5) ist Grundlage für die Defektprofilanalyse (siehe Abschnitt 2.2.6).

2.2.4. Positroneneinfang in leerstellenartige Defekte

Die Diffusion findet hauptsächlich im Zwischengitterbereich statt, da die positiv geladenen Atomrümpfe Positronen abstoßen. Fehlen Atome im Gitter oder treten negativ geladene Zentren in Halbleitern auf, so bildet sich ein für Positronen attraktives Potential aus. Dort kann es bis zur Annihilation in energetisch tieferliegenden Zuständen lokalisiert (eingefangen) werden. Dabei ist zu bemerken, daß nur thermalisierte Positronen eingefangen werden können. Grundsätzlich können Defekte mit offenem Volumen, z.B. Leerstellen und Leerstellencluster, Versetzungen, inkoherente Ausscheidungen aber auch negativ geladene Ionen ohne offenes Volumen als Einfangzentren wirken. Kein Einfang erfolgt dagegen an Zwischengitteratomen, nicht negativ geladenen Fremdatomen und Stapelfehlern. Diese Defekttypen sind für Positronen nicht nachweisbar. In Halbleitern spielt die Ladung der Defekte eine entscheidende Rolle beim Positroneneinfang. Für negativ geladene Defekte wird der Einfang wahrscheinlicher als für neutrale Defekte, der Einfang in positiv geladene leerstellenartige Defekte konnte trotz der Existenz von günstigeren Energieniveaus experimentell nicht nachgewiesen werden. Das repulsive Potential eines positiv geladenen Defekts kann offenbar nicht überwunden werden. In Abbildung 2.2 sind die auf die Positronen wirkenden Potentiale in der Nähe verschiedener Gitterdefekte schematisch gezeigt. Es

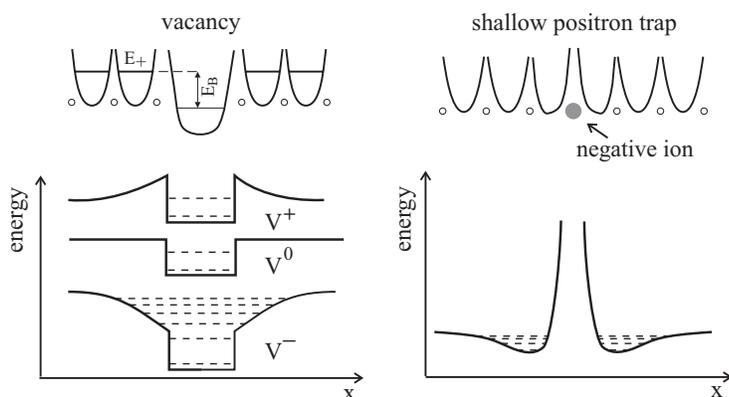


Abbildung 2.2: Energieniveaus von Leerstelle und flacher Falle für Positronen (nach [Kra92]). V^- und V^0 besitzen tiefe Energiezustände, in denen Positronen bis zur Annihilation gebunden werden können. Im Potential um die flache Falle können Positronen nur bei tiefen Temperaturen gebunden werden, wenn die thermische Energie nicht zum Entweichen ausreicht.

werden prinzipiell zwei Einfangmechanismen unterschieden. Die Einfangrate für *ratenlimitierten* Übergang ist von der Wahrscheinlichkeit des Übergangs vom delokalisierten in den lokalisierten Zustand abhängig [Nie79]. Der *diffusionslimitierte* Übergang ist für relativ große, nicht sehr dicht liegenden Einfangzentren wie z.B. Ausscheidungen zu beobachten, wenn der Einfangquerschnitt von der Diffusion der Positronen zum Defekt hin bestimmt wird [Bra74]. Für kleine Defekte, wie Leerstellen oder kleine Leerstellenagglomerate bis zu einer Größe von etwa 5 Leerstellen, ist immer der *ratenlimitierte* Übergang gültig [Nie79]. Danach ist die Einfangrate (auch: Trappingrate) κ_i in einen Defekt i proportional zur Defektdichte n_i :

$$\kappa_i = \mu_i n_i . \quad (2.2.7)$$

Der Proportionalitätsfaktor μ_i heißt Einfangkoeffizient (auch Trappingkoeffizient) und ist defektspezifisch. Zur Bestimmung von μ_i ist eine Referenzmethode nötig, um die Defektdichte n_i unabhängig zu messen. Genaue Zahlenwerte existieren aber nur für wenige Defekttypen und sind auf Grund von Skalierungsproblemen mit Fehlern behaftet [Kra97]. Typische Werte für Leerstellen sind $10^{14} - 10^{15} \text{ s}^{-1}$. Allgemein ist μ_i abhängig von der Ladung des Defekts. Der Einfang in neutrale Leerstellen ist temperaturunabhängig und schwächer als das in negative Leerstellen der Fall ist. Hier sorgt das attraktive COULOMB-Potential für flache RYDBERG-artige Zustände, in welche der Einfang temperaturabhängig ($T^{-1/2}$) ist [Pus90]. Von dort aus gehen die Positronen

sehr leicht in die tieferen Zustände des Defektes über. Die sogenannten flachen Positronenfallen (meist negative Ionen) in Halbleitern zeichnen sich durch besondere Eigenschaften aus. Zum einen ändern sich die Annihilationsparameter der eingefangenen Positronen kaum gegenüber denen im delokalisierten Zustand, so daß flache Positronenfallen direkt nur über die Verringerung der effektiven Positronendiffusionsweglänge nachweisbar sind. Zum anderen ist der Einfang in solche Fehlstellen stark temperaturabhängig. Das langreichweitige COULOMB-Potential bewirkt flache RYDBERG-artige Zustände und eine $T^{-1/2}$ -Abhängigkeit des Positroneneinfangs [Man81]. Zusätzlich können Positronen, die im flachen Potential um solche Gitterfehlstellen gebundene sind, thermisch zum Übergang in den delokalisierten Zustand angeregt werden und entweichen [Man81]. Die Temperaturabhängigkeit dieses Prozesses ist von der Bindungsenergie des Positrons in der flachen Falle bestimmt.

Für kleine Leerstellenagglomerate (bis zu 5 Leerstellen) nimmt man an, daß der Einfangkoeffizient proportional zur Größe des Defektes ist [Nie79]. Es ist somit möglich, die integrale Konzentration von Leerstellen zu messen, ohne Aussagen zur speziellen Natur der Defekte zu benötigen. So ist z.B. eine Anzahl von 6 Leerstellen zu messen, wenn eine Doppelleerstelle und eine Vierfachleerstelle vorliegen. Aktuelle Ergebnisse für spezifische Einfangraten in Silizium stammen von KAWASUSO et al. (ein mittlerer Wert ist $\mu_{\text{vac}} = 5 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$ [Kaw95]).

In Gebieten mit konstanter Defektdichte n_i reduziert sich die Diffusionsweglänge L_+ (Gl. (2.2.6)) auf die effektive Diffusionsweglänge $L_{+, \text{eff}}$:

$$L_{+, \text{eff}} = \sqrt{\frac{D_+}{\lambda_b + \kappa_i}}. \quad (2.2.8)$$

$L_{+, \text{eff}}$ läßt sich durch eine nichtlineare Anpassung aus den Daten einer Positronenstrahlungsmessung bestimmen und ist deshalb ein geeigneter Parameter zur unmittelbaren Charakterisierung von Proben (siehe Abschnitt 2.2.6). $\lambda_b + \kappa_i$ ist äquivalent zur effektiven Einfangrate λ_{eff} aus der Diffusionsgleichung (2.2.5).

Die untere Nachweisgrenze für leerstellenartige Defekte beträgt für Positronen etwa 10^{15} cm^{-3} [Hau95]. Die Obergrenze für die Positronenstrahltechnik wird dann erreicht, wenn $L_{+, \text{eff}}$ in die Größenordnung der mittleren freien Weglänge der Positronen kommt. Das entspricht einem Sättigungswert von ca. 8 nm. Dieser Wert wird z.B. in amorphem Si gefunden [Hak93], wo auf Grund der hohen Defektdichte keine Diffusion zu erwarten ist, sondern nach dem Thermalisieren sofort der Einfang erfolgt. Es können so leerstellenartige Defekte bis zu $5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ in Silizium nachgewiesen werden.

Auch an der Oberfläche, dem größten Kristalldefekt, können Positronen eingefangen werden. Die Elektronendichte ändert sich gegenüber dem Festkörper drastisch. Die spezielle elektronische Struktur der Oberfläche, ihre Rauigkeit und auch das Bildladungspotential von Positronen vor leitenden Oberflächen formen Positronenfallen. Weiterhin kann sich Positronium, ein gebundener, Wasserstoff-ähnlicher Zustand zwischen Positron und Elektron mit einer Bindungsenergie von ca. 6.8 eV, in verschiedenen Konfigurationen bilden [Sch88]. Einige Positronen können den Festkörper wieder verlassen, insbesondere dann, wenn die Positronenaustrittsarbeit negative Werte annimmt. Die vielen Möglichkeiten sind in [Hut90] zusammenfassend beschrieben. Bei der Untersuchung von Defekten im Inneren von Festkörpern ist es ausreichend, der Oberfläche spezifische Annihilationsparameter zuzuordnen, die die Gesamtheit ihrer Eigenschaften beschreiben.

2.2.5. Annihilationsparameter

Bei der Annihilation eines Positrons in einem lokalisierten Defektzustand ändern sich die Annihilationsparameter signifikant gegenüber der Annihilation im delokalisierten Zustand. Die Positronenlebensdauer erhöht sich proportional zu der geringeren Elektronendichte in den entsprechenden Defekten. Außerdem annihilieren Positronen im Defekt bevorzugt mit Elektronen geringerer Impulse und die Dopplerverbreiterung der Annihilationslinie wird verringert. Dadurch ist der Nachweis von Defekten möglich. An konventionellen Positronenstrahlensystemen

wird die Dopplerverbreiterung des Energiespektrums der bei der Annihilation entstehenden γ -Strahlung gemessen. Je nach Impulsdichteverteilung der Elektronen am Annihilationsort müssen Strukturen im Annihilationsspektrum auftreten, die durch die begrenzte Energieauflösung des Detektorsystems verbreitert sind. Man versucht die wesentlichen Bestandteile des Spektrums auf Parameter zu reduzieren, um physikalisch relevante Effekte handhabbar quantifizieren zu können.

So werden die Linienformparameter S (von engl. „Shape“ = Gestalt) und W (von engl. „Wing“ = Flügel) für das untergrundreduzierte Spektrum definiert. Der S -Parameter ist das Verhältnis der Zahl von Annihilationsereignissen im Zentrum des 511-keV Peaks zur Gesamtzahl im Peak, der W -Parameter ist das Verhältnis von Ereignissen in den Ausläufern des Peaks zur Gesamtereigniszahl im Peak. In Abbildung 2.3 werden die entsprechenden Intervalle zur Definition des S - und W -Parameters an im *koinzidenten* Modus aufgenommenen 511-keV Peaks der Annihilation im defektfreien Volumen und in leerstellenartigen Defekten gezeigt. Die Messung

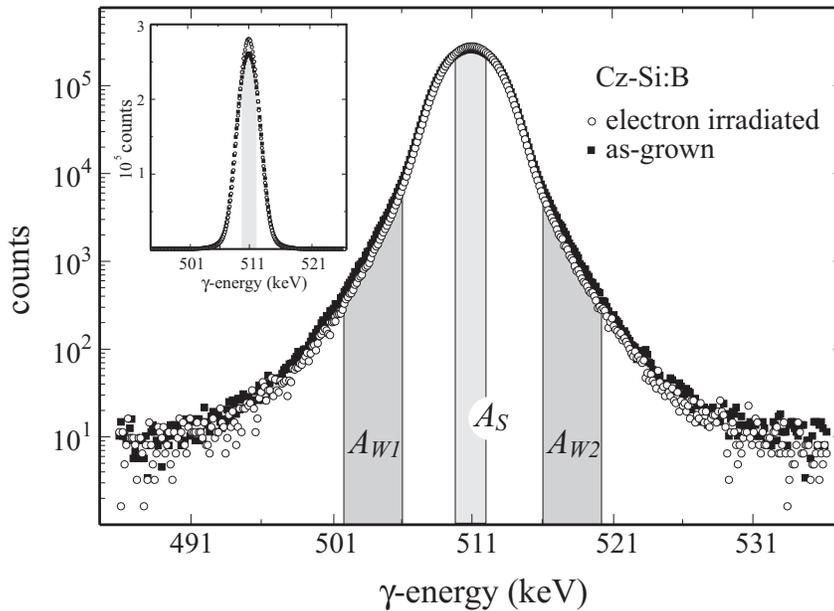


Abbildung 2.3: Definition des S - und W -Parameters am 511 keV γ -Peak und Vergleich von verschiedenen Annihilationspeaks.

koinzidenten Spektren beruht auf einer neu belebten technischen Entwicklung [Lyn79], bei der durch den *koinzidenten* Nachweis beider Annihilationsquanten eine drastische Untergrundreduktion im Meßspektrum erreicht wird [AK96]. Üblicherweise werden die Grenzen der Zentralregion so festgelegt, daß der S -Parameter im defektfreien Material einen Wert von 0.5 annimmt. In diesem Bereich ist die Empfindlichkeit für Änderungen am größten [AK94]. In unserem Fall entspricht das einer Zentralregion von 511 ± 0.8 keV. Hier sind hauptsächlich Informationen zu Elektronen mit kleinen Impulsen, d.h. Valenzelektronen mit niedrigen Bindungsenergien, enthalten. Der W -Parameter dagegen beinhaltet Aussagen zur Annihilation mit Elektronen hoher Impulse, den Rumpf-Elektronen. In Defekten mit offenem Volumen annihilieren die Positronen hauptsächlich mit Valenzelektronen der Nachbarn, die kleine Impulse besitzen. Daher ist im allgemeinen der S -Parameter bei Anwesenheit von leerstellenartigen Defekten gegenüber dem Wert im ungestörten Kristall erhöht, der W -Parameter erniedrigt. Eine genauere Analyse des W -Parameters bzw. der hochenergetischen Flanke des Annihilationsspektrums liefert Informationen über die chemische Umgebung eines Defektes, der als Einfangzentrum wirkt [Ala95, Ala96], wegen der Annihilation mit den elementspezifischen Rumpf-Elektronen der nächsten Nachbarn. Es gibt Fortschritte auf dem Gebiet der theoretischen Berechnungen der hochenergetischen Flanke

des DOPPLER-Spektrums [Ala95] wie auch des Gesamtspektrums [Hak97]. Damit wird eine präzisere Interpretation der Daten möglich, wie sie in der vorliegenden Arbeit noch nicht durchgeführt werden konnte. Der Meßaufwand für den Erhalt mit der Theorie vergleichbarer *koinzident* aufgenommener Daten ist jedoch ungleich höher (ca. 30 h) als bei konventionellen Messungen (ca. 20 min). Zusammenfassend kann man sagen, daß der *S*-Parameter im allgemeinen ein Maß für das offene Volumen eines Defektes ist, der *W*-Parameter ist eher sensitiv für die chemische Umgebung eines Defektes.

Jedem Zustand, in dem Positronen annihilieren, kann ein eigener charakteristischer *S*- bzw. *W*-Parameter zugeordnet werden. Die Absolutwerte der Parameter haben dabei keine physikalische Bedeutung, da sie von der Festlegung der Intervallgrenzen und den Eigenschaften des Detektorsystems abhängen. Von Interesse und mit anderen Ergebnissen vergleichbar sind nur Relativwerte, meist bezogen auf die im defektfreien Kristallvolumen gemessenen Werte S_b und W_b ⁵. Jeder gemessene *S*-Parameter (entsprechend auch *W*) setzt sich aus Anteilen verschiedener Annihilationszustände zusammen:

$$S_m = J_s S_s + J_b S_b + \sum_i J_i S_i \quad (2.2.9)$$

S_s, S_b, S_i sind die *S*-Parameter für vollständige Annihilation an der Oberfläche, im Kristallvolumen bzw. im Defektyp *i*. J_x sind die Anteile für Annihilation im jeweiligen Zustand mit der Nebenbedingung $\sum J_x = 1$. In den meisten Arbeiten zur Defektprofiluntersuchung werden die Annihilationsparameter als Funktion der Energie aufgenommen. Die $S(E)$ -Kurve enthält Tiefeninformationen und vermittelt einen visuellen Eindruck des Defektprofils. Quantitative Aussagen erfordern die Lösung der Diffusionsgleichung (2.2.5), die im Abschnitt 2.2.6 vorgestellt wird. Aus den gemessenen *S*-Parametern oder *W*-Parametern allein lassen sich im allgemeinen keine eindeutigen Rückschlüsse bezüglich des Defektyps oder der Defektdichte ziehen.

Die Analyse im sog. *S*-*W*-Plot⁶ liefert dazu detailliertere Informationen. Angenommen Annihilation aus zwei verschiedenen Zuständen liegt vor, so gilt nach Gl. (2.2.9):

$$S_m = f_1 S_1 + f_2 S_2, \quad (2.2.10)$$

wobei $S_{1(2)}$ der *S*-Parameter der Annihilation im Zustand 1(2) ist und weiterhin gilt: $f_1 + f_2 = 1$. Dann kann die Änderung von S_m mit den Annihilationsanteilen geschrieben werden als:

$$S_m - S_1 = f_2 (S_2 - S_1). \quad (2.2.11)$$

Eine äquivalente Gleichung kann für den *W*-Parameter gefunden werden. Der Annihilationsanteil f_2 wird durch Division eliminiert, und man erhält:

$$S_m = R (W - W_1) + S_1 \quad (2.2.12)$$

mit einem charakteristischen Parameter $R = (S_2 - S_1)/(W_2 - W_1)$ [Man78, Lis94]. Trägt man den *S*-Parameter gegen den *W*-Parameter auf, sollten die Punkte für unterschiedliche Annihilationsanteile auf einer Geraden mit dem Anstieg R zwischen den spezifischen Punkten (W_1, S_1) und (W_2, S_2) liegen. Für die Annihilation in drei Zuständen mit sich ändernden Anteilen ergeben sich z.B. mehr oder weniger gekrümmte Kurven, die sich asymptotisch den Verbindungslinien der spezifischen (W, S) -Punkte nähern. In Abbildung 2.4 ist ein einfaches Beispiel einer *S*-*W*-Analyse dargestellt. Hier sind für die verschiedenen Positronenenergien die *S*- gegen die *W*-Parameter aufgetragen. Mit geringen Energien implantierte Positronen annihilieren nahezu ausschließlich an der Probenoberfläche. Der Zustand (surface) wird durch die entsprechenden Annihilationsparameter (S_s, W_s) charakterisiert. Wird die Energie der Positronen erhöht, so kommt es zunehmend zum Positroneneinfang und Annihilation in leerstellenartigen Defekten. Zwei Annihilationszustände tragen zum Signal bei, und der Formalismus der Gleichungen (2.2.10) - (2.2.12) ist gültig. Die entsprechende Trajektorie ist eine Gerade. In einem bestimmten Energiebereich implantierte Positronen annihilieren ausschließlich in Defekten. Die spezifischen

⁵Der Index *b* stammt vom englischen Wort bulk für Kristallvolumen.

⁶Auftrag des *S*-Parameters gegen den *W*-Parameter

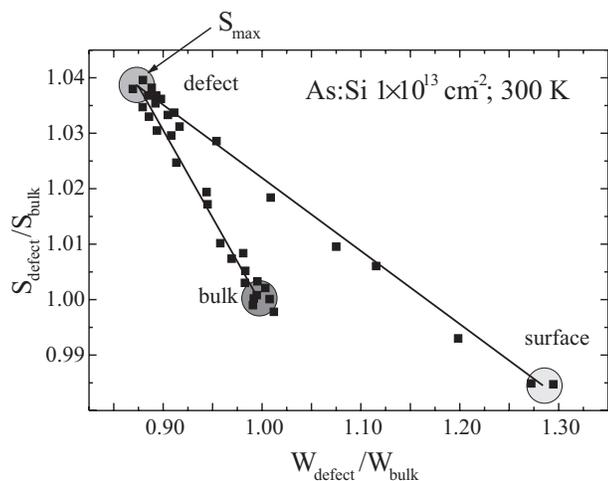


Abbildung 2.4: Ein einfaches Beispiel der S - W -Analyse ist anhand von Messungen an der $1 \times 10^{15} \text{ As}^+ \text{ cm}^{-2}$ implantierten Probe gegeben. Die drei Annihilationszustände der Positronen an der Oberfläche (surface), im leerstellenartigen Defekt (defect) und im ungestörten Kristall (bulk) werden von niedrigen zu hohen Positronenenergien (oder von geringen zu hohen Eindringtiefen) durchlaufen.

Annihilationsparameter können dem Graphen entnommen werden. An diesem Punkt sind verschieden behandelte Proben bezüglich der enthaltenen Defekte miteinander zu vergleichen. Für genügend hohe Positronenenergien werden Positronen in den ungestörten Kristall implantiert. Sie annihilieren dort mit spezifischen Parametern (bulk). Auch hier liegen die Punkte auf einer Geraden, denn im Übergangsbereich sind lediglich zwei Annihilationszustände existent. Im allgemeinen kann man also Aussagen zur Anzahl der beteiligten Annihilationszustände, zur Natur dieser Zustände (ähnlich einem Fingerabdruck) und zu den Anteilen der verschiedenen Signale treffen. In einigen Fällen kann die Sättigung des Positroneneinfangs in Defekte festgestellt werden. Eine sehr ausführliche Beschreibung der Möglichkeiten und Vorteile der S gegen W -Plots ist in [Cle96, Cle97] gegeben.

Die Identifizierung der verschiedenen leerstellenartigen Defekte mittels DOPPLER-Verbreiterung der Positronenannihilationslinie allein hat sich in der Vergangenheit als sehr schwierig herausgestellt. Viele Autoren haben in früheren Arbeiten ihre Messungen anhand nur eines Annihilationsparameters (S oder W , siehe Abschnitt 2.2.5) interpretiert. Gerade in ionenimplantierten Proben ist es nahezu unmöglich, den Zustand des gesättigten Positroneneinfangs in nur einen einzigen Defekttyp zu garantieren. Es sind immer eine Vergleichsmethode, mit der der Anteil des Positroneneinfangs in die Defekttypen bestimmt werden kann, und ein entsprechendes Modell notwendig. Dazu eignen sich z.B. Positronenlebensdauermessungen [Kau97, Ava94] oder auch **IR**-Messungen, aus denen beispielsweise die Konzentration der Doppelleerstelle bestimmt werden kann [Eic97a]. Weiterhin sind die auf die Werte im ungestörten Volumen normierten S -

Tabelle 2.1: Theoretisch berechnete Doppler-Parameter für Leerstellen-Agglomerate in Silizium (aus [Hak97]).

System	S/S_b	W/W_b
Si-Volumen	$S_b = 0.5344$	$W_b = 0.01701$
V	1.0186	0.86
V ₂	1.045	0.72
V ₃	1.053	0.68
V ₄	1.067	0.64
V ₅	1.081	0.59

und W -Parameter von der Energieauflösung des Detektorsystems abhängig. Lediglich an einer Apparatur gemessene Annihilationsparameter sind miteinander vergleichbar. So gibt es z.B. für die Doppelleerstelle in Silizium unterschiedliche Werte ($S_{2v}=1.040$ [Sim97], $S_{2v}=1.040$ [Eic97a],

$S_{2v}=1.052$ [Kau97], $S_{2v}=1.067$ [Ava94]). Inzwischen gibt es auch theoretische Berechnungen der Impulsverteilung von Positronen-Elektronen-Paaren in Silizium [Hak97]. Um die berechneten DOPPLER-Kurven mit dem Experiment vergleichen zu können, werden sie mit einer der experimentellen Auflösungsfunktion entsprechenden GAUSS-Verteilung gefaltet. Die Ergebnisse der theoretische Rechnungen sind in der Tabelle 2.1 zusammengefaßt. Hier ist zur Faltung eine GAUSS-Verteilung mit einer Halbwertsbreite von 1.19 keV verwendet worden. Wenn man die theoretischen DOPPLER-Spektren für das ungestörten Silizium und für einen leerstellenartigen Defekt mit verschiedenen breiten Auflösungsfunktionen faltet, was Messungen an Apparaturen mit verschiedener Energieauflösung entspricht, dann ergeben sich nicht unerwartet Unterschiede für die normierten Annihilationsparameter S/S_b und W/W_b . In der Abbildung 2.5 sind die Ergebnisse einer solchen Analyse am Beispiel leerstellenartiger Defekte in Silizium (100-Richtung) dargestellt. Es wurden die von HAKALA et al. theoretisch berechneten Spektren mit verschiedenen

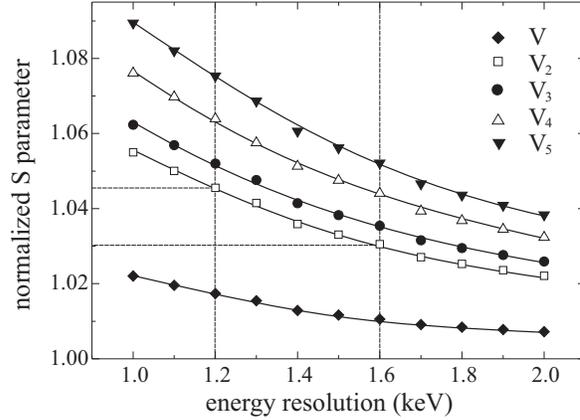


Abbildung 2.5: Abhängigkeit des normierten S -Parameters für verschiedene Leerstellenagglomerate von der experimentellen Energieauflösung des Detektors bei der Energie des 511-keV Annihilationsquants.

breiten GAUSS-Kurven gefaltet. Das S -Parameter-Intervall wird dabei üblicherweise so gewählt, daß der S -Parameter für das im ungestörten Volumen gemessene Spektrum möglichst nahe an 0.5 liegt. Wenn man in Anbetracht des in Abbildung 2.5 dargestellten Abhängigkeit die von den verschiedenen Autoren angegebenen Energieauflösungen der Spektrometer vergleicht (Western Ontario 1.3 keV, Helsinki 1.2 keV, Halle 1.53 keV, Winipeg 1.2 keV, Delft 2.2 keV), so wird klar, daß die mit verschiedenen Systemen gemessenen normierten Annihilationsparameter S/S_b untereinander nicht ohne weiteres vergleichbar sind. Auch W/W_b ist von der Detektorauflösung abhängig. Ein Vergleich von Daten, die in ein und derselben Anlage mit unveränderten Spektrometerparametern gemessen wurden, ist zulässig. Literaturwerte können nur sehr begrenzt verglichen werden. Eine Übereinstimmung ist nur ein schwaches Indiz für das Vorliegen gleicher Defekttypen, wenn man nicht gleichzeitig die genauen Energieauflösungen der Detektoren kennt. Viele Autoren geben diese Größe nicht an, oder sie ermitteln sie in einem anderen Energiebereich. Die gestrichelten Linien in Abbildung 2.5 verdeutlichen die zu erwartenden Abweichungen, die in dem Bereich der S -Parametererhöhung von einer Leerstelle liegt.

2.2.6. Bestimmung von Defektprofilen

Zur Extraktion der Verteilung leerstellenartiger Defekte aus Positronenstrahlungsmessungen ist die diskrete Lösung der Diffusionsgleichung (2.2.5) über den gesamten von Positronen bevölkerten Bereich nötig. Für N Tiefenintervalle ($[z_{i-1}, z_i]; i = 1, \dots, N; z_0 = 0$) mit konstanter Defektdichte $n_i(z)$ und konstantem elektrischen Feld $\mathcal{E}_i(z)$ existieren analytische Lösungen von (2.2.5) [Sch88, vV90, Smi92]):

$$c_i(z) = A \exp(z\gamma^+) + B \exp(z\gamma^-) + P(E, z)/L_{+, \text{eff}}^2 \quad (2.2.13)$$

mit

$$\gamma^\pm = -\frac{1}{2} \left(\frac{e\mathcal{E}_i(z)}{k_B T} \pm \sqrt{\left(\frac{e\mathcal{E}_i(z)}{k_B T} \right)^2 + \left(\frac{4}{L_{+, \text{eff}}^2} \right)} \right) \quad (2.2.14)$$

$P(E, z)$ ist das Implantationsprofil der Positronen (siehe Abschnitt 2.2.2) und $L_{+, \text{eff}}$ die effektive Diffusionsweglänge nach Gl. (2.2.8). A und B sind Konstanten. Deren Bestimmung erfolgt aus der Lösung der $2N$ Randbedingungen (lineares Gleichungssystem [vV90]):

$$c_i(z_i) = c_{i+1}(z_i), \quad \forall i = 1, \dots, N-1, \quad (2.2.15)$$

$$\left[\frac{dc_i}{dz} \right]_{z_i} - \frac{eD_+}{k_B T} \mathcal{E}_i(z_i) = \left[\frac{dc_{i+1}}{dz} \right]_{z_i} - \frac{eD_+}{k_B T} \mathcal{E}_{i+1}(z_i), \quad \forall i = 1, \dots, N-1, \quad (2.2.16)$$

$$\left[\frac{dc_1}{dz} \right]_{z_0} = \frac{c_1(z_0)}{L_a}, \quad (2.2.17)$$

$$\left[\frac{dc_N}{dz} \right]_{z_N} = \frac{c_N(z_N)}{L_+}. \quad (2.2.18)$$

Die Gleichungen (2.2.15) folgen aus der Forderung nach Stetigkeit von $c(z)$. Aus der Stetigkeit für die Driftterme ergeben sich die Randbedingungen (2.2.16). Der Positronenabfluß zur Oberfläche wird durch eine Absorptionslänge L_a in Gleichung (2.2.17) beschrieben. Geht L_a gegen 0, ist die Oberfläche total reflektierend, für $L_a \rightarrow \infty$ ist die Oberfläche total absorbierend [Sch88]. Im feldfreien Gebiet ($z > z_N$), in dem keine Positronen implantiert werden, nimmt die Positronenkonzentration exponentiell ab:

$$c(z) = c(z_N) \exp\left(-\frac{z - z_N}{L_+}\right) \text{ für } z > z_N. \quad (2.2.19)$$

Bei konstanter Defektdichte $n(z)$ für $z > z_N$ ist L_+ in Gl. (2.2.19) durch die effektive Diffusionsweglänge $L_{+, \text{eff}}$ zu ersetzen. Der entsprechende Positronenfluß ins Volumen ist in Gl. (2.2.18) gegeben.

Der Anteil der Positronen, der im Intervall i annihiliert, wenn ein Positronen im Intervall j implantiert wird, ist:

$$t_{i,j} = \left[\frac{dc_{i+1}}{dz} \right]_{z_i} - \left[\frac{dc_i}{dz} \right]_{z_{i-1}} - \frac{eD_+}{k_B T} \mathcal{E}_{i+1} c_{i+1}(z_i) + \frac{eD_+}{k_B T} \mathcal{E}_i c_i(z_{i-1}) + \delta_{i,j}. \quad (2.2.20)$$

Das KRONECKER-Symbol $\delta_{i,j}$ liefert 1 für $i = j$, ansonsten ist es Null. Mit den $t_{i,j}$ kann der totale Anteil Positronen T_i , der im Tiefenintervall i annihiliert, berechnet werden:

$$T_i(E) = \sum_{j=1}^N P_j(E) t_{i,j}. \quad (2.2.21)$$

P_j ist die durch das Implantationsprofil gegebene Wahrscheinlichkeit für den Positronenstopp im Intervall j . Daraus folgt eine Gleichung für den S -Parameter zu einer gegebenen Energie E :

$$S'(E) = \sum_{i=1}^N S_i T_i + T_S S_S. \quad (2.2.22)$$

$T_S = 1 - \sum_i^N T_i$ ist der Anteil Positronen, die zur Oberfläche gelangen und dort mit dem charakteristischen S -Parameter S_S annihilieren. Der Anteil *epithermischer* Positronen an der Oberfläche [Bri88] ist:

$$J_{\text{epi}}(E) = \int_0^{\infty} P(E, z) \exp\left(\frac{-z}{L_{\text{epi}}}\right) dz. \quad (2.2.23)$$

$J_{\text{epi}}(E)$ hängt von einer *epithermischen* Streulänge L_{epi} (ca. 1 nm für viele Materialien [Sch88]) ab und findet Berücksichtigung in

$$S(E) = S'(E)(1 - J_{\text{epi}}(E)) + S_{\text{epi}} J_{\text{epi}}(E). \quad (2.2.24)$$

Der beschriebene Formalismus gestattet es, die Energieabhängigkeit des S -Parameters aus Angaben zum Defektprofil zu berechnen. Eine Anpassung des Defektprofils an die gemessenen Daten $S(E)$ ist nach einer semi-linearen Methode nach MARQUARDT mit dem Programm **VEPFIT** möglich [vV90]. Zunächst werden die linearen Parameter des Modells (S -Parameter) berechnet, die nichtlinearen Parameter (Diffusionsweglängen, Schichtgrenzen, elektrische Felder) werden iterativ unter jeweiliger Neuberechnung des linearen Anteils angepaßt. Einschränkend ist die Tatsache, daß nur jeweils 6 nichtlineare Parameter gleichzeitig angepaßt werden können.

Das Defektprofil wird in Form von effektiven Diffusionsweglängen $L_{+,eff}$ innerhalb bestimmter Tiefenintervalle berechnet. Die Einfangrate läßt sich nach Gl. (2.2.8) und Gl. (2.2.6) ermitteln:

$$\kappa_t = \frac{1}{\tau_b} \left(\left(\frac{L_+}{L_{+,eff}} \right)^2 - 1 \right), \quad (2.2.25)$$

wobei τ_b die Positronenlebensdauer im defektfreien Material ist. Bei Annahme von Positroneneinfang in ausschließlich einen Defekt und Kenntnis dessen spezifischen Einfangrate μ_t läßt sich dann mit Gl. (2.2.7) die Defektkonzentration berechnen.

Insgesamt muß gesagt werden, daß die Anpassung bei komplizierteren Defektprofilen ohne feste Annahmen keine eindeutigen Ergebnisse liefert. Es kommt dazu, daß einige Eingabeparameter nur ungenau bekannt sind (u.a. Implantationsprofil, Diffusionskonstanten, epithermische Streulänge, elektrische Felder). Deshalb ist in dieser Arbeit versucht worden, sich auf Relativaussagen zu beschränken, die unter den gleichen vernünftigen Modellparametern erhalten wurden. Weiterhin sind möglichst einfache Defektprofile erzeugt worden, so daß die Anzahl der anzupassenden nichtlinearen Parameter auf ein Minimum beschränkt werden konnte. Die Anwendung und die Möglichkeiten des Programms **VEPFIT** zur Analyse von Positronenstrahlungsmessungen ist in [Geb94] detailliert dargestellt.

2.2.7. Technische Details

Alle Messungen mit langsamen Positronen wurden am Positronenstrahlssystem POSSY in Halle durchgeführt. Die Anlage ist in [Eic94] ausführlich beschrieben. Im folgenden sollen die wichtigsten Eigenschaften genannt werden.

Primär werden die Positronen vom β^+ -Strahler ^{22}Na (Halbwertszeit: 2.6 Jahre) erzeugt. Die Aktivität der Quelle betrug beim Einbau 1994 ca. 1.8 GBq (50 mCi), eine Bleiabschirmung sorgt dafür, daß das Gerät die Grenzwerte für den Betrieb im Kontrollbereich (Dosisleistung kleiner

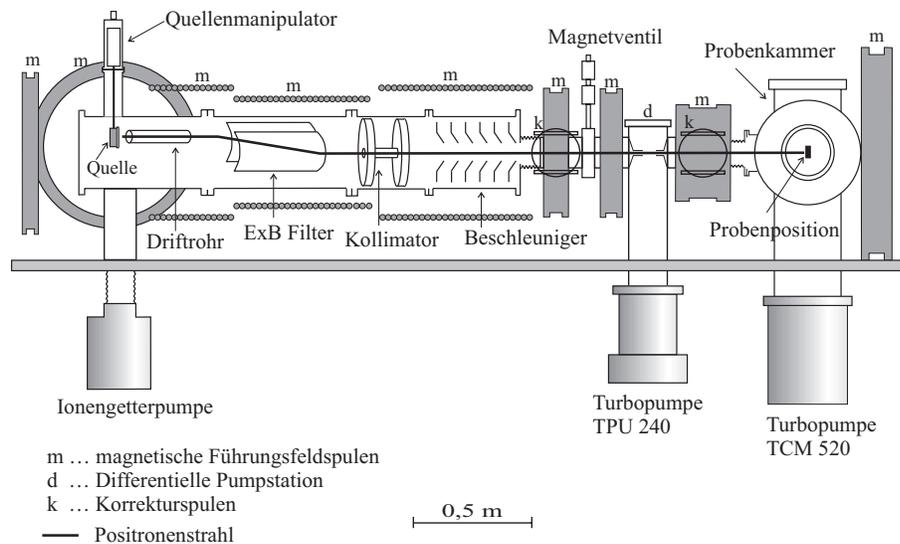


Abbildung 2.6: Schematische Darstellung des Positronenstrahlsystems (aus [Geb95]).

als $7.5 \mu\text{Sv/h}$) nicht überschreitet. Die Moderation wird in einer Wolframeinkristallfolie ($4 \mu\text{m}$ dick) mit einer Effizienz von ca. 10^{-5} realisiert. Die Separation der langsamen Positronen von den schnellen erfolgt in einem $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Filter. Für die Nachbeschleunigung auf maximal 50 keV sorgt ein aus 5 Dynoden aufgebauter Linearbeschleuniger. POSSY ist ein magnetisch geführter Positronenstrahl, d.h. Positronen mit Geschwindigkeitskomponenten senkrecht zur Strahlrichtung werden von einem homogenen Magnetfeld auf eine Spiralbahn gezwungen und bis zur Probe geführt. Die Annihilationsquanten werden dort mit Hilfe eines hochreinen Germanium-Detektors (ORTEC) registriert und ihre Energie wird analysiert. Die Energieauflösung des Detektors beträgt 1.53 keV bei einer Energie von 514 keV (gemessen am Isotop ^{85}Sr). Die gesamte Anlage arbeitet im Hochvakuum (10^{-5} Pa), um die empfindliche Moderatorfolie vor Umwelteinflüssen zu schützen und um die mittlere freie Positronenweglänge von einigen Metern zu gewährleisten (siehe auch [Eic94]). Der gesamte Aufbau des Positronenstrahlsystems ist in der Abbildung 2.6 schematisch dargestellt.

Detektorsystem. Das Herzstück der Apparatur bildet der energieauflösende Detektor. Die Abbildung 2.7 zeigt das Blockschaltbild des Detektorsystems. Der hochreine Germanium-Kristall besitzt 3 Zonen, eine p-leitende, eine n-leitende und dazwischen eine intrinsische Zone. Bei tiefen Temperaturen (77 K durch flüssigen Stickstoff gekühlt) existieren in der intrinsischen Zone keine Ladungsträger. Einfallende γ -Quanten erzeugen Ladungsträger, die bei angelegter Hochspannung (z.B. 2.5 kV) getrennt werden und einen Strompuls liefern. Hauptsächlich gibt es dabei

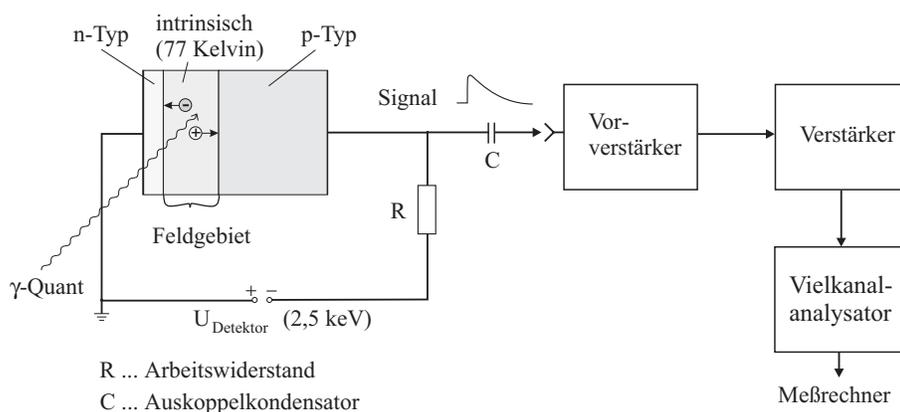


Abbildung 2.7: Schematische Darstellung des γ -Detektors (aus [Eic94]).

zwei Wechselwirkungsmechanismen. Die einfallenden Photonen geben ihre gesamte Energie an ein Elektron weiter (Photoelektrischer Effekt), das seinerseits Elektronen-Loch-Paare erzeugt (2.95 eV/Pair). Der Detektorpuls ist proportional zur Energie des einfallenden Photons. Solche Ereignisse formen den sogenannten 'Photopeak' im Spektrum, der letztendlich zur Messung der Energie der Annihilationsquanten benutzt wird. Der Wechselwirkungsquerschnitt ist proportional zur fünften Potenz der Ordnungszahl des Detektormaterials ($Z \dots$ Ordnungszahl). Streuen die Photonen an Elektronen quasielastisch, kommt es zum sog. COMPTON-Effekt. Die resultierenden γ -Energien sind verteilt bis zur sogenannten COMPTON-Kante, die energetisch vor dem Photopeak liegt. Dieser Effekt wirkt sich ungünstig auf die Auswertung des Photopeaks aus, da er den niederenergetischen Untergrund des Spektrums erhöht.

Eine nachfolgende Elektronik verstärkt die Signale, die dann in einem Vielkanalanalysator gespeichert werden. Es wird zu jeder Positronenenergie ein komplettes γ -Spektrum mit dem Germanium-Detektor gemessen. In der Abbildung 2.8 wird ein typisches Annihilationsspektrum gezeigt. Im Spektrum ist der 511-keV -Annihilationspeak klar zu erkennen. Zu niedrigen Energien schließt sich ein Untergrund an, der hauptsächlich durch COMPTON-Streuung im Detektor entsteht. Die Photopeaks bei kleinen Energien entstehen durch Annihilationsquanten, die an der den Detektor umgebenden Blei-Abschirmung gestreut wurden.

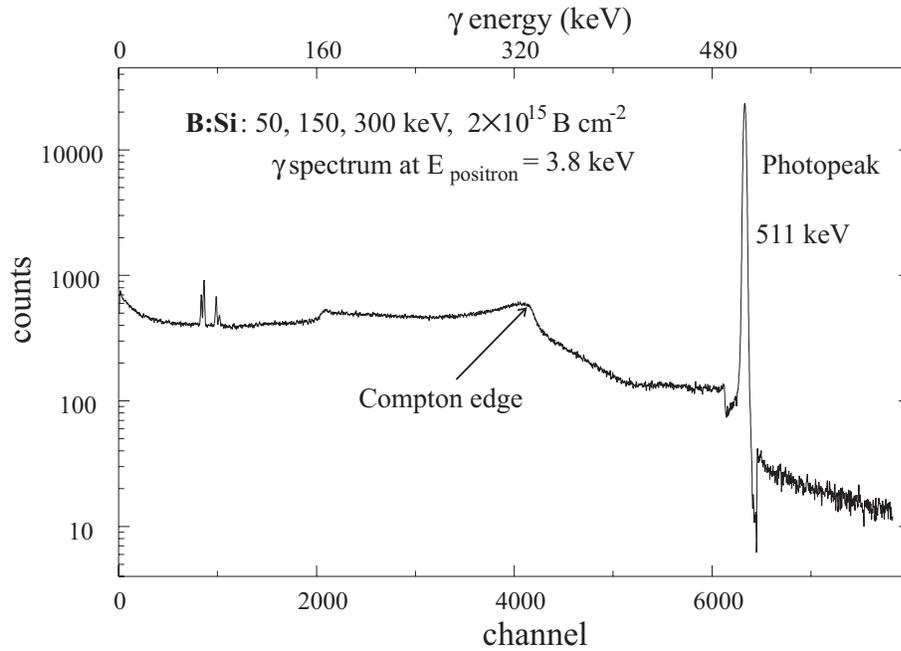


Abbildung 2.8: Typisches Annihilationsspektrum gemessen mit einem hochreinen Germanium-Detektor. Die Kanalbreite beträgt 0.08 keV (aus [Geb95]).

Der sich aus dem Spektrum ergebende S -Parameter genügt einer Binomial-Verteilung [Hak93], und der statistische Fehler σ_S lässt sich dann wie folgt angeben:

$$\sigma_S = \sqrt{\frac{S(1-S)}{N}}. \quad (2.2.26)$$

Hier ist S der gemessene S -Parameter und N die Zahl gemessener Ereignisse im 511 keV-Peak. Damit Änderungen im S -Parameter in der Größenordnung von 0.001% detektiert werden können, ist demnach eine Zahl von mindestens 10^6 Ereignissen im Photopeak aufzunehmen, was eine Meßzeit von 10 - 20 Minuten pro Spektrum erfordert. Für die Messung der hochenergetischen Flanke des Photopeaks, die Aussagen zur chemischen Umgebung des Defekts enthält, ist insgesamt eine höhere Statistik nötig, da in dem relevanten Bereich die Anzahl der Ereignisse reduziert ist.

Probenhalterung und Temperaturkontrolle. Neben Raumtemperaturprobenhaltern wurde ein Probenhalter für temperaturabhängige Messungen und in-situ-Ausheilungen aufgebaut. Dieser Halter arbeitet in einem Temperaturbereich von 100 bis 1100 K. Eine schematische

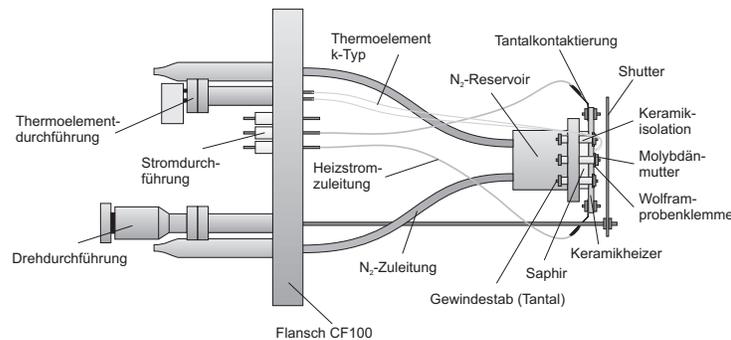


Abbildung 2.9: Schematische Darstellung des Probenhalters für die Temperexperimente (aus [Eic94]).

Darstellung der Konstruktion ist in der Abbildung 2.9 gezeigt. Im Temperaturbereich von 100 K bis zu Raumtemperatur wird das Prinzip der Gegenheizung genutzt, d.h. gegenüber einem kalten LN-Reservoir (77 K) wird durch entsprechendes Heizen ein Gradient so eingestellt, daß am Probenort die gewünschte Temperatur herrscht. Für die Wärmekopplung sorgt ein Saphir (ca. 5 mm dick, ausschließlich phononische Wärmeleitung), der zwischen Heizplatte und Stickstoff-Reservoir angebracht ist. Bei höheren Temperaturen als Raumtemperatur wird ausschließlich geheizt und der Saphir unterbricht den Wärmekontakt zum LN-Reservoir. Die UHV-taugliche Widerstandsheizung wird durch eine in Bornitrit eingebettete Graphitbahn realisiert. Gemessen wird die Temperatur mit Hilfe eines K-Typ-Thermoelements (NiCr/Ni), das an die Probe angepunktet wird. Ein PID-Regler kontrolliert die Temperatur über die Regelung des Heizstroms.

2.3. RUTHERFORD-Rückstreuung

Die RUTHERFORD-Rückstreuung (engl. **RUTHERFORD Backscattering Spectrometry (RBS)**) basiert auf dem RUTHERFORD-schen Experiment, die Struktur fester Materie durch den Beschuß hochenergetischer Teilchen aufzuklären, indem die Winkel- und Energieverteilung der gestreuten Teilchen gemessen wird. In kristallinen Festkörpern kann man Informationen zur Störung der Gitterstruktur erhalten, wenn man die hochenergetischen Teilchen in niedrig indizierte Kristallrichtungen einschießt. Im idealen Gitter wird ihre Bewegung kaum gebremst (channeling). Sind jedoch Gitteratome deplaziert oder sitzen Fremdatome in den Kanälen, dann erhöht sich die Rückstreausbeute. Neben dem Nachweis ausgedehnter Kristalldefekte wie Versetzungen, Stapelfehler und Korngrenzen, ist auch die tiefenaufgelöste Untersuchung von Punktdefekten möglich. Für die Analyse von Strahlenschäden nach Ionenimplantation ist **RBS** besonders geeignet, weil sowohl der Tiefenbereich von einigen Mikrometern als auch die nachweisbaren Defektkonzentrationen von 0.05 bis 1 relative Atomdichte durch Ionenimplantation mit relativ hohen Dosen erreicht werden. **RBS** wird hauptsächlich bei der Untersuchung von Prozessen der Amorphisierung und Rekristallisation angewendet. Entsprechend ihren Wechselwirkungsmechanismen ist **RBS** hauptsächlich empfindlich für Zwischengitteratome, die eine direkte Blockierung der Ionenbahnen bewirken. Der Nachweis anderer Defekte (insbesondere Leerstellen und Leerstellenkomplexe) ist dagegen nur sehr eingeschränkt (über ihr Verzerrungsfeld) möglich. **RBS** bietet sich damit als Ergänzung zur Positronenstrahltechnik an, die für Zwischengitteratome nicht empfindlich ist. Einen umfassenden Überblick über die Methode und ihre Möglichkeiten gibt [Goe88]. Hier soll nur eine kurze Einführung mit dem Schwerpunkt auf für die Arbeit relevante Fragen folgen.

2.3.1. Methodik

Eine wichtige Rolle für die Behandlung von **RBS**-Spektren spielt der kinematische Faktor k , der den Energieverlust in Abhängigkeit von Stoßmassen M_1 und M_2 und -Winkel θ . Er folgt aus dem „Harte Kugeln“-Modell der kinetischen Stoßtheorie und ist:

$$k = \left(\frac{\cos \theta + \sqrt{(M_2/M_1)^2 - \sin^2 \theta}}{1 + M_2/M_1} \right)^2. \quad (2.3.1)$$

Eine nähere Analyse der Gleichung (2.3.1) zeigt, daß die Messung der Rückstreausbeute bei großen Streuwinkeln am empfindlichsten ist. Bei einem festen Winkel (z.B. 177°) wird die Energieverteilung leichter, monoenergetischer Ionen (meist He mit einigen MeV) gemessen, die von der Probe zurückgestreut werden. Am Beispiel der Abbildung 2.10 soll das Meßprinzip kurz erläutert werden. Ein Ionenstrahl (Ionen mit M_1 und Z_1) trifft mit der Energie E_0 auf einen Kristall, bestehend aus zwei Atomsorten mit M_2 und Z_2 und mit M_3 , Z_3 . Auf seiner Oberfläche befindet sich ein dünner Film von Atomen mit M_4 und Z_4 . Ein Detektor registriert die um einen Winkel θ gestreuten Ionen und analysiert ihre Energie. Im unteren Teil der Abbildung sind charakteristische Spektren für den Einschuß in niedrig indizierte Richtungen („aligned“) und Einschuß in beliebige Richtungen („random“) dargestellt. Der Begriff „random“ kennzeichnet Bedingungen, wie sie bei Rückstreuung von amorphen Schichten oder außerhalb

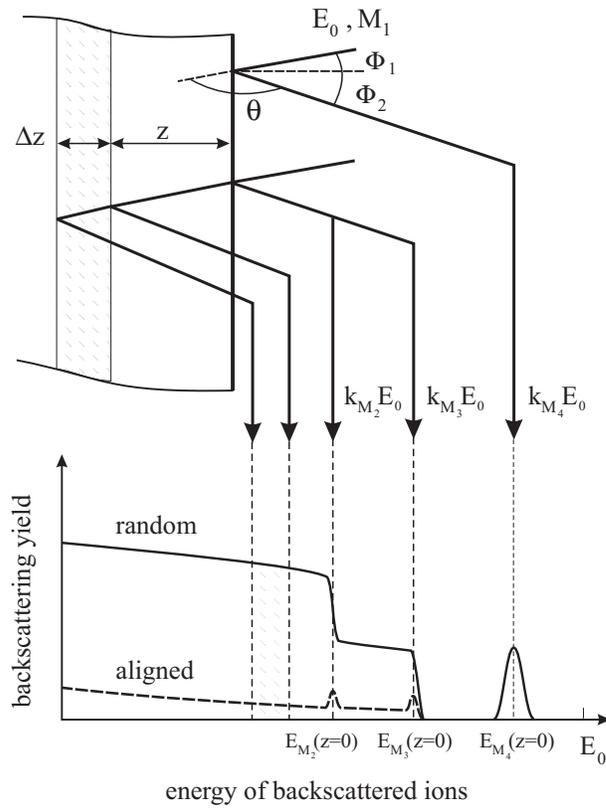


Abbildung 2.10: Meßprinzip bei Rutherford-Rückstreuung, Streuprozeß und Energiespektren bei kanalisiertem und nicht-kanalisiertem („random“) Einschuß (nach [Goe88]).

kristallografischer Vorzugsrichtungen herrschen. An der Oberfläche kommt es auch beim gerichteten Strahl zur erhöhten Rückstreuung (nicht alle Ionen finden einen Kanal), was dem Peak im Channeling-Spektrum entspricht. Die auf „random“-Ausbeute Y_{ran} normierte Ausbeute χ steigt mit zunehmender Eindringtiefe an. Ursache sind Wechselwirkungen, die eine stetige Dekanalierung verursachen, z.B. Gitterschwingungen und die Wechselwirkung mit Elektronen. Die Energie $E(O)$ der an der Oberfläche gestreuten Ionen ist um den elastischen Anteil vermindert (kinematische Faktor), der bei Streuung an Kristall- bzw. Fremdatome abgegeben wird. Die so entstehenden isolierten Peaks sind wegen der unterschiedlichen kinematischen Faktoren nach Atommassen getrennt. Aus dem allgemeinen Energieverlust der Sondenionen auf ihrem Weg durch das Target dE/ds läßt sich die Energie einer Tiefe zuordnen. Die Energie eines in der Tiefe z gestreuten Ions beträgt im Laborsystem:

$$E(z) = k \left(E_0 - \int_0^{z/\cos\phi_1} \left(\frac{dE}{ds} \right)_{\text{in}} ds \right) - \int_0^{z/\cos\phi_2} \left(\frac{dE}{ds} \right)_{\text{out}} ds . \quad (2.3.2)$$

Darin sind ϕ_1 und ϕ_2 die Winkel zwischen Ein- und Austrittsrichtung des Ionenstrahls und der Oberflächennormale des Kristalls. Diese Energie-Tiefen-Konversion erlaubt es, Defektverteilungen mit einer Tiefenauflösung von 20 - 30 nm zu messen. Dabei ist die Tiefenauflösung eine Funktion der Energieauflösung des Detektors $\delta E'$ und der geometrischen Bedingungen:

$$\delta z = \frac{\delta E'}{\frac{k}{\cos\phi_1} \epsilon_{\text{in}} + \frac{1}{\cos\phi_2} \epsilon_{\text{out}}} \quad (2.3.3)$$

wobei ϵ_{in} und ϵ_{out} die als konstant angenommenen Energieverluste pro Weg der einfallenden bzw. ausfallenden Ionen sind. Durch geeignete Optimierung der Winkel kann die Tiefenauflösung verbessert werden.

2.3.2. Defektprofilanalyse mit RBS

Die Defektprofilanalyse mit **RBS** basiert auf der Dekanalisation (Dechanneling) der Ionen bei Anwesenheit von Defekten. Die Probe wird dabei zunächst nach der Kanalisierungsbedingung ausgerichtet, das heißt die integrale Rückstreuerausbeute sollte minimal sein. Die meisten Ionen bewegen sich dann in einem Kanal niedrig indizierter Richtung. Dekanalisation bedeutet nun, das ein Defekt oder ein Ausläufer eines Defektes eine Blockierung des Kanals bewirkt, und das Ion zurückgestreut wird. Typische Defekte, die eine Rückstreuung hervorrufen, sind beispielsweise Zwischengitteratome, Versetzungen und Stapelfehler. Aber auch Verzerrungsfelder von leerstellenartigen Defekten führen zu „verbogenen“ Kanälen, die zu erhöhten Rückstreuerausbeuten beitragen. Für vollständig amorphe Materialien ist die Rückstreuung maximal und es läßt sich kein Minimum der integralen Rückstreuerausbeute finden. Die Energie-Tiefen-Konvertierung nach Gl. (2.3.2) erlaubt es, die Rückstreuerausbeute $Y(z)$ einer entsprechenden Tiefe zuzuordnen. Typische Rückstreuenspektren aus eigenen Messungen werden im Kap. 3 gezeigt.

Quantitative Aussagen über Verteilung, Konzentration und Art der vorhandenen Defekte erlaubt die **RBS**-Spektroskopie ebenfalls. Man verwendet dazu häufig die auf die Rückstreuerausbeute in „random“-Richtung normierte Minimum-Ausbeute

$$\chi_{\min}(z) = Y_{\text{aligned}}(z)/Y_{\text{random}}(z) \quad (2.3.4)$$

als Funktion der Tiefe, oder auch die Differenz zwischen der normierten Minimum-Ausbeute der zu untersuchenden und einer perfekt kristallinen Probe

$$\Delta\chi_{\min}(z) = \chi_{\min}(z) - \chi_{\min,\text{perf}}(z) . \quad (2.3.5)$$

Für hohe Defektkonzentrationen (größer als 0.1 at%) kann man davon ausgehen, daß verschiedene Defekte mit verschiedenen Auslenkungen r_a in den Kanal existieren. Im Rahmen der sog. Zwei-Strahl-Näherung [Bøg68] werden zwei Rücksteuanteile unterschieden, ein Anteil, der vom perfekten Kristall zurückgestreut wird, und ein Anteil, der durch Rückstreuung an Defekten entsteht. Mit tabellierten Werten für die Dekanalisationswahrscheinlichkeit als Funktion der Defektverteilung $P(n_{da}(z))$ kann man den Dekanalisationsbeitrag $\chi_r(z)$ berechnen, und es ergibt sich das Defektprofil iterativ:

$$n_{da}(z) = \frac{\chi_{\min}(z) - \chi_r(z)}{1 - \chi_r(z)} \quad \text{mit} \quad (2.3.6)$$

$$\chi_r(z) = \chi_{\min,\text{perf}}(z) + [1 - \chi_{\min,\text{perf}}(z)]P(n_{da}(z)) . \quad (2.3.7)$$

Für geringere Defektkonzentrationen (kleiner als 0.1 at%) kann man annehmen, daß Defekte mit einer definierten mittleren Auslenkung r_a von den regulären Gitterplätzen existieren. Die Dekanalisation erfolgt durch zufällig verteilte Stöße mit Defekten (mit der Wahrscheinlichkeit $\square_i^{da}(r_a)$) oder mit thermisch ausgelenkten Gitteratomen (mit der Wahrscheinlichkeit $\square_i(T)$). Den thermischen Beitrag kann man durch Variation der Meßtemperatur separieren. Die Verteilung der Defekte $n_{pd}(z)$ und die mittlere Auslenkung der Defekte r_a läßt sich durch Lösung der Gleichung

$$n_{pd}(z) = \frac{\chi_{\min}(z) - \sum_i g_i(z) \square_i(T)}{\sum_i g_i(n_{da}(z)) \left[\square_i^{da}(r_a) - \square_i(T) \right]} \quad (2.3.8)$$

für bei unterschiedlicher Temperatur gemessene Spektren bestimmen [Goe88]. g_i bedeutet dabei die relative Anzahl rückgestreuter Ionen im i -ten Energieintervall. Auch hier ist die Lösung nur iterativ möglich, da g_i die Defektdichte $n_{pd}(z)$ ebenfalls enthält. Die Bestimmung der Auslenkung r_a erlaubt prinzipiell Aussagen über Defekttypen und die mikroskopische Konfiguration von Defekten. Sehr ausführlich sind die neuesten Möglichkeiten der Auswertung und Interpretation von **RBS**-Daten in [Gär97] beschrieben.

2.3.3. Technik

Die **RBS**-Messungen wurden am Jenaer VAN-DE-GRAAF-Beschleuniger unter Benutzung von 1.4 MeV He⁺-Ionen durchgeführt. Die rückgestreuten Ionen wurden unter einem Winkel von $\theta=170^\circ$ mit einem Oberflächen-Sperrschicht-Detektor (Energieauflösung bei 514 keV 1.56 keV) analysiert. Nach einem Wechselwirkungsereignis mit einem Ion ist die Höhe des Spannungspulses am Ausgang des Detektors proportional zur Ionenenergie. Die Energieinformation wird in einem Vielkanalanalysator (ADCAM) gespeichert. Zum Einstellen der Kanalisierungsbedingung wurde die integrale Rückstreausbeute als Funktion des Probenwinkels minimiert.

2.4. Monte-Carlo-Simulation der Ionenimplantation-TRIM

TRIM (The **TR**ansport of **I**ons in **M**atter) ist ein Computerprogramm zur Monte-Carlo-Simulation der Wechselwirkungen, die in amorphe Festkörper implantierte Ionen erfahren. Dabei werden sowohl die Verteilung der implantierten Ionen als auch die mit dem Energieverlust verbundenen kinetischen Phänomene (Strahlenschäden, Phononen etc.) berechnet. Das Programm beruht auf Arbeiten von J.F. Ziegler und J.P. Biersack und wird detailliert in [Zie85] erläutert.

TRIM ist weltweit verbreitet. Es wurde in einer Vielzahl von Arbeiten (z.B. [Sim91, Ued92a, AK94, Fuj95a]) zu vergleichenden Berechnungen bei Ionenimplantation herangezogen. Die Ergebnisse für die Verteilung der implantierten Ionen sind weitgehend akzeptiert und entsprechen experimentellen Ergebnissen.

TRIM beruht auf der Simulation der Ionen-Festkörper-Wechselwirkung nach dem **BCA**-Modell (**B**inary **C**ollision **A**pproximation). Die Bewegung eines Ions oder eines gestoßenen Targetatoms im Festkörper wird als Folge von Einzelstößen zwischen je zwei Teilchen behandelt. Die Rechnung erfolgt im Rahmen einer klassischen Stoßtheorie, deren Grundlagen im Abschnitt 1.1.1 gegeben sind. Auf der Grundlage des **BCA**-Modells werden 3 entsprechend zufällig verteilte Parameter berechnet: die Distanz λ zwischen zwei Stößen, der Streuwinkel Θ und der azimutale Streuwinkel φ . λ ist um einen mittleren Abstand λ_0 exponentiell verteilt. Der Streuwinkel Θ wird aus der zufälligen Wahl eines Stoßparameters p nach Gl. (1.1.7) berechnet. Der maximale Stoßparameter p_{\max} wird aus $p_{\max} = \pi^{-1/2} N^{-1/3}$ bestimmt, N ist die atomare Dichte. Die zufälligen Werte des Azimutwinkels φ sind auf Grund der planaren Streugeometrie gleichverteilt. Die ausführliche Ableitung des Formalismus wird z.B. in [Eck91] gegeben.

Der Weg des Ions und der gestoßenen Targetatome im Festkörper wird schrittweise und in jedem Schritt zufällig simuliert. Der Energieübertrag auf die Gitteratome verursacht Ersetzungsstoßfolgen. Eine Verlagerung von Gitteratomen findet statt, wenn die übertragene Energie die vorgegebene Verlagerungsenergie T_d überschreitet. Eine Leerstelle entsteht, wenn beide Kollisionspartner eine Energie oberhalb T_d haben. Ist die Energie kleiner als T_d , verbleibt das Atom als Zwischengitteratom und die Energie wird in Form von Phononen abgegeben. Die Rechnung für ein implantiertes Ion endet, wenn eine vollständige Energieabgabe stattgefunden hat. **TRIM** berücksichtigt die Gitterstruktur des Festkörpers nur in Form einer Mindestdistanz r_{\min} , die vor dem nächsten Stoß zurückgelegt werden muß. Effekte, wie z.B. Ionen-Channeling, die aus Kristallsymmetrien folgen, werden nicht berücksichtigt. Die Verteilung von Defekten folgt aus den berechneten Stoßfolgen, sekundäre Effekte wie Defektdiffusion und -rekombination werden vernachlässigt. Reale Defektdichten können deshalb in **TRIM**-Simulationen nicht berechnet werden.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden **TRIM**-Rechnungen mit der Programmversion **TRIM-92.12** zu Vergleichszwecken für alle gemessenen Proben durchgeführt. Die Ergebnisse liefern Anhaltspunkte für die Auswertung der Positronenstrahlungsmessungen und erlauben eine Fehlerabschätzung. Sie sind im Kapitel 3 dargestellt.

2.5. Infrarot-Absorptionsspektroskopie

Fast alle Materialien zeigen im infraroten Spektralbereich eine mehr oder weniger ausgeprägte Struktur in der Absorption. Die Infrarotspektroskopie (**IR**) zählt deshalb zu den am weitesten verbreiteten spektroskopischen Untersuchungsmethoden der Festkörper-Physik. Von

besonderem Interesse in Festkörpern sind die Absorptionsprozesse durch Anregung von Gitterschwingungen. So findet man für bestimmte Kristalldefekte spezifische Absorptionslinien, die sowohl qualitativ als auch quantitativ ausgewertet werden können.

Eine Atomgruppe im Kristallverband kann Energie einer elektromagnetischen Welle (z.B. im IR-Bereich) aufnehmen und zu Schwingungen angeregt werden. Aus dem Energiesatz folgt die Frequenzbedingung $E' - E'' = h\nu$. E' und E'' sind die Schwingungsenergien vor und nach dem Absorptionsprozeß. Die Wellenzahl ν der absorbierten Strahlung ergibt sich also als Differenz zweier Schwingungsterme:

$$\nu = \frac{E'}{h} - \frac{E''}{h} . \quad (2.5.1)$$

Für das Modell des harmonischen Oszillators ergibt sich ein Schwingungsterm:

$$\frac{E}{h} = \nu \left(n + \frac{1}{2} \right) . \quad (2.5.2)$$

Berücksichtigt man hier noch die Energieerhaltung aus Gl. (2.5.1), so folgt die Auswahlregel $\Delta n = \pm 1$. Im Fall realer unsymmetrischer Anziehungspotentiale zwischen den Atomen muß zum Modell des anharmonischen Oszillators mit der Auswahlregel $\Delta n = \pm 1, 2, 3, \dots$ übergegangen werden. Hier sind auch Übergänge zu höheren Termen möglich, allerdings mit abnehmender Übergangswahrscheinlichkeit. Man spricht dann von Oberschwingungen, da deren Frequenz zwar nicht exakt aber nahezu beim vielfachen Wert der Grundschwingung liegt.

Die Anzahl der Normalschwingungen eines Moleküls oder einer Atomgruppe wird durch deren Freiheitsgrade bestimmt. Jedes Atom einer Atomgruppe kann sich in drei Raumrichtungen bewegen, was zu $3N$ Bewegungsfreiheitsgraden⁷ führt. Bei drei dieser Bewegungen resultiert keine relative Verschiebung zueinander, sondern nur eine Bewegung des Massenschwerpunktes. Weitere drei Bewegungskombinationen führen zur Rotation um den Massenschwerpunkt. Die Zahl der Freiheitsgrade bestimmt sich damit zu $Z = 3N - 6$. N ist dabei die Zahl der Atome pro Molekül. Bei linearer Anordnung der Atome existieren nur zwei Rotationsfreiheitsgrade, was zu einem Schwingungsfreiheitsgrad mehr führt: $Z = 3N - 5$.

Durch elektromagnetische Strahlung (z.B. IR-Licht) sind nur Schwingungsformen mit elektrischem Dipolmoment anregbar. Einige Schwingungsformen, wie etwa die symmetrische Streckschwingung eines dreiatomigen linearen Moleküls, sind nicht IR-aktiv. Normalschwingungen, die gleiche Anregungsfrequenzen aufweisen, sind nicht unterscheidbar und werden als entartet bezeichnet.

Neben der Anregung von Atomschwingungen kann es auch zu elektronischen Anregung durch die Einstrahlung einer elektromagnetischen Welle in den Festkörper kommen. Ist die Energie des Strahlung größer als die Bandlücke eines Halbleiters ($h\nu \geq E_g$), kommt es zur sogenannten Band-Band-Absorption. Diese wird auch Fundamentalabsorption genannt und beginnt an der Absorptionskante. Diese liegt für Silizium bei einer Wellenlänge von $\lambda = 1.2 \mu\text{ m}$. Eine größere Rolle in der Festkörperspektroskopie spielen elektronische Übergänge zwischen einem Band und einem lokalisierten Energiezustand in der verbotenen Zone. Solche elektronischen Zustände werden durch Kristallgitterdefekte hervorgerufen. Übergänge von Elektronen in bzw. aus diesen Zuständen können stattfinden, wenn die Energie des eingestrahlt Lichts größer ist als der energetische Abstand dieses Zustandes zum Leitungs- bzw. Valenzband des Halbleiters. Die sog. bandkanten-nahe Absorption kann somit zur qualitativen und über die Intensität der Absorption zur quantitativen Bestimmung solcher Störstellenniveaus in der Bandlücke genutzt werden.

2.5.1. Dispersion und Absorption

Um die Absorption des IR-Lichts beschreiben zu können, muß von der elektrodynamischen Behandlung des Lichts ausgegangen werden. Die Wellengleichung für eine elektromagnetische

⁷ N ist die Anzahl der Atome in der Atomgruppe

Welle lautet:

$$\frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial \mathbf{r}^2} = \frac{\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial t^2} + \frac{\sigma}{c^2 \epsilon_0} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} . \quad (2.5.3)$$

- \mathcal{E} ... elektrische Feldstärke
- \mathbf{r} ... Ortsvektor
- σ ... elektrische Leitfähigkeit
- ϵ ... relative Dielektrizitätskonstante des Stoffes
- ϵ_0 ... Dielektrizitätskonstante des Vakuums
- c ... Lichtgeschwindigkeit.

Die Lösung der Differentialgleichung (2.5.3) erfolgt mittels des Ansatzes einer ebenen Welle:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} . \quad (2.5.4)$$

Hierbei ist \mathbf{k} der Wellenzahlvektor und $\omega = 2\pi\nu$ die Kreisfrequenz. Die resultierende Dispersionsrelation ist dann:

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon + i \frac{\omega}{c^2} \frac{\sigma}{\epsilon_0} . \quad (2.5.5)$$

Man setzt $\omega/c = k_0$. Dabei ist k_0 die Wellenzahl, die man mit $\epsilon = 1$ und $\sigma = 0$ als Lösung für die elektromagnetische Welle im Vakuum erhält. Bildet man analog zum Brechungsindex $n = c/v = \sqrt{\epsilon\mu}$ einen Brechungsindex \tilde{n} , so erhält man:

$$\tilde{n} = \frac{k}{k_0} = \left(\epsilon + i \frac{\sigma}{\omega \epsilon_0} \right)^{1/2} . \quad (2.5.6)$$

Die so definierte Größe \tilde{n} ist der komplexe Brechungsindex eines Stoffes unter Einbeziehung der Absorption. Für Real- und Imaginärteil von \tilde{n} läßt sich formal schreiben:

$$\tilde{n} = n - i\kappa . \quad (2.5.7)$$

Die Wellenzahl k ergibt sich somit zu:

$$k = \frac{\omega}{c} n + i \frac{\omega}{c} \kappa . \quad (2.5.8)$$

n ist der gewöhnliche Brechungsindex und κ der Absorptionsindex, der als Dämpfungsmaß der ebenen Welle aufgefaßt werden kann.

Durch die beiden Materialgrößen n und κ lassen sich Reflexion und Transmission des Lichts berechnen. Außer dem komplexen Brechungsindex \tilde{n} werden dazu Anschlußbedingungen für die elektrische und magnetische Feldstärke benötigt, die aus den MAXWELL-Gleichungen folgen. Für senkrechten Lichteinfall ergibt dies einen Reflexionskoeffizienten R an der Grenzfläche zweier Medien:

$$R = \frac{(n-1)^2 - \kappa^2}{(n+1)^2 + \kappa^2} . \quad (2.5.9)$$

Im LAMBERT'schen Absorptionsgesetz:

$$I = I_0 e^{-\alpha x} , \quad (2.5.10)$$

welches eine Aussage über die Intensität I der sich in x -Richtung ausbreitenden ebenen Welle macht, ist der Absorptionskoeffizient α definiert als:

$$\alpha = \frac{4\pi\kappa}{\lambda} . \quad (2.5.11)$$

λ ist dabei die Wellenlänge des eingestrahnten Lichts.

Betrachtet man nun die Transmission T einer elektromagnetischen Welle durch eine planparallele

Platte der Dicke d , so muß man die Vielfachreflexionen berücksichtigen. Für T ergibt sich als über alle Interferenzen gemittelter Wert:

$$T = \frac{(1 - R)^2(1 + \kappa^2/n^2)e^{-\alpha d}}{1 - R^2e^{-2\alpha d}}. \quad (2.5.12)$$

Oft und auch für Silizium kann davon ausgegangen werden, daß $\kappa \ll n$ ist. Daher vereinfacht sich Gl.(2.5.12) zu:

$$T = \frac{(1 - R)^2e^{-\alpha d}}{1 - R^2e^{-2\alpha d}} \quad (2.5.13)$$

und Gl.(2.5.9) zu:

$$R = \frac{(n - 1)^2}{(n + 1)^2}. \quad (2.5.14)$$

R nimmt beispielsweise für Silizium mit einer Brechzahl von $n = 3.46$ einen Wert von 0.304 an.

Für die ionenimplantierten Proben muß von einem Zweischichtsystem ausgegangen werden. Die beiden Brechzahlen sind gleich und die Schichtdicken d_1 und d_2 bekannt. Die erste Schicht ist die durch Implantation mit Ionen geschädigte und die zweite der ungestörte Kristall. $d = d_1 + d_2$ ist die Gesamtdicke der Probe. Führt man für die Dämpfung der elektromagnetischen Welle die Abkürzung $\delta = \alpha d$ ein, wird sie in diesem Fall zu:

$$\delta = \alpha_1 d_1 + \alpha_2 d. \quad (2.5.15)$$

α_1 ist der Absorptionskoeffizient der geschädigten Schicht und α_2 der ungeschädigten. $\delta_{\text{ref}} = \alpha_2 d$ ist der Wert der Dämpfung der Referenzprobe. Der für die Untersuchungen interessante Wert α_1 ergibt sich aus:

$$\alpha_1 = \frac{\delta - \delta_{\text{ref}}}{d_1}. \quad (2.5.16)$$

Das zur Berechnung von α_1 notwendige δ läßt sich aus Gl.(2.5.13) ableiten:

$$\delta = \ln \left[\frac{(1 - R)^2}{2T} + \sqrt{\left(\frac{(1 - R)^2}{2T} \right)^2 + R^2} \right], \quad (2.5.17)$$

wobei T das experimentell bestimmte Transmissionsvermögen und R durch Gl. (2.5.9) gegeben ist. Dabei gelten die Voraussetzungen $\kappa \ll n$ und $n = \text{constant}$. α_1 enthält dann nur noch Informationen der geschädigten Schicht, die geometrischen Parameter spielen keine Rolle mehr.

2.5.2. IR-Spektrometer

Die Messungen zur **IR**-Absorption wurden an der Universität Leipzig in der Gruppe von Dr. H. RIEDE durchgeführt. Das zur Verfügung stehende Gerät ist ein kommerzielles Zweistrahl-Spektrometer „Lambda19“ der Firma Perkin Elmer, was in den Bereichen UV, VIS und NIR arbeitet.⁸ Die Totalreflexionsoptik ist in LITTROW-Anordnung aufgebaut. Das zur Auflösung der Wellenlängen notwendige holographische Gitter besitzt 360 Linien/mm. Die Steuerung erfolgt über einen externen PC. Die Messungen wurden im Bereich des nahen Infrarot (175 nm - 3200 nm, Genauigkeit von ± 0.6 nm) durchgeführt. Als Strahlungsquelle dient im NIR-Bereich eine vorjustierte Wolfram-Halogenlampe. Ein PbS-Detektor dient der Signalaufnahme.

⁸UV: ultravioletter Bereich; VIS: sichtbarer Bereich; NIR: naher Infrarot-Bereich

2.6. RAMAN-Streuung

Die RAMAN-Spektroskopie hat sich mit der Entwicklung der **LASER** als wichtiges Hilfsmittel zur Untersuchung elementarer Anregungen von Festkörpern, wie Phononen, Plasmonen usw. durchgesetzt. Bei dieser Art der Spektroskopie wird die inelastische Lichtstreuung (sichtbarer Spektralbereich) durch die betreffenden elementaren Anregungen ausgenutzt. Wie bei allen Streuprozessen an zeitlich sich ändernden periodischen Strukturen (schwingendes Kristallgitter) müssen Energie und Wellenzahlvektor bis auf einen reziproken Gittervektor \mathbf{G} erhalten bleiben. Es muß also gelten:

$$0 = \hbar\omega_0 - \hbar\omega \pm \hbar\omega(\mathbf{q}) , \quad (2.6.1)$$

$$0 = \hbar\mathbf{k}_0 - \hbar\mathbf{k} \pm \hbar\mathbf{q} + \hbar\mathbf{G} . \quad (2.6.2)$$

Hierbei beschreiben ω_0 und \mathbf{k}_0 bzw. ω und \mathbf{k} die einfallende bzw. die gestreute Lichtwelle, $\omega(\mathbf{q})$ und \mathbf{q} sind Frequenz und Wellenzahlvektor der elementaren Anregung, z.B. eines Phonons. Für Licht aus dem sichtbaren Spektralbereich ist $|\mathbf{k}_0|$ bzw. $|\mathbf{k}|$ von der Größenordnung $1/1000$ eines reziproken Gittervektors, d.h. es nehmen an der RAMAN-Streuung nur Anregungen aus dem Zentrum der BRILLOUIN-Zone teil.

Die Valenzelektronen in einem Festkörper lassen sich im elektrischen Feld \mathcal{E} einer einfallenden Lichtwelle polarisieren. Die Polarisation ist:

$$\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi \mathcal{E} , \quad (2.6.3)$$

wobei χ Suszeptibilitätstensor heißt. Die periodische Änderung hat die Ausstrahlung einer Welle, der gestreuten Welle, zur Folge. Die elektronische Suszeptibilität ist eine Funktion der Kernkoordinaten, d.h. auch der Auslenkungen X , die mit der Gitterschwingung $(\omega(\mathbf{q}), \mathbf{q})$ gegeben sind. Diese Auslenkungen $X(\omega(\mathbf{q}), \mathbf{q})$ sind als Störungen aufzufassen und in der formalen Entwicklung kann man sich auf zwei Glieder beschränken:

$$\chi = \chi_0 + \frac{\partial \chi}{\partial X} X . \quad (2.6.4)$$

Wegen $\mathbf{q} \approx 0$ schreibt man vereinfachend $X = X_0 \cos \omega(\mathbf{q})t$. Mit der einfallenden Lichtwelle $\mathcal{E} = \mathcal{E}_a \cos \omega_0 t$ ergibt sich die Polarisation:

$$\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi_0 \mathcal{E}_a \cos \omega_0 t + \frac{1}{2} \epsilon_0 \frac{\partial \chi}{\partial X} X_0 \mathcal{E}_a [\cos (\omega_0 + \omega(\mathbf{q}))t + \cos (\omega_0 - \omega(\mathbf{q}))t] . \quad (2.6.5)$$

Die Streustrahlung enthält also neben dem elastischen Anteil der Frequenz ω_0 (RAYLEIGH-Streuung) die RAMAN-Seitenbanden mit den Frequenzen $\omega_0 \pm \omega(\mathbf{q})$. Die Linien mit niedrigerer Frequenz als ω_0 heißen STOKES-Linien und sie entstehen durch Streuung unter Abgabe der Energie der elementaren Anregung $(\omega(\mathbf{q}), \mathbf{q})$. Die Linien mit erhöhter Frequenz heißen Anti-STOKES-Linien, hier wird bei der Streuung an elementaren Anregungen Energie aufgenommen. Die Intensität der Anti-STOKES-Linien ist bei relativ niedrigen Temperaturen gering, weil sich die betreffenden elementaren Anregungen überwiegend im Grundzustand befinden. Man untersucht deshalb meist die STOKES-Linien, deren Intensität typischerweise um 10^6 kleiner ist als die des erregenden Lichtes. Übliche Lichtquellen sind intensive **LASER**-Quellen (Neodym-, Krypton-, Argon-**LASER**). Wichtig sind außerdem die Symmetrieeigenschaften der elementaren Anregung, denn für das Auftreten der RAMAN-Linie ist das Nichtverschwinden der Suszeptibilitätsableitung $\frac{\partial \chi}{\partial X}$ nach den Koordinaten X der elementaren Anregung Voraussetzung. Mit der Änderung der Versuchsgeometrie können auch Aussagen zur Kristallsymmetrie der untersuchten Probe gewonnen werden.

Die Messungen mittels RAMAN-Spektroskopie wurden an der Universität Leipzig von Dr. G. LIPPOLD durchgeführt.

Ergebnisse und Diskussion

3.1. Ionenimplantation in Silizium

3.1.1. Präparation der Silizium-Proben und TRIM-Simulation

Die Messungen an ionenimplantiertem Silizium wurden an verschiedenen Probenreihen durchgeführt, um die Abhängigkeiten der Defekterzeugung von Implantationsdosis und Kristallrichtung sowie das Ausheilverhalten zu untersuchen. Alle Proben wurden bei Raumtemperatur und unter einem Winkel von 7° zu einer niedrig indizierten Kristallrichtung (meist $\langle 100 \rangle$) implantiert. Technologisch wird ein solcher Winkel benutzt, um channeling-Effekte zu vermeiden. Das Substratmaterial war undotiert bzw. schwach Bor-dotiert (p-Typ, $\rho \approx 10 - 30 \Omega\text{cm}$). Zur Untersuchung des Einflusses des Sauerstoffgehaltes auf die Defektbildung wurde Czochralski- ([O] ca. $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) und FZ-Material ([O] ca. $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) bestrahlt (jeweils Phosphordotiert, $\rho = 0.6 \Omega\text{cm}$). Um ein möglichst homogenes Defektprofil zu erhalten, wurden alle Proben nacheinander mit Ionen verschiedener Energie beschossen. Die entsprechenden Dosisverhältnisse wurden mit Hilfe von **TRIM**-Simulationen bestimmt. Eigentlich werden mit **TRIM** Energie-depositionen pro Volumen berechnet (vergleiche Abschnitt 2.4). Mit dem Ansatz der Leerstel-

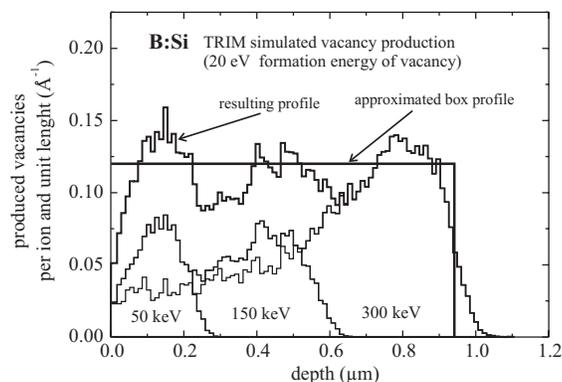


Abbildung 3.1: Überlagerung der Leerstellenprofile der Bor-Implantationen mit verschiedenen Energien. Die resultierende Defektverteilung kann durch ein Kastenprofil angenähert werden.

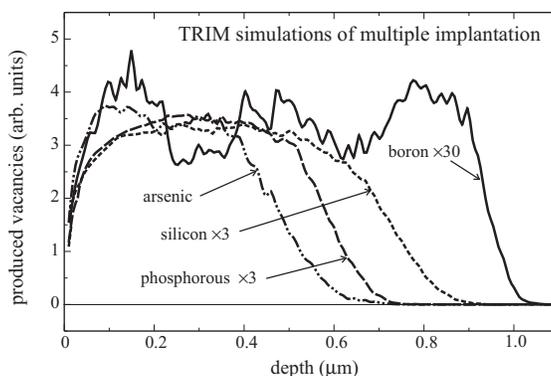


Abbildung 3.2: Die resultierenden Defektverteilungen für die verschiedenen Implantate sind skaliert dargestellt. Trotz Erhöhung der Implantationsenergie nimmt die Eindringtiefe mit der Masse der Ionen ab. Für alle Implantationen kann ein näherungsweise homogenes Defektprofil erzeugt werden.

lenbildungsenergie (für Silizium ca. 20 eV) erhält man dann die primäre Leerstellenverteilung. Jede **TRIM**-Simulation wurde mit mindestens 5000 Ionen ausgeführt. In Abbildung 3.1 sind am Beispiel der Bor-Implantation die Simulationsergebnisse dargestellt. Die Leerstellenverteilungen nach den mit verschiedenen Energien ausgeführten Bor-Implantationen reichen unterschiedlich tief. Überlagert man diese Profile gewichtet, so erhält man eine resultierende Defektverteilung, die durch ein Kastenprofil approximiert werden kann. Die Gewichtsverhältnisse entsprechen dann den Dosisverhältnissen bei der jeweiligen Implantation. Für alle Implantationen sind die **TRIM**-Ergebnisse in Abbildung 3.2 gezeigt. Hier wird deutlich, daß trotz der Erhöhung der Implantationsenergie die Eindringtiefe mit der Masse der Ionen abnimmt. Für alle Implantationen

kann ein näherungsweise homogenes Defektprofil erzeugt werden. Später werden die erhaltenen Werte für die deponierte Energiedichte zur Skalierung der Dosis dienen und eine Vergleichbarkeit der Implantationsschäden garantieren (siehe Abschnitt 3.1.3).

Tabelle 3.1: Implantationsparameter der Siliziumproben

Implantat	Dosisbereich (cm^{-2})	Energien (keV)	Dosisverh.
Bor	$1 \times 10^{14} - 2 \times 10^{16}$	300, 150, 50	1:0.5:0.2
Bor (Ausheilung)	$1 \times 10^{14} - 1 \times 10^{16}$	180, 90, 30	1:0.5:0.2
Silizium	$5 \times 10^{13} - 5 \times 10^{15}$	400, 250, 150	1:0.3:0.2
Phosphor	$5 \times 10^{13} - 5 \times 10^{15}$	600, 250, 150	1:0.3:0.2
Arsen	$5 \times 10^{12} - 5 \times 10^{14}$	600, 250, 150	1:0.4:0.3

In Tabelle 3.1 sind die Implantationsparameter für die einzelnen Implantationen in Silizium aufgelistet. Die Dosis überstreicht zwei Größenordnungen (5 Proben je Implantat), und die maximale Dosis richtet sich nach der amorphisierenden Dosis für Raumtemperaturimplantation [Rys78]. Außer Bor, dessen Masse zu gering ist, um Silizium bei Raumtemperatur zu amorphisieren, haben alle Implantate bei Verwendung der maximalen Dosis zu amorphen Schichten geführt (siehe Diskussion der **RBS**-Ergebnisse). Zur Identifikation der Proben in der nachfolgenden Diskussion, wird die Ionendosis für die höchste Implantationsenergie als Dosis Φ bezeichnet. Die Ausheilung der Proben im Positronenexperiment wurde in-situ bei einem Druck von 10^{-6} Pa vorgenommen. Für die anderen Experimente wurde unter Argonschutzgas bei einem Druck von 10^{-2} Pa ausgeheilt.

3.1.2. Bor-Implantation

Die Untersuchung der Bor-Implantation in Silizium bei Raumtemperatur ist deshalb sehr interessant, weil hier hauptsächlich isolierte Kristalldefekte (Punktdefekte und Punktdefektglomerate) erzeugt werden. Dagegen führt die Implantation schwererer Ionen mit zunehmender Dosis zur Bildung von amorphen Gebieten, und die Identifizierung der entstehenden Defekte ist schwieriger. Die Experimente am Bor-implantierten Silizium werden im folgenden ausführlicher dargestellt. Sie geben ein Beispiel für die Möglichkeiten und Grenzen der Methode der Annihilationsspektroskopie mit langsamen Positronen.

Zunächst wurde die Schädigung der Proben im implantierten Zustand mit **RBS** gemessen. In Abbildung 3.3 sind die Energiespektren der rückgestreuten 1.4 MeV He^+ Ionen für alle B^+ implantierten $\langle 100 \rangle$ Proben dargestellt. Die Rückstreuenspektren der implantierten Proben enthalten Beiträge von dekanalisierten Ionen, was auf die Existenz von Punktdefekten oder Punktdefektglomeraten hindeutet. Die Konzentration dieser Punktdefekte steigt mit wachsender Implantationsdosis (siehe oberer Teil in Abbildung 3.3). Die Struktur der Spektren, die besonders bei der $2 \times 10^{16} \text{ B}^+ \text{ cm}^{-2}$ -implantierten Probe hervorsticht, ist Indiz für eine inhomogene Tiefenverteilung der Defekte, die von der Dreifachimplantation herrührt. Die zugehörigen Defektprofile wurden berechnet und sind im Abschnitt 3.1.3 in Abbildung 3.10 dargestellt. Vergleicht man das Rückstreuenspektrum für $\Phi = 2 \times 10^{16} \text{ B}^+ \text{ cm}^{-2}$ mit dem „random“-Spektrum (siehe unteren Teil in Abbildung 3.3), wird klar, daß die Gesamtschädigung noch gering ist und keine amorphen Zonen existieren. Die Daten der Messungen mit langsamen Positronen, wie sie in Abbildung 3.4 dargestellt sind, zeigen ebenfalls eine Abhängigkeit der Implantationsschäden von der Dosis. In der unbestrahlten Referenzprobe gibt es nur zwei Annihilationszustände der Positronen. Bei kleinen Positronenenergien ist der gemessene S -Parameter charakteristisch für die mit einer dünnen Oxidschicht bedeckten Oberfläche. Für höhere Positronenenergien (> 15 keV) annihilieren alle Positronen im defektfreien Kristall. Im Energiebereich zwischen 0 und 15 keV diffundieren

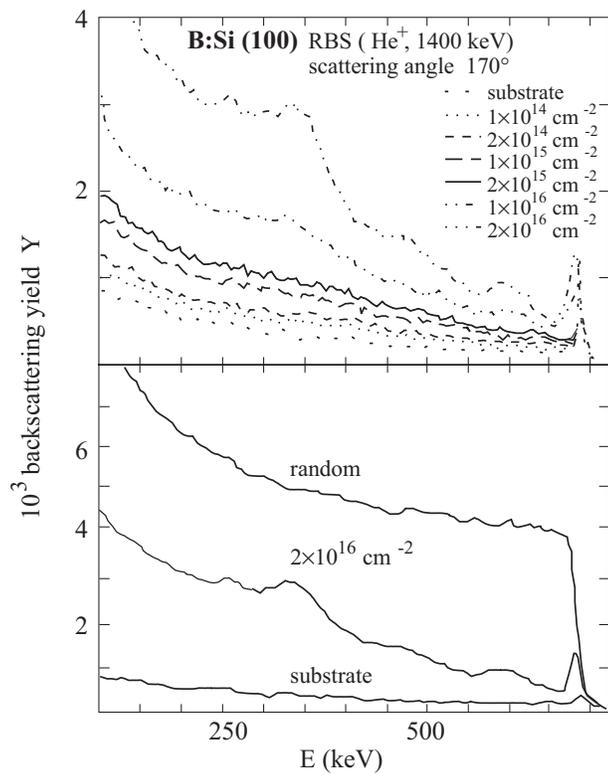


Abbildung 3.3: **RBS**-Spektren von Si(100) Bor-implantiert mit verschiedenen Dosen (oberer Teil) und Vergleich zwischen **RBS**-Spektren für Si(100) bestrahlt mit der höchsten Implantationsdosis und einem random-Spektrum, typisch für amorphes Material (unterer Teil) (aus [Eic97a]).

mehr oder weniger Positronen zurück zur Oberfläche. Der Verlauf des zusammengesetzten S -Parameters (Gl. 2.2.9) charakterisiert die Positronendiffusionslänge von 245 nm für defektfreies Silizium [Hak93]. Die S -Parameterkurven der implantierten Proben zeigen ein typisches Verhalten [AK94]. Der niedrige S -Parameter an der Oberfläche ändert sich mit der Bor-Dosis, was auf eine strukturelle Änderung der Oxidschicht hindeutet. Ein ähnlicher Effekt wurde von UEDONO et al. für γ -bestrahtetes SiO_2 gefunden [Ued88b], und andere Methoden zeigen Oberflächenschädigungen nach Ionenimplantation [Gha97]. Im Bereich zwischen 2 und 10 keV Positronenenergie zeigt sich ein Plateau mit einem erhöhtem S -Parameter, das durch den Einfang und der Annihilation von Positronen in implantationsinduzierten leerstellenartigen Defekten entsteht. Auch für die niedrigste Dosis kann angenommen werden, daß der Positroneneinfang in Defekte mit offenem Volumen gesättigt ist, d.h. der Anteil der eingefangenen Positronen η ist nahe 1. Dieser

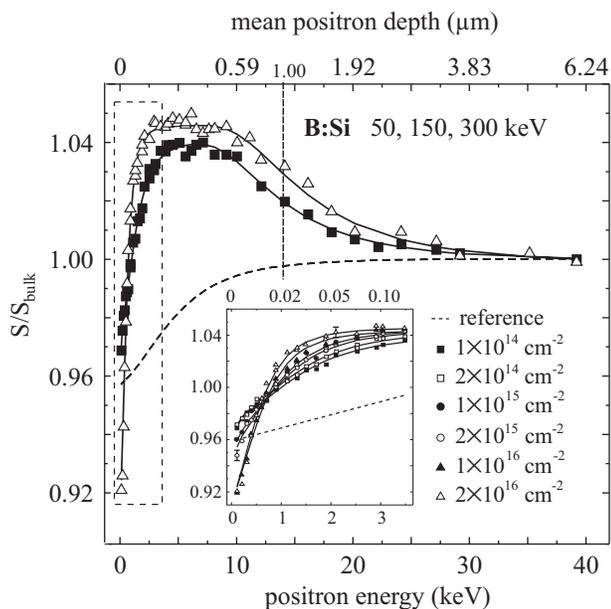


Abbildung 3.4: Die $S(E)$ -Kurven von undotiertem Cz-Si implantiert mit $2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ und $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ Bor-Ionen sind exemplarisch dargestellt. Die verschiedenen Anstiege im niederenergetischen Teil aller Meßkurven ist im Inset zu sehen. Die Linien charakterisieren den besten Fit mit dem Programm **VEPFIT** (aus [Eic97a]).

Anteil kann wie folgt berechnet werden:

$$\eta = \frac{\kappa_t}{\kappa_t + \lambda_b}, \quad (3.1.1)$$

wobei die Einfangrate κ_t als bekannt vorausgesetzt wird (siehe Gl. (3.1.2)). Daraus folgt, daß der typische S -Parameter der Schicht direkt vom Plateau der $S(E)$ -Kurve bestimmt werden kann. Die Anpassung mit VEPFIT bestätigt die Richtigkeit dieses Vorgehens. Wichtig sind die Unterschiede in den Anstiegen der S -Parameterkurven vom Oberflächen- S -Parameter bis zum Plateau- S -Parameter, die einer Änderung der effektiven Positronendiffusionslänge in der geschädigten Schicht entsprechen (siehe Inset in Abbildung 3.4). Mit der Anpassung der effektiven Positronendiffusionsweglänge $L_{+,eff}$ kann die Defektkonzentration in der geschädigten Schicht ermittelt werden (siehe weiter unten). Für hohe Energien (größer als 30 keV) nimmt der S -Parameter den Wert für ungestörtes Material (S_{bulk}) an. Das bedeutet, daß alle Positronen tief genug implantiert werden, um hinter der gestörten Schicht zu annihilieren.

Wie man aus den **TRIM**-Simulationen weiß, können die Defektprofile in erster Näherung als homogen angenommen werden. Unter dieser Bedingung sind die effektive Positronendiffusionsweglänge $L_{+,eff}$ und die Dicke der gestörten Schicht die einzigen nichtlinearen Parameter der Anpassung der Positronendaten mittels VEPFIT. Falls der Positroneneinfang in einen Defekttyp dominiert, kann die Defektkonzentration unter Verwendung der Gl. (3.1.2) bestimmt werden. Die exakten Positroneneinfangraten für die verschiedenen Defekttypen sind unbekannt, und außerdem ist die Natur der leerstellenartigen Defekte und deren Ladung nicht genau bekannt. Auf Grund dieser Unsicherheiten kann man sich auf den Standpunkt zurückziehen, lediglich die Konzentration der Leerstellen, unabhängig von der speziellen Anordnung in einem Defekt, bestimmen zu wollen. Das ist deshalb möglich, weil die Positroneneinfangraten eines kleinen Leerstellenagglomerates proportional zur Anzahl der enthaltenen Leerstellen sind [Nie79]. Für die Einfangrate der Einfachleerstelle nehmen wir einen mittleren Wert aus der Literatur an: $\mu_{vac} = 5 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$ [Kaw95]. Die integrale Leerstellenkonzentration der Proben ist dann (nach Gln. (2.2.8) und (2.2.7)):

$$n_{vac} = \frac{\lambda_b}{\mu_{vac}} \left(\left(\frac{L_{+,b}}{L_{+,eff}} \right)^2 - 1 \right). \quad (3.1.2)$$

Die berechneten Kastenprofile der Leerstellenkonzentration $n_{vac}(z)$ sind in Abbildung 3.5 dargestellt. Ein Ansteigen der Leerstellenkonzentration mit wachsender Dosis ist zu verzeichnen.

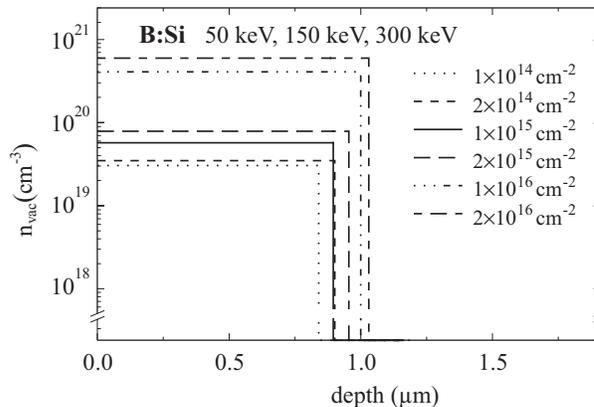


Abbildung 3.5: Die errechneten **VEPFIT** Kastenprofile der Leerstellendichte nach Schädigung durch Bor-Implantation sind für die verschiedenen Bor-Dosen gezeigt. Sowohl die Dicke der geschädigten Schicht als auch die Defektkonzentration wächst mit der Dosis (aus [Eic97a]).

Weiterhin scheint auch die Schichtdicke mit zunehmender Dosis zu wachsen (Abbildung 3.5), was auch als Artefakt der Anpassung unter der Annahme von Kastenprofilen verstanden werden könnte (siehe Diskussion in Abschnitt 3.1.5). Im Gegensatz dazu fanden UEDONO et al. [Ued88a] für Bor-Implantationen (80 keV) mit wachsenden Dosen zwischen 5×10^{12} und $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ eine Verschiebung des Schädigungspeaks zur Oberfläche hin. Dieser Schluß wurde jedoch lediglich aus der entsprechenden Verschiebung der Maxima der $S(E)$ -Kurven gezogen. Die Ergebnisse von UEDONO et al. wurden möglicherweise auch durch die spezielle Implantation durch eine 43 nm dicke

Oxidschicht hindurch beeinflusst. Insbesondere bei niedrigen Defektkonzentrationen, bei denen die Positronendiffusion eine zunehmende Rolle spielt, ist eine genauere quantitative Auswertung notwendig. Der Vergleich der an Hand verschiedener Methoden (**TRIM**, **RBS** und **VEPAS**) er-

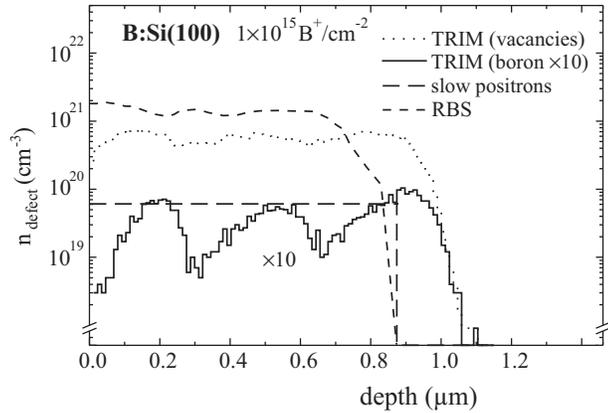


Abbildung 3.6: Die Defektprofile, ermittelt mittels **TRIM**, **RBS** und **VEPAS**, sind für die $1 \times 10^{15} \text{ B}^+ \text{ cm}^{-2}$ implantierte Probe vergleichend dargestellt (aus [Eic97a]).

mittelter Defektprofile zeigt, daß die **RBS**- und Positronenergebnisse recht gut übereinstimmen und die **TRIM**-Rechnungen zu etwas tieferen Verteilungen führen (siehe Abbildung 3.6).

Die dosisabhängigen Ergebnisse sind zusammenfassend in Abbildung 3.7 dargestellt. Die integrale Leerstellenkonzentration n_{vac} (gemessen mit langsamen Positronen) und die Konzentration deplatziertes Siliziumatome (charakterisiert durch $\Delta\chi_{\text{min}}$ im **RBS**-Experiment) sind proportional zur Wurzel der Implantationsdosis. Dagegen bleibt die Konzentration der Doppelleerstellen, wie sie aus der Messung der **IR**-Absorptionsbande bei $\hbar\omega = 0.68 \text{ eV}$ bestimmt wurde, näherungsweise konstant [Wen94]. n_{vac} und $\Delta\chi_{\text{min}}$ enthalten Informationen über die totale Schädigung der implantierten Schicht. Eine ähnliche Abhängigkeit im gleichen Dosisbereich wurde von SEALY et al. für die integrale Spannung mittels RÖNTGEN-Beugung (**DCXD**¹) in 50 keV und 1 MeV Bor-implantiertem Silizium gemessen [Sea95]. Eine solche Wurzelabhängigkeit von der Dosis ist typisch für Defektentstehung durch Nukleation nach einem Modell von CHADDERTON (siehe Abschnitt 1.3.1). Es ist anzunehmen, daß die in Defektkaskaden gebildeten Punktdefekte ausdiffundieren und sich homogen verteilen. Von diesem Zwischenstadium aus bilden sich stabilere Defekte durch Agglomeration der mobilen Punktdefekte [Cha71]. Abbildung 3.7 zeigt weiter, daß die Konzentration der Doppelleerstellen bis zu einer Dosis von $3 \times 10^{15} \text{ B}^+ \text{ cm}^{-2}$ konstant bleibt [Zam94]. Für höhere Dosen sinkt die Doppelleerstellenkonzentration sogar wieder. Sowohl diese Beobachtung als auch die kritische (maximale) Dichte von $3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ stimmt gut mit früheren

¹Double-Crystal X-ray Diffractometry

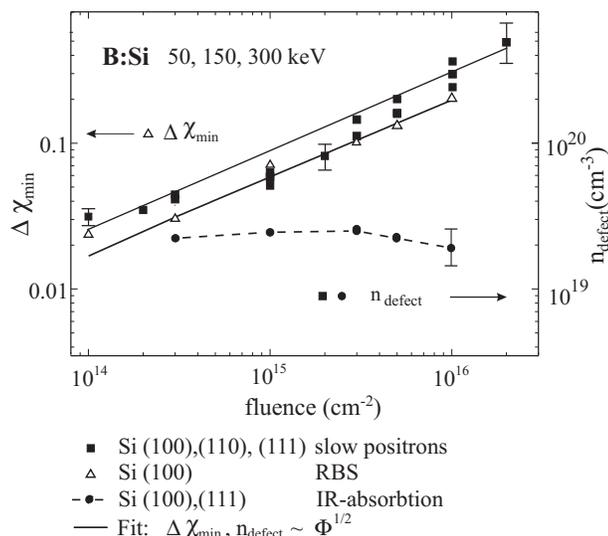


Abbildung 3.7: Die integrale Leerstellenkonzentration aus **VEPAS**-Messungen, die Konzentration von Doppelleerstellen bestimmt mittels **IR** sowie die Rückstreuausbeute im Channeling-Experiment (**RBS**), in Bor-implantiertem Silizium ist als Funktion der Implantationsdosis dargestellt. Die integrale Leerstellenkonzentration und die Konzentration deplatziertes Siliziumatome ist jeweils proportional zur Wurzel der Implantationsdosis, wogegen die Konzentration der Doppelleerstellen näherungsweise konstant bleibt (gepunktete Linie) (aus [Eic97a]).

Resultaten von STEIN et al. überein [Ste70]. Vergleicht man die Konzentration der Doppelleerstellen mit der aller leerstellenartigen Defekte (n_{vac}), so wird deutlich, daß für Dosen größer als $1 \times 10^{14} \text{ B}^+ \text{ cm}^{-2}$ neben den Doppelleerstellen noch mindestens ein weiterer Defekttyp, der Leerstellen enthält, existieren muß. Die integrale Leerstellenkonzentration steigt, wogegen die Doppelleerstellenkonzentration konstant bleibt. Der S -Parameter wächst i.a. mit der Größe eines Leerstellenagglomerates [Hak97]. Schon Abbildung 3.4 hat eine Änderung des S -Parameters mit der Implantationsdosis gezeigt. Sein Anstieg kann nicht mit der Konzentrationsänderung nur eines Defekts erklärt werden, da der Zustand des gesättigten Positroneneinfangs vorliegt, d.h. alle Positronen annihilieren in Defekten. Lediglich eine dosisabhängige Änderung der Konzentrationsverhältnisse von mindestens zwei Defektarten ist denkbar. Um dieses Verhalten detaillierter untersuchen zu können, wird der S -Parameter sowie der R -Parameter der gestörten Schicht gegen die Ionendosis aufgetragen (Abbildung 3.8). Wie in Abschnitt 2.2.5 beschrieben,

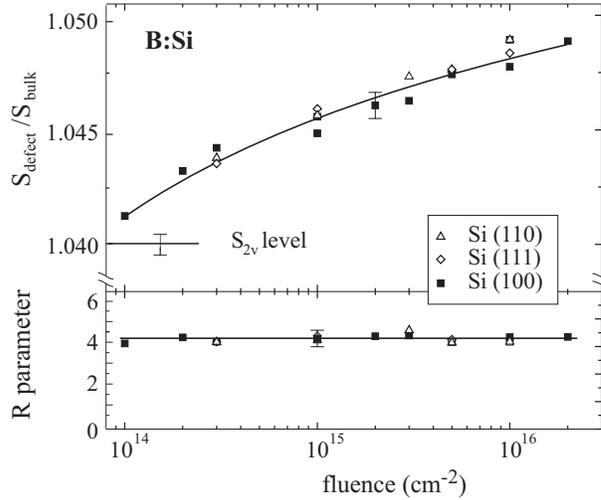


Abbildung 3.8: Der S -Parameter und der defekt-spezifische R -Parameter der gestörten Schicht als Funktion der Implantationsdosis sind aufgetragen. Der R -Parameter wurde auf die Annihilationsparameter der Doppelleestelle ($S_{2v}/S_{bulk} = 1.040$ [Gol95, Kei88], $W_{2v}/W_{bulk} = 0.935$ [Gol95, Sim91]) bezogen. Eine detaillierte Diskussion folgt im Text (aus [Eic97a]).

bleibt der R -Parameter konstant im Fall des gesättigten Positroneneinfangs in zwei verschiedene Defektarten. Eine signifikante Änderung des R -Parameters ist zu erwarten, wenn ein dritter Annihilationszustand detektiert wird. Wegen des gesättigten Positroneneinfangs in der gestörten Schicht schon für die kleinste Bor-Dosis ist klar, daß auch für höhere Dosen kein weiterer Defekttyp sichtbar wird. Andererseits wächst der S -Parameter der gestörten Schicht kontinuierlich mit steigender Ionendosis. Der typische S -Parameter der Doppelleestelle S_{2v}/S_{bulk} liegt bei 1.040 [Sim97]. Aus der Tatsache des konstanten R -Parameters und des anwachsenden S -Parameter muß geschlossen werden, daß Doppelleerstellen und größere Leerstellenagglomerate in der implantierten Silizium-Schicht existieren. Ausgehend von vollständigem Positroneneinfang in zwei verschiedene Defekte, kann man den Schicht- S -Parameter berechnen als:

$$S_{\text{defekt}} = f_{2v}S_{2v} + f_{cl}S_{cl} \quad \text{mit} \quad (3.1.3)$$

$$1 = f_{2v} + f_{cl} . \quad (3.1.4)$$

Die Annihilationsanteile f_{2v} und f_{cl} können aus der mit **IR** gemessenen Konzentration der Doppelleerstellen n_{2v} , dem Einfangkoeffizienten μ_{2v} und der Einfangrate beider Defekttypen κ nach den Gleichungen (2.2.7) und (2.2.25) berechnet werden. Es ergibt sich aus Gl. (3.1.3):

$$S_{\text{defekt}} = \frac{\mu_{2v}n_{2v}}{\kappa}S_{2v} + \frac{\kappa - \mu_{2v}n_{2v}}{\kappa}S_{cl} . \quad (3.1.5)$$

Die gemessenen Werte $S_{\text{defekt}}/S_{\text{bulk}}$ (entsprechend dem S -Parameterplateau in Abbildung 3.4) wurden nach der Gl. (3.1.5) angepaßt. Die Linie in der Abbildung 3.9 zeigt die beste Anpassung zur Bestimmung von S_{cl} . Der Fehler des Verfahrens wird von der Unsicherheit der aus **IR**-Messungen bestimmtem absoluten Doppelleerstellenkonzentration (10%) und vom Fehler des Einfangkoeffizienten μ_{2v} dominiert. Die Gl. (3.1.5) beschreibt die experimentellen Daten sehr gut, was die Vermutung der Existenz zweier verschiedener leerstellenartiger Defekte unterstützt.

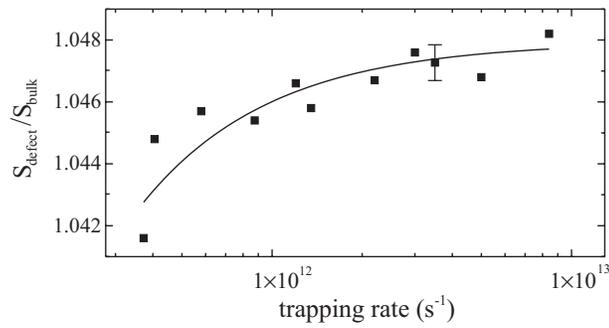


Abbildung 3.9: Anpassung des S -Parameters des Leerstellenagglomerates nach Gl. (3.1.5) (aus [Eic97a]).

Der S -Parameters des Leerstellenagglomerates wurde bestimmt zu $S_{cl}/S_{bulk} = 1.048 \pm 0.001$. Ein ähnlicher Wert wurde von NIELSEN et al. in 5 MeV, 1×10^{14} Si⁺cm⁻² implantierten Cz-Silizium beobachtet und ebenfalls kleineren Leerstellenagglomeraten zugeordnet [Nie93]. **EPR**-Untersuchungen von Sealy et al. [Sea95] zeigten in ähnlich bestrahlten Proben die Existenz von Si-P3-Zentren, die als planare Vierfachleerstellen identifiziert wurden [Bro71], und von Leerstellenagglomeraten zugeordneten Σ -Zentren [Bro72]. Der S -Parameter von Doppelleerstellen wurde in einer freien Anpassung überprüft, und es ergab sich $S_{2v}/S_{bulk} = 1.0403 \pm 0.002$.

Der VO-Komplex (A-Zentrum) wurde überraschenderweise in den Bor-implantierten Proben nicht gefunden. Im mittleren **IR**-Bereich (500 - 5000 cm⁻¹) konnten zwar die für Cz-Material typische Vibrationsmode des im Zwischengitter sitzenden Sauerstoffatoms beobachtet werden (1106 cm⁻¹), nicht jedoch die Mode des A-Zentrums, die bei etwa 830 cm⁻¹ zu erwarten ist [New65b, New65a, Wat61]. Für die Implantation verschiedener Ionen in niedrigen Dosen [Sve97] und nach Elektronenbestrahlung [Pol97] in Cz-Silizium wird das A-Zentrum in einer mehr oder minder großen Konzentration gefunden. Es kann nur spekuliert werden, daß bei der Ionenimplantation von höheren Dosen sehr viele Primärdefekte gebildet werden, die sich mit großer Wahrscheinlichkeit zusammenlagern und somit nicht für die Bildung von A-Zentren zur Verfügung stehen.

Zusammenfassend kann man zu den Untersuchungen am Bor-implantierten Silizium folgende Aussagen treffen:

1. Es wird keine Amorphisierung des Silizium-Targets durch Raumtemperaturimplantation von Bor bis zu Dosen von 2×10^{16} B⁺cm⁻² erreicht. Die entsprechenden **RBS**-Daten unterscheiden sich deutlich vom für amorphe Schichten typischen Random-Spektrum.
2. Ein näherungsweise konstantes Doppelleerstellsignal wurden in einem weiten Dosisbereich (1×10^{14} bis 2×10^{16} B⁺cm⁻²) mit **IR**-Absorption gemessen. Die integralen Defektkonzentrationen nach **VEPAS** und **RBS** sind dagegen proportional zur Wurzel aus der Ionendosis in Übereinstimmung mit dem Modell der Defektnukleation nach CHADDERTON.
3. Neben den Doppelleerstellen werden mittels **VEPAS** größere Leerstellenagglomerate (drei oder vier Leerstellen) beobachtet. Der S -Parameter dieses Defekttyps wurde zu $S_{cl}/S_{bulk} = 1.048 \pm 0.001$ bestimmt.
4. Die Schwingungsmode des A-Zentrums wurde im **IR**-Absorptionsspektrum nicht gefunden.

3.1.3. Dosisabhängigkeit von B-, P-, Si- und As-Implantationen

Die im vorhergehenden Abschnitt beschriebenen Untersuchungen zur Dosisabhängigkeit der Kristallschädigung nach Bor-Implantation sind in ähnlicher Weise auch für die Implantation von Silizium, Phosphor und Arsen in Silizium durchgeführt worden. Der Versuch einer genauen Identifizierung der eingeführten Defekte wurde zunächst nicht unternommen, weil die Defektstrukturen nach Implantation von schwereren Ionen eher komplexer werden und schon amorphe

Gebiete entstehen. Stattdessen wird sich auf integrale Meßgrößen (Diffusionsweglänge der Positronen und Rückstreuerausbeute im **RBS**-Experiment) zurückgezogen. Neben den vergleichenden Ergebnissen sind im folgenden die Einzelexperimente (**RBS** und **VEPAS**) nur exemplarisch dargestellt.

RBS. Die Tiefenaufösung der **RBS**-Technik ist gut genug, um die durch die Mehrfachimplantation hervorgerufenen einzelnen Schädigungspeaks im **RBS**-Spektrum sichtbar werden zu lassen. Die Defektprofile für die Bor-Implantation sind in Abbildung 3.10 beispielhaft gezeigt. Die Profile wurden in Zwei-Strahl-Näherung berechnet (siehe Abschnitt 2.3). Eine Amorphisierung von Silizium durch die Bor-Implantation bei Raumtemperatur ist im Gegensatz zur Silizium-Selbstimplantation oder zur Arsen-Implantation nicht möglich. Die mittlere Konzen-

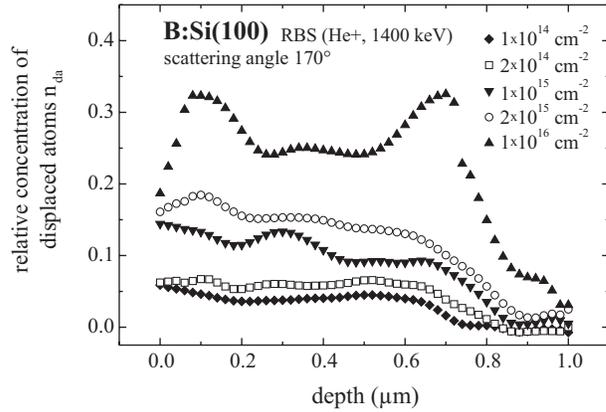


Abbildung 3.10: Aus **RBS**-Spektrern berechnete Defektprofile für mit verschiedenen Dosen Bor-implantiertes Silizium (aus [Eic97b]).

tration deplazierter Atome wird durch Integration der Schädigungsprofile berechnet. Diese integralen Werte werden später mit den Positronenergebnissen verglichen. Die mit den jeweils höchsten Arsen- und Silizium-Dosen von $5 \times 10^{14} \text{ As}^+ \text{ cm}^{-2}$ bzw. $5 \times 10^{15} \text{ Si}^+ \text{ cm}^{-2}$ bestrahlten Proben zeigen im **RBS**-Experiment eine nahezu vollständig amorphe Schicht.

VEPAS. Die Konzentration der leerstellenartigen Defekte kann aus der gemessenen Positronendiffusionsweglänge ermittelt werden (vergleiche Abschnitt 2.2). Die dazugehörigen $S(E)$ -Messungen mit langsamen Positronen sind in Abbildung 3.11 am Beispiel der Silizium-Selbstimplantation gezeigt. Die Referenzprobe zeigt den typischen Verlauf: die Annihilation an

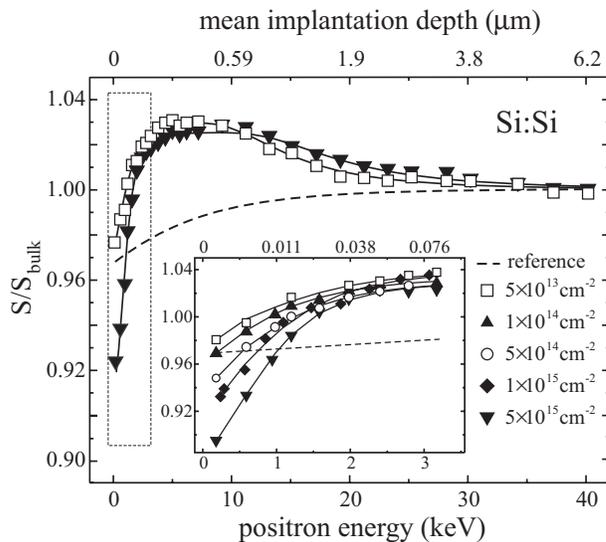


Abbildung 3.11: Die $S(E)$ -Kurven für Silizium-implantiertes Silizium (Referenz, $5 \times 10^{13} \text{ Si}^+ \text{ cm}^{-2}$ und $5 \times 10^{15} \text{ Si}^+ \text{ cm}^{-2}$) sind exemplarisch dargestellt. Im Inset sind die verschiedenen Anstiege aller gemessenen Kurven im Bereich niedriger Positronenenergien dargestellt. Sie charakterisieren die Konzentration leerstellenartiger Defekte. Die eingezeichneten Linien bezeichnen die besten Fits nach der Diffusionsgleichung mittels **VEPFIT** (aus [Eic97b]).

der mit der natürlichen Oxidschicht bedeckten Oberfläche für geringe Positronenenergien und im defektfreien Volumen für Energien $> 10 \text{ keV}$. Der S -Parameter wird von den charakteristischen Werten der Annihilationszustände und im Übergangsbereich (0 - 10 keV) von der Positronenrückdiffusion (Diffusionslänge 245 nm) zur Oberfläche bestimmt. Auch nach Implantation

von Silizium wird mindestens ein weiterer durch einen höheren S -Parameter charakterisierter Annihilationszustand sichtbar. Der Positroneneinfang in die Implantationsdefekte im geschädigten Tiefenbereich ist gesättigt, wie die Analyse mit **VEPFIT** ergeben hat. Die verschiedenen Anstiege der S -Parameterkurve für niedrige Positronenenergien (siehe Inset von Abbildung 3.11) sind charakteristisch für unterschiedliche Diffusionsweglängen der Positronen und somit auch für unterschiedliche Konzentrationen leerstellenartiger Defekte. Hohe Defektkonzentrationen bewirken wegen des verstärkten Einfangs der Positronen eine Verkürzung der Positronendiffusionsweglänge. Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß in eine bestimmte Tiefe eindringende Positronen die Oberfläche mit ihren spezifischen Annihilationsparametern erreichen ist geringer als für kleinere Defektkonzentrationen. Der Anstieg der $S(E)$ -Kurve im oberflächennahen Gebiet ist für hohe Konzentrationen steiler als für geringe Konzentrationen. Die Anpassung der Diffusionsweglänge mit **VEPFIT** bestätigt diese Korrelation. Unter der Annahme einer homogenen Schädigung in einem bestimmten Tiefenbereich sind die effektive Positronendiffusionsweglänge und die Dicke der geschädigten Schicht die einzigen nichtlinearen Anpassungsparameter in **VEPFIT**. Die Defektkonzentration kann nach Gl. (3.1.2) bestimmt werden, wenn man alle Leerstellen betrachtet, die in verschiedenen Defektkomplexen eingebaut sind. Die amorphen Schichten nach Arsen- und Silizium-Implantation mit der jeweils höchsten Dosis zeigen die typischen Positronendiffusionsweglängen zwischen 5 und 12 nm [Hak92].

Vergleichende Betrachtung. Die dosisabhängige **RBS**- und **VEPAS**-Analyse wurde für alle implantierten Proben durchgeführt. Für einen Vergleich der Schädigungen nach Implantation der verschieden schweren Ionen ist es zweckmäßig, die Dosis in die deponierte Energiedichte umzurechnen. Diese Größe ist ein Maß für die Zahl der eingeführten Primärdefekte (FRENKEL-Paare). Die durchgeführten **TRIM**-Simulationen liefern die deponierten Energiedichten proportional zur Dosis (siehe Abschnitt 3.1.1). Der Bezug der gemessenen Strahlenschädenkonzentration auf ihre Primärkonzentration ist wegen der guten Vergleichbarkeit der Daten vernünftig. In Abbildung 3.12 sind die integralen Leerstellenkonzentrationen (unterer Teil) und die mittleren Konzentrationen deplazierter Gitteratome (oberer Teil) dargestellt. Fast alle Auftragungen der Konzentrationen von Strahlenschäden zeigen eine Wurzel-Abhängigkeit von der deponierten

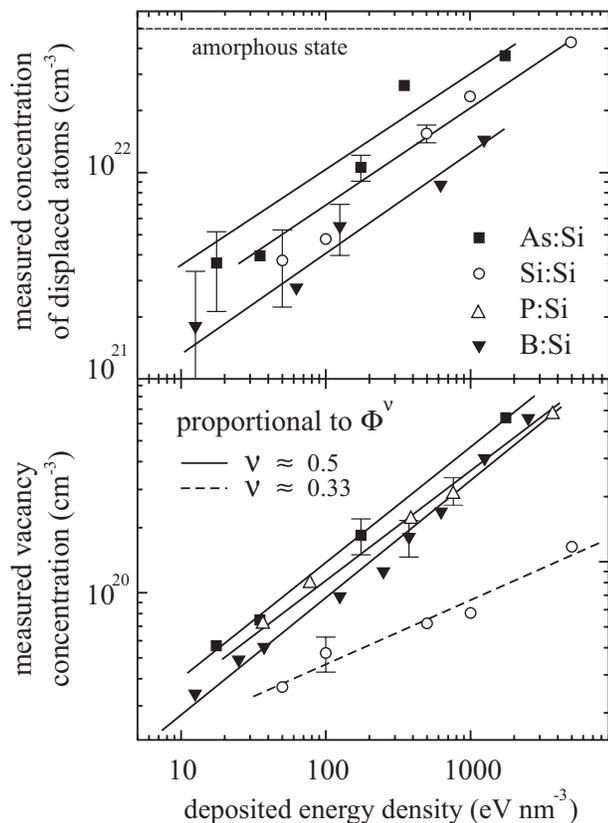


Abbildung 3.12: Vergleich der Dosisabhängigkeit der mittleren Konzentration deplazierter Gitteratome (oberer Teil) nach Bor-, Silizium- und Arsen-Implantation und der Leerstellenkonzentration (unterer Teil) nach Implantation von Bor-, Phosphor-, Silizium- und Arsen-Ionen in Silizium. Die Linien sind jeweils Anpassungen an ein Potenzgesetz (aus [Eic97b]).

Energiedichte, d.h. von der Implantationsdosis. Für niedrigere Implantationsdosen wurde dagegen ein linearer Verlauf der Defektkonzentration leerstellenartiger Defekte abhängig von der Dosis gefunden [Sve97]. Von SIMPSON et. al. konnte schon eine Abweichung von dieser Linearität für höhere Dosen beobachtet werden [Sim91]. Auch SEALY et al. fanden mittels **DCXD** und **EPR** für die Abhängigkeit der Konzentration verschiedener Leerstellenagglomerate nach Ionenimplantation Dosisexponenten kleiner als eins [Sea95]. Das heißt, die Rekombination der primär produzierten Defekte beginnt eine Rolle zu spielen, weil sich die von den einzelnen Ionen geschädigten Zonen überlappen. In den Abschnitten 1.3.1 und 3.1.2 wurde das CHADDERTON-Modell bereits diskutiert. Im Bereich der untersuchten deponierten Energien scheint für alle verwendeten Implantate das Modell der Defektnukleation nach CHADDERTON zu gelten. Sowohl das Leerstellensignal als auch das der Zwischengitteratome zeigen diese Wurzelabhängigkeit, woraus geschlossen werden kann, daß die Defektbilanz ausgewogen ist. Das heißt, integrierend betrachtet ist die Anzahl der Leerstellen zumindest proportional zur Anzahl von Zwischengitteratomen für eine bestimmte Dosis, unabhängig vom speziellen Implantat.

Lediglich für die Leerstellenkonzentration nach Silizium-Selbstimplantation zeigt sich eine Abweichung von diesem Wurzel-Verhalten. Der Dosisexponent ν beträgt hier nur ca. 1/3. Das Besondere an dem Silizium-Implantat ist nun, daß das Ion, nachdem es abgebremst wurde, nicht von einem Zwischengitteratom zu unterscheiden ist und sich wie ein solches verhält. Es kann also auch zur Rekombination von Zwischengitteratomen und Leerstellen beitragen. Im Modell der Defektnukleation nach CHADDERTON werden die Implantat-Ionen nicht berücksichtigt. Zur Erklärung der Besonderheiten bei der Selbstimplantation ist eine Erweiterung des Modells notwendig.

Modellierung der Dosisabhängigkeit. Das Modell der homogenen Defektnukleation wurde von CHADDERTON entwickelt, um die Schädigung von Silizium nach Bor-Implantation zu beschreiben. Für die integralen Konzentrationen von Leerstellen und Zwischengitteratomen wurde die Wurzelabhängigkeit von der Dosis unter Annahme bestimmter Voraussetzungen vorhergesagt (siehe Abschnitt 1.3.1). Die mit konstanter Rate erzeugten Zwischengitteratome werden von Zentren mit konstantem Wechselwirkungsquerschnitt eingefangen oder sie rekombinieren mit den zeitgleich gebildeten Leerstellen. Die Leerstellen werden im Gegensatz zu den Zwischengitteratomen als quasi unbeweglich angesehen. Die Wurzelabhängigkeit ist eine direkte Konsequenz des konstanten Einfangquerschnitts der Nukleationszentren. Die Natur dieser Zentren ist unbekannt und für die theoretische Behandlung nicht wichtig. Versetzungen kommen dafür nicht in Frage, Siliziumkristalle werden üblicherweise versetzungsfrei gezüchtet. Mittels **TEM**-Untersuchungen wurde gefunden, daß sich Agglomerate von Zwischengitteratomen bilden [Wer93], die die Rolle der Einfangzentren im CHADDERTON-Modell übernehmen könnten.

Ein wichtiges experimentelles Ergebnis ist die signifikante Abweichung der funktionellen Abhängigkeit der Leerstellenkonzentration von der Implantationsdosis von einer Wurzelfunktion nach Silizium-Selbstimplantation (siehe Abbildung 3.12). Eine Erklärung dafür könnte sein, daß es, wegen der zusätzlich eingebrachten Siliziumatome, zur verstärkten Rekombination von Punktdefekten während der Implantation kommt. Eine qualitative Beschreibung dieses Prozesses erhält man durch die numerische Behandlung der reaktionskinetischen Differentialgleichungen der primär erzeugten Punktdefekte. Dabei geht man von den Bedingungen des CHADDERTON-Modells der homogenen Nukleation aus und betrachtet die Rekombination von Punktdefekten neben der Agglomeration von Zwischengitteratomen. Die zeitliche Änderung der Leerstellenkonzentration n_{vac} und der Zwischengitteratome n_i wird durch ein System von Differentialgleichungen beschrieben:

$$\frac{d n_i(t)}{d t} = -K_1 n_i(t) n_{\text{vac}}(t) - K_2 N_u n_i(t) , \quad (3.1.6)$$

$$\frac{d n_{\text{vac}}(t)}{d t} = -K_1 n_i(t) n_{\text{vac}}(t) , \quad (3.1.7)$$

wobei K_1 und K_2 die üblichen Ratenkonstanten sind. Der erste Term in beiden Gleichungen charakterisiert die Rekombination von Leerstellen und Zwischengitteratomen. Der zweite Term

in der Gleichung (3.1.6) steht für die Agglomeration der Zwischengitteratome an Zentren der Konzentration N_u . Die Lösung des Anfangswertproblems ($n_i(0) = n_{\text{vac}}(0) = \bar{\Phi}$) führt für lange Zeiten auf einen stationären Zustand mit $n_i(\infty) = 0$ und $n_{\text{vac}}(\infty) = n_{\text{vac}}(\bar{\Phi})$. Der Anfangswert $\bar{\Phi}$ ist die Zahl der primär erzeugten FRENKEL-Paare proportional zur Implantationsdosis. Seine Variation bestimmt die Abhängigkeit $n_{\text{vac}}(\bar{\Phi})$. Das Problem sind die unbekanntenen Konstanten K_1 und K_2 sowie die Konzentration der Agglomerationszentren N_u . Viele Parametersätze reproduzieren die erwartete Wurzelabhängigkeit $n_{\text{vac}} \propto \bar{\Phi}^{1/2}$. Für die speziellen Werte $K_1 = 1$ und $K_2 N_u = 1000$ im Bereich $1000 \leq \bar{\Phi} \leq 10000$ ist die Funktion in Abbildung 3.13 dargestellt (■). Eine separate Erhöhung des Anfangswertes der Konzentration der Zwischengitteratome durch einen Faktor ε simuliert die Situation der Silizium-Selbstimplantation, bei der die implantierten Siliziumatome zur Rekombination der Punktdefekte beitragen. Die Lösungen für $n_i(0) = \varepsilon \bar{\Phi}$, $\varepsilon > 1$ und $n_{\text{vac}}(0) = \bar{\Phi}$ zeigen einen geringeren Dosisexponenten (○). In Abbildung 3.13 ist die Dosisabhängigkeit speziell für $\varepsilon = 1.07$ mit dem konventionellen Ergebnis und den exakten exponentiellen Funktionen $\nu = 1/2$ bzw. $1/3$ verglichen. Mit einem entsprechenden ε kann

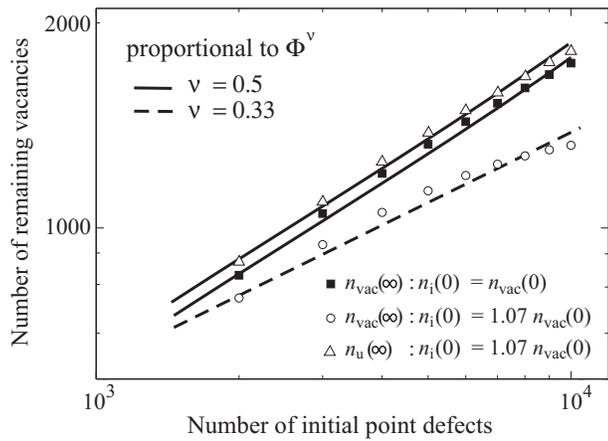


Abbildung 3.13: Die Dosisabhängigkeiten der stationären Punktdefektkonzentrationen, berechnet aus dem Anfangswertproblem der Reaktionskinetik von Punktdefekten und variierenden Anfangswerten, sind mit den exakten Exponentialgesetzen verglichen. Die separate Erhöhung der Anfangskonzentration der Zwischengitteratome führt zu einer verstärkten Rekombination und zur Senkung des Dosisexponenten für die Leerstellenkonzentration (aus [Eic98b]).

also das experimentelle Ergebnis für die Dosisabhängigkeit der Leerstellenkonzentration simuliert werden. Darüber hinaus beschreibt das Modell auch die unveränderte Wurzelabhängigkeit der Zahl der agglomerierten Zwischengitteratome n_u von der Dosis (Δ). Mit den Anfangswerten $n_{\text{vac}}(0) = \bar{\Phi}$ und $n_i(0) = \bar{\Phi} + (\varepsilon - 1)\bar{\Phi}$ sowie dem stationären Wert der Leerstellenkonzentration $n_{\text{vac}}(\infty)$ ergibt sich $n_u = n_{\text{vac}}(\infty) + (\varepsilon - 1)\bar{\Phi}$. So ist auch das **RBS**-Ergebnis zu verstehen, bei dem der Dosisexponent auch für die Selbstimplantation bei ca. 0.5 bleibt.

Die vorhergehende Betrachtung ist vernünftig, da z.B. für die höchste Dosis ($5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$) ungefähr $10^{20} \text{ Si}^+ \text{ cm}^{-3}$ in die Schicht eingeführt werden. Das ist ein Wert, der im Bereich der beobachteten Leerstellenkonzentration in dieser Probe liegt. Ein Einfluß der implantierten Siliziumatome auf das Gleichgewicht der Punktdefekte und auf ihre Rekombination ist naheliegend. Andererseits sollten die implantierten Dotierungsatome (Bor, Phosphor und Arsen) eine solche Rolle nicht spielen können. Die meisten von ihnen sitzen im implantierten Zustand auf Zwischengitterpositionen und erst eine Temperaturbehandlung führt zur Besetzung elektrisch aktiver Gitterplätze [Rys78]. Das Verhalten von Bor in Silizium ist etwas komplizierter, es bildet schon bei geringeren Temperaturen Defektkomplexe [Wat75, Wat76] und wirkt als Nukleationszentrum für Zwischengitteratome. Jedenfalls sollten bei Raumtemperatur Fremdatome nicht zur Verringerung der Zahl von Leerstellen beitragen. Diese Fakten erklären den Unterschied im Dosisverhalten der Leerstellenkonzentration bei Implantation von Silizium und den anderen Ionen. Nimmt man für FRENKEL-Paare in Silizium eine Bildungsenergie von 20 eV an, so erzeugt in unserem Fall ein Silizium-Ion ungefähr 1000 primäre FRENKEL-Paare (berechnet mit **TRIM**). Dann würde der Wert $\varepsilon = 1.07$ bedeuten, daß zirka 98% der gebildeten Punktdefekte während des Implantationsprozesses rekombinieren. Diese Tatsache ist in der Literatur gut bekannt und wird z.B. von SVENSSON et al. ausführlich diskutiert [Sve93].

Die wirkliche Situation ist sicher komplizierter. Das hier vorgestellte einfache Modell beschreibt den Einfluß des Überschusses an Zwischengitteratomen bei Silizium-Selbstimplantation auf die Entwicklung der Implantationsdefekte mit der Dosis. Sogar quantitativ stimmen die Werte der Modellierung mit den bestehenden Vorstellungen der Defekterzeugung überein.

Aussagen zu leerstellenartigen Defekten. Die existierenden Defekttypen sind nicht genau bekannt, trotzdem können einige Aussagen dazu getroffen werden. Bei Raumtemperatur sind Einfachleerstellen nicht stabil [Wat64]. Doppelleerstellen sind vorhanden, sie wirken jedoch nicht als dominierendes Einfangzentrum für Positronen, was aus später beschriebenen Ausheiluntersuchungen geschlossen werden kann. Die Bildung von Defektkomplexen mit den implantierten Dotandenatomen ist in nennenswerter Zahl nicht zu beobachten, ansonsten müßten sich im Experiment deutliche Unterschiede für die verschiedenen Implantat-Ionen ergeben.

Für die höchsten Dosen der Silizium-, Phosphor- und Arsen-Implantation wurde mit **RBS** eine vollständige Amorphisierung der implantierten Schicht gefunden. Bei der Implantation geringerer Dosen sollte eine Mischung von amorphen Zonen und kristallinen Gebieten entstehen, die verschiedene leerstellenartige Defekte enthalten. Für gesättigten Positroneneinfang, und davon kann man ausgehen, spiegelt der Schicht- S -Parameter diese Situation wieder. In Abbildung 3.14 ist der Schicht- S -Parameter S_{layer} für alle Implantate über der deponierten Energiedichte aufgetragen. Das Ansteigen der S -Parameter zeigt, daß der Anteil der in größeren leerstellenartigen Defekten eingefangenen Positronen mit der Dosis wächst. Für die höchsten Dosen der relativ schweren Implantate findet man einen signifikanten Abfall des S -Parameters, der auf die vollständige Amorphisierung der implantierten Schicht zurückzuführen ist. Es ist bekannt, daß der S -Parameter in amorphem Material typischerweise höher als im ungestörten Material und niedriger als für leerstellenartige Defekte liegt [AK94, Ued92c], da das isolierte offene Volumen amorpher Strukturen kleiner als das einer Leerstelle ist.

Im Abschnitt 3.1.2 wurde schon festgestellt, daß nach Raumtemperaturimplantation von Bor keine amorphen Zonen entstehen. Der S -Parameter steigt auch für die höchste Bor-Dosis. Die Analyse der S - W -Darstellung in Abbildung 3.15 unterstützt die These von der Koexistenz verschiedener Defekte. Die in der geschädigten Schicht gemessenen S -Parameter sind über den

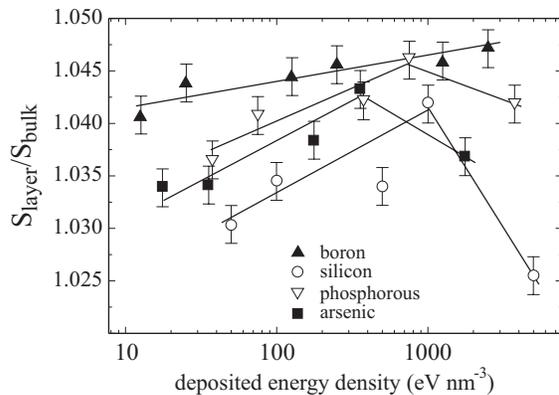


Abbildung 3.14: Schicht- S -Parameter für alle untersuchten geschädigten Schichten (aus [Eic98b]).

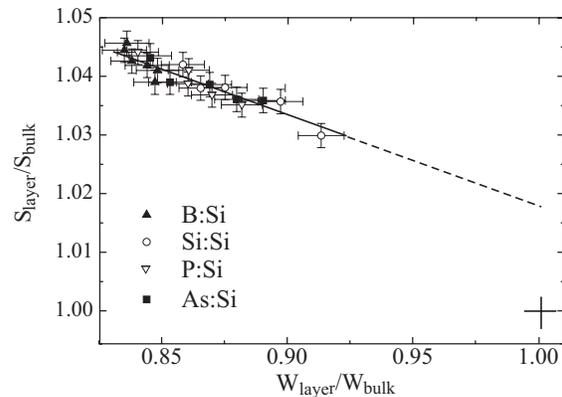


Abbildung 3.15: Zusammenfassende S über W Darstellung für alle untersuchten geschädigten Schichten (aus [Eic98b]).

zugehörigen W -Parametern aufgetragen. Im Fall des gesättigten Positroneneinfangs in Defekte und dem Vorhandensein von mehr als einem Defekttyp sollte der den Annihilationszustand im ungestörten Volumen charakterisierende Punkt (1.0, 1.0) nicht Teil der S - W -Trajektorie oder ihrer Verlängerung sein [Lis94, Cle96]. Die Tatsache, daß die einzelnen Datenpunkte im Rahmen der Fehler auf einer Geraden liegen, ist ein Zeichen für die Dominanz zweier Defekttypen. Zum einen sollten der Positroneneinfang in amorphe Zonen eine Rolle spielen, zum anderen der in Leerstellenagglomerate.

Zusammenfassend kann zur Defektentwicklung nach Bor-, Silizium-, Phosphor- und Arsen-Implantation gesagt werden:

1. Die Rekombination von primär erzeugten Punktdefekten während der Implantation führt zur Abweichung von der linearen Dosisabhängigkeit der Defektkonzentration. Die Rekombinationswahrscheinlichkeit ist wegen der mehr oder minder starken Überlappung der Kollisionskaskaden selbst eine Funktion der Implantationsdosis.
2. In Silizium scheint die Wurzelabhängigkeit der integralen Punktdefektkonzentration von der Implantationsdosis (Defektnukleation nach CHADDERTON) charakteristisch für deponierte Energiedichten zwischen 10 und 5000 eV nm⁻³ zu sein.
3. Nur nach Silizium-Selbstimplantation findet man einen kleineren Dosisexponenten (1/3). Dieses Verhalten kann mit einer Erhöhung der Rekombinationswahrscheinlichkeit von Punktdefekten durch die zusätzlich implantierten Siliziumatome erklärt werden. Eine qualitative Beschreibung liefert die numerische Behandlung der Reaktionskinetik der primär erzeugten Punktdefekte unter den Voraussetzungen des CHADDERTON-Modells. Auch die quantitative Übereinstimmung der Modellparameter mit den existierenden Vorstellungen der Defektentwicklung nach Teilchenbestrahlung ist vernünftig.
4. Eine Mischung aus stabilen leerstellenartigen Defekten, wie Doppelleerstellen und größeren Leerstellenagglomeraten, existiert neben amorphen Gebieten im implantierten Zustand der Proben.

3.1.4. Richtungsabhängigkeit der Bor-Implantation

Zur Untersuchung der Abhängigkeit der Implantationsschäden von der Kristallrichtung wurde p-Typ [*B*] Cz-Silizium ($\rho \approx 10 - 30 \Omega\text{cm}$) unterschiedlicher Orientierung ($\langle 111 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, und $\langle 100 \rangle$) im Dosisbereich $10^{14} - 10^{16} \text{ B}^+\text{cm}^{-2}$ bestrahlt. Die Dosisabhängigkeit der Schädigung wurde schon im vorhergehenden Abschnitt (3.1.2) diskutiert. Prinzipiell können zwei richtungsabhängige Effekte eine Rolle spielen.

Einmal ist es möglich, daß die Erzeugung von Implantationsdefekten in verschiedenen orientierten Targetkristallen zumindest quantitativ anders verläuft. So entstehen bei der Bildung von FRENKEL-Paaren Ersetzungsstoßfolgen entlang niedrig indizierter Richtungen (siehe Abschnitt 1.2). Von der Entfernung der FRENKEL-Partner hängt die Wahrscheinlichkeit der spontanen Rekombination ab, und somit die Konzentration der verbleibenden stabilen Defekte. Die Reichweite der Ersetzungsstoßfolgen ist korreliert mit der Symmetrie und den Bindungsverhältnissen der jeweiligen Kristallrichtung. Praktisch wird jedoch nicht genau senkrecht zur Targetoberfläche implantiert, sondern um 7° verkippt, um Channelingeffekte zu vermeiden. Dennoch wäre eine bevorzugte Verlagerung in Richtung der Kristallorientierung vorstellbar. Zweitens könnten Asymmetrien der Kristalldefekte zumindest im **RBS**-Signal beobachtet werden, da die analysierenden He-Ionen exakt in die entsprechende Kristallrichtung eingeschossen werden und die verschiedenen Auslenkungen der Atome eines asymmetrischen Defekts in die Gitterkanäle spüren. Außerdem sollten anisotrope Gitterverzerrungen detektiert werden. Das Positronensignal sollte auf solche Anisotropien nicht ansprechen. Die als Funktion der Positronenenergien gemessenen *S*-Parameter einer Referenzprobe und drei gleich implantierten ($5 \times 10^{15} \text{ B}^+\text{cm}^{-2}$) aber unterschiedlich orientierten Proben sind in Abbildung 3.16 gezeigt. Die Referenzdaten zeigen den typischen Verlauf. Der *S*-Parameter der gestörten Schicht der implantierten Proben ist wegen des Positroneneinfangs in die implantationsinduzierten leerstellenartigen Defekte größer als der im ungestörten Volumen (siehe Diskussion in Abschnitt 3.1.2 und Abbildung 3.4). Der in diesem Experiment interessierende Punkt ist, daß die Daten für die verschiedenen Kristallrichtungen nicht mehr als die üblichen Meßfehler voneinander abweichen. Das heißt, die gebildeten Defekttypen mit offenem Volumen und ihre Konzentrationen sind unabhängig von der Orientierung des Siliziumkristalls während der Implantation. Im Gegensatz dazu zeigen die **RBS**-Ergebnisse Unterschiede für die entlang verschiedener niedrig indizierter Richtungen implantierter Proben [Wen94, Eic97a]. Exemplarisch ist in Abbildung 3.17 die relative Konzentration deplazierter Gitteratome n_{da} über der Tiefenskala nach Implantation von $5 \times 10^{15} \text{ B}^+\text{cm}^{-2}$ aufgetragen. Die dazugehörigen mittleren Verrückungen r_a , wie sie aus temperaturabhängigen Messungen

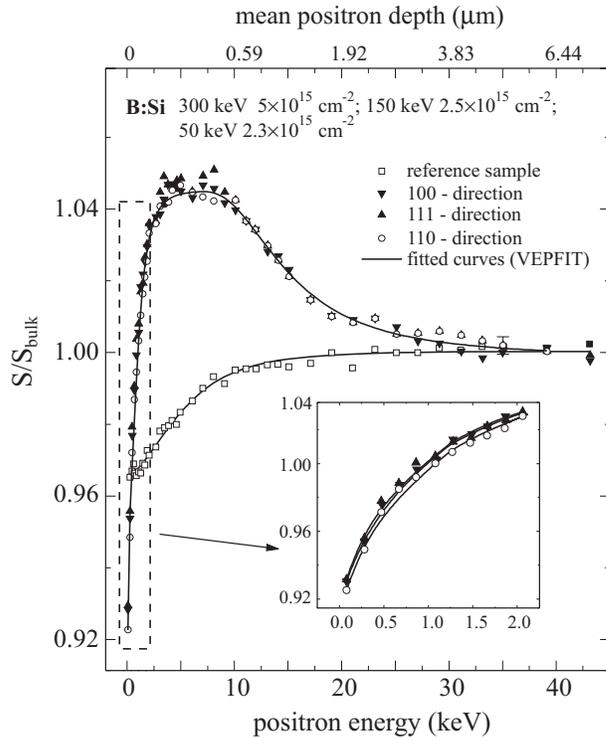


Abbildung 3.16: Die $S(E)$ -Kurven für in unterschiedlich Richtungen ($\langle 111 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 100 \rangle$) geschnittene bestrahlte ($5 \times 10^{15} \text{ B}^+ \text{ cm}^{-2}$) Siliziumproben (p-Typ, $\rho \approx 10 - 30 \Omega \text{ cm}$). Die gestrichelte Box ist im Inset vergrößert dargestellt. Die Kurven unterscheiden sich weder in den Anstiegen noch in den Plateauwerten (aus [Eic97a]).

folgen (siehe Abschnitt 2.3), und die Profile selbst unterscheiden sich für $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ und $\langle 111 \rangle$ orientiertes Silizium. Wegen der Richtungsunabhängigkeit des Positronensignals (siehe Abbildung 3.16), kann eine Abhängigkeit der Gitterschädigung von der Targetorientierung ausgeschlossen werden. Der hier bestimmte Deplazierungsabstand ist ein mittlerer Wert aus großen Abständen, die von Punktdefekten hervorgerufen werden, und kleineren Verrückungen bedingt durch Gitterverzerrungen in der Umgebung von Defekten. n_{da} ist also die Konzentration aller deplazierter Gitteratome und nicht die Konzentration eines oder mehrerer Defekte. Die Daten aus Abbildung 3.17 zeigen, daß in $\langle 100 \rangle$ Richtung eine starke Gitterverzerrung auftritt, die zu kleinem r_a und großer Konzentration führt. In den anderen beiden Fällen ($\langle 110 \rangle$ und $\langle 111 \rangle$) dominieren schwere deplazierte Silizium-Atome [Wen94].

Diesen Abschnitt abschließend, kann man feststellen, daß eine Abhängigkeit der Defekterzeugung von der Orientierung der Targets mit Positronen nicht beobachtet werden konnte. Unterschiede in den **RBS**-Daten lassen sich mit der Anisotropie von Gitterverzerrungen im Umfeld von Defekten erklären. Konkrete Aussagen zur Struktur vorhandener Defekte können ohne weiteres nicht getroffen werden.

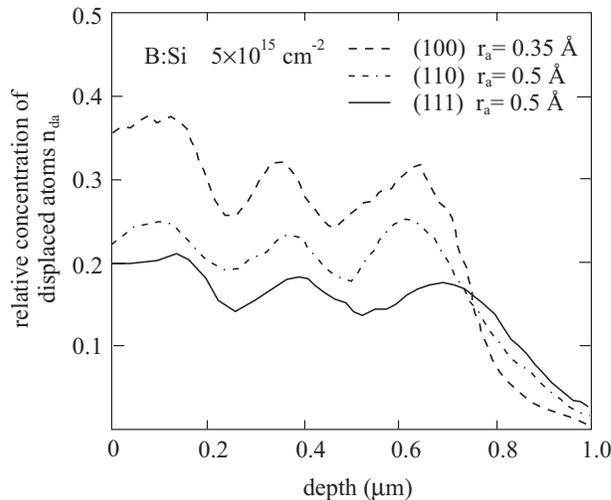


Abbildung 3.17: Die aus **RBS**-Messungen berechneten Defektprofile von p-Typ Cz-Silizium ($\rho \approx 10 - 20 \Omega \text{ cm}$) mit $5 \times 10^{15} \text{ B}^+ \text{ cm}^{-2}$, in die Kristallrichtungen $\langle 111 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ und $\langle 100 \rangle$ implantiert, sind gezeigt. Die dreifache Struktur der Profile folgt aus der Mehrfachimplantation mit drei verschiedenen Energien. Die Profile unterscheiden sich in ihrer Höhe voneinander und die berechneten mittleren Atomauslenkungen sind ebenfalls verschieden (aus [Eic97a]).

3.1.5. Dickenbestimmung an den Ionen-implantierten Schichten

Die Tiefenauflösung der **VEPAS** ist sehr begrenzt und darüberhinaus eine Funktion der Tiefe selbst und der Positronendifusionsweglänge. Je tiefer die Positronen implantiert werden, um so breiter ist ihre Verteilung nach der Thermalisierung. Durch die mehr oder weniger ausgeprägte Diffusion wird das ohnehin breite Profil weiter verschmiert. Eine Anpassung des Defektprofils ist deshalb schwierig. In dieser Arbeit wurde versucht, das Problem der Konzentrationsbestimmung abzuschwächen, indem das Verfahren der Mehrfachimplantation benutzt wurde. Man kann durch geeignete Wahl der Implantationsparameter erreichen, daß eine quasi homogen geschädigte Schicht entsteht, d.h. daß ein Kastenprofil entsteht. Die nichtlinearen Parameter der Anpassung in **VEPFIT** sind dann nur die Defektkonzentration und die Schichtdicke. Die Defektkonzentration wird aus der Diffusionsweglänge bestimmt, die hauptsächlich aus der Anpassung des Anstiegs der $S(E)$ -Kurven von der Oberfläche zum S -Parameter-Plateau folgt. Hier ist die Tiefenauflösung noch akzeptabel und der Konzentrationsfehler gering. Die Schichtdicke jedoch wird aus der hochenergetischen Flanke der $S(E)$ -Kurve abgeleitet, der Fehler ist hier beträchtlich. Wenn man sich die **TRIM**-Simulationen der Schädigung im Abschnitt 3.1.1 ansieht, fällt auf, daß die Schicht nicht abrupt endet, sondern mehr oder weniger breit ausläuft. Zum Schichtdickenfehler kommt also noch der Anteil, der die Abweichung der realen Defektverteilung zum angenommenem Kastenprofil charakterisiert. Für die Bor-Implantation ist in Abbildung 3.1 einen relative steile Flanke zu sehen. Hier variiert die aus **VEPAS** ermittelte Schichtdicke zwischen 0.7 und 1.0 μm (siehe Abbildung 3.5). Nach der Implantation schwererer Ionen ergibt sich eine unerwartet große Erhöhung der Schichtdicke. Es muß geprüft werden, ob der Grund dafür in der relativ großen Abweichung der realen Schädigungsprofile vom Kastenprofil liegen kann. Am Beispiel der Arsen-implantierten Proben soll das Vorgehen näher erläutert werden.

Die aus der Anpassung mit einem Kastenprofil resultierenden Schichtdicken sind in Abbildung 3.18 dargestellt. Die **VEPFIT**-Auswertung mit der Annahme eines Kastenprofils liefert

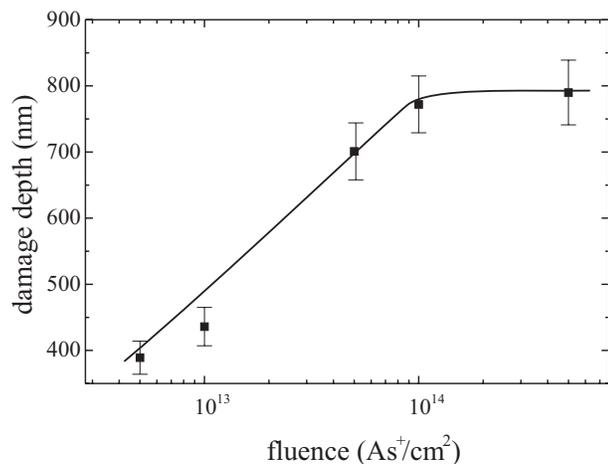


Abbildung 3.18: Dosisabhängigkeit der angepaßten Schädigungstiefe nach Arsen-Implantation. Es sind die aus der **VEPFIT**-Auswertung unter Annahme eines Blockprofils erhaltenen Werte aufgetragen (■). Die durchgezogene Linie charakterisiert das Ergebnis der Modellrechnung auf der Grundlage eines Trapezprofils (nach [Bör96]).

den Anstieg der Schichtdicke von 390 nm auf 790 nm mit der Dosis. Dieser Effekt ist weder durch Defektdiffusion aus der geschädigten Schicht ins ungestörte Volumen noch durch einen anderen physikalischen Effekt zu erklären. Offenbar ist die Näherung eines Kastenprofils für die Verteilung der Implantationsdefekte zu grob. Die Verwendung eines komplizierteren Profils für die Anpassung mittels **VEPFIT** ist nicht vorteilhaft, da die Zahl der nichtlinearen Parameter dadurch wächst und die Ergebnisse erheblich unsicherer werden. Man kann jedoch auch nachträglich die aus der Anpassung mit dem Kastenprofil erhaltenen Schichtdicken interpretieren.

Es ist nicht anzunehmen, daß bei gleichbleibender Energie die Schädigungstiefe mit der Dosis derartig zunimmt. Nur die Konzentration der entstehenden Defekte sollte sich erhöhen. Das Ende des Blockprofils wird bei der Auswertung zu dem Wert bestimmt, bei dem die Defektkonzentration unter einen bestimmten Wert (z.B. dem der Grenzkonzentration für gesättigten Positroneneinfang) abgefallen ist. Da bei höheren Dosen dieser Wert der Konzentration erst

in einer größeren Tiefe erreicht wird, kommt es durch die Näherung des Blockprofils zu dieser scheinbaren Dosisabhängigkeit der Schädigungstiefe. Die Modellierung dieser Dosisabhängigkeit unter der Annahme eines anderen Profils ist in Abbildung 3.19 dargestellt. Nimmt man eine

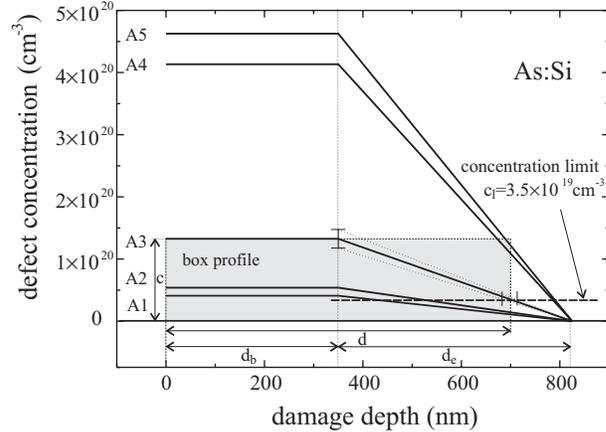


Abbildung 3.19: Profilnäherung mit linearem Abfall (Trapezmodell) der Defektkonzentration zur Bestimmung der Schädigungstiefe nach As-Implantation in Si. Bei dem Modell wird die Näherung gemacht, daß die Defektkonzentration, die aus der Auswertung mittels VEPFIT folgt, konstant bis 350 nm ist und danach linear bis zu 825 nm abfällt (nach [Bör96]).

dosisunabhängige Form der Defektverteilung mit einer bis in die Tiefe d_b gleichbleibenden und danach bis in eine Tiefe d_e linear abfallenden Konzentration an, so liefert der Schnittpunkt dieses Trapezprofils mit einer kritischen Konzentration c_l (waagerechte gestrichelte Linie) das Ende des Blockprofils (grau unterlegt). Aus den Fehlern der Bestimmung der Defektkonzentration mittels **VEPFIT** folgen die Fehler für die Schichtdicken (siehe Abbildung 3.19).

Die geometrische Beschreibung des Modells ist einfach. Man erhält für die meßbare Schichtdicke d als Funktion der Defektkonzentration c und unter Berücksichtigung der in Abbildung 3.19 benutzten Bezeichnungen:

$$d = d_e \left[1 - \frac{c_l}{c} \right] + d_b . \quad (3.1.8)$$

Die Tiefenparameter d_e und d_b bestimmen die der Realität besser entsprechenden Defektverteilungen. Die Interpretation der kritischen Konzentration c_l ist schwieriger, sie sollte unmittelbar mit dem Begriff des gesättigten Positroneneinfangs verknüpft sein. Der S -Parameter ändert sich im Fall gesättigten Positroneneinfangs in einen Defekttyp kaum², so daß Konzentrationsänderungen nicht registriert werden können. Bis die Konzentration unter das Limit des gesättigten Positroneneinfangs fällt, wird eine konstante Defektkonzentration gemessen (Kastenprofil). Der Anteil der eingefangenen Positronen η läßt sich aus der Annihilationsrate im ungestörten Volumen λ_b (für Silizium ca. $4.5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$) und der Einfangrate κ berechnen:

$$\eta = \frac{\kappa}{\lambda_b + \kappa} . \quad (3.1.9)$$

Ist η größer als 0.9, so kann man von nahezu gesättigtem Positroneneinfang sprechen. Mit einer spezifischen Einfangrate für Leerstellen in Silizium von ca. $5 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$ tritt dieser Fall bei einer Defektkonzentration von ca. $4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ein. Paßt man die Ergebnisse der **VEPFIT**-Auswertung (d und c) nach Gl. (3.1.8) an (siehe Abbildung 3.20), so wird der Parameter d_e unabhängig zu 825 nm gefunden. Die Parameter b und c_l sind stark voneinander abhängig, wobei man d_b jedoch gut aus den **TRIM**-Simulationen der Verteilung von Implantationsschäden (siehe Abbildung 3.2) abschätzen kann. Mit $d_b = 375 \text{ nm}$ ergibt sich $c_l = 3.8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Eine ähnliche Behandlung der Daten für die Silizium-Selbstimplantation liefert $d_e = 1600 \text{ nm}$, $d_b = 800 \text{ nm}$ und $c_l = 2.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Wie vermutet liegen die Werte für c_l sehr nahe bei der kritischen Konzentration für den gesättigten Positroneneinfang.

Die Anwendung des Trapezmodells liefert eine Erklärung für die Dosisabhängigkeit der Schichtdicken mit der Annahme eines Kastenprofils. Die Schädigungstiefe ist nicht oder zumindest nicht so stark von der Implantationsdosis abhängig. Dies entspricht auch den theoretischen

²ausgenommen hiervon ist der S -Parameter im Einflußbereich der Oberfläche

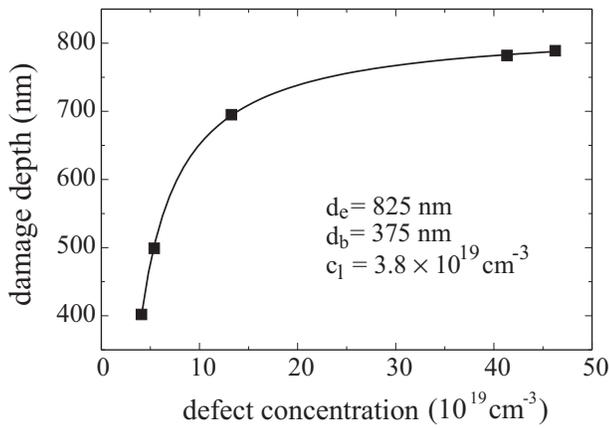


Abbildung 3.20: Anpassung der Trapezverteilung für Defekte nach Arsen-Implantation in Silizium nach Gl. (3.1.8).

Modellen zur Entstehung von Strahlenschäden [Bou83, Bri75]. Eine Ausdiffusion von leerstellenartigen Defekten ist auf Grund der Unsicherheit der Dickenbestimmung nicht festzustellen, sie ist jedoch auch nicht auszuschließen.

3.1.6. Ausheilverhalten leerstellenartiger Defekte und amorpher Schichten

3.1.6.1. Ausheilung nach Implantation leichter Ionen. Der wichtigste Defekt, der nach Raumtemperaturbestrahlung von Silizium mit sehr leichten Teilchen wie z.B. Elektronen oder Protonen entsteht, ist die Doppelleerstelle, die zwischen 400 und 600 K ausheilt [Bou83, Che66, Che68]. Die Implantation leichter Ionen in niedrigen Dosen in Cz-Silizium führt hauptsächlich zu Doppelleerstellen und Leerstellen-Sauerstoff-Komplexen [Sve97]. Schon für mittlere Dosen erreicht die Doppelleerstellenkonzentration einen Sättigungswert [Zam94, Ste70]. Die im folgenden beschriebenen Ausheilexperimente an Bor- und Kohlenstoff-implantiertem Silizium können zur Identifizierung der bei der Implantation entstandenen Defekte beitragen.

Zunächst kann man recht einfach die elektrische Aktivierung der implantierten Bor-Ionen als Funktion der Ausheiltemperatur sowie das Dotierungsprofil messen. Dazu wurde ein $C(V)$ -Profilmeßgerät verwendet, das Material von der Oberfläche elektrolytisch ätzt und in bestimmtem Tiefen die Kapazität der Verarmungsschicht in Abhängigkeit der angelegten Spannung mißt. Unter der Voraussetzung von Modellen kann man dann die Ladungsträgerkonzentration tiefenabhängig ermitteln. In Abbildung 3.21 ist die mittlere Ladungsträgerkonzentration der im-

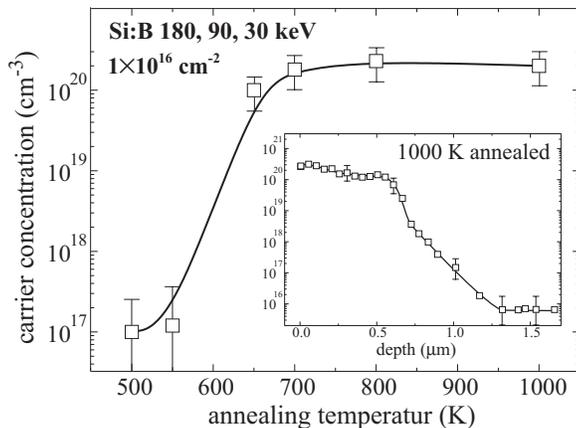


Abbildung 3.21: Die implantierten Bor-Atome werden zwischen 550 und 650 K elektrisch aktiviert. Dargestellt ist die mittlere Ladungsträgerkonzentration in der implantierten Schicht. Im Inset ist ein entsprechendes Ladungsträgerprofil gezeigt.

plantierten Schicht gegen die Ausheiltemperatur aufgetragen. Zwischen 550 und 650 K werden die Bor-Implantate elektrisch aktiv, d.h. sie nehmen reguläre Gitterpositionen ein. Die Ladungsträgerkonzentration entspricht etwa der Dotierungskonzentration in der Schicht, so daß man davon ausgehen kann, daß fast alle Bor-Atome in das Gitter eingebaut werden. Das Profil der Ladungsträger (siehe Inset in Abbildung 3.21) bleibt während der Ausheilung der Proben bis zu 1000 K stabil.

Die S - E -Kurven, die während des Ausheilexperimentes für das mit niedrigen Bor-Dosen implantierte ($1 \times 10^{14} \text{ B}^+ \text{ cm}^{-2}$) Cz-Silizium und FZ-Silizium aufgenommen wurden, sind in den Abbildungen 3.22 bzw. 3.23 gezeigt. Der Verlauf der Kurven im implantierten Zustand (300 K)

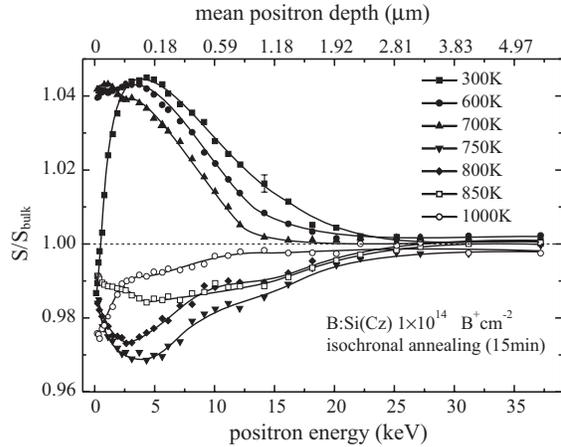


Abbildung 3.22: Die dargestellten $S(E)$ -Kurven charakterisieren Ausheilverhalten der Defekte in Cz-Silizium nach Implantation von $1 \times 10^{14} \text{ B}^+ \text{ cm}^{-2}$. Der S -Parameter kleiner als eins wird durch einen Komplex, der Sauerstoff enthält, bewirkt (aus [Eic97a]).

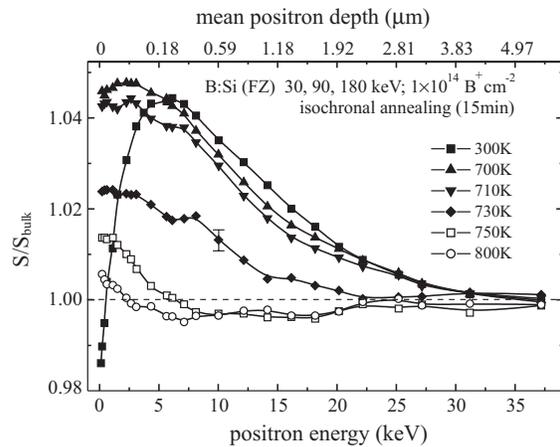


Abbildung 3.23: Die dargestellten $S(E)$ -Kurven charakterisieren Ausheilverhalten der Defekte in FZ-Silizium nach Implantation von $1 \times 10^{14} \text{ B}^+ \text{ cm}^{-2}$ (aus [Eic97a]).

sind schon im Abschnitt 3.1.2 beschrieben worden. Der niedrige S -Parameter an der Oberfläche verschwindet im Verlauf der in-situ Ausheilung bei ca. 450 K. Ein solches Verhalten wurde auch von SIMPSON et al. beobachtet [Sim97]. Es könnte sein, daß bei dieser Temperatur auf der Oberfläche gebundenes Wasser desorbiert. Eine Veränderung der dünnen Oxidschicht ist dagegen unwahrscheinlich, da sie bis zu Temperaturen über 1000 K stabil ist. Von FUJINAMI et al. wurden für Wasserstoff-terminierte Siliziumoberflächen ein S -Parameter größer als eins gefunden. Für die Terminierung der Oberfläche mit OH-Gruppen dagegen lag der S -Parameter deutlich unter eins [Fuj93]. Die bedeckungsabhängige Änderung des Annihilationszustandes der Positronen an der Siliziumoxidoberfläche bzw. -grenzfläche wurde z.B. durch Untersuchungen von Metall-Oxid-Silizium-Systemen gezeigt [Cle97]. Mit dem veränderten Oberflächen- S -Parameter ist eine seriöse Bestimmung der Positronendiffusionsweglänge nicht mehr möglich. Man ist nun gezwungen, den Schicht- S -Parameter auszuwerten, der sowohl vom Defektyp als auch von der Defektkonzentration abhängt. Der Verlauf des Schicht- S -Parameters mit der Ausheiltemperatur im isochronen Ausheilexperiment (siehe Abschnitt 1.4) ist für Cz-Silizium und FZ-Silizium in Abbildung 3.24 dargestellt. Bis zu einer Temperatur von 650 K ist keine signifikante Änderung des

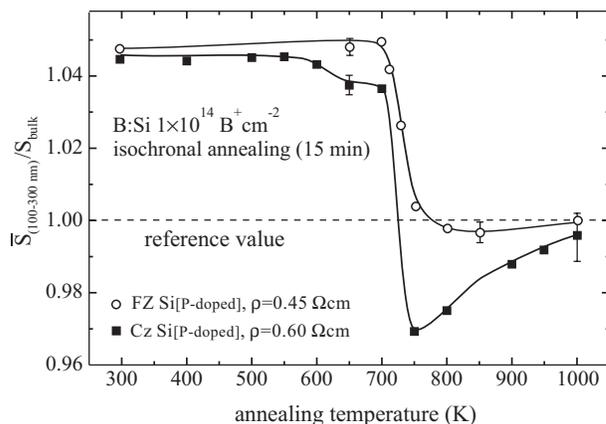


Abbildung 3.24: Die mittleren Schicht- S -Parameter im Bereich von 100 bis 300 nm in Cz-Silizium und FZ-Silizium nach Implantation von $1 \times 10^{14} \text{ B}^+ \text{ cm}^{-2}$ sind über der Ausheiltemperatur aufgetragen (aus [Eic97a]).

Schicht- S -Parameters zu beobachten. Die Hauptausheilstufe des dominierenden leerstellenartigen Defekts (**a**)³ wurde sowohl im Cz- als auch in FZ-Material bei ungefähr 720 K beobachtet. Die Doppelleerstelle heilt schon bei 470 K aus, sie kann als dominanter Defekt ausgeschlossen werden. Das Verschwinden der entsprechenden 1.8 μm -Bande im **IR**-Spektrum bei der Ausheilung einer identischen Probe ist in Abbildung 3.25 dargestellt. Der leerstellenartigen Defekt (**a**)

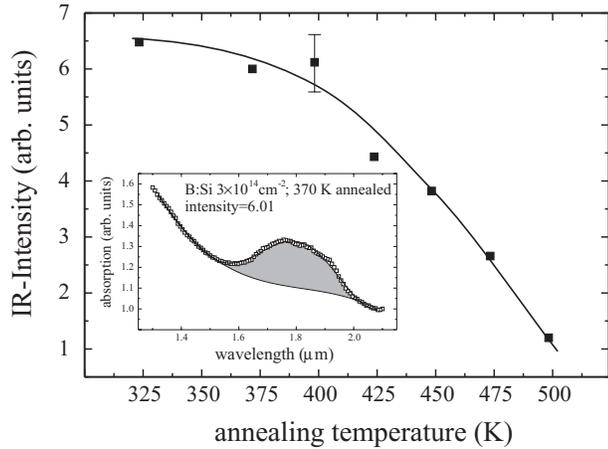


Abbildung 3.25: Die Ausheilung der nach Implantation von $1 \times 10^{14} \text{ B}^+ \text{ cm}^{-2}$ entstandenen Doppelleerstellen ist in **IR**-Signal beobachtet worden. Die Linie dient lediglich der Anschauung. Im Inset ist ein Absorptionsspektrum mit dem der Doppelleerstelle entsprechenden Absorptionsbande bei 1.8 μm dargestellt (aus [Eic98a]).

sollte wegen der höheren thermischen Stabilität mehr als zwei Leerstellen enthalten [Eic97a].

Man kann nun versuchen, die Aktivierungsenergie des Ausheilprozesses zu bestimmen. Es gibt dabei einige Schwierigkeiten. Erstens ist die Ordnung der Reaktion nicht bekannt bzw. eine Reaktionsgleichung kann in Unkenntnis des elementaren Ausheilprozesses nicht aufgestellt werden. Zweitens ist das isochrone Experiment mit variablen Aufheizzeiten recht ungenau für die Bestimmung der reaktionskinetischen Parameter. Außerdem ist der Fehler der S -Parameter-Messung für die empfindliche Berechnung von Defektkonzentrationen relativ groß. Mit der Annahme, daß nur ein Defekttyp existiert, kann man dessen Konzentration berechnen:

$$C = \frac{1}{\lambda_b \mu} \frac{S - S_b}{S_d - S}. \quad (3.1.10)$$

Mit der Annahme einer Reaktion erster Ordnung ($\alpha = 1$) vereinfacht sich Gl. (1.4.8) zu:

$$\frac{C_e(T)}{C_a(T)} - 1 = -K_0 \Delta t \exp\left(\frac{-\Delta E}{k_B T}\right). \quad (3.1.11)$$

Für die Berechnung des Konzentrationsverhältnisses ist die Kenntnis der Annihilationsrate λ_b und des spezifischen Einfangkoeffizienten μ nicht notwendig. Die Abbildung 3.26 illustriert die Analyse der Ausheilkinetik des dominierenden leerstellenartigen Defektes nach Bor-Implantation ($1 \times 10^{14} \text{ B}^+ \text{ cm}^{-2}$) in FZ-Silizium. Aus der oberen S -Parameterkurve wurden in einem Intervall (grau unterlegt), indem die Meßfehler klein gegen die Änderung des S -Parameters sind, die Konzentrationsverhältnisse bestimmt (linke Seite in Gl. (3.1.11)). Diese Werte wurden nach Gl. (3.1.11) angepaßt (siehe unteren Teil der Abbildung 3.26). Es ergaben sich $E_b = (2.2 \pm 0.4) \text{ eV}$ und $K_0 = 6 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$. Mit den Modellwerten ist dann auf den S -Parameter zurückgerechnet worden (Linie im oberen Teil der Abbildung 3.26). Die Fehler des Verfahrens sind aufgrund der obengenannten Unzulänglichkeiten nicht zu unterschätzen. Die Anpassung lieferte einen relativen Energiefehler von ca. 40%. Andere Methoden, die signalproportionale Konzentrationen in kurzen Zeiten messen, sind sehr viel genauer.

In der Abbildung 3.24 ist weiter zu erkennen, daß nach der Hauptausheilstufe der S -Parameter der geschädigten Schicht im Cz-Silizium (\blacksquare) Werte kleiner eins annimmt, um zwischen 900 und 1000 K den S -Parameter im ungestörten Volumen zu erreichen. Für die FZ-Probe (\circ) ist dagegen ein sofortiges Einlaufen auf den Volumenwert zu verzeichnen (siehe Abbildung 3.24). Das Verhalten der Cz-Probe ist zunächst ungewöhnlich, da Einfangzentren mit offenem Volumen

³Im folgenden sollen nicht genau identifizierte Defekte mit Buchstaben oder römischen Ziffern bezeichnet werden.

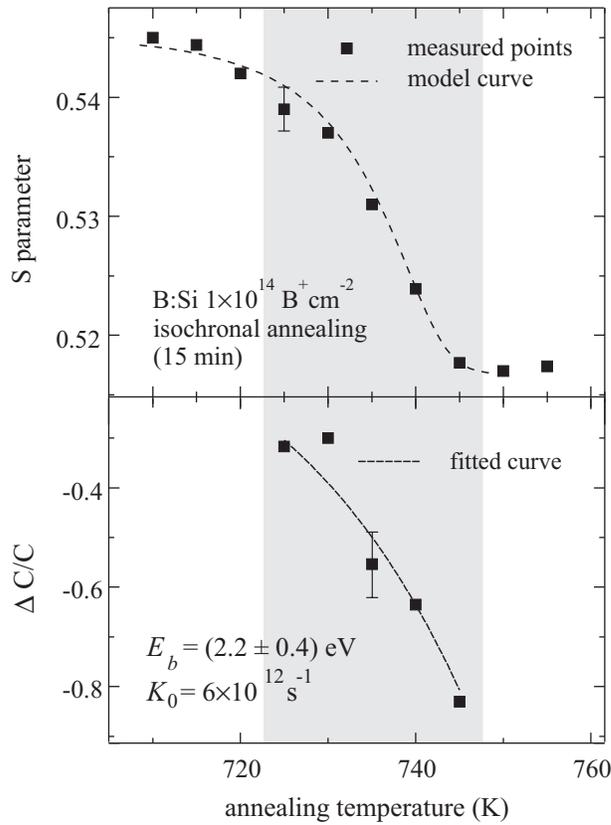


Abbildung 3.26: Die Analyse der Ausheilkinetik an der $1 \times 10^{14} \text{ B}^+ \text{ cm}^{-2}$ -implantierten FZ-Probe ist dargestellt (aus [Eic98a]). Das Auswertungsintervall ist grau unterlegt. Die Linien sind Ergebnisse der Anpassung.

i.a. durch einen höheren S -Parameter charakterisiert werden. Viele Autoren fanden ebenfalls ein unterschiedliches Ausheilverhalten für Czochralski- und Flußzonen-gewachsenes Silizium (Cz-Si bzw. FZ-Si) bezüglich des tiefen S -Parameters (z.B. [Fuj95a]). Die verschiedenen gezogenen Kristalle unterscheiden sich hauptsächlich im Gehalt des gelösten Sauerstoffs ($[O]_{Cz} \approx 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $[O]_{FZ} \approx 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$). Man kann daraus schließen, daß im Cz-Material Leerstellen-Sauerstoff-Komplexe beobachtet werden. Das einfache A-Zentrum scheidet dabei aus, weil die entsprechende **IR**-Bande auch während der Ausheilung nicht beobachtet wurde. Dagegen scheint das Element Bor eine wichtige Rolle bei der Bildung dieses speziellen Defektkomplexes, der zum tiefen S -Parameter führt, zu spielen. Alle Proben, die den tiefen S -Parameter im Ausheilexperiment gezeigt haben, enthielten Bor (entweder als Dotierungsatom oder als Implantat) [Fuj95a]. PUFF et al. haben die Bildung solcher Komplexe mit thermischen Leerstellen für Bor-dotiertes Cz-Silizium gezeigt [Puf89]. Alle im Rahmen dieser Arbeit ausgeführten Ausheilexperimente am Cz-Silizium ohne Beteiligung von Bor haben nie einen Schicht- S -Parameter kleiner als S_{bulk} gezeigt.

Für das Ausheilverhalten der Bor-implantierten Cz-Probe sind zwei Interpretationen denkbar. Entweder entsteht der postulierte Bor-Sauerstoff-Leerstellen-Komplex während des Verschwindens der Leerstellenagglomerates (**a**) oder er existiert bereits bevor der Defekt **a** ausheilt. Im ersten Fall könnten die Agglomerate beweglich werden oder dissoziieren und es könnten sich leerstellenartige Defekte an die Bor- bzw. Sauerstoff-Atome anlagern. Andererseits könnte es sein, daß der Positroneneinfang in die Leerstellenagglomerate (**a**) bis 720 K dominiert. Die Bor-Sauerstoff-Leerstellen-Komplexe wären erst nach dem Verschwinden von Defekt (**a**) zu messen.

Eine einfache Ausheilstufe wurde ebenfalls in Kohlenstoff-implantiertem Cz-Silizium gefunden (siehe Abbildung 3.27). Hier wurden Kohlenstoff-Ionen mit einer Energie von 2.5 MeV und einer Dosis von $5 \times 10^{15} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$ implantiert. Die Ausheiltemperatur der erzeugten Defekte ist jedoch gegenüber den Bor-implantierten Proben auf 900 K verschoben. Nach 2.5 MeV Kohlenstoff-Implantation sind offenbar andere leerstellenartige Defekte (**b**) zu beobachten, die durch die Annihilationsparameter $S/S_{bulk} = 1.045 \pm 0.02$ und $W/W_{bulk} = 0.95 \pm 0.02$ charakterisiert sind. Diese Defekte sind homogen bis zu einer Tiefe von zirka $2 \mu\text{m}$ verteilt [Wer97]. Der in

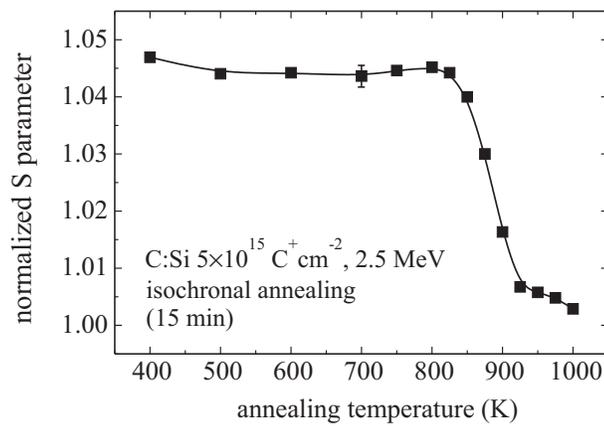


Abbildung 3.27: Der Verlauf der mittleren Schicht-S-Parameter mit der Ausheiltemperatur charakterisiert die Ausheilung der durch 2.5 MeV Kohlenstoff-Implantation ($5 \times 10^{15} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$) eingeführten Defekte in Cz-Silizium (aus [Eic98a]).

Abbildung 3.27 aufgetragene S-Parameter wurde in dem Bereich um $1 \mu\text{m}$ gemessen. Die implantierten Kohlenstoffatome spielen in diesem Bereich keine Rolle für die erzeugten Defekte, weil die projizierte Reichweite der Implantate für diese Probe bei ungefähr $2.7 \mu\text{m}$ liegt [Wer97]. Entweder sind die Leerstellenagglomerate hier größer und damit stabiler als in den Bor-implantierten Proben oder die leerstellenartigen Defekte sind durch ein oder mehrere Fremdatome stabilisiert. Im Cz-Silizium ist nur Sauerstoff in solch einer Konzentration ($1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) vorhanden, um als Stabilisatoratom in Frage zu kommen. Der Komplex V_3O_3 , der bis zu einer Temperatur von 870 K stabil sein soll [Lee76], wäre ein geeigneter Kandidat.

Die Implantation leichter Ionen in Silizium bei Raumtemperatur und ab Dosen von 10^{14} cm^{-2} scheint leerstellenartige Agglomerate (V_n bzw. V_nX , $n > 2$) in der implantierten Schicht zu produzieren. Das Ausheilverhalten dieser Defekte ist einfach. Es tritt eine scharfe Ausheilstufe bei einer Temperatur auf, bei der der Defekt beweglich wird oder dissoziiert. Dann ist die Bildung anderer Defekte oder die Rekombination an entsprechenden Senken möglich.

Die integrale Konzentration der leerstellenartigen Defekte steigt mit der Dosis an (siehe Abschnitt 3.1.2 und [Eic97a]). Abbildung 3.28 zeigt das Ausheilverhalten der Defekte in einer mit hoher Dosis ($1 \times 10^{16} \text{ B}^+ \text{ cm}^{-2}$) implantierten Siliziumprobe. Hier zeigen die Experimente ein tiefenabhängiges Ausheilverhalten. Eine neue höherliegende S-Parameter-Komponente wird im Bereich von 700 bis 850 K bei Positronenenergien zwischen 0.5 und 2 keV sichtbar.

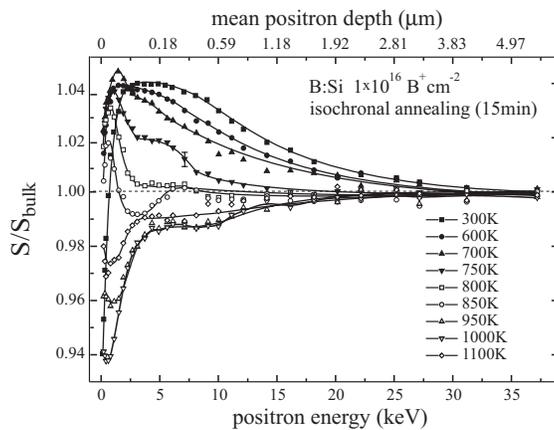


Abbildung 3.28: Die dargestellten $S(E)$ -Kurven charakterisieren Ausheilverhalten der Defekte in Cz-Silizium nach Implantation von $1 \times 10^{16} \text{ B}^+ \text{ cm}^{-2}$ (aus [Eic97a]).

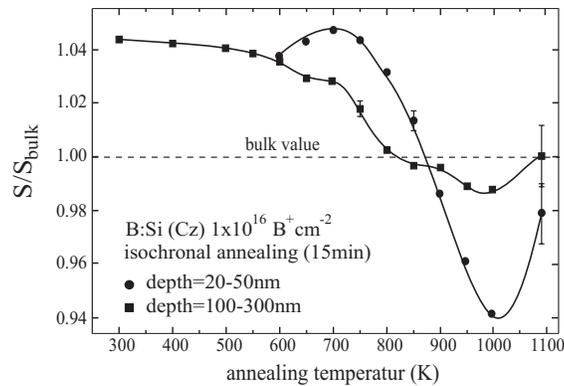


Abbildung 3.29: Der mittlere Schicht-S-Parameter in den Bereichen von von 20 bis 50 nm und von 100 bis 300 nm in Cz-Silizium nach Implantation von $1 \times 10^{16} \text{ B}^+ \text{ cm}^{-2}$ ist über der Ausheiltemperatur gezeigt. Die eingezeichneten Linien dienen der Anschauung (aus [Eic98a]).

Man kann davon ausgehen, daß hier ein zusätzlicher Defekt (**c**) entsteht. In Abbildung 3.29 sind die Abhängigkeiten der S -Parameter von der Ausheiltemperatur in der Region zwischen 20 und 90 nm und der Region zwischen 100 und 300 nm miteinander verglichen. Im ersten Tiefenbereich kann die Ausheilung des Defektes (**c**) beobachtet werden, im zweiten die des schon bekannten Defektes (**a**). Zunächst fällt auf, daß die Ausheilstufen breiter sind als bei den niedrig-implantierten Proben. Dies könnte die Folge einer Größenverteilung der entstandenen Leerstellenagglomerate sein. Deren Stabilität ist im wesentlichen von ihrer Größe abhängig, und beim Vorhandensein einer Größenverteilung der Agglomerate kommt es zur Verbreiterung der Ausheilstufe. Der maximale S -Parameter in der oberflächennahen Schicht bis zu 100 nm ist etwas erhöht gegenüber den Werten in den niedrig-implantierten Proben. Eine Agglomeration von leerstellenartigen Defekten scheint im gleichen Temperaturbereich stattzufinden, in dem die Defekte in tieferen Regionen ausheilen. Man könnte sich vorstellen, daß die Defektkonzentration in der oberflächennahen Region einen kritischen Wert übersteigt und die Wahrscheinlichkeit der Agglomeration mobil werdender Defekte größer als die Wahrscheinlichkeit der Rekombination wird. Bis auf die Verbreiterung unterscheidet sich das Ausheilverhalten in der tieferen Region (100 - 300 nm) prinzipiell nicht von dem der mit $1 \times 10^{14} \text{ B}^+ \text{ cm}^{-2}$ implantierten Probe. Die Defekte (**c**) bilden sich bei 700 K und sie heilen bei 900 K aus. Die gleiche Ausheiltemperatur wurde auch für die Defekte (**b**) im Kohlenstoff-implantierten Material gefunden. Außerdem stimmen die Annihilationsparameter der Defekte (**b**) und (**c**) sehr gut überein. Diese Übereinstimmungen deuten darauf hin, daß es sich hier um ein und denselben Defekttyp handelt, obwohl gerade das letzte Argument sehr schwach ist, wenn es sich nicht um gesättigten Positroneneinfang in den entsprechenden Defekt handelt. Nachdem die Leerstellenagglomerate (**a**) und (**c**) ausgeheilt sind, scheinen ähnliche, wie die schon in den niedrig-implantierten Proben auftretenden Defekte, zu entstehen, die durch einen niedrigen S -Parameter charakterisiert sind. Allerdings ist der in der oberflächennahen Schicht (bis 90 nm) zu beobachtende S -Parameter viel niedriger als sonst üblich. In beiden Schichten erreicht der S -Parameter den Wert des ungestörten Volumens bei ungefähr 1100 K, was dafür spricht, daß hier die gleichen Defekte (**d**) in unterschiedlicher Konzentration vorliegen. Auch dieser Schluß ist nicht sicher, weil bei niedrigen Defektkonzentrationen die Positronendiffusion an Einfluß gewinnt und die Bestimmung der Schicht- S -Parameter mit einem größeren Fehler behaftet ist [AK94, Cle96]. Die Bildung eines ähnlich zusammengesetzten aber größeren Defektes mit einem extrem niedrigen S -Parameter in der vorderen Schicht kann nicht ausgeschlossen werden. Die auftretenden Annihilationszustände können in den ent-

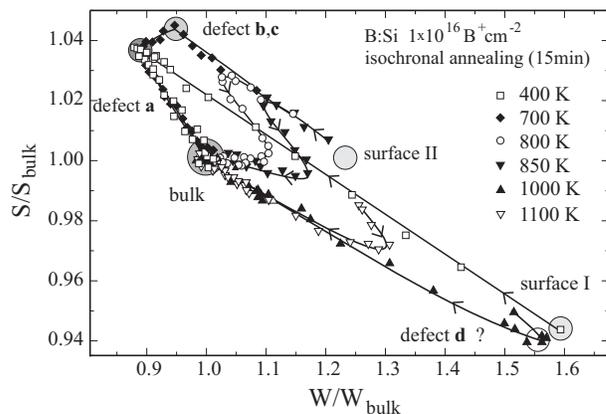


Abbildung 3.30: Das Ausheilverhalten der Defekte in Cz-Silizium nach Implantation von $1 \times 10^{16} \text{ B}^+ \text{ cm}^{-2}$ ist an verschiedenen S - W -Trajektorien gezeigt. Die verschiedenen Annihilationszustände werden sichtbar. Die Linien folgen den Daten von niedrigen zu hohen Positronenenergien (aus [Eic98a]).

sprechenden S - W -Plots der Abbildung 3.30 charakterisiert werden. Die 400 K-Daten (\square) zeigen die typische Situation für durch Ionenimplantation produzierte geschädigte Schichten im DOPPLER-Experiment. Mit geringen Energien implantierte Positronen annihilieren fast alle in der Oberfläche (surface I), die einen hohen Einfangquerschnitt für Positronen besitzt. Hier könnte eine mit Wasser bedeckte natürliche Oxidschicht existieren. Weiter erhält man für ansteigende Positronenenergien eine gerade Linie zum Annihilationszustand der implantationsinduzierten Defekte (defect **a**). Nach Messungen der Positronendiffusionsweglänge ist man sich sicher, daß der Positroneneinfang in diese Defekte gesättigt ist (siehe Abschnitt 3.1.2 und [Eic97a]). Mit

hohen Energien implantierte Positronen stoppen hinter der gestörten Schicht und annihilieren im delokalisierten Volumenzustand (bulk). Die Temperaturbehandlung ändert die Verhältnisse an der Oberfläche, sie wirkt weniger attraktiv auf Positronen, d.h. der Oberflächen- S -Parameter ist nicht mehr unabhängig vom S -Parameter der tieferliegenden Region. Außerdem ändern sich die Annihilationsparameter an der Oberfläche signifikant (surface II), wobei die Bestimmung der exakten Position in der S - W -Ebene schwierig ist. Nach Temperung bei 700 K (\blacklozenge) wird ein anderer Annihilationszustand sichtbar, der einem weiteren leerstellenartigen Defekt (defect **b,c**) zugeordnet werden kann. Die S -förmigen Spuren der Daten nach Temperung bei 800 K (\circ) und 850 K (\blacktriangledown) entstehen durch jeweils unvollständigen Positroneneinfang in mindestens zwei unterschiedliche Defekte (**b,c** und **d**). Die Bestimmung der Lage des Annihilationszustandes **d**, der Leerstellen-Sauerstoff-Bor-Komplexe charakterisieren sollte, ist schwierig, weil die Einfangrate in diesen Defekt nicht bekannt ist. Außerdem besteht die Möglichkeit, daß verschiedene Defekttypen der Art $O_x B_y V_z$ beobachtet werden.

3.1.6.2. Ausheilung nach Implantation schwerer Ionen. Bei der Implantation von schwereren Ionen im mittleren Dosisbereich führt bei Raumtemperatur zur Bildung amorpher Zonen neben Agglomeraten von Leerstellen und Zwischengitteratomen [Gla82]. Das Verhältnis der Volumina von amorphen und kristallinen defekthaltigen Phasen ist durch die Implantationsdosis bestimmt. Die komplette Amorphisierung der implantierten Schicht wird bei einer kritischen Dosis erreicht (amorphisierende Dosis) [Rys78]. Die Massendichte solcher amorphen Schichten ist gegenüber der des kristallinen Materials verringert, d.h. ein Überschuß an offenem Volumen ist vorhanden. Während der Rekristallisation sollten viele leerstellenartige Defekte im Kristall verbleiben und erst bei höheren Temperaturen ausheilen.

Die Ergebnisse des isochronen Ausheilungsexperiments an einer durch Arsen-Implantation ($5 \times 10^{14} \text{ As}^+ \text{ cm}^{-2}$) erzeugten amorphen Schicht sind in Abbildung 3.31 dargestellt. **RBS-**

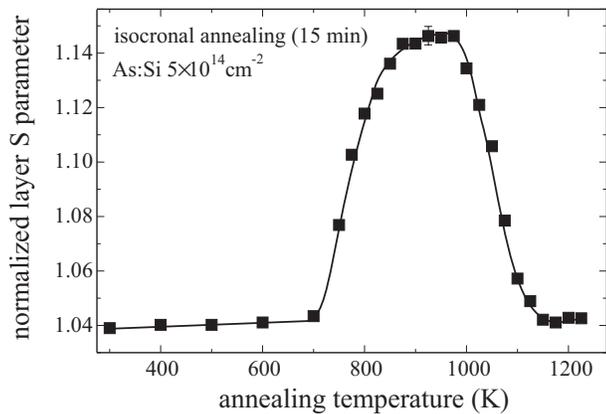


Abbildung 3.31: Der normierte S -Parameter der durch Implantation von $5 \times 10^{14} \text{ As}^+ \text{ cm}^{-2}$ erzeugten amorphen Schicht ist über der Ausheiltemperatur aufgetragen. (nach [Eic98a])

Messungen an dieser Probe haben gezeigt, daß sich durch die Arsen-Implantation eine amorphe Schicht von zirka $0.5 \mu\text{m}$ Dicke gebildet hat. Der für die gestörte Schicht typische S -Parameter von 1.04 im implantierten Zustand wächst nach Temperung bis zu 700 K nur schwach. Die amorphe Phase scheint bis zu dieser Temperatur stabil zu sein. Dann steigt der S -Parameter jedoch auf einen Wert von 1.15 nach Temperung bei 875 K an. Dieser Wert entspricht der Positronenannihilation in sehr großen Leerstellenagglomeraten. Die amorphe Schicht ist rekristallisiert und das offene Volumen hat sich zu relativ großen Defektstrukturen zusammengelagert. Ab einer Temperatur von 1000 K beginnen diese Defekte auszuheilen, sie sind stabiler als die im Bor- oder Kohlenstoff-implantiertem Material beobachteten Leerstellenagglomerate. Der S -Parameter bleibt nach Ausheilung bei 1125 K wieder auf einem Wert von 1.04 konstant. Ein extrem stabiler leerstellenartiger Defekt bleibt in der bis zu 1250 K ausgeheilten Probe übrig. Es ist bekannt, daß Arsen durch die Bildung von Arsen-Leerstellen-Komplexen ($\text{As}_n\text{-Si}_{4-n}\text{-V}$) bei ungefähr 1050 K elektrisch deaktiviert wird [Rou94, Law95, Myl96]. Solche Defektstrukturen könnten auch in dieser Probe gebildet werden, zumal die Arsen-Konzentration in der implantierten Schicht zirka 10^{19} cm^{-3} beträgt. In Abbildung 3.32 sind die Annihilationsparameter der Schicht für jeden Ausheilungsschritt gegeneinander aufgetragen. In diesem S - W -Plot ist zu erkennen, daß während

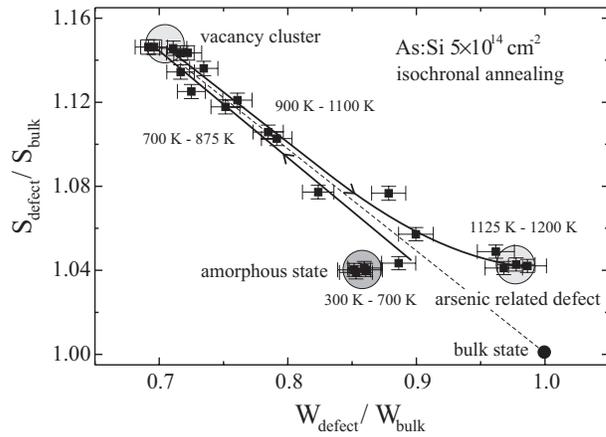


Abbildung 3.32: Das Ausheilverhalten von $5 \times 10^{14} \text{ As}^+ \text{ cm}^{-2}$ implantiertem Silizium ist durch den S-W-Plot für die Schicht-Annihilationsparameter bei verschiedenen Temperaturen charakterisiert. Der relativ stabile Zustand der amorphen Phase, die Bildung großer Leerstellenagglomerate sowie thermisch sehr stabiler Arsen-Leerstellen-Komplexe ist zu erkennen. Die Linien folgen dem Temperaturverlauf (nach [Eic98a]).

der Rekristallisation der amorphen Schicht zunächst ein als Positronenfalle wirkender leerstellenartiger Defekt entsteht und ausheilt. Die entsprechende Trajektorie liegt auf einer Geraden mit den charakteristischen Werten für Annihilation im defektfreien Volumen (1.0,1.0). Die extremen Werte der Annihilationsparameter und die relativ hohe thermische Stabilität des Defektes legen den Schluß nahe, daß hier große als Voids bezeichnete Leerstellenagglomerate beobachtet werden. Erst im weiteren Verlaufe der Ausheilung bilden sich andere sehr stabile Defekte (wahrscheinlich Arsen-Leerstellen-Komplexe), die nach dem Verschwinden der Voids bei 1125 K vollends sichtbar werden. Die Abhängigkeit des Ausheilverhaltens vom Zustand der Probe nach

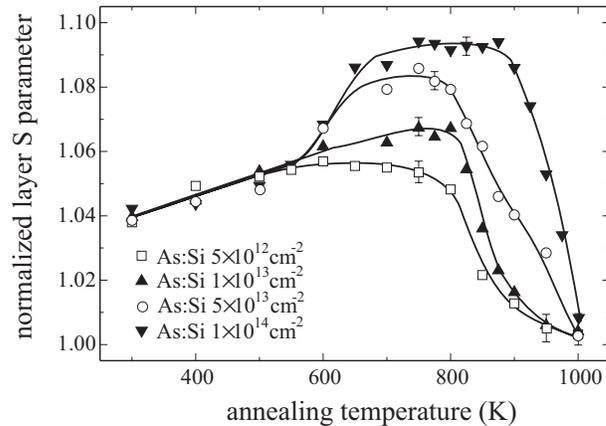


Abbildung 3.33: Die Schicht-S-Parameter für verschiedene As-implantierte Proben gegen die Ausheiltemperatur sind dargestellt. Das Ausheilverhalten ist von der Schädigung im implantierten Zustand abhängig (nach [Eic98a]).

der Implantation wird durch die Darstellung der Entwicklung des Schicht-S-Parameters über der Ausheiltemperatur in Abbildung 3.33 illustriert. Die Rekristallisation der entstandenen amorphen Gebiete ist durch einen gleichmäßig steigenden S-Parameter gekennzeichnet und bis zu einer Temperatur von 600 K abgeschlossen. Im Vergleich zur vollständig amorphisierten Probe (siehe Abbildung 3.31) wächst der S-Parameter-Anstieg signifikant an, und die Rekristallisation verläuft offenbar bei etwas geringeren Temperaturen. Diese Effekte sind mit der Koexistenz von amorphen und kristallinen Gebieten in der gestörten Schicht und der größeren Phasengrenzfläche zwischen amorphem und kristallinem Material, die beim Rekristallisationsprozeß eine große Rolle spielt, zu erklären. Um genauere Aussagen zum Rekristallisationsverhalten der Proben treffen zu können, wurde exemplarisch die Ausheilung einer Probe ($1 \times 10^{14} \text{ As}^+ \text{ cm}^{-2}$) mittel RAMAN-Spektroskopie untersucht. In den in Abbildung 3.34 gezeigten Spektren sind zwei Strukturen von besonderem Interesse. Zum einen wird kristallines Material durch eine temperaturabhängige Silizium-Mode (schmalere Peak zwischen 510 und 520 cm^{-1}) charakterisiert. Hier werden die einfallenden Photonen an optischen Phononen mit Impulsen nahe null gestreut. Die Dispersionsrelation $\omega(\mathbf{q})$ zeigt, daß für $\mathbf{q} = 0$ nur Phononen bestimmter Energie existieren. Zum anderen bewirkt amorphes Material zwischen 440 und 500 cm^{-1} eine breite Bande im RAMAN-Spektrum. Die Aufhebung der Translationssymmetrie des Kristallgitters führt dazu, daß bei $\mathbf{q} = 0$ Phononen jeder Energie erlaubt sind, d.h. im RAMAN-Spektrum wird die Phononenzustandsdichte

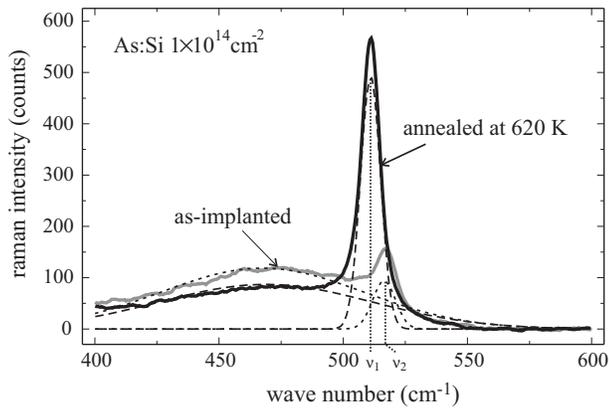


Abbildung 3.34: RAMAN-Spektrum einer Arsen-implantierten Probe ($1 \times 10^{14} \text{ As}^+ \text{ cm}^{-2}$) im implantierten und im bei 620 K ausgeheilten Zustand. Das Wachsen des kristallinen Peaks bzw. das Schwinden des amorphen Peaks ist zu beobachten. Es wurden jeweils zwei Gaußsche Peakfunktionen angepaßt (gestrichelte Linien). Die temperaturabhängige Verschiebung des kristallinen Peaks ist zu erkennen (nach [Eic98a]).

für $\mathbf{q} = 0$ abgebildet. Dabei liegt das Signal der an akustischen Phononen gestreuten Photonen (niedrige Wellenzahlen) nahe den elastisch gestreuten Photonen. Die Überlagerung macht eine Auswertung schwer. Die Frequenzen der an optischen Phononen gestreuten Photonen können dagegen deutlich von der eingestrahlten Frequenz getrennt werden. Das Verhältnis der Flächen dieser Peakstrukturen liefert Informationen zum Volumenverhältnis der kristallinen Phase und der amorphen Phase (Aufhebung der Translationssymmetrie). In Abbildung 3.35 ist der Verlauf dieses Verhältnisses während eines isochronen Ausheilungsexperiments (10 min) bis 710 K und nach isothermer Ausheilung bei 710 K dargestellt. Es ist zu sehen, daß das Volumen der amorphen

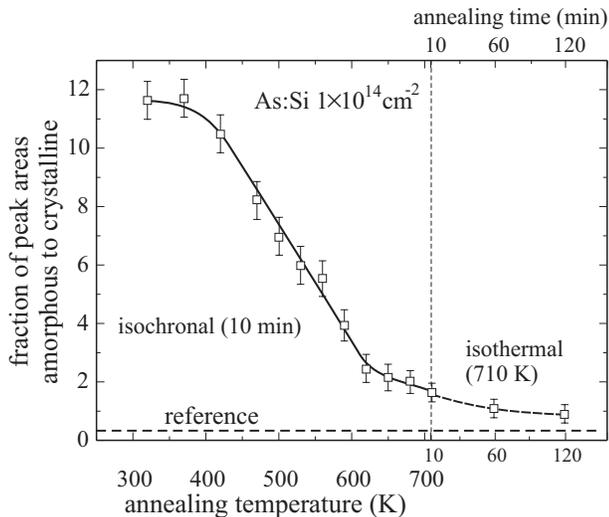


Abbildung 3.35: Die Entwicklung des Flächenverhältnisses vom amorphen zum kristallinen Peak während der isochronen Ausheilung und während der isothermen Ausheilung bei 710 K. Die Rekristallisation der amorphen Gebiete ist bei 620 K nahezu abgeschlossen. (nach [Eic98a])

Zonen von 370 bis 620 K kontinuierlich verschwindet. Die Positronenergebnisse bezüglich der Rekristallisation (siehe Abbildung 3.33) werden bestätigt. Die mit verschiedenen Dosen implantierten Proben zeigen in diesem Bereich der Ausheilung keine signifikanten Unterschiede in den Parametern der Positronenannihilation.

Nach dem Abschluß der Rekristallisation unterscheidet sich das Verhalten der verbleibenden leerstellenartigen Defekte dosisabhängig. Sie beginnen sich zu mehr oder weniger großen Leerstellenagglomeraten zusammenzulagern. Erstens steigt der S -Parameter in der Schicht an, was ein Indiz für ein größeres offenes Volumen der entstehenden Defekte ist, wenn man von gesättigtem Positroneneinfang ausgeht. Weiterhin nimmt die Ausheiltemperatur mit der Größe der Agglomerate zu. Es ist leicht einzusehen, daß die Wahrscheinlichkeit der Agglomeration von der Dichte der Defekte im Ausgangszustand abhängig ist (siehe Diskussion in Abschnitt 3.1.6.3). Damit ist indirekt ein weiterer Nachweis der Dosisabhängigkeit der Konzentration leerstellenartiger Defekte nach der Rekristallisation gelungen. Die Ausheilung der gestörten Schicht findet in allen Silizium-Proben von der Volumenseite aus statt. Die Oberfläche dagegen scheint nicht als Senke für leerstellenartige Defekte zu wirken. Eine mögliche Erklärung dafür wäre die

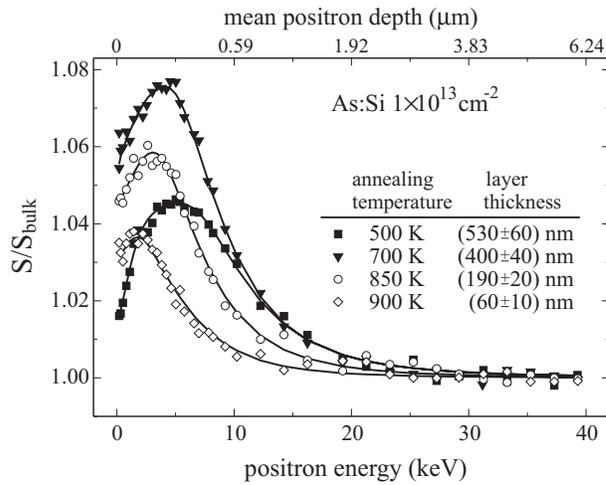


Abbildung 3.36: Ausgewählte $S(E)$ -Kurven der $1 \times 10^{13} \text{ As}^+ \text{ cm}^{-2}$ implantierten Probe nach verschiedenen Ausheilschritten zeigen die Verminderung der Dicke der defektreichen Schicht von der Seite des ungestörten Kristallvolumens mit der Ausheiltemperatur. Die eingezeichneten Linien repräsentieren die beste Anpassung an die Diffusionsgleichung mittels **VEPFIT** (nach [Eic98a]).

dünne natürliche Oxidschicht auf der Siliziumoberfläche, die als Diffusionsbarriere wirken könnte. Andererseits diffundieren beweglich werdende oder in bewegliche Defekte dissoziierende Leerstellenagglomerate in das ungestörte Kristallvolumen aus. Dort rekombinieren die Defekte oder sie können nicht mehr nachgewiesen werden. Als Rekombinationszentren kommen Agglomerate von Zwischengitteratomen in Frage, die sich bei tieferen Temperaturen aus den hochbeweglichen Zwischengitteratomen bilden. GOLDBERG et al. haben in kombinierten Positronen- und **TEM**-Untersuchungen gefunden, daß sich mit dem Verschwinden der leerstellenartigen Defekte auch Änderungen an den tieferliegenden Agglomeraten von Zwischengitteratomen, wie Versetzungsschleifen, vollziehen [Gol95]. Man könnte also sagen, daß ausdiffundierende leerstellenartige Defekte an diesen Agglomeraten von Zwischengitteratomen rekombinieren. In Abbildung 3.36 ist anhand ausgewählter $S(E)$ -Kurven der mit $1 \times 10^{13} \text{ As}^+ \text{ cm}^{-2}$ implantierten Probe exemplarisch die Verminderung der Dicke der geschädigten Schicht während des Ausheilprozesses dargestellt. Die Daten wurden mit dem Programm **VEPFIT** und unter der Annahme eines Kastenprofils angepaßt. Die resultierenden Schichtdicken waren weitgehend unabhängig von der in der Schicht angenommenen Positronendiffusionsweglänge. Die Ergebnisse der Analyse sind ebenfalls in Abbildung 3.36 gezeigt und bestätigen den durch einfaches Hinsehen gewonnenen Eindruck, daß die Schichtdicke mit der Ausheiltemperatur abnimmt. Die Fehler der absoluten Dickenbestimmung, die wegen der Annahme eines Kastenprofils nicht unerheblich sein können (siehe Abschnitt 3.1.5), ändern nichts an der getroffenen Relativaussage.

Eine ähnliche Analyse des Ausheilverhaltens implantationsinduzierter Defekte kann man auch für die Silizium-selbstimplantierten Proben durchführen. Zunächst wird die Ausheilung der vollständig amorphisierten Schicht betrachtet. Dazu sind in Abbildung 3.37 die Schicht- S -Parameter über der Ausheiltemperatur dargestellt. Wie schon bei der durch Arsen-Implantation

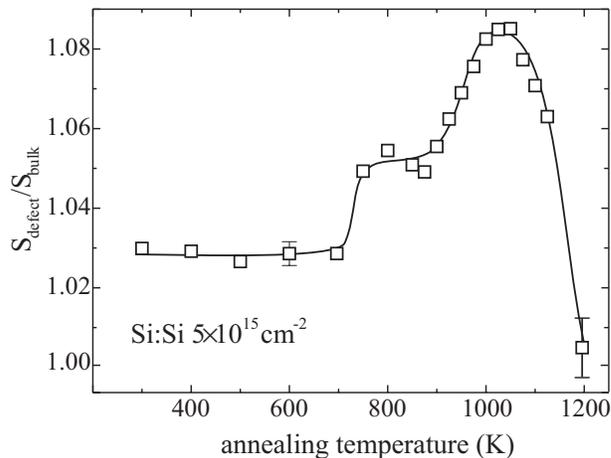


Abbildung 3.37: Der normierte S -Parameter der durch Implantation von $5 \times 10^{15} \text{ Si}^+ \text{ cm}^{-2}$ erzeugten amorphen Schicht ist über der Ausheiltemperatur aufgetragen (nach [Eic98a]).

amorphisierten Probe bleibt der S -Parameter bis zu einer Temperatur von etwa 700 K konstant, was auf die Stabilität der amorphen Phase bis zu dieser Temperatur schließen läßt. Nach der Rekristallisation erhöht sich der S -Parameter in zwei Stufen, die dem Positroneneinfang in unterschiedliche Defekte entsprechen. Die Betrachtung des S - W -Plots in Abbildung 3.38 bestätigt diese Aussage. Hier zeigt sich bei 750 K die Bildung eines Defekttypes **I**, dessen W -

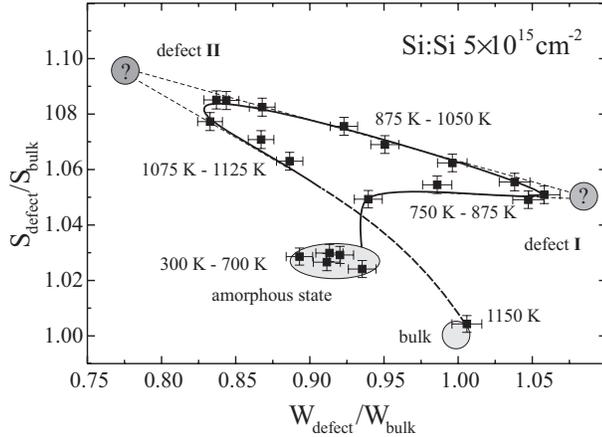


Abbildung 3.38: Das Ausheilverhalten von $5 \times 10^{15} \text{ Si}^+ \text{ cm}^{-2}$ implantiertem Silizium ist durch den S - W -Plot charakterisiert. Nach der Rekristallisation ist die Bildung von Sauerstoff-Leerstellen-Komplexen und von Leerstellenagglomeraten zu beobachten (nach [Eic98a]).

Parameter größer als eins wird, obwohl der S -Parameter ebenfalls größer als eins bleibt. Solch eine Konstellation ist bisher nicht beobachtet worden. Für den in Abschnitt 3.1.6.1 postulierten Bor-Sauerstoff-Leerstellen-Komplex ist zwar ebenfalls einen W -Parameter größer eins gefunden worden, jedoch bei $S < 1$. Es sollte sich bei dem hier diskutierten Defekt **I** um einen Defekt-komplex mit einem Fremdatom handeln, da der geänderte W -Parameter für eine Änderung im Bereich der Annihilation von Positronen mit Rumpfelektronen spricht. Eine solche Änderung ist zu erwarten, wenn sich in der Nachbarschaft des Positroneneinfangszentrums mit offenem Volumen ein Fremdatom befindet. Als Fremdatome kommen nur die des Sauerstoffs in Frage, der im Cz-Material in einer Konzentration von etwa 10^{18} cm^{-3} gelöst ist. Andere Verunreinigungen, wie z.B. Kohlenstoff, sind in weit geringeren Konzentrationen ($\leq 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) vorhanden. Es stellt sich die Frage, warum dieser Defekt nur in Silizium-implantierten Proben sichtbar wird und nicht etwa nach Arsen-Implantation. Eine mögliche Erklärung wäre die geringere totale Konzentration leerstellenartiger Defekte nach Silizium-Selbstimplantation (siehe Abschnitt 3.1.3). Die Sauerstoff-Leerstellen-Komplexe werden bei den Arsen-implantierten Proben durch ebenfalls entstehenden Leerstellenagglomerate überdeckt oder gar nicht gebildet. Nach Silizium-Implantation hingegen reicht die Gesamtmenge des eingebrachten offenen Volumens nicht aus, um genügend Leerstellenagglomerate als Konkurrenz zu den Sauerstoff-Leerstellen-Komplexen zu bilden. Bei Temperaturen von etwa 900 K verschwindet der Sauerstoff-Leerstellen-Komplex und Leerstellenagglomerate (**II**) sind zu beobachten. Im S - W -Plot ist zu erkennen, daß der Positroneneinfang in diese Defekte nicht vollständig ist. Die S - W -Trajektorie verläuft mehr oder

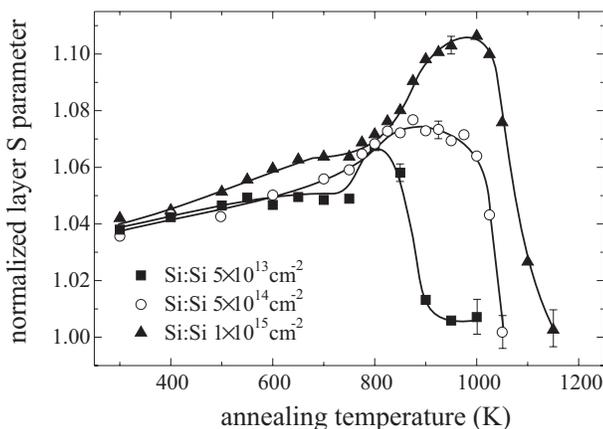


Abbildung 3.39: Die Schicht- S -Parameter für verschiedene Silizium-implantierte Proben gegen die Ausheiltemperatur sind dargestellt. Das Ausheilverhalten ist von der Schädigung im implantierten Zustand abhängig (nach [Eic98a]).

weniger gekrümmt. Die Bestimmung der Annihilationsparameter ist in diesem Fall schwierig. Die Leerstellenagglomerate beginnen bei Temperaturen von ca. 1050 K auszuheilen. Die Ausheilung der nicht vollständig amorphisierten Silizium-implantierten Proben ist durch die entsprechenden S -Parameter-Kurven in Abbildung 3.39 charakterisiert. Die Rekristallisation der amorphen Gebiete erfolgt ähnlich wie nach Arsen-Implantation bis zu einer Temperatur von 650 K. Der erste deutliche Agglomerationschritt erfolgt ab 750 K. Hier ist eine ausgeprägte Dosisabhängigkeit zu beobachten. In Abbildung 3.40 ist dieses Verhalten an S - W -Trajektorien der $5 \times 10^{13} \text{ Si}^+ \text{ cm}^{-2}$ und der $1 \times 10^{14} \text{ Si}^+ \text{ cm}^{-2}$ -implantierten Proben näher betrachtet. Zunächst zeigen beide

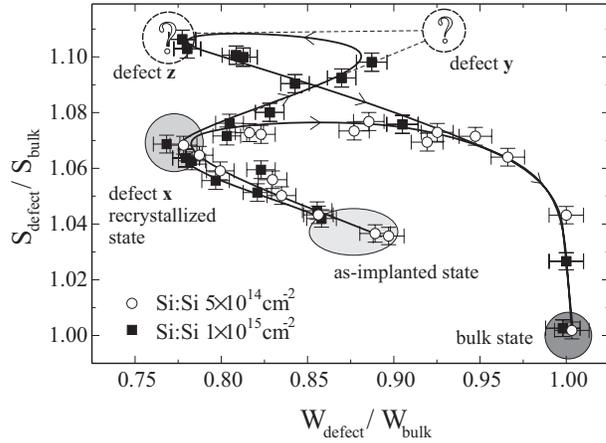


Abbildung 3.40: Die S - W -Trajektorien (die Annihilationsparameter wurden in der geschädigten Schicht gemessen) für die $5 \times 10^{13} \text{ Si}^+ \text{ cm}^{-2}$ - und die $1 \times 10^{14} \text{ Si}^+ \text{ cm}^{-2}$ -implantierte Cz-Silizium-Probe während der Ausheilung illustrieren die Bildung verschiedener leerstellenartiger Defekte abhängig vom Grad der Schädigung nach der Implantation. Die Linien verfolgen die Spur von geringen zu hohen Ausheiltemperaturen (nach [Eic98a]).

Proben bis zur Ausheilung amorpher Zonen ein ähnliches Verhalten. Im vollständig rekristallisierten Zustand existieren leerstellenartige Defekte (\mathbf{x}). Die Konzentration dieser Defekte ist abhängig von der Implantationsdosis. Bei weiterer Temperung beginnt sich ein Defekt (\mathbf{y}) mit höherem W -Parameter zu bilden. Außerdem werden die Defekte (\mathbf{x}) beweglich oder sie beginnen zu dissoziieren. Im Fall der $5 \times 10^{13} \text{ Si}^+ \text{ cm}^{-2}$ -implantierten Probe liegt die Konzentration dieser Defekte unter einem bestimmten kritischen Wert, die Agglomerationswahrscheinlichkeit ist gering und die Defekte heilen aus. Bei höheren Temperaturen (1000 K) heilen auch die Defekte (\mathbf{y}) aus, und die Annihilationsparameter des ungestörten Kristalls werden beobachtet. Während der Ausheilung ist der Einfang in die entsprechenden Defekte nicht gesättigt, die Annihilationsparameter charakterisieren vielmehr Defektmischungen (nach Gl. (2.2.9)). Die S - W -Kurven verlaufen gekrümmt, wenn Positronen in mehr als zwei Defektarten eingefangen werden und sich die entsprechenden Einfangraten ändern. Für die $1 \times 10^{14} \text{ Si}^+ \text{ cm}^{-2}$ -implantierte Probe liegt die Konzentration der Defekte (\mathbf{x}) über dem für die Agglomeration entscheidenden Wert. Neben der Bildung der Defekte (\mathbf{y}) kommt es zur Agglomeration, und aus den Defekten (\mathbf{x}) entstehen die Defekte (\mathbf{z}). Diese sind thermisch stabiler und heilen erst bei 1100 K aus. Die Bestimmung der spezifischen Annihilationsparameter ist nur schwer möglich, weil der hundertprozentige Positroneneinfang in einen Defekttyp nicht beobachtet wird. Die in Abbildung 3.40 eingezeichneten Annihilationszustände sind spekulativ. Dennoch kann festgestellt werden, daß sich die Defekte (\mathbf{x}) und (\mathbf{z}) im S -Parameter deutlich unterscheiden, die Defekte (\mathbf{z}) sollten mehr Leerstellen enthalten als die Defekte (\mathbf{x}), sie sind außerdem thermisch stabiler. Der Defekttyp (\mathbf{y}) dagegen ist durch einen höheren W -Parameter charakterisiert. Hier sollte sich die chemische Umgebung des beobachteten offenen Volumens gegenüber den Defekten (\mathbf{x}) und (\mathbf{z}) ändern. Eine Komplexbildung mit Sauerstoffatomen ist wahrscheinlich, weil die Konzentration anderer Verunreinigungen zu niedrig ist.

3.1.6.3. Zusammenfassung und Modellierung der Ausheilexperimente. Die Ausheilexperimente liefern weitergehende Informationen zum Zustand der Probe nach der Implantation. Es wurden verschiedene Prozesse wie Rekristallisation, Agglomeration und Ausheilung beobachtet. Die Temperaturen, bei denen Defekte beweglich werden oder zerfallen, sind spezifisch und lassen Schlüsse über die Natur der Defekte zu. Insbesondere beim Vergleich von Ergebnissen, die mit verschiedenen Methoden oder/und an verschiedenen Proben erhalten werden, kann das Ausheilverhalten der Defekte eine wichtige Rolle bei ihrer Identifizierung spielen.

Wichtig ist dabei jedoch die Vergleichbarkeit der Ausheilprozedur, um den Einfluß kinetisch bedingter Effekte ausschließen zu können.

1. Die Stabilität vollständig amorphisierter Schichten nach Arsen- bzw. Silizium-Implantation zeigt sich bis zur Rekristallisation bei 750 K in nahezu konstanten Anihilationsparametern. Die Dichte amorpher Schichten ist im allgemeinen geringer als die von kristallinem Material, so daß nach der Rekristallisation leerstellenartige Defekte zurückbleiben, während z.B. mit **RBS** kaum noch Schädigung im Zwischengitter beobachtet wird. Die verbleibenden leerstellenartigen Defekte sind stabil bei der Rekristallisationstemperatur, d.h. es kommen nur Leerstellenagglomerate, die mehr als zwei Leerstellen enthalten, oder Defektkomplexe mit den Implantaten oder mit im Cz-Material gelösten Sauerstoffatomen in Frage.
2. Mittelschwere und schwere Elemente wie Silizium oder Arsen erzeugen bei Implantation von Dosen unterhalb der amorphisierenden Dosis mehr oder weniger große amorphe Gebiete. Die verbleibenden kristallinen Bereiche enthalten Defekte. Die Grenzfläche zwischen amorpher und kristalliner Phase ist hier sehr viel größer als bei vollständig amorphen Schichten. Es ist bekannt, daß die Rekristallisation von amorphen Gebieten in Nachbarschaft zu kristallinen Bereichen über Prozesse der Grenzflächenepitaxie abläuft. Eine große Grenzfläche sollte zur Beschleunigung der Rekristallisation führen. So ist verständlich, daß bei schwach geschädigten Proben bereits nach Temperung bis zu 600 K die amorphen Zonen verschwinden.
3. Leichtere Ionen (Bor, Kohlenstoff) schädigen das Target weit weniger, die amorphisierende Dosis liegt höher und die Implantation von Bor ist beispielsweise bei Raumtemperatur nicht in der Lage, eine amorphe Schicht zu erzeugen. Es bilden sich je nach Implantationsdosis mehr oder weniger große Leerstellenagglomerate, die meist in einfachen Ausheilstufen verschwinden.

Der Vorgang der Agglomeration ist ein allgemeines Phänomen, das immer dann auftritt, wenn eine kritische Konzentration von Ausgangsdefekten vorliegt und diese beweglich werden bzw. dissoziieren. Die kritische Konzentration der Defekte muß eine Funktion der Dichte potentieller Rekombinationszentren und der Diffusionskoeffizienten der beweglichen Defekte sein. Weiterhin spielen die kinetischen Parameter der Defektreaktionen und Bindungsenergien der Agglomerate, sowie die Einfangquerschnitte der Rekombinationszentren und Agglomerationskeime eine Rolle. Die quantitative Beschreibung der Agglomeration ist wegen der Fülle unbekannter Parameter nicht möglich. Ein qualitatives Bild soll im folgenden gegeben werden.

Zunächst werden einige Begriffe definiert:

DEFINITION 3.1.1. Wenn Defekte, die miteinander wechselwirken, zumindest teilweise verschwinden, so sind diese Defekte *rekombinierbar*.

So sind z.B. Leerstellen bzw. Leerstellenagglomerate und Zwischengitteratome bzw. Agglomerate von Zwischengitteratomen oder bestimmte Typen von Versetzungen rekombinierbar.

DEFINITION 3.1.2. Systeme, in denen die verschiedenen rekombinierbaren Nichtgleichgewichtsdefekte gleichverteilt sind, heißen *geschlossene Nichtgleichgewichtssysteme*.

DEFINITION 3.1.3. Systeme, in denen die verschiedenen rekombinierbaren Nichtgleichgewichtsdefekte nicht gleichverteilt sind und deren Verteilungsschwerpunkte nicht zusammenfallen, heißen *offene Nichtgleichgewichtssysteme*.

So stellt z.B. das System von durch Elektronenbestrahlung homogen eingeführter Defekte ein geschlossenes Nichtgleichgewichtssystem dar. Im Gegensatz dazu werden von hochenergetischen Ionen Defekte in begrenzten Gebieten bzw. Schichten erzeugt. Diese primären Defekte werden wegen ihrer unterschiedlichen Beweglichkeit voneinander getrennt und die lokale Defektbilanz ist gestört. Es entsteht ein offenes Nichtgleichgewichtssystem.

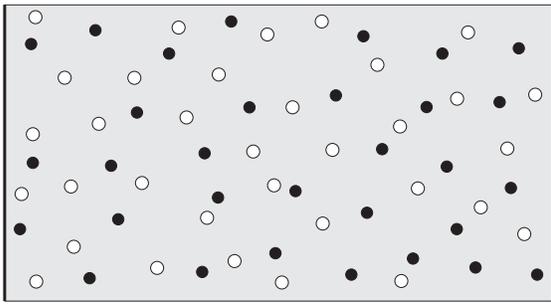


Abbildung 3.41: Schematische Darstellung eines geschlossenen Nichtgleichgewichtssystems am Beispiel von leerstellenartigen Defekten (\circ) und Defekten im Zwischengitter (\bullet) nach Bestrahlung eines Halbleiters mit hochenergetischen Elektronen.

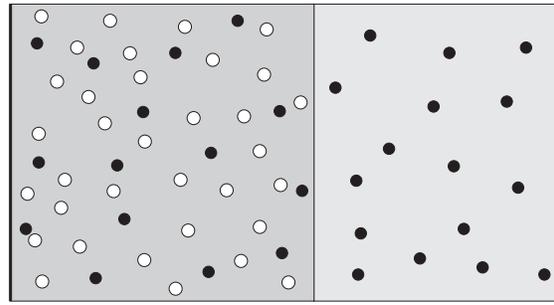


Abbildung 3.42: Schematische Darstellung eines offenen Nichtgleichgewichtssystems am Beispiel von leerstellenartigen Defekten (\circ) und Defekten im Zwischengitter (\bullet) nach Ionenimplantation eines Halbleiters.

DEFINITION 3.1.4. Wenn beim Beweglichwerden von leerstellenartigen Defekten die Agglomerationswahrscheinlichkeit in einem Gebiet um einen bestimmten Punkt größer ist als die Rekombinationswahrscheinlichkeit, so übersteigt die Konzentration der leerstellenartigen Defekte die *kritische Agglomerationskonzentration*.

Die so definierte kritische Agglomerationskonzentration ist eine Funktion des Ortes \mathbf{r} und abhängig von den Konzentrationen bzw. von den mittleren Abständen der verschiedenen rekombinierbaren Defekte um \mathbf{r} . Die in Definition 3.1.4 benutzte Rekombinationswahrscheinlichkeit beinhaltet auch die Möglichkeit der Ausdiffusion von Defekten aus geschädigten in nicht geschädigte Gebiete für offene Nichtgleichgewichtssysteme.

In elektronenbestrahltem Silizium werden primär FRENKEL-Paare erzeugt. Wenn die Leerstellen bei etwa 100 K beweglich werden, so rekombinieren sie oder sie bilden Komplexe wie Doppelleerstellen und A-Zentren (in Cz-Material). Offenbar überwiegt jedoch die Rekombination, denn die mittlere Positronenlebensdauer, die man während des isochronen Ausheilexperimentes mißt, sinkt, obwohl die spezifische Positronenlebensdauer der Doppelleerstelle (310 ps) über der der Einfachleerstelle (270 ps) liegt (siehe [Pol97]). Die Defekte nach Elektronenbestrahlung bilden ein geschlossenes Nichtgleichgewichtssystem. Die Konzentration der Rekombinationszentren für Leerstellen ist relativ hoch, so daß es kaum zu anderen Defektreaktionen neben der Rekombination kommt. In ionenimplantiertem Silizium dagegen werden die Defekte in einem begrenzten Gebiet produziert. Die unterschiedliche Beweglichkeit von Leerstellen und Zwischengitteratomen führt zu einer Trennung von potentiellen Rekombinationspartnern. Bei Raumtemperatur existieren mehr oder weniger große leerstellenartige Agglomerate in der gestörten Schicht und tieferliegend Agglomerate von Zwischengitteratomen (siehe auch [Gol95]). Es liegt ein offenes Nichtgleichgewichtssystem vor. Die Implantation leichter Ionen (Bor, Kohlenstoff) erzeugt eine relativ niedrige Konzentration gleichartiger Leerstellenagglomerate. Hier diffundieren die leerstellenartigen Defekte bei genügend hohen Temperaturen aus und rekombinieren mit den Defekten im Zwischengitter, ohne miteinander wechselzuwirken. Lediglich bei der mit der höchsten Bor-Dosis ($1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$) bestrahlten Probe scheint in einem Gebiet nahe der Oberfläche die kritische Agglomerationskonzentration überschritten. Hier ist bei einer Temperatur, bei der die Defekte beweglich werden, eine Erhöhung des S -Parameters zu beobachten. Das heißt, daß bei nahezu konstanter Gesamtkonzentration der leerstellenartigen Defekte der Einzeldefekt ein größeres offenes Volumen aufweist. In Abbildung 3.43 ist das Ausheilverhalten von Defekten in offenen Nichtgleichgewichtssystemen für Defektkonzentrationen größer (I) und kleiner (II) als die kritische Agglomerationskonzentration schematisch dargestellt. Für genügend hohe Konzentrationen leerstellenartiger Defekte (I) sind deren mittleren Abstände ausreichend klein und es kommt zur Agglomeration (a) zu thermisch stabileren Defekten. Die Wahrscheinlichkeit der Rekombination mit den Defekten im Zwischengitter (r) ist wegen deren vergleichsweise geringen

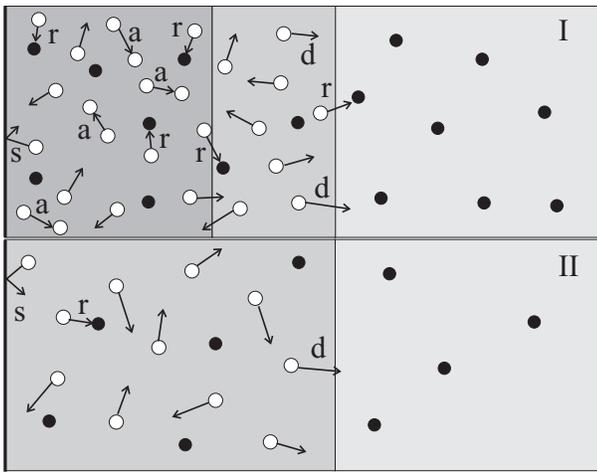


Abbildung 3.43: Das Ausheilverhalten von Defekten in offenen Nichtgleichgewichtssystemen ist für Defektkonzentrationen größer (I) und kleiner (II) als die kritische Agglomerationskonzentration schematisch dargestellt. Im ersten Fall kommt es in einem bestimmten Gebiet zur Agglomeration von Defekten (a). Im zweiten Fall können nur Rekombinations- (r) und Ausdiffusionsprozesse (d) stattfinden. Die Oberfläche wirkt als Diffusionsbarriere (s).

Konzentration klein. In einem Gebiet nahe dem Ende der gestörten Schicht dominiert die Ausdiffusion von Defekten. Hier wird, wie auch in Fall der niedrigen Konzentration leerstellenartiger Defekte (II), die kritische Agglomerationskonzentration unterschritten.

Bei der Ausheilung von Silizium- und Arsen-implantiertem Silizium sind für alle Proben Agglomerationsprozesse zu beobachten. Sie verlaufen in unterschiedlichen Schichten und auch mehrstufig. Mehrstufig heißt in diesem Zusammenhang, daß die aus der ersten Agglomeration hervorgegangenen Defekte mit einer Dichte über der kritischen Agglomerationskonzentration vorliegen und sich beim Beweglichwerden wiederum zusammenlagern.

Mit diesem qualitativen Modell lassen sich die Ereignisse der Ausheilexperimente erklären. Sowohl die Dosisabhängigkeit des Agglomerationsverhaltens als auch die Ausheilung von der Seite des ungestörten Kristalls her werden verstanden. Erste Ansätze, dieses Modell in eine Monte-Carlo-Simulation umzusetzen, sind vorhanden. Hier kann versucht werden, Quantitäten zu Konzentrationen, Diffusions- und Reaktionsprozessen abzuschätzen.

3.2. Experimente zur ionenstrahlinduzierten Rekristallisation in Germanium

Am Germanium wurden in Kooperation mit einer Arbeitsgruppe der Universität Jena Untersuchungen zur ionenstrahlgestützten epitaktischen Rekristallisation (**Ion Beam Induced Epitaxial Crystallization, IBIEC**) durchgeführt. Die Methode der **IBIEC** ermöglicht die Rekristallisation amorpher Schichten bei niedrigeren Temperaturen, als sie für die thermische Rekristallisation benötigt werden. Technologisch ist das Verfahren besonders im Fall binärer Halbleiter interessant, da hier die Bildung hoher Konzentrationen von Restdefekten verhindert wird, die in Form von Stapelfehlern und Zwillingen nach thermischer Rekristallisation auftreten.

Wird eine amorphe Schicht mit Ionen bestrahlt, deren Energie ausreichend ist, um diese Schicht zu durchdringen, so kann es zu einer Wanderung der Grenzfläche amorph/kristallin kommen. Diese Wanderung kann oberhalb einer kritischen Temperatur T_R zum Abbau der amorphen Schicht führen (**IBIEC**) bzw. unterhalb von T_R das amorphe Gebiet vergrößern (**Ion Beam Induced Interfacial Amorphization, IBIIA**). Die kritische Temperatur ist vom Substratmaterial, von der Ionenmasse sowie von der Dosisrate abhängig. Für Germanium und bei Verwendung mittelschwerer Ionen (z.B. Argon) beträgt die kritische Temperatur etwa 485 K [Sch97], thermische Rekristallisation findet bei zirka 670 K statt. Die Geschwindigkeit der Grenzflächenbewegung beim **IBIEC**-Prozeß ist hauptsächlich von der Dosisrate abhängig. Die Implantationsenergie wird so gewählt, daß die projizierte Reichweite R_p weit hinter der Grenzfläche liegt und die Ionen selbst nicht im Bereich der Grenzfläche zur Ruhe kommen, damit sie dort nicht chemisch oder elektrisch aktiv werden. Außerdem verlieren die Ionen den Hauptteil ihrer Energie erst in tieferen Bereichen (siehe Abschnitt 1.1), so daß primär relativ wenige Punktdefekte im oberflächennahen Gebiet der Probe erzeugt werden. Eine geeignete Methode, Prozesse wie **IBIEC** und **IBIIA** zu untersuchen, ist **RBS** (siehe Abschnitt 2.3). Hier kann man sehr schön die Phasenumwandlung und die Wanderung der Phasengrenzfläche beobachten [Sch97]. Welche Defekte

nach vollständiger Rekrystallisation im Material verbleiben, ist mittels **RBS** nur in begrenztem Umfang zu klären. Aus temperaturabhängigen Messungen kann man Aussagen zu Korrelationen von atomaren Auslenkungen und der Stärke von Auslenkungen treffen sowie bestimmte Defekttypen unterscheiden. Zur genaueren Bestimmung von Defektstrukturen mit geringer Konzentration müssen jedoch alternative Methoden herangezogen werden, wie z.B. **TEM** oder **VEPAS**. Im Rahmen dieser Arbeit wurde folgendes Experiment durchgeführt.

Identische Proben wurden durch die Implantation von $2 \times 10^{15} \text{ N}^+ \text{ cm}^{-2}$ (50 keV) bei Raumtemperatur bis zu einer Tiefe von 100 nm voramorphisiert und danach verschiedenen Behandlungen ausgesetzt. Die Dosisabhängigkeit des **IBIEC**-Prozesses kann am Beispiel der Bestrahlung mit 1.0 MeV Ar^+ für drei verschiedene Dosiswerte ($2.5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$) bei einer Temperatur vom 550 K demonstriert werden. Zum Vergleich wurde auch eine amorphisierte Schicht bei einer Temperatur von 670 K (4 h) einer konventionellen thermischen Festkörperepitaxie unterzogen. Abbildung 3.44 zeigt die **RBS**-Spektren der verschieden

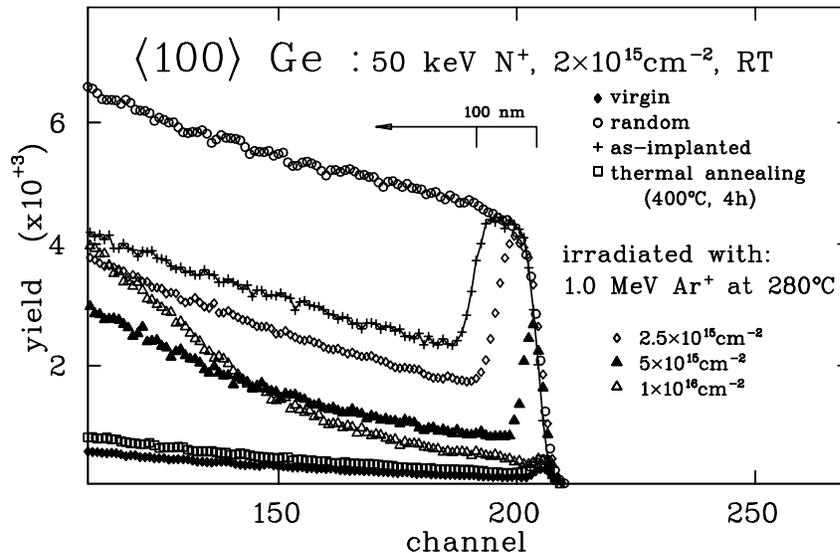


Abbildung 3.44: **RBS**-Spektren von Ge nach Ausheilung durch **IBIEC** mit 1.0 MeV Ar^+ bei 550 K bzw. einer thermischen Ausheilung (4 h, 670 K). Zum Vergleich sind das Spektrum von einkristallinem Germanium und ein Random-Spektrum eingezeichnet (aus [Sch97]).

behandelten Proben. Die nicht voramorphisierte Referenzprobe und die thermisch rekrystallisierte Probe zeigen kaum Unterschiede. Die thermische Rekrystallisation ist nahezu perfekt verlaufen. Die leichte Erhöhung der Rückstreuerausbeute in Oberflächennähe deutet jedoch darauf hin, daß auch hier Defekte in der rekrystallisierten Matrix übrig bleiben. Die Empfindlichkeit des angewandten **RBS**-Standardverfahrens ist zu gering für den eindeutigen Nachweis einer offenbar geringen Konzentration von Kristalldefekten. Die Ausgangsdicke der amorphen Schicht betrug 100 nm, wie das entsprechende **RBS**-Spektrum zeigt. Weiter ist zu erkennen, daß die Dicke der amorphen Schicht nahezu linear mit der **IBIEC**-Dosis abnimmt; bei einer Dosis von $1 \times 10^{15} \text{ Ar}^+ \text{ cm}^{-2}$ ist die Probe vollständig rekrystallisiert. Es ist jedoch im Bereich der ehemals amorphen Schicht eine signifikante Abweichung zur Rückstreuerausbeute der Referenzprobe zu beobachten. Es bleiben also Kristalldefekte zurück. In größerer Tiefe unterscheiden sich die **IBIEC**-Proben von der thermisch ausgeheilten Probe und der Referenzprobe noch deutlicher. Dort kommen die hochenergetischen Argon-Ionen zur Ruhe und erzeugen eine geschädigte Zone, die Punktdefekte, Agglomerate von Punktdefekten bis hin zu Versetzungsnetzwerken enthalten sollte.

Zur Klärung der Frage nach den leerstellenartigen Defekten, die nach dem **IBIEC**-Verfahren zurückbleiben, wurden an denselben mittels **RBS** untersuchten Proben Messungen mit langsamen Positronen durchgeführt. In Abbildung 3.45 sind die typischen *S-E*-Plots dargestellt. Wie

auch Silizium zeigt einkristallines Germanium (\square) zwei deutlich unterscheidbare Annihilationszustände, zum einen Annihilation an der Oberfläche, gekennzeichnet durch einen niedrigen S -Parameter (0.93), und zum anderen Annihilation im ungestörten Kristall. Aus der Messung des S -Parameters als Funktion der Positronenenergie läßt sich die Positronendiffusionsweglänge zu $L_+ = (151 \pm 10)$ nm anpassen (siehe Abschnitt 2.2.6). Die durch Stickstoff-Implantation voramorphisierte Probe (\bullet) zeigt eine für amorphes Material typische effektive Positronendiffusionsweglänge von 4 nm innerhalb einer Schicht von etwa 120 nm. Der normierte S -Parameter der amorphen Schicht beträgt 1.04. Die Ionenstrahl-rekristallisierten Proben zeigen neben der

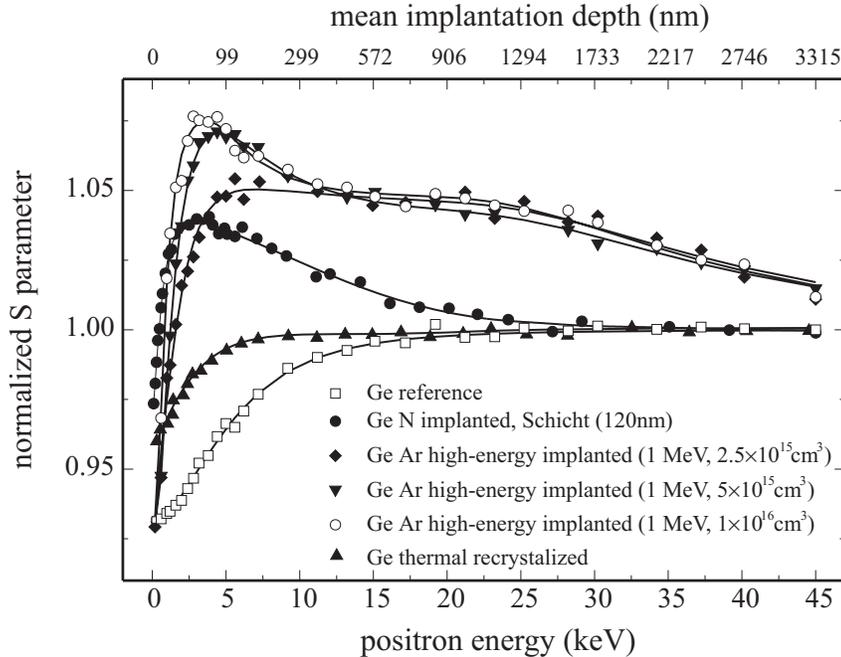


Abbildung 3.45: S Parameter als Funktion der Positronenenergie für Ge nach **IBIEC**-Ausheilung mit 1.0 MeV Ar^+ bei 550 K und einer thermisch ausgeheilten Probe (4 h, 670 K). Weiterhin sind die Daten für einkristallines Germanium und für die amorphenisierten Probe dargestellt. Die eingezeichneten Kurven sind die Ergebnisse von VEPFIT-Anpassungen.

gestörten ehemals amorphenisierten Schicht ein Zone (zwischen 15 und 25 keV Positronenenergie), die durch die Hochenergieimplantation geschädigt ist. Diese Zone reicht bis in eine Tiefe, die der projizierten Reichweite R_p , wie sie mit **TRIM** berechnet wird, entspricht. In diesem Bereich gibt es keine signifikante Abhängigkeit des S -Parameters (1.05) von der **IBIEC**-Dosis. Im Gegensatz dazu kann man im Tiefenbereich der Voramorphisierung (zwischen 2.5 und 10 keV Positronenenergie) deutlich einen dosisabhängigen Effekt beobachten. Hier wächst sowohl der Schicht- S -Parameter als auch der Positroneneinfang mit der **IBIEC**-Dosis. Letzteres wird durch die mit der Dosis sinkende effektive Diffusionsweglänge der Positronen in diesem Bereich deutlich (siehe Tabelle 3.2). Für die nur teilweise rekristallisierten Proben ist die Interpretation der Positronendaten schwierig. Hier liegen eine schon rekristallisierte und defektreiche sowie die verbleibende amorphe Schicht nebeneinander vor. Der S -Parameter kann als Mischung der spezifischen Parameter für amorphes Material und leerstellenartige Defekte verstanden werden. Die relativ große Diffusionsweglänge für die nicht vollständig rekristallisierten Proben ist nicht konventionell erklärbar. Das **IBIEC**-Verfahren bei erhöhten Temperaturen müßte auch Einfluß auf die Struktur der noch nicht rekristallisierten, amorphen Schicht nehmen. Auch nach thermischer Rekristallisation wird der Zustand der einkristallinen Referenzprobe nicht erreicht. Die verringerte Diffusionsweglänge deutet auf die Existenz von Defekten hin, was schon nach den **RBS**-Messungen vermutet wurde. Die Frage nach der Natur der nach **IBIEC** zurückbleibenden

Probe	$L_+(0 - 120 \text{ nm})$	$S(0 - 120 \text{ nm})$
(□) Referenz	$(151 \pm 10) \text{ nm}$	1.000 ± 0.000
(●) amorphisiert	$(4 \pm 1) \text{ nm}$	1.042 ± 0.001
(○) IBIEC $1 \times 10^{16} \text{ Ar}^+ \text{ cm}^{-2}$	$(7 \pm 1) \text{ nm}$	1.079 ± 0.001
(▼) IBIEC $5 \times 10^{15} \text{ Ar}^+ \text{ cm}^{-2}$	$(12 \pm 2) \text{ nm}$	1.077 ± 0.001
(◆) IBIEC $2.5 \times 10^{15} \text{ Ar}^+ \text{ cm}^{-2}$	$(20 \pm 2) \text{ nm}$	1.055 ± 0.001
(▲) thermisch rekristallisiert	$(24 \pm 2) \text{ nm}$	1.000 ± 0.001

Tabelle 3.2: Effektive Positronendiffusionsweglängen und S -Parameter von **IBIEC**-Proben und den entsprechenden Referenzen.

Defekte kann aus dem S -Parameter allein nicht geklärt werden, da dieser sowohl vom Defektyp als auch von der Einfangrate abhängt. Wie in Abschnitt 2.2.5 beschrieben, kann man aus der Auftragung der Annihilationsparameter S und W gegeneinander Aussagen zu vorhandenen Defektypen treffen. In Abbildung 3.46 ist eine solche Analyse für **IBIEC**-Proben und die Re-

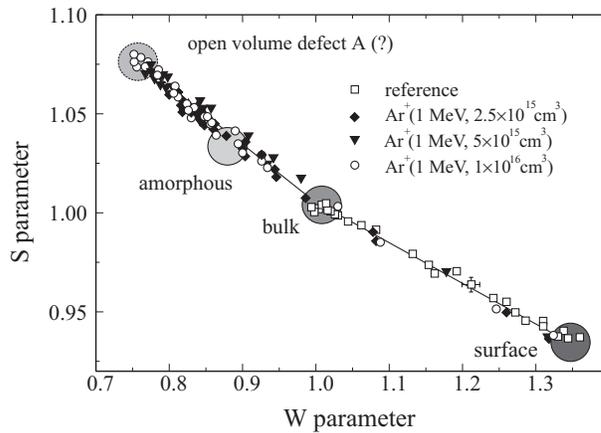


Abbildung 3.46: S - W -Plot für Ge nach Ausheilung durch **IBIEC** sowie für die Ge-Referenzprobe.

ferenzprobe gezeigt. Es sind drei Annihilationszustände zu erkennen, die Oberfläche (0.93,1.35), das ungestörte Kristallgitter (1.0,1.0) und ein Defekt mit offenem Volumen, dessen spezifischen Annihilationsparameter nicht sicher ablesbar sind, weil es sich am Punkt (1.08, 0.80) nicht notwendigerweise um vollständigen Positroneneinfang handeln muß. Die Tatsache jedoch, daß alle Punkte auf einer Geraden zwischen den entsprechenden spezifischen Annihilationsparametern liegen, deutet auf den Positroneneinfang in nur einen Defektyp hin. Dies gilt sowohl für den vor-amorphisierten Bereich als auch für die tieferliegende Zone, die durch die **IBIEC**-Implantation geschädigt wurde. Die Tatsache, daß der Annihilationszustand für amorphes Germanium (1.04, 0.88) nahe an dieser Geraden liegt, verhindert eine weitergehende Analyse der Positronendaten bezüglich der nicht vollständig rekristallisierten Proben. Der S -Parameter sollte bei Positroneneinfang in nur einen Defektyp die Konzentration dieser Defekte widerspiegeln. Es ist also zu schließen, daß durch die nachträgliche Argon-Implantation leerstellenartige Defekte eingeführt werden (Defekt A), deren Konzentration im Rekristallisationsbereich erhöht ist. Diese Daten stützen die Interpretation der **RBS**-Spektren, die im rekristallisierten Gebiet eine leichte Erhöhung der Rückstreausbeute aufweisen. Darüber hinausgehend zeigt ein Vergleich einer vor-amorphisierten und einer kristallinen Probe, die beide dem **IBIEC**-Prozeß ausgesetzt wurden, daß beim Rekristallisationsprozeß eine höhere Konzentration von leerstellenartigen Defekten zurückbleibt als ausschließlich durch die **IBIEC**-Bestrahlung eingeführt wird.

Eine zusätzliche Möglichkeit, weitere Informationen über den Defektyp zu erlangen, bietet die Untersuchung des Ausheilungsverhaltens der Defekte. Ein isochrones Temperexperiment

(15 min je Temperaturschritt) wurde für die durch **IBIEC** vollständig rekristallisierte Probe durchgeführt. Hierbei wurden nur die mittleren Schicht- S -Parameter betrachtet. In Abbildung 3.47 sind die Ergebnisse dargestellt. Im Bereich der rekristallisierten Schicht steigt der

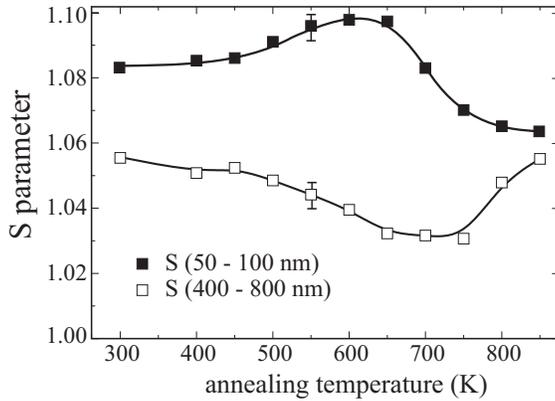


Abbildung 3.47: Schicht S -Parameter als Funktion der Temperatur im thermischen Ausheilregime der **IBIEC**-ausgeheilten Ge-Probe.

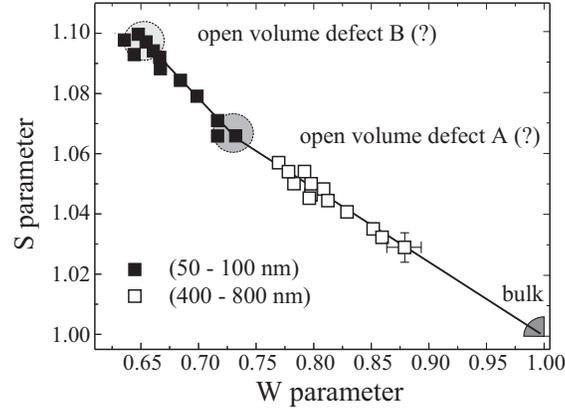


Abbildung 3.48: S - W -Plot für Ge nach thermischer Ausheilung der **IBIEC**-behandelten Probe ($1.0 \text{ MeV } 1 \times 10^{16} \text{ Ar}^+ \text{ cm}^{-2}$ bei 550 K).

S -Parameter (■) ab 500 K von 1.085 auf 1.100 , während im gleichen Temperaturbereich der S -Parameter (□) im Bereich bis zu R_p der Hochenergieimplantation sinkt. Offensichtlich wird der gleiche Defekt (A) beweglich. Der zu beobachtende Effekt ist also auf die unterschiedliche Konzentration dieses Defektes zurückzuführen. Im vorderen Bereich überwiegt die Agglomeration der leerstellenartigen Defekte zu größeren Agglomeraten (Defekt B), wogegen in der tieferliegenden Region der Prozeß der Rekombination bzw. der Ausdiffusion dominiert. Bei einer Temperatur von 650 K heilen die größeren Agglomerate (B) im vorderen Bereich aus, der S -Parameter (■) sinkt auf den Wert 1.06 ab und scheint sich zu stabilisieren. Bei 750 K steigt der S -Parameter (□) im hinteren Bereich ungefähr auf das Niveau in der vorderen Zone an. Dieses Verhalten ist zunächst überraschend. Es gibt zwei Interpretationsmöglichkeiten; erstens könnte sich ein stabilerer Defekt im gesamten implantierten Gebiet bilden. Ein Kandidat hierfür ist ein Sauerstoff-Leerstellen-Komplex ($V_n O_m$). Die Leerstellen, die dafür im tieferen Gebiet benötigt werden, könnten aus der vorderen Region ausdiffundieren, wenn dort die größeren Agglomerate dissoziieren. Sauerstoff ist im Czochralski-gezogenem Substratmaterial in Konzentrationen bis zu 10^{18} cm^{-3} gelöst. Zweitens könnte die Positronendiffusionsweglänge durch das Verschwinden von Einfangzentren so groß werden, daß auch Positronen, die mit höherer Energie in die Probe eingeschossen werden und zunächst tiefer eindringen, die vordere Schicht erreichen und dort annihilieren. Für das thermische Ausheilexperiment wurde ebenfalls eine S - W -Analyse durchgeführt (siehe Abbildung 3.48). Hier wird die Bildung einer weiteren Defektart (Defekt B) in der ehemals amorphisierten Schicht bestätigt. Neben dem schon in Abbildung 3.46 gezeigten Zweig (□), ist ein neuer Zweig (■) im S - W -Plot zu sehen, der zwischen den Annihilationsparametern von Defekt A und Defekt B liegt. Die Bildung eines neuen Defektkomplexes nach 750 K scheint unwahrscheinlich, da im S - W -Plot ein weiterer Zweig auftreten müßte. Das ist nicht der Fall, so daß die Erhöhung der Positronendiffusionsweglänge für das Ansteigen des Schicht- S -Parameters im hinteren Bereich verantwortlich sein sollte.

Zusammenfassend kann man sagen, daß nach der **IBIEC**-Rekristallisation Defekte mit offenem Volumen zurückbleiben. Ihre erhöhte Konzentration im Rekristallisationsgebiet gegenüber der ausschließlich durch die Hochenergieimplantation geschädigten Zone spricht dafür, daß in der amorphen Phase ein Überschuß an offenem Volumen existiert. Bei der thermischen Rekristallisation wird die gesamte Probe erhitzt. Es werden also alle Defekte, die durch die amorphisierende Implantation entstanden sind, in das Rekristallisationsgeschehen einbezogen. Vorhandene lokale Defektüberschüsse können ausgeglichen werden. Während des **IBIEC**-Prozesses dagegen,

finden auf atomarer Ebene Wechselwirkungen statt, die nur in einem eng begrenzten Gebiet zur kurzzeitigen Temperaturerhöhung führen. Die Rekristallisation kommt eigentlich durch epitaktisches Wachstum zustande, und lokale Defektüberschüsse müssen in den Kristall eingebaut werden. Auch die Erhöhung der Einführraten von Implantationsdefekten für amorphes Material gegenüber denen für kristalline Strukturen, würde die experimentellen Daten erklären können.

3.3. Ionenimplantation in Galliumarsenid

3.3.1. Präparation der GaAs-Proben und TRIM-Simulation

Die Messungen an mit Sauerstoff-, Silizium-, Tellur- und Arsen-Ionen implantiertem Galliumarsenid wurden an undotierten, Zink-dotierten (p-Leitung, $p \approx 8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) und Tellur-dotierten (n-Leitung, $n \approx 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) Proben durchgeführt. Wie schon beim Silizium wurden alle Proben bei Raumtemperatur und unter einem Winkel von 7° zur $\langle 100 \rangle$ -Kristallrichtung implantiert. Um ein breiteres homogenes Defektprofil zu erhalten, wurden die meisten Proben nacheinander mit Ionen verschiedener Energie beschossen. Die entsprechenden Dosisverhältnisse wurden mit Hilfe von **TRIM**-Simulationen bestimmt. Jede **TRIM**-Simulation wurde mit

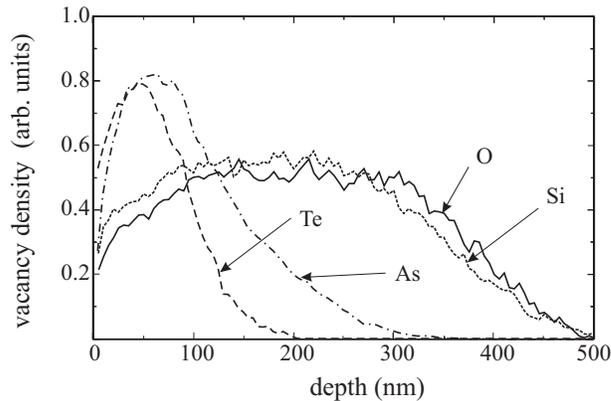


Abbildung 3.49: Die simulierten Defektverteilungen für die verschiedenen Implantate sind dargestellt. Die Kurven sind zur besseren Anschauung verschieden skaliert worden.

mindestens 2000 Ionen ausgeführt. Für alle Implantationen sind die **TRIM**-Ergebnisse in Abbildung 3.49 gezeigt. Auch hier wird deutlich, daß trotz der Erhöhung der Implantationsenergie die Eindringtiefe mit der Masse der Ionen abnimmt. In Tabelle 3.3 sind die Implantationsparame-

Tabelle 3.3: Implantationsparameter der Galliumarsenid-Proben

Implantat	Dosisbereich (cm^{-2})	Energien (keV)	Dosisverh.
Sauerstoff	$1 \times 10^{13} - 1 \times 10^{15}$	80, 200	0.2:1
Silizium	$1 \times 10^{13} - 1 \times 10^{15}$	100, 250	0.15:1
Tellur	$1 \times 10^{12} - 1 \times 10^{14}$	300	-
Arsen	$2 \times 10^{14} - 2 \times 10^{16}$	200, 400	0.5:1

ter für die einzelnen Implantationen in Galliumarsenid aufgelistet. Die Dosen überstreichen zwei Größenordnungen (5 Proben je Implantat). Zur Identifikation der Proben in der nachfolgenden Diskussion, wird die Ionendosis für die höchste Implantationsenergie als Dosis Φ bezeichnet.

Die Behandlung und Interpretation der an den Galliumarsenid-Proben gemessenen Daten ist komplizierter als das für Silizium der Fall war. Eine Auswertung der Diffusionsweglänge der Positronen in Oberflächennähe ist nicht möglich, weil die Differenzen der S -Parameter relativ klein sind und die Fehler der Ergebnisse der Anpassung sehr groß werden. Die Defektprofile sind durch die Diffusion von Defekten verschmiert. Weiterhin sind bei Raumtemperatur einige der entstandenen Defekte derart beweglich, daß es zu Langzeitveränderungen kommen kann (siehe

z.B. [Wei92]). Die Proben sind nach der Implantation im flüssigen Stickstoff bei einer Temperatur von 77 K aufbewahrt worden, um das vorzeitige Ausheilen von Defekten zu verhindern. Die Ausheiluntersuchungen der Proben wurde in-situ bei einem Druck von 10^{-6} Pa vorgenommen. Die maximale Ausheiltemperatur ist in den einfachen Experimenten ohne Probenabdeckung auf 800 K beschränkt. Der relativ hohe Arsen-Partialdruck [Art67] bewirkt bei höheren Temperaturen die Ausdiffusion von Arsen und eine Veränderung der Stöchiometrie des Kristalls.

In Abbildung 3.50 sind die $S(E)$ -Kurven von der bei verschiedenen Temperaturen getemperten undotierten Referenzprobe gezeigt. Die Diffusionsweglänge der Positronen in dieser Probe

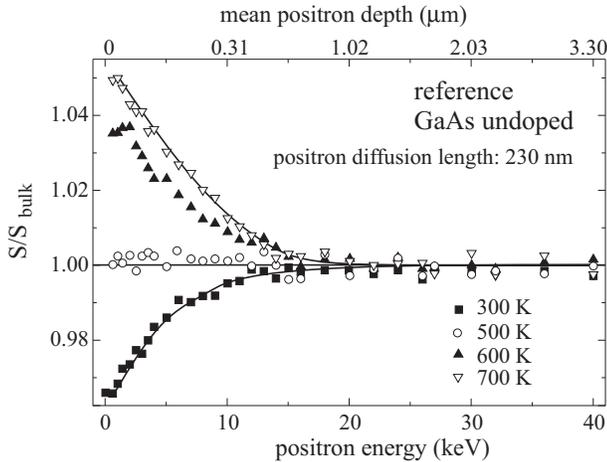


Abbildung 3.50: $S(E)$ -Kurven für getemperte GaAs-Referenzproben (undotiert). An der 300 K- und der 700 K-Kurve ist die Positronendiffusionsweglänge mittels **VEPFIT** angepaßt worden.

konnte in mehreren Anpassungen zu 230 ± 15 nm bestimmt werden. Das ist ein Wert, der mit anderen Messungen befriedigend übereinstimmt [Soi92, Sha96]. Die Probenoberfläche von undotiertem Galliumarsenid ist während der Temperung Modifikationen unterworfen, die sich in geänderten Annihilationsparametern zeigen. Zwischen 400 K und 700 K wird ein stetiges Ansteigen des Oberflächen- S -Parameters beobachtet. Im Gegensatz zur Silizium- bzw. Siliziumoxid-Oberfläche besitzt die Galliumarsenid-Oberfläche einen gleichbleibend hohen Positroneneinfangquerschnitt. Das heißt, daß bei der Interpretation der Daten an getemperten Proben der Einfluß der Oberfläche berücksichtigt werden muß. Es ist bemerkenswert, daß das Verhalten der Oberflächen von der Dotierung des Materials abhängt. In Abbildung 3.51 sind die S - W -Plots der

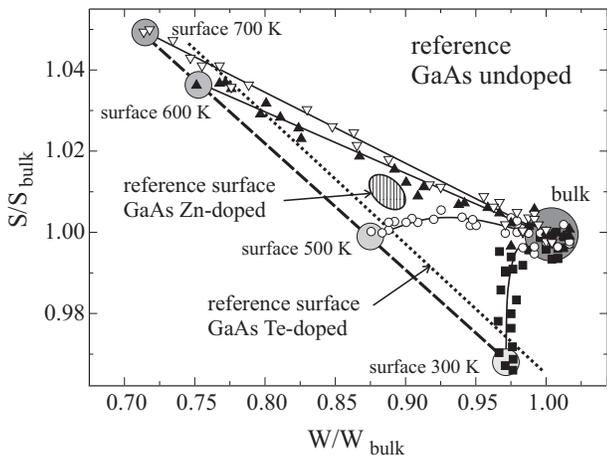


Abbildung 3.51: S - W -Plots für getemperte GaAs-Referenzproben (undotiert). Der Oberflächenzustand verändert sich derart, daß die paarweise aufgetragenen Annihilationsparameter (S , W) auf einer Geraden (gestrichelt) liegen. Die resultierende Gerade für die Tellur-dotierte Probe (gepunktet) sowie der stabile Zustand der Zink-dotierten Oberfläche (schraffiert) sind ebenfalls eingezeichnet.

getemperten undotierten GaAs-Referenzproben gezeigt. Der Oberflächenzustand verändert sich derart, daß die entsprechenden Datenpunkte (S , W) auf einer Geraden liegen. Dies ist ein Indiz für das Vorhandensein eines Oberflächenzustandes, der bei Temperung im Vakuum in einen anderen Zustand übergeht. Die Desorption einer Oberflächenbelegung liegt hier nicht vor, da diese schneller ablaufen und bei einer bestimmten Temperatur stattfinden sollte. Es könnte auch zu strukturellen Änderungen oder Stöchiometrieabweichungen an der Oberfläche kommen,

die sich in geänderten Annihilationsparametern niederschlagen. Die aus der S - W -Auftragung für die Oberfläche der Tellur-dotierten Probe resultierende Gerade charakterisiert ein ähnliches Verhalten. Die Oberfläche der Zink-dotierten Referenz scheint zumindest im Lichte der Positronenannihilation stabil zu sein. Die Annihilationsparameter der Oberfläche ändern sich während der Temperung nicht signifikant.

Die Defektidentifizierung mittels Positronenannihilation gestaltet sich in Galliumarsenid wegen der Vielzahl möglicher Defekte komplizierter als in Silizium. Lediglich die Annihilationsparameter für die Gallium-Leerstelle oder Komplexe mit der Gallium-Leerstelle sind gut bekannt. Sie wurden an der selben Anlage im Positronenlabor in Halle gemessen, so daß die direkte Vergleichbarkeit gewährleistet ist [Geb97b]. In Silizium-dotiertem GaAs entsteht im Gleichge-

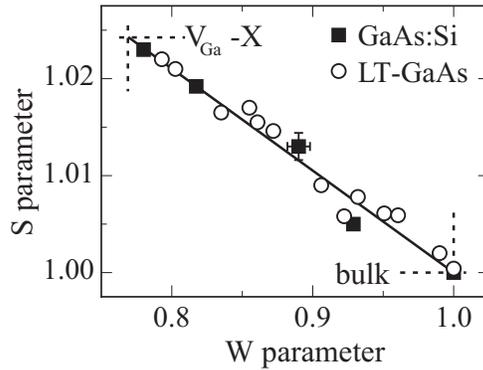


Abbildung 3.52: Typische S - W -Plots für Gallium-Leerstellen in Silizium-dotiertem GaAs und LT-GaAs werden gezeigt. (aus [Geb97b]).

wicht ein Defektkomplex aus Gallium-Leerstelle und Silizium-Atom auf Gallium-Platz, der als kompensierendes Zentrum wirkt. Das Silizium-Atom sitzt in diesem Komplex in Bezug auf die Gallium-Leerstelle auf dem übernächsten Gitterplatz, so daß es kaum einen Einfluß auf die Annihilationsparameter nimmt. Die Sättigung des Positroneneinfangs in den Defekt wurde bei einer Dotierungskonzentration von $4 \times 10^{19} \text{ Si cm}^{-3}$ mittels Positronenlebensdauerspektroskopie bestimmt. Hier konnten die Annihilationsparameter der Gallium-Leerstelle direkt gemessen werden (siehe Abbildung 3.52) [Geb97a]. Auch in LT-GaAs, das bei niedrigen Temperaturen mit einem Arsen-Überschuß gewachsen wird, entstehen abhängig von der Wachstumstemperatur Gallium-Leerstellen bzw. Komplexe, die eine Gallium-Leerstelle enthalten. Es werden die Annihilationsparameter der Gallium-Leerstelle beobachtet [Geb97b].

Nach Ionenimplantation in Galliumarsenid beobachtet man schwach und stark geschädigte Schichten [Wes93]. Leichte Ionen oder in geringen Dosen auch schwerere Ionen erzeugen abhängig von der Implantationstemperatur lediglich eine schwache Schädigung des Targetkristalls. Hier existieren keine ausgedehnten Defekte oder gar amorphe Gebiete. Für schwerere Ionen kommt es zur starken Überlappung von Defektkaskaden und zur Ausbildung amorpher Zonen bis hin zur vollständigen Amorphisierung. Die Defektentwicklung hängt sehr stark von der Implantationstemperatur ab, die bestimmt, in welchem Maße die Kristalldefekte beweglich sind und schon während der Implantation rekombinieren können.

3.3.2. Schwache Schädigung

Die Implantation von Sauerstoff im Dosisbereich von $1 \times 10^{13} \text{ O}^+ \text{cm}^{-2}$ - $1 \times 10^{15} \text{ O}^+ \text{cm}^{-2}$ führt zur schwachen Schädigung des Kristallgitters. Die relative auf die Atomzahl bezogene Schädigung im integrierten **RBS**-Signal ist in Abbildung 3.53 gezeigt. Sie nimmt mit der Dosis zu, ist jedoch weit entfernt von einer amorphen Schädigung. Nach dem Modell von HECKING (siehe Abschnitt 1.3.3) werden in diesem Bereich zunehmend Punktdefekte erzeugt. Die Positronenmessungen bestätigen dieses Bild. In Abbildung 3.54 sind die entsprechenden $S(E)$ -Kurven dargestellt. Der Oberflächen- S -Parameter wächst mit zunehmender Dosis. Entweder verändert sich die Oberfläche oder der Einfang in die Oberfläche ist auch für geringe Positronenenergien nicht dominierend. Der von der Existenz leerstellenartiger Defekte bestimmte S -Parameter für höhere Positronenenergien sinkt mit zunehmender Tiefe. S -Parameter-Plateaus, wie sie im geschädigten Silizium auftreten, sind nur andeutungsweise zu beobachten. Es kommt offenbar

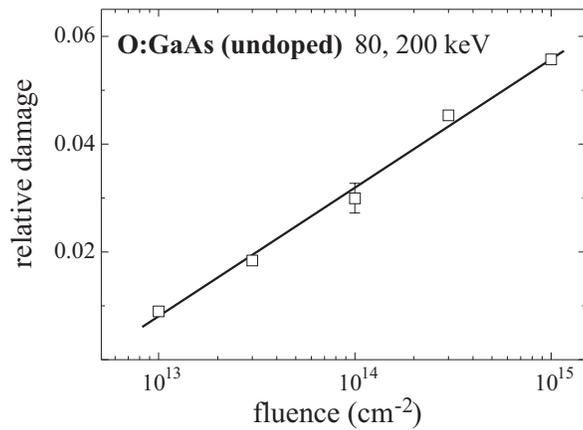


Abbildung 3.53: Die integrale Schädigung im Zwischengitterbereich nach Sauerstoff-Implantation wurde in Abhängigkeit von der Dosis gemessen und dargestellt.

nicht zur Ausbildung homogen geschädigter Schichten. Für höhere Positronenenergien (zwischen 12 und 20 keV) ist in allen Kurven eine Schulter im Verlauf des S -Parameters zu beobachten. Leerstellenartige Defekte scheinen schon während der Implantation in tieferliegende Gebiete auszudiffundieren. Im in Abbildung 3.55 dargestellten zusammenfassenden S - W -Plot wird die Zunahme der Konzentration leerstellenartiger Defekte mit wachsender Dosis nochmals deutlich. Weiterhin ist an der Lage der mittleren Annihilationsparametern der implantierten Schicht zu

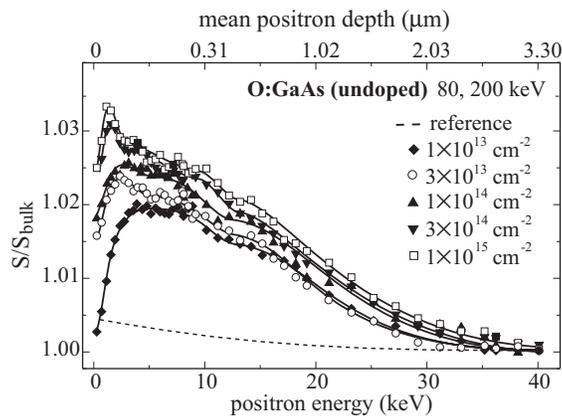


Abbildung 3.54: Die $S(E)$ -Kurven für mit verschiedenen Dosen Sauerstoff-implantiertes GaAs-Proben sind dargestellt. Die Schädigung steigt mit der Dosis an. Die Linien sind lediglich zur Verbesserung der Übersichtlichkeit eingezeichnet.

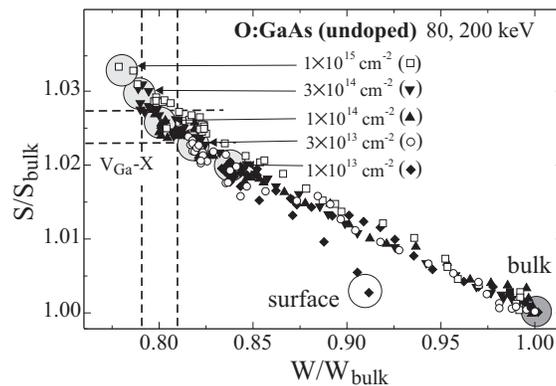


Abbildung 3.55: Die S - W -Plots für mit verschiedenen Dosen Sauerstoff-implantiertes GaAs-Proben zeigen, daß mit zunehmender Dosis die Konzentration der Gallium-Leerstellen wächst bzw. Doppelleerstellen gebildet werden.

sehen, daß der Positroneneinfang hauptsächlich in Defekte erfolgt, die eine Gallium-Leerstelle enthalten. Alle Datenpunkte liegen auf der entsprechenden Gerade im S - W -Plot. In undotiertem Material sollten die Leerstellen im Arsen-Untergitter positiv geladen sein. Sie sind damit für Positronen nicht sichtbar. Die in der Abbildung 3.55 durch Kreise gekennzeichneten Annihilationszustände in der gestörten Schicht lassen den Schluß zu, daß die Konzentration der Gallium-Leerstelle mit der Implantationsdosis zunimmt und daß sich für die höchsten Dosen in einem schmalen oberflächennahen Bereich sogar Defekte mit größerem offenen Volumen bilden. Diese Defekte werden durch einen höheren S - und einen niedrigeren W -Parameter gekennzeichnet. Es könnte sich hier um Doppelleerstellen handeln.

Die Ergebnisse der Ausheilexperimente spiegeln die Eigenschaften der Proben nach der Implantation wieder. Abhängig von der vorliegenden Defektkonzentration lagern sich mehr oder weniger Leerstellen zu Agglomeraten zusammen. In Abbildung 3.56 ist der mittlere S -Parameter der gestörten Schicht gegen die Ausheiltemperatur aufgetragen. Es wird deutlich, daß der An-

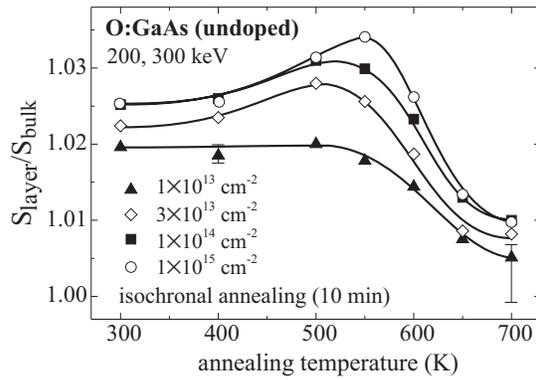


Abbildung 3.56: Die Schicht- S -Parameter von O-implantiertem GaAs sind als Funktion der Ausheiltemperatur dargestellt. Für zunehmende Implantationsdosis bzw. Kristallschädigung kommt es während der Ausheilung zur vermehrten Bildung von Leerstellenagglomeraten. Die Agglomerate heilen bei Temperaturen von etwa 600 K aus.

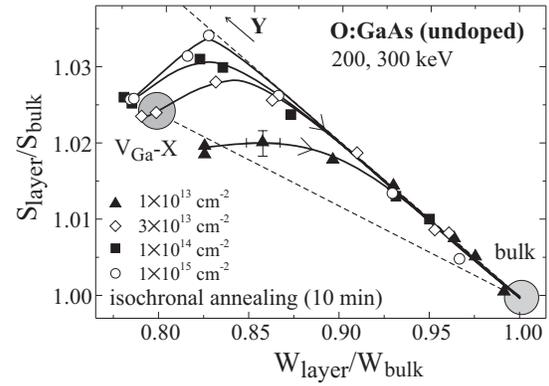


Abbildung 3.57: Die S - W -Trajektorien gehen während der Ausheilung von dem Zustand der Gallium-Leerstelle in einen Zustand über, der Leerstellenagglomeraten zugeordnet werden kann. Die Pfeile zeigen die Richtung von niedrigen zu hohen Ausheiltemperaturen.

stieg des S -Parameters ab etwa 400 K mit zunehmender Implantationsdosis größer wird. Es werden Defekte (**Y**) mit größerem offenen Volumen gebildet. Wie schon im Silizium agglomerieren die leerstellenartigen Defekte auch in GaAs abhängig von der Defektkonzentration im Ausgangszustand. Man sollte meinen, daß in der $1 \times 10^{13} \text{ O}^+ \text{ cm}^{-2}$ -implantierten Probe keine Agglomeration stattfindet, weil der S -Parameter hier nicht ansteigt. Jedoch zeigt der entsprechende S - W -Plot die Bildung der gleichen Agglomerate, die in den stärker geschädigten Proben entstehen, und außerdem heilen die Defekte bei derselben Temperatur von etwa 600 K aus. Der gleichbleibende S -Parameter ergibt sich eher zufällig, weil parallel zur Agglomeration auch Rekombinationsprozesse stattfinden und die Gesamtkonzentration des offenen Volumens sinkt. Alle S - W -Trajektorien gehen während der Ausheilung von dem Zustand der Gallium-Leerstelle in einen Zustand über, der Leerstellenagglomeraten **Y** zugeordnet werden kann. Der Positroneneinfang in diesen Defekt ist wahrscheinlich nicht gesättigt, und deshalb können die spezifischen Annihilationsparameter des Defekts nicht bestimmt werden. Wenn man berücksichtigt, daß im undotierten Material die Gallium-Leerstelle negativ geladen ist und die Arsen-Leerstelle eine positive Ladung trägt, so ist die Bildung einer Doppelleerstelle $V_{\text{Ga}}-V_{\text{As}}$ zumindest plausibel. Auch andere Autoren glauben, diesen Defekt in Ionen-implantiertem Galliumarsenid beobachtet zu haben [Wei92, Ued92b, Lee90].

Nach Silizium-Implantation von Galliumarsenid werden die gleichen Defekte wie im Sauerstoff-implantiertem Material beobachtet. Aus den **RBS**-Messungen konnte geschlossen werden, daß auch hier eine schwache Schädigung der Targets vorliegt.

3.3.3. Starke Schädigung

Eine starke Schädigung wurde durch die Implantation massereicherer Ionen, wie Tellur-Ionen ($1 \times 10^{12} \text{ Te}^+ \text{ cm}^{-2}$ - $1 \times 10^{14} \text{ Te}^+ \text{ cm}^{-2}$) und Arsen-Ionen ($2 \times 10^{14} \text{ As}^+ \text{ cm}^{-2}$ - $2 \times 10^{16} \text{ As}^+ \text{ cm}^{-2}$), erreicht. Die **RBS**-Ergebnisse für die Tellur-implantierten Proben sind in den Abbildungen 3.58 und 3.59 dargestellt. Bis zur Implantationsdosis von $1 \times 10^{13} \text{ Te}^+ \text{ cm}^{-2}$ bleibt die Schädigung nahezu konstant. Nach dem Modell von HECKING (siehe Abschnitt 1.3.3) besteht hier ein Gleichgewicht zwischen Defekterzeugung und Defektrekombination. Für höhere Dosen kommt es zur kollapsartigen Bildung amorpher Gebiete. Die starke Überlappung von Defektkaskaden führt dazu, daß sich das Kristallgitter während der Implantation nicht erholen kann. Schon nach Implantation von $3 \times 10^{13} \text{ Te}^+ \text{ cm}^{-2}$ ist die implantierte Schicht fast vollständig amorphisiert.

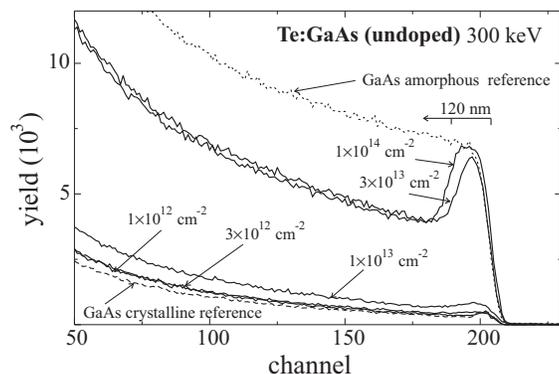


Abbildung 3.58: Die **RBS**-Spektren für die Te-implantierten GaAs-Proben zeigen die mit der Dosis zunehmende Schädigung des Kristalls bis hin zur Amorphisierung der implantierten Schicht.

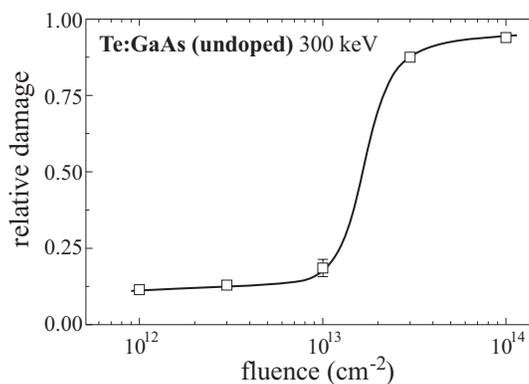


Abbildung 3.59: Die Dosisabhängigkeit des relativen Anteils von verlagerten Atomen nach Te-Implantation in GaAs aus **RBS**-Messungen ist dargestellt.

Die dazugehörigen Positronenmessungen ($S(E)$ -Kurven) sind in Abbildung 3.60 dargestellt. Die Schädigung nach Implantation geringer Dosen ist vergleichbar mit der nach Sauerstoff-Implantation beobachteten. Im Bereich der implantierten Schicht (bis in 120 nm Tiefe) erhöht sich der S -Parameter mit der Dosis deutlich. Für höhere Positronenenergien zeigt sich in allen Tellur- und undotierten Proben eine Schulter in Verlauf des S -Parameters. Hier werden offenbar Defekte beobachtet, die aus der geschädigten Schicht ausdiffundiert und in tieferliegenden Regionen durch Komplexbildung stabilisiert worden sind. Die Daten der mit den drei höchsten Dosen implantierten Proben wurden an ein Dreischichtmodell mit **VEPFIT** angepaßt (erste Schicht: starke Schädigung durch Implantation, zweite Schicht: ausdiffundierte Defekte, dritte Schicht: ungestörter Kristall). Die Diffusionsweglänge der Positronen im ungestörten Volumen (230 nm) sowie die Dicke der Implantationsschicht (120 nm) wurden dabei festgehalten. Die

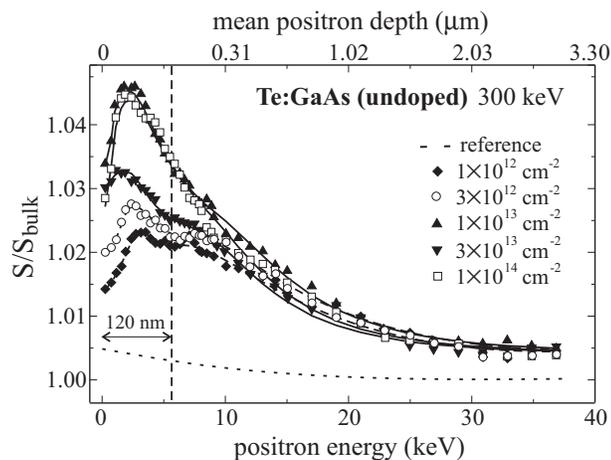


Abbildung 3.60: Die $S(E)$ -Kurven für mit verschiedenen Dosen Te-implantiertes GaAs zeigen einen drastischen Anstieg des S -Parameters für die amorphisierten Proben. Die Linien ergaben sich aus Anpassungen mit einem Modell, das zwei defektreiche Schichten mit unterschiedlichen Diffusionsweglängen enthält.

ausdiffundierten Defekte erreichen Tiefen bis zu einem μm , wobei eine genauere Tiefenangabe nicht gemacht werden kann, da in dem vereinfachten Modell homogene Defektverteilungen innerhalb der Schichten angenommen werden, was zumindest für die ausdiffundierten Defekte wahrscheinlich nicht zutrifft. In der Abbildung 3.61 sind die S - W -Plots für alle Te-implantierten Proben zusammenfassend dargestellt. Die beiden schwach implantierten Proben (\blacklozenge und \circ) zeigen Anihilationsparameter, die auf der Geraden zwischen den Parametern der Gallium-Leerstelle ($V_{\text{Ga}}-X$) und des ungestörten Kristalls (bulk) liegen. Danach ändert sich der in der geschädigten

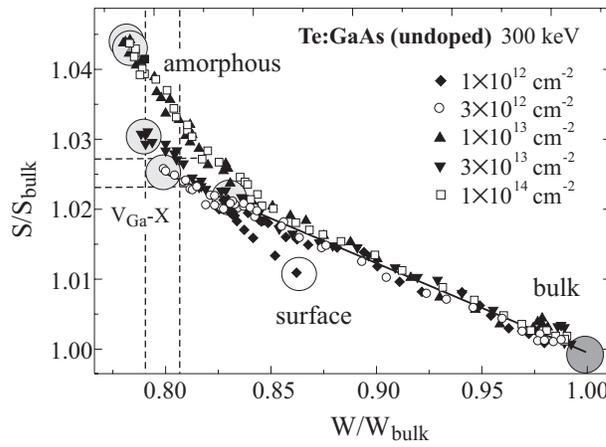


Abbildung 3.61: Die S - W -Plots für mit verschiedenen Dosen Te-implantiertes GaAs zeigen, daß zunächst Gallium-Leerstellen erzeugt werden und dann mit der Dosis zunehmend amorphe Gebiete entstehen. Die ausdiffundierenden Defekte können als Gallium-Leerstellen identifiziert werden.

Schicht gemessene Annihilationszustand drastisch. Der S -Parameter für amorphes Galliumarsenid liegt offenbar höher als der für Einfach- oder Doppelleerstellen. Die Änderung im W -Parameter ist etwas geringer. Die S - W -Trajektorien laufen aber immer wieder auf der Geraden zwischen $(V_{Ga} - X)$ und (bulk) ein. Die ausdiffundierten Defekte sollten Gallium-Leerstellen sein, oder Komplexe, die eine Gallium-Leerstelle enthalten.

Untersucht man die Schädigung in identisch implantiertem aber unterschiedlich dotiertem Substratmaterial (undotiert, Te-dotiert, Zn-dotiert), so findet man im **RBS**-Experiment keine signifikanten Unterschiede. Die Annihilationsparameter, die man mit Positronen in der implantierten Schicht mißt, sind ebenfalls identisch. Ausdiffundierte Defekte sind jedoch nur in Tellur- und undotiertem Material zu beobachten. In Abbildung 3.62 sind die entsprechend S - W -Plots am Beispiel der $1 \times 10^{14} \text{ Te}^+ \text{ cm}^{-2}$ implantierten Probe vergleichend dargestellt. Während die S - W -Trajektorie für Tellur- und undotiertes Material auf der $(V_{Ga} - X)$ -(bulk)-Geraden einläuft, liegt sie im Zink-dotiertem Material auf der Gerade zwischen amorphem Zustand und (bulk)-Zustand. Das heißt, daß hier kein signifikanter Positroneneinfang in ausdiffundierte Defekte stattfindet.

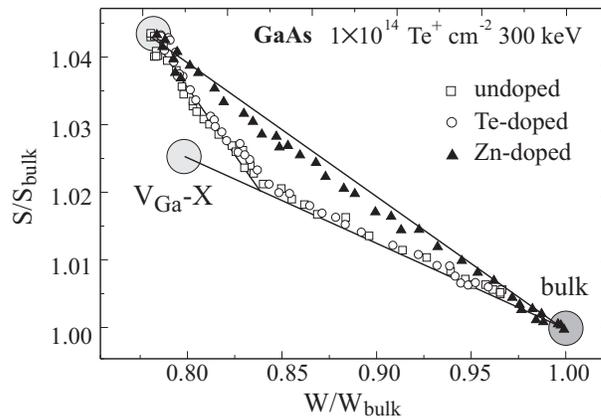


Abbildung 3.62: Der Vergleich der S - W -Plots nach Te-Implantation in verschiedenen dotierten Substraten macht deutlich, daß die ausdiffundierenden Defekte in Zink-dotiertem Material nicht zu beobachten sind.

Am Beispiel der Arsen-implantierten Proben soll dieses Verhalten etwas näher beleuchtet werden. Im **RBS**-Experiment konnte gezeigt werden, daß in diesen Proben eine etwa 180 nm dicke amorphe Schicht erzeugt wurde. Dabei zeigten sich keine Unterschiede für die verschiedenen Substratdotierungen. In Abbildung 3.63 ist exemplarisch ein **RBS**-Spektrum einer solchen Probe im Vergleich zu einer amorphen und einer kristallinen GaAs-Probe dargestellt. In den Abbildungen 3.64 und 3.65 sind die üblichen $S(E)$ - bzw. S - W -Darstellungen für die Arsen-Implantation in verschieden dotiertes Substratmaterial gezeigt. Signifikante Unterschiede ergeben sich für die Defektausdiffusion. In Tellur- und undotiertem Material werden hinter der implantierten Schicht Gallium-leerstellenartige Defekte beobachtet. Im Zink-dotiertem Material sind sie dagegen nicht sichtbar. Eine Anpassungen der Daten aus Abbildung 3.64 mittels **VEPFIT** ergab für die implantierte Schicht in allen drei Proben eine Dicke von etwa 150 nm,

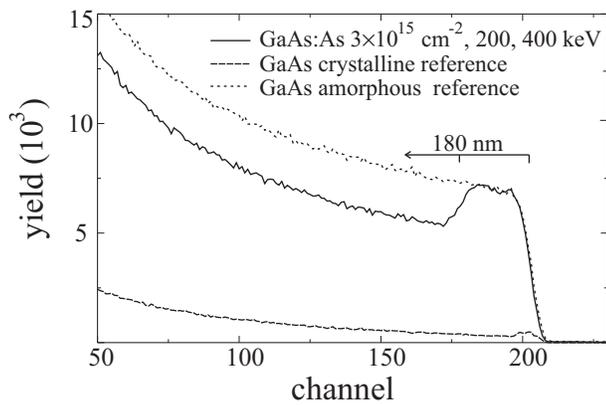


Abbildung 3.63: Das **RBS**-Spektrum einer As-implantierten GaAs-Probe ist mit amorphen und kristallinen Referenzspektren verglichen.

was befriedigend mit den **RBS**-Resultaten (180 nm) übereinstimmt. Die ausdiffundierten Defekte in den Tellur- und undotierten Proben reichen bis in eine Tiefe von etwa 1.2 μm . Diese Tiefenangabe ist stark fehlerbehaftet, da zur Anpassung eine konstante Defektkonzentration angenommen werden muß. Das Profil der ausdiffundierenden Defekte ist wahrscheinlich nicht kastenförmig. Die näherungsweise bestimmte mittlere Positronendiffusionsweglänge von etwa 130 nm erlaubt wegen der vereinfachenden Annahmen nur eine grobe Abschätzung der mittleren Konzentration der ausdiffundierten Defekte. Geht man von der einer Positronenlebensdauer im ungestörten Kristall von 228 ps [Saa91, Kra94] und von einem spezifischen Einfangkoeffizienten für eine Leerstelle in GaAs bei Raumtemperatur von etwa $1 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ [Kra97] aus, so ergibt sich nach Gleichung (2.2.25) eine mittlere Konzentration der ausdiffundierten Defekte von $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

Es gibt zwei Erklärungen für diese von der Dotierung des Targets abhängigen Effekte. Aus Diffusionsexperimenten ist bekannt, daß sich die Diffusionsmechanismen abhängig von der Lage des FERMI-Niveaus ändern. In intrinsischem bzw. n-leitendem Material wird die Diffusion von Dotanden und die Selbstdiffusion über dreifach negativ geladene Gallium-Leerstellen vermittelt [Dab94, Gös91]. Deren Gleichgewichtskonzentration steigt auch mit zunehmender n-Leitung [Tan93, Tan94]. In p-dotiertem Material dagegen läuft die Diffusion hauptsächlich

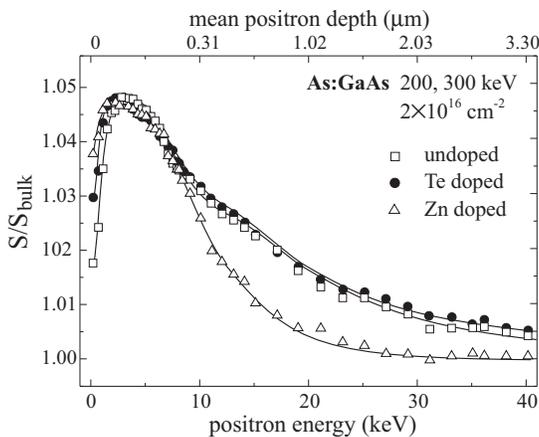


Abbildung 3.64: Die in tieferliegende Gebiete diffundierten Defekte sind anhand der $S(E)$ -Kurven nur für die Tellur- und die undotierte Probe zu beobachten. Die eingezeichneten Linien entsprechen den besten Anpassungen mittels **VEPFIT**.

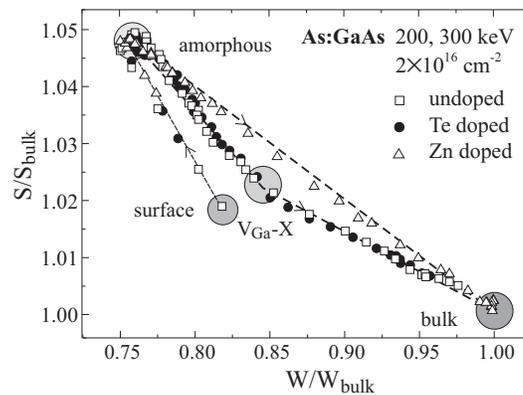


Abbildung 3.65: Im Gegensatz zu den Tellur- und undotierten Proben zeigt die Zink-dotierte Probe im S - W -Plot keinen signifikanten Positroneneinfang in Gallium-Leerstellen. Die Pfeile zeigen den Kurvenverlauf in Richtung zunehmender Tiefe an.

unter Beteiligung von zweifach positiven Gallium-Zwischengitteratomen ab [Gös91]. Die Gleichgewichtskonzentration der Gallium-Leerstellen ist hier sehr niedrig. Da die effektive Diffusionskonstante der Selbstdiffusion proportional zur Gleichgewichtskonzentration der Punktdefekte ist, könnten die Unterschiede in der Gleichgewichtskonzentration und den Diffusionsmechanismen eine Erklärung für das besondere Verhalten der Zink-dotierten Probe sein. Andererseits sind im hoch p-dotierten Material wahrscheinlich sowohl die Gallium-Leerstellen als auch die Arsen-Leerstelle positiv geladen und somit für Positronen nicht detektierbar. So wurde z.B. in relativ niederenergetisch (0.55 MeV) elektronenbestrahltem Zink-dotiertem Galliumarsenid die Ladungsträgerkonzentration höher als vor der Bestrahlung. Leerstellenartige Defekte, die höchstwahrscheinlich erzeugt worden sind, waren nicht detektierbar [Pol97]. Auch in mit geringen Dosen Beryllium-implantiertem p-Typ-Material wurden im Gegensatz zur n-leitenden Probe keine leerstellenartigen Defekte beobachtet [Ued92b]. Die Ausheilung der durch die Im-

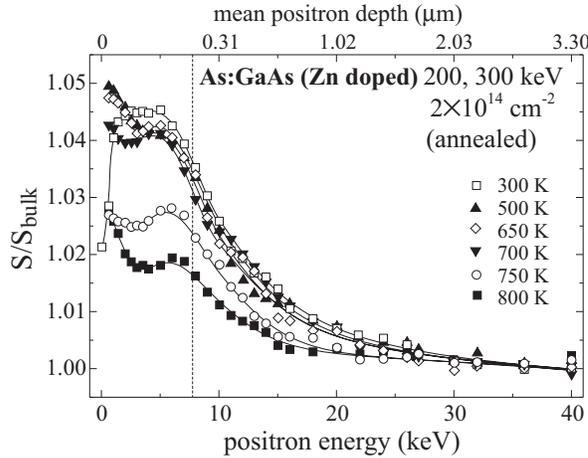


Abbildung 3.66: Die $S(E)$ -Kurven der durch Arsen-Implantation in ein p-GaAs-Substrat amorphen Schichten sind nach verschiedenen Ausheilschritten dargestellt. Die Linien sind das Ergebnis von Anpassungen, die eine konstante Schichtdicke ergeben.

plantation erzeugten amorphen Schicht kann gut an Zink-dotiertem Galliumarsenid untersucht werden, da hier die ausdiffundierten Defekte keine Rolle im Positronenexperiment spielen. In Abbildung 3.66 sind ausgewählte $S(E)$ -Kurven nach verschiedenen Ausheilschritten gezeigt. Zunächst ändern sich die Kurven kaum, bis dann bei 750 K der S -Parameter in der implantierten Schicht abnimmt. Eine Anpassung der Daten mittels **VEPFIT** ergab eine in Rahmen der Fehler konstante Schichtdicke. Eine Ausdiffusion von Defekten oder eine signifikante Abnahme der Schichtdicke, wie beispielsweise in Silizium, ist nicht zu beobachten. Das mehr oder weniger ausgeprägte Minimum des S -Parameters in Oberflächennähe ist ein Indiz dafür, daß einige wenige Defekte zur Oberfläche diffundieren und dort annihilieren. Die Oberflächen von Festkörpern sind i.a. Senken für Punktdefekte. Der S - W -Plot in Abbildung 3.68 zeigt, daß schon bei niedrigeren Ausheiltemperaturen bis 500 K eine Änderung der Defektstruktur stattfindet. Es könnte sich um die Rekristallisation der amorphen Schicht handeln, die leerstellenartige Agglomerate (**A**) zurückläßt. Die Rekristallisation ähnlich implantierter Schichten wurde bei 500 K auch von CLAVERIE und FUJIOKA mittels Röntgen-Methoden beobachtet [Cla95, Fuj95b]. Die bei der Rekristallisation entstehenden Agglomerate (**A**) heilen bei etwa 750 K in einer relativ scharfen Stufe aus, d.h. sie sind thermisch stabiler als die Defekte (**Y**), die bei der Ausheilung der Sauerstoff-implantierten Proben beobachtet wurden. Die Frage, durch welchen Prozeß die Ausheilung vonstatten geht, kann nicht eindeutig beantwortet werden. Die Agglomerate könnten zerfallen und die entstehenden Leerstellen könnten ausdiffundieren. Der eine Gallium-Leerstelle enthaltende stabile Defektkomplex könnte wie die Arsen-Leerstellen dann positiv geladen und nicht sichtbar sein. Eine andere Möglichkeit wäre die Eindiffusion von Zwischengitteratomen, die bei den entsprechenden Temperaturen bei Zerfall von Defekttagglomeraten frei werden könnten. Es ist bekannt, daß z.B. die Gallium-Zwischengitteratome in p-dotiertem GaAs für die Diffusion der Dotanden Zink, Beryllium und Magnesium verantwortlich sind [Gös91].

Wenn man die Ausheilung der amorphen Schicht in der undotierten Probe beobachtet, so zeigt sich ein weitaus komplizierteres Verhalten. In der Abbildung 3.69 werden die $S(E)$ -Kurven

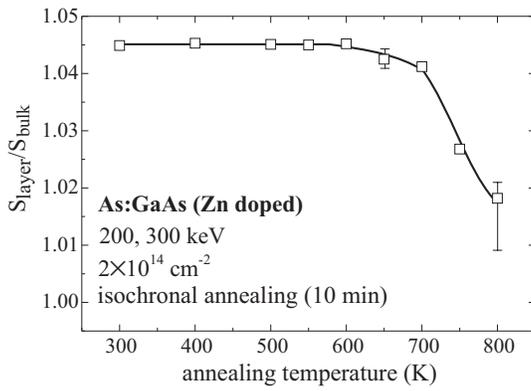


Abbildung 3.67: Der Schicht- S -Parameter als Funktion der Ausheiltemperatur zeigt die einfache Ausheilstufe der nach der Rekristallisation entstandenen Leerstellen-Agglomerate bei etwa 750 K.

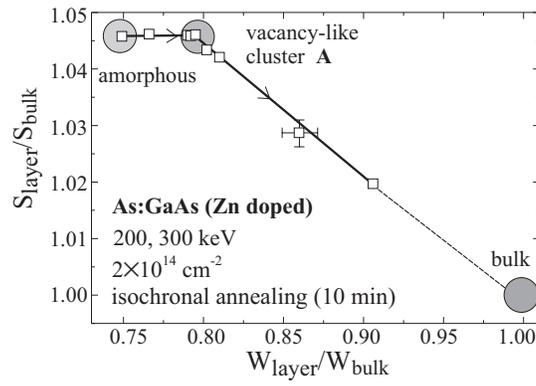


Abbildung 3.68: Die Annihilationsparameter in der implantierten Schicht S und W sind gegeneinander aufgetragen. Es zeigt sich eine Änderung der Defektstruktur bei etwa 500 K und die Ausheilung von Leerstellen-Agglomeraten (A) bei 750 K.

für verschiedenen Ausheilstufen dargestellt, und Abbildung 3.70 zeigt die dazugehörigen S - W -Plots. Nach der Rekristallisation der amorphen Schicht bei etwa 500 K hat sich das S -Parameter-Maximum weiter in die Tiefe verlagert und es bildet sich, wie schon bei der Zink-dotierten Probe, ein S -Parameter-Minimum nahe der Oberfläche. Dieses Verhalten kann mit einer Änderung des

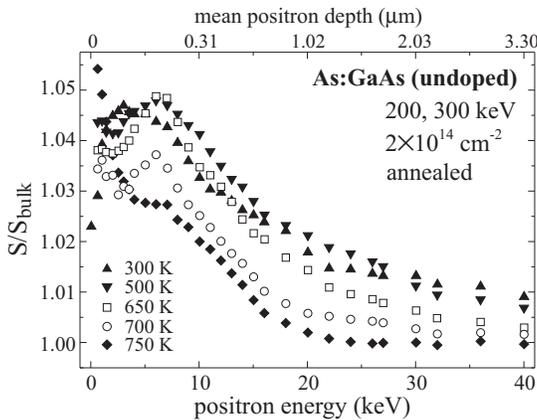


Abbildung 3.69: Die $S(E)$ -Kurven der durch Arsen-Implantation in ein undotiertes GaAs-Substrat nach verschiedenen Temperschritten charakterisieren ein sehr komplexes Ausheilverhalten.

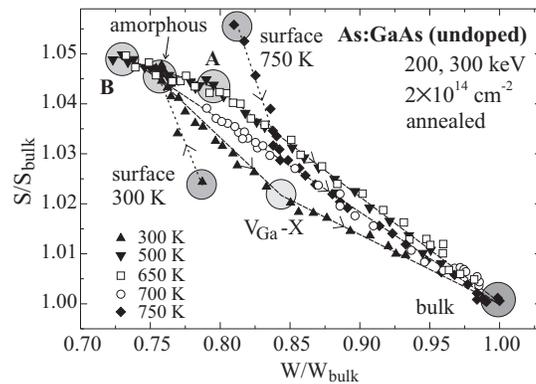


Abbildung 3.70: Die kompletten S - W -Plots nach verschiedenen Ausheilsschritten einer amorphen Schicht in undotiertem GaAs zeigt ein gegenüber der Zink-dotierten GaAs-Probe geändertes Verhalten. Die Linien folgen dem Verlauf der Kurve mit zunehmender Tiefe.

Schädigungsprofils durch Defektdiffusion zusammenhängen. Die bei der Rekristallisation freierwerdenen leerstellenartigen Defekte könnten sowohl zur Oberfläche als auch ins Innere des Kristalls diffundieren. An der Oberfläche verschwinden die Defekte, in tieferen Regionen bilden sich stabile Defekte, und der S -Parameter erhöht sich dort leicht. In den S - W -Plots ist eine Änderung der Defekttypen zu erkennen. Während nach der Implantation im vorderen Bereich die amorphe Schicht und tieferliegend galliumleerstellen-artige durch Ausdiffusion entstandene Defekte zu beobachten sind, scheinen sich nach Ausheilung bei 500 K verschiedene leerstellenartige Agglomerate zu bilden. Die amorphe Schicht sollte rekristallisiert sein, hier bleiben jedoch andere Defekte (B) (siehe Abbildung 3.70) als in der Zn-dotierten Probe (A) (siehe auch Abbildung 3.68)

zurück. Die entsprechenden Annihilationsparameter, insbesondere die W -Parameter, unterscheiden sich deutlich voneinander. Die Annihilationsparameter der in tieferen Schichten zerstrahlten Positronen liegen nahe den Geraden, die charakteristisch für die Leerstellenagglomerate (**A**) in der Zn-dotierten Probe bzw. für die schon in getemperten Sauerstoff-implantierten Proben beobachteten Defekte (**Y**) sind (siehe auch Abbildung 3.71). Die nach Ausdiffusion entstandenen Defektkomplexe beginnen jedoch bei etwa 600 K auszuheilen, deshalb liegt die Identifizierung als Defekt **Y** nahe, sie ist jedoch nicht sicher. Die Leerstellenagglomerate in der rekristallisierten

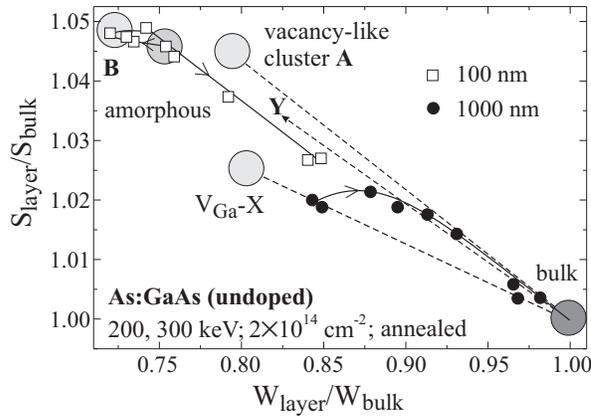


Abbildung 3.71: Die $S(E)$ -Kurven der durch Arsen-Implantation amorphisierten GaAs-Schichten sind nach verschiedenen Ausheil-schritten dargestellt. Die Linien folgen der Ausheiltemperatur.

Zone (**B**) beginnen bei etwa 700 K auszuheilen. Das heißt, daß sich die Defekte (**A**) und (**B**) auch in ihrer Ausheiltemperatur etwas unterscheiden. Das Aufstellen mikroskopischer Modelle der beobachteten Defekte ist beim derzeitigen Wissensstand nicht möglich. Erschwerend für die Defektidentifizierung kommt hier hinzu, daß einige die Defekte charakterisierenden Geraden im S - W -Plot sehr dicht beieinander liegen, und gerade bei ungesättigtem Positroneneinfang ist die Zuordnung der Defekte kaum möglich. In den Abbildungen 3.69 und 3.70 wird außerdem deutlich, daß der zunehmende Einfluß der Oberfläche ab 750 K die Bestimmung der Annihilationsparameter in der Schicht erschwert. Andererseits wird auch klar, daß die Positronendiffusionsweglänge in der gestörten Schicht zu- und der Einfang in Defekte abnimmt.

3.3.4. Zusammenfassung der Experimente am GaAs

In Galliumarsenid wurden leerstellenartige Defekte in einem weiten Schädigungsbereich untersucht.

In schwach geschädigtem Sauerstoff- und Silizium implantiertem Galliumarsenid dominiert der Positroneneinfang in Gallium-Leerstellen oder Komplexe mit Gallium-Leerstellen. Nach der Temperung der Sauerstoff-implantierten Proben bei etwa 500 K bilden sich abhängig von der Defektkonzentration im implantierten Zustand mehr oder weniger Leerstellenagglomerate, die bei einer Temperatur von etwa 600 K ausheilen. Es könnte sich hierbei um Doppelleerstellen handeln.

Der Übergang von der schwachen Schädigung bis zur Amorphisierung des Targetmaterials wurde am Beispiel der Tellur-Implantation gezeigt. Innerhalb eines schmalen Dosisbereiches kann man die qualitative Änderung der Defektstrukturen beobachten. Zunächst entstehen Punktdefektkomplexe mit einer Gallium-Leerstelle (die Leerstelle im Arsen-Untergitter ist für Positronen nicht sichtbar). Nach der Implantation einer kritischen Dosis kommt es zur Abbildung amorpher Gebiete. Dieses Verhalten ist für III-V-Halbleiter bekannt und kann mit einem Modell von HECKING beschrieben werden.

In intrinsischem oder n-leitendem Galliumarsenid wurden leerstellenartige Defekte auch in tieferen Regionen beobachtet, die sich nach Ausdiffusion der Gallium-Leerstelle während der Implantation gebildet haben müssen. In p-dotiertem Material sind diese Defekte nicht zu beobachten, weil entweder die Gallium-Leerstellen nicht ausdiffundieren oder aber weil die entstandenen Defektkomplexe hier positiv geladen und damit nicht detektierbar sind.

Die Rekristallisation von amorphen Galliumarsenid-Schichten wird bei etwa 500 K beobachtet. Es bleiben dabei leerstellenartige Agglomerate zurück, die zwischen 700 und 750 K ausheilen.

Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde versucht, leerstellenartige Defekte nach Ionenimplantation in Halbleitern *systematisch* zu studieren. Die Variation der Implantationsdosis gestattete es, die Defektentwicklung mit zunehmendem Energieeintrag sowie das Ausheilverhalten der Schädigung bei unterschiedlichen Ausgangskonzentrationen leerstellenartiger Defekte zu untersuchen. Dabei wurden neben defektphysikalischen Erkenntnissen auch methodische Einsichten gewonnen.

Die Positronenstrahltechnik eignet sich prinzipiell zur Untersuchung leerstellenartiger Defekte in Oberflächennähe. Wegen der geringen Tiefenauflösung sollten die Proben jedoch speziell präpariert werden, um konkrete Aussagen zu Defekttypen und deren Verteilung treffen zu können. Die konsequente Anwendung der *S-W*-Analyse verbessert die Aussagekraft der Methode bezüglich der auftretenden Defekttypen deutlich. Der Vergleich mit Ergebnissen anderer Methoden an den gleichen Proben ist für die Interpretation der Positronendaten unerlässlich. Der Wert des normierten *S*- bzw. *W*-Parameter ist zwar prinzipiell defektspezifisch, die unterschiedlichen Energieauflösungen der verschiedenen Detektorsysteme beeinflusst jedoch diese Größen. Ein Vergleich der Daten ist nur unter Berücksichtigung dieser Tatsache zulässig. Mit ein und demselben Detektorsystem gemessene Annihilationsparameter sind defektspezifisch. Die systematische Beobachtung des Ausheilverhaltens liefert im Vergleich mit den Ergebnissen anderer Methoden weitere Informationen zum Typ und zur Konzentration der Defekte im Ausgangszustand.

Bei der Anpassung von Schädigungstiefen in Silizium mit dem Programm **VEPFIT** wurden systematische Fehler gefunden, die auf die Näherung von Kastenprofilen zurückzuführen sind. Die Annahme einer trapezförmigen Defektverteilung ermöglichte eine Modellierung der Anpassungsergebnisse, die zu physikalisch sinnvollen Resultaten führt.

Zu leerstellenartigen Defekten nach Ionenimplantation in Silizium gibt es bereits eine Reihe von Arbeiten. Hier konnte ein wesentlicher Beitrag zur Systematisierung und Konkretisierung der Ergebnisse geliefert werden.

Durch die Kombination von **VEPAS** und **IR**-Spektroskopie sowie durch Ausheilexperimente wurde gezeigt, daß für leichte Implantate (Bor und Kohlenstoff) von mittleren Dosen an neben Doppelleerstellen auch größere leerstellenartige Agglomerate entstehen.

Die Dosisabhängigkeit der Schädigung sowohl im Zwischengitter (gemessen mittels **RBS**) als auch in Form leerstellenartiger Defekte (gemessen mittels **VEPAS**) in Silizium konnte mit einem Modell nach CHADDERTON in Einklang gebracht werden. Für die Silizium-Selbstimplantation wurde dieses Modell erweitert und die verstärkte Rekombination von Punktdefekten durch die zusätzlich eingebrachten Silizium-Atome berücksichtigt.

Die Experimente zur Ausheilung der leerstellenartigen Defekte in Silizium wurden vom Wechselspiel der Rekombination und Agglomeration bestimmt. In sogenannten offenen Nichtgleichgewichtssystemen ist die Ausgangskonzentration der Defekte entscheidend für die Agglomerationswahrscheinlichkeit.

Weiterhin wurden in Czochralski-Silizium Defektkomplexe von Leerstellen mit Sauerstoff sowie mit Bor und Sauerstoff beobachtet. Diese Defekte zeichnen sich durch besondere Annihilationsparameter der Positronen aus.

Nach der mittels Raman-Spektroskopie nachgewiesenen thermischen Rekristallisation amorpher Schichten wurde die Bildung stabiler Leerstellenagglomerate beobachtet. Der Überschuß an offenem Volumen in der amorphen Phase kondensiert während des Prozesses der

Festphasenepitaxie.

An Germanium-Proben wurden Experimente zur **IBIEC** amorpher Schichten durchgeführt. Auch hier konnte neben der **IBIEC**-Schädigung selbst das Zurückbleiben leerstellenartiger Defekte nach der Rekristallisation und deren Ausheilverhalten beobachtet werden. Auch hier konnten **RBS**- und **VEPAS**-Daten miteinander verglichen werden.

Mit der systematischen Untersuchung leerstellenartiger Defekte nach Ionenimplantation in Galliumarsenid wurde im Rahmen dieser Arbeit erst begonnen. Die Interpretation der Ergebnisse ist wegen der Vielzahl der möglichen Defekte schwierig. Trotzdem konnten einige interessante Effekte beobachtet werden.

Schwach geschädigte Proben zeigen leerstellenartige Defekte, die eine Gallium-Leerstelle enthalten. Diese Defekte sind thermisch bis etwa 500 K stabil bevor sich größere Komplexe bilden, die ihrerseits bei etwa 600 K ausheilen.

Die kollapsartige Bildung amorpher Strukturen wurde in einem schmalen Dosisbereich in Tellur-implantierten Galliumarsenid beobachtet. Zunächst entstehen Punktdefekte, die sich zu Komplexen zusammenlagern können. Deren Konzentration ist nahezu unabhängig von der Implantationsdosis, weil sich ein Gleichgewicht zwischen Defekterzeugung und -rekombination einstellt. Erst nach der Implantation einer kritischen Dosis kommt es zur Ausbildung amorpher Gebiete.

Die während der Implantation stattfindende Ausdiffusion von Gallium-Leerstellen in tiefere Regionen konnte in undotiertem oder n-leitendem Galliumarsenid beobachtet werden. Dort haben sich bei Raumtemperatur stabile Komplexe gebildet, die nachgewiesen werden konnten. In p-dotiertem Material sind diese Defekte nicht zu beobachten, weil entweder die Gallium-Leerstellen nicht ausdiffundieren oder aber weil die entstandenen Defektkomplexe hier positiv geladen und damit mit Positronen nicht detektierbar sind.

Die Rekristallisation von amorphen Galliumarsenid-Schichten bei etwa 500 K macht sich in geänderten Annihilationsparametern der Positronen bemerkbar. Es bleiben leerstellenartige Agglomerate zurück, die zwischen 700 und 750 K ausheilen.

Die Ergebnisse dieser Arbeit lassen hoffen, daß weitere systematische Untersuchungen von Implantationsschäden in Halbleitern unter Verwendung langsamer Positronen folgen. Die Verbesserung des experimentellen Aufbaus durch die Anwendung der koinzidenten Messung von DOPPLER-Spektren in Verbindung mit theoretischen Fortschritten bei der Berechnung dieser Spektren sollte die Möglichkeiten und die Aussagekraft der Methode steigern. In einigen Fällen wird die direkte Identifizierung von Defekten möglich sein. Gerade in Verbindungshalbleitern, in denen die Vielzahl der möglichen Defektkonfigurationen existiert, kann man neue und weiterführende Erkenntnisse erwarten.

Die systematische Variation von weiteren Implantationsparametern (z.B. Dosisrate, Implantationstemperatur) geben zu der Hoffnung Anlaß, experimentellen Zugang zu den Anfangsstadien der Implantationsschädigung zu finden und die Ergebnisse mit existierenden Modellrechnungen zu vergleichen. Weiterhin kann man versuchen, Prozesse der Agglomeration und Rekombination von Defekten in offenen Nichtgleichgewichtssystemen zu simulieren und die Ergebnisse mit den experimentellen Befunden zu vergleichen.

In Galliumarsenid und anderen Verbindungshalbleitern scheint es vielversprechend zu sein, Dotierungsabhängigkeiten der Positronenmessungen weiter zu untersuchen. Die Variation der Lage des FERMI-Niveaus könnte Aufschluß über Umladungsniveaus von einigen Defekten geben. Hier sollte in speziellen Fällen die Möglichkeit der optischen Umladung der Defekte studiert werden. Die beobachtete Diffusion von Nichtgleichgewichtsdefekten im Galliumarsenid ist sehr interessant. Temperaturabhängige Implantationen würden Aussagen zum elementaren Diffusionsprozeß von Leerstellen in Galliumarsenid erwarten lassen.

Literaturverzeichnis

- [AK94] P. Asoka-Kumar, K.G. Lynn, D.O. Welch. Characterization of defects in Si and SiO₂-Si using positrons. *J. Appl. Phys.*, 76(9):4935 – 4982, 1994.
- [AK96] P. Asoka-Kumar, M. Alatalo, V.J. Ghosh, A.C. Kruseman, B. Nielsen, K.G. Lynn. Increased elemental specificity of positron annihilation spectra. *Phys. Rev. Lett.*, 77(10):2097, 1996.
- [Ala95] M. Alatalo, H. Kauppinen, K. Saarinen, M.J. Puska, J. Mäkinen, P. Hautojärvi, R.M. Nieminen. Identification of vacancy defects in compound semiconductors by core-electron annihilation: application to InP. *Phys. Rev. B*, 51(7):4176, 1995.
- [Ala96] M. Alatalo, B. Barbiellini, M. Hakala, H. Kauppinen, T. Korhonen, M. J. Puska, K. Saarinen, P. Hautojärvi, R. M. Nieminen. Theoretical and experimental study of positron annihilation with core electrons in solids. *Phys. Rev. B*, 54(4):2397, 1996.
- [Art67] M. Arthur. Vapor pressures and phase equilibria in the Ga-As system. *J. Phys. Chem. Solids*, 28:2257–2267, 1967.
- [Ava94] V. Avalos, S. Dannefaer. Positron-annihilation investigation of vacancy agglomeration in electron-irradiated float-zone silicon. *Phys. Rev. B*, 76(9):4935 – 4982, 1994.
- [Bar85] G.A. Baraff, M. Schlüter. Electronic structure, total energies, and abundances of the elementary point defects in GaAs. *Phys. Rev. Lett.*, 55:1327, 1985.
- [Ber92] Bergmann - Schaefer. *Lehrbuch der Experimentalphysik, Band 6, Festkörper*. Walter de Gruyter, Berlin New-York, 1992.
- [Bör96] F. Börner. Untersuchungen von Defekten nach Ionenimplantation in Silizium. Diplomarbeit, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Fachbereich Physik, 1996.
- [Bou83] J. Bourgoin, M. Lannoo. *Point Defects in Semiconductors II, Experimental Aspects*, volume 35. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New-York, 1983.
- [Bra74] W. Brandt. Positron dynamics in solids. *Appl. Phys.*, 5:1, 1974.
- [Bri75] D.K. Brice. *Ion Implantation Range and Energy Deposition Distributions*. Plenum, New York, 1975.
- [Bri88] D.T. Britton, P.C. Rice-Evans, J.H. Evans. Epithermal effects in positron depth profiling measurements. *Phil. Mag. Lett.*, 57:165, 1988.
- [Bro71] K. L. Brower. Structure of multiple-vacancy (oxygen) centers in irradiated silicon. *Radiat. Effects*, 8:213, 1971.
- [Bro72] K. L. Brower, W. Beezhold. Electron paramagnetic resonance of the lattice damage in oxygen-implanted silicon. *J. Appl. Phys.*, 43:3499, 1972.
- [Cat96] M.-J. Caturla, T. Diaz de la Rubia, L.A. Marques, G.H. Gilmer. Ion-beam processing of silicon at keV energies: A molecular-dynamics study. *Phys. Rev. B*, 54(23):16683, 1996.
- [Cha71] L.T. Chadderton. Nucleation of damage centres during ion implantation of silicon. *Radiat. Effects*, 8(1-2):77–86, 1971.
- [Cha88] D.J. Chadi, K.J. Chang. Magic numbers for vacancy aggregation in crystalline Si. *Phys. Rev. B*, 38(2):1523, 1988.
- [Che66] L.J. Cheng, J.C. Corelli, J.W. Corbett, G.D. Watkins. Characteristics of Neutron Damage in Silicon. *Phys. Rev. B*, 152:161, 1966.
- [Che68] L.J. Cheng, J. Lori. Characteristics of Neutron Damage in Silicon. *Phys. Rev. B*, 171(3):171, 1968.

- [Cla95] A. Claverie, H. Fujioka, L. La nab, Z. Liliental-Weber, E.R. Weber. Synthesis of semi-insulating GaAs by As implantation and thermal annealing: Structural and electrical properties. *Phys. Rev. B*, 96(1-2):327–330, 1995.
- [Cle96] M. Clement, J.M.M. Nijs, P. Balk, H. Schut, A. van Veen. Analysis of positron beam data by the combined use of the shape- and the wing-parameters. *J. Appl. Phys.*, 79(12):9029, 1996.
- [Cle97] M. Clement, J.M.M. Nijs, P. Balk, H. Schut, A. van Veen. Transport of positrons in the electrically biased metal-oxide-silicon system. *J. Appl. Phys.*, 81(4):1943, 1997.
- [Dab94] J. Dabrowski, J.E. Northrup. Microscopic theory of diffusion on the Ga sublattice of GaAs: vacancy-assisted diffusion of Si and Ga. *Phys. Rev. B*, 49(20):14286, 1994.
- [Eck91] W. Eckstein. *Computer Simulation of Ion-Solid Interactions*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1991.
- [Eic94] S. Eichler. Aufbau und Inbetriebnahme eines Positronenstrahlensystems zur Untersuchung von oberflächennahen Defekten in Festkörpern. Diplomarbeit, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Fachbereich Physik, 1994.
- [Eic97a] S. Eichler, J. Gebauer, F. Börner, A. Polity, R. Krause-Rehberg, E. Wendler, B. Weber, W. Wesch, H. Börner. Defects in Silicon after B⁺-Implantation: A Study by Positron Beam Technique, Rutherford Backscattering, Secondary Mass Spectroscopy and Infra-red Absorption Spectroscopy. *Phys. Rev. B*, 56(3):1393, 1997.
- [Eic97b] S. Eichler, C. Hübner, R. Krause-Rehberg. A Monte-Carlo simulation of positron diffusion in solids. *Appl. Surf. Sci.*, 116:155–161, 1997.
- [Eic98a] S. Eichler, F. Börner. Open-volume defects in silicon after ion implantation part II: annealing behavior. *to be publish in Phys. Rev. B*, 1998.
- [Eic98b] S. Eichler, F. Börner, J. Gebauer, R. Krause-Rehberg, E. Wendler, B. Weber, W. Wesch. Open-volume defects in silicon after ion implantation part I: fluence dependence. *to be publish in Phys. Rev. B*, 1998.
- [Est97] S.K. Estreicher, J.L. Hastings, P.A. Fedders. The ring-hexavacancy in silicon: A stable and inactive defect. *Appl. Rev. Lett.*, 70(4):432, 1997.
- [Evw76] A.O. Evwaraye, E. Sun. Electron-irradiation-induced divacancy in lightly doped silicon. *J. Appl. Phys.*, 47(9):3776, 1976.
- [Ewe95] C.P. Ewels, R. Jones, S. Öberg. First principles investigation of vacancy oxygen defects in Si. *Mat. Sci. For.*, 196-201:1297–1302, 1995.
- [Fan59] H.Y. Fan, A.K. Ramdas. Infrared Absorption and Photoconductivity in Irradiated Silicon. *J. Appl. Phys.*, 30(8):1127, 1959.
- [Fir59] O.B. Firsov. *Sov. Phys.-JETP*, 9:1076, 1959.
- [Fuj92] S. Fujii, S. Shikata, L. Wei, S. Tanigawa. Characterization of vacancy-type defects in Se-implanted GaAs by means of a slow positron beam. *J. Appl. Phys.*, 72(4):1405, 1992.
- [Fuj93] M. Fujinami, N.B. Chilton. Positron trap sites in the nativ oxide film grown on a hydrogen-terminated silicon surface. *Appl. Phys. Lett.*, 63(25):3458, 1993.
- [Fuj95a] M. Fujinami, S. Hayashi. Study of Defect Behaviour in Ion-Implanted Si Wafers by Slow Positron Annihilation Spectroscopy. *Mater. Sci. Forum*, 196-201(3):1165, 1995.
- [Fuj95b] M. Fujioka, J. Krueger, A. Prasad, X. Liu, E.R. Weber, A.K. Verma. Annealing dynamics of arsenic-rich GaAs formed by ion implantation. *J. Appl. Phys.*, 78(3):1470, 1995.
- [Fuj96a] M. Fujinami. Oxygen-related defects in Si studied by variable-energy positron annihilation spectroscopy. *Phys. Rev. B*, 53(19):13047, 1996.
- [Fuj96b] M. Fujinami, A. Tsuge, K. Tanaka. Characterization of defects in self-ion implanted Si using positron annihilation spectroscopy and Rutherford backscattering spectroscopy. *J. Appl. Phys.*, 79(12):9017, 1996.
- [Gär97] K. Gärtner. Progress in Non-Standard defect Analysis by RBS. *Mater. Sci. Forum*, 248-249:327–332, 1997.
- [Geb94] J. Gebauer. Rekonstruktion von Defektprofilen aus Daten der Positronenstrahltechnik. *Forschungsbeleg, Martin-Luther-Universität, FB Physik, FG Exp. Phys III*, 1994.

- [Geb95] J. Gebauer. Untersuchungen von Defektprofilen in ionenimplantiertem Silizium mit Hilfe der Positronenstrahltechnik. Diplomarbeit, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Fachbereich Physik, 1995.
- [Geb96] J. Gebauer, S. Eichler, R. Krause-Rehberg, H.P. Zeindl. Experiments to determine the depth scale of positrons in silicon: slow positron beam measurements on MBE-grown silicon layers on silicon oxide. *Appl. Surf. Sci.*, 116:247–250, 1996.
- [Geb97a] J. Gebauer, R. Krause-Rehberg, C. Domke, Ph. Ebert, K. Urban. Identifikation and quantification of defects in highly Si-doped GaAs by positron annihilation and scanning tunneling microscopy. *Phys. Rev. Lett.*, 78(17):3334, 1997.
- [Geb97b] J. Gebauer, R. Krause-Rehberg, S. Eichler, M. Lysberg, H. Sohn, E. R. Weber. Ga vacancies in low-temperature-grown GaAs identified by slow positrons. *Appl. Phys. Lett.*, 71(5):638–640, 1997.
- [Gha97] M. Ghaly, R.S. Averbach. Surface effect on the nature of damage production in ion-irradiated solids: a molecular dynamics investigation. *Mater. Sci. For.*, 248-249:15–20, 1997.
- [Gho95] V.J. Ghosh. Positron implantation profiles in elemental and multilayer systems. *Appl. Surf. Sc.*, 85:187–195, 1995.
- [Gil95] G.H. Gilmer, T. Dias de la Rubia, D.M. Stock, M. Jaraiz. Diffusion and interactions of point defects in silicon: Molecular dynamics simulations. *Nucl. Instrum. Methods B*, 102:247–255, 1995.
- [Gla82] E. Glaser, G. Götz, N. Sobolev, W. Wesch. Investigations of Radiation Damage Production in Ion Implanted Silicon. *Phys. Stat. Sol.*, 69:603–614, 1982.
- [Goe88] G. Goetz, K. Gärtner, editors. *High Energy Ion Beam Analysis of Solids*. Akademie-Verlag, Berlin, 1988.
- [Gol95] R. D. Goldberg, P. J. Schultz, P. J. Simpson. Determination of the characteristic signal for positron annihilation at divacancies in ion-irradiated silicon. *Appl. Surf. Sci.*, 85:287–291, 1995.
- [Gös91] U.M. Gösele, T.Y. Tan. *Equilibria, nonequilibria, diffusion, and precipitation*, volume 4 of *Materials science and technology*, page 197. VCH, Weinheim, 1991.
- [Hak92] R.A. Hakvoort, S. Roorda, A. van Veen, M.J. van den Boogaard, F.J.M. Buters, H. Schut. Positron beam analysis of amorphous silicon. *Mater. Sci. For.*, 105-110:1391, 1992.
- [Hak93] R. A. Hakvoort. *Applications of Positron Depth Profiling*. Dissertationsschrift, Technische Universität Delft, 1993.
- [Hak97] M. Hakala, M.J. Puska, R.M. Nieminen. Momentum distribution of electron-positron pairs annihilating at vacancy clusters in Si. *submitted to Phys. Rev. B*, 1997.
- [Has95] M. Hasegawa, A. Kawasuso, T. Chiba, T. Akahane, M. Suezawa. Positron lifetime and 2D-ACAR studies of divacancies in Si. *Appl. Phys. A*, D61:65–70, 1995.
- [Hau79] P. Hautojärvi, editor. *Positrons in solids*. Topics in Current Physics Vol. 12. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1979.
- [Hau88] P. Hautojärvi, P. Huttunen, J. Mäkinen, E. Punkka, A. Vehanen. *Vacancy-type defects in ion-implanted Si studied by slow positron beam*. Defects in Electronic Materials. Mater. Res. Soc., Pittsburgh, 1988.
- [Hau95] P. Hautojärvi. Defects in semiconductors: recent progress in positron experiments. *in Mater. Sci. Forum*, 175-178:47, 1995.
- [Hec86] N. Hecking, E. Te Kaat K. F. Heidemann. Defects in semiconductors: recent progress in positron experiments. *Nucl. Instr. and Meth. B*, 15:760, 1986.
- [Huo87] H. Huomo, A. Vehanen, M.D. Bentzon, P. Hautojärvi. Positron diffusion in Mo: the role of epithermal positrons. *Phys. Rev. B*, 35:8252, 1987.
- [Hut90] P.A. Huttunen. *Positron interaction on solid surfaces and at bilayered structures*. Dissertationsschrift, Helsinki University of Technology, Laboratory of Physics, 1990.

- [Jan89] R.W. Jansen, O.F. Sankey. Theory of relative native- and impurity-defect abundances in compound semiconductors and the factors that influence them. *Phys. Rev. B*, 39:3192, 1989.
- [Jar95] M. Jaraiz, G.H. Gilmer, J.M. Poate, T. Diaz de la Rubia. Atomistic calculations of ion implantation in Si: Point defect and transient enhanced diffusion phenomena. *Appl. Phys. Lett.*, 68(3):409, 1995.
- [Jen90] K.O. Jensen, A.B. Walker. Positron Thermalisation and Nonthermal Trapping in Aluminium. in *Positron beams for solids and surfaces*, AIP Conf. Proc., 218:44, 1990.
- [Kau97] H. Kauppinen, C. Corbel, K. Skog, T. Laine, P. Hautojärvi, P. Desgardin, E. Ntsoenzok. Divacancy and resistivity profiles in n-type Si implanted with 1.15-MeV protons. *Phys. Rev. B*, 55(15):9598, 1997.
- [Kaw95] A. Kawasuso, M. Hasegawa, M. Suezawa, S. Yamaguchi, K. Sumino. Charge State Dependences of Positron Trapping Rates Associated with Divacancies and Vacancy-Phosphorus Pairs in Si. *Jpn. Journ. Appl. Phys.*, 34:2197–2206, 1995.
- [Kei88] J. Keinonen, M. Hautala, E. Rauhala, V. Karttunen, A. Kuronen, E. Rauhala, A. Vehanen, E. Punkka, P. Hautojärvi. Defect Formation in H implantation of crystalline Si. *Phys. Rev. B*, 37(14):8269, 1988.
- [Kim77] L.C. Kimerling. volume Conf. ser.31 of *In radiation defects in semiconductors*. Inst. Phys. London, London, 1977.
- [Kra90] R. Krause, K. Saarinen, P. Hautojärvi, A. Polity, G. Gärtner, C. Corbel. Observation of a monovacancy in the metastable state of EL2 defect in GaAs by Positron annihilation. *Phys. Rev. Lett.*, 65:3329, 1990.
- [Kra92] R. Krause, A. Polity. Untersuchung von Kristalldefekten mit Hilfe der Positronenannihilation, 1.Teil: Konventionelle Positronentechniken. *Wiss.Z.Univ.Halle*, 3:3–22, 1992.
- [Kra94] R. Krause-Rehberg, H.S. Leipner, A. Kupsch, A. Polity, Th. Drost. Positron study of defects in as-grown and plastically deformed GaAs:Te. *Phys.Rev.B*, 49(4):2385–2395, 1994.
- [Kra97] R. Krause-Rehberg, H.S. Leipner. Determination of absolute vacancy concentrations in semiconductors by means of positron annihilation. *Appl. Phys. A*, 64:457–466, 1997.
- [Law95] D W. Lawther, U. Myler, P.J. Simpson, P.M. Rousseau, P. B. Griffin, J. D. Plummer. Vacancy generation resulting from electrical deactivation of arsenic. *Appl. Phys. Lett.*, 67(24):3575–3577, 1995.
- [Lee76] Y. H. Lee, J. W. Corbett. EPR studies of defects in electron-irradiated silicon: A triplet state of vacancy-oxygen complexes. *Phys. Rev. B*, 13:2653, 1976.
- [Lee90] J. L. Lee, A. Uedono, S. Tanigawa, J. Y. Lee. Vacancy-type defects in Si-implanted GaAs and its electrical activation by rapid thermal annealing. *J. Appl. Phys.*, 67(10):6153, 1990.
- [Lin63] J. Lindhard, J. Scharff, H. Schiøtt. *Kgl. Danske Videnskab. Selskab., Mat.-Fys. Medd.*, 33(14), 1963.
- [Lis94] L. Liskay, C. Corbel, L. Baroux, P. Hautojärvi, M. Bayhan, A. W. Brinkmann, S. Tarentenko. Positron trapping at divacancies in thin polycrystalline CdTe films deposited on glass. *Appl. Phys. Lett.*, 64(11):1380, 1994.
- [LW95] Z. Liliental-Weber, X.W. Lin, J. Washburn, W. Schaff. Rapid thermal annealing of low-temperature GaAs layers. *Appl. Phys. Lett.*, 66(16):2086, 1995.
- [Lyn79] K.G. Lynn, J.E. Dickman, W.L. Brownand M.F. Robbins, E. Bonderup. Vacancies studied by positron annihilation with high-momentum core electrons. *Phys. Rev. B*, 20(9):3566, 1979.
- [Mäk91] J. Mäkinen, C. Corbel, P. Hautojärvi, D. Mathiot. Measurement of positron mobility in Si at 30-300 K. *Phys. Rev. B*, 43(14):12114, 1991.
- [Man78] S. Mantl, W. Triftshäuser. Defect annealing studies on metals by positron annihilation and electrical resistivity measurements. *Phys. Rev. B*, 17(4):1645, 1978.
- [Man81] M. Manninen, R.M. Nieminen. Positron Detrapping from Defects: A Thermodynamic Approach. *Appl. Phys. A*, 26:93, 1981.

- [Man89] M.O. Manasreh, D.W. Fischer, W.C. Mitchel. The EL2 defect in GaAs: some recent developments. *Phys. Stat. Sol. (b)*, 154:11, 1989.
- [Mil82] A.P. Mills, R.J. Wilson. *Phys. Rev. A*, 26:490, 1982.
- [Mor71] F. F. Morehead, B. L. Crowder. *Ion Implantation*, volume , page 25. F. H. Eisen and C. S. Cadderton, London, 1971.
- [My196] U. Myler, R.D. Goldberg, A. P. Knights, D.W. Lawther, P.J. Simpson. Chemical information in positron annihilation spectra. *Appl. Phys. Lett.*, 69(22):3333–3335, 1996.
- [New65a] R.C. Newman, R.S. Smith. Vibrational absorption of carbon and carbon-oxygen complexes in silicon. *J. Phys. & Chem. Solids*, 30:1493, 1965.
- [New65b] R.C. Newman, J.B. Willis. *J. Phys. & Chem. Solids*, 26:373, 1965.
- [Nie79] R.M. Nieminen, J. Laakkonen. Positron trapping rate into vacancy clusters. *Appl. Phys.*, 20:181, 1979.
- [Nie86] B. Nielsen, K.G. Lynn, Yen C. Chen. Study of solids by use of nonthermalized positrons. *Phys. Rev. Lett.*, 57:1789, 1986.
- [Nie93] B. Nielsen, O.W. Holland, T.C. Leung, K.G. Lynn. Defects in MeV Si-implanted Si probed with positrons. *J. Appl. Phys.*, 74:1636, 1993.
- [Per70] A. Perkins, J.P. Carbotte. Effect of the positron-phonon-interaction on positron motion. *Phys.Rev.B*, 1:101, 1970.
- [Pol97] A. Polity. Habilitation, Strahlendefekte in Festkörpern. 1997.
- [Puf89] W. Puff, P. Mascher, D. Kerr, S. Dannefaer. Effects of boron doping on the annealing characteristics of Cz-silicon. *Mater. Sci. Forum*, 38-41:225–230, 1989.
- [Pus89] M.J. Puska. Electronic structures of point defects in III-V compound semiconductors. *J. Phys.: Condens. Matter*, 1:7347, 1989.
- [Pus90] M. Puska, C. Corbel, R. Nieminen. Positron trapping in semiconductors. *Phys. Rev. B*, 41:9980, 1990.
- [Rit90] K. A. Ritley, M.C. McKeown, K.G. Lynn. Monte-Carlo model of positrons and electrons in matter. in *Positron beams for solids and surfaces*, AIP Conf. Proc., 218:3, 1990.
- [Ros80] L.J. Rosenberg, A.H. Weiss, K.F. Canter. Low-energy positron diffraction from a Cu(111) surface. *Phys.Rev.Lett.*, 44:1139, 1980.
- [Rou94] P. M. Rousseau, P. B. Griffin, J. D. Plummer. Electrical deactivation of arsenic as a source of point defects. *Appl. Phys. Lett.*, 65(5):578, 1994.
- [Rys78] H. Ryssel, I. Ruge. *Ionenimplantation*. B.G.Teubner, Stuttgart, 1978.
- [Saa91] K. Saarinen, P. Hautojärvi, P. Lanki, C. Corbel. Ionization levels of As vacancies in as-grown GaAs studied by positron-lifetime spectroscopy. *Phys. Rev. B*, 44:10585, 1991.
- [Sch88] P.J. Schultz, K.G. Lynn. Interaction of positron beams with surfaces, thin films and interfaces. *Rev. of Mod. Phys.*, 60(3):701–779, 1988.
- [Sch97] R. Schulz. *Ionenstrahlinduzierte epitaktische Kristallisation und Interface-Amorphisierung von III-V-Verbindungshalbleitern und Germanium*. Dissertations-schrift, Friedrich-Schiller-Universität Jena, 1997.
- [Sea95] L. Sealy, R.C. Barklie, G. Lulli, R. Nipoti, R. Balboni, S. Milita, M. Servidori. EPX and X-ray diffraction study of damage produced by implantation of B ions (50 keV, 1 MeV) or Si ions (50 keV, 700 keV, 1.5 MeV) into silicon. *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B*, 96:215–218, 1995.
- [Seo95] H. Seong, L.J. Lewis. Tight-binding molecular-dynamics study of point defects in GaAs. *Phys. Rev. B*, 52(8):5675, 1995.
- [Sha96] Y.Y. Shan, P. Asoka-Kumar, K.G. Lynn, S. Fung, C.B. Beling. Field effect on positron diffusion in semi-insulating GaAs. *Phys. Rev. B*, 54(3):1982–1986, 1996.
- [Shi94] F. Shimura, editor. *Oxygen in Silicon*, volume 42 of *Semiconductors and Semimetals*. Academic Press Inc., Boston, 1994.
- [Sim91] P.J. Simpson, M. Vos, I.V. Mitchell, C. Wu, P.J. Schultz. Ion-beam-induced damage in silicon studied using variable-energy positrons, Rutherford backscattering , and infrared absorption. *Phys. Rev. B*, 44(22):12180, 1991.

- [Sim97] P.J. Simpson, A.P. Knights, R.D. Goldberg, G.C. Aers, D. Landheer. Intrinsic electric fields in silicon. *Appl. Surf. Sci.*, 116:211, 1997.
- [Smi92] D.L. Smith, H. Evans, C. Smith, P.C. Rice-Evans, J.H. Evans. Positron beam measurements on hydrogen implanted silicon. *in Mater. Sci. Forum*, 105-110:1447, 1992.
- [Soi92] E. Soininen, J. Mäkinen, D. Beyer, P. Hautojärvi. High Temperature Positron Diffusion in Si, Ge, and GaAs. *Phys. Rev. B*, 46(20):13104–13118, 1992.
- [Ste70] H.J. Stein, F.L. Vook, D.K. Brice, J.A. Borders, S.T. Picraux. Infrared Studies of the Crystallinity of ion-implanted Si. *Radiation Effects*, 6:19–26, 1970.
- [Suz94] R. Suzuki, Y. Kobayashi, K. Awazu, T. Mikado, M. Chiwaki, H. Ohgaki, T. Yamazaki. Positron lifetime study on ion-implanted amorphous SiO₂ with a variable-energy pulsed positron beam. *Nucl. Instr. and Meth. B*, 91:410, 1994.
- [Sve86] B.G. Svensson, J.L. Lindström. Annealing of irradiated highly phosphorus-doped Czochralski silicon. *Mater. Sci. Forum*, 10-12:1087, 1986.
- [Sve93] B.G. Svensson, C. Jagadish, J.S. Williams. Generation rate of point defects in silicon irradiated by MeV ions. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B*, 80-81:583, 1993.
- [Sve97] B. G. Svensson, C. Jagadish, A. Hallén, J. Lalita. Generation of vacancy-type point defects in single collision cascades during swift-ion bombardment of silicon. *Phys. Rev. B*, 55(16):10498, 1997.
- [Tan85] T.Y. Tan, H.M. You, U.M. Gösele. Point defects, diffusion processes, and swirl defect formation in silicon. *Appl. Phys. A*, 37:1–17, 1985.
- [Tan93] T.Y. Tan, U.M. Gösele. Thermal equilibrium concentrations and effect of negatively charged Ga vacancies in n-type GaAs. *Appl. Phys. A*, 56:249, 1993.
- [Tan94] T.Y. Tan. Thermal equilibrium concentrations of point defects in gallium arsenide. *J. Phys. Chem. Solids*, 55(10):917, 1994.
- [Tan95] S. Tanigawa, A. Uedono, L. Wei, R. Suzuki. *Defects in semiconductors observed by 2D-ACAR and by a slow-positron beam*, pages 729–752. IOS Press, Amsterdam, 1995.
- [Tra95a] M.-A. Trautwaert, J. Vanhellefont, H.E. Maes, A.-M. Van Bavel, G. Langouche, P. Clauws. Low-temperature anneal of the divacancy in p-type silicon: A transformation from V₂ to V_xO_y complexes? *Appl. Phys. Lett.*, 66(22):3057, 1995.
- [Tra95b] M.-A. Trautwaert, J. Vanhellefont, H.E. Maes, A.-M. Van Bavel, G. Langouche, A. Stesmans, P. Clauws. On the behaviour of the the divacancy during anneals between 200 and 350 C. *Mater. Sci. Forum*, 196-201:1147, 1995.
- [Ued88a] A. Uedono, S. Tanigawa, J. Sugiura, M. Ogasawara. Depth profile of vacancy-type defects in B⁺-implanted Si with SiO₂ overlayer by a variable-energy positron beam. *Appl. Phys. Lett.*, 53(4):25, 1988.
- [Ued88b] A. Uedono, S. Tanigawa, K. Suzuki, K. Watanabe. Variable-energy positron beam studies of SiO₂/Si irradiated by ionizing radiation. *Appl. Phys. Lett.*, 53(6):473, 1988.
- [Ued92a] A. Uedono, L. Wei, Y. Tabuki, H. Kondo, S. Tanigawa, J. Sugiura, M. Ogasawara. Vacancy-type defects in Si⁺- and Be⁺-implanted Si probed by a monoenergetic positron beam. *Materials Science Forum*, 105-110:1479–1482, 1992.
- [Ued92b] A. Uedono, L. Wei, Y. Tabuki, H. Kondo, S. Tanigawa, K. Wada, H. Nakanishi. Monoenergetic positron beam studies of near surface defects induced by low dosed Be-implantation. *Mater. Sci. Forum*, 105-110:1483–1486, 1992.
- [Ued92c] A. Uedono, L. Wei, S. Tanigawa. The depth profiles of ion implantation induced vacancy-type defects probed by a monoenergetic positron beam. *Radiat. Eff. Defects Solids*, 124:31, 1992.
- [Val83] S. Valkealathi, R.M. Nieminen. Monte-Carlo calculations of keV electron and positron slowing down in solids I. *Appl. Phys. A*, 32:95–106, 1983.
- [Val84] S. Valkealathi, R.M. Nieminen. Monte Carlo calculations of keV electron and positron slowing down in solids II. *Appl. Phys. A*, 35:51–59, 1984.
- [Vin54] G. Vineyard, G.J. Dienes. *Phys. Rev.*, 93:265, 1954.

- [vV90] A. v. Veen, H. Schut, J. de Vries, R.A. Hakvoort, M. R. Ijpma. Analysis of positron profiling data by means of VEPFIT. *in Positron beams for solids and surfaces, AIP Conf. Proc.*, 218:171, 1990.
- [Wat61] G.D. Watkins, J.W. Corbett. Defects in irradiated silicon. I. Electron spin resonance of the Si-A center. *Phys. Rev.*, 102:1001, 1961.
- [Wat64] G.D. Watkins, J.W. Corbett. *Phys. Rev.*, 134:A 1359, 1964.
- [Wat65] G.D. Watkins, J.W. Corbett. Defects in Irradiated Silicon: Electron Paramagnetic Resonance of the Divacancy. *Phys. Rev. B*, 138(2A):A543, 1965.
- [Wat75] G.D. Watkins. Defects in irradiated silicon: EPR and electron-nuclear double resonance of interstitial boron. *Phys. Rev. B*, 12(12):5824, 1975.
- [Wat76] G.D. Watkins. EPR of a trapped vacancy in boron-doped silicon. *Phys. Rev. B*, 13(6):2511, 1976.
- [Wei92] L. Wei, J.L. Lee, S. Tanigawa, M. Kawabe. Characterization of point defects in Impurity-doped GaAs by slow positrons. *Mater. Sci. Forum*, 105-110:1487-1490, 1992.
- [Wen94] E. Wendler, K. Gärtner, W. Wesch, U. Zammit, K.N. Madhusoodanan. Defect investigation in boron implanted silicon by means of temperature dependent RBS and optical near-edge absorption. *Nucl. Instr. Meth.*, 85:528 - 532, 1994.
- [Wen95] E. Wendler, T. Opfermann, P. Müller, W. Wesch. Defect investigation in boron implanted silicon by means of temperature dependent RBS and optical near-edge absorption. *Nucl. Instr. Meth.*, 106:303-307, 1995.
- [Wer93] P. Werner, M. Reiche, J. Heydenreich. HREM Investigations of the Agglomeration of Self-Interstitials in Silicon. *phys. stat. sol. (a)*, 137:533, 1993.
- [Wer97] P. Werner, S. Eichler, G. Mariani, R. Kögler, W. Skorupa. Investigations of C_xSi defects in C implanted silicon by transmission electron microscopy. *Appl. Phys. Lett.*, 70(2):533, 1997.
- [Wes93] W. Wesch. Modification of $A_{III}B_V$ semiconductor layers by ion implantation. *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, 300:297, 1993.
- [Wil94] P. Willutzki, J. Stormer, G. Kögel, P. Sperr, D. T. Britton, R. Steindl, W. Triftshauser. An improved pulsed low-energy positron system. *Meas. Sci. and Techn.*, 5:548, 1994.
- [Xu90] H. Xu, U. Lindelfelt. Electronic structure of neutral and charged vacancies in GaAs. *Phys. Rev. B*, 41:5979, 1990.
- [Zam94] U. Zammit, K.N. Madhusoodanan, M. Marinelli, F. Scudieri, R. Pizzoferrato, F. Mercuri, E. Wendler, W. Wesch. Optical-absorption studies of ion-implantation damage in Si on sapphire. *Phys. Rev. B*, 49(20):14322, 1994.
- [Zha91] S.B. Zhang, J.E. Northrup. Chemical potential dependence of defect formation energies in GaAs: application to Ga self-diffusion. *Phys. Rev. Lett.*, 67:2339, 1991.
- [Zie85] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark. *The Stopping and Range of Ions in Solids*. Pergamon Press, New York, 1985.

Abbildungsverzeichnis

1.1	Verlauf der Bremsquerschnitte S_e und S_n	4
1.2	Geometrie bei Zweikörperstreuung	4
1.3	Reichweiteverteilung nach der LSS-Theorie für B und As in Silizium	7
1.4	Tiefenverteilung der Energieabgabe in atomare Deplazierungen für B in Si	7
1.5	Schema zur Erzeugung eines FRENKEL-Paares	8
1.6	Schematische Darstellung der Kaskadenbildung	9
1.7	Modell der Doppelleerstelle in Si	10
1.8	Energieniveaus der Doppelleerstelle in Silizium	10
1.9	Temperaturabhängigkeit der amorphisierenden Dosis	17
1.10	Defektentwicklung nach HECKING	18
1.11	Schema der isochronen Ausheilungen	19
2.1	Wechselwirkungen der Positronen im Festkörper	23
2.2	Energieniveaus und Potentiale einiger Defekte für Positronen (schematisch)	26
2.3	Definition von S - und W -Parameter	28
2.4	Beispiel der S - W -Analyse	30
2.5	Abhängigkeit des S -Parameters von der Energieauflösung des Detektors	31
2.6	Aufbau des Positronenstrahlsystems	33
2.7	Aufbau des Detektorsystems	34
2.8	Typisches Annihilationsspektrum aus einer Positronenstrahlungsmessung	35
2.9	Aufbau des Probenhalters	35
2.10	Meßprinzip bei Rutherford-Rückstreuung	37
3.1	Überlagerung der Leerstellenprofile	44
3.2	Vergleich resultierenden Defektverteilungen (TRIM für Implantation in Si)	44
3.3	RBS -Spektren von Si(100) Bor-implantiert mit verschiedenen Dosen	46
3.4	Die $S(E)$ -Kurven von undotiertem Cz-Si implantiert mit Bor	46
3.5	Kastenprofile der Leerstellendichte nach Bor-Implantation	47
3.6	Vergleich der Defektprofile ermittelt mit TRIM , RBS und VEPAS	48
3.7	Vergleich der Defektkonzentrationen ermittelt mit VEPAS , RBS und IR	48
3.8	Dosisabhängigkeit von S - und R -Parameter	49
3.9	Anpassung des S -Parameters der Leerstellenagglomerater	50
3.10	Dosisabhängigkeit der Defektprofile deplazierter Atome nach B-Implantation	51
3.11	Dosisabhängigkeit der $S(E)$ -Kurven nach Si-Selbstimplantation	51
3.12	Vergleich der Dosisabhängigkeit der Implantationsschäden	52

3.13	Modellierung der Dosisabhängigkeiten der Implantationsschäden	54
3.14	Schicht- <i>S</i> -Parameter für alle untersuchten geschädigten Schichten	55
3.15	<i>S-W</i> -Darstellung für alle untersuchten geschädigten Schichten	55
3.16	<i>S(E)</i> -Kurven für richtungsabhängige B-Implantation in Si	57
3.17	Defektprofile nach richtungsabhängiger B-Implantation in Si aus RBS -Messungen	57
3.18	Dosisabhängigkeit der angepaßten Schädigungstiefe nach As-Implantation	58
3.19	Trapez-Modell zur Bestimmung der Schädigungstiefe	59
3.20	Anpassung einer Trapezverteilung für Defekte nach As-Implantation in Si	60
3.21	Elektrische Aktivierung der implantierten Bor-Atome	60
3.22	Ausheilverhalten der Defekte in Cz-Si nach Implantation von 1×10^{14} $B^+ cm^{-2}$	61
3.23	Ausheilverhalten der Defekte in FZ-Si nach Implantation von 1×10^{14} $B^+ cm^{-2}$	61
3.24	Schicht- <i>S</i> -Parameter in Cz-Si und FZ-Si nach Implantation von 1×10^{14} $B^+ cm^{-2}$ während der Ausheilung	61
3.25	Ausheilung der Doppelleerstelle im IR -Signal	62
3.26	Analyse der Ausheilkinetik des dominierenden Leerstellenagglomerates	63
3.27	Ausheilung der Defekte nach C-Implantation in Si	64
3.28	Ausheilverhalten der Defekte in Cz-Si nach Implantation von 1×10^{16} $B^+ cm^{-2}$	64
3.29	Schicht- <i>S</i> -Parameter in Cz-Si nach Implantation von 1×10^{16} $B^+ cm^{-2}$ während der Ausheilung	64
3.30	<i>S-W</i> -Darstellung für Cz-Silizium nach Implantation von 1×10^{16} $B^+ cm^{-2}$ nach verschiedenen Ausheilschritten	65
3.31	<i>S</i> -Parameter einer durch As-Implantation amorphisierten Schicht während der Ausheilung	66
3.32	Charakterisierung des Ausheilverhaltens durch As-Implantation amorphisierter Schichten im <i>S-W</i> -Plot	67
3.33	Ausheilverhalten von verschieden Arsen-implantierten Proben	67
3.34	RAMAN-Spektrum einer Arsen-implantierten Probe	68
3.35	Verhältnis von amorpher zur kristallinen Phase während der Ausheilung	68
3.36	Verlauf der Dicke der geschädigten Schicht während der Ausheilung	69
3.37	<i>S</i> -Parameter einer durch Si-Implantation amorphisierten Schicht während der Ausheilung	69
3.38	Charakterisierung des Ausheilverhaltens durch As-Implantation amorphisierten Schichten im <i>S-W</i> -Plot	70
3.39	Ausheilverhalten von verschieden Si-implantierten Proben	70
3.40	<i>S-W</i> -Trajektorien nach Ausheilung Si-implantierter Schichten	71
3.41	Schematische Darstellung eines geschlossenen Nichtgleichgewichtssystems	73
3.42	Schematische Darstellung eines offenen Nichtgleichgewichtssystems	73
3.43	Schema des Ausheilverhaltens leerstellenartiger Defekte	74
3.44	RBS -Spektren von Ge nach Ausheilung durch IBIEC	75
3.45	<i>S(E)</i> -Kurven für Ge nach Ausheilung durch IBIEC	76
3.46	<i>S-W</i> -Plot für Ge nach Ausheilung durch IBIEC	77

3.47	Thermische Ausheilung der IBIEC -ausgeheilten Ge-Probe	78
3.48	<i>S-W</i> -Plot für Ge nach thermischer Ausheilung einer IBIEC -behandelten Probe	78
3.49	Vergleich simulierter Defektverteilungen (TRIM) für Implantation in GaAs	79
3.50	<i>S(E)</i> -Kurven für getemperte GaAs Referenzproben	80
3.51	<i>S-W</i> -Plots für getemperte GaAs Referenzproben	80
3.52	Typischer <i>S-W</i> -Plot für die Ga-Leerstelle	81
3.53	Schädigung im Zwischengitterbereich nach O-Implantation	82
3.54	<i>S(E)</i> -Kurven für die O-implantierten GaAs-Proben	82
3.55	<i>S-W</i> -Plots für die O-implantierten GaAs-Proben	82
3.56	Schicht- <i>S</i> -Parameter von O-implantiertem GaAs während der Ausheilung	83
3.57	<i>S-W</i> -Plots der O-implantiertem GaAs-Proben während der Ausheilung	83
3.58	RBS -Spektren für die Te-implantierten GaAs-Proben	84
3.59	Dosisabhängigkeit der Schädigung nach Te-Implantation in GaAs	84
3.60	<i>S(E)</i> -Kurven für die Te-implantierten GaAs-Proben	84
3.61	<i>S-W</i> -Plots für die Te-implantierten GaAs-Proben	85
3.62	<i>S-W</i> -Plots nach Te-Implantation in verschiedenen dotierten Substraten	85
3.63	RBS -Spektrum einer As-implantierten GaAs-Probe	86
3.64	<i>S(E)</i> -Kurven für verschieden dotierte As-implantierte GaAs-Proben	86
3.65	<i>S-W</i> -Plots für verschieden dotierte As-implantierte GaAs-Proben	86
3.66	Ausheilverhalten der amorphen Schicht nach As-Implantation in p-GaAs	87
3.67	<i>S(T)</i> -Diagramm für die Ausheilung der amorphen Schicht im p-GaAs	88
3.68	<i>S-W</i> -Plot für die Ausheilung der amorphen Schicht in p-GaAs	88
3.69	Ausheilverhalten der amorphen Schicht nach As-Implantation in GaAs	88
3.70	<i>S-W</i> -Plots nach verschiedenen Ausheilschritten einer amorphen Schicht in GaAs	88
3.71	Annihilationsparameter aus verschiedenen Tiefen während der Ausheilung der amorphen Schicht nach As-Implantation in SI-GaAs	89

Tabellenverzeichnis

1.1	Ausheiltemperaturen von Sauerstoff-Leerstellen-Komplexen	11
1.2	Theoretische Bindungsenergien von Leerstellen-Agglomeraten	11
2.1	Theoretisch berechnete Doppler-Parameter für Leerstellen-Agglomerate in Si	30
3.1	Implantationsparameter der Siliziumproben	45
3.2	VEPAS -Ergebnisse für IBIEC -Ge	77
3.3	Implantationsparameter der Galliumarsenid-Proben	79

Erklärung

Hiermit erkläre ich, Stefan Eichler, an Eides statt, daß ich die vorliegende Arbeit selbständig, ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Quellen und Hilfsmittel angefertigt habe. Die aus anderen Werken wörtlich oder inhaltlich entnommenen Daten, Fakten und Konzepte sind unter Angabe der entsprechenden Quelle als solche gekennzeichnet.

Diese Arbeit wurde bisher weder im In- noch Ausland in gleicher oder ähnlicher Form in einem anderen Prüfungsverfahren vorgelegt.

Ich habe mich zu keinem früheren Zeitpunkt um den Doktorgrad beworben.

Halle/Saale, im Dezember 1997

(Stefan Eichler)

Lebenslauf

Stefan Eichler
Nickel-Hoffmann-Str. 20
06110 Halle (Saale)

geboren am 24.06.1968 in Halle (Saale)
Familienstand: verheiratet

Ausbildung

1975 - 1985	Polytechnische Oberschule in Halle
1985 - 1987	Spezialklassen für Mathematik und Physik der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Abitur
1987 - 1989	Wehrdienst
1989 - 1994	Physikstudium und Diplom an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

Berufsweg

1994 - 1997	wissenschaftlicher Mitarbeiter im Fachbereich Physik der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg im Rahmen eines DFG-Projektes
-------------	-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

Halle/Saale, den 9. November 1998

Stefan Eichler

DANKSagung

Die vorliegende Arbeit wurde am Fachbereich Physik der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg im Positronenlabor der Fachgruppe Experimentelle Physik II Oberflächen und Grenzflächen unter der Leitung von Prof. Dr. H. Neddermeyer angefertigt.

An dieser Stelle möchte ich Herrn Priv. Doz. Dr. habil. R. Krause-Rehberg für die Überlassung des Themas herzlich *danken*.

Ebenfalls *bedanken* möchte ich mich bei Herrn Dr. Th. Abgarjan, der großen Anteil am Aufbau des Positronenstrahlensystems in Halle hat, und bei den Herren Dipl.-Phys. F. Börner und Dipl.-Phys. J. Gebauer, die ihre Diplomarbeiten auf dem Gebiet der Implantationsdefekte in Silizium einreichten. Frau Dr. A. Polity möchte ich für ihre ständige Diskussionsbereitschaft und Hilfe besonderen *Dank* aussprechen.

Zum guten Arbeitsklima im Positronenlabor trugen weiterhin bei: Frau Dipl.-Phys. C. Hahn, Herr Dipl.-Phys. C.G. Hübner, Herr Dr. Ing. B. Somieski, Herr Dr. T.E.M. Staab, Herr Dipl.-Phys. C. Nagel, Herr Dr. H. Leipner, Herr Dipl.-Phys. S. Huth, Herr Dipl.-Phys. F. Rudolf, Herr Dipl.-Päd. Th. Engelbrecht, Herr cand.-phys. K. Petters sowie Herr cand.-phys. M. Lausmann.

Den Mitarbeitern der Mechanischen Werkstätten mit Obermeister Helbig an der Spitze möchte ich meinen *Dank* und Respekt für ihre stets sorgfältige Arbeit zollen. Die Kollegen Herr H. Benkwitz, Herr L. Büttner, Herr G. Jacob, Herr L. Hintzsche, Frau A. Busse und Herr S. Bölling aus der Werkstatt II standen jederzeit mit Rat und Tat zur Seite. Den Mitarbeitern der Elektronikwerkstatt insbesondere Herrn Dr. Balzerowski und Herrn Dipl.-Ing. A. Müller *danke* ich für die unkomplizierte Lösung der elektronischen Probleme im Labor.

Den Kollegen und Mitarbeitern, die die Ionenimplantation an den verschiedenen Proben ausgeführt haben, möchte ich ebenfalls *danken*. Stellvertretend seien hier Herr Dipl.-Ing. B. Müller, Herr G. Lenk und Herr Dr. R. Kögler genannt.

Herrn Prof. Dr. W. Wesch und Frau Dr. E. Wendler *danke* ich für ihre hilfreiche Betreuung bei den **RBS**-Experimenten. Herrn Dr. R. Schulz und Herrn Dr. E. Glaser möchte ich für die Ausführung der Rekrystallisationsexperimente am Germanium und die Diskussion der Ergebnisse *danken*.

Bei Herrn Dr. G. Lippold möchte ich mich für die Durchführung der RAMAN-Messungen *bedanken*.

Für die Hilfe bei den Messungen der Ladungsträgerkonzentration *danke* ich Herrn Dipl.-Phys. R. Scholz.

Den Firmen WACKER SILTRONIC und FREIBERGER MATERIALS COMPOUND GMBH möchte ich für das zur Verfügung gestellte Probenmaterial *danken*.

Nicht zuletzt möchte ich mich bei meiner Frau Claudia und meinen Eltern *bedanken*, deren Unterstützung mir immer sicher war.