

Akzeptor - Wasserstoff - Komplexe und  
spannungsinduzierte elektrische Feldgradienten  
in Silizium und Germanium

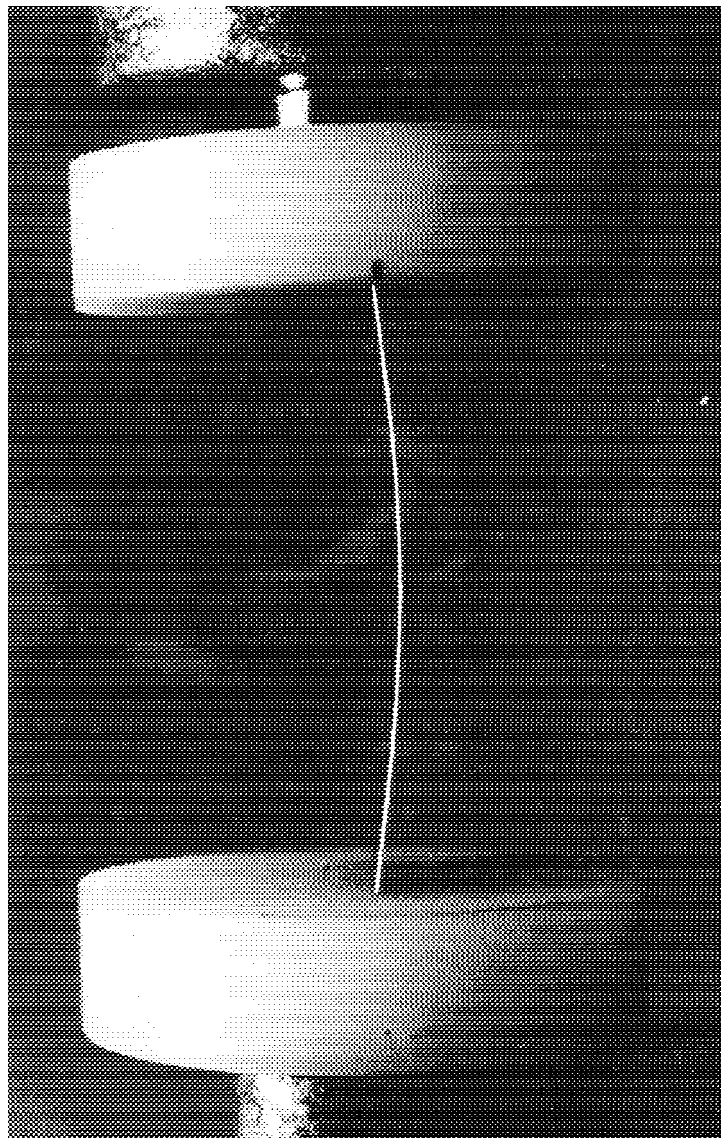
Inaugural - Dissertation  
zur  
Erlangung der Doktorwürde  
der  
Mathematisch - Naturwissenschaftlichen Fakultät  
der  
Rheinischen Friedrich - Wilhelms - Universität  
zu  
Bonn

vorgelegt von  
Guido Marx

Bonn 1995



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



Referent : Priv. Doz. Dr. R. Vianden

Korreferent : Prof. Dr. K. Maier



Meinen Eltern gewidmet



---

<b>I.</b>	<b>Einleitung</b> . . . . .	1
<b>II.</b>	<b>Die Elementhalbleiter Silizium und Germanium</b> . . . . .	3
II.1.	Die Halbleitereigenschaften von Si und Ge . . . . .	4
II.2.	Die elastischen Eigenschaften von Si und Ge . . . . .	8
II.3.	Das Verhalten von Wasserstoff in Si und Ge . . . . .	15
<b>III.</b>	<b>Die Meßmethode</b> . . . . .	17
III.1.	Die zeitlich differentielle Messung der Winkelkorrelation . . . . .	17
a.	Die ungestörte $\gamma$ - $\gamma$ Winkelkorrelation . . . . .	18
b.	Die Störung der $\gamma$ - $\gamma$ Winkelkorrelation durch einen elektrischen Feldgradienten . . . . .	19
c.	Die gestörte Winkelkorrelation im kubischen Einkristall . . . . .	26
III.2.	Der Sondenkern $^{111}\text{In} / ^{111}\text{Cd}$ . . . . .	28
III.3.	Der Aufbau der Meßapparatur . . . . .	30
III.4.	Die Auswertung der Meßergebnisse . . . . .	33
a.	Die Methode der R-Wert Bildung . . . . .	33
b.	Die Anpassung an die theoretische Störfunktion . . . . .	36
<b>IV.</b>	<b>Die Probenpräparation</b> . . . . .	47
VI.1.	Die Sondenimplantation . . . . .	47
VI.2.	Die Wasserstoffbeladung . . . . .	50
VI.3.	Die Erzeugung von uniaxialen Zug- und Druckspannungen . . . . .	51
<b>V.</b>	<b>Die Bildung von Akzeptor-Wasserstoff Komplexen in Ge</b> . . . . .	59
V.1.	Die Erzeugung von In-H-Komplexen im Hochdruckplasma . . . . .	61
V.2.	Die thermische Stabilität der In-H-Komplexe in Ge . . . . .	64
V.3.	Die Temperaturabhängigkeit der Wechselwirkungsfrequenzen . . . . .	68
V.4.	Die Orientierungsmessungen . . . . .	71
V.5.	Diskussion der Meßergebnisse . . . . .	73

<b>VI.</b>	<b>Die Erzeugung eines spannungsinduzierten elektrischen Feldgradienten</b>	79
VI.1.	Die Symmetrie der Sondenumgebung	81
VI.2.	Silizium unter uniaxialer Zugspannung	83
	a. entlang einer $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse	84
	b. entlang einer $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse	87
	c. entlang einer $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse	90
VI.3.	Die Orientierung des spannungsinduzierten EFG	93
VI.4.	Berechnung des EFG nach dem Punktladungsmodell	97
VI.5.	Diskussion der Meßergebnisse	103
<b>VII.</b>	<b>In-H-Komplexe in Si und Ge unter uniaxialer Druck- bzw. Zugspannung</b>	107
VII.1	In-H-Komplexe in Si unter uniaxialer Zugspannung	108
	a. entlang einer $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse	109
	b. entlang einer $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse	116
	c. entlang einer $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse	120
VII.2.	In-H-Komplexe in Ge unter uniaxialer	
	a. Zug-/Druckspannung entlang einer $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse	129
	b. Zugspannung entlang einer $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse	135
VII.3.	Diskussion der Meßergebnisse	139
<b>VIII.</b>	<b>Zusammenfassung</b>	147
<b>IX.</b>	<b>Anhang</b>	149
IX.1.	$s_n^{\text{eff}}$ -Koeffizienten für spezielle Detektororientierungen	150
IX.2.	Bestimmung der Detektorwinkel im Hauptachsensystem des EFG	158
	<b>Literaturverzeichnis</b>	163



---

## I. Einleitung

Störstellen wie Fremdatome oder intrinsische Gitterdefekte besitzen in Halbleitern eine wesentliche Bedeutung, da sie die elektrischen und optischen Eigenschaften entscheidend beeinflussen. Halbleitermaterialien, insbesondere die Elementhalbleiter Silizium ( Si ) und Germanium ( Ge ) gehören daher heute zu den technisch in höchster Reinheit herstellbaren Materialien. Die Möglichkeit durch geeignete Dotierung, d.h. dem kontrollierten Einbringen von Fremdatomen in das Kristallgitter, bestimmte Eigenschaften gezielt zu manipulieren, erklärt die Bedeutung, welche die Halbleitertechnologie in den vergangenen Jahrzehnten erlangt hat. Das Interesse an einer Charakterisierung und sicheren Identifizierung von Defekten und deren Komplexbildung ist dementsprechend groß.

Gerade in dieser Hinsicht hat sich die Methode der gestörten  $\gamma$ - $\gamma$  Winkelkorrelation ( PAC : Perturbed Angular Correlation ) bei der Untersuchung von Punktdefekten in Metallen als besonders leistungsfähig erwiesen [ VIA 88 ]. Deshalb war es naheliegend, die Anwendung dieser Meßmethode auch auf Halbleitermaterialien auszudehnen. Die PAC-Methode gehört mit der kernmagnetischen Resonanz ( NMR ), der Myonen-Spinresonanz (  $\mu$ SR ) und der Mössbauerspektroskopie zur Gruppe der Hyperfein-Spektroskopie-Methoden und erlaubt eine mikroskopische Beobachtung der unmittelbaren Umgebung eines in einen Festkörper eingebrachten radioaktiven Sondenkerns, ist also bestens geeignet, um Eigen- und Fremdatomdefekte in Festkörpern zu erkennen und zu untersuchen.

Aus Symmetriegründen sollte in Halbleitern mit Diamantstruktur, wie z.B. Si und Ge, auf substitutionellen Gitterplätzen sowie auf tetraedrischen Zwischengitterplätzen wegen der tetraedrischen Umgebung kein elektrischer Feldgradient ( EFG ) auftreten. Befindet sich dagegen ein Defekt in unmittelbarer Umgebung des Sondenatoms, wird die kubische Ladungssymmetrie am Ort der Sonde gestört und man erhält ein für diesen speziellen Sonde-Defekt-Komplex charakteristisches PAC-Signal.

Auf Grund der Proportionalität des EFG zu  $r^{-3}$ , wobei  $r$  der Abstand zwischen dem Sondenatom und einem an diesem angelagerten Defekt ist, ist diese Methode insbesondere sensitiv auf die direkte Sondenumgebung und somit besonders geeignet, um Strukturen im atomaren Bereich, wie z.B. einfache Punktdefekte ( Leerstellen, Eigenzwischengitteratome ), zu untersuchen. Durch Variation verschiedener Parameter ( Temperatur, Dotierung,... ), die sich auf die Eigenschaften des Komplexes und seine Bildung auswirken, kann in vielen Fällen auf die Natur des zugrundeliegenden Defektes geschlossen werden.

Unter Anwendung dieser Meßmethode konnten in den letzten Jahren in verschiedenen Halbleitermaterialien verschiedene Defektkonfigurationen nachgewiesen werden [ WIC 92a ]. Untersucht wurde z.B. die Akzeptor-Donator-Wechselwirkung zwischen dem Sondenkern  $^{111}\text{In}$  und Gruppe-V-Donatoren ( P, As, Sb ) [ DEI 92, FOR 92 ], ferner die Passivierung von Akzeptoren durch Wasserstoff [ SKU 92, WIC 92b ] sowie bestrahlungsinduzierte Defekte [ FOR 89, FEU 90a/b ].

Im Rahmen dieser Arbeit wurden zunächst die Bedingungen bei der H-Plasmabeladung optimiert. Ein Ziel bestand darin, eine wirkungsvolle Methode zur kontrollierten Passivierung des Akzeptors  $^{111}\text{In}$  zu entwickeln. Unter Passivierung versteht man dabei die elektrische Deaktivierung von Dotierungsatomen bei gleichzeitiger Bildung von Komplexen mit Defekten. Die auf diese Weise gebildeten In-H Komplexe wurden anschließend hinsichtlich ihrer mikroskopischen Struktur und thermischen Stabilität sowie der Temperaturabhängigkeit der zugehörigen Wechselwirkungsfrequenzen untersucht.

Um das Verhalten solcher Defektkomplexe unter dem Einfluß mechanischer Spannungen zu untersuchen, wie sie z.B. innerhalb eines Kristalls in der Umgebung von Versetzungen und Korngrenzen auftreten können, wurde die kernphysikalische Meßmethode PAC erstmals mit der Anwendung externer, uniaxialer Druck- bzw. Zugspannungen kombiniert. Zu diesem Zweck wurden verschiedene Probenhalter entwickelt, mit denen sich die erforderlichen Spannungen über Biegespannungen erzeugen ließen.

Zum ersten Mal konnte bei den folgenden Experimenten mit der PAC-Meßmethode nachgewiesen werden, daß infolge der Verzerrung eines kubischen Diamantgitters ein Gitterfeldgradient auftritt, der sich in Abhängigkeit einer von außen angelegten Spannung in reproduzierbarer Weise variieren läßt. Die Orientierung dieses spannungsinduzierten Gitterfeldgradienten zeigt entlang der Druck- bzw. Zugachse. Abhängig von der Lage der Spannungsachse im Kristallsystem wird dabei die Punktsymmetrie um einen substitutionellen Sondenkern in unterschiedlicher Weise erniedrigt. Bei einer Druck-/Zugachse entlang einer  $\langle 100 \rangle$ - bzw.  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse erhält man daher einen axialsymmetrischen EFG, wohingegen in  $\langle 110 \rangle$ -Richtung ein nichtaxialsymmetrischer EFG resultiert.

---

## II. Die Elementhalbleiter Silizium und Germanium

Zum besseren Verständnis der Experimente [ Kap. V.-VII. ] sind in diesem Kapitel die wesentlichen Eigenschaften des Probenmaterials Si und Ge zusammengefaßt. Kapitel II.1 befaßt sich zunächst mit den physikalischen Eigenschaften der Elementhalbleiter Si und Ge. Die Kenntnis der in Kapitel II.2 dargestellten elastischen Eigenschaften ist notwendig, um die auftretenden mechanischen Spannungen berechnen zu können. Kapitel II.3 gibt schließlich einen kurzen Überblick über das Verhalten von Wasserstoff in Si bzw. Ge.

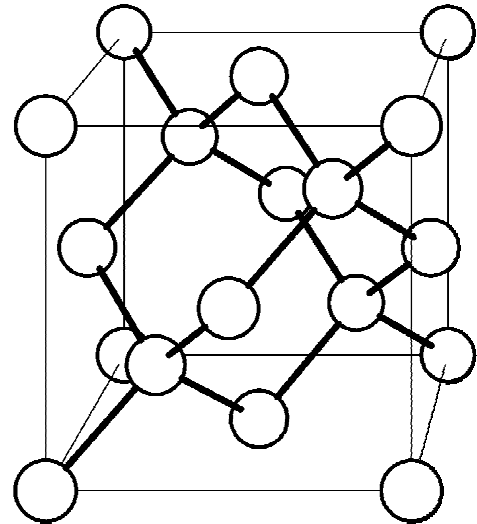


Abb. II.1 : Die Diamantstruktur

Die Kristallstruktur der Elementhalbleiter Silizium und Germanium entspricht der eines Diamantgitters. Sie wird durch zwei, ineinander verschachtelte, kubisch flächenzentrierte Teilgitter charakterisiert, die entlang der Raumdiagonalen um den Betrag  $a/4 \cdot \sqrt{3}$  verschoben sind ( $a$  = Kantenlänge der kubischen Gitterzelle). Die Koordinationszahl ist 4, d.h. jedes Atom ist tetraedrisch von vier nächsten Nachbarn umgeben. Bei der Bindung handelt es sich um eine rein kovalente  $sp^3$ -Hybridbindung, welche die extreme Härte der Materialien erklärt.

Eine (100)-Ebene besitzt eine Flächendichte von 2 Atomen pro Einheitszelle, auf jeder Seite 4 Eckatome zu je  $1/8$  und die Hälfte des im Flächenmittelpunkt liegenden flächenzentrierten Atoms. Das entspricht bei einem Siliziumkristall einer Flächendichte von etwa  $6,8 \cdot 10^{14}$  Atomen/cm<sup>2</sup>. Der Abstand zur nächsten Ebene beträgt  $a/4$ .

Die (110)-Ebenen haben einen Abstand von  $a/\sqrt{2}$ , innerhalb des Kristalls besitzen die einzelnen Atomlagen in dieser Richtung den größten Abstand voneinander. Die Flächendichte beträgt 4 Atome pro Elementarzelle entsprechend  $9,6 \cdot 10^{14}$  Atome/cm<sup>2</sup>. Da die (110)-Ebene in sich abgesättigte Bindungen enthält, ist die Bindung von Atomlage zu Atomlage relativ schwach, so daß beim mechanischen Brechen eines Kristalls in der Regel eine glatte Bruchkante mit  $\langle 110 \rangle$ -Orientierung entsteht.

Bei einem Abstand von  $a/\sqrt{3}$  sind die (111)-Ebenen am dichtesten mit Atomen besetzt ( $15,7 \cdot 10^{14}$  Atomen/cm<sup>2</sup>), entsprechend wächst der Kristall in dieser Richtung am langsamsten.

## II.1. Die Halbleitereigenschaften von Si und Ge

Die makroskopischen Eigenschaften eines Festkörpers basieren auf der Wechselwirkung der Atome im Kristallgitter, d.h. die inneren Bindungsverhältnisse sind die Ursache für das jeweilige Verhalten der Materialien in mechanischer und elektrischer Hinsicht. Je fester die Bindung, desto geringer der Gitterabstand. Gleichzeitig wird der energetische Abstand der Energiebänder, die Breite der verbotenen Zone  $E_g$  ( Energy gap ), größer. Parallel dazu nimmt der Schmelzpunkt zu, während wegen der geringeren Polarisierbarkeit die Dielektrizitätskonstanten  $\epsilon_r$  und der optische Brechungsindex  $n$  abnehmen.

Für Germanium und Silizium findet sich in der folgenden Tabelle eine Zusammenstellung der wichtigsten Eigenschaften der reinen Werkstoffe.

physik. Eigenschaften ( bei Raumtemperatur 300°K )		Ge	Si
kristallographisch	Atome/cm <sup>3</sup>	$4,42 \cdot 10^{22}$	$5,0 \cdot 10^{22}$
	Atomgewicht [ $u$ ]	72,60	28,09
	Kristallstruktur	Diamant	Diamant
	Gitterkonstante [ $\text{Å}$ ]	5,64613	5,43095
	Schmelzpunkt [ °C ]	937	1415
	Dampfdruck [ Pa ]	1 bei 1330 °C $10^{-6}$ bei 760 °C	1 bei 1650 °C $10^{-6}$ bei 900 °C
thermisch	Ausdehnungskoeffizient $\alpha$ [ °C <sup>-1</sup> ]	$5,8 \cdot 10^{-6}$	$2,6 \cdot 10^{-6}$
	spezifische Wärme [ J/g·°C ]	0,31	0,7
	Wärmeleitfähigkeit [ W/cm·°C ]	0,6	1,5
	therm. Diffusionskoeffizient [ cm <sup>2</sup> /s ]	0,36	0,9
elektrisch	Bandabstand [ eV ]	0,66	1,12
	intrinsische Ladungsträgerkonz. $\rho_i$ [ cm <sup>-3</sup> ]	$2,4 \cdot 10^{13}$	$1,45 \cdot 10^{10}$
	intrinsischer spez. Widerstand [ $\Omega \cdot \text{cm}$ ]	47	$2,3 \cdot 10^5$
	Driftbeweglichkeit [ cm <sup>2</sup> /V·s ] Elektronen	3900	1500
	Löcher	1900	450
Dielektrizitätskonstante $\epsilon_r$	16,0	11,9	

Tab. II.1 : Eigenschaften der reinen Werkstoffe Si und Ge, bei temperaturabhängigen Größen ist Raumtemperatur ( 300°K ) zugrunde gelegt [ SCH 91 ].

Elektronen (  $n$  ) und Löcher (  $p$  ), welche in einem Halbleiter bewegt werden können, stammen entweder paarweise aus thermischer Anregung von den Grundgitteratomen ( intrinsische Leitfähigkeit ) oder von Verunreinigungen des Halbleiters mit Fremdatomen ( Dotierung ).

Fremdatome, welche das Gitter nur relativ wenig stören und ähnliche Eigenschaften wie die Matrixatome besitzen, erzeugen sogenannte flache Störstellen. Ein solches Störstellenverhalten ist bei den Elementhalbleitern Ge und Si am ehesten von Fremdatomen aus der III. und V. Gruppe des Periodensystems zu erwarten.

Im einfach ionisierten Zustand weisen flache Störstellen oft eine ähnliche Bindungsstruktur auf wie die Matrixatome. So hat die  $sp^2$ -Hybridisierung der Valenzelektronen von Bor ( III. Hauptgruppe ) eine dreizählige Symmetrie, die nach negativer Ionisation ( Aufnahme eines weiteren Elektrons ) in eine tetraedisch ausgerichtete vierzählige Symmetrie übergehen kann. Um in das Gitter eines Elementhalbleiters eingebaut werden zu können, wird der Gittermatrix ein Elektron entzogen, dort also ein Loch erzeugt. Dieses Loch ( Defektelektron ) ist im Grundzustand mit einer Bindungsenergie  $E_A$  elektrostatisch an das Fremdion gebunden. Da solche Störstellen Elektronen aus dem Valenzband aufnehmen, bezeichnet man sie auch als Akzeptoren. Der Einbau von Akzeptor-Atomen erhöht somit die Löcherdichte und trägt damit zur Leitfähigkeit des Elementhalbleiters durch Löcherleitung bei.

Flache Störstellen aus der V. Hauptgruppe werden im positiv ionisierten Zustand in das Kristallgitter eingebaut. Das dazugehörige Elektron ist zunächst elektrostatisch an die Störstelle gebunden. Die Bindungsenergie  $E_D$  im Grundzustand liegt jedoch nur wenig unterhalb der Leitungsbandkante [ Abb. II.2 ] ( daher auch die Bezeichnung "flache" Störstelle ), der Energieabstand  $E_L - E_D$  liegt meist in der Größenordnung von  $kT$  bei Raumtemperatur. Das hat zur Folge, daß bereits bei relativ niedrigen Temperaturen das gebundene Elektron sich völlig von der Störstelle löst und in das Leitungsband aktiviert wird, weshalb man diese Dotierungsatome auch als Donatoren bezeichnet.

Da die Konzentration intrinsischer Ladungsträger bei Raumtemperatur sehr gering ist, kann durch den Einbau flacher Störstellen die Ladungsträgerkonzentration um viele Größenordnungen erhöht werden. Dies ist die Ursache dafür, daß Fremdatome einen außerordentlich großen Einfluß auf die Leitfähigkeit von Halbleitern haben können.

Elektronen ( losgelöste Ladungen ) sind in allen Halbleitern beweglicher als Löcher ( fehlende Elektronen-Bindungen ). Die Bewegung der Ladungsträger wird in erster Linie durch Wechselwirkung mit ionisierten Störstellen und Gitterschwingungen behindert. Daher steigt die Beweglichkeit  $\mu$  einerseits mit höherer Reinheit des Materials und sinkt andererseits bei Temperaturerhöhung.



Aufgrund der Symmetrie des Kristalls sind die elektrischen Eigenschaften von Ge und Si isotrop. Bei einem deformierten Kristall [ Kap. II.2. ] treten dagegen wegen der Verringerung der Symmetrie des Gitters besondere Effekte auf, die sich z.B. in einer Änderung des spezifischen Widerstandes in Abhängigkeit von einem äußeren mechanischen Druck ( sog. piezoresistiver Effekt ) bemerkbar machen. Die Energieverteilung der Elektronen wird wegen der gegenseitigen Verschiebung der Energiebänder verändert, was sich über die Änderung der effektiven Masse und der wirksamen Beweglichkeit als Widerstandsänderung äußert.

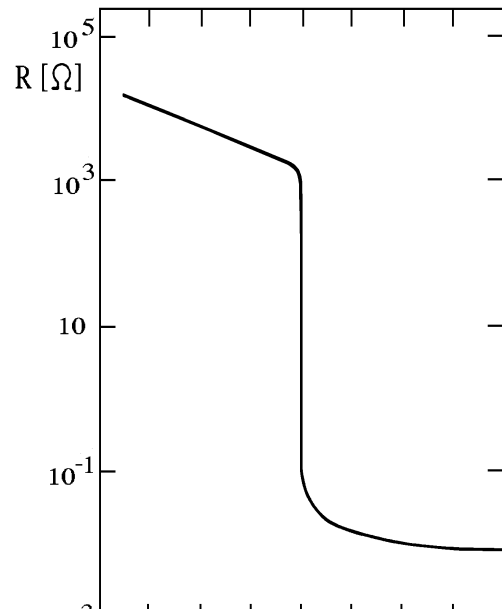


Abb. II.3 : Widerstandsänderung einer Si-Probe bei hydrostatischem Druck [ SEE 85 ]

Technisch werden solche Effekte bei der Epitaxie nicht gitterangepaßter Schichten durch bewußte Einführung von mechanischen Spannungen erzeugt. So läßt sich z.B. durch eine hohe isoelektronische Dotierung mit Atomen anderen Durchmessers als denen des Wirtskristalls, welche nicht im Sinne einer zusätzlichen n- bzw. p-Dotierung wirken, eine mechanische Verspannung erzielen ( Verspannungs-Epitaxie SLE : Strained Layer Epitaxy ). Im Falle von Si wird hierzu Ge verwendet, wegen der unterschiedlichen kovalenten Atomradien (  $r_{\text{Ge}}$ :  $1,22 \text{ \AA}$  ,  $r_{\text{Si}}$ :  $1,17 \text{ \AA}$  ) tritt eine Druckspannung in der dotierten Schicht auf. Ebenso erwartet man in Si und Ge auch im Bereich der implantierten Sondenkerne  $^{111}\text{In}$  (  $r_{\text{In}}$ :  $1,44 \text{ \AA}$  ) das Auftreten einer entsprechenden Druckspannung.

## II.2. Die elastischen Eigenschaften von Si und Ge

Die Verformung fester Stoffe unter dem Einfluß äußerer Spannungen läßt sich mit den in Abbildung II.4 angedeuteten Grundversuchen bestimmen. Bei kleinen Deformationen gilt das Hookesche Gesetz, wonach die Verformung proportional zur Spannung ist. Somit ergibt sich

für die Dehnung

$$\sigma_D = E \cdot \epsilon \quad \text{wobei} \quad \epsilon = \frac{\Delta l}{l} \quad (\text{II.1})$$

mit  $\sigma_D$ : Zugspannung /  $E$ : linearer Elastizitätsmodul /  $\epsilon$ : Dehnung bzw. Stauchung

für die Scherung

$$\sigma_S = G \cdot \gamma \quad (\text{II.2})$$

mit  $\sigma_S$ : Schubspannung /  $G$ : Schubmodul /  $\gamma$ : Scherung

für die Kompression

$$p = -B \cdot \delta \quad \text{wobei} \quad \delta = \frac{\Delta V}{V} \quad (\text{II.3})$$

mit  $p$ : hydrostatischer Druck /  $B$ : Kompressionsmodul /  $\delta$ : relative Volumenänderung

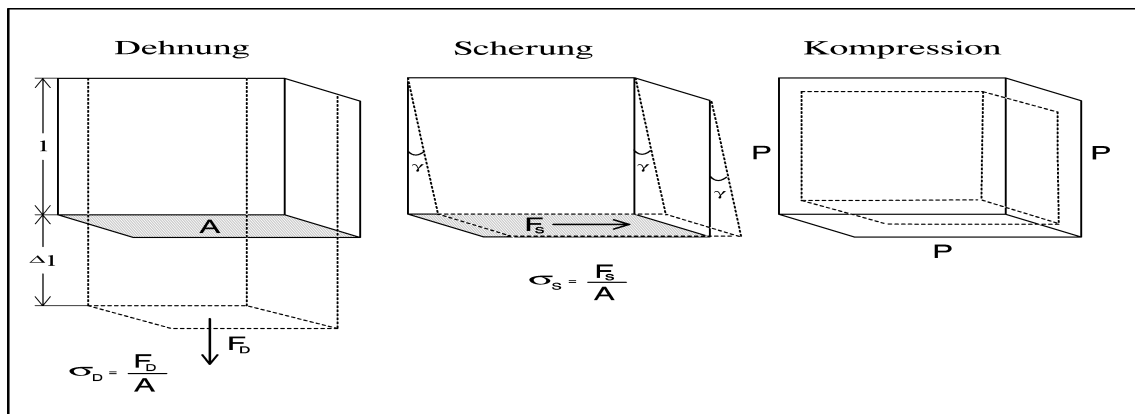


Abb. II.4 : Die Verformung eines Festkörpers durch Dehnung, Scherung oder Kompression



Die an Kristallen beobachtete Anisotropie wird dadurch berücksichtigt, daß die Verzerrungen und Spannungen als richtungsabhängige Größen angesetzt werden. Das Spannungsfeld in einem Festkörper läßt sich vollständig durch sechs voneinander unabhängige Komponenten beschreiben. Diese bilden einen symmetrischen Tensor 2. Stufe, den sogenannten Spannungstensor  $\underline{\sigma}$ .

$$\underline{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad (\text{II.4})$$

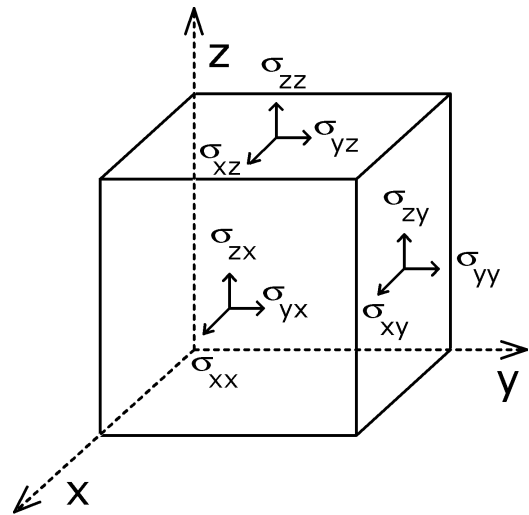


Abb. II.5.: Die Spannungskomponenten  $\sigma_{ij}$

Die Deformation des Kristalls wird durch einen ebenfalls symmetrischen Verzerrungstensor  $\underline{\epsilon}$  beschrieben. Ein beliebiger Ortsvektor  $\underline{x}$  im Kristall wird durch den Verzerrungstensor  $\underline{\epsilon}$  zum Vektor  $\underline{x}'$  verzerrt. Eine solche Verformung heißt homogen, wenn der Verzerrungstensor nicht vom Ort abhängt.

$$\underline{x}' = (\underline{1} + \underline{\epsilon}) \cdot \underline{x} \quad \text{mit } \underline{1} : \text{Einheitsmatrix} \quad (\text{II.5})$$

Um die in Gleichung II.1 ausgedrückte Proportionalität zwischen Spannung und Dehnung auf anisotrope Medien zu erweitern, muß ein linearer Zusammenhang zwischen dem Verzerrungstensor  $\underline{\epsilon}$  und dem Spannungstensor  $\underline{\sigma}$  hergestellt werden.

Eine solche lineare Transformation wird gegeben durch

$$\underline{\sigma} = C \cdot \underline{\epsilon} \quad (\text{II.6})$$

wobei  $C$  ein Tensor 4. Stufe ist, mit  $3^4 = 81$  Komponenten  $C_{ijkl}$  ( $i, j, k, l = 1, 2, 3$ ). Wegen der Symmetrie von  $\underline{\epsilon}$  und  $\underline{\sigma}$  können jedoch höchstens  $6^2 = 36$  Komponenten voneinander unabhängig sein. Wenn man die Doppelindizes in folgender Weise zusammenfaßt [ WEI 80 ],

$$\begin{array}{l|l} 11 \Rightarrow 1 & 23, 32 \Rightarrow 4 \\ 22 \Rightarrow 2 & 13, 31 \Rightarrow 5 \\ 33 \Rightarrow 3 & 12, 21 \Rightarrow 6 \end{array} \quad (\text{II.7})$$

lassen sich die Tensoren wie folgt ersetzen:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{\alpha} \quad \text{und} \quad \epsilon_{ij} = \begin{cases} \epsilon_{\alpha} & \text{für } \alpha = 1, 2, 3 \\ \frac{1}{2} \cdot \epsilon_{\alpha} & \text{für } \alpha = 4, 5, 6 \end{cases} \quad (\text{II.8})$$

Das verallgemeinerte Hookesche Gesetz [ Gl. II.6 ] läßt sich dann in der bekannten Form als Produkt einer quadratischen Matrix  $C_{ik}$  mit der sechsgliedrigen Zeilenmatrix der Dehnungskomponenten angeben.

$$\sigma_{\alpha} = \sum_{\beta} C_{\alpha\beta} \cdot \epsilon_{\beta} \quad \text{mit} \quad C_{\alpha\beta} : \text{verallg. Elastizitätsmoduln} \quad (\text{II.9})$$

Nach den Regeln der Tensorrechnung läßt sich diese Gleichung auch umkehren.

$$\epsilon_{\beta} = \sum_{\alpha} S_{\alpha\beta} \cdot \sigma_{\alpha} \quad \text{mit} \quad S_{\alpha\beta} = (C_{\alpha\beta})^{-1} : \text{verallg. Elastizitätskonstanten} \quad (\text{II.10})$$

Die Anzahl der unabhängigen elastischen Konstanten nimmt mit wachsender Symmetrie der Kristalle ab. Kubische Kristalle besitzen lediglich drei unabhängige elastische Konstanten, aus denen sich die Matrix der Elastizitätsmoduln wie folgt zusammensetzt.

$$(C_{ik})_{\text{kubisch}} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \quad (\text{II.11})$$

Die entsprechenden Komponenten der Elastizitätskoeffizienten  $S_{ik} = (C_{ik})^{-1}$  berechnen sich aus den folgenden Beziehungen:

$$\begin{aligned} S_{11} &= \frac{C_{11} + C_{12}}{(C_{11} - C_{12}) \cdot (C_{11} + 2 \cdot C_{12})} \\ S_{12} &= \frac{-C_{12}}{(C_{11} - C_{12}) \cdot (C_{11} + 2 \cdot C_{12})} \\ S_{44} &= \frac{1}{C_{44}} \end{aligned} \quad (\text{II.12})$$

Die temperaturabhängigen Elastizitätsmoduln sind aus der Literatur [ SKI 53 ] bekannt.

Bei Raumtemperatur ( 20°C ) erhält man für die Elastizitätsmoduln:

	Silizium	Germanium
$C_{11}$	1.6574 Mbar	1.2890 Mbar
$C_{12}$	0.6392 Mbar	0.4832 Mbar
$C_{44}$	0.7957 Mbar	0.6712 Mbar

Nach Gl. II.12 berechnen sich hieraus die Elastizitätskonstanten wie folgt:

	Silizium	Germanium
$S_{11}$	0.7683 Mbar <sup>-1</sup>	0.9751 Mbar <sup>-1</sup>
$S_{12}$	- 0.2138 Mbar <sup>-1</sup>	- 0.2659 Mbar <sup>-1</sup>
$S_{44}$	1.2568 Mbar <sup>-1</sup>	1.4899 Mbar <sup>-1</sup>

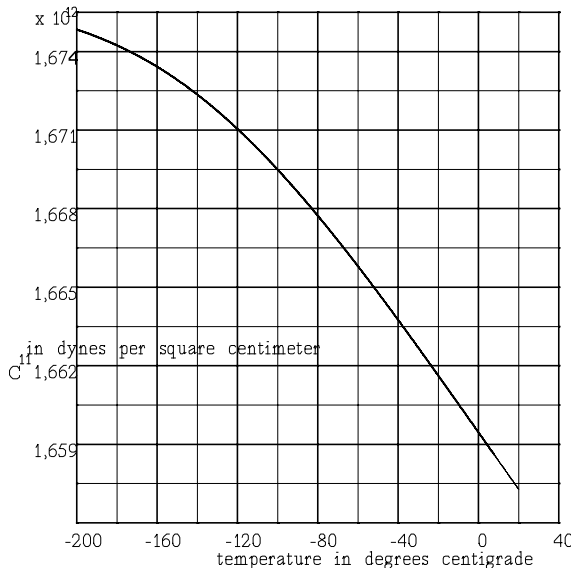


Abb. II.6 :  $C_{11}$  gegen die Temperatur ( Si )

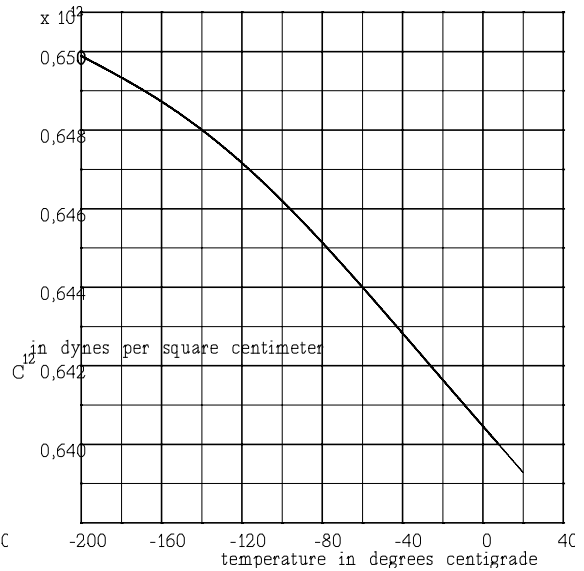


Abb. II.7 :  $C_{12}$  gegen die Temperatur ( Si )

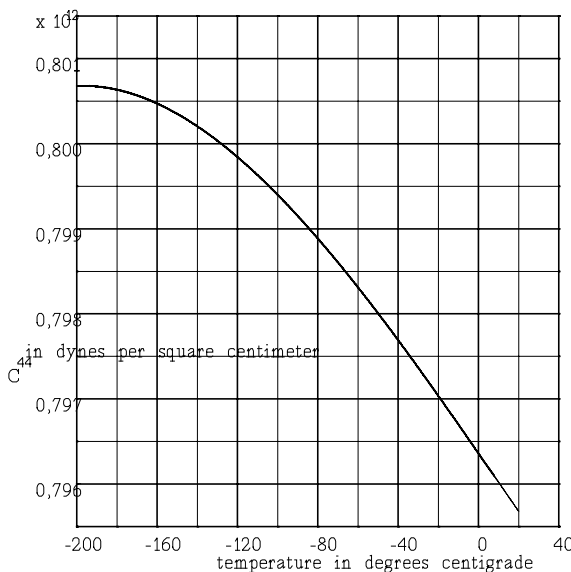
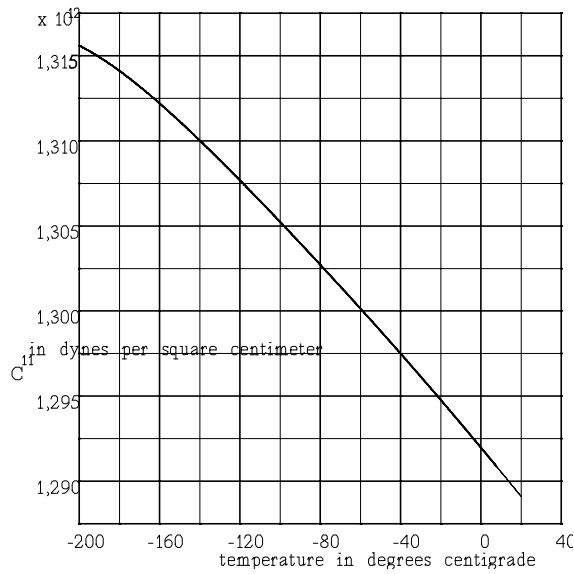
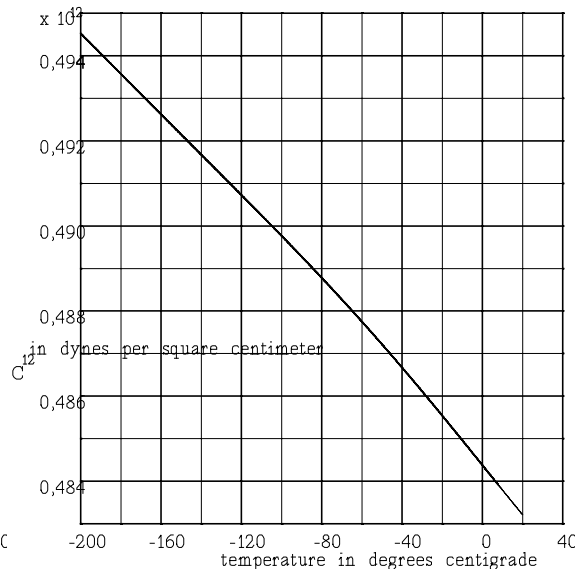
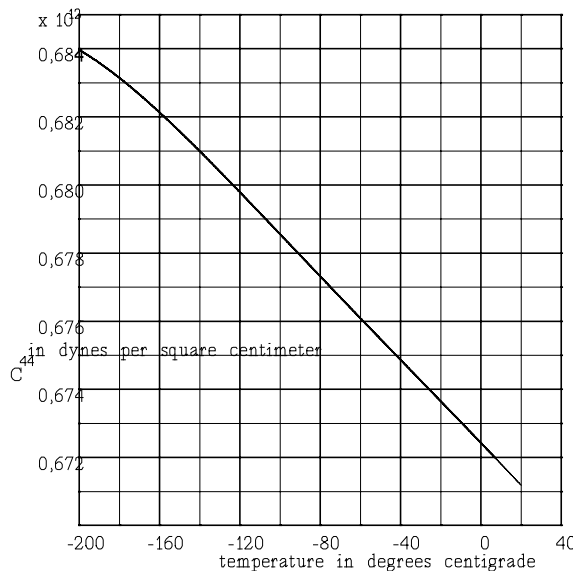


Abb. II.8 :  $C_{44}$  gegen die Temperatur ( Si )

Die Abbildungen II.6 bis II.11 sind aus [ SKI 53 ] entnommen und zeigen für Si und Ge den Temperaturverlauf der elastischen Konstanten in der Einheit  $\text{dyn/cm}^2 = 10^{-5} \text{ N/cm}^2 = 10^{-1} \text{ Pa} = 10^{-6} \text{ bar}$ . (  $10^{12} \text{ dyn/cm}^2 = 1 \text{ Mbar}$  )

Abb. II.9 :  $C_{11}$  gegen die Temperatur ( Ge )Abb. II.10 :  $C_{12}$  gegen die Temperatur ( Ge )Abb. II.11 :  $C_{44}$  gegen die Temperatur ( Ge )

Im Falle kubischer Symmetrie bestehen zwischen den in Zug- bzw. Torsionsversuchen direkt ermittelten Werten des Elastizitätsmoduls  $E$  und des Schubmoduls  $G$  und den elastischen Moduln  $C_{ij}$  die folgenden Beziehungen [ PAU 78 ]:

$$\frac{1}{E} = \frac{C_{11} + C_{12}}{(C_{11} - C_{12}) \cdot (C_{11} + 2 \cdot C_{12})} - 2 \cdot \left( \frac{1}{C_{11} - C_{12}} - \frac{1}{2 \cdot C_{44}} \right) \cdot (n_x^2 \cdot n_y^2 + n_x^2 \cdot n_z^2 + n_z^2 \cdot n_x^2) \quad (\text{II.13})$$

$$\frac{1}{G} = \frac{1}{C_{44}} + 4 \cdot \left( \frac{1}{C_{11} - C_{12}} - \frac{1}{2 \cdot C_{44}} \right) \cdot (n_x^2 \cdot n_y^2 + n_x^2 \cdot n_z^2 + n_z^2 \cdot n_x^2) \quad (\text{II.14})$$

Dabei sind die  $n_i$  ( $i = x, y, z$ ) die jeweiligen Projektionen des Einheitsvektors in Richtung der Stabachse auf die drei Koordinatenachsen der kubischen Elementarzelle. Für beliebige Orientierungen der Stabachse läßt sich mit diesen Gleichungen der Elastizitätsmodul  $E$  sowie der Schubmodul  $G$  berechnen.

1 Mbar=10 <sup>11</sup> Pa =10 <sup>12</sup> dyn/cm <sup>2</sup>		Stabachse entlang der kristallographischen Achse		
		< 100 >	< 110 >	< 111 >
Ge	Elastizitätsmodul $E$	1.0255 Mbar	1.3753 Mbar	1.5518 Mbar
	Schubmodul $G$	0.6712 Mbar	0.5035 Mbar	0.4648 Mbar
Si	Elastizitätsmodul $E$	1.3016 Mbar	1.6909 Mbar	1.8781 Mbar
	Schubmodul $G$	0.7957 Mbar	0.6209 Mbar	0.5786 Mbar

Tab. II.3 : Elastizitätsmodul  $E$  und Schubmodul  $G$  für Silizium und Germanium abhängig von der Kristallorientierung bei Raumtemperatur ( 20°C )

Für den Kompressionsmodul  $B$  kubischer Kristalle gilt [ PAU 78 ]:

$$B = \frac{1}{3} \cdot (C_{11} + 2 \cdot C_{12}) \quad (\text{II.15})$$

und man erhält:

	Kompressionsmodul $B$
Silizium	0.7518 Mbar
Germanium	0.9786 Mbar

Tab. II.4 : Der Kompressionsmodul  $B$  für Si und Ge bei Raumtemperatur

Die Beziehung des Verzerrungstensors  $\underline{\epsilon}$  zum angewandten Druck ergibt sich über das verallgemeinerte Hookesche Gesetz [ Gl. II.6 ], doch gilt für kubische Kristalle folgende Vereinfachung [ HEA 46 ]:

$$\begin{aligned} \epsilon_{ii} &= -P \cdot (S_{11} \cdot n_i^2 + S_{12} \cdot (n_j^2 + n_k^2)) \quad \text{mit } i, j, k = x, y, z \\ \epsilon_{ij} &= -P \cdot \frac{1}{2} \cdot S_{44} \cdot n_i \cdot n_j \quad \text{mit } i \neq j \end{aligned} \quad (\text{II.16})$$

Dabei sind  $P$  die Dehnungskraft pro Flächeneinheit und  $n_i$  die Projektionen des Einheitsvektors entlang der Druckachse auf die Kubusachsen ( $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1$ ). Gleichung II.16 gilt auch für Zug- statt Druckspannungen, jedoch fällt dann das negative Vorzeichen weg.

Bei Auswahl der Druckachse entlang einer  $\langle 100 \rangle$ -,  $\langle 110 \rangle$ - oder  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse ergibt sich für den Verzerrungstensors  $\underline{\underline{\epsilon}}$  jeweils:

	$\underline{\underline{\epsilon}}_{\langle 100 \rangle}$	$\underline{\underline{\epsilon}}_{\langle 110 \rangle}$	$\underline{\underline{\epsilon}}_{\langle 111 \rangle}$
Si	$\begin{pmatrix} -0.7683 & 0 & 0 \\ 0 & 0.2138 & 0 \\ 0 & 0 & 0.2138 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -0.2773 & -0.3442 & 0 \\ -0.3142 & -0.2773 & 0 \\ 0 & 0 & 0.2138 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -0.1136 & -0.2095 & -0.2095 \\ -0.2095 & -0.1136 & -0.2095 \\ -0.2095 & -0.2095 & -0.1136 \end{pmatrix}$
Ge	$\begin{pmatrix} -0.9751 & 0 & 0 \\ 0 & 0.2659 & 0 \\ 0 & 0 & 0.2659 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -0.3546 & -0.3725 & 0 \\ -0.3725 & -0.3546 & 0 \\ 0 & 0 & 0.2659 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -0.1478 & -0.2483 & -0.2483 \\ -0.2483 & -0.1478 & -0.2483 \\ -0.2483 & -0.2483 & -0.1478 \end{pmatrix}$

Tab. II.5 : Der Verzerrungstensor  $\underline{\underline{\epsilon}}$  [ P / Mbar ] für Druckspannungen längs der kristallographischen Hauptachsen  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$

Für die entsprechenden Zugspannungen kehren sich lediglich die Vorzeichen der Matrixelemente um.

Die Anwendung des Verzerrungstensors  $\underline{\underline{\epsilon}}$  auf den  $\langle 111 \rangle$ -Vektor ergibt z.B. in Silizium für eine Druckspannung entlang der  $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse:

$$\underline{x}' = \left( \underline{\underline{1}} + \underline{\underline{\epsilon}}_{\langle 100 \rangle} \right) \cdot \underline{x} = \underline{x} + \underline{\Delta x} \quad (\text{II.17})$$

wobei

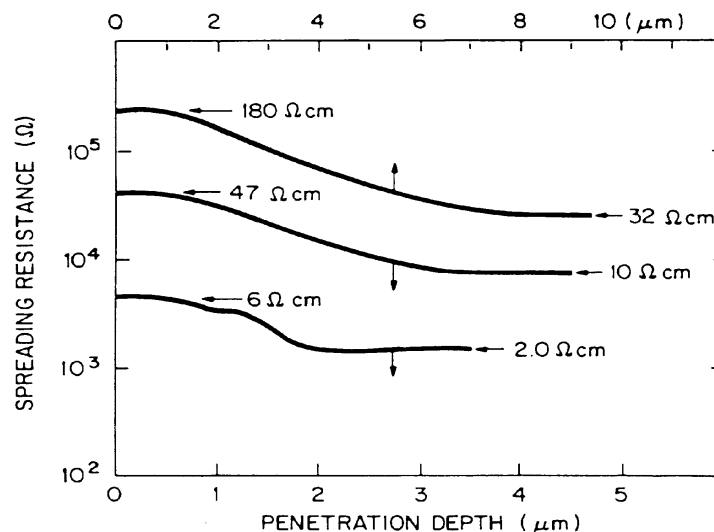
$$\begin{aligned} \underline{\Delta x} &= \underline{\underline{\epsilon}}_{\langle 100 \rangle} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.7683 \\ 0.2138 \\ 0.2138 \end{pmatrix} P \text{ [ Mbar ]} \\ &= \left[ -0.1136 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + 0.3274 \cdot \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right] P \text{ [ Mbar ]} \end{aligned} \quad (\text{II.18})$$

Das entspricht einer Stauchung um  $-0.1136 \cdot P$  [ Mbar ] in Richtung der Raumdiagonalen und gleichzeitig einer Drehung um  $27.58^\circ \cdot P$  [ Mbar ] in  $\langle -211 \rangle$ -Richtung.

### II.3. Das Verhalten von Wasserstoff in Si und Ge

Erst vor wenigen Jahren wurde die Passivierung von flachen Akzeptoren in Si entdeckt [ SAH 83 ]. Als Ursache für die beobachtete unerwünschte Deaktivierung der B-Dotierung vermutete man bereits die Bildung von B-H Komplexen. Im Gegensatz zur Kompensation, bei der sich gegensätzliche Dotierungen in ihrer elektrischen Wirkung aufheben, bilden sich bei der Passivierung mikroskopische Dotierungsatom-Defekt-Komplexe, die für das Verschwinden der elektrischen Leitfähigkeit verantwortlich sind.

Mit einer Widerstandsmessung an schräg angeschliffenen Proben konnte die durch ein H-Plasma erzeugte oberflächliche Deaktivierung von Bor in Si erstmals experimentell nachgewiesen werden [ PAN 83 ], und auch für andere flache Akzeptoren ( z.B. Al, Ga, In ) beobachtete man das gleiche Phänomen [ PAN 84 ]. Die Widerstandserhöhung durch Wasserstoffpassivierung erreichte dabei eine Tiefe von einigen  $\mu\text{m}$  [ Abb. II.12 ].



**Abb. II.12 :** Tiefenprofil des elektr. Widerstands von drei Si-Proben mit unterschiedlichen homogenen B-Dotierungen nach H-Plasmabeladung [ PAN 83 ]

Inzwischen ist bekannt, daß die Passivierung von elektrisch aktiven Zentren in Halbleitern durch Wasserstoff eine sehr allgemeine Erscheinung ist. Übersichtsartikel über dieses Gebiet sind von Pearton [ PEA 86/87 ], Pantelides [ PTL 87 ], Seager [ SEA 87 ] und Corbett [ COR 90 ] verfaßt worden. In Si werden nicht nur flache Akzeptoren, sondern auch flache Donatoren [ JOH 86 ] sowie tiefe Störstellen [ BNT 80 ] deaktiviert. Auch im Elementhalbleiter Ge lassen sich elektrisch aktive Zustände durch eindiffundierten Wasserstoff passivieren [ PEA 84 ].

Die Änderung der elektrischen Eigenschaften eines Halbleiters durch Wasserstoffpassivierung kann leicht unbeabsichtigt geschehen, z.B. bei Reinigungs- oder Ätzprozeduren in wässrigen Lösungen [ TAV 86 ], beim Plasmaätzen [ PAN 83 ] sowie bei bestimmten Spannungsbedingungen in Schottky- oder MOS-Bauelementen [ JAW 89 ]. Neben diesen unerwünschten Erscheinungen läßt sich die Wasserstoffpassivierung auch gezielt einsetzen, um in amorphem Silizium ( z.B. bei der Herstellung von Solarzellen ) unerwünschte Rekombinationszentren für freie Ladungsträger, sogenannte "dangling bonds" ( ungepaarte Bindungen ), unwirksam zu machen [ COR 88 ].

Der Nachweis, daß sich bei der Passivierung von elektrisch aktiven Störstellen durch Wasserstoff mikroskopische Komplexe bilden, gelang durch Infrarot- ( IR ) [ PAN 85 , JOH 85, STA 87, PAJ 88 ] und Ramanspektroskopie [ STU 87 ]. Der Nachweis diskreter Absorptionslinien in passiviertem Silizium und ihre Verschiebung bei Verwendung verschiedener Isotope bestätigte, daß sich sowohl der Wasserstoff als auch die Akzeptoratome in den Komplexen befinden [ Abb. II.13 ].

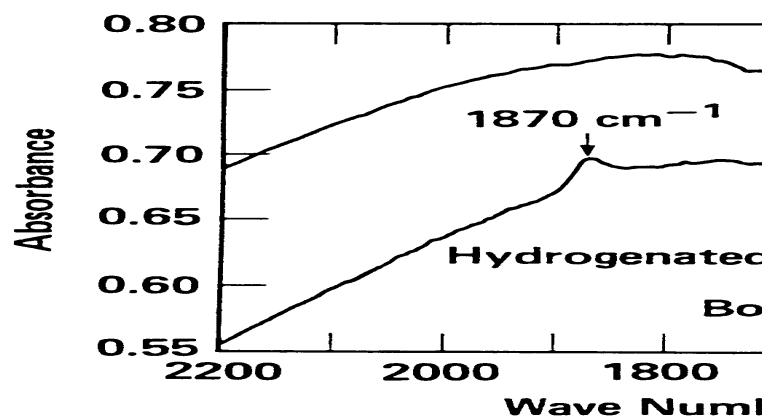


Abb. II.13 : Isotopieeffekt bei der IR-Absorption an B-dotiertem Silizium nach Passivierung durch H- bzw. D-Plasmabeladung [ JOH 85 ]

Durch Halleffektmessungen an B-dotiertem Si ließ sich nach H-Plasmabeladung eine Reduktion der Konzentration freier Löcher bei gleichzeitiger Erhöhung ihrer Beweglichkeit nachweisen [ CHA 89 ]. Dies ist ein weiterer Hinweis auf die Bildung von B-H-Paaren, die elektrisch inaktiv und ungeladen sind, denn die erhöhte Mobilität der verbleibenden Ladungsträger erklärt sich durch die mit der elektrischen Passivierung verbundenen Verminderung der Konzentration von Coulomb-Streuzentren.

Das Verschwinden von Zuständen innerhalb der Bandlücke läßt sich auch durch Photolumineszenz ( PL ) [ THE 85 ] sowie bei tiefen Störstellen durch Kapazitäts-Spektroskopie ( DLTS : Deep Level Transient Spectroscopy ) [ BNT 80 ] nachweisen. Diese Techniken messen makroskopische elektrische Größen und lassen keine Aussagen auf die zugrundeliegende mikroskopische Struktur der gebildeten Komplexe zu.



---

### III. Die Meßmethode

Den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Experimenten liegt die TDPAC-Methode ( TDPAC : Time Differential Perturbed Angular Correlation ) zugrunde. Diese Meßmethode ist geeignet, um in einem Festkörper elektrische Feldgradienten ( EFG ) sowie magnetische Felder am Ort eines radioaktiven Sondenkerns auf einer mikroskopischen Skala zu untersuchen. Hierzu werden radioaktive Sondenkerne, deren Zerfallsschema eine geeignete  $\gamma$ - $\gamma$  Kaskade enthält, in das Wirtsgitter des Festkörpers eingebaut. Infolge der Hyperfeinwechselwirkung zwischen den bekannten Kernmomenten und den elektrischen bzw. magnetischen Feldern am Ort des Sondenkerns wird die räumliche Emissionswahrscheinlichkeit zweier, beim Zerfall des Sondenkerns korreliert ausgesandter  $\gamma$ -Quanten zeitabhängig gestört. Anschaulich beobachtet man eine Präzession der  $\gamma$ -Ausstrahlungscharakteristik mit Drehfrequenzen, die durch die Stärke der Wechselwirkung bestimmt sind. Eine Analyse dieser Oszillationen ermöglicht Rückschlüsse auf Größe und Symmetrie eines am Sondenort auftretenden EFG. Bei einkristallinen Proben läßt sich darüber hinaus die Orientierung der Symmetrieachse des EFG im Kristallgitter bestimmen. Gitterdefekte, die in der Umgebung der Sonde einen defektinduzierten EFG erzeugen, lassen sich auf diese Weise mit der TDPAC eindeutig charakterisieren.

Im folgenden Kapitel werden das Prinzip der Meßmethode sowie experimentelle Einzelheiten, wie der Aufbau der Meßapparatur und das Auswerteverfahren, beschrieben.

#### III.1. Die zeitlich differentielle Messung der Winkelkorrelation

Die zeitlich differentielle Messung der gestörten  $\gamma$ - $\gamma$  Winkelkorrelation beruht auf der Beobachtung der zeitlichen Veränderung der Richtungskorrelation zweier, beim Zerfall eines radioaktiven Sondenkerns nacheinander ausgesandter Gammaquanten. Hierbei nutzt man aus, daß die Emissionswahrscheinlichkeit des zweiten Quants räumlich anisotrop bezüglich der Emissionsrichtung des ersten Quants ist.

Die TDPAC-Meßmethode gehört heute zu den Standardmethoden der nuklearen Festkörperphysik. Die zugrundeliegende Theorie ist weitestgehend entwickelt und in der Literatur ausführlich dargestellt [ FRA 65, STE 75, BUT 89 ]. Der folgende Überblick faßt die Theorie zusammen, die für das Verständnis der Messungen und ihrer Auswertung in dieser Arbeit benötigt wird.

### III.1.a. Die ungestörte $\gamma$ - $\gamma$ Winkelkorrelation

Solange die Kerne, aus denen die  $\gamma$ -Emission erfolgt, im allgemeinen Fall keine Spinrichtung bevorzugen, ist die Emissionswahrscheinlichkeit für die  $\gamma$ -Quanten eines Übergangs räumlich isotrop.

Für den Fall, daß ein angeregter Kern über eine  $\gamma$ - $\gamma$  Kaskade in seinen Grundzustand zerfällt [ Abb. III.1 ], ist es jedoch aus Drehimpulserhaltungsgründen möglich, durch den Nachweis des zeitlich ersten Quants  $\gamma_1$  in einer bestimmten Raumrichtung  $\vec{k}_1$ , ein Ensemble von Kernen zu selektieren, deren Kernspins  $I$  in eine bestimmte Raumrichtung zeigen. Bezüglich dieser Richtung kann, ebenfalls aus Gründen der Drehimpulserhaltung, die Emission des zweiten Quants  $\gamma_2$  nur anisotrop erfolgen. Im Sinne der Quantenmechanik bedeutet dies, daß die magnetischen  $m$ -Unterzustände des Zwischenzustands bezüglich der Emissionsrichtung  $\vec{k}_1$  als Quantisierungsachse ungleich besetzt sind.

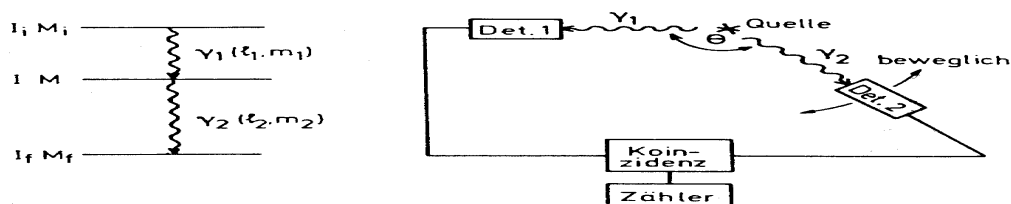


Abb. III.1: Das Prinzip der  $\gamma$ - $\gamma$  Winkelkorrelation

Die koinzidente Emission des zugehörigen zweiten Quants  $\gamma_2$  erfolgt räumlich anisotrop in eine Richtung  $\vec{k}_2$  und läßt sich durch eine Wahrscheinlichkeitsverteilung  $W(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$  beschreiben. Solange keine weitere Richtung ausgezeichnet ist, wird, wegen der Zylindersymmetrie bezüglich  $\vec{k}_1$ , zur Beschreibung der Winkelverteilung nur der Winkel  $\theta$  zwischen den Emissionsrichtungen  $\vec{k}_1$  und  $\vec{k}_2$  benötigt. In diesem Fall läßt sich die ungestörte Winkelkorrelationsfunktion  $W(\theta)$  nach Legendre-Polynomen entwickeln.

$$W(\theta) = \sum_{\substack{k=0 \\ k \text{ gerade}}}^{k_{\max}} A_{kk} P_k(\cos\theta) \quad (\text{III.1})$$

Die Entwicklungskoeffizienten  $A_{kk}$  in dieser Reihe, die sogenannten Anisotropiekoeffizienten, sind vom Kernspin  $I$  im Zwischenzustand sowie den Multipoleigenschaften der  $\gamma$ -Strahlung ( $L_1, L_2$ ) abhängig. Tabelliert findet man die Werte z.B. bei [ FER 65 , STE 75 ], als Normierungsbedingung wird  $A_{00} = 1$  gewählt. Diese zeitunabhängige Beschreibung gilt jedoch nur solange, wie der Kern im Zwischenzustand nicht mit seiner Umgebung in Wechselwirkung tritt.

Aus Gründen der Paritätserhaltung nimmt  $k$  nur gerade Werte an, in Folge der Drehimpulserhaltung gilt ferner:

$$k_{\max} \leq \text{Min} ( 2I, 2L_1, 2L_2 ) \quad (\text{III.2})$$

Für den im folgenden verwendeten Sondenkern  $^{111}\text{In}$  ( s. Kap. III.2 ) bedeutet dies, daß  $k$  keine größeren Werte als  $k_{\max} = 4$  annehmen kann.

In Gleichung ( III.1 ) treten dann die folgenden Legendre - Polynome auf:

$$\begin{aligned} P_0(\cos\theta) &= 1 \\ P_2(\cos\theta) &= 1/2 ( 3 \cos^2\theta - 1 ) \\ P_4(\cos\theta) &= 1/8 ( 35 \cos^4\theta - 30 \cos^2\theta + 3 ) \end{aligned} \quad (\text{III.3})$$

### III.1.b. Die Störung der $\gamma$ - $\gamma$ Winkelkorrelation durch einen elektrischen Feldgradienten

Infolge der Hyperfeinwechselwirkung zwischen den elektrischen bzw. magnetischen Kernmultipolmomenten und den am Ort des Sondenkerns auftretenden elektromagnetischen Feldern wird die Richtungskorrelation zwischen den Emissionsrichtungen  $\vec{k}_1$  und  $\vec{k}_2$  zeitabhängig gestört.

Im folgenden wird der Fall betrachtet, daß ein statischer, elektrischer Feldgradient ( EFG ) in einem polykristallinen Material eine solche Störung der  $\gamma$ - $\gamma$  Winkelkorrelation hervorruft. Da die einzelnen Mikrokristalle rein zufällig orientiert sind, wird in einem polykristallinen Material keine Raumrichtung besonders bevorzugt. Da somit, auch bei Einführung einer zusätzlichen Störung durch einen EFG, neben der Emissionsrichtung  $\vec{k}_1$  keine weitere Raumrichtung ausgezeichnet wird, bleibt die Zylindersymmetrie des Systems erhalten, und die gestörte Winkelkorrelationsfunktion enthält auch in diesem Fall nur eine Abhängigkeit vom Winkel  $\theta$  zwischen den Emissionsrichtungen  $\vec{k}_1$  und  $\vec{k}_2$ .

Die Modulation der Winkelverteilung  $W(\theta, t)$  läßt sich dann durch eine zeitabhängige Störfunktion  $G_{kk}(t)$  beschreiben, man erhält für polykristalline Proben [ FRA 65 ]:

$$W(\theta, t) = \sum_{\substack{k=0 \\ k \text{ gerade}}}^{k_{\max}} A_{kk} G_{kk}(t) P_k(\cos\theta) \quad (\text{III.4})$$

Im diskreten Bild der Quantenmechanik wird durch den Nachweis von  $\gamma_1$  ein Kernspinensemble selektiert, dessen magnetische  $m$ -Unterzustände ungleich besetzt sind. Da sich dieses Ensemble im allgemeinen nicht in einem Eigenzustand des Hamiltonoperators befindet, wird der Erwartungswert des Kernspinvektors zeitabhängig. Dies bedeutet aber eine Umbesetzung der  $m$ -Unterzustände und somit auch eine Zeitabhängigkeit der Ausstrahlungswahrscheinlichkeit von  $\gamma_2$ , wobei als charakteristische Frequenzen die Übergangsfrequenzen zwischen den magnetischen Unterzuständen gemessen werden.

Ein elektrischer Feldgradient wird durch die umgebende Ladungsverteilung erzeugt und ist als zweite partielle Ableitung des elektrostatischen Potentials  $V(\vec{r})$  nach den Ortskoordinaten wie folgt definiert:

$$V_{ij} := \frac{\partial^2 V(\vec{r})}{\partial x_i \cdot \partial x_j} \quad \text{mit } i, j = 1, 2, 3 \quad (\text{III.5})$$

Damit sind Stärke und Symmetrie des Feldgradienten ein Maß für die Änderung des elektrischen Feldes und enthalten somit indirekt Informationen über das elektrische Potential.

Durch eine Koordinatentransformation auf das Hauptachsensystem können die Komponenten dieses Tensors auf die drei Diagonalelemente  $V_{xx}$ ,  $V_{yy}$  und  $V_{zz}$  reduziert werden.

Innerhalb des Kernvolumens besitzen nur die s-Elektronen eine endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Wegen ihrer kugelsymmetrischen Ladungsverteilung bewirken diese jedoch keine Aufhebung der  $m$ -Entartung eines Kernzustandes, sondern lediglich eine Verschiebung aller  $m$ -Zustände um denselben Energiebetrag. Die s-Elektronen liefern somit nur einen Beitrag zur Isomerieverschiebung und werden daher in den weiteren Betrachtungen nicht mehr berücksichtigt [ SCH 85 ].

Unter der Annahme, daß sich innerhalb des Kernvolumens keine zum EFG beitragende Ladungen befinden, gilt die Laplace Gleichung:

$$\Delta V = V_{xx} + V_{yy} + V_{zz} = 0 \quad (\text{III.6})$$

Folglich läßt sich der EFG durch zwei Größen vollständig bestimmen. Üblicherweise wählt man das Koordinatensystem so, daß  $|V_{xx}| \leq |V_{yy}| \leq |V_{zz}|$  und beschreibt den Gradienten durch seine betragsmäßig größte Komponente  $V_{zz}$  sowie eine symmetrie-spezifische Größe, den sogenannten Asymmetrieparameter  $\eta$ .

$$\eta := \frac{V_{xx} - V_{yy}}{V_{zz}} \quad (0 \leq \eta \leq 1) \quad (\text{III.7})$$

Anstelle der Maximalkomponente  $V_{zz}$  wird oftmals auch die sogenannte Quadrupol-kopplungskonstante  $\nu_Q$  angegeben, da zu ihrer Messung das Quadrupolmoment  $Q$  des Kerns im Zwischenzustand nicht bekannt sein muß.

$$\nu_Q := \frac{e \cdot Q \cdot V_{zz}}{h} \quad (\text{III.8})$$

Besitzt der Sondenkern im Zwischenzustand ein elektrisches Quadrupolmoment  $Q$  ( für  $I > 1/2$  ), so führt die Wechselwirkung mit einem elektrischen Feldgradienten zu einer teilweisen Aufhebung der  $m$ -Entartung der Unterzustände. Diese Quadrupolaufspaltung läßt sich durch folgenden Hamiltonoperator beschreiben [ GER 69, RIN 79 ]:

$$\hat{H}_Q = \frac{3m^2 - I(I+1) + \eta(\hat{I}_x^2 - \hat{I}_y^2)}{4I(2I-1)} \cdot e \cdot Q \cdot V_{zz} \quad (\text{III.9})$$

Für einen axialsymmetrischen Feldgradienten ( d.h.  $\eta=0$  ) ist der Hamiltonoperator diagonal und es ergeben sich folgende Energieeigenwerte:

$$E_m = (3m^2 - I(I+1)) \cdot \frac{e Q V_{zz}}{4I(2I-1)} \quad (\text{III.10})$$

Der in dieser Arbeit verwendete Sondenkern  $^{111}\text{In}$  besitzt im Zwischenniveau den Kernspin  $I = 5/2$ . Die daraus resultierende Aufspaltung der  $m$ -Unterzustände ist in Abbildung III.2 graphisch dargestellt.

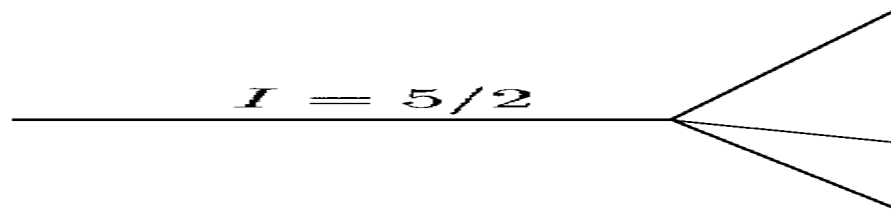


Abb. III.2 : Quadrupolaufspaltung für  $I = 5/2$  und  $\eta = 0$

Definiert man nun die Quadrupolfrequenz  $\omega_Q$  durch

$$\omega_Q := \frac{e Q V_{zz}}{4 I (2 I - 1) \hbar} \quad (\text{III.11})$$

dann gilt:

$$\Delta E_{mm'} = |E_m - E_{m'}| = 3 \cdot |m^2 - m'^2| \cdot \omega_Q \cdot \hbar \quad (\text{III.12})$$

und man erhält für die niedrigste Übergangsfrequenz  $\omega_0$  zwischen zwei  $m$ -Niveaus:

$$\begin{aligned} \omega_0 &= 3 \cdot \omega_Q && \text{für } I = \text{ganzzahlig} \\ \text{bzw. } \omega_0 &= 6 \cdot \omega_Q && \text{für } I = \text{halbzahlig} \end{aligned} \quad (\text{III.13})$$

Für einen axialsymmetrischen EFG (d.h.  $\eta = 0$ ) ergibt sich dann eine sehr einfache Beziehung für die Übergangsfrequenzen  $\omega_n$ :

$$\omega_n = n \cdot \omega_0 \quad \text{für } n = 1, 2, 3 \quad (\text{III.14})$$

Im Fall nicht axialsymmetrischer Feldgradienten läßt sich mit Hilfe der magnetischen Quantenzahl  $m$  eine geeignete Parametrisierung für die Komponenten des Quadrupolwechselwirkungsoperators finden [ GER 69, BUT 89 ].

$$\begin{aligned} H_{m,m} &= \hbar \omega_Q (3 m^2 - I(I+1)) \\ H_{m,m+1} &= 0 \\ H_{m,m+2} &= 1/2 \hbar \omega_Q \eta \sqrt{(I \mp m - 1)(I \mp m)(I \pm m + 1)(I \pm m + 2)} \end{aligned} \quad (\text{III.15})$$

Damit lassen sich die Energieeigenwerte des  $I = 5/2$  Zwischenniveaus als Funktion des Asymmetrieparameters  $\eta$  und der Quadrupolfrequenz  $\omega_Q$  wie folgt angeben:

$$\begin{aligned} E_{+5/2} &= E_0 + 2 \alpha \hbar \omega_Q \cos (1/3 \arccos \beta) \\ E_{+3/2} &= E_0 - 2 \alpha \hbar \omega_Q \cos (1/3 (\pi + \arccos \beta)) \\ E_{+1/2} &= E_0 - 2 \alpha \hbar \omega_Q \cos (1/3 (\pi - \arccos \beta)) \end{aligned} \quad (\text{III.16})$$

$$\text{mit } \alpha = \sqrt{28(1 + \eta^2/3)} \quad \text{und} \quad \beta = \frac{80(1 - \eta^2)}{\alpha^3}$$

Für die einzelnen Übergangsfrequenzen  $\omega_n$  ergeben sich dann folgende Relationen:

$$\begin{aligned}\omega_1 &= 2\sqrt{3} \alpha \omega_Q \sin (1/3 \arccos \beta) \\ \omega_2 &= 2\sqrt{3} \alpha \omega_Q \sin (1/3 (\pi - \arccos \beta)) \\ \omega_3 &= \omega_1 + \omega_2 = 2\sqrt{3} \alpha \omega_Q \sin (1/3 (\pi + \arccos \beta))\end{aligned}\quad (\text{III.17})$$

Der Verlauf der Energieeigenwerte  $E_n$  sowie der zugehörigen Wechselwirkungsfrequenzen  $\omega_n$  ist in Abhängigkeit des Asymmetrieparameters  $\eta$  in Abbildung III.3 graphisch dargestellt.

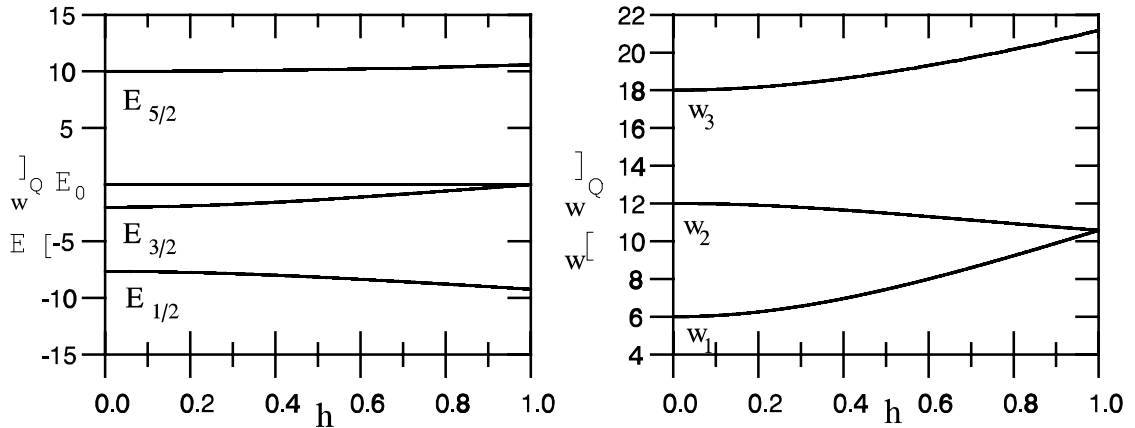


Abb. III.3 : Die Aufspaltung eines  $I = 5/2$  Zwischenlevels als Funktion des Asymmetrieparameters  $\eta$

Der Einfluß einer Störung durch einen statischen EFG bewirkt nun, daß die magnetischen  $m$ -Unterzustände des Zwischenlevels mit der Wechselwirkungsfrequenz  $\omega_n$  periodisch umbesetzt werden. Bei einer  $\gamma$ - $\gamma$  Winkelkorrelationsmessung beobachtet man daher eine zeitliche Modulation der Richtungskorrelationsfunktion  $W(\theta, t)$ . Diese Modulation läßt sich mit Hilfe der in Gleichung III.4 eingeführten Störfunktion  $G_{kk}(t)$  durch eine Überlagerung der Wechselwirkungsfrequenzen  $\omega_n$  beschreiben.

$$G_{kk}(t) = \sum_{n=0}^3 s_{kn}(\eta) \cdot \cos(\omega_n(\eta, V_{zz}) \cdot t) \quad (\text{III.18})$$

Für den, bei den PAC-Messungen verwendeten, Sondenkern  $^{111}\text{In}$  wird der Anisotropiekoeffizient  $A_{44}$  üblicherweise vernachlässigt [ vgl. Tab. III.1 ], womit sich die Beziehung III.4 wie folgt vereinfacht:

$$W(\theta, t) = 1 + A_{22} \cdot G_{22}(t) \cdot P_2(\cos\theta) \quad (\text{III.19})$$

Die Fourierkoeffizienten  $s_{2n}$  sind in polykristallinen Proben nur noch vom Asymmetrieparameter  $\eta$  abhängig und lassen sich für  $k=2$  sowie  $I=5/2$  in guter Näherung als Polynome darstellen ( vgl. [ PÜT 82 ] ).

$$\begin{aligned}
 s_{20} &= 0.20018 - 0.00642 \cdot \eta + 0.33630 \cdot \eta^2 - 0.42682 \cdot \eta^3 + 0.15533 \cdot \eta^4 \\
 s_{21} &= 0.37294 - 0.03492 \cdot \eta - 0.15689 \cdot \eta^2 + 0.11476 \cdot \eta^3 \\
 s_{22} &= 0.28595 - 0.00472 \cdot \eta - 0.00837 \cdot \eta^2 + 0.02186 \cdot \eta^3 \\
 s_{23} &= 0.14318 - 0.00167 \cdot \eta + 0.05591 \cdot \eta^2 - 0.06813 \cdot \eta^3 + 0.02376 \cdot \eta^4
 \end{aligned}
 \tag{ III.20 }$$

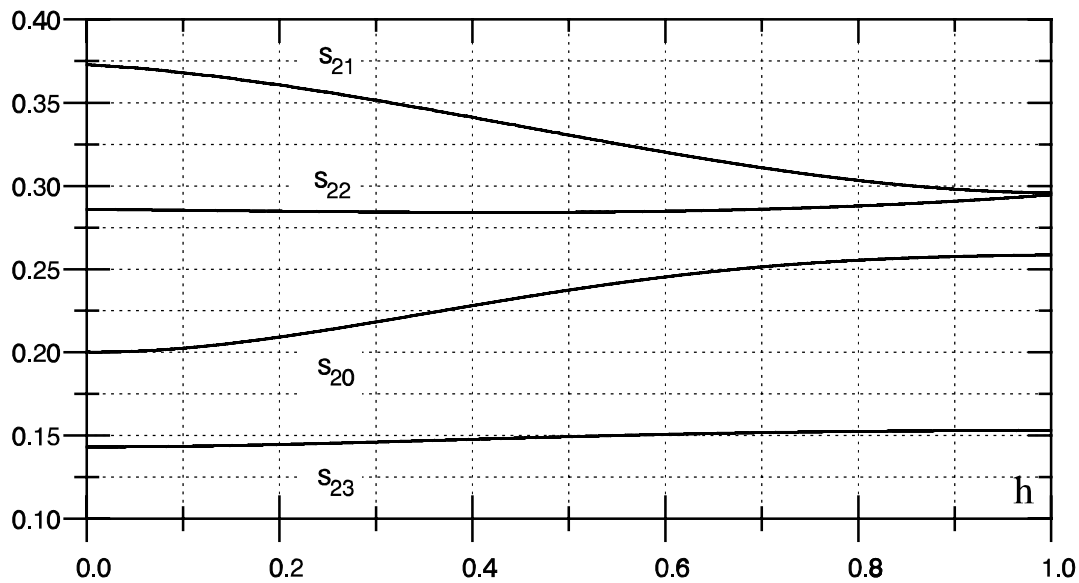


Abb. III.4 : Die  $s_{2n}$ -Koeffizienten für  $I = 5/2$  in Abhängigkeit von  $\eta$

Der Einfluß des Asymmetrieparameters  $\eta$  auf die Störfunktion  $G_{22}(t)$  ist in der Abbildung III.5 graphisch dargestellt. Eine periodische Struktur erhält man für  $\eta = 0$  sowie für  $\eta = 1$ .

Im Fall einer gedämpften statischen Wechselwirkung zwischen einem EFG und einem Kernquadrupolmoment sinkt  $G_{kk}(t)$  für  $t \rightarrow \infty$  nicht unter einen Grenzwert, den sogenannten "hard core"-Wert [ vgl. Abb. III.11 ]. Dieser Wert wird bestimmt durch den Term  $s_{k0}$  in Gleichung III.18, er nimmt für einen axialsymmetrischen EFG ( $\eta=0$ ) ein Minimum an, wobei gilt:

$$G_{kk}^{hc}(t) = \frac{1}{2k+1}
 \tag{ III.21 }$$



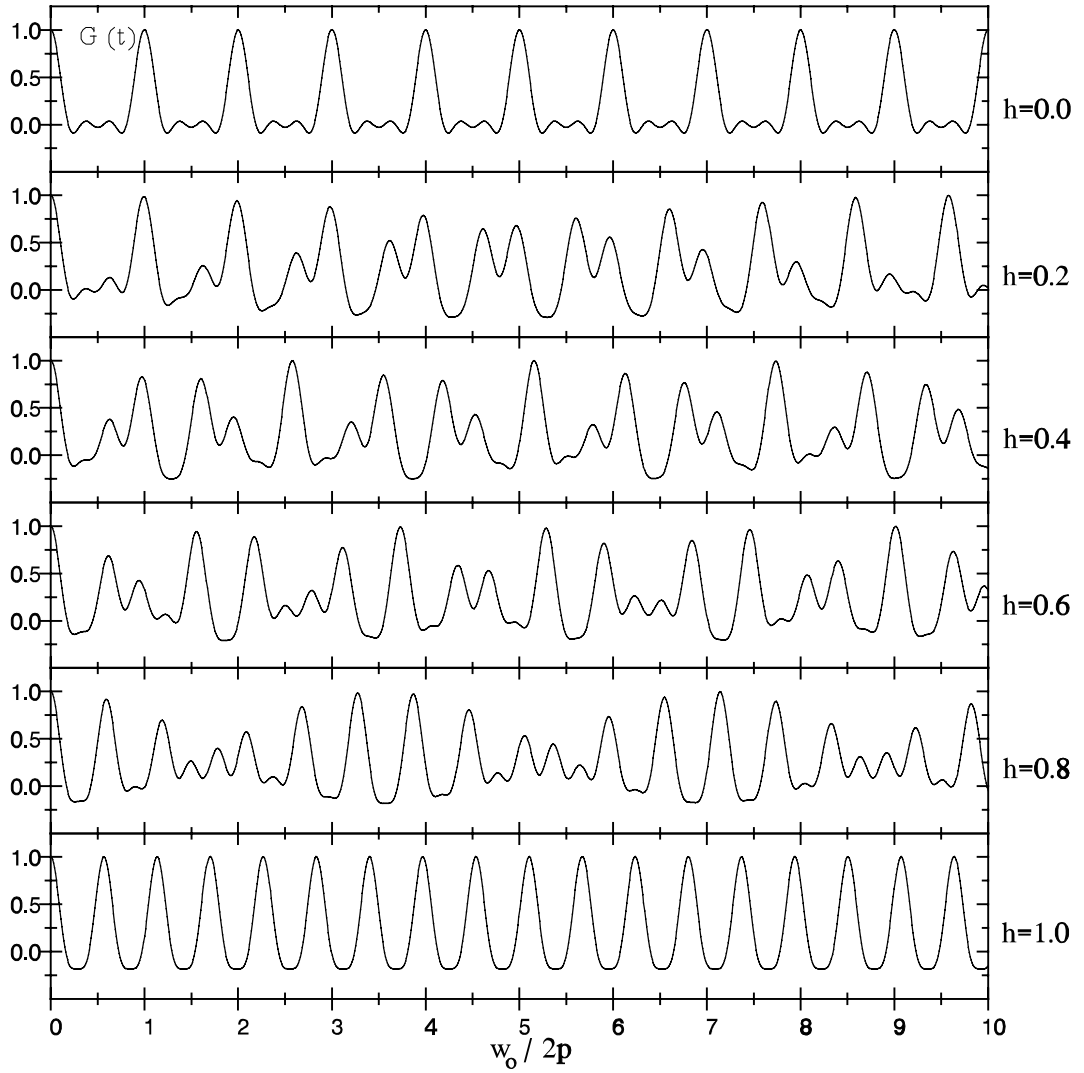


Abb. III.5 : Der Verlauf der Störfunktion  $G_{22}(t)$  für einen Kernspin  $I=5/2$  für verschiedene  $\eta$

Bei Verwendung eines anderen Sondenkerns ist die Näherung  $A_{44} \approx 0$  nicht mehr zulässig. In diesem Fall muß neben der Störfunktion  $G_{22}(t)$  auch  $G_{44}(t)$  berücksichtigt werden. Da man die gestörte Winkelkorrelation in der Regel nur unter zwei Winkeln beobachtet ( üblicherweise  $\theta = 180^\circ$  bzw.  $90^\circ$  ) ist allerdings eine unabhängige Bestimmung von  $G_{22}(t)$  und  $G_{44}(t)$  nicht möglich. Man definiert daher sogenannte effektive  $s_n^{eff}$ -Koeffizienten:

$$s_n^{eff}(\theta, \eta) := s_{2n}(\eta) \cdot P_2(\cos\theta) + \frac{A_{44}}{A_{22}} \cdot s_{4n}(\eta) \cdot P_4(\cos\theta)$$

$$\text{also: } s_n^{eff}(180^\circ, \eta) = s_{2n}(\eta) + \frac{A_{44}}{A_{22}} \cdot s_{4n}(\eta) \quad (\text{III.22})$$

$$s_n^{eff}(90^\circ, \eta) = -0.5 \cdot s_{2n}(\eta) + 0.375 \cdot \frac{A_{44}}{A_{22}} \cdot s_{4n}(\eta)$$

und erhält damit eine Störfunktion  $G(\theta, t)$ ,

$$G(\theta, t) = \sum_{n=0}^3 s_n^{eff}(\theta, \eta) \cdot \cos(\omega_n(\eta, V_{zz}) \cdot t) \quad (\text{III.23})$$

mit der sich die Winkelkorrelationsfunktion  $W(\theta, t)$  wie folgt darstellt:

$$W(\theta, t) = 1 + A_{22} \cdot G(\theta, t) \quad (\text{III.24})$$

### III.1.c. Die gestörte Winkelkorrelation im kubischen Einkristall

Bei den bisher behandelten polykristallinen Proben ist durch die statistische Verteilung der einzelnen Mikrokristalle im Mittel keine Richtung des EFG bevorzugt. Dies ändert sich bei Messungen an einem Einkristall, da das Hauptachsensystem des EFG an die Kristallachsen gebunden ist. Im Gegensatz zu einer polykristallinen Probe ist dadurch neben der Emissionsrichtung  $\vec{k}_1$  des zeitlich ersten  $\gamma$ -Quants eine weitere Raumrichtung ausgezeichnet und die Zylindersymmetrie des Systems aufgehoben. Abhängig von der Orientierung der Detektoren relativ zu den Kristallachsen ändert sich daher die Störfunktion in charakteristischer Weise. Dadurch ist es jedoch auch möglich, die Lage der Symmetrieachse des EFG im Kristallgitter zu bestimmen, wodurch man wichtige Informationen über die Struktur des zugrundeliegenden Sonde-Defekt-Komplexes erhält.

Die allgemeine Form der Richtungskorrelationsfunktion  $W(\vec{k}_1, \vec{k}_2, t)$  lautet für eine einkristalline Probe [ FRA 65 ]:

$$W(\vec{k}_1, \vec{k}_2, t) = \sum_{\substack{k_1, k_2 \\ N_1, N_2}} A_{k_1}(\gamma_1) \cdot A_{k_2}(\gamma_2) \cdot G_{k_1, k_2}^{N_1, N_2}(t) \cdot [(2k_1 + 1) \cdot (2k_2 + 1)]^{-1/2} \cdot Y_{k_1}^{N_1}(\theta_1, \varphi_1) \cdot Y_{k_2}^{N_2}(\theta_2, \varphi_2) \quad (\text{III.25})$$

mit der Störfunktion  $G_{k_1, k_2}^{N_1, N_2}(t)$ ,

$$G_{k_1, k_2}^{N_1, N_2}(t) = \sum_{\substack{k_1, k_2 \\ N_1, N_2}} (-1)^{2I+m_a+m_b} \cdot [(2k_1 + 1) \cdot (2k_2 + 1)]^{-1/2} \cdot \exp(-i/\hbar) \cdot (E_n - E_{n'}) \cdot t \cdot \langle n | m_b \rangle^* \langle n | m_a \rangle \langle n' | m'_b \rangle \langle n' | m'_a \rangle^* \cdot \begin{pmatrix} I & I & k_1 \\ m'_a & -m_a & N_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & I & k_2 \\ m'_b & -m_b & N_2 \end{pmatrix} \quad (\text{III.26})$$

den Kugelflächenfunktionen  $Y_k^N$  und den, für die entsprechende Kaskade tabellierten, Anisotropiekoeffizienten  $A_k$  [ STE 75 ].

Hierbei beschreiben  $\theta_i$  und  $\varphi_i$  die Positionen der Detektoren bzw. die Emissionsrichtungen  $\vec{k}_1$  und  $\vec{k}_2$  im Hauptachsensystem des EFG und  $\vartheta$  den Winkel  $\sphericalangle(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$  zwischen den Detektoren [ Abb. III.6 ].

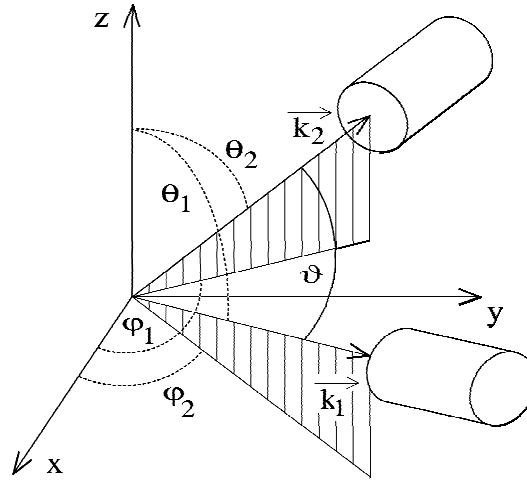


Abb. III.6 : Die Anordnung der Detektoren im Hauptachsensystem des EFG

Unter Verwendung sogenannter effektiver  $s_n^{eff}$ -Koeffizienten ist es möglich, die Richtungskorrelationsfunktion  $W(\vec{k}_1, \vec{k}_2, t)$  [ Gl. III.25 ] darzustellen als:

$$W(\vec{k}_1, \vec{k}_2, t) = W(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2, t) = 1 + A_{22} \cdot G(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2, t) \quad (\text{III.27})$$

Wobei die Störfunktion  $G(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2, t)$  formal eine ähnliche Gestalt erhält wie bei der Quadrupolwechselwirkung in polykristallinen Proben [ Gl. III.23 ].

$$G(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2, t) = \sum_{n=0}^3 s_n^{eff}(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2, \eta, \frac{A_{24}}{A_{22}}, \frac{A_{42}}{A_{22}}, \frac{A_{44}}{A_{22}}) \cdot \cos(\omega_n(\eta, V_{zz}) \cdot t) \quad (\text{III.28})$$

Im Gegensatz zum polykristallinen Fall hängen nun die Fourierkoeffizienten von der Lage der Detektoren im Hauptachsensystem des EFG ab. Die Berechnung der  $s_n^{eff}$ -Koeffizienten bei Einkristallmessungen ist für den Sondenkern  $^{111}\text{In}$  am Beispiel spezieller Detektororientierungen ausführlich im Anhang [ Kap. IX.1/2 ] dargestellt. Sofern der EFG jedoch nicht axialsymmetrisch ist ( $\eta \neq 0$ ), muß die Störfunktion für jeden Wert von  $\eta$  neu berechnet werden.

Bei Richtungskorrelationsmessungen am Einkristall ist außerdem zu beachten, daß es für jede Sonde-Defekt-Konfiguration im allgemeinen Fall mehrere kristallographisch äquivalente Anordnungen gibt, die zu unterschiedlichen Orientierungen der EFG-Hauptachsen bezüglich des Detektorsystems führen. So kann eine Leerstelle auf einem  $\langle 111 \rangle$ -Nachbarplatz acht, physikalisch vollkommen äquivalente, Positionen einnehmen ( $[111]$ ,  $[-111]$ ,  $[-1-11]$ ,  $[1-11]$ ,  $[-1-1-1]$ ,  $[1-1-1]$ ,  $[11-1]$ ,  $[-11-1]$ ), die jedoch zu verschiedenen Richtungen der Symmetrieachse des EFG führen. Die hierzu gehörigen Richtungskorrelationsfunktionen sind jedoch nur für solche Orientierungen identisch, die sich lediglich durch ihr Vorzeichen unterscheiden.

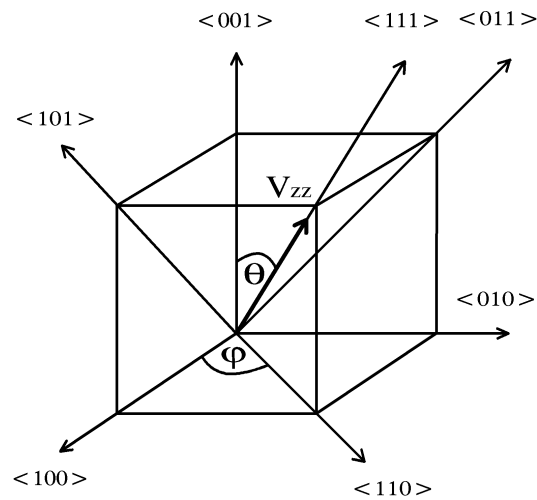


Abb. III.7 : Die Detektororientierung relativ zu den Kristallachsen, charakterisiert durch die Millerschen Indizes  $\langle hkl \rangle$

Unter der Annahme, daß alle äquivalenten Plätze mit gleicher Wahrscheinlichkeit besetzt sind, kann über die verschiedenen  $s_n^{eff}$ -Koeffizienten wie folgt gemittelt werden:

$$\overline{s_n^{eff}} = \frac{1}{P} \sum_{i=1}^P s_n^{eff}(h_i, k_i, l_i) \quad (\text{III.29})$$

### III.2. Der Sondenkern $^{111}\text{In} / ^{111}\text{Cd}$

Der bei den folgenden Experimenten verwendete Sondenkern  $^{111}\text{In}$  ist, aufgrund seiner für  $\gamma$ - $\gamma$  Richtungskorrelationsmessungen nahezu idealen Eigenschaften, eine der am häufigsten eingesetzten PAC-Sonden.

Der Zerfall des Mutterisotops Indium zum Cadmium erfolgt durch Elektroneneinfang (EC) mit einer Halbwertszeit von 2,8 Tagen [ Abb. III.8 ], die wichtigsten kernphysikalischen Daten sind in Tabelle III.1 zusammengestellt. Für die PAC-Messung wird die  $\gamma$ - $\gamma$  Kaskade ( $E(\gamma_1) = 172 \text{ keV}$ ,  $E(\gamma_2) = 247 \text{ keV}$ ) ausgenutzt, durch die der angeregte  $7/2^+$ -Zustand über den  $5/2^+$ -Zwischenzustand schließlich in den  $1/2^+$ -Grundzustand des  $^{111}\text{Cd}$  übergeht. Die Lebensdauer  $\tau = 84 \text{ ns}$  des Zwischenniveaus ist, gemessen an der typischen Zeitauflösung einer PAC-Apparatur ( $\approx 1-3 \text{ ns}$ ), einerseits lang genug, andererseits aber auch kurz genug, um die Zahl der zufälligen Koinzidenzen gering zu halten.

Außerdem besitzt das Zwischenniveau, je nach zu untersuchender Wechselwirkung, ein ausreichend großes Quadrupolmoment ( $Q = 0.83 \text{ barn}$ ) bzw. magnetisches Dipolmoment ( $\mu = -0.76 \mu_N$ ), um in Verbindung mit den im Festkörper auftretenden typischen elektrischen Feldgradienten bzw. Magnetfeldern beobachtbare Wechselwirkungsfrequenzen zu erzeugen.

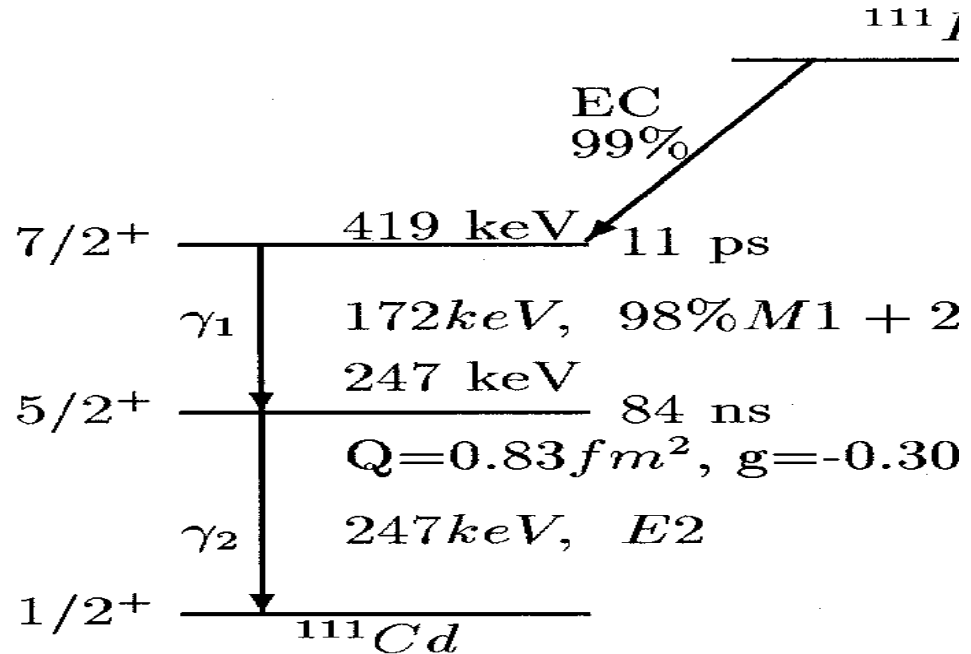


Abb. III.8 : Partielles Zerfallsschema des Sondenkerns  $^{111}\text{In}$

Mutterisotop	: $^{111}\text{Indium}$	
Tochterisotop	: $^{111}\text{Cadmium}$	
Halbwertszeit des Mutterisotops	: 2.81 d	[ LED 73 ]
Halbwertszeit des Zwischenniveaus	: 84 ns	[ NDS 79 ]
Spin und Parität des Zwischenniveaus	: $5/2^+$	
Quadrupolmoment des Zwischenniveaus	: 0.83 (13) barn	[ HER 80 ]
Magn. Dipolmoment des Zwischenniveaus	: $-0.7656 (25) \mu_N$	[ STE 56 ]
Energien und Multipolaritäten der Kaskade	: $\gamma_1$ : 172 keV, 98%M1 2%E2 $\gamma_2$ : 247 keV, E2	[ LED 73 ]
Anisotropiekoeffizienten der Kaskade	: $A_{22}$ : - 0.180 (2) $A_{44}$ : 0.002 (3) $A_{24}$ : - 0.204 ( berechnet ) $A_{42}$ : - 0.001 ( " )	[ STE 56 ]
Sternheimer - Korrekturfaktor ( $1 - \gamma_\infty$ )	: 30.3 ( freies $\text{Cd}^{++}$ - Ion )	[ FEI 69 ]

Tab. III.1 : Eigenschaften des Sondenkerns  $^{111}\text{In} / ^{111}\text{Cd}$

Die Anisotropiekoeffizienten  $A_{22}$  und  $A_{24}$  enthalten die Spins der beteiligten Kernzustände, die Multipolaritäten der Übergänge sowie deren Mischungsverhältnisse. Aufgrund der endlichen Raumwinkelauflösung sind die gemessenen Werte  $A_{ij}^{app}$  kleiner als die angegebenen Literaturwerte  $A_{ij}$ . Hierbei gilt  $A_{ij}^{app} = Q_{ij} \cdot A_{ij}$ , wobei die experimentell ermittelten Korrekturfaktoren  $Q_{ij}$  von der speziellen Detektorgeometrie abhängig sind [ vgl. Kap. III.4.b ].

Der Sternheimer - Korrekturfaktor  $(1 - \gamma_{\infty})$  berücksichtigt die Verstärkung des EFG am Ort des Sondenkerns durch die Polarisation seiner Elektronenhülle [ STE 67 ]. Da dieser Korrekturfaktor nur für freie Ionen bekannt ist, bleibt die Berechnung von Feldgradienten aus den gemessenen Wechselwirkungsfrequenzen in einem Festkörper problematisch.

Die chemischen und elektronischen Eigenschaften des Mutterkerns  $^{111}\text{In}$  im jeweiligen Wirtsgitter bestimmen, ob und in welchem Umfang mit der Anlagerung von Defekten zu rechnen ist. Das Dotierungsatom Indium verhält sich in den Elementhalbleitern Silizium und Germanium als flacher Akzeptor und bildet dort elektrisch aktive Zentren, welche sich z.B. durch Eindiffusion von Wasserstoff passivieren lassen.

Die Beobachtung des EFG findet hingegen erst nach dem Zerfall des  $^{111}\text{In}$  am Kernort des  $^{111}\text{Cd}$  statt. Die PAC - Messungen zeigen, daß die Atomhülle, die sich nach dem radioaktiven Zerfall in einem angeregten und ionisierten Zustand befindet, bereits nach  $t_{1/2} = 0.11 \text{ ns}$  ( Halbwertszeit des  $7/2^+$ - Niveaus im  $^{111}\text{In}$  ) wieder vollständig relaxiert sein muß, da ansonsten keine einheitlichen EFG zu beobachten wären.

### III.3. Der Aufbau der Meßapparatur

Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Messungen wurden an verschiedenen Winkelkorrelationsapparaturen durchgeführt. Eine ausführliche Beschreibung der Apparaturen, die nach dem konventionellen Fast-Slow-Koinzidenzprinzip arbeiten, findet sich z.B. in [ WRE 86, KOC 90, SCH 92 ]. Es wird daher an dieser Stelle nur die prinzipielle Arbeitsweise einer Vier-Detektor-Winkelkorrelationsapparatur [ Abb. III.10 ] beschrieben.

Die Messung der  $\gamma$ - $\gamma$  Koinzidenzzählrate erfolgt bei polykristallinen Proben unter den festen Detektorwinkeln  $90^\circ$  bzw.  $180^\circ$ . Diese Konfiguration ist besonders zur Aufnahme der Störfunktion  $G(\theta, t)$  geeignet, da in diesem Fall der Zählratenunterschied aufgrund der Werte für  $P_2(\cos \theta)$  maximal wird [ vgl. Gl. III.19 ].

Bei Messungen an einem Einkristall werden die Detektoren dagegen entlang besonders ausgezeichneter Kristallachsen positioniert. Eine  $\langle 100 \rangle$  bzw.  $\langle 110 \rangle$ -Orientierung der Detektoren führt zu einem Detektorwinkel von  $90^\circ$  bzw.  $180^\circ$ , wohingegen bei einer  $\langle 111 \rangle$ -Orientierung der Winkel zwischen zwei benachbarten Detektoren auf  $70,5^\circ$  bzw.  $109,5^\circ$  geändert werden muß.

Um die Detektoren möglichst nahe an die Probe heranzubringen, wurde eine konische Kristallform gewählt [ vgl. Abb III.9 ]. Als Szintillatorkristall wird  $\text{BaF}_2$  verwendet, da  $\text{BaF}_2$ -Szintillatoren eine hohe Nachweiswahrscheinlichkeit bei sehr guter Zeitauflösung und einer ausreichend guten Energieauflösung besitzen [ SCH 87 ]. Die Kristalle sind mit Silikonöl auf die Photomultiplieröhren ( XP 2020Q ) aufgesetzt und an den übrigen Flächen, zur Verbesserung der Reflexionseigenschaften, mit Teflonband umwickelt.

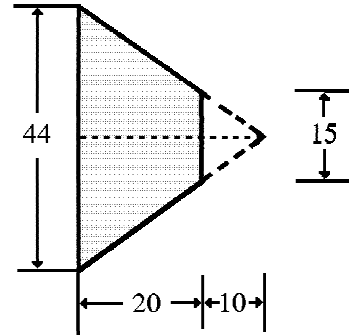


Abb. III.9 : Der  $\text{BaF}_2$ - Szintillatorkristall  
( alle Angaben in mm )

Die von der Probe emittierte  $\gamma$ -Strahlung wird im Szintillatorkristall in energieproportionale Lichtblitze umgesetzt, welche ihrerseits auf der Photokathode des Photomultipliers eine proportionale Elektronenemission auslösen. Dieser Elektronenpuls wird dann mit einer Hochspannung von ca. 2.3 kV über 12 Dynoden stufenweise verstärkt.

Die Zeitsignale werden an der 9. Dynode abgegriffen und gelangen unverstärkt auf die Constant-Fraction-Diskriminatoren ( CFD ), wo sie in einen, von der Amplitude unabhängigen, Nadelimpuls ( Fast-Signal ) umgewandelt werden. Die zugehörigen Energiesignale werden an der Anode der Photomultiplier abgegriffen und über Vor- und Hauptverstärker auf die Eingänge zweier Einkanalanalysatoren ( SCA ) gegeben. Für jeden Detektor gibt es somit jeweils einen SCA zur Registrierung der Energie (  $E(\gamma_1) = 172 \text{ keV}$  ) des zeitlich ersten Quants der verwendeten  $\gamma$ - $\gamma$  Kaskade ( START-Signal ) und einen SCA zur Registrierung der STOP-Energie (  $E(\gamma_2) = 247 \text{ keV}$  ). Die SCA erzeugen beim Nachweis eines  $\gamma$ -Quants der entsprechenden Energie einen positiven sowie einen negativen Normpuls ( Slow-Signale ). Die negativen Normpulse werden nun zusammen mit den Zeitsignalen auf ein AND-Gatter geführt [ Abb. III.8 ]. Die Weiterleitung des Zeitsignals erfolgt hier nur, wenn das Signal koinzident mit dem START- bzw. STOP-Signal eines Einkanalanalysators ist, also tatsächlich ein  $\gamma$ -Quant der Kaskade nachgewiesen wurde. Eine Verzögerung von ca.  $0,6 \mu\text{s}$  über ein etwa 200 m langes, dämpfungsarmes Koaxialkabel ist notwendig, um die Laufzeitunterschiede der langsameren Energiesignale gegenüber den Zeitsignalen im sogenannten FAST-Kreis der Elektronik wieder auszugleichen.

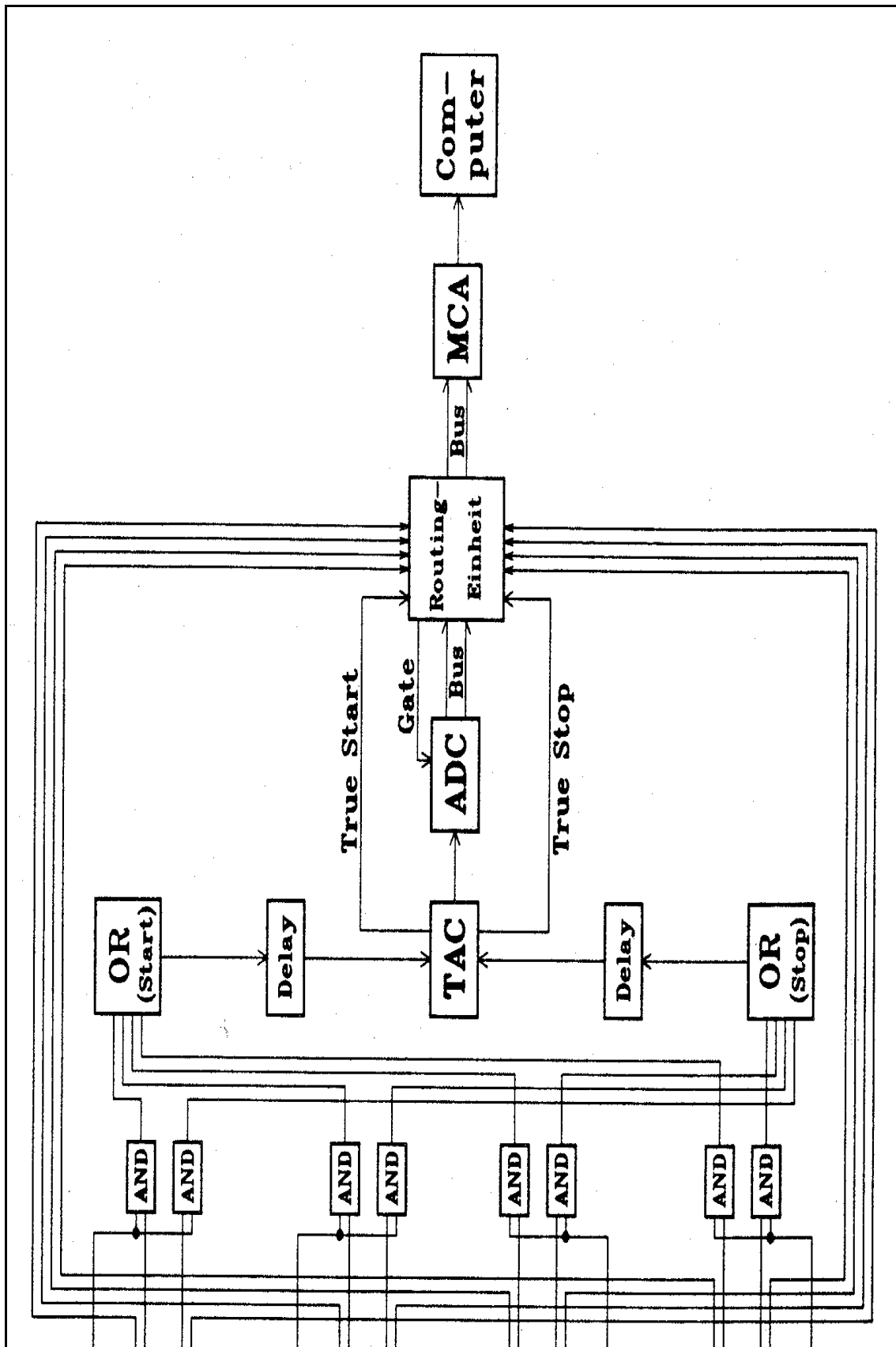


Abb. III.10 : Blockschaltbild einer Vier-Detektor-Apparatur ( Fast-Slow-Koinzidenzprinzip )



Über zwei OR-Verknüpfungen werden die START- bzw. STOP-Ereignisse der vier Detektoren zusammengefaßt und auf die entsprechenden Eingänge des Time-to-Amplitude-Converter ( TAC ) gegeben. Der Ausgangspuls des TAC ist proportional zum Zeitintervall zwischen dem Nachweis von  $\gamma_1$  und  $\gamma_2$ . Die TAC-Signale werden schließlich im Analog-Digital-Wandler ( ADC ) digitalisiert und über die sogenannte Routingeinheit ( RE ) an den Vielkanalanalysator ( MCA ) weitergeleitet.

Zur Identifizierung der angesprochenen Detektorkombination werden in der RE die, von den SCA gelieferten, positiven Normpulse verarbeitet [ WRE 82, WIL 84 ]. Findet eine erwünschte Koinzidenz statt, so wird ein GATE-Impuls erzeugt, der den ADC zur Konversion des anliegenden TAC-Ausgangspulses veranlaßt. Weiterhin sorgt die RE für die Codierung der vorliegenden START-STOP-Kombination in drei Steuerbits, die zusammen mit der digitalisierten Zeitinformation an einen PC-MCA ( Accuspec ) weitergeleitet werden. Diese zusätzlichen Bits sorgen dafür, daß die gemessenen Zeitspektren, je nach angesprochener Detektorkombination, in verschiedenen Speicherbereichen abgelegt werden. Ein On-Line-Programm [ LIE 93 ] ermöglicht die Auswertung der gemessenen Koinzidenzzählraten bereits während der laufenden Messung.

### III.4. Die Auswertung der Meßergebnisse

Ein unbekannter elektrischer Feldgradient ( EFG ) verursacht, am Ort eines radioaktiven Sondenkerns mit bekanntem elektrischen Quadrupolmoment  $Q$ , eine Störung der Winkelkorrelation zweier nacheinander emittierter  $\gamma$ -Quanten. Die gesamte Information über die Wechselwirkung steckt allein in der zeitabhängigen Störfunktion [ vgl. Gl. III.24 ]. Das Ziel einer TDPAC-Messung ist es daher, die Störfunktion  $G(t)$  zu ermitteln, um darüber Informationen über die lokalen elektromagnetischen Felder in der unmittelbaren Sondenumgebung zu erhalten.

#### III.4.a. Die Methode der $R$ -Wert Bildung

Zwei unter einem Winkel  $\theta$  angeordnete Detektoren liefern ein Koinzidenzspektrum, bei dem die Lebensdauerkurve des Zwischenzustands mit der Winkelkorrelationsfunktion  $W(\theta,t)$  moduliert ist.

$$N(\theta,t) = N_0 \cdot \exp(-t/\tau) \cdot W(\theta,t) + C \quad (\text{III.30})$$

Hierbei ist  $\tau$  die Lebensdauer des Zwischenzustands und  $C$  der noch zu korrigierende Untergrund an zufälligen Koinzidenzereignissen.

Für den Sondenkern  $^{111}\text{In}$  wird der Anisotropiekoeffizient  $A_{44}$  üblicherweise vernachlässigt [ vgl. Gl. III.19 ], so daß man bei einer polykristallinen Probe folgende untergrundkorrigierte Koinzidenzzählrate erhält:

$$N(\theta, t) = N_o \cdot \exp(-t/\tau) \cdot ( 1 + A_{22} \cdot G_{22}(t) \cdot P_2(\cos\theta) ) \quad (\text{III.31})$$

Die Messung der Koinzidenzzählraten erfolgt üblicherweise unter den Detektorwinkeln  $\theta=90^\circ$  bzw.  $180^\circ$ . Bildet man nun aus den, bei dieser Detektorkombination gemessenen Spektren, ein geeignetes Zählratenverhältnis, den sogenannten  $R$ -Wert, so läßt sich die Störfunktion  $G_{22}(t)$  aus den untergrundkorrigierten Zählraten wie folgt extrahieren:

$$R(t) := 2 \cdot \frac{N(180^\circ, t) - N(90^\circ, t)}{N(180^\circ, t) + 2 \cdot N(90^\circ, t)} \quad (\text{III.32})$$

Mit  $P_2(\cos\theta)=1/2(3\cos^2\theta - 1)$  erhält man unmittelbar nach Einsetzen von Gl.III.31:

$$R(t) = A_{22} \cdot G_{22}(t) \quad (\text{III.33})$$

Entsprechend erhält man für die zweite Unbekannte  $A_o(t)=N_o \cdot \exp(-t/\tau)$  :

$$A_o(t) = \frac{N(180^\circ, t) + 2 \cdot N(90^\circ, t)}{3} \quad (\text{III.34})$$

Da bei einer Vier-Detektor-Apparatur die  $90^\circ$ - und  $180^\circ$ -Spektren von verschiedenen Detektorkombinationen aufgenommen werden, müssen die unterschiedlichen Ansprechwahrscheinlichkeiten der einzelnen Detektoren berücksichtigt werden. Hierzu wird das geometrische Mittel der Einzelzählraten  $N_i(\theta, t)$  gebildet [ ARE 80 ].

$$\overline{N(\theta, t)} = \left( \prod_{i=1}^n (N_i(\theta, t) - Z_i) \right)^{\frac{1}{n}} \quad (\text{III.35})$$

Mit einer Vier-Detektor-Apparatur können gleichzeitig maximal  $n=4$  Spektren unter  $180^\circ$  und  $n=8$  Spektren unter  $90^\circ$  aufgenommen werden. Die in guter Näherung als zeitlich konstant angenommenen Zufälligenanteile  $Z_i$  werden zunächst aus dem Mittelwert der Zählraten in den Kanälen vor dem Zeitnullpunkt bestimmt und anschließend noch durch Anpassung an die theoretische  $A_o(t)$ -Kurve korrigiert. Die Funktion  $A_o(t)$  [ Gl. III.34 ] beschreibt lediglich die exponentielle Abnahme der Zählrate und enthält keine wechselwirkungsabhängigen Anteile mehr.

Bei Messungen an kubischen Einkristallen erhält man, mit der in Gl. III.28 definierten Störfunktion  $G(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2, t)$ , folgenden Ausdruck für die bereits untergrundkorrigierte Koinzidenzzählrate:

$$N(\theta, t) = N_0 \cdot \exp(-t/\tau) \cdot (1 + A_{22} \cdot G(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2, t)) \quad (\text{III.36})$$

Alle Detektoren werden dabei gewöhnlich entlang gleichindizierter Kristallachsen orientiert. Bei Messungen entlang von  $\langle 100 \rangle$ - oder  $\langle 110 \rangle$ - Kristallachsen kann die übliche Detektorgeometrie mit  $\theta_1=180^\circ$  und  $\theta_2=90^\circ$  beibehalten werden. Bei einer  $\langle 111 \rangle$  Orientierung der Detektoren müssen dagegen die Koinzidenzspektren unter  $\theta_1=180^\circ$  und  $\theta_2=70,5^\circ$  aufgenommen werden. In jedem Fall werden die  $R$ -Werte wieder gemäß der Gleichung

$$R(t) := 2 \cdot \frac{N(180^\circ, t) - N(\theta_2, t)}{N(180^\circ, t) + 2 \cdot N(\theta_2, t)} \quad (\text{III.37})$$

gebildet und man erhält nach Einsetzen von Gl. III.34:

$$R(t) = 2 \cdot \frac{A_{22} \cdot (G(180^\circ, t) - G(\theta_2, t))}{3 + A_{22} \cdot (G(180^\circ, t) + 2 \cdot G(\theta_2, t))} \quad (\text{III.38})$$

Bei Messungen entlang von  $\langle 100 \rangle$ -Richtungen gilt  $G(180^\circ, t) = -2G(90^\circ, t)$  und damit enthält der Nenner keine Zeitabhängigkeit mehr. Für die  $\langle 110 \rangle$ - und  $\langle 111 \rangle$ -Richtungen ist dies zwar nicht der Fall, aber auch hier gilt in guter Näherung [ WEG 85 ]

$$3 + A_{22} \cdot (G(180^\circ, t) + 2 \cdot G(\theta_2, t)) \approx 3 \quad (\text{III.39})$$

und man erhält damit :

$$R(t) = \frac{2}{3} \cdot A_{22} \cdot (G(180^\circ, t) - G(\theta_2, t)) := A_{22} \cdot \tilde{G}(t) \quad (\text{III.40})$$

Während bei polykristallinen Proben die  $s_n^{\text{eff}}$ -Koeffizienten gemäß der Polynom-Approximation [ Gl. III.20 ] berechnet werden, sind sie in Einkristallexperimenten als freie Fitparameter zu behandeln, aus deren Größe durch Vergleich mit den theoretisch berechneten Werten auf die Orientierung des EFG geschlossen werden kann.

Für gegebene Orientierungen von Detektoren und EFG bezüglich der Kristallachsen ergeben sich die theoretischen  $\sigma_n^{\text{eff}}$ -Koeffizienten zu [ vgl. Tab. III.5 ]:

$$\sigma_n^{\text{eff}}(\eta) := \frac{2}{3} \cdot \left( s_n^{\text{eff}}(180^\circ, \eta) - s_n^{\text{eff}}(\theta_2, \eta) \right) \quad (\text{III.41})$$

Mit den auf diese Weise definierten  $\sigma_n^{\text{eff}}$ -Koeffizienten nimmt die Störfunktion  $\tilde{G}(t)$  in Gleichung III.40 formal dieselbe Gestalt an, wie bei der Quadrupolwechselwirkung in polykristallinen Proben [ vgl. Gl. III.21 ].

$$\tilde{G}(t) = \frac{2}{3} \cdot \left( G(180^\circ, t) - G(\theta_2, t) \right) = \sum_{n=0}^3 \sigma_n^{\text{eff}}(\eta) \cdot \cos(\omega_n(\eta, V_{zz}) \cdot t) \quad (\text{III.42})$$

### III.4.b. Die Anpassung an die theoretische Störfunktion

Der Angleich der theoretischen Funktion an die aus den Koinzidenzzählraten experimentell erhaltenen  $R$ -Werte erfolgt nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate. Die Störfunktion  $G(t)$  setzt sich jedoch im allgemeinen aus einer Überlagerung mehrerer Komponenten  $G_i(t)$  zusammen. Die verschiedenen Anteile  $f_i$  berücksichtigen, daß Teilmengen der Sondenkerne in unterschiedlichen Umgebungen des kubischen Wirtsgitters auch unterschiedlichen Hyperfeinwechselwirkungen ausgesetzt sein können [ Abb. III.11 ].

$$G(t) = \sum_i f_i \cdot G_i(t) \quad \text{mit der Normierung} \quad \sum_i f_i = 1 \quad (\text{III.43})$$

Der Summationsindex  $i$  gibt die Anzahl der nicht gleichartigen Sondenumgebungen im Kristallgitter an.

Für Anteile  $f_i$  von Sondenkernen, die einem einheitlichen, statischen elektrischen Feldgradient ausgesetzt sind, lautet die Störfunktion:

$$G_i(t) = \sum_{n=0}^3 s_n^{\text{eff}}(\eta^{(i)}) \cdot \cos(\omega_n^{(i)}(\eta^{(i)}, V_{zz}^{(i)}) \cdot t) \quad (\text{III.44})$$

Infolge von Gitterfehlern unterscheiden sich die einzelnen Sondenumgebungen jedoch geringfügig, wodurch die Sondenkerne in der Praxis in der Regel keiner einheitlichen Störung ausgesetzt sind.

Eine lorenzförmige Verteilung des EFG um einen Mittelwert der Wechselwirkungsfrequenz  $\omega$  führt zu einer exponentiellen Dämpfung der Störfunktion, wobei der Dämpfungsparameter  $\delta$  der relativen Größe der halben Halbwertsbreite ( HWHM ) entspricht. Die Fitfunktion lautet somit:

$$G_i(t) = \sum_{n=0}^3 s_n^{eff}(\eta^{(i)}) \cdot \cos(\omega_n^{(i)}(\eta^{(i)}, V_{zz}^{(i)}) \cdot t) \cdot \exp(-\omega_n^{(i)} \cdot \delta^{(i)} \cdot t) \quad (\text{III.45})$$

Geringe Abweichungen von der regelmäßigen Gitterstruktur, beispielsweise verursacht durch Verunreinigungen, führen zu kleinen Dämpfungsparametern ( $\delta \approx 1\text{-}5\%$ ). Stark uneinheitliche, elektrische Feldgradienten, wie sie in der Regel unmittelbar nach der Implantation beobachtet werden können, führen hingegen zu einem Wechselwirkungsmuster, welches durch einen direkten exponentiellen Abfall auf den sogenannten "hard core"-Wert gekennzeichnet ist. Dieser asymptotische Grenzwert, den die Störfunktion für  $t \rightarrow \infty$  annimmt, wird bestimmt durch den Term  $s_{k0}$  in Gl. III.18 ( für polykristalline Proben und  $\eta = 0$  erhält man  $G_{22}^{hc} = 0.2$  ).

Sondenkerne, welche nur schwachen elektrischen Feldgradienten ( $\omega \approx 0$  MHz) ausgesetzt sind, wie sie z.B. durch weiter entfernte Gitterdefekte erzeugt werden, führen zu:

$$G_1(t) = \sum_{n=0}^3 s_n^{eff}(\eta) \cdot \exp(-n \cdot \delta \cdot t) \quad (\text{III.46})$$

Solche Kerne, die auf ungestörten kubischen Gitterplätzen infolge der Ladungssymmetrie keiner Wechselwirkung unterliegen, werden beschrieben durch:

$$G_o(t) = 1 \quad (\text{III.47})$$

Die endliche Zeitauflösung der Apparatur läßt sich durch eine Faltung mit der sogenannten Prompten Kurve  $P(t)$  wie folgt berücksichtigen:

$$R(t) = A_{22} \cdot \int_0^\infty P(t'-t) \cdot \tilde{G}(t') dt' + C \quad (\text{III.48})$$

Die additive Konstante  $C$  bewirkt dabei eine Verschiebung der gemessenen Spektren. Eine solche Verschiebung kann durch eine unterschiedliche probeninterne  $\gamma$ -Absorption unter  $90^\circ$  bzw.  $180^\circ$  sowie durch eine eventuell vorhandene Dejustierung der Probe aus dem Zentrum der Detektoranordnung verursacht werden.

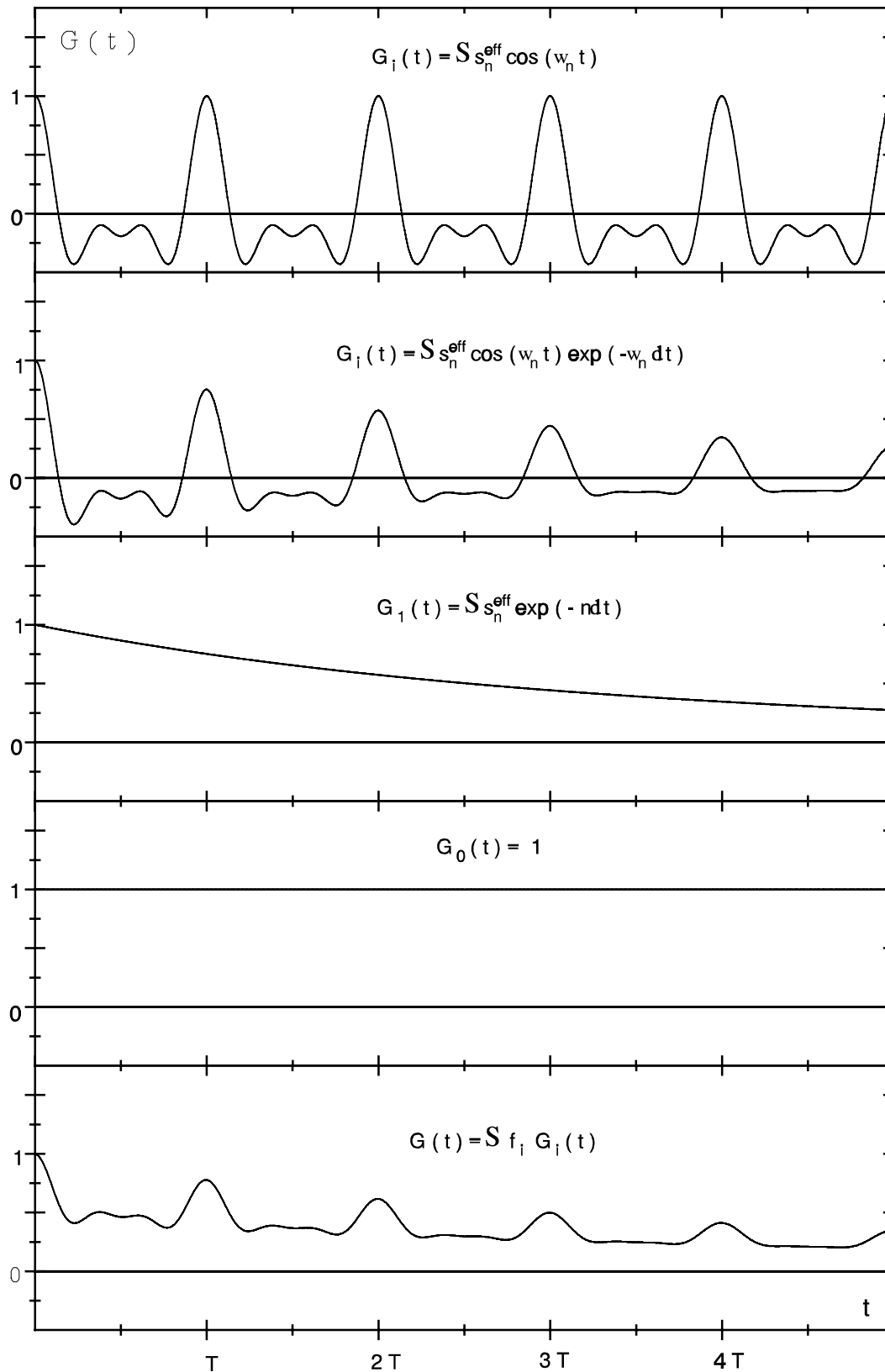


Abb. III.11 : PAC-Winkelkorrelationsspektren für Sondenkerne in unterschiedlichen Umgebungen eines kubischen Wirtsgitters

Unter der Annahme einer Normalverteilung der Prompten Kurve gemäß

$$P(t-t') = \frac{1}{\tau \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(t-t')^2}{\tau^2}\right) \quad (\text{III.49})$$

läßt sich die Zeitauflösung der Apparatur durch Einführung des Parameters  $\tau$  in der Störfunktion  $G_i(t)$  berücksichtigen [ BER 69 ].

$$G_i(t) = \sum_{n=0}^3 s_n^{(i)} \cdot \cos(\omega_n^{(i)} \cdot t) \cdot \exp(-\omega_n^{(i)} \cdot \delta^{(i)} \cdot t) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} (\omega_n^{(i)})^2 \cdot \tau^2\right) \quad (\text{III.50})$$

Das bei der Auswertung verwendete Fitprogramm berechnet, bei ausschließlich elektrischer Quadrupolwechselwirkung, bis zu drei gleichartige Sondenumgebungen, welche durch einen entsprechenden Satz von Parametern  $\{ \nu_\varrho^{(i)}, \eta^{(i)}, \delta^{(i)} \}$  charakterisiert werden.

Angefittet wird dabei das gemessene  $R$ -Wert-Spektrum [ vgl. III.37 ]:

$$R(t) = A_{22} \cdot \sum_{i=1}^3 f_i \cdot \tilde{G}_i(t) \cdot e^{-\lambda_i t} + C \quad (\text{III.51})$$

Eine möglicherweise durch Diffusion verursachte dynamische Dämpfung der Spektren kann, in den Näherungen einer langsamen bzw. schnellen Fluktuation des EFG, durch einen zusätzlichen Relaxationsparameter  $\lambda_i$  beschrieben werden [ BAU 87 ]. Bei rein statischer Wechselwirkung wird dieser Dämpfungsparameter gleich Null gesetzt.

Überlagern sich statische und dynamische Dämpfung, so ist eine Unterscheidung prinzipiell möglich, jedoch muß bei den üblichen statistischen Meßgenauigkeiten die Dämpfung groß genug sein.

Bei rein statischer Dämpfung ( $\delta$ ) tritt neben einer Amplitudenreduktion eine Verbreiterung der Peaks auf. Diese Verbreiterung fehlt hingegen im Fall der dynamischen Dämpfung ( $\lambda$ ). Der Verlauf der Störfunktion liefert daher bei ausreichend großer Dämpfung ein Entscheidungskriterium zugunsten eines Parameters [ vgl. Abb. III.12 ]. Ein weiteres Unterscheidungskriterium ist dadurch gegeben, daß im Fall dynamischer Dämpfung durch fluktuierende Felder die Störfunktion auf Null abfällt, so daß der "hard core"-Wert unterlaufen wird. Jedoch ist auch dieser Effekt durch die Unbestimmtheit der additiven Konstanten  $C$  oft nicht nutzbar.

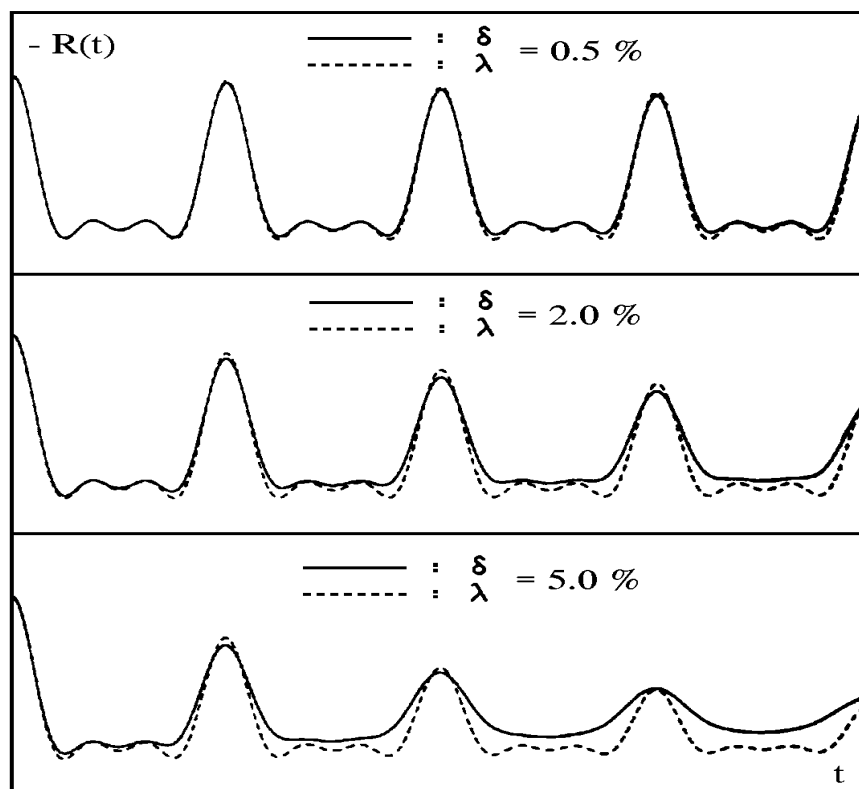


Abb. III.12 : Zur Unterscheidung von statischer und dynamischer Dämpfung ( $\lambda$  in Einheiten von  $\omega_0$ )

Durch die endliche Ausdehnung der Detektoren und der Quelle wird die zu erwartende Anisotropie herabgesetzt. Dieser Effekt ist bei der Auswertung der Meßdaten ebenfalls zu berücksichtigen.

Für die konischen  $\text{BaF}_2$ -Detektoren wurde die apparative Anisotropie  $A_{22}^{app}$  mit einer ungestörten  $^{111}\text{In}$ -Sonde für verschiedene Abstände  $d$  zwischen Detektor und Quelle gemessen [ Tab. III.2 ]. Eine  $^{111}\text{InCl}_3$ -Lösung wurde hierzu auf einer Goldfolie eingedampft. Anschließend wurde die Goldfolie in einer Elektronen-Kanone geschmolzen, danach gewalzt, und hiernach für die Dauer einer Stunde im Vakuum ( $p = 1,5 \cdot 10^{-7}$  kPa) bei  $923^\circ\text{K}$  gegläht. Nach dieser Behandlung befinden sich die radioaktiven  $^{111}\text{In}$ -Sondenkerne auf substitutionellen Plätzen in einer ungestörten, kubischen Umgebung [ PAS 85 ].

$d$ [cm]	1	1.5	2	2.5	3	3.5	4
$A_{22}^{app}$	- .114(5)	- .125(3)	- .134(3)	- .143(4)	- .150(3)	- .155(3)	- .159(4)

Tab. III.2 : Die gemessenen Anisotropien für  $^{111}\text{In}$  in verschiedenen Abständen zwischen Quelle und Detektor [ KOC 92 ]



Die reduzierten Anisotropiekoeffizienten lassen sich mit folgenden Formeln berechnen:

$$A_{ij}^{app} = Q_{ij} \cdot A_{ij} \quad (\text{III.52})$$

Hierbei gilt:

$$\begin{aligned} A_{ij} &= A_i(\gamma_1) \cdot A_j(\gamma_2) \\ \text{und } Q_{ij} &= Q_i(\gamma_1) \cdot Q_j(\gamma_2) \end{aligned} \quad (\text{III.53})$$

wobei:

$$Q_i = \frac{\int_0^\alpha P_i(\cos \beta) \cdot \epsilon(\beta) \cdot \sin(\beta) \cdot d\beta}{\int_0^\alpha \epsilon(\beta) \cdot \sin(\beta) \cdot d\beta} \quad (\text{III.54})$$

Zu beachten ist, daß die Nachweiswahrscheinlichkeit  $\epsilon$  im Detektor außer von der  $\gamma$ -Energie noch von dem Winkel  $\beta$  zwischen der Ausbreitungsrichtung der  $\gamma$ -Quanten und der Symmetrieachse des Kristalls abhängt. Für einen konischen Kristall [ Abb. III.9 ] kann  $\epsilon$  bei einem festen Detektorabstand als winkelunabhängig angesehen werden, und für kleine  $\gamma$ -Energien ( 172 keV / 247 keV bei  $^{111}\text{In}$  ) kann ferner in guter Näherung  $\epsilon = 1$  gesetzt werden. Für einen axialsymmetrischen Kristall erhält man bei einem Öffnungswinkel  $\alpha/2 = 36.25^\circ$  sowie einem zugehörigen Detektorabstand von  $d = 10$  mm [ YAT 65 ]:

$$\begin{aligned} Q_2 &= \frac{1}{2} \cdot \cos \alpha \cdot (1 + \cos \alpha) & (\text{a}) \\ Q_4 &= \frac{1}{8} \cdot \cos \alpha \cdot (1 + \cos \alpha) \cdot (7 \cos^2 \alpha - 3) & (\text{b}) \end{aligned} \quad (\text{III.55})$$

Vergrößert man jedoch den Abstand der Detektoren, so ist die Nachweiswahrscheinlichkeit der registrierten  $\gamma$ -Quanten nicht mehr unabhängig von ihrer Ausbreitungsrichtung. Die Abschwächungskoeffizienten  $Q_2$  und  $Q_4$  wurden daher in einer Monte-Carlo-Simulation für unterschiedliche  $\gamma$ -Energien und verschiedenen Detektorabständen berechnet [ Tab. III.3 ]. Hierbei bestimmt man auf der Grundlage der Wirkungsquerschnitte, ob ein zufallsverteiltes  $\gamma$ -Quant im Photopeak absorbiert oder gegebenenfalls nach mehrmaliger Comptonstreuung aus dem Szintillatorkristall [ Abb. III.9 ] herausgestreut wird. Die Abschwächungskoeffizienten  $Q_i$  berechnen sich dann als Summe über die insgesamt betrachteten Einzelprozesse:

$$Q_i = \frac{\sum_{k=1}^{k_{ges.}} \epsilon_k \cdot P_i(\cos \beta)}{\sum \epsilon_k \quad ( = \text{Anzahl der abs. } \gamma\text{-Quanten} )} \quad (\text{III.56})$$

$$\text{mit : } \epsilon_k = \begin{cases} 1 & \text{für ein absorbiertes } \gamma\text{-Quant} \\ 0 & \text{für ein herausgestreutes } \gamma\text{-Quant} \end{cases}$$

$E$ [keV]	$d$	1 cm	1.5 cm	2 cm	2.5 cm	3 cm	3.5 cm	4 cm
133	$Q_2$	.72565(66)	.80969(58)	.85424(42)	.88259(50)	.90238(43)	.91876(37)	.92999(30)
	$Q_4$	.2772(19)	.4605(18)	.5724(15)	.6479(16)	.7020(14)	.7488(13)	.7808(11)
173 ( $\gamma_1$ )	$Q_2$	.72483(95)	.81315(56)	.85960(53)	.88779(39)	.90910(31)	.92393(34)	.93532(28)
	$Q_4$	.2750(24)	.4691(18)	.5861(18)	.6615(13)	.7216(10)	.7635(11)	.79716(95)
243	$Q_2$	.72232(92)	.81670(59)	.86651(56)	.89522(52)	.91639(43)	.92946(32)	.94094(29)
	$Q_4$	.2693(25)	.4762(18)	.6041(18)	.6821(18)	.7420(14)	.7789(11)	.8134(11)
248 ( $\gamma_2$ )	$Q_2$	.72214(89)	.81675(64)	.86650(54)	.89501(49)	.91506(42)	.92976(44)	.94160(37)
	$Q_4$	.2674(24)	.4765(19)	.6039(18)	.6818(16)	.7374(14)	.7803(15)	.8150(13)
482	$Q_2$	.7223(15)	.82061(99)	.87179(98)	.90157(90)	.92185(72)	.93555(64)	.9469(57)
	$Q_4$	.2679(43)	.4866(34)	.6167(31)	.6993(31)	.7572(23)	.7966(22)	.8317(20)
753	$Q_2$	.7257(22)	.8187(18)	.8714(14)	.9050(10)	.9238(11)	.93819(96)	.94891(77)
	$Q_4$	.2766(63)	.4783(58)	.6156(45)	.7094(34)	.7639(36)	.8063(33)	.8377(26)

Tab. III.3 : Die in einer Monte-Carlo-Simulation für eine konische Kristallform [ Abb. III.9 ] berechneten Abschwächungskoeffizienten  $Q_i$  für verschieden  $\gamma$ -Energien und Detektorabstände

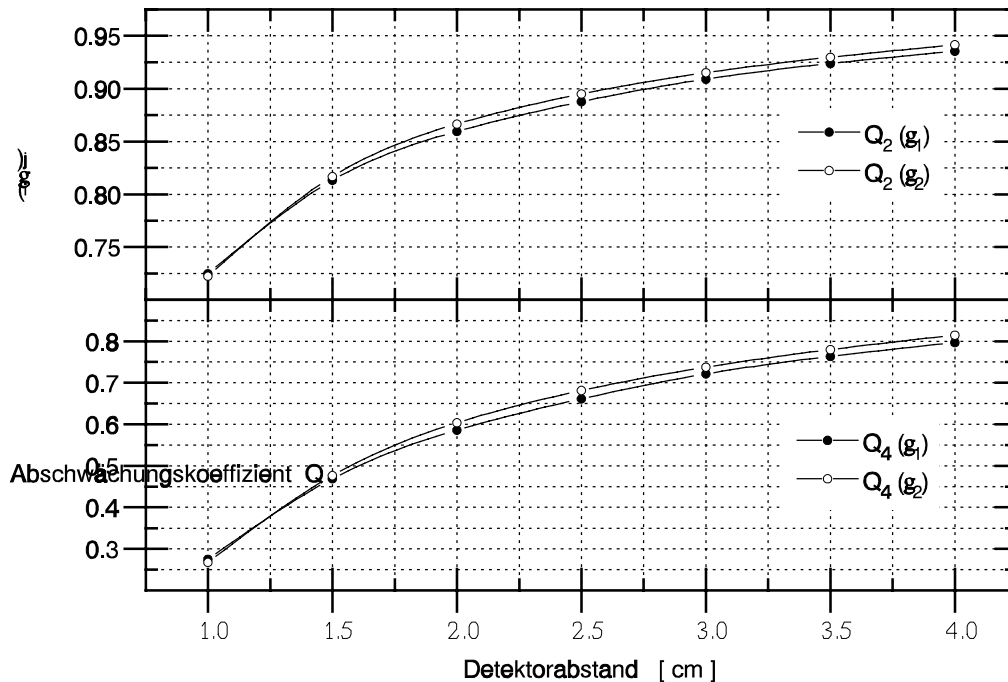


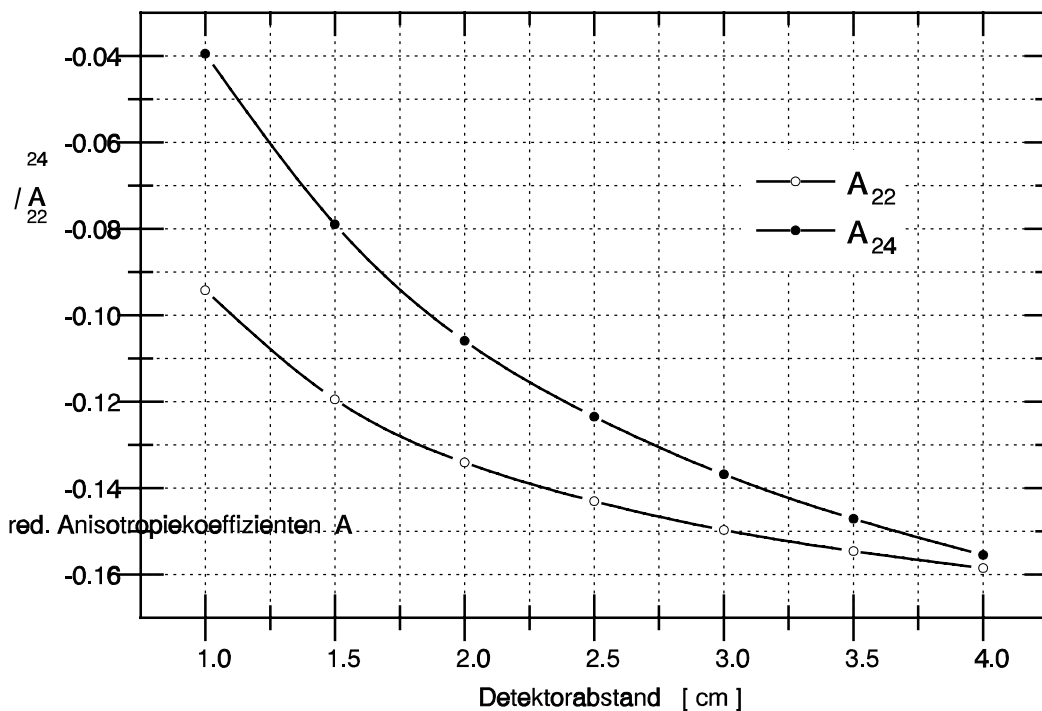
Abb. III.13 : Die Abschwächungskoeffizienten  $Q_i(\gamma_j)$  aus Tab. III.3, für die  $\gamma$ -Energien von  $^{137}\text{Cs}$  in Abhängigkeit vom Detektorabstand

In die Berechnung der  $s_n^{eff}$ -Koeffizienten [ WEG 85 ] geht auch das Verhältnis der Anisotropiekoeffizienten  $A_{24} / A_{22}$  ein [ vgl. Gl. IX.4 ]. Da sich die abstandsabhängige Reduzierung der Anisotropie unterschiedlich auswirkt, ist somit auch das Verhältnis der Anisotropiekoeffizienten vom jeweiligen Detektorabstand abhängig.

Die tabellierten Werte der  $s_n^{eff}$ -Koeffizienten [ PÜT 82 ] wurden für ein vorgegebenes Verhältnis von  $A_{24}/A_{22} = 0.9$  berechnet. Mit Hilfe der Abschwächungskoeffizienten aus Tabelle III.3 lassen sich nun die Anisotropiekoeffizienten  $A_{22}^{app}$  und  $A_{24}^{app}$  in Abhängigkeit vom Detektorabstand angeben. Für die  $\gamma$ - $\gamma$  Kaskade  $^{111}\text{In}/^{111}\text{Cd}$  lauten die Anisotropiekoeffizienten  $A_2(\gamma_1) = 0.3299$ ,  $A_2(\gamma_2) = -0.5345$ ,  $A_4(\gamma_1) = 0.0023$ ,  $A_4(\gamma_2) = -0.6172$  [ WEG 85 ].

d [ cm ]	1	1.5	2	2.5	3	3.5	4
$A_{22}^{app}$	-0.0942(2)	-0.1195(2)	-0.1341(2)	-0.1430(1)	-0.1497(1)	-0.1546(1)	-0.1585(1)
$A_{24}^{app}$	-0.0395(4)	-0.0790(4)	-0.1059(4)	-0.1235(3)	-0.1368(3)	-0.1471(3)	-0.1555(3)
$A_{24}^{app}/A_{22}^{app}$	0.42	0.66	0.79	0.86	0.91	0.95	0.98

**Tab. III.4 :** Die für eine konische Kristallform [ Abb. III.9 ] berechneten Anisotropiekoeffizienten  $A_{ij}^{app}$  bei verschiedenen Detektorabständen



**Abb. III.14 :** Die reduzierten Anisotropiekoeffizienten  $A_{ij}^{app}$  aus Tab. III.4 in Abhängigkeit vom Detektorabstand

Vergleicht man die gemessenen [ Tab. III.2 ] mit den berechneten [ Tab. III.4 ] Anisotropiekoeffizienten, so stellt man eine sehr gute Übereinstimmung fest. Lediglich bei kleinen Detektorabständen beobachtet man Abweichungen, die darauf zurückzuführen sind, daß wegen der Umwicklung des Kristalls mit Teflonband und Tape der tatsächliche Abstand zwischen Quelle und Detektor minimal ( $\approx 1\text{-}2$  mm) größer war als in Tabelle III.2 angegeben.

Orientierung		$\sigma_n^{\text{eff}}$	Detektorabstand $d$ [ cm ]							
DET	EFG		$n$	1	1.5	2	2.5	3	3.5	4
<100> 90°/180°	<100>	0	.5000	.5000	.5000	.5000	.5000	.5000	.5000	.5000
		1	.3863	.4237	.4436	.4550	.4627	.4686	.4731	
		2	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	
		3	.1137	.0734	.0564	.0450	.0373	.0314	.0269	
	<110>	0	.1250	.1250	.1250	.1250	.1250	.1250	.1250	.1250
		1	.3542	.3371	.3280	.3227	.3192	.3165	.3144	
		2	.3788	.3912	.3979	.4017	.4042	.4062	.4077	
		3	.1420	.1467	.1492	.1506	.1516	.1523	.1529	
	<111>	0	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
		1	.3856	.3745	.3687	.3653	.3630	.3612	.3599	
		2	.4377	.4155	.4037	.3969	.3923	.3889	.3862	
		3	.1767	.2099	.2276	.2377	.2447	.2498	.2539	
<110> 90°/180°	<100>	0	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
		1	.4192	.4275	.4319	.4344	.4362	.4375	.4385	
		2	.5050	.5216	.5307	.5356	.5390	.5416	.5436	
		3	.0758	.0509	.0376	.0300	.0248	.0210	.0179	
	<110>	0	.2500	.2500	.2500	.2500	.2500	.2500	.2500	.2500
		1	.3775	.3858	.3902	.3928	.3945	.3958	.3968	
		2	.2021	.1814	.1703	.1640	.1596	.1564	.1539	
		3	.1704	.1828	.1895	.1933	.1958	.1978	.1993	
	<111>	0	.3334	.3334	.3334	.3334	.3334	.3334	.3334	.3334
		1	.3075	.2835	.2708	.2634	.2584	.2547	.2518	
		2	.1907	.2092	.2190	.2247	.2285	.2314	.2337	
		3	.1683	.1739	.1768	.1785	.1796	.1805	.1812	
<111> 70°/110°	<100>	0	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
		1	.3428	.3329	.3280	.3247	.3227	.3211	.3199	
		2	.3891	.3693	.3595	.3528	.3487	.3457	.3433	
		3	.1571	.1866	.2014	.2114	.2175	.2221	.2257	
	<110>	0	.2218	.2218	.2218	.2218	.2218	.2218	.2218	.2218
		1	.3058	.2960	.2908	.2878	.2857	.2842	.2830	
		2	.2545	.2790	.2921	.2996	.3047	.3086	.3116	
		3	.1067	.0920	.0841	.0796	.0765	.0743	.0724	
	<111>	0	.2961	.2961	.2961	.2961	.2961	.2961	.2961	.2961
		1	.3596	.3881	.4032	.4119	.4177	.4222	.4257	
		2	.1034	.0815	.0699	.0632	.0586	.0552	.0525	
		3	.1297	.1232	.1198	.1178	.1164	.1154	.1146	

Tab. III.5 : Die  $\sigma_n^{\text{eff}}$ -Koeffizienten ( $^{111}\text{In}$ ) für verschiedene Orientierungen von Detektoren und EFG in einem kubischen Einkristall

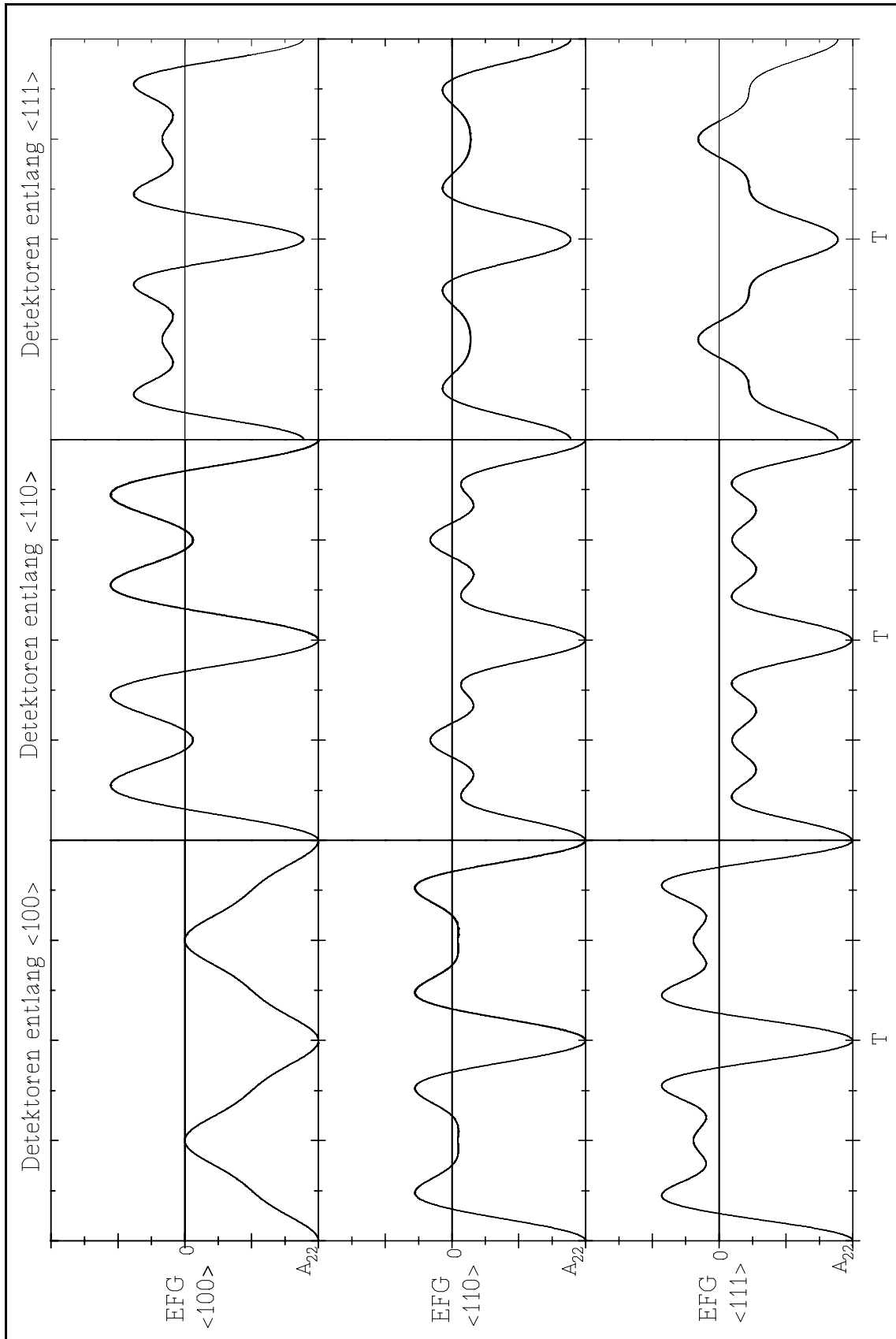


Abb. III.15 : Verlauf der Störfunktion  $A_{22} \cdot G_{22}(\sigma_n^{\text{eff}})$  mit  $\sigma_n^{\text{eff}} = 2/3 \cdot (s_n^{\text{eff}}(180^\circ) - s_n^{\text{eff}}(\theta))$  für den Sondenkern  $^{111}\text{In}$  in Abhängigkeit von der Detektorgeometrie

Für häufig auftretende Orientierungen von defektinduzierten EFG sind die  $\sigma_n^{eff}$ -Koeffizienten in Abhängigkeit vom Detektorabstand in der Tabelle III.5 tabelliert und der Verlauf der Störfunktion in Abbildung III.15 graphisch dargestellt. Da physikalisch äquivalente Positionen innerhalb des Kristalls in der Regel auch mit gleicher Wahrscheinlichkeit besetzt sind, wird bei den angegebenen Werten stets über alle gleichwertigen Orientierungen des EFG gemittelt.

Diese Voraussetzung ist keineswegs immer erfüllt, so tritt beispielsweise ein uniaxialer spannungsinduzierter EFG innerhalb des Kristalls nur entlang einer Kristallrichtung auf. Ferner sollten äußere uniaxiale Spannungen, je nach Lage der Spannungsachse, eine Ungleichbesetzung äquivalenter Orientierungen eines defektinduzierten EFG zur Folge haben. In Abhängigkeit von der jeweiligen Detektorkombination sowie für jede mögliche Richtung des EFG innerhalb des Kristalls enthalten die Tabellen IX.1-4 [ Kap. IX.1. ] die zugehörigen Detektorwinkel  $\theta$  und  $\varphi$ . Hieraus lassen sich dann die zugehörigen  $\sigma_n^{eff}$ -Koeffizienten berechnen und gegebenenfalls verschieden gewichten.

Für den allgemeinen Fall eines EFG, dessen Lage innerhalb des Kristallsystems zwar bekannt ist, bei dem der Kristall jedoch relativ zum ortsfesten Detektor- bzw. Laborsystem gedreht wurde, enthält Kapitel IX.2 einen einfachen Algorithmus zur Bestimmung der Detektorwinkel im Hauptachsensystem des EFG.

---

## IV. Die Probenpräparation

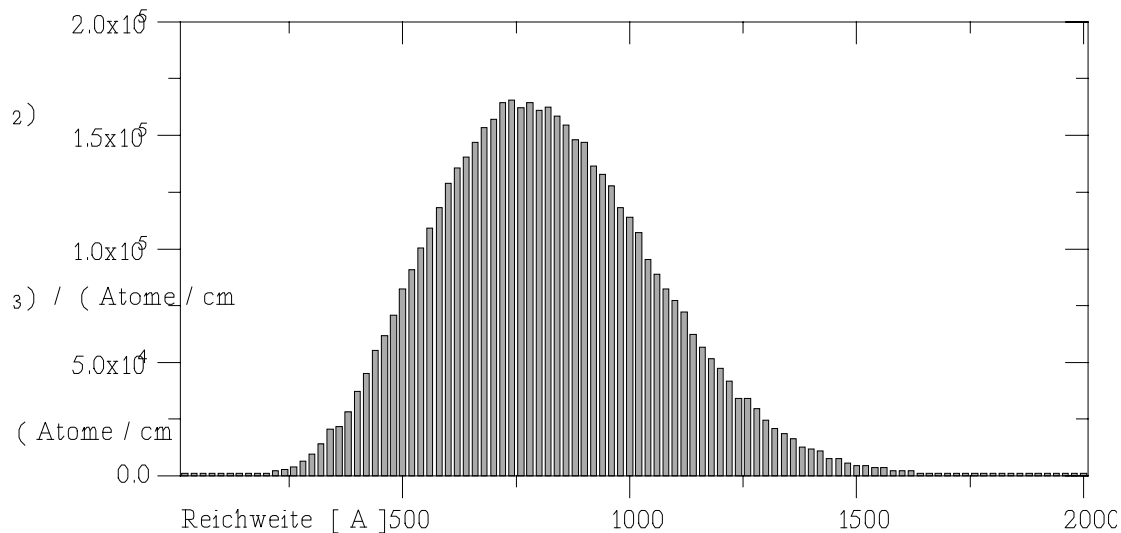
Zur Untersuchung der In-H-Komplexe in den Elementhalbleitern Si und Ge wurden intrinsische Proben mit niedriger Fremdatomkonzentration verwendet. Die von AKZO gelieferten undotierten Ge-Wafer waren 1 mm dick, einseitig poliert und besaßen eine  $\langle 100 \rangle$ -Oberflächenorientierung. Zur Erzeugung der notwendigen Biegespannungen waren jedoch Probendicken von max. 100 - 120  $\mu\text{m}$  erforderlich. Daher wurden die 10 · 20 mm großen Stücke zunächst mit einer Diamantdrahtsäge in zwei etwa gleichdicke Scheiben zerschnitten, und diese anschließend mit SiC weiter heruntergeschliffen. Die zur Implantation vorgesehene Oberfläche der Proben wurde schließlich noch mit natürlicher Diamantpaste und -spray mit Körnungen von 3  $\mu\text{m}$ , 1  $\mu\text{m}$  und 1/4  $\mu\text{m}$  mechanisch poliert.

Die Si-Wafer ( Durchmesser 2" ) der Firma VIRGINIA SEMICONDUCTOR waren beidseitig poliert und besaßen bereits eine Dicke von nur  $100 \pm 2,5 \mu\text{m}$ . Neben der üblichen  $\langle 100 \rangle$ -Oberflächenorientierung ( $\pm 1/4^\circ$ ) waren Wafer mit einer  $\langle 110 \rangle$ -Orientierung erhältlich. Wafer mit einer solchen  $\langle 110 \rangle$ -Oberfläche haben den Vorteil, daß  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachsen in der Oberfläche liegen, und somit für uniaxiale Druck- und Zugspannungen alle drei Hauptachsen zur Verfügung stehen.

Zur Entfernung von Verunreinigungen und einer möglicherweise vorhandenen Oxidschicht wurden sämtliche Proben vor der  $^{111}\text{In}$ -Implantation so lange in 40% Flußsäure ( HF ) geätzt, bis die Oberfläche wasserabweisend war. Anschließend wurde die polierte Probenoberfläche mit Äthanol und deionisiertem Wasser gereinigt und schließlich im Stickstoffstrom getrocknet.

### IV.1. Die Sondenimplantation

Die Implantation der radioaktiven  $^{111}\text{In}$ -Sondenkerne erfolgte bei Raumtemperatur am Bonner Isotopenseperator. Technische Einzelheiten zur Vorbereitung und Durchführung einer solchen Implantation sind in [ FRE 77 ] ausführlich beschrieben. Die verwendeten Einschußenergien lagen typischerweise bei 150 - 160 keV. Die daraus resultierenden Reichweiten wurden mit dem Programm TRIM [ BIE 80 ] berechnet und ergeben ein näherungsweise gaußförmiges Implantationsprofil mit einem Konzentrationsmaximum und einer zugehörigen Standardabweichung bei Ge:  $513 \pm 226 \text{ \AA}$  bzw. Si:  $786 \pm 237 \text{ \AA}$  [ ZIE 87 ].



**Abb. IV.1 :** Reichweite für  $^{111}\text{In}$  in Si berechnet für eine Einschubenergie von  $E = 155 \text{ keV}$

Bei einer Dosis von  $10^{12} - 10^{13} \text{ Ionen/cm}^2$  liegt die lokale Indiumkonzentration etwa bei  $10^{17} - 10^{18} \text{ Ionen/cm}^3$ , was einer Fremdatomkonzentration von einigen at.ppm. entspricht. Es wurde darauf geachtet, daß die Gesamtdosis einer Implantation, einschließlich unvermeidbarer Anteile des Zerfallsproduktes  $^{111}\text{Cd}$  sowie anderer inaktiver Indiumisotope [ KRU 77 ], möglichst  $10^{13} \text{ Ionen/cm}^2$  nicht übersteigt, da ansonsten der implantationsbedingte Strahlenschaden nicht mehr vollständig ausgeheilt werden kann. Vielfältige Versuche wurden unternommen, um das Verhältnis zwischen implantierter Aktivität und Dosis zu optimieren. Für die einzelnen Proben sind in der Tabelle IV.1 die wichtigsten Implantationsdaten zusammengestellt.

Probe	$^{111}\text{In}$ - Implantation		Probe	$^{111}\text{In}$ - Implantation	
	Energie [keV]	Dosis [ $\text{I/cm}^2$ ]		Energie [keV]	Dosis [ $\text{I/cm}^2$ ]
Ge/2a/	150	$3,0 \cdot 10^{13} \text{ ( \# )}$	Si/3a/	155	$2,7 \cdot 10^{12} \text{ ( \# )}$
Ge/3d/	160	$8,0 \cdot 10^{11}$	Si/3b/	155	$1,5 \cdot 10^{12} \text{ ( \# )}$
Ge/4b/	160	$1,6 \cdot 10^{11}$	Si/3c/	155	$2,8 \cdot 10^{12} \text{ ( \# )}$
Ge/4c/	160	$1,5 \cdot 10^{12}$	Si/4a/	153	$5,0 \cdot 10^{11} \text{ ( \# )}$
Ge/4d/	160	$3,0 \cdot 10^{12}$	Si/5a/	160	$4,0 \cdot 10^{12} \text{ ( \# )}$
Ge/4e/	160	$1,0 \cdot 10^{13} \text{ ( \# )}$	Si/6c/	150	$3,0 \cdot 10^{12} \text{ ( \# )}$
Ge/5a/	157	$2,0 \cdot 10^{12} \text{ ( \# )}$	Si/7c/	160	$2,0 \cdot 10^{13} \text{ ( \# )}$
Ge/5b/	157	$2,0 \cdot 10^{12} \text{ ( \# )}$	( \# ) Strahlführung gewobbelt Strahlfleck ca. $8 \cdot 8 \text{ mm}^2$		
Ge/8a/	160	$2,3 \cdot 10^{12} \text{ ( \# )}$			
Ge/9b/	160	$2,6 \cdot 10^{13} \text{ ( \# )}$			
Ge/9c/	160	$2,5 \cdot 10^{13} \text{ ( \# )}$			
Ge/10b/	160	$5,7 \cdot 10^{12} \text{ ( \# )}$			

**Tab. IV.1 :** Implantationsdaten für die Dotierung mit  $^{111}\text{In}$



Um den durch die Implantation verursachten Strahlenschaden auszuheilen und die  $^{111}\text{In}$ -Sonden elektrisch aktiv auf substitutionelle Gitterplätze einzubauen [ LIN 86 ], wurden die Proben nach der Dotierung in einem Rohrofen oder in einer Kurzzeit-Temperatur-Anlage ( RTA : Rapid Thermal Annealing) [ MAR 90 ] getempert.

Ge: entweder durch einen konventionellen zweistufigen Ausheilprozeß in einem evakuierten Quarzrohr bei  $450^\circ\text{C}$  und  $650^\circ\text{C}$  für jeweils 30 Minuten, oder durch kurzzeitiges Tempern ( $\approx 15$  Sekunden) bei  $700^\circ\text{C}$  in der evakuierten RTA-Anlage ( $p < 10^{-5}$  hPa).

Si: durch kurzzeitiges Tempern ( $\approx 20$  Sekunden) bei  $900^\circ\text{C}$  in der RTA-Anlage unter einer  $\text{N}_2$ -Atmosphäre.

Der Vorteil eines Kurzzeittempervorgangs, bei dem sich die Probe in der RTA-Anlage zwischen zwei stromdurchflossenen Graphitstreifen befindet, liegt in der Beibehaltung des aus den Implantationsdaten bekannten Dotierungsprofils, da Diffusionsprozesse minimiert werden. Der maximale Temperaturgradient von  $100^\circ\text{C}$ - $150^\circ\text{C}$  pro Sekunde bestimmt die Anstiegszeit  $t_r$ . Der Tempervorgang läßt sich durch die Aktivierungstemperatur  $T$  und die Plateauzeit  $t_d$  eindeutig charakterisieren [ Abb. IV.2 ].

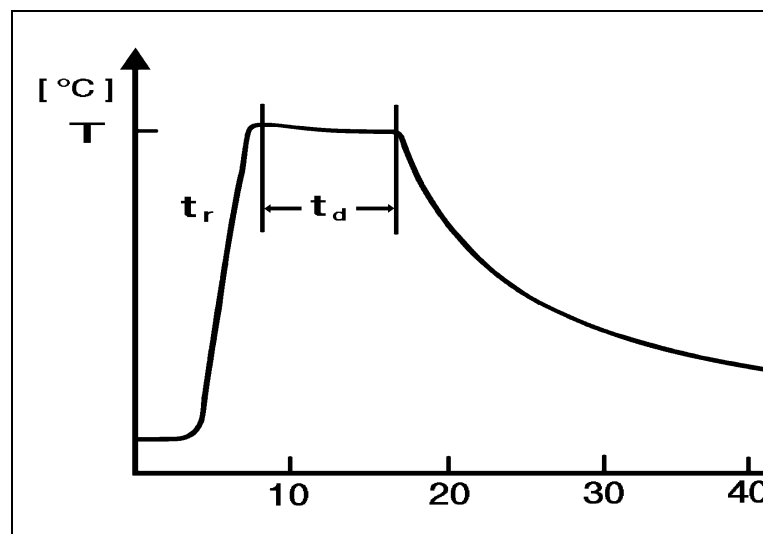


Abb. IV.2 : Typischer Temperaturverlauf eines RTA-Vorgangs

Bei den Anlaßexperimenten [ Kap. V.2 ] wurde die Probe in einer Vakuumanlage ( $p < 10^{-6}$  hPa) für jeweils 10 Minuten (isochron) bei verschiedenen Anlaßtemperaturen getempert. Die Tieftemperaturmessungen [ Kap. V.3 ] wurden mit Hilfe einer He-Kompressorkühlmaschine im Vakuum ( $p < 10^{-7}$  hPa) durchgeführt. Eine eingebaute und regelbare Heizung ermöglichte Meßtemperaturen zwischen  $15^\circ\text{K}$  und Raumtemperatur.

## IV.2. Die Wasserstoffbeladung

Die Passivierung des Akzeptors Indium kann durch mehrere Verfahren erfolgen. Neben der niederenergetischen  $H^+$ -Implantation und dem Kochen der Proben in  $H_2O$  bzw.  $HCl$  hat sich die Beladung in einem H-Plasma am effektivsten erwiesen [ SKU 92 ].

Die Wasserstoffbeladung erfolgte in unserem Fall in einem Hochdruckplasma, welches im Bereich der normalen Glimmentladung brannte, d.h. bei gleichbleibender Spannung zwischen Anode und Kathode. Die Proben befanden sich im Wasserstoffstrom ( $p \approx 1 \text{ hPa}$ ) zwischen zwei Elektroden, an die eine Hochspannung von 2 kV angelegt wurde. Mittels einer Heizwendel aus Wolfram ließ sich gleichzeitig die Proben-temperatur erhöhen, um das Eindiffundieren von Wasserstoff zu beschleunigen [ Abb. IV.3 ]. Gewöhnlich wurde beim Beladungsprozeß eine Proben-temperatur von  $60^\circ\text{C}$  sowie eine Beladungsdauer von 3 Stunden gewählt.

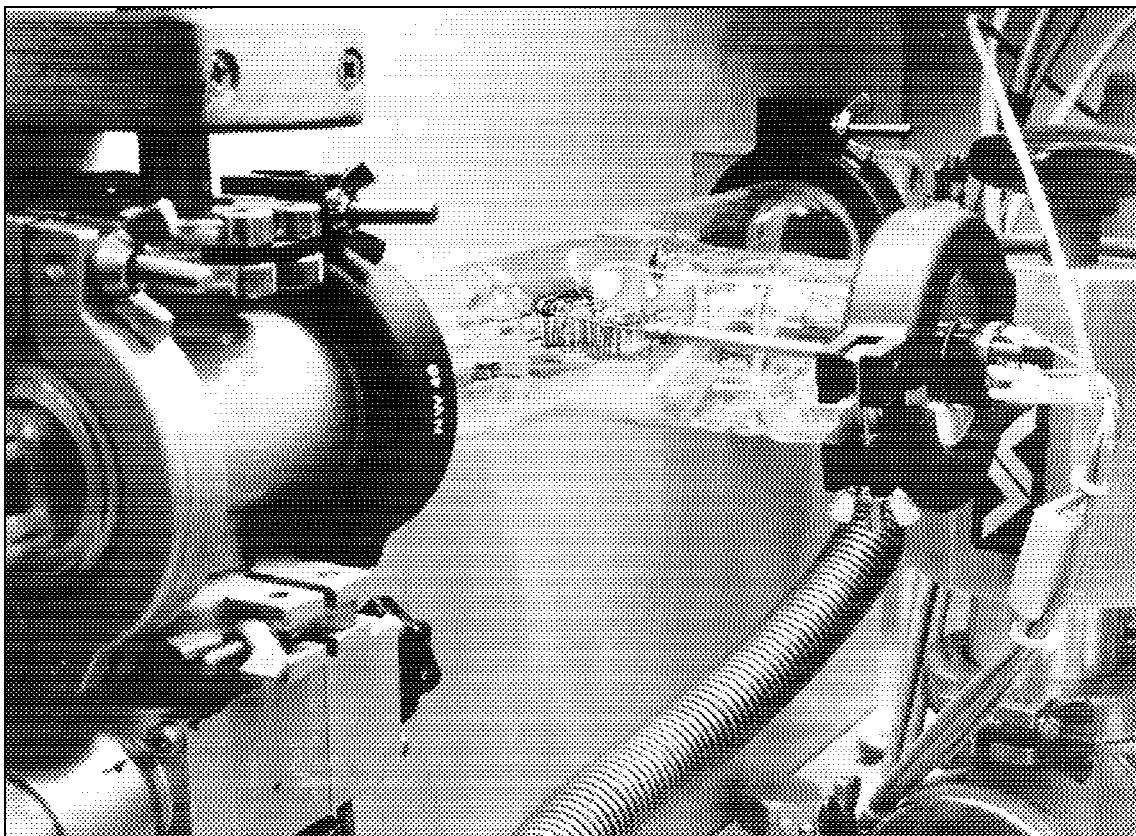


Abb. IV.3 : Die H-Beladung der Proben im Hochdruckplasma einer Glimmentladungsröhre

Bei einem Druck von 1 hPa ist die freie Weglänge der  $H^+$ -Ionen nur kurz und die kinetische Energie ( einige eV ) zu gering, um beim Auftreffen auf die Oberfläche des Kristalls Gitterdefekte zu erzeugen. Bei einer niederenergetischen  $H^+$ -Implantation kann dagegen die Produktion unerwünschter Strahlenschäden nicht völlig ausgeschlossen werden, da die von einem Proton ( 200 eV ) auf ein Gitteratom übertragene Energie in der Größenordnung von dessen Verlagerungsenergie ( 10 - 20 eV ) liegt.

### VI.3. Die Erzeugung von uniaxialen Zug- und Druckspannungen

Uniaxiale Zug- bzw. Druckspannungen lassen sich über Biegespannungen in der Oberfläche einer Probe erzeugen. Die Proben werden hierzu in einer Weise präpariert, daß die Richtung, in der gebogen wird, einer kristallographischen Achse entspricht.

Verwendet man Wafer mit einer  $\langle 110 \rangle$ -Oberfläche, so liegen die drei Hauptachsen  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$  in der Oberfläche. Bei einer  $\langle 100 \rangle$ -Oberflächenorientierung liegen dagegen nur die  $\langle 100 \rangle$  und die  $\langle 110 \rangle$ -Richtungen in der Probenoberfläche. Entsprechend dem Schnittmuster in Abbildung IV.4/5 lassen sich Proben in den Abmessungen  $20 \text{ mm} \times 10 \text{ mm}$  aus dem Wafermaterial heraussägen. Die Längskante zeigt dabei entsprechend der beabsichtigten Zug- bzw. Druckrichtung entlang einer  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  oder  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse.

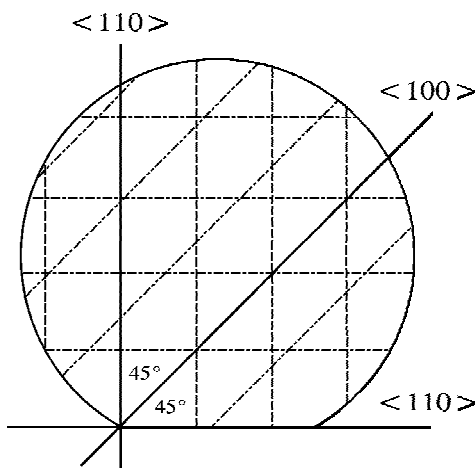


Abb. IV.4 : Wafer mit  $\langle 100 \rangle$ -Oberfläche

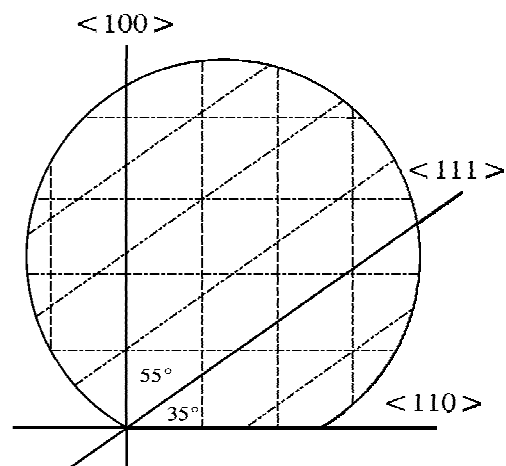


Abb. IV.5 : Wafer mit  $\langle 110 \rangle$ -Oberfläche

Bei den kommerziell erhältlichen, kreisrunden Wafer wird zur Kennzeichnung der Kristallachsen üblicherweise an einer Seite ein Segment entlang einer  $\langle 110 \rangle$ -Richtung abgesägt. Infolge der Diamantstruktur lassen sich Si- und Ge-Wafer entlang dieser  $\langle 110 \rangle$ -Richtung besonders leicht spalten.

Die Lage der Kristallachsen wurde mit Hilfe von Laue-Aufnahmen [ Abb. IV.6/7 ] bestimmt. Deutlich erkennt man in Abbildung IV.6 die 4-zählige Symmetrieachse sowie zwei Spiegelebenen entlang einer  $\langle 100 \rangle$ -Einfallrichtung ( Symmetrie: 4mm ). Fällt der Röntgenstrahl dagegen entlang einer  $\langle 110 \rangle$ -Richtung auf den Kristall, so lassen sich in der Laue-Aufnahme zwei senkrecht zueinander stehende Spiegelebenen erkennen [ Abb. IV.7 ]. Entsprechend der Kristallsymmetrie tritt in diesem Fall nur noch eine zweizählige Drehachse auf ( Symmetrie: 2mm ).

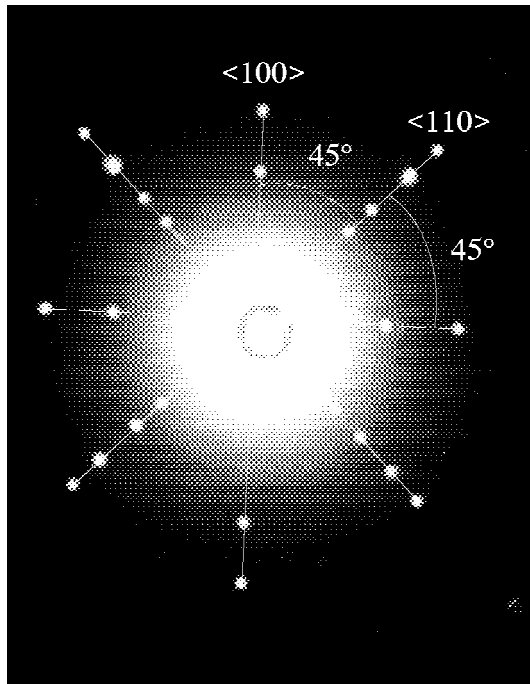


Abb. IV.6 : Laue-Aufnahme von Si entlang einer  $\langle 100 \rangle$ -Kristallrichtung

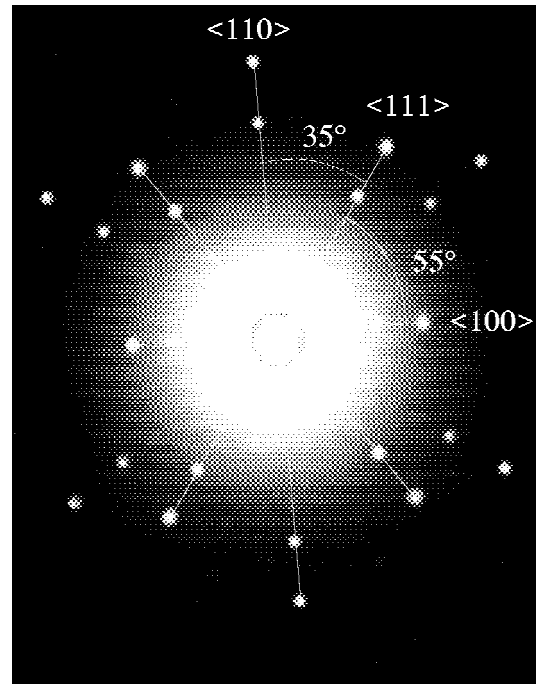


Abb. IV.7 : Laue-Aufnahme von Si entlang einer  $\langle 110 \rangle$ -Kristallrichtung

Die Laue-Aufnahmen in Abb. IV.6/7 wurden bei einem Probenabstand von 7,5 cm mit einer W-Röhre ( 30 keV / 30 mA ) bei einer Belichtungszeit von 4 Minuten erstellt.

Zur Erzeugung der mechanischen Spannungen wurden die Proben nun in verschiedene Probenhalter eingespannt und entlang vorgegebener Kristallachsen gebogen. Infolge der relativen Längenänderung  $\Delta L$  in der Oberfläche einer auf diese Weise gebogenen dünnen Probe kommt es zu einer Zug- bzw. Druckspannung. Die hierbei erzeugten Oberflächenspannungen  $\sigma$  berechnen sich wie folgt:

$$\sigma = E \cdot \frac{\Delta L}{L} \quad (\text{IV.1})$$

Eine Tabelle mit Werten für den Elastizitätsmodul  $E$  von Silizium und Germanium entlang der drei Hauptachsen  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$  findet sich in Kapitel II.

Bei der Berechnung der, durch Biegung erzeugten, relativen Längenänderung  $\Delta L/L$  geht man davon aus, daß sich in der Mitte einer kreisförmig gebogenen Probe eine sogenannte neutrale Faser ausbildet. Infolge der Biegung kommt es in der einen Oberflächenschicht zu einer Verkürzung, woraus dann eine entsprechende Druckspannung resultiert, während die gegenüberliegende Seite einer entsprechenden Zugspannung ausgesetzt ist [ Abb. IV.8 ].

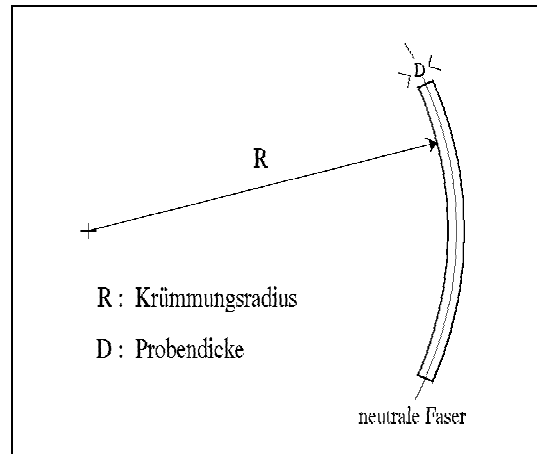


Abb. IV.8 : Längenänderung beim Biegen

Unter dieser Voraussetzung berechnet sich die relative Längenänderung  $\Delta L/L$  wie folgt:

$$\frac{\Delta L}{L} = \frac{2\pi \cdot \left(R + \frac{D}{2}\right) - 2\pi \cdot R}{2\pi \cdot \left(R + \frac{D}{2}\right)} = \frac{D}{2R + D} \quad (\text{IV.2})$$

Auf diese Weise läßt sich bei einer 100  $\mu\text{m}$  dicken Probe und einem Krümmungsradius von  $R = 5 \text{ cm}$  eine relative Längenänderung von  $\Delta L/L \approx 10^{-3}$  erreichen. Abhängig vom Material und der Lage der Zug- bzw. Druckachsen läßt sich somit eine Oberflächenspannung von 0,5 - 2,5 kbar ( 1 kbar  $\triangleq 10^8 \text{ N/m}^2$  ) erzeugen.

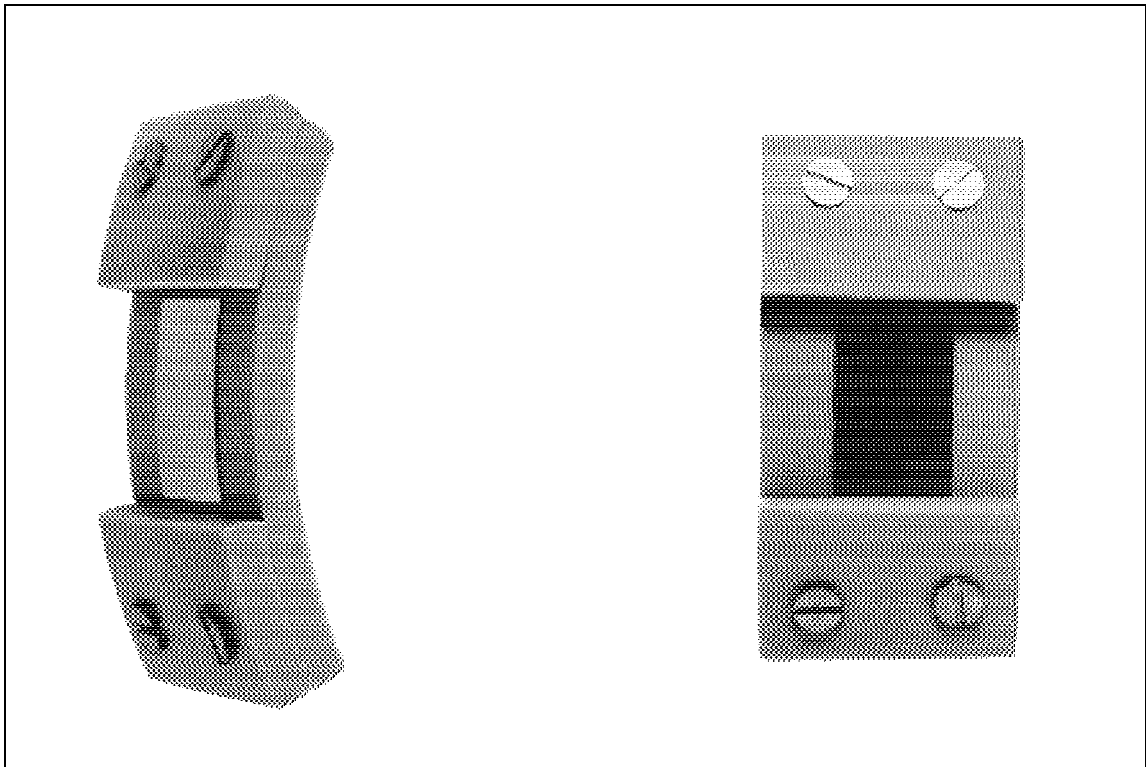


Abb. IV.9 : Der Probenhalter aus PVC ( Krümmungsradius  $r = 40 \text{ mm}$  )

Spannungen in dieser Größenordnung lassen sich auch erzeugen, indem man die unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten verschiedener Materialien ausnutzt. So erfährt ein, bei Raumtemperatur auf Kupfer aufgeklebter, Siliziumkristall beim Abkühlen eine entsprechende Druckspannung.

Die relative Längenänderung beträgt in diesem Fall:

$$\frac{\Delta L}{L} = \frac{l \cdot (1 + \alpha_{Cu} \cdot \Delta T) - l \cdot (1 + \alpha_{Si} \cdot \Delta T)}{l \cdot (1 + \alpha_{Si} \cdot \Delta T)} = \frac{(\alpha_{Cu} - \alpha_{Si}) \cdot \Delta T}{1 + \alpha_{Si} \cdot \Delta T} \quad (\text{IV.3})$$

mit  $\alpha$  : linearer Ausdehnungskoeffizient [ 1/°K ]  
 $\Delta T$  : Temperaturänderung  
 $L$  : Länge bei Raumtemperatur

Die auf diese Weise erzeugten Spannungen sind jedoch biaxial und darüber hinaus fest an die Proben temperatur gekoppelt. Eine unabhängige Variation von Spannung und Temperatur ist daher nicht möglich, weshalb diese Methode nicht eingesetzt wurde.

Um den Einfluß von Temperaturänderungen auf einen vorgespannten Kristall zu untersuchen, wurde ein Probenhalter aus Kupfer konstruiert, bei dem eine Klinge seitlich auf die Probe drückt und dabei ein entsprechendes Biegemoment erzeugt [ Abb. IV.10 ].

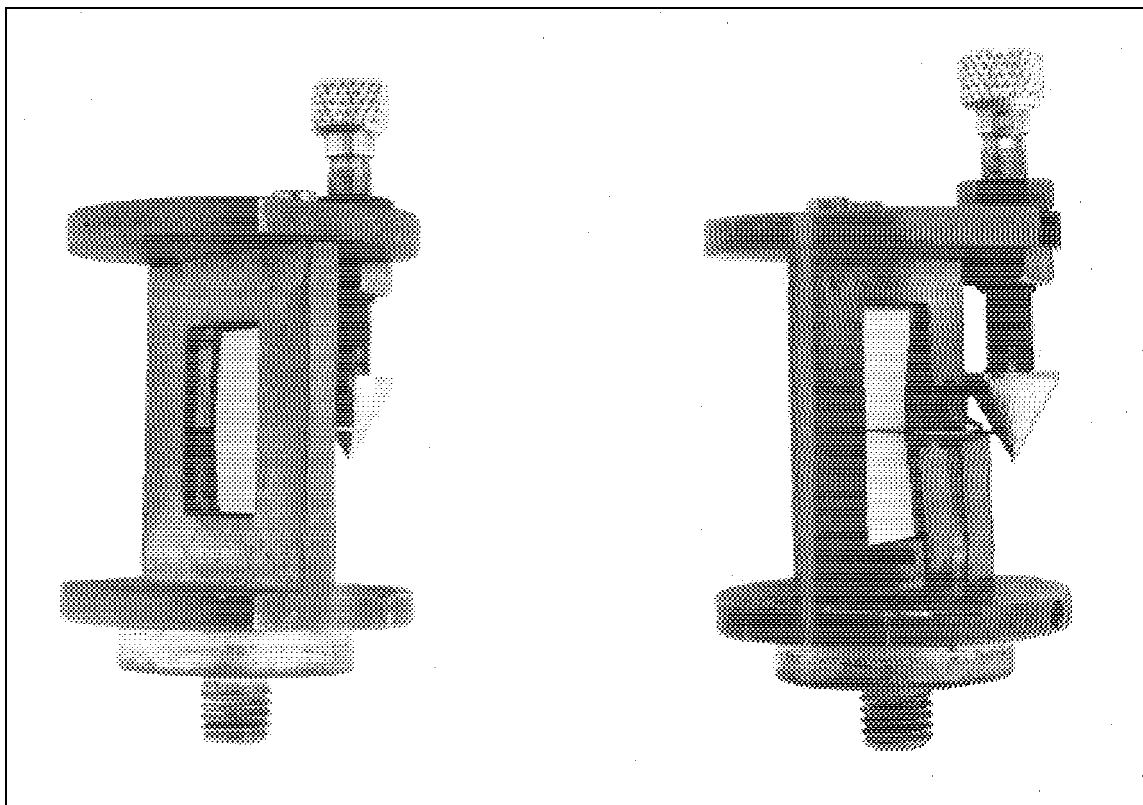


Abb. IV.10 : Der Probenhalter zum Einbau in die He-Kompressorkühlmaschine

Die Durchbiegung der Probe lässt sich über eine Feingewindespindel ( 1/4 mm / Umdr.) einstellen. Aus Platzgründen war es notwendig, die über die Spindel erzeugte, auslenkende Kraft seitlich umzulenken. Diese Konstruktion bietet darüberhinaus den Vorteil, daß über den Kegel (  $\sphericalangle = 60^\circ$  ) eine zusätzliche Untersetzung von 1:2 erreicht wird, so daß eine weitere Umdrehung an der Spindel die Durchbiegung der Probe um 0,125 mm vergrößert.

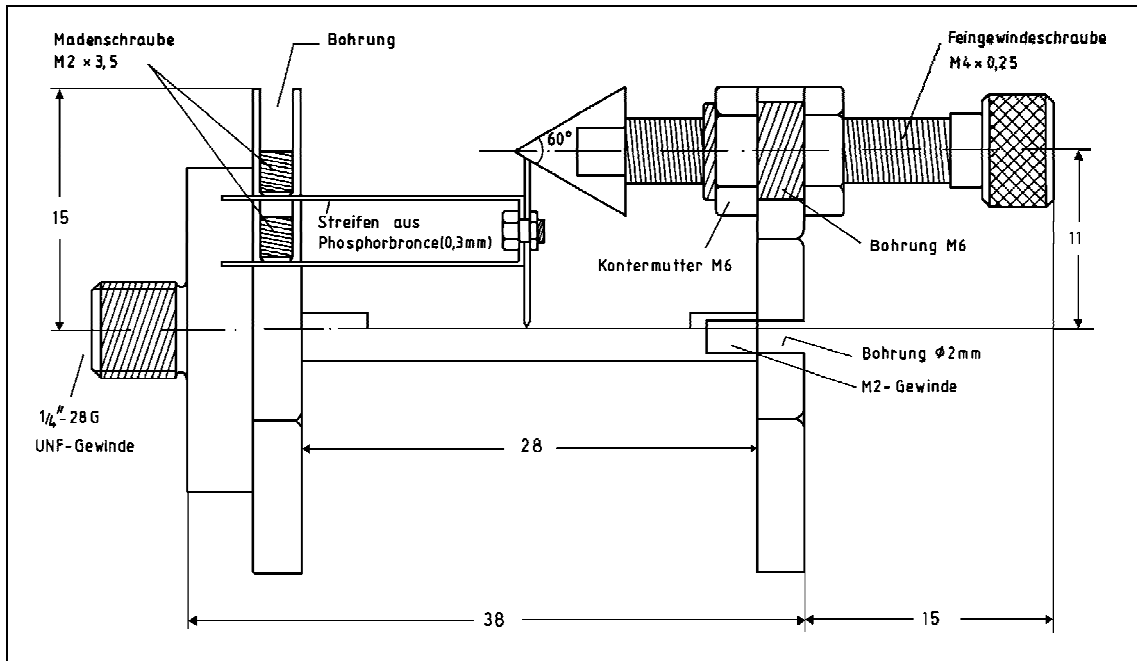


Abb. IV.11 : Detailskizze des Probenhalters

Der über eine Durchbiegung  $H$  erzeugte Krümmungsradius  $R$  beträgt:

$$R = \frac{S}{4} \cdot \left( \frac{S}{2H} + \frac{2H}{S} \right) \quad (\text{IV.4})$$

Spindelumdrehungen	0,5	1	1,5	2	2,5
Krümmungsradius $R$ [ mm ]	512,03	256,06	170,76	128,13	102,56
Spindelumdrehungen	3	3,5	4	4,5	5
Krümmungsradius $R$ [ mm ]	85,52	73,36	64,25	57,17	51,51
Spindelumdrehungen	6	7	8	9	10
Krümmungsradius $R$ [ mm ]	43,04	37,01	32,50	29,01	26,23

Tab. IV.2 : Der einstellbare Krümmungsradius in Abhängigkeit von der Spindelumdrehung

Eine weitere Möglichkeit Biegespannungen zu erzeugen besteht darin, die Probe in einer Mikrometerschraube zwischen zwei Einspannbacken aus Teflon einzuspannen. Dreht man die Mikrometerschraube nun langsam zusammen, so biegt sich die Probe nach Überschreitung einer entsprechenden Knicklast seitlich weg [ Abb. IV.13/14 ].

Die Last  $F$  drückt von oben unter einem Winkel  $\varphi \approx L/2R$  gegen die Längsachse. Die von der Mikrometerschraube erzeugte Kraft zerlegt sich also in eine axiale und eine senkrechte Komponente  $F_{\perp} = L \cdot F/2R$ . Auf diese Weise läßt sich ein Biegemoment  $T = F_{\perp} \cdot L/2 = L^2 \cdot F/4R$  erzeugen, allerdings tritt bei dieser Form des Probenhalters zusätzlich ein unerwünschter Staudruck auf.

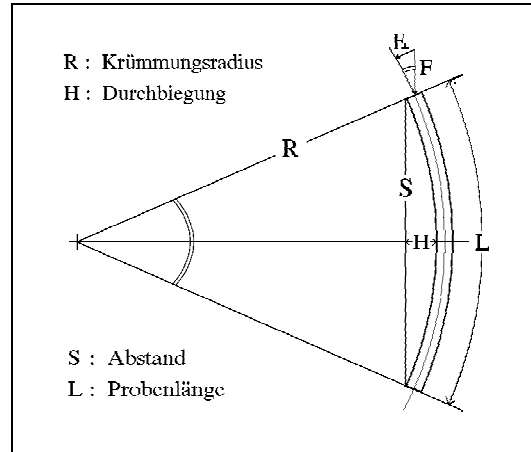


Abb. IV.12 : Die Durchbiegung der Probe

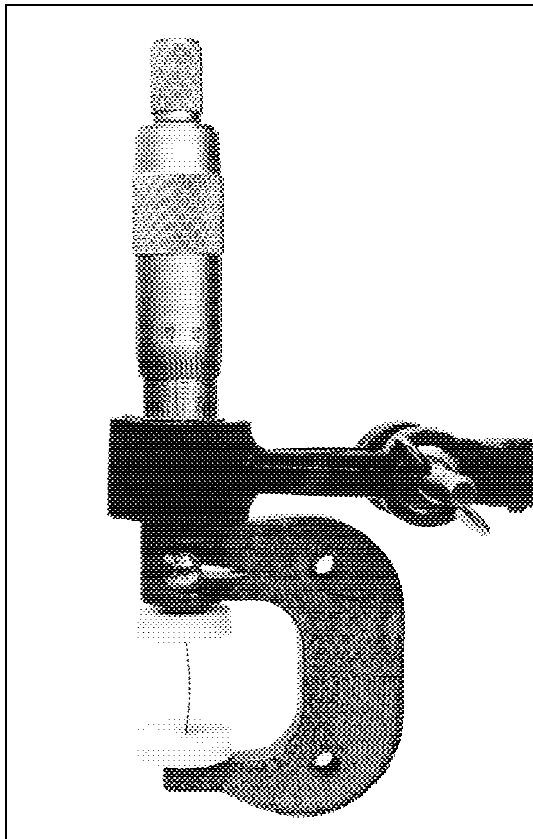


Abb. IV.13 : Die Mikrometerschraube

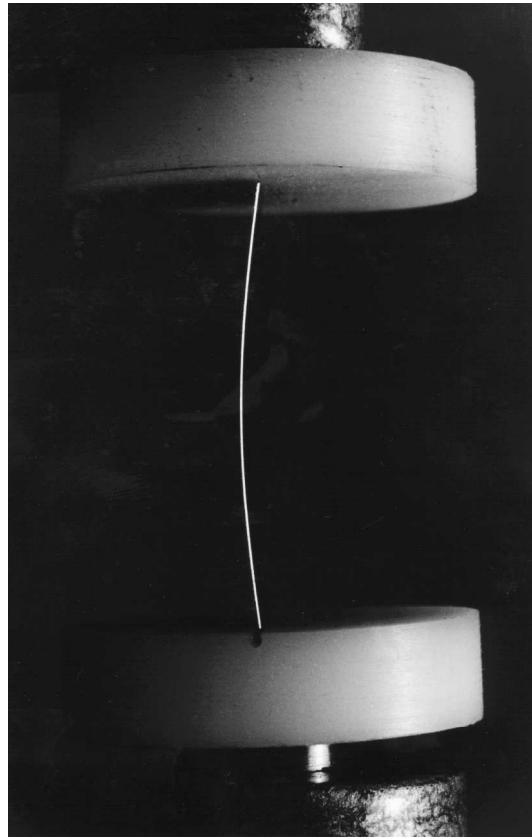


Abb. IV.14 : Eine eingespannte Si-Probe



Der auf diese Weise erzeugte Krümmungsradius  $R$  läßt sich bei bekannter Länge  $L$  der Probe und einem Abstand  $S$  zwischen den Einspannbacken der Mikrometerschraube nur iterativ bestimmen.

$$\varphi = \frac{L}{2} \cdot \frac{360^\circ}{2\pi \cdot R} = \arcsin\left(\frac{S}{2 \cdot R}\right) \quad (\text{IV.5})$$

Unter der Voraussetzung einer kreisförmig durchgebogenen Probe [ Abb. IV.12 ] läßt sich aus dem Krümmungsradius  $R$  die Durchbiegung  $H$  wie folgt berechnen:

$$H = R - \frac{1}{2}\sqrt{4R^2 - S^2} \quad (\text{IV.6})$$

Bei einer typischen Probenlänge von  $L = 20$  mm wurde die Mikrometerschraube in Schritten von 3/100 mm zusammengedreht, wodurch sich folgende Krümmungsradien bzw. Durchbiegungen ergaben:

Druckstufe	Abstand $S$ [ mm ]	Krümmungsradius $R$ [ mm ]	Durchbiegung $H$ [ mm ]
O	20.00	$\infty$	0
I	19.97	105	0.48
II	19.94	74.5	0.73
III	19.91	60.8	0.82
IV	19.88	52.7	0.95
V	19.85	47.1	1.06
VI	19.82	43.0	1.16
VII	19.79	39.8	1.25
VIII	19.76	37.2	1.34
IX	19.73	35.1	1.41
X	19.70	33.3	1.49

Tab. IV.3 : Einstellbare Krümmungsradien beim Zusammendrehen einer Mikrometerschraube in Schritten von 3/100 mm ( Probenlänge  $L = 20$  mm )

In einem einfachen Versuchsaufbau [ Abb. IV.15 ] wurde die Oberfläche der Probe mit einem He-Ne-Laser abgetastet, um auf diese Weise den tatsächlichen Krümmungsradius zu ermitteln. Es zeigte sich bei allen verwendeten Probenhaltern, daß der Krümmungsradius einer eingespannten Probe auf der gesamten Länge nur um wenige Prozent variiert. Insbesondere in der Mitte der Probe, dort wo sich der Strahlfleck (  $8 \cdot 8$  mm<sup>2</sup> ) befindet, kann man daher in sehr guter Näherung tatsächlich von einer kreisförmigen Ausbiegung ausgehen.

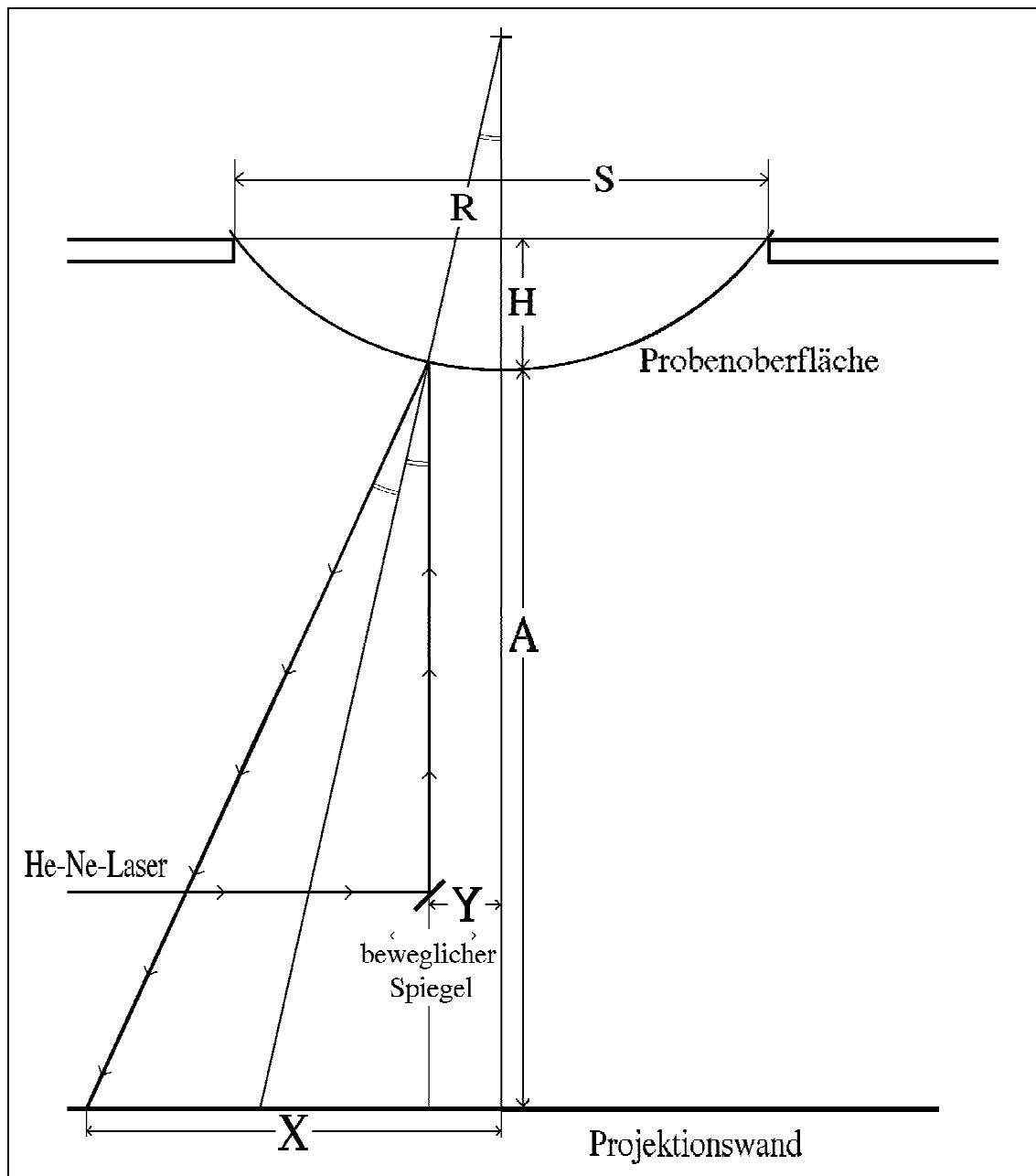


Abb. IV.15 : Versuchsaufbau zur Bestimmung des Krümmungsradius auf der Probenoberfläche

Mißt man auf einer Projektionswand den Abstand X des von der Probenoberfläche reflektierten Strahlfecks in Abhängigkeit von der Stellung Y des beweglichen Spiegels, so läßt sich für jeden Punkt der Oberfläche ein zugehöriger Krümmungsradius bestimmen.

$$R = \frac{Y}{\sin \varphi} , \quad \text{mit} \quad \varphi = \frac{1}{2} \cdot \arctan \left( \frac{X - Y}{A} \right) \quad (\text{IV.7})$$

Die Genauigkeit, mit der sich der Krümmungsradius angeben läßt, beträgt etwa 1 %. Da die Probendicke ebenfalls leicht variiert ( 1 - 2  $\mu\text{m}$  ), läßt sich die erzeugte Spannung mit einer relativen Genauigkeit von ca. 2,5 % angeben.

---

## V. Die Bildung von Akzeptor-Wasserstoff Komplexen in Ge

Die Passivierung von flachen Akzeptoren durch Anlagerung von Wasserstoff wurde bereits durch eine Vielzahl experimenteller Techniken untersucht. Eine weitere Methode, die bereits bei sehr geringen Fremdatomkonzentrationen ( $\approx 10^{13}$  Atome/cm<sup>3</sup>) anwendbar ist, steht mit der PAC zur Verfügung. Mit ihr kann die Bildung und Dissoziation von nahen Komplexen mikroskopisch sensitiv, und vor allem auch quantitativ, nachgewiesen werden. Einmal identifizierte Komplexe lassen sich anhand ihrer charakteristischen Hyperfeinparameter immer eindeutig wiedererkennen. Die experimentellen Randbedingungen sind gering, allerdings gibt es nur wenige brauchbare Sondenkerne. Als Vertreter flacher Akzeptoren steht jedoch mit dem radioaktiven Isotop <sup>111</sup>In glücklicherweise eine der für die PAC am besten geeigneten Sonden zur Verfügung.

Im folgenden Kapitel werden die Ergebnisse der am System <sup>111</sup>In-H<Ge> durchgeführten Experimente zur Untersuchung der Bildung und Dissoziation von In-H Paaren im Elementhalbleiter Ge vorgestellt. Zunächst wurden in einer Meßreihe (<Ge>/4c/4d/) die optimalen Prozeßparameter für eine H-Plasmabeladung der Probe ermittelt. Die Dissoziation der gebildeten In-H Paare wurde dann in einem isochronen Ausheilprogramm (<Ge>/4b/) untersucht, um hieraus Informationen über die thermische Stabilität der In-H Komplexe sowie das Diffusionsverhalten des H zu gewinnen. Es folgten Messungen zur Temperaturabhängigkeit der auftretenden Wechselwirkungsfrequenzen im Bereich unterhalb Raumtemperatur (<Ge>/4e/) sowie Orientierungsmessungen (<Ge>/4c/5a/), welche Rückschlüsse auf die mikroskopische Struktur des zugrundeliegenden Indium-Wasserstoff-Komplexes ermöglichten.

Vor der eigentlichen Beladung mit Wasserstoff muß zunächst der bei der radioaktiven Implantation entstandene Strahlenschaden ausgeheilt werden. Das bedeutet, daß die In-Sondenkerne auf substitutionelle Gitterplätze eingebaut werden, wo sie elektrisch aktive Störstellen in Form von Einfach-Akzeptoren bilden.

Abbildung V.1 zeigt ein typisches R-Wert Spektrum, wie es üblicherweise direkt nach einer radioaktiven Implantation beobachtet wird. Alle Sondenkerne unterliegen Wechselwirkungen mit Defekten, die durch eine breite Verteilung hoher EFG beschrieben werden können [ Tab. V.1 ]. Es handelt sich dabei um uneinheitliche Störungen der Gittersymmetrie, die sich auf den bei der Implantation entstandenen Strahlenschaden zurückführen lassen.

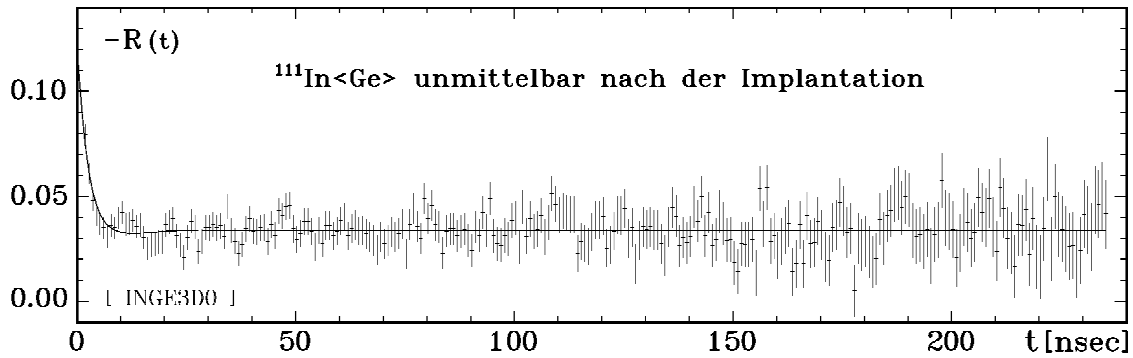


Abb. V.1 : Typisches PAC-Spektrum direkt nach einer In-Implantation (  $T_m=RT$  )

$^{111}\text{In}\langle\text{Ge}\rangle$	$\nu_Q$ [ MHz ]	$\delta$ [ % ]	$\eta$	$f$ [ % ]	C	$A_{22}^{\text{app}}$
wie implantiert	138.6(69)	75.0(86)	0	100	0.012(1)	- 0.110

Tab. V.1 : Fitergebnisse für das System  $^{111}\text{In}\langle\text{Ge}\rangle$  direkt nach der In-Implantation

Das Ausheilen des Strahlenschadens erfolgt unter Vakuum (  $p < 10^{-5}$  hPa ) entweder in einem konventionellen Rohrofen ( jeweils 30 Min. bei  $450^\circ\text{C}$  und  $650^\circ\text{C}$  ) oder durch kurzzeitiges Tempern zwischen zwei Graphitstreifen (  $\approx 15$  Sek. ) bei  $700^\circ\text{C}$  in der RTA-Anlage [ Kap. IV.1 ]. Bis zu einer Dosis von etwa  $10^{13}$  Ionen/ $\text{cm}^2$  lässt sich der Strahlenschaden mit beiden Verfahren fast vollständig ausheilen. Die zugehörigen PAC-Spektren [ Abb. V.2 ] zeigen nach dem Ausheilprogramm die volle Anisotropie bei einer praktisch ungestörten Winkelkorrelation.

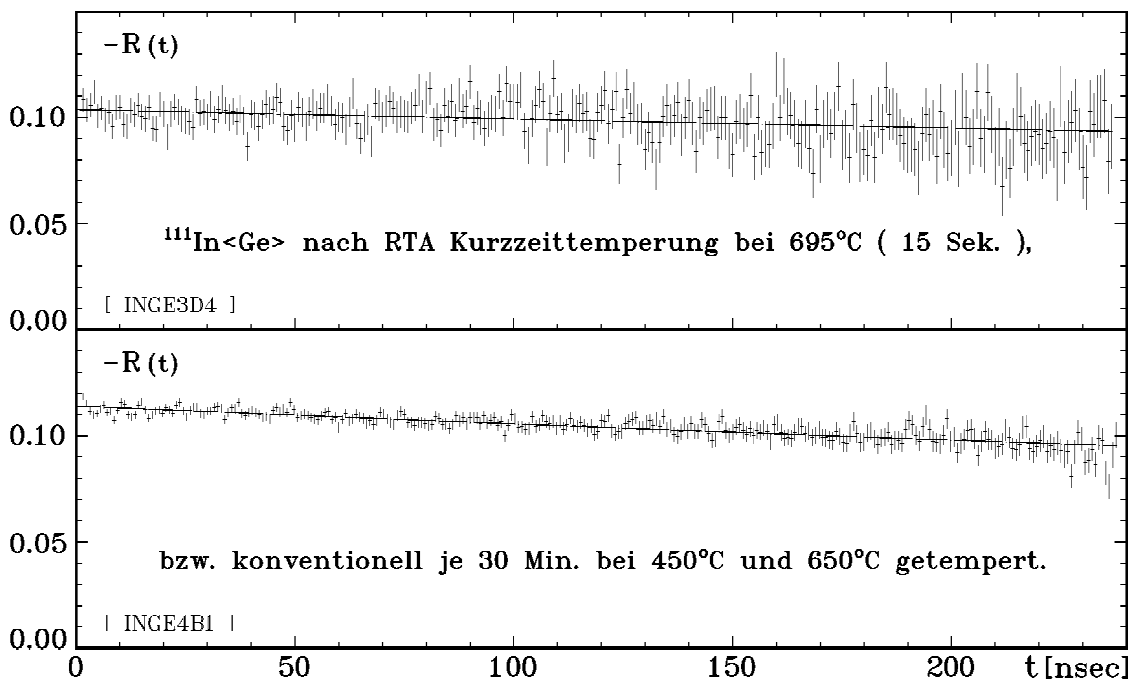


Abb. V.2 : Typisches PAC-Spektrum für  $^{111}\text{In}\langle\text{Ge}\rangle$  nach dem Ausheilen des implantationsbedingten Strahlenschadens (  $T_m=RT$  )

Die Sondenkerne befinden sich nach dem Tempern auf substitutionellen Gitterplätzen, wo sie infolge der kubischen Ladungssymmetrie keinem EFG ausgesetzt sind. Der interstitielle Tetraederplatz im Diamantgitter besitzt zwar ebenfalls kubische Symmetrie, so daß eine Unterscheidung mit der PAC-Methode nicht möglich ist. Channeling-Experimente zeigen jedoch, daß es keine interstitielle In-Komponente in Germanium gibt [ BJÖ 68, MAY 68, MAY 70 ].

Der beobachtbare, lediglich schwache Abfall der Anisotropie läßt sich auf Sondenkerne zurückführen, die sehr schwachen elektrischen Feldgradienten unterliegen, wie sie z.B. durch weiter entfernte Gitterdefekte erzeugt werden. Diese Situation läßt sich am besten beschreiben durch Annahme einer lorenzförmigen Verteilung von Wechselwirkungsfrequenzen um den Schwerpunkt  $\omega \approx 0$  MHz sowie mit einer Breite  $\delta$ , die zu einer exponentiellen Dämpfung des Wechselwirkungsmusters führt [ Tab. V.2 ].

$^{111}\text{In}\langle\text{Ge}\rangle$	$\nu_Q$ [ MHz ]	$\delta$ [ MHz ]	$\eta$	f [ % ]	C	$A_{22}^{\text{app}}$
RTA-Kurzzeittemperung	0.0	0.32(6)	0	100	0.006(1)	- 0.110
konventionell getempert	0.0	0.64(2)	0	100	- 0.004(1)	- 0.110

Tab. V.2 : Fitergebnisse für das System  $^{111}\text{In}\langle\text{Ge}\rangle$  nach dem Annealprogramm

Tempert man die Proben bei höheren Temperaturen, so beginnen die In-Sondenkerne verstärkt zur Oberfläche hinzudiffundieren, wo sie hohen uneinheitlichen Feldgradienten ausgesetzt sind. Im PAC-Spektrum beobachtet man in diesem Fall einen steigenden Anteil von hohen Wechselwirkungsfrequenzen, die mit einer großen Frequenzunschärfe  $\delta$  behaftet sind.

## V.1. Die Erzeugung von In-H-Komplexen im Hochdruckplasma

Um den Prozeß der H-Plasmabeladung in einer Glimmentladungsröhre [ Kap. IV.2 ] kontrolliert zur Erzeugung von In-H Komplexen einzusetzen, wurde zunächst untersucht, wie die Bildung solcher Komplexe von der Dauer der Plasmabeladung sowie der dabei herrschenden Temperatur abhängt.

Nach dem thermischen Ausheilen des implantationsbedingten Strahlenschadens wurden die Proben einer mehrstündigen H-Plasmabeladung ausgesetzt. Neben der Beladungsdauer wurde die Probentemperatur zwischen 20°C und 60°C variiert, um auf diese Weise ein Eindiffundieren des Wasserstoffs zu beschleunigen. Die zugehörigen PAC-Spektren sind in Abbildung V.3 dargestellt.

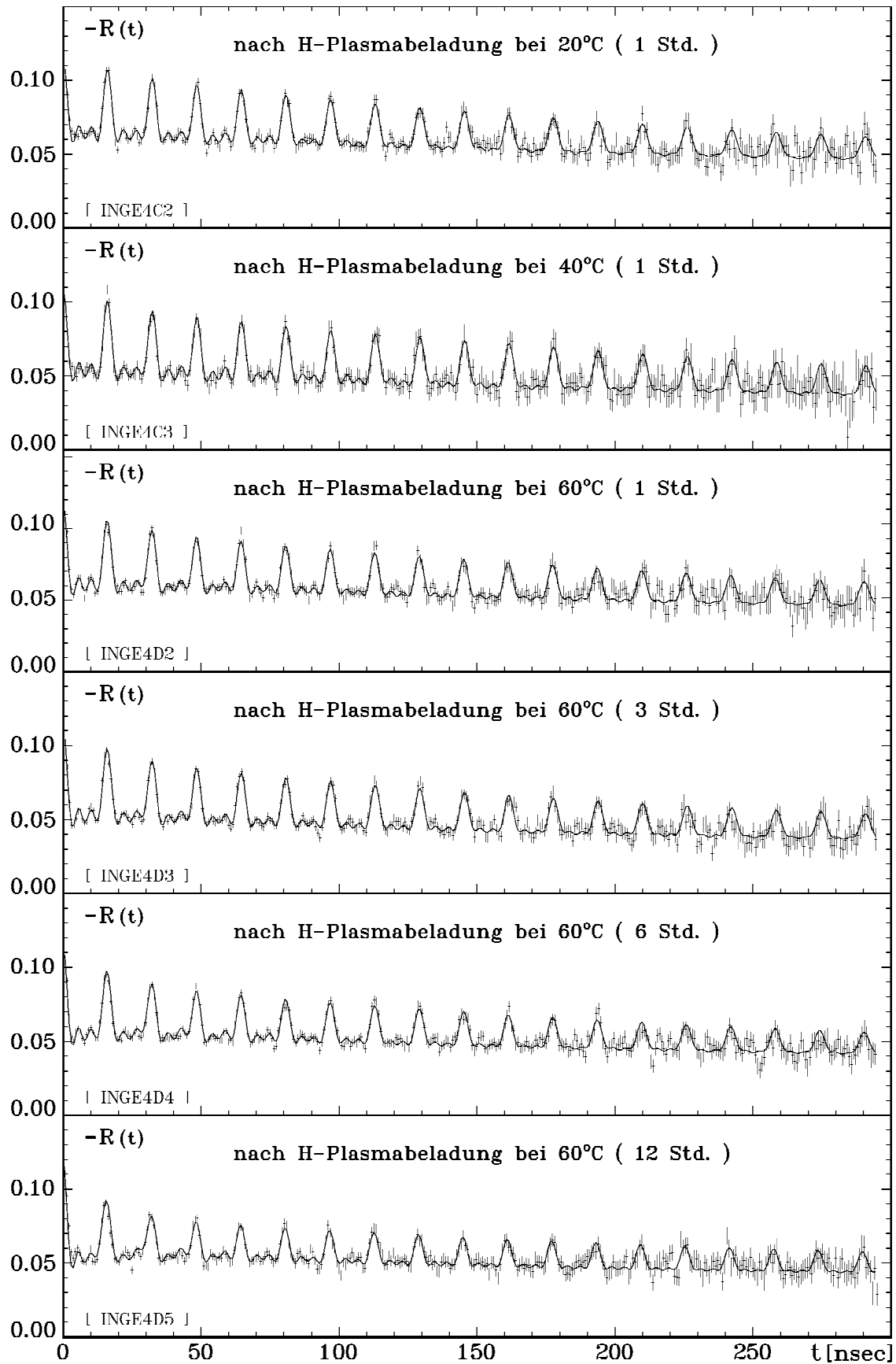


Abb. V.3: PAC-Spektren für das System  $^{111}\text{In-H} \langle \text{Ge} \rangle / 4\text{c}/4\text{d}/$  nach der Beladung mit Wasserstoff in einem Hochdruckplasma (  $T_m = RT$  )

Wasserstoffbeladung im Hochdruckplasma	1 Std. 20°C	1 Std. 40°C	1 Std. 60°C	3 Std. 60°C	6 Std. 60°C	12 Std. 60°C
$\nu_{Q_1}(\text{In-H})$ [ MHz ]	412.6(2)	412.5(2)	413.2(2)	412.6(2)	413.3(2)	414.2(2)
$\delta_1$ [ % ]	0.66(5)	0.52(5)	0.56(5)	0.54(5)	0.55(6)	0.37(7)
$\eta_1$	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
$f_1$ [ % ]	48.8(23)	51.2(34)	44.8(28)	45.0(41)	39.8(46)	28.5(46)
$\nu_{Q_2}(\text{In-H})$ [ MHz ]	449.7(29)	451.8(29)	449.7(47)	449.8(48)	449.9(40)	452.5(42)
$\delta_2$ [ % ]	1.2(10)	2.0(11)	5.5	6.7(13)	6.8(12)	8.9(10)
$\eta_2$	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
$f_2$ [ % ]	4.0(16)	7.9(25)	15.7(21)	21.6(33)	26.6(36)	44.9(36)
$\nu_{Q_0}$ [ MHz ]	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
$\delta_0$ [ MHz ]	1.7(1)	1.9(2)	1.7(1)	2.9(4)	2.3(3)	2.9(6)
$f_0$ [ % ]	47.1(16)	40.9(23)	39.6(18)	33.4(25)	33.6(28)	26.6(29)
C	0.001(1)	0.006(2)	0.000(1)	0.001(2)	0.0048(4)	0.0054(4)
$A_{22}^{\text{app.}}$	- 0.115	- 0.115	- 0.115	- 0.115	- 0.115	- 0.115

$$[ \sigma_0^{\text{eff.}} : 0.3334 \ / \ \sigma_1^{\text{eff.}} : 0.2584 \ / \ \sigma_2^{\text{eff.}} : 0.2285 \ / \ \sigma_3^{\text{eff.}} : 0.1796 \ ]$$

Tab. V.3 : Fitergebnisse der Meßreihe  $^{111}\text{In-H}\langle\text{Ge}\rangle/4\text{c}/4\text{d}/$  nach der H-Plasmabeladung

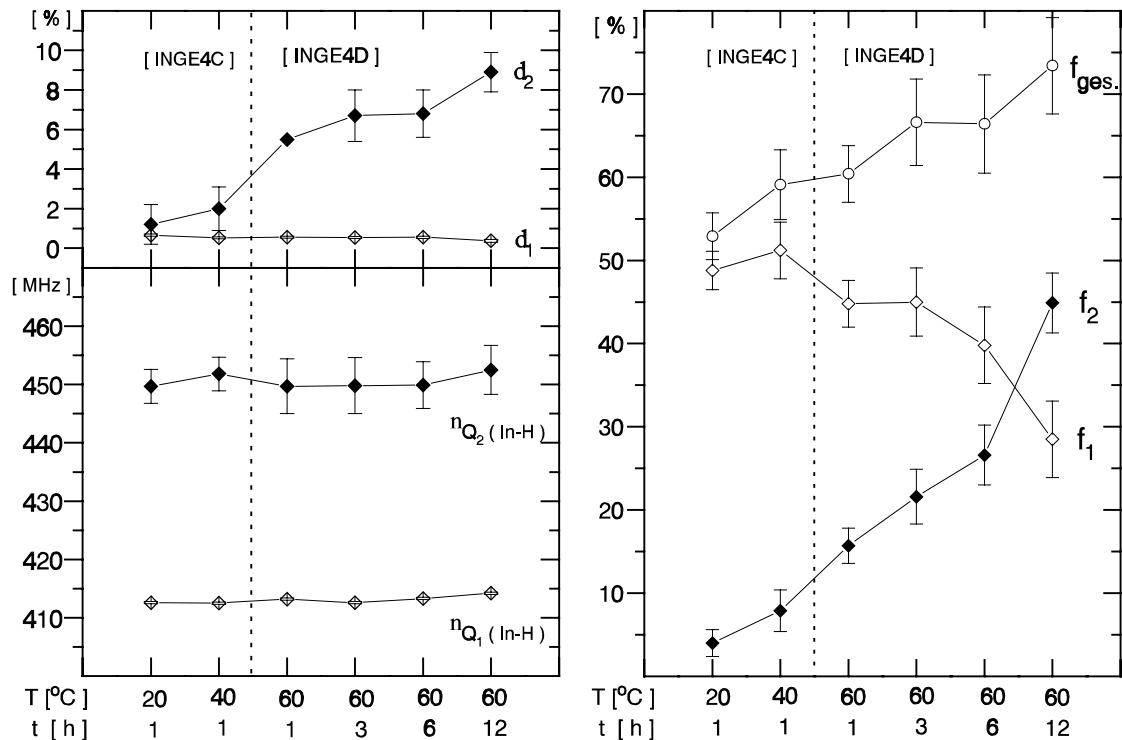


Abb. V.4 : Graphische Darstellung der Fitparameter für die Meßreihe  $^{111}\text{In-H}\langle\text{Ge}\rangle/4\text{c}/4\text{d}/$

Nach dem Beladen der Proben mit Wasserstoff können zwei Wechselwirkungsfrequenzen  $\nu_{Q_1} = 413(1)$  MHz und  $\nu_{Q_2} = 450(5)$  MHz beobachtet werden, wobei es sich hier um mittlere Werte handelt, die aus den Einzelmessungen bestimmt wurden. Die Frequenz  $\nu_{Q_1}$  ist praktisch ungedämpft ( $\delta_1 < 1\%$ ), was auf einen sehr einheitlichen Sonde-Defekt-Komplex schließen läßt. Dagegen unterliegt die Frequenz  $\nu_{Q_2}$  bei zunehmender Beladungsdauer einer deutlich stärkeren Dämpfung ( $\delta_2 \approx 1-10\%$ ). Auffällig groß ist auch der Fehler den der Fit für die Frequenz  $\nu_{Q_2}$  liefert. Beiden Frequenzen liegt ein axialsymmetrischer EFG ( $\eta = 0$ ) zugrunde.

Bei zunächst geringem Wasserstoffgehalt der Probe überwiegt der zur Frequenz  $\nu_{Q_1}$  gehörende Anteil  $f_1$ . Mit zunehmender Wasserstoffaufnahme der Probe steigt jedoch der Anteil  $f_2$  stark an, während der Anteil  $f_1$  gleichzeitig absinkt. Der Gesamtanteil ( $f_{\text{ges.}} = f_1 + f_2$ ) an Sondenkernen, die - in welcher Weise auch immer - mit Wasserstoff dekoriert sind, steigt kontinuierlich mit Erhöhung der Probentemperatur (20 bis 60°C) und Steigerung der Beladungsdauer an.

## V.2. Die thermische Stabilität der gebildeten In-H-Komplexe

Das Verhalten der mit Wasserstoff korrelierten Defekt-Komplexe wurde in einem isochronen Ausheilprogramm untersucht. Hierbei wurde die Probe  $\langle \text{Ge} \rangle / 4b/$  nach H-Plasmabeladung bei 40°C (3 Std.) für jeweils 10 Minuten bei verschiedenen Temperaturen ( $T_{\text{ann.}} = 60 - 105^\circ\text{C}$ ) angelassen und anschließend bei Raumtemperatur ( $RT = 295^\circ\text{K}$ ) gemessen. Aus der Messung des Zerfalls von In-H-Paaren kann man direkt auf die thermische Stabilität der gebildeten Komplexe schließen [MAR 92a]. Die Fitergebnisse können der Tabelle V.4 entnommen werden, der Verlauf der Fitparameter ist in Abbildung V.6 graphisch dargestellt, die zugehörigen Spektren sind in Abbildung V.5 gezeigt. Werte ohne Fehlerangabe wurden beim Fit nicht variiert.

Unmittelbar nach der Plasmabeladung lassen sich beide Wechselwirkungsfrequenzen  $\nu_{Q_1} = 413(1)$  MHz und  $\nu_{Q_2} = 450(5)$  MHz mit zunächst etwa gleichen Anteilen  $f_i \approx 30\%$  beobachten. Ein Tempern der Probe bei 60°C bewirkt bereits eine deutliche Abnahme des Anteils  $f_2$ , während der konkurrierende Anteil  $f_1$  zunächst noch weiter anwächst. Offensichtlich wird bei der Auflösung des durch  $\nu_{Q_2}$  charakterisierten Defekts atomarer Wasserstoff freigesetzt, welcher sich dann in der durch die Frequenz  $\nu_{Q_1}$  charakterisierten Konfiguration wiederfindet.

Führt man das Temperprogramm oberhalb von 90°C weiter fort, so zerfällt auch dieser Komplex, wobei der zugehörige Anteil  $f_1$  sehr rasch abnimmt. Bei 105°C sind praktisch keine In-H-Komplexe mehr nachweisbar.



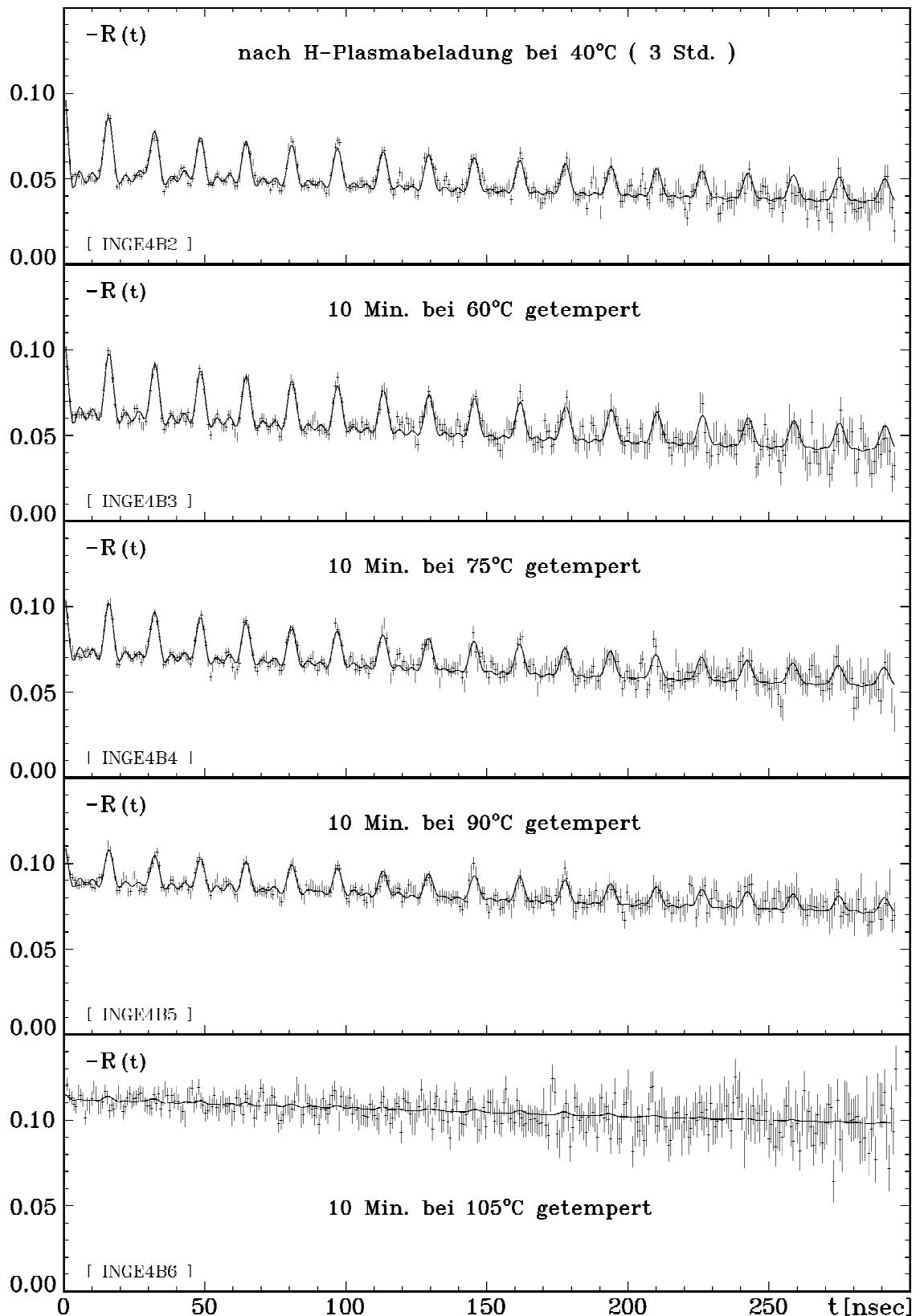
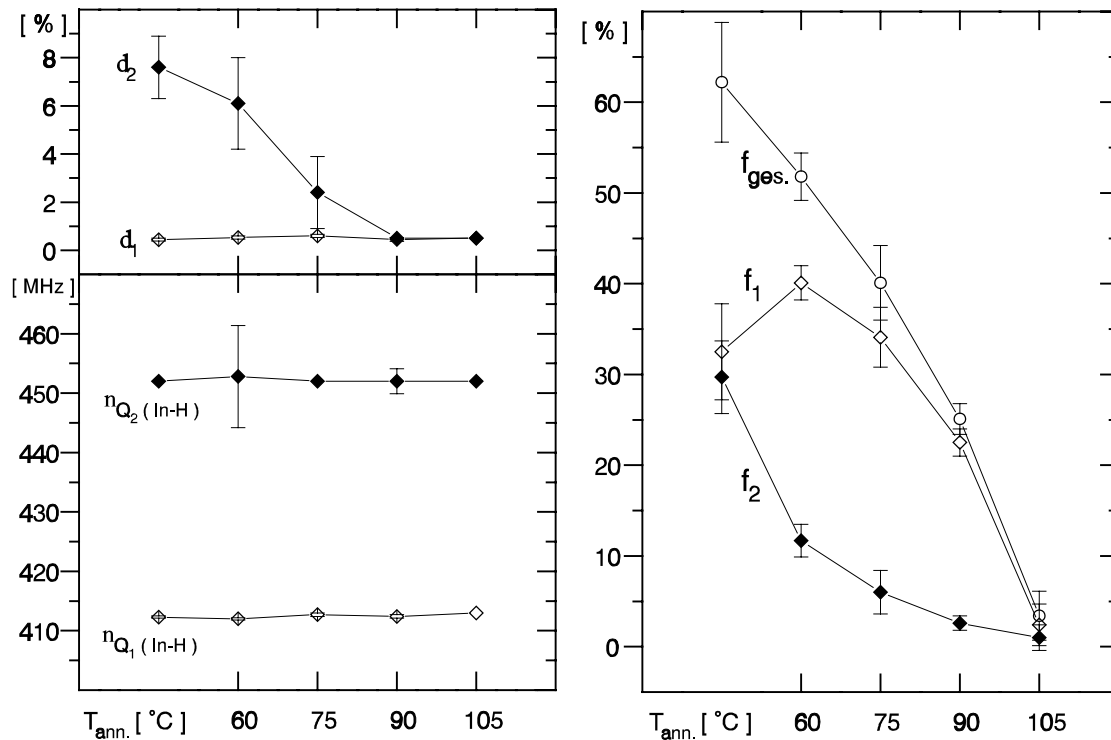


Abb. V.5 : PAC-Spektren für das System  $^{111}\text{In-H}\langle\text{Ge}\rangle/4b/$  nach dem Anlassen der Probe für jeweils 10 Minuten bei verschiedenen Temperaturen (  $T_m = \text{RT}$  )

Thermische Stabilität der In-H-Komplexe	H-Plasmabeladung bei 40°C ( 3 Std.)	für jeweils 10 Min. unter Hochvakuum getempert bei			
		60°C	75°C	90°C	105°C
$\nu_{Q_1}(\text{In-H})$ [ MHz ]	412.3(2)	412.0(2)	412.7(3)	412.4(3)	413.0
$\delta_1$ [ % ]	0.44(6)	0.53(7)	0.60(7)	0.45(8)	0.50
$\eta_1$	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
$f_1$ [ % ]	32.5(53)	40.1(19)	34.1(33)	22.5(15)	2.4(23)
$\nu_{Q_2}(\text{In-H})$ [ MHz ]	452.0	452.8(86)	452.0	452.0(21)	452.0
$\delta_2$ [ % ]	7.6(13)	6.1(19)	2.4(15)	0.5	0.5
$\eta_2$	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
$f_2$ [ % ]	29.7(40)	11.7(18)	6.0(24)	2.6(8)	1.0(14)
$\nu_{Q_0}$ [ MHz ]	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
$\delta_0$ [ MHz ]	2.2(4)	2.18(7)	1.29(8)	0.80(3)	0.45(4)
$f_0$ [ % ]	37.8(36)	48.2(5)	59.9(22)	74.9(12)	96.6(19)
C	0.004(3)	0.001	0.001(2)	- 0.002(1)	- 0.005(2)
$A_{22}^{\text{app}}$	- 0.110	- 0.110	- 0.110	- 0.110	- 0.110

[  $\sigma_0^{\text{eff}}$  : 0.3334 /  $\sigma_1^{\text{eff}}$  : 0.2584 /  $\sigma_2^{\text{eff}}$  : 0.2285 /  $\sigma_3^{\text{eff}}$  : 0.1796 ]

Tab. V.4 : Fitergebnisse der Meßreihe  $^{111}\text{In-H}\langle\text{Ge}\rangle/4b/$  ( isochrones Ausheilprogramm )Abb. V.6 : Graphische Darstellung der Fitparameter für die Meßreihe  $^{111}\text{In-H}\langle\text{Ge}\rangle/4c/4d/$

Aus dem Anlaßverhalten kann man eine Dissoziationstemperatur  $T_D$  für die In-H Komplexe abschätzen und über diese Rückschlüsse auf die Dissoziationsenergie  $E_D$  des zugehörigen Defektes ziehen.

Es gilt ein Arrhenius-Verhalten:

$$v = v_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_D}{k_B \cdot T_D}\right) \quad (\text{V.1})$$

$1/v$  : Verweildauer auf einem Gitterplatz  
 $v_0$  : sogenannte "Versuchsfrequenz"  
 $E_D$  : Dissoziationsenergie  
 $k_B$  : Boltzmannkonstante ( $8.6171 \cdot 10^{-5} \text{ eV/}^\circ\text{K}$ )

Läuft der Dissoziationsmechanismus in einem Schritt ab, d.h. genügt ein Sprung, um den Komplex aufzulösen, und vernachlässigt man darüberhinaus die Neubildung von In-H Paaren, so erhält man die Dissoziationsenergie über die Beziehung:

$$E_D = k_B \cdot T_D \cdot \ln(v_0 \cdot t_A) \quad (\text{V.2})$$

Die isochrone Anlaßzeit betrug jeweils  $t_A = 600$  Sekunden. Die Sprungfrequenz  $v_0$  läßt sich aus der Debyefrequenz  $v_D$  abschätzen, welche sich aus der Debyetemperatur  $\theta_D$  berechnen läßt.

$$v_0 \approx v_D = \frac{k_B \cdot \theta_D}{h} \quad (\text{V.3})$$

Für Germanium resultiert daraus eine Sprungfrequenz von  $v_0 \approx 8 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$ . Liegt diese Sprungfrequenz so hoch, daß ein einzelnes Hüpfen nicht mehr von der PAC-Meßapparatur aufgelöst werden kann, so würde sich die Symmetrie von  $C_{3v}$  auf "effektive"  $T_d$ -Symmetrie erhöhen, was wiederum ein quasi ungestörtes PAC-Signal zur Folge hätte. Bei Raumtemperatur liegt die Verweildauer des Protons jedoch deutlich über dem PAC-Zeitfenster von max. 800 ns, so daß der In-H Komplex für die PAC-Apparatur statisch erscheint.

Bei einer Dissoziationstemperatur von  $T_D \approx 360^\circ\text{K}$  läßt sich für den durch  $\nu_{Q1} = 413(1)$  MHz charakterisierten In-H-Komplex eine Dissoziationsenergie von  $E_D \approx 1.12(5)$  eV angeben. Der durch  $\nu_{Q2} = 450(5)$  MHz beschriebene Defekt löst sich bereits bei  $T_D \approx 330^\circ\text{K}$  auf, was einer Dissoziationsenergie von  $E_D \approx 1.03(5)$  eV entspricht. Da die vernachlässigte Neubildung von In-H Paaren die beobachtete Dissoziation zu höheren Temperaturen verzögern kann, sind die angegebenen Werte als eine obere Grenze für die Dissoziationsenergie anzusehen.

### V.3. Die Temperaturabhängigkeit der Wechselwirkungsfrequenzen

Nach einer H-Plasmabeladung der Probe  $\langle \text{Ge} \rangle / 4e/$  bei  $60^\circ\text{C}$  ( 12 Std. ) wurde die Temperaturabhängigkeit der beobachteten EFG untersucht. Die Messungen erfolgten im Temperaturbereich zwischen  $15^\circ\text{K}$  und  $285^\circ\text{K}$  bei ansteigender Meßtemperatur. Dabei unterlag die Probe zwischen den einzelnen Meßpunkten keiner weiteren Behandlung.

In den zugehörigen PAC-Spektren [ Abb. V.7 ] beobachtet man erneut das Auftreten von zwei unterschiedlichen Wechselwirkungsfrequenzen  $\nu_{Q1}$  und  $\nu_{Q2}$ . Während die Frequenz  $\nu_{Q1}$  praktisch ungedämpft ist (  $\delta_1 < 1\%$  ), unterliegt die Frequenz  $\nu_{Q2}$  infolge einer breiteren Frequenzverteilung wiederum einer deutlich größeren Dämpfung (  $\delta_2 \approx 7,5\%$  ) [ vgl. Tab. V.5 ].

Infolge der langen Beladungsdauer ( 12 Std. ) und dem damit verbundenen hohen Wasserstoffgehalt der Probe liegt der Anteil der mit der niedrigeren Frequenz  $\nu_{Q1}$  dekorierten Sonden mit etwa  $f_1 \approx 18(5)\%$  erwartungsgemäß unter dem zur Frequenz  $\nu_{Q2}$  gehörenden Anteil  $f_2 \approx 62(4)\%$ . Im Rahmen der Meßgenauigkeit bleiben beide Anteile im Verlauf des Meßprogramms in etwa konstant. Eine Änderung der jeweiligen Anteile würde man auch erst oberhalb der Raumtemperatur erwarten, wo sich die zugrundeliegenden Komplexe aufzulösen beginnen.

Betrachtet man den Verlauf der beiden Wechselwirkungsfrequenzen in Abhängigkeit von der Meßtemperatur  $T_m$ , so läßt sich in beiden Fällen eine charakteristische Änderung feststellen. Die graphische Darstellung der Fitparameter [ Abb. V.8 ] zeigt im Temperaturbereich zwischen  $15^\circ\text{K}$  und  $285^\circ\text{K}$  deutlich eine - in guter Näherung - lineare Abnahme der Wechselwirkungsfrequenzen um 20 - 30 MHz. Eine solche Frequenzänderung in einer Größenordnung von 5 - 7% läßt sich nicht auf die thermisch bedingte Kontraktion des Kristallgitters zurückführen. Da sich die Gitterkonstante im betrachteten Temperaturbereich nur um etwa 0,15% ändert, und der EFG proportional zu  $r^{-3}$  ist, würde man lediglich eine Frequenzänderung von  $\sim 0,5\%$  erwarten. Eine temperaturabhängige Frequenzänderung dieser Größenordnung beobachtet man z.B. für intrinsische Punktdefekte wie den In-Leerstellen-Komplex in Germanium [ FEU 90b ].

Da die In-H Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_{Q1} = 413$  MHz bei Raumtemperatur praktisch mit der charakteristischen Frequenz  $\nu_Q = 415$  MHz des In-Leerstellen-Komplexes identisch ist, kann erst aus dem unterschiedlichen Temperaturverhalten darauf geschlossen werden, daß es sich tatsächlich um zwei unterschiedliche Defekte handelt.

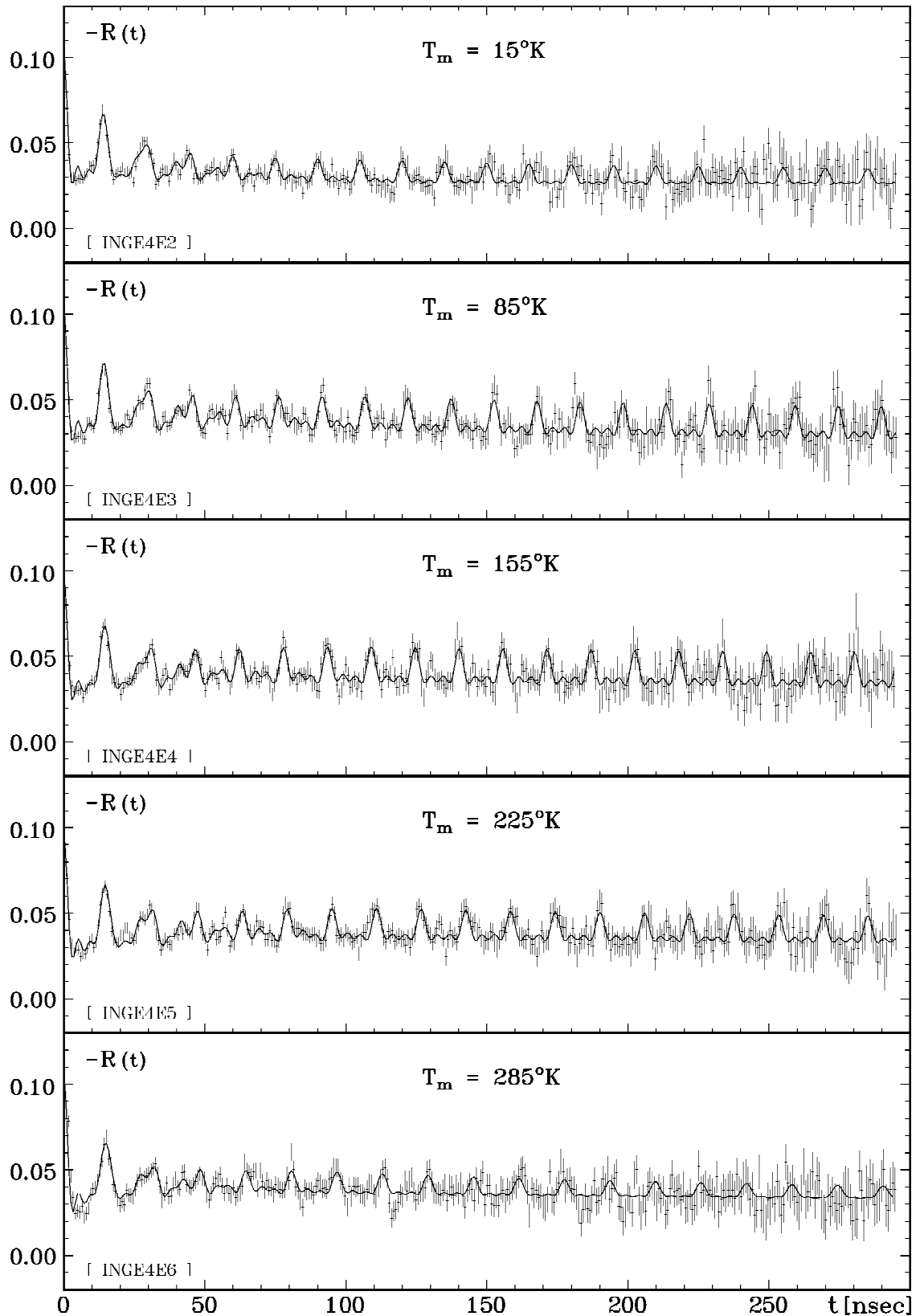
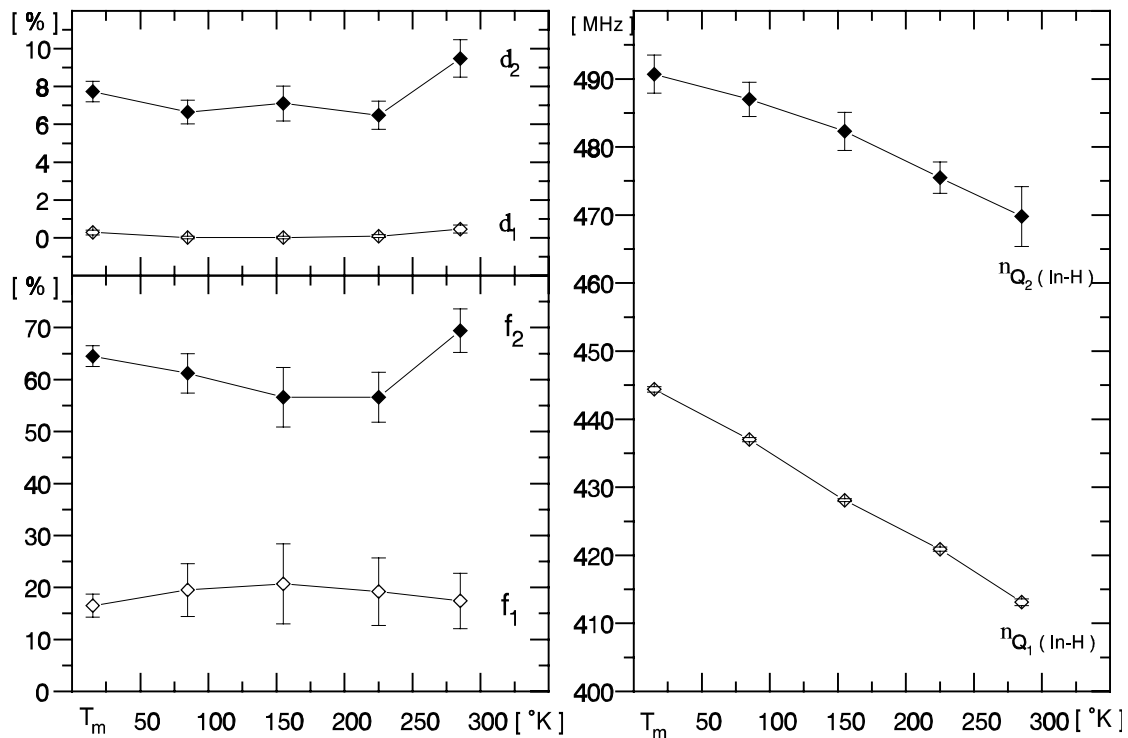


Abb. V.7 : PAC-Spektren für das System  $^{111}\text{In-H}\langle\text{Ge}\rangle/4e/$  nach H-Plasmabeladung bei  $60^\circ\text{C}$  ( 12 Std.), unter Variation der Meßtemperatur  $T_m$

Temperaturabhängigkeit der Wechselwirkungsfrequenz	Variation der Meßtemperatur nach H-Plasmabeladung				
	15°K	85°K	155°K	225°K	285°K
$\nu_{Q_1}(\text{In-H})$ [ MHz ]	444.4(4)	437.0(3)	428.1(2)	420.9(3)	413.1(5)
$\delta_1$ [ % ]	0.28(13)	0.01(7)	0.01(7)	0.09(8)	0.46(21)
$\eta_1$	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
$f_1$ [ % ]	16.5(22)	19.5(51)	20.7(77)	19.2(65)	17.4(53)
$\nu_{Q_2}(\text{In-H})$ [ MHz ]	490.7(28)	487.0(25)	482.3(28)	475.5(23)	469.8(44)
$\delta_2$ [ % ]	7.74(54)	6.65(63)	7.10(92)	6.48(74)	9.48(99)
$\eta_2$	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
$f_2$ [ % ]	64.5(20)	61.2(38)	56.6(57)	56.6(48)	69.4(42)
$\nu_{Q_0}$ [ MHz ]	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
$\delta_0$ [ MHz ]	13.7(20)	3.2(12)	0.63(23)	0.51(16)	3.8(24)
$f_0$ [ % ]	19.0(9)	19.4(33)	22.7(52)	24.2(44)	13.2(33)
C	0.006(1)	0.006(1)	0.011(4)	0.013(3)	0.002(3)
$A_{22}^{\text{app}}$	- 0.110	- 0.110	- 0.110	- 0.110	- 0.110

[  $\sigma_0^{\text{eff.}}$  : 0.3334 /  $\sigma_1^{\text{eff.}}$  : 0.2584 /  $\sigma_2^{\text{eff.}}$  : 0.2285 /  $\sigma_3^{\text{eff.}}$  : 0.1796 ]

Tab. V.5 : Fitergebnisse der Meßreihe  $^{111}\text{In-H}\langle\text{Ge}\rangle/4e/$  bei Variation der MeßtemperaturAbb. V.8 : Graphische Darstellung der Fitparameter für die Meßreihe  $^{111}\text{In-H}\langle\text{Ge}\rangle/4e/$

## V.4. Die Orientierungsmessungen

Bei den bisherigen Messungen waren die Detektoren entlang der  $\langle 110 \rangle$ -Kristallachsen ausgerichtet [ Abb. V.9 ]. Bei dieser Orientierung beträgt der Winkel zwischen den Detektoren jeweils  $90^\circ$ , und die  $\langle 100 \rangle$ -Probenoberfläche zeigt genau zwischen die Detektoren. Dreht man die Probenoberfläche um  $45^\circ$ , dann zeigen die Detektoren bei sonst gleicher Anordnung entlang der  $\langle 100 \rangle$ -Hauptachsen [ Abb. V.10 ]. Eine Orientierung der Probenoberfläche unter  $45^\circ$  zu den Detektoren besitzt jedoch den Vorteil, daß die probeninterne  $\gamma$ -Absorption für die Detektorwinkel  $90^\circ$  bzw.  $180^\circ$  gleichgroß ist. Ferner resultiert für einen ausgedehnten Strahlfleck bei dieser Probenanordnung eine gleichmäßige Dejustierung der Quelle aus dem geometrischen Zentrum.

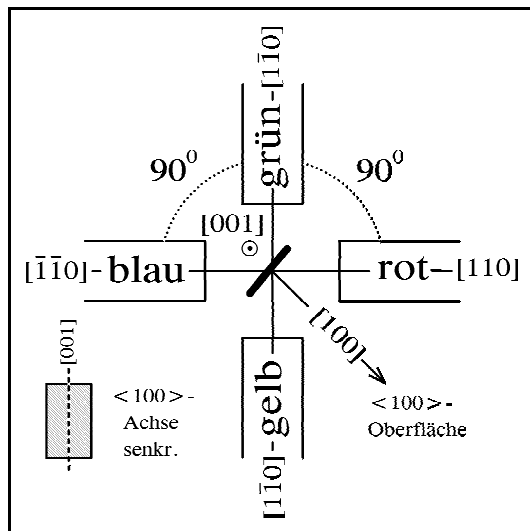


Abb. V.9 : Detektororientierung entlang der  $\langle 110 \rangle$ -Kristallachsen

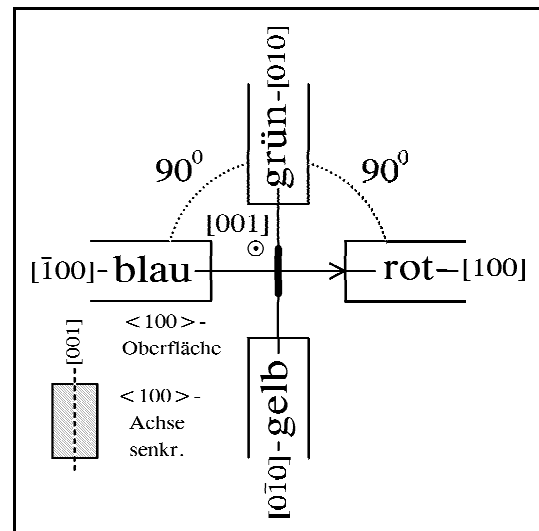


Abb. V.10 : Detektororientierung entlang der  $\langle 100 \rangle$ -Kristallachsen

Bei einer  $\langle 111 \rangle$ -Anordnung sind die Detektoren unter einem Winkel von  $70,5^\circ$  bzw.  $109,5^\circ$  zueinander orientiert. Je nach Lage der Kristallachsen muß die Probe in einem ortsfesten Detektorsystem so gedreht werden, daß jeweils zwei  $\langle 111 \rangle$ -Achsen auf die Detektoren zeigen. Bei einer  $\langle 111 \rangle$ -Probenoberfläche ergibt sich eine Orientierung gemäß Abbildung V.11. Die Lage der zweiten  $\langle 111 \rangle$ -Achse muß allerdings zuvor röntgenkristallographisch bestimmt werden.

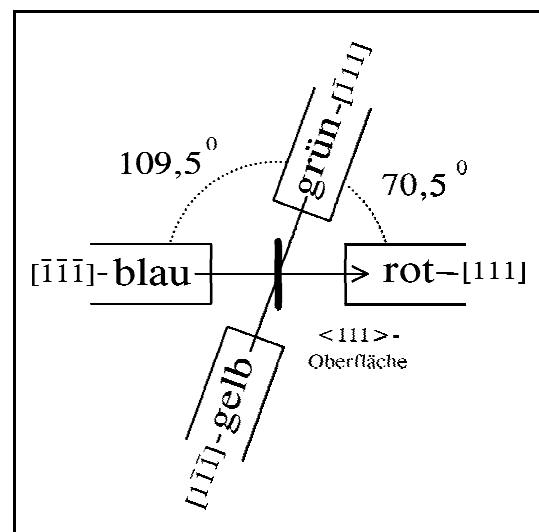
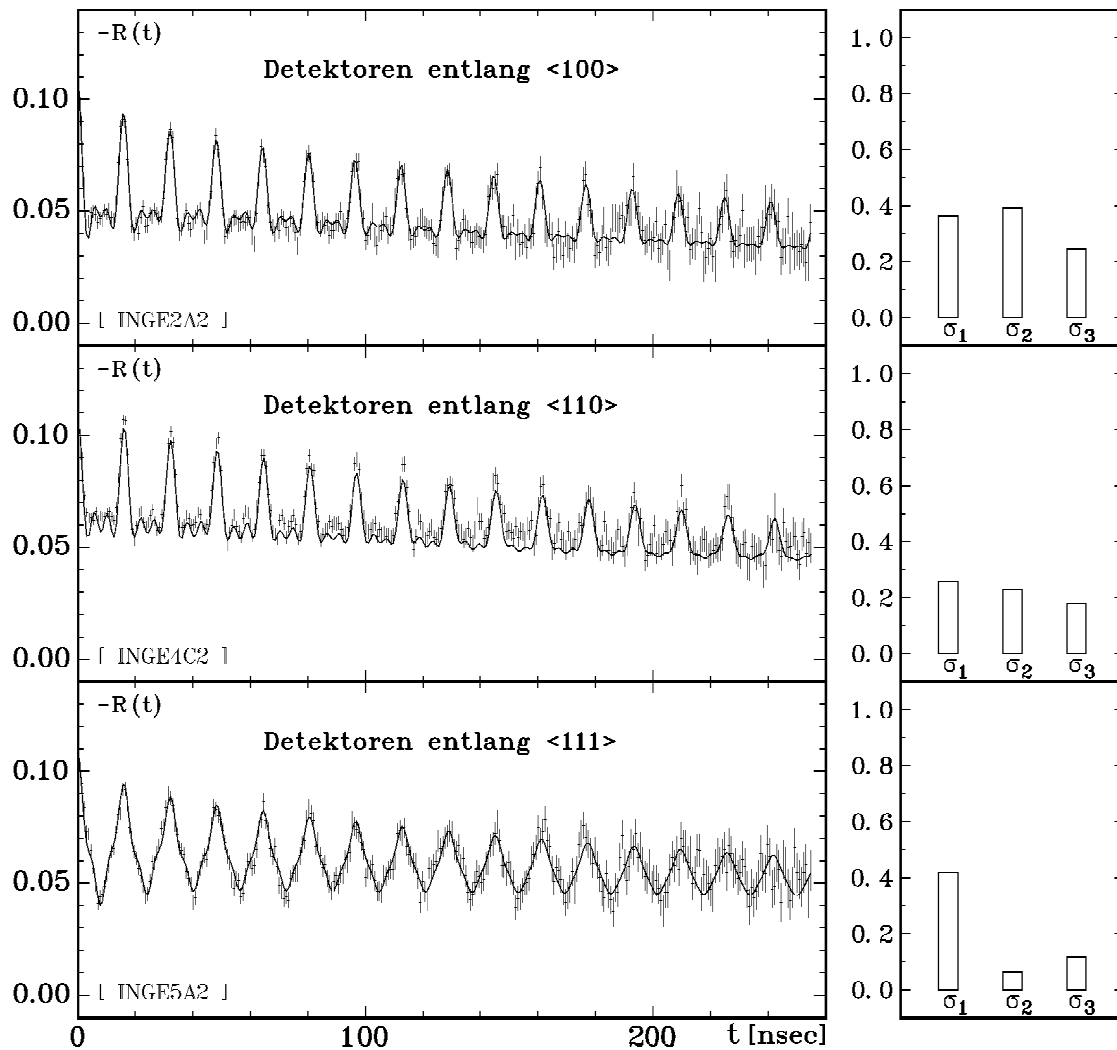


Abb. V.11 : Detektororientierung entlang der  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachsen

Aufschluß über die räumliche Orientierung des wasserstoffinduzierten EFG erhält man nun durch Orientierungsmessungen [ vgl. Kap. III ], bei denen die Probe so zwischen den Detektoren positioniert wird, daß die Detektoren entlang gleichindizierter Kristallachsen ausgerichtet sind. Die folgenden PAC-Spektren [ Abb. V.12 ] wurden bei einer Orientierung der Detektoren entlang der drei Hauptachsen  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$  aufgenommen [ vgl. Abb. V.9-11 ]. Die Orientierungsmessungen wurden an unterschiedlichen Proben durchgeführt, daher weichen die in Tabelle V.6 angegebenen Fitparameter der jeweiligen Einzelmessung voneinander ab.



**Abb. V.12:** PAC - Spektren für das System  $^{111}\text{In-H}\langle\text{Ge}\rangle$  für verschiedene Orientierungen der Detektoren bezüglich der Kristallachsen. Der rechte Teil der Abbildung zeigt eine graphische Darstellung der zugehörigen  $\sigma_n$ - Koeffizienten.

Die theoretische Störfunktion läßt sich für verschiedene Orientierungen des EFG bezüglich der Kristallachsen berechnen. Aus dem charakteristischen Verschwinden der Oberfrequenzen bei einer Orientierung der Detektoren entlang der  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung kann bereits eine  $\langle 111 \rangle$ -Orientierung des EFG abgeleitet werden.



Die relativen Amplituden  $\sigma_n^{\text{eff}}$  der beteiligten Wechselwirkungsfrequenzen wurden für eine Orientierung der Hauptkomponente  $V_{zz}$  des EFG entlang der  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse berechnet [ Anhang IX.1 ] und sind für die verschiedenen Detektorstellungen in der Tabelle V.6 angegeben bzw. in der Abbildung V.12 graphisch dargestellt.

Orientierungsmessungen	Detektoren entlang $\langle 100 \rangle$	Detektoren entlang $\langle 110 \rangle$	Detektoren entlang $\langle 111 \rangle$
$v_{Q_1}(\text{In-H})$ [ MHz ]	414.9(2)	412.6(2)	413.4(4)
$\delta_1$ [ % ]	0.49(6)	0.66(5)	0.85(12)
$\eta_1$	0.00	0.00	0.00
$f_1$ [ % ]	31.7(12)	51.1(22)	41.1(25)
$v_{Q_2}(\text{In-H})$ [ MHz ]	450.0	449.8(24)	450(19)
$\delta_2$ [ % ]	7.3(12)	0.9(8)	15.3(30)
$\eta_2$	0.00	0.00	0.00
$f_2$ [ % ]	15.8(11)	3.7(15)	23.7(25)
$v_{Q_0}$ [ MHz ]	0.0	0.0	0.0
$\delta_0$ [ MHz ]	1.4(1)	1.9(1)	1.8(1)
$f_0$ [ % ]	52.5(4)	45.2(16)	35.2(6)
$\sigma_1^{\text{eff.}}$	0.3630	0.2584	0.4177
$\sigma_2^{\text{eff.}}$	0.3923	0.2285	0.0586
$\sigma_3^{\text{eff.}}$	0.2447	0.1796	0.1164
C	0.000	- 0.004(1)	0.000
$A_{22}^{\text{app.}}$	- 0.110	- 0.110	- 0.110

Tab. V.6 : Fitergebnisse der Orientierungsmessungen am System  $^{111}\text{In-H}\langle\text{Ge}\rangle$  (  $T_m=\text{RT}$  )

Vergleicht man das beobachtete Verhalten mit der Theorie, so kann eindeutig eine  $\langle 111 \rangle$ -Orientierung für die beiden EFG abgeleitet werden. Ferner ist das Verhältnis der beteiligten Übergangsfrequenzen  $\omega_1:\omega_2:\omega_3$  exakt 1:2:3, was die axiale Symmetrie (  $\eta = 0$  ) des EFG belegt.

## V.5. Diskussion der Meßergebnisse

Leider ist es bis heute nicht möglich, die Größe des EFG am Ort des Sondenkerns unter Vorgabe des Wirtsgitters und einer speziellen Sonde-Defekt-Geometrie theoretisch genau zu berechnen. Deshalb ist stets eine indirekte Identifikation eines mit der PAC beobachteten EFG über Erzeugungsmechanismen, Orientierung und Symmetrieeigenschaften, Meßtemperaturabhängigkeit, etc. sowie durch Vergleich mit anderen Meßmethoden notwendig.

Die Wasserstoffbeladung der Proben in einem H-Plasma ist elementspezifisch, wodurch andere Fremdatome als H ausscheiden. Ferner ist in einem Hochdruckplasma ( $p \approx 1$  hPa) die freie Weglänge der  $H^+$ -Ionen nur kurz und die kinetische Energie somit zu gering ( $\sim$  einige eV), um beim Auftreffen auf die Kristalloberfläche Gitterdefekte wie z.B. Zwischengitteratome (ZGA) bzw. Leerstellen (LS) zu erzeugen. Andere im Material vorhandene Verunreinigungen, die an der Bildung von Defekt-Komplexen beteiligt sein könnten, können wegen der hohen Reinheit des Ausgangsmaterials ausgeschlossen werden.

Die naheliegendste Deutung für den zugrundeliegenden Sonde-Defekt-Komplex ist daher die eines In-H Paares. Diese Annahme ist auch mit der in Halbleitern allgemein zu beobachtenden Tendenz zur Bildung von ladungsneutralen Komplexen zwischen Akzeptoren und Donatoren verträglich, da sich ein negativ ionisiertes In- und ein positiv geladenes H-Atom exakt kompensieren. Eine solche Paarbildung ist folglich auch mit der beobachteten elektrischen Deaktivierung des Akzeptors verbunden.

Die bereits nach kurzzeitiger H-Plasmabeladung zu beobachtende Quadrupolwechselwirkungsfrequenz  $\nu_{QI} = 413(1)$  MHz läßt sich auch nach niederenergetischer  $H^+$ -Implantation nachweisen [DEI 89, SKU 89]. Die Frequenz  $\nu_{QI}$  ist praktisch ungedämpft ( $\delta_1 < 1\%$ ), was auf einen sehr einheitlichen Sonde-Defekt Komplex schließen läßt.

Konsistent mit der beobachteten Axialsymmetrie ( $\eta = 0$ ) und der Orientierung des EFG entlang einer  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse ist eine Konfiguration, bei der sich der Wasserstoff entweder auf der Bindungsachse zwischen dem Sondenatom und einem benachbarten Ge-Gitteratom befindet (Bond Center- bzw. BC-Platz) oder auf der gegenüberliegenden Seite zwischen der Tetraederlücke (T) und dem Sondenatom (Antibonding- bzw. AB-Platz), wobei Relaxationen des Sondenatoms und benachbarter Ge-Atome symmetrisch zur  $\langle 111 \rangle$ -Achse möglich sind.

Das Resultat einer PAC-Messung ist, wie bereits erwähnt, sensitiv auf die Symmetrie und Orientierung eines EFG zum Zeitpunkt der Messung. Diese Eigenschaften können folglich für das durch den radioaktiven Zerfall des  $^{111}\text{In}$ -Sondenatoms entstandene Cd-H Paar bestimmt werden. Auf die Geometrie des ursprünglichen In-H Paares kann daher nur indirekt zurückgeschlossen werden.

Da für die Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_{QI} = 413(1)$  MHz keine dynamischen Effekte beobachtet werden, kann man davon ausgehen, daß sich das Cd-H Paar nach dem Zerfall, zumindest für den Zeitraum der PAC-Messung (ca.  $0,5 \mu\text{s}$ ), in der durch das In-H Paar bestimmten strukturellen Konfiguration befindet. Daher sind für die In-H Paare ebenfalls die in Abb. V.13 dargestellten Konfigurationen in Betracht zu ziehen.

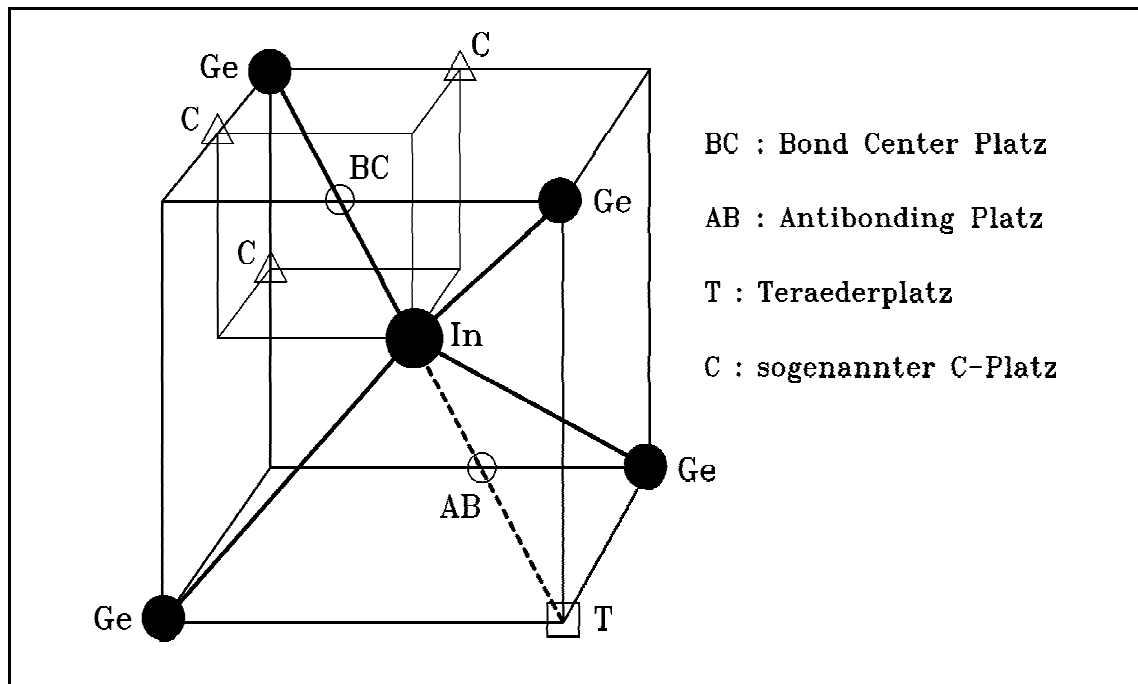


Abb. V.13 : Mögliche Gitterplätze des H für Akzeptor-H-Paare mit axialer  $\langle 111 \rangle$ -Symmetrie

Die Interpretation der verfügbaren experimentellen Ergebnisse und theoretische Berechnungen konvergieren zunehmend auf einem BC-Platz des H am Akzeptor In. Der Wasserstoff sättigt dabei, unter Bildung einer Si-H Bindung, die freie Valenz ab und führt zu einer Relaxation des dreiwertigen Akzeptors In entlang der  $\langle 111 \rangle$ -Richtung, hin zu einer mehr planarerer Konfiguration.

Theoretische Berechnungen an vergleichbaren Akzeptor-Wasserstoff Paaren in Si [ LEO 86, BON 87, CHA 88 ] lassen jedoch erkennen, daß eine exakte BC-Position des H-Atoms sehr empfindlich von der Relaxation des substitutionellen Akzeptors abhängt. Experimentelle Untersuchungen [ HRR 88 ] am B-H Komplex in Si ergaben, daß das B-Atom von seinem substitutionellen Gitterplatz entlang einer  $\langle 111 \rangle$ -Richtung relaxiert ist und gleichzeitig der Wasserstoff von seinem BC-Platz in Richtung auf einen der drei sogenannten C-Plätze verschoben ist.

Die Vermutung liegt nahe, daß der relativ große Akzeptor In den Wasserstoff von seinem BC-Platz auf eine off-axis (OA)-Position verdrängt, wobei der Wasserstoff zwischen äquivalenten OA-Positionen relativ leicht beweglich sein sollte.

Da die Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_{QI} = 413(1)$  MHz keine Dämpfung aufweist, muß die Sprungfrequenz der Wasserstoffionen so hoch sein, daß der Kernspin anschaulich den Fluktationsbewegungen des sich sehr schnell ändernden EFG nicht mehr folgen kann. In diesem Fall würde man tatsächlich einem resultierenden mittleren EFG entlang einer  $\langle 111 \rangle$ -Richtung beobachten, analog dem Fall einer statischen Wechselwirkung mit einem ortsfesten H-Atom auf einem BC-Platz.

Im Grenzfall schneller Fluktuationen verschwindet die dynamische Dämpfung, wenn die Zeit zwischen zwei Sprüngen des H-Atoms beträchtlich kürzer als die Spinpräzessionsperiode ist. Da bei Absenkung der Kristalltemperatur auf 15°K ebenfalls keine Dämpfung beobachtet wurde, muß der Wasserstoff selbst bei diesen Temperaturen noch so beweglich sein, daß ein einzelner Sprung von der PAC-Apparatur zeitlich nicht aufgelöst werden kann. Eine Entscheidung darüber, ob sich der Wasserstoff auf einem BC-Platz befindet oder sehr schnell ( $\tau < \text{ns}$ ) zwischen den verschiedenen OA-Positionen um die  $\langle 111 \rangle$ -Bindungsachse springt, ist mit der PAC leider nicht möglich.

Schwieriger ist die Situation bei der Deutung des durch die Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_{Q2} = 450(5) \text{ MHz}$  ( $\eta = 0$ ) beschriebenen Defektes, dem ebenfalls ein axial-symmetrischer EFG entlang einer  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse zugrunde liegt.

Neben der Bindung an den Akzeptor In wird der Wasserstoff auch an Defekten gebunden, die z.B. durch Ionenbeschuß bei der Implantation der Sondenatome erzeugt wurden. Diese Affinität von H zu Defekten ist leicht verständlich, denn die in den leerstellenartigen Defekten vorhandenen gebrochenen Bindungen (dangling bonds) werden durch H effektiv abgesättigt. Abbildung V.14 zeigt einige Modelle wasserstoffpassivierter Defekt-Komplexe in Silizium [PEA 87].

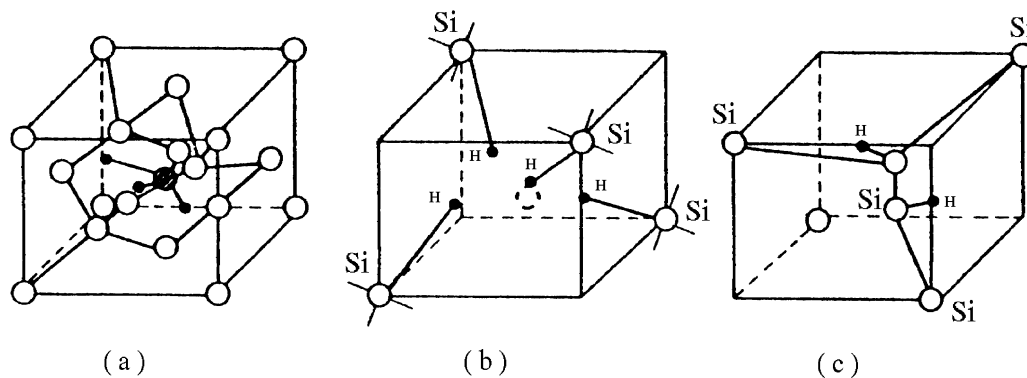


Abb. V.14 : ( a ) Interstitielles Silan ( $\text{Si-H}_4$ ) auf einem Teraederplatz  
 ( b ) H-passivierte Einfachleerstelle  
 ( c ) H-passiviertes  $\langle 100 \rangle$ -Zwischengitteratom

Als Folge einer Übersättigung mit Wasserstoff ( $> 10^{17} \text{ H-Atome/cm}^3$ ), die während des Kristallwachstums unter einer  $\text{H}_2$ -Atmosphäre entstanden ist oder auf eine anschließenden Plasmabehandlung zurückgeführt werden kann, lassen sich z.B. in Si bis in eine Tiefe von  $\sim 0,5 \mu\text{m}$  ausgedehnte planare Defekte in  $\langle 111 \rangle$ -Richtung sowie Wasserstoffblasen nachweisen [JOH 87, JEN 88]. Da solche wasserstoffinduzierten Defekt-Komplexe erst bei Temperaturen oberhalb von  $\sim 200^\circ\text{C}$  ausheilen, können sie nicht für das Auftreten der bei hohem Wasserstoffgehalt zusätzlich beobachteten Wechselwirkung verantwortlich gemacht werden, denn der Anteil  $f_2$  der zugehörigen Frequenz  $\nu_{Q2}$  nimmt bereits ab  $\sim 60^\circ\text{C}$  merklich ab.

Theoretische Berechnungen [BON 87, EST 87] der Gitterposition von isoliertem

Wasserstoff in Si zeigen, daß es neben dem relaxierten BC-Platz noch ein weiteres Energieminimum in der Nähe des Tetraederplatzes ( T ) gibt. Das Auftreten von zwei Energieminima wird ferner durch die Beobachtung von unterschiedlichen Aktivierungsenergien bei der Wasserstoffdiffusion in Si nahegelegt. Die erforderliche Aktivierungsenergie beträgt für einen  $BC \rightleftharpoons BC$  Sprung des H-Atoms  $\sim 1\text{eV}$ , während ein  $AB \rightleftharpoons AB$  ( bzw.  $T \rightleftharpoons T$  ) Platzwechsel eine Energiebarriere von nur  $\sim 0.5\text{eV}$  besitzt [ DEA 88 ].

Auch bei Channeling-Experimenten an B-dotiertem Si [ NIE 88 ] läßt sich ein gewisser Anteil an H-Atomen in der Nähe des Tetraederplatzes nachweisen. Der Fit ( durchgezogene Linie ) liefert 87% Deuterium auf einem BC-Platz und 13% in der Nähe des Tetraederplatzes [ Abb. V.15 ].

Da Silizium und Germanium dieselbe Gitterstruktur besitzen, sollten diese Ergebnisse im wesentlichen auch auf Germanium übertragbar sein.

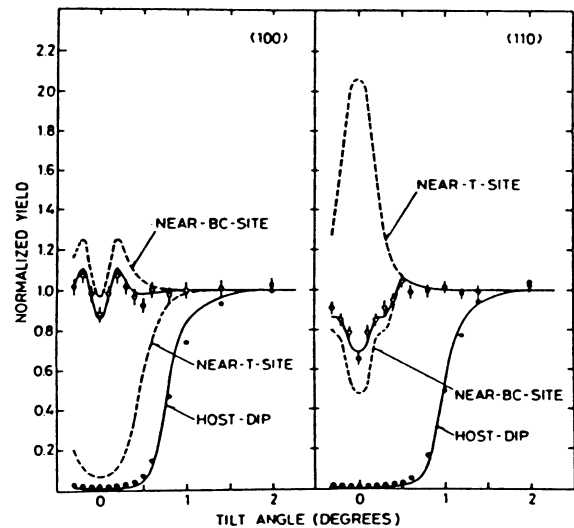


Abb. V.15 : Channeling-Untersuchung der Gitterplätze von Deuterium in B-dotiertem Si [ NIE 88 ]

Von interstitiellem Wasserstoff in Ge wird ferner vermutet, daß er zwischen den vier äquivalenten Tetraederplätzen tunnelt [ HAL 85 ]. Das Auftreten der Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_{Q_2} = 450(5)$  MHz, die bei zunehmender Beladungsdauer und ansteigendem Wasserstoffgehalt der Probe dominiert, läßt sich daher möglicherweise durch ein weiteres H-Atom erklären, das sich auf einem T-Platz in der Nähe des Sondenatoms befindet. Eine solche Konfiguration hätte einen axialsymmetrischen EFG entlang einer  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse zur Folge. Eine zusätzliche Ladung auf einem T-Platz befindet sich etwa im doppelten Abstand zum Sondenkern wie ein  $H^+$ -Ion auf einem BC-Platz. Dies hätte wegen der  $r^{-3}$ -Abhängigkeit eine  $\sim 10\%$  Verstärkung des EFG zur Folge, in sehr guter Übereinstimmung mit der gemessenen Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_{Q_2}$ .

Da sich die Ladungen eines negativ ionisierten In- und eines positiv geladenes H-Atoms gerade kompensieren, übt das gebildete In-H-Paar keine weitere attraktive Coulomb-Wechselwirkung auf ein weiteres H-Atom aus, der zusätzliche Wasserstoff ist folglich nur schwach gebunden. Ein Tempern der Probe bei  $60^\circ\text{C}$  ( 10 Min.) bewirkt bereits eine deutliche Abnahme des entsprechenden Anteils  $f_2$ , während der Anteil an In-H-Paaren (  $f_1$  ) durch den freigesetzten Wasserstoff zunächst noch zunimmt.

Die beobachtbare deutlich größere Dämpfung ( $\delta_2$  max. 10% ) der Frequenz  $\nu_{Q_2}$  läßt sich möglicherweise auf dynamische Prozesse zurückzuführen, die auf eine durch die Elementumwandlung verursachte strukturelle Neukonfiguration hindeuten. Durch den radioaktiven Zerfall wandelt sich der neutrale In-H-Komplex in den negativ ionisierten Einfachakzeptor ( $\text{Cd-H}^-$ ) um, welcher dann eine attraktive Wechselwirkung auf ein weiteres H-Atom ausübt. Befindet sich unmittelbar nach dem Zerfall, also zum Zeitpunkt der PAC-Messung, ein zusätzliches Wasserstoffatom auf einem T-Platz und somit in direkter Nachbarschaft zum Doppelakzeptor Cd, so beobachtet man einen EFG, welcher aus zwei angelagerten H-Atomen resultiert, ansonsten wird der EFG durch das an den Akzeptor In gebundene H-Atom bestimmt.

---

## VI. Die Erzeugung eines spannungsinduzierten elektrischen Feldgradienten

Bei dem Versuch, die in einem Hochdruckplasma gebildeten In-H-Komplexe durch Anlegen einer äußeren uniaxialen Druck- bzw. Zugspannung innerhalb eines Ge- bzw. Si-Kristalls auszurichten [ Abb. VI.1 ], konnte erstmals das Auftreten eines spannungsinduzierten Gitterfeldgradienten beobachtet werden.

In einem nicht-kubischen Wirtsgitter verspürt ein Sondenkern auf einem regulären Gitterplatz wegen der nicht-sphärischen Anordnung der Nachbaratomrümpfe einen elektrischen Gitterfeldgradienten. So verursacht eine hexagonale Kristallstruktur ( $\alpha=\beta=90^\circ$   $\gamma=120^\circ$ ,  $a=b\neq c$ ) einen axialsymmetrischen EFG ( $\eta=0$ ) entlang der c-Achse. Infolge der kubischen Ladungssymmetrie verschwindet dagegen im Diamantgitter eines Si- bzw. Ge-Einkristalls der EFG auf einem substitutionellen Gitterplatz.

Durch eine von außen angelegte uniaxiale Zug- bzw. Druckspannung sollte es jedoch auch in einem kubischen Einkristall prinzipiell möglich sein, durch Verzerrung der Ladungssymmetrie einen elektrischen Feldgradienten zu erzeugen.

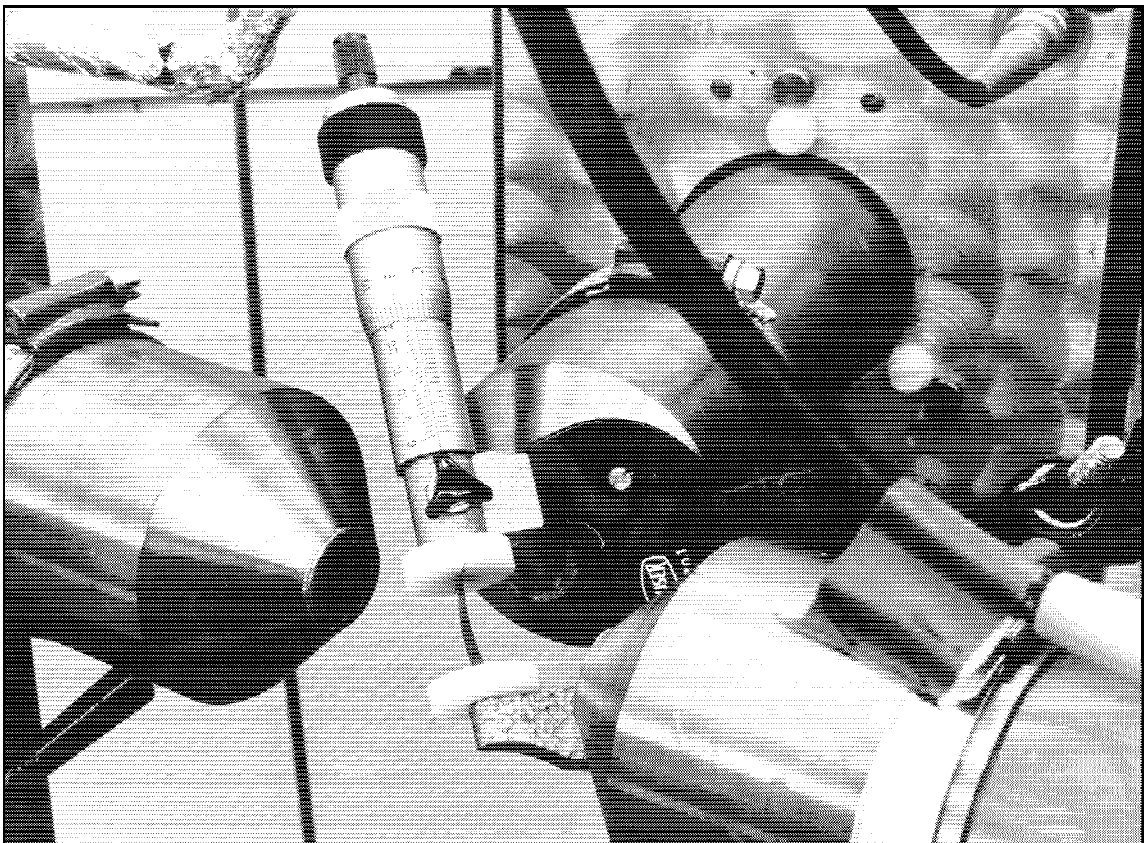


Abb. VI.1 : Eine eingespannte Si-Probe zwischen den Detektoren einer PAC-Apparatur

Überraschend war die Feststellung, daß bereits Spannungen in der Größenordnung von einigen kbar ( $\approx 10^8$  Pa) ausreichen, um einen spannungsinduzierten elektrischen Feldgradienten zu erzeugen, der eine meßbare elektrische Quadrupolwechselwirkung hervorruft.

Die wesentliche Idee bestand darin, die erforderlichen Druck- und Zugspannungen durch einfaches Biegen der Proben zu erzeugen. Hierzu wurden die Proben in unterschiedliche Probenhalter eingespannt und entlang ihrer Längskante gebogen. Verwendet man Proben mit einer  $\langle 110 \rangle$ -Oberflächenorientierung, so liegen die drei Hauptachsen  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$  in der Oberfläche und stehen somit als Zug- oder Druckachsen zur Verfügung.

Da sich die implantierten  $^{111}\text{In}$ -Sondenkerne in einer sehr dünnen Schicht dicht unter der Oberfläche befinden ( bei einer Implantationsenergie von 160 keV erhält man ein Konzentrationsmaximum bei Ge:  $513 \pm 226 \text{ \AA}$  / Si:  $786 \pm 237 \text{ \AA}$  ), verspüren diese entweder eine Druckspannung oder eine entsprechende Zugspannung, falls der Kristall in die andere Richtung durchgebogen wird. Auf diese Weise lassen sich über Biegemomente homogene uniaxiale Druck- und Zugspannungen erzeugen.

Verwendet man dagegen zur Druckerzeugung eine konventionelle Stempelpresse, so ist zu erwarten, daß die hierbei aufgebauten Druckspannungen, insbesondere an der Probenoberfläche, dort also, wo sich die implantierten Sondenkerne befinden, sehr inhomogen und auch nicht wirklich uniaxial sind. Ein entsprechender Versuch konnte erwartungsgemäß keinen spannungsinduzierten EFG nachweisen [ GUZ 93 ].

Im folgenden Kapitel wird zunächst der Einfluß von uniaxialen Zug-/Druckspannungen auf die Symmetrie eines Diamantgitters behandelt [ Kap. VI.1 ], wobei insbesondere die Symmetrieeigenschaften des durch die Gitterverzerrung erzeugten EFG untersucht werden. Nach diesen theoretischen Vorüberlegungen werden die Meßergebnisse vorgestellt [ Kap. VI.2 ]. Wie die Orientierungsmessungen [ Kap. VI.3 ] eindeutig zeigen, liegt die Symmetrieachse des spannungsinduzierten EFG in Richtung der Zug- bzw. Druckspannungsachse. Unter Verwendung des entsprechenden Verzerrungstensors  $\underline{\epsilon}$  aus Kap. II.2 wurden zunächst die zu erwartenden Verrückungen der Atomrümpfe bestimmt. Auf der Grundlage eines einfachen Punktladungsmodells [ Kap. VI.4 ] war es dann möglich, die zugehörigen spannungsinduzierten Gitterfeldgradienten zu berechnen. Die Diskussion der Meßergebnisse [ Kap. VI.5 ] schließt dieses Kapitel ab.



## VI.1. Die Symmetrie der Sondenumgebung

In Abhängigkeit von der Punktsymmetrie des Gitters lassen sich folgende, allgemeine Aussagen zum Tensor des elektrischen Feldgradienten ( EFG ) machen:

Die ursprünglich sehr hohe Symmetrie ( $O_h$ ) des Diamantgitters von Si/Ge [ Abb. VI.2 ] wird durch den Einbau eines Fremdatoms und dem resultierenden Verlust an Translationssymmetrie auf tetraedrische Punktsymmetrie verringert.

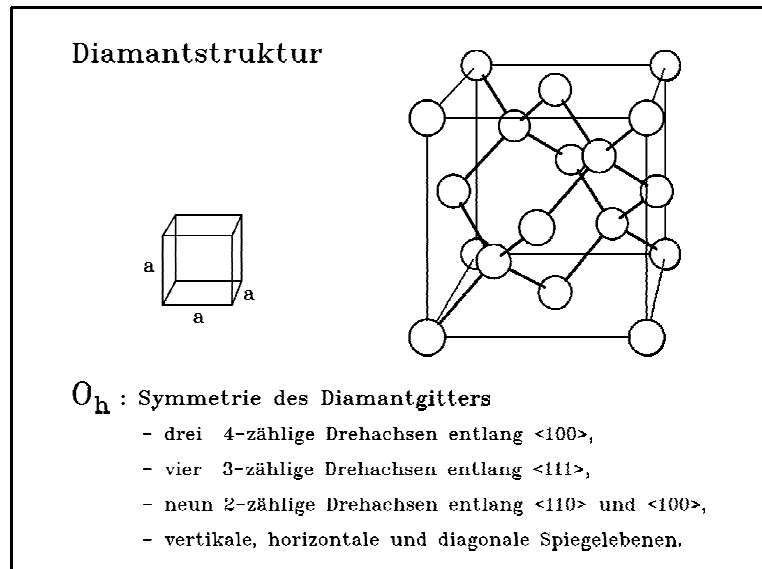


Abb. VI.2 : Die Symmetrie des Diamantgitters

Ist mehr als eine n-zählige Drehachse, mit  $n > 2$  vorhanden, dann besitzt der zugehörige Tensor-ellipsoid Kugelgestalt.  
( d.h.  $V_{xx}=V_{yy}=V_{zz}=0$  )

Dies ist der Fall, wenn die Umgebung um den substitutionellen Sondenkern kubische bzw. tetraedrische Struktur besitzt und somit kein EFG auftritt [ Abb. VI.3 ].

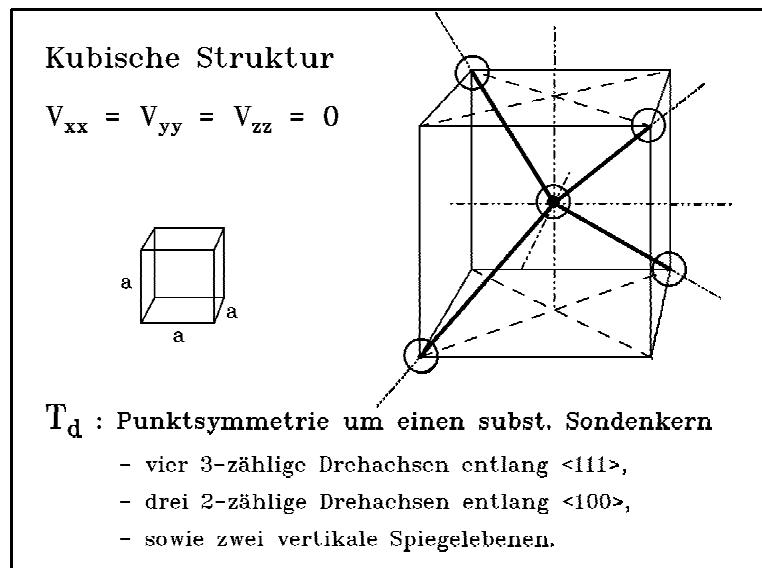


Abb. VI.3 : Die Punktsymmetrie um ein substitutionelles Fremdatom in einem kubischen Diamantgitter

Gibt es nur eine  $n$ -zählige Drehachse mit  $n > 2$ , so können wir diese als  $z$ -Achse annehmen. Da in diesem Fall mindestens eine Dreizähligkeit vorliegt, muß  $V_{xx} = V_{yy}$  sein, wobei  $V_{zz} \neq 0$  ist. Der zugehörige Tensorelipsoid des EFG ist dann rotations-symmetrisch, was einen axialsymmetrischen EFG ( $\eta = 0$ ) zur Folge hat. Dies ist z.B. der Fall für trigonale, tetragonale und hexagonale Strukturen. Auch durch gerichteten Druck bzw. Zug auf ein kubisches Diamantgitter läßt sich die Punktsymmetrie um einen substitutionellen Sonden Kern entsprechend verringern.

Auf diese Weise erhält man, bei einer von außen angelegten Druck- / Zugspannung entlang einer  $\langle 111 \rangle$ -Achse, eine dreizählige Drehachse entlang der Druck - bzw. Zugachse und eine vertikale Spiegelebene ( $C_{3v}$ ).

Die zugehörige Gitterstruktur ist in diesem Fall trigonal [ Abb. VI.4 ].

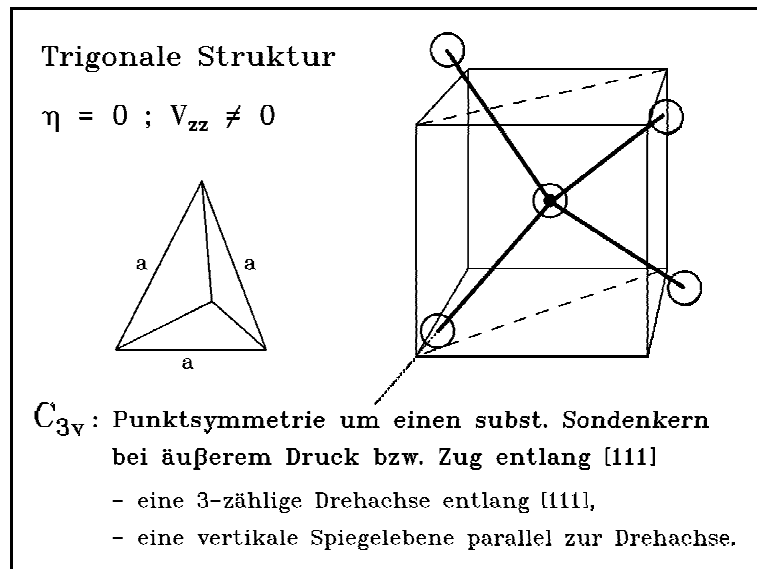


Abb. VI.4 : Die Punktsymmetrie um ein substitutionelles Fremdatom in einem Diamantgitter, bei Druck bzw. Zug entlang einer  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse

Richtet man dagegen die Druck- bzw. Zugachse entlang einer  $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse aus, dann erhält man eine tetragonale Struktur mit drei jeweils nur zweizähligen Drehachsen sowie zwei vertikalen Spiegelebenen ( $D_{2d}$ ).

Die zugehörige Gitterstruktur ist in diesem Fall tetragonal [ Abb. VI.5 ].

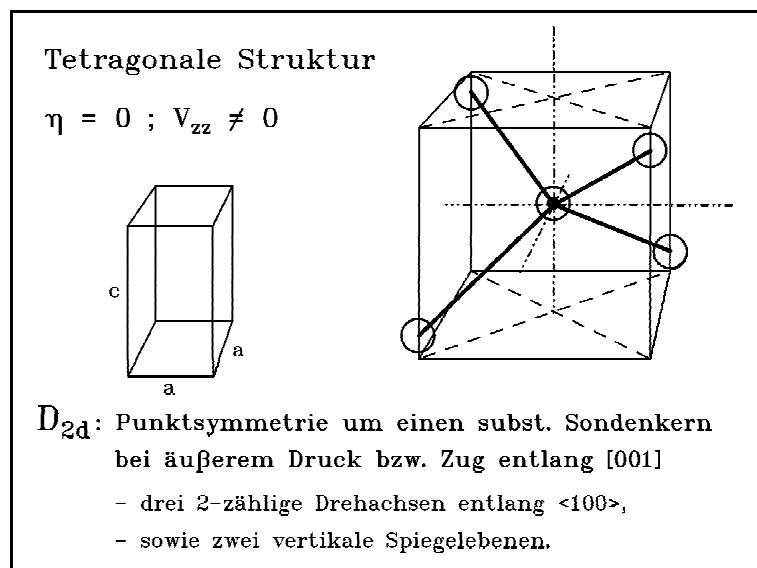


Abb. VI.5 : Die Punktsymmetrie um ein substitutionelles Fremdatom in einem Diamantgitter, bei Druck bzw. Zug entlang einer  $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse

In beiden Fällen bewirkt die Verzerrung einer ursprünglich kubischen Kristallstruktur, daß ein EFG mit axialer Symmetrie am Ort eines Gitteratoms erzeugt wird.

Existiert dagegen keine  $n$ -zählige Drehachse mit  $n > 2$ , so ist der Tensor des EFG dreiachsig ellipsoid, d.h.  $V_{zz} \neq 0$ , wobei  $V_{xx} \neq V_{yy}$  (also  $\eta \neq 0$ ). Die zugehörigen Gitterstrukturen besitzen in diesem Fall nur eine geringe Symmetrie (z.B. rhombisch).

Durch gerichteten Druck bzw. Zug entlang einer  $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse läßt sich die Punktsymmetrie um einen substitutionellen Sondenkern in einem kubischen Diamantgitter soweit verringern, so daß nur noch eine zweizählige Drehachse entlang einer  $\langle 100 \rangle$ -Achse und eine hierzu parallele Spiegelebene übrig bleibt.

[ Abb. VI.6 ]

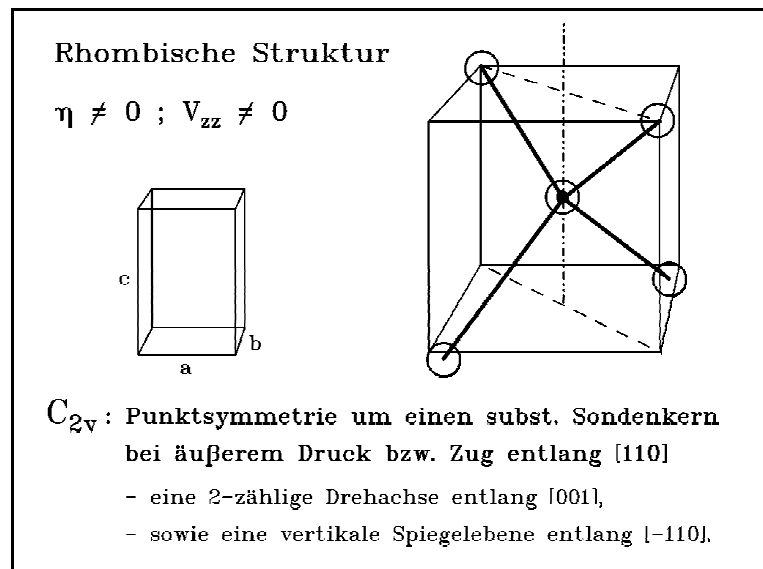


Abb. VI.6: Die Punktsymmetrie um ein substitutionelles Fremdatom in einem Diamantgitter bei Druck bzw. Zug entlang einer  $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse

## VI.2. Silizium unter uniaxialer Zugspannung

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der an den Systemen  $^{111}\text{In}\langle\text{Si}\rangle$  durchgeführten Messungen beschrieben, bei denen durch Anlegen einer äußeren Spannung ein zusätzlicher Gitterfeldgradient erzeugt werden konnte. Die hierzu erforderlichen uniaxialen Druck- und Zugspannungen wurden durch Biegespannungen erzeugt, welche beim Einspannen der Probe in einer Mikrometerschraube entstehen [ vgl. Kap. IV.3 ]. Die Proben wurden so präpariert, daß die Längsrichtung, entlang der gebogen wurde, in Richtung unterschiedlicher Kristallachsen zeigte. Da sich die Sondenkerne nach der Implantation in einer dünnen Schicht dicht unter der Oberfläche befinden, spüren diese entweder eine Druck- oder, wenn man den Kristall in die andere Richtung durchbiegt, eine entsprechende Zugspannung. Auf diese Weise standen für die folgenden Experimente unterschiedliche Zug- und Druckachsen zur Verfügung.

Die erzeugten uniaxialen Spannungen betragen je nach Lage der Zug- bzw. Druckachse zwischen 0.4 und 2.3 kbar, wobei sich das Einspannen der Proben mit Hilfe einer Mikrometerschraube als äußerst schwierig erwies und viel Übung erforderte. So mußte insbesondere beim Zusammendrehen der Mikrometerschraube darauf geachtet werden, daß kein Torsionsmoment auf die Probe übertragen wurde. In keinem Fall läßt sich jedoch bei dieser einfachen Form des Probenhalters verhindern, daß neben dem erwünschten Biegemoment immer ein unerwünschter Staudruck auftritt. Dieser zusätzliche Staudruck war häufig dafür verantwortlich, daß die Proben bereits beim Einspannen zerrissen.

### VI.2.a. Si unter Zugspannung entlang einer $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse

Abbildung VI.8 zeigt die PAC-Spektren, die beobachtet werden, wenn man eine Si-Probe einer uniaxialen Zugspannung entlang einer  $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse aussetzt. Die zugehörigen Fitparameter sind in Tabelle VI.1 enthalten und in Abbildung VI.9 graphisch dargestellt. Werte ohne Fehlerangabe wurden bei der Anpassung nicht variiert.

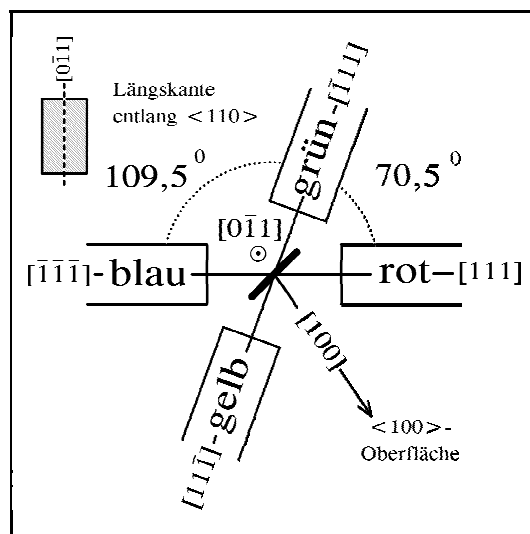


Abb. VI.7 : Orientierung der Detektoren bei Zug- / Druckspannungen entlang  $\langle 110 \rangle$

Die Detektoren zeigten dabei jeweils in Richtung einer  $\langle 111 \rangle$ -Achse, während die Zugachse entlang einer  $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse senkrecht auf der Detektorebene stand [ Abb. VI.7 ].

Der implantationsbedingte Strahlenschaden läßt sich durch Kurzzeittemperung ( RTA ) ausheilen ( 20 Sek. bei  $900^\circ\text{C}$  unter einer  $\text{N}_2$ - Atmosphäre ). Anschließend befinden sich nahezu alle Sondenkerne auf substitutionellen Gitterplätzen, wo sie aufgrund der kubischen Ladungssymmetrie keinem EFG ausgesetzt sind.

Solange keine äußere Spannung angelegt wird, ist daher das beobachtete PAC-Spektrum zunächst völlig ungestört. In Abhängigkeit der von außen angelegten Zugspannung beobachtet man das Auftreten einer zusätzlichen Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_{Q'}$ , welche sich bis zum Zerreißen der Probe in reproduzierbarer Weise variieren läßt. Die spannungsinduzierte Wechselwirkungsfrequenz ist nahezu ungedämpft ( $\delta_i \approx 5\%$ ), und nimmt linear mit der extern angelegten Zugspannung zu.

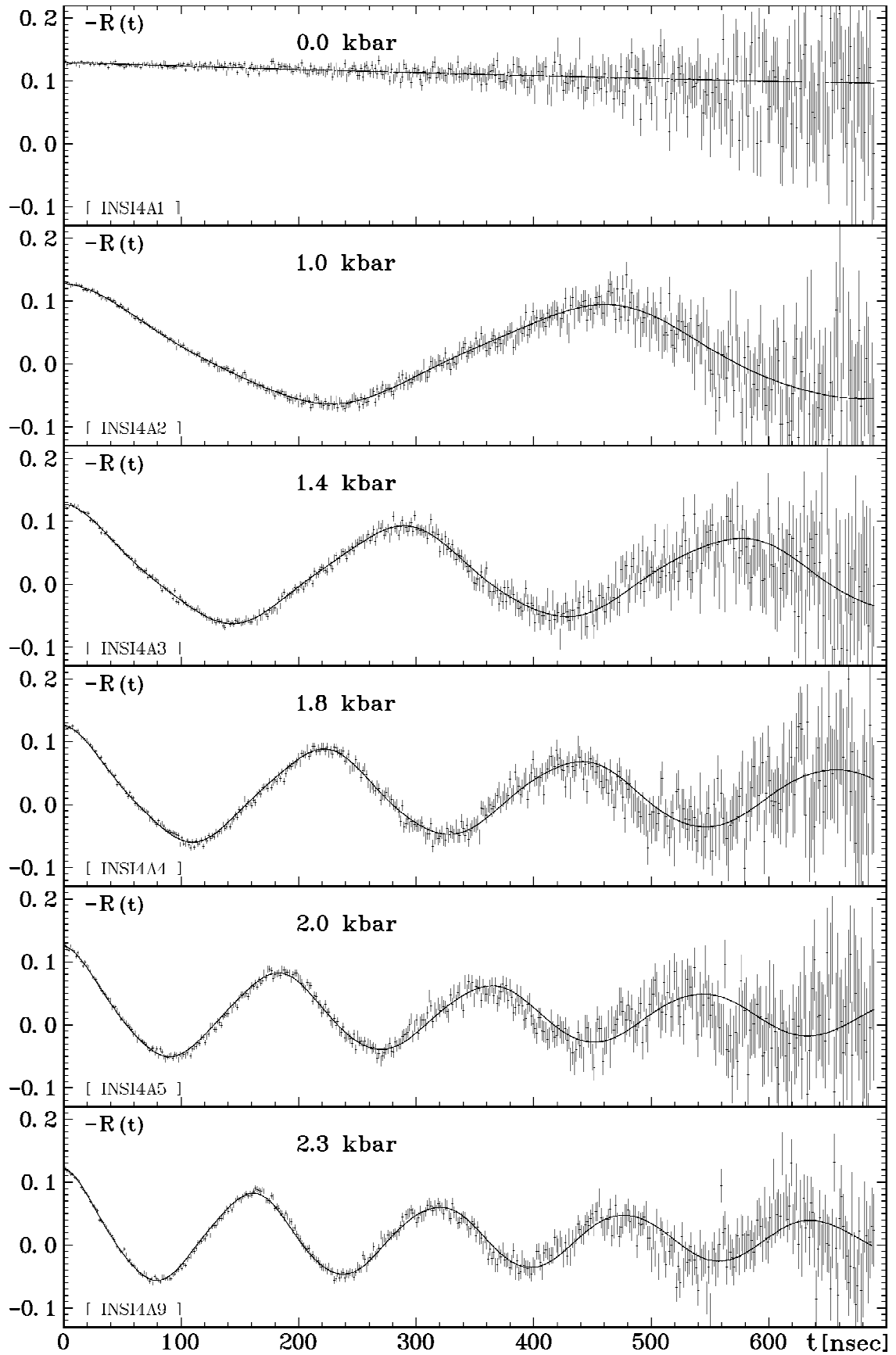


Abb. VI.8 : PAC-Spektren für das System  $^{111}\text{In}\langle\text{Si}\rangle/4a/$  unter einer externen uniaxialen Zugspannung entlang einer  $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse ( $T_m = RT$ )

Zugspannung in [ kbar ]	O 0.00	I 1.02(4)	II 1.44(5)	III 1.79(6)	IV 2.03(7)	V 2.30(8)
$\nu_{Q_0}$ [ MHz ]	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
$\delta_0$ [ MHz ]	0.42(2)	0.8(9)	2.4(9)	6.4(27)	7.8(27)	3.4(6)
$f_0$ [ % ]	100	8(2)	11(1)	15(2)	19(2)	16(1)
$\nu_{Q_1}$ [ MHz ]	-	13.2(2)	21.2(2)	28.5(3)	34.2(4)	38.5(4)
$\delta_1$ [ % ]	-	6.5(6)	4.9(4)	4.4(4)	5.2(4)	4.9(2)
$\eta_1$	-	0.33(2)	0.31(2)	0.26(2)	0.27(2)	0.29(2)
$f_1$ [ % ]	-	92(2)	89(1)	85(2)	81(2)	84(1)
C	- .0048(4)	- .004(1)	- .005(1)	- .005(1)	- .004(1)	- .010(1)
$A_{22}^{\text{app.}}$	- 0.134	- 0.134	- 0.134	- 0.134	- 0.134	- 0.134

$$[ \sigma_0^{\text{eff.}} : 0.0000 \quad / \quad \sigma_1^{\text{eff.}} : 0.7885 \quad / \quad \sigma_2^{\text{eff.}} : 0.0000 \quad / \quad \sigma_3^{\text{eff.}} : 0.1003 \quad ]$$

Tab. VI.1 : Fitergebnisse der Meßreihe  $^{111}\text{In}\langle\text{Si}\rangle/4a/$  unter Zugspannung entlang  $\langle 110 \rangle$

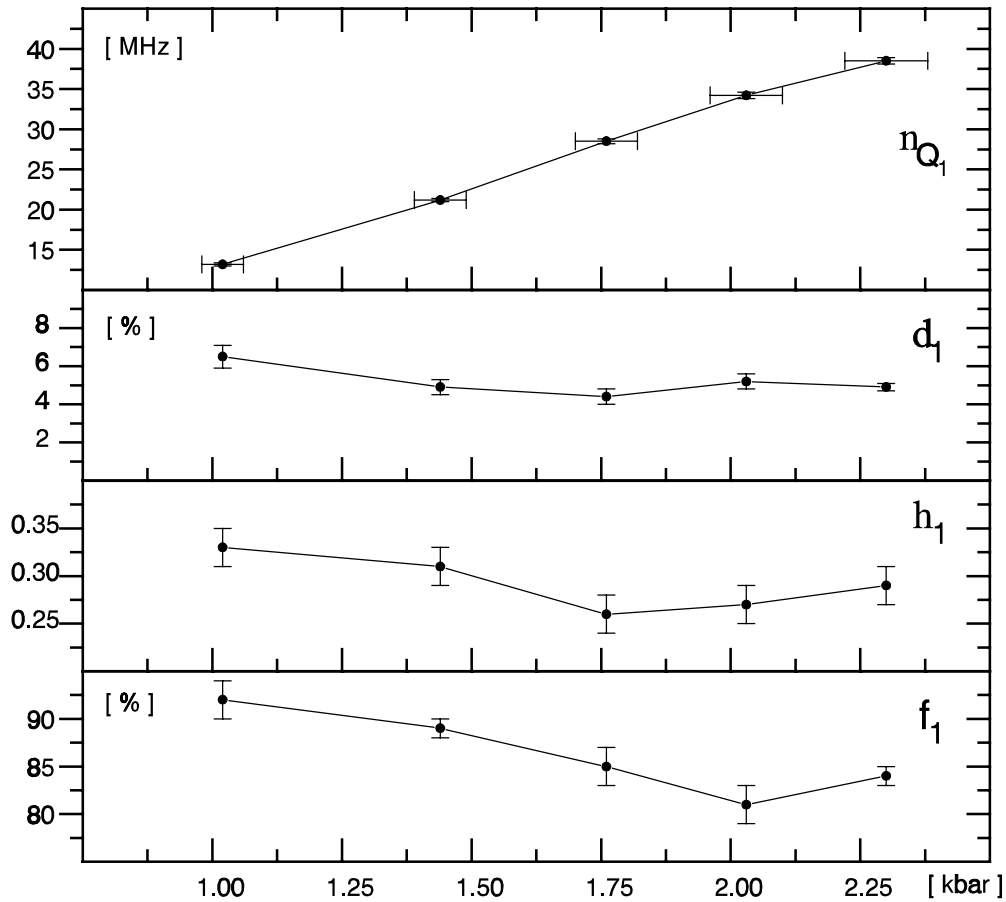


Abb. VI.9 : Graphische Darstellung der Fitparameter für die Meßreihe  $^{111}\text{In}\langle\text{Si}\rangle/4a/$

Der spannungsinduzierte EFG ist bei einer  $\langle 110 \rangle$ -Zugachse offensichtlich jedoch nicht mehr axialsymmetrisch, der beobachtete Asymmetrieparameter liegt bei  $\eta \approx 0,3$ . Tatsächlich erwartet man für eine Verzerrung des kubischen Gitters entlang einer  $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse das Auftreten eines nichtaxialsymmetrischen EFG ( $\eta \neq 0$ ) [ vgl. Kap. VI.1 ].

Der Anteil der Sondenkerne, welche eine einheitliche Wechselwirkung mit diesem spannungsinduzierten EFG zeigen, liegt bei etwa 85%. Der Rest der Sondenkerne befindet sich in einer Umgebung, die durch schwache, uneinheitliche elektrische Feldgradienten charakterisiert werden kann.

### VI.2.b. Si unter Zugspannung entlang einer $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse

Für den Fall einer externen Zugspannung entlang der  $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse wurde eine Probengeometrie gewählt, bei der die Detektoren entlang einer  $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse ausgerichtet sind.

Die Längskante, entlang der gebogen wird, liegt also in Richtung einer  $\langle 100 \rangle$ -Achse und steht senkrecht auf der Detektorebene. Die  $\langle 100 \rangle$ -Probenoberfläche zeigt dabei genau zwischen die unter  $90^\circ$  angeordneten Detektoren. Bei dieser Probengeometrie stehen dann alle Detektoren entlang einer  $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse [ Abb. VI.10 ].

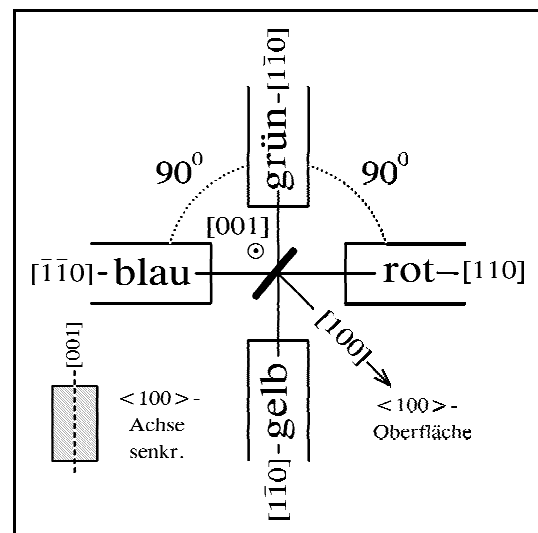


Abb. VI.10 : Orientierung der Detektoren bei Zug- / Druckspannung entlang  $\langle 100 \rangle$

Wie die PAC-Spektren in Abbildung VI.11 deutlich zeigen, läßt sich auch bei einer Zugachse entlang der  $\langle 100 \rangle$ -Kristallrichtung ein spannungsinduzierter Gitterfeldgradient erzeugen. So wie man es für eine tetragonal verzerrte Einheitszelle erwartet, ist der beobachtete EFG in diesem Fall tatsächlich axialsymmetrisch ( $\eta_1 = 0$ ). Die geringfügigen Abweichungen der Fitkurve von den gemessenen Spektren lassen sich durch eine leichte Fehlorientierung der Probe erklären. Die theoretisch berechneten  $\sigma_n^{eff}$ -Koeffizienten basieren auf der in Abbildung VI.10 dargestellten Probe-Detektor-Geometrie und wurden bei der Auswertung nicht angepaßt.

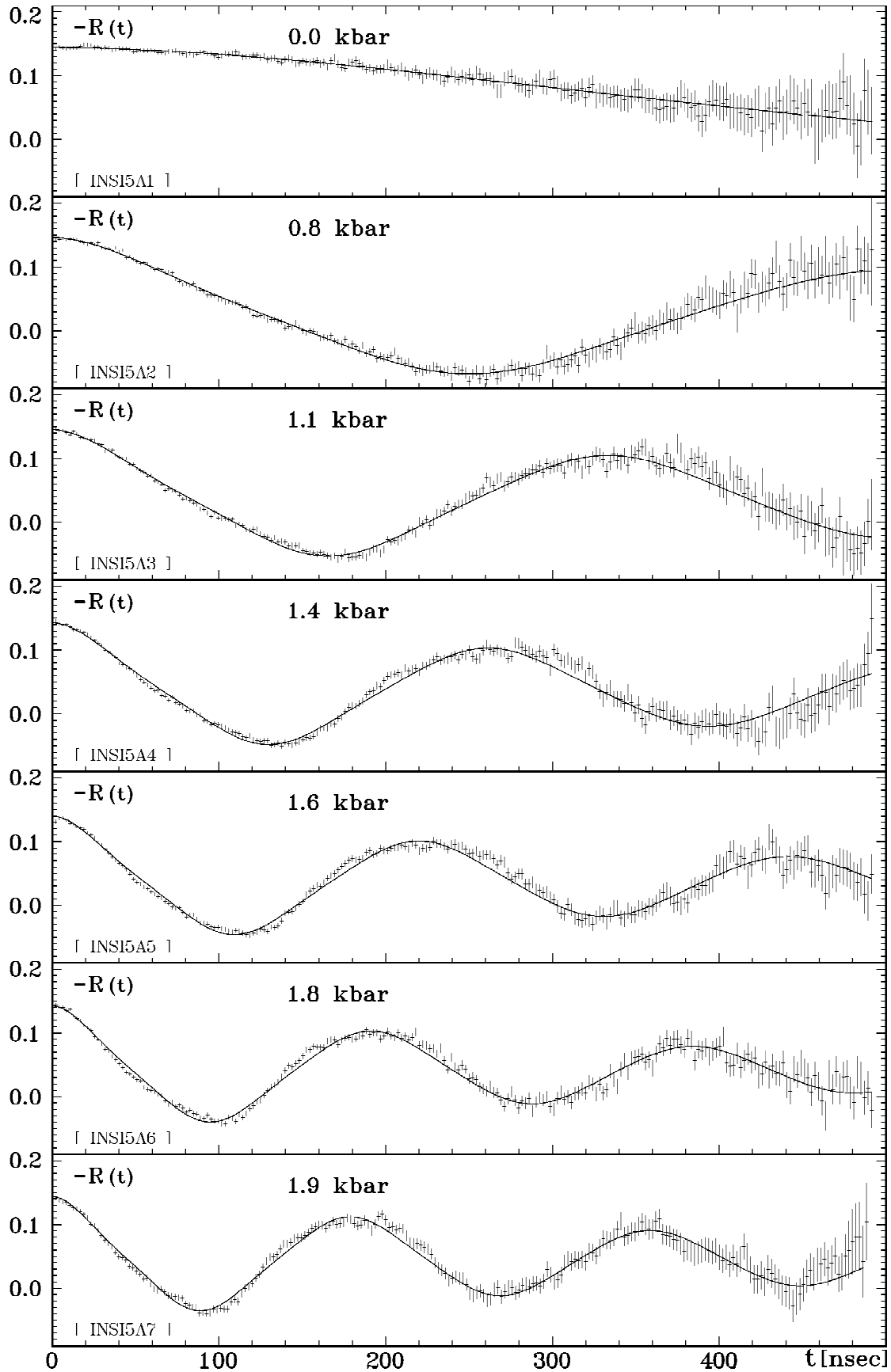


Abb. VI.11 : PAC-Spektren für das System  $^{111}\text{In}\langle\text{Si}\rangle/5a/$  unter einer externen uniaxialen Zugspannung entlang einer  $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse ( $T_m = RT$ )



Zugspannung in [ kbar ]	O 0.00	I 0.79(3)	II 1.12(4)	III 1.37(5)	IV 1.58(6)	V 1.77(6)	VI 1.94(7)
$\nu_{Q_0}$ [ MHz ]	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
$\delta_0$ [ MHz ]	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
$f_0$ [ % ]	17(8)	19.4(7)	26.9(6)	29.2(7)	30.8(7)	32.0(8)	34.7(9)
$\nu_{Q_1}$ [ MHz ]	3.1(2)	13.1(1)	19.8(1)	25.3(1)	30.0(1)	34.5(1)	37.0(1)
$\delta_1$ [ % ]	7.0	7.8(6)	6.4(4)	6.6(4)	6.7(4)	6.9(4)	5.5(3)
$\eta_1$	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
$f_1$ [ % ]	83(8)	80.6(7)	73.1(6)	70.8(7)	69.2(7)	68.0(8)	65.3(9)
C	0.005(1)	0.003(1)	0.005(1)	0.007(1)	0.009(1)	0.007(1)	0.006(1)
$A_{22}^{\text{app.}}$	- 0.150	- 0.150	- 0.150	- 0.150	- 0.150	- 0.150	- 0.150

$$[ \sigma_0^{\text{eff.}} : 0.0000 \quad / \quad \sigma_1^{\text{eff.}} : 0.9299 \quad / \quad \sigma_2^{\text{eff.}} : 0.0000 \quad / \quad \sigma_3^{\text{eff.}} : 0.0701 \quad ]$$

Tab. VI.2 : Fitergebnisse der Meßreihe  $^{111}\text{In}\langle\text{Si}\rangle/5a/$  unter Zugspannung entlang <100>

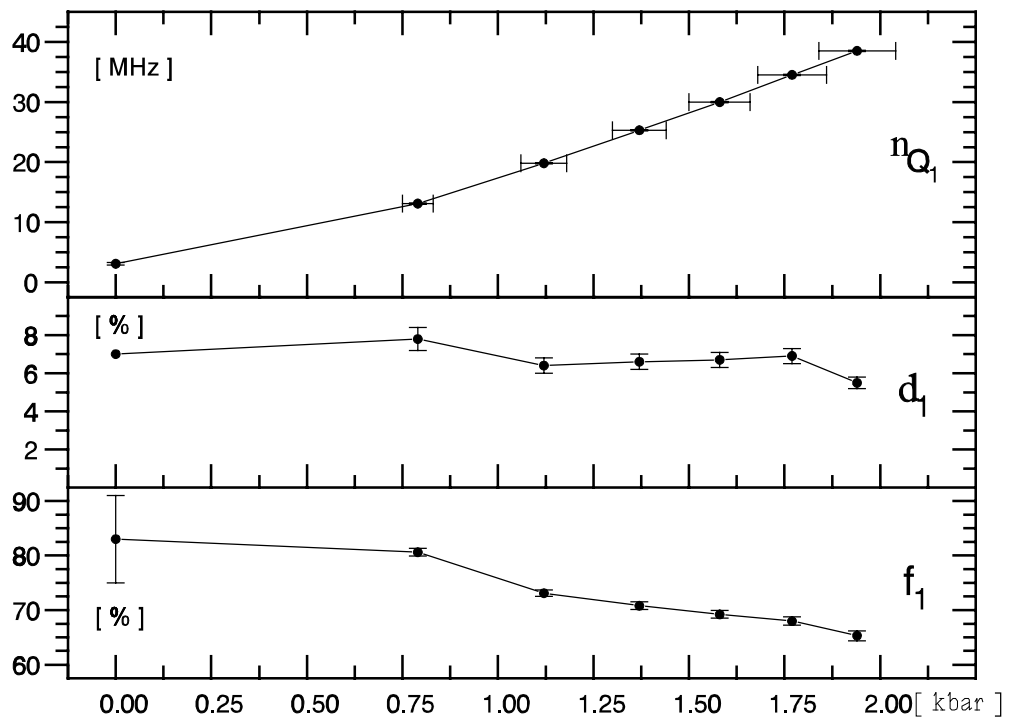


Abb. VI.12 : Graphische Darstellung der Fitparameter für die Meßreihe  $^{111}\text{In}\langle\text{Si}\rangle/5a/$

VI.2.c. Si unter Zugspannung entlang einer  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse

Setzt man einen Si-Einkristall einer uniaxialer Zugspannung entlang der  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse aus, lassen sich die folgenden PAC-Spektren [ Abb. VI.13 ] beobachten.

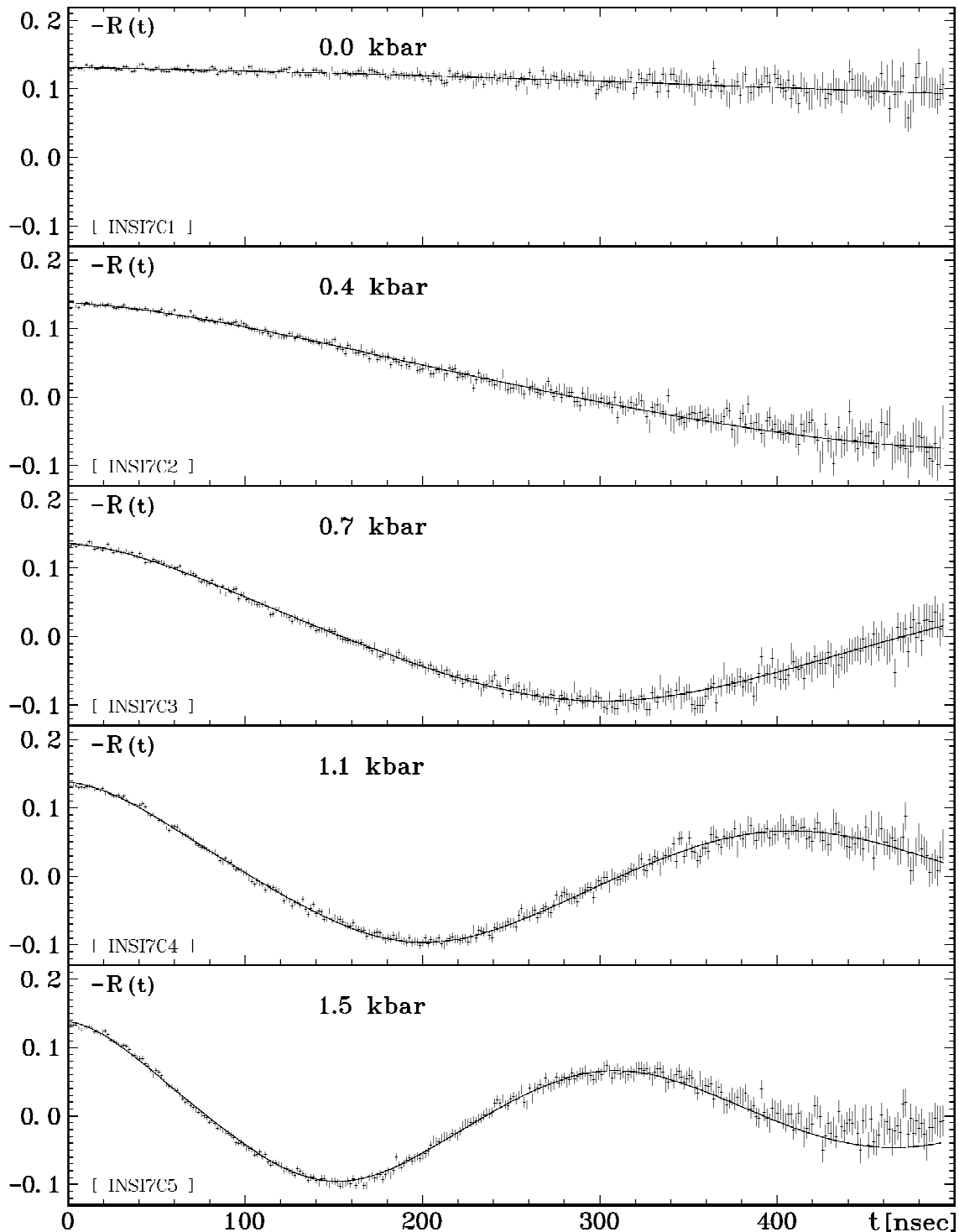


Abb. VI.13 : PAC-Spektren für das System  $^{111}\text{In}\langle\text{Si}\rangle/7c/$  unter einer externen uniaxialen Zugspannung entlang einer  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse (  $T_m = RT$  )

Bei dieser Meßreihe wurde erstmals ein neuer Probenhalter [ Abb. IV.10/11 ] eingesetzt, bei dem die Biegespannungen durch ein seitliches Auslenken der Probe erzeugt werden. Der unerwünschte Staudruck, der beim Einspannen der Probe in einer Mikrometerschraube zusätzlich auftritt [ Abb. IV.13/14 ], kann auf diese Weise vermieden werden.

Die Probengeometrie wurde so gewählt, daß die  $\langle 111 \rangle$ -Spannungsachse bei einer üblichen  $90^\circ$ -Orientierung der Detektoren senkrecht auf der Detektorebene steht. Die implantierte  $\langle 110 \rangle$ -Oberfläche zeigt dabei zwischen die Detektoren [ Abb. VI.14 ].

Leider stehen die Detektoren in diesem Fall nicht entlang gleichindizierter Kristallachsen. Die Berechnung der theoretischen  $\sigma_n^{\text{eff}}$ -Koeffizienten erfordert daher einen größeren Rechenaufwand [ Kap. XI.2 ].

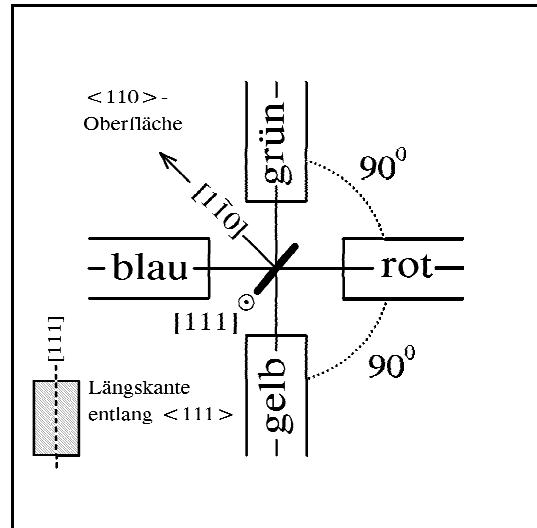


Abb. VI.14 : Orientierung der Detektoren bei Druck- / Zugspannung entlang  $\langle 111 \rangle$

Nach dem Ausheilen des implantationsbedingten Strahlenschadens beobachtet man zunächst wieder ein praktisch ungestörtes PAC-Spektrum. Wird nun eine externe, uniaxiale Zugspannung in  $\langle 111 \rangle$ -Richtung angelegt, so läßt sich wiederum eine mit zunehmender Spannung ansteigende Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_{Q1}$  beobachten. Die angefitzten Parameter sind in Tabelle VI.3 zusammengefaßt.

Zugspannung in [ kbar ]	O	I	II	III	IV
$\nu_{Q1}$ [ MHz ]	0.00	0.37(1)	0.73(3)	1.10(4)	1.46(5)
$\delta_1$ [ % ]	1.09(9)	5.82(3)	10.67(3)	16.08(3)	21.23(4)
$\eta_1$	30(6)	17.9(7)	12.4(3)	11.7(2)	11.4(2)
$f_1$ [ % ]	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C	100	100	100	100	100
$A_{22}^{\text{app.}}$	- 0.0066(4)	- 0.0004(4)	- 0.0016(3)	- 0.0006(3)	- 0.0002(3)

$$[ \sigma_0^{\text{eff.}} : 0.0000 \quad / \quad \sigma_1^{\text{eff.}} : 0.9631 \quad / \quad \sigma_2^{\text{eff.}} : 0.0000 \quad / \quad \sigma_3^{\text{eff.}} : 0.0369 ]$$

Tab. VI.3 : Fitergebnisse der Meßreihe  $^{111}\text{In}\langle\text{Si}\rangle/7c/$  unter Zugspannung entlang  $\langle 111 \rangle$

Bei dem neuen Probenhalter, mit dem konstruktionsbedingt ausschließlich Biegespannungen erzeugt werden, liegt der Anteil der Sondenkerne, die einer einheitlichen Wechselwirkung ausgesetzt sind, bei 100%. Spannt man dagegen die Probe in einer Mikrometerschraube ein, so befinden sich stets ein Teil der Sondenkerne ( 15 - 30% ) in einer Umgebung, die durch schwache uneinheitliche Feldgradienten beschrieben werden kann. Der beim Einspannen der Proben in einer Mikrometerschraube [ vgl. Abb. IV.12 ] stets auftretende Staudruck erzeugt möglicherweise zusätzliche, uneinheitliche Materialspannungen, denen ein Teil der Sondenkerne ausgesetzt ist.

Wie man es für eine trigonale Verzerrung einer kubischen Einheitszelle bei Zugspannungen entlang der  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse erwartet [ vgl. Kap. IV.1 ], ist der resultierende EFG in diesem Fall axialsymmetrisch, d.h.  $\eta_1 = 0$ .

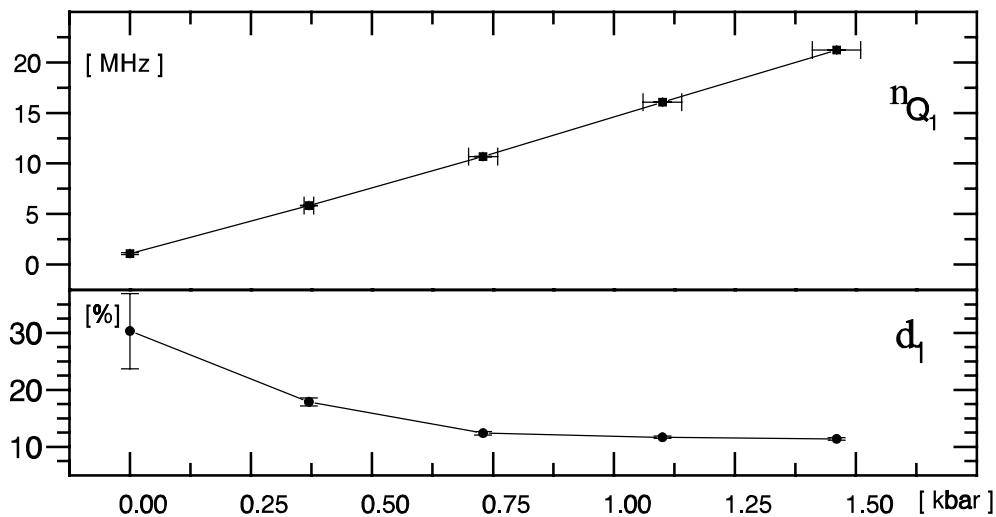


Abb. VI.15 : Graphische Darstellung der Fitparameter für die Meßreihe  $^{111}\text{In}\langle\text{Si}\rangle/7c/$

Stellt man die Fitparameter graphisch dar [ Abb. VI.15 ], so erkennt man deutlich, daß auch bei einer  $\langle 111 \rangle$ -Spannungsachse ein linearer Zusammenhang zwischen der spannungsinduzierten Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_{Q_1}$  und der von außen angelegten, uniaxialen Zugspannung  $\sigma$  besteht.

Mit dem Anwachsen der angelegten, uniaxialen Zugspannung  $\sigma$  unterliegen die Sondenkerne einem immer einheitlicheren Spannungszustand, was sich in der Abnahme der Dämpfung  $\delta_1$  bemerkbar macht.

Daß auch in dem Fall, wenn keine externe Spannung angelegt wird, eine - wenn auch geringe - Wechselwirkungsfrequenz auftritt, kann als Indiz dafür gewertet werden, daß sich die Probe auch ohne äußeren Einfluß in einem Spannungszustand befindet. Eine geringfügige Abweichung von der kubischen Ladungssymmetrie eines Diamantgitters, als Folge der Implantation, könnte durch die Sondenkerne selbst hervorgerufen werden.

### VI.3. Die Orientierung des spannungsinduzierten EFG

Nachdem die vorhergehenden Messungen gezeigt hatten, daß es in einem kubischen Si-Kristall möglich ist, einen spannungsinduzierten EFG zu erzeugen, wurden die folgenden Orientierungsmessungen durchgeführt. Diese sollten Aufschluß über die räumliche Orientierung der Hauptachse des zugrundeliegenden EFG-Tensors liefern.

Zu diesem Zweck wurde eine Si-Probe auf einem PVC-Rohr ( Krümmungsradius 40mm ) aufgespannt und auf diese Weise eine Biegespannung (  $\sigma = 2,11(7)$  kbar ) entlang einer  $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse erzeugt. Der verwendete Probenhalter [ vgl. Abb. IV.9 ] war so dimensioniert, daß unterschiedliche Orientierungen der Zugachse relativ zu den unter  $90^\circ$  angeordneten Detektoren realisiert werden konnten.

Bei einer Orientierung der Zugachse senkrecht zur Detektorebene [ Abb. VI.16 ] zeigte sich bereits bei früheren Messungen, daß die Grundfrequenz  $\omega_1$  in den PAC-Spektren besonders deutlich hervortritt. Diese Beobachtung legte bereits die Vermutung nahe, daß der spannungsinduzierte Gitterfeldgradient in Richtung der Spannungsachse orientiert ist.

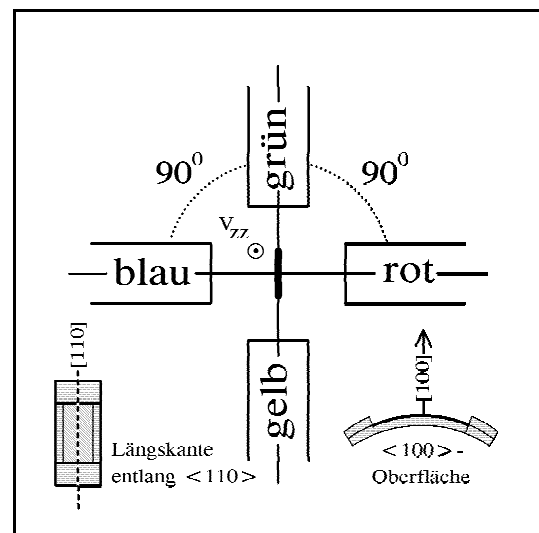


Abb. VI.16 : Orientierung der Spannungsachse senkrecht zur Detektorebene

Besonders deutlich zeigt sich die Orientierung des EFG, wenn die Zugachse in der Detektorebene liegt und mit den Detektoren jeweils einen Winkel von  $45^\circ$  bildet [ Abb. VI.17 ]. In dieser speziellen, sogenannten Raghavan-Geometrie wird das PAC-Spektrum maßgeblich durch die erste Oberfrequenz  $\omega_2$  charakterisiert [ RAG 74 ].

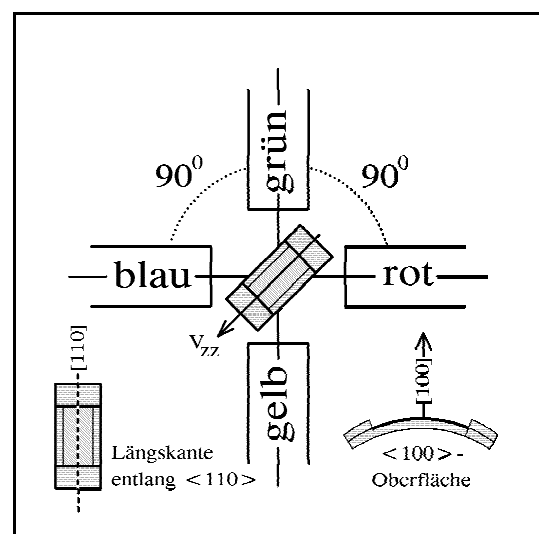


Abb. VI.17 : Orientierung der Spannungsachse unter  $45^\circ$  zu den Detektoren

Liegt die Zugachse in Richtung der  $180^\circ$ -Detektoren und zeigt dabei direkt auf den jeweiligen START-Detektor [ Abb.VI.18 ], so beobachtet man für die folgenden START/STOP - Kombinationen ( rot/blau | rot/grün bzw. blau/rot | blau/gelb ) keine Modulation in den PAC-Spektren. Für die zweite Detektorkombination ( gelb/grün | gelb/blau bzw. grün/gelb | grün/rot ) schließt der START-Detektor einen Winkel von  $90^\circ$  mit der Richtung der Zugachse ein und man beobachtet erneut die Grundfrequenz  $\omega_1$ , allerdings mit einer auf die Hälfte verminderten Amplitude.

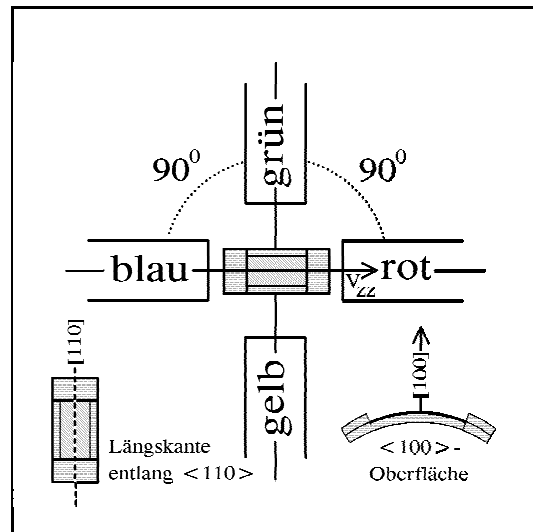


Abb. VI.18 : Orientierung der Spannungsumgebung ( unter  $0^\circ$  ) in Richtung der Detektoren

Abbildung VI.19 zeigt zunächst die gemessenen PAC-Spektren, die sich bei den verschiedenen gewählten Orientierungen ergeben, die zugehörigen Fitparameter sind in Tabelle VI.4 aufgeführt.

Die theoretische Störfunktion läßt sich für verschiedene Orientierungen des EFG bezüglich der Kristallachsen berechnen [ Kap. IX.1 ]. Vergleicht man nun das beobachtete Verhalten mit den theoretisch berechneten Anisotropiekoeffizienten  $\sigma_n^{eff}$ , so kann zweifelsfrei eine Orientierung des EFG in Richtung der Zugachse abgeleitet werden. Die Hauptkomponente  $V_{zz}$  des EFG-Tensors zeigt also eindeutig entlang der äußeren Zug- bzw. Druckspannungsumgebung.

Die für eine EFG-Orientierung parallel zur Spannungsumgebung theoretisch berechneten  $\sigma_n^{eff}$ -Koeffizienten sind in Tabelle VI.4 angegeben und auch als Balkendiagramme in Abbildung VI.19 enthalten. Die gemessenen Anisotropiekoeffizienten  $\sigma_n^{exp}$  sind in dieser Abbildung als dreieckige Symbole dargestellt und zeigen deutlich die hervorragende Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment.

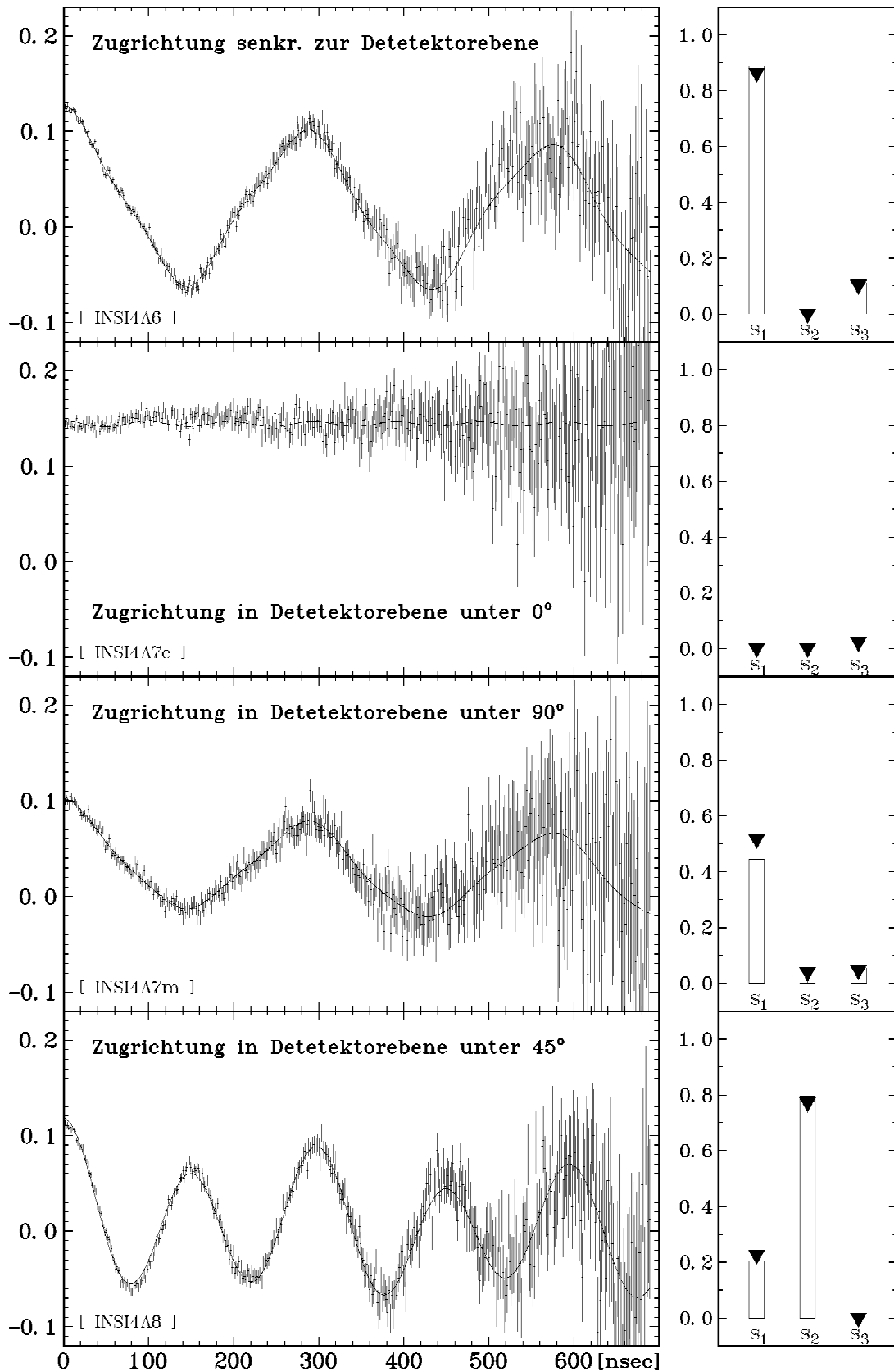


Abb. VI.19 : PAC-Spektren für das System  $^{111}\text{In}\langle\text{Si}\rangle/4a/$  unter Zugspannung längs einer  $\langle 110 \rangle$ -Achse bei verschiedenen Detektororientierungen. Die Balkendiagramme rechts zeigen die zugehörigen theoretisch berechneten  $\sigma_n^{\text{eff}}$ -Koeffizienten, die dreieckigen Symbole geben die gemessenen Anisotropiekoeffizienten  $\sigma_n^{\text{exp}}$  wieder.

Parameter, welche beim Fit festgehalten wurden		Verlauf der Zugspannungsachse				
			senkrecht zur Detektorebene	innerhalb der Detektorebene unter		
				0°	90°	45°
$\nu_{Q_0}$ [ MHz ]	0.0	$\sigma_1^{\text{eff}}$	0.863(5)	0.000(5)	0.516(6)	0.227(5)
$\delta_0$ [ MHz ]	2.0	$\sigma_2^{\text{eff}}$	0.000(5)	0.000(5)	0.039(6)	0.771(6)
$f_0$ [ % ]	30	$\sigma_3^{\text{eff}}$	0.104(5)	0.023(5)	0.047(6)	0.000(6)
$\nu_{Q_i}$ [ MHz ]	22.5	C	-0.007(1)	0.013(1)	-0.032(1)	-0.016(1)
$\delta_1$ [ % ]	1	theor. $\sigma_n^{\text{eff}}$ -Koeffizienten für einen EFG $\parallel$ zur Zugachse				
$\eta_1$	0.2	$\sigma_1^{\text{eff}}$	0.8871	0.0000	0.4436	0.2043
$f_1$ [ % ]	70	$\sigma_2^{\text{eff}}$	0.0000	0.0000	0.0000	0.7957
$A_{22}^{\text{app.}}$	-134	$\sigma_3^{\text{eff}}$	0.1129	0.0000	0.0564	0.0000

Tab. VI.4 : Fitergebnisse der Orientierungsmessung, durchgeführt am System  $^{111}\text{In}\langle\text{Si}\rangle/4a/$  unter Zugspannung entlang einer  $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse,  $T_m = \text{RT}$

Die Parameter (  $f_i$ ,  $\nu_{Q_i}$ ,  $\delta_i$ ,  $\eta_1$  / mit  $i=0$  bzw. 1 ) wurden bei der Auswertung der Meßergebnisse jeweils festgehalten. Als freie Fitparameter wurden lediglich die relativen Amplituden  $\sigma_n^{\text{eff}}$  sowie eine zusätzliche additive Konstante C berücksichtigt.

Die leichte Verschiebung der gemessenen Spektren läßt sich sowohl durch die unterschiedliche probeninterne  $\gamma$ -Absorption als auch durch eine leichte Dejustierung der Probe aus dem Zentrum der Detektoranordnung erklären.

Eine Fourieranalyse der gemessenen R-Wert Spektren [ Abb. VI.20 ] liefert eine weitere Form der Darstellung für die relativen Amplituden  $\sigma_n^{\text{exp}}$  als Funktion der Wechselwirkungsfrequenz. An der Fouriertransformierten erkennt man deutlich die nicht-axiale Symmetrie des zugehörigen EFG. Im Fall axialer Symmetrie (  $\eta_i = 0$  ) sollten die auftretenden Frequenzen im Verhältnis  $\omega_1:\omega_2:\omega_3=1:2:3$  stehen, für das Frequenzverhältnis  $\omega_1:\omega_2 = 1,9$  erhält man  $\eta = 0,2$ .

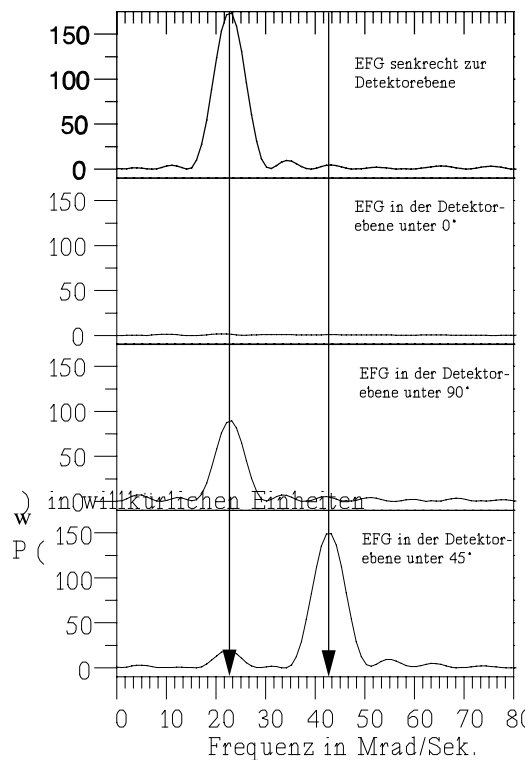


Abb. VI.20 : Fourieranalyse der Daten



## VI.4. Berechnung des EFG nach dem Punktladungsmodell

Der am Kernort wirksame elektrische Feldgradient läßt sich nicht auf direktem Wege berechnen. Zur näherungsweisen Berechnung spaltet man daher üblicherweise den EFG in zwei Komponenten auf, den Gitteranteil  $V_{zz}^{lat}$  und den elektronischen Anteil  $V_{zz}^{el}$ .

Der Gitteranteil resultiert aus den z-fach positiv geladenen Ionen des gesamten Kristallgitters, wobei die zur Sicherstellung der Ladungsneutralität notwendigen Leitungselektronen einen homogenen Ladungshintergrund bilden. Der elektronische Anteil wird durch die nichtsphärische Verteilung der Leitungselektronen in der unmittelbaren Umgebung des Sondenkerns gebildet.

Die durch diese Felder hervorgerufene Deformation der abgeschlossenen Elektronenschale des Sondenkerns läßt sich durch Einführung der sogenannten Sternheimerfaktoren  $\gamma_{\infty}$  und  $R$  berücksichtigen [ STE 67, RAG 75 ].

Für den resultierende Feldgradient erhält man dann:

$$V_{zz}^{eff} = (1 - \gamma_{\infty}) \cdot V_{zz}^{lat} + (1 - R) \cdot V_{zz}^{el} \quad (\text{VI.1})$$

Für die Berechnung des Gitteranteils des EFG mit Hilfe des Punktladungsmodells muß das Diamantgitter zunächst in rechtwinklige Quader zerlegt werden, welche dann durch Translation das gesamte Gitter aufbauen [ ASS 85 ].

Das Raumgitter einer Diamantstruktur [ Abb. VI.2 ] ist kubisch flächenzentriert und besitzt eine zweiatomigen Basis [ (0,0,0) und (1/4,1/4,1/4) ]. Diese Struktur ist das Ergebnis einer gerichteten kovalenten  $sp_3$ - Hybridisierungsbindung, was die extreme Härte erklärt, obwohl das Diamantgitter verhältnismäßig leer ist. Der maximale Raumanteil, der von dichten Kugeln ausgefüllt werden kann, beträgt nämlich nur 34 Vol.% und beträgt damit nur etwa 46% der Raumauffüllung einer dichtesten Kugelpackung. Ein solches Diamantgitter läßt sich in vier Quader zerlegen, welche dann durch Translation das gesamte Gitter aufbauen. Die Kantenlängen (  $a/\sqrt{2}$ ,  $a/\sqrt{2}$ ,  $a$  ) jeder dieser Quader bilden dann die Basisvektoren des Gitters.

Zur Berechnung der Gittersumme benötigt das entsprechende FORTRAN-Programm als Eingabedaten die drei Basisvektoren des Gitters, die Koordinaten des gewählten Punktes und einen Konvergenzparameter  $D$ , der sich wie folgt berechnet [ EWA 21 ]:

$$D = 2 \cdot (a/\sqrt{2} \cdot a/\sqrt{2} \cdot a)^{\frac{2}{3}} = \sqrt[3]{2} \cdot a^2 \quad (\text{VI.2})$$

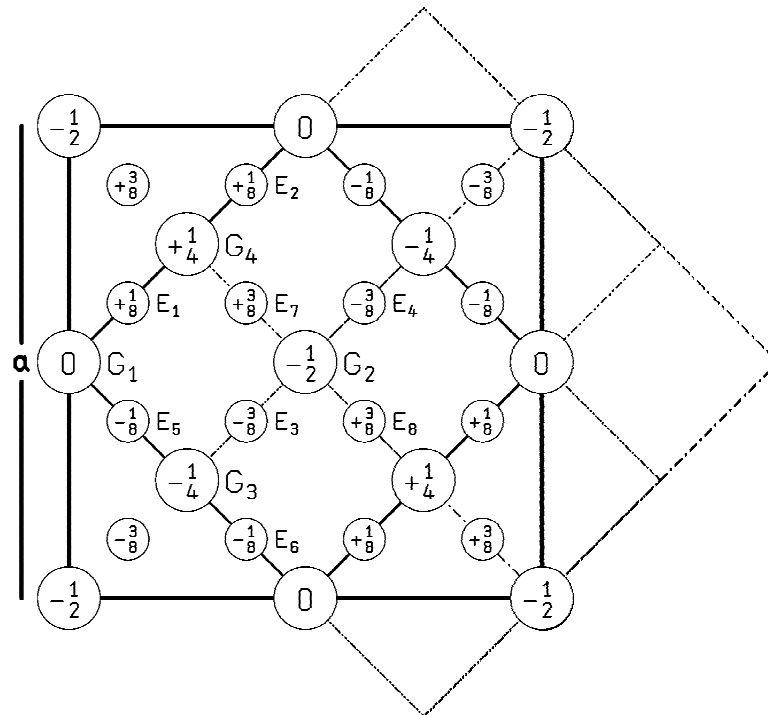


Abb. VI.21 : Die Orte der Atome in der Einheitszelle einer Diamantstruktur, projiziert auf die Mittelebene ( Höhe der Atome in Bruchteilen der Kantenlänge )

Legt man den Ursprung in das Zentrum der Elementarzelle, dann erhält man für die vier Untergitter  $G_i$  der Diamantstruktur [ Abb. VI.21 ] die folgenden Basisvektoren:

$$\begin{aligned}\vec{a} &= (a/2, -a/2, 0) \\ \vec{b} &= (a/2, a/2, 0) \\ \vec{c} &= (0, 0, a)\end{aligned}\quad (\text{VI.3})$$

Bei Raumtemperatur (  $20^\circ\text{C}$  ) beträgt die Gitterkonstante [ LAN 82 ] für Germanium  $a = 5.6574 \text{ \AA}$  und für Silizium  $a = 5.4303 \text{ \AA}$ .

Ausgehend vom Zentrum der Elementarzelle findet man die Eckpunkte der orthogonalen Untergitter  $G_i$  auf den folgenden Koordinaten [ Tab. VI.5 ].

Gitter	$\vec{a}$	$\vec{b}$	$\vec{c}$	Ladung
$G_1$	-1/2	-1/2	0	+ 4
$G_2$	0	0	-1/2	+ 4
$G_3$	0	-1/2	-1/4	+ 4
$G_4$	-1/2	0	1/4	+ 4

Tab. VI.5 : Lage der Eckpunkte der Untergitter einer Diamantstruktur



Abb. VI.22 : Dichteverteilung der Valenzelektronen um eine neutrale Einzeleerstelle in einem idealen, unrelaxiertem Si-Gitter [ LOU 76 ]

Theoretische Berechnungen der Dichteverteilung von Valenzelektronen in Halbleiterkristallen, wie sie für Silizium durchgeführt wurden [ LOU 76, BAR 79 ], zeigen, daß die Elektronendichte in der Mitte zwischen zwei Gitterplätzen, die sich in nächster Nachbarschaft zueinander befinden und über eine gemeinsame Bindung verfügen, ein sehr gut lokalisiertes Maximum aufweist.

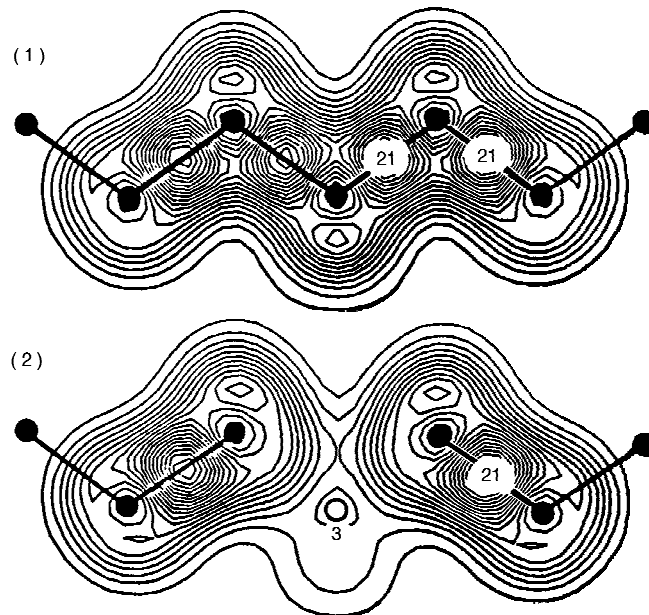


Abb. VI.23 : Elektronendichteverteilung längs einer  $\langle 110 \rangle$ - Atomkette in einem (1) ungestörtem Si-Gitter und (2) in der Umgebung einer Leerstelle [ BAR 79 ]

Im Punktladungsmodell lassen sich die gut lokalisierten Bindungselektronen dadurch berücksichtigen, daß man für die Gitterionen eine Ladung von  $Z = +4$  annimmt, und ferner zwischen allen Atomen, die über eine gemeinsame Bindung verfügen, Ladungen für die dort lokalisierten Elektronen einfügt. Da jeweils zwei Elektronen an einer solchen Bindung beteiligt sind, wurde für die Ladung  $Z = -2$  gewählt, was wiederum die Ladungsneutralität des Gitters gewährleistet. In diesem einfachen Modell besetzen die Elektronenladungen dann die in Tabelle VI.6 angegebenen Untergitter  $E_i$ .

Entfernt man dagegen ein Gitteratom, dann brechen in der Umgebung dieser Einzeleerstelle alle Bindungen zu den Nachbaratomen auf [ vgl. Abb. VI.22/23 ], wobei sich die verbleibenden Elektronenladungen weitgehend kugelsymmetrisch um die übrigen Atome verteilen.

Gitter	$\vec{a}$	$\vec{b}$	$\vec{c}$	Ladung
E <sub>1</sub>	-1/2	-1/4	1/8	- 2
E <sub>2</sub>	-1/2	1/4	1/8	- 2
E <sub>3</sub>	0	-1/4	-3/8	- 2
E <sub>4</sub>	0	1/4	-3/8	- 2
E <sub>5</sub>	-1/4	-1/2	-1/8	- 2
E <sub>6</sub>	1/4	-1/2	-1/8	- 2
E <sub>7</sub>	-1/4	0	3/8	- 2
E <sub>8</sub>	1/4	0	3/8	- 2

Tab. VI.6 : Lage der lokalisierten Bindungselektronen

Unter dem Einfluß einer von außen angelegten uniaxialen Druck- bzw. Zugspannung wird das kubische Kristallgitter verzerrt. Für einen regulären Gitterplatz, der ursprünglich eine kubische Ladungssymmetrie besaß, resultiert aus der Verzerrung des Gitters das Auftreten eines elektrischen Feldgradienten. Die Stärke und Symmetrie dieses spannungsinduzierten Gitterfeldgradienten hängt unmittelbar von der Verzerrung des Gitters ab und läßt sich in einem einfachen Punktladungsmodell dadurch berechnen, daß man die verzerrungsbedingten Verrückungen der Atomrümpfe und der dazwischenliegenden Bindungselektronen entsprechend berücksichtigt.

Die Zerlegung des Kristallgitters in die entsprechenden Untergitter G<sub>i</sub> bzw. E<sub>i</sub> bleibt auch für das verzerrte Gitter erhalten. Unter dem Einfluß einer äußeren Spannung verschieben sich lediglich die Basisvektoren  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  und  $\vec{c}$ , durch welche die Untergitter aufgespannt werden. Die verzerrten Basisvektoren erhält man durch Anwendung des Verzerrungstensors  $\underline{\epsilon}$ :

$$\underline{x}' = (\underline{1} + \underline{\epsilon}) \cdot \underline{x} = \underline{x} + \underline{\Delta x} \quad \text{mit } \underline{1} : \text{Einheitsmatrix} \quad (\text{VI.4})$$

wobei  $\underline{\Delta x} = \underline{\epsilon} \cdot \underline{x}$

In der Tabelle VI.7 sind die auf diese Weise berechneten Verrückungen  $\Delta\vec{a}$ ,  $\Delta\vec{b}$  und  $\Delta\vec{c}$  der Basisvektoren ( $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$ ) in Abhängigkeit einer von außen angelegten Druckspannung angegeben. Die Verzerrungstensoren für uniaxiale Druck- bzw. Zugspannungen längs der kristallographischen Hauptachsen  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$  wurden bereits in Kapitel II.2 berechnet.

Verrückungen der Basisvektoren		uniaxiale Druckspannung entlang der Kristallachse		
		<100>	<110>	<111>
Ge	$\vec{a} = \begin{pmatrix} 2.8287 \\ -2.8287 \\ 0 \end{pmatrix}$ $\Delta\vec{a}$	$\begin{pmatrix} -2.7583 \\ -0.7514 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{P}{\text{Mbar}}$	$\begin{pmatrix} 0.0506 \\ -0.0506 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{P}{\text{Mbar}}$	$\begin{pmatrix} 0.2843 \\ -0.2843 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{P}{\text{Mbar}}$
	$\vec{b} = \begin{pmatrix} 2.8287 \\ 2.8287 \\ 0 \end{pmatrix}$ $\Delta\vec{b}$	$\begin{pmatrix} -2.7583 \\ 0.7514 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{P}{\text{Mbar}}$	$\begin{pmatrix} -2.0567 \\ -2.0567 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{P}{\text{Mbar}}$	$\begin{pmatrix} -1.1204 \\ -1.1204 \\ -1.4047 \end{pmatrix} \cdot \frac{P}{\text{Mbar}}$
	$\vec{c} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 5.6574 \end{pmatrix}$ $\Delta\vec{c}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1.5043 \end{pmatrix} \cdot \frac{P}{\text{Mbar}}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1.5043 \end{pmatrix} \cdot \frac{P}{\text{Mbar}}$	$\begin{pmatrix} -1.4047 \\ -1.4047 \\ -0.8362 \end{pmatrix} \cdot \frac{P}{\text{Mbar}}$
Si	$\vec{a} = \begin{pmatrix} 2.71515 \\ -2.71515 \\ 0 \end{pmatrix}$ $\Delta\vec{a}$	$\begin{pmatrix} -2.0860 \\ -0.5805 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{P}{\text{Mbar}}$	$\begin{pmatrix} 0.1002 \\ -0.1002 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{P}{\text{Mbar}}$	$\begin{pmatrix} 0.2604 \\ -0.2604 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{P}{\text{Mbar}}$
	$\vec{b} = \begin{pmatrix} 2.71515 \\ 2.71515 \\ 0 \end{pmatrix}$ $\Delta\vec{b}$	$\begin{pmatrix} -2.0860 \\ 0.5805 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{P}{\text{Mbar}}$	$\begin{pmatrix} -1.6060 \\ -1.6060 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{P}{\text{Mbar}}$	$\begin{pmatrix} -0.8773 \\ -0.8773 \\ -1.1376 \end{pmatrix} \cdot \frac{P}{\text{Mbar}}$
	$\vec{c} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 5.4303 \end{pmatrix}$ $\Delta\vec{c}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1.1610 \end{pmatrix} \cdot \frac{P}{\text{Mbar}}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1.1610 \end{pmatrix} \cdot \frac{P}{\text{Mbar}}$	$\begin{pmatrix} -1.1376 \\ -1.1376 \\ -0.6169 \end{pmatrix} \cdot \frac{P}{\text{Mbar}}$

Tab. VI.7 : Mit Hilfe der Verzerrungstensoren [ Tab. II.5 ] lassen sich die Verrückungen der Basisvektoren  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  und  $\vec{c}$  im uniaxialen Spannungsfeld berechnen [ Gl. VI.4 ] ( Bei Zug- statt Druckspannungen kehren sich die Vorzeichen jeweils um )

Legt man bei der Gittersummenrechnung die auf diese Weise berechneten, verzerrten Basisvektoren zugrunde, so erhält man am Ort eines substitutionell eingebauten Sondenatoms den in Abbildung VI.24 dargestellten Verlauf des spannungsinduzierten elektrischen Gitterfeldgradienten.

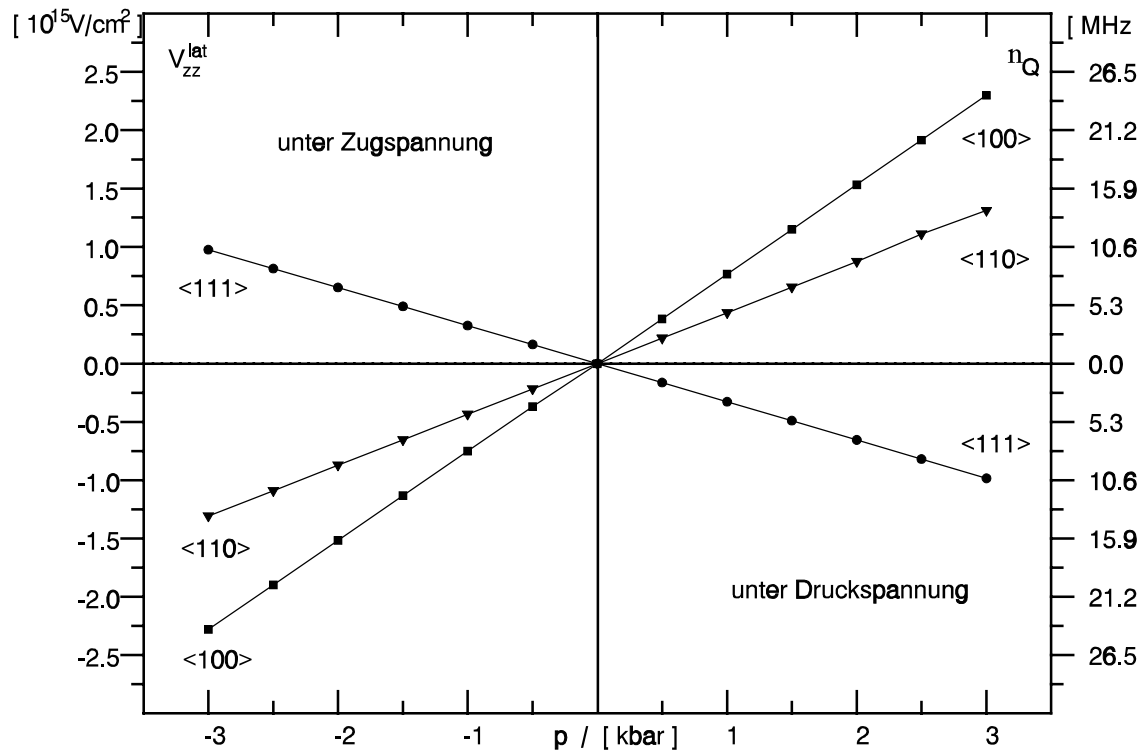


Abb. VI.24 : Mit dem Punktladungsmodell für Si berechneter Gitterfeldgradienten, bei einer Zug-/ Druckspannung entlang der <100>-, <110>- und <111>-Kristallachse

Ohne äußere Spannung erhält man infolge der kubischen Ladungssymmetrie auf einem regulären Gitterplatz tatsächlich keinen EFG. Erwartungsgemäß ist der berechnete EFG für eine <100>- bzw. <111>-Orientierung der Druck- / Zugachse axialsymmetrisch und im Fall einer <110>-Kristallorientierung nichtaxialsymmetrisch ( $\eta = 0.75$ ).

Das Punktladungsmodell liefert im Bereich elastischer Deformation einen linearen Zusammenhang zwischen einer extern angelegten Zug- bzw. Druckspannung  $\sigma$  und dem resultierenden Gitterfeldgradienten  $V_{zz}^{lat}$ . Die in Abbildung VI.24 dargestellte lineare Regression wird durch nachfolgende Parameter beschrieben [ Tab. VI.8 ].

$V_{zz}^{lat} = A + B \cdot \sigma$	A [ $10^{15} \text{ V cm}^{-2}$ ]	B [ $10^{15} \text{ V cm}^{-2} \text{ kbar}^{-1}$ ]
Zug/Druck entlang <100>	0.0075(11)	0.7623(61)
Zug/Druck entlang <110>	0.0017(13)	0.4373(71)
Zug/Druck entlang <111>	- 0.0019(52)	- 0.3266(28)

Tab. VI.8 : Parameter der in Abb.VI.24 dargestellten linearen Regression

Die zu erwartenden Wechselwirkungsfrequenzen lassen sich wie folgt berechnen:

$$\nu_Q = \frac{e \cdot Q \cdot (1 - \gamma_\infty) \cdot V_{zz}^{lat}}{h} \quad (\text{VI.5})$$

Mit der sogenannten Josephsonrelation [ PAR 67 ]

$$\frac{2e}{h} = 4.835912(13) \cdot 10^{14} \frac{\text{Hz}}{\text{V}} \quad (\text{VI.6})$$

folgt dann:

$$\nu_Q [\text{MHz}] = 0.2417956 \cdot Q [\text{barn}] \cdot (1 - \gamma_\infty) \cdot V_{zz}^{lat} [10^{15} \text{V/cm}^2] \quad (\text{VI.7})$$

## VI.5. Diskussion der Meßergebnisse

Beim Anlegen einer äußeren uniaxialen Zugspannung konnte erstmals im kubischen Wirtsgitter eines Si-Kristalls ein spannungsinduzierter Gitterfeldgradient beobachtet werden. Dieser EFG entsteht durch die spannungsbedingte Verzerrung einer ursprünglich tetraedrischen Struktur der Sondenumgebung. Bei Zug-/Druckspannungen entlang einer  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse erhält man eine trigonale Struktur, in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung eine tetragonale Struktur. Infolge der dabei resultierenden Punktsymmetrie um den substitutionellen Sondenkern  $^{111}\text{In}$  sollte der EFG in beiden Fällen axialsymmetrisch sein, was durch die Meßergebnisse bestätigt wurde. Ferner tritt für eine  $\langle 110 \rangle$ -Zugachse erwartungsgemäß ein nichtaxialsymmetrischer EFG auf, der auf die rhombisch verzerrte Struktur des Gitters zurückzuführen ist.

Die Orientierungsmessungen konnten eindrucksvoll zeigen, daß die Hauptachse des zugrundeliegenden EFG-Tensors in Richtung der Zug- bzw. Druckachse liegt. Das Vorzeichen läßt sich nun durch ein  $\beta$ - $\gamma$  Winkelkorrelationsexperiment bestimmen.

Die zugehörige Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_{Q_i}$  nimmt bis zum Zerreißen der Probe in reproduzierbarer Weise linear mit der von außen angelegten uniaxialen Zugspannung zu. Da die elastischen Eigenschaften des Kristalls anisotrop sind, sollte der spannungsinduzierte EFG je nach Lage der Druck- bzw. Zugachse ein unterschiedliches Verhalten zeigen. In der Abbildung VI.25 sind daher die gemessenen Gitterfrequenzen  $\nu_{Q_i}$  in Abhängigkeit von der jeweiligen Spannungsachse dargestellt.

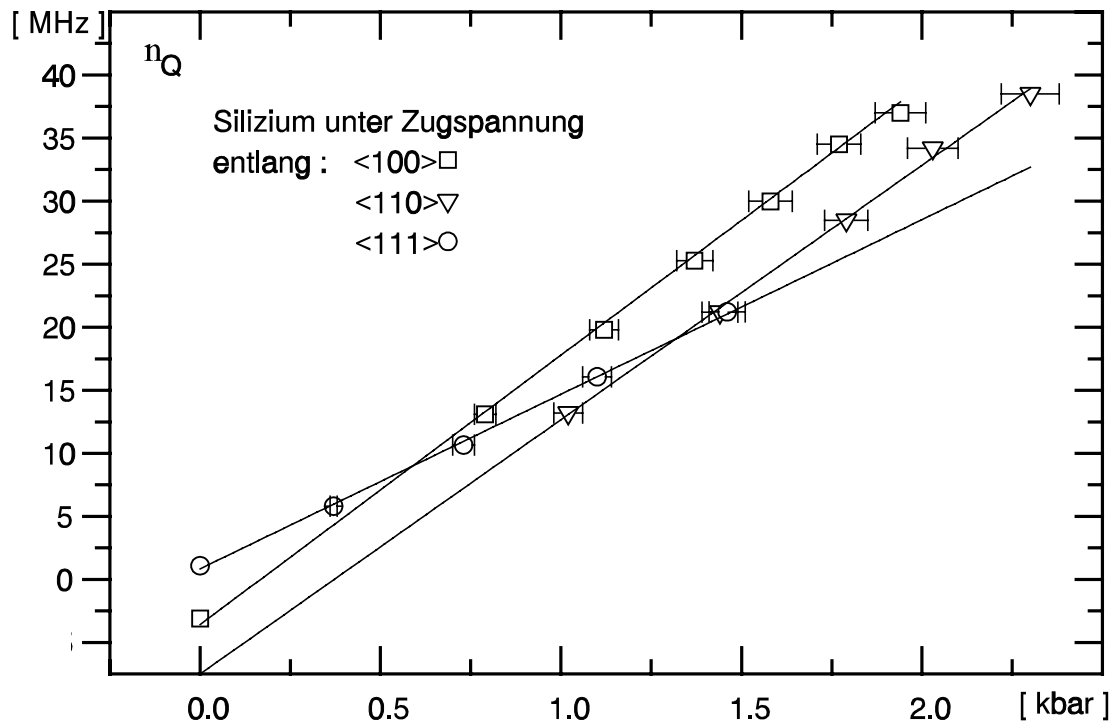


Abb. VI.25 : Die in Si gemessenen spannungsinduzierten Wechselwirkungsfrequenzen  $\nu_Q$  für uniaxiale Zugspannungen entlang der <100>, <110> und <111> Kristallachse

Die in Abbildung VI.25 dargestellten linearen Regressionsgeraden an die gemessenen Quadrupolwechselwirkungsfrequenzen sind durch folgende Parameter beschrieben:

$\nu_Q = A + B \cdot P$	A [ MHz ]	B [ MHz · kbar <sup>-1</sup> ]
Zugspannung entlang <100>	- 3.8(7)	21.3(4)
Zugspannung entlang <110>	- 7.5(10)	20.2(5)
Zugspannung entlang <111>	0.5(2)	14.2(2)

Tab. VI.9 : Parameter der in Abbildung VI.25 dargestellten linearen Regressionsgeraden

Aus den spannungsabhängigen Verrückungen der Gitterionen läßt sich  $V_{zz}^{lat}(\sigma)$  zuverlässig berechnen. Legt man nun den auf der Grundlage des Punktladungsmodells [ Kap. VI.4 ] berechneten Gitterfeldgradienten  $V_{zz}^{lat}(\sigma)$  zugrunde, so erhält man ebenfalls einen linearen Zusammenhang zwischen den gemessenen Quadrupolwechselwirkungsfrequenzen  $\nu_Q$  und der von außen angelegten uniaxialen Zugspannung  $\sigma$ . Trägt man  $\nu_Q$  gegen  $V_{zz}^{lat}(\sigma)$  auf, so läßt sich aus der Steigung ein experimenteller Wert für den Sternheimer-Korrekturfaktor von Cd in Si bestimmen. Zuverlässige Berechnungen des Korrekturfaktors  $(1 - \gamma_\infty)$  existieren bisher nur für freie Ionen (z.B.  $\gamma_\infty(\text{Cd}^{++}) = -29,3$  [ FEI 69 ]). Generell gilt, daß die in einem Festkörper gemessenen Werte stets größer sind [ KAU 79 ].



Bei der Anpassung an die gemessenen Gitterwechselwirkungsfrequenzen wurde lediglich die Proportionalitätskonstante  $(1 - \gamma_\infty)$  sowie eine weitere additive Konstante  $C$  als freie Fitparameter variiert [ Tab. VI.10 ]. Auf diese Weise gelingt es durch Beobachtung eines spannungsinduzierten EFG einen experimentellen Wert für den Sternheimer-Korrekturfaktor anzugeben.

$v_Q = e/h \cdot Q \cdot \left( (1 - \gamma_\infty) \cdot V_{zz}^{lat}(\sigma) + C \right)$	$(1 - \gamma_\infty)$	$C [ 10^{17} \text{ V/cm}^2 ]$
Zugspannung entlang $\langle 100 \rangle$	139.2(29)	- 0.200(33)
Zugspannung entlang $\langle 110 \rangle$	229.9(61)	- 0.378(48)
Zugspannung entlang $\langle 111 \rangle$	211.2(33)	0.038(10)

Tab. VI.10 : Fitparameter für die Anpassung des spannungsinduzierten EFG

Der Einfluß der Zugspannung auf den EFG ist für eine Zugachse entlang der  $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse am stärksten und entlang der  $\langle 111 \rangle$ -Richtung am schwächsten. Die beobachtete Richtungsabhängigkeit des spannungsinduzierten EFG stimmt mit den qualitativen Vorhersagen einer einfachen Gittersummenrechnung auf der Grundlage des Punktladungsmodells überein.

Betrachtet man den Elastizitätsmodul  $E$  für Silizium in Abhängigkeit von der Kristallorientierung, so gilt  $E_{\langle 100 \rangle} < E_{\langle 110 \rangle} < E_{\langle 111 \rangle}$  [ vgl. Kap. II.2. ]. Entlang einer  $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse läßt sich ein Si-Kristall folglich am leichtesten dehnen, entsprechend erwartet man entlang dieser Richtung den größten Einfluß auf den resultierenden Gitterfeldgradienten.

Bei einer  $\langle 111 \rangle$ -Zugachse ist im entspannten Zustand tatsächlich kein Gitterfeldgradient beobachtbar. Die Winkelkorrelation ist vollständig ungestört, so wie man es bei einer kubischen Ladungsverteilung erwartet.

Dahingegen zeigt das PAC-Spektrum im Fall einer  $\langle 100 \rangle$ -Zugachse auch im entspannten Zustand einen leichten Abfall der Anisotropie, der sich durch eine Wechselwirkungsfrequenz  $v_{Q1} = 3.1(2)$  MHz beschreiben läßt. Trägt man diese Frequenz nach unten, also negativ, auf [ Abb. VI.25 ], so liegen die gemessenen Gitterfrequenzen alle auf derselben Regressionsgeraden. Diese Beobachtung läßt den Schluß zu, daß sich die Probe auch ohne äußere Einwirkung in einem Spannungszustand befindet. Die hierfür erforderliche Vorspannung beträgt 0.19(3) kbar und könnte die Folge einer, auf die radioaktive Implantation zurückführbaren, Verzerrung des Kristallgitters in der unmittelbaren Sondenumgebung sein.

Da sich die Implantationsbedingungen in der Regel von Probe zu Probe unterscheiden, ist es nicht verwunderlich, daß solche lokalen Gitterverzerrungen nicht in jedem Fall beobachtet werden. Um zu klären, unter welchen Bedingungen ( Ionendosis, Oberflächenorientierung, etc. ) man solche Gitterverzerrungen erwarten kann, sind weitere systematische Untersuchungen notwendig.

Bereits bei früheren PAC-Messungen in Si und Ge wurde ein solcher Abfall der Anisotropie beobachtet [ PAS 87, PAS 88 ]. Hierfür wurden gelegentlich dynamische Relaxationsprozesse innerhalb der hochionisierten Elektronenhülle des Cd-Ions, die als Folge des EC-Zerfalls nach der Elementumwandlung auftreten, verantwortlich gemacht. Die Vermutung, daß solche Zerfallsnachwirkungen ( sogenannte "after-effects" ) die Ursache für die Abnahme der Anisotropie sind, erscheint mit dem Nachweis von spannungsinduzierten Gitterfeldgradienten unwahrscheinlicher denn je.

Extrapoliert man die im Falle einer  $\langle 110 \rangle$ -Spannungsachse gemessenen Gitterfrequenzen, so würde man im entspannten Zustand eine Wechselwirkungsfrequenz von 7.5(10) MHz erwarten, tatsächlich ist das PAC-Spektrum jedoch ungestört. Dieses Verhalten ließe sich dann erklären, wenn man annimmt, daß die gemessenen Gitterfrequenzen bei einer von außen angelegten Zugspannung entlang der  $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse systematisch zu gering gemessen wurden. Ob hierfür möglicherweise der bisher nicht berücksichtigte, aufgrund des Probenhalters [ vgl. Kap. IV.3 ] jedoch zusätzlich auftretende Staudruck innerhalb der Probe verantwortlich ist, kann nur als Spekulation gewertet werden.

Die theoretischen Berechnungen eines spannungsinduzierten EFG auf der Grundlage des Punktladungsmodells lassen für eine  $\langle 111 \rangle$ -Orientierung der Zugspannungsachse ein anderes Vorzeichen des EFG-Tensors erwarten, als im Fall einer  $\langle 100 \rangle$  bzw.  $\langle 110 \rangle$ -Zugspannungsachse. Ferner sollte sich das Vorzeichen auch beim Übergang von Zug- zu Druckspannungen umkehren.

Da jedoch die Zirkularpolarisation der emittierten  $\gamma$ -Quanten üblicherweise bei einem  $\gamma$ - $\gamma$  Winkelkorrelationsexperiment nicht beobachtet wird, läßt sich das Vorzeichen des EFG-Tensors nicht angeben. Ein geplantes  $\beta$ - $\gamma$  Winkelkorrelationsexperiment ist jedoch in der Lage, auch das Vorzeichen eines spannungsinduzierten Gitterfeldgradienten zu bestimmen.

Überhaupt scheint ein spannungsverzerrter Einkristall ein interessantes Modellsystem zur Überprüfung theoretisch berechneter Gitterfeldgradienten zu sein. Bisher fehlten hierzu allerdings experimentell gemessene spannungsinduzierte elektrische Gitterfeldgradienten.

---

## VII. In-H-Komplexe in Silizium und Germanium unter uniaxialer Druck- und Zugspannung

In diesem Kapitel soll insbesondere die Frage geklärt werden, ob es durch Anlegen eines äußeren, uniaxialen Spannungsfeldes möglich ist, Defekt-Komplexe innerhalb eines Kristalls auszurichten. Ferner ist zu klären, ob die Meßmethode der gestörten  $\gamma$ - $\gamma$  Winkelkorrelation ( PAC ) sensitiv genug ist, um eine solche Defektorientierung innerhalb eines Einkristalls zu beobachten.

Normalerweise gibt es für die Symmetrieachse eines defektinduzierten EFG - bedingt durch die hohe Symmetrie eines kubischen Diamantgitters - stets mehrere, gleichwertige Möglichkeiten, sich bezüglich eines festen, an die Kristallachsen gebundenen Koordinatensystems einzustellen. Als physikalisch äquivalent werden alle Lagen im Kristall bezeichnet, welche durch Permutation oder Vorzeichenumkehr einer oder mehrerer Koordinaten [hkl] eines gegebenen Richtungsvektors entstehen.

So gibt es z.B. acht Lagen, die zur [111]-Achse äquivalent sind ( [111], [-111], [1-11], [11-1], [-1-1-1], [1-1-1], [-11-1], [-1-11] ). Da es in einem  $\gamma$ - $\gamma$  Winkelkorrelations-experiment nicht möglich ist, das Vorzeichen des EFG zu bestimmen, reduziert sich die Anzahl der äquivalenten Orientierungen im genannten Beispiel auf die Richtungen [111], [1-1-1], [1-11] und [-1-11]. Für jede dieser Richtungen lassen sich die zugehörigen  $s_n^{eff}$ -Koeffizienten zunächst einzeln berechnen [ Kap. IX.1. ]. Sind nun die Besetzungswahrscheinlichkeiten  $P_i$  für die kristallographisch äquivalenten Anordnungen verschieden, muß die Mittelwertbildung entsprechend gewichtet durchgeführt werden.

$$\overline{s_n^{eff}} = \sum_i P_i \cdot s_n^{eff}(h_i, k_i, l_i) \quad \text{mit} \quad \sum_i P_i = 1 \quad (\text{VII.1})$$

Die Fourierkoeffizienten  $s_n^{eff}$  bestimmen in charakteristischer Weise die Struktur der gemessenen PAC-Spektren, somit sind Rückschlüsse auf die beteiligten Orientierungen des EFG möglich. Sind beispielsweise alle dem EFG zugrundeliegenden Defekt-Komplexe senkrecht zur Detektorebene ausgerichtet, so tritt in den PAC-Spektren nur noch die Grundfrequenz  $\omega_1$  auf.

Sollte es uns gelingen, Defekt-Komplexe einheitlich auszurichten, so wäre man ferner in der Lage, in einem  $\beta$ - $\gamma$  Winkelkorrelationsexperiment auch das Vorzeichen eines defektinduzierten EFG zu bestimmen.

### VII.1. In-H-Komplexe in Si unter uniaxialer Zugspannung

Die Struktur der  $^{111}\text{In}$ -Wasserstoff-Komplexe in Si sowie die zugehörigen Hyperfeinparameter sind aus früheren PAC-Experimenten bereits sehr gut bekannt [ WIC 89, SKU 92 ]. Der Akzeptor  $^{111}\text{In}$  wird in einem Si- bzw. Ge-Untergitter substitutionell eingebaut und ist dann tetraedrisch von vier Gitteratomen des Wirtsgitters umgeben. Die tetraedrische Punktsymmetrie  $T_d$  um den substitutionellen Sondenkern hat zur Folge, daß kein EFG auftritt und das PAC-Spektrum zunächst völlig ungestört ist.

Die Tetraedersymmetrie  $T_d$  verringert sich durch die Anlagerung des H-Atoms in eine  $C_{3v}$ -Symmetrie mit einer 3-zähligen Hauptachse entlang der  $\langle 111 \rangle$ -Bindungsachse. Hierdurch erklärt sich das Auftreten eines charakteristischen EFG in Richtung einer  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse.

Über den Ort, auf dem sich das H-Atom bei der Anlagerung an den Akzeptor setzt, wurde lange diskutiert [ STU 91 ]. Inzwischen wird aber allgemein angenommen, daß es sich dabei um den sogenannten "Bond-Center-Platz" ( BC ) und nicht um den "Antibonding-Platz" ( AB ) handelt [ Abb. VII.1 ]. Beide Gitterplätze liegen interstitiell entlang einer  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung zwischen dem Akzeptor-Sondenatom  $^{111}\text{In}$  und einem der vier nächsten Gitteratome. Der durch Anlagerung eines H-Atoms induzierte EFG besitzt jedoch in beiden Fällen sowohl die gleiche Orientierung als auch dieselben Symmetrieeigenschaften, so daß in einem PAC-Experiment keine Entscheidung zugunsten des einen oder anderen Platzes getroffen werden kann.

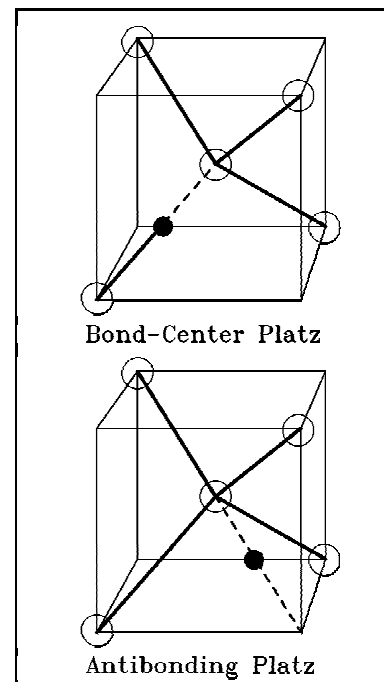


Abb. VII.1: Der In-H-Komplex

Die folgenden Experimente sollen die Frage klären, ob es im Fall der In-H-Komplexe möglich ist, eine - zumindest teilweise - Ausrichtung der Defektkomplexe in einem uniaxialen Spannungsfeld zu beobachten. Zu diesem Zweck wurden die Si-Proben nach Implantation der  $^{111}\text{In}$ -Sondenkerne und anschließender Kurzzeitemperatur ( RTA : 20 Sek. bei  $900^\circ\text{C}$  unter  $\text{N}_2$ -Atm. ) zunächst in einem Hochdruckplasma [ Kap. IV.2. ] mit Wasserstoff beladen. Untersucht wurde dann das Verhalten der In-H-Komplexe in einem durch Biegespannungen entlang der drei Hauptachsen  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$  erzeugten uniaxialen Spannungsfeld [ vgl. Kap. IV.3. ].

### VII.1.a. In-H-Komplexe in Si unter uniaxialer Zugspannung entlang einer $\langle 110 \rangle$ - Kristallachse

Liegt die Zugspannungsachse in Richtung einer  $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse und wird eine Detektorgeometrie gemäß Abbildung VII.2 gewählt, so befinden sich zwei Bindungsachsen ( $[111]$  und  $[1-1-1]$ ) innerhalb der Detektorebene, während die beiden übrigen ( $[1-11]$  und  $[-1-11]$ ) in einer hierzu senkrechten Ebene liegen. Abbildung VII.3 zeigt die Lage der Zugspannungsachse und die möglichen Gitterpositionen des an den Akzeptor In gebundenen H-Atoms. Die Lage der Spannungsachse entlang einer  $\langle 110 \rangle$ -Kristallrichtung läßt ein unterschiedliches Verhalten bezüglich der vier, ursprünglich äquivalenten, H-Gitterpositionen erwarten. Die innerhalb der Detektorebene liegenden H-Bindungen sollten sich unter Spannungseinwirkung anders als die senkrecht hierzu, in der Ebene der Spannungsachse, liegenden Bindungen verhalten.

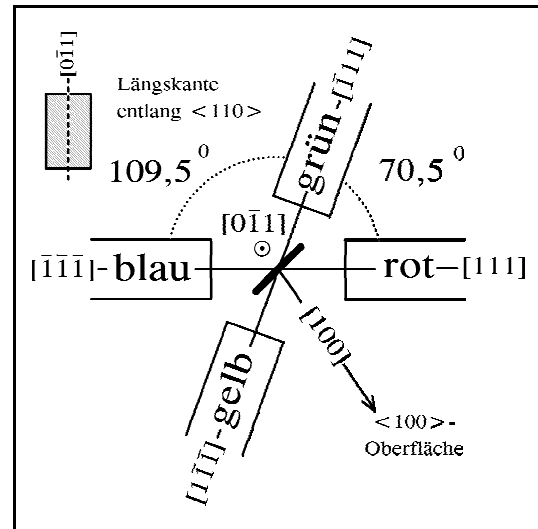


Abb. VII.2: Orientierung der Detektoren für Zug- / Druckspannungen entlang  $\langle 110 \rangle$

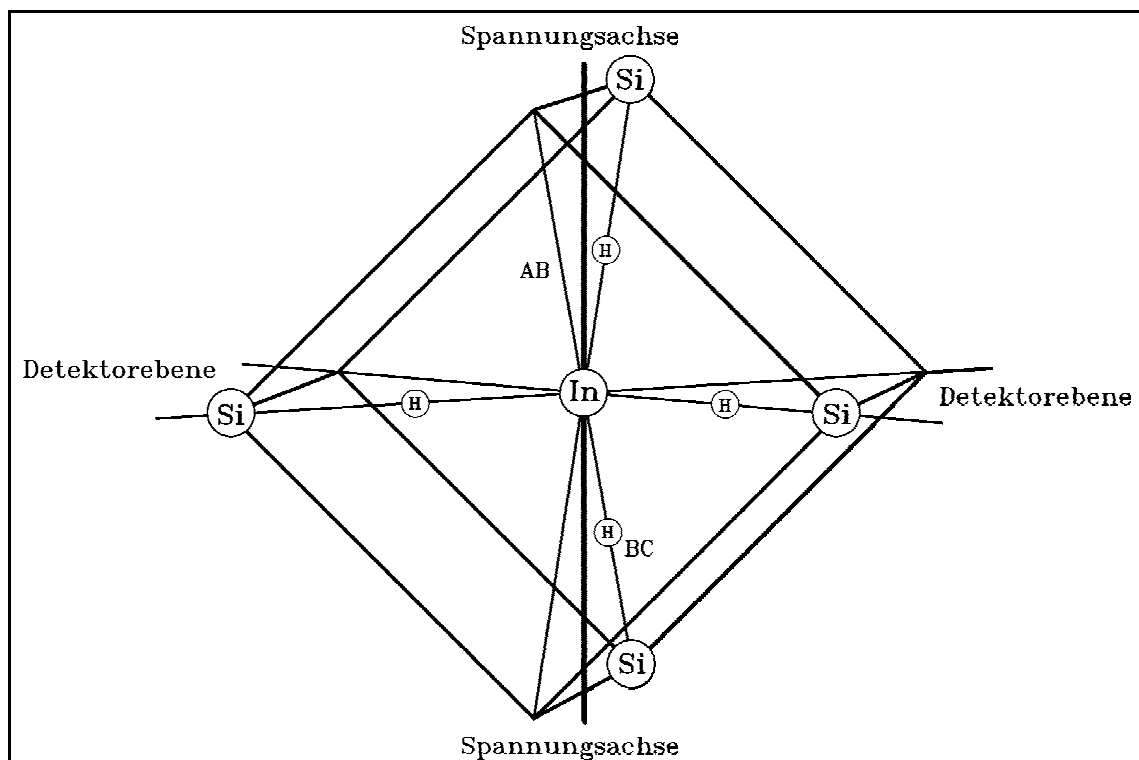


Abb. VII.3: Der In-H-Komplex im Si-Kristallsystem unter dem Einfluß einer externen uniaxialen Zugspannung entlang der  $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse

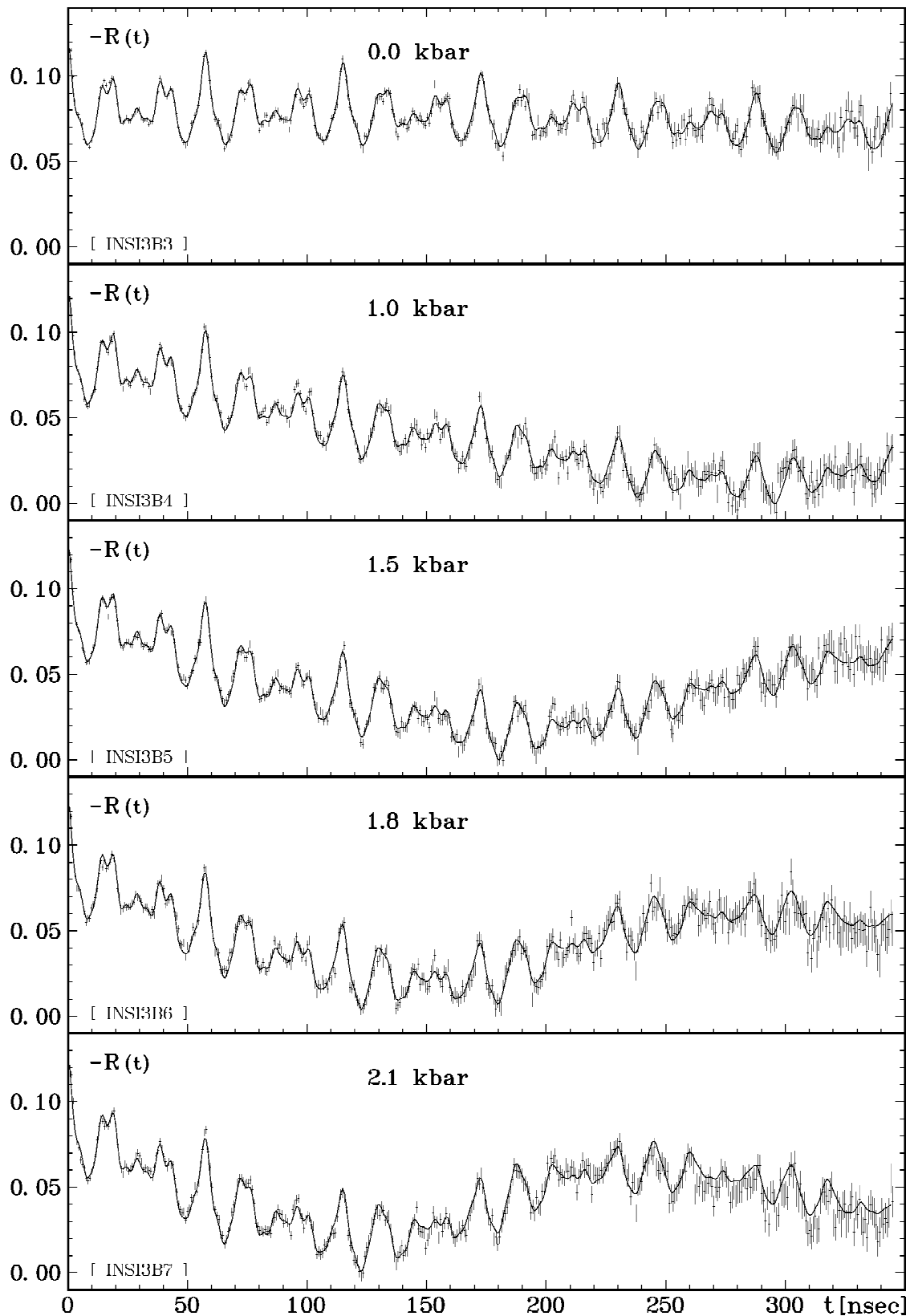


Abb. VII.4 : PAC-Spektren für das System  $^{111}\text{In-H}\langle\text{Si}\rangle/3b/$  unter einer externen, uniaxialen Zugspannung entlang der  $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse (  $T_m = RT$  )

Nach der H-Plasmabeladung lassen sich in den PAC-Spektren [ Abb. VII.4 ] die für In-H Paare in Si ( bei  $T_m = 295^\circ\text{K}$  ) charakteristischen Wechselwirkungsfrequenzen  $\nu_{Q1/2} = 349\text{ MHz}$  und  $\nu_{Q2} = 463\text{ MHz}$  beobachten (  $\eta = 0$ ,  $\langle 111 \rangle$ -Symmetrie ).

Das Cd-H Paar ist wegen der Valenzänderung nach der Elementumwandlung ein einfacher Akzeptor, dessen Umladungsniveau bei  $E_V = 94(10)\text{ meV}$  liegt. Der ungeladene Zustand  $(\text{Cd-H})^0$  ist durch eine Quadrupolfrequenz  $\nu_{Q1/0} = 263\text{ MHz}$ , der bei Raumtemperatur RT (  $295^\circ\text{C}$  ) ionisierte Zustand  $(\text{Cd-H})^-$  durch  $\nu_{Q1/2} = 349\text{ MHz}$  charakterisiert [ WIC 87, DEI 89a/b, SKU 92a/b ]. Die Frequenz  $\nu_{Q1}$  wird somit durch die Lage des Fermi-niveaus bestimmt. Die bei RT ebenfalls auftretende zweite Frequenz  $\nu_{Q2} = 463\text{ MHz}$  wird auf einen strukturell oder elektronisch unterschiedlichen Zustand  $(\text{Cd-H})^*$  zurückgeführt, der möglicherweise von einem, über die Löcherkonzentration kontrollierten, Platzwechsel des H-Atoms bereits am In herrührt. Beiden Meßsignalen liegt ein axialsymmetrischer EFG entlang einer  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung zugrunde.

Unter uniaxialer Zugspannung tritt ein zusätzlicher, spannungsinduzierter EFG auf. Die zugehörige Gitterfrequenz  $\nu_{Q3}$  bleibt auch nach Auflösung der In-H-Paare durch Tempern oberhalb der Dissoziationstemperatur ( $\approx 420^\circ\text{K}$ ) beobachtbar [ Abb. VII.5 ].

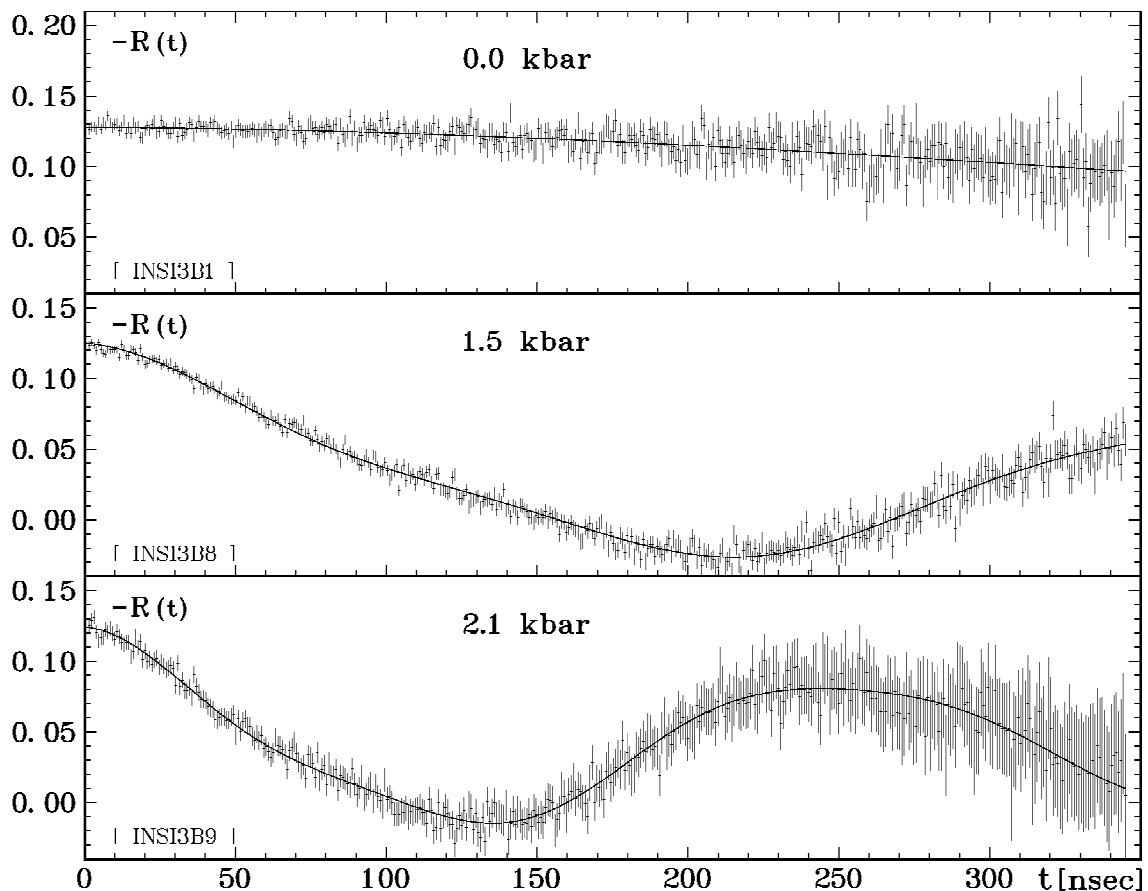


Abb. VII.5 : PAC-Spektren derselben Probe, nachdem der Wasserstoff durch Tempern bei  $150^\circ\text{C}$  ( 30 Min. ) ausgetrieben wurde (  $T_m = \text{RT}$  )

Zugspannung [ kbar ]    <110>	O 0.00	I 1.03(4)	II 1.45(5)	III 1.78(6)	IV 2.06(7)
$\nu_{Q_{1c}}(\text{In-H})$ [ MHz ]	348.1(1)	348.0(4)	347.9(4)	348.3(5)	347.8(6)
$\delta_1$ [ % ]	0.47(5)	0.79(6)	0.90(5)	0.84(7)	1.02(7)
$\eta_1$	0.00	0.060(8)	0.091(6)	0.105(7)	0.122(6)
$f_1$ [ % ]	32.6(9)	36.5(9)	36.8(6)	35.8(8)	38.4(8)
$\nu_{Q_{2c}}(\text{In-H})$ [ MHz ]	462.4(2)	462.3(4)	462.4(2)	462.9(5)	462.3(5)
$\delta_2$ [ % ]	0.36(4)	0.38(5)	0.46(4)	0.52(6)	0.40(5)
$\eta_2$	0.00	0.020(20)	0.020	0.008(49)	0.033(15)
$f_2$ [ % ]	25.0(6)	27.1(6)	28.6(5)	29.4(7)	27.7(7)
$\nu_{Q_3}$ [ MHz ]	1.6(1)	11.1(2)	15.5(2)	17.7(4)	20.6(5)
$\delta_3$ [ % ]	8.0	8.4(13)	8.5(6)	10.5(6)	10.4(5)
$\eta_3$	0.00	0.235(51)	0.389(25)	0.540(33)	0.564(32)
$f_3$ [ % ]	42.4(8)	36.4(7)	34.6(3)	34.8(4)	33.9(4)
C	- 0.0056(6)	- 0.0001(3)	0.0014	0.0013	0.0014(2)
$A_{22}^{\text{app}}$	- 0.125	- 0.125	- 0.125	- 0.125	- 0.125

$$[ \nu_{Q_{1c}}/\nu_{Q_2} : \sigma_0^{\text{eff}} : 0.3555 / \sigma_1^{\text{eff}} : 0.3531 / \sigma_2^{\text{eff}} : 0.0703 / \sigma_3^{\text{eff}} : 0.1100 ]$$

$$[ \nu_{Q_3} : \sigma_0^{\text{eff}} : 0.0000 / \sigma_1^{\text{eff}} : 0.7628 / \sigma_2^{\text{eff}} : 0.0000 / \sigma_3^{\text{eff}} : 0.1261 ]$$

Tab. VII.1 : Fitergebnisse der Meßreihe  $^{111}\text{In-H}<\text{Si}>/3\text{b}/$  unter Zugspannung entlang <110>

Zugspannung [ kbar ]    <110>	O 0.00	II 1.45(5)	IV 2.06(7)
$\nu_{Q_0}$ [ MHz ]	0.0	0.0	0.0
$\delta_0$ [ MHz ]	0.5	1.4(22)	0.6(2)
$f_0$ [ % ]	4(17)	27(10)	29(1)
$\nu_{Q_3}$ [ MHz ]	1.6(1)	14.0(2)	20.4(3)
$\delta_3$ [ % ]	6.0	7.2(25)	6.5(7)
$\eta_3$	0.00	0.382(53)	0.552(23)
$f_3$ [ % ]	96(17)	73(10)	71(1)
C	0.003(1)	- 0.000(1)	- 0.001(1)
$A_{22}^{\text{app}}$	- 0.125	- 0.125	- 0.125

$$[ \nu_{Q_3} : \sigma_0^{\text{eff}} : 0.0000 / \sigma_1^{\text{eff}} : 0.7628 / \sigma_2^{\text{eff}} : 0.0000 / \sigma_3^{\text{eff}} : 0.1261 ]$$

Tab. VII.2 : Fitergebnisse der Meßreihe  $^{111}\text{In-H}<\text{Si}>/3\text{b}/$  unter Zugspannung entlang <110>, nachdem der Wasserstoff durch Tempern der Probe ausgetrieben wurde



Die Fitergebnisse der Meßreihe  $^{111}\text{In-H}\langle\text{Si}\rangle/3\text{b}/$  unter Zugspannung entlang  $\langle 110 \rangle$  sind in Tab. VII.1/2 zusammengefaßt und in Abb. VII.6/7 graphisch dargestellt. Werte ohne Fehlerangabe wurden bei der Anpassung nicht variiert.

Während die spannungsinduzierte Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_{Q_3}$  kontinuierlich mit der von außen angelegten Zugspannung ansteigt, zeigen die zu den In-H Komplexen gehörenden Frequenzen  $\nu_{Q_{1/2}} = 349 \text{ MHz}$  und  $\nu_{Q_2} = 463 \text{ MHz}$  keine signifikante Frequenzänderung.

Das mit zunehmender Zugspannung beobachtbare Ansteigen des Asymmetrieparameters  $\eta_1$  bzw.  $\eta_2$  erklärt sich aus der Überlagerung des H-induzierten EFG mit dem, infolge der Gitterverzerrung zusätzlich auftretenden, Gitterfeldgradienten. Dieser Effekt macht sich erwartungsgemäß stärker bei der niedrigeren Frequenz  $\nu_{Q_{1/2}}$  bemerkbar.

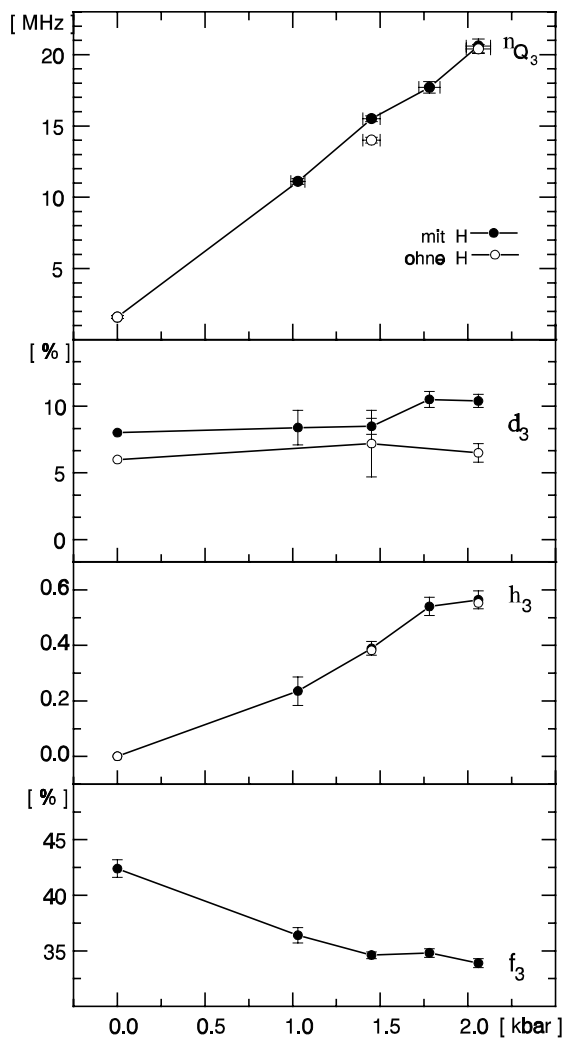


Abb. VII.6 : Darstellung der Fitparameter für den spannungsinduzierten EFG, Zugspannung entlang  $\langle 110 \rangle$

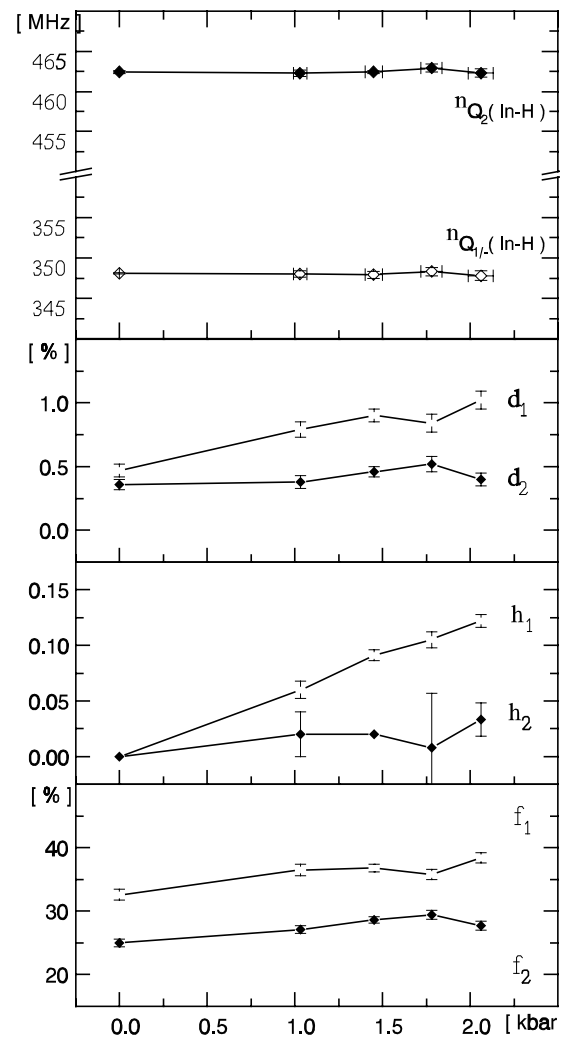


Abb. VII.7 : Darstellung der Fitparameter für die In-H-Wechselwirkung unter Zugspannung entlang  $\langle 110 \rangle$

Bei einer  $\langle 110 \rangle$ -Spannungsachse erwartet man eine rhombisch verzerrte Gitterzelle ( $a \neq b \neq c$ ,  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ ), in diesem Fall ist der resultierende Gitterfeldgradient aus Symmetriegründen nicht mehr axialsymmetrisch.

Der Anteil der Sondenkerne, die mit einem H-Atom dekoriert sind, steigt unter zunehmender Spannung leicht an. Diese Beobachtung lässt sich darauf zurückführen, daß bei Spannungsänderungen innerhalb des Materials Wasserstoff aus Haftstellen freigesetzt wird, wobei zusätzliche In-H-Paare entstehen.

Auffällig ist ferner, daß sich die charakteristische Struktur der PAC-Spektren [ Abb. VII.4 ] unter einer uniaxialen Zugspannung nicht ändert, folglich muß man davon ausgehen, daß sich die zugrundeliegenden Defekt-Komplexe durch den Spannungseinfluß nicht umorientiert haben.

Berechnet man die Fourierkoeffizienten [ Kap. IX.1. ] in Abhängigkeit vom Anteil  $X$  an In-H-Komplexen, die innerhalb der Ebene in der sich die Spannungsachse befindet ausgerichtet sind [ Abb. VII.3 ], so erhält man den in Abb. VII.8 dargestellten Verlauf. Bei Annahme einer Gleichbesetzung der einzelnen Gitterpositionen erwartet man für 50% der In-H-Komplexe eine Orientierung innerhalb der Detektorebene und für die restlichen Anteile ( $X = 50\%$ ) eine Ausrichtung innerhalb der Ebene der Zugspannungsachse, senkrecht zur Detektorebene.

Die beste Anpassung an die gemessenen Spektren erhält man für  $X=40\%$ . Das entspricht zwar einer geringfügigen Ungleichbesetzung, ein Zusammenhang mit der von außen angelegten Spannung ist jedoch nicht erkennbar.

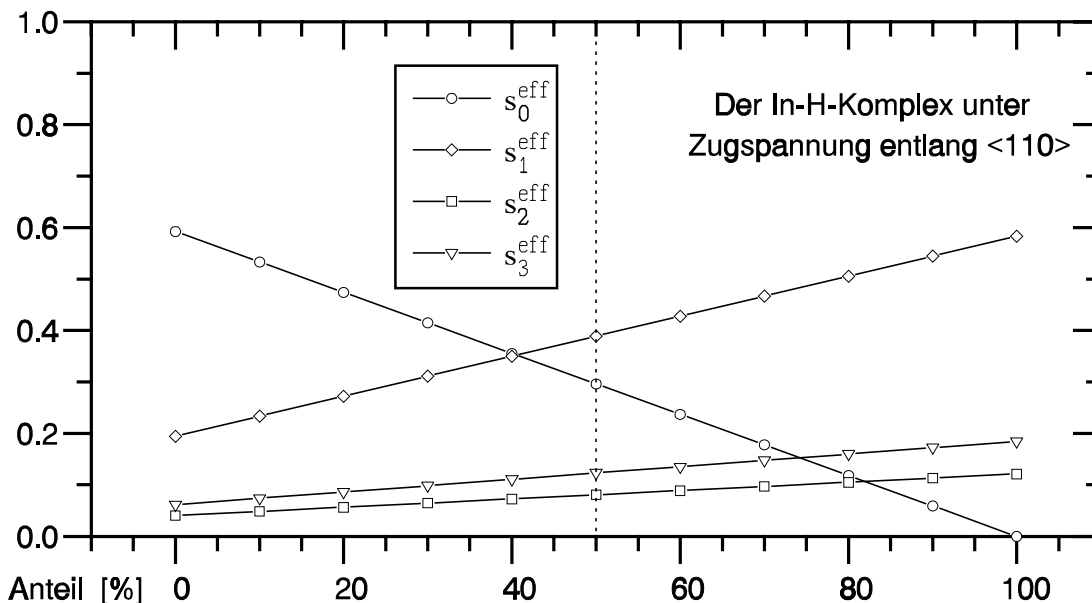


Abb. VII.8 : Verlauf der  $\sigma_n$ -Koeffizienten in Abhängigkeit vom Anteil  $X$  an In-H-Komplexen, die entlang der  $\langle 110 \rangle$ -Zugspannungsachse ausgerichtet sind

Wie sich das charakteristische PAC-Muster bei vollständiger Defektorientierung ( $X = 100\%$  bzw.  $0\%$ ) ändern sollte, wird in Abbildung VII.9 ersichtlich. Dargestellt ist das gemessene PAC-Spektrum bei maximaler Zugspannung ( $2.1 \text{ kbar}$ ) sowie drei zugehörige theoretisch berechnete R-Wert-Spektren, die einer Ausrichtung von  $0\%$ ,  $40\%$  und  $100\%$  der In-H-Paare entlang der Zugspannungsachse entsprechen. In diesem Fall bedeutet  $X=0\%$ , daß keine In-H-Paare entlang der  $\langle 110 \rangle$ -Zugspannungsachse ausgerichtet sind und somit alle In-H-Paare innerhalb der Detektorebene liegen.

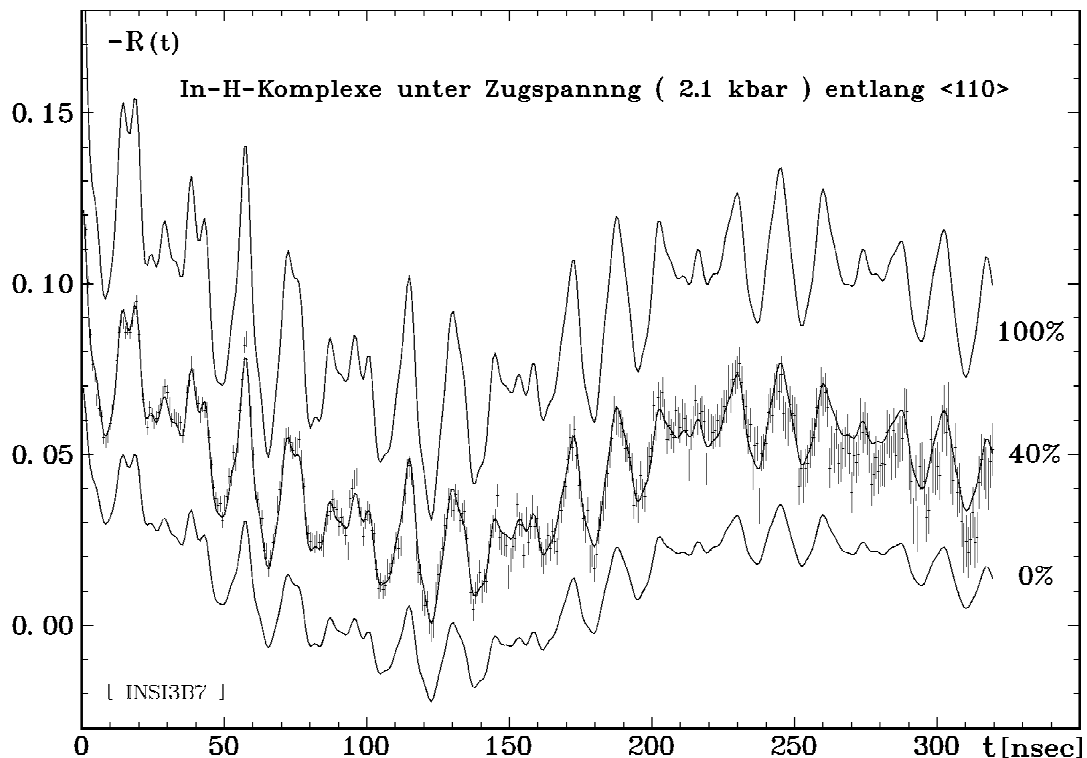


Abb. VII.9 : Vergleich der theor. Fitfunktionen in Abhängigkeit vom Anteil  $X$  [%] der In-H-Komplexe, die entlang der äußeren  $\langle 110 \rangle$ -Spannungsachse ausgerichtet sind.

Mit zunehmender Ausrichtung der In-H-Paare sollte die Grundfrequenz  $\omega_1$  deutlich dominieren, allerdings wird die Auswertung durch das gleichzeitige Auftreten von zwei Quadrupolfrequenzen  $\nu_{Q1}$  und  $\nu_{Q2}$  erschwert.

Die experimentelle Genauigkeit, mit welcher sich die  $\sigma_n$ -Koeffizienten aus den gemessenen PAC-Spektren bestimmen lassen, liegt etwa bei  $\pm 0.05$ . Der Anteil  $X$  an ausgerichteten In-H-Paaren läßt sich somit im Fall einer  $\langle 110 \rangle$ -Zugspannungsachse auf ca.  $\pm 10\%$  abschätzen. Im Rahmen der Meßgenauigkeit kann daher keine, auf einen Spannungseinfluß hinweisende, Umbesetzung der In-H-Komplexe festgestellt werden.

### VII.1.b. In-H-Komplexe in Si unter uniaxialer Zugspannung entlang einer $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse

Für den Fall einer externen Zugspannung entlang der  $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse wurde ebenfalls eine Probengeometrie gewählt, bei der die Detektoren entlang einer  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse orientiert sind [ Abb. VII.10/11 ].

Die Längskante, entlang der gebogen wird, liegt parallel einer  $\langle 100 \rangle$ -Richtung. Man dreht den Kristall nun soweit, daß diese Längskante unter  $45^\circ$  zur Detektorebene steht, die  $\langle 100 \rangle$ -Probenoberfläche zeigt dabei zwischen die beiden Detektoren, die unter  $109,5^\circ$  zueinander angeordnet sind. Bei dieser Probengeometrie stehen alle Detektoren entlang einer  $\langle 111 \rangle$ -Raumdiagonalen. Abb. VI.1 zeigt die in einer Mikrometerschraube eingespannte Probe bei einer entsprechenden Detektorgeometrie.

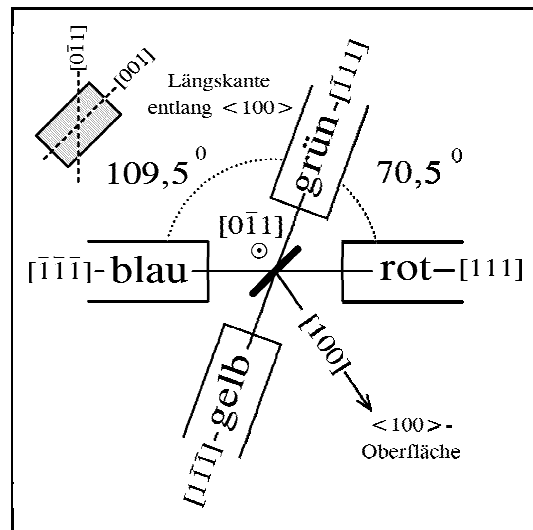


Abb. VII.10 : Orientierung der Detektoren bei Zug- / Druckspannung entlang  $\langle 100 \rangle$

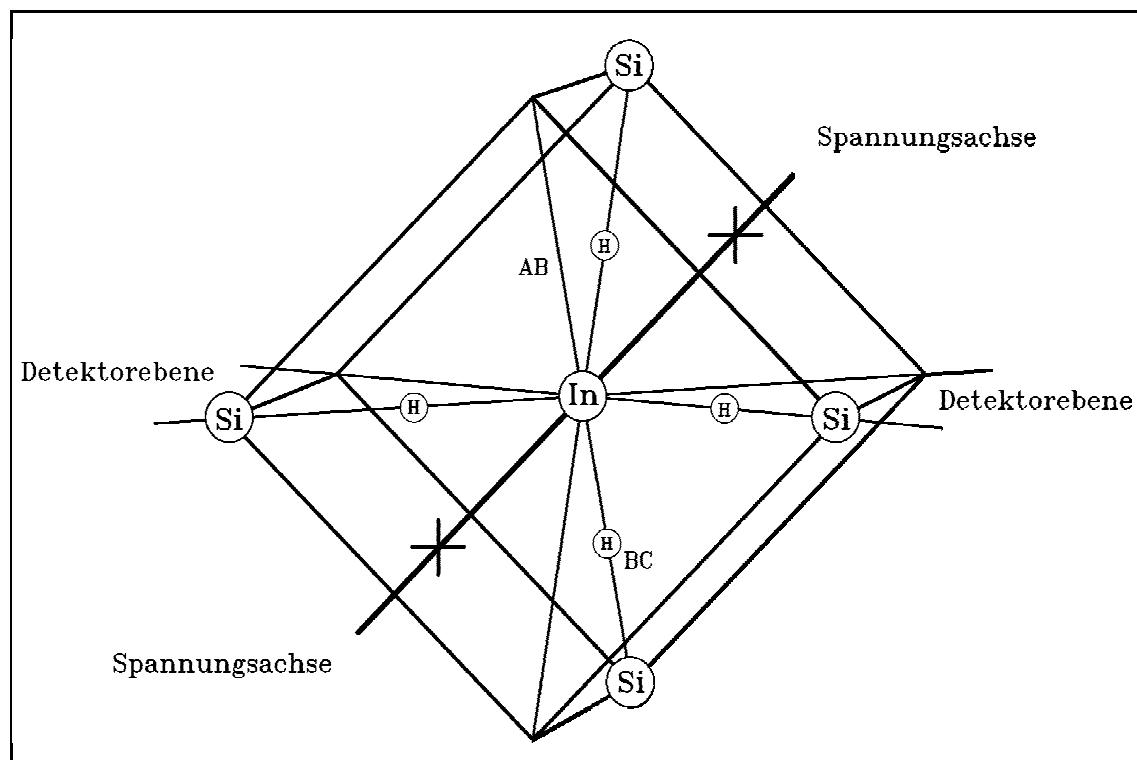


Abb. VII.11 : Der In-H-Komplex im Si-Kristallsystem unter dem Einfluß einer externen uniaxialen Zugspannung entlang der  $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse

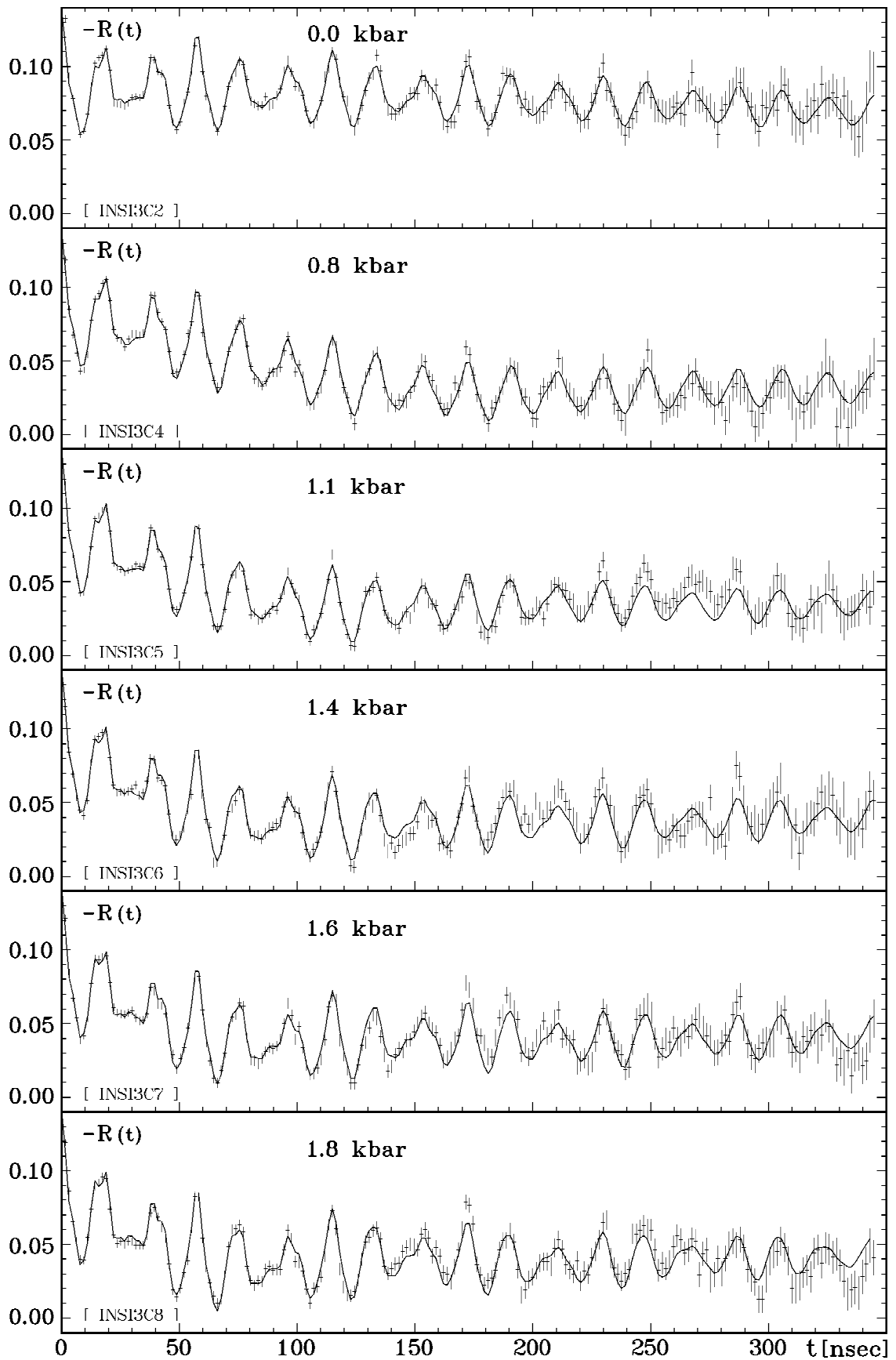


Abb. VII.12 : PAC-Spektren für das System  $^{111}\text{In-H}\langle\text{Si}\rangle/3\text{c}/$  bei einer extern angelegten uniaxialen Zugspannung entlang einer  $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse ( $T_m = RT$ )

Liegt die Zugspannungsachse entlang einer  $\langle 100 \rangle$ -Kristallrichtung, so führt dies zu einer tetragonalen Verzerrung der Einheitszelle ( $a=b \neq c$ ,  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ ), wovon alle  $\langle 111 \rangle$ -Bindungsachsen gleichermaßen betroffen sind [ Abb. VII.11 ]. Für einen uniaxialen Zug entlang der  $\langle 100 \rangle$ -Achse erwartet man folglich eine Gleichbesetzung der Gitterpositionen entlang der  $\langle 111 \rangle$ -Raumdiagonalen. In diesem Fall können die  $\sigma_n^{\text{eff}}$ -Koeffizienten unmittelbar der Tabelle III.5 ( $d=3 \text{ cm}$ ) entnommen werden.

Der zusätzlich erzeugte Gitterfeldgradient ist im Fall einer  $\langle 100 \rangle$ -Zugachse axial-symmetrisch (d.h.  $\eta_3=0$ ) und entlang der Zugspannungsachse orientiert. [ vgl. Kap. VI.1. ]. Die zur Berechnung der zugehörigen  $\sigma_n^{\text{eff}}$ -Koeffizienten notwendigen Detektorwinkel  $\theta_i$  und  $\varphi_i$  sind in Tabelle IX.3 angegeben.

Die Fitergebnisse sind in Tab.VII.3 zusammengefaßt und in Abb.VII.13/14 graphisch dargestellt. Die gemessenen PAC-Spektren [ Abb. VII.12 ] ließen sich sehr gut mit den theoretisch berechneten  $\sigma_n^{\text{eff}}$ -Koeffizienten anfitzen. Für eine uniaxiale Zugspannung entlang einer  $\langle 100 \rangle$ -Kristallrichtung sind also tatsächlich alle  $\langle 111 \rangle$ -Bindungsachsen äquivalent.

Zugspannung [ kbar ] $\parallel \langle 100 \rangle$	O 0.00	I 0.78(3)	II 1.10(4)	III 1.36(5)	IV 1.57(5)	V 1.75(6)
$\nu_{Q1c}(\text{In-H})$ [ MHz ]	348.3(2)	347.5(6)	347.6(6)	348.5(7)	347.9(7)	347.4(7)
$\delta_1$ [ % ]	0.78(8)	0.78(7)	1.01(7)	0.85(9)	0.74(8)	0.88(8)
$\eta_1$	0.00	0.059(12)	0.073(12)	0.049(20)	0.061(15)	0.086(11)
$f_1$ [ % ]	37.4(18)	40.9(12)	42.7(11)	41.1(15)	40.3(15)	43.4(14)
$\nu_{Q2}(\text{In-H})$ [ MHz ]	461.3(6)	458.7(31)	461.2(22)	462.4(19)	461.1(19)	461.3(17)
$\delta_2$ [ % ]	1.32(16)	2.02(21)	1.61(15)	1.16(15)	1.27(14)	1.13(13)
$\eta_2$	0.00	0.047(66)	0.043(60)	0.003(-)	0.000(-)	0.042(40)
$f_2$ [ % ]	22.9(11)	23.5(10)	25.9(9)	27.6(11)	30.2(12)	30.8(11)
$\nu_{Q3}$ [ MHz ]	0.9(1)	7.1(2)	11.2(2)	13.6(4)	14.8(4)	15.9(3)
$\delta_3$ [ % ]	30.0	28.2(30)	23.9(27)	29.3(42)	30.6(47)	15.9(30)
$\eta_3$	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
$f_3$ [ % ]	39.7(14)	35.6(8)	31.4(7)	31.3(9)	29.5(10)	25.8(8)
C	0.009(1)	0.0099(4)	0.0076(3)	0.0056(4)	0.0048(4)	0.0054(4)
$A_{22}^{\text{app}}$	- 0.148	- 0.148	- 0.148	- 0.148	- 0.148	- 0.148

$$[ \nu_{Q1c}/\nu_{Q2} : \sigma_0^{\text{eff}} : 0.2961 / \sigma_1^{\text{eff}} : 0.4177 / \sigma_2^{\text{eff}} : 0.0586 / \sigma_3^{\text{eff}} : 0.1164 ]$$

$$[ \nu_{Q3} : \sigma_0^{\text{eff}} : 0.0000 / \sigma_1^{\text{eff}} : 0.3021 / \sigma_2^{\text{eff}} : 0.2621 / \sigma_3^{\text{eff}} : 0.3247 ]$$

Tab. VII.3 : Fitergebnisse der Meßreihe  $^{111}\text{In-H}\langle\text{Si}\rangle/3c/$  unter Zugspannung entlang  $\langle 100 \rangle$

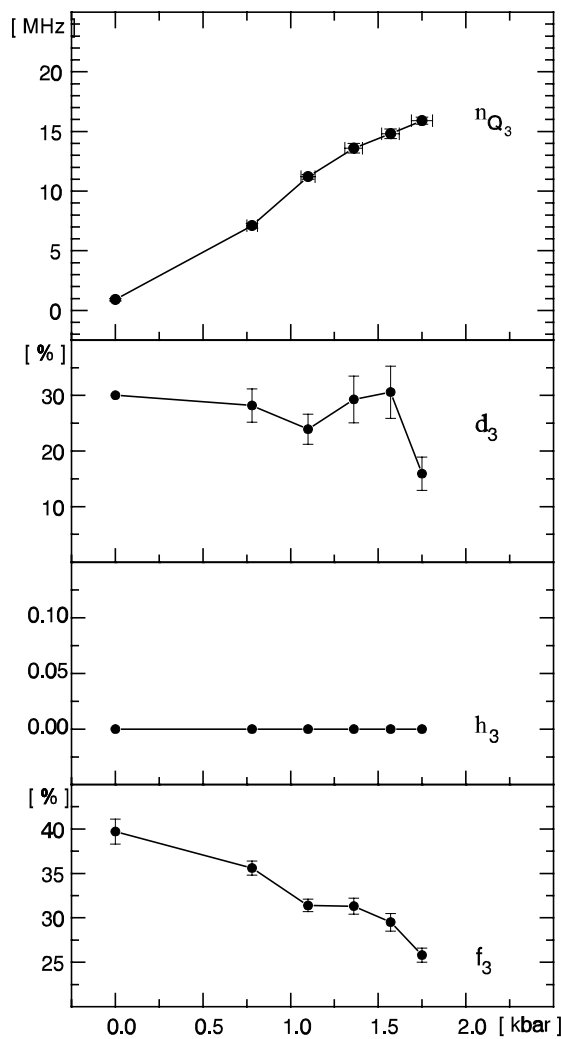


Abb. VII.13 : Darstellung der Fitparameter für den spannungsinduzierten EFG, Zugspannung entlang  $\langle 100 \rangle$

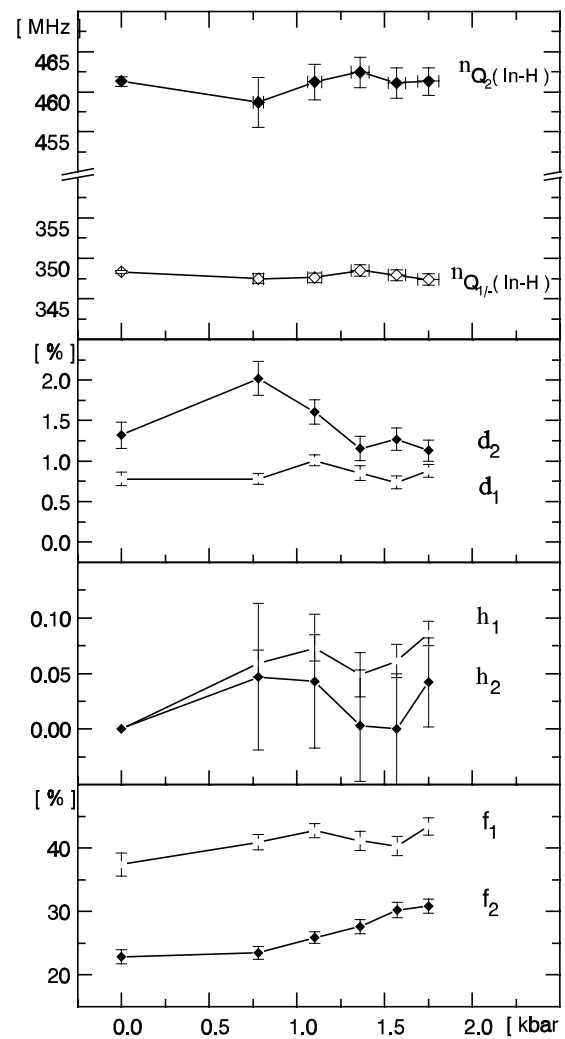


Abb. VII.14 : Darstellung der Fitparameter für die In-H-Wechselwirkung unter Zugspannung entlang  $\langle 100 \rangle$

Während die spannungsinduzierte Gitterfrequenz  $\nu_{Q_3}$  linear ansteigt, bleiben die In-H-Wechselwirkungsfrequenzen  $\nu_{Q_{1/2}}$  und  $\nu_{Q_2}$  auch unter dem Einfluß einer uniaxialen Zugspannung in etwa konstant. Durch die Überlagerung mit dem zusätzlichen Gitterfeldgradienten ist der resultierende EFG jedoch nicht mehr axialsymmetrisch ( d.h.  $\eta_1, \eta_2 \neq 0$  ).

Auch im Fall einer  $\langle 100 \rangle$ -Zugspannungsachse wird offensichtlich bei zunehmender Materialspannung Wasserstoff freigesetzt. Die damit verbundene Neubildung von In-H-Paaren macht sich im Anstieg der entsprechenden Anteile  $f_1$  bzw.  $f_2$  bemerkbar.

### VII.1.c. In-H-Komplexe in Si unter uniaxialer Zugspannung entlang einer $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse

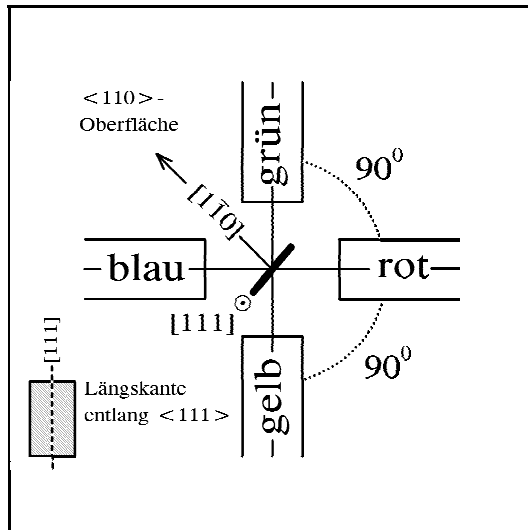


Abb. VII.15 : Orientierung der Detektoren bei Zug- / Druckspannung entlang  $\langle 111 \rangle$

Während ein uniaxialer Zug entlang einer  $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse alle vier  $\langle 111 \rangle$ -Achsen äquivalent läßt, sollte bei einem gerichteten Zug entlang einer  $\langle 111 \rangle$ -Richtung eine der vier Achsen von den anderen zu unterscheiden sein.

Abb. VII.15/16 zeigt die gewählte Probengeometrie, bei der die  $[111]$ -Spannungsachse senkrecht auf der Detektorebene steht. Die Lage der Probenoberfläche legt die Orientierung des Kristalls im ortsfesten Detektorsystem eindeutig fest. Da die Detektoren in diesem Fall jedoch nicht wie bisher entlang gleichindizierter Kristall-

achsen stehen, mußten zur Berechnung der  $\sigma_n^{eff}$ -Koeffizienten zunächst die Detektorwinkel  $\theta_i$  und  $\varphi_i$  im Hauptachsensystem des EFG bestimmt werden [ Kap. IX.2. ].

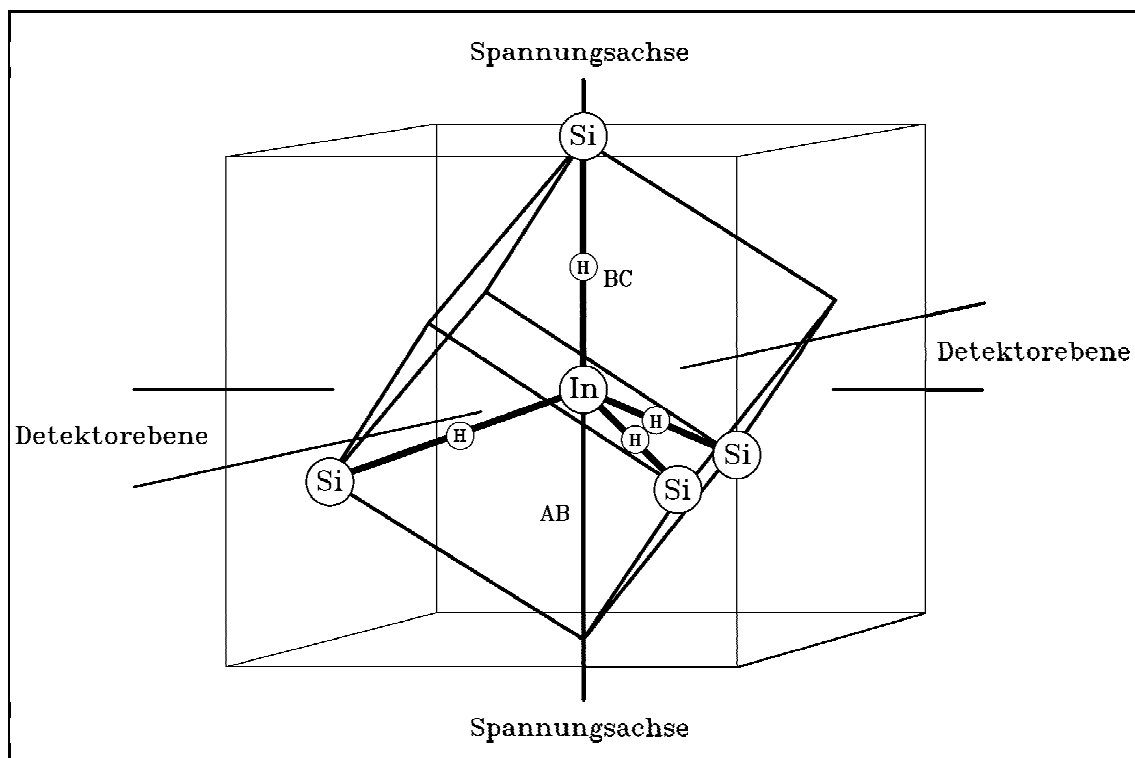
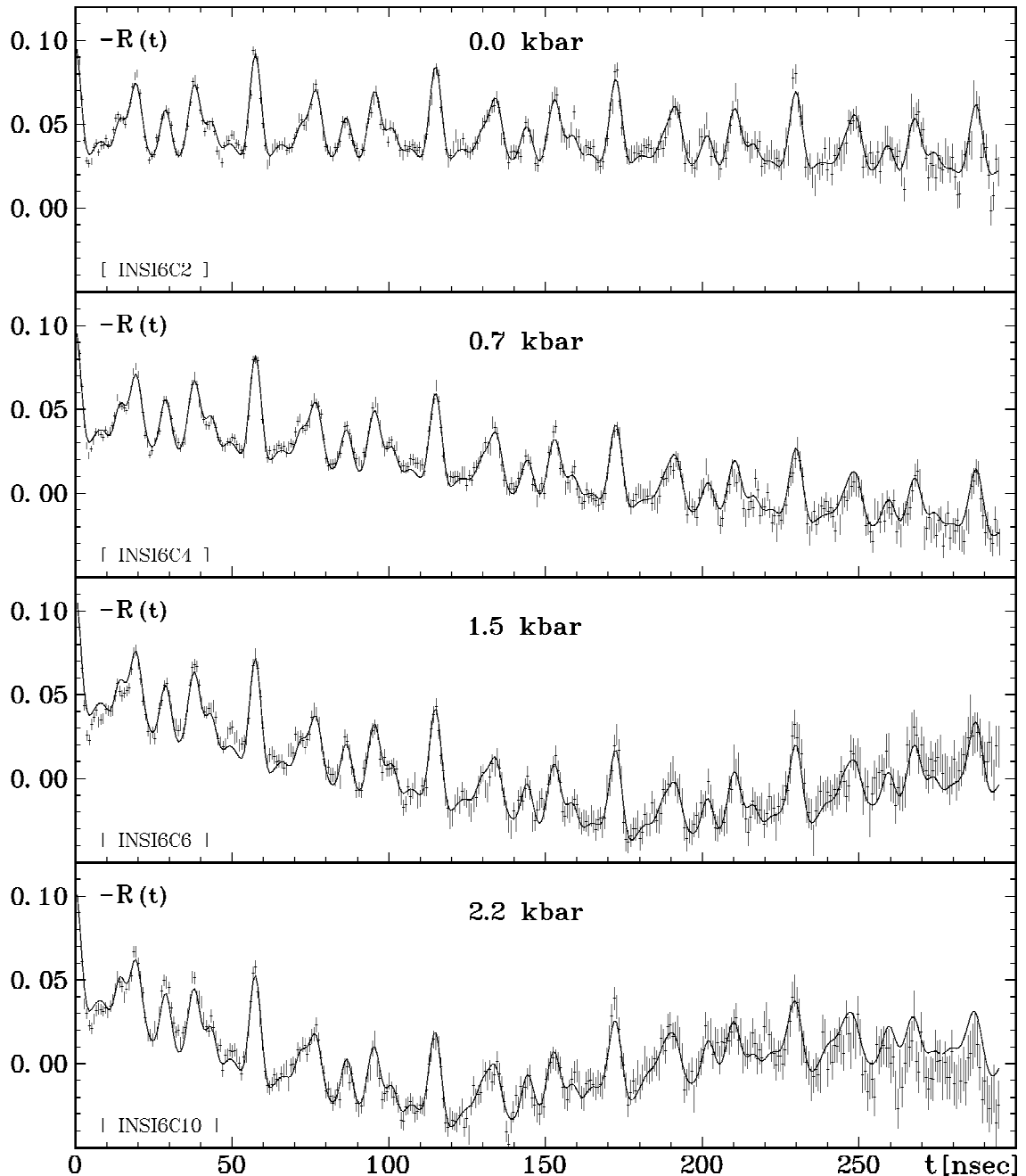


Abb. VII.16 : Der In-H-Komplex im Si-Kristallsystem unter dem Einfluß einer externen uniaxialen Zugspannung entlang der  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse





**Abb. VII.17 :** PAC-Spektren für das System  $^{111}\text{In-H}\langle\text{Si}\rangle/6c/$  bei einer extern angelegten uniaxialen Zugspannung entlang einer  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse ( $T_m = RT$ )

In den PAC-Spektren [ Abb. VII.17 ] lassen sich wiederum die für die In-H-Paare in Si charakteristischen Quadrupolfrequenzen  $\nu_{Q1/}$  und  $\nu_{Q2}$  beobachten. Als Folge des unter Spannungseinfluß zusätzlich auftretenden Gitterfeldgradienten ist den Spektren eine langsame Oszillation  $\nu_{Q3}$  überlagert. Die Form des Wechselwirkungsmusters bleibt jedoch auch bei Erhöhung der Zugspannung erhalten, was bereits darauf hindeutet, daß es nicht zu einer spannungsbedingten Umlagerung der In-H-Komplexe kommt.

Unter dem Einfluß einer Zugspannung entlang der  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung wird die Einheitszelle trigonal verzerrt, was einen axialsymmetrischen EFG ( $\eta_3=0$ ) zur Folge hat. Die in Abb. VII.18/19 graphisch dargestellten Fitparameter [ Tab. VII.4 ] zeigen erneut ein lineares Ansteigen der Gitterfrequenz  $\nu_{Q_3}$ . Während sich die zu den In-H-Paaren gehörenden Wechselwirkungsfrequenzen  $\nu_{Q_{1/2}}$  und  $\nu_{Q_2}$  nicht wesentlich ändern, bedingt die Überlagerung von zwei EFG allerdings das Auftreten eines Asymmetrieparameters  $\eta_1, \eta_2 \neq 0$ .

Für diejenigen In-H-Komplexe, die entlang der Zugspannungsachse ausgerichtet sind, führt die Überlagerung des H-induzierten EFG mit dem spannungsbedingten Gitterfeldgradienten zu einem resultierenden EFG, der weiterhin axialsymmetrisch ist. Ein weiteres Indiz dafür, daß es nicht gelungen, ist die In-H-Komplexe entlang der Spannungsachse auszurichten, ist die Tatsache, daß der beobachtete EFG jedoch nicht axialsymmetrisch ist.

Wie bereits bei den vorhergehenden Experimenten wird unter Spannungseinfluß offensichtlich weiterer Wasserstoff freigesetzt, der dann zur Bildung neuer In-H-Paare führt.

Zugspannung [ kbar ] $\parallel \langle 111 \rangle$	O 0.00	I 0.73(3)	II 1.46(5)	III 2.18(8)
$\nu_{Q_{1/2}}$ (In-H) [ MHz ]	348.4(2)	348.4(2)	348.6(2)	349.0(3)
$\delta_1$ [ % ]	0.22(4)	0.28(4)	0.33(6)	0.38(7)
$\eta_1$	0.00	0.041(7)	0.051(8)	0.081(6)
$f_1$ [ % ]	34.2(15)	33.8(6)	36.3(8)	34.8(13)
$\nu_{Q_2}$ (In-H) [ MHz ]	463.0(3)	462.7(3)	462.9(4)	463.2(5)
$\delta_2$ [ % ]	0.40(8)	0.51(7)	0.39(8)	0.60(11)
$\eta_2$	0.00	0.019(24)	0.053(11)	0.050
$f_2$ [ % ]	19.3(9)	21.2(6)	21.7(8)	24.0(11)
$\nu_{Q_3}$ [ MHz ]	1.8(1)	6.8(1)	17.2(2)	25.6(2)
$\delta_3$ [ % ]	19.2(79)	18.0	17.6(9)	21.8(13)
$\eta_3$	0.00	0.00	0.00	0.00
$f_3$ [ % ]	46.5(12)	45.0	42.0	41.2(8)
C	- 0.021(1)	- 0.021(1)	- 0.009(1)	- 0.013(1)
$A_{22}^{\text{app.}}$	- 0.120	- 0.120	- 0.120	- 0.120

$$[ \nu_{Q_{1/2}}/\nu_{Q_2} : \sigma_0^{\text{eff}} : 0.2370 / \sigma_1^{\text{eff}} : 0.3579 / \sigma_2^{\text{eff}} : 0.3048 / \sigma_3^{\text{eff}} : 0.1003 ]$$

$$[ \nu_{Q_3} : \sigma_0^{\text{eff}} : 0.0000 / \sigma_1^{\text{eff}} : 0.8465 / \sigma_2^{\text{eff}} : 0.0000 / \sigma_3^{\text{eff}} : 0.1535 ]$$

Tab. VII.4 : Fitergebnisse der Meßreihe  $^{111}\text{In-H}<\text{Si}>/6c/$  unter Zugspannung entlang  $\langle 111 \rangle$

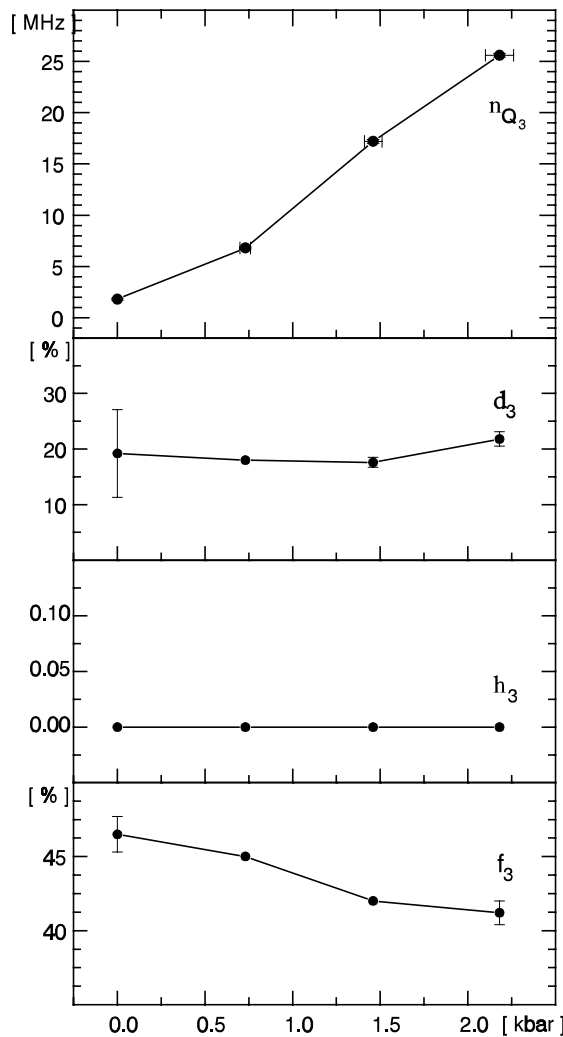


Abb. VII.18 : Darstellung der Fitparameter für den spannungsinduzierten EFG, Zugspannung entlang  $\langle 111 \rangle$

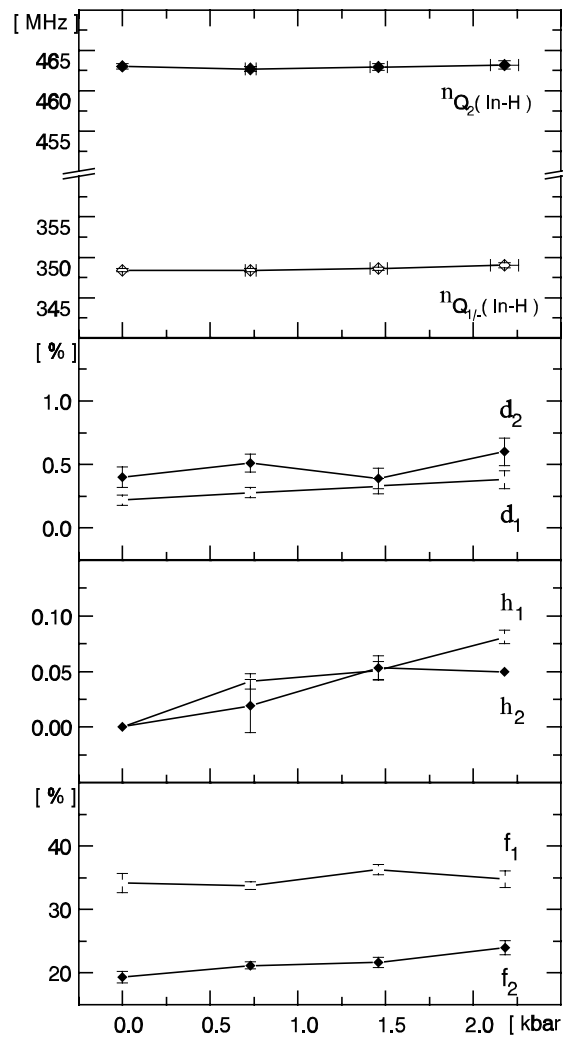


Abb. VII.19 : Darstellung der Fitparameter für die In-H-Wechselwirkung unter Zugspannung entlang  $\langle 111 \rangle$

Betrachtet man nun den Verlauf der theoretisch berechneten  $\sigma_n^{\text{eff}}$ -Koeffizienten in Abhängigkeit vom Anteil  $X$  an In-H-Paaren, die entlang der äußeren Zugspannung ausgerichtet sind [ Abb. VII.20 ], so erwartet man bei vollständiger Defektorientierung entlang der Zugspannungsachse ( $X=100\%$ ), daß nur noch die Grundfrequenz  $\omega_1$  in den Spektren auftritt. Daß bei einem senkrecht auf der Detektorebene stehenden EFG neben der Grundfrequenz  $\omega_1$  auch noch eine merkliche Beimischung von  $\omega_3$  auftritt, erklärt sich aufgrund des endlichen Öffnungswinkels der Detektoren.

Bei angenommener Gleichverteilung sind nur  $1/4$  der In-H-Paare ( $X=25\%$ ) entlang der Spannungsachse orientiert. Die zugehörigen Fourierkoeffizienten lassen in diesem Fall ein völlig anderes Wechselwirkungsmuster erwarten.

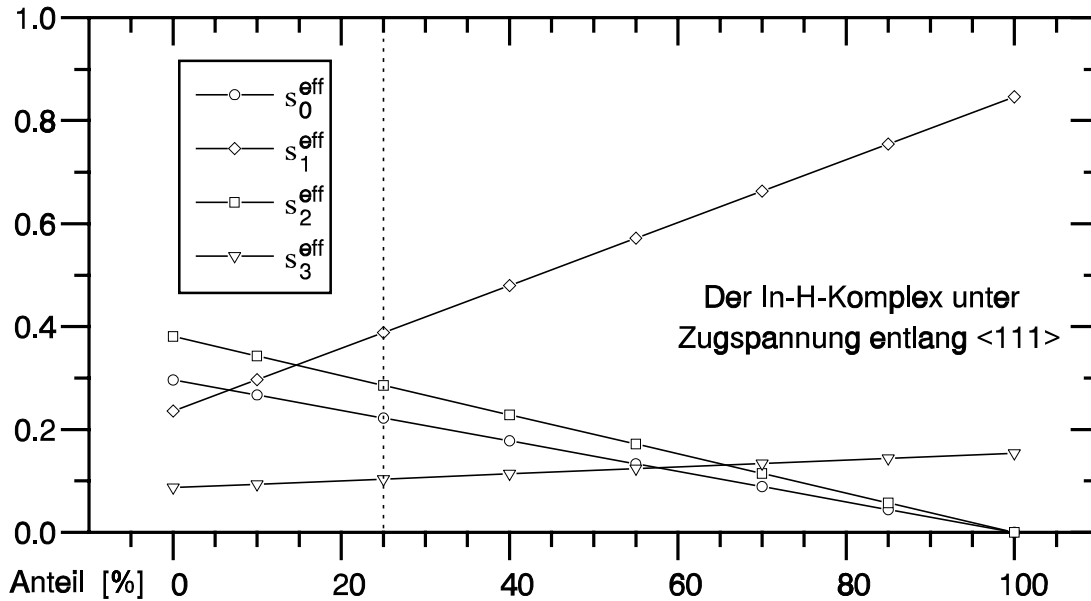


Abb. VII.20 : Verlauf der  $\sigma_n^{\text{eff}}$ -Koeffizienten in Abhängigkeit vom Anteil X an In-H-Komplexen, die entlang der  $\langle 111 \rangle$ -Zugspannungsachse ausgerichtet sind

Die beste Anpassung an die gemessenen Spektren erhält man unter der Annahme, daß 20% der In-H-Paare entlang der  $\langle 111 \rangle$ -Zugspannungsachse ausgerichtet sind. Der Anteil X läßt sich dabei mit einer Genauigkeit von ca.  $\pm 5\%$  angeben. Abbildung VII.21 zeigt am Beispiel maximaler Zugspannung ( 2.2 kbar ) zum Vergleich die theoretisch berechneten R-Wert-Spektren für  $X=0\%$  bzw.  $100\%$ .

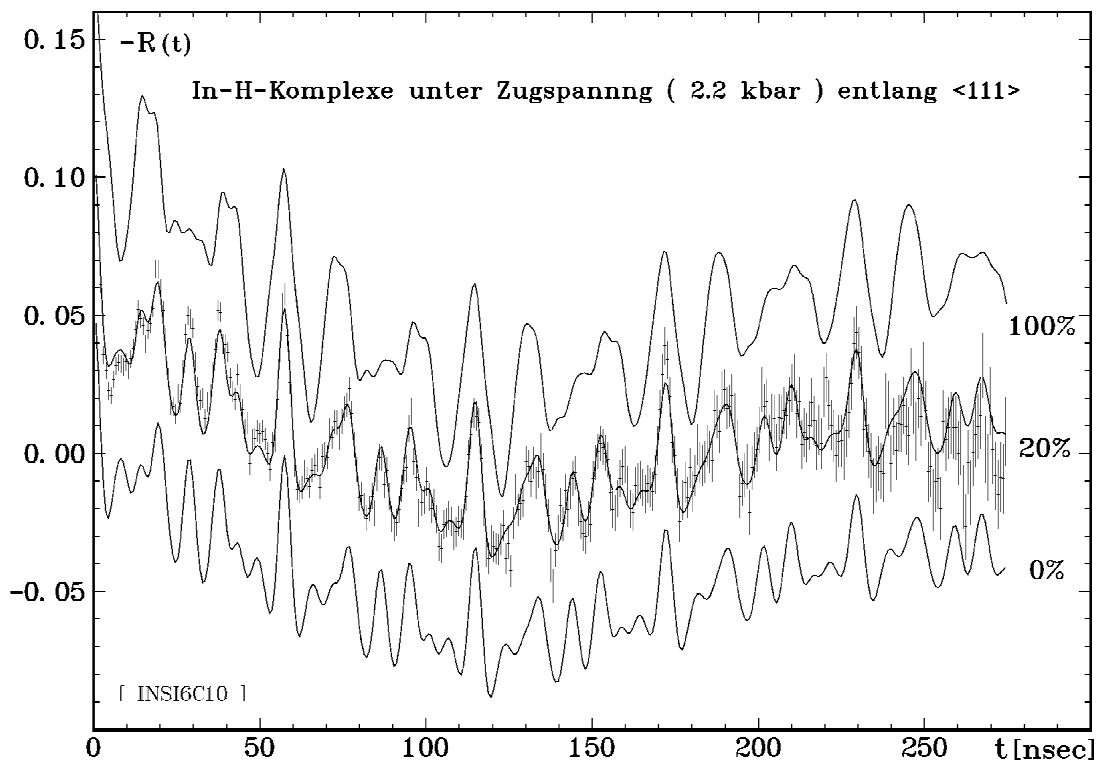


Abb. VII.21 : Vergleich der theor. Fitfunktionen in Abhängigkeit vom Anteil X [%] der In-H-Komplexe, die entlang der äußeren  $\langle 111 \rangle$ -Spannungsachse ausgerichtet sind

Im Rahmen der Meßgenauigkeit läßt sich auch bei einer  $\langle 111 \rangle$ -Spannungsachse keine signifikante Ungleichbesetzung der verschiedenen Orientierungen erkennen. Ein möglicher Grund hierfür könnte in der Beweglichkeit des Wasserstoffs liegen. Die Verweildauer des H-Protons liegt zwar bei Raumtemperatur deutlich über dem PAC-Zeitfenster ( max.  $\approx 800$  ns ), so daß der In-H Komplex für die PAC-Messung statisch erscheint, falls der Wasserstoff allerdings unter geringem Energieaufwand zwischen seinen vier äquivalenten Lagen hüpfen kann, wäre jedoch im zeitlichen Mittel keine Gitterposition bevorzugt. Senkt man nun die Meßtemperatur  $T_m$  ab und versucht so den Wasserstoff einzufrieren, dann erhält man die folgenden Spektren [ Abb. VII.22 ].

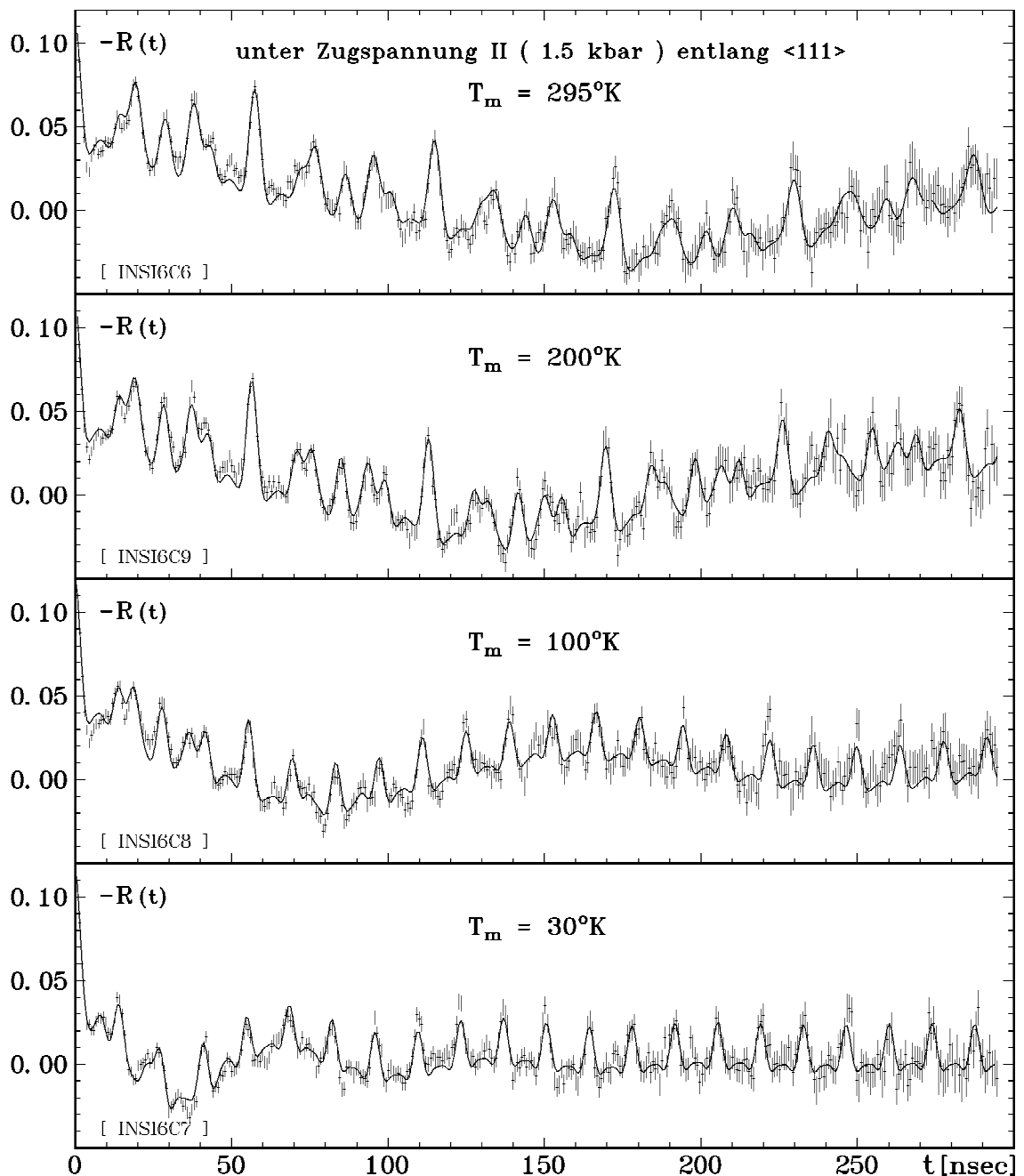


Abb. VII.22 : PAC-Spektren für das System  $^{111}\text{In-H}\langle\text{Si}\rangle/6\text{c/}$  unter uniaxialer Zugspannung entlang der  $\langle 111 \rangle$ -Achse bei Absenkung der Meßtemperatur

Bei dieser Meßreihe wurde die Probe in einem speziell für Tieftemperaturmessungen konstruierten Probenhalter [ Abb. IV.10 ] eingebaut. Die PAC-Messung erfolgte zunächst bei Raumtemperatur (  $T_m = 295^\circ\text{K}$  ) unter einer Zugspannung von 1.46(5) kbar entlang einer  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung. Anschließend wurde die Meßtemperatur auf  $T_m = 30^\circ\text{K}$  abgesenkt und danach schrittweise erhöht.

In den PAC-Spektren [ Abb. VII.22 ] sind bei Verringerung der Meßtemperatur zwar deutliche Veränderungen des Wechselwirkungsmusters beobachtbar, diese lassen sich jedoch nicht auf eine Änderung der zugehörigen Fourierkoeffizienten zurückführen. Die Veränderungen in den PAC-Spektren sind vollständig reversibel und werden durch eine temperaturabhängige Änderung der Wechselwirkungsfrequenzen  $\nu_{Q_{1/2}}$  und  $\nu_{Q_2}$  hervorgerufen. Die Anpassung an die gemessenen Spektren wurde, wie bereits bei der vorhergehenden Meßreihe, unter der Annahme  $X=20\%$  vorgenommen ( d.h. etwa  $20 \pm 5\%$  der In-H-Paare sind entlang der  $\langle 111 \rangle$ -Zugspannungsachse ausgerichtet ).

Auch bei Verringerung der Meßtemperatur lassen sich somit keine, auf eine Defektorientierung hindeutende, Veränderungen in den Spektren erkennen.

Zugspannung $\parallel \langle 111 \rangle$ Meßtemperatur $T_m$	II 295°K	II.a 200°K	II.b 100°K	II.c 30°K
$\nu_{Q_{1/2}}(\text{In-H})$ [ MHz ]	348.7(2)	354.5(2)	359.9(17)	272.4(16)
$\delta_1$ [ % ]	0.42(6)	0.48(6)	4.1(4)	6.3(8)
$\eta_1$	0.051(7)	0.074(6)	0.123(23)	0.206(34)
$f_1$ [ % ]	38.1(11)	35.3(10)	37.1(13)	32.3(17)
$\nu_{Q_2}(\text{In-H})$ [ MHz ]	463.1(4)	471.2(2)	480.4(3)	487.0(2)
$\delta_2$ [ % ]	0.53(9)	0.19(5)	0.09(5)	0.01(5)
$\eta_2$	0.052(11)	0.031(11)	0.038(9)	0.017(17)
$f_2$ [ % ]	23.8(9)	27.7(8)	24.1(10)	22.9(10)
$\nu_{Q_3}$ [ MHz ]	17.6(1)	23.3(2)	38.5(3)	95.5(8)
$\delta_3$ [ % ]	11.1(13)	15.1(10)	22.1(11)	25.5(12)
$\eta_3$	0.00	0.00	0.00	0.00
$f_3$ [ % ]	38.1(7)	37.0(6)	38.8(8)	44.8(14)
C	- 0.008(1)	- 0.007(1)	- 0.006(1)	- 0.005(4)
$A_{22}^{\text{app}}$	- 0.120	- 0.120	- 0.120	- 0.120

$$[ \nu_{Q_{1/2}}/\nu_{Q_2} : \sigma_0^{\text{eff}} : 0.2370 / \sigma_1^{\text{eff}} : 0.3579 / \sigma_2^{\text{eff}} : 0.3048 / \sigma_3^{\text{eff}} : 0.1003 ]$$

$$[ \nu_{Q_3} : \sigma_0^{\text{eff}} : 0.0000 / \sigma_1^{\text{eff}} : 0.8465 / \sigma_2^{\text{eff}} : 0.0000 / \sigma_3^{\text{eff}} : 0.1535 ]$$

Tab. VII.5 : Fitergebnisse der Meßreihe  $^{111}\text{In-H}\langle\text{Si}\rangle/6c/$  unter uniaxialer Zugspannung entlang der  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse bei Absenkung der Meßtemperatur

Trägt man die gemessenen Wechselwirkungsfrequenzen  $\nu_{Q_{1/2}}$  und  $\nu_{Q_2}$  gegen die Meßtemperatur  $T_m$  auf [ Abb. VII.24 ], so erkennt man zunächst den üblichen, leichten Frequenzanstieg ( einige % ) zu tiefen Temperaturen hin. Die bei der Frequenz  $\nu_{Q_1}$  auftretende Frequenzverschiebung ist mit einem Umladungsprozeß des Cd-H-Paares korreliert [ SKU 92a/b ]. Bei niedrig liegendem Fermi-niveau ( tiefe Temperatur ) liegt der Cd-H Komplex neutral vor  $(\text{Cd-H})^0$ , charakterisiert durch  $\nu_{Q_{1/0}}=269$  MHz. Verschiebt sich das Fermi-niveau über das Umladungsniveau des Komplexes, so wird dieser negativ geladen  $(\text{Cd-H})^-$ . Durch die geänderte Ladungsverteilung aufgrund des zusätzlichen Elektrons ändert sich der EFG und die Frequenz steigt bei Raumtemperatur auf  $\nu_{Q_{1/2}}=349$  MHz. Durch die oberflächennahe Bandverbiegung findet dieser Übergang innerhalb der verschiedenen Tiefen bei unterschiedlichen Temperaturen statt, was zu einer statischen Relaxation führt. Das Meßsignal ist folglich für  $\nu_{Q_{1/2}}$  zunächst ungedämpft, und zeigt in der Übergangsstufe eine Relaxation, die sich in einer Zunahme der Dämpfung  $\delta_1$  bemerkbar macht [ vgl. Kap. III.4.b. ].

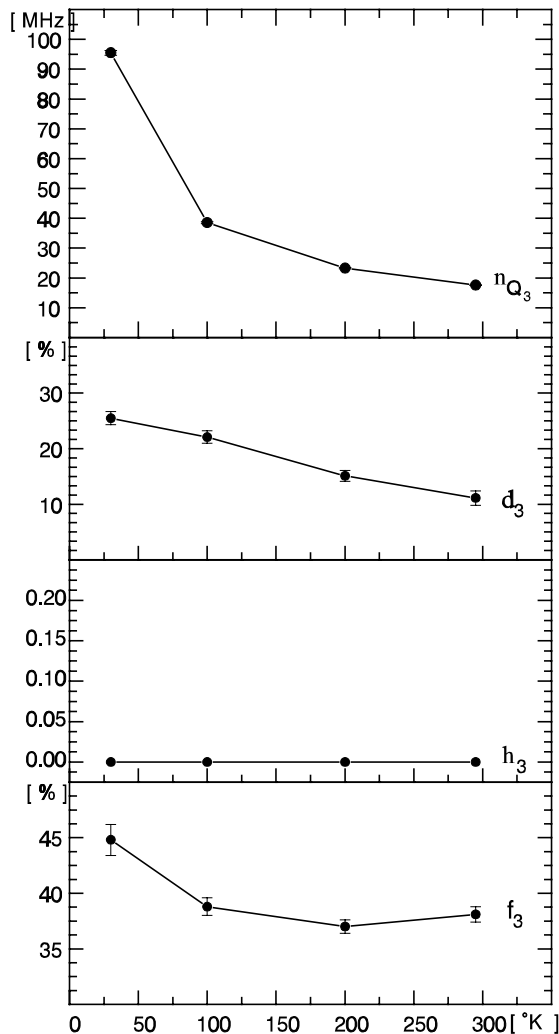


Abb. VII.23 : Darstellung der Fitparameter für den spannungsinduzierten EFG, Zugspannung entlang  $\langle 111 \rangle$

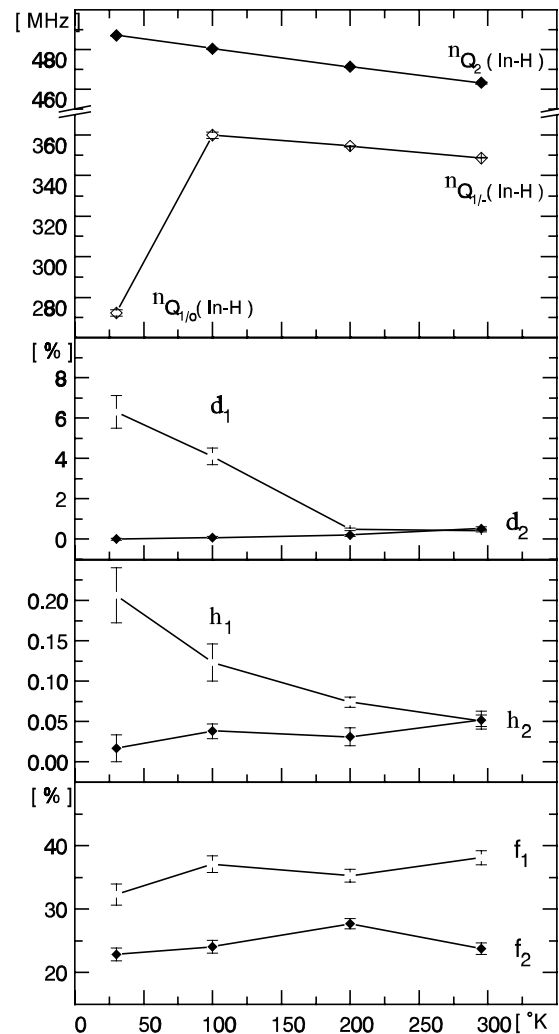


Abb. VII.24 : Darstellung der Fitparameter für die In-H-Wechselwirkung unter Zugspannung entlang  $\langle 111 \rangle$

Auffällig ist weiterhin das starke Anwachsen der spannungsinduzierten Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_{Q_3}$  von 17.6(1) MHz bei  $T_m=295^\circ\text{K}$  auf 95.5(8) MHz bei  $T_m=30^\circ\text{K}$  [ vgl. Tab. VII.5 / Abb. VII.23 ].

Die Temperaturabhängigkeit der elastischen Konstanten [ vgl. Kap. II.2. ] würde bei gleichem Biegeradius einen Spannungszuwachs von einigen Prozent erwarten lassen. Die hieraus resultierende Frequenzänderung entspricht damit in etwa dem üblichen Temperaturgang der Wechselwirkungsfrequenzen und würde somit lediglich einen Frequenzanstieg von einigen MHz erklären.

Diese Überlegungen gelten allerdings nur für homogene Kristallgitter. Die implantierten  $^{111}\text{In}$ -Sondenkerne befinden sich jedoch in einer hochdotierten ( $\approx 10^{18}$  Atome/ $\text{cm}^3$ ) sehr dünnen ( $\approx 500 \text{ \AA}$ ) Schicht umgeben von intrinsischem Si-Substratmaterial. Für die beobachtete Temperaturabhängigkeit des spannungsinduzierten Gitterfeldgradienten könnten pobeninterne Materialspannungen innerhalb der implantierten Zone verantwortlich gemacht werden.

Bereits in Kap. VI. wurden erste Indizien dafür beobachtet, daß sich die Probe auch ohne äußere Einflüsse in einem internen Spannungszustand befindet. Die unerwartet große Temperaturabhängigkeit des spannungsinduzierten Gitterfeldgradienten ist ein weiteres Indiz für das Auftreten einer implantationsbedingten, lokalen Gitterverzerrung in der unmittelbaren Umgebung der Sondenatome.

Vergleicht man die kovalenten Radien der Si-Wirtsatome mit denen der In-Fremdatome ( Si:  $1.17 \text{ \AA}$  / In:  $1.44 \text{ \AA}$  ), so ist eine Gitterfehlpassung zu erwarten. Die beim Abkühlen der Probe beobachtete starke Zunahme der Gitterwechselwirkungsfrequenz ließe sich dadurch erklären, daß es infolge verschiedener Gitterparameter und eines unterschiedlichen Temperaturverhaltens zu einer starken Deformation innerhalb der implantierten Zone kommt.



### VII.2.a. In-H-Komplexe in Ge unter uniaxialer Zug- / Druckspannung entlang einer $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse

Die in Ge gebildeten In-H-Komplexe sind bereits in Kapitel V. charakterisiert worden. In den nun folgenden Experimenten soll, zunächst für eine  $\langle 110 \rangle$ -Spannungsachse, das Verhalten der In-H Paare unter dem Einfluß einer äußeren uniaxialen Zug- bzw. Druckspannung untersucht werden.

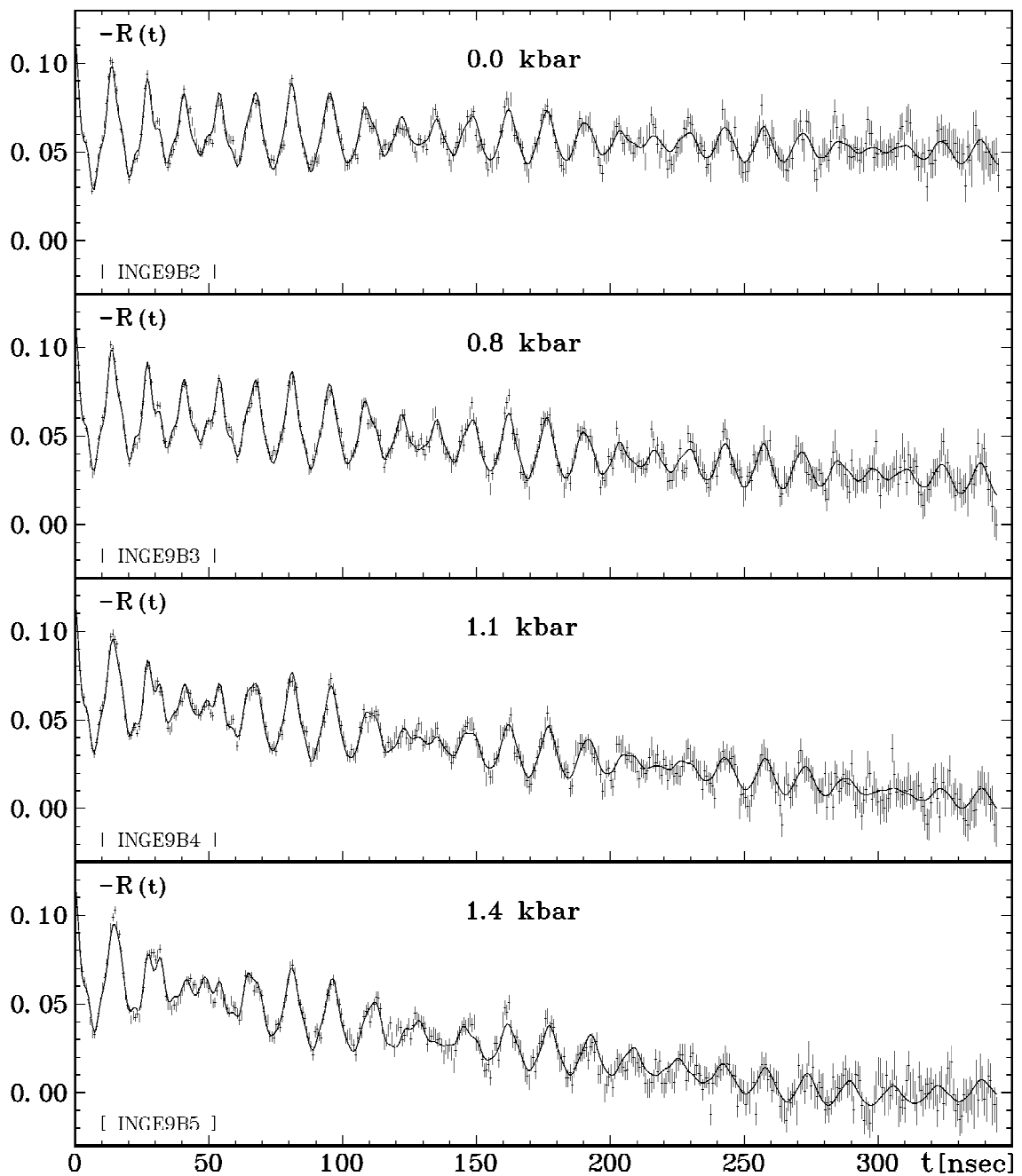


Abb. VII.25 : PAC-Spektren für das System  $^{111}\text{In-H}\langle\text{Ge}\rangle/9b/$  bei einer extern angelegten uniaxialen Zugspannung entlang einer  $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse ( $T_m = RT$ )

Die in Abbildung VII.25 dargestellten PAC-Spektren erhält man mit derselben Detektoranordnung, die bereits in Kap. VII.1.a. für eine  $\langle 110 \rangle$ -Spannungsachse gewählt wurde [ vgl. Abb.VII.2/3 ]. Die zugehörigen Fitergebnisse sind in Tab. VII.6 zusammengefaßt und in Abb. VII.26/27 graphisch dargestellt, Werte ohne Fehlerangabe wurden bei der Anpassung nicht variiert.

Nach der H-Plasmabeladung bei  $60^\circ\text{C}$  ( 3 Std. ) läßt sich wiederum die für In-H-Paare in Ge bei Raumtemperatur (  $RT = 295^\circ\text{K}$  ) charakteristische Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_{Q_1} = 413(1)$  MHz nachweisen. Zusätzlich tritt eine weitere Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_{Q_2} = 490(2)$  MHz auf. Beide Frequenzen besitzen eine axiale (  $\eta = 0$  )  $\langle 111 \rangle$ -Symmetrie und sind praktisch ungedämpft (  $\delta \approx 1\%$  ), was auf einen sehr einheitlichen zugrundeliegenden Defektkomplex schließen läßt.

Daß auch die Frequenz  $\nu_{Q_2}$  eindeutig mit dem Wasserstoff korreliert ist, zeigt das Verhalten der jeweiligen Anteile  $f_1$  bzw.  $f_2$ . Unter zunehmender Zugspannung löst sich der durch die Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_{Q_2}$  charakterisierte Defektkomplex auf, und der Anteil  $f_1$  der In-H-Paare steigt im gleichen Maße kontinuierlich an.

Zugspannung [ kbar ] $\parallel \langle 110 \rangle$	O 0.00	I 0.79(4)	II 1.12(6)	III 1.37(8)
$\nu_{Q_1}$ ( In-H ) [ MHz ]	414.2(4)	413.7(8)	413.7(3)	413.8(7)
$\delta_1$ [ % ]	0.56(15)	0.57(11)	0.82(9)	0.80(9)
$\eta_1$	0.00	0.048(20)	0.030	0.021(39)
$f_1$ [ % ]	14.6(19)	16.3(14)	25.6(13)	31.4(15)
$\nu_{Q_2}$ ( In-H ) [ MHz ]	492.3(3)	492.3(5)	490.5(9)	487.9(18)
$\delta_2$ [ % ]	1.27(7)	0.98(5)	1.39(8)	1.86(14)
$\eta_2$	0.00	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
$f_2$ [ % ]	54.2(12)	51.6(9)	43.2(10)	36.4(12)
$\nu_{Q_3}$ [ MHz ]	1.9(1)	5.4(2)	8.7(2)	10.1(2)
$\delta_3$ [ % ]	15.0	13.9(40)	6.9(17)	2.1(19)
$\eta_3$	0.00	0.10	0.20	0.35(6)
$f_3$ [ % ]	31.3(15)	32.1(11)	31.2(9)	32.2(9)
C	- 0.012(1)	- 0.011(1)	- 0.009(1)	- 0.009(1)
$A_{22}^{\text{app}}$	- 0.125	- 0.125	- 0.125	- 0.125

$$[ \nu_{Q_1} / \nu_{Q_2} : \sigma_0^{\text{eff}} : 0.2963 / \sigma_1^{\text{eff}} : 0.3923 / \sigma_2^{\text{eff}} : 0.0781 / \sigma_3^{\text{eff}} : 0.1222 ]$$

$$[ \nu_{Q_3} : \sigma_0^{\text{eff}} : 0.0000 / \sigma_1^{\text{eff}} : 0.7628 / \sigma_2^{\text{eff}} : 0.0000 / \sigma_3^{\text{eff}} : 0.1261 ]$$

Tab. VII.6 : Fitergebnisse der Meßreihe  $^{111}\text{In-H}\langle\text{Ge}\rangle/9\text{b}$  unter Zugspannung entlang  $\langle 110 \rangle$

Bereits in Kap.V. wurde mit zunehmendem Wasserstoffgehalt der Probe das Auftreten einer zusätzlichen Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_{Q_2}$  beobachtet und damit erklärt, daß sich zusätzlich zu dem H-Atom, welches den Akzeptor In passiviert, weiterer interstieller Wasserstoff auf einem T-Platz in der Nähe des Sondenatoms befindet. Unter Spannungseinfluß wird dieser zusätzlich im Kristallgitter vorhandene Wasserstoff freigesetzt, was dann zu einer Zunahme des Anteils  $f_1$  an In-H Paaren führt. Daß dieser überschüssige Wasserstoff tatsächlich nur schwach im Kristallgitter gebunden ist, zeigte sich bereits beim Anlassen der Probe auf  $60^\circ\text{C}$  ( 10 Min.) [ vgl. Kap.V.2. ].

Desweiteren läßt sich wiederum eine spannungsinduzierte Gitterwechselwirkungsfrequenz  $\nu_{Q_3}$  beobachten, welche mit der von außen angelegten Zugspannung linear ansteigt. Bedingt durch die  $\langle 110 \rangle$ -Richtung der Spannungsachse ist der auftretende Gitterfeldgradient nicht axialsymmetrisch [ vgl. Kap. VI.1. ], der Asymmetrieparameter  $\eta_3$  steigt dementsprechend unter zunehmenden Spannungseinfluß deutlich an.

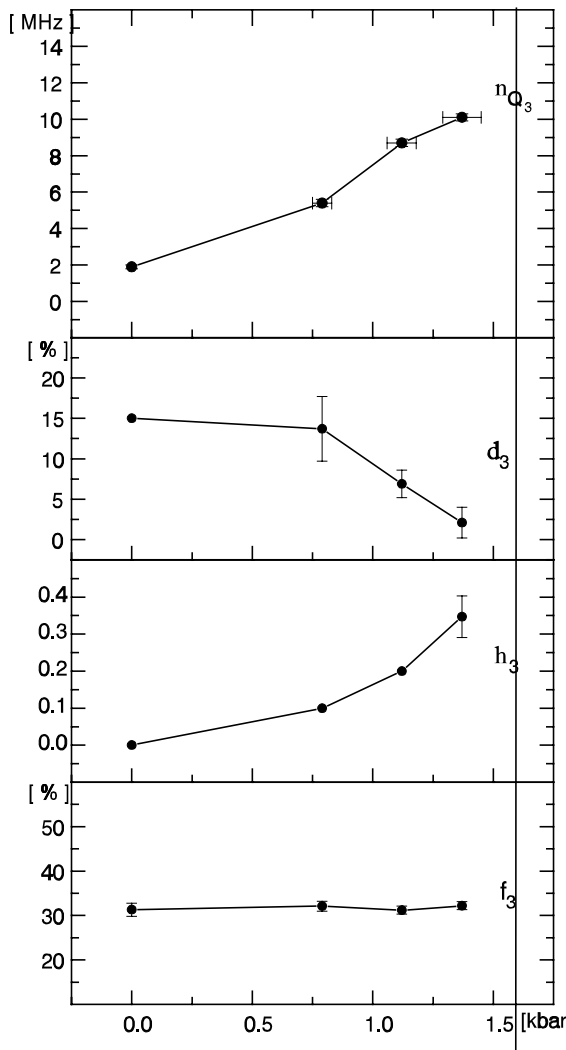


Abb. VII.26 : Darstellung der Fitparameter für den spannungsinduzierten EFG, Zugspannung entlang  $\langle 110 \rangle$

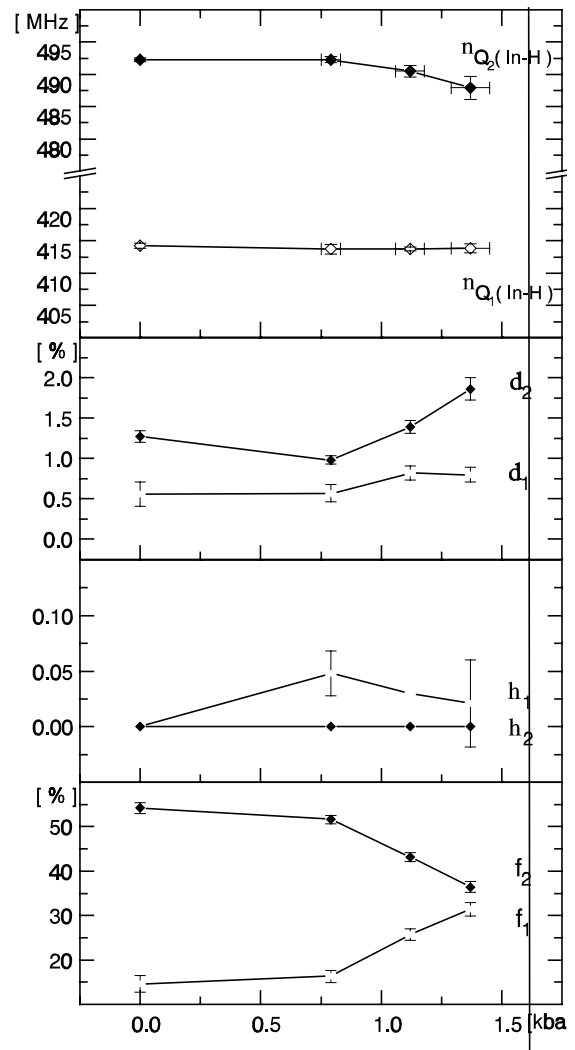


Abb. VII.27 : Darstellung der Fitparameter für die In-H-Wechselwirkung unter Zugspannung entlang  $\langle 110 \rangle$

Die beste Anpassung an die gemessenen Spektren erhält man unter der Annahme, daß der Wasserstoff die vier möglichen BC-Gitterpositionen gleichermaßen besetzt. Die für diesen Fall theoretisch berechneten  $\sigma_n^{eff}$ -Koeffizienten wurden bei der Anpassung der gemessenen PAC-Spektren [ Abb. II.25 ] zugrunde gelegt. Die bei einer Ungleichbesetzung zu erwartenden Änderungen in den  $\sigma_n^{eff}$ -Koeffizienten sind in Abb. VII.8 dargestellt. Der Anteil X [%] bezieht sich dabei auf diejenigen In-H-Komplexe, die senkrecht zur Detektorebene entlang der Zugspannungsachse ausgerichtet sind [ vgl. Abb. VII.3 ]. Für eine Gleichbesetzung der äquivalenten Gitterpositionen erhält man X = 50%. Die experimentelle Genauigkeit, mit welcher sich die  $\sigma_n^{eff}$ -Koeffizienten aus den gemessenen PAC-Spektren bestimmen lassen, läßt eine Abschätzung des Anteils an ausgerichteten In-H Paaren auf etwa  $\pm 10\%$  erwarten. Doch auch unter zunehmender Zugspannung lassen sich keine Anzeichen dafür erkennen, daß es zu einer spannungsinduzierten Umorientierung der In-H Paare kommt.

Bei gleicher Detektorgeometrie [ vgl. Abb. VII.2/3 ] wurde im folgenden Experiment das Verhalten der In-H Paare unter einer uniaxialen Druckspannung entlang der  $\langle 110 \rangle$ -Kristallrichtung untersucht. Die Druckspannungen wurden analog den Zugspannungen durch Biegespannungen erzeugt, wobei die Probenoberfläche nun konkav durchgebogen wurde. Beim Einspannen der Probe in die Mikrometerschraube zeigt sich, daß die implantierte und mit Wasserstoff beladene Probenoberfläche vorzugsweise eine konvexe Form annimmt. Dieses, bereits häufiger beobachtete Phänomen, hängt möglicherweise damit zusammen, daß der in der Probenoberfläche enthaltene Wasserstoff zu einer Aufweitung des Kristallgitters führt, wodurch sich die Vorzugsrichtung beim Biegen der Probe erklärt.

Die Wasserstoffbeladung erfolgte wie üblich in einem Hochdruckplasma bei  $60^\circ\text{C}$  ( 3 Std.). In den zugehörigen PAC-Spektren [ Abb. VII.28 ] läßt sich erneut die zu den In-H Paaren gehörende Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_{Q1} = 413(1)$  MHz sowie eine weitere Frequenz  $\nu_{Q2} = 470(2)$  MHz nachweisen. Beiden Frequenzen liegt ein axialsymmetrischer EFG (  $\eta_1/\eta_2 = 0$  ) entlang einer  $\langle 111 \rangle$ -Richtung zugrunde. Während  $\nu_{Q1}$  wiederum praktisch ungedämpft ist (  $\delta_1 < 1\%$  ), zeigt  $\nu_{Q2}$  eine deutlich größere Dämpfung (  $\delta_2 \approx 5\%$  ).

Der spannungsinduzierten Gitterfrequenz  $\nu_{Q3}$  liegt infolge des rhombisch verzerrten Kristallgitters (  $a \neq b \neq c$ ,  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$  ) ein nicht axialsymmetrischer EFG zugrunde. Mit zunehmender Druckspannung steigt der Asymmetrieparameter  $\eta_3$  kontinuierlich an, ferner beobachtet man eine Abnahme des Dämpfungsparameters  $\delta_3$ , die sich darauf zurückzuführen läßt, daß die Sondenkerne einer immer einheitlicheren Gitterwechselwirkung ausgesetzt sind.

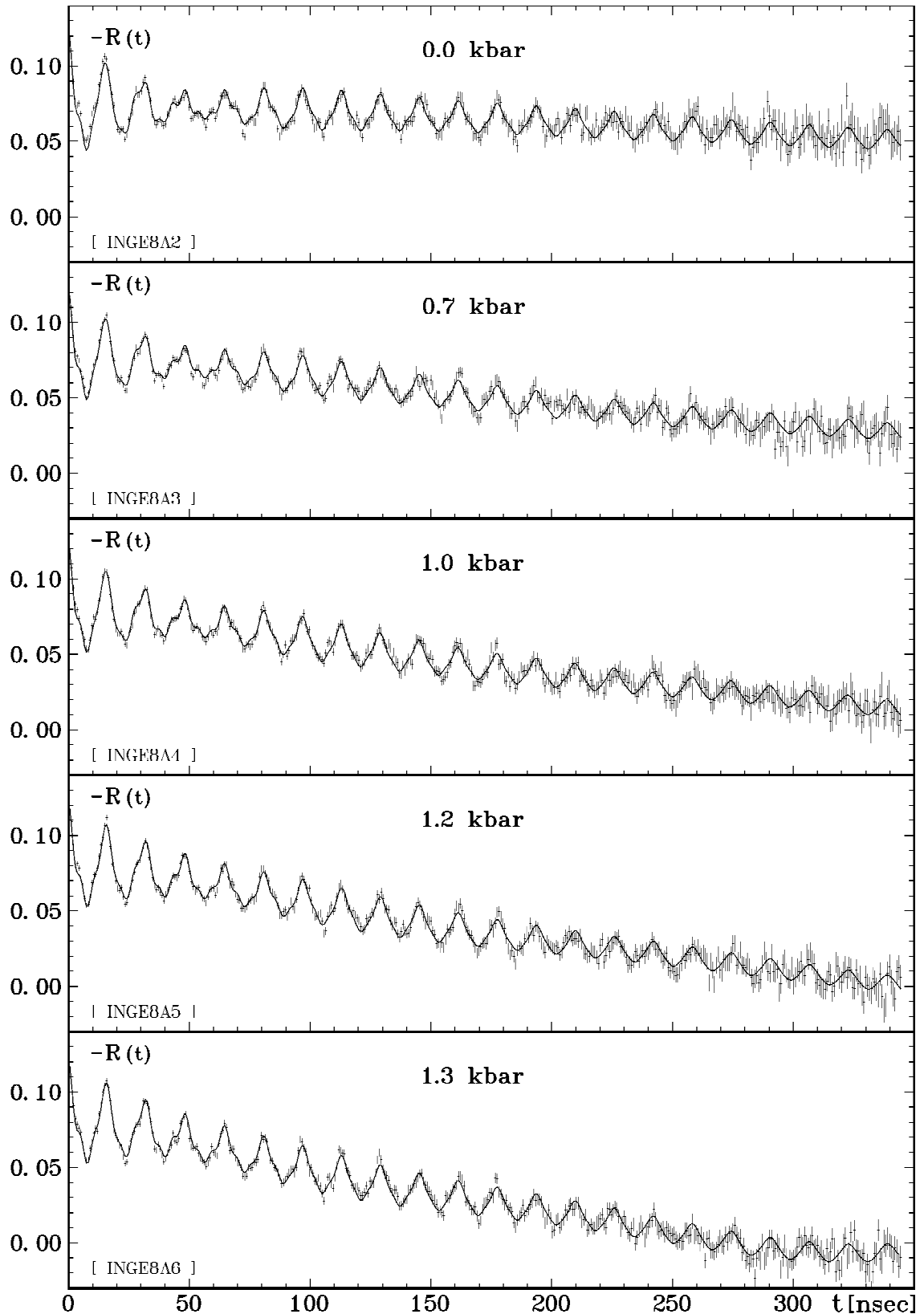


Abb. VII.28 : PAC-Spektren für das System  $^{111}\text{In-H}\langle\text{Ge}\rangle/8a/$  bei einer extern angelegten uniaxialen Druckspannung entlang einer  $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse (  $T_m=RT$  )

Druckspannung [ kbar ] $\parallel$ $\langle 110 \rangle$	O 0.00	I 0.67(4)	II 0.95(6)	III 1.16(8)	IV 1.34(9)
$\nu_{Q_1}(\text{In-H})$ [ MHz ]	413.0(3)	413.0(6)	413.3(5)	412.8(5)	413.0(5)
$\delta_1$ [ % ]	0.57(9)	0.70(9)	0.80(8)	0.90(8)	0.85(7)
$\eta_1$	0.000	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)	0.000(-)
$f_1$ [ % ]	27.1(29)	27.4(22)	30.9(20)	34.1(24)	34.2(15)
$\nu_{Q_2}(\text{In-H})$ [ MHz ]	471.5(14)	470.0	471.7(15)	464.2(17)	465.8(54)
$\delta_2$ [ % ]	5.45(47)	5.54(48)	5.10(46)	4.52(58)	5.24(56)
$\eta_2$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.002(-)
$f_2$ [ % ]	38.7(23)	32.4(18)	28.3(16)	22.0(19)	21.8(14)
$\nu_{Q_3}$ [ MHz ]	2.7(1)	5.6(2)	7.1(2)	8.0(2)	9.7(1)
$\delta_3$ [ % ]	25.0	15.0	10.8(20)	9.4(17)	6.4(10)
$\eta_3$	0.00	0.172(163)	0.220	0.242(55)	0.250
$f_3$ [ % ]	34.2(19)	38.9(19)	40.8(12)	43.9(14)	44.0(6)
C	- 0.002(1)	- 0.003(1)	- 0.002(1)	- 0.004(1)	- 0.004(1)
$A_{22}^{\text{app}}$	- 0.125	- 0.125	- 0.125	- 0.125	- 0.125

$$\begin{aligned} & [ \nu_{Q_1} / \nu_{Q_2} : \sigma_0^{\text{eff}} : 0.2963 / \sigma_1^{\text{eff}} : 0.3923 / \sigma_2^{\text{eff}} : 0.0781 / \sigma_3^{\text{eff}} : 0.1222 ] \\ & [ \nu_{Q_3} : \sigma_0^{\text{eff}} : 0.0000 / \sigma_1^{\text{eff}} : 0.7628 / \sigma_2^{\text{eff}} : 0.0000 / \sigma_3^{\text{eff}} : 0.1261 ] \end{aligned}$$

Tab. VII.7 : Fitergebnisse der Meßreihe  $^{111}\text{In-H}\langle\text{Ge}\rangle/8a/$  unter Druckspannung entlang  $\langle 110 \rangle$

Betrachtet man die Anteile  $f_1$  und  $f_2$  der H-induzierten Wechselwirkungsfrequenzen in Abhängigkeit von der angelegten Druckspannung [ Tab. VII.7 ], so zeigt sich erneut, daß sich der Wasserstoffkomplex, welcher der Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_{Q_2}$  zugrunde liegt, mit zunehmender Druckspannung aufzulösen beginnt, wobei gleichzeitig der Anteil  $f_1$  an In-H Paaren weiter ansteigt [ vgl. Abb. VII.30 ].

Wie bereits zuvor gelingt es auch unter einer extern angelegten uniaxialen Druckspannung nicht, eine merkliche Umorientierung der In-H Paare herzustellen. Die beste Anpassung an die gemessenen PAC-Spektren erhält man ebenfalls mit den  $\sigma_n^{\text{eff}}$ -Koeffizienten, die für eine angenommene Gleichbesetzung der vier äquivalenten BC-Gitterpositionen berechnet wurden.

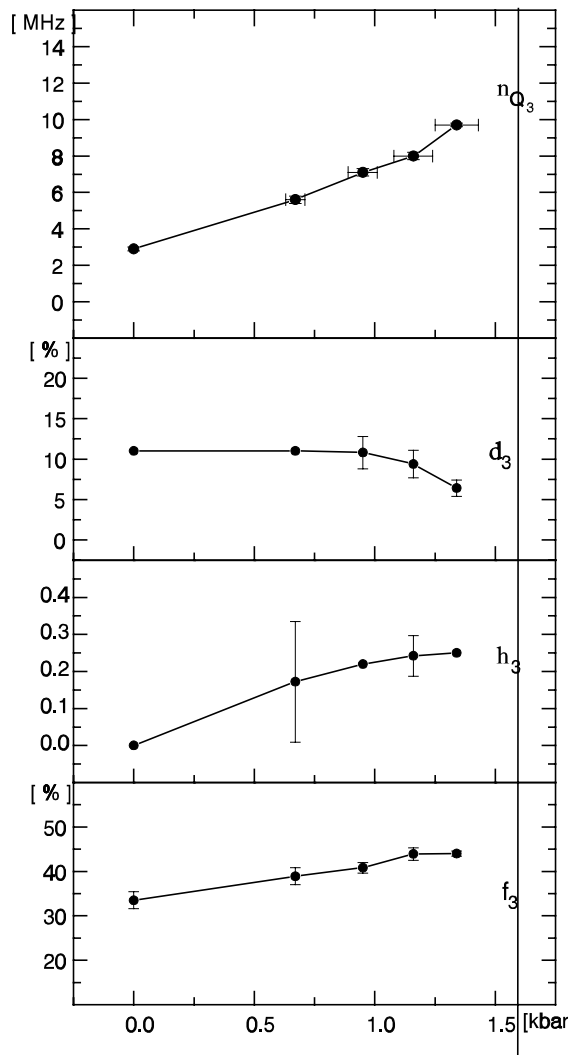


Abb. VII.29 : Darstellung der Fitparameter für den spannungsinduzierten EFG, Druckspannung entlang  $\langle 110 \rangle$

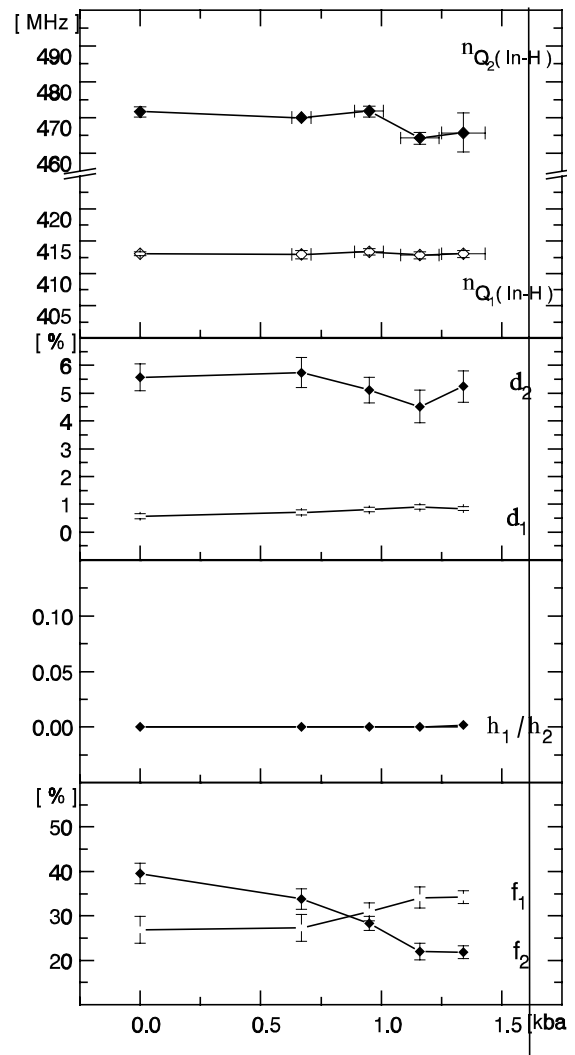


Abb. VII.30 : Darstellung der Fitparameter für die In-H-Wechselwirkung, unter Druckspannung entlang  $\langle 110 \rangle$

### VII.2.b. In-H-Komplexe in Ge unter uniaxialer Zugspannung entlang einer $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse

Während man für eine  $\langle 110 \rangle$ -Spannungsachse eine Ausrichtung der Defektkomplexe erwarten würde, sind die BC-Gitterpositionen entlang der  $\langle 111 \rangle$ -Richtungen bei einer  $\langle 100 \rangle$ -Zugspannungsachse auch unter Spannungseinfluß weiterhin äquivalent. In diesem Fall ist folglich keine Umorientierung zu erwarten. Die bei der Anpassung der Spektren verwendeten  $\sigma_n^{eff}$ -Koeffizienten wurden daher unter der Annahme gleicher Besetzungswahrscheinlichkeit für die vier kristallographisch äquivalenten  $\langle 111 \rangle$ -Anordnungen berechnet.

Den beobachteten PAC-Spektren [ Abb. VII.31 ] liegt eine Detektororientierung zugrunde, wie sie bereits in Kapitel VII.1.b. ausführlich beschrieben wurde [ vgl. Abb. VII.10/11 ]. Die zugehörigen Fitergebnisse sind in Tabelle VII.8 bzw. Abbildung VII.32/33 zusammengestellt.

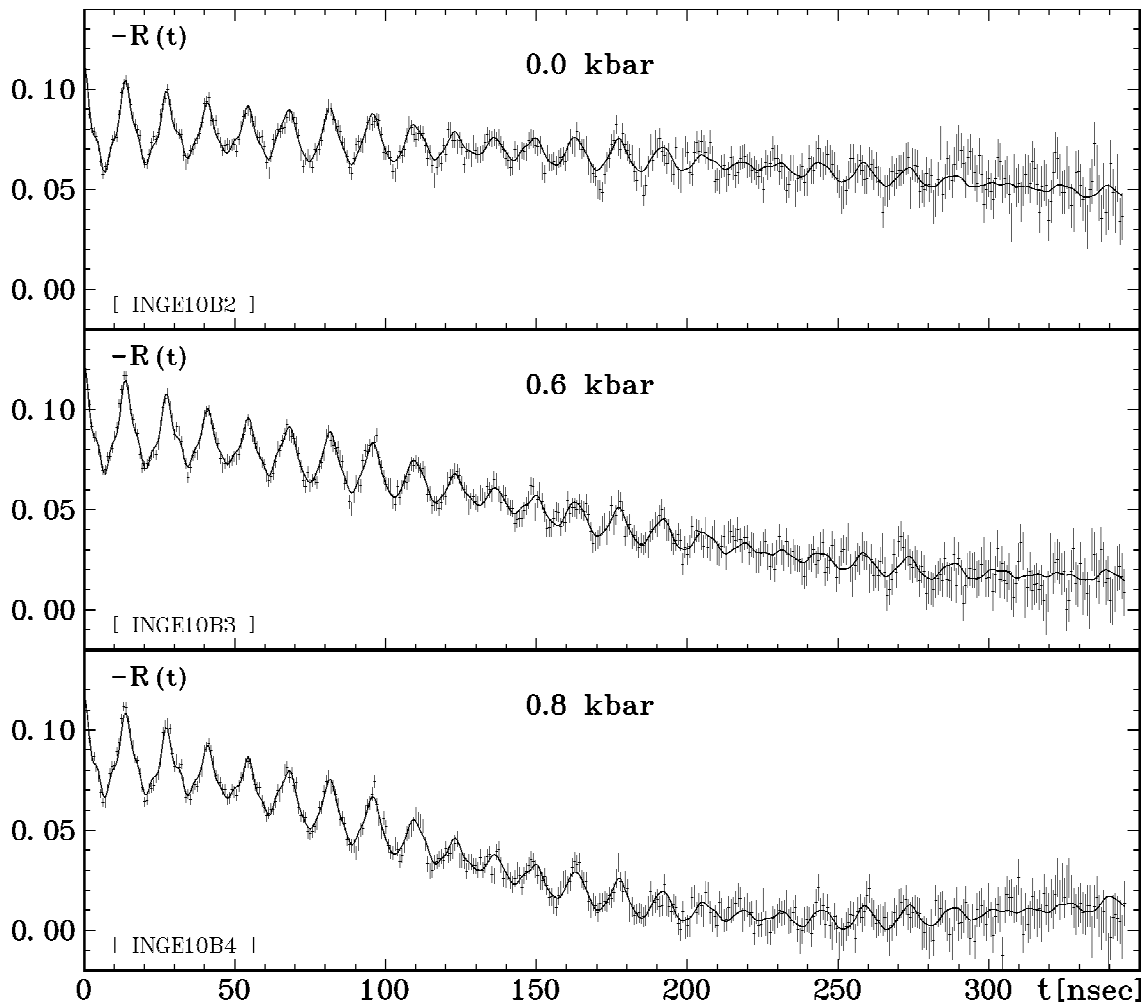


Abb. VII.31 : PAC-Spektren für das System  $^{111}\text{In-H}\langle\text{Ge}\rangle/10\text{b}/$  bei einer extern angelegten uniaxialen Zugspannung entlang einer  $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse (  $T_m = RT$  )

Die Plasmabeladung erfolgte gemäß dem standardisierten Beladungsprozeß bei  $60^\circ\text{C}$  ( 3 Std. ). Anschließend läßt sich wiederum die, zu den In-H Paaren in Ge gehörende, Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_{Q_1} = 413(1)$  MHz sowie eine weitere, nahezu ungedämpfte, Frequenz  $\nu_{Q_2} = 488(2)$  MHz ( axialsymmetrisch,  $\langle 111 \rangle$ -Orientierung ) nachweisen. Beide Frequenzen zeigen unter Spannungseinfluß keine signifikante Frequenzänderung.

Die charakteristische Form des Wechselwirkungsmusters bleibt auch bei Erhöhung der Zugspannung erhalten, demzufolge kommt es erwartungsgemäß auch nicht zu einer spannungsbedingten Umorientierung der In-H Paare.



Bei Zunahme der Druck- bzw. Zugspannung konnte man im Fall einer  $\langle 110 \rangle$ -Spannungsachse eine Abnahme des, zur Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_{Q_2}$  gehörenden, Anteils  $f_2$  beobachten, wobei gleichzeitig der Anteil  $f_1$  an In-H Paaren weiter anstieg [ vgl. Abb. VII.27/30 ]. Ein ähnliches Verhalten scheint sich auch im Fall einer  $\langle 100 \rangle$ -Spannungsachse anzukündigen [ vgl. Abb. VII.32 ]. Die Probe zerbrach jedoch bereits bei einer Zugspannung von etwa 0.8 kbar, leider zu früh um eine eindeutige Tendenz abzuleiten.

Für eine unter Spannungseinfluß tetragonal verzerrte Einheitszelle erwartet man ferner das Auftreten eines zusätzlichen, axialsymmetrischen EFG. Die zugehörige spannungsinduzierte Gitterfrequenz  $\nu_{Q_3}$  ist in den PAC-Spektren deutlich erkennbar. Erhöht man die Zugspannung, so steigt die Frequenz  $\nu_{Q_3}$  linear an. Gleichzeitig nimmt die Dämpfung  $\delta_3$  ab, ein Zeichen dafür, daß die Sondenkerne mit zunehmender Zugspannung einer immer einheitlicheren Gitterwechselwirkung ausgesetzt sind.

Zugspannung [ kbar ] $\parallel \langle 100 \rangle$	O 0.00	I 0.59(3)	II 0.83(5)
$\nu_{Q_1}$ ( In-H ) [ MHz ]	414.1(7)	413.7(11)	413.0(12)
$\delta_1$ [ % ]	0.23(24)	0.13(21)	0.27(22)
$\eta_1$	0.000	0.045(35)	0.000(-)
$f_1$ [ % ]	6.1(18)	5.5(13)	6.4(10)
$\nu_{Q_2}$ ( In-H ) [ MHz ]	488.9(5)	488.0(11)	488.1(11)
$\delta_2$ [ % ]	1.59(11)	1.54(9)	1.29(8)
$\eta_2$	0.000	0.000(-)	0.000(-)
$f_2$ [ % ]	38.2(12)	39.5(9)	34.8(8)
$\nu_{Q_3}$ [ MHz ]	1.44(4)	4.06(7)	5.61(5)
$\delta_3$ [ % ]	27.5	17.2(16)	12.6(11)
$\eta_3$	0.000	0.000	0.000
$f_3$ [ % ]	55.7(13)	55.0(9)	58.8(6)
C	- 0.012(1)	- 0.001(1)	- 0.007(1)
$A_{22}^{\text{app}}$	- 0.125	- 0.125	- 0.125

$$[ \nu_{Q_1} / \nu_{Q_2} : \sigma_0^{\text{eff}} : 0.2963 / \sigma_1^{\text{eff}} : 0.3923 / \sigma_2^{\text{eff}} : 0.0781 / \sigma_3^{\text{eff}} : 0.1222 ]$$

$$[ \nu_{Q_3} : \sigma_0^{\text{eff}} : 0.0000 / \sigma_1^{\text{eff}} : 0.3277 / \sigma_2^{\text{eff}} : 0.2749 / \sigma_3^{\text{eff}} : 0.2863 ]$$

Tab. VII.8 : Fitergebnisse der Meßreihe  $^{111}\text{In-H}\langle\text{Ge}\rangle/10\text{b/}$  unter Zugspannung entlang  $\langle 100 \rangle$

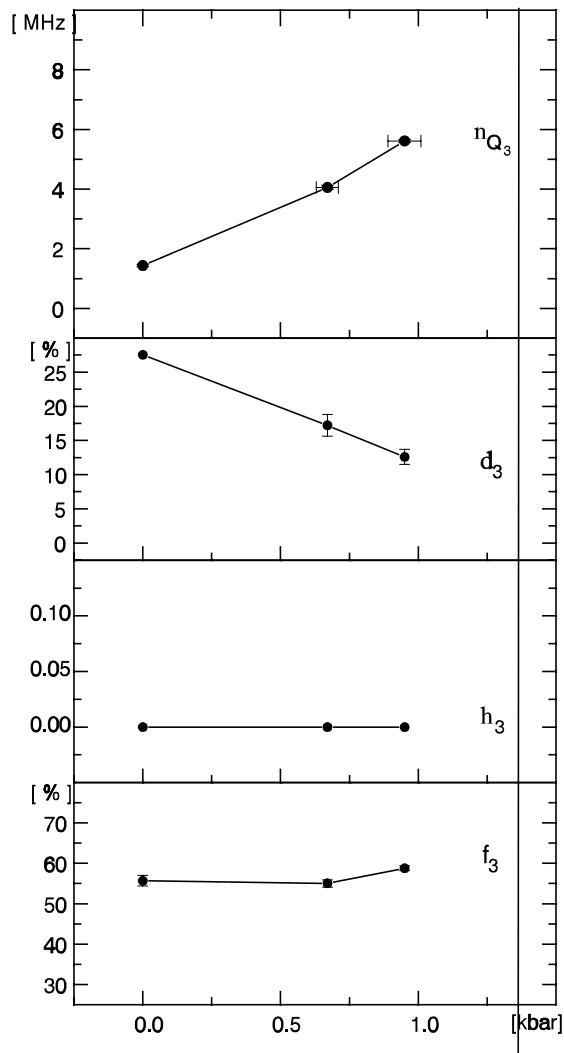


Abb. VII.32 : Darstellung der Fitparameter für den spannungsinduzierten EFG, Zugspannung entlang  $\langle 100 \rangle$

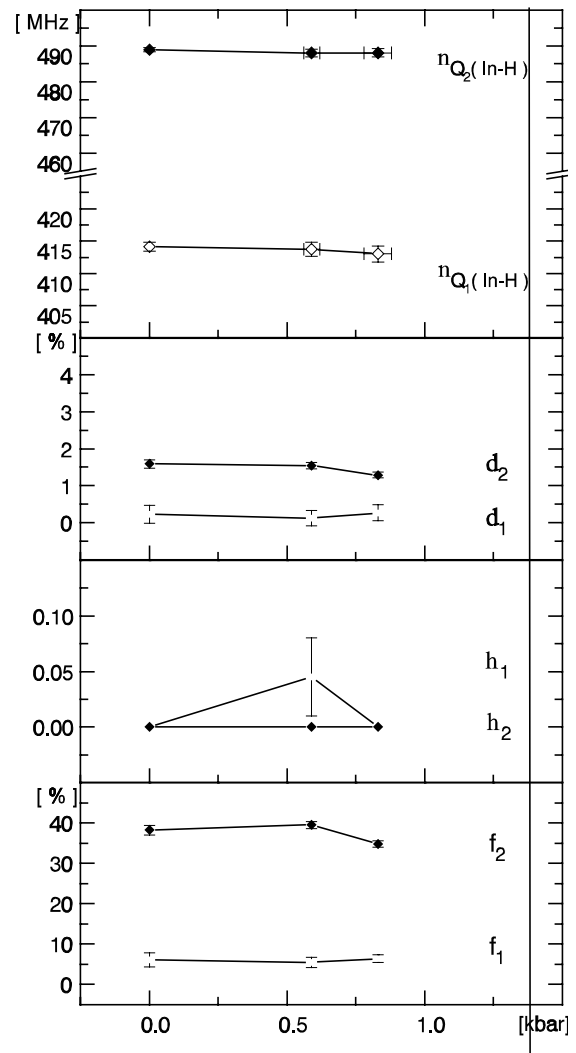


Abb. VII.33 : Darstellung der Fitparameter für die In-H-Wechselwirkung unter Zugspannung entlang  $\langle 100 \rangle$

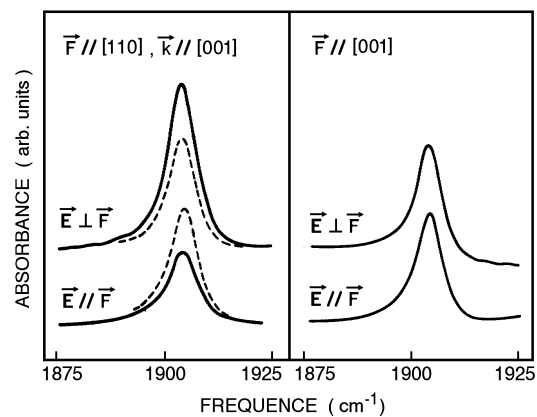
### VII.3. Diskussion der Meßergebnisse

Es konnte gezeigt werden, daß sich die Ausrichtung von Defektkomplexen, welche innerhalb des Kristallgitters in verschiedenen, kristallographisch äquivalenten Orientierungen vorliegen, theoretisch mit der PAC-Meßmethode beobachten läßt. Das besondere Interesse bestand nun darin, eine mögliche spannungsinduzierte Bewegung des H-Atoms innerhalb des In-H-Komplexes nachzuweisen.

Über die Bewegungsmechanismen des H-Atoms innerhalb solcher Komplexe ist bislang wenig bekannt [ HAL 89, PAN 91 ]. Bisher wurden erst wenige Komplexe untersucht, und bis heute ist nicht klar, unter welchen Umständen bzw. in welchen Komplexen der Wasserstoff tatsächlich beweglich ist. Während in einigen Komplexen die Bewegung des H-Atoms zwischen seinen äquivalenten Gitterpositionen offensichtlich thermisch aktiviert ist [ STA 88 ], kann der Wasserstoff in anderen Komplexen, wie z.B. dem Be-H Komplex in Si, bei tiefen Temperaturen tunneln [ MUR 86 ], oder er liegt als statischer Komplex vor [ KAH 87 ].

Die Anwendung von uniaxialen Druck- bzw. Zugspannungen hat sich bei der Untersuchung der Beweglichkeit von Wasserstoff in solchen Komplexen als besonders geeignet erwiesen [ STA 88, HRR 88 ].

Im Fall des B-H Komplexes in Si gelang es durch Anlegen einer uniaxialen Druckspannung ( $\approx 0.3$  GPa) entlang einer  $\langle 110 \rangle$  bzw.  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung, eine Ausrichtung der B-H Komplexe herzustellen. Der Nachweis gelang dabei durch die Beobachtung eines spannungsinduzierten Dichroismus der IR-Absorptionslinie bei  $1903 \text{ cm}^{-1}$  [ STA 88 ]. Ohne eine äußere



Druckspannung ist die gemessene IR-Absorptionsspektren für den B-H Komplex in Si unter uniaxialer Druckspannung (3 kbar) entlang einer  $\langle 110 \rangle$  bzw.  $\langle 100 \rangle$ -Kristallrichtung [ STA 88 ].

Legt man jedoch eine geeignete uniaxiale Druckspannung an, so zeigt sich ein deutlicher Unterschied in den Absorptionsspektren, je nachdem ob die Polarisationsrichtung des eingestrahnten Lichts parallel oder senkrecht zur Spannungsachse steht. Wegen der trigonalen Symmetrie des B-H Komplexes wird erwartungsgemäß für eine  $\langle 100 \rangle$ -Spannungsachse kein Effekt beobachtet.

Spannt man die Probe zunächst bei Raumtemperatur ein, kühlt sie anschließend ab und entspannt sie wieder bei tiefen Temperaturen, so läßt sich die Reorientierung des Komplexes in Abhängigkeit von der Probertemperatur beobachten [ Abb. VII.35 ].

Hieraus läßt sich die Aktivierungsenergie  $E_A = 0,19$  eV für einen BC-BC Sprung des H-Atoms bestimmen, in sehr guter Übereinstimmung mit Berechnungen [ DEN 89 ], die für die Potentialbarriere zwischen zwei BC-Plätzen  $E_A = 0,2$  eV angeben.

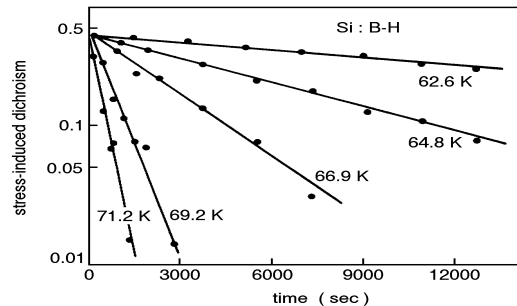


Abb. VII.35 : Der thermisch aktivierte Zerfall des spannungsinduzierten Dichroismus der  $1903\text{ cm}^{-1}$  Linie des B-H Komplexes in Si [ STA 88 ]

Ein sehr ähnliches Verhalten zeigt sich auch für den Be-H Komplex in GaAs [ STA 89 ] und es scheint wahrscheinlich, daß eine thermisch aktivierte Bewegung des H-Atoms auch für andere Akzeptor-Wasserstoff Komplexe gefunden werden kann.

Im Fall des In-H Komplexes in Si und Ge zeigt sich jedoch, daß durch Anlegen einer äußeren uniaxialen Zug- bzw. Druckspannung keine Umbesetzung der H-Gitterposition erzielt werden kann. Weder für eine  $\langle 110 \rangle$  noch für eine  $\langle 111 \rangle$ -Orientierung der Spannungsachse lassen sich in den PAC-Spektren Anzeichen für eine Ausrichtung der In-H Komplexe erkennen. Die  $\langle 100 \rangle$ -Orientierung der Zugspannungsachse diente lediglich zur Kontrolle, da bei der zugrundeliegenden trigonalen Symmetrie der Komplexe entlang dieser Richtung kein Effekt erwartet wird.

Da die beobachteten H-induzierten Wechselwirkungsfrequenzen praktisch keine Dämpfung aufweisen, und der In-H Komplex für die PAC-Apparatur somit statisch ist, kann gefolgert werden, daß die Verweildauer  $\tau$  des Protons bei Raumtemperatur über dem PAC-Zeitfenster von max.  $\sim 800$  ns liegt.

Würde dagegen die H-Sprungfrequenz so hoch liegen, daß der Kernspin anschaulich den Fluktuationenbewegungen des sich sehr schnell ändernden EFG nicht mehr folgen kann und somit ein einzelnes Hüpfen von der PAC- Meßapparatur nicht mehr aufzulösen ist ( $\tau < \text{ns}$ ), dann würde sich die Symmetrie von  $C_{3v}$  auf eine "effektive"  $T_d$ - Symmetrie erhöhen, was wiederum ein quasi ungestörtes PAC-Signal zur Folge hätte. Im Grenzfall langsamer Fluktuationen, wenn also nur wenige Sondenkerne von einer Konfigurationsänderung in ihrer Umgebung betroffen sind, würde man eine dynamische Relaxation in den PAC-Spektren beobachten.

Aus den experimentellen Ergebnissen kann gefolgert werden, daß der Wasserstoff innerhalb der In-H Komplexe in Si und Ge die Potentialbarriere zwischen zwei benachbarten BC-Plätzen nicht überwinden kann und somit bei Raumtemperatur nicht beweglich ist. Folglich lassen sich auch keine Sprünge zwischen benachbarten BC-Gitterplätzen beobachten. Unter dem Einfluß einer uniaxialen Zug- bzw. Druckspannung gelingt es folglich auch nicht, eine bevorzugte Ausrichtung der In-H-Komplexe herzustellen.

Während im Fall des am B-H Komplexes in Si die BC-Position des H-Atoms sowohl experimentell [ BER 88, MAW 87, NIE 88, STA 88 ] als auch theoretisch [ BON 87, CHA 88, DEN 89, EST 89 ] als gesichert gilt, gibt es bei größeren Akzeptoren Al, Ga und In Hinweise für eine sogenannte off-BC ( bzw. off-axis ) Position des Wasserstoffs.

Neuere Berechnungen [ BON 91/92 ] zeigen, daß die Position des H-Atoms innerhalb der Akzeptor-H Komplexe empfindlich von der Größe des beteiligten Fremdatoms abhängt [ Tab. VII.9 ]. Die exakte BC-Position des H-Atoms im Fall des B-H Komplexes ist demnach als ein Grenzfall anzusehen, der bei zunehmender Größe des Akzeptor-Atoms in eine off-BC Position übergeht.

tetraedrisch-kovalente Atomradien [ Å ]	H	B	Si	Al	Ga	In
	0.32	0.88	1.17	1.26	1.26	1.44

Tab. VII.9 : Atomradien der isovalenten Akzeptoratome B, Al, Ga und In in tetraedrisch koordinierten, kovalenten Bindungen [ PHI 73 ]

In der BC-Position befindet sich das H-Atom in der Mitte einer Si-X ( X=Akzeptor ) Bindungsachse. Dagegen ist in einer off-axis ( OA ) Konfiguration das H-Atom aus der Si-X Bindungsachse herausgerückt und liegt nun in der Nähe einer der drei sogenannten M-Positionen, die sich in der Mitte zwischen den C-Plätzen befinden. In Abbildung VII.36 ist ferner ein möglicher Diffusionsweg des H-Atoms zwischen den drei äquivalenten OA-Positionen gestrichelt dargestellt.

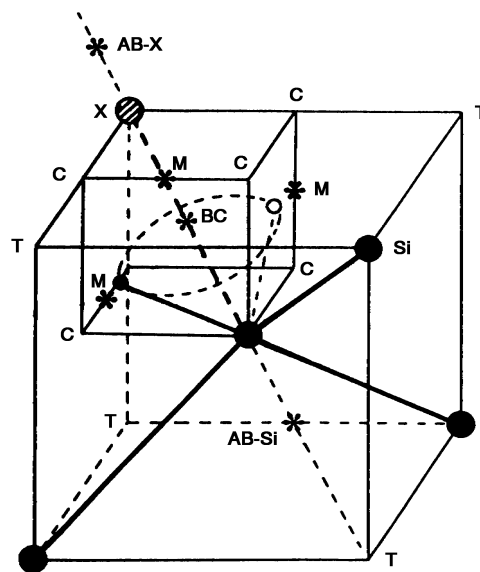


Abb. VII.36 : Die Lage der BC, AB und möglicher off-axis Positionen für den Si-H-X Komplex in Si ( X = B, Al, Ga, In ) [ BON 92 ]

Ersetzt man den Akzeptor B durch den nächstgrößeren isovalenten Akzeptor Al, so zeigt sich [ BON 91 ], daß die on-axis ( BC ) Position des H-Atoms eine erheblich größere Relaxation der benachbarten Gitteratome als im Fall des B-H Komplexes erfordert. Solche großen Gitterrelaxationen sind jedoch energetisch ungünstig. Die ursprüngliche BC-Position wird daher instabil und geht in eine Konfiguration über, die für das benachbarte Si- bzw. Al-Atom eine geringere Relaxation erfordert, und bei welcher das H-Atom eine off-axis ( OA )-Position einnimmt, die etwa 0.91 Å von der Bindungsachse entfernt ist.

Für eine solche OA-Position des H-Atoms spricht auch, daß in den IR-Absorptionsspektren des Al-H bzw. Ga-H Komplexes ein zusätzlicher H-Schwingungsmodus auftritt, welcher einer quasi freien Rotation des H-Atoms in einer Ebene, senkrecht zur Bindungsachse, entspricht [ STA 87/88 ].

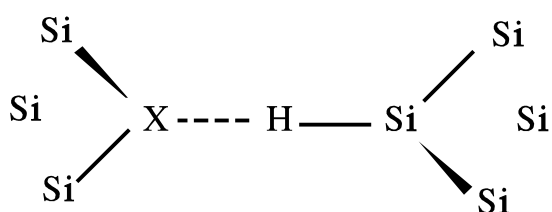


Abb. VII.37 : Modellvorstellung einer Si-H-X Brückenstruktur ( X=Akzeptor )

(  $\text{SiH}_4$  ) bzw. Boran-Molekülen (  $\text{BH}_3$  ) gemessenen Werten. Auch ist die gemessene IR-Absorptionsfrequenz von  $1903 \text{ cm}^{-1}$  [ STA 88 ] deutlich kleiner als die für eine ungestörte Si-H Bindung in Silan bzw. amorphem Si gemessenen Werte von  $2100 \text{ cm}^{-1}$  bis  $2250 \text{ cm}^{-1}$  [ NAK 78 ].

Für größere Akzeptoratomer wie Al, Ga oder In wird die on-axis BC-Konfiguration instabil, da der Si-Akzeptor Abstand in diesem Fall nicht mehr groß genug ist. Der Wasserstoff nimmt daher eine OA-Position in der Nähe der drei äquivalenten M-Plätze ein [ BON 92 ]. Betrachtet man die Ladungsdichteverteilung für eine Si-H-Al Konfiguration innerhalb einer (110)-Ebene [ Abb.VII.38 ], so erkennt man die off-axis Position des H-Atoms. Ferner ist die Ladungsdichte innerhalb der Si-H Bindung deutlich größer als in der Bindung zum Akzeptor. Unter gleichzeitiger Abschwächung der Akzeptor-H Bindung ist der Wasserstoff folglich stärker als beim B-H-Komplex an das benachbarte Si-Gitteratom gebunden. Die härtere Si-H Bindung macht sich experimentell in einem Anstieg der gemessenen IR-Absorptionsfrequenzen bemerkbar (  $1903 \text{ cm}^{-1}$  in Si:B /  $2201 \text{ cm}^{-1}$  in Si:Al /  $2171 \text{ cm}^{-1}$  in Si:Ga ) [ STA 87/88 ]. Die Modellvorstellung einer Si-H··In-Si<sub>3</sub> Konfiguration [ Abb. VII.37 ] symbolisiert eine enge Bindung zwischen Si und H einerseits und In und den drei restlichen Si-Atomen andererseits, aber nur eine geringe Wechselwirkung zwischen H und In.

Die stärkere Si-H Bindung innerhalb der Si-H-X Konfiguration ( X= Al, Ga, In ) erklärt auch eine wesentlich schwächere Ankopplung einer extern angelegten uniaxialen Zugspannung an die H-Schwingungsmode als im Fall des B-H Komplexes [ BER 88/89, BON 91 ].

Im Gegensatz zum B-H Komplex in Si [ STA 88 ] gelingt es im Fall des Al-H Komplexes [ STA 94 ] erst bei einer Spannung von  $\approx 1$  GPa entlang einer  $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse, einen spannungsinduzierten Dichroismus der  $2201 \text{ cm}^{-1}$  IR-Absorptionslinie zu beobachten. Die Ausrichtung der Al-H Komplexe läßt sich bei genügend tiefen Temperaturen einfrieren, auf diese Weise läßt sich die Kinetik der Reorientierung in einem isochronen Annealprogramm untersuchen. Tempern bei  $118^\circ\text{K}$  ( 20 Min. ) führt zu einer Reduzierung des Dichroismus auf  $1/e$ , was eine Abschätzung der Aktivierungsenergie zu  $\approx 0.37 \text{ eV}$  zuläßt.

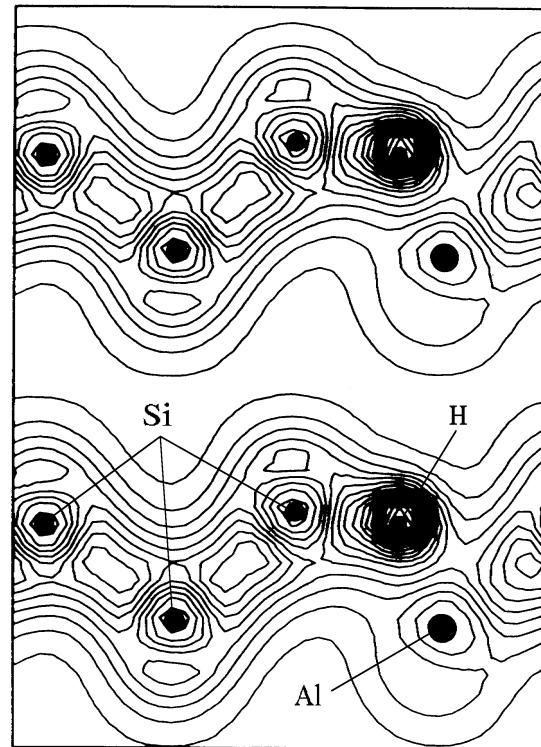


Abb. VII.38 : Ladungsdichteverteilung in einer (110)-Ebene für die off-axis Konfiguration eines Al-H Komplexes in Si [ BON 92 ]

Geht man einmal davon aus, daß die Verhältnisse beim In-H Komplex in Si ähnlich liegen, dann sollte der Wasserstoff bei Raumtemperatur eigentlich in der Lage sein, die Potentialbarriere zwischen benachbarten, äquivalenten Gitterpositionen zu überwinden. In jedem Fall sollte sich jedoch eine Ungleichbesetzung einstellen, wenn sich die Probe zum Zeitpunkt der Plasmabeladung bereits unter einer entsprechenden Zugspannung befindet. Gelingt auch dies nicht, so bliebe letztlich nur der Schluß übrig, daß die Ankopplung des In-H Komplexes an das uniaxiale Spannungsfeld zu gering ist, um bei den derzeit zur Verfügung stehenden Zug- bzw. Druckspannungen einen merklichen Effekt zu erzeugen.

Die Berechnungen [ BON 92 ] zeigen ferner, daß für die Akzeptoratome B, Al, Ga nur eine stabile Konfiguration des H-Atoms existiert, während für den In-H Komplex in Si eine weitere metastabile Konfiguration auftritt, bei welcher das H-Atom einem anti-bonding (AB)-Platz besetzt. Experimentell beobachtet man in einem  $\gamma$ - $\gamma$  Winkelkorrelationsexperiment neben der, dem ionisierten Zustand  $(\text{Cd-H})^-$  zugeordneten, Frequenz  $\nu_{Q1} = 349 \text{ MHz}$  tatsächlich eine weitere Frequenz  $\nu_{Q2} = 463 \text{ MHz}$ , welche bei intrinsischen bzw. hochpassivierten Proben und bevorzugt bei niedrigen Temperaturen ( somit also bei geringer Löcherkonzentration ) auftritt.

Die Sondenkerne, die nicht mit einem H-Atom dekoriert sind, unterliegen unter Spannungseinfluß einem zusätzlichen Gitterfeldgradienten. Dieser EFG entsteht durch die spannungsbedingte Verzerrung des ursprünglich kubischen Diamantgitters eines Si- bzw. Ge-Kristalls [ vgl. Kap. VI. ]. Je nach Lage der Spannungsachse ändert sich dabei die Punktsymmetrie um den substitutionellen Sondenkern, was im Fall einer  $\langle 100 \rangle$ - und  $\langle 111 \rangle$ -Spannungsachse einen axialsymmetrischen EFG und bei einer  $\langle 110 \rangle$ -Spannungsachse einen nicht axialsymmetrischen EFG zur Folge hat [ vgl. Kap. VI.1. ]. Die Symmetrieachse des spannungsinduzierten EFG zeigt dabei in Richtung der Spannungsachse [ vgl. Kap. VI.3. ].

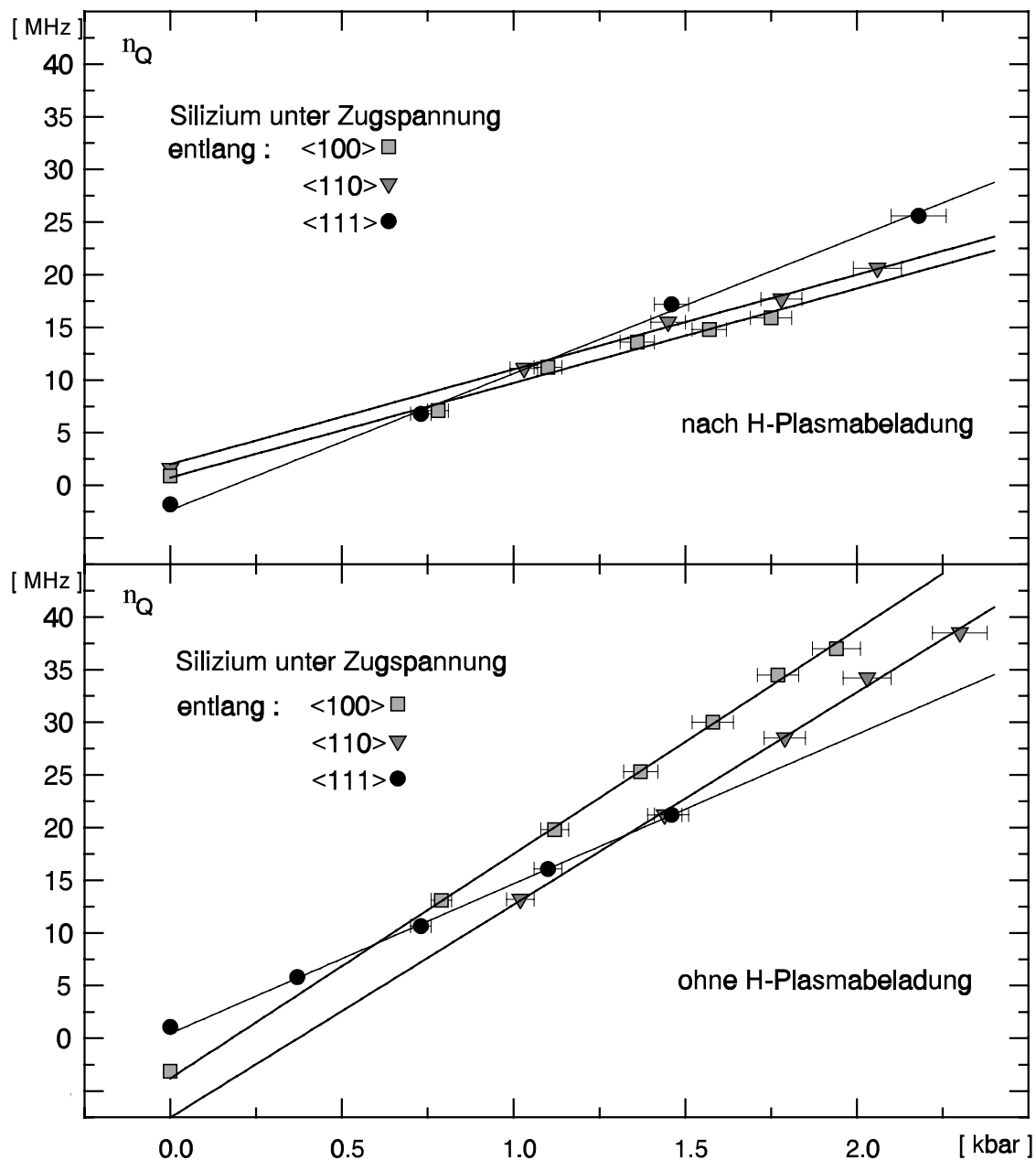


Abb. VII.39 : Verlauf der spannungsinduzierten Gitterwechselwirkungsfrequenz  $\nu_Q$  in Si unter uniaxialen Zugspannung jeweils in Abhängigkeit vom Wasserstoffgehalt



Die zugehörige Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_Q$  nimmt in reproduzierbarer Weise linear mit der von außen angelegten uniaxialen Zug- bzw. Druckspannung zu. Da die elastischen Eigenschaften des Kristalls anisotrop sind, hängt die gemessene Gitterfrequenz  $\nu_Q$  zusätzlich von der Lage der Spannungsachse ab.

Vergleicht man nun den Verlauf der spannungsinduzierten Wechselwirkungsfrequenz nach einer H-Plasmabeladung mit den in Kap.VI. für einen intrinsischen Si-Kristall gemessenen Quadrupolfrequenzen [ Abb. VII.39 ], so erkennt man deutlich, daß der Wasserstoffgehalt in der Probe einen merklichen Einfluß auf den spannungsinduzierten Gitterfeldgradienten besitzt.

Der in der Abbildung VII.39 dargestellte lineare Zusammenhang zwischen den gemessenen Quadrupolwechselwirkungsfrequenzen  $\nu_Q$  und der von außen angelegten uniaxialen Zugspannung  $\sigma$  wird durch die folgenden Parameter beschrieben:

$\nu_Q = A + B \cdot P$	A [ MHz ]		B [ MHz · kbar <sup>-1</sup> ]	
	ohne H	mit H	ohne H	mit H
Zugspannung entlang <100>	- 3.8(7)	0.7(12)	21.3(4)	9.0(9)
Zugspannung entlang <110>	- 7.5(10)	2.0(9)	20.2(5)	9.0(5)
Zugspannung entlang <111>	0.5(2)	-2.4(12)	14.2(2)	13.0(7)

Tab. VII.10 : Parameter der in Abbildung VII.39 dargestellten linearen Regression

Der Einfluß der äußeren Zugspannung auf den EFG, die sich in einem mehr oder weniger starken Anstieg der Wechselwirkungsfrequenzen bemerkbar macht, ändert sich nach einer H-Plasmabeladung merklich. So ist der resultierende Gitterfeldgradient nach einer H-Plasmabeladung generell kleiner als bei einer Probe, die keinen Wasserstoff enthält [ Abb. VII.39 ].

Vergleicht man den Elastizitätsmodul von Si für verschiedene Kristallorientierungen [ vgl. Kap. II.2. ], so zeigt sich, daß der Kristall entlang einer <111>-Achse am härtesten ist. Erwartungsgemäß beobachtet man unter Spannungseinfluß entlang dieser Richtung nur einen geringen Anstieg des resultierenden Gitterfeldgradienten.

Im Gegensatz zu einem ungestörten Si-Kristall beobachtet man allerdings bei einer mit Wasserstoff beladenen Probe bei einer <111>-Spannungsachse einen größeren spannungsbedingten Zuwachs des Gitterfeldgradienten als bei einer <100> bzw. <110>-Zugspannungsachse. Der Wasserstoff innerhalb der Si-H-In Konfiguration scheint also tatsächlich zu einer Abschwächung der In-Si Bindungsachse zu führen, was auch erklärt, weshalb sich das Kristallgitter bei einer wasserstoffbeladenen Probe am leichtesten entlang einer <111>-Kristallachse dehnen läßt.

Daß auch im entspannten Zustand ein Feldgradient beobachtbar ist, und somit der Nulldurchgang der Regressionsgeraden mehr oder weniger stark verschoben ist, wurde bereits in Kap.VI. damit erklärt, daß sich die Probe in einem inneren Spannungszustand befindet. Das Auftreten solcher lokalen Gitterverzerrungen hängt von den jeweiligen Implantationsbedingungen ab, die von Probe zu Probe stark variieren können.

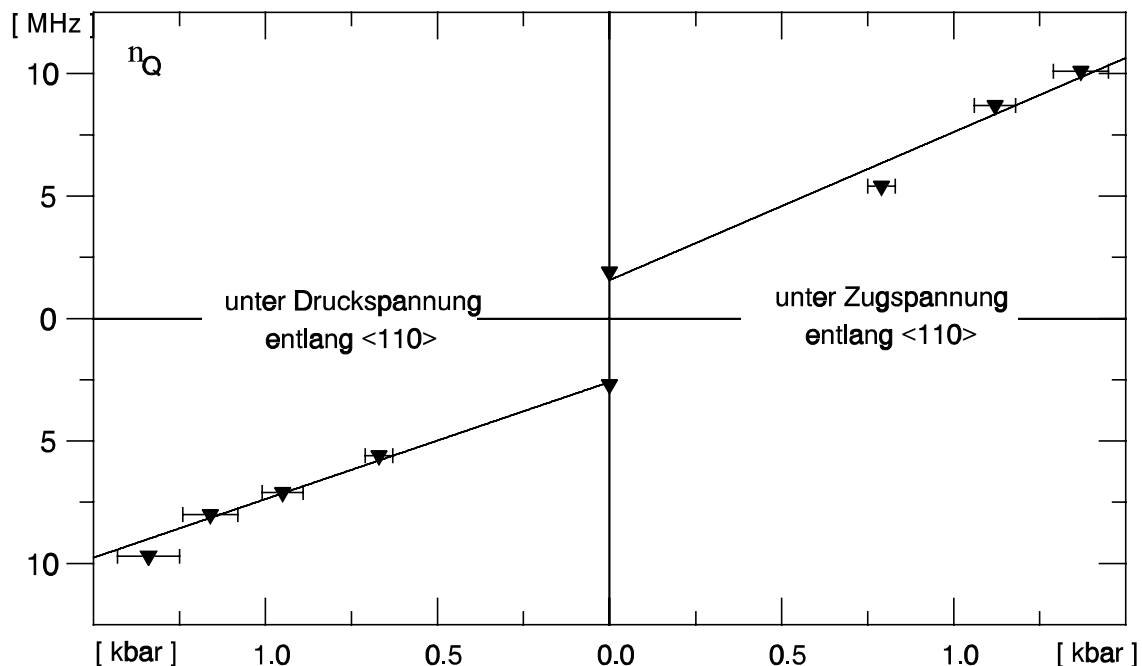


Abb. VII.40 : Verlauf der spannungsinduzierten Gitterwechselwirkungsfrequenz  $\nu_Q$  in Ge unter uniaxialer Zug- bzw. Druckspannung entlang einer  $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse

Theoretische Berechnungen auf der Grundlage des Punktladungsmodells [ Kap.VI.4. ] lassen erwarten, daß die spannungsbedingte Zunahme des induzierten Gitterfeldgradienten unabhängig davon ist, ob eine uniaxiale Zug- oder eine entsprechende Druckspannungen vorliegt, allerdings sollte sich das Vorzeichen des EFG umkehren. Zum Nachweis einer solchen Vorzeichenumkehr ist ein  $\beta$ - $\gamma$  Winkelkorrelationsexperiment in Vorbereitung.

In Abb. VII.40 ist am Beispiel eines Ge-Kristalls [ vgl. Kap.VII.2.a. ] die spannungsbedingte Zunahme der Gitterwechselwirkungsfrequenz  $\nu_Q$  für eine uniaxiale Zug- bzw. Druckspannung entlang der  $\langle 110 \rangle$ -Kristallrichtung dargestellt. In beiden Fällen beobachtet man tatsächlich dieselbe Zunahme der Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_Q$ . Die einzelnen Meßreihen wurden mit verschiedenen Proben durchgeführt und zeigen daher ein unterschiedliches Verhalten am Nullpunkt. Gerade das Verhalten beim Übergang von Druck- zu Zugspannungen sollte bei zukünftigen Experimenten noch genauer untersucht werden. Zu diesem Zweck wurde bereits ein neuer Probenhalter [ Abb. IV.10/11 ] konstruiert, der insbesondere bei kleinen Biegespannungen eine genauere Einstellung ermöglicht.

---

## VIII. Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde mit der Methode der gestörten  $\gamma$ - $\gamma$  Winkelkorrelation der direkte Nachweis für die Bildung von In-H-Paaren bei der H-Passivierung des Akzeptors In in den Elementhalbleitern Ge und Si erbracht. Hierzu wurden zunächst die Bedingungen bei der H-Plasmabeladung optimiert und ein standardisierter Beladungsprozeß entwickelt. Die im Hochdruckplasma gebildeten  $^{111}\text{In}$ -H Komplexe erzeugen innerhalb der Diamantstruktur eines Ge- bzw. Si-Gitters axialsymmetrische elektrische Feldgradienten entlang einer  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse, was entsprechende Rückschlüsse auf die mikroskopische Struktur des zugrundeliegenden Komplexes zuläßt.

In Ge beobachtet man bei Raumtemperatur die Quadrupolfrequenz  $\nu_{Q1} = 413$  MHz, welche aufgrund ihrer geringen Dämpfung auf einen sehr einheitlichen zugrundeliegenden In-H Komplex schließen läßt. Die Interpretation der experimentellen Ergebnisse sowie theoretische Untersuchungen legen die Vermutung nahe, daß sich der Wasserstoff auf einem bond-centered (BC) Platz am Akzeptor In befindet. Es gibt jedoch auch Hinweise dafür, daß der Wasserstoff nicht exakt auf der Bindungsachse lokalisiert ist, sondern zwischen jeweils drei äquivalenten off-axis Positionen springt. Dies hätte einen resultierenden mittleren EFG entlang einer  $\langle 111 \rangle$ -Richtung zur Folge, analog dem Fall einer statischen Wechselwirkung mit einem ortsfesten H-Atom auf einem BC-Platz. Die bei zunehmender Beladungsdauer und ansteigendem Wasserstoffgehalt der Probe zusätzlich auftretende Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_{Q2} = 450$  MHz wird einer Konfiguration zugeordnet, bei der sich ein weiteres H-Atom auf einem T-Platz in der Nähe des Sondenatoms befindet.

Für die thermische Stabilität von In-H-Paaren in Ge ergibt sich in einem isochronen Annealprogramm eine Dissoziationstemperatur von  $T_D \approx 360^\circ\text{K}$ , was einer Dissoziationsenergie  $E_D = 1.12(5)$  eV entspricht. Im Gegensatz dazu dissoziieren In-H-Paare in Si erst bei  $420^\circ\text{K}$ , entsprechend einer Dissoziationsenergie von  $E_D = 1.3$  eV.

Bei Raumtemperatur beobachtet man für die In-H-Paare in Si die charakteristischen Wechselwirkungsfrequenzen  $\nu_{Q1} = 349$  MHz und  $\nu_{Q2} = 463$  MHz. Die Frequenz  $\nu_{Q1}$  ist eindeutig durch die Lage des Fermi-niveaus bestimmt und charakterisiert bei RT den als flachen Einfachakzeptor ionisiert vorliegenden Zustand  $(\text{Cd-H})^-$ . Liegt das Fermi-niveau unter dem Umladungsniveau (niedrige Temperatur, hohe Vordotierung), so liegt der Komplex neutral  $(\text{Cd-H})^0$  vor und die Frequenz verschiebt sich zu  $\nu_{Q1/0} = 269$  MHz. Die ebenfalls bei RT auftretende Wechselwirkungsfrequenz  $\nu_{Q2}$  wird einem strukturell unterschiedlichen Zustand  $(\text{Cd-H})^*$  zugeordnet, der möglicherweise von einem, über die Löcherkonzentration kontrollierten, Platzwechsel des H-Atoms bereits am In herrührt.

Theoretische Berechnungen zeigen, daß es im Fall des In-H-Komplexes in Si für das H-Atom neben einer stabilen off-BC Konfiguration auch eine weitere metastabile AB-Konfiguration gibt. Solange es jedoch nicht möglich ist, den EFG am Ort eines Sondenkerns unter Vorgabe des Wirtsgitters und einer speziellen Sonde-Defekt-Konfiguration theoretisch genau zu berechnen, bleibt eine direkte Zuordnung der gemessenen Wechselwirkungsfrequenzen zu möglichen Sonde-Defekt-Konfigurationen nur spekulativ.

Bei dem Versuch, die In-H-Komplexe durch Anlegen einer äußeren uniaxialen Druck- bzw. Zugspannung im Kristallgitter eines Si bzw. Ge-Kristalls auszurichten, gelang es erstmals in einem kubischen Wirtsgitter, einen spannungsinduzierten EFG mit der PAC-Methode nachzuweisen. Es konnte ferner gezeigt werden, daß dieser Gitterfeldgradient in reversibler Weise durch die spannungsbedingte Verzerrung der ursprünglich kubischen Sondenumgebung entsteht, wobei sich die Reduzierung der Punktsymmetrie um den substitutionellen Sondenkern je nach Lage der Spannungsachse unterschiedlich auf die Symmetrieeigenschaften des EFG auswirkt. Wie die Orientierungsmessungen eindrucksvoll bestätigen, liegt die Hauptachse des zugrundeliegenden EFG-Tensors in Richtung der Spannungsachse. Das Vorzeichen läßt sich nun durch ein  $\beta$ - $\gamma$  Winkelkorrelationsexperiment bestimmen. Ein spannungsverzerrter Einkristall ist somit ein interessantes Modellsystem zur Überprüfung theoretisch berechneter Gitterfeldgradienten, bislang fehlten hierzu allerdings experimentell gemessene spannungsinduzierte EFG.

Desweiteren konnte gezeigt werden, daß die PAC-Meßmethode sensitiv genug ist, um eine Ausrichtung von Defektkomplexen innerhalb des Kristallgitters zu beobachten. Die Besetzungswahrscheinlichkeiten für die einzelnen, kristallographisch äquivalenten Orientierungen erhält man aus der Auswertung des charakteristischen Wechselwirkungsmusters und der zugehörigen  $\sigma_n^{eff}$ -Koeffizienten. Hieraus lassen sich dann weitere Rückschlüsse auf die Bewegungsmechanismen innerhalb des Sonde-Defekt-Komplexes ziehen.

Vielversprechende erste Ansätze zur Kombination der PAC mit der Anwendung uniaxialer Spannungen wurden durchgeführt. Leider gelang es jedoch bislang mit den zur Verfügung stehenden uniaxialen Zug- und Druckspannungen nicht, eine merkliche spannungsinduzierte Ausrichtung der untersuchten In-H Komplexe in Si bzw. Ge zu beobachten.

---

## IX. Anhang

Im Gegensatz zu Richtungskorrelationsexperimenten an polykristallinen Proben, ist die Detektororientierung bei Einkristallexperimenten von entscheidender Bedeutung. Für die, bei den PAC-Experimenten aufgetretenen, Orientierungen der Detektoren relativ zu den Hauptachsen des EFG im Kristallsystem ist daher im nun folgenden Anhang die Berechnung der  $s_n^{eff}$ -Koeffizienten ausführlich dargestellt.

Grundlage der Berechnungen sind die jeweiligen Detektorwinkel  $\theta$  und  $\varphi$ , welche die Position der Detektoren bzw. die Emissionsrichtungen  $\vec{k}_1$  und  $\vec{k}_2$  im Hauptachsensystem des EFG beschreiben [ Abb. IX.1 ].

Allerdings lassen sich diese Winkel nicht in jedem Fall unmittelbar aus einer Skizze der zugrundeliegenden Geometrie zwischen Probe und Detektor [ Abb. IX.2 - 11 ] bestimmen. Insbesondere dann, wenn die Detektorrichtungen nicht mit den Kristallachsen übereinstimmt [ Abb. IX.10/11 ], müssen zuerst die Detektorwinkel  $\theta$  und  $\varphi$  berechnet werden.

Für den allgemeinen Fall eines EFG, dessen Lage innerhalb des Kristallsystems zwar bekannt ist, bei dem der Kristall jedoch relativ zum ortsfesten Detektor- bzw. Laborsystem gedreht wurde, enthält Kapitel IX.2 einen einfachen Algorithmus zur Bestimmung der Detektorwinkel im Hauptachsensystem des EFG.

Für häufig auftretende Orientierungen von defektinduzierten EFG lassen sich tabellierte Werte für die  $s_n^{eff}$ -Koeffizienten finden [ Tab. III.5 ]. Da physikalisch äquivalente Positionen innerhalb des Kristalls in der Regel auch mit gleicher Wahrscheinlichkeit besetzt sind, wird bei den angegebenen Werten stets über alle gleichwertigen Orientierungen des EFG gemittelt.

Diese Voraussetzung ist keineswegs immer erfüllt, so tritt beispielsweise ein spannungsinduzierter EFG innerhalb des Kristalls nur entlang einer Kristallrichtung auf. Ferner sollten äußere uniaxiale Spannungen, je nach Lage der Spannungsachse, auch unterschiedliche Auswirkungen auf Defekt-Komplexe besitzen, was die üblicherweise angenommene Gleichbesetzung zumindest in Frage stellt.

In Abhängigkeit von der jeweiligen Detektorkombination sowie für jede mögliche Richtung des EFG innerhalb des Kristalls enthalten die Tabellen IX.1-4 die zugehörigen Detektorwinkel  $\theta$  und  $\varphi$ . Die hieraus berechneten  $s_n^{eff}$ -Koeffizienten lassen sich dann, je nach Orientierung des EFG, verschieden gewichten.

### IX.1. $s_n^{\text{eff}}$ -Koeffizienten für spezielle Detektororientierungen

Die allgemeine Form der Richtungskorrelationsfunktion lautet im Fall einer axial-symmetrischen Störung ( $\eta = 0$ ) durch einen EFG [ STE 75 ]:

$$W(\vec{k}_1, \vec{k}_2, t) = \sum_{k_1, k_2, N} \mathbf{A}_{k_1}(\gamma_1) \cdot \mathbf{A}_{k_2}(\gamma_2) \cdot G_{k_1, k_2}^{N, N}(t) \cdot [(2k_1 + 1) \cdot (2k_2 + 1)]^{-1/2} \cdot Y_{k_1}^{N*}(\theta_1, \varphi_1) \cdot Y_{k_2}^N(\theta_2, \varphi_2) \quad (\text{IX.1})$$

mit der Störfunktion

$$G_{k_1, k_2}^{N, N}(t) = \sum_n s_{n, N}^{k_1, k_2} \cdot \cos(\omega_n \cdot t) \quad (\text{IX.2})$$

den Kugelflächenfunktionen  $Y_k^N$  und den für die entsprechende Kaskade tabellierten Anisotropiekoeffizienten  $A_k$ . Ferner gilt  $N = m - m'$  für alle Kombinationen ( $m, m'$ ) der magnetischen Quantenzahlen des Spins im aufgespaltenen Zwischenniveau. Werte für  $s_{n, N}^{k_1, k_2}$  findet man bei [ STE 75 ].

Für den Spezialfall  $I=5/2$  läßt sich die Richtungskorrelationsfunktion  $W(\vec{k}_1, \vec{k}_2, t)$  unter Verwendung sogenannter effektiver  $s_n^{\text{eff}}$ -Koeffizienten schreiben als:

$$W(\vec{k}_1, \vec{k}_2, t) = 1 + A_{22} \cdot \sum_{n=0}^3 s_n^{\text{eff}}(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2, \eta, \frac{A_{24}}{A_{22}}, \frac{A_{42}}{A_{22}}, \frac{A_{44}}{A_{22}}) \cdot \cos(\omega_n \cdot t) \quad (\text{IX.3})$$

Für den Sondenkern  $^{111}\text{In}$  ist die Näherung  $A_{44}, A_{42} \approx 0$  zulässig [ vgl. Tab. III.1 ] und man erhält somit für die  $s_n^{\text{eff}}$ -Koeffizienten [ vgl. PÜT 82 ]:

$$\begin{aligned} s_0^{\text{eff}} &= \frac{1}{4} \cdot (3 \cos^2 \theta_1 - 1) \cdot (3 \cos^2 \theta_2 - 1) \\ s_1^{\text{eff}} &= \frac{2 \cdot 3}{7} \cdot \sin \theta_1 \cdot \cos \theta_1 \cdot \sin \theta_2 \cdot \cos \theta_2 \cdot \cos(\varphi_2 - \varphi_1) \\ &\quad + \frac{3 \cdot 9}{7 \cdot 8} \cdot \sin^2 \theta_1 \cdot \sin^2 \theta_2 \cdot \cos 2(\varphi_2 - \varphi_1) \\ &\quad + \frac{A_{24}}{A_{22}} \cdot \left( \frac{5 \cdot \sqrt{3}}{2 \cdot 7} \cdot \sin \theta_1 \cdot \cos \theta_1 \cdot \sin \theta_2 \cdot \cos \theta_2 \cdot (3 - 7 \cos^2 \theta_2) \cdot \cos(\varphi_2 - \varphi_1) \right) \\ &\quad - \frac{A_{24}}{A_{22}} \cdot \left( \frac{3 \cdot 5 \cdot \sqrt{3}}{2 \cdot 7 \cdot 8} \cdot \sin^2 \theta_1 \cdot \sin^2 \theta_2 \cdot (7 \cos^2 \theta_2 - 1) \cdot \cos 2(\varphi_2 - \varphi_1) \right) \quad (\text{IX.4}) \\ s_2^{\text{eff}} &= \frac{3 \cdot 5}{7} \cdot \sin \theta_1 \cdot \cos \theta_1 \cdot \sin \theta_2 \cdot \cos \theta_2 \cdot \cos(\varphi_2 - \varphi_1) \\ &\quad - \frac{A_{24}}{A_{22}} \cdot \left( \frac{5 \cdot \sqrt{3}}{2 \cdot 7} \cdot \sin \theta_1 \cdot \cos \theta_1 \cdot \sin \theta_2 \cdot \cos \theta_2 \cdot (3 - 7 \cos^2 \theta_2) \cdot \cos(\varphi_2 - \varphi_1) \right) \\ s_3^{\text{eff}} &= \frac{3 \cdot 5}{7 \cdot 8} \cdot \sin^2 \theta_1 \cdot \sin^2 \theta_2 \cdot \cos 2(\varphi_2 - \varphi_1) \\ &\quad + \frac{A_{24}}{A_{22}} \cdot \left( \frac{3 \cdot 5 \cdot \sqrt{3}}{2 \cdot 7 \cdot 8} \cdot \sin^2 \theta_1 \cdot \sin^2 \theta_2 \cdot (7 \cos^2 \theta_2 - 1) \cdot \cos 2(\varphi_2 - \varphi_1) \right) \end{aligned}$$

Die Winkel  $\theta_i$  und  $\varphi_i$  beschreiben die Position der Detektoren bzw. die Emissionsrichtungen von  $\gamma_1$  und  $\gamma_2$  im Hauptachsensystem des EFG. Da sich die Reduzierung der Anisotropie bei einer Verringerung des Detektorabstandes unterschiedlich auf die Anisotropiekoeffizienten  $A_{ij}^{app}$  auswirkt, sind somit auch die  $s_n^{eff}$ -Koeffizienten abstandsabhängig. Die für verschiedene Detektorabstände berechneten Anisotropiekoeffizienten  $A_{ij}^{app}$  sind in Tabelle III.4 zusammengefaßt.

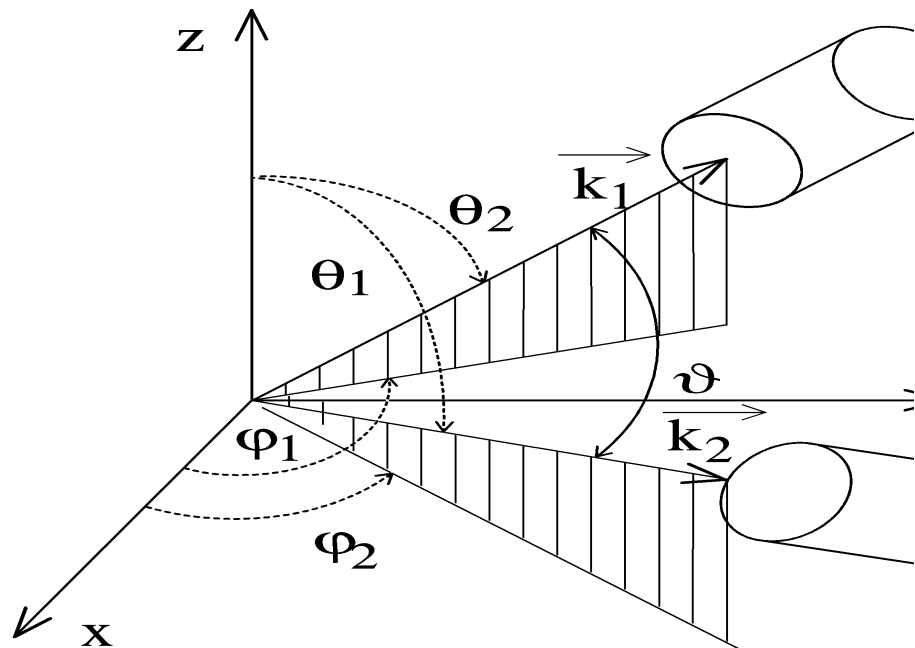


Abb. IX.1 : Die Anordnung der Detektoren im Hauptachsensystem des EFG

Für die bei den verschiedenen Experimenten aufgetretenen Orientierungen des EFG sind die jeweiligen Detektorwinkel  $\theta_i$  und  $\varphi_i$  auf den folgenden Seiten tabelliert. Hieraus lassen sich dann, unter Verwendung von Gl. IX.4, die entsprechenden  $s_n^{eff}$ -Koeffizienten berechnen.

Gibt es mehrere äquivalente Lagen des EFG innerhalb der Einheitszelle, so muß anschließend noch über die, für jede Orientierung des EFG, berechneten  $s_n^{eff}$ -Koeffizienten gemittelt werden.

Da das Vorzeichen des EFG bei einer  $\gamma$ - $\gamma$  Richtungskorrelationsmessung nicht bestimmt werden kann, führen Orientierungen, welche sich nur durch das Vorzeichen unterscheiden, prinzipiell auch zu den gleichen  $s_n^{eff}$ -Koeffizienten. Von den bei vier START-/STOP- Detektoren maximal möglichen 12 Detektorkombinationen liefern höchstens vier Detektorkombinationen unterschiedliche Werte für die  $s_n^{eff}$ -Koeffizienten. Wegen der hohen Symmetrie eines kubischen Gitters reduziert sich die Berechnung der  $s_n^{eff}$ -Koeffizienten häufig auf die Betrachtung von nur je zwei Detektorkombinationen.

Bei einem rein spannungsinduzierten EFG tritt nur eine einzige Orientierung auf. In der Tabelle IX.1 sind die Detektorwinkel  $\theta_i$  und  $\varphi_i$  für die bei den Orientierungsmessungen gewählten Richtungen der Spannungsachse zusammengefasst. Die Abbildungen IX.2/3/4 zeigen die Probengeometrien, die den PAC-Experimenten in Kapitel VI.3. zugrundelagen.

In der Position ( 1 ) steht der spannungsinduzierte EFG genau senkrecht auf der Detektorebene [ Abb. IX.2 ].

In der Position ( 2 ) liegt der EFG dagegen in der Detektorebene und zeigt zwischen die Detektoren [ Abb. IX.3 ]. Bei dieser speziellen Geometrie handelt es sich um die sogenannte Raghavan-Geometrie.

In der Position ( 3 ) liegt der EFG ebenfalls in der Detektorebene, zeigt jedoch diesmal genau auf ein Detektorpaar. Bei dieser Geometrie [ Abb. IX.4 ] erhält man für die beiden Detektorkombinationen unter  $180^\circ$  verschiedene  $s_n^{eff}$ -Koeffizienten.

In allen drei Fällen sind die Detektoren unter jeweils  $90^\circ$  bzw.  $180^\circ$  zueinander angeordnet.

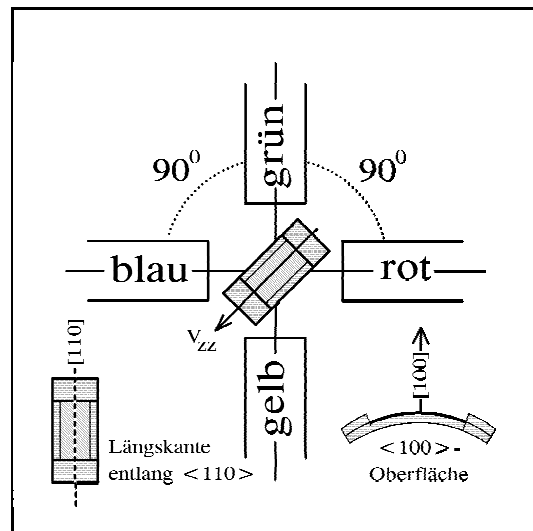


Abb. IX.3 : Orientierung der Spannungsachse unter  $45^\circ$  zu den Detektoren

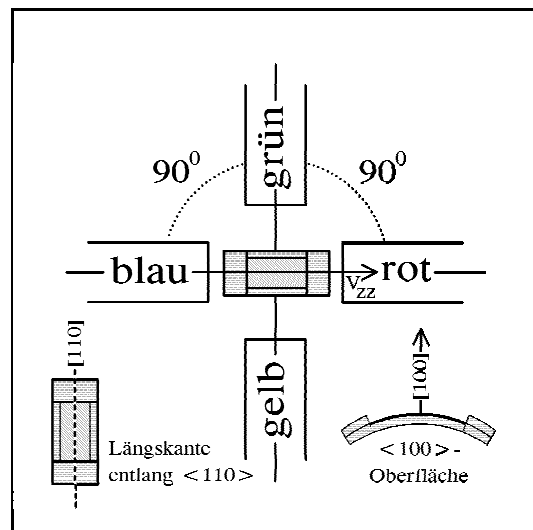


Abb. IX.4 : Orientierung der Spannungsachse ( unter  $0^\circ$  ) in Richtung der Detektoren



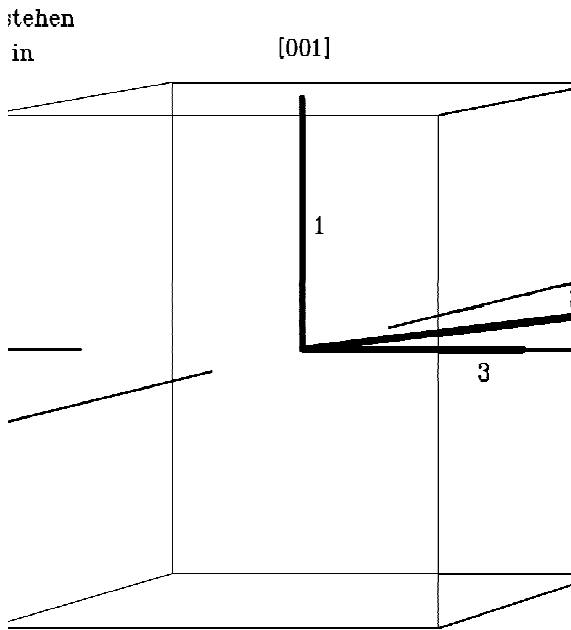


Abb. IX.5 : Die Ausrichtung der Detektoren bezüglich eines spannungsinduzierten EFG (1,2,3)

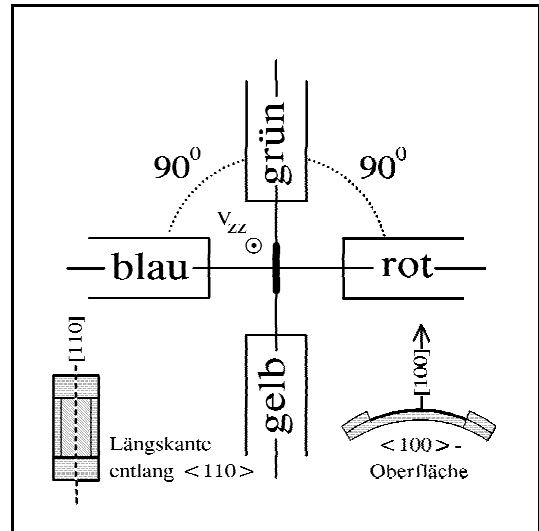


Abb. IX.2 : Orientierung der Spannungs - achse senkrecht zur Detektorebene

Die Anordnung der Detektoren im Hauptachsensystem des EFG	$\theta_1$	$\theta_2$	$\phi_1$	$\phi_2$	$\vartheta$	Detektorkombination $\gamma_1 / \gamma_2$
Der EFG zeigt senkrecht zur Detektorebene	$90^\circ$	$90^\circ$	$0^\circ$	$180^\circ$	$180^\circ$	rot / blau
	$90^\circ$	$90^\circ$	$0^\circ$	$90^\circ$	$90^\circ$	rot / grün
	$90^\circ$	$90^\circ$	$270^\circ$	$90^\circ$	$180^\circ$	gelb / grün
	$90^\circ$	$90^\circ$	$270^\circ$	$180^\circ$	$90^\circ$	gelb / blau
Der EFG zeigt in der Detektorebene	$45^\circ$	$135^\circ$	$0^\circ$	$180^\circ$	$180^\circ$	rot / blau
	$45^\circ$	$45^\circ$	$0^\circ$	$180^\circ$	$90^\circ$	rot / grün
	$135^\circ$	$135^\circ$	$0^\circ$	$180^\circ$	$180^\circ$	gelb / grün
	$135^\circ$	$135^\circ$	$0^\circ$	$180^\circ$	$90^\circ$	gelb / blau
Der EFG zeigt in der Detektorebene unter $0^\circ$ in Richtung der Detektoren rot/blau	$0^\circ$	$180^\circ$	$0^\circ$	$0^\circ$	$180^\circ$	rot / blau
	$0^\circ$	$90^\circ$	$0^\circ$	$90^\circ$	$90^\circ$	rot / grün
	$90^\circ$	$90^\circ$	$270^\circ$	$90^\circ$	$180^\circ$	gelb / grün
	$90^\circ$	$180^\circ$	$270^\circ$	$0^\circ$	$90^\circ$	gelb / blau

Tab. IX.1 : Die Anordnung der Detektoren bei den Orientierungsmessungen [Kap. VI.3.]

Die In-H Komplexe in Si bzw. Ge erzeugen einen defektinduzierten EFG in Richtung einer  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse der Diamantstruktur. Die Detektorgeometrie wurde bei den PAC-Experimenten in der Regel so gewählt, daß die Detektoren in Richtung gleichindizierter  $\langle 111 \rangle$ -Achsen standen. Je nach Orientierung der Probenoberfläche ergeben sich dann verschiedene Positionen der Probe zwischen den unter  $70,5^\circ$  bzw.  $109,5^\circ$  zueinander orientierten Detektoren [ Abb. IX.6/7/8 ].

Durch äußere uniaxiale Zug- und Druckspannungen sollte es prinzipiell möglich sein eine Ungleichbesetzung der  $\langle 111 \rangle$ -Raumrichtungen herzustellen. Bei einer  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$ -Spannungsachse konnte die ursprüngliche Detektorausrichtung beibehalten werden [ Abb. IX.7/8 ]. Für jede  $\langle 111 \rangle$ -Richtung innerhalb des Kristalls wurden die  $s_n^{eff}$ -Koeffizienten einzeln berechnet. Die einzelnen  $s_n^{eff}$ -Koeffizienten wurden dann im Einzelfall nach der Besetzungswahrscheinlichkeit gewichtet.

Abb. IX.9 zeigt die Lage aller  $\langle 111 \rangle$ -Richtungen ( 1a - 1d ). Die zugehörigen Detektorwinkel  $\theta$  und  $\varphi$ , mit denen die  $s_n^{eff}$ -Koeffizienten schließlich berechnet wurden, sind in Tabelle IX.2 aufgeführt.

Bei den Zug-/Druckspannungsexperimenten tritt zusätzlich ein spannungsinduzierter EFG in Richtung der Spannungsachse auf [ Abb. IX.7/8 ]. Die zugehörigen Detektorwinkel lassen sich leicht aus Abb. IX.9 bestimmen und sind in Tab. IX.2 enthalten.

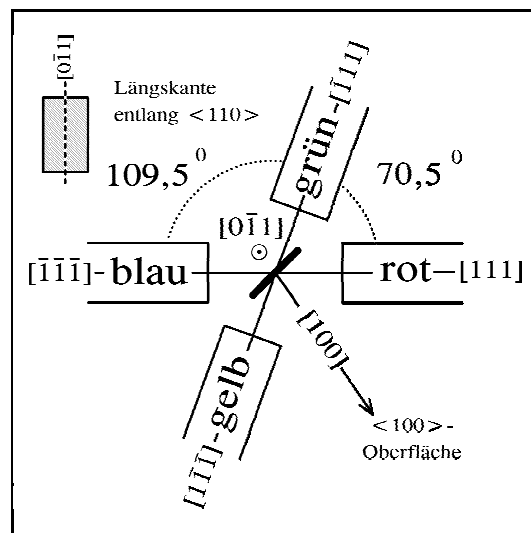


Abb. IX.7 : Orientierung der Detektoren für Zug- / Druckspannungen entlang  $\langle 110 \rangle$

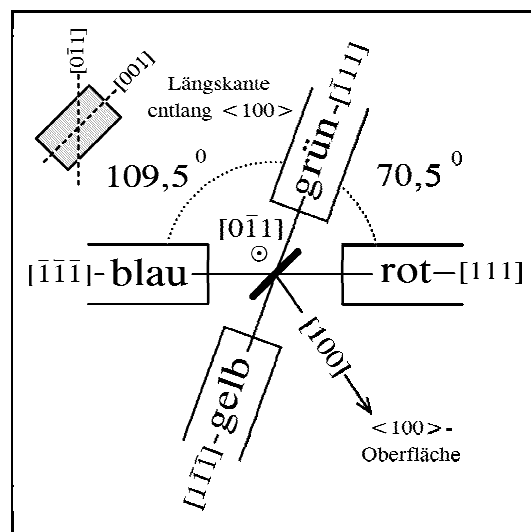


Abb. IX.8 : Orientierung der Detektoren für Zug- / Druckspannungen entlang  $\langle 100 \rangle$

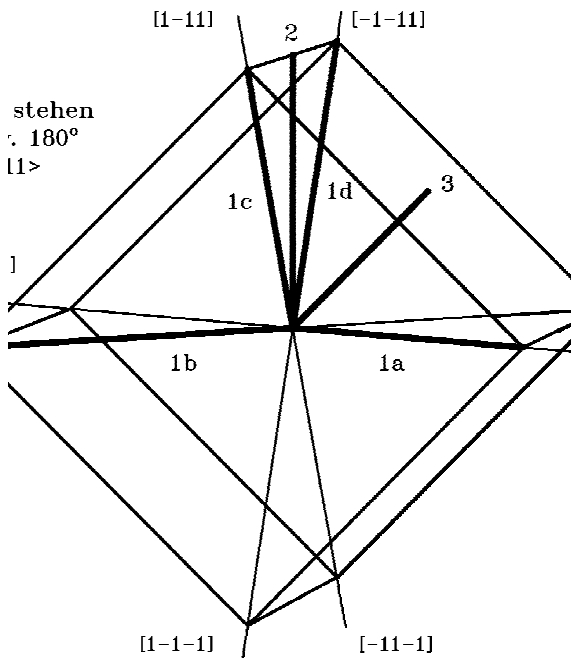


Abb. IX.9: Die Ausrichtung der Detektoren bezüglich der In-H-Komplexe (1a,1b,1c,1d) für den Fall einer äußeren uniaxialen Spannung entlang der  $\langle 100 \rangle$ - bzw.  $\langle 110 \rangle$ -Kristallrichtung

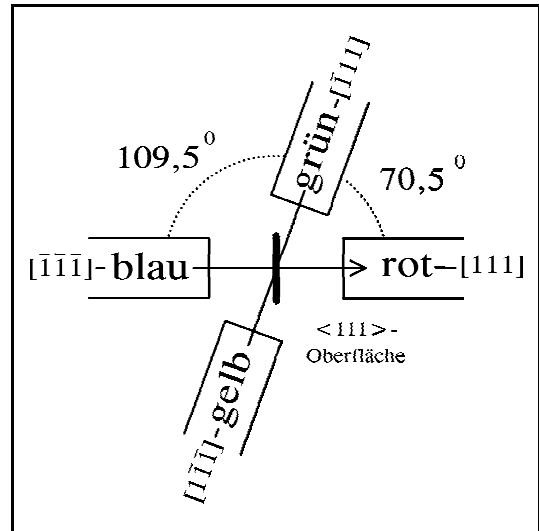


Abb. IX.6: Orientierung der Detektoren entlang der  $\langle 111 \rangle$ - Kristallachsen

Die Anordnung der Detektoren im Hauptachsensystem des EFG	$\theta_1$	$\theta_2$	$\phi_1$	$\phi_2$	$\vartheta$	Detektorkombination $\gamma_1 / \gamma_2$
	Der EFG zeigt innerhalb der Detektor ebene in Richtung [111]	$0^\circ$	$180^\circ$	$0^\circ$	$0^\circ$	
Der EFG zeigt innerhalb der Detektor ebene in Richtung [1-1-1]	$0^\circ$	$70.5^\circ$ $288^\circ$	$0^\circ$	$90^\circ$	$70.5^\circ$ $288^\circ$	rot / grün
	$109.47^\circ$ $12^\circ$	$70.5^\circ$ $288^\circ$	$270^\circ$	$90^\circ$	$180^\circ$	gelb / grün
	$109.47^\circ$ $12^\circ$	$180^\circ$	$270^\circ$	$0^\circ$	$70.5^\circ$ $288^\circ$	gelb / blau
	$109.47^\circ$ $12^\circ$	$70.5^\circ$ $288^\circ$	$90^\circ$	$270^\circ$	$180^\circ$	rot / blau
Der EFG zeigt außerhalb der Detektor ebene in Richtung [1-1-1]	$109.47^\circ$ $12^\circ$	$70.5^\circ$ $288^\circ$	$90^\circ$	$270^\circ$	$180^\circ$	rot / blau
	$109.47^\circ$ $12^\circ$	$180^\circ$	$90^\circ$	$0^\circ$	$70.5^\circ$ $288^\circ$	rot / grün
	$0^\circ$	$180^\circ$	$0^\circ$	$0^\circ$	$180^\circ$	gelb / grün
Der EFG zeigt außerhalb der Detektor ebene in Richtung [1-11]	$70.5^\circ$ $528^\circ$ $8^\circ$	$109.47^\circ$ $471^\circ$ $2^\circ$	$0^\circ$	$180^\circ$	$180^\circ$	rot / blau
	$70.5^\circ$ $528^\circ$ $8^\circ$	$109.47^\circ$ $471^\circ$ $2^\circ$	$0^\circ$	$60^\circ$	$70.5^\circ$ $288^\circ$	rot / grün
	$70.5^\circ$ $528^\circ$ $8^\circ$	$109.47^\circ$ $471^\circ$ $2^\circ$	$240^\circ$	$60^\circ$	$180^\circ$	gelb / grün

Die Anordnung der Detektoren im Hauptachsensystem des EFG		$\theta_1$	$\theta_2$	$\varphi_1$	$\varphi_2$	$\vartheta$	Detektorkombination $\gamma_1 / \gamma_2$
2	Der EFG zeigt senkrecht auf die Detektorebene	90°	90°	0°	180°	180°	rot / blau
		90°	90°	0°	70.5288°	70.5288°	rot / grün
		90°	90°	250.5288°	70.5288°	180°	gelb / grün
		90°	90°	250.5288°	180°	70.5288°	gelb / blau
3	Der EFG zeigt zwischen die Detektoren rot/grün ( 45° zur Detektorebene )	54.7356°	125.2644°	0°	180°	180°	rot / blau
		54.7356°	54.7356°	0°	90°	70.5288°	rot / grün
		125.2644°	54.7356°	270°	90°	180°	gelb / grün
		125.2644°	125.2644°	270°	180°	70.5288°	gelb / blau

Tab. IX.3 : Die Anordnung der Detektoren ( unter 70,5°/180° ) im Hauptachsensystem eines spannungsinduzierten EFG entlang einer  $\langle 110 \rangle$ - bzw.  $\langle 100 \rangle$ -Kristallachse

Während bei allen bisherigen Orientierungen die Detektoren in Richtung gleich-indizierter Kristallachsen standen, war dies bei den Zug- bzw. Druckspannungsexperimenten entlang der  $[111]$ -Kristallachse nicht möglich. Es wurde daher eine Proben- bzw. Detektorgeometrie gewählt, bei der die  $[111]$ -Spannungsachse und hiermit der zusätzlich auftretende spannungsinduzierte EFG senkrecht zur Detektorebene stand.

Die zu dieser Richtung gehörenden Detektorwinkel  $\theta$  und  $\varphi$  sind dieselben wie in Abb. IX.2 und Abb. IX.5 ( Pos.1 ) bzw. Tabelle IX.1 ( 1 ). Allerdings bedeutete diese Wahl, daß die Lage der ebenfalls vorhandenen defektinduzierten EFG entlang der übrigen  $\langle 111 \rangle$ -Raumrichtungen erst berechnet werden muß.

Für die Bestimmung der  $s_n^{eff}$ -Koeffizienten sind zunächst die Detektorwinkel für die  $\langle 111 \rangle$ -Richtungen des gedrehten Kristallsystems notwendig. Diese Berechnungen sind ausführlich in Kap. IX.2 dargestellt. Die Lage der  $\langle 111 \rangle$ -Richtungen im ortsfesten Detektorsystem ist aus Abb. IX.11 ersichtlich. Tabelle IX.4 enthält schließlich die Detektorwinkel im Hauptachsensystem eines EFG, welcher im Kristallsystem entlang einer  $\langle 111 \rangle$ -Richtung orientiert ist.

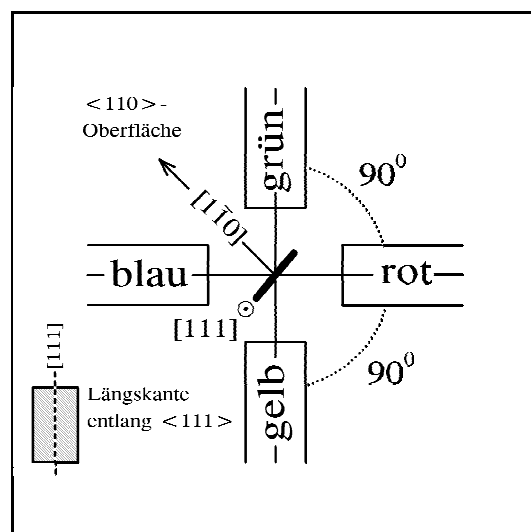


Abb. IX.10 :Orientierung der Detektoren für Zug- / Druckspannungen entlang  $\langle 111 \rangle$

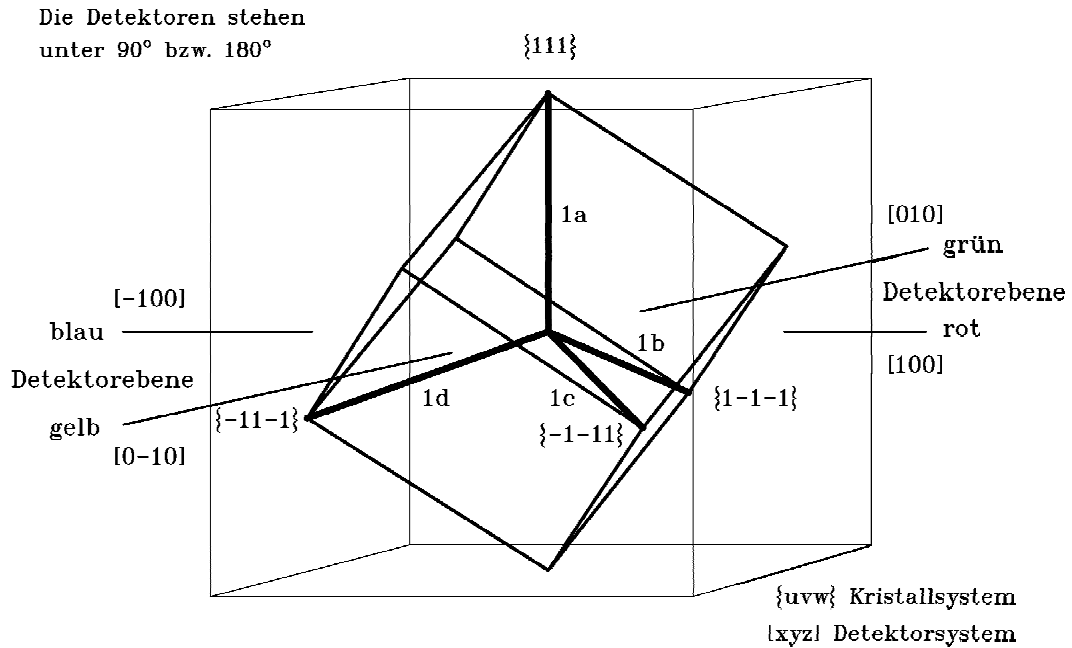


Abb. IX.11 : Die Ausrichtung der Detektoren bezüglich der In-H-Komplexe (1a,1b,1c,1d) für den Fall einer äußeren uniaxialen Spannung entlang der  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse

Die Anordnung der Detektoren im Hauptachsensystem des EFG	$\theta_1$	$\theta_2$	$\varphi_1$	$\varphi_2$	$\vartheta$	Detektorkombination $\gamma_1 / \gamma_2$
1a Der EFG zeigt im Kristallsystem in Richtung $\{111\}$	$90^\circ$	$90^\circ$	$0^\circ$	$180^\circ$	$180^\circ$	rot / blau
	$90^\circ$	$90^\circ$	$0^\circ$	$90^\circ$	$90^\circ$	rot / grün
	$90^\circ$	$90^\circ$	$270^\circ$	$90^\circ$	$180^\circ$	gelb / grün
	$90^\circ$	$90^\circ$	$270^\circ$	$180^\circ$	$90^\circ$	gelb / blau
1b Der EFG zeigt im Kristallsystem in Richtung $\{1-1-1\}$	$155.6000^\circ$	$24.4000^\circ$	$0^\circ$	$180^\circ$	$180^\circ$	rot / blau
	$155.6000^\circ$	$75.8763^\circ$	$0^\circ$	$303.6900^\circ$	$90^\circ$	rot / grün
	$104.1237^\circ$	$75.8763^\circ$	$123.6900^\circ$	$303.6900^\circ$	$180^\circ$	gelb / grün
	$104.1237^\circ$	$24.4000^\circ$	$123.6900^\circ$	$180^\circ$	$90^\circ$	gelb / blau
1c Der EFG zeigt im Kristallsystem in Richtung $\{-1-11\}$	$48.1897^\circ$	$131.8103^\circ$	$0^\circ$	$180^\circ$	$180^\circ$	rot / blau
	$48.1897^\circ$	$48.1897^\circ$	$0^\circ$	$216.8699^\circ$	$90^\circ$	rot / grün
	$131.8103^\circ$	$48.1897^\circ$	$36.8699^\circ$	$216.8699^\circ$	$180^\circ$	gelb / grün
	$131.8103^\circ$	$131.8103^\circ$	$36.8699^\circ$	$180^\circ$	$90^\circ$	gelb / blau
1d Der EFG zeigt im Kristallsystem in Richtung $\{-11-1\}$	$75.8763^\circ$	$104.1237^\circ$	$0^\circ$	$180^\circ$	$180^\circ$	rot / blau
	$75.8763^\circ$	$155.6000^\circ$	$0^\circ$	$303.6900^\circ$	$90^\circ$	rot / grün
	$24.4000^\circ$	$155.6000^\circ$	$123.6900^\circ$	$303.6900^\circ$	$180^\circ$	gelb / grün
	$24.4000^\circ$	$104.1237^\circ$	$123.6900^\circ$	$180^\circ$	$90^\circ$	gelb / blau

Tab. IX.4 : Die Anordnung der Detektoren ( unter  $90^\circ/180^\circ$  ) im Hauptachsensystem eines defektinduzierten EFG in Richtung einer  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse

## IX.2. Bestimmung der Detektorwinkel im Hauptachsensystem des EFG

Bei der folgenden Probengeometrie steht die  $[111]$ -Achse senkrecht auf der Detektorebene und die  $[1-10]$ -Probenoberfläche zeigt zwischen die Detektoren rot und gelb [ Abb. IX.12 ]. Die unter jeweils  $90^\circ$  zueinander angeordneten Detektoren zeigen in diesem Fall jedoch nicht entlang derselben, niedrigindizierten Kristallachsen. Durch die räumliche Festlegung der beiden Kristallachsen  $[111]$  und  $[1-10]$ , ist die Lage des Kristalls im ortsfesten Detektorsystem jedoch vollständig charakterisiert.

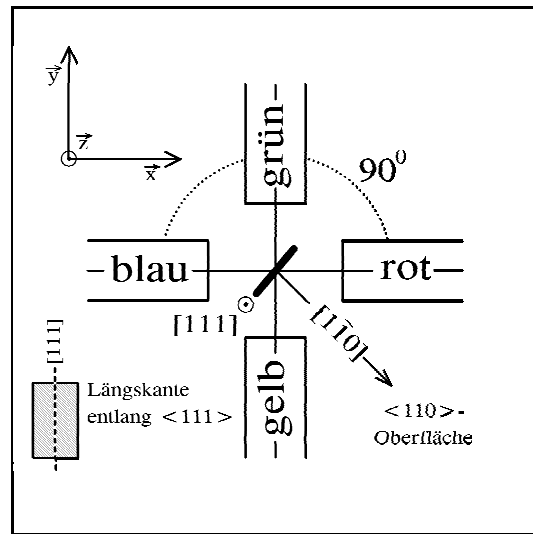


Abb. IX.12 : Orientierung der Detektoren für Zug-/ Druckspannungen entlang  $\langle 111 \rangle$

Allgemein läßt sich jeder Kristall, dessen Achsen  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  und  $\vec{c}$  ursprünglich in Richtung der Hauptachsen des äußeren Laborsystems  $\vec{x}$ ,  $\vec{y}$  und  $\vec{z}$  standen, durch Drehung um drei Achsen in eine Lage überführen, welche der gewählten Probengeometrie entspricht.

Die Drehmatrizen  $\underline{\underline{R}}$  für eine Drehung um die Hauptachsen  $\vec{x}$ ,  $\vec{y}$  und  $\vec{z}$  lauten:

$$\underline{\underline{R}}_x(\alpha) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \alpha & -\sin \alpha \\ 0 & \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \quad \underline{\underline{R}}_y(\beta) = \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & \sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix} \quad \underline{\underline{R}}_z(\gamma) = \begin{pmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma & 0 \\ \sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{IX.5})$$

Hieraus setzt sich die allgemeine Drehmatrix  $\underline{\underline{R}}_{xyz}$  wie folgt zusammen:

$$\underline{\underline{R}}_{xyz} = \begin{pmatrix} \cos \beta \cdot \cos \gamma & -\cos \beta \cdot \sin \gamma & \sin \beta \\ \cos \alpha \cdot \sin \gamma + \sin \alpha \cdot \sin \beta \cdot \cos \gamma & \cos \alpha \cdot \cos \gamma - \sin \alpha \cdot \sin \beta \cdot \sin \gamma & -\sin \alpha \cdot \cos \beta \\ \sin \alpha \cdot \sin \gamma - \cos \alpha \cdot \sin \beta \cdot \cos \gamma & \sin \alpha \cdot \cos \gamma + \cos \alpha \cdot \sin \beta \cdot \sin \gamma & \cos \beta \cdot \cos \gamma \end{pmatrix} \quad (\text{IX.6})$$

Die Festlegung von zwei gedrehten Kristallachsen im ortsfesten Laborsystem liefert dann ein Gleichungssystem, durch das die Drehmatrix  $\underline{\underline{R}}_{xyz}$  eindeutig bestimmbar ist.

In unserem Fall gilt:

$$\underline{\underline{R}}_{xyz} \cdot \sqrt{\frac{1}{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \underline{\underline{R}}_{xyz} \cdot \sqrt{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{IX.7})$$

Im Fall der in Abbildung IX.12 dargestellten Probengeometrie erkennt man jedoch auch ohne Lösung des Gleichungssystems [ Gl. IX.7 ], welche Drehungen notwendig sind, um den Kristall in die gewünschte Position zu bringen.

Aus seiner Ausgangslage wird der Kristall zunächst um  $\gamma = 45^\circ$  um die z-Achse des feststehenden Laborsystems und anschließend noch um  $\alpha = 54,7356^\circ$  um die x-Achse gedreht. Die  $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse steht nun bereits senkrecht auf der Detektorebene, allerdings zeigt die Probenoberfläche noch auf den blauen Detektor, sodaß schließlich noch einmal mit dem Drehwinkel  $\gamma = 135^\circ$  um die z-Achse gedreht werden muß.

Die Drehmatrizen  $\underline{\underline{R}}$  für die entsprechenden Drehungen lauten:

$$\underline{\underline{R}}_x(54.7^\circ) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} & -\sqrt{\frac{2}{3}} \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}} \end{pmatrix} \quad \underline{\underline{R}}_z(45^\circ) = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2}} & -\sqrt{\frac{1}{2}} & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \underline{\underline{R}}_z(135^\circ) = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{1}{2}} & -\sqrt{\frac{1}{2}} & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{2}} & -\sqrt{\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{IX.8})$$

Hieraus setzt sich die benötigte Drehmatrix  $\underline{\underline{R}}_{zxz}$  wie folgt zusammen:

$$\underline{\underline{R}}_{zxz} = \underline{\underline{R}}_z(135^\circ) \cdot \underline{\underline{R}}_x(54.7^\circ) \cdot \underline{\underline{R}}_z(45^\circ) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}(1+\sqrt{\frac{1}{3}}) & \frac{1}{2}(1-\sqrt{\frac{1}{3}}) & \sqrt{\frac{1}{3}} \\ \frac{1}{2}(1-\sqrt{\frac{1}{3}}) & -\frac{1}{2}(1+\sqrt{\frac{1}{3}}) & \sqrt{\frac{1}{3}} \\ \sqrt{\frac{1}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}} \end{pmatrix} \quad (\text{IX.9})$$

Durch die Drehung des Kristallsystems transformieren sich die  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtungen innerhalb des ortsfesten Detektorsystems wie folgt:

$$\underline{\underline{R}}_{zxz} \cdot \sqrt{\frac{1}{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \underline{\underline{R}}_{zxz} \cdot \sqrt{\frac{1}{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} \Rightarrow \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -(1+\sqrt{3}) \\ (\sqrt{3}-1) \\ -1 \end{pmatrix} \quad (\text{IX.10})$$

$$\underline{\underline{R}}_{zxz} \cdot \sqrt{\frac{1}{3}} \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \underline{\underline{R}}_{zxz} \cdot \sqrt{\frac{1}{3}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \Rightarrow \frac{1}{3} \begin{pmatrix} (\sqrt{3}-1) \\ -(1+\sqrt{3}) \\ -1 \end{pmatrix}$$

Liegt der EFG im Kristallsystem z.B. in  $[-1-11]$ -Richtung [ (1c) in Abb. IX.11 ], so zeigt  $V_{zz}$  im ortsfesten Detektor- bzw. Laborsystem in Richtung  $[22-1]$ .

Für einen EFG, der innerhalb des gedrehten Kristallsystems in Richtung der  $[-1-11]$ -Kristallachse zeigt, berechnet sich der Winkel  $\theta$  zwischen seiner Hauptachse  $V_{zz}$  und der jeweiligen Detektorrichtung [ Abb. IX.1 ]

$$[\text{rot}] = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad [\text{grün}] = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad [\text{blau}] = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad [\text{gelb}] = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{IX.11})$$

wie folgt:

$$\begin{aligned} \cos \theta_{\text{rot}} &= \frac{1}{3} \cdot \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{2}{3} \Rightarrow \theta_{\text{rot}} = 48.1879^\circ \\ \cos \theta_{\text{grün}} &= \frac{1}{3} \cdot \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{2}{3} \Rightarrow \theta_{\text{grün}} = 48.1879^\circ \\ \cos \theta_{\text{blau}} &= \frac{1}{3} \cdot \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = -\frac{2}{3} \Rightarrow \theta_{\text{blau}} = 131.8103^\circ \\ \cos \theta_{\text{gelb}} &= \frac{1}{3} \cdot \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = -\frac{2}{3} \Rightarrow \theta_{\text{gelb}} = 131.8103^\circ \end{aligned} \quad (\text{IX.12})$$

Entsprechend läßt sich der Winkel  $\theta_i$  für jede andere  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung bestimmen. Zur vollständigen Festlegung der Detektorposition im Hauptachsensystem des EFG benötigt man nun noch den Winkel  $\varphi_i$  [ vgl. Abb. IX.1 ].

Gesucht ist nun ein geeignetes Hauptachsensystem  $\vec{u}$ ,  $\vec{v}$  und  $\vec{w}$ , so daß die Projektion der Detektorrichtung [ rot ], auf die von den Vektoren  $\vec{u}$  und  $\vec{v}$  aufgespannte Ebene, in Richtung der Hauptachse  $\vec{u}$  zeigt. Durch diese Zusatzbedingung läßt sich der Winkel  $\varphi_{\text{rot}} = 0^\circ$  bereits festlegen. Für den gegenüberliegenden blauen Detektor beträgt der  $\varphi$ -Winkel somit  $\varphi_{\text{blau}} = 180^\circ$ .

Die Richtung der 1. Hauptachse  $\vec{u}$  ist dann durch folgendes Gleichungssystem bestimmt:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} &= \vec{U} + c \cdot \vec{W} \quad \text{und} \quad \vec{U} \cdot \vec{W} = 0, \quad \text{wobei} \quad \vec{W} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix} \parallel \vec{V}_{zz} \\ \Leftrightarrow \begin{cases} 1 = u_1 + 2c \\ 0 = u_2 + 2c \\ 0 = u_3 - c \\ 0 = 2u_1 + 2u_2 - u_3 \end{cases} &\Leftrightarrow \begin{cases} u_1 = 5/9 \\ u_2 = -4/9 \\ u_3 = 2/9 \\ c = 2/9 \end{cases} \Rightarrow \vec{U} = \begin{pmatrix} 5/9 \\ -4/9 \\ 2/9 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{IX.13})$$



Die Richtung der 2. Hauptachse  $\vec{v}$ , die senkrecht auf  $\vec{u}$  und  $\vec{w}$  steht, wobei  $\vec{u}$ ,  $\vec{v}$  und  $\vec{w}$  ein Rechtssystem bilden, findet man durch Bildung des Vektorproduktes  $\vec{w} \times \vec{u}$ :

$$\vec{v} = \vec{w} \times \vec{u} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 5/9 \\ -4/9 \\ 2/9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ -2 \end{pmatrix} \quad (\text{IX.14})$$

Für einen EFG, der im Kristallsystem in Richtung der [-1-11]-Kristallachse zeigt, bilden die normierten Vektoren  $\vec{u}$ ,  $\vec{v}$  und  $\vec{w}$  ein geeignetes orthogonales Hauptachsensystem.

$$\vec{u} = \frac{1}{\sqrt{45}} \begin{pmatrix} 5 \\ -4 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad \vec{v} = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ -2 \end{pmatrix}, \quad \vec{w} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (\text{IX.15})$$

Innerhalb der  $uv$ -Ebene des EFG-Hauptachsensystems zeigt die Projektion der Detektorrichtung [ rot ] konstruktionsbedingt in Richtung der 1. Hauptachse  $\vec{u}$ , somit ergeben sich zwangsläufig die Winkel  $\varphi_{rot} = 0^\circ$  und  $\varphi_{blau} = 180^\circ$ . Um nun auch für die Detektorrichtungen [ grün ] und [ gelb ] die zugehörigen Projektionswinkel  $\varphi_{grün}$  und  $\varphi_{gelb}$  zu bestimmen, zerlegt man die Detektorrichtungen im Hauptachsensystem des EFG

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = a \cdot \vec{u} + b \cdot \vec{v} + c \cdot \vec{w} = [\text{grün}] \quad (\text{IX.16})$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} 0 = 5a + 2c \\ 1 = -4a - b + 2c \\ 0 = 2a - 2b - c \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} a = -4/45 \\ b = -9/45 \\ c = 10/45 \end{cases}$$

und erhält für die Projektion der Detektorrichtung [ grün ] in der  $uv$ -Ebene:

$$\mathbf{P}_{uv} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = a \cdot \vec{u} + b \cdot \vec{v} = \frac{-4}{\sqrt{45}} \begin{pmatrix} 5 \\ -4 \\ 2 \end{pmatrix} - \frac{9}{\sqrt{45}} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ -2 \end{pmatrix} = \frac{1}{9} \begin{pmatrix} -4 \\ 5 \\ 2 \end{pmatrix} \quad (\text{IX.17})$$

Der Winkel  $\varphi_{grün}$  zwischen dieser Projektion und der 1. Hauptachse  $\vec{u}$  beträgt dann:

$$\cos \varphi_{grün} = \frac{1}{45} \cdot \begin{pmatrix} -4 \\ 5 \\ 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 5 \\ -4 \\ 2 \end{pmatrix} = \frac{-36}{45} \Rightarrow \varphi_{grün} = 143.1301^\circ \quad (\text{IX.18})$$

Der Richtungssinn des auf diese Weise bestimmten Winkels  $\varphi_{\text{grün}}$  läßt sich am leichtesten in der nebenstehenden Skizze [ Abb. IX.13 ] ablesen.

Man erhält schließlich:

$$\varphi_{\text{grün}} = -143,1301^\circ \text{ ( bzw. } 216,8699^\circ \text{ )}$$

und

$$\varphi_{\text{gelb}} = 36,8699^\circ$$

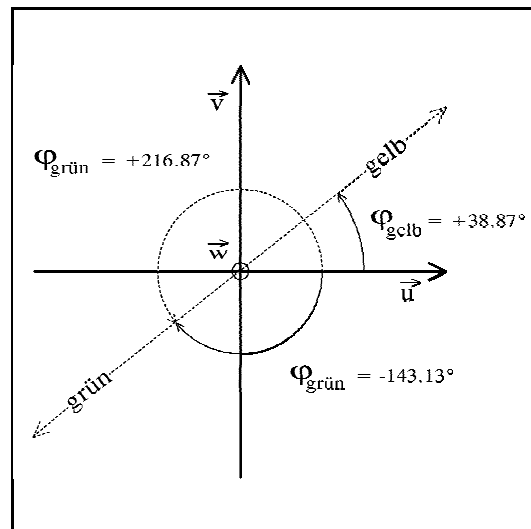


Abb. IX.13 : Lage des Projektionsvektors in der  $uv$ -Ebene ( Vorzeichen des Winkels  $\varphi$  )

Im Fall einer Probengeometrie gemäß Abb. IX.11/12 erhält man, für die Orientierung des EFG entlang der  $[-1-11]$ -Kristallrichtung, die in der Tabelle IX.5 aufgeführten Detektorwinkel  $\theta$  und  $\varphi$ .

Die Anordnung der Detektoren im Hauptachsensystem des EFG	$\theta_1$	$\theta_2$	$\varphi_1$	$\varphi_2$	$\vartheta$	Detektorkombination
Der EFG zeigt im Kristallsystem in Richtung $\{-1-11\}$	$48.1897^\circ$	$131.8103^\circ$	$0^\circ$	$180^\circ$	$180^\circ$	rot / blau
	$48.1897^\circ$	$48.1897^\circ$	$0^\circ$	$216.8699^\circ$	$90^\circ$	rot / grün
	$131.8103^\circ$	$48.1897^\circ$	$36.8699^\circ$	$216.8699^\circ$	$180^\circ$	gelb / grün
	$131.8103^\circ$	$131.8103^\circ$	$36.8699^\circ$	$180^\circ$	$90^\circ$	gelb / blau

Tab. IX.5 : Die Detektorwinkel im Hauptachsensystem für einem EFG in Richtung einer  $[-1-11]$ -Kristallachse bei einer Probengeometrie gemäß Skizze [ Abb. IX.12 ]

Entsprechend der für den Fall einer  $[-1-11]$ -Orientierung des EFG im Kristallsystem beschriebenen Vorgehensweise, lassen sich die Detektorwinkel im Hauptachsensystem auch für die übrigen Orientierungen (  $[111]$ ,  $[1-1-1]$ ,  $[-11-1]$  ) des EFG berechnen. Die zugehörigen Winkel  $\theta$  und  $\varphi$  sind in der Tabelle IX.4 zusammengefaßt.

Der beschriebene Algorithmus eignet sich ebenso zur Berechnung der Detektorwinkel im Hauptachsensystem eines EFG innerhalb eines beliebigen Kristallsystems, dessen Lage im ortsfesten Detektorsystem durch Angabe der zugehörigen Drehmatrix eindeutig festgelegt ist.

- ARE 80 A.R. Arends, C. Hohenemser, F. Pleiter, H. de Waard, L. Chow and R.M. Suter; *Data reduction methodology for perturbed angular correlation experiments*, Hyp. Int. 8 ( 1980 ), 191
- ASS 85 M. Aßmann; *Elektrische Feldgradienten in Metallen und geordneten intermetallischen Verbindungen berechnet im Punktladungsmodell*, Staatsexamensarbeit, Universität Bonn ( 1985 )
- BAU 87 A. Baudry and P. Boyer; *Approximation of the Blume's stochastic model by asymptotic models for PAC relaxation analysis*, Hyp. Int. 35 ( 1987 ), 803
- BAR 79 G.A. Baraff and M. Schlüter; *New self-consistent approach to the electronic structure of localized defects in solids*, Phys. Rev. B 19 ( 1979 ), 4965
- BER 69 R. Béraud, I. Berkes, J. Danière, G. Marest and R. Rougny; *Effect of finite time-resolution on perturbed angular correlation measurements*, Nucl. Ins. and Meth. 69 ( 1969 ), 41
- BEN 91 H. Beneking; *Halbleiter-Technologie*, Teubner-Verlag , Stuttgart ( 1991 )
- BER 88 K. Bergmann, M. Stavola, S.J. Pearton and T. Hayes; *Structure of acceptor-hydrogen and donor-hydrogen complexes in silicon from uniaxial stress studies*, Phys. Rev. B 38 ( 1988 ), 9643
- BER 89 K. Bergmann, M. Stavola, S.J. Pearton, J. Lopata, H.G. Grimmeiss and T. Hayes; *Off-axis hydrogen in acceptor-hydrogen complexes from uniaxial stress studies*, Mater. Science Forum 38-41 ( 1989 ), 1015
- BIE 80 J.P. Biersack and L.G. Haggmark; *A Monte Carlo Computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets*, Nucl. Ins. and Meth. 174 ( 1980 ), 257
- BJÖ 68 K. Björkpvist, B. Domeij, L. Erikson, G. Fladda, A. Fontell and J.W. Mayer; *Lattice location of dopant elements implanted into Ge*, Appl. Phys. Lett. 13 ( 1968 ), 379
- BNT 80 J.L. Benton, C.J. Doherty, S.D. Ferris, D.L. Flamm, L.C. Kimmerling and H.J. Leamy; *Hydrogen passivation of point defects in silicon*, Appl. Phys. Lett. 60 ( 1980 ), 670
- BON 87 A. Amore Bonapasta, A. Lapicciarella, N. Tomassini and M. Capizzi; *Hydrogen passivation of shallow acceptors in c-Si: An ab initio approach*, Phys. Rev. B 36 (1987 ) , 6228
- BON 91 A. Amore Bonapasta, P. Giannozzi and M. Capizzi; *Structural and vibrational properties of the Si-H-Al complex in crystalline silicon*, Phys. Rev. B 44 ( 1991 ), 3399

- BON 92 A. Amore Bonapasta, P. Giannozzi and M. Capizzi; *Silicon-hydrogen-acceptor complexes in crystalline silicon*, Phys. Rev. B 45 ( 1992 ), 11744
- BUT 89 T. Butz; *Analytic perturbation functions for static interactions in perturbed angular correlations of  $\gamma$ -rays*, Hyperfine Int. 52 ( 1989 ), 189
- CHA 88 K.J. Chang and D.J. Chadi; *Theorie of hydrogen passivation of shallow-level dopants in crystalline silicon*, Phys. Rev. Lett. 60 ( 1988 ), 1422
- CHA 89 A. Chari and M. Aucouturier; *A Study of the majority carrier mobility in hydrogenated boron-doped silicon*, Solid State Comm. 71 ( 1989 ), 105
- COR 88 J.W. Corbett, J.L. Lindström, S.J. Pearton and A.J. Tavendale; *Passivation in silicon* , Solar Cells 24 ( 1988 ), 127
- COR 90 J.W. Corbett; *Hydrogen passivation of damage centers in semiconductors*, in the series *Semiconductor and Semimetals*, Volume *Hydrogen in Semiconductors*, edited by J.I. Pankove and N.M. Johnson, Academic Press, New-York, ( 1990 )
- DEA 88 P. Deak, L.C. Snyder, J.L. Lindstrom, J.W. Corbett, S.J. Pearton and A.J. Tavendale; *The self-trapping of hydrogen in semiconductors*, Phy. Lett. A 126 ( 1988 ), 427
- DEI 89a M. Deicher, G. Grübel, R. Keller, E. Recknagel, N. Schulz, H. Skudlik and Th. Wichert; *Thermal stability of acceptor-hydrogen pairs in silicon*, Mater. Science Forum 38-41 ( 1989 ), 25
- DEI 89b M. Deicher, R. Keller, W. Pfeiffer, H. Skudlik, D. Steiner, E. Recknagel and Th. Wichert; *Pairing of acceptors with interstitial donors in silicon and germanium*, Mater. Science and Engineering 4 ( 1989 ), 25
- DEI 92 M. Deicher; *PAC studies on the formation and stability of acceptor - defect complexes in semiconductors*, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B 63 ( 1992 ), 189
- DEN 89a P.J.H. Denteneer, C.G. Van de Walle and S.T. Pantelides; *Structure and properties of hydrogen-impurity pairs in elemental semiconductors*, Phys. Rev. Lett. 62 ( 1989 ), 1884
- DEN 89b P.J.H. Denteneer, C.G. Van de Walle and S.T. Pantelides; *Microscopic structure of the hydrogen-boron complex in crystalline silicon*, Phys. Re. B 39 ( 1989 ), 10809
- EWA 21 P. Ewald; *Die Berechnung optischer und elektrostatischer Gitterpotentiale*, Ann. d. Physik, Serie 4, Band 64, Leipzig ( 1921 )
- EST 87 S.K. Estreicher; *Equilibrium sites and electronic structure of interstitial hydrogen in silicon*, Phys. Rev. B 36 ( 1987 ), 9122

- EST 89 S.K. Estreicher, L. Throckmorton, D.S. Marynick; *Hydrogen passivation of shallow acceptors and donors in c-Si: Comparison and trends*, Phys. Rev. B 39 ( 1989 ), 13241
- FEI 69 F.D. Feiock and W.R. Johnson; *Atomic susceptibilities and shielding factors*, Phys. Rev. 187 ( 1969 ), 39
- FER 65 M. Ferenz and N. Rosenzweig; *Table of angular correlation coefficients*, Appendix 8 in [ SIE 65 ], 1687
- FEU 90a U. Feuser, R. Vianden and A.F. Pasquevich; *Defect - acceptor pairs in germanium*, Hyp. Int. 60 ( 1990 ), 829
- FEU 90b U. Feuser; *Untersuchung defektinduzierter elektrischer Feldgradienten im Halbleiter Germanium*, Dissertation, Universität Bonn ( 1990 )
- FRA 65 H. Frauenfelder, R.M. Steffen; *Angular correlations*, in [ SIE 65 ], 997
- FRE 77 K. Freitag; *Bestimmung des Penetrations-Parameters  $\lambda$  der anomalen M1-Konversion des 482 keV Übergangs in  $^{181}\text{Ta}$  mit Hilfe der zeitlich differentiellen Beobachtung gestörter  $e^- \gamma$  Winkelkorrelation*, Dissertation, Universität Bonn ( 1977 )
- FOR 89 D. Forkel, S. Deubler, U. Reislöhner, K. Spörl, W. Witthuhn and H. Wolf; *Defects in silicon after proton and electron irradiation*, Mat. Sci. For. 38-41 ( 1989 ), 1251
- FOR 92 D. Forkel, N. Achtziger, A. Baurichter, M. Deicher, S. Deubler, W. Witthuhn, M. Puschmann, H. Wolf and ISOLDE Collaboration; *Acceptor-donor pairs in germanium*, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B 63 ( 1992 ), 217
- GER 69 E. Gerdau, J. Wolf, H. Winkle and J. Braunsfurth; *Quadrupole interaction of  $^{181}\text{Ta}$  in Hf compounds*, Proc. Roy. Soc. A 311 ( 1969 ), 197
- GUZ 93 V. Guzmann; *Druckabhängigkeit des Cd-H Komplexes in Silizium*, Diplomarbeit Universität Erlangen ( 1993 )
- HAL 85 E.E. Haller, L.M. Falicov; *Solid State Commun.* 53 ( 1985 ), 1121
- HAL 89 E.E. Haller; in *Shallow Impurities in Semiconductors*, edited by B. Monemar, IOP, Bristol (1989), 425
- HAM 75 W.D. Hamilton ( Hrsg. ); *The Electromagnetic Interaction in Nuclear Spectroscopy*, North-Holland Pub. Comp., New York ( 1975 )
- HEA 46 R.F.S. Hearmon; *The elastic constant of anisotropic materials*, Revs. Mod. Phys. 18 ( 1946 ), 1946

- HER 80 P. Herzog, K. Freitag, M. Reuschenbach and H. Walitzki; *Nuclear orientation of the  $^{111m}\text{Cd}$  and Be and the quadrupole moment of the 245 keV state*, Z. Phys. A 294 ( 1980 ), 13
- HER 91 W. Herz; *Die gestörte Winkelkorrelation als Methode zur Untersuchung der Wasserstoffdiffusion in Festkörpern am Beispiel der Hydride von Zirkonium und Hafnium*, Dissertation, Universität Bonn ( 1991 )
- HRR 88 C.P. Herrero and M. Stutzmann; *Microscopic structure of boron-hydrogen complexes in crystalline silicon*, Phys. Rev. B 38 ( 1988 ), 12668
- JAC 66 R.J. Jacodine and W.A. Schlegel; *Measurement of strains at Si-SiO<sub>2</sub> interface*, J. Appl. Phys. 37 ( 1966 ), 2429
- JAW 89 A.E. Jaworowski and J.H. Robinson; *Hydrogenation of shallow and deep Levels in silicon*, Mater. Science and Engineering B 4 ( 1989 ), 51
- JEN 88 S.J. Jen, G.S. Oehrlein and G.J. Scilla; *Hydrogen plasma induced defects in silicon*, Appl. Phys. Lett. 53 ( 1988 ), 1735
- JOH 85 N.M. Johnson; *Mechanism of hydrogen compensation of shallow-acceptor impurities in single crystal silicon*, Phys. Rev. B 31 ( 1985 ), 5525
- JOH 86 N.M. Johnson, C. Herring and D.J. Chadi; *Interstitial hydrogen and neutralization of shallow donor impurities in single crystal silicon*, Phys. Rev. Lett. 56 ( 1986 ), 769
- JOH 87 N.M. Johnson, F.A. Ponce, R.A. Street and R.J. Nemanich; *Defects in single-crystal silicon induced by hydrogenation*, Phys. Rev. B 35 ( 1987 ), 4166
- KAU 79 E.N. Kaufmann and R. Vianden; *The electric field gradient in noncubic metals*, Rev. Mod. Phys. 51 ( 1979 ), 161
- KAH 87 J.M. Kahn, R.E. Mc Murray Jr., E.E. Haller and L.M. Falicov; *Trigonal hydrogen-related acceptor complexes in germanium*, Phys. Rev. B 36 ( 1987 ), 8001
- KOC 90 H. Koch; *Defekt-Fremdatom Wechselwirkungen in den hexagonalen Metallen Rhenium und Lutetium*, Dissertation, Universität Bonn ( 1990 )
- KRU 77 K. Krusch; *Strahlenschäden nach Implantation von  $^{111}\text{In}$  in Platin und Kupfer*, Diplomarbeit, Universität Bonn ( 1977 )
- LAN 82 Landolt, Börnstein; *Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaft und Technik*, Neue Serie, Gr. III/17-a, Springer Verlag Berlin ( 1982 )
- LED 73 M. Lederer, J.M. Hollander and I. Perlman; *Table of isotopes*, Wiley, New York ( 1973 )

- LEO 85 G.G. De Leo and W. Beall Fowler; *Hydrogen-acceptor pairs in silicon: Pairing effect on the hydrogen vibrational frequency*, Phys. Rev. B 31 ( 1985 ), 6861
- LEO 86 G.G. De Leo and W. Beall Fowler; *Hydrogen-acceptor pairs in silicon*, Phys. Rev. Lett. 56 ( 1986 ), 402
- LIA 92 E. Liarokapis and W. Richter; *Design of two devices for biaxial stresses and their application to silicon wafers*, Meas. Sci. Technol. 3 ( 1992 ), 347
- LIE 93 M. Lieder; *Winkelkorrelationsmessungen am Yttrium - Wasserstoff - System*, Diplomarbeit, Universität Bonn ( 1993 )
- LIN 86 G. Lindner, H. Hofsäss, S. Winte, B. Besold, E. Recknagel, J.W. Petersen and G. Weyer; *Direct evidence for substitutional ion-implanted indium dopants in silicon*, Phys. Rev. Lett. 57 ( 1986 ), 2283
- LOU 76 S.G. Louie, M. Schlüter, J.R. Chelikowsky and M.L. Cohen; *Self-consistent electronic states for reconstructed Si vacancy models*, Phys. Rev. B 13 ( 1976 ), 1654
- MAR 90 G. Marx; *Aufbau und Test einer RTA - Kurzzeit-Temper-Anlage*, Diplomarbeit, Universität Bonn ( 1990 )
- MAR 92a G. Marx, H. Knauf und R. Vianden; *Bildung und Stabilität von In-H Paaren im Halbleiter Germanium*, Frühjahrstagung der DPG ( 1992 ) in Regensburg, Beitrag HL 5.10
- MAR 92b G. Marx, U. Feuser und R. Vianden; *Indium-Defekt-Komplexe in Germanium*, Arbeitstagung des MPI für Festkörperphysik auf Schloß Ringberg ( 1992 )
- MAR 93a G. Marx and R. Vianden; *Hydrogen in crystalline silicon under compression and tension*, 13th General Conference of the EPS ( 1993 ) in Regensburg, presentation SC 1.6
- MAR 93b G. Marx und R. Vianden; *In-H Komplexe in Si und Ge unter dem Einfluß äußerer Druck- bzw. Zugspannungen*, Arbeitstreffen des Verbundes - Festkörperphysik und Materialforschung mit nuklearen Methoden in Holzgau ( 1993 )
- MAR 93c G. Marx and R. Vianden ; *A tension induced electric field gradient in Silicon and Germanium*, ISKP Research Report 1993, University of Bonn ( 1993 )
- MAR 94 G. Marx und R. Vianden; *Spannungsinduzierte elektrische Feldgradienten in Silizium und Germanium*, Frühjahrstagung der DPG ( 1994 ) in Münster, Beitrag HL 8.4
- MAR 95a G. Marx und R. Vianden; *Indium-Defekt-Komplexe in Silizium unter uniaxialer Spannung*, Frühjahrstagung der DPG ( 1995 ) in Berlin, Beitrag HL 5.4

- MAR 95b G. Marx und R. Vianden; *Indium-hydrogen complexes in silicon and germanium under compression and tension*, Proc. 10th Int. Conf. on Hyperfine Interactions, Leuven ( 1995 ), to be published
- MAR 95c G. Marx und R. Vianden; *Electric field gradients in Si induced by uniaxial stress*, Phys. Lett. A ( 1995 ), to be published
- MAW 87 A.D. Marwick, G.S. Oehrlein and N.M. Johnson; *Structure of the boron-hydrogen complex in crystalline silicon*, Phys. Rev. B 36 ( 1987 ), 4539
- MAY 68 J.W. Mayer, L. Erikson, S.T. Picraux and J.A. Davies; *Ion implantation of silicon and germanium at room temperature. Analysis by means of 1 MeV helium ion scattering*, Canad. J. Phys. 46 ( 1968 ), 663
- MAY 70 J.W. Mayer, L. Erikson and J.A. Davies; *Ion implantation in semiconductors*, Academic Press, New York ( 1970 )
- MUR 86 K. Muro, A.J. Sievers; *Proton tunneling with millielectronvolt energies at the Be-H acceptor complex in silicon*, Phys. Rev. Lett. (1986), 897
- NAK 78 K. Nakamoto; *IR and raman spectra of inorganic and coordination compounds*, Wiley, New York ( 1978 )
- NDS 79 B. Marmatz; *Nuclear Data Sheets for A=111* , in NDS Bd. 27.3 , Academic Press, New York ( 1979 ), 453
- NIE 88 B. Nielsen, J.U. Anderson and S.J. Pearton; *Lattice location of deuterium interacting with the boron acceptor in silicon*, Phys. Rev. Lett. 60 ( 1988 ), 321
- PAJ 88 B. Pajot, A. Chari, M. Aucouturier, M. Astier and A. Chantre; *Experimental evidence for boron-hydrogen interactions in boron-doped silicon*, Solid State Comm. 67 ( 1988 ), 855
- PAN 83 J.I. Pankove, D.E. Carlson, J.E. Berkeyheiser and R.O. Wance; *Neutralization of shallow acceptor levels in silicon by atomic hydrogen*, Phys. Rev. Lett. 51 ( 1983 ), 2224
- PAN 84 J.I. Pankove, R.O. Wance, J.E. Berkeyheiser; *Neutralization of acceptors in silicon by atomic hydrogen*, Appl. Phys. Lett. 45 ( 1984 ), 1100
- PAN 85 J.I. Pankove, P.J. Zanzuchi, C.W. Magee, G. Lukovsky; *Hydrogen localization near boron in silicon*, Appl. Phys. Lett. 46 ( 1985 ), 421
- PAN 91 J.I. Pankove and N.M. Johnson; *Hydrogen in Semiconductors*, Academic Press, San Diego (1991)
- PAR 67 W.H. Parker, B.N. Taylor and D.N. Langenberg; *Measurement of  $2e/h$  using the ac Josephson-effect and its implications for quantum electrodynamics*, Phys. Rev. Lett. 18 ( 1967 ), 287



- PAS 85 A.F. Pasquevich, A. Hoffmann, R. Vianden and U. Wrede; *Oxidation of indium in gold - indium alloys*, J. Appl. Phys. 58 ( 1985 ), 3200
- PAS 87 A.F. Pasquevich and R. Vianden; *Temperature dependence of the hyperfine interactions of  $^{111}\text{Cd}$  in silicon*, Phys. Rev. B 35 ( 1987 ), 1560
- PAS 88 A.F. Pasquevich and R. Vianden; *Temperature dependence of the hyperfine interactions of  $^{111}\text{Cd}$  in germanium*, Phys. Rev. B 37 ( 1988 ), 10858
- PAU 78 P. Paufler, G.E.R. Schulze; *Physikalische Grundlagen mechanischer Festkörpereigenschaften*, Bd. I, Vieweg, Braunschweig ( 1978 )
- PEA 84 S.J. Pearton, J.M. Kahn, W.L. Hansen, E.E. Haller; *Deuterium in germanium - interaction with point defects*, J. Appl. Phys. ( 1984 ), 1464
- PEA 86 S.J. Pearton; *Hydrogen in crystalline silicon*, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 59 ( 1986 ), 457
- PEA 87 S.J. Pearton, J.W. Corbett and T.S. Shi; *Hydrogen in crystalline semiconductors* Appl. Phys. A 43 ( 1987 ), 153
- PEA 89 S.J. Pearton, M. Stavola and J.W. Corbett; *Configurations and Properties of Hydrogen in Crystalline Semiconductors*, Mat. Sci. For. 38-41 (1989 ), 25
- PHI 73 J.C. Phillips; *Bonds and Bands in Semiconductors*, Academic Press, New York ( 1973 ), 21
- PTL 87 S.T. Pantelides; *Effect of hydrogen on shallow dopants in crystalline silicon*, Appl. Phys. Lett. 50 ( 1987 ), 995
- PÜT 82 U. Pütz; *Gitterdefekte in Wolfram und Platin nachgewiesen mit Hilfe der TDPAC-Methode*, Dissertation , Universität Bonn ( 1982 )
- RAG 74 R.S. Raghavan, E.N. Kaufmann, P. Raghavan, E.J. Ansaldo and R.A. Naumann; *Sign of the quadrupole interaction at  $^{111}\text{Cd}$  in non-cubic metals by  $\beta$ - $\gamma$  perturbed angular correlations*, Proc. Int. Conf. on Hyperfine Interactions studied in nuclear reactions and decay, Uppsala ( 1974 ), 200
- RAG 75 R.S. Raghavan, E.N. Kaufmann and P. Raghavan; *Universal correlation of electronic and ionic field gradients in noncubic metals*, Phys. Rev. Lett. 34 ( 1975 ), 1280
- RIN 79 H.H. Rinneberg; *Application of perturbed angular correlations to chemistry and related areas of solid state physics*, Atomic Energy Rev. 17(2) ( 1979 ), 477
- SAH 83 Chih-Tang Sah, Jack Yuan-Chen Sun and Joseph Jeng-Tao Tzou; *Deactivation of boron acceptors in silicon by hydrogen*, Appl. Phys. Lett. 43 ( 1983 ), 204

- SEA 87 C.H. Seager, R.A. Anderson and J.K.G. Panitz; *The diffusion of hydrogen in silicon and mechanisms for unintentional hydrogenation during ion beam processing*, J. Mat. Res. 2 ( 1987 ), 96
- SEE 85 K. Seeger; *Semiconductor Physics*, Springer Verlag, Berlin ( 1985 )
- SCH 85 G. Schatz und A. Weidinger; *Nukleare Festkörperphysik*, Teubner-Verlag, Stuttgart ( 1985 )
- SCH 87 T. Schäfer; *Einsatz von BaF<sub>2</sub>- Detektoren zur Messung kurzer Lebensdauern*, Diplomarbeit, Universität Bonn ( 1987 )
- SCH 91 H. Schaumburg; *Werkstoffe und Bauelemente der Elektronik*, Teubner-Verlag, Stuttgart ( 1991 )
- SCH 92 T. Schäfer; *Donator-Defekt-Komplexe in GaAs untersucht mit der  $\gamma$ - $\gamma$  Winkelkorrelation unter Einsatz der Sonden <sup>73</sup>Se und <sup>77</sup>Br*, Dissertation, Universität Bonn ( 1992 )
- SIE 65 K. Siegbahn ( Hrsg. ); *Alpha -, Beta - and Gamma - Ray Spectroscopy*, North-Holland Publ. Comp., Amsterdam ( 1965 )
- SKI 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 ( 1953 ), 988
- SKU 89 H. Skudlik, M. Deicher, R. Keller, W. Pfeiffer, D. Steiner and Th. Wichert; *Stability of acceptor-hydrogen complexes in silicon*, Proc. Int. Conf. Science and Technology of Defect Control in Semiconductors, Yokohama ( 1989 )
- SKU 92a H. Skudlik, M. Deicher, R. Keller, R. Magerle, W. Pfeiffer, D. Steiner, R. Recknagel and Th. Wichert; *Influence of electronic parameters on the electric-field gradients induced by H at the probe atom <sup>111</sup>In / <sup>111</sup>Cd in Si*, Phys. Rev. B 46 ( 1992 ), 2159
- SKU 92b H. Skudlik, M. Deicher, R. Keller, R. Magerle, W. Pfeiffer, P. Pross, E. Recknagel and Th. Wichert; *H passivation of shallow acceptors in Si studied by use of the perturbed  $\gamma$ - $\gamma$  angular-correlation technique*, Phys. Rev. B 46 ( 1992 ), 2172
- STA 87 M. Stavola, S.J. Pearton, J. Lopata and W.C. Dautremont-Smith; *Vibrational characteristics of acceptor-hydrogen complexes in silicon*, Appl. Phys. Lett. 50 ( 1987 ), 1086
- STA 88a M. Stavola, K. Bergman, S.J. Pearton and J. Lopata; *Hydrogen motion in defect complexes: Reorientation kinetics of the B-H complex in silicon*, Phys. Rev. Lett. 61, (1988), 2786

- STA 88b M. Stavola, S.J. Pearton, J. Lopata and W.C. Dautremont-Smith; *Vibrational spectroscopy of acceptor-hydrogen complexes in silicon: Evidence for low-frequency excitations*, Phys. Rev B 37 ( 1988 ), 8313
- STA 89 M. Stavola, K. Bergman, S.J. Pearton and J. Lopata; in *Shallow Impurities in Semiconductors*, edited by B. Monemar, IOP, Bristol (1989), 447
- STA 94 M. Stavola, Y.M. Cheng and G. Davies; *Isotope shift for the low energy excitation of the Al-H complex in Si: evidence for a hydrogen wagging mode*, Mater. Science Forum 143-147 ( 1994 ), 885
- STE 56 R.M. Steffen; *Influence of the time-dependent quadrupole interaction on the directional correlation of the  $^{111}\text{Cd}$  gamma rays*, Phys. Rev. 103 ( 1956 ), 116
- STE 67 R.M. Sternheimer; *Quadrupole antiscreening factors of ions*, Phys. Rev. 159 ( 1967 ), 266
- STE 75 R.M. Steffen and K. Alder; *Extranuclear perturbations of angular distributions and correlations*, in [ HAM 75 ], 583
- STU 87 M. Stutzmann; *Hydrogen passivation of boron acceptors in silicon by Raman studies*, Phys. Rev. 35 ( 1987 ), 5921
- STU 91 M. Stutzmann and J. Chevallier; *Hydrogen in Semiconductors*, North - Holland Pub. Comp., Amsterdam ( 1991 )
- SZE 81 S.M. Sze; *Physics of Semiconductor Devices*, Wiley, New York ( 1981 )
- TAV 86 A.J. Tavendale, A.A. Williams and S.J. Pearton; *Hydrogen injection and neutralization of boron acceptors in silicon boiled in water*, Appl. Phys. Lett. 48 ( 1986 ), 590
- THE 85 M.L.W. Thewalt, E.C. Lightowers and J.I. Pankove; *Photoluminescence studies of the neutralization of acceptors in silicon by atomic hydrogen*, Appl. Phys. Lett. 46 ( 1985 ), 689
- VIA 88 R. Vianden; *Impurity-defect interactions in metals*, NATO-ASI E 144, Kluwer, Dordrecht ( 1988 ), 239
- WEG 85 D. Wegner; *Calculated perturbed angular correlations for  $^{111}\text{In}$  doped cubic single crystals*, Hyp. Int. 23 ( 1985 ), 179
- WEI 80 Ch. Weißmantel und C. Hamann; *Grundlagen der Festkörperphysik*, Springer-Verlag, Berlin ( 1980 )
- WIC 87 Th. Wichert, H. Skudlik, M. Deicher, G. Grübel, R. Keller, E. Recknagel and L. Song; *Passivation of shallow acceptors by H in Si: A microscopic study by perturbed angular correlations*, Phys. Rev. Lett. 59 ( 1987 ), 2087

- WIC 89 Th. Wichert, M. Deicher, G. Grübel, R. Keller, N. Schulz and H. Skudlik; *Indium-defect complexes in silicon studied by perturbed angular correlation spectroscopy*, Appl. Phys. A 48 ( 1989 ), 59
- WIC 92a Th. Wichert, N. Achtziger, H. Metzner and R. Sielemann; in *Hyperfine Interactions of Defects in Semiconductors*, Hrsg.: G. Langouche, Amsterdam ( 1992 ), 77
- WIC 92b Th. Wichert; *Atomic defect configurations identified by nuclear techniques*, Mater. Science Forum 83-87 ( 1992 ), 1081
- WIL 84 A. Willmeroth; *Untersuchung von Strahlenschäden in Rhodium mit der TDPAC-Methode*, Diplomarbeit, Universität Bonn ( 1984 )
- WRE 82 U. Wrede; *Untersuchung von Strahlenschäden in Vanadium mit der TDPAC - Methode*, Diplomarbeit , Universität Bonn ( 1982 )
- WRE 86 U. Wrede; *Einfang von Sauerstoff an substitutionellen Fremdatomen in den bcc-Metallen Niob und Tantal*, Dissertation, Universität Bonn ( 1986 )
- YAT 65 M.J.L. Yates; *Finite solid angle corrections*, Apendix 9 in [ SIE 65 ] ,1691
- ZIE 85 J.F. Ziegler , J.P. Biersack , U. Littmark; *The Stopping and Range of Ions in Solids*, Pergamon Press, New York ( 1985 )

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen, die zur Entstehung dieser Dissertation beigetragen haben, bedanken.

Die Arbeit entstand am Institut für Strahlen- und Kernphysik der Universität Bonn am Lehrstuhl für Kern- und Neutronenphysik von Herrn Prof. Dr. E. Bodenstedt, sowie unter seinem Nachfolger Herrn Prof. Dr. K. Maier.

Für die Betreuung dieser Arbeit, seine ständige Ansprechbarkeit und Diskussionsbereitschaft und für sein Verständnis in schwierigen Phasen gilt mein besonderer Dank vor allem Herrn Priv. Doz. Dr. R. Vianden.

Bei allen ehemaligen und neu hinzugekommenen Mitgliedern unserer Arbeitsgruppe bedanke ich mich für die gute Zusammenarbeit und die angenehme Arbeitsatmosphäre während der letzten Jahre.

Mein Dank gilt auch den Mitarbeitern des Bonner Isotopenseparators, Herrn Dr. K. Freitag und Frau S. Engelhard, die oft bis spät in der Nacht mit der Vorbereitung und Durchführung der radioaktiven Implantationen beschäftigt waren. Bei der Lösung feinmechanischer Probleme konnte ich immer mit der prompten Unterstützung von Herrn S. Hinderlich rechnen.

Die Belegschaft der feinmechanischen Werkstatt und die Mitarbeiter der Elektronikwerkstatt standen mir bei den erforderlichen Erweiterungen bzw. Veränderungen von Meßapparaturen stets mit Rat und Tat zur Seite.

Nicht zuletzt möchte ich mich auch bei meiner Familie bedanken, bei meinen Eltern, die mir, nicht nur durch ihre finanzielle Unterstützung, mein Studium erst ermöglicht haben, sowie bei meiner Frau Isabel, meinen Kindern Jennifer und Moritz, die in den vergangenen Jahren sehr viel Geduld und Verständnis für mich und meine Arbeit aufgebracht haben.

Teile dieser Arbeit wurden vom Bundesministerium für Forschung und Technologie ( BMFT ) gefördert.

Ich versichere, daß ich diese Arbeit selbständig verfaßt habe, daß ich keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe und die Stellen der Arbeit, die anderen Werken dem Wortlaut oder dem Sinn nach entnommen sind, in jedem einzelnen Fall als Entlehnung kenntlich gemacht habe.

Bonn, den