

HZDR-016

Elastische Rückstoßatomspektrometrie leichter Elemente mit Subnanometer- Tiefenauflösung

Marcel Kosmata

Wissenschaftlich-Technische Berichte
HZDR-016 · ISSN 2191-8708

WISSENSCHAFTLICH-
TECHNISCHE BERICHTE

HZDR



HELMHOLTZ
ZENTRUM DRESDEN
ROSSENDORF

Wissenschaftlich-Technische Berichte
HZDR-016

Marcel Kosmata

**Elastische Rückstoßatomspektrometrie
leichter Elemente mit Subnanometer-
Tiefenauflösung**

HZDR

 **HELMHOLTZ**
| ZENTRUM DRESDEN
| ROSSENDORF

Elastische Rückstoßatomspektrometrie leichter Elemente mit Subnanometer-Tiefenauflösung

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

Doctor rerum naturalium
(Dr. rer. nat.)

vorgelegt von

Marcel Kosmata

geboren am 13.10.1981 in Hoyerswerda

Fachrichtung Physik
Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften
der Technischen Universität Dresden

2011

1. Gutachter: Prof. Dr. W. Möller

2. Gutachter: Prof. Dr. C. Ronning

Datum des Einreichens der Arbeit: 30.06.2011

Kurzfassung

In der vorliegenden Arbeit wird erstmals das QQDS-Magnetspektrometer für die höchstauflösende Ionenstrahlanalytik leichter Elemente am Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf umfassend vorgestellt. Zusätzlich werden sowohl alle auf die Analytik Einfluss nehmenden Parameter untersucht als auch Methoden und Modelle vorgestellt, wie deren Einfluss vermieden oder rechnerisch kompensiert werden kann.

Die Schwerpunkte dieser Arbeit gliedern sich in fünf Bereiche.

Der Erste ist der Aufbau und die Inbetriebnahme des QQDS-Magnetspektrometers, der zugehörige Streukammer mit allen Peripheriegeräten und des eigens für die höchstauflösende elastische Rückstoßanalyse entwickelten Detektors. Sowohl das umgebaute Spektrometer als auch der im Rahmen dieser Arbeit gebaute Detektor wurden speziell an experimentelle Bedingungen für die höchstauflösende Ionenstrahlanalytik leichter Elemente angepasst und erstmalig auf einen routinemäßigen Einsatz hin getestet. Der Detektor besteht aus zwei Komponenten. Zum einen befindet sich am hinteren Ende des Detektors eine Bragg-Ionisationskammer, die zur Teilchenidentifikation genutzt wird. Zum anderen dient ein Proportionalzähler, der eine Hochwiderstandsanode besitzt und direkt hinter dem Eintrittsfenster montiert ist, zur Teilchenpositionsbestimmung im Detektor.

Die folgenden zwei Schwerpunkte beinhalten grundlegende Untersuchungen zur Ionen-Festkörper-Wechselwirkung. Durch die Verwendung eines Magnetspektrometers ist die Messung der Ladungszustandsverteilung der herausgestreuten Teilchen direkt nach einem binären Stoß sowohl möglich als auch für die Analyse notwendig. Aus diesem Grund werden zum einen die Ladungszustände gemessen und zum anderen mit existierenden Modellen verglichen. Außerdem wird ein eigens entwickeltes Modell vorgestellt und erstmals im Rahmen dieser Arbeit angewendet, welches den ladungszustandsabhängigen Energieverlust bei der Tiefenprofilierung berücksichtigt. Es wird gezeigt, dass ohne die Anwendung dieses Modells die Tiefenprofile nicht mit den quantitativen Messungen mittels konventioneller Ionenstrahlanalytikmethoden und mit der Dickenmessung mittels Transmissionselektronenmikroskopie übereinstimmen, und damit falsche Werte liefern würden. Der zweite für die Thematik wesentliche Aspekt der Ionen-Festkörper-Wechselwirkung, sind die Probenschäden und -modifikationen, die während einer Schwerionenbestrahlung auftreten. Dabei wird gezeigt, dass bei den hier verwendeten Energien sowohl elektronisches Sputtern als auch elektronisch verursachtes Grenzflächendurchmischen eintreten. Das elektronische Sputtern kann durch geeignete Strahlparameter für die meisten Proben ausreichend minimiert werden. Dagegen ist der Einfluss der Grenzflächendurchmischung meist signifikant, so dass dieser analysiert und in der Auswertung berücksichtigt werden muss. Schlussfolgernd aus diesen Untersuchungen ergibt sich für die höchstauflösende Ionenstrahlanalytik leichter Elemente am Rossendorfer 5-MV Tandembeschleuniger, dass die geeignetsten Primärionen Chlor mit einer Energie von 20 MeV sind. In Einzelfällen, wie zum Beispiel der Analyse von Bor, muss die Energie

jedoch auf 6,5 MeV reduziert werden, um das elektronische Sputtern bei der notwendigen Fluenz unterhalb der Nachweisgrenze zu halten.

Der vierte Schwerpunkt ist die Untersuchung von sowohl qualitativen als auch quantitativen Einflüssen bestimmter Probeneigenschaften, wie beispielsweise Oberflächenrauheit, auf die Form des gemessenen Energiespektrums beziehungsweise auf das analysierte Tiefenprofil. Die Kenntnis der Rauheit einer Probe an der Oberfläche und an den Grenzflächen ist für die Analytik unabdingbar. Als Resultat der genannten Betrachtungen werden die Einflüsse von Probeneigenschaften und Ionen-Festkörper-Wechselwirkungen auf die Energie- beziehungsweise Tiefenauflösung des Gesamtsystems beschrieben, berechnet und mit der konventionellen Ionenstrahlanalytik verglichen. Die Möglichkeiten der höchstauflösenden Ionenstrahlanalytik werden zudem mit den von anderen Gruppen veröffentlichten Komplementärmethoden gegenübergestellt.

Der fünfte und letzte Schwerpunkt ist die Analytik leichter Elemente in ultradünnen Schichten unter Berücksichtigung aller in dieser Arbeit vorgestellten Modelle, wie die Reduzierung des Einflusses von Strahlschäden oder die Quantifizierung der Elemente im dynamischen Ladungszustandsnichtgleichgewicht. Es wird die Tiefenprofilierung von Mehrschichtsystemen, bestehend aus SiO_2 - $\text{Si}_3\text{N}_4\text{O}_x$ - SiO_2 auf Silizium, von Ultra-Shallow-Junction Bor-Implantationsprofilen und von ultradünnen Oxidschichten, wie zum Beispiel High-k-Materialien, demonstriert.

Abstract

In this thesis the QQDS magnetic spectrometer that is used for high resolution ion beam analysis (IBA) of light elements at the Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf is presented for the first time. In addition all parameters are investigated that influence the analysis. Methods and models are presented with which the effects can be minimised or calculated.

There are five focal points of this thesis.

The first point is the construction and commissioning of the QQDS magnetic spectrometer, the corresponding scattering chamber with all the peripherals and the detector, which is specially developed for high resolution elastic recoil detection. Both the reconstructed spectrometer and the detector were adapted to the specific experimental conditions needed for high-resolution Ion beam analysis of light elements and tested for routine practice. The detector consists of two components. At the back end of the detector a Bragg ionization chamber is mounted, which is used for the particle identification. At the front end, directly behind the entrance window a proportional counter is mounted. This proportional counter includes a high-resistance anode. Thus, the position of the particles is determined in the detector.

The following two points concern fundamental studies of ion-solid interaction. By using a magnetic spectrometer the charge state distribution of the particles scattered from the sample after a binary collision is both possible and necessary for the analysis. For this reason the charge states are measured and compared with existing models. In addition, a model is developed that takes into account the charge state dependent energy loss. It is shown that without the application of this model the depth profiles do not correspond with the quantitative measurements by conventional IBA methods and with the thickness obtained by transmission electron microscopy. The second fundamental ion-solid interaction is the damage and the modification of the sample that occurs during heavy ion irradiation. It is shown that the used energies occur both electronic sputtering and electronically induced interface mixing. Electronic sputtering is minimised by using optimised beam parameters. For most samples the effect is below the detection limit for a fluence sufficient for the analysis. However, the influence of interface mixing is so strong that it has to be included in the analysis of the layers of the depth profiles. It is concluded from these studies that at the Rossendorf 5 MV tandem accelerator chlorine ions with an energy of 20 MeV deliver the best results. In some cases, such as the analysis of boron, the energy must be reduced to 6.5 MeV in order to retain the electronic sputtering below the detection limit.

The fourth focus is the study of the influence of specific sample properties, such as surface roughness, on the shape of a measured energy spectra and respectively on the analysed depth profile. It is shown that knowledge of the roughness of a sample at the surface and at the interfaces for the analysis is needed. In addition, the contribution parameters limiting the depth resolution are calculated and compared with the

conventional ion beam analysis. Finally, a comparison is made between the high-resolution ion beam analysis and complementary methods published by other research groups.

The fifth and last focus is the analysis of light elements in ultra thin layers. All models presented in this thesis to reduce the influence of beam damage are taken into account. The dynamic non-equilibrium charge state is also included for the quantification of elements. Depth profiling of multilayer systems is demonstrated for systems consisting of $\text{SiO}_2\text{-Si}_3\text{N}_4\text{O}_x\text{-SiO}_2$ on silicon, boron implantation profiles for ultra shallow junctions and ultra thin oxide layers, such as used as high-k materials.

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	i
Abstract	iii
Inhaltsverzeichnis	v
Motivation	1
Physikalische Grundlagen	5
1.1 Kinematik	5
1.2 Wirkungsquerschnitte	7
1.3 Energieverlust von Ionen in Materie.....	9
1.4 RBS und ERD als Ionenstrahlanalytische Methoden	12
Aufbau der Messapparatur	15
2.1 Strahlführung.....	15
2.1.1 Primärionenbeschleuniger	15
2.1.2 Strahlführung und -diagnostik	16
2.2 UHV-Streukammer	17
2.2.1 Restgasanalysator	18
2.2.2 Kühlfalle	19
2.2.3 Fünf-Achsen-Präzisionsmanipulator	19
2.2.4 Probenschleuse.....	20
2.2.5 Proben temperaturmessung	21
2.3 Strahlstrommessung – Flügelrad	21
2.4 Das QQDS Magnetspektrometer für höchstauflösende ERD.....	23
2.4.1 Höchstauflösende Teilchenspektrometer – Überblick.....	23
2.4.2 Das QQDS-Magnetspektrometer	25
2.4.3 Eigenschaften des Magnetspektrometers QQDS	26
2.4.4 Ionenstrahloptik.....	26
2.4.5 Berechnung der QQDS-Magnetfelder	29
2.4.6 Experimentelle Kontrolle der berechneten Magnetfelder	31
2.4.7 Kinematische Korrektur mit Hilfe der Quadrupole	32
2.5 Fokalebenendetektor für höchstauflösende ERD	32
2.5.1 Allgemeine Anforderungen an einen höchstauflösenden ERD- Detektor.....	32
2.5.2 Aufbau des QQDS-Fokalebenendetektors.....	34
2.6 Datenverarbeitung.....	41
2.6.1 Online-Datenerfassung.....	41
2.6.2 Datenerfassung und Koinzidenzzeit	42

2.6.3 Erzeugung der Energiespektren.....	43
2.7 Energiekalibrierung	44
Ladungszustandsverteilung	45
3.1 Überblick.....	45
3.2 Theoretische Grundlagen zur Ladungszustandsverteilung	47
3.2.1 Ladungszustandsfluktuationen	47
3.2.2 Das dynamische Ladungszustandsgleichgewicht.....	49
3.2.3 Semiempirisches Modell der Ladungszustandsreraxation	51
3.2.4 Der effektive Ladungszustand und die Abschirmlänge.....	53
3.2.5 Energieverlust im Nichtgleichgewicht	56
3.3 Experimentelle Untersuchungen zur Ladungszustandsverteilung.....	58
3.3.1 Ladungszustandsverteilung im dynamischen Gleichgewicht.....	58
3.3.2 Ladungszustandsverteilung im dynamischen Nichtgleichgewicht	62
Schädigung durch den Primärstrahl	67
4.1 Überblick und theoretische Grundlagen.....	67
4.1.1 Änderung der Materialstruktur auf mesoskopischer Skala	69
4.1.2 Primärionenimplantation	70
4.1.3 Desorption von volatilen Elementen	70
4.1.4 Elementmischung an Grenzflächen.....	71
4.1.5 Oberflächenzerstäubung und ioneninduzierte Diffusion	73
4.2 Experimentelle Untersuchungen an einer dünnen Siliziumdioxidschicht	74
4.2.1 Sauerstoffmischung an der Grenzfläche zum Siliziumsubstrat	74
4.2.2 Sauerstoffverlust während der Schwerionenbestrahlung.....	77
4.2.3 Sauerstoffverlust bei verschiedenen Primärion	79
4.2.4 Sauerstoffverlust bei Variation des Einfallswinkels	80
4.2.5 Sauerstoffverlustes bei Variation der Primärionenenergie.....	81
4.3 Strahlparameter am QQDS.....	83
4.3.1 Gewählte Strahlparameter zur Reduzierung der Probenschädigung ..	83
4.3.2 Probescan zur Reduzierung der Fluenz	83
ERD mit Tiefenaufösungen im Subnanometerbereich	85
5.1 Referenzprobe.....	85
5.2 Analyse der Tiefenprofile	86
5.2.1 Einfluss der Ladungszustandsverteilung nach der Streuung	86
5.2.2 Einfluss des ladungszustandsabhängigen Energieverlustes	87
5.2.3 Einfluss von Oberflächenrauheit.....	88
5.2.4 Einfluss der Grenzflächenrauheit.....	90
5.2.5 Einfluss der Zwischenschichten an Grenzflächen.....	90
5.2.6 Einfluss von primärstrahlinduzierter Probenschädigung	91
5.3 Diskussion der Tiefenauflösung	92
5.3.1 Tiefenauf Lösungsbegrenzende Parameter	92
5.3.2 Berechnung der Tiefenauf Lösung	101
5.3.3 Vergleich der höchstauflösenden mit der konventioneller ERD	102
5.3.4 Vergleich der höchstauflösenden Ionenstrahlanalytik mit anderen Tiefenprofilierungsmethoden	104

Anwendungsbeispiele für höchstauflösende ERD	107
6.1 SiO ₂ -Si ₃ N ₄ O _x -SiO ₂ -Multischicht.....	107
6.2 Ultra-Shallow-Junction Bor-Implantationsprofile.....	109
6.3 High-K Materialien und ultradünne Oxidschichten.....	110
Zusammenfassung und Ausblick	113
7.1 Zusammenfassung.....	113
7.2 Ausblick.....	113
Maß- und Datenblatt des Magnetspektrometers QQDS	I
A.1 Dipolmagnet.....	I
A.2 Quadrupole	I
A.3 Sextupol	II
A.4 Abstände zwischen den Magneten	II
Abbildungsverzeichnis	III
Tabellenverzeichnis	VII
Literaturverzeichnis	IX

Motivation

In vielen Bereichen der modernen Technologien werden Materialien mit genau definierten *Volumen- und Oberflächeneigenschaften* benötigt. Oftmals ist diese Forderung bei Verwendung eines homogenen Materials nicht zu erfüllen. Während für das Volumen Eigenschaften wie mechanische Festigkeit, elektrische Leitfähigkeit, Wärmeleitvermögen, optischer Brechungsindex oder Temperaturbeständigkeit im Vordergrund stehen, werden an die Oberfläche oft andere Anforderungen gestellt. Dazu gehören neben Rauheit, Polierbarkeit, Härte, Korrosionsbeständigkeit oder elektrochemischem Potential auch die elektronischen, magnetischen und optischen Eigenschaften. Dies wird durch Aufbringen dünner Schichten, deren Material und Oberfläche die gewünschten Eigenschaften aufweisen, oder durch Modifikation einer dünnen Oberflächenschicht des Grundmaterials erreicht.

Beschichtungen wurden in der Vergangenheit auf vielfältige Weise realisiert. Die Techniken reichen vom Lackauftrag über die chemische Abscheidung, die Galvanik bis zum Aufdampfen oder Aufputtern (Katodenzerstäubung) im Vakuum [VEN00]. Die Schichtdicken lagen dabei im Bereich oberhalb von 1 μm . Gleichzeitig mit der Entwicklung der Abscheideverfahren für diese dünnen Schichten wurden hierfür auch Mess- und Prüfverfahren entwickelt. Ziel dieser Verfahren der Dünnschichtanalytik war ein möglichst genaues Verständnis dafür, wie sich Prozessparameter bei der Schichtabscheidung auf die interessierenden Eigenschaften der Schicht auswirken. Insbesondere mit der Entwicklung der Halbleiterelektronik mit den hochkomplexen integrierten Schaltkreisen wurden Analyseverfahren notwendig, die eine umfassende Charakterisierung praktisch aller Eigenschaften der dünnen Schichten und ihrer Oberflächen ermöglichten. Viele der physikalischen Grundlagen werden in [FEL⁺86] behandelt, während in [BUB⁺02] moderne Instrumentierung für viele dieser Verfahren und typische Anwendungen vorgestellt werden.

Die notwendige Information über die Eigenschaften der Schichten und Oberflächen erhält man im Allgemeinen nur durch den Einsatz mehrerer komplementärer *Analysemethoden* [VIC⁺09, OCO⁺03, BRU⁺92]. Auf Elektronen- oder Röntgendiffraktion [BIR05] beruhende Methoden wie die Beugung niederenergetischer Elektronen an Oberflächen LEED (engl.: low energy electron diffraction), die Beugung hochenergetischer Elektronen bei Reflexion RHEED (engl.: reflection high energy electron diffraction), die Transmissionselektronenmikroskopie TEM [WIL⁺96] oder die Röntgenbeugung XRD (engl.: X-ray diffraction) liefern Aussagen über die Struktur und Strukturdefekte. Für die Elementanalyse werden beispielsweise die Sekundärionen-Massenspektrometrie SIMS [WAT⁺06, MAG⁺82, AMS⁺05], die Atomemissionsspektrometrie AES, die energiedispersive Röntgenspektroskopie EDX [GOL⁺02], die Totalreflexions-Röntgenfluoreszenzanalyse TXRF, die Proton-induzierte Röntgenemission PIXE, die niederenergetische Ionenstreuungspektroskopie LEIS (engl.: low energy ion scattering), die mittlereenergetische Ionenstreuungspektroskopie MEIS, die Rutherford-Rückstreuungspektrometrie RBS [GEI⁺09, RUT11], die Elastische Rückstoßanalyse ERD [LEC⁺76] sowie die Nuklearreaktionsanalyse NRA eingesetzt. Aussagen

zu chemischen Bindungen und elektronische Eigenschaften der ersten Atomlagen eines Festkörpers erhält man mit Methoden der Photoelektronenspektrometrie, wie der AES, der Röntgenphotoelektronenspektroskopie XPS, der Ultraviolett-Photoelektronenspektroskopie UPS, der Elektronenenergieverlustspektroskopie EELS und der Infrarot-Spektrometrie. Mit den verschiedenen Varianten der Rastersondenmikroskopie (beispielsweise Rasterkraft- [BIN⁺82], oder Rastertunnelmikroskopie [BIN⁺86]) lassen sich mit atomarer lateraler Auflösung durch orts aufgelöste Messung des Tunnelstromes, der van-der-Waals-Kräfte oder der magnetischen Kraft die Oberflächentopografie, atomare Strukturen (Gitter-Rekonstruktion), Materialkontraste oder magnetische Strukturen darstellen [HAM⁺91, WIE94, BIN⁺87, SCH49].

Insbesondere die Entwicklung der *Mikroelektronik* in den letzten Jahrzehnten mit dem rasanten Anstieg der Integrationsdichte von Schaltkreisen führte zu einer immer höheren Anzahl von Transistoren pro Flächeneinheit, wie in Moore's law vorhergesagt [HAM99]. Mit der Verkleinerung der lateralen Transistorstrukturen war es notwendig, immer dünnere Schichten und neuartige Materialien für die Isolator- oder Metallisierungsschichten einzusetzen. Um zum Beispiel bei einer komplementären Metall-Oxid-Halbleiter-Schaltung (CMOS; engl.: Complementary Metal Oxide Semiconductor) bei schrumpfender Gateoxid-Fläche deren notwendige Kapazität zu erhalten, muss die bisher verwendete SiO₂- Gateoxidschicht immer dünner werden. Diese Verkleinerung der Schichtdicke hat Grenzen, die durch den Anstieg des Tunnelstromes gegeben sind. Deswegen müssen andere Gateoxidmaterialien mit wesentlich höherer Dielektrizitätszahl als die $\epsilon_r = 3,9$ für SiO₂ (sogenannte high-k Materialien) eingesetzt werden. Bei gleicher Kapazität pro Fläche können dann größere Schichtdicken (bei gleichem Tunnelstrom) genutzt werden [WIL⁺01]. Aussichtsreiche Oxide für diesen Zweck sind beispielsweise HfO₂ [COP⁺04], ZrO₂ [COP⁺00] oder La₂O₃ [COP⁺01]. Andere wie Ta₂O₅ oder TiO₂ sind thermisch nicht stabil und damit nicht kompatibel mit dem CMOS-Prozess [WIL⁺01]. Die Schichtdicken, die dabei angestrebt werden, liegen bei wenigen Nanometern. Ein weiteres wichtiges Anwendungsgebiet für Stapel ultradünner Schichten ist die Röntgenoptik [GRÖ⁺04].

Mit abnehmender Schichtdicke steigt der Einfluss von Oberflächen und Grenzflächen auf die Eigenschaften der gesamten Schicht an. Neue Depositionsverfahren wie die Atomlagenabscheidung ALD (engl.: Atomic Layer Deposition) können zum Eintrag von Kontaminationen und atomaren Transportprozessen führen, die selbst bei Reichweiten von wenigen Atomlagen unerwünschte Effekte haben. Die Charakterisierung dieser ultradünnen Schichten stellt qualitativ neue und hohe Anforderungen, wie beispielsweise eine hohe Tiefenauflösung oder niedrige Nachweisgrenzen, an die analytischen Verfahren.

Im Weiteren soll betrachtet werden, welche Beiträge die Ionenstrahlanalytik, insbesondere die elastische Ionenstreuung, zur Elementanalytik ultradünner Schichten leisten kann. Ausgenommen sollen hier explizit die Möglichkeiten der LEIS sein, die die Rückstreuung von Edelgas- oder Alkaliionen mit Energien zwischen 1 – 10 keV nutzt, da hier lediglich die ersten zwei bis drei Atomlagen und keine tiefer liegenden Elemente analysiert werden können [BRO⁺07].

Die *MEIS*-Technik ist eine Sonderform der RBS, bei der die rückgestreuten leichten Ionen (H und He) mit Energien von typisch 100 keV mit hoher Energie- und

Winkelauflösung detektiert werden. Dabei können gleichzeitig die Tiefenverteilung der Elemente und aus den sogenannten blocking patterns die Kristallstruktur der obersten Atomlagen bestimmt werden [BAI⁺01, GUS⁺00]. Der Streuwirkungsquerschnitt ist bei diesen Energien noch stark beeinflusst durch die Elektronenabschirmung des Coulombpotentials des Kernes. Dieser Wirkungsquerschnitt lässt sich aber hinreichend gut berechnen, so dass eine quantitative Analytik möglich ist. MEIS hat eine sehr hohe Tiefenauflösung in Oberflächennähe, die aber mit zunehmender Tiefe durch das starke Energiestraggling [CHU76] sehr schnell abnimmt. Bei höheren Energien, das heißt bei Energien im unteren MeV-Bereich, in dem auch die RBS und ERD betrieben wird, ist dieser Effekt deutlich geringer. Bei diesen Methoden kann somit auch in tieferen Regionen eine ausreichende Tiefenauflösung erzielt werden. Jedoch sind die elektrostatischen Toroidspektrometer, die bei der MEIS die hohe Energieauflösung liefern, für diese Energien nicht geeignet.

Die konventionellen Methoden der Ionenstreuung erlauben insbesondere bei Ionenenergien im MeV-Bereich (RBS, ERD) eine quantitative, standardfreie Bestimmung der Elementzusammensetzung dünner Schichten mit einer Unsicherheit im unteren Prozentbereich [AMS⁺05]. Deshalb hat sich die RBS [GEI09, RUT11] seit langem zur Messung von Tiefenverteilungen schwerer Elemente als Standard-Analysemethode für dünne Schichten etabliert. Zunehmend wird auch die ERD [LEC⁺76] eingesetzt, um die Tiefenverteilung leichter Elemente oder Isotope quantitativ zu bestimmen. Die physikalischen Grundlagen beider Methoden werden in den folgenden Abschnitten behandelt.

Beim Einsatz von einfachen Teilchenspektrometern (Halbleiterdetektoren, Ionisationskammern, Flugzeitspektrometer) zur Messung der Energieverteilung der gestreuten Ionen beziehungsweise der Rückstoßionen beträgt die erreichbare Tiefenauflösung circa 5 nm. Um bei Energien oberhalb von 500 keV Sub-Nanometer-Tiefenauflösungen zu erzielen, müssen höchstauflösende Teilchenspektrometer eingesetzt werden (Bsp.: [POL⁺09, AND⁺06, ICH⁺05, GRÖ⁺04, KLE03, CAR98, LAN⁺98, ARN⁺96, KIM⁺96, DOL⁺92, END⁺92]). Der Aufbau und der Betrieb diese Spektrometer sind jedoch sehr aufwendig, weshalb Geräte dieser Art nur in wenigen Laboratorien verfügbar sind.

Es soll hier noch einmal darauf hingewiesen werden, dass die Hochenergie-Ionenstreuung die unikale Eigenschaft besitzt, dass nur atomare Zweierstöße eine Rolle spielen. Für die Messung von Tiefenverteilungen wird die Schicht nicht abgetragen oder signifikant verändert, so dass atomare Transportprozesse in-situ gemessen werden können, wie z. B. bei Temperprozessen. Im Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf wurde ein Magnetspektrometer vom Browne-Buechner-Typ aufgebaut, der seit mehreren Jahren für die höchstauflösende RBS eingesetzt wird [VIE10, GRÖ⁺04, KLE03]. Dieses Spektrometer ist, wie in diese Arbeit gezeigt wird, für ERD wenig geeignet. Für die ERD mit höchster Tiefenauflösung wurde deshalb im Rahmen dieser Arbeit ein neues Magnetspektrometer entwickelt und für die Analyse leichter Elemente eingesetzt.

Kapitel 1

Physikalische Grundlagen

Die Rutherford Rückstreu-Spektrometrie (RBS) und die Elastische Rückstoßteilchenanalyse (ERD) sind die für diese Arbeit genutzten Verfahren und werden aus diesem Grund in den nachfolgenden Abschnitten genauer beschrieben.

Die RBS und die ERD sind identisch, was ihre physikalischen Grundlagen betrifft. In beiden Fällen handelt es sich um elastische Stöße zweier Atomkerne, dem des schnellen Ions und dem eines Atoms der zu untersuchenden Schicht [BOH48]. Die Inzidenzenergie der Ionen kann im Allgemeinen so gewählt werden, dass für die Wechselwirkung das elektrostatische Coulombpotential der Atomkerne dominiert und die Abschirmung durch die Elektronen einerseits und die Einflüsse der reinen Kernkraft andererseits nur geringe Korrekturen erfordert.

Wegen der einfachen, gut verstandenen und gut beschreibbaren physikalischen Grundprozesse ermöglichen RBS und ERD per se quantitative und genaue Elementanalysen dünner Schichten.

Es sind nur drei physikalische Prozesse zu betrachten:

1. die nichtrelativistische Zweiteilchen-Stoßkinematik,
2. der Wirkungsquerschnitt als Maß für die Wahrscheinlichkeit eines Stoßprozesses und
3. der spezifische Energieverlust von energetischen Ionen in Materie.

1.1 Kinematik

Die Kinematik der beiden am Stoß beteiligten Atomkerne mit den Massen M_p und M_r ist gegeben durch die Erhaltung von kinetischer Energie und Gesamtimpuls. Im Laborsystem, das wegen der besseren Anschaulichkeit im Weiteren benutzt wird, überträgt ein schnelles Teilchen mit der Masse M_p und der Energie E_0 , das mit dem Stoßparameter b auf einen als ruhend betrachteten Atomkern zufliegt, beim Stoß auf diesen die Energie E_r und den Impuls $M_r \cdot v_r$ und wird dabei um den Winkel θ abgelenkt. Dieser Streuprozess ist in Abbildung 1.1 schematisch dargestellt.

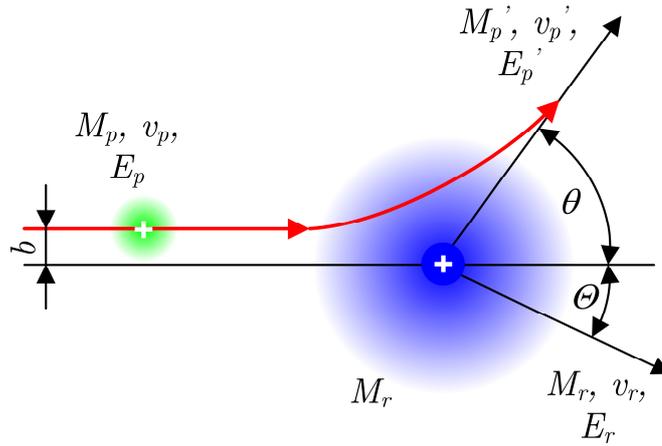


Abbildung 1.1: Schematische Darstellung einer elastischen Streuung eines Projektils an einem Targetatom

Die Erhaltung der kinetischen Energie liefert hierbei:

$$E_0 = E_p' + E_r \quad (1.1)$$

und die Impulserhaltung

$$M_p' v_p' \cos \theta + M_r v_r \cos \Theta = M_p v_p \quad \text{und} \quad M_p' v_p' \sin \theta - M_r v_r \sin \Theta = 0. \quad (1.2)$$

Für die Energie des gestreuten Teilchens ergibt sich damit

$$E_p^{\pm} = k_{RBS}^{\pm} \cdot E_p = \left(\frac{M_p \cos \theta \pm \sqrt{M_r^2 - M_p^2 \sin^2 \theta}}{M_p + M_r} \right)^2 \cdot E_p, \quad (1.3)$$

wobei die Energie E_p^+ nur existiert, wenn M_p größer als M_r ist.

Für die Energie des Rückstoßkernes ergibt sich

$$E_r = k_{ERD} \cdot E_p = 4 \cdot \frac{M_p \cdot M_r}{(M_p + M_r)^2} \cdot \cos^2 \Theta \cdot E_p \quad (1.4)$$

Die beiden Faktoren k_{RBS} und k_{ERD} werden kinematische Faktoren genannt. In Abbildung 1.2 a) sind die kinematischen Faktoren k_{RBS} für C-Ionen bei Streuung an unterschiedlichen Massen M_r und k_{ERD} für Cl-Ionen mit unterschiedlichen Rückstoßatomen über dem Streuwinkel aufgetragen.

In Abbildung 1.2 a) sind bei der Streuung des Projektils zwei charakteristische Merkmale zu erkennen. Zum ersten besitzt die Massendispersion dk_{RBS} / dM_p , also der Unterschied der k_{RBS} -Faktoren bei unterschiedlichen Inzedenzionsmassen, bei einem Streuwinkel von 180° einen maximalen Wert, und zum anderen besitzen die gestreuten Ionen für den Fall $M_p > M_r$ für alle Winkel θ zwei verschiedene Energien unterhalb des Grenzwinkels θ_{max} :

$$\theta_{max} = \arcsin \frac{M_r}{M_p}. \quad (1.5)$$

Betrachtet man die Kinematik für die Rückstoßatome (vgl. Abbildung 1.2 b)), so ist ersichtlich, dass diese nicht unter einem Winkel $\Theta > 90^\circ$ gestreut werden können. Bei abflachender Streugeometrie $\Theta \rightarrow 0^\circ$ steigt sowohl die Massendispersion dk_{ERD} / dM_p als auch die Energie der herausgestreuten Recoilionen.

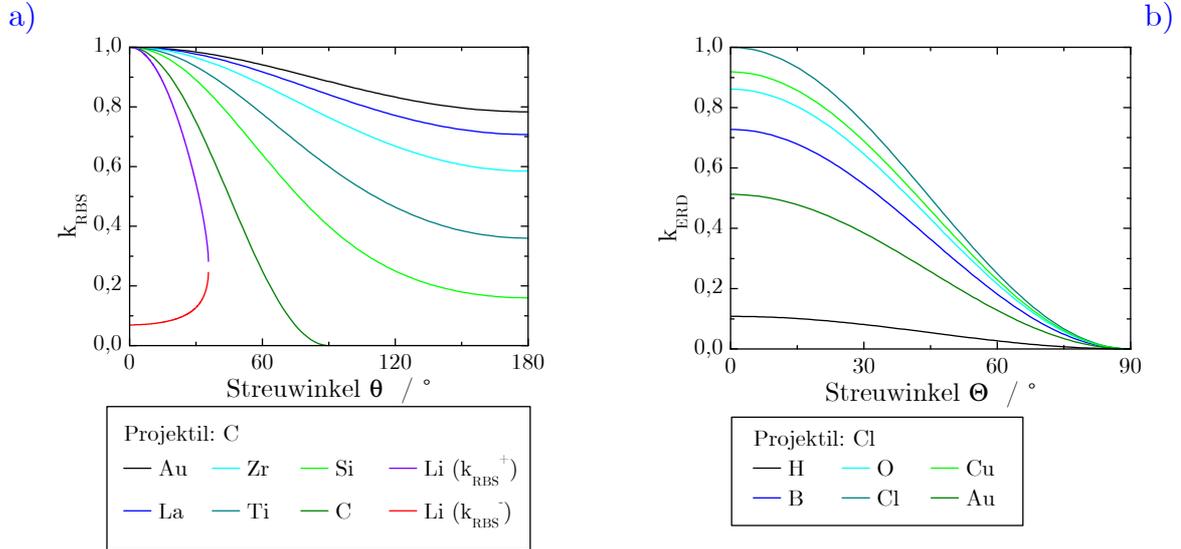


Abbildung 1.2: kinematisches Faktor als Funktion des Streuwinkels für a) RBS von Kohlenstoff und b) ERD von Chlor

1.2 Wirkungsquerschnitte

Der Wirkungsquerschnitt (WQ), ein Begriff aus der Atom-, Kern- und Teilchenphysik, ist ein Maß für die Wahrscheinlichkeit für eine bestimmte Wechselwirkung zwischen einem schnellen Teilchen und einem Targetatom. Der WQ hat die Dimension einer Fläche und transformiert den Ortsraum vor der Wechselwirkung (Anregung, Streuung, Kernreaktion) in den Winkelraum nach der Wechselwirkung.

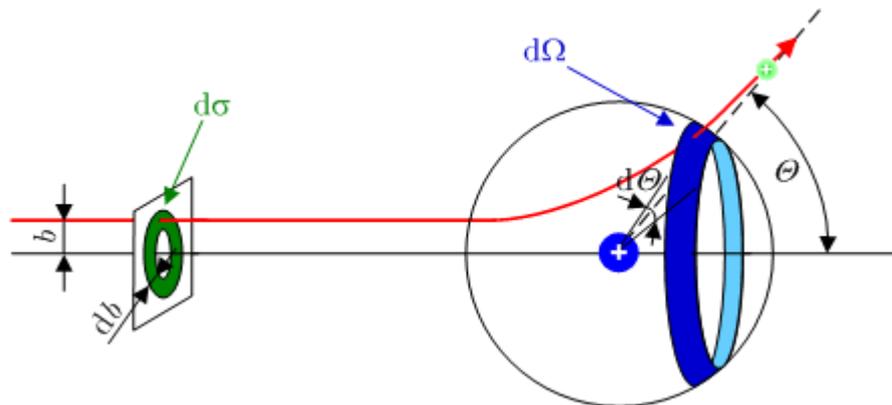


Abbildung 1.3: Graphische Veranschaulichung des differentiellen Wirkungsquerschnitts

Der differentielle WQ ist der Quotient aus dem Element der Eintrittsfläche $d\sigma = 2\pi b db$ und dem Raumwinkelelement $d\Omega = 2\pi \sin\Theta d\Theta$.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\Theta) = -\frac{b}{\sin\Theta} \frac{db}{d\Theta} \quad (1.6)$$

Das Minuszeichen zeigt an, dass bei der elastischen Streuung mit wachsendem Stoßparameter b der Streuwinkel kleiner wird. Eine graphische Veranschaulichung ist in Abbildung 1.3 dargestellt.

Das Lösen der Bewegungsgleichung im reinen Coulombpotential mit den Kernladungszahlen Z_p und Z_r für das Projektil und Targetatom in einem Abstand r

$$V_c(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_p \cdot Z_r \cdot e^2}{r} \quad (1.7)$$

ist analytisch exakt möglich und führt zur sogenannten Rutherford-Formel für den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{Rutherford, CM}} = \left(\frac{Z_p Z_r e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot 4E_{CM}} \right)^2 \cdot \frac{1}{\sin^4 \frac{\Theta_{CM}}{2}} \quad (1.8)$$

im Schwerpunktsystem (CM engl.: centre-of-mass system). Die Transformation in das Laborsystem ergibt den differentiellen WQ für das gestreute Teilchen zu

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{RBS} = \left(\frac{Z_p Z_r e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot 2E_p} \right)^2 \cdot \frac{\left(\cos\Theta \pm \sqrt{1 - \left(\frac{M_p}{M_r} \right)^2 \sin^2\Theta} \right)^2}{\sin^4\Theta \cdot \sqrt{1 - \left(\frac{M_p}{M_r} \right)^2 \sin^2\Theta}} \quad (1.9)$$

und für den Rückstoßkern

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{ERD} = \left(\frac{Z_p Z_r e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot 2E_p} \right)^2 \cdot \left(1 + \frac{M_p}{M_r} \right)^2 \cdot \frac{1}{\cos^3\Theta} \quad (1.10)$$

Beide Formeln gelten exakt nur für das reine Coulomb-Potential. Bei Energien über etwa 1 MeV / amu wird bei kleinen Stoßparametern und insbesondere bei leichten Targetatomen das Kernpotential spürbar [BOZ⁺90]. Bei deutlich geringeren Energien und größeren Stoßparametern muss die Abschirmung des Coulombpotentials des Kernes durch die Hüllenelektronen mit einem Korrekturfaktor F berücksichtigt werden:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = F(E, \Theta) \cdot \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{RBS/ERD} \quad (1.11)$$

Andersen et al. [AND⁺80] haben eine Formel für den energie- und winkelabhängigen Korrekturfaktor $F(E, \Theta)$ angegeben und experimentell verifiziert. In dieser Arbeit werden die mit dieser Formel korrigierten Wirkungsquerschnitte verwendet.

Die Kenntnis der genauen WQe erlaubt prinzipiell die Zusammensetzung der Elemente i einer sehr dünnen Schicht der Dicke dt mit der Flächendichte $N_i(M_i, Z_i) \cdot dt$ aus der Energieverteilung der in das Raumwinkelement Ω gestreuten Teilchen beziehungsweise Rückstoßteilchen zu bestimmen. Die dabei beobachteten Energiespektren sind Linienspektren. Die Energiewerte der Linien werden über die Kinematik durch die Atommassen M_i definiert und die Intensität dY_i der Linien durch den WQ und die Zahl N der Inzidenzonen.

Die jeweiligen Flächendichten

$$N_i \cdot dt = \frac{dY_i}{N \cdot \Omega \cdot \frac{d\sigma}{d\Omega_i}} \quad (1.12)$$

lassen sich somit sehr genau messen, da auch die Experimentgrößen N und Ω sehr genau (besser 1 %) bestimmt werden können. Damit ist mit Hilfe der elastischen Streuung eine ionenstrahlanalytische standardfreie Bestimmung der Zusammensetzung dünner Schichten mit einer Genauigkeit im unteren Prozentbereich möglich. Faktoren, die diese Möglichkeiten einschränken, werden weiter unten diskutiert.

1.3 Energieverlust von Ionen in Materie

Die Energie, die schnelle Teilchen in Materie verlieren, gibt die Möglichkeit, für die Streueignisse die entsprechende Energieskala in eine Tiefenskala zu transformieren und so Tiefenverteilungen der atomaren Dichten N_i zu bestimmen. Der Energieverlust schneller Teilchen in Materie soll im Folgenden betrachtet werden.

Tritt ein schnelles Ion in Materie ein, so verliert es kinetische Energie durch Wechselwirkung mit den Elektronen (elektronischer Energieverlust) und den Atomkernen des Targetmaterials (nuklearer Energieverlust). Die Summe aus beiden Energieverlusten ist der spezifische Energieverlust (engl.: stopping power).

$$S(E) = -\frac{dE}{dx} \quad (1.13)$$

Dieser ist wegen der statistischen Natur der Abbremsung definiert als der mittlere Energieverlust $\langle \delta E \rangle$ einer großen Zahl von Ionen, die eine Schicht mit der infinitesimalen Dicke dx durchlaufen. Da alle Energieverlustprozesse auf einer atomaren Skala stattfinden, ist eine Dickenangabe in Längeneinheiten nicht sinnvoll, wenn nicht zugleich die atomare Dichte des Materials angegeben wird. Deshalb wird in der Ionenstrahlanalytik besser der Bremsquerschnitt $\varepsilon(x)$ verwendet [ZIE99, SIG⁺02]. Dieser ist definiert als

$$\varepsilon(x) = -\frac{1}{N} \frac{dE}{dx} \quad (1.14)$$

und gibt somit den mittleren Energieverlust $\langle \delta E \rangle$ pro durchquerter Flächendichte N an.

In Abhängigkeit von der Energie der Ionen beziehungsweise deren Geschwindigkeit tragen verschiedene Mechanismen zum Energieverlust bei. Abbildung 1.4 zeigt den spezifischen Energieverlust von Cl-Ionen in Siliziumdioxid. Der Verlauf der Kurve für den elektronischen Energieverlust ist charakteristisch und lässt sich in drei Gebiete einteilen. Bei hohen Ionenenergien (Bereich C) ist die nukleare Bremsung wegen der kleinen Wirkungsquerschnitte bei diesen Energien vernachlässigbar. Es dominiert die Wechselwirkung mit den Elektronen, die zuerst von Bethe [Bet32] mit Hilfe der quantenmechanischen Störungstheorie beschrieben wurde und einen Ausdruck für den spezifischen Energieverlust von nackten Kernen mit der Atomladung q_p von

$$S_e \Big|_{\text{nicht relativistisch}} = 4\pi \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{Z_r \rho_r N_a}{A_t} \frac{q_p^2}{m_e v_p} \ln \left(\frac{2m_e v_p^2}{I} \right) \quad (1.15)$$

ergab. Z_r , A_r , ρ_r sind die Kernladungszahl, die molare Masse und die Dichte des Probenmaterials und q_p und v_p der Ladungszustand und die Geschwindigkeit des Projektilions. Die Konstanten ϵ_0 , N_a und m_e sind die elektrische Feldkonstante, die Avogadro-Konstante und die Ruhemasse des Elektrons. Bloch [Blo33] zeigte anschließend, dass mit einer mittleren Anregungsenergie $I \approx 10,5 \text{ [eV]} \cdot Z_t$ die Bremsung in weiten Grenzen zufriedenstellend beschrieben wird. Weitere Korrekturen von Barkas et al. [BAR⁺63] und Andersen et al. [AND⁺69] mit einem z^3 -Term und von Bloch [BLO33] mit einem z^4 -Term brachten hierfür weitere Verbesserungen [LIN76].

Für den niedrigen Energiebereich (Bereich A in Abbildung 1.4), bei dem die Projektilgeschwindigkeit v_p kleiner ist als die Bohrsche Geschwindigkeit v_0 eines Elektrons in dem 1s-Orbital im Wasserstoffatom, wird die Annahme gemacht, dass die Wechselwirkung des Projektils mit einem Elektronengas in Form eines viskosen Mediums stattfindet. Lindhard und Scharff [Lin61] leiteten daraus für diesen Energiebereich folgende Näherung für den spezifischen elektronischen Energieverlust ab:

$$S_e \Big|_{LSS} = \xi_e \cdot 8\pi \cdot e^2 \cdot a_0 \frac{Z_p \cdot Z_t}{\left(Z_p^{2/3} + Z_t^{2/3} \right)^{3/2}} \cdot \frac{v_p}{v_0} \quad (1.16)$$

In dieser Gleichung ist $a_0 = (4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot \hbar) / (m_e \cdot e^2)$ der Bohrsche Radius und ξ_e kann mit $Z_p^{1/6}$ abgeschätzt werden. Die Konstanten ϵ_0 , \hbar und m_e sind die elektrische Feldkonstante, das reduzierte plancksche Wirkungsquantum und die Ruhemasse des Elektrons.

Der elektronische Energieverlust steigt somit für niedrige Energien proportional zur Projektilgeschwindigkeit v_p und fällt bei großen Energien mit $1 / v_p^2$ ab.

Bei den spezifischen Ionenenergien zwischen 0,1 und 1 MeV / amu, bei dem die Projektilgeschwindigkeiten größer als v_0 aber kleiner als das 3-fache der Fermigeschwindigkeit v_f sind, die wie oben erläutert für die Ionenstrahlanalytik bevorzugt genutzt werden, ist das Projektil nicht vollständig ionisiert. Damit ist die grundlegende Annahme für das Bethe-Bloch-Modell, einer vollständigen Ionisierung, nicht mehr erfüllt. Die theoretische Beschreibung der Bremsung in diesem Energiebereich (Bereich B in der Abbildung 1.4) ist mit keinem geschlossenen Modell möglich.

Varelas und Biersack [Val70] beschreiben diesen Bereich als harmonisches Mittel aus hochenergetischem und niederenergetischem spezifischen Energieverlust:

$$\frac{1}{S_e^{v_0 \leq v_p \leq 3v_f}} = \frac{1}{S_e^{\text{niederenergetisch}}} + \frac{1}{S_e^{\text{hochenergetisch}}} \quad (1.17)$$

Als Grundlage für den Bereich niedriger Energie wird oft die Theorie von Lindhard und Scharff [Lin61] und für den Bereich hoher Energie die Formel von Bethe und Bloch mit Korrekturfaktoren verwendet [Eck91]. Mit Hilfe der Parameter a_1 bis a_8 wird der elektronische Energieverlust für den nieder- und hochenergetischen Bereich von Protonen gemäß [ZIE⁺08] wie folgt approximiert:

$$S_e^{\text{niederenergetisch}} = a_1 \left(\frac{E_p}{M_p} \right)^{a_2} + a_3 \left(\frac{E_p}{M_p} \right)^{a_4} \quad (1.18)$$

$$S_e^{\text{hochenergetisch}} = a_5 \frac{\ln \left(a_7 \frac{M_p}{E_p} + a_8 \frac{M_p}{E_p} \right)}{\left(\frac{M_p}{E_p} \right)^{a_6}} \quad (1.19)$$

Da diese Berechnungen ebenfalls nur für vollständig ionisierte Projektile gelten, führte Northcliffe [Nor60] das Konzept der effektiven Ladung q_{eff} ein. Hiermit können die Berechnungen für Protonen auf schwerere Ionen mit gleicher Geschwindigkeit, die sich im Ladungszustandgleichgewicht befinden, übertragen werden:

$$S_e^{\text{ion}}(v_p) = S_e^{\text{Proton}}(v_p) \cdot q_{\text{eff}}^2(v_p) \quad (1.20)$$

Mit diesen semiempirischen Modellen und durch ständige Anpassung der Parameter mit zuverlässigen experimentellen Werten, stehen Daten für die Bremsquerschnitte mit guter Genauigkeit zur Verfügung [ZIE⁺10, PAU⁺02, PAU⁺01].

Bei kleinen Ionenenergien unterhalb von 100 keV/amu trägt die nukleare Bremsung zum spezifischen Energieverlust wesentlich bei und dominiert mit abnehmender Energie (vgl. Abbildung 1.4).

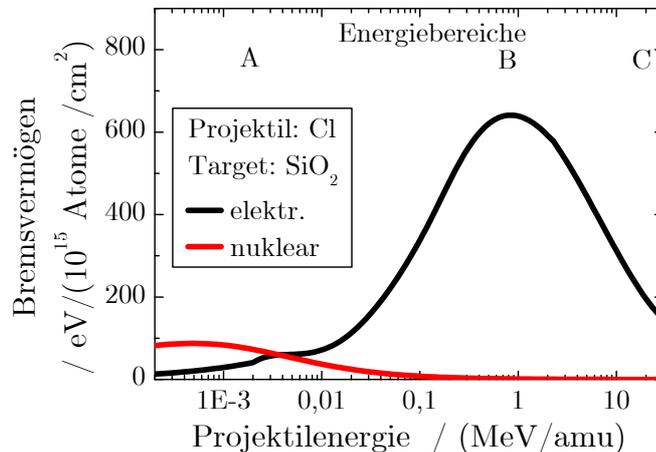


Abbildung 1.4: Bremsquerschnitt von Chlor in SiO₂

Ursachen des nuklearen Energieverlustes sind elastische Stöße der Projektile am abgeschirmten Coulombpotential der Substratatomkerne. Bei großen Stoßparametern wechselwirkt das Projektil nicht mit dem Coulombpotential einer Punktladung sondern mit einem durch die gebundenen Elektronen in der Atomhülle abgeschirmtem Kernpotential. Somit ist zur Berechnung des nuklearen Energieverlustes die Kenntnis der abgeschirmten Potentiale notwendig. Das Potential $V(r)$ eines Atoms kann mittels Separationsansatz durch das kugelsymmetrische Coulombpotential $V_c(r)$ (vgl. Gleichung (1.7)) und eine Abschirmfunktion $\Phi(r)$ beschrieben werden:

$$V(r) = V_c(r) \cdot \Phi(r) \quad (1.21)$$

Die Abschirmfunktion beinhaltet alle Schaleneffekte der Elektronen, deren Bahnradius kleiner als r ist. Mittels theoretischer und semiempirischer Rechnungen wurde eine Vielzahl von möglichen Atompotentialen und Abschirmfunktionen veröffentlicht, wie zum Beispiel von Bohr [Boh48], Thomas-Fermi [Som32], Molière [Mol47], Lens-Jensen [Len32] oder Ziegler-Biersack-Littmark [Zie85]. Konsequenzen dieser Wechselwirkungsprozesse sind die Erzeugung von Punktdefekten (Versetzung, Fehlstellen, Frenkel-Paare) sowie Stoßkaskaden, aus denen ausgedehnte Defekte entstehen können. Mit Hilfe dieser Atompotentiale und der Energie-, Impuls- und Drehimpulserhaltung lässt sich das Streuproblem klassisch lösen.

Im Energiebereich, der für RBS und ERD genutzt wird, ist die nukleare Bremsung für den Gesamtenergieverlust vernachlässigbar. Da aber bei den Stößen kinetische Energie auf die Targetatome übertragen werden kann, die weit über der Verlagerungsenergie der Atome hinausgeht und zu Stoßkaskaden führen kann, ist die nukleare Bremsung für Strahlenschäden im Target während der Analyse verantwortlich. Außerdem führen diese Stoßkaskaden zu möglichen Veränderungen der Tiefenverteilung der Elemente. Diese Aspekte werden im Detail im Kapitel 4 diskutiert. Dort wird gezeigt, dass der elektronische Energieverlust ebenfalls einen nicht zu vernachlässigenden Strahlschaden und auch eine Veränderung der Tiefenverteilung produziert.

1.4 RBS und ERD als Ionenstrahlanalytische Methoden

Die **Rutherford-RückstreuSpektrometrie** RBS (engl.: Rutherford Backscattering Spectrometry) ist das älteste Verfahren der Ionenstrahlanalyse zur Untersuchung oberflächennaher dünner Schichten.

Hierzu wird ein monoenergetischer, gut kollimierter Strahl von leichten Ionen, meist He-Ionen, seltener Protonen oder Li-Ionen, auf die zu analysierende Probe, das Target, gelenkt. Mit einem Teilchendetektor unter möglichst großem Streuwinkel bezüglich der Strahlrichtung wird die Energieverteilung der rückgestreuten Projektilionen gemessen. Das erhaltene Energiespektrum ist eine Superposition von Streuungen an unterschiedlichen Atommassen in unterschiedlichen Tiefen. Ein Detektorwinkel nahe $\Theta = 180^\circ$ wird im Allgemeinen deshalb gewählt, weil hier die Winkeldispersion $dE/d\theta$ minimal und die Massendispersion dE/dM_T maximal ist (vgl. Abbildung 1.2 a)).

Die Energie $E_p'(t)$ der gestreuten Teilchen am Detektor beträgt

$$\begin{aligned}
 E_p'(t) &= k_{RBS} \cdot (E_0 - \Delta E_p(x_1)) - \Delta E_p(x_2) \\
 &= k_{RBS} \cdot \left(E_0 - \int_0^{\frac{t}{\sin \alpha}} \varepsilon_p(x) N dt \right) - \int_0^{\frac{t}{\sin \beta}} \varepsilon_p'(x) N dx
 \end{aligned} \tag{1.22}$$

wobei t die Streutiefe angibt, die sich aus den Wegstrecken x_1 (von der Probenoberfläche bis zur Streuung) und x_2 (vom Streupunkt bis wieder zur Oberfläche) ergibt und sowohl vom Einfallswinkel α als auch vom Ausfallswinkel β abhängt. Die Bremsquerschnitte für das Projektil vor und nach dem Stoß sind durch $\varepsilon(t)$ und $\varepsilon_p'(t)$ gegeben.

Auf Grund der impliziten Integrale lässt sich keine Energie-Tiefe-Beziehung in geschlossener Form angeben. Man kann jedoch für jede in der Probe enthaltene Atommasse M_r mit dem Kinematikfaktor k_{RBS} eine separate Tiefenskala für die entsprechenden Teile der Energieskala angeben.

Die **Elastische Rückstoßanalyse** ERD (engl.: Elastic Recoil Detection) ist ebenfalls eine Ionenstrahlanalyseverfahren, die dafür geeignet ist, um ein Tiefenprofil leichter Elemente in einem Festkörper zu bestimmen [LEC⁺76]. In Abbildung 1.5 sind die Methode und einige relevante Größen am Beispiel einer dünnen Schicht, die sich auf einem Substrat befindet, dargestellt.

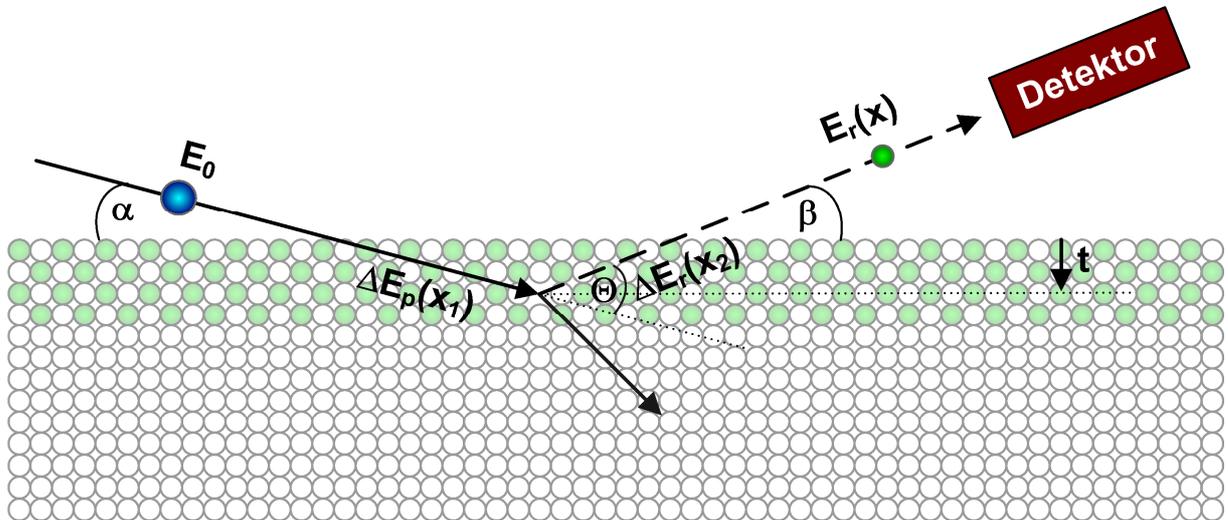


Abbildung 1.5: Prinzip der ERD-Messung

Bei dieser Analyseverfahren werden schwere Ionen mit einem Teilchenbeschleuniger auf eine Energie E_0 von 0,5 - 3 MeV/Nukleon beschleunigt. Diese schweren Ionen, wie z. B. Cl, Ni, Cu, I oder Au mit der Masse M_p , werden anschließend unter einem flachen Einfallswinkel α auf das zu untersuchende Material gelenkt, wo sie durch Wechselwirkungen mit den Kernen und Elektronen der Probe kontinuierlich abgebremst werden und die Energie ΔE_p verlieren. Trifft dieses Projektil in einer Tiefe t ein Probenatom der Masse M_r , so überträgt es auf dieses Atom eine vom

Streuwinkel Θ abhängige Energie $E_r = E_p - E_p'$. Dieses elastisch gestreute Atom verliert anschließend auf dem Weg zur Oberfläche eine Energie ΔE_r und besitzt somit an der Oberfläche die Energie $E_r(x)$:

$$\begin{aligned} E_r(t) &= k_{ERD} \cdot (E_0 - \Delta E_p(x_1)) - \Delta E_r(x_2) \\ &= k_{ERD} \cdot \left(E_0 - \int_0^{\frac{t}{\sin \alpha}} \varepsilon_p(x) N dt \right) - \int_0^{\frac{t}{\sin \beta}} \varepsilon_r(x) N dx \end{aligned} \quad (1.23)$$

$\varepsilon_p(t)$ ist der Bremsquerschnitt für das Projektil und $\varepsilon_r(t)$ der für das herausgestreute Atom. Die Rückstöße werden in einem geeigneten Detektor nach ihrer Ordnungs- oder Massenzahl identifiziert. Somit kann für jedes Element ein separates Tiefenprofil ermittelt werden. Die ERD ist zudem ebenfalls standardfrei und quantitativ, da die Flächenbelegungsichte $N\Delta t$ für jedes einzelne Element bestimmt werden kann.

Die Tiefenauflösung δt beider Methoden beträgt:

$$\delta t = \frac{\delta(\Delta E)}{N \cdot \left(\frac{k\varepsilon(E_0)}{\sin \alpha} + \frac{\varepsilon(E')}{\sin \beta} \right)} \quad \text{wobei } E' = \begin{cases} E_p' & \text{für RBS} \\ E_r & \text{für ERD} \end{cases} \quad (1.24)$$

mit $\delta(\Delta E)$ als der Gesamtenergieauflösung, die sich aus verschiedenen Einflussgrößen ergibt. Die Tiefenauflösung, die sich sowohl für die konventionelle als auch für die höchstauflösende ERD ergibt, wird in Abschnitt 5.3 genauer behandelt und berechnet.

Kapitel 2

Aufbau der Messapparatur

Die Messapparatur für die höchstauflösende ERD wurde für den Einsatz am Rossendorfer 5 MV-Tandembeschleuniger entwickelt und installiert. Schematisch ist der Aufbau in Abbildung 2.1 dargestellt.

Sie besteht aus fünf Hauptkomponenten:

1. der Strahlführung und der –diagnostik zwischen dem Schaltmagneten und der Streukammer,
2. der UHV-Streukammer mit dem UHV-Probenmanipulator,
3. der Strahlstrommessung
4. der QQDS-Magnetanordnung auf einer Lafette und
5. dem Fokalebenendetektor.

Die Lafette mit den beiden magnetischen Quadrupolen, dem Dipolmagneten und dem magnetischen Sextupol stammen vom QQDS-Magnetspektrometer „Little John“ [GIL⁺89a, GIL⁺89b]. Das benötigte Vakuumsystem wie auch die anderen Hauptkomponenten wurden speziell für das ERD-Spektrometer entwickelt. Sie werden im Folgenden beschrieben.

2.1 Strahlführung

2.1.1 Primärionenbeschleuniger

Der Tandembeschleuniger ist ein linearer Gleichspannungsbeschleuniger nach dem van-de-Graaff-Beschleunigerprinzip [GRA67]. Beim Tandem wird die positive Hochspannung U zweimal genutzt [ALV51], indem einfach geladene negative Ionen aus der Ionenquelle nach der ersten Beschleunigung im Inneren der Hochspannungselektrode (Terminal), wo sie die Energie $E_{\text{Terminal}} = e \cdot U_{\text{Terminal}}$ haben, in einem Gaskanal oder einer Folie (allgemein: Stripper) umgeladen werden [ALL⁺59]. Im Stripper werden Elektronen des Projektils „abgestreift“ und die damit positiv geladenen Ionen werden im elektrostatischen Feld weiter beschleunigt. Am Ausgang der Beschleunigungsstrecke, die wieder auf Erdpotential ist, haben die Ionen somit

eine Gesamtenergie von $(1 + q) \cdot U_{\text{Terminal}}$, wenn mit q die Ladung des Ions in Elementarladungen e angegeben wird. Die Hochspannung U_{Terminal} für einen stabilen Betrieb konnte zwischen 1 MV und 5 MV gewählt werden.

Wie oben erläutert, stellt sich beim Durchlaufen des Strippers eine Ladungszustandsverteilung annähernd der im dynamischen Gleichgewicht ein. Am Ausgang des Tandems kommen somit Teilchen mit unterschiedlichen, aber diskreten Energien an, deren jeweilige Intensität der Ladungszustandsverteilung entspricht. Mit Hilfe eines Magneten werden die Ionen unterschiedlicher Ladung und unterschiedlicher Energie separiert und mit ionenoptischen Elementen (magnetische Quadrupollinsen, Schaltmagneten und „Steerern“) formiert und auf die Probe in der Streukammer gelenkt.

Für die Injektion der negativen Ionen aus der Quelle in den Beschleuniger müssen die Ionen eine Energie von einigen keV besitzen. Die Injektorspannung am Rossendorfer Tandem betrug meist $U_{\text{Injektor}} = 30 \text{ kV}$. Da alle Ionenquellen für negative Ionen nur einfach geladene Ionen $q_{\text{Quelle}} = -1e^-$ liefern können, beträgt die kinetische Energie der injizierten Ionen $e \cdot U_{\text{Injektor}}$. Die genaue Gesamtenergie der Ionen mit dem Ladungszustand q beträgt damit:

$$E_o = (q_i - q_{\text{Quelle}}) \cdot U_{\text{Terminal}} - q_{\text{Quelle}} \cdot U_{\text{Injektor}} \quad (2.1)$$

Für die höchstauflösende ERD ist die Anforderung an die Energiestabilität (Langzeit- und Kurzzeit-Stabilität) des Beschleunigers sehr hoch und liegt bei $\delta E/E = 5 \cdot 10^{-4}$. Die zugehörige Stabilität der Terminalspannung ist mit dem van-de-Graaff-Generator, bei dem die Spannung durch mechanischen Ladungstransport zum Terminal auf einem umlaufenden Band bewerkstelligt wird, ohne Regelung nicht zu erreichen. Am Tandem diente dazu ein Energieregelsystem mit einem hochstabilen 90° -Analysemagneten mit einem Ablenkradius von einem Meter.

Es sollte angemerkt werden, dass nach Abschluss dieser Arbeiten der 5 MV-Tandem durch einen ultrastabilen 6 MV-Tandetron ersetzt wurde, bei dem die Hochspannung voll elektronisch erzeugt wird.

2.1.2 Strahlführung und -diagnostik

Der Strahlrohrabschnitt zwischen dem Schaltmagneten des Tandem und der UHV-Streukammer ist ausgelegt als differentielle Pumpstufe zwischen dem Hochvakuum des Beschleunigers von 10^{-6} mbar und dem der UHV-Streukammer mit 10^{-8} mbar. Unmittelbar vor der Streukammer befindet sich eine kleine Vorkammer in der ein schrittmotorgetriebener Flügelread, für die indirekte Messung des Ionenstromes, eingebaut wurde. Diese Kammer wird zusätzlich mit einer Ionengetterpumpe ausgepumpt. In Abschnitt 2.3 wird die Funktion des Flügelrads genauer beschrieben.

Ionenoptisch besteht dieser Teil der „beamline“ aus einer magnetischen Quadrupol-Dublett-Linse und zwei Paaren von Schlitzblenden, die als Aperturblenden dienen. In Abbildung 2.1 und Abbildung 2.2 b) sind diese und alle weiteren Hauptkomponenten des QQDS-Magnetspektrometers dargestellt. Die Quadrupol-Linse mit einem Mittenabstand von 1,87 m von der Streukammerachse bildet einen motorisierten Präzisionskreuzspalt, der die Funktion eines Objektpaltes hat und sich unmittelbar vor dem Schaltmagneten in einer Entfernung von 5,8 m von der Linsenmitte befindet, auf die

Probenoberfläche ab. Durch die Wahl der Objektpaltdimensionen lassen sich optimale Strahlfleckdimensionen auf der Probe einstellen. Mit zusätzlich zwei Paaren von Luftspulen sind zudem magnetisch geringe Korrekturen der Strahlage möglich.

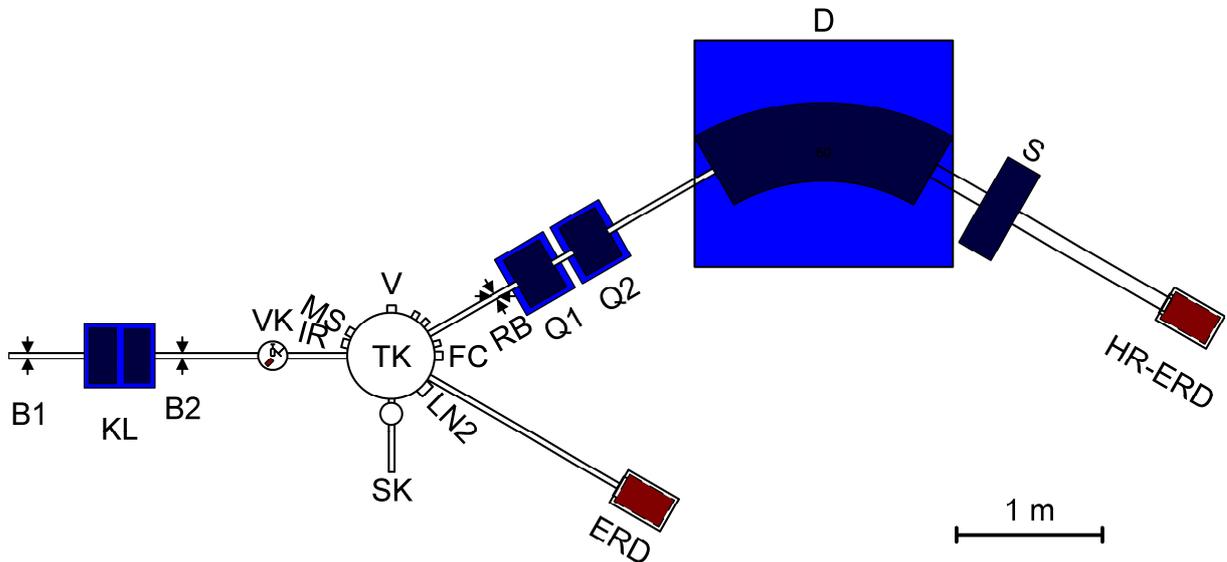


Abbildung 2.1: Der QQDS Magnetspektrometer für die höchstauflösende ERD

- B1 ...Blende1
- KL ...Kanallinse (Quadrupolduplet)
- B2 ...Blende2
- VK ...Vorkammer (mit Flügelrad und Faradaybecher1)
- TK ...Streukammer
- IR ...Infrarotkamera
- MS ...Restgasanalysator
- V ...Videokamera
- FC ...Faradaybecher2
- LN2 ...Kühlfalle
- SK ...Probenschleuse
- ERD...ERD-Detektor
- RB ...Raumwinkelblende
- Q1 ...Quadrupol1
- Q2 ...Quadrupol2
- D ...Dipol
- S ...Sextupol
- HR-ERD ...höchstauflösender ERD-Detektor

2.2 UHV-Streukammer

Die Streukammer ist eine zylindrische UHV-Kammer mit einem Durchmesser von 600 mm und einer Höhe von 850 mm. Sie steht auf der massiven justierbaren Achse, um die sich die Lafette mit den Magneten rotieren lässt und ist so justiert, dass die Kammerachse und die Drehachse der Lafette zusammenfallen. In Abbildung 2.2 a) ist ein Bild dieser Kammer und in b) des gesamten Magnetspektrometers dargestellt.

Die Kammer hat zwei Flanschebenen. Die obere definiert die Detektionsebene, die untere ist die Serviceebene. Im Boden und im Deckel der Kammer sind jeweils weitere acht Flansche für mögliche Zusatzgeräte, die alle auf den Schnittpunkt der Kammerachse mit der Detektionsebene zeigen. Dies ist der Ort der normalen Strahlposition auf dem Target. Im Schwenkbereich des Magnetspektrometers befinden sich in der Detektionsebene fünf Anschlussflansche an denen das Magnetspektrometer auf einfache Weise angeschlossen werden kann. Hiermit können fünf Streuwinkel von 0° , 15° , 30° , 45° und 60° gewählt werden.

In der Serviceebene befindet sich eine Drag-Turbomolekularpumpe (Pfeiffer TMU 1001p; Saugleistung von 1000 l / s), ein horizontaler Flüssig-Stickstoff-Kryostat sowie ein Restgasanalysator.



Abbildung 2.2: Fotografie a) der Streukammer b) des QQDS Magnetspektrometers (orange farben: Lafette)

2.2.1 Restgasanalysator

Die Anforderungen an das Vakuum in der Kammer sind spezifisch für die höchstauflösende Ionenstrahlanalytik. Es ist kein extremes UHV notwendig, da keine in situ Schichtpräparation erfolgt. Die oft angegebene Bedeckungsrate der Probenoberfläche mit Restgasmolekülen wie N_2 , O_2 oder H_2O stellt hier keine relevante Größe dar, da diese Moleküle durch den Ionenstrahl desorbieren. Kritisch hingegen sind Restgasbestandteile wie alle Kohlenwasserstoffe, die auf der Oberfläche durch den Ionenstrahl gecrackt werden, dabei einen Teil des Wasserstoffes abgeben und einen festhaftenden Film von kohlenstoffreichen Molekülen bilden. Ein Wachsen dieses Filmes während der Messung würde die Tiefenauflösung verschlechtern. Die Restgaskontrolle in der Streukammer ist deshalb von wesentlicher Bedeutung.

Der hier verwendete Restgasanalysator ist ein hochempfindliches PrismaPlus QMG 220 M1 Kompakt-Quadrupol-Massenspektrometer mit C-SEM-Detektor der Firma Pfeiffer. Das PrismaPlus kann eine hoch sensitive Partialdruckanalyse im Massenbereich von 1 amu bis 100 amu bei Drücken von $p < 10^{-4} \text{ mbar}$ durchführen. Dieses Gerät eignet es sich sowohl zur normalen Restgasanalyse als auch zur Lecksuche im He-Lecksuchmodus. Durch eine kontinuierliche Restgasanalyse während

der Messung können aus der Probe durch den Ionenstrahl desorbierte oder anderweitig freigesetzte Atome oder Moleküle als Funktion der Fluenz oder des Flusses nachgewiesen werden.

2.2.2 Kühlfalle

Die unterhalb des Targets in die Kammer ragende Flüssig-Stickstoff-Kühlfalle dient als Kondensationspumpe für kondensable Restgasbestandteile, insbesondere also Kohlenwasserstoffe. Da die Partialdrücke dieser störenden Moleküle im Restgas kaum nachweisbar sind, wurde die Wirkung der Kühlfalle anhand der Abnahme des Wassers im Restgas demonstriert. In Abbildung 2.3 ist die Abnahme des Partialdrucks von Wasser ab dem Zeitpunkt des Befüllens der Kühlfalle mit flüssigem Stickstoff dargestellt. Nach etwa zwei Stunden ist der Partialdruck von Wasser auf weniger als 10 % des Ausgangsdruckes reduziert. Bei allen Messungen konnte hier kein Aufwachsen einer kohlenstoffreichen Kontaminationsschicht beobachtet werden.

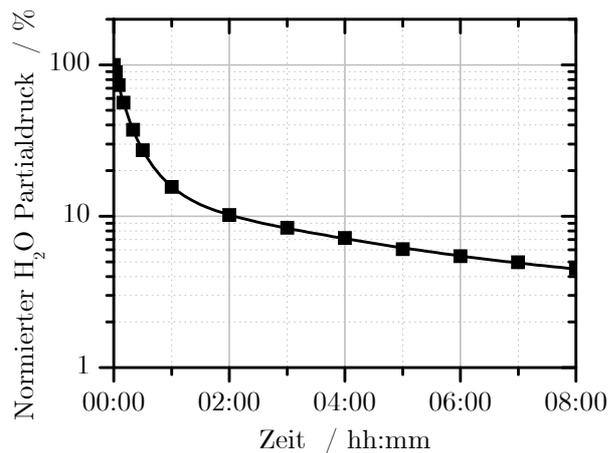


Abbildung 2.3: Partialdruckabnahme von Wasser nach Befüllen der Kühlfalle

2.2.3 Fünf-Achsen-Präzisionsmanipulator

Zentrisch im Kammerdeckel sitzt ein 5-Achsen-UHV-Präzisionsmanipulator [VAB07] der Firma Vakuum-Anlagenbau GmbH mit drei Translations- und zwei Rotationsachsen. Alle Achsen werden von Schrittmotoren bewegt, die über ein Steuergerät von einem PC kontrolliert werden (vgl. Abbildung 2.2).

Mit der vertikalen Rotationsachse wird der Einfallswinkel zwischen Ionenstrahl und Probe festgelegt. An dieser Achse ist der fixe Teil der Probenhalterung befestigt. Der verwendete Probenhalter ist vom Typ ein indiumfreier AFIF [CRE07] der Firma Createc und besitzt einen Durchmesser von 2 Zoll. Die Probenoberfläche liegt, wegen der unterschiedlichen Dicken der Proben, nicht notwendigerweise in der Rotationsachse des Manipulators. Mit den ortsfesten horizontalen Translationsbewegungen, für die x- und y- Richtung, kann aber bei jedem Winkel jeder Punkt auf der Oberfläche auf die Kammerachse und damit auf die Drehachse des Magnetspektrometers

gefahren werden. Mit der z-Translation kann die Probe in vertikaler Richtung zum Strahl positioniert werden. Die Probenhalterung wurde so an den Manipulator montiert, dass die Normale der Probenoberfläche parallel zur horizontalen Detektionsebene liegt.

Die drei Translationsbewegungen gewährleisten, dass während der Messung die komplette Probe mechanisch abgerastert werden kann. Somit wird die strahlinduzierte Schädigung auf die komplette Probenoberfläche verteilt. Die zweite Rotationsachse des Manipulators findet beim verwendeten Standardprobenhalter keine Anwendung. Sie dient aber bei einem speziellen Probenhalter zur Probenkipfung um die horizontale Achse.

Die Kontrolle der Strahlage und der Fokussierung auf die Probenoberfläche erfolgt optisch durch visuelles Beobachten der Ionolumineszenz von Alpha-Quarz unter dem Strahl mit Hilfe eines justierten Nivelliergerätes durch ein Sichtfenster. Alpha-Quarz weist eine typische blaue Ionolumineszenz bei Anregung durch schnelle Ionen auf. Das optische Spektrum besitzt bei 440 nm und 500 nm jeweils eine hohe und bei 740 nm eine niedrige Intensität, so dass das emittierte Licht blau erscheint [COS⁺97]. Es wurden für die hochauflösende ERD auch Al₂O₃, ZrO₂ getestet. Diese und andere Materialien zeigen teilweise anfangs eine noch stärkere Luminiszenz jedoch auch eine schnellere Schädigung und damit schnelles Nachlassen der Intensität mit steigender Fluenz. Diese Effekte wurden auch von anderen Gruppen beobachtet [BAL⁺05, McM⁺03, McM⁺05].

Eine weitere Möglichkeit der Strahlagekontrolle besteht in der Messung des Ionenstromes auf einer Nadel, die unterhalb des Probenträgers in der Drehachse des Manipulators angebracht ist. Diese Nadel ist elektrisch von der Kammer isoliert und kann präzise in die Kammerachse positioniert und zur Feinpositionierung des Ionenstrahls quer zur Strahlrichtung benutzt werden. Dazu wird der Strahl grob auf die Magnetspektrometerachse ausgerichtet und anschließend die Nadel quer zum Strahl verfahren. Dabei erfolgt kontinuierlich eine Monitorierung des Strahlstroms. Befindet sich die Mitte der Intensität des Strahles nicht auf der Magnetspektrometerachse, wird der Strahl in seiner horizontalen Position korrigiert.

2.2.4 Probenschleuse

Die meist mit mehreren Proben bestückten Probenteller werden über eine Schleuse auf die Andockstation am Manipulator transferiert. In der kleinen Schleusenkammer werden die Probenhalter in die Bajonett-Klaue am Kopf der magnetisch gekoppelten UHV-Schiebedurchführung eingerastet. Die Schleusenkammer wird anschließend mit einer 100 l / s Drag-Turbomolekularpumpe und einer Membranpumpe als Vorvakuumpumpe ölfrei auf etwa 10⁻⁶ mbar abgepumpt. Bei Erreichen dieses Druckes kann das UHV-Durchgangsventil zur Streukammer geöffnet und der Probenteller auf den Probenhalter am Manipulator transferiert werden. Durch das Fluten der Schleusenkammer mit trockenem Stickstoff liegt die Gesamtzeit für den Probentransfer unter einer Stunde.

2.2.5 Probentemperaturmessung

Bei der verwendeten Probenhalterung sind keine Probenheizung und keine Probenkühlung vorgesehen. Aus diesem Grund ist keine Temperaturmessung der Proben bzw. des Probenhalters vorgesehen. Eine Bestimmung der Temperatur der Probenhalterung, die sich während der Messung einstellt, ist auf Grund des schwer abschätzbaren Wärmewiderstandes zwischen Probenhalter und Probenhalteraufnahme auf dem Manipulator nur ungenau möglich, führt aber bei den verwendeten Ionenströmen im nA-Bereich zu Temperaturerhöhungen von < 1 K. Bei Proben beziehungsweise Schichtsubstraten mit extrem niedriger Wärmeleitfähigkeit könnte die Temperatur im Strahlfleck selbst wesentlich höher sein.

Zur Kontrolle der Oberflächentemperatur wird einer Wärmebildkamera vom Typ IC 100 [TRO10], der Firma Trotec verwendet. In Abbildung 2.4 a) ist dies an einer Quarzprobe demonstriert. Auf die Probe ist ein $^{35}\text{Cl}^{4+}$ Strahl mit $E_0 = 20$ MeV und einem hohen Strahlstrom von 10 nA gerichtet. Der Strahlfokus produziert dabei einen Bereich mit erhöhter Temperatur. Die unterschiedlichen Temperaturen und damit Farbwerte der Umgebung sind zum größten Teil das Resultat verschiedener Emissionsgrade. In der Abbildung 2.4 a) ist das gesamte Bild mit dem ungefähren Emissionsgrad für Quarzglas $\varepsilon = 0,85$ angegeben. Da der Probenträger aus rostfreiem Stahl besteht und damit einen viel geringeren Emissionsgrad besitzt, erscheint dieser kälter als er in Wirklichkeit ist. Somit muss für jede Probe der Emissionsgrad separat ermittelt werden. Nur mit dem exakten Wert ist es möglich die Temperatur der Probe während der Bestrahlung zu messen. Bei dem hier dargestellten Temperaturprofil ergibt sich somit für die Temperatur zwischen den Bereichen mit und ohne Strahl eine Differenz von $\Delta T = 3,2 \pm 0,8$ K.

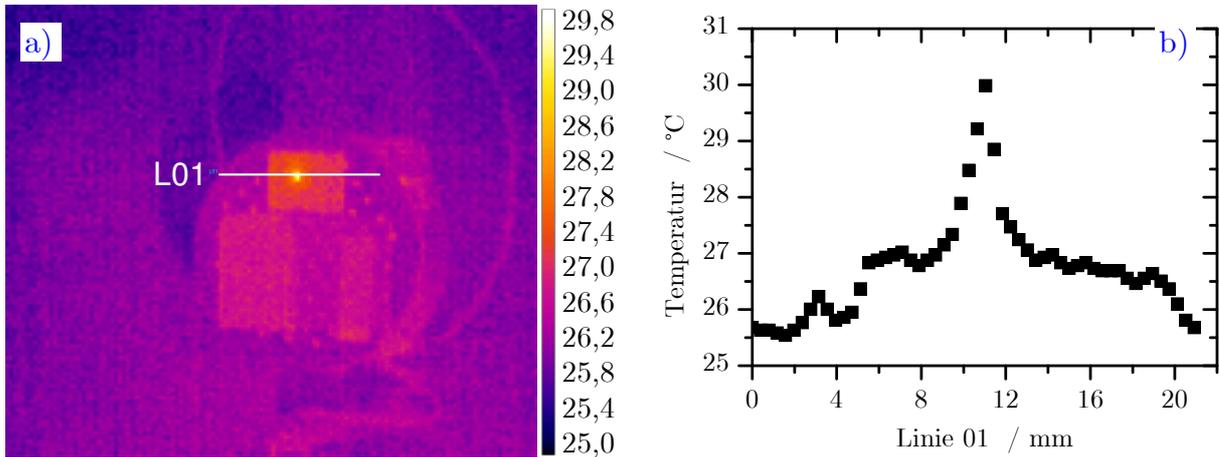


Abbildung 2.4: a) Wärmebild und b) Temperaturprofil einer Quarzprobe auf einem Probeträger mit $^{35}\text{Cl}^{4+}$ 20 MeV Strahl

2.3 Strahlstrommessung – Flügelrad

Für die quantitative Auswertung der gemessenen Spektren ist die genaue Kenntnis der Zahl der Projektionen N , die für die Messung der Spektren auf die Probe geleitet wurden, notwendig (vgl. Gl. (1.12)). Da sowohl bei der RBS als auch bei der ERD

mit Ionenströmen im Bereich von nA gearbeitet wird, ist ein direktes Zählen der einfallenden Ionen nicht möglich. Deshalb werden zwei unterschiedliche Verfahren angewandt. Die erste Variante ist die Bestimmung der Gesamtladung der aufgetroffenen Projektilionen Q durch Integration des Ionenstromes. Dies ist technisch einfach umsetzbar, indem der Probenstrom auf einen kalibrierten Strom-Frequenzwandler geleitet wird, dessen Ausgangsimpulse gezählt werden. Jeder Zählimpuls repräsentiert dabei eine genau definierte Ladungsmenge. Diese Normierung durch die Stromintegration ist seit langem in der Kernphysik üblich und wird auch in der RBS eingesetzt. Die vom Strahl ausgelösten Sekundärelektronen und die geladenen gesputterten Teilchen werden durch ein elektrostatisches Gegenfeld (Suppressor-Blende) am Verlassen der Probe gehindert. Damit kann eine Messgenauigkeit der integrierten Ladung von $\ll 1\%$ erreicht werden [HER+95], da die Gesamtladung der rückgestreuten leichten Ionen, die in der Bilanz fehlt, vernachlässigbar klein ist. Diese einfache Art der Messung setzt voraus, dass die Proben nicht hoch isolierend sind, so dass die Aufladungen im Strahlfleck signifikant kleiner als die Suppressorspannung bleiben, anderenfalls versagt diese Methode. Dies ist zum Beispiel bei Messungen an Isolatoren wie Quarz der Fall.

Für isolierende Materialien wurden Verfahren entwickelt, um den Strahlstrom vor der Probe zu messen und zu integrieren. Eine Möglichkeit besteht darin, die Ionisation des Restgases in einer Messstrecke vor dem Target zu nutzen und den dabei erzeugten Elektronenstrom mit einem Querfeld abzuziehen und auf eine Mikrokanalplatte (engl.: micro-channel plate) zu leiten [WIZ79]. Dabei muss allerdings der Druck in der Vakuumkammer präzise gemessen werden. Als zuverlässiger und reproduzierbarer hat es sich erwiesen, nur einen genau definierten Bruchteil des Ionenstromes zur Messung zu nutzen. Dazu kann ein engmaschiges, aber hoch transparentes Metallnetz in Strahl dienen, bei dem auf beiden Seiten die Sekundärelektronen unterdrückt werden [BOU+06] und das ein permanentes Ionenstrom-Signal liefert. Die andere Möglichkeit besteht darin, den Strahl mit einem Flügelrad periodisch zu unterbrechen und den Strahlstrom auf dem Flügelrad zu messen [PÁS90]. Bei beiden Varianten wird nur ein Teil der Gesamtladung erfasst, der proportional zur Ladung auf der Probe ist.

Im Fall der ERD mit schweren Projektilionen mit Energien von einigen zehn MeV sind die einfachen Methoden der Ladungsintegration mit großen Fehlern behaftet. Außer der schwer beherrschbaren vollständigen Unterdrückung der Sekundärelektronen können auch Umladungen der Projektilionen durch das Restgas zwischen Schaltmagnet und Target die Umrechnung der integrierten Gesamtladung auf die Teilchenzahl verfälschen [GRA07, NEE07].

Ein ganz anderes Verfahren der Bestimmung der Anzahl an Projektilionen besteht darin, einen kleinen Teil des Strahlstromes auf ein Streutarget zu leiten und die gestreuten Projektile zu zählen. Hierbei wird ausgenutzt, dass die Rate der durch den Strahl erzeugten Sekundärteilchen proportional zum Ionenstrom ist, allerdings aber von der Inzidenzenergie abhängt. An allen Rossendorfer Schwerionen-Apparaturen befindet sich im Strahlgang kurz vor der Probe ein Flügelrad, das von einem Schrittmotor angetrieben wird und den Strahl mit einer Periode von ca. 1 s^{-1} unterbricht. Das Flügelrad besteht aus zwei 15° Segmenten und ist reines Aluminium, auf das eine dünne Goldschicht aufgedampft ist. Trifft der Strahl auf das Flügelrad werden Primärionen an der Goldschicht gestreute und in einem Silizium-

Teichendetektor registriert. Im Spektrum lässt sich die Peakintensität der am Gold gestreuten Ionen untergrundfrei auswerten. Die Dicke der Goldschicht muss so gewählt sein, dass die Zählrate und damit die Totzeit des spektroskopischen Zweiges des Monitordetektors vernachlässigbar klein bleibt, wenn das Flügelradsegment im Strahl steht.

Zur Kalibrierung, die regelmäßig durchgeführt wird, um eventuelle Sputterverluste der Goldschicht zu kontrollieren, wird der Probenhalter aus dem Strahlengang herausgefahren und der Strahl gelangt in einen langen Faraday-Becher am 0° -Port der Streukammer und wird dort gemessen und aufintegriert. Der Proportionalitätsfaktor zwischen der Fluenz auf der Probe und der Peaksumme des Goldpeaks im Spektrum wird zur Normierung der Spektren genutzt. Auzelyte et al. [AUZ06] zeigten, dass mit dieser indirekten Methode Strahlströme bis in den pA-Bereich gemessen werden können. Bei der höchstauflösenden ERD beträgt die Anzahl der Primärionen pro in den Detektor zurückgestreutem Ion, bei einem $^{35}\text{Cl}^{4+}$ -Strahl mit der Energie von $E_0 = 20 \text{ MeV}$, gleich $1,68 \cdot 10^9$. Das entspricht einer Ladung von $4 \cdot 0,26895 \text{ nC}$. In Abbildung 2.1 ist der Aufbau der Flügelradeinheit dargestellt.

2.4 Das QQDS Magnetspektrometer für höchstauflösende ERD

2.4.1 Höchstauflösende Teilchenspektrometer – Überblick

Die Teilchenspektrometrie mit Hilfe von Magnetfeldern ist so alt wie die Kernphysik selbst. Bereits 1900 zeigte Becquerel, dass sich die Betastrahlung durch ein Magnetfeld ablenken lässt. In den Jahren nach dem Geiger-Marsden-Experiment 1909 und Rutherfords theoretischer Erklärung, also in den zwanziger Jahren des zwanzigsten Jahrhunderts, wurden einige Magnetspektrographen gebaut, um die natürlichen Alphazerfälle zu untersuchen. Das beste Instrument dabei war ein einfach fokussierender 180° -Spektrograph von Cockroft [COC33].

Mit der Verfügbarkeit der ersten energiescharfen van-de-Graaff-Beschleuniger und ihrer Anwendung zur Untersuchung von Kernreaktionen nach 1940 bestand die Notwendigkeit, die Energieverteilung der emittierten geladenen Teilchen mit hoher Energie- und Winkelauflösung zu messen. Die einzige Möglichkeit dafür waren Magnetfelder, nach deren Passieren Teilchen unterschiedlicher magnetischer Steifigkeit \mathfrak{R} (engl.: rigidity) (Teilchenimpuls/Teilchenladung = p/Q) räumlich getrennt auf einem ortsempfindlichen Detektor auftreffen. Aufgrund der Verwendung von akkumulierenden Kernspurplatten als ortsempfindliche Detektoren wurden diese Geräte als Magnetspektrographen bezeichnet. Die Quantifizierung erfolgte hierbei über das Zählen der Teilchenspuren. Wurden hingegen mit einem Szintillator die Teilchen gezählt, die einen schmalen Ausgangsspalt passierten, werden sie, um sie unterscheiden zu können, Magnetspektrometer genannt. Heutzutage sind die ortsempfindlichen Detektoren unterschiedlichster Bauart, aber generell alle Zähler, so dass der Begriff Spektrograph für moderne Instrumente nicht mehr verwendet wird.

Die ersten Magnetspektrographen, die für Messungen von Kernreaktionen eingesetzt wurden, waren einfach fokussierende Instrumente wie der oben erwähnte Cockroft-

Spektrograph. Deren kleine zulässige Raumwinkel und der schmale Bereich von \mathfrak{R} mit $p_{\max}/p_{\min} = 1,05$ führten zu extrem langen Messzeiten für ein einzelnes Spektrum. Aus diesem Grund wurde am Massachusetts Institute of Technology (MIT) ein einfacher breitbandiger Magnetspektrograph entwickelt, der Teilchen in einem Impulsbereich von $p_{\max}/p_{\min} = 1,5$ aufzeichnen konnte [BRO⁺56]. Der Magnetspektrograph vom Browne-Buechner-Typ ist ein 90°-Sektormagnet mit kreisrunden Polschuhgrenzen und wurde weltweit in vielen Kernphysiklaboratorien kopiert und erfolgreich eingesetzt.

Der relativ kleine Raumwinkel von $\Omega < 0,5$ msr, den diese Instrumente zulassen und der anfangs akzeptabel war, da ein breiter Energiebereich gleichzeitig aufgezeichnet werden konnte, erwies sich für die Untersuchung von Kernreaktionen mit kleinem Wirkungsquerschnitt als hinderlich. Deshalb wurden Magnetspektrographen mit mehreren magnetischen Komponenten (Dipolen, Quadrupolen, Sextupolen und höheren Multipolen) entwickelt, die bei höchster Energieauflösung einen mehr als 10-fach höheren Raumwinkel erfassten. Zur Charakterisierung dieser Spektrographen wird die jeweilige Anordnung der Magnetkomponenten abgekürzt angegeben. Ein Spektrometer vom Typ Q3D besteht demzufolge aus einem Quadrupol, gefolgt von drei Dipolen. Einen umfangreichen Überblick über diese Entwicklung dieser Geräte, die bis 1980 im Wesentlichen abgeschlossen war, gibt Enge [ENG79].

Für die höheren Energien, die mit Tandem-Beschleunigern erreicht wurden, und zugeschnitten auf die Ortsauflösung der Vieldraht-Proportionalzähler als ortsauflösende Fokalebene-Detektoren, hat Enge mit dem Q3D-Prinzip ein Spektrometer-Typ entwickelt, der in unterschiedlichen Varianten an mehr als 10 Beschleunigern in Europa und Nordamerika eingesetzt wurde, drei davon in Deutschland (Heidelberg, München, Berlin).

Es ist verwunderlich, dass bis auf eine Ausnahme keines der existierenden hochentwickelten Instrumente für die Ionenstrahlanalytik mit höchster Tiefenauflösung eingesetzt wird. Einzig das Q3D-Spektrometer der Münchener Universitäten in Garching wird von der Gruppe um Dollinger dafür sehr erfolgreich für die höchstauflösende ERD genutzt [DOL⁺04, DOL⁺92]. Ansonsten dienten vorhandene Magnetspektrometer in der Ionenstrahlanalyse, speziell der Nuklearresonanzanalyse nur zur Unterdrückung des Untergrundes elastisch gestreuter Teilchen [HIR⁺78]. Eine der Ursachen bestand sicher darin, dass für das Energiegebiet der RBS von einem bis drei Megaelektronenvolt lange Zeit keine positionsempfindlichen Detektoren mit der notwendigen Ortsauflösung von kleiner als 1 mm zur Verfügung standen. Für die MEIS wird ein ortsauflösender Mikrokanalplatten-Detektor [WIZ79] hinter einem elektrostatischen Toroidanalyser [NIS⁺98] genutzt, der für Protonenrückstreuung und mit Einschränkungen auch für die He-Ionen-Rückstreuung bei Energien kleiner 200 keV gut geeignet ist [COP00].

Für die höchstauflösende RBS wurden seit 1990 eine Reihe von Spektrometern gebaut und erfolgreich eingesetzt. Eines davon ist ein Spektrometer auf der Basis eines zylinderförmigen elektrostatischen Energieanalysierers [CAR98, END⁺92]. Die anderen Instrumente sind Magnetspektrometer [POL⁺09, AND⁺06, ICH⁺05, GRÖ⁺04, KLE03, LAN⁺98, ARN⁺96, KIM⁺96, DOL⁺92]. Ein Browne-Buechner-Spektrometer mit einem Sollkreisradius von 650 mm wird am Rossendorfer 3 MV-Tandemtron für die höchstauflösende RBS eingesetzt [VIE10, GRÖ⁺04, KLE03, GRÖ⁺01].

Für den ERD-Betrieb reicht das Ablenkvermögen p/q^2 dieser relativ kleinen Instrumente nur für spezielle Fälle wie die ERD der Wasserstoffisotope aus, nicht aber für die Spektrometrie schwerer Rückstoßatome. Deshalb wurde für die höchstauflösende ERD am Rossendorfer Tandem das Magnetspektrometer „Little John“ übernommen, das im Forschungszentrum Karlsruhe für kernphysikalische Messungen gebaut [GIL⁺89a, GIL⁺89a] und dort nicht mehr benötigt worden ist. Dieses QQDS-Spektrometer wurde im Rahmen dieser Arbeit grundlegend modernisiert (Vakuumsystem, Stromversorgung, Feldmessgerät für den Dipolmagneten und die Targetkammer mit Zubehör) und zudem erfolgte die Entwicklung eines speziell für den QQDS zugeschnittenen neuen ortsauflösenden Fokalebeneendetektors. Dieses Gerät wird im nächsten Kapitel ausführlicher beschrieben.

2.4.2 Das QQDS–Magnetspektrometer

Das Magnetspektrometer QQDS besteht aus einer Anordnung von zwei magnetischen Quadrupolen, gefolgt von einem Dipolmagneten mit einem Sollbahnradius von 1,5 m, einem Ablenkwinkel von 60° und einer maximalen Magnetfeldstärke von 1,7 T. Unmittelbar hinter dem Dipol ist ein magnetischer Sextupol angeordnet.

Die maximale magnetische Steifigkeit der Teilchen, die noch analysiert werden können, beträgt 2,55 Tm und die rechnerische Impuls-Auflösung $p/\Delta p$ von 3000 ergibt eine Energieauflösung $E/\Delta E$ von 1500. Alle Magnetkomponenten sind fest zueinander auf einer Lafette montiert, die um die Achse der Streukammer rotiert werden kann. Das Spektrometer kann, wie Abschnitt 2.2 erwähnt, unter den Winkeln 0° , 15° , 30° , 45° und 60° bezogen auf die Strahlrichtung mit der UHV-Targetkammer verbunden werden. Zwischen der Kammer und der ersten Quadrupollinse befindet sich ein Doppelkreuzspalt, mit dem die Akzeptanzwinkel sowohl in der horizontalen Streuebene als auch senkrecht zur Streuebene festgelegt werden. Während die Größe des vertikalen Akzeptanzwinkels von $2\cdot\beta_y$ nur geringen Einfluss auf die erreichbare Energieauflösung und damit auf die erreichbare Tiefenauflösung bei der ERD hat, beeinflusst der Akzeptanzwinkel in der Streuebene von $2\cdot\beta_x$ die Tiefenauflösung in kritischer Weise. Zum einen hängt die Aberration des Spektrometers von β_x ab und zum anderen bewirkt die Abhängigkeit der Energie der gestreuten Teilchen beziehungsweise der Rückstoßatome vom Streuwinkel eine kinematische Energieverschmierung (vgl. Gleichungen (1.3) und (1.4)).

Bei einem einfachen Dipol-Spektrometer werden kinematische Korrekturen durch Verschieben des Fokalebeneendetektors in Richtung des Dipols erzielt. Dies kann erfolgen, da sowohl bei der RBS als auch bei der ERD Teilchen, die unter kleinerem Streuwinkel emittiert werden, die höhere Energie haben. Damit verschiebt sich das ionenoptische Bild des Strahlfleckes auf dem Target in Richtung Magnet [ENG58, LAN⁺98].

Bei dem verwendeten QQDS-Spektrometer kann der Detektor an einer festen Position montiert werden, da mit den beiden magnetischen Quadrupolfeldern die kinematische Korrektur vorgenommen und immer auf den Detektoreingang fokussiert werden kann. Da es wegen der dann minimalen effektiven Dicke des Eintrittsfensters des Detektors vorteilhaft ist, wenn die Teilchen in guter Näherung senkrecht auf den Fokalebeneendetektor treffen, kann der Winkel der Fokalebene zum Strahl auf der

Sollbahn, der durch den Ablenkwinkel von 60° des Dipols entsteht, mit dem Sextupol auf 90° gekippt werden.

2.4.3 Eigenschaften des Magnetspektrometers QQDS

Die Abmaßen der vier Magnetkomponenten und die zugehörige Konfiguration am QQDS sind der Vollständigkeit halber im Anhang A zusammengefasst. Diese Werte werden für die Berechnung der Magnetfelder (vgl. Abschnitt 2.4.5) genutzt. Der Raumwinkel Ω , aus dem die Teilchen durch den rechteckigen Eintrittsspalt (vgl. Abbildung 2.5) mit den wählbaren Breiten von w_x und w_y sowie einer Entfernung von $h = 825$ mm vom Target bzw. mit den Öffnungswinkeln $2\beta_x$ und $2\beta_y$ in das Spektrometer eintreten, beträgt:

$$\Omega = 4 \cdot \arctan\left(\frac{w_x \cdot w_y}{2h \cdot \sqrt{4h^2 + w_x^2 + w_y^2}}\right) = 4 \cdot \arcsin(\sin \beta_x \cdot \sin \beta_y) \quad (2.2)$$

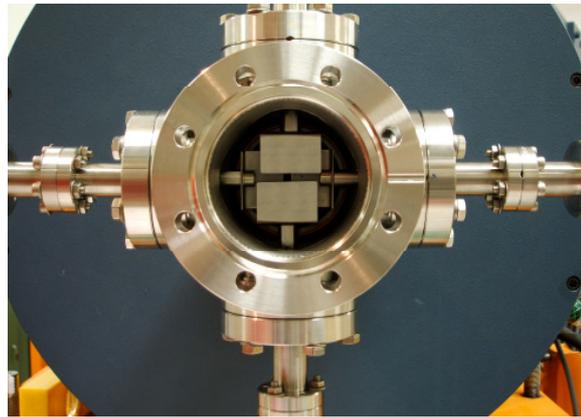


Abbildung 2.5: Fotografie der manuell einstellbaren Raumwinkelblende, die sich direkt vor den Quadrupolen (blau) befindet

Der maximale Raumwinkel, der über eine Blende eingestellt werden kann, beträgt $\Omega = 1,1$ msr.

In der aktuellen Position der magnetischen Komponenten und des Detektors beträgt die Dispersion:

$$D_{p_0} = \frac{\Delta x}{\frac{\Delta p}{p_0}} = 23,8 \frac{mm}{\%_{p_0}} \quad (2.3)$$

Das bedeutet, dass ein Ion, welches um ein Prozent vom Sollimpuls p_0 abweicht, um 23,8 mm neben einem Ion mit dem Impuls p_0 in der Fokalebene auftritt.

2.4.4 Ionenstrahloptik

Zur Beschreibung der Vorgänge und Eigenschaften der Ionenstrahloptik wird die gleiche Terminologie verwendet, die auch bei der klassischen Lichtoptik Anwendung

findet. Allerdings ist die Vergleichbarkeit auf Phänomene der ersten Ordnung beschränkt. In der Lichtoptik lassen sich beliebig geformte Grenzflächen der optischen Wirkung, die Oberflächen der lichteoptischen Elemente wie Linsen, Spiegel, Prismen, relativ leicht realisieren. Die Verhältnisse in der Ionenoptik sind wesentlich komplexer, da Teilchen nur in elektrischen oder magnetischen Feldern abgelenkt werden können, die sich nicht scharf begrenzen lassen. Diese Randfelder beeinflussen die Trajektorien der Teilchen auch bei einem einfachen Dipol und können je nach Winkel zwischen Trajektorie und Feld fokussierende oder defokussierende Wirkung haben [ARD⁺05].

Noch problematischer ist der Vergleich bei Linsen. Rotationssymmetrische Linsen wie in der Lichtoptik sind bei MeV-Teilchenenergien nur mit supraleitenden Spulen [DAT⁺01, MEI⁺95] mit einem nur im Einzelfall vertretbarem Aufwand zu realisieren. Deshalb werden magnetische (selten elektrostatische) Quadrupole als fokussierende Elemente eingesetzt. Bei Quadrupolfeldern (zwischen vier Polschuhen mit (idealerweise) hyperbolischer Oberfläche) nimmt das transversale Magnetfeld achsennah proportional zum Abstand von der Achse zu.

$$F_x = -B_y \cdot v = -g \cdot v \cdot x \quad \text{und} \quad F_y = B_x \cdot v = g \cdot v \cdot y \quad (2.4)$$

mit $g = \frac{2\mu_0 NI}{a^2}$

wobei g die Quadrupolstärke, μ_0 die magnetische Feldkonstante, N die Anzahl der Windungen pro Polschuh und a der Aperturradius sind.

Die Lorentzkraft wirkt senkrecht zur Bewegung der Teilchen nur in einer Ebene unmittelbar in Richtung Linsenachse, d.h. der Strahl konvergiert nur in einer Ebene und divergiert in der Ebene senkrecht dazu [ARD⁺05, GRI⁺82]. In Abbildung 2.6 a) sind die magnetische Anordnung und die sich ergebenden Feldlinien sowie die Kraft, die auf ein positiv geladenes Ion ausgeübt wird für einen Quadrupol dargestellt.

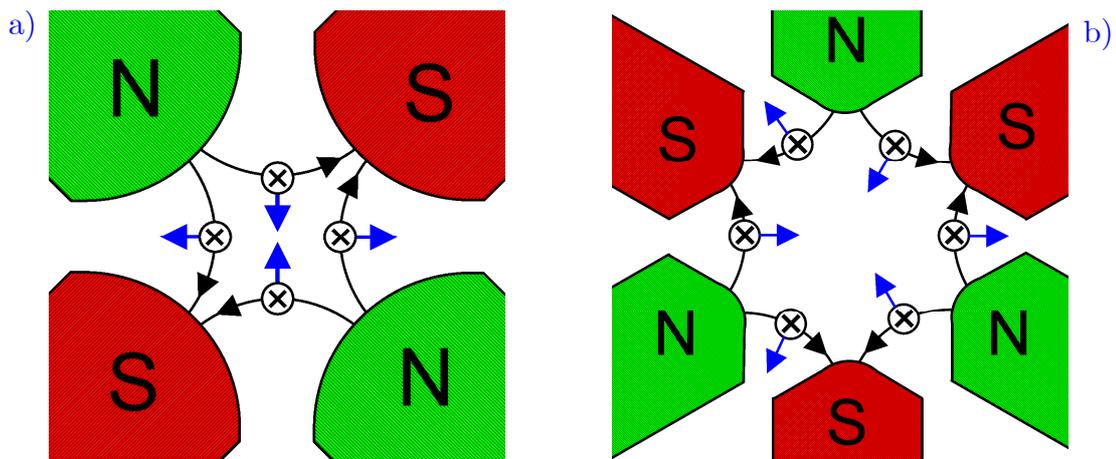


Abbildung 2.6: magnetische Anordnung mit Feldlinien (schwarze Linien) und Kraft (blaue Pfeile), die auf ein positiv geladenes Ion ausgeübt werden a) Quadrupol b) Sextupol

Eine in beiden Richtungen fokussierende Wirkung wird nur durch die Kombination von zwei Quadrupollinsen zu einem Quadrupoldublett, bei dem die Feldrichtung in

den einzelnen Linsen senkrecht zueinander steht, erreicht. Eine konforme Abbildung lässt sich jedoch mit einem Quadrupoldublett nicht erreichen.

Im Unterschied zu den Strahltransportsystemen eines Beschleunigers, wo nur nahezu monoenergetischen Teilchen mit einer Energieschärfe $dE/E < 10^{-3}$ auftreten, werden bei einem Magnetspektrometer aus dem Strahlfleck auf dem Target Teilchen mit unterschiedlicher Energie, Ladung und Masse in den Akzeptanzwinkelbereich emittiert. Die interessierende Information ist die Energieverteilung der ausgewählten Teilchensorte, aus der sich die Tiefenverteilung der Streueignisse ergibt. Die sich aus dieser Energievariation ergebende Änderung der Fokussierung muss weitestgehend kompensiert werden. Dazu wird ein Multipolfeld, im einfachsten Fall ein einzelner magnetischer Sextupol benötigt. Dieser besteht aus sechs magnetischen Polen und besitzt wie ein Quadrupol eine fokussierende Wirkung. Jedoch hängt dessen Fokussierungsstärke von der Trajektorie der Ionen ab. In Abbildung 2.6 b) sind die Anordnung eines Sextupols, die damit entstehenden Feldlinien und die Wirkung auf ein positiv geladenes Ion, das in die Zeichnungsebene hineinläuft, dargestellt. Mit einem Sextupol, der nach dem Dipol angeordnet ist, können also chromatische Fehler der Quadrupole kompensiert werden. Eine grafische Veranschaulichung der Chromatizitätskompensation ist in Abbildung 2.7 dargestellt. Die Fokussierpunkt von Ionen mit verschiedenem Impuls (Energien) würde bei reinen Quadrupolen (hellblaue Linien) vom Impuls selbst abhängen. Durch die Chromatizitätskompensation des Sextupols befindet sich der Fokussierpunkt immer an der gleichen Stelle (dunkelblaue und dunkelgrüne Linien).

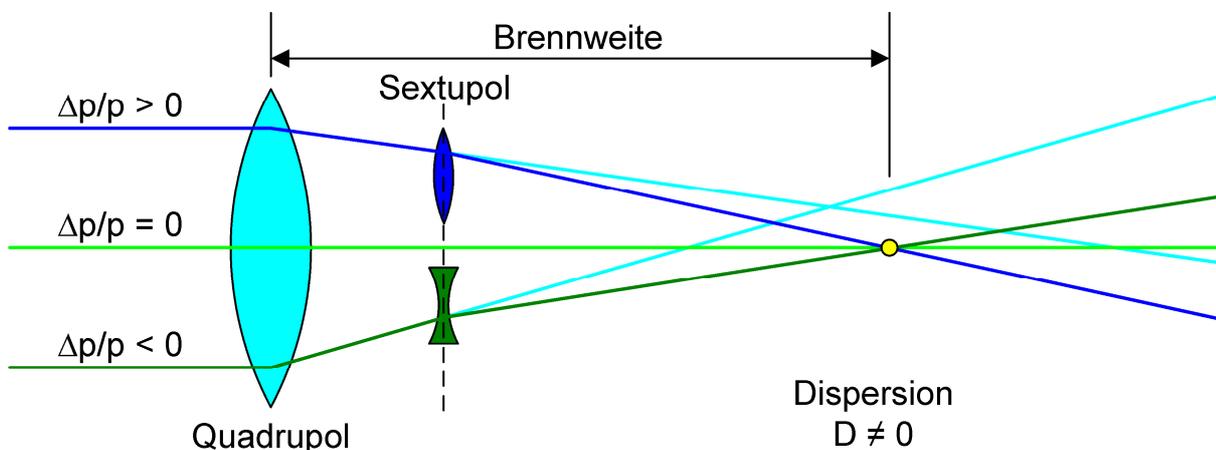


Abbildung 2.7: Grafische Veranschaulichung der Chromatizitätskompensation mit der Kombination Quadrupol und Sextupol bei Dispersion $D \neq 0$ (die hellblauen Linien zeigen den ionenimpulsabhängigen Fokussierpunkt und die dunkelblaue und dunkelgrüne Linie den durch einen separat verwendeten Sextupol chromatizitätskompensierten Fokussierpunkt)

Um eine möglichst gute Energie- und damit Tiefenauflösung beim Einsatz des Magnetspektrometers für die höchstauflösende ERD zu erzielen, ist es notwendig, für jede Messung einer Tiefenverteilung von bestimmten Elementen bzw. Atommassen die optimalen Parameter für die Akzeptanzwinkel und die magnetischen Feldstärken der Magnetkomponenten zu berechnen.

Eine Quelle zusätzlicher Aberrationen wären die Abweichungen der Magnetfelder, die sich durch unvermeidliche Toleranzen bei der mechanischen Fertigung ergeben [MAR06]. Die sind z. B. Nichtparallelität oder Deformation der Polflächen des Dipols sowie eine Poldejustierung bei den Quadrupolen oder bei dem Sextupol. Bei den geringen spezifizierten Toleranzen der von der Firma Bruker hergestellten Magnetkomponenten [GIL81] war es nicht notwendig, diese Aberrationsterme bei den Rechnungen zu berücksichtigen [GRÖ07].

2.4.5 Berechnung der QQDS-Magnetfelder

Die Magnetfelder für die Komponenten des QQDS-Magnetspektrometer werden mit einem Computerprogramm berechnet, das im Rahmen dieser Arbeit entwickelt wurde. Dieses ist so konzipiert, dass es jederzeit auf andere Konfigurationen angewendet werden kann. Damit sind zukünftige bauliche Änderungen problemlos implementierbar. Die Berechnung der Magnetfelder erfolgt rekursiv mit Hilfe der Transfermatrix-Methode. Penner [PEN61] bewies, dass diese Methode unter Berücksichtigung einer zusätzlichen Komponente, einer Impulsvariation, genutzt werden kann. Außerdem zeigte er, dass drei Bedingungen erfüllt sein müssen, damit die Gleichungen für die Ionentrajektorie linear bleiben und ein Matrix-Formalismus angewandt werden kann.

1. Der Ionenstrahl darf nur eine geringe räumliche Ausdehnung im Vergleich zum Ablenkradius im Dipol haben.
2. Die Winkelvariation darf nur wenige Grad betragen.
3. Der Impuls darf nur wenige Prozent variieren.

Diese Bedingungen sind am QQDS erfüllt. Somit kann diese Transfermatrix-Methode für die Magnetfeldberechnung angewandt werden. Für das zu lösende Problem zeigt sich, dass folgende Vereinfachungen angenommen werden können [FRI86]:

1. Die Lagebestimmung der Ionen erfolgt in einem kartesischen Koordinatensystem, wobei die z-Achse der Richtung der Strahlachse entspricht.
2. Der Ionenstrahl und die Magnetfelder sind zeitlich konstant.
3. Die einzelnen Ionenbewegungen in den transversalen Richtungen x und y sind voneinander unabhängig.
4. Jedes Ion kann durch seine Orts- und Impulskomponente dargestellt werden, wobei die Impulskomponenten p_x und p_y durch die Winkel zur Strahlachse $x' = dx/dz$ und $y' = dy/dz$ beschrieben werden.
5. Bei den genutzten spezifischen Energien ($E_0 < 10$ MeV/amu) können relativistische Effekte vernachlässigt werden.

Zur Berechnung der Ionenbahnen kann damit die Wirkung eines ionenoptischen Elementes in erster Ordnung durch eine Transfermatrix M beschrieben werden:

$$(x, x', y, y', \delta, l)^T = M (x, x', y, y', \delta, l)_0^T \quad (2.5)$$

Hierbei bezeichnen der Index 0 die Anfangskoordinaten, $\delta = \Delta p/p$ die relative Abweichung des mittleren Impulses und l die Weglängendifferenz eines Ions in seiner Bewegungsrichtung im Vergleich zu einem Ion mit dem Impuls p , welches sich auf der Strahlachse bewegt. Wenn die Ionen ein ionenoptisches System bestehend aus n Elementen durchlaufen, die durch die Transfermatrizen M_1 bis M_n beschrieben werden, ergibt sich die Transfermatrix M des Gesamtsystems durch Multiplikation der Einzelmatrizen:

$$M = M_n \cdot M_{n-1} \cdot \dots \cdot M_2 \cdot M_1 \quad (2.6)$$

Für das Magnetspektrometer QQDS ergibt dies:

$$M = M_{G5} \cdot M_S \cdot M_{G4} \cdot M_D \cdot M_{G3} \cdot M_{Q2} \cdot M_{G2} \cdot M_{Q1} \cdot M_{G1} \quad (2.7)$$

M_{Q1} und M_{Q2} sind die Transfermatrizen der beiden Quadrupole, M_S die des Sextupols und M_D die des Dipolmagneten. M_{G1} bis M_{G5} sind die Transfermatrizen der Driftstrecken, bei denen keine äußere Kraft auf die Ionen wirkt.

Brown et al. [BRO⁺64] erweiterten diese Methode auf eine Matrixalgebra zweiter Ordnung. Sie zeigten, dass die Matrixmultiplikationsmethode zur Lösung von einer Menge von linearen Gleichungen einfach durch Terme zweiter und höherer Ordnung mit linearen Variablen erweitert werden kann. Zur Berechnung der Magnetfelder am QQDS werden daher die erste und zweite Ordnung genutzt. Die Matrixelemente werden hierbei um die zweite Ordnung erweitert. Damit entsteht eine Transfermatrix aus den Elementen R_{ij} , welche die Elemente erster Ordnung beschreiben, und T_{ijk} für die Elemente zweiter Ordnung. Rechnerisch ergibt sich damit für die Komponenten der Trajektorie:

$$x_i = \sum_{j=1}^6 R_{ij} x_j(0) + \sum_{j=1}^6 \sum_{k=j}^6 T_{ijk} x_j(0) x_k(0) \quad (2.8)$$

$$\text{mit } x_1 = x, x_2 = x', x_3 = y, x_4 = y', x_5 = \delta \text{ und } x_6 = l$$

Die einzelnen Elemente der Transfermatrizen können durch Lösen der allgemeinen Bewegungsgleichung und anschließender Taylorentwicklung identifiziert werden. Brown gibt in [BRO82] eine Übersicht der Transfermatrixelemente erster und zweiter Ordnung. Diese sind identisch mit denen, die für den QQDS benutzt werden.

Brown [BRO82] ermittelt für die Bewegungsgleichung eines reinen Quadrupols:

$$\begin{aligned} x'' + k_q^2 x &= k_q^2 x \delta \\ y'' - k_q^2 y &= k_q^2 y \delta \end{aligned}$$

$$\text{mit } k_q^2 = \frac{B_0}{a} \frac{1}{B \cdot R_0} = \frac{2 \cdot \mu_0 \cdot N \cdot I}{a^2} \frac{q}{\sqrt{2 \cdot M \cdot E}} \quad (2.9)$$

und für einen reinen Sextupol:

$$\begin{aligned} x'' + k_s^2 (x^2 - y^2) &= 0 \\ y'' - 2k_s^2 xy &= 0 \end{aligned}$$

$$\text{mit } k_s^2 = \frac{B_0}{a^2} \frac{1}{B \cdot R_0} = \frac{2 \cdot \mu_0 \cdot N \cdot I}{a^3} \frac{q}{\sqrt{2 \cdot M \cdot E}} \quad (2.10)$$

Hierbei sind a der Aperturradius, μ_0 die Induktionskonstante und $N \cdot I$ die Amperewindungszahl pro Pol.

Die Randfelder können nach [DAY⁺54] durch effektive Feldlängen l_{eff} mit der Länge l des Quadrupols berechnet werden. Für die Quadrupole ergibt das:

$$l_{\text{eff}} = l + 1,14 \cdot a. \quad (2.11)$$

Die gesuchten Magnetfelder beziehungsweise die entsprechenden Ströme wurden durch rekursives Lösen der Transfermatrixgleichungen des Gesamtsystems berechnet. Zu beachten ist, dass die Winkel x' und y' am QQDS nicht größer als $\pm 1,1^\circ$ gewählt werden, da ansonsten die Ionen die Polschuhe der Quadrupole berühren. Die Abschlussbedingungen für die rekursive Lösung sind,

1. dass sich ein Ion mit dem Impuls p_0 auf der Sollbahn des Dipols bewegt,
2. dass die entstehenden Abbildungen sowohl für x als auch für y auf Höhe des positionsempfindlichen Detektors minimal sind und
3. dass die Fokalebene parallel zur Polschuhkante des Dipols gerichtet ist und damit der Fokuspunkt für Ionen mit $\Delta p/p \neq 0$ den gleichen Abstand vom Dipol, wie für Ionen mit $\Delta p/p = 0$ besitzt.

2.4.6 Experimentelle Kontrolle der berechneten Magnetfelder

Der experimentelle Nachweis, dass die rekursive Berechnung das richtige Ergebnis liefert, ist schwierig und zeitaufwendig. Jedoch besteht am QQDS die Möglichkeit, das Spektrometer auf einen Streuwinkel von $\Theta = 0^\circ$ zu drehen und zusätzlich den Probenhalter aus dem Ionenstrahl heraus zu fahren. In diesem Fall gelangt der Strahl vom Beschleuniger direkt in das Magnetspektrometer. Der Fokalebenen-detektor wird entfernt und an seiner Stelle ein ionolumineszierendes Sichtquarz im Vakuum montiert. Anstelle der Probe werden zwei in Reihe geschaltete Ablenkspulen mit Weicheisenkernen installiert. Der Strahl passiert den Spalt zwischen den Polen und wird bei Stromfluss in den Spulen entsprechend der Lorentzkraft abgelenkt. Dieses Spulenpaar kann einmal für die horizontale und einmal für die vertikale Strahlablenkung eingebaut werden. An die Spulen wird ein sinusförmiger Wechselstrom mit einstellbarer Frequenz angelegt. Dadurch wird der Strahl wahlweise horizontal oder vertikal kontinuierlich über die gesamte Breite bzw. Höhe der Akzeptanzblende gewobbelt. Wenn die Fokussierung der Quadrupole richtig eingestellt ist, wird auf dem Sichtquarz nur einen scharf begrenzter Strahlfleck abgebildet, der als ionenoptische Abbildung der Strahldimension am Ort der Ablenkspulen mit Berücksichtigung der entsprechenden Spektrometervergrößerungsfaktoren entspricht.

Zur Überprüfung der korrekten Wirkungsweise des Sextupols wurde die Strahlenergie um jeweils $\Delta E_0 = 4,2\%$ verkleinert oder vergrößert. Nach Gleichung (2.3) muss damit das Bild um circa 50 mm nach rechts bzw. links versetzt erscheinen, aber keine Größenänderung erfahren.

2.4.7 Kinematische Korrektur mit Hilfe der Quadrupole

Ionen, die zwar aus der gleichen Tiefe herausgestreut werden, aber verschiedene Streuwinkel besitzen, haben nach den Gleichungen (1.3) und (1.4) eine unterschiedliche Energie. Die damit verbundene Impulsänderung beträgt:

$$\frac{\Delta p}{p} = \frac{1}{2} \frac{\Delta E}{E} = \frac{1}{2} \frac{dE}{d\beta} \frac{\Delta\beta}{E} \quad (2.12)$$

Wie in Abschnitt 2.4.3 erwähnt, bewirkt die kinematische Energievariation über den Akzeptanzwinkel bei einem Dipol eine Verschiebung der Fokalebene in Richtung Dipol im Vergleich zum Fall $\Delta p_{\text{kin.}} = 0 \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$. Am QQDS kann mit Hilfe der Quadrupole und des Sextupoles jedoch diese Verschiebung der Fokalebene immer so kompensiert werden, dass die effektive Fokalebene an die Stelle des festen Fokalebeneendetektors gebracht wird. Da in der Transfermatrix-Methode sowohl der Winkel als auch eine Impulsvariation als Startwerte definiert werden, kann hier die kinematische Abhängigkeit der Energie vom Streuwinkel berücksichtigt werden [ENG58].

Bei der Berechnung der Quadrupol- und der Sextupolfelder werden somit nicht monoenergetische Ionen auf einen Punkt fokussiert, sondern die Ionen, die aus der gleichen Tiefe herausgestreut wurden. Hierbei muss die Gleichung (2.12) erfüllt sein. Dafür ist es erforderlich, dass immer die Kombination von $\Delta p/p$ mit dem entsprechenden Ausfallwinkel $\Delta\beta$ als Randbedingung der Anfangswerte bei der Berechnung der Magnetfelder vorgegeben wird. Für die kinematische Korrektur der ERD-Spektren ergibt sich somit nach Gleichung (2.12) oberflächennah die Korrektur:

$$\frac{\Delta p}{p} = \frac{1}{2} \frac{\Delta E}{E} \cong -\tan \Theta \cdot \Delta\beta \quad (2.13)$$

Recoilionen, die unter dem Winkel $\Theta + \Delta\beta$ herausgestreut werden, besitzen damit eine um den Wert ΔE geringere Energie. Diese Korrektur, die sich aufgrund der Gleichung (2.14) ergibt, ist somit sowohl massen- als auch oberflächennah tiefenunabhängig. Für geringe Streutiefen kann folglich für alle Energien und damit für alle Tiefen die gleiche kinematische Korrektur vorgenommen werden.

2.5 Fokalebeneendetektor für höchstauflösende ERD

2.5.1 Allgemeine Anforderungen an einen höchstauflösenden ERD-Detektor

Die Anforderungen an den Fokalebeneendetektor eines Magnetspektrometers werden durch die Analytikmethode vorgegeben. Ganz generell transformiert ein Magnetspektrometer die Impulsverteilung (Energieverteilung) von geladenen Teilchen in eine Ortsverteilung auf der Fokalfläche, die in guter Näherung als Ebene betrachtet werden kann. Teilchen gleicher magnetischer Steifigkeit erzeugen eine Abbildung des Quellflecks an einer definierten Position auf dieser Ebene. Die Abbildungseigenschaften, die Energiedispersion D_E und die Vergrößerung M_b in der Dispersionsebene sind

von den mechanischen Dimensionen des Spektrometers, d. h. von der Größe und Anordnung der einzelnen magnetischen Komponenten abhängig.

Zur Bestimmung der Spektrometerauflösung sind die Größen Dispersion D_E und Vergrößerung M_h in der Streuebene (am QQDS horizontal h) von wesentlicher Bedeutung. Die Definition von D_E und M_h lauten:

$$\frac{\Delta s}{D_E} = \frac{\Delta E}{E_0} = 2 \cdot \frac{\Delta p}{p_0} \quad (2.14)$$

$$M_h = \frac{\Delta s}{\Delta b_h} \quad (2.15)$$

Dabei ist Δs ein Wegstück entlang der Fokalebene und Δd_h eine Verschiebung des Strahlflecks entlang der Streuebene auf der Probe. Bei einer gegebenen Strahlflecksgröße von Δb_h auf der Probe ergibt sich ein Auflösungsvermögen des Spektrometers von:

$$\mathfrak{R} = \frac{E_0}{\Delta E} = \frac{D_E}{M_h \cdot \Delta b_h} \quad (2.16)$$

Der Fokalebendetektor ist also in erster Linie ein ortsempfindlicher Detektor (engl.: position sensitive detector PSD) mit der Ortsauflösung in der Dispersionsebene Δx_b als wichtigem Parameter für die Energieauflösung des Spektrometers, die deutlich kleiner als Δb_h sein sollte, um die theoretisch mögliche Energieauflösung des Instrumentes voll auszunutzen.

Für kleine Spektrometer, die für die RBS mit leichten Ionen mit Energien < 1 MeV und unter Detektorwinkeln $> 90^\circ$ eingesetzt werden, waren Fokalebendetektoren, die aus einer Mikrokanalplatte (engl.: micro-channel plate) und einer Streifenanode bestehen [KIM⁺96, OSI⁺06] die einzige Möglichkeit, im praktischen Betrieb Ortsauflösungen $< 500 \mu\text{m}$ zu erreichen. Der große Nachteil dieser Detektoren ist es, dass sie keine Energieauflösung bieten und deshalb nicht zwischen Teilchen mit gleicher magnetischer Steifigkeit, aber unterschiedlicher Energie unterscheiden können. Im Falle der MEIS mit Protonen treffen den Detektor nur rückgestreute Protonen, die bei gleicher Steifigkeit gleiche Energie haben. Jedoch gibt es schon bei der He-RBS das Problem, das He^+ und He^{2+} bei gleicher Steifigkeit mit unterschiedlicher Energie den Detektor erreichen. Die Energieverteilungen der rückgestreuten He-Ionen in beiden Ladungszuständen überlappen, was zu Komplikationen bei der Interpretation der Spektren führt. Die Kombination eines derartigen Detektors mit einem Wien-Filter [ARN⁺96] erwies sich in der Praxis wegen des hohen Untergrundes durch Sekundärelektronen als nur bedingt tauglich (GRÖ07, ARN10).

Bei kommerziell erhältlichen und einfach zu handhabenden Si-PSD mit ultraflacher implantierter Widerstands-Frontelektrode [CAN07] sinkt die Ortsauflösung linear mit sinkender Energie [KLE03]. Sie sind also für kleine Spektrometern nicht gut geeignet. Klein konnte zeigen, dass sich bei der RBS mit 2 MeV C-Ionen mit einem derartigen Detektor Tiefenaufösungen < 1 nm erreichen lassen [KLE03, VIE10].

Für die Röntgenastronomie wurden Mitte der 90er Jahre von den Halbleiterlabors der Max-Planck-Institute (MPI/HLL) zweidimensionale pn-CCD-Pixeldetektoren ent-

wickelt [HAR⁺06, HAR09]. Eine Anordnung von 12 solcher Detektoren mit einer Fläche von je $(30 \times 10) \text{ mm}^2$ und einer Pixelgröße von $(150 \cdot 150) \mu\text{m}^2$ wurde sehr erfolgreich im ESA-Satelliten XMM/Newton als Fokaldetektor eines Röntgenteleskopes eingesetzt. Da sich diese Pixeldetektoren hervorragend als PSD für kleine RBS-Magnetspektrometer eignen sollten, wurde ein derartiger Detektor mit (200×64) Pixeln als Fokalebeneendetektor für ein kleines Browne-Buechner-Spektrometer mit einem Sollbahnradius von 350 mm am Rossendorfer 3 MV-Tandetron ausgewählt. Da leichte Ionen bis 2 MeV damit spektrometriert werden sollen, musste der für den Röntgenenergiebereich konzipierte Standard-Detektor mit dem hybridintegrierten CAMEX-Auslesechip modifiziert werden [HAR09, GRÖ09, HAN09]. Dieser Detektor befindet sich zur Zeit im Testbetrieb.

Die bisher diskutierten Typen von Fokalebeneendetektoren eignen sich nicht oder nur sehr eingeschränkt bei Magnetspektrometern für die höchstauflösende ERD mit Schwerionen als Primärteilchen. Für ERD ist der Detektorwinkel generell $< 90^\circ$, so dass neben den elastisch gestreuten Inzidenzen (wenn diese nicht kinematisch ausgeschlossen sind (vgl. Gleichung (1.5)) die Rückstoßatome aller in der zu analysierenden Schicht vorhandenen Elemente ihre Isotope die Akzeptanzblende des Spektrometers passieren. Entsprechend der jeweiligen Ladungszustandsverteilung treten Ionen mit unterschiedlichsten Massen und Ladungszuständen in einem breiten Energiebereich auf. Somit treten Fälle auf, dass unterschiedliche Teilchen mit gleicher magnetischer Steifigkeit sehr eng benachbarte Energien haben und von der Energieauflösung des Detektors nicht getrennt werden können. Stabile Isobare der interessierenden Rückstoßatome, die magnetisch generell von diesen nicht zu trennen wären, gibt es im Massenbereich der ERD nicht (Mattauchschen Isobarenregel).

Zur Vermeidung von spektralen Interferenzen, die bei einfachsten ERD-Experimenten auftreten, wenn nur ein Teilchendetektor mit einer Stopperfolie genutzt wird [TES⁺95], werden heute bei der ERD-Methode sowohl ΔE - E_{rest} -Detektorteleskope [FUL79, QUA⁺79, ASS92, ASS⁺94, BER⁺98] bzw. Bragg-Ionisationskammern [GRU⁺82, SCH⁺82, ASS⁺82, SHE⁺85, KOT⁺87, HEN⁺89, ORT⁺89, ASS92, KRE⁺94, TRI⁺97, SAN⁺00, BAR⁺06, SAN⁺08] verwendet, die eine Teilchenidentifikation hinsichtlich der Ordnungszahl ermöglichen [FUL79], als auch Time-of-Flight-Detektoren [BUS⁺80, KOT05], die die Teilchen nach ihrer Massenzahl selektieren. Diese Identifikation ist im interessierenden Massenbereich der Rückstoßatome eindeutig. Insbesondere die ΔE - E_{rest} -Ionisationskammern werden auch mit einer Ortsauflösung, z. B. durch eine strukturierte back-gammon-Anode, ausgestattet, die bei großen Raumwinkeln eine kinematische Korrektur ermöglicht [ASS⁺94]. Die Ortsauflösung dieser Anordnungen reicht jedoch für den Einsatz als Fokalebeneendetektor beim höchstauflösenden QQDS ERD-Magnetspektrometer nicht aus. Für dieses Spektrometer musste deshalb ein neuartiges Detektorteleskop entwickelt werden. Diese Detektoranordnung wird im Folgenden beschrieben.

2.5.2 Aufbau des QQDS-Fokalebeneendetektors

Das Detektorteleskop besteht aus zwei unterschiedlichen Detektoren, die in einem Gehäuse hintereinander angeordnet sind. Der erste ist ein ortsempfindlicher Proportionalzähler und der zweite eine Bragg-Ionisationskammer. Der Aufbau der beiden Detektoren ist in Abbildung 2.8 a) und b) dargestellt. Beide Ionisationsdetektoren

befinden sich im selben Gasvolumen, das durch eine circa $70 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ (ca. 700 nm) dünne Polypropylen-Folie [BAR⁺77] vom Hochvakuum des Magnetspektrometers getrennt ist. Diese Eintrittsfolie wird durch ein Stützgitter getragen.

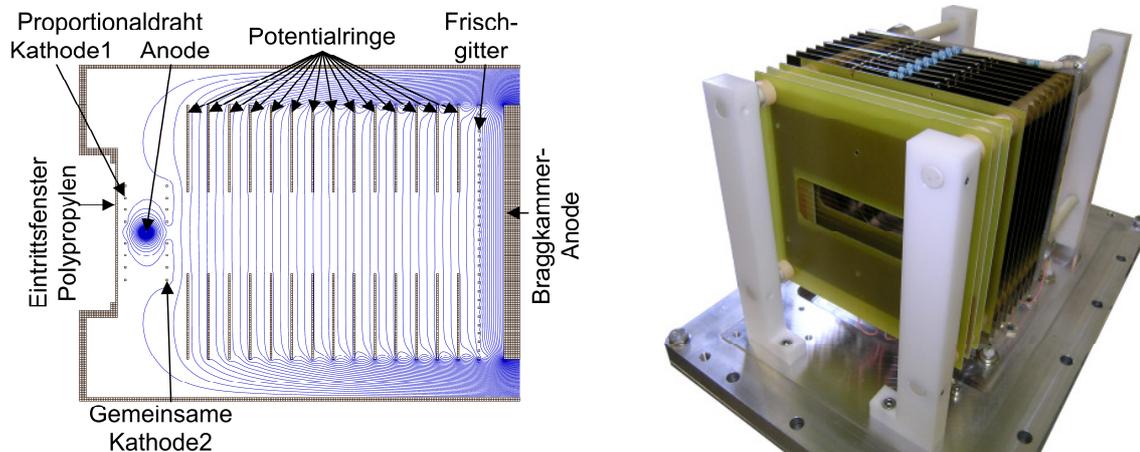


Abbildung 2.8: Aufbau des Fokalebenendetektors

- a) Schnitt senkrecht zur Dispersionsebene des Dipols mit elektrischen Äquipotentialflächen (blau), die mit der Software SIMION v7 [SIM07] simuliert wurden
- b) Fotografie

Der im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Proportionalzähler hat einen Anodendraht aus einer $\text{NiCr}_{20}\text{AlSi}$ Legierung mit einem spezifischen Gleichstromwiderstand von $\rho = 16,807 \text{ k}\Omega\cdot\text{m}^{-1}$. Er ist circa 130 mm lang und besitzt einen Durchmesser von $d_{\text{prop}} = 10 \mu\text{m}$ [ISA07]. Es werden beidseitig ladungsempfindliche Vorverstärker CANBERRA 2003T [CAN07a] eingesetzt.

Der Fokalebenendetektor ist eine spezielle Form eines so genannten ΔE - E_{rest} -Detektorteleskopes. Die Restenergie, die die Teilchen nach Passieren des Proportionalzählers behalten, wird hier mit einer Bragg-Ionisationskammer (BIC) [GRU⁺82, SCH⁺82] gemessen.

Die BIC besteht aus der Kathode, durch die die Teilchen eintreten, einem Gasraum und am Ende aus einer Kombination von Frischgitter und Anode. Das elektrische Feld ist hier axial, also parallel zur Einfallsrichtung der Teilchen gerichtet. Das notwendig homogene Driftfeld innerhalb des Driftvolumens wird durch äquidistante Potentialringe, die durch isolierende Abstandsringe eine Distanz von 7 mm aufweisen, erzeugt. In Abbildung 2.8 a) sind in diesem Zusammenhang zusätzlich zum Detektor-design die Äquipotentiallinien, die mit der Software SIMION [SIM07] simuliert wurden, eingezeichnet. An ihnen ist zu erkennen, dass das elektrische Feld zwischen Kathode und Frischgitter homogen ist. Die Potentialringe sind über eine Widerstandskette miteinander verbunden. Das Massepotential dieser Widerstandskette ist die kammerseitige Kathode, die gleichzeitig eine der Kathoden des Proportionalzählers ist.

Das **Gehäuse** mit einem rechteckigen Querschnitt (vgl. Abbildung 2.9) ist UHV-gerecht aus Edelstahl geschweißt. Das Material für die inneren Bauteile wurde für

eine möglichst niedrige Gasabgabe ausgewählt. Das verwendete Zählergas ist Isobutan mit einer Reinheit von 99,99% [BRO⁺98]. Bereits geringe Verunreinigungen elektronegativer Gase wie zum Beispiel O₂, NH₃ oder H₂O können die Detektoreigenschaften stark beeinträchtigen, insbesondere wenn sich deren Partialdruck durch Vakuumlecks oder durch Ausgasen der Bauteile ändert. Aus diesem Grund wird mit Gasdurchfluss gearbeitet. Der Isobutandruck kann dabei für jede Messung individuell so eingestellt werden, dass die Teilchen mit der größten Reichweite noch im Gas vollständig abgebremst werden und ihre gesamte Energie durch Ionisation abgeben.

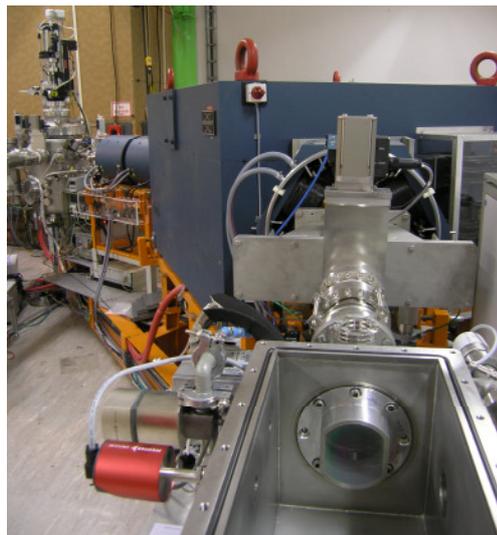


Abbildung 2.9: Fotografie des Detektorgehäuses (unten rechts), der vier Magnetkomponenten (blau) und der Targetkammer

Die Detektorkammer wird im Durchflussbetrieb permanent mit einer Vorvakuum-pumpe durch ein Nadelventil abgepumpt. Die Saugleistung bzw. der Gasdurchfluss kann manuell eingestellt werden. Der Druck in der Detektorkammer wird mit einem temperaturkompensierten kapazitiven Vakuummesskopf CMR 362 der Firma Pfeiffer gemessen. Dessen Messgenauigkeit ist mit 0,2 % vom Messwert angegeben. Ein PID-Regler (Proportional-Integral-Differential controller) RVC 300, ebenfalls der Firma, steuert das Piezoventil am Gaseinlass, so dass in der Kammer der eingestellte Soll-druck langsam erreicht und anschließend gehalten wird.

Die physikalische **Funktion des ortsempfindlichen Proportionalzählers** ist gleich der eines konventionellen koaxialen Proportionalzählers [KLE05], hat aber eine andere Feldverteilung. Wenn ein Ion in den Bereich des Proportionalzählers gelangt, ionisiert dieses Ion das Zählergas und erzeugt Elektron-Ion-Paare. Die mittlere Energie, die zur Erzeugung eines Elektron-Ion-Paares benötigt wird, beträgt bei Isobutan circa 23 eV. Die mittlere Anzahl dieser Paare pro atomarer Flächendichte ist proportional zum spezifischen elektronischen Bremsquerschnitt. Die generierten Elektronen und Ionen diffundieren ohne anliegendes elektrisches Feld gleichförmig vom Entstehungspunkt in jede Raumrichtung. Durch die Coulombanziehung rekombiniert ein großer Teil der Ion-Elektronen-Paare. Bei Anlegen einer externen Spannung an die Elektroden wird entlang der Feldlinien des äußeren elektrischen Feldes der Diffusionsbewegung eine Drift überlagert, so dass die Elektronen zur Anode und die Ionen zur Kathode driften. Bei hinreichend großer Feldstärke findet

keine Rekombination statt und die Zahl der driftenden Ladungsträger entspricht der Zahl der erzeugten. Die transversale Diffusion bleibt jedoch von der Drift unbeeinflusst. Die Beschleunigung der Ladungsträger wird durch eine Kollision mit den Gasmolekülen unterbrochen, so dass sich eine mittlere Driftgeschwindigkeit einstellt, die für Elektronen und Ionen sehr unterschiedlich ist. In unmittelbarer Nähe des dünnen Anodendrahtes mit einem Durchmesser von $10\ \mu\text{m}$ wird bei ausreichend hoher Spannung die Feldstärke so groß, dass Lawinenbildung und damit Gasverstärkung einsetzt.

Das Verhältnis aus der Anzahl aller freien Elektronen N zur Anzahl der durch primäre Ionisation frei gewordenen Elektronen N_0 ist der Gasverstärkungsfaktor:

$$M = \frac{N}{N_0} \quad (2.17)$$

Neben der Detektorgeometrie und der Wahl des Zählgases wird der Gasverstärkungsfaktor und damit der Betriebsmodus des Gasetektors durch die angelegte Hochspannung U_{Bias} bestimmt [KLE05]. In Proportionalzählern ist der Gasverstärkungsfaktor konstant. Dies bedeutet, dass das Signal $Q\delta(t)$ proportional zur primären Ionisation ist. Die einstellbaren Gasverstärkungsfaktoren liegen hier im Bereich von $1 \cdot 10^3$ bis $5 \cdot 10^3$.

Durch die Gasverstärkung ist die von einem durchfliegenden Teilchen auf den Anodendraht influenzierte Ladung

$$Q\delta(t) = \int_0^{\infty} I_e(t) dt \quad (2.18)$$

um den Faktor M höher als bei einer Ionisationskammer gleicher Dimension.

Bei einem einfachen Proportionalzählrohr fließt diese Ladung auf den Rückkoppelkondensator C_f eines ladungsempfindlichen Vorverstärkers und erzeugt an dessen Ausgang einen Spannungssprung von:

$$u_{vV}(t) = \frac{1}{C_f} \int_0^{\infty} I_e(t) dt \quad (2.19)$$

Da die Teilchenbahnen im Detektor etwa senkrecht zum Anodendraht liegen, wobei es keine Komponenten des elektrischen Feldes parallel zur Dispersionsebene gibt, bewirkt die transversale Diffusion der Ladung keine wesentliche Verbreiterung der Ladungswolke und die Ladungslawine bildet sich an der Anode genau oberhalb (oder unterhalb) der Teilchenbahn. Diese Position lässt sich durch Ladungstrennung auf dem Anodendraht messen. Die Anode besteht dazu aus einem Draht mit einem großen spezifischen Ohmschen Widerstand ρ und der Länge l [OWE⁺68, BOR⁺78, FOR79, MAT⁺79, MAT⁺81, MAT⁺82]. Wird an einer Position mit dem Abstand x von einem Ende des Drahtes (vgl. Abbildung 2.10) ein Ladungsimpuls $Q\delta(t)$ eingespeist, so teilt sich der Strom auf und es fließen unterschiedliche Ströme I_{links} und I_{rechts} und damit unterschiedliche Ladungen Q_{links} und Q_{rechts} zu den beiden Enden des Drahtes.

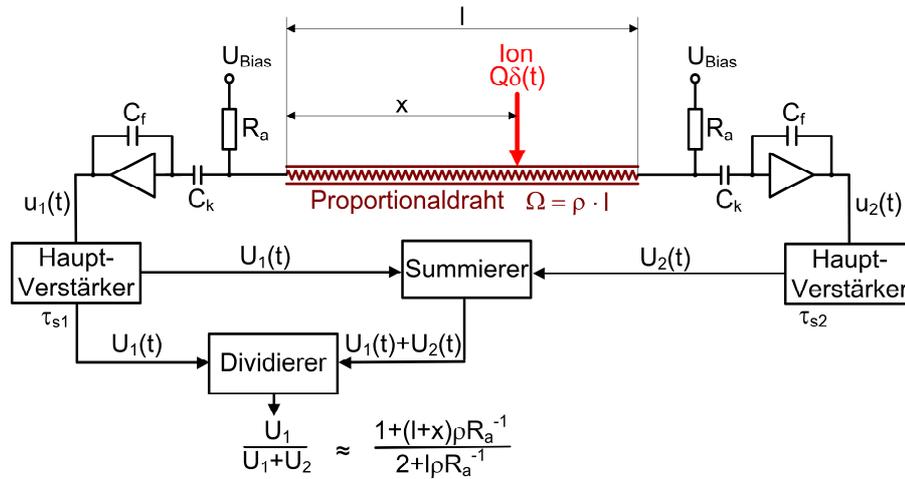


Abbildung 2.10: Blockschaltbild des positionsempfindlichen Proportionaldrahtes:

- $Q\delta(t)$... $\delta(t)$ -förmige Ladung des Ions;
- l ... Länge des Proportionaldrahtes;
- x ... Position des Ions auf dem Proportionaldraht;
- Ω ... Gesamtwiderstand des Proportionaldrahtes;
- ρ ... spezifischer Widerstand des Proportionaldrahtes;
- R_a ... Arbeitswiderstand;
- U_{Bias} ... Hochspannung;
- C_k ... Koppelkondensator;
- C_f ... Rückkoppelkondensator;
- $u_1(t)$ und $u_2(t)$... Spannung nach Vorverstärker;
- $U_1(t)$ und $U_2(t)$... Spannung nach Hauptverstärker;
- τ_{s1} und τ_{s2} ... Formungszeiten des Hauptverstärkers

$$Q_{\text{links}}(t) = Q\delta(t) \cdot \left(1 - \frac{x}{l}\right) \quad \text{und} \quad Q_{\text{rechts}}(t) = Q\delta(t) \cdot \frac{x}{l} \quad (2.20)$$

An beiden Drahtenden sind ladungsempfindliche Vorverstärker angeschlossen, gefolgt von sogenannten spektroskopischen Verstärkern, die durch Impulsintegration und -differentiationsstufen aus dem Spannungssprung der Vorverstärker gaußförmige Impulse formen, deren Höhe

$$U_1(t) = c_1 \cdot Q_{\text{links}}(t) + o_1 \quad \text{und} \quad U_2(t) = c_2 \cdot Q_{\text{rechts}}(t) + o_2 \quad (2.21)$$

jeweils ungefähr proportional der Eingangsladung ist. Geringe Unterschiede der Proportionalitätskonstanten c_1 und c_2 sind geringe Unterschiede der Vorverstärker (Rückkoppelkapazität) und spektroskopischen Verstärker bedingt, die Konstanten o_1 und o_2 durch den Gleichspannungsoffset am Ausgang der spektroskopischen Verstärker. Durch sorgfältigen Abgleich der Elektronik mit Hilfe eines Präzisionsimpuls-generators lässt sich aber immer erreichen, dass

$$c = c_1 = c_2 \quad \text{und} \quad o = o_1 = o_2 \quad (2.22)$$

wird.

Die Positionsinformation P ergibt sich dann entweder

$$P_{\text{links}} = \frac{U_{\text{links}}}{U_{\text{links}} + U_{\text{rechts}}} \quad \text{oder} \quad P_{\text{rechts}} = \frac{U_{\text{rechts}}}{U_{\text{links}} + U_{\text{rechts}}} \quad (2.23)$$

durch Analogsignalsummation und -division wie in Abbildung 2.10 schematisch dargestellt.

Einfacher ist jedoch die numerische Lösung. In den nachfolgenden Analog-Digital-Konvertern (ADC) werden die Signale U_{links} und U_{rechts} ohnehin digitalisiert und einem Multiparameter Multichannel System MPA-3, der Firma FastComTec [FAS07] weiterverarbeitet. Der Ausgang der ADC ist eine Adresse als Binärzahl. Deren Größe A ist wieder jeweils proportional zu U, jedoch gerätetypisch mit geringfügigen unterschiedlichen Proportionalitätsfaktoren c_3 und c_4 .

$$\begin{aligned} A_1 &= c_3 \cdot U_1 + o_3 = c_1 \cdot c_3 \cdot Q_{\text{links}} + o_3 & \text{bzw.} \\ A_2 &= c_4 \cdot U_2 + o_4 = c_2 \cdot c_4 \cdot Q_{\text{rechts}} + o_4 \end{aligned} \quad (2.24)$$

Während o_3 und o_4 (die Nullpunktoffsets der ADC) sich wieder relativ einfach beseitigen lassen, sind die Konversionskoeffizienten der ADC nicht einstellbar, so dass durch Einstellung der Hauptverstärker (c_1 und c_2) die Produkte der Koeffizienten gleichgesetzt werden:

$$c_1 \cdot c_3 = c_2 \cdot c_4 \quad (2.25)$$

Die Ungleichheit der beiden spektroskopischen Zweige kann auch experimentell bestimmt und numerisch berücksichtigt werden [OST⁺05].

Entlang der Teilchenspur werden Elektronen-Ionen-Paare generiert, deren räumliche Dichte

$$\frac{dQ_-(x)}{dx} = \frac{dQ_+(x)}{dx} \quad (2.26)$$

wiederum dem spezifischen Energieverlust der Teilchen proportional ist. Im elektrischen Feld werden die Ladungen getrennt und die Rekombination minimiert. Die ursprünglich generierten Ladungen bewegen sich mit den jeweiligen konstanten Driftgeschwindigkeiten v_+ und v_- zur Katode (Ionen) und zur Anode (Elektronen). Ausgewertet wird nur das Signal, das die Elektronenwolke beim Durchtritt durch das Frischgitter auf der Anode induziert. Das Frischgitter bewirkt eine Abschirmung der Ladungen während der vorherigen Drift, so dass sich die Zeitabhängigkeit des induzierten Stromes I_- ergibt zu

$$I_- = \frac{\Delta Q_-(t)}{\Delta t} = \frac{\Delta Q_-(x)}{\Delta x} \cdot \left. \frac{\Delta x}{\Delta t} \right|_- = \frac{\Delta Q_-(x)}{\Delta x} \cdot v_{D-} \quad \text{mit } v_D = \text{konstant} \quad (2.27)$$

Im verwendeten Isobutan beträgt die Driftgeschwindigkeit der Elektronen ca. 4 cm/ μ s.

Ist die Reichweite der Teilchen im Zählgas kleiner als die Kammerlänge, so wird die gesamte Restenergie abgegeben und die auf der Anode integrierte Ladung ist proportional zur Teilchenenergie.

Die spezifische Ionisation $dQ(x)/dx$ enthält die Information über die Kernladungszahl Z der Teilchen. Der Maximalwert dieser Ionisationsfunktion, also die Höhe des Braggpeaks, steigt mit steigendem Z der Teilchen. Dieser Wert ist somit charakteristisch für die Kernladungszahl Z . Am Beispiel von Sauerstoff und Kohlenstoff bei einer Primärenergie von 15 MeV ist dies in Abbildung 2.11 exemplarisch dargestellt.

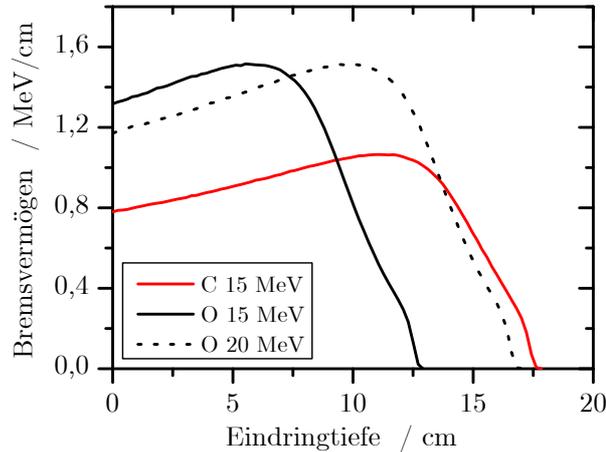


Abbildung 2.11: Bremsvermögen von O und C in Isobutan bei $p = 35$ mbar

Aus der elektronischen Impulsanalyse, z. B. mit Hilfe eines Braggprozessors auf der Basis einer schnellen sampling-Einheit erhält man die Information über die Energie durch Impulsintegration und durch Impulsformanalyse über die Kernladungszahl der Teilchen. Messtechnisch einfacher und im Rahmen dieser Arbeit interessierenden Energie- und Z -Bereich gleichwertig ist es, das Signal nach dem ladungsempfindlichen Vorverstärker der Anode aufzuteilen. Zum einen wird das Signal einem spektroskopischen Verstärker mit langer Integrationszeit ($\tau_{\text{lang}} = 2 \mu\text{s}$) zugeführt, der das Energiesignal liefert. Im zweiten spektroskopischen Zweig wird in einem schnellen spektroskopischen Verstärker das Signal bei der Formung mit einer Zeitkonstante von $\tau_{\text{kurz}} = 200$ ns differenziert. Dieser Verstärker liefert das Braggpeak-Signal (BPS) als Maß für die Kernladungszahl des Teilchens. In einem zweidimensionalen Graphen (vgl. Abbildung 2.12) kann die beiden Signale dargestellt und anschließend das zu untersuchende Teilchen selektiert werden.

Bei der Konstruktion einer BIC sind neben den Anforderungen an die Reinheit des Zählergases noch andere physikalische und konstruktive Randbedingungen zu beachten, um ein Optimum an Energie- und Z -Auflösung für den jeweils interessierenden Energie- und Teilchenbereich zu erreichen. In einer großen Anzahl von Arbeiten werden diese Aspekte diskutiert [GRU⁺82, SCH⁺82, ASS⁺82, SHE⁺85, KOT⁺87, HEN⁺89, ORT⁺89, TRI⁺97, SAN⁺00, BAR⁺06, SAN⁺08].

Besondere Aufmerksamkeit erfordert die konstruktive Gestaltung der Anordnung von Frischgitter und Anode. Das **Frischgitter** FG befindet sich auf einem Potential zwischen dem der Kathode und dem der Anode, räumlich hinter dem letzten Potentialring und in einem geringen Abstand vor der Anode. Die Ladungsträger werden innerhalb des Bereichs zwischen Kathode und Frischgitter erzeugt. Das FG soll in dieser Konstruktion einerseits die Wirkung des Feldes dieser Ladungsträger auf

die Anode möglichst gut abschirmen, andererseits aber hochtransparent sein, damit möglichst viele Elektronen zur Anode gelangen und nicht von den Drähten des FG absorbiert werden. Diese Effekte werden beeinflusst vom Durchmesser $d_{\text{FG}} = 2 \cdot r_{\text{FG}}$ und Abstand der Drähte des Frischgitters $d_{\text{FG-FG}}$ und vom Abstand des FG von der Anode ($d_{\text{FG-A}} = 1,3 \text{ mm}$). Das Verhältnis der Frischgitterdrahtabstände zum Abstand der Anode zum Frischgitter bestimmt die Effizienz der Gitterabschirmung. Die Ineffizienz der Abschirmung σ_{FG} des Frischgitters geben Bunemann et al. [BUN+49] mit

$$\sigma_{\text{FG}} \approx \frac{d_{\text{FG-FG}}}{2\pi d_{\text{FG-A}}} \log \frac{d_{\text{FG-FG}}}{2\pi \cdot r_{\text{FG}}} \quad (2.28)$$

In der BIC für das QQDS-Magnetspektrometer wurde ein Frischgitter eingesetzt, das im Detektorlabor des HZDR entwickelt und gebaut wurde [HUT08]. Diese Gitterentwicklung wurde bei vielen im HZDR gebauten Detektoren eingesetzt und hat sich bewährt, da es wenig schwingungsanfällig ist und die Mikrophonieanfälligkeit des Detektors minimal ist. Es besteht aus parallelen vorgespannten Wolframdrähten mit einem Durchmesser von $d_{\text{FG}} = 50 \mu\text{m}$ und äquidistanten Abständen von $d_{\text{FG-FG}} = 0,5 \text{ mm}$. Die Ineffizienz der hier gewählten Gitterabschirmung beträgt nach Gleichung (2.28) somit $\sigma_{\text{FG}} = 0,003$ und ist damit unkritisch für die erreichbare Energie- und Z-Auflösung.

2.6 Datenverarbeitung

2.6.1 Online-Datenerfassung

Für die Datenaufnahme wird ein System mit der Bezeichnung MPA-3 (Multiparameter Data Acquisition System) [FAS07] der Firma Fast ComTec GmbH verwendet. Mit diesem System können bis zu 16 digitale Parameter und eine Signallrate von bis zu $6 \cdot 10^6$ Ereignisse je Sekunde unter wählbaren Koinzidenzbedingungen erfasst werden. Das Hauptmodul, welches mittels einer PCI-Karte¹ mit dem Computer verbunden ist, hat vier Analog-Digital-Wandler-Eingänge (ADC-Eingänge) und kann mit bis zu drei Erweiterungsmodulen, die ebenfalls je vier ADC-Eingänge besitzen, aufgerüstet werden. Die Konvertierung der analogen Messsignale in kompatible digitale Werte übernehmen Wandler der selben Firma mit der Bezeichnung 7074 [FAS07a]. Mit der zugehörigen Software MPA-NT [FAS07] können ein- oder zweidimensionale Spektren in Form von Histogrammen erzeugt werden. Da während der Messung (online) flexible Bedingungen gesetzt werden können, ist es möglich eine vorläufige Datenanalyse während eines laufenden Experiments durchzuführen. Die aufgenommenen Daten werden in zwei Dateiformaten abgelegt. Zum einen werden die entstandenen Histogramme (*.mpa) gespeichert. Hierbei geht die Zeitinformation verloren und nachträgliche Änderungen sind nicht mehr möglich. Zum anderen werden die einzelnen Ereignisse chronologisch in Ereignislisten (listfile) gespeichert. Dadurch wird die vollständige Information der Messung festgehalten und nachträg-

¹ Peripheral Component Interconnect (PCI): ein paralleler, synchroner Bus-Standard zum Verbinden von Computersteckkarten mit dem Chipsatz eines Prozessors [SHA+99]

liche Auswertungen mit geänderten Analysebedingungen sind möglich. Die weiteren Auswertungen erfolgen anschließend offline, so dass sie nicht während der Messzeit durchgeführt werden müssen. Hierfür wird eine (innerhalb dieser Arbeit) selbstgeschriebene Software namens "LJanalysisMK" verwendet. Bei dieser Software sind alle Eingabe-, Analyse- und Ausgabemöglichkeiten auf die Auswertung von höchstaflösenden ERD-Messungen optimiert, können aber jeder Zeit an neue Konfigurationen angepasst werden.

2.6.2 Datenerfassung und Koinzidenzzeit

Über die Softwarevoreinstellungen im MPA-3 werden die Einstellungen gewählt, die für die digitale Datenerfassung notwendig sind. Dies sind zum Beispiel die Auswahl der ADCs, der Speicherort auf einem Datenträger, die Messabbruchkriterien, die bit-Auflösung der ADCs sowie die Koinzidenzzeit. Zusätzlich besteht ebenfalls die Möglichkeit die erfassten Spektren nach Aufnahme der Messwerte weiter zu bearbeiten. Hilfreich ist oft zum Beispiel eine drei-dimensionale Darstellungen der erfassten Spektren.

Die Messungen müssen immer im Koinzidenzmode erfolgen. In diesem Mode werden nur Ereignisse erfasst, die zeitlich im orts- und im ordnungszahlsensitiven Detektor zusammentreffen. Durch diese Koinzidenzmessung werden zum einen die Zufallsereignisse herausgefiltert und zum anderen den Messungen eindeutig sowohl die Elementart als auch die Position und damit auch die Energie (vgl. Abschnitt 2.7) der Ionen zugeordnet. Im List-mode werden alle koinzident registrierten Ereignisse in einer Datei niedergeschrieben. Diese Datei enthält die Zahlenwerte aller digitalisierten Signale in zeitlicher Reihenfolge. Durch die Wahl einer geeigneten Koinzidenzzeit können alle Werte, die von einem Ion stammen, erfasst werden. Dies ist notwendig, da die Detektoren unterschiedliche Auflösungs- und verschiedene Formungszeiten haben (vgl. Abschnitt 2.5.2) und damit nicht gleichzeitig die Signale verarbeiten. Zu beachten ist hierbei, dass bei zu groß gewählter Koinzidenzzeit die Totzeit der Detektoren und damit die Gesamtmesszeit erhöht wird. Durch einen Vergleich der Auflösungs- und Formungszeiten der einzelnen Hauptverstärker ergibt sich eine Koinzidenzzeit von $t_{\text{Koinzidenz}} = 5 \mu\text{s}$.

Der Gesamtdetektor wird mit einem Ionisationsgasdruck betrieben, bei dem nur die nachzuweisenden Elemente und gegebenenfalls leichtere Elemente in den Braggdetektor gelangen. Die schwereren Elemente, die nicht nachgewiesen werden sollen, werden bereits vor der Braggkammer gestoppt. Demzufolge muss der Gasdruck an das jeweilige Experiment angepasst werden, und die Gesamtrate aller Teilchen wird dabei nur vom ersten Detektor, dem ortssensitiven Detektor, erfasst. Im Fall der Sauerstoffrecoilmessungen beträgt der Isobutandruck beispielsweise $p_{\text{iso-C}_4\text{H}_{10}} = 55 \text{ mbar}$. Dies hat zum einen die Folge, dass die Koinzidenzzeit zum größten Teil die Totzeit bestimmt. Beträgt z. B. die Rate im Detektor 2000 Ionen pro Sekunde, dann ist ein ADC 2000-mal für $5 \mu\text{s}$ nicht bereit neue Signale entgegenzunehmen, falls nicht vor Ablauf der Koinzidenzzeit die anderen ADCs einen Wert oberhalb des Schwellenwertes digitalisieren. Damit würde sich in diesem Fall eine Totzeit von circa 1 % ergeben. Zum anderen kann es bei einer zu hohen Ionenrate dazu kommen, dass zwei Ereignisse innerhalb der Formungszeit der Hauptverstärker des ortssensitiven Detektors fälschlicherweise als ein Signal vom ADC verarbeitet werden. Dies ergibt beispielswei-

se bei einer Rate von 2000 Ionen pro Sekunde und einer Formungszeit von $\tau_{\text{shap}} = 0,2 \mu\text{s}$ eine vernachlässigbare Wahrscheinlichkeit von 0,000008% (Annahme: Poisson-Verteilung) für ein Doppel- bzw. Mehrfachereignis.

2.6.3 Erzeugung der Energiespektren

Für die Erzeugung der höchstauflösenden ERD-Energiespektren wurde im Rahmen dieser Arbeit eigens ein Softwarepaket namens "LJanalysisMK" entwickelt. Dieses Programm wurde mit der ereignisorientierten ANSI-C-Programmierungsumgebung LabWindows/CVI geschrieben. LabWindows verwendet dieselben Bibliotheken und Datenerfassungsmodule wie LabVIEW der Firma National Instruments.

Die durch MPA-NT im List-mode (vgl. Abschnitt 2.6.2) gespeicherte Datei muss als erstes in ein Format konvertiert werden, welches von dem Programm "LJanalysisMK" verarbeitet werden kann. Anschließend werden mit dieser Software aus allen Ereignissen die zu analysierenden Elemente herausgefiltert. Dies findet durch Selektion, dem sogenannten "Region-of-Interest", in einem zwei-dimensional aufgetragenen Ereignishistogramm statt. Die beiden Achsen stellen die Messergebnisse der Braggionisationskammer dar. Das Signal, welches auf der x-Achse abgetragen wird, entspricht dem der Restenergie. Auf der y-Achse wird das Signal abgetragen, dass der Ordnungszahl Z proportional ist. In Abbildung 2.12 a) ist dies am Beispiel einer SiO_2 -Probe, die mit einem $^{35}\text{Cl}^{4+}$ (20 MeV) Strahl und einem Kammerionisationsdruck von 30 mbar gezeigt. Bei Erhöhung des Ionisationskammerdruckes auf 55 mbar erreichen sowohl die Si-Recoilatome als auch die elastisch gestreuten Primärionen nicht mehr die Braggionisationskammer. Dieser Fall ist in Abbildung 2.12 b) dargestellt. Bei hohem Ionisationskammerdruck müssen somit nur andere leichtere Elemente der Probe und Verunreinigung in den Schichten herausgefiltert werden. Die nun selektierten Signale sind im Fall von SiO_2 , in dem der Sauerstoff nachgewiesen werden soll, ausschließlich Sauerstoff-Recoils mit einem exakten Ladungszustand. Von genau diesen Signalen wird jetzt das Ortsspektrum generiert. Dazu wird aus den beiden ortssensitiven Detektorsignalen die Position der Recoilionen in der Fokalebene bestimmt (vgl. Gleichung (2.23)).

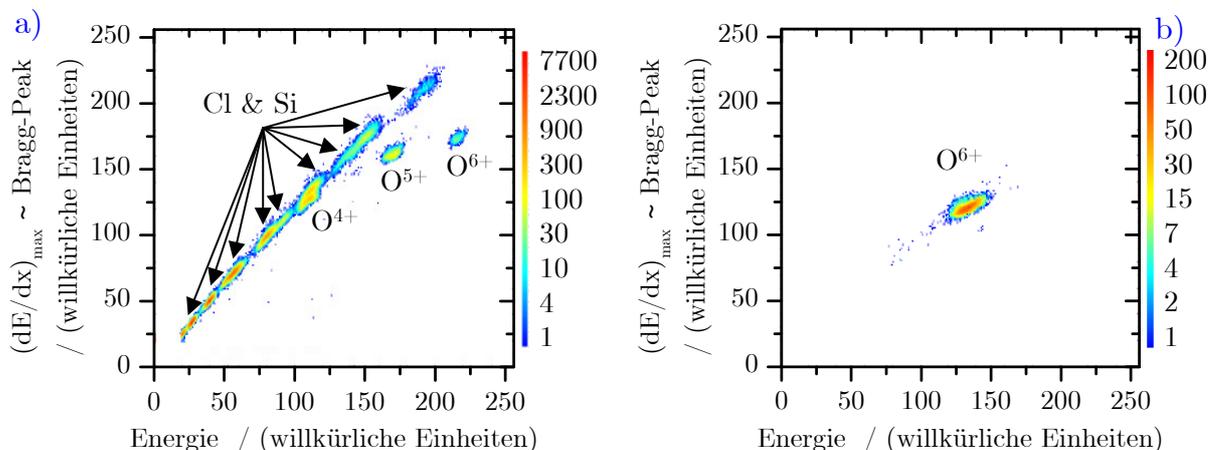


Abbildung 2.12: zwei-dimensionale Histogrammdarstellung der Braggionisationskammersignale einer SiO_2 -Probe und einem $^{35}\text{Cl}^{4+}$ (20 MeV) Stahl mit einem Kammerionisationsdruck von a) 30 mbar b) 55 mbar

2.7 Energiekalibrierung

Die Lorentzkraft $\vec{F}_L = q \cdot (\vec{v} \times \vec{B})$ ist die Kraft, die ein magnetisches Feld mit der magnetischen Flussdichte B auf ein Ion mit der elektrischen Ladung q ausübt. Diese Kraft ist orthogonal zu den magnetischen Feldlinien und ebenfalls orthogonal zur Bewegungsrichtung des Ions. Somit wird das Ion durch das magnetische Feld von seiner ursprünglichen Bewegungsrichtung abgelenkt, der Betrag der Geschwindigkeit jedoch nicht geändert. Damit ist in einem magnetischen Dipolfeld mit der magnetischen Flussdichte B_D , welches senkrecht zur Bewegungsrichtung des Ions gerichtet ist, die Lorentzkraft gleich der Zentripetalkraft $F_Z = m \cdot v^2 \cdot r^{-1}$, die auf das Ion wirkt. Daraus ergibt sich die Relation (2.29), die als magnetische Steifigkeit bezeichnet wird:

$$B_D \cdot r = \frac{mv}{q} = \frac{\sqrt{2 \cdot m \cdot E}}{q} \quad (2.29)$$

In einem konstanten Magnetfeld B_D kann die Energie eines Ions mit der Masse m und dem Ladungszustand q als Funktion des Radius $r = r(E)$ bestimmt werden. Am QQDS wird dieser Radius mittels des ortssensitiven Detektors ermittelt. Somit kann r als eine Funktion der Ortes $r = r(x)$ beschrieben werden.

Bei Streuexperimenten ergibt sich, dass sowohl die elastisch gestreuten Ionen, als auch die Recoilionen eine maximale Energie nach Streuung an Atomen, die sich an der Oberfläche befinden, besitzen. Durch die Selektion des ordnungszahlsensitiven Detektors können die Recoilion mit der gewählten Ordnungszahl Z oder auch die elastisch gestreuten Ion ausgewählt werden. Nur das Spektrum dieser Ionen wird in den Folgeschritten ausgewertet. Die maximale Energie dieser Ionen kann als sogenannte Oberflächenkante im Ortsspektrum des positionsempfindlichen Detektors zugeordnet werden. Anschließend wird die magnetische Flussdichte B_D in diskreten Schritten geändert und dabei die Position der Oberflächenkante erfasst. Somit ergibt sich eine Ortsfunktion $x = f(B_D, E)$, die von B_D und der Oberflächenenergie E abhängt. Da das magnetische Feld mit einer Hall-Sonde gemessen wird und damit bekannt ist, kann mittels der magnetischen Steifigkeit (2.29) für jedes Magnetfeld ein Ablenkradius berechnet werden. Somit kann die Position x als eine Funktion $x = f(r(B_D, E))$ angegeben werden. Dessen Umkehrfunktion ist somit die Energiekalibrierung.

Diese indirekte Energiekalibrierung hängt wiederum direkt von der Dispersion ab und muss aus diesem Grund bei einer Änderung dieses Parameters neu ermittelt werden.

Die für diese Arbeit ermittelte Energiekalibrierung wurde mittels einer Lanthanoxid-Probe durchgeführt. Dafür wurde zuerst der Radius in Abhängigkeit vom Ort ermittelt. Der Ort wird hierbei durch einen Digitalwert (Kanal) des Analog-Digital-Wandlers (ADC) repräsentiert und mit der magnetischen Steifigkeit (vgl. Gleichung (2.29)) ergibt sich damit die aktuelle Energiekalibrierung in Abhängigkeit der Kanalnummer K :

$$E_{LJ}(K) = \frac{(B_D \cdot q)^2}{2 \cdot m} \cdot (0,01449 + 5,1068 \cdot 10^{-6} \cdot K)^2 \quad (2.30)$$

Kapitel 3

Ladungszustandsverteilung

3.1 Überblick

Das Abbremsen von schweren Ionen in Materie ist mit ständigen Änderungen des Ladungszustandes verbunden. Das Ion kann Elektronen sowohl direkt aus einem gebundenen Zustand eines Probenatoms (electron capture) [EIC85] als auch aus dem Leitungsband, wobei ein Photon emittiert werden kann [EIC07], einfangen. Ebenso kann das Ion Elektronen entweder durch direkte Ionisation oder durch Ionisation nach Anregung in eine höhere Schale an das Targetmaterial abgeben (electron loss) [KHA⁺69].

Alle diese Prozesse konkurrieren miteinander und verursachen eine Fluktuation des Ladungszustandes der Ionen. Je nach Wahrscheinlichkeiten (Querschnitte) für die Ladungsaustauschprozesse stellt sich nach Durchfliegen einer Weglänge λ eine statistisch bedingte Ladungszustandsverteilung (engl.: charge state distribution CSD) ein. Diese Gleichgewichtsverteilung ändert sich mit abnehmender Energie und der mittlere Ladungszustand wird dabei kleiner [SHI⁺92]. Der Bremsquerschnitt $\epsilon(x)$ hängt zwar vom tatsächlichen Ladungszustand des Ions ab, jedoch durch den häufig wechselnden Ladungszustand kann mit einem mittleren Ladungszustand für ausreichend große Weglängen gerechnet werden.

Für die konventionelle RBS und ERD werden Teilchenspektrometer eingesetzt (Halbleiterdetektoren, Gasionisationsdetektoren, Flugzeitspektrometer), deren Nachweiseffektivität nicht vom Ladungszustand der detektierten Teilchen abhängt. Die Energieauflösung dieser Spektrometer führt zu einer Tiefenauflösung δt , die deutlich über der Weglänge λ liegt. Für die Auswertung der Spektren und die Berechnung der Tiefenverteilungen der Elemente ist daher die Verwendung der tabellierten Werte für den spezifischen Energieverlust [ZIE⁺08, ZIE⁺10] gerechtfertigt, die auf dem Ladungsgleichgewicht basieren.

Für die höchstauflösende Ionenstrahlanalytik ist die Situation anders. Die verwendeten magnetischen oder elektrostatischen Spektrometer separieren die Teilchen nach ihrem Ladungszustand und im Allgemeinen kann in einer Messung (mit einer konstanten Feldstärke) nur die spektrale Verteilung von Teilchen in einem schmalen Energiegebiet bestimmt werden. Mit einem Magnetspektrometer werden nur Teilchen

registriert, die bis auf geringe Abweichungen einen vorgewählten Wert für die magnetische Steifigkeit entsprechen (vgl. Gleichung (2.29)).

Die Energieauflösung $\Delta E/E$ von $\leq 10^{-3}$ ergibt rechnerisch eine oberflächennahe Tiefenauflösung δt in der Größenordnung von Atomabständen in Festkörpern. Die Weglängen liegen dann auch bei schrägem Ein- und Austritt der Teilchen deutlich unter λ und die Annahme einer Gleichgewichtsladungsverteilung ist nicht brauchbar. Vielmehr muss die Entwicklung der Ladungszustandsverteilungen im Nichtgleichgewicht und die resultierende Verteilung im Gleichgewicht ermittelt werden, um aus den Spektren der gestreuten Teilchen die Konzentrationstiefenverteilungen der interessierenden Elemente berechnen zu können. Es sind dabei drei Abschnitte zu berücksichtigen:

1. die Entwicklung der Ladungszustandsverteilung von der Oberfläche bis zur Tiefe, in der die Streuung erfolgt (Relaxationsphase),
2. die Änderung der Ladungszustandsverteilung durch den Stoßprozess mit dem kleinen Stoßparameter und
3. die Entwicklung dieser Ladungszustandsverteilung auf dem Rückweg.

Ein mit einem höchstauflösenden ESA durchgeführtes Experiment, bei dem die Energieverteilung von 1,2 MeV Ar-Ionen nach der Streuung an Gold für die Ladungszustände $q = +1$ bis $+8$ gemessen wurde (vgl. Abbildung 3.1), illustriert dies deutlich [CAR98].

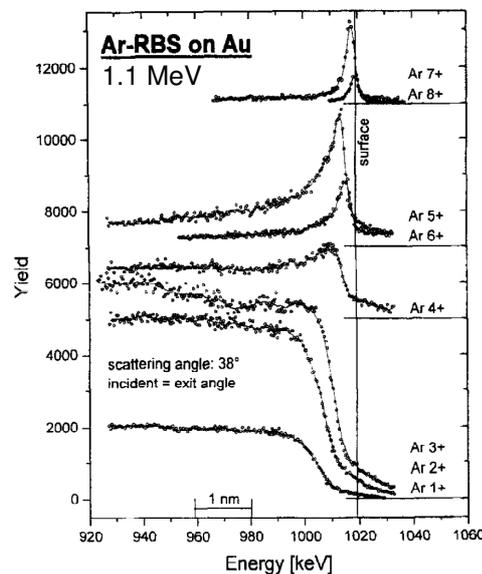


Abbildung 3.1: Ausbeute verschiedener Ladungszustände bei Streuung von Ar mit 1,2 MeV an Gold mit der höchstauflösenden ESA [CAR98]

Es deutet vieles darauf hin [KLE03, Mat⁺94, DIN⁺10a], dass die Ladungszustandsverteilung nach dem Stoß nicht vom Ladungszustand der Ionen vor dem Stoß abhängt.

Wenn ein Projektil auf ein Probenatom stößt und dabei elastisch gestreut wird beziehungsweise dabei ein Probenatom heraus streut, ändert sich schlagartig die Geschwindigkeit dieser Elemente. Dieser Vorgang verursacht ebenfalls eine Änderung

der Ladungszustandsverteilung der elastisch gestreuten Ionen bzw. generiert eine Ladungszustandsverteilung der herausgestoßenen Probenatome.

Boerma et. al [BOE⁺97] beschreiben diesen Ladungszustandsänderungsprozess für elastisch gestreute Primärionen als einen Drei-Zustands-Prozess. In der ersten Phase durchdringt das Primärion die Elektronenhülle des Probenatoms und bewegt sich in Richtung des Atomkerns. In dieser Phase kann sich durch möglichen Elektroneneinfang oder Elektronenverlust bei der Kollision des Primärions mit den Elektronen des Probenatoms der Ladungszustand des Ions ändern. Hierbei stellt sich, für viele Ionen betrachtet, bereits eine Ladungszustandsverteilung ein. In der zweiten Phase gelangt das Primärion sehr nah an den Kern des Probenatoms und wird daran gestreut. Bei diesem Prozess ändert sich schlagartig die Geschwindigkeit, so dass eine neue Ladungszustandsverteilung entsteht. Boerma et. al zeigen, dass nach diesem heftigen Stoß die entstehende Ladungszustandsverteilung nahezu unabhängig vom Ausgangsladungszustand ist. Damit beeinflusst die in der ersten Phase entstandene Ladungszustandsverteilung nicht jene, die nach dem Stoß entsteht. Jedoch zeigen Boerma et. al auch, dass die in der zweiten Phase entstandene Ladungszustandsverteilung vom Streuwinkel abhängig ist. Nach dem Stoßprozess durchdringt das Ion wiederum die Atomhülle des Probenatoms und generiert in dieser dritten Phase eine weitere Ladungszustandsverteilung.

Für die herausgestreuten Probenatome, den Recoilionen, zeigten Matsumo et. al und Ding et. al [MAT⁺94, DIN⁺10a], dass für die Ladungszustandsverteilung nach dem Stoßprozess der Ausgangsladungszustand des Primärions bis zu einem bestimmten Wert ebenfalls keine Rolle spielt. Die Ladungszustände der Recoilionen werden durch Elektroneneinfang, Ionisation, Elektronenverlust oder durch Transferionisationsprozesse generiert. Bei sehr hohen Ladungszuständen des Primärions ändern sich jedoch die Wirkungsquerschnitte für die Ladungszustandsänderungsprozesse. Die dabei entstehenden hochgeladenen Recoilionen werden nicht nur durch vielfache Ionisation der äußeren Schale generiert. Es findet ebenfalls eine Ionisation der inneren Schale statt. Dies verursacht teilweise Augerelektronenemission und somit einen höheren Ladungszustand der Recoilionen.

Im Folgenden wird ausführlich erläutert, wie die Dynamik der Ladungszustandsverteilung bisher verstanden wird und welchen Einfluss diese auf die Berechnung der Energie-Tiefe-Beziehung bei der ERD hat. Die hier behandelten Theorien und Modelle werden in den folgenden Abschnitten zum Vergleich mit experimentell gewonnenen Daten verwendet und dienen zur Analyse und Quantifizierung der gemessenen Spektren.

3.2 Theoretische Grundlagen zur Ladungszustandsverteilung

3.2.1 Ladungszustandsfluktuationen

Wie oben angedeutet resultiert die mittlere Ladungszustandsverteilung als ein dynamisches Gleichgewicht, bei dem Elektroneneinfang- und Elektronenverlustprozesse sich die Waage halten. Die mittlere Ladungszustandsverteilung ändert sich nur

langsam mit der abnehmenden Geschwindigkeit der Projektil-Ionen [BOH48, NOR63, BET72].

Eine mittlere Ladungszustandsverteilung aller Ionen kann durch Lösung der Ratengleichungen (gekoppelter Differentialgleichungen) bestimmt werden:

$$\frac{dY_i}{dx} = \sum_j Y_j(x) \cdot \sigma_{ji} - Y_i(x) \cdot \sum_j \sigma_{ij} \quad (3.1)$$

$Y_i(x)$ ist allgemein der Anteil der Ionen mit einer bestimmten Elektronenkonfiguration ($\sum_i Y_i(x) = 1$) nach der durchquerten Weglänge x . σ_{ij} ist der Wirkungsquerschnitt für den Übergang von einer Elektronenbesetzungskonfiguration in eine andere. Durch diese Beschreibung werden nicht nur Umladungen sondern auch Anregungen der Ionen mit berücksichtigt. Dies ist wichtig, da z. B. die Wirkungsquerschnitte für Ionisationen von der Hauptquantenzahl n des betreffenden Ions abhängen. Da die unterschiedlichen Elektronenkonfigurationen eines Ladungszustandes bei den Messungen der höchstauflösenden ERD nicht unterschieden werden können, bezeichnet $Y_i(x)$ hier den Anteil eines Ladungszustandes und soll fortan zur Unterscheidung $f_i(x)$ genannt werden.

Die Änderung der Ladungszustände der Projektilionen beim Durchqueren von Materie kann experimentell durch Transmissionsmessungen bestimmt werden. Hierzu werden die Ladungszustandsverteilungen von Ionen nach dem Passieren von ultradünnen Folien (z. B. Kohlenstofffolien) unterschiedlicher Dicke bestimmt [Bsp.: PEN⁺83, HAY⁺84, BRI⁺88, OGA⁺93, IMA⁺05]. Zu beachten ist jedoch, dass hierbei immer der Ladungszustand $q(x)_{exit}$ nach Verlassen der Folien bestimmt wird und nicht $q(x)$ innerhalb der Folie [Lif⁺04]. Aus der experimentell ermittelten Ladungszustandsverteilung lässt sich ein mittlerer Ladungszustand $\overline{q(x)_{exit}}$ berechnen:

$$\overline{q(x)_{exit}} = \sum_{q=1}^{Z_p} q \cdot f_q(x)_{exit} \quad (3.2)$$

Analytisch stellt diese Funktion eine mittlere Bilanz der sich ständig ändernden Ladungszustände aller Ionen dar, die durch Einfang und Verlust von Elektronen verursacht wird. Der Ladungszustand der Projektilionen vor dem Eintritt in die Probe ist in der Regel kleiner als der mittlere Ladungszustand, der sich im dynamischen Gleichgewicht einstellt. Dieser Inzidenzladungszustand wird durch den Typ und durch die Arbeitsweise des Beschleunigers vorgegeben. Entscheidend für die Wahl des Ladungszustandes ist die geforderte kinetische Energie (vgl. Abschnitt 2.1.1). In allen Fällen wird hier angenommen, dass der Ladungszustand der Projektilionen gleich ist, da die Wegstrecke bis zum Experiment kurz gehalten ist und somit Umladungen im Restgas vernachlässigt werden können. Dieser Ladungszustand wird im Weiteren als $q(0)$ bezeichnet.

Bohr [BOH⁺54] beschreibt den Verlauf von $q(x)$ als eine exponentielle Relaxation vom Anfangszustand $q(0)$ bis zu einem sich asymptotisch nähernden Endwert, dem dynamischen Ladungszustandsgleichgewicht $\overline{q(\infty)}$:

$$\overline{q(x)} = \overline{q(\infty)} + [q(0) - \overline{q(x)}] \cdot e^{-\frac{x}{X}} \quad (3.3)$$

mit einer charakteristischen Einstelllänge X .

Die Ladungszustandsverteilung der Recoilionen, oder der elastisch gestreuten Ionen, die sich innerhalb der Probe einstellt, ändert sich wiederum beim Durchqueren der Probe zur Probenoberfläche. Dies kann wiederum nach Gleichung (3.3) beschrieben werden. Es ist hierbei zu beachten, dass der Ausgangsladungszustand für die Betrachtung aller Ionen nach dem Stoß aus mehreren Ladungszuständen besteht. Nach einer gewissen Weglänge stellt sich hier ebenfalls ein dynamisches Ladungszustandsgleichgewicht ein.

3.2.2 Das dynamische Ladungszustandsgleichgewicht

Mit der Annahme, dass die experimentell ermittelten mittleren Ladungszustände nach Passieren einer Probe (zusammengefasst von Shima et. al [SHI⁺86, SHI⁺92]) gleich den mittleren Ladungszuständen in Materie sind ($\overline{q(x)_{exit}} = \overline{q(x)}$), wurden die Werte für die dynamischen Gleichgewichte empirisch an verschiedene Funktionen angepasst. Lifschitz et al. [Lif⁺04] beschrieben, dass der Austritt aus der Probenoberfläche und die probenoberflächennahe Entfernung der Ionen ebenfalls eine Änderung des Ladungszustandes verursachen können. Diese Effekte lassen sich jedoch experimentell nicht zeigen, da alle Ladungszustandsmessungen darauf angewiesen sind, dass die Ionen sich von der Probe lösen und sich von dieser entfernen.

Betz et. al [Bet⁺66] berechnen die Werte für die dynamischen Gleichgewichte mit Parametern, die für jede spezielle Primärion-Target-Kombination separat gefunden werden müssen. Mit C und γ als empirische Parameter für eine bestimmte Primärion-Target-Kombination sowie mit der Bohrschen Geschwindigkeit v_{Bohr} und der Geschwindigkeit v_p und der Kernladungszahl Z_p der Projektile ergibt sich damit:

$$\overline{q(\infty)}_{Betz} = Z_p \cdot \left(1 - C e^{\frac{v_p}{v_{Bohr} \cdot Z_p^\gamma}} \right) \quad (3.4)$$

Nikolaev und Dmitriev [DMI⁺65, NIK⁺68] fanden eine allgemeingültige semiempirische Fitfunktion:

$$\overline{q(\infty)}_{ND} = Z_p \cdot \left[1 + (x_{ND})^{-\frac{1}{0,6}} \right]^{-0,6} \quad (3.5)$$

mit
$$x_{ND} = \frac{v_p}{Z_p^{0,45} \cdot 3,6 \cdot 10^8 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}}$$

Die semiempirischen Formeln von Betz et al. und von Nikolaev und Dmitriev wurden durch fortführende Experimente von verschiedenen Gruppen [Bsp.: BAR72, BAR⁺75, TO⁺76, SAY77, FRI⁺77, TO⁺79] immer weiter an experimentelle Daten angepasst. Shima et al. [SHI⁺82] passten $\overline{q(\infty)}_{ND}$ ebenfalls an hochenergetische Messungen semiempirisch an und fanden eine Abhängigkeit von der Kernladungszahl des Targets:

$$\overline{q(\infty)}_s = Z_p \left(1 - e^{-1,25x_{ND} + 0,32x_{ND}^2 - 0,11x_{ND}^3} \right) \left[1 - 0,0019(Z_t - 6)x_{ND}^{0,5} + (Z_t - 6)^2 x_{ND} \cdot 10^{-5} \right] \quad (3.6)$$

Schiwietz und Grande zeigten, dass der Fehler der Fitfunktion von Nikolaev und Dmitriev sogar mit allen folgenden Erweiterungen durch Shima et al. bei $\Delta q(\infty)_{ND} / Z_p = 3,3\%$ liegt. Aus diesem Grund passen sie die Messwerte an eine eigene semiempirische Fitfunktion $\overline{q(\infty)}_{SG}$ an. Diese wird kontinuierlich an aktuelle empirische Messwerte angepasst und besitzt lediglich eine Abweichung von $\Delta q(\infty)_{SG} / Z_p = 2,3\%$ [SHI⁺82, SHI⁺83 und SCH⁺01]. Die momentan aktuellste Fitfunktion für $\overline{q(\infty)}_{SG}$ ist [SCH⁺04]:

$$\overline{q(\infty)}_{SG} = Z_p \cdot \frac{8,29x_{SG} + x_{SG}^4}{0,06x_{SG}^{-1} + 4 + 7,4x_{SG} + x_{SG}^4} \quad (3.7)$$

$$\text{mit } x_{SG} = \left(1 - 0,26 \cdot e^{-\frac{Z_t}{11}} \cdot e^{-\frac{(Z_t - Z_p)^2}{9}} \right) \left(\frac{\tilde{v}}{1,54 \cdot (1 + 0,030 \cdot \tilde{v} \cdot \ln(Z_t))} \right)^{1 + \frac{1,83}{Z_p}}$$

$$\text{mit } \tilde{v} = \frac{Z_p^{-0,543} \cdot v_p}{v_{Bohr}}$$

Z_p und Z_t sind die Kernladungszahlen von Projektil und Target, v_p ist die Projektilgeschwindigkeit, v_{Bohr} ist die Bohr-Geschwindigkeit und x_{ND} als auch x_{SG} sind die jeweiligen reduzierten Geschwindigkeiten.

Die Häufigkeitsverteilung $f(q_i)$ aller Ladungszustände kann nach Baudinet-Robinet [BAU81, BAU82] mittels dreier Modelle beschrieben werden. Dies sind das χ^2 -Modell, das Gauß-Modell und das reduzierte χ^2 -Modell für jeweils den Niedrig-, Mittel- und Hochgeschwindigkeitsbereich für ein durchquerendes Ion. Diese Modelle berücksichtigen, dass es einen maximalen und einen minimalen Ladungszustand für jedes Element gibt. Die in dieser Arbeit genutzten Energien liegen alle im mittleren energetischen Bereich, so dass das Gauß-Modell hier überall angewendet werden kann. Die beiden anderen Modelle können in den Arbeiten [BAU81] und [BAU82] nachgelesen werden. Für die Häufigkeitsverteilung nach dem Gauß-Modell ergibt sich:

$$f(q_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_{f(q_i)}} \cdot e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{q_i - \overline{q(\infty)}}{\sigma_{f(q_i)}} \right)^2} \quad (3.8)$$

Die Breite der Ladungszustandsverteilung $\sigma_{f(q_i)}$ entspricht der Standardabweichung der Ladungszustandsverteilungsfunktion:

$$\sigma_{f(q_i)} = \sqrt{\sum_i (q_i - \overline{q(\infty)})^2 f(q_i)} \quad (3.9)$$

Schiwietz und Grande [SCH⁺01, SCH⁺04] ermittelten die Breite der Ladungszustandsverteilung $\sigma_{f(q_i)}$ semiempirisch aus bisherigen Messwerten. Sie führten hierzu eine reduzierte Breite der Ladungszustandsverteilung w_{SG} in Abhängigkeit von den mittleren noch gebundenen Elektronen am Ion $N_b = Z_p - \overline{q(\infty)}_{SG}$ ein. Diese reduzierte Breite kann für die jeweilige Anzahl an gebundenen Elektronen [SCH⁺01] entnommen werden und ist der Vollständigkeit halber in Abbildung 3.2 dargestellt.

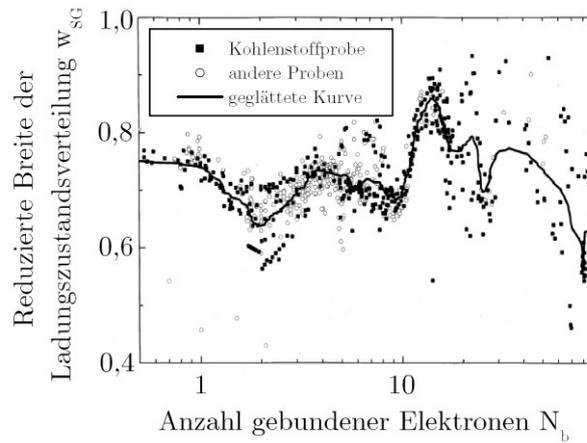


Abbildung 3.2: Reduzierte Breite der Ladungszustandsverteilung in Abhängigkeit von der Anzahl an gebundenen Elektronen [SCH⁺01]

Die semiempirische Breite der Ladungszustandsverteilung $\sigma_{f(q_i)}$ ist somit nach [SCH⁺01]:

$$\sigma_{f(q_i)} = \frac{w_{SG}}{Z_p^{-0,27} \cdot Z_t^{0,035-0,0009 \cdot Z_p} \cdot f\left(\overline{q(\infty)}_{SG}\right) \cdot f\left(Z_p - \overline{q(\infty)}_{SG}\right)} \quad (3.10)$$

mit $f(x) = \sqrt{\frac{(x + 0,37 \cdot Z_p^{0,6})}{x}}$

3.2.3 Semiempirisches Modell der Ladungszustandsreraxation

Der Verlauf der Ladungsverteilung im Nichtgleichgewicht in Abhängigkeit von der Wegstrecke kann qualitativ mit Gleichung (3.3) beschrieben werden. Eine Randbedingung hierbei ist, dass der Anfangsladungszustand kleiner als der Ladungszustand im Gleichgewicht sein muss. Im Fall der Projektile ist der Anfangsladungszustand durch die beschleunigten Ionen mit der Ladung q_p vorgegeben. Der Ladungszustand im dynamischen Gleichgewicht kann mit Gleichung (3.7) berechnet und die Relaxati-

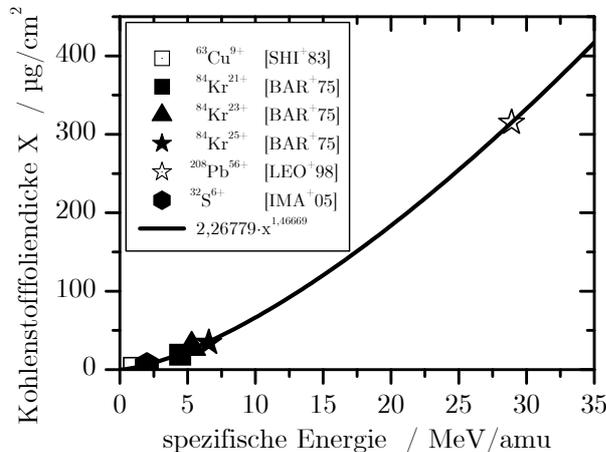


Abbildung 3.3: Charakteristische Dicke für die Ladungszustandsrelaxation in Kohlenstoff

onskonstante X aus einem Vergleich von vielen Messungen semiempirisch gewonnen werden [TOU06]. Die für diese Arbeit zugrundeliegende semiempirische Funktion ist aus der Veröffentlichung von Toulemonde [TOU06] und anhand der Beispiele in [SHI⁺83] für Kupfer mit circa 0,5 bis 2,5 MeV/u, in [IMA⁺05] für Schwefel mit 2 MeV/u, in [BAR⁺75] für Krypton mit circa 4,5 bis 6,5 MeV/u oder in [LEO⁺98] für Projektile mit $36 \leq Z_p \leq 92$ und $18 \text{ MeV/u} \leq E \leq 44 \text{ MeV/u}$, gewonnen.

In Tabelle 3.1 sind die in den Quellen angegebenen Messwerte aufgelistet. Die Relaxationskonstante X , und damit die Kohlenstofffoliendicke, ist als Funktion der spezifischen Energie (Energie je Masse) E/M in Abbildung 3.3 aufgetragen. Als semiempirische Funktion kann die Gleichung

$$X = 2,26779 \cdot \left(\frac{E}{M} \right)^{1,46669} . \quad (3.11)$$

an die Messwerte angefitet werden.

Tabelle 3.1: ausgewählte Ladungszustandsrelaxationsparameter X

Element	Spezifische Energie in MeV/amu	Relaxationsparameter X in $\mu\text{g}/\text{cm}^2$	Quelle
$^{63}\text{Cu}^{9+}$	1,03	2,46	[SHI ⁺ 83]
$^{32}\text{S}^{6+}$	2,00	5,0	[IMA ⁺ 05]
$^{84}\text{Kr}^{21+}$	4,44	19,23	[BAR ⁺ 75]
$^{84}\text{Kr}^{23+}$	5,29	28,57	[BAR ⁺ 75]
$^{84}\text{Kr}^{25+}$	6,57	34,48	[BAR ⁺ 75]
$^{208}\text{Pb}^{56+}$	28,9	315	[LEO ⁺ 98]

Mit diesen semiempirisch gewonnenen Werten kann die Ladungsverteilung für die Primärionen berechnet werden. Als Beispiel ist dies in Abbildung 3.4 für den in dieser Arbeit am häufigsten verwendeten Strahl $^{35}\text{Cl}^{4+}$ bei einer Energie von $E_0 = 20 \text{ MeV}$

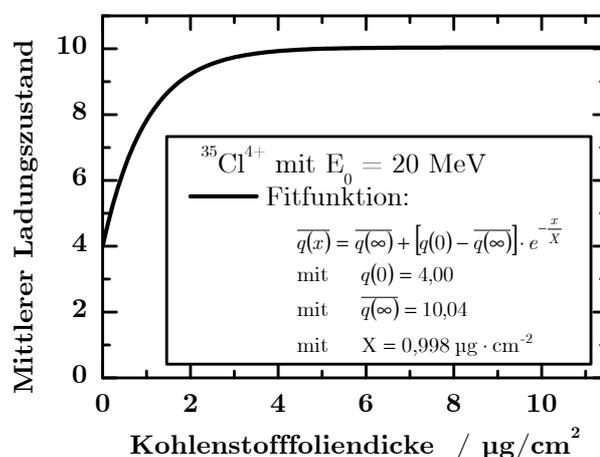


Abbildung 3.4: berechnete Ladungszustandsverteilung von Cl mit der Primärenergie $E_0 = 20 \text{ MeV}$ und einem Anfangsladungszustand von $q = 4+$

demonstriert. Der Anfangsladungszustand beträgt $q(0) = q_p = 4$. Der Ladungszustand im dynamischen Gleichgewicht kann nach Gleichung (3.7) berechnet werden und beträgt $\overline{q(\infty)} = 10,04$. Die Relaxationskonstante beträgt nach Gleichung (3.11) $X = 0,998 \mu\text{g} \cdot \text{cm}^{-2}$.

3.2.4 Der effektive Ladungszustand und die Abschirlänge

Das Quadrat des effektiven Ladungszustandes q_{eff} ist nach Gleichung (1.20) direkt proportional zum elektronischen Energieverlust. Jede Software, die semiempirisch diesen Energieverlust berechnet, interpolieren zwischen direkt gemessenen Werten nach physikalisch sinnvollen theoretischen Modellen (vgl. Abschnitt 1.3). Gemeinsam haben diese Werte, dass der Energieverlust immer für Ladungszustände im dynamischen Ladungszustandsgleichgewicht bestimmt wird. Dies ist der Fall, da in diesen Modellen nur Messergebnisse von Folien, beziehungsweise Schichten, betrachtet werden, die so dick waren, dass sich ein Ladungszustandsgleichgewicht einstellte. Aus diesem Grund muss der Energieverlust im Bereich des dynamischen Ladungszustandsnichtgleichgewichts separat berechnet werden (vgl. Abschnitt 3.2.5).

In Abbildung 3.5 ist der effektive Ladungszustand in Abhängigkeit von der Ordnungszahl des Probenmaterials für Chlorionen mit einer Energie von 20 MeV dargestellt. Weiterhin sind in dieser Abbildung die Hauptquantenzahlen n_{Target} eingetragen. Die quadratischen Symbole sind die mit SRIM10 [ZIE⁺10] berechneten effektiven Ladungszustände, deren Mittelwert $q_{\text{eff_mean}} = 8,60$ ergibt und durch eine rote Linie gekennzeichnet ist. Die einfache Standardabweichung¹ aller ermittelten effektiven Ladungszustände ergibt $\sigma_{q_{\text{eff}}} = \pm 0,25$ und ist in Abbildung 3.5 als

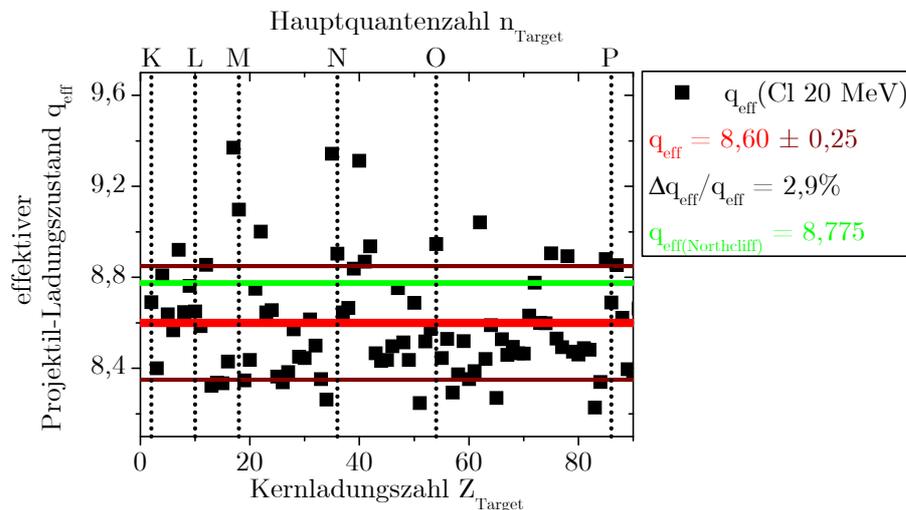


Abbildung 3.5: effektiver Ladungszustand q_{eff} für ein Chlorion mit einer Energie von 20 MeV (berechnet mit SRIM2010)
 -quadratische Symbole: mit SRIM10 ermittelt q_{eff}
 -rote Linie: Mittelwert der mit SRIM ermittelten q_{eff}
 -braune Linien: Standardabweichung der mit SRIM ermittelten q_{eff}
 -grüne Linie: nach Gleichung (3.12) berechnete Wert für q_{eff}

¹ dargestellt ist die einfache Standardabweichung, nicht die Standardabweichung des Mittelwerts

Abweichung um den berechneten Mittelwert braun dargestellt. Zusätzlich ist durch eine grüne Linie der nach Gleichung (3.12) berechnete effektive Ladungszustand eingetragen. Die relative Abweichung der ermittelten effektiven Ladungszustände zeigt, dass diese Ladungszustände nicht berechnet, sondern durch eine Interpolation von Messwerten ermittelt werden. Innerhalb der Ladungszustandsstreuung ist keine direkte Abhängigkeit vom Probenmaterial zu erkennen. Auch die Hauptquantenzahlen zeigen keinen Einfluss von dem effektiven Ladungszustand. Mit dieser starken Variation der effektiven Ladungszustände dieser semiempirischen Daten, wie in Abbildung 3.5 dargestellt, ist es unmöglich ein exaktes Modell zur Berechnung des effektiven Ladungszustandes herzuleiten. Diese Variation muss demzufolge als Minimalfehler zur Bestimmung des Energieverlustes und damit der Tiefe angesehen werden.

Außerdem ist zu beachten, dass der effektive Ladungszustand nicht identisch mit dem mittleren Ladungszustand ist. Dies hat zwei Konsequenzen. Erstens muss für jede Probe der effektive Ladungszustand im dynamischen Gleichgewicht aus den semiempirischen Energieverlustprogrammen, wie zum Beispiel SRIM [ZIE⁺10], ermittelt und zweitens muss der experimentell bestimmbare mittlere Ladungszustand im dynamischen Ladungszustandsnichtgleichgewicht in einen effektiven Ladungszustand umgerechnet werden.

Im dynamischen Ladungszustandsgleichgewicht leitete Northcliffe [NOR60] gemittelt über alle Abstände zwischen Ion und Elektronen die effektive Ladung $q_{eff}(\infty)$ ab. Pierce und Blann [PIE⁺68] passten diese Formel noch geringfügig an experimentelle Daten an und ermittelten damit:

$$q_{eff}(\infty) = Z_p \left[1 - e^{-\frac{0,92 \cdot v_p}{Z_p^{2/3} \cdot v_{Bohr}}} \right]. \quad (3.12)$$

Brandt et al. [BRA⁺82] fanden eine semiempirische Formel für den effektiven Ladungszustand $q_{eff}(\infty)$, die in den meisten Ionenstrahlanalyseprogrammen genutzt wird:

$$q_{eff}(\infty) = Z_p \left\{ q + (1 - q) \frac{v_{Bohr}}{2 \cdot v_f} \ln \left[1 + \left(\frac{2 \cdot A \cdot v_f}{a_{Bohr} \cdot v_{Bohr}} \right)^2 \right] \right\}. \quad (3.13)$$

A ist hierbei die Abschirmlänge, die die Ausdehnung der Ladungsverteilung und damit die Abschirmung des Kernpotentials beschreibt:

$$A = \frac{2a_{Bohr} \cdot (1 - q)^{2/3}}{Z_p^{1/3} \cdot \left(1 - \frac{1 - q}{7} \right)}. \quad (3.14)$$

Die Parameter a_{Bohr} und v_{Bohr} sind hier der Bohr-Radius und die Bohr-Geschwindigkeit. Die Ionisierung q wird aus dem Verhältnis der Ionengeschwindigkeit v_p zur Fermi-Geschwindigkeit v_f berechnet.

$$q = \begin{cases} 1 - e^{0,803 \cdot y_r^{0,3} - 1,3167 \cdot y_r^{0,6} - 0,38157 \cdot y_r - 0,008983 \cdot y_r^2} & \text{wenn } y_r \geq 0,13 \\ 1 & \text{wenn } y_r < 0,13 \end{cases} \quad (3.15)$$

Nach Ziegler et al. [ZIE⁺08] ergibt sich:

$$y_r = \begin{cases} \frac{v_p}{v_{Bohr} \cdot Z_p^{1/3}} \cdot \left[1 + \frac{1}{5} \cdot \left(\frac{v_f}{v_p} \right)^2 \right] & \text{wenn } v_p \geq v_f \\ \frac{3}{4} \cdot \frac{v_f}{v_{Bohr} \cdot Z_p^{1/3}} \cdot \left[1 + \frac{2}{3} \cdot \left(\frac{v_p}{v_f} \right)^2 - \frac{1}{15} \cdot \left(\frac{v_p}{v_f} \right)^4 \right] & \text{wenn } v_p < v_f \end{cases} \quad (3.16)$$

Die Fermi-Geschwindigkeit beträgt:

$$v_f = (3\pi^2 \rho_e)^{1/3} \cdot \frac{\hbar}{m_e}, \quad (3.17)$$

wobei ρ_e die Elektronendichte und m_e die Elektronenmasse sind.

In Abbildung 3.6 ist die Differenz aus dem berechneten mittleren Ladungszustand nach Gleichung (3.7) und dem effektiven Ladungszustand nach Gleichung (3.12) in Abhängigkeit von der spezifischen Energie (Megaelektronenvolt je Nukleon) aufgetragen. Es sind ihre Differenzen von Sauerstoff, Chlor, Kupfer, Iod und Gold in einer Kohlenstoffprobe dargestellt. Der Graph des Sauerstoffs ist im Diagramm kaum zu erkennen, da die Differenz sehr klein ist. Aus dem Verlauf der unterschiedlichen Graphen ist zu entnehmen, dass der Unterschied zwischen mittlerem und effektivem Ladungszustand mit zunehmender Ordnungszahl ansteigt. Außerdem ist zu sehen, dass der mittlere Ladungszustand im dargestellten Bereich größer ist als der effektive Ladungszustand.

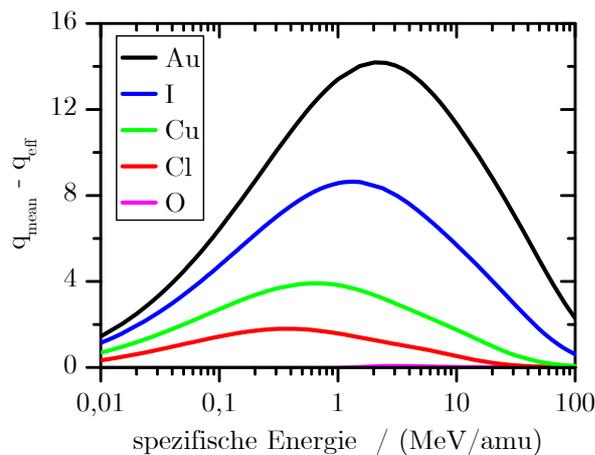


Abbildung 3.6: Berechnete Differenz aus dem mittleren Ladungszustand [SCH⁺04] und dem effektiven Ladungszustand [PIE68] für Sauerstoff, Chlor, Kupfer, Iod und Gold in einer Kohlenstoffprobe. Der Graph des Sauerstoffs ist im Diagramm kaum zu erkennen, da die Differenz sehr klein ist.

Die Theorie des effektiven Ladungszustandes wird in der Analysesoftware SRIM [ZIE⁺10] und damit in dieser Arbeit für das Bremsvermögen im Gleichgewicht benutzt. Ein Model zur Berechnung des Bremsvermögens im Nichtgleichgewicht wird in Abschnitt 3.2.5 vorgestellt und in den Anwendungsbeispielen in Kapitel 6 benutzt.

3.2.5 Energieverlust im Nichtgleichgewicht

Zur Berechnung des Bremsvermögens im Nichtgleichgewicht soll ebenfalls die Theorie des effektiven Ladungszustandes genutzt werden. Damit besteht die Möglichkeit die Auswertung mit der Analysesoftware NDF [BAR⁺97, BAR⁺98, BAR⁺08] durchzuführen. Aus diesem Grund wurde im Rahmen dieser Arbeit ein Modell zur Berechnung des Bremsvermögens im Ladungszustandsnichtgleichgewicht entwickelt.

Zur Bestimmung des effektiven Ladungszustandes wird als erstes die Relaxation, wie in Abschnitt 3.2.1 beschrieben, anhand der Gleichungen (3.3) berechnet. Ausgangsladungszustand q_i ist der Ladungszustand am Ausgang des Beschleunigers. In dieser Arbeit sind dies für die höchstauflösende ERD zum Beispiel vierfach positiv geladene Chlorionen mit einer Energie von $E_0 = 20$ MeV. $\overline{q(\infty)}_{SG}$ wird nach Schiwietz et al. [SCH⁺04] anhand der Gleichung (3.7) berechnet. In Abbildung 3.4 ist die Relaxation für das Beispiel eines Chlorstrahls mit der Energie 20 MeV und einem Ladungszustand von $q_i = 4+$ dargestellt. Da diese Relaxation die mittlere Ladungsverteilung im dynamischen Nichtgleichgewicht und nicht die des effektiven Ladungszustandes beschreibt, muss diese anschließend auf den effektiven Ladungszustand normiert werden. Die sich daraus ergebende Funktion beschreibt die Verteilung des effektiven Ladungszustandes im dynamischen Nichtgleichgewicht für das einfallende Primärion. Diese Verteilung kann aufgrund der quadratischen Abhängigkeit, vgl. Gleichung (1.20), zur Berechnung des Energieverlustes im dynamischen Nichtgleichgewicht genutzt werden. Die Normierung erfolgt anhand des im Abschnitt 3.2.3 gezeigten Zusammenhangs zwischen effektivem und mittlerem Ladungszustand. Zu einer bestimmten Energie kann ein mittlerer und ein effektiver Ladungszustand berechnet werden. Die berechnete Differenz des effektiven Ladungszustandes zu einem mittleren Ladungszustand als Funktion des mittleren Ladungszustands stellt die hier genutzte

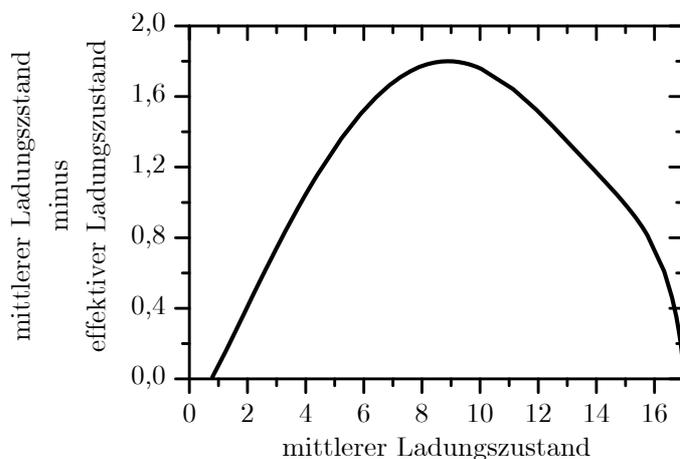


Abbildung 3.7: Differenz aus mittlerem Ladungszustand und effektivem Ladungszustand als Funktion des mittleren Ladungszustands von Chlor als Inzidenzion

Normierung dar. In Abbildung 3.7 ist diese Differenz am Beispiel von Chlorionen dargestellt.

Die Relaxationsfunktion in Abhängigkeit vom effektiven Ladungszustand wird anschließend aus der Relaxationskurve in Abhängigkeit vom mittleren Ladungszustand mit dem entsprechenden Differenzwert ermittelt. Die sich daraus ergebende Funktion ist in Abbildung 3.8 a) dargestellt.

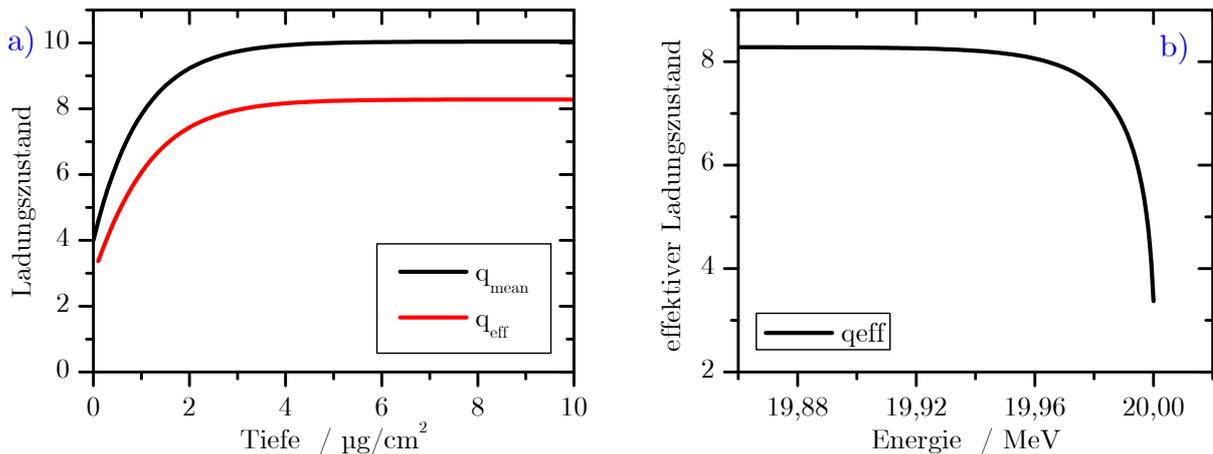


Abbildung 3.8: a) berechneter effektiver und mittlerer Ladungszustand in Abhängigkeit von der Tiefe im dynamischen Nichtgleichgewicht
 b) effektiver Ladungszustand in Abhängigkeit von der Energie im dynamischen Nichtgleichgewicht.

Die Berechnung erfolgte mit einem Chlorstrahl mit 20 MeV Primärenergie und einem Ausgangsladungszustand von $q = 4+$.

Zum Vergleich ist in dieser Abbildung ebenfalls die Relaxationskurve des mittleren Ladungszustandes eingetragen. Der effektive Ladungszustand wird mit dem Bremsvermögen von Wasserstoff (bei gleicher Geschwindigkeit) in eine Energieabhängigkeit umgerechnet:

$$E(x_{n+1}) = E(x_n) - \frac{q_{\text{eff}}^2(x_{n+1}) + q_{\text{eff}}^2(x_n)}{2} \cdot S_H(v_p) \cdot (x_{n+1} - x_n) \quad (3.18)$$

$$\text{mit } E(x_0) = E_p^0 \quad \text{und } x_0 = 0 \mu\text{g} \cdot \text{cm}^{-2}$$

Anhand der Gleichung (3.18) ist zu sehen, dass für jeden Schritt ein neuer effektiver Ladungszustand angenommen wird. Somit ist die Umrechnung der Tiefenabhängigkeit in eine Energieabhängigkeit keine lineare Transformation. Der sich daraus ergebende effektive Ladungszustand in Abhängigkeit von der Energie ist in Abbildung 3.8 b) dargestellt. Da wie aus Abbildung 3.5 hervorgeht, die semiempirischen Werte des effektiven Ladungszustands im dynamischen Gleichgewicht für verschiedene Proben nicht gleich sind, muss nun der berechnete an den semiempirischen Wert angepasst werden. Dies ist notwendig, da die Auswertesoftware das Bremsvermögen im dynamischen Gleichgewicht berechnen soll. Am Übergang vom dynamischen Nichtgleichgewicht- in den Gleichgewichtszustand würde sich ansonsten ein Sprung des Bremsvermögens ergeben.

Der zweite Fall, der zu einem ladungszustandsabhängigen Energieverlust führt, ist die Ladungsverteilung im dynamischen Nichtgleichgewicht der Recoilionen. Dieser Effekt fällt im Vergleich zum ladungszustandsabhängigen Energieverlust der Primärionen viel geringer aus. Dies ist der Fall, da erstens die Primärionen mit einem viel geringeren Ladungszustand, als deren mittlerer Ladungszustand im dynamischen Gleichgewicht ist, auf die Probe geschossen werden und somit deren Bremsvermögen eine große Variation in diesem Bereich besitzt. Am Beispiel der höchstauflösenden ERD werden die Chlorionen mit dem Ladungszustand $q_i = 4+$ und einer Energie von 20 MeV auf die Probe gelenkt und der sich ergebende Gleichgewichtsladungszustand beträgt $q(\infty) = 10,04$ (vgl. Abbildung 3.4). Die Recoilionen hingegen entstehen mit einem Ladungszustand, der bereits nahe dem im dynamischen Gleichgewichtsladungszustand entspricht. Zum zweiten ist die Weglänge der Recoilionen im Vergleich zu der Weglänge der Primärionen für eine gegebene Tiefe, aufgrund der Geometrie von Einfallswinkel ($\alpha = 5^\circ$) und Ausfallswinkel ($\beta = 10^\circ$), um einen Faktor von $\sin 10^\circ / \sin 5^\circ \approx 2$ kürzer. Das heißt, dass die Tiefe größtenteils durch den Energieverlust des Primärions bestimmt ist. Drittens wird dieser Effekt zusätzlich dadurch verstärkt, dass der Energieverlust der schweren Primärionen (im Vergleich zu den Recoilionen) größer als der der leichten Recoilionen ist.

Aus diesem Grund wird in dieser Arbeit für sehr dünne Schichten folgende Annahme gemacht. Die Ladungszustandsverteilung im dynamischen Nichtgleichgewicht, die sich direkt nach einem Stoß für die Recoilionen ergibt, entspricht in der gesamten dünnen Schicht gleich der, die sich an der Oberfläche ergibt. Damit kann der experimentell ermittelte mittlere Ladungszustand, der in den Abbildung 3.12 d) bis f) darstellt ist, für jede Tiefe genutzt werden. Für diese Annahme muss die Energieabhängigkeit immer in Bezug auf die Energie, die die Recoilionen direkt nach der Streuung besitzen, normiert werden. Das heißt, die Energie wird nicht mehr absolut betrachtet sondern immer als Differenzwert von der jeweiligen Anfangsenergie, die das Recoilion direkt nach dem Stoß besitzt.

3.3 Experimentelle Untersuchungen zur Ladungszustandsverteilung

3.3.1 Ladungszustandsverteilung im dynamischen Gleichgewicht

Die aktuelle Fitfunktion nach Schiwietz et al. [SCH⁺04] ist in Abbildung 3.10 für ein Sauerstoffion als durchquerendes Teilchen durch Siliziumdioxid im Energiebereich von 4 - 36 MeV dargestellt. Diese Funktion wurde nach Gleichung (3.7) berechnet. Darüber hinaus ist die von Schiwietz et al. [SCH⁺04] angegebene Standardabweichung mit dem Vertrauensniveau von 1σ eingetragen. Der mittlere Ladungszustand im dynamischen Gleichgewicht kann mit Gleichung (3.2) aus den gemessenen Ladungszuständen berechnet werden. Der so ermittelte mittlere Ladungszustand ist ebenfalls in Abbildung 3.10 dargestellt. Der reale mittlere Ladungszustand stimmt innerhalb der gegebenen Standardabweichung mit der semiempirischen Fitfunktion überein.

Weiterhin kann nach Baudinet-Robinet [BAU81, BAU82] und Schiwietz et al. [SCH⁺03] mittels Gleichung (3.8) die Häufigkeitsverteilung jedes diskreten Ladungs-

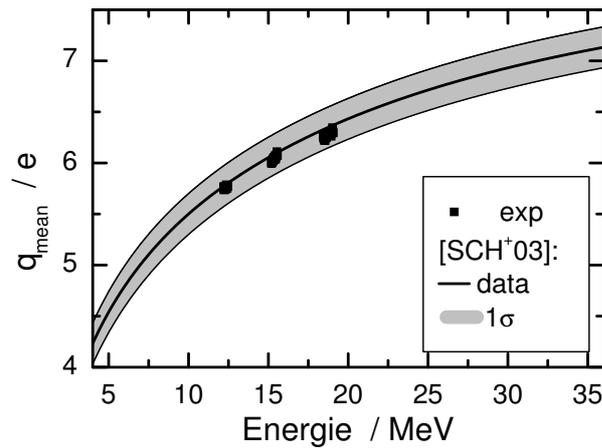


Abbildung 3.10: mittlerer Ladungszustand:

- Symbol: gemessene Werte
- Linie: nach Schiwietz et al. [SCH+03] berechnete Werte
- grau: nach Schiwietz et al. [SCH+03] berechnete Vertrauensniveau mit einfacher Standardabweichung

zustandes im dynamischen Gleichgewicht berechnet werden. In Abbildung 3.9 sind die berechneten Ladungszustandsverteilungen mit ausgewählten experimentell ermittelten gegenübergestellt. Bei circa 15 MeV ist mit dem Ladungszustand 6+ eine maximale Ausbeute zu erwarten. Dieses Maximum ist in einem großen Energiebereich (relativ zum Messenergieintervall und der experimentellen Nachweisgrenze) annähernd konstant. Für die konventionelle ERD ist eine maximale kinetische Energie von Vorteil, da dadurch die Rückstoßionen ebenfalls eine maximale kinetische Energie erhalten. Notwendig ist dies, da Ionen verschiedener Elemente eine Mindestenergie benötigen, um mit einem Braggionisationsdetektor voneinander unterschieden werden zu können. Somit ist bei höherenergetischen Rückstoßionen ein größerer Bereich als Tiefenprofilierung erreichbar.

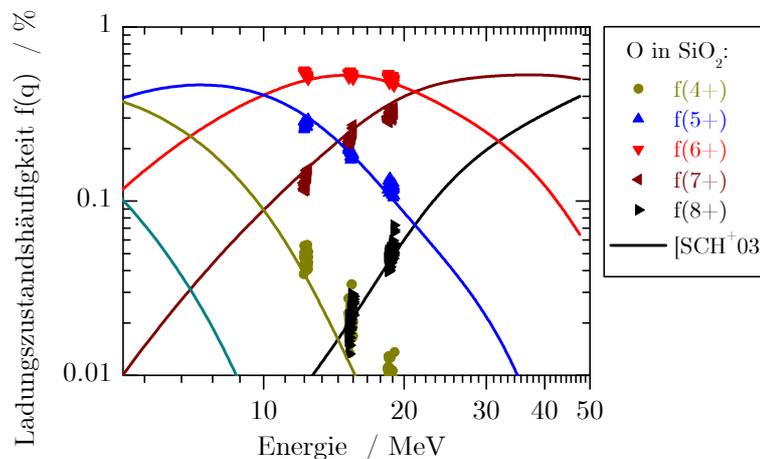


Abbildung 3.9: Ladungszustandsverteilung von Sauerstoffrecoils im dynamischen Gleichgewicht (Experimentelle Daten sind als Elemente und nach [SCH+03] berechnete Ladungszustandsverteilungen als Linien dargestellt)

Bei der höchstauflösenden ERD mit einem Magnetspektrometer spielt der maximale Tiefennachweis keine Rolle. Grund hierfür ist, dass die extrem hohe Tiefenauflösung nur im oberflächennahen Bereich (ca. 100 nm tief) erzielt werden kann. Viel entscheidender ist, dass das Spektrum eines Elements nur durch Messung eines einzelnen Ladungszustandes stattfindet. Aus diesem Grund sollte der Nachweis mit dem Ladungszustand, der die höchste Häufigkeit aufweist, stattfinden. Jeder Beschleuniger- und jeder Detektortyp ist für einen bestimmten Energiebereich optimiert. Demzufolge ist am Magnetspektrometer QQDS der Arbeitsbereich für Sauerstoff im Bereich von 12 bis 18 MeV (ca. 15 MeV ist theoretisches Maximum) mit dem Ladungszustand 6+ energetisch die beste Wahl.

Wird beispielsweise Chlor als Primärionenstrahl gewählt, muss bei einem Streuwinkel von $\Theta = 15^\circ$ eine Primärenergie von circa $E = 20$ MeV verwendet werden, um im optimalen Bereich des Spektrometers arbeiten zu können (vgl. Gl. (1.23)). In Abbildung 3.11 (a-f) sind die Ladungszustandsanteile im dynamischen Gleichgewicht von Sauerstoff-Rückstoßionen dargestellt. Ermittelt wurden hierbei die Ladungszustände der Sauerstoffionen, die von Chlorionen im Binärstoßprozess mit den Primärenergien von 16, 20 und 24 MeV herausgeschlagen wurden und die sich nach einer bestimmten Weglänge im dynamischen Gleichgewicht befinden. Zusätzlich zu den experimentell ermittelten Werten sind in der Abbildung die nach Baudinet-Robinet und Schiwietz et al. gefitteten mittleren Ladungszustandsverteilungen mit ihrem Vertrauensniveau von einer Standardabweichung dargestellt. Die semiempirisch gefitteten aller bisher, größtenteils aus Kohlenstofffolientransmissionsexperimenten, bekannten Ladungszustandsverteilungen im dynamischen Gleichgewicht stimmen innerhalb ihres Vertrauensniveaus mit den experimentell ermittelten Ladungszustandsverteilungen der Sauerstoff-Rückstoßionen in einer Siliziumdioxidschicht im gewählten Energiebereich überein.

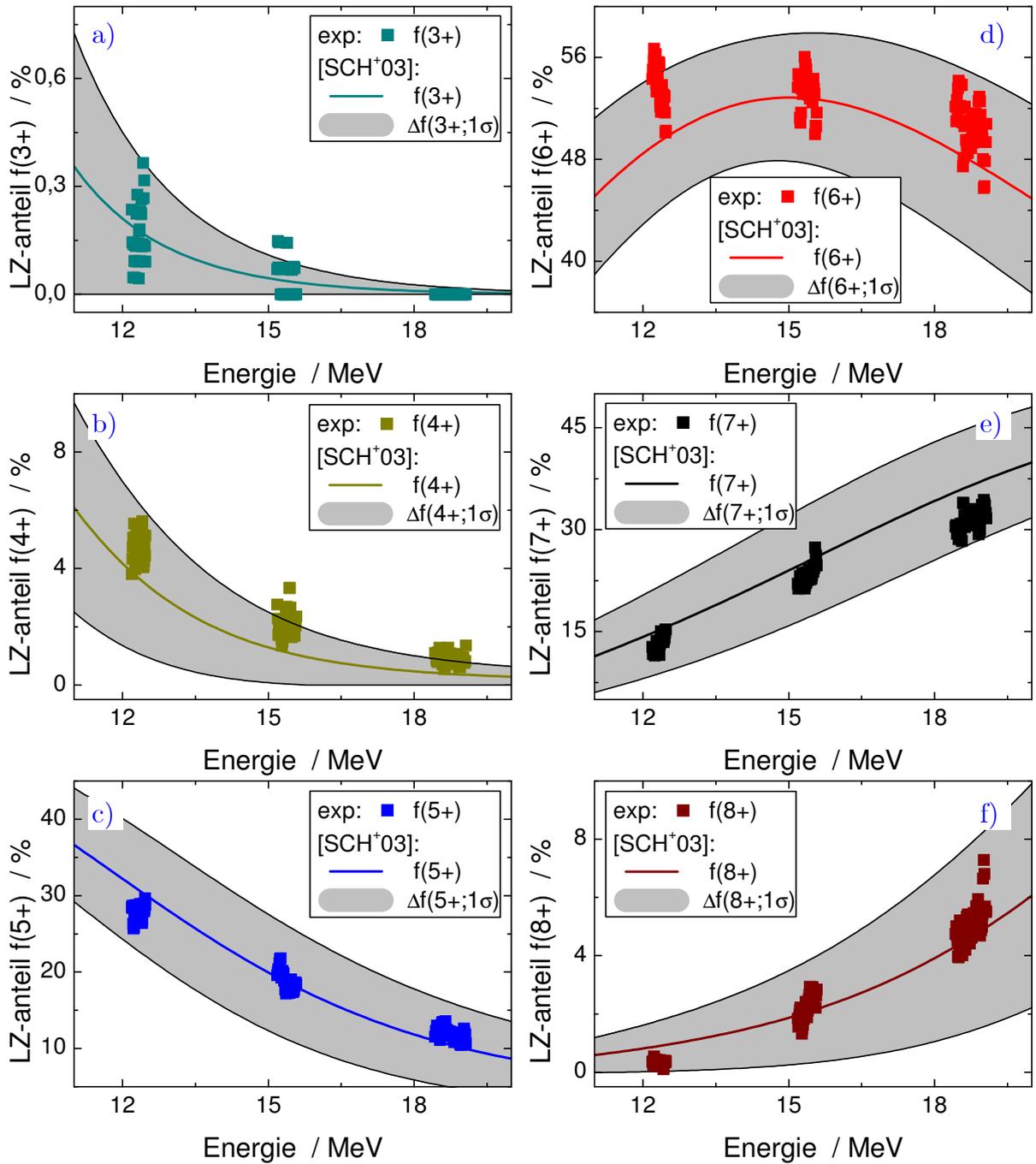


Abbildung 3.11: Ladungszustands-Anteil $f(q)$ von Sauerstoff-Rückstoßionen in Siliziumdioxid im dynamischen Gleichgewicht:

a) $f(3+)$; b) $f(4+)$; c) $f(5+)$; d) $f(6+)$; e) $f(7+)$; f) $f(8+)$

Experimentelle Daten sind als farbige Rechtecke und die nach [SCH⁺03] berechneten semiempirischen Ladungszustandsverteilungen mit einem Vertrauensniveau von einer Standardabweichung (1σ) als Linien dargestellt.

3.3.2 Ladungszustandsverteilung im dynamischen Nichtgleichgewicht

Die Änderung der Ladungszustandsverteilung von **Projektilionen** beim Durchqueren eines Materials ist, wie in Abschnitt 3.1 erläutert, qualitativ sehr gut beschreibbar. Eine quantitative Berechnung der Ladungszustände benötigt viele empirisch gewonnene Messwerte. Diese Messwerte werden anschließend durch semiempirische Funktionen gefittet. Das ist möglich, da der physikalisch qualitative Verlauf bekannt ist. Experimentell werden hierzu die Projektile mit dem Ladungszustand q_i durch ultradünne Folien (mit unterschiedlicher Dicke) geleitet und die Häufigkeit jedes Ladungszustandes nach dem Verlassen der Folien gemessen. Problematisch hierbei ist, dass die Dicke der Folien nur ein paar Nanometer betragen darf. Das heißt, diese Folien dürfen nur aus wenigen Atom-Monolagen bestehen. Aus diesem Grund gibt es nur wenige Materialien, für die die Ladungsverteilung eines durchstreifenden Ions gemessen werden kann. Die in der Literatur am häufigsten genutzten Folien bestehen aus diamantartigem Kohlenstoff [ROB02].

Am Magnetspektrometer QQDS besteht ebenfalls die Möglichkeit, solche Transmissionsmessungen mittels ultradünner Folien durchzuführen. Der Vorteil wäre, dass hierbei exakt die Messbedingungen, wie sie für die höchstauflösende ERD benötigt werden, untersucht werden können. In diesem Fall muss der Spektrometerstreuwinkel auf $\Theta_{\text{HRERD}} = 0^\circ$ gedreht werden. Jedoch sind diese Messungen unergiebig, da sie unverhältnismäßig viel Zeit in Anspruch nehmen. Aus diesem Grund ist für die höchstauflösende Ionenstrahlanalytik ein weiterer Experimentalaufbau entwickelt und praktisch umgesetzt worden [WIE10]. Der messtechnische Unterschied und zugleich Vorteil dieser Anlage ist eine zusätzlich anlegbare Spannung sowie der Einsatz von zwei Kohlenstofffolien. Diese Spannung wird longitudinal zu den Ionen zwischen den beiden Folien angelegt. Die Ionen, die vom Beschleuniger auf die erste Folie geleitet werden, sind monoenergetisch und besitzen einen Monoladungszustand. Durchdringen diese Ionen die erste Folie, besitzen sie nach dem Austritt eine spezielle Ladungsverteilung. Diese Ionen bewegen sich zur zweiten Folie. Da zwischen den beiden Folien eine Spannung angelegt ist, werden diese Ionen erneut beschleunigt. Jedoch ist diese Geschwindigkeitserhöhung proportional zu ihrem Ladungszustand. Somit besitzen Ionen mit unterschiedlichem Ladungszustand eine unterschiedliche kinetische Energie. Beim Durchdringen der zweiten Folie ändert sich ihr Ladungszustand erneut. Anschließend werden die Ionen durch einen Elektrostaten gelenkt. Dieser trennt Ionen mit einem unterschiedlichen E/q -Verhältnis örtlich voneinander. Die Ionen werden nach ihrer Trennung mit einem ortsempfindlichen Halbleiterdetektor nachgewiesen. Der finale Ladungszustand kann durch die Position auf dem Detektor bestimmt werden. Der Ladungszustand, den die Ionen vor der zweiten Folie besaßen, kann ihnen durch eine kleine Verschiebung im Positionsspektrum zugeordnet werden. Das hierbei gewonnene Resultat ist, dass für viele Anfangsladungszustände parallel deren Ladungszustandsverteilung nach dem Durchdringen einer dünnen Kohlenstofffolie gemessen werden kann. Zusammenfassend ist zu sagen, dass durch den Einsatz einer zweiten Folie und einer zusätzlichen Spannung erheblich viel Zeit gespart werden kann, da ansonsten jeder einzelne Ausgangsladungszustand separat gemessen werden müsste.

Der Vergleich des semiempirischen Modells aus Abschnitt 3.2.3 mit den experimentell ermittelten Daten bleibt noch aus. Die Arbeit von Wiemann [WIE10] bezog sich auf

den Aufbau und die Messung des für die höchstauflösende Rutherford-Spektrometrie benötigten Strahlelements Kohlenstoff. Fortführende Messungen konnten nicht durchgeführt werden, da der 5 MV-Tandembeschleuniger zur Zeit durch einen neuen 6 MV-Beschleuniger ersetzt wird und damit keine Strahlzeit zur Verfügung steht.

Für die gestreuten beziehungsweise herausgestreuten Ionen sind diese Erkenntnisse nur bedingt nutzbar, da die Anfangsladungszustandsverteilung direkt nach dem Stoß weiterhin unbekannt bleibt. Für diese Ionen muss jeweils die Ladungszustandsverteilung am Magnetspektrometer QQDS gemessen werden.

Die Ladungszustandsverteilung der **Ionen nach dem Stoß** wird ebenfalls für die Analyse von höchstauflösenden Spektren benötigt. Zum einen muss das gemessene Spektrum über die Ladungszustandsverteilung normiert werden. Die Vorgehensweise dieser Normierung wird in Abschnitt 5.2.1 erläutert. Zum anderen ist der elektronische Energieverlust vom effektiven Ladungszustand abhängig (vgl. Abschnitt 3.2.3). In Abbildung 3.12 sind diese Ladungszustandsverteilungen für Sauerstoff als Recoilion bei verschiedenen Energien, dargestellt. Die Abbildung 3.12 a) bis c) beinhalten die Ladungszustandsverteilungen, die die Sauerstoffionen nach dem Stoß besitzen. Die gepunkteten Linien entsprechen den Verteilungen, die nach Schiwietz et al. [SCH⁺04] mit den Gleichungen (3.8), (3.7) und (3.10) berechnet wurden und die gemessenen Werte sind stellvertretend durch Symbole dargestellt. Die durchgezogenen Linien sind die dazugehörigen Fitfunktionen. Diese Funktionen werden aus Gleichung (3.3) und (1.14) gewonnen. Daraus folgt, dass als Fitfunktion wurde folgender Zusammenhang berücksichtigt:

$$\begin{aligned} \overline{q(x)} &= \overline{q(\infty)} + [q(0) - \overline{q(\infty)}] \cdot e^{-\frac{x}{X}} \\ \text{mit } S_r &= -\frac{\Delta E}{x} = -\frac{E - E_r^0}{x} \\ \overline{q(x)} &= \overline{q(\infty)} + [q(0) - \overline{q(\infty)}] \cdot e^{-\frac{(E - E_r^0)}{S_r \cdot X}} \end{aligned} \quad (3.19)$$

In den Abbildung 3.12 d) bis f) sind die mittleren Ladungszustände dargestellt. Die Symbole stehen auch hier stellvertretend für die experimentell gewonnenen Werte, die nach Gleichung (3.2) ermittelt wurden und die durchgezogenen Linien sind nach Gleichung (3.19) gefittet. Bei den dargestellten Verteilungen ist zu erkennen, dass die semiempirischen Fitfunktionen von Schiwietz et al. [SCH⁺04] auf experimentelle Werte übertragbar sind.

Für den Wert S_r muss beachtet werden, dass er nicht dem Bremsvermögen der einzelnen Ladungszustände entspricht, da die dargestellte Ladungshäufigkeitsverteilung als Funktion der Energie nicht von einem gleichbleibendem Ladungszustand kommt, sondern dies die Häufigkeiten sind, die sich bei permanenten Umladungen durch Elektroneneinfang und -verlust ergeben. Zusätzlich nimmt die Energie nicht linear mit der durchdrungenen Tiefe ab, da der mittlere Ladungszustand der Primärionen von der durchdrungenen Weglänge abhängt. Somit ändert sich das Bremsvermögen der Primärionen mit der Tiefe. Das führt dazu, dass die tiefenabhängige Energie der herausgestreuten Ionen in dem Bereich, in dem die Primärionen noch nicht im Gleichgewicht waren, stark verzerrt ist.

Die beiden notwendigen Korrekturen können mit den Ladungszustandsverteilungen aus Abbildung 3.12 durchgeführt werden, weil die Normierung der Ionen im energieabhängigen Spektrum erfolgen muss. Das ladungszustandsabhängige Bremsvermögen der Recoilionen kann hierbei genutzt werden, da bei der Analyse die Ladungsverteilung der Primärionen im Nichtgleichgewicht berücksichtigt wird. Dies ist der Fall, da dadurch die Energie-Tiefen-Beziehung, die an der Oberfläche verzerrt ist, einbezogen, und einem herausgestreuten Ion somit für eine Tiefe die richtige Energie zugeordnet werden kann.

Die Verteilung der mittleren Ladungszustände der elastisch gestreuten Schwerionen wird auf die gleiche Weise berechnet, wie die der Recoilionen. Berechnet werden die Fittfunktionen ebenfalls nach Gleichung (3.19).

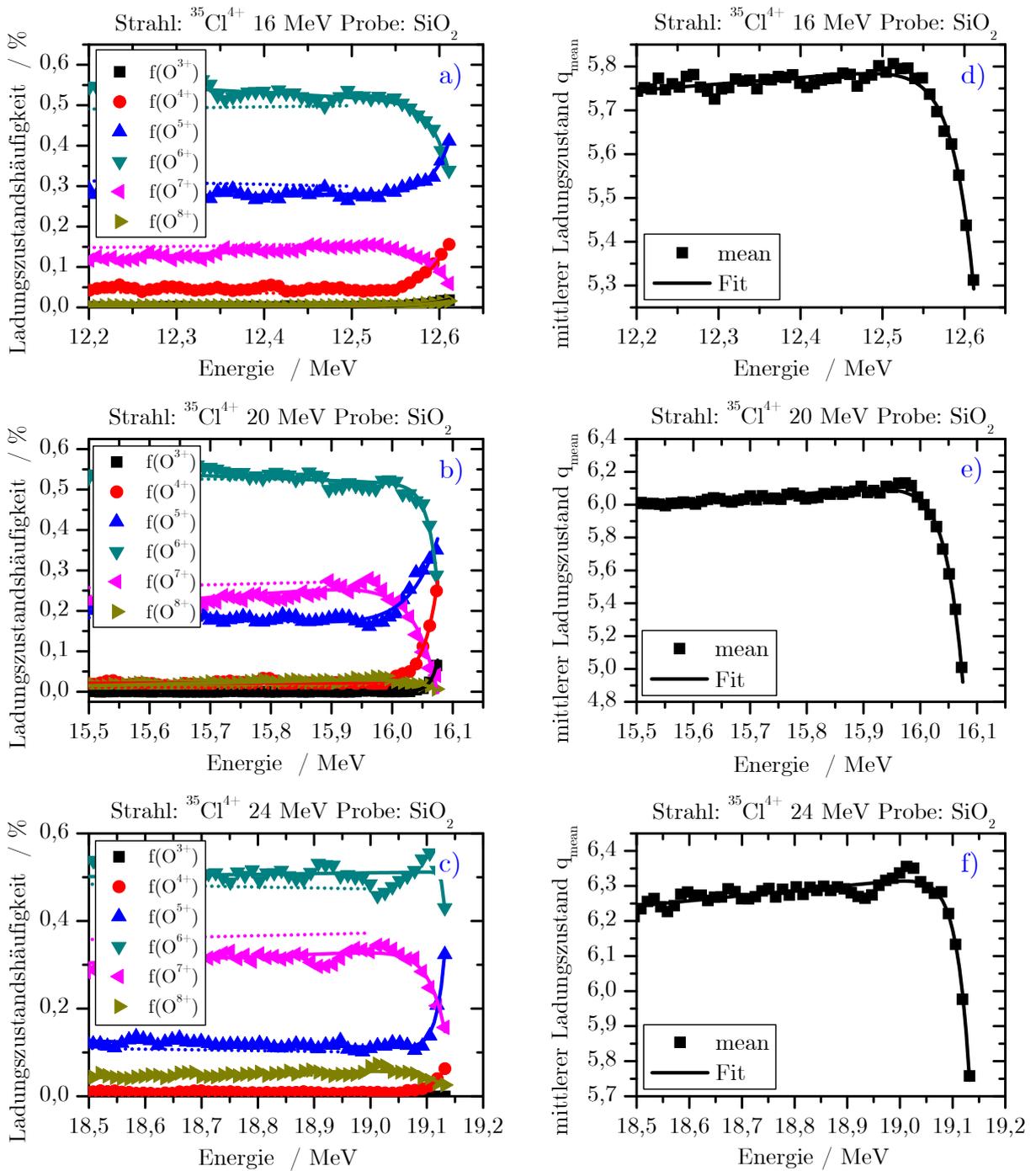


Abbildung 3.12: Ladungszustandsverteilungen a) bis c) für Sauerstoff bei verschiedenen Energien und ihre entsprechenden mittleren Ladungszustände d) bis f)

(Die Symbole stehen stellvertretend für experimentell gewonnenen Werte, die gepunkteten Linien für die nach Schiwietz et al. [SCH⁺04] berechneten Werten und die durchgezogenen Linien sind nach Gleichung (3.19) angepasste Fitfunktionen.)

Kapitel 4

Schädigung durch den Primärstrahl

4.1 Überblick und theoretische Grundlagen

Schnelle Ionen, die in einem Festkörper abgebremst werden, erzeugen entlang ihrer Trajektorie ein Gebiet mit einer hohen elektronischen Anregung [FLE⁺65]. Die laterale Ausdehnung dieser Spur ist radialsymmetrisch und hat einen Durchmesser von etwa 10 nm. Besitzen diese Projektile eine Energie von einigen MeV, so deponieren sie auf ihrem Weg durch den Festkörper mehrere 10 keV pro Nanometer. Diese deponierte Energie, die sie aufgrund ihrer Abbremsung im Festkörper hinterlassen, wird an die umliegenden Atome abgegeben. In vielen Materialien kann dadurch eine Reihe von Modifikationen im Festkörper und auch an dessen Oberfläche entstehen [ARN⁺03]. Die Hauptprobleme bei sehr dünnen Schichten sind hierbei:

- die Desorption von leicht flüchtigen Elementen oder Molekülen, wie zum Beispiel H₂ oder N₂, aus dem zu untersuchenden Festkörper [MAR⁺96],
- das Herausstoßen von neutralen und geladenen Atomen oder Molekülen aus der Oberfläche des Festkörpers (nukleares und elektronisches Zerstäuben) [JOH⁺92],
- die Amorphisierung [STU⁺97] und die Grenzflächendurchmischung an Phasengrenzen [SZE02, SCH⁺04a],
- die Ausbildung von Nanokristallen in amorphen Materialien [BAC⁺09],
- die Entmischung von Phasen, wie beispielsweise Si und SiO₂ in SiO_x Schichten [ARN⁺05] und
- die Änderung der Materialstruktur auf der mesoskopischen Skala, wie zum Beispiel der Oberflächenstruktur [BRO⁺00].

Der Grund dieser Materialveränderungen liegt in der Übertragung der Energie der angeregten Elektronen (in der und außerhalb der Spur) in das atomare System des Festkörpers. Für diesen Vorgang gibt es verschiedene Modelle. Insbesondere wird hierbei das Coulomb-Explosions-Modell (auch Ionic-Spike-Modell) [FLE⁺65a] und das Thermal-Spike-Modell [WAN⁺96, TOU⁺96, TOU⁺96a, MEF⁺98] kontrovers disku-

tiert. Experimente zeigen, dass die Spurbildung in Isolatoren erst oberhalb einer materialabhängigen Schwelle der elektronischen Energiedeposition zu beobachten ist.

Die „**Coulomb Explosion**“ beginnt mit der Abstoßung ionisierter Targetatome, die sie aufgrund ihrer Coulombkraft aufeinander auswirken. Damit die Targetionen ihren Platz verlassen, muss die Coulombabstoßung zwischen ihnen größer sein als die Gitterbindung. Dies führt zu einer reduzierten Dichte im Zentrum und einer erhöhten Dichte am Rand des Zylinders. Der instabile Zustand kollabiert daraufhin, die Atome fallen zurück in das Zentrum der Spur und nach etwa 10^{-13} s ist die „Coulomb Explosion“ abgeschlossen. Damit sich tatsächlich eine Spur ausbilden kann, dürfen freie Elektronen die Targetionen nicht zu schnell neutralisieren. Damit muss die Ionisierungsdauer größer sein als die Diffusionszeit der Targetionen.

Das **Thermal-Spike-Modell** beginnt mit einer Thermalisierung des Elektronensystems. Zusätzlich wird ein Teil der Energie durch eine Elektronen-Phononen-Kopplung auf das Gitter des Festkörpers übertragen. Die damit verbundene Temperaturerhöhung des Gitters kann nahe der Ionenbahn sogar die Schmelztemperatur T_m des Materials lokal übersteigen. Durch Wärmeleitung wird nach wenigen 10^{-11} Sekunden die Umgebungstemperatur wieder erreicht. Dadurch ist eine Spurbildung jedoch erst möglich, wenn die Gittertemperatur entlang der Ionenbahn die Schmelztemperatur T_m des jeweiligen Materials übersteigt. Somit existiert eine Schwellenenergiedeposition, ab der eine Spurbildung eintritt.

An das Thermal-Spike-Modell knüpft Szenes [SZE95] ein semiempirisches Modell an, mit dem eine Abschätzung der Spurradien R_0 und der Schwelle S_{et} des elektronischen Bremsvermögens S_e zur Bildung von Spuren möglich ist. Mit den Annahmen, dass die Temperaturverteilung im Raum und mit fortlaufender Zeit gaußverteilt ist und dass der Spurradius dem maximalen Radius entspricht, an dem die Schmelztemperatur T_m noch überschritten wird, ergibt sich für den Radius die Abschätzung:

$$R_0^2 = \begin{cases} a^2(0) \cdot \ln\left(\frac{S_e}{S_{et}}\right) & \text{wenn } 2,7 \geq \frac{S_e}{S_{et}} \geq 1 \\ \frac{a^2(0)}{2,7} \cdot \frac{S_e}{S_{et}} & \text{wenn } \frac{S_e}{S_{et}} \geq 2,7 \end{cases} \quad (4.1)$$

Und für die Schwelle S_{et} ergibt sich:

$$S_{et} = \pi \cdot a^2(0) \cdot \frac{c \cdot (T_m - T_{Umgebung})}{\tilde{g}} \quad (4.2)$$

$T_{Umgebung}$ ist die Umgebungstemperatur und c die Wärmekapazität. Die Parameter $a(0)$ und \tilde{g} sind von experimentellen Daten abgeleitete Fitparameter. Szenes gibt für $a^2(0)$ den Wert 20 an und stellte fest, dass für die Isolatoren \tilde{g} im Bereich von 0,17 bis 0,5 liegen.

Schäden, die während dieser Arbeit beobachtet wurden, sollen im Folgenden dargestellt werden. Zusätzlich wird dargelegt, wie diese Strahlschäden vermieden oder zumindest so klein gehalten werden können, dass sie die Messergebnisse nicht verfälschen. Dabei wird deutlich, dass ab einem bestimmten elektronischen Bremsvermögen S_{et} besonders der auftretende Strahlschaden beachtet werden muss.

4.1.1 Änderung der Materialstruktur auf mesoskopischer Skala

Die Bestrahlung einer dünnen Schicht mit schweren Ionen kann zu einer Änderung der internen Spannung in dieser Schicht führen und dadurch verschiedene Effekte verursachen. Zum einen kann sich direkt die Morphologie dieser Schicht verändern [DEV94]. Zum anderen kann es zu einer Spannungsrelaxation aufgrund eines verstärkten Newtonschen Fließverhaltens [SNO⁺94] oder zu einer anisotropischen Expansion [BEN⁺92] kommen. Brongersma et al. [BRO⁺00] zeigten zudem, dass auch eine Erzeugung von Punktdefekten durch transiente Spannungsrelaxation stattfinden kann.

Änderungen der Materialstruktur während einer Analysemessung gilt es grundsätzlich zu vermeiden. Ein Beispiel einer Oberflächenmodifikation ist in Abbildung 4.1 a) und b) dargestellt. Dies sind Mikroskopaufnahmen einer ca. 50 nm dünnen Borschicht, die auf Silizium aufgetragen wurde und mit Chlorionen mit einer Energie von 20 MeV und einer Fluenz von $2,2 \cdot 10^{14}$ Chlorionen/cm² bestrahlt wurde. In Abbildung 4.1 a) ist eine Ecke einer bestrahlten Position mit 10-facher Vergrößerung und in Abbildung 4.1 b) eine Kante mit 20-facher Vergrößerung dargestellt. Es sind sowohl Hügel als auch Risse in der Oberfläche zu erkennen.

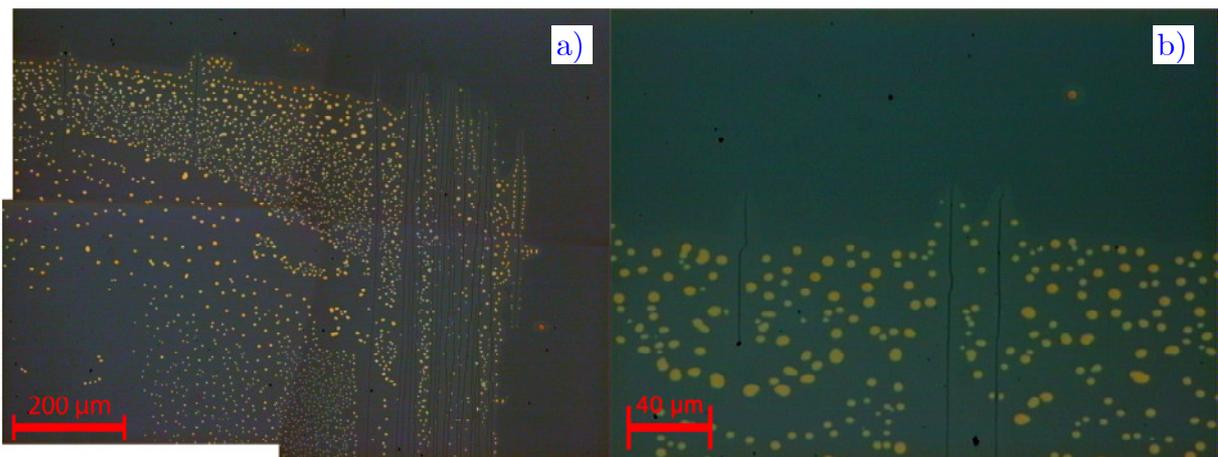


Abbildung 4.1: Mikroskopaufnahmen einer Borschicht auf Silizium nach einer Bestrahlung von $2,2 \cdot 10^{14}$ Chlorionen/cm²
a) 10-fache Vergrößerung einer Strahlfleckecke (vier Bilder zu einem zusammengefügt)
b) 20-fache Vergrößerung einer Strahlfleckkante

Diese Veränderungen sind der Grund, weshalb die Analyse von Bor nicht mit Chlorionen und einer Energie von 20 MeV durchgeführt werden kann. Für Bor zeigt sich, dass Energien unter 8 MeV genutzt werden müssen. Die maximale Fluenz wird durch das elektronische Sputtern festgelegt (vgl. Abschnitt 4.1.5). Bei den Proben, bei denen Sauerstoff der Analyt war, zeigten sich bei 20 MeV nicht solche morphologischen Veränderungen.

4.1.2 Primärionenimplantation

Die Ionenimplantation ist ein Verfahren zur Einbringung von Fremdatomen in ein Grundmaterial. Hierbei wird die stoffliche Zusammensetzung des Festkörpers geändert. Auf diese Weise bilden sich zum Beispiel Verbindungen und Legierungen, die die Eigenschaften eines Materials ändern. Die Reichweite und Verteilung der implantierten Ionen hängt von der Ionenart, von der Primärenergie der Ionen sowie vom Material der Probe selbst ab.

Da bei der Ionenstrahlanalyse ebenfalls Ionen auf die Probe gelenkt werden, findet bei jeder dieser Analysen eine Ionenimplantation statt. Aus diesem Grund erfolgte eine Simulation von Chlorionen-Implantation mit einem Einfallswinkel von 85° und einer Primärenergie von 20 MeV in eine Siliziumprobe, auf der sich eine 10 nm SiO_2 Schicht befindet, mit der Software TRIM [ZIE⁺10] simuliert. Bei diesen Messbedingungen beträgt die mittlere Reichweite der Chlorionen etwa 680 nm mit einer Standardabweichung von etwa ± 345 nm beträgt. Die höchstauflösenden Spektren werden allerdings für die ersten zehn Nanometer gewonnen. Somit werden fast alle eindringenden Chlorionen unterhalb der zu untersuchenden Schichten implantiert und haben damit keinen Einfluss auf die Elementkonzentrationen der zu untersuchenden Schichten.

4.1.3 Desorption von volatilen Elementen

Bei der Bestrahlung einer Probe mit Schwerionen kann es dazu kommen, dass während der Messung Atome aus der Probe ausgetrieben werden. Besonders kritisch ist dies für Wasserstoff, da sich in Folge dessen einerseits das Bremsvermögen der Inzidenzonen geringfügig ändert. Andererseits wird die Interpretation der Sauerstoffprofile erschwert, falls die Wasserstoffatome in Form von Wasser eingelagert sind und somit nicht die Sauerstoffatome der Schicht selbst sondern die vom Wasser abgetragen werden. Aus diesem Grund ist zur Quantifizierung der Probenzusammensetzung in dieser Arbeit von jeder Probe ein Wasserstoffprofil aufgenommen worden. Diese Wasserstoffbestimmungen erfolgten über eine nukleare Resonanzanalyse. Die hierfür

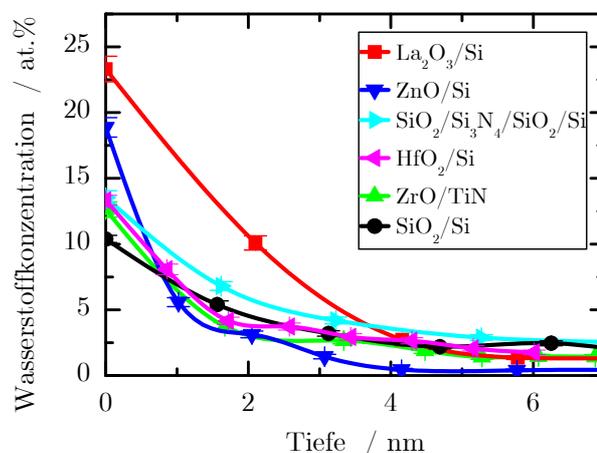


Abbildung 4.2: Wasserstoffkonzentration in Abhängigkeit der Tiefe von verschiedenen in dieser Arbeit genutzten Schichtsystemen; gemessen mit der Nuklear-Resonanz-Analyse $^1\text{H}(^{15}\text{N},\alpha\gamma)^{12}\text{C}$

genutzte Reaktion ist ${}^1\text{H}({}^{15}\text{N},\alpha\gamma){}^{12}\text{C}$ mit der Resonanzenergie von 6,385 MeV. Analysiert wird die Häufigkeit der γ -Quanten. In Abbildung 4.2 sind die Wasserstoffprofile von ausgewählten Schichten, die während dieser Arbeit analysiert wurden, dargestellt. Es ist zu erkennen, dass sich bei allen Schichten direkt auf der Oberfläche eine erhöhte Konzentration von Wasserstoff befindet. Das hier genutzte Referenzmaterial SiO_2 auf Si weist im Vergleich zu all diesen Schichten die niedrigste und La_2O_3 auf Si die höchste Konzentration von Wasserstoff auf. Somit kann die Austreibung der Wasserstoffmoleküle geringfügig das Bremsvermögen der Analyseionen während der Messung beeinflussen. Eine Untersuchung der Desorption bei Schichtanalysen muss damit in jedem Fall stattfinden. Die Desorption von Wasserstoffmolekülen aus dem genutzten Referenzmaterial SiO_2 auf Si kann aufgrund der niedrigen Konzentration an Wasserstoff jedoch vernachlässigt werden. Die Wasserstoffprofile, die in Abbildung 4.2 dargestellt sind, werden somit ohne Betrachtung der Austreibung in der Auswertesoftware NDF [BAR⁺97, BAR⁺98, BAR⁺08] berücksichtigt und gehen damit direkt in die Analytik mit ein.

4.1.4 Elementmischung an Grenzflächen

Die Grenzflächendurchmischung ist ein Prozess, bei dem Ionenstrahlen die Grenzfläche zwischen zwei Schichten beziehungsweise zwischen einer dünnen Schicht und dem darunter liegenden Substrat verändern. Sowohl die Primärionen, als auch von ihnen verursachte elektronische Anregungen erzeugen Stoßkaskaden, die ein merkliches Grenzflächenmischen hervorrufen können und zu nicht-stöchiometrischen und instabilen Phasen in der Nähe der Grenzfläche führen. In Abbildung 4.3 ist dieser Einfluss schematisch dargestellt. Abbildung 4.3 a) zeigt eine dünne Schicht mit einer scharfen Grenzfläche zum Substrat. Diese scharfe Grenzfläche wird durch Bestrahlung mit Schwerionen kontinuierlich diffuser. Das Resultat, eine diffuse Phasengrenzen, ist in Abbildung 4.3 b) verdeutlicht. Zusätzlich sind in der jeweiligen Abbildung die experimentell nachweisbaren Standardabweichungen σ_{ub} für eine unbestrahlte und σ_{be} für eine bestrahlte Probe, die sich für die dargestellten Übergänge ergibt, angedeutet.

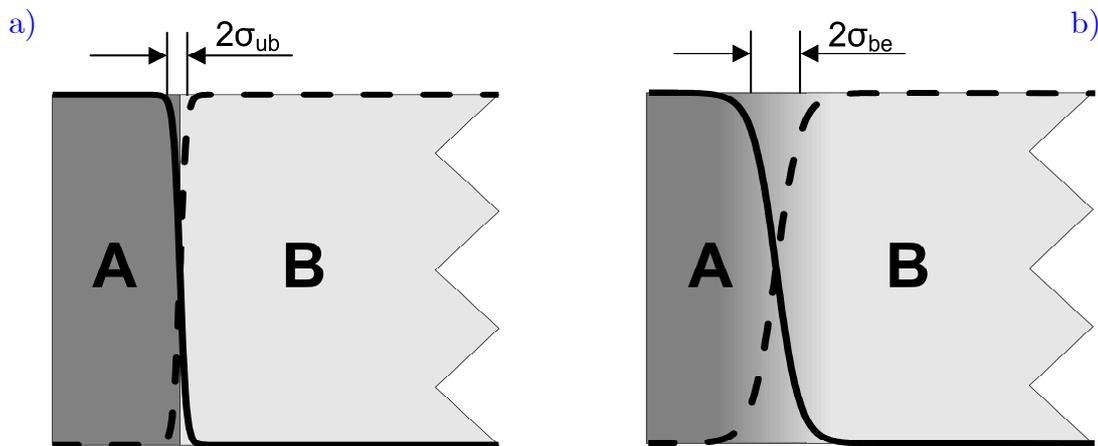


Abbildung 4.3: a) unbestrahlte Doppelschicht mit scharfer Grenzfläche
 b) bestrahlte Doppelschicht mit diffuser Phasengrenze
 (σ_{ub} und σ_{be} sind die experimentell nachweisbaren Standardabweichungen, die sich für den Übergang ergeben)

Das Mischverhalten kann als Diffusion mit einer Mischrate k beschrieben werden. Mit der Annahme einer linearen Abhängigkeit der Grenzflächenverbreiterung $\Delta\sigma^2 = \sigma_{be}^2 - \sigma_{ub}^2$ von der Ionenfluenz Φ ergibt sich für die Mischrate:

$$k = \frac{d\Delta\sigma^2}{d\Phi} = \frac{\Delta\sigma^2}{\Phi}. \quad (4.3)$$

Die Grenzflächenverbreiterung kann bei einem Diffusionsprozess durch die effektive Diffusionskonstante D und durch die effektive Diffusionszeit τ bestimmt werden und ergibt:

$$\Delta\sigma^2 = 2Dt. \quad (4.4)$$

Zusätzlich wird vorausgesetzt, dass die Grenzflächendurchmischung durch eine Überlagerung unabhängiger Mischprozesse in einzelne Ionenspuren erfolgt. Damit gibt die Mischrate k die Grenzflächendurchmischung eines einzelnen Ions mit dem Ionenspurquerschnitt πr^2 an. Somit folgt:

$$\frac{k}{\pi r^2} = 2Dt. \quad (4.5)$$

In dem **Energiebereich**, in dem die **nukleare Energiedeposition** dominiert, ist die ionenstrahlinduzierte Grenzflächendurchmischung ausführlich von Paine et al. [PAI⁺85] untersucht worden. Bei dieser Durchmischung tragen nur Zweiteilchenstöße zur Grenzflächendurchmischung bei. Dies sind sowohl Stöße zwischen einem Primäri- on und einem Probenatom als auch die zahlreichen Folgestöße zwischen den Probenatomen, die schließlich zu einer Kollisionskaskade führen. Ist der Energieübertrag hierbei größer als eine kritische Energie, so kann durch den Stoß ein Targetatom verlagert werden. Mit der Monte-Carlo-Simulationssoftware TRIDYN [MÖL⁺84, MÖL⁺85, MÖL⁺88] kann diese Zweiteilchenstoß-Grenzflächendurchmischung abgeschätzt werden. Für eine 10 nm SiO₂-Sicht auf Silizium mit einem Chlorionenstrahl mit der Energie von 20 MeV und der Fluenz von 5·10¹² Ionen / cm² zeigte sich, dass der Effekt dieser Grenzflächenmischung vernachlässigbar klein ist. Dies ist der Fall, da das nukleare Bremsvermögen bei der gewählten Energie und bei der Wahl von Chlor als Primäri- on äußerst niedrig ist.

Für den **Bereich des elektronischen Energieverlustes** existieren aktuell wenig experimentelle Daten. Szenes [SZE02] beschreibt dieses Mischverhalten als Diffusion mit der Mischrate k und einem sich zeitlich ändernden Ionenspurradius. Mit Hilfe der Spurbildungsschwelle (Gleichung (4.2)) und dem Spurradius (Gleichung (4.1)) erhält Szenes folgende Abschätzung der Mischrate:

$$k = \pi a^4 (0) \frac{D}{8 \cdot D_T} \left[\left(\frac{S_e}{S_{et}} \right)^2 - \ln \left(\frac{S_e}{S_{et}} \right)^2 - 1 \right]. \quad (4.6)$$

D_T ist die thermische Diffusion. Da sowohl D_T als auch D in den genutzten Temperaturbereichen wenig bis gar nicht bekannt sind, ist eine theoretische Vorhersage derzeit nicht möglich. Jedoch liefert Gleichung (4.6) einen funktionalen Zusammenhang zwischen der Mischrate k und dem elektronischen Energieverlust. Wesentlich ist die Tatsache, dass die Grenzflächenmischung auch im elektronischen Bereich einen Schwellwert besitzt [SCH⁺04a].

4.1.5 Oberflächenzerstäubung und ioneninduzierte Diffusion

Ein weiterer Effekt, der während der Ionenbestrahlung von Materialien auftritt, ist die ioneninduzierte Emission von Atomen aus der Probenoberfläche. Dieser Prozess wird als Oberflächenzerstäubung oder als Sputtern bezeichnet. Wird einem oberflächennahen Atom infolge eines elastischen Stoßes ein Impuls in Richtung der Oberflächennormalen übertragen, so dass dessen kinetische Energie groß genug ist, um die Potentialschwelle an der Oberfläche (Bindungsenergie U_0) zu überwinden, so kann es zur Emission dieses Atoms kommen. Schematisch ist dieser Prozess in Abbildung 4.4 a) dargestellt.

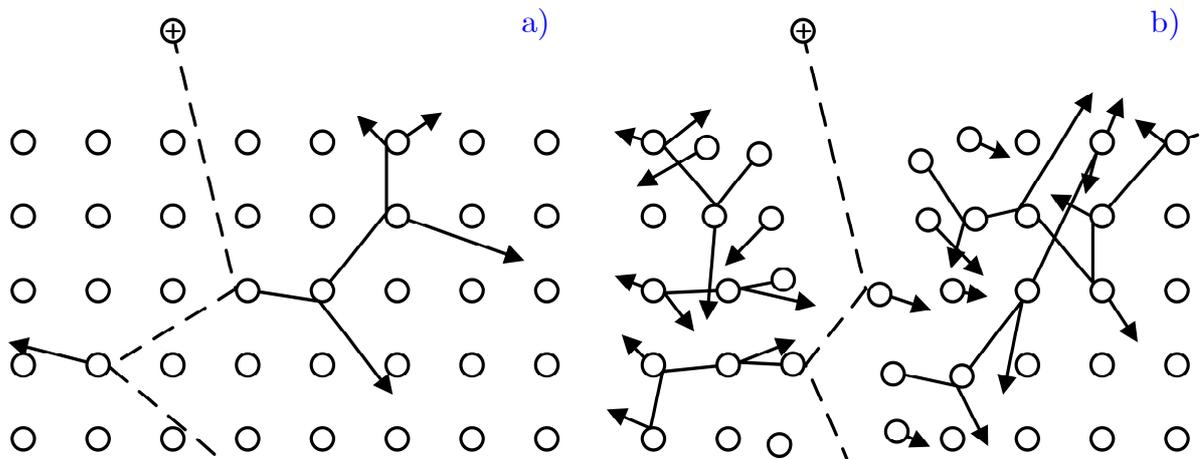


Abbildung 4.4: a) Sputtern mit Einzelkollisionen und Stoßkaskaden
 b) Sputtern anhand des Thermal-Spike-Modells und dabei entstehender Spur

Die hierbei relevante Größe ist die Sputterausbeute Y_n für ein Element n . Diese entspricht der mittleren Anzahl an emittierten Atomen (oder Molekülen) pro einfallendem Ion:

$$Y_n = \frac{N_{Atom}}{N_{Ion}} \propto \frac{dE}{dx} \Big|_{NS} \frac{1}{U_0}. \quad (4.7)$$

N_{Atom} entspricht der Gesamtanzahl an emittierten Atomen und N_{Ion} der Gesamtanzahl der einfallenden Primärionen.

Sigmund [SIG69] beschrieb die Sputterausbeute theoretisch über die Lösung der Transportgleichung für amorphe Festkörper. Der Ansatz hierbei ist, dass die Atome als Rückstoßatome (Recoils) bei der Ausbildung von linearen Stoßkaskaden die Oberflächenbindungsenergie U_0 überwinden und die Probenoberfläche verlassen. Matsunami et al. [MAT⁺84] und Yamamura et al. [YAM⁺96] passten daraufhin die theoretische Sputterausbeute an experimentelle Daten an. Wichtig für die Betrachtung bei der höchstauflösenden ERD ist die Tatsache, dass bei dieser Beschreibung die Sputterausbeute ausschließlich durch den nuklearen Anteil des Energieverlustes der Ionen bestimmt wird. Der elektronische Anteil wird dabei vernachlässigt. Ein wesentlicher Nachteil dieser semiempirischen Sputterausbeuten ist, dass damit nur die

Ausbeuten einzelner Elemente berechnet werden können. Eine Berechnung der Sputterausbeute für Legierungen und Verbindungen ist nicht möglich. Mit einer Simulationssoftware wie TRIM [ZIE⁺09] lassen sich die Sputterausbeuten zahlreicher Verbindungen und Legierungen allerdings gewinnen. Mit der Monte-Carlo-Simulationssoftware TRIDYN [MÖL⁺84, MÖL⁺85, MÖL⁺88] werden zusätzlich auch noch dynamische Veränderungen der Schichtzusammensetzung während der Messung berücksichtigt.

Mit TRIM ergibt sich beispielsweise bei einer Energie von 20 MeV mit einem Chlorprimärstrahl und einem Einfallswinkel von $\alpha = 85^\circ$ in eine 10 nm SiO₂-Schicht, die auf Silizium oxidiert ist, eine Sputterausbeute von $Y_{\text{Si}} = 0,56$ Si-Atome je einfallendem Chlor-Ion und von $Y_{\text{O}} = 1,54$ O-Atome je einfallendem Chlor-Ion. Diese Abweichung entsteht aufgrund der chemischen Zusammensetzung von SiO₂, welches aus einem Siliziumatom und zwei Sauerstoffatomen besteht.

Durchqueren Ionen einen Festkörper mit einer hohen Geschwindigkeit, hinterlassen diese Ionen, wie oben im Abschnitt beschrieben, eine Spur in diesem Material. In der Abbildung 4.4 ist dieser Effekt verdeutlicht. Schematisch sind die nuklearen Stöße, die die Ionen bei niedriger Geschwindigkeit ausüben, in Abbildung 4.4 a) dargestellt. Es ist zu erkennen, dass hierbei ausschließlich die Einzelkollisionen und daraus entstehenden Stoßkaskaden zu einer Verschiebung der Atome von ihren Gitterplätzen beitragen. Findet jedoch zusätzlich eine Spurbildung entlang der Trajektorie des durchquerenden Ions statt, so werden weitere Atome, die sich in der Nähe dieser Trajektorie befinden, von ihren Gitterplätzen verschoben. Diese Ionen produzieren anschließend ebenfalls Einzelkollisionen im Festkörper. Somit kommt es, wie in Abbildung 4.4 b) schematisch dargestellt, zu einer erhöhten Verschiebungsrate (ioneninduzierte Diffusion) der Atome im Festkörper und damit zu einer erhöhten Sputterrate.

Toulemonde et al. [TOU⁺96, TOU⁺96a] zeigen, dass das Thermal-Spike-Modell den elektronischen Sputterprozess bei der Bestrahlung einer Probe mit Schwerionen ausreichend beschreibt. Für die höchstauflösende ERD ergeben sich daraus zwei Fragestellungen. Erstens, verhält sich das Sputtern bei ultradünnen Schichten, die nur aus wenigen Atomlagen bestehen, anders als bei Schichten, die mehrere hundert Nanometer dünn sind? Und zweitens, wie stark beeinflusst das Sputtern die quantitative Elementanalyse dieser ultradünnen Schichten? Um diesen Fragen nachzugehen werden in den folgenden Abschnitten Änderungen der Sputterraten bei verschiedenen Parametern dargestellt und deren Einfluss erläutert.

4.2 Experimentelle Untersuchungen an einer dünnen Siliziumdioxidschicht

4.2.1 Sauerstoffmischung an der Grenzfläche zum Siliziumsubstrat

In Abbildung 4.5 ist die Grenzflächendurchmischung von Sauerstoff an der Grenzfläche zum Siliziumsubstrat dargestellt. Hierbei wurde eine SiO₂-Schicht auf Silizium mit Chlor und der Energie von 20 MeV bestrahlt und das Sauerstoffkonzentrationsprofil mit steigender Fluenz analysiert.

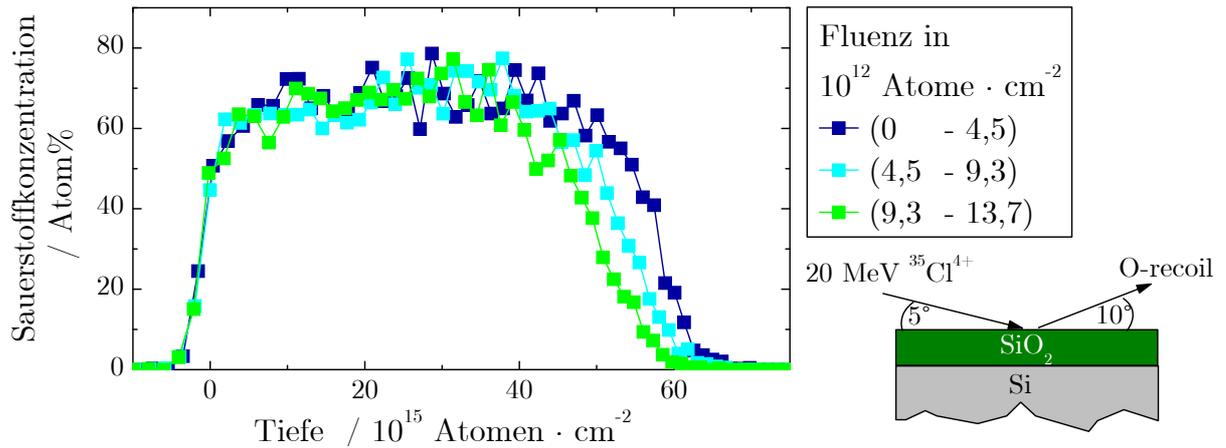


Abbildung 4.5: Sauerstoffkonzentrationsprofile einer SiO_2 -Schicht drei unabhängiger serieller Messungen auf derselben Probe (die erste Messung ist dunkelblau, die zweite hellblau und die dritte grün dargestellt; den jeweiligen Fluenzbereich gibt die Legende an)

An der Kante zwischen SiO_2 und Si sind deutlich zwei Effekte zu sehen. Zum einen nimmt der Sauerstoffgehalt mit steigender Fluenz ab. Dieser Effekt wird in den folgenden Abschnitten noch genauer erläutert. Zum anderen flacht der Übergang mit steigender Fluenz ebenfalls ab. Dies resultiert aus der Grenzflächendurchmischung. Die gemessene quadratische Grenzflächendicke (Standardabweichung σ_{be}) von Sauerstoff an der Grenzfläche zwischen SiO_2 und Si bei steigender Fluenz Φ , die aus Anpassung einer Gaussischen Fehlerfunktion resultiert, ist in Abbildung 4.6 dargestellt. In das Diagramm wurde zusätzlich eine Fitfunktion mit linearer Abhängigkeit von der Fluenz aufgetragen ($k = 3,48 \cdot 10^{31} \text{ Atome}^2 \cdot \text{Ionen}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$ und $\sigma_{be}^2 = 1,28 \cdot 10^{31} \text{ Atome}^2 \cdot \text{cm}^{-4}$). Für den Wert von Sauerstoff dieser Grenzflächendurchmischung ergibt sich damit eine Diffusionskonstante von $k = 3,48 \cdot 10^{31} \text{ Atome}^2 \cdot \text{Ionen}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$.

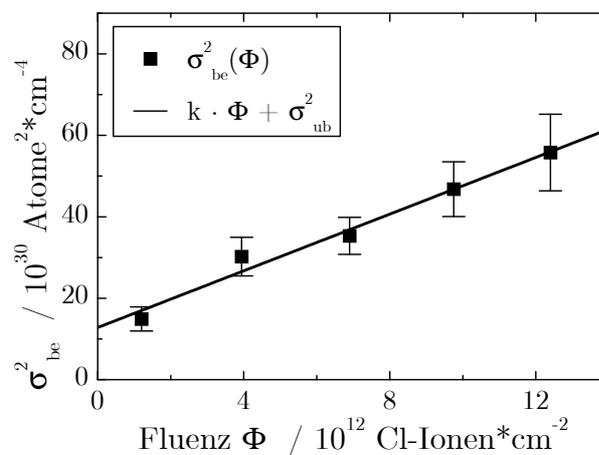


Abbildung 4.6: gemessene quadratische Grenzflächendicke (Standardabweichung σ_{be}) von Sauerstoff an der Grenzfläche zwischen SiO_2 und Si bei steigender Fluenz Φ mit einer linearen Fitfunktion ($k = 3,48 \cdot 10^{31} \text{ Atome}^2 \cdot \text{Ionen}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$ und $\sigma_{be}^2 = 1,28 \cdot 10^{31} \text{ Atome}^2 \cdot \text{cm}^{-4}$)

Parallel zur Entwicklung der höchstauflösenden ERD erfolgten Vorversuche mit der klassischen ERD. In diesem Zusammenhang fanden Analysen statt, die die optimalen

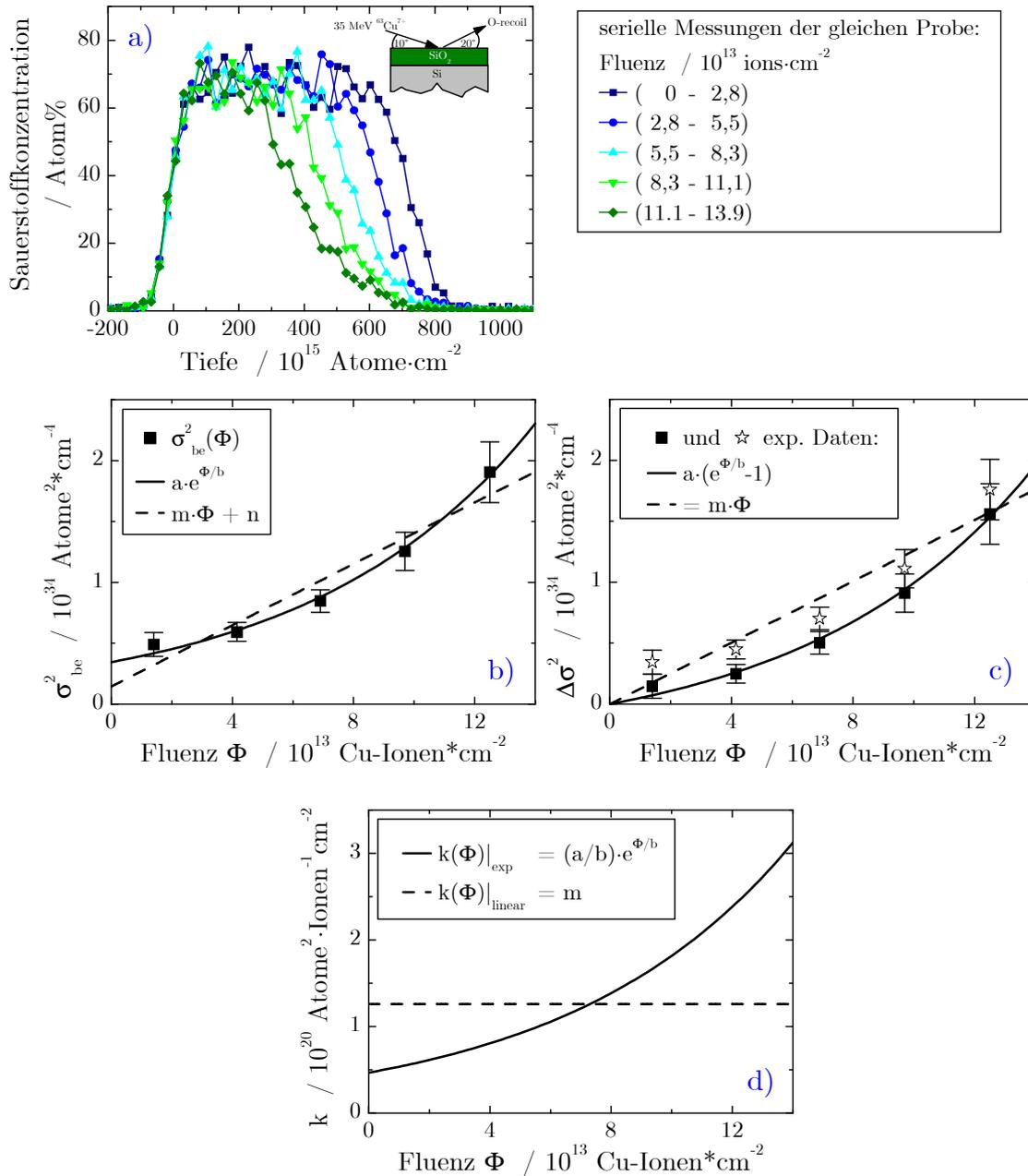


Abbildung 4.7: a) Sauerstoffkonzentrationsprofile einer SiO₂ Schicht bei steigender Fluenz
 b) gemessene quadratische Dicke (Standardabweichung σ_{be}) von Sauerstoff an der Grenzfläche zwischen SiO₂ und Si bei steigender Fluenz Φ und zwei Fitfunktionen (linear und exponentiell)
 c) quadratische Differenz der Standardabweichungen $\sigma_{be}(\Phi)$ und $\sigma_{un}(\Phi = 0)$ und die sich aus a) ergebenen Fitfunktionen
 d) Diffusionskonstante k von Sauerstoff an der Grenzfläche zwischen SiO₂ und Si bei steigender Fluenz Φ mit exponentieller (durchgezogene Linie) und linearer (gestrichelte Linie) Abhängigkeit der Grenzflächendicke

Strahlparameter für die höchstauflösende ERD charakterisieren sollten. Der Hauptschwerpunkt galt hierbei dem Strahlschaden, der während einer Messung entsteht. Ein Beispiel, gemessen mit klassischer ERD, ist in Abbildung 4.7 gezeigt. Hier erfolgte die Analyse mit Hilfe eines Kupferstrahls mit einer Energie von 35 MeV. Bei dieser Analyse ist der lineare Zusammenhang der quadratischen Grenzflächendurchmischung mit steigender Fluenz nicht eindeutig zu erkennen. Wie in Abbildung 4.7 a) deutlich zu sehen ist, deutet sich statt einer linearen eher eine exponentielle Abhängigkeit an. Damit ergibt sich auch eine exponentielle Abhängigkeit der Grenzflächendickenzunahme, die in Abbildung 4.7 b) dargestellt ist. Der Wert der Diffusion ist bei steigender Fluenz in diesem Fall nicht mehr konstant, sondern ebenfalls exponentiell von dieser abhängig. Diese Abhängigkeit ist in Abbildung 4.7 c) verdeutlicht. Der Grund hierfür kann nur eine mit der Fluenz stark ansteigende Schadensproduktion durch zum Beispiel überlagernde Ionenspuren im Material sein. Gezielte Untersuchungen an verschiedenen Materialien und an variierenden Strahlparametern stehen noch aus und sollen in dieser Arbeit nicht weiter verfolgt werden, da die mit der höchstauflösenden ERD getesteten Schichten alle einen linearen Anstieg der quadratischen Grenzflächendurchmischung zeigten und somit einen konstanten Diffusionskoeffizienten k aufweisen.

4.2.2 Sauerstoffverlust während der Schwerionenbestrahlung

Voruntersuchungen mit der klassischen ERD zeigten bereits, dass der Sauerstoffverlust nicht konstant mit der Erhöhung der Primärionenzahl ansteigt, da die Anzahl an Sauerstoffatomen in der Schicht begrenzt ist. Die gemessene Anzahl an Sauerstoffatomen unterschiedlich dicker SiO_2 -Schichten ist in Abbildung 4.8 als Funktion der Fluenz Schichten gegenübergestellt. Darin wird deutlich, dass die Fluenz einen begrenzenden Parameter bei der Analyse dünner Schichten mit Schwerionen darstellt.

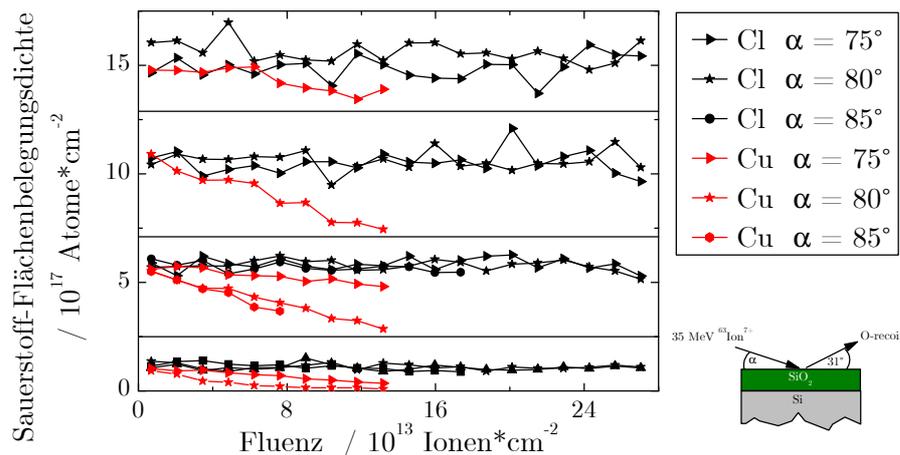


Abbildung 4.8: Vergleich der Anzahl an Sauerstoffatomen unterschiedlich dicker SiO_2 -Schichten bei steigender Fluenz und mit variierten Strahlparametern

Die Verringerung des gemessenen Sauerstoffgehalts einer mit der höchstauflösenden ERD gemessenen SiO_2 -Schicht (ca. 7 nm) auf einem Siliziumsubstrat stellt Abbildung

4.9 bei steigender Fluenz dar. Die zugehörigen Tiefenprofile wurden bereits in Abbildung 4.5 gezeigt. Zu bemerken ist, dass bei den Profilen, die sowohl mit der konventionellen (Abbildung 4.7 a)), als auch mit der höchstauflösenden ERD (Abbildung 4.5) gemessen wurden, die Sauerstoffoberflächenkonzentration konstant bleibt. Es liegt somit kein Vorzugssputtern eines Elementes vor. Daher wird entweder SiO_2 als Ganzes abgetragen, oder der Sauerstoffverlust an der Oberfläche durch ioneninduzierte Diffusion ausgeglichen. Welcher dieser beiden Prozesse stattfindet kann derzeit nicht geklärt werden.

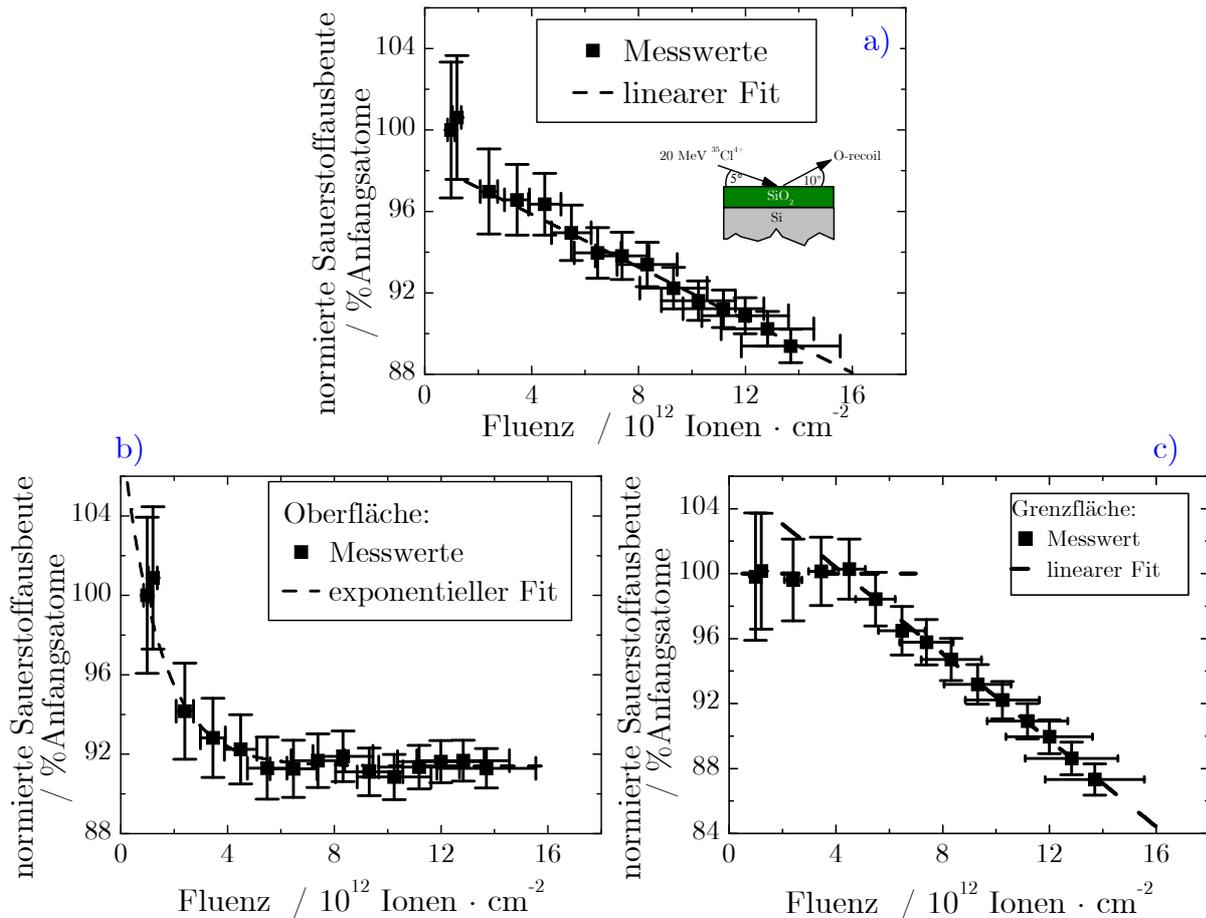


Abbildung 4.9: normierte Sauerstoffausbeute bei steigender Fluenz

- a) einer SiO_2 -Schicht,
- b) ihrer Oberfläche und
- c) ihrer Grenzfläche.

In Abbildung 4.9 ist der Gesamtsauerstoffgehalt in Abhängigkeit von der Fluenz, auf den Wert mit der kleinsten Fluenz normiert, dargestellt. Die Schicht wurde in drei Gebiete unterteilt. In Abbildung 4.9 a) ist der fluenzabhängige Verlauf der gesamten Schicht dargestellt. In Abbildung 4.9 b) ist der Verlauf bei hohen Recoilenergien und in Abbildung 4.9 c) der bei niedrigen Recoilenergien. Der Verlauf der Gesamtschicht ist bis auf die ersten beiden Messungen linear von der Fluenz abhängig. Der Sauerstoffgehalt der Recoilionen bei hohen Energien nimmt bei geringen Fluenzen ab und erreicht bei einer Fluenz von etwa $\Phi = 5 \cdot 10^{12}$ Ionen·cm⁻² einen konstanten Wert. Der

Sauerstoffgehalt bei niedrigen Energien bleibt bis zu einer Fluenz von etwa $\Phi = 5 \cdot 10^{12}$ Ionen \cdot cm $^{-2}$ ebenfalls konstant und nimmt anschließend linear mit der Fluenz ab. Der Grund für die Abweichung der Abnahme des Sauerstoffgehalts bei kleinen Fluenzen ist eine geringe Menge an Wasser in den oberflächennahen Schichten. Diese Verunreinigungen werden bei niedrigen Fluenzen primär abgetragen. In Abbildung 4.2 war ersichtlich, dass die Konzentration an Wasserstoff weniger als 10 Atom% an der Oberfläche beträgt und damit die Wasserstoffkonzentration sehr gering ausfällt. Eine vollständige Abtragung einer Monolage Kohlenwasserstoffverbindungen kann ausgeschlossen werden, da sich die Oberflächenkante der Profile nicht zu einem anderen Tiefenwert verschoben hat. Somit müssen diese Verunreinigungen aus wenigen Molekülen, die Sauerstoff enthalten, bestehen. Für die Analytik der SiO $_2$ -Schichtdicke kann dieser Effekt jedoch genutzt werden, da damit bis zu einer Fluenz von etwa $\Phi = 5 \cdot 10^{12}$ Ionen \cdot cm $^{-2}$ der Messwert der die Grenzflächentiefe bestimmt konstant bleibt.

Um sicherzustellen, dass die Reduzierung des Sauerstoffgehaltes durch Abtragung verursacht wird und dass Sauerstoffatome nicht so weit ins Substrat diffundieren, dass sie nicht mehr nachgewiesen werden können, erfolgte eine weitere Kontrollmessung. Hierzu wurde eine SiO $_2$ -Probe in zwei zu untersuchende Proben geteilt. Auf eine Hälfte wurde eine 10 nm dünne Goldschicht aufgetragen und die andere blieb unbehandelt. Anschließend wurden beide Hälften mit einem Kupferstrahl mit 35 MeV Primärenergie bei verschiedenen Fluenzen analysiert. In Abbildung 4.10 ist die Gesamtmenge an Sauerstoff dieser SiO $_2$ -Schicht einmal ohne und einmal mit der 10 nm Gold-Schicht an der Oberfläche dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die Hälfte mit der dünnen Gold-Schicht keine erkennbaren Sauerstoffverluste aufweist. Damit ist nachgewiesen, dass die Sauerstoffatome von der Oberfläche abgetragen werden und nicht ins Material diffundieren.

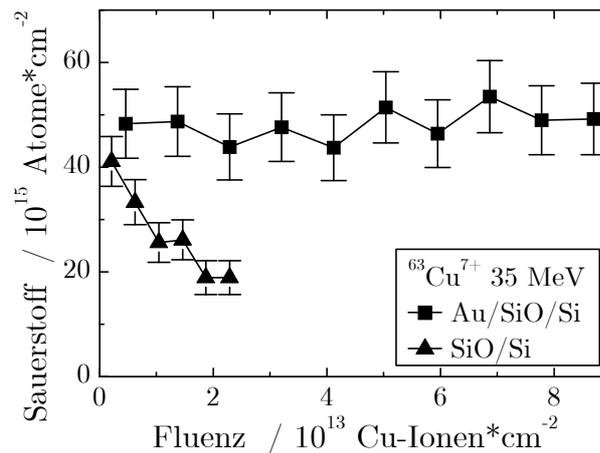


Abbildung 4.10: Menge an Sauerstoff einer SiO $_2$ -Schicht; einmal ohne und einmal mit einer 10 nm Gold-Schicht an der Oberfläche

4.2.3 Sauerstoffverlust bei verschiedenen Primärion

Der Sauerstoffverlust hängt ebenfalls von dem Primärionenelement ab. Ersichtlich ist dies in den Abbildung 4.8 und Abbildung 4.11. Der Anteil an Sauerstoff wird mit

steigender Fluenz bei einem Kupferstrahl schneller als bei einem Chlorstrahl reduziert. Nach Dollinger [DOL09] muss bei der ERD der Strahlschaden immer in Relation zur gemessenen Anzahl der Recoilionen gesetzt werden. Dies bedeutet, dass bei der Forderung gleicher Statistik die Fluenz bei schwereren Ionen deutlich geringer gewählt werden kann.

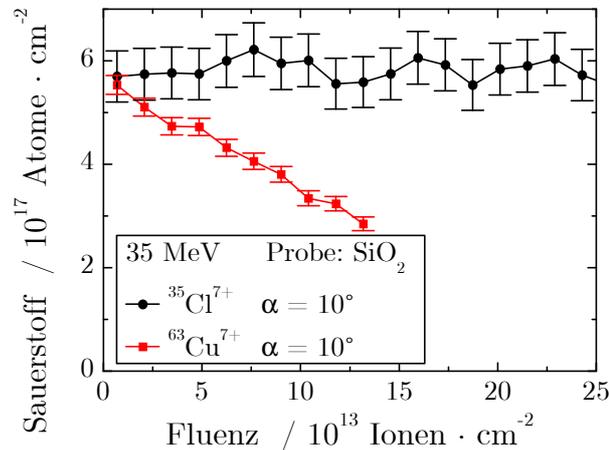


Abbildung 4.11: Vergleich des Sauerstoffverlustes zwischen den Primärionen Chlor und Kupfer

An einem Ionenbeschleuniger können nicht alle Elemente beschleunigt und zur Analytik genutzt werden, da bei einigen Elementen der Strahlstrom zu gering für eine Messung wäre. Typische Kandidaten für die Schwerionen-ERD sind z. B. Si, Cl, Ni, Cu, Au oder I. An der höchstauflösenden ERD Anlage wurden Cl, Ni und Cu getestet, ob sie für die höchstauflösende Schichtanalytik geeignet sind. Schwere Ionen können am 5 MV-Tandembeschleuniger aufgrund der zu geringen magnetischen Steifigkeit des Analysiermagneten nicht getestet werden. Diese Messungen mit der konventionellen als auch höchstauflösenden ERD zeigten, dass der Strahlschaden, der bei gleicher Statistik mit einem Kupfer- oder Nickelstrahl an einer SiO_2 -Schicht erzeugt wird, deutlich größer ist, als mit einem Chlorstrahl. Aus diesem Grund wird für die höchstauflösende ERD Chlor als Primärion gewählt. Für weitere Schichtsystem muss der primärionenabhängige Strahlschaden noch untersucht werden, da dieser ebenfalls vom elektronischen Bremsvermögen und damit Energie der Primärionen abhängt.

4.2.4 Sauerstoffverlust bei Variation des Einfallswinkels

Die Analyse der Sauerstoffverlustes bei unterschiedlichem Einfallswinkel erfolgte anhand eines Kupferstrahls mit einer Energie von $E_0 = 35$ MeV. In der Abbildung 4.12 a) ist der Sauerstoffgehalt einer ultra dünnen SiO_2 -Schicht (ca. $7,5 \cdot 10^{15}$ Sauerstoffatome \cdot cm $^{-2}$) bei steigender Fluenz einmal mit einem Einfallswinkel von $\alpha = 15^\circ$ und einmal mit einem von $\alpha = 10^\circ$ dargestellt. Es ist zu erkennen, dass sich der Sauerstoffgehalt bei einer Bestrahlung von $\alpha = 10^\circ$ mit exponentieller Abhängigkeit bei steigender Fluenz einem Grenzwert nahe der Null annähert. Der Sauerstoff kann nicht vollständig abgetragen werden, da das Vakuum in der Kammer immer

noch hinreichend viele Sauerstoffmoleküle enthält, um erneut eine native SiO_2 -Schicht auf Silizium zu generieren. Bei niedrigen Konzentrationen ergibt sich somit ein dynamisches Gleichgewicht zwischen Sauerstoffabtragung und Generierung von nativem Siliziumoxid.

Ist der Sauerstoffgehalt so groß, dass der Sauerstoffverlustprozess dominierend ist, kann die Abtragung in sehr guter Näherung als lineare Abhängigkeit von der Fluenz beschrieben werden. Dieser lineare Zusammenhang ist sowohl in Abbildung 4.12 a) bei der Bestrahlung einer ultra dünnen SiO_2 -Schicht unter $\alpha = 15^\circ$ als auch in Abbildung 4.12 b) bei einer dünnen SiO_2 -Schicht (ca. $7,5 \cdot 10^{17}$ Sauerstoffatome $\cdot \text{cm}^{-2}$) unter $\alpha = 10^\circ$ und ebenfalls unter $\alpha = 15^\circ$ zu erkennen. In diesem Fall ist die Sputterrate ein konstanter Wert. Unter $\alpha = 15^\circ$ ergibt sich bei der ultra dünnen SiO_2 -Schicht eine Sputterrate von $Y = 560 \pm 30$ und bei der dünnen SiO_2 -Schicht $Y = 620 \pm 50$. Innerhalb ihrer Fehlergrenzen können diese Werte als ein und dieselben angenommen werden. Unter einem flacheren Winkel von $\alpha = 10^\circ$ ergibt sich bereits eine Sputterrate von $Y = 2170 \pm 50$.

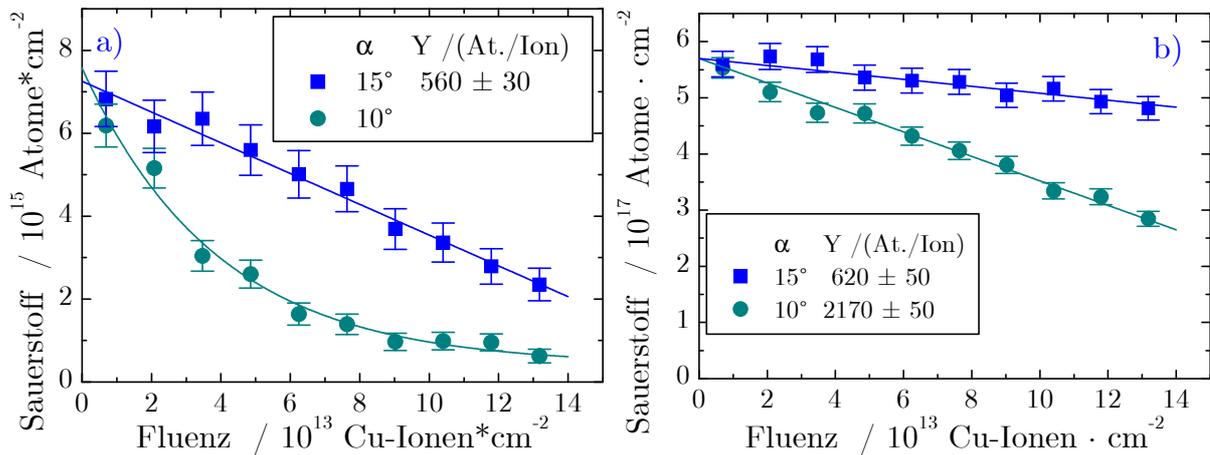


Abbildung 4.12: Anzahl Sauerstoffatome mit steigender Fluenz unter verschiedenen Einfallswinkeln α
a) einer ultadünnen SiO_2 Schicht
b) einer dünnen SiO_2 Schicht

Die Sputterraten sind somit vom Einfallswinkel abhängig. Für die höchstauflösende ERD ist es notwendig einen möglichst flachen Einfallswinkel zu nutzen, um eine hohe Tiefenauflösung zu erreichen. Jedoch sollte aufgrund der starken Einfallswinkelabhängigkeit der Sputterraten dieser Winkel nicht kleiner, als es notwendig ist, genutzt werden.

4.2.5 Sauerstoffverlustes bei Variation der Primärionenenergie

Die Primärenergie ist ein entscheidender Faktor für das elektronische Sputtern, da die kinetische Energie eines Ions den Wert seines Abbremsvermögens bestimmt (vgl. Gl. (1.14)). Kritisch ist dieser Wert, weil das Thermal-Spike-Modell eine Schwelle des elektronischen Bremsvermögens für das Auftreten von Sputtereffekten beinhaltet

[ARN⁺03] (vgl. Einleitung dieses Abschnittes). Unterhalb dieser Schwelle findet kein elektronisches Sputtern statt. Ab diesem Schwellenwert wächst wiederum die Sputterraten mit steigendem Bremsvermögen [ARN⁺03]. In Abbildung 4.13 ist die Auswirkung dieses Effektes zu sehen. Dargestellt ist hier der gemessene Sauerstoffanteil bei steigender Fluenz verschiedener Schichtzusammensetzungen, die alle Sauerstoff enthalten. Gezeigt sind die Mengen an Sauerstoff in ultradünnen SiO₂- (Abbildung 4.13 a)), ZnO- (Abbildung 4.13 b)), La₂O₃- (Abbildung 4.13 c)) und HfO₂-Schichten (Abbildung 4.13 d)). Diese Schichten wurden mit Kupfer bei sowohl einer Primärenergie von E₀ = 25 MeV (dunkelgrün) als auch einer Primärenergie von E₀ = 35 MeV (hellgrün) analysiert. Die Einfallswinkel betragen hierbei α = 10°. Zum Vergleich erfolgten zwei weitere Messungen. Zum einem wurden diese Schichten zusätzlich bei der Energie von E₀ = 35 MeV und einem Einfallswinkel von α = 5° analysiert. Zum anderen erfolgte eine Analyse der Schichten mit einem Chlorstrahl bei einer Primärenergie von E₀ = 20 MeV und einem Einfallswinkel von α = 5°.

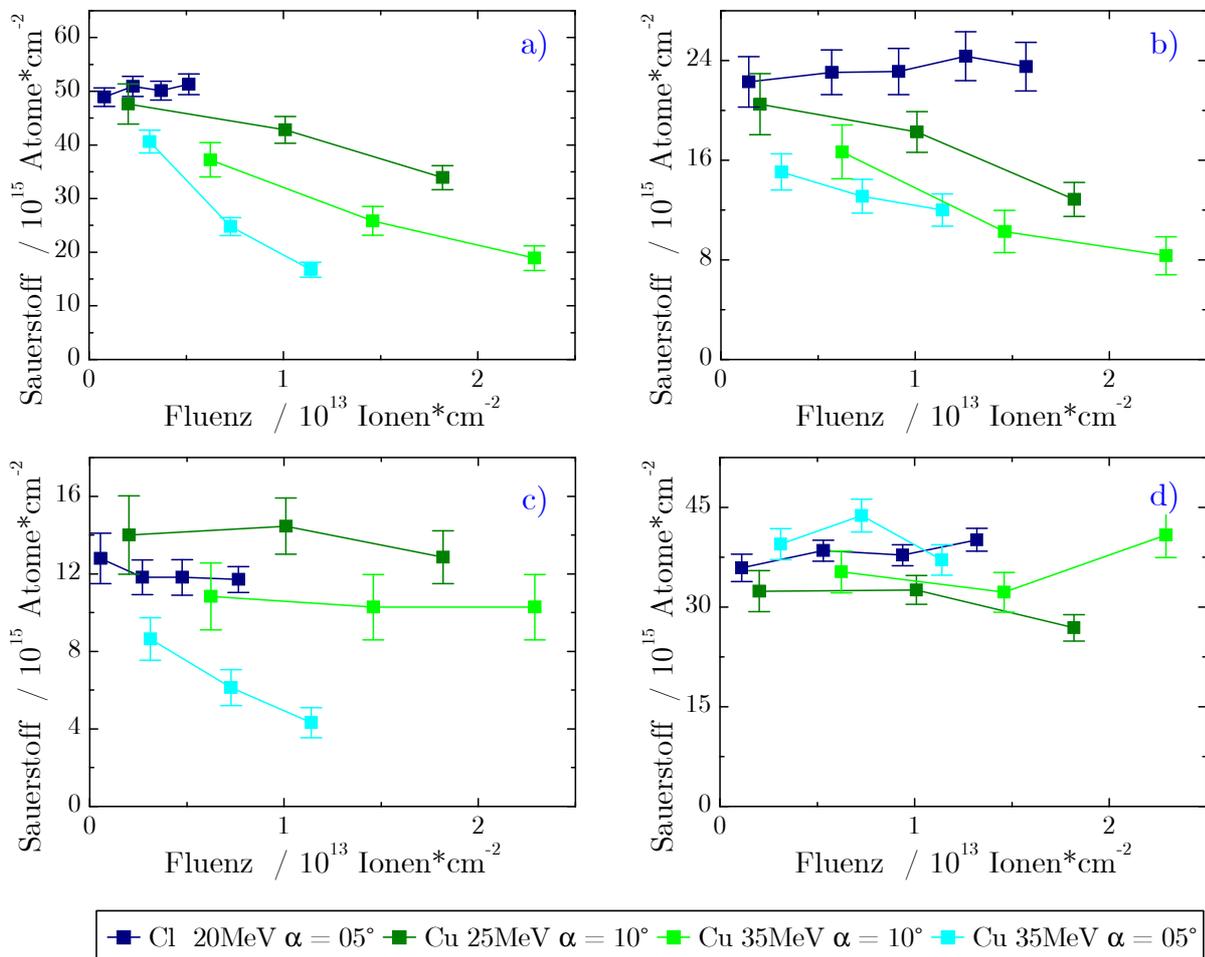


Abbildung 4.13: gemessener Sauerstoffgehalt unterschiedlicher Sauerstoffschichten bei steigender Fluenz und bei verschiedenen Strahlparametern
a) SiO₂; b) ZnO; c) La₂O₃; d) HfO₂

Diese Messungen zeigen, dass sich die Sputterraten bei jedem Schichtsystem unterscheiden aber immer bei der größeren Energie eine erhöhte Rate aufweisen.

Grund hierfür ist, dass in dem hier untersuchten Energiebereich das Maximum des Bremsvermögens noch nicht erreicht ist und dadurch die Sputterraten ansteigen. Die Vergleichsmessungen beweisen ebenfalls die in Abschnitt 4.2.4 erläuterte Abhängigkeit vom Einfallswinkel.

Somit ist gezeigt, dass die Analytik von ultra dünnen Schichten mit möglichst niedrigen Energien erfolgen sollte. Jedoch müssen hierbei zwei Dinge beachtet werden. Zum einen trennt der Detektor die leichten Elemente ab einer bestimmten Energie nicht mehr von den schweren Elementen. Zum anderen erhöht sich der Einfluss der Energieverlust- und Kleinwinkelstreuung bei kleineren Primärenergien. Vergleiche hierzu Abschnitt 5.3.1.

4.3 Strahlparameter am QQDS

4.3.1 Gewählte Strahlparameter zur Reduzierung der Probenschädigung

Für die standardmäßige höchstauflösende ERD von Sauerstoffschichten wird ein $^{35}\text{Cl}^{4+}$ -Strahl mit einer Primärenergie von $E_0 = 20$ MeV genutzt. Die maximale Fluenz beträgt $\Phi = 5,0 \cdot 10^{12}$ Ionen $\cdot\text{cm}^{-2}$. Damit die erforderliche Tiefenauflösung erreicht wird, ist der Einfallswinkel $\alpha = 5^\circ$.

Für die Analyse von Elementen, die leichter als Sauerstoff sind, hat sich gezeigt, dass die Primärenergie $E_0 = 6,5$ MeV gewählt werden muss. Da für leichte Elemente der Wirkungsquerschnitt kleiner ist, kann er somit aufgrund seiner $\sigma \sim E^{-2}$ Abhängigkeit erhöht werden. Durch die Erhöhung des Wirkungsquerschnittes steigt die Ausbeute an Recoilionen, ohne dass die Fluenz erhöht werden muss. Für sehr leichte Elemente wird daher zusätzlich ausgenutzt, dass bei einer gleichen Anzahl an Recoilionen die Fluenz reduziert werden kann. Damit verringert sich auch der fluenzabhängige strahlinduzierte Probenschaden, aber der Einfluss der Energieverlust- und Kleinwinkelstreuung erhöht sich und damit reduziert sich die Tiefenauflösung im Material (vgl 5.3.1).

4.3.2 Probenscan zur Reduzierung der Fluenz

Eine Möglichkeit, den strahlinduzierten Probenschaden zu reduzieren, ist die Fluenz minimal zu halten. Aus diesem Grund wird die Fläche, auf der gemessen wird, vergrößert. Der Strahlspot, der die Fluenz regelt, hat eine feste Größe von $(5,0 \times 0,8)$ mm 2 . Diese Höhe und Breite sind die optimalen Abmaßen. Dies ist der Fall, da sich bei einem größeren Spot ein zu großes Bild auf dem positionsempfindlichen Detektor abbildet und sich somit die Tiefenauflösung reduziert. Aus diesem Grund wird die Probe entlang der Streuebene bewegt. Durch diese Bewegung wird die Streugeometrie nicht verändert aber die Fläche, auf der gemessen wird, vergrößert. Eine grafische Darstellung dieser Scanbewegung sowohl in y als auch in z Richtung ist in Abbildung 4.14 gezeigt.

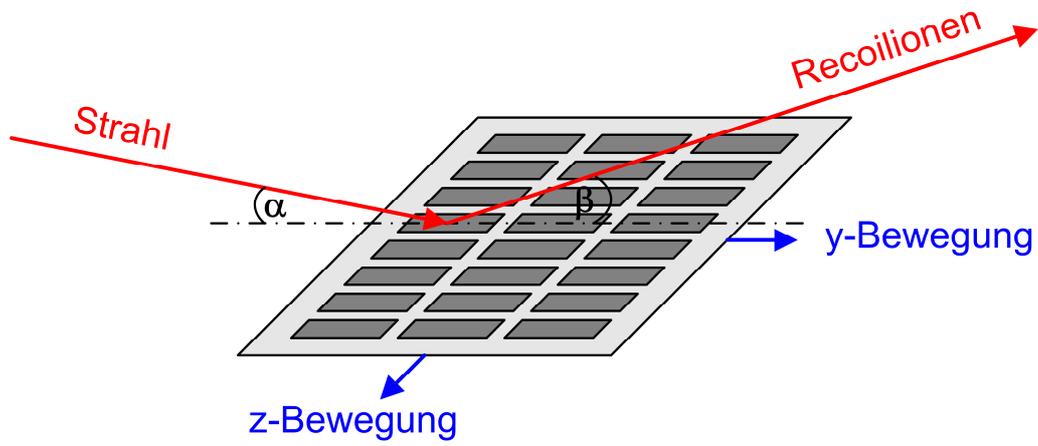


Abbildung 4.14: grafische Darstellung der Probenbewegung während einer Messung

Kapitel 5

ERD mit Tiefenauflösungen im Subnanometerbereich

In den nachfolgenden Abschnitten werden anhand des Sauerstoff-Recoil-Spektrums alle Einflüsse, die zusätzlich untersucht werden müssen, erläutert. Dabei wird dargestellt, dass mit dem Versuchsaufbau der höchstauflösenden ERD nicht nur Elementanalytik betrieben werden kann, sondern zugleich verschiedene Ion-Festkörper-Wechselwirkungen untersucht werden können. Dargestellt wird dies an dünnen SiO_2 -Schichten, die mit Chlor (Massenzahl 35, Ladungszustand $q_i = +4$) und der kinetischen Energie von $E_0 = 20$ MeV bei einem Einfallswinkel von $\alpha = 85^\circ$ und einem Streuwinkel von $\beta = 15^\circ$ in IBM-Geometrie untersucht wurden.

5.1 Referenzprobe

Die Analyse der Spektren von konventioneller ERD und von höchstauflösender ERD ist hinsichtlich des physikalischen Grundprinzips identisch. Jedoch gibt es Einflussgrößen, die erst durch die hohe Tiefenauflösung sichtbar und damit für die Analyse relevant werden. Mit dieser Verbesserung können Wechselwirkungen zwischen schnellen Ionen und Materie untersucht werden, die bei konventioneller ERD verborgen bleiben, da sie in der Systemauflösung untergehen.

In diesem Kapitel werden alle Faktoren erörtert, die bei der Auswertung berücksichtigt werden müssen und damit separat analysiert werden können. Hierzu werden alle Parameter anhand einer dünnen Siliziumdioxidschicht SiO_2 erläutert. Das SiO_2 ist eine amorphe Schicht, welches durch thermische Oxidation von Silizium auf ein einkristallines Siliziumsubstrat (Silizium-(100)-Wafer) aufgebracht wird. Die Schichtdicken, die hierbei für die höchstauflösende ERD benötigt werden, liegen im Bereich von fünf bis zehn Nanometern. Aus diesem Grund wurde bei diesen Schichten die trockene Oxidation bei einer Temperatur von $\vartheta = 900^\circ\text{C}$ angewandt. Die Aufwachszeit beträgt damit nach Deal et al. [DEA⁺65] 20 bis 60 min. Für die konventionelle ERD werden Referenzproben mit einer Dicke von circa 200 nm benötigt. Da bei gleichem Herstellungsverfahren die Aufwachszeit etwa 30 Stunden betragen würde, kommt hierbei die nasse Oxidation zum Einsatz. Zusätzlich kann die Aufwachsrate durch Erhöhung der Temperatur gesteigert werden. Deshalb wurden

diese SiO₂-Schichten bei $\vartheta = 1050^\circ\text{C}$ aufoxidiert und die Auswachszeit beträgt dadurch nur circa 15 min. Zusätzlich werden bei beiden Verfahren die Proben vor und nach der Oxidation mit Peroxomonoschwefelsäure (H₂O₂/H₂SO₄) gereinigt.

Die Dicke einer Schicht, die bei allen Ionenstrahlanalyseverfahren ermittelt wird, besitzt als Einheit "Atome je Fläche". Diese Einheit ergibt sich, da die Abbremsung und damit der Energieverlust nur von der Anzahl der Atome, die der Strahl auf dem Weg in die Probe tangiert, abhängt. Ist eine Dicke in absoluten Längeneinheiten von Interesse, muss die Dickeneinheit nur auf eine atomare Dichte N_t normiert werden. Zur verständlichen Darstellung wird die Dicke in diesem Kapitel mit einer konstanten mittleren Dichte von $\rho = 2,2 \text{ g/cm}^3$ [PET78] im gesamten Siliziumdioxid angenommen. Damit ergibt sich für SiO₂ eine mittlere atomare Dichte von:

$$N_t = \frac{N_a}{\langle M_Z \rangle} \cdot \rho = \frac{N_a}{\sum_i f_i \cdot M_{Z_i}} \cdot \rho = 6,6 \cdot 10^{22} \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^3} \quad (5.1)$$

N_a ... Avogadrokonstante

$\langle M_Z \rangle$... mittlere Atommasse

f_i ... Anteil des Elements i

M_{Z_i} ... mittlere Atommasse des Elements i

In den folgenden Abschnitten werden nacheinander alle Schritte erläutert, die zur Analyse dieser Siliziumdioxidschicht von Nöten sind.

5.2 Analyse der Tiefenprofile

5.2.1 Einfluss der Ladungszustandsverteilung nach der Streuung

Die Ladungszustandsverteilung, die sich nach der Streuung ergibt, muss aufgrund des magnetischen Dipols berücksichtigt werden. Dies ist der Fall, da ein magnetischer Dipol Elemente entsprechend ihres Verhältnisses aus Impuls und Ladungszustand unterschiedlich ablenkt. Aus diesem Grund wird von dem zu untersuchenden Spektrum nur ein einziger Ladungszustand gemessen. Für das Elementtiefenprofil ist es jedoch unerheblich, welchen Ladungszustand das herausgestreute Ion besitzt, denn für dessen quantitativen Nachweis werden alle Ladungszustände benötigt. Dies bedeutet, dass entweder jeder Ladungszustand separat gemessen werden muss, oder die gezählten Ereignisse eines Ladungszustandes auf alle möglichen Ladungszustände normiert werden müssen, um ein quantitatives Elementspektrum aufnehmen zu können. Für den letztgenannten Fall ist es nur einmal notwendig die Ladungszustandsverteilung zu ermitteln. In Abschnitt 3.3.2 ist die Ladungszustandsverteilung von Sauerstoff als Recoilion nach einer elastischen Streuung dargestellt. Der Ladungszustand $q = +6$ ist allgemein der am häufigsten auftretende Ladungszustand für Sauerstoff im dynamischen Gleichgewicht bei einer Energie im Bereich von $E_r = 15 \text{ MeV}$. Aus diesem Grund wird für das Tiefenprofil ausschließlich das Spektrum dieses Ladungszustandes gemessen. Damit anschließend das gemessene Spektrum nicht übermäßig verzerrt ist, wird die relative Häufigkeit des Ladungszu-

standes $q = +6$ mit der sich im dynamischen Gleichgewicht ergebenden Häufigkeit von $f(q) = 53\%$ über die Anzahl der Strahlionen normiert. Für die quantitative Analyse wird somit angenommen, dass die Probe mit nur 53% der tatsächlichen Anzahl an Chlorionen bestrahlt wurde. Die Ladungsverteilung von $q = +6$ im dynamischen Nichtgleichgewicht muss jedoch im gemessenen Spektrum direkt normiert werden. In Abbildung 5.1 sind die gezählten Ereignisse sowie die im dynamischen Nichtgleichgewicht normierten Ereignisse gegenübergestellt. Im Vergleich ist zu erkennen, dass direkt an der Oberfläche ohne diese Normierung die Ausbeute an Sauerstoff als zu niedrig analysiert würde.

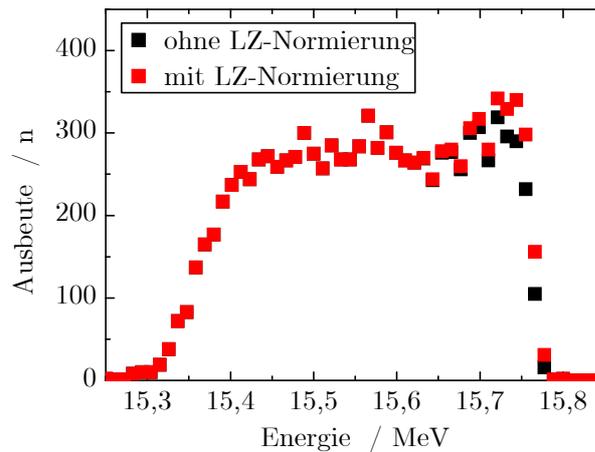


Abbildung 5.1: Ausbeute an Sauerstoffrecoillionen des Ladungszustandes (LZ) $f(q) = +6$ einmal mit und einmal ohne Normierung der Ladungszustandsverteilung im dynamischen Nichtgleichgewicht

5.2.2 Einfluss des ladungszustandsabhängigen Energieverlustes

Die Berechnung der ladungszustandsabhängigen Energieverluste im Nichtgleichgewicht wurde im Abschnitt 3.2.5 erläutert und wird in dieser Arbeit zur Auswertung

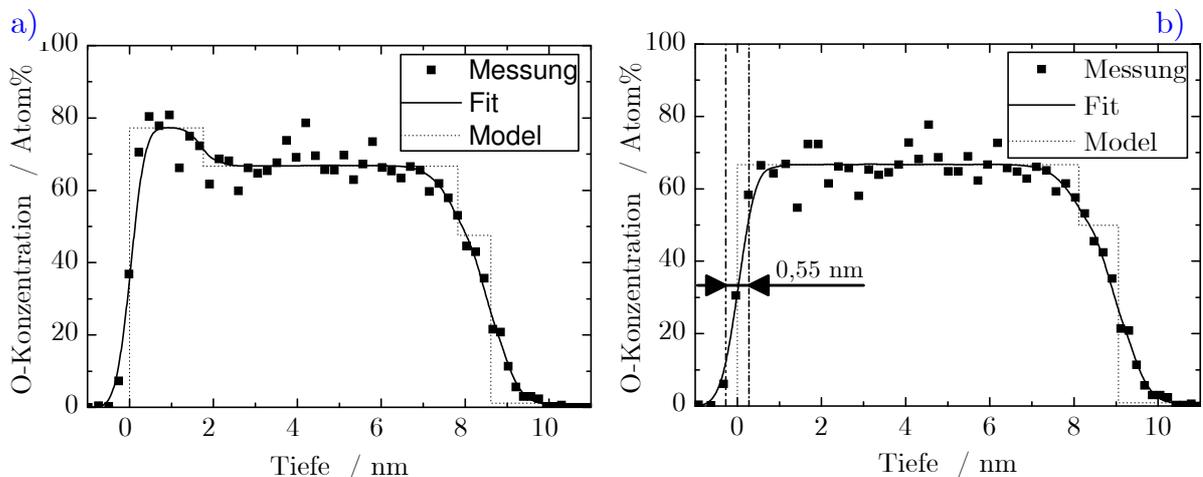


Abbildung 5.2: Sauerstoffkonzentrationsprofil einer SiO_2 -Probe a) ohne und b) mit Berücksichtigung des Ladungszustandsabhängigen Bremsvermögens

der Spektren angewendet. In Abbildung 5.2 sind die analysierten Spektren für eine SiO_2 -Standardprobe dargestellt. Hier erfolgte die Auswertung einmal mit und einmal ohne Berücksichtigung des ladungszustandsabhängigen Energieverlustes und. Darin ist ersichtlich, dass der niedrigere Ladungszustand, der sich an der Oberfläche ergibt, zu einem geringeren Energieverlust führt. Erkennbar ist dies daran, dass die Ausbeute eines Energieintervalls an der Oberfläche mehr Recoilionen registriert als ein Energieintervall im dynamischen Gleichgewicht. Ohne diese Berücksichtigung würde die Analyse der Konzentration an Sauerstoff an der Oberfläche zu einem verfälschten Wert führen. Zudem ist die gemessene Tiefenaufösung von 0,55 nm in das Diagramm eingetragen.

5.2.3 Einfluss von Oberflächenrauheit

Mikroskopisch betrachtet, bilden die Oberflächenatome keine scharfe Begrenzung, da sie keine festen Kugeln sind. Außerdem können zwischen den Atomen Lücken vorliegen, die um ein Vielfaches größer sind als sie selbst. Zusätzlich kommt es an Oberflächen von Festkörpern zu einer Adsorption von Stoffen aus der Gasphase, die damit die Elementkonzentration an der Oberfläche beeinflussen. Makroskopisch muss zwischen zwei Abweichungsarten von der geometrischen Oberflächentextur unterschieden werden. Dies sind zum einen die Rauheit bzw. Welligkeit und zum anderen die lokal beschränkten Oberflächenunvollkommenheiten, die beabsichtigt oder zufällig durch die Bearbeitung, Lagerung oder Funktion der Oberfläche entstanden sind [DIN⁺99, DIN⁺08].

Einzelne Oberflächenunvollkommenheiten werden statistisch durch den lateralen Scan über die gesamte Probe unterdrückt. Jedoch können diese bei erhöhter Häufigkeit, wie zum Beispiel der primärstrahlinduzierten Probenschädigung (vgl. Abschnitt 5.2.6), eine entscheidende einschränkende Rolle spielen.

Bei den Methoden der Ionenstrahlanalyse beeinflussen hingegen sowohl die Rauheit als auch die Welligkeit die experimentellen Daten. Aus diesem Grund müssen diese zur Bestimmung eines Tiefenprofils immer aus den gemessenen Spektren entfaltet werden. Die Ermittlung und Berechnung dieser Größen kann der entsprechenden DIN-Normen [DIN⁺10] entnommen werden. Der Großteil der Tiefenanalysierungssoftware in der Ionenstrahlphysik beinhaltet bereits Routinen, die die Rauheit und die Welligkeit von Proben, die mit einem senkrechten Ionenstrahl gemessen wurden, entfalten können. In Abbildung 5.3 ist der Einfluss einer solchen Rauheit auf ein analysiertes Spektrum dargestellt. Zwei Dinge sind in diesem Zusammenhang zu beachten. Erstens, die Oberflächenkante wird durch die Rauheit oder die Welligkeit nicht beeinflusst und zweitens die Niederenergiekante das heißt die Grenzfläche zwischen der zu analysierenden dünnen Schicht und der Folgeschicht wird abgerundet und erhält einen Auslauf zu viel niedrigeren Energien. Ohne Berücksichtigung dieses Rauheitseffektes würde ein falscher Elementgradient in der Folgeschicht analysiert werden, obwohl sich die Rauheit eigentlich auf der Oberfläche befindet. Ebenfalls problematisch ist bei einem flach einfallenden Ionenstrahl, dass zum Beispiel ein Primärion durch eine große schmale Erhöhung hindurchfliegen und anschließend erneut die Probenoberfläche durchdringen kann. Gleiches gilt selbstverständlich für das herausgeschlagene Recoilion. Aus diesem Grund wurde von Vieluf [VIE10] eine Software entwickelt, die solche Effekte anhand eines gemessenen Rasterkraftmikro-

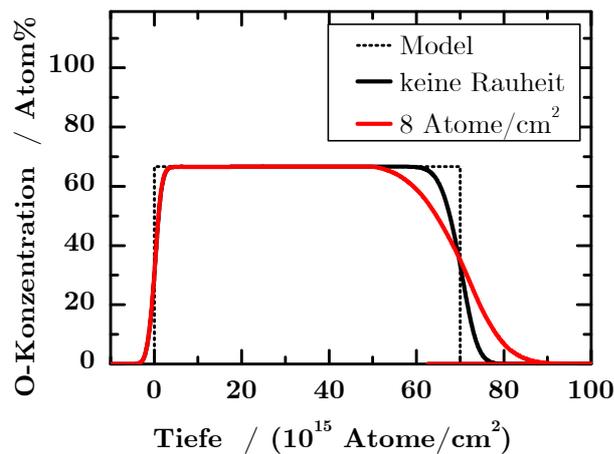


Abbildung 5.3: Vergleich der modellierten Sauerstoffkonzentrationsprofile mit und ohne Rauheit einer Probe

skopbild (AFM) [BIN⁺86] simulieren kann. Hierzu wird von jeder zu analysierenden Probe ein solches AFM-Bild erstellt und bei gegebener Geometrie alle möglichen Variationen der Primärionen und Recoilpfade, die aufgrund der Oberflächenrauheit entstehen können, simuliert. In Abbildung 5.4 a) ist solch eine Aufnahme einer SiO₂-Schicht auf Silizium dargestellt. Das quadratische Mittel der Rauheit dieser Probe beträgt RMS = 0,3 nm. Diese Rauheit ist extrem gering und in der Größenordnung einer Monolage. Dies ist einer der Gründe, warum SiO₂ als Referenzmaterial für die ERD und insbesondere für die höchstauflösende ERD genutzt wird.

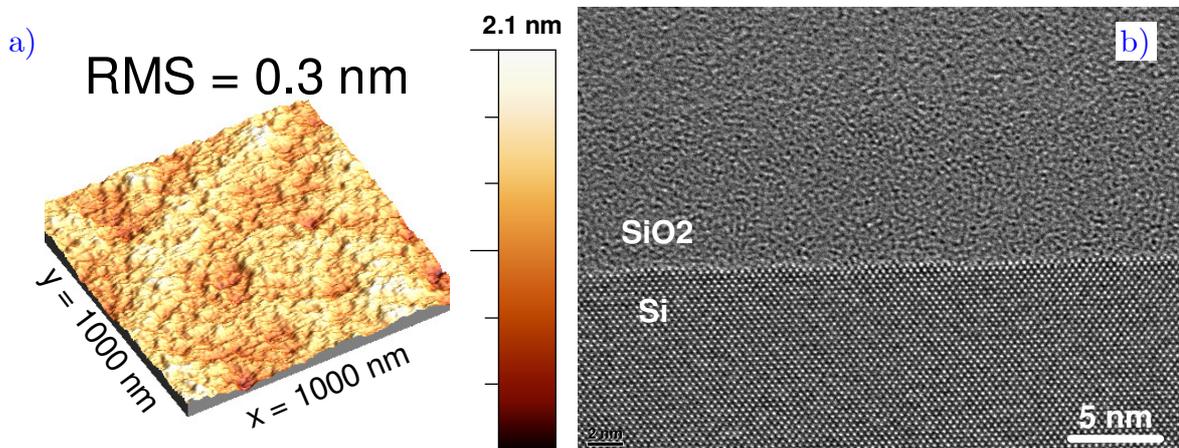


Abbildung 5.4: a) AFM-Bild der Oberfläche b) TEM- Bild der Grenzfläche der SiO₂-Referenzprobe

Ein weiterer wichtiger Punkt ist die Adsorption von Atome oder Moleküle aus der Umgebungsluft in die Oberfläche eines Festkörpers. Wasserstoff bzw. Moleküle, die Wasserstoff enthalten, muss dabei immer betrachtet werden. Aus diesem Grund wird bei jeder Probe, so auch bei der Referenzprobe, eine Wasserstoffnuklearresonanzanalyse mit streifendem Einfallswinkel durchgeführt [WIE⁺02]. Das sich dabei ergebende Wasserstoffprofil ist in Abbildung 4.2 dargestellt. Darin ist zu erkennen, dass sich direkt an der Oberfläche der Probe 10 Atom% Wasserstoff befinden. Bereits nach

2 nm ist diese Wasserstoff-Konzentration jedoch auf unter 5 Atom% gefallen. Dieser Wasserstoffgehalt, der sich direkt an der Oberfläche der Probe befindet, muss bei der Analyse also in jedem Fall berücksichtigt werden.

5.2.4 Einfluss der Grenzflächenrauheit

Die Grenzflächenrauheit kann als Welligkeit unter der zu analysierenden Schicht interpretiert werden. Mit dieser Annahme kann dieser Effekt genauso wie die Oberflächenrauheit aus dem gemessenen Spektrum entfaltet werden. Die Grenzfläche zwischen dem SiO_2 und dem Si der Referenzprobe kann mit einem hochauflösenden Transmissionselektronenmikroskop betrachtet werden und ist in Abbildung 5.4 b) dargestellt. Besser, jedoch in den meisten Fällen unmöglich, wäre eine zusätzliche AFM-Aufnahme der Probe, bevor die zu analysierende Schicht auf die Probe gebracht wird. Im Fall der Referenzprobe, das heißt SiO_2 auf Silizium, kann dies problemlos durchgeführt werden. Hierbei muss nur von der reinen Siliziumprobe vor der thermischen Oxidation ein AFM-Bild aufgenommen werden. Die dabei zu messende RMS-Rauheit ist bei dieser höchstaflösenden ERD Referenzprobe gleich der RMS-Rauheit (vgl. Abschnitt 5.2.3) nach der thermischen Oxidation.

5.2.5 Einfluss der Zwischenschichten an Grenzflächen

Zwischenschichten sind entweder bewusst übereinandergestapelte Funktionsschichten mit unterschiedlicher chemischer Zusammensetzung und damit sich unterschiedlicher Funktionalität oder es handelt sich um kontinuierliche Übergänge zwischen zwei Schichten. Schichtabfolgen bilden im atomaren Bereich immer Schichtgradienten. Ein Elementgradient an Grenzflächen ist niemals scharf begrenzt und zudem skalenabhängig (vgl. Abschnitt 5.2.3). Relevant ist dies vor allem bei der Elementanalyse, da die Zwischenschichten, die ebenfalls das Analyt enthalten, an den Phasengrenzen der zu untersuchenden Schicht eine abweichende Elementkonzentration verursachen. Im Fall von SiO_2 ist die Phasengrenze zu Silizium bereits umfassend erforscht. Aus diesem Grund wurde eine Vielzahl von Modellen für diese Grenzfläche vorgeschlagen, die diesen Bereich interpretieren [z. B. BRA59, PHI71, YAS⁺72, HAM⁺78, NEU⁺79, NI⁺81, HIM⁺79, HOH⁺03]. Hohl et al. [HOH⁺03] beispielsweise erläutern diese Grenzfläche mittels eines Interface-Cluster-Mixture-Modells. Dieses Modell beschreibt eine grenzflächenbeeinflusste Clustermischung. Demnach ist diese Zwischenschicht eine Mischung aus einer Grenzschicht und aus zwei Arten von Clustern, und zwar den SiO_2 -Clustern und den konvexen Si-Clustern. Damit ergeben sich drei unterschiedlich stöchiometrische Regionen, die aber streng genommen keine Phasenregionen sind. Das Modell von Hohl et al. erklärt weiterhin, warum SiO trotz seiner Zusammensetzung chemisch nicht wie eine Mischung aus Si und SiO_2 reagiert. Die Ionenstrahlanalytikmethoden, so auch die höchstaflösende ERD, sind von den chemischen Verbindungen in der Probe unabhängig. Dies bedeutet, dass die Analyse nur sensitiv auf die mittlere Konzentration von Sauerstoff und Silizium in der Probe ist. Der sich daraus ergebende Vorteil ist, dass durch eine mögliche Mischung von Zwischenschicht und Clustern die Analyse nicht beeinflusst wird. Die Auswirkung auf das Sauerstofftiefenprofil dieser Zwischenschicht ist in Abbildung 5.2 b) zu sehen. Diese Zwischenschicht hat eine mittlere Sauerstoffkonzentration von 50 Atom%.

Durch die physikalisch beschränkte Tiefenauflösung verursacht diese extrem dünne Zwischenschicht eine zusätzliche Abflachung der Rückkante des Sauerstoffprofils.

5.2.6 Einfluss von primärstrahlinduzierter Probenschädigung

Grundvoraussetzung für jede Analytik ist, dass die Messung selbst keinen Einfluss auf das Ergebnis haben darf. Demnach sind je nach Fragestellung gewisse Modifikationen der Probe verboten. Im Fall der Tiefenprofilanalytik bedeutet dies, dass während der Messung die Elementkonzentrationen sowie das Tiefenprofil der zu untersuchenden Schicht nicht verändert werden dürfen. Die Auswirkungen von Strahlschäden auf die Probe sind detailliert in Kapitel 4 beschrieben. Im Folgenden soll gezeigt werden, dass die Messung mit dem gewählten Ionenstrahl ($^{35}\text{Cl}^{4+}$ mit $E_0 = 20$ MeV) nur einen vernachlässigbar kleinen Einfluss auf das Tiefenprofil hat.

In Abbildung 4.9 sind die Ergebnisse der primärstrahlinduzierten Probenschädigungsmessung dargestellt. Hierbei wurde eine SiO_2 -Schicht auf Silizium mit einer hohen Fluenz von insgesamt $1,4 \cdot 10^{13}$ Ionen/ cm^2 beschossen. Anschließend wurde die Ausbeute an Sauerstoff bei verschiedenen Fluenzen analysiert. Dazu wurde die Probe mehrfach gescannt und das Spektrum nach jedem Scan ausgewertet. Bis zu einer Fluenz von $5 \cdot 10^{12}$ Ionen/ cm^2 ist an der Oberfläche keine Abnahme des Sauerstoffgehalts zu erkennen. Ausschließlich an der Oberfläche ist zu erkennen, dass Verunreinigungen von Molekülen, die Sauerstoff enthalten, abgetragen werden. Jedoch ab dieser maximal zulässigen Fluenz verringert sich der Gehalt an Sauerstoff der SiO_2 -Schicht kontinuierlich. Das heißt im Umkehrschluss, dass bis zu dieser Fluenz entweder kein Strahlschaden der Schicht auftritt, oder dieser unterhalb der Nachweisgrenze liegt. In beiden Fällen wird also das zu analysierende Spektrum bis zu dieser Fluenz nicht beeinflusst. Aus diesem Grund wird die Referenzprobe nur bis zu einer Fluenz von $5 \cdot 10^{12}$ Ionen- cm^{-2} analysiert. Dadurch trägt der Primärstrahl nicht zur Reduzierung der Schichtdicke bei.

Das Elementmischen an der Grenzfläche tritt bereits bei kleinen Fluenzen auf (vgl. Abschnitt 4.1.4). Aus diesem Grund muss bei der Analyse der Daten die Diffusion von Sauerstoff in tiefere Gebiete als Elementgradient berücksichtigt werden. Damit wird dieser Effekt rechnerisch kompensiert und das Tiefenprofil durch das Elementmischen nicht verändert. Für jede Schichtanalytik wurde somit immer die Grenzflächendurchmischung während der Messung bestimmt.

Die AFM-Aufnahme der Referenzprobe SiO_2 auf Si nach der Bestrahlung mit der Fluenz von $5 \cdot 10^{12}$ Ionen- cm^{-2} zeigt keine Änderungen der Oberflächenrauheit. Damit gibt es während der Messung keine Variation des Einflusses der Oberflächenrauheit auf das zu analysierende Spektrum.

Eine weitere wichtige Fragestellung ist, ob sich der Energieverlust mit steigender Fluenz ändert, da dieser von der Elementzusammensetzung der zu untersuchenden Schicht abhängt. Aus diesem Grund erfolgt die Analyse der Schicht erst ab dieser Fluenz. Bei der Referenzprobe lieferte eine konventionelle ERD-Analyse das Ergebnis, dass sich neben Wasserstoff keine weiteren Elemente in der Probe befinden. Der Wasserstoff wird, wie in Abschnitt 5.2.3 beschrieben, mittels Wasserstoffnuklearresonanzanalyse gemessen. Da diese Messung nicht gleichzeitig mit der höchstaflösenden ERD möglich ist, kann derzeit keine Aussage gemacht werden, ob die Wasserstoff-

konzentration während der Messung mit einer Fluenz bis $5 \cdot 10^{12}$ Ionen- cm^{-2} durch den Strahl selbst geändert wird. Ein Hinweis darauf ist jedoch in Abbildung 4.9 b) ist zu erkennen. Der Sauerstoffgehalt an der Oberfläche wird bis zu einer Fluenz von circa $2 \cdot 10^{12}$ Ionen- cm^{-2} um etwa 10% reduziert und bleibt anschließend konstant. Weitere Elemente müssen bei jeder Probe durch eine zusätzliche Messung entweder durch eine konventionelle oder, wenn nötig, durch eine weitere höchstauflösende ERD-Messung überprüft werden.

Die Strahlionen, die in die Probe eindringen und diese anschließend nicht wieder verlassen, können auch in die zu analysierende Schicht implantiert werden und dabei eine Konzentration erreichen, die einen Einfluss auf den Energieverlust hat. Mithilfe der Monte-Carlo-Software SRIM [ZIE⁺10] kann die Eindringtiefe von Chlorionen mit $E_0 = 20$ MeV ermittelt werden. Das simulierte Implantationsprofil von ^{35}Cl mit der Anfangsenergie von $E_0 = 20$ MeV und einem flachen Einfallswinkel von $\alpha = 5^\circ$ in eine 10 nm dünne SiO_2 -Schicht auf Silizium ergab eine mittlere Eindringtiefe von 710 nm mit einer Standardabweichung von $\sigma = 350$ nm, die durch Kleinwinkelvielfachstreuung an den Probeatomen verursacht wird, Die laterale projizierte Reichweite beträgt aufgrund des flachen Einfallswinkels 7,2 μm . Die Monte-Carlo-Simulation liefert das Ergebnis, dass 99% der Chlorionen durch die 10 nm SiO_2 -Schicht hindurchfliegen und erst im Silizium gestoppt werden. Damit spielt die gleichzeitig stattfindende Implantation von Chlor für die Analytik der SiO_2 -Schicht keine Rolle.

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass die Referenzprobe, durch die Schwerionenbestrahlung während der Analytik, bei einer Fluenz von 2 bis $5 \cdot 10^{12}$ Ionen- cm^{-2} nicht beeinflusst wird. Einzig das Grenzflächendurchmischen muss bekannt sein, damit es bei der Auswertung berücksichtigt werden kann. Damit entspricht das gemessene Spektrum innerhalb der Auflösungsgrenzen exakt dem Tiefenprofil und muss somit nicht durch ungenaue Extrapolationen korrigiert werden.

5.3 Diskussion der Tiefenauflösung

5.3.1 Tiefenauflösungsbegrenzende Parameter

Die physikalische Auflösung ist die Fähigkeit eines Messgerätes, physikalische Größen gleicher Dimension voneinander zu trennen. Die Tiefenauflösung gibt somit den kleinsten Tiefenbereich an (senkrecht zur Oberfläche), der gerade noch einen wahrnehmbaren Unterschied zum nächsten Tiefenbereich liefert. Dies ist von der Genauigkeit zu unterscheiden, die die Präzision der Tiefenachse angibt.

Die hervorragende Tiefenauflösung ist der größte Vorteil der höchstauflösenden ERD-Anlage und soll aus diesem Grund im Folgenden detailliert beschrieben werden. Außerdem werden die entscheidenden Unterschiede zur konventionellen ERD, die zu dieser Tiefenauflösung beitragen, dargestellt.

Die Einflussgrößen, die die Tiefenauflösung beschränken, können in fünf Kategorien unterteilt werden [MÖL⁺78, WIL⁺78]. Diese sind der Beitrag sowohl des Strahlführungssystems, der ionisierenden Ionen, der Probe, der geometrischen Anordnung als auch der des Detektionssystems

Der **Beitrag des Strahlführungssystems** hängt zum einen von der Energievariation des Strahls ab. Diese wiederum wird größtenteils von der Energieblende und der Stabilität der Beschleunigungsspannung bestimmt [HAR⁺96]. Der Einsatz einer neuen, auf Mikrocontroller basierten Methode, der "vorhersagbaren Fluktuationskompensation" zur Verbesserung der relativen Beschleunigerspannungsstabilität am Van-de-Graaff-Beschleuniger [BÜR⁺08], wird derzeit auf die Einsatzmöglichkeit im 5MV-Tandembeschleuniger untersucht. Diese Kompensation bringt am van-de-Graaff Beschleuniger eine Reduzierung der Beschleunigerspannungsfuktuation um den Faktor drei bis sechs und liefert damit eine Energieauflösung bis deutlich unter 10^{-4} . Bei diesen Untersuchungen ergab sich eine Terminal-Spannungs-Fluktuation und damit eine Energievariation am Tandem-Beschleuniger von $4 \cdot 10^{-4}$. Mit Gleichung (1.23) ergibt sich damit für die **Energievariation des Strahls**:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\Delta E_r}{E_r} \right|_{E_0} &= \frac{\left| \frac{dE_r}{dE_0} \right| \Delta E_0}{E_r} = \pm \frac{k_{ERD} \Delta E_0}{k_{ERD} \cdot (E_0 - S_0 l_0) - S_r l_r} \approx \pm \frac{k_{ERD} \Delta E_0}{k_{ERD} \cdot (E_0)} \quad (5.2) \\ &= \pm \frac{\Delta E_0}{E_0} = \pm 4 \cdot 10^{-4} \end{aligned}$$

Zum anderen hängt der Beitrag des Strahlführungssystems von dessen **Winkelbreite** ab. Diese Variation geht direkt als Einfallswinkelvariation $\Delta\alpha$ in die Gesamtauflösung des Systems ein. Durch den Einbau zweier Kreuzspalte kann dieser Wert bestimmt und auf ein notwendiges Minimum reduziert werden. Die Winkelbreite ist immer ein Kompromiss zwischen der geforderten Gesamtauflösung und dem geforderten Strahlstrom. Hier ist diese mit $\Delta\alpha = \pm 0,08^\circ$ an die Anforderungen angepasst und sollte bei Bedarf reduziert bzw. vergrößert werden. Mit Gleichung (1.23) ergibt sich aus der Winkelbreite folgende Energieauflösung:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\Delta E_r}{E_r} \right|_{\alpha} &= \frac{\left| \frac{dE_r}{d\alpha} \right| \Delta\alpha}{E_r} = \frac{\left| \frac{\delta E_r}{\delta \Theta} \frac{\delta \Theta}{\delta \alpha} + \frac{\delta E_r}{\delta \alpha} \right| \Delta\alpha}{k_{ERD} \cdot \left(E_0 - S_0 \frac{x}{\sin \alpha} \right) - S_r \frac{x}{\sin(\Theta - \alpha)}} \quad (5.3) \\ &\approx \pm \left(-2 \tan \Theta + \frac{S_0 \frac{x}{\sin \alpha}}{E_0 - S_0 \frac{x}{\sin \alpha}} \cot \alpha \right) \Delta\alpha \end{aligned}$$

Der **Beitrag des Strahls** zur Energie- und damit zur Tiefenauflösung ist zum größten Teil durch statistische Prozesse bestimmt. Einer dieser Prozesse ist die **Energieverluststreuung** (englisch: energy straggling). Sie beschreibt, dass der Energieverlust beim Durchqueren von Materie nicht konstant ist, sondern kleinen Fluktuationen unterliegt und somit von Projektil zu Projektil variiert. Bohr [BOH48] gab eine Abschätzung für die Halbwertsbreite dieser Streuung für Ionen mit hohen Geschwindigkeiten an. Chu [CHU76, MAY⁺78] zeigte, dass dieser Wert bei Experimenten mit Energien im Bereich von circa 1 MeV/amu als Obergrenze angesehen werden muss. Zusätzlich lieferte er empirische Korrekturfaktoren H_{Chu} , die die Einflüsse der Ionenenergie und der Ionenmasse relativ zur Ordnungszahl der Probe

Z_t berücksichtigen. Weitere Ansätze für semiempirische Korrekturen werden in den Veröffentlichungen von Besenbacher et al., Sofield et al oder Yang et al. [BES⁺80, SOF⁺80, SOF2⁺80, YAN⁺91] beschrieben. Sie verdeutlichen, dass die Ladungszustandsänderung des durchdringenden Ions ebenfalls einen Einfluss auf die Energieverluststreuung hat. An einem umfassenden Nachweis für sehr dünne Schichten mangelte es jedoch aufgrund einer adäquaten Energieauflösung. Erst durch die höchstauflösende Tiefenprofilierung ist es möglich geworden, diese Werte zu überprüfen. Zu bemerken ist allerdings, dass Yang et al. [YAN⁺91] zeigten, dass bei Schwerionen die Energieverluststreuung auch größer als der von Bohr berechnete Wert sein kann. Aus diesem Grund wird in dieser Arbeit die Energieverluststreuung von Bohr mit den Chu-Korrekturfaktoren als Richtwert angegeben. Bei Streuexperimenten muss zur Berechnung der Energieverluststreuung der Beitrag der Projektile, der gestreuten Ionen sowie der Recoilionen berücksichtigt werden und ergibt somit:

$$\Delta E_{es} = \sqrt{8 \ln 2 \cdot \frac{4\pi e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} Z_t \cdot N_t \left(H_{Chu}^0 k^2 Z_0^2 \frac{x}{\sin \alpha} + H_{Chu}^r Z_r^2 \frac{x}{\sin \beta} \right)} \quad (5.4)$$

Ein weiterer statistischer Prozess ist die **Kleinwinkelstreuung** (englisch: angular straggling). Beim Durchqueren eines Ions durch ein Material wird dieses mehrfach an den Probeatomen gestreut, was zu einer statistischen Verteilung des Einfallswinkels, respektive des Ausfallswinkels innerhalb der Probe führt. Dies wiederum hat zur Folge, dass die Wegstrecke von Ion zu Ion abweicht und sich damit eine Variation der Weglänge einstellt. Aufgrund dieser Weglängendifferenzen ergibt sich eine Energieverteilung der Ionen für eine bestimmte Tiefe. Außerhalb des Materials ist jedoch kein Unterschied im Einfallswinkel bzw. Ausfallswinkel dieser Ionen zu erkennen. In den zwei Arbeiten von Sigmund et al. [SIG⁺74, SIG⁺78] und der von Marwick et al. [MAR⁺75] werden diese Kleinwinkelstreuungen analytisch und numerisch für realistische Thomas-Fermi- und Lenz-Jensen-Abschirmpotentiale in Materialien mit einem Element beschrieben. Von Nagata et al. [NAG⁺85] und Pászti et al. [PÁS⁺91] werden diese Streuungen für die elastisch gestreute Rückstoßatom-Analyse zusammengefasst. Szilágyi et al. [SZI⁺95, AMS⁺03] erweitern diese Theorien zudem auf Proben mit mehr als einem Element und mit einer möglichen Abbremsung der Ionen, welche durch Vielfachstreuung verursacht wird. In Abbildung 5.5 ist dies an einem Beispiel dargestellt. Die gestrichelte Gerade entspricht der theoretischen Wegstrecke

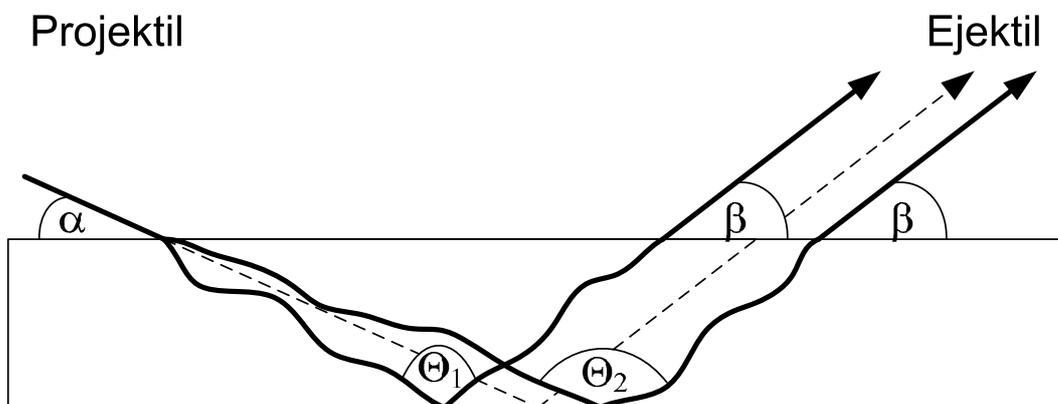


Abbildung 5.5: Beispiel für Kleinwinkelstreuung

der Ionen bei einer vorgegebenen geometrischen Zuordnung des Einfallswinkels und des Ausfallswinkels. Die durchgezogene Linie zeigt mögliche reale Wegstrecken der Ionen durch das Material bei derselben vorgegebenen geometrischen Anordnung. Dabei ist ersichtlich, dass sowohl der Streuwinkel als auch die Weglänge der Ionen, die in derselben Tiefe gestreut werden, variieren können. Die Kleinwinkelvielfachstreuung kann somit durch einen kinematischen und durch einen lateralen Anteil beschrieben werden. Der kinematische Anteil wird durch die Winkelaufweitung verursacht und erzeugt somit eine Streuwinkelvariation. Der laterale Anteil entsteht durch die Weglängendifferenz und verursacht einen direkten Unterschied im Energieverlust. Die gegenseitige Abhängigkeit ist dabei vernachlässigbar, so dass die Summe beider quasi unabhängiger quadratischer Terme sowohl für das Primärion als auch für das Recoilion nach Gleichung (5.5) berechnet werden kann:

$$\begin{aligned} \Delta E_{ms} &= \pm \sqrt{\Delta E_{ms}^o{}^2 + \Delta E_{ms}^r{}^2} & (5.5) \\ \Delta E_{ms}^o &= \pm \sqrt{(-2k_{ERD} E_0 \tan \Theta \Delta \phi_0)^2 + (S_0(E_0) \cot \alpha \Delta \omega_0)^2} \\ \Delta E_{ms}^r &= \pm \sqrt{(-2k_{ERD} E_r \tan \Theta \Delta \phi_r)^2 + (S_r(E_r) \cot \beta \Delta \omega_r)^2} \end{aligned}$$

$\Delta \phi_0$ und $\Delta \phi_r$ sowie $\Delta \omega_0$ und $\Delta \omega_r$ sind die Halbwertsbreiten der Winkel- und der lateralen Aufspreizung. Die Winkelaufweitungen ($\Delta \phi_0$ und $\Delta \phi_r$) können nach Sigmund et al. [SIG⁺74]:

$$\begin{aligned} \Delta \phi_0 &= \frac{4Z_0 Z_t \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}}{(E_0^0 + E_0^x) a_0^{TF}} \cdot 0,5 \cdot \left(\pi a_0^{TF^2} N_t \frac{x}{\sin \alpha} \right)^{0,62} & (5.6) \\ \Delta \phi_r &= \frac{4Z_r Z_t \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}}{(E_r^0 + E_r^x) a_r^{TF}} \cdot 0,5 \cdot \left(\pi a_r^{TF^2} N_t \frac{x}{\sin \beta} \right)^{0,62} \end{aligned}$$

Und die lateralen Aufspreizungen ($\Delta \omega_0$ und $\Delta \omega_r$) nach Marwick et al. [MAR⁺75] berechnet werden:

$$\begin{aligned} \Delta \omega_0 &= \frac{\Delta \phi_0}{\Gamma} \cdot \frac{x}{\sin \alpha} \\ \Delta \omega_r &= \frac{\Delta \phi_r}{\Gamma} \cdot \frac{x}{\sin \beta} \end{aligned} \quad (5.7)$$

Z_0 , Z_r und Z_t sind die Kernladungszahlen der Primärionen, der Recoilionen und der Probe. Des Weiteren sind e die Elementarladung, ϵ_0 die Permittivität, α und β der Einfallswinkel und Ausfallswinkel, a_0^{TF} und a_r^{TF} die Thomas-Fermi-Radien von Primärion sowie Recoil und N_t die atomare Dichte der Probe. Γ ist eine Tiefenskalierungskonstante, die aus der Arbeit von Marwick et al. [MAR⁺75] für die jeweiligen Schichtdicken entnommen werden kann.

Der **Beitrag der Probe** wird durch die Inhomogenität des Probenmaterials bestimmt. Dies sind die Oberflächen- beziehungsweise Grenzflächenrauheiten sowie

die Schichtdickeninhomogenitäten. Dichteschwankungen sind keine direkten Einflussgrößen, solange die Dicke, respektive die Tiefe in der Probe in Atome je Quadratzenimeter angegeben wird. Bei dieser Einheit spielt es keine Rolle, wie weit die einzelnen Atome voneinander entfernt sind, sofern diese Abstände zeitlich konstant bleiben. Zur Umrechnung in Nanometer muss jedoch die tatsächliche Dichte bekannt sein. Die Oberflächen- und Grenzflächenrauheit kann, wie in Abschnitt 5.2.3 beschrieben, dem Spektrum entfaltet werden und ist somit, wenn sie bekannt ist, eine tiefenauf Lösungsbegrenzende Größe. Einzig eine **laterale Schichtdickeninhomogenität** Δx ist eine direkte Einflussgröße und deren Beitrag kann mit nachfolgender Gleichung berechnet werden:

$$\left. \frac{\Delta E_r}{E_r} \right|_x = \frac{\left| \frac{dE_r}{dx} \right| \Delta x}{E_r} = \frac{k \frac{S_0}{\sin \alpha} + \frac{S_r}{\sin \beta}}{E_r} \Delta x \quad (5.8)$$

Der **Beitrag der geometrischen Anordnung** entsteht dadurch, dass der Raumwinkel des Detektionssystems experimentell nicht infinitesimal klein sein kann. Für die elastische Rückstoßatom-Analyse muss sogar ein möglichst großer Raumwinkel erzielt werden, da die Wirkungsquerschnitte hier sehr klein sind. Die maximale Fluenz und damit die maximale Messzeit sind durch den primärstrahlinduzierten Strahlschaden limitiert (vgl. Abschnitt 4). Um dennoch eine hinreichend große Anzahl an Recoilionen zu detektieren und dadurch eine hinreichende Statistik zu erhalten, muss der Raumwinkel vergrößert werden. Eine Vergrößerung des Raumwinkels bedeutet jedoch gleichzeitig, dass die Variation des Ausfallwinkels und damit auch die des Streuwinkels verbreitert wird. Ohne kinematische Korrektur geht diese Variation direkt in die Energieauflösung des Systems ein:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\Delta E_r}{E_r} \right|_\beta &= \frac{\left| \frac{dE_r}{d\beta} \right| \Delta\beta}{E_r} = \frac{\left| \frac{\delta E_r}{\delta \Theta} \frac{\delta \Theta}{\delta \beta} + \frac{\delta E_r}{\delta \beta} \right| \Delta\beta}{k_{ERD} \cdot \left(E_0 - S_0 \frac{x}{\sin \alpha} \right) - S_r \frac{x}{\sin \beta}} \\ &\approx \pm \left(-2 \tan \Theta + \frac{S_r \frac{x}{\sin \beta}}{k_{ERD} \left(E_0 - S_0 \frac{x}{\sin \alpha} \right)} \cot \beta \right) \Delta\beta \end{aligned} \quad (5.9)$$

Für die höchstauflösende ERD Anlage beträgt die maximal einstellbare Ausfallwinkelvariation $\Delta\beta = \pm 1,12^\circ$. In Abbildung 5.6 ist die berechnete sowie die experimentell ermittelte Energieauflösung bei unterschiedlichen Öffnungswinkeln des Spektrometers dargestellt.

Bis zur Ausfallwinkelvariation von $\Delta\beta \approx \pm 0,8^\circ$ stimmen die experimentellen Daten mit dem theoretisch berechneten Wert überein. Dies bedeutet, dass ab diesem Winkel die Blende nicht mehr das limitierende Element für den Raumwinkel darstellt. Diese Winkelvariation ist bei der ERD für die Energieauflösung dominierend. Die Forderung für die Energieauflösung der höchstauflösenden elastischen Rückstoßatom-Analyse ist $\Delta E/E < 10^{-3}$. Somit produziert der maximale Raumwinkel eine zu große

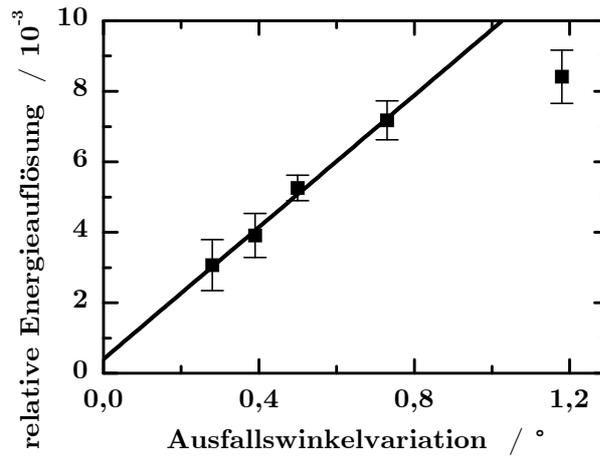


Abbildung 5.6: Energieauflösung als Funktion des Spektrometeröffnungswinkels

Energievariation. Aufgrund der begrenzten Fluenz ist jedoch der maximal mögliche Raumwinkel für die Analyse notwendig, so dass die kinematische Energievariation korrigiert werden muss. Dies geschieht ionenoptisch mit Hilfe der magnetischen Quadrupole (vgl. Abschnitt 2.4.5). Diese kinematische Korrektur bewirkt, dass Ionen eines Isotops, die aus derselben Tiefe herausgestreut wurden, auf die selbe Position in die Fokalebene fokussiert werden. Da bei der höchstauflösenden „Magnetspektrometer“-ERD die Tiefe über die Position und nicht über die absolute Energie ermittelt wird, ist demzufolge die Streuwinkelvariation korrigiert.

Der Raumwinkel wird jedoch nicht nur durch die horizontale Komponente sondern ebenfalls durch die vertikale Öffnung bestimmt. Diese betrug bei den Experimenten $\Delta\beta_{\text{verikal}} = \pm 1,14^\circ$. Der effektive Streuwinkel Θ_{eff} kann mit Hilfe der Drehmatrix im euklidischen R^3 -Raum berechnet werden und ergibt:

$$\cos \Theta_{\text{eff}} = \cos \beta_{\text{vertikal}} \cdot \cos \beta \cdot \cos \alpha - \sin \beta \cdot \sin \alpha \quad (5.10)$$

Die sich daraus ergebende Winkelabweichung $\Delta\beta_{\text{eff}}$, die sich nicht mit den magnetischen Quadrupolen korrigierbar lässt, beträgt:

$$\Delta\beta_{\text{eff}} = \Theta_{\text{eff}} - \Theta \quad (5.11)$$

Sie ergibt im Fall der höchstauflösenden ERD-Anlage $\Delta\beta_{\text{eff}}(\text{HR-ERD}) = 0,043^\circ$.

Der **Beitrag des Detektorsystems** hängt von der Bauart und der Arbeitsweise des Gesamtsystems ab. Da sich in diesem Zusammenhang die konventionelle und die höchstauflösende ERD grundsätzlich unterscheiden, diese jedoch in Abschnitt 5.3.2 gegenüber gestellt werden, erfolgt hier eine Auflistung aller möglichen tiefenauflösenden begrenzenden Parameter.

Bei der Verwendung von Detektoren mit Ionisationsgas wird immer eine dünne Folie zwischen dem Detektor und dem vom Gas evakuierten Bereich benötigt. Diese Folie wird Detektorfensterfolie bezeichnet. Bei beiden ERD-Anlagen wird eine Polypropylenfolie mit einer Dicke von $x_f = 750$ nm benutzt [BAR⁺77]. Eine laterale Dickenvariation der Folie verursacht hierbei folgende Energievariation:

$$\Delta E_{\text{Dickenvariation}}^f = \frac{\Delta E_{\text{Dicke}}^f}{E_r^f} = \frac{\left| \frac{dE_r^f}{dx} \right| \Delta x_f}{E_r^f} = \frac{S_r^f(E_r^f)}{E_r^f} \Delta x_f \quad (5.12)$$

Außerdem findet in dieser Fensterfolie sowohl eine Energieverlust- als auch eine Kleinwinkelvielfachstreuung der Recoilionen statt. Die **Energieverluststreuung in der Fensterfolie** kann ebenfalls nach Bohr [BOH48] und anhand der Chu-Korrekturfaktoren [CHU76, MAY⁺78] abgeschätzt werden:

$$\Delta E_{es}^f = \sqrt{8 \ln 2 \cdot \frac{4\pi e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot Z_f \cdot N_f \cdot H_{Chu}^f \cdot Z_r^2 \frac{x_f}{\sin \delta_f}} \quad (5.13)$$

Nicht alle gestreuten Ionen fallen senkrecht in die Folie ein. Aus diesem Grund muss bei der Wegstrecke der maximale Folieneinfallswinkel δ_f , zwischen Probenoberfläche und einfallendem Ion, berücksichtigt werden.

Die **Kleinwinkelvielfachstreuung in der Fensterfolie** kann nach dem gleichen Prinzip wie die Kleinwinkelstreuung in der Probe berechnet werden. Hierbei ist allerdings zu beachten, dass es keinen kinematischen Anteil gibt, da weder ein Streuwinkel noch eine Streuwinkelvariation existieren. Aus den Gleichungen (5.5),(5.6) und (5.7) ergibt sich:

$$\Delta E_{ms}^f = \pm S_r^f(E_r^f) \cdot \cot \delta_f \cdot \Delta \omega_r^f \quad (5.14)$$

$$\text{mit } \Delta \omega_r^f = \frac{\Delta \phi_r^f}{\Gamma_r^f} \cdot \frac{x_f}{\sin \delta_f}$$

$$\text{und } \Delta \phi_r^f = \frac{4Z_r Z_f \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}}{(E_r^0 + E_r^{x_f}) a_{r,f}^{TF}} \cdot 0,5 \cdot \left(\pi a_{r,f}^{TF^2} N_f \frac{x_f}{\sin \delta_f} \right)^{0,62}$$

Die Energieverlust- und die Kleinwinkelvielfachstreuung spielen für die höchstauflösende ERD keine Rolle, da sich das Detektorfenster hinter dem dispersiven Element, dem magnetischen Dipol, befindet. Nach diesem Dipolmagneten wird der Radius, um den das Ion im Magnetfeld abgelenkt wurde, detektiert und nicht die Energie selbst. Jedoch führt die Kleinwinkelvielfachstreuung in der Detektorfensterfolie zur Aufspaltung und damit zur Variation der Position in der Fokalebene. Zusammenfassend ergibt dies:

$$\Delta x_{MS}^{\text{Prop}} = \frac{d_{\text{Fenster-Prop}} \cdot \tan \Delta \phi_r^f}{\sin^2 \delta_f} \quad (5.15)$$

Der Einfallswinkel in den ortsempfindlichen Detektor entspricht dem in die Detektorfolie δ_f . $\Delta \phi_r^f$ ist die Halbwertsbreite der Winkelaufspaltung in der Detektorfensterfolie und $d_{\text{Fenster-Prop}}$ ist der Abstand zwischen dem Detektorfenster und der Anode des ortsempfindlichen Detektors, dem Proportionalzähler.

Die Position im ortsempfindlichen Detektor repräsentiert die Energie des Ions. Aus diesem Grund kann mittels der Dispersion D des magnetischen Dipols die Energievariation aus der Positionsvariation berechnet werden. Allgemein bedeutet dies:

$$\frac{\Delta E}{E} = 2 \cdot \frac{\Delta p}{p} = 2 \cdot \frac{\Delta x}{D_{p_0}} \quad (5.16)$$

Die Dispersion für das Magnetspektrometer beträgt hier $D_{p_0} = 23,8 \text{ mm}/\%p_0$.

Eine weitere Ortsauflösungsbegrenzung ist die **intrinsische Ortsauflösung** des Detektionssystems. Der Detektor ist der Funktionsweise nach ein ortsempfindlicher Proportionalzähler und somit mit Ionisationsgas gefüllt, in dem Energie durch Abbremsung abgegeben wird. Der örtliche Schwerpunkt dieser abgegebenen Energie wird als Position detektiert. Die Standardabweichung dieser Position ist die intrinsische Ortsvariation:

$$\Delta x_{\text{intrinsisch}} = \sqrt{\frac{1}{d_{\text{Prop}} \cdot \cot \delta_f} \int_{-\frac{d_{\text{Prop}} \cdot \cot \delta_f}{2}}^{\frac{d_{\text{Prop}} \cdot \cot \delta_f}{2}} x^2 dx} = \frac{1}{\sqrt{12}} d_{\text{Prop}} \cot \delta_f \quad (5.17)$$

Aufgrund der Energieabgabe kommt es hierbei ebenfalls zu einer **Energieverluststreuung im ortsempfindlichen Detektor** selbst. Dies führt zu einer zusätzlichen Vergrößerung der intrinsischen Ortsauflösung:

$$\Delta x_{\text{es}}^{\text{Prop}} = \frac{1}{\sqrt{12}} d_{\text{Prop}} \cot \delta_f \frac{\Delta E_{\text{es}}^{\text{Prop}}}{\Delta E_{\text{Prop}}} \quad (5.18)$$

mit $\Delta E_{\text{es}}^{\text{Prop}} = \sqrt{8 \ln 2 \cdot \frac{4\pi e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot Z_{\text{Prop}} \cdot N_{\text{Prop}} \cdot H_{\text{Chu}}^{\text{Prop}} \cdot Z_r^2 \frac{d_{\text{Prop}}}{\sin \delta_f}}$

und $\Delta E_{\text{Prop}} = S_r^{\text{Prop}} (E_r^{\text{Prop}}) \cdot \frac{d_{\text{Prop}}}{\sin \delta_f}$

Zusätzlich muss beachtet werden, dass die magnetischen Quadrupole zwar die Ionen unter Berücksichtigung der kinematischen Korrektur fokussieren, jedoch ebenfalls die Strahlfleckausdehnung auf die Fokalebene projizieren. Die Projektionsvergrößerungsfaktoren sind beim momentanen Aufbau: $M_v = 5,83$ in vertikaler und $M_h = 0,17$ in horizontaler Ebene. Die horizontale Ebene ist hierbei die Dispersionsebene. Damit ergibt sich für die Ortsauflösung:

$$\Delta x_b = M_h \frac{\sin \beta}{\sin \alpha} b_h \quad (5.19)$$

Anhand dieser Relation wird b_h so gewählt, dass Δx_b im Vergleich zu anderen auflösungsbegrenzenden Parametern vernachlässigbar klein bleibt. Andererseits muss der Strahlfleck so groß wie möglich gewählt werden, damit der fluenzabhängige Strahlschaden reduziert und bei Bewegung der Probe (Scan) die Messzeit minimiert wird. Momentan wird der Strahlfleck auf $b_x = 0,4 \text{ mm}$ und $b_v = 0,8 \text{ mm}$ justiert.

Ein weiterer beeinflussbarer Parameter ist das **thermische Rauschen des Proportionalzählers**. Eine systematische Herleitung sowie eine Erläuterung für dieses Rauschen befinden sich unter anderem in den Veröffentlichungen von Owen et al [OWE⁺68], Radeka [RAD74] und Matoba et al. [MAT⁺79]. Zusammengefasst besteht das Rauschen eines Proportionalzählers aus einem parallelen und einem seriellen Anteil. Der parallele Anteil entsteht hauptsächlich aus dem thermischen Rauschen des Widerstanddrahtes und der serielle aus dem Schrotrauschen im Feldeffekttransistoreingang des Vorverstärkers. Durch das CR-RC-Formungsnetzwerk, bestehend aus einem ladungsempfindlichen Vorverstärker und einem Gauß-Formungsverstärker (englisch: shaping amplifier), entstehen die folgenden parallelen und seriellen Rauschkomponenten:

$$\langle V_{parallel}^2 \rangle = \frac{k_B T}{2C_f^2} \frac{\tau_s}{rl} \quad (5.20)$$

$$\langle V_{seriell}^2 \rangle = \frac{k_B T}{2C_f^2} \frac{R_s}{\tau_s} \left[\left(C_f + \frac{cl}{3} \right)^2 + \left(\frac{\tau_s}{rl} \right)^2 \right] \quad (5.21)$$

Hierbei sind k_B die Boltzmannkonstante, T die absolute Temperatur, $C_f = 6,8$ pF [CAN07a] die Rückkopplungskapazität des Vorverstärkers, $R_s = 70 \Omega$ [CAL10] der äquivalente Rauschwiderstand des Schrotrauschens sowie r und c der Widerstand und die Kapazität des Anodendrahtes normiert auf eine Länge. Wenn ein Ion durch den Proportionalzähler gelangt, generiert es ein Ladungssignal, dass die Form einer δ -Funktion besitzt. Dieser δ -Peak erzeugt in einem CR-RC-Netzwerk eine maximale Spannung von:

$$V_{\max} = \frac{1}{e} \frac{\eta_M M Q_0}{C_f} \quad (5.22)$$

Q_0 ist die Initiaalladung, die das Ion im Proportionalzähler generiert und e die eulersche Zahl. M steht für den Gasmultiplikationsfaktor, der sich aufgrund der Stoßionisation ergibt, und η für den Reduktionsfaktor von M , der von der Proportionalzählergeometrie und von dem Filternetzwerk abhängt. Im momentanen Aufbau beträgt $\eta M = 2200$. Daraus ergibt sich folgende Positionsauflösung:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta x_{Prop}}{l} &= \frac{\sqrt{\langle V_{parallel}^2 \rangle + \langle V_{seriell}^2 \rangle}}{V_{\max}} \\ &= \frac{e}{\eta M Q_0} \sqrt{\frac{k_B T}{2} \left[\frac{R_s}{\tau_s} \left(C_f + \frac{cl}{3} \right)^2 + \frac{\tau_s}{rl} \left(1 + \frac{R_s}{rl} \right)^2 \right]} \end{aligned} \quad (5.23)$$

Sowohl Redeka [RAD74] als auch Matoba et al. [MAT⁺79] zeigten, dass die dominierende Komponente des Positionsrauschens im Proportionalzähler dem Anteil des parallelen Rauschens entspricht. Somit ergibt sich aus Gleichung (5.23):

$$\frac{\Delta x_{Prop}}{l} \approx \frac{e}{\eta M Q_0} \sqrt{\frac{k_B T}{2}} \frac{\tau_s}{rl} \quad (5.24)$$

Anhand der Gleichung (5.24) ist zu erkennen, dass das Rauschen des ortsempfindlichen Detektors zwar proportional mit dessen Länge ansteigt, allerdings auch durch Erhöhung des Gesamtdrahtwiderstandes rl mit dessen Wurzel abfällt. Dementsprechend muss ein Material gewählt werden, das einen möglichst großen Widerstand besitzt. Momentan besitzt der Draht eine NiCr₂₀AlSi-Legierung (ISA OHM[®] der Firma Isabellenhütte) [ISA07] und einen Durchmesser von 10 μm sowie einen längenbezogenen Gleichstromwiderstand von $r = 16,8 \Omega \cdot \text{m}^{-1}$. Da das Rauschen von der Drahtlänge abhängt (vgl. Gl. (5.24)) soll dieser so kurz wie möglich sein. Aus diesem Grund wurde eine Länge von etwa $l = 12 \text{ cm}$ gewählt. Aus der Gleichung ist ausserdem zu entnehmen, dass die Formungskonstante τ_s des Gaußformungsverstärkers so klein wie möglich gewählt werden sollte. Die kleinstmögliche Formungszeit die am eingesetzten 16fach-Verstärker wählbar ist, beträgt $\tau_s = 0,2 \mu\text{s}$.

Nach Radeka et al. [RAD⁺88] dominiert für eine Ionisationskammer die serielle Komponente. $\langle V_{\text{seriell}}^2 \rangle$ kann als relativer Fehler mit V_{max} berechnet werden. Daraus ergibt sich die **intrinsische Energievariation einer Ionisationskammer**. Die Detektorkapazität cl kann über das Ersatzschaltbild von in Reihe geschaltete Plattenkondensatoren berechnet werden und ergibt $cl = 1,219 \text{ fC}$.

Die genutzten **Analog-Digitalkonverter** (ADC) wandeln analoge Eingangsspannungen in digitale 14-Bit Zahlenwerte um. Die Auflösung dieser Werte liegt weit über der geforderten Auflösung. Zudem zeigten Langzeittests, dass trotz Raumklimatisierung der ADC nur eine thermisch stabile 12-Bit Auflösung im eingesetzten Labor besitzt. Diese Stabilität wurde bereits nach zehn Minuten erreicht. Aus diesen Gründen werden die Daten mit 9 bit-Auflösung erfasst und anschließend per Software auf die notwendige Auflösung reduziert. Die allgemeine Auflösung des verwendeten ADC beträgt ± 1 bit des gewählten Auflösungsbereiches.

5.3.2 Berechnung der Tiefenauflösung

In der Tabelle 5.1 werden die Tiefenaufösungen der konventionellen und der höchstauflösenden ERD gegenübergestellt. Den Berechnungen liegen die Geometrien zu Grunde, die auch bei realen Messungen angewandt werden. Damit stellt diese Tabelle keinen direkten Vergleich der Messmethoden dar, sondern zeigt die Tiefenaufösungen beider Methoden unter realen Messbedingungen.

Zusammenfassend betragen die theoretischen Energieauflösungen an der Oberfläche einer Probe für die konventionelle ERD:

$$\left. \frac{\Delta E}{E} (E_0 = 35 \text{ MeV}, \Theta = 31^\circ, \alpha = 15^\circ) \right|_{\text{ERD}} = 1,15 \cdot 10^{-2} \quad (5.25)$$

und für die höchstauflösende ERD:

$$\left. \frac{\Delta E}{E} (E_0 = 20 \text{ MeV}, \Theta = 15^\circ, \alpha = 5^\circ) \right|_{\text{HR-ERD}} = 1,45 \cdot 10^{-3} \quad (5.26)$$

Tabelle 5.1: theoretische Energieauflösungen der konventionellen und der höchstauflösenden ERD

Fehlerbezeichnung	Formelzeichen	Relative Messabweichung in 10^{-4}			
		Oberfläche		X = 10 nm	
		ERD	HR-ERD	ERD	HR-ERD
Beitrag des Strahlführungssystems					
• Energievariation des Strahls	ΔE_0	4,0	4,0	4,0	4,0
• Winkelbreite	ΔE_α	42	7,5	41	3,6
Beitrag des Strahls					
• Energieverluststreuung	ΔE_{es}	0	0	10,9	28,6
• Kleinwinkelstreuung	ΔE_{ms}	0	0	8,0	14,6
Beitrag der Probe					
• Schichtdickeninhomogenität	ΔE_{rough}	2,1	8,9	2,1	9,2
Geometrische Anordnung					
• Streuwinkelvariation	ΔE_β	69	4,0	69	3,8
Detektorsystem					
• Fensterfoliendickenvariation	$\Delta E_{rough-window}$	34,3	0	34,6	0
• Energiestreuung in der Folie	$\Delta E_{es-window}$	42,3	0	42,6	0
• Kleinwinkelvielfachstreuung in der Folie	$\Delta E_{ms-window}$	<0,01	<0,4	<0,01	<0,4
• Intrinsische Ortsauflösung	$\Delta E_{intr-prop}^{Window}$	0	0,7	0	0,7
• Energieverluststreuung im ortsempfindlichen Detektor	$\Delta E_{es-prop}$	0	<0,02	0	<0,02
• Thermisches Rauschen des ortsempfindlichen Detektors	$\Delta E_{TN-prop}$	0	1,2	0	1,2
• Intrinsische Energieauflösung der Braggpeak detektierenden Ionisationskammer	$\Delta E_{intr-BPchamber}$	0	0	0,1	0,1
• Analog-Digital-Wandler	ΔE_{ADC}	60,9	6,3	61,3	6,5
Summe $\Delta E = \sum_i \Delta E_i^2$	ΔE	115,0	14,5	115,8	34,7

5.3.3 Vergleich der höchstauflösenden mit der konventioneller ERD

Gemeinsam haben beide Methoden, dass sie Elementanalyseverfahren sind, welche leichte Elemente in einer schweren Matrix nachweisen. Zudem kann in einer Probe die Menge jedes einzelnen Elements in Abhängigkeit von der Tiefe beziehungsweise für jedes Element separat ein unabhängiges Tiefenprofil ermittelt werden. Die maximale Tiefe, in der ein Element nachgewiesen werden kann, wird durch die

Primärionenenergie bestimmt. Ab einer speziellen Tiefe ist die Abbremsung des Primärions so groß, dass das herausgestreute Recoil nach der Streuung so wenig kinetische Energie besitzt, dass es die Oberfläche nicht mehr verlassen kann. Typische Tiefenauflösungsgrenzen der konventionellen ERD liegen im Bereich von 10 bis 20 Nanometern. Diese Auflösung kann durch die geeignete Wahl des Primärions sowie des Einfallswinkels reduziert werden. In Abbildung 5.7 sind die Tiefenaufösungen an der Oberfläche von Sauerstoff in einer SiO_2 -Schicht bei verschiedenen Primärionen und in Abhängigkeit vom Einfallswinkel dargestellt. Der Streuwinkel beträgt hierbei immer $\Theta_{\text{ERD}} = 31^\circ$. Es ist zu erkennen, dass die Tiefenauflösung ein Maximum besitzt und bei abflachender Geometrie des Einfalls- sowie des Ausfallswinkels abnimmt. Die Tiefenauflösung für Gold und Iod sind ausschließlich berechnete Werte und jene von Chlor und Kupfer sind berechnet und experimentell ermittelt.

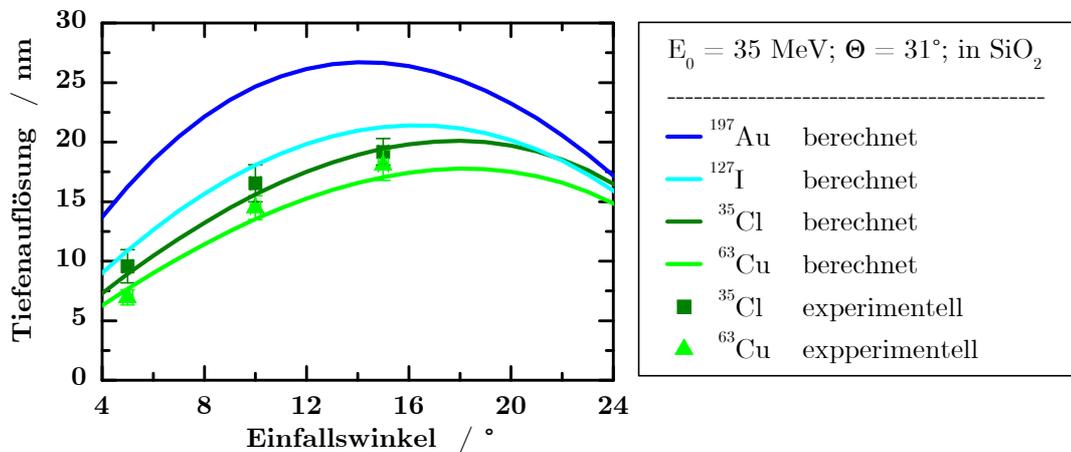


Abbildung 5.7: Tiefenauflösung der konventionellen ERD an der Oberfläche einer SiO_2 -Schicht in Abhängigkeit vom Einfallswinkel (bei konstantem Streuwinkel) verschiedenen Primärionen

Damit in einer schweren Matrix die leichte Elemente auch in ultradünnen Schichten oder Schichtabfolgen, die weit dünner als die Tiefenauflösung der ERD sind, bestimmt werden können, wurde mit dieser Arbeit das Magnetspektrometer QQDS zur höchstauflösenden ERD aufgebaut. Die theoretische Energieauflösung (vgl. Abschnitt 5.3.2) dieser Anlagen ist bei der höchstauflösenden ERD an der Oberfläche einer Probe um den Faktor acht kleiner als bei der konventionellen. Damit können Tiefenaufösungen im Subnanometerbereich erzielt werden.

Zum direkten Vergleich der bestehenden konventionellen und der höchstauflösenden ERD sind in Abbildung 5.8 deren berechnete Tiefenaufösungen in Abhängigkeit von der Probtiefe gegenübergestellt. Die Farben rot und braun zeigen die Tiefenaufösungen der höchstauflösenden und blau die der konventionellen ERD. Zusätzlich sind in dieser Abbildung die Tiefenaufösungen für die ERD mit dafür optimierten Parametern in den Farben hell- und dunkelgrün eingetragen. Bis in etwa 100 Nanometer Tiefe besitzt die höchstauflösende ERD eine deutlich niedrigere Tiefenauflösung als die konventionelle, danach erfolgt aufgrund des flacheren Streuwinkels eine Verschlechterung. Dieser flache Streuwinkel wird jedoch für die notwendige Tiefenauflösung nahe der Oberfläche benötigt. Zusammenfassend kann gesagt werden, dass ab einer Tiefe von etwa 100 Nanometern sind die Kleinwinkel- und die Energiestreu-

effekte in der Probe so stark dominieren, dass die höchstaflösende ERD keinen Vorteil mehr bietet.

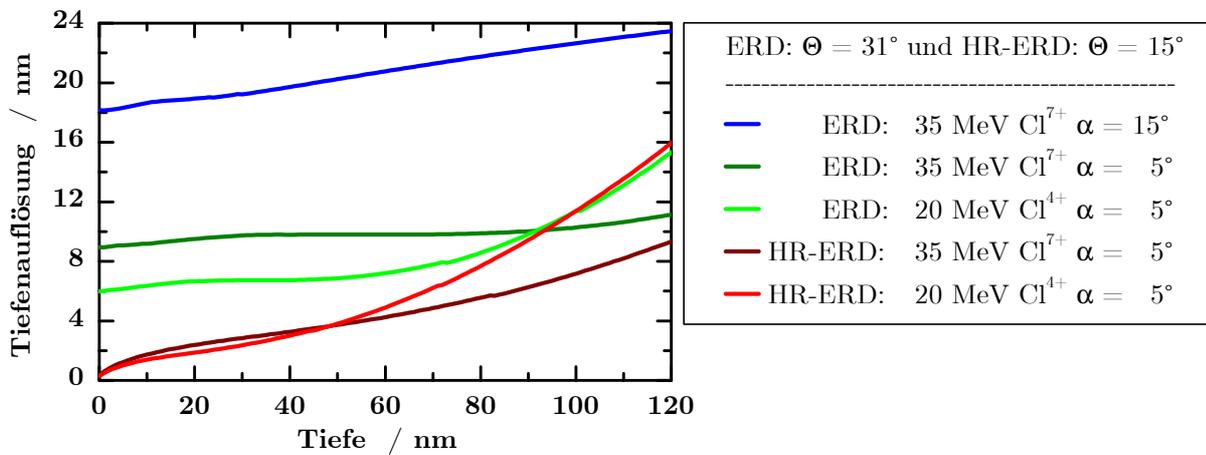


Abbildung 5.8: Berechnete Tiefenauflösung in Abhängigkeit von der Tiefe bei verschiedenen ERD und höchstaflösenden ERD (HR-ERD) Geometrien

Der Nachteil der höchstaflösenden ERD besteht darin, dass pro Messung nur ein Element nachgewiesen werden kann. Für jedes weitere muss eine separate Messung durchgeführt werden.

Die hohe Tiefenauflösung der höchstaflösenden ERD bietet noch weitere Messmöglichkeiten. Zum einen können gezielt strahlinduzierte Verschiebungen der Elemente in einer Probe untersucht (vgl. Abschnitt 4.1.4) und zum anderen die Ladungsverteilungen, die sich nach einem Stoß für ein Element einstellen, analysiert werden (vgl. Abschnitt 3). Zusätzlich wird die Form der Spektren durch Grenzflächenrauheiten beeinflusst, die dadurch gezielt untersucht werden können. Als Beispiel sei hier die Elementabscheidung erwähnt, bei der keine homogene sondern eine „Inselhaufen“-Verteilung entsteht.

Zusammenfassend ist die konventionelle ERD die bevorzugte Analysemethode, wenn eine Tiefenauflösung von über zehn Nanometern ausreicht. Bei dünnen Schichten im Bereich von 10 nm und kleiner, oder bei dickeren Schichten, bei denen die Grenzflächen analysiert werden sollen, liefert die höchstaflösende ERD die besseren Ergebnisse. Beispiele hierfür werden in Abschnitt 6 aufgeführt.

5.3.4 Vergleich der höchstaflösenden Ionenstrahlanalytik mit anderen Tiefenprofilierungsmethoden

Der Vergleich der höchstaflösenden Ionenstrahlanalytik mit anderen Methoden soll hier beispielhaft anhand zweier Versuchsreihen verdeutlicht werden.

Das **erste Beispiel** ist den Veröffentlichungen von Moon et. al [MOO⁺01] und Grötzschel et. al. [GRO⁺04] entnommen. Hier wurde das Schichtsystem, bestehend von der Oberfläche beginnend, aus 5,2 nm Si und vier mal der Schichtfolge (0,57 nm Ta_{0,085}Si_{0,915}/5,2 nm Si) auf einem Siliziumsubstrat mit der mittlereenergetischen Ionenstreuungspektroskopie MEIS [MOO⁺01] sowie mit der höchstaflösenden RBS

[GRO⁺04] analysiert. Bei der MEIS wurden H⁺-Ionen mit einer Primärenergie von $E_0 = 100$ keV bei senkrechtem Einfall auf die Probe und einem Streuwinkel von $\Theta = 130^\circ$ genutzt (vgl. Abbildung 5.9 a). Bei der höchstaufösenden RBS erfolgte die Analyse mit C²⁺-Ionen und einer Primärenergie von $E_0 = 2$ MeV unter einem Streuwinkel von $\Theta = 35,5^\circ$ und einem Einfallswinkel von $\alpha = 17,5^\circ$ (vgl. Abbildung 5.9 b). Grötzschel et al. [GRO⁺04] stellten bei diesem Vergleich fest, dass im Energiespektrum der MEIS-Messungen nur die ersten beiden Tantal-Peaks aufgelöst und damit quantitativ analysiert werden können. Die folgenden Schichten sind aufgrund der niedrigen Ausbeuten, der schnell abnehmenden Tiefenaufösendung und des Stragglings so stark überlagert, dass sie nicht mehr trennbar sind. Bei der HR-RBS ist die Tiefenaufösendung im gesamten Bereich größer, da erstens Kohlenstoff ein viel höheres Bremsvermögen aufweist und zweitens der Einfalls- sowie der Ausfallswinkel aufgrund der höheren Energie flacher gewählt werden können. Somit ist es nur mit der HR-RBS möglich alle fünf Tantal enthaltenden Schichten zu analysieren

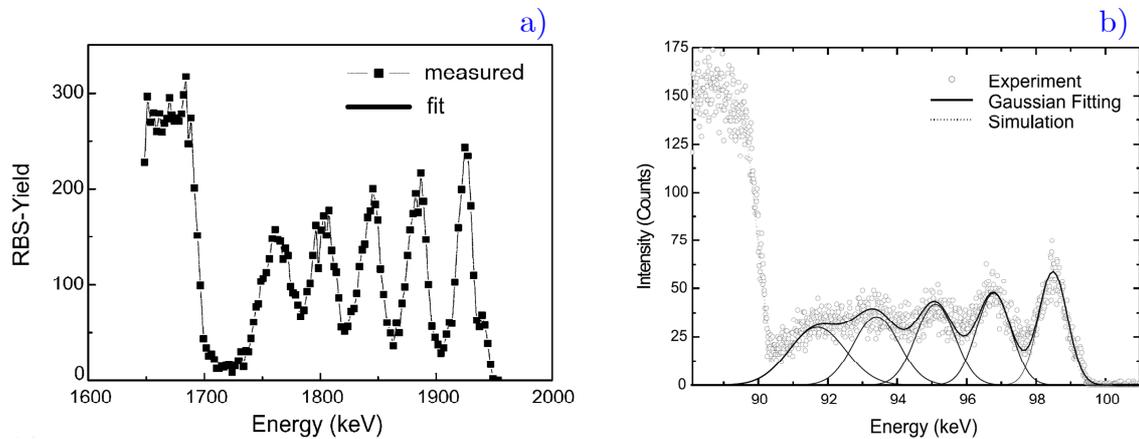


Abbildung 5.9: Vergleichsmessungen einer 5,2 nm Si auf 4* (0,57 nm Ta_{0,085}Si_{0,915}/5,2 nm Si) aus Siliziumsubstrat a) HR-RBS [GRO⁺04] b) MEIS [MOO⁺01]

Das **zweite Beispiel** stammt aus der Arbeit von Brijs et. al [BRI⁺06]. Darin wird die Analyse eines Mehrschichtensystems, bestehend aus einer oberen 8 nm SiO₂-, einer mittleren 5 nm Si₃N₄- und einer unteren 2 nm SiO₂-Schicht auf einem Silizium-Substrat, anhand mehrerer Methoden verglichen. Die genutzten Analyseverfahren sind dabei die höchstaufösende RBS [KIM⁺94], die Niederenergie-SIMS und die Niederenergie-Schwerionen-ToF-ERD [BUS⁺80] und deren analysierte Spektren sind in der Abbildung 5.10 dargestellt. Bei der höchstaufösenden RBS wurden elastisch gestreute He⁺-Ionen, die eine Primärenergie von $E_0 = 400$ keV besaßen, unter einem Streuwinkel von $\Theta = 50^\circ$ gemessen und deren Energiespektrum analysiert. Die Niederenergie-SIMS ist eine Quadrupol-SIMS Anlage (Atomika FEI 4500), bei der ein Cs-Strahl mit einer Energie von $E = 300$ eV und unter einem Winkel von 45° auf die Probe gelenkt und anschließend ein Nachweis der gesputterten Ionen durchgeführt wurde. Bei der Niederenergie-Schwerionen-ToF-ERD wurden Recoilionen nachgewiesen, die bei einer Bestrahlung der Probe mit Cl ($E_0 = 6$ MeV) und unter einem Streuwinkel von $\Theta = 38,2^\circ$ sowie einem Ausfallswinkel von $\beta = 3,6^\circ$ herausgestreut wurden. Das Resultat dieser Vergleichsmessungen war, dass keine dieser Methoden allein ein vollständiges Tiefenprofil mit einer Auflösung kleiner einem Nanometer und

einer Sensitivität von einem Atomprozent über den Bereich von Null bis 50 Nanometern lieferte. Nur die höchstauflösende RBS und die ToF-ERD lieferte sehr oberflächennah ein Tiefenprofil mit einer ausreichenden Tiefenauflösung, jedoch nimmt diese Auflösung mit steigender Tiefe rapide ab. Die bessere Tiefenauflösung ergab sich bei der höchstauflösenden RBS, wobei jedoch die Signale der leichten Elemente mit Signalen der schwereren Elemente überlagert sind. Bei der ToF-ERD werden die Signale der leichten Elemente unabhängig voneinander und damit untergrundfrei gemessen. Die SIMS zeigt eine sehr starke Matrixabhängigkeit, die dazu führt, dass die Analyse an den Grenzflächen widersprüchliche Werte liefert. In tieferen Bereichen liefert die SIMS allerdings die bessere Auflösung, da dessen Tiefenauflösung nahezu tiefenunabhängig ist. Zusätzlich ergaben ausschließlich die Messungen mit der ToF-ERD, dass sich an der Oberfläche Verunreinigungen von Wasserstoff und Kohlenstoff befanden.

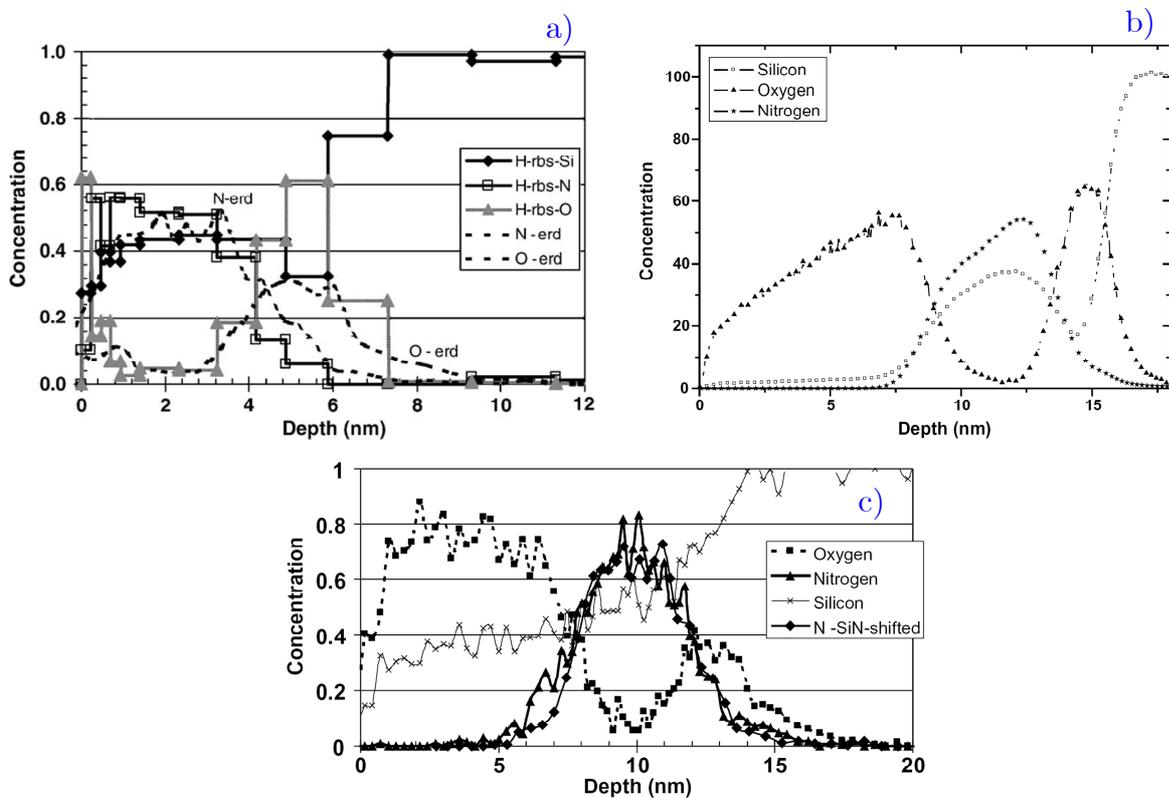


Abbildung 5.10: Vergleichsmessungen einer Multischicht, bestehend aus 8 nm SiO_2 , 5 nm Si_3N_4 und 2 nm SiO_2 auf einem Siliziumsubstrat [BRI⁺06], die mittels a) HR-RBS b) SIMS und c) ToF-ERD analysiert wurden

Zusammenfassend ist an diesen Beispielen gezeigt, dass die höchstauflösende RBS sehr oberflächennah die beste Auflösung besitzt. Sobald sich Signale von unterschiedlichen Elementen überlagern, wird jedoch die Auswertung problematisch und könnte sogar zu falschen Werten führen. Dies ist insbesondere bei leichten Elementen der Fall, die sich in einer Schicht zusammen mit schwereren befinden. Hierbei liefert jedoch die ERD einen quantitativen Wert, da damit jedes Element einzeln nachgewiesen wird. Aus diesem Grund sind in dieser Arbeit die höchstauflösende ERD Anlage aufgebaut und die notwendigen Parameter, die zur Quantifizierung benötigt wurden, systematisch analysiert worden.

Kapitel 6

Anwendungsbeispiele für höchstauflösende ERD

Die im Folgenden dargestellten Beispiele sind Tiefenprofile von dünnen Schichten, welche größtenteils in der Mikroelektronik Anwendung finden. Es soll gezeigt werden, dass durch die höchstauflösende ERD das Tiefenprofil der dargestellten Schichten analysierbar wird. Weiterhin werden Probleme dargelegt, die sich bei der Analyse dieser Schichten ergaben.

6.1 $\text{SiO}_2\text{-Si}_3\text{N}_4\text{O}_x\text{-SiO}_2\text{-Multischicht}$

In nichtflüchtigen Speichern, also Datenspeichern, deren Informationen dauerhaft erhalten bleiben sollen, auch wenn der Computer nicht in Betrieb ist bzw. nicht mit Strom versorgt wird, werden die Dielektrika der Kondensatoren oft aus einem $\text{SiO}_2/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2$ -Stapel hergestellt [BAN⁺04]. Dieser Schichtstapel wird in der Mikroelektronik ONO-Schicht genannt [ALB06] und besitzt im Vergleich zu einer einfachen SiO_2 -Schicht eine höhere Dielektrizitätszahl. Daher können Kondensatoren mit einer ONO-Schicht eine größeren Dicke besitzen, um dennoch eine gleichbleibende Kapazität zu erzielen. Dies führt zu einer erhöhten Speicherfähigkeit [BAN⁺04].

Typische Dicken von ONO-Schichten liegen bei etwa 5 nm pro Schicht. Diese müssen für die immer kleiner werdenden Bauteile aber ebenfalls reduziert werden. Akkurate Messungen dieser extrem dünnen Schichten sind eine große Herausforderung für zerstörungsfreie Messtechniken [BAN⁺04, BRI⁺06].

In Abbildung 6.1 b) ist eine Transmissionselektronenmikroskopaufnahme (TEM) einer ONO-Schicht zu sehen. Befindet sich, wie in diesem Beispiel, kein Sauerstoff in der Si_3N_4 -Schicht, sind die einzelnen Schichten des Stapels mit einer TEM-Aufnahme zu erkennen. In Abbildung 6.1 a) ist das gemessene Sauerstoffprofil derselben ONO-Schicht dargestellt. Gemessen wurde dieses Profil einmal mit der konventionellen und einmal mit der höchstauflösenden ERD (Symbole). Das sich daraus ergebende Profil ist ebenfalls in dieses Diagramm eingezeichnet (gepunktete Linie). Die Umrechnung in Nanometereinheiten erfolgte mit den Standarddichten für SiO_2 und Si_3N_4 . Es ist ersichtlich, dass mit der konventionellen ERD zwar die beiden Sauerstoffschichten

voneinander getrennt analysiert werden können, diese jedoch kein Tiefenprofil liefern. Anders sieht das Spektrum der höchstauflösenden ERD aus. Hier sind eindeutig beide Schichten voneinander getrennt. Außerdem lässt sich ein Tiefenprofil mit weniger als einem Nanometer Tiefenauflösung an der Oberfläche aus dem gemessenen Spektrum bestimmen. Die Dicken der Schichten in nm stimmen mit einem Fehler von 10 % mit denen der TEM-Aufnahmen überein. Hauptsächlich ist dieser Unterschied durch die nicht exakt bekannte Dichte zurückzuführen.

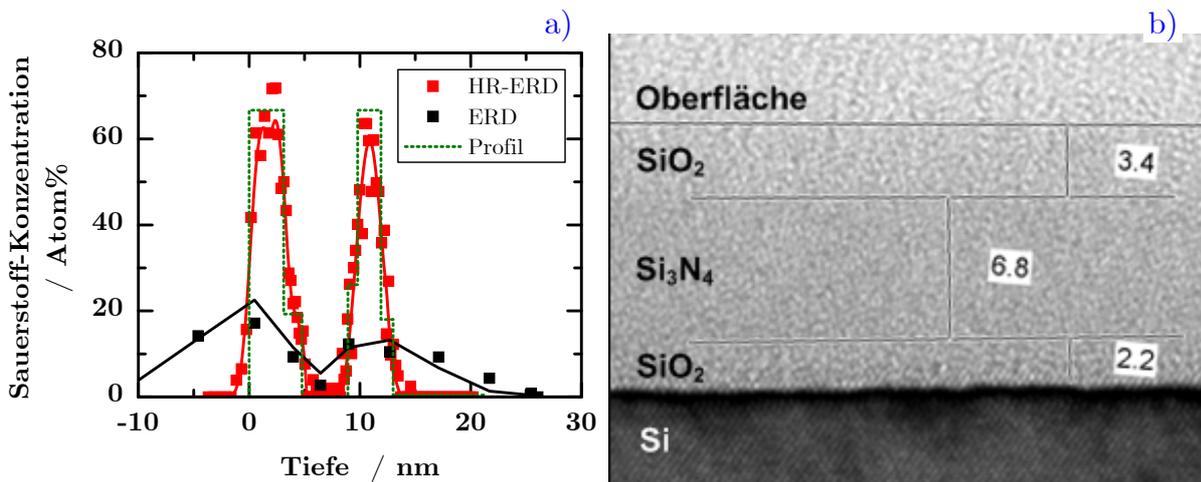


Abbildung 6.1: a) Sauerstoffprofil und b) TEM-Aufnahme einer SiO₂-Si₃N₄-SiO₂-Si Probe

In Abbildung 6.2 ist das Tiefenprofil eines ONO-Schichtstapels dargestellt, welcher in der Siliziumnitridschicht zusätzlich etwa 25 Atom% Sauerstoff enthält. Abgebildet ist das Profil, welches sowohl mit konventioneller als auch mit höchstauflösender ERD ermittelt wurde. Es ist eindeutig zu erkennen, dass bei Vorhandensein von Sauerstoff in der Siliziumnitrid-Schicht dieser Sauerstoff nicht mehr mit der konventionellen ERD nachweisbar ist. Das Tiefenprofil, welches mit der höchstauflösenden ERD ermittelt wurde, liefert sowohl die Breite der beiden SiO₂-Schichten als auch die Konzentration von etwa 25 Atom% Sauerstoff in der dazwischenliegenden Schicht.

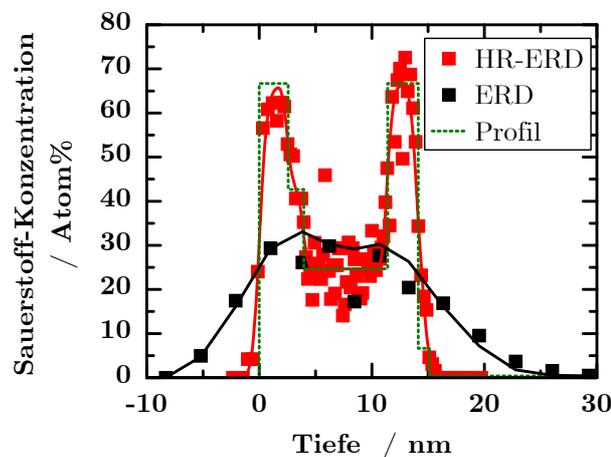


Abbildung 6.2: Sauerstoffprofil einer SiO₂-Si₃N₄O_x-SiO₂-Si Probe

6.2 Ultra-Shallow-Junction Bor-Implantationsprofile

Das kontinuierliche Fortschreiten der Packungsdichte von siliziumbasierten ultra-hochintegrierten Schaltungen (engl.: ultra large scale integrated circuits) wird größtenteils durch die Verkleinerung ihrer Komponenten ermöglicht (z. B. Metall-Oxid-Halbleiter-Feldeffekttransistor MOSFET) [IWA98]. Hierbei werden unter anderem die Breite und die Länge der Gates reduziert. Somit verringert sich der Abstand zwischen Source und Drain, und deren Einfluss auf die Verteilung des elektrostatischen Potentials unterhalb des Gates erhöht sich. Die dadurch auftretenden Effekte werden Kurz-Kanal-Effekte (engl. short channel effects) genannt. Einer dieser Effekte ist die Reduzierung der Schwellspannung durch die Verkleinerung Source-Drain-Abstandes [YAU74]. Dies kann nur vermieden werden, indem die Tiefe von Source und Drain ebenfalls reduziert wird. Aus diesem Grund werden bei Strukturgrößen ≤ 20 nm sogenannte Ultra-Shallow-Junctions benötigt. Hierbei werden die Source- und Drain-Dotiergebiete durch Implantation von z. B. Bor oder Arsen in das Silizium bei sehr geringer Energie (≤ 1 keV) und bei einem darauf folgenden Ausheilprozess mit ebenfalls geringem Wärmeeintrag erzielt.

Mit der höchstauflösenden ERD können Bor-Konzentrationsprofile, die mit einer Energie von ≤ 1 keV in das Silizium implantiert wurden, analysiert werden. Hierbei beträgt die mittlere Eindringtiefe nur wenige Nanometer. In Abbildung 6.3 ist ein Implantationsprofil von Bor mit der gemessenen Dosis von $4,9$ Bor-Ionen / cm^2 dargestellt. Dabei sind die Profile von klassischer und höchstauflösender ERD gegenüber gestellt. Zusätzlich sind die mit dem Monte-Carlo-Programm CrystalTRIM [POS94] simulierten Profile in das Diagramm eingetragen [ZIE11]. Die Proben besaßen vor der Implantation natives SiO_2 auf der Oberfläche [HÖN⁺10]. Die Dicke dieser Schicht wurde durch konventionelle ERD mit $9 \cdot 10^{15}$ SiO_2 -Atomen / cm^2 ermittelt. Dieser Wert entspricht bei einer Standarddichte von $\rho = 2,2$ g / cm^3 einer Dicke von $1,5$ nm und wurde bei jeder Analyse berücksichtigt. Im Vergleich zwischen konventioneller und höchstauflösender ERD fällt auf, dass mit der konventionellen ERD kein Profil zu erkennen ist und das gesamte Bor-Profil lediglich durch eine breite Gauss-Verteilung ermittelt wird.

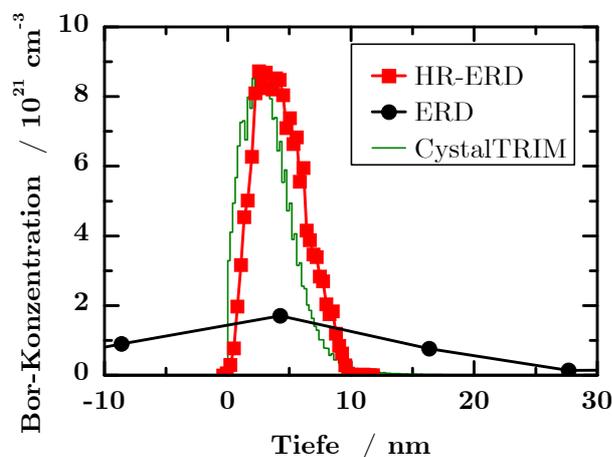


Abbildung 6.3: Bor-Implantationsprofil (Implantationsenergie 1 keV und Dosis $4,9$ Bor-Ionen / cm^2)

In Abbildung 6.4 sind die mit der höchstauflösenden ERD gemessenen und mit Crystal-TRIM simulierten Bor-Profile und die ermittelten Implantationsdosen von Bor dargestellt. Hier betragen die jeweiligen Implantationsenergien 0,2 keV, 0,5 keV und 1,0 keV. Im Vergleich zwischen der Monte-Carlo-Simulation und dem gemessenen Bor-Profil sind zwei Auffälligkeiten zu erkennen. Zum einen stimmen die abfallenden Verläufe in die Tiefe qualitativ sehr gut überein. Zum anderen ist eine signifikante Differenz in den Anstiegen zu erkennen.

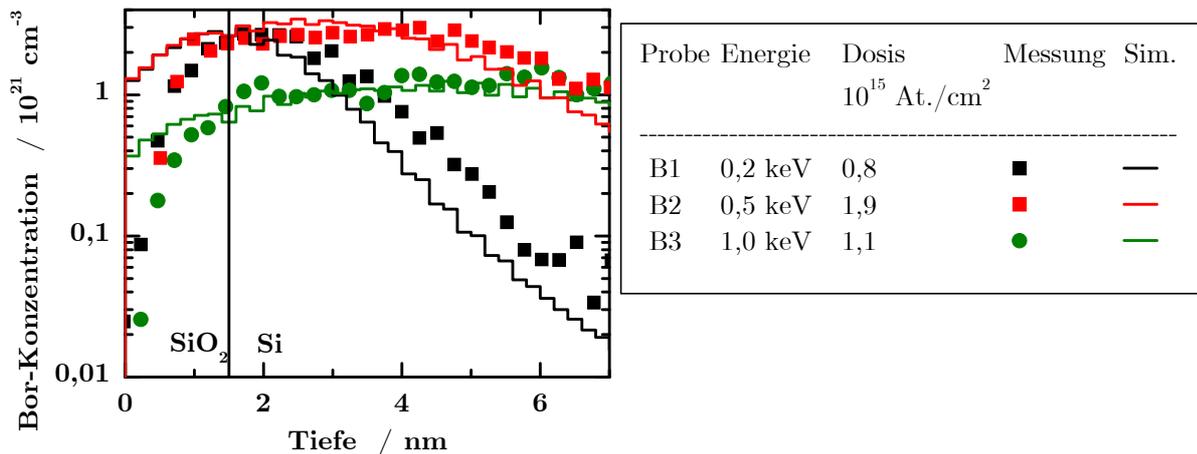


Abbildung 6.4: Bor-Implantationsprofile (gemessen mit höchstauflösender und konventioneller ERD, simuliert mit Crystal-TRIM)

6.3 High-K Materialien und ultradünne Oxidschichten

Im Folgenden werden drei Beispiele gezeigt, die spezifische Merkmale in der analysierten Schicht beinhalten. Abbildung 6.5 a) zeigt ein Tiefenprofil einer ZnO-Schicht, die mittels reaktiv gepulstem Magnetronspputtern auf Silizium aufgetragen wurde [COR⁺09]. Bei der Analyse dieser und aller anderen Schichten wurde berücksichtigt, dass sich Wasser in den obersten Lagen befindet. Der Wasserstoff wurde für jede Schicht mittels Kernresonanzanalyse in einer zusätzlichen Messung bestimmt (vgl. Abschnitt 4.1.3). Die Sauerstoffatome des Wassers können nicht von denen der zu untersuchenden Schichten mittels höchstauflösender ERD getrennt werden, so dass immer ein Sauerstoffprofil analysiert wird, welches dem Mittelwert des gesamten Sauerstoffs in einer bestimmten Tiefe entspricht.

In Abbildung 6.5 b) ist das Sauerstoffprofil einer La_2O_3 -Schicht dargestellt, die auf einer SiO_2 -Schicht per Atomlagenabscheidung ALD (engl: atomic layer deposition) aufgetragen wurde. Beide Schichten enthalten Sauerstoff. Dies bedeutet, dass das gemessene Sauerstofftiefenprofil einen fließenden Übergang von der La_2O_3 -Schicht zur SiO_2 -Schicht darstellt. Bei dieser Grenzfläche änderten sich sowohl das Bremsvermögen des durchdringenden Ions als auch die Dichte des Materials. Aus diesem Grund ist im Tiefenprofil ein kleiner Sprung an dieser Grenzfläche zu erkennen. Dieser Sprung im Tiefenprofil fällt jedoch sehr gering aus, da die La_2O_3 -Schicht so dünn ist, dass deren Nachweis nahe der Tiefenauflösung des gesamten Spektrometers liegt. Aus diesem Grund ist der Gesamt-Lanthangehalt zusätzlich mit der RBS-Methode zu $1,4 \cdot 10^{15} \text{ La-Atomen / cm}^2$ bestimmt worden. Die sich dadurch ergebende La_2O_3 -

Schicht ist bei der Auswertung berücksichtigt, und das resultierende Tiefenprofil in Abbildung 6.5 b) zusätzlich dargestellt.

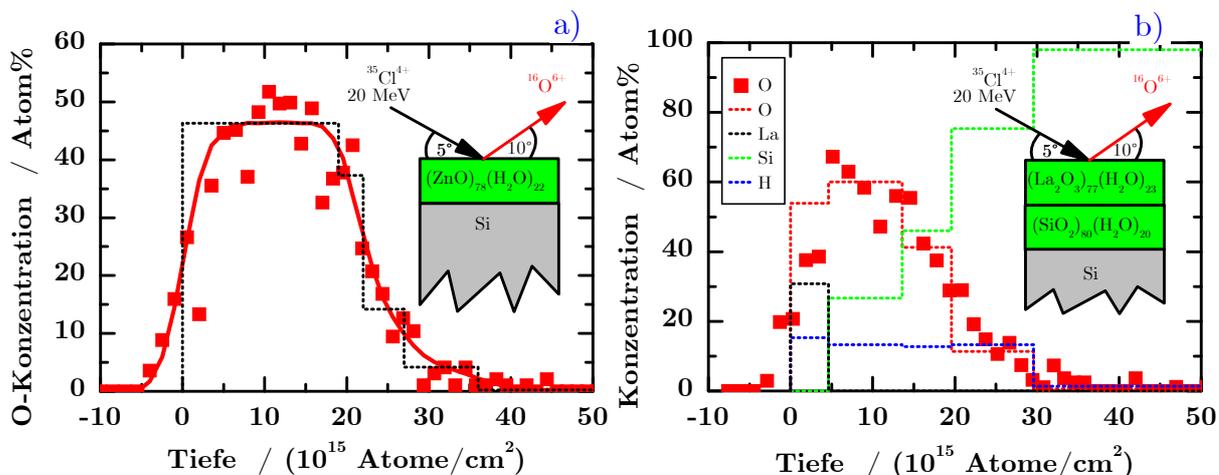


Abbildung 6.5: Tiefenprofil a) von Sauerstoff einer ZnO-Schicht auf Si b) einer La_2O_3 -Schicht auf SiO_2 auf Si. (Die oberen Schichten beinhalten zudem Wasser.)

Abbildung 6.6 a) zeigt das Tiefenprofil einer per ALD abgeschiedenen ZrO_2 -Schicht und b) dessen Rauheitsprofil, dass mit einem Rasterkraftmikroskop gemessen wurde. Das ermittelte Rauheitsprofil ergab eine quadratische Rauheit von $\text{RMS} = 1,1 \text{ nm}$. Dies entspricht derselben Größenordnung, die auch die Dicke der ZrO_2 -Schicht aufweist. Die Ermittlung eines exakten Tiefenprofils dieser Schicht nicht möglich, da der Unterschied zwischen Grenzflächenrauheit und Elementgradient in die Tiefe nicht unterschieden werden kann. Aus diesem Grund wird derzeit ein Programm namens PEST [VIE10], entwickelt und getestet, welches aus einem AFM-Bild die Rauheit extrahieren kann und diese bei der Analyse der Schicht mit einfließen lässt, da nur mit solch einer Auswerterroutine die Rauheit exakt simulierbar wird. Das in Abbildung 6.6 a) dargestellte Sauerstofftiefenprofil wurde mit der Rauheitsberechnung, die im Auswerteprogramm NDF enthalten ist, ermittelt.

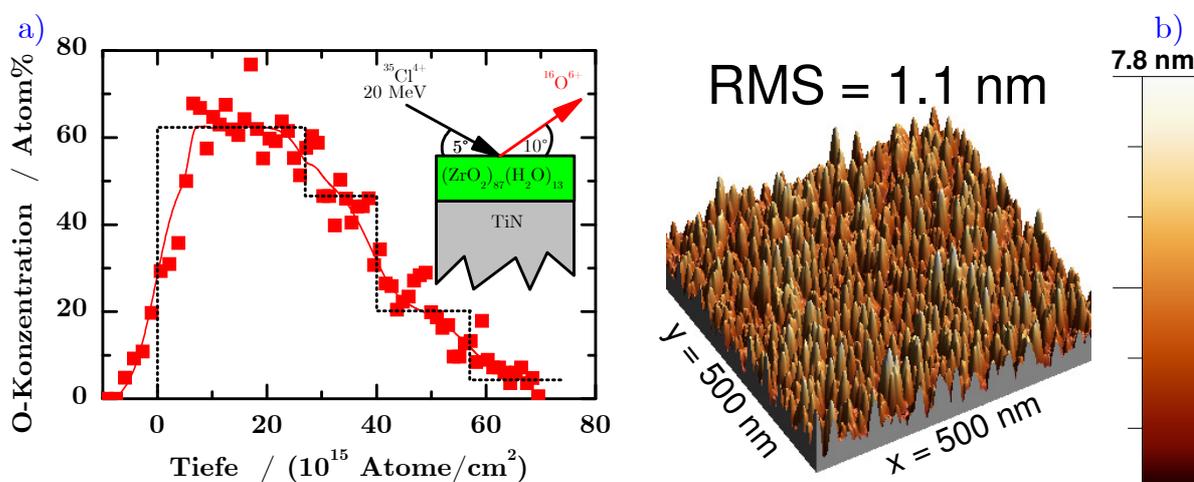


Abbildung 6.6: a) Sauerstofftiefenprofil einer ZrO_2 -Schicht auf TiN mit einer Rauheit, die im Bereich der Schichtdicke liegt ($\text{RMS} = 1,1 \text{ nm}$) b) AFM-Bild der ZrO_2 -Probe

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

7.1 Zusammenfassung

Das mit dieser Arbeit entstandene Magnetspektrometer QQDS, welches zur Analyse leichter Elemente in jeglichem Substrat genutzt werden kann, und dessen Peripheriegeräte (vgl. Kapitel 2) liefern Elementtiefenprofile mit einer Tiefenauflösung von weniger als einem Nanometer nahe der Oberfläche (vgl. Kapitel 5 und Abbildung 5.2 b)). Somit können ultra-dünne Schichten und deren Grenzflächen, wie in Kapitel 6 gezeigt, mit diesem Aufbau untersucht werden.

Mit den Analysen der Ladungszustandsverteilung im dynamischen Nichtgleichgewicht (vgl. Kapitel 3) können die Spektren der höchstauflösenden ERD mit einem Magnetspektrometer zum einen normiert, und zum anderen können Tiefenprofile leichter Elemente quantitativ ermittelt werden. Genutzt wurde hierfür das Modell aus Abschnitt 3.2.5.

Die umfangreichen Untersuchungen aus Kapitel 4 dienten dazu, Strahlschaden, der während der Bestrahlung bei einer Messung auftritt, zu messen und damit diesen entweder zu vermeiden oder bei der Analytik der Schichten als Parameter mit einfließen zu lassen. Letztendlich konnten die bestmöglichen Strahlparameter (20 MeV $^{35}\text{Cl}^{4+}$) zur Analyse von Oxidschichten am QQDS ermittelt werden (vgl. Abschnitt 4.3).

7.2 Ausblick

Die Abhängigkeiten des elektronischen Sputterns müssen für verschiedene Schichtzusammensetzungen gezielt untersucht werden. Beispielsweise gibt Arnoldbik et al. [ARN⁺03] 500 eV / (10^{15} Atome/cm²) als Schwelle für das Bremsvermögen in SiO₂ an, ab der das elektronische Sputtern auftritt. Bei notwendigen Detektorumbauten am QQDS muss immer berücksichtigt werden, dass leichte Elemente (wie z. B. Sauerstoff), die bei der Energie herausgestreut werden, bei der das Bremsvermögen der Primärionen unterhalb dieser Schwelle liegt, detektiert werden können. In SiO₂ entspricht das für Chlor etwa 7,5 MeV. Diese Schwelle gilt jedoch nur für SiO₂. Untersuchungen in dieser Arbeit haben gezeigt, dass andere Oxidschichten bereits ab

20 MeV keinen Strahlschaden mehr aufweisen (vgl. Abschnitt 4.2.5 und Abbildung 4.13). Aus diesem Grund sollten die Schwellen von verschiedenen Materialien untersucht und dadurch eine maximal mögliche Fluenz für eine Analytik genutzt werden.

Die Grenzflächendurchmischung, die durch Schwerionenbestrahlung im MeV-Bereich verursacht wird, sollte für jede einzelne Schichtzusammensetzung untersucht werden. Ist diese Größe bekannt, kann sie bei der Analytik, wie in Abschnitt 4.1.4 beschrieben, Berücksichtigung finden. Diese Durchmischung hat somit auf das analysierte Tiefenprofil keinen Einfluss mehr.

Das ladungszustandsabhängige Bremsvermögen im Nichtgleichgewicht kann, wie in Abschnitt 3.2.5 beschrieben, mit dem Modell aus Abschnitt 3.2.3 zur Analytik angewandt werden. Derzeit ist die Anzahl der Werte, die veröffentlicht wurden und damit für die X-Bestimmung genutzt werden, sehr gering. Aus diesem Grund sollten mit dem in Abschnitt 3.3.2 beschriebenen Experiment von Wiemann [WIE10] die Ladungszustandsverteilungen und deren Bremsvermögen gezielt für Schwerionen in Transmission untersucht werden. Anschließend sollte dieses Experiment dazu genutzt werden, sowohl die Ladungszustandsverteilung als auch deren Bremsvermögen nach einer elastischen Streuung der Ionen zu untersuchen. Die Abhängigkeit des Bremsvermögens von der Ladungszustandsverteilung nach einer Streuung kann daraufhin in NDF implementiert werden [BAR10].

Parallel zum Aufbau der höchstauflösenden ERD sollte zukünftig ein Time-of-Flight-ERD Detektor in Betrieb genommen werden. Derzeit wurden alle in dieser Arbeit untersuchten Proben in einer Zweitmessung mit der konventionellen ERD verglichen. Dies erwies sich des Öfteren als problematisch, da mitunter ein strahlinduzierter Schaden in der Zweitmessung vorhanden war. Es würde zudem Zeit sparen, wenn beide Spektren zeitgleich aufgenommen werden könnten.

Die Apertur der Quadrupole stellt derzeit die Begrenzung des Raumwinkels am QQDS dar (vgl. Abschnitte 2.4.2, 2.4.3, A.2 und Tabelle A.2). Daher sollten diese zukünftig durch solche mit einem größeren Innendurchmesser ausgetauscht werden, die dennoch die Schwerionen auf die große Distanz bis zum Detektor fokussieren können.

Der Einfluss verschiedener Rauheiten (lang- und kurzwellig) sowohl auf einer Probenoberfläche (vgl. Abschnitt 5.2.3 und Abbildung 5.3) als auch an Grenzflächen (vgl. Abschnitt 5.2.4) ist aufgrund der Untersuchungen durch Vieluf [VIE10] theoretisch sehr gut erklärbar. Dieser Einfluss auf das analysierte Spektrum kann durch eine Rauheitsmessung (z.B.: AFM-Messungen) zu einem großen Teil herausgerechnet werden. Jedoch gibt es extreme Formen der Rauheitsprofile, die mit einer AFM-Spitze nicht gemessen werden können, da deren Durchmesser größer als der mittlere Abstand zwischen zwei Rauheitsbergen bzw. -tälern sein kann. Aus diesem Grund sollte das Modell von Vieluf mit gezielt hergestellten Oberflächenrauheiten sowohl auf seine Anwendbarkeit als auch auf seine Grenzen untersucht werden.

Ein wichtiges Element, welches zukünftig mit der höchstauflösenden ERD untersucht werden sollte, ist Wasserstoff. Die in dieser Arbeit untersuchten Schichten beinhalten alle dieses Element. Ein hoher Wasserstoffanteil an der Oberfläche der zu untersuchenden Schicht hat einen starken Einfluss auf das Bremsvermögen der

durchquerenden Ionen. Daher wurden in dieser Arbeit Wasserstofftiefenprofile mit der Nuklearreaktionsanalyse NRA untersucht (vgl. Abschnitt 4.1.3 und Abbildung 4.2) und bei der Analytik der Schichten genutzt und mitberechnet (vgl. Abschnitt 6.3). Jedoch zeigte sich, dass Wasserstoffprofile, die mit der NRA gemessen wurden, eine zu geringe Tiefenauflösung besitzen. Es war teilweise nicht möglich, eine Wasserstoffkonzentration eindeutig einer dünnen Schicht oder deren Grenzfläche zuzuordnen. In welcher Tiefe die Wasserstoffatome sich exakt eingelagert haben, ist somit durch die NRA nicht messbar.

Anhang A

Maß- und Datenblatt des Magnet- spektrometers QQDS

In den folgenden Abschnitten werden die Spezifikationen des QQDS-Magnetspektrometers aufgeführt, die für die Berechnung der Magnetfelder (vgl. Abschnitt 2.4.5) benötigt werden oder Auswirkungen auf die Beschaffenheit der Magnetfelder haben. Die technischen Daten und die Abmaßen der Magnete sind dem Primärbericht [GIL81] entnommen.

A.1 Dipolmagnet

Tabelle A.1: Maß- und Datenblatt des Dipolmagneten

Komponente	Wert
Ablenkwinkel	60°
Radius der Sollbahn R_0	1500 mm
maximale Induktion	1,7 T
Polschuhabstand	60 mm
Kantenwinkel, Ein- und Ausgang	0°
homogener radialer Bereich	220 mm
radiale Feldhomogenität bei $B = 1,1$ T	$\leq 3 \cdot 10^{-4}$

A.2 Quadrupole

Tabelle A.2: Maß- und Datenblatt der Quadrupole Q1 und Q2

Komponente	Wert
Polschuhlänge l	280 mm
Apertur a	35 mm
Zahl der Windungen pro Spule N	93

maximale Induktion (am Pol)	0,6 T
Abweichung vom Sollfeldgradienten	$\leq 2 \cdot 10^{-4}$

A.3 Sextupol

Tabelle A.3: Maß- und Datenblatt des Sextupols

Komponente	Wert
Polschuhlänge l	250 mm
Apertur a	100 mm
Zahl der Windungen pro Spule N	962
maximale Induktion (am Pol)	0,2 T
Abweichung vom Sollfeldgradienten	$\leq 2 \cdot 10^{-4}$

A.4 Abstände zwischen den Magneten

Tabelle A.4: Abstände zwischen den Magneten

Abstand zwischen	Wert
Probe und Quadrupol 1	950 mm
Quadrupol 1 und Quadrupol 2	160 mm
Quadrupol 2 und Dipol	840 mm
Dipol und Sextupol	400 mm
Sextupol und Detektor	1235 mm

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1.1:	Schematische Darstellung einer elastischen Streuung eines Projektils an einem Targetatom	6
Abbildung 1.2:	kinematisches Faktor als Funktion des Streuwinkels für a) RBS von Kohlenstoff und b) ERD von Chlor	7
Abbildung 1.3:	Graphische Veranschaulichung des differentiellen Wirkungsquerschnitts	7
Abbildung 1.4:	Bremsquerschnitt von Chlor in SiO ₂	11
Abbildung 1.5:	Prinzip der ERD-Messung	13
Abbildung 2.1:	Der QQDS Magnetspektrometer für die höchstauflösende ERD	17
Abbildung 2.2:	Fotographie a) der Streukammer b) des QQDS Magnetspektrometers (orange farben: Lafette)	18
Abbildung 2.3:	Partialdruckabnahme von Wasser nach Befüllen der Kühlfalle	19
Abbildung 2.4:	a)Wärmebild und b) Temperaturprofil einer Quarzprobe auf einem Probeträger mit ³⁵ Cl ⁴⁺ 20 MeV Strahl	21
Abbildung 2.5:	Fotografie der manuell einstellbaren Raumwinkelblende, die sich direkt vor den Quadrupolen (blau) befindet	26
Abbildung 2.6:	magnetische Anordnung mit Feldlinien (schwarze Linien) und Kraft (blaue Feile), die auf ein positiv geladenes Ion ausgeübt werden a) Quadrupol b) Sextupol	27
Abbildung 2.7:	Grafische Veranschaulichung der Chromatizitätskompensation mit der Kombination Quadrupol und Sextupol bei Dispersion $D \neq 0$ (die hellblauen Linien zeigen den ionenimpulsabhängigen Fokussierpunkt und die dunkelblaue und dunkelgrüne Linie den durch einen separat verwendeten Sextupol chromatizitätskompensierten Fokussierpunkt	28
Abbildung 2.8:	Aufbau des Fokalebenendetektors	35
Abbildung 2.9:	Fotografie des Detektorgehäuses (unten rechts), der vier Magnetkomponenten (blau) und der Targetkammer	36
Abbildung 2.10:	Blockschaltbild des positionsempfindlichen Proportionaldrahtes:	38
Abbildung 2.11:	Bremsvermögen von O und C in Isobutan bei $p = 35$ mbar	40
Abbildung 2.12:	zwei-dimensionale Histogrammdarstellung der Braggionisationskammersignale einer SiO ₂ -Probe und einem ³⁵ Cl ⁴⁺ (20 MeV) Stahl mit einen Kammerionisationsdruck von a) 30 mbar b) 55 mbar	43
Abbildung 3.1:	Ausbeute verschiedener Ladungszustände bei Streuung von Ar mit 1,2 MeV an Gold mit der höchstauflösenden ESA [CAR98]	46
Abbildung 3.2:	Reduzierte Breite der Ladungszustandsverteilung in Abhängigkeit von der Anzahl an gebundenen Elektronen [SCH ⁺ 01]	51

Abbildung 3.3:	Charakteristische Dicke für die Ladungszustandsrelaxation in Kohlenstoff	51
Abbildung 3.4:	berechnete Ladungszustandsverteilung von Cl mit der Primärenergie $E_0 = 20 \text{ MeV}$ und einem Anfangsladungszustand von $q = 4+$	52
Abbildung 3.5:	effektiver Ladungszustand q_{eff} für ein Chlorion mit einer Energie von 20 MeV (berechnet mit SRIM2010)	53
Abbildung 3.6:	Berechnete Differenz aus dem mittleren Ladungszustand [SCH ⁺ 04] und dem effektiven Ladungszustand [PIE68] für Sauerstoff, Chlor, Kupfer, Iod und Gold in einer Kohlenstoffprobe. Der Graph des Sauerstoffs ist im Diagramm kaum zu erkennen, da die Differenz sehr klein ist.	55
Abbildung 3.7:	Differenz aus mittlerem Ladungszustand und effektivem Ladungszustand als Funktion des mittleren Ladungszustands von Chlor als Inzidenz	56
Abbildung 3.8:	a) berechneter effektiver und mittlerer Ladungszustand in Abhängigkeit von der Tiefe im dynamischen Nichtgleichgewicht	57
Abbildung 3.9:	Ladungszustandsverteilung von Sauerstoffrecoils im dynamischen Gleichgewicht (Experimentelle Daten sind als Elemente und nach [SCH ⁺ 03] berechnete Ladungsverteilungen als Linien dargestellt)	59
Abbildung 3.10:	mittlerer Ladungszustand:	59
Abbildung 3.11:	Ladungszustands-Anteil $f(q)$ von Sauerstoff-Rückstoßionen in Siliziumdioxid im dynamischen Gleichgewicht:	61
Abbildung 3.12:	Ladungszustandsverteilungen a) bis c) für Sauerstoff bei verschiedenen Energien und ihre entsprechenden mittleren Ladungszustände d) bis f)	65
Abbildung 4.1:	Mikroskopaufnahmen einer Borschicht auf Silizium nach einer Bestrahlung von $2,2 \cdot 10^{14}$ Chlorionen/cm ²	69
Abbildung 4.2:	Wasserstoffkonzentration in Abhängigkeit der Tiefe von verschiedenen in dieser Arbeit genutzten Schichtsystemen; gemessen mit der Nuklear-Resonanz-Analyse $^1\text{H}(^{15}\text{N},\alpha\gamma)^{12}\text{C}$	70
Abbildung 4.3:	a) unbestrahlte Doppelschicht mit scharfer Grenzfläche	71
Abbildung 4.4:	a) Sputtern mit Einzelkollisionen und Stoßkaskaden	73
Abbildung 4.5:	Sauerstoffkonzentrationsprofile einer SiO ₂ -Schicht drei unabhängiger serieller Messungen auf derselben Probe	75
Abbildung 4.6:	gemessene quadratische Grenzflächendicke (Standardabweichung σ_{be}) von Sauerstoff an der Grenzfläche zwischen SiO ₂ und Si bei steigender Fluenz Φ mit einer linearen Fitfunktion ($k = 3,48 \cdot 10^{31} \text{ Atome}^2 \cdot \text{Ionen}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$ und $\sigma_{be}^2 = 1,28 \cdot 10^{31} \text{ Atome}^2 \cdot \text{cm}^{-4}$)	75
Abbildung 4.7:	a) Sauerstoffkonzentrationsprofile einer SiO ₂ Schicht bei steigen- der Fluenz	76
Abbildung 4.8:	Vergleich der Anzahl an Sauerstoffatomen unterschiedlich dicker SiO ₂ -Schichten bei steigender Fluenz und mit variierten Strahlparametern	77

Abbildung 4.9:	normierte Sauerstoffausbeute bei steigender Fluenz	78
Abbildung 4.10:	Menge an Sauerstoff einer SiO ₂ -Schicht; einmal ohne und einmal mit einer 10 nm Gold-Schicht an der Oberfläche	79
Abbildung 4.11:	Vergleich des Sauerstoffverlustes zwischen den Primärionen Chlor und Kupfer	80
Abbildung 4.12:	Anzahl Sauerstoffatome mit steigender Fluenz unter verschiedenen Einfallswinkeln α	81
Abbildung 4.13:	gemessener Sauerstoffgehalt unterschiedlicher Sauerstoffschichten bei steigender Fluenz und bei verschiedenen Strahlparametern	82
Abbildung 4.14:	grafische Darstellung der Probenbewegung während einer Messung	84
Abbildung 5.1:	Ausbeute an Sauerstoffrecoilionen des Ladungszustandes (LZ) $f(q) = +6$ einmal mit und einmal ohne Normierung der Ladungszustandsverteilung im dynamischen Nichtgleichgewicht	87
Abbildung 5.2:	Sauerstoffkonzentrationsprofil einer SiO ₂ -Probe a) ohne und b) mit Berücksichtigung des Ladungszustandsabhängigen Bremsvermögen	87
Abbildung 5.3:	Vergleich der modellierten Sauerstoffkonzentrationsprofile mit und ohne Rauheit einer Probe	89
Abbildung 5.4:	a) AFM-Bild der Oberfläche b) TEM- Bild der Grenzfläche der SiO ₂ -Referenzprobe	89
Abbildung 5.5:	Beispiel für Kleinwinkelstreuung	94
Abbildung 5.6:	Energieauflösung als Funktion des Spektrometeröffnungswinkels	97
Abbildung 5.7:	Tiefenauflösung der konventionellen ERD an der Oberfläche einer SiO ₂ -Schicht in Abhängigkeit vom Einfallswinkel (bei konstantem Streuwinkel) verschiedenen Primärionen	103
Abbildung 5.8:	Berechnete Tiefenauflösung in Abhängigkeit von der Tiefe bei verschiedenen ERD und höchstauflösenden ERD (HR-ERD) Geometrien	104
Abbildung 5.9:	Vergleichsmessungen einer 5,2 nm Si auf 4* (0,57 nm Ta _{0,085} Si _{0,915} /5,2 nm Si) aus Siliziumsubstrat a) HR-RBS [GRO ⁺ 04] b) MEIS [MOO ⁺ 01]	105
Abbildung 5.10:	Vergleichsmessungen einer Multischicht, bestehend aus 8 nm SiO ₂ , 5 nm Si ₃ N ₄ und 2 nm SiO ₂ auf einem Siliziumsubstrat [BRI ⁺ 06], die mittels a) HR-RBS b) SIMS und c) ToF-ERD analysiert wurden	106
Abbildung 6.1:	a) Sauerstoffprofil und b) TEM-Aufnahme einer SiO ₂ -Si ₃ N ₄ -SiO ₂ -Si Probe	108
Abbildung 6.2:	Sauerstoffprofil einer SiO ₂ -Si ₃ N ₄ O _x -SiO ₂ -Si Probe	108
Abbildung 6.3:	Bor-Implantationsprofil (Implantationsenergie 1 keV und Dosis 4,9 Bor-Ionen / cm ²)	109
Abbildung 6.4:	Bor-Implantationsprofile (gemessen mit höchstauflösender und konventioneller ERD, simuliert mit Crystal-TRIM)	110

- Abbildung 6.5:** Tiefenprofil a) von Sauerstoff einer ZnO-Schicht auf Si b) einer La_2O_3 -Schicht auf SiO_2 auf Si. (Die oberen Schichten beinhalten zudem Wasser.) 111
- Abbildung 6.6:** a) Sauerstofftiefenprofil einer ZrO_2 -Schicht auf TiN mit einer Rauheit, die im Bereich der Schichtdicke liegt (RMS = 1,1 nm) b) AFM-Bild der ZrO_2 -Probe 111

Tabellenverzeichnis

Tabelle 3.1:	ausgewählte Ladungszustandsrelaxationsparameter X	52
Tabelle 5.1:	theoretische Energieauflösungen der konventionellen und der höchstauflösenden ERD	102
Tabelle A.1:	Maß- und Datenblatt des Dipolmagneten	I
Tabelle A.2:	Maß- und Datenblatt der Quadrupole Q1 und Q2	I
Tabelle A.3:	Maß- und Datenblatt des Sextupols	II
Tabelle A.4:	Abstände zwischen den Magneten	II

Literaturverzeichnis

- [ALB06] J. ALBERS. *"Grundlagen integrierter Schaltungen: Bauelemente und Mikrostrukturierung"*. Verlag: Hanser Fachbuchverlag, ISBN-13: 978-3446406865, (2006)
- [ALL⁺59] K.W. ALLEN, F.A. JULIAN, W.D. ALLEN, A.E. PYRAH, J. BLEARS. *"The Tandem Generators of the United Kingdom Atomic Energy Authority"*. Nature. **184** Issue 4683, 303 (1959)
- [ALV51] L.W. ALVAREZ. *"Energy doubling in DC accelerators"*. Review of Scientific Instruments. **22** Issue 9, 705 (1951)
- [AMS⁺03] G. AMSEL, G. BATTISTIG, A. L'HOIR. *"Small angle multiple scattering of fast ions, physics, stochastic theory and numerical calculations"*. Nuclear Instruments and Methods. **B201**, 325 (2003)
- [AMS⁺05] G. AMSEL, G. BATTISTIG. *"The impact on materials science of ion beam analysis with electrostatic accelerators"*. Nucl. Instr. and Meth. **B 240**, 1 (2005)
- [AND⁺69] H.H. ANDERSEN, H. SIMONSEN, H. SØRENSEN. *"An experimental investigation of charge-dependent deviations from the Bethe stopping power formula"*. Nuclear Physics. **A125**, 171 (1969)
- [AND⁺80] H.H. ANDERSEN, F. BESENBACHER, P. LOFTAGER, W. MÖLLER. *"Large-Angle scattering of light ions in the weakly screened Rutherford region"*. Physical Review. **A21**, Number 6, 1891 (1980)
- [AND⁺06] R. ANDRZEJEWSKI, J. LUCAS, A. GUIRAO, N. GORDILLO, D. BOERMA. *"A wide-angle magnetic spectrograph of a novel design"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B249**, 939 (2006)
- [ARD⁺05] M. V. ARDENNE [HRSG], G. MUSIOL [HRSG], U. KLEMRADT [HRSG]. *"Effekte der Physik und ihre Anwendungen"*. Harri Deutsch, 3. überarbeitete, neu strukturierte und wesentlich erweiterte Auflage, ISBN 3-8171-1682-9 (2005)
- [ARN⁺96] W.M. ARNOLDBIK, W. WOLFSWINKEL, D.K. INIA, V.C.G. VERLEUN, S. LOBNER, J.A. REINDERS, F. LABOHM, D.O. BOERMA. *"A high resolution magnetic spectrograph for ion beam analysis"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B118**, 566 (1996)
- [ARN⁺03] W.M. ARNOLDBIK, N. TOMOZEIU, F.H.P.M. HABRAKEN. *"Electronic sputtering of thin SiO₂ films by MeV heavy ions"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B203**, 151 (2003)
- [ARN⁺05] W.M. ARNOLDBIK, N. TOMOZEIU, E.D. VAN HATTUM, R.W. LOF, A.M. VREDENBERG, F.H.P.M. HABRAKEN. *"High-energy ion-beam-induced phase separation in SiO_x films"*. Physical Review. **B71**, 125329 (2005)

- [ARN10] W.M. ARNOLDBIK. "*Private Kommunikation*". (2010)
- [ASS⁺82] J.M. ASSELINEAU, J. DUCHON, M. L'HARIDON, P. MOSRIN, R. REGIMBART, B. TAMAIN. "*Performance of a Bragg Curve Detector for heavy ion identification*". Nuclear Instruments and Methods. **204**, 109 (1982)
- [ASS92] W. ASSMANN. "*Ionization chamber for materials analysis with heavy ion beam*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B64**, 267 (1992)
- [ASS⁺94] W. ASSMANN, H. HUBER, C. STEINHAUSEN, M. DOBLER, H. GLÜCKLER, A. WEIDINGER. "*Elastic recoil detection analysis with heavy ions*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B89**, 131 (1994)
- [BAC⁺09] M. BACKMAN, F. DJURABEKOVA, O.H. PAKARINEN, K. NORDLUND, L.L. ARAUJO, M.C. RIDGWAY. "*Amorphization of Ge and Si nanocrystals embedded in amorphous SiO₂ by ion irradiation*". Physical Review. **B80**, 144109 (2009)
- [BAI⁺01] P. BAILEY, T.C.Q. NOAKES, C.J. BADDELEY, S.P. TEAR, D.P. WOODRUFF. "*Monolayer resolution in medium energy ion scattering*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B193**, 62 (2001)
- [BAN⁺04] S. BANERJEE, S. FERRARI, R. PIAGGE, S. SPANDONI. "*Determination of density profile of ultrathin SiO₂/Si₃N₄/SiO₂/Si(001) multilayer structures using x-ray reflectivity technique*". Applied Physics Letters. **84** Issue 19, 3798 (2004)
- [BAR⁺63] W.H. BARKAS, J.N. DYER, H.H. HECKMAN. "*Resolution of the Σ -Mass Anomaly*". Physical Review Letters. **11**, 26 (1963)
- [BAR72] E. BARON. "*Heavy-ion stripping by solid foils between 1 and 6 MeV/nucleon*". IEEE transactions on nuclear science. **NS19** Issue 2, 256 (1972)
- [BAR⁺75] E. BARON, B. DELAUNAY. "*Stripping of high-energy krypton ions by various solid materials*". Physical Review. **A12** Issue 1, 40 (1975)
- [BAR⁺77] D.M. BARRUS, R.L. BLAKE. "*Technique for producing ultrathin polypropylene films*". Review of Scientific Instruments. **48** Issue 2, 116 (1977)
- [BAR⁺97] N.P. BARRADAS, C. JEYNES, R.P. WEBB. "*Simulated annealing analysis of Rutherford backscattering data*". Applied Physics Letters. **71**, Issue 2, 291 (1997)
- [BAR⁺98] N.P. BARRADAS, P.K. MARRIOTT, C. JEYNES, R.P. WEBB. "*The RBS data furnace: Simulated annealing*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B36-138**, 1157 (1998)
- [BAR⁺06] L. BARDELLI, G. POGGI, NUCL-EX COLLABORATION. "*Digital-sampling systems in high-resolution and wide dynamic-range energy measurements: Finite time window, baseline effects, and experimental tests*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **A560**, 524 (2006)

- [BAR⁺08] N.P. BARRADAS, C. JEYNES. *"Advanced physics and algorithms in the IBA DataFurnace"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B266**, 1875 (2008)
- [BAR10] N.P. BARRADAS. *"Private Kommunikation"*. (2011)
- [BAU81] Y. BAUDINET-ROBINET. *"Equilibrium charge-state distributions of highly stripped ions in carbon foils"*. Nuclear Instruments and Methods. **190**, 197 (1981)
- [BAU82] Y. BAUDINET-ROBINET. *"Equilibrium charge-state distributions of heavy ions exiting carbon foils"*. Physical Review. **A26** Issue 1, 62 (1982)
- [BEN⁺92] A. BENYAGOUB, S. LÖFFLER, M. RAMMENSEE, S. KLAUMÜNZER, G. SAEMANN-ISCHENKO. *"Plastic deformation in SiO₂ induced by heavy-ion irradiation"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B65**, 228 (1992)
- [BER⁺98] A. BERGMAIER, G. DOLLINGER, C.M. FREY. *"A compact DE-Eres detector for elastic recoil detection with high sensitivity"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B136-138**, 638 (1998)
- [BES⁺80] F.BESENBACHER, J.U. ANDERSEN, E. BONDERUP. *"Straggling in energy loss of energetic hydrogen and helium ions"*. Nuclear Instruments and Methods. **168**, 1 (1980)
- [BET⁺66] H.D. BETZ, G. HORTIG, E. LEISCHNER, CH. SCHMELZER, B. STADLER, J. WEIHRAUCH. *"The average charge of stripped heavy ions"*. Physical Letters. **22** Issue 5, 643 (1966)
- [BET72] H.D. BETZ. *"Charge states and charge-changing cross sections of fast heavy ions penetrating through gaseous and solid media"*. Reviews of Modern Physics. **44** Issue 3, 465 (1972)
- [BIN⁺82] G. BINNIG, H. ROHRER. *"Scanning Tunnel Microscopy"*. Helvetica Physica Acta. **55** Issue 6, 726 (1982)
- [BIN⁺86] G. BINNIG, C.F. QUATE, CH. GERBER. *"Atomic Force Microscope"*. Physical Review Letters. **56** No 9, 930 (1986)
- [BIN⁺87] G. BINNIG, CH. GERBER, E. STOLL, T.R. ALBRECHT, C.F. QUATE. *"Atomic resolution with Atomic Force Microscope"*. Europhysics Letters. **3** Issue 12, 1281 (1987)
- [BIR05] M. BIRKHOLZ. *"Thin Film Analysis by X-Ray Scattering: Techniques for Structural Characterization"*. Verlag: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, ISBN-13: 978-3527310524, 1. Auflage (2005)
- [BLO33] F. BLOCH. *"Zur Bremsung rasch bewegter Teilchen beim Durchgang durch Materie"*. Annalen der Physik. **16**, 285 (1933)
- [BOE⁺97] D.O. BOERMA, W.M. ARNOLDBIK, N.M. KABACHNIK, V.A. KHODYREV. *"Charge-state distribution in close collisions of 3 MeV C²⁺ ions with Ag and Au atoms"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B122**, 181 (1997)

- [BOH48] N. BOHR. *"The penetration of atomic particles through matter"*. Det Kongelige. Danske Videnskabernes Selskab. Matematisk-fysiske Meddelelser. **18** Issue 8, (1948)
- [BOH⁺54] N. BOHR, J. LINDHARD. *"Electron capture and loss by heavy ions penetrating through matter"*. Det Kongelige. Danske Videnskabernes Selskab. Matematisk-fysiske Meddelelser. **28** Issue 7, (1954)
- [BOR⁺78] C.J. BORKOWSKI, M.K. KOPP. *"Recent Improvments to RC-Line encoded position-sensitive proportional counters"*. Journal of Applied Crystallography. **11** Issue OCT, 430 (1978)
- [BOU⁺06] M. EL BOUANANI, P. PELICO, A. RAZPET, I. ČADEŽ, M. BUDNAR, J. SIMČIČ, S. MARKELJ. *"Simple and accurate spectra normalization in ion beam analysis using a transmission mesh-based charge integration"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B243** Issue 2, 392 (2006)
- [BOZ⁺90] M. BOZOIAN, K.M. HUBBARD, M. NASTASI. *"Deviations from Rutherford-scattering cross sections"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B51**, 311 (1990)
- [BRA59] G.W. BRADY. *"A study of Amorphous SiO"*. Journal of Physical Chemistry. **63** Issue 7, 1119 (1959)
- [BRA⁺82] W. BRANDT, M. KITAGAWA. *"Effective stopping-power charges of swift ions in condensed matter"*. Physical Review. **B25** Issue 9, 5631 (1982)
- [BRI⁺88] L.B. BRIDWELL, H.J. HAY, L.F. PENDER, C.J. SOFIELD, P.B. TREACY. *"Excitation of Swift Heavy Ions in Foil Targets. IV Preequilibrium Energy Losses and Mean Charge States"*. Australian Journal of Physics. **41**, 681 (1988)
- [BRI⁺06] B. BRIJS, T. SAJAVAARA, S. GIANGRANDI, T. JANSSENS, T. CONRAD, K. ARSTILA, K. NAKAJIMA, K. KIMURA, A. BERGMAIER, G. DOLLINGER, A. VANTOMME, W. VANDERVORST.. *"The analysis of a thin SiO₂/Si₃N₄/SiO₂ stack: A comparative study of low-energy heavy ion elastic recoil detection, high-resolution Rutherford backscattering and secondary ion mass spectrometry"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B249**, 847 (2006)
- [BRO⁺56] C.P. BROWNE, W.W. BUECHNER. *"Broad-Range Magnetic Spectrograph"*. Review of Scientific Instruments. **27**, 899 (1956)
- [BRO⁺64] K. L. BROWN, R. BELBEOCH, P. BOUNIN. *"First- and Second-Order Magnetic Optics Matrix Equations for the Midplane of Uniform-Field Wedge Magnets"*. Review of Scientific Instruments. **35** Number 4, 481 (1964)
- [BRO⁺82] K. L. BROWN. *"A First- and Second-Order Matrix Theory for the Design of Beam Transport Systems and Charged Particle Spectrometers"*. Stanford Linear Accelerator Center Report. **75**, (1982)

- [BRO⁺98] I. K. BRONIĆ, B. GROSSWENDT. "*Gas amplification and ionization coefficients in isobutane and argon-isobutane mixtures at low gas pressures*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B142**, 219 (1998)
- [BRO⁺00] M.L. BRONGERSMA, E. SNOEKS, T. VAN DILLEN, A. POLMAN. "*Origin of MeV ion irradiation-induced stress changes in SiO₂*". Journal of Applied Physics. **88** Number 1, 59 (2000)
- [BRO⁺07] L.H.H. BRONGERSMA, M. DRAXLER, M. DE RIDDER, P. BAUER. "*Surface composition analysis by low-energy ion scattering*". Surface Science Reports. **62**, 63 (2007)
- [BRU⁺92] R. BRUNDLE, C. EVANS, S. WILSON. "*Encyclopedia of Materials Characterization: Surfaces, Interfaces, Thin Films (Materials Characterization Series)*". Verlag: Butterworth-Heinemann, ISBN-13: 978-0750691680, (1992)
- [BUB⁺02] H. BUBERT (HRSG.), H. JENETT (HRSG.). "*Surface and Thin Film Analysis: A Compendium of Principles, Instrumentation, and Applications*". Verlag: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, ISBN-13: 978-3527304585, 1. Auflage (2002)
- [BUN⁺49] O. Bunemann, T.E. Cranshaw, J.A. Harvey. "*Design of Grid ionization chambers*". Canadian Journal of Research Section A – Physical Sciences. **27** Issue 5, 191 (1949)
- [BÜR⁺08] W. BÜRGER, H. LANGE, V. PETR. "*A new method of improving the acceleration voltage stability of Van de Graaff accelerators*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **A586** Issue 2, 160 (2008)
- [BUS⁺80] F. BUSCH, W. PFEFFER, B. KOHLMAYER, D. SCHÜLL, F. PÜHLHOFFER. "*A Position-Sensitive Transmission Time Detector*". Nuclear Instruments and Methods. **171**, 71 (1980)
- [CAL10] CALOGIC CORPORATION. "*N-Channel JFET Switch 2N5434*"., Datasheet (2010)
- [CAN07] CANBERRA INDUSTRIES. "*Position Sensitive Pad Detectors - series PF/RT*". 800 Research Parkway, Meriden, CT 06450, USA. www.canberra.com, Datasheet (2007)
- [CAN07a] CANBERRA INDUSTRIES. "*Model 2003BT Silicon Surface Barrier Detector Preamplifier*". 800 Research Parkway, Meriden, CT 06450, USA. www.canberra.com, Datasheet (2007)
- [CAR98] H. D. CARSTANJEN. "*Ion beam analysis with monolayer depth resolution*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B136**, 1183 (1998)
- [CHU76] W.K. CHU. "*Calculation of energy straggling for protons and helium ions*". Physical Review. **A13** Issue 6, 2057 (1976)

- [COC33] J.D. COCKROFT. "*A magnet for X-ray spectroscopy*". Journal of Science Instruments. **10**, 71 (1933)
- [COP00] M. COPEL. "*Medium-energy ion scattering for analysis of microelectronic materials*". IBM Journal of Research and Development. **44**, Issue 4, 571 (2000)
- [COP⁺00] M. COPEL, M. GRIBELYUK, E. GUSEV. "*Structure and stability of ultrathin zirconium oxide layers on Si(001)*". Applied Physics Letters. **76**, Number 4, 436 (2000)
- [COP⁺01] M. COPEL, E. CARTIER, F.M. ROSS. "*Formation of a stratified lanthanum silicate dielectric by reaction with Si(001)*". Applied Physics Letters. **78**, Number 11, 1607 (2001)
- [COP⁺04] M. COPEL, M.C. REUTER, P. JAMISON. "*Interlayer composition of HfO₂/Si(001) films*". Applied Physics Letters. **85**, Number 3, 458 (2004)
- [CRE07] CreaTec Fischer & Co. GmbH. "*AFIF - Indium-free substrate holders*". Industriestraße 9, D-74391 Erligheim, Germany, (2007)
- [DAT⁺01] G. DATZMANN, G. DOLLINGER, C. GOEDEN, A. HAUPTNER, H.-J. KÖRNER, P. REICHART, O. SCHMELMER. "*The Munich microprobe SNAKE: First results using 20 MeV protons and 90 MeV sulfur ions*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B181**, 20 (2001)
- [DAY⁺54] I.E. DAYTON, F.C. SHOEMAKER, R.F. MOZLEY. "*The Measurement of Two-Dimensional Fields. Part II: Study of a Quadrupol Magnet*". Review of Scientific Instruments. **25** Number 5, 485 (1954)
- [DEV94] R.A.B. DEVINE. "*Macroscopic and microscopic effects of radiation in amorphous SiO₂*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B91**, 378 (1994)
- [DIN⁺99] DIN EN ISO 8785. "*Geometrische Produktspezifikation (GPS) - Oberflächenunvollkommenheiten - Begriffe, Definitionen und Kenngrößen*". ISO **8785** (1998), Deutsche Fassung EN ISO 8785 (1999)
- [DIN⁺08] DIN EN ISO 25178-2. "*Geometrische Produktspezifikation (GPS) - Oberflächenbeschaffenheit: Flächenhaft - Teil 2: Begriffe und Oberflächen-Kenngrößen*". ISO/DIS **25178-2**, Deutsche Fassung prEN ISO 25178-2 (2008)
- [DIN⁺10] DIN EN ISO 4287. "*Geometrische Produktspezifikation (GPS) - Oberflächenbeschaffenheit: Tastschnittverfahren - Benennungen, Definitionen und Kenngrößen der Oberflächenbeschaffenheit*". ISO **24287** (1997) + Cor 1 (1998) + Cor 2 (2005) + Amd 1 (2009), Deutsche Fassung EN ISO 4287 (1998) + AC (2008) + A1 (2009) (2010)
- [DIN⁺10a] B. DING, D. YU, F. RUAN, R. LU, C. SHAO, C. WAN, S. CHEN, X. CAI. "*Single- and double-electron processes in collisions of Xe²³⁺ ions with helium*". Physical Review. **A82**, 032703 (2010)

- [DMI⁺65] I.S. DMITRIEV, V.S. NIKOLAEV. *"Semi-empirical method for calculation of equilibrium distribution of charges in a fast-ion beam"*. Soviet Physics Jetp-USSR. **20** Issue 2, 409 (1965)
- [DOL⁺92] G. DOLLINGER, T. FAESTERMANN, P. MAIER-KOMOR. *"High resolution depth profiling of light elements"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B645**, 422 (1992)
- [DOL⁺04] G. DOLLINGER, A. BERGMAIER, L. GOERGENS, P. NEUMAIER, W. VANDERVORST, S. JAKSCHIK. *"High resolution elastic recoil detection"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B219**, 333 (2004)
- [DOL09] G. DOLLINGER. *"Private Kommunikation"*. (2009)
- [EGE09] R.F. EGERTON. *"Electron energy-loss spectroscopy in the TEM"*. Reports on Progress in Physics. **72** Issue 1, 016502 (2009)
- [EIC85] J. EICHLER. *"Relativistic eikonal theory of electron capture"*. Physical Review. **A32** Number 1, 112 (1985)
- [EIC07] J. EICHLER, T. STOHLKER. *"Radiative electron capture in relativistic ion-atom collisions and the photoelectric effect in hydrogen-like high-Z systems"*. Physics Reports-Review Section of Physics Letters. **439** Issue 1-2, 1 (2007)
- [END⁺92] T. ENDERS, M. RILLI, H.D. CARSTANJEN. *"A high-resolution electrostatic spectrometer for the investigation of near-surface layers in solids by high-resolution Rutherford backscattering with MeV ions"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B64**, 817 (1992)
- [ENG58] H. A. ENGE. *"Combined Magnetic Spectrograph and Spectrometer"*. Review of Scientific Instruments. **29** Number 10, 885 (1958)
- [ENG79] H. A. ENGE. *"Magnetic Spectrographs for nuclear-reaction studies"*. Nuclear Instruments and Methods. **162** Issue 1, 161 (1979)
- [FAS07] FAST COMTEC GMBH. *"MPA-3, Multiparameter Data Acquisition System, User Manual"*. Grünwalder Weg 28a, D-82041 Oberhaching, Germany. Version 1.71, (2007)
- [FAS07a] FAST COMTEC GMBH. *"Model 7074 Quad Analog-to-Digital Converter, User Manual"*. Grünwalder Weg 28a, D-82041 Oberhaching, Germany, (2007)
- [FEL⁺86] L.C. FELDMAN, J.W. MAYER. *"Fundamentals of Surface Thin Film Analysis"*. Verlag: Prentice Hall; Facsimile edition, ISBN-13: 978-0135005705, (1986)
- [FLE⁺65] R.L. FLEISCHER, P.B. PRICE, R.M. WALKER. *"Tracks of Charged Particles in Solids"*. Science. **149** Issue 3682, 383 (1965)
- [FLE⁺65a] R.L. FLEISCHER, P.B. PRICE, R.M. WALKER. *"Ion Explosion Spike Mechanism for Formation of Charged-Particle Tracks in Solids"*. Journal of Applied Physics. **36** Number 11, 3645 (1965)

- [FOR79] J.L.C. FORD. *"Position Sensitive Proportional Counters as Focal Plane Detectors"*. Nuclear Instruments and Methods. **162**, 277 (1979)
- [FRA⁺95] W. FRANK, H.J. THOMAS, A. SCHINDLER. *"Depth profiling by means of the combination of glancing incidence X-ray-fluorescence spectrometry with low-energy ion-beam etching technique"*. Spectrochimica Acta Part B-Atomic Spectroscopy. **50** Issue 3, 265 (1995)
- [FRI⁺77] G. FRICK, V. CHAKI, B. HEUSCH, C. RICAUD, P. WAGNER, E. BARON. *"Stripping experiments in carbon foils with heavy-ions in energy-range of 0.4 - 0.9 MeV/A"*. Revue de Physique Appliquee. **12** Issue 10, 1525 (1977)
- [FRI86] M. FRIEDRICH. *"Ionenoptische Untersuchungen am Rossendorfer Tandembeschleuniger EGP-10-1"*. Akademie der Wissenschaften der DDR, Zentralinstitut für Kernforschung Rossendorf bei Dresden. **593**, (1986)
- [FUL79] H. W. FULBRIGHT. *"Ionization Chambers"*. Nuclear Instruments and Methods. **162**, 21 (1979)
- [GEI09] H. GEIGER. *"On a diffuse refelction of the alpha-particles"*. Proceedings of the Royal Society of London Series A-Containing Papers of a Mathematical and Physical Character. **82**, 495 (1909)
- [GIL81] H.J. GILS.. *"Die Magnete des Spektrographen "Little John" - Technische Daten und Magnetfeldeigenschaften"*. Primärbericht Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH 11.01.01P14S (1981)
- [GIL⁺89a] H.J. GILS, J. BUSCHMANN, S. ZAGROMSKI, J. KRISCH, H. REBEL. *"The QQDS magnetic spectrograph "Little John" at the Karlsruhe cyclotron I. Design and construction"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **A276**, 151 (1989)
- [GIL⁺89b] H.J. GILS, J. BUSCHMANN, S. ZAGROMSKI, J. KRISCH, H. REBEL. *"The QQDS magnetic spectrograph "Little John" at the Karlsruhe cyclotron II. Experimental procedures and performance"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **A276**, 169 (1989)
- [GOL⁺02] J. GOLDSTEIN, D.E. NEWBURY, D.C. JOY, C.E. LYMAN, P. ECHLIN, E. LIFSHIN, L.C. SAWYER, J.R. MICHAEL. *"Scanning Electron Microscopy and X-ray Microanalysis "*. Verlag: Springer Netherlands, ISBN-13: 978-0306472923, (2002)
- [GRA67] R.J. VAN DE GRAAFF. *"High voltage particle accelerators using charge transfer processes"*. United States Patent O. **14**, 3353107 (1967)
- [GRA07] D. GRAMBOLE. *"Private Kommunikation"*. (2007)
- [GRI⁺82] G.W. GRIME, F. WATT, G.D. BLOWER, J. TAKACS. *"Real and parasitic aberations of quadrupole probe-forming systems"*. Nuclear Instruments and Methods. **197**, 97 (1982)

- [GRÖ⁺01] R. GRÖTZSCHEL, C. KLEIN, O. KRUSE. *"The rossendorf broad-range magnetic spectrometer for high resolution RBS and NRA"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B183**, 3 (2001)
- [GRÖ⁺04] R. GRÖTZSCHEL, C. KLEIN, M. MÄDER. *"RBS with high depth resolution using small magnetic spectrometers"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B219**, 344 (2004)
- [GRÖ07] R. GRÖTZSCHEL. *"Private Kommunikation"*. (2007)
- [GRÖ09] R. GRÖTZSCHEL. *"Private Kommunikation"*. (2009)
- [GRU⁺82] C.R. GRUHN, M. BINIMI, R. LEGRAIN, R. LOVEMAN, W. PANG, M. ROACH, D.K. SCOTT, A. SHOTTER, T.J. SYMONS, J. WOUTERS, M. ZISMAN, R. DEVRIES, Y.C. PENG, W. SONDEHEIM. *"Bragg Curve Spectroscopy"*. Nuclear Instruments and Methods. **196**, 33 (1982)
- [GRÜ⁺04] F. GRÜNER, F. BELL, W. ASSMANN, M. SCHUBERT. *"Integrated Approach to the Electronic Interaction of Swift Heavy Ions with Solids and Gases"*. Physical Review Letters. **93** Issue 21, Article Number 213201 (2004)
- [GUS⁺00] E.P. GUSEV, M. COPEL, E. CARTIER, I.J.R. BAUMVOL, C. KRUG, M.A. GRIBELYUK. *"High-resolution depth profiling in ultrathin Al₂O₃ films on Si"*. Applied Physics Letters. **76**, 175 (2000)
- [HAR⁺96] B. HARTMANN, S. KALBITZER, CH. KLATT. *"Energy widths of ion beam from a tandem accelerator"*. Nuclear Instruments and Methods. **B113** Issue 1-4, 50 (1996)
- [HAR⁺06] R. HARTMANN, W. BUTTLER, H. GORKE, S. HERRMANN, P. HOLL, N. MEIDINGER, H. SOLTAU, L. STRÜDER. *"A high-speed pnCCD detector system for optical applications"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **A5683**, 118 (2006)
- [HAR09] R. HARTMANN. *"Private Kommunikation"*. (2010)
- [HAL⁺78] P.M. HALL, J.M. MORABITO. *"Compositional depth profiling by Auger-Electron Spectroscopy"*. CRC Critical Review in Solid State and Materials Sciences. **8** Issue 1, 53 (1978)
- [HAM⁺78] M. HAMASAKI, T. ADACHI, S. WAKAYAMA, M. KIKUCHI. *"Crystallographic study of semi-insulating polycrystalline silicon (SIPOS) doped with Oxygen-atoms"*. Journal of Applied Physics **49** Issue 7, 3987, (1978)
- [HAM⁺91] D. HAMANN, M. HIETSCHOLD. *"Raster-Tunnel-Mikroskopie"*. Verlag: Akademie Verlag, Berlin, ISBN-10: 3-05-501272-0, (1991)
- [HAM99] S. HAMILTON. *"Taking Moore's law into the next century"*. Computer **32** Issue 1, 43, (1999)
- [HAN09] D. HANF. *"Private Kommunikation"*. (2009)

- [HAY⁺84] H.J. HAY, L.F. PENDER, P.B. TREACY. *"Pre-equilibrium charge states of swift chlorine ions in solids"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B2**, 505 (1984)
- [HEN⁺89] E. HENTSCHEL, R. KOTTE, H.G. ORTLEPP, F. STARY, D. WOHLFARTH. *"Performance of a Bragg ionization chamber for depth profiling and surface analysis"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B43**, 82 (1989)
- [HER⁺95] F. HERRMANN, D. GRAMBOLE. *"The new Rossendorf nuclear microprobe"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B104**, 26 (1995)
- [HIN⁺98] B.J. HINDS, F. WANG, D.M. WOLFE, C.L. HINKLE, G. LUCOVSKY. *"Investigation of postoxidation thermal treatments of Si/SiO₂ interface in relationship to the kinetics of amorphous Si suboxide decomposition"*. Journal of Vacuum Science & Technology. **B16** Issue 4, 2171 (1998)
- [HIR⁺78] J.K. HIRVONEN, W.H. LUCKE. *"Nuclear Reaction Analysis of 16O concentration profiles with high-resolution magnetic spectrometer"*. Nuclear Instruments and Methods. **149**, 295 (1978)
- [HOH⁺03] A. HOHL, T. WIEDER, P.A. VAN AKEN, T.E. WEIRICH, G. DENNINGER, M. VIDAL, S. OSWALD, C. DENEKE, J. MAYER, H. FUESS. *"An interface cluster mixture model for the structure of amorphous silicon monoxide (SiO)"*. Journal of Non-Crystalline Solids. **320** Issue 1-3, 255 (2003)
- [HÖN⁺10] P. HÖNICKE, B. BECKHOFF, M. KOLBE, D. GIUBERTONI, J VAN DEN BERG, G. PEPPONI. *"Depth profile characterization of ultra shallow junction implants"*. Analytical and Bioanalytical Chemistry. **396** Issue 8, 2825 (2010)
- [HUT08] J. HUTSCH. *"Private Kommunikation"*. (2008)
- [ICH⁺05] C. ICHIHARA, A. KOBAYASHI, K-I. INOUE, K. KIMURA. *"A new spectrometer for Rutherford backscattering spectrometry"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B229**, 527 (2005)
- [IMA⁺05] M. IMAI, M. SATAKA, K. KAWATSURA, K. TAKAHIRO, K. KOMAKI, H. SHIBATA, H. SUGAI, K. NISHIO. *"Charge state distribution and its equilibration of 2 MeV/u sulfur ions passing through carbon foils"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **230**, 63 (2005)
- [ISA07] ISABELLENHÜTTE HEUSLER GMBH & CO KG. *"ISAOHM Datenblatt"*. Eibacher Weg 3-4, D-35683 Dillenburg, Deutschland. (2007)
- [IWA98] H. IWAI. *"Downsizing of silicon MOSFETs beyond 0.1 μm"*. Microelectronics Journal. **29** Issue 10, 671 (1998)
- [JOH⁺92] R.E. JOHNSON, B.U.R. SUNDQVIST. *"Electronic sputtering: From atomic physics to continuum-mechanics"*. Physics Today. **45** Issue 3, 28 (1992)
- [KHA⁺69] G.S. KHANDELWAL, B.H. CHOI, E. MERZBACHER. *"Tables for Born Approximation Calculations of K- and L-shell ionization by protons and"*

- other charged particles*". Atomic Data and Nuclear Data Tables. **1**, 103 (1969)
- [KIM⁺94] K. KIMURA, K. OHSHIMA, M. MANNAMI. "*Monolayer Analysis in Rutherford Backscattering Spectroscopy*". Applied Physics Letters. **64**, 2232 (1994)
- [KIM⁺96] K. KIMURA, M-H MANNAMI. "*RBS with monolyer resolution*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B113**, 270 (1996)
- [KLE03] C. KLEIN. "*Hochauflösende Rutherford-Streuspektrometrie mit schweren Ionen*". Dissertation, TU-Dresden (2003)
- [KLE05] K. KLEINKNECHT. "*Detektoren für Teilchenstrahlung*". Verlag: Vieweg+Teubner, ISBN-13: 978-3835100589, (2005)
- [KOT⁺87] R. KOTTE, H.J. KELLER, H.G. ORTLEPP, F. STARY. "*Bragg Peak Spectroscopy of low-energy heavy ions*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **A257**, 244 (1987)
- [KOT05] C. KOTTLER. "*Dünnschichtanalyse mittels Vorwärtsstreuung bei tiefer Energie*". Dissertation, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich (2005)
- [KRE⁺94] U. KREISSIG, R. GRÖTZSCHEL, R. BEHRISCH. "*Simultaneous measurement of the hydrogen isotopes H, D, T and ³He with HIERD*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B85**, 71 (1994)
- [LAN⁺98] W.A. LANFORD, B. ANDERBERG, H. ENGE, B. HJORVARSSON. "*Compact broar range magnetic spectrometer for use in ion beam analysis*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B136**, 1177 (1998)
- [LEC⁺76] J. L'ECUYER, C. BRASSARD, C. CARDINAL, J. CHABBAL, L. DESCHENES, J.P. LABRIE, B. TERREAULT, J.G. MARTEL, R. ST.-JACQUES. "*An accurate and sensitive method for the determination of the depth distribution of light elements in heavy materials*". Journal of Applied Physics. **47** Issue 1, 381 (1976)
- [LEO⁺98] A. LEO, S. MELKI, D. LISFI, J.P. GRANDIN, P. JARDIN, M.G. SURAUD, A. CASSIMI. "*Charge state distributions of swift heavy ions behind various solid targets ($36 \leq Z_p \leq 92$, $18 \text{ MeV/u} \leq Z_p \leq 44 \text{ MeV/u}$)*". Atomic Data and Nuclear Data Tables. **69**, 217 (1998)
- [LIF⁺04] A.F. LIFSCHITZ, N. R. ARISTA. "*Effective charge and the mean charge of swift ions in solids*". Physical Review. **A69**, 012902 (2004)
- [LIN76] J. LINDHARD. "*The Barkar effect - or Z13, Z14-corrections to stopping of swift charged particles*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **132**, 1 (1976)
- [MAG⁺82] C.W. MAGEE, R.E. HONIG. "*Depth profiling by SIMS – Depth resolution, dynamic range and sensitivity*". Surface and Interface Analysis. **4** Issue 2, 35 (1982)

- [MAR⁺75] A.D. MARWICK, P. SIGMUND. *"Small-angle multiple scattering of ions in the screened coulomb region 2. Lateral spread"*. Nuclear Instruments and Methods. **126**, 317 (1975)
- [MAR⁺96] C.H.M. MARÉE, A.M. VREDENBERG, F.H.P.M. HABRAKEN. *"Mechanism of MeV ion induced hydrogen depletion from organic layers"*. Materials Chemistry and Physics. **46**, 198 (1996)
- [MAR06] N. MARKS. *"Conventional Magnets for Accelerators"*. MDLS/CCLRS Lecture to Cockcroft Institute. (2006)
- [MAT⁺79] M. MATOBA, K. TSUJI, K. MARUBAYASHI, T. SHINTAKE. *"One meter single-wire position sensitive proportional counter for low ionization particles"*. Nuclear Instruments and Methods. **165**, 469 (1979)
- [MAT⁺81] M. MATOBA, K. TSUJI, K. MARUBAYASHI, T. SHINTAKE, H. IKEGAMI, T. YAMAZAKI, S. MORINOBU, I. KATAYAMA, M. FUJIWARA, Y. FUJITA. *"A 1.5 m single-wire position-sensitive proportional counter for a magnetic spectrograph with a large dispersion"*. Nuclear Instruments and Methods. **180**, 419 (1981)
- [MAT⁺82] M. MATOBA, T. SAKAE, T. YAMAZAKI, S. MORINOBU, I. KATAYAMA, M. FUJIWARA, Y. FUJITA, H. IKEGAMI, H. IIDA, Y. AOKI, Y. TOBA, S. KUNORI, K. NAGANO, K. HASHIMOTO, K. YAGI. *"Characteristics and Construction of charge-division type single-wire position-sensitive proportional counter"*. Nuclear Instruments and Methods. **196**, 257 (1982)
- [MAT⁺84] N. MATSUNAMI, Y. YAMAMURA, Y. ITIKAWA, N. ITOH, Y. KAZUMATA, S. MIYAGAWA, K. MORITA, R. SHIMIZU, H. TAWARA. *"Energy dependence of the ion-induced sputtering Yields of monatomic solids"*. Atomic Data and Nuclear Data Tables. **31**, 1 (1984)
- [MAT⁺94] T. MATSUO, T. TONUMA, H. KUMAGAI, H. TAWARA. *"Cross section of Neⁱ⁺ recoil-ion production through pure ionization, electron loss, and electron capture or projectiles in 1.05-MeV/amu Ar^{q+} + Ne collisions"*. Physical Review. **A50**, 1178 (1994)
- [MAY⁺78] J.W. MAYER, E. RIMINI. *"Ion Beam Handbook for Material Analysis"*. Academic Press. ISBN-10: 0124808603, (1978)
- [MCG⁺81] J.H. MCGUIRE, N. STOLTERFOHT, P.R. SIMONY. *"Screening and antiscreeing by projectile electrons in high-velocity atomic collisions"*. Physical Review. **A24** Issue 1, 97 (1981)
- [MEF⁺98] A. MEFTAH, M. DJEBARA, N. KHALFAOUI, M. TOULEMONDE. *"Sputtering of vitreous SiO₂ and Y₃Fe₅O₁₂ in the electronic stopping power region: A thermal spike description"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B146**, 431 (1998)
- [MEI⁺95] J. MEIJER, A. STEPHAN, J. ADAMCZEWSKI, H. RÖCKEN, H.H. BUKOW, C. ROLFS. *"Superconducting microprobe at Bochum"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B99**, 423 (1995)

- [MÖL⁺78] W. MÖLLER, J.S. WILLIAMS. *"The lateral spread of MeV Helium ions in carbon, Aluminium, and Copper"*. Nuclear Instruments and Methods. **157**, 205 (1978)
- [MÖL⁺84] W. MÖLLER, W. ECKSTEIN. *"TRIDYN - A TRIM simulation code including dynamic composition changes"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B2**, 814 (1984)
- [MÖL⁺85] W. MÖLLER, W. ECKSTEIN. *"Ion mixing and recoil implantation simulations by means of TRIDYN"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B7/8**, 645 (1985)
- [MÖL⁺88] W. MÖLLER, W. ECKSTEIN, J.P. BIERSACK. *"TRIDYN - Binary collision simulation of atomic collisions and dynamic composition changes in solids"*. Computer Physics Communications. **51**, 355 (1988)
- [MOO⁺01] D.W. MOON, H.I. LEE, K.J. KIM, T. NISHIMURA, Y. KIDO. *"Estimation of the electronic straggling using delta-doped multilayers"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B183**, 10 (2001)
- [NEE07] C. NEELMEIJER. *"Private Kommunikation"*. (2007)
- [NEU⁺79] H.G. NEUMANN, T. ROY. *"Diffraction investigation on the structure of SiO_x"*. Physica Status Solidi A-Applied Research. **54**, K107 (1979)
- [NI⁺81] J. Ni, E. Arnold. *"Electrical-conductivity of semi-insulating polycrystalline silicon and its dependence upon oxygen-content"*. Applied Physics Letters. **39** Issue 7, 554 (1981)
- [NIK⁺68] V.S. NIKOLAEV, I.S. DMITRIEV. *"On the equilibrium charge distribution in heavy element ion beams"*. Physics Letter. **A28** Issue 4, 277 (1968)
- [NIS⁺98] T. NISHIMURA, A. IKEDA, Y. KIDO. *"A new toroidal electrostatic analyzer and application to surface analysis"*. Review of Science Instruments. **69** Number 4, 1671 (1998)
- [NOR60] L.C. NORTHCLIFFE. *"Energy Loss and Effective Charge of Heavy Ions in Aluminium"*. Physical Review. **120**, 1744 (1960)
- [NOR63] L.C. NORTHCLIFFE. *"Passage of heavy ions through matter"*. Annual Review of Nuclear Science. **13**, 67 (1963)
- [OCO⁺03] D.J. O'CONNOR (HRSG.), R.S.C. SMART (HRSG.), B.A. SEXTON (HRSG.). *"Surface Analysis Methods in Materials Science (Springer Series in Surface Sciences)"*. Verlag: Springer Berlin Heidelberg, ISBN-13: 978-3642074585, (2009)
- [OGA⁺93] H. OGAWA, I. KATAYAMA, I. SUGAI, Y. HARUYAMA, M. SAITO, K. YOSHIDA, M. TOSAKI, H. IKEGAMI. *"Charge state dependent energy loss of high velocity oxygen ions in the charge state non-equilibrium region"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B82**, 80 (1993)
- [ORT⁺89] H.G. ORTLEPP, A. ROMAGUERA. *"Real time digital processing of Bragg Ionization chamber signals"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **A276**, 500 (1989)

- [OSI⁺06] T. OSIPOWICZ, H.L. SENG, T.K. CHAN, B. HO. *"The CIBA high resolution RBS facility"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B249**, 915 (2006)
- [OST⁺05] V. OSTASHKO, A. TUMINO, S. ROMANO. *"A working with a Silicon Position Sensitive Detector (dE%E calibration and isotopes separation"*. *ArXiv Nuclear Experiments*. **0501001**, (2005)
- [OWE⁺68] R.B. OWEN, M.L. AWCOCK. *"One and two dimensional sensing semiconductor detectors"*. IEEE Transactions on Nuclear Science. **NS15**, Issue 3, 290 (1968)
- [PAI⁺85] B.M. PAINE, R.S. AVERBACK. *"Ion beam mixing: Basic experiments"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B7/8**, 666 (1985)
- [PÁS⁺90] P. PÁSZTI, A. MANUABA, C. HAJDU, A.A. MELO, M.F. DA SILVA. *"Current measurement on MeV energy ion beam"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B47**, 187 (1990)
- [PAU⁺01] H. PAUL, A. SCHINNER. *"An empirical approach to the stopping power of solids and gases for ions from 3Li to 18Ar"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B179**, 299 (2001)
- [PAU⁺02] H. PAUL, A. SCHINNER. *"An empirical approach to the stopping power of solids and gases for ions from 3Li to 18Ar -Part II"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B195**, 166 (2002)
- [PEN61] S. PENNER. *"Calculations of Properties of Magnetic Deflection Systems"*. Review of Scientific Instruments. **32** Number 2, 150 (1961)
- [PEN⁺83] L.F. PENDER, H.J. HAY. *"Preequilibrium Charge Exchange of 130-MeV Br Ions Incident on Thin Carbon Foils"*. Physical Review Letters. **50** Number 24, 1907 (1983)
- [PET78] K.E. PETERSEN. *"Dynamic Micromechanics on Silicon: Techniques and Devices"*. IEEE Transactions on Electron Devices. **25**, 1241 (1978)
- [PHI71] H.R. PHILIPP. *"Optical Properties of non-crystalline Si, SiO, SiO_x and SiO₂"*. Journal of Physics and Chemistry of Solids. **32** Issue 8, 1935 (1971)
- [PIE⁺68] T.E. PIERCE, M. BLANN. *"Stopping Powers and Ranges of 5-90-MeV S³², Cl³⁵, Br⁷⁹, and I¹²⁷ Ions in H₂, He, N₂, Ar, and Kr: A Semiempirical Stopping Power Theory for Heavy Ions in Gases and Solids"*. Physical Review. **173**, 390 (1968)
- [POL⁺09] T.J. POLLOCK, J.A. HAAS, G.M. KLODY. *"New High Resolution RBS System"*. Application of Accelerators in Research and Industry. **1099**, 323 (2009)
- [POS94] M. POSSELT. *"Crystal-trim and its application to investigations on channelling effects during ion implantation"*. Radiation Effects and Defects in Solids. **130**, 87 (1994)

- [QUA⁺79] U. QUADE, K. RUDOLPH, G. SIEGERT. "*A high resolution ionisation chamber tested with fission products of ²³⁵U*". Nuclear Instruments and Methods. **164**, 435 (1979)
- [RAD74] V. RADEKA. "*Signal, noise and resolution in position-sensitive detectors*". IEEE Transactions on Electron Science. **NS21**, 51 (1974)
- [RAD⁺88] V. RADEKA, S. RESCIA. "*Speed and noise limits in ionization chamber calorimeters*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **A265**, 228 (1988)
- [ROB02] J. ROBERTSON. "*Diamond-like amorphous carbon*". Materials Science and Engineering Reports: A Review Journal. **R37**, 129 (2002)
- [RUT11] E. RUTHERFORD. "*The scattering of α and β particles by matter and the structure of the atom*". Philosophical Magazine. Series **6** Volume 21 Issue 125, 669 (1911)
- [SAN⁺00] G.M. SANTOS, J.C. ACQUADRO, P.R.S. GOMES, R.M. ANJOS, R.L. NETO, N. ADDED, N.H. MEDINA, N. CARLIN, M.M. COIMBRA, M.L. DI TADA, R.G. CRESSWELL, L.K. FIFIELD. "*The Brazilian Bragg curve detector built for AMS studies*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B172**, 310 (2000)
- [SAN⁺08] T. SANAMI, M. HAGIWARA, T. OISHI, M. BABA, M. TAKADA. "*A Bragg curve counter with an active cathode to improve the energy threshold in fragment measurements*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **A589**, 193 (2008)
- [SAY77] R.O. SAYER. "*Semi-empirical formulas for heavy-ion stripping data*". Revue de Physique Appliquée. **12**, 1543 (1977)
- [SCH49] O. SCHERZER. "*The theoretical resolution limit of the Electron Microscope*". Journal of Applied Physics. **20** Issue 1, 20 (1949)
- [SCH⁺82] CH. SCHIESSL, W. WAGNER, K. HARTEL, P. KIENLE, H.J. KÖRNER, W. MAYER, K.E. REHM. "*A Bragg-Curve Spectroscopy Detector*". Nuclear Instruments and Methods **192**, 291 (1982)
- [SCH⁺01] G. SCHIWETZ, P.L. GRANDE. "*Improved charge-state formulas*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research **B175-177**, 125 (2001)
- [SCH⁺04] G. SCHIWETZ, K. CZERSKI, M. ROTH, F. STAUFENBIEL, P.L. GRANDE. "*Femtosecond dynamics – snapshots of the early ion-track evolution*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research **B226**, 683 (2004)
- [SCH⁺04a] B. SCHATAT, W. BOLSE. "*Fast heavy ion induced interface mixing in thin-film systems*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research **B225**, 105 (2004)
- [SHA⁺99] T. SHANLEY, D. ANDERSON, MINDSHARE INC.. "*PCI System Architecture - Fourth Edition*". Verlag: Addison-Wesley Professional, ISBN-13: 978-0201309744, 4. Ausgabe (1999)

- [SHE⁺85] N.J. SHENHAV, H. STELZER. "The mass dependence of the signal peak height of a Bragg curve ionization chamber". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research **228**, 359 (1985)
- [SHI⁺82] K. SHIMA, T. ISHIHARA, T. MIKUMO. "Empirical formula for the average equilibrium charge-state of heavy ions behind various foils". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **200** Issue 2-3, 605 (1982)
- [SHI⁺83] K. SHIMA, T. ISHIHARA, T. MIYOSHI, T. MIKUMO. "Equilibrium charge-state distribution of 35 – 146 MeV Cu ions behind carbon foils". Physical Review. **A28** Issue, 2162 (1983)
- [SHI⁺86] K. SHIMA, T. MIKUMO, H. TAWARA. "Equilibrium charge state distribution of ions ($Z \geq 4$) after passing through foils: compilation of data after 1972". Atomic Data and Nuclear Data Tables. **34**, 357 (1986)
- [SHI⁺92] K. SHIMA, N. KUNO, M. YAMANOUCHI, H. TAWARA. "Equilibrium charge fractions of ions of $Z = 4-92$ emerging from a carbon foil". Atomic Data and Nuclear Data Tables. **51**, 173 (1992)
- [SIG69] P. SIGMUND. "Theory of Sputtering. I. Sputtering Yield of Amorphous and Polycrystalline Targets". Physical Review. **184** Number 2, 184 (1969)
- [SIG⁺74] P. SIGMUND, K.B. WINTERBON. SCHINNER. "Small-angle multiple scattering of ions in the screened coulomb region 1. Angular distributions". Nuclear Instruments and Methods. **119**, 541 (1974)
- [SIG⁺78] P. SIGMUND, J. HEINEMEIER, F. BESENBACHER, P. HVELPLUND, H. KNUDSEN. "Small-angle multiple scattering of ions in the screened coulomb region 3. Combined Angular and Lateral Spread". Nuclear Instruments and Methods. **150**, 221 (1978)
- [SIG⁺02] P. SIGMUND, A. SCHINNER. "Binary theory of electronic stopping". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B195**, 64 (2002)
- [SIM07] D. DAHL. "SIMION Version7". Idaho National Labs. (2007)
- [SNO⁺94] E. SNOEKS, A. POLMAN, C.A. VOLKERT. "Densification, anisotropic, and plastic flow of SiO₂ during MeV heavy ion irradiation". Applied Physics Letters. **65** Issue 19, 2487 (1994)
- [SOF⁺80] C.J. SOFIELD, N.E.B. COWERN, J.M. FREEMAN. "Charge-exchange effects in energy-loss straggling". Nuclear Instruments and Methods. **170**, 221 (1980)
- [SOF⁺80] C.J. SOFIELD, N.E.B. COWERN, J.M. FREEMAN. "On a reported discrepancy between predicted and observed energy-loss straggling of fully stripped ions". Nuclear Instruments and Methods. **170**, 611 (1980)
- [STU⁺97] F. STUDER, M. HERVIEU, J.-M. COSTANTINI, M. TOULEMONDE. "High resolution electron microscopy of tracks in solids". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B122**, 449 (1997)

- [SZE95] G. SZENES. "*General features of latent track formation in magnetic insulators irradiated with swift heavy ions*". Physical Review. **B51**, Number 13, 8026 (1995)
- [SZE02] G. SZENES. "*Thermal spike analysis of interface mixing induced by swift heavy ions*". Applied Physics Letters. **81**, Number 24 4622 (2002)
- [SZI+95] E. SZILÁGYI, F. PÁSZTI, G. AMSEL. "*Theoretical approximations for depth resolution calculations in IBA methods*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B100**, 103 (1995)
- [TES+95] J.R. TESMER, M. NASTASI, J.C. BARBOUR, C.J. MAGGIORE, J.W. MAYER. "*Handbook of Modern Ion Beam Materials Analysis.*". Verlag: Materials Research Society, ISBN-10: 1-55899-254-5, (1995)
- [TO+76] K.X. TO, R. DROUIN. "*Etude des distributions des états de charge à l'équilibre d'ions énergétiques de bore dans le carbone et observation de niveaux d'énergie doublement excités du B III*". Physica Scripta. **14**, 277 (1976)
- [TO+79] K.X. TO, R. DROUIN. "*Determination semi-empirique des états de charges d'un faisceau d'ions rapides ($Z \leq 18$)*". Nuclear Instruments and Methods. **160**, 461 (1979)
- [TOU+96] M. TOULEMONDE, C. DUFOUR, Z. WANG, E. PAUMIER. "*Atomic and cluster ion bombardment in the electronic stopping power regime: A thermal spike description*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B112**, 26 (1996)
- [TOU+96a] M. TOULEMONDE, J.M. COSTANTINI, C. DUFOUR, A. MEFTAH, E. PAUMIER, F. STUDER. "*Track creation in SiO_2 and $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$ by swift heavy ions: a thermal spike description*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B116**, 37 (1996)
- [TOU06] M. TOULEMONDE. "*Irradiation by swift heavy ions: Influence of the non-equilibrium projectile charge state for near surface experiments*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B250**, 263 (2006)
- [TRI+97] A. TRIPATHI, S. MANDAL, D.O. KATARIA, D.K. AVASTHI, S.K. DATTA. "*A Bragg curve spectroscopy detector for EDRA studies*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B129**, 423 (1997)
- [TRO10] TROTEC GMBH & CO. KG. "*IC 100 Datenblatt*". Grebbener Str. 7, 52525 Heinsberg-4, Deutschland. (2010)
- [VAB07] Vab Vakuum-Anlagenbau GmbH. "*Präzisions UHV-Manipulator*". Marie-Curie-Straße 11, D-25337 Elmshorn, Germany, (2007)
- [VEN00] J.A. VENABLES. "*Introduction to Surface and Thin Film Processes*". Verlag: Cambridge University Press, ISBN-13: 978-0521785006, (2000)
- [VIC+09] J.C. VICKERMAN (HRSG.), I. GILMORE (HRSG.). "*Surface Analysis: The Principal Techniques*". Verlag: John Wiley & Sons, ISBN-13: 978-0470017647, (2009)

- [VIE10] M. VIELUF. *"Hochauflösende Rutherford-Streuspektrometrie zur Untersuchung von ZrO₂-Schichtwachstum im Anfangsstadium"*. Dissertation, TU-Dresden (2010)
- [WAN⁺96] Z.G. WANG, C. DUFOUR, B. CABEAU, J. DURAL, G. FUCHS, E. PAUMIER, F. PAWLAK, M. TOULEMONDE. *"Velocity effect on the damage creation in metals in the electronic stopping power regime"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B107**, 175 (1996)
- [WAN09] Y. WANG, M. NASTASI. *"Handbook of Modern Ion Beam Materials Analysis"*. Verlag: Cambridge University Press, ISBN-13: 978-1605112152, (2009)
- [WAT⁺06] J.F. WATTS, J. WOLSTENHOLME. *"Introduction to Sims for Surface and Thin Film Analysis"*. Verlag: Wiley-Blackwell, ISBN-13: 978-0470091333, (2006)
- [WIE94] R. WIESENDANGER. *"Scanning Probe Microscopy and Spectroscopy: Methods and Applications"*. Verlag: Cambridge University Press, ISBN-13: 978-0521428477, (1994)
- [WIE⁺02] L.S. WIELUNSKI, D. GRAMBOLE, U. KREISSIG, R. GRÖTZSCHEL, G. HARDING, E. SZILÁGYI. *"Hydrogen depth resolution in multilayer metal structures, comparison of elastic recoil detection and resonant nuclear reaction method"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B190**, 693 (2002)
- [WIE10] R. WIEMANN. *"Umladungswirkungsquerschnitte von MeV-Kohlenstoffionen in ultradünnen Kohlenstofffolien"*. Diplomarbeit, Technische Universität Dresden, (2010)
- [WIL⁺78] J.S. WILLIAMS, W. MÖLLER. *"On the determination of optimum depth-resolution conditions for Rutherford backscattering analysis"*. Nuclear Instruments and Methods. **157**, 213 (1978)
- [WIL⁺96] D.B. WILLIAMS, C.B. CARTER. *"Transmission Electron Microscopy. A Textbook for Materials Science."*. Verlag: Springer Netherlands, ISBN-13: 978-0306453243, (1996)
- [WIL⁺01] G.D. WILK, R.M. WALLACE, J.M. ANTHONY. *"High-k gate dielectrics: Current status and materials properties considerations"*. Journal of Applied Physics. **89**, Number 10, 5243 (2001)
- [WIZ79] J.L. WIZA. *"Microchannel Plate Detectors"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **162**, 587 (1979)
- [YAM⁺96] Y. YAMAMURA, H. TAWARA. *"Energy dependence of ion-induced sputtering yields from monatomic solids at normal incidence"*. Atomic Data and Nuclear Data Tables. **62**, 149 (1996)
- [YAN⁺91] Q. YANG, D.J. O'CONNOR, Z. WANG. *"Empirical formulae for energy loss straggling of ions in matter"*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B61**, 149 (1991)

- [YAS⁺72] J.A. YASAITIS, R. KAPLOW. "*Structure of amorphous silicon monoxide*". Journal of Applied Physics. **43**, 995 (1972)
- [YAU74] L.D. YAU. "*A simple theory to predict the threshold voltage of short-channel IGFET's*". Solid-State Electronics. **17**, 1059 (19742)
- [ZIE99] J.F. ZIEGLER. "*Stopping of energetic light ions in elemental matter*". Journal of Applied Physics. **85** Number 3, 1249 (1999)
- [ZIE⁺08] J.F. ZIEGLER (HRSG.), J.P. BIRSACK, M.D. ZIEGLER. "*SRIM – The Stopping and Range of Ions in Matter*". Verlag: SRIM Co., ISBN-13: 978-0-9654207-1-6, (2008)
- [ZIE⁺10] J.F. ZIEGLER, M.D. ZIEGLER, J.P. BIRSACK. "*SRIM – The stopping and range of ions in matter (2010)*". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. **B268** Issue 11–12, 1818 (2010)
- [ZIE11] M. ZIER. "*Private Kommunikation*". (2011)

Danksagung

Für meine Doktorarbeit schulde ich sehr vielen Menschen einen herzlichen Dank.

Besonders möchte ich mich bei meinem Doktorvater Prof. Wolfhard Möller sowohl für das interessante und anspruchsvolle Thema als auch für die wertvollen Ratschläge, die für das Gelingen dieser Arbeit beitrugen, bedanken.

Des Weiteren möchte ich Prof. Wolfhard Möller und Prof. Carsten Ronning für die Bereitschaft zur Begutachtung meiner Dissertation danken.

Weiter gilt mein herzlicher Dank meinen Kollegen Dr. Rainer Grötzschel und Dr. Frans Munnik für die stete Betreuung der Arbeit und für die geduldige Bereitschaft sowie die unzähligen Gespräche zur Beratung und Lösungsfindung komplexer und unübersichtlicher Fragestellungen.

Für die finanzielle und administrative Unterstützung danke ich Dr. Rainer Grötzschel, Prof. Andreas Kolitsch, Dr. Silke Merchel, Dr. Bernd Schmidt, Dr. Johannes von Borany und Dr. Wolfgang Skorupa sowie dem europäischen FP7-Projekt SPIRIT 227012, dem SAB Projekt KZWEI 13808/2382 und den Institutsdirektoren Prof. Manfred Helm, Prof. Jürgen Fassbender und dessen Vorgänger Prof. Wolfhard Möller.

Weiterhin gilt mein großer Dank Herrn Prof. Kenji Kimura für die Einladung zu einem Vortrag auf der Konferenz „High-Resolution Depth Profiling“ in Kyoto (Japan). Diesbezüglich danke ich ebenfalls dem Deutschen Akademischen Austauschdienst (DAAD) für die finanzielle Unterstützung dieser Konferenzreise.

Meinem Freund und Kollegen Daniel Hanf danke ich sowohl für die wertvollen Tipps und Hilfen in allen Fragen der Elektronik und der Programmierung als auch für die zahlreichen Nachtschichten, die er unterstützend mit mir zusammen gearbeitet hat.

Dr. Andreas Bergmaier möchte ich für die Unterstützung und die Fehlerbeseitigung im Detektordesign sowohl bei meinen Besuchen in München als auch bei seinem Besuch in Rossendorf danken. Außerdem möchte ich ihm und Prof. Günther Dollinger für die Beratung bei der kinematischen Korrektur von höchstauflösenden ERD-Spektren mit Hilfe von Magnetfeldern meinen Dank aussprechen.

Insbesondere gebührt mein Dank meinem Freund, Kollegen und Mitpromovenden Maik Vieluf für die zahlreichen Gespräche und den regen Erfahrungsaustausch zur höchstauflösenden Streuspektrometrie. Gratulation zu Deiner bestandenen Doktorprüfung: Dr. Maik Vieluf.

Ein großer Dank geht an alle Operatoren des Ionenstrahlzentrums: Steffen Klare, René Mester, Andreas Vetter, Axel Weise und Jürgen Winkelmann sowie an Robert Aniol und André Reichel, ohne deren Engagement am Magnetspektrometer QQDS und der Bereitschaft auch nachts zu arbeiten, viele Untersuchungen nicht möglich gewesen wären.

Mein besonderer Dank geht an Dr. Maciel Oskar Liedke für die schnelle Einarbeitung am Rasterkraftmikroskop, Dr. René Heller für die NRA-Messungen zur Bestimmung der Wasserstoffprofile und Herrn Dr. Arndt Mücklich für die Messungen am hochauflösenden Transmissionselektronenmikroskop sowie Monika Fritzsche für die Unterstützung bei der Interpretation der Daten.

Meinem Freund und Kollegen Dr. Michael Zier danke ich für die Unterstützung bei der Messung und bei der Interpretation der Ultra-Shallow-Junction Bor-Implantationsprofile.

Bei Dr. Bernd Schmidt, Claudia Neisser und Heike Hilliges möchte ich mich sowohl für die Beratung als auch für die Präparation der in dieser Arbeit genutzten Siliziumdioxidschichten bedanken.

Dr. Sonja Richter von X-FAB danke ich für die exzellente Zusammenarbeit und für die Bereitstellung der ONO-Schichten.

Bei Dr. Burkhardt Beckhoff bedanke ich mich für die Bereitstellung der Ultra-Shallow-Junction Bor-Implantationsprofil-Proben, die dem europäischen Projekt ANNA 026134-RII3 in Kooperation mit Intel Ireland entstammen.

Für die motivierenden Worte und die ergiebigen Ratschläge zur Präsentation meiner Daten auf Konferenzen möchte ich sowohl Prof. Carsten Ronning als auch Dr. Silke Merchel an dieser Stelle meinen ganz besonderen Dank aussprechen.

Insbesondere möchte ich meinem Freund und Physiker René Pietzsch danken, dass er nie den Glauben an mich verloren hat, selbst zu Zeiten, als ich es tat.

Außerdem möchte ich meinem Freund Thomas Schulze für seine ständigen Bemühungen danken, mich sowohl geistig als auch körperlich fit zu halten, so dass ich zum Teil auch unüberwindbar erscheinende Herausforderungen meistern konnte.

Ein herzliches Dankeschön geht an die intellektuelle Kaffeegruppe „Klugscheißer vs. Bullshitter“: Dr. Michael Zier, Christian Wilde, Richard Arthur Wilhelm, Joachim Wagner, Dr. Ayman Sherif El-Said und Dr. Christian Neelmeijer. Ihr wart immer da, wenn es nötig war. Danke.

Für die sprachliche Verbesserung dieser Dissertation möchte ich Ronny Kosmata, Marika Mertins und Christine Schneider danken. Ihr seid anstrengender als meine Deutschlehrerin auf dem Gymnasium! Ich danke euch von ganzem Herzen dafür.

Liebevoll bedanken möchte ich mich bei meiner Freundin Claudia Pilz, die mich in der anstrengenden letzten Phase täglich ertragen und geliebt hat.

Meinen Eltern und Großeltern möchte ich danken, dass ihr immer an mich geglaubt habt. Es tut mir schrecklich leid, dass ich mich in den letzten Monaten meiner Dissertation so rar gemacht und euch so selten besucht habe. Insbesondere möchte ich mich bei meinen Eltern bedanken, ohne die ein Studium und diese Doktorarbeit niemals möglich geworden wären.

Dank Euch allen. Jetzt bleibt mir nur noch eins:

Einundzwanzig.

Eidesstattliche 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 übernommenen 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.

Dresden, 30.06.2011

Unterschrift