

FORSCHUNGSZENTRUM  
ROSSENDORF e.V.

FZR

---

Archiv-Ex.:  
FZR-175  
März 1997

FZR - 1997 - 175 - C  
FZR - 1997 - 175 - 1

---

*Thomas Henkel*

**Ionenstrahlinduzierte Wachstumsprozesse  
amorpher Schichten in Silicium**

**Forschungszentrum Rossendorf e.V.**

**Postfach 51 01 19 · D-01314 Dresden**

**Bundesrepublik Deutschland**

**Telefon (0351) 260 3343**

**Telefax (0351) 260 3411**

**E-Mail [heera@fz-rossendorf.de](mailto:heera@fz-rossendorf.de)**

# Ionenstrahlinduzierte Wachstumsprozesse amorpher Schichten in Silicium

Dissertation  
zur Erlangung des akademischen Grades  
Doctor rerum naturalium  
Dr. rer. nat

vorgelegt der  
Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften  
der Technischen Universität Dresden

von  
Dipl.-Phys. Thomas Henkel  
geboren am 06.10.1963 in Dresden

Gutachter: Prof. W. Möller, Forschungszentrum Rossendorf  
Doz. Dr. W. Wesch, Universität Jena  
Prof. K. Leo, Technische Universität Dresden

Eingereicht am: 22.10.1996  
Tag der Verteidigung: 13.03.1997

# Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung .....	1
2	Ionenstrahlinduzierte Amorphisierung in Silicium .....	3
2.1	Volumen-Amorphisierung .....	3
2.2	Planare Amorphisierung .....	5
2.2.1	Definition und Abgrenzung des Begriffes .....	5
2.2.2	Bisherige experimentelle Resultate .....	7
2.2.3	Modelle der planaren Amorphisierung .....	14
3	Verfahren zur Charakterisierung von Schichtwachstumsprozessen .....	22
3.1	Überblick .....	22
3.2	Zeitaufgelöste Laserreflektometrie .....	23
3.2.1	Prinzip und Anwendungen .....	23
3.2.2	Theorie der Reflexion von Licht an Schichtsystemen .....	27
3.2.3	Schichtsysteme aus amorphem und kristallinem Silicium .....	30
3.2.4	Aufbau einer rechnergestützten Reflektivitätsmeßtechnik .....	36
3.3	Rutherford Rückstreupektroskopie .....	38
3.3.1	Grundlagen .....	38
3.3.2	Energie- und Tiefenauflösung .....	41
3.3.3	Bestimmung der Dicke amorpher Schichten .....	43
3.3.4	Meßaufbau zur Analyse der Rückstreu-Ionen .....	44
4	Experimentelle Methodik .....	46
4.1	Herstellung der amorphen Schichten .....	46
4.2	Hochenergie-Implantation .....	46
4.3	Simulation der Energie- und Reichweiteverteilung .....	50
4.4	Analyse der Proben .....	51
4.4.1	Zeitaufgelöste Laserreflektometrie .....	51
4.4.2	Rutherford Rückstreuung .....	53
4.4.3	Elektronenmikroskopie .....	53
5	Experimentelle Ergebnisse .....	54
5.1	Reflektivitätsmessungen .....	54
5.1.1	Strahlenschäden .....	54
5.1.2	Planare Amorphisierung .....	55
5.2	Rutherford Rückstreupektroskopie .....	58
5.2.1	Amorphe Oberflächenschichten .....	58
5.2.2	Vergrabene amorphe Schichten .....	62
5.3	Elektronenmikroskopie .....	63
5.3.1	Amorphe Oberflächenschichten .....	64
5.3.2	Vergrabene amorphe Schichten .....	66

6	Diskussion der Ergebnisse .....	68
6.1	Strahlenschäden .....	68
6.2	Planare Amorphisierung .....	69
6.2.1	Fluenzabhängigkeit .....	69
6.2.2	Temperaturabhängigkeit .....	70
6.2.3	Stromdichteabhängigkeit .....	75
6.2.4	Energieabhängigkeit .....	77
6.2.5	Unterschiede zur Volumen-Amorphisierung .....	79
7	Zusammenfassung .....	80
8	Ausblick .....	82
	Literaturverzeichnis .....	83
	Anhang A Liste der verwendeten Symbole .....	92
	Anhang B Liste der verwendeten Abkürzungen .....	96
	Anhang C Beschreibung des Computerprogramms REFLECT .....	97

# 1 Einleitung

Einkristallines Silicium ist aufgrund seiner intrinsischen Eigenschaften für viele elektronische Anwendungen ein geeignetes Material. Daher wird es heute im großen Umfang für die Herstellung von Halbleiterbauelementen verwendet. Aber auch in der Mikrosystem- und Sensortechnik erlangt es zunehmend an Bedeutung. Für die Herstellung solcher Bauelemente sind Verfahren gefordert, die eine gezielte, lokale Veränderung der Materialeigenschaften erlauben. Der präzisen Erzeugung elektrisch leitender oder isolierender Schichtstrukturen im oberflächennahen Bereich des Halbleiters kommt dabei eine besondere Rolle im weltweiten Trend der Miniaturisierung von Bauelementestrukturen zu. Die Ionenimplantation hat sich in den letzten Jahren zum beherrschenden Verfahren der Dotierung und Modifizierung von Halbleitern in der Industrie durchgesetzt. Darüber hinaus sind aber bei der Erforschung der Grundlagen der Ion-Festkörper-Wechselwirkung auch Verfahren entstanden, die über klassische Anwendungen der Ionenimplantation weit hinausgehen. Stellvertretend seien hier nur die Ionenstrahlsynthese (*Ion Beam Synthesis, IBS*), das Ionenmischen (*Ion Mixing*), die Ionenstrahlunterstützte Schichtabscheidung (*Ion Beam Assisted Deposition, IBAD*) und die Ionenstrahlinduzierte Festphasenepitaxie (*Ion Beam Induced Epitaxial Crystallization, IBIEC*) genannt.

Bei allen Verfahren der Ionenbestrahlung werden ionisierte Atome oder Moleküle in einem elektrischen Feld beschleunigt und auf den Festkörper geschossen. Heute ist es möglich, Beschleunigungsenergien von eV bis zu einigen GeV einzustellen. Die in das Material eingebrachten Fremdatome haben ein Konzentrationsprofil, das in erster Näherung durch eine gaußförmige Verteilung mit einer mittleren projizierten Reichweite  $R_p$  und einer Standardabweichung  $\Delta R_p$  beschrieben werden kann. Die Reichweite der Teilchen ist von ihrer Energie sowie von der Masse der Ionen und der Atome im Festkörper abhängig.

Durch die Ionenbestrahlung eines Halbleiters werden aber auch Strahlenschäden erzeugt, die zu einer Änderung der Materialeigenschaften führen und daher in der Regel unerwünscht sind. In Abhängigkeit von der Energie und Masse der implantierten Ionen werden Atome von ihren Gitterplätzen versetzt. Diese können wiederum andere Atome versetzen, so daß es zur Herausbildung einer Stoßkaskade kommt. Die Folge ist eine Anhäufung von Leerstellen und Zwischengitteratomen im Halbleiter. Solche einfache Punktdefekte werden von leichten Ionen erzeugt. Mit steigender Ionenmasse nimmt die Defektdichte im Halbleiter zu. Je nach Substrattemperatur können die erzeugten Defekte während der Implantation teilweise wieder ausheilen. Bei nicht zu hohen Temperaturen bilden sich kleine amorphe Cluster, deren Akkumulation mit zunehmender Ionenfluenz schließlich zur Bildung einer amorphen Schicht führt. Je nach Ionenenergie kann bei diesem Prozeß der Volumen-Amorphisierung die amorphe Schicht an der Oberfläche oder in der Tiefe des Halbleiters entstehen.

Amorphe Schichten in einkristallinem Silicium rekristallisieren bei Temperaturen oberhalb 500 °C durch thermische Festphasenepitaxie. Der gleiche Effekt kann bei niedrigeren Temperaturen mit der Ionenstrahlinduzierten Epitaxie erreicht werden, wo der Halbleiter mit hochenergetischen Ionen bestrahlt wird. Bei einer Absenkung der Substrattemperatur verlangsamt sich der IBIEC-Prozeß und kommt schließlich bei einer kritischen Temperatur ganz zum Erliegen. Unterhalb dieser Temperatur beginnt die Schicht wieder zu wachsen. Diesem Umkehreffekt der Epitaxie, der planaren Amorphisierung, ist bisher nur wenig Aufmerksamkeit in der Forschung gewidmet worden. Dahingegen wurde die Ionenstrahlinduzierte Epitaxie in Silicium in den letzten Jahren im wesentlich stärkerem Maße untersucht [90Pri][93Cus][93Hee].

So gibt es bis heute nur wenige Publikationen zur planaren Amorphisierung in Silicium. Außerdem sind experimentelle Untersuchungen zu diesem Effekt nur bei Temperaturen oberhalb 0 °C durchgeführt worden [93Kan][94Bat]. Die Kinetik dieses Prozesses ist noch weitgehend unklar. Es ist auch noch kein Versuch unternommen worden, alle bisher vorliegenden experimentellen Daten in einen größeren Zusammenhang zu stellen und mit einem theoretischen Modell zu erklären. Die Modellierung dieses Prozesses steckt noch in den Anfängen. Daher lag es nahe, experimentelle Untersuchungen zur planaren Amorphisierung, insbesondere bei Temperaturen unterhalb Raumtemperatur durchzuführen, um die Kinetik dieses Prozesses in diesem Regime näher zu beleuchten.

Nach Kenntnis des Autors gab es bisher noch keine Diskussion in der Literatur über potentielle Anwendungsmöglichkeiten. Vorstellbar wäre aber eine Nutzung dieses Prozesses für die präzise Strukturierung von amorph-kristallinen Schichtstrukturen für elektronische und optische Anwendungen (z.B. Wellenleiter).

Zur Untersuchung der Prozeßkinetik ist die Bestimmung der Dicke der amorphen Schicht in Abhängigkeit von den Bestrahlungsparametern erforderlich. Das ist mit ex-situ-Verfahren wie Rutherford Rückstreuung, Elektronenmikroskopie und mit optischen Methoden möglich, jedoch sehr zeitaufwendig. Aus der Literatur ist bekannt, daß optische Reflektivitätsmeßtechniken unter bestimmten Bedingungen zur in-situ-Analyse von Schichtwachstumsprozessen herangezogen werden können. Eine wesentliche Aufgabe dieser Arbeit bestand deshalb auch darin, eine zeitaufgelöste Reflektivitätsmeßtechnik aufzubauen und zu prüfen, inwieweit diese zur Untersuchung der planaren Amorphisierung angewendet werden kann.

In der vorliegenden Arbeit wird die planare Amorphisierung in Silicium im Temperaturbereich zwischen -192 °C und +80 °C untersucht. Zunächst wird im Kapitel 2 der gegenwärtige Stand experimentell gesicherter Erkenntnisse und der Modellierung dieses Prozesses dargelegt. Dabei wird auch auf Gemeinsamkeiten und Unterschiede zur Volumen-Amorphisierung eingegangen. Zur Charakterisierung des Schichtwachstums und der Strahlenschäden werden die Rutherford Rückstreuungspektroskopie, die zeitaufgelöste in-situ-Laserreflektometrie und die Elektronenmikroskopie herangezogen. Im Kapitel 3 werden die Grundlagen der optischen in-situ-Technik und der Rutherford Rückstreuung behandelt. Da die Elektronenmikroskopie ein Standardverfahren der festkörperphysikalischen Analytik ist, wird in dieser Arbeit nur auf Besonderheiten bei der Anwendung dieser Technik eingegangen. Einzelheiten zur experimentellen Methodik werden im 4. Kapitel dargelegt. Im Kapitel 5 werden die gewonnenen experimentellen Ergebnisse vorgestellt. Diese und die aus der Literatur verfügbaren Resultate werden im Kapitel 6 im Zusammenhang diskutiert. Dabei wird auch auf die im Kapitel 2 vorgestellten Modelle der planaren Amorphisierung eingegangen.

## 2 Ionenstrahlinduzierte Amorphisierung in Silicium

### 2.1 Volumen-Amorphisierung

Durch Ionenbestrahlung eines Halbleiters wird Energie in elektronische Anregungsprozesse und elastische Kernstöße deponiert. Überschreitet die in einem nuklearen Stoß auf das Gitteratom übertragene Energie einen Schwellenwert (Versetzungsenergie  $E_d$ ), so wird es von seinem Gitterplatz versetzt. Unter einer atomaren Versetzung ist hier nicht eine Versetzungslinie oder -schleife (*Dislocation*), sondern eine Atomverlagerung (*Displacement*) zu verstehen. Es entsteht eine Leerstelle und ein Zwischengitteratom (Frenkelpaar). Für Silicium wird  $E_d$  mit etwa 13 bis 16 eV angegeben [79And][72Gib]. Das Zwischengitteratom kann, sofern seine kinetische Energie ausreicht, weitere Atome von ihren Gitterplätzen versetzen, die ihrerseits wieder Atome verlagern können. Es kommt zur Herausbildung einer Stoßkaskade, in der weniger die Primärionen, sondern die herausgeschlagenen Atome (*Recoil*- oder *Knock-on*-Atome) für die Schadensakkumulation verantwortlich sind. Bei fortgesetzter Bestrahlung und nicht zu hoher Substrattemperatur wächst die Konzentration der Punktdefekte, die schließlich zu komplexen Festkörperdefekten (Punktdefektcluster) akkumulieren. Diese diskreten Strahlenschäden haben einen großen Einfluß auf die elektronischen Eigenschaften des Halbleitermaterials und wurden deshalb in der Vergangenheit intensiv untersucht [94Nij].

Im Frühstadium der Schadensakkumulation entstehen kleine amorphe Cluster [95Cel], die bei anhaltender Ionenbestrahlung sich immer mehr ausdehnen und schließlich überlappen. Es kommt zur Bildung einer amorphen Schicht in der Tiefe, wo die nukleare Energie-deponierung ein Maximum hat. Mit zunehmender Fluenz wird die amorphe Schicht dicker und erreicht im Fall niederenergetischer Ionenbestrahlung (keV-Bereich) schnell die Oberfläche. Hochenergetische Ionen (MeV-Bereich) können aufgrund ihrer größeren Reichweite im Festkörper eine vergrabene amorphe Schicht erzeugen, die ebenfalls ab einer bestimmten Fluenz die Oberfläche des Halbleiters erreicht. Dieser Effekt der Volumen-Amorphisierung ist seit den sechziger Jahren bekannt [67Dav][78Rys] und bis heute bei vielen Materialien Gegenstand der Forschung.

Die Mikrostruktur des amorphen Siliciums ist bis heute noch nicht völlig geklärt. Experimentelle Befunde belegen, daß die Nahordnung im Vergleich zu der des Einkristalls unverändert, die Fernordnung (Abstand  $> 10 \text{ \AA}$ ) jedoch gestört ist [96Mot1]. Die Realstruktur, die auch Defekte und Fremdatome (z. B. Wasserstoff) enthalten kann, ist stark von den Präparationsbedingungen abhängig [91Roo][95Mot1]. Einfache Strukturmodelle gehen von einem Netzwerk (*Continuous Random Network, CRN*) kovalent gebundener Siliciumatome aus [73Pol][85Woo]. Diese Modellvorstellungen sind jedoch mit neueren experimentellen Befunden insofern nicht mehr konsistent, als diese auf verschiedene Arten von Defekten im amorphen Material hinweisen [94Sto][95Mot2]. Amorphes Silicium unterscheidet sich nicht nur in der Struktur von kristallinem Silicium, sondern auch in den elektronischen [94Pri], optischen [93Rei][94Chr] und vielen anderen Eigenschaften. Die Amorphisierung des Kristalls kann mit der Rutherford Rückstreuung [78Chu1], Elektronenmikroskopie [88Cla], Ramanspektroskopie [85Bee] und anderen Analyseverfahren untersucht werden. Da die Kriterien für den Grad der Strahlenschädigung bei Einkristallen von der Meßmethode abhängig sind, können sich je nach der verwendeten Methode unterschiedliche Werte für die zur Amorphisierung notwendigen Ionenfluenz  $\Phi_A$  ergeben.

Aus experimentellen Untersuchungen ist bekannt, daß  $\Phi_A$  von der Temperatur, der in elastische Kernstöße (nuklear) deponierten Energie, der Ionenstromdichte und den



Substrateigenschaften abhängig ist [82Car][88Ell]. Die Amorphisierungsfluenz steigt mit zunehmender Temperatur und abnehmender Ionenmasse [72Mor][78Den]. Letzteres ist leicht nachvollziehbar, da schwere Ionen mehr Energie in atomare Versetzungen deponieren als leichte Ionen. Der Temperatureffekt kann mit einer thermischen Ausdiffusion von Punktdefekten aus amorphen Clustern erklärt werden. Die Clustergröße nimmt demzufolge mit steigender Temperatur ab, das wiederum erfordert eine höhere Amorphisierungsfluenz [70Mor]. Eine experimentelle Stromdichteabhängigkeit wurde zwar schon früher gefunden [73Voo], aber erst in den letzten Jahren systematisch untersucht [88Ell][90Wil][95Gol]. Auch die Substrateigenschaften, d.h. die Kristallstruktur und -orientierung als auch Dotanden und deren Konzentration im Halbleiter haben zwar keinen starken, aber dennoch meßbaren Einfluß auf  $\Phi_A$  [82Car][93Cam].

Durch atomare Stoßprozesse nimmt die Konzentration der Defekte während der Ionenbestrahlung stetig zu. Wird eine kritische Defektdichte überschritten, kollabiert das Material spontan zum amorphen Zustand. Auf dieser Annahme beruht das Kritische Energiedichtemodell (auch Kritisches Defektdichtemodell genannt), das zuerst von Stein et al. [71Ste] vorgeschlagen und seitdem immer wieder diskutiert wurde [84Nar1][89Cla][93Laa]. Für Metalle und Halbleiter wird angenommen, daß die durch die Ionenbestrahlung erzeugte Defektdichte im Material mit der nuklear deponierten Energiedichte korreliert [89Cla]. Dann entspricht der kritischen Defektdichte  $\bar{\epsilon}$  eine kritische Energiedichte  $\epsilon$ , die in atomare Versetzungsprozesse deponiert werden muß, um den Halbleiter zu amorphisieren. Nach diesem Modell kann bei Kenntnis von  $\epsilon$  und der nuklearen Energiedeposition  $S_n$  pro Ion und Weglänge die Amorphisierungsfluenz  $\Phi_A$  entsprechend

$$\Phi_A = \frac{\epsilon}{S_n} \quad (1)$$

berechnet werden. Für Ionen mit Energien im keV-Bereich liegt  $\epsilon$  in Abhängigkeit von der Substrattemperatur und Ionenmasse im Bereich von  $2 \times 10^{23}$  bis  $5 \times 10^{24}$  eV/cm<sup>3</sup> bzw. 4 bis 100 eV/Atom [85Pru][91Jon]. Daß diese bei hochenergetischen Ionen noch etwas höher ist, wird auf einen komplexen Mechanismus der Defektmigration und -rekombination infolge der höheren elektronischen Energiedeposition bei MeV-Ionen zurückgeführt [89Tam]. So wurde zum Beispiel bei Arsen-Ionen mit Energien unterhalb 200 keV eine Energiedichte  $\epsilon$  von etwa  $2 \times 10^{23}$  eV/cm<sup>3</sup> bzw. 5 eV/Atom [85Pru] gefunden. Bei Energien im MeV-Bereich erhöht sich  $\epsilon$  auf  $5 \times 10^{24}$  eV/cm<sup>3</sup> bzw. 100 eV/Atom [82Byr].

Ein wesentliches Merkmal der Volumen-Amorphisierung besteht darin, daß bei amorphen Oberflächenschichten ein breiter Übergangsbereich zum kristallinen Substrat existiert, der vor allem in der Nähe der "rauen" amorph/kristallinen Grenzfläche noch kleine amorphe Cluster enthält [82Byr]. Zusätzlich ist dieser Bereich durch gestörte kristalline Gebiete (Punktdefekte) charakterisiert. Die Defektdichte ist nahe der amorphen Zone sehr hoch und nimmt mit zunehmender Entfernung von ihr kontinuierlich ab. Bei vergrabenen amorphen Schichten wird dieses Übergangsgebiet auch oberhalb der amorphen Schicht beobachtet [87Rai].

Die Nukleation einer amorphen Phase im Halbleiter wird verhindert, d.h. das "Amorphisierungsregime" verlassen, wenn bei gegebenen Implantationsparametern die Substrattemperatur erhöht wird. Bei einer bestimmten Temperatur wird ein Regime erreicht, in dem Volumen-Amorphisierung und dynamische Defektausheilung im Gleichgewicht stehen [90Wil]. Diese kritische Temperatur variiert bei gegebener Energiedeposition stark mit der Ionenstromdichte [94Wil2]. Bei einer weiteren Temperaturerhöhung überwiegt die dynamische Defektausheilung.

Mehrere Modelle sind bisher vorgeschlagen worden, um die Temperatur-, Energie- und Fluenzabhängigkeit der Volumen-Amorphisierung abzuschätzen. Modellvorstellungen auf der Grundlage einer homogenen [69Voo][71Cha] als auch heterogenen Nukleation einer amorphen Phase [70Mor][72Gib] wurden entwickelt. Dazu kam das Kritische Energiedichte-Modell [73Voo][93Laa], dessen Konzept von den sogenannten Kompositionsmodellen [78Den][79Web] aufgegriffen wurde. Alle diese und auch neuere Modelle [86Hec][88Cer][93Cam] sind nicht in der Lage, ein geschlossenes Bild der Nukleation der amorphen Phase zu liefern. Bis heute kann der mikroskopische Prozeß der Volumen-Amorphisierung nur unvollständig erklärt werden, trotzdem viele Parameterabhängigkeiten bekannt sind.

## 2.2 Planare Amorphisierung

### 2.2.1 Definition und Abgrenzung des Begriffes

Eine amorphe Oberflächenschicht auf einkristallinem Silicium mit einer scharfen Grenzfläche kann sich beim Durchschuß mit hochenergetischen Ionen auf Kosten des Substratmaterials ausdehnen, d.h. die Grenzfläche zwischen dem amorphen und kristallinen Material (a/c-Grenzfläche) wandert in das kristalline Substrat hinein (s. Abb. 1).

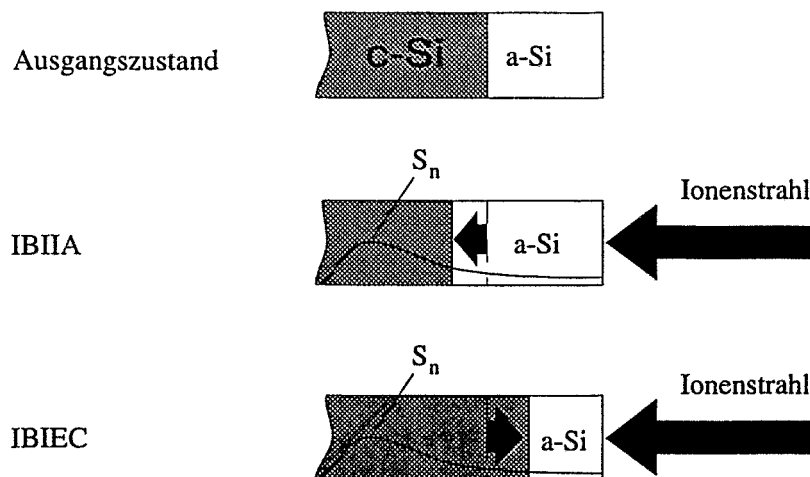


Abb. 1: Schema zur ionenstrahlinduzierten planaren Amorphisierung (IBIIA) und ionenstrahlinduzierten Epitaxie (IBIEC)

Bei diesem Prozeß der planaren Amorphisierung bleibt, im Unterschied zur Volumen-Amorphisierung, die a/c-Grenzfläche stets "eben", ihre Rauigkeit beträgt nur wenige Atomlagen [87Ell1]. Das Wachstum erfolgt schichtweise, daher wird dieser Prozeß auch *planar Layer-by-Layer Amorphization* [90Pri] oder auch *Ion Beam Induced Interfacial Amorphization (IBIIA)* [87Lei] genannt. IBIIA wurde nach Kenntnis des Autors zuerst von Nakata Anfang der achtziger Jahre beobachtet [81Nak][82Nak], später intensiver an den AT&T Bell Laboratories [87Lei][87Bro], am Royal Melbourne Institute of Technology (RMIT) [87Ell1][87Ell2] und an der Chalmers University of Technology in Göteborg [87Lin1][87Lin2] untersucht.

In den IBIIA-Experimenten liegt das Maximum der nuklearen Energiedeposition erheblich tiefer als die a/c-Grenzfläche der Oberflächenschicht, d. h. die Ionenenergie beträgt mindestens einige 100 keV, üblicherweise einige MeV. Damit wird garantiert, daß der Amorphisierungsprozeß an der Grenzfläche nicht durch sogenannte *End of Range*-Effekte (EOR) beeinflußt wird [87Bro]. Das Tiefenprofil der nuklear deponierten Energie  $S_n(x)$  hat im allgemeinen den in Abbildung 1 dargestellten Verlauf. Der IBIIA-Prozeß unterscheidet sich von dem der Volumen-Amorphisierung noch in zwei Punkten. Zum einen wird planare Amorphisierung unterhalb der, für die Volumen-Amorphisierung notwendigen, kritischen Energiedichte von etwa  $5 \times 10^{24}$  eV cm<sup>-3</sup> beobachtet [87Ell1][87Lei]. Zum anderen ist von Rutherford-Rückstreuungsmessungen in Verbindung mit der Kanalisierungstechnik (*Rutherford Backscattering Spectrometry / Channeling, RBS/C*) bekannt, daß die Defektdichte im kristallinen Bereich unmittelbar hinter der a/c-Grenzfläche im Vergleich zum Ausgangszustand nur wenig zunimmt. Im Gegensatz dazu wird bei der Volumen-Amorphisierung vor und hinter dem amorphen Gebiet immer ein dichtes Defektband beobachtet [87Ell1].

Es hat sich herausgestellt, daß bei einer konstanten Ionenstromdichte IBIIA nur unterhalb einer kritischen Temperatur, der Umkehrtemperatur  $T_u$ , stattfindet [88Lin]. Diese ist stark von der Stromdichte und der nuklear deponierten Energie an der a/c-Grenzfläche abhängig und liegt bei Silicium gewöhnlich im Bereich  $50^\circ\text{C} < T_u < 300^\circ\text{C}$ . Ein empirischer Fit der experimentellen Daten von Linnros et al. liefert für die Umkehrtemperatur die folgende Beziehung

$$T_u = \frac{c_1}{c_2 - \ln(j N_u^2)} \quad (2)$$

wobei  $c_1 = 13400$  K und  $c_2 = 62,1$  sind ( $j$  in cm<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup>,  $N_u$  in Atomversetzungen pro nm) [88Lin][93Koe]. Wird bei konstanter Stromdichte  $j$  die Temperatur über  $T_u$  hinaus erhöht, findet keine planare Amorphisierung mehr statt. Beobachtet wird statt dessen ein Schrumpfen der amorphen Schicht, d.h. die a/c-Grenzfläche wandert zur Oberfläche hin. Dieser zu IBIIA konkurrierende Prozeß der Rekristallisation einer amorphen Schicht wurde schon Anfang der siebziger Jahre bei RBS-Messungen nachgewiesen [70Wes][71Bog]. Eine Rekristallisation kann auch dann stattfinden, wenn  $j$  auf einen Wert unterhalb einer kritischen Stromdichte  $j_u$  abgesenkt wird.

Die Rate der planaren Amorphisierung  $r_A$  wird als Schichtdickenzuwachs  $dx$  pro Fluenzeinheit  $d\Phi$  definiert

$$r_A \equiv \frac{dx}{d\Phi} \quad (3)$$

( $[dx] = nm$ ,  $[\Phi] = cm^{-2}$ ,  $[r_A] = \frac{nm}{cm^{-2}}$ ). Die IBIIA-Rate hängt nach den gegenwärtigen Erkenntnissen von der Temperatur, der Ionenstromdichte und der nuklear deponierten Energie an der a/c-Grenzfläche ab. Diese Parameterabhängigkeiten werden im folgenden Abschnitt detaillierter vorgestellt, außerdem soll der Einfluß des Substratmaterials auf die planare Amorphisierung zur Sprache kommen. Wenn bei einer gegebenen Stromdichte  $T = T_u$  ist, bewegt sich die a/c-Grenzfläche während der Ionenbestrahlung nicht, d.h. IBIIA und IBIEC sind im Gleichgewicht. Die bisher für diesen Übergangsbereich bekannten experimentellen Ergebnisse werden ebenfalls im nächsten Abschnitt dargelegt. Die Modellierung der planaren Amorphisierung wird im Kapitel 2.2.3 behandelt.

## 2.2.2 Bisherige experimentelle Resultate

### • Temperaturabhängigkeit

Von allen Forschungsgruppen, die IBIIA untersucht haben, ist eine Temperaturabhängigkeit der IBIIA-Rate nachgewiesen worden. Diese kann (für Temperaturen unterhalb  $T_u$ ) mit einem inversen Arrhenius-Gesetz wie folgt beschrieben werden:

$$r_A = r_{A_0} \exp\left(\frac{E_A}{kT}\right) \quad (4)$$

( $r_{A_0}$  Konstante,  $k$  Boltzmann-Konstante,  $E_A$  Energieparameter). Abbildung 2 zeigt die Ergebnisse verschiedener Autoren, Unterschiede in der nuklearen Energiedeposition und der verwendeten Ionenstromdichte sind vernachlässigbar.

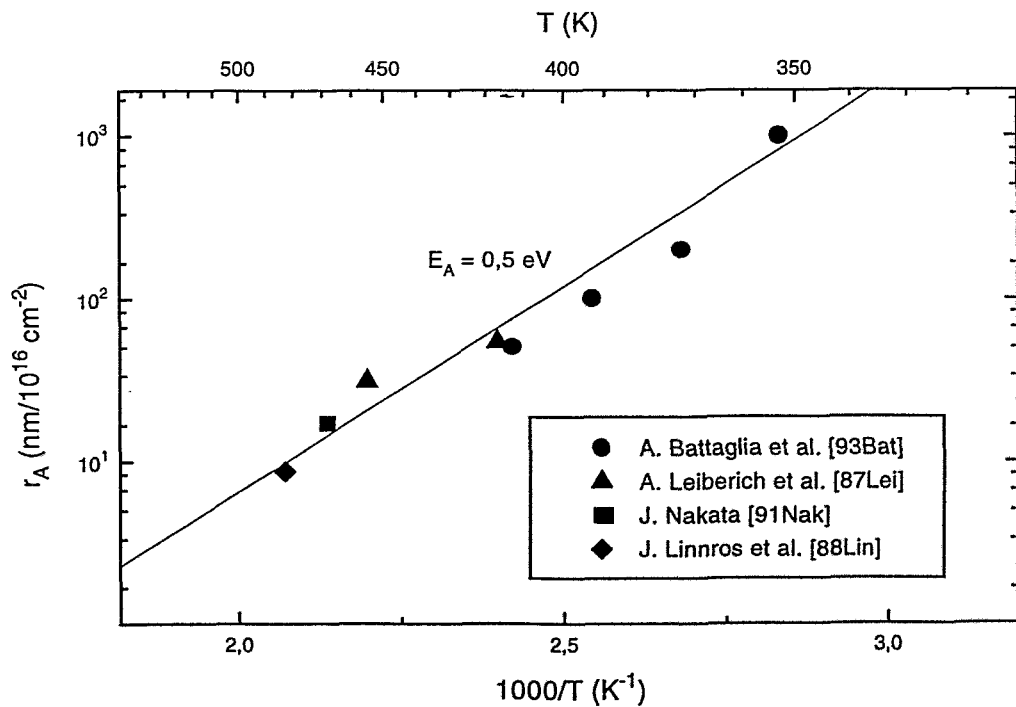


Abb. 2: IBIIA-Rate  $r_A$  in Abhängigkeit von der Temperatur  $T$   
(nach [93Bat][87Lei][91Nak][88Lin])

Der präexponentielle Faktor  $r_{A_0}$  beträgt etwa  $6 \times 10^{-5} \text{ nm}/10^{16} \text{ cm}^{-2}$ , die Energie  $E_A$  für diesen Prozeß 0,5 eV. Bei  $T \rightarrow T_u$  ergibt sich nach Gl. (4) ein sehr kleiner Wert für  $r_A$ , so daß bei dieser Temperatur praktisch keine planare Amorphisierung stattfindet.

Für sehr tiefe Temperaturen würde  $r_A \rightarrow \infty$  gehen. Das ist jedoch unrealistisch, da mit abnehmender Temperatur thermische Effekte wie Diffusions- und Rekombinationsprozesse an Bedeutung verlieren und eine rein athermische Defektgeneration durch elastische Stoßprozesse überwiegt. Da letztere nur eine endliche Zahl von Atomen pro Volumeneinheit versetzen können, sollte  $r_A$  bei tiefen Temperaturen einen Sättigungswert annehmen. Unter der Voraussetzung, daß jedes Siliciumatom in den Stoßprozessen von

seinem Gitterplatz versetzt wird, soll im folgenden der athermische Grenzwert für die Amorphisierungsrate abgeschätzt werden. Wenn  $\Delta x$  linear von der Ionenfluenz abhängt, was experimentell bestätigt wird (s. Kap. 6.2.2), kann an Stelle von Gl. (3) folgende Beziehung verwendet werden:

$$r_A = \frac{\Delta x}{\Phi} \quad (5)$$

Nach einem einfachen Modell von Kinchin und Pease kann die Zahl der von einem Ion versetzten Atome im Festkörper mit

$$N_a^{KP} = \frac{E_0}{2E_d} \quad (6)$$

abgeschätzt werden, wobei  $E_0$  die Ionenenergie ist [55Kin]. Diese Beziehung gilt u.a. nur dann, wenn beide Stoßpartner die gleiche Masse besitzen und ausschließlich elastische Stöße zwischen den als harte Kugeln betrachteten Teilchen auftreten. Die von Sigmund hergeleitete Beziehung

$$N_a^S = \zeta \frac{\nu(E_0)}{2E_d} \quad (7)$$

ist frei von dieser Einschränkung und gilt auch in Energiebereichen, wo es zu abgeschirmten Coulombstößen kommt. In Gl. (7) ist  $\zeta$  ein Faktor  $< 1$ , dessen Größe vom atomaren Wechselwirkungsprozess abhängt, und  $\nu(E_0)$  der Energieanteil, welcher in elastische Stoßprozesse deponiert wird [69Sig1]. Eine allgemeinere Rechnung liefert für  $\zeta$  0,84 [69Sig2]. Wird  $\nu(E_0)$  durch das nukleare Bremsvermögen (*Stopping Power*)  $S_n \equiv dE/dx$  ersetzt, erhält man die Zahl der pro Ion und Tiefenintervall versetzten Atome:

$$N_d(x) = \frac{0,42 S_n(x)}{E_d} \quad (8)$$

Hieraus kann die Zahl der erzeugten Versetzungen pro Atom (*displacements per atom, dpa*) berechnet werden, wenn Gl. (8) auf die Atomdichte  $n$  normiert wird. Bei Kenntnis des Bremsvermögens  $S_n$  an der a/c-Grenzfläche ist dann

$$N_{dpa}(x) = \frac{0,42 S_n(x) \Phi}{E_d n} \quad (9)$$

Diese Beziehung gilt strenggenommen nur für räumlich isolierte, nicht zu dichte Stoßkaskaden und wenn Rekombinationsprozesse und Gittereffekte (z. B. *Channeling*) vernachlässigt werden [70May]. Weiterhin enthält Gl. (9) keine Korrektur für bereits stark geschädigte oder amorphisierte Gebiete. Trotz dieser Einschränkungen sollte mit den Gln. (5) und (9) eine grobe Abschätzung für die maximale IBIIA-Rate möglich sein. Mit  $N_{dpa} = 1$ ,  $S_n = 200$  eV/nm,  $E_d = 15$  eV und  $n = 5 \times 10^{22}$  cm<sup>-3</sup> ist die Amorphisierungsfluenz  $\Phi$  bekannt. Mit diesem Wert und der Annahme, daß der Kristall nicht weiter als bis zur doppelten projizierten Reichweite amorphisiert werden kann ( $\Delta x \approx 2R_p \approx 1$   $\mu$ m), ergibt sich für die IBIIA-Rate ein athermischer Grenzwert von etwa  $10^4$  nm/10<sup>16</sup> cm<sup>-2</sup>. Dieser ist jedoch in den bisherigen experimentellen Arbeiten noch nicht nachgewiesen worden. Die verwendeten Werte für  $S_n$  und  $R_p$  gehen auf eine Monte-Carlo-Rechnung unter Benutzung des TRIM-Programmes (s.u.) zurück. Deren Parameter entsprachen den experimentellen Bedingungen, unter denen Battaglia et al. die in Abbildung 2 dargestellten Ergebnisse erhielten [93Bat]. Die Abschätzung zeigt, daß die IBIIA-Rate bei tiefen Temperaturen einen Sättigungswert annehmen muß.

## • Energieabhängigkeit

Die IBIIA-Rate ist von der nuklearen Energiedeposition der Ionen an der a/c-Grenzfläche abhängig. Bei der Untersuchung der planaren Amorphisierung von amorphen Oberflächenschichten wurde eine lineare Abhängigkeit von der Zahl der pro Ion und Tiefenintervall erzeugten atomaren Versetzungen  $N_v$  gefunden [93Gol][94Bat]. Diese wurde mit Hilfe von Monte-Carlo-Rechnungen (TRIM) [85Zie] abgeschätzt. Das TRIM-Programm berechnet in der Zweierstoß-Näherung (*Binary Collision Approximation, BCA*) die im Einzelstoß auf das Targetatom übertragene Energie. Daraus wird unter Berücksichtigung von Gl. (7) die Zahl der erzeugten Atomversetzungen bestimmt. Für jedes Tiefenintervall werden die Ergebnisse aufsummiert und beim Abbruch der Rechnung in tabellierter Form ausgegeben. Die berechnete tiefenabhängige Zahl  $N_v$  ist dem nuklearen Bremsvermögen  $S_n$  proportional, wenn die BCA nicht verletzt wird und die Bestrahlungsfluenz im Vergleich zur Atomdichte des Targets klein ist, daß das Bremsvermögen nicht durch Sputter-[81Beh][83Beh], Misch- [94Nas] und andere Effekte beeinflusst wird.

Battaglia et al. [94Bat] haben die Energieabhängigkeit detaillierter untersucht und bei der Bestrahlung mit verschiedenen Ionen eine lineare Abhängigkeit der Rate von  $N_v$  gefunden (s. Abb. 3).

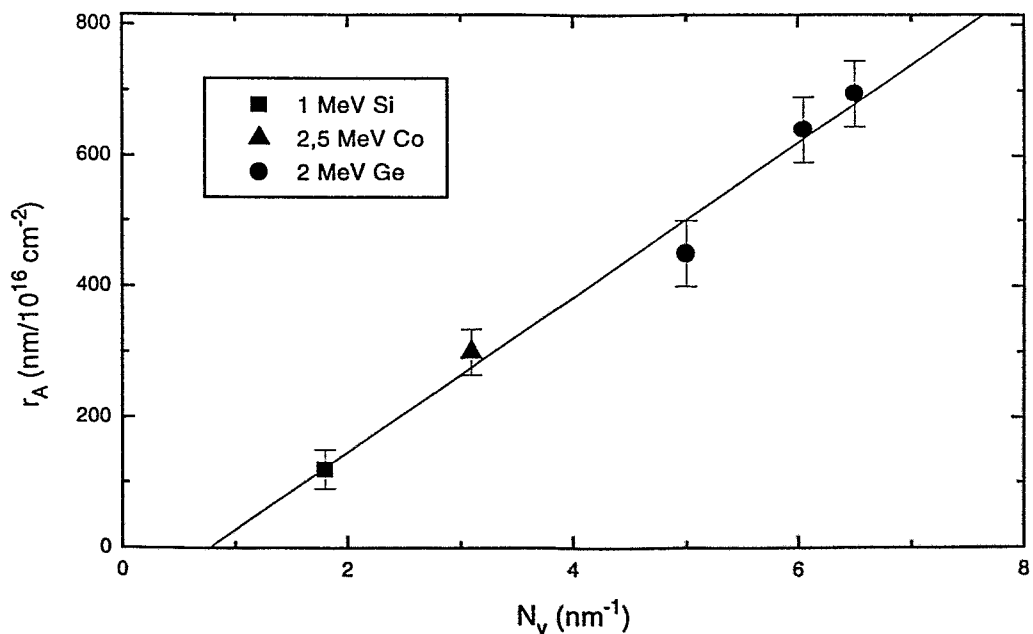


Abb. 3: IBIIA-Rate  $r_A$  in Abhängigkeit von  $N_v$  bei konstanter Stromdichte ( $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ ) und Temperatur ( $50 \text{ }^\circ\text{C}$ ) (nach [94Bat])

Ein Einfluß der elektronischen Energiedeposition auf IBIIA wird nicht vermutet, da dieser bei der Volumen-Amorphisierung von untergeordneter Bedeutung ist. Untersuchungen zu dieser Fragestellung hat es aber bisher noch nicht gegeben.

## • Stromdichteabhängigkeit

Die IBIIA-Rate ist von der Stromdichte  $j$  der auf den Halbleiter treffenden Ionen abhängig [92Suk][93Kan][94Bat]. Dieser Effekt wird aber erst dann sichtbar, wenn  $j$  um Größenordnungen variiert wird. Sukirno et al. [92Suk] haben nach einer Bestrahlung mit 40 keV  $\text{Ne}^+$  bei  $-196\text{ }^\circ\text{C}$  keine relevante Stromdichteabhängigkeit festgestellt. Dieses Ergebnis kann aber in Frage gestellt werden, da bei diesen Experimenten die Energie und damit die Reichweite der Ionen im Bezug zum Schichtwachstum zu klein gewählt wurde. Außerdem waren die Ionenstromdichten sehr hoch (bis  $1 \times 10^{14}\text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ ), so daß eine Erwärmung der Probe während der Ionenbestrahlung nicht ausgeschlossen werden kann. Bei Raumtemperatur (RT) nahm die Rate mit der Stromdichte geringfügig zu, diese Abhängigkeit wurde aber nicht näher quantifiziert. Battaglia et al. [94Bat] untersuchten diesen Effekt bei der Bestrahlung mit 600 keV  $\text{Kr}^{2+}$  bei  $100\text{ }^\circ\text{C}$  und  $120\text{ }^\circ\text{C}$ , wobei die Stromdichte zwischen  $3 \times 10^{11}$  und  $5 \times 10^{12}\text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$  variiert wurde. Diesen Ergebnissen zufolge nimmt die IBIIA-Rate mit  $j^{2/3}$  zu (s. Abb. 4). Das gilt jedoch nur für einen Temperaturbereich, in dem ausschließlich planare Amorphisierung dominiert.

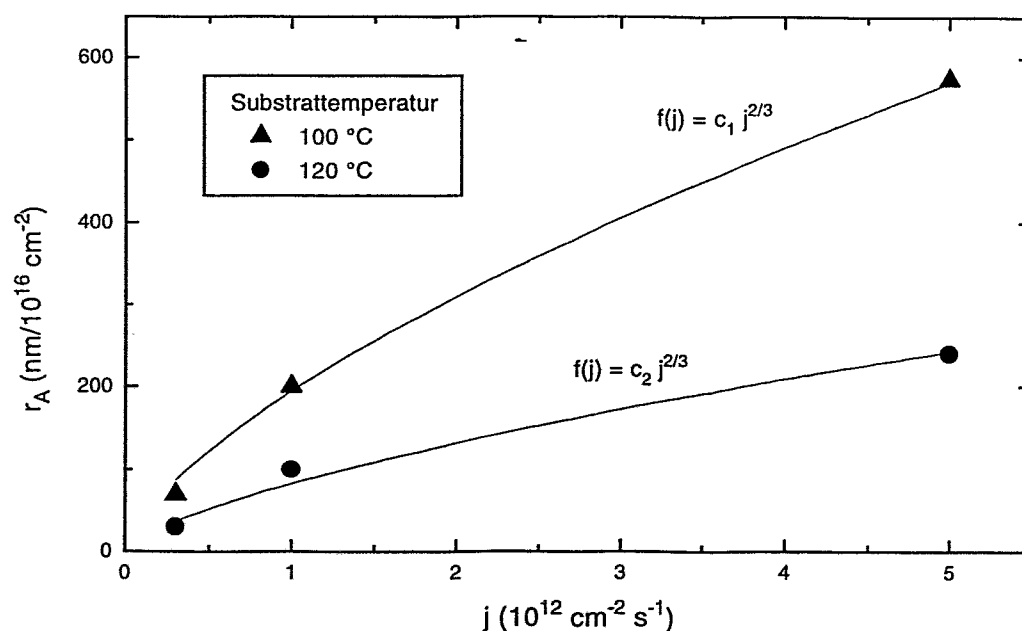


Abb. 4: IBIIA-Rate  $r_A$  als Funktion der Ionenstromdichte  $j$  bei verschiedenen Temperaturen (nach [94Bat])

Kanayama untersuchte die planare Amorphisierung von Silicium mit einem feinfokussierten Ionenstrahl (*Focused Ion Beam, FIB*), welcher mit einer Flüssigmetall-Ionenquelle erzeugt wurde [87Kan]. Da dieser Ionenstrahl auf eine sehr kleine Fläche ( $<1\ \mu\text{m}$ ) fokussiert wird, ist die in das Target eingebrachte Leistung sehr klein, d.h. im mW-Bereich. Deshalb sind Experimente mit Stromdichten von bis zu  $1 \times 10^{16}\text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$  möglich, ohne daß sich die Probe nennenswert erwärmt [87Mel]. Kanayama hat bei der Bestrahlung mit 160 keV  $\text{Si}^{2+}$  bei verschiedenen Temperaturen im Stromdichtebereich von  $1 \times 10^{13}$  bis  $1 \times 10^{16}\text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$  ebenfalls eine schwache  $j$ -Abhängigkeit festgestellt [93Kan]. Allerdings lassen sich hier bestenfalls die zwei kleinsten Stromdichte-Werte mit einer  $j^{2/3}$ -Funktion anfitten (s. Abb. 5 und 6).

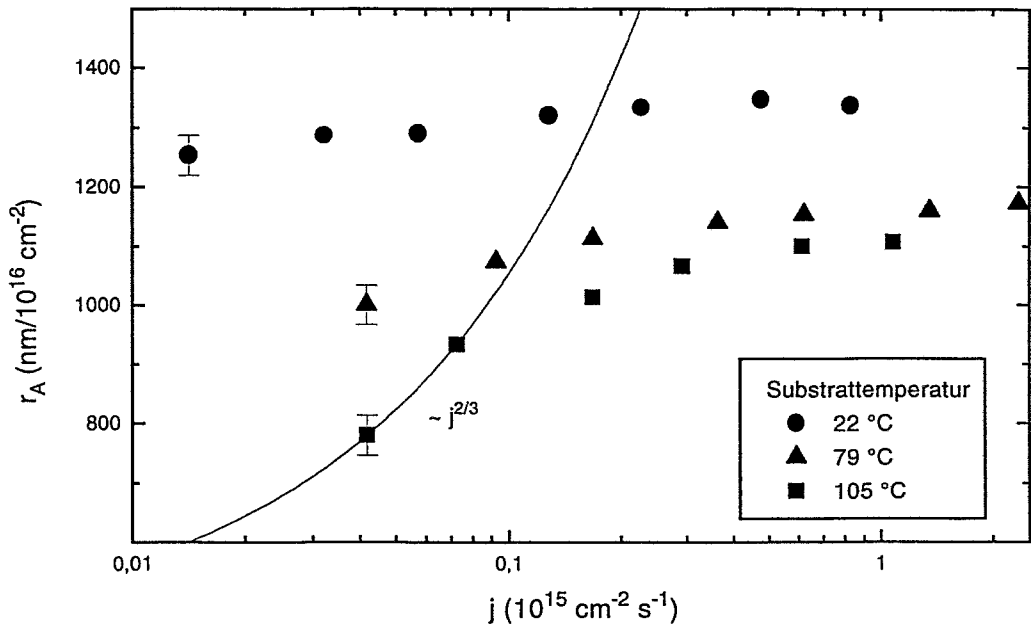


Abb. 5: IBIIA-Rate  $r_A$  als Funktion der Ionenstromdichte  $j$  bei verschiedenen Temperaturen (nach [93Kan])

Bei höheren Stromdichten strebt die Rate einem Sättigungswert zu. Bemerkenswert ist, daß der Effekt der Stromdichteabhängigkeit mit abnehmender Temperatur schwächer wird. Insbesondere ist bei RT nicht mehr sicher, ob die IBIIA-Rate wirklich noch von  $j$  abhängt.

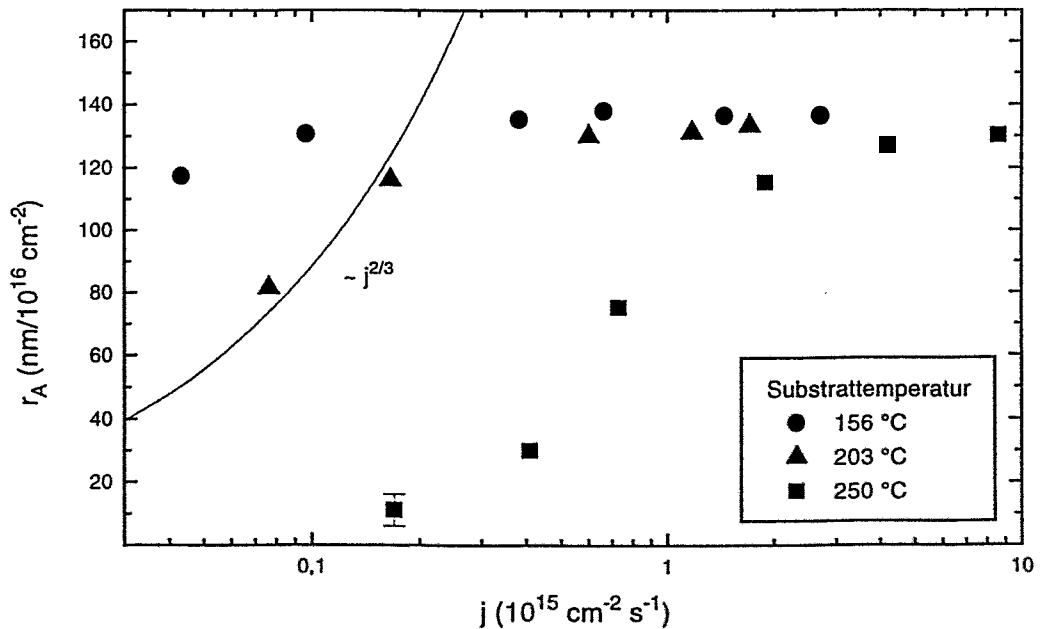


Abb. 6: IBIIA-Rate  $r_A$  als Funktion der Ionenstromdichte  $j$  bei höheren Temperaturen (nach [93Kan])



Die Dicke der amorphen Schichten wurde durch selektives Ätzen in Phosphorsäure bei 200 °C bestimmt. Die Schichtdickenänderungen, welche an den bei RT bestrahlten Proben gemessen worden sind, übersteigen nur wenig die Auflösungsgrenze dieser Methode (5nm) [87Kan][95Kan].

Bei höheren Temperaturen bis hin zur Umkehrtemperatur nimmt die IBIIA-Rate rapide ab (s. Abb. 6). Das ist nicht weiter überraschend, da jetzt der konkurrierende Einfluß der Temperatur auf die Rate spürbar wird. Dieser Effekt ist bei höheren Temperaturen stärker (exponentielle Abhängigkeit) als der der Stromdichteabhängigkeit. Außerdem wird mit zunehmender Temperatur eine Verschiebung der Kurven zu höheren Stromdichten hin beobachtet. Mit wachsender Temperatur steigt aber auch die kritische Stromdichte  $j_u$ , unterhalb der keine Amorphisierung beobachtet werden kann. Demzufolge muß der IBIIA-Prozeß bei höheren Stromdichten einsetzen. Diese Ergebnisse zeigen, daß eine  $j^{2/3}$ -Abhängigkeit nur in einem begrenzten Temperatur- und Stromdichtebereich gültig sein kann.

#### • Substrateinfluß

Von IBIEC-Experimenten in Silicium ist bekannt, daß die Orientierung des Substrates als auch dessen Dotierung mit Fremdatomen die Rekristallisationsrate beeinflussen kann [90Pri][93Cus]. Auch bei der Volumen-Amorphisierung ist experimentell eine schwache Abhängigkeit der Amorphisierungsfluenz  $\Phi_A$  von der Art des Dotanden und dessen Konzentration im Halbleiter nachgewiesen worden [93Wil]. So steigt  $\Phi_A$  beispielsweise bei einer Bordotierung von  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$  in Silicium um den Faktor 1,5 im Vergleich zum undotierten Substrat [93Cam]. Bis heute ist der Einfluß des Substrates auf die planare Amorphisierung nur in einer einzigen Arbeit untersucht worden [92Bat]. Nach der Bestrahlung einer  $\langle 111 \rangle$  orientierten Siliciumoberfläche mit 680 keV  $\text{Kr}^+$  wurde keine Änderung der IBIIA-Rate bezüglich einer  $\langle 100 \rangle$  orientierten Oberfläche registriert. Weiterhin wurde der Einfluß eines mit Bor dotierten Substrates untersucht. Die maximale Konzentration betrug etwa  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$ . Im untersuchten Temperaturbereich von 100 °C bis 140 °C wurde keine signifikante Änderung der Rate im Vergleich zum undotierten Substrat beobachtet.

#### • Übergang zur Ionenstrahlinduzierten Epitaxie

Wird, ausgehend vom IBIIA-Regime, die Temperatur bei konstant gehaltener Ionenstromdichte schrittweise erhöht, verlangsamt sich das Wachstum der amorphen Schicht. Schließlich erreicht man bei der Umkehrtemperatur  $T_u$  ein Regime, in dem die a/c-Grenzfläche sich nicht mehr bewegt. Bei dieser Temperatur sind IBIIA und IBIEC im dynamischen Gleichgewicht. Falls die Substrattemperatur in der Nähe von  $T_u$  liegt, kann dieser Zustand auch durch schrittweise Verringerung der Stromdichte bei konstant gehaltener Temperatur bis zu einem kritischen Wert  $j_u$  erreicht werden. Ein weiterer Temperaturanstieg oder eine weitere Abnahme der Stromdichte erzwingt eine Umkehr in der Grenzflächenbewegung, d.h. die amorphe Schicht wird dünner, es dominiert epitaktische Rekristallisation.

Experimentell ist nachgewiesen worden, daß die Umkehrtemperatur von der Ionenstromdichte und der nuklear deponierten Energie an der a/c-Grenzfläche abhängt [88Lin][93Gol]. Es zeigte sich, daß die kritische Stromdichte  $j_u$  in Abhängigkeit von  $1/T_u$  einem Arrhenius-Gesetz folgt. Dabei ergaben sich Aktivierungsenergien von 1,06 eV bis 1,3 eV

in Abhängigkeit von der verwendeten Ionenart. Um auch den quantitativen Einfluß der nuklear deponierten Energie im Übergangsregime näher zu beleuchten, haben Linnros et al. das Produkt aus  $j_u$  und  $N_v^2$  (Zahl der erzeugten atomaren Versetzungen pro Ion und Tiefenintervall zum Quadrat) über  $1/T_u$  aufgetragen (s. Abb. 7 u. Gl. (2)) [88Lin].

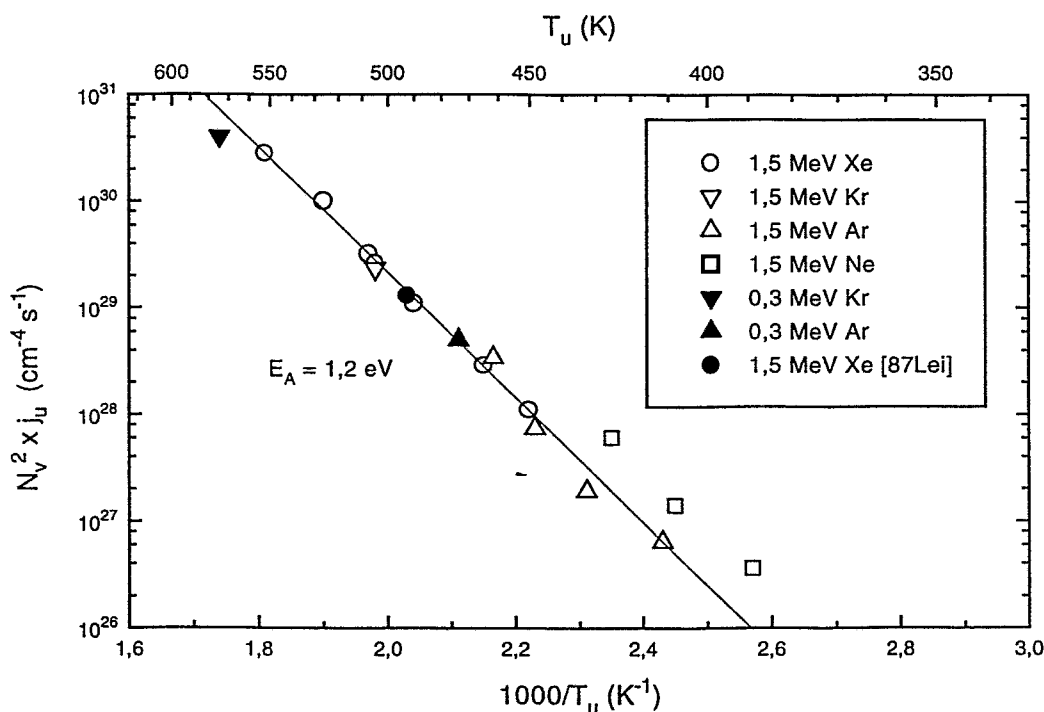


Abb. 7:  $N_v^2 \times j_u$  in Abhängigkeit von der Umkehrtemperatur  $T_u$  (nach [88Lin])

Unabhängig von der Ionenart ergab sich nun eine einheitliche Aktivierungsenergie von etwa 1,2 eV. Das ist gerade die Energie, die notwendig ist, um Doppelleerstellen auszuheilen [69Voo]. Aufgrund dieser Tatsache und der quadratischen Skalierung mit der nuklear deponierten Energie vermuten Linnros et al., daß Defekte zweiter Ordnung, zum Beispiel Doppelleerstellen über Generations- und Dissoziationsprozesse das Übergangsregime im untersuchten Temperaturbereich von 120 °C - 300 °C steuern.

Im Gegensatz dazu haben Goldberg et al. im Temperaturbereich 130 °C - 160 °C eine Aktivierungsenergie von etwa 0,9 eV gefunden [93Gol]. Es wird vermutet, daß bei diesen Temperaturen andere, nicht näher genannte Defekte für die Amorphisierung bzw. Rekristallisation verantwortlich sind.

Bemerkenswert ist, daß auch die implantierte Fluenz einen Einfluß auf die Umkehrtemperatur hat. Bei einer Bestrahlung mit 600 keV  $1 \times 10^{15} \text{ Si}^+ \text{ cm}^{-2}$  mit einer Stromdichte von  $1 \mu\text{A}/\text{cm}^2$  wurde eine Umkehrtemperatur von 55 °C gemessen. Bei einer Fluenz von  $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$  stieg  $T_u$  auf 135 °C [93Gol]. Dieser Effekt der Erhöhung der Umkehrtemperatur mit zunehmender Fluenz wurde schon bei der Volumen-Amorphisierung entdeckt [88Eil]. Hier gibt es ein ähnliches Übergangsregime, in dem dynamische Defektausheilung und Defektakkumulation im Gleichgewicht stehen [91Sch]. Bei einer Erhöhung der Fluenz wird das kritische Regime ebenfalls zu höheren Temperaturen hin bewegt [94Gol]. Elektronenmikroskopie-Aufnahmen zeigen, daß zunächst bei der mittleren projizierten Reichweite der Ionen statt amorpher Zonen ein stark geschädigtes Gebiet entsteht. Mit zunehmender

Fluenz werden die Defekte komplexer und dichter, so daß die für die amorphe Phasenbildung noch zu deponierende Energie leicht abnimmt. Dieser Effekt beeinflußt vermutlich das Gleichgewicht zwischen Defektvernichtung und -erzeugung. Diese Interpretation könnte auch für die beobachtete Fluenzabhängigkeit der Umkehrtemperatur im IBIIA/IBIEC-Übergangsregime zutreffen [94Wil2].

### 2.2.3 Modelle der planaren Amorphisierung

- Bisherige Modellvorstellungen

Für die Volumen-Amorphisierung sind eine ganze Reihe von Modellen entwickelt worden, die auf verschiedenen Konzepten beruhen und diesen Effekt teilweise erklären können. Alle diese Modelle (s. Kap. 2.1) versagen aber, sobald man sie auf die planare Amorphisierung anwendet. Da IBIIA unterhalb der für die Volumen-Amorphisierung notwendigen, kritischen Energiedichte beobachtet wird, kann das Kritische Energiedichte-Modell hier nicht angewendet werden. Auch die Stromdichteabhängigkeit der IBIIA-Rate kann von keinem dieser Modelle erklärt werden. Deshalb sind für die planare Amorphisierung Modelle entwickelt worden, die versuchen, die genannten Defizite abzubauen. Es sollen hier alle Modellvorstellungen diskutiert werden, bei denen IBIEC keine Bedeutung hat, d.h. der interessierende Temperaturbereich weit unterhalb der Umkehrtemperatur liegt.

Die einfachste Vorstellung besteht in der Annahme, daß jedes in den Festkörper eindringende Ion ein mikroskopisch kleines Volumen an der a/c-Grenzfläche amorphisiert, bevor es weit entfernt von der Grenzfläche zur Ruhe kommt. Das führt zu einer konstanten IBIIA-Rate [88Jac]. Realistischer ist dagegen das Modell von Nakata, in dem zwei Prozesse, eine athermische Generation und eine thermische Diffusion von Punktdefekten an der Grenzfläche miteinander konkurrieren [91Nak]. Danach ergibt sich für die IBIIA-Rate

$$r_A = c_G - c_D \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \quad (10)$$

wobei  $E$  die Aktivierungsenergie für die thermische Diffusion der Punktdefekte ist. Der erste Term in Gl. (10) repräsentiert die Defektgeneration, während der zweite für die Defektdiffusion verantwortlich ist. Die Konstanten  $c_G$  und  $c_D$  sind, explizit nicht näher angeführte, Funktionen der Ionenenergie und -masse. Dieses Modell ist damit nicht geeignet, die experimentellen Befunde zu erklären. Das gilt insbesondere für die beobachtete Temperaturabhängigkeit der Amorphisierungsrate.

Battaglia et al. stellten ein halbempirisches Modell auf, das auf der Akkumulation von Zwischengitteratomen an der a/c-Grenzfläche beruht [93Bat]. Innerhalb einer Stoßkaskade werden sowohl auf der amorphen als auch auf der kristallinen Seite der Grenzfläche Punktdefekte, d.h. vorwiegend Zwischengitteratome und Leerstellen, erzeugt. Die Temperatur hat auf den Prozeß der Defektgeneration keinen Einfluß. Da Grenzflächen energetisch bevorzugte Einbauplätze für Zwischengitteratome haben, kommt es zu einer Anhäufung dieser Defekte an der a/c-Grenzfläche. Dieser Prozeß ist umgekehrt proportional zur Wahrscheinlichkeit, daß ein Zwischengitteratom mit einer Leerstelle rekombiniert. Daher nimmt mit sinkender Temperatur die Häufigkeit, daß ein Zwischengitteratom an der Grenzfläche "kondensiert", mit  $e^{E_A/kT}$  zu. Hinter  $E_A$  verbirgt sich dann die für die Rekombination der beiden Partner notwendige Energie. Aufgrund der schon bekannten Stromdichteabhängigkeit der Volumen-Amorphisierung wurde vermutet, daß der Prozeß der planaren Amorphisierung ebenfalls mit der Ionenstromdichte zunimmt.

Daher wurde für die IBIIA-Rate folgende Beziehung vorgeschlagen

$$r_A = r_{A_0} j^n \exp\left(\frac{E_A}{kT}\right) \quad (11)$$

wobei  $r_{A_0}$  eine Konstante, die von der nuklear deponierten Energie abhängt, und der Exponent  $n$  ein Parameter sind. Mit diesem Modell können die experimentellen Ergebnisse nur in einem kleinen Bereich der experimentellen Parameter gefittet werden. Bei tiefen Temperaturen oder hohen Stromdichten versagt auch dieses Konzept (s. Kap. 2.2.2). Weiterhin bleibt offen, aus welchem physikalischen Grund die Rate einer  $j^n$ - Abhängigkeit folgen soll.

Carter und Nobes entwickelten ein einfaches phänomenologisches Modell, das eine Erzeugung und Ausheilung von kleinen amorphen Clustern zugrundelegt [91Car]. Es wird angenommen, daß jedes Ion ein mikroskopisch kleines Volumen an der a/c-Grenzfläche direkt amorphisiert. Dieses Volumen wächst proportional mit der nuklear deponierten Energie des Ions. Der entstandene Cluster soll die Querschnittsfläche  $\sigma_0$  und die Länge  $l_0$  senkrecht zur Grenzfläche haben. In Abhängigkeit von der Temperatur kann der Cluster jedoch thermisch relaxieren, was durch Umordnungsprozesse oder/und durch eine Abnahme der Defektdichte im Cluster verursacht werden kann. Dieser Prozeß wird durch eine Relaxationszeit  $\tau_s$  mit der Aktivierungsenergie  $E_s$ , wie folgt charakterisiert:

$$\tau_s = \frac{\tau_0}{\exp\left(-\frac{E_s}{kT}\right)} \quad (12)$$

Weiterhin wird angenommen, daß nur die pro Ion amorphisierte Fläche  $\sigma_0$  schrumpfen kann, nicht jedoch  $l_0$ . Die Beschreibung der beiden Prozesse in einer Ratengleichung führt zu der folgenden Beziehung für die IBIIA-Rate:

$$r_A = l_0 \left( \frac{1}{j \tau_s} + \sigma_0 \right) \quad (13)$$

Im Grenzfall  $T \rightarrow 0$  geht  $\tau_s \rightarrow \infty$ , so daß  $r_A$  nach Gl. (13) unabhängig von  $T$  und  $j$ , jedoch linear abhängig von  $\sigma_0$  wird. Das widerspricht nicht den Überlegungen zum athermischen Grenzwert der IBIIA-Rate (s. Kap. 2.2.2). Im allgemeinen Fall gibt dieses Modell aber die im Experiment beobachtete Temperatur- und Stromdichteabhängigkeit nicht korrekt wieder.

Im folgenden soll auf das von Wang et al. [94Wan][95Wan] vorgeschlagene Modell detaillierter eingegangen werden, weil es die experimentellen Befunde zwar nicht vollständig, aber besser als alle bisher genannten Modelle erklären kann. Dieses Modell ist sowohl für die planare Amorphisierung als auch für die ionenstrahlinduzierte Rekristallisation entwickelt worden. Es wird angenommen, daß IBIEC durch *Thermal Spikes* [81Tho] und IBIIA durch ballistische Stoßprozesse (*Knock-on*-Prozesse) stimuliert wird. Im folgenden werden nur die Bestandteile des Modells vorgestellt, die für die planare Amorphisierung von Bedeutung sind.

Auf seinem Weg durch den Festkörper deponiert das einfallende Ion Energie in elastische Stöße mit den Atomen und in elektronische Anregungsprozesse. Letztere haben bei der Amorphisierung keine Bedeutung. Bei der primären Ion-Atom-Wechselwirkung erhält das Atom in der Regel eine Energie, die größer als die Versetzungsenergie  $E_d$  ist. Damit kann das Atom seinen Gitterplatz verlassen und, sofern seine kinetische Energie noch ausreicht, weitere Atome von ihren Plätzen versetzen (*Knock-on*-Atome). Es entwickelt sich

eine Stoßkaskade, in der letztendlich eine Vielzahl von Frenkel-Defekten erzeugt werden. Diffusionsprozesse über größere Wegstrecken werden ausgeschlossen, so daß Defekte berücksichtigt werden, die in der Nähe der a/c-Grenzfläche entstehen. Diese können nicht nur die Amorphisierung, sondern auch die Rekristallisation durch Rekombinationsprozesse stimulieren. In einer Stoßkaskade werden durch Kombination von einfachen Leerstellen auch Doppelleerstellen erzeugt [93Nie], die den IBIEC-Prozeß behindern. Sie tragen nicht direkt zur Amorphisierung bei, beeinflussen aber stark das Gleichgewicht zwischen IBIEC und IBIIA. Von experimentellen Untersuchungen ist bekannt, daß Doppelleerstellen bei RT thermisch stabil sind, bei etwa 200 °C jedoch ausheilen [70Voo][72Amm].

Die amorphe Seite der Grenzfläche stellt ein Nukleationszentrum für *Knock-on*-Atome dar, die auf der kristallinen Seite der Grenzfläche entstehen, d.h. sie werden an der amorphen Struktur stabilisiert. *Knock-on*-Atome, die auf der amorphen Seite der Grenzfläche erzeugt werden, rekombinieren dahingegen zur kristallinen Struktur. Sowohl die IBIIA- als auch die IBIEC-Rate ist proportional zur Zahl der erzeugten *Knock-on*-Atome. Die von einem Ion in  $f_a$  atomaren Schichten erzeugten *Knock-on*-Atome auf der kristallinen Seite der Grenzfläche können in amorphes Material umgewandelt werden, währenddessen die in  $f_c$  Schichten erzeugten *Knock-on*-Atome auf der amorphen Seite zur kristallinen Phase rekombinieren. Die Amorphisierungsrate ist dann mit  $f_a \xi V$ , die Rekristallisationsrate mit  $f_c \xi V$  gegeben, wobei  $V$  das Volumen eines Atoms im Siliciumkristall ist. Die Zahl  $\xi$  der erzeugten atomaren Versetzungen pro Monolage kann wie folgt definiert werden

$$\xi = \frac{S_n \lambda}{2 E_d} \quad (14)$$

In Gl. (14) stellt  $S_n$  das nukleare Bremsvermögen des Ions am Ort der Grenzfläche und  $\lambda$  die Schichtdicke einer Monolage dar. Unter der Annahme, daß die auf der kristallinen Seite der Grenzfläche existenten Doppelleerstellen den Rekristallisationsprozeß behindern, gilt für die resultierende Reaktionsrate

$$r = [f_c(1 - N_D) - f_a] \xi V \quad (15)$$

wobei  $N_D$  die auf die gesamte Defektkonzentration normierte Zahl der Doppelleerstellen pro Flächeneinheit ist.  $N_D$  kann mit Hilfe einer Ratengleichung, die eine Erzeugung und Vernichtung von Doppelleerstellen berücksichtigt, berechnet werden. Es wird vorausgesetzt, daß die Generationsrate  $\propto \xi^2 j$  ist. Als der wahrscheinlichste Mechanismus von allen Vernichtungsprozessen wird die Rekombination einer Doppelleerstelle mit einem Zwischengitteratom angenommen. Die Vernichtungsrate ist daher dem Quadrat der Konzentration der Doppelleerstellen proportional. Für die zeitliche Änderung der Doppelleerstellenkonzentration  $N_D$  auf der kristallinen Seite der Grenzfläche gilt dann

$$\frac{dN_D}{dt} = g \xi^2 \frac{j}{N} (1 - N_D) - k_A N_D^2 \quad (16)$$

wobei  $g$  die Wahrscheinlichkeit für die Defekterzeugung,  $N$  die Flächendichte der Atome im Siliciumkristall und  $k_A$  eine Ratenkonstante sind. Der Term  $1 - N_D$  berücksichtigt, daß am Ort einer Doppelleerstelle nicht nochmals eine Doppelleerstelle erzeugt werden kann. Da die Defektvernichtungsprozesse in Zeiten ablaufen, die wesentlich kleiner als die Bestrahlungszeiten sind, genügt es, Gl. (16) für den stationären Fall zu lösen. Dann ergibt sich für die Gleichgewichtskonzentration

$$N_D = \frac{\alpha}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{4} + \frac{\alpha}{2}}} \quad (17)$$

wobei  $\alpha$  wie folgt definiert ist

$$\alpha = \sqrt{\frac{g j}{k_A N}} \xi \quad (18)$$

Die Ratenkonstante

$$k_A = k_{A_0} \exp\left(-\frac{E_A}{kT}\right) \quad (19)$$

ist abhängig von der Temperatur, wobei  $E_A$  die Aktivierungsenergie für die Vernichtung von Doppelleerstellen darstellt. Die Größe  $\alpha$  kann durch  $\eta X$  ersetzt werden, wobei für die neuen Variablen gilt

$$\eta = \eta_0 \xi = \sqrt{\frac{g}{k_{A_0} N}} \xi \quad (20)$$

$$X = j^{1/2} \exp\left(\frac{E_A}{2kT}\right) \quad (21)$$

Für die Reaktionsrate  $r$  ergibt sich dann unter Berücksichtigung der Gln. (15) und (17)

$$r = (f_c - f_a) \xi V - f_c \xi V \left[ \frac{\eta X}{\sqrt{1 + \left(\frac{\eta X}{2}\right)^2 + \frac{\eta X}{2}}} \right] \quad (22)$$

Gl. (22) ist von den Variablen  $\xi$  und  $X$  sowie von den Parametern  $f_c$ ,  $f_a$ , und  $\eta_0$  abhängig. Positive Werte für  $r$  deuten auf IBIEC, negative auf IBIIA hin. Der erste Term geht auf ballistische Stoßprozesse im amorphen sowie kristallinen Gebiet der Grenzfläche zurück, der zweite beschreibt die Akkumulation von Doppelleerstellen an der Grenzfläche. Nur dieser letzte Beitrag enthält eine Temperatur- und Ionenstromdichteabhängigkeit.

Mit diesem Modell können alle vorliegenden experimentellen Daten oberhalb RT bis auf die von Kanayama (s. Kap. 2.2.2) unter einer Bedingung gefittet werden: Die Parameter  $f_a$  und  $f_c$  müssen stets gleich groß sein. Diese Bedingung deutet auf eine Balance zwischen IBIIA und IBIEC hin, falls die Doppelleerstellenkonzentration  $N_D$  verschwindend gering ist. Mit zunehmenden  $N_D$  gewinnt jedoch die planare Amorphisierung an Bedeutung, deren Kinetik von der Akkumulation der Doppelleerstellen an der a/c-Grenzfläche, nicht aber durch Diffusions- oder Transportprozesse von Defekten bestimmt wird. Mit  $f_a = f_c$  verschwindet der ballistische Term in Gl. (22), so daß die IBIIA-Rate nur durch den zweiten Term beschrieben wird. Im Grenzfall  $T \rightarrow 0$  sollte der IBIEC-Beitrag vernachlässigbar, d.h.  $f_c = 0$  sein. Folglich würde  $r \rightarrow 0$  gehen, was im Widerspruch zur Argumentation zum athermischen Grenzwert steht (s. Kap. 2.2.2). Dieses Modell ist daher für die Beschreibung des IBIIA-Prozesses bei Temperaturen weit unterhalb der Umkehrtemperatur, wo IBIEC keinerlei Bedeutung hat, ungeeignet. Weiterhin wird angenommen, daß bei tiefen Temperaturen ein ballistisch getriebener Defekttransport die Kinetik entscheidend bestimmt. Solche Prozesse, wie sie auch beim Ionenmischen beobachtet werden, spielen in diesem Modell keine Rolle. Deshalb ist im Rahmen dieser Arbeit ein neues Modell für die planare Amorphisierung [96Hen2] entwickelt worden, das im folgenden vorgestellt wird.

## • Defekttransportmodell

Dieses Modell soll helfen, den IBIIA-Prozeß insbesondere bei tiefen Temperaturen zu verstehen. Grundlage des Modells ist die Evolution von einfachen Zwischengitteratomen an der a/c-Grenzfläche, wobei neben der Defekterzeugung und -vernichtung ein athermischer Transport von Zwischengitteratomen durch rein ballistische Prozesse zugelassen wird.

Die IBIIA-Rate wird mit einer Diffusionskonstanten  $D$  und einem Materialparameter  $c$  wie folgt definiert:

$$r_A \equiv c \frac{D}{j} \frac{\partial N}{\partial x} \Big|_{x=0} \quad (23)$$

d.h.  $r_A$  ist proportional zu einem Defektstrom zur Grenzfläche. Daher genügt es, nur die erste Ableitung der Defektdichte  $N$  an der a/c-Grenzfläche zu kennen. Grundlage für deren Berechnung ist eine Ratengleichung für die Defektdichte, für die im folgenden ein Ansatz gesucht werden soll.

In einer Stoßkaskade erzeugt ein in den Festkörper eindringendes Ion Leerstellen und Zwischengitteratome sowohl auf der amorphen als auch auf der kristallinen Seite der Grenzfläche. Da Zwischengitteratome mobiler als Leerstellen sind, insbesondere bei Temperaturen unterhalb RT [81Cor][92Mak], wird nur die Evolution von Zwischengitteratomen in einer Ratengleichung behandelt. Sie setzt sich aus einem Generations-, einem Vernichtungs- und einem Transport- oder Diffusionsterm zusammen.

Es wird angenommen, daß die Generationsrate der Zwischengitteratome proportional zur Ionenstromdichte  $j$  und der nuklearen Energiedeposition  $S_n$  an der a/c-Grenzfläche ist. Von Untersuchungen der Defektstruktur in Silicium ist bekannt, daß auch bei hohen Ionenfluenzen eine bestimmte Defektkonzentration im Halbleiter nicht überschritten werden kann [91Roo][94Sto]. In diesem Modell soll deshalb die Konzentration der Zwischengitteratome einen maximalen Wert  $N_{\max}$  nicht übersteigen dürfen.

Der Vernichtungsterm berücksichtigt eine paarweise Rekombination von Leerstellen und Zwischengitteratomen. Die Vernichtungsrate ist dabei proportional zur Konzentration der Leerstellen  $N_L$  als auch der Zwischengitteratome  $N_Z$  an der Grenzfläche. Unter der Voraussetzung, daß  $N_L \approx N_Z$  ist, kann die Vernichtungsrate mit  $k_A N_L^2$  beschrieben werden. Die Defektvernichtung ist temperaturabhängig, was in der Definition der Ratenkonstante entsprechend

$$k_A = k_{A_0} \exp\left(-\frac{E_A}{kT}\right) \quad (24)$$

zum Ausdruck kommt. Darin ist  $E_A$  eine für diesen Mechanismus charakteristische Aktivierungsenergie, d.h. die Migrationsenergie der Zwischengitteratome. Der präexponentielle Faktor  $k_{A_0}$  ist proportional zur Diffusion der Zwischengitteratome [83Bou]

$$k_{A_0} = k_m D \quad (25)$$

dabei stellt  $k_m$  eine Konstante dar, die vor allem von der Konfiguration des Defektes (Geometrie, Ladungszustand, Beweglichkeit usw.) abhängt [91Hol]. Weiterhin wird angenommen, daß sich die Diffusionskonstante entsprechend

$$D = D_b + D_{th} \quad (26)$$

aus einem ballistischen ( $D_b$ ) und einem thermischen Beitrag ( $D_{th}$ ) zusammensetzt. Das bedeutet, daß es neben einer schwachen thermischen Diffusion einen von der Temperatur

unabhängigen Transport von Zwischengitteratomen sowohl vom amorphen als auch vom kristallinen Gebiet zur Grenzfläche gibt. In Analogie zum atomaren Mischen ist dieser Mechanismus ein rein ballistischer Effekt und kann über klassische Diffusionsgleichungen beschrieben werden [94Nas]. Deshalb wird in die Ratengleichung ein Diffusionsterm aufgenommen, welcher den Transport von Zwischengitteratomen berücksichtigen soll.

Von experimentellen Untersuchungen des ballistischen Mischens an einer Grenzfläche ist bekannt, daß die Diffusionskonstante  $D_b$  für diesen Mechanismus nicht von der Temperatur abhängt und proportional zur nuklearen Energiedeposition an der Grenzfläche als auch zur Ionenfluenz ist [89Pri][94Nas][95For]. Demzufolge wird angenommen, daß  $D_b$  entsprechend

$$D_b = D_{b_0} S_n j \quad (27)$$

linear von der Defekterzeugungsrate  $S_n j$  abhängt. Die Proportionalitätskonstante  $D_{b_0}$  berücksichtigt nichtlineare Kaskadeneffekte sowie Unterschiede im Massenverhältnis Ion/Atom (Kinematischer Faktor) und in der Versetzungsenergie  $E_d$  [81Sig][94Nas].

Unter diesen Voraussetzungen ergibt sich für die Konzentration der Zwischengitteratome in Abhängigkeit von der Zeit

$$\frac{\partial N(x, t)}{\partial t} = k_G S_n j \left(1 - \frac{N(x, t)}{N_{\max}}\right) - k_{A_0} \exp\left(-\frac{E_A}{kT}\right) N^2(x, t) + D \frac{\partial^2 N(x, t)}{\partial x^2} \quad (28)$$

wobei folgende Randbedingungen gelten:

$$N(x = 0) = 0 \quad (29)$$

$$N(x \rightarrow \infty) = N_{\max} \quad (30)$$

Die erste Bedingung bedeutet, daß sich bei  $x = 0$ , d.h. am Ort der a/c-Grenzfläche, eine unendlich große Senke für Zwischengitteratome befindet. Dahinter verbirgt sich die Vorstellung, daß die Defekte an der Grenzfläche aufgrund einer Minimierung der freien Energie des Systems stabilisiert bzw. in das amorphe Material eingebaut werden und dann nicht mehr für Transport- oder Rekombinationsprozesse zur Verfügung stehen [90Wil][92Por1]. Die zweite Randbedingung berücksichtigt, daß weit entfernt von der Grenzfläche ein unendliches Reservoir von Defekten vorhanden ist, das nicht abgebaut werden kann. Dieser Effekt kann der starken Defekterzeugung am Maximum der nuklear deponierten Energie im Festkörper zugeschrieben werden.

Da die Bestrahlungszeiten im Experiment sehr groß gegenüber den Zeiten sind, in denen die genannten Prozesse ablaufen ( $\leq 1$  s), kann Gl. (28) zeitunabhängig gelöst werden. Damit ergibt sich im stationären Fall ( $\partial N(t)/\partial t = 0$ )

$$\frac{\partial^2 N}{\partial x^2} = -\frac{k_G S_n j}{D} \left(1 - \frac{N}{N_{\max}}\right) + \frac{k_{A_0} \exp\left(-\frac{E_A}{kT}\right)}{D} N^2 \quad (31)$$

Aus Gründen einer einfacheren mathematischen Behandlung wird eine reduzierte Defektdichte

$$n = \frac{N}{N_{\max}} \quad (32)$$

eingeführt, die nur Werte zwischen 0 und 1 annehmen kann. Damit ergibt sich mit Gl. (31) und den neuen Konstanten  $\alpha$  und  $\beta$

$$\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} = -\alpha (1 - n) + \beta n^2 \quad (33)$$



wobei

$$\alpha = \frac{k_G S_n j}{D N_{\max}} \quad (34)$$

und

$$\beta = \frac{k_{A_0} \exp\left(-\frac{E_A}{kT}\right) N_{\max}}{D} \quad (35)$$

ist. Partielle Integration der Gl. (33) führt mit der Integrationskonstanten  $\gamma$  zu

$$\frac{1}{2} \left( \frac{\partial n}{\partial x} \right)^2 + \alpha \left( n - \frac{n^2}{2} \right) - \frac{1}{3} \beta n^3 - \gamma = 0 \quad (36)$$

oder

$$\frac{\partial n}{\partial x} = \sqrt{-2\alpha \left( n - \frac{n^2}{2} \right) + \frac{2}{3} \beta n^3 + 2\gamma} \quad (37)$$

Diese Operation kann nur ausgeführt werden, wenn  $\alpha$  nicht von  $x$  abhängt, d.h.  $S_n$  in der Umgebung der a/c-Grenzfläche näherungsweise konstant ist. Unter Berücksichtigung der ersten Randbedingung (Gl. (29)) ergibt sich

$$\left. \frac{\partial n}{\partial x} \right|_{x=0} = \sqrt{2\gamma} \equiv \delta \quad (38)$$

Mit Gl. (23) folgt dann für die IBIIA-Rate

$$r_A = c N_{\max} \frac{D}{j} \delta \quad (39)$$

Die rechte Seite der Gl. (37) stellt ein elliptisches Integral dar, das nur numerisch gelöst werden kann. Exakte Parameterabhängigkeiten sind dann im Normalfall nicht mehr zu bestimmen. Deshalb sollen hier nur Grenzfälle diskutiert werden.

### • 1. Fall: Keine Rekombination ( $T \rightarrow 0$ )

Mit  $T \rightarrow 0$  verschwindet  $\beta$  und die Defektdichte erreicht schnell ihren maximalen Wert  $n_{\max} = 1$ . Genau dann verschwindet aber die erste Ableitung von  $n$ , d.h. es gilt

$$\frac{\partial n}{\partial x} = \sqrt{-2\alpha \left( n_{\max} - \frac{n_{\max}^2}{2} \right) + \delta^2} = 0 \quad (40)$$

so daß sich für  $\delta$  die einfache Lösung

$$\delta = \sqrt{\alpha} \quad (41)$$

ergibt. Bei tiefen Temperaturen überwiegt der ballistische Beitrag in  $D$ , so daß man mit  $D = D_b$  für die IBIIA-Rate unter Beachtung von (27), (34) und (39) folgende Beziehung erhält

$$r_A = c \sqrt{k_G D_{b_0} N_{\max}} S_n = r_{A_0} S_n \quad (42)$$

Im Grenzfall "Keine Rekombination" sagt dieses Modell eine von der Temperatur unabhängige Amorphisierungsrate voraus, die linear von der nuklearen Energiedeposition an der Grenzfläche, nicht aber von der Ionenstromdichte abhängt.

## • 2. Fall: Schwache Rekombination

In diesem Fall ist  $n_{\max} < 1$ . Ausgehend von Gl. (33) wird  $\alpha n$  gegenüber  $\beta n^2$  vernachlässigt. Dann gilt unter Berücksichtigung der zweiten Randbedingung (Gl. (30))

$$\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \Big|_{x \rightarrow \infty} \approx -\alpha + \beta n_{\max}^2 \quad (43)$$

Da im Unendlichen die erste als auch zweite Ableitung der Defektdichte verschwindet, ergibt sich für  $n_{\max}$  die folgende Näherungslösung

$$n_{\max} = \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} \quad (44)$$

Statt Gl. (40) gilt allgemein

$$\sqrt{-2\alpha(n_{\max} - \frac{n_{\max}^2}{2}) + \frac{2}{3}\beta n_{\max}^3 + \delta^2} = 0 \quad (45)$$

oder

$$\delta^2 = 2\alpha(n_{\max} - \frac{n_{\max}^2}{2}) - \frac{2}{3}\beta n_{\max}^3 \quad (46)$$

Der Term  $n_{\max}^2/2$  kann gegenüber  $n_{\max}$  vernachlässigt werden. Mit  $n_{\max} = \sqrt{\alpha/\beta}$  findet man die Lösung

$$\delta = \sqrt{\frac{4}{3}} \sqrt[4]{\frac{\alpha^3}{\beta}} \quad (47)$$

Für die IBIIA-Rate folgt dann unter Beachtung von (34), (35) und (39)

$$r_A = c \sqrt{\frac{4}{3}} \frac{k_G^{3/4} S_n^{3/4} j^{-1/4} D^{1/2}}{k_{A_0}^{1/4} N_{\max}} \exp\left(\frac{E_A}{4kT}\right) \quad (48)$$

Es wird angenommen, daß in diesem Regime  $D_{th} \ll D_b$  ist. Daraus folgen die Beziehungen  $D = D_b$  und  $k_{A_0} = k_m D_b$ . Mit (27) ergibt sich schließlich für die Amorphisierungsrates

$$r_A = \sqrt[4]{\frac{16k_G^3 D_{b_0}}{9k_m}} c S_n \exp\left(\frac{E_A}{4kT}\right) = r_{A_1} S_n \exp\left(\frac{E_A}{4kT}\right) \quad (49)$$

Im Grenzfall "Schwache Rekombination" sagt dieses Modell eine IBIIA-Rate voraus, die linear von der nuklearen Energiedeposition an der a/c-Grenzfläche und schwach von der Temperatur, nicht jedoch von der Ionenstromdichte abhängt.

## • 3. Fall: Starke Rekombination

Bei hohen Temperaturen existiert eine sehr starke Defektrekombination. Dann ist  $n \ll 1$ , so daß der Term  $\beta n^2$  in Gl. (33) gegenüber  $\alpha$  vernachlässigt werden kann. Daraus folgt

$$\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} = -\alpha \quad (50)$$

Diese Gleichung kann integriert werden, führt aber zu einer Schichtdickenabhängigkeit für die IBIIA-Rate. Da außerdem dieser Temperaturbereich jenseits des IBIIA-Regimes, d.h. oberhalb der Umkehrtemperatur liegt, wird dieser Fall hier nicht weiterverfolgt.

Im Kapitel 6 soll dann versucht werden, die eigenen und die aus der Literatur verfügbaren experimentellen Daten mit den Aussagen dieses Modells zu vergleichen.

## 3 Verfahren zur Charakterisierung von Schichtwachstumsprozessen

### 3.1 Überblick

Die Analyse von Schichtwachstumsprozessen hat für ionenstrahlgestützte Verfahren eine herausragende Bedeutung, da viele Fragen chemisch-physikalischer Natur von analytischen Untersuchungsmethoden beantwortet werden können. Von Interesse sind dabei Informationen über die Kinetik der Wachstumsprozesse, die Mikrostruktur und chemische Zusammensetzung der Schichten und nicht zuletzt über die Struktur von Grenzflächen. In den letzten Jahren haben sich viele Analyseverfahren in der Festkörperphysikalischen Forschung etabliert, die wertvolle Informationen über Schichtwachstumsprozesse liefern können. Ohne einen Anspruch auf Vollständigkeit zu erheben, sollen hier einige Methoden erwähnt werden, die zur Untersuchung von ionenstrahlinduzierten Prozessen beitragen können.

Die Kinetik von Wachstumsprozessen kann vor allem mit optischen Verfahren zeitaufgelöst untersucht werden [93Gle]. Aussagen über die chemische Zusammensetzung kann man von RBS/C, der Augerelektronen- (*AES*) und der Sekundärionenmassenspektroskopie (*SIMS*) bekommen. Informationen über die Mikrostruktur können die Elektronenmikroskopie und die Röntgenbeugung liefern. Grenzflächenstrukturen lassen sich mit RBS/C und der Transmissionselektronenmikroskopie (*cross-sectional Transmission Electron Microscopy, XTEM*) aufklären.

Die meisten der erwähnten Methoden sind *ex-situ*-Verfahren, d.h. mit diesen kann nur der Zustand der Probe vor und nach einem Experiment untersucht werden. Dahingegen besitzen Verfahren, die bestimmte Schichteigenschaften während des Wachstumsprozesses messen können (*in-situ*), wesentliche Vorteile. So sind Rückschlüsse auf die Kinetik des Prozesses möglich, wenn Schichtdicken zeitaufgelöst gemessen werden können. Auch Informationen über Änderungen der Rauigkeit von Grenzflächen sowie in der chemischen Zusammensetzung und der Defektdichte des Schichtmaterials sind erhältlich. Desweiteren können diese Verfahren das Einsetzen von Auscheidungen (Präzipitate) und chemischen Prozessen (Verbindungsbildung) nachweisen.

Vor allem optischen Methoden werden mit großem Erfolg als *in-situ*-Verfahren angewendet. Das betrifft alle Varianten der optischen Reflektometrie (*Laser Reflectometry* [95Far], *Spectroscopic Reflectometry* [93Kil], *Reflectance Anisotropy Spectroscopy* [95Mor], *Differential Reflectometry* [88Hum] u.a.) und der Ellipsometrie [93Mar] als auch die pyrometrische Interferometrie (*Pyrometric Interferometry*) [90Spr]. Aber auch Verfahren der Elektronenbeugung (*Reflection High Energy Electron Diffraction (RHEED)*, *TEM*) werden zunehmend als *in-situ*-Verfahren eingesetzt [91Kan][88Hoj]. Mit RHEED können jedoch nur sehr dünne Filme (10 - 20 nm) analysiert werden [91Far], bei TEM ist die Probenpräparation sehr aufwendig. Die Anwendung der beiden Verfahren bei einem höheren Gasdruck als  $10^{-3}$  Pa ist aufgrund der starken Elektronenstreuung an den Gas-molekülen problematisch.

Dagegen können optische Verfahren auch bei höheren Drücken und in einem großen Temperaturbereich eingesetzt werden. Es sind zerstörungsfreie Verfahren, wobei oft ein einfacher und kostengünstiger Aufbau realisiert werden kann. Nachteilig ist bei diesen Methoden, daß sie zum Teil komplexe Modelle zur Simulation benötigen. Die optischen Konstanten können sich während des Schichtwachstumsprozesses ändern. Für die Charak-

terisierung des Ausgangs- und Endzustandes sind oft zusätzliche Informationen notwendig, die von anderen ex-situ-Verfahren geliefert werden müssen. So können zum Beispiel mit RBS/C die Schichtdicken eines Schichtsystems bestimmt werden. Dieses Verfahren ist als in-situ-Methode zu aufwendig und auch nicht mit jedem ionenstrahlgestützten Prozeß kompatibel. Als ex-situ-Verfahren liefert es aber wertvolle Informationen sowohl über die Defektstruktur der Schichten als auch über die Rauigkeit von Grenzflächen.

Im Rahmen dieser Arbeit sind die Laserreflektometrie als in-situ- und RBS/C als ex-situ-Verfahren eingesetzt worden. Beide Methoden sollen ausführlich erläutert werden. Darüber hinaus werden XTEM-Ergebnisse gezeigt. Auf die Elektronenmikroskopie soll hier nicht eingegangen werden. Ausführliche Darstellungen zu diesem Analyseverfahren sind in [88Goo] und [77Hir] zu finden. Die hochauflösende Elektronenmikroskopie (*High Resolution Electron Microscopy, HREM*) wird beispielsweise in [88Spe] detailliert erläutert.

## 3.2 Zeitaufgelöste Laserreflektometrie

### 3.2.1 Prinzip und Anwendungen

In der Literatur gibt es keine einheitliche Bezeichnung für die Methode der zeitaufgelösten Laserreflektometrie (LR). *Dynamic Optical Reflectivity Measurements (DOR)* [92Arm], *Laser Reflectometry* [95Far], *Laser Reflectance Interferometry (LRI)* [93Bon][96Zui] und ganz allgemein *Time Resolved Reflectivity Measurements (TRR)* [93Eng] sind üblich. Das Verfahren funktioniert nach folgendem Prinzip:

Unter Prozeßbedingungen trifft ein Laserstrahl auf die Probenoberfläche. Die Intensität des reflektierten Strahles wird mit einem Detektor zeitaufgelöst gemessen. Besteht zum Zeitpunkt der Messung die Probe noch aus einem homogenen Material, so bestimmen allein die optischen Eigenschaften des Systems *umgebendes Medium/Substrat* die Höhe des gemessenen Signals. Das ändert sich, wenn man ein Einschichtsystem betrachtet (siehe Abb. 8).

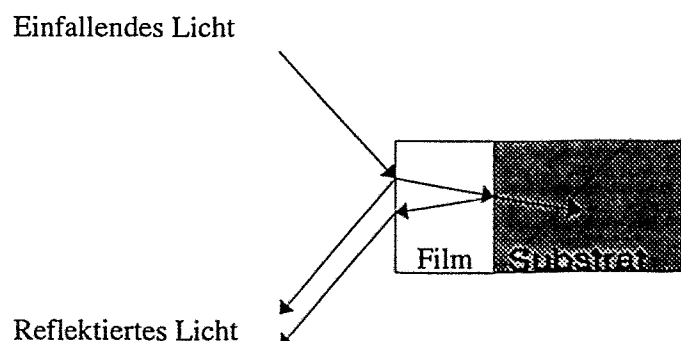


Abb. 8: Zeitaufgelöste Laserreflektometrie. Reflexion und Transmission des Laserstrahls an den Grenzflächen eines Einschichtsystems

Die reflektierte Intensität setzt sich jetzt aus einem Oberflächen- und einem Schicht-Beitrag zusammen, der von der Reflexion eines Teils des einfallenden Lichtes an der Grenzfläche *Schicht/Substrat* herrührt. Die Höhe des letzteren Beitrages wird von den

optischen Eigenschaften der Schicht (Absorption) und der Grenzfläche bestimmt. Dieser geht gegen Null, wenn die Absorption in der Schicht sehr hoch ist und/oder die optischen Konstanten von Schicht und Substrat sich zu wenig unterscheiden. Beide Anteile interferieren miteinander, so daß das resultierende Meßsignal größer oder kleiner als das Oberflächensignal ausfallen kann. Bei Mehrschichtsystemen kommt für jede Schicht noch ein Beitrag dazu. Die Höhe des Beitrages einer einzelnen Schicht hängt jedoch nicht nur von den optischen Eigenschaften der Grenzfläche und der Schicht selbst, sondern auch von den optischen Eigenschaften der darüberliegenden Schichten ab.

Ausgewertet wird die Reflektivität, d.h. das Verhältnis zwischen der Intensität des reflektierten Strahles und der des einfallenden Strahles, als Funktion der Zeit. Dabei wird der einfallende Laserstrahl in zwei Strahlen aufgespalten. Einer dient zur Messung der Intensität des einfallenden Lichtes, der andere wird auf die Probenoberfläche gelenkt und nach der Reflexion ebenfalls gemessen. Diese Methode hat zur Folge, daß Langzeitschwankungen in der Intensität eliminiert werden.

Die Reflektivität erfährt bei Phasenumwandlungen in einer Schicht, deren Dicke sich nicht ändert, eine kontinuierliche Änderung von einem konstanten Ausgangssignal zu einem konstanten Endsignal. Bei Schichtsystemen hingegen durchläuft sie Oszillationen durch wachsende oder schrumpfende Schichten. Treten beide Effekte gleichzeitig auf, ist die Auswertung besonders schwierig.

Die Anwendung des Verfahrens ist nur dann erfolgreich, wenn einige Bedingungen eingehalten werden. So muß das die Probe umgebende Medium homogen und bei der verwendeten Laserwellenlänge hinreichend transparent sein. Druck- und Temperaturverhältnisse spielen, wie schon erwähnt, eine untergeordnete Rolle. Die Rauigkeit der Grenzflächen, auch der Oberfläche, darf  $1/10$  der Wellenlänge nicht überschreiten [86Lic]. Ansonsten kommt es zu einer Dämpfung bis hin zu einer völligen Auslöschung der Interferenzen. An der jeweiligen Grenzfläche muß ein genügend großer "Sprung" in den optischen Konstanten vorhanden sein, anderenfalls geht der Beitrag dieser Grenzfläche für die Reflektivität gegen Null.

Weiterhin muß die Laserwellenlänge so gewählt werden, daß einerseits die optische Absorption in den Schichten nicht zu hoch ist, andererseits das Meßsignal nicht durch Reflexionen von der Substratrückseite bzw. Probenhalterung verfälscht wird. Letzteres tritt bei vielen Schichtsystemen im Infrarotbereich (IR) auf. In der Regel ist der Einfallswinkel des Laserstrahles auf der Probenoberfläche sehr klein, so daß die Polarisation des Lichtes keinen Einfluß auf die Reflektivität hat. Im Einzelfall kann ein größerer Winkel auftreten, das Licht sollte dann aber aus Gründen einer einfacheren Simulation linear polarisiert sein. Ein Spezialfall stellt die Methode dar, bei der parallel zur Einfallsebene polarisiertes Licht nahe dem Brewster-Winkel auf die Oberfläche trifft (*Parallel-Polarized Reflectance Spectroscopy, PRS*). Das führt zu einer erhöhten Empfindlichkeit im oberflächennahen Bereich [93Tak][95Die].

Abbildung 9 zeigt, wie aus einer Reflektivitätsmessung im Experiment und aus der Simulation der Reflektivitätskurve die Geschwindigkeit der Grenzfläche *Schicht/Substrat* bei einem Einschichtsystem bestimmt werden kann. Im Experiment wird eine zeitabhängige Reflektivität  $R(t)$  gemessen. Die Theorie liefert eine Reflektivität  $R(d)$  in Abhängigkeit von der Schichtdicke  $d$ . Aus dem Vergleich beider Kurven erhält man die Funktion  $d(t)$ . Eine Differentiation dieser Funktion nach  $t$  liefert die Geschwindigkeit der Grenzfläche  $v$  in Abhängigkeit von der Zeit  $t$  oder der Schichtdicke  $d$ , da eine feste Beziehung zwischen  $d$  und  $t$  besteht.

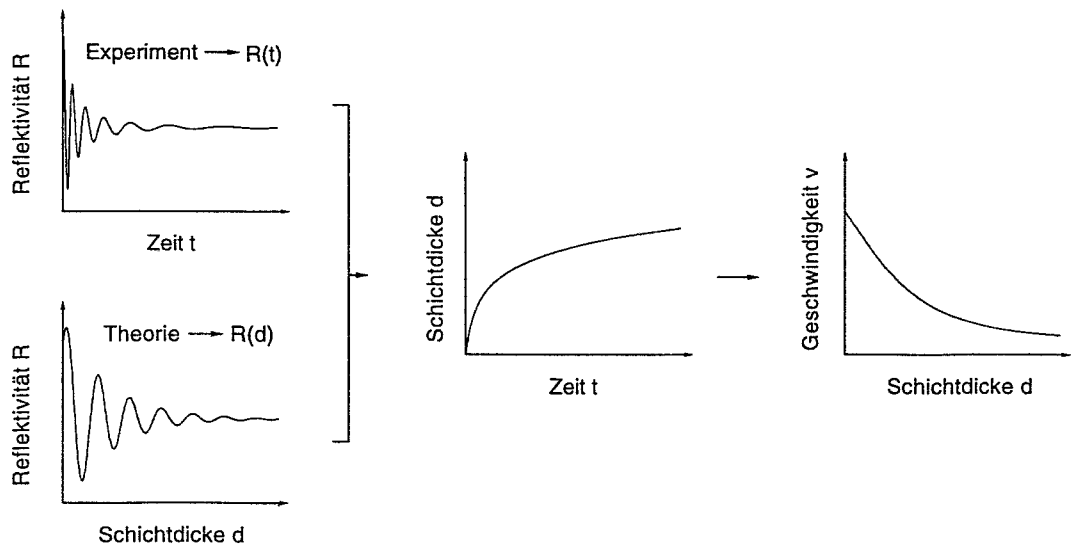


Abb. 9: Bestimmung der Grenzflächengeschwindigkeit als Funktion der Schichtdicke bei einem Einschichtsystem

In-situ-Reflektivitätsmessungen eröffnen die Möglichkeit, die Kinetik von Ausheilungsprozessen zu studieren. Angewandt wurde diese Technik erstmalig Ende der 70er Jahre bei der laserinduzierten Flüssigphasenepitaxie (*Liquid Phase Epitaxy, LPE*) [78Aus1] sowie bei der laserinduzierten Festphasenepitaxie (*Solid Phase Epitaxy, SPE*) [78Aus2][80Ols]. Diese Prozesse wurden bisher mit RBS/C und elektrischen Methoden untersucht, um die Mechanismen des epitaktischen Wachstums aufzuklären. Bei einer Temperatur von mehr als  $600\text{ }^{\circ}\text{C}$  ist das aber aufgrund der hohen Rekristallisationsrate nur sehr eingeschränkt möglich, so daß Olson et al. die zeitaufgelöste LR entwickelt haben [82Rot].

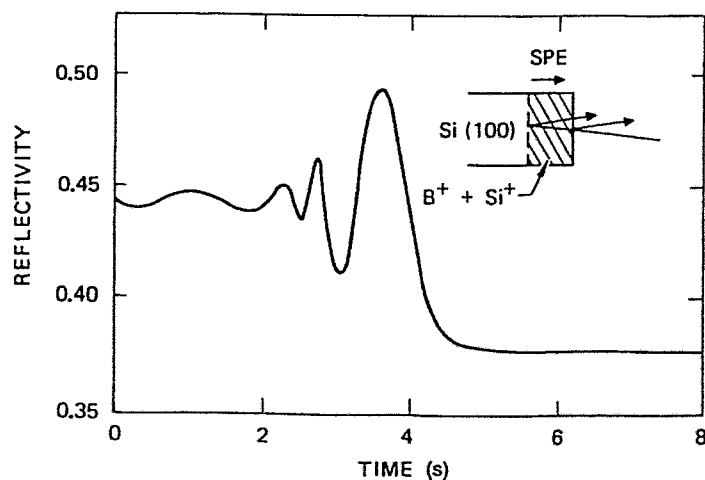


Abb. 10: TRR-Kurve von einem SPE-Prozeß einer Bor dotierten amorphen Oberflächenschicht in Silicium bei  $710\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Die maximale Borkonzentration betrug  $1 \times 10^{20}\text{ cm}^{-3}$  (nach [88Ols]).

Mit dieser Methode ist die Aufzeichnung schneller Prozesse möglich, da die zeitliche Auflösung des Systems nur durch die Zeitkonstante des Detektors und der Meßelektronik

begrenzt wird. Abbildung 10 zeigt als ein Beispiel dieser Untersuchungen die TRR-Kurve von einer Rekristallisation einer Bor dotierten amorphen Oberflächenschicht in Silicium bei einer Temperatur von 710 °C.

Auch zur in-situ-Diagnose von aufwachsenden Filmen, die mittels CVD-Verfahren (*Chemical Vapour Deposition*) [95Nai][93Raf] oder Molekularstrahlepitaxie (*Molecular Beam Epitaxy, MBE*) [90Kob][91Far] abgeschieden wurden, hat man die LR erfolgreich eingesetzt. Als ein Beispiel sei hier die TRR-Kurve von einer Abscheidung von GaAs/AlAs-Schichten auf einem GaAs-Substrat aus der Dampfphase bei 720 °C gezeigt (*Metal-Organic Vapour Phase Epitaxy, MOVPE*) (s. Abb. 11).

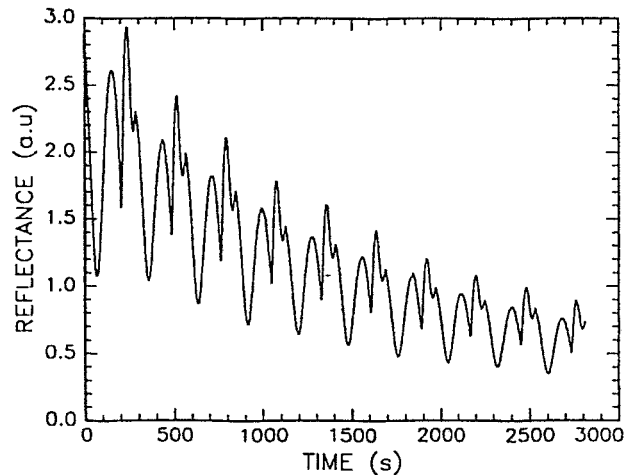


Abb. 11: TRR-Kurve von einer Abscheidung dünner GaAs/AlAs-Vielfachschichten auf GaAs aus der Dampfphase bei 720 °C (nach [93Raf])

Die LR ist erfolgreich zur Untersuchung der Kinetik des Wachstumsprozesses bei der ionenstrahlinduzierten Epitaxie eingesetzt worden [90Pri][92Bat][94Ell]. Sie vereint die Vorteile eines relativ einfachen experimentellen Aufbaus, einer genauen Tiefenauflösung (ca. 1 nm) und der uneingeschränkten Möglichkeit, Prozesse über lange Zeiten aufzuzeichnen. TRR-Messungen liefern Informationen über den Verlauf der Rekristallisationsphase, die Qualität der a/c-Grenzfläche, das Einsetzen von Nukleationen und Ausscheidungen (Präzipitate) und die Bildung von Verbindungen zwischen dem Ausgangsmaterial und Fremdstoffen. Es zeigte sich außerdem, daß diese Technik präzise Beginn und Ende der Epitaxie nachweisen kann. Auch zur Untersuchung des IBIIA-Prozesses bei Temperaturen  $\geq 100$  °C wurde die LR mit Erfolg eingesetzt [92Bat][93Bat].

Für ein tiefer gehendes Verständnis ist eine kurze Darstellung der Theorie der Reflexion von polarisiertem Licht an planaren Schichtsystemen notwendig, die im nächsten Abschnitt gegeben wird. Im Kapitel 3.2.3 werden berechnete TRR-Kurven für Schichtsysteme aus kristallinem und amorphem Silicium diskutiert. Schließlich soll im Kapitel 3.2.4 der Aufbau einer rechnergestützten Reflektivitätsmeßtechnik vorgestellt werden.

### 3.2.2 Theorie der Reflexion von Licht an Schichtsystemen

In diesem Abschnitt soll die Reflektivität für Ein- und Mehrschichtsysteme berechnet werden. Die Theorie beruht auf den Maxwell-Gleichungen, eine ausführliche Darstellung findet man in [S7Azz1].

Isotrop absorbierende Medien können durch einen komplexen Brechungsindex der Form

$$N \equiv n - k i \quad (51)$$

beschrieben werden, wobei  $n$  der reelle Brechungsindex und  $k$  der Extinktionskoeffizient ist. Dieser ist dem Absorptionskoeffizienten  $a$  entsprechend

$$k = \frac{\lambda}{4\pi} a \quad (52)$$

proportional.

Allgemein läßt sich die Reflektivität  $R$  einer monochromatischen ebenen Lichtwelle aus der Intensität  $I_e$  der einfallenden Welle und der resultierenden Intensität  $I_r$  der reflektierten Wellen wie folgt berechnen,

$$R \equiv \frac{I_r}{I_e} = \frac{\|E_r\|^2}{\|E_e\|^2} \quad (53)$$

wobei sich die Intensitäten aus dem Betragsquadrat der entsprechenden Feldstärke ergeben.

Zunächst soll die Reflektivität eines Einschichtsystems berechnet werden. Auf einem Substrat mit dem komplexen Brechungsindex  $N_2$  befindet sich eine dünne, planare Schicht mit dem Brechungsindex  $N_1$  und der Dicke  $d$ . Das Schichtsystem sei in ein beliebiges Medium mit dem Brechungsindex  $N_0$  eingebettet. In den meisten Fällen ist dieses transparent und damit  $N_0$  reell. Es wird angenommen, daß alle Materialien homogen und optisch isotrop sind (s. Abb. 12).

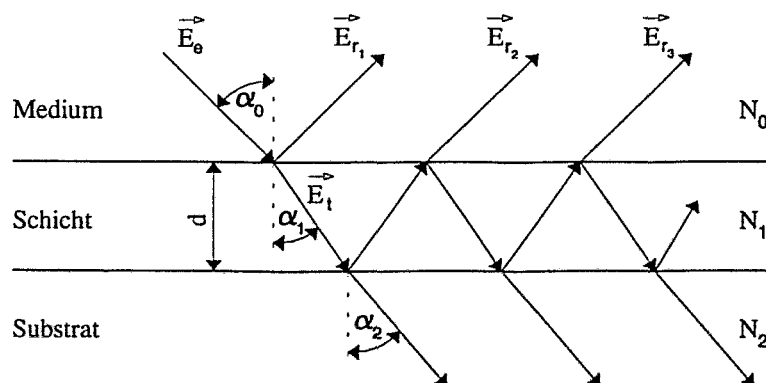


Abb. 12: Reflexion und Transmission von polarisiertem Licht an einem Einschichtsystem

Eine unter einem Winkel  $\alpha_0$  auf die Oberfläche treffende, monochromatische ebene Lichtwelle mit der Feldstärke  $\vec{E}_e$  wird in eine reflektierte Welle mit der Feldstärke  $\vec{E}_{r_1}$  und in eine transmittierte Welle mit der Feldstärke  $\vec{E}_t$  aufgespalten, wobei letztere unter einem



Winkel  $\alpha_1$  in das Schichtmaterial hineinläuft. Die Amplituden der reflektierten und transmittierten Wellen des einfallenden Lichtes können mit Hilfe der Fresnelschen Koeffizienten unter Berücksichtigung der Polarisation berechnet werden. Besitzt die einfallende Welle eine beliebige Polarisation, folgt daraus für die Fresnelschen Koeffizienten der reflektierten und transmittierten Welle parallel zur Einfallsebene (p-Polarisation)

$$r_{01,p} = \frac{N_1 \cos \alpha_0 - N_0 \cos \alpha_1}{N_1 \cos \alpha_0 + N_0 \cos \alpha_1} \quad (54)$$

$$t_{01,p} = \frac{2N_0 \cos \alpha_0}{N_1 \cos \alpha_0 + N_0 \cos \alpha_1} \quad (55)$$

Für die Koeffizienten senkrecht zur Einfallsebene (s-Polarisation) gilt entsprechend

$$r_{01,s} = \frac{N_0 \cos \alpha_0 - N_1 \cos \alpha_1}{N_0 \cos \alpha_0 + N_1 \cos \alpha_1} \quad (56)$$

$$t_{01,s} = \frac{2N_0 \cos \alpha_0}{N_0 \cos \alpha_0 + N_1 \cos \alpha_1} \quad (57)$$

Der Index 01 weist daraufhin, daß diese Gleichungen für die Grenzfläche *umgebendes Medium/Schicht*, d.h. nur für die Oberfläche gelten. Die Fresnelschen Koeffizienten haben für die Reflexion und Transmission des Lichtes an der Grenzfläche *Schicht/Substrat* die analoge Form, es müssen nur die Indizes formal um eins erhöht werden. Die Amplitude der in die Schicht hineinlaufenden Welle wird infolge der Absorption proportional zu  $\exp(-\beta i)$  gedämpft, wobei der Phasenwinkel  $\beta$  mit

$$\beta = \frac{2\pi}{\lambda} d N_1 \cos \alpha_1 \quad (58)$$

gegeben ist. Im Fall einer linear polarisierten, einfallenden Lichtwelle werden für die Berechnung der Reflektivität nur die Koeffizienten  $r_{01}$  und  $r_{12}$  der p- oder s-Polarisation benötigt. Die Teilwellen mit den Feldstärken  $\vec{E}_{r_1}, \vec{E}_{r_2}, \vec{E}_{r_3}, \dots$  bzw. komplexen Amplituden  $r_{01}, t_{01} t_{10} r_{12} \exp(-2\beta i), t_{01} t_{10} r_{10} r_{12}^2 \exp(-4\beta i), \dots$  verlassen die amorphe Schicht, interferieren miteinander und bilden die resultierende Welle mit der Feldstärke  $\vec{E}_r$ . Unter Berücksichtigung der Feldstärke der einfallenden Welle  $\vec{E}_e$  ergibt sich

$$\frac{E_r}{E_e} = r_{01} + t_{01} t_{10} r_{12} \exp(-2\beta i) + t_{01} t_{10} r_{10} r_{12}^2 \exp(-4\beta i) + \dots \quad (59)$$

Nach Summation aller Glieder der geometrischen Reihe erhält man

$$\frac{E_r}{E_e} = \frac{r_{01} + r_{12} \exp(-2\beta i)}{1 + r_{01} r_{12} \exp(-2\beta i)} \quad (60)$$

Der Feldstärkevektor einer beliebig polarisierten ebenen Welle kann in eine parallele und eine senkrechte Komponente bezüglich der Ausbreitungsebene zerlegt werden. Da diese linear unabhängig voneinander sind, läßt sich für jede Komponente die Reflektivität separat berechnen. Analog zu Gl. (53) erhält man unter Beachtung der Polarisation

$$R_p = \left\| \frac{r_{01,p} + r_{12,p} \exp(-2\beta i)}{1 + r_{01,p} r_{12,p} \exp(-2\beta i)} \right\|^2 \quad (61)$$

$$R_s = \left\| \frac{r_{01s} + r_{12s} \exp(-2\beta i)}{1 + r_{01s} r_{12s} \exp(-2\beta i)} \right\|^2 \quad (62)$$

Für beliebig polarisiertes Licht setzt sich die Reflektivität aus den Intensitäten  $I_{e_p}$  und  $I_{e_s}$  der einfallenden Welle sowie den Intensitäten  $I_{r_p}$  und  $I_{r_s}$  der reflektierten Welle wie folgt zusammen:

$$R = \frac{I_{r_p} + I_{r_s}}{I_{e_p} + I_{e_s}} \quad (63)$$

Mit (61) und (62) ergibt sich dann für die Reflektivität eines Einschichtsystems

$$R = \frac{\|\vec{E}_{e_p}\|^2 R_p + \|\vec{E}_{e_s}\|^2 R_s}{\|\vec{E}_{e_p}\|^2 + \|\vec{E}_{e_s}\|^2} \quad (64)$$

Das oben beschriebene, "klassische" Verfahren der Summation einzelner Teilwellen eignet sich nicht mehr für Systeme mit zwei und mehr Schichten, da die Berechnungen sehr komplex werden. Eine weitaus elegantere Methode beruht auf der Anwendung einer linearen Matrix-Transformation [87Azz2]. Dieser Algorithmus soll hier nur kurz skizziert werden.

Auf einem Substrat befinden sich  $m$  dünne, planare Schichten mit dem Brechungsindex  $N_j$  und der Schichtdicke  $d_j$ . Die zu Beginn dieses Abschnittes genannten Bedingungen für die Anwendung der Theorie gelten auch hier. Um die Reflektivität zu erhalten, ist zunächst eine Streumatrix  $S$  zu berechnen, die sich aus Interface-Matrizen  $I_{(j-1)j}$  und Schicht-Matrizen  $L_j$  wie folgt zusammensetzt:

$$S = I_{01} L_1 I_{12} L_2 \dots I_{(j-1)j} L_j \dots L_m I_{m(m+1)} \quad (65)$$

Die  $2 \times 2$  Streumatrix repräsentiert alle Eigenschaften der optischen Transmission und Reflexion, die das System besitzt. Speziell beschreibt die Interface-Matrix ausschließlich alle optischen Eigenschaften der jeweiligen Grenzfläche, analog charakterisiert die Schicht-Matrix alle optischen Eigenschaften der betreffenden Schicht. Um  $S$  zu erhalten, müssen demzufolge alle Interface- und Schicht-Matrizen berechnet werden. Nach Herleitung eines allgemeinen Ausdrucks für  $I$  und  $L$  erhält man

$$I_{(j-1)j} = \frac{1}{t_{(j-1)j}} \begin{pmatrix} 1 & r_{(j-1)j} \\ r_{(j-1)j} & 1 \end{pmatrix} \quad (66)$$

$$L_j = \begin{pmatrix} \exp(\beta_j i) & 0 \\ 0 & \exp(-\beta_j i) \end{pmatrix} \quad (67)$$

wobei  $r_{(j-1)j}$  und  $t_{(j-1)j}$  die Fresnelschen Koeffizienten der Reflexion und Transmission an der Grenzfläche  $j - 1/j$  und

$$\beta_j = \frac{2\pi}{\lambda} d_j N_j \cos \alpha_j \quad (68)$$

die schon genannte Phasenverschiebung (hier für die Schicht  $j$ ) ist. Im Fall einer linear polarisierten Welle ergibt sich mit den Komponenten  $S_{11}$  und  $S_{21}$  der Streumatrix für die Reflektivität eines Mehrschichtsystems

$$R = \left\| \frac{E_r}{E_e} \right\|^2 = \left\| \frac{S_{21}}{S_{11}} \right\|^2 \quad (69)$$

In Analogie zur "klassischen" Berechnung der Reflektivität müssen bei einer beliebig polarisierten Welle zunächst  $R_p$  und  $R_s$  bestimmt werden. Das bedeutet, daß für die p- und s-Polarisation die Elemente  $S_{11,p}$  und  $S_{21,p}$  sowie  $S_{11,s}$  und  $S_{21,s}$  der jeweiligen Streumatrix berechnet werden müssen. Nach der Bestimmung von  $R_p$  und  $R_s$  entsprechend

$$R_p = \left\| \frac{S_{21,p}}{S_{11,p}} \right\|^2 \quad (70)$$

und

$$R_s = \left\| \frac{S_{21,s}}{S_{11,s}} \right\|^2 \quad (71)$$

können diese Werte in Gleichung (64) eingesetzt werden. Da die Schichtmatrizen unabhängig von der Polarisation sind, brauchen diese nur einmal berechnet zu werden.

### 3.2.3 Schichtsysteme aus amorphem und kristallinem Silicium

Um die Reflektivität berechnen zu können, ist die Kenntnis der optischen Konstanten  $n$  und  $k$  des Substrat- und Schichtmaterials als Funktion der Wellenlänge notwendig. In Abbildung 13 ist die Wellenlängenabhängigkeit des Brechungsindex von kristallinem (c-Si) und amorphem Silicium (a-Si) dargestellt [85Pal1][72Pie][93Rei][95Fuk]. Die optischen Konstanten von amorphem Silicium sind stark von den Präparationsbedingungen, vom Zustand der Oberfläche (Rauhigkeit, Oxidfilm) und vom Wasserstoffgehalt in dem Material abhängig [85Pal2]. Es gibt große Unterschiede im Brechungsindex, je nachdem, ob amorphes Silicium als Schicht abgeschieden [72Pie] oder durch Ionenimplantation [93Rei] hergestellt wurde.

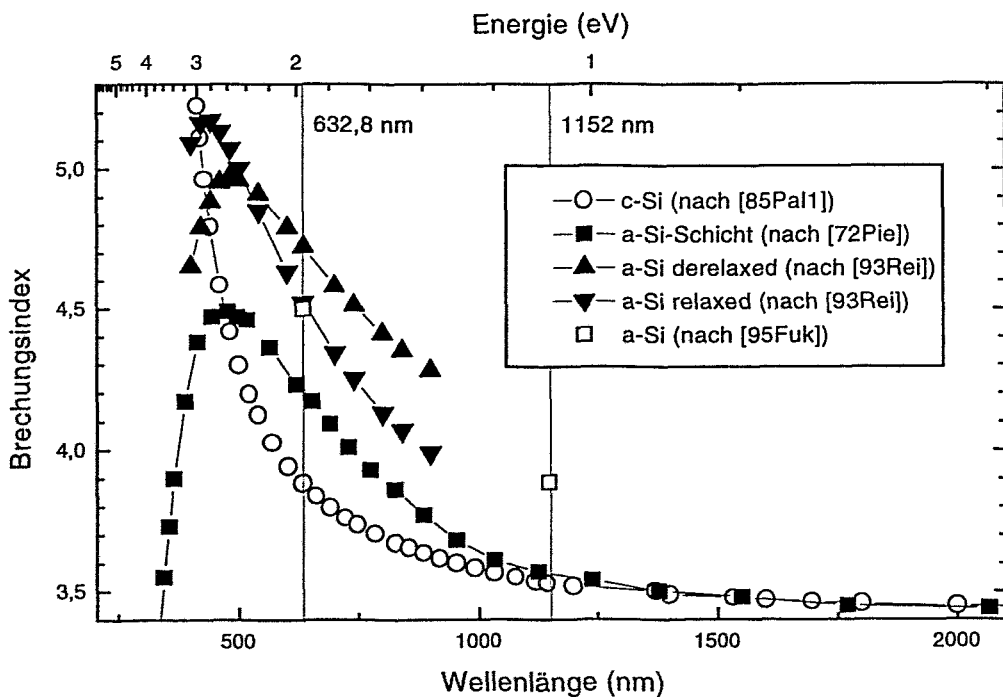


Abb. 13: Wellenlängenabhängigkeit des Brechungsindex von c-Si und a-Si

Bei letzterem Verfahren ist seit einigen Jahren bekannt, daß die amorphe Phase durch zwei Zustände (*relaxed* und *derelaxed*) charakterisiert werden kann [83Fre][84Wad]. Durch Ionenimplantation hergestelltes amorphes Silicium (*derelaxed*) kann durch eine geeignete Temperung in einen neuen, metastabilen Gleichgewichtszustand (*relaxed*) überführt werden. Dieser zeichnet sich durch einen geringfügig höheren Ordnungsgrad der amorphen Struktur aus [84Wad]. Die dielektrische Funktion reagiert empfindlich auf eine solche Reorganisation, folglich auch die eng mit ihr verknüpften optischen Konstanten. Eine reduzierte atomare Polarisierbarkeit nach der Temperung könnte die Ursache für diesen Effekt sein [84Wad]. Durch eine nachfolgende Ionenbestrahlung kann die relaxierte Phase wieder in den *derelaxed*-Zustand gebracht werden. Der jeweilige amorphe Zustand ist durch eine geeignete Temperung bzw. Ionenbestrahlung jederzeit umkehrbar.

Die Wahl der Laserwellenlänge für TRR-Untersuchungen ist davon abhängig, wie groß der "Sprung" in den optischen Konstanten und die Absorption im kristallinen und amorphen Material ist. In Abbildung 13 ist deutlich erkennbar, daß es bei der Wellenlänge des Helium-Neon-Lasers von 632,8 nm eine recht große Differenz im Brechungsindex zwischen kristallinem und amorphem Silicium gibt, unabhängig davon, wie das amorphe Material hergestellt worden ist. Der Extinktionskoeffizient von kristallinem Silicium ist bei dieser Wellenlänge so klein, daß eine Eindringtiefe von 20  $\mu\text{m}$  mühelos erreicht wird. Eine Verfälschung des Meßsignals durch Reflexionen an der Rückseite der 200 bis 300  $\mu\text{m}$  dicken Siliciumwafer ist jedoch bei den üblichen Laserleistungen (0,5 ... 10 mW) ausgeschlossen. Beim amorphen Silicium ist die Absorption höher, so daß eine TRR-Analyse auf Schichten mit einer Dicke von nicht mehr als etwa 400 nm beschränkt bleibt.

Reitano et al. haben die Änderung der optischen Konstanten von amorphem Silicium, ausgehend vom relaxierten Zustand, nach einer Ionenbestrahlung detaillierter untersucht [93Rei].

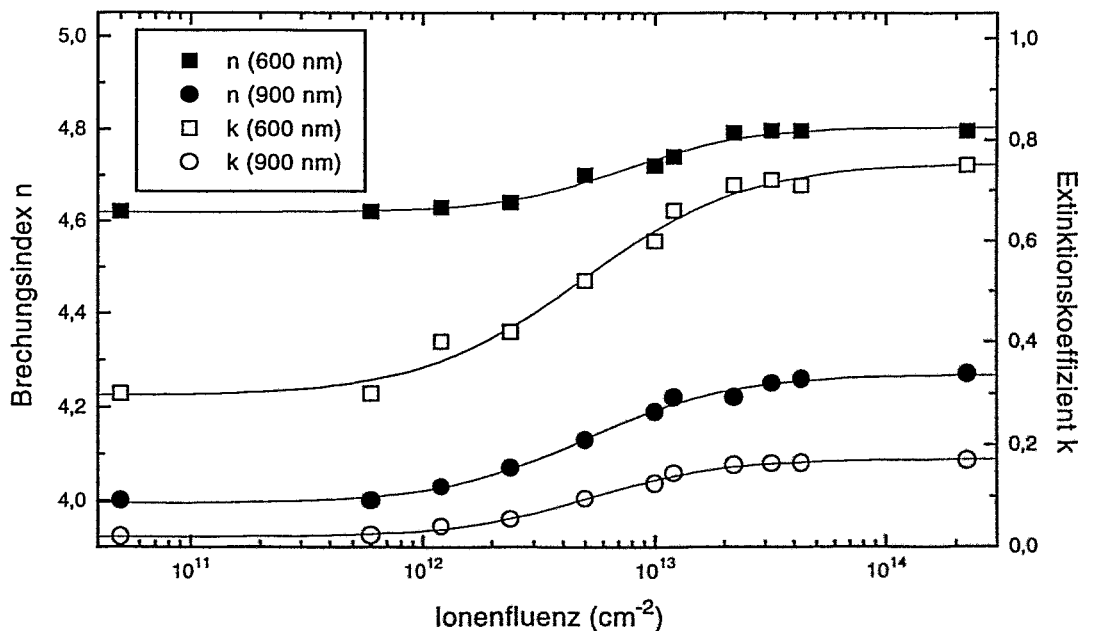


Abb. 14: Änderung der optischen Konstanten  $n$  und  $k$  von amorphem Silicium mit der Ionenfluenz bei 600 nm und 900 nm (nach [93Rei])

Es zeigte sich, daß  $n$  und  $k$  im Wellenlängenbereich 600 ... 900 nm mit steigender Fluenz kontinuierlich zunehmen und nach etwa  $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$  einen Sättigungswert erreichen (s. Abb. 14).

Aber auch die optischen Eigenschaften von kristallinem Silicium werden durch eine Ionenbestrahlung verändert. In Abhängigkeit vom Grad der Strahlenschädigung des kristallinen Materials nehmen  $n$  und  $k$  zu, bis schließlich beim Einsetzen der Amorphisierung eine Sättigung erreicht wird (s. Abb 15) [81Hei][82Gla]. Die optischen Konstanten sind nun mit denen des amorphen Siliciums (*derelaxed*) identisch.

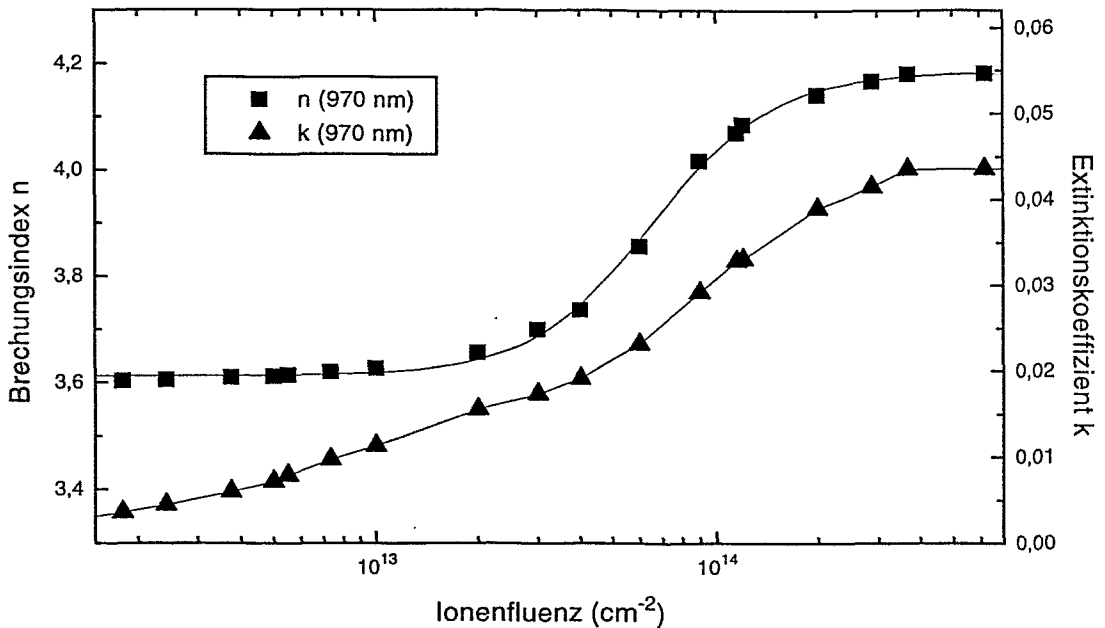


Abb. 15: Änderung der optischen Konstanten  $n$  und  $k$  von kristallinem Silicium mit der Ionenfluenz bei 970 nm (nach [81Hei])

Die in Abbildung 14 und 15 dargestellten Kurven können aber nur eine grobe Orientierung sein. Der Grad der Änderung von  $n$  und  $k$  ist von den Ionenstrahlparametern und der Temperatur abhängig. Bei einer Simulation von TRR-Kurven muß die Änderung der optischen Konstanten im Fall einer starken Strahlenschädigung mit berücksichtigt werden. Die dazu notwendigen Informationen kann man beispielsweise von ellipsometrischen Messungen bekommen.

Mit dieser Einschränkung sind Schichtsysteme aus kristallinem und amorphem Silicium im Bereich des sichtbaren Lichtes, insbesondere bei 632,8 nm, für eine TRR-Analyse geeignet. Übersteigt die Gesamtdicke aller amorphen Schichten 400 nm, können diese Untersuchungen im nahen IR-Bereich durchgeführt werden. Allerdings verringert sich dann die Tiefenauflösung, wie das später am Beispiel eines Einschichtsystems gezeigt wird.

Wie im Kapitel 3.2.1 beschrieben, ist für die Analyse der gemessenen TRR-Kurven ein Vergleich mit berechneten Kurven notwendig. Deshalb ist für die Simulation das Computerprogramm REFLECT (Programmiersprache C) entwickelt worden. Es berechnet die Reflektivität von planaren Mehrschichtsystemen nach der im Kapitel 3.2.2 vorgestellten Matrizenmethode. Folgende Parameter können vor dem Start der Berechnungen eingestellt werden:

- Polarisation, Wellenlänge und Einfallswinkel des Lichtes
- Anzahl der Schichten (0 ... 10)
- optische Konstanten ( $n, k$ ) aller Medien
- Dicke aller Schichten
- Grenzflächengeschwindigkeiten als Polynom 5. Grades

Weitere Einzelheiten können der Programmbeschreibung entnommen werden (s. Anhang). Um die theoretischen Grenzen des Informationsgehaltes der TRR-Kurven zu ermitteln, sind einige Modellsysteme mit REFLECT simuliert worden. In den folgenden Beispielen wurde mit konstanten Grenzflächengeschwindigkeiten gerechnet. Für  $n$  und  $k$  sind folgende Werte verwendet worden:

$\lambda$	c-Si	a-Si	SiO <sub>2</sub>
632,8 nm	(3,882 , 0,019)	(4,72 , 0,61)	(1,543 , 0)
1152 nm	(3,530 , $5 \times 10^{-6}$ )	(3,89 , 0,004)	(1,533 , 0)
	nach [85Pal1]	nach [93Rei][95Fuk]	nach [85Pal3]

Tabelle 1: Optische Konstanten verschiedener Materialien

Zunächst wurde das Aufwachsen einer amorphen Schicht auf kristallinem Silicium bei zwei verschiedenen Wellenlängen simuliert (s. Abb. 16). Bei einem Einfallswinkel von 0° hat eine Polarisation des Lichtes, sofern vorhanden, keinen Einfluß auf die Reflektivität.

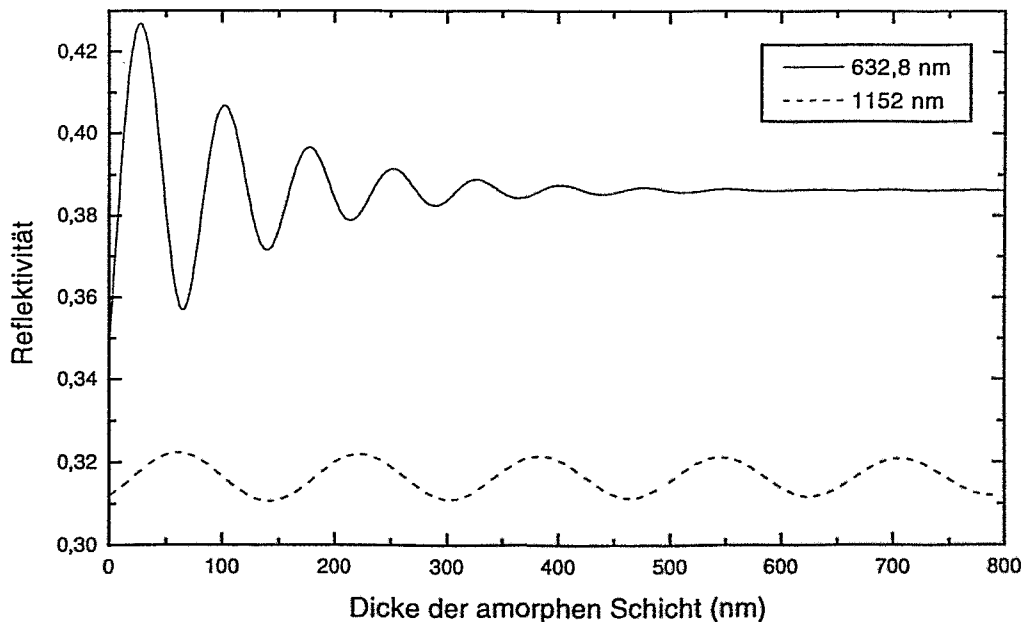


Abb. 16: Berechnete Reflektivität als Funktion der Schichtdicke für den Fall einer aufwachsenden amorphen Schicht auf einem kristallinen Substrat. Variiert wurde die Wellenlänge des Lichtes. ( $N_{a-Si} = (4,23, -0,46)$  bei 632,8 nm und  $N_{a-Si} = (3,57, -0,04)$  bei 1152 nm (nach [72Pie]),  $\alpha_0 = 0^\circ$ )

Abgeschiedene Schichten von amorphem Silicium besitzen in der Regel andere optische Konstanten als die in Tabelle 1 angeführten Werte. Letztere orientieren sich an amorphem Material, das durch Ionenimplantation hergestellt wurde. Deshalb sind für diese Simulation abweichende Werte für  $n$  und  $k$  benutzt worden.

Die Schicht wächst mit einer konstanten Geschwindigkeit auf der kristallinen Unterlage auf. Bei diesem Prozeß durchläuft die Reflektivität Minima und Maxima. Die starke Absorption bei der Wellenlänge von 632,8 nm führt zu einer spürbaren Dämpfung der Oszillationen (die Einhüllende dieser Kurve ist  $\propto \exp(-ad)$ ). Bereits bei einer Schichtdicke von etwa 500 nm ist die Absorption schon so stark, daß Oszillationen nicht mehr zu sehen sind. Bei der IR-Wellenlänge hingegen ist die Absorption so schwach, daß sie bei Schichtdicken von bis zu 1  $\mu\text{m}$  praktisch vernachlässigt werden kann. Diesem Vorteil bei der TRR-Analyse mit einem IR-Laser steht die schlechtere Tiefenaufösung im Vergleich zum Helium-Neon-Laser ( $\lambda = 632,8 \text{ nm}$ ) gegenüber. Bei der Verwendung des IR-Lasers treten im gleichen Schichtdicken- oder Zeitintervall deutlich weniger Oszillationen auf. Aus der TRR-Kurve kann die Weglänge berechnet werden, welche die Grenzfläche *umgebendes Medium/amorphe Schicht* zurücklegt. Bei einem Einschichtsystem entspricht die Distanz zwischen Minimum und Maximum (Halbwelle) einer zurückgelegten Weglänge, für die

$$l_H = \frac{\lambda}{4 \operatorname{Re} \left\{ \sqrt{N_1^2 - \sin^2 \alpha_0} \right\}} \quad (72)$$

gilt. Mit  $\lambda = 632,8 \text{ nm}$ ,  $N_1 = 4,23 - 0,46i$  für amorphes Silicium und  $\alpha_0 = 0^\circ$  ergibt sich eine Weglänge von etwa 37 nm pro Halbwelle. Da diese beim IR-Laser aber 81 nm beträgt, ist für Untersuchungen des Wachstums dünner amorpher Filme der Helium-Neon-Laser besser geeignet. Die Empfindlichkeit ist stark vom "Sprung" im Brechungsindex zwischen kristallinem und amorphem Material abhängig. In der Literatur variieren  $n$  und  $k$  stark in Abhängigkeit von den Präparationsbedingungen. Deshalb kann die hier gezeigte geringe Änderung der Reflektivität von  $\pm 2\%$  im IR-Bereich durchaus größer ausfallen.

Im nächsten Beispiel wurde das planare Wachstum einer amorphen Oberflächenschicht (IBIIA) simuliert (s. Abb. 17). Die a/c-Grenzfläche bewegt sich mit konstanter Geschwindigkeit  $v_1$  in das kristalline Material hinein, wobei die Anfangsschichtdicke 25 nm betrug. Mit  $N_1 = 4,72 - 0,61i$  für amorphes Silicium und  $\alpha_0 = 40^\circ$  ergibt sich mit Gl. (72) eine Weglänge von etwa 75 nm pro Halbwelle bei 1152 nm im Vergleich zu 34 nm pro Halbwelle bei 632,8 nm. Die Polarisation des Lasers hat keinen Einfluß auf den qualitativen Verlauf der Kurven. Eine lineare Polarisation parallel zur Ausbreitungsrichtung (p) führt zu einer niedrigeren Reflektivität als bei einem s-polarisierten Laser. Dafür sind die vom Betrag her verschiedenen Fresnelschen Koeffizienten der p- und s-Polarisation verantwortlich. Die Simulation zeigt auch, daß ein 5 nm dünner  $\text{SiO}_2$ -Film auf der amorphen Schicht keine signifikante Änderung in der Reflektivität bewirkt. Die angenommene Schichtdicke ist in der Regel größer als die eines natürlichen Oxidfilms auf Silicium [85Swaj].

Schließlich wurde das planare Wachstum einer amorphen Oberflächenschicht und einer vergrabenen amorphen Schicht simuliert (Dreischichtsystem). Die obere Grenzfläche der vergrabenen Schicht bewegt sich mit der Geschwindigkeit  $v_2$  zur Oberfläche hin, während die anderen beiden Grenzflächen entgegengesetzt in Richtung des Substrates wandern. Dieses Modellsystem entspricht in etwa der realen Situation der Durchstrahlung einer amorphen Oberflächenschicht bei gleichzeitiger Bildung einer vergrabenen amorphen Schicht durch den hochenergetischen Ionenstrahl. In Abbildung 18 ist die berechnete Reflektivität dargestellt, variiert wurden die Geschwindigkeitsverhältnisse  $v_2/v_1$  und  $v_3/v_1$ .

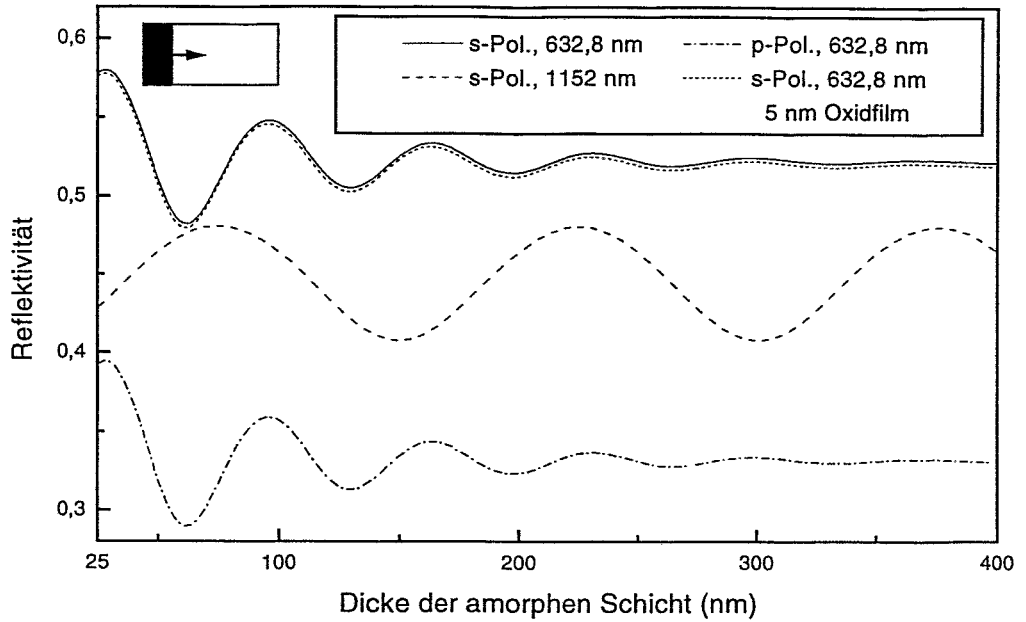


Abb. 17: Simulation von IBIIA einer amorphen Oberflächenschicht. Variiert wurden die Polarisierung und Wellenlänge des Lichtes (Anfangsschichtdicke  $d(t=0) = 25$  nm,  $\alpha_0 = 40^\circ$ ).

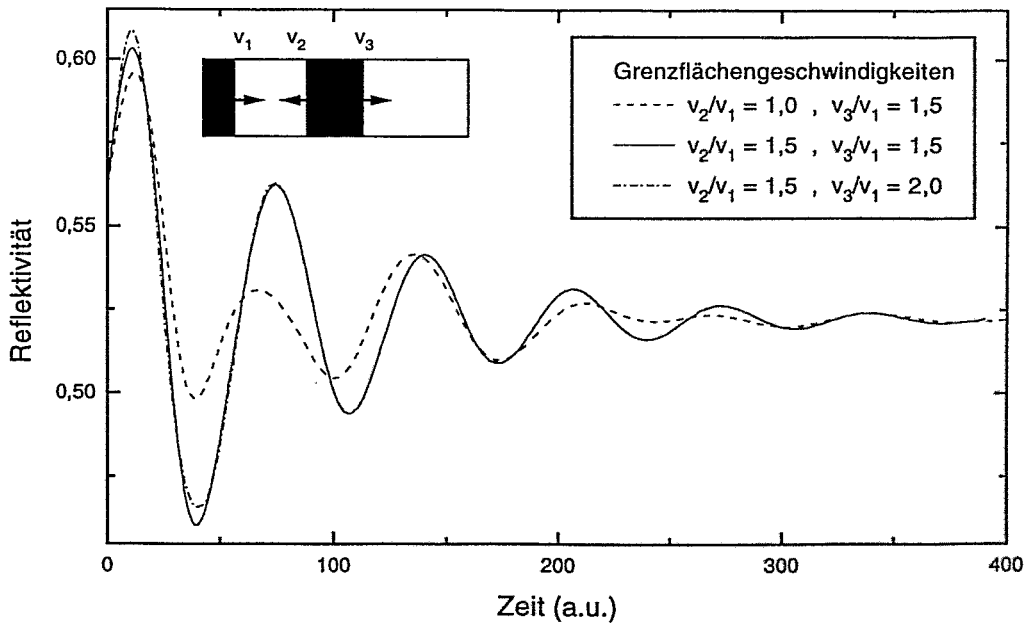


Abb. 18: Simulation des planaren Wachstums an drei Grenzflächen. Variiert wurden die Geschwindigkeitsverhältnisse  $v_2/v_1$  und  $v_3/v_1$  ( $\alpha_0 = 40^\circ$ , Anfangsschichtdicken  $d_1(0) = 25$  nm,  $d_2(0) = 975$  nm,  $d_3(0) = 100$  nm).

Die Simulation wurde gestoppt, als die kristalline Schicht vollständig amorphisiert war. Eine Änderung von  $v_2/v_1$  hat einen großen Einfluß auf die TRR-Kurve. Dahingegen wird die Kurve bei einer Variation von  $v_3/v_1$  nur wenig beeinflusst, was auf die zunehmende



Dämpfung durch die dicker werdende vergrabene amorphe Schicht zurückzuführen ist. Je nach den Interferenzbedingungen erscheinen einzelne Minima und Maxima stärker oder schwächer. Weitere Simulationen zeigten, daß auch Verzerrungen der Oszillationen (z. B. "Buckel") auftreten können.

Die Beispiele demonstrieren, daß es mit der in-situ-LR möglich ist, kleine Änderungen in den optischen Konstanten des Schichtsystems und in den Geschwindigkeiten der einzelnen Grenzflächen aufzulösen.

### 3.2.4 Aufbau einer rechnergestützten Reflektivitätsmeßtechnik

Die optische in-situ-Technik wurde so konzipiert, daß Schichtwachstumsprozesse während der Ionenbestrahlung beobachtet werden können. Infolgedessen wurde der Reflektivitätsmeßplatz mit einer Hochvakuumkammer für Ionenimplantationen gekoppelt. Die Kammer ist an einen Teilchenbeschleuniger angeschlossen, der den Ionenstrahl liefert. Einzelheiten zum Beschleuniger werden im Kapitel 4.2 dargelegt. Der Aufbau der optischen Technik unterscheidet sich vom Prinzip her nicht von den Anlagen, mit denen die Abscheidung dünner Schichten auf nichttransparenten Substraten untersucht werden kann. Abbildung 19 zeigt den Aufbau der realisierten TRR-Meßtechnik.

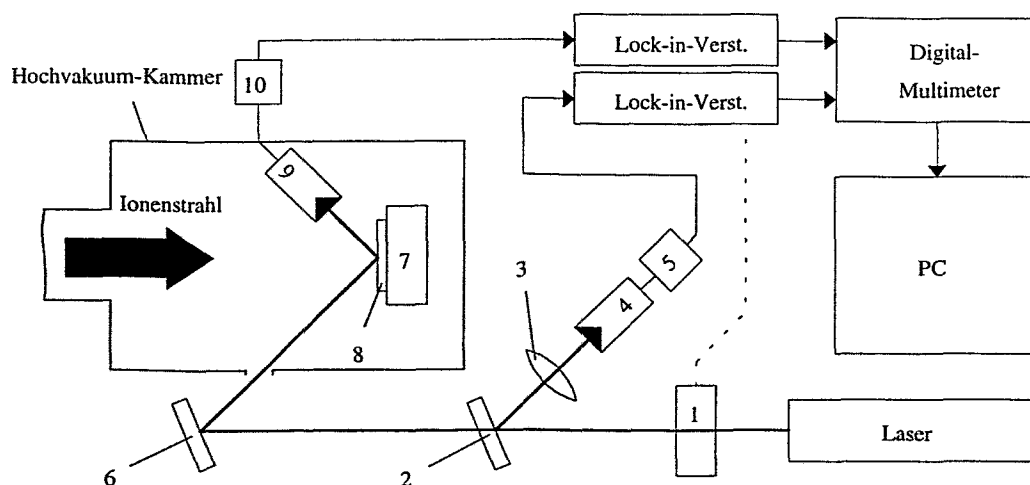


Abb. 19: Aufbau der in-situ-Reflektivitätsmeßtechnik (schematisch)  
 (1 Chopper, 2 Strahlteiler, 3 Linse, 4/9 Detektoren, 5/10 Vorverstärker,  
 6 Umlenkspiegel, 7 Probenhalter, 8 Probe)

Als Lichtquelle wird ein linear polarisierter Helium-Neon-Laser mit einer Wellenlänge von 632,8 nm und einer Leistung von 2 mW verwendet. Der Laserstrahl passiert einen Chopper (1) (Lichtzerhacker), wobei die Lichtamplitude mit einer Frequenz von 2 kHz moduliert wird. An einem nachfolgenden Strahlteiler (2) wird der gepulste Laserstrahl in zwei Strahlen aufgeteilt. Etwa 50 Prozent des Lichtes wird reflektiert und mit Hilfe einer Bikonvexlinse (3) auf einen Detektor (4) fokussiert. Das restliche Licht passiert den Strahlteiler (2) und wird über einen Umlenkspiegel (6) durch ein Fenster der Vakuumkammer auf die Probe (8) geführt.

Die Probenhalterung (7) ist mit einem Vier-Achsen-Goniometer gekoppelt, damit wird eine genaue Justierung der Probe bezüglich des Ionenstrahles ermöglicht. Die Intensität

des an der Probe reflektierten Strahles wird mit einem nahe davor angeordneten Detektor (9) gemessen. Dieser kann zur Justierung mit Hilfe eines kleinen Manipulators gekippt und in eine Richtung senkrecht zum Ionenstrahl bewegt werden. Eine magnetische Halterung des Detektormoduls am Manipulator erlaubt problemlos einen schnellen Austausch der Detektoren. Zur Justierung des Laserstrahles auf der Probenoberfläche läßt sich der Spiegel (6) kippen und drehen. Der Durchmesser des Strahles auf der Probenoberfläche ( $1/e^2$  - Breite) wurde mit etwa 2 mm abgeschätzt [94Lan]. Bei sehr kleinen Proben mit Abmessungen in dieser Größenordnung kann zur besseren Fokussierung eine Bikonvexlinse vor dem Fenster angeordnet werden. Wenn die Oberflächennormale der Probe in axialer Richtung des Ionenstrahles liegt, beträgt der Einfallswinkel des Laserstrahles auf der Probe etwa  $45^\circ$ . In den Experimenten wurde das Target jedoch um einige Grad gegen den Ionenstrahl gedreht, um eine Kanalisierung der Ionen (*Channeling*, s. Kap. 3.3.1) zu vermeiden. Der Einfallswinkel variierte dann im Bereich von  $36^\circ - 42^\circ$ .

Als Detektoren (4/9) kommen rauscharme Silicium-Fotodioden zum Einsatz. Vorverstärker (5/10) wandeln den Fotostrom in eine Spannung im Bereich 0 ... 10 V um. Dieses Signal wird jeweils einem digitalen Lock-in-Verstärker zugeführt. Diese filtern nach dem Prinzip der phasensensitiven Detektion [95Pau] nur den Signalanteil aus dem gesamten Frequenzspektrum heraus, der genau der Referenzfrequenz, d.h. der Chopperfrequenz entspricht. Diese wird von der Steuerelektronik des Choppers geliefert. Am Ausgang des Lock-in-Verstärkers steht dann die Spannung  $U_e$  bzw.  $U_r$  mit einem wesentlich höheren Signal-Rausch-Verhältnis zur Verfügung, als das ohne Anwendung dieser Technik der Fall wäre.  $U_e$  ist dem am Detektor (4),  $U_r$  dem am Detektor (9) gemessenen Fotostrom proportional. Diese Signale werden von einem Digitalmultimeter in periodischen, einstellbaren Zeitabständen detektiert und über eine spezielle Schnittstelle (IEC-Bus) einem Personalcomputer zugeführt. Die weitere Datenverarbeitung und -speicherung erfolgt mit einem dafür entwickelten Programm, das eine "experimentelle" Reflektivität wie folgt berechnet,

$$R_{\text{exp}} = k_v k_e \frac{U_r}{U_e} \quad (73)$$

wobei  $k_v$  verschiedene elektronische Verstärkungen der Lock-in-Verstärker berücksichtigt. Die Eichkonstante  $k_e$  beschreibt die Verluste durch Reflexion und Absorption des Lichtes am Fenster der Vakuumkammer und der optischen Komponenten (2), (3) und (6). Für eine genaue Eichung der Technik muß der Einfallswinkel  $\alpha_0$  des Laserstrahles auf der Probenoberfläche bekannt sein. Dieser kann jedoch nur mit einer Unsicherheit von  $\pm 3^\circ$  bestimmt werden, weil die exakte Position des Laserstrahles von experimentellen Gegebenheiten abhängig ist (Probengeometrie, Lage der Probe auf dem Substrathalter, Position des Ionenstrahles auf der Probe usw.). Mit diesem Fehler wurde für die Eichkonstante  $k_e$  ein Wert von  $0,188 \pm 0,015$  für einen s-polarisierten Laser ermittelt. Demzufolge bleibt die absolute Genauigkeit der gemessenen Reflektivität auf  $\pm 10\%$  beschränkt. Die relative Genauigkeit der optischen Technik ist dagegen wesentlich höher. Das Signal-Rausch-Verhältnis ist besser als  $5 \times 10^4$  und für die maximale Drift über 8 Stunden kann hier nach vielen Testmessungen eine obere Grenze von  $\pm 0,5\%$  angegeben werden. Die Konstante  $k_v$  wird beim Start des Meßprogrammes abgefragt. Im Fall eines p-polarisierten Lasers verschlechtert sich die absolute Meßgenauigkeit mindestens um den Faktor 1,6, weil im Winkelbereich  $36^\circ - 42^\circ$  der Fresnelkoeffizient  $r_p$  stärker von  $\alpha_0$  abhängt als  $r_s$ . Aus diesem Grund wurde für alle Experimente eine s-Polarisation gewählt.

Zusätzlich können auch Untersuchungen im IR-Bereich bei einer Wellenlänge von 1152 nm durchgeführt werden. Dafür ist aber der Austausch des Lasers und der Detektoren

notwendig. Bisher sind Germanium-Fotodioden als Detektoren eingesetzt worden. Aufgrund des wesentlich niedrigeren Dunkelstromes und der etwas höheren Empfindlichkeit werden InGaAs-Dioden als Alternative empfohlen. Als Lichtquelle steht ebenfalls ein Helium-Neon-Laser mit einer Leistung von 5 mW zur Verfügung. Als weitere Option hat dieser Laser noch einen Mode bei einer Wellenlänge von 3392 nm. Für ein akzeptables Signal-Rausch-Verhältnis müßten jedoch zusätzlich der Strahlteiler und die Linsen ausgetauscht werden, da in diesem Wellenlängenbereich deren Transmission sehr klein ist (BK7-Glas).

### 3.3 Rutherford Rückstreu-spektroskopie

RBS ist ein weit verbreitetes Verfahren der nuklearen Analytik. Mit dieser Methode können die Komposition, Fremdatomverteilung und die Kristallstruktur, d.h. die Schadensverteilung im Festkörper und damit auch die Tiefenlage und Dicke von amorphen Schichten bestimmt werden [77Cam][78Chu1]. Hier sollen einige Aspekte des Verfahrens kurz erläutert werden, die für das Verständnis der experimentellen Ergebnisse notwendig sind.

#### 3.3.1 Grundlagen

Bei dieser Methode wird die elastische Streuung von leichten Ionen an den Atomen eines Targets ausgenutzt. Abbildung 20 zeigt die Stoßgeometrie und den prinzipiellen experimentellen Aufbau. Ein einfallendes Ion mit der Energie  $E_0$  und der Masse  $m$  trifft unter einem Winkel  $\theta_1$  auf das Target, dessen Atome die Masse  $M$  haben. Ein Teil der Ionen wird bereits an der Oberfläche reflektiert. Die restlichen Ionen dringen in das Target ein und werden in Abhängigkeit von ihrem Energieverlust aus verschiedenen Tiefen  $x$  zurückgestreut. Ein vor dem Target im Winkel  $\theta_2$  angeordneter Detektor registriert die rückgestreuten Teilchen.

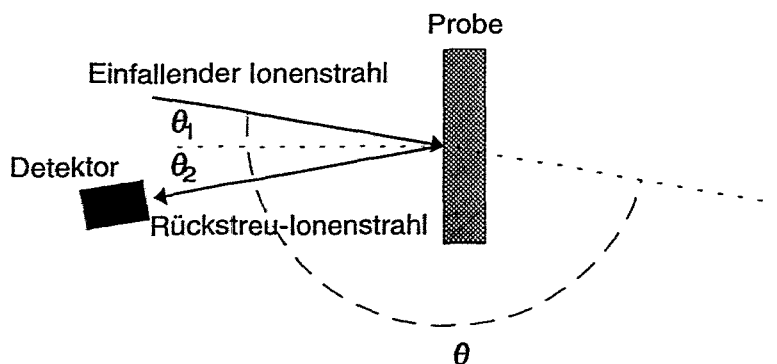


Abb. 20: Definition der Winkel und Stoßgeometrie für elastisch gestreute Teilchen an einem Target

Ionen, die von der Oberfläche ( $x = x_0$ ) zurückgestreut werden, haben die Energie

$$E_1 = E(x_0) = K E_0 \quad (74)$$

wobei der kinematische Faktor  $K$  wie folgt definiert ist:

$$K = \left( \frac{m \cos \theta + \sqrt{M^2 - m^2 \sin^2 \theta}}{m + M} \right)^2 \quad (75)$$

Bei kleiner Masse  $M$  der Targetatome ist  $K$  sehr klein. Mit zunehmendem Massenverhältnis  $M/m$  steigt der kinematische Faktor stark an und geht bei großen Werten  $M/m$  gegen 1.

Ein Ion, das den Weg von der Oberfläche bis in eine Tiefe  $x$  zurücklegt, hat die Energie

$$E(x) = E_0 - \int_{x_0}^{x/\cos \theta_1} S_{in}(E) dx \quad (76)$$

wobei  $S_{in}(E) \equiv \frac{dE}{dx}$  das im allgemeinen tiefenabhängige Bremsvermögen (*Stopping Power*) des Ions auf dem Hinweg durch den Festkörper ist. Wird es in der Tiefe  $x$  zurückgestreut, so hat es beim Austritt aus der Oberfläche des Festkörpers die Energie

$$E_2 = K E(x) - \int_{x/\cos \theta_2}^{x_0} S_{out}(E) dx \quad (77)$$

$S_{out}(E)$  ist analog das Bremsvermögen des Ions auf dem Rückweg durch den Festkörper. Der Energieverlust  $\Delta E = E_1 - E_2$  der rückgestreuten Ionen ist von der Masse, Ladung und Energie des einfallenden Ions sowie von der elementaren Zusammensetzung und der Dichte des Targets abhängig. In einem RBS-Spektrum wird die Rückstreausbeute, d.h. die Zahl der im Detektor registrierten Ionen, normiert auf die zur Analyse verwendete Ionenanzahl, über der Energie  $E_2$  der rückgestreuten Ionen aufgetragen.

Im Normalfall ist die kristalline Probe nicht mit der Einschußrichtung des analysierenden Ionenstrahles korreliert. Das Ergebnis der RBS-Messung ist ein Spektrum in *Random*-Richtung. Energieverlust und Rückstreuung erfolgen wie im amorphen Festkörper. Werden die Ionen jedoch längs einer Kristallachse in die Probe geschossen, so dringen sie erheblich tiefer ein, weil sie durch das periodische Potential des Kristallgitters entlang der Atomketten geführt werden. Demzufolge nimmt die Ausbeute der rückgestreuten Ionen stark ab. Bei dieser Kanalisierungs- oder *Channeling*-Technik erfolgt im idealen Kristall eine Rückstreuung nur an Oberflächenatomen und durch die thermische Bewegung der Gitterbausteine. Die Streuung an der Oberfläche führt zu dem charakteristischen *Surface Peak* im *Aligned*-Spektrum, welcher bei der Rückstreuung am realen Kristall noch durch Fremdatome (Oxidschicht) und Defekte erhöht wird. Darüberhinaus wird im strahlengeschädigten Halbleiter das Rückstreupektrum durch zwei Effekte beeinflusst. Einerseits werden Ionen direkt von den im Kanal sitzenden Atomen zurückgestreut. Andererseits werden Ionen durch Defekte aus dem Kanal in *Random*-Richtungen abgelenkt. Dadurch wird die Rückstreuung im Vergleich zum ungestörten Kristall, vor allem aus tieferen Schichten, erhöht. Die Natur der Defekte läßt sich mit RBS/C nur im begrenzten Umfang aufklären, dafür sind andere Verfahren (z. B. TEM) besser geeignet.

Bei der Kanalisierungstechnik wird ein Spektrum in *Aligned*-Richtung aufgenommen, das Rückschlüsse über die Tiefenverteilung der versetzten Atome zuläßt. Dabei reicht eine Versetzung des Atoms um 0,1 bis 0,2 Å von seinem Gitterplatz bereits aus, um Ionen in Richtungen zu streuen, die einen kritischen Winkel  $\Psi_k$  übersteigen. Dieser darf nicht überschritten werden, soll der Ionenstrahl im Kanal geführt werden. Aus *Channeling*-Messungen erhält man außerdem Informationen über den Grad der Strahlenschädigung

(bis hin zur Amorphisierung) oberflächennaher Bereiche der Probe. Für die Charakterisierung dieser Schäden wird oft das Verhältnis der Rückstreausbeuten kanalisierter Ionen im *Aligned*-Spektrum ( $Y_a$ ) und nichtkanalisierter Ionen im *Random*-Spektrum ( $Y_r$ ), die sogenannte Minimalausbeute

$$\chi_{\min} = \frac{Y_a}{Y_r} \quad (78)$$

herangezogen.

Abbildung 21a zeigt ein idealisiertes *Random*- und *Aligned*-Spektrum von einem defektfreien Einkristall. Die Unterschiede in den Rückstreausbeuten im *Aligned*- und *Random*-Spektrum können mehr als zwei Größenordnungen betragen. Die Zunahme der Ausbeute im *Random*-Spektrum mit fallender Energie folgt aus der Energieabhängigkeit des Streuquerschnitts. Dieser ist  $\propto 1/E^2$ , so daß der Rutherford'sche Streuquerschnitt und damit die Rückstreausbeute mit abnehmender Energie der Ionen zunimmt. Für einen gut kanalisierten Ionenstrahl sind im Idealfall die nahe der Oberfläche auf Gitterplätzen sitzenden Atome "unsichtbar", d.h. die Rückstreausbeute im *Aligned*-Spektrum sollte gegen Null gehen. Unter experimentellen Bedingungen wird aber immer ein kleiner Teil der Ionen (2 - 5 %) in Richtungen gestreut, bei denen der kritische Winkel  $\Psi_k$  überschritten wird. Dieser Anteil trägt ebenso zu einer erhöhten Rückstreausbeute bei wie die thermische Bewegung der Gitterbausteine.

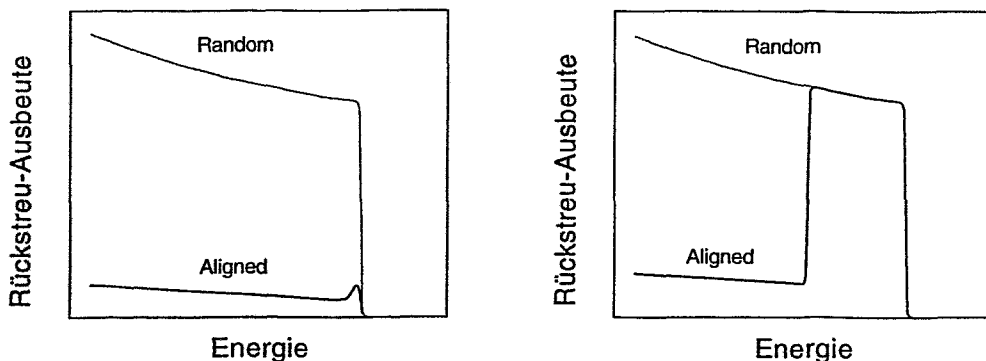


Abb. 21: Idealisiertes RBS/C-Spektrum von einem Einkristall  
a) defektfrei                      b) mit einer amorphen Schicht an der Oberfläche

Sitzt dagegen ein Teil der Atome nicht korrekt auf den Gitterplätzen, nimmt die Ausbeute im *Aligned*-Spektrum zu. Die Höhe dieser Verteilung im Vergleich zur *Random*-Höhe korreliert mit dem Grad der Kristallschädigung. Im Extremfall, wenn ein beträchtlicher Anteil der Atome Zwischengitterpositionen einnehmen, erreicht die Rückstreausbeute die *Random*-Höhe (s. Abb. 21b). Eine Änderung der Einschubrichtung des Ionenstrahles bezüglich des Substrates beeinflusst die Rückstreausbeute dann nicht mehr. In diesem Fall ist der Kristall im analysierten Tiefenbereich amorph.

Ist das Bremsvermögen im betrachteten Tiefenintervall näherungsweise konstant, läßt sich ohne großen mathematischen Aufwand eine Tiefenskalierung angeben. Eine weit verbreitete Methode ist die Anwendung der Oberflächen-Energie-Näherung (*Surface Energy Approximation, SEA*), die im allgemeinen für dünne Oberflächenschichten erfüllt ist und im folgenden erläutert werden soll.

Die energetische Position eines rückgestreuten Ions im RBS-Spektrum wird durch den Energieverlust entlang des Hinweges durch den Festkörper zum Streuzentrum, den Energieübertrag an das Streuzentrum und den Energieverlust auf dem Weg zurück zur Oberfläche bestimmt. Die Strahlenergie  $E_0$  und die Energie  $E_2$ , die das Ion beim Austritt aus der Festkörperoberfläche besitzt, sind aus der Messung bekannt. Die Energie  $E$  unmittelbar vor dem Stoß und die Tiefe  $x_s$  des Streuzentrums müssen berechnet werden. Die Integration über den Ort in Gl. (77) wird in eine Integration über die Energie überführt. Die Tiefe des Streuzentrums läßt sich dann aus dem Bremsvermögen  $S(E)$  über den Hin- oder Rückweg ermitteln:

$$\frac{x_s}{\cos \theta_1} = - \int_{E_0}^E \frac{dE}{c_1 S(E)} \quad (79)$$

$$\frac{x_s}{\cos \theta_2} = - \int_{KE}^{E_2} \frac{dE}{c_2 S(E)} \quad (80)$$

Dies sind zwei Gleichungen zur Bestimmung der unbekanntenen Größen  $x_s$  und  $E$ . Die zusätzlichen Konstanten  $c_1$  und  $c_2$  berücksichtigen eine Korrektur des Bremsvermögens bei einer Kanalisierung des Ions. In *Random*-Richtung gilt  $c_1 = c_2 = 1$  [91Sut]. Zur Bestimmung von  $E$  und  $x_s$  werden in der Praxis verschiedene Verfahren angewendet, oft wird aber die SEA benutzt [78Chu2]. Diese Näherung kann für dünne Oberflächenschichten verwendet werden, wo der Zusammenhang zwischen Energieverlust  $\Delta E$  und Tiefe  $x$  linear ist. Dann vereinfachen sich die Gln. (79) und (80) zu

$$\Delta E_{in} = E_0 - E = c_1 \frac{S(\overline{E}_{in})}{\cos \theta_1} x_s \quad (81)$$

$$\Delta E_{out} = K E - E_2 = c_2 \frac{S(\overline{E}_{out})}{\cos \theta_2} x_s \quad (82)$$

Zur Bestimmung von  $S(\overline{E}_{in})$  und  $S(\overline{E}_{out})$  wird in erster Näherung die jeweilige Ionenenergie an der Oberfläche eingesetzt, d.h.  $\overline{E}_{in} = E_0$  und  $\overline{E}_{out} = K E_0$ . Wird  $E$  in Gl. (82) mit Hilfe von Gl. (81) ersetzt, kann die Energie des den Festkörper verlassenden Ions  $E_2$  mit

$$E_2(x) = K E_0 - V x \quad (83)$$

in eine Tiefe  $x$  umgerechnet werden, wobei der Energieverlustparameter  $V$  wie folgt definiert ist:

$$V \equiv c_1 K \frac{S(\overline{E}_{in})}{\cos \theta_1} + c_2 \frac{S(\overline{E}_{out})}{\cos \theta_2} \quad (84)$$

### 3.3.2 Energie- und Tiefenaufösung

Die Energie- und damit die Tiefenaufösung wird im wesentlichen durch den verwendeten Detektor und die Energieunschärfe der analysierenden Ionen begrenzt. Die Zahl der Stöße der Ionen mit den Atomen des Festkörpers und damit auch ihr Energieverlust unterliegen einer statistischen Verteilung. Diese wird mit zunehmender Tiefe, d.h. mit fortschreitendem Energieverlust der Ionen breiter (*Energy Straggling*). Eine inhomogene Materialzusammensetzung, raue Grenzflächen und Unterschiede in der chemischen Komposition des Targets können diesen Effekt im Vergleich zu einem homogenen, einelementigen Target erhöhen.

Der Anstieg der hochenergetischen "Kante" im RBS-Spektrum (s. Abb. 21) wird nicht durch das Energie-*Stragglng* beeinflusst, da dieser Teil des Spektrums nur von an der Oberfläche rückgestreuten Ionen bestimmt wird. Die Ursache ist vielmehr instrumenteller Art. Fluktuationen in der Energie der einfallenden Ionen und bei der Signalgewinnung im Detektor als auch elektronisches Rauschen in der gesamten Informationsverarbeitung beeinflussen das Spektrum. Auch geometrische Effekte (Durchmesser und Divergenz des Ionenstrahles, Akzeptanzwinkel des Detektors usw.) beeinflussen die Energieauflösung [96Kim]. Diese Einflüsse werden üblicherweise unter dem Begriff der System-Auflösung ( $\Delta E_{System}$ ) zusammengefaßt. Für die "Verschmierung" der niederenergetischen "Kante" ist im wesentlichen die System-Auflösung und das Energie-*Stragglng* verantwortlich. Hinzu kommt der Effekt der Vielfachstreuung, der aber erst bei flachem Einschub ( $\theta_1 > 80^\circ$ ) an Bedeutung gewinnt [78Wil]. Auch die Rauhgigkeit der einzelnen Grenzflächen kann die Auflösung begrenzen. Unter der Annahme, daß jede "Quelle" eine gaußförmige Energieverteilung besitzt, ergibt sich für die gesamte Energieauflösung eines RBS-Spektrums [78Chu3]

$$(\Delta E_{ges})^2 = (\Delta E_{Str})^2 + (\Delta E_{VS})^2 + (\Delta E_{GF})^2 + (\Delta E_{System})^2 \quad (85)$$

wobei für die Systemauflösung gilt,

$$(\Delta E_{System})^2 = K^2 (\Delta E_{Strahl})^2 + (\Delta E_{Det})^2 + (\Delta E_{Geom})^2 + (\Delta E_{Elektronik})^2 \quad (86)$$

( $\Delta E_{Strahl}$  Energiebreite des Ionenstrahles,  $\Delta E_{Det}$  Detektorauflösung;  $\Delta E_{VS}$ ,  $\Delta E_{GF}$ ,  $\Delta E_{Geom}$ ,  $\Delta E_{Elektronik}$  Energieverbreiterung durch Vielfachstreuung, Rauhgigkeit der Grenzflächen, geometrische und elektronische Effekte). Für die Berechnung der Gesamtenergieauflösung ist es nicht notwendig, die Energiebreite einer jeden "Quelle" zu kennen. Bei der Verwendung von polierten Siliciumwafern hat die Oberflächentopografie keinen nennenswerten Einfluß auf  $\Delta E_{ges}$ , daher kann der Term  $(\Delta E_{GF})^2$  in Gl. (85) vernachlässigt werden. Dann gilt für die Oberfläche  $(\Delta E_{ges})^2 = (\Delta E_{System})^2$ , so daß mit einer numerischen Analyse der hochenergetischen "Kante" die Systemauflösung bestimmt werden kann. Dazu muß die Rückstreausbeute in der Umgebung dieser "Kante" nach der Energie differenziert werden. In der Regel erhält man eine gaußförmige Verteilung, deren Halbwertsbreite (*Full Widht of Half Maximum, FWHM*) der Energiebreite der "Kante" und damit  $\Delta E_{System}$  entspricht [78Chu4]. Die ermittelte Energieauflösung  $\Delta E_{ges}$  kann dann mit dem bekannten Energieverlustparameter  $V$  und

$$\Delta x = \frac{\Delta E_{ges}}{V} \quad (87)$$

in eine Tiefenauflösung  $\Delta x$  umgerechnet werden.

Bei Kenntnis der Energiebreite des Ionenstrahles läßt sich die Detektorauflösung in guter Näherung aus Gl. (86) bestimmen, da  $\Delta E_{Geom}$  und  $\Delta E_{Elektronik}$  in der Regel klein gegen  $\Delta E_{Strahl}$  sind und daher vernachlässigt werden können:

$$(\Delta E_{Det})^2 \simeq (\Delta E_{System})^2 - K^2 (\Delta E_{Strahl})^2 \quad (88)$$

Als Standarddetektoren werden meistens Silicium-Oberflächensperrschicht-Detektoren eingesetzt. Deren Energieauflösung beträgt etwa 15 keV für 1 MeV  $^4\text{He}^+$ -Ionen. Damit erreicht man eine Tiefenauflösung von etwa 15 bis 20 nm an der Siliciumoberfläche. Die relative Genauigkeit bei der Bestimmung von Schichtdickenänderungen aus den Spektren ist etwa eine Größenordnung besser (s. Kap. 4.4.2). Bei streifendem Einfall des Ionenstrahles, d.h. bei  $\theta_1 > 80^\circ$  läßt sich die Tiefenauflösung wegen des kleineren kinematischen

Faktors (Gl. (75)) bis auf ca. 1 - 5 nm an der Oberfläche verbessern [94Rau]. Vielfachstreuung, geometrische und andere Effekte begrenzen diese jedoch wieder, wenn  $\theta_1 > 85^\circ$  gewählt wird [78Wil].

### 3.3.3 Bestimmung der Dicke amorpher Schichten

Im folgenden soll an einem simulierten Rückstreupektrum gezeigt werden, wie die Dicke einer amorphen Oberflächenschicht auf einem einkristallinen Substrat bestimmt werden kann (s. Abb. 22a). Schicht und Substrat sollen aus demselben Element bestehen. Aufgetragen wird die normierte Ausbeute über der Energie der rückgestreuten Ionen. Die an der Oberfläche zurückgestreuten Teilchen haben die Energie  $KE_0$ . An dieser Stelle befindet sich die hochenergetische "Kante" der Schicht. Ihre niederenergetische "Kante" wird durch die Energie  $KE_0 - \Delta E$  repräsentiert, wobei  $\Delta E$  der Energieverlust des Ions beim Hin- und Rückweg durch die Schicht ist. Für jede "Kante" wird zunächst die maximale Rückstreausbeute ermittelt. Anschließend wird die Energie bestimmt, bei dem die Rückstreausbeute die Hälfte dieses Wertes erreicht. Die gefundene Energiedifferenz (*FWHM*) kann mit Hilfe der SEA in eine Schichtdicke umgerechnet werden.

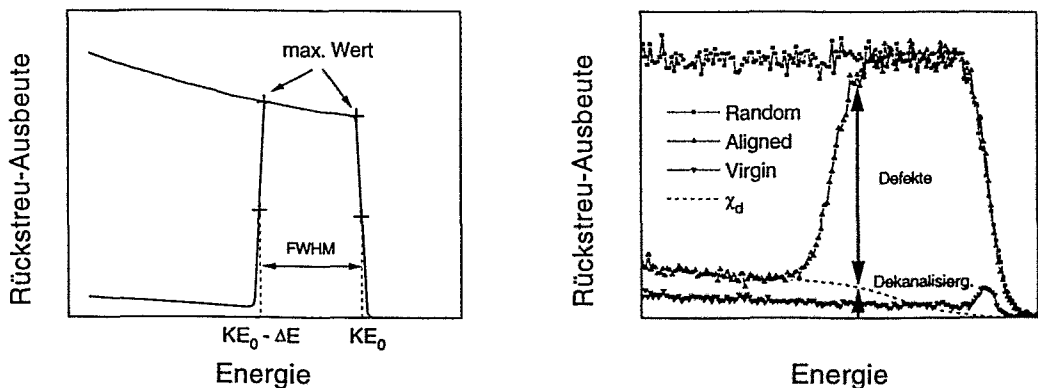


Abb. 22: Bestimmung der Dicke einer amorphen Oberflächenschicht in einem  
a) idealisierten RBS-Spektrum                      b) realen RBS-Spektrum

Diese Verfahrensweise stößt in der Praxis oft auf Schwierigkeiten. In Abbildung 22b ist ein RBS/C-Spektrum dargestellt, das an einer Siliciumprobe mit einer amorphen Oberflächenschicht gemessen wurde. Das *Random*-Spektrum dient als Referenz für die maximal erreichbare Rückstreausbeute. Das *Aligned*-Spektrum dieser *as implanted*-Probe erreicht an der Oberfläche das *Random*-Spektrum. Das deutet darauf hin, daß eine Schicht an der Oberfläche amorph ist.

Ein erstes Problem ist die Bestimmung der maximalen Rückstreausbeuten, da die *Random*-Werte oft stark streuen und die "Kanten" durch das *Energie-Straggling* weniger steil verlaufen. Auch eine Grenzfläche mit einer hohen Rauigkeit trägt zur "Verschmierung" der "Kante" bei. Ein zweites Problem stellt die Dekanalisation der Ionen dar, die durch verschiedene Effekte verursacht werden kann. Zum einen wird die Ausbeute durch Kristallbaufehler und thermische Schwingungen der Atome erhöht, wie es das *Aligned*-Spektrum einer *Virgin*-Probe zeigt. Andererseits werden Ionen auch beim Durchgang durch die amorphe Schicht dekanalisiert. Dieser Effekt dominiert um so mehr, je dicker die Schicht ist. Das ist im *Aligned*-Spektrum der *as implanted*-Probe zu sehen, da in der



Tiefe eine höhere Rückstreuerausbeute gemessen wurde als bei der *Virgin*-Probe. Bei dicken Schichten sollte deshalb vor einer Bestimmung der Halbwertsbreite das *Aligned*-Spektrum um den dekanalisierten Anteil  $\chi_d$  der Ausbeute reduziert werden. Dieser kann mit einem iterativen Verfahren berechnet werden, das aber die Kenntnis von  $\chi_d$  an einer Stelle hinter der Defektverteilung voraussetzt [82Fel]. In Abbildung 22b ist das unmittelbar hinter der amorphen Schicht der Fall, weil dort keine Kristallschädigung mehr vorhanden ist. Die Abbildung enthält auch den Verlauf von  $\chi_d$  über der Energie. An der Oberfläche geht  $\chi_d$  gegen Null, während in der Tiefe eine Annäherung an das *Aligned*-Spektrum der *as implanted*-Probe erfolgt. Die Fläche unter dieser Kurve ist dem Anteil der dekanalisierten, rückgestreuten Ionen proportional. Der darüber liegende Anteil in der amorphen Schicht wird durch Rückstreuung an Defekten im Kanal verursacht.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde mit Hilfe der Methode der kleinsten Quadrate jede "Kante" mit einer Geraden approximiert. Damit werden statistische Fluktuationen in der Defektverteilung reduziert. Die so gefundenen "Silicium-Kanten" aller Kurven wurden außerdem noch übereinandergelegt, um die eventuell vorhandene Drift in der Energie zu kompensieren. Anschließend wurde für jede "Kante" der Kanal ermittelt, bei dem die Rückstreuerausbeute die Hälfte des *Random*-Wertes erreicht. Für die so ermittelte Halbwertsbreite ist dann unter Anwendung der SEA die zugehörige Schichtdicke berechnet worden. Die Tiefenprofile der nuklearen Energiedeponierung, die man von TRIM-Rechnungen erhält (s. Abb. 26), zeigen, daß die SEA für die hier benutzten Ionenarten und -energien an dünnen Oberflächenschichten mit Dicken von bis zu 100 nm in guter Näherung angewendet werden kann.

Die Subtraktion des dekanalisierten Anteils von der Gesamtausbeute kann nach dem o.g. Verfahren nur dann durchgeführt werden, wenn die Minimalausbeute im kristallinen Gebiet der a/c-Grenzfläche im wesentlichen durch dekanalisierte Ionen und nicht durch Rückstreuung an Defekten im Kanal bestimmt wird. Unter Berücksichtigung dieser Tatsache ergaben sich nach einigen Beispielrechnungen Abweichungen von etwa 10 % von den Schichtdicken, die ohne Subtraktion von  $\chi_d$  bestimmt worden waren. Dieses Ergebnis überrascht nicht, denn bei den hier verwendeten dünnen Schichten ist die Dekanalisation der Ionen noch nicht so stark ausgeprägt. Aufgrund dieser geringen Abweichung wurde die Dekanalisation bei der Schichtdickenbestimmung nicht mit berücksichtigt.

### 3.3.4 Meßaufbau zur Analyse der Rückstreu-Ionen

Dieser Abschnitt soll den instrumentellen Aspekten der Rutherford-Rückstreuung und dem genutzten apparativen Aufbau gewidmet werden.

RBS/C-Untersuchungen wurden mit dem 1963 im Institut installierten 2 MV-Van de Graaff-Beschleuniger durchgeführt. Als Quellengas wird gegenwärtig Wasserstoff und Helium eingesetzt. Die Energie der Teilchen kann zwischen 0,3 und 1,7 MeV variiert werden. Weitere Einzelheiten zur Beschleunigungstechnik sind in [78Ric] zu finden. Über ein Strahlrohr ist diese Maschine mit einer Targetkammer zur RBS-Analyse verbunden. Bevor der Ionenstrahl die Kammer erreicht, durchläuft dieser zwei Blenden (4), die der Kollimation des Strahles (3) dienen (s. Abb. 23). Ein in die Analysekommer eingebauter Vier-Achsen-Goniometer (2) mit einer Probenhalterung (1) erlaubt vielfältige Bewegungsmöglichkeiten. Eine Rotations- und eine Translationsbewegung dienen zur genauen Positionierung der Probe. Außerdem kann diese in zwei Richtungen bezüglich des einfallenden Ionenstrahles gedreht bzw. gekippt werden. Die Drehachsen liegen dabei senkrecht zueinander in der Probenoberfläche und kreuzen sich im Schnittpunkt mit der

Strahlachse. Das ist für *Channeling*-Messungen von Bedeutung, da bei einer Drehung der Probe der Auftreffpunkt des Ionenstrahles auf der Probenoberfläche so erhalten bleibt.

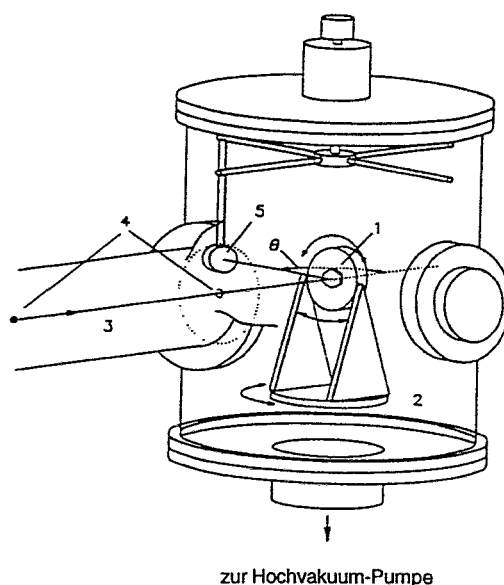


Abb. 23: Targetkammer zur RBS-Analyse (schematisch)

Der auf das Target treffende Ionenstrahl hat eine Strahldivergenz von etwa  $0,1^\circ$  und einen Durchmesser von 1 mm. Ein spezieller Halbleiterdetektor (*Passivated Implanted Planar Silicon Detector, PIPS*) registriert die unter dem Winkel  $\theta$  aus der Probe rückgestreuten Ionen. PIPS-Detektoren haben eine bessere Energieauflösung und einen niedrigeren Leckstrom als Oberflächensperrschicht-Detektoren [92Cos]. Der Detektor (5) ist drehbar montiert, so daß der Beobachtungswinkel  $\theta_2$  zwischen  $0^\circ$  und  $80^\circ$  verändert werden kann.

Die Energieauflösung des Detektors ist nicht nur von der Strahlenergie  $E_0$  der Ionen, sondern auch vom Energie-*Straggling*, von der Homogenität der Schichtdicken, der statistischen Streuung der Elektron-Loch-Paar-Erzeugung in der Verarmungszone und von der Defektdichte des Halbleitermaterials abhängig [78Chu5]. Eine Analyse der gemessenen RBS-Kurven nach Gl. (88) lieferte ein  $\Delta E_{Det}$  von etwa 13 keV für 1 MeV  $^4\text{He}^+$ -Ionen und 16 keV für 1,5 MeV  $^4\text{He}^+$ -Ionen bei einer Energiebreite des Ionenstrahles von 1 keV.

Jedes in die aktive Zone des Detektors einfallende Ion erzeugt durch die Generation von Elektron-Loch-Paaren einen Ladungsimpuls, dessen Höhe in guter Näherung proportional zur Ionenenergie ist. Diese Impulse werden in einem, am Detektor angeschlossenen Vorverstärker in Spannungsimpulse umgewandelt und verstärkt, bevor sie zum Hauptverstärker weitergeleitet werden. Dessen Ausgang ist mit einem Vielkanalanalysator verbunden, in dem die Impulse energiespektroskopisch registriert werden.

## 4 Experimentelle Methodik

### 4.1 Herstellung der amorphen Schichten

Als Ausgangsmaterial wurden (100)-orientierte Siliciumwafer (Czochralski-Material vom Typ n, Phosphor dotiert, spezifischer Widerstand 5-7  $\Omega\text{cm}$ , Oberfläche poliert, Rückseite geschliffen) verwendet. Die Herstellung von dünnen amorphen Oberflächenschichten erfolgte durch eine Ionenimplantation von Germanium am 60 kV-Implanter des Instituts. Die Proben wurden auf einem Standard-Waferhalter montiert und bei RT bestrahlt. Eine erste Probenserie wurde mit 20 keV  $5 \times 10^{14} \text{ Ge}^+ \text{ cm}^{-2}$  (Serie A) und eine weitere mit 40 keV  $7,5 \times 10^{14} \text{ Ge}^+ \text{ cm}^{-2}$  (Serie B) implantiert. Germanium wurde deshalb gewählt, weil es aufgrund der größeren Masse Silicium "effektiver" amorphisiert. Außerdem ist Germanium in sehr hohen Konzentrationen mit Silicium mischbar. Nach der Ionenbestrahlung wurden die Wafer 30 min in Stickstoff-Atmosphäre bei 400 °C getempert. Die Ofen-Ausheilung führt zu einer Glättung der a/c-Grenzfläche [94Sei].

Eine dritte Probenserie (C) wurde sowohl mit einer Oberflächen- als auch mit einer vergrabenen amorphen Schicht präpariert, um die Amorphisierung an einer a/c-Grenzfläche einer vergrabenen Schicht im Vergleich zur Oberflächenschicht untersuchen zu können. Die vergrabene amorphe Schicht ist mit einer Bestrahlung von 4 MeV  $1 \times 10^{15} \text{ Ge}^{3+} \text{ cm}^{-2}$  am 3 MV-Ionenbeschleuniger des Instituts (Tandetron, Fa. High Voltage Engineering Europa B.V., Niederlande) hergestellt worden. Anschließend wurden diese Proben in einer RTA-Anlage (*Rapid Thermal Annealing, RTA*) bei 550 °C eine Minute lang in Stickstoff-Atmosphäre getempert. Unter diesen Bedingungen werden leichte, durch die Hochenergie-Implantation entstandene Strahlenschäden (Punktdefekte) ausgeheilt und die Grenzflächen geglättet. Die amorphe Oberflächenschicht wurde mit einer 40 keV  $\text{Ge}^+$ -Implantation und einer anschließenden Ofen-Ausheilung wie bei der Probenserie B hergestellt.

Aus den TEM-Aufnahmen der *as implanted*-Proben wurde für die a/c-Grenzfläche der Oberflächenschicht ein Rauigkeitswert  $< 1 \text{ nm}$  ermittelt (s. Kap. 5.3). Die Dicke der Schichten wurde mit RBS/C (1,5 MeV  $\text{He}^+$ ,  $\theta_1 = 0^\circ$ ,  $\theta_2 = 80^\circ$ ) bestimmt und beträgt etwa 35 nm bei der Probenserie A und 55 nm bei den Serien B und C. Die obere Grenzfläche der vergrabenen amorphen Schicht (Serie C) liegt in einer Tiefe von  $1,7 \pm 0,2 \mu\text{m}$ . Bei der maximalen Terminalspeisung von 1,7 MV am Van de Graaff-Beschleuniger ist die Energie der  $\text{He}^+$ -Ionen für eine RBS-Analyse der vergrabenen Schichten nicht ausreichend. Daher wurden diese Schichten mit 1 MeV  $\text{H}^+$  gemessen. Die Schwankung in der Schichtdicke rührt von der schlechten Tiefenaufösung des Protonenstrahles her (s. Kap. 5.2.2).

### 4.2 Hochenergie-Implantation

Die Experimente zur Untersuchung der planaren Amorphisierung wurden am 5 MV-Ionenbeschleuniger (Tandem) des Instituts durchgeführt. Abbildung 24 zeigt den Aufbau des nach dem Van de Graaff- und Tandem-Prinzip [92Will] arbeitenden Beschleunigers. Dieser wurde 1972 in Betrieb genommen und ist seitdem ständig weiter entwickelt worden. An dieser Stelle soll nur kurz auf die Funktionsweise des Beschleunigers eingegangen werden. Ausführliche Darstellungen sind in [74Hoc][82Ric][86Fri] zu finden.

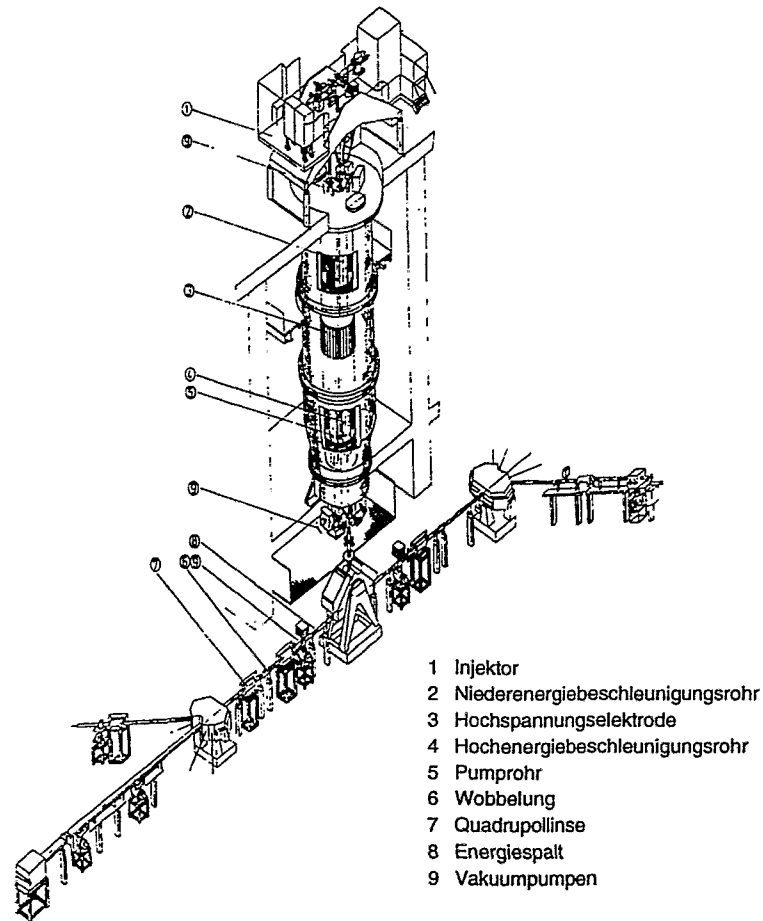


Abb. 24: Aufbau des Rossendorfer Tandem-Beschleunigers EGP-10-1 (schematisch)

Der Injektor (1) dient zur Erzeugung, Vorbeschleunigung und Formierung von negativen Ionen. Als Ionenquellen stehen das Duoplasmatron EKTON-4 [S2Ric] für die Erzeugung von  $H^-$ ,  $^2H^-$  und  $(NH_2)^-$  Ionen sowie die Cs-Sputterquelle MISS-790 [86Mat] für eine Vielzahl weiterer Ionen zur Verfügung. Die aus der Quelle extrahierten Ionen werden mit Hilfe eines Systems von elektrostatischen Linsen und Korrektoren durch den Injektormagneten fokussiert. Eine magnetische Elektronenfalle entfernt die im Ionenstrahl enthaltenen Elektronen. Im Injektormagneten wird die gewünschte Ionenart um  $90^\circ$  in die vertikale Richtung abgelenkt. Eine elektrostatische Linse fokussiert den austretenden Strahl auf den Eingang des Niederenergiebeschleunigungsrohres (2), in dem die Ionen auf die Energie  $eU_T$  beschleunigt werden. Die Terminalspannung  $U_T$  kann zwischen 0,8 und 4,5 MV variiert werden. Unmittelbar hinter dem Niederenergiebeschleunigungsrohr befindet sich der Gasstripper, in dem die Umladung der Ionen stattfindet.

Positiv geladene Ionen werden nach Passieren des Hochenergiebeschleunigungsrohres (4) mittels einer Quadrupollinse und verschiedenen Korrektoren auf den Eingangsspalt des Analysiermagneten fokussiert. Dieser separiert die Ionen mit der gewünschten Energie und lenkt den Strahl wahlweise in einen der beiden Versuchsräume. Das Magnetfeld des Analysiermagneten und der dahinter angeordnete Energiespalt (8) übernehmen gleichzeitig die Energieregulierung des Ionenstrahles. In jedem Versuchsraum wird der Strahl mit

Hilfe des Verteilermagneten in einen der fünf Versuchskanäle gelenkt. Die magnetische Quadrupollinse (7) fokussiert den Strahl durch den Verteilermagneten auf das Target der entsprechenden Experimentierkammer, das in der Regel auf Masse liegt. Die Endenergie der Ionen mit der Ladungszahl  $q$  beträgt

$$E = (1 + q) e U_T \quad (89)$$

Um eine homogene Bestrahlung der Probe zu erreichen, muß der Strahl aufgefächert werden. Diese Funktion übernimmt die Wobbelung (6). Der Strahl wird dabei in zwei senkrecht zueinander stehende Richtungen  $x$  und  $y$  abgelenkt. An der Experimentierkammer, wo die Hochenergie-Implantationen durchgeführt worden sind, betragen die Ablenkfrequenzen etwa 390 Hz und 770 Hz in  $x$ - bzw.  $y$ -Richtung.

Das Vakuum in der Experimentierkammer, das durch eine Turbomolekularpumpe mit einer vorgeschalteten Drehschieberpumpe erzeugt wird, beträgt während der Ionenbestrahlung etwa  $10^{-4}$  Pa. Die Probe wurde mit Silberleitlack auf eine kleine Kupferplatte geklebt, die eine Bohrung für die Aufnahme des Thermoelementes enthielt. Diese ist dann auf den Probenhalter montiert worden. Ein in die Kammer eingebautes Fünf-Achsen-Goniometer ermöglicht eine Bewegung des Probenhalters in drei Richtungen ( $x, y, z$ ) und um zwei Drehachsen ( $d1, d2$ ). Die Stabilität des Probenhalters entsprach jedoch nicht den Anforderungen der optischen Meßtechnik. Eine wesentliche Ursache lag in der Instabilität der Drehachse  $d2$  (Kippung der Probe), die folglich "stillgelegt" werden mußte. Die Genauigkeit und Reproduzierbarkeit der Positionierung mit den verbleibenden Achsen als auch ihre Stabilität war für die optischen Messungen ausreichend. Trotzdem soll darauf hingewiesen werden, daß die Reproduzierbarkeit der Drehachsenbewegung  $d1$  nicht besser als  $0,3^\circ$  ist.

Der Probenhalter kann in Verbindung mit einer Kühlfalle mit flüssigem Stickstoff gekühlt werden. Dabei sinkt der Restgasdruck um etwa eine Größenordnung. Die niedrigste, je erreichte Temperatur betrug etwa  $-192^\circ\text{C}$ . Eine zusätzliche Widerstandsheizung im Probenhalter ermöglicht es, Temperaturen zwischen  $-192^\circ\text{C}$  und  $+400^\circ\text{C}$  stufenlos einzustellen. Die Temperaturmessung erfolgte mit einem Thermoelement (NiCr-Ni, Typ K). Die absolute Genauigkeit der Messungen beträgt  $\pm 10$  K, die Reproduzierbarkeit der Temperatur  $\pm 3$  K.

Der Ionenstrom wird mit einem zylinderförmigen Faraday-Becher, der zentral vor dem Probenhalter montiert ist, gemessen. Der Ionenstrahl passiert den Becherboden durch eine quadratische Öffnung, deren Fläche gleich der vollbestrahlten Restfläche des Bodens ist ( $2\text{ cm}^2$ ). Bei einer homogenen Bestrahlung treffen genauso viele Ionen pro Zeiteinheit auf den Becherboden wie auf die dahinter positionierte Probe. Ein Problem bei der Strommessung sind die Sekundärelektronen, die beim Beschuß des Bechers aus dem Material herausgeschlagen werden. Ihr Stromanteil addiert sich zum positiven Ionenstrom. Um diesen Effekt zu reduzieren, wurde vor und hinter dem Faraday-Becher eine Blende angeordnet. An diese wird während des Experimentes eine negative Spannung angelegt, damit werden die herausgeschlagenen Elektronen wieder in den Becher hineingelenkt. Die Höhe der Spannung ist von der Geometrie der Anordnung abhängig und beträgt hier etwa  $-50$  V. Ein Strom-Spannungswandler verstärkt den gemessenen Ionenstrom. Dessen Ausgangsspannung wird in periodischen Zeitabständen (typ. 1 min) von einem Computer gemessen, digitalisiert und über der Zeit integriert. Aus diesem Wert wird dann die aktuelle Ionenfluenz berechnet.

Die am Thermoelement gemessene Spannung wird ebenfalls in diesem Zeittakt gemessen, digitalisiert und in eine Temperatur in Grad Celsius umgerechnet. Temperatur,

aktueller und maximaler Strom während des laufenden Experimentes, Ionenfluenz sowie die Reflektivität werden auf dem Bildschirm dargestellt und gleichzeitig in einer Datei gespeichert.

Die präparierten Proben wurden mit Germanium, Arsen oder Jod mit einer Energie von 4 bzw. 7 MeV bestrahlt. Die Temperatur wurde zwischen  $-192\text{ °C}$  und  $+80\text{ °C}$  variiert. In den Experimenten sind die Proben mit Fluenzen zwischen  $1 \times 10^{14}\text{ cm}^{-2}$  und  $6,2 \times 10^{15}\text{ cm}^{-2}$  bestrahlt worden. In Tabelle 2 wird eine Übersicht über die Parameter der durchgeführten IBIIA-Experimente gegeben. Sie enthält auch die aus den TRIM-Rechnungen gewonnenen Daten bezüglich der zu erwartenden mittleren projizierten Reichweite der Ionen  $R_p$  und der nuklearen Energiedeposition  $S_n$  an der a/c-Grenzfläche der Oberflächenschicht (s. auch Kap. 4.3).

Proben- serie	Ion	Energie (MeV)	$R_p$ ( $\mu\text{m}$ )	$S_n$ (eV/nm)	Temp. ( $^{\circ}\text{C}$ )	Stromdichte ( $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ )	Ionenfluenz ( $\text{cm}^{-2}$ )
A	$^{75}\text{As}^{3+}$	4	2,6	60	+20	$3,5 \times 10^{10}$	$2,5 \times 10^{15}$
					+2	$2,6 \times 10^{10}$	2 ... $6 \times 10^{14}$
					-22	$3,3 \times 10^{10}$	$5 \times 10^{14}$
					-23	$3,1 \times 10^{10}$	$2 \times 10^{14}$
					-55	$2,7 \times 10^{10}$	$2 \times 10^{14}$
					-61	$2,8 \times 10^{10}$	$4 \times 10^{14}$
					-90	$3,1 \times 10^{10}$	2 ... $5 \times 10^{14}$
					-117	$2,0 \times 10^{10}$	$2,5 \times 10^{14}$
					-131	$6,0 \times 10^{10}$	$1 \times 10^{14}$
-165	$2,6 \times 10^{10}$	1 ... $3 \times 10^{14}$					
B	$^{75}\text{As}^{3+}$	4	2,6	60	-150	$3,0 \times 10^{10}$	$5 \times 10^{14}$
	$^{79}\text{Br}^{2+}$	4	2,4	60	+20	$1,7 \times 10^{10}$	$4 \times 10^{14}$
					+20	$1,2 \times 10^{11}$	$3 \times 10^{14}$
					+20	$3,8 \times 10^{11}$	$2 \times 10^{14}$
+20	$1,0 \times 10^{12}$	$1,5 \times 10^{14}$					
$^{127}\text{I}^{3+}$	7	2,7	100	+80	$1,0 \times 10^{11}$	$2,2...6,2 \times 10^{15}$	
C	$^{74}\text{Ge}^{3+}$	4	2,9	50	+50	$1,5 \times 10^{10}$	$2 \times 10^{15}$
					+20	$3,0 \times 10^{10}$	$1,2 \dots 3 \times 10^{15}$
					+1	$2,1 \times 10^{10}$	2 ... $5 \times 10^{15}$
					-154	$3,1 \times 10^{10}$	2 ... $5 \times 10^{14}$
					-192	$2,3 \times 10^{10}$	1 ... $3 \times 10^{14}$

Tabelle 2: Bestrahlungsparameter in den IBIIA-Experimenten

Die zu geringe Konstanz und Ausbeute des Ionenstromes am Tandem-Beschleuniger ließ eine Untersuchung der Stromdichteabhängigkeit der planaren Amorphisierung nicht zu. Deshalb wurden diese Experimente am Tandetron-Beschleuniger durchgeführt. Allerdings mußte hier auf eine zeitaufgelöste Reflektivitätsmessung verzichtet werden, da an diesem Beschleuniger eine derartige in-situ-Technik nicht vorhanden ist. Der Tandetron-Beschleuniger, welcher 1993 in Betrieb genommen worden ist, arbeitet ebenfalls nach dem Tandem-Prinzip. Die Hochspannung wird in einer Kaskadenschaltung erzeugt. Ausführliche Darstellungen zur Beschleunigungstechnik sind in [92Wil2][93HV] zu finden. In der

Implantationskammer sind vor einer Blende vier Faraday-Becher segmentartig angeordnet. Über diese wird der Gesamtstrom gemessen und daraus die Fluenz berechnet.

Hier wurden die präparierten Proben mit 4 MeV  $\text{Br}^{2+}$  bei RT bestrahlt. Die Ionenstromdichte wurde im Bereich 5 - 320 nA/cm<sup>2</sup>, d.h.  $1,7 \times 10^{10}$  -  $1 \times 10^{12}$  cm<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup> und die Fluenz zwischen  $1,5 \times 10^{14}$  cm<sup>-2</sup> und  $4 \times 10^{14}$  cm<sup>-2</sup> variiert (s. Tab. 2). Bei der Darstellung der experimentellen Ergebnisse werden die verwendeten Ionenstrahlparameter und die Substrattemperatur für jedes Experiment bzw. jede Experimentserie genauer angegeben (s. Kap. 5).

### 4.3 Simulation der Energie- und Reichweiteverteilung

Da die Reichweiteverteilung der Ionen in nur wenigen Fällen durch eine Gaußverteilung angenähert werden kann, wird sie heute im allgemeinen durch Simulationsrechnungen bestimmt. Dabei haben sich zwei verschiedene Vorgehensweisen herauskristallisiert, die auf computergestützten Berechnungen basieren. Die erste Methode, die auf Molekulardynamischen Rechnungen (MD) beruht, geht von der numerischen Lösung der klassischen Bewegungsgleichungen aller beteiligten Teilchen aus. Die Beschreibung sämtlicher Wechselwirkungen eines hochenergetischen Teilchens in einem Festkörper entlang der Stoßkaskade bis zur völligen Energieabgabe erfordert eine hohe Rechenleistung. Aus diesem Grund ist eine MD-Rechnung nur für kleine Volumina mit einer linearen Ausdehnung in der Größenordnung von 10 nm sinnvoll. Das bedeutet eine Beschränkung der Ionenenergie auf einige 100 eV. Dieses Verfahren eignet sich besonders für die Beschreibung der Ion-Festkörper-Wechselwirkung bei kristallinen Substraten mit ausgezeichneten Kristallrichtungen, so daß beispielsweise *Channeling*-Effekte sehr genau simuliert werden können [95Wod].

Der zweite Weg zur Berechnung der Stoßkaskaden basiert auf der Zweierstoßnäherung (BCA). Danach wird das Bewegungsproblem als zeitliche Aufeinanderfolge von einzelnen Wechselwirkungen zweier Teilchen gelöst, was zu einer wesentlichen Verkürzung der Rechenzeit führt. Ein auf dieser Methode beruhendes Programm TRIM wurde von Ziegler et al. entwickelt [85Zie]. Es arbeitet nach der Monte-Carlo-Methode und setzt eine amorphe Struktur der Targetatome voraus. Neben der Tiefen- wird die laterale Verteilung der Ionen sowie die der erzeugten Frenkelpaare berechnet. Ein Überblick über die verschiedenen methodischen Ansätze der BCA ist in [94Rob] zu finden.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde das Simulationsprogramm TRIM93 (*Transport of Ions in Matter*) von Ziegler et al. genutzt. In Abbildung 25 ist die Reichweiteverteilung und in Abbildung 26 die nukleare Energiedeposition über der Tiefe für die hier verwendeten Ionenarten und -energien dargestellt. Diesen Kurven liegen TRIM-Rechnungen zugrunde.

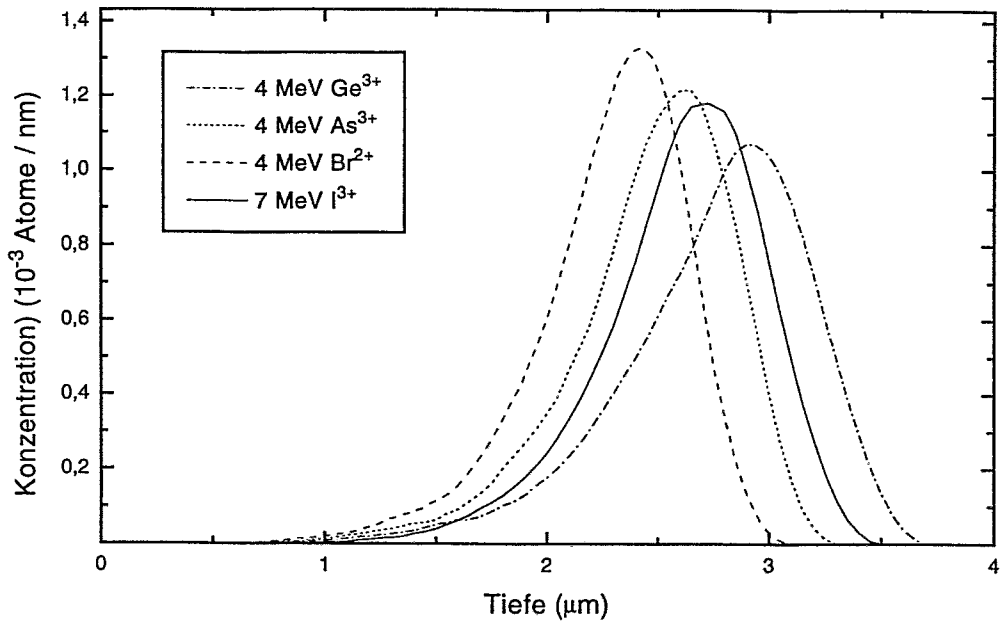


Abb. 25: Reichweiteverteilungen für verschiedene Ionenarten und -energien

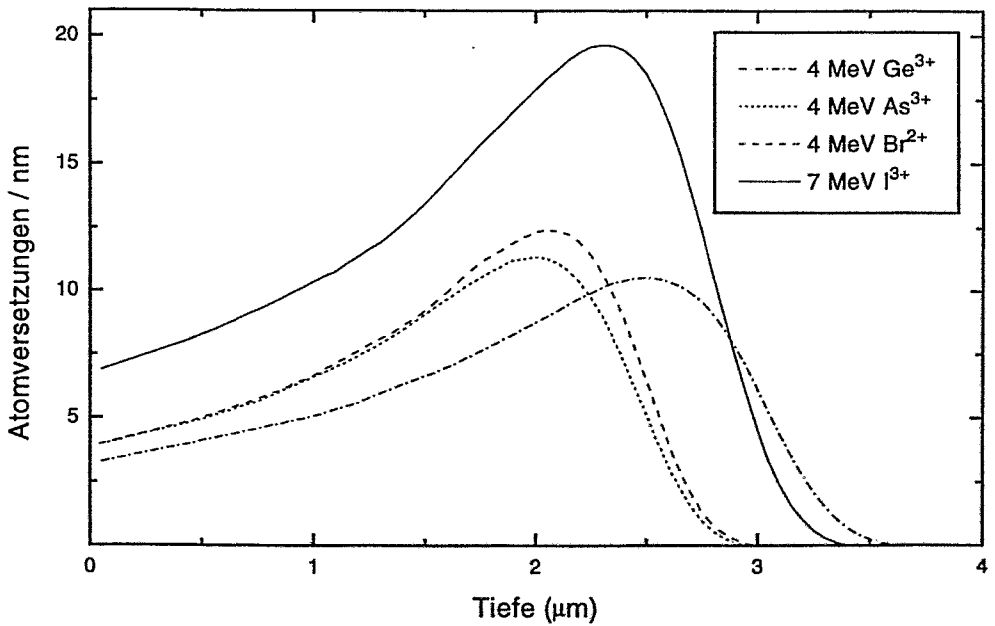


Abb. 26: Nukleare Energiedeposition über der Tiefe für verschiedene Ionenarten und -energien

## 4.4 Analyse der Proben

### 4.4.1 Zeitaufgelöste Laserreflektometrie

Da die Ionenströme am Tandem-Beschleuniger während der Experimente schwanken, werden die Reflektivitätskurven nicht in Abhängigkeit von der Zeit wie im Kapitel 3 erläutert,



sondern als Funktion der Ionenfluenz gezeigt. Im Vorfeld der geplanten Experimente wurde zuerst ein IBIEC-Experiment durchgeführt, um die optische Technik zu testen. Für derartige Experimente lagen bereits Ergebnisse aus der Literatur vor, so daß die Funktionsweise des Reflektivitätsmeßplatzes überprüft werden konnte.

Dafür wurde zunächst eine Probe mit 500 keV  $\text{Sb}^+$  bei RT mit einer Fluenz von  $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$  implantiert. RBS/C-Messungen zeigten, daß sich eine amorphe Schicht von der Oberfläche bis in eine Tiefe von 380 nm gebildet hatte. Im IBIEC-Experiment wurde diese Probe mit 7 MeV  $\text{I}^{3+}$  bei einer Temperatur von 300 °C bestrahlt. Die mittlere Stromdichte betrug  $2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ , die Energiedeposition an der a/c-Grenzfläche etwa 120 eV/nm. Die gemessene Reflektivität oszilliert über mehrere Perioden (s. Abb. 27).

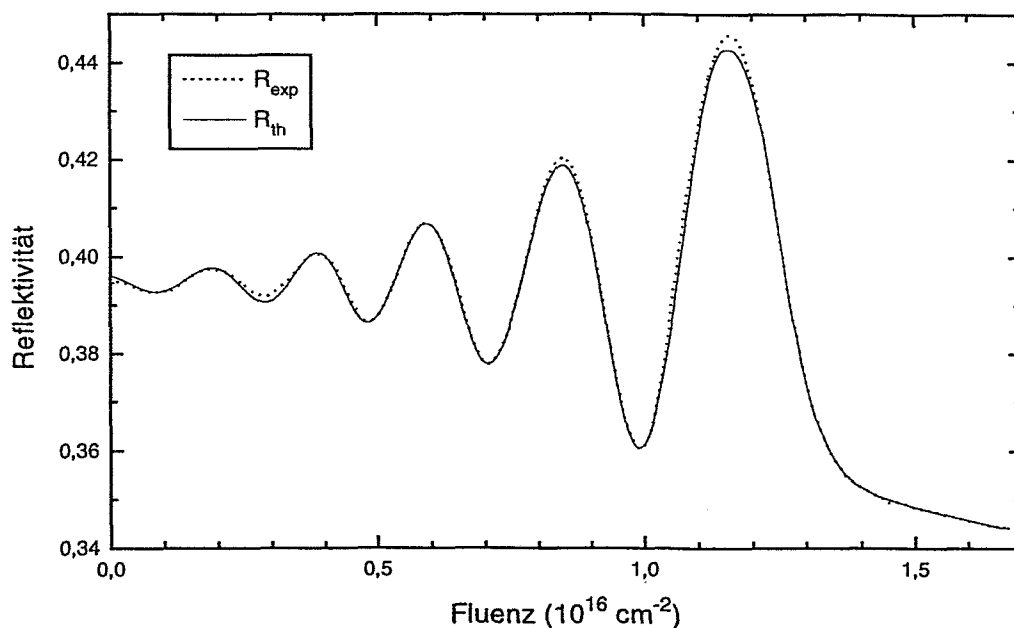


Abb. 27: Reflektivität in Abhängigkeit von der Ionenfluenz für eine Bestrahlung mit 7 MeV  $1,7 \times 10^{16} \text{ I}^{3+} \text{ cm}^{-2}$  bei 300 °C ( $j = 2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ ,  $S_n = 120 \text{ eV/nm}$ ). Die Probe wurde mit 500 keV  $\text{Sb}^+$  voramorphisiert ( $d = 380 \text{ nm}$ ). Parameter für  $R_{th}$ :  $n_{a-Si} = 4,41$ ,  $k_{a-Si} = -0,483$ ,  $n_{c-Si} = 3,882$ ,  $k_{c-Si} = -0,019$ ,  $d_{a-Si} = 383,5 \text{ nm}$ ,  $\alpha_0 = 35^\circ$ ,  $\lambda = 632,8 \text{ nm}$ , 3 nm  $\text{SiO}_2$ -Schicht.

Bei einer Fluenz von  $1,7 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$  wurde das Experiment abgebrochen, weil die Reflektivität sich nicht mehr stark änderte. Der TRR-Kurve zufolge sollte die amorphe Schicht völlig rekristallisiert sein. Diese Annahme wurde von RBS/C-Messungen bestätigt. Die Amplitude der Oszillationen wächst mit zunehmender Ionenfluenz. Das ist auf eine kleiner werdende Absorption in der amorphen Schicht zurückzuführen, da deren Dicke kontinuierlich abnimmt. Die zurückgelegte Distanz zwischen einem Maximum und einem Minimum der Kurve beträgt mit Gl. (72) etwa 36 nm.

Die Übereinstimmung der theoretischen mit der experimentellen Kurve ist gut, obwohl hier mit unveränderlichen optischen Konstanten gerechnet wurde. Offensichtlich können bei diesen Temperaturen die Defekte rascher ausheilen, so daß die optischen Eigenschaften des kristallinen Siliciums während der gesamten Bestrahlung erhalten bleiben. Geringe Abweichungen gibt es nur in der zweiten Hälfte des Experimentes, wo die Maxima der

experimentellen Kurve die der theoretischen übersteigen. Die Ursache liegt vermutlich in der abnehmenden Absorption des kristallinen Bereiches an der a/c-Grenzfläche. Zu Beginn des Experimentes ist dieser Bereich durch die vorherige Implantation noch stark geschädigt, so daß der Absorptionskoeffizient größer als der des ungeschädigten kristallinen Siliciums ist. Während des IBIEC-Experimentes wird dieser Schaden (Punktdefekte) zunehmend ausgeheilt, die Absorption nimmt demzufolge ab.

Das Beispiel demonstriert, daß die aufgebaute Reflektivitätsmeßtechnik problemlos funktioniert und dieses Verfahren für die Untersuchung von Ionenstrahlinduzierten Umordnungsprozessen erfolgreich eingesetzt werden kann.

#### 4.4.2 Rutherford Rückstreuung

Für die Untersuchung der Schadensverteilung vor und nach dem IBIIA-Experiment wurden Rückstremessungen in Verbindung mit der Kanalisierungstechnik (RBS/C) durchgeführt. Für die Berechnung der IBIIA-Rate genügt die Kenntnis der relativen Schichtdickenänderung  $\Delta d$  bezüglich der Ausgangsschichtdicke der *as implanted*-Probe. Mehrfache *Channeling*-Messungen mit 1,2 MeV He<sup>+</sup> an einigen *as implanted*-Proben ergaben, daß die Reproduzierbarkeit der niederenergetischen "Kante" (der amorphen Oberflächenschicht) oder der "Silicium-Kante" besser als 1 keV war. Nach Durchführung der Energie-Tiefen-Konvertierung unter Anwendung der SEA (s. Kap. 3.3.1) ergibt sich damit eine Genauigkeit für die Bestimmung von  $\Delta d$  von besser als 2 nm, bei der Analyse unter flachem Winkel ( $\theta = 100^\circ$ ) besser als 1 nm. Damit ist klar, daß der Fehler bei der Bestimmung von Schichtdickenänderungen nach der im Kapitel 3.3.3 beschriebenen Methode wesentlich kleiner ist als der bei der Bestimmung von absoluten Schichtdicken.

Alle *Channeling*-Messungen erfolgten bei senkrechtem Ioneneinschuß ( $\theta_1 = 0^\circ$ ), d.h. in [100]-Richtung und bei einem Rückstreuwinkel von  $100^\circ$  oder  $170^\circ$ . Amorphe Oberflächenschichten wurden mit He<sup>+</sup>-Ionen im Energiebereich von 1,2 - 1,5 MeV analysiert. Aufgrund der größeren Eindringtiefe von Protonen gegenüber He<sup>+</sup>-Ionen wurden vergrabene amorphe Schichten mit 1 MeV H<sup>+</sup> untersucht. Die zur Analyse verwendete Ionenladung betrug 20  $\mu\text{C}$ .

#### 4.4.3 Elektronenmikroskopie

XTEM wurde herangezogen, um die Mikrostruktur der Grenzflächen zu untersuchen und die Korrelation mit den RBS-Ergebnissen zu zeigen. Die Präparation der XTEM-Folien erfolgte nach bekannten Standardprozeduren, wobei das mechanische Polieren bei RT durchgeführt und beim nachfolgenden Ionenstrahl-Abdünnen die Probe mit flüssigen Stickstoff gekühlt wurde. Letzteres ist erforderlich, um IBIEC während des Abdünnens zu verhindern. Die Präparation und Untersuchung der Folien erfolgte im IV. Physikalischen Institut der Universität Göttingen. Die XTEM-Aufnahmen wurden bei 200 keV in einem Elektronenmikroskop der Firma Philips (CM200-FEG-UT) angefertigt.

Als Bezugspunkt bei der Bestimmung der Dicke der amorphen Oberflächenschichten wurde die Position der Probenoberfläche verwendet. Die Gitterabbildung des kristallinen Substrats diente zur Eichung der Vergrößerung. Rauigkeitsspektren der a/c-Grenzfläche wurden nach einer Methode von Goodnick et al. [85Goo] bestimmt. Danach wird die Grenzfläche digitalisiert, wobei deren Tiefenlage aus der letzten sichtbaren Gitterabbildung des Kristalls in der eindimensionalen Projektion des Probenquerschnitts festgelegt wird. Die Grenzflächenrauigkeit (*root-mean-square-roughness*, *rms*) und deren Frequenzspektrum können aus diesen Daten dann extrahiert werden.

## 5 Experimentelle Ergebnisse

### 5.1 Reflektivitätsmessungen

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Charakterisierung von Strahlenschäden und der planaren Amorphisierung in Silicium durch in-situ-Reflektivitätsmessungen vorgestellt.

#### 5.1.1 Strahlenschäden

Im folgenden werden TRR-Kurven gezeigt, die für die Akkumulation von Strahlenschäden während einer MeV-Implantation charakteristisch sind. Ein unbehandelter Siliciumwafer wurde bei RT mit 3 MeV  $2 \times 10^{15} \text{ I}^{2+} \text{ cm}^{-2}$  bei einer Stromdichte von  $2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$  bestrahlt. Die Reflektivität ist mit einem linear polarisierten Helium-Neon-Laser ( $\lambda = 632,8 \text{ nm}$ ) gemessen worden. In Abbildung 28 ist zu erkennen, daß die Reflektivität zunächst bis etwa  $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$  nur geringfügig zunimmt. Dann steigt diese mit zunehmender Ionenfluenz stärker und erreicht ein Maximum bei etwa  $8 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ . Bei fortgesetzter Bestrahlung fällt sie leicht wieder ab und strebt einem Sättigungswert entgegen. Bei einer Temperatur von  $100 \text{ }^\circ\text{C}$  wurde lediglich eine stetige Zunahme der Reflektivität beobachtet, ein Maximum oder eine Sättigung wurde jedoch nicht erreicht.

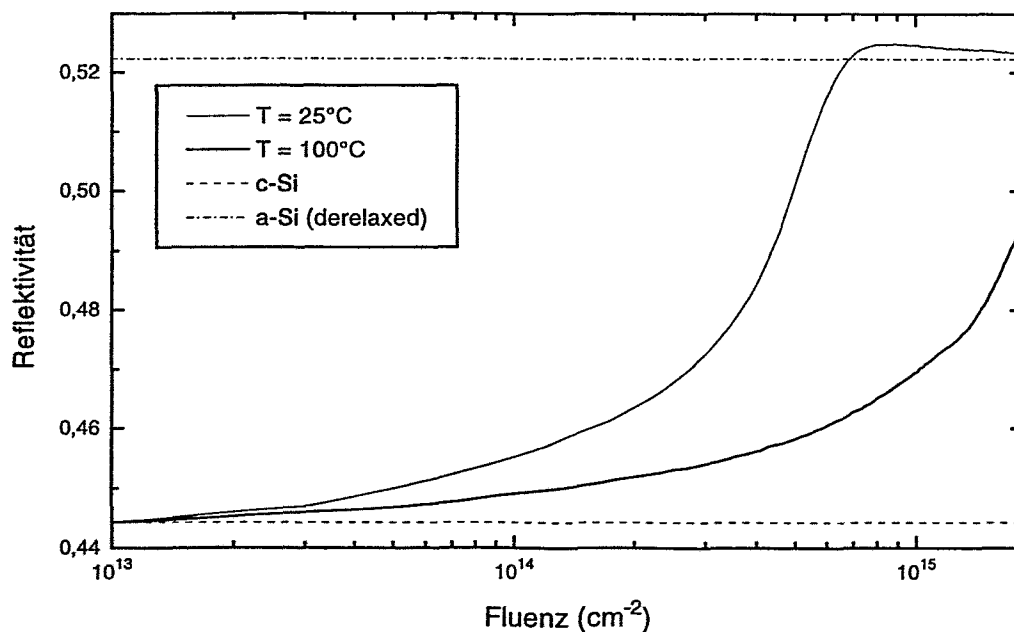


Abb. 28: Reflektivität als Funktion der Ionenfluenz während der Akkumulation von Strahlenschäden in Silicium bei verschiedenen Temperaturen

Die Reflektivität setzt bei einem, für ungeschädigtes kristallines Silicium charakteristischen Wert von 0,444 ein. Abbildung 28 enthält auch den theoretischen Wert von 0,522 für die Reflektivität von amorphem Silicium (*derelaxed*). Dieser ergibt sich, wenn die im Kapitel 3.2.3 angeführten optischen Konstanten (s. Tab. 1) und ein Einfallswinkel des Laserstrahles auf der Probe von  $40^\circ$  zugrunde gelegt werden. Die Korrelation mit den experimentellen Kurven ist gut. Insbesondere dürfte sicher sein, daß nach der Ionenbestrahlung bei RT die Probe bis zur Oberfläche völlig amorphisiert ist.

### 5.1.2 Planare Amorphisierung

Für die ersten Experimente zur Untersuchung der Temperaturabhängigkeit wurden Proben der Serie B verwendet (Dicke der amorphen Oberflächenschicht: 55 nm). Abbildung 29 zeigt die Reflektivität und den Ionenstrom für eine 7 MeV  $I^{3+}$  Bestrahlung bei 80 °C als Funktion der Zeit. Trotz starker Schwankungen von bis zu 80 % und mehrmaligen Ausfällen des Ionenstromes während des Experimentes ist der Verlauf der Reflektivität klar erkennbar. Sie durchläuft ein Minimum und steigt danach mit zunehmender Fluenz bis zum Ende des Experimentes kontinuierlich an. Die mittlere Stromdichte betrug etwa  $1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ , die Fluenz  $6,2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$  und die nukleare Energiedeposition an der a/c-Grenzfläche etwa 100 eV/nm (aus TRIM-Rechnung). Um *Channeling*-Effekte zu begrenzen, ist die Probe um einige Grad aus der Senkrechten bezüglich des Ionenstrahles gedreht worden. Im Experiment betrug dieser Winkel etwa 9°, der Einfallswinkel des Laserstrahles  $\alpha_0$  auf der Probe reduzierte sich dann von 45° auf etwa 36°.

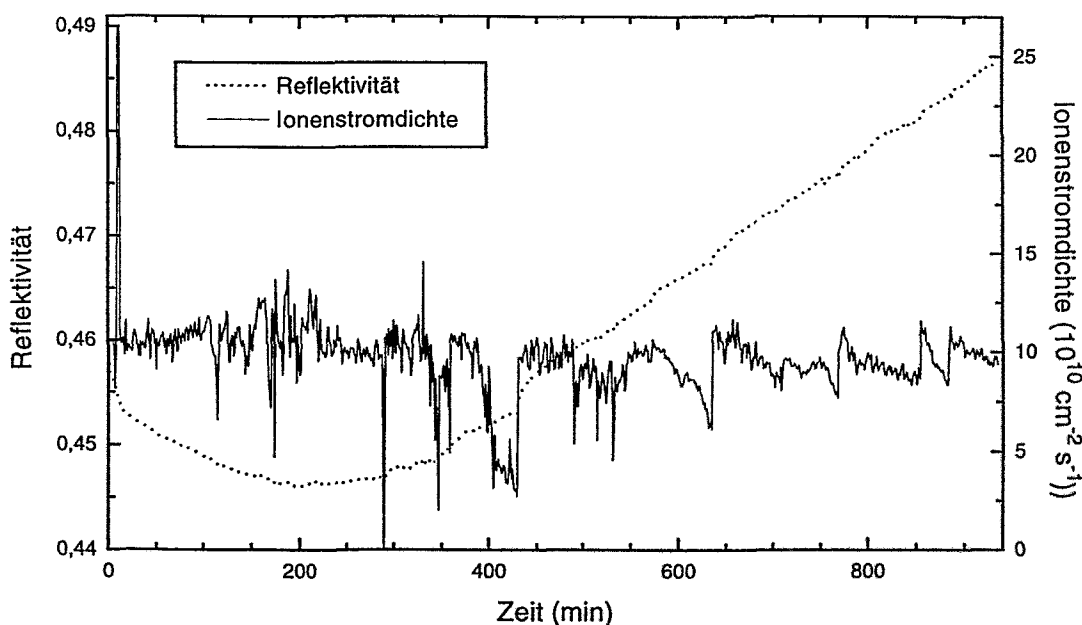


Abb. 29: Reflektivität und Ionenstromdichte als Funktion der Zeit für eine Bestrahlung mit 7 MeV  $6,2 \times 10^{15} I^{3+} \text{ cm}^{-2}$  bei 80 °C ( $S_n = 100 \text{ eV/nm}$ ).

In Abbildung 30 ist die Reflektivität als Funktion der Ionenfluenz dargestellt. Auf der Grundlage eines einfachen Schichtmodells (3 nm  $\text{SiO}_2$  / 55 nm a-Si / c-Si-Substrat) wurde eine theoretische Reflektivität ( $R1_{th}$ ) für eine sich mit konstanter Geschwindigkeit bewegenden a/c-Grenzfläche berechnet. Fitparameter waren die Endschichtdicke  $d_{a-Si}$  der amorphen Schicht sowie die optischen Konstanten  $n_{a-Si}$  und  $k_{a-Si}$ , wobei für letztere eine maximale Abweichung von 30 % vom Tabellenwert zugelassen wurde (s. Tab. 1). Der beste Fit ergab ein Schichtdickenwachstum von 29 nm. RBS/C-Messungen lieferten ein Wachstum von 23 nm. Die Abweichung von 6 nm liegt im Rahmen der Genauigkeit dieser Untersuchungsmethoden.

Die Abbildung zeigt, daß dieser einfache Fit nicht besonders gut ist. Für die Abweichungen der experimentellen von der theoretischen Kurve bis etwa  $1,3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$  könnten Stromschwankungen verantwortlich sein. Für die letzte Phase des Experimentes

trifft das jedoch nicht zu. Hier dürfte die Ursache in der schon diskutierten Änderung der optischen Konstanten des kristallinen Materials liegen. Dieser Effekt würde mit steigender Ionenfluenz zunehmend sichtbarer werden.

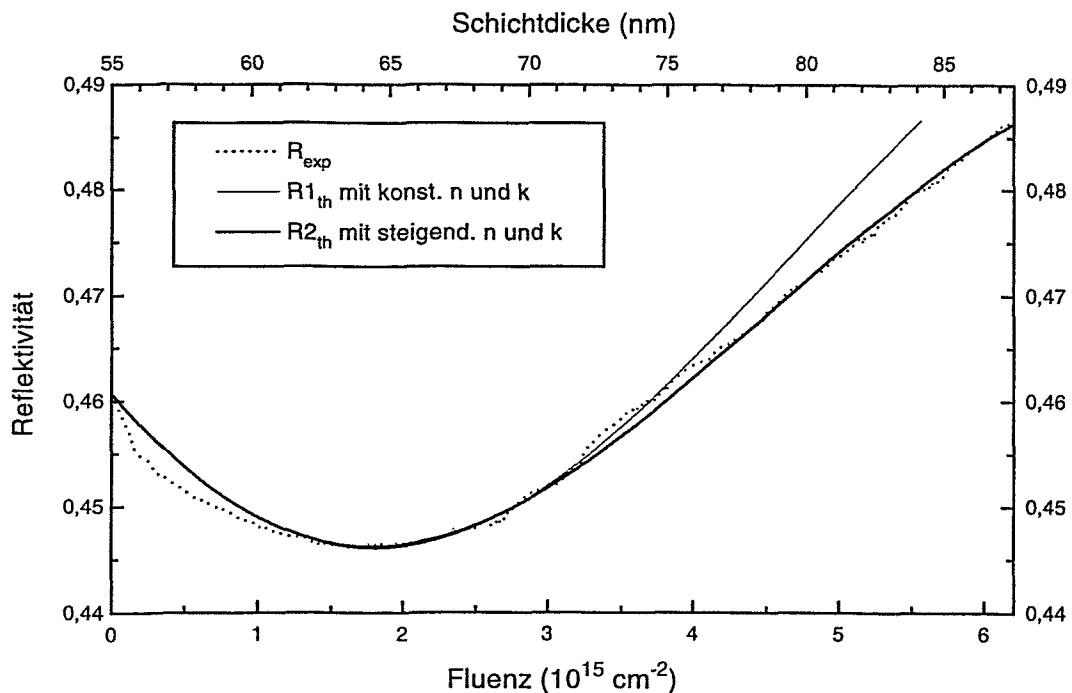


Abb. 30: Reflektivität in Abhängigkeit von der Ionenfluenz. Theoretische Kurven als Funktion der Schichtdicke (Parameter:  $n_{a-Si} = 4,5$ ,  $k_{a-Si} = -0,46$  ( $-0,36$ ) für  $R1_{th}$  ( $R2_{th}$ ),  $n_{c-Si} = 3,882$ ,  $k_{c-Si} = -0,019$ ,  $d_{a-Si} = 55$  nm,  $\alpha_0 = 36^\circ$ ,  $\lambda = 632,8$  nm, 3 nm  $SiO_2$ -Schicht). Bei  $R2_{th}$  wurde eine lineare Steigung der optischen Konstanten des kristallinen Siliciums mit dem Schichtdickenwachstum entsprechend  $n_{c-Si} = 3,882 + 6 \times 10^{-3} \text{ nm}^{-1} \times \Delta d_{a-Si}(\text{nm})$  und  $k_{c-Si} = 0,019 + 4 \times 10^{-3} \text{ nm}^{-1} \times \Delta d_{a-Si}(\text{nm})$  simuliert.

Tatsächlich zeigt eine Simulation, daß die Abnahme der IBIIA-Rate oberhalb einer Fluenz von  $3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$  mit einer stetigen Zunahme von  $n$  und  $k$  des kristallinen Siliciums erklärt werden kann. Die Reflektivität  $R2_{th}(d)$  fittet die experimentelle Kurve wesentlich besser als  $R1_{th}(d)$ . Die gesamte Änderung der optischen Konstanten des kristallinen Materials würde dann etwa 20 % von  $\Delta n_{max} = n_{a-Si} - n_{c-Si}$  bzw.  $\Delta k_{max} = k_{a-Si} - k_{c-Si}$  betragen. Dieses Ergebnis korrespondiert mit der gemessenen Zunahme der Minimalausbeute im RBS/C-Spektrum.

Im Gegensatz zu diesem Resultat lieferte die optische in-situ-Technik von Experimenten, die bei tieferen Temperaturen durchgeführt wurden, keine auswertbaren Kurven. Als ein Beispiel sei hier eine TRR-Kurve gezeigt, die während einer Bestrahlung mit 4 MeV  $As^{3+}$  bei  $-150^\circ C$  aufgenommen wurde. Bei diesen Experimenten nahm die Reflektivität mit der Ionenfluenz kontinuierlich zu und erreichte bei einer bestimmten Fluenz einen Sättigungswert. Danach änderte sich die Reflektivität auch bei weiterer Bestrahlung nicht mehr (s. Abb. 31).

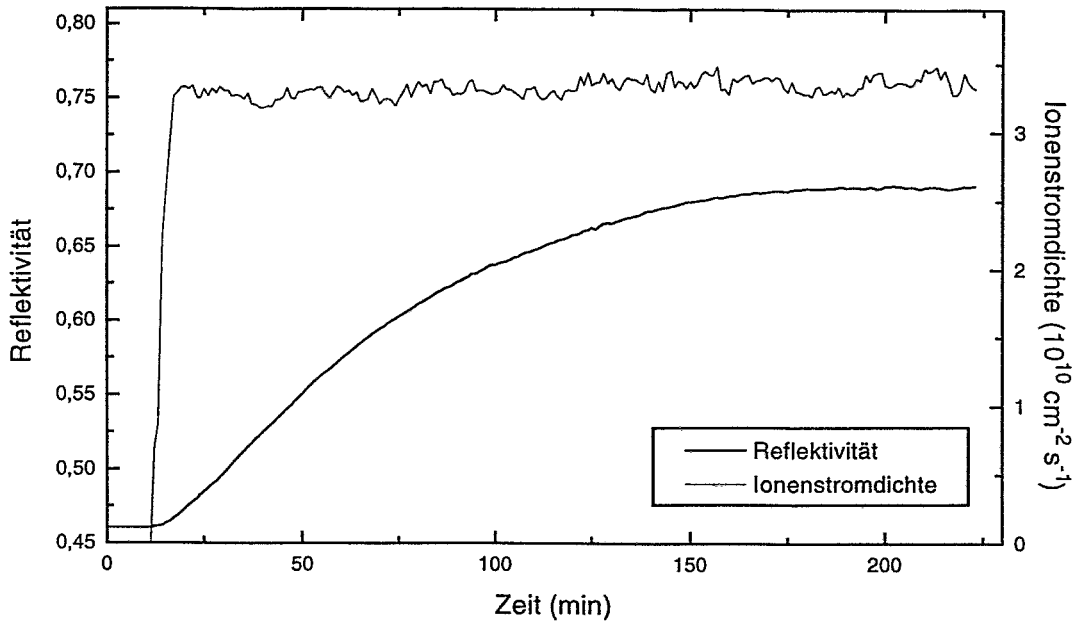


Abb. 31: Reflektivität und Ionenstromdichte als Funktion der Zeit für eine Bestrahlung mit  $4 \text{ MeV } 5 \times 10^{14} \text{ As}^{3+} \text{ cm}^{-2}$  bei  $-150 \text{ }^\circ\text{C}$  ( $S_n = 60 \text{ eV/nm}$ ).

Die Ursache dafür war zunächst nicht klar, da nach bisherigen Erkenntnissen die IBIIA-Rate mit fallender Temperatur weiter exponentiell ansteigen sollte (s. Gl. (4)). Deshalb wurde vermutet, daß insbesondere bei tiefen Temperaturen Oszillationen der Reflektivität besonders gut beobachten werden könnten. Um zu überprüfen, ob bei tiefen Temperaturen die LR versagt oder/und andere Effekte die planare Amorphisierung beeinflussen, wurden die bestrahlten Proben mit RBS/C untersucht. Die *Channeling*-Messungen zeigen, daß mit sinkender Temperatur die Minimalausbeute im kristallinen Gebiet unmittelbar hinter der a/c-Grenzfläche stark zunimmt (s. Kap. 5.2.1). Ab einer bestimmten Fluenz ist dieses Gebiet so stark geschädigt, daß sich die optischen Konstanten beiderseits der Grenzfläche weitgehend angeglichen haben. Eine deutliche Diskontinuität von  $n$  und  $k$  an der a/c-Grenzfläche, die Voraussetzung für eine erfolgreiche Anwendung der optischen Technik, ist nicht mehr gegeben. Das Experiment mußte an dieser Stelle abgebrochen werden.

Das Wachstum der amorphen Schicht fiel mit abnehmender Temperatur immer geringer aus (etwa 10 bis 20 nm), hingegen dominierte die Volumen-Amorphisierung immer stärker. Aus diesem Grund konnte mit der in-situ-LR nicht einmal eine Halbwelle beobachtet werden. Daher wird die TRR-Kurve in Abbildung 31 vielmehr durch die Volumen-Amorphisierung des kristallinen Bereiches hinter der a/c-Grenzfläche als durch das (geringe) planare Wachstum der amorphen Oberflächenschicht bestimmt.

Um den störenden Einfluß der Volumen-Amorphisierung zumindest teilweise zu begrenzen, wurde eine neue Probenserie (C) mit einer amorphen Oberflächenschicht als auch mit einer vergrabenen amorphen Schicht präpariert. Letzteres erfolgte mit einer Implantation der gleichen Ionenart und -energie, mit welcher die IBIIA-Experimente durchgeführt werden sollten ( $4 \text{ MeV Ge}^{3+}$ ). Eine anschließende Ausheilung in einer RTA-Anlage hatte zur Folge, daß sich in etwa  $2 \mu\text{m}$  Tiefe eine scharfe a/c-Grenzfläche bildete. Wenn bereits eine planare Grenzfläche vorhanden ist, sollte das durch die Energiedeposition der hochenergetischen Ionen verursachte Schichtwachstum bei nicht zu tiefen Temperaturen weiterhin planar erfolgen. Diese Annahme wurde durch die Tatsache gestützt, daß die

Ausdehnung einer Phase B an einer planaren Grenzfläche zweier Phasen A und B energetisch bevorzugt ist im Vergleich zur Nukleation einer neuen Phase B in einer Matrix A [92Por2]. Grenzflächen stellen immer Senken für Defekte dar und sollten diese aus dem kristallinen Bereich "absaugen".

Diese Annahme hat sich nicht bestätigt. Selbst bei 50 °C ist die Volumen-Amorphisierung immer noch stark präsent. Offenbar ist die Beweglichkeit der Defekte nicht hoch genug, um eine größere Distanz zurücklegen zu können. Folglich mußten andere Verfahren herangezogen werden, um die Kinetik der planaren Amorphisierung bei tiefen Temperaturen zu untersuchen. Dafür geeignete Methoden sind RBS/C und TEM. Die mit diesen Verfahren erhaltenen Ergebnisse werden in den Kapiteln 5.2 und 5.3 dargestellt. Außerdem soll der "konkurrierende" Effekt der Volumen-Amorphisierung genauer beleuchtet werden.

## 5.2 Rutherford Rückstreupektroskopie

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse von ex-situ-Rutherford Rückstremessungen vorgestellt, welche die planare Amorphisierung näher charakterisieren werden. Schwerpunkt ist die Untersuchung der Temperaturabhängigkeit des IBIIA-Prozesses von amorphen Oberflächenschichten.

### 5.2.1 Amorphe Oberflächenschichten

- Temperaturabhängigkeit

Der Prozeß des planaren Wachstums von dünnen Oberflächenschichten wurde im Temperaturbereich von -192 °C bis +80 °C untersucht. Die Präparation der Schichten erfolgte mit einer 20 keV oder 40 keV Ge<sup>+</sup>-Implantation bei RT. Eine anschließende Ionenbestrahlung mit 4 MeV As<sup>3+</sup> bei verschiedenen Temperaturen führte zur planaren Amorphisierung der Oberflächenschicht. In diesen Experimenten betrug die Stromdichte etwa  $3 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$  und die an der a/c-Grenzfläche nuklear deponierte Energie 60 eV/nm. Bei jeweils konstanter Temperatur wurden drei Gebiete ein und derselben Probe mit verschiedener Fluenz bestrahlt. Dieses Verfahren liefert Erkenntnisse über die Fluenzabhängigkeit und erlaubt eine genauere Bestimmung der IBIIA-Rate.

Abbildung 32 zeigt einige ausgewählte RBS/C-Spektren, die das Wachstum der amorphen Oberflächenschicht bei Temperaturen zwischen -165 °C und -23 °C dokumentieren. Alle Proben wurden mit der gleichen Fluenz von  $2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$  bestrahlt. Unter Berücksichtigung der Gl. (75), (83) und (84) kann den Spektren eine Tiefenskala zugeordnet werden, die auf der oberen x-Achse aufgetragen ist. Daß in Gl. (84) das, mit TRIM berechnete, nukleare Bremsvermögen für amorphes Silicium (*Random Stopping Power*) eingesetzt wurde, ist in diesem Fall unkritisch. Die den *Aligned*-Spektren zugeordnete Tiefenskala ist nur im kristallinen Bereich nicht sehr genau, da das Bremsvermögen bei kanalisierten Ionen um etwa 20 bis 30 % geringer ist [78Chu6]. Das bedeutet, daß die Tiefenskala der *Aligned*-Spektren im Vergleich zum *Random*-Spektrum zwischen Kanal 340 und etwa Kanal 350 "komprimiert" werden müßte. Der daraus resultierende Fehler bei der Bestimmung von  $\Delta d$  kann aber vernachlässigt werden, da der kristalline Bereich unmittelbar hinter der Grenzfläche durch die Ionenbestrahlung mehr oder weniger stark geschädigt worden ist.

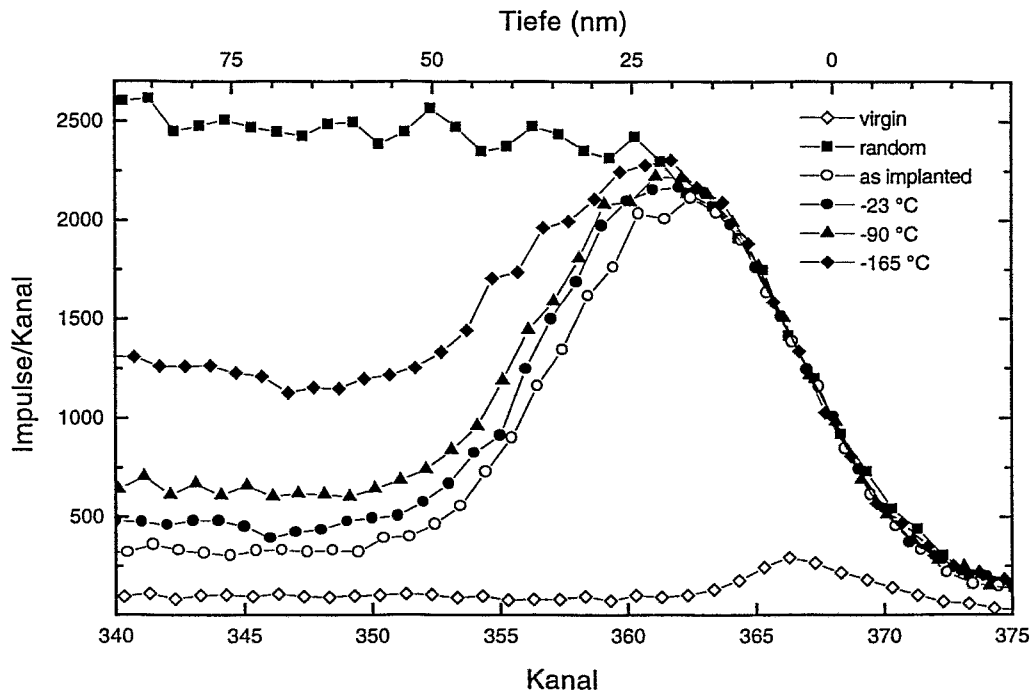


Abb. 32: Mit 1,2 MeV He<sup>+</sup> gemessene RBS/C-Spektren nach einer Bestrahlung der *as implanted*-Proben (Serie A) mit 4 MeV  $2 \times 10^{14}$  As<sup>3+</sup> cm<sup>-2</sup> bei verschiedenen Temperaturen

Aus dem *Aligned*-Spektrum der *as implanted*-Probe ist ersichtlich, daß eine dünne Schicht an der Oberfläche amorph ist. Die Minimalausbeute  $\chi_{\min}$  hinter dieser Schicht ist höher als beim unbestrahlten Kristall (*virgin*). Da das kristalline Material weitgehend defektfrei ist (s. Kap. 5.3.1), kann dieser Effekt auf eine im Vergleich zum kristallinen Material höhere Dekanalisation der eingeschossenen Ionen in der amorphen Schicht zurückgeführt werden ( $\chi_{\min} \approx \chi_d$ ). Die bereits im Kapitel 3.3.1 genannte Methode zur Berechnung des dekanalisierten Anteils der Rückstreuerausbeute liefert für  $\chi_d$  etwa 0,1 in einer Tiefe von 60 nm. Diese Abschätzung stimmt recht gut mit dem experimentellen Wert für  $\chi_{\min}$  von 0,13 überein. Nach der As<sup>3+</sup>-Bestrahlung erhöht sich aber  $\chi_{\min}$  noch zusätzlich um einen Beitrag, welcher von der Rückstreuung kanalisierter Ionen an Defekten herrührt.

Die *Aligned*-Spektren zeigen, daß mit abnehmender Temperatur die Dicke der amorphen Schicht, wenn auch nur geringfügig, zunimmt. Bei -23 °C wurde ein Zuwachs von 3 nm, bei -90 °C 4,2 nm ermittelt. Mit einer Bestrahlungsfluenz von  $2 \times 10^{14}$  cm<sup>-2</sup> ergeben sich IBIIA-Raten von 150 nm/10<sup>16</sup> cm<sup>-2</sup> bzw. 210 nm/10<sup>16</sup> cm<sup>-2</sup>.

Die planare Amorphisierung wird von einer starken Schadensakkumulation im kristallinen Gebiet begleitet, die bei andauernder Bestrahlung zur Volumen-Amorphisierung führen würde. Diese Anhäufung von Gitterdefekten wird durch die nukleare Energiedeposition der hochenergetischen Ionen verursacht. Die im Vergleich zur *as implanted*-Probe erhöhte Rückstreuerausbeute in diesem Gebiet ist ein Hinweis auf diesen Effekt. Ein Teil der in den Kanal geschossenen Helium-Ionen wird an eingebauten Gitterdefekten dekanalisiert und zurückgestreut. Mit sinkender Temperatur nimmt der Grad der Strahlenschädigung, demzufolge auch die Dekanalisation und Minimalausbeute zu (s. Abb. 32).

Bei fortgesetzter Ionenbestrahlung und konstanter Temperatur wächst  $\chi_{\min}$  und erreicht bei einer bestimmten Fluenz die *Random*-Höhe (s. Abb. 33 und 34). In diesem Fall



sind beide amorphe Schichten zusammengewachsen, d.h. die Oberflächenschicht und die in der Tiefe durch die hochenergetischen Ionen erzeugte amorphe Schicht. Die Folge dieser starken Schadensakkumulation ist, daß das Experiment beim Erreichen einer bestimmten Ionenfluenz beendet werden muß, soll es nicht zum Zusammenwachsen der Schichten kommen. Anderenfalls ist eine hinreichend genaue Bestimmung der Dicke der amorphen Oberflächenschicht mit ex-situ-Methoden (RBS, TEM) nicht mehr möglich.

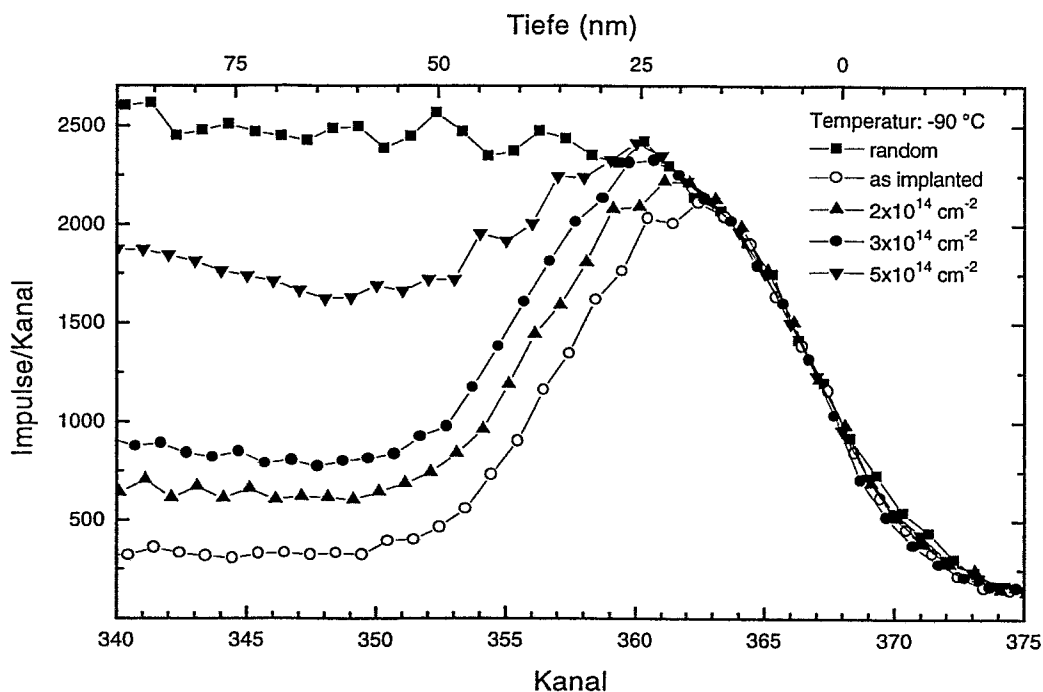


Abb. 33: Mit 1,2 MeV  $\text{He}^+$  gemessene RBS/C-Spektren nach einer Bestrahlung der *as implanted*-Probe (Serie A) mit 4 MeV  $\text{As}^{3+}$  bei  $-90^\circ\text{C}$ . Variiert wurde die Fluenz.

Bei konstanter Temperatur nimmt die Dicke der amorphen Oberflächenschicht mit der Ionenfluenz kontinuierlich zu. Dieses Verhalten bleibt unverändert, wenn die Substrattemperatur bis auf  $-192^\circ\text{C}$  abgesenkt wird. Das ist ein deutlicher Beweis, daß IBIIA auch bei tiefen Temperaturen stattfindet.

Die bis zum Abbruch des Experimentes erreichten Dickenänderungen der amorphen Oberflächenschicht überstiegen selten 20 nm. Ein Vergleich der Spektren in Abbildung 33 und 34 zeigt, daß das erreichte Schichtdickenwachstum bis zum "korrekten" Abbruch des Experimentes bei tiefen Temperaturen geringer ausfällt als bei höheren Temperaturen. Durch die Temperaturabhängigkeit der Volumen-Amorphisierung bedingt wird eine bestimmte Defektdichte im Kristall bei tiefen Temperaturen mit einer kleineren Ionenfluenz erreicht als bei höheren Temperaturen.

Im Temperaturbereich  $0^\circ\text{C} \dots 10^\circ\text{C}$  waren die gemessenen Schichtdickenänderungen am größten (bis ca. 30 nm). Bei noch höheren Temperaturen verliert der Prozeß der Volumen-Amorphisierung zwar weiter an Bedeutung, andererseits wird aber die exponentielle Temperaturabhängigkeit der IBIIA-Rate spürbar. Die Folge ist, daß unter den genannten Bestrahlungsbedingungen  $r_A$  schon bei RT sehr klein ist (ca.  $50 \text{ nm}/10^{16} \text{ cm}^{-2}$ ). Bei noch höheren Temperaturen muß die Defekterzeugungsrate, d.h. die Ionenmasse und/oder die Ionenstromdichte erhöht werden, um den Effekt der planaren Amor-

phisierung überhaupt noch beobachten zu können. Deshalb wurde eine *as implanted*-Probe bei 80 °C mit Jod bestrahlt (s. Kap. 5.1.2).

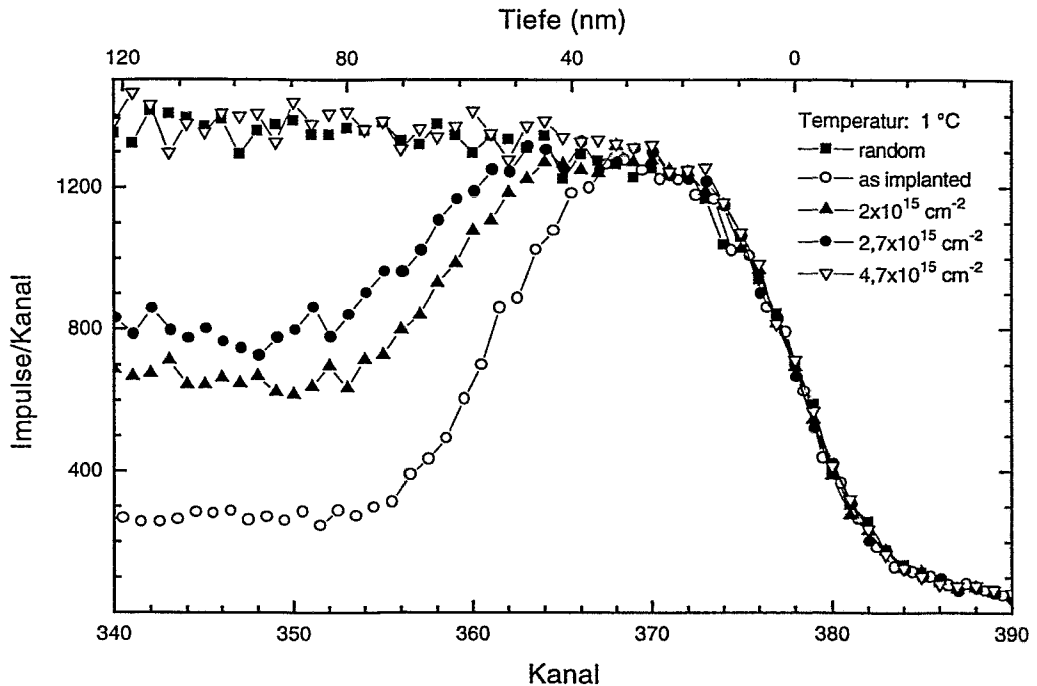


Abb. 34: Mit 1,2 MeV  $\text{He}^+$  gemessene RBS/C-Spektren nach einer Bestrahlung der *as implanted*-Probe (Serie C) mit 4 MeV  $\text{Ge}^{3+}$  bei 1 °C. Variiert wurde die Ionenfluenz.

#### • Stromdichteabhängigkeit

In diesen Untersuchungen sollte geklärt werden, ob die Ionenstromdichte bei tiefen Temperaturen einen Einfluß auf die planare Amorphisierung hat. Die IBIIA-Experimente wurden mit einer 4 MeV  $\text{Br}^{2+}$ -Bestrahlung bei RT durchgeführt. Die Ionenstromdichte wurde dabei zwischen  $1,7 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$  und  $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$  variiert. Die Einstellung noch kleinerer Stromdichten mit der erforderlichen Stabilität war am Tandetron-Beschleuniger nicht möglich. Bei noch höheren Stromdichten ist die in die Probe eingebrachte Leistung bereits größer als  $1 \text{ W/cm}^2$ , was zu Temperaturerhöhungen von mehr als 10 K führen würde [83Smi]. Da die IBIIA-Rate exponentiell von der Temperatur abhängt, wäre ein solcher Temperaturanstieg für diese Experimentserie nicht mehr akzeptabel. Leistungen von mehr als  $1 \text{ W/cm}^2$  konnten von dem verwendeten, wassergekühlten Probenhalter nicht mehr ausreichend abgeführt werden, obwohl ein spezielles Hochvakuumfett mit einer hohen Wärmeleitfähigkeit zur Fixierung der Silicium-Probe verwendet wurde. Bei der höchsten Stromdichte von  $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$  kann eine Temperaturerhöhung von 10 K als obere Grenze angegeben werden.

Abbildung 35 zeigt die Ergebnisse von RBS/C-Messungen, die mit 1,5 MeV  $\text{He}^+$  unter flachem Winkel ( $\theta_1 = 0^\circ$ ,  $\theta_2 = 80^\circ$ ) durchgeführt worden sind. Unter diesen Bedingungen ist die Genauigkeit bei der Bestimmung des Schichtdickenwachses an der Silicium-Oberfläche besser als 1 nm (s. Kap. 4.4.2). Aus den *Aligned*-Spektren ist ein planares Wachstum der amorphen Oberflächenschicht erkennbar.

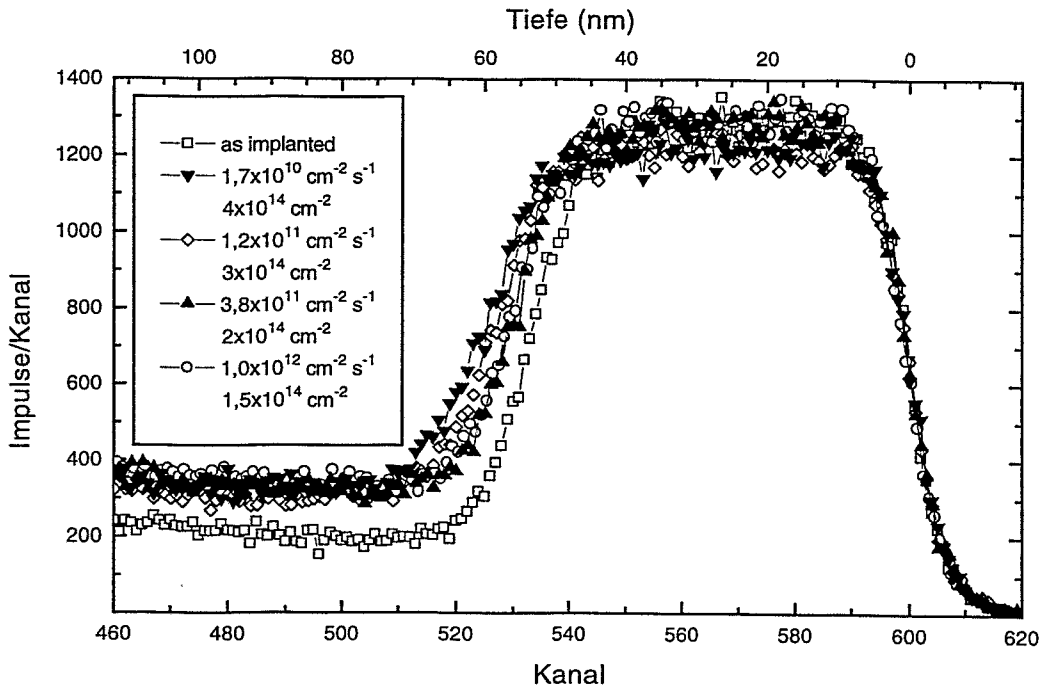


Abb. 35: RBS/C-Spektren ( $1,5 \text{ MeV He}^+$ ,  $\theta_1 = 0^\circ$ ,  $\theta_2 = 80^\circ$ ) nach einer Bestrahlung der *as implanted*-Proben (Serie B) mit  $4 \text{ MeV Br}^{2+}$  bei RT ( $S_n = 60 \text{ eV/nm}$ ). Variiert wurde die Ionenstromdichte.

Im Vergleich zu dem Experiment, das bei der niedrigsten Stromdichte durchgeführt wurde, mußte bei den anderen Experimenten die Ionenfluenz reduziert werden. Anderenfalls würde die stärkere Schadensakkumulation im kristallinen Gebiet durch die höhere Stromdichte zu einer unerwünscht hohen Rückstreausbeute führen. Eine Auswertung der *Aligned*-Spektren wäre dann nur noch bedingt möglich. Die aus den Spektren ermittelten Schichtdickenänderungen liegen im Bereich  $3,5 \dots 8 \text{ nm}$ .

### 5.2.2 Vergrabene amorphe Schichten

Um die Amorphisierung einer vergrabenen amorphen Schicht untersuchen zu können, wurden Silicium-Proben mit derartigen Schichten hergestellt. Diese Proben wurden außerdem mit einer dünnen amorphen Oberflächenschicht präpariert, um einen Vergleich zum IBIIA-Prozeß an der Oberfläche zu ermöglichen (Probenserie C).

Höhere Terminalspannungen als  $1,7 \text{ MV}$  können am Van de Graaff-Beschleuniger nicht realisiert werden. Da die Energie von  $1,7 \text{ MeV}$  nicht ausreicht, um Defektverteilungen bis in eine Tiefe von  $3 \mu\text{m}$  mit  $\text{He}^+$ -Ionen zu analysieren, wurden die RBS/C-Messungen mit  $1 \text{ MeV H}^+$  durchgeführt. Abbildung 36 zeigt die *Aligned*-Spektren nach einer Bestrahlung mit  $4 \text{ MeV } 2 \times 10^{15} \text{ Ge}^{3+} \text{ cm}^{-2}$  bei verschiedenen Temperaturen.

Das *Aligned*-Spektrum der *as implanted*-Probe zeigt deutlich eine amorphe Schicht in einer Tiefe von etwa  $2 \mu\text{m}$ . An der Oberfläche erreicht das Spektrum nicht die *Random*-Höhe, wie es sonst bei amorphen Schichten beobachtet wird. Die Ursache liegt hier in der schlechteren Tiefenauflösung, die auf das im Vergleich zum Helium niedrigere Bremsvermögen der Protonen zurückgeht. An der Oberfläche beträgt die Energieauflösung etwa  $12 \text{ keV}$  und die Tiefenauflösung etwa  $140 \text{ nm}$ . In größeren Tiefen verschlechtert sich

die Auflösung weiter, da hier noch das Energie-*Stragglng* hinzukommt. Der kristalline Bereich unmittelbar hinter der amorphen Oberflächenschicht ist nahezu defektfrei, wie das RBS/C-Messungen mit  $\text{He}^+$ -Ionen gezeigt haben (s. Abb. 34).

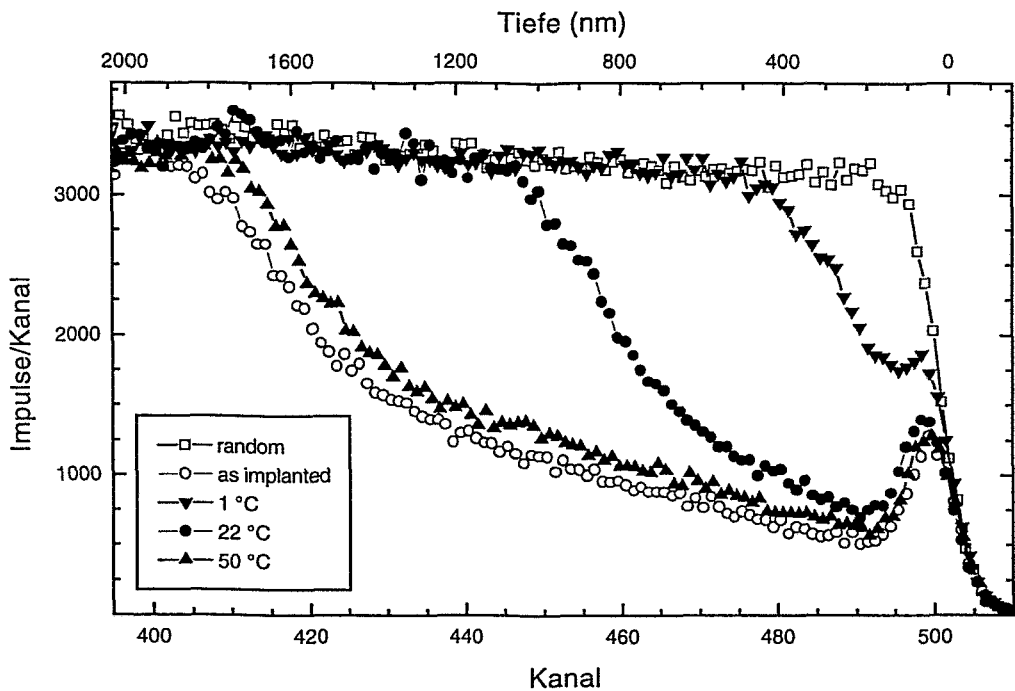


Abb. 36: Mit 1 MeV  $\text{H}^+$  gemessene RBS/C-Spektren nach einer Ionenbestrahlung der *as implanted*-Proben (Serie C) mit  $4 \text{ MeV } 2 \times 10^{15} \text{ Ge}^{3+} \text{ cm}^{-2}$  bei verschiedenen Temperaturen

Aus den *Aligned*-Spektren ist zu erkennen, daß mit abnehmender Temperatur die vergrabene amorphe Schicht sich zur Oberfläche hin ausdehnt. Außerdem deuten alle Spektren darauf hin, daß diese Schicht keine scharfe *a/c*-Grenzfläche hat, da mit dem Energie-*Stragglng* allein der flache Anstieg der hochenergetischen "Kante" in den Spektren nicht erklärt werden kann. Insbesondere weist die Defektverteilung nach der Bestrahlung bei RT einen großen Übergangsbereich mit einem stetig steigenden Grad der Strahlenschädigung vom kristallinen zum amorphen Gebiet auf.

### 5.3 Elektronenmikroskopie

Probenbezeichnung	Bestrahlungsparameter
C6	$4 \text{ MeV } 2 \times 10^{15} \text{ Ge}^{3+} \text{ cm}^{-2}$ bei $+1 \text{ °C}$
C9	$4 \text{ MeV } 2 \times 10^{14} \text{ Ge}^{3+} \text{ cm}^{-2}$ bei $-154 \text{ °C}$
C12	$4 \text{ MeV } 1 \times 10^{14} \text{ Ge}^{3+} \text{ cm}^{-2}$ bei $-192 \text{ °C}$

Tabelle 3: IBIIA-Bestrahlungsparameter der untersuchten Proben

In diesem Kapitel werden Ergebnisse der TEM-Untersuchungen vorgestellt. Analysiert wurden die Mikrostruktur der Grenzflächen vor und nach dem IBIIA-Experiment als

auch der erreichte Dickenzuwachs bei den Oberflächenschichten. In Tabelle 3 sind die Bestrahlungsparameter im IBIIA-Experiment für die untersuchten Proben angegeben.

### 5.3.1 Amorphe Oberflächenschichten

Abbildung 37 zeigt als ein Beispiel die oberflächennahe Mikrostruktur der Referenzprobe C1 (*as amorphized*) im Vergleich zur Probe C6. Bei der Referenzprobe wurde eine Schichtdicke von etwa  $50 \pm 2$  nm ermittelt. Das korrespondiert gut mit den RBS-Messungen, die eine Dicke von 55 nm lieferten (s. Abb. 34). Bei der Probe C6 beträgt die Schichtdicke etwa  $61 \pm 2$  nm. Die Schwankungen in der Schichtdicke sind auf die Rauigkeit der Grenzflächen und die Inhomogenität der Schichten (Welligkeit) zurückzuführen. Die Übereinstimmung mit dem Schichtdickenwachstum von 15 nm, das die RBS/C-Messungen lieferten, ist gut.

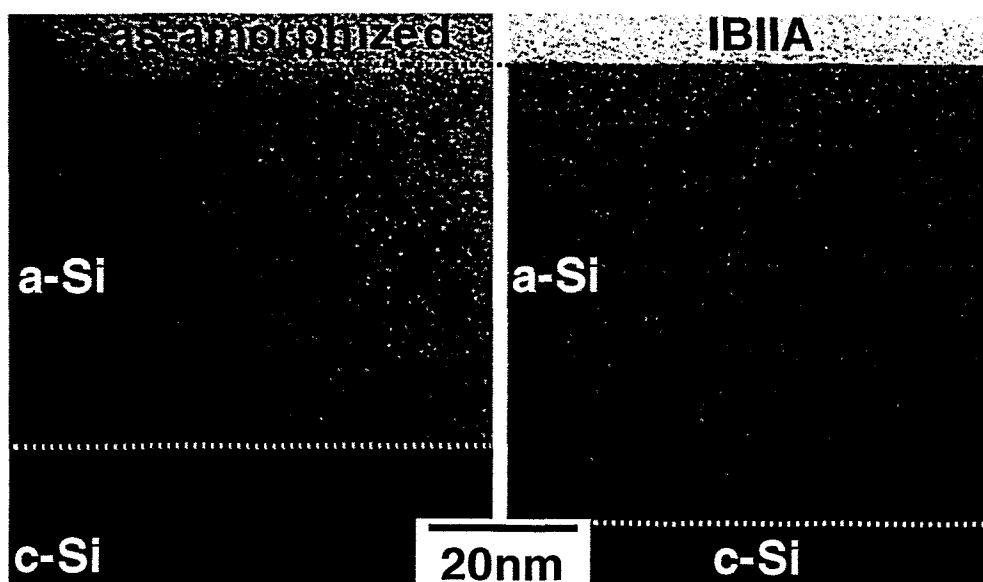


Abb. 37: XTEM-Aufnahmen der amorphen Oberflächenschicht der Referenzprobe C1 (li.) und der IBIIA-Probe C6 (re.) (oberste Linie kennzeichnet die Oberfläche)

Die Probe C9 ist mit  $2 \times 10^{14} \text{ Ge}^{3+} \text{ cm}^{-2}$  bei  $-154 \text{ }^\circ\text{C}$  bestrahlt worden. Dabei wuchs die amorphe Oberflächenschicht um etwa 7 nm (s. Abb. 38). RBS/C lieferte ein Schichtdickenwachstum von etwa 8 nm. Damit zeigen auch die TEM-Untersuchungen, daß IBIIA von amorphen Oberflächenschichten bei tiefen Temperaturen beobachtet werden kann.

Weiterhin wurde die Mikrostruktur der a/c-Grenzflächen untersucht. Dabei ist die Rauigkeit nach einem Verfahren von Goodnick [85Goo] bestimmt worden (s. Kap. 4.4.3). Die Untersuchungen ergaben, daß die Rauigkeit (rms) der a/c-Grenzfläche der Oberflächenschicht bei der Referenzprobe  $< 1$  nm ist (s. Abb. 39). Die Grenzfläche weist allerdings eine geringe Welligkeit auf, deren Ursache inhomogene Bestrahlungsbedingungen sein könnten. Amorphe Cluster in einer kristallinen Umgebung als auch kristalline Einschlüsse in einer amorphen Umgebung sind nicht sichtbar. Dies und die geringe Grenzflächenrauigkeit der Referenzprobe sind eine Folge der thermischen Ausheilung [93Sei][94Sei].

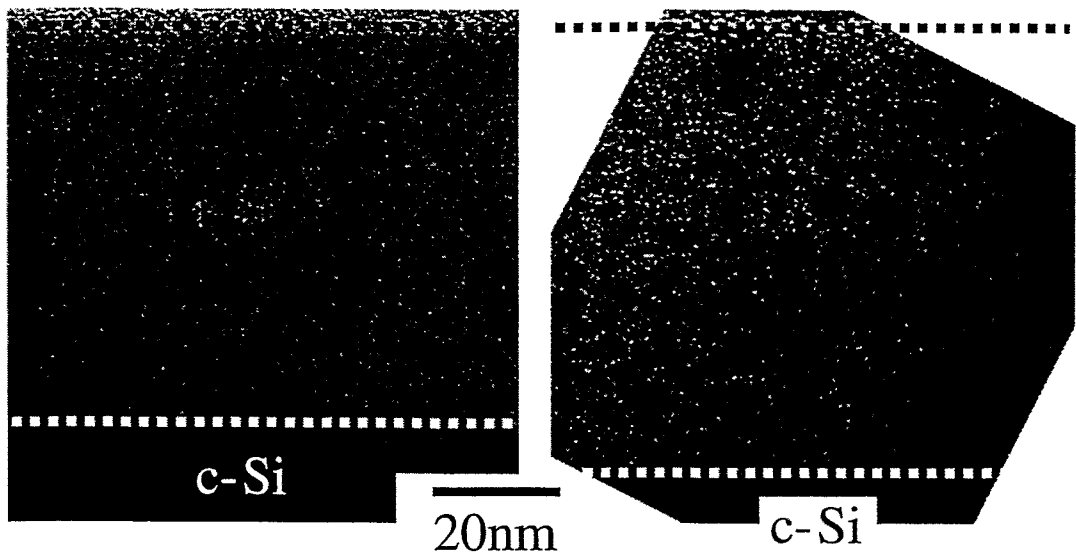


Abb. 38: XTEM-Aufnahmen der amorphen Oberflächenschicht der Referenzprobe C1 (li.) und der IBIIA-Probe C9 (re.) (oberste Linie kennzeichnet die Oberfläche)

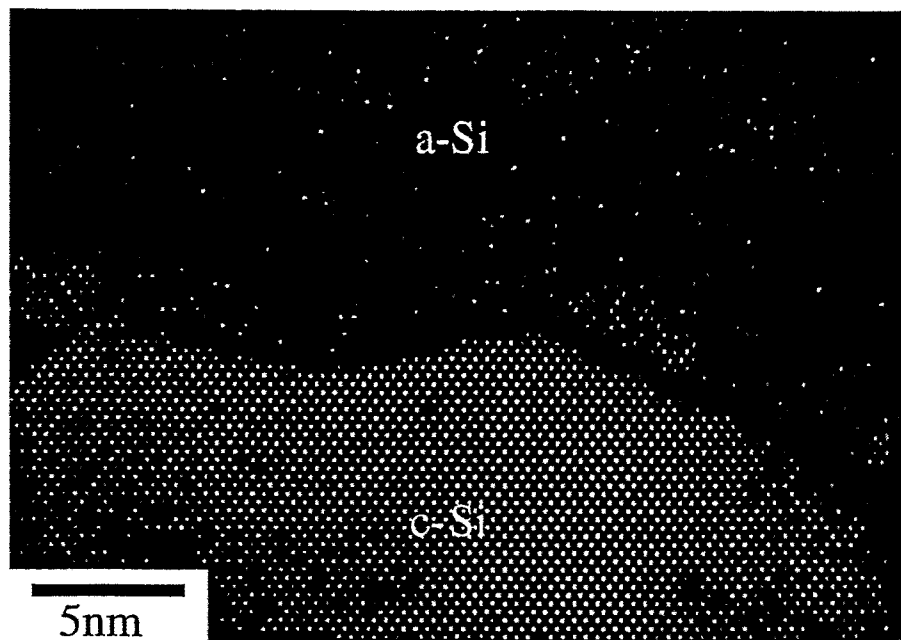


Abb. 39: HREM-Aufnahme der Mikrostruktur der a/c-Grenzfläche der Referenzprobe C1

Nach der MeV-Ionenbestrahlung bei tiefen Temperaturen (IBIIA-Experiment) erhöht sich die Rauigkeit der a/c-Grenzfläche nicht oder nur sehr geringfügig. Für die Probe C12 kann eine obere Grenze von 2 nm (rms) angegeben werden (s. Abb. 40). Das gilt auch für die Probe C9, welche mit der doppelten Ionenfluenz bestrahlt worden ist (s. Abb. 41).

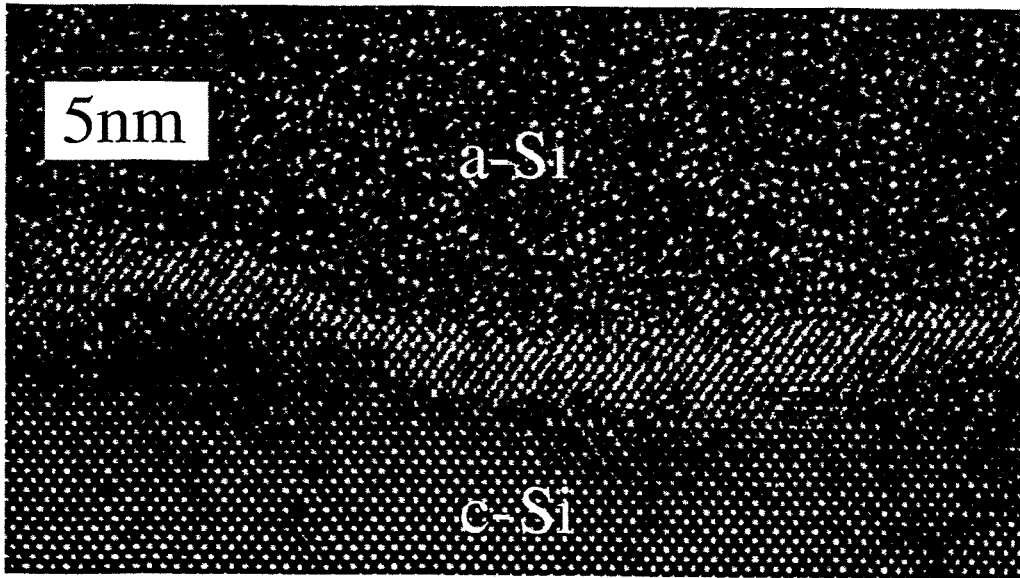


Abb. 40: HREM-Aufnahme der Mikrostruktur der a/c-Grenzfläche der Probe C12

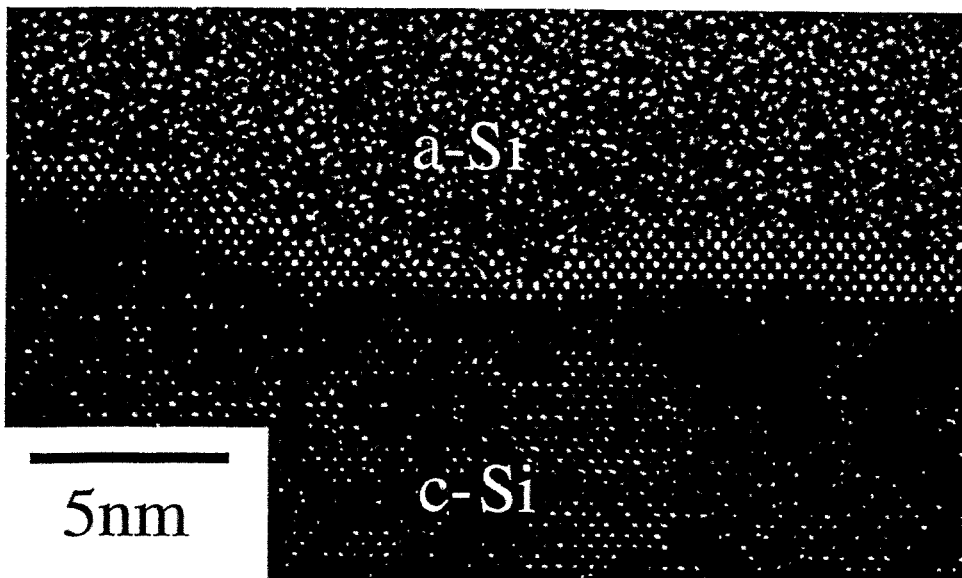


Abb. 41: HREM-Aufnahme der Mikrostruktur der a/c-Grenzfläche der Probe C9

### 5.3.2 Vergrabene amorphe Schichten

TEM-Untersuchungen wurden auch an vergrabenen amorphen Schichten durchgeführt. Die *as implanted*-Proben enthielten neben einer dünnen amorphen Schicht an der Oberfläche auch eine vergrabene amorphe Schicht (Probenserie C). Abbildung 42 zeigt XTEM-Aufnahmen von den Grenzflächen dieser Schicht nach der  $\text{Ge}^{3+}$ -Implantation bei  $-192\text{ }^\circ\text{C}$  in dieses amorphe Gebiet. Die Dicke der amorphen Schicht beträgt etwa  $400\text{ nm}$ , die obere Grenzfläche befindet sich einer Tiefe von etwa  $2\text{ }\mu\text{m}$ . Es gibt keine scharfen Grenzflächen, sondern einen etwa  $150\text{ nm}$  breiten Übergangsbereich zwischen der kristallinen und der

amorphen Phase, der sich durch eine Anhäufung von amorphen Clustern in einem stark geschädigten kristallinen Bereich auszeichnet. Weiterhin sind kristalline Einschlüsse in einer amorphen Umgebung sichtbar. Die Defektdichte nimmt vom kristallinen zum amorphen Gebiet kontinuierlich zu. In der Tiefe, wo die kleinsten amorphen Cluster entstanden sind, wurde gerade die kritische Energieschwelle für die (Volumen-)Amorphisierung erreicht. Die Größe der Cluster nimmt in Richtung des amorphen Gebietes zu. Dieses Verhalten kann mit dem starken Gradienten im nuklearen Energiedepositionsprofil erklärt werden.

Auch eine Ionenbestrahlung bei einer um 200 K höheren Substrattemperatur führt nicht zu deutlich schärferen Grenzflächen, wie die XTEM-Aufnahme der Probe C6 zeigt (s. Abb. 43).

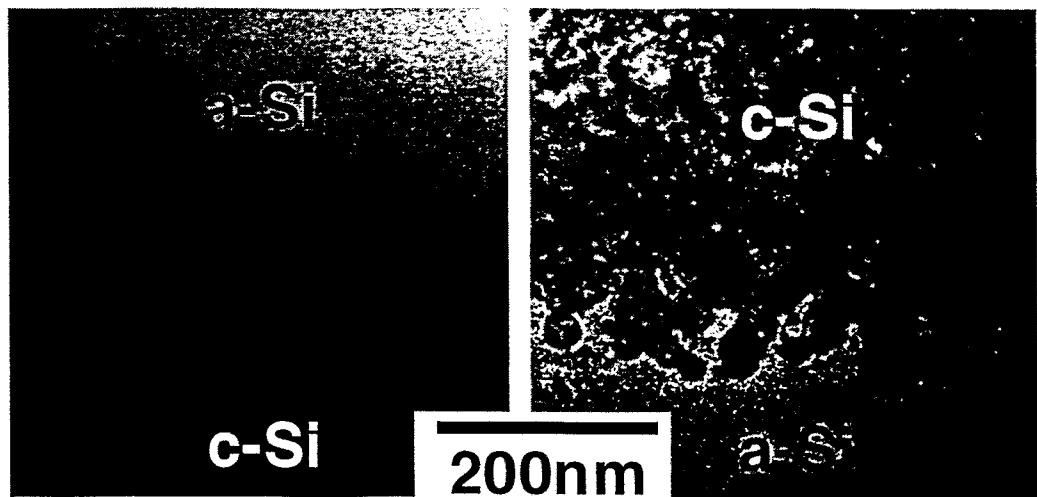


Abb. 42: XTEM-Aufnahmen von den Grenzflächen der vergrabenen amorphen Schicht der Probe C12 (li. tiefer gelegene Grenzfläche, re. obere Grenzfläche)



Abb. 43: XTEM-Aufnahme der vergrabenen amorphen Schicht der Probe C6 (Oberfläche ist oberhalb der Abbildung)



## 6 Diskussion der Ergebnisse

### 6.1 Strahlenschäden

Die TRR-Messungen haben gezeigt, daß die Reflektivität und die mit ihr verknüpften optischen Konstanten  $n$  und  $k$  sich während einer hochenergetischen Ionenbestrahlung schon bei geringen Ionenfluenzen stark ändern (s. Abb. 28). Dies kann hier nicht auf Interferenzeffekte wie im Fall einer keV-Implantation [89Swa] zurückgeführt werden, da es keine scharfen Grenzflächen gibt. Sie ist vielmehr Ausdruck einer starken Änderung der Volumeneigenschaften des Kristalls während des Ionenbeschusses. So sind  $n$  und  $k$  über die dielektrische Funktion von der Elektronenstruktur des zu untersuchenden Materials abhängig. Diese wird wiederum stark vom Grad der Strahlenschädigung, d.h. von der Art und Dichte der Defekte und den daraus resultierenden Strukturveränderungen des Kristalls während der Ionenbestrahlung beeinflusst.

Die gemessenen TRR-Kurven können mit einem einfachen Modell erklärt werden. Die Reflektivität ergibt sich danach nur aus einem Beitrag, der von einer Reflexion des Lichtes an der Oberfläche des Substrates herrührt, wobei  $n$  und  $k$  des Substratmaterials mit zunehmender Ionenfluenz kontinuierlich ansteigen. Diese Annahme ist in vielen Untersuchungen bestätigt worden [85Wan][93Rei]. Beim Start des Experimentes steigt deshalb die Reflektivität mit zunehmender Fluenz, da der Schädigungsgrad des kristallinen Materials zunimmt. Ab einer bestimmten Fluenz setzt am Maximum der nuklearen Energiedeposition, d.h. in einer Tiefe von etwa 950 nm, die Volumen-Amorphisierung ein. Bei fortgesetzter Bestrahlung wird die amorphe Schicht dicker, bis sie schließlich die Oberfläche erreicht. Die Reflektivität durchläuft zu diesem Zeitpunkt ein Maximum. Die zur Amorphisierung nötige Fluenz läßt sich mit der in-situ-LR gut bestimmen, sie beträgt bei der RT-Bestrahlung etwa  $8 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ .

Bei weiterer Ionenbestrahlung sinkt die Reflektivität wieder, bis schließlich ein Sättigungswert erreicht wird. Diese Ursache dieses Effektes ist noch nicht völlig geklärt. Zeitaufgelöste Verbiegungsmessungen an Siliciumwafern haben gezeigt, daß sich während des Ionenbeschusses kompressive Spannungen aufbauen, die ähnlich der TRR-Kurve in Abbildung 28 ein Maximum erreichen und danach wieder abgebaut werden [92Yua]. Die letzte Phase wird mit einem viskosen Fließen des amorphen Materials erklärt [91Vol].

Die Ergebnisse der TRR-Messungen korrelieren mit denen, die von RBS/C-Messungen mit 1,7 MeV He<sup>+</sup> erhalten wurden. Bei RT wurde die Probe von der Oberfläche bis in eine Tiefe von mehr als 1  $\mu\text{m}$  völlig amorphisiert. Bei 100 °C hingegen wurde der Kristall nur leicht geschädigt. Offenbar ist der konkurrierende Effekt der ionenstrahlinduzierten Ausheilung von Defekten bei 100 °C wesentlich stärker. Für die Amorphisierung des Halbleiters ist deshalb eine deutlich höhere Fluenz als  $8 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$  notwendig.

Nach dem Kritischen Energiedichtemodell (Gl. (1)) soll nun die kritische Dichte  $\epsilon$  abgeschätzt werden, die deponiert werden muß, um den Halbleiter zu amorphisieren. Mit  $S_n = 200 \text{ eV/nm}$  für die nukleare Energiedeposition an der Oberfläche (von einer TRIM-Rechnung) und  $\Phi_A = 8 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$  ergibt sich eine kritische Energiedichte von  $1,6 \times 10^{24} \text{ eV/cm}^3$ .

Tamura et al. haben für eine Bestrahlung mit 1 MeV As<sup>+</sup> eine kritische Energiedichte von  $5 \times 10^{24} \text{ eV/cm}^3$  bestimmt [89Tam], wobei  $S_n$  dem Tabellenwerk von Brice entnommen worden ist [75Bri]. Die Abweichung zum experimentellen Ergebnis von  $1,6 \times 10^{24} \text{ eV/cm}^3$  kann darauf zurückgeführt werden, daß die an der Oberfläche nuklear deponierte Energie bei 3 MeV I<sup>2+</sup> höher ist als bei 1 MeV As<sup>+</sup>. Daraus könnten dichtere Kaskaden und eine

erhöhte Defektgeneration resultieren. Folglich wäre eine kleinere Energiedichte für die Amorphisierung des Halbleiters notwendig. Es soll aber auch darauf hingewiesen werden, daß der, experimentell bereits nachgewiesene, Einfluß der Temperatur- und Stromdichte von diesem Modell nicht berücksichtigt wird. Selbst bei RT ist eine Defektausheilung nicht zu vernachlässigen. Demzufolge muß eine höhere Energiedichte deponiert werden, um den Festkörper zu amorphisieren. Das ist in dem Experiment von Tamura et al. der Fall, wo ein Temperaturanstieg von etwa 40 K über RT während der Ionenbestrahlung registriert wurde. Eine Temperaturabhängigkeit der kritischen Energiedichte ist experimentell auch bestätigt worden [86Mas]. Darüberhinaus korrespondiert das eigene Ergebnis gut mit dem von Wang und Spitzer et al. [85Wan]. Sie bestimmten eine kritische Dichte von  $2,2 \pm 0,4 \times 10^{24}$  eV/cm<sup>3</sup> für eine 380 keV Si<sup>+</sup>-Implantation bei RT, wobei die nukleare Energiedeposition an der Oberfläche etwas geringer war (110 eV/nm) als im eigenen Experiment.

Durch die Bestrahlung von Silicium mit hochenergetischen Ionen entstehen Strahlenschäden, deren Folgen bei IBIIA-Experimenten berücksichtigt werden müssen. Die Untersuchungen haben gezeigt, daß selbst MeV-Ionen im oberflächennahen Bereich beträchtliche Energie deponieren, was in der Folge zu einer stetigen Änderung der optischen Konstanten  $n$  und  $k$  des kristallinen Materials führt.

## 6.2 Planare Amorphisierung

### 6.2.1 Fluenzabhängigkeit

Mit Hilfe der TRR-Messungen kann herausgefunden werden, inwieweit die IBIIA-Rate von einem bestimmten Bestrahlungsparameter abhängt. Durch eine Korrelation der experimentellen Reflektivitätskurve  $R_{\text{exp}}(\Phi)$  mit der theoretischen Kurve  $R_{\text{th}}(d)$  nach der im Kapitel 3.2.1 erläuterten Methode kann die IBIIA-Rate zum Beispiel in Abhängigkeit

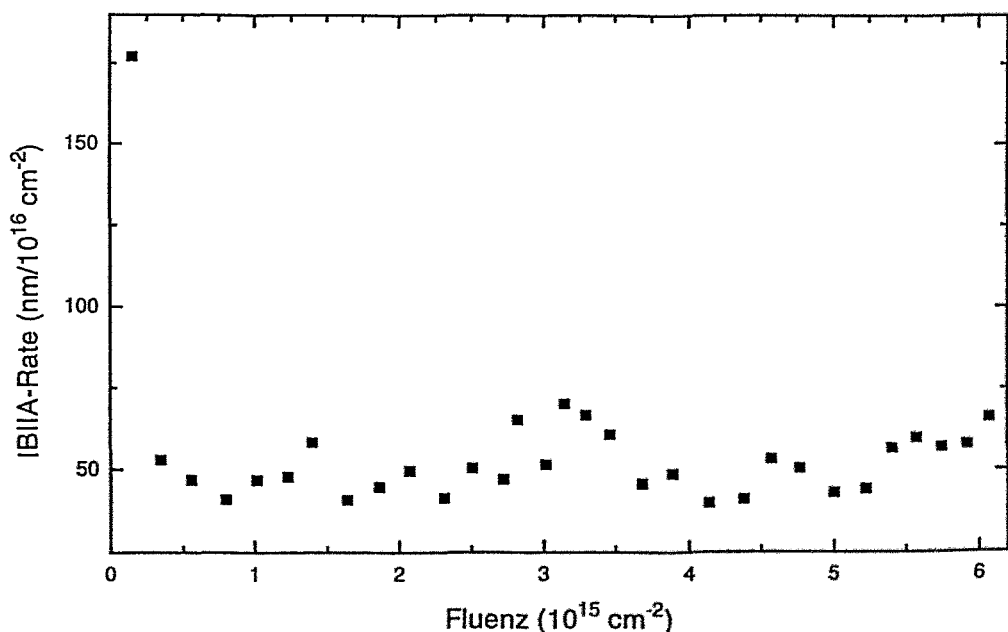


Abb. 44: IBIIA-Rate in Abhängigkeit von der Ionenfluenz (Bestrahlung: 7 MeV I<sup>3+</sup> bei 80 °C)

von der Ionenfluenz bestimmt werden. Man bekommt so einen Überblick über die Konstanz der Rate während der Ionenbestrahlung. Das Ergebnis einer solchen Korrelation zwischen  $R_{\text{exp}}(\Phi)$  und  $R_{2\text{th}}(d)$  aus Abbildung 30 zeigt die oben stehende Grafik.

Mit Ausnahme der Startphase des Experimentes ist die Rate während der gesamten Bestrahlungszeit näherungsweise konstant. Die Ursache für die hohe Rate am Anfang als auch für die Fluktuation kann auf die schon erwähnten Strom- und auf damit verbundene Temperaturschwankungen zurückgeführt werden. Kurz nach dem Start des Experimentes wurde eine "Stromspitze" von  $3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$  für eine Dauer von etwa 3 min beobachtet. Diese könnte die Ursache für die hohe Rate zu Beginn des Experimentes sein (s. Abb. 29). Danach sank die IBIIA-Rate auf einen mittleren Wert von  $50 \text{ nm}/10^{16} \text{ cm}^{-2}$ . Dieser Ratenabfall kann aber nur zu etwa 60 % mit einer  $j^{2/3}$ -Abhängigkeit erklärt werden. Offensichtlich hat eine Aufheizung der Probe um einige Grad während der Ionenbestrahlung, die auch gemessen wurde, ebenfalls zu einer Reduzierung der Rate geführt.

Die Auswertung aller RBS-Spektren zeigte, daß die IBIIA-Rate im untersuchten Fluenzbereich von  $0,1 \dots 6,2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$  im Rahmen der Meßgenauigkeit unabhängig von  $\Phi$  ist. Auch Leiberich et al. haben in ihren Experimenten ( $2 \times 10^{15} \leq \Phi \leq 1,7 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ ) keine Fluenzabhängigkeit der Rate festgestellt [87Lei].

### 6.2.2 Temperaturabhängigkeit

RBS/C- und TRR-Messungen haben gezeigt, daß bei konstanter Temperatur die Dicke der amorphen Oberflächenschicht während der hochenergetischen Ionenbestrahlung kontinuierlich zunimmt. Dieses Verhalten bleibt unverändert, wenn die Substrattemperatur bis auf  $-192 \text{ }^\circ\text{C}$  abgesenkt wird. Die durchgeführten XTEM-Untersuchungen der bestrahlten Proben bestätigen dieses wichtige Ergebnis, daß IBIIA auch bei Temperaturen unterhalb RT stattfindet.

Allerdings sind die bei tiefen Temperaturen bestimmten IBIIA-Raten um Größenordnungen kleiner als die, welche man von bisherigen experimentellen Befunden her erwarten würde. Mit Hilfe von Gleichung (4) können theoretische Werte für  $r_A$  abgeschätzt werden. Die Konstante  $r_{A_0}$  muß jedoch neu berechnet werden, da die nukleare Energiedeposition an der a/c-Grenzfläche etwa um den Faktor 4 kleiner war als bei den in Abbildung 2 vorgestellten experimentellen Befunden. Auf der Basis der linearen Energieabhängigkeit der IBIIA-Rate (s. Kap. 2.2.2) ergibt sich dann für den präexponentiellen Faktor  $r_{A_0}$   $1,5 \times 10^{-5} \text{ nm}/10^{16} \text{ cm}^{-2}$ . Mit  $E_A = 0,5 \text{ eV}$  erhält man beispielsweise für eine Temperatur von  $-90 \text{ }^\circ\text{C}$  eine Rate von  $87 \text{ nm}/10^{16} \text{ cm}^{-2}$ , die weit vom experimentellen Ergebnis von  $210 \text{ nm}/10^{16} \text{ cm}^{-2}$  entfernt ist (s. Kap. 5.2.1). Die Auswertung der experimentellen Daten zeigte, daß die Temperaturabhängigkeit der IBIIA-Rate unterhalb RT von Gl. (4) nicht korrekt beschrieben wird.

In Abbildung 45 sind die aus den eigenen Experimenten ermittelten Raten in Abhängigkeit von  $1/T$  dargestellt. Es ist klar erkennbar, daß die IBIIA-Rate mit abnehmender Temperatur zunächst ansteigt, bei tiefen Temperaturen jedoch gegen einen Grenzwert konvergiert. Außerdem scheint eine höhere Stromdichte bei  $-131 \text{ }^\circ\text{C}$  keinen, bei  $+80 \text{ }^\circ\text{C}$  dagegen einen spürbaren Einfluß auf die Rate zu haben (s. a. Tab. 2). Um diese Ergebnisse mit denen anderer Autoren vergleichen zu können, ist eine normierte IBIIA-Rate entsprechend

$$r_n(T) = \frac{r_A(T)}{N_v j^{2/3}} \quad (90)$$

berechnet worden. Hier sind die bereits bekannten Abhängigkeiten bezüglich der nuklear

deponierten Energie und der Ionenstromdichte eingegangen (s. Kap. 2.2.2). Jetzt können alle vorliegenden Ergebnisse in einer Grafik dargestellt werden, unabhängig davon, mit welchen Ionenstromdichten, -massen und -energien experimentiert worden ist. Obwohl die  $j^{2/3}$ -Abhängigkeit nur in einem eingeschränkten Temperatur- und Stromdichtebereich gültig ist, erhält man durch deren Einbeziehung in die Berechnung von  $r_n(T)$  eine geringere Streuung der Raten, als es bei einer Vernachlässigung dieser Normierung der Fall wäre.

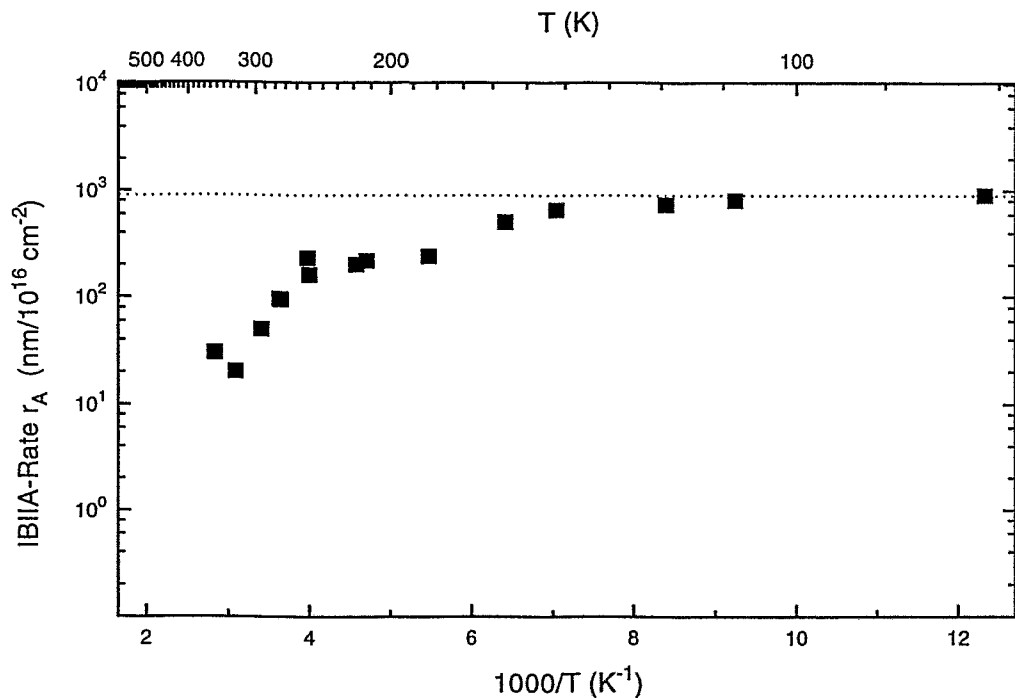


Abb. 45: IBIIA-Rate  $r_A$  in Abhängigkeit von der Temperatur  $T$

Die Raten  $r_A$  wurden unter Verwendung des aus den RBS/C-Spektren ermittelten Schichtdickenzuwachses  $\Delta x$  und der eingeschossenen Ionenfluenz  $\Phi$  nach Gl. (5) berechnet. Diese Beziehung gilt nur, wenn  $\Delta x$  linear von  $\Phi$  abhängt, was bereits (im vorangegangenen Abschnitt) bestätigt worden ist. Die Zahl der pro Ion und Tiefenintervall erzeugten Atomversetzungen  $N_v$  wurde mit TRIM93 berechnet. Für den relativen Fehler  $\frac{\Delta r_n}{r_n}$  wurde eine obere Grenze von 50 % abgeschätzt. Dieser könnte im Einzelfall, insbesondere bei sehr tiefen Temperaturen, erreicht werden, wo die ermittelten Schichtdickenänderungen sehr gering ausfielen. Der entsprechende Fehlerbalken ist exemplarisch für einen Punkt in Abbildung 46 dargestellt. Aufgrund der begrenzten Gültigkeit des  $j^{2/3}$ -Gesetzes wurden nur die Daten von Kanayama berücksichtigt, die bei der kleinsten Ionenstromdichte ermittelt worden sind.

Alle Punkte oberhalb RT wurden mit einer Geraden angefitet, deren Anstieg eine "Aktivierungsenergie" von 0,57 eV ergab (s. Abb. 46). Das entspricht den im Kapitel 2.2.2 dargestellten Ergebnissen, nach denen es ein Hochtemperaturregime gibt, in welchem die Rate einem inversen Arrheniusgesetz mit dieser Energie folgt. Bisher glaubte man aber, daß dieses Gesetz auch bei Temperaturen unterhalb 50 °C noch gültig sein würde. Die berechneten und die aus den Experimenten ermittelten Raten unterscheiden sich jedoch um Größenordnungen, so daß diese Abhängigkeit bei tiefen Temperaturen nicht

mehr länger gültig sein kann. Stattdessen wächst  $r_n$  mit abnehmender Temperatur immer weniger und geht schließlich bei sehr tiefen Temperaturen in eine Sättigung über (Übergangsregime). Etwa unterhalb  $-150\text{ }^\circ\text{C}$  ist die Rate im Rahmen der Meßgenauigkeit unabhängig von der Temperatur (Niedrigtemperaturregime). Dieses Verhalten entspricht den im Kapitel 2.2.2 angestellten Überlegungen zum athermischen Grenzwert, welcher durch die punktierte Linie in Abbildung 46 angedeutet ist. Der Übergang zwischen dem Hoch- und dem Niedrigtemperaturregime verläuft nicht abrupt, sondern fließend und setzt, in grober Näherung, etwa bei RT ein. Es sollte erwähnt werden, daß die eigenen Daten bei  $50\text{ }^\circ\text{C}$  und  $80\text{ }^\circ\text{C}$  den exakten Anschluß an das Hochtemperaturregime zeigen.

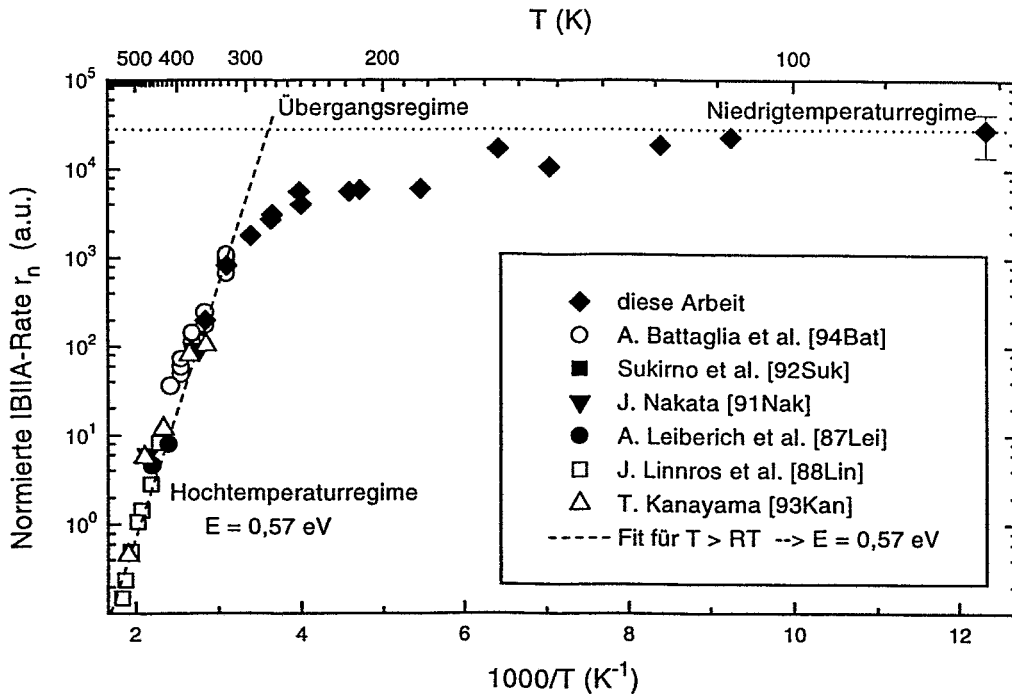


Abb. 46: Normierte IBIIA-Rate  $r_n$  in Abhängigkeit von der Temperatur  $T$

Im folgenden soll nun die Korrelation mit den im Kapitel 2.2.3 vorgestellten Modellen gesucht werden. Zuerst wird das Modell von Wang et al. diskutiert.

Bei der Anpassung der Parameter an die experimentellen Daten wurde festgestellt, daß  $f_c$  und  $f_a$  die gleiche Größe haben müssen, um eine gute Übereinstimmung der Modellvorhersagen mit den experimentellen Befunden zu erreichen. Das unterstreicht die im Kapitel 2.2.3 getroffene Feststellung bezüglich der Anwendbarkeit dieses Modells auf die planare Amorphisierung, d.h. daß nur ein mehr oder weniger begrenzter Übergangsbereich zwischen IBIIA und IBIEC für dieses Konzept relevant ist.

Abbildung 47 zeigt, daß die experimentellen Ergebnisse im Hochtemperaturregime gut mit diesem Modell angefitet werden können. Der Anstieg der Kurve ist proportional zur halben Aktivierungsenergie  $E_A$  für die Vernichtung von Doppelleerstellen (s. Gl. (19)), da bei hohen Temperaturen die Größe  $\eta X$  in Gl. (22) sehr klein wird und demzufolge der Nenner im Klammerausdruck vernachlässigt werden kann. Im Ergebnis von Elektronenspinresonanz- (*Electron Paramagnetic Resonance, EPR*) [66Che][72Amm] und IR-Absorptionsmessungen [69Voo] wurde eine Aktivierungsenergie von  $1,2\text{ eV}$  für die Ausheilung von Doppelleerstellen gefunden, so daß ein Fit mit diesem Wert sehr gut mit

der in Abbildung 46 bestimmten Energie von 0,57 eV korrespondiert. Die beste Parameteranpassung ergab  $f_c = f_a = 900$ ,  $\lambda = 2 \text{ \AA}$  und  $\eta_0 = 6 \times 10^{-16} \text{ cm s}^{1/2}$ . Der gefundene Wert für  $\lambda$  korreliert gut mit dem kleinsten Abstand zweier Atome im Siliciumkristall von 2,35 Å. Mit diesem Wert für  $\eta_0$ ,  $N = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$  und  $g = 10^{-2}$  ergibt sich für den präexponentiellen Faktor  $k_{A_0}$  etwa  $10^{13} \text{ s}^{-1}$ , was in der Größenordnung der Sprungfrequenz von Punktdefekten im Silicium liegt [94Pri][94Sto]. Der relativ niedrige Wert für  $g$  reflektiert die Tatsache, daß die in einer Stoßkaskade erzeugten Defekte vorwiegend Frenkel-Paare sind [71May].

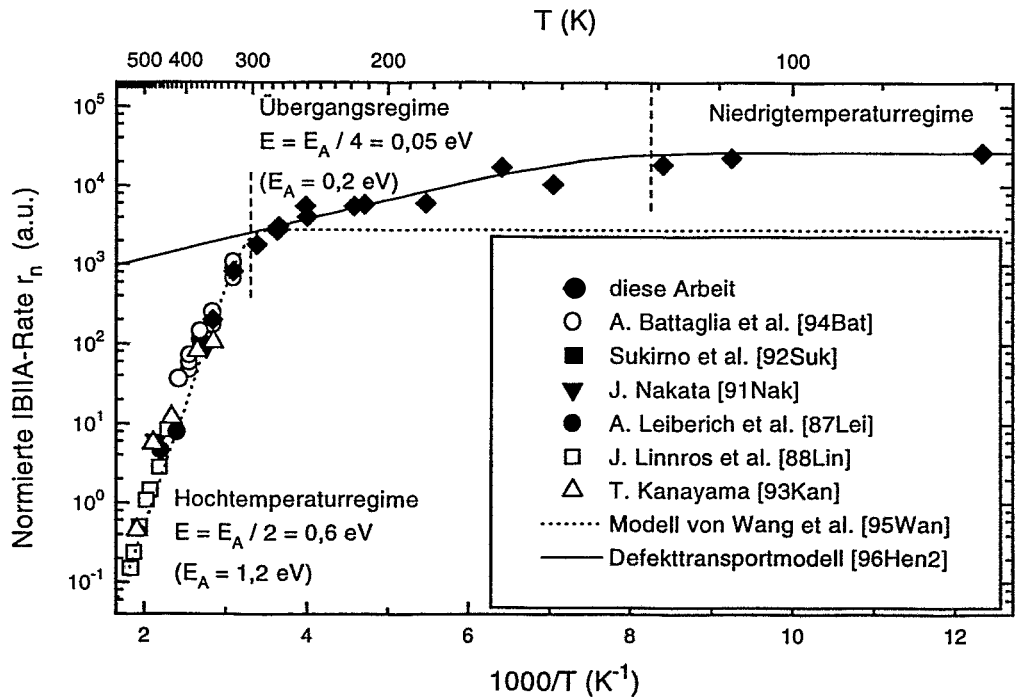


Abb. 47: Normierte IBIIA-Rate  $r_n$  in Abhängigkeit von der Temperatur  $T$ . Theoretische Kurven nach dem Modell von Wang et al. [95Wan] und nach dem Defekttransportmodell [96Hen2]

Die Tatsache, daß der IBIEC-Beitrag nicht vernachlässigt werden kann ( $f_c = f_a \neq 0$ ), verbietet eine Anwendung des Modells auf das Übergangs- und Niedrigtemperaturregime. Außerdem gibt es keine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten unterhalb RT (s. Abb. 47). Eine Temperaturabhängigkeit im Übergangsregime sollte dieses Modell auch gar nicht vorhersagen können, da Doppelleerstellen bei diesen Temperaturen thermisch stabil sind [81Cor]. Daher soll im folgenden eine Korrelation mit dem Defekttransportmodell gesucht werden.

Bei tiefen Temperaturen gilt Gl. (42). Durch Anfitzen des niedrigsten Temperaturpunktes ( $T = -192 \text{ °C}$ ) ergibt sich mit dem experimentell bestimmten Ratenwert  $r_A$  von  $900 \text{ nm}/10^{16} \text{ cm}^{-2}$  und der nuklearen Energiedeposition  $S_n$  von  $50 \text{ eV/nm}$  für die Konstante  $r_{A_0}$   $18 \text{ nm}^2 \text{ eV}^{-1}/10^{16} \text{ cm}^{-2}$ . Bei Temperaturen oberhalb  $-150 \text{ °C}$  bleibt die Rate dann nicht mehr konstant, sondern wird mit zunehmender Temperatur kleiner. Das deutet darauf hin, daß das Niedrigtemperaturregime verlassen wird. Die schwache Temperaturabhängigkeit im Übergangsregime wird von der numerischen Lösung der Gl. (37) als auch von Gl. (49) (Näherungslösung) gut beschrieben (s. Abb. 47).

Im Fall der Näherungslösung liefert die beste Parameteranpassung mit der gleichen nuklearen Energiedeposition etwa 0,2 eV für  $E_A$  und  $0,2 \text{ nm}^2 \text{ eV}^{-1} / 10^{16} \text{ cm}^{-2}$  für die Konstante  $r_{A_1}$ . Der gefundene Wert für die Migrationsenergie der Zwischengitteratome korreliert mit experimentellen Befunden, wonach Zwischengitteratome sich schneller durch den Siliciumkristall bewegen als Leerstellen. Das wird in einigen experimentellen Untersuchungen indirekt bestätigt [73Wat]. Einen direkten Beweis gibt es bis heute nicht. Weiterhin wurde mit Hilfe von EPR-Messungen für Leerstellen eine Migrationsenergie von 0,2 bis 0,3 eV in Abhängigkeit vom Ladungszustand ermittelt [63Wat][68Wat]. Diese Hinweise belegen, daß  $E_A$  Werte  $\leq 0,2 \text{ eV}$  annehmen könnte.

Die kritische Temperatur des Übergangs zum Hochtemperaturregime, die sich aus dem Berührungspunkt der theoretischen Kurven in Abbildung 47 ergibt, liegt etwa bei RT. Bei noch höheren Temperaturen sollte eine thermische Diffusion der Defekte überwiegen, d.h. für die Diffusionskonstante würde

$$D \approx D_{th} = D_0 \exp\left(-\frac{E_A}{kT}\right) \quad (91)$$

gelten. Geht man mit diesem Ansatz in die Gl. (48), ergibt sich eine Ratenabhängigkeit proportional zu  $S_n^{3/4} j^{-1/4}$ . Das sind Parameterabhängigkeiten, die im IBIEC-Regime beobachtet werden [93Hee][95Hee] und daher die planare Amorphisierung nicht beschreiben können.

Abschließend läßt sich festhalten, daß das Defekttransportmodell gut mit den experimentellen Ergebnissen im Niedrigtemperatur- und Übergangsregime korrespondiert. Dem Modell zufolge kann ein ballistisch getriebener Defekttransport, wie es beim Ionemischen (*Ballistic Mixing*) [94Nas][94Bol] beobachtet wird, die planare Amorphisierung unterhalb RT erklären. Dabei ist eine Reichweite der Recoilatome von einigen Å völlig ausreichend, um IBIIA zu stimulieren. Diese Vorstellungen werden außerdem durch MD-Rechnungen gestützt, nach denen durch die "Injektion" von Recoilatomen mit niedriger Energie (20 eV) nahe der a/c-Grenzfläche atomare Transportprozesse ausgelöst werden [95Cat2]. Die schwache Temperaturabhängigkeit im Übergangsregime ist vermutlich die Folge einer thermisch aktivierten Rekombination von Punktdefekten. Dieses Szenario wird von dem neu entwickelten Modell bestätigt.

Mit steigender Temperatur gewinnen Diffusions- und Rekombinationsprozesse zunehmend an Bedeutung. Auch die Beweglichkeit von größeren Defekten (z.B. Doppelleerstellen [72Amm]) nimmt stark zu. Daher dürften, wie im Modell von Wang et al. angenommen, komplexere Mechanismen (mehrere Defektarten, thermische Diffusionsprozesse usw.) im Hochtemperaturregime vorherrschen, das vom Defekttransportmodell nicht erklärt werden kann.

Allerdings ist es möglich, durch die Einbeziehung eines weiteren Defektes in das Defekttransportmodell die Kinetik bei hohen Temperaturen stark zu verändern. So vermutet Motooka, daß, basierend auf MD-Rechnungen, IBIIA durch die Akkumulation von D-D-Paaren (*Divacancy-Diinterstitial-Pairs*) an der a/c-Grenzfläche stimuliert wird [96Mot2]. Der gefundene Energieparameter  $E$  von 0,6 eV kann daher nicht auf einen einzigen, den IBIIA-Prozeß steuernden Defekt zurückgeführt werden. Stattdessen dürfte es eher wahrscheinlich sein, daß mehrere konkurrierende Kombinations- bzw. Rekombinationsprozesse ablaufen, die in Abhängigkeit von der erzeugten Dichte des jeweiligen Defektes und der Substrattemperatur ein unterschiedliches Gewicht haben und zu einer scheinbaren "Aktivierungsenergie" führen [95Gol]. Solche komplexen Zusammenhänge lassen sich dann aber nur noch in Ausnahmefällen analytisch behandeln, da in der Regel ein System von gekoppelten Differentialgleichungen gelöst werden muß [91Hol].

### 6.2.3 Stromdichteabhängigkeit

Die Frage der Stromdichteabhängigkeit ist bei RT untersucht worden (s. Abb. 35, Kap. 5.2.1). In Abbildung 48 sind die aus den RBS/C-Messungen ermittelten Raten  $r_n$  als Funktion der Stromdichte  $j$  dargestellt. Um einen Vergleich mit den Ergebnissen von Kanayama zu ermöglichen, wurden diese auf die nukleare Energiedeposition  $S_n$  an der a/c-Grenzfläche normiert. Für die Berechnung der Ionenfluenz am Tandetron-Beschleuniger wurde ein maximaler Fehler von 10 % zugrunde gelegt. Die Unsicherheit bei der Bestimmung des Schichtdickenzuwachses  $\Delta d$  liegt bei etwa 0,5 nm. Damit ergeben sich relative Fehler  $\frac{\Delta r_n}{r_n}$  von 16 ... 25 %, die in der Abbildung gezeigt werden.

Zum Vergleich sind die bei höheren Temperaturen nachgewiesene  $j^{2/3}$ -Abhängigkeit [94Bat] und die experimentellen Ergebnisse von Kanayama (s. Kap. 2.2.2) mit dargestellt. Warum letztere nicht nahtlos an die eigenen Daten anschließen, ist nicht völlig klar. Die normierten Raten differieren um einen Faktor von 2 ... 3. Das würde einer Temperaturdifferenz von etwa 20 K entsprechen, wenn man die gemessene Temperaturabhängigkeit der Rate (s. Abb. 46) zugrunde legt. Dieser Temperaturunterschied könnte aufgrund der unterschiedlichen Bestrahlungsbedingungen in den Experimenten durchaus aufgetreten sein.

Die Abbildung zeigt, daß es bei RT im untersuchten Stromdichtebereich keine relevante  $j$ -Abhängigkeit der IBIIA-Rate gibt. Das wird außerdem durch das Defekttransportmodell bestätigt, mit dem die eigenen Daten angefüttet worden sind.

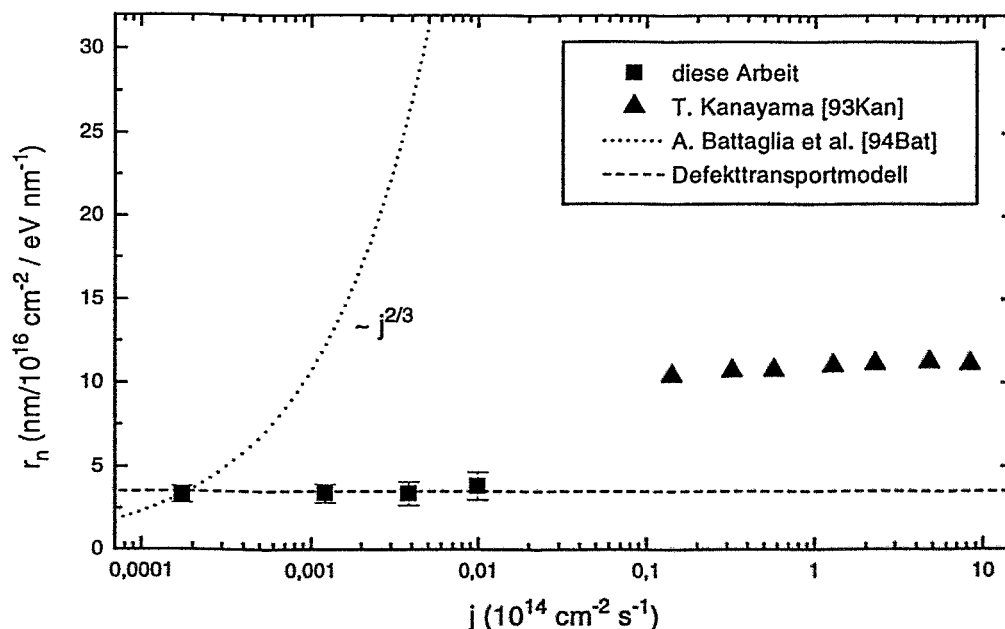


Abb. 48: Auf  $S_n$  normierte IBIIA-Rate  $r_n$  in Abhängigkeit von der Ionenstromdichte  $j$  bei RT. Theoretische Kurve nach dem Defekttransportmodell

Die Näherungslösungen (42) und (49) für das Niedrigtemperatur- bzw. Übergangsregime sind unabhängig von der Ionenstromdichte. Für das Niedrigtemperaturregime gibt es dazu bisher keine experimentellen Untersuchungen. Allerdings dürfte im Ergebnis einer solchen Experimentserie eine  $j$ -Abhängigkeit sehr unwahrscheinlich sein, da bei tiefen Temperaturen wegen der starken Defektakkumulation und einer möglichen Erwärmung



der Probe die Stromdichte und die Ionenfluenz nur in einem sehr kleinen Bereich variiert werden können. Die Modellaussagen sind auch insofern mit diesen Ergebnissen konsistent, da unabhängig von der Materialzusammensetzung eine Stromdichteabhängigkeit beim Ionenmischen bei Temperaturen  $\leq 20$  °C nicht gefunden worden ist [85Pai][89Reh].

Bei höheren Temperaturen haben Battaglia et al. und Kanayama in den Experimenten eine Ratenabhängigkeit von der Stromdichte festgestellt (s. Kap. 2.2.2). Da das Hochtemperaturregime mit dem Defekttransportmodell nicht mehr beschrieben werden kann, soll eine Korrelation dieser Ergebnisse mit dem Modell von Wang et al. gesucht werden.

Die Übereinstimmung der experimentellen Befunde von Battaglia et al. mit den Modellvorhersagen ist befriedigend (s. Abb. 49). Die Parameter  $\lambda$  und  $\eta_0$  blieben unverändert (s. Kap. 6.2.2). Mit  $S_n = 210$  eV/nm und  $T = 100$  °C liefert der beste Fit den gleichen Wert für  $f_a$  wie in Abbildung 47. Bei  $T = 120$  °C ändert sich  $f_a$  nur geringfügig. Eine Ratenabhängigkeit proportional zu  $j^{2/3}$  entsprechend dem semiempirischen Modell von Battaglia et al. [93Bat] fittet diese Ergebnisse zwar besser (s. Abb. 4), kann aber nicht begründet werden.

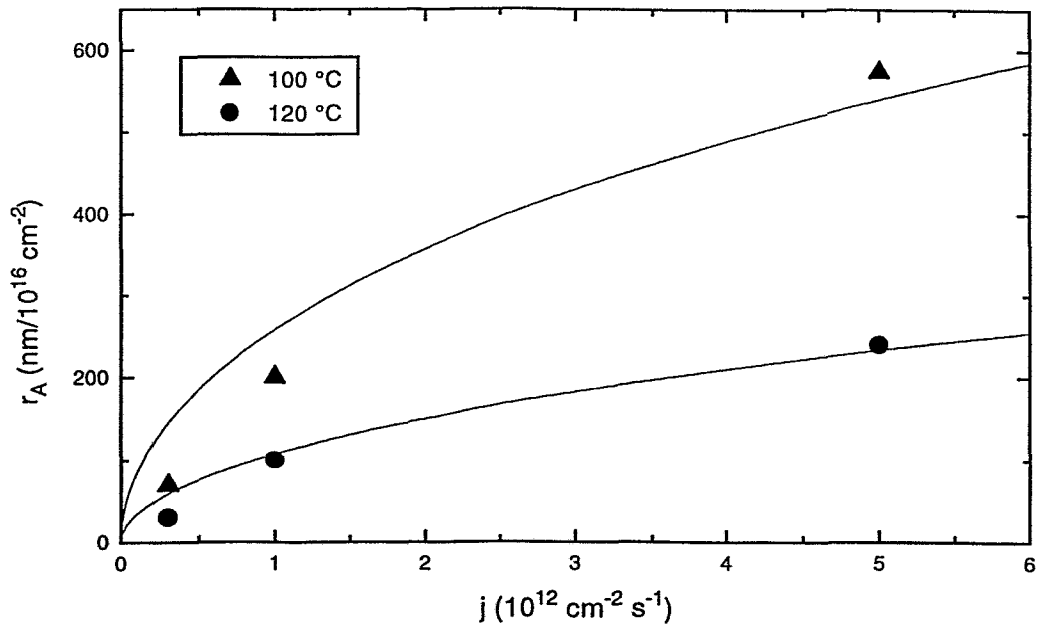


Abb. 49: IBIIA-Rate  $r_A$  in Abhängigkeit von der Ionenstromdichte  $j$  (nach [94Bat]). Theoretische Kurven nach dem Modell von Wang et al. [95Wan] (Parameter:  $f_a = 900$  bei 100 °C,  $f_a = 935$  bei 120 °C,  $\eta_0 = 6 \times 10^{-16} \text{ cm s}^{1/2}$ ,  $S_n = 210 \text{ eV/nm}$ ).

Die bei 79 °C und 105 °C von Kanayama gemessene Ratenabhängigkeit kann mit dem Modell von Wang et al. gut beschrieben werden. Allerdings mußte hier der Parameter  $\eta_0$  um den Faktor 2 bzw. 4 erhöht werden (s. Abb. 50).

Mit diesem Modell können die experimentellen Ergebnisse bei Temperaturen oberhalb 150 °C nicht mehr gefittet werden, ohne den Parameter  $f_a$  stark zu ändern. Das ist aber nicht zulässig, da  $f_a$  eine ballistische, d.h. von der Temperatur unabhängige Größe ist. Das Modell von Wang et al. ist daher nur bedingt in der Lage, die experimentellen Befunde bezüglich der Stromdichteabhängigkeit im Hochtemperaturregime zu erklären.

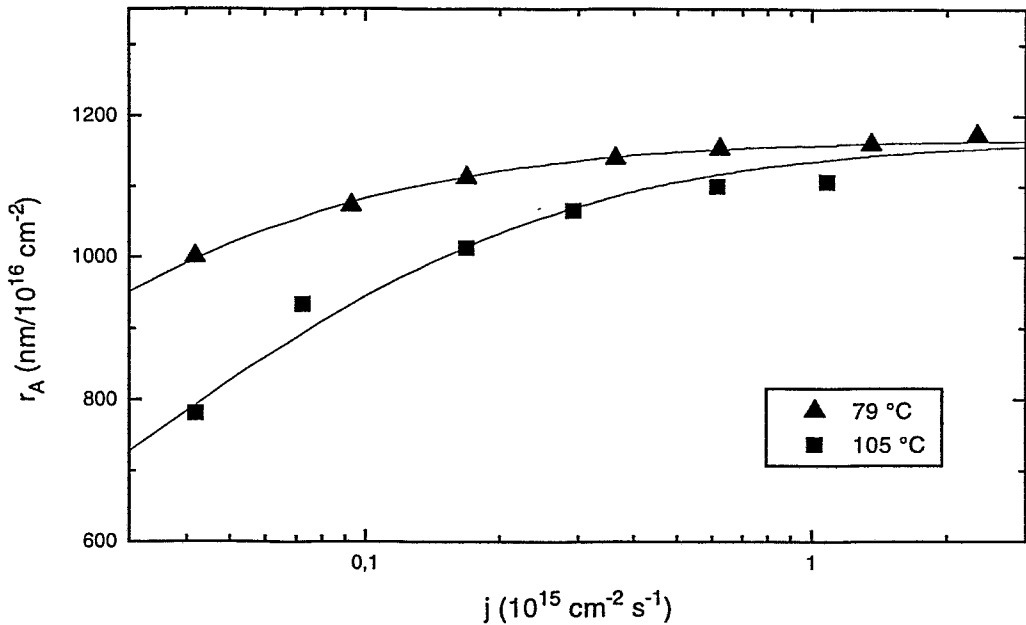


Abb. 50: IBIIA-Rate  $r_A$  in Abhängigkeit von der Ionenstromdichte  $j$  (nach [93Kan]). Theoretische Kurven nach dem Modell von Wang et al. [95Wan] (Parameter:  $f_a = 730$ ,  $\eta_0 = 1,1 \times 10^{-15}$  ( $2,3 \times 10^{-15}$ )  $\text{cm s}^{1/2}$  bei 79 °C (105 °C),  $S_n = 120 \text{ eV/nm}$ ).

#### 6.2.4 Energieabhängigkeit

Mit Modell von Wang et al. wurde außerdem versucht, eine Korrelation mit den experimentellen Ergebnissen von Battaglia et al. [94Bat] bezüglich der Energieabhängigkeit der IBIIA-Rate zu finden. Diese Daten (s. Abb. 3) sind auf die Stromdichte ( $j^{2/3}$ -Gesetz) normiert worden, um einen Vergleich mit dem eigenen, jedoch bei einer wesentlich niedrigeren Stromdichte bestimmten Ratenwert zu ermöglichen (s. Tab. 2). Die beste Anpassung liefert etwa die gleichen Werte für  $\eta_0$  und  $f_a$  wie in Abbildung 47. Die theoretische Kurve entspricht etwa einer quadratischen Abhängigkeit von der nuklear deponierten Energie an der a/c-Grenzfläche, die mit den experimentellen Befunden nicht so gut korrespondiert wie eine lineare Abhängigkeit (s. Abb. 51).

Bei RT ist nach diesem Modell die Energieabhängigkeit noch nahezu linear, da der Klammerausdruck in Gl. (22) fast 1 ist und demzufolge keinen Beitrag zur Energieabhängigkeit liefern kann. Mit zunehmender Temperatur wird das nichtlineare Verhalten jedoch immer stärker, da dieser Term an Bedeutung gewinnt. Bei hohen Temperaturen, insbesondere in der Nähe der Umkehrtemperatur, liefert das Modell eine nahezu quadratische Abhängigkeit von der nuklear deponierten Energie. Die unbefriedigende Übereinstimmung des Modells mit den experimentellen Daten geht auf den physikalischen Ansatz für die Generationsrate der Doppelleerstellen in Gl. (16) zurück, welcher kritisch hinterfragt werden soll. Die Defektgenerationsrate ist allgemein eine Funktion von  $(\xi j)^n$  ( $n > 0$ ), da in diesem Prozeß  $\xi$  und  $j$  nicht voneinander entkoppelt werden können. Daher wird im folgenden eine Modifizierung des Modells vorgeschlagen.

Für die Generationsrate der Doppelleerstellen wird statt einer Abhängigkeit von  $\xi^2 j$  eine lineare Abhängigkeit von  $\xi j$  vorgeschlagen. Das ist gerechtfertigt, wenn der größte Teil der Doppelleerstellen unmittelbar in den Stoßkaskaden erzeugt wird. Statt Gl. (20) gilt

dann die folgende Beziehung

$$\eta = \eta_0 \sqrt{\xi} = \sqrt{\frac{g}{k_{A_0} N}} \sqrt{\xi} \quad (92)$$

Damit wird die Energieabhängigkeit in dem Klammerausdruck in Gl. (22) abgeschwächt. Ein Fit nach diesem modifizierten Modell zeigt deutlich eine bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Daten (s. Abb. 51). Diese Modifikation beeinflusst nicht die anderen Parameterabhängigkeiten des Modells.

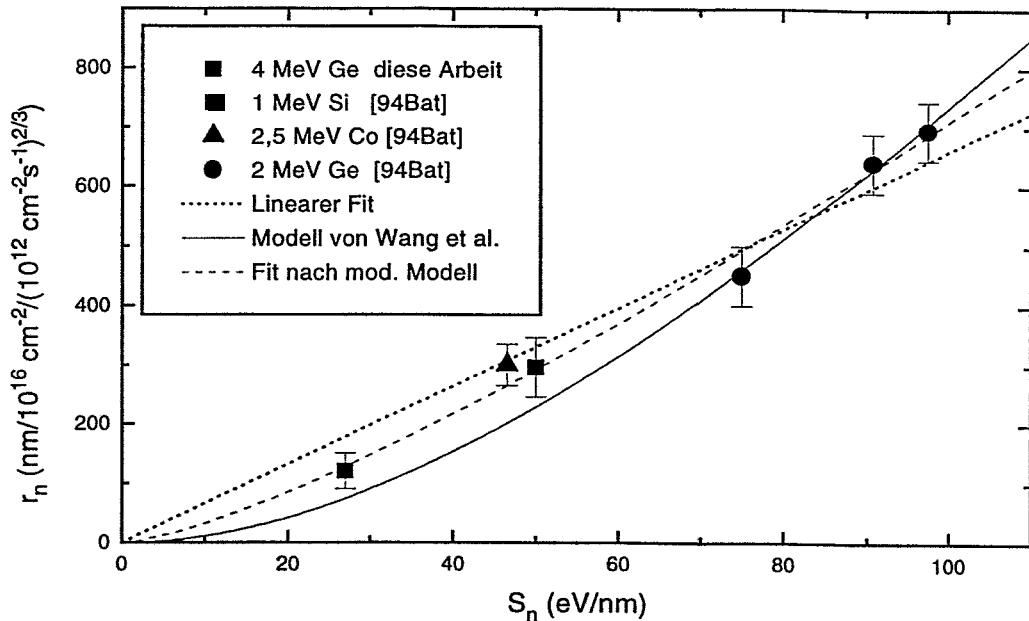


Abb. 51: Auf  $j^{2/3}$  normierte IBIIA-Rate  $r_n$  in Abhängigkeit von der nuklearen Energiedeposition  $S_n$  an der a/c-Grenzfläche bei einer Temperatur von 50 °C. Theoretische Kurve nach dem Modell von Wang et al. [95Wan] (Parameter:  $\eta_0 = 6 \times 10^{-16} \text{ cm s}^{1/2}$ ,  $f_a = 930$  (805 nach mod. Modell)).

Für das Übergangs- und Niedrigtemperaturregime liegen keine experimentellen Befunde vor. Untersuchungen sind durch die starke Defektakkumulation bei tiefen Temperaturen nur in einem kleinen Energie- und Ionenflussbereich möglich. Aufgrund des sich daraus ergebenden geringen Schichtdickenzuwachses steigt aber der Fehler bei der Bestimmung der Rate wegen der begrenzten Auflösung der Analyseverfahren. Im Rahmen des angegebenen Meßfehlers von bis zu 25 % kann man die Ergebnisse von Battaglia et al. mit einer Funktion  $\propto S_n^m$  anfitten, wobei der Exponent  $m$  zwischen 1 und 1,5 variiert werden kann. Das verdeutlicht dieses Problem. Die Näherungslösungen (42) und (49) des Defekttransportmodells enthalten eine lineare Abhängigkeit von der nuklearen Energiedeposition, was plausibel erscheint.

### 6.2.5 Unterschiede zur Volumen-Amorphisierung

Die XTEM-Aufnahmen zeigen deutlich Unterschiede in der Mikrostruktur der a/c-Grenzflächen zwischen IBIIA und Volumen-Amorphisierung. Nach einem IBIIA-Experiment nimmt die Rauigkeit der Grenzfläche, auch bei tiefen Temperaturen, nur geringfügig zu (s. Abb. 40). Der kristalline Bereich unmittelbar hinter der Grenzfläche bleibt nahezu defektfrei. Bei der Volumen-Amorphisierung hingegen nimmt die Rauigkeit stark mit der Ionenbestrahlung zu (s. Abb. 43). Es kommt zur Herausbildung eines Defektbandes, das einige 100 nm dick sein kann.

Daher kann von der rauhen "Grenzfläche" der vergrabenen amorphen Schicht kein Beitrag für die Reflektivität erwartet werden. Bei einer Lichtwellenlänge von 633 nm muß dieser Übergangsbereich vom amorphen zum defektfreien kristallinen Gebiet kleiner als 100 nm sein [86Lic]. Da diese Bedingung nicht erfüllt ist, sind starke Kohärenzverluste bei der Interferenz der Lichtwellen die Folge. Lediglich eine Zunahme der Reflektivität durch die Änderung der optischen Konstanten  $n$  und  $k$  während der Ionenbestrahlung kann registriert werden. Oszillationen in der Reflektivität, hervorgerufen durch eine Ausdehnung der vergrabenen amorphen Schicht, können dagegen nicht beobachtet werden. Die optischen in-situ-Messungen haben das bestätigt (s. Kap. 5.1.2).

Die für die Volumen-Amorphisierung bei tiefen Temperaturen notwendige, kritische Energiedichte beträgt für keV-Ionen mindestens  $2 \times 10^{23}$  eV/cm<sup>3</sup> (s. Kap. 2.1). IBIIA wird dagegen bei Energiedichten beobachtet, die unter diesem Wert liegen. So wurde bereits nach einer Bestrahlung mit 4 MeV  $1 \times 10^{14}$  Ge<sup>3+</sup> cm<sup>-2</sup> bei -192 °C planare Amorphisierung der Oberflächenschicht festgestellt. Mit dieser Ionenfluenz und einer nuklear deponierten Energie von 50 eV/nm an der a/c-Grenzfläche ergibt sich eine Energiedichte von  $5 \times 10^{22}$  eV/cm<sup>3</sup>. Damit sind nach Gl. (9) bereits 0,03 dpa ausreichend, um IBIIA auszulösen. Für die Amorphisierung des Substratmaterials bei tiefen Temperaturen sind dagegen mindestens 0,1 dpa erforderlich [81Chr][84Nar2]. Im obigen Beispiel betrug das Wachstum der amorphen Oberflächenschicht nur wenige nm. Die kritische Energiedichte hingegen wird noch unter  $5 \times 10^{22}$  eV/cm<sup>3</sup> liegen. Ihre Bestimmung ist stark von der Meßgenauigkeit der Analysemethode abhängig. Diese müßte ein Schichtwachstum im Å-Bereich nachweisen können.

Die Überlegungen zeigen, daß IBIIA im Vergleich zur Volumen-Amorphisierung ein energetisch bevorzugter Prozeß ist. Die gleiche Energiedichte, welche an der a/c-Grenzfläche die planare Amorphisierung stimulieren kann, führt nur wenige nm davon entfernt im kristallinen Gebiet zur Bildung von Punktdefekten. Eine amorphe Schicht entsteht jedoch nicht. Dieses Verhalten korrespondiert mit dem Ergebnis von MD-Rechnungen, wonach planare a/c-Grenzflächen energetisch stabiler sind als kleine amorphe Cluster in einer kristallinen Matrix [95Cat1]. Es sollte erwähnt werden, daß IBIIA nur unterhalb der kritischen Schwelle zur Volumen-Amorphisierung beobachtet werden kann. Abschließend läßt sich also festhalten, daß die im Kapitel 2.2.1 genannten Unterschiede zwischen IBIIA und Volumen-Amorphisierung bezüglich der Grenzflächenstruktur und der nuklearen Energiedeponierung auch bei tiefen Temperaturen auftreten.

## 7 Zusammenfassung

Amorphe Oberflächenschichten auf einkristallinem Silicium rekristallisieren unter Ionenbeschuß (IBIEC), falls die Substrattemperatur einen kritischen Wert nicht unterschreitet. Dagegen wird bei Temperaturen unterhalb dieser Schwelle ( $T_u$ ) ein planares Wachstum der amorphen Schicht beobachtet (IBIIA). Dieser Prozeß unterscheidet sich von dem der Volumen-Amorphisierung im wesentlichen in zwei Punkten: Die kritische Energiedichte, bei der das planare Schichtwachstum einsetzt, ist niedriger als bei der Volumen-Amorphisierung. Darüber hinaus bleibt die Grenzfläche zwischen der kristallinen und der amorphen Phase während des Wachstumsprozesses scharf.

Die Ionenstrahlinduzierte Epitaxie (IBIEC) ist in den letzten Jahren intensiv untersucht worden. Dagegen gibt es nur wenige Arbeiten zur planaren Amorphisierung in Silicium. Diese Untersuchungen wurden ausschließlich bei Temperaturen oberhalb 0 °C durchgeführt.

In der vorliegenden Arbeit wurde die Kinetik des IBIIA-Prozesses in Silicium in Abhängigkeit von der Temperatur (-192 °C ... +80 °C), Ionenfluenz ( $1 \times 10^{14}$  ...  $6,2 \times 10^{15}$  cm<sup>-2</sup>) und Ionenstromdichte ( $1,5 \times 10^{10}$  ...  $1,4 \times 10^{12}$  cm<sup>-2</sup> s<sup>-1</sup>) untersucht. Um Experimente in diesem Temperaturbereich durchführen zu können, wurde eine kühl- und heizbare Targetstation am 5 MV-Tandem-Beschleuniger aufgebaut. Die Herstellung von dünnen amorphen Oberflächenschichten erfolgte durch eine 20 keV bzw. 40 keV Ge<sup>+</sup>-Implantation und eine nachfolgende Temperung bei 400 °C in Stickstoff-Atmosphäre. Die präparierten Proben wurden mit 4 MeV Ge<sup>3+</sup>, As<sup>3+</sup> oder Br<sup>2+</sup> bestrahlt.

Die Charakterisierung der Schichtwachstumsprozesse erfolgte mit RBS/C und XTEM. Die eigenen und die aus der Literatur verfügbaren experimentellen Daten wurden im Zusammenhang diskutiert. Erste Modellvorstellungen zur planaren Amorphisierung bei niedrigen Temperaturen sind entwickelt worden.

Ein neuer Befund dieser Untersuchungen ist, daß sich die Temperaturabhängigkeit der IBIIA-Rate durch drei Regime auszeichnet: Unterhalb der Umkehrtemperatur kann die Wachstumsrate mit einem inversen Arrheniusgesetz mit einer Energie von 0,6 eV beschrieben werden (Hochtemperaturregime). Die vorgestellten theoretischen und experimentellen Ergebnisse dieser Arbeit haben jedoch gezeigt, daß diese Abhängigkeit bei tiefen Temperaturen nicht mehr gültig ist. Unterhalb RT nimmt die Rate mit sinkender Temperatur nur noch geringfügig zu und erreicht schließlich bei etwa -150 °C einen Sättigungswert (Übergangsregime). Bei noch tieferen Temperaturen bleibt die IBIIA-Rate unverändert konstant (Niedrigtemperaturregime). Dieser athermische Grenzwert beträgt unter den o.g. experimentellen Bedingungen etwa  $1 \mu\text{m}/10^{16} \text{ cm}^{-2}$ . Eine Abschätzung der maximalen Wachstumsrate unter Berücksichtigung der notwendigen, ballistischen Atomversetzungsprozesse im Festkörper führt zum gleichen Resultat.

Die Temperaturabhängigkeit im Hochtemperaturregime kann mit dem Modell von Wang et al. beschrieben werden, das auf der Akkumulation von Doppelleerstellen an der a/c-Grenzfläche basiert. Das Verhalten im Übergangs- und Niedrigtemperaturregime kann dieses Modell jedoch nicht erklären. Daher wurde ein neues Modell entwickelt, das in Analogie zum atomaren Mischen auf einem athermischen Transport von Zwischengitteratomen zur a/c-Grenzfläche beruht. Dieses Defekttransportmodell kann das planare Schichtwachstum bei Temperaturen unterhalb RT erklären. Danach ist die thermisch aktivierte Rekombination von Zwischengitteratomen und Leerstellen für die schwache Temperaturabhängigkeit im Übergangsregime verantwortlich. Im Niedrigtemperaturregime

dominieren nur noch ballistische Transportprozesse, die zu einer temperaturunabhängigen IBIIA-Rate führen.

Im Hochtemperaturregime ist IBIIA schwach von der Ionenstromdichte abhängig. Bei RT gibt es jedoch keine relevante  $j$ -Abhängigkeit mehr. Dieser neue Befund korrespondiert mit dem Defekttransportmodell, nach dem die Stromdichte im Übergangs- und ballistischen Regime keinen Einfluß auf die IBIIA-Rate hat. Das Modell liefert weiterhin eine lineare Abhängigkeit von der nuklearen Energiedeposition an der a/c-Grenzfläche bei Temperaturen unterhalb RT.

Die experimentellen und theoretischen Befunde deuten daraufhin, daß ein ballistischer Defekttransport die Kinetik bei Temperaturen unterhalb RT, d.h. im Übergangs- und Niedrigtemperaturregime, entscheidend bestimmen könnte. Dieser wird den Modellvorstellungen zufolge durch elastische Stoßprozesse von Recoilatomen niedriger Energie an der a/c-Grenzfläche stimuliert. Das Verhalten im Hochtemperaturregime wird durch einen komplexen Mechanismus gesteuert, da Diffusions- und Rekombinationsprozesse bei höheren Temperaturen an Bedeutung gewinnen. Dabei könnten Paare von Zwischengitteratomen (*Diinterstitials*) und/oder Leerstellen (*Divacancies*) eine zentrale Rolle innehaben.

IBIIA kann nur dann beobachtet werden, wenn die nukleare Energiedeposition an der a/c-Grenzfläche unterhalb der kritischen Schwelle zur Volumen-Amorphisierung bleibt. Weitere Untersuchungen haben gezeigt, daß die Charakteristika, welche IBIIA von der Volumen-Amorphisierung unterscheiden, auch bei tiefen Temperaturen auftreten. So wurde bereits bei einer nuklearen Energiedeposition von  $5 \times 10^{22}$  eV/cm<sup>3</sup> oder 0,03 dpa an der a/c-Grenzfläche planares Schichtwachstum nachgewiesen. Dieser Wert ist niedriger als die kritische Energiedichte, welche für die Volumen-Amorphisierung erforderlich ist. Daher ist IBIIA ein energetisch effektiverer Prozeß als die Volumen-Amorphisierung. Dieser, bisher nur verbal beschriebene Befund ist in dieser Arbeit erstmals quantitativ nachgewiesen worden. Die XTEM-Ergebnisse belegen, daß auch bei tiefen Temperaturen die Unterschiede in der Grenzflächenstruktur erhalten bleiben.

Im Rahmen dieser Arbeit bestand eine weitere Aufgabe darin, IBIIA mit Hilfe der Laserreflektometrie in-situ zu charakterisieren. Zeitaufgelöste Reflektivitätsmessungen liefern Informationen über die Kinetik des Schichtwachstumsprozesses und die Qualität der Grenzflächen. Dieses Verfahren wurde auch deshalb ausgewählt, weil es zur Charakterisierung von IBIIA- und IBIEC-Prozessen bei Temperaturen von  $\geq 100$  °C bereits mit Erfolg eingesetzt worden ist. Daher ist an der Targetstation eine in-situ-Reflektivitätsmeßtechnik aufgebaut worden, die sich durch eine einfache Handhabung sowie eine automatische Datenerfassung und -speicherung auszeichnet. Diese Methode ist für die Untersuchung der planaren Amorphisierung bei tiefen Temperaturen jedoch nicht geeignet, da die starke Akkumulation von Defekten im kristallinen Gebiet hinter der a/c-Grenzfläche die Interferenzen zerstört. Dagegen ist die in-situ-Laserreflektometrie bei der Untersuchung der Volumen-Amorphisierung und des IBIEC-Prozesses in Silicium erfolgreich angewendet worden. Darüber hinaus kann diese Technik für das Studium einer Vielzahl von weiteren chemisch-physikalischen Prozessen in Festkörpern genutzt werden.

Gleichwohl die in dieser Arbeit erhaltenen Ergebnisse einen tieferen Einblick in die Kinetik der planaren Amorphisierung als bisher erlauben, kann dieser Effekt auf der Ebene der atomaren Wechselwirkungsprozesse nur unvollständig erklärt werden. Weitere experimentelle und theoretische Untersuchungen sind notwendig, um IBIIA genauer zu charakterisieren.

## 8 Ausblick

Aufgrund der Untersuchungen im Rahmen dieser Arbeit ergeben sich eine Reihe von neuen Fragestellungen, für die folgende, weiterführende Untersuchungen vorgeschlagen werden:

- **Stromdichteabhängigkeit**

Es konnte gezeigt werden, daß die Ionenstromdichte bei RT nahezu keinen Einfluß auf IBIIA hat. Es gibt bisher keine experimentellen Untersuchungen zu dieser Frage bei Temperaturen unterhalb RT. Allerdings ist in diesem Regime der zur Verfügung stehende Fluenz- und Stromdichtebereich durch die starke Defektakkumulation und durch thermische Effekte während der Ionenbestrahlung eingeschränkt. Weiterhin wäre auch eine systematische Untersuchung der Stromdichteabhängigkeit im Hochtemperaturregime über mehrere Größenordnungen erforderlich ( $10^{10} \dots 10^{17} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ ), um diese Abhängigkeit genauer zu quantifizieren bzw. die Grenzen des  $j^{2/3}$ -Gesetzes zu zeigen. Diese Experimente lassen sich nur mit einer Ionenfeinstrahlanlage realisieren.

- **Energieabhängigkeit**

Systematische Untersuchungen wären nötig, um die vom Defekttransportmodell vorhergesagte lineare Abhängigkeit von der nuklearen Energiedeponierung zu überprüfen. Darüberhinaus ist der Einfluß der elektronischen Energiedeponierung bisher nur im IBIEC-Regime untersucht worden [96Nak]. Ob dieser im IBIIA-Regime vernachlässigt werden kann, muß in weiteren Untersuchungen geklärt werden.

- **Mechanismen und Defekte**

Das Defekttransportmodell zeigt, daß es bei tiefen Temperaturen einen athermischen Transport von Atomen oder Defekten zur Grenzfläche gibt. Die Ursache wird in ballistischen Stoßprozessen gesehen, die von den Primärionen ausgelöst werden. Hier wird eine enge Korrelation zum Ionenmischen hergestellt. Diese Modellvorstellung kann durch experimentelle Untersuchungen an vergrabenen amorphen Schichten überprüft werden. Dem Modell zufolge sollte es keine Unterschiede im IBIIA-Prozess zwischen den beiden Grenzflächen, d.h. keine Richtungsabhängigkeit, geben.

Da IBIIA ein Prozeß ist, der fern vom thermodynamischen Gleichgewicht abläuft, läßt sich dieser Effekt besser mit in-situ-Methoden (TEM, RBS, Ellipsometrie) untersuchen. Bei tiefen Temperaturen wird ohnehin eine höhere Genauigkeit von den Analyseverfahren gefordert, da der Schichtdickenzuwachs in der Regel nicht mehr als 10 nm beträgt.

- **Modellierung**

Das Defekttransportmodell könnte mit neuen experimentellen Daten korreliert und auf das Hochtemperaturregime erweitert werden. In der Regel wird man dann aber auf numerische Methoden zurückgreifen müssen. Alternativ können neue Erkenntnisse auch aus MD-Rechnungen gewonnen werden. Aber auch hier steht man erst am Anfang [95Cat2][96Mot2].

## Literaturverzeichnis

- [55Kin] G. H. Kinchin and R. S. Pease, Rep. Progr. Phys. 18, 1, 1955
- [63Wat] G. D. Watkins, J. Phys. Soc. Japan 18, Suppl. II, 22, 1963
- [66Che] L. J. Cheng, J. C. Corelli, J. W. Corbett and G. D. Watkins, Phys. Rev. 152, 761, 1966
- [67Dav] J. A. Davies, J. Denhartog, L. Eriksson and J. W. Mayer, Can. J. Phys. 45, 4053, 1967
- [68Wat] G. D. Watkins, in: Radiation Effects in Semiconductors, ed. by F. L. Vook, Plenum Press, New York, 1968, pp. 67
- [69Sig1] P. Sigmund, Appl. Phys. Lett. 14(3), 114, 1969
- [69Sig2] P. Sigmund, Radiat. Eff. 1, 15, 1969
- [69Voo] F. L. Vook and H. J. Stein, Radiat. Eff. 2, 23, 1969
- [70May] J. W. Mayer, L. Eriksson and J. A. Davies: Ion Implantation in Semiconductors, Academic Press, New York and London, 1970, pp. 71
- [70Mor] F. F. Morehead and B. L. Crowder, Radiat. Eff. 6, 27, 1970
- [70Voo] F. L. Vook and H. J. Stein, Radiat. Eff. 6, 11, 1970
- [70Wes] J. E. Westmoreland, J. W. Meyer, F. H. Eisen and B. Welch, Radiat. Eff. 6, 161, 1970
- [71Bog] E. Bogh, P. Hogild and I. Stensgaard, Radiat. Eff. 7, 115, 1971
- [71Cha] L. T. Chadderton, Radiat. Eff. 8, 77, 1971
- [71May] J. W. Mayer, Radiat. Eff. 8, 269, 1971
- [71Ste] H. J. Stein, F. L. Vook, D. K. Brice, J. A. Borders and S. T. Picraux, in: Proc. 1st Int. Conf. on Ion Implantation, ed. by L. T. Chadderton and F. H. Eisen, Gordon and Breach, London, 1971, p. 17
- [72Amm] C. A. J. Ammerlaan and G. D. Watkins, Phys. Rev. B5, 3988, 1972
- [72Gib] J. F. Gibbons, Proc. IEEE 60(9), 1062, 1972
- [72Mor] F. F. Morehead, B. L. Crowder and R. S. Title, J. Appl. Phys. 43, 1112, 1972
- [72Pie] D. T. Pierce and W. E. Spicer, Phys. Rev. B5, 3017, 1972
- [73Pol] D. E. Polk and D. S. Boudreaux, Phys. Rev. Lett. 31(2), 92, 1973
- [73Voo] F. L. Vook, in: Radiation Damage and Defects in Semiconductors, ed. by J. E. Whitehouse, Conf. Series No. 16, Institute of Physics, London and Bristol, 1973, pp. 60 - 71



- [73Wat] G. D. Watkins, in: Radiation Damage and Defects in Semiconductors, ed. by J. E. Whitehouse, Conf. Series No. 16, Institute of Physics, London and Bristol, 1973, p. 228
- [74Hoc] B. M. Hochberg, V. D. Mikhailov and V. A. Romanov, Nucl. Instr. Meth. 122, 119, 1974
- [75Bri] D. K. Brice: Ion Implantation Ranges and Energy Deposition Distributions, Plenum Press, New York, vol. 1, 1975
- [77Cam] S. U. Campisano, W. K. Chu, G. Foti, J. W. Mayer, M.-A. Nicolet and E. Rimini, in: Ion Beam Handbook for Material Analysis, ed. by J. W. Mayer and E. Rimini, Academic Press, New York, 1977, pp. 22-65
- [77Hir] P. Hirsch, A. Howie, R. B. Nicholson, D. W. Pashley, M. J. Whelan: Electron Microscopy of Thin Crystals, R. E. Krieger Publ. Co. Inc., New York, 1977
- [78Aus1] D. H. Auston, C. M. Surko, T. N. C. Venkatesan, R. E. Slusher, J. A. Golovchenko, Appl. Phys. Lett. 33(5), 437, 1978
- [78Aus2] D. H. Auston, J. A. Golovchenko, P. R. Smith, C. M. Surko, T. N. C. Venkatesan, Appl. Phys. Lett. 33(6), 539, 1978
- [78Chu1] W. K. Chu, J. W. Mayer and M. A. Nicolet: Backscattering Spectrometry, Academic Press, New York, 1978
- [78Chu2] wie [78Chu1], pp. 59
- [78Chu3] wie [78Chu1], p. 116
- [78Chu4] wie [78Chu1], p. 198
- [78Chu5] wie [78Chu1], p. 171
- [78Chu6] wie [78Chu1], p. 261
- [78Den] J. R. Dennis and E. B. Hale, J. Appl. Phys. 49(3), 1119, 1978
- [78Ric] E. Richter, in: Beschleunigungstechnik, ZfK, 1978
- [78Rys] H. Ryssel und I. Ruge: Ionenimplantation, B. G. Teubner, Stuttgart, 1978, pp. 28
- [78Wil] J. S. Williams and W. Möller, Nucl. Instr. Meth. 157, 213, 1978
- [79And] H. H. Andersen, Appl. Phys. 18, 131, 1979
- [79Web] R. Webb and G. Carter, Radiat. Eff. 42, 159, 1979
- [80Ols] G. L. Olson, S. A. Kokorowski, R. A. McFarlane, L. D. Hess, Appl. Phys. Lett. 37(11), 1019, 1980
- [81Beh] R. Behrisch: Sputtering by Particle Bombardment, Appl. Phys. vol. 47, Springer-Verlag, Berlin, 1981

- [81Chr] L. A. Christel, J. F. Gibbons and T. W. Sigmon, *J. Appl. Phys.* 52(12), 7143, 1981
- [81Cor] J. W. Corbett, J. P. Karins and T. Y. Tan, *Nucl. Instr. Meth.* 182/183, 457, 1981
- [81Hei] K. F. Heidemann, *Phil. Mag.* B44(4), 465, 1981
- [81Nak] J. Nakata and K. Kajiyama, *Proceedings of the 13th Conference on Solid State Devices, Tokyo, 1981*
- [81Sig] P. Sigmund and A. Gras-Marti, *Nucl. Instr. Meth.* 182/183, 25, 1981
- [81Tho] D. A. Thompson, *Rad. Eff.* 56, 105, 1981
- [82Byr] P. F. Byrne, N. W. Cheung and D. K. Sadana, *Appl. Phys. Lett.* 41(6), 537, 1982
- [82Car] G. Carter and W. A. Grant, *Nucl. Instr. Meth.* 199, 17, 1982
- [82Fel] L. C. Feldman, J. W. Mayer, S. T. Picraux: *Materials Analysis by Ion Channeling*, Academic Press, New York, 1982
- [82Gla] E. Glaser, G. Götz, N. Sobolev and W. Wesch, *phys. stat. sol. (a)* 69, 603, 1982
- [82Nak] J. Nakata and K. Kajiyama, *Appl. Phys. Lett.* 40, 686, 1982
- [82Ric] E. Richter, *ZfK-490*, 1982
- [82Rot] J. A. Roth, S. A. Kokorowski, G. L. Olson, L. D. Hess, in: *Laser and Electron-Beam Interactions with Solids*, ed. B. R. Appleton and G. K. Celler, Elsevier, Amsterdam, 1982, pp. 169 - 176
- [83Beh] R. Behrisch: *Sputtering by Particle Bombardment*, *Appl. Phys.*, vol. 52, Springer-Verlag, Berlin, 1983
- [83Bou] J. Bourgoin, M. Lannoo: *Point Defects in Semiconductors*, Springer-Verlag, Berlin und Heidelberg, 1983, pp. 248
- [83Fre] J. E. Fredrickson, C. N. Waddell, W. G. Spitzer and G. K. Hubler, in: *Ion Implantation for Materials Processing*, ed. by F. A. Smidt (Noyes Data, Park Ridge, USA), 1983, pp. 219 - 229
- [83Smi] T. C. Smith, in: *Ion Implantation: Equipment and Techniques*, ed. by H. Ryssel and H. Glawischnig, Springer Verlag, Berlin, 1983, p. 14
- [84Nar1] J. Narayan, D. Fathy, O. S. Oen and O. W. Holland, *Mater. Lett.* 2(3), 211, 1984
- [84Nar2] J. Narayan, D. Fathy, O. S. Oen and O. W. Holland, *J. Vac. Sci. Technol.* A2(3), 1303, 1984
- [84Wad] C. N. Waddell, W. G. Spitzer, J. E. Fredrickson, G. K. Hubler and T. A. Kennedy, *J. Appl. Phys.* 55(12), 4361, 1984

- [85Bee] D. Beeman, R. Tsu, M. F. Thorpe, *Phys. Rev.* B32(2), 874, 1985
- [85Goo] S. M. Goodnick, D. K. Ferry, C. W. Wilmsen, Z. Liliental, D. Fathy and O. L. Krivanek, *Phys. Rev.* B32(12), 8171, 1985
- [85Pai] B. M. Paine and R. S. Averbeck, *Nucl. Instr. Meth.* B7/8, 666, 1985
- [85Pal1] E. D. Palik: *Handbook of Optical Constants of Solids*, vol. 1, Academic Press, 1985, pp. 547
- [85Pal2] wie [85Pal1], pp. 571
- [85Pal3] wie [85Pal1], pp. 719
- [85Pru] S. Prussin, D. I. Margolese and R. N. Tauber, *J. Appl. Phys.* 57(2), 180, 1985
- [85Swa] P. L. Swart, H. Aharoni and B. M. Lacquet, *Nucl. Instr. Meth.* B6, 365, 1985
- [85Wan] K.-W. Wang, W. G. Spitzer, G. K. Hubler and D. K. Sadana, *J. Appl. Phys.* 58(12), 4553, 1985
- [85Woo] F. Wooten, K. Winer and D. Weaire, *Phys. Rev. Lett.* 54, 1392, 1985
- [85Zie] J. F. Ziegler, J. P. Biersack and U. Littmark: *The Stopping and Range of Ions in Solids*, Pergamon Press, New York, 1985, pp. 1
- [86Fri] M. Friedrich, *ZfK-593*, 1986
- [86Hec] N. Hecking, K. F. Heidemann and E. Te Kaat, *Nucl. Instr. Meth.* B15, 760, 1986
- [86Lic] C. Licoppe and Y. I. Nissim, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* 51, 167, 1986
- [86Mas] W. P. Maszara, G. A. Rozgonyi, L. Simpson and J. J. Wortman, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* 51, 381, 1986
- [86Mat] H. Matthes and W. Pfestorf, *Nucl. Instr. Meth.* A244, 155, 1986
- [87Azz1] R.M.A. Azzam, N.M. Bashara: *Ellipsometry and Polarized Light*, Elsevier, Amsterdam, 1987, pp. 269
- [87Azz2] wie [87Azz1], pp. 332
- [87Bro] W. L. Brown, R. G. Elliman, R. V. Knoell, A. Leiberich, J. Linnros, D. M. Maher and J. S. Williams: *Microscopy of Semiconductor Materials*, A. G. Cullis (Institute of Physics), London, 1987, pp. 61
- [87Ell1] R. G. Elliman, J. S. Williams, W. L. Brown, A. Leiberich, D. M. Maher and R. V. Knoell, *Nucl. Instr. Meth.* B19/20, 435, 1987
- [87Ell2] R. G. Elliman, J. S. Williams, S. T. Johnson and E. Nygren, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* 74, 471, 1987
- [87Kan] T. Kanayama, H. Tanoue and M. Komuro, *Jap. J. Appl. Phys.* 26(2), L84, 1987

- [87Lei] A. Leiberich, D. M. Maher, R. V. Knoell and W. L. Brown, *Nucl. Instr. Meth.* B19/20, 457, 1987
- [87Lin1] J. Linnros and G. Holmen, *J. Appl. Phys.* 62(12), 4737, 1987
- [87Lin2] J. Linnros, R. G. Elliman and W. L. Brown, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* 74, 477, 1987
- [87Mel] J. Melngailis, *J. Vac. Sci. Technol.* B5(2), 469, 1987
- [87Rai] A. K. Rai, J. Baker and D. C. Ingram, *Appl. Phys. Lett.* 51(3), 172, 1987
- [88Cer] G. F. Cerofolini, L. Meda and C. Volpones, *J. Appl. Phys.* 63(10), 4911, 1988
- [88Cla] A. Claverie, C. Vieu, J. Faure and J. Beauvillain, *J. Appl. Phys.* 64(9), 4415, 1988
- [88Ell] R. G. Elliman, J. Linnros and W. L. Brown, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* 100, 363, 1988
- [88Goo] P. J. Goodhew and F. J. Humphreys: *Electron Microscopy and Analysis*, Taylor & Francis, London, 1988
- [88Hoj] K. Hojou, S. Furuno, H. Otsu, K. Izui and T. Tsukamoto, *J. Nucl. Mater.* 155-157, 298, 1988
- [88Hum] R. E. Hummel, W. Xi, P. H. Holloway and K. A. Jones, *J. Appl. Phys.* 63(8), 2591, 1988
- [88Jac] K. A. Jackson, *J. Mater. Res.* 3(6), 1218, 1988
- [88Lin] J. Linnros, R. G. Elliman and W. L. Brown, *J. Mater. Res.* 3(6), 1208, 1988
- [88Ols] G. L. Olson and J. A. Roth, *Mater. Sci. Rep.* 3(1), 1, 1988
- [88Spe] J. C. H. Spence: *Experimental High Resolution Electron Microscopy*, Oxford University Press, New York and Oxford, 1988
- [89Cla] A. Claverie, C. Vieu, J. Faure and J. Beauvillain, *Mater. Sci. Eng.* B2, 99, 1989
- [89Pri] F. Priolo, J. M. Poate, D. C. Jacobson and J. L. Batstone, *Nucl. Instr. Meth.* B39, 343, 1989
- [89Reh] L. E. Rehn and P. R. Okamoto, *Nucl. Instr. Meth.* B39, 104, 1989
- [89Swa] P. L. Swart, B. M. Lacquet and M. F. Grobler, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* 147, 119, 1989
- [89Tam] M. Tamura and T. Suzuki, *Nucl. Instr. Meth.* B39, 318, 1989
- [90Kob] N. Kobayashi and Y. Horikoshi, *Jpn. J. Appl. Phys.* 29, L702, 1990
- [90Pri] F. Priolo and E. Rimini, *Mater. Sci. Rep.* 5, 321, 1990
- [90Spr] A. J. SpringThorpe and A. Majeed, *J. Vac. Sci. Technol.* B8(2), 266, 1990

- [90Wil] J. S. Williams, K. T. Short, R. G. Elliman, M. C. Ridgway and R. Goldberg, Nucl. Instr. Meth. B48, 431, 1990
- [91Car] G. Carter and M. J. Nobes, J. Mater. Res. 6(10), 2103, 1991
- [91Far] T. Farrell, J. V. Armstrong and P. Kightley, Appl. Phys. Lett. 59(10), 1203, 1991
- [91Hol] O. W. Holland and C. W. White, Nucl. Instr. Meth. B59/60, 353, 1991
- [91Jon] K. S. Jones and C. J. Santana, J. Mater. Res. 6(5), 1048, 1991
- [91Kan] M. Kanai, T. Kawai and S. Kawai, Appl. Phys. Lett. 58(7), 771, 1991
- [91Nak] J. Nakata, Phys. Rev. B43(18), 14643, 1991
- [91Roo] S. Roorda, W. C. Sinke, J. M. Poate, D. C. Jacobson, S. Dierker, B. S. Dennis, D. J. Eaglesham, F. Spaepen, P. Fuoss, Phys. Rev. B44(8), 3702, 1991
- [91Sch] P. J. Schultz, C. Jagadish, M. C. Ridgway, R. G. Elliman and J. S. Williams, Phys. Rev. B44(16), 9118, 1991
- [91Sut] W. Suttrop, Dissertation, Universität Erlangen-Nürnberg, S. 20, 1991
- [91Vol] C. A. Volkert, J. Appl. Phys. 70(7), 3521, 1991
- [92Arm] J. V. Armstrong, T. Farrell, T. B. Joyce, P. Kightley, T. J. Bullough and P. H. Goodhew, J. Crystal Growth 120, 84, 1992
- [92Bat] A. Battaglia, F. Priolo and E. Rimini, Appl. Surf. Sci. 56-58, 577, 1992
- [92Cos] W. De Coster, B. Brijs, W. Vandervorst and P. Burger, Nucl. Instr. Meth. B64, 287, 1992
- [92Mak] J. Mäkinen, Mater. Sci. Forum 105-110, 369, 1992
- [92Por1] D. A. Porter, K.E. Easterling: Phase Transformations in Metals and Alloys, Chapman & Hall, London, 1992, pp. 192
- [92Por2] wie [92Por1], pp. 186
- [92Suk] Sukirno, B. Zeroual, G. Carter and G. A. Stephens, Nucl. Instr. Meth. B67, 470, 1992
- [92Wil1] K. Wille: Physik der Teilchenbeschleuniger und Synchrotronstrahlungsquellen, Teubner Verlag, Stuttgart, 1992, p. 10
- [92Wil2] wie [92Wil1], p. 7
- [92Yua] J. Yuan, I. V. Verner, S. K. Maksimov and J. W. Corbett, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 235, 33, 1992
- [93Bat] A. Battaglia and S. U. Campisano, J. Appl. Phys. 74(10), 6058, 1993
- [93Bon] A. M. Bonnot, B. S. Mathis and S. Mpuhin, Appl. Phys. Lett. 63, 1754, 1993

- [93Cam] S. U. Campisano, S. Coffa, V. Raineri, F. Priolo and E. Rimini, Nucl. Instr. Meth. B80/81, 514, 1993
- [93Cus] J. S. Custer, A. Battaglia, M. Saggio and F. Priolo, Nucl. Instr. Meth. B80/81, 881, 1993
- [93Eng] J. M. C. England, P. J. Timans, C. Hill, P. D. Augustus and H. Ahmed, J. Appl. Phys. 73(9), 4332, 1993
- [93Gle] Diagnostic Techniques for Semiconductor Materials Processing, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 324, ed. by O. J. Glembocki, S. W. Pang, F. H. Pollak, G. M. Crean and G. Larrabee, Boston, 1993
- [93Gol] R. D. Goldberg, R. G. Elliman and J. S. Williams, Nucl. Instr. Meth. B80/81, 596, 1993
- [93Hee] V. Heera, R. Kögler, W. Skorupa and R. Grötzschel, Nucl. Instr. Meth. B80/81, 538, 1993
- [93HV] High Voltage Engineering Europa B.V., Technical Description, Tandetron Accelerator Model 4130HC
- [93Kan] T. Kanayama, Bull. Electrotechn. Lab. 57(4), 81, 1993
- [93Kil] K. P. Killeen and W. G. Breiland, J. Electron. Mater. 23(2), 279, 1993
- [93Koe] R. Kögler, V. Heera, W. Skorupa, E. Glaser, T. Bachmann and D. Rück, Nucl. Instr. Meth. B80/81, 556, 1993
- [93Laa] L. Laânab, A. Roumili, M. M. Faye, N. Gessinn and A. Claverie, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 279, 529, 1993
- [93Mar] G. N. Maracas, J. L. Edwards, D. S. Gerber and R. Droopad, Appl. Surf. Sci. 63, 1, 1993
- [93Nie] B. Nielsen, O. W. Holland, T. C. Leung, K. G. Lynn, J. Appl. Phys. 74(3), 1636, 1993
- [93Raf] Y. Raffle, R. Kuszelewicz, R. Azoulay, G. Le Roux, J. C. Michel, L. Dugrand and E. Toussaere, Appl. Phys. Lett. 63(25), 3479, 1993
- [93Rei] R. Reitano, M. G. Grimaldi, P. Baeri, E. Bellandi, S. Borghesi and G. Baratta, J. Appl. Phys. 74(4), 2850, 1993
- [93Sei] M. Seibt, in: Gettering and Defect Engineering in Semiconductors Technology, GADEST 1993, ed. by H. G. Grimmeis, M. Kittler and H. Richter, Solid State Phenomena 32 & 33, 463, 1993
- [93Tak] A. Takano, M. Kawasaki and H. Koinuma, J. Appl. Phys. 73(11), 7987, 1993
- [93Wil] J. S. Williams, R. G. Elliman, M. C. Ridgway, C. Jagadish, S. L. Ellingboe, R. Goldberg, M. Petravic, W. C. Wong, Z. Dezhang, E. Nygren and B. G. Svensson, Nucl. Instr. Meth. B80/81, 507, 1993

- [94Bat] A. Battaglia, G. Romano, S. U. Campisano, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 316, 253, 1994
- [94Bol] W. Borse, Mater. Sci. Eng. R12(2), 53, 1994
- [94Chr] C. Christofides, A. Othonos, M. Bisson, J. Boussey-Said, J. Appl. Phys. 75(7), 3377, 1994
- [94Ell] R. G. Elliman, W. C. Wong, Nucl. Instr. Meth. B85, 178, 1994
- [94Gol] R. D. Goldberg, J. S. Williams and R. G. Elliman, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 316, 259, 1994
- [94Lan] W. Lange: Einführung in die Laserphysik, Wissenschaftliche Buchgesellschaft, Darmstadt, 1994, S. 124 ff.
- [94Nas] M. Nastasi and J. W. Mayer, Mater. Sci. Eng. R12(1), 1, 1994
- [94Nij] J. F. A. Nijs: Advanced Silicon and Semiconducting Silicon-Alloy Based Materials and Devices, Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia, 1994, pp. 65 - 71
- [94Pri] F. Priolo, S. Coffa and A. Battaglia, Nucl. Instr. Meth. B90, 314, 1994
- [94Rau] E. Rauhala, in: Chemical Analysis by Nuclear Methods, ed. by Z. B. Alfassi, John Wiley & Sons Ltd., 1994, pp. 253
- [94Rob] M. T. Robinson, Radiation Effects and Defects in Solids, 130-131, 3, 1994
- [94Sei] M. Seibt, J. Imschweiler and H.-A. Hefner, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 319, 189, 1994
- [94Sto] P. A. Stolk, F. W. Saris, A. J. M. Berntsen, W. F. van der Weg, L. T. Sealy, R. C. Barklie, G. Krötz and G. Müller, J. Appl. Phys. 75(11), 7266, 1994
- [94Wan] Z.-L. Wang, N. Itoh and N. Matsunami, Appl. Phys. Lett. 64(8), 1000, 1994
- [94Wil1] J. S. Williams, R. D. Goldberg, M. Petravic and Z. Rao, Nucl. Instr. Meth. B84, 199, 1994
- [94Wil2] J. S. Williams, H. H. Tan, R. D. Goldberg, R. A. Brown and C. Jagadish, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 316, 15, 1994
- [95Cat1] M. J. Caturla, T. Diaz de la Rubia, G. H. Gilmer, Nucl. Instr. Meth. B106, 1, 1995
- [95Cat2] M. J. Caturla, T. Diaz de la Rubia, G. H. Gilmer, J. Appl. Phys. 77(7), 3121, 1995
- [95Cel] C. Cellini, A. Carnera, M. Berti, A. Gasparotto, D. Steer, M. Servidori, S. Milita, Nucl. Instr. Meth. B96, 227, 1995
- [95Die] N. Dietz, A. E. Miller and K. J. Bachmann, J. Vac. Sci. Technol. A13, 153, 1995

- [95Far] T. Farrell, J. V. Armstrong, Appl. Surf. Sci. 86, 582, 1995
- [95For] D. V. Forbes, J. J. Coleman, J. L. Klatt and R. S. Averbeck, J. Appl. Phys. 77(7), 3543, 1995
- [95Fuk] W. Fukarek, persönliche Mitteilung
- [95Gol] R. D. Goldberg, J. S. Williams, R. G. Elliman, Nucl. Instr. Meth. B106, 242, 1995
- [95Hee] V. Heera, T. Henkel, R. Kögler and W. Skorupa, Phys. Rev. B52, 15776, 1995
- [95Kan] T. Kanayama, persönliche Mitteilung
- [95Mor] S. J. Morris, J.-Th. Zettler, K. C. Rose, D. I. Westwood, D. A. Woolf, R. H. Williams and W. Richter, J. Appl. Phys. 77(7), 3115, 1995
- [95Mot1] T. Motooka, Y. Hiroshima, R. Suzuki, T. Ohdaira, Y. Hirano and F. Sato, Jpn. J. Appl. Phys. 34(2A), L149, 1995
- [95Mot2] T. Motooka, Y. Hiroshima, R. Suzuki, T. Ohdaira, Y. Hirano and F. Sato, Nucl. Instr. Meth. B106, 198, 1995
- [95Nai] N. Naito, A. Takano, M. Sumiya, M. Kawasaki and H. Koinuma, Appl. Phys. Lett. 66(9), 1071, 1995
- [95Pau] R. Paul: Elektrotechnik und Elektronik für Informatiker, Bd.2 Grundgebiete der Elektronik, B. G. Teubner, Stuttgart, 1995, pp. 196
- [95Wan] Z.-L. Wang, N. Itoh, N. Matsunami, Q. T. Zhao, Nucl. Instr. Meth. B100, 493, 1995
- [95Wod] S.-A. Wode, Dissertation, TU Braunschweig, S. 10, 1995
- [96Hen1] T. Henkel, V. Heera, R. Kögler, W. Skorupa and M. Seibt, Appl. Phys. Lett. 68(24), 3425, 1996
- [96Hen2] T. Henkel, V. Heera, R. Kögler, W. Skorupa and M. Seibt, submitted to J. Appl. Phys.
- [96Kim] M. S. Kim, Y. D. Bae, H. I. Bak, Nucl. Instr. Meth. B108, 139, 1996
- [96Mot1] T. Motooka, Thin Solid Films, 272(2), 235, 1996
- [96Mot2] T. Motooka, Proc. of the 10th Int. Conf. of Ion Beam Modification of Materials, Albuquerque, USA, 1996
- [96Nak] J. Nakata, J. Appl. Phys. 79(2), 682, 1996
- [96Zui] C. D. Zuiker, D. M. Gruen and A. R. Krauss, J. Appl. Phys. 79(7), 3541, 1996



# Anhang A      Liste der verwendeten Symbole

## Festkörperphysikalische Parameter

$E$	Ionenenergie
$E_0$	kinetische Energie des auf den Festkörper treffenden Ions
$\nu(E_0)$	nuklear deponierter Anteil von $E_0$
$E_A$	Aktivierungsenergie, Energieparameter
$E_d$	Versetzungsenergie
$j$	Ionenstromdichte
$j_u$	kritische Ionenstromdichte
$k$	Boltzmann-Konstante
$n$	Targetatomdichte
$N_a$	Zahl der von einem Ion in einer Stoßkaskade erzeugten Atomversetzungen
$N_d, N_v$	Zahl der pro Ion und Tiefenintervall erzeugten Atomversetzungen
$N_{dpa}$	Zahl der erzeugten Versetzungen pro Atom
$r$	Rate
$r_A$	IBIIA-Rate
$r_{A_0}$	präexponentieller Faktor der IBIIA-Rate
$r_n$	normierte IBIIA-Rate
$R_p$	mittlere projizierte Reichweite des Ions
$\Delta R_p$	Standardabweichung von $R_p$
$S$	Energiedeposition pro Tiefenintervall (Bremsvermögen)
$S_n$	pro Ion und Tiefenintervall nuklear deponierte Energie
$t$	Zeit
$T$	Temperatur
$T_u$	Umkehrtemperatur
$x$	Tiefe im Festkörper
$\Delta x$	zurückgelegte Weglänge der a/c-Grenzfläche
$\epsilon$	kritische Energiedichte
$\Phi$	Ionenfluenz
$\Phi_A$	Amorphisierungsfluenz

## Modell-Parameter

$D$	Diffusionskonstante
$D_b$	ballistischer Anteil von $D$
$D_{th}$	thermischer Anteil von $D$
$E$	Energie
$E_A$	Aktivierungsenergie, Energieparameter
$E_d$	Versetzungsenergie
$f_a$	Zahl der auf der kristallinen Seite der Grenzfläche amorphisierten Monolagen
$f_c$	Zahl der auf der amorphen Seite der Grenzfläche rekristallisierten Monolagen
$g$	Wahrscheinlichkeit für die Defekterzeugung
$j$	Ionenstromdichte
$k$	Boltzmann-Konstante
$k_A$	Ratenkonstante für die Defektvernichtung
$k_{A_0}$	präexponentieller Faktor von $k_A$
$k_G$	Ratenkonstante für die Defekterzeugung
$l_0$	Länge des amorphen Clusters
$n$	reduzierte Defektdichte
$n_{max}$	maximale (reduzierte) Defektdichte
$N$	Flächen- oder Volumendichte
$N_D$	normierte Flächendichte der Doppelleerstellen an der a/c-Grenzfläche
$N_{max}$	maximale Volumendichte der Zwischengitteratome
$r$	resultierende Reaktionsrate
$r_A$	IBIIA-Rate
$r_{A_0}, r_{A_1}$	präexponentieller Faktor der IBIIA-Rate
$r_n$	normierte IBIIA-Rate
$S_n$	pro Ion und Tiefenintervall nuklear deponierte Energie
$t$	Zeit
$T$	Temperatur
$V$	Volumen eines Siliciumatoms
$x$	Entfernung von der a/c-Grenzfläche
$\delta$	Gradient der reduzierten Defektdichte an der a/c-Grenzfläche
$\lambda$	Dicke einer Monolage
$\sigma_0$	Querschnittsfläche des amorphen Clusters
$\tau_0$	Zeit bis zum "Eintreffen" des nächsten Ions
$\tau_s$	Relaxationszeit des amorphen Clusters
$\xi$	Zahl der Atomversetzungen pro Ion und Monolage

## Optische Parameter

$a$	Absorptionskoeffizient
$d$	Schichtdicke
$d_j$	Dicke der Schicht $j$
$E$	Feldstärke einer elektromagnetischen Welle
$E_e$	Feldstärke der einfallenden Welle
$E_r$	Feldstärke der reflektierten Welle
$E_t$	Feldstärke der transmittierten Welle
$I_{(j-1)j}$	Interface-Matrix der Schichten $j - 1$ und $j$
$I$	Intensität einer elektromagnetischen Welle
$I_e$	Intensität der einfallenden Welle
$I_r$	Intensität der reflektierten Welle
$k$	Extinktionskoeffizient
$l_H$	zurückgelegte Weglänge der a/c-Grenzfläche, die einer Halbwelle der TRR-Kurve entspricht
$L_j$	Schicht-Matrix der Schicht $j$
$n$	reeller Brechungsindex
$N$	komplexer Brechungsindex
$N_j$	komplexer Brechungsindex der Schicht $j$
$p$	p-polarisiert (nur als Index verwendet)
$r_{mn}$	Fresnelkoeffizient für die Reflexion an der Grenzfläche $mn$
$R$	Reflektivität
$R_{exp}$	im Experiment gemessene Reflektivität
$R_{th}$	berechnete Reflektivität
$Re \{X\}$	Realteil von $X$
$s$	s-polarisiert (nur als Index verwendet)
$S$	Streumatrix
$S_{mn}$	Element $mn$ der Streumatrix $S$
$t$	Zeit
$t_{mn}$	Fresnelkoeffizient für die Transmission an der Grenzfläche $mn$
$v$	Grenzflächengeschwindigkeit
$\alpha_0$	Einfallswinkel
$\alpha_j$	Brechungswinkel in der Schicht $j$
$\beta$	Phasenwinkel
$\beta_j$	Phasenwinkel in der Schicht $j$
$\lambda$	Wellenlänge des Lichtes

## RBS-Parameter

$e$	Elementarladung
$E$	Ionenenergie
$E_0$	kinetische Energie des auf den Festkörper treffenden Ions
$E_1$	Energie des von der Festkörperoberfläche rückgestreuten Ions
$E_2$	Energie des aus der Tiefe $x$ rückgestreuten Ions
$K$	kinematischer Faktor
$m$	Masse des Ions
$M$	Masse des Targetatoms
$q$	Ladungszahl des Ions
$S$	Bremsvermögen des Ions
$S_{in}$	Bremsvermögen des Ions auf dem Hinweg zum Streuzentrum
$S_{out}$	Bremsvermögen des Ions auf dem Rückweg zur Oberfläche
$U_T$	Terminalspannung
$V$	Energieverlustparameter
$x$	Tiefe im Festkörper
$x_0$	Ort der Festkörperoberfläche
$x_s$	Tiefe des Streuzentrums im Festkörper
$Y_a$	Rückstreausbeute im <i>Aligned</i> -Spektrum
$Y_r$	Rückstreausbeute im <i>Random</i> -Spektrum
$\chi_{min}$	Minimalausbeute
$\chi_d$	dekanalisierter Anteil von $\chi_{min}$
$\Delta E$	Energieverlust, Energieauflösung
$\Delta x$	Tiefenauflösung
$\Psi_k$	kritischer Winkel für die Kanalisierung des Ions
$\theta$	Rückstreuwinkel
$\theta_1$	Einfallswinkel des Ions bezüglich der Oberflächennormale
$\theta_2$	Beobachtungswinkel (bezüglich der Oberflächennormale)

## Anhang B Liste der verwendeten Abkürzungen

a/c	amorph/kristallin
a-Si	amorphes Silicium
c-Si	kristallines Silicium
AES	Auger Electron Spectroscopy
BCA	Binary Collision Approximation
CRN	Continuous Random Network
CVD	Chemical Vapour Deposition
DOR	Dynamic Optical Reflectivity Measurements
dpa	displacements per atom
EOR	End of Range
EPR	Electron Paramagnetic Resonance
FIB	Focused Ion Beam
FWHM	Full Width of Half Maximum
HREM	High Resolution Electron Microscopy
IBAD	Ion Beam Assisted Deposition
IBIEC	Ion Beam Induced Epitaxial Crystallization
IBIIA	Ion Beam Induced Interfacial Amorphization
IBS	Ion Beam Synthesis
IR	Infrared
LPE	Liquid Phase Epitaxy
LR	Laserreflektometrie (Laser Reflectometry)
LRI	Laser Reflectance Interferometry
MBE	Molecular Beam Epitaxy
MD	Molecular Dynamics Calculation
MOVPE	Metal-Organic Vapour Phase Epitaxy
PIPS	Passivated Implanted Planar Silicon Detector
PRS	Parallel-Polarized Reflectance Spectroscopy
RBS/C	Rutherford Backscattering Spectrometry / Channeling
RHEED	Reflection High Energy Electron Diffraction
RT	Raumtemperatur
RTA	Rapid Thermal Annealing
SEA	Surface Energy Approximation
SIMS	Secondary Ion Mass Spectroscopy
SPE	Solid Phase Epitaxy
TEM	Transmission Electron Microscopy
TRIM	Transport of Ions in Matter (Computerprogramm)
TRR	Time Resolved Reflectivity (Measurements)
XTEM	cross-sectional Transmission Electron Microscopy

## Anhang C

# Beschreibung des Computerprogramms REFLECT

### • Einleitung

REFLECT ist ein interaktives DOS-Programm zur Berechnung der Reflektivität von planaren Mehrschichtsystemen nach der im Kapitel 3.2.2 vorgestellten Matrizenmethode [87Azz2]. Für ein gegebenes System von maximal 10 homogenen, optisch isotropen und planaren Schichten auf einem beliebigen Substrat und eingebettet in ein beliebiges Medium berechnet REFLECT die Reflektivität eines auf das Schichtsystem treffenden Lichtstrahls beliebiger Polarisation.

Die Berechnung der Reflektivität wird in einer Schleife solange wiederholt, bis eine der möglichen Abbruchbedingungen eintritt. Eine Bedingung fordert, daß alle Schichtdicken positiv sein müssen. Eine andere verlangt aus Gründen der grafischen Darstellung und der verfügbaren Speicherressourcen eine maximale Zahl von Schleifendurchläufen. Die Ergebnisse der Berechnungen, d.h. die Reflektivität einschließlich der dazugehörigen Schichtdicken und der Zeit können in tabellarischer Form gespeichert, auf den Bildschirm oder auf einen Drucker ausgegeben werden. Die Reflektivität wird wahlweise entweder als Funktion der Zeit oder der Dicke der obersten Schicht grafisch dargestellt. Folgende Parameter sind einstellbar:

- Polarisation, Wellenlänge und Einfallswinkel des Lichtes
- Anzahl der Schichten auf dem Substrat (0 ... 10)
- optische Konstanten ( $n, k$ ) aller Medien
- Dicke aller Schichten
- Grenzflächengeschwindigkeiten als Polynom 5. Grades

### • Programmaufbau

REFLECT ist in der Programmiersprache C mit dem Borland-Compiler Turbo C++ (Version 1.00) geschrieben worden und besteht aus folgenden Modulen (Dateien):

- bs.c enthält Funktionen zur Steuerung des Cursors und des Bildschirms
- start.c enthält das Hauptprogramm, Funktionen zur Ein- und Ausgabe von Zeichen, zur Terminalsteuerung, Datenspeicherung und Ausgabe von Daten auf den Bildschirm bzw. Drucker
- edit.c enthält eine leistungsfähige Funktion zum Editieren von Integer- und Gleitpunktzahlen
- param.c enthält Funktionen zum Einstellen o.g. Parameter
- calc.c enthält Funktionen zur Berechnung der Reflektivität und deren Zwischenergebnisse sowie Standardroutinen für komplexe Zahlen
- graphic.c enthält Funktionen für die Initialisierung des Grafik-Bildschirms und die grafische Darstellung der Reflektivitätskurve

### • 3. Benutzerhinweise

Der Nutzer wird durch die einzelnen Programmmodule menügeführt. Das Programm wird mit der Eingabe von REFLECT auf Betriebssystemebene (DOS) aufgerufen. REFLECT kann zu jeder Zeit durch Drücken von CTRL+C abgebrochen werden. Dabei erfolgt jedoch keine Sicherung aktueller Daten. Ein Datenverlust ist daher unvermeidbar. Nach Drücken einer beliebigen Taste wird der Nutzer aufgefordert, weitere wichtige Parameter einzustellen.

Zunächst wird die Eingabe einer Schrittweite  $s$  erwartet (Standardwert: 2,0 / Wertebereich:  $0 < s \leq 100$ ). Kleine Schrittweiten erzeugen eine hohe grafische Auflösung und umgekehrt. Bei einem VGA-Bildschirm mit einer Auflösung von  $640 \times 480$  Pixel und bei einer Schrittweite von  $s = 5$  wird auf jedes dritte Pixel ein Bildpunkt gesetzt ( $0,6 \times s = 3$ ). Desweiteren muß der gewünschte Abzissenparameter für die grafische Darstellung, die Zeit oder die Dicke der obersten Schicht, eingegeben werden. Schließlich muß man festlegen, ob die Reflektivität oder deren Quadrat ausgegeben und ob mit voreingestellten Standardparametern gerechnet werden soll. Diese Parameter, die nur durch einen Eingriff in das Programm geändert werden können, sind wie folgt definiert:

- Polarisation: linear (s)
- Laser: He-Ne-Laser
- Wellenlänge: 632,8 nm
- Einfallswinkel:  $0^\circ$
- Anzahl der Schichten: 1
- Substrat: kristallines Silicium ( $n = 3,882$ ,  $k = 0,019$ )
- Umgebendes Medium: Vakuum
- Schicht: a-Si ( $n = 4,72$ ,  $k = 0,61$ ), 500 nm dick, Geschwindigkeitskonstante  $c_1 = 1$ )

Falls nicht mit Standardparametern gerechnet werden soll, wird der Nutzer aufgefordert, schrittweise alle erforderlichen Parameter einzugeben.

Als erstes muß dann die Polarisation des Laserstrahls festgelegt werden. Jeder beliebige Polarisationszustand ist möglich, d.h. linear (s oder p), zirkular, elliptisch oder unpolarisiert. Bei elliptischer Polarisation müssen die konkreten Amplituden  $A_p$  und  $A_s$  der einfallenden elektromagnetischen Welle (Wertebereich: 0 ... 1) angegeben werden.

Der nächste einzugebende Parameter ist die Laserwellenlänge. Neben der Auswahl von vorgegebenen Lasern kann auch eine beliebige Wellenlänge im Bereich von 10 nm bis  $20 \mu\text{m}$  eingegeben werden. Ein Name für den Laser muß nicht unbedingt angegeben werden, Eingabe von ENTER ignoriert diese Aufforderung.

Weiterhin müssen der Einfallswinkel  $\alpha_0$  im Bereich  $0 \leq \alpha_0 < 90^\circ$  und die Anzahl der sich auf dem Substrat befindenden Schichten (maximal 10) eingegeben werden. Wird nur die ENTER-Taste betätigt, so wird die Anzahl der Schichten auf Null und der Einfallswinkel auf  $0^\circ$  gesetzt. Auch Rechnungen ohne Schichten sind möglich, diese können als Kontrolle der Reflektivitätswerte für eine einfache Reflexion an Oberflächen verschiedenster Materialien dienen.

Es folgt die Eingabe von Materialien und Brechungsindizes für das das Schichtsystem umgebende Medium. Neben einer freien Eingabe können folgende Materialien mit voreingestellten optischen Konstanten ausgewählt werden:

- Vakuum
- kristallines Silicium für 633 nm oder 1115 nm
- amorphes Silicium für 633 nm oder 1115 nm
- amorphes Siliciummonoxid für 620 nm oder 1000 nm
- kristallines Siliciumdioxid für 633 nm oder 1115 nm
- kristallines Siliciumkarbid (6H) für 620 nm oder 1248 nm

Bei einer freien Eingabe können Bezeichnungen für das Material wie oben durch Eingabe von ENTER ignoriert werden. Der Realteil des Brechungsindex muß im Bereich  $1 \leq n < 10$ , der imaginäre Anteil im Bereich  $-10 < k \leq 0$  liegen.

Beim Festlegen der Materialien für das Schichtsystem können neben einer freien Eingabe auch o.g. Materialien ausgewählt werden. Wird das Schichtmaterial frei gewählt, kann hier der reelle Brechungsindex im Bereich  $0,001 \leq n < 10$  vereinbart werden.

Beginnend mit der ersten (obersten) Schicht erwartet REFLECT nacheinander die Eingabe des Materials, einer Schichtdicke im Bereich  $0 \leq d < 10 \mu\text{m}$  und letztlich einer dimensionslosen Geschwindigkeitskonstanten  $c$  im Bereich  $-100 \leq c \leq 100$ . Diese Konstante bestimmt die Geschwindigkeit des Interfaces, das sich näher zum Substrat befindet. Positive Konstanten bewirken eine Bewegung des Interfaces zur Oberfläche hin, negative eine Bewegung desselben zum Substrat hin. Mit einer alleinigen Eingabe von ENTER wird  $c$  auf Null gesetzt, damit bleibt die räumliche Lage des Interfaces im Schichtsystem unverändert, unabhängig von allen anderen ablaufenden Prozessen. Bei der Abfrage der Parameter für die erste Schicht erwartet REFLECT auch die Eingabe einer Geschwindigkeitskonstanten  $c_0$ . Diese beschreibt die Bewegung der Oberfläche des Schichtsystems. Sie erlaubt damit die Simulation von aufwachsenden Schichten.

Nachdem die Parameter für die letzte Schicht bzw. o.g. Standardparameter eingestellt worden sind, erscheint das Parametermenü auf dem Bildschirm. Hier sind alle festgelegten Parameter für die folgende Rechnung kontrollierbar. Die letzte Spalte der Tabelle enthält die Schichtdickenänderung in nm/Zeiteinheit. Für die Schicht  $i$  ist diese gleich

$$\Delta d_i = s (c_{i-1} - c_i)$$

wobei  $s$  die Schrittweite und  $c_i$  die Geschwindigkeitskonstante des Interfaces *Schicht  $i$  / Schicht  $i + 1$*  ist.

Falls jetzt noch ein Parameter geändert werden soll, kann dies mit der Eingabe von "y" und des (schwarz hervorgehobenen) Anfangsbuchstabens des gewünschten Parameters geschehen. Wird die Anzahl der Schichten geändert, müssen alle Parameter des Schichtsystems neu eingegeben werden. Bei einer Änderung eines Materials, Brechungsindex, einer Schichtdicke oder Geschwindigkeitskonstanten muß die entsprechende Schicht über die Eingabe einer Integerzahl (Index) angewählt werden. Dabei entspricht generell 0 dem Medium, 1 der ersten (obersten) Schicht, 2 der mittleren Schicht usw.

Wenn alle Parameter die gewünschten Werte haben, kann, ausgehend vom Parametermenü, durch zweimalige Eingabe von ENTER die Berechnungsprozedur gestartet werden. Während der Berechnung der Reflektivitätskurven können die aktuellen Schichtdicken auf dem Bildschirm mitverfolgt werden. Falls während der Prozedur keine Schicht verschwindet, wird nach 1000 Reflektivitätsberechnungen die Prozedur abgebrochen und das Ergebnis in einer  $R(t)$ - oder  $R(d_1)$ -Darstellung ( $d_1$  Dicke der ersten Schicht) auf den Bildschirm ausgegeben.

Falls eine Schicht verschwindet, wird die Prozedur angehalten und nach deren Fortsetzung gefragt. Wenn dies erfolgen soll, können die Geschwindigkeitskonstanten aller



verbliebenen Schichten neu festgelegt werden.

Die Berechnungsprozedur kann zu jeder Zeit durch Drücken einer beliebigen Taste abgebrochen werden, die bis dahin berechnete Ergebnisse werden danach auf den Bildschirm ausgegeben. Zu jeder Reflektivitätskurve wird noch über der Abzisse eine Zeile eingeblendet, welche die minimale ( $R_{\min}$ ) und maximale Reflektivität ( $R_{\max}$ ) sowie die Reflektivität zur Zeit  $t = 0$  und  $t = t_{\max}$  enthält. Ausgehend von vier Skalierungsmöglichkeiten wird eine optimale Einteilung der Ordinate automatisch gewählt.

Durch Drücken einer beliebigen Taste kommt man in das Hauptmenü. Möchte man sich die grafische Darstellung in einer anderen Skalierung der Abzisse nochmal ansehen, so ist nach der Wahl von NEW PLOT eine Integerzahl für den gewünschten Skalenendwert einzugeben.

Falls eine neue Berechnung durchgeführt werden soll, wählt man NEW CALCULATION. Prinzipiell können mehrere Kurven in einem Graph gezeichnet werden, dies geht aber immer auf Kosten der verfügbaren Speicherressourcen. Ein wesentlicher Vorteil des Programms besteht in seiner dynamischen Speicherverwaltung, d.h. der RAM-Speicher wird nur soweit beschrieben, wie Daten generiert werden. Reicht der Speicher nicht mehr aus, erscheint eine Fehlermeldung auf dem Bildschirm. Nach Drücken einer beliebigen Taste kann man, ausgehend vom Hauptmenü, wieder eine neue Rechnung mit NEW CALCULATION starten.

Das Programm erlaubt weiterhin über die Option VIEW DATA die Darstellung von Daten und Parametern der ersten Reflektivitätskurve auf dem Bildschirm. Auf der ersten Bildschirmseite werden die eingestellten Parameter angezeigt. Durch Drücken einer beliebigen Taste werden auf der folgenden Seite Daten in tabellarischer Form dargestellt. Es können die üblichen Funktionstasten zur Bewegung des Cursors benutzt werden. Mit ESCAPE gelangt man in das Hauptmenü zurück.

REFLECT bietet außerdem die Möglichkeit, Daten der ersten Reflektivitätskurve zu speichern oder auf einen Drucker auszugeben. Zur Datensicherung wählt man im Hauptmenü die Option SAVE DATA. Danach ist ein Dateiname, gegebenenfalls mit einem vollständigen Pfad einzugeben. Wird nur ein Dateiname angegeben, legt das Programm das Datenfile in dem Verzeichnis ab, das die Datei REFLECT.EXE enthält. Bleibt die Suche nach der Programmdatei erfolglos oder sollen die Daten in einem anderen Verzeichnis gespeichert werden, so ist ein vollständiger Pfad anzugeben. Existiert bereits eine Datei gleichen Namens, so kann ihr Inhalt überschrieben werden. Soll letzteres nicht geschehen, so ist ein neuer Dateiname einzugeben. Treten Systemfehlermeldungen auf, wird nach Drücken einer beliebigen Taste das Hauptmenü wieder eingeblendet.

Für eine schnelle Auswertung kann die Grafik durch Drücken der Tasten SHIFT+PRINT unter der Voraussetzung auf einen Drucker ausgegeben werden, daß vor dem Aufruf von REFLECT das DOS-Programm GRAPHICS in den RAM-Speicher geladen wurde.

Zur Ausgabe von Daten auf einen Drucker ist die Option PRINT DATA zu wählen. Zuerst werden als zusätzliche Sicherheit die Daten nach derselben Prozedur wie bei SAVE DATA gespeichert und danach auf einen Drucker ausgegeben. Dieser muß an der parallelen Schnittstelle LPT1 installiert, eingeschaltet und betriebsbereit sein. Die Dichte der eingestellten Schrift sollte mindestens 12 cpi betragen. Nach der Datensicherung bzw. dem Senden des Druckauftrags erscheint wieder das Hauptmenü. Über EXIT (oder CTRL+C) kann man das Programm verlassen.

## Versicherung

Hiermit versichere ich, daß ich die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe; die aus fremden Quellen direkt oder indirekt entnommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht. Die Arbeit wurde bisher weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

Diese Arbeit wurde am Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung des Forschungszentrums Rossendorf e.V. unter Betreuung von Dr. V. Heera und Dr. R. Kögler angefertigt.

Die Promotionsordnung der Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften der Technischen Universität Dresden in der Fassung vom 27. September 1994 wird anerkannt.

# Danksagung

Zum Gelingen dieser Arbeit haben viele Menschen entscheidend beigetragen. Mein herzlichen Dank gilt insbesondere

- dem Leiter des Instituts für Ionenstrahlphysik und Materialforschung, Herrn Prof. W. Möller, und Herrn Prof. E. Wieser für die Ermöglichung dieser Arbeit
- den Herren Dr. V. Heera und Dr. R. Kögler für die intensive Betreuung und viele anregende Diskussionen
- dem Leiter der Abteilung Neue Materialien, Herrn Dr. W. Skorupa für die engagierte Förderung dieser Arbeit
- Herrn Dr. A. Mücklich für die Durchführung von TEM-Untersuchungen
- den Laborantinnen A. Protze, C. Rußig und I. Morawitz für die Präparation von TEM-Folien und die kollegiale Zusammenarbeit bei der Durchführung der Experimente
- Herrn Dr. M. Seibt (Universität Göttingen) für die Präparation und Untersuchung von XTEM-Folien sowie für intensive Diskussionen
- den Herren Dr. M. Voelskow und M. Mäder für die Durchführung von RBS-Untersuchungen
- Herrn Dr. W. Fukarek für die Ausführung von IR-spektroskopischen und ellipso-metrischen Messungen sowie für die intensive Diskussion optischer Fragen
- Herrn R. Kliemann für die engagierte Unterstützung beim Aufbau des TRR-Meßplatzes und bei der Lösung elektronischer Probleme
- Herrn E. Müller für die Unterstützung bei der Anwendung von mathematischen Routinen
- dem Leiter der Gruppe Beschleunigertechnik, Herrn Dr. M. Friedrich und Herrn S. Turuc sowie weiteren Mitarbeitern für die kontinuierliche Zusammenarbeit bei der "Bereitstellung" des Ionenstrahles
- den Mitarbeitern des chemischen Labors für die Präparation der Proben
- sowie den übrigen Mitgliedern des Instituts für Ionenstrahlphysik und Materialforschung für ein anregendes Arbeits- und Diskussionsklima
- und nicht zuletzt meinen Eltern, deren kontinuierliche Unterstützung in vielerlei Hinsicht nicht unwesentlich zum Abschluß dieser Arbeit beigetragen hat.

# Lebenslauf

- 06.10.1963 Geburt als Sohn des Zahnarztes Dr. H.-P. Henkel und der stomatologischen Schwester M. Henkel in Dresden
- 1970 - 1980 Besuch der polytechnischen Oberschule in Freiberg/Sachsen
- 1980 - 1983 Abitur und Berufsausbildung zum Feinoptiker in der Firma Carl Zeiss Jena
- 1983 - 1988 Studium der Physik an der Technischen Universität Chemnitz  
Vertiefungsrichtung Festkörperphysik  
Diplomarbeit über Optimierung der Betriebsparameter einer Ion Plating-Anlage
- 1988 - 1991 Wissenschaftlicher Mitarbeiter in der Firma Transformatoren- und Röntgenwerk (TuR) Dresden  
Arbeitsgebiet: Digitale Lumineszenzradiographie
- 1991 - 1992 Informatik-Lehrgang bei Control Data Institut Dresden  
Abschluß als Technik-Informatiker
- 1992 - 1995 Doktorand im Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung des Forschungszentrums Rossendorf e.V.  
Arbeitsgebiet: Ionenstrahlinduzierte Amorphisierung und Rekristallisation in Silicium
- 1995 - 1996 4-monatiger Gastwissenschaftleraufenthalt am Electrotechnical Laboratory (ETL) in Tsukuba, Japan  
Arbeitsgebiet: MBE-Wachstum von GaAs bei niederenergetischer Ionenbestrahlung