

**Das Verhalten von Brom in InAs und GaAs,
untersucht mit den Sonden**

$^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$, ^{79}Br und ^{82}Br

Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades (Dr. rer. nat.)

der

Mathematisch – Naturwissenschaftlichen Fakultät

der

Rheinischen Friedrich – Wilhelms – Universität Bonn

vorgelegt von

Monika Risse

aus

Neheim – Hüsten

Bonn 2000

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

Referent: Priv. Doz. Dr. Reiner Vianden
Korreferent: Prof. Dr. Manfred Forker
Tag der Promotion: 21.06.2000

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	4
1 Defekte in III-V Halbleitern	7
1.1 Defekte in Halbleiter-Kristallen	7
1.1.1 Erzeugung von Defekten durch Bestrahlung	8
1.2 III-V-Halbleiter	9
1.2.1 Metastabile Defekte, Vacancy-Interstitial-Modell	10
1.2.1.1 EL2-Defekt in GaAs	13
1.3 ^{77}Br (^{77}Se) in GaAs und InAs	15
2 Die PAC-Methode	17
2.1 Theorie	17
2.1.1 Die ungestörte Winkelkorrelation	17
2.1.2 Die Störung der Winkelkorrelation durch einen elektrischen Feldgradienten	19
2.1.2.1 Polykristalline Proben	21
2.1.2.2 Kubische Einkristalle	22
2.2 ^{77}Br (^{77}Se) als nukleare Sonde	24
2.3 Messapparatur	27
2.4 Datenanalyse	29
2.4.1 Bildung der R-Wert-Spektren	29
2.4.1.1 Anpassung an die theoretische Störfunktion	31
2.4.1.2 Apparative Anisotropiekoeffizienten	33
2.4.1.3 Das Fitprogramm	35
3 Probenpräparation	36
3.1 Materialien	36
3.1.1 InAs	36
3.1.2 GaAs	37
3.2 α -Bestrahlung	38
3.3 Ionenimplantation	40
3.4 Simulation von Ionenbestrahlungen, TRIM	42
3.5 Thermisches Ausheilen des Gitterschadens	43
3.5.1 Schutz der Oberfläche	43

3.5.2	Thermische Behandlung	44
4	PAC-Messungen an ^{77}Br(^{77}Se) in InAs	46
4.1	PAC-Messungen nach α -Bestrahlung	46
4.1.1	n-InAs	46
4.1.1.1	Isochrones Temperprogramm	47
4.1.1.2	Orientierungsmessungen	51
4.1.1.3	Messungen bei tiefen Temperaturen	52
4.1.2	p-InAs	54
4.1.2.1	Isochrones Temperprogramm	55
4.1.3	InAs:Un	58
4.1.3.1	Isochrones Temperprogramm	59
4.1.3.2	Orientierungsmessungen	62
4.2	PAC-Messungen nach Ionenimplantation	62
4.3	Abhängigkeit von der Sondenkonzentration	65
5	Elektrische Messungen	68
5.1	Halleffekt- und Vierpunkt-Messungen	69
5.1.1	Messungen	71
5.1.1.1	InAs:S	71
5.1.1.2	InAs:Zn	74
5.1.1.3	InAs:Un	76
5.2	DLTS-Messungen	78
5.2.1	Die DLTS-Methode	78
5.2.2	Messungen an ^{79}Br und ^{77}Br (^{77}Se) in GaAs	82
6	Diffusion von Brom in InAs und GaAs	87
6.1	SIMS-Messungen an Brom in InAs	87
6.1.1	Die SIMS-Messmethode	87
6.1.2	Messungen an Br in InAs	92
6.1.2.1	InAs:S	95
6.1.2.2	InAs:Zn	96
6.1.2.3	InAs:Un	98
6.1.3	Ergebnisse	99
6.2	Radiotracer-Messungen an Br in GaAs	101
6.2.1	Die Radiotracer-Methode	102
6.2.2	Messungen an ^{82}Br in si-GaAs	104
6.2.3	Ergebnisse	110
6.3	Ergebnisse aller Diffusionsmessungen	111
7	Interpretation	113
7.1	Mögliches Verhalten von Brom/Selen in InAs, GaAs	113
7.2	Abschätzung des einfach negativen Selen-Niveaus	116

7.3	Gegenüberstellung: V–I–Modell und Indium–Leerstelle	118
7.4	Übergang im metastabilen Zustand	121
Zusammenfassung		124
A Berechnung elektronischer Eigenschaften		125
A.1	Die Lage des Fermi-niveaus	125
A.2	Die intrinsische Ladungsträgerdichte n_i	127
B Bestimmung der eingebrachten Sondenkonzentrationen		128
B.1	α -Bestrahlung	128
B.2	Ionenimplantation	130
C Definition eines axialsymmetrischen EFG für NNfit		131
D Liste aller PAC-Messungen		134
E Anisotropie-Fehler durch Probengeometrie		138
E.1	PAC-Messungen bei unterschiedlichen Detektorabständen	138
E.2	Auswirkung auf die apparativen Anisotropiekoeffizienten	140
E.2.1	Selbstabsorption in der Probe	141
E.2.2	Absorption im BaF ₂ -Szintillatorkristall	143
E.3	Auswirkung auf die Auswertung der PAC-Messergebnisse	145
Tabellenverzeichnis		147
Abbildungsverzeichnis		148
Literaturverzeichnis		152
Danksagung		158
Lebenslauf		160

Einleitung

Die Halbleitertechnologie spielt durch den vielfältigen Einsatz elektronischer Geräte im alltäglichen Leben eine wichtige Rolle. Den größten Anwendungsbereich findet dabei noch immer der Elementhalbleiter Silizium (Si). Jedoch wird in den letzten Jahren der III–V–Verbindungshalbleiter Galliumarsenid (GaAs) immer häufiger in elektronischen Bauteilen eingesetzt. Aufgrund seiner hohen Elektronenbeweglichkeit (etwa sechsmal so hoch wie die von Si) kommt es zu höheren Verarbeitungsgeschwindigkeiten, die für Anwendungen in der Höchsthfrequenztechnik (GHz-Bereich) notwendig sind. So werden beispielsweise in Mobiltelefonen ausschließlich GaAs–Transistoren eingesetzt.

Ein weiterer Vorteil von GaAs liegt in seiner direkten Bandlücke, sodass es auch bei optischen Anwendungen Einsatz finden kann. Der Verbindungshalbleiter Indiumarsenid (InAs) besitzt ebenfalls eine direkte Bandlücke und eine sehr hohe Ladungsträgerbeweglichkeit (etwa 22mal so hoch wie die von Si). Zusammen mit dem sehr geringen Bandabstand führt das dazu, dass InAs breiten Einsatz bei elektrischen und optoelektronischen Anwendungen im fernen Infrarot findet, z.B. in Feld-Effekt–Transistoren mit verschiedenen Halbleiterübergängen [LUO89], resonanten Tunnelioden [CHEN91], bipolaren Transistoren [PEKA92] und Halbleiterlasern im fernen Infrarot [KAST91] sowie als Infrarot–Detektor.

Aus der zweikomponentigen Struktur der Verbindungshalbleiter ergibt sich jedoch ein Nachteil gegenüber den Elementhalbleitern, der in der Schwierigkeit liegt, Gitterdefekte auszuheilen. Bei der Herstellung von Halbleiterbauelementen werden bei vielen Verfahrensschritten Defekte im Kristall erzeugt. So wird z.B. zur Dotierung der Materialien die Ionenimplantation eingesetzt, die zu zahlreichen Defekten im Material führt. Durch eine geeignete Wärmebehandlung des Kristalls lassen sich diese Defekte in Silizium vollständig beseitigen. Im Verbindungshalbleiter hingegen ist das Ausheilen weniger erfolgreich, da es z.B. leicht zu Antisite–Defekten kommen kann, bei denen ein Atom einer Atomsorte auf dem „falschen“ Untergitter der anderen Atomsorte eingebaut wird. Solche Defekte beeinflussen dann die elektrischen Eigenschaften des Halbleiters in negativer Weise.

Für die kontrollierte Herstellung von elektronischen Bauteilen ist es daher unabdingbar, die in den Materialien vorhandenen Defekte und Defektkomplexe genauer zu untersuchen und ihr Verhalten zu verstehen. Obwohl Untersuchungen am GaAs bereits seit den siebziger Jahren durchgeführt werden, sind die Kenntnisse nicht sehr umfangreich und es gibt noch viele unbeantwortete Fragen. Die Kenntnisse über den III–V–Halbleiter InAs sind noch wesentlich geringer.

Zur Untersuchung von mikroskopischen Strukturen in Halbleitern, hierzu gehören auch die Defekte, werden Methoden der nuklearen Festkörperphysik eingesetzt. Dazu zählen unter anderem das Emission–Channeling und die Positronenzerstrahlung sowie die Hyperfeinwechselwirkungstechniken: Mößbauerspektroskopie, Kernorientierung und gestörte Winkelkorrelation (TDPAC **T**ime **D**ifferential **P**erturbed **A**ngular **C**orrelation, im Folgenden kurz PAC genannt). Eine Übersicht über dieses Gebiet findet sich z.B. in [SCHA92b].

Weitere Methoden, die zur elektrischen Charakterisierung von Halbleitern eingesetzt werden, sind integrale Methoden wie die klassische Halleffektmessung und die **D**eep **L**evel **T**ransient **S**pectroscopy (DLTS). Bei diesen Methoden braucht kein radioaktiver Sondenkern eingesetzt werden, geschieht dies dennoch, so werden diese ursprünglich „chemisch blinden“ Messmethoden sensitiv auf den Elementcharakter der Störstellen.

Ionenstrahlanalytische Methoden dienen zur Charakterisierung von Tiefenprofilen eingebrachter Dotieratome und für die Analyse chemischer Zusammensetzungen. Zu ihnen zählen die Rutherford–Rückstreuung (RBS) und die **S**econdary **I**on **M**ass **S**pectroscopy (SIMS). Zur Untersuchung des Tiefenprofils und des Diffusionsverhaltens von in das Material eingebrachten Atomen, findet außerdem die Radiotracer–Methode Einsatz.

Um ein möglichst umfassendes Bild der Defektstrukturen zu erhalten, ist es notwendig, diese durch Anwendung unterschiedlicher Methoden von verschiedenen Ansätzen her zu betrachten.

Die PAC–Methode ist sehr sensitiv auf die nächste Umgebung eines radioaktiven Sondenkerns und bietet so die Möglichkeit, die direkte Sondenumgebung zu charakterisieren. Der Einsatz des Sondenkerns $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ bietet dabei eine interessante Perspektive. Wird $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ auf dem Anionengitter in InAs oder GaAs eingebaut, so wirkt es dort als Donator. Es sollte dann ähnliche Eigenschaften zeigen wie die im sogenannten Vacancy–Interstitial Modell (V–I) beschreibbaren DX– und EL2–Defekte. Für GaAs gehören diese Defekte zu den am Besten erforschtesten. Eine genaue Beschreibung des V–I–Modells ist in Kapitel 1.2.1 gegeben.

Es sind bereits einige ausführliche PAC–Untersuchungsreihen mit der Sonde $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ im GaAs durchgeführt worden [SCHA92a], [WEHN97]. Die Kenntnisse über InAs hingegen sind in diesem Bereich sehr gering. Im Rahmen dieser Arbeit ist das System $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ in InAs grundlegend untersucht worden. Kapitel 4 zeigt die Ergebnisse, die bei diesen Messungen gewonnen wurden.

Zur Einbringung des Sondenkerns $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ werden zwei Methoden angewandt. Durch Kernreaktion wird bei einer α –Bestrahlung über die Reaktion $^{75}\text{As}(\alpha, 2n)^{77}\text{Br}$ die Sonde direkt im Material erzeugt. Eine Alternative ist die Ionenimplantation, bei der die Sonde in das Material „hineingeschossen“ wird. Um eine für PAC–Messungen ausreichende Anzahl von Sondenkernen im Material zu erhalten, sind bei beiden

Einbringungsarten unterschiedliche Sondenkonzentrationen notwendig. Bei der Ionenimplantation ergibt sich, aufgrund einer schmaleren Tiefenverteilung, eine höhere Sondenkonzentration als bei der α -Bestrahlung. Die bei den beiden Methoden erzeugten Strahlendefekte unterscheiden sich hinsichtlich ihrer Konzentration und ihrer relativen Lage bezogen auf die eingebrachten Sonden. Daher ist ein Vergleich des Verhaltens der Sonden nach dem Einbringen auf die unterschiedlichen Arten interessant, er erfolgt in Kapitel 4.3.

Es ist bekannt, dass die erzeugten Strahlenschäden Auswirkungen auf die elektrischen Eigenschaften des Materials haben. Zur Charakterisierung wird daher mit der integralen Hallmessmethode der Einfluss der α -Bestrahlung auf InAs untersucht (Kapitel 5.1). Um den Einfluss von Diffusionsprozessen während den notwendigen Ausheilschritten zu beobachten, wurden Tiefenprofile nach Implantation und nach anschließendem Ausheilen an Br-implantierten InAs-Proben mittels der SIMS-Methode aufgenommen (Kapitel 6.1).

Ergänzend zu den bisherigen Untersuchungen an GaAs wurden DLTS-Messungen an Br in GaAs durchgeführt, die die elektrischen Eigenschaften der Br-Sonde im Material klären sollen (Kapitel 5.2). Die Diffusion der Br-Atome im GaAs wurde mittels der Radiotracer-Methode näher betrachtet (Kapitel 6.2).

Im Kapitel 7 werden die Ergebnisse der einzelnen Messungen zusammenfassend diskutiert und abschließend interpretiert.

Kapitel 1

Defekte in III-V Halbleitern

Im folgenden Kapitel wird zunächst eine allgemeine Einführung in grundlegende Begriffe, die zur Charakterisierung von Defekten in Halbleitern benötigt werden, gegeben. Außerdem werden die wichtigsten, physikalischen Eigenschaften der untersuchten Materialien InAs und GaAs angegeben. Es folgt eine ausführliche Beschreibung des Vacancy–Interstitial–Modells, welches zur Interpretation der Messergebnisse Anwendung findet. Anschließend folgt ein kurzer Überblick über die für ^{77}Br (^{77}Se) in GaAs, sowie InAs bereits bekannten Messergebnisse.

1.1 Defekte in Halbleiter–Kristallen

Während sich in einem perfekten Kristall alle Atome an ihren vorgesehenen Plätzen befinden, gibt es im realen Kristall verschiedene Abweichungen von dieser Regelmäßigkeit. Jegliche Abweichung von der idealen geometrischen Struktur bzw. der chemischen Zusammensetzung eines Kristallgitters wird dabei als Defekt bezeichnet.

Sind an einer solchen Fehlordnung im Kristall nur Atome des Wirtsgitters beteiligt, so spricht man von **intrinsischen oder Eigendefekten**. Entsprechend ihrer Ausdehnung spricht man dann von nulldimensionalen Punktdefekten oder mehrdimensionalen Defekttagglomerationen. Die einfachsten Punktdefekte in einem aus einem Element aufgebauten Kristall sind Leerstellen (ein Gitterplatz im Kristall ist unbesetzt) und Zwischengitteratome (ein Atom befindet sich auf einem nichtregulären Platz). Die Kombination aus einer Leerstelle und einem Zwischengitteratom wird als Frenkel–Defekt bezeichnet.

Bei Legierungen, wie den binären III–V–Verbindungen, treten außerdem sogenannte **Substitutionsfehler oder Antisite–Defekte** auf. Dabei befinden sich Atome einer Sorte auf einem Platz der anderen Atomsorte. Unmittelbar in der Umgebung dieser Defekte treten dann häufig elastische Spannungen auf.

Ausgedehnte Defektagglomerationen komplizierter Struktur werden nach ihrer Ausdehnung unterschieden. Als Versetzungen bezeichnet man linienförmige Defekte, die sich in einer Dimension über viele Gitterkonstanten erstrecken. Es werden Stufenversetzungen sowie Versetzungsringe unterschieden, die beim Aufbau unvollständiger Gitterebenen auftreten. Schraubenversetzungen entstehen durch spiralförmiges Wachstum von Gitterebenen um eine Achse. Korngrenzen und Stapelfehler sind flächenhaft angeordnete Fehlstellen. Ebenso rechnet man Oberflächen und Grenzflächen zu den zweidimensionalen Gitterfehlern. Ausscheidungen stellen dreidimensionale Defekte dar.

Wird eine geringe Anzahl von Fremdatomen in den Kristall eingebaut, so spricht man von **extrinsischen oder Fremdatomdefekten**. Solche Defekte können entweder unbeabsichtigt beim Zuchtprozess in den Kristall gelangen oder gezielt als Dotieratome eingebracht werden, um die elektrischen Eigenschaften des Materials zu beeinflussen. Der Einbau des Fremdatoms in das Gitter wird im Wesentlichen durch seinen Radius bestimmt. Ist der Radius des Fremdatoms deutlich geringer als der Radius der Wirtsatome, so wird es bevorzugt im Zwischengitter eingebaut (z.B. Wasserstoff in Metallen und Halbleitern). Sind die Radien in etwa vergleichbar, so ist der Einbau auf substitutionellen Gitterplätzen energetisch günstiger (z.B. Phosphor in Silizium). In solchen Fällen kommt es lokal zu Gitterverspannungen im Material und die Nachbaratome des Fremdatoms relaxieren von ihrer regulären Gitterposition, um in einen kräftefreien Zustand zu gelangen.

1.1.1 Erzeugung von Defekten durch Bestrahlung

Defekte können bei der Bestrahlung von Kristallen mit hochenergetischen Teilchen, z. B. Ionen oder Elektronen entstehen. Beim Eintritt in den Kristall erfolgt die Abbremsung der Teilchen zunächst hauptsächlich durch Streuung an den Elektronen der Targetatome (elektronisches Bremsen). Dabei werden in vielen schwach inelastischen Stößen die Atome angeregt oder ionisiert. Bei Energien unterhalb von 1MeV/Nukleon dominiert dann das sogenannte nukleare Bremsen; dabei werden die Projektilteilchen an den Kernen der Targetatomen durch Rutherford-Streuung gestreut. Gitterschäden entstehen hauptsächlich bei demnuklearen Bremsen. Wenn die Energie, die bei den elastischen Stößen übertragen wird, oberhalb der Verlagerungsenergie des Kristalls liegt, verlässt das getroffene Atom seinen Gitterplatz und hinterlässt eine Leerstelle. Das herausgeschlagene Atom bewegt sich dann im Zwischengitter weiter. Wenn seine kinetische Energie ausreicht, besteht auf dem Weg durch den Kristall die Möglichkeit zu weiteren Stößen und es kann so eine ausgedehnte Kaskade entstehen. Da die Stoßpartner meist ähnliche Massen haben, kommt es zu Ersetzungsstoßfolgen. Die im Zwischengitter befindlichen Atome rekombinieren meist mit anderen Leerstellen. So kommt es im Innern der Stoßkaskade zu leerstellenreichen und weiter außen zu zwischengitteratomreichen Zonen.

1.2 III-V-Halbleiter

Bei den III-V-Halbleitern handelt es sich um Verbindungshalbleiter, die aus einem Element der dritten Hauptgruppe¹ im Periodensystem der Elemente (PSE) und einem der fünften Hauptgruppe² bestehen. Nach der Grimm-Sommerfeldschen Regel besitzen sie als im Mittel vierwertige Materialien einen halbleitenden Charakter. Bei allen Verbindungen handelt es sich um kristalline Strukturen, die zum größten Teil in einer Zinkblende-Struktur³ kristallisieren. Hierbei ist ein Atom einer Sorte tetraedrisch von vier Atomen der anderen Sorte umgeben. Eine solche Struktur bildet sich dadurch, dass zwei kubisch flächenzentrierte Strukturen um $\frac{1}{4}$ der Raumdiagonalen gegeneinander verschoben sind. Abbildung 1.1 zeigt eine solche Zinkblende-Struktur. Bei den Elementhalbleitern Si und Ge sind alle Git-

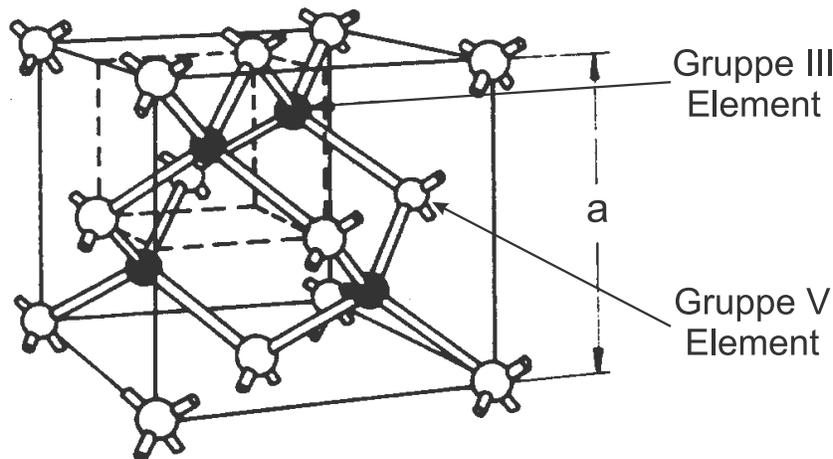


Abbildung 1.1: Zinkblende-Struktur, aufgebaut aus zwei ineinander verschachtelten, kubisch flächenzentrierten Gittern. Mit a ist die Gitterkonstante bezeichnet. Bei 300K gilt: $a(\text{InAs})=6,0584\text{\AA}$ und $a(\text{GaAs})=5,6533\text{\AA}$.

terplätze der Struktur mit Atomen der gleichen Sorte besetzt (Diamant-Struktur). Die Bindungen der Atome untereinander sind hier rein kovalent. Im Fall der binären III-V-Halbleiter liegt kein rein kovalenter Charakter mehr vor, es gibt hier einen zusätzlichen ionischen Anteil. Im Falle des GaAs liegt der Anteil des ionischen Charakters bei ca. 30%. Die kovalenten Bindungen liegen als sp^3 -Hybridbindungen vor.

In der Tabelle 1.1 sind die wichtigsten Eigenschaften der beiden untersuchten III-V-Halbleiter aufgelistet. Aufgeführt sind außerdem die Werte von Si, um einen Vergleich mit dem immer noch wichtigsten Halbleitermaterial zu ermöglichen.

¹ Elemente der III. Hauptgruppe: Bor (B), Aluminium (Al), Gallium (Ga), Indium (In) und Thallium (Tl).

² Elemente der V. Hauptgruppe: Stickstoff (N), Phosphor (P), Arsen (As), Antimon (Sb) und Wismut (Bi).

³ Im Gegensatz dazu kristallisieren die Stickstoffverbindungen überwiegend in Wurtzit-Struktur.

Eigenschaften	InAs	GaAs	Si
Kristalleigenschaften			
Atome [cm^{-3}]	$3,58 \cdot 10^{22}$	$4,42 \cdot 10^{22}$	$5,0 \cdot 10^{22}$
Atomgewicht	189,74	144,63	28,09
Dichte [$\frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$]	5,66	5,32	2,33
Gitterkonstante [\AA]	6,0584	5,6533	5,43095
Schmelzpunkt [$^{\circ}\text{C}$]	942	1238	1415
Dampfdruck [mbar]	1 bei 900°C 0,01 bei 740°C	10 bei 1050°C 0,01 bei 900°C	0,01 bei 1650°C 10^{-8} bei 900°C
thermische Eigenschaften			
therm. Ausdehnungskoeffizient $\Delta l/l \cdot [\text{K}^{-1}]$	$4,52 \cdot 10^{-6}$	$6,86 \cdot 10^{-6}$	$2,6 \cdot 10^{-6}$
Wärmeleitfähigkeit [$\frac{\text{W}}{\text{cm}\cdot\text{K}}$]	0,25	0,46	1,5
elektrische Eigenschaften			
Bandlücke	direkt	direkt	indirekt
bei 300K [eV]	0,36	1,42	1,12
bei 0K [eV]	0,42	1,52	1,17
intrinsische Ladungsträgerkonz. n_i [cm^{-3}]	$1,0 \cdot 10^{15}$	$1,79 \cdot 10^{16}$	$1,45 \cdot 10^{10}$
intrinsischer spez. Widerstand [Ωcm]	0,03	10^8	$2,3 \cdot 10^5$
effektive Zustandsdichte im:			
Leitungsband N_{LB} [cm^{-3}]	$8,7 \cdot 10^{16}$	$4,7 \cdot 10^{17}$	$2,8 \cdot 10^{19}$
Valenzband N_{VB} [cm^{-3}]	$1,3 \cdot 10^{19}$	$7,0 \cdot 10^{18}$	$1,04 \cdot 10^{19}$
effektive Masse m^*/m_0 von Elektronen	0,023	0,067	$m_{IE}^*:0,98$; $m_{sE}^*:0,19$
von Löchern	0,40	$m_{iL}^*:0,082$; $m_{sL}^*:0,45$	$m_{iL}^*:0,16$; $m_{sL}^*:0,49$
Mobilität [$\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$]			
Elektronen	33000	8500	1500
Löcher	460	400	450
dielektrische Eigenschaften			
Dielektrizitätskonstante	14,6	13,1	11,9

Tabelle 1.1: *Physikalische Eigenschaften der beiden untersuchten III-V-Halbleiter InAs und GaAs. Für einen direkten Vergleich der Eigenschaften mit dem technologisch wichtigen Si sind dessen Daten ebenfalls aufgelistet. Aufgrund verschiedener Minima der Dispersionskurve im Leitungsband treten beim Si schwere (m_{sE}^*) und leichte Elektronen (m_{IE}^*) auf. Wegen der Entartung des Valenzbandes muss bei GaAs und Si zwischen den effektiven Massen für leichte m_{iL}^* und schwere m_{sL}^* Löcher unterschieden werden. Die Daten für GaAs und Si sind [SCHA91] entnommen. Die Daten für InAs, sind eine Zusammenstellung aus: [SZE81], [LAND84], und [RUDD95]. Der Dampfdruck ist aus [WOOD81] entnommen. N_{LB} , N_{VB} und n_i sind entsprechend Anhang A berechnet. Wenn nicht anders angegeben gelten alle Daten für eine Temperatur von 300K.*

1.2.1 Metastabile Defekte, Vacancy–Interstitial–Modell

Unter einem metastabilen Defekt versteht man einen Defekt, der durch geeignete Anregung in eine andere Konfiguration überführt wird, die ebenfalls — unter bestimmten Bedingungen — stabil bleibt. In III–V–Halbleitern sind eine Reihe solcher Defekte bekannt. So gibt es im GaAs den technologisch äußerst bedeutsamen, intrinsischen EL2–Defekt. Er wird im Abschnitt 1.2.1.1 näher diskutiert. Des Weiteren gibt es den extrinsischen DX–Defekt. Die gemeinsame Ursache des möglichen Auftretens solcher metastabiler Defekte liegt in der Eigenschaft der sp –Hybridbindungen in III–V–Halbleitern. So liegt normalerweise eine

tetraedrische sp^3 -Hybridbindung vor, jedoch kann es in bestimmten Fällen energetisch günstiger sein, durch eine Symmetrierniedrigung in eine trigonale sp^2 -Hybridbindung überzugehen. Ein bekanntes Beispiel ist der Kohlenstoff mit seinen beiden Modifikationen Graphit und Diamant. Ersteres ist die stabile Modifikation und besitzt sp^2 -Hybridbindungen. Die metastabile Modifikation Diamant weist sp^3 -Hybridbindungen auf. Der Wechsel zwischen beiden Modifikationen vollzieht sich jedoch auf einer sehr langen Zeitskala, sodass der Vorgang im alltäglichen Leben keine Rolle spielt. Schematisch ist dieser Übergang der Bindungsstrukturen in Abbildung 1.2 gezeigt. Bei dem Übergang von der sp^3 - zur sp^2 -Struktur bricht

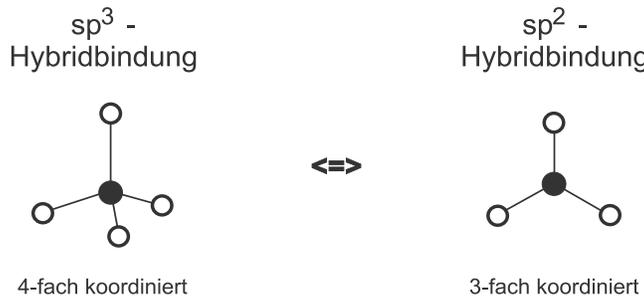


Abbildung 1.2: Übergang der sp -Hybridbindungsstrukturen. Auf der linken Seite ist die tetraedrische sp^3 -Struktur, auf der rechten Seite die trigonal-planare sp^2 -Struktur schematisch dargestellt.

eine Bindung auf. Das dann vorhandene antibindende p_z -Orbital steht senkrecht auf der planaren Ebene der sp^2 -Bindungen und stößt sich mit dem benachbarten p_z -Orbital des anderen ehemaligen Bindungspartners ab. Dabei ist offensichtlich, dass die Stabilität stark vom Ladungszustand abhängt. Sind beide p_z -Orbitale mit je zwei Elektronen besetzt, so ist die Abstoßung am größten und auch die Stabilität der Konfiguration ist besonders hoch. Im Falle des Graphit stoßen sich so übereinanderliegende, trigonal gebundene Schichten über die p_z - p_z -Orbitalabstoßung ab.

J. Dabrowski und M. Scheffler [DABR92] haben theoretische Rechnungen im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie durchgeführt und dabei den Fall eines Si-Atoms in GaAs untersucht. Wird das Si-Atom auf einem Ga-Platz eingebaut, so ist es als Element der Gruppe IV dort ein Donator. Bei der Entdeckung dieses Defektes hatte man keine Vorstellung von der Struktur des Defektes, es war lediglich klar, dass ein Donator beteiligt ist. Daher nannte man diesen Defekt **DX-Zentrum**, D für Donator und X für eine unbekanntere weitere Struktur. Die geometrische Vorstellung des Defektverhaltens [DABR92] ist in der Abbildung 1.3 dargestellt. Die linke Seite zeigt das substitutionell auf dem Ga-Platz eingebrachte Si-Atom, welches tetraedrisch von vier As-Atomen umgeben ist. Dieses entspricht dem linken Teil in Abbildung 1.2. Auf der rechten Seite ist dann eine Bindung aufgebrochen und es liegt eine sp^2 -Hybridbindung, entsprechend der rechten Darstellung in Ab-

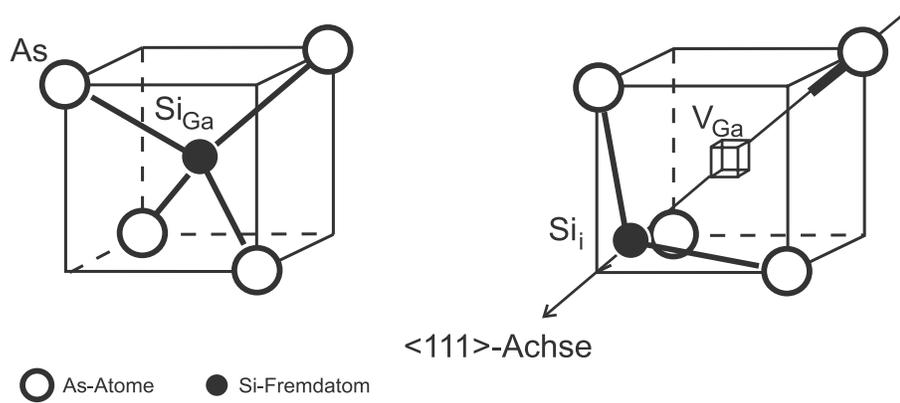


Abbildung 1.3: Angenommene geometrische Struktur des DX-Zentrums $\text{GaAs}:\text{Si}_{\text{Ga}}$. Links ist die Konfiguration für die sp^3 -Hybridbindung gezeigt, diese substitutionelle Situation ist für den einfach negativen Defektfall die metastabile Konfiguration. Auf der rechten Seite ist eine Bindung aufgebrochen, die ein antibindendes p_z -Orbital zurücklässt. Das zuvor auf dem Ga-Platz befindliche Si ist entlang der $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse in das Zwischengitter relaxiert. Die dargestellte Struktur ist nicht planar, gibt aber das berechnete Ergebnis für die stabile Struktur wieder. Diese relaxierte Situation entspricht der stabilen Defekt-Konfiguration im Falle eines einfach negativ geladenen Si.

bildung 1.2, vor. Das Si-Atom relaxiert entlang der $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse in das Zwischengitter und lässt eine Leerstelle am Ga-Gitterplatz zurück. Es liegt somit ein Paar einer Leerstelle und eines Zwischengitter-Atoms vor (**Vacancy-Interstitial-Modell (V-I)**). Das Si-Atom ist mit seinen umgebenden As-Atome nicht strikt planar eingezeichnet (wie es bei einer sp^2 -Bindung streng genommen vorliegt). Es wird jedoch die Geometrie, wie sie sich aus den Rechnungen für die stabile Situation des verlagerten Si-Atoms ergibt, wiedergegeben.

Die Abstoßung zwischen den beiden antibindenden p_z -Orbitalen ist am größten, wenn beide mit je zwei Elektronen besetzt sind. Dies ist der Fall, wenn der Defekt bzw. der eingebrachte Donator einfach negativ geladen ist. Daher sollte eine mögliche Stabilisierung dieser relaxierten Struktur (rechte Seite von Abb. 1.3) nur in diesem negativen Ladungszustand vorliegen. Die totale Energie des Systems in Abhängigkeit von der Verlagerung des Si-Atoms ist für verschiedene Si-Ladungszustände in Abbildung 1.4 gezeigt. Die Berechnungen sind ohne Berücksichtigung der Gitterrelaxation durchgeführt worden. Die Kurven für den Fall des neutralen bzw. einfach positiv geladenen Siliziums weisen ihr absolutes Minimum bei 0% Verlagerung auf. Das bedeutet, in diesen Ladungszuständen liegt der substitutionelle Zustand (linke Seite in Abbildung 1.3) vor. Im Fall des negativen Si zeigt die Gesamtenergie — wie bereits angedeutet — einen anderen Verlauf. Das Minimum der Gesamtenergie liegt hier bei einer Verlagerung des Si-Atoms von etwa 60%. Das bedeutet, dass im negativen Ladungszustand die relaxierte Situation stabil ist. Liegt ein anderer Ladungszustand vor, so wird die einfache substitutionelle Situation (linke Seite in Abb. 1.3) realisiert. Für den neutralen Ladungszustand

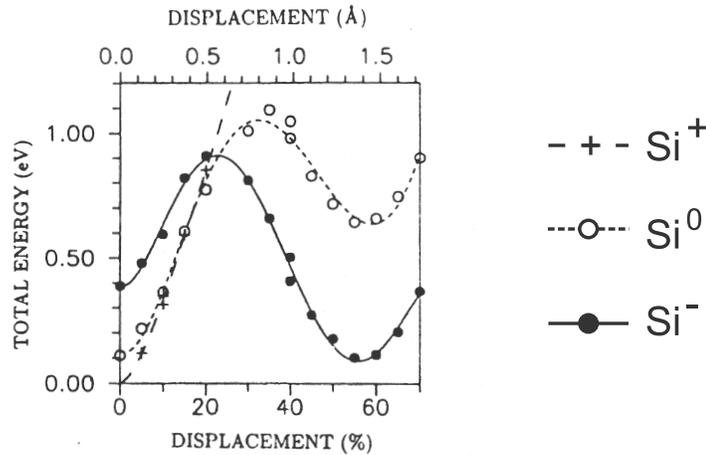


Abbildung 1.4: Gesamtenergie des Systems $\text{GaAs:Si}_{\text{Ga}}$ als Funktion der Verlagerung des Si-Atoms. Keine Verlagerung bezeichnet die substitutionelle Si_{Ga} -Situation. Es sind die drei verschiedenen Si-Ladungszustände Si^+ , Si^0 und Si^- berechnet worden (aus [DABR92]).

findet sich bei in etwa derselben Verlagerung von 60% ein lokales Minimum, sodass auch hier eine Anregung in die relaxierte — dann metastabile — Situation möglich sein sollte.

Das vorgestellte Verhalten des DX-Zentrums $\text{GaAs:Si}_{\text{Ga}}$ im V-I-Modell lässt sich nun auf alle Donatoren und Doppeldonatoren in den III-V-Halbleitern ausweiten, da die Grundlage des Auftretens des metastabilen Defektes die in allen diesen Verbindungen vorhandene sp-Bindung ist. So sagen J. Dabrowski und M. Scheffler [DABR92] voraus, dass alle Donatoren im negativen Ladungszustand und alle Doppeldonatoren im neutralen Ladungszustand ein analoges Verhalten zeigen können. Wird ein Doppeldonorator eingebracht, so muss kein weiteres Elektron aufgenommen werden, um beide antibindenden p_z -Orbitale mit zwei Elektronen aufzufüllen. Daher gelten die für den einfach negativ geladenen Donator angestellten Überlegungen hier für den neutralen Defektfall. Es ist dabei unbedeutend, auf welchem Untergitter der Einbau erfolgt. Die genaue Bedingung dafür, welche Situation im angegebenen Ladungszustand stabilisiert wird, ist dabei empfindlich abhängig von der Art des eingebrachten Atoms und vom Wirtsgitter und müsste für jeden Fall neu berechnet werden (entsprechend Abb. 1.4).

1.2.1.1 EL2-Defekt in GaAs

Für die Halbleitertechnologie ist es von großer Bedeutung, hochohmiges Ausgangsmaterial ($\approx 10^8 \Omega\text{cm}$) zu bekommen, in dem dann dotierte Strukturen hergestellt werden. Beim Elementhalbleiter Si erhält man solches Material mit geringer extrinsischer Ladungsträgerkonzentration durch ein Zonenschmelzverfahren. Im Gegensatz

dazu lässt sich beim GaAs diese geringe Konzentration nicht erzeugen. Dennoch war es bereits in den 60er-Jahren möglich, hochohmiges, sogenanntes semiisolierendes si-GaAs-Material herzustellen. In Kristallen, die aus arsenreichen Schmelzen gezüchtet werden, sind relativ hohe Konzentrationen an As_{Ga} Antisite-Defekten zu finden. Mittlerweile gilt es als gesichert, dass dieser Antisite-Defekt dem tiefen Doppeldonator EL2 entspricht [CHAD88], [DABR92], [WIRB97]. Das Material erweist sich als n-leitend mit einem hohen spezifischen Widerstand. In galliumreichen Schmelzen gezogene Kristalle sind dagegen, aufgrund fehlender As_{Ga} -Defekte und einem recht hohen Anteil an Ga_{As} (flacher Akzeptor), p-leitend und besitzen einen geringen spezifischen Widerstand. Abbildung 1.5 zeigt schematisch das Bänderschema des GaAs. In der Bandlücke befinden sich flache Akzeptor- (A) und Donator-

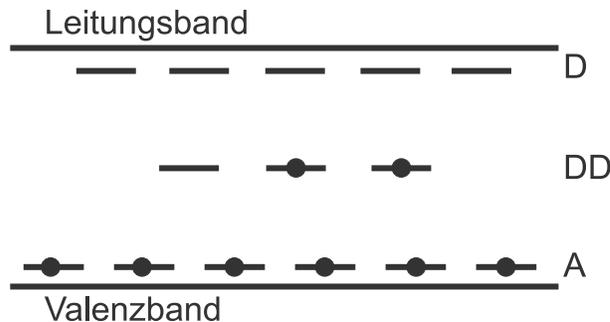


Abbildung 1.5: Energieniveau-Schema von semiisolierendem GaAs. Eingezeichnet sind flache Donator-Niveaus (D), flache Akzeptor-Niveaus (A), sowie tiefe Donator-Niveaus (DD) des EL2.

(D) Verunreinigungen. Diese werden durch den tiefen, in der Mitte der Bandlücke befindlichen, Donator (DD) des EL2-Defekts kompensiert, wenn für die Konzentrationen N gilt:

$$N_A > N_D \text{ und } N_{DD} > (N_A - N_D) \quad (1.1)$$

Ist diese Bedingung erfüllt, so wird die Lage des Fermi-niveaus durch das tiefe Niveau bestimmt und befindet sich somit in der Mitte der Bandlücke („Pinning“ des Fermi-niveaus); das Material verhält sich quasi intrinsisch. Somit kann ein n-leitender Kristall mit einer Donator-Konzentration im Bereich von ca. 10^{16} cm^{-3} einen hohen spezifischen Widerstand besitzen. Neben dem Antisite-Defekt sind somit auch die flachen Niveaus notwendig für die Kompensation und somit für die Herstellung hochohmigen Materials. Zur Züchtung von Kristallen mit exakter Kompensation der Antistrukturdefekte verwendet man Fremdatome, die als flache Akzeptoren in das GaAs-Gitter eingebaut werden. Meist wird dazu Kohlenstoff benutzt.

Das EL2-Donator-Niveau befindet sich mit einer Aktivierungsenergie von $E_T=0,77\text{eV}$ etwa in der Mitte der Bandlücke, sein Einfangquerschnitt σ hat einen Wert von $2,5 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^{-2}$ [COLA92].

Auch der EL2-Defekt kann im Rahmen des V-I-Modells verstanden werden. Dabei

befindet sich das As als Doppeldonor auf dem Ga-Platz. Da es sich um einen Doppeldonor handelt, kann nun die Überlegung des negativ geladenen Si-Donators auf das neutrale As analog übertragen werden. Jedoch ergeben Rechnungen, dass das absolute Minimum der Energie bei einer Verlagerung von 0% zu beobachten ist. Für die verlagerte V-I-Situation liegt ein lokales Minimum vor und um in den relaxierten Zustand zu gelangen, muss eine Energiebarriere überwunden werden. Für die geometrische Situation des EL2-Defektes ergibt sich somit eine im Vergleich zu Abbildung 1.3 völlig analoge Struktur. Auf dem Ga-Platz befindet sich dann ein As-Atom, welches ebenfalls in das Zwischengitter relaxieren kann. Jedoch geschieht dieses im neutralen Ladungszustand des Defektes und die relaxierte Situation ist hier metastabil und die substitutionelle stabil. Der EL2-Defekt besitzt somit neben den 0/+ und +/2+ Umladungsniveaus ein dem metastabilen Übergang zugeordnetes 0/0-Niveau.

Die wichtige Eigenschaft des EL2 — die Metastabilität — zeigt sich, wenn ein Einkristall bei tiefen Temperaturen ($<140\text{K}$) beleuchtet wird ($1,04\text{eV} < h\nu < 1,3\text{eV}$). Es ändern sich dann sämtliche an den EL2 gebundene Eigenschaften, wie elektrische Aktivierung, Absorption und Lumineszenz. Der EL2 befindet sich in einem Zustand, in dem er weder elektrisch, optisch noch magnetisch aktiv ist. Dieses als „Bleichen“ bezeichnete Verschwinden der charakteristischen Eigenschaften kann nur auf thermischem Weg durch Erhitzen ($T > 125\text{K}$, $\cong 0,34\text{eV}$) rückgängig gemacht werden. Der große Unterschied zwischen optischer und thermischer Aktivierungsenergie lässt sich durch die große Gitterrelaxation im metastabilen Zustand erklären. Ein großer Teil der Energie muss beim Übergang in die metastabile Defektconfiguration für die strukturelle Änderung aufgebracht werden.

1.3 $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ in GaAs und InAs

An dem System GaAs: $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ sind bereits ausführliche PAC-Untersuchungen durchgeführt worden [SCHA92a], [WEHN97]. Nach einem geeigneten Ausheilschritt (850°C für 120s) konnte eine einheitliche Quadrupolwechselwirkung mit $\nu_Q = 299\text{MHz}$ beobachtet werden. Die Orientierung des elektrischen Feldgradienten (EFG) konnte zu $\langle 111 \rangle$ bestimmt werden.

Der Anteil der Sondenatome, die sich in dieser Sondenumgebung befinden, ist abhängig von der Art der Sondeneinbringung (Abschnitt 3.2). So können nach α -Bestrahlung 100% der Sondenatome in dieser einheitlichen Umgebung beobachtet werden. Wenn die $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ -Sonden durch Ionenimplantation eingebracht werden, können nach analoger Ausheilbehandlung lediglich 20-40% der Sonden in der durch die 299MHz charakterisierten Sondenumgebung gefunden werden. Dieser Unterschied wird auf die höhere Sondenkonzentration im ionenimplantierten Fall ($10^{17} - 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) gegenüber der α -Bestrahlung (10^{14} cm^{-3}) zurückgeführt.

Emission-Channeling-Untersuchungen nach Ionenimplantation haben gezeigt, dass diese Sonden in einheitlicher Umgebung auf substitutionellen Plätzen eingebaut sind.

Das beobachtete Defektverhalten kann dabei im Rahmen des im Abschnitt 1.2.1 erläuterten Vacancy-Interstitial-Modells (V-I) interpretiert werden. In dem einen Defektzustand wird dabei das eingebrachte $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ -Ion substitutionell auf einem As-Platz eingebaut. Der andere Defektzustand ergibt sich dadurch, dass das entlang der $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse benachbarte Ga-Atom entlang dieser Achse in das Zwischengitter relaxiert. Diese relaxierte Situation kann mit dem beobachteten PAC-Messergebnis, dem auftretenden EFG, in Übereinstimmung gebracht werden. Es ist jedoch nicht gelungen, die substitutionelle Situation, bei der keine Relaxation auftritt, zu beobachten. Bei dieser Situation ergibt sich kein resultierender EFG, und man würde mit der PAC ein ungestörtes Spektrum beobachten (siehe Abschnitt 2.4.1.1). Die mögliche Stabilisierung der Defektsituationen ist dabei stark vom Ladungszustand des Defektes abhängig.

Eine andere mögliche Beschreibung der Messergebnisse liefert das Ga-Leerstellen-Modell. Eine an die $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ -Sonde angelagerte Leerstelle kann ebenfalls den bei den PAC-Messungen aufgetretenen EFG erklären. Bei der Ga-Leerstelle sollte es sich um einen dreifach Akzeptor handeln [BARA85], der entweder neutral oder negativ geladen ist.

In InAs konnten bei ersten Messungen von M. Wehner [WEHN95] erstmals zwei Sondensituationen bei PAC-Untersuchungen mit $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ beobachtet werden. Daher ist es von besonderem Interesse, und das Ziel dieser Arbeit, diese Untersuchungen mit gut charakterisiertem Probenmaterial weiter zu verfolgen.

Kapitel 2

Die PAC-Methode

Die Methode der gestörten γ - γ -Winkelkorrelation (**P**erturbed **A**ngular **C**orrelation, **PAC**) ist sensitiv auf die Gitterumgebung von in Materialien eingebrachten radioaktiven Sondenatomen. Daher können mit ihr Defekte oder Defektkomplexe in Kristallgittern untersucht werden. Es wird die Quadrupolwechselwirkung des elektrischen Quadrupolmoments eines Sondenkerns mit einem elektrischen **F**eld**G**radienten (**EFG**) gemessen. Außerdem kann die magnetische Wechselwirkung des magnetischen Dipolmoments eines Sondenkerns mit einem Magnetfeld beobachtet werden. Die vorliegende Arbeit diskutiert ausschließlich die Wechselwirkung mit elektrischen Feldgradienten. Die Quadrupolwechselwirkung stört die räumliche Verteilung der Emissionswahrscheinlichkeit zweier korreliert ausgesandter Kern- γ -Quanten; diese Störung wird zur Untersuchung ausgenutzt. In der Literatur sind die Grundlagen der Methode ausführlich dargelegt [FRAU65], [SCHA92b]. Daher wird hier nur ein kurzer Überblick über die Grundlagen gegeben.

2.1 Theorie

2.1.1 Die ungestörte Winkelkorrelation

Im allgemeinen Fall erfolgt die Aussendung von γ -Quanten eines angeregten Atomkerns isotrop, d.h. gleichverteilt in alle Raumrichtungen. Wird jedoch in einer γ - γ -Kaskade (siehe Abbildung 2.1) das erste Quant γ_1 in einer bestimmten Raumrichtung (\vec{k}_1) nachgewiesen, bewirkt dieses aufgrund der Drehimpulserhaltung eine Ausrichtung des Kernspins I des Zwischenniveaus. Die Emission des zweiten Quants γ_2 erfolgt dann anisotrop bezüglich \vec{k}_1 . Quantenmechanisch bedeutet dieses eine Ungleichbesetzung der M -Unterzustände des durch den Kernspin I und seine magnetischen Unterzustände charakterisierten Zwischenniveaus $|I, M\rangle$. Wird die Emission von γ_2 in Abhängigkeit von γ_1 gemessen, wie im rechten Teil von Abbildung 2.1

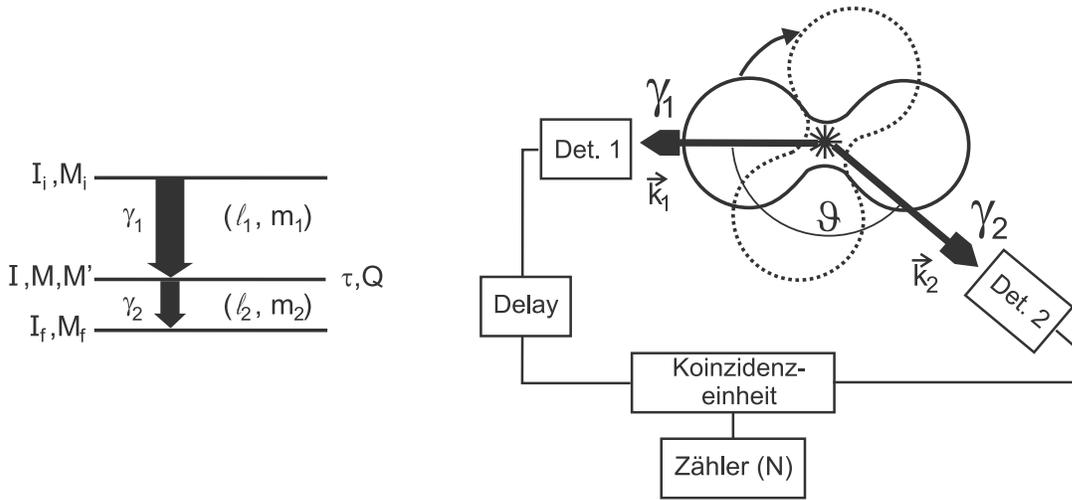


Abbildung 2.1: *Links:* Energieniveauschema einer γ - γ -Kaskade mit den Drehimpuls- und Magnetquantenzahlen I bzw. M (i - Ausgangsniveau, f - Endniveau) und den Multipolaritäten ℓ_1 und ℓ_2 der emittierten γ -Quanten. Das Zwischenniveau ist charakterisiert durch seine mittlere Lebensdauer τ ($\tau = \frac{1}{\lambda} = \frac{t_{1/2}}{\ln 2}$) und das Quadrupolmoment Q . *Rechts:* Einfachster Aufbau einer PAC-Anlage. Zwischen zwei unter einem Winkel ϑ angeordneten Detektoren befindet sich die emittierende Quelle. Eingezeichnet ist die Ausstrahlcharakteristik des zweiten γ -Quants. Für den Fall einer vorliegenden Störung, eines EFG, ist außerdem die Präzession angedeutet. Durch Veränderung der Verzögerung zwischen beiden Detektorsignalen (Delay) kann zeitabhängig das Lebensdauerspektrum des Zwischenniveaus (I, M) aufgenommen werden.

schematisch gezeigt, so wird eine Wahrscheinlichkeitsverteilung $W(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ beobachtet. Durch die Zylindersymmetrie bezüglich \vec{k}_1 genügt zur Beschreibung der Winkelkorrelation der Winkel ϑ zwischen den beiden Emissionsrichtungen \vec{k}_1 und \vec{k}_2 , solange keine weitere Achse ausgezeichnet ist. Die ungestörte Winkelkorrelationsfunktion $W(\vartheta)$ lässt sich nach Legendre-Polynomen $P_k(\cos \vartheta)$ entwickeln:

$$W(\vartheta) = \sum_{\substack{k=0 \\ k \text{ gerade}}}^{k_{\max}} A_{kk} P_k(\cos \vartheta) \quad (2.1)$$

Die Entwicklungskoeffizienten A_{kk} in dieser Reihe sind die sogenannten Anisotropiekoeffizienten. Sie sind durch den Kernspin I und die Multipolaritäten ℓ_1, ℓ_2 der beteiligten γ -Übergänge festgelegt. Als Normierung wird dabei $A_{00}=1$ gewählt. Tabellierte Werte findet man z.B. in [FRAU65]. Aufgrund der Paritätserhaltung nimmt k nur gerade Werte an. Für den Maximalwert k_{\max} von k gilt infolge der Drehimpulserhaltung:

$$k_{\max} \leq \text{Min}(2I, 2\ell_1, 2\ell_2) \quad (2.2)$$

Für den in dieser Arbeit verwendeten Sondenkern $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ folgt mit $I=5/2$, $\ell_1=1$ oder 2 und $\ell_2=2$ (siehe Abbildung 2.4), dass k_{\max} den Wert vier annimmt.

2.1.2 Die Störung der Winkelkorrelation durch einen elektrischen Feldgradienten

Tritt am Ort des Sondenkerns ein statischer EFG auf, so führt die elektrische Quadrupolwechselwirkung mit dem Kernquadrupolmoment Q zu einer zeitabhängigen Störung der γ - γ -Winkelkorrelation. Anschaulich kommt es zu einer Präzession des Kernspins I um die Richtung des EFG, und damit zu einer Präzession der Ausstrahlcharakteristik (siehe Abb.2.1 rechts). Quantenmechanisch entspricht dies einer zeitlich periodischen Umbesetzung der durch den EFG energetisch aufgespaltenen M -Unterzustände.

Ein EFG tritt bei einer Abweichung der Ladungsverteilung um den Sondenkern von einer Kugelsymmetrie auf. Er ist als die zweite partielle Ableitung des elektrostatischen Potentials $V(\vec{r})$ nach der Ortskoordinate definiert:

$$V_{ij} = \frac{\partial^2 V(\vec{r})}{\partial x_i \partial x_j} \quad \text{mit } i, j = 1, 2, 3 \quad (2.3)$$

Durch eine Koordinatentransformation auf das Hauptachsensystem kann dieser Tensor auf die drei Diagonalelemente V_{xx} , V_{yy} und V_{zz} reduziert werden. Die den EFG erzeugenden Ladungen sind nicht innerhalb des Kernvolumens lokalisiert, sodass die Laplace-Gleichung gilt:

$$\Delta V = V_{xx} + V_{yy} + V_{zz} = 0 \quad (2.4)$$

Da nur zwei Komponenten linear unabhängig sind, reicht die Angabe von zwei Größen zur eindeutigen Bestimmung des EFG aus. Konventionsgemäß werden die Koordinatenachsen des Hauptachsensystems so gewählt, dass $|V_{xx}| \leq |V_{yy}| \leq |V_{zz}|$ gilt. Der EFG wird dann durch seine Maximalkomponente V_{zz} und den Anisotropieparameter η vollständig beschrieben. Dabei wird η definiert durch:

$$\eta = \frac{V_{xx} - V_{yy}}{V_{zz}}, \quad 0 \leq \eta \leq 1 \quad (2.5)$$

Häufig erfolgt nicht die Angabe von V_{zz} , sondern der sogenannten Quadrupolkopplungskonstanten ν_Q , denn zu ihrer Messung muss das elektrische Quadrupolmoment Q nicht bekannt sein.

$$\nu_Q = \frac{e \cdot Q \cdot V_{zz}}{h} \quad (2.6)$$

Dabei bezeichnet e die Elementarladung und h das Plancksche Wirkungsquantum.

Besitzt der Sondenkern ein Quadrupolmoment Q im Zwischenzustand, so wird die Entartung der M -Unterzustände durch den Einfluss des EFG teilweise aufgehoben. Die elektrische Quadrupolwechselwirkung kann im Hauptachsensystem des EFG durch folgenden Hamiltonoperator beschrieben [GERD69], [BUTZ89] werden:

$$H_{M,M}^{\text{el}} = \hbar \cdot \omega_Q \cdot (3M^2 - I(I + 1))$$

$$H_{M,M\pm 1}^{\text{el}} = 0 \quad (2.7)$$

$$H_{M,M\pm 2}^{\text{el}} = \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega_Q \cdot \eta \cdot \sqrt{(I \mp M - 1) \cdot (I \mp M) \cdot (I \pm M + 1) \cdot (I \pm M + 2)}$$

Dabei ist die Quadrupolwechselwirkungsfrequenz ω_Q definiert als:

$$\omega_Q = \frac{e \cdot Q \cdot V_{zz}}{4I \cdot (2I - 1)\hbar} \quad (2.8)$$

Für einen axialsymmetrischen EFG mit $\eta = 0$ ist der Hamiltonoperator in Gleichung 2.7 diagonal und besitzt die Energieeigenwerte:

$$E_M = \hbar \cdot \omega_Q \cdot (3M^2 - I(I + 1)) \quad (2.9)$$

Bei dem verwandten Sondenkern $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ mit einem $I = \frac{5}{2}$ Zwischenniveau berechnen sich daraus für die möglichen M-Unterszustände $(\pm\frac{5}{2}, \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2})$:

$$E_{\pm\frac{5}{2}} = 10\hbar\omega_Q, \quad E_{\pm\frac{3}{2}} = -2\hbar\omega_Q, \quad E_{\pm\frac{1}{2}} = -8\hbar\omega_Q \quad (2.10)$$

Die minimale Übergangsfrequenz ω_0 zweier Niveaus mit halbzahligem Kernspin I ergibt sich daher zu:

$$\omega_0 = \text{Min}\left(\frac{|E_M - E_{M'}|}{\hbar}\right) = 6\omega_Q \quad (2.11)$$

Liegt kein axialsymmetrischer EFG vor, so ist die Berechnung der Matrixelemente E_M in der Regel nicht mehr analytisch möglich und der Hamiltonoperator (2.7) muss numerisch diagonalisiert werden.

Für den beim $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ vorliegenden Fall $I = \frac{5}{2}$ kann jedoch ein geschlossener Ausdruck für die Quadrupolaufspaltung als Funktion des Asymmetrieparameters η und der Quadrupolwechselwirkungsfrequenz ω_Q angegeben werden [GERD69]:

$$\begin{aligned} E_{\pm\frac{5}{2}} &= E_0 + 2\alpha\hbar\omega_Q \cos\left(\frac{1}{3} \arccos \beta\right) \\ E_{\pm\frac{3}{2}} &= E_0 - 2\alpha\hbar\omega_Q \cos\left(\frac{1}{3}(\pi + \arccos \beta)\right) \\ E_{\pm\frac{1}{2}} &= E_0 - 2\alpha\hbar\omega_Q \cos\left(\frac{1}{3}(\pi - \arccos \beta)\right) \end{aligned} \quad (2.12)$$

mit

$$\alpha = \sqrt{\frac{28}{3}(3 + \eta^2)} \quad \text{und} \quad \beta = \frac{80(1 - \eta^2)}{\alpha^3} \quad (2.13)$$

Die Wechselwirkungsfrequenzen ergeben sich dann aus den Energiedifferenzen:

$$\begin{aligned} \omega_1 &= 2\sqrt{3}\alpha\omega_Q \sin\left(\frac{1}{3} \arccos \beta\right) \\ \omega_2 &= 2\sqrt{3}\alpha\omega_Q \sin\left(\frac{1}{3}(\pi - \arccos \beta)\right) \end{aligned} \quad (2.14)$$

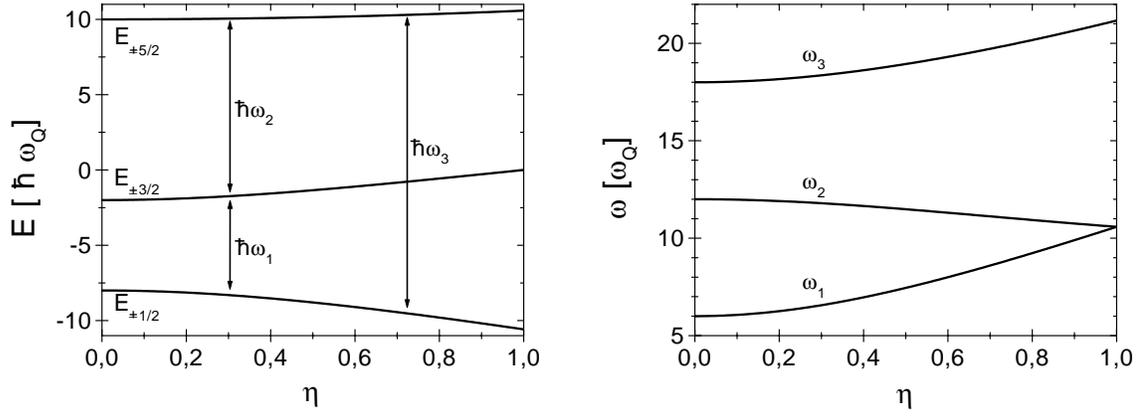


Abbildung 2.2: Aufspaltung eines $I=\frac{5}{2}$ Zwischenlevels in Abhängigkeit vom Asymmetrieparameter η . Auf der linken Seite ist die Abhängigkeit der Energieeigenwerte E_M , auf der rechten Seite die der zugehörigen Wechselwirkungsfrequenzen gezeigt.

$$\omega_3 = \omega_1 + \omega_2 = 2\sqrt{3}\alpha\omega_Q \sin\left(\frac{1}{3}(\pi + \arccos \beta)\right)$$

Die Definition von ω_1 , ω_2 und ω_3 sowie ihre Verläufe in Abhängigkeit von η sind zusammen mit den Energieeigenwerten E_M in Abbildung 2.2 gezeigt. Bei einem axialsymmetrischen EFG ($\eta=0$) gilt $\omega_n = n \cdot \omega_0$ mit $n=1,2,3$. Mit ω_n erfolgt die periodische Umbesetzung der M-Unterszustände. Im Fall $I=\frac{5}{2}$ (^{77}Br (^{77}Se)) folgt daraus mit den Gleichungen 2.6, 2.8 und 2.11:

$$\nu_Q = \frac{20}{\pi}\omega_Q = \frac{10}{3\pi}\omega_1 \quad (2.15)$$

2.1.2.1 Polykristalline Proben

Ein wichtiger Spezialfall bei der elektrischen Quadrupolwechselwirkung ist die polykristalline Probe. Aufgrund der statistischen Orientierung der Mikrokristalle ist keine Richtung neben der Emissionsrichtung von γ_1 ausgezeichnet, die Zylindersymmetrie um \vec{k}_1 bleibt erhalten. In diesem Fall hängt die Winkelkorrelation nur noch vom Winkel ϑ zwischen \vec{k}_1 und \vec{k}_2 ab. Die durch den Einfluss eines statischen EFG hervorgerufene zeitabhängige Störung äußert sich als eine zeitliche Modulation mit der Störfunktion $G_{kk}(\eta, t)$:

$$W(\vartheta, t) = \sum_{\substack{k=0 \\ k \text{ gerade}}}^{k_{\max}} A_{kk} G_{kk}(\eta, t) P_k(\cos \vartheta) \quad (2.16)$$

Die Störfunktion $G_{kk}(\eta, t)$ kann im Fall $I=\frac{5}{2}$ als Überlagerung der in Gleichung 2.14 angegebenen Wechselwirkungsfrequenzen $\omega_n(\eta, V_{zz})$ dargestellt werden:

$$G_{kk}(\eta, t) = \sum_{n=0}^3 s_{kn}(\eta) \cdot \cos(\omega_n(\eta, V_{zz}) \cdot t) \quad (2.17)$$

Auch bei der Mittelung über die statistisch verteilten Orientierungen des elektrischen Feldgradienten (polykristallin) resultiert also eine zeitabhängige Störung (Präzession). Dazu kann man sich die Präzession um eine beliebige Feldgradientenorientierung in zwei Anteile zerlegt vorstellen. Ein Anteil bei dem sich die Winkelkorrelation in sich dreht und damit zeitlich konstant bleibt. Dieser Anteil bewirkt, das $G_{kk}(\eta, t)$ nicht unter einen Grenzwert, den sogenannten „hard core“ Wert G_{kk}^{hc} sinkt. Für axialsymmetrische EFG nimmt er sein Minimum an mit:

$$G_{kk}^{\text{hc}} = \frac{1}{2k + 1} \quad (2.18)$$

Der andere Anteil ist zeitlich veränderlich und weist eine Drehung um eine Achse senkrecht zur Symmetrieachse der Winkelkorrelation auf. Diese ergibt dann eine zeitlich oszillierende Ausstrahlcharakteristik. Dabei ist die Oszillationsfrequenz nur vom Betrag, nicht jedoch von der Orientierung des EFG abhängig.

2.1.2.2 Kubische Einkristalle

Gegenüber den Achsen eines Einkristalls hat das Hauptachsensystem des EFG eine feste Lage. Dadurch ist im Gegensatz zu einer polykristallinen Probe eine weitere Raumrichtung neben der Emissionsrichtung \vec{k}_1 ausgezeichnet und die Zylindersymmetrie des Systems ist aufgehoben. Die Störfunktion hängt dann von der Orientierung der Detektoren relativ zu den Kristallachsen ab. Dadurch kann die Lage der Symmetrieachse des EFG im Kristallgitter bestimmt werden, woraus Rückschlüsse auf die Struktur des zugrundeliegenden Sonde–Defekt–Komplexes gezogen werden können.

Die Winkelkorrelation nimmt die folgende allgemeine Form an [FRAU65]:

$$W(\theta_1, \phi_1, \theta_2, \phi_2, t) = \sum_{\substack{N_1, N_2 \\ k_1, k_2}} A_{k_1}(\gamma_1) \cdot A_{k_2}(\gamma_2) \cdot G_{k_1 k_2}^{N_1 N_2}(t) \cdot \frac{Y_{k_1}^{N_1*}(\theta_1, \phi_1) \cdot Y_{k_2}^{N_2}(\theta_2, \phi_2)}{\sqrt{(2k_1 + 1)(2k_2 + 1)}} \quad (2.19)$$

Hierbei sind $G_{k_1 k_2}^{N_1 N_2}(t)$ die Störfunktionen und $Y_k^N(\theta, \phi)$ die Kugelflächenfunktionen. Die Winkel $\theta_1, \phi_1, \theta_2, \phi_2$ beschreiben die Lage der γ -Nachweisrichtungen \vec{k}_1 bzw. \vec{k}_2 im Hauptachsensystem des EFG, sie sind in Abbildung 2.3 definiert.

Für den Spezialfall $I = \frac{5}{2}$ kann die Gleichung 2.19 unter Verwendung effektiver s_n -Koeffizienten in die folgende Form gebracht werden [WEGN85]:

$$W(\theta_1, \phi_1, \theta_2, \phi_2, t) = 1 + A_{22} \cdot G(\vartheta, t) \quad \text{mit} \\ G(\vartheta, t) = \sum_{n=0}^3 s_n^{\text{eff}}(\theta_1, \phi_1, \theta_2, \phi_2, \eta, \frac{A_{24}}{A_{22}}, \frac{A_{42}}{A_{22}}, \frac{A_{44}}{A_{22}}) \cdot \cos(\omega_Q(\eta, V_{zz}) \cdot t) \quad (2.20)$$

Die Fourierkoeffizienten s_n^{eff} enthalten alle Informationen über die Geometrie des EFG und die Anordnung der Detektoren relativ zum Kristallgitter, außerdem ist

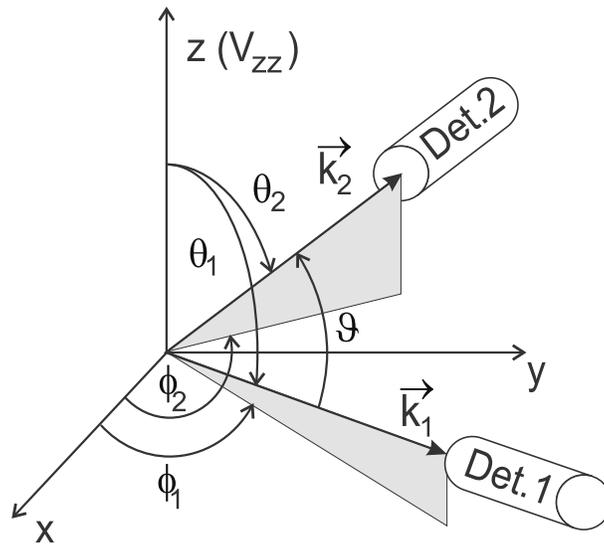


Abbildung 2.3: Anordnung der Detektoren im Hauptachsensystem des EFG. Die Winkel ϕ_1 und ϕ_2 sind in der x - y -Ebene zwischen der x -Achse und den Projektionen von \vec{k}_1 bzw. \vec{k}_2 auf die Ebene definiert. θ_1 und θ_2 bezeichnen die Winkel zwischen der Richtung der Hauptkomponenten des EFG (V_{zz}) und den Nachweisrichtungen der γ -Quanten \vec{k}_1 bzw. \vec{k}_2 , also den Detektoren 1 und 2. ϑ bezeichnet den Winkel zwischen \vec{k}_1 und \vec{k}_2 .

die Abhängigkeit vom Asymmetrieparameter η enthalten. Jeder Koeffizient ergibt sich als Mittelwert über alle äquivalenten EFG-Orientierungen im kubischen Kristall. Für den axialsymmetrischen Fall kann ein geschlossener Ausdruck für die s_n^{eff} -Koeffizienten angegeben werden, im Fall $\eta \neq 0$ muss die Störfunktion für jeden Wert von η neu berechnet werden.

Zu berücksichtigen ist bei den Winkelkorrelationsmessungen am Einkristall die Tatsache, dass es für jede Sonde-Defekt-Konfiguration mehrere kristallographisch äquivalente Anordnungen gibt, für die die Detektoren im Hauptachsensystem des EFG jeweils unterschiedlich orientiert sind. Lagert sich beispielsweise in einem kubischen Gitter eine Leerstelle auf einem $[111]$ -Nachbarplatz an einen substitutionellen Sondenkern an, so ist dieser Platz physikalisch äquivalent zu den Positionen $[-111]$, $[-1-11]$, $[-11-1]$, $[-1-1-1]$, $[1-11]$, $[11-1]$ und $[1-1-1]$. Diese unter dem Symbol $\langle 111 \rangle$ zusammengefassten acht Positionen führen jedoch zu verschiedenen Richtungen der Symmetrieachse des EFG bezüglich der Detektor-Anordnung. Da die γ - γ Winkelkorrelation nicht auf das Vorzeichen des EFG sensitiv ist, sind die s_n^{eff} -Koeffizienten für äquivalente Lagen, die sich nur durch das Vorzeichen unterscheiden, gleich. Für alle übrigen äquivalenten Orientierungen müssen die zugehörigen s_n^{eff} -Koeffizienten gesondert berechnet werden. Unter der Annahme, dass alle äquivalenten Plätze mit gleicher Wahrscheinlichkeit besetzt werden, geht in Gleichung 2.20 ein Mittelwert über diese verschiedenen s_n^{eff} -Koeffizienten ein.

2.2 $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ als nukleare Sonde

Für γ - γ -Winkelkorrelationsmessungen geeignete Sonden müssen verschiedene Bedingungen erfüllen:

- Die A_{22} -Anisotropie der Ausstrahlung beider γ -Quanten muss möglichst groß sein.
- Das Kernquadrupolmoment Q sollte so groß sein, dass man in der durch die Lebensdauer des isomeren Zwischenniveaus vorgegebenen Zeit, die Wechselwirkungsfrequenz ω_Q bestimmen kann. Weil sich die in Festkörpern auftretenden EFG im allgemeinen in der Größenordnung von $V_{zz} \approx 10^{17 \pm 1} \text{Vcm}^{-2}$ bewegen, sollte $Q \geq 0,1 \text{barn}$ sein.
- Die Lebensdauer des Zwischenniveaus sollte lang genug sein, um die typischen Wechselwirkungsfrequenzen beobachten zu können. Sie darf jedoch nicht zu lang sein, da sonst zufällige Koinzidenzen dominieren. Die Lebensdauer sollte daher zwischen einigen ns und μs liegen.
- Die Halbwertszeit des Mutterisotops darf nicht zu kurz sein, um eine Probenpräparation nach Sondeneinbringung sowie eine ausgedehnte Messreihe mit ausreichender Statistik zu ermöglichen. Da die Dauer einer PAC-Messung im Bereich einiger Stunden bis einige Tage liegt, sollte die Halbwertszeit ebenfalls im Bereich einiger Stunden, besser einiger Tage liegen.
- Die Energien der γ -Quanten sollte 100keV nicht unterschreiten, damit eine starke Selbstabsorption in der Probe vernachlässigt werden kann. Außerdem sollte die Energie gut mit Szintillationsdetektoren nachgewiesen werden können.

Der bei den Untersuchungen eingesetzte Sondenkern $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ erfüllt diese voranstehenden Eigenschaften. Das ^{77}Br geht mit einer Halbwertszeit von 57h durch einen EC/β^+ -Zerfall in den Tochterkern ^{77}Se über. Die Winkelkorrelationsmessung wird durch die in Abbildung 2.4 gezeigte 755keV-250keV γ - γ -Kaskade des ^{77}Se ermöglicht. Die Kaskade besitzt eine günstige, große Anisotropie mit $A_{22} = -0,454(9)$ [MOHS88]. Durch die Halbwertszeit des Zwischenniveaus von 9,68ns [FIRE96] und dem vorhandenen Kernquadrupolmoment Q ist eine Beobachtung der im Festkörper auftretenden elektrischen Quadrupolwechselwirkungsfrequenzen ω_Q möglich. Das Quadrupolmoment des $\frac{5}{2}^-$ -Zwischenniveaus ist nicht gut bekannt und man findet in der Literatur verschiedene Werte 1,1(9)barn [UNTE83], [FIRE96] sowie 0,76(5)barn [HAAS93]. Daher ergeben sich große Unsicherheiten bei der Berechnung von V_{zz} aus gemessenen Quadrupolkopplungskonstanten ν_Q mit Hilfe von Q (siehe Gleichung 2.6). Neben dem elektrischen Quadrupolmoment besitzt das Zwischenniveau

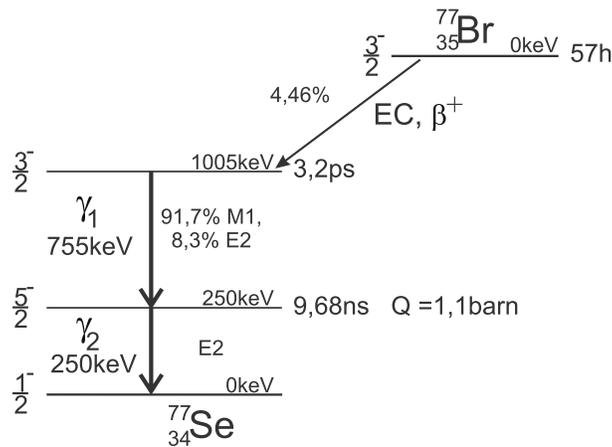


Abbildung 2.4: Ausschnitt aus dem ^{77}Br (^{77}Se)-Zerfallsschema mit der für die PAC-Messungen notwendigen γ - γ -Kaskade.

auch ein magnetisches Dipolmoment μ , sodass Untersuchungen von magnetischen Wechselwirkungen möglich sind. Alle relevanten kernphysikalischen Eigenschaften der Sonde ^{77}Br (^{77}Se) fasst die Tabelle 2.1 zusammen.

Mutterisotop	: $^{77}_{35}\text{Br}$ Brom	
Tochterisotop	: $^{77}_{34}\text{Se}$ Selen	
Halbwertszeit Mutterisotop	: 57,036h	[FIRE96]
Halbwertszeit Zwischenniveau	: 9,68(6)ns	[FIRE96]
Spin und Parität des Zwischenniveaus	: $\frac{5}{2}^-$	[FIRE96]
Quadrupolmoment des Zwischenniveaus	: 1,1(5)barn	[FIRE96], [UNTE83]
	: 0,76(5)barn	[HAAS93]
magnetisches Dipolmoment des Zwischenniveaus	: 1,12(2) μ_N	[FIRE96]
Energien und Multipolaritäten der Kaskade	: γ_1 : 755,397keV; 91,7% M1 8,3% E2	[FIRE96]
	: γ_2 : 249,786keV; 100% E2	
Wahrscheinlichkeit des Übergangs über die Kaskade	: 1,2%	[FIRE96]
Anisotropiekoeffizient der Kaskade	: $A_{22} = -0,454(9)$	[MOHS88]
	: $A_{24} = -0,525$	[WEHN97]
	: $A_{42} = 0,031$	[WEHN97]
	: $A_{44} = -0,036$	[MOHS88]
Sternheimer-Korrekturfaktor ($1 - \gamma_\infty$)	: 88,4 für Se^{2-}	[SCHM80]

Tabelle 2.1: Kernphysikalische Eigenschaften des Sondenkerns ^{77}Br (^{77}Se).

Ebenfalls eingetragen ist der Sternheimer-Korrekturfaktor. Der am Kernort wirkende EFG wird durch die Polarisation der Elektronenhülle des Sondenkerns im Gitter beeinflusst. Deshalb benutzt man zur Berechnung des auf das Sondenatom wirkenden EFG den Korrekturfaktor $(1 - \gamma_\infty)$, der diesen Einfluss berücksichtigt.

Die Bevölkerung der γ - γ -Kaskade im ^{77}Br (^{77}Se) erfolgt nur zu einem geringen Anteil von 1,2% [FIRE96]. Diese Tatsache bewirkt eine starke Zählratenbelastung der Messanlage durch die übrigen Zerfälle und einen hohen Anteil zufälliger, meist

prompter Koinzidenzen. Abbildung 2.5 zeigt ein mit einem BaF_2 -Detektor aufgenommenes Energiespektrum einer α -bestrahlten p-Typ-InAs-Probe (siehe Abschnitt 3.2) etwa 7h nach Bestrahlungsende. Die beiden Linien der Kaskade können

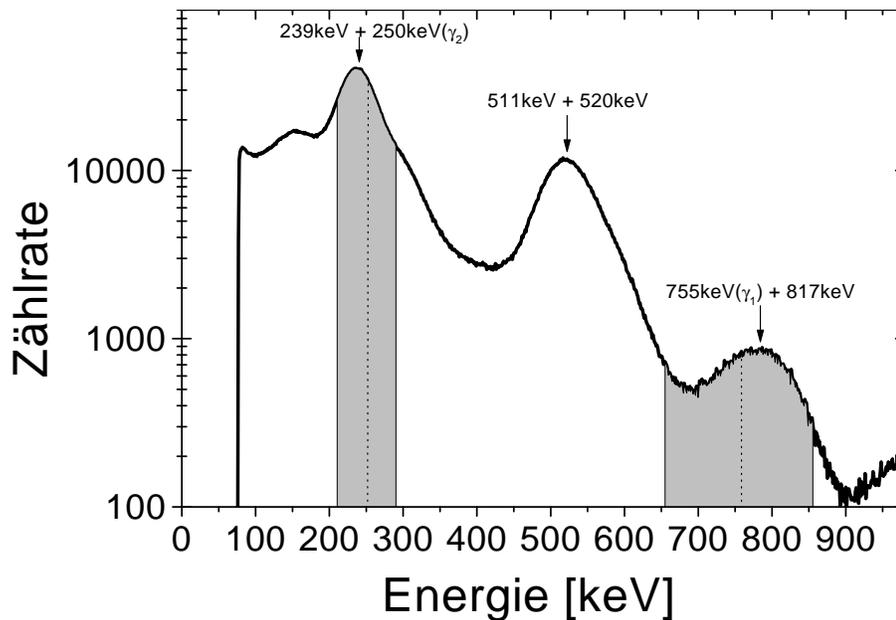


Abbildung 2.5: Energiespektrum von ^{77}Br (^{77}Se). Aufgenommenen mit einem BaF_2 -Detektor an einer für 3h mit 33MeV bei 300nA α -bestrahlten p-Typ-InAs Probe, etwa 7h nach Bestrahlungsende. Dominiert wird das Spektrum durch die intensivsten Linien des komplexen Spektrums mit 239keV und 520keV . Außerdem ist ein Anteil der 511keV -Vernichtungsstrahlung des β^+ -Zerfalls zu sehen. Markiert sind die beiden Energien der γ -Quanten der Kaskade, $\gamma_1=755\text{keV}$ und $\gamma_2=250\text{keV}$. Unterlegt sind das Start- und das Stop-Energiefenster welche bei den Messungen aufgrund der Energieeichung eingestellt werden.

mit der Energieauflösung des BaF_2 -Detektors ($\sim 15\%$) nicht aufgelöst werden. Die Start-Linie $\gamma_1=755\text{keV}$ (Anteil am Spektrum: $1,67\%$) wird von der 817keV -Linie ($2,08\%$) überlagert. Auch die Stop-Linie $\gamma_2=250\text{keV}$ ($3,07\%$) kann nicht vom sehr intensiven 239keV -Übergang ($23,4\%$) getrennt werden. Ein weiterer starker Übergang liegt bei 520keV ($22,4\%$).

Neben diesen meist unverzögert auftretenden Zerfällen führt die durch den β^+ -Zerfall auftretende 511keV -Vernichtungsstrahlung zu einem zusätzlichen prompten Anteil im Koinzidenzspektrum (siehe Abbildung 2.8). Im Bereich dieser „prompten Kurve“ ist keine Auswertung der PAC-Daten möglich, sodass eine gute Zeitauflösung der Apparatur wünschenswert ist. Der hohe Anteil zufälliger Koinzidenzen führt zu großen Fehlern in dem zur Auswertung herangezogenen R-Wert-Spektrum (siehe Kapitel 2.4.1) und schränkt das Zeitfenster auf etwa 50ns ein.

2.3 Messapparatur

Für die PAC-Messungen, die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt wurden, sind zwei verschiedene Messanlagen verwandt worden. Beide arbeiten nach dem fast-slow-Prinzip. Das bedeutet, dass Zeit und Energie der Ereignisse getrennt ausgewertet werden. Eine einfache Prinzipskizze des konventionellen Prinzips, wie es auch in der vorwiegend verwandten Drei-Detektor-Anlage vorliegt, ist in Abbildung 2.6 dargestellt. Im schnellen Zweig werden die Zeitimpulse zum Starten und Stoppen

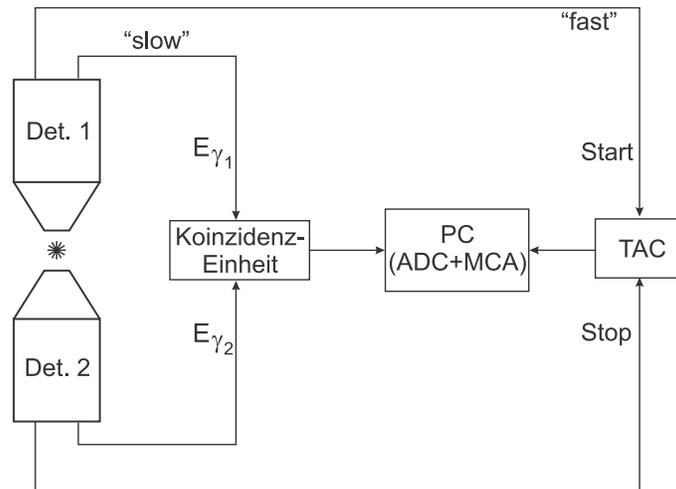


Abbildung 2.6: Prinzipschaltbild der Drei-Detektor PAC-Anlage nach der fast-slow Arbeitsweise. Im langsamen Zweig erfolgt die Energieauswahl, die das Aufnehmen der im schnellen Zweig bestimmten Zeit zwischen Start- und Stoppsignal in das Zeitspektrum bestimmt. Die Zeitmessung erfolgt mittels des TAC (time to amplitude converter). Die Koinzidenzeinheit überprüft, ob die gemessenen Energien denen der Kaskade entsprechen. Die Datenaufnahme erfolgt durch einen Computer (PC), der mit einer MCA-Karte (multi channel analyser) ausgestattet ist, darin integriert ist ein ADC (analog digital converter) für die Konvertierung der Daten.

der Uhr, in diesem Fall eines TAC (time to amplitude converter), genutzt. Das TAC-Ausgangssignal wird an eine MCA-Karte (multi channel analyser) mit integriertem ADC (analog digital converter) des Computers weitergegeben. Während der ADC die Konversion durchführt, erfolgt im langsamen Zweig die Überprüfung der Energie der beiden γ -Quanten. Liegen die gemessenen Energien in den eingestellten Energiefenstern (siehe Abbildung 2.5), liefert die Koinzidenzeinheit einen Gateimpuls. Dann und nur dann wird der konvertierte TAC-Ausgangsimpuls von der MCA-Karte in das Zeitspektrum eingeordnet. Es werden insgesamt 8 Spektren aufgenommen, die aus unterschiedlichen Detektorkombinationen resultieren. Der genaue Schaltplan der Anlage ist in [SCHA92a] enthalten.

Beide Anlagen arbeiten mit BaF₂-Szintillatorkristallen, sie zeichnen sich durch eine

hinreichend gute Energieauflösung und eine hohe Zeitauflösung aus. Für die beobachtete Kaskade liegt sie bei etwa 200ps [SCHA92a]. Durch die Energieauflösung werden die Energiefenster der Start- und Stop- γ 's festgelegt (γ_1 : 650 - 850keV, γ_2 : 210 - 290keV, siehe Abb. 2.5). Die Form der konischen Kristalle ist in der Abbildung 2.7 gezeigt.

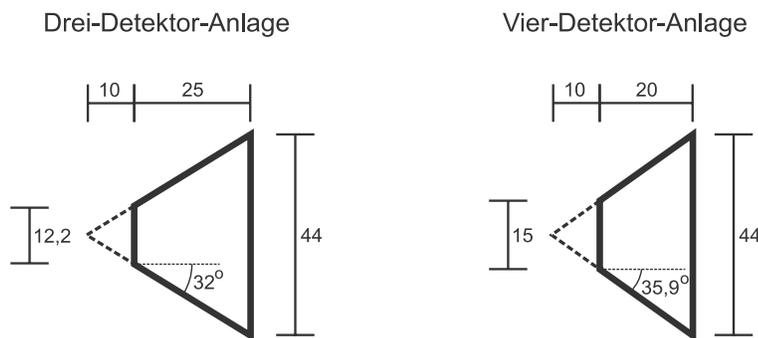


Abbildung 2.7: BaF_2 -Szintillatorkristalle der beiden verwandten PAC-Anlagen. Die eingetragenen Längenmaße sind Angaben in mm.

Bei der verwandten Anlage handelt es sich um eine Drei-Detektor-Anlage mit einem fahrbaren Detektor, der üblicherweise alle 10^4 s seine Position wechselt. Die beiden anderen Detektoren sind ortsfest. Der Winkel ϑ zwischen den Detektoren beträgt dabei 90° bzw. 180° . Durch den fahrbaren Detektor wird eine Vier-Detektor-Anlage „simuliert“, bei der die zur Bildung der R-Werte (siehe 2.4.1) benötigten, jeweils unter 90° bzw. 180° aufgenommenen Zeitspektren, immer von der gleichen Detektorkombination stammen. Das PAC-Spektrum wird somit unabhängig von Detektoreigenschaften und elektronischen Einstellungen.

Einige wenige Messungen wurden an einer Vier-Detektor-Anlage durchgeführt, die nach einem modifizierten fast-slow-Koinzidenzprinzip arbeitet. Eine ausführliche Beschreibung der Anlage ist in [KOCH92] gegeben, weshalb hier nicht weiter darauf eingegangen wird. Der Unterschied zu einer konventionellen Maschine besteht in einer Vorkoinzidenz der Zeitinformation und der Energieinformation. Dadurch wird der TAC nur noch von γ -Quanten der richtigen Energie gestartet bzw. gestoppt. Auf diese Weise erreicht man eine drastische Verminderung der Totzeiten des TAC, der zufälligen Koinzidenzen, sowie eine Unterdrückung von falsch einsortierten Ereignissen. Aus diesem Grunde wäre die Anlage ideal für Messungen mit der Sonde ^{77}Br (^{77}Se) mit ihrem umfangreichen γ -Spektrum (siehe vorherigen Abschnitt 2.2).

Jedoch ist die Drei-Detektor-Anlage aus zwei anderen Gründen besser geeignet. Die BaF_2 -Kristalle der Drei-Detektor-Anlage haben eine Tiefe von 25mm gegenüber denen der Vier-Detektor-Anlage von 20mm (Abb. 2.7). Bei dem höher energetischen Start- γ mit 755keV macht sich dieses in einer höheren Absorption bemerkbar. Zudem ist die Photoabsorption in diesem Energiebereich nur sehr gering. Bei einer

punktförmigen Quelle wird in einem Abstand von 14mm vom Detektor bei einem Kristall der Tiefe 25mm 8% der Strahlung absorbiert, bei dem Kristall der Tiefe 20mm nur 6% (siehe Anhang E). Außerdem sind die Spannungsteiler der Photomultiplier der Drei-Detektor-Anlage so dimensioniert, dass höhere Querströme (ca. 20mA) fließen (Vier-Detektor-Anlage ca. 10mA). Dadurch können die bei einer starken Quelle aus den Dynoden des Photomultipliers ausgeschlagenen Elektronen schneller kompensiert werden. Andernfalls würde die Verstärkung des Photomultipliers verändert (in diesem Fall vergrößert) und sich mit dem Zerfall der Sondenkerne verschieben. Somit kann eine stärkere Probe die, aufgrund der geringen Bevölkerung der Kaskade, für eine gute Statistik notwendige ist, ohne Beeinträchtigung der Verstärkung an der Drei-Detektor-Anlage vermessen werden.

2.4 Datenanalyse

2.4.1 Bildung der R-Wert-Spektren

Bei der PAC-Messung wird mit jeweils zwei unter dem Winkel ϑ angeordneten Detektoren ein Koinzidenzspektrum $N(\vartheta, t)$ aufgenommen. Dieses stellt die mit der Winkelkorrelationsfunktion $W(\vartheta, t)$ modulierte Lebensdauerkurve des Zwischenniveaus der γ - γ -Kaskade dar:

$$N(\vartheta, t) = D \cdot (N_0 \cdot \exp(-\frac{t}{\tau}) \cdot W(\vartheta, t) + Z) \quad (2.21)$$

N_0 bezeichnet darin die Zählrate am Zeitnullpunkt, τ die Lebensdauer des Zwischenniveaus und Z den Untergrund zufälliger Koinzidenzereignisse. D beschreibt einen Dejustierungsfaktor, der auf eine geometrische Dejustierung zwischen den Detektoren oder eine richtungsabhängige Absorption der γ -Quanten in der Probe zurückzuführen ist. In Abbildung 2.8 sind zwei Koinzidenzspektren für $\vartheta = 90^\circ$ und $\vartheta = 180^\circ$ gezeigt, die mit der Sonde $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ aufgenommen worden sind.

Aus den unter verschiedenen Winkeln aufgenommenen Koinzidenzzählraten $N(\vartheta, t)$ wird dann ein Asymmetrieverhältnis, der sogenannte R-Wert berechnet:

$$R(t) = 2 \cdot \frac{N(180^\circ, t) - N(90^\circ, t)}{N(180^\circ, t) + 2 \cdot N(90^\circ, t)} \quad (2.22)$$

Bei PAC-Messungen an polykristallinen Proben erfolgt durch diese R-Wert-Bildung gerade eine Eliminierung der Lebensdauer¹ aus 2.21 und es ergibt sich:

$$R(t) = A_{22} \cdot G_{22}(t) \quad (2.23)$$

¹ Bei polykristallinen Proben gilt: $N(\vartheta, t) = N_0 \cdot \exp(-\frac{t}{\tau}) \cdot (1 + A_{22} \cdot G_{22}(t) \cdot P_2(\cos(\vartheta)))$; für $\vartheta_1 = 180^\circ$ und $\vartheta_2 = 90^\circ$ ist: $P_2(\cos 90^\circ) = -\frac{1}{2}$ und $P_2(\cos 180^\circ) = 1$

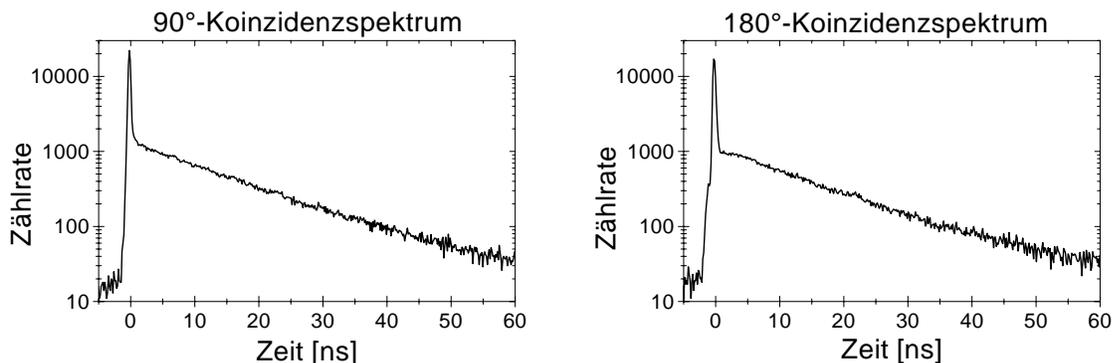


Abbildung 2.8: Zeitabhängige Koinzidenzzählraten $N(\vartheta, t)$ für einen Winkel ϑ von 90° (links) und 180° (rechts) zwischen Start- und Stop-Detektor. Beim Zeitnullpunkt ist der prompte Anteil durch die unverzögert auftretenden Zerfälle und die 511keV -Vernichtungsstrahlung aus dem β^+ -Zerfall zu erkennen. Die Modulation der Lebensdauerkurve durch die Quadrupolwechselwirkung kann nicht aufgelöst werden. Dem Spektrum ist außerdem ein konstanter Untergrund der zufälligen Koinzidenzen überlagert. Durch die negative Anisotropie des ^{77}Br (^{77}Se)-Sondenkerns ist im 180° Spektrum die Zählrate in den ersten Kanälen nach dem Zeitnullpunkt verringert gegenüber der linearen Fortsetzung der Lebensdauerkurve.

Vor der Bildung der R-Werte werden zufällige Koinzidenzen und Dejustierungen korrigiert. Die Zufälligenzählrate Z wird aus einem Bereich des Koinzidenzspektrums bestimmt, in dem echte Koinzidenzen keine Rolle spielen. Z kann in guter Näherung als zeitlich konstant angenommen werden. Die Dejustierung wird aus dem Verhältnis der Zufälligenzählraten im 90° - bzw. 180° -Spektrum bestimmt. Zur Kontrolle wird die wechselwirkungsunabhängige Größe $A_0(t)$ berechnet:

$$A_0(t) = \frac{N(180^\circ, t) + 2 \cdot N(90^\circ, t)}{3} = N_0 \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (2.24)$$

Bei erfolgter Zufälligen-Korrektur ergibt $A_0(t)$ in halblogarithmischer Darstellung eine Gerade mit der Steigung τ .

Mit der Drei-Detektor-Apparatur werden in jeder Position des fahrbaren Detektors simultan vier Koinzidenzspektren aufgenommen. Es werden jeweils vier R-Wert-Spektren mit denjenigen 90° - bzw. 180° -Spektren gebildet, die von der gleichen Detektorkombination stammen. Von diesen vier R-Wert-Spektren wird dann ein Summenspektrum gebildet.

Bei PAC-Messungen am kubischen Einkristall werden die Detektoren entlang gleich-indizierter Kristallachsen ausgerichtet. Im Rahmen dieser Arbeit wurde im Allgemeinen die $\langle 110 \rangle$ -Orientierung der Detektoren verwandt. Bei Orientierungsmessungen (Abschnitte 4.1.1.2 und 4.1.3.2) wurde auch in $\langle 100 \rangle$ - und $\langle 111 \rangle$ -Orientierung der Detektoren gemessen. Bei den Messungen mit in $\langle 100 \rangle$ - oder $\langle 110 \rangle$ -Richtung orientierten Detektoren kann die übliche Detektorgeometrie mit Winkeln von $\vartheta_1=180^\circ$ und $\vartheta_2=90^\circ$ zwischen den Detektoren beibehalten werden. Bei

der $\langle 111 \rangle$ -Orientierung der Detektoren werden die Koinzidenzspektren hingegen unter den Winkeln $\vartheta_1=180^\circ$ und $\vartheta_2=70^\circ$ aufgenommen (siehe Abbildung C.1).

Zur Auswertung erfolgt auch hier eine R-Wert Bildung, es gilt:

$$R(t) = 2 \cdot \frac{N(180^\circ, t) - N(\vartheta_2, t)}{N(180^\circ, t) + 2 \cdot N(\vartheta_2, t)} \quad (2.25)$$

Mit der untergrundkorrigierten Koinzidenzzählrate

$$N(\vartheta, t) = N_0 \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \cdot (1 + A_{22} \cdot G(\vartheta, t)) \quad (2.26)$$

folgt daraus:

$$R(t) = 2 \cdot \frac{A_{22} \cdot (G(180^\circ, t) - G(\vartheta_2, t))}{3 + A_{22} \cdot (G(180^\circ, t) + 2 \cdot G(\vartheta_2, t))} \quad (2.27)$$

Bei Messungen entlang der $\langle 100 \rangle$ -Richtung gilt $G(180^\circ, t) = -2 \cdot G(90^\circ, t)$ 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 [WEGN85]:

$$R(t) = \frac{2}{3} \cdot A_{22} \cdot (G(180^\circ, t) - G(\vartheta_2, t)) := A_{22} \cdot \tilde{G}(t) \quad (2.28)$$

Definiert man die Koeffizienten

$$\sigma_n^{\text{eff}} := \frac{2}{3} \cdot (s_n^{\text{eff}}(180^\circ, \eta) - s_n^{\text{eff}}(\vartheta_2, \eta)) \quad (2.29)$$

so nimmt die durch Berechnung der R-Werte zu bestimmende Störfunktion $\tilde{G}(t)$ formal dieselbe Gestalt an, wie bei der Quadrupolwechselwirkung in polykristallinen Proben (Gln. 2.17):

$$\tilde{G}(t) = \sum_{n=0}^3 \sigma_n^{\text{eff}} \cdot \cos(\omega_n(\eta, V_{zz}) \cdot t) \quad (2.30)$$

2.4.1.1 Anpassung an die theoretische Störfunktion

Zur Anpassung der theoretischen Störfunktion an die aus den Koinzidenzspektren experimentell erhaltenen R-Werte, wird die Methode der kleinsten Fehlerquadrate verwendet. Die eingebrachten Sondenkerne werden sich nicht alle in der gleichen Umgebung befinden, sondern Teilmengen von Kernen werden sich in mikroskopisch verschiedenen Situationen befinden. Sie können dann auch unterschiedlichen Hyperfeinwechselwirkungen ausgesetzt sein. Die anzupassende Störfunktion ist daher eine Überlagerung von mehreren Komponenten $\tilde{G}_i(t)$ mit unterschiedlichen Anteilen A_i :

$$\tilde{G}(t) = \sum_i A_i \cdot \tilde{G}_i(t) \quad \text{mit der Normierung} \quad \sum_i A_i = 1 \quad (2.31)$$

Im kubischen Einkristall können folgende Anteile unterschieden werden:

- Für einen Anteil A_u von Sondenatomen, die sich in einer ungestörten kubischen Umgebung befinden, tritt kein effektiver EFG am Ort der Sonde auf und es gilt für den Anteil an der Störfunktion:

$$A_u \cdot \tilde{G}_u(t) = A_u \cdot 1 \quad (2.32)$$

In einem Zinkblende-Gitter liegt diese Situation vor, wenn die Sonde substitutionell auf einem Gitterplatz eingebaut ist und seine Umgebung im Abstand mehrerer Gitterkonstanten ungestört ist oder wenn es auf dem sogenannten Tetraederplatz, d.h. im Zentrum der Einheitszelle des fcc-Untergitters, eingebaut ist.

- Für einen Anteil A_i von Sonden, die einem einheitlichen, statischen EFG mit einem Asymmetrieparameter η unterliegen, lautet die Störfunktion:

$$\tilde{G}_i(t) = \sum_{n=0}^3 \sigma_n^{\text{eff}}(\eta^{(i)}) \cdot \cos(\omega_Q^{(i)}(\eta^{(i)}, V_{zz}^{(i)}) \cdot t) \quad (2.33)$$

Eine einheitliche Wechselwirkung tritt auf, wenn es sich bei der Störung z.B. um einen definierten, an eine substitutionell eingebaute Sonde angelagerten Defekt handelt. Das bedeutet, der Defekt befindet sich immer in Richtung gleich indizierter Achsen und im gleichen Abstand zur Sonde.

- Infolge von Gitterfehlern unterscheiden sich die einzelnen Umgebungen jedoch geringfügig, sodass man eine Verteilung des EFG um einen Mittelwert der Wechselwirkungsfrequenz ω_n erhält. Eine lorentzförmige Verteilung führt zu einer exponentiellen Dämpfung der Störfunktion, wobei der Dämpfungsparameter δ der relativen Größe der halben Halbwertsbreite entspricht:

$$\tilde{G}_i(t) = \sum_{n=0}^3 \sigma_n^{\text{eff}}(\eta^{(i)}) \cdot \cos(\overline{\omega_Q}^{(i)}(\eta^{(i)}, V_{zz}^{(i)}) \cdot t) \cdot \exp(-\overline{\omega_Q}^{(i)} \cdot \delta^{(i)} \cdot t) \quad (2.34)$$

Bei geringer Abweichung von der Gitterstruktur, wie z.B. bei Verunreinigungen, ist der Dämpfungsparameter klein ($\delta \approx 1-5\%$ von $\overline{\omega_Q}$). Starke uneinheitliche EFG, wie sie in der Regel in stark geschädigten Kristallen direkt nach der Implantation beobachtet werden können, führen hingegen zu einer starken Dämpfung. Die Störfunktion zeigt dann einen schnellen Abfall auf den „hard core“-Wert, der durch $\sigma_0^{\text{eff}}(\eta)$ bestimmt ist.

- Sondenkerne, welche nur einem schwachen EFG ausgesetzt sind, wie er z.B. durch weiter entfernte Gitterdefekte erzeugt wird, lassen sich beschreiben durch:

$$\tilde{G}_i(t) = \sum_{n=0}^3 \sigma_n^{\text{eff}}(\eta^{(i)}) \cdot \exp(-n \cdot \delta \cdot t) \quad (2.35)$$

In der Abbildung 2.9 sind simulierte Störfunktionen zu den voran beschriebenen SONDENSITUATIONEN dargestellt. Es ist jeweils ein axialsymmetrischer EFG angenommen worden.

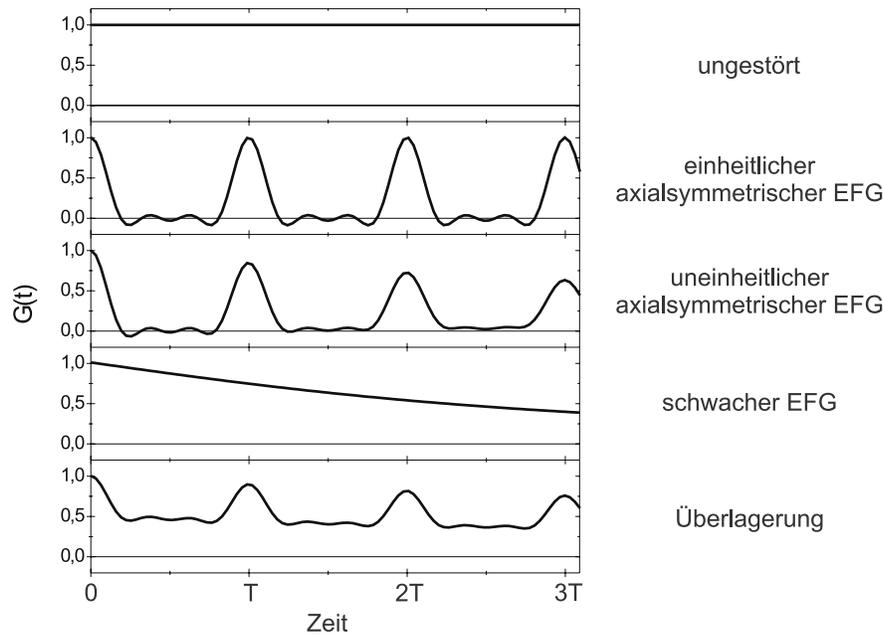


Abbildung 2.9: Verschiedene Störfunktionen für Sondenkerne in unterschiedlichen Umgebungen eines kubischen Wirtsgitters.

2.4.1.2 Apparative Anisotropiekoeffizienten

Die Szintillationsdetektoren integrieren über einen gewissen Raumwinkel. Diese Tatsache muss ebenfalls bei der Berechnung der theoretischen Störfunktion berücksichtigt werden. Es kommt zu einer Abschwächung der Anisotropiekoeffizienten A_{kl} . Die sich daraus ergebenden apparativen Anisotropiekoeffizienten A_{kl}^{app} lassen sich wie folgt berechnen:

$$A_{kl}^{app} = A_{kl} \cdot Q_{kl}$$

$$\text{mit} \quad A_{kl} = A_k(\gamma_1) \cdot A_l(\gamma_2) \quad \text{und} \quad Q_{kl} = Q_k(\gamma_1) \cdot Q_l(\gamma_2) \quad (2.36)$$

Für die numerisch berechenbaren Dämpfungskoeffizienten Q_k und Q_l gilt allgemein [YATE65]:

$$Q_k = \frac{\int_0^\alpha P_k(\cos \beta) \cdot \varepsilon(\beta) \cdot \sin \beta \cdot d\beta}{\int_0^\alpha \varepsilon(\beta) \cdot \sin \beta \cdot d\beta} \quad (2.37)$$

β bezeichnet in dieser Gleichung den Azimutalwinkel der Richtung des nachgewiesenen γ -Quants in Bezug auf die Detektorachse und $\varepsilon(\beta)$ die Nachweiswahrscheinlichkeit für diesen Eintrittswinkel. Beim Einsatz konischer Kristalle kann die Winkelabhängigkeit von ε vernachlässigt werden, wenn man davon ausgeht, dass sich die Probe am Ort der Spitze des Konus befindet. Dieses ist bei beiden verwandten Anlagen bei einem Abstand von 1cm der Fall (siehe Abb. 2.7). Die Dämpfungskoeffizienten können in diesem Fall analytisch berechnet werden [MARX95].

Bei größeren Abständen zwischen Probe und Detektor ist die Nachweiswahrscheinlichkeit nicht mehr unabhängig von der Ausbreitungsrichtung des γ -Quants. Die

Bestimmung der Q_k -Koeffizienten ist dann nicht mehr analytisch möglich, im Allgemeinen wird eine Monte-Carlo-Simulation zur Bestimmung durchgeführt. Hierbei wird für einzelne, zufallsgenerierte γ -Quanten einer festen Energie auf Basis der Wirkungsquerschnitte für Photoeffekt, Comptoneffekt und Paarbildung berechnet, ob die Quanten zum Photopeak beitragen oder nicht. Der Abschwächungskoeffizient kann dann durch Summation über die simulierten Einzelprozesse berechnet werden:

$$Q_k = \frac{\sum_{i=1}^{i_{\text{ges}}} \varepsilon_i \cdot P_1(\cos \beta)}{\sum_i^{i_{\text{ges}}} \varepsilon_i} \quad \text{mit } \varepsilon_i = \begin{cases} 1 & \text{für im Photopeak registriertes } \gamma \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.38)$$

Eine entsprechende Monte-Carlo-Simulation wurde von W. Knichel [KNIC94] für verschiedene Kristallformen und für Energien der γ - γ -Kaskaden einiger PAC-Sondenkerne durchgeführt. Die aus den simulierten Abschwächungskoeffizienten² mithilfe von Gleichung 2.36 berechneten apparativen Anisotropiekoeffizienten sind in der Abbildung 2.10 gezeigt. Angegeben sind die Werte für die γ - γ -Kaskade

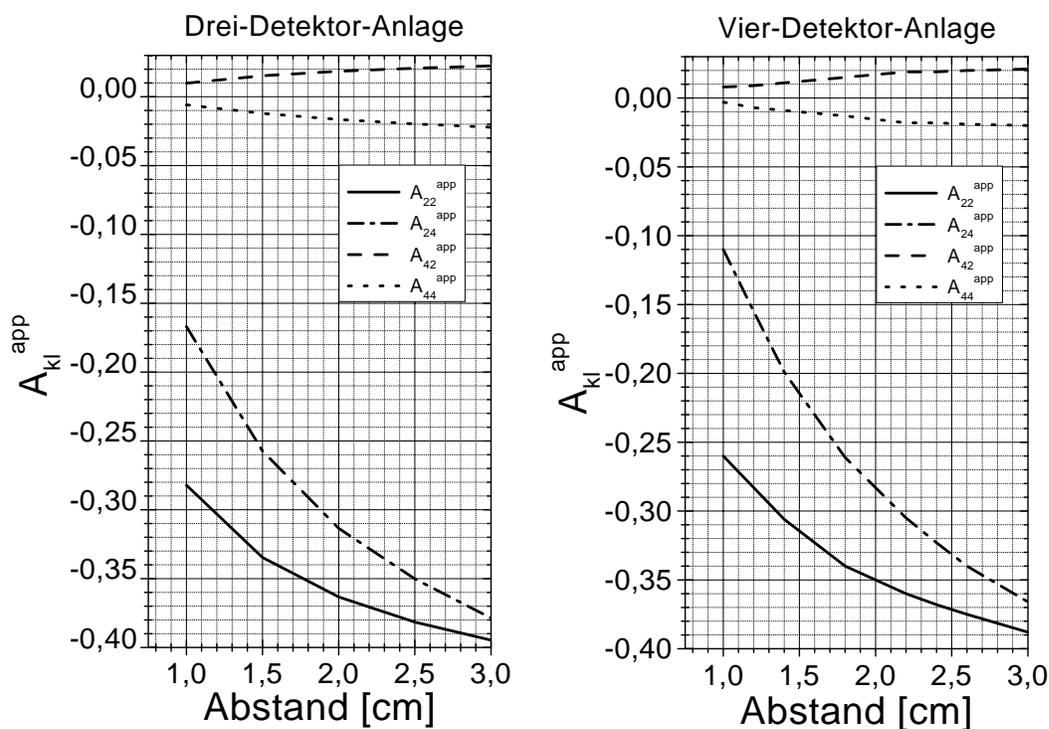


Abbildung 2.10: Apparative Anisotropiekoeffizienten A_{kl}^{app} für die γ - γ -Kaskade der ^{77}Br (^{77}Se)-Sonde ($\gamma_1=755\text{keV}$, $\gamma_2=250\text{keV}$) und die beiden verwandten PAC-Messanlagen in Abhängigkeit von dem Abstand zwischen Probe und Detektor.

des ^{77}Br (^{77}Se) für die beiden PAC-Anlagen. Aus der Grafik können die A_{kl}^{app} -Koeffizienten für verschiedene Probe-Detektor-Abstände entnommen werden. Bei der Drei-Detektor-Anlage muss dabei berücksichtigt werden, dass sich über den BaF_2 -Kristallen noch eine Messing-Umhüllung befindet. Daher muss zu den gemessenen Abständen eine Dicke von 1,5mm addiert werden.

² Eine Auflistung der Q -Werte für die Drei-Detektor-Anlage findet sich in [WEHN97]

2.4.1.3 Das Fitprogramm

Zur Anpassung der theoretischen Störfunktion, an die aus den gemessenen Koinzidenzspektren berechneten R-Wert-Spektren, wird das Programm NNfit verwendet. Das Programm ist speziell für die Analyse von PAC-Daten von N. Barradas entwickelt worden [BARR93].

Durch numerische Diagonalisierung des die betrachtete Wechselwirkung beschreibenden Hamiltonoperators (Gln. 2.7 für elektrische Wechselwirkung) wird eine theoretische R-Wert-Funktion gemäß Gleichung 2.27 für drei in einer Ebene liegende Detektoren berechnet. Diese Funktion wird dann durch Variation bestimmter Wechselwirkungsparameter nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate an die experimentellen R-Werte angepasst. Variiert werden können dabei z.B. die Quadrupolwechselwirkungsfrequenz ω_0 , der Asymmetrieparameter η und die Dämpfungskonstante δ . Es erfolgt eine vollständige Berechnung der theoretischen Winkelkorrelationsfunktion, das heißt neben G_{22} werden auch die Terme G_{24} , G_{42} und G_{44} herangezogen.

Bei der Berechnung der Winkelkorrelationsfunktion $W(\vartheta, t)$ können bis zu sieben verschiedene Umgebungen mit kombinierter Hyperfeinwechselwirkung und bis zu vier Umgebungen mit rein magnetischer Wechselwirkung angenommen werden. Die Orientierung des EFG-Tensors kann durch Angabe von drei Winkeln relativ zu drei in einer Ebene liegenden Detektoren (ein Start und zwei Stop-Detektoren) definiert werden. Die Winkel zwischen den Detektoren können frei vorgegeben werden, sodass auch PAC-Spektren, bei denen die Detektoren längs der $\langle 111 \rangle$ -Achse orientiert sind, angepasst werden können. Die im Programm anzugebenden Winkel für einen axialsymmetrischen EFG befinden sich in Anhang C. Durch die kristallografisch äquivalenten Orientierung von V_{zz} im kubischen Einkristall, müssen für die Berechnung des Gesamtspektrums für alle äquivalenten Orientierungen kombinierte Anteile (bezüglich ω_0, η, δ) angenommen werden. Dadurch verringert sich die Anzahl der möglichen annehmbaren Anteile (siehe Tabelle C.1). Das Programm erlaubt zusätzlich die Anpassung einer additiven und einer multiplikativen Konstanten an die R-Wert-Funktion. So können eventuelle Dejustierungsfehler und ungenau bestimmte experimentelle Anisotropiekoeffizienten ausgeglichen werden.

Um die endliche Zeitauflösung der Apparatur zu berücksichtigen, muss die theoretische Funktion mit der prompten Kurve $P(t)$ gefaltet werden:

$$R(t) = A_{22} \cdot \int_0^\infty P(t-t') \cdot \tilde{G}(t) \cdot dt \quad (2.39)$$

Dies geschieht im Programm unter der Annahme, dass die prompte Kurve durch eine Gaußverteilung beschrieben werden kann.

Kapitel 3

Probenpräparation

3.1 Materialien

3.1.1 InAs

Für die Untersuchungen standen drei unterschiedlich vorbehandelte **InAs**-Wafer zur Verfügung. Es wurden von der Firma Wafer Technologie erworben: 1. nicht vordotiertes Material (InAs:Un), 2. mit Schwefel vordotiertes n-Typ-Material (InAs:S) und 3. mit Zink vordotiertes p-Typ-Material (InAs:Zn). Es handelt sich dabei um Material, welches mit dem LEC-Verfahren¹ gezogen wurde. Außerdem wurde eine Probe von der Firma Crystal untersucht, zu der keine Daten mitgeliefert wurden. Dieses Material ist identisch mit dem von M. Wehner [WEHN97] untersuchten Crystal-Material.

Im Abschnitt 1.2 sind die allgemeinen physikalischen Eigenschaften von InAs angegeben (Tabelle 1.1), die spezifischen Eigenschaften der untersuchten Materialien sind in Tabelle 3.1 zusammengestellt. Dabei sind sowohl die in den mitgelieferten Datenblättern angegebenen Werte (obere Daten in der Tabelle) wie auch die durch Vierpunkt- und Hallmessungen gewonnenen Werte (siehe Kapitel 5.1) angegeben (untere Daten). Angegeben sind die Ladungsträgerkonzentration n , der spezifische Widerstand ρ , die Ladungsträgerbeweglichkeit μ und die Ätzgrubendichte EPD (etch pitch density). Die ebenfalls angegebene Lage des Fermi-niveaus relativ zur Leitungsbandkante wurde aus den Ladungsträgerkonzentrationen berechnet (AnhangA).

Der in den Datenblättern angegebene, zum Teil recht große Wertebereich der Proben beruht darauf, dass die Verteilung der durch Diffusion eingebrachten Dotieratome nicht homogen über den gesamten gezogenen Kristall ist. Zur Charakterisierung des Materials wird der erste und letzte verwendete Wafer benutzt, daher ist die

¹ LEC: Liquid-Encapsulated-Czochralski

Material	Dotieratom	n [cm ⁻³]	ρ [mΩcm]	μ [cm ² /Vs]	EPD [cm ⁻²]	E_F-E_{LB} [meV]
n-Typ InAs R4/IA/615/S	Schwefel	5,7...6,7·10 ¹⁶ 6,5(3)·10 ¹⁶	4,7...4,0 4,32(3)	2,31...2,36·10 ⁴ 2,2(1)·10 ⁴	1,4...1,0·10 ⁴	-5...0 -1(2)
InAs, Crystal	?	4,2(1)·10 ¹⁶	8,0(2)	1,88(6)·10 ⁴		-15(1)
p-Typ InAs R4/IA/669/Zn	Zink	6,2·10 ¹⁷ 3,3(1)·10 ¹⁷	45 77(1)	223 213(4)	8,2·10 ³	-284 -268(1)
InAs R4/IA/651/Un	-	2,1·10 ¹⁶ 2,006(2)·10 ¹⁶	12 13,1(1)	2,5·10 ⁴ 2,38(1)·10 ⁴	9400	-36 -36(1)

Tabelle 3.1: Zusammenstellung der Materialeigenschaften der untersuchten InAs-Materialien. Angegeben sind die freie Ladungsträgerkonzentration n , der spezifische Widerstand ρ , die Ladungsträgerbeweglichkeit μ , die Ätzgrubendichte EPD (etch pitch density) sowie die Lage des Fermi-niveaus relativ zum Leitungsband E_F-E_{LB} . Die Werte (n, ρ, μ, EPD) sind aus den Datenblättern der gekauften Materialien entnommen (obere Werte) beziehungsweise aus Hallmessungen gewonnen (untere Zeile), die Lage des Fermi-niveaus ist aus n berechnet worden (siehe Abschnitt A). Zum Crystal-Material wurde kein Datenblatt mitgeliefert, die angegebenen Daten sind Messwerte.

genaue Spezifikation des verwendeten Materials nicht bekannt. Für das InAs:S ergibt sich daraus, dass das Fermi-niveau bei höchstmöglicher Ladungsträgerdichte mit der Unterkante des Leitungsbandes zusammenfällt und somit fast ein entarteter Halbleiter vorliegt.

3.1.2 GaAs

Für die im Kapitel 5.2 beschriebenen DLTS-Messungen (Deep Level Transient Spectroscopy) stand epitaktisches GaAs-Material zur Verfügung. Auf hoch dotiertem² GaAs-Substratmaterial wurden mittels Molecular Beam Epitaxy (MBE) am Institut für Festkörperphysik der Universität Jena bei 630°C 0,7μm dicke Schichten aufgewachsen. Die Dotierung der Epi-Schichten erfolgte für das n-Typ-Material mit Si und im Fall des p-Typ-Materials mit Be. In beiden Fällen liegt die Ladungsträgerkonzentration bei 8·10¹⁶ cm⁻³.

Bei dem für die Radiotracer-Messungen eingesetzten GaAs (Kapitel 6.2) handelt es sich um semiisolierendes-GaAs-LEC-Material der Firma FCM mit der Nr. 41498. Es ist nicht dotiert und weist einen spezifischen Widerstand von $\rho=1,0-1,7\cdot 10^{18}\Omega\text{cm}$ bei 22°C auf. Die Ladungsträgerbeweglichkeit μ beträgt 6100-6810cm/Vs. Die Ätzgrubendichte wird mit 39000-49300cm⁻² angegeben.

² Sowohl beim n- wie auch beim p-dotierten Material war die Ladungsträgerkonzentration größer als 1·10¹⁸cm⁻³.

3.2 α -Bestrahlung

Eine recht einfache Möglichkeit zur Einbringung des PAC-Sondenkerns ^{77}Br (^{77}Se) in arsenhaltige III-V-Halbleiter bietet die Bestrahlung mit α -Strahlen, die am Hochstromplatz des Bonner Isochronzyklotrons durchgeführt werden kann. Man bedient sich dabei der $^{75}\text{As}(\alpha,2n)^{77}\text{Br}$ -Kernreaktion, wobei aus dem zu 100% im natürlichen Arsen enthaltenen ^{75}As das gewünschte ^{77}Br (^{77}Se) erzeugt wird.

Die Bestrahlung erfolgt mit einer Energie von 33MeV. In Abbildung 3.1 ist der Wirkungsquerschnitt der Reaktion aufgezeichnet. Man erkennt, dass die gewählten

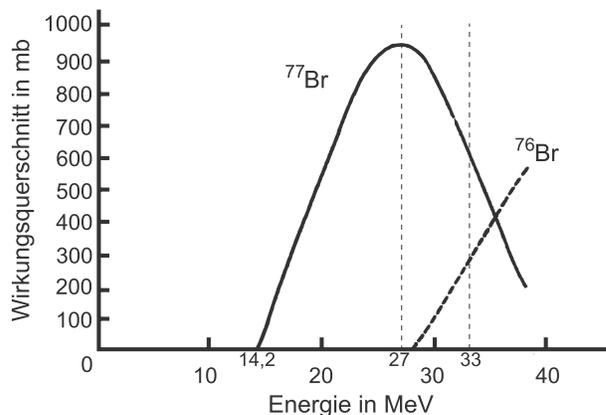


Abbildung 3.1: Anregungskurven der Reaktionen $^{75}\text{As}(\alpha,2n)^{77}\text{Br}$ und $^{75}\text{As}(\alpha,3n)^{76}\text{Br}$ aus [NOZA78].

33MeV nicht den gesamten Wirkungsquerschnitt einschließen. Es wird jedoch darauf verzichtet, eine höhere Strahlenergie zu verwenden, um die bei höheren Energien dominante $^{75}\text{As}(\alpha,3n)^{76}\text{Br}$ -Reaktion zu unterdrücken. ^{76}Br hat eine Halbwertszeit von $t_{1/2}=16,0\text{h}$ und emittiert hochenergetische β^+ -Strahlung ($E_{\text{beta}}^{\text{max}}=3,9\text{MeV}$). Daher ist es von Interesse, nur einen geringen Anteil dieses Br-Isotops zu erzeugen. Bei den üblichen Bestrahlungsbedingungen liegt das Verhältnis von $^{77}\text{Br} : ^{76}\text{Br}$ bei etwa 5:1. Im Laufe einer vierstündigen α -Bestrahlung wird etwa 5MBq ^{77}Br erzeugt. Eine Liste aller bei der Bestrahlung von InAs entstehenden Isotope, mit einer Halbwertszeit von mehr als einer Stunde, ist in der Tabelle 3.2 aufgeführt.

Die Bestrahlung der Proben erfolgte normalerweise immer mit 300nA, um eine Zerstörung des Kristalls zu vermeiden. Ein Test mit einem Strahlstrom von $1\mu\text{A}$ hat ergeben, dass das Probenmaterial dann oberflächlich „verbrannt“ aussah. Durch die Erwärmung der Probe kommt es dann zum Abdampfen der leichter flüchtigen As-Komponente. Für eine „gute“ PAC-Probe, mit der eine ausgedehnte Messreihe mit genügender Statistik durchgeführt werden kann, ist eine Anzahl von etwa $1 \cdot 10^{12}$ ^{77}Br (^{77}Se)-Sonden notwendig. Dazu muss die Probe für etwa 3-4h bei 300nA bestrahlt werden. Im linken Teil der Abbildung 3.2 ist die TRIM-simulierte Energieverteilung der α -Teilchen (siehe Abschnitt 3.4) für eine Eintrittsenergie von 33MeV

Reaktion	Zerfallsart	stabiles Endprodukt	Halbwertszeit
$^{75}\text{As}(\alpha, 2n)^{77}\text{Br}$	β^+ , EC	^{77}Se	57h
$(\alpha, 3n)^{76}\text{Br}$	β^+	^{76}Se	16,0h
$(\alpha, \alpha n)^{74}\text{As}$	β^+ , EC; β^-	^{74}Ge ; ^{74}Se	17,8d
$^{115}\text{In}(\alpha, n)^{118}\text{Sb}^{\text{M}}$	β^+ , EC	^{118}Sn	5h
$(\alpha, 2n)^{117}\text{Sb}$	β^+ , EC	^{117}Sn	2,8h
$(\alpha, 3n)^{116}\text{Sb}^{\text{M}}$	β^+ , EC	^{116}Sn	60min
$(\alpha, np)^{117}\text{Sn}^{\text{M}}$		^{117}Sn	13,6d

Tabelle 3.2: Bei der α -Bestrahlung von InAs auftretende Reaktionsprodukte. Aufgeführt sind alle Isotope, die eine Halbwertszeit von länger als 1h besitzen. Die kurzlebigeren Isotope sind bei Messbeginn bereits abgeklungen. Die Bestimmung der erhaltenen Produkte erfolgte durch die Aufnahme eines γ -Spektrums einer mit 300nA, 33MeV α 's bestrahlten Probe.

im InAs gezeigt. Auf der rechten Seite ist die Br-Konzentration $c(^{77}\text{Br})$ dargestellt.

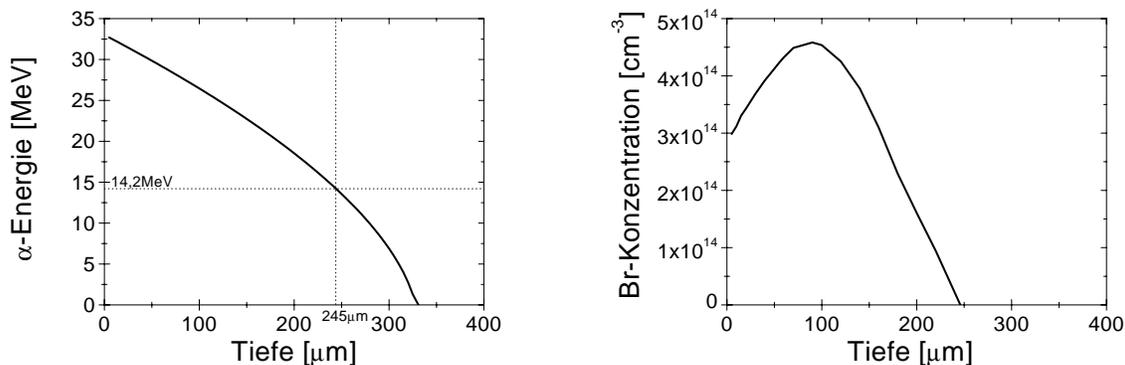


Abbildung 3.2: Links: Energie der α -Teilchen im InAs bei einer Eintrittsenergie von 33MeV. Rechts: Abschätzung des Tiefenprofils der eingebrachten ^{77}Br (^{77}Se)-Sonden bei 33MeV α -Bestrahlung, mit einem Strahlstrom von 300nA für 3,5h und einem Strahldurchmesser von 8mm.

Sie wird mithilfe der Anregungsfunktion aus Abbildung 3.1 abgeschätzt:

$$c(^{77}\text{Br}) = c(^{75}\text{As}) \cdot \sigma \cdot \Phi \cdot t \quad (3.1)$$

Dabei beträgt die ^{75}As -Konzentration $= 2 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, σ ist der aus Abbildung 3.1 zu entnehmende Wirkungsquerschnitt, Φ der Teilchenfluss des Zyklotrons und t die Bestrahlungsdauer. Der Teilchenfluss berechnet sich dabei aus:

$$\Phi = \frac{I}{A \cdot e \cdot q} \quad (3.2)$$

Dabei ist I der α -Strahlstrom des Zyklotrons, A der Strahldurchmesser, e die Elementarladung und q die Ladungszahl der Strahlteilchen (2 für α 's). Als übliche α -Bestrahlungsbedingungen werden für eine InAs-Probe 33MeV mit $I=300\text{nA}$ $t=3,5\text{h}$

bei einem Strahldurchmesser von 8mm angenommen. Im rechten Teil der Abbildung 3.2 erkennt man, dass das Tiefenprofil sehr breit bis in eine Tiefe von etwa $250\mu\text{m}$ reicht. Das Profil kann in einem Bereich bis $200\mu\text{m}$ als etwa konstant angenommen werden.

In Abbildung 3.3 ist die Tiefenabhängigkeit der bei der α -Bestrahlung erzeugten Leerstellenkonzentration gezeigt. Die Simulation erfolgte mithilfe von TRIM (Abschnitt 3.4) und gibt die Summe von direkt durch die α -Teilchen erzeugten Leerstellen und die durch In- und As-Rückstoßatome erzeugten Leerstellen an.

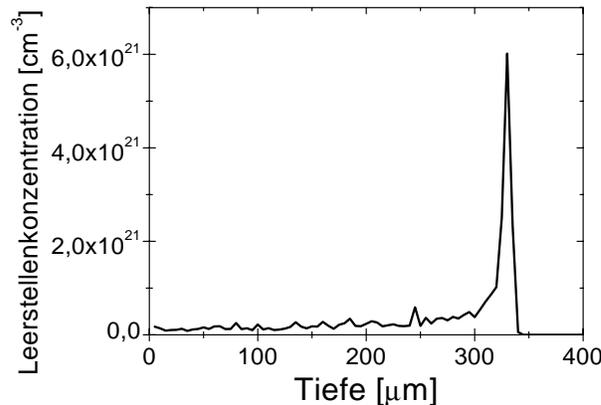


Abbildung 3.3: TRIM-Simulation der bei der α -Bestrahlung mit 33MeV in InAs-Material erzeugten Leerstellenverteilung. Es wurden die Standardbedingungen $I=300\text{nA}$, $t=3,5\text{h}$ sowie einem Strahldurchmesser von 8mm angenommen. Die Gesamtatomkonzentration im InAs beträgt $3,58 \cdot 10^{22} \text{cm}^{-3}$.

Ein Vergleich der Leerstellenverteilung (Abb. 3.3) und der Verteilung der eingebrachten ^{77}Br (^{77}Se)-Sonden (Abb. 3.2, rechts) im α -bestrahlten InAs-Material zeigt, dass der Bereich, in dem sich die Sondenkerne befinden, eine relativ homogene Leerstellenkonzentration aufweist. Denn in dem Bereich der Kernreaktion dominiert für die α -Teilchen das elektronische Bremsen, welches eine geringere Gitterschädigung bewirkt (Abschnitt 1.1.1). In dem Bereich, in dem das nukleare Bremsen überwiegt und die größte Gitterschädigung erzeugt wird, reicht die Energie der α -Teilchen nicht mehr aus, um die Kernreaktion zu bewirken.

3.3 Ionenimplantation

Bei der Ionenimplantation muss zwischen zwei Prinzipien unterschieden werden, der On-Line-Implantation und der Off-Line-Implantation. Zur Implantation des ^{77}Br wurde der On-Line-Isotopenseparator **ISOLDE** der Forschungsanlage CERN³ benutzt. Dabei werden (je nach Betriebsmodus) ^{77}Rb (Rubidium), ^{77}Kr (Krypton)

³ Centre Europeen de la Recherche Nucleaire

und ^{77}Br oder nur ^{77}Kr in das Probenmaterial implantiert. Das ^{77}Rb wandelt sich mit einer Halbwertszeit von 3,9min in ^{77}Kr um, welches wiederum mit einer Halbwertszeit von 1,24h in ^{77}Br zerfällt.

Die Produktion der radioaktiven Nuklide erfolgt durch Bombardement eines Targets mit einem gepulsten 1GeV Protonenstrahl⁴. Dabei kommt es zu Spallation, Fragmentierung oder Spaltung. Als Targetmaterial für die Produktion von ^{77}Br wird in den meisten Fällen Niob verwandt. Durch thermische Diffusion erfolgt über ein Transferrohr der Transport der Isotope aus dem Targetbehälter in die Ionenquelle. Es handelt sich dabei um eine heiße-Plasma-Quelle, die auf einem Potential von 60keV liegt und in der dann die Ionisierung erfolgt. Die typische Ausbeute kann mit $3 \cdot 10^9$ Atome/s angegeben werden.

Durch einen Analysatormagneten werden die Isotope dann nach ihrer Masse separiert. Der Ionenstrahl kann durch ein System von elektrostatischen Deflektoren und Linsen auf mehrere Strahlplätze in der Experimentierhalle verteilt werden. Für die PAC-Proben (siehe Abschnitt 4.2) erfolgte die Implantation mit einer Energie von 60keV in der sogenannten Festkörperphysikkammer, die sich in der Nähe des Strahl-Eintritts in die Experimentierhalle befindet.

Für die mit ^{77}Br implantierten DLTS-Proben (siehe Abschnitt 5.2) erfolgte die Implantation an der zum ersten Mal für diese Implantationen zur Verfügung stehenden Hochspannungsplattform mit einer Maximalenergie von 260keV.

Da von der Erzeugung des Isotops bis zur Implantation in der Probe nur wenige Millisekunden vergehen, spricht man in diesem Fall von einer On-Line-Implantation. Alle anderen implantierten Proben wurden mittels einer Off-Line-Implantations-Anlage implantiert.

- Für die Untersuchungen an stabil implantierten DLTS-Proben, mit 260keV ^{79}Br am Jennaer ROMEO-Implanter.
- Die Proben für die SIMS-Messungen (Abschnitt 6.1), mit ^{79}Br bei 150keV am Ionen-Implanter der Australian National University in Canberra.
- Die aktive Implantation für die Radiotracer-Messungen (Abschnitt 6.2), mit ^{82}Br bei 60keV am Bonner Isotopenseparator.

Prinzipiell laufen diese Separationen alle ähnlich ab. Zunächst wird das zu implantierende Material verdampft und ionisiert. Dieses geschieht in der Ionenquelle. Die gleichgeladenen Ionen werden dann beschleunigt und im Magnetfeld je nach Masse abgelenkt und durch eine Blende auf die verschiedenen Wirtsmaterialien beschleunigt.

⁴ Der Protonenstrahl wird vom Proton Synchrotron Booster (PSB) des CERN geliefert und kann einen Strahlstrom von bis zu 0,2A besitzen.

Bei der Ionenimplantation dominiert durch die geringe Implantationsenergie — im Vergleich zur α -Bestrahlung — der im Abschnitt 1.1.1 beschriebene Prozess des nuklearen Bremsens. Daher liegen die erzeugten Leerstellen alle im gleichen Tiefenbereich wie die eingebrachten Ionen. Exemplarisch dazu sind sowohl die Leerstellen- als auch die Br-Konzentrationen für eine TRIM-Simulation von 60keV Br in InAs im rechten Teil von Abbildung 3.4 dargestellt.

Die implantierten Ionen befinden sich hier nur in einem Bereich von einigen 100nm unter der Oberfläche. Die mithilfe des Simulationsprogramms TRIM bestimmten Tiefenverteilungen für ^{79}Br -Implantationen mit 60, 150 und 260keV sind im linken Teil von Abbildung 3.4 gezeigt. Da sich die Verteilungen in InAs und GaAs nur gering unterscheiden, sind nur Simulationen für InAs dargestellt.

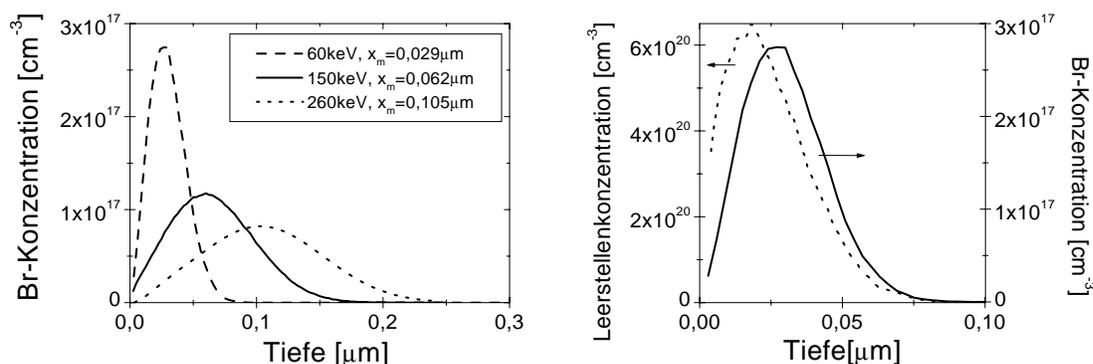


Abbildung 3.4: *Links:* TRIM-Simulationen von ^{79}Br in InAs für 60keV, 150keV und 260keV. Angegeben sind die mittleren Reichweiten x_m . *Rechts:* Leerstellen-(gepunktete Linie) und Br-Konzentration (durchgezogene Linie) simuliert mit TRIM für ^{79}Br in InAs. Die Gesamtatomkonzentration im InAs beträgt $3,58 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$.

Bei Ionenimplantationen in kristalline Materialien kann es zu Gitterführungseffekten, dem sogenannten Channeling, kommen, wenn der Einschuss entlang einer Kristallachse erfolgt. Zur Vermeidung dieser Gitterführung wird daher die Normale der Kristalloberfläche gezielt gegen die Strahlachse verkippt. Üblicherweise wird dazu ein Winkel von 7° gewählt.

3.4 Simulation von Ionenbestrahlungen, TRIM

TRIM (the **T**ransport of **I**ons in **M**atter) ist ein Programm zur Monte-Carlo-Simulation der Abbremsung und Streuung von implantierten Ionen in amorphen Materialien. Gitterführungseffekte in Kristallen finden daher keine Berücksichtigung bei der Simulation. Es werden neben der Reichweite der gestoppten Ionen auch die erzeugten Defektverteilungen und Phononen berechnet. Das Programm basiert auf dem von Biersack entwickelten Reichweiten-Algorithmus und der von Ziegler aufgestellten Theorie des Abstoppens von Ionen in Materie [BIER80], [ZIEG85].

Es findet breiten Einsatz bei der Simulation von Implantations- und Bestrahlungsexperimenten und gilt als hinreichend zuverlässig für die Berechnung der Ionenverteilung. Als weniger realistisch haben sich dagegen die errechneten Fehlstellenverteilungen erwiesen.

Die Methode basiert auf der Verfolgung einzelner Ionen auf ihrem Weg durch das Material. Dieser Weg beginnt mit einer bestimmten Energie, Position und Richtung. Das Teilchen erfährt durch Kernstöße Richtungsänderungen, wobei nur Stöße zwischen zwei Partnern berücksichtigt werden (Binary Collision Approximation BCA). Zwischen den Stößen legt das Teilchen eine gerade Strecke zurück, auf der nur elektronisches Bremsen stattfindet. Durch Stöße und elektrische Wechselwirkung verliert es so auf seinem Weg durch das Material seine gesamte Energie, erzeugt Fehlstellen und Ersetzungsstoßfolgen und bleibt schließlich stecken.

Die Energieverluste durch elektronisches und nukleares Bremsen werden als unabhängig voneinander behandelt. Das bedeutet, die Teilchen verlieren ihre Energie einerseits in diskreten Portionen durch Kernstöße und andererseits kontinuierlich durch elektrische Wechselwirkungen.

Das Programm ist über einen weiten Energiebereich von 0,1keV bis zu vielen MeV anwendbar. Eine obere Grenze ergibt sich aus der Nichtbeachtung von relativistischen Effekten. In den Materialien werden die Atome als zufällig verteilt angesehen, sodass keine Gitterstruktureffekte betrachtet werden. Ebenso werden Kernreaktionen unberücksichtigt gelassen.

Für die im Rahmen der Arbeit durchgeführten Implantationen und Bestrahlungen wurden Simulationen mit dem Programm TIRM92 durchgeführt.

3.5 Thermisches Ausheilen des Gitterschadens

Um den durch die α -Bestrahlung bzw. Implantation entstandenen Gitterschaden auszuheilen und eine substitutionelle Platzbesetzung der Fremdatome zu erreichen, müssen die Proben einer geeigneten thermischen Behandlung unterzogen werden. Bei III-V-Halbleitern besteht dabei jedoch das Problem, dass der Dampfdruck der Elemente der V. Hauptgruppe so hoch ist, dass diese bei den erforderlichen Ausheiltemperaturen aus dem Material ausdampfen.

3.5.1 Schutz der Oberfläche

Um ein Ausdampfen der leichter flüchtigen Gruppe-V-Komponente zu verhindern kann eine dünne dielektrische Schicht als Diffusionsbarriere aufgebracht werden. Dazu steht eine Rapid Thermal Annealing Anlage (kurz RTA) zur Verfügung, mit

der mittels Chemical Vapour Deposition aus der Gasphase eine Si_3N_4 -Schutzschicht, das sogenannte Cap, auf dem Probenmaterial abgeschieden werden kann [MARX90]. Die Abscheidung erfolgt bei einer Prozesstemperatur von 660°C , dabei kann die Zeitdauer zwischen 15 und 60s variieren. Die Dicke der so abgeschiedenen Schichten liegt typischerweise bei 60-90nm.

Zur Charakterisierung der Si_3N_4 -Schicht hinsichtlich Dicke und Brechungsindex⁵ steht ein Ellipsometer zur Verfügung [MEND96]. Die Schicht kann nach dem Ausheilen der Probe durch abätzen mit Flusssäure in etwa 5min entfernt werden. Dieses Ablösen ist notwendig bei den Untersuchungen nach Ionenimplantation, da dort die eingebrachten Sonden so nahe unter der Oberfläche liegen, dass sie bei einer Wärmebehandlung zur Si_3N_4 -Schicht diffundieren (siehe Abschnitt 4.2). Bei den Proben die nach α -Bestrahlung vermessen werden kann die Si_3N_4 -Schicht auf der Oberfläche belassen werden. PAC-Messungen mit Si_3N_4 und nach dem Ablösen zeigen das gleiche Ergebnis.

Bei einigen Proben wurde ein sogenanntes Proximity-CAP verwandt. Dabei handelt es sich um ein Stück des gleichen Materials wie die Probe, welches während des Ausheilvorganges mit der Oberfläche auf die zu schützende Probenoberfläche gelegt wird.

3.5.2 Thermische Behandlung

Im Kapitel 1 wurde bereits erläutert, dass es bei der Sondeneinbringung zu einer beträchtlichen Schädigung des Halbleiter-Kristallgitters kommt. Dieser Strahlenschaden beeinflusst die physikalischen und insbesondere die elektrischen Eigenschaften des Materials. Dotierungsatome können an Defekten eingefangen werden, wodurch ihre elektrische Aktivierung verhindert und die Ladungsträgerkonzentration herabgesetzt wird. Kristalldefekte wirken als Streuzentren und vermindern die Mobilität (siehe Abschnitt 5.1).

Das Ausheilen des Strahlenschadens sowie der Einbau der Dotieratome auf regulären Gitterplätzen erfordert eine geeignete Wärmebehandlung „Temperung“. Üblicherweise werden Temperaturen unterhalb des Schmelzpunktes des Substratmaterials verwendet, sodass die Rekristallisation durch Festphasenepitaxie geschieht. In der Halbleiterprozessierung hat sich dafür das Verfahren der Kurzzeit-Temperung (RTA) durchgesetzt. Bereits kurze Ausheilzeiten bei hohen Temperaturen reichen für eine maximal erreichbare elektrische Aktivierung aus.

Für das RTA-Verfahren wird eine Erhitzung der Probe innerhalb weniger Sekunden auf hohe Temperaturen gefordert. Dieses kann durch Bestrahlung der Probe mit

⁵ Der Brechungsindex charakterisiert die Zusammensetzung der Schicht und somit die Qualität. Stöchiometrisches Si_3N_4 besitzt auf GaAs einen Brechungsindex von $n=2,03$. Eine Sauerstoffkontamination zeigt sich in einer Erniedrigung des Brechungsindex.

Halogenlampen erreicht werden. Eine solche Anlage wurde für das Ausheilen der mit der SIMS-Methode untersuchten Proben angewandt (Kapitel 6.1).

Außerdem bietet die mit der Si_3N_4 -Abscheidung verknüpfte RTA-Anlage die Möglichkeit einer Graphitwiderstandsheizung [MARX90], [MÖLL92]. Dabei wird die Probe zwischen zwei Graphitstreifen eingebettet, die in massive, wassergekühlte Kupfer-Elektroden eingespannt werden. Das Tempern kann dann im Vakuum oder unter Stickstofffluss erfolgen. Die Temperaturmessung erfolgt über ein Nickelchrom-Nickel-Thermoelement, welches sich in einer Bohrung im Graphit unter der Probe befindet. Die daraus anzugebende tatsächliche Probertemperatur kann durch die Abweichung vom Messort und der Probenposition nur mit einer Unsicherheit von etwa $10\text{-}20^\circ\text{C}$ angegeben werden, die Reproduzierbarkeit des Temperaturverlaufs ist hingegen sehr gut. Die auf diese Weise durchgeführten Temperungen zeichnen sich durch einen sehr schnellen Temperaturanstieg aus. Bei einem typischen Ausheilschritt mit einer Temperatur von 750°C beträgt die Anstiegszeit etwa 7s.

Kapitel 4

PAC–Messungen an ^{77}Br (^{77}Se) in InAs

In diesem Kapitel werden die mit der Sonde ^{77}Br (^{77}Se) in verschiedenen InAs–Substratmaterialien gewonnenen PAC–Messergebnisse zusammengestellt. Die Eigenschaften der untersuchten Probenmaterialien sind in Kapitel 3.1.1 aufgeführt. Dabei sind Untersuchungen an α –bestrahlten Proben (Abschnitt 4.1.1) sowie an ionenimplantierten Proben (Abschnitt 4.2) durchgeführt worden. Eine Übersicht aller Messungen ist im Anhang D aufgeführt. Bei dem Einbringen der ^{77}Br (^{77}Se)–Sonden durch die α –Bestrahlungen bzw. die Ionenimplantation wird das Wirtsgitter geschädigt. Um diese sogenannten korrelierten Gitterschäden auszuheilen und eine definierte Platzbesetzung der Sondenkerne zu erzielen, ist eine Wärmebehandlung der Proben nach der Bestrahlung erforderlich. Insbesondere in zweikomponentigen Materialien wie InAs führt die Bestrahlung mit hochenergetischen, schweren Teilchen zur Ausbildung komplizierter Defektstrukturen, die während des Ausheilprozesses miteinander reagieren und mehrkomponentige Defektkomplexe bilden können [BOUR88]. Für alle Materialien sind Messreihen nach isochronem¹ Anlassen durchgeführt worden. Um den Einfluss des Fermienergielevels auf das Defektverhalten zu studieren, wurden die Untersuchungen an drei unterschiedlich vordotierten Materialien durchgeführt. Außerdem wurden Orientierungsmessungen und Messungen bei tiefen Temperaturen durchgeführt.

4.1 PAC–Messungen nach α –Bestrahlung

4.1.1 n-InAs

Die in diesem Abschnitt vorgestellten Ergebnisse sind durch Messungen an zwölf unterschiedlichen InAs:S–Proben gewonnen worden. Die α –Bestrahlungen erfolg-

¹ Ausheilschritte gleicher Dauer

ten alle mit einem Strahlstrom von 300nA bei einer Energie von 33MeV am Bonner Isochronzyklotron. Durch unterschiedliche Bestrahlungszeiten (45min – 4h) ergeben sich verschiedene Sonden-Dosen. Eine Liste aller Proben mit ihren unterschiedlichen Bestrahlungen und den sich daraus ergebenden Sonden-Dosen und -Konzentrationen ist in Tabelle 4.1 zusammengestellt.

Probennummer	Sondeneinbringung	Sonden-Dosis [cm ⁻²]	mittlere Sonden-Konzentration [cm ⁻³]
BIAAn_3	1h 33MeV α 's 300nA	1,3(3)·10 ¹²	6(2)·10 ¹³
BIAAn_4	0,75h 33MeV α 's 300nA	1,2(3)·10 ¹²	6(2)·10 ¹³
BIAAn_5	1,25h 33MeV α 's 300nA	1,6(2)·10 ¹²	8(2)·10 ¹³
BIAAnb_5	1,5h 33MeV α 's 300nA	1,9(3)·10 ¹²	9(3)·10 ¹³
BIAAn_9	3h 33MeV α 's 300nA	3,7(2)·10 ¹²	2(1)·10 ¹⁴
BIAAnb_9	3h 33MeV α 's 300nA	3,7(2)·10 ¹²	1,9(6)·10 ¹⁴
BIAAn_10	3h 33MeV α 's 300nA	3,7(9)·10 ¹²	1,9(6)·10 ¹⁴
BIAAn_13	3,6h 33MeV α 's 300nA	5(1)·10 ¹²	2,2(8)·10 ¹⁴
BIAAnb_13	4h 33MeV α 's 300nA	5(2)·10 ¹²	3(1)·10 ¹⁴
BIAAn_14	ISOLDE Implantation 60keV 300nC	2,0(7)·10 ¹²	4(1)·10 ¹⁷
BIAAn_18	3,5h 33MeV α 's 300nA	4(1)·10 ¹²	2,2(7)·10 ¹⁴
BIAAn_21	3h 33MeV α 's 300nA	3,6(7)·10 ¹²	1,8(7)·10 ¹⁴
BIAAn_23	4h 33MeV α 's 300nA	5(1)·10 ¹²	2,5(8)·10 ¹⁴

Tabelle 4.1: Übersicht über alle *n*-Typ-InAs-Proben. Bei der Probe BIAAn_21 handelt es sich um das in Tabelle 3.1 aufgeführte Crystal Material, alle anderen Proben entstammen dem Material der Firma Wafer Technologie. Ebenfalls ist in der Tabelle die Probe BIAAn_14 aufgeführt, die an der ISOLDE implantiert wurde. Diese Implantation erfolgte mit 60keV. Die Sonden-Dosen und Konzentrationen sind entsprechend Anhang B berechnet.

4.1.1.1 Isochrones Temperprogramm

An verschiedenen Proben wurden Messungen nach gleichen Ausheilschritten durchgeführt. Eine detaillierte Auflistung der an den verschiedenen Proben durchgeführten Ausheilschritten und Messungen ist im Anhang D angegeben. Alle Ausheilschritte wurden im Vakuum isochron für 120s durchgeführt. Bis zu einer Temperatur von 650°C erfolgte dies ohne Schutz der Oberfläche. Für Temperaturen oberhalb von 650°C wurde zuvor bei 660°C eine Si₃N₄-Schutzschicht aufgebracht (siehe Kapitel 3.5).

Abbildung 4.1 zeigt eine Auswahl der im Rahmen des Ausheilprogramms bei Raumtemperatur gemessenen PAC-Spektren. Dargestellt sind die zeitabhängigen R-Wert Spektren, deren Bildung in Kapitel 2.4.1 beschrieben ist.

Die hier gezeigten Spektren sind überwiegend an der Drei-Detektor-Anlage aufgenommen worden und nur die Spektren zwischen 200°C und 400°C sind an der Vier-Detektor-Anlage gewonnen worden. Bei allen Messungen waren die Detektoren entlang der <110>-Kristallachse der Proben ausgerichtet, die Messungen erfolgten in der sogenannten <110>-Orientierung (siehe Abbildung C.1). In die

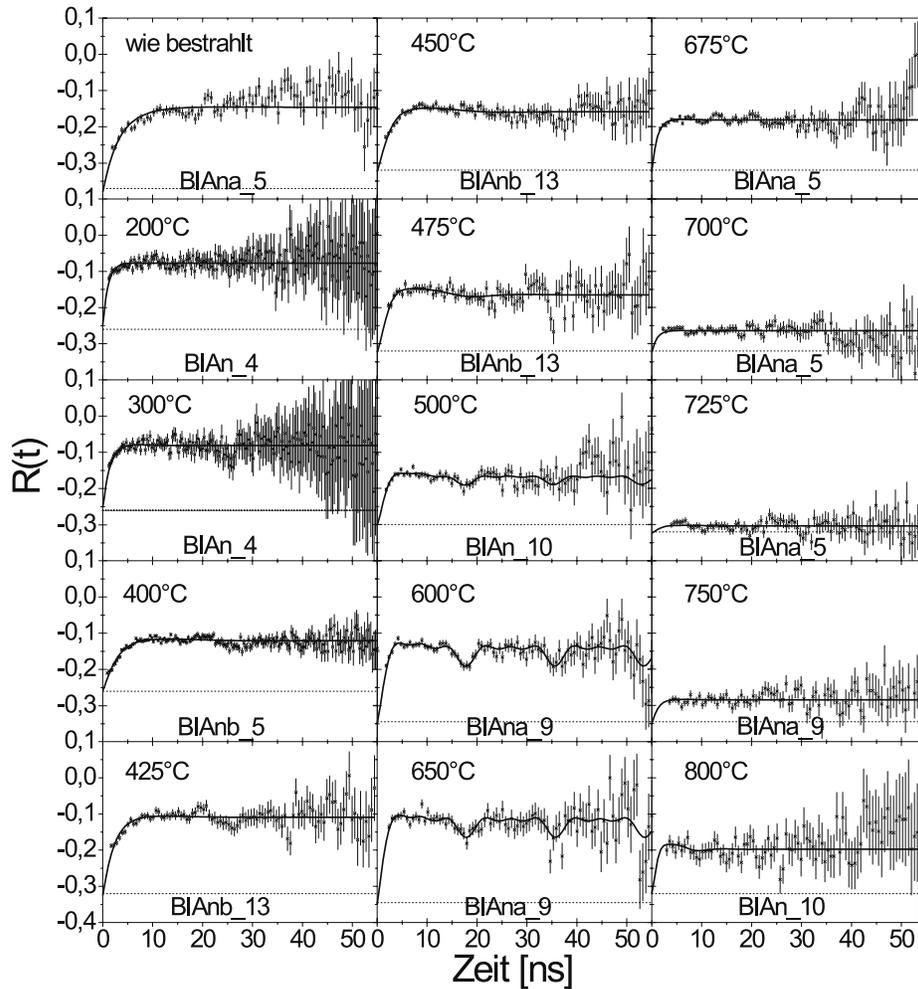


Abbildung 4.1: Bei Raumtemperatur aufgenommene PAC-Spektren von α -bestrahltem n -Typ-InAs in Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur T_A , die in den einzelnen Spektren eingetragen ist. Bei allen Messungen waren die Detektoren entlang der $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse orientiert. Die durchgezogenen Linien geben den Fit der Daten wieder. Da die Messungen bei unterschiedlichen Abständen zwischen Probe und Detektor durchgeführt wurden und zum Teil auf unterschiedlichen Anlagen gemessen wurden, sind in die Spektren zusätzlich die öffnungswinkelkorrigierten, apparativen-Anisotropiekoeffizienten A_{22}^{app} als gepunktete Linie eingetragen. Aufgrund der geringen Statistik bei den Messungen mit der Sonde ^{77}Br (^{77}Se), können mit einer Probe nur etwa 4 Spektren aufgenommen werden. In jedem Spektrum ist der Name der zugehörigen Probe entsprechend Tabelle 4.1 eingetragen.

Spektren ist neben den Messwerten samt Fehler ein Fit der Daten (durchgezogene Linie) eingetragen. Da die Messungen bei unterschiedlichen Abständen zwischen Probe und Detektor (10–20mm) und zum Teil auch auf unterschiedlichen Anlagen durchgeführt wurden, wurden außerdem die öffnungswinkelkorrigierten Anisotropieparameter A_{22}^{app} als gestrichelte Linien in die Spektren eingezeichnet. Die jeweiligen Ausheiltemperaturen T_A sind in die Spektren eingetragen.

T_A [°C]	A_u [%]	$A_D(\nu_{QD})$ [%]	ν_{QD} [MHz]	δ_D [%]	η_D	$A_V(\nu_{QV})$ [%]	ν_{QV} [MHz]	δ_V [%]	η_V
wie bestr.*	23,9(8)					76(2)	97(18)	170(47)	0,0(3)
200	12,1(9)					88(6)	302(31)	203(27)	0,0(2)
300	14(1)					86(6)	305(21)	140(20)	0,0(3)
400	33,4(6)					66,6(6)	186(10)	88(9)	0,0(2)
400†	55,6(6)	7,5(0,4)	378(5)	0(51)	0,00(7)	36,8(5)	405(15)	68(7)	0,0(3)
425	17,19(1)					82,6(2)	186(6)	127(6)	0,0(1)
450	36,5(8)					64(1)	237(8)	70(7)	0,0(2)
475	39(1)					61(2)	322(16)	45(7)	0,0(2)
500*	53(5)	8,3(2)	378(1)	0(79)	0,0(2)	37(4)	389(4)	52(2)	0,0(6)
600*	21(9)	26(3)	376(1)	0(43)	0,00(4)	64(4)	430(33)	59(12)	0,0(3)
600‡	27,1(9)	23(2)	374,2(3)	0(32)	0,00(6)	49(1)	416(21)	36(7)	0,0(6)
650*	27,7(7)	19(3)	372(1)	0(74)	0,00(5)	48,5(5)	428(47)	62(2)	0,0(3)
675	44,9(8)					55(1)	309(25)	196(26)	0,0(2)
700	77(2)					22,8(7)	370(130)	150(60)	0,0(3)
725	92(2)					7,9(4)	370(140)	70(60)	0,0(3)
750*	77(1)					22(2)	338(49)	126(20)	0,0(3)
800	52(2)					48(2)	654(138)	43(22)	0,0(8)

* Ergebnisse von Proben, die unter gleichen Bedingungen produziert wurden, sind gewichtet gemittelt.

† Probe BIAN_4 (siehe Tab.4.1) war nur 45min bei 300nA 33MeV α 's bestrahlt worden.

‡ Ergebnisse aus den Orientierungsmessungen

Tabelle 4.2: Ergebnisse des isochronen Ausheilprogramms in α -bestrahltem n-Typ-InAs. Detaillierte Erläuterungen sind im Text enthalten.

In Tabelle 4.2 sind die Messergebnisse zusammengetragen und in Abbildung 4.2 grafisch dargestellt. Dabei sind die sich ergebenden Werte bei den Ausheiltemperaturen, bei denen verschiedene Proben gleicher Präparationsbedingungen vermessen wurden, gewichtet gemittelt worden. Die Werte, bei denen mehrere Proben zum Ergebnis beitragen, sind durch ein * in der Tabelle gekennzeichnet. Die anderen in der Tabelle angegebenen Fehler geben die dem Fitprogramm entnommenen Fehler wieder. Bei den Fehlern ist kein systematischer Fehler berücksichtigt, der sich durch die Ungenauigkeit der eingesetzten Anisotropiekoeffizienten sowie der Probengeometrie und der Messung auf unterschiedlichen Anlagen ergibt. Eine weitergehende Betrachtung dazu befindet sich im Abschnitt E.

Maximal drei verschiedene Sondenumgebungen reichen zur Beschreibung der Daten aus. A_u bezeichnet den Anteil von Sondenatomen, die keinen EFG erfahren und sich in einer ungestörten Umgebung befinden. Neben einem einheitlichen Anteil A_D mit $\nu_{QD} = 374(1)$ MHz ($\eta_D = 0, \delta_D = 0$) und der Orientierung des EFG entlang $\langle 111 \rangle$ wurde eine EFG-Verteilung A_V mit freier mittlerer Quadrupolkopplungskonstante ν_{QV} und Dämpfungskonstante δ_V vorgegeben. Für deren Asymmetrieparameter ergab sich $\eta_V = 0$.

Nach der Bestrahlung befindet sich der größte Teil der Sondenatome in einer durch den Strahlenschaden gestörten Umgebung (Verteilung um $\nu_{QV} = 97$ MHz). Dies entspricht der gleichen Verteilung, wie sie bei stärker n-dotiertem InAs von M. Wehner [WEHN97] nach äquivalenter Bestrahlung beobachtet wurde ($A_u = 29,7(0,1)\%$, $A_V = 70,3(3,8)\%$, $\nu_{QV} = 97,2(4,5)$ MHz, $\delta_V = 108(10)\%$, $\eta_V = 0$). Ein Anteil von

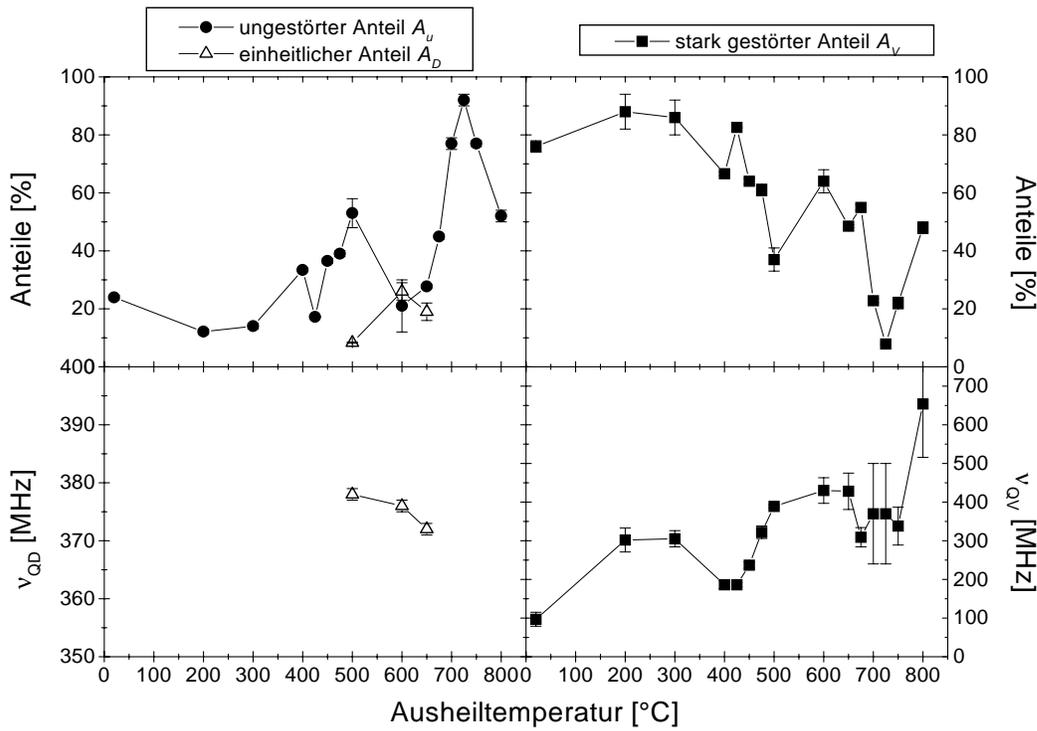


Abbildung 4.2: Grafische Darstellung der Messergebnisse nach α -Bestrahlung und isochronem Ausheilen in n -Typ-InAs aus Tabelle 4.2. Im linken Teil ist die Verteilung der Anteile A_u , A_D und deren Quadrupolkonstanten gezeigt. Der rechte Teil gibt eine analoge Darstellung für den stark gestörten Anteil A_V . Der Asymmetrieparameter η ist in allen Fällen gleich 0 und nicht eingezeichnet.

etwa 24% der Sondenatome befindet sich bereits auf ungestörten kubischen Gitterplätzen. Dieser Anteil wächst mit steigender Anlasstemperatur auf Kosten des stark gestörten Anteils A_V an und hat bei 725°C sein Maximum mit 92%. Bei den Proben, die für 3–4h mit 300nA bestrahlt wurden, tritt bei 500°C der einheitliche Anteil A_D auf und bewirkt ein Absinken des ungestörten Anteils A_u . Zunächst ist ein Anteil von $A_D=8,3\%$ zu beobachten. A_D steigt bis zu einem maximalen Wert von 26% nach Ausheilen bei 600°C an und ist bei Temperaturen oberhalb von 650°C völlig verschwunden. Die Orientierung des diesen Anteil erzeugenden EFG ist in Orientierungsmessungen zu $\langle 111 \rangle$ bestimmt worden (siehe Abschnitt 4.1.1.2). Bei einer Ausheiltemperatur ab 750°C sinkt der Anteil der Atome, die sich in einer ungestörten Umgebung befinden. Das deutet darauf hin, dass nach dem Ausheilen der Strahlenschäden eine neue Schädigung entsteht, die auf die Temperaturbehandlung zurückzuführen ist. Dies ist damit im Einklang, dass die Oberfläche der Proben bei Temperaturen ab 800°C nicht mehr unversehrt aussieht, es ist eine deutliche Schädigung an der Oberfläche zu erkennen. Die Si_3N_4 -Schutzschicht kann hier die Oberfläche wahrscheinlich nicht mehr genügend gegen ein Abdampfen der leichter flüchtigen Gruppe-V-Komponente Arsen schützen.

An der Probe des Crystal-Materials, welches nach den Charakterisierungs-Messungen n-Typ-Charakter aufweist, wurde eine Messung mit einer Si_3N_4 -Schutzschicht nach Ausheilen bei 750°C für 120s durchgeführt. Es ergibt sich dabei in guter Übereinstimmung mit dem in Tabelle 4.2 gezeigten Ergebnis für das Wafer-Technologie Material: $A_u=81(2)\%$, $A_v=19,2(0,7)\%$, $\nu_{QV}=398(165)\text{MHz}$, $\delta_v=119(280)\%$ und $\eta_v=0(0,8)$. Am gleichen Material wurden von M. Wehner [WEHN97] Messungen bis zu einer Temperatur von 650°C durchgeführt. Dabei konnte ebenfalls ein einheitlicher Anteil beobachtet werden mit $A_D=23(3)\%$ und $\nu_{QD}=369(4)\text{MHz}$. Damit zeigt dieses Material ebenfalls das Verhalten eines auftretenden kristallinen Anteils, der dann bei höheren Temperaturen wieder verschwindet und ein fast ungestörtes Spektrum zurücklässt.

4.1.1.2 Orientierungsmessungen

Da der beobachtete einheitliche Anteil A_D in den Proben, die bei 600°C ausgeheilt wurden, am größten ist, wurden an einer solchen Probe Orientierungsmessungen zur Bestimmung der Ausrichtung des entsprechenden EFG durchgeführt. Die Probe wurde dabei so eingebaut, dass jeweils die $\langle 110 \rangle$ -, die $\langle 100 \rangle$ - und die $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse auf die Detektoren gerichtet waren. Der Abstand zwischen Probe und Detektor betrug 24,5mm ($\langle 110 \rangle$, $\langle 100 \rangle$) bzw. 25,5mm ($\langle 111 \rangle$), entsprechend sind die apparativen Anisotropiekoeffizienten $A_{22}^{\text{app}} = -0,380$ bzw. $-0,383$. Die genaue Probengeometrie ist in Abbildung C.1 gezeigt. Die bei Messungen an der Probe BIAN.18 erhaltenen Spektren sind in Abbildung 4.3 gezeigt.

Detektor-Orientierung entlang:

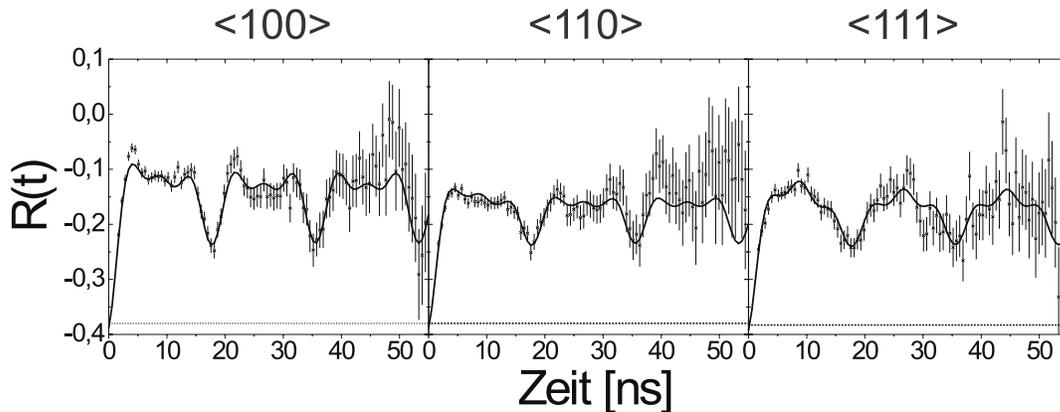


Abbildung 4.3: PAC-Orientierungsmessungen an α -bestrahltem InAs:S nach Ausheilen bei 600°C für 120s. Die Orientierung der Probe bezogen auf die Detektoren ist in der Abbildung angegeben.

Ein Vergleich mit den im Anhang angegebenen Verläufen der theoretischen R-Wert-Funktionen für unterschiedliche Detektorgeometrien und Orientierungen der Hauptkomponente V_{ZZ} in Abbildung C.2 zeigt, dass es sich um einen EFG in

$\langle 111 \rangle$ -Orientierung handeln muss (Siehe die dritte Zeile in der Abbildung C.2). Dies bestätigen auch die in die Spektren eingezeichneten Fitfunktionen. Sie sind ein gewichtetes Mittel aus den Einzelfits aller Spektren, in welchen lediglich die Winkel Θ und Φ entsprechend der Messgeometrie (siehe Tabelle C.1) eingesetzt sind. Wie in Abbildung 4.3 zu erkennen ist, werden die Messdaten auf diese Weise sehr gut beschrieben. Die Anpassungsergebnisse sind ebenfalls in der Tabelle 4.2 eingetragen.

4.1.1.3 Messungen bei tiefen Temperaturen

Außer bei Raumtemperatur wurden auch Messungen bei tiefen Temperaturen (bis zu 20K) durchgeführt. Die dabei vermessene Probe BIAN_23 wurde zunächst für 120s bei 750°C nach Aufbringen einer Si_3N_4 -Schutzschicht getempert. Der Einbau der Probe erfolgte auch hier in $\langle 111 \rangle$ -Orientierung in einem in Abbildung 4.4 schematisch gezeigten Kupferhalter. Um den Wärmekontakt zwischen Probe und

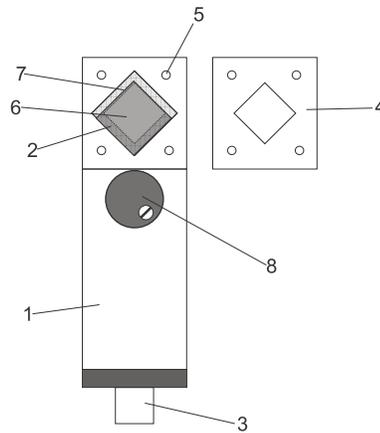


Abbildung 4.4: Probenhalter für die Messungen bei tiefen Temperaturen bestehend aus: (1) Halter aus Kupfer, (2) Einfräsung zur Probenauflage, (3) Schraubgewinde für die Montage am Kühlfinger, (4) anzuschraubende Gegenplatte (5) Gewindelöcher für die Befestigung der Gegenplatte, (6) Öffnung für die γ -Strahlung, (7) Probe, (8) Temperatormessdiode.

Halter zu verbessern, wird die Probe bei den Messungen in Aluminiumfolie eingeschlagen. Die Temperaturmessung erfolgte über eine Messdiode (8) der Firma CryoVac. Wie in der Skizze zu sehen ist, wurde die Diode so nah wie möglich zu der Probe an den Halter angeschraubt und liefert die Möglichkeit, eine genauere Temperaturmessung durchzuführen, als mit der Steuermessdiode des Displexes, die sich weiter entfernt am Ende des Kühlkopfes befindet. Die mit der Diode gemessene Temperatur wird als Proben temperatur angenommen. Um das Vakuumsystem des Displexes abzuschließen, wird über den Probenhalter eine Plexiglashaube gestülpt, die mit einer Dichtfläche versehen ist. Die Wärmestrahlung aus dem Raum auf die Probe wird verringert, indem innerhalb der Haube noch eine Aluminiumhaube um

den Probenhalter gelegt wird. Während der Messungen wird die Messtemperatur der Diode mit einem x-y-Schreiber aufgezeichnet. Die Stabilität der Messtemperatur beträgt $\pm 1\text{K}$. Die Messtemperatur wurde von der Raumtemperatur (RT) bis auf 20K verringert, anschließend wurden beim Erwärmen noch weitere Messpunkte aufgenommen. Die gewonnenen PAC-Spektren zeigt Abbildung 4.5.

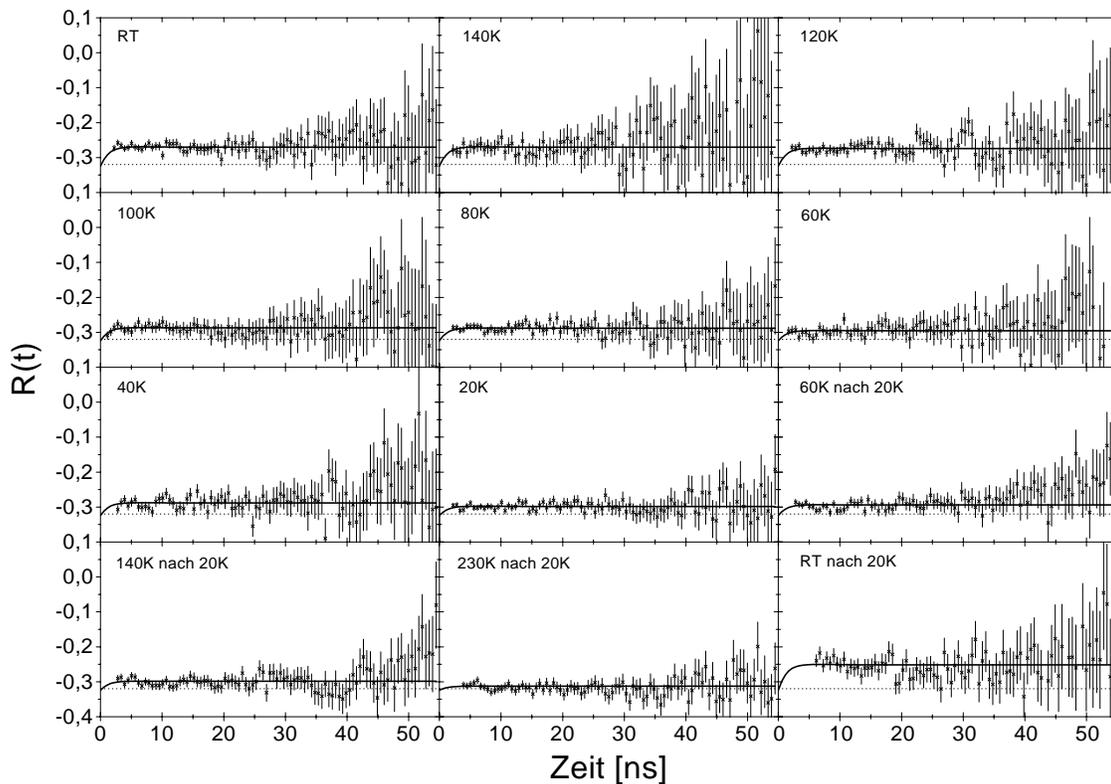


Abbildung 4.5: PAC-Spektren der Messungen bei den in den Spektren eingetragenen tiefen Temperaturen an α -bestrahltem und für 120s bei 750°C ausgeheiltem InAs:S. Die eingetragenen durchgezogenen Linien kennzeichnen den Fit an die Daten.

Man erkennt, dass sich der größte Anteil A_u der Sondenatome in einer ungestörten Umgebung befinden. Für den Fit der Messdaten wurde zusätzlich ein gestörter Anteil A_V zugelassen, dessen weitere Parameter mit $\nu_{QV}=338\text{MHz}$, $\delta_V=126\%$ und $\eta_V=0$ auf den Werten, die aus dem isochronen Temperprogramm gewonnen wurden (siehe Tabelle 4.2), festgehalten wurden. Als freie Parameter bleiben somit nur A_u und A_V , die über den Temperaturbereich nur geringe Änderungen zeigen (Abbildung 4.6).

Das Ziel dieser Messreihe war es, festzustellen, ob durch eine temperaturbedingte Verschiebung des Fermi-niveaus eine Änderung der Anteile auftritt. Bei keiner Messtemperatur wurde ein periodischer Anteil beobachtet. Leichte Schwankungen der Anteile A_u und A_V , wie sie in den Abbildungen 4.5 und 4.6 zu erkennen sind,

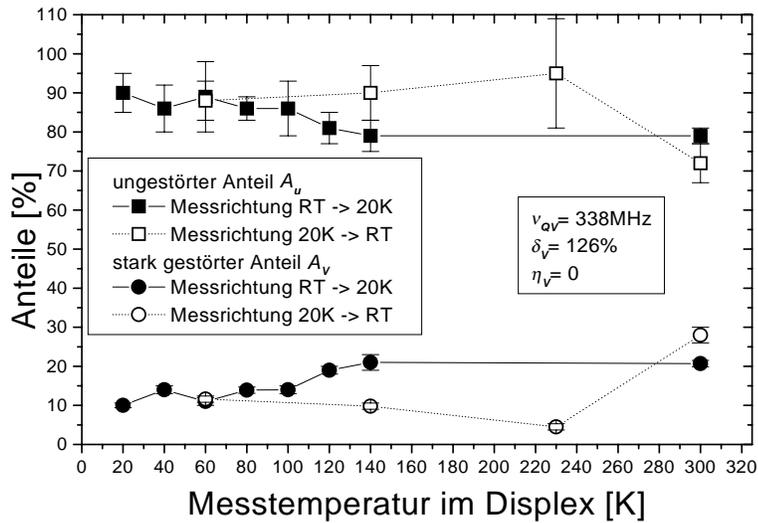


Abbildung 4.6: Verteilung der Anteile aus den bei tiefen Temperaturen aufgenommenen PAC-Messungen an α -bestrahltem InAs:S.

können auf kleine Veränderungen der Probenposition aufgrund von Vibrationen des Kaltkopfes zurückgeführt werden. Eine Reduktion dieser Vibrationen führte zu konstanteren Werten in den Messungen ab 80K.

Aufgrund dieser Messung kann man zum einen ausschließen, dass eine durch Abkühlung erzielte Verschiebung des Fermi-niveaus Einfluss auf die lokale Umgebung der Sonde hat. Zum anderen kann man daraus schließen, dass es sich bei den bei Raumtemperaturmessungen auftretenden ungestörten Anteilen A_u nicht um einen durch einen dynamischen Prozess hervorgerufenen Effekt handelt. Ein ungestörter Anteil könnte bei Raumtemperatur auch dadurch auftreten, dass ein sehr schnell fluktuierender EFG im Mittel eine kubische Umgebung vortäuscht. Durch Messungen bei tiefen Temperaturen würde diese Fluktuation reduziert werden und man könnte dann eine Frequenz beobachten. Es sei noch darauf hingewiesen, dass der Anisotropieparameter im Rahmen dieser Messreihe durch den veränderten Probenhalter im Kaltkopf und die Wände der Vakuumkammer leicht reduziert wurde. Dieser Effekt ist jedoch für alle Messungen dieser Reihe gleich und da die Ergebnisse nur untereinander verglichen werden, ist er nicht weiter berücksichtigt worden.

4.1.2 p-InAs

Im Folgenden sind die Ergebnisse der Messungen an zinkdotiertem InAs dargestellt. Im Gegensatz zu den n-Typ-Proben wurde hier auch der Einfluss des α -Strahlstroms untersucht. Es wurde mit Strahlströmen von 300nA und 50nA bestrahlt, wobei die Bestrahlungszeiten so bemessen waren, dass die erzeugten Sonden-Dosen bzw. Sonden-Konzentrationen in der gleichen Größenordnung lagen. Eine Zusammenstellung aller Proben mit ihren Bestrahlungsbedingungen ist in Tabelle 4.3 angegeben.

Probennummer	Sondeneinbringung	Sonden-Dosis [cm ⁻²]	mittlere Sonden-Konzentration [cm ⁻³]
BIAp_1	10min 33MeV α 's 300nA	$2(2) \cdot 10^{11}$	$1(9) \cdot 10^{13}$
BIAp_10	3h 33MeV α 's 300nA	$3,7(6) \cdot 10^{12}$	$1,9(6) \cdot 10^{14}$
BIAp_11	3h 33MeV α 's 300nA	$3,7(7) \cdot 10^{12}$	$1,9(6) \cdot 10^{14}$
BIApa_12	4h 33MeV α 's 300nA	$5(2) \cdot 10^{12}$	$3(1) \cdot 10^{14}$
BIApb_12	4h 33MeV α 's 300nA	$5(3) \cdot 10^{12}$	$5(1) \cdot 10^{14}$
BIAp_14	ISOLDE Implantation 60keV 300nC	$2,0(8) \cdot 10^{12}$	$4(2) \cdot 10^{17}$
BIAp_19	13h 33MeV α 's 50nA	$2,5(6) \cdot 10^{12}$	$1,3(4) \cdot 10^{14}$
BIAp_20	13h 33MeV α 's 50nA	$2,5(6) \cdot 10^{12}$	$1,3(4) \cdot 10^{14}$
BIAp_21	3h 33MeV α 's 300nA	$4(1) \cdot 10^{12}$	$1,9(7) \cdot 10^{14}$

Tabelle 4.3: Übersicht über alle p -Typ-InAs-Proben. Ebenfalls in die Tabelle eingetragen ist die mit 60keV an der ISOLDE implantierte Probe BIAp_14. Die Sonden-Dosen und Konzentrationen sind entsprechend Anhang B berechnet.

4.1.2.1 Isochrones Temperprogramm

An den fünf Proben, die für 3–4h mit 300nA 33MeV α 's bestrahlt worden sind, wurden Messungen an der Drei-Detektor-Anlage durchgeführt. Der Abstand zwischen Probe und Detektor betrug dabei 13,5 – 14mm und dementsprechend $A_{22}^{app} = 0,320$ bzw 0,325. Eine Auswahl der in $\langle 110 \rangle$ -Detektorgeometrie gewonnenen R-Wert-Spektren zeigt Abbildung 4.7.

Alle Ausheilschritte wurden isochron im Vakuum für 120s in der RTA durchgeführt,

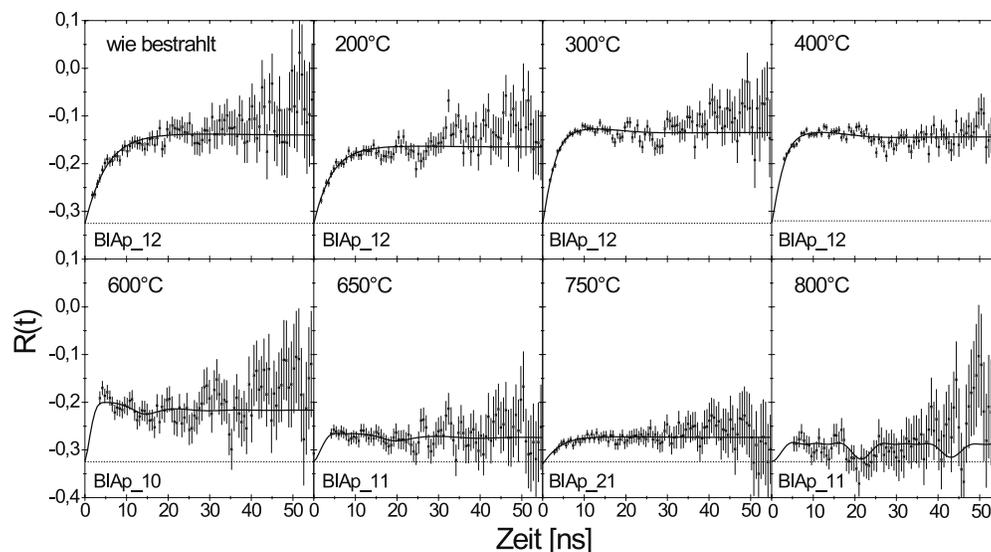


Abbildung 4.7: Bei Raumtemperatur aufgenommene PAC-Spektren von α -bestrahltem InAs:Zn nach isochronem Tempern. Die Proben wurden für 3–4h im Isochronzyklotron bei 300nA mit 33MeV α 's bestrahlt. Die Messungen erfolgten alle in $\langle 110 \rangle$ -Orientierung. Die durchgezogenen Linien geben die Anpassung an die Daten an. Als gepunktete Linie sind die A_{22}^{app} -Werte in die Spektren eingezeichnet. Ebenfalls eingetragen sind die Namen der vermessenen Proben entsprechend Tabelle 4.3.

bis zu einer Ausheiltemperatur von 650°C war dabei die Oberfläche der Proben ungeschützt. Bei den darüberliegenden Temperaturen wurde zuvor eine Si_3N_4 -Schicht aufgebracht und befand sich auch bei den Messungen auf den Proben. Die Messtemperatur war immer die Raumtemperatur. Bei allen Messungen wurden für die Beschreibung der Daten zwei Anteile angenommen: ein ungestörter Anteil A_u für die Sondenatome, die keinen EFG erfahren und ein Anteil A_V einer EFG-Verteilung mit einer mittleren Quadrupolkopplungskonstanten ν_{QV} . Eine Zusammenstellung der Ergebnisse findet sich in Tabelle 4.4 und ist in der Abbildung 4.8 grafisch dargestellt. Auch hier wurden die Ergebnisse, die aus Messungen an verschiedenen Proben gleicher Präparation gewonnen wurden, gewichtet gemittelt.

T_A [$^\circ\text{C}$]	A_u [%]	$A_V(\nu_{QV})$ [%]	ν_{QV} [MHz]	δ_V [%]	η_V
<i>3-4h 300nA 33MeV α's</i>					
wie bestr.	29(19)	71(3)	76(3)	144(10)	0,0(2)
200	38,9(5)	61,1(5)	87(7)	152(16)	0,0(2)
300*	24(2)	77(2)	160(29)	138(50)	0,0(7)
400	30,7(6)	69(1)	200(5)	77(7)	0,0(1)
600	58(3)	42(2)	432(64)	31(11)	0,1(2)
650	81(3)	19(1)	329(41)	23(12)	0,0(7)
750	78,9(5)	21,1(8)	117(13)	115(27)	0,0(1)
800	88(5)	12(1)	254(64)	30(40)	0,0(8)
<i>13h 50nA 33MeV α's</i>					
wie bestr.*	26(2)	73(2)	79(2)	182(5)	0,0(2)
400	33,3(8)	67(2)	180(5)	49(4)	0,0(2)
500	50,8(8)	49,2(8)	189(5)	60(5)	0,0(4)
600	66,2(9)	33,8(6)	143(5)	81(9)	0
650	62,9(9)	37,4(7)	212(16)	145(20)	0,0(3)
750*	90,6(6)	9,4(7)	121(2)	32(1)	0
850	81(2)	19,3(8)	208(55)	152(111)	0(1)
<i>10min 300nA 33MeV α's</i>					
750	100	additive Konstante 1% von A_{22}^{app}			

Tabelle 4.4: Ergebnisse der Fits aus den Messungen für p-Typ-InAs. Die mit * markierten Daten kennzeichnen Ergebnisse verschiedener Proben, die unter gleichen Bedingungen produziert und gewichtet gemittelt wurden.

Im Gegensatz zu den n-Typ-Proben fällt auf, dass bei diesem Temperprogramm kein einheitlicher Anteil auftritt. Direkt nach der Bestrahlung befindet sich ein Großteil ($A_V=71\%$) der Sondenkerne in einer Umgebung, die durch eine breite Verteilung von Wechselwirkungsfrequenzen um $\nu_{QV}=76\text{MHz}$ und $\delta_V=144\%$ ($\eta_V=0$) charakterisiert wird. Dieser Anteil nimmt mit zunehmender Ausheiltemperatur ab und der zweite, bereits direkt nach der Bestrahlung vorliegende, ungestörte Anteil A_u nimmt bis zu einem maximalen Wert von 88% bei $T_A=800^\circ\text{C}$ zu. Jedoch muss angemerkt werden, dass bei dieser Probe die Oberfläche nicht mehr unbeschädigt aussah, sodass auch hier nur bis zu einer Temperatur von maximal 750°C ausgeheilt werden sollte. Dort lagen etwa 80% der Sondenatome in der ungestörten Umgebung vor.

Da der Kristall nicht zu 100% ausgeheilt werden konnte (nach dem Ausheilen bei

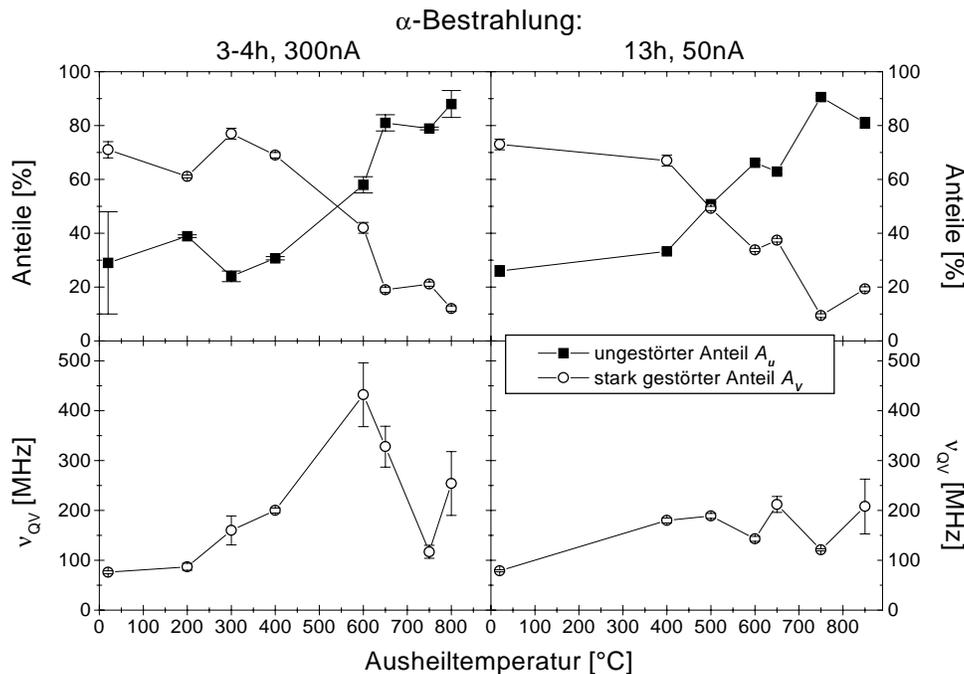


Abbildung 4.8: Grafische Darstellung der Ergebnisse der Messungen von α -bestrahltem InAs:Zn. Auf der linken Seite sind die Anteile A_u und A_V sowie die Frequenz ν_{QV} des stark gestörten Anteils für die α -Bestrahlung von 3-4h mit 300nA gezeigt. Die rechte Seite zeigt die analogen Ergebnisse für einen α -Strahlstrom von 50nA bei einer Bestrahlungsdauer von 13h.

750°C ist noch ein recht großer Anteil von 20% der Sondenatome in einer stark gestörten Umgebung vorhanden) ist weiterhin untersucht worden, ob die Parameter der α -Bestrahlung hierauf einen Einfluss haben. Daher sind zwei weitere Proben mit einem geringeren Strahlstrom von nur 50nA bestrahlt worden. Um die gleiche Sonden-Dosis zu erhalten, wurde die Bestrahlungsdauer auf 13h verlängert. Die PAC-Spektren sind in der Abbildung 4.9 zu sehen. Auch hier können alle Daten mit zwei Anteilen, analog zu den zuvor vorgestellten Messungen, angepasst werden. Die Ergebnisse befinden sich ebenfalls in der Tabelle 4.4 und in Abbildung 4.8.

Die Ergebnisse nach Ausheilen bis zu einer Temperatur von 400°C unterscheiden sich nur wenig von denen der Bestrahlung mit 300nA, dann jedoch wird der ungestörte Anteil A_u größer und bei einer Temperatur von 750°C sind 91% der Sondenatome in einer ungestörten Umgebung. Die Wahl eines geringeren Strahlstroms bei der α -Bestrahlung führt zu einem besser ausgeheilten Kristall, jedoch kann auch hier keine vollständige Ausheilung beobachtet werden. Die Messung nach $T_A=850^\circ\text{C}$ zeigt einen deutlich geringeren Anteil A_u . Wie bereits erwähnt, ist dies darauf zurückzuführen, dass die Probe optisch erkennbar deutlich an der Oberfläche geschädigt ist.

Um den Einfluss der Sonden-Konzentration abzuschätzen, wurde eine Probe nur für 10min mit einem Strom von 300nA bestrahlt. Hier, bei einer ca. 20fach geringeren Sonden-Konzentration, fanden sich nach dem Ausheilen für 120s bei 750°C 100% der

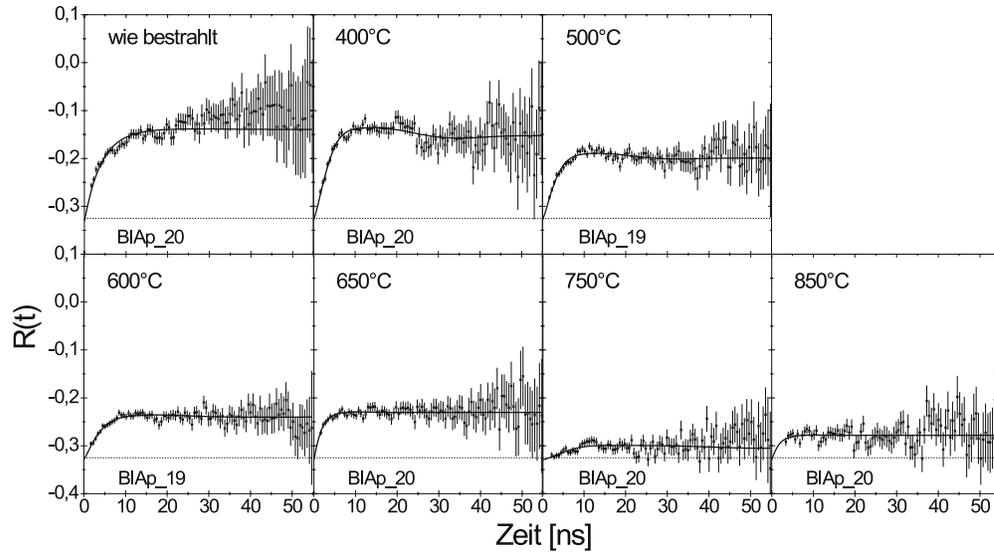


Abbildung 4.9: Bei Raumtemperatur aufgenommene PAC-Spektren von InAs:Zn nach isochronem Tempern. Die Proben wurden für 13h im Zyklotron bei 50nA mit 33MeV α 's bestrahlt. Die Messungen erfolgten alle in $\langle 110 \rangle$ -Orientierung bei einem Abstand von 14mm zwischen Probe und Detektor. Die Ausheiltemperatur T_A ist in den Spektren angegeben. Ebenfalls eingetragen sind die Namen der vermessenen Proben entsprechend Tabelle 4.3.

Sonden in einer ungestörten Umgebung. Da die so erzeugte Anzahl von $\sim 1,6 \cdot 10^{11}$ Br-Sonden für die Durchführung von ausgedehnten Messreihen nicht ausreicht, wurden normalerweise die Bestrahlungsparameter $I=300\text{nA}$ und $t=3\text{-}4\text{h}$ verwendet.

Aus den Ergebnissen dieser Messungen kann man schließen, dass bei α -bestrahlten Proben

- die höhere mittlere Defektkonzentration bei höherem Strahlstrom wahrscheinlich zur Ausbildung stabilerer Defektkomplexe führt und
- eine Reduktion der Sonden- und Defekt-Konzentration um den Faktor ~ 20 zu einer beobachtbaren Verbesserung des Ausheilergebnisses führt.

4.1.3 InAs:Un

Im Folgenden sind die Ergebnisse zusammengestellt, die an nicht vordotiertem InAs-Material gewonnen worden sind. Es sind Messungen nach isochronem Tempern durchgeführt worden, wobei die α -Bestrahlungen bis auf einen Fall für 3-4h mit 300nA bei 33MeV erfolgten. Eine Übersicht über alle hergestellten Proben ist in der Tabelle 4.5 zusammengestellt. Es wurden außerdem auch für dieses Material Orientierungsmessungen durchgeführt.

Probennummer	Sondeneinbringung	Sonden-Dosis [cm ⁻²]	mittlere Sonden-Konzentration [cm ⁻³]
BIAu_14	ISOLDE Implantation 60keV 300nC	2,0(8)·10 ¹²	4(2)·10 ¹⁷
BIAua_15	4h 33MeV α 's 300nA	5(1)·10 ¹²	2,5(9)·10 ¹⁴
BIAub_15	4h 33MeV α 's 300nA	5(1)·10 ¹²	2,5(9)·10 ¹⁴
BIAua_16	3h 33MeV α 's 300nA	4(1)·10 ¹²	1,9(7)·10 ¹⁴
BIAub_16	3h 33MeV α 's 300nA	4(1)·10 ¹²	1,9(7)·10 ¹⁴
BIAu_18	3,2h 33MeV α 's 300nA	4,0(9)·10 ¹²	2,0(7)·10 ¹⁴
BIAu_21	3h 33MeV α 's 300nA	4(1)·10 ¹²	1,9(7)·10 ¹⁴
BIAua_22	4h 33MeV α 's 300nA	3,7(8)·10 ¹²	1,9(6)·10 ¹⁴
BIAua_22	6,6h 33MeV α 's 50nA	1,3(3)·10 ¹²	7(2)·10 ¹³

Tabelle 4.5: Übersicht über alle nicht vordotierten InAs:Un-Proben. Ebenfalls in die Tabelle eingetragen ist die Probe BIAu_14, die an der ISOLDE mit 60keV implantiert worden ist. Die Sonden-Dosen und Konzentrationen sind entsprechend Anhang B berechnet.

4.1.3.1 Isochrones Temperprogramm

An den verschiedenen Proben wurden Messungen nach Ausheilschritten von 200°C bis 750°C für 120s durchgeführt. Das Ausheilen erfolgte in der RTA-Anlage unter Vakuum. Bis zu Temperaturen von einschließlich 600°C war dabei die Oberfläche der Proben ungeschützt, bei höheren Temperaturen erfolgte der Schutz der Oberfläche durch eine Si₃N₄-Schutzschicht. Eine Auswahl der bei Raumtemperatur aufgenommenen PAC-Spektren ist in der Abbildung 4.10 zu sehen. Die Spektren wurden alle an der 3-Detektor Anlage in der <110>-Orientierung und bei einem Abstand zwischen Probe und Detektor von 14mm aufgenommen.

Ähnlich wie bei dem n-Typ-Material sind auch hier drei Anteile für die Beschreibung der Daten ausreichend. Die Ergebnisse aus den Fitanpassungen sind in Abbildung 4.11 grafisch dargestellt und in Tabelle 4.6 zusammengestellt. Auch hier wurden Ergebnisse, die an Messungen unterschiedlicher Proben gleicher Probenpräparation gewonnen wurden, gewichtet gemittelt. Sie sind in der Tabelle durch ein * gekennzeichnet.

Man beobachtet zunächst einen großen Teil ($A_V=69\%$) der Sondenatome in einer durch die α -Bestrahlung stark gestörten Umgebung. Dabei liegen die Dämpfung dieses Anteils ($\delta_V=178\%$) und die Quadrupolkopplungskonstante ($\nu_{QV}=81\text{MHz}$) in der gleichen Größe wie beim n-Typ- und auch beim p-Typ-Material. Außerdem befindet sich ein weiterer Anteil ($A_u=31\%$) auch direkt nach der Bestrahlung in einer ungestörten Umgebung. A_u und A_V ändern sich bis zu einer Ausheiltemperatur von 300°C nicht. Dann jedoch sinkt der ungestörte Anteil A_u zugunsten von A_V auf 16% ab und steigt danach wieder an. Bei $T_A=550^\circ\text{C}$ tritt schließlich auch hier eine einheitliche Wechselwirkung auf, der Anteil dieser Sondenatome wird auch hier mit A_D bezeichnet. A_D tritt auf Kosten des ungestörten Anteils auf, der etwa um den gleichen Wert absinkt. Das gewichtete Mittel von ν_{QD} entspricht mit 374(2)MHz genau dem Wert, der auch beim n-Typ-Material gefunden wird. δ_D und η_D sind

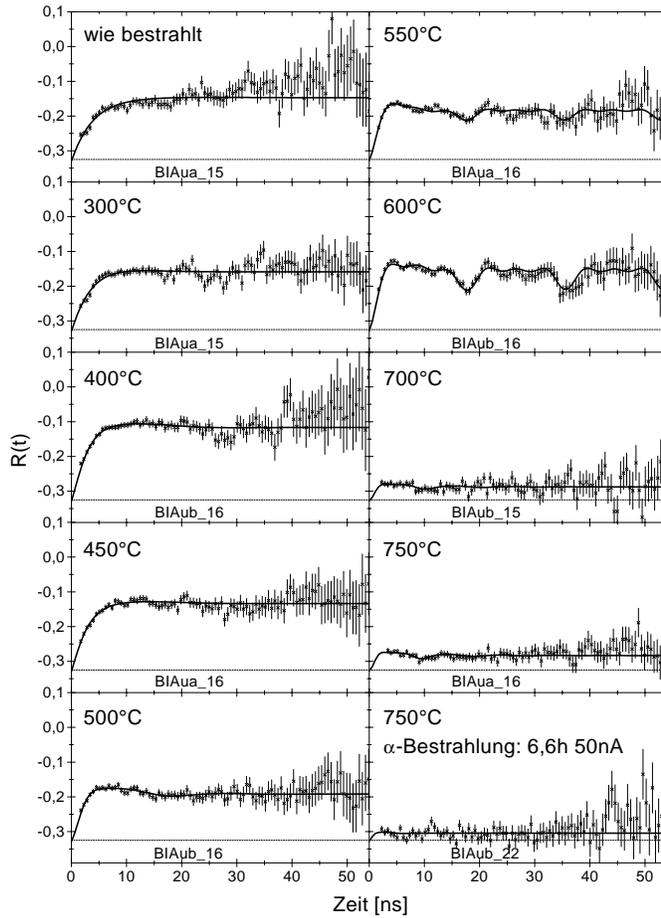


Abbildung 4.10: Bei Raumtemperatur aufgenommene PAC-Spektren von InAs: Un nach isochronem Tempern bei den in den Spektren eingetragenen Ausheiltemperaturen T_A . Alle Messungen erfolgten in $\langle 110 \rangle$ -Orientierung und bei einem Abstand von 14mm zwischen Probe und Detektor. Gestrichelt eingezeichnet ist der Anisotropieparameter A_{22}^{app} , die durchgezogene Linie gibt den Fit an. Das unten rechts eingetragene Spektrum ist nach einem Ausheilschritt bei 750°C an der Probe BIAub_22 gewonnen worden, welche mit geringererem α -Strahlstrom bestrahlt wurde (siehe Tabelle 4.5). Ebenfalls eingetragen sind die Namen der vermessenen Proben entsprechend Tabelle 4.5

auch hier gleich null.

Die im nächsten Abschnitt dargestellten Orientierungsmessungen bestätigen auch hier, dass es sich um einen elektrischen Feldgradienten in $\langle 111 \rangle$ -Orientierung handelt. Bei Ausheiltemperaturen über 700°C ist dieser einheitliche Anteil nicht mehr vorhanden und es ergibt sich ein Spektrum, welches zu einem großen Teil ungestört ist, $A_u=83\%$. Die Anteile und die weiteren Fitparameter ändern sich nicht mehr, wenn man zu 750°C übergeht. Der stark gestörte Anteil wird bei höheren Ausheiltemperaturen immer geringer, dabei liegt direkt nach der Bestrahlung eine mittlere Dämpfung von 178(15)% vor, die bei $T_A=750^\circ\text{C}$ bis auf 17% abnimmt. Gleichzeitig steigt die Quadrupolkopplungsfrequenz von 81(9)MHz bis auf 692(35)MHz an.

Bei dem in Abbildung 4.10 unten rechts gezeigten Spektrum, welches nach α -

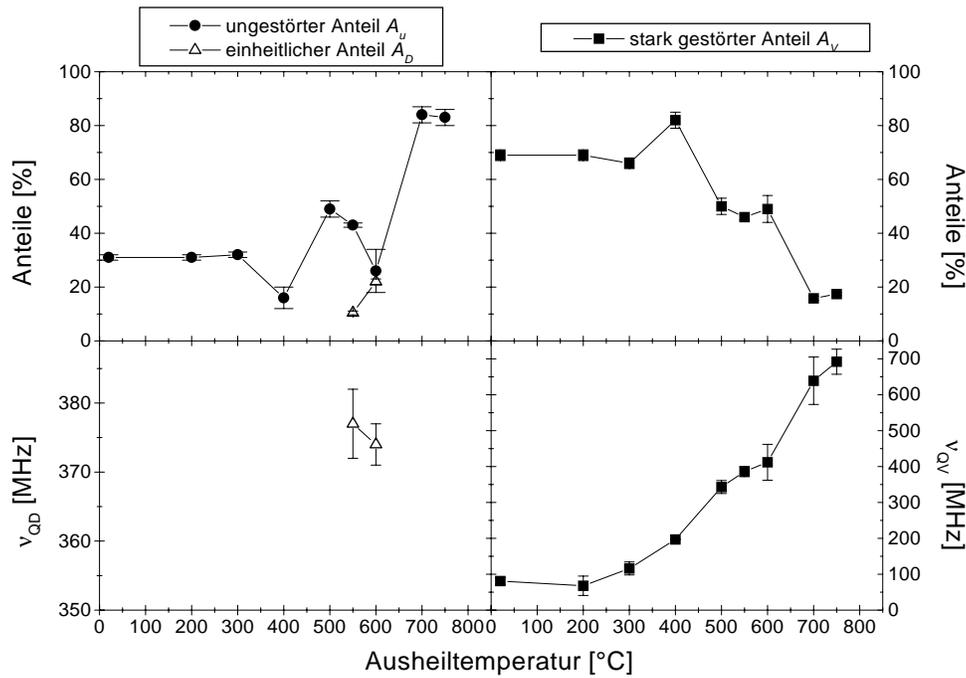


Abbildung 4.11: Grafische Darstellung der Messergebnisse von α -bestrahltem InAs: Un nach isochronem Ausheilprogramm. Im linken Teil sind die Verteilung der Anteile A_u , A_D und deren Quadrupolkonstanten gezeigt. Der rechte Teil gibt eine analoge Darstellung für den stark gestörten Anteil A_V . Der Asymmetrieparameter η ist in allen Fällen gleich 0 und nicht eingezeichnet.

T_A [°C]	A_u [%]	$A_D(\nu_{QD})$ [%]	ν_{QD} [MHz]	δ_D [%]	η_D	$A_V(\nu_{QV})$ [%]	ν_{QV} [MHz]	δ_V [%]	η_V
<i>3 - 4h 300nA 33MeV α's</i>									
wie bestr.	31(1)					69(2)	81(9)	178(15)	0,0(2)
200	31(1)					69(2)	68(27)	185(78)	0,0(3)
300	32(1)					66(2)	116(18)	122(32)	0,3(3)
400*	16(4)					82(3)	197(1)	91(20)	0,0(2)
500*	49(3)					50(3)	343(18)	34(7)	0,0(4)
550	43,0(8)	10,4(7)	377(5)	0(20)	0,0(5)	46(1)	386(14)	44(5)	0,4(1)
600*	26(8)	22(1)	374(3)	0(50)	0,00(6)	49(5)	412(50)	41(13)	0,0(3)
600‡	23(2)	24(1)	372(3)	0(42)	0,00(8)	53(1)	407(2)	39(7)	0,0(2)
700	84(3)					15,8(7)	639(66)	21(7)	0,0(4)
750*	83(3)					17,4(6)	692(35)	17(5)	0,0(5)
<i>6,6h 50nA 33MeV α's</i>									
750	91(7)					9,4(7)	1011(557)	43(14)	0,00(4)
	100	Fit mit additiver Konstante, 6,8% von A_{22}^{app} .							

*Ergebnisse von verschiedenen Proben, die unter gleichen Bedingungen produziert wurden, sind gewichtet gemittelt.

‡ Ergebnisse aus den Orientierungsmessungen.

Tabelle 4.6: Ergebnisse des isochronen Ausheilprogramms in α bestrahltem nicht vordotiertem InAs.

Bestrahlung bei einem geringeren Strahlstrom von 50nA und einer Ausheiltemperatur von 750°C aufgenommen wurde, lag die Bestrahlungsdauer bei 6,5h; dieses ergibt damit eine eingebrachte Sondenkonzentration, die unterhalb der der anderen Proben liegt (siehe dazu die Daten in der Tabelle 4.5). Es zeigt sich hier dieselbe Tendenz,

wie bei den bestrahlungsstromabhängigen Messungen am p-Typ-Material.

4.1.3.2 Orientierungsmessungen

Der Anteil A_D von Sondenatomen, die sich in einer einheitlichen Umgebung ($\nu_{QD}=374\text{MHz}$) befinden, ist nach dem Ausheilschritt bei 600°C mit 22% am größten. Daher wurde eine entsprechend behandelte Probe für die Orientierungsmessungen verwendet. Die Messungen wurden an der Drei-Detektor-Anlage bei Raumtemperatur durchgeführt. Die Detektoren waren dabei entlang der $\langle 100 \rangle$ -, $\langle 110 \rangle$ - und $\langle 111 \rangle$ -Richtung der Kristallachsen ausgerichtet (siehe Abbildung C.1). Der Abstand zwischen Probe und Detektor betrug in allen Fällen 25,5mm.

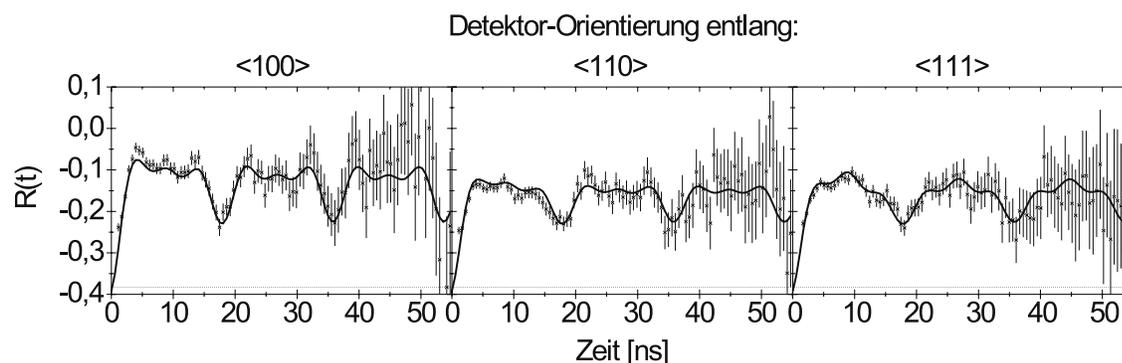


Abbildung 4.12: PAC-Orientierungsmessungen an α -bestrahltem nicht vordotiertem InAs, nach Ausheilen bei 600°C für 120s in verschiedenen Orientierungen.

In Abbildung 4.12 sind die an der Probe BIAub_22 gemessenen Spektren gezeigt. Die eingetragenen Fitfunktionen ergeben sich auch hier aus einem gewichteten Mittel der Einzelfits der einzelnen Spektren, in denen lediglich die für die Beschreibung der Orientierung notwendigen Winkel Θ und Φ geändert worden sind. Die gute Übereinstimmung des Fits mit den Daten zeigt somit auch im Fall des InAs:Un Materials, dass der am Ort der Sonde wirkende elektrische Feldgradient in $\langle 111 \rangle$ -Richtung orientiert ist (siehe Abbildung C.2). Die Ergebnisse der Orientierungsmessungen sind ebenfalls in Tabelle 4.6 eingetragen.

4.2 PAC-Messungen nach Ionenimplantation

Um einen Vergleich zwischen den Proben nach α -Bestrahlung und nach Ionenimplantation durchführen zu können, wurden an den drei unterschiedlichen InAs-Materialien Messungen nach Ionenimplantation und isochronem Tempern durchgeführt. Dazu wurden an der ISOLDE Ionen der Massenzahl 77 mit 60keV implantiert (siehe Abschnitt 3.3). Die implantierte Sonden-Dosis lag bei allen drei Proben

bei $2 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$, daraus ergibt sich eine mittlere Konzentration von $4 \cdot 10^{17} \text{cm}^{-3}$. Die Daten sind ebenfalls in den Tabellen 4.1, 4.3 und 4.5 eingetragen. Da an allen drei Materialien Untersuchungen vorgesehen waren und die Strahlzeit an der ISOLDE begrenzt ist, wurden Messungen direkt nach der Implantation, nach Ausheilen bei 600°C und nach Ausheilen bei 750°C durchgeführt. Vor dem Ausheilschritt von 750°C wurde zum Schutz der Oberfläche eine Si_3N_4 -Schutzschicht aufgebracht. Da die Tiefenverteilung der implantierten Sonden sehr nah unter der Oberfläche liegt und daher bei dem Tempersschritt von 750°C ein Teil der Sonden aus der Probe zum Si_3N_4 diffundiert, ist vor den Messungen die Schutzschicht durch Abätzen mit Flusssäure entfernt worden.

Die Ausheilschritte sind so gewählt worden, da bei den α -bestrahlten Proben nach Ausheilen bei 750°C der größte Sondenanteil in einer ausgeheilten ungestörten Umgebung vorlag. Nach den Tempersritten bei 600°C tritt bei α -bestrahlten InAs:S- und InAs:Un-Proben eine Wechselwirkung von 374MHz mit dem größten Anteil auf. Die Messungen wurden jeweils an einer Probe des entsprechenden Materials durchgeführt (InAs:S: BIA_n_14, InAs:Zn: BIA_p_14, InAs:Un: BIA_u_14). Alle Messungen sind an der Drei-Detektor-Anlage in der $\langle 110 \rangle$ -Orientierung bei einem Probe-Detektor-Abstand von 14mm durchgeführt worden. Die gewonnenen PAC-Spektren zeigen die Abbildungen 4.13 .

Die Verteilung der vorgegebenen Anteile und deren Parameter ist für alle Materialien in der Tabelle 4.7 zusammengefasst.

T_A [°C]	A_u [%]	$A_D(\nu_{QD})$ [%]	ν_{QD} [MHz]	δ_D [%]	η_D	$A_V(\nu_{QV})$ [%]	ν_{QV} [MHz]	δ_V [%]	η_V
<i>InAs:S</i>									
wie impl.	25,9(6)					79(5)	75(3)	197(7)	0,0(5)
600	44(1)	14(1)	375(5)	0(2)	0,00(5)	41(1)	372(18)	33(3)	0,38(7)
750	100								
<i>InAs:Zn</i>									
wie impl.	27,6(7)					72,2(7)	81(10)	167(12)	0,0(4)
600	49,0(8)					51(1)	365(14)	49(6)	0,0(3)
750	95(13)					5,2(8)	82(17)	12(17)	0,8(6)
<i>InAs:Un</i>									
wie impl.	28(1)					72(3)	75(3)	195(12)	0,0(2)
600	41(1)	15(1)	369(4)	0(4)	0,00(4)	44(1)	387(20)	31(5)	0,37(7)
750*	84(5)					15,7(9)	415(7)	2(2)	0,62(4)
750	100								

* Messung mit Si_3N_4 -Schutzschicht.

Tabelle 4.7: Ergebnisse des isochronen Ausheilprogramms an ionenimplantiertem InAs.

Bei allen drei Materialien stimmen die Ergebnisse mit den Untersuchungen nach α -Bestrahlung überein. Auch hier tritt bei InAs:S und InAs:Un nach 600°C ein einheitlicher Anteil mit $\nu_{QD}=371(3)\text{MHz}$ auf, welcher bei InAs:Zn nicht zu beobachten ist.

Die ionenimplantierten Kristalle können besser ausgeheilt werden. Dies zeigt der

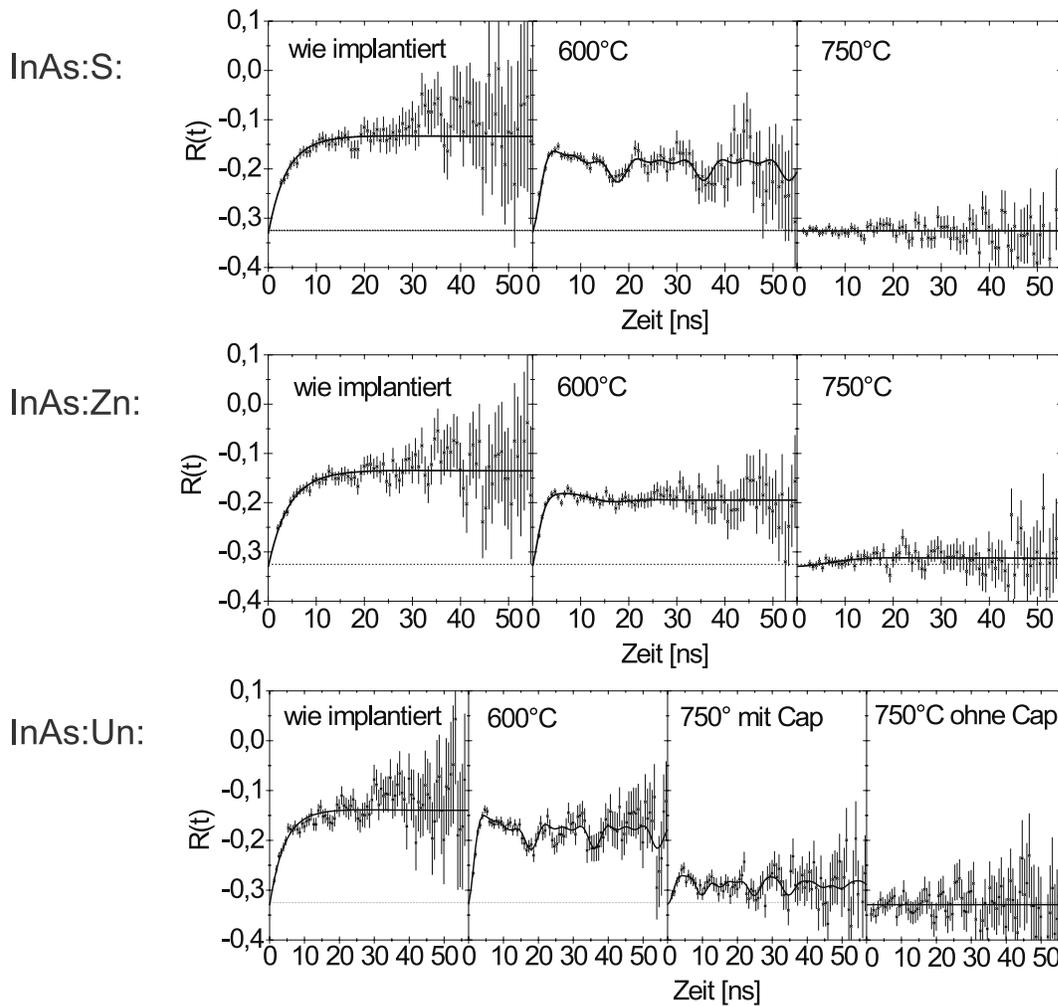


Abbildung 4.13: PAC-Spektren von $60\text{keV } ^{77}\text{Br}$ (^{77}Se) implantierten InAs-Materialien nach isochronem Tempern. Die obersten Spektren zeigen die Messungen an InAs:S, darunter die an InAs:Zn und zuunterst sind die Spektren des nicht vordotierten InAs-Materials dargestellt. Die Messungen sind bei Raumtemperatur in $\langle 110 \rangle$ -Orientierung in einem Abstand von $1,4\text{cm}$ aufgenommen worden.

hohe Anteil an Sondenatomen in einer ungestörten Umgebung nach Ausheilen bei 750°C . Die Messungen in InAs:S und InAs:Un stimmen sehr gut überein. Bei beiden Proben werden zunächst zwei Anteile vorgegeben, ein ungestörter Anteil A_u mit $25,9(0,6)$ bzw. $28(1)\%$ der Sondenatome und ein zweiter durch den Strahlenschaden hervorgerufener Anteil von Sondenatomen in einer stark gestörten Umgebung A_V , die bei beiden Proben im Rahmen der Fehler übereinstimmen. Der Anteil A_V sinkt nach Ausheilen bei 600°C auf $41(1)$ bzw. $44(1)\%$ ab und ist schließlich nach dem Ausheilen bei 750°C auf null abgesunken. Die Quadrupolkopplungskonstante ν_{QV} sowie die Dämpfung δ_V und der Asymmetrieparameter η_V stimmen auch hier im Rahmen der Fehler bei beiden Proben überein. Dabei steigt ν_{QV} von einer kleinen Verteilung mit mittlerer Dämpfung auf einen Wert in der gleichen Größe

wie der dem einheitlichen Anteil entsprechenden Wert bei kleiner Dämpfung an. Außerdem tritt bei 600°C ein Asymmetrieparameter von 0,38(0,07) bzw. 0,37(0,07) auf.

Bei den Messungen an InAs:Un wurde zusätzlich eine Messung nach dem Ausheilschritt bei 750°C durchgeführt, bei dem sich die Si₃N₄-Schutzschicht noch auf der Probe befand. Anschließend ist die Schutzschicht durch Abätzen entfernt worden. Deutlich ist zu erkennen, dass sich beim Belassen der Schutzschicht auf der Probe ein Anteil von 15,7(0,8)% der Sondenatome in einer durch die Schutzschicht oder die Grenzschrift zwischen Probe und Si₃N₄ bestimmten Umgebung befindet (Abb. 4.13). Nach Entfernen des Si₃N₄ befinden sich 100% der Sonden in einer ungestörten Umgebung. Der Kristall ist völlig ausgeheilt. Die Flusssäure, mit deren Hilfe die Si₃N₄-Schicht abgeätzt worden ist, wies anschließend eine Kontamination auf. Bei α -bestrahlten Proben tritt dieser Effekt nicht auf, da dort die Sonden in eine größere Probentiefe eingebracht werden. Bei solchen Proben, bei denen das Si₃N₄ ebenfalls abgeätzt wurde, zeigte die Flusssäure keine Kontamination. Daher wurde bei diesen Proben die Si₃N₄-Schutzschicht in der Regel bei den Messungen auf der Oberfläche belassen.

4.3 Abhängigkeit von der Sondenkonzentration

Der große Unterschied zwischen ionenimplantierten und α -bestrahlten Proben liegt in der dabei eingebrachten Sondenkonzentration pro Volumen, die durch das schmale Tiefenprofil im Falle der Implantation um einen Faktor $1 \cdot 10^3$ größer ist. Es ist bekannt, dass die höhere Sonden-Konzentration bei GaAs zu einer stärkeren Störung der Sondenatomumgebung führt, und somit der Anteil von Sondenatomen in einer einheitlichen Umgebung sinkt [WEHN97]. Daher sind hier für den Fall des InAs die erzielten Anteile in Abhängigkeit von der Sonden-Konzentration dargestellt. Das Ergebnis zeigt der obere Teil von Abbildung 4.14, außerdem ist im unteren Teil der Abbildung die Abhängigkeit der Anteile vom Strahlstrom, der bei der Sondereinbringung vorlag, dargestellt. Dabei ist im Fall der α -bestrahlten Proben der vom Isochronzyklotron gelieferte α -Teilchen-Strahlstrom angegeben (300 oder 50nA) und bei den ionenbestrahlten Proben der Strahlstrom der Masse 77 (1,4nA).

Es zeigt sich, dass die Verteilung der Anteile nicht signifikant von der Sonden-Konzentration abhängt. Der Anteil der 374MHz Wechselwirkung der bei 600°C für 120s ausgeheilten Proben auftritt, variiert nur gering mit der Konzentration. So liegen bei den ISOLDE-implantierten Proben mit einer Konzentration von $4 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ etwa 15%, bei den α -bestrahlten Proben bei $2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 24% und bei $8 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ 27% der Sondenatome in der einheitlichen Umgebung mit $\nu_{QD}=374\text{MHz}$ vor. Der ungestörte Anteil der Sondenatome nach Ausheilen der Proben bei 750°C für 120s ist jedoch nicht in dieser Weise von der Sonden-Konzentration abhängig. So zeigten

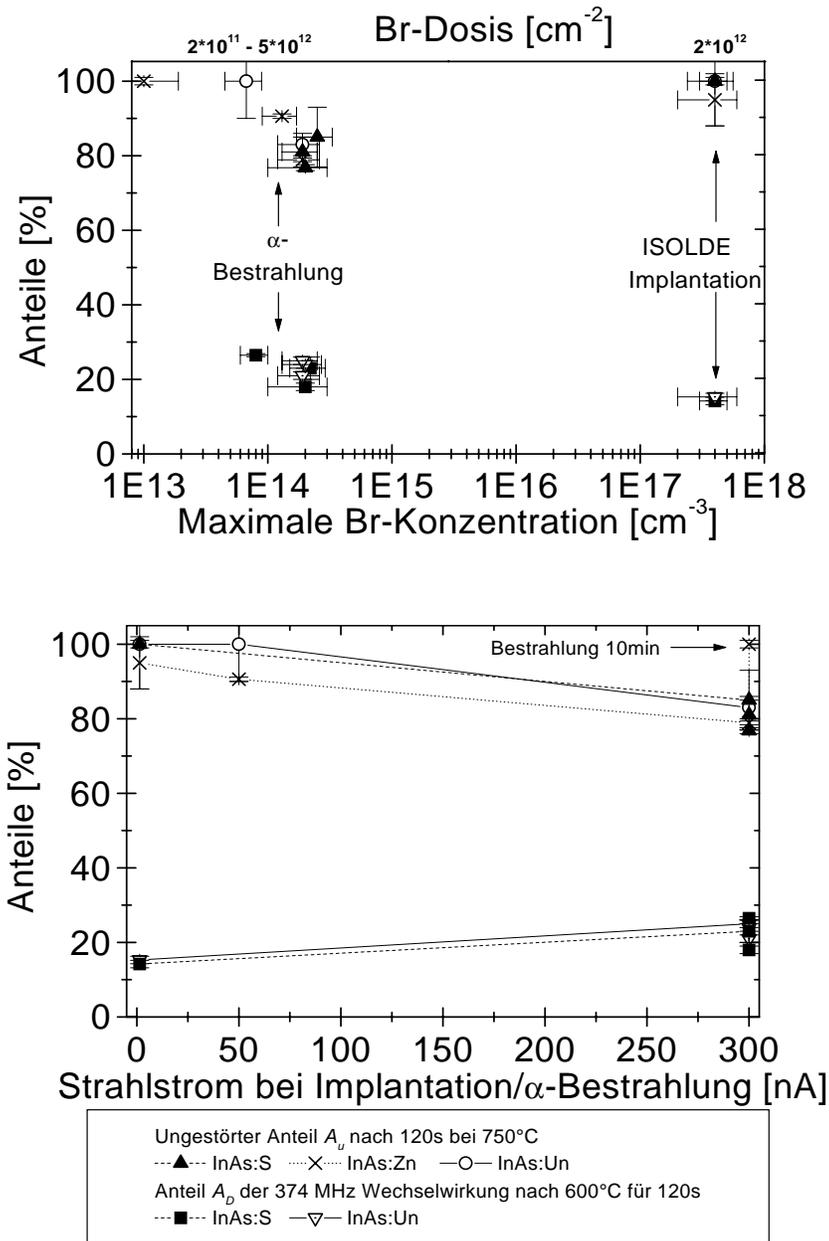


Abbildung 4.14: Verteilung des ungestörten Anteils A_u nach Ausheilen bei 750°C für 120s und des kristallinen Anteils A_D nach Ausheilen bei 600°C für 120s für alle drei InAs-Materialien. Gezeigt ist oben die Abhängigkeit von der eingebrachten Sondenkonzentration sowie von dem dabei verwandten Strahlstrom (unten). Bei den ionenimplantierten Proben ist der Strahlstrom der Masse 77 angegeben ($1,4\text{nA}$). Bei den α -bestrahlten Proben der vom Isochronzyklotron gelieferte α -Teilchen-Strahlstrom (50 oder 300nA).

sowohl die Probe mit der geringsten vermessenen Konzentration von $1 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, die nur für 10min mit 300nA α 's bestrahlt worden ist, wie auch die ISOLDE-Proben mit $4 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ einen Anteil A_u von 100% der Sondenatome in der ungestörten Umgebung. Dieser Anteil hängt, wie schon in Abschnitt 4.1.2.1 geschildert, von dem gewählten Strahlstrom beim Einbringen der Sondenatome ab. Außer der Probe, die

nur für 10min mit 300nA α 's bestrahlt wurde, liegt bei allen anderen Proben, die ebenfalls mit 300nA bestrahlt wurden, ein wesentlich geringerer Anteil an Sonden ($A_u \approx 80\%$) in einer ungestörten Umgebung vor als bei denen mit 50nA ($A_u > 90\%$) bestrahlten oder implantierten Proben ($A_u > 95\%$).

Kapitel 5

Elektrische Messungen

Im Kapitel 1.2.1 wurde der DX-Defekt vorgestellt. Dabei zeigte sich, dass der Ladungszustand des Defektes essentiell für die Ausbildung verschiedener möglicher Defektsituationen ist. Der Ladungszustand von Defekten ist von der Lage des Fermi-niveaus abhängig. Um Aussagen über das Fermi-niveau in den untersuchten Materialien machen zu können, sind daher Halleffekt- und Vierpunkt-Messungen an den drei untersuchten InAs-Materialien nach α -Bestrahlung und verschiedenen Ausheilsschritten durchgeführt worden (Abschnitt 5.1).

Zur direkten Bestimmung der Lage eines möglichen Br-Niveaus sind außerdem **Deep Level Transient Spectroscopy** (DLTS) Untersuchungen durchgeführt worden (Abschnitt 5.2). DLTS-Untersuchungen an implantierten III-V-Halbleitern stellen hohe Anforderungen an die Probenpräparation bezüglich der Präparation von Schottky- und Ohmschen-Kontakten. Durch die Implantation und anschließende Wärmebehandlung können auf der Oberfläche Veränderungen auftreten, die eine gute Kontaktierung verhindern. In der Vergangenheit wurden erste Versuche mit Br-implantierten GaAs-Proben durchgeführt, bei denen jedoch kein Br-korreliertes Niveau gefunden werden konnte [WEHN97]. Es wurden daher weitere Untersuchungen an Br-implantiertem n-Typ-GaAs-Material vorgenommen. Transmutations-Untersuchungen, mithilfe des radioaktiven ^{77}Br (^{77}Se) durchgeführt, sollten eine eindeutige Aussage bezüglich eines Br-korrelierten Effektes liefern.

Erste Kontaktierungsversuche mit InAs-Proben stellten sich als äußerst problematisch heraus. Aufgrund seiner geringen Bandlücke (0,36eV) war es nicht möglich, Kontakte auf dem Material zu präparieren, die das notwendige diodenartige Verhalten aufweisen. Die Bandverbiegung bei der Kontaktierung (vergl. Abb. 5.5) bewirkt bei dem geringen Bandabstand, dass keine Barriere mehr vorhanden ist und somit ein Ohmscher Kontakt vorliegt. Aus der Literatur sind keine DLTS-Messungen an InAs-Vollmaterial bekannt. Lediglich wenige Untersuchungen an MIS-Strukturen (Metall-Insulator-Semiconductor) sind durchgeführt worden [SALM90]. Es konnten daher keine DLTS-Untersuchungen an dem InAs-Material durchgeführt werden.

5.1 Halleffekt- und Vierpunkt-Messungen

Der Halleffekt bildet die physikalische Grundlage für eine der wichtigsten Messmethoden zur Charakterisierung von Halbleitermaterialien. Mit der Halleffekt-Messung lässt sich bei einem extrinsischen Halbleiter unmittelbar die Ladungsträgerart und -konzentration ermitteln. In Verbindung mit einer Messung des spezifischen Widerstands erhält man einen Wert für die Ladungsträgerbeweglichkeit.

Im Folgenden wird nur ein einfaches Modell für den Halleffekt angegeben und nicht auf notwendige Korrekturen durch zusätzliche temperaturabhängige Effekte eingegangen. Die Auswirkungen dieser Effekte spielen im Allgemeinen, durch geschickte Messgeometrien und Messdurchführungen, für das Messergebnis keine Rolle. Ausführliche Beschreibungen finden sich in der Literatur (z.B. [SEEG73], [BLOO92]).

In der Abbildung 5.1 ist eine einfache Anordnung zur Messung des Halleffekts gezeigt. Durch die flache, rechteckige Probe der Dicke d fließt ein Strom in x -Richtung.

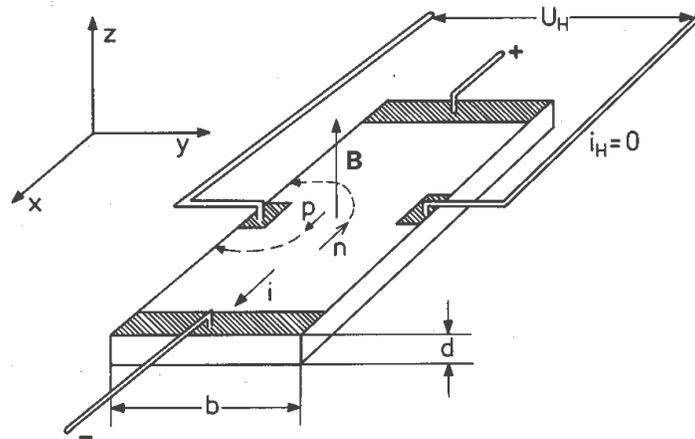


Abbildung 5.1: Einfache Anordnung zur Halleffekt-Messung nach [IBAC95]. An die flache, rechteckige Probe der Dicke d ist in x -Richtung ein Strom i angelegt. Senkrecht dazu ist in z -Richtung ein Magnetfeld B angelegt. Die Elektronen werden durch die Lorentzkraft in y -Richtung abgelenkt und die Hallspannung U_H kann gemessen werden.

Wird senkrecht zur Probenebene und zur Stromrichtung ein Magnetfeld in positiver z -Richtung angelegt, so werden die negativen Ladungsträger durch die Lorentzkraft $F_L = e \cdot v \cdot B_z$ entgegengesetzt zur y -Richtung abgelenkt. Es bildet sich ein stationärer Zustand aus, in dem die Kraft auf die Ladungsträger durch das entstandene elektrische Hallfeld entgegengesetzt gleich groß der Lorentzkraft ist. Die Ladungsträger fließen wieder ungestört in x -Richtung. Jedoch bewegen sich die Ladungsträger nun nicht mehr genau in Richtung des äußeren elektrischen Feldes, da durch das transversale Hallfeld das resultierende Feld nicht mehr parallel zur x -Achse liegt.

Der Tangens des sogenannten Hallwinkels Θ_H ist ein Maß für das Verhältnis von transversalem Hallfeld und dem von außen angelegten elektrischen Feld:

$$\tan \Theta_H = \frac{E_H}{E_x} \quad (5.1)$$

Die Größe des elektrischen Hallfeldes E_H wird durch die Stromdichte j_x und das angelegte Magnetfeld B_z bestimmt. Die Proportionalitätskonstante R_H bezeichnet man als Hallkoeffizient:

$$E_H = R_H \cdot j_x \cdot B_z \quad (5.2)$$

In praktisch messbaren Größen ausgedrückt nimmt diese Gleichung die folgende Form an:

$$R_H = \frac{V_H \cdot d}{I \cdot B_z} \quad (5.3)$$

V_H bezeichnet dabei die gemessene Hallspannung und I den von außen angelegten Strom. Die Messungen werden nach der van der Pauw-Methode [SEEG73] durchgeführt. Dabei werden Strom und Magnetfeld in den verschiedenen möglichen Polaritäten angelegt, sowie die Anschlüsse von Strommessung und angelegter Spannung vertauscht. Durch die geschickte Mittelung über die Hallspannungs-Messungen aller acht möglichen Kombinationen werden so alle größeren, durch Temperaturschwankungen auftretende Thermospannungen, eliminiert und der statistische Fehler wird verringert.

Aus dem berechneten Hallkoeffizienten R_H lässt sich direkt die Ladungsträgerkonzentration errechnen, das Vorzeichen des Koeffizienten gibt die Art der Majoritätsladungsträger an. Ist $R_H < 0$ so sind Elektronen die Majoritätsladungsträger und für die Ladungsträgerkonzentration n gilt mit der Elementarladung e :

$$R_H = -\frac{1}{n \cdot e} \quad (5.4)$$

Der untersuchte Halbleiter besitzt dann einen n-Typ-Charakter. Nimmt die Hallkonstante einen positiven Wert $R_H > 0$ an, so ist das transversale Hallfeld entgegengesetzt gerichtet und es liegt eine Löcherleitung vor. Für den untersuchten Halbleiter bedeutet dieses, dass er einen p-Typ-Charakter besitzt.

$$R_H = \frac{1}{p \cdot e} \quad (5.5)$$

Um die Ladungsträgerbeweglichkeit μ zu ermitteln, muss zusätzlich der spezifische Widerstand ρ der Probe bestimmt werden. Dieses erfolgt durch eine Vierpunkt-Messung nach van der Pauw. Auch sie setzt sich aus insgesamt acht Einzelmessungen zusammen. Strom und Spannung werden dabei nicht — wie bei den Halleffekt-Messungen — an den gegenüberliegenden Kontakten angelegt bzw. abgegriffen, sondern zwischen den benachbarten Kontakten. Die Anschlüsse der Kontakte bzw. die

Stromrichtung werden dann zyklisch vertauscht und die Mittelung über alle Messungen ergibt auch hier einen von Thermospannungen weitestgehend unbeeinflussten Wert.

$$\mu = \frac{|R_H|}{\rho} \quad (5.6)$$

Ein Teil der durchgeführten Messungen sind von Herrn M. Noack vom Forschungszentrum Jülich durchgeführt worden. Der größere Teil der Messungen wurde in Bonn durchgeführt, die dabei verwandte Messapparatur wird in [ROHR96] ausführlich beschrieben und soll hier nicht weiter dargestellt werden.

Die Kontaktierung der untersuchten InAs-Materialien erfolgte in allen Fällen auf eine recht einfache Weise. An den Ecken der Probe ist die Probenoberfläche mit Schleifpapier aufgeraut worden. Auf diese aufgerauten Stellen ist dann Leitsilber aufgebracht worden. Diese Kontakte sind dann bei etwa 100°C auf einer Heizplatte für 10min erwärmt worden. Es kommt durch das Einlegieren zu einer dünnen Schicht im InAs in dem eine erhöhte Konzentration an Silberatomen vorliegt. Sie zeigt eine lineare Strom-Spannungs-Charakteristik (Ohmsche Kontakte). Den Kontakt zur Messapparatur stellen Federspitzen her, die lediglich auf diese Leitsilberkontakte gedrückt werden.

5.1.1 Messungen

Es wurden Proben aller drei InAs-Materialien, deren Eigenschaften in Kapitel 3.1.1 aufgeführt sind, untersucht. Dabei sind sowohl Messungen an unbehandelten Proben durchgeführt worden als auch an Proben, die zur Erzeugung des PAC-Sondenkerns $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ mit 33MeV α -Teilchen bestrahlt und anschließend ausgeheilt wurden. An den meisten vermessenen Proben waren zuvor PAC-Messungen durchgeführt worden.

5.1.1.1 InAs:S

In Tabelle 5.1 findet sich eine Auflistung aller schwefeldotierten n-Typ-InAs-Proben, die untersucht worden sind.

Für alle Proben sind die Hallkonstante und der spezifische Widerstand ermittelt und daraus die Ladungsträgerdichte und die Ladungsträgerbeweglichkeit bestimmt worden. Die Ergebnisse der Messungen sind flächenspezifische Größen, die mithilfe der Dicke der Proben in volumenspezifische Werte umgerechnet worden sind. Die Zusammenstellung zeigt die Tabelle 5.2. Für die in Bonn durchgeführten Messungen wurden mindestens drei Messungen an jeder Probe durchgeführt. Die angegebenen Werte sind der Mittelwert und die Standardabweichung. Der Fehler der in Jülich durchgeführten Messungen liegt bei 5%. Außerdem sind in der Tabelle die aus dem

Probe	α -Bestrahlung 300nA 33 MeV	Wärmebehandlung	Messort
BIAAn_H	—	—	J/B
BIAAn_4	45min	200, 300, 400°C je 120s	J/B
BIAAnb_5	1,5h	400, 500°C je 120s	J/B
BIAAna_5	1,25h	600°C 120s	J
BIAAna_9	3h	600, 650, 750°C je 120s	J/B
#2	3h	600°C 120s	J/B
#3	3h	750°C 120s	J

Tabelle 5.1: Liste aller InAs:S-Proben, an denen Halleffekt-Messungen sowie Vierpunkt-Messungen durchgeführt worden sind. Angegeben sind die Bedingungen bei der α -Bestrahlung sowie die durchlaufenen Wärmebehandlungen. Die Proben BIAAna_9 und #3 wurden vor dem Tempersschritt bei 750°C mit einer Si_3N_4 -Schutzschicht versehen. Die Schicht ist anschließend wieder entfernt worden. In der Spalte Messort steht J für Jülich und B für Bonn.

Probe	Messort	Ausheiltemperatur	ρ [m Ω cm]	R_H [$\frac{\text{cm}^3}{\text{As}}$]	n [cm $^{-3}$]	μ [$\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$]
Datenblatt			4,7...4,0	—	(5,7...6,79)·10 16	23100...23600
BIAAn_H	J	—	4,3(7)	-95,85(5)	(6,5(3))·10 16	22140(1107)
BIAAn_4	B	400°C	2,54(5)	-25,0(6)	(2,49(6))·10 17	9788(150)
BIAAn_4	J	400°C	2,51(2)	-27,11(5)	(2,3(1))·10 17	1076(150)
BIAAnb_5	B	500°C	2,81(5)	-30,2(6)	(2,07(4))·10 17	10809(21)
BIAAnb_5	J	500°C	2,60(1)	-28,00(6)	(2,2(1))·10 17	10790(540)
BIAAna_5	J	600°C	3,3(5)	49,84(5)	(1,25(6))·10 17	15100(755)
#2	B	600°C	2,96(6)	-47(1)	(1,30(3))·10 17	16130(222)
#2	J	600°C	2,998(1)	-43(2)	(1,44(7))·10 17	14510(726)
BIAAna_9	B	750°C	5,2(1)	-120(2)	(5,2(1))·10 16	23189(180)
BIAAna_9	J	750°C	5,234(5)	-107(5)	(5,8(3))·10 16	20530(1027)
#3	J	750°C	4,7(3)	-108(5)	(5,8(3))·10 16	22860(1143)

Tabelle 5.2: Ergebnisse der Halleffekt-Messungen an InAs:S Proben. Die angegebenen Ausheiltemperaturen bezeichnen den letzten Ausheilschritt, den die Proben nach der α -Bestrahlung erfahren haben. Die komplette Probenbehandlung ist in der Tabelle 5.1 aufgelistet.

mitgelieferten Datenblatt des Herstellers entnommenen Werte angegeben. Bei der Probe BIAAn_H handelt es sich um eine unbehandelte Probe, sie ist nicht bestrahlt worden und wurde auch nicht thermisch behandelt. In der Abbildung 5.2 sind die Ergebnisse grafisch dargestellt. Vergleicht man in allen Fällen die erhaltenen Werte für die unbehandelte Probe mit den Daten, die aus den Datenblättern entnommen wurden, so erkennt man im Rahmen der Fehler eine sehr gute Übereinstimmung. Dieses zeigt die Güte der durchgeführten Messungen und bestätigt, dass die einfachen Leitsilberkontakte eine gute Qualität besitzen. Außerdem ist in der Abbildung eine gute Übereinstimmung der Messungen an den unterschiedlichen Messanlagen in Bonn und Jülich zu erkennen. Für eine spätere Auswertung werden daher die erhaltenen Werte einer festen Ausheiltemperatur gemittelt.

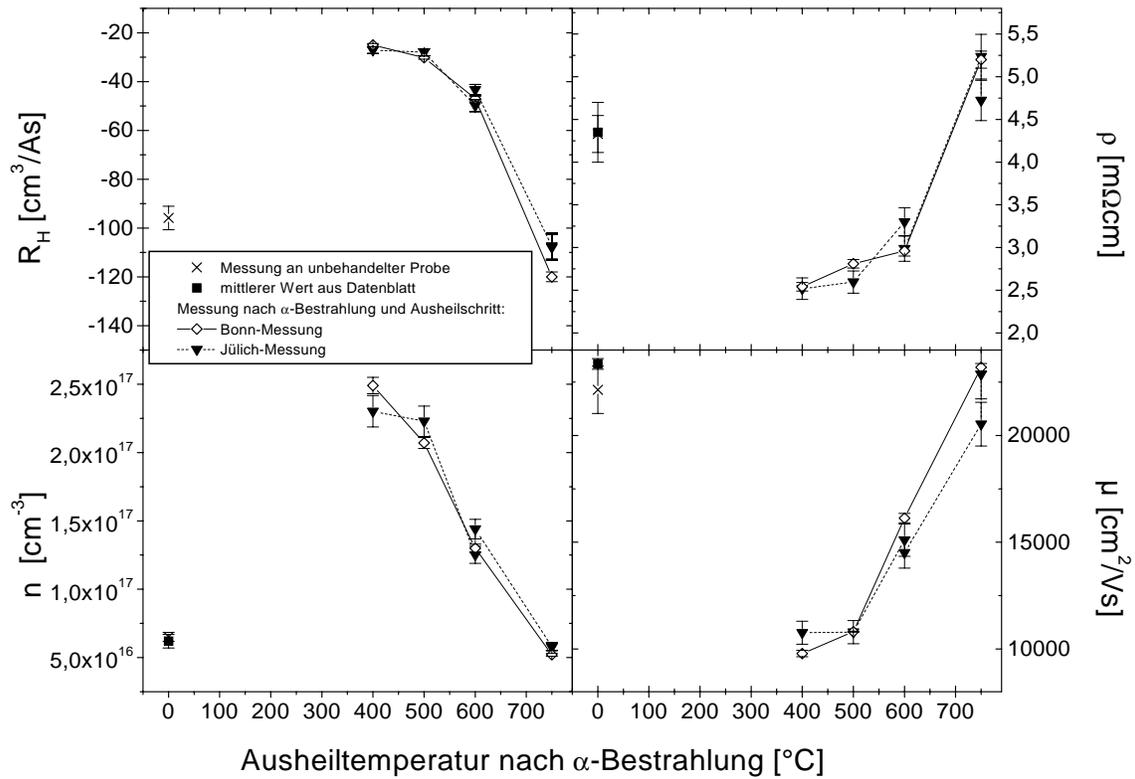


Abbildung 5.2: Halleffekt- und Vierpunkt-Messungen an InAs:S. Die Proben wurden α -bestrahlt und anschließend thermisch behandelt bzw. unbehandelt vermessen. Gezeigt sind der Hallkoeffizient R_H , der spezifische Widerstand ρ , die freie Ladungsträgerkonzentration n und die Ladungsträgerbeweglichkeit μ in Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur.

Betrachtet man die Ladungsträgerkonzentrationen n , so kann man deutlich erkennen, dass diese nach α -Bestrahlung und Ausheilen bei 400°C auf etwa den vierfachen Wert gegenüber der unbehandelten Probe angestiegen ist. Die Konzentration nimmt nach Ausheilschritten bei höheren Temperaturen bis auf den Wert der unbehandelten Probe hin ab. Der negative Hallkoeffizient R_H gibt außerdem an, dass weiterhin ein n-Typ-Material vorliegt. Das bedeutet, dass die α -Bestrahlung eine n-dotierende Wirkung auf das InAs:S-Material hat. Aus dem Verlauf der Ladungsträger-Daten ist ersichtlich, dass direkt nach der Bestrahlung eine noch stärkere n-Dotierung des Materials vorliegen muss. Nach Elektronen-Bestrahlung fanden auch M. Soukiassian et al. [SOUK76] im InAs ein Ansteigen der Ladungsträgerkonzentration.

Bei den meisten Halbleitern wie den Elementhalbleitern Silizium und Germanium sowie dem III-V-Halbleiter GaAs ist bekannt, dass Strahlenschäden eine p-dotierende Wirkung besitzen. So haben H. Ghamlouch et al. bei elektronenbestrahltem (7MeV) GaAs eine Abnahme der Ladungsträgerkonzentration sowie der Mobilität beobachtet [GHAM93]. N. Croitoru et al. [CROI98] beobachten, dass die durch Neutronenbestrahlung erzeugten Strahlenschäden in Si ein Vorzeichenwechsel im Hallkoeffizienten von negativ zu positiv bewirken. Nur wenige Materialien

zeigen das vorliegende Verhalten, so konnten z.B. J.W. Cleland und J.H. Crawford [CLEL59] an neutronenbestrahltem InSb einen Anstieg der Ladungsträgerkonzentration beobachten.

Der spezifische Widerstand ρ sinkt nach α -Bestrahlung ab und steigt nach thermischer Behandlung wieder an. Nach einem Ausheilschritt bei 750°C nimmt er dann sogar größere Werte als im unbehandelten Material an. Durch den Einfluss der Strahlenschäden nimmt die Beweglichkeit μ der Ladungsträger zunächst ab und steigt dann wieder auf den ursprünglichen Wert an.

5.1.1.2 InAs:Zn

Eine Auflistung aller untersuchten Zink-dotierten p-Typ-InAs-Proben ist in der Tabelle 5.3 gegeben. Die aus den Messungen erhaltenen Werte sind in der Tabelle 5.4 aufgeführt. Auch hier handelt es sich um Mittelwert und Standardabweichung der

Probe	α -Bestrahlung 300nA 33 MeV	Wärmebehandlung	Messort
BIAp_H	—	—	B
BIApb_12	4h	200°C 120s	B
BIApa_12	4h	300, 400°C je 120s	B
BIAp_11	3h	300, 500, 650, 800°C je 120s	B

Tabelle 5.3: Liste aller InAs:Zn-Proben an denen Halleffekt-Messungen sowie Vierpunkt-Messungen durchgeführt worden sind. Angegeben sind die Bedingungen bei der α -Bestrahlung sowie die durchlaufenen Wärmebehandlungen. Die Probe BIAp_11 ist vor dem letzten Ausheilschritt mit einer Si_3N_4 -Schutzschicht versehen worden, die anschließend wieder entfernt wurde.

Probe	Messort	Ausheiltemperatur	ρ [m Ω cm]	R_H [$\frac{\text{cm}^3}{\text{As}}$]	n [cm $^{-3}$]	μ [$\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$]
Datenblatt			45	—	$6,2 \cdot 10^{17}$	223
BIAp_H	B	—	77(1)	0,198(4)	$(3,31(7)) \cdot 10^{17}$	243(4)
BIApb_12	B	200°C	2,67(5)	-5,4(6)	$(1,2(1)) \cdot 10^{18}$	2035(221)
BIApa_12	B	300°C	7,4(2)	-1,5(4)	$(4(1)) \cdot 10^{18}$	208(52)
BIAp_11	B	800°C	70(2)	8,6(5)	$(7,3(4)) \cdot 10^{17}$	123(9)

Tabelle 5.4: Ergebnisse der Halleffekt-Messungen an InAs:Zn-Proben. Die angegebenen Ausheiltemperaturen bezeichnen den letzten Ausheilschritt, den die Proben nach der α -Bestrahlung erfahren haben. Die komplette Probenbehandlung ist in der Tabelle 5.3 aufgelistet.

aus mindestens drei Einzelmessungen erhaltenen Werte. Die grafische Darstellung der Ergebnisse zeigt die Abbildung 5.3. Der Hallkoeffizient nimmt bei der Messung der unbehandelten Probe einen positiven Wert an, wie es bei p-Typ-Material zu

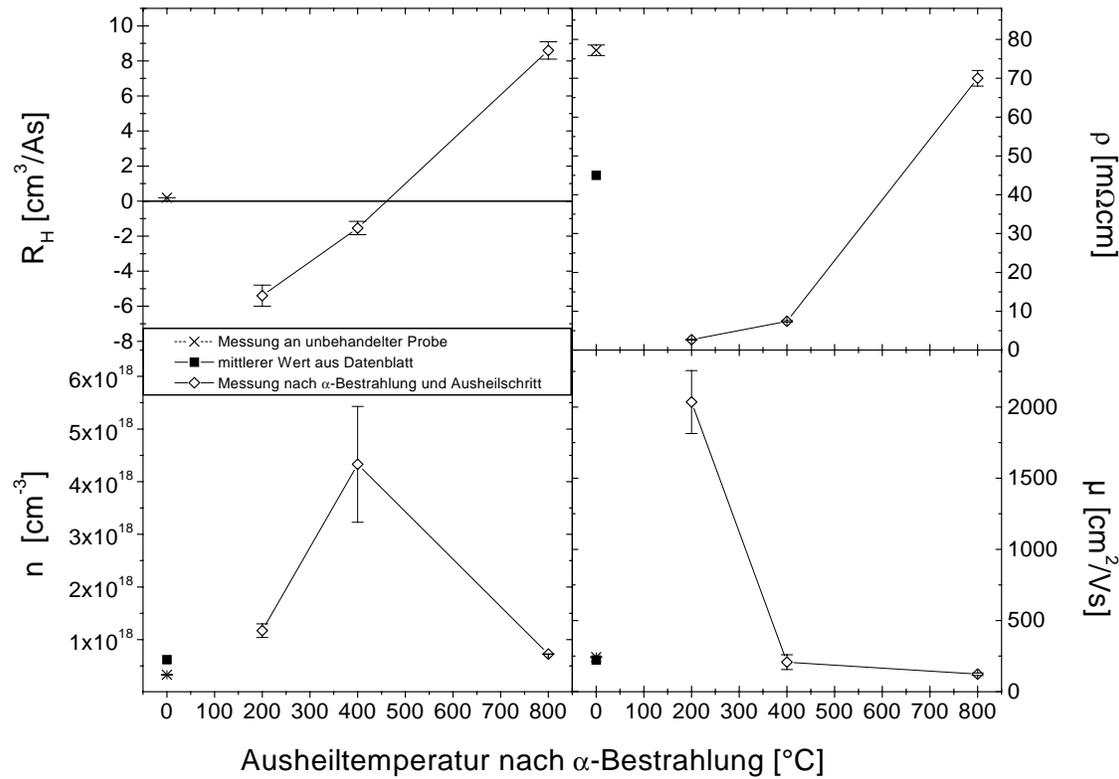


Abbildung 5.3: Halleffekt- und Vierpunkt-Messungen an InAs:Zn. Die Proben wurden α -bestrahlt und anschließend thermisch behandelt bzw. unbehandelt vermessen. Gezeigt sind der Hallkoeffizient R_H , der spezifische Widerstand ρ , die freie Ladungsträgerkonzentration n und die Ladungsträgerbeweglichkeit μ in Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur.

erwarten ist. Nach der Bestrahlung liegen jedoch negative Werte für R_H vor. Das bedeutet, dass auch hier die Strahlenschäden eine n-dotierende Wirkung haben und das InAs:Zn-Material einen n-Typ-Charakter aufweist. Nach weiterem Ausheilen nimmt die Schädigung ab und das Material hat wieder einen positiven Hallkoeffizienten und somit einen p-Typ-Charakter. Aufgrund dieser Tatsache ändert sich die Anzahl der freien Ladungsträger n auch sehr stark. Denn es sind nun beide Arten von Ladungsträgern vorhanden, Löcher wie auch Elektronen. Beide tragen bei der Messung zu n bei. Die einfachen Zusammenhänge zwischen Hallkoeffizient und Ladungsträgerkonzentration (Gln. 5.4, 5.5) gelten nicht mehr. Bei gleichzeitiger Anwesenheit von Löchern und Elektronen gilt:

$$R_H = \frac{n \cdot \mu_e^2 - p \cdot \mu_l^2}{e (n \cdot \mu_e + p \cdot \mu_l)^2} \quad (5.7)$$

Dabei bezeichnen μ_e und μ_l die Elektronen- sowie die Löcherladungsträgerbeweglichkeit. In den beiden Grenzfällen $n \gg p$ und $p \gg n$ erhält man wieder Gln. 5.4 und 5.5. Für deutlich verschiedene Ladungsträgerkonzentrationen ist demnach das Vorzeichen von R_H direkt das Vorzeichen der stärker vertretenen Ladungsträger. Sind allerdings p und n von gleicher Größenordnung, müssen die Beweglichkeiten mit in Betracht gezogen werden.

Die Ladungsträgerbeweglichkeit zeigt in Abbildung 5.3 nach der Bestrahlung einen starken Anstieg. Dieses weist vielleicht auf das vermehrte Vorhandensein von leichter beweglichen Elektronen gegenüber den in p-Typ-Material vorhandenen Löcher-Majoritätsladungsträgern hin. Nach einem Ausheilschritt bei 400°C nimmt jedoch auch hier der Wert wieder ab und sinkt bei der bei 800°C ausgeheilten Probe sogar unter den Wert für unbehandeltes Material.

5.1.1.3 InAs:Un

Die Tabelle 5.5 gibt eine Auflistung aller InAs:Un-Proben, an denen Halleffekt- und Vierpunktmessungen durchgeführt worden sind.

Probe	α -Bestrahlung 300nA 33 MeV	Wärmebehandlung	Messort
BIAu_H	—	—	B
BIAu_11	2,25h	—	B
BIAub_16	3h	400, 500, 600°C je 120s	B
BIAub_15	3h	650, 700°C je 120s	B
BIAua_16	3h	450, 550, 750°C je 120s	B

Tabelle 5.5: Liste aller InAs:Un-Proben, an denen Halleffekt-Messungen sowie Vierpunkt-Messungen durchgeführt worden sind. Angegeben sind die Bedingungen bei der α -Bestrahlung sowie die durchlaufenen Wärmebehandlungen. Die Proben BIAub_15 und BIAua_16 sind vor dem letzten Ausheilschritt mit einer Si_3N_4 -Schutzschicht versehen worden, welche anschließend wieder entfernt worden ist.

Probe	Messort	Ausheiltemperatur	ρ [m Ω cm]	R_H [$\frac{\text{cm}^3}{\text{As}}$]	n [cm $^{-3}$]	μ [$\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$]
Datenblatt			12	—	$2,1 \cdot 10^{16}$	25000
BIAu_H	B	—	13,10(5)	-311,2(4)	$(2,006(2)) \cdot 10^{16}$	23797(98)
BIAu_11	B	RT	2,37(5)	-13,5(3)	$(4,63(9)) \cdot 10^{17}$	5681(10)
BIAub_16	B	600°C	2,8(3)	-21(1)	$(3,0(2)) \cdot 10^{17}$	11665(1246)
BIAub_15	B	700°C	15,0(5)	-346(11)	$(1,80(5)) \cdot 10^{16}$	23077(264)
BIAua_16	B	750°C	19(1)	-406(26)	$(1,5(1)) \cdot 10^{16}$	20489(231)

Tabelle 5.6: Ergebnisse der Halleffekt-Messungen an InAs:Un-Proben. Die angegebenen Ausheiltemperaturen bezeichnen den letzten Ausheilschritt, den die Proben nach der α -Bestrahlung erfahren haben. Die komplette Probenbehandlung ist in der Tabelle 5.5 aufgelistet. Die bei der Probe BIAu_11 als Ausheiltemperatur angegebene Raumtemperatur gibt an, dass diese Probe nach der α -Bestrahlung nicht weiter thermisch behandelt worden ist.

Die Ergebnisse der Messungen zeigt die Tabelle 5.6. Neben den Messungen an einer unbehandelten Probe BIAu_H sind bei diesem Material auch Messungen an einer α -bestrahlten aber nicht ausgeheilten Probe BIAu_11 durchgeführt worden, um den dotierenden Effekt über den gesamten Bereich zu beobachten. Abbildung 5.4 stellt

die Ergebnisse grafisch dar. Auch bei diesem Material kann man eine sehr gute

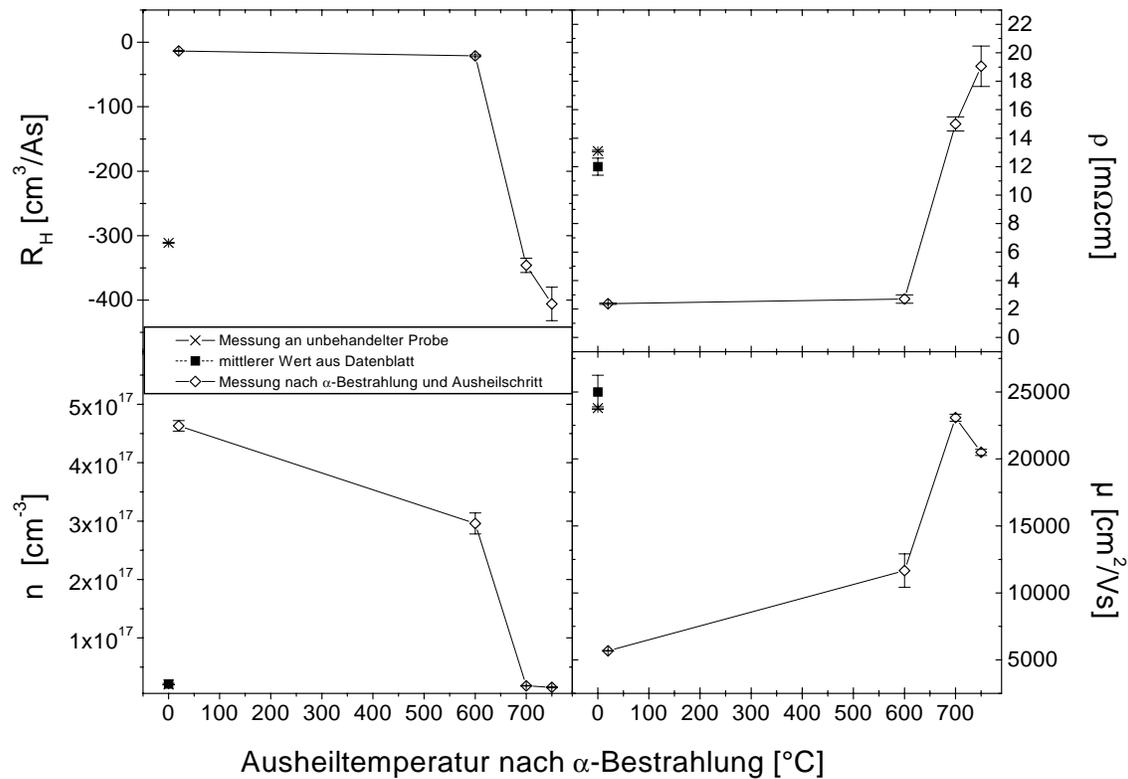


Abbildung 5.4: Halleffekt- und Vierpunkt-Messungen an $InAs:Un$. Die Proben wurden α -bestrahlt und anschließend thermisch behandelt bzw. unbehandelt vermessen. Gezeigt sind der Hallkoeffizient R_H , der spezifische Widerstand ρ , die freie Ladungsträgerkonzentration n und die Ladungsträgerbeweglichkeit μ in Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur.

Übereinstimmung zwischen den Messwerten der unbehandelten Probe und den Daten aus dem Datenblatt erkennen. Die Ladungsträgerkonzentration nimmt nach der α -Bestrahlung auf den 23-fachen Wert gegenüber dem in der unbehandelten Probe gemessenen Wert zu. Dieser Anstieg um mehr als eine Zehnerpotenz zeigt die große n -dotierende Wirkung der Strahlenschäden. Bereits nach einem Ausheilschritt bei 700°C liegt die Ladungsträgerkonzentration wieder bei dem Wert der unbehandelten Probe und nimmt noch etwas weiter ab, wenn ein weiterer Ausheilschritt bei 750°C durchgeführt wird.

Der Hallkoeffizient zeigt zunächst einen deutlichen Anstieg im Wert und sinkt dann unter den in der unbehandelten Probe gemessenen Wert ab. Ebenso erreicht die spezifische Leitfähigkeit nach dem Ausheilen nicht den in der unbehandelten Probe gemessenen Wert, sondern steigt weiter auf höhere Werte an. Direkt nach der Bestrahlung kann zunächst ein stark verringerter Wert beobachtet werden.

Durch den Einfluss der Strahlenschäden kann auch hier eine Abnahme der Ladungsträgerbeweglichkeit nach der α -Bestrahlung beobachtet werden, die nach den Ausheilschritten wieder ansteigt.

5.2 DLTS–Messungen

Aus Channeling und SIMS–Experimenten kann als nachgewiesen gelten, dass die Br–Sonden in GaAs einen substitutionellen Gitterplatz besetzen, solange die Br–Konzentration unterhalb einiger 10^{17}cm^{-3} liegt [WEHN96]. Dabei ist davon auszugehen, dass das Gruppe V–Untergitter besetzt wird. Dort stellt Br_{As} einen Doppel-donator dar, der zwei Umladungsniveaus ($0/+$ und $+/2+$) in der Bandlücke besitzen sollte. Die Lage der zu erwartenden Niveaus konnte jedoch bislang noch nicht festgelegt werden. Daher ist es von besonderem Interesse, die Lage dieser Niveaus zu beobachten.

5.2.1 Die DLTS–Methode

Die Kapazitätstransientenspektroskopie (Deep Level Transient Spectroscopy DLTS) ist eine elektrische Messmethode zur Charakterisierung tiefer Störstellen in Halbleitern. Sie wurde 1974 von Lang vorgestellt [LANG74]. Voraussetzung für die Anwendung der Messmethode ist das Vorhandensein einer Raumladungszone im zu untersuchenden Halbleiter. Diese ermöglicht ein Umladen der Störstellen. Eine solche Raumladungszone kann z.B. durch einen Schottky–Kontakt realisiert werden. Das Umladen der Störstellen durch einen Spannungspuls in Durchlassrichtung und die anschließende Rückkehr zum Ausgangszustand durch Ladungsträgeremission aus den Störstellen, führt zu einer Kapazitätsänderung der Sperrschicht. Bei der Kapazitäts–DLTS wird die zeitliche Änderung der Sperrschichtweite als Kapazitätstransiente nachgewiesen. Durch eine temperaturabhängige Messung dieser Kapazitätsänderung lassen sich dann die Aktivierungsenergie, der Einfang–Wirkungsquerschnitt und die Konzentration der Störstellen bestimmen.

Für den Fall eines Schottky–Kontakts auf einem n–Typ–Halbleiter und Elektronen–Haftstellen (Traps) wird das DLTS–Messprinzip schematisch erläutert. Als Elektronen–Trap wird dabei eine tiefe Störstelle bezeichnet, deren Umladungsniveau in der oberen Hälfte der Bandlücke liegt. In diesem Fall ist dann der Austausch von Elektronen mit dem Leitungsband dominant. Dargestellt wird das DLTS–Messprinzip in Abbildung 5.5.

Abbildung 5.5 a) zeigt die schematische Darstellung des Spannungsverlaufs an einem n–Typ–Schottky–Kontakt. Periodisch wechselnd werden Sperrspannung V_r bzw. Füllpulsspannung V_p angelegt. In den darunterliegenden Teilabbildungen b)–d) sind dazu korrelierend die verschiedenen Fälle im Bänderdiagramm dargestellt.

Zunächst wird der Schottky–Kontakt in Sperrichtung betrieben (Abb. 5.5 b)), so dass im stationären Zustand tiefe Störstellen nur bis x_{fr} besetzt sind. Nach Anlegen des Füllpulses V_p in Vorwärtsrichtung sind die tiefen Störstellen bis zu einer Tiefe von x_{fp} besetzt (Abb. 5.5 c)). Nach Wiederanlegen der Sperrspannung emittieren

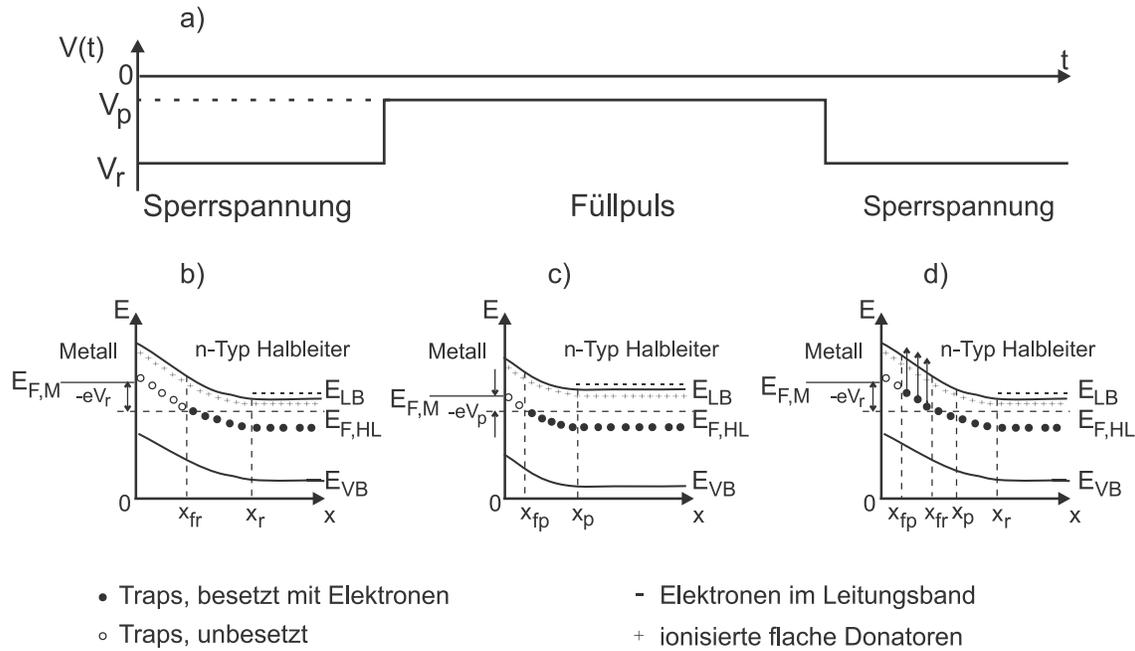


Abbildung 5.5: Teil a) zeigt schematisch den Spannungsverlauf an einem n-Typ-Schottky-Kontakt. Zunächst wird die Sperrspannung V_r angelegt. Im nächsten Zeitintervall wird dann der Füllpuls mit der Spannung V_p angelegt. Im letzten Abschnitt ist wieder die Sperrspannung V_r angelegt. Die Teilabbildungen b)-d) korrelieren mit dem in Teil a) gezeigten Spannungsverlauf und zeigen im Bänderdiagramm die verschiedenen Betriebsbedingungen eines n-Typ Schottky-Kontakts. b): stationärer Zustand bei angelegter Sperrspannung V_r , c): stationärer Zustand nach angelegter Füllpulsspannung V_p , d): Ungleichgewichtszustand unmittelbar nach Wiederanlegen der Sperrspannung. x_p und x_r bezeichnen die Raumladungszonenenden bei den angelegten Spannungen V_p bzw. V_r . x_{fr} und x_{fp} bezeichnen die Tiefen, bis zu denen die Störstellen unbesetzt sind.

die tiefen Störstellen Elektronen im Raumladungszonenbereich von x_{fp} bis x_{fr} in das Leitungsband (Abb. 5.5 d)). Das Abklingen dieser Störung der Gleichgewichtsbesetzung für angelegte Sperrspannung erfolgt exponentiell. Für die Emissionsrate e_n gilt:

$$e_n = \frac{1}{\tau_e} = \sigma_n \cdot \nu_{th} \cdot N_{LB} \cdot g^{-1} \cdot \exp\left(-\frac{E_{LB} - E_T}{kT}\right) \quad (5.8)$$

Dabei bezeichnet τ_e die Emissions-Zeitkonstante, σ_n den Elektronen-Einfangquerschnitt, ν_{th} die mittlere thermische Driftgeschwindigkeit der Elektronen, N_{LB} die effektive Zustandsdichte im Leitungsband, g die Entartung des Trap-Niveaus und $E_{LB} - E_T$ die Lage des Energieniveaus der tiefen Störstelle.

Gleichung 5.8 zeigt die starke Temperaturabhängigkeit der thermischen Emissionsrate und somit der Zeitkonstanten. Aufgabe ist es, die Zeitkonstante aus dem zeitlichen Verlauf einer äußeren makroskopischen Messgröße zu bestimmen. Dazu wird die Kapazität der Raumladungszone beobachtet. Als einfaches Bild kann man sich dazu den Schottky-Kontakt als Plattenkondensator vorstellen. Dabei entspricht die Verarmungszone dem im Kondensator eingebrachten Dielektrikum. Die Kapazität

wird dann durch die Breite der Verarmungszone x gemäß $C = \frac{A \cdot \epsilon \cdot \epsilon_0}{x}$ bestimmt. Dabei ist A die Fläche des Kontakts und ϵ bzw. ϵ_0 die Dielektrizitätskonstante des Halbleiters bzw. des Vakuums.

In der Abbildung 5.6 ist die Kapazität eines Schottky-Kontakts in Abhängigkeit des Spannungsverlaufs dargestellt. Der obere Teil beschreibt den Verlauf der Spannung

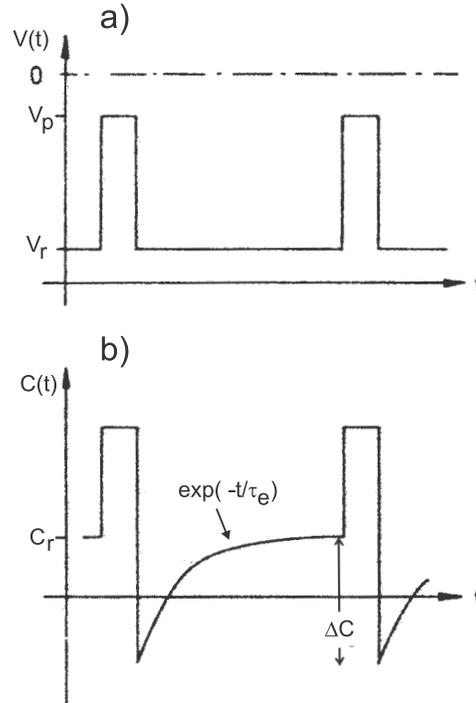


Abbildung 5.6: Typische Zeitabhängigkeit des Schottky-Kontakt-Kapazitätssignals (Teil b)) in Abhängigkeit von der angelegten Spannung (Teil a)).

und zeigt das periodische Anlegen der Füllpulse. Im unteren Teil ist die Änderung der Kapazität C dargestellt.

Im stationären Fall der angelegten Sperrspannung ergibt sich so ein fester Wert C_r , der sich durch Anlegen des Füllpulses stark erhöht. Denn die Elektronen-Traps werden mit Elektronen besetzt und die Breite der Raumladungszone wird stark vermindert. Der Anstieg der Kapazität ist in Abbildung 5.6b) gezeigt. Unmittelbar nach Wiederanlegen der Sperrspannung ist die effektive positive Raumladung und damit die Kapazität minimal. Dies zeigt sich durch ein Absinken der Kapazität zeigt. Die anschließende thermische Emission der Elektronen führt dann zu der exponentiellen Änderung der Kapazität nach $\exp(-\frac{t}{\tau_e})$.

Bei der betrachteten, klassischen DLTS wird die Änderung der Kapazität (DLTS-Signal) zwischen zwei Zeitpunkten t_1 und t_2 gemessen. Betrachtet man den Emissionsprozess für ein diskretes, tiefes Niveau, so nimmt das DLTS-Signal im Zeitfenster $t_2 - t_1$ wegen der Temperaturabhängigkeit der Emissionszeitkonstanten (siehe Gln.

5.8) für verschiedene Temperaturen unterschiedliche Werte an. Abbildung 5.7 zeigt den Zusammenhang zwischen Kapazitätstransiente und dem korrespondierenden DLTS-Signal. Im linken Teil der Abbildung ist die gemessene Kapazitätstransiente

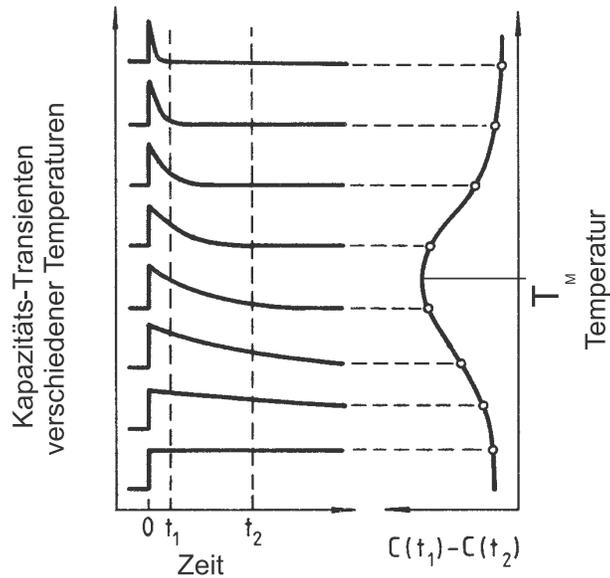


Abbildung 5.7: Veranschaulichung der Bestimmung eines DLTS-Signals. Auf der linken Seite sind Kapazitätstransienten — entsprechend $C_r - C(t)$ in Abb. 5.6 — für verschiedene Messtemperaturen gezeigt. Die Kapazitätsdifferenzen der Transienten zur Zeit t_1 und t_2 ergeben das im rechten Teil gezeigte temperaturabhängige DLTS-Signal.

bei verschiedenen Messtemperaturen gezeigt. Die Auftragung $C_r - C(t)$ gegenüber der Zeit führt zu einem gespiegelten Transientenverlauf im Vergleich zu Abbildung 5.6. Auf der rechten Seite sind die Kapazitätsdifferenzen $\Delta C := C(t_1) - C(t_2)$ gegen die Temperatur aufgetragen und ergeben so das DLTS-Messsignal. Das Signal durchläuft bei einer bestimmten Temperatur ein Maximum, dabei ist die dem Maximum zugeordnete Relaxationszeit $\tau_M = \tau_e(T_M)$ eindeutig mit dem gewählten Zeitfenster verknüpft. Es gilt:

$$\tau_M = \frac{t_1 - t_2}{\ln\left(\frac{t_1}{t_2}\right)} \quad (5.9)$$

Wird das Ratenfenster (t_1, t_2) variiert, so führt dieses zu einer Verlagerung der Maximumlage. Werden $\ln \tau_M$ und $\frac{1}{T_M}$ in einem Arrhenius-Plot gegeneinander aufgetragen, so ergibt sich nach Gleichung 5.8 eine Gerade, aus deren Steigung die Aktivierungsenergie des tiefen Niveaus bestimmt werden kann. Aus dem Achsenabschnitt kann dann der Elektronen-Einfangquerschnitt σ_n berechnet werden.

Mithilfe der DLTS-Methode wurden zahlreiche tiefe Störstellen katalogisiert. Die Zuordnung dieser Traps zu einem bestimmten Defektzentrum ist jedoch nur durch Kombination mit anderen Messmethoden möglich, da die Methode auf die chemi-

sche Zusammensetzung oder mikroskopische Struktur eines Defektes nicht empfindlich ist. Um diesen Nachteil zu überwinden, wurde die DLTS-Methode in den letzten Jahren mit dem Einsatz radioaktiver Sonden kombiniert [PETE90], [LANG91]. Durch die mit dem Zerfall verbundene Elementumwandlung kann, bei einem zeitabhängigen Verhalten des DLTS-Peaks mit einer Zeitkonstante in der Größe der Halbwertszeit der eingebrachten Sonde, der Messpeak eindeutig einem Element zugeordnet werden.

5.2.2 Messungen an ^{79}Br und ^{77}Br (^{77}Se) in GaAs

Alle Messungen sind in Zusammenarbeit mit Frau F. Albrecht vom Institut für Festkörperphysik der Friedrich-Schiller-Universität in Jena durchgeführt worden [ALBR99a], [ALBR99b] und setzen eine bereits bestehende Zusammenarbeit auf diesem Gebiet mit Herrn N. Achtziger aus der gleichen Arbeitsgruppe fort [WEHN97].

Die Materialeigenschaften des Materials sind in Kapitel 3.1.2 zusammengefasst. Zunächst wurden Untersuchungen an mit stabilem ^{79}Br implantierten n-Typ-GaAs-Proben durchgeführt. Die Implantationen wurden am ROMEO-Implanter der Universität Jena mit einer Energie von 260keV durchgeführt. Die Proben waren dabei halbseitig abgedeckt, um eine Vergleichsmessung mit einer nicht implantierten Probe bei gleicher Probenbehandlung zu ermöglichen. Bei der Implantationsenergie handelt es sich um die Maximalenergie, mit der an der ISOLDE/CERN implantiert werden kann. Sie wurde gewählt, um einen Vergleich von stabil und aktiv implantierten Proben zu ermöglichen. Die Implantationsdosis lag bei $5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

Damit liegt die Dotierung bei etwa einem Hundertstel der Grunddotierung und auftretende Br-korrelierte Störstellen sollten zu beobachten sein. Die Ladungsträgerkonzentration des untersuchten Materials bestimmt die Ausdehnung der Raumladungszone ohne äußere angelegte Spannung. Die Raumladungszone ist umso größer, je geringer die Grunddotierung ist. Störstellen, die im Bereich dieser Raumladungszone liegen, können daher nicht umgeladen und somit nicht untersucht werden. Daher muss bei der Implantation von Ionen, deren Störstellenniveaus untersucht werden sollen, darauf geachtet werden, dass sie nicht in diesen Bereich hinein implantiert werden. Abbildung 5.8 zeigt eine TRIM-Simulation für Br, welches mit einer Energie von 260keV und einer Dosis von $5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ in GaAs implantiert wird. Es ist zu erkennen, dass bei den gewählten Bedingungen der größte Anteil der Br-Atome in einem nicht zugänglichen Bereich liegt. Allerdings ist die Br-Konzentration im zugänglichen Bereich zwischen der minimalen Raumladungszone ohne angelegte Spannung $RLZ_{0V} \approx 140\text{nm}$ und der maximalen Raumladungszone bei angelegter Sperrspannung von -2V mit $RLZ_{-2V} \approx 230\text{nm}$ hinreichend groß, um eine vorhandene Br-Störstelle zu detektieren. Aus Diffusionsuntersuchungen

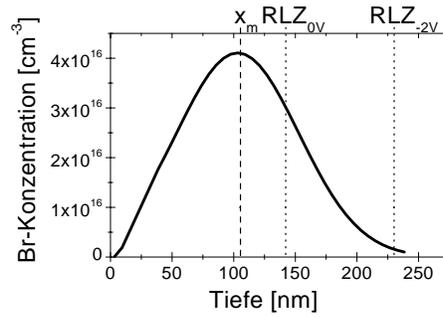


Abbildung 5.8: TRIM-Simulation für $5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ Br in GaAs, welches mit einer Energie von 260 keV implantiert wird. Eingetragen ist die mittlere Reichweite x_m von 105 nm . Außerdem sind die Raumladungszonen ohne angelegte äußere Spannung $RLZ_{0V} \approx 140 \text{ nm}$ und bei angelegter Sperrspannung von $V_r = -2 \text{ V}$ $RLZ_{-2V} \approx 230 \text{ nm}$ gekennzeichnet.

(Kapitel 6) ist bekannt, dass sich das Tiefenprofil bei diesen geringen Sondenkonzentrationen während der für die DLTS-Untersuchungen durchgeführten Wärmebehandlungen nur unwesentlich ändert. Jedoch konnten breitere Verteilungen als die TRIM-simulierten beobachtet werden, was zu einer höheren Br-Konzentration im zugänglichen Bereich führen würde.

Der beobachtbare Energiebereich in der Bandlücke hängt nach Gleichung 5.8 sowohl von der Aktivierungsenergie $E = E_{LB} - E_T$ als auch dem Einfangquerschnitt σ_n ab. Daher ist eine einfache Abschätzung über den beobachtbaren Energiebereich in der Bandlücke nicht möglich. Wird jedoch in n- sowie p-Material gemessen, so wird von beiden Bandkanten aus gemessen und so sollte der gesamte Bereich der Bandlücke von GaAs mit der DLTS-Messung zugänglich sein. Liegt das gesuchte Elektron-Trap-Niveau¹ jedoch sehr weit auf der p-Seite, so müsste man bei dem n-Typ-GaAs mit sehr hohen Temperaturen arbeiten. Bei einem sehr geringen Einfangquerschnitt für Löcher bedeutet dieses im p-Typ-Material ebenfalls sehr hohe Temperaturen, so dass ein solches Niveau nicht messbar ist.

Nach der Implantation sind die Proben bei 850°C für 120s ausgeheilt worden, entsprechend den Ausheilparametern, wie sie bei PAC-Messungen zu einer 100% einheitlichen Umgebung der eingebrachten Br-Sondenatome führen [WEHN97]. Die Probenoberfläche wurde während des Ausheilens durch ein Proximity-CAP geschützt. Auf die Rückseite der Proben wurde AuGe (88:12) mit einer Dicke von etwa 25nm flächig aufgedampft und anschließend für 15min bei 450°C in einer Stickstoffatmosphäre einlegiert. Es kommt so im Halbleiter zu einer dünnen Schicht, in der eine hohe Konzentration von Ge-Atomen vorliegt. Solch ein Halbleiter-Metall-Übergang zeichnet sich durch eine lineare Strom-Spannungs-Charakteristik aus (Ohmscher Kontakt). Die Schottky-Dioden wurden durch Aufdampfen von Goldpunkten mit einem Durchmesser von 0,5mm und einer Dicke von etwa 80nm auf

¹ Für den Fall des Br geht man davon aus, dass es sich um einen Donator handelt und somit ein Elektron-Trap zu erwarten ist.

der Vorderseite der Probe realisiert.

Im n-Typ-GaAs konnten nach der Br-Implantation zwei neue tiefe-Zustände beobachtet werden. Das zugehörige DLTS-Spektrum ist in der Abbildung 5.9 gezeigt. Aufgetragen ist hier $\Delta C/C$, um die aufgetretene Variation der Kapazität im Ver-

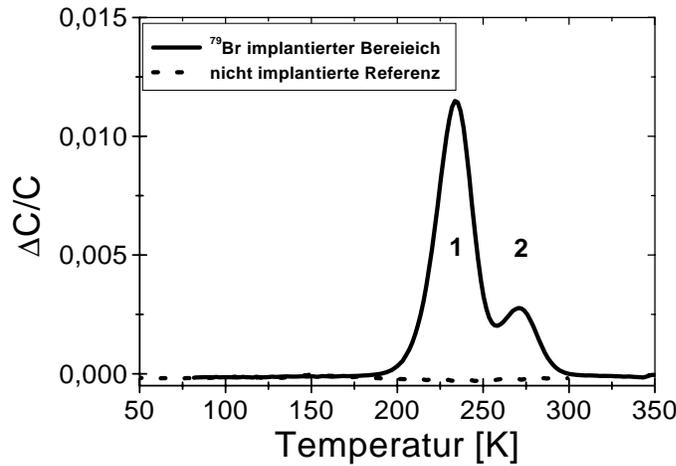


Abbildung 5.9: DLTS-Spektrum von n-Typ-GaAs nach Implantation mit einer ^{79}Br -Dosis von $5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ bei 260 keV und einem Ausheilschritt für 120 s bei 850° C . ΔC entspricht hier $C(t_1) - C(t_2)$ (entsprechend Abbildung 5.7) gefaltet mit einer Korrelationsfunktion und C der Kapazität ohne angelegte Spannung.

lauf mehrerer Messungen zu kompensieren. Eine mögliche Ursache dafür ist ein sich verschlechternder Kontakt, dieser äußert sich in einer Verkleinerung der Kontaktfläche, die einen Abfall der Kapazität über verschiedene Messungen hervorruft. Eine Veränderung der Kapazität könnte jedoch auch durch eine Variation der Dotierung hervorgerufen werden, wenn etwa durch den Zerfall des Radiotracers nennenswert Ladungsträger entstehen oder kompensiert werden. Dies würde zu einer Veränderung der Raumladungszonenbreite führen, was dann zur Folge hätte, dass jede Messung in einer anderen Tiefe in der Probe durchgeführt würde. Damit wären die verschiedenen Spektren nicht mehr miteinander vergleichbar. Im vorliegenden Fall sollte die Konzentration der implantierten Atome mit $2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ gegenüber der Grunddotierung von $8 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ zu gering sein, um einen solchen Effekt zu bewirken. Daher ist davon auszugehen, dass die Variation der Kapazität auf die Veränderung der Kontakte zurückzuführen ist und durch die Auftragung von $\Delta C/C$ dieser Effekt kompensiert wird.

Deutlich ist zu erkennen, dass bei der implantierten Probe zwei Peaks im Spektrum erscheinen (Abbildung 5.9), die bei der nicht implantierten Referenzprobe nicht zu beobachten sind. Die Lage der zugehörigen Niveaus und deren Einfangquerschnitte ergeben sich daraus zu:

$$1 : E_1 = E_{\text{LB}} - 0,48(2) \text{ eV}$$

$$\begin{aligned}\sigma_1 &= 2 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^2 \\ 2 : E_2 &= E_{\text{LB}} - 0,59(2) \text{ eV} \\ \sigma_2 &= 7 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2\end{aligned}$$

Um eindeutig festzustellen, ob ein oder beide Niveaus dem Br zuzuordnen sind oder durch einen Strahlenschaden verursacht sind, wurde radioaktives ^{77}Br (^{77}Se) an ISOLDE/CERN implantiert. Die Probenbehandlung erfolgte identisch wie bei der stabil implantierten Probe. DLTS-Spektren wurden wiederholt auf einer Zeitskala von Tagen aufgenommen. Als Zeitnullpunkt wurde der Zeitpunkt nach dem Tempern der Probe festgelegt, da dann das endgültige Tiefenprofil der Br-Atome ausgebildet ist. Das Ergebnis der Messreihe zeigt Abbildung 5.10. Das erste, nach der

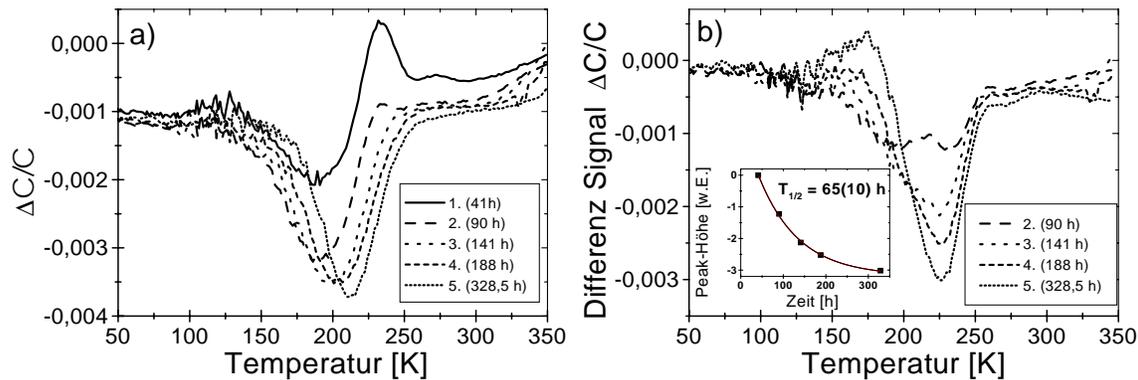


Abbildung 5.10: a) DLTS-Spektren an einer mit ^{77}Br implantierten n-Typ-GaAs-Probe nach einem Ausheilschritt bei 850°C für 120s. Gezeigt sind Messungen zu verschiedenen Zeiten nach der Implantation. b) Differenzspektren, die aus a) gewonnen wurden durch Subtraktion des ersten aufgenommenen Spektrums von den folgenden Spektren. Eingetragen ist außerdem die beobachtete Peakhöhe über der vergangenen Zeit.

Temperung aufgenommene DLTS-Spektrum — mit 1. bezeichnet — zeigt wie im Fall der stabilen Implantation zwei Störstellen, deren Parameter mit denen der stabil implantierten Probe übereinstimmen. Die Peaks sind jedoch wesentlich schwächer und werden von einem negativen Peak überlagert. Die weiteren Messungen zeigen deutlich eine zeitliche Änderung der aufgenommenen Peaks. Der in Abbildung 5.9 mit 1 bezeichnete Peak kann auch hier recht gut aufgelöst werden und aus der Auftragung des Referenzsignals² kann eine Peakhöhenverteilung über der Zerfallszeit aufgetragen werden. Aus dieser in Abbildung 5.10 b) zu sehenden Abhängigkeit kann eine Halbwertszeit der beobachteten Störstelle von $65(10)\text{h}$ bestimmt werden. Im Rahmen der Fehler stimmt diese mit der Halbwertszeit des ^{77}Br (^{77}Se) von 57h überein. Somit kann zumindest das Niveau 1 eindeutig dem Br-zugeordnet werden. Der aus dieser Messung bestimmte Einfangquerschnitt $\sigma = 1 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2$ und die

² Das Spektrum, welches zum Zeitnullpunkt aufgenommen worden ist, wird von allen nachfolgenden Spektren subtrahiert.

Lage des Niveaus 1 von $E = E_{\text{LB}} - 0,44(3)\text{eV}$ stimmen ebenfalls gut mit den aus der stabilen Messung ermittelten Werten überein.

Dass während der Messungen kein neuer Peak erscheint, zeigt, dass im betrachteten Bereich der Bandlücke kein Se-korreliertes Niveau vorhanden ist. Durch den Zerfall des Br zum Se hätte sonst in gleicher Weise, wie der Peak 1 in Abb. 5.10 abgenommen hat, ein weiterer Peak entstehen müssen. Für das GaAs sind zwei Se-Umladungsniveaus bekannt. Ein sehr flaches Donator-Niveau bei $E_{\text{LB}} - E_{\text{T}} = 0,0059\text{eV}$ für ein auf dem As-Platz befindliches Se-Atom und ein tiefes Donator-Niveau bei $E_{\text{LB}} - E_{\text{T}} = 0,89\text{eV}$ [SZE81].

Der überlagerte negative Peak, der sich in Abbildung 5.10 zeigt, kann möglicherweise auf die Emission von Elektronen aus Störstellen, durch Verunreinigungen an der Grenzfläche zwischen Epischicht und Substrat, zurückgeführt werden. Ähnliches konnte von S. Tanaka und H. Ishii [TANA99] und P. Bury et al. [BURY99] beobachtet werden.

Nicht gezeigt sind Messungen an p-Typ-GaAs-Proben. Auch bei diesen wurden Messungen nach der Implantation von ^{77}Br (^{77}Se) durchgeführt. Bei dieser Messung hat sich kein zeitabhängiger Peak gezeigt. Daraus ist zu schließen, dass entweder kein Br-korreliertes Niveau unterhalb von $E_{\text{LB}} - 0,57\text{eV}$ vorhanden ist, oder dass es sich — wie bereits erläutert — um eine sehr flache Störstelle mit geringem Einfangsquerschnitt handelt, die im untersuchten Temperaturbereich nicht aufgenommen werden kann.

Kapitel 6

Diffusion von Brom in InAs und GaAs

Die Diffusion der eingebrachten Br-Sondenatome in den untersuchten Materialien ist für die Interpretation der Messergebnisse nach thermischer Probenbehandlung von besonderer Bedeutung. Für InAs sind bislang keine Kenntnisse über die Diffusion vorhanden. Im Falle des GaAs gibt es nur geringe Kenntnisse, die sich aus SIMS-Messungen von M. Wehner [WEHN97] an Br implantiertem GaAs ergeben. Daher sind einige grundlegende Untersuchungen bezüglich der Br-Diffusion durchgeführt worden.

Das System Br in InAs ist mithilfe der **Sekundärionen-Massen-Spektroskopie** (SIMS) untersucht worden (Abschnitt 6.1). Untersuchungen mit im Verhältnis dazu geringeren Br-Konzentrationen sind mit der Radiotracer-Methode am GaAs durchgeführt worden (Abschnitt 6.2).

6.1 SIMS-Messungen an Brom in InAs

6.1.1 Die SIMS-Messmethode

Die **Sekundärionen-Massen-Spektroskopie** (SIMS) beruht auf dem Sputter-Effekt. Hierbei wird eine Probenoberfläche mit einem Strahl von Primärionen bombardiert. Die dabei aus der Probe ausgelösten Sekundärionen werden in einem Massenspektrometer untersucht. Diese massenspektroskopische Erfassung der Sekundärionen ermöglicht eine Identifizierung der „abgesputterten“ Teilchen aufgrund ihres Verhältnisses von Masse zu Ladung. Durch Aufnahme der entsprechenden Sekundärionen in Abhängigkeit von der Sputterdauer, kann, bei Kenntnis der Sputterrate, die Tiefenverteilung der untersuchten Elemente ermittelt werden. Ausführliche Beschreibungen der Methode finden sich z.B. in [BENN87] oder [GRAS86].

Beim Beschuss der Probenoberfläche mit Ionen kommt es zu einem Impulsübertrag auf die Festkörperatome. Dieser bewirkt einen Platzwechsel der Targetatome. Neben der Fortbewegung der Targetatome in das Material hinein („Recoil Mixing“) gibt es eine gewisse Wahrscheinlichkeit dafür, dass Teilchen mit geringen Energien¹ aus der Probenoberfläche austreten. Diese gesputterten Teilchen sind überwiegend ungeladen, und es kann sich um Atome, Moleküle oder neutrale Cluster handeln.

Die Ausbeute² an geladenen Teilchen ist sehr gering, sie kann jedoch durch die geeignete Wahl reaktiver Primärionen gegenüber dem Standard-Primärion Ar^+ stark erhöht werden. Bei diesem Reaktiv-Sputtern werden für Probenelemente mit niedrigen Ionisierungsenergien (1.–4. Gruppe des PSE) Primärionen hoher Elektronenaffinität eingesetzt. Im Allgemeinen wird Sauerstoff gewählt, und man erhält so eine erhöhte Ausbeute an positiven Sekundärionen. Bei Probenelementen mit hoher Elektronenaffinität (5.–7. Gruppe des PSE) finden Primärionen mit niedriger Ionisierungsenergie Anwendung. Hier wird häufig Caesium verwandt, um eine erhöhte Ausbeute an negativen Sekundärionen zu erreichen. In Tabelle 6.1 sind die ersten Ionisierungsenergien und die Elektronenaffinitäten der beiden häufig benutzten reaktiven Primärionen Sauerstoff und Caesium angegeben. Ebenfalls eingetragen sind die Werte für die in den untersuchten Proben enthaltenen Elemente, das implantierte Br, As und In als Matrixelemente und die beiden Dotieratome S und Zn der n- bzw. p-Typ-Proben. Ein Blick in die Tabelle zeigt, dass das Halogen Br

Element	Einsatz als	Ionisierungsenergie [eV]	Elektronenaffinitäten [eV]
O	Primärionen	13,6	1,5
Cs		3,9	0,5
Br	Target-Elemente	11,8	3,4
As		9,8	0,8
In		5,8	0,3
S		10,4	2,1
Zn		9,4	0

Tabelle 6.1: Erste Ionisierungsenergien und Elektronenaffinitäten für die Primärionen O und Cs sowie für die Probenelemente (aus [GRAS86]).

sehr elektronegativer ist³ und so eine hohe Sputterausbeute an negativen Ionen bei dem Sputtern mit dem Primärion Cs^+ erwartet werden kann. Für alle übrigen aufgeführten Elemente ist dementsprechend eine geringere Ausbeute zu erwarten. Die Ausbeute verschiedener Elemente weist Unterschiede von mehreren Zehnerpotenzen auf (ca. $0,1$ bis $1 \cdot 10^{-5}$).

¹ Die Sekundärionen zeigen eine Energieverteilung bis ca. 200eV für Atomionen und ca. 100eV für Molekülionen. Die wahrscheinlichste Energie (Intensitätsmaximum) liegt bei ca. 5 bis 10eV [GRAS86].

² Die Sputterausbeute S ist definiert als die Anzahl der ausgelösten Sekundärionen pro eingestrahlem Primärion.

³ Nur F (3,4eV) und Cl (3,6eV) sind noch elektronegativer.

In der Abbildung 6.1 ist der Aufbau der verwandten SIMS-Anlage gezeigt. Es handelt sich um ein kommerzielles Spektrometer der Firma RIBER Typ MIQ 256. Es

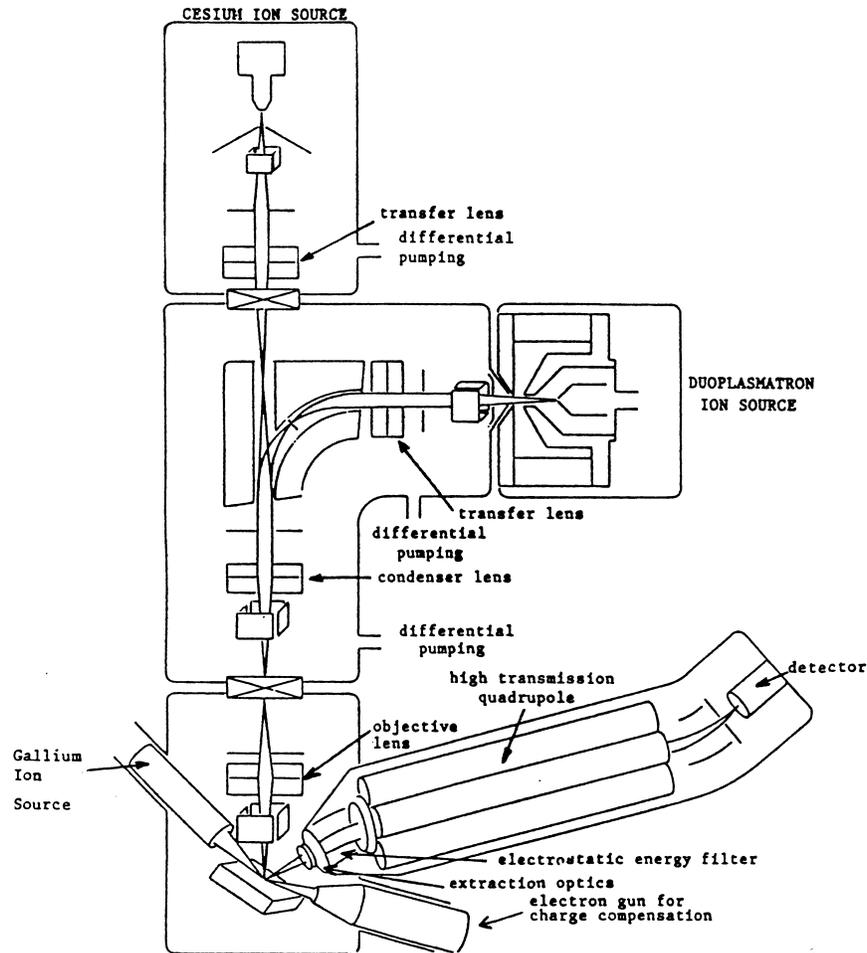


Abbildung 6.1: Aufbau des MIQ 256 SIMS-Spektrometers aus der Produktinformation der Firma RIBER. Oben im Bild befindet sich die Caesium-Ionenquelle. Im unteren rechten Teil sind der Energiefilter, das Quadrupol-Massenspektrometer sowie der Ionen-Detektor gezeigt. Im Zentrum unten in der Abbildung befindet sich die Probe.

verfügt über drei Ionenquellen: eine Gallium-Quelle, eine Duoplasmatron-Quelle zur Erzeugung eines Sauerstoff-Primärionenstrahls und die verwandte Caesium-Quelle. Die Primärionen gelangen durch ein Strahlführungssystem auf die Probe und tasten dort einen Bereich von etwa $0,25\mu\text{m}^2$ ab. Dabei können die Ionen auf $0,5\text{--}20\text{keV}$ bei einer Strahlstromdichte von $0,1\text{--}10\frac{\mu\text{A}}{\text{cm}^2}$ beschleunigt werden. Der Cs-Strahl kann in einem Winkel von $0\text{--}89^\circ$ zur Oberflächennormale der Probe eingestellt werden. Die ausgeschlagenen Sekundärionen werden mittels einer Extraktionsspannung in einen elektrostatischen Energiefilter beschleunigt und fokussiert. Durch den Energiefilter können Untergrundverunreinigungen durch Massen-Interferenzen ausgeschlossen werden. Beispielsweise können so $^{56}\text{Fe}^+$ und $^{28}\text{Si}_2$ getrennt werden. Die

Ionen werden dann durch ein Quadrupol–Massenspektrometer⁴ ihrer Masse nach analysiert, um anschließend in einem Ionen–Detektor nachgewiesen zu werden. Die Datenaufnahme erfolgt über einen Computer.

Die gesamte Anlage ist evakuiert, und es liegt in der Probenkammer ein Ultrahochvakuum von etwa $4\text{--}5\cdot 10^{-10}$ mbar vor. UHV–Bedingungen sind essentiell für eine gute Analyse, da Verunreinigungen auf der Oberfläche die Ausbeute an Sekundärionen verändern können. So wirken sich z.B. Sauerstoffverunreinigungen auf der Oberfläche durch die recht hohe Elektronenaffinität positiv auf die Erzeugung positiver Sekundärionen aus, jedoch negativ, wenn negative Sekundärionen analysiert werden. Die erreichbare Nachweiswahrscheinlichkeit liegt im ppm–Bereich und kann in günstigen Fällen sogar den ppb–Bereich erreichen.

Die in der Anlage befindliche Elektronenkanone kann dazu verwandt werden, ein Aufladen der Probe auszugleichen. Dieser Effekt tritt insbesondere bei Isolatoren auf. Durch den Beschuss mit positiv geladenen Primärionen (Cs^+) und Aussendung von negativen Sekundärionen wird die Probe positiv aufgeladen, da die Ladungen nicht abfließen können. Durch Beschuss mit Elektronen kann diese Aufladung ausgeglichen werden. Da die Ergebnisse bei diesem Verfahren nicht so leicht reproduzierbar sind, wurde bei der Untersuchung der InAs–Halbleitermaterialien auf die Verwendung der Elektronenkanone verzichtet.

Die Austrittstiefe — und damit das theoretisch maximal erreichbare Tiefenaufklärungsvermögen von SIMS — beträgt ca. 3–5 Atomlagen. Diese Auflösung wird in der Praxis durch das Recoil Mixing und eine statistische Aufräuhung der Oberfläche einer ursprünglich ebenen Probe durch das Sputtern noch verschlechtert. Außerdem erfährt der Festkörper durch die Implantation der Sputterionen eine Veränderung. Diese äußert sich in einer Anreicherung der Primärionen im Material sowie einer Änderung der ursprünglichen Kristallstruktur. So kann es zu einer Amorphisierung kommen. Dieser veränderte Bereich in der Probe wird als „altered layer“ bezeichnet. Die Dicke der Schicht entspricht etwa dem Doppelten der mittleren projizierten Reichweite der Primärionen.

Weitere Effekte, die die Ergebnisse verfälschen, sind Kratereffekte. Beim Abtragen der Probenoberfläche entsteht ein Krater. Zwei Beispiele von solchen Kratern zeigen die Abbildungen 6.2 und 6.3. Es handelt sich hier um Querschnittsaufnahmen der gesputterten Proben im abgetasteten Bereich. Die Aufnahme erfolgte mit einem Alpha–Step–Profilmessgerät, welches eine Tiefenaufklärung von 5nm besitzt. Von den Wänden des ausgebildeten Kraters werden ebenfalls Teilchen abgesputtert, die die Tiefeninformation verfälschen. Es wird daher eine Gate–Technik angewandt, sodass nur Informationen aus 10% des zentralen Bereichs des Kraters gezählt werden. Wenn die Kraterbreite am Boden (b in Abbildung 6.2) jedoch kleiner als ein Drittel der

⁴ Quadrupol–Massenspektrometer haben im Vergleich zu magnetischen Spektrometern ein geringeres Auflösungsvermögen, ermöglichen jedoch eine höhere Scan–Geschwindigkeit.

Breite oben (a in Abbildung 6.2) ist, sind die Kratereffekte durch die Gate-Technik nicht mehr auszugleichen. Messungen, bei denen diese Bedingung nicht erfüllt ist, sollten daher nicht betrachtet werden. Abbildung 6.3 zeigt einen solchen Messkrater.

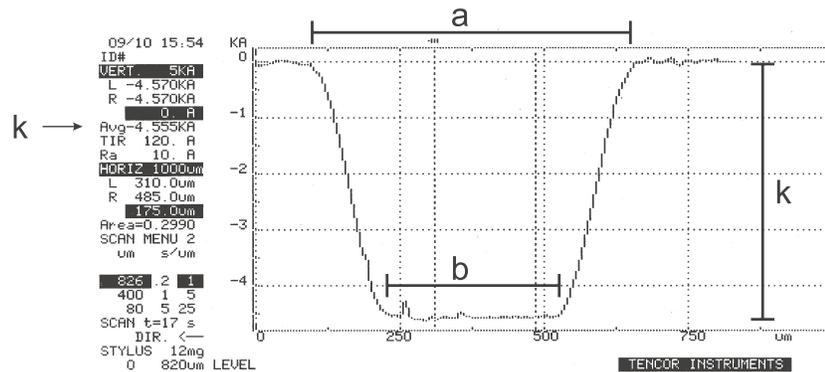


Abbildung 6.2: Vermessener Sputterkrater im Querschnitt. Die Tiefenskala auf der Ordinate ist in $k\text{\AA}$ angegeben, die Abszisse gibt die Länge in μm an.

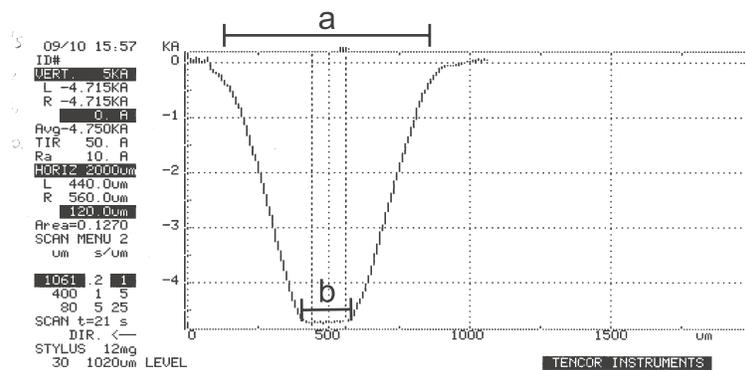


Abbildung 6.3: Vermessener Sputterkrater im Querschnitt. Die Tiefenskala auf der Ordinate ist in $k\text{\AA}$ angegeben, die Abszisse gibt die Länge in μm an. Da hier $b < \frac{1}{3}a$ ist, kann diese Messung nicht in Betracht gezogen werden.

Die Festlegung der Tiefenskala (x_i) erfolgt durch Umrechnung der Messzeit (t_i) mit der Sputterrate (σ) über:

$$x_i = t_i \cdot \sigma \quad \sigma = \frac{k}{t} \quad (6.1)$$

Die Sputterrate ergibt sich aus der gemessenen Kratertiefe k (siehe Abbildung 6.2) und der Gesamtsputterdauer t . Bei der dynamischen SIMS, die die Tiefenverteilung untersucht, liegt die Sputterrate typischerweise in der Größenordnung von $1 \frac{\text{nm}}{\text{s}}$. Bei statischen Oberflächen-Analysen liegt sie in der Größe von $1 \cdot 10^{-3} \frac{\text{nm}}{\text{s}}$. Der Fehler bei der Umrechnung in die Tiefenskala ergibt sich durch die Ungenauigkeit bei der

Messung der Tiefe des entstandenen Sputterkraters und liegt bei 10nm bis zu einer Tiefe von ca. $10\mu\text{m}$.

6.1.2 Messungen an Br in InAs

Alle SIMS-Messungen wurden während eines Forschungsaufenthaltes an der Research School of Physical Sciences & Engineering der Australian National University in Canberra in Zusammenarbeit mit Herrn P.N.K. Deenapanray durchgeführt. In alle vermessenen InAs-Proben wurde ^{79}Br mit dem dortigen 150keV Ionen-Implanter mit der Maximalenergie unter einem Winkel von 7° implantiert. Diese Energie wurde gewählt, um einen Vergleich mit bereits von M. Wehner [WEHN97] durchgeführten Messungen an mit 160keV ^{79}Br implantierten GaAs-Proben zu ermöglichen. Es sind Proben der drei unterschiedlichen InAs-Materialien untersucht worden, deren Eigenschaften in der Tabelle 3.1 angegeben sind. Die Proben sind mit einer Dosis von $2\cdot 10^{13}\text{ cm}^{-2}$ und $1\cdot 10^{14}\text{ cm}^{-2}$ implantiert worden. Es wurde jeweils eine Probe wie implantiert gemessen und eine nach einem Ausheilschritt bei 750°C für 120s. Das Ausheilen erfolgte mit einer Halogenlampen-RTA-Anlage (siehe Abschnitt 3.5) unter einem Stickstofffluss von 2l/min bei Verwendung eines Proximity-CAP. Dieses Verfahren war durch die örtlichen Möglichkeiten vorgegeben. In der Tabelle 6.2 sind die vermessenen Proben aufgeführt.

Probe	Br-Dosis [$\frac{\text{Ionen}}{\text{cm}^2}$]	mittlere Br-Konzentration [$\frac{\text{Ionen}}{\text{cm}^3}$]	Messung	aufgenommene Elemente	Sputter- strom
<i>InAs:S</i>					
I	$2\cdot 10^{13}$	$2\cdot 10^{18}$	wie implantiert	$^{75}\text{As}, ^{79}\text{Br}$	15nA
II	$2\cdot 10^{13}$	$2\cdot 10^{18}$	nach 120s bei 750°C	$^{75}\text{As}, ^{79}\text{Br}$	15nA
II	$2\cdot 10^{13}$	$2\cdot 10^{18}$	nach 120s bei 750°C	$^{75}\text{As}, ^{79}\text{Br}, ^{32}\text{S}, ^{34}\text{S}$	150nA
VI	$1\cdot 10^{14}$	$1\cdot 10^{19}$	nach 120s bei 750°C	$^{75}\text{As}, ^{79}\text{Br}$	15nA
VI	$1\cdot 10^{14}$	$1\cdot 10^{19}$	nach 120s bei 750°C	$^{75}\text{As}, ^{79}\text{Br}, ^{32}\text{S}$	150nA
<i>InAs:Zn</i>					
X	$2\cdot 10^{13}$	$2\cdot 10^{18}$	wie implantiert	$^{75}\text{As}, ^{79}\text{Br}$	15nA
XII	$2\cdot 10^{13}$	$2\cdot 10^{18}$	nach 120s bei 750°C	$^{75}\text{As}, ^{79}\text{Br}$	15nA
XIV	$1\cdot 10^{14}$	$1\cdot 10^{19}$	wie implantiert	$^{75}\text{As}, ^{79}\text{Br}$	150nA
XV	$1\cdot 10^{14}$	$1\cdot 10^{19}$	nach 120s bei 750°C	$^{75}\text{As}, ^{79}\text{Br}$	150nA
<i>InAs:Un</i>					
LI	$2\cdot 10^{13}$	$2\cdot 10^{18}$	wie implantiert	$^{75}\text{As}, ^{79}\text{Br}$	15nA
LII	$2\cdot 10^{13}$	$2\cdot 10^{18}$	nach 120s bei 750°C	$^{75}\text{As}, ^{79}\text{Br}$	15nA
LV	$1\cdot 10^{14}$	$1\cdot 10^{19}$	wie implantiert	$^{75}\text{As}, ^{79}\text{Br}$	150nA
LVI	$1\cdot 10^{14}$	$1\cdot 10^{19}$	nach 120s bei 750°C	$^{75}\text{As}, ^{79}\text{Br}$	150nA

Tabelle 6.2: Liste aller mit SIMS vermessenen InAs-Proben. Die Ausheilschritte erfolgten alle für 120s unter einem Stickstofffluss von 2l/min mit einem Proximity-CAP. Die Bestimmung der Br-Dosen bzw. Konzentrationen erfolgte entsprechend Anhang B.2.

Die Energie der positiv geladenen Caesium-Sputterionen war in allen Fällen 10keV bei einem Einfallswinkel von 50° zur Oberflächennormalen. Der Sputterstrom betrug 15nA bzw. 150nA.

Aufgezeichnet wurden die Arsen-, Brom- und bei den n-Typ-Proben zum Teil die Schwefelausbeuten. Angegeben werden die gemessenen Intensitäten. Absolute Konzentrationen können nicht angegeben werden, da kein geeichter Standard mitgemessen wurde. Um die Ergebnisse an den unterschiedlichen Proben vergleichen zu können, sind die gesamten Daten auf die Arsenausbeute der Probe I (Tabelle 6.2) normiert. Diese Normierung ist in der Abbildung 6.4 exemplarisch gezeigt. Dargestellt sind die Messungen an der Probe LI und LII aus der Tabelle 6.2. Die As-Intensität besitzt einen konstanten Wert, die Messwerte sind alle mit einem Faktor multipliziert worden, sodass die Arsen-Intensitäten aller Messungen übereinstimmen. Die zugehörigen Br- und S-Ausbeuten sind dementsprechend mit den gleichen Faktoren multipliziert worden. In der Abbildung sind die Intensitäten gegenüber der

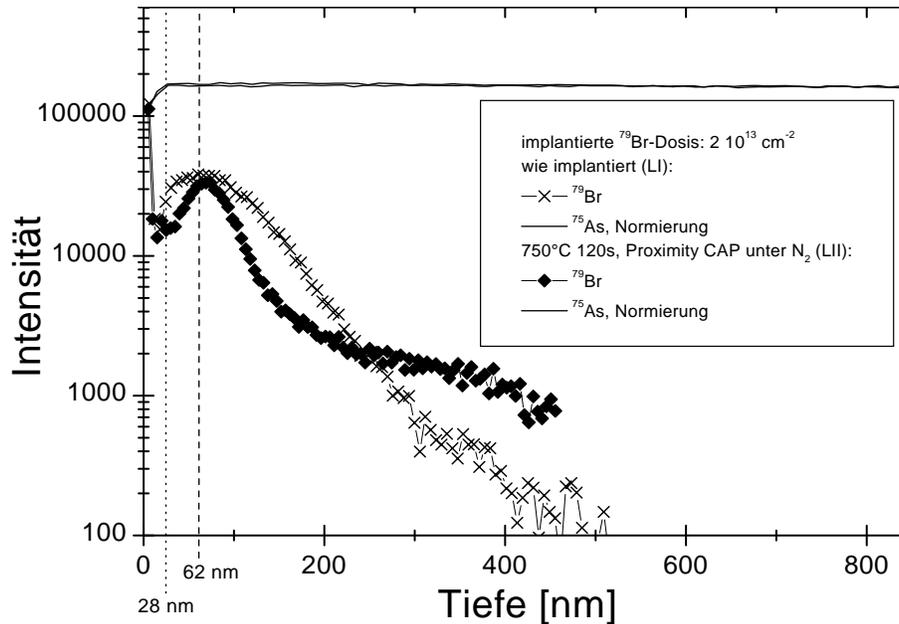


Abbildung 6.4: Beispiel der Normierung der SIMS-Profile auf die As-Ausbeuten. Die Genauigkeit der Normierung erkennt man an der Überlappung der As-Intensitäten. Eingezeichnet ist die Tiefe von 28nm, bei der sich ein Gleichgewicht der Sputterbedingungen eingestellt hat und ab der somit die Ergebnisse verwandt werden können. Außerdem ist die mittlere Reichweite x_m der Br-Ionen eingezeichnet, die sich aus der TRIM-Simulation zu 62nm ergibt.

Tiefe aufgetragen. Die Normierung auf die As-Intensität ist gut gegeben, was die beiden übereinanderliegenden, nicht mehr auflösbaren Datenlinien zeigen. Die Diskussion des Ergebnisses erfolgt weiter unten. Über die oberflächennahen Schichten können keine Aussagen getroffen werden, da erst einige Sekunden benötigt werden, bis sich die Sputterrate eingeregelt hat. Der erkennbare Anstieg der Intensitäten an der Oberfläche ist also nicht physikalischen Ursprungs. Am As-Profil lässt sich gut erkennen, wann sich die konstante Ausbeute und somit das Gleichgewicht bei den Sputterbedingungen eingestellt hat. Der nicht zu verwertende Oberflächenbereich

ergibt sich damit zu 28nm und liegt damit noch vor dem Br-Implantationsmaximum welches sich nach der TRIM-Simulation bei einer Tiefe von 62nm befindet. Es zeigt sich hier außerdem, dass es nicht sinnvoll ist, bei den SIMS-Messungen Implantationen mit geringer Energie durchzuführen, da dann das Implantationsmaximum im nicht zu verwertenden Oberflächenbereich liegen würde.

Die Sputterausbeute des Broms ist wesentlich höher als die des Arsens, wie es auch nach dem im vorherigen Abschnitt Diskutierten zu erwarten ist. Das aus der Abbildung ablesbare Verhältnis der Intensitäten von Brom zu Arsen beträgt im Intensitätsmaximum etwa 0,3. Da das Verhältnis der Konzentrationen⁵ nur $1 \cdot 10^{-9}$ beträgt, ist somit die Ausbeute von Brom etwa um einen Faktor 10^8 höher als die von Arsen.

Die Abbildung 6.5 zeigt, dass die Sputterausbeute abhängig vom gewählten Sputterstrom ist. Die gezeigten Messungen sind an derselben Probe II mit unterschiedlichen

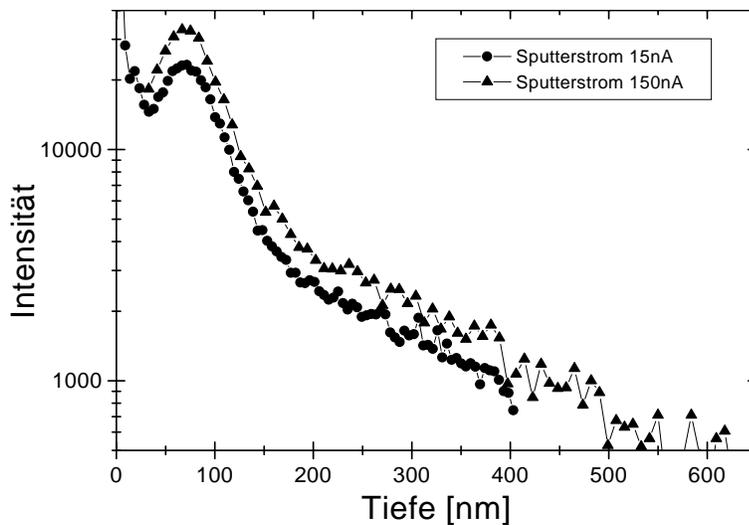


Abbildung 6.5: ⁷⁹Br-Profile aus den SIMS-Messungen, die mit unterschiedlichen Cs-Sputterströmen an Probe II (Tabelle 6.2) durchgeführt worden sind.

Strömen durchgeführt worden, einmal mit 15nA und einmal mit 150nA. Bei gleicher Normierung zeigt sich bei der mit höherem Strom gesputterten Messung eine erhöhte Intensität, bei etwa gleicher Profilform. Da auch hier auf die Arsen-Intensität normiert worden ist, ist entweder die Sputterausbeute des Arsens bei höherem Strom geringer oder die Ausbeute des Br bei höherem Strom größer. Messungen, die mit unterschiedlichen Sputterströmen durchgeführt wurden, können daher nicht miteinander verglichen werden.

⁵ Die As-Konzentration im InAs-Material ergibt sich aus:

$$\frac{6 \cdot 10^{23}}{M(\text{In}) + M(\text{As})} \cdot \rho(\text{InAs}) = \frac{6 \cdot 10^{23}}{114,82\text{g} + 74,92\text{g}} \cdot 5,66 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} = 2 \cdot 10^{22} \frac{1}{\text{cm}^3}.$$

Bei einer Br-Konzentration von $2 \cdot 10^{13} \frac{1}{\text{cm}^3}$ kann man daraus das Verhältnis von $1 \cdot 10^{-9}$ berechnen.

6.1.2.1 InAs:S

In der Abbildung 6.6 sind die Messungen gezeigt, die an InAs:S gewonnen wurden. Betrachtet man zunächst den Fall der geringeren Implantationsdosis ($2 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$),

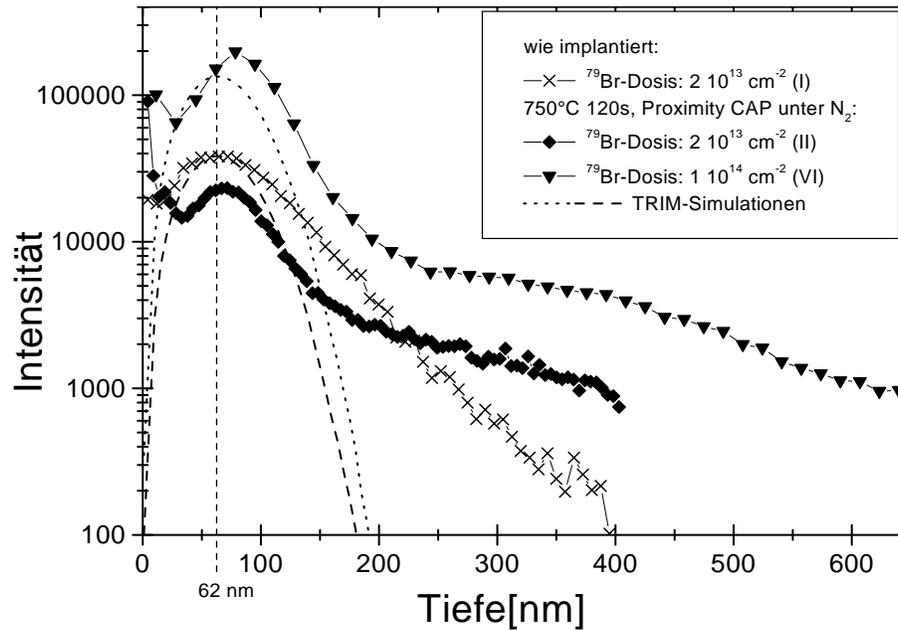


Abbildung 6.6: SIMS-Messungen an InAs:S, implantiert mit $150 \text{ keV } ^{79}\text{Br}$, mit einer Dosis von $2 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ und $1 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$. Eingetragen sind außerdem die TRIM-simulierten Tiefenprofile für die beiden Dosen sowie die dabei ermittelte mittlere Reichweite x_m von 62 nm .

so erkennt man, dass das Implantationsmaximum gut mit dem Maximum der TRIM-Simulation bei 62 nm übereinstimmt. Jedoch ist die Verteilung zu größeren Tiefen hin wesentlich breiter. Im Gegensatz zu der durch eine Gaussverteilung anpassbaren TRIM-Verteilung wird das Implantationsprofil durch eine Lorentzverteilung beschrieben. Aus den dabei ermittelten Breiten ergibt sich eine Verbreiterung des Profils gegenüber der Simulation von etwa 10%. Diese Verbreiterung könnte man durch eine Diffusion während der Implantation oder durch Gitterführungseffekte erklären. Da die Proben unter einem Winkel von 7° implantiert wurden, kann ein starker Gitterführungseffekt ausgeschlossen werden. Nach dem Ausheilschritt bei 750°C ist die Verteilung im Maximum etwas schmaler, und es zeigt sich durch die Erhöhung des Profils im Inneren der Probe eine deutliche Diffusion in das Material hinein. Integriert man beide Kurven, so kann man daraus schließen, dass nach dem Ausheilschritt noch ca. 70% der eingebrachten Br-Atome in der Probe sind.

Für die höhere Implantationsdosis von $1 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ wurde nur eine Probe nach einem Ausheilschritt bei 750°C vermessen. Man erkennt, dass auch hier eine Diffusion in die Probe stattgefunden haben muss. Ein Vergleich mit der TRIM-Simulation zeigt

außerdem, dass das Maximum des Profils in das Innere verschoben ist.

Bei den ausgeheilten Proben wurde außerdem die Schwefel-Ausbeute vermessen. Das Ergebnis ist in Abbildung 6.7 dargestellt. Dabei ist bei der Probe II mit der Br-Dosis von $2 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ sowohl die Ausbeute des häufigsten Isotops ^{32}S (95,02%) als auch die des ^{34}S (4,21%) vermessen worden. Bei der Probe VI mit der höheren Implantationsdosis ist nur die Ausbeute von ^{32}S aufgenommen worden. Deutlich ist

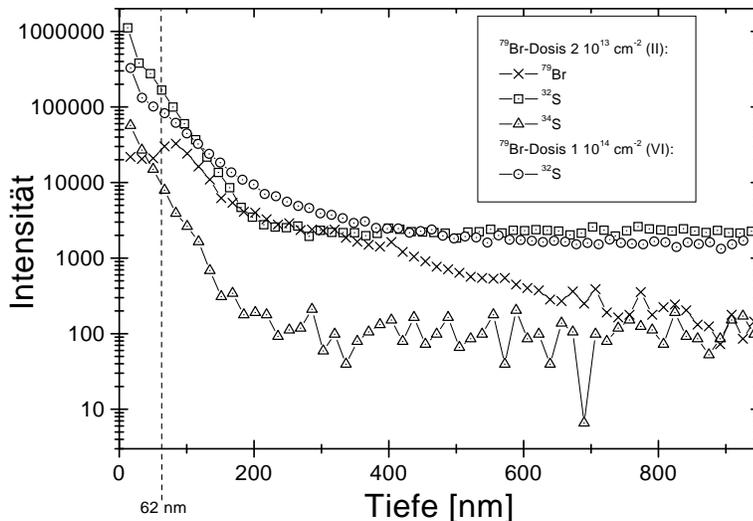


Abbildung 6.7: SIMS-Profil der Schwefelverteilung in InAs:S-Proben mit verschiedenen implantierten Br-Dosen. Alle Proben sind für 120s bei 750°C mit einem Proximity-CAP unter Stickstofffluss ausgeheilt worden. Außerdem ist die TRIM-simulierte mittlere Reichweite x_m von 62nm eingetragen.

zu erkennen, dass bei beiden Proben die Schwefel-Konzentration an der Oberfläche angestiegen ist. In den ersten 300nm erkennt man bei der Probe II eine sehr stark erhöhte S-Intensität bei der Probe VI sogar bis zu einer Tiefe von 400nm. Das entspricht genau dem Bereich, in dem das Implantationsmaximum des Br liegt. In einer nicht getemperten Probe wurde die Schwefel-Ausbeute nicht vermessen, sodass ein Vergleich nicht möglich ist. Daher kann nicht geklärt werden, ob der Anstieg durch die Implantation bedingt ist oder nicht.

Ein Isotopeneffekt kann nicht beobachtet werden, das Verhältnis der S-Intensitäten im Bulk der Probe beträgt $\frac{I(^{34}\text{S})}{I(^{32}\text{S})} = 0,04$. Die Isotopenhäufigkeiten haben ebenfalls ein Verhältnis von 0,04.

6.1.2.2 InAs:Zn

Die Abbildung 6.8 zeigt die Messungen, die am p-Typ-InAs gewonnen wurden. Bei der Betrachtung der Probe X mit einer geringeren Implantationsdosis zeigt sich ein analoges Verhalten wie bei dem n-Typ-InAs. Die Lage des Implantationsmaximums

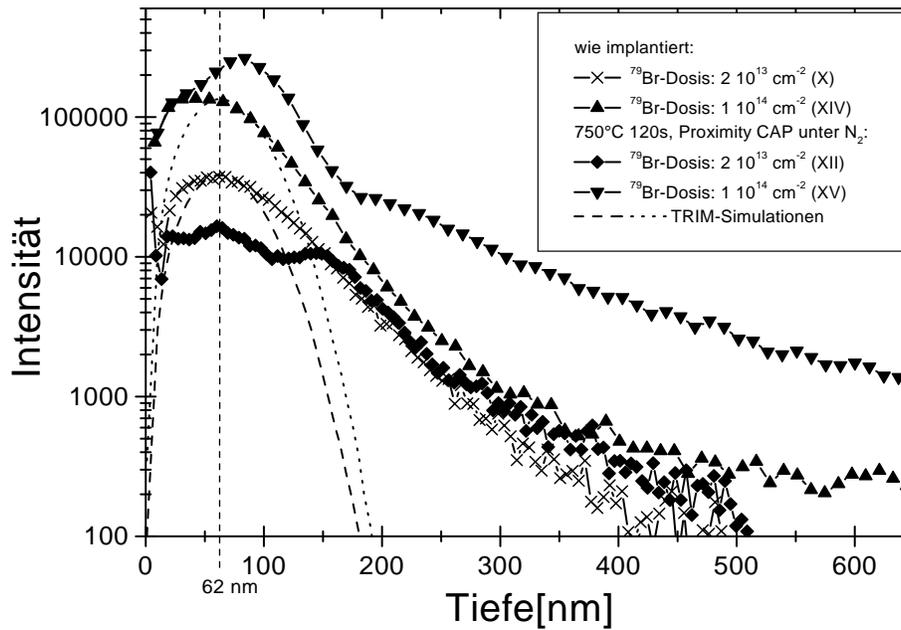


Abbildung 6.8: SIMS-Messung an InAs:Zn, implantiert mit $150\text{keV } ^{79}\text{Br}$, und einer Dosis von $2 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ und $1 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$. Eingezeichnet sind außerdem die TRIM-simulierten Tiefenprofile für die beiden Dosen sowie die dabei ermittelte mittlere Reichweite x_m von 62nm .

stimmt mit der in der TRIM-Simulation ermittelten gut überein. Jedoch ist auch hier die gemessene Verteilung wesentlich breiter. Nach dem Ausheilschritt bei 750°C ist keine weitere Diffusion in das Probeninnere zu beobachten. Allerdings bildet sich in diesem Fall ein weiterer Peak bei etwa 150nm aus. Dieses Verhalten hat sich in einer weiteren Messung bestätigt. Integriert man beide Kurven, so zeigt sich, dass nach dem Ausheilschritt nur noch 60% der implantierten Br-Dosis in der Probe verblieben ist.

Bei der höheren Implantationsdosis (Proben XIV und XV) zeigt das Br-Profil der wie implantiert gemessenen Probe XIV das gleiche Verhalten wie die anderen Proben, die direkt nach der Implantation vermessen wurden. Das Maximum des Profils liegt auch hier bei den in der TRIM-Simulation ermittelten 62nm . Jedoch ist das Profil breiter als simuliert. Nach dem Ausheilen ist jedoch das Maximum zu größeren Tiefen hin verschoben und es ist etwas schmaler. Im Gegensatz zu dem Verhalten bei der geringen Implantationsdosis bildet sich hier kein zweiter Peak aus. Ab etwa 200nm zeigt sich eine Erhöhung der Br-Intensität. Dies bedeutet eine Diffusion in das Probeninnere. Da die beiden vermessenen Proben nicht gleichzeitig implantiert worden sind, ist es nicht sicher, dass in beiden Proben die exakt gleiche Dosis implantiert worden ist. Ein Vergleich der Intensitätsintegrale für eine qualitative Aussage ist daher nicht möglich. Bei den beiden nominell mit $1 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2} \text{ } ^{79}\text{Br}$ implantierten Proben ergibt sich so in der Tat bei der für 120s bei 750°C ausgeheilten Probe eine größere Gesamtintensität als bei der Probe, die wie implantiert vermes-

sen worden ist. Bei den bisher verglichenen Proben sind die Implantationen immer gleichzeitig erfolgt.

Da die Ausbeute an negativ geladenen Zn-Sekundärionen aufgrund ihrer geringen Elektronenaffinität beim Cs-Sputtern sehr gering ist, erfolgte keine Messung der Zn-Intensitäten.

6.1.2.3 InAs:Un

Die am InAs:Un gewonnenen Ergebnisse sind in der Abbildung 6.9 gezeigt. Bei

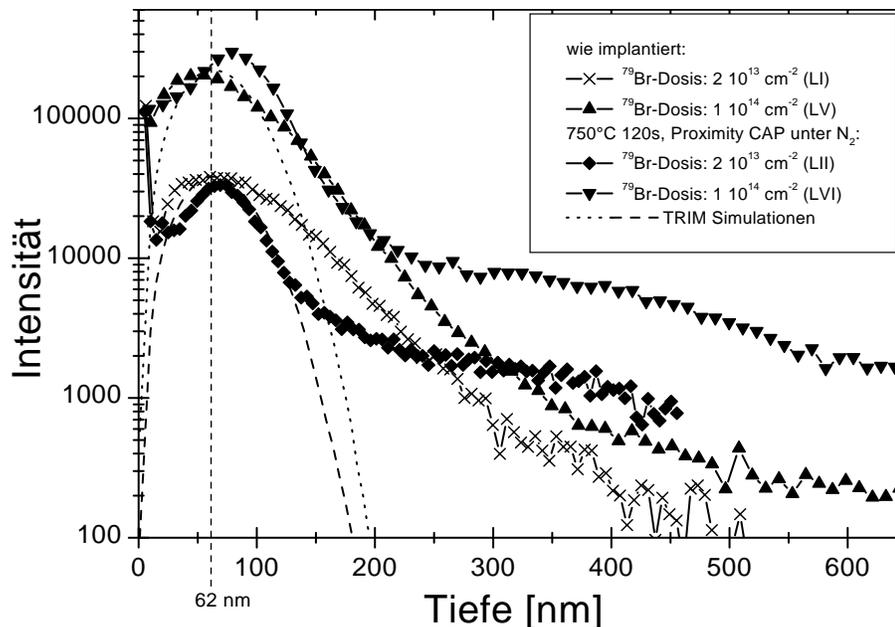


Abbildung 6.9: SIMS-Messungen an nicht vordotiertem InAs-Material, welches mit 150keV ^{79}Br und den Dosen $2 \cdot 10^{13}\text{ cm}^{-2}$ und $1 \cdot 10^{14}\text{ cm}^{-2}$ implantiert worden ist. Eingetragen sind außerdem die TRIM-simulierten Tiefenprofile für die beiden Dosen sowie die daraus erhaltene mittlere Reichweite x_m von 62nm .

beiden Implantationsdosen zeigen die wie implantiert vermessenen Proben LI und LV einen Implantationspeak bei der TRIM-simulierten Tiefe von 62nm mit einem verbreiterten Profil in das Probeninnere. Die Probe LII mit der geringeren Br-Dosis zeigt nach dem Ausheilschritt ein schmaleres Profil in der Nähe des Maximums. Das Profil entspricht bis zu einer Tiefe von etwa 120nm dem Profil der TRIM-Simulation. Dann stellt sich jedoch eine deutlich erhöhte Konzentration ein. Eine Integration beider Kurven zeigt, dass bei der geringen Implantationsdosis nach dem Ausheilschritt noch etwa 69% der Br-Atome im Material sind. Bei der höheren Dosis (Probe LVI) zeigt sich nach dem Ausheilen ebenfalls eine Verschmälerung des Peaks. Jedoch zeigt sich auch hier, wie bei den beiden anderen InAs-Materialien, dass der Peak etwas in das Probeninnere verschoben ist. Auch hier ist eine deutliche

Diffusion in das Probeninnere zu erkennen, die sich in der erhöhten Intensität im Probeninneren äußert. Ein quantitativer Vergleich der Intensitätsintegrale kann, aufgrund der Tatsache, dass beide Proben nicht zusammen implantiert worden sind, auch in diesem Fall nicht erfolgen.

6.1.3 Ergebnisse

Die SIMS-Messungen haben gezeigt, dass der überwiegende Teil der implantierten Br-Atome von der thermischen Behandlung unbeeinflusst in der durch die Implantation vorgegebenen Position verbleibt. Für eine bei einer Implantationsenergie von 150keV eingebrachte Br-Dosis von $2 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-2}$ liegt der Gesamtverlust der Br-Atome, die über die Oberfläche aus dem Material hinaus diffundieren, bei 31% (InAs:S, InAs:Un) bzw. 40% (InAs:Zn). Dieses Resultat stimmt gut überein mit einer früheren Untersuchung an GaAs. Dort wurde radioaktives ^{82}Br mit 160keV in GaAs implantiert und bei 850°C für 120s ausgeheilt. Der Verlust der Aktivität betrug dabei 28%. Außer bei dem InAs:Zn, welches mit der geringeren Dosis implantiert worden ist, konnte bei allen anderen Proben eine merkliche Diffusion in das Probeninnere gefunden werden.

Auch SIMS-Messungen an GaAs, die nach der Implantation von ^{79}Br mit 160keV durchgeführt wurden [WEHN97] zeigen, dass die Ergebnisse an InAs und GaAs vergleichbar sind. Abbildung 6.10 zeigt SIMS-Messungen an si-GaAs mit einer Br-Dosis von $3 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-2}$. Auch hier wird eine Diffusion in das Probeninnere sowie zur

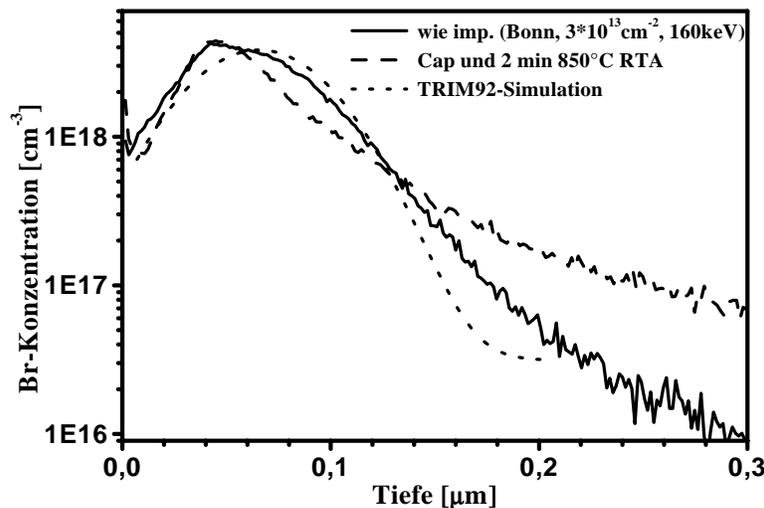


Abbildung 6.10: TRIM-Simulation und SIMS-Spektren von Br in GaAs, nach 160keV Implantation ($3 \cdot 10^{13} \text{ Br cm}^{-2}$) und Ausheilen bei 850°C für 120s (aus [WEHN97]). Die Cs^+ -Primärionen hatten eine Energie von 10keV und es lag eine Stromdichte von 200nA cm^{-2} vor. Eine Diffusion der Br-Atome beim Ausheilen ist deutlich zu erkennen.

Probenoberfläche beobachtet. Dies zeigt sich — im Gegensatz zu den Messungen am InAs — in einer Oberflächenverlagerung des Peaks nach thermischer Behandlung. Das Profil direkt nach der Implantation ist auch hier breiter als es aus der TRIM-Simulation erhalten wird, jedoch zeigt sich der Effekt hier weniger deutlich. Die Lage des Peakmaximums stimmt weniger gut mit der simulierten mittleren Reichweite überein als bei den InAs–Untersuchungen.

Die mit einer Br–Dosis von $2 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ implantierten InAs:S– und InAs:Un–Proben zeigen nach der Ausheilung von 120s bei 750°C ein schmaleres Tiefenprofil gegenüber den wie implantiert vermessenen Proben. Gleichzeitig kann eine Diffusion in das Probeninnere beobachtet werden. Ein ähnliches Verhalten konnte von Gerasimenko et al. [GERA95] bei der Untersuchung von Beryllium in InAs beobachtet werden. Dort wurde eine Be–Dosis von $1 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ mit einer Energie von 200keV implantiert. Die Proben wurden bei Temperaturen von 400°C - 800°C für 30min unter Stickstoffatmosphäre ausgeheilt. Die Oberflächen der Proben waren dabei durch eine SiO_2 –Schutzschicht geschützt. Die aus SIMS–Messungen mit 13keV O_2^+ bei einer Abtragerate von $1 \frac{\text{nm}}{\text{s}}$ gewonnenen Ergebnisse zeigt die Abbildung 6.11. Nach

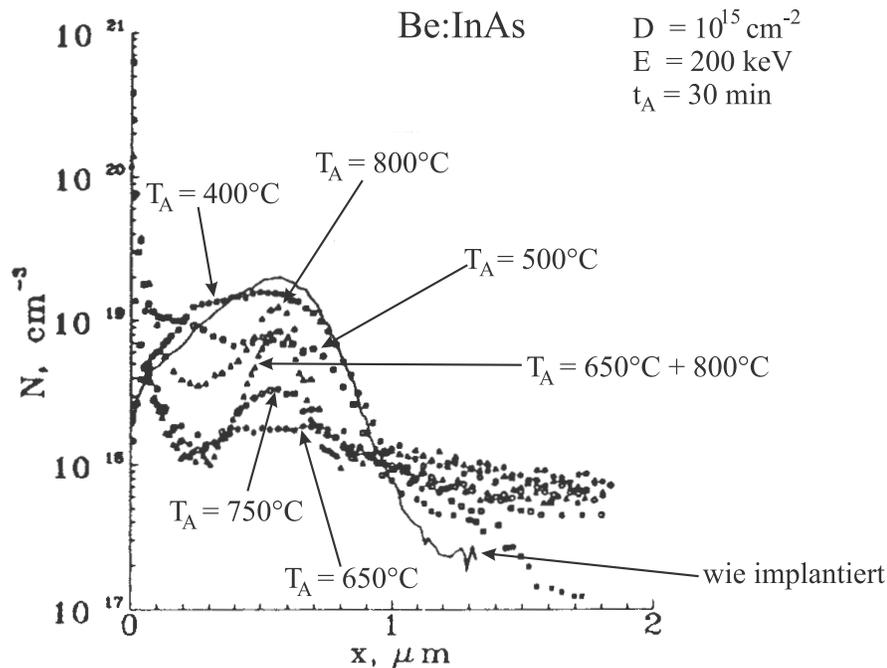


Abbildung 6.11: SIMS–Spektren von Be in InAs nach 200keV Implantation ($1 \cdot 10^{15} \text{ Be cm}^{-2}$) (aus [GERA95]). Die O_2^+ –Primärionen hatten eine Energie von 13keV. Gezeigt sind Spektren nach unterschiedlichen Ausheilschritten bei den Temperaturen T_A .

der Implantation erhält man ein recht breites Tiefenprofil, das sich bis zu Ausheiltemperaturen von 400°C kaum verändert. Dann tritt eine Diffusion in das Innere der Probe und zum SiO_2 –InAs–Interface hin auf. Die Be–Konzentration bei der mittleren Eindringtiefe nimmt nach einem Temperschnitt bei 650°C für 30min um eine Größenordnung ab. Bei weiter steigender Ausheiltemperatur bildet sich jedoch

an derselben Stelle ein schmalerer, neuer Peak aus. Dieses merkwürdige Verhalten wird darauf zurückgeführt, dass die bei der mittleren Eindringtiefe erzeugten Strahlenschäden nicht mit dem interstitiell eingebrachten Beryllium wechselwirken und so das Beryllium zunächst aus diesem Bereich über interstitielle Diffusion herausdiffundiert. Bei Temperaturen oberhalb von 700°C sollten dann diese nicht ausgeheilten Strahlenschäden eine Getterschicht bilden und so eine Senke für das diffundierende Beryllium darstellen und damit die Neubildung des Peaks bewirken.

Ob sich das Brom im InAs ähnlich verhält und auch hier die Atome an einer Getterschicht ab einer bestimmten Ausheiltemperatur eingefangen werden, lässt sich anhand der vorliegenden Daten nicht feststellen, da nach niedrigeren Ausheiltemperaturen keine Untersuchungen durchgeführt wurden.

Bei den Messungen an Proben verschiedener Br-Dosen konnte ein konzentrationsabhängiges Verhalten beobachtet werden. Bei allen drei InAs-Materialien zeigten die Proben mit der höheren Br-Dosis von $1 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ nach dem Ausheilen bei 750°C für 120s eine Verlagerung des Peakmaximums in das Innere der Probe hinein. Diese Verlagerung kann bei der geringeren Dosis von $2 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ nicht beobachtet werden. Jedoch zeigt sich dort beim p-Typ-InAs die Ausbildung eines zweiten Peaks nach dem Ausheilschritt bei 750°C .

Für die Untersuchungen, die an Br-ionenimplantierten InAs- und GaAs-Proben durchgeführt werden, bedeutet dieses Ergebnis, dass bei Br-Implantationen im Bereich von $5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ die Verteilung der eingebrachten Ionen nach der Implantation genügend gut durch eine entsprechende TRIM-Simulation gegeben ist. Nach einem Ausheilschritt von 120s bei 750°C bei dem InAs bzw. bei 850°C im Fall des GaAs, befindet sich der größte Teil der eingebrachten Atome an der gleichen Position im Material wie zuvor.

6.2 Radiotracer-Messungen an Br in GaAs

Für die Untersuchungen mit der SIMS-Methode benötigt man Proben mit einer relativ hohen Br-Konzentration im Vergleich zu den an ISOLDE-CERN mit ^{77}Br (^{77}Se) implantierten und der PAC-Methode untersuchten Proben. Zudem konnte bei den InAs-Materialien ein konzentrationsabhängiges Verhalten beobachtet werden, sodass Messungen mit Br-Konzentrationen unterhalb der SIMS-Nachweisgrenze von besonderem Interesse sind.

Die dazu verwandte Radiotracer-Methode zeichnet sich durch eine hohe Sensitivität aus und ermöglicht so die Untersuchung geringerer Konzentrationen. Alle Messungen sind in Stuttgart am Institut für Theoretische und Angewandte Physik in Zusammenarbeit mit Herrn S. Matics durchgeführt worden. Der Beginn der Kollaboration lag zeitlich vor der Festlegung des Forschungsschwerpunktes InAs, sodass die

Messungen alle an GaAs durchgeführt wurden. Die vorangehenden Untersuchungen mit der SIMS-Methode haben jedoch gezeigt, dass die an GaAs gewonnenen Ergebnisse in gewissem Maße auf InAs übertragen werden können. Es sind Messungen an semiisolierenden si-GaAs-Proben, deren Eigenschaften in Kapitel 3.1.2 aufgeführt sind, durchgeführt worden. Die Proben sind mit radioaktivem ^{82}Br bei 60keV unter 7° am Bonner Isotopenseparator (Abschnitt 3.3) implantiert worden. Dies entspricht der Implantationsenergie der PAC-Proben, die an ISOLDE-CERN implantiert wurden.

6.2.1 Die Radiotracer-Methode

An den implantierten und thermisch behandelten Proben erfolgt zur Bestimmung der Br-Tiefenprofile eine Schichtenteilung der Proben mit einer Ionenstrahlzerstäubungsanlage. Der Vorteil dieses Verfahrens besteht in einer hohen Tiefenauflösung, die im Bereich von wenigen atomaren Schichten liegen kann. Abbildung 6.12 zeigt schematisch den Aufbau der verwandten Anlage.

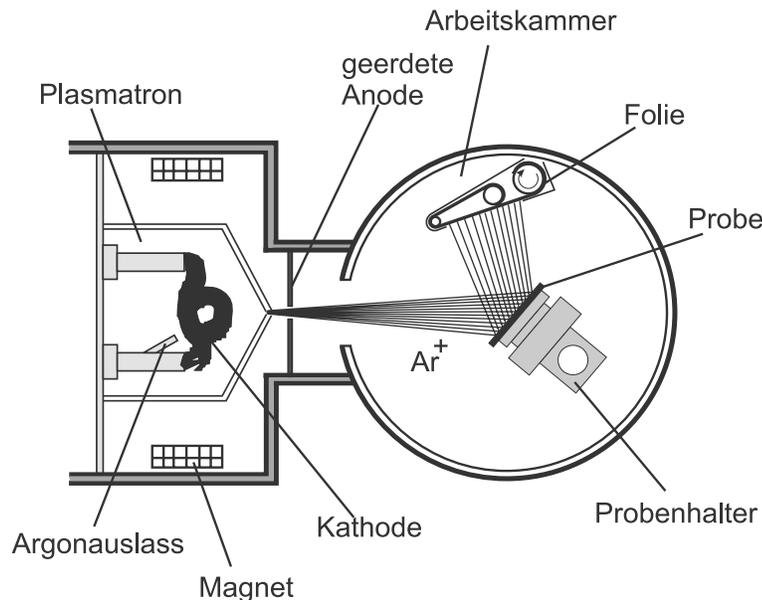


Abbildung 6.12: Schematische Darstellung der Ionenzerstäubungsanlage, eine genauere Beschreibung befindet sich im Text.

Hauptbestandteile der Ionenstrahlzerstäubungsanlage sind die Ionenquelle (Plasmatron) und die Arbeitskammer. Im Plasmatron wird ein konstanter Argondruck von $2 \cdot 10^{-2}$ mbar aufrechterhalten. Eine mit Thorium legierte Wolframkathode, durch die ein Strom von ungefähr 50A fließt, emittiert Elektronen durch Glühemission. Durch das Anlegen einer Spannung werden diese in Richtung der als Zwischenanode wirkenden Plasmatronwand beschleunigt, wobei sie durch Stöße Argonatome ionisieren. Dadurch wird zwischen Plasmatronwand und Zwischenanode ein Plas-

ma gezündet. Um eine hohe Ionisationsrate zu erreichen, werden Elektronen und Argonionen zusätzlich mittels eines Magnetfeldes auf Kreisbahnen gezwungen. Der Plasmastrom kann in einem Bereich von 1,6 - 2,9A eingestellt werden.

Das Plasmatron ist durch eine kleine Öffnung mit der Arbeitskammer verbunden. In dieser herrscht ein Druck von $2 \cdot 10^{-5}$ mbar. Aufgrund dieser Druckdifferenz und eines negativen Potentials zwischen Plasmatronwand und der geerdeten Anode gelangen die Argonionen in die Arbeitskammer. Eine negative Hochspannung beschleunigt diese zur Probe, wo sie ihre Energie auf die Probenatome übertragen. Die Probenatome können dann über Stoßfolgeprozesse die Probe verlassen, die Probenoberfläche wird abgesputtert. Der Argon-Ionenstrom liegt dabei in der Größenordnung von $200\text{-}300\mu\text{A}$. Ist am Probenhalter eine Gleichspannung angelegt, so wird die Probe einem kontinuierlichen Argon-Ionenstrom ausgesetzt. Man spricht dabei vom Gleichspannungs-Sputtern. Bei diesem Abtragprozess können sich nichtleitende Materialien aufladen, da die zugeführte positive Ladung der Argonionen nicht abfließen kann. Dies führt zu einer Verringerung der Sputterrate und einer Verfälschung des Profils. Für solche Materialien wurde das Hochfrequenz-Sputtern (HF) entwickelt [HORZ97]. Dabei wird zwischen der Plasmaquelle und der Probe ein hochfrequentes Wechselfeld im GHz-Bereich angelegt. Auf einer Halbwelle werden dann die Argonionen zur Probe hin beschleunigt und auf der anderen Halbwelle werden die Ionen abgebremst und die im Plasmatron befindlichen Elektronen können zum Ladungsausgleich auf die Probe gelangen. Aufgrund der größeren Trägheit der Argonionen wird jedoch auch bei diesem Verfahren effektiv mehr positive als negative Ladung auf die Probe gelangen.

Um eine über die Probe konstante Abtragrata zu erzielen, wird der Probenhalter durch einen Motor gedreht. Hierdurch werden mikroskopische Unebenheiten, wie sie bei Ionenbeschuss generell entstehen, reduziert. Die von den Argonionen abgetragenen Atome werden auf einer Folie gesammelt, die nach bestimmten, einstellbaren Zeitabschnitten durch einen Motor weitergedreht wird. Eine Blende stellt sicher, dass stets ein konstanter Bruchteil des abgetragenen Materials auf der Folie aufgesammelt wird. Eine genauere Beschreibung der Apparatur findet sich in [MAIE74].

Nach so erfolgter Schichtenteilung der Probe wird die Radioaktivität der einzelnen Folienabschnitte bestimmt. Im Falle des verwandten ^{82}Br werden dazu die Folienabschnitte in kleine Fläschchen mit Flüssig-Szintillator gegeben und mittels eines β -Detektors⁶ eine zur Aktivität des Abschnitts proportionale Zählrate aufgenommen. Diese ist proportional zur ^{82}Br -Tracer-Konzentration in der zugehörigen Probenschicht. In Verbindung mit der genauen Kenntnis der abgetragenen Schichtdicke erhält man somit die Tiefenprofile der Tracer-Atome.

Um Tiefenprofile verschiedener Proben miteinander vergleichen zu können, muss eine Anpassung der Zählraten erfolgen. Dazu wird die Zählrate auf den Messzeitpunkt

⁶Die ausgesandte β -Strahlung des nachzuweisenden Isotops, regt das Szintillationsmaterial an und führt so zur Aussendung von Photonen, die dann mit einem Photomultiplier detektiert werden.

einer Probe im β -Detektor normiert und so der radioaktive Zerfall berücksichtigt. Dies ist wichtig, wenn — wie bei dem verwandten ^{82}Br — die Halbwertszeit mit 36h relativ kurz ist. Für einen Vergleich muss außerdem die anfänglich eingebrachte Aktivität normiert werden. Dazu ist nach der Implantation die Stärke jeder Probe mit einem Zählrohr aufgenommen und auf den Wert einer Probe normiert worden. Die so erhaltenen Tiefenprofile sind somit untereinander vergleichbar.

6.2.2 Messungen an ^{82}Br in si-GaAs

Tabelle 6.3 gibt eine Übersicht über alle untersuchten Proben.

Probe	Br-Dosis [cm^{-2}]	mittlere Br-Konzentration [cm^{-3}]	Temperaturbehandlung	Si_3N_4 -Schicht entfernt ?	Sputtern
5_D1	$\leq 1 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$	$\leq 2 \cdot 10^{17} \text{cm}^{-3}$	—	—	HF
2_D1	$\leq 1 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$	$\leq 2 \cdot 10^{17} \text{cm}^{-3}$	—	ja	HF
3_D1	$\leq 1 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$	$\leq 2 \cdot 10^{17} \text{cm}^{-3}$	850°C 120s RTA	ja	HF
10_D1	$\leq 2 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$	$\leq 4 \cdot 10^{17} \text{cm}^{-3}$	350°C 15,8h Rohrofen	ja	HF
1_D2	$1 \cdot 10^{14} \text{cm}^{-2}$	$8 \cdot 10^{19} \text{cm}^{-3}$	850°C 120s	ja	HF
15_D2	$4 \cdot 10^{11} \text{cm}^{-2}$	$8 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$	—	nein	GS 1,6A
6_D2	$6 \cdot 10^{11} \text{cm}^{-2}$	$1 \cdot 10^{17} \text{cm}^{-3}$	1000°C 2h Rohrofen	nein	GS 1,6A
14_D2	$4 \cdot 10^{11} \text{cm}^{-2}$	$8 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$	—	nein	GS 2,9A
7_D2	$6 \cdot 10^{11} \text{cm}^{-2}$	$1 \cdot 10^{17} \text{cm}^{-3}$	850°C 14,5h Rohrofen	nein	GS 2,9A
16_D2	$2 \cdot 10^{11} \text{cm}^{-2}$	$4 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$	1000°C 46h Rohrofen	nein	GS 2,9A
8_D2	$6 \cdot 10^{11} \text{cm}^{-2}$	$1 \cdot 10^{17} \text{cm}^{-3}$	1130°C 1,3h Rohrofen	nein	GS 2,9A

Tabelle 6.3: Tabelle aller Proben, die mit der Radiotracer-Methode untersucht worden sind. In der letzten Spalte ist die Sputter-Methode angegeben. HF bezeichnet dabei das Hochfrequenz-Sputtern und GS das Gleichspannungs-Sputtern. Der angegebene Strom von 1,6 bzw. 2,9A entspricht dem Plasmastrom im Plasmatron. Außer auf Probe 5_D1 wurde auf alle Proben eine Si_3N_4 -Schutzschicht aufgebracht. Bei allen HF-gesputterten Proben wurde vor der Messung das Si_3N_4 entfernt. Bei dem Gleichspannungs-Sputtern wurde es auf allen Proben belassen. Bei der Probe 1_D2 sind abwechselnd ^{82}Br und ^{81}Br implantiert worden (^{82}Br -Dosis $\approx 4 \cdot 10^{11} \text{cm}^{-2}$). Die Berechnungen der Br-Dosen und Konzentrationen erfolgten entsprechend Anhang B.2.

Um einem möglichen Aufladen des semiisolierenden Halbleitermaterials GaAs entgegenzuwirken, sind die ersten Proben alle mittels Hochfrequenz-Sputterns gesputtert worden (siehe Tabelle 6.3). Zur Bestimmung der Tiefenprofile wurde neben der bereits geschilderten Normierung der Zählraten die Tiefenskala mithilfe der aus der gemessenen Sputterdauer ermittelten Sputterrate berechnet. Dazu wurde nach dem Ende der Messung der Gesamtabtrag der Probe an unterschiedlichen Stellen, die während des Abtragens geschützt waren, mit einem mechanischen Höhenmessgerät vermessen⁷. Mithilfe der gesamten Sputterdauer ergibt sich die Sputterrate und so die Tiefe entsprechend Formel 6.1. Die Sputterrate lag bei allen Proben bei $11 \frac{\text{nm}}{\text{min}}$.

⁷ Der Fehler in der Tiefenskala beträgt etwa 9%.

In Abbildung 6.13 sind die Ergebnisse der HF-gesputterten Proben grafisch dargestellt. Zunächst wurden Messungen nach Ausheilschritten, die denen für typische

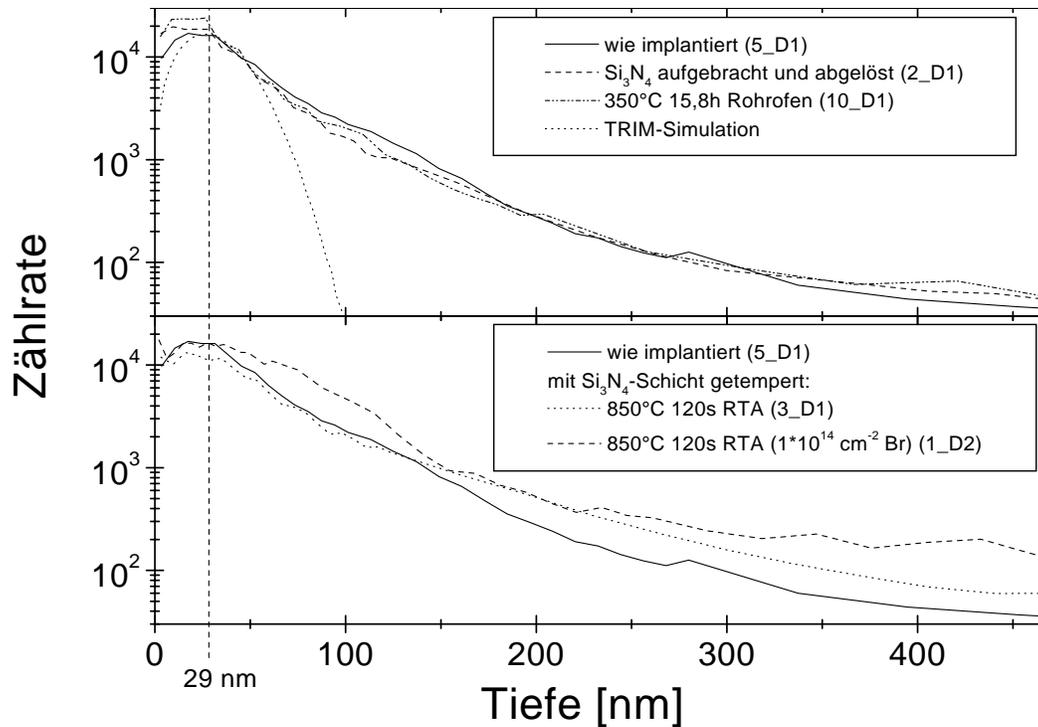


Abbildung 6.13: HF-gesputterte Radiotracer-Messungen an mit ^{82}Br implantierten *si*-GaAs-Proben. Der Übersichtlichkeit halber sind die Daten in zwei Spektren aufgeteilt. Im oberen Teil ist ebenfalls die TRIM-Simulation der Tiefenverteilung, sowie die daraus ermittelte mittlere Reichweite x_m mit 29nm eingetragen. Die für die Ausheilschritte aufgetragenen Si_3N_4 -Schutzschichten sind vor dem Sputtern jeweils entfernt worden.

PAC-Messungen entsprechen, durchgeführt. Die Probe 5_D1 ist wie implantiert vermessen worden. Ein Vergleich mit der in der Abbildung eingetragenen TRIM-Simulation für mit 60keV unter 7° in GaAs eingeschossenes Br zeigt eine gute Übereinstimmung in der Lage des Peakmaximums bei 29nm. Dieses gilt auch für alle anderen dargestellten Messungen. Jedoch zeigt sich auch hier, wie bei den mit der SIMS-Methode untersuchten Proben, dass die gemessene Verteilung in das Innere der Probe hinein eine größere Br-Konzentration als bei der Simulation ergibt. Die Implantationen erfolgten auch hier alle unter 7° , um einem Gitterführungseffekt entgegenzuwirken. Außerdem kann eine starke Verschleppung⁸ in das Innere der Probe ausgeschlossen werden, da dieser Effekt bei der verwandten Anlage nicht bekannt ist. Als Test dafür wurden zusätzlich zwei Proben desselben GaAs-Materials mit ^{195}Au implantiert. Bei einer Probe ist das Implantationsprofil gemessen worden und

⁸Unter Verschleppung ist hier zu verstehen, dass sich von der Probenoberfläche ausgeschlagene Atome auf dem Probenhalter absetzen und später von dort wieder ausgeschlagen werden können. Dadurch wird ein Teil der Atome einer zu tiefen Schicht zugeordnet und es kommt zu einer Erhöhung der Konzentration im Inneren der Probe.

es konnte nach Abtrag der gesamten Aktivität eine Nullrate gemessen werden. Bei einer zweiten Probe ist nur ein Teil der aktiven Schicht abgetragen worden. Anschließend ist eine nicht implantierte Probe gesputtert worden. Es zeigt sich, dass nach wenigen Sputterschritten die Zählrate auf die Nullrate abgenommen hat. Eine Abschätzung dieser beobachteten geringen Verschleppung kann daher keine solch starke Verbreiterung des aufgenommenen Profils erklären.

Bei der Probe 2_D1 wurde zunächst bei 660°C für 15s eine Si₃N₄-Schutzschicht aufgebracht (siehe Abschnitt 3.5) und vor dem Abtragen der Probe wieder entfernt. Die maximale Zählrate weist einen geringfügigen Unterschied zu dem wie implantiert vermessenen Profil auf. Dieser kann auf die Normierung bezüglich der Aktivität nach der Implantation und den statistischen Fehler zurückgeführt werden. Die Unsicherheit hierbei beträgt etwa 10%. Dadurch könnten die Profile in ihrer Lage nach oben bzw. nach unten verschoben sein, die Form der Profile bleibt davon jedoch unbeeinflusst. Zudem scheint jedoch eine geringe Verlagerung des Peakmaximums zur Oberfläche hin aufgetreten zu sein.

Da bei PAC-Messungen an implantierten GaAs-Proben die beste Ausheilung bei einem Tempersschritt bei 850°C für 120s [WEHN97] auftritt, wurde eine ebenso behandelte Probe (3_D1) nach Entfernen der Si₃N₄-Schutzschicht untersucht (Abbildung 6.13 unten). Die Lage des Peakmaximums liegt unverändert bei einer der TRIM-Simulation entsprechenden mittleren Reichweite von 29nm. Die Höhe des Peaks entspricht auch hier nicht dem der wie implantiert vermessenen Probe 5_D1. Zudem ist zu erkennen, dass die Form der Kurven nicht übereinstimmt. Die beiden Kurven schneiden sich. Das Profil nach dem Ausheilschritt ist zum Inneren der Probe hin leicht erhöht. Man kann so eine geringe Diffusion in das Probeninnere bei gleichbleibendem Profilmaximum beobachten. Der Verlust der Br-Konzentration bei dem Tempern ergibt sich aus der Integration der beiden zugehörigen Messkurven zu 23%. Dieser Wert ist allerdings mit einem recht großen Fehler aus der Unsicherheit der Aktivitätsnormierung behaftet. So ergeben sich z.B. bei einem Vergleich der anderen thermisch behandelten Proben mit der wie implantiert gemessenen Probe 5_D1 Zuwächse in der Br-Konzentration⁹.

Um einen Einfluss der Dosis auf die Diffusion zu beobachten, wurde in die Probe 1_D2 eine um zwei Zehnerpotenzen höhere Dosis implantiert. Dazu wurde abwechselnd der Radiotracer ⁸²Br und das stabile ⁸¹Br implantiert. Die Tracer-Dosis lag im Bereich der anderen untersuchten Proben und hatte einen gut handhabbaren Wert. Die Normierung erfolgt auch hier nur auf den aktiven Anteil. Auch hier stimmt die Lage des Peakmaximums gut mit dem der anderen vermessenen Proben überein. Der Peak ist jedoch verbreitert gegenüber der wie implantiert vermessenen Probe 5_D1. Außerdem ist die Konzentration in größeren Tiefen erhöht gegenüber den Proben geringerer Gesamtdosis.

⁹ Bei der Probe 2_D1 ergibt sich ein Zuwachs um 3%, bei der Probe 10_D1 um 16% und bei der Probe 1_D2 sogar um 37%.

Da unter den bei PAC-Messungen üblichen Ausheilsschritten (Temperaturen bis zu 850°C bei Ausheildauern von 120s) keine nennenswerte Diffusion zu beobachten ist, sind weitere Temperaturbehandlungen über einen längeren Zeitraum und bei zum Teil höheren Temperaturen durchgeführt worden. Dazu sind die Proben unter Vakuum in eine Quarzampulle eingeschmolzen worden und dann in einem Rohrofen ausgeheilt worden. Das Tiefenprofil der Probe 10_D1, die für 15,8h bei 350°C getempert wurde, ist ebenfalls in Abbildung 6.13 gezeigt. Das Profil entspricht dem der Probe 2_D1, auf die nur eine Si₃N₄-Schicht aufgebracht und wieder abgelöst wurde, und weist eine geringe Verlagerung des Peakmaximums zur Oberfläche hin auf, jedoch zeigt sich keine Veränderung gegenüber dem wie implantiert aufgenommenen Profil in größere Tiefen des Materials.

Bei Proben, die bei höheren Temperaturen für längere Zeit getempert worden sind, ergaben sich Probleme bei dem Entfernen der Si₃N₄-Schutzschicht. Bei normalen Verhältnissen lässt sich eine Si₃N₄-Schicht innerhalb von 5min durch Schwenken in Flusssäure ablösen. Bei diesen Proben waren jedoch Zeitdauern von über einer Stunde notwendig, um die Schicht abzulösen. Dabei konnte man jedoch nicht genau feststellen, ob eine komplette Ablösung stattgefunden hat oder eventuell die GaAs-Oberfläche angegriffen wurde. Im letzteren Fall wären dann die Profile verfälscht. Die Ergebnisse dieser Proben werden daher nicht weiter diskutiert. Die Probleme bei dem Ablösen können durch Kristallisierungen in der Si₃N₄-Schicht hervorgerufen worden sein. Ein solches Verhalten bei höheren Ausheiltemperaturen wurde auch von G. Marx [MARX90] beobachtet.

Aus diesem Grund ist bei einem weiteren Experiment die Si₃N₄-Schutzschicht nicht entfernt worden. Das Sputtern erlaubt es, Schichtsysteme abzutragen und es sollte so eine mögliche Diffusion zum Interface beobachtet werden können. Da bei den zuvor untersuchten Tempersritten keine starke Diffusion beobachtet werden konnte, ist bei dieser Probenserie bei höheren Temperaturen und für längere Zeiten ausgeheilt worden. Alle Temperungen wurden in einem Rohrofen durchgeführt.

Wie bei der vorhergehenden Probenserie sollte auch hier das HF-Sputtern eingesetzt werden, leider war dieses aber nicht möglich. Beim Versuch eine Probe mit darauf befindlicher Si₃N₄-Schutzschicht zu sputtern, konnte der Sputterstrom nicht aufrechterhalten werden und die Messung musste abgebrochen werden. Aus diesem Grund wurden alle weiteren Proben mit Gleichspannung gesputtert. Da für diese Sputterart zuvor keine Tests an dem Material durchgeführt worden sind, mussten beim Experiment geeignete Parameter gefunden werden. Daher ist mit zwei verschiedenen Plasmaströmen von 1,6 und 2,9A gearbeitet worden. Die Proben sind ebenfalls in der Tabelle 6.3 aufgeführt. Da die Sputterraten vom Sputterstrom abhängen, erfolgt die Auswertung für die unterschiedlichen Ströme getrennt.

Eine einfache Bestimmung der Tiefenprofile, wie sie bei der ersten Messserie angegeben ist, ist aufgrund der Zwei-Schichten-Struktur nicht möglich. Die Dicke der Si₃N₄-Schicht ($d_{\text{Si}_3\text{N}_4}$) wurde mithilfe eines Ellipsometers [MEND96] bestimmt. Die

gesamte abgetragene Dicke (d_{gesamt}) wurde mit dem mechanischen Höhenmessgerät ermittelt. Bei der bekannten Gesamt-Sputterdauer (t_{gesamt}) und separat ermittelten GaAs-Sputterrate (σ_{GaAs}) sollten sich daher die Si_3N_4 -Sputterrate ($\sigma_{\text{Si}_3\text{N}_4}$) und somit die Tiefenskala (x_i) wie folgt errechnen lassen:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{Si}_3\text{N}_4} &= \frac{d_{\text{Si}_3\text{N}_4}}{t_{\text{gesamt}} - \frac{(d_{\text{gesamt}} - d_{\text{Si}_3\text{N}_4})}{\sigma_{\text{GaAs}}}} \\ x_i &= \sigma_{\text{Si}_3\text{N}_4} \cdot t_i, & x_i &\leq d_{\text{Si}_3\text{N}_4} \\ x_i &= \sigma_{\text{GaAs}} \cdot t_i, & x_i &> d_{\text{Si}_3\text{N}_4} \end{aligned} \quad (6.2)$$

Zu diesem Zweck sind nach den Messungen an zwei nicht implantierten GaAs-Proben ohne Si_3N_4 -Schicht die GaAs-Sputterraten für die gleichspannungsgesputterten Proben bei beiden Plasmaströmen bestimmt worden.

Leider hat sich die so durchgeführte Auswertung als nicht stimmig herausgestellt. So lag z.B. bei der Probe die außer des Aufbringens des Si_3N_4 keine Wärmebehandlung erfahren hat, der Peak der Aktivität komplett im Si_3N_4 . Da die vorhergehenden Messungen jedoch gezeigt haben, dass bei den Proben, die bis zu 850°C für 120s ausgeheilt wurden, der überwiegende Teil der eingebrachten Atome in der Probe verbleibt, und das Profil dem der TRIM-Simulation recht nahe kommt, muss diese Art der Auswertung verworfen werden.

Bei den beiden mit 1,6A gesputterten Proben 15_D2 (Si_3N_4 aufgebracht) und 6_D2 (Si_3N_4 aufgebracht und 2h bei 1000°C ausgeheilt) wurde die Auswertung daher wie folgt durchgeführt. Unter der Annahme, dass in der Si_3N_4 -Schutzschicht keine Aktivität vorliegt, ist das Maximum der Verteilung auf die aus den TRIM-Simulationen bekannte mittlere Reichweite von 29nm festgelegt worden. Außerdem sollte der Verlauf des Profils am Schichtübergang stetig sein. Die so erhaltenen Sputterraten $\sigma_{\text{Si}_3\text{N}_4} = 1,2(0,1) \frac{\text{nm}}{\text{min}}$ und $\sigma_{\text{GaAs}} = 1,8(0,5) \frac{\text{nm}}{\text{min}}$ sind dann für die Auswertung der Probe 6_D2 verwendet worden. Das Ergebnis der Auswertung zeigt die Abbildung 6.14.

Da die Si_3N_4 -Schicht nicht homogen die ganze Fläche der Probe bedeckt hat — die ellipsometrisch ermittelte Dicke ist mit einem Fehler von 5nm behaftet — kann auch in der gezeigten Si_3N_4 -Schicht noch ein geringer Anteil an Aktivität vorhanden sein. Die logarithmische Auftragung macht jedoch deutlich, dass dieser Anteil sehr gering ist. Der Fehler, der sich durch diese Auswertung ergibt, ist recht hoch und liegt in der Größenordnung von 35%. Der Übersichtlichkeit halber sind diese Fehler nicht in den Abbildungen eingetragen.

Deutlich ist zu erkennen, dass sich auch bei der Probe 6_D2 das Peakmaximum noch in der gleichen Tiefe befindet. Jedoch ist der Peak wesentlich schmaler geworden. Ein kleiner Teil der Tracer-Atome scheint auch hier in größere Tiefen diffundiert zu sein. Dies zeigt sich in der erhöhten Konzentration im Probeninneren und könnte auf einen geringen Anteil interstitiell diffundierender Atome zurückzuführen sein.

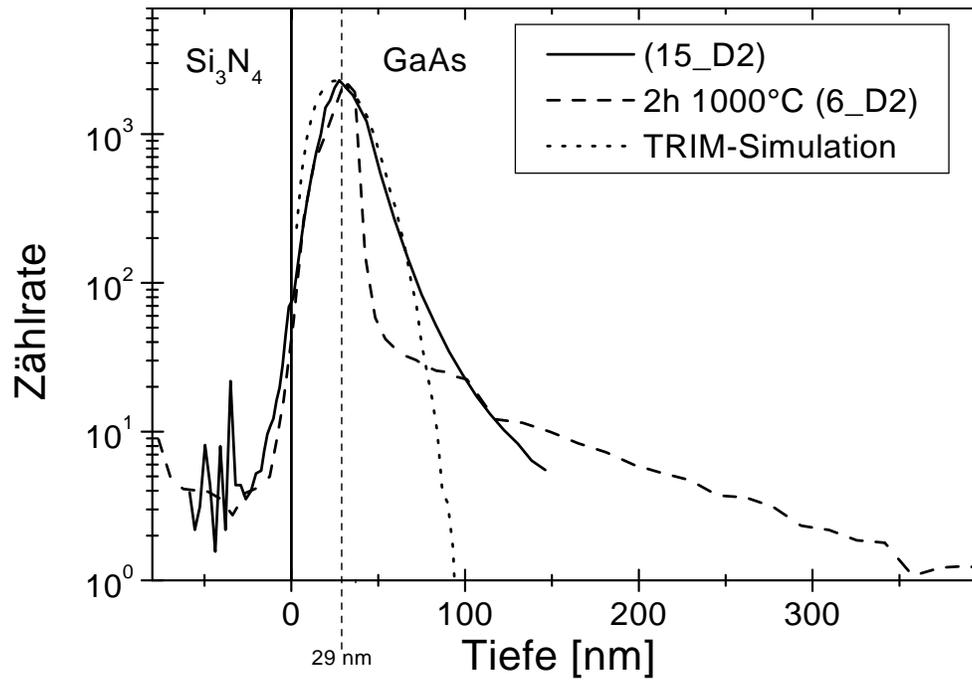


Abbildung 6.14: Gleichspannungsgesputterte Radiotracer-Messungen an mit ^{82}Br bei 60keV implantiertem *si*-GaAs. Bei beiden Messungen befand sich eine Si_3N_4 -Schicht auf der Probe. Der Plasmastrom betrug $1,6\text{A}$.

Ein weiterer größerer Anteil scheint zur Oberfläche diffundiert zu sein, was die Verengung des Peaks zeigt.

Bei den Proben, die mit einem höheren Plasmastrom von $2,9\text{A}$ gesputtert wurden, sollte die Auswertung auf die gleiche Weise erfolgen. Unglücklicherweise war jedoch die eingestellte Zeit, in der auf einem Folienabschnitt die ausgeschlagenen Atome aufgefangen werden, im Übergangsbereich zwischen Si_3N_4 und GaAs recht lang. Daher ist keine eindeutige Anpassung des Profils der Probe 14_D2, auf die nur das Si_3N_4 aufgebracht worden ist, möglich. Die vorhergehenden, mit geringerem Plasmastrom durchgeführten Messungen haben jedoch gezeigt, dass sich selbst nach dem Temperschnitt von 2h bei 1000°C das Maximum des Profils noch an der gleichen Stelle befindet. Mit der Annahme, dass dieses ebenfalls für die Probe 7_D2 gilt, die für $14,5\text{h}$ bei 850°C getempert worden ist, erfolgt die Anpassung des Profils dieser Probe. Die aus der Anpassung dieses Profils gewonnenen Sputterraten sind dann auf die beiden übrigen Proben 8_D2 (Si_3N_4 aufgebracht und $1,3\text{h}$ bei 1130°C ausgeheilt) und 16_D2 (Si_3N_4 aufgebracht und 46h bei 1000°C ausgeheilt) übertragen worden. Als Sputterraten haben sich so ergeben:

Probe	$\sigma_{\text{Si}_3\text{N}_4} \left[\frac{\text{nm}}{\text{min}} \right]$	$\sigma_{\text{GaAs}} \left[\frac{\text{nm}}{\text{min}} \right]$
14_D2	1,1(4)	3(2)
7_D2	1,5(4)	4(2)

Die so erhaltenen Tiefenprofile sind in der Abbildung 6.15 gezeigt. Trotz der großen Unsicherheit der Sputterraten, ist deutlich zu erkennen, dass bei den Proben 16_D2 und 8_D2 die Aktivität fast vollständig aus den Proben hinausdiffundiert ist. Dieses Ergebnis ist gesichert und unabhängig von den angenommenen Sputterraten.

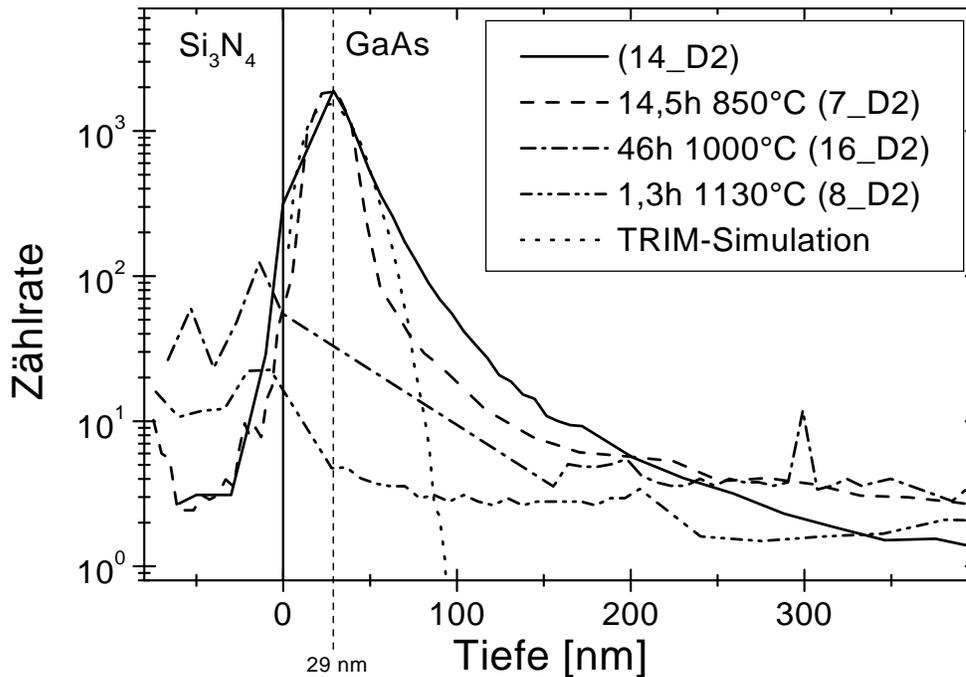


Abbildung 6.15: Gleichspannungsgesputterte Radiotracer-Messungen an mit ^{82}Br bei 60keV implantiertem *si*-GaAs. Bei allen Messungen befand sich eine Si_3N_4 -Schutzschicht auf der Probe. Der Plasmastrom betrug 2,9A.

6.2.3 Ergebnisse

Bei Ausheilschritten bis zu 850°C scheint keine Br-Diffusion im GaAs aufzutreten. Es konnte bei den Proben, bei denen nur die Si_3N_4 -Schicht aufgebracht und wieder abgelöst (2_D1) sowie bei 350°C für 15,8h (10_D1) geheizt wurde eine geringe Verlagerung des Peakmaximums zur Oberfläche hin beobachtet werden. Jedoch ist keine Diffusion in das Material hinein beobachtet worden. Nach dem Schritt bei 850°C für 120s (3_D1) ist die Lage des Peakmaximums unverändert gegenüber der wie implantiert vermessenen Probe (5_D1), jedoch kann die Diffusion eines kleinen Anteils der Br-Atome in das Probeninnere hin beobachtet werden. Daher kann angenommen werden, dass es sich bei der beobachteten Peakverlagerung zur Oberfläche um einen Effekt handelt, der im Rahmen der Messgenauigkeit vernachlässigt werden kann.

Die beobachtete Diffusion ist recht gering und es handelt sich bei Br in GaAs nicht um einen schnellen Diffuser. Bei den Untersuchungen an den Proben, die für 46h

bei 1000°C (16_D2) bzw. für 1,3h bei 1130°C (8_D2) ausgeheilt wurden zeigt sich, dass fast alles Brom aus den Proben hinaus diffundiert ist. Das Material wird bei diesen Temperbedingungen stark geschädigt. Die bei 1130°C getemperte Probe sah optisch stark verändert aus. Daher kann man annehmen, dass durch die erzeugten vielzahligen Defekte die Diffusion zur Oberfläche hin begünstigt wird. Genaue Aussagen über den Diffusionsmechanismus lassen sich daraus jedoch nicht ableiten.

6.3 Ergebnisse aller Diffusionsmessungen

Bei allen Messungen zur Br-Diffusion sind recht breite Tiefenprofile im Vergleich zur angestellten TRIM-Simulation beobachtet worden. Bei den Messungen mit der Radiotracer-Methode zeigt ein Vergleich der HF-gesputterten Proben mit den Proben, die mit Gleichspannung gesputtert worden sind, dass die Profile bei dem HF-Sputtern breiter sind. Daraus könnte man ableiten, dass bei dem HF-Sputtern die Tracer in das Material hinein getrieben worden sind. Dem widerspricht die Tatsache, dass bei den Experimenten mit Au in GaAs keine nennenswerte Verschleppung beobachtet werden konnte. Eventuell weist dies auf einen Effekt hin, der sich durch den geringeren Massenunterschied zwischen Brom und Argon als zwischen Gold und Argon ergibt. Auch scheint es so zu sein, dass die Profile der mit höherem Strom beim Gleichspannungssputtern abgetragenen Profile etwas breiter sind als die der mit geringerem Strom abgetragenen. Daraus ließe sich ableiten, dass auch die bei den SIMS-Messungen erhaltenen breiten Profile durch die Messung selbst entstanden sind. SIMS-Messungen mit einem wesentlich geringeren Sputterstrom könnten daher vielleicht schmalere Profile liefern.

Diffusionskoeffizienten für die Diffusion von Br in InAs und GaAs lassen sich aus den durchgeführten ersten Messungen nicht ableiten. Aus den Radiotracer-Messungen ist aufgrund der großen Unsicherheit bei der Auswertung und der Tatsache, dass bei den meisten Ausheilschritten keine nennenswerte Diffusion beobachtet werden konnte, keine Bestimmung des Diffusionskoeffizienten möglich. Bei den SIMS-Messungen sind dafür ebenfalls zu wenig Untersuchungen durchgeführt worden.

Radiotracer-Messungen an InAs müssten noch durchgeführt werden, um die Übertragbarkeit der am GaAs gewonnenen Ergebnisse zu bestätigen.

Quantifiziert angegeben werden kann nur das aus den SIMS-Messungen gewonnene Ergebnis der Ausdiffusion in InAs. Unterschiedlich vordotierte InAs-Materialien, in die mit 150keV unter 7° mit $2 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ Bromionen implantiert worden sind, zeigen nach Ausheilen bei 750°C für 120s, dass etwa 30% (InAs:S, InAs:Un) bzw. 40% (InAs:Zn) der eingebrachten Br-Atome aus dem Material herausdiffundiert sind.

Als wichtiges Ergebnis im Rahmen dieser Arbeit hat sich gezeigt, dass bei den für die PAC-Messungen standardmäßig verwandten Temperbedingungen nur eine geringe

Diffusion der implantierten Atome auftritt. Und somit ist die Annahme, dass der Großteil der eingebrachten Sondenatome in der durch die Einbringung bestimmten Position verbleibt gerechtfertigt. Außerdem wird die Verteilung der implantierten Sondenatome bzw. die Lage des Maximums sehr gut durch die TRIM-Simulationen wiedergegeben.

Kapitel 7

Interpretation

7.1 Mögliches Verhalten von Brom/Selen in InAs, GaAs

Im Kapitel 1.2.1 wurde das V–I–Modell vorgestellt. Aus ihm leitet sich ab, dass jeder in III–V–Halbleitern eingebrachte Donator oder Doppeldonator ein metastabiles Defektverhalten aufweisen sollte. Wird der eingebrachte $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ –Sondenkern auf einem As–Platz im InAs eingebaut, so bedeutet dies, dass sowohl für den Br–Mutterkern als Doppeldonator als auch für den Se–Tochterkern als einfacher Donator ein solches Defektverhalten erwartet werden kann. Die geometrische Struktur sollte dann derjenigen für das DX–Zentrum GaAs:Si_{Ga} (siehe Abbildung 1.3) entsprechen.

Aufgrund der elektronischen Struktur kann man davon ausgehen, dass der Einbau des $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ auf dem Gruppe–V–Platz des As erfolgt. Diese substitutionelle Situation ist auf der linken Seite der Abbildung 7.1 dargestellt. Die zu erwartende relaxierte Situation des metastabilen Defektes ist auf der rechten Seite dieser Abbildung gezeigt. Sie ergibt sich dadurch, dass ein dem eingebrachten $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ –Kern benachbartes In–Atom entlang der $\langle 111 \rangle$ –Kristallachse in das Zwischengitter relaxiert. Es wird davon ausgegangen, dass bei den meisten dieser DX–Zentren in III–V–Halbleitern das Atom des Gruppe–III–Platzes in das Zwischengitter relaxiert [MOON90], unabhängig davon, auf welchem Platz der Donator oder Doppeldonator eingebracht worden ist. Im Fall des $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ im InAs wird daher ebenfalls davon ausgegangen, dass bei der relaxierten Struktur ein dem $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ benachbartes In–Atom in das Zwischengitter relaxiert.

Entsprechend den Ausführungen in Kapitel 1.2.1 kann die dargestellte metastabile Defektsituation im Falle eines Donators nur für den einfach negativ geladenen Zustand und im Falle eines Doppeldonators nur für den neutralen Ladungszustand stabilisiert werden. Welche Situation jedoch stabil und welche metastabil ist, kann

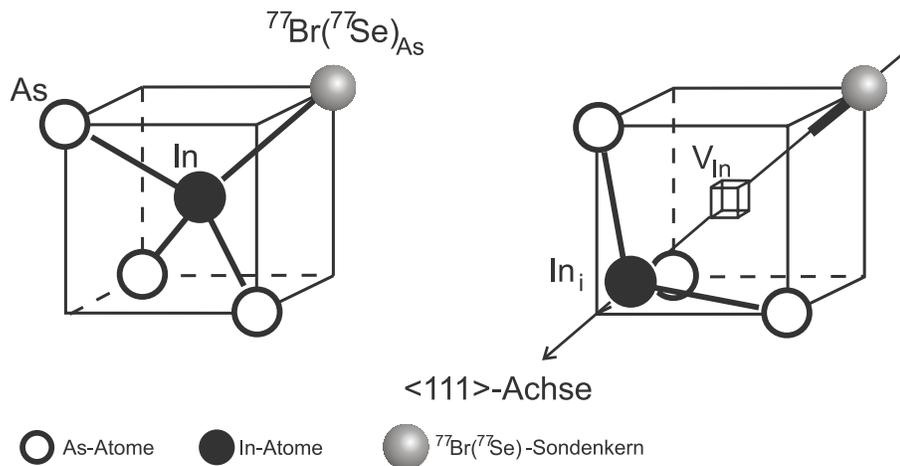


Abbildung 7.1: Mögliche geometrische Strukturen für das in InAs eingebrachte $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$. Links: substitutionelle Situation, metastabile Konfiguration bei Se^- . Rechts: relaxierte Situation, stabile Konfiguration bei Se^- . Ein dem $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ benachbartes In-Atom relaxiert entlang der $\langle 111 \rangle$ -Achse in das Zwischengitter. Die Entscheidung, welche Konfiguration stabil und welche metastabil ist, basiert auf den Messergebnissen.

nicht aus einfachen Argumenten abgeleitet werden und muss für den Einzelfall mithilfe einer vollen Dichtefunktionalrechnung neu berechnet werden. In allen anderen Ladungszuständen sollte die substitutionelle Sonden-situation stabil sein.

Im Falle des untersuchten $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ muss nun berücksichtigt werden, dass die PAC-Messungen an der elektronischen Struktur des Tochterkerns Se durchgeführt werden. Zwar bestimmt der Mutterkern den Gittereinbau, jedoch wird die anschließende metastabile Defektstruktur durch den Tochterkern bestimmt. Würde die beobachtete Situation vom Br-Mutterkern dominiert sein, so müsste sie über die Messdauer von etwa 50ns stabil bleiben¹. Die bei einem Kernzerfall freiwerdende Rückstoßenergie ist jedoch so groß, dass diese Annahme sehr unwahrscheinlich ist.

Aufgrund dieser Überlegungen geht die nachfolgende Interpretation von der einfachen Donatorsituation des Se aus, für die die relaxierte metastabile Defektsituation nur im einfach negativen Ladungszustand des Se stabilisiert werden kann.

Betrachtet man die beiden Strukturen in Abbildung 7.1, so ergibt sich für die substitutionelle Situation (links), dass auf den Sondenkern kein EFG wirkt. Dies entspricht dem ungestörten Anteil in Abschnitt 2.4.1.1 (oberste Darstellung in Abb. 2.9). Im Fall der vorliegenden relaxierten Situation, wirkt ein einheitlicher axialsymmetrischer EFG in $\langle 111 \rangle$ -Richtung (entsprechend der zweiten Darstellung in Abb. 2.9). Mit der PAC-Methode ist also eine gute Möglichkeit gegeben, die beiden zu erwartenden Defekt-Strukturen zu detektieren und zu unterscheiden.

In Kapitel 4 sind die PAC-Messungen am System $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ in InAs vorgestellt worden. Bei dem InAs:S- (Abschnitte 4.1.1 und 4.2) sowie dem InAs:Un-Material

¹ Der Ausgangszustand der γ - γ -Kaskade besitzt nur eine Halbwertszeit von 3,2ps.

(Abschnitte 4.1.3 und 4.2) konnte dabei das Auftreten eines einheitlichen axialsymmetrischen Anteils A_D mit $\nu_{QD} = 374\text{MHz}$ und einer EFG-Orientierung in $\langle 111 \rangle$ -Richtung beobachtet werden. Dieser beobachtete Anteil lässt sich mit der relaxierten Defektsituation beschreiben (Abbildung 7.1 rechts).

Die einheitliche Defektwechselwirkung tritt im InAs:S nach Sondeneinbringung und Ausheilen in einem Temperaturbereich von $500 - 650^\circ\text{C}$ auf (siehe Tabelle 4.2). Bei dem nicht vordotierten InAs kann ein Auftreten des Anteils nach Ausheilschritten von $550 - 600^\circ\text{C}$ beobachtet werden (siehe Tabelle 4.6).

Bei dem Übergang zu höheren Temperaturen erhält man in beiden Materialien ein zum großen Teil ungestörtes Spektrum. Ein solcher ungestörter Anteil A_u kann im kubischen Zinkblende-Gitter entweder durch die Besetzung eines substitutionellen Platzes oder durch Besetzung eines Tetraederplatzes erzeugt werden (Abschnitt 2.4.1.1). Im GaAs wird das Br auf substitutionellen Gitterplätzen eingebaut [WEHN96]. Geht man davon aus, dass der Einbau beim InAs ebenfalls auf einem substitutionellen Platz erfolgt, kann A_u mit der substitutionellen Defektsituation identifiziert (Abbildung 7.1 links) werden. Somit können die in den beiden InAs-Materialien beobachteten Anteile A_u und A_D mit der substitutionellen sowie der relaxierten Defektsituation (Abb. 7.1) in Übereinstimmung gebracht werden.

Anders ist der Fall beim p-Typ-InAs (Abschnitte 4.1.2 und 4.2). Hier tritt keine einheitliche Wechselwirkung auf. Jedoch kann auch hier ein großer ungestörter Anteil A_u , entsprechend der substitutionellen Situation beobachtet werden.

Wie bereits erläutert, ist eine notwendige Voraussetzung für eine mögliche Stabilisierung der relaxierten Defektsituation das Vorliegen des einfachen Se-Donators im einfach negativen Ladungszustand. Das bedeutet, dass im Fall des InAs:S und des InAs:Un der negative Ladungszustand des Se in dem Temperaturbereich, in dem ν_{QD} auftritt, eingenommen wird.

Bei elektrischen Messungen an den α -bestrahlten Proben (Kapitel 5.1) wurde gezeigt, dass die Bestrahlung eine n-dotierende Wirkung hat. Das bedeutet, dass das Fermi-niveau bei der Bestrahlung angehoben wird und anschließend bei dem Ausheilen wieder abgesenkt wird. Dabei wird dann das negative Umladungsniveau überstrichen, welches für die Stabilisierung des relaxierten Defekt-Zustands notwendig ist. Mithilfe der aus den Halleffekt-Resultaten abgeleiteten Fermi-niveau-Lagen, kann daher das einfach negative Niveau des Se abgeschätzt werden. Diese Methode, sowie die entsprechenden Ergebnisse, werden im Folgenden Abschnitt diskutiert.

7.2 Abschätzung des einfach negativen Selen–Niveaus

Aus den im Kapitel 5.1 gemessenen Ladungsträgerkonzentrationen sind die Fermienergie-Lagen nach α -Bestrahlung und anschließendem Ausheilen berechnet worden (Anhang A). Eine Zusammenstellung der erhaltenen Werte gibt Tabelle 7.1.

Ausheiltemperatur T_A [°C]	n [cm ⁻³]	$E_F - E_{LB}$ [eV]	E_F [eV]
<i>InAs:S</i>			
unbehandeltes Material	$6,5(3) \cdot 10^{16}$	-0,001(2)	0,359(2)
400	$2,4(1) \cdot 10^{17}$	0,050(2)	0,410(2)
500	$2,1(1) \cdot 10^{17}$	0,044(2)	0,404(2)
600	$1,3(1) \cdot 10^{17}$	0,024(4)	0,384(4)
750	$5,6(3) \cdot 10^{16}$	-0,005(3)	0,355(3)
<i>InAs:Un</i>			
unbehandeltes Material	$2,006(2) \cdot 10^{16}$	-0,036(1)	0,324(1)
RT	$4,63(9) \cdot 10^{17}$	0,088(1)	0,448(1)
600	$3,0(2) \cdot 10^{17}$	0,062(5)	0,422(5)
700	$1,80(5) \cdot 10^{16}$	-0,039(1)	0,321(1)
750	$1,5(1) \cdot 10^{16}$	-0,044(2)	0,316(2)
<i>InAs:Zn</i>			
unbehandeltes Material	$3,3(1) \cdot 10^{16}$	-0,268(1)	0,092(1)

Tabelle 7.1: Zusammenstellung der gemessenen Ladungsträgerkonzentrationen n der drei verschiedenen unbehandelten InAs-Materialien, sowie der α -bestrahlten und bei T_A ausgeheilten InAs:S- und InAs:Un-Proben. Angegeben sind die berechneten Fermienergie-Lagen relativ zur Leitungsbandkante ($E_F - E_{LB}$) sowie in Bezug auf die Valenzbandkante (E_F). Für das p -Typ-Material sind nur die Angaben für das unbehandelte Material angegeben, da aufgrund der gemischten Ladungsträgerarten nach der α -Bestrahlung keine einfache Berechnung des Fermienergieaus erfolgen kann und die Lagen für die Abschätzung des Se^- -Niveaus irrelevant sind.

Zur Abschätzung des einfach negativen Selen–Niveaus muss der Energiebereich der Fermienergie-Lagen bestimmt werden, in dem bei den PAC-Messungen die Wechselwirkung von 374MHz beobachtet wird. Nur dann liegt die relaxierte Sondersituation vor, die nur im negativen Ladungszustand stabilisiert werden kann. Dieser Sachverhalt ist in Abbildung 7.2 dargestellt. Aufgetragen sind die aus den Ladungsträgerkonzentrationen berechneten Fermienergie-Lagen relativ zur Valenzbandkante² in

² Mit einer Bandlückenenergie von 0,36eV.

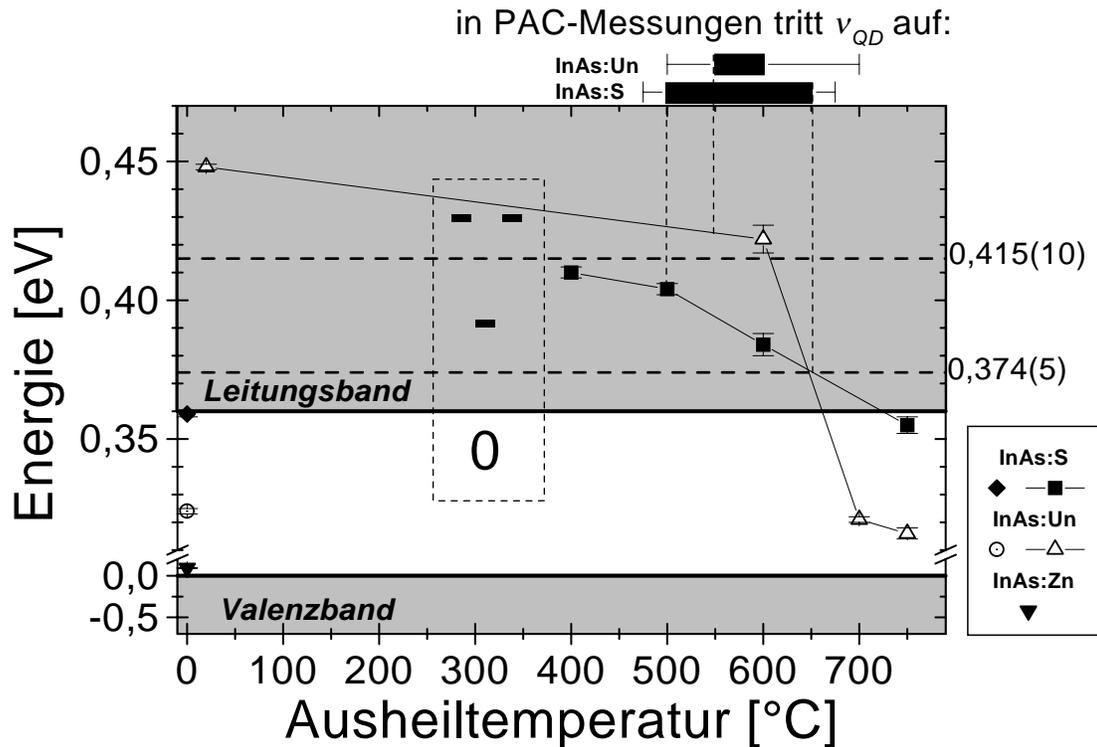


Abbildung 7.2: Abschätzung des einfach negativen Se-Umladungsniveaus. Aufgetragen sind die aus den Ladungsträgerkonzentrationen berechneten Fermienergie-Lagen für α -bestrahlte und für 120s ausgeheilte InAs:S- und InAs:Un-Proben (siehe Tabelle 7.1). Bei der Ausheiltemperatur von 0°C sind die Daten der unbehandelten InAs-Materialien eingetragen. Die Temperaturbereiche, in denen die 374MHz-Wechselwirkung auftritt, sind oberhalb der Grafik markiert. Ihr Fehler ergibt sich aus der Schrittweite der Ausheiltemperaturen, nach denen PAC-Messungen durchgeführt worden sind (siehe Tabelle 4.2 und 4.6). Die abgeschätzten Umladungsniveaus 0/- und -/2- sind ebenfalls eingezeichnet. Die Energieachse ist durch den Achsenbruch verzerrt.

Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur nach α -Bestrahlung. Bei der Ausheiltemperatur von 0°C sind zusätzlich die Daten für die unbehandelten Proben eingetragen. Zum Vergleich der ursprünglichen Fermienergie-Lagen ist auch der Wert für das InAs:Zn-Material eingetragen. Oberhalb der Grafik sind die Temperaturbereiche markiert, bei denen nach entsprechendem Ausheilschritt in den PAC-Messungen die einheitliche Wechselwirkung auftritt. Der angegebene Fehler ergibt sich aus den Temperaturschritten, bei denen die Proben ausgeheilt wurden. So ist der Bereich im Falle des InAs:S sehr gut bestimmt, da Messungen nach Ausheilschritten im Abstand von 25°C durchgeführt worden sind (Tab. 4.2). Im Falle des InAs:Un ist der Temperaturbereich wesentlich ungenauer bestimmt worden (Tab. 4.6).

Da die Lage des Se-Umladungsniveaus unabhängig von der Vordotierung des InAs-Materials ist, wird zur Abschätzung des -/2- Umladungsniveaus ein mittlerer Wert aus den InAs:S- und InAs:Un-Daten bestimmt. Es ergibt sich so eine Lage von 0,415(10)eV oberhalb der Valenzbandkante bzw. mit der Bandlückenenergie von

0,36eV eine Lage von +55(10)meV oberhalb der Leitungsbandkante (Abb. 7.2). Das 0/- -Umladungsniveau wird allein aus den Ergebnissen der Messungen im InAs:S gewonnen, denn im Gegensatz zur -/2- -Niveauabschätzung ist die Variation der ermittelten Fermienergien beim InAs:Un über den Bereich, in dem keine PAC-Messungen durchgeführt worden sind, sehr groß. Das 0/- -Umladungsniveau wird daher zu 0,374(5)eV relativ zur Valenzbandkante, entsprechend +14(5)meV relativ zur Leitungsbandkante, bestimmt.

Es liegt somit der ungewöhnliche Fall vor, dass sich das einfach negative Se-Niveau im Leitungsband befindet. Solche im Leitungsband liegende Niveaus sind mit den üblichen Methoden zur Niveaubestimmung nicht zugänglich. Bei DLTS-Messungen (Kapitel 5.2) können sie nicht detektiert werden.

7.3 Gegenüberstellung: V-I-Modell und Indium-Leerstelle

Nach Gleichung 2.6 kann der Betrag der EFG-Maximalkomponente V_{zz} aus der Quadrupolkopplungskonstanten ν_Q berechnet werden. Dazu muss das Kernquadrupolmoment Q eingesetzt werden. Im Fall des ^{77}Br (^{77}Se) ist dieses jedoch nicht gut bekannt (Abschnitt 2.2). Daher gestaltet sich ein Vergleich des experimentell ermittelten EFG mit Ergebnissen theoretischer Rechnungen recht problematisch. Aus $\nu_{QD}=374\text{MHz}$ kann V_{zz} zu den in Tabelle 7.2 angegebenen Werten bestimmt werden. In der Tabelle ist außerdem das Ergebnis aus ersten ab initio Berechnungen

$ V_{zz}^{\text{exp.}} $		$V_{zz}^{\text{gerechnet}}$	
$Q=1,1(5)\text{barn}$	$Q=0,76(5)\text{barn}$	In verlagert	In-Leerstelle
$14(6)\cdot 10^{21}$	$20(1)\cdot 10^{21}$	kein Ergebnis	$-10,25\cdot 10^{21}$

Tabelle 7.2: EFG-Werte in Vm^{-2} : Links: berechnet aus der gemessenen Quadrupolkopplungskonstanten $\nu_{QD}=374(1)\text{MHz}$ mit den beiden aus der Literatur bekannten Quadrupolmomenten ($|V_{zz}^{\text{exp.}}|$). Rechts: berechnet mit dem Programmpaket WIEN97 ($V_{zz}^{\text{gerechnet}}$). Für den relaxierten Fall, (entsprechend Abbildung 7.1), konnte bislang kein kräftefreier Fall berechnet werden. Bei der Berechnung der In-Leerstelle ist das dem ^{77}Br (^{77}Se)-Atom entlang der $\langle 111 \rangle$ -Achse benachbarte In-Atom entfernt worden. Die Atome, die die Leerstelle umgeben, sind so relaxiert, dass auf sie keine Kräfte wirken.

der Elektronendichteverteilung in InAs:Se-Superzellen³ eingetragen, die im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie mit dem Programmpaket WIEN97 [BLAH96] bestimmt worden sind. Die Rechnungen sind von Herrn N. Ulbrich der Abteilung Nukleare

³ Die Superzelle wurde durch Verdopplung der Einheitszelle in alle drei Raumrichtungen erzeugt. Die Dotierung der die As-Atome ersetzenden Se-Atome betrug dabei As:Se = 7:1

Festkörperphysik der Universität Leipzig durchgeführt worden. Sie sollten zur Aufklärung der Defektstruktur beitragen.

Zunächst wurden Rechnungen durchgeführt, bei denen die Position des dem Se benachbarten In-Atoms entlang der $\langle 111 \rangle$ -Achse variiert wurde, entsprechend den Rechnungen am GaAs:Si_{Ga} in Abbildung 1.4. Es konnte bei diesen Rechnungen kein lokales Energieminimum außer bei der unrelaxierten Situation gefunden werden. Jedoch wurden die Rechnungen ohne Relaxation der weiteren benachbarten Atome durchgeführt, auf die große Kräfte wirken. Die Berechnung der relaxierten Situation ist noch nicht abgeschlossen und es kann kein EFG angegeben werden. Daher ist es notwendig, weitere Rechnungen mit einbezogener Relaxation der weiteren Nachbaratome durchzuführen.

Im Allgemeinen wird davon ausgegangen, dass das Element auf dem Gruppe-III-Platz entlang der $\langle 111 \rangle$ -Achse in das Zwischengitter relaxiert [MOON90]. Betrachtet man die Größenverhältnisse der beteiligten Atome (Tabelle 7.3), so könnte im vorliegenden Fall eine Verlagerung des eingebrachten ⁷⁷Br(⁷⁷Se)-Atoms bevorzugt sein. Zur geometrischen Veranschaulichung ist der Fall eines verlagerten

Element	Ga	In	Si	As	Se	Br
Hauptgruppe	III	III	IV	V	VI	VII
Atomradius [nm]	0,126	0,144	0,117	0,121	0,117	0,114

Tabelle 7.3: Atomradien der beteiligten Atome im InAs:⁷⁷Br(⁷⁷Se). Angegeben sind die Radien für die neutralen Atome. Zum Vergleich der Größenverhältnisse sind die Werte für Ga und Si, die beim GaAs:Si_{Ga} DX-Zentrum beteiligt sind, ebenfalls angegeben.

⁷⁷Br(⁷⁷Se)-Atoms in Abbildung 7.3 dargestellt. Auch für diesen Fall der Verlagerung des ⁷⁷Br(⁷⁷Se)-Atoms müssten Rechnungen der Gesamtenergie durchgeführt werden. Zur experimentellen Klärung dieses Sachverhaltes könnten z.B. Emission-Channeling-Messungen an einem Se-Isotop (z.B. ⁷³Se) durchgeführt werden. Bei einer substitutionellen Platzbesetzung muss dann von einer Verlagerung des In-Atoms ausgegangen werden.

Eine **In-Leerstelle** auf einem dem ⁷⁷Br(⁷⁷Se) benachbarten Gitterplatz würde ebenfalls einen EFG in $\langle 111 \rangle$ -Richtung bewirken. Sie könnte so das Auftreten des einheitlichen Anteils A_D erklären. Daher wurde bei weiteren Rechnungen das dem ⁷⁷Br(⁷⁷Se) benachbarte In-Atom aus dem Gitter entfernt und die benachbarten Atome relaxiert, sodass sie kräftefrei sind. Der so theoretisch berechnete Wert für die In-Leerstelle ist in Tabelle 7.2 eingetragen. Er ist geringer als der aus den Messungen errechnete Wert für V_{zz} . Die Unsicherheit des Quadrupolmomentes gestaltet den Vergleich jedoch recht problematisch.

Die In-Leerstelle könnte das Auftreten der beobachteten einheitlichen Wechselwirkung erklären, jedoch kann sie den ungestörten Anteil A_u nicht erklären.

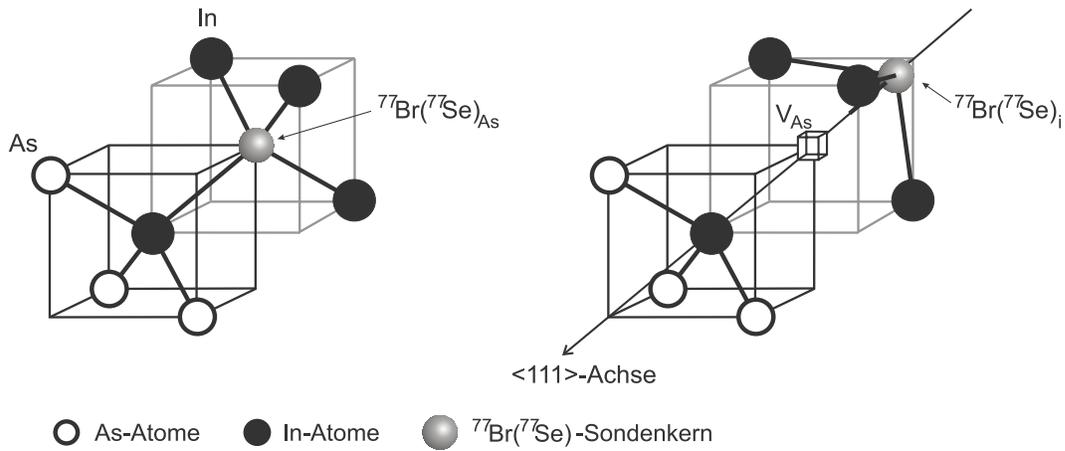


Abbildung 7.3: Mögliche geometrische Struktur für das im InAs eingebrachte $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ bei Verlagerung des auf dem Gruppe-V-Platz befindlichen Atom. Links: substitutionelle Situation, metastabile Konfiguration bei Se^- . Rechts: relaxierte Situation, stabile Konfiguration bei Se^- . Das eingebrachte $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ -Atom relaxiert entlang der $\langle 111 \rangle$ -Achse in das Zwischengitter. Das interstitielle $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})_i$ hinterlässt eine Leerstelle auf dem As-Platz (V_{As}).

Einen weiteren Fingerzeig für die Richtigkeit der Interpretation nach dem V-I-Modell liefert die beobachtete Verteilung der auftretenden Anteile A_D und A_u bei den PAC-Messungen. So ist beim InAs:S sowie beim InAs:Un das Auftreten der Wechselwirkung ν_{QD} mit einer Abnahme des ungestörten Anteils verbunden. Dieses entspricht gerade dem Übergang von der substitutionellen zur relaxierten Defektsituation.

Die Tatsache, dass der ungestörte Anteil bei dem Auftreten des einheitlichen Anteils nicht gänzlich verschwindet, lässt sich dadurch erklären, dass die Probenbedingungen nicht völlig homogen über den breiten Bereich der eingebrachten $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ -Sondenatome (siehe Abb. 3.2 und 3.3) sind. Würde ein vollständig ausgeheiltes Kristall vorliegen und man würde den Übergang der Defektsituation im negativen Ladungszustand von der stabilen zur metastabilen Konfiguration beobachten, so sollten bei geeigneter Anregung alle Sondenatome in der gleichen Situation vorliegen. Zudem ist in Anhang E gezeigt, dass der ungestörte Anteil mit einem schwer abzuschätzenden Fehler behaftet ist.

Die Frage, ob es sich bei dem beobachteten Defekt um den Einfang einer Leerstelle oder die relaxierte Situation eines DX-artigen Defektes handelt, konnte jedoch noch nicht abschließend geklärt werden. Alle Ergebnisse können im Rahmen des V-I-Modells interpretiert werden. Durch die große Anzahl an Leerstellen, die bei den Sondeneinbringungen erzeugt werden, könnte jedoch auch ein Leerstelleneinfang vorliegen. Zur Klärung dieser Frage sollten weitere, genauere Rechnungen und Untersuchungen an Systemen, bei denen ein Übergang zwischen den beiden Defekt-konfigurationen extern induziert wird, beitragen.

7.4 Übergang im metastabilen Zustand

Im Abschnitt 7.1 ist das Auftreten der 374MHz Wechselwirkung im InAs:S und InAs:Un mit der relaxierten, stabilen Konfiguration des metastabilen Defektes identifiziert worden. Bei geeigneter Anregung sollte der Übergang dieser Konfiguration in die metastabile Defekt-Konfiguration (substitutionelle Situation) beobachtet werden können.

Da kein Probenmaterial zur Verfügung stand, in welchem das Fermi-niveau im ermittelten Energiebereich des negativen Se-Niveaus liegt, musste das Fermi-niveau des vorhandenen Materials dahingehend variiert werden. Daher sind an einer InAs:S-Probe, die für 120s bei 750°C ausgeheilt worden ist, PAC-Messungen bei tiefen Temperaturen durchgeführt worden (Kapitel 4.1.1.3). Durch das Abkühlen der Probe wird das Fermi-niveau angehoben (siehe Anhang A). Für den Fall einer Ladungsträgerkonzentration von $5,6 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ (siehe Tabelle 7.1) ist dieser temperaturabhängige Verlauf in Abbildung 7.4 gezeigt. Ebenfalls ist in der Abbildung

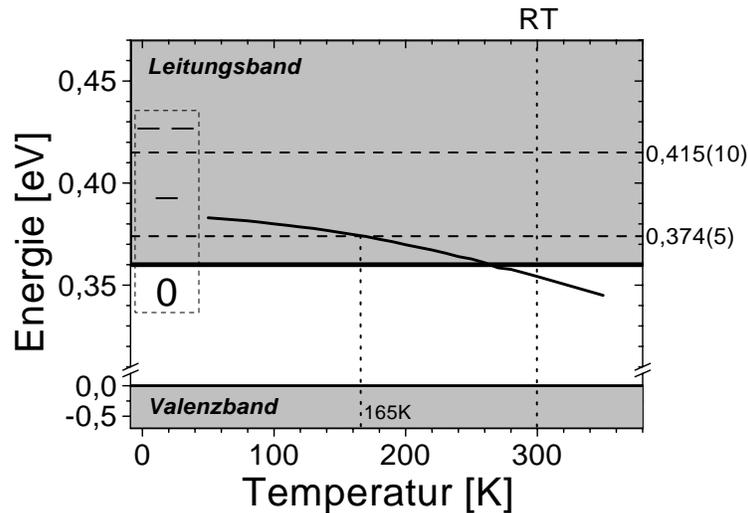


Abbildung 7.4: Temperaturabhängige Fermi-niveaulage im InAs-Material mit einer konstanten Ladungsträgerkonzentration von $5,6 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ (Gleichung A.2).

die ermittelte Lage des negativen Se-Niveaus (Abschnitt 7.2) eingetragen. Zu erkennen ist, dass bei einer Temperatur von 165K das Fermi-niveau das 0/- Niveau überschreitet. Dies bedeutet, dass dann die relaxierte Defektsituation stabilisiert werden sollte.

Bei den temperaturabhängigen PAC-Messungen sollte bei Messtemperaturen unterhalb von 165K die 374MHz-Wechselwirkung zu beobachten sein. Die PAC-Messungen haben jedoch gezeigt, dass keine Wechselwirkung auftritt und dass die Spektren einen sehr hohen ungestörten Anteil A_u aufweisen (siehe Abbildung 4.6).

Bei der Berechnung des Fermi-niveaus ist davon ausgegangen worden, dass die Ladungsträgerkonzentration im entsprechenden Temperaturbereich konstant ist. Diese Annahme gilt für einen im Sättigungsbereich befindlichen Halbleiter. Der allgemeine temperaturabhängige Verlauf der Ladungsträgerkonzentration in einem Halbleiter ist im linken Teil der Abbildung 7.5 gezeigt. Der Verlauf kann in drei Bereiche ein-

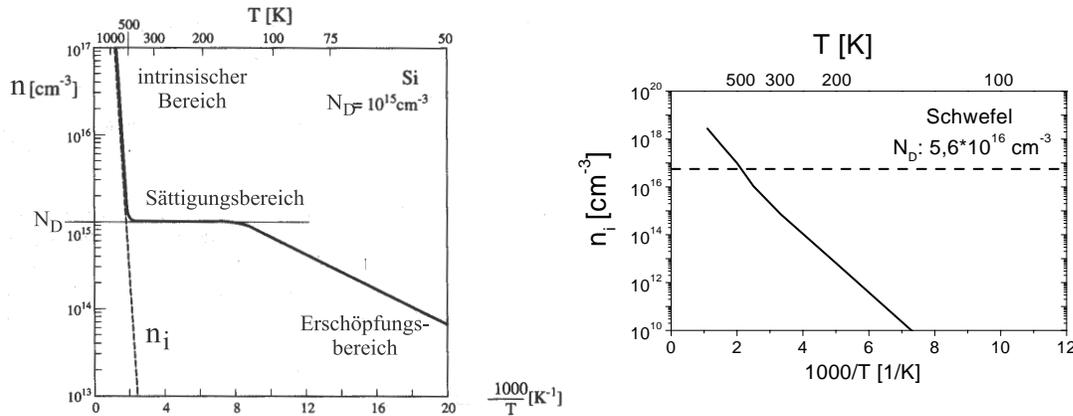


Abbildung 7.5: *Links:* Temperaturabhängigkeit der Ladungsträgerdichte bei einem *n*-dotierten Silizium-Kristall (aus [SCHA91]). *Rechts:* Berechnete intrinsische Ladungsträgerkonzentration des InAs in Abhängigkeit von der Temperatur. Eingezeichnet ist zudem die S-Donatorkonzentration im vermessenen InAs:S-Material.

geteilt werden. Im **Erschöpfungsbereich** bei tiefen Temperaturen liegt eine reine Störstellenleitung vor. Die Steigung der logarithmisch dargestellten Kurve ist in diesem Bereich gegeben durch $-\frac{E_{LB}-E_D}{k_B T}$, wobei E_D die Lage des Donator-Störstellenniveaus bezeichnet. Im **Sättigungsbereich** sind sämtliche Donatoren ionisiert, d. h. die Ladungsträgerkonzentration ist in diesem Bereich konstant gleich der Donatorkonzentration. Im **intrinsischen Bereich** hoher Temperaturen dominiert mit ansteigender Temperatur immer stärker die Eigenleitung gegenüber der Störstellenleitung. Die logarithmische Kurve hat in diesem Bereich die Steigung $-\frac{E_{BL}}{2k_B}$ mit der Bandlückenenergie E_{BL} .

Entsprechend dazu ist im rechten Teil von Abbildung 7.5 die intrinsische Ladungsträgerkonzentration des InAs eingetragen. Die Daten sind unter Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit der Bandlückenenergie (aus [LAND84]) nach Gleichung A.11 berechnet worden. Ebenfalls eingetragen ist die Schwefel-Donatorkonzentration von $5,6 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Die Lage des S-Niveaus im InAs ist nicht bekannt, daher kann auch der Verlauf der Ladungsträgerkurve im Übergangsbereich vom Sättigungsbereich zum Erschöpfungsbereich nicht weiter angegeben werden. Durch das Ergebnis der durchgeführten Messungen muss davon ausgegangen werden, dass sich das InAs:S-Material im Temperaturbereich $<165\text{K}$ im Erschöpfungsbereich befindet. Mit verringerter Ladungsträgerdichte verringert sich dann auch das Fermi-niveau (siehe Abbildung A.1) und die Darstellung in Abbildung 7.4 ist

nicht mehr gültig.

Die Variation der Ladungsträgerkonzentration mit der Temperatur macht es somit unmöglich, bei dem vorhandenen Probenmaterial durch Abkühlung mit dem Fermi-niveau in den Energiebereich des negativen S-Niveaus zu gelangen und somit kann keine Anregung des metastabilen Zustands versucht werden. Es konnte kein Übergang von der stabilen (relaxierten) Defekt-Konfiguration zu der metastabilen (substitutionellen) Konfiguration beobachtet werden. Ein direkter, gesteuerter Übergang dieser beiden Defekt-Konfigurationen würde eine noch stärkere Evidenz für das Vorliegen eines metastabilen Defektes geben.

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde das Donatorsystem $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ in den III–V–Halbleitern InAs und GaAs mit unterschiedlichen Messmethoden näher untersucht.

Es wurden PAC–Messungen mit der Sonde $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ an drei unterschiedlich dotierte InAs–Materialien (InAs:S, InAs:Zn und nicht vordotiertes InAs) durchgeführt. Die Einbringung der Sonde erfolgte dabei auf zwei unterschiedliche Arten, zum einen durch die Kernreaktion $^{75}\text{As}(\alpha, 2n)^{77}\text{Br}$ und zum anderen durch Ionenimplantation. An allen Materialien erfolgten die Messungen nach einem isochronen Ausheilprogramm. Zusätzlich wurden Untersuchungen in Abhängigkeit von der Orientierung der Probenkristalle relativ zum Detektorsystem sowie PAC–Messungen bei tiefen Temperaturen durchgeführt.

Die Auswirkung der α –Bestrahlung auf die elektrischen Eigenschaften des Materials wurde mittels Halleffekt– und Vierpunkt–Messungen untersucht. Im InAs zeigte sich dabei eine n–dotierende Wirkung der α –Bestrahlung. Um Aussagen über die Diffusion des für den Gittereinbau relevanten Mutterisotops ^{77}Br im InAs machen zu können, wurden SIMS–Messungen an mit stabilem ^{79}Br implantierten InAs–Proben unterschiedlicher Vordotierung durchgeführt. Bei allen drei InAs–Materialien blieb der größte Teil der eingebrachten Br–Atome in der durch die Implantation bestimmten Umgebung. Die Lage des Implantationsmaximums konnte dabei gut durch eine TRIM–Simulation beschrieben werden.

An GaAs wurden zur Bestimmung der Br–Niveaus DLTS–Messungen sowohl an mit stabilem ^{79}Br implantierten Proben, als auch an mit $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ implantierten Proben, durchgeführt. Bei letzteren Messungen kann durch den Elementübergang beim Zerfall eine direkte Zuordnung beobachteter Niveaus zum Mutterisotop ^{77}Br sowie zum Tochterisotop ^{77}Se erfolgen. Es konnten zwei Br–korrelierte Niveaus beobachtet werden. Um auch bei diesem System Aussagen über die Br–Diffusion im Material machen zu können, wurden Radiotracer–Messungen an GaAs–Proben durchgeführt, die mit ^{82}Br implantiert wurden. Bei den typischen Ausheilbedingungen trat keine nennenswerte Diffusion der Br–Atome gegenüber dem Implantationsprofil auf.

Bei den PAC–Messungen konnte im InAs:S und im nicht vordotierten InAs bei beiden Arten der Sondeneinbringung nach Ausheilschritten in einem bestimmten Temperaturbereich eine einheitliche axialsymmetrische Wechselwirkung ($\nu_Q=374(1)\text{MHz}$) mit einem EFG in $\langle 111 \rangle$ –Richtung beobachtet werden. Bei allen drei Materialien lag nach einem Ausheilschritt bei 750°C ein größtenteils ungestörtes Spektrum vor und die einheitliche Wechselwirkung war verschwunden. Im Rahmen des V–I–Modells konnte damit das Se als DX–ähnlicher Defekt im InAs identifiziert werden. Mithilfe der Ergebnisse der Halleffekt– und Vierpunkt–Messungen konnte aus den PAC–Ergebnissen die Lage des negativen Se–Niveaus abgeschätzt werden. Entgegen den Erwartungen liegt das Niveau im sonst nicht zugänglichen Leitungsband.

Anhang A

Berechnung elektronischer Eigenschaften

A.1 Die Lage des Fermi-niveaus

Elektronen und Löcher verhalten sich im Leitungs- bzw. Valenzband wie freie Teilchen. Im thermischen Gleichgewicht wird die Verteilung zwischen den erreichbaren Energieniveaus durch die Fermi–Dirac–Statistik beschrieben:

$$\frac{n_s}{Z(E)_s} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_s - E_F}{k_B T}\right)} \quad (\text{A.1})$$

Dabei bezeichnet n_s die Anzahl der Elektronen, die das Niveau der Energie E_s besetzen. Die Anzahl dieser Niveaus wird durch die Zustandsdichte $Z(E)_s$ beschrieben. k_B ist der Boltzmann–Faktor¹ und T die Gittertemperatur. Das Fermi-niveau E_F wird beschrieben durch die Bandstruktur, die Dotierung des Materials und die Temperatur. Die Zustandsdichte hingegen wird durch die Dispersion $E(\vec{k})$ beschrieben.

Für parabolische isotrope Bänder² ergibt sich daraus für die Berechnung der Ladungsträgerkonzentration in Abhängigkeit von dem Fermi-niveau, der effektiven Masse m^* sowie der Temperatur [NAG80], [KOPI92]:

$$n = \int_{E_{LB}}^{\infty} Z(E)f(E)dE = N_{LB} \cdot F_{\frac{1}{2}}(E_F - E_{LB}) \quad (\text{A.2})$$

$$p = \int_{-\infty}^{E_{VB}} Z(E)(1 - f(E))dE = N_{VB} \cdot F_{\frac{1}{2}}(E_{VB} - E_F) \quad (\text{A.3})$$

¹ $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} = 2,08 \cdot 10^{-4} \text{ eV/K}$

² Ein Band heißt isotrop, wenn es sich im relevanten Energiebereich als Funktion von $|\vec{k}|$ darstellen lässt. Es heißt parabolisch, wenn E quadratisch von k abhängt. Hier ist: $E(k) = \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2m^*}$

Darin bezeichnet $f(E)$ die Fermi-Funktion, $F_{\frac{1}{2}}(\eta)$ das Fermi-Integral und N_{LB} sowie N_{VB} die effektiven Zustandsdichten im Leitungs- sowie im Valenzband.

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-E_F}{k_B T}\right) + 1} \quad (\text{A.4})$$

$$F_{\frac{1}{2}}(\eta) = \frac{1}{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x} dx}{1 + \exp(x - \eta)} \quad (\text{A.5})$$

$$N_{\text{LB}} = 2 \cdot \left(\frac{2\pi \cdot m_E^* \cdot k_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} = 8,7 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3} \quad (\text{für InAs}) \quad (\text{A.6})$$

$$N_{\text{VB}} = 2 \cdot \left(\frac{2\pi \cdot m_L^* \cdot k_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} = 1,3 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3} \quad (\text{für InAs}) \quad (\text{A.7})$$

Im Falle negativer E_F und $|E_F| \gg k_B T$ gehen die exakten Beziehungen A.2 und A.3 in die folgenden klassischen Näherungen über:

$$\begin{aligned} n &= N_{\text{LB}} \cdot \exp\left(-\frac{E_{\text{LB}} - E_F}{k_B T}\right) \\ \text{und } E_{\text{LB}} - E_F &= k_B T \cdot \ln\left(\frac{N_{\text{LB}}}{n}\right) \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

$$\begin{aligned} p &= N_{\text{VB}} \cdot \exp\left(\frac{E_{\text{VB}} - E_F}{k_B T}\right) \\ \text{und } E_F - E_{\text{VB}} &= k_B T \cdot \ln\left(\frac{N_{\text{VB}}}{p}\right) \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Im Fall einer hohen Entartung ($\frac{E_F}{k_B T} \gg 0$) ergibt sich:

$$n = N_{\text{LB}} \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{E_F}{k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (\text{A.10})$$

In der Abbildung A.1 ist die Ladungsträgerkonzentration n in Abhängigkeit von der Fermienergie für 300K dargestellt. Es ist sehr gut zu erkennen, dass die Näherungen in ihrem Gültigkeitsbereich ein sehr gutes Resultat liefern.

Die im Rahmen der Arbeit gemessenen Ladungsträgerkonzentrationen liegen im Bereich von $1,5 \cdot 10^{16}$ - $4,63 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (Tabelle 7.1) und somit in dem Bereich, in dem das Fermi-niveau exakt berechnet werden muss. Da das Fermi-Integral (Gln. A.2) nicht analytisch lösbar ist, kann keine exakte Formel für die Abhängigkeit der Fermienergie von der Ladungsträgerkonzentration angegeben werden. Die Werte können aus Abbildung A.1 abgelesen werden.

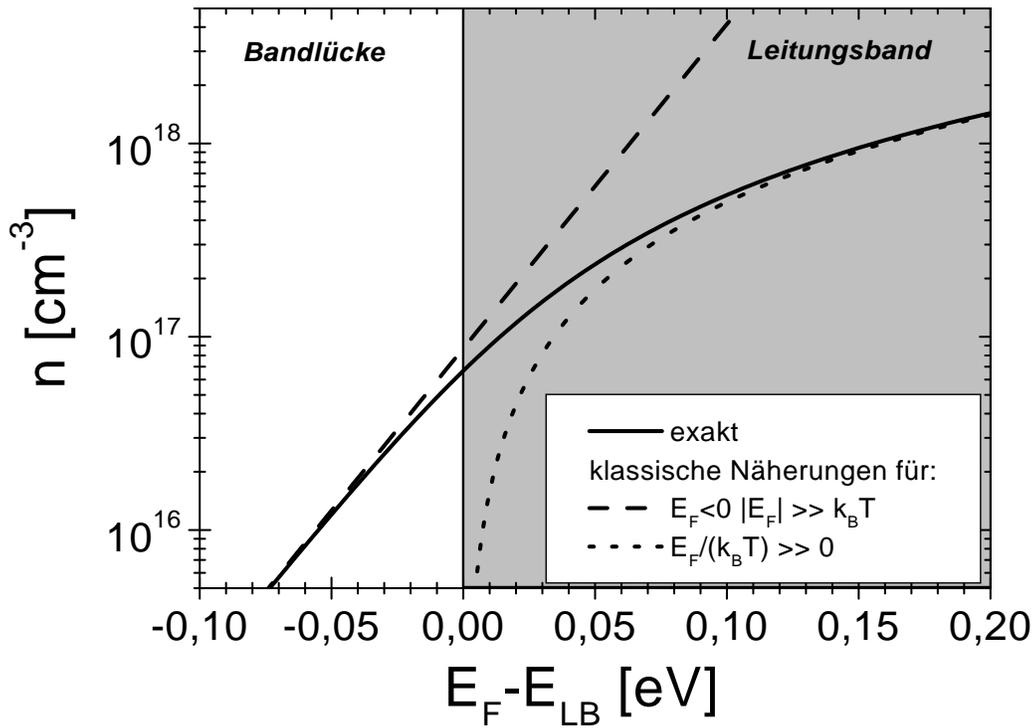


Abbildung A.1: Ladungsträgerkonzentration in Abhängigkeit von der Ferminiveaulage relativ zur Leitungsbandkante für 300K. Gezeigt sind die Ergebnisse aus: 1.) (durchgezogen) der exakten Berechnung über den gesamten Bereich nach Gleichung A.2 2.) (gestrichelt) der klassischen Näherung für $E_F < 0$, $|E_F| \gg k_B T$ nach Gleichung A.8 3.) (gepunktet) der Lösung für einen hoch entarteten Halbleiter $\frac{E_F}{k_B T} \gg 0$ nach Gleichung A.10.

A.2 Die intrinsische Ladungsträgerdichte n_i

Die intrinsische Ladungsträgerdichte n_i lässt sich im nicht entarteten Halbleiter mithilfe der effektiven Zustandsdichten berechnen nach[RUDD95]:

$$n = p \equiv n_i = \sqrt{N_{LB} \cdot N_{VB}} \cdot \sqrt{F_{\frac{1}{2}} \left(\frac{E_F - E_{LB}}{k_B T} \right) \cdot F_{\frac{1}{2}} \left(\frac{E_{VB} - E_F}{k_B T} \right)} \quad (\text{A.11})$$

Im klassischen Grenzfall vereinfacht sich der Zusammenhang zu:

$$n_i = \sqrt{N_{LB} \cdot N_{VB}} \cdot \exp \left(-\frac{E_{BL}}{2k_B T} \right) \quad (\text{A.12})$$

Dabei bezeichnet E_{BL} die Bandlückenenergie.

Anhang B

Bestimmung der eingebrachten Sondenkonzentrationen

B.1 α -Bestrahlung

Für die Berechnung der bei α -Bestrahlung für eine Bestrahlungsdauer t erhaltenen Aktivität A erfolgt aus dem Zerfallsgesetz [MAY94]:

$$A(t) = \lambda N_0 \cdot \frac{\lambda_2}{\lambda_2 - \lambda} \cdot (\exp(-\lambda t) - \exp(-\lambda_2 t)) \quad (\text{B.1})$$

Die Zerfallskonstante λ ist durch die Halbwertszeit $t_{1/2}$ gegeben, $\lambda = \frac{\ln 2}{t_{1/2}}$.

λ_2 ist gegeben durch:

$$\lambda_2 = \sigma \cdot \Phi \quad (\text{B.2})$$

mit:

σ = Wirkungsquerschnitt der Kernreaktion

Φ = Teilchenfluß des Zyklotrons = $\frac{I}{A \cdot e \cdot q} \left[\frac{1}{\text{cm}^2 \cdot \text{s}} \right]$

I = Strom [A]

A = Strahlfläche [cm^2]

e = Elementarladung [C]

q = Ladungszahl (2 für α 's)

N_0 gibt die Anzahl der zum Zeitnullpunkt vorhandenen Atome eines Isotops an und lässt sich berechnen aus:

$$N_0 = A_V \cdot g \cdot h \cdot m \cdot \frac{1}{M} \quad (\text{B.3})$$

mit:

A_V = Avogadrozahl ($6,02 \cdot 10^{23} \frac{1}{\text{mol}}$)

g = relativer Elementgehalt des Ausgangselements im Material

h = relative Isotopenhäufigkeit

m=effektive Targetmasse

M=Massenzahl im Target

Für den vorliegenden Fall, dass $\lambda_2 \ll \lambda$ und $\lambda_2 \cdot t \ll 1$ vereinfacht sich Gleichung B.1 zu:

$$A = \frac{1}{M} \cdot 1,6 \cdot 10^{-13} \cdot \Phi \cdot \sigma \cdot m \cdot g \cdot h \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{\ln 2}{t_{1/2}} \cdot t\right)\right) \quad (\text{B.4})$$

Die Größen müssen dabei wie folgt angegeben werden:

M dimensionslos (^{75}As : 75)

Φ in $\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$

σ in barn (für $^{75}\text{As}(\alpha, 2n)^{77}\text{Br}$ -Reaktion: 0,7barn)

m in mg

g dimensionslos (As im InAs: 0,52)

h in % (^{75}As : 100%)

t in h

$t_{1/2}$ in h (^{77}Br : 57h)

Der angegebene Wert von 0,7barn für den Wirkungsquerschnitt der $(\alpha, 2n)$ -Reaktion ergibt sich aus der Annahme, dass die Anregungsfunktion (Abbildung 3.1) durch ein Kastenpotential angenähert werden kann. Man geht dabei davon aus, dass der Wirkungsquerschnitt im Bereich von 20MeV bis zu der Eintrittsenergie von 33MeV konstant als 700mbarn angenommen werden kann. Die effektive Targetmasse ergibt sich dann als die Masse in dem Probenvolumen, in dem eine Kernreaktion stattfindet. Dazu wird das Volumen aus der Strahlfläche und der Tiefe $x_{20\text{MeV}}$ berechnet, in der die α -Teilchen noch eine Energie von 20MeV besitzen. Nach Abbildung 3.2 ist dieses bei $180\mu\text{m}$ der Fall. Somit gilt:

$$m = \frac{\text{Fläche} \cdot x_{20\text{MeV}}}{\rho}$$

Dabei ist ρ die Dichte des Materials ($5,66 \text{ g/cm}^3$).

Die implantierte Dosis lässt sich dann berechnen über:

$$\text{Dosis} = \frac{\#\text{Atome}}{\text{Fläche}} = \frac{\text{Aktivität}}{\lambda \cdot \text{Fläche}} \quad (\text{B.5})$$

Aus der Dosis lässt sich dann die eingebrachte mittlere Sondenkonzentration bestimmen:

$$\text{Sondenkonzentration} = \frac{\text{Dosis}}{\text{Tiefe}} \quad (\text{B.6})$$

Als Tiefe wird dabei der Wert von $200\mu\text{m}$ angenommen, bis zu dem das Sondenprofil als annähernd konstant angesehen werden kann (siehe Abschnitt 3.2).

B.2 Ionenimplantation

Bei den Ionenimplantationen (Abschnitt 3.3) wird die eingebrachte Dosis über die gemessene, implantierte Ladung bestimmt:

$$\text{Dosis} = \frac{\text{implantierte Ladung}}{\text{Elementarladung} \cdot \text{Fläche}} \quad (\text{B.7})$$

Um auf die eingebrachte mittlere Sondenkonzentration zu kommen muss nun in Gleichung B.6 als Tiefe die aus der TRIM-Simulation (Abb. 3.4) für die jeweilige Energie ermittelte mittlere Breite des Implantationsprofils eingesetzt werden. Die so abgeschätzten Werte für die verschiedenen verwandten Implantationsenergien zeigt Tabelle B.1.

Implantationsenergie [keV]	60	150	260
mittlere Breite [μm]	0,05(1)	0,10(5)	0,15(5)

Tabelle B.1: Aus TRIM-Simulationen (Abb. 3.4) abgeschätzte mittlere Breiten der Implantationsprofile.

Anhang C

Definition eines axialsymmetrischen EFG für NNfit

In Kapitel 2.4.1.3 wird das Programm NNfit vorgestellt, welches zur Anpassung der theoretischen R-Wert-Funktion gemäß Gleichung 2.27 eingesetzt wird.

Die Orientierung des EFG-Tensors im Einkristall relativ zu den Detektoren wird durch drei Winkel Θ , Φ und ρ festgelegt [BARR92]. Θ gibt den Winkel zwischen der Detektorebene und der Hauptachse V_{zz} des EFG an. Φ bezeichnet den Winkel zwischen der Projektion von V_{zz} auf die Detektorebene und der Richtung des Start-Detektors. Somit ist die Orientierung von V_{zz} festgelegt. ρ beschreibt eine Rotation der xy-Ebene um diese V_{zz} -Achse und wird bei der Beschreibung von Einkristallen nicht benötigt. Daher ist $\rho=0$.

Bei Messungen im kubischen Einkristall gibt es, wie in Kapitel 2.1.2.2 erläutert, kristallographisch äquivalente Orientierungen von V_{zz} , für die die oben genannten Winkel und damit die theoretischen R-Wert-Funktionen unterschiedliche Formen annehmen können. Zur Berechnung des theoretischen Gesamtspektrums müssen deshalb für jede äquivalente Orientierung von V_{zz} und für alle möglichen Detektor-Kombinationen die Winkel Θ und Φ berechnet werden. Aufgrund der hohen Symmetrie des kubischen Systems führen i.A. jedoch nur wenige Winkelkombinationen zu unterschiedlichen R(t)-Funktionen, über die gemittelt werden muss.

In Tabelle C.1 sind die zur Beschreibung des theoretischen Gesamt-R-Wert-Spektrums erforderlichen verschiedenen Anteile mit den entsprechenden Winkeln Θ und Φ für die wichtigsten Detektorgeometrien und Orientierungen der Hauptkomponente V_{zz} aufgeführt. Um eine entsprechende Gewichtung der Einzelspektren zu gewährleisten, müssen alle aufgeführten Anteile bei der Berechnung berücksichtigt werden.

V_{ZZ}	Det.	Anteil 1		Anteil 2		Anteil 3		Anteil 4		Anteil 5		Anteil 6	
		Θ_1	Φ_1	Θ_2	Φ_2	Θ_3	Φ_3	Θ_4	Φ_4	Θ_5	Φ_5	Θ_6	Φ_6
$\langle 100 \rangle$	$\langle 100 \rangle$	0	0	0	90	90	0						
	$\langle 110 \rangle$	0	-45	0	45	90	0						
	$\langle 111 \rangle$	0	-54,75	45	35,26	-45	-35,26						
$\langle 110 \rangle$	$\langle 100 \rangle$	0	45	45	90	45	0						
	$\langle 110 \rangle$	0	0	0	-90	45	45	-45	-135	45	-45	-45	135
	$\langle 111 \rangle$	35,26	-19,5	-35,25	90	90	0	0	35,26	35,26	-90	-35,26	160,5
$\langle 111 \rangle$	$\langle 100 \rangle$	35,26	45										
	$\langle 110 \rangle$	35,26	0	35,26	90								
	$\langle 111 \rangle$	0	0	0	70,53	54,74	125,27	54,74	305,26				

Tabelle C.1: Die zur Berechnung von theoretischen R-Wert-Spektren eines axialsymmetrischen EFG im kubischen Einkristall notwendigen Winkel Θ und Φ für das Programm NNfit. Angegeben sind die wichtigsten Orientierungen der Feldgradienten V_{ZZ} (erste Spalte) für verschiedene Detektororientierungen entlang der angegebenen Achsen.

Mit den angegebenen Werten für Θ und Φ sind die entsprechenden theoretischen R-Wert-Funktionen mit NNfit berechnet worden. Das Ergebnis zeigt Abbildung C.2.

Das untersuchte Probenmaterial hatte in allen Fällen eine (100)-Oberfläche und Probenkanten entlang der $\langle 110 \rangle$ -Achsen. Für die Orientierungsmessungen müssen die Proben daher entsprechend Abbildung C.1 eingebaut werden.

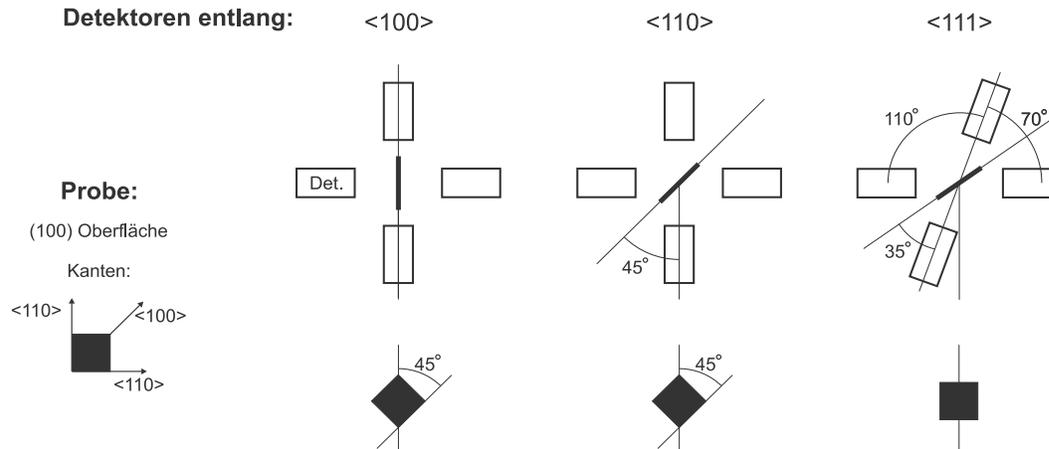


Abbildung C.1: Probeneinbau für die Orientierungsmessungen. In der oberen Hälfte der Abbildung ist die Aufsicht auf die PAC-Anlage gezeigt. Darunter ist in der Frontansicht die Position der Probe bezüglich der Detektorebene gezeigt.

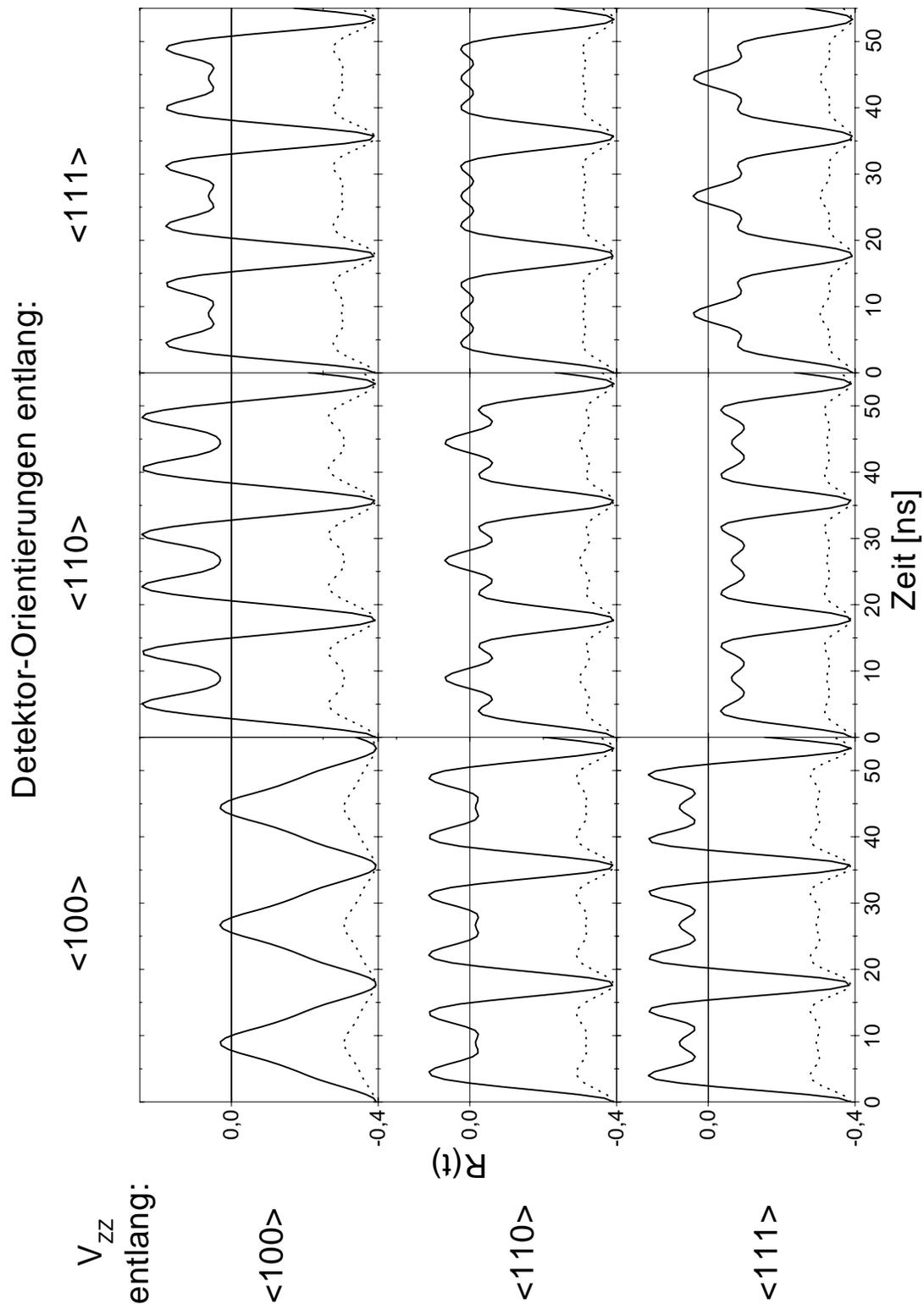


Abbildung C.2: Verlauf der theoretischen R -Wert-Funktionen im kubischen Einkristall für die Sonde ^{77}Br (^{77}Se) bei einem angenommenen Probe-Detektor Abstand von 2,55cm ($A_{22}^{app} = -0,383$). Gezeigt sind zwei Fälle: 1) durchgezogene Linie: einheitlicher, axialsymmetrischer EFG mit 100% 2) gepunktete Linie: einheitlicher, axialsymmetrischer EFG mit 20% und einem zusätzlichen ungestörten Anteil von 80%.

Anhang D

Liste aller PAC–Messungen

Die folgenden Seiten sind eine Zusammenstellung aller PAC–Messungen, die mit der Sonde $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ in den unterschiedlichen InAs–Materialien durchgeführt worden sind. Das untersuchte Material (entsprechend Tabelle 3.1) ist in der dritten Spalte aufgeführt. Spalte 4 gibt die Bezeichnung der Proben wieder, die auch bei der Beschreibung der durchgeführten Messungen (Kapitel 4) angegeben worden sind. Die darauf folgende Spalte gibt die Art der Sondeneinbringung, sowie die Art der Isotopenproduktion an (siehe Kapitel 3.2 und 3.3).

Die Spalte Messprogramm gibt an, nach welchen Probenbehandlungen Messungen durchgeführt worden sind. Die Angaben 3-Det (Drei–Detektor–Anlage) und 4-Det (Vier–Detektor–Anlage) in Spalte 7 beziehen sich auf die verwandte PAC–Apparatur (siehe Kapitel 2.3). In den Spalten 8 und 9 sind Angaben über die Probengeometrie bei der Durchführung der Messungen gemacht worden. Die Messgeometrie entspricht den in Abbildung C.1 gezeigten Anordnungen. Die Angabe des Detektorabstands beinhaltet im Fall der Drei–Detektor–Anlage zusätzlich zu dem gemessenen Abstand eine Dicke von 1,5mm entsprechend der Messing–Abdeckung, die den BaF_2 –Detektor umgibt (siehe Kapitel 2.3). Die letzte Spalte zeigt einige Bemerkungen zum Verlauf der durchgeführten Messungen.

Messnummer	Messzeitraum	Material	Probennummer	Sondeneinbringung	Messprogramm	PAC-Anlage	Messgeometrie	Detektorabstand	Bemerkung
MS1	April '97	R4/IA/651/Zn	BIAp-1	10min 300nA 33MeV α 's	750°C 120s	4-Det	<110>	10mm	Proximity-Cap
MS3	Mat/Juni '97	R4/IA/651/Zn	BIAp-3	30min 300nA 33MeV α 's	wie bestrahlt Cap 750°C 120s decap	4-Det	<110>	20mm	HF nicht kontaminiert
MS3	Mai/Juni '97	R4/IA/615/S	BIAn-3	1h 300nA 33MeV α 's	wie bestrahlt Cap, 750°C 120s bei 14K bei RT	4-Det	<110>	20mm	Messungen im Displex unter Vakuum
MS4	Juni/Juli '97	R4/IA/615/S	BIAn-4	45min 300nA 33MeV α 's	wie bestrahlt 200°C 120s 300°C 120s 400°C 120s	4-Det	<110>	20mm	Detektorprobleme
MS5	Juli '97	R4/IA/615/S	BIAn-5	1,25h 300nA 33MeV α 's	wie bestrahlt wie bestrahlt 600°C 120s	4-Det	<110>	10mm	Detektorprobleme
MS5			BIAnb-5	1,5h 300nA 33MeV α 's	wie bestrahlt 400°C 120s 500°C 120s	4-Det	<110>	10mm	Detektorprobleme
MS8	Okt. '97	R4/IA/615/S	BIAn-8	1h 300nA 33MeV α 's					Probe nicht richtig getroffen
MS9	Nov. '97	R4/IA/615/S	BIAnb-8	1h 300nA 33MeV α 's					Probe zerbrochen
MS9			BIAna-9	3h 300nA 33MeV α 's	wie bestrahlt 600°C 120s Cap 45s, 650°C 75s 750°C 120s decap	3-Det	<110>	21,5mm	Detektorprobleme
MS9			BIAnb-9	3h 300nA 33MeV α 's	500°C 120s 550°C 120s	3-Det	<110>	16,5mm	Probe beim Ausbau zerbrochen!
MS10	Febr. '98	R4/IA/615/S	BIAn-10	3h 300nA 33MeV α 's	500°C 15min Cap 30s, 650°C 75s	3-Det	<110>	11,5mm	Detektorprobleme
MS10			BIAp-10	3h 300nA 33MeV α 's	750°C 120s 800°C 120s	3-Det	<110>	13,5mm	Detektorprobleme Probenoberfläche kaputt
MS10	Febr. '98	R4/IA/651/Zn	BIAn-10	3h 300nA 33MeV α 's	200°C 120s 400°C 120s	3-Det	<110>	21,5mm	Detektorprobleme
MS10			BIAnb-10	3h 300nA 33MeV α 's	500°C 120s 600°C 120s	3-Det	<110>	13,5mm	Detektorprobleme
MS11	Febr. '98	R4/IA/651/Zn	BIAp-11	3h 300nA 33MeV α 's	300°C 120s 500°C 120s	3-Det	<110>	13,5mm	Detektorprobleme
MS11			BIAnb-11	3h 300nA 33MeV α 's	Cap 25s, 650°C 95s 800°C 120s	3-Det	<110>	13,5mm	Detektorprobleme

Messnummer	Messzeitraum	Material	Probennummer	Sondeneinbringung	Messprogramm	PAC-Anlage	Messgeometrie	Detektorabstand	Bemerkung
MS12	März. '98	R4/IA/651/Zn	BIAPA_12	4h 300nA 33MeV α 's	300°C 400°C 120s wie bestrahlt 200°C 120s	3-Det 3-Det 3-Det 3-Det	<110> <110> <110> <110>	13,5mm 13,5mm 13,5mm 13,5mm	
Umbauarbeiten am Zyklotron, März bis Juli '98									
MS13	Aug. '98	R4/IA/615/S	BIAna_13	3,6h 300nA 33MeV α 's	Cap 675°C 120s 700°C 120s 725°C 120s 425°C 120s 450°C 120s 475°C 120s	3-Det 3-Det 3-Det 3-Det 3-Det 3-Det	<110> <110> <110> <110> <110> <110>	13,5mm 13,5mm 13,5mm 13,5mm 13,5mm 13,5mm	
MS14	Nov. '98	R4/IA/615/S	BIAn_14	300nC 60keV ISOLDE 160s 1,4nA	wie implantiert 600°C 120s Cap 750°C 120s decap	3-Det 3-Det 3-Det	<110> <110> <110>	14mm 14mm 14mm	HF kontaminiert
MS14	Nov. '98	R4/IA/651/Zn	BIAP_14	300nC 60keV ISOLDE 160s 1,4nA	wie implantiert 600°C 120s Cap 750°C 120s decap	3-Det 3-Det 3-Det	<110> <110> <110>	14mm 14mm 14mm	HF kontaminiert
MS14	Nov. '98	R4/IA/669/Un	BIAn_14	300nC 60keV ISOLDE 160s 1,4nA	wie implantiert 600°C 120s Cap 750°C 120s decap	3-Det 3-Det 3-Det 3-Det	<110> <110> <110> <110>	14mm 14mm 14mm 14mm	HF kontaminiert
MS15	Dez. '98	R4/IA/669/Un	BIAua_15	4h 300nA 33MeV α 's	200°C 120s 300°C 120s 400°C 120s 500°C 120s wie bestrahlt Cap 11s 650°C 115s 700°C 120s	3-Det 3-Det 3-Det 3-Det 3-Det 3-Det 3-Det	<110> <110> <110> <110> <110> <110> <110>	14mm 14mm 14mm 14mm 14mm 14mm 14mm	Probe tot
MS16	Febr. '99	R4/IA/669/Un	BIAua_16	3h 300nA 33MeV α 's	450°C 120s 550°C 120s Cap 750°C 120s 400°C 500°C 120s 600°C 120s	3-Det 3-Det 3-Det 3-Det 3-Det 3-Det	<110> <110> <110> <110> <110> <110>	14mm 14mm 14mm 14mm 14mm 14mm	
MS17	Febr. '99	R4/IA/615/S	BIAna_17	4h 300nA 33MeV α 's		3-Det	<110>	14mm	Probe beim Ausbau zerbrochen

Mess-nummer	Mess-zeitraum	Material	Proben-nummer	Sondeneinbringung	Messprogramm	PAC-Anlage	Mess-geometrie	Detektor-abstand	Bemerkung
MS18	März '99	R4/IA/615/S	BIAu_18	3,5h 300nA 33MeV α 's	600°C 120s 600°C 120s 600°C 120s	3-Det 3-Det 3-Det	<110> <100> <111>	24,5mm 24,5mm 25,5mm	
MS18	März '99	R4/IA/669/Un	BIAu_18	3,2h 300nA 33MeV α 's	600°C 120s 600°C 120s 600°C 120s	3-Det 3-Det 3-Det	<110> <100> <111>	24,5mm 24,5mm 25,5mm	Probe tot
MS19	April '99	R4/IA/651/Zn	BIAp_19	13h 50nA 33MeV α 's	wie bestrahlt 500°C 120s 600°C 120s	3-Det 3-Det 3-Det	<110> <110> <110>	14mm 14mm 14mm	Probe nach letzter Messung zerbrochen
MS20	Mai '99	R4/IA/651/Zn	BIAp_20	13h 50nA 33MeV α 's	wie bestrahlt 400°C 120s Cap 30s 650°C 120s 750°C 120s 750°C 120s 800°C 120s	3-Det 3-Det 3-Det 3-Det 3-Det 3-Det	<110> <110> <110> <110> <110> <110>	14mm 14mm 14mm 14mm 14mm 14mm	Anlage neu eingestellt Probenoberfläche kaputt
MS21	Juni '99	R4/IA/651/Zn	BIAp_21	3h 300nA 33MeV α 's	Cap 750°C 120s	3-Det	<110>	14mm	
MS21	Juni '99	Crystal	BIAu_21	3h 300nA 33MeV α 's	Cap 750°C 120s	3-Det	<110>	14mm	
MS21	Juni '99	R4/IA/669/Un	BIAu_21	3h 300nA 33MeV α 's	600°C 120s	3-Det 3-Det 3-Det	<110> <110> <111>	14mm 25,5mm 25,5mm	Probe nicht berührt
MS22	Juni/Juli '99	R4/IA/669/Un	BIAua_22	4h 300nA 33MeV α 's	600°C 120s	3-Det 3-Det 3-Det 3-Det 3-Det 3-Det	<111> <100> <110> <110> <110> <110>	25,5mm 25,5mm 25,5mm 18,5mm 14mm 18,5mm	
MS23	Aug./Sept. '99	R4/IA/615/S	BIAu_23	6,6h 50nA 33MeV α 's 4h 300nA 33MeV α 's	Cap 750°C 120s Cap, 750°C 120s bei RT bei 140K bei 120K bei 100K bei 80K bei 60K bei 40K bei 20K bei 60K bei 140K bei 230K bei RT	3-Det 3-Det 3-Det 3-Det 3-Det 3-Det 3-Det 3-Det 3-Det 3-Det 3-Det 3-Det	<110> <110> <110> <110> <110> <110> <110> <110> <110> <110> <110> <110>	13,5mm 13,5mm 13,5mm 13,5mm 13,5mm 13,5mm 13,5mm 13,5mm 13,5mm 13,5mm 13,5mm 13,5mm	Detektor wandert durch Pumpbewegung des Displex

Tabelle D.1: Übersicht über alle PAC-Messungen an InAs

Anhang E

Anisotropie–Fehler durch Probengeometrie

E.1 PAC–Messungen bei unterschiedlichen Detektorabständen

Bei den meisten PAC–Messungen ist der Abstand zwischen Probe und Detektor auf den minimal möglichen Wert von etwa 14mm eingestellt worden, um eine möglichst gute Statistik zu erhalten. Für die Orientierungsmessungen (siehe Abschnitte 4.1.1.2 und 4.1.3.2) muss der Abstand jedoch aufgrund der Detektorgeometrie vergrößert werden, da bei den Messungen in $\langle 111 \rangle$ –Orientierung der Winkel zwischen zwei Detektoren von 90° auf 70° verringert werden muss (siehe Abbildung C.1). Der geänderte Abstand bewirkt eine Änderung der zu berücksichtigenden apparativen Anisotropiekoeffizienten A_{kl}^{app} . Die Änderung sollte dem in Abbildung 2.10 dargestellten Verlauf folgen. Eine alleinige Änderung des Probenabstandes darf daher bei Berücksichtigung der A_{kl}^{app} keine Auswirkung auf das gemessene R–Wert–Spektrum haben.

An dem InAs:Un–Material sind an vier Proben Messungen nach einem Ausheil–schritt bei 600°C durchgeführt worden. Dabei lag der Detektorabstand zwischen 14–25,5mm. Es wurde außerdem in den drei unterschiedlichen Orientierungen gemessen. Eine Liste mit den verschiedenen Messungen und Messbedingungen ist in Tabelle E.1 aufgeführt.

Bei der Auswertung der Daten wurden zunächst alle Spektren einzeln gefittet. Lediglich die Ergebnisse für den einheitlichen Anteil A_D stimmen dabei gut überein. Die Anteile des ungestörten Anteils sowie des stark gestörten Anteils variieren recht stark. Auch die sich ergebenden mittleren Frequenzen ν_{QV} und Dämpfungen δ_V variieren stärker als durch den aus dem Fit erhaltenen Fehler abgedeckt wird. Fits mit gewichteten Mitteln für alle Parameter außer den Anteilen liefern dennoch recht

Messnummer	Probennummer	Dauer α -Bestrahlung	Abstand [mm]	Messorientierung	A_u [%]	A_D [%]	A_V [%]
1	BIAub_16	3h	14	<110>	33,9(7)	21(1)	45,4(7)
2	BIAu_18	3h	24,5	<110>	18,4(7)	13(2)	69(3)
3			24,5	<100>	9,1(5)	20(1)	71(6)
4	BIAu_21	3h	14	<110>	25,1(7)	22(1)	53(2)
5			25,5	<110>	34,6(8)	23(1)	42(1)
6			25,5	<111>	43(1)	16,8(8)	41(1)
7	BIAua_22	4h	25,5	<111>	24,4(9)	20(1)	55(2)
8			25,5	<100>	20,1(8)	26(1)	54(5)
9			25,5	<110>	25,7(9)	23(2)	52(2)
10			18,5	<110>	19,3(8)	25(2)	56(2)
11			14	<110>	12,5(5)	24(3)	63(4)

Tabelle E.1: Übersicht über alle Messungen an α -bestrahltem InAs:Un nach einem Ausheilschritt für 120s bei 600° C.

gute Anpassungen, sodass zur weiteren Betrachtung nur noch die drei Anteile (A_u , A_D und A_V) angepasst worden sind. Das Ergebnis, welches diese Anpassung liefert, ist in der Tabelle E.1 angegeben sowie in der Abbildung E.1 grafisch dargestellt und in dessen Bildunterschrift beschrieben.

Deutlich zu erkennen ist, dass der einheitliche Anteil A_D für alle Messungen recht konstant ist, wohingegen die beiden anderen Anteile stärker variieren. Es ist möglich, dass bei unterschiedlichen Proben andere Bestrahlungsbedingungen am Isochronzyklotron vorgelegen haben, obwohl gleiche Bedingungen gefordert wurden. So kann zum Beispiel ein heißer Kern des α -Strahls an einer Probe eine stärkere Schädigung hervorrufen. Wie bereits im Kapitel 3.2 angemerkt wurde, führt ein zu hoher Strahlstrom zu einer starken Schädigung der Oberfläche. Bei den hier vermessenen vier Proben, konnte auf den Oberflächen keine sichtbare Schädigung beobachtet werden.

Vergleicht man in der Abbildung E.1 die Ergebnisse für die Messungen mit den laufenden Nummen 9, 10 und 11, die alle an der Probe BIAu_22 (in der Abbildung mit P22 bezeichnet) bei Abständen von 25,5, 18,5 und 14mm durchgeführt wurden, so erkennt man, dass sich der stark gestörte Anteil A_V um 11% absolut vergrößert bei einem gleichzeitig um 13,2% verringerten ungestörten Anteil A_u . Der einheitliche Anteil bleibt etwa gleich. Gleiches kann man bei der Probe BIAu_21 (in der Abbildung mit P21 bezeichnet) bei den Abständen 14 und 25,5mm beobachten. Eine Änderung der Messgeometrie führt dagegen nicht zu einer solch drastischen Veränderung der angepassten Anteile.

Dass der angepasste einheitliche Anteil A_D bei allen Messungen recht gut übereinstimmt, lässt sich dadurch verstehen, dass sich die Anpassung dieses Anteils recht eindeutig aus dem Hub der Störung im R-Wert-Spektrum ergibt und die Bestimmung der Frequenz nicht auf den vorderen, schlechter charakterisierten Zeitbereich beschränkt ist. Dieser vordere Teil der zeitabhängigen R-Wert-Spektren ist im Fall von mit der Sonde ^{77}Br (^{77}Se) gewonnenen Daten durch einen prompten Peak überlagert (siehe Abb. 2.8). Abbildung E.2 zeigt dazu ein nach einem Ausheilschritt für

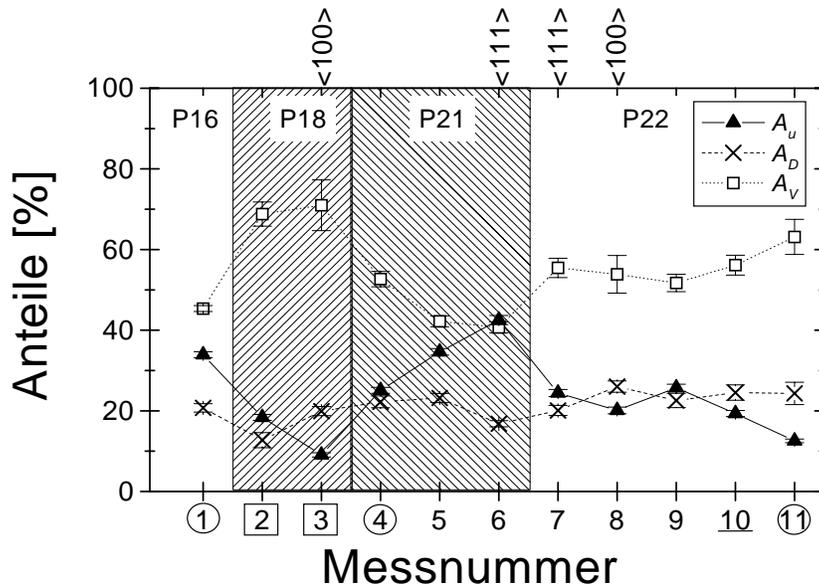


Abbildung E.1: Angepasste Anteile A_u , A_D und A_V für die in Tabelle E.1 aufgelisteten Messungen nach einem Temperschritt für 120s bei 600°C. Alle übrigen Fit-Parameter waren identisch. Auf der Abszisse sind die in der ersten Spalte der Tabelle angegebenen laufenden Nummern aufgetragen. Dabei markieren die eingekreisten Zahlen die Messungen, die bei einem Abstand von 14mm aufgenommen wurden. Die mit einem Quadrat markierten wurden bei 24,5mm, die unterstrichene Messung 10 wurde bei 18,5mm und alle anderen wurden bei 25,5mm aufgenommen. Oberhalb des Diagramms ist die verwandte Messgeometrie angegeben, wobei die unbeschrifteten Messungen in $\langle 110 \rangle$ -Orientierung aufgenommen wurden. Die Messungen an unterschiedlichen Proben sind durch unterschiedliche Hintergrundwahl hervorgehoben. Es sind die Proben P16 (BIAu_16), P18 (BIAu_18), P21 (BIAu_21) und P22 (BIAu_22) entsprechend Tabelle E.1 im Diagramm gekennzeichnet.

120s bei 600°C aufgenommenes Spektrum (siehe Nr. 4 in der Tabelle E.1 bzw. Abbildung E.1), in dem der Fit sowie dessen einzelne Komponenten eingetragen sind. Man kann in dieser aufgeschlüsselten Darstellung außerdem erkennen, dass eine Änderung des ungestörten Anteils A_u gleichbedeutend ist mit einer Änderung der Anisotropie. Denn entsprechend Gleichung 2.28 gibt die Anisotropie die Anbindung an die R(t)-Achse an.

E.2 Auswirkung auf die apparativen Anisotropiekoeffizienten

Im Abschnitt 2.4.1.1 wurde beschrieben, dass die bei der Auswertung eingesetzten openingwinkelkorrigierten Anisotropieparameter durch eine Monte-Carlo-

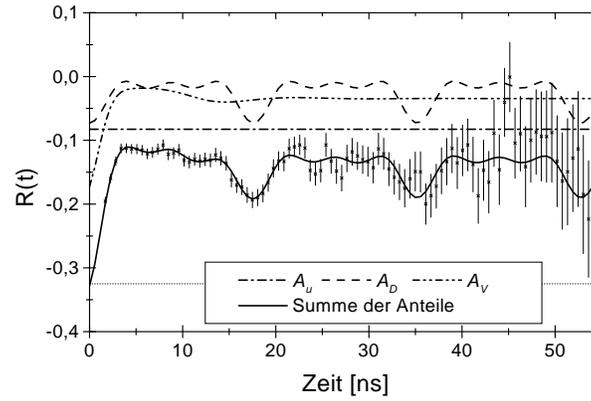


Abbildung E.2: PAC-Spektrum der Probe BIAu₂₁ nach Ausheilen bei 600° C für 120s bei einem Detektorabstand von 14mm und einer $\langle 110 \rangle$ -Detektorgeometrie. Es sind die drei angepassten Anteile A_u , A_D und A_V eingezeichnet. Die durchgezogene Linie ist die Summe der einzelnen Anteile und identisch mit dem Gesamtfit.

Simulation der Dämpfungskoeffizienten in den BaF₂-Szintillationskristallen für die entsprechenden Energien der γ - γ Kaskade bei unterschiedlichen Abständen bestimmt werden. Die so bestimmten apparativen Anisotropiekoeffizienten A_{kl}^{app} gelten streng genommen nur für eine punktförmige Quelle. Bei den hier durchgeführten Messungen handelte es sich jedoch immer um ausgedehnte Verteilungen der Quelle in der Probe. Dies führt zu zwei Effekten, die nachfolgend betrachtet werden.

Zum einen tritt eine Absorption der γ -Strahlung in der Probe auf, die sich stärker auf der Rückseite der Probe auswirkt als auf der Vorderseite (vom Detektor aus betrachtet). Zum anderen ändert sich die Absorption im BaF₂-Kristall des Detektors und dadurch die Nachweiswahrscheinlichkeit durch unterschiedlich lange Wege der γ -Quanten im Kristall bei verschiedenen Probe-Detektor-Abständen. In Abbildung E.3 ist die Probengeometrie für die $\langle 110 \rangle$ -Orientierung (siehe Abb. C.1) gezeigt.

E.2.1 Selbstabsorption in der Probe

Um den Effekt der Absorption in der Probe zu bestimmen, wurde angenommen, dass die Sondenatome gleichmäßig in der dem Detektor abgewandten Seite verteilt sind. In Abbildung E.3 sind der Strahlengang für die γ -Quanten, die von den Kanten der Probe in den Detektorkristall einfallen, für den kleinsten (14mm) und den größten verwandten Abstand (25,5mm) eingezeichnet. In der Vergrößerung kann man dann erkennen, dass im Fall des kleineren Abstands (gestrichelte Linien) der Weg durch das Probenmaterial größer ist als im Fall des größeren Abstands (durchgezogene Linien). Das bedeutet, dass die Absorption in der Probe für einen kleineren Detektorabstand größer wird.

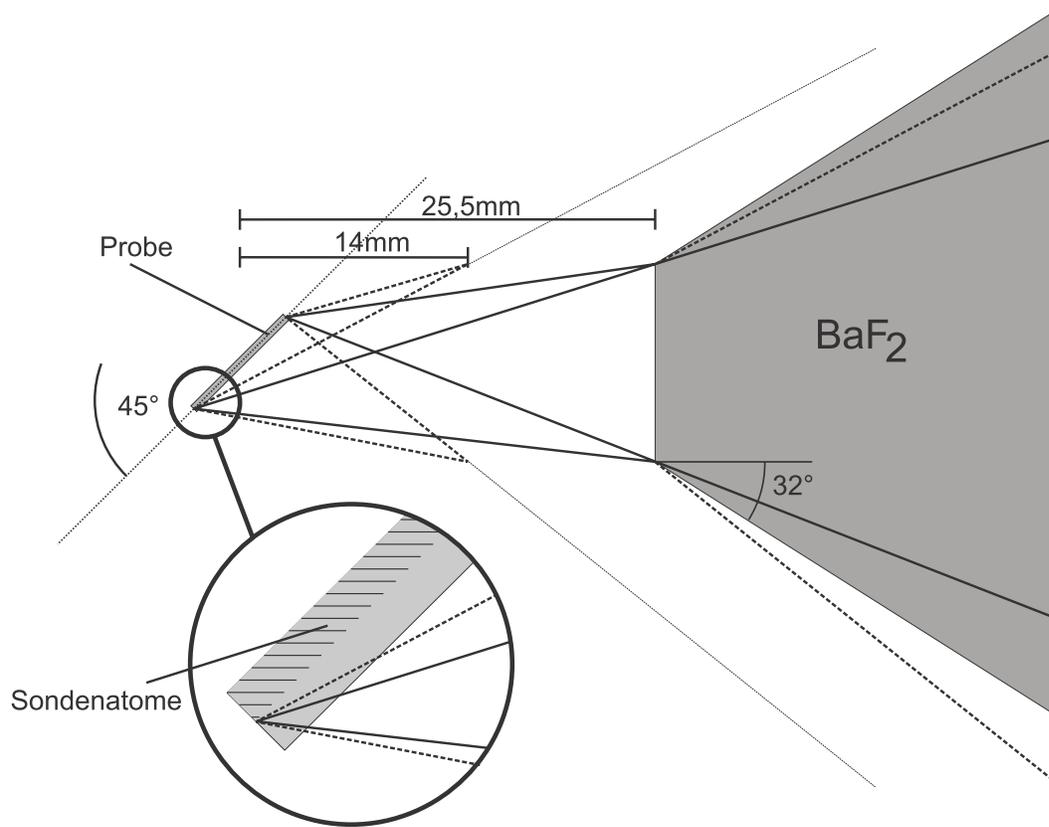


Abbildung E.3: Probe-Detektor-Geometrie für die $\langle 110 \rangle$ -Orientierung. Auf der rechten Seite ist der BaF₂-Szintillatorkristall entsprechend Abbildung 2.7 gezeigt. Links ist eine 500 µm dicke Probe eingezeichnet. In ihr ist bis in eine Tiefe von 250 µm eine homogene Sondenverteilung auf der dem Detektor abgewandten Seite enthalten. Die durchgezogenen Linien zeigen den Strahlengang für eine im Abstand von 25,5 mm befindliche, 8 mm breite Probe von den äußeren Kanten eine im Abstand von 14 mm befindliche Probe als gestrichelte Linien eingezeichnet. Im Kristall ist der parallelverschobene Strahlengang für den bei 14 mm befindlichen Kristall ebenfalls gestrichelt eingezeichnet.

Um diesen Effekt abzuschätzen, wird die Transmission durch die gesamte Probe numerisch ermittelt. Da der Abschwächungsfaktor in InAs nicht bekannt ist, ist zur Abschätzung zum einen die Rechnung mit dem Faktor für Germanium durchgeführt worden und zum anderen als obere Grenze mit dem von reinem Indium. Die Ergebnisse für unterschiedliche Probe-Detektor-Abstände sind in der Tabelle E.2 aufgeführt.

Man erkennt in der Tabelle, dass der Effekt geringerer Transmission bei kleinerem Probe-Detektor-Abstand in der Rechnung bestätigt wird. Jedoch liegt der Unterschied zwischen der Transmission vom größten zum kleinsten Abstand für gleiche Probenorientierung bei nur 0,5%. Wesentlich größer ist hingegen der Effekt, der sich durch die Betrachtung der unterschiedlichen Probenseiten ergibt. So ist die Abschwächung der Strahlung, die aus der Rückseite der Probe austritt, bei einem Abstand von 14 mm um 2,7% (für Ge) größer als beim Austreten aus der Vorderseite.

γ -Energie	Abstand Probe-Detektor	Transmission bei	
		Ge	In
<i>bestrahlte Seite von Detektor abgewandt</i>			
250keV	14mm	0,9622	0,9171
	25,5mm	0,9658	0,9224
750keV	14mm	0,9793	0,9765
	25,5mm	0,9808	0,9781
<i>bestrahlte Seite auf Detektor zuweisend</i>			
250keV	14mm	0,9885	0,9732
	25,5mm	0,9893	0,9751
750keV	14mm	0,9940	0,9928
	25,5mm	0,9945	0,9933

Tabelle E.2: Für die beiden γ -Energien der Kaskade berechnete Transmission durch die gesamte Probe. Angenommen ist eine gleichmäßige Sondenverteilung über eine Probenbreite von 8mm. Die Berechnungen sind für beide möglichen Probenoberflächen-Orientierungen bezüglich des Detektors durchgeführt worden. Aufgrund der Unkenntnis über das Transmissionsverhalten im InAs sind zur Abschätzung die Werte für reines In (als obere Grenze) und Ge berechnet worden. Deren Transmissionsverhalten ist [Philips] entnommen.

Dieser Effekt ist ebenfalls um so größer, je kleiner der Abstand ist. Für die Bestimmung der openingwinkelkorrigierten apparativen Anisotropiekoeffizienten wird die Ungleichverteilung der Sonden in der Probe nicht berücksichtigt. Dieser Effekt ist bei jedem Abstand vorhanden, sollte sich aber wie gezeigt stärker bei kleinerem Abstand auswirken.

E.2.2 Absorption im BaF₂-Szintillatorkristall

Ein weiterer abstandsabhängiger Effekt ist die Absorption im BaF₂-Szintillatorkristall. In der Abbildung E.3 ist auf der rechten Seite der äußerste Strahlengang durch den Detektorkristall für die Abstände 25,5 und 14mm eingezeichnet. Es ist zu erkennen, dass bei einem kleineren Probe-Detektor-Abstand der Weg der γ -Quanten länger wird und somit eine höhere γ -Absorption auftritt, d.h. die Effizienz steigt. In der Zeichnung ist ebenfalls zu erkennen, dass bei einer derart ausgedehnten Probe (der aktive Bereich ist mit einer Breite von 8mm angenommen) die Strahlung vom oberen Bereich der Probe in einem zu großen Winkel auf die untere Kante des Detektor-Kristalls auftrifft, sodass sie nicht in den Kristall eintritt. Die Absorption im BaF₂-Kristall ist daher für unterschiedliche Probe-Detektor-Abstände, sowie für unterschiedlich ausgedehnte Proben berechnet worden. Für die Betrachtung dieses Effektes ist das höherenergetische γ_1 (755keV) der Kaskade ausschlaggebend, da bei ihm eine geringere Absorption

auftritt. Der Abschwächungskoeffizient Für BaF_2 ist [FARU70] entnommen und in der Abbildung E.4 dargestellt.

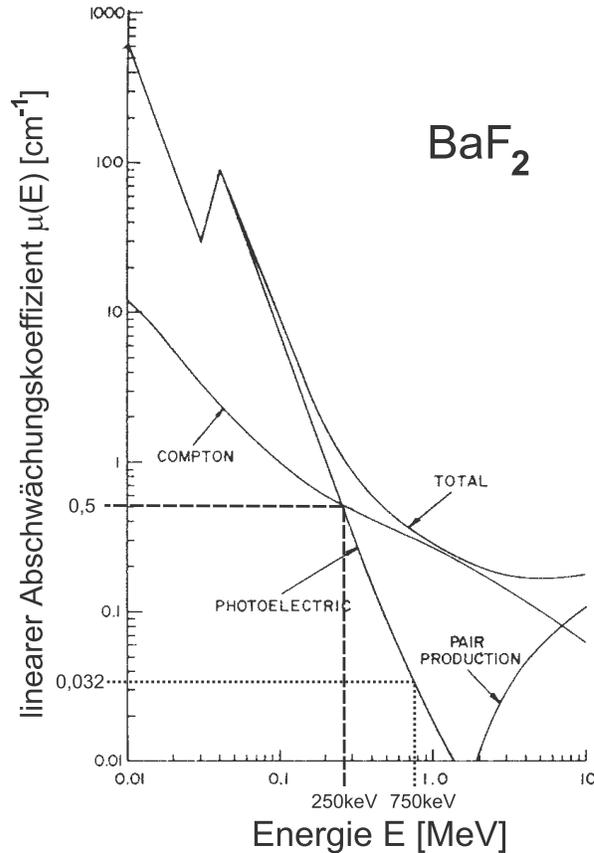


Abbildung E.4: Totaler linearer Abschwächungskoeffizient $\mu_{\text{tot}}(E)$ sowie dessen einzelne Komponenten $\mu_{\text{photo}}(E)$, $\mu_{\text{compton}}(E)$ und $\mu_{\text{paar}}(E)$ für BaF_2 aus [FARU70]. Markiert sind die Werte der Photoabsorption für die γ - γ Kaskade des ^{77}Br (^{77}Se).

Die Ergebnisse der Berechnungen sind in der Tabelle E.3 zusammengetragen. An ihnen ist zu erkennen, dass sich die Absorption im Detektorkristall für geringere Probenabstände vergrößert, dieser Effekt liegt mit etwa 2% im Fall der 750keV-Strahlung auch um eine Größenordnung höher als der zuvor betrachtete Effekt der Absorption im Probenmaterial. Jedoch ergibt sich dieser abstandsabhängige Effekt auch für eine punktförmige Quelle. Zum Vergleich sind die Ergebnisse dazu ebenfalls in der Tabelle eingetragen.

Das bedeutet, dass in der Monte-Carlo-Simulation dieser Effekt bereits berücksichtigt wird. Allerdings ist auch zu erkennen, dass für eine ausgedehnte Probe der Unterschied der Absorption größer ist als bei einer punktförmigen Quelle. Dieser Unterschied ist jedoch kleiner als 0,5%, und somit in der gleichen Größenordnung wie der Unterschied aus der Betrachtung der Selbstabsorption in der Probe.

Aus den hier durchgeführten Überlegungen lässt sich nicht schließen, worin die Ur-

γ - Energie	Breite der Quelle	Absorption im BaF_2 beim Abstand $j=$		Verhältnis [%]
		14mm	25,5mm	
750keV	8mm	0,0794	0,0777	2,14
	6mm	0,0793	0,0777	2,02
	4mm	0,0792	0,0776	2,02
	punktförmig	0,0791	0,0776	1,90
250keV	8mm	0,7252	0,7175	1,06
	6mm	0,7247	0,7172	1,03
	4mm	0,7241	0,7170	0,98
	punktförmig	0,7237	0,7168	0,95

Tabelle E.3: Berechnete mittlere Absorption im BaF_2 -Kristall, entsprechend der Geometrie in Abbildung E.3, in Abhängigkeit von der Größe der Quelle und dem Detektorabstand. In der letzten Spalte ist das Verhältnis der Absorptionen für die beiden Abstände angegeben.

sache für die unterschiedlichen Anteile bei den Messungen bei unterschiedlichen Probenabständen liegt. Jedoch ist gezeigt worden, dass aufgrund geometrischer Gegebenheiten eine Ungenauigkeit bezüglich der verwandten öfFnungswinkelkorrigierten Anisotropieparameter vorliegt.

E.3 Auswirkung auf die Auswertung der PAC-Messergebnisse

Um den Effekt der Unsicherheit in den verwandten apparativen Anisotropiekoeffizienten auf die Auswertung der Messergebnisse zu betrachten, erfolgt eine weitere Auswertung der Daten aus den abstandsabhängigen Messungen. Im Fall der Messungen 9, 10 und 11, die bei unterschiedlichen Abständen an der Probe BIAub_22 durchgeführt worden sind (siehe Tabelle E.1), wurden die erhaltenen verschiedenen Anteile gewichtet gemittelt und dann die Daten erneut mit festgehaltenen Parametern gefittet; lediglich die additive und die multiplikative Konstante (siehe Kapitel 2.4.1.3) wurden freigelassen. Tabelle E.4 fasst dieses Ergebnis zusammen.

Die Abbildung E.5 zeigt die drei Messungen. Es sind zum einen die Einzelfits eingetragen (durchgezogene Linien), die unabhängig für jede Messung gewonnen wurden, zum anderen die Fits bei denen alle Parameter auf die gewichtet gemittelten Werte festgehalten wurden und nur die multiplikative und additive Konstante variabel waren (gepunktete Linien). Man erkennt deutlich, dass die beiden unterschiedlichen Fits in allen drei Fällen gut übereinstimmen und die Daten gut beschreiben. Im Wesentlichen liegt der Unterschied in der Anbindung an die y -Achse, die durch die

Abstand [cm]	A_{22}^{app}	multiplikative Konstante	additive Konstante	% von A_{22}
14mm	-0,325	1,00(0,02)	0,020(0,002)	6
18,5mm	-0,356	1,00(0,01)	0,001(0,002)	0,4
25,5mm	-0,383	1,00(0,01)	-0,019(0,002)	5

Tabelle E.4: Auswertung der in der $\langle 110 \rangle$ -Orientierung bei Raumtemperatur aufgenommenen abstandsabhängigen Messungen von Probe BIAub.22. Alle Parameter außer der multiplikativen und der additiven Konstante, die in der Tabelle angegeben sind, sind als gewichtete Mittel der Einzelfits festgehalten. Es sind $A_u=19\%$, $A_D=25\%$, $\nu_{QD}=374\text{MHz}$, $\delta_D=0\%$, $\eta_D=0$, $A_V=53\%$, $\nu_{QV}=389\text{MHz}$, $\delta_V=41\%$ und $\eta_V=0$. Der öffnungswinkelkorrigierte Anisotropieparameter A_{22}^{app} ist ebenso angegeben sowie das Verhältnis der additiven Konstanten dazu.

freie additive Konstante verschoben wird. Dieser Teil ist vergrößert in den Spektren dargestellt.

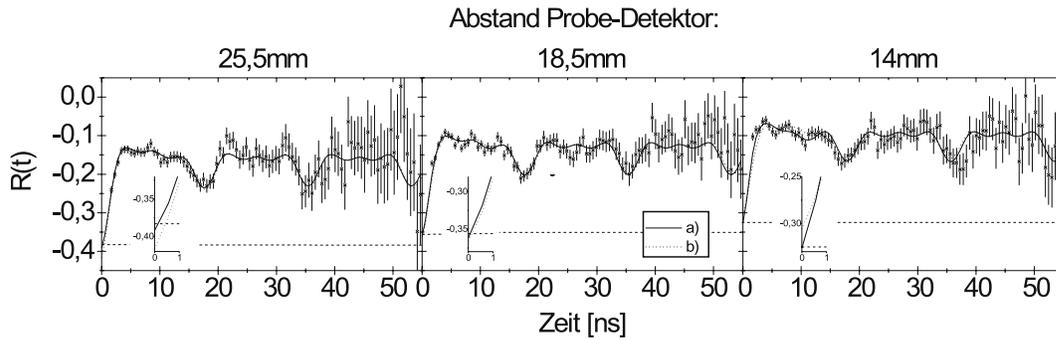


Abbildung E.5: In unterschiedlichen Abständen aufgenommene PAC-Spektren der Probe BIAua.22 nach einem Ausheilschritt für 120s bei 600°C . Die Messgeometrie war bei allen Messung $\langle 110 \rangle$. Als durchgezogene Linien (in der Legende mit a) bezeichnet) sind die einzeln an die Messungen angepassten Fits eingetragen. Bei den gepunkteten Linien (in der Legende mit b) bezeichnet) handelt es sich um den Fit, bei dem lediglich die additive- und die multiplikative-Konstante variiert worden sind (siehe Tabelle E.4). In die Spektren sind zusätzlich Vergrößerungen des Anfangsbereichs eingetragen. Als gestrichelte Linien eingetragen sind die A_{22}^{app} -Werte.

Somit bleibt die Schlussfolgerung, dass die ermittelten Anteile für A_u und A_V mit einem apparativen geometrischen Fehler unbekannter Größe behaftet sind. Der einheitliche Anteil A_D , der zur weiteren Interpretation der Messergebnisse dieser Arbeit betrachtet wird, ist hingegen gut bestimmbar.

Tabellenverzeichnis

1.1	Physikalische Eigenschaften von InAs, GaAs und Si	10
2.1	Kernphysikalische Eigenschaften des Sondenkerns ^{77}Br (^{77}Se)	25
3.1	Spezifische Materialeigenschaften der untersuchten InAs-Materialien	37
3.2	Reaktionsprodukte der α -Bestrahlung von InAs	39
4.1	Übersicht über alle PAC-Messungen an InAs:S	47
4.2	Fitergebnisse der PAC-Messungen an α -bestrahltem InAs:S	49
4.3	Übersicht über alle PAC-Messungen an InAs:Zn	55
4.4	Fitergebnisse der PAC-Messungen an α -bestrahltem InAs:Zn	56
4.5	Übersicht über alle PAC-Messungen an InAs:Un	59
4.6	Fitergebnisse der PAC-Messungen an α -bestrahltem InAs:Un	61
4.7	Fitergebnisse der PAC-Messungen an ionenimplantiertem InAs	63
5.1	Liste aller InAs:S Proben für Halleffekt- und Vierpunkt-Messungen	72
5.2	Ergebnisse der Halleffekt- und Vierpunkt-Messungen an α - bestrahltem InAs:S	72
5.3	Liste aller InAs:Zn Proben für Halleffekt- und Vierpunkt-Messungen	74
5.4	Ergebnisse der Halleffekt- und Vierpunkt-Messungen an α - bestrahltem InAs:Zn	74
5.5	Liste aller InAs:Un Proben für Halleffekt- und Vierpunkt-Messungen	76
5.6	Ergebnisse der Halleffekt- und Vierpunkt-Messungen an α - bestrahltem InAs:Un	76
6.1	Ionisierungsenergien und Elektronenaffinitäten von Primär- und Se- kundärionen bei SIMS-Untersuchungen	88

6.2	Liste aller InAs–Proben für SIMS–Messungen	92
6.3	Liste aller GaAs–Proben für die Radiotracer–Untersuchungen	104
7.1	Ferminiveau–Lagen der InAs–Proben nach α –Bestrahlung und Ausheilen	116
7.2	V_{zz} : gemessen, gerechnet	118
7.3	Atomradien einzelner Atome	119
B.1	Aus TRIM–Simulationen abgeschätzte mittlere Breiten der Implantationsprofile.	130
C.1	Winkelparameter für die Beschreibung eines axialsymmetrischen EFG im kubischen Einkristall im Fitprogramm NNfit	132
D.1	Übersicht über alle PAC–Messungen an InAs	137
E.1	Übersicht über alle Messungen an α –bestrahltem und bei 600°C ausgeheiltem InAs:Un	139
E.2	Berechnete Transmission durch die Probe	143
E.3	Berechnete Absorption im BaF ₂ –Kristall	145
E.4	Fitanteile aus PAC–Messungen bei unterschiedlichen Detektorabständen	146

Abbildungsverzeichnis

1.1	Zinkblende-Struktur	9
1.2	Übergang der sp-Bindungsstruktur	11
1.3	Geometrische Struktur des DX-Zentrums GaAs:Si _{Ga}	12
1.4	Gesamtenergie für GaAs:Si _{Ga} als Funktion der Si-Position	13
1.5	Schematisches Energieniveau-Schema von semiisolierendem GaAs	14
2.1	Energieniveauschema einer γ - γ -Kaskade, einfacher PAC-Aufbau	18
2.2	Aufspaltung eines $\frac{5}{2}$ -Niveaus in Abhängigkeit von η	21
2.3	Anordnung der Detektoren im Hauptachsensystem des EFG	23
2.4	PAC-relevanter Ausschnitt aus dem $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ Zerfallsschema	25
2.5	$^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ γ -Spektrum, aufgenommen mit einem BaF ₂ -Detektor	26
2.6	Prinzipschaltbild der Drei-Detektor-Anlage	27
2.7	BaF ₂ -Kristalle der Drei- und Vier-Detektor-Anlagen	28
2.8	Zeitabhängige Koinzidenzzählraten für $\vartheta = 90^\circ$ und 180°	30
2.9	Störfunktionen für typische Sondenumgebungen	33
2.10	Apparative Anisotropiekoeffizienten für $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$	34
3.1	Anregungskurven der Reaktionen $^{75}\text{As}(\alpha, 2n)^{77}\text{Br}$ und $^{75}\text{As}(\alpha, 3n)^{76}\text{Br}$	38
3.2	$^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ Sondenverteilung in InAs	39
3.3	TRIM-simulierte Leerstellenverteilung von α -bestrahltem InAs	40
3.4	TRIM-simulierte Implantationsprofile für Br in InAs	42
4.1	PAC-Messungen an α -bestrahltem InAs:S nach isochronem Tempern	48
4.2	Fitergebnisse aus PAC-Messungen an α -bestrahltem InAs:S	50
4.3	PAC-Orientierungsmessungen an α -bestrahltem InAs:S	51

4.4	Probenhalter für PAC-Messungen bei tiefen Temperaturen	52
4.5	PAC-Messungen an α -bestrahltem InAs:S bei tiefen Temperaturen	53
4.6	PAC-Messergebnisse von α -bestrahltem InAs:S bei tiefen Temperaturen	54
4.7	PAC-Messungen an mit 300nA α -bestrahltem InAs:Zn nach isochronem Temporn	55
4.8	Fitergebnisse aus PAC-Messungen an α -bestrahltem InAs:Zn . . .	57
4.9	PAC-Messungen an mit 50nA α -bestrahltem InAs:Zn nach isochronem Temporn	58
4.10	PAC-Messungen an α -bestrahltem InAs:Un nach isochronem Temporn	60
4.11	Fitergebnisse der PAC-Messungen an α -bestrahltem InAs:Un . . .	61
4.12	PAC-Orientierungsmessungen an α -bestrahltem InAs:Un	62
4.13	PAC-Messungen an ionenimplantiertem InAs:S, InAs:Zn und InAs:Un	64
4.14	Anteile in Abhängigkeit von der Sondenkonzentration und vom Strom	66
5.1	Einfache Anordnung für Halleffekt-Messungen	69
5.2	Ergebnisse aus Halleffekt- und Vierpunkt-Messungen an α -bestrahltem InAs:S	73
5.3	Ergebnisse der Halleffekt- und Vierpunkt-Messungen an α -bestrahltem InAs:Zn	75
5.4	Ergebnisse der Halleffekt- und Vierpunkt-Messungen an α -bestrahltem InAs:Un	77
5.5	Spannungsverlauf und Bänderschema für DLTS-Messungen mit Schottky-Kontakten	79
5.6	Spannungsverlauf und Kapazitätstransiente bei einer DLTS-Messung	80
5.7	Bestimmung DLTS-Signal	81
5.8	TRIM-Simulation für 260keV ^{79}Br in GaAs	83
5.9	DLTS-Spektrum an ^{79}Br in GaAs	84
5.10	DLTS-Spektrum an $^{77}\text{Br}(^{77}\text{Se})$ in GaAs	85
6.1	Aufbau SIMS-Apparatur	89
6.2	Aufnahme eines Sputterkraters aus SIMS-Messung (1)	91

6.3	Aufnahme eines Sputterkraters aus SIMS-Messung (2)	91
6.4	Normierung der SIMS-Profile anhand der As-Ausbeuten	93
6.5	SIMS-Profile in Abhängigkeit vom Sputterstrom	94
6.6	SIMS-Messungen an ^{79}Br -implantiertem InAs:S, Br-Ausbeute . . .	95
6.7	SIMS-Messungen an ^{79}Br -implantiertem InAs:S, S-Ausbeute	96
6.8	SIMS-Messungen an ^{79}Br -implantiertem InAs:Zn, Br-Ausbeute . .	97
6.9	SIMS-Messungen an ^{79}Br -implantiertem InAs:Un, Br-Ausbeute . .	98
6.10	SIMS-Messungen an ^{79}Br -implantiertem GaAs	99
6.11	SIMS-Messungen an Be-implantiertem InAs	100
6.12	Aufbau Ionenzerstäubungsanlage für Radiotracer-Untersuchungen .	102
6.13	Radiotracer-Messungen an ^{82}Br -implantierten GaAs-Proben, HF .	105
6.14	Radiotracer-Messungen an ^{82}Br -implantierten GaAs-Proben, GS 1,6A109	
6.15	Radiotracer-Messungen an ^{82}Br -implantierten GaAs-Proben, GS 2,9A110	
7.1	Mögliche geometrische Struktur von ^{77}Br (^{77}Se) in InAs	114
7.2	Ferminiveau-Lagen in InAs, Abschätzung des negativen Selniveaus	117
7.3	Mögliche geometrische Struktur mit verlagertem ^{77}Br (^{77}Se) in InAs	120
7.4	Temperaturabhängige Ferminiveaulage in InAs:S	121
7.5	Temperaturabhängigkeit der Ladungsträgerkonzentration	122
A.1	Zusammenhang von Ladungsträgerkonzentration und Ferminiveau in InAs	127
C.1	Einbau der Proben in PAC-Anlage für Orientierungsmessungen . .	132
C.2	Theoretische R-Wert-Funktionen für unterschiedliche Probengeome- trien und EFG-Orientierungen	133
E.1	Anteile aus Fitangepassung der α -bestrahlten und bei 600°C ausgeheil- ten InAs:Un-Proben	140
E.2	PAC-Spektrum in Einzelanteile zerlegt	141
E.3	Probe-Detektor-Geometrie	142
E.4	Linearer Abschwächungskoeffizient von BaF_2	144
E.5	PAC-Messungen an α -bestrahltem und bei 600°C ausgeheiltem InAs:Un in unterschiedlichen Detektorabständen	146

Literaturverzeichnis

- [ALBR99a] F. Albrecht, M. Risse, N. Achtziger, C.v. Nathusius, C.H. Lange, R. Vianden, W. Witthuhn, ISOLDE–Collaboration; *Identification of a Br–correlated bandgap state in GaAs by elemental transmutation of the isotope ^{77}Br* ; Annual Report 1999; Institut für Festkörperphysik Universität Jena (1999)
- [ALBR99b] F. Albrecht, N. Achtziger, M. Risse, C.H. Lange, W. Witthuhn; *Annealing behavior of GaAs following ion implantation of group V, VI and VII elements*; Annual Report 1999; Institut für Festkörperphysik Universität Jena (1999)
- [BARA85] G.A. Baraff, M. Schluter; *Bistability and metastability of the gallium vacancy in GaAs: the actuator of EL2?*; Phys. Rev. Lett. Vol. 55 no. 21 pp. 2340-2343 (1985)
- [BARR92] N.P. Barradas; *NNFIT the PAC MANual*; Lissabon (1992)
- [BARR93] N.P. Barradas, M. Rots, A.A. Melo, J.C. Soares; *Magnetic anisotropy and temperature dependence of the hyperfine fields of ^{111}Cd in single crystalline cobalt*; Phys. Rev. B Vol. 47 pp. 8763-8768 (1993)
- [BENN87] A. Benninghoven, F.G. Rüdener, H.W. Werner; *Secondary Ion Mass Spectrometry: Basic Concepts, Instrumental Aspects, Applications and Trends*; Wiley, New York (1987)
- [BIER80] J.P. Biersack, L.G. Haggmark; *A Monte Carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets*; Nucl. Inst. Meth. Vol. 174 no. 1-2 pp. 257-269 (1980)
- [BLAH96] P. Blaha, P. Dufek, K. Schwarz, H. Haas, *Calculation of electric hyperfine interaction parameters in solids*; Hyperfine Interactions Vol. 97-98 no. 1-4 pp.3-10 (1996)
- [BLOO92] P. Blood and J.W. Orton; *The Electrical Characterization of Semiconductors: Majority Carriers and Electron States*; Academic Press, London (1992)

- [BOUR88] J.C. Bourgoin, M. Lannoo; *Point defects in semiconductors II*; Springer Verlag (1983)
- [BURY99] P. Bury, I. Jamnicky, V.W. Ramton; *Acoustic spectroscopy of deep centers in GaAs/AlGaAs heterostructures*; Physica B Vol. 263-264 pp. 94-97 (1999)
- [BUTZ89] T. Butz; *Analytic perturbation functions for static interactions in perturbed angular correlations of γ -rays*; Hyp. Int. Vol. 52 no. 3 pp. 189-228 (1989)
- [CHAD88] D.J. Chadi, K.J. Chang; *Metastability of the isolated arsenic-antisite defect in GaAs*; Phys. Rev. Lett. Vol. 60 no. 21 pp. 2187-2190 (1988)
- [CHEN91] J.F. Chen, L. Yang, M.C. Wu, S.N.G. Chu, A.Y. Cho; *Studies of the tunneling currents in the InAs/AlSb/GaSb single-barrier interband tunneling diodes grown on GaAs substrates*; J. Cryst. Growth Vol. 111 no. 1-4 pp. 659-663 (1991)
- [CLEL59] J.W. Cleland, J.H. Crawford; Bull. Am. Phys. Soc. Vol. 30, pp. 1239 (1959)
- [COLA92] A Cola, M.G. Lupo, L. Vasanelli, A. Valentini; *Ti/GaAs schottky barriers prepared by ion beam sputtering*; J. Appl. Phys. Vol. 71 no. 10 pp. 4966-4971 (1992)
- [CROI98] N. Croitoru, R. Dahan, P.G. Rancoita, M. Rattaggi, G. Rossi, A. Seidman; *Study of resistivity and majority carrier concentration of silicon damaged by neutron irradiation*; Nucl. Phys. B - Proc. Suppl. Vol. 61B pp. 456-463 (1996)
- [DABR92] J. Dabrowski, M. Scheffler; *Defect metastability in III-V compounds*; Mat. Sci. For. Vol. 83-87 pp. 735-750 (1992)
- [FIRE96] R.B. Firestone, V.S. Shirly; *Table of Isotopes*; eight Edition Vol. 1 (1996)
- [FRAU65] H. Frauenfelder, R.M. Steffen; in [SIEG65] pp. 997 (1965)
- [FARU70] M.R. Farukhi, C.F. Swinehart; *Barium Fluoride as a gamma ray and charged particle detector*; IEEE Tr. Nuc. Sci. Vol. NS-18 no. 1 pp. 200-204 (1970)
- [GERA95] N.N. Gerasimenko, G.S. Khryashchev, G.L. Kuryshev, A.M. Myasnikov, V.I. Obodnikov; *SIMS study on redistribution of implanted impurities in InSb and InAs during post-implantation annealing*; Nucl. Inst. Meth. B Vol. 111 pp. 281-284 (1996)

- [GERD69] E. Gerdau, J. Wolf, H. Winkle, J. Braunsfurth; *Quadrupole interaction of ^{181}Ta in Hf compounds*; Proc. Roy. Soc. A Vol. 311 no. 1504 pp. 197-200 (1969)
- [GHAM93] H. Ghamlouch, M. Aubin, C. Carlone, S.M. Khanna; *Electron irradiation of GaAs: Improvement of transport properties and observation of DX-like centers at ambient pressure*; J. Appl. Phys. 74(7) pp. 4357 (1993)
- [GRAS86] M. Grasserbauer, H.J. Dudek, M.F. Ebel; *Angewandte Oberflächenanalyse mit SIMS AES XPS*; Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1986)
- [HAAS93] H. Haas, P. Blaha, S. Unterricker, D. Forkel-Wirth, G. Correira; in: Jahresbericht 1993, HMI GmbH Berlin, Bereich Schwerionenphysik pp. 115 (1993)
- [HART68] J.L. Hartke; *The three-dimensional Pole-Frenkel effect*; J. Appl. Phys. Vol. 39 no. 10 pp. 4871-4873 (1968)
- [HORZ97] M. Horz; Dissertation Universität Stuttgart (1997)
- [IBAC95] H. Ibach, H. Lüth; *Festkörperphysik*; Springer Lehrbuch (1995)
- [KAST91] A. Kastalsky, V.J. Goldman, J.H. Abeles; *Possibility of infrared laser in a resonant tunneling structure*; Appl. Phys. Lett. Vol. 59 no. 21 pp. 2636-8 (1991)
- [KNIC94] W. Knichel ISKP-interne Mitteilung (1994)
- [KOCH92] H. Koch; *Defekt-Fremdatom Wechselwirkungen in den hexagonalen Metallen Rhenium und Lutetium*; Dissertation Universität Bonn (1992)
- [KOPI92] K. Kopitzki; *Einführung in die Festkörperphysik*; Teubner Studienbücher (1992)
- [LAND84] O. Madelung, M. Schulz, H. Weiss; *Landolt-Börnstein, Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaften und Technik, Neue Serie*; Band 17d (1984)
- [LANG74] D.V. Lang; *Deep-level transient spectroscopy: A new method to characterize traps in semiconductors*; J. of Appl. Phys. Vol. 45 No. 7 pp. 3023 (1974)
- [LANG91] M. Lang, G. Pensel, M. Gebhard, N. Achtziger, M. Uhrmacher; *Deep Level transient spectroscopy on radioactive impurities: demonstration for Si^{111}In* ; Appl. Phys. A Vol. A53 no. 2 pp. 95-101 (1991)

- [LUO89] L.F. Luo, R. Beresford, W.I. Wang, H. Munekata; *Heterojunction field-effect transistors based on AlGaSb/InAs*; Appl. Phys. Lett. Vol. 55 no. 8 pp. 789-791 (1989)
- [MAIE74] K. Maier, W. Schüle; Euratom Report EUR 5234d (1974)
- [MARX90] G. Marx; *Aufbau und Test einer RTA-Kurzzeit-Temper-Anlage*; Diplomarbeit Universität Bonn (1990)
- [MARX95] G. Marx; *Akzeptor-Wasserstoff-Komplexe und spannungsinduzierte elektrische Feldgradienten in Silizium und Germanium*; Dissertation Universität Bonn (1995)
- [MAY94] T. Mayer-Kuckuk; *Kernphysik*; Teubner Studienbücher (1994)
- [MEND96] M. Mendel; *Aufbau und Test eines Ellipsometers zur Bestimmung der optischen Eigenschaften dünner dielektrischer Schichten*; Diplomarbeit Universität Bonn (1996)
- [MÖLL92] A. Möller; *Aufbau und Test eines elektronischen Temperaturreglers für die RTA-Kurzzeit-Temper-Anlage*; Diplomarbeit Universität Bonn (1992)
- [MOHS88] M. Mohsen, F. Pleiter; *Magnetic hyperfine field of Se in nickel measured by means of the DPAC method*; Hyp. Int. Vol. 39 no. 2 pp. 123-128 (1988)
- [MOON90] P.M. Mooney; *Deep donor levels (DX centers) in III-V semiconductors*; J. Appl. Phys. Vol. 67 no. 3 pp. R1 (1990)
- [NAG80] B.R. Nag; *Electron transport in compound semiconductors*; Springer Series in Solid-State Sciences 11 (1980)
- [NOZA78] T. Nozaki, M. Iwamoto, Y. Itoh; *Production of ^{77}Br by various nuclear reactions*; Int. J. of Applied Radiation and Isotopes Vol. 30 pp. 79-83 (1978)
- [PEKA92] J.J. Pekarik, H. Kroemer J.H. English; *An AlSb-InAs-AlSb double heterojunction P-n-P bipolar Transistor*; J. Vac. Sci. Technol. B Vol. 10 no. 2 pp. 1032-1034 (1992)
- [PETE90] J.W. Petersen, J. Nielsen; *Identification of bandgap states by deep level transient spectroscopy on radioactive probes: the case of Au and Pt in silicon*; Appl. Phys. Lett. Vol. 56 no. 12 pp. 1122-1124 (1990)
- [Philips] Philips Datenblätter; *Transmission of high-energy photons through various materials*; Eindhoven

- [PTZ82] U. Pütz; *Gitterdefekte in Wolfram und Platin nachgewiesen mit Hilfe der TDPAC-Methode*; Dissertation Universität Bonn (1982)
- [ROHR96] G. Rohrlack; *Halleffektmessungen an Halbleitern dotiert mit Radioisotopen*; Dissertation Universität Bonn (1996)
- [RUDD95] M.N. Rudden, J. Wilson; *Elementare Festkörperphysik und Halbleiterelektronik*; Spektrum Lehrbuch (1995)
- [SALM90] E.G. Salman, A.N. Korshunov, V.N. Vertoprakhov; *A DLTS study of InAs MIS structures*; Phys. Stat. Sol. (a) Vol. 117 pp. 509 (1990)
- [SCHA92a] Th. Schaefer; *Donator-Defektkomplexe in GaAs untersucht mit der γ - γ Winkelkorrelation unter Einsatz der Sonden ^{73}Se und ^{77}Br* ; Dissertation Universität Bonn (1992)
- [SCHA92b] G. Schatz, A. Weidinger; *Nukleare Festkörperphysik*; (Teubner Studienbücher) Teubner Stuttgart (1992)
- [SCHA91] H. Schaumburg; *Halbleiter, Werkstoffe und Bauelemente der Elektrotechnik 2*; Teubner Stuttgart (1991)
- [SCHM80] P.C. Schmidt, K.D. Sen, T.P. Das, A. Weiss; *Effect of self-consistency and crystalline potential in the solid state on nuclear quadrupole Sternheimer antishielding factors in closed-shell ions*; Phys. Rev. B Vol. 22 no. 9 pp. 4167-4179 (1980)
- [SEEG73] K. Seeger; *Semiconductor Physics*; Springer Wien (1973)
- [SIEG65] Ed. K. Siegbahn; *Alpha-, beta- and gamma-ray Spectroscopy*; North-Holland Publ. Comp. Amsterdam (1965)
- [SOUK76] M. Soukiassian, J.H. Albany, M. Vandevyver; *Electron irradiation of undoped n-type InAs*; International Conference on Radiation Effects in Semiconductors Inst. Phys. pp. 395-401 (1977)
- [SZE81] S.M. Sze; *Physics of semiconductor devices*; John Wiley & Sons (1981)
- [TANA99] S. Tanaka, H. Ishii; *Effects of impurity between epitaxial layer and substrate on current transient for GaAs metal-semiconductor field-effect transistors*; Jpn. J. Appl. Phys. Vol. 38 pp. 22-25 (1999)
- [UNTE83] S. Unterricker, F. Schneider; *TDPAC measurements of the quadrupole interaction of ^{77}Se in arsenic*; Hyp. Int. Vol. 14 pp. 119-123 (1983)
- [WEGN85] D. Wegner; *Calculated perturbed angular correlations for ^{111}In doped cubic single crystals*; Hyp. Int. Vol. 23 pp. 197 (1985)

- [WEHN95] M. Wehner, P. Friedsam, R. Vianden, S. Jahn, D. Forkel-Wirth; *PAC-investigations of the donor-defect interaction in III-V compound semiconductors with the probe ^{77}Br (^{77}Se)*; Mat. Sci. For. Vols. 196-201 pp. 1419-1424 (1995)
- [WEHN96] M. Wehner, M. Risse, R. Vianden, M. Dalmer, H. Hofsäss, M.C. Ridgeway, M. Petracic, and the ISOLDE-Collaboration; *Perturbed angular correlation measurements and lattice site location of Br in GaAs*; Mat. Sci. For. Vols. 258-263 pp. 899-904 (1996)
- [WEHN97] M. Wehner; *Untersuchung des Fremdatoms Brom in Galliumarsenid und anderen III-V Halbleitern*; Dissertation Universität Bonn (1997)
- [WIRB97] F. Wirbeleit, J.R. Niklas; *The micro structure of the EL2 defect in GaAs — a different look to former spin resonance data*; Mat. Sci. For. Vol. 258-263 pp. 987-992 (1997)
- [WOOD81] J.M. Woodall, H. Ruprecht, R.J. Chicotka; *Proximate capless annealing of GaAs using a controlled-excess As vapor pressure source*; Appl. Phys. Lett. Vol. 38 no. 8 pp. 639-641 (1981)
- [YATE65] M.J.L. Yates; *Finite solid angle corrections*; Appendix 9 in [SIEG65] pp. 1691 (1965)
- [ZIEG85] J.F. Ziegler, J.B. Biersack, U. Littmark; *The stopping and range of ions in solids*; Pergamon Press, New York (1985)

Danksagung

Am Ende dieser Arbeit bleibt mir nur noch, allen denjenigen zu danken, die zum Gelingen dieser Arbeit auf ihre Weise beigetragen haben.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Priv. Doz. Dr. R. Vianden, der mir die Durchführung dieser Arbeit ermöglichte. Für seine tatkräftige Unterstützung sowohl bei der Durchführung der Experimente als auch bei der Diskussion der Messergebnisse sei gedankt. Die gute Versorgung mit Frischobst und Pflaumenkuchen soll nicht unerwähnt bleiben.

Herrn Prof. M. Forker danke ich für die Übernahme des Korreferats.

Bei allen Mitgliedern der Arbeitsgruppe bedanke ich mich für die gute Atmosphäre und den vielen Spaß, den wir zusammen hatten. Mein besonderer Dank gilt Peter und Jörn sowie Katharina für die intensive Durchsicht meines Manuskriptes und Christoph für die vielen Diskussionen. Bei Maria bedanke ich mich für die umfangreichen Vorarbeiten zu diesem Thema.

Den Bonner Zyklotronoperateuren Stefan Birkenbach, Jürgen Dissemund, Siegfried Lehmann, Eugen Momper und Herrn J. Ziegenberg danke ich für ihren Einsatz und die gute Atmosphäre bei zahlreichen Strahlzeiten und Institutsfeierlichkeiten.

Bedanken möchte ich mich beim Team des Bonner Isotopenseparators um Herrn K. Freitag für den Einsatz bei den durchgeführten Implantationen. Siggie Hinderlich und Conny Noll danke ich außerdem für Rat und Tat, auch bei anderen Fragestellungen und für viel Spaß innerhalb und außerhalb des Instituts.

Auch allen anderen Festangestellten des ISKP möchte ich meinen Dank für die Unterstützung aussprechen.

Herrn M. Noack vom Institut für Festkörperphysik der KFA Jülich danke ich für die Durchführung einiger Halleffekt- und Vierpunkt-Messungen.

Fanny Albrecht vom Institut für Festkörperphysik der Universität Jena danke ich für die Durchführung der DLTS-Messungen, ihr großes Engagement für das Projekt und die gute Zusammenarbeit, gerade deshalb, da die Ergebnisse über weite Teile der Zusammenarbeit nicht zu großem Enthusiasmus beigetragen haben.

Für die Hilfe und gute Betreuung während meines Forschungsaufenthaltes an der Australian National University in Canberra danke ich ganz herzlich Dr. Aiden Byrne. Chris Glover danke ich für die Unterstützung bei den Implantationen und P.N.K. Deenapanray für die Durchführung der SIMS-Messungen.

Bei Stefan Matics vom Institut für Theoretische und Angewandte Physik der Universität Stuttgart möchte ich mich für die Zusammenarbeit bei den Radiotracer-Untersuchungen und die zahlreichen Diskussionen zur Interpretation der Daten bedanken. Auch dem Rest der dortigen Arbeitsgruppe danke ich für die freundliche Aufnahme und die Hilfsbereitschaft sowohl bei der Durchführung der Messungen als auch bei der Diskussion der nicht leicht zu interpretierenden Ergebnisse.

Nicolaus Ulbrich von der Abteilung Nukleare Festkörperphysik der Universität Leipzig danke ich für die Durchführung der ersten WIEN-Rechnungen, zu denen er sich unvorsichtiger Weise nach einem Vortrag von mir bereit erklärt hat, ohne sich dem Ausmaß der Arbeit bewusst gewesen zu sein.

Den Mitgliedern der ISOLDE-Kollaboration, insbesondere Frau Dr. A Burchard, Herrn Dr. M. Dietrich und Frau Dr. D. Forkel-Wirth, danke ich für die Unterstützung während der Strahlzeiten am On-Line-Isotopenseparator des CERN. Den weiteren Kollaborationsmitgliedern danke ich für die Hilfsbereitschaft bei den Strahlzeiten und den Spaß in den Strahlpausen.

Dr. Jose Marques vom INETI bei Lissabon danke ich für die Erweiterung des Programms RTR12 um die Möglichkeit einer Kanaladdition.

Allen wissenschaftlich Tätigen des Instituts danke ich für die allgegenwärtige Hilfsbereitschaft bei jedweden Problemen.

Der Freitags-Kaffeerunde danke ich für den Lichtblick am Ende der Woche. Sowie allen, die bei der Mitgestaltung diverser Institutsveranstaltungen mitgeholfen haben, und so zu vielen schönen Stunden beigetragen haben.

Dem BMBF danke ich für die finanzielle Unterstützung der Arbeit im Rahmen des Projektes 03-MA5BON.

Meiner Familie und meinen Freunden danke ich für die freundschaftliche Begleitung auf meinem Weg. Jochen danke ich außerdem für die Durchsicht des Manuskripts.

Ein ganz besonderer Dank gilt meinem lieben Freund Christoph. Du hast mich die ganze letzte Zeit mit meinem ständigen Gejammere ertragen und mir durch zahlreiche fachliche Diskussionen und der Durchsicht des Manuskripts sehr geholfen. Ich danke dir für deine Liebe und Zuversicht.

Alle anderen, die nicht namentlich aufgeführt sind und mir während der Zeit meines Studiums auf die eine oder andere Weise behilflich gewesen sind, habe ich nicht vergessen und ich bedanke mich auch bei ihnen für die Unterstützung.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name: Monika Risse
 Geburtsdatum: 15.04.1972
 Geburtsort: Neheim-Hüsten
 Familienstand: ledig

Schulbildung

Sept. 1978 - Aug. 1982 Grundschule Hünningen-Lüttringen
 Aug. 1982 - Juni 1991 Graf-Gottfried-Gymnasium Neheim-Hüsten
 19.06.1991 Abschluss Abitur

Hochschulausbildung

Okt. 1991 - Nov. 1996 Studium der Physik an der Rheinischen
 Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn
 Dez. 1995 - Nov. 1996 Diplomarbeit in Experimentalphysik am Institut
 für Strahlen- und Kernphysik (ISKP)
 der Universität Bonn bei
 Priv. Doz. Dr. R. Vianden zum Thema:
 Off-Line Implantation von ^{77}Br
 am Bonner Isotopenseparator
 28.11.1996 Erlangung des Physik-Diploms
 seit Dez. 1996 Promotion in Experimentalphysik am ISKP
 bei Priv. Doz. Dr. R. Vianden

Berufliche Tätigkeiten

Dez. 1995 - Nov. 1996 Studentische Hilfskraft im ISKP
 seit Dez. 1996 Wissenschaftliche Mitarbeiterin im ISKP

Sonstige Hochschultätigkeiten

Aug. 1997 - Juli 1999 Studentische Vertreterin im Institutsvorstand
 Apr. 1998 - Apr. 2000 Wissenschaftliche Vertreterin in der
 Fachgruppe Physik-Astronomie

Wissenschaftliche Auslandsaufenthalte

Apr.-Mai 1997 Forschungsaufenthalt an der Universität Lissabon und
 am Forschungszentrum INETI bei Lissabon, Portugal
 Sep. 1998 Forschungsaufenthalt an der Research School of
 Physical Sciences and Engineering der Australian
 National University in Canberra, Australien