

Diplomarbeit in Physik
angefertigt im
Helmholtz - Institut für Strahlen- und Kernphysik

PAC-Untersuchungen
von dotiertem Silizium
unter uniaxialer Zugspannung

vorgelegt der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der
Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

von
Nicole Santen

Bonn, Januar 2006

Anfertigung mit der Genehmigung
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

Referent: Priv.Doz.Dr. Reiner Vianden

Koreferent: Prof.Dr. Karl Maier

Hiermit versichere ich, dass ich diese Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie die Zitate kenntlich gemacht habe.

Bonn, den 20. Januar 2006

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1. Der Elementhalbleiter Silizium	3
1.1 Physikalische Eigenschaften	3
1.2 Elastische Eigenschaften	5
2. Die Messmethode	9
2.1 γ - γ -Winkelkorrelation	9
2.1.1 Die ungestörte Winkelkorrelation	9
2.1.2 Die gestörte Winkelkorrelation	11
2.2 Der Sondenkern ^{111}In	14
2.3 Der Aufbau der Messapparatur	15
2.4 Die Datenanalyse	16
2.4.1 Die Berechnung der R-Werte	16
2.4.2 Auswertung der R-Wert Spektren	18
3. Die Probenpräparation	19
3.1 Die Implantation	19
3.2 Das Ausheilen von Implantationsschäden	21
3.3 Die Erzeugung von uniaxialen Zug- und Druckspannungen	22
3.4 Die Probenhalter	23
4. Messungen	27
4.1 Intrinsisches Silizium unter uniaxialer Zug- und Druckspannung	27

4.1.1	Silizium unter Zug entlang $\langle 100 \rangle$	27
4.1.2	Silizium unter Zug entlang $\langle 110 \rangle$	30
4.1.3	Silizium unter Zug entlang $\langle 111 \rangle$	32
4.1.4	Silizium unter Druck entlang $\langle 111 \rangle$	34
4.1.5	Diskussion der Messergebnisse	36
4.2	Dotiertes Silizium unter uniaxialer Zugspannung	38
4.2.1	Te-dotiertes Silizium unter uniaxialer Zugspannung	39
4.2.2	As-dotiertes Silizium unter uniaxialer Zugspannung	48
4.3	Diskussion der Messergebnisse	56
4.3.1	Diskussion der Zugabhängigkeit	56
4.3.2	Diskussion der Dosisabhängigkeit	60
5.	Zusammenfassung und Ausblick	63
	Literaturverzeichnis	65
	Danksagung	69

Einleitung

Die anhaltende Miniaturisierung der integrierten Strukturen auf Siliziumbasis bestimmt weiterhin die Technologieentwicklung. Dies erfordert höhere Dotierkonzentrationen in immer kleineren Regionen des Siliziumsubstrats. Die Implantation der Dotierungatome kann deshalb bei hohen Dosen zu lokalen Verspannungen innerhalb der implantierten Zone führen.

Während man in der Vergangenheit bestrebt war, solche Verspannungen zu vermeiden, führt man sie heute gezielt herbei. So wird beispielsweise bei der Herstellung von CPUs sogenanntes *Strained Silicon*, also gedehntes Silizium, verwendet. Dazu wird eine dünne Siliziumschicht auf ein Silizium-Germanium-Substrat aufgebracht. Weil das Kristallgitter von SiGe größere Gitterabstände als das von Silizium besitzt, wird diese Siliziumschicht gestreckt, das Kristallgitter also aufgeweitet. Aufgrund der geringeren Streuwahrscheinlichkeit der Ladungsträger in diesem aufgeweiteten Gitter ist deren Beweglichkeit in dieser Schicht bis zu 70 % größer als in gewöhnlichem Silizium. Laut Angaben von IBM kann mit einer Schicht aus gestrecktem Silizium die Schaltgeschwindigkeit von Transistoren um etwa 35 % erhöht werden. Untersuchungen von Verspannungen im Elementhalbleiter Silizium sind folglich von großer technologischer Relevanz.

Die Methode der gestörten γ - γ -Winkelkorrelation (*Perturbed Angular Correlation*, **PAC**) ist sehr gut für die Untersuchung solcher lokaler Verspannungen in Silizium geeignet. Hierbei wird die Wechselwirkung eines implantierten, radioaktiven Sondenkerns mit einem elektrischen Feldgradienten (EFG) untersucht. Aufgrund des lokalen Charakters des EFG (r^{-3} -Abhängigkeit) dient die PAC-Methode für mikroskopische Beobachtungen der unmittelbaren Umgebung eines Sondenkerns, sodass Gitterverzerrungen, wie sie in implantierten Bereichen auftreten, erkannt und untersucht werden können.

Um in dieser Arbeit Verspannungen in Silizium mit der PAC-Methode untersuchen zu können, wurde durch einfaches Biegen von Siliziumkristallen eine externe uniaxiale Zugspannung erzeugt. Dazu wurden die Proben auf Probenhalter mit verschiedenen Krümmungsradien gespannt.

Im Falle einer externen uniaxialen Zugspannung konnte erstmals von G. Marx [MARX 95] ein spannungsinduzierter EFG nachgewiesen werden, der infolge der Verzerrung des kubischen Siliziumgitters am Ort eines ^{111}In -Sondenkerns entsteht.

Abgesehen von den besonderen mechanischen Eigenschaften der Bauteile aus gedehntem Silizium könnte eine gezielte Verunreinigung des verwendeten Siliziums noch weitere Vorteile mit sich bringen. Aus diesem Grunde wurden die Siliziumproben mit Donatoren wie Arsen und Tellur unterschiedlich stark dotiert, um den Einfluss der implantierten Dosis der Fremdatome auf den spannungsinduzierten EFG zu studieren.

Desweiteren wurden Zugspannungen entlang unterschiedlicher Kristallrichtungen erzeugt, um zu klären, ob hierbei die elastischen Eigenschaften von dotiertem Silizium abhängig von der Lage der Zugachse im Kristall signifikante Veränderungen zeigen.

Kapitel 1

Der Elementhalbleiter Silizium

Silizium ist auch heute noch das wichtigste Material der gesamten Halbleitertechnik und Mikroelektronik. Für die Fertigung von elektronischen Bauteilen auf Siliziumbasis sind Kristalle mit außerordentlich großer Reinheit erforderlich. Außerdem kann die elektrische Leitfähigkeit des Materials durch gezielten Einbau von Fremdatomen in das Kristallgitter (Dotierung) genau eingestellt werden. Somit ist es möglich, Siliziumschichten mit unterschiedlicher Leitfähigkeit zu erzeugen, die für die Herstellung von Halbleiterbauelementen wie Transistoren und integrierte Schaltungen nötig sind.

1.1 Physikalische Eigenschaften

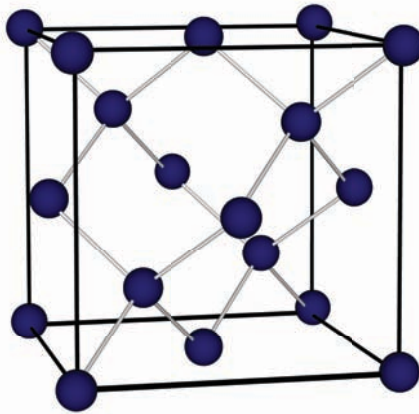


Abbildung 1.1: Die kubische Einheitszelle der Diamantstruktur

Die Kristallstruktur von Silizium entspricht der eines Diamantgitters (Abb. 1.1). Dabei handelt es sich um ein kubisch flächenzentriertes Gitter mit zweiatomiger Basis, wobei das zweite Basisatom gegenüber dem ersten entlang der Raumdiagonalen um ein Viertel verschoben ist. Bei der Diamantstruktur ist jedes Atom tetraedisch von seinen vier nächsten Nachbarn umgeben.

In der nachfolgenden Tabelle sind die wichtigsten Eigenschaften von Silizium aufgelistet. Die temperaturabhängigen Größen beziehen sich alle auf Raumtemperatur (300 K).

Konzentration [Atome/cm ³]		5,0 · 10 ²²
Atomgewicht [u]		28,09
Kristallstruktur		Diamant
Dichte [g/cm ³]		2,33
Schmelzpunkt [°C]		1415
Gitterkonstante [Å]		5,43
Bandlücke [eV]		1,12
Beweglichkeit [cm ² /Vs]	Elektronen	1500
	Löcher	450
E effektive Masse [m*/m ₀]	Elektronen	0,98
	Löcher	0,16

Tabelle 1.1: Wichtige Eigenschaften von Silizium [SZE 81]

Durch gezielten Einbau von Fremdatomen in das Kristallgitter kann die elektrische Leitfähigkeit des Halbleiters gesteuert werden. Durch die sog. Dotierung entstehen neue Energieniveaus innerhalb der Energielücke, wie in Abb. 1.2 zu sehen ist. Wenn z.B. Atome der III. Hauptgruppe in den Halbleiter eingebaut werden, fehlt für die kovalente Bindung mit den vier benachbarten Siliziumatomen ein Elektron. Dieses wird aus dem Valenzband aufgenommen, sodass dort ein Loch entsteht. Die zusätzlichen Energieniveaus, die durch die Dotierung der Fremdatome entstehen, nennt man Akzeptor-Niveaus, da sie Elektronen aus dem gefüllten Valenzband aufnehmen, wenn diese thermisch angeregt werden. Die dadurch im Valenzband entstehenden Löcher verhalten sich dann wie positive Ladungsträger. Deshalb spricht man hier von einem p-Halbleiter.

Fremdatome aus der V. Hauptgruppe hingegen besitzen ein überschüssiges Elektron, das für die kovalente Bindung mit den umgebenden Atomen nicht benötigt wird und somit schon bei relativ niedrigen Temperaturen ins Leitungsband angeregt wird. Aus diesem Grunde werden diese Störstellen auch als Donatoren bezeichnet. Bei der Dotierung mit Donatoren sorgen vorwiegend die Elektronen im Leitungsband für die elektrische Leitfähigkeit („n-Leiter“).

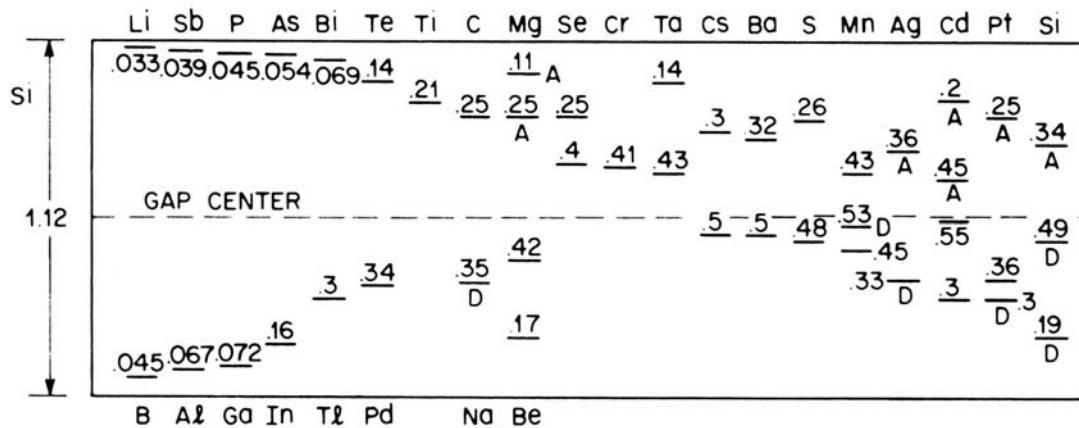


Abbildung 1.2: Energieniveaus für Donatoren und Akzeptoren in Silizium. Die Zahlen geben die jeweiligen Aktivierungsenergien in eV an, gemessen von der zugehörigen Bandkante [SZE 81].

1.2 Elastische Eigenschaften

Unter dem Einfluss äußerer Kräfte oder Spannungen kann ein fester Körper seine Gestalt ändern. Wirkt auf einen elastischen Körper der Länge l mit dem Querschnitt A eine Zugkraft F , so ändert sich seine Länge l um Δl (Abb. 1.3).

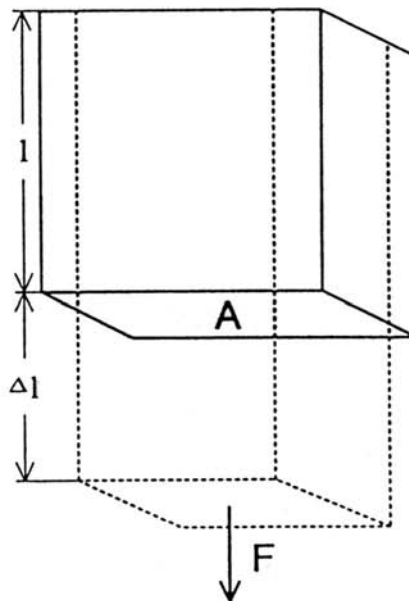


Abbildung 1.3: Die Verformung eines Festkörpers durch Dehnung

Bei kleinen Deformationen gilt das Hooke'sche Gesetz:

$$F = E \cdot A \cdot \frac{\Delta l}{l} \quad (1.1)$$

Die Proportionalitätskonstante E in Gl. 1.1 heißt *Elastizitätsmodul*. Führt man die Zugspannung

$$\sigma = \frac{F}{A}$$

und die relative Dehnung bzw. Stauchung $\epsilon = \frac{\Delta l}{l}$ ein, so erhält man aus Gl. 1.1 folgende von der Geometrie unabhängige Form des Hooke'schen Gesetzes:

$$\sigma = E \cdot \epsilon \quad (1.2)$$

Zu beachten ist, dass dieser lineare Zusammenhang zwischen Dehnung und Zugspannung nur für relativ kleine Deformationen gilt. Bei größeren Auslenkungen treten nichtlineare Rückstellkräfte auf.

Im Fall von anisotropen Körpern, bei denen die elastischen Eigenschaften von der Richtung ihrer Beanspruchung abhängen, muss die Zugspannung als Tensor zweiter Stufe, dem sog. Spannungstensor σ_{ij} , angesetzt werden. Die Deformation des Kristalls muss ebenso durch einen Verzerrungstensor ϵ_{kl} beschrieben werden. Durch eine lineare Transformation zwischen beiden Tensoren lässt sich Gl. 1.2 auf anisotrope Medien erweitern:

$$\sigma_{ij} = \sum_{kl} C_{ijkl} \epsilon_{kl}$$

wobei C_{ijkl} die verallgemeinerten Elastizitätsmoduln sind. Aufgrund der hohen Symmetrie der kubischen Struktur von Silizium nimmt die Anzahl unabhängiger elastischer Konstanten ab. Somit lässt sich die Matrix der Elastizitätsmoduln mit nur drei unabhängigen elastischen Konstanten beschreiben:

$$C_{ijkl} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix}$$

Zwischen den elastischen Moduln C_{ij} , welche in der Literatur [SKIM 53] angegeben sind, und dem Elastizitätsmodul E besteht folgender Zusammenhang [PAUF 78]:

$$\frac{1}{E} = \frac{C_{11} + C_{12}}{(C_{11} - C_{12}) \cdot (C_{11} + 2 \cdot C_{12})} - 2 \cdot \left(\frac{1}{C_{11} - C_{12}} - \frac{1}{2 \cdot C_{44}} \right) \cdot (n_x^2 n_y^2 + n_x^2 n_z^2 + n_z^2 n_y^2)$$

Hierbei sind die n_i ($i = x, y, z$) die Projektionen der Einheitsvektoren in Richtung der Zugachse auf die Koordinatenachsen der kubischen Elementarzelle. Folglich hängt der Elastizitätsmodul von der Kristallorientierung bezüglich der Zugachse ab. Die aus obiger Gleichung berechneten Werte für den Elastizitätsmodul entlang der drei Hauptachsen in Silizium sind in Tab. 1.2 aufgelistet.

Kristallorientierung	Elastizitätsmodul E
$\langle 100 \rangle$	130,16 GPa
$\langle 110 \rangle$	169,09 GPa
$\langle 111 \rangle$	187,81 GPa

Tabelle 1.2: Elastizitätsmodul E von Silizium in Abhängigkeit von der Kristallorientierung

Kapitel 2

Die Messmethode

2.1 γ - γ -Winkelkorrelation

Für die Untersuchungen in dieser Arbeit wurde die Methode der gestörten γ - γ -Winkelkorrelation (**P**erturbed **A**ngular **C**orrelation: **PAC**) angewandt. Sie basiert auf der Hyperfeinwechselwirkung zwischen dem Kernquadrupolmoment radioaktiver Sondenkerne und den elektrischen bzw. magnetischen Feldern am Ort der Sonde. Dies führt zu einer Präzession der Ausstrahlungscharakteristik zweier von der Sonde korreliert ausgesandter γ -Quanten, infolgedessen man Informationen über Größe und Symmetrie eines am Kernort auftretenden elektrischen Feldgradienten (EFG) erhält. Aufgrund der r^{-3} -Abhängigkeit des EFG ist diese Messmethode für mikroskopische Strukturuntersuchungen von Festkörpern bestens geeignet. So können auch Gitterdefekte, die in der unmittelbaren Umgebung der Sonde einen Feldgradienten erzeugen, eindeutig charakterisiert werden.

Die theoretischen Grundlagen dieser Messmethode sollen im folgenden kurz erläutert werden. Eine ausführlichere Darstellung findet sich z.B. in [SCHA 97, FRAU 65, BUTZ 89].

2.1.1 Die ungestörte Winkelkorrelation

Im allgemeinen Fall ist bei einem Ensemble radioaktiver Kerne keine Spinrichtung bevorzugt, sodass die Emissionswahrscheinlichkeit von γ -Quanten eines angeregten Atomkerns räumlich isotrop ist. Für die Beobachtung der gestörten Winkelkorrelation ist eine anisotrope Winkelverteilung jedoch zwingend erforderlich. Um diese zu erzeugen, verwendet man in Winkelkorrelationsmessungen einen angeregten Kern, der über eine γ - γ -Kaskade (Abb. 2.1 b) in seinen Grundzustand zerfällt.

Der Anfangszustand $|I_i, m_i\rangle$ zerfällt unter Emission von γ_1 in den Zwischenzustand $|I, m_a\rangle$ und dieser unter Emission von γ_2 in den Endzustand $|I_f, m_f\rangle$. Durch

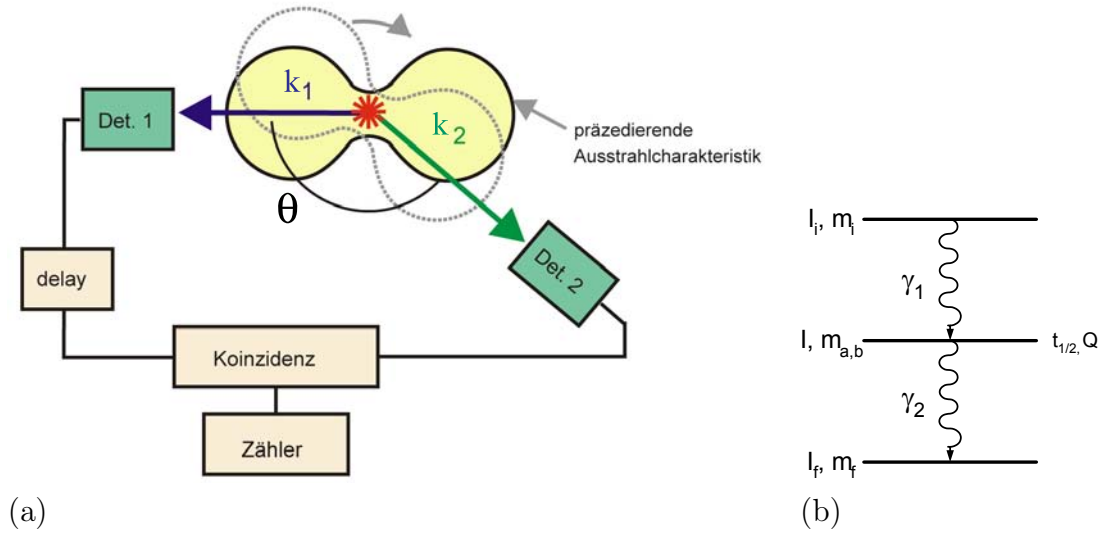


Abbildung 2.1: (a) Prinzip der γ - γ -Winkelkorrelation und (b) γ - γ -Kaskade

den Nachweis von γ_1 in einer bestimmten Richtung \vec{k}_1 wird ein Ensemble von Kernen ausgewählt, deren Spin gleich orientiert ist. Dadurch wird eine ungleiche Besetzung der m -Unterzustände des Zwischenniveaus erzeugt, so dass die Ausstrahlcharakteristik für γ_2 bei koinzidenter Messung aufgrund der Drehimpulserhaltung anisotrop bezüglich \vec{k}_1 erfolgt. Die Wahrscheinlichkeit $W(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ für eine Emission von γ_2 in Richtung \vec{k}_2 lässt sich aus den einzelnen Übergangsamplituden berechnen:

$$W(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = \sum_{m_i, m_f} \left| \sum_m \langle m_f | \mathcal{H}_2 | m_a \rangle \langle m_a | \mathcal{H}_1 | m_i \rangle \right|^2 \quad (2.1)$$

\mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 sind die Wechselwirkungsoperatoren für die Emission von γ_1 und γ_2 . Die Berechnung der Matrixelemente und Ausführung der Summationen führt nach Fraunfelder zu folgender Form der Winkelkorrelation [FRAU 65]

$$W(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = W(\theta) = \sum_{k \text{ gerade}}^{k_{\max}} A_k(1) A_k(2) P_k(\cos \theta) \quad (2.2)$$

Wegen der Zylindersymmetrie bezüglich \vec{k}_1 reicht zur Beschreibung der Winkelverteilung der Winkel θ zwischen den Emissionsrichtungen \vec{k}_1 und \vec{k}_2 aus, sofern keine weitere Achse ausgezeichnet ist. Der Laufindex k kann die Werte $0 \leq k \leq \min(2I, l_1 + l'_1, l_2 + l'_2)$ annehmen. Dabei ist I der Kernspin des Zwischenzustandes und $l_{1,2}$ bzw. $l'_{1,2}$ bezeichnen die Multipolaritäten der Übergänge. Dies folgt aus der Drehimpulserhaltung. Aufgrund der Paritätserhaltung kann k nur gerade Werte annehmen. Da der in dieser Arbeit verwendete Sondenkern ^{111}In den Spin $I = 5/2$ besitzt, nimmt k keine Werte größer als vier an.

2.1.2 Die gestörte Winkelkorrelation

Wenn der Kern während der Lebensdauer seines Zwischenzustandes eine Hyperfeinwechselwirkung erfährt, die durch elektromagnetische Felder am Ort des Sondenkerns verursacht wird, so ist die Winkelkorrelation gestört. Diese Wechselwirkung führt zu einer zeitabhängigen Umbesetzung der m -Unterzustände des Zwischenlevels, was eine Präzession der Ausstrahlcharakteristik zur Folge hat (vgl. Abb. 2.1 a). Die zeitliche Veränderung des Zwischenzustands $|m_a\rangle$ wird durch den Zeitentwicklungsoperator $\Lambda(t)$ beschrieben:

$$|m_a\rangle \rightarrow \Lambda(t) |m_a\rangle = \sum_{m_b} |m_b\rangle \langle m_b | \Lambda(t) |m_a\rangle$$

Durch Einsetzen in Gl. 2.1 ergibt sich:

$$W(\vec{k}_1, \vec{k}_2, t) = \sum_{m_i, m_f} \left| \sum_{m_a, m_b} \langle m_f | \mathcal{H}_2 | m_b \rangle \langle m_b | \Lambda(t) | m_a \rangle \langle m_a | \mathcal{H}_1 | m_i \rangle \right|^2$$

Nach [FRAU 65] erhält man daraus folgende allgemein gültige Form der zeitabhängigen γ - γ -Winkelkorrelation:

$$W(\vec{k}_1, \vec{k}_2, t) = \sum_{k_1, k_2, N_1, N_2} A_{k_1}(1) A_{k_2}(2) G_{k_1, k_2}^{N_1, N_2}(t) \frac{1}{\sqrt{(2k_1 + 1)(2k_2 + 1)}} \cdot Y_{k_1}^{N_1*}(\theta_1, \phi_1) Y_{k_2}^{N_2}(\theta_2, \phi_2) \quad (2.3)$$

mit dem Störfaktor $G_{k_1, k_2}^{N_1, N_2}(t)$:

$$G_{k_1, k_2}^{N_1, N_2}(t) = \sum_{m_a, m_b} (-1)^{2I+m_a+m_b} \sqrt{(2k_1 + 1)(2k_2 + 1)} \cdot \begin{pmatrix} I & I & k_1 \\ m'_a & -m_a & N_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & I & k_2 \\ m'_b & -m_b & N_2 \end{pmatrix} \langle m_b | \Lambda(t) | m_a \rangle \langle m'_b | \Lambda(t) | m'_a \rangle^* \quad (2.4)$$

Für die Indizes gilt $k_i = 0, 2, \dots, \min(2I, l_i + l'_i)$ und $|N_i| \leq k_i$, wobei $N_i = m_i - m'_i$. Die Koeffizienten $A_{k_i}(1) \cdot A_{k_j}(2)$ werden häufig zu A_{ij} zusammengefasst und sind die Anisotropiekoeffizienten des betrachteten Übergangs. Y_k^N sind die Kugelflächenfunktionen. Die Winkel θ_i und ϕ_i sind in Abb. 2.2 definiert.

Ein elektrischer Feldgradient (EFG) wird durch die umgebende Ladungsverteilung erzeugt und ist als zweite partielle Ableitung des klassischen elektrostatischen Potentials Φ am Kernort definiert:

$$V_{ij} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i \partial x_j}$$

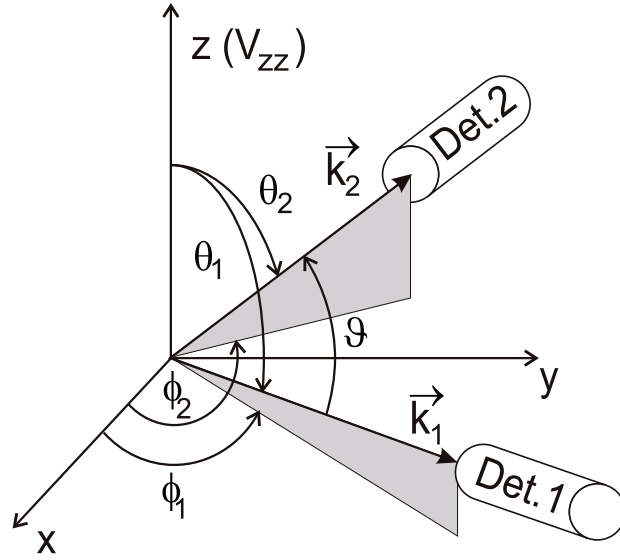


Abbildung 2.2: Allgemeines Koordinatensystem

Da sich am Kernort aufgrund der sphärischen Ladungsverteilung der s-Elektronen keine Ladung befindet, die zum EFG beiträgt, gilt die Laplace-Gleichung $\Delta\Phi = 0$, d.h. V_{ij} ist spurlos ($\Sigma V_{ii} = 0$). Ein solcher Tensor kann durch eine geeignete Hauptachsentransformation diagonalisiert werden. Im allgemeinen werden die Achsen so gewählt, dass

$$|V_{zz}| \geq |V_{yy}| \geq |V_{xx}|$$

Der EFG kann nun vollständig durch die Maximalkomponente V_{zz} und den sogenannten Asymmetrieparameter η bestimmt werden, der wie folgt definiert ist:

$$\eta := \frac{V_{xx} - V_{yy}}{V_{zz}}$$

Die Wechselwirkungsenergie zwischen dem Kernquadrupolmoment Q und dem EFG lässt sich ableiten aus dem Hamiltonoperator

$$H_Q = \frac{3I_z^2 - I(I+1) + \frac{\eta}{2}(I_x^2 + I_y^2)}{4I(2I-1)} eQV_{zz}$$

Im Falle eines axialsymmetrischen Feldgradienten, d.h. $\eta = 0$, ist der Hamiltonoperator diagonal und besitzt die Energieeigenwerte:

$$E_Q = \frac{3m^2 - I(I+1)}{4I(2I-1)} eQV_{zz} \quad (2.5)$$

Definiert man nun die Quadrupolfrequenz ω_Q durch

$$\omega_Q = \frac{e Q V_{zz}}{4I(2I-1)\hbar} \quad (2.6)$$

so erhält man folgende Aufspaltung zwischen zwei Unterzuständen m und m' :

$$E_Q(m) - E_Q(m') = 3 \cdot |m^2 - m'^2| \hbar \omega_Q \quad (2.7)$$

Für die niedrigsten Übergangsfrequenzen ω_0 zwischen zwei m -Unterzuständen gilt:

$$\begin{aligned} \omega_0 &= 3 \cdot \omega_Q && \text{für ganzzahligen Kernspin } I \\ \omega_0 &= 6 \cdot \omega_Q && \text{für halbzahligen Kernspin } I \end{aligned}$$

Bei einem axialsymmetrischen Feldgradienten gilt somit $\omega_n = n\omega_0$ für $n = 1, 2, 3$. In dieser Arbeit wurde ^{111}In als Sondenkern mit einem Kernspin von $I = 5/2$ verwendet. Somit erhält man folgende Übergangsfrequenzen:

$$\begin{aligned} \omega_1 &= 6\omega_Q \\ \omega_2 &= 12\omega_Q \\ \omega_3 &= 18\omega_Q \end{aligned}$$

Die Aufspaltung eines $I = 5/2$ -Kernniveaus unter dem Einfluss eines axialsymmetrischen Feldgradienten ist in Abb. 2.3 graphisch dargestellt.

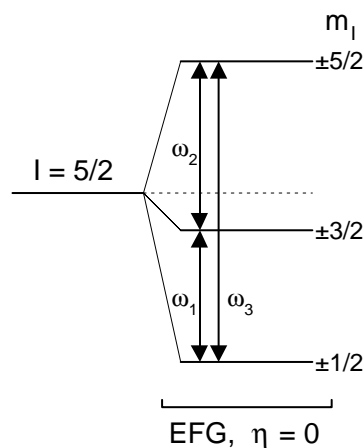


Abbildung 2.3: Quadrupolaufspaltung für ein Niveau mit $I = 5/2$ und Axialsymmetrie ($\eta = 0$)

In der Literatur wird oft anstelle von ω_Q (Gl. 2.6) die Quadrupolkopplungskonstante ν_Q angegeben, da sie unabhängig vom Drehimpuls I ist:

$$\nu_Q = \frac{eQV_{zz}}{h} \quad (2.8)$$

Für den Fall $I = 5/2$ kann die Gl. 2.3 schließlich in folgende Form gebracht werden:

$$W(\theta_1, \phi_1, \theta_2, \phi_2, t) = 1 + A_{22} \cdot G_{k_1, k_2}^{N_1, N_2}(t) \quad (2.9)$$

wobei der Störfaktor sich vereinfacht zu [BUTZ 89]:

$$G_{k_1, k_2}^{N_1, N_2}(t) = \sum_{n=0}^3 s_{kn}(\theta_1, \phi_1, \theta_2, \phi_2, \eta) \cos(\omega_n t) \quad (2.10)$$

mit $\omega_0 = 0$.

Die s_{kn} hängen von den Anisotropiekoeffizienten A_{ij} , dem Asymmetrieparameter η sowie von den Winkeln θ_i und ϕ_i ab.

2.2 Der Sondenkern ^{111}In

Für die folgenden Experimente wurde ^{111}In als Sondenkern verwendet, da es für Winkelkorrelationsmessungen ideale Eigenschaften aufweist und deshalb auch heute noch die am meisten verwendete PAC-Sonde ist. Das Zerfallsschema ist in Abb. 2.4 dargestellt.

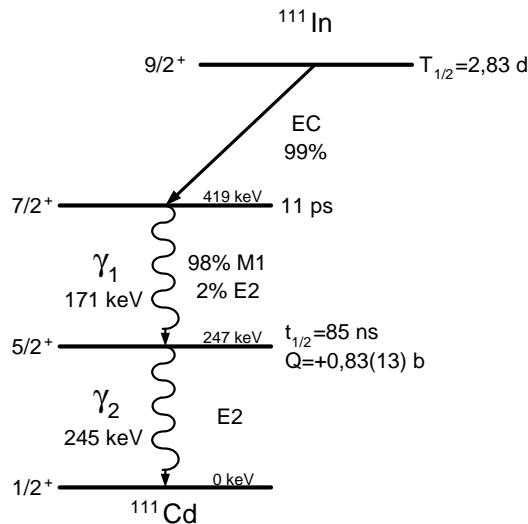


Abbildung 2.4: Zerfallsschema des Sondenkerns ^{111}In

Das Mutterisotop ^{111}In zerfällt über Elektroneneinfang (EC) bei einer Halbwertszeit $T_{1/2}$ von 2,8 Tagen zum ^{111}Cd . Für die PAC-Messung wird die γ - γ -Kaskade mit den Energien $E(\gamma_1) = 172\text{ keV}$ und $E(\gamma_2) = 247\text{ keV}$ genutzt. Die Halbwertszeit $t_{1/2} = 85\text{ ns}$ des Zwischenniveaus ist einerseits nicht zu kurz, da die Anwendbarkeit für kurze Zeiträume durch die Zeitauflösung der Apparatur begrenzt ist. Andererseits ist die Lebensdauer aber auch nicht zu lang, so dass der Untergrund durch zufällige Koinzidenzen gering bleibt.

2.3 Der Aufbau der Messapparatur

Für die Messungen dieser Arbeit wurde eine 3-Detektoranlage verwendet, deren Blockschaltbild in Abb. 2.5 zu sehen ist. Eine ausführliche Beschreibung der Apparatur ist in der Dissertation von T. Schaefer [SCHA 92] zu finden.

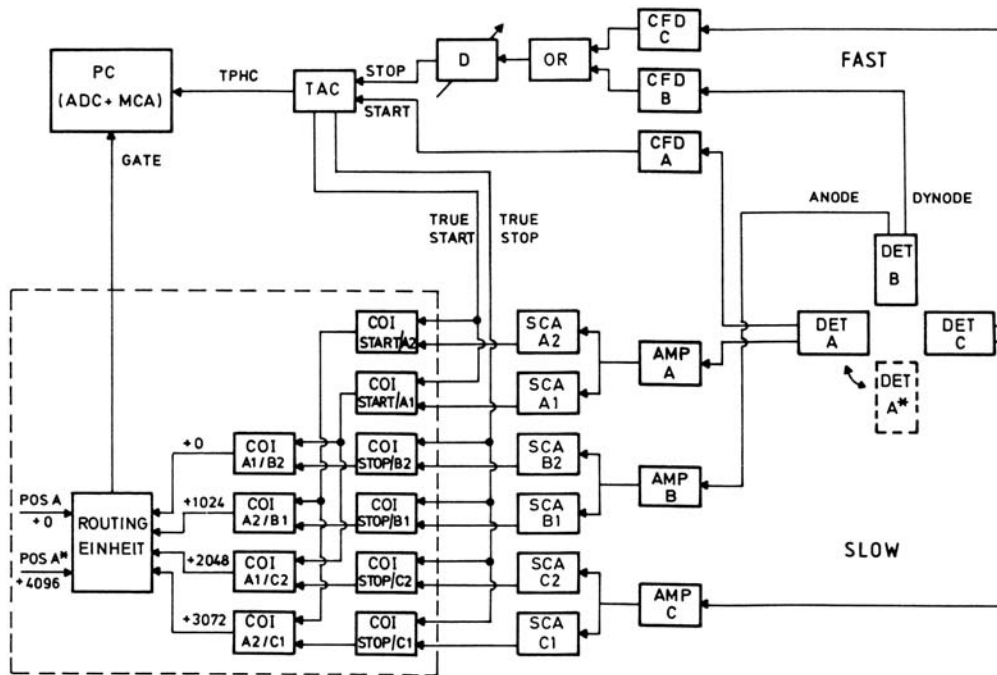


Abbildung 2.5: Aufbau der 3-Detektor-Apparatur [SCHA 92]

Die Anlage arbeitet nach dem Prinzip der “Fast-Slow-Koinzidenz“, die eine hohe Zeitauflösung ermöglicht. Zwei der Detektoren (B und C) dienen als Stoppdetektoren und sind fest unter einem Winkel von 90° montiert. Der dritte Detektor A fungiert als Startdetektor und wechselt typischerweise alle 2000 s zwischen den Positionen A (90° zu B) und A* (180° zu B). Hierdurch ist es möglich, die zur R-Wert Bildung nötigen jeweils unter 90° und 180° aufgenommenen Koinzidenzspektren immer von der gleichen Detektorkombination zu nehmen. Um zeitliche

Veränderungen in den Zählraten der Spektren auszugleichen, wählt man eine Reihenfolge der Position wie AA^*A^*A . Als Szintillationsmaterial wird BaF_2 verwendet, da es sich durch eine hohe Nachweiswahrscheinlichkeit und einer sehr guten Zeitauflösung auszeichnet. Um die γ -Emissionen der Probe in einem möglichst großen Raumwinkel zu erfassen, besitzen die BaF_2 -Kristalle eine konische Form. Hinter den Szintillationskristallen befinden sich Photomultiplier mit Fast- und Slow-Ausgang.

Im Fast-Kreis werden die Zeitsignale an der neunten Dynode des Photomultipliers abgegriffen und in einem **Constant-Fraction-Discriminator** (CFD) in einen scharfen Zeitpuls umgewandelt, der unabhängig von der Signalhöhe am Eingang ist. Die Zeitsignale der beiden Stopdetektoren (B und C) werden über ein OR-Gatter zusammengeführt und verzögert. Ausschließlich die CFD-Signale des Detektors A starten den **Time to Amplitude Converter** (TAC), die Stoppsignale werden von den Detektoren B und C geliefert. Demzufolge fällt die Hälfte der Zeitspektren zu "negativen Zeiten" hin ab, je nachdem ob der TAC von γ_1 oder γ_2 gestartet wurde. Das Ausgangssignal des TAC, dessen Höhe proportional zur Zeitdifferenz zwischen dem Nachweis der beiden γ -Quanten der Zerfallskaskade ist, wird in einem ADC digitalisiert und über eine Routingeinheit zum **Multichannel Analyser** (MCA) weitergeleitet.

Im Slow-Kreis werden die Energiesignale der drei Detektoren an der Anode der Photomultiplier abgegriffen, verstärkt und auf je zwei Einkanal-Analysatoren (SCA) gegeben, die die Photolinien der beiden γ -Quanten selektieren. Danach schließt sich eine Koinzidenzelektronik an, die die TAC-Ereignisse in acht Lebensdauerspektren entsprechend der angesprochenen Detektorkombination einsortiert. Allerdings wird die Koinzidenz nur dann analysiert, wenn der TAC auch tatsächlich eine Zeitmessung beginnt oder beendet.

In Abb. 2.6 ist die Zuordnung der Lebensdauerspektren abgebildet. Die ersten vier Spektren wurden in Position A, die letzten vier in Position A^* aufgenommen. Die Buchstabenpaare geben die Detektorkombination an (Detektor von γ_1 groß, Detektor von γ_2 klein).

2.4 Die Datenanalyse

2.4.1 Die Berechnung der R-Werte

Für die Zählrate in den einzelnen Koinzidenzspektren mit dem Winkel ϑ zwischen den beiden angesprochenen Detektoren gilt

$$N(\vartheta, t) = N_0 \exp^{-\frac{t}{\tau}} \cdot W(\vartheta, t) + U \quad (2.11)$$

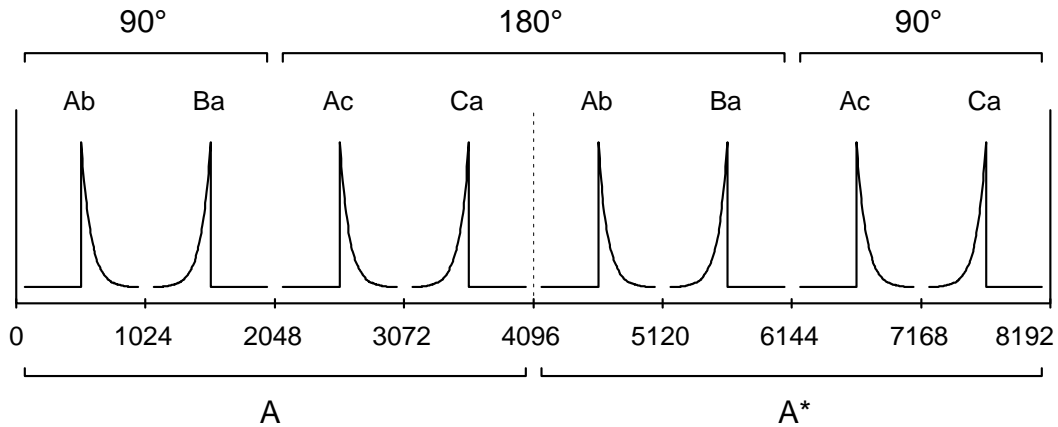


Abbildung 2.6: Zuordnung der Spektren anhand der Detektorkombination [NEDE 02]

Die Lebensdauerkurve des Zwischenniveaus der γ - γ -Kaskade, welche durch die exp-Funktion beschrieben wird, ist mit der Winkelkorrelationsfunktion $W(\vartheta, t)$ moduliert. Die aufgenommenen Spektren müssen noch um den Untergrund U der zufälligen Koinzidenzen korrigiert werden. Anschließend kann durch die Verrechnung der unter 90° bzw. 180° aufgenommenen Spektren zu dem sogenannten R-Wert die Lebensdauer eliminiert werden:

$$R(t) = 2 \cdot \frac{N(180^\circ, t) - N(90^\circ, t)}{N(180^\circ, t) + 2 N(90^\circ, t)} \quad (2.12)$$

Berechnet man zudem die geometrischen Mittel von $N(90^\circ, t)$ bzw. $N(180^\circ, t)$, so fallen bei der Bildung des R-Wertes auch die Ansprechwahrscheinlichkeit und der Raumwinkel jedes einzelnen Detektors heraus.

Da man für den hier verwendeten Sondenkern ^{111}In den Anisotropiekoeffizienten A_{44} vernachlässigen kann, erhält man für eine polykristalline Probe folgende Koinzidenzzählrate:

$$N(\vartheta, t) = N_0 \exp^{-\frac{t}{\tau}} \cdot (1 + A_{22} \cdot G_{22}(t) \cdot P_2(\cos \vartheta)) \quad (2.13)$$

Mit $P_2(\cos 180^\circ) = 1$ und $P_2(\cos 90^\circ) = 1/2$ ergibt sich für das Zählratenverhältnis (Gl. 2.12):

$$R(t) = A_{22} \cdot G_{22}(t) \quad (2.14)$$

Die Größe $R(t)$ enthält also nur noch den gewünschten Störfaktor, der die gesamte Information über die Wechselwirkung und damit auch über die lokalen elektromagnetischen Felder in der unmittelbaren Sondenumgebung beinhaltet.

2.4.2 Auswertung der R-Wert Spektren

An die aus den gemessenen Koinzidenzspektren erhaltenen R-Werte wird eine theoretische Störfunktion angepasst. Dies geschieht mithilfe des Programmes NN-Fit [BARR 92] nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate. Zu beachten ist, dass sich die Sondenatome generell in unterschiedlichen Umgebungen des Wirtsgitters befinden, so dass sie nicht einer einheitlichen Wechselwirkung ausgesetzt sind. Deshalb setzt die Störfunktion $G_{kk}^{NN}(t)$ sich aus mehreren Anteilen zusammen. Dabei ist f_i der Anteil an Sondenkernen, die sich in der Umgebung i befinden.

$$G_{kk}^{NN}(t) = \sum_i f_i \cdot G_{kk}^{NN(i)}(t), \quad \sum_i f_i = 1$$

Wie die einzelnen Komponenten für diverse Umgebungen im Kristallgitter explizit aussehen, ist z.B. in [BART 02] zu finden. Für den Fit können bis zu sieben unabhängige Anteile für die Quadrupolwechselwirkung angenommen werden. Die Anteile f_i , die Frequenz ω_0 und ihre Dämpfung δ , der Asymmetrieparameter η sowie die Winkel des EFG relativ zum Startdetektor werden als Parameter angepasst.

Desweiteren kann eine additive sowie eine multiplikative Konstante angepasst werden. Die additive Konstante kann eine Dejustierung der Probe relativ zum Detektorsystem ausgleichen. Ausserdem kann eine unterschiedliche probeninterne γ -Absorption unter 90° bzw. 180° , bedingt durch den Probenhalter, Ursache einer Verschiebung des gemessenen Spektrums sein. Durch die multiplikative Konstante können ungenau bestimmte experimentelle Anisotropiekoeffizienten ausgeglichen werden.

Bei der Berechnung der Störfunktionen muss berücksichtigt werden, dass die Anisotropiekoeffizienten A_{ij} nur für punktförmige Detektoren gelten. Durch die endliche Ausdehnung der Detektoren wird die theoretisch erwartete Anisotropie jedoch abgeschwächt. Daher werden "effektive Anisotropiekoeffizienten" verwendet, die spezifisch für die benutzte PAC-Anlage sind und sich als Produkt der theoretischen Koeffizienten mit Dämpfungskoeffizienten berechnen lassen:

$$A_{ij}^{app} = A_{ij} \cdot Q_i Q_j = A_{ij} \cdot Q_{ij}$$

Kapitel 3

Die Probenpräparation

Für die Messungen in dieser Arbeit wurden Siliziumwafer der Firma Virginia Semiconductor verwendet, die mit dem Cz-Verfahren hergestellt wurden. Sie sind beidseitig poliert, haben eine Dicke von $100\ \mu\text{m}$ und eine $\langle 110 \rangle$ -Oberfläche. Außerdem sind die meisten Wafer mit Bor dotiert, wobei der spezifische Widerstand nach Herstellerangaben größer als $10\ \Omega\text{cm}$ ist. Bei den Proben In-Si1 und In-As-Si2 handelt es sich um nominell undotiertes Material vom n-Typ. Der spezifische Widerstand ist hier ebenfalls größer als $10\ \Omega\text{cm}$.

Mit Hilfe einer Diamantdrahtsäge wurden die Wafer in ca. $7 \times 20\ \text{mm}^2$ große Proben so geschnitten, dass die Längskante, die der Zugachse entspricht, entlang einer der drei Kristallachsen $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ oder $\langle 111 \rangle$ liegt. Dabei ist es vorteilhaft, dass durch die $\langle 110 \rangle$ -Oberflächenorientierung unserer Wafer alle drei Hauptachsen in der Oberfläche (Abb. 3.1 a) liegen. Zur Kennzeichnung der Kristallachse ist bei den kommerziell erhältlichen, kreisrunden Wafern ein Kreissegment („flat“) abgeschnitten, was in unserem Fall entlang einer $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse liegt. Desweiteren wurden zur Bestimmung der Lage der jeweiligen Kristallachsen Laue-Aufnahmen der einzelnen Wafer entlang einer $\langle 110 \rangle$ -Richtung gemacht, wie in Abb. 3.1 b zu sehen ist. Dabei stehen die $\langle 110 \rangle$ - und $\langle 100 \rangle$ -Kristallachsen senkrecht zueinander, während die $\langle 111 \rangle$ -Achse einen Winkel von 35° mit der $\langle 110 \rangle$ -Richtung einschließt.

Nach dem Sägen der Proben werden die Längskanten abgeschliffen, um eventuell vorhandene kleine Risse zu beseitigen, die während des Sägevorgangs entstehen können. Abschließend werden die Proben mit Aceton und Ethanol gereinigt.

3.1 Die Implantation

Sämtliche Implantationen dieser Arbeit wurden am Bonner Isotopenseparator durchgeführt. Es wurden sowohl die radioaktiven Sondenkerne ^{111}In , als auch die stabilen Isotope ^{128}Te und ^{75}As als gezielte Verunreinigungen in die Proben eingebracht.

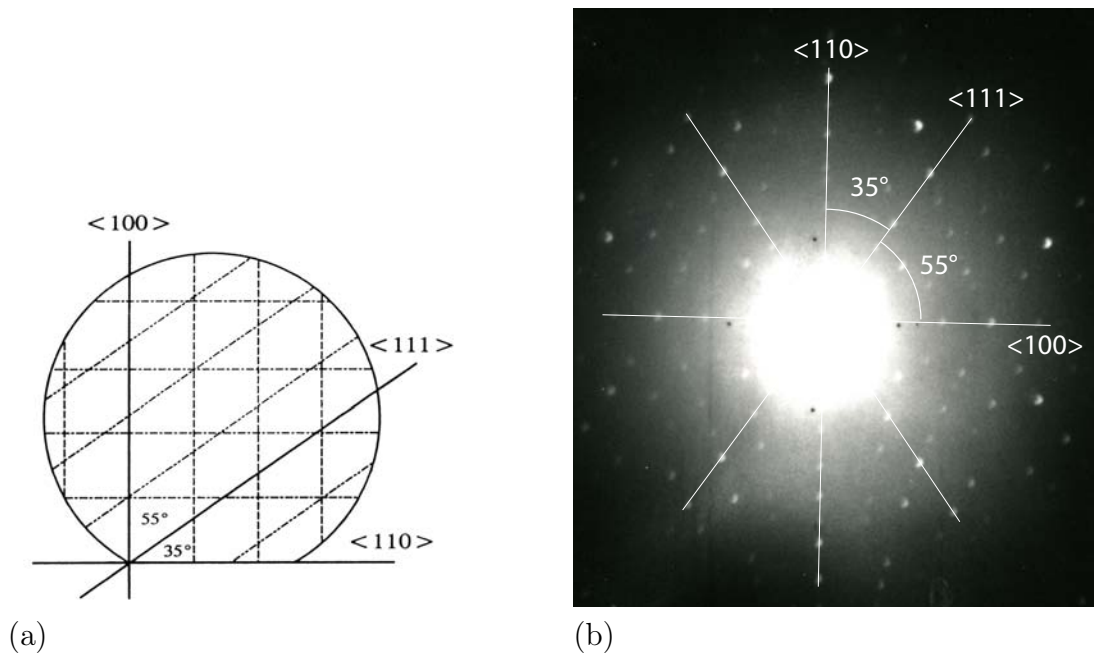


Abbildung 3.1: (a) Lage der Kristallachsen eines Wafers mit $\langle 110 \rangle$ -Oberfläche und
(b) Laue-Aufnahme von Silizium entlang einer $\langle 110 \rangle$ -Achse

Für die vorliegenden Messungen wird ^{111}In mit einer maximalen Einschussenergie von 160 keV bei einem Einfallswinkel von 7° gegen die Normale zur Vermeidung von Channelling implantiert. Durch das sog. „Wobbeln“ des Ionenstrahls wird eine homogene Implantation über einen bestimmten Bereich im Zentrum der Probe garantiert. Typische Dosen für die ^{111}In -Implantationen liegen zwischen 10^{12} und 10^{13} Atome/cm².

Die Reichweite der implantierten Isotope in Silizium kann mit Hilfe des Monte-Carlo-Simulationsprogramms SRIM 2003 [BIER 80] berechnet werden. Dieses liefert wichtige Informationen über die Implantationstiefen und Konzentrationen. Bei der Koimplantation von Te oder As muss darauf geachtet werden, dass die in etwa gaußförmigen Implantationsprofile sich mit der Region der implantierten Sondenkerne ^{111}In maximal überlappen (Abb. 3.2).

Dementsprechend müssen die Einschussenergien gegebenenfalls variiert werden. Somit ergibt sich für ^{128}Te ebenfalls eine Energie von 160 keV, für ^{75}As wird eine Energie von 120 keV gewählt. Die Ergebnisse der SRIM-Simulationen sind in Tab. 3.1 zusammengefasst. Es sind jeweils die mittleren Eindringtiefen der Ionen (Range) und die Standardabweichung des Implantationspeaks (Straggle) angegeben.

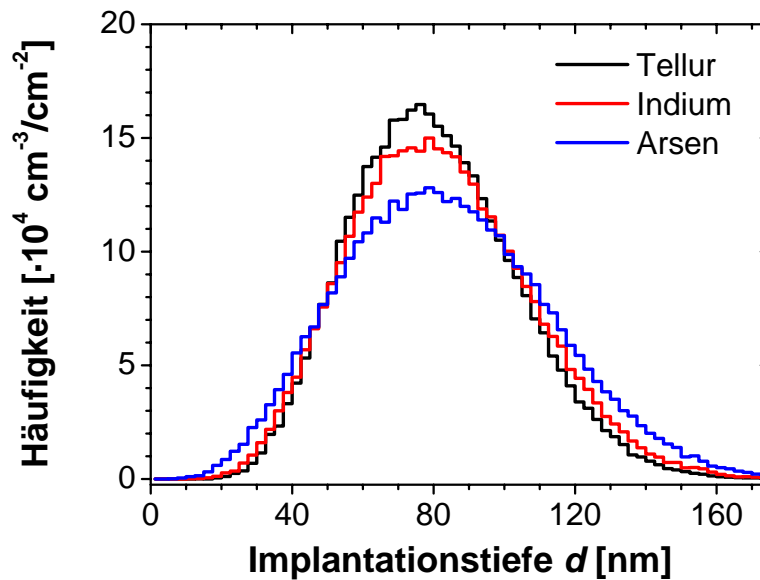


Abbildung 3.2: SRIM-Simulation für die Implantation von ^{111}In (160 keV), ^{128}Te (160 keV) und ^{75}As (120 keV). In Klammern sind die jeweiligen Einschussenergien angegeben (vgl. Tab. 3.1)

Isotop	Energie [keV]	Range [nm]	Straggle [nm]
^{111}In	160	81,7	25,2
^{128}Te	160	80,1	23,3
^{75}As	120	83,6	29,0

Tabelle 3.1: Ergebnisse der SRIM-Simulationen

3.2 Das Ausheilen von Implantationsschäden

Zum Ausheilen der implantationsbedingten Strahlenschäden wird eine Kurzzeittemperanlage (RTA: **R**apid **T**hermal **A**nnealing) verwendet [MARX 90]. Dabei werden die Indiumatome auf substitutionellen Gitterplätzen eingebaut, auf denen sie aufgrund der kubischen Gittersymmetrie keinen elektrischen Feldgradienten erfahren ($V_{xx} = V_{yy} = V_{zz} = 0$). Im R-Wert-Spektrum ist dann die volle Anisotropie A_{22} zu beobachten.

Die Probe wird zum Tempern zwischen zwei Graphitstreifen mit einer Breite von 2 cm gelegt, die in zwei wassergekühlte Kupferelektroden eingeklemmt werden. Durch Anlegen einer Spannung ist es nun möglich innerhalb weniger Sekunden Temperaturen von über 1200°C in der Mitte der Graphitstreifen zu erreichen. Die

Temperatur kann dabei mit einem Thermoelement kontrolliert werden, welches durch ein Loch in den Graphitstreifen nahe an die Probe herangebracht wird. Zum Schutz der Probenoberfläche wird ein Proximity Cap verwendet. Dazu wird eine zweite Siliziumprobe der gleichen Abmessung auf die erste gelegt. Je nach Art der implantierten Ionen werden verschiedene Ausheilverfahren durchgeführt [TESSE 03]:

- intrinsisches Silizium: bei 900°C für ca. 20 s unter konstantem Stickstofffluss (75 l/h)
- Koimplantation ^{128}Te : bei 400°C und anschließend 700°C für je 600 s in Vakuum ($p < 10^{-5}$ hPa)
- Koimplantation ^{75}As : bei 800°C für 600 s in Vakuum

3.3 Die Erzeugung von uniaxialen Zug- und Druckspannungen

Durch einfaches Biegen des Kristalls lassen sich uniaxiale Zug- und Druckspannungen erzeugen. Die Proben werden so präpariert, dass die Längsrichtung, entlang der gebogen wird, in Richtung unterschiedlicher Kristallachsen zeigt. Es stehen unterschiedliche Probenhalter zur Verfügung, in welche die Proben eingespannt werden können, um die erwünschten Spannungen zu erzeugen.

Da sich die implantierte Region der ^{111}In -Sondenkerne in einer sehr dünnen Schicht dicht unter der Oberfläche befindet (Dicke der Probe: 100 μm , Implantationstiefe ca. 0,08 μm), ist es möglich zwei Arten von Spannungen zu erzeugen (Abb. 3.3). Die räumliche Verteilung der Sondenkerne ist gegenüber der Probendicke (und dem Krümmungsradius) vernachlässigbar, so dass die Zugspannung über dem Implantationsvolumen als konstant angenommen werden kann.

Befindet sich die implantierte Fläche außen, so wird die Gitterkonstante lokal gedehnt, die implantierten Atome erfahren eine Zugspannung. Wird die Probe allerdings in die andere Richtung durchgebogen, d.h. die implantierte Fläche ist innen, so wird die Gitterkonstante in der Umgebung der Sondenkerne gestaucht, die Atome sind folglich einer Druckspannung ausgesetzt. In der Mitte der gebogenen Probe befindet sich die sogenannte neutrale Faser, die keine relative Längenänderung erfährt.

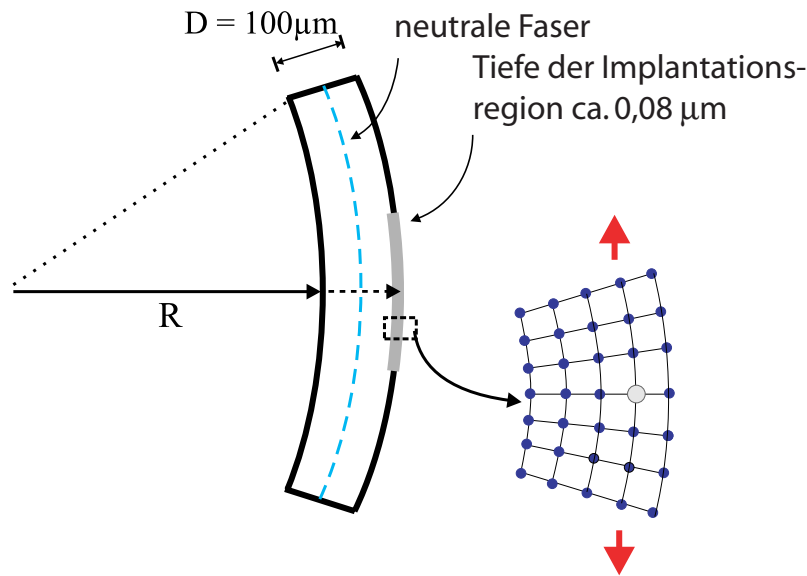


Abbildung 3.3: Erzeugung von uniaxialen Spannungen durch Biegen der Probe. Vergrößert dargestellt ist die mikroskopische Umgebung eines Sondenatoms [TESSE 03].

Bei kleinen Deformationen gilt das Hooke'sche Gesetz, mit dessen Hilfe man die über Biegemomente erzeugten homogenen Zug- und Druckspannungen berechnen kann:

$$\sigma = E \cdot \frac{\Delta l}{l} \quad (3.1)$$

Die Werte für den Elastizitätsmodul E von Silizium entlang der kristallographischen Achsen sind in Tabelle 1.2 auf S. 7 angegeben.

Die relative Längenänderung $\Delta l/l$ kann experimentell durch folgende Beziehung bestimmt werden:

$$\frac{\Delta l}{l} = \frac{D}{2R + D} \quad (3.2)$$

wobei die Dicke D der Probe (hier: $100 \mu\text{m}$) und der Krümmungsradius R der Probe einfließen. Durch diese Biegemethode kann eine relative Längenänderung von $\Delta l/l \approx 10^{-3}$ erreicht werden. Je nach Orientierung der Zug- bzw. Druckachse betragen die erzeugten Spannungen $1,3 - 2,0 \text{ MPa}$.

3.4 Die Probenhalter

Um die erforderlichen Zug- und Druckspannungen zu erzeugen, stehen verschiedene Probenhalter zur Verfügung, die auch schon in früheren Experimenten zum Einsatz kamen [MARX 95, TESSE 03].

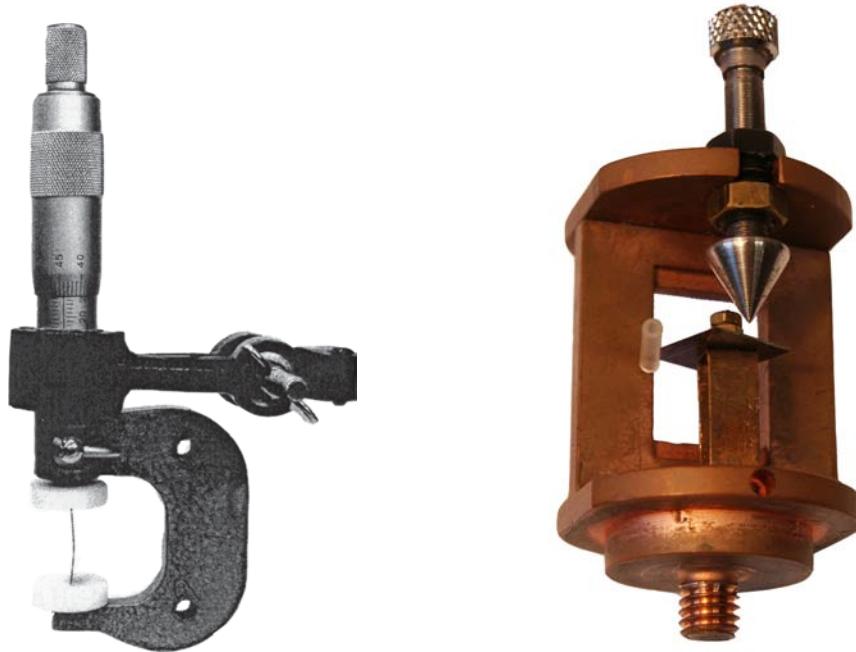


Abbildung 3.4: Mikrometerschraube und Probenhalter zum Einbau in eine Kompressorkühlmaschine

Damals wurde üblicherweise eine Mikrometerschraube verwendet (Abb. 3.4–links). Dabei wurde eine Probe zwischen zwei Backen aus Teflon eingespannt. Durch Drehung der Mikrometerschraube konnte die auf die Probe lastende Kraft kontinuierlich variiert werden. Die Probe bog sich dementsprechend seitlich weg. Ein Nachteil der Mikrometerschraube war, dass zusätzlich ein unerwünschter Staudruck auftrat, der unvermeidlich war. Es musste auch darauf geachtet werden, dass beim Zusammendrehen der Schraube kein Torsionsmoment auf die Probe übertragen wurde. Ein weiterer Nachteil ist, dass die Nullpunkteinstellung recht ungenau war: Der Nullpunkt wurde dort angesetzt, wo die Probe gerade von den Einspannbacken gehalten wurde. Bei unterschiedlichen Proben konnte er somit geringfügig variieren und die nachfolgenden eingestellten „Druckstufen“ folglich voneinander abweichen, sodass die erzeugten Spannungen nicht immer wohldefiniert waren.

Einen weiteren Probenhalter zeigt Abb. 3.4–rechts, der für den Einbau in eine Kompressorkühlmaschine konzipiert war, um die Temperaturabhängigkeit spannungsinduzierter, elektrischer Feldgradienten zu untersuchen. Außerdem wollte man mit diesem Probenhalter den bei der Mikrometerschraube auftretenden Staudruck vermeiden. Hierbei drückte eine Klinge seitlich auf die eingespannte Probe und erzeugte somit ein Biegemoment. Die Anwendung erwies sich jedoch als ziemlich schwierig, da die scharfe Kante der Klinge häufig zum Bruch der Proben führte.

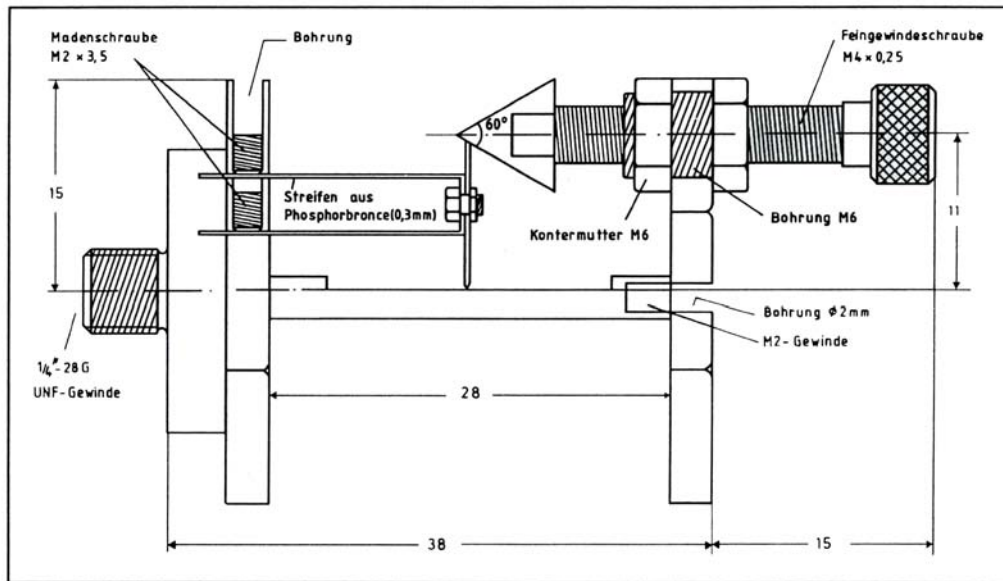


Abbildung 3.5: Skizze des Probenhalters für die Kompressorkühlmaschine

Zur Vermeidung der oben genannten Probleme wird für sämtliche Untersuchungen dieser Arbeit ein neuer Probenhalter aus PVC verwendet (Abb. 3.6). Er besteht aus einem kreisförmigen Segment, auf das die Probe mittels zweier Backen fest aufgedrückt werden kann. Zur Polsterung sind die Innenseiten der Backen mit Schaumsto ausgekleidet.



Abbildung 3.6: Der neue Probenhalter aus PVC

Ein großer Vorteil dieses Probenhalters ist, dass er einen wohldefinierten Radius besitzt und die mit ihm erzeugten Zugspannungen genau berechnet werden können. Somit ist die Reproduzierbarkeit gewährleistet. Vorteilhaft ist auch, dass der Krümmungsradius über die gesamte Länge der Probe konstant ist, d.h. es kann eine homogene uniaxiale Zugspannung realisiert werden. Ein Nachteil gegenüber den vorigen Probenhaltern besteht darin, dass die Druckstufen nicht kontinuierlich verändert werden können und nur wenige, bestimmte Spannungs-Werte erzeugt werden.

Insgesamt stehen vier solcher PVC-Probenhalter mit verschiedenen Krümmungsradien ($R = 43$ mm, 47 mm, 50 mm und 55 mm) zur Verfügung. Dabei ist es nur ein einziges Mal gelungen, eine Probe auf den Halter mit dem Radius $R = 43$ mm aufzubringen. Hier sind die erreichten Zugspannungen wohl etwas zu groß, so dass die Proben zerbrechen. In Tab. 3.2 sind die mit den PVC-Probenhaltern erreichten Zugspannungen aufgelistet, die abhängig von der Lage der Zugachse im Kristall sind.

Krümmungsradius R [mm]	Zugspannung [MPa] entlang		
	$\langle 100 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 111 \rangle$
55	118	154	171
50	130	169	188
47	138	180	200
43	151	196	218

Tabelle 3.2: Erzeugte Zugspannungen mit den PVC-Probenhaltern, abhängig von der Lage der Zugachse im Kristall

Kapitel 4

Messungen

4.1 Intrinsisches Silizium unter uniaxialer Zug- und Druckspannung

Der Einfluss einer von außen angelegten uniaxialen Zug- bzw. Druckspannung auf intrinsisches Silizium wurde in der Vergangenheit bereits ausführlich in der Dissertation von G. Marx untersucht [MARX 95].

In dieser Arbeit sollen solche Messungen nochmals mit neuen PVC-Probenhaltern durchgeführt werden. Ziel ist es aufgrund derer wohldefinierten Krümmungsradien den relativen Fehler der Zugspannungen zu minimieren und eine gute Reproduzierbarkeit zu erreichen. Bei den bisherigen Experimenten, in denen die Zugspannungen mit Hilfe einer Mikrometerschraube erzeugt wurden, war letzteres nicht immer gegeben, da die Krümmung der Probe nicht genau bestimmt werden konnte.

Aus früheren Messungen ist bekannt, dass bei einer von außen angelegten Zug- bzw. Druckspannung auch bei einem kubischen Diamantgitter, wie es Silizium besitzt, spannungsinduzierte elektrische Feldgradienten auftreten. Diese werden durch die Verzerrung der kubischen Ladungssymmetrie hervorgerufen. In dem nun folgenden Kapitel soll das Phänomen genauer untersucht werden.

4.1.1 Silizium unter Zug entlang $\langle 100 \rangle$

Sämtliche Messungen dieser Arbeit wurden mit der in Kap.2.3 beschriebenen Dreidetektor-Anlage durchgeführt. Die Detektoranordnung ist in Abb. 4.1 dargestellt. Die Normale der implantierten Probenoberfläche liegt genau zwischen zwei unter 90° angeordneten Detektoren, wobei die Zugachse senkrecht zur Detektorebene steht. Die $7 \times 20 \text{ mm}^2$ große Probe ist so gesägt, dass die Längskante entlang einer $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse liegt. Somit verläuft die Zugachse auch entlang dieser

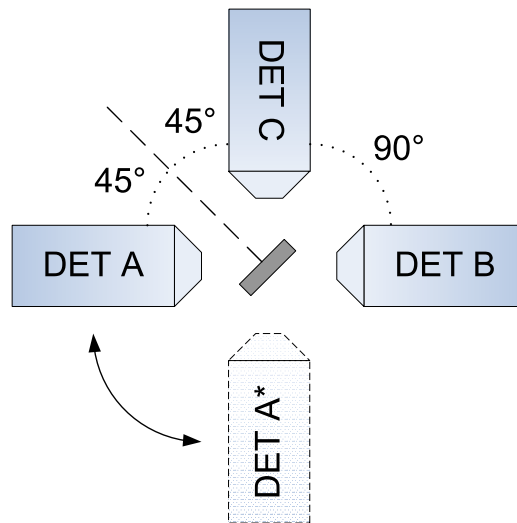


Abbildung 4.1: Detektoranordnung

Richtung. Die jeweiligen Zugspannungen werden durch einfaches Biegen der Probe auf diversen Probenhaltern mit unterschiedlichen Krümmungsradien erzeugt.

Zunächst wurden die radioaktiven PAC-Sondenkerne ^{111}In mit einer Einschussenergie von 160 keV in die Siliziumproben implantiert. Dabei entstehen Strahlenschäden (siehe Diskussion in 4.1.5), die bei 900°C unter N_2 -Fluss in der RTA ausgeheilt wurden. Danach nehmen ca. 90 % der Sondenkerne substitutionelle Gitterplätze ein. Dort erfahren sie aufgrund der symmetrischen Ladungsverteilung keinen EFG. In dem zugehörigen PAC-Spektrum (Abb. 4.2 oben) ist deshalb die volle Anisotropie zu beobachten.

Wird die Probe nun gebogen, so lässt sich eine neue Wechselwirkungsfrequenz ν_{Q_0} erkennen, die mit zunehmender Zugspannung in etwa linear anwächst. Diese spannungsinduzierte Frequenz wird durch die Verzerrung des kubischen Diamantgitters infolge der von außen angelegten Spannung hervorgerufen. Für diese Frequenz wird ein systematischer Fehler von 1 % angenommen, der aus Unsicherheiten bei der Zeiteichung der Apparatur resultiert.

Wird das Gitter entlang einer $\langle 100 \rangle$ -Achse gebogen, so wird die kubische Einheitszelle tetragonal verzerrt, d.h. der resultierende EFG ist in diesem Fall axial-symmetrisch, was sich auch in dem Asymmetrieparameter $\eta = 0$ widerspiegelt.

Bei dem Fit wird auch ein polykristalliner Anteil f_{poly} angepasst, der diejenigen Sondenkerne beschreibt, die sich auf nicht definierten Plätzen befinden. Dieser Anteil beträgt 8,9 % und wird beim Fitten festgehalten, da ausgeschlossen werden kann, dass das Indium bei Raumtemperatur diffundiert. Die thermische Energie reicht nicht dafür aus, dass die Sondenkerne ihre Gitterplätze wechseln.

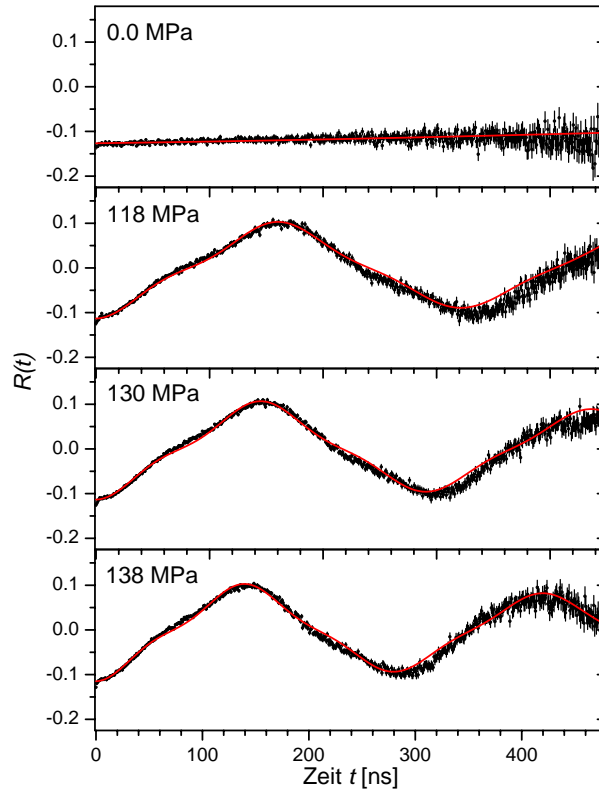


Abbildung 4.2: PAC-Spektren für ^{111}In in intrinsischem Silizium unter verschiedenen uniaxialen Zugspannungen entlang $\langle 100 \rangle$.

Zugspannung [MPa]	0	118	130	138
ν_{Q_0} [MHz]	0,82(3)	20,7(2)	22,9(2)	23,8(2)
δ_0 [%]	30(2)	3,2(1)	2,2(1)	2,8(1)
f_0 [%]	91,1(6)	91,1(6)	91,1(6)	91,1(6)
η_0	0,00	0,00	0,00	0,00
f_{poly} [%]	8,9(6)	8,9(6)	8,9(6)	8,9(6)
Additive Konstante	-0,0039(2)	0,0094(2)	0,0091(2)	0,0076(2)
$A_{22}^{app.}$	-0,1225	-0,1225	-0,1225	-0,1225

Tabelle 4.1: Fitergebnisse für ^{111}In in intrinsischem Silizium unter verschiedenen uniaxialen Zugspannungen entlang $\langle 100 \rangle$.

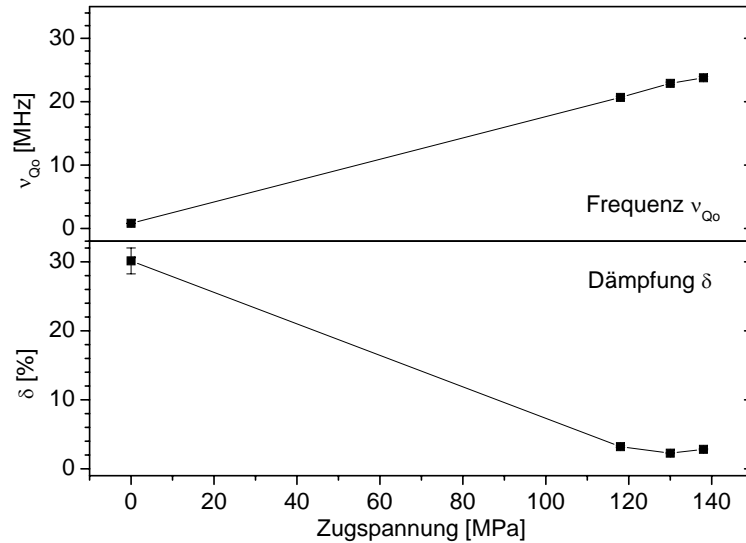


Abbildung 4.3: Fitparameter für ^{111}In in intrinsischem Silizium unter verschiedenen uniaxialen Zugspannungen entlang $\langle 100 \rangle$.

Die Fitergebnisse sind in Tab. 4.1 aufgelistet und in Abb. 4.3 graphisch dargestellt. Werte ohne Fehlerangabe wurden festgehalten. Die Abweichungen der Fitkurve von den gemessenen Spektren können von einer leichten räumlichen Dejustierung der Probe relativ zum Detektorsystem herrühren.

4.1.2 Silizium unter Zug entlang $\langle 110 \rangle$

Ist die Siliziumprobe einer uniaxialen Zugspannung entlang einer $\langle 110 \rangle$ -Achse ausgesetzt, so beobachtet man die PAC-Spektren, die in Abb. 4.4 gezeigt sind. Die Fitergebnisse sind in Tab. 4.2 zusammengefasst und in Abb. 4.5 graphisch dargestellt.

Nach dem Ausheilen der Implantationsschäden erkennt man ohne externe Zugspannung wieder ein völlig ungestörtes Spektrum. Legt man nun eine Zugspannung in $\langle 110 \rangle$ -Richtung an, lässt sich der spannungsinduzierte Gitterfeldgradient wieder beobachten. Der Anteil der Sondenkerne, welche mit diesem eine einheitliche Wechselwirkung zeigen, liegt bei ca. 95%. Die restlichen Indiumkerne befinden sich auf nicht definierten Gitterplätzen, wo sie uneinheitlichen, schwachen elektrischen Feldgradienten ausgesetzt sind.

Im Falle einer äußeren Zugspannung entlang $\langle 110 \rangle$ erhalten wir aus dem Fit einen nicht-axialsymmetrischen EFG, d.h. $\eta \neq 0$. Dies erwartet man auch für eine rhombisch verzerrte Einheitszelle, die man durch gerichteten Zug bzw. Druck entlang einer $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse erhält.

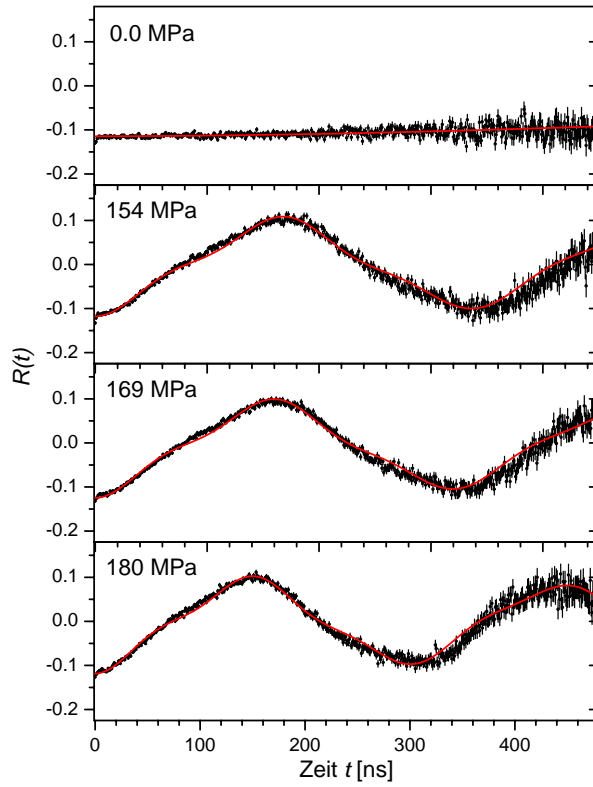


Abbildung 4.4: PAC-Spektren für ^{111}In in intrinsischem Silizium unter verschiedenen uniaxialen Zugspannungen entlang $\langle 110 \rangle$.

Zugspannung [MPa]	0	154	169	180
ν_{Q_0} [MHz]	1,01(3)	19,4(2)	20,3(2)	21,5(2)
δ_0 [%]	3,9(6)	2,0(1)	2,4(1)	2,5(1)
f_0 [%]	95,4(8)	95,4(8)	95,4(8)	95,4(8)
η_0	0,110(2)	0,192(3)	0,197(2)	0,217(2)
f_{poly} [%]	4,6(8)	4,6(8)	4,6(8)	4,6(8)
Additive Konstante	0,0080(2)	0,0047(2)	-0,0024(2)	0,0038(2)
$A_{22}^{app.}$	-0,1225	-0,1225	-0,1225	-0,1225

Tabelle 4.2: Fitergebnisse für ^{111}In in intrinsischem Silizium unter verschiedenen uniaxialen Zugspannungen entlang $\langle 110 \rangle$.

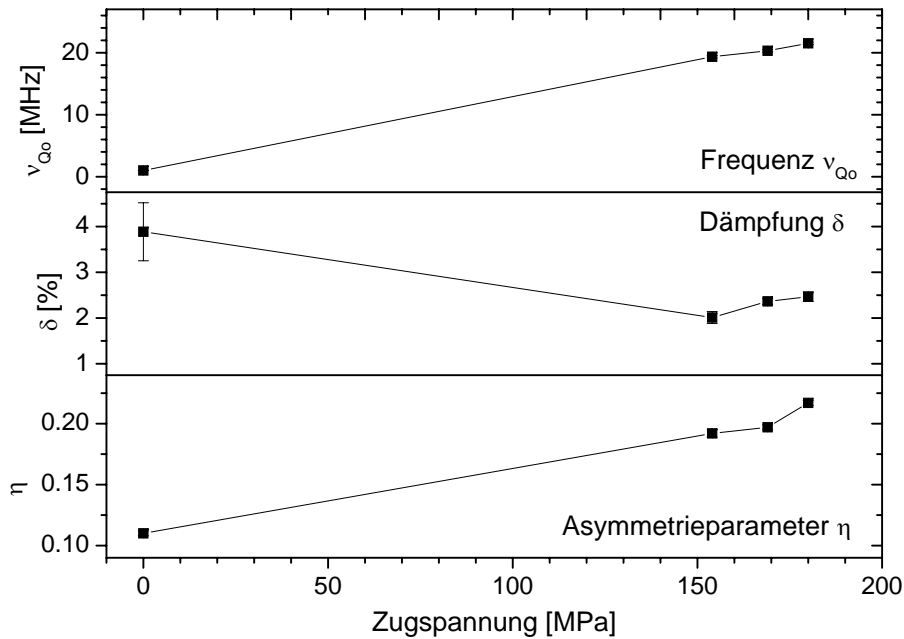


Abbildung 4.5: Fitparameter für ^{111}In in intrinsischem Silizium unter verschiedenen uniaxialen Zugspannungen entlang $\langle 110 \rangle$.

4.1.3 Silizium unter Zug entlang $\langle 111 \rangle$

Die PAC-Spektren im Falle einer externen Zugspannung entlang einer $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse sind in Abb. 4.6 dargestellt. Deutlich ist zu erkennen, dass sich auch hier ein spannungsinduzierter Gitterfeldgradient erzeugen lässt. Wiederum nimmt die Wechselwirkungsfrequenz ν_{Q_0} linear mit steigender Spannung zu (Abb. 4.7). Außerdem lässt sich beobachten, dass die Dämpfung δ_0 der spannungsinduzierten Frequenz deutlich mit zunehmender Spannung abnimmt. Dies ist ein Hinweis darauf, dass die Sondenkerne sich in einem immer einheitlicheren Spannungszustand befinden.

Der Anteil der Sondenkerne, die sich auf substitutionellen Gitterplätzen befinden und mit dem spannungsinduzierten Feldgradienten in Wechselwirkung treten, liegt bei etwa 86%. Der Rest der Sondenkerne ist in gestörten Gitterumgebungen eingebaut. Die Fitergebnisse sind in Tab. 4.3 zu finden.

Bei einer externen Zugspannung in $\langle 111 \rangle$ -Richtung ist der spannungsinduzierte EFG aufgrund der trigonalen Verzerrung der ursprünglich kubischen Einheitszelle axialsymmetrisch.

Auällig ist, dass auch in ungebogenem Zustand der Probe ein geringer elektrischer Feldgradient auftritt. Eine mögliche Erklärung hierfür ist, dass die Probe sich infolge der Implantation der Indiumatome auch ohne äußeren Einfluss in einem inneren Spannungszustand befindet.

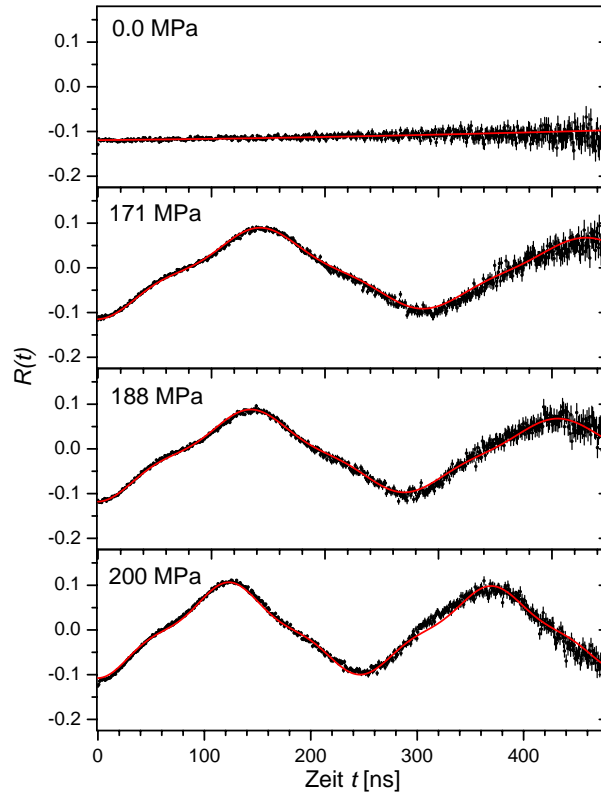


Abbildung 4.6: PAC-Spektren für ^{111}In in intrinsischem Silizium unter verschiedenen uniaxialen Zugspannungen entlang $\langle 111 \rangle$.

Zugspannung [MPa]	0	171	188	200
ν_{Q_0} [MHz]	0,91(2)	23,2(2)	24,6(2)	27,0(3)
δ_0 [%]	19(1)	3,3(1)	2,9(1)	1,0(1)
f_0 [%]	86,4(5)	86,4(5)	86,4(5)	86,4(5)
η_0	0,00	0,00	0,00	0,00
f_{poly} [%]	13,6(5)	13,6(5)	13,6(5)	13,6(5)
Additive Konstante	0,0032(2)	0,0077(2)	0,0045(2)	0,0150(1)
$A_{22}^{app.}$	-0,1225	-0,1225	-0,1225	-0,1225

Tabelle 4.3: Filtergebnisse für ^{111}In in intrinsischem Silizium unter verschiedenen uniaxialen Zugspannungen entlang $\langle 111 \rangle$.

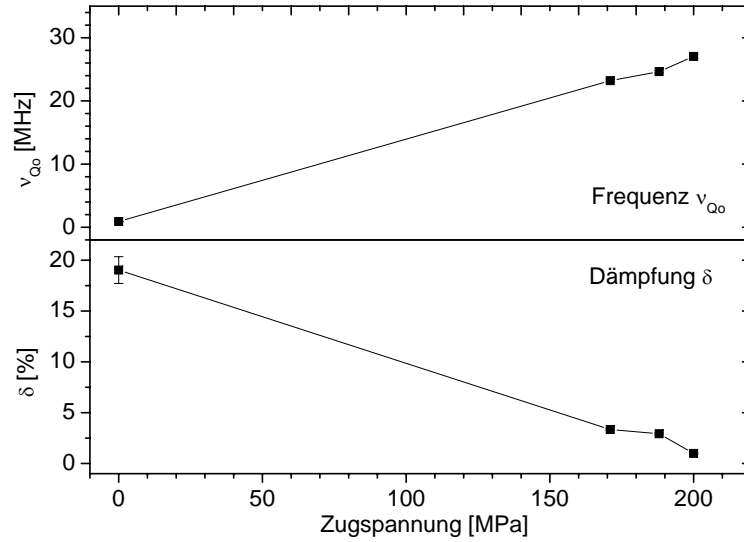


Abbildung 4.7: Fitparameter für ^{111}In in intrinsischem Silizium unter verschiedenen uniaxialen Zugspannungen entlang $\langle 111 \rangle$.

4.1.4 Silizium unter Druck entlang $\langle 111 \rangle$

Nun wird eine uniaxiale Druckspannung entlang einer $\langle 111 \rangle$ - Kristallachse erzeugt. In diesem Fall muss die implantierte Fläche auf dem Probenhalter aufliegen, um den gewünschten Druck zu erzeugen. Die zugehörigen Spektren sind in Abb. 4.8 gezeigt. Die Fitergebnisse sind in Tab. 4.4 zusammengefasst.

Wenn man die hier erhaltenen Ergebnisse mit denen im vorigen Kapitel vergleicht, in dem eine externe Zugspannung in $\langle 111 \rangle$ -Richtung erzeugt wurde, so stellt man fest, dass sie nur geringfügig voneinander abweichen. Die spannungsinduzierten Wechselwirkungsfrequenzen ν_{Q_0} stimmen innerhalb der Fehler miteinander überein. Alle anderen angepassten Parameter wie z.B. die beiden Anteile der Sondenkerne in unterschiedlichen Gitterumgebungen sind nahezu identisch mit den obigen unter uniaxialer Zugspannung. Dies ist nicht weiter verwunderlich, da es sich um dieselbe Probe handelt.

Wie bereits von Marx [MARX 95] auf Basis des Punktladungsmodells berechnet, ist die spannungsbedingte Zunahme des induzierten elektrischen Feldgradienten unabhängig davon, ob eine uniaxiale Zug- oder eine entsprechende Druckspannung auf die Probe wirkt. Es sollte sich nur das Vorzeichen des EFG umkehren. Da wir jedoch mit der γ - γ Winkelkorrelation die Zirkularpolarisation der emittierten Gammaquanten nicht beobachten, lässt sich das Vorzeichen des EFG nicht bestimmen. Hierfür sind β - γ Winkelkorrelationsmessungen nötig.

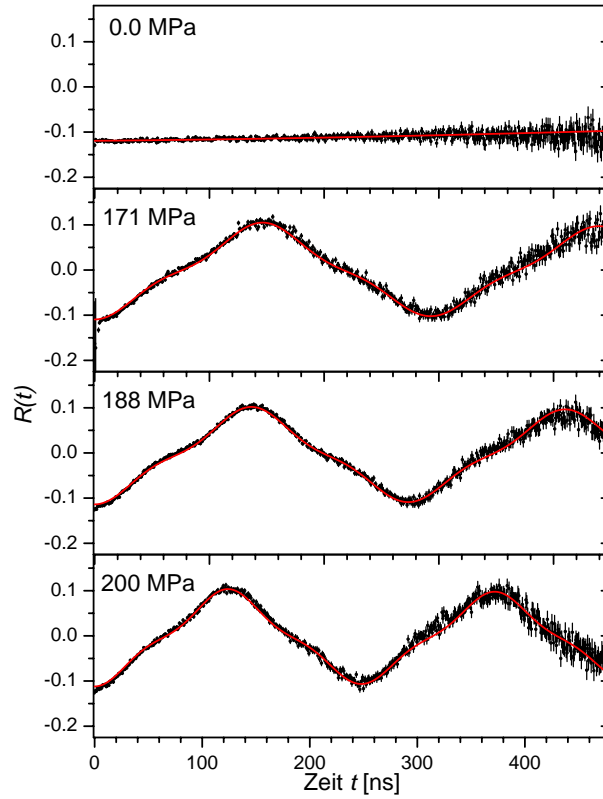


Abbildung 4.8: PAC-Spektren für ^{111}In in intrinsischem Silizium unter verschiedenen uniaxialen Druckspannungen entlang $\langle 111 \rangle$.

Druckspannung [MPa]	0	171	188	200
ν_{Q_0} [MHz]	0,91(2)	22,7(2)	24,4(2)	26,9(3)
δ_0 [%]	19(1)	0,93(9)	0,63(7)	0,68(8)
f_0 [%]	86,4(5)	86,4(5)	86,4(5)	86,4(5)
η_0	0,0	0,0	0,0	0,0
f_{poly} [%]	13,6(5)	13,6(5)	13,6(5)	13,6(5)
Additive Konstante	0,0032(2)	0,0131(2)	0,0086(1)	0,0105(2)
$A_{22}^{app.}$	-0,1225	-0,1225	-0,1225	-0,1225

Tabelle 4.4: Fitergebnisse für ^{111}In in intrinsischem Silizium unter verschiedenen uniaxialen Druckspannungen entlang $\langle 111 \rangle$.

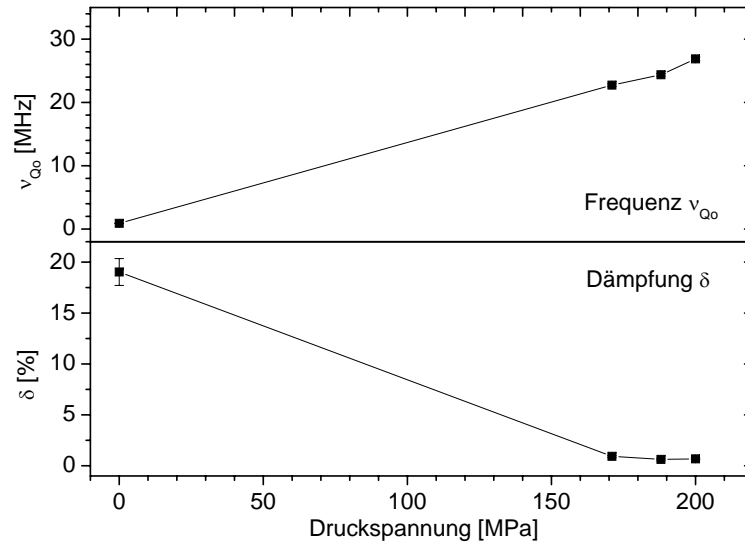


Abbildung 4.9: Fitparameter für ^{111}In in intrinsischem Silizium unter verschiedenen uniaxialen Druckspannungen entlang $\langle 111 \rangle$.

4.1.5 Diskussion der Messergebnisse

Wie auch schon in [MARX 95] beschrieben, lässt sich auch in einem kubischen Einkristall aus Silizium durch eine extern angelegte, uniaxiale Zug- bzw. Druckspannung ein elektrischer Gitterfeldgradient erzeugen, der infolge der Verzerrung der symmetrischen Ladungsverteilung um einen Sondenkern auftritt. Verläuft die Zugachse entlang einer $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse, so wird das Gitter tetragonal verzerrt, während man entlang einer $\langle 111 \rangle$ -Richtung eine trigonale Struktur erhält. In beiden Fällen erhält man aufgrund der resultierenden Punktsymmetrie in der Sondenumgebung einen axialsymmetrischen EFG. Zieht man entlang einer $\langle 110 \rangle$ -Achse, so ist der entsprechende Gitterfeldgradient infolge der rhombischen Verzerrung des Gitters nicht-axialsymmetrisch.

Mit Hilfe von Orientierungsmessungen wurde von Marx [MARX 95] gezeigt, dass die Symmetrieachse des spannungsinduzierten EFG in Richtung der Zugachse liegt.

Desweiteren wächst die spannungsinduzierte Wechselwirkungsfrequenz ν_{Q_0} linear mit der extern angelegten, uniaxialen Zugspannung an. Aufgrund der wohldefinierten Krümmungsradien der neuen Probenhalter konnten die relativen Messfehler hier minimiert werden.

Wegen der anisotropen Beschaffenheit des Elastizitätsmoduls müsste die Stärke des durch eine Biegespannung induzierten EFG abhängig sein von der Richtung der Zug- bzw. Druckachse. Um dies zu überprüfen, wird die Zugabhängigkeit der spannungsinduzierten Frequenz ν_{Q_0} für die unterschiedlichen Zugachsen in

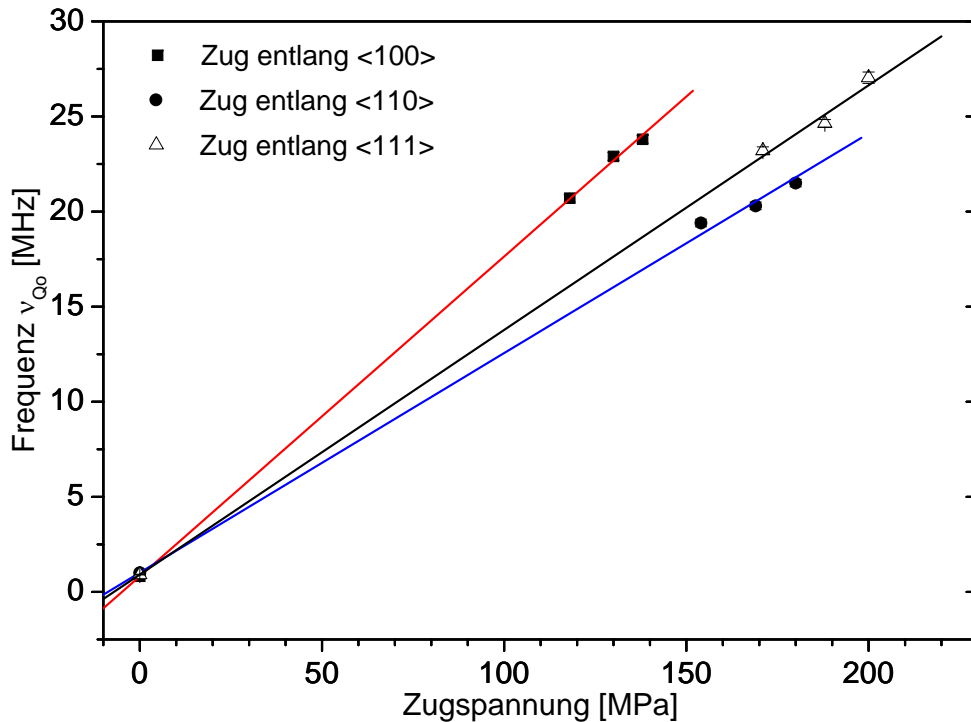


Abbildung 4.10: Die spannungsinduzierten Frequenzen am Ort von ^{111}In in intrinsischem Silizium in Abhängigkeit der unterschiedlichen Zugachsen.

$\nu_Q = A + B \cdot \sigma$	<100>	<110>	<111>
A [MHz]	0,82(3)	1,01(3)	0,91(2)
B [MHz·MPa ⁻¹]	0,1680(9)	0,1155(7)	0,1286(7)

Tabelle 4.5: Fitparameter der linearen Regressionsgeraden

Abb. 4.10 graphisch dargestellt. Dabei wird eine lineare Regressionsgerade an die gemessenen Werte angepasst, deren Parameter in Tab. 4.5 aufgelistet sind.

Da für den Elastizitätsmodul in Abhängigkeit der Orientierung $E_{\langle 100 \rangle} < E_{\langle 110 \rangle} < E_{\langle 111 \rangle}$ gilt (vgl. Tab. 1.2), ist infolge des Hooke schen Gesetzes der Einfluss der externen Zugspannung auf den EFG für eine Zugachse entlang <100> am größten. Entlang einer <111>-Zugachse hingegen lässt sich ein Siliziumkristall am schwersten dehnen. Somit beobachtet man unter Spannungseinfluss entlang dieser Richtung einen vergleichsweise geringen Anstieg des resultierenden Gitterfeldgradienten. Dies kann durch die gewonnenen Messergebnisse bestätigt werden: Bei Zug in <100>-Richtung erhalten wir aus dem linearen Fit den stärksten Anstieg des EFG mit wachsender Spannung (Tab. 4.5). Entgegen der theoretischen Erwartung ist die Zugabhängigkeit des EFG im Falle einer gerichteten Zugspannung

entlang einer $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse jedoch niedriger als bei einer $\langle 111 \rangle$ -Achse.

Wenn sich die Sondenkerne auf substitutionellen Plätzen im Wirtsgitter befinden, sollten sie aufgrund der kubischen Ladungssymmetrie keinen EFG erfahren, solange keine externe Zugspannung anliegt. Tatsächlich ist aber auch im ungebogenen Zustand der Probe eine geringe Wechselwirkungsfrequenz im Bereich von 0,82–1,01 MHz zu beobachten, was darauf hindeutet, dass die Probe sich in einem inneren Spannungszustand befindet. Dieser resultiert aus der Implantation der Sondenkerne, deren kovalenter Radius sich von dem der Wirtsatome unterscheidet (In: 144 pm, Si: 111 pm). Dies führt lokal zu einer größeren Gitterkonstanten in der unmittelbaren Umgebung der Sonden und somit auch zu Materialspannungen innerhalb der implantierten Zone.

Das Auftreten solcher lokaler Gitterverzerrungen hängt von den jeweiligen Implantationsbedingungen (Ionendosis, Oberflächenorientierung, etc.) ab, die von Probe zu Probe unterschiedlich sein können.

4.2 Dotiertes Silizium unter uniaxialer Zugspannung

In der Vergangenheit wurde der Einfluss einer von außen angelegten, uniaxialen Zugspannung auf diverse Indium-Donator-Komplexe in Silizium mit der PAC-Methode ausführlich studiert [TESSE 03]. Dabei wurde festgestellt, dass eine Biegung der Probe keinerlei Einfluss auf die Wechselwirkung in dem Komplex hat, der aus einem ^{111}In -Sondenkern und einem Donatoratom gebildet wird. Die Untersuchungen haben allerdings auch einen weiteren interessanten Effekt hervorgebracht, der dann in den Mittelpunkt des Interesses rückte: Am Ort der substitutionellen, donatorfreien Sondenkerne konnte ein spannungsinduzierter elektrischer Feldgradient beobachtet werden, der linear mit der externen Zugspannung ansteigt, wobei der Proportionalitätsfaktor der entsprechenden Wechselwirkungsfrequenz offensichtlich von der Art der implantierten Donatoren abhängt (siehe Abb. 4.11).

Demzufolge ist die spannungsinduzierte Frequenz vermutlich abhängig von der Größe der implantierten Fremdatome. Desweiteren reagiert mit Phosphor dotiertes Silizium überhaupt nicht auf eine Zugspannung. Durch eine Phosphor-Implantation werden die elastischen Eigenschaften von Silizium folglich enorm verändert. Außerdem fällt auf, dass bei intrinsischem Silizium und uniaxialer Zugspannung im Vergleich zu dotiertem Silizium größere Feldgradienten auftreten.

All diese beobachteten Phänomene geben Grund zu der Vermutung, dass auch eine Abhängigkeit des spannungsinduzierten Feldgradienten von der Dosis der

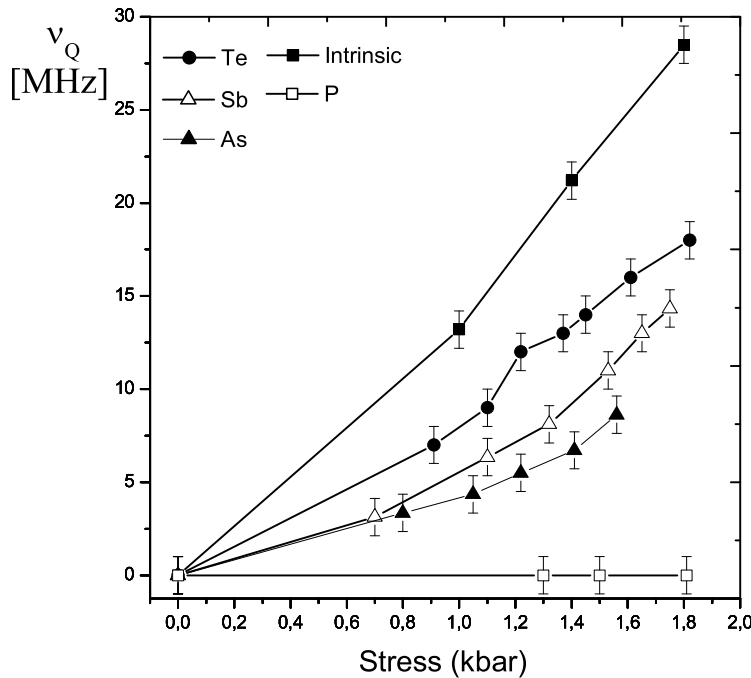


Abbildung 4.11: Spannungsinduzierte Frequenz am Ort von ^{111}In in Abhängigkeit von der uniaxialen Zugspannung entlang einer $\langle 110 \rangle$ -Achse in Silizium. Das Silizium ist mit verschiedenen Donatoratomen dotiert [TESSE 03].

implantierten Donatoren besteht. Ziel der folgenden Experimente war es, diese Dosisabhängigkeit des EFG zu untersuchen, um die daraus resultierenden Veränderungen der mechanischen Eigenschaften von Silizium verstehen zu können.

4.2.1 Te-dotiertes Silizium unter uniaxialer Zugspannung

Zunächst soll Te-dotiertes Silizium unter einer externen, uniaxialen Zugspannung untersucht werden. Um die Dosisabhängigkeit des spannungsinduzierten EFG in Silizium zu studieren, wurden die Proben mit unterschiedlichen Tellur-Dosen bei einer Einschussenergie von 160 keV implantiert. Die verschiedenen Implantationsdosen von Tellur sind in Tab. 4.6 aufgelistet. Danach fand die Implantation der radioaktiven ^{111}In -Sondenkerne mit ebenfalls 160 keV statt. Durch diese Implantationen entstehen Strahlenschäden (vgl. Kap. 3.2), die bei 400°C und 700°C für jeweils 10 min in der RTA ausgeheilt wurden. Die $7 \times 20 \text{ mm}^2$ großen Proben wurden so gesägt, dass die Längskanten, entlang derer gebogen wurde, in Richtung von $\langle 100 \rangle$ - und $\langle 111 \rangle$ -Kristallachsen liegen.

Probe	Te-Dosis [Atome/cm ²]	Längskante
In-Te-Si1	1·10 ¹⁴	<111>
In-Te-Si4	5·10 ¹⁴	<111>
In-Te-Si5	1·10 ¹⁵	<111>
In-Te-Si6	1·10 ¹⁴	<100>
In-Te-Si7	5·10 ¹³	<100>
In-Te-Si8	1·10 ¹⁵	<100>
In-Te-Si9	2·10 ¹⁵	<100>
In-Te-Si10	1·10 ¹³	<111>

Tabelle 4.6: Tellur-Implantationsdosen in Silizium

Zugabhängige Messungen entlang einer <100>-Kristallachse

Im folgenden Abschnitt wird die Zugabhängigkeit des spannungsinduzierten elektrischen Feldgradienten untersucht. Dazu wurde eine Siliziumprobe auf Probenhalter verschiedener Krümmungsradien gespannt, um unterschiedliche Spannungen zu erzeugen. Die Auswertung soll exemplarisch an der Probe In-Te-Si7 erfolgen, die eine implantierte Tellurdosis von $5 \cdot 10^{13}$ Te/cm² hat. Die Zugachse ist dabei entlang einer <100>-Kristallachse gerichtet. Die PAC-Spektren sind in Abb. 4.12 dargestellt.

Beim Fit werden zwei einkristalline und ein polykristalliner Anteil angepasst. Unmittelbar nach dem Tempern erscheint auch im ungebogenen Zustand der Probe eine deutlich sichtbare Frequenz ($\nu_{Q_1} = 447$ MHz), die die Wechselwirkung zwischen einem substitutionellem Indium-Sondenkern und einem in der unmittelbaren Umgebung befindlichen Telluratome widerspiegelt. Während des Tempervorgangs diffundieren die Telluratome aufgrund der thermischen Energie im Siliziumkristall und bilden dabei wegen der Coulombanziehung Komplexe mit den Indiumatomen. Die Telluratome nehmen dabei nächste Oktaederplätze zu den Indiumsonden ein. Die zugehörige, den In-Te-Komplex charakterisierende Frequenz ist wohldefiniert und in der Vergangenheit schon ausführlich von Tessema diskutiert worden [TESSE 03]. Der Anteil dieser Pärchen beträgt hier ca. 43 %.

Legt man nun von außen eine Zugspannung an, so erscheint eine neue, mit der Stärke der Zugspannung ansteigende Frequenz (siehe Abb. 4.12 und 4.13). Diese zeitliche Modulation im PAC-Spektrum beschreibt den Einfluss der uniaxialen Zugspannung auf die substitutionellen Indiumatome, die keinen Komplex mit einem Donator bilden. Dieser Anteil beträgt etwa 18 % und bleibt auch bei zunehmender Spannung innerhalb der Fehler konstant. Dies ist damit zu erklären,

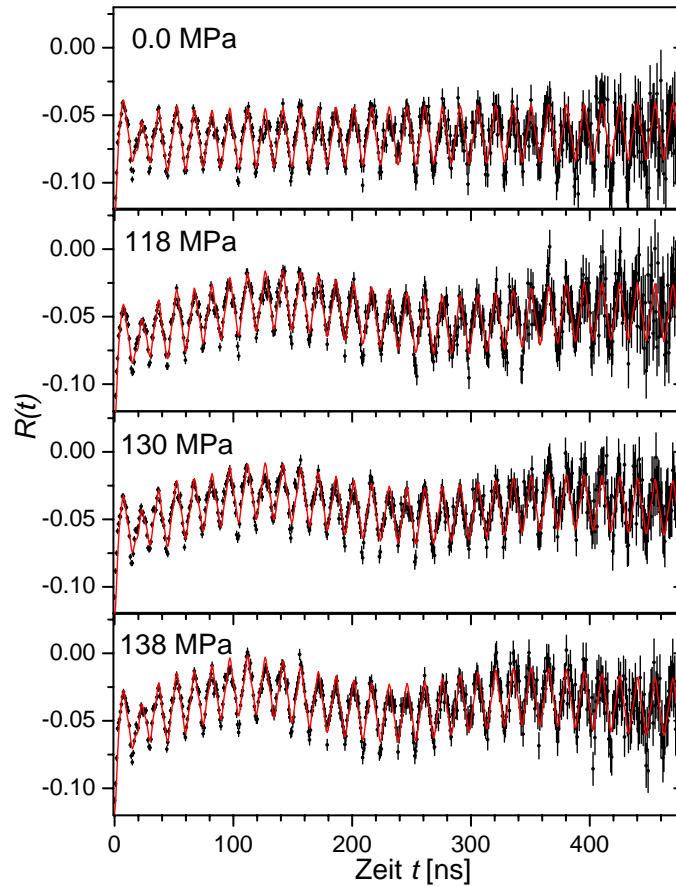


Abbildung 4.12: PAC-Spektren für ^{111}In in Silizium, dotiert mit $5 \cdot 10^{13} \text{ Te/cm}^2$ unter verschiedenen uniaxialen Zugspannungen entlang $\langle 100 \rangle$.

dass die thermische Energie bei Raumtemperatur für einen Wechsel der Gitterplätze von Indium nicht ausreicht. Der spannungsinduzierte Feldgradient ist aufgrund der tetragonalen Verzerrung des Gitters bei Zug entlang einer $\langle 100 \rangle$ -Achse axialsymmetrisch, d.h. $\eta = 0$. Interessant ist, dass die Indiumsonden auch im entspannten Zustand einem geringen Feldgradienten ausgesetzt sind. Die zugehörige Wechselwirkungsfrequenz beträgt $\nu_{Q_0} = 0,87 \text{ MHz}$ und kann eine Folge von implantationsbedingten Verspannungen innerhalb des Kristalls sein.

Wie aus den PAC-Spektren außerdem zu entnehmen ist, bleibt die charakteristische Form des Wechselwirkungsmusters der In-Te-Komplexe auch bei Erhöhung der Zugspannung erhalten, so dass man daraus bestätigen kann, dass die Spannung keinen Einfluss auf die Pärchen hat.

Desweiteren wird eine polykristalline Frequenz angefügt, die den Anteil (hier: $f_{poly} = 39 \%$) der Sondenkerne beschreibt, die uneinheitlichen elektrischen Feldgradienten ausgesetzt sind. Sie befinden sich in stark gestörter Umgebung, evtl. sogar in teilweise amorphem Silizium, wenn die Implantationsschäden nicht vollständig

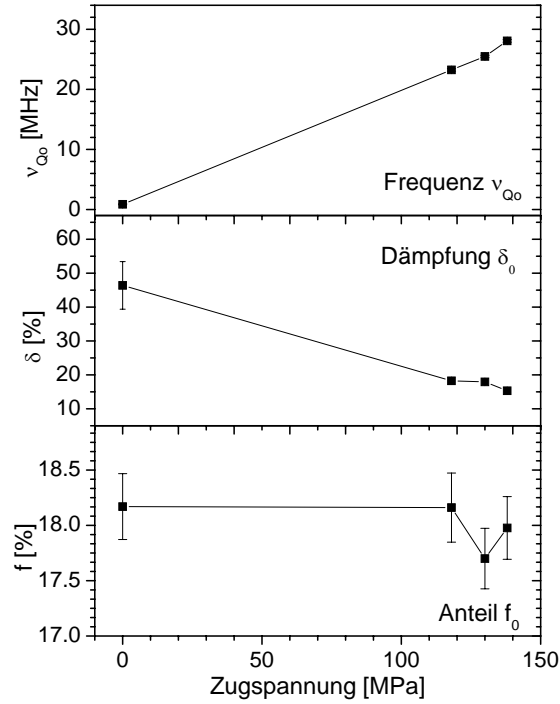


Abbildung 4.13: Fitparameter für ^{111}In in Silizium, dotiert mit $5 \cdot 10^{13} \text{ Te/cm}^2$ unter verschiedenen uniaxialen Zugspannungen entlang $\langle 100 \rangle$.

Zugspannung [MPa]	0	118	130	138
ν_{Q_0} [MHz]	0,87(2)	23,2(2)	25,5(3)	28,1(3)
δ_0 [%]	46(7)	18(1)	18(1)	15(1)
f_0 [%]	18,2(3)	18,2(3)	17,7(3)	18,0(3)
η_0	0,0	0,0	0,0	0,0
ν_{Q_1} [MHz]	447(4)	447(4)	447(4)	447(4)
δ_1 [%]	0,020(2)	0,020(2)	0,020(2)	0,020(2)
f_1 [%]	42,9(3)	42,8(3)	42,7(3)	42,9(3)
η_1	0,0	0,0	0,0	0,0
f_{poly} [%]	38,9(3)	39,0(3)	39,6(3)	39,1(3)
Additive Konstante	-0,0060(2)	-0,0099(2)	-0,0030(2)	0,0033(2)
$A_{22}^{app.}$	-0,1225	-0,1225	-0,1225	-0,1225

Tabelle 4.7: Fitergebnisse für ^{111}In in Silizium, dotiert mit $5 \cdot 10^{13} \text{ Te/cm}^2$ unter verschiedenen uniaxialen Zugspannungen entlang $\langle 100 \rangle$.

ausgeheilt werden konnten. Dieser Anteil soll hier nicht tiefergehend diskutiert werden. Die erhaltenen Fitparameter sind in Tab. 4.7 wiedergegeben.

Zugabhängige Messungen entlang einer $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse

Um die Zugabhängigkeit des spannungsinduzierten Gitterfeldgradienten in Te-dotiertem Silizium entlang einer $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse zu untersuchen, implantierten wir eine Tellurdosis von $1 \cdot 10^{13} \text{ Te/cm}^2$.

Bei dieser Messreihe konnten nur zwei verschiedene Stärken der Zugspannung realisiert werden. Beim Aufbringen auf den dritten Probenhalter zerbrach die Probe. Im Folgenden soll nur auf die für unsere Messungen relevante spannungsinduzierte Frequenz eingegangen werden.

Auch entlang einer $\langle 111 \rangle$ -Zugachse erhalten wir im ungebogenen Zustand der Probe schon eine Wechselwirkungsfrequenz von $\nu_{Q_0} = 0,54 \text{ MHz}$. Legt man nun von außen eine uniaxiale Zugspannung an, so steigt diese Frequenz zwar geringfügig an (Abb. 4.14), kommt aber dennoch nicht über einen Wert von $\nu_{Q_0} = 0,71 \text{ MHz}$ bei 188 MPa hinaus. Jedoch muss erwähnt werden, dass selbst Zugspannungen von 171 bzw. 188 MPa, wie sie hier auftreten, vergleichsweise hoch sind. Im Falle einer $\langle 100 \rangle$ -Zugachse haben wir schon bei einer Zugspannung von „nur“ 138 MHz eine Frequenz von 28 MHz erhalten. Desweiteren ist anzumerken, dass die spannungsinduzierten Frequenzen ziemlich hohe Dämpfungen von 50–60% aufweisen. Hier scheinen die Sondenkerne uneinheitlichen Feldgradienten in einer gestörten Umgebung ausgesetzt zu sein. Die Fitergebnisse sind in Tab. 4.8 angegeben.

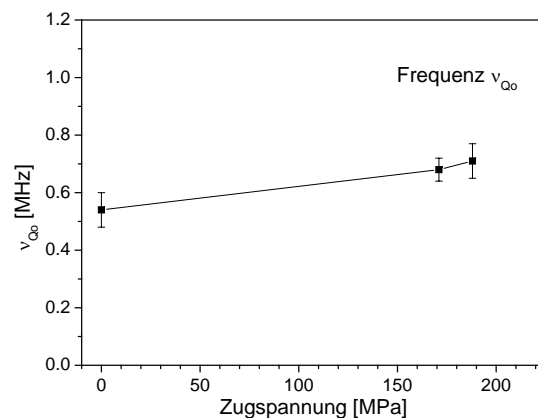


Abbildung 4.14: Zugabhängigkeit der spannungsinduzierten Frequenz am Ort von ^{111}In in Silizium, dotiert mit $1 \cdot 10^{13} \text{ Te/cm}^2$ entlang einer $\langle 111 \rangle$ -Zugachse.

Zugspannung [MPa]	0	171	188
ν_{Q_0} [MHz]	0,54(6)	0,68(4)	0,71(6)
δ_0 [%]	51(7)	57(8)	49(7)
f_0 [%]	28,9(2)	29,4(3)	29,9(3)
η_0	0,0	0,0	0,0
ν_{Q_1} [MHz]	447(4)	447(4)	447(4)
δ_1 [%]	0,29(2)	0,33(3)	0,29(1)
f_1 [%]	34,0(6)	34,6(6)	34,9(6)
η_1	0,0	0,0	0,0
f_{poly} [%]	37,1(8)	36,0(9)	35,2(8)
Additive Konstante	-0,0128(2)	-0,0105(2)	-0,0101(2)
$A_{22}^{app.}$	-0,1225	-0,1225	-0,1225

Tabelle 4.8: Fitergebnisse für ^{111}In in Silizium, dotiert mit $1 \cdot 10^{13} \text{ Te/cm}^2$ unter verschiedenen uniaxialen Zugspannungen entlang $\langle 111 \rangle$.

Dosisabhängige Messungen entlang einer $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse

Um den Einfluss der implantierten Tellurdosis auf den spannungsinduzierten Gitterfeldgradienten zu untersuchen, wurden mehrere Siliziumproben unterschiedlich stark dotiert. Die Implantationsdosen der Telluratome reichen von $5 \cdot 10^{13}$ – $2 \cdot 10^{15} \text{ Te/cm}^2$. Diesmal wurden die Proben auf ein und denselben Probenhalter mit dem Krümmungsradius von $R = 55 \text{ mm}$ gespannt. Mit diesem erreicht man entlang einer $\langle 100 \rangle$ -Zugrichtung eine Spannung von 118 MPa. Die beobachteten PAC-Spektren sind in Abb. 4.16 dargestellt und die zugehörigen Fitparameter in Tab. 4.9 zusammengefasst.

Zunächst ist wieder die charakteristische Frequenz von $\nu_{Q_1} = 447 \text{ MHz}$ der In-Te-Komplexe zu sehen. Der Anteil dieser Frequenz liegt je nach Probe im Bereich von 43–48%. Auffällig ist, dass bei den beiden Proben mit hoher Tellurdosis (3. und 4. Spektrum in Abb. 4.16) die Frequenz nicht so ausgeprägt und wohldefiniert ist wie bei den beiden Proben mit geringerer Dosis implantierter Telluratome. Es ist möglich, dass es bei zu hohen Konzentrationen zu Wechselwirkungen zwischen den Fremdatomen kommt, was zu verschiedenen EFGs in der unmittelbaren Sondenumgebung führt.

Der Anteil der substitutionellen Sondenkerne, die kein Telluratom eingefangen haben, beträgt bei dieser Messreihe 13–18%. Diese donatorfreien Indiumatome reagieren auf die von außen angelegte uniaxiale Zugspannung. Deutlich ist zu erkennen, dass die entsprechende Wechselwirkungsfrequenz ν_{Q_0} mit zunehmender

Dosis [Atome/cm ²]	5·10 ¹³	1·10 ¹⁴	1·10 ¹⁵	2·10 ¹⁵
ν_{Q_0} [MHz]	23,2(2)	22,5(2)	20,9(2)	20,8(2)
δ_0 [%]	18(1)	21(1)	8(1)	14(1)
f_0 [%]	18,2(3)	15,5(2)	12,7(3)	13,0(2)
η_0	0,0	0,0	0,0	0,0
ν_{Q_1} [MHz]	447(4)	447(4)	447(4)	447(4)
δ_1 [%]	0,020(2)	0,020(2)	0,020(2)	0,020(2)
f_1 [%]	42,8(3)	46,7(2)	46,3(3)	47,7(2)
η_1	0,0	0,0	0,0	0,0
f_{poly} [%]	39,0(3)	37,8(2)	41,0(3)	39,3(2)
Additive Konstante	-0,0099(2)	-0,0057(1)	0,0185(2)	0,0222(2)
$A_{22}^{app.}$	-0,1225	-0,1225	-0,1225	-0,1225

Tabelle 4.9: Fitergebnisse der Dosisabhängigkeit für ¹¹¹In in Silizium, dotiert mit Te unter einer uniaxialen Zugspannung von 118 MPa entlang $\langle 100 \rangle$.

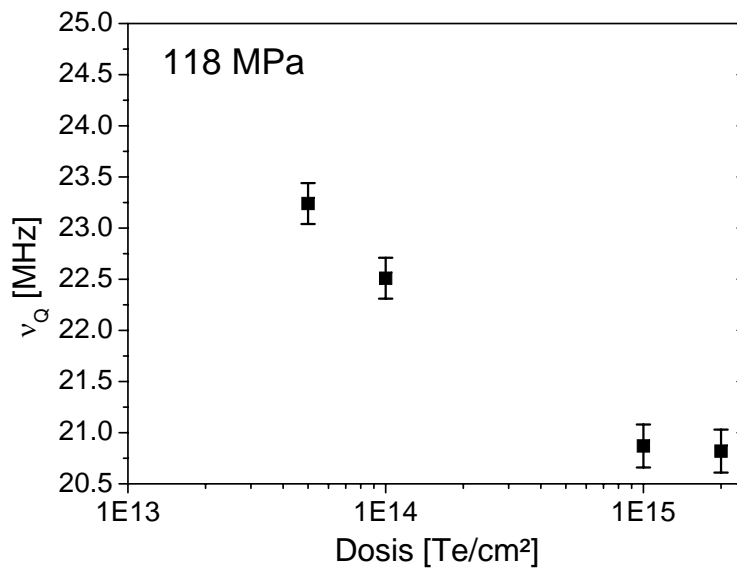


Abbildung 4.15: Dosisabhängigkeit der spannungsinduzierten Frequenz am Ort von ¹¹¹In in Silizium, dotiert mit Te unter einer uniaxialen Zugspannung von 118 MPa entlang $\langle 100 \rangle$.

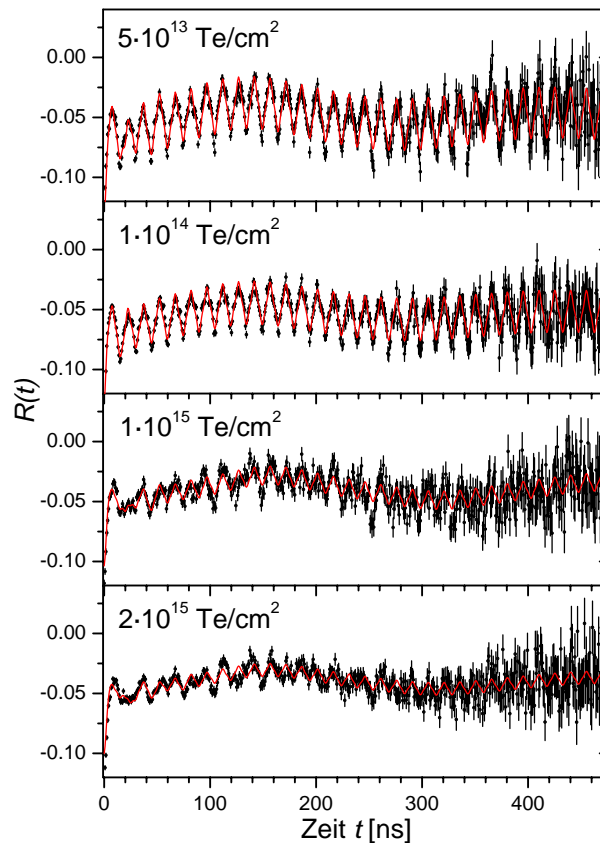


Abbildung 4.16: PAC-Spektren der Dosisabhängigkeit für ^{111}In in Silizium, dotiert mit Te unter einer uniaxialen Zugspannung von 118 MPa entlang $\langle 100 \rangle$.

Dosis implantierter Telluratome abnimmt (Abb. 4.16 und 4.15). Der spannungsinduzierte EFG besitzt hierbei wieder aufgrund der tetragonalen Verzerrung der kubischen Einheitszelle bei Zug entlang $\langle 100 \rangle$ eine Axialsymmetrie.

Der polykristalline Anteil für Sondenkerne in nicht definierter Umgebung beträgt bei den hier vermessenen Proben 38–41 %.

Dosisabhängige Messungen entlang einer $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse

Um den Einfluss der implantierten Tellurdosis auf den spannungsinduzierten EFG entlang einer $\langle 111 \rangle$ -Richtung zu studieren, werden Siliziumproben unterschiedlich stark dotiert. Die jeweiligen Implantationsdosen sind in Tab. 4.6 zu finden. Anschließend werden die Proben auf den Probenhalter mit dem Krümmungsradius $R = 55 \text{ mm}$ mit der implantierten Fläche nach außen gebogen. Auf diese Weise erhält man entlang einer $\langle 111 \rangle$ -Richtung eine uniaxiale Zugspannung von 171 MPa.

Dosis [Atome/cm ²]	1·10 ¹³	1·10 ¹⁴	5·10 ¹⁴	1·10 ¹⁵
ν_{Q_0} [MHz]	0,68(4)	1,22(6)	0,57(6)	0,73(4)
δ_0 [%]	57(8)	87(6)	102(14)	63(4)
f_0 [%]	29,4(3)	21,1(3)	20,1(3)	18,4(1)
η_0	0,0	0,0	0,0	0,0
ν_{Q_1} [MHz]	447(4)	447(4)	447(4)	447(4)
δ_1 [%]	0,33(3)	0,10(2)	33(1)	52(3)
f_1 [%]	34,6(6)	26,9(7)	54,3(7)	47,0(3)
η_1	0,0	0,0	0,0	0,0
f_{poly} [%]	36,0(9)	52(1)	25,6(7)	34,6(4)
Additive Konstante	-0,0105(2)	0,0252(2)	0,0016(3)	-0,0031(1)
$A_{22}^{app.}$	-0,1225	-0,1225	-0,1225	-0,1225

Tabelle 4.10: Fitergebnisse der Dosisabhängigkeit der spannungsinduzierten Frequenz am Ort von ¹¹¹In in Silizium, dotiert mit Te unter einer uniaxialen Zugspannung von 171 MPa entlang $\langle 111 \rangle$.

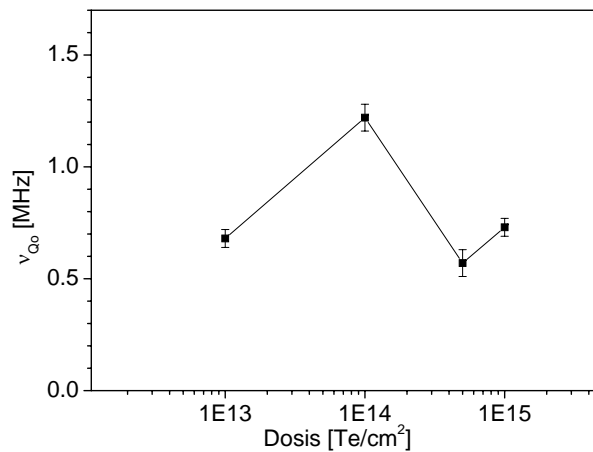


Abbildung 4.17: Dosisabhängigkeit der spannungsinduzierten Frequenz am Ort von ¹¹¹In in Silizium, dotiert mit Te unter einer uniaxialen Zugspannung von 171 MPa entlang $\langle 111 \rangle$.

Im Falle einer $\langle 111 \rangle$ -Zugachse ist die spannungsinduzierte Wechselwirkungsfrequenz sehr gering. Sie nimmt für die unterschiedlich dotierten Proben Werte zwischen 0,57 MHz und 1,22 MHz an (Abb. 4.17). In dieser Größenordnung liegen die Frequenzen aber auch schon in ungebogenem Zustand der Probe. Deshalb ist nicht sicher, dass der zugehörige EFG von der extern angelegten Zugspannung verursacht wird. Die intuitive Annahme, dass eine hohe Dosis implantierter Telluratome auch automatisch zu einer größeren Gitterverzerrung in der unmittelbaren Sondenumgebung und somit auch zu größeren, resultierenden Feldgradienten führt, lässt sich hier nicht bekräftigen.

Auch hier ist die spannungsinduzierte Frequenz sehr stark gedämpft mit Werten bis zu 100 %. Dies lässt wieder auf eine stark gestörte Sondenumgebung schließen.

4.2.2 As-dotiertes Silizium unter uniaxialer Zugspannung

In diesem Kapitel wird As-dotiertes Silizium unter einer externen uniaxialen Zugspannung untersucht. Dafür werden die Siliziumproben mit unterschiedlichen Arsen-Dosen bei einer Einschussenergie von 120 keV implantiert. Die verwendeten Implantationsdosen von Arsen sind in Tab. 4.11 zu finden. Anschließend werden die radioaktiven ^{111}In -Sondenkerne mit einer Energie von 160 keV implantiert und die implantationsbedingten Strahlenschäden bei 800°C für 10 min in der RTA ausgeheilt. Danach befinden sich nahezu alle Sondenkerne auf substitutionellen Gitterplätzen. Um Zugspannungen in unterschiedliche Kristallrichtungen zu erzeugen, werden die $7 \times 20 \text{ mm}^2$ großen Proben so gesägt, dass die Längskanten entlang verschiedener Kristallachsen liegen.

Probe	As-Dosis [Atome/cm ²]	Längskante
In-As-Si2	$5 \cdot 10^{13}$	senkr. zu $\langle 111 \rangle$
In-As-Si16	$5 \cdot 10^{13}$	$\langle 100 \rangle$
In-As-Si18	$1 \cdot 10^{13}$	$\langle 110 \rangle$
In-As-Si19	$5 \cdot 10^{13}$	$\langle 110 \rangle$
In-As-Si20	$1 \cdot 10^{14}$	$\langle 110 \rangle$
In-As-Si21	$1 \cdot 10^{14}$	$\langle 110 \rangle$

Tabelle 4.11: Arsen-Implantationsdosen in Silizium

Zugabhängige Messungen entlang einer $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse

Zur Untersuchung der Zugabhängigkeit des spannungsinduzierten elektrischen Feldgradienten entlang einer $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse wird eine mit Arsen dotierte

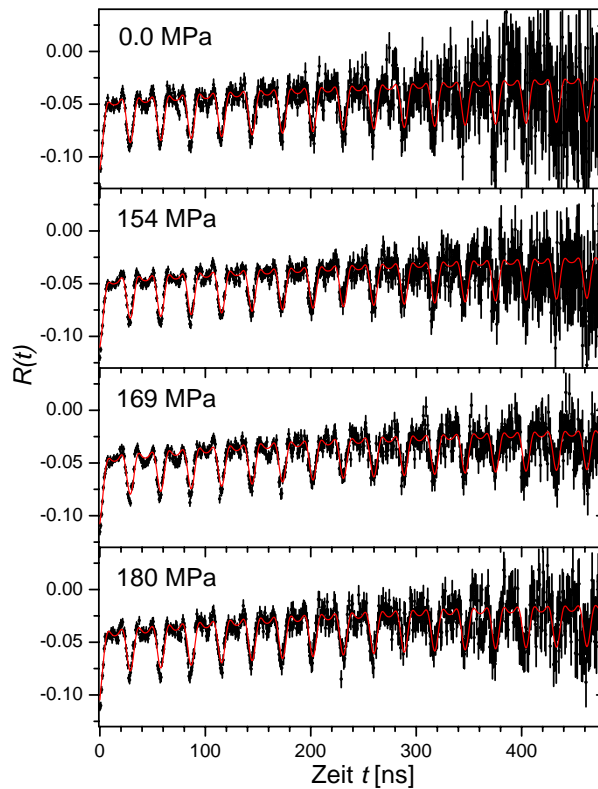


Abbildung 4.18: PAC-Spektren für ^{111}In in Silizium, dotiert mit $1 \cdot 10^{13} \text{ As/cm}^2$ unter verschiedenen uniaxialen Zugspannungen entlang $\langle 110 \rangle$.

Siliziumprobe auf Probenhalter verschiedener Krümmungsradien gespannt, um unterschiedliche Stärken von Spannungen zu erzeugen. Die implantierte Arsenosis beträgt in diesem Fall $1 \cdot 10^{13} \text{ As/cm}^2$. Die PAC-Spektren sind in Abb. 4.18 dargestellt, die zugehörigen Fitergebnisse sind in Tab. 4.12 zusammengefasst und in Abb. 4.19 graphisch dargestellt.

Direkt nach dem Tempern der Probe beobachtet man eine wohldefinierte Wechselwirkungsfrequenz ν_{Q_1} von 231(2) MHz (Abb. 4.18 oben), wobei es sich hier um einen Mittelwert handelt, der aus den Einzelmessungen bestimmt wurde. Der zugehörige Fehler beträgt 1% und resultiert aus Unsicherheiten bei der Zeiteichung der Apparatur. Diese Frequenz beschreibt die Wechselwirkung zwischen einem ^{111}In -Sondenkern und einem auf dem nächsten Nachbarplatz befindlichen Arsenatom [TESSE 03]. Der Anteil dieser Sonde-Donator-Komplexe beträgt bei der hier vermessenen Probe etwa 54%.

Legt man nun eine externe uniaxiale Zugspannung in $\langle 110 \rangle$ -Richtung an, so lässt sich auf den ersten Blick keine Veränderung feststellen. Aus dem Fit an die gemessenen PAC-Spektren erhält man allerdings eine zusätzliche, spannungsinduzierte Wechselwirkungsfrequenz ν_{Q_0} , die mit zunehmender Zugspannung eine

Zugspannung [MPa]	0	154	169	180
ν_{Q_0} [MHz]	2,14(2)	2,01(2)	3,06(3)	3,15(3)
δ_0 [%]	104(6)	100(1)	96(1)	98(1)
f_0 [%]	21,3(7)	21,1(5)	21,3(5)	20,9(5)
η_0	0,00	0,052(2)	0,099(3)	0,098(3)
ν_{Q_1} [MHz]	231(2)	231(2)	231(2)	231(2)
δ_1 [%]	0,020(7)	0,020(7)	0,020(7)	0,020(7)
f_1 [%]	55,2(7)	53,0(5)	53,0(5)	53,9(5)
η_1	0,0	0,0	0,0	0,0
f_{poly} [%]	23,5(7)	25,9(5)	25,7(5)	25,2(5)
Additive Konstante	0,0108(3)	0,0121(2)	0,0148(2)	0,0177(3)
A_{22}^{app}	-0,1225	-0,1225	-0,1225	-0,1225

Tabelle 4.12: Fitergebnisse für ^{111}In in Silizium, dotiert mit $1 \cdot 10^{13}$ As/cm² unter verschiedenen uniaxialen Zugspannungen entlang $\langle 110 \rangle$.

leicht ansteigende Tendenz hat. Der Anteil der substitutionellen, donatorfreien Indiumatome, der dieser Wechselwirkung unterliegt, beträgt ca. 21 % und bleibt innerhalb der Fehler während der ganzen Messreihe konstant. Die Dämpfung der spannungsinduzierten Frequenz ist mit 100 % au allend groß. Dies lässt auf eine weite Verteilung verschiedener Feldgradienten an den Orten der Sondenatome schließen.

Aufgrund der rhombischen Verzerrung des Gitters bei einer Zugspannung entlang $\langle 110 \rangle$ erwartet man einen nicht-axialsymmetrischen EFG, der mit zunehmender Spannung ansteigt (siehe Abb. 4.19). Der Grund hierfür ist, dass die Ladungssymmetrie in unmittelbarer Umgebung der Sondenkerne mit anliegendem Zug immer stärker gebrochen wird.

Desweiteren ist anzunehmen, dass sich die Probe auch ohne äußere Einflüsse in einem internen Spannungszustand befindet. Ein deutlicher Hinweis hierfür ist eine Frequenz von $\nu_{Q_0}=2,14(2)$ MHz im unbogenen Zustand der Probe.

Wie auch schon bei den In-Te-Komplexen bleibt die charakteristische Frequenz der In-As-Paare auch unter Einfluss einer uniaxialen Zugspannung unverändert.

Als dritter Anteil wird beim Fit eine polykristalline Frequenz angepasst, die denjenigen Teil der Sondenkerne beschreibt, der sich auf nicht definierten Plätzen im Kristallgitter befindet. In diesem Fall beträgt er ca. 25 %.

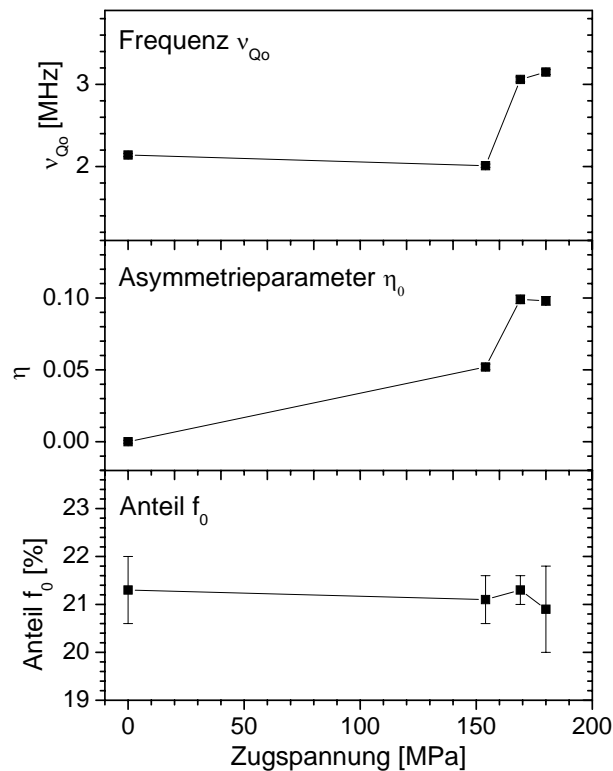


Abbildung 4.19: Fitparameter für ^{111}In in Silizium, dotiert mit $1 \cdot 10^{13} \text{ As/cm}^2$ unter verschiedenen uniaxialen Zugspannungen entlang $\langle 110 \rangle$.

Zugabhängige Messungen entlang einer $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse

Im Falle einer uniaxialen Zugspannung entlang einer $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse bei einer mit Te-dotierten Siliziumprobe (implantierte Dosis: $5 \cdot 10^{13} \text{ Te/cm}^2$) sind die in Abb. 4.20 dargestellten PAC-Spektren zu beobachten. Hier konnten nur zwei Spannungen erzeugt werden, da die Probe bei Anlegen eines stärkeren Zuges zerbrochen ist. Im Folgenden soll nur die für uns interessante spannungsinduzierte Frequenz besprochen werden.

Auch bei einer $\langle 100 \rangle$ -Zugachse lässt sich ein spannungsinduzierter EFG beobachten. Die zugehörige Wechselwirkungsfrequenz ν_{Q_0} nimmt bis zum Bruch der Probe in reproduzierbarer Weise mit der außen angelegten uniaxialen Zugspannung zu (Abb. 4.21). Auch im entspannten Zustand der Sondenkerne ist eine Frequenz von $\nu_{Q_0} = 1,23(1) \text{ MHz}$ zu messen. Diese probeninterne Spannung ist auf implantationsbedingte, lokale Gitterverzerrungen in der unmittelbaren Umgebung der Sondenkerne zurückzuführen. Die spannungsinduzierte Frequenz ist sehr stark gedämpft ($\delta_0 > 230 \%$), was ein Indiz für uneinheitliche Feldgradienten in einer stark gestörten Sondenumgebung ist. Wie bei einer tetragonalen Verzerrung des Gitters bei Zug in $\langle 100 \rangle$ -Richtung erwartet, ist der aus der Zugspannung re-

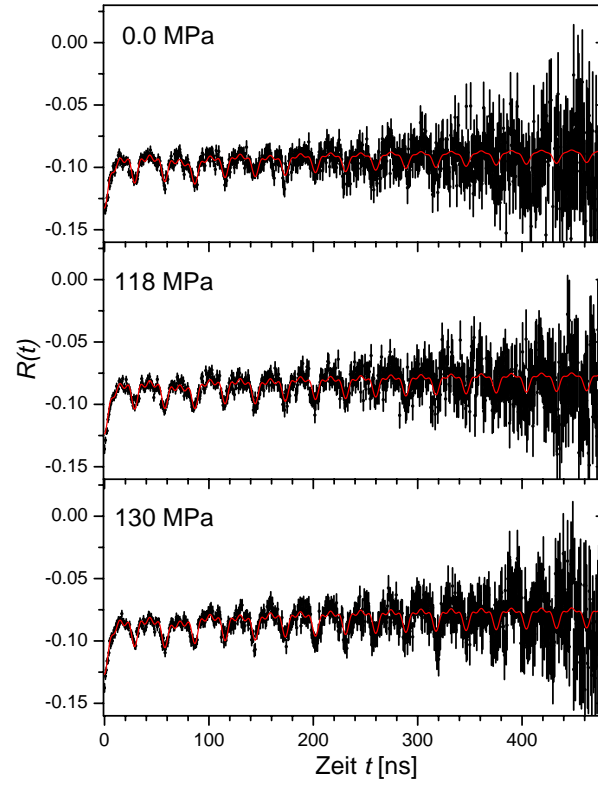


Abbildung 4.20: PAC-Spektren für ^{111}In in Silizium, dotiert mit $5 \cdot 10^{13} \text{ As/cm}^2$ unter verschiedenen uniaxialen Zugspannungen entlang $\langle 100 \rangle$.

Zugspannung [MPa]	0	118	130
ν_{Q_0} [MHz]	1,23(1)	1,71(2)	2,40(2)
δ_0 [%]	239(20)	235(14)	232(5)
f_0 [%]	31(1)	31(1)	31(1)
η_0	0,0	0,0	0,0
ν_{Q_1} [MHz]	231(2)	231(2)	231(2)
δ_1 [%]	0,6(1)	0,3(1)	0,2(1)
f_1 [%]	32(2)	32(2)	31(2)
η_1	0,0	0,0	0,0
f_{poly} [%]	37(2)	37(2)	38(2)
Additive Konstante	-0,0828(2)	-0,0742(2)	-0,0742(2)
$A_{22}^{app.}$	-0,1225	-0,1225	-0,1225

Tabelle 4.13: Fitergebnisse für ^{111}In in Silizium, dotiert mit $5 \cdot 10^{13} \text{ As/cm}^2$ unter verschiedenen uniaxialen Zugspannungen entlang $\langle 100 \rangle$.

sultierende Feldgradient axialsymmetrisch ($\eta_0 = 0$). Die angefitzten, additiven Konstanten sind bei dieser Messreihe recht hoch, was auf eine räumliche Dejustierung der Probe relativ zum Detektorsystem hindeutet. Die Fitergebnisse sind in Tab. 4.13 zu finden.

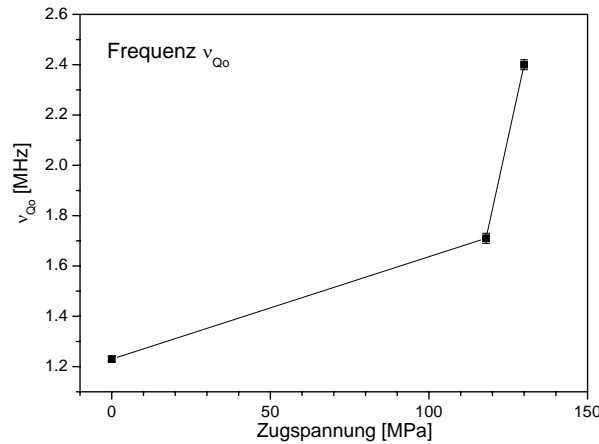


Abbildung 4.21: Spannungsinduzierte Frequenz am Ort von ^{111}In in Silizium, dotiert mit $5 \cdot 10^{13} \text{ As/cm}^2$ unter Zug entlang $\langle 100 \rangle$.

Zug senkrecht zu $\langle 111 \rangle$

Bei der folgenden Messung wurde eine Siliziumprobe mit Arsen implantiert (Dosis: $5 \cdot 10^{13} \text{ As/cm}^2$) und entlang einer Achse gebogen, die senkrecht zu einer $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse liegt. Diese Probe wurde auf einen Probenhalter mit einem Krümmungsradius von $R = 43 \text{ mm}$ gespannt. Da hier nicht entlang einer Hauptachse im Kristall gebogen wurde, lässt sich die hier erzeugte Zugspannung nur sehr schwer abschätzen, weil der Elastizitätsmodul nicht bekannt ist. Die mit dem vorliegenden Probenhalter entlang einer $\langle 100 \rangle$ -Achse erzeugte Zugspannung würde 151 MPa betragen, für eine $\langle 111 \rangle$ -Richtung wären es dagegen 218 MPa . Die Zugachse senkrecht zu $\langle 111 \rangle$ schließt mit einer weiteren $\langle 111 \rangle$ -Achse einen Winkel von 20° ein, mit einer $\langle 100 \rangle$ -Achse bildet sie einen Winkel von 35° . Folglich liegt sie näher an einer $\langle 111 \rangle$ -Achse. Eine Abschätzung für die erzeugte Zugspannung in einer Richtung senkrecht zur $\langle 111 \rangle$ -Achse wäre somit ca. 190 MPa . Ein weiterer Grund, warum die genaue Zugspannung nicht berechnet werden kann, ist die Abhängigkeit des Elastizitätsmoduls von der implantierten Dosis der Dotierungsatome. Auf diesen Aspekt wird später noch genauer eingegangen.

In Abb. 4.22 oben ist das PAC-Spektrum der ungebogenen Probe zu sehen. Hier lässt sich eine Frequenz von $1,70(2) \text{ MHz}$ beobachten. Bei dem sich darunter befindlichen Spektrum wurde eine uniaxiale Zugspannung von etwa 190 MPa erzeugt (s.o.). Neben der die In-As-Paare charakterisierenden Frequenz ist nun

deutlich eine zusätzliche Frequenz von 25,1 MHz zu sehen. Der zugehörige Feldgradient resultiert aus der spannungsbedingten Verzerrung der kubischen Ladungssymmetrie um einen Sondenkern. Der Anteil der substitutionellen Sondenkerne, die keinen Komplex mit einem Arsenatom bilden und auf die externe Zugspannung reagieren, beträgt etwa 18 %.

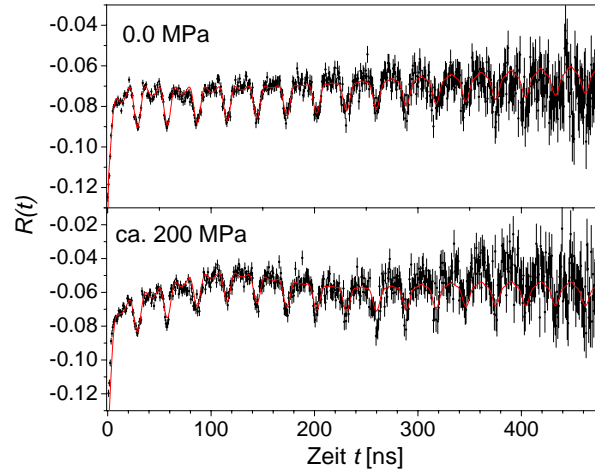


Abbildung 4.22: PAC-Spektren für ^{111}In in Silizium, dotiert mit $5 \cdot 10^{13} \text{ As/cm}^2$ unter uniaxialer Zugspannung senkrecht zu $\langle 111 \rangle$.

Dosisabhängige Messungen entlang einer $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse

Um den Einfluss der implantierten Dosis auf den spannungsinduzierten Feldgradienten für eine $\langle 110 \rangle$ -Zugrichtung zu untersuchen, wurden mehrere Siliziumproben mit verschiedenen Arsendosen implantiert. Die verwendeten Implantationsdosen deckten dabei einen Bereich von $1 \cdot 10^{13} - 1 \cdot 10^{15} \text{ As/cm}^2$ ab. Alle Proben wurden auf denselben Probenhalter mit dem Krümmungsradius von $R = 55 \text{ mm}$ gespannt. Entlang einer $\langle 100 \rangle$ -Zugachse erreicht man somit eine uniaxiale Zugspannung von 154 MPa. Die beobachteten PAC-Spektren sind in Abb. 4.24 dargestellt und die zugehörigen Fitparameter in Tab. 4.14 enthalten.

Zunächst beobachtet man wieder die für die In-As-Komplexe charakteristische Frequenz von $\nu_{Q_1} = 231(2) \text{ MHz}$. Der zugehörige Anteil dieser gebildeten Pärchen wächst mit der implantierten Dosis der As-Atome stetig an und beträgt je nach Probe 53–81 %.

Die spannungsinduzierte Wechselwirkungsfrequenz ν_{Q_0} ist im Falle einer Zugachse in $\langle 110 \rangle$ -Richtung sehr gering. Auch hier lässt sich keine eindeutige Abhängigkeit von der implantierten As-Dosis erkennen. Die Werte liegen alle in einem Bereich von $\nu_{Q_0} = 2,0 - 2,8 \text{ MHz}$. Diese können aber auch von den schon mehrfach

Dosis [Atome/cm ²]	1·10 ¹³	5·10 ¹³	1·10 ¹⁴	1·10 ¹⁵
ν_{Q_0} [MHz]	2,01(2)	2,05(2)	2,75(3)	2,13(2)
δ_0 [%]	100(1)	110(2)	101(2)	106(1)
f_0 [%]	21,1(5)	24,8(4)	25,6(3)	9,7(5)
η_0	0,052(2)	0,071(2)	0,080(3)	0,070(3)
ν_{Q_1} [MHz]	231(2)	231(2)	231(2)	231(2)
δ_1 [%]	0,020(7)	0,020(7)	0,022(6)	0,36(3)
f_1 [%]	53,0(5)	62,7(2)	65,2(3)	80,8(5)
η_1	0,0	0,0	0,0	0,0
f_{poly} [%]	25,9(5)	12,5(2)	9,2(3)	9,5(5)
Additive Konstante	0,0121(2)	0,0265(1)	0,0241(1)	0,0438(2)
A_{22}^{app}	-0,1225	-0,1225	-0,1225	-0,1225

Tabelle 4.14: Fitergebnisse der Dosisabhängigkeit für ¹¹¹In in Silizium, dotiert mit As, unter einer uniaxialen Zugspannung von 154 MPa entlang <110>.

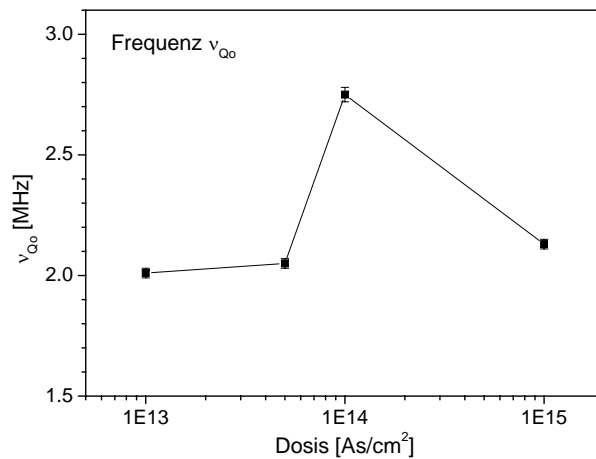


Abbildung 4.23: Dosisabhängigkeit der spannungsinduzierten Frequenz am Ort von ¹¹¹In in Silizium, dotiert mit As unter Zug entlang <110>.

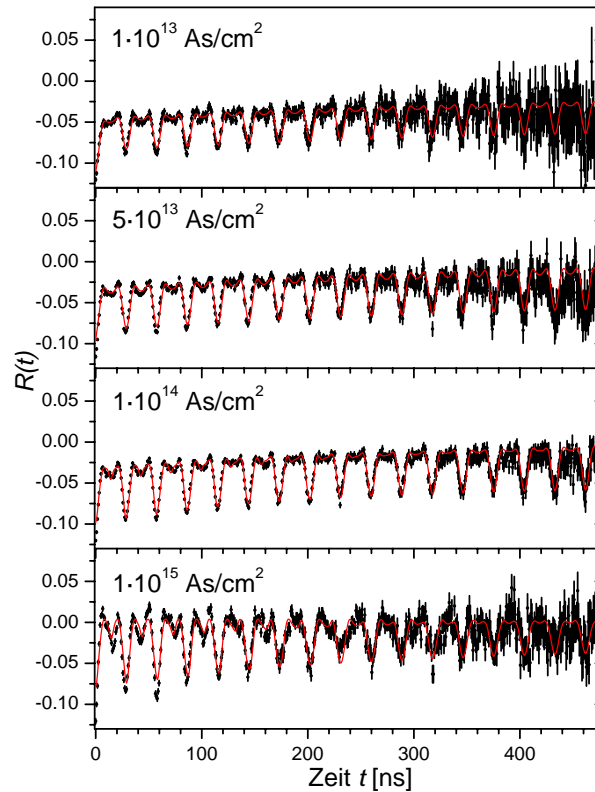


Abbildung 4.24: PAC-Spektren der Dosisabhängigkeit für ^{111}In in Silizium, dotiert mit As unter einer uniaxialen Zugspannung von 154 MPa entlang $\langle 110 \rangle$.

erwähnten implantationsbedingten, inneren Spannungen in der Probe resultieren. Das Auftreten solcher lokaler Gitterverzerrungen hängt von den jeweiligen Implantationsbedingungen ab, die von Probe zu Probe stark variieren können.

4.3 Diskussion der Messergebnisse

4.3.1 Diskussion der Zugabhängigkeit

Mit Hilfe der PAC-Messmethode konnte gezeigt werden, dass durch eine extern angelegte, uniaxiale Zugspannung ein elektrischer Gitterfeldgradient in Silizium erzeugt wird, welches mit verschiedenen Arten von Donatoren dotiert wurde. Wie eingangs schon berichtet, wurde bereits von Tessema [TESSE 03] eine Abhängigkeit dieses spannungsinduzierten EFG von der Art der implantierten Donatoratome beobachtet (vgl. Abb. 4.11). Um dieses Phänomen genauer zu untersuchen, wurden zugabhängige Messungen an Silizium durchgeführt, in das

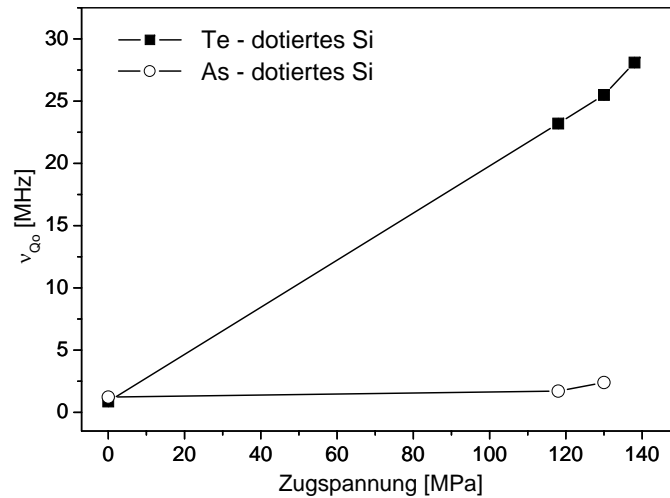


Abbildung 4.25: Spannungsinduzierte Frequenz am Ort von ^{111}In in Silizium in Abhängigkeit der uniaxialen Zugspannung entlang $\langle 100 \rangle$ bei Implantation von As bzw. Te. Die Fehler der Frequenz sind so klein, dass die entsprechenden Fehlerbalken nicht zu erkennen sind.

zusätzlich zum Sondenkern ^{111}In auch Arsen als einfacher und Tellur als zweifacher Donator implantiert wurde. Das Ergebnis der Messungen ist in Abb. 4.25 graphisch dargestellt. Zu sehen ist die spannungsinduzierte Frequenz in Abhängigkeit einer uniaxialen Zugspannung entlang $\langle 100 \rangle$, die auftritt, wenn die Probe in dieser Richtung gebogen wird.

Es ist deutlich zu erkennen, dass die Zugspannung einen größeren Einfluss auf das mit Tellur dotierte Silizium hat als auf das mit Arsen dotierte. Dies macht sich in einem starken Anstieg der spannungsinduzierten Wechselwirkungsfrequenz bemerkbar. Die näherungsweise lineare Zunahme des entsprechenden Feldgradienten ist dadurch zu erklären, dass die kubische Ladungssymmetrie um einen Sondenkern infolge der externen Zugspannung verzerrt wird. Die Stärke und Symmetrie des EFG ist dabei unmittelbar abhängig von der Verzerrung des Gitters.

Im Falle einer mit Arsen implantierten Siliziumprobe wächst die spannungsinduzierte Frequenz zwar auch mit der von außen angelegten Spannung, hier ist der Anstieg allerdings vergleichsweise gering. Eine mögliche Begründung für die unterschiedliche Reaktion auf die Spannung könnte in der unterschiedlichen Größe der implantierten Donatoratome liegen.

Ein weiteres Phänomen, das bei diesen Messungen zum Vorschein kam, ist, dass der Einfluss einer externen, uniaxialen Zugspannung auf den Siliziumkristall auch abhängig von der Lage der Zugachse ist. Betrachtet man beispielsweise die mit Tellur dotierten Siliziumproben, so treten bei einer Zugachse entlang $\langle 100 \rangle$ vergleichsweise große Wechselwirkungsfrequenzen von über 20 MHz auf. Im Falle

einer Zugspannung entlang $\langle 111 \rangle$ hingegen sind die spannungsinduzierten Frequenzen sehr gering: Im ungebogenen Zustand der Probe erhalten wir eine Frequenz von 0,54(6) MHz und auch bei einer Zugspannung von 188 MPa kommt sie nicht über 0,71(6) MHz hinaus.

Ein ähnliches richtungsabhängiges Verhalten zeigen auch die mit Arsen dotierten Siliziumproben: Während bei Zugachsen entlang $\langle 100 \rangle$ und $\langle 110 \rangle$ keine großen Frequenzen induziert werden ($\nu_{Q_0} = 3,15$ MHz bei 180 MPa), so konnte für eine Zugachse senkrecht zu $\langle 111 \rangle$ bei einer Spannung von 190 MPa eine Frequenz von 25,1 MHz beobachtet werden.

Diese großen Differenzen können sicherlich nicht allein durch die unterschiedlichen Atomgrößen der implantierten Donatoratome bedingt sein. Vielmehr ist hier die Anordnung der In-Donator-Komplexe innerhalb des Kristallgitters eine denkbare Erklärung dieses Verhaltens. Somit wäre es möglich, dass die Lage der In-Donator Paare relativ zu den Zugachsen einen Einfluss auf die elastischen Eigenschaften des Kristalls hat, z.B. in Form einer Verringerung oder Verstärkung des Elastizitätsmoduls.

Komplexe von Indium in Silizium mit Donatoren aus der V. Hauptgruppe wie beispielsweise Arsen sind bestens bekannt und ausführlich von Wichert et al. untersucht worden [WICH 86]. Sie bestehen aus einem substitutionellen Indiumatom und einem Arsenatom, das sich auf einem substitutionellen nächsten Nachbarplatz befindet. Aus Orientierungsmessungen ist bekannt, dass die Hauptkomponente V_{zz} des EFG von Komplexen dieser Art entlang der Verbindungslinie der beiden beteiligten Atome liegt, also entlang einer $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung verläuft.

Die Orientierung eines In-Te-Komplexes in Silizium ist hingegen anders: Sowohl Orientierungsmessungen mit der PAC-Messmethode als auch Channelling Experimente deuten darauf hin, dass das Telluratom im Siliziumgitter einen oktaedrischen Zwischengitterplatz einnimmt und der gebildete Komplex mit einem substitutionellen Indiumkern somit in einer $\langle 100 \rangle$ -Richtung verläuft [TESSE 03].

Wie bei den hier durchgeführten Messungen gezeigt werden konnte, wird bei den mit Tellur dotierten Siliziumproben ein relativ großer Gitterfeldgradient erzeugt, wenn man in Richtung der In-Te-Pärchen zieht, d.h. in Richtung einer $\langle 100 \rangle$ -Zugachse.

Im Vergleich dazu wird bei den mit Arsen implantierten Proben eine ausgeprägte, spannungsinduzierte Frequenz beobachtet, wenn man genau senkrecht zu den angeordneten In-As-Komplexen, also senkrecht zur $\langle 111 \rangle$ -Achse, zieht. Ob dieses Verhalten auch für andere implantierte Donatorarten gilt und was der genaue Grund dafür ist, muss in weiteren Untersuchungen noch geklärt werden.

Es soll noch einmal deutlich darauf hingewiesen werden, dass die externe, uniaxiale Zugspannung keinen Einfluss auf die Wechselwirkung der Indium-Donator-Komplexe in Silizium hat. Dies ist zumindest anhand der unveränderten charak-

teristischen Wechselwirkungsfrequenz dieser Pärchen in den PAC-Spektren anzunehmen. Ausschließlich die substitutionellen ^{111}In -Sondenkerne, die kein Donatoratom in der nächsten Nachbarschaft haben und somit ungebunden sind, reagieren auf eine von außen angelegte Spannung. Umso erstaunlicher ist die beobachtete Abhängigkeit des spannungsinduzierten EFG von der Art der implantierten Donatoratome.

Bei allen hier vermessenen Proben ist auch im ungebogenen Zustand eine geringe Wechselwirkungsfrequenz beobachtet worden. Dies ist ein Hinweis darauf, dass sich die Probe auch ohne äußere Einflüsse in einem inneren Spannungszustand befindet, der durch die Implantation der Sondenkerne und der Donatoren hervorgerufen wird.

Die implantierten ^{111}In -Sondenkerne befinden sich in einer sehr dünnen Schicht von etwa 50 nm, umgeben von intrinsischem Silizium-Substratmaterial. Die lokale Indiumkonzentration, die ungefähr 10^{18} At/cm^3 beträgt, ist für Halbleitermaterialien ziemlich hoch. Vergleicht man zudem die kovalenten Radien der Wirtsatome (Si: 111 pm) mit denen der implantierten Fremdatome (In: 144 pm, Te: 135 pm, As: 121 pm), so ist eine Gitterfehlانpassung zu erwarten. Dies führt zu einer lokalen Vergrößerung der Gitterkonstanten, so dass es innerhalb der implantierten Zone zu Materialspannungen kommt.

Der Einfluss von Bor-Fremdatomen in Silizium auf die Gitterkonstante wurde von Kucytowski und Wokulska [KUCY 05] untersucht. Es konnte gezeigt werden, dass die Gitterkonstante mit zunehmender Konzentration der Boratome linear abnimmt. Die Kontraktion des Gitters ist auf den kleineren kovalenten Radius des Boratoms zurückzuführen.

Obwohl Arsen einen größeren kovalenten Radius als Silizium hat, führt die Dotierung von Silizium mit Arsen nicht zu einer Vergrößerung der Gitterkonstanten. Tatsächlich wurde sogar eine leichte Reduzierung der Gitterkonstanten festgestellt, obwohl die As-Si Bindungslänge größer ist als die von Si-Si [ADEY 05].

Nach theoretischen Berechnungen mittels Dichte-Funktional-Theorie (DFT) von Adey et al. [ADEY 05] erwartet man, dass die Löslichkeit von Boratomen in Si durch eine biaxiale, kompressive Spannung verbessert werden kann. Dies kann im wesentlichen auf zwei Effekte zurückgeführt werden. Zum einen führt die kleinere Größe des Boratoms ohnehin zu einer Reduzierung der Gitterkonstanten. Dominanter zum anderen ist, dass die Bildungsenthalpie für substitutionelle Dotierungsatome eine Abhängigkeit von der Fermienergie besitzt. Durch die Erhöhung des Fermi-niveaus bei kompressiver Spannung wird die Löslichkeit von Boratomen deutlich verbessert. Für das größere Atom Arsen zeigen EXAFS (Extended X-Ray Absorption Fine Structure) Messungen an dotierten Proben, dass sich die Gitterkonstante nicht messbar ändert. Da Arsen als Donator fungiert, wird hier die Löslichkeit durch eine Zugspannung, also ein Absenken der Fermi-Energie begünstigt.

4.3.2 Diskussion der Dosisabhängigkeit

Die Ergebnisse der dosisabhängigen Messungen von dotiertem Silizium sind noch einmal in Abb. 4.26 zusammengefasst. Dargestellt ist die spannungsinduzierte Frequenz in Abhängigkeit der implantierten Dosen von Arsen bzw. Tellur.

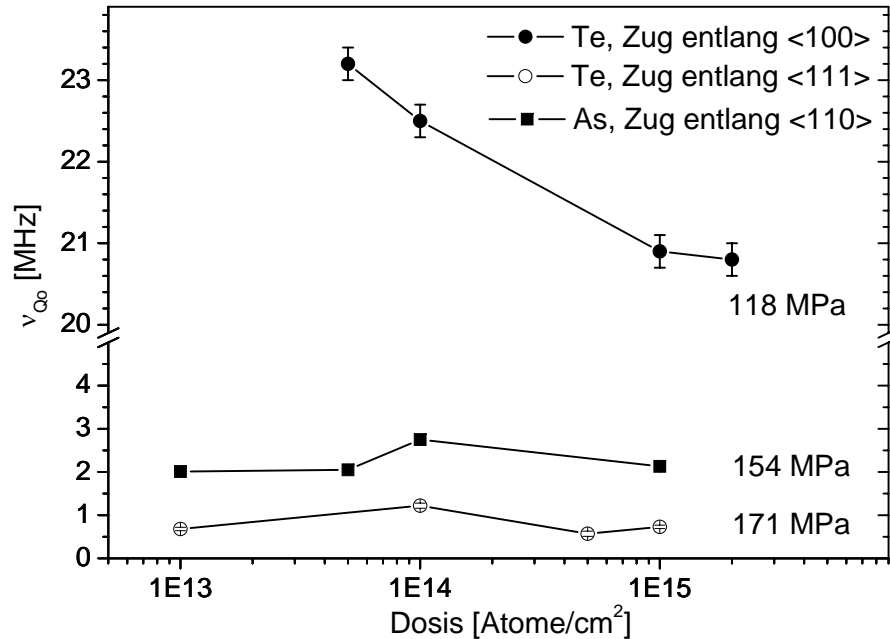


Abbildung 4.26: Spannungsinduzierte Frequenz am Ort von ¹¹¹In in Silizium in Abhängigkeit der implantierten Dosen von As bzw. Te bei gegebener Zugspannung entlang verschiedener Kristallachsen.

Biegt man eine Te-dotierte Siliziumprobe entlang einer <100>-Kristallachse, so ist deutlich eine Abnahme des spannungsinduzierten EFG mit zunehmender Dosis implantierter Te-Atome zu sehen. Hier liegt die Vermutung nahe, dass die Konzentration der implantierten Fremdatome nicht nur wie oben beschrieben die Gitterkonstante, sondern auch die elastischen Eigenschaften des Kristalls, d.h. den Elastizitätsmodul, ändert.

In Abb. 4.25 ist zu sehen, dass bei einer Te-dotierten Si-Probe entlang einer <100>-Zugachse die spannungsinduzierte Frequenz proportional zur angelegten Zugspannung ist. Diese wiederum lässt sich mit dem Hooke schen Gesetz berechnen, so dass folgende Relation gegeben ist:

$$\nu_Q \propto \sigma = E \cdot \frac{\Delta L}{L} \quad (4.1)$$

Die relative Längenänderung $\Delta L/L$ der gebogenen Probe ist hier konstant, da alle Proben auf dem Probenhalter mit dem Krümmungsradius von $R = 55$ mm

gespannt wurden. Somit wurde eine Zugspannung von 118 MPa erzeugt. Aus Abb. 4.26 entnimmt man, dass

$$\nu_Q \propto \frac{1}{\text{Dosis}}$$

Setzt man dies in Gl. 4.1 ein, so erhält man folgenden Zusammenhang:

$$\frac{1}{\text{Dosis}} \propto E \quad (4.2)$$

Folglich nimmt der Elastizitätsmodul bei gegebener Spannung mit zunehmender Tellurdosis ab. Dies gilt jedoch nur bei einer Te-dotierten Siliziumprobe, die entlang einer $\langle 100 \rangle$ -Richtung gebogen wird. Im Falle einer $\langle 111 \rangle$ -Zugachse ist im Rahmen des Messfehlers keine Veränderung des spannungsinduzierten, ohnehin sehr geringen Feldgradienten zu erkennen. Das gleiche Verhalten wird bei einer Arsen-dotierten Probe beobachtet.

Eine mögliche Erklärung dafür, warum einige Donatoren wie Te bei Zugachsen in bestimmten Richtungen das elastische Verhalten von Silizium verändern und wiederum einige nicht, gibt es zum jetzigen Zeitpunkt noch nicht. Hierzu sind weitere systematische Untersuchungen geplant.

Kapitel 5

Zusammenfassung und Ausblick

Für die Herstellung von Halbleiterbauelementen wie Transistoren und integrierten Schaltungen gewinnt das sog. *Strained Silicon*, also gedehntes Silizium, immer mehr an Bedeutung. Um weitere Fortschritte auf diesem Gebiet zu erzielen, ist es von großer technologischer Relevanz, Verspannungen jeglicher Art in Silizium systematisch zu untersuchen.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden durch einfaches Biegen von Siliziumproben externe uniaxiale Zugspannungen erzeugt. Die dazu hergestellten Probenhalter besitzen einen wohldefinierten Krümmungsradius, so dass die relativen Fehler der erzeugten Zugspannungen minimiert werden können und die Reproduzierbarkeit der Messungen gewährleistet ist.

Zunächst wurde mit der PAC-Methode der Einfluss einer uniaxialen Zugspannung auf intrinsisches Silizium untersucht. Dabei konnte das Auftreten eines spannungsinduzierten Feldgradienten aus früheren Messungen bestätigt werden. Dieser entsteht durch die spannungsbedingte Verzerrung der ursprünglich kubischen Ladungssymmetrie um einen substitutionellen ^{111}In -Sondenkern und nimmt wie erwartet linear mit der von außen angelegten Zugspannung zu.

Um der anisotropen Beschaffenheit der elastischen Eigenschaften Rechnung zu tragen, wurden die Zugspannungen entlang verschiedener Hauptkristallachsen gerichtet. Es zeigte sich, dass die Zunahme des spannungsinduzierten EFG in der Tat von der Lage der Zugachse im Kristall abhängig ist. So lässt sich ein Siliziumkristall entlang einer $\langle 100 \rangle$ -Richtung in Übereinstimmung mit dem Hooke schen Gesetz am leichtesten dehnen.

Um die Abhängigkeit des spannungsinduzierten EFG von der Dosis implantierter Donatoratome zu studieren, wurden Messungen an Silizium durchgeführt, das mit Arsen und Tellur dotiert war. Auch hier ist ein in reproduzierbarer Weise mit der Spannung ansteigender EFG zu beobachten. Neue Erkenntnisse wurden für Te-dotierte Siliziumproben gewonnen. So zeigte sich, dass der EFG bei einer Zugachse entlang $\langle 100 \rangle$ mit zunehmender Dosis implantierter Te-Atome abnimmt. Eine Erklärung hierfür ist, dass die dotierten Fremdatome die elasti-

schen Eigenschaften von Silizium in charakteristischer Weise beeinflussen und der Elastizitätsmodul in diesem Fall sinkt.

Ein weiterer interessanter Aspekt ist auch das unterschiedliche Verhalten von dotiertem Silizium in Bezug auf die Orientierung der Zugachse im Kristall. Es konnte gezeigt werden, dass bei einer uniaxialen Zugspannung entlang $\langle 111 \rangle$ in Te-dotiertem Silizium ein vergleichsweise schwacher Gitterfeldgradient induziert wird. Bei einer $\langle 100 \rangle$ -Zugachse hingegen ist der auftretende EFG um einen Faktor zehn größer. Ähnlich zeigt auch Silizium, das mit Arsen dotiert ist, eine Abhängigkeit des EFG von der Lage der Zugachse. So ist entlang einer $\langle 100 \rangle$ - und $\langle 110 \rangle$ -Kristallrichtung nur ein sehr geringer spannungsinduzierter EFG zu beobachten. Außerdem konnten wir im Falle einer $\langle 100 \rangle$ -Zugachse bei As-dotiertem Silizium im Rahmen der Messfehler keine Abhängigkeit des EFG von der Dosis implantierter Fremdatome feststellen. In jüngsten Messungen ließ sich allerdings bei einer uniaxialen Zugspannung senkrecht zu einer $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse in As-dotiertem Silizium ein vergleichsweise hoher EFG beobachten. Die hier auftretende Wechselwirkungsfrequenz ist um einen Faktor zehn größer als bei anderen Orientierungen der Zugachse. Aus diesem Grund sind weitere Messungen für eine Zugrichtung senkrecht zu $\langle 111 \rangle$ geplant. Vielleicht zeigt sich auch hier eine Abhängigkeit des EFG von der Dosis implantierter Arsenatome.

Bisher ist noch unklar, inwieweit die Orientierung der In-Donator Komplexe innerhalb des Siliziumkristalls für die unterschiedlichen Reaktionen und folglich auch für die Änderung der elastischen Eigenschaften bezüglich der Lage der Spannungsachse verantwortlich sind. Eine interessante Fragestellung hinsichtlich zukünftiger Messungen wäre sicherlich, ob die kristallographisch äquivalenten Anordnungen der In-Donator-Komplexe entgegen bisheriger Annahmen unterschiedliche Besetzungswahrscheinlichkeiten relativ zur Spannungsachse oder Probenoberfläche aufweisen.

Bei den hier vorgestellten Experimenten wurden ausschließlich uniaxiale Zugspannungen entlang einer bestimmten Kristallachse erzeugt. Geplante Messungen sollen den Einfluss von biaxialen Zugspannungen in Silizium untersuchen, die durch eine dünne, epitaktisch aufgebraute Siliziumschicht auf SiGe infolge der Gitterfehlpassung erzeugt werden. Solche biaxial verspannten Schichten werden auch bei der Herstellung heutiger Halbleiterbauelemente verwendet.

Literaturverzeichnis

- [ADEY 05] **J. Adey, R. Jones, P.R. Briddon**; *Enhanced dopant solubility in strained silicon*; Phys. stat. sol. (c) 2, No. 6, 1953–1957 (2005)
- [BARR 92] **N.P. Barradas**; *NNfit, the PAC MANual*; Lissabon (1992)
- [BART 02] **J. Bartels**; *Fremdatome in Silizium-Kavitäten untersucht mit der gestörten Winkelkorrelation*; Dissertation, Universität Bonn (2002)
- [BIER 80] **J.P. Biersack, L.G. Hagmark**; *A Monte Carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets*; Nucl. Instr. Meth. 174, 257–269 (1980)
- [BUTZ 89] **T. Butz**; *Analytic Perturbation Functions for Static Interactions in Perturbed Angular Correlations of γ -Rays*; Hyp. Int. 52, 189–228 (1989)
- [FRAU 65] **H. Frauenfelder, R.M. Steffen**; *Alpha-, Beta-, and Gamma-Ray Spectroscopy*; Vol. 2, Hrsg. K. Siegbahn, Amsterdam (1965)
- [KUCY 05] **J. Kucytowski, K. Wokulska**; *Lattice parameter measurements of boron doped Si single crystals*; Cryst. Res. Technol. 40, No. 4/5, 424–428 (2005)
- [MARX 90] **G. Marx**; *Aufbau und Test einer RTA - Kurzzeit-Temper-Anlage*; Diplomarbeit, Universität Bonn (1990)
- [MARX 95] **G. Marx**; *Akzeptor - Wasserstoff - Komplexe und spannungsinduzierte elektrische Feldgradienten in Silizium und Germanium*; Dissertation, Universität Bonn (1995)
- [TESSE 03] **G. Tessema Mola**; *Indium-impurity pairs in semiconductors and the study of the influence of uniaxial stress on defect complexes in silicon*; Dissertation, Universität Bonn (2003)
- [NEDE 02] **R. Nédélec**; *Rückstoßimplantation von ^{48}Cr und erste PAC Messungen mit der Sonde $^{48}\text{Cr}/^{48}\text{V}$* ; Diplomarbeit, Universität Bonn (2002)

- [PAUF 78] **P. Paufler, G.E.R. Schulze**; *Physikalische Grundlagen mechanischer Festkörpereigenschaften*; Bd. I, Vieweg, Braunschweig (1978)
- [SCHA 92] **T. Schaefer**; *Donator-Defektkomplexe in GaAs untersucht mit der γ - γ Winkelkorrelation unter Einsatz der Sonden ^{73}Se und ^{77}Br* ; Dissertation, Universität Bonn (1992)
- [SCHA 97] **G. Schatz, A. Weidinger**; *Nukleare Festkörperphysik*; B. G. Teubner, 3. Auflage (1997)
- [SKIM 53] **H.J. Mc Skimin**; *Measurement of elastic constants at low temperatures by means of ultrasonic waves - Data for silicon and germanium single crystals, and for fused silica*; J. Appl. Phys. 24, 988 (1953)
- [SZE 81] **S.M. Sze**; *Physics of Semiconductor Devices*; Wiley, New York (1981)
- [WICH 86] **T. Wichert**; *Formation of In-As complexes in Silicon Observed by the Perturbed-Angular-Correlation Technique*; Phys. Rev. Vol. 57 No. 14, 1757–1760 (1986)

Abbildungsverzeichnis

1.1	Die kubische Einheitszelle der Diamantstruktur	3
1.2	Energieniveaus für Donatoren und Akzeptoren in Silizium	5
1.3	Die Verformung eines Festkörpers durch Dehnung	5
2.1	Prinzip der γ - γ -Winkelkorrelation	10
2.2	Allgemeines Koordinatensystem	12
2.3	Quadrupolaufspaltung für ein Niveau mit $I = 5/2$	13
2.4	Zerfallsschema des Sondenkerns ^{111}In	14
2.5	Aufbau der 3-Detektor-Apparatur	15
2.6	Zuordnung der Spektren anhand der Detektorkombination	17
3.1	Lage der Kristallachsen und Laue-Aufnahme	20
3.2	SRIM-Simulation für die Implantationen	21
3.3	Erzeugung von uniaxialen Spannungen durch Biegen der Probe	23
3.4	Mikrometerschraube und Klappenprobenhalter	24
3.5	Schematischer Aufbau des Probenhalters	25
3.6	Der neue Probenhalter aus PVC	25
4.1	Detektoranordnung	28
4.2	PAC-Spektren für ^{111}In in Silizium, Zug entlang $\langle 100 \rangle$	29
4.3	Fitparameter für ^{111}In in Silizium, Zug entlang $\langle 100 \rangle$	30
4.4	PAC-Spektren für ^{111}In in Silizium, Zug entlang $\langle 110 \rangle$	31
4.5	Fitparameter für ^{111}In in Silizium, Zug entlang $\langle 110 \rangle$	32
4.6	PAC-Spektren für ^{111}In in Silizium, Zug entlang $\langle 111 \rangle$	33

4.7	Fitparameter für ^{111}In in Silizium, Zug entlang $\langle 111 \rangle$	34
4.8	PAC-Spektren für ^{111}In in Silizium, Druck entlang $\langle 111 \rangle$	35
4.9	Fitparameter für ^{111}In in Silizium, Druck entlang $\langle 111 \rangle$	36
4.10	Zugabhängigkeit des EFG für ^{111}In in Silizium	37
4.11	Zugabhängigkeit des EFG für ^{111}In in dotiertem Silizium	39
4.12	PAC-Spektren für Te-dotiertes Si, Zug entlang $\langle 100 \rangle$	41
4.13	Fitparameter für Te-dotiertes Si, Zug entlang $\langle 100 \rangle$	42
4.14	Zugabhängigkeit des EFG für Te-dotiertes Si, Zug entlang $\langle 111 \rangle$	43
4.15	Dosisabhängigkeit des EFG für Te-dotiertes Si, Zug entlang $\langle 100 \rangle$	45
4.16	PAC-Spektren Dosisabh. für Te-dotiertes Si, Zug entlang $\langle 100 \rangle$	46
4.17	Dosisabhängigkeit des EFG für Te-dotiertes Si, Zug entlang $\langle 111 \rangle$	47
4.18	PAC-Spektren für As-dotiertes Si, Zug entlang $\langle 110 \rangle$	49
4.19	Fitparameter für As-dotiertes Si, Zug entlang $\langle 110 \rangle$	51
4.20	PAC-Spektren für As-dotiertes Si, Zug entlang $\langle 100 \rangle$	52
4.21	Zugabhängigkeit des EFG für As-dotiertes Si, Zug entlang $\langle 100 \rangle$	53
4.22	PAC-Spektren für As-dotiertes Si, Zug senkr. $\langle 111 \rangle$	54
4.23	Dosisabhängigkeit des EFG für As-dotiertes Si, Zug entlang $\langle 110 \rangle$	55
4.24	PAC-Spektren Dosisabh. für As-dotiertes Si, Zug entlang $\langle 110 \rangle$	56
4.25	Zugabhängigkeit des EFG für As- und Te-dotiertes Si	57
4.26	Dosisabhängigkeit des EFG für As- und Te-dotiertes Si	60

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich ganz herzlich bei allen bedanken, die zum Entstehen dieser Arbeit beigetragen haben.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Priv. Doz. Dr. Reiner Vianden für die gute Betreuung dieser Arbeit. Ohne seine Hilfe und sein Interesse sowie seine Diskussionsbereitschaft bei der Interpretation der Messergebnisse wäre eine Diplomarbeit in dieser Form nicht möglich gewesen.

Herrn Prof. Dr. Karl Maier danke ich für die Übernahme des Koreferats.

Der Arbeitsgruppe Vianden danke ich für das tolle Arbeitsklima und die vielen unterhaltsamen Stunden im Büro. Jakob Penner danke ich besonders für die Hilfe in der Anfangsphase und seine interessierte Begleitung meiner Arbeiten. Ein herzliches Dankeschön gilt Riccardo Valentini für seine Hilfe beim Setzen der Graphiken und für die kleinen Aufmunterungen zwischendurch. Bei Thomas Geruschke und Makhsud Rasulbaev möchte ich mich für ihre Unterstützung jeglicher Art bedanken. Meinem lieben Freund Ronan Nédélec danke ich herzlich für die Einarbeitung in PAC-Messungen und das Durchsehen meines Manuskripts. Außerdem möchte ich mich bei ihm für die Motivationshilfen in schwierigen Phasen der Arbeit bedanken.

Ein außerordentlicher Dank geht an das Team des Bonner Isotopenseparators, ohne das diese Arbeit nicht zustande gekommen wäre. Mein Dank gilt Herrn Priv. Doz. Dr. Paul-Dieter Eversheim und ganz besonders Cornelia Noll, Siegfried Hinderlich und Albert Dahl, deren unermüdlicher Arbeitseinsatz die Durchführung der Experimente für diese Arbeit erst möglich gemacht haben.

Ich danke den vielen Helfern in den feinmechanischen und elektronischen Werkstätten sowie in den Sekretariaten.

Mein besonderer Dank gilt meiner Familie, die es mir durch ihre Unterstützung leicht gemacht hat, mich auf das Studium zu konzentrieren.