Emissionschanneling - Untersuchungen an ionenimplantierten Gruppe III-Nitriden mit hexagonaler Gitterstruktur

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

des Doktors der Naturwissenschaften

(Dr. rer. nat.)

an der Universität Konstanz

Fakultät für Physik

vorgelegt von

Michael Dalmer

Tag der mündlichen Prüfung: 11.06.99

Referent: Prof. Dr. H. Hofsäss

Referent: Prof. em. Dr. E. Recknagel

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung 3

1. Einleitung 5

2. Galliumnitrid und Aluminiumnitrid 8

2.1 Das Wurtzitgitter 8

2.2 Physikalische Eigenschaften von GaN und AlN 11

3. Die Emissionschanneling-Methode 14

3.1 Grundlagen des Channelings 14

3.2 Emissionschanneling mit Alpha-Teilchen 15

3.3 Emissionschanneling mit Elektronen 17

4. Gestörte Winkelkorrelation (PAC) 19

5. Experimentelle Durchführung 21

5.1 Experimentelle Voraussetzungen 21

5.1.1 Grundlagen der Ionenimplantation 21

5.1.2 Ionenimplantation in GaN und AlN am Isotopenseparator ISOLDE 22

5.1.3 Meßapparatur für Channeling-Experimente 23

5.1.4 Datenerfassung und Datenverarbeitung 26

5.2 Übersicht über die verwendeten Isotope 29

5.2.1 ^{8}Li 29

5.2.2 ^{24}Na 30

5.2.3 ^{89}Sr 30

5.2.4 ^{111}In 31

5.2.5 ^{167}Er und ^{169}Yb 32

6. Quantitative Gitterplatzbestimmung 34

6.1 Theoretisches Modell für die Gitterführung von Alpha-Teilchen 34

6.2 Theoretisches Modell und Simulation der Gitterführung von Elektronen 37

6.3 Einfluß experimenteller Parameter auf die Rechnung 40

6.4 Besonderheiten bei der Simulation von β^--Spektren 42

6.5 Anpassung der Simulationen an die experimentellen Daten 43

7. Untersuchungen an GaN 44

7.1 In und Sr in GaN 44

7.2 Li und Na in GaN 48

7.3 Er und Yb in GaN 53

8. Untersuchungen an AlN 57

8.1 In in AlN 57

8.2 Li und Na in AlN 59

Literatur 63

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden erstmals einkristalline Halbleiterschichten mit Wurtzitstruktur nach Implantation radioaktiver Sonden mit der **E**missions**c**hanneling-Methode (EC-Methode) untersucht. Die untersuchten Halbleiter GaN und AlN zeichnen sich unter anderem durch eine große Bandlücke (wide-band-gap) und eine hohe Bindungsionizität aus. Zuerst wurde der Einfluß der Gitterschäden, produziert durch Schwerionenimplantation mit niedrigen Dosen, anhand der Sonden ^{111}In und ^{89}Sr in GaN und anhand ^{111}In in AlN, mit EC-Messungen untersucht. Es zeigt sich, daß die Gitterschäden, verursacht durch Implantationsdosen bis $2\cdot10^{13}/cm^2$ und einer Implantationsenergie von bis zu 285 keV, keinen meßbaren Einfluß auf die Gitterführung der emittierten Elektronen ausüben. Bereits direkt nach der Implantation zeigen Vergleiche mit den mit dem Manybeam-Formalismus simulierten Spektren, einen substitutionellen Einbau der Indium-Emitter von $90 \pm 10\%$ und damit einen vernachlässigbaren strukturellen Gitterschaden in GaN und AlN. Ergänzende Messungen mit der gestörten γ- γ-Winkelkorrelation (**P**erturbed **A**ngular **C**orrelation, PAC) ebenfalls an der Sonde ^{111}In ergaben, daß sich direkt nach der Implantation die Sonden trotzdem in einer lokal gestörten Umgebung befinden. Der Anteil der Sonden in gestörter Umgebung konnte durch Ausheilen der GaN und AlN Proben im Vakuum bis auf 1273 K auf ca. 50 % reduziert werden. Das bedeutet, daß durch Ionenimplantation in GaN und AlN viele lokale Gitterfehler erzeugt werden, die wieder ausgeheilt werden können, die langreichweitige Gitterordnung, die für die EC-Methode ausschlaggebend ist, aber nicht zerstört wird.

Um mögliche Dotierungen des GaN und des AlN mit Gruppe I Elementen zu untersuchen, wurde ^{8}Li und ^{24}Na implantiert und der Gitterplatz sowie die interstitielle Diffusion in Abhängigkeit der Temperatur gemessen. Lithium und Natrium gehören als Element der Gruppe I zu dem Kreis möglicher Akzeptoratome falls sie auf substitutionellen Gitterplätzen eingebaut werden. Li^+ und Na^+ auf Zwischengitterplätzen wirken jedoch als Donatoren.

Bei der radioaktiven Sonde ^{8}Li wurde der Gitterplatz über die Emissionsverteilungen der emittierten α-Teilchen während der Implantation entlang verschiedener kristallographischer Richtungen bestimmt. Bei Natrium erfolgte die Bestimmung der Gitterplatzverteilung über die Emissionsverteilung der emittierten β^--Elektronen. Lithium wird in GaN und in AlN direkt nach der Implantation interstitiell im Zentrum des c-Achsen Hexagons bei 1/4 und 3/4 des c-Achsenabstandes eingebaut. Die attraktive Coulombwechselwirkung zwischen dem Li^+ und den negativ geladenen Metall-Leerstellen führt bei beiden Kristallen bei derselben Probentemperatur von 700 K zu einem Gitterplatzwechsel. Das Lithium wird oberhalb dieser Temperatur substitutionell eingebaut. Eine Ausdiffusion des Lithiums konnte bis zu einer Temperatur von 900 K weder bei GaN noch bei AlN beobachtet werden. Aus der kurzen Lebensdauer des Lithiums ($t_{½}$ = 0,84 s) und der Temperatur, bei der der Gitterplatzwechsel stattfindet, kann man die Aktivierungsenergie für interstitielle Diffusion des Lithiums bestimmen. Für GaN und AlN erhält man $E_A \approx 1{,}6$ eV.

Natrium verhält sich in GaN und AlN zunächst ähnlich. Direkt nach der Implantation wird Natrium in diesen Kristallen zu ≈ 60% auf den gleichen interstitiellen Plätzen wie Lithium und zu ≈ 40% auf substitutionelle Plätze eingebaut. Bei GaN ändert sich diese Gitterplatzverteilung bis zu einer Ausheiltemperatur von 1073 K nicht. Das bedeutet, daß keine interstitielle Diffusion des Natriums bis zu dieser Temperatur stattfindet. Bei AlN dagegen verändert sich die Gitterplatzverteilung kontinuierlich hin zu einem größeren substitutionellen Anteil. Bei einer Ausheiltemperatur von 1073 K befinden sich noch ≈ 40% auf den interstitiellen Plätzen und ≈ 60% auf substitutionellen Plätzen. Eine mögliche Erklärung für die geringe interstitielle Diffusion des Natriums in GaN könnte eine Komplexbildung des Natriums sein.

Mit Erbium dotiertes GaN wird als Lichtquelle im Infraroten (1,54 µm) erforscht, da Lichtleiter aus Glas gerade bei dieser Wellenlänge ihr Absorptionsminimum haben. Die Intensität der 1,54 µm Linie des Erbiums in GaN ist weniger temperaturabhängig als in Silizium. Zudem läßt sich die Intensität der Linie durch die Kodotierung mit Sauerstoff bis um einen Faktor 20 steigern. Um einen Beitrag zur Erklärung der Intensitätssteigerung zu liefern, wurde untersucht, ob sich Sauerstoff-Erbium Komplexe bilden, die den Gitterplatz des Erbiums in GaN beeinflussen. Dazu wurden Gitterplatzuntersuchungen an mit den Mutterisotopen des Erbiums (Thulium) und des elektronisch ähnlichen Ytterbiums (Lutetium) implantierten GaN mit und ohne Koimplantation von Sauerstoff durchgeführt. Die Messungen fanden nach dem Zerfall der Mutterisotope in die Tochterisotope Erbium und Ytterbium statt. Erbium und Ytterbium besetzten in GaN nach Implantation und Ausheilen auf 1073 K Gitterplätze, die statisch isotrop um 0,25 Å von dem substitutionellen Platz ausgelenkt sind. Eine Veränderung der Gitterplatzverteilung durch Koimplantation von Sauerstoff konnte nicht beobachtet werden. Ergänzend wurden an den mit Thulium implantierten Proben nach Zerfall des Thuliums in Erbium Photolumineszenzmessungen durchgeführt. Hier zeigte sich durch die Sauerstoffkoimplantation eine deutliche Änderung der Intensitätsverteilung und eine Zunahme der Intensität bei 1,54 µm. Die zusätzliche Sauerstoffkonzentration verändert also stark die Lumineszenz-eigenschaften des in GaN implantierten Erbiums, beeinflußt die Gitterplatzverteilung aber nicht.

1. Einleitung

Immer öfter werden, wenn es um die Erzeugung von Licht geht, Leuchtdioden (**L**ight **E**mitting **D**iode) statt herkömmlichen schwarzen Strahlern verwendet, denn eine LED benötigt bei gleicher Helligkeit nur 13% der Energie [Hof99] von Glühlampen. Die etwa 100-fache Lebensdauer gegenüber einer herkömmlichen Glühlampe und die damit verbundenen geringen Wartungskosten kompensieren den höheren Kaufpreis [NakF97]. Rote LED's aus GaAlAs oder GaAs werden bereits vielfältig eingesetzt, ebenso wie rote Laserdioden (LD), die als preiswerte und einfache Lichtquellen für kohärentes Licht in CD-Spielern und CD-ROM Laufwerken eingesetzt werden. Um den Frequenzbereich der LED's und LD's zu höheren Frequenzen hin erweitern zu können, müssen Materialien verwendet werden, die eine größere Bandlücke als GaAs haben. Um mit LED's Farbbildschirme (Prototypen z. B. bei [IBM96]) oder weißes Licht erzeugen zu können (erste weiße LED [SchS97]) werden alle drei Grundfarben Rot, Grün und Blau benötigt. Speziell eine blaue LED muß äußerst leistungsstark sein, da die Empfindlichkeit des Auges im Grünen ihr Maximum erreicht und danach zu kürzeren Wellenlängen hin rasch abfällt [MorS94]. Es ist bereits gelungen aus InGaN blaue LED's mit einer Leuchtkraft von 2 cd, sowie grüne LED's mit 10 cd herzustellen [Nak97]. Eine blaue LD ermöglicht eine höhere Speicherdichte z. B. bei CD's, da diese von der Wellenlänge abhängt. Von rot zu blau steigt die Speicherdichte um das 4-fache. Auch hochauflösende Laserdrucker benötigen einen Schreiblaser mit kurzer Wellenlänge [Bri98]. Für eine Kommunikation durch Wasser wäre wegen der geringen Absorption ein grüner Laser ideal [PonB97]. Branchenkenner schätzen den zukünftigen Umsatz durch blaue LED's und LD's auf 40 bis 50 Milliarden Dollar pro Jahr [Hor98]. GaN ist hier auf Grund der großen direkten Bandlücke ein physikalisch möglicher Kandidat. SiC und GaP scheiden zumindest für die Herstellung von Laserdioden auf Grund ihrer indirekten Bandlücke aus. GaN hat auch den Vorteil, daß es hart und widerstandsfähig ist. Die ersten blauen LED's aus GaN wurden von Nakamura 1993 bei einer Konferenz vorgestellt. Diese übertrafen in ihrer Leuchtkraft alle zu diesem Zeitpunkt aus anderen Materialien entwickelten blauen LED's um das 100-fache [Hor98]. Nakamura gelang es auch, 1995 die erste blaue LD herzustellen. Auf GaN basierende Laser haben bereits eine Lebensdauer von 1000 h bei 50°C, woraus eine Lebensdauer von 10000 h bei 20°C extrapoliert werden kann [Nak98]. Nun ging es darum, die LED's zum einen zu verbessern und zum anderen LED's jeder gewünschten Wellenlänge zwischen grün und violett herstellen zu können. Wie in Bild 1.1 gezeigt, können durch Veränderung der Stöchiometrie von Aluminium, Gallium und Indium bei den Gruppe III-Nitriden Bandlücken zwischen 1,9 und 6,2 eV realisiert werden [Mat92]. So ist es möglich, im grünen Bereich die leuchtschwache GaP LED abzulösen und LED's bis hin zum Violetten zu konstruieren [NakF97]. Eine Zusammenstellung vieler möglichen Anwendungen, die sich aus den physikalischen Eigenschaften von GaN ergeben, sind in [Aka98] zusammengestellt.

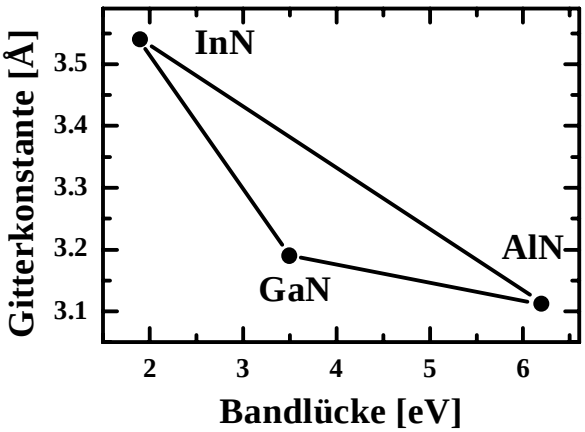

Bild 1.1: Die Gitterkonstanten von InN, AlN und GaN aufgetragen gegen die Bandlücke. Durch verschiedene Stöchiometrien der Al, Ga und In Atome in AlGaInN lassen sich alle Punkte in dem skizzierten Dreieck erreichen [Mat92].

Für Halbleiteranwendungen muß GaN sowohl als n- als auch als p-Typ herstellbar sein. Gewachsenes unbehandeltes GaN ist n-Typ. Um es als p-Typ zu dotieren, muß ein passender Akzeptor gefunden werden. Hier werden bislang hauptsächlich die Gruppe II Elemente Magnesium, Kalzium

und Beryllium verwendet. Ihre energetischen Niveaus liegen 170 meV (Ca) [ZolW96] und 250 meV (Mg, Be) oberhalb des Valenzbandes [Amb98], [SalK96].

Dotieratome der Gruppe I können in III-V Halbleitern sowohl auf Zwischengitterplätzen als Donator als auch auf substitutionellen Gruppe III-Plätzen als Doppelakzeptor eingebaut werden. Das energetische Akzeptorniveau des Lithiums liegt bei 750 meV [StrM92]. Außerdem kann Lithium analog zu Wasserstoff Donatoren in GaN passivieren [PanD73].

Um ein Material zu dotieren gibt es mehrere Möglichkeiten. Die Fremdatome können z. B. während des Wachstums dazugegeben werden, nachträglich in den Kristall eindiffundiert oder durch Ionenimplantation eingebracht werden. Die Eindiffusion scheidet bei GaN und AlN aus [WilP95]. Die Dotierung durch Ionenimplantation ist von großem Vorteil, da die implantierte Fremdatomkonzentration bekannt ist und die implantierten Bereiche sowie lateral als auch tiefenaufgelöst sind. Ein Nachteil der Ionenimplantation ist der dabei entstehende Gitterschaden, der in einem der Implantation folgendem Ausheilprozeß bestmöglichst ausgeheilt werden muß. Prinzipiell können bei GaN Implantationsschäden auch nach hoher Implantationsdosis bis zu $10^{16}/cm^2$ ausgeheilt werden, da die implantierten Gebiete bis zu dieser Dosis nicht amorphisieren [TanW96].

Mit Kalzium dotiertes p-Typ und Silizium dotiertes n-Typ GaN wurde auch schon ein sog. „Junction Field Effect Transistor“ entwickelt [ZolS96]. Als Alternative zu Kalzium wird für die Dotierung zum p-Typ GaN während des Wachstums wie erwähnt auch Magnesium verwendet. Wird das GaN bereits während des Wachstums mit Magnesium dotiert, sind die Magnesiumniveaus durch angelagerten Wasserstoff passiviert. Das Magnesium muß erst zum Beispiel durch Aufheizen der Schichten bis auf 700°C aktiviert werden [NakT92].

Da die Art der Dotierung durch Fremdatome von ihrem Gitterplatz abhängt, wurden im Rahmen dieser Arbeit die Gitterplatzverteilungen sowie das Diffusionsverhalten des Lithiums und des Natriums in GaN in Abhängigkeit der Temperatur bestimmt. Eine direkte Methode, Gitterplätze von Fremdatomen in Festkörpern zu bestimmen, ist die Emissionschanneling-Methode. Radioaktive Sondenatome werden in die Kristalle implantiert und über charakteristische Channeling- und Blockingeffekte der beim Zerfall aus dem Kristall emittierten geladenen Teilchen die Gitterplätze der Fremdatome bestimmt. Gegenüber anderen Gitterplatzbestimmungsmethoden wie **R**utherford-**B**ackscattering-**S**pectrometry (RBS), **N**uclear-**R**eaction-**A**nalysis (NRA) oder **P**article-**I**nduced-**X**-ray-**E**mission (PIXE), die ebenfalls Gitterführungseffekte ausnutzen, bietet Emissionschanneling einige Vorteile: Es werden nur geringe Fremdatomkonzentrationen von ca. 10^{16}-10^{17} cm^{-3} benötigt und bei der Messung wird kein zusätzlicher analysierender Ionenstrahl verwendet. Insbesondere bei der RBS-Methode muß die Masse des Fremdatoms größer sein als die Massen der Wirtsgitteratome. Auch diese Einschränkung trifft auf die Emissionschanneling-Methode nicht zu. Die in dieser Arbeit behandelten Gitterplatzbestimmungen wurden ausschließlich mit der Emissionschanneling-Methode durchgeführt.

Zuvor wurde die Bildung von Implantationsschäden sowie das Ausheilverhalten nach Schwerionenimplantation mit niedrigen Dosen und Energien von 60 keV bzw. 100 keV anhand der Isotope ^{111}In und ^{89}Sr mit Hilfe der Emissionschanneling-Methode und der gestörten Winkelkorrelation untersucht.

Eine andere Anwendung von dotiertem GaN ist als Lichtquelle im Infraroten. Die 1,54 µm Linie, die von mit Erbium dotiertem GaN emittiert wird, ist die ideale Lichtquelle für den Transport von Information in Lichtleitern wie Glasfaserkabeln, die gerade bei dieser Wellenlänge die kleinste Absorption haben. GaN als Diodenmaterial hat den Vorteil, daß die Quantenausbeute des Erbium Übergangs auch bei Raumtemperatur besonderst gut ist [HömT97] und die Intensität der Linie durch Kodotierung von Sauerstoff mit einer Konzentration, die um das 10-fache größer ist als die des Erbiums, um einen Faktor 20 gesteigert werden kann [TorF96].

Über die Herkunft der Steigerung der Intensität durch die Koimplantation von Sauerstoff werden verschiedene Möglichkeiten in der Literatur diskutiert. Eine davon ist die Komplexbildung des Sauerstoffes mit dem Erbium. Ein solcher Komplex könnte den Gitterplatz des Erbiums verändern. Deswegen wurden die Gitterplätze des Erbiums und des chemisch sehr ähnlichen Ytterbiums mit und ohne Sauerstoffkoimplantation ermittelt. Dazu wurden ^{167}Tm und ^{169}Lu implantiert, welche über die zu messenden Isotope in einen stabilen Kern übergehen. Zusätzlich wurde die Lumineszenz des Erbiums mit und ohne Sauerstoffkoimplantation an denselben Proben mit der Photolumineszenzspektroskopie gemessen.

Potentielle Anwendungen für AlN sind Detektoren für Elektronen, Ionen und hochenergetische elektromagnetische Strahlung, die im sichtbaren Bereich und auch im nahen UV nicht ansprechen und somit auch keinen Untergrund verursachen, Sensoren für den Einsatz bei hohen Temperaturen und als chemisch resistente Wärmesenke [Dav91]. Durch die große Bandlücke von 6,2 eV bietet sich AlN als Material für LED’s und LD’s im Ultravioletten an. Leider konnten für AlN noch keine passenden Akzeptor- und Donatoratome gefunden werden. Um zu überprüfen, ob hier die Gruppe I Elemente einen Beitrag leisten können, wurde in AlN das Ausheilverhalten nach Schwerionenimplanation mit ^{111}In und die Gitterplatzverteilung sowie das Diffusionsverhalten von Lithium und Natrium Fremdatomen in Abhängigkeit der Temperatur bestimmt.

2. Galliumnitrid und Aluminiumnitrid

2.1 Das Wurtzitgitter

Bei der Emissionschanneling-Methode werden Gitterführungseffekte entlang oder zwischen Kristallachsen und Kristallebenen betrachtet. Bevor also auf die Emissionschanneling-Methode im Einzelnen eingegangen wird, sollen in diesem Kapitel die in Frage kommenden Kristallachsen und Ebenen im Wurtzitgitter dargestellt werden. Daß die stabilen Kristallstrukturen des GaN und des AlN dem Wurtzitgitter zuzuordnen sind, wurde für GaN von [JuzH38] und für AlN von [Ott24] gezeigt. In beiden Arbeiten wurde gezeigt, daß die Atome eine hexagonale Kugelpackung bilden und daß die Bindungen eher ionischer Natur sind. Hier sei angemerkt, daß es durchaus auch beide Materialien mit einer kubischen Kristallstruktur gibt. Auf diese soll hier nicht eingegangen werden, da die vorliegende Arbeit ausschließlich die Materialien mit Wurtzitgitter behandelt.

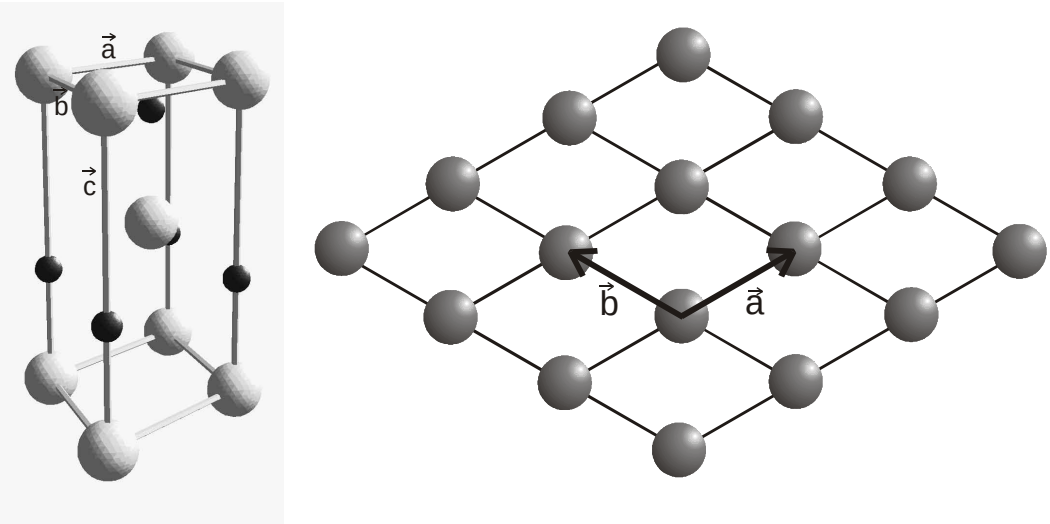

Bild 2.1: Links: Basiszelle des Wurtzitgitters mit den Einheitsvektoren $\vec{a}$, $\vec{b}$ und $\vec{c}$. Die größeren hellen Kugeln symbolisieren die Metall-, die kleineren dunklen die Stickstoffatome. Rechts: Aufsicht auf die hexagonale Netzstruktur der Metallatome der (0002)-Ebene mit den Basisvektoren $\vec{a}$ und $\vec{b}$ im Winkel von 120° zueinander.

Die Struktur des Wurtzitgitters ähnelt derjenigen der Zinkblendestruktur. Beide haben die Koordiniationszahl vier und die Atome sind tetraedrisch angeordnet. Die Orientierung der Tetraeder unterscheidet sich dagegen von der der Zinkblendestruktur: Während die Zinkblendestruktur drei Atomebenen der Metallatome benötigt und diese in der Folge ABCABC… stapelt, reichen in der Wurtzitstruktur durch die wechselnde Orientierung der Tetraeder zwei Ebenen, die alternierend ABABAB… gestapelt werden. Dadurch wird ein Netz von hexagonalen Ringen gebildet, ähnlich der Aufsicht entlang der <111>-Achse in kubischen Gittern. Durch die hexagonale Struktur werden nun zwei Gitterkonstanten nötig, eine für den Abstand der Metallatome senkrecht zu der Netzebene (c-Achse) und eine für den Atomabstand in dem Netzgitter. Die Gitterkonstanten des GaN betragen 5,185 Å entlang der c-Achse und 3,189 Å in der Ebene [StrM92], die des AlN 4,982 Å und 3,112 Å [StrM92]. In Bild 2.1 ist eine Basiszelle des Wurtzitgitters und eine Skizze der Metallatome in Aufsicht auf das hexagonale Netz dargestellt. Eingezeichnet sind die Basisvektoren $\vec{a}$ und $\vec{b}$ in der Ebene sowie $\vec{c}$ senkrecht dazu. $\vec{a}$ und $\vec{b}$ sind vom Betrag gleich groß. Der Winkel zwischen ihnen beträgt 120° und sie bilden die (0002)-Ebene aus. Beschrieben werden die Achsen und Ebenen mit den Miller'schen Indizes <ihkl> mit i = -(h+k).

Die c-Achsenorientierung ist dadurch ausgezeichnet, daß es die einzige Blickrichtung ist, in der vollständige Sechsecke beobachtet werden können und die verschiedenen Atomsorten sich ständig abwechseln. In Bild 2.2 ist die Aufsicht auf das Gitter in c-Achsenrichtung <0002> mit den alternierenden Atomen der Kristallachse gezeigt. Die Metallatome sind durch die hellen größeren, die Stickstoffatome durch die kleineren dunklen Kugeln dargestellt. Außerdem sind sechs Kristallebenen im Winkel von jeweils 30° zueinander eingezeichnet. Von diesen sechs sind jeweils drei unter 60° äquivalent, z. B. $(\bar{2}110)$, $(\bar{1}010)$ und $(\bar{1}100)$. Deswegen wird im Folgenden nur noch von der $(\bar{2}110)$-Ebene als Vertreter der einen drei Ebenen und von der $(\bar{3}120)$-Ebene für die anderen drei Ebenen die Rede sein.

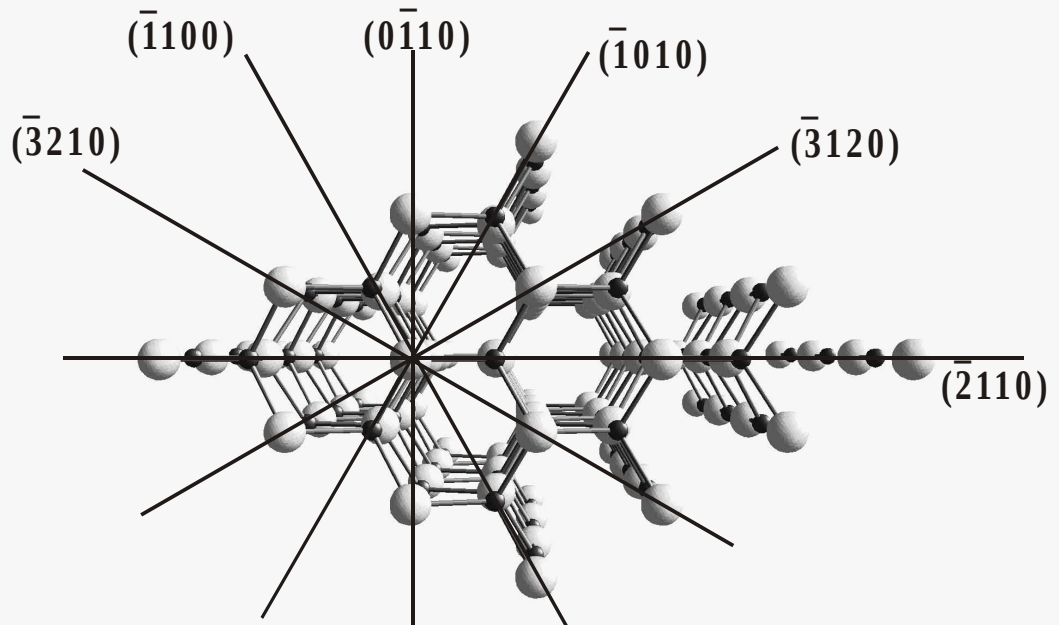

Bild 2.2: *Aufsicht auf das Wurtzitgitter des GaN und des AlN entlang der c-Achsenrichtung. Die größeren, helleren Kugeln symbolisieren die Metall-, die kleineren, dunkleren die Stickstoffatome. Außerdem sind die sechs im Winkel von 30° zueinander stehenden Ebenen eingezeichnet.*

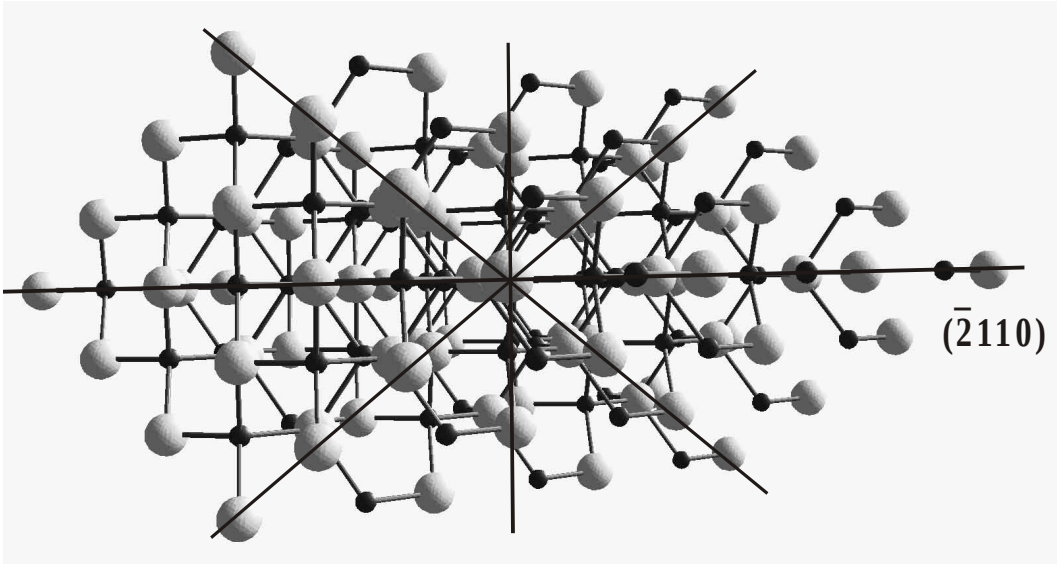

Bild 2.3: *Aufsicht auf das Wurtzitgitter des GaN und des AlN entlang der* $<02\bar{2}3>$*-Achsenrichtung. Die größeren, helleren Kugeln symbolisieren die Metall-, die kleineren, dunkleren die Stickstoffatome.*

Wird das Gitter um die $<\bar{2}110>$-Achse gedreht, so erscheint nach ca. 36° wieder eine Kristallachse, die sich durch $<02\bar{2}3>$ beschreiben läßt. Bei dieser Achse befinden sich die Metall- und die Stickstoffatome auf getrennten Atomreihen. Außerdem sind die Atome nicht exakt hintereinander, sondern alternierend leicht versetzt angeordnet. Die genaue Lage dieser Kristallachse hängt von den Gitterkonstanten der Materialien ab. Bei GaN befindet sich die Achse unter 35,37°, bei AlN unter 35,80°. In Bild 2.3 ist die Aufsicht auf die $<02\bar{2}3>$-Achse dargestellt. Zusätzlich sind noch durch vier Kristallebenen Linien eingezeichnet: Die $(\bar{2}110)$-Ebene, entlang der das Gitter verkippt worden ist, sowie eine Ebene senkrecht dazu, und zwei weitere Ebenen, die ± 40° zur $(\bar{2}110)$-Ebene stehen.

Wird nun das Kristallgitter weiter entlang der $(\bar{2}110)$-Ebene gekippt, dann erscheint unter 46,80° relativ zur c-Achse beim GaN und unter 47,25° beim AlN die $<01\bar{1}1>$-Kristallachse. Die Aufsicht des Kristalls entlang dieser Achse ist in Bild 2.4 dargestellt. In der $<01\bar{1}1>$-Achse wechseln sich wieder Metall- und Stickstoffatome ab. Zusätzlich zu der hier waagrecht dargestellten $(\bar{2}110)$-Ebene sind zwei weitere Kristallebenen je im Winkel von ± 60° zur $(\bar{2}110)$-Ebene abgebildet.

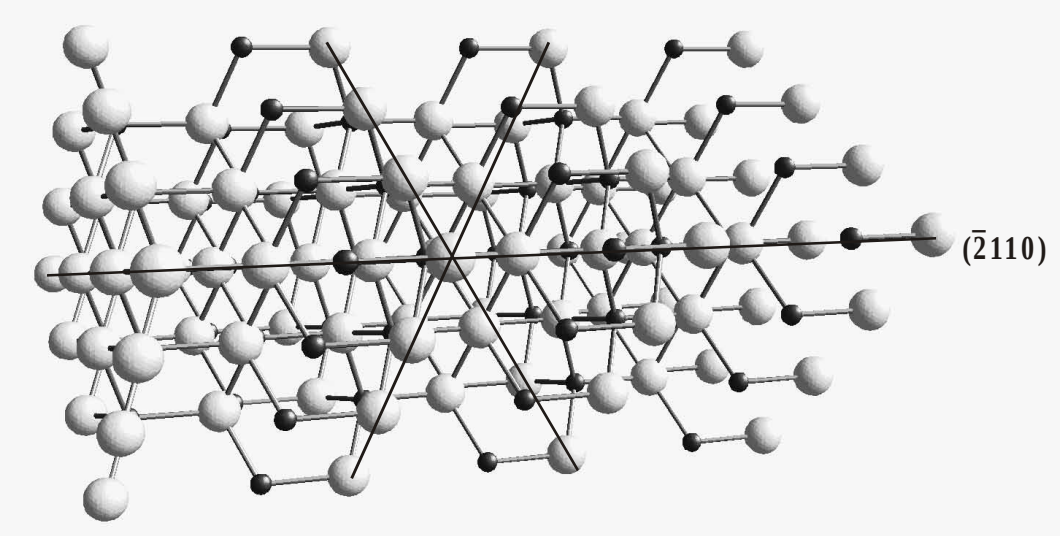

Bild 2.4: Aufsicht auf das Wurtzitgitter des GaN und des AlN entlang der $<01\bar{1}1>$-Achsenrichtung.

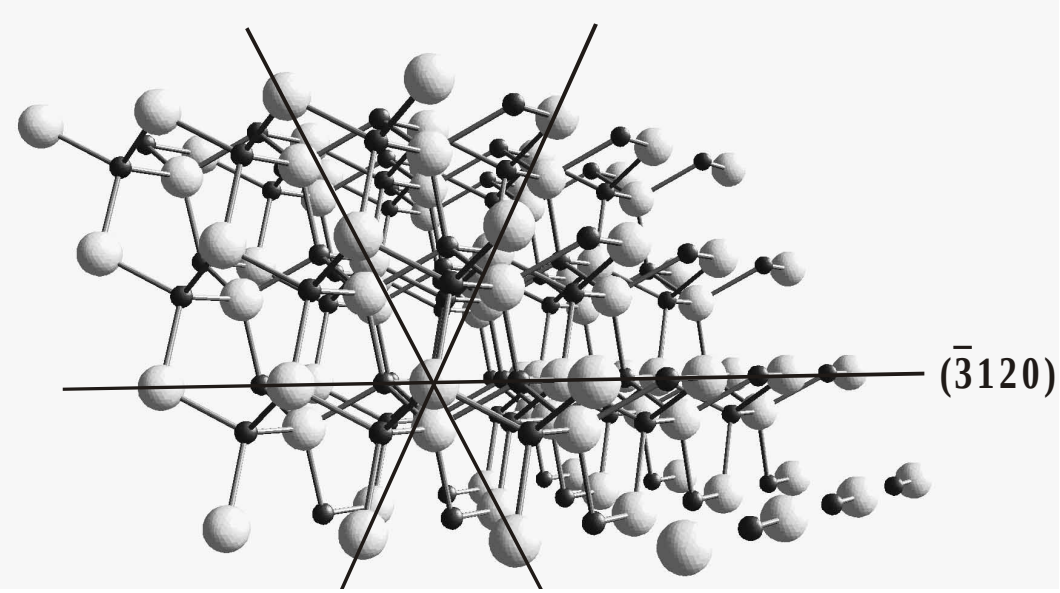

Bild 2.5: Aufsicht auf das Wurtzitgitter des GaN und des AlN entlang der $<\bar{1}101>$-Achsenrichtung.

Wird wieder von der c-Achse ausgegangen, das Kristallgitter nun aber nicht entlang der $(\bar{2}110)$-Achse sondern entlang der $(\bar{3}120)$-Ebene gekippt, so wird unter 31,58° beim GaN und unter 31,98° beim AlN bezüglich der c-Achse die $<\bar{1}101>$-Achse erreicht. Eine Aufsicht auf diese Achse ist in Bild 2.5 gezeigt. Diese Achse wird ähnlich der $<02\bar{2}3>$-Achse aus getrennten Doppelreihen der Metall- und Stickstoffatome gebildet. Außerdem existieren noch Kristallebenen, die im Winkel von ± 75° relativ zur $(\bar{3}120)$-Ebene liegen. Des weiteren interessant ist die $<\bar{2}201>$-Achse, die erreicht wird, wenn das Kristallgitter weiter entlang der $(\bar{3}120)$-Ebene bis auf 50,88° (GaN) bzw. 51,32° (AlN) bezüglich der c-Achse gedreht wird. Entlang dieser Richtung existiert eigentlich keine richtige Achse, jedoch drei Doppelebenen, die den interstitiellen Platz auszeichnen, der zwischen allen Doppelebenen liegt. Die Aufsicht unter diesem Winkel auf das Wurtzitgitter ist in Bild 2.6 dargestellt.

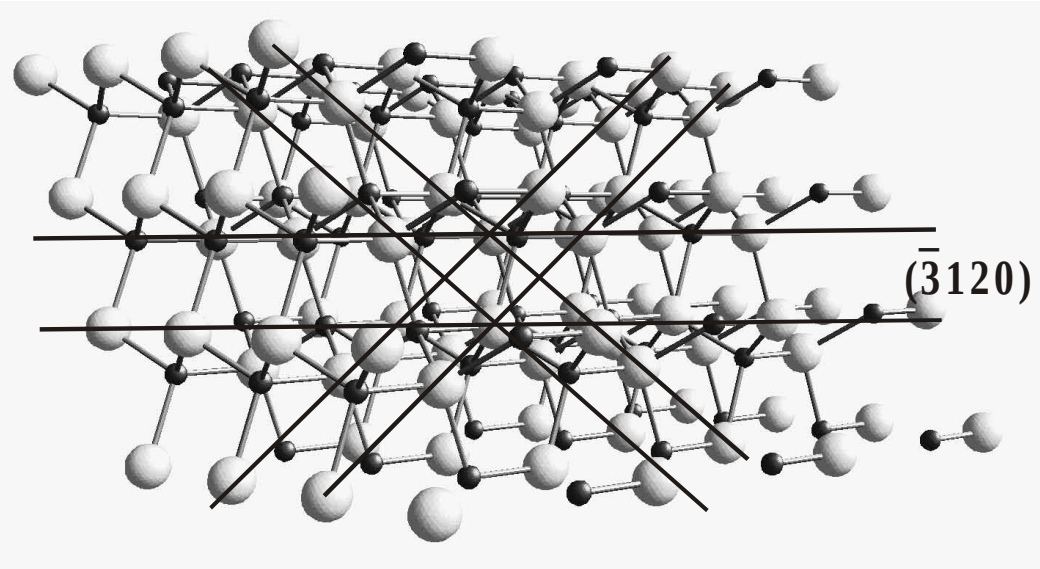

Bild 2.6: Aufsicht auf das Wurtzitgitter des GaN und des AlN entlang der $<\bar{2}201>$-Achsenrichtung.

2.2 Physikalische Eigenschaften von GaN und AlN

In der Tabelle 2.1 wird eine Auswahl der physikalischen Daten der Materialien Galliumnitrid und Aluminiumnitrid den Daten von Silizium und Galliumarsenid gegenübergestellt. Es zeigt sich, daß diese Materialien außer ihrer großen direkten Bandlücke und der damit verbundenen möglichen Anwendung als LED im blauen und ultravioletten Bereich noch andere besondere Eigenschaften besitzen, die für die Halbleiterindustrie besonders wichtig sind. So ist die Kombination von hoher Durchbruchfeldstärke und großer Driftgeschwindigkeit der Ladungsträger die Voraussetzung für einen schnellen Transistor aus GaN [ZolS96]. Durch die große Bandlücke, die große Härte und ihre Transparenz im sichtbaren Bereich des Lichtes ergeben sich Anwendungen für Detektoren, Sensoren [Dav91] und Transistoren für hohe Bertiebstemperaturen (300°C-400°C [Jun93]).

Meßgröße:	**GaAs:**	**Si:**	**GaN:**	**AlN:**
Struktur	Zinkbl.	Diamant	Wurtzit	Wurtzit
Bandlücke (eV)	1,43	1,1	3,5 [1)]	6,2 [1)]
Löcherbeweglichkeit (cm^2/Vs) bei 300 K	400	600	300 [2)]	14 [3)]
Elektronenbeweglichkeit (cm^2/Vs)	850	1500	900 [4)]	300 [5)]
Durchbruchfeldstärke (V/cm)	$6\cdot10^5$	$3\cdot10^5$	$3\cdot10^6$ [4)]	--
Debye-Temperatur (K)	345	625	600 [6)]	950 [6)]
Wärmeleitfähigkeit (W/cm)	0,46	1,45	1,3 [1)]	3,19 [7)]
Maximale Elektronengeschwindigkeit (cm/s)	$1\cdot10^7$	$1\cdot10^7$	$3\cdot10^7$ [4)]	--
Dielektrizitätskonstante	12,5	11,0	9,5 [8)]	8,5 [8)]
Gitterkonstante (Å)	5,65	5,43	a = 3,189 [1)] c = 5,185 [1)]	a = 3,112 [1)] c = 4,982 [1)]
Dichte (g/cm^3)	5,316	2,33	6,15 [4)]	3,23 [4)]
Härte (GPa)	6	10	12 [9)]	14 [9)]
Brechungsindex (bei 3 eV)	3,4	3,5	2,43 [10)]	2,15 [1)]
Wärmeausdehnungskoeffizient (1/K)	$5{,}9\cdot10^{-6}$	$2{,}6\cdot10^{-6}$	a: $5{,}59\cdot10^{-6}$ c: $3{,}17\cdot10^{-6}$ [1)]	a: $4{,}2\cdot10^{-6}$ c: $5{,}3\cdot10^{-6}$ [1)]
Schmelzpunkt (K)	1238	1685	2800 [9)]	2275 [11)]
Güte (nach Johnson)	$6\cdot10^{24}$	$9\cdot10^{23}$	$2{,}5\cdot10^{26}$ [12)]	--
Güte (nach Keyes)		$1{,}38\cdot10^3$	$2{,}43\cdot10^3$ [12)]	--

[1)] [MorS94]; [2)] [MelR98]; [3)] [Sze98]; [4)] [Pea97]; [5)] [ChiT94]; [6)] [Sla73]; [7)] [SlaT87]; [8)] [StrM92]; [9)] [DroA96]; [10)] [BilG97]; [11)] [Dav91]; [12)] [Dav93];

Tabelle 2.1: *Materialkonstanten und daraus hergeleitete Größen des GaN und AlN im Vergleich zu Galliumarsenid und Silizium.*

Fremdatom	**Donatorniveau (E_g-E in meV)**	**Akzeptorniveau (E in meV)**
V_N:	20-30 [MelL93]	
As:	1000 [StrM92]	
Be:		250 [SalK96]
C:		230 [Amb98]
Ca:		170 [ZolW96]
Cd:		550 [StrM92]
Hg:		410 [StrM92]
K:	880 [HaaB97]	
Li:		750 [StrM92]
Mg:		250 [Amb98]
O:	34 [Zol97]	
Si:	Si_{Ga}: 25 [OhuT97]	Si_N: 225 [Edg94]
Zn:		340 [Amb98]

Tabelle 2.2: *Energieniveaus von Fremdatomen in GaN*

Für Halbleitermaterialien führte Johnson eine Güte G [V/s] hinsichtlich der physikalisch möglichen Leistung und erreichbaren Frequenz von Transistoren ein, die sich folgend ergibt [Joh65]:

$$G_J := V_m f_T = \frac{E_B V_S}{\pi} \tag{2.1}$$

E_B: Durchbruchfeldstärke
V_S: Maximale Geschwindigkeit der Elektronen
V_m: Größtmögliche Arbeitsspannung
f_T: Maximale Frequenz

Eine Beziehung von Materialkonstanten, die die Schaltgeschwindigkeit von Transistoren und von logischen Bausteinen beschreibt, wurde von Keyes aufgestellt. [Key72].

$$G_K := \sigma_T \sqrt{\frac{V_S}{\varepsilon_0}} \tag{2.2}$$

σ_T: Thermische Leitfähigkeit
V_S: Maximale Geschwindigkeit der Elektronen
ε_0: Dielektrizitätskonstante

Wie aus der Tabelle ersichtlich, ist bei GaN der Johnson-Faktor um drei Größenordnungen größer als bei Silizium und auch der Keyes-Faktor ist ist doppelt so groß. Damit GaN als Material für Halbleiter und Elektronikanwendungen Verwendung finden kann, muß es sowohl als p- als auch als n-Typ herstellbar sein. Um mögliche Dotierungen mit Fremdatomen darzustellen, sind in Tab. 2.2 gemessene energetische Niveaus von Fremdatomen und Gitterdefekten in GaN aufgelistet.

3. Die Emissionschanneling-Methode

3.1 Grundlagen des Channelings

Werden beschleunigte Ionen (z. B. Protonen oder α-Teilchen) auf ein Target geschossen, so können über die Energieverteilung der rückgestreuten Projektile die Masse und die Tiefenverteilung der sich im Kristall befindenden Atome ermittelt werden (**R**utherford **B**ack **S**cattering).

Handelt es sich beim Target um einen Kristall mit periodischer Struktur, treten weitere Effekte auf. Die Bewegung geladener Teilchen innerhalb eines Festkörpers wird in erster Linie durch die Coulomb-Wechselwirkung mit der abgeschirmten Ladung der Atomkerne bestimmt: positiv geladene Teilchen wie Protonen, Positronen, Alpha-Teilchen oder die Kerne schwerer, positiv geladener Ionen werden von den ebenfalls positiv geladenen Atomkernen abgestoßen, während Elektronen eine attraktive Wechselwirkung mit den Atomkernen erfahren. Innerhalb eines Einkristalls mit seiner dreidimensionalen periodischen Anordnung der Atome werden deshalb positiv geladene Teilchen entlang der Achsen und Ebenen, die von den Atomen des Kristalls gebildet werden, eine geringe Aufenthaltswahrscheinlichkeit besitzen, Elektronen dagegen eine hohe.

Wird der Kristall so ausgerichtet, daß nur ein kleiner Winkelbereich zwischen der Bewegungsrichtung der Teilchen und der Richtung der Atomreihen zugelassen wird, so können die Projektile über viele Kleinwinkelstreuungen an dem Potential der Atomkerne zwischen den Achsen oder Ebenen in den Kristall hineingeführt werden. Dadurch steigt die Implantationstiefe bis um einen Faktor 50 [MayE70]. Wird die Anzahl der rückgestreuten Kerne in Abhängigkeit des Winkels zwischen dem einfallenden Ionenstrahl und der Kristallachse aufgetragen, so ensteht ein Minimum der Rückstreurate bei einem Winkel von 0°. Diesen Effekt, bei dem die Hauptkomponente der Teilchenbewegung für positiv geladene Projektile zwischen und für Elektronen entlang der Achsen oder Ebenen liegt, wird als Channeling- oder Gitterführungs-Effekt bezeichnet. Wie groß der Winkel zwischen dem einfallenden Ionenstrahl und den Kristallachsen bzw. den Kristallebenen sein darf, um den Gitterführungseffekt noch zu ermöglichen hängt in erster Linie von der Energie des Projektils, aber auch von dem Gitterpotential also von den Kernladungszahlen und den Atomabständen d der Wirtsgitteratome ab. Eine Abschätzung gibt der sog. Lindhardsche kritische Winkel [Lin65] ψ_c, der im axialen Fall (Gitterführungseffekte entlang einer Kristallachse) durch

$$\psi_c^{axial} = \sqrt{\frac{2\,Z_1\,Z_2\,e^2}{E \cdot d}} \tag{3.1}$$

und im planaren Fall (Gitterführungseffekte entlang oder zwischen Kristallebenen) durch

$$\psi_c^{planar} = \sqrt{\frac{2\pi\,Z_1\,Z_2\,e^2\,a_{TF}\,N\,d_p}{E}} \tag{3.2}$$

gegeben ist. Für die in Frage kommenden Energien (im Bereich von 100 keV und größer) ergeben sich kritische Winkel von ca. 1° oder weniger. Dabei sind Z_1e bzw. E die Kernladung bzw. die kinetische Energie des Projektils, Z_2e die mittlere Kernladung der Gitteratome innerhalb der entsprechenden Kristallachse oder -ebene, d der Abstand der Atome entlang der Achse, d_p der Abstand der Kristallebenen, N die Gesamtanzahldichte der Atome im Kristall,

$$a_{TF} = \frac{0.4685}{\sqrt[3]{\left(\sqrt{Z_1} + \sqrt{Z_2}\right)^2}} \tag{3.3}$$

der mittlere Thomas-Fermi-Abschirmradius (≈ 0,1 – 0,2 Å) und a_0 der Bohrsche Radius (0,53 Å). Hierbei wird in einem Kontinuums-Modell näherungsweise die Gitterführung durch die Wechselwirkung der Ionen mit einer entlang der Atomreihen linienförmigen Ladungsverteilung beschrieben.

Ist der Kanal, in dem die Ionen geführt werden sollen, durch ein Fremdatom oder einen Gitterfehler gestört, so wird der Channelingeffekt beeinträchtigt und es tritt eine Großwinkelstreuung auf. Dies bedeutet, daß die Rückstreurate, gemessen in einem Energiefenster nahe der entsprechenden Rückstreukante für an der Oberfläche reflektierte Projektile, bei 0° größer wird, als im Falle des ungestörten Gitters.

Der Channeling-Effekt für positiv geladene Ionenstrahlen hat vielfältige Anwendungen gefunden: die Untersuchung von Kristalldefekten nach Bestrahlung mit hochenergetischen Teilchen, die Gitterplatzlokalisierung von Fremdatomen z. B. nach Ionenimplantation, oder die Aufklärung der Strukturen von rekonstruierten Oberflächen oder von Grenzflächen. Sehr gute Übersichtsartikel zum Ionenchanneling, in denen insbesondere auch ausführlich auf die Abhängigkeit der beobachtbaren Parameter (normierte Emissionsrate entlang von kristallinen Richtungen, Halbwertsbreite der Channeling-Effekte etc.) von den Eigenschaften des Kristalls und der Projektile (Gitterkonstante, thermische Schwingungsamplitude, Kernladungen, kinetische Energie etc.) eingegangen wird [ChuM78],[FelM86],[Mor73] oder leicht verständliche Einführungen [SchW92] finden sich in der Literatur.

Die größten Nachteile der RBS-Channeling-Methode sind zum einen, daß für die Gitterplatzbestimmung von Fremdatomen Implantationsdosen größer als $10^{14}cm^{-2}$ nötig sind, da der Streuquerschnitt klein ist und zum anderen, daß durch den analysierenden Strahl noch mehr Gitterfehler erzeugt werden. Ein weiterer Nachteil ist, daß mit der RBS-Channeling-Methode in der Regel nur Gitterplätze von Fremdatomen untersucht werden können, deren Masse größer als die des Wirtsgitters ist. Werden radioaktive Atome als Sonden implantiert und die Gitterführungseffekte an deren Zerfallsprodukten (α-, β^--, β^+- Teilchen oder Konversionselektronen) beobachtet, so ist die Nachweisgrenze nicht mehr durch den Streuquerschnitt, sondern durch den Raumwinkel für die Teilchendetektion limitiert. So konnte bei der Gitterplatzbestimmung von ^{33}P in Diamant gezeigt werden, daß bereits Implantationsdosen von $10^{11}cm^{-2}$ für die Emissionschanneling-Methode (EC-Methode) ausreichend sind [HofD97]. Außerdem können alle Atome, zu denen ein Isotop mit einem geeigneten Zerfall existiert, untersucht werden, unabhängig von der Masse der Sonde oder der Atome des Wirtsgitters.

Bei α-Emittern kann ein Channelingeffekt der α-Teilchen zwischen den Atomreihen oder ein Blockingeffekt, d. h. eine Reduzierung der α-Emission entlang einer Kristallachse oder Ebene, durch die Atome in den Atomreihen auftreten. Wird die Anzahl der aus dem Kristall austretenden α-Teilchen in Abhängigkeit des Winkels für verschiedene Kristallachsen gemessen, so kann der Gitterplatz eines Fremdatoms bestimmt werden. Analog verhalten sich schnelle Elektronen. Wegen ihrer negativen Ladung erfolgt die Gitterführung hierbei nicht in den Kanälen zwischen, sondern entlang den Atomreihen.

3.2 Emissionschanneling mit Alpha-Teilchen

Werden α-Emitter in den zu untersuchenden Festkörper implantiert, so hängt die Austrittswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit des Winkels der emittierenden α-Teilchen zu Kristallachsen und Ebenen extrem vom Aufenthaltsort des Emitters zum Zeitpunkt seines Zerfalls ab. Wird die α-Flußdichte in Abhängigkeit dieses Winkels in einem Bereich von einigen Grad bezüglich verschiedener Kristallachsen gemessen, so kann der Ort, an dem der Emitter zerfallen ist, bestimmt werden. Bereits in den sechziger Jahren wurde versucht, Fremdatome (^{222}Rn) mit Hilfe der sogenannten Emissions-

channelingtechnik zu lokalisieren [Dom66]. In Bild 3.1 sind symbolisch die zu erwartenden Effekte entlang verschiedener Kristallachsen für den substitutionellen (linkes Bild) und interstitiellen (rechtes Bild) Einbau des Emitters in ein kubisches Gitter gezeigt. Es wird für den substitutionellen Fall in Richtung der gezeigten drei Achsen ein Blockingeffekt erwartet. Zerfällt nun aber der Emitter auf einem tetraedrischen interstitiellen Platz, so werden zwar immer noch Blockingeffekte entlang der <100>- und <111>- Achse erwartet, entlang der <110>- Achse wird nun aber ein Channeling-Effekt erwartet, da sich die emittierten α-Teilchen in dieser Achse in einem freien Kanal befinden, in dem sie über viele Kleinwinkelstreuungen nach außen geführt werden können.

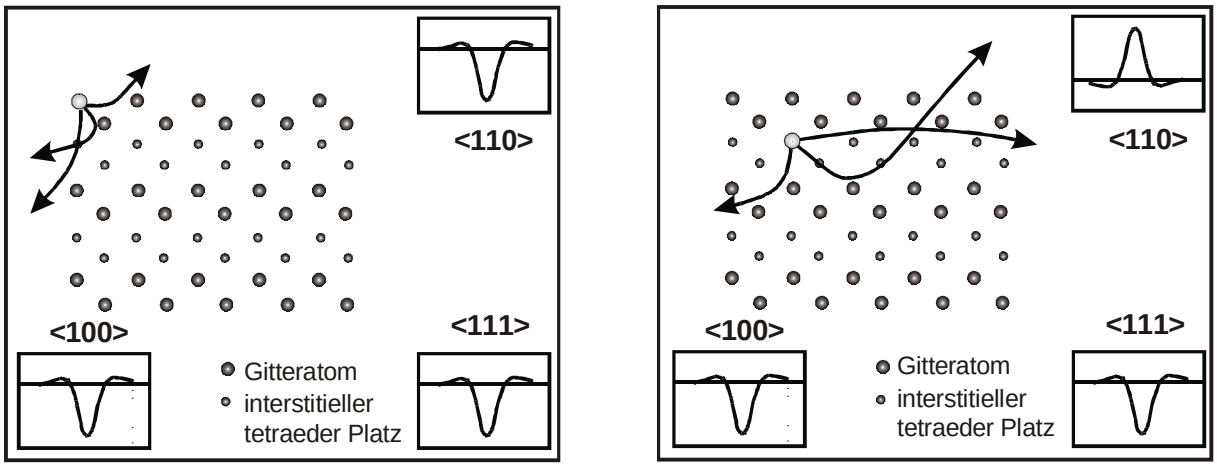

Bild 3.1: Schnittbild der {110}-Ebene eines kubischen Kristallgitters. Die Linien repräsentieren die Bewegungen der α-Teilchen entlang der <100>-, <110>- und <111>-Kristallachsenrichtungen. Die Bildausschnitte am Ende der Kristallachsenrichtungen geben symbolisch die Channeling- und Blockingeffekte wieder. Die Situation für substitutionelle Fremdatome ist auf der linken, für tetraedrische Zwischengitterplätze auf der rechten Bildseite wiedergegeben.

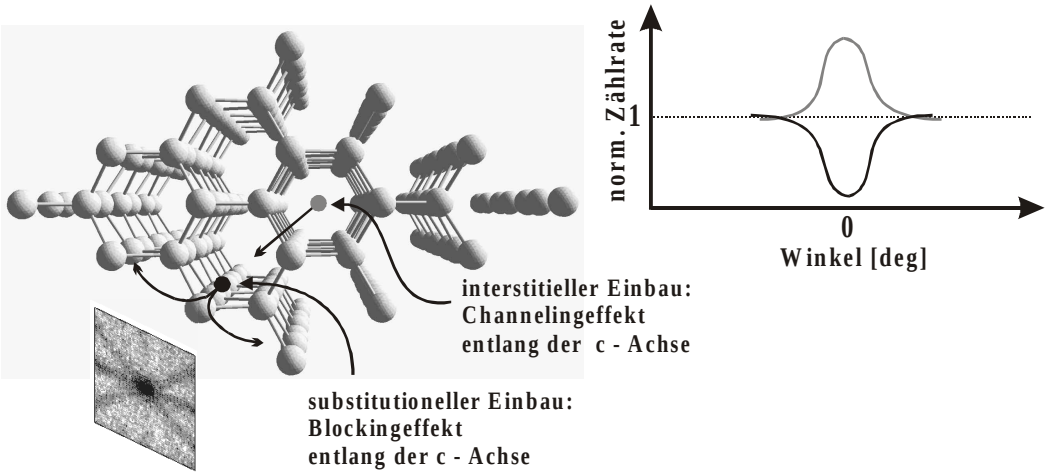

Bild 3.2: Aufsicht auf das Wurtzitgitter des GaN entlang der c-Achse und symbolisch die zu erwartenden Channeling- oder Blockingeffekte für interstitiellen (grau) bzw. substitutionellen (schwarz) Einbau der α-Emitter in das Gitter.

Die Ableitung der Grundlagen der Gitterführung und einiger Meßgrößen wie kritische Winkel oder minimale Rückstreuraten stehen z. B. in [FelM86]. Eine genauere Beschreibung des α-Emissionschannelings findet sich in [Wah97]. Wie nun Channeling- bzw. Blockingeffekte der α-Teilchen im Wurtzitgitter des GaN oder des AlN entlang der c-Achsen zustandekommen, ist in

Bild 3.2 gezeigt. Hier sind das Wurtzitgitter und die Emissionsverteilungen für interstitielle bzw. substitutionelle Sondenplätze der α-Emitter entlang der c-Achse gezeigt.

Außerdem sind nochmals die zu erwartenden Channelingeffekte entlang der c - Achse dargestellt. Erkennbar ist auch, daß sich zu dem axialen Channelingeffekt bei interstitiellem Einbau noch drei Channeling - $(\bar{3}120)$, $(\bar{3}210)$ und $(0\bar{1}10)$ und drei Blockingebenen $(\bar{2}110)$, $(\bar{1}010)$ und $(\bar{1}100)$ gesellen. Bei substitutionellem Einbau werden zusätzlich zum axialen Blockingeffekt noch drei Blockingebenen $(\bar{2}110)$, $(\bar{1}010)$ und $(\bar{1}100)$ gebildet.

Auf die experimentelle Messwerterfassung wird noch in Kapitel 5.1.4. eingegangen werden. Eine genauere theoretische Beschreibung des Emissionschannelings mit α-Emittern wird in Kapitel 6.2 behandelt.

3.3 Emissionschanneling mit Elektronen

Die Vielseitigkeit der Emissionschannelingmethode, fast alle Atome des Periodensystems als Fremdatome lokalisieren zu können, wird aber erst durch das Elektronenemissionschanneling erreicht. Hier wird der Gitterführungseffekt der Elektronen vermessen. Das bedeutet, daß alle radioaktiven Kerne, die β^--Elektronen oder Konversionselektronen emittieren, im Prinzip verwendet werden können, wenn sich die Elektronen energetisch oder durch die Halbwertzeit von denen der anderen Zerfälle eindeutig trennen lassen. Im Gegensatz zu positiv geladenen Teilchen, die an den ebenfalls positiv geladenen Kernen streuen, haben Elektronen eine attraktive Coulomb-Wechselwirkung mit den Atomkernen. Diese führt dazu, daß ein Elektron, welches auf einem substitutionellen Gitterplatz emittiert wurde, entlang der Atomreihen im Gitterpotential nach außen geführt wird. Statt eines Blockingeffektes wie bei den positiv geladenen Teilchen wird also ein Channelingeffekt entlang den Atomreihen erwartet. Eine Darstellung des Prinzips ist in Bild 3.3 zu sehen.

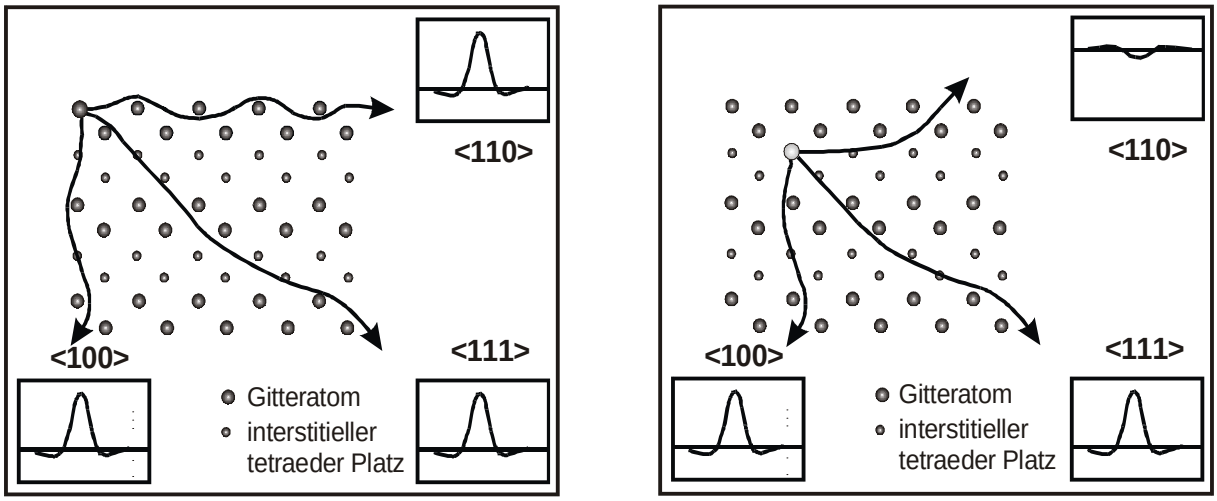

Bild 3.3: Schnittbild der {110}-Ebene eines kubischen Kristallgitters. Die Linien repräsentieren die Bewegungen der Elektronen entlang der <100>-, <110>- und <111>-Kristallachsenrichtungen. Die Bildausschnitte am Ende der Kristallachsenrichtungen geben symbolisch die Channelingeffekte wieder. Die Situation für substitutionelle Fremdatome ist auf der linken, für tetrahedrale Zwischengitterplätze auf der rechten Bildseite wiedergegeben.

Es zeigt wieder einen Schnitt durch die {110}- Kristallebene eines kubischen Gitters. Auf der linken Seite sind die Bahnen der Elektronen, die von substitutionellen Sondenatomen in diese Richtungen emittiert werden dargestellt. Am Ende der Bahnen ist jeweils ein Teilbild zu sehen, in dem symbolisch die zu erwartende Zählrate in Abhängigkeit des Winkles dargestellt ist. In allen drei

Richtungen werden Channeling-Effekte beobachtet, was typisch für substitutionelle Elektronenemitter ist. Im rechten Bild ist die für interstitielle Sondenatome wegen der fehlenden Gitterführung in der <110>-Kristallachsenrichtung isotrope Emissionswahrscheinlichkeit dargestellt, während Channeling-effekte in den anderen beiden Richtungen auftreten. Es kann also wie beim Channeling mit α-Teilchen bereits aus der Messung der <110>-Achse der Anteil der Emitter auf substitutionellen Plätzen ermittelt werden. Im Gegensatz zum α-Channeling ist aber eine Beobachtung von Blockingeffekten ausgeschlossen, da ein emittiertes Elektron auf einem Zwischengitterplatz Energieniveaus einnimmt, die oberhalb des bindenden transversalen Gitterpotentials liegen, dieses deswegen kaum spüren und somit eine fast isotrope Ausstrahlcharakteristik zeigen [HofL91].

Um nochmals zu verdeutlichen, wie Channelingeffekte von Elektronen im Wurtzitgitter des GaN oder des AlN entlang der c-Achsen zustandekommen ist das Wurtzitgitter und die Emissions-verteilungen für interstitielle bzw. substitutionelle Sondenplätze der Emitter in Bild 3.4 gezeigt.

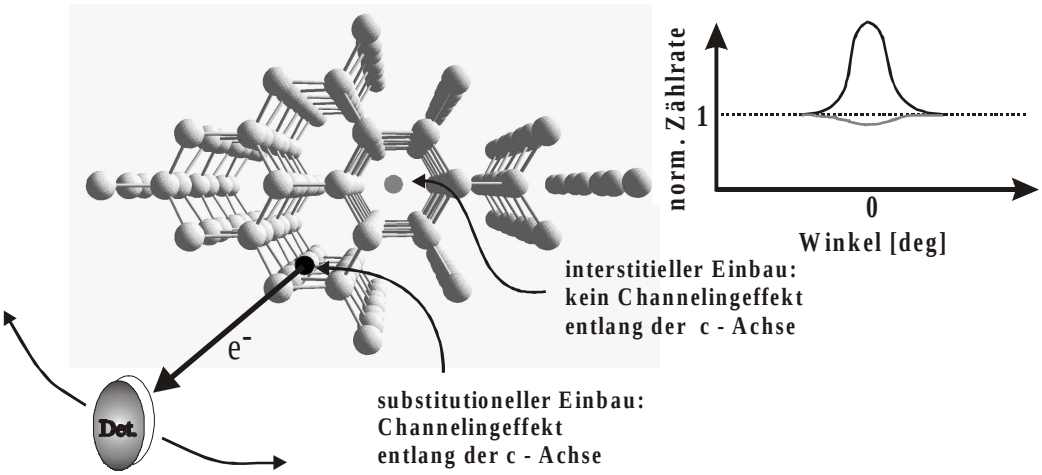

Bild 3.4: Aufsicht auf das Wurtzitgitter des GaN und symbolisch die zu erwartenden Channeling-effekte für interstitiellen (grau) bzw. substitutionellen (schwarz) Einbau der Emitter in das Gitter.

Es ist der zu erwartende Channelingeffekt entlang der c - Achse für substitutionellen Einbau dargestellt. Auch zu erkennen ist, daß sich zu dem axialen Channelingeffekt bei substitutionellem Einbau noch sechs Channelingebenen $(\bar{3}120)$, $(\bar{3}210)$, $(0\bar{1}10)$, $(\bar{2}110)$, $(\bar{1}010)$ und $(\bar{1}100)$ vorhanden sind. Bei interstitiellem Einbau werden zwar weder ein Channling- noch ein Blockingeffekt entlang der c-Achse beobachtet, jedoch bleiben drei Channelingebenen $(\bar{2}110)$, $(\bar{1}010)$ und $(\bar{1}100)$ erhalten. Auf eine geauere Beschreibung des Elektronenchannelings wird noch in Kapitel 6.3 eingegangen.

4. Gestörte Winkelkorrelation (PAC)

Die Methode der gestörten γ- γ-Winkelkorrelation (**P**erturbed **A**ngular **C**orrelation) benutzt geeignete radioaktive Sondenkerne zur Untersuchung von Festkörpereigenschaften. Dabei wechselwirken die Kernmomente des Sondenkerns mit den elektromagnetischen Hyperfeinfeldern in der Probe, wodurch man Aufschluß über den elektrischen Feldgradienten (EFG) und das magnetische Hyperfeinfeld am Kernort des Sondenatoms erhält. Da sich Gitterdefekte in der näheren Umgebung der Sonde in Kristallen auf den elektrischen Feldgradienten auswirken, läßt sich das Ausheilverhalten des Materials nach Ionenimplantation mit dieser Methode untersuchen. Da der Schwerpunkt dieser Arbeit bei Untersuchungen mittels Emissionschanneling liegt, wird hier nur in wenigen Worten auf das Grundprinzip der PAC-Methode eingegangen. Darüber hinaus ist die Methode der PAC ausführlich in der Literatur beschrieben, z. B. [SchW92].

In dieser Arbeit wurde ^{111}In als PAC-Sonde verwendet. Das zugehörige Zerfallsschema ist in Kap. 5 Bild 5.8 dargestellt. ^{111}In zerfällt mit einer Halbwertszeit von 2,83 Tagen in einen angeregten Zustand des ^{111}Cd. Dieser geht durch Ausstrahlung von γ_1 in einen Zwischenzustand mit Kernspin 5/2 über. Dieser zerfällt mit einer Halbwertszeit von 84 ns unter Ausstrahlung von γ_2 in den ^{111}Cd Grundzustand.

Der Spin 5/2-Zustand spaltet aufgrund der Hyperfeinwechselwirkung des Kernquadrupolmoments Q mit dem elektrischen Feldgradienten V_{ij} am Kernort in drei Niveaus auf. Der elektrische Feldgradient V_{ij} ist durch die zweite Ableitung des elektrostatischen Potentials bestimmt. Er ist ein symmetrischer, diagonalisierbarer und spurfreier Tensor 2. Stufe:

$$V_{ij} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i \partial x_j} - \frac{1}{3}(\Delta\Phi)\delta_{ij} \quad , \quad i, j = 1, 2, 3 \tag{4.1}$$

Im Hauptachsensystem ist der elektrische Feldgradient durch das größte Diagonalelement V_{zz} und den Asymmetrieparameter $\eta = (V_{xx} - V_{yy})/V_{zz}$ eindeutig bestimmt. Aufgrund der hexagonalen Wurtzitstruktur von GaN und AlN wird auch im defektfreien Gitter ein axialsymmetrischer EFG beobachtet ($\eta = 0$).

Zur Bestimmung des elektrischen Feldgradienten mißt man die Emission der beiden γ-Quanten des Zerfalls in Abhängigkeit des Emissionswinkels und der Koinzidenzzeit. Wurde γ_1 detektiert, so hat man durch Festlegung der γ_1-Emissionsrichtung eine Selektion von Unterzuständen im Zwischenniveau vollzogen, was eine Ungleichbesetzung der Unterzustände zur Folge hat. Die Emission von γ_2 kann nun wegen den Auswahlregeln nicht mehr in jede Richtung mit gleicher Wahrscheinlichkeit stattfinden, sondern zeigt eine charakteristische, anisotrope Winkelverteilung $W(\theta,t)$ bezüglich der Emissionsrichtung von γ_1, die im ungestörten Fall nicht von der Zeit abhängt.

$$W(\theta, t) = \sum_{k_{gerade}}^{k_{max}} A_{kk} G_{kk}(t)\, P_k(\cos\theta) \tag{4.2}$$

A_{kk}: Anisotropiefaktor
$G_{kk}(t)$: Störfaktor
$P_k(\cos\theta)$: Legendre-Polynome

Befindet sich der zerfallende Kern jedoch in einem Kristall mit einem elektrischen Feldgradienten am Sondenort, so wird die Besetzung der magnetischen Unterzustände des Zwischenniveaus aufgrund der Hyperfeinwechselwirkung zwischen dem Kernquadrupolmoment und dem elektrischen Feldgradienten geändert, und bewirkt so eine Zeitabhängigkeit der Winkelverteilung $W(\theta,t)$. Indem man diese mißt,

kann man über eine Fourier-Analyse des Zählratenverhältnisses R(t) auf ω_1, ω_2 und ω_3 der Zwischenniveauaufspaltung schließen, und somit das Produkt QV_{zz} bestimmen.

$$R(t) = \frac{2}{3}\left[\sqrt{\frac{N_{13}(180°,t)\cdot N_{24}(180°,t)}{N_{14}(90°,t)\cdot N_{23}(90°,t)}} - 1\right] \tag{4.3}$$

Da das Kernquadrupolmoment für viele Kerne nicht exakt bekannt ist, wird V_{zz} zumeist nicht explizit berechnet, sondern durch die Quadrupolkopplungskonstante $\nu_Q = eQV_{zz}/h$ ausgedrückt. In Bild 4.1 ist eine schematische Darstellung der Meßmethode gezeigt.

Sind verschiedene Defekte in der unmittelbaren Sondenumgebung vorhanden, so ist das Sondenatom einer breiten Verteilung von Feldgradienten um einen Mittelwert ausgesetzt, was sich als starke Dämpfung im R(t)-Spektrum äußert. Die Quadrupolkopplungskonstante $\langle\nu_Q\rangle$ und deren Breite $\Delta\nu_Q$ sind daher ein Maß für Gitterdefekte um die lokale Sondenumgebung [BurD97].

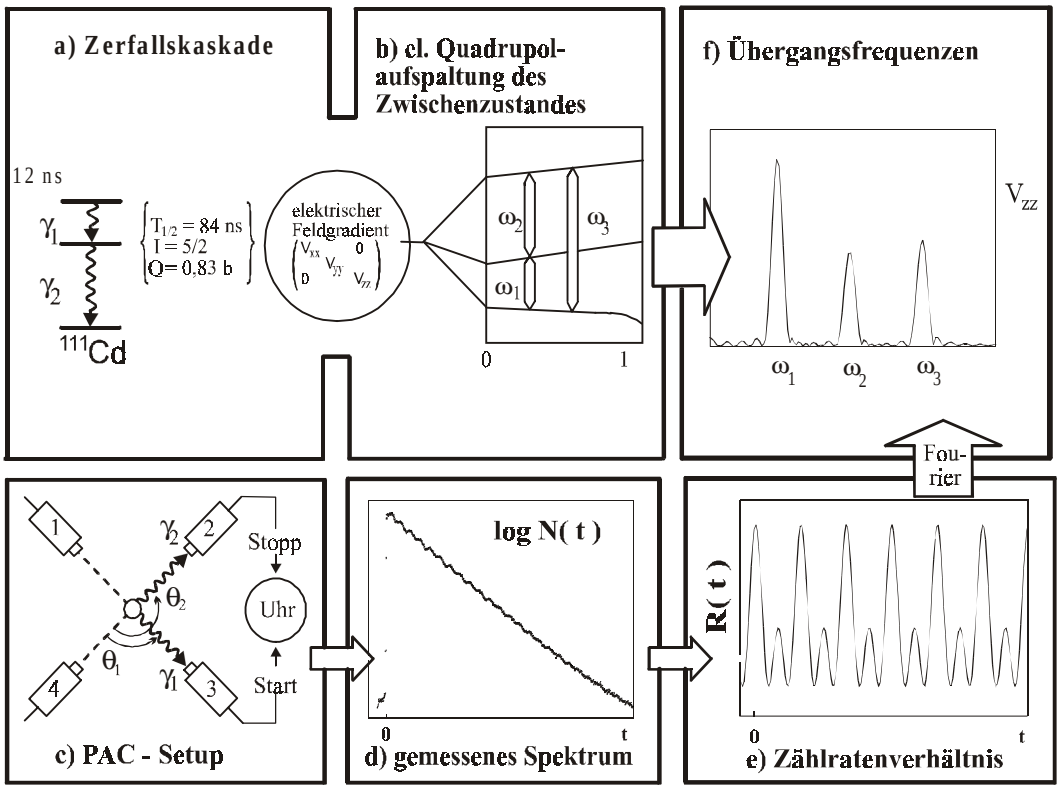

Bild 4.1: *Schematische Darstellung der PAC-Methode. Neben dem Zerfallskaskade des ^{111}Cd (a) ist die Hyperfeinaufspaltung des 5/2- Niveaus durch einen elektrischen Feldgradienten als Funktion des Asymmetrieparameters η gezeigt (b). Im Experiment werden mittels vier γ-Detektoren koinzidente Ereignisse in Abhängigkeit der Zeit und des Winkels gemessen (c). Aus den gemessenen Zählraten (d) wird unter Berücksichtigung der Detektoranordnung das Zählratenverhältnis R(t) berechnet (e). Die Übergangsfrequenzen ω_1, ω_2 und ω_3 werden durch Fourieranalyse aus R(t) bestimmt. Kennt man das Kernquadrupolmoment, so läßt sich aus den Übergangsfrequenzen der EFG berechnen.*

5. Experimentelle Durchführung

5.1 Experimentelle Voraussetzungen

5.1.1 Grundlagen der Ionenimplantation

Die theoretischen Grundlagen zur Ionenimplantation gehen auf Bohr [Boh13] [Boh15] und Rutherford [Rut11] zurück. Beim Beschuß von Festkörpern mit Ionen gibt es zwei Mechanismen, die diese abbremsen oder streuen: zum einen die elastischen Stöße mit den Kernen, zum anderen die Wechselwirkung mit den Elektronen. Welcher der beiden Effekte überwiegt, hängt von der Energie und der Masse der Projektile sowie von der Masse der Targetatome ab. Bei Ionen mit hoher kinetischer Energie bzw. kleiner Kernladungszahl Z überwiegt die elektrische Wechselwirkung, auch „elektronic stopping“ genannt. Sie bestimmt die mittlere Eindringtiefe der Projektile. Bei kleineren kinetischen Energien bzw. großen Kernladungszahlen Z überwiegt die Rutherford Streuung (nuclear stopping) am Coulombpotential der Kerne [MayE70]. Diese Streuung bewirkt den Gitterschaden, denn ist die an das Kristallatom übertragene Energie größer als seine Versetzungsenergie, so verläßt das Kristallatom seinen Gitterplatz und kann daraufhin unter Umständen weitere Gitteratome verlagern, ebenso wie das eingeschossene Ion bei seiner weiteren Bewegung erneut Verlagerungsstöße ausführen kann, bis es zur Ruhe kommt und eine Defektkaskade entlang seiner Bahn hinterläßt. Das Implantationsprofil hängt also auch von der Versetzungsenergie der Kristallatome ab. Der Implantatiosprozeß ist schematisch in Bild 5.1 für ^{8}Li und ^{169}Yb in GaN für eine Implantationsenergie von 60 keV gezeigt. Bei geringen Dosen sind die stark geschädigten Gebiete räumlich voneinander getrennt. Bei hohen Dosen können die Defektkaskaden überlappen. Um die Implantationstiefe und die Breite des näherungsweise gaußförmigen Implantationsprofils [MayE70] der Ionen in einem Kristall zu berechnen, wird das Monte-Carlo-Simulationsprogramm TRIM98 (**TR**ansport of **I**ons in **M**atter) [ZieB85] verwendet.

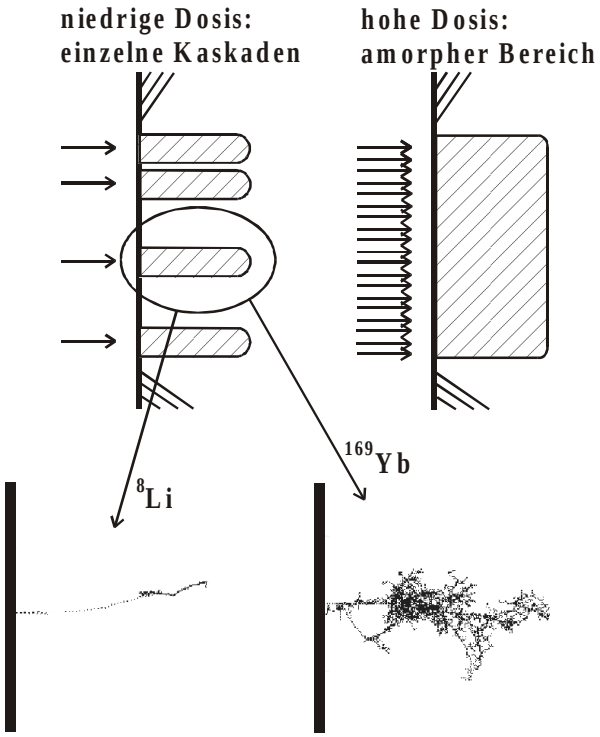

Bild 5.1: Eine schematische Darstellung des Implantationsschadens. Bei geringen Dosen sind die stark geschädigten Gebiete räumlich voneinander getrennt. Bei hohen Dosen überlappen die Defektkaskaden und es entsteht ein amorphes Gebiet.

Die Versetzungsenergie der Gitteratome entspricht ungefähr der vierfachen Bindungsenergie [Sig69] und beträgt in Halbleitern typischerweise 10 - 30 eV. Das bedeutet, daß eine Anhäufung von Leerstellen und Zwischengitteratomen (Frenkel-Defekte) sowie komplexer Gitterdefekte (Versetzungslinien, etc.) insbesondere in der direkten Umgebung des implantierten Ions gebildet werden, da das „nuclear stopping“, wie oben erwähnt, bei kleinen Energien dominiert.

5.1.2 Ionenimplantation in GaN und AlN am Isotopenseparator ISOLDE

Die Implantation der radioaktiven Sonden für die in dieser Arbeit beschriebenen Emissionschanneling-Untersuchungen wurden, mit Ausnahme von ^{111}In, alle am on-line Isotopenseparator ISOLDE [KugF92] durchgeführt. Das Indium wurde in Konstanz mit 100 keV in GaN und am II. Physikalischen Institut der Universität Göttingen mit 285 keV in AlN implantiert. Die verschiedenen an ISOLDE verfügbaren Isotope werden über Kernreaktionen von Protonen mit geeigneten Materialien erzeugt. Für die Produktion von ^{8}Li treffen die Protonen aus einem Proton-Synchrotron-Booster (PSB) mit 1 GeV Energie in einem gepulsten Strahl auf ein Target aus Tantal. In Abstreifreaktionen entsteht das ^{8}Li, das an einer heißen Wolframoberfläche chemisch-selektiv ionisiert wird. Die Massentrennung erfolgt durch einen Separationsmagneten nachdem die Ionen auf 60 keV beschleunigt worden sind. Anschließend wird der ^{8}Li-Ionenstrahl durch ein Strahlrohrsystem zur Meßkammer geführt und dort mit Hilfe einer Quadrupollinse auf die Probe fokussiert. Um an den Isotopen ^{167}Er und ^{169}Yb messen zu können, wurden die Mutterisotope ^{167}Yb ($t_{½}$ = 17,5 min) und ^{169}Lu ($t_{½}$ = 34,1 h) implantiert. Diese radioaktiven Isotope werden im besonderen Maße aus einem Target aus Tantal [BjoH86] erzeugt. Das Isotop ^{24}Na entsteht als Reaktionsprodukt bei einem Aluminiumoxid Target, und ^{89}Sr wurde bei einer Stahlzeit implantiert, in der ein Urancarbid Target zur Verfügung stand. Einen Überblick, welches Isotop in welches Material implantiert und ausgemessen wurde zeigt das vereinfachte Periodensystem in Bild 5.2.

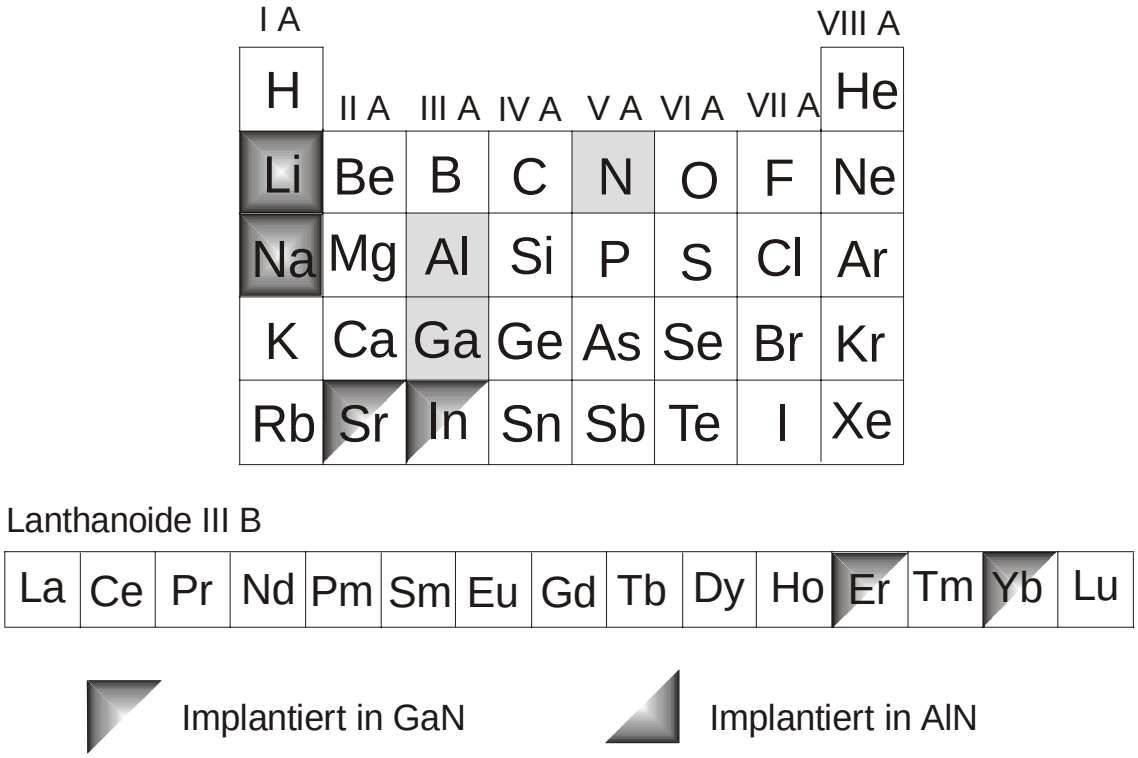

Bild 5.2: Schematisches Periodensystem als Übersicht der implantierten Fremdatome in GaN und AlN.

Die im rechten oberen Teil unterlegten Isotope wurden in GaN, die im unteren linken Teil unterlegten Isotope in AlN implantiert. Eine Zusammenstellung der mit TRIM98 berechneten Implantationstiefen und Tiefenverteilungen ist in Tab. 5.1 gegeben. Implantiert wurde in 1-2 µm dicke einkristalline GaN und AlN Schichten, die auf ein α(6H)- SiC(0001) Substrat bei 1273 K und 45 Torr im MOVPE Verfahren gewachsen wurden [DavW97]. Vor dem Aufbringen der GaN Schichten wurde eine 0,1 µm dicke AlN Pufferschicht gewachsen. Als Ausgangsmaterialien wurden Triethylaluminium

(TEA) und Triethylgallium in Verbindung mit 1,5 SLM NH_3-Gas und 3 SLM H_2-Gas verwendet. Die c-Achse der einkristallinen GaN und AlN Schichten steht senkrecht zur Probenoberfläche. Eine Probe war p-Typ GaN, dotiert mit $4{,}4\cdot10^{19}$ cm^{-3} Mg (Akzeptorkonzentration: $4{,}4\cdot10^{18}$ cm^{-3}). Die magnesiumhaltige 0,5 µm dicke Schicht wurde dabei auf eine undotierte 1 µm dicke GaN Schicht gewachsen und danach 30 s lang bei 800 °C aktiviert.

Ein großer Nachteil bei der Implantation von Fremdatomen ist der dabei entstehende Gitterschaden (Verlagerungsenergie der Gitteratome in GaN ist 18 eV [WilP84]), der in einem dem Implantationsprozeß folgendem Anlassen der Probe wieder ausgeheilt werden muß [TanW96]. Für viele Halbleiter gilt die Faustregel, daß die Anlaßtemperatur 70% der Schmelztemperatur betragen sollte. Der Schmelzpunkt von GaN liegt bei 2800 K [DroA96], der des AlN bei 2275K [Dav91]. Demnach müßte GaN bei ca. 1960 K und AlN bei ca. 1600 K getempert werden. Das große Problem ist die vor Erreichen dieser Temperatur beginnende Zersetzung von GaN im Vakuum ab ca. 1000 K durch Abdampfen des Stickstoffs an der Oberfläche [GroG74]. Die Stickstoffabdampfrate ist stark temperaturabhängig [KarP84]. Über 1300 K wird der Stickstoffverlust so stark, daß die verwendeten Proben nach 10 Minuten Anlassen im Vakuum bereits starken Schaden nehmen. Beim AlN treten diese Probleme nicht auf. Die EC-Methode wurde auch verwendet, um den Strahlenschaden nach einer Schwerionenimplantation mit geringen Dosen und dessen Auswirkungen auf unsere Messungen zu untersuchen [RonD97]. Bedingt durch den großen Anteil ionischer Bindung wird das makroskopische Gitter trotz der vielen enstehenden lokalen Gitterschäden des GaN und des AlN bei Dosen bis 10^{16} cm^{-2} nur so wenig gestört, daß der Gitterschaden mit unserer Meßmethode ebenso wie mit der des RBS-Channelings nicht beobachtbar ist [TanW96].

Probe	Sonde	E_{imp} [keV]	Dosis [cm^{-2}]	Tiefe (σ) [Å]
GaN	^{111}In	100	$3\cdot10^{13}$	264 (103)
GaN	^{89}Sr	60	$2\cdot10^{13}$	205 (85)
GaN	^{8}Li	60	$<2\cdot10^{13*)}$	2367 (874)
GaN	^{24}Na	30	$2\cdot10^{13}$	322 (160)
GaN	^{167}Yb	60	$2\cdot10^{13}$	157(54)
GaN	^{169}Lu	60	$2\cdot10^{13}$	155(53)
AlN	^{111}In	285	$3\cdot10^{13}$	895 (228)
AlN	^{8}Li	60	$<2\cdot10^{13*)}$	3129 (786)
AlN	^{24}Na	30	$2\cdot10^{13}$	422 (170)

*) 10^{12} je Spektrum

Tab. 5.1: Implantationstiefen, -breiten und -dosen für die verwendeten Isotope und Implantationsenergien, in GaN und AlN.

5.1.3 Meßapparatur für Channeling-Experimente

Je nach Isotop, das ausgemessen werden soll, werden sehr unterschiedliche Anforderungen an die Meßapparatur gestellt. In diesem Kapitel sollen die zwei verschiedenen verwendeten Meßkammern beschrieben werden. Ist die Halbwertszeit des Isotopes lang genug, so wurden die Proben nach der Implantation nach Konstanz transportiert und dort gemessen. Dies war bei den verwendeten Isotopen ^{167}Er, ^{169}Yb, und ^{111}In der Fall. Für diese EC-Messungen wurde eine UHV-taugliche Meßapparatur verwendet [Hof87]. Das wichtigste Element der Meßapparatur ist ein Dreiachs-Goniometer der Firma „Panmure Instruments“. Es ermöglicht ein Drehen der Probe um drei Achsen entsprechend den Euler’schen Winkeln. Der Antrieb erfolgt durch Schrittmotoren, die mit dem Personalcomputer gesteuert werden, wobei ein Schritt einer Drehung von 0,0025° entspricht. Die Reproduzierbarkeit einer Drehung liegt bei dem von uns verwendeten Steuerprogramm bei 0,02°. Die Kammer ist mit einem Vakuum-Pumpsystem, bestehend aus einer Drehschiebervorpumpe und einer Turbomolekularpumpe versehen. Die Messung erfolgt nun, indem die Probe in einen Probenhalter einbaut wird und dieser mithilfe des Goniometers entsprechend der kristallographischen Orientierung des Kristalls auf den Detektor ausgerichtet wird. Dieser ist in horizontaler Drehebene des Goniometers

auf einen Flanschdeckel montiert. Um die Elektronen des Er, Yb und In energieaufgelöst nachweisen zu können, wird ein Silizium - Oberflächen - Sperrschicht - Detektor mit einer 300 µm dicken Sperrschicht verwendet.

Die Detektoren haben eine aktive Fläche mit 5,6 mm Durchmesser. Durch die Verwendung von Teflonblenden kann der Durchmesser auf 2 mm oder 3 mm reduziert werden, um eine bessere Winkelauflösung zu erreichen. Der Abstand des Detektors zur Probe beträgt 390 mm. Aus der Geometrie ergeben sich bei einer typischen Größe des Implantationsflecks von 3 mm Winkelauflösungen von 0,45° bei einer Messung ohne Blende, 0,3° bei einer 3 mm Blende und 0,2° für die 2 mm Blende. Bei Isotopen mit mittlerer Lebensdauer, d. h. lang genug um offline messen zu können, aber zu kurz um die Proben nach Konstanz transportieren zu können, wurde eine Channelingkammer zu ISOLDE / CERN transportiert und die Proben dort nach der Implantation direkt in die Meßapparatur eingebaut. Hierfür gab es bereits eine kleinere transportable Channelingkammer mit einem Zweiachsgoniometer, die in [Res96] beschrieben worden ist.

Um einen höheren Temperaturbereich zu ermöglichen und um den Untergrund der EC-Messungen zu reduzieren, sowie eine exaktere Positionierung des Strahlflecks bei online-Experimenten zu ermöglichen, war der Bau einer neuen Channelingkammer nötig. Durch eine großzügigere Architektur konnte der Untergrund, der von Comptonelektronen herrührt, deutlich reduziert werden. Um die Proben in der Kammer bei höheren Temperaturen ausheilen zu können, wurde ein neuer Probenhalter aus Tantal konstruiert, in den eine Widerstands-Strahlungsheizung eingebaut war. Als Strahlungsquelle wurde die Wolframglühwendel einer 150 W Halogenlampe verwendet. Die Proben wurden in eine Gaphitscheibe eingebettet, und diese von der Wolframglühwendel beheizt. Mit dieser Heizung konnten Temperaturen bis 1000°C erreicht werden.

Um den Untergrund, der hauptsächlich von den Comptonelektronen der je Elektron emittierten zwei hochenergetischen γ-Quanten mit 2,75 MeV und 1,37 MeV herrührt, für die Messungen am ^{24}Na weiter zu minimieren, wurde eine Abschirmung aus sechs zentrischen Lochscheiben aus Teflon mit 5 mm Dicke und einem Abstand zueinander von 3 cm konstruiert. Die Elektronen wurden über den Energieverlust in dem oben beschriebenen Si-Sperrschichtdetektor nachgewiesen.

Aufgrund der kurzen Halbwertszeit des ^{8}Li (0,8 s) müssen die Messungen online durchgeführt werden. Der durch zwei Blenden kollimierte Ionenstrahl trifft mit einem Durchmesser des Strahlflecks von 0,7 mm auf die Probe. Ein dünner Stahlkegel mit einer dicken Bornitridummantelung wird zur weiteren Untergrundunterdrückung als zweite Blende verwendet. Er ist auf einem fahrbaren Schlitten direkt vor die Probe positionierbar. Die Probe wird in einem elektrisch und thermisch vom Dreiachsgoniometer isolierten Probenhalter montiert. Das Goniometer selbst ist auf einem höhenverstellbaren Kreuztisch montiert, wodurch die gesamte Anordnung in drei orthogonal zueinander stehenden Raumrichtungen exakt reproduzierbar auf Bruchteile eines Millimeters linear verschoben werden kann. Durch Drehen der Goniometerachsen mit Schrittmotoren können die Kristallachsen der einkristallinen Probe exakt in Richtung des Detektors gedreht werden. Zur Registrierung des Auftreffortes und der Energie der α-Teilchen wurden ortsempfindliche Si-Detektoren mit einer Fläche von 2 cm x 2 cm von der Firma SITEK verwendet. Für temperaturabhängige Messungen kann die Probe mit der oben beschriebenen Strahlungsheizung geheizt oder durch eine „closed cycle" Kühlmaschine über eine flexible Litze aus hochreinem Kupfer, die an den Probenhalter geschraubt wird, gekühlt werden. Bei online EC-Messungen ist die Probentemperatur bei Implantation und Messung gleich. Deshalb muß auch das Heizen der Probe gleichzeitig mit der Aufnahme der α-Emissionsspektren erfolgen. Zum Erreichen einer Probentemperatur von über 800 K ist es unvermeidlich, daß die Probe glüht. Dieses Glühen führt zu einem

extremen Anstieg des Leckstromes des lichtempfindlichen Si-Detektors und verschlechtert das Signal-Rausch Verhältnis bei der Detektion der α-Teilchen so stark, daß keine Ortsauflösung mehr möglich ist. Deshalb wird für Messungen über 800 K eine 2,5 µm dicke und mit 300 Å Aluminium bedampfte Mylarfolie in kleinstmöglichem Abstand (ca. 1 mm) vor dem Detektor angebracht. Dadurch können Meßtemperaturen von über 1000 K erreicht werden, ohne die Funktion des Detektors zu beeinträchtigen. Durch die Mylarfolie wird die Energie der α-Teilchen um ca. 0,62 MeV reduziert und die verwertbare α-Zählrate verringert sich ungefähr auf die Hälfte der Zählrate ohne Folie. Da EC-Messungen mit und ohne Mylarfolie jeweils bei Raumtemperatur und bei 700 K die gleichen

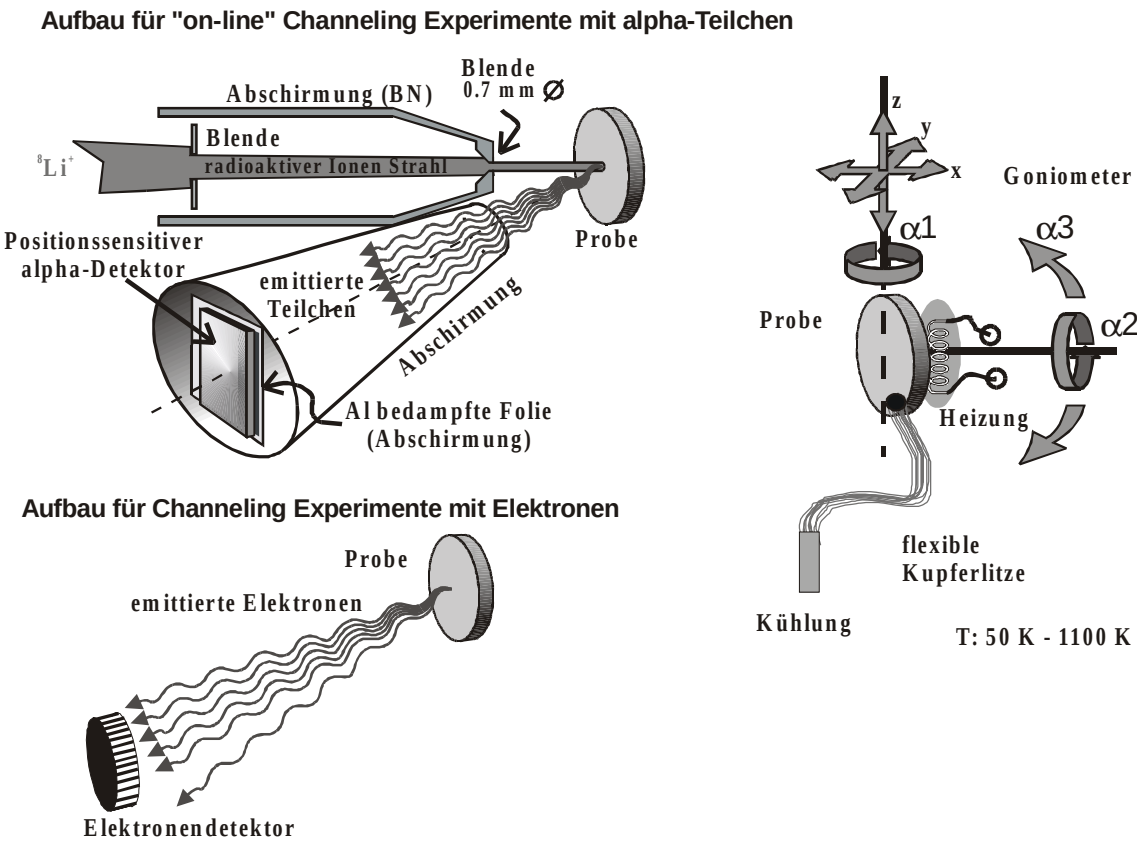

Bild 5.3: *Prinzip der Channelingapparatur für Channeling-Experimente mit α- und Elektronenemittern. Rechts die auf einem um alle drei Achsen drehbaren und in allen Raumrichtungen verschiebbaren Goniometer aufgebrachte Probe, links oben schematisch der Strahlengang und der Aufbau des Detektors für Channelingexperimente mit der Sonde ^{8}Li am Isotopenseparator ISOLDE, links unten der für das Elektronenchanneling.*

normierten Emissionsverteilungen ergaben, trägt die Folie nicht zu einer Verschlechterung der Winkelauflösung oder zu einer Erhöhung des Untergrundes bei [Res96]. In dieser Arbeit wurde beim α-Channeling nur in Temperaturbereichen gearbeitet, bei denen der Einsatz der Folie nicht nötig war. Die wesentlichen Bestandteile, die für die Channeling-Experimente verwendet werden, sind im Bild 5.3 dargestellt. Rechts ist der für α- , β^-- und Konversionselektronen-Channeling prinzipiell gleicher Aufbau des Goniometers und des Probenhalters gezeigt. Auf der linken Seite im oberen Bild ist der Aufbau des Strahlenganges und des Detektors für online α-Channeling gezeigt. Im unteren Bild ist der des offline-Elektronenchannelings zu sehen.

5.1.4 Datenerfassung und Datenverarbeitung

In diesem Kapitel soll nun auf die Datenerfassung der Channelingmessungen vom Detektor über die Elektronik bis hin zum Rechner eingegangen werden. Auch hier muß wieder zwischen Elektronenchanneling und α-Channeling unterschieden werden.

i) Channeling mit Elektronenemittern

Die Messung der Elektronen und deren Energie erfolgt durch einen Si-Sperrschichtdetektor. Die Dicke der Sperrschicht beträgt bei einer angelegten Spannung von 130 V ca. 300 µm [Neu66]. Nach Auftreffen der Elektronen auf die Oberfläche des Detektors werden sie beim weiteren Eindringen abgebremst, wobei Elektron-Loch-Paare gebildet werden, die dann über die Kontakte am Detektor nachgewiesen werden. Deren Gesamtzahl und damit das Signal, das über Vor- und Hauptverstärker verstärkt wird, ist proportional zur Energie der Elektronen. Dieses Signal wird nun in einem Vielkanalanalysator einem Kanal zugeordnet und in einem Rechner gespeichert. Für die Channelingmessungen werden dazu entsprechende Energiefenster ausgewählt. Da für Elektronen bislang nur Prototypen zweidimensionaler Detektoren existieren, [WahV97] und diese auch nur für niederenergetische Elektronen (unter 500 keV) geeignet sind, wird ein nulldimensionaler Detektor verwendet und für eine winkelaufgelöste Messung muß jeder einzelner Winkel zur Kristallachse sequentiell gemessen werden. Die Zählrate in dem Energiefenster und die gewünschten Zählereignisse legen zusammen mit der Zerfallskorrektur die Meßzeit für jeden Punkt fest. Durch Variation des Azimut- und des Polarwinkels wird ein Raster gemessen. Aus dem Raster wird der genaue Ort des Maximums, sowie die Lage der Ebeneneffekte, bestimmt. Nun ist es möglich, ein kleineres Raster oder mehrere Scans um die Lage des Maximums mit höherer Zählrate und kleinerer Schrittweite als im großen Raster aufzunehmen. Typischerweise wird ein großes Raster direkt nach der Implantation bei Raumtemperatur aufgenommen, danach werden kleinere Raster oder mehreren Einzelscans gemessen, um die Veränderung des Channelingeffektes mit der Anlaßtemperatur zu beobachten. Nach der Anlaßreihe wird nochmals ein großes Raster aufgenommen. Die nötige Größe des Rasters hängt vor allem von der Energie der Elektronen ab. Bei niederenergetischen Elektronen (einige 100 keV) sind größere Raster nötig, da die Effekte breiter sind, bei hochenergetischen Elektronen (MeV) genügen wegen der schmäleren Effekte kleinere Raster. Dafür wird eine bessere Winkelauflösung benötigt.

Als Ergebnis werden Spektren gemessen, die eine Intensitätsverteilung der emittierten Elektronen bezüglich der gewählten Kristallachse in Abhängigkeit des Winkels zeigen. Nach der Untergrundkorrektur (der Untergrund lag bei unseren Messungen mit β^--Elektronen bei etwa 25%, bei den Messungen mit Konversionselektronen bei 8 - 12%) werden die Spektren noch auf den „Randomwert“, das heißt die Zählrate außerhalb eines Channeling oder Blockingeffektes, normiert, bevor die gemessenen Spektren mit denen verglichen werden können, die mit dem Manybeam-Formalismus simuliert worden sind (Kap. 6).

ii) Channeling mit α-Emittern

Im letzten Kapitel wurde bereits erwähnt, daß die beim ^{8}Li-Zerfall von der Probe ausgesandten α-Teilchen in einem hochohmigen Si-Sperrschichtdetektor orts- und energieaufgelöst detektiert werden. Die Dicke der Sperrschicht beträgt ca. 300 µm. Nach Auftreffen der α-Teilchen am Ort (x, y) auf die Oberfläche des Detektors werden sie beim weiteren Eindringen abgebremst, wobei Elektron-Loch-Paare gebildet werden. Deren Gesamtzahl ist proportional zur Energie des α-Teilchens. Entsprechend ihrer Ladung driften sie aufgrund der angelegten Spannung zur Vorder- bzw. Rückseite

des Detektors. Beide Seiten bestehen aus einer niederohmigen dünnen Schicht. An zwei gegenüberliegenden Kanten einer jeden Seite sind Elektroden angebracht. Die Ladungen an den Oberflächen werden zu beiden Elektroden hin abgesaugt, wobei zwischen den Elektroden eine Aufteilung in Teilladungsmengen stattfindet, die umgekehrt proportional zur Länge der Widerstandsschicht zwischen Ort (x, y) und den Elektroden ist. Somit sind die Teilladungsmengen direkt proportional zu den Größen E·x/l, E·(l-y)/l, E·y/l, wobei l die Kantenlänge des Detektors ist.

Das Energie-Signal E wird durch die Addition der zwei Teilladungsmengen E·(l-y)/l, E·y/l von einer Seite des Detektors erhalten. Ein unerwünschter Untergrund in E wird durch einen Einkanaldiskriminator (**S**ingle **C**hannel **A**nalyzer, SCA) ausgeblendet, der durch Steuerung von drei Koinzidenzstufen (linear gates) die mit E verbundene ebenfalls unerwünschte Ortsinformation herausfiltert. Zwei analoge Dividiereinheiten (**A**nalog **D**ivider, AD) teilen die E·x/l- und E·(l-y)/l- durch die E-Signale. Die x/l- und y/l-Pulse werden mittels Analog-Digital-Wandlern (**A**nalog **D**igital **C**onverter, ADC) digitalisiert und als letzter Schritt in Form einer 128×128 Histogramm-Matrix gespeichert.

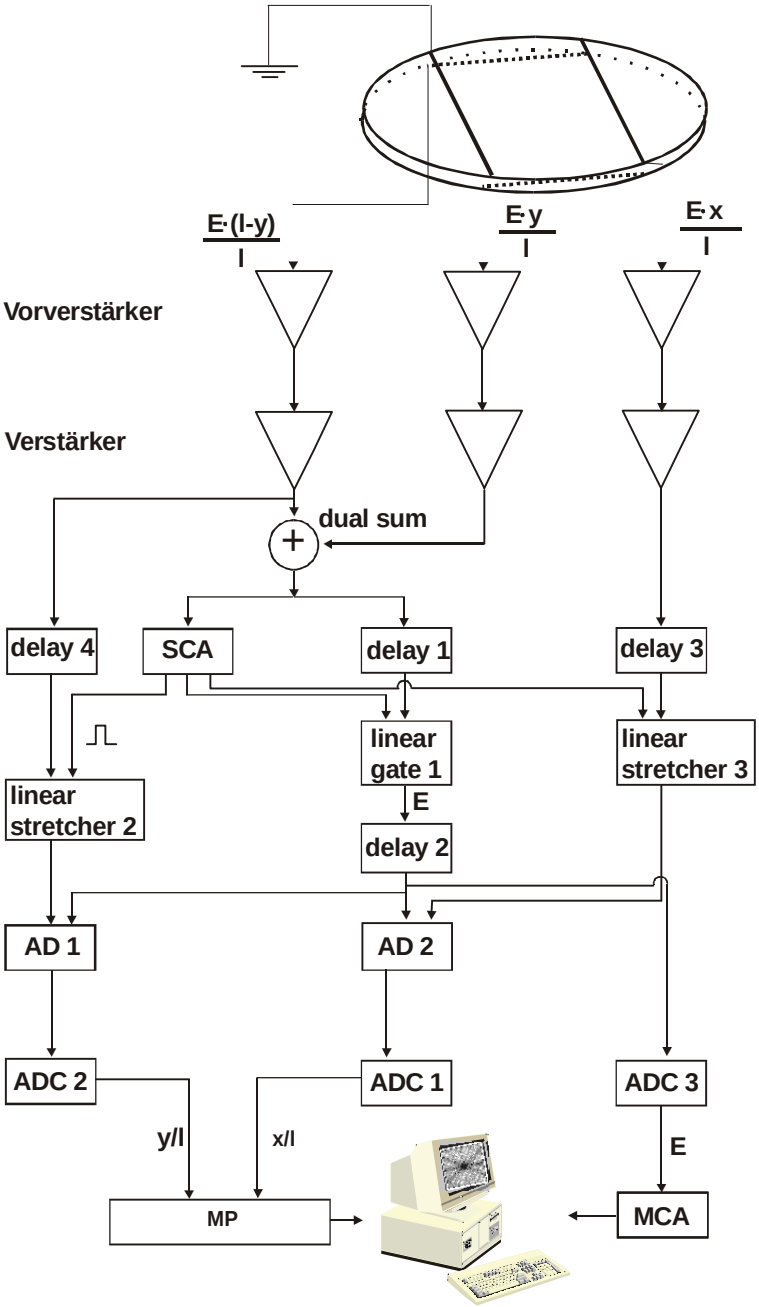

Bild 5.4: Übersicht über die Funktionsweise des positionssensitiven α-Detektors und der Meßelektronik zur Erfassung der α-Emissionschannelingspektren aus dem Zerfall des ^{8}Li.

Die gemessenen α-Emissionsverteilungen müssen danach noch weiter bearbeitet werden. Aufgrund möglicher Inhomogenitäten im Datenerfassungssystem (Ansprechwahrscheinlichkeit des Detektors) können Unregelmäßigkeiten bei der Zählratenverteilung in den α-Emissionsverteilungen entstehen. Diese werden durch die Division durch ein Korrekturspektrum ausgeglichen, das durch Aufnahme einer α-Emissionsverteilung bei einer Bestrahlung einer polykristallinen Probe (z. B. des Probenhalters) mit ^{8}Li-Ionen ermittelt wird. Weiterhin werden die Emissionsverteilungen auf Random normiert, d. h. auf die Zählrate in einer Region, in der sich keine planaren Channeling- oder Blocking-Effekte befinden. Obwohl ein Untergrund von β^{-}-Strahlung durch den Diskriminator bestmöglichst unterdrückt wird, ist dennoch

eine Untergrundzählrate von ca. 2% vorhanden, die durch eine entsprechende Untergrundkorrektur der Spektren berücksichtigt wird.

Der beschriebene Versuchsaufbau erlaubt Datenaufnahmeraten bis zu 10 kHz und somit eine Meßdauer von wenigen Minuten bei einer ^{8}Li-Dosis von $5 \cdot 10^{11}$ cm^{-2} pro zweidimensionalem Spektrum. Leider wird die Meßdauer selten durch die Elektronik als vielmehr durch den erhältlichen Fluß der α-Teilchen an ISOLDE begrenzt. Meistens wird mit Zählraten um 2 kHz gemessen, die Meßzeiten von 20 - 30 min erfordern.

Ein wesentliches Charakteristikum bei der Interpretation von EC-Messungen ist die experimentelle Winkelauflösung. Die Winkelauflösung ist bei festem Abstand vom Detektor zur Probe hauptsächlich durch zwei Faktoren festgelegt: durch die Ortsauflösung des verwendeten Detektors und den Durchmesser des implantierten Bereiches. Die relative Ortsauflösung ist zunächst durch die relative Energieauflösung des Detektors gegeben und wird meist durch eine zweidimensionale Gauß-Funktion mit Standardabweichungen ($\sigma_{x,Det}$, $\sigma_{y,Det}$) beschrieben. Der Strahlfleck ist in unserem Fall kreisförmig mit einem Durchmesser von d = 0,7 mm, d. h. seine Standardabweichung ist:

$$\sigma_{x,Strahl} = \sigma_{y,Strahl} = \frac{1}{2\sqrt{3}}\, d = 0{,}289\, d = 0{,}2\text{mm} \tag{5.1}$$

Die Standardabweichungen einer Gauß'schen und einer rechteckigen Verteilung addieren sich näherungsweise quadratisch [Die73]:

$$\sigma_{total} \approx \sqrt{\sigma_{Strahl}^2 + \sigma_{Det}^2}\,, \tag{5.2}$$

so daß es keinen Sinn macht, einen Strahlfleck zu verwenden, der wesentlich kleiner als die Ortsauflösung des Detektors ist oder umgekehrt. Die Ortsauflösung und Linearität des verwendeten Detektors wurden mittels Masken aus Cu mit 5×5 Löchern mit einem Duchmesser von je 1 mm, die direkt vor dem Detektor positioniert wurden, für die α-Strahlung des ^{8}Li direkt bestimmt. Es ergaben sich Standardabweichungen von ca. 0,3 mm für das kontinuierliche Spektrum des ^{8}Li. Die Winkelauflösung der Messungen war 0,12° und der abgebildete Winkelausschnitt ± 2,5°. Eine detailliertere Beschreibung der Datenerfassung beim α-Channeling und der Winkelauflösung findet sich in [Wah97].

5.2 Übersicht über die verwendeten Isotope

5.2.1 ^{8}Li

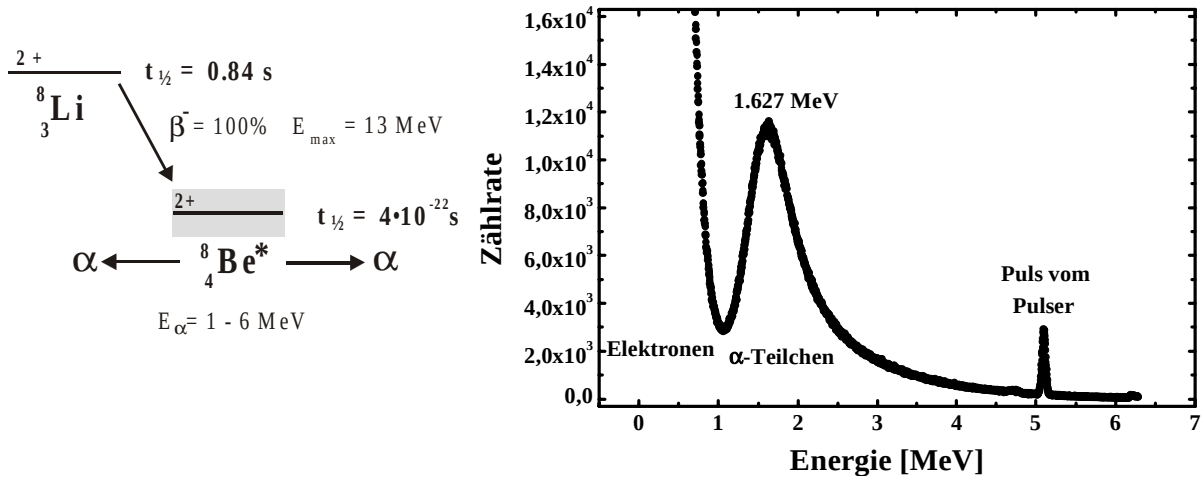

Bild 5.5: Zerfallsschema und Energiespektrum aus dem Zerfall von ^{8}Li gemessen mit dem ortsempfindlichen Detektor. Der Peak des Pulsers ist zuvor auf den Energiewert einer ^{208}Po Kalibrierquelle eingestellt worden.

Das Isotop ^{8}Li entsteht durch eine Abstreifreaktion, die durch die 1 GeV Protonen in einem Tantal-Target ausgelöst wird. Das Lithium wird dann mit einer Energie von 60 keV in GaN und AlN implantiert. Der ^{8}Li-Kern zerfällt über β^--Emission ($t_{1/2}$ = 838 ms) in einen angeregten Zustand des ^{8}Be, der wiederum innerhalb $t_{1/2} = 4\cdot10^{-22}$ s in zwei α-Teilchen zerfällt, deren Energien kontinuierlich um ca. 1,6 MeV verteilt sind [Ajz84]. In Bild 5.5 ist das mit dem ortsempfindlichen Detektor gemessene Energiespektrum, sowie das Zerfallsschema von ^{8}Li abgebildet. Der angeregte ^{8}Be-Kern erhält aus dem hochenergetischen β^--Zerfall eine Rückstoßenergie von bis zu 12 keV. Wegen seiner sehr kurzen Lebensdauer beträgt die Strecke, die der Kern in dieser Zeit zurücklegt, weniger als 10^{-15} m. Somit stimmt der Ort des α-Zerfalls, der aus der EC-Messung bestimmt wird, mit dem Gitterplatz des ^{8}Li überein [LinW89].

Im Bild 5.5 ist ein experimentell aufgenommenes Energiespektrum dargestellt. Die Energiekalibrierung wurde durch Zuordnen der Position des breiten Maximums in der α-Energieverteilung zu einem Energiewert von 1,627 MeV durchgeführt. Bei Aufnahme der Energiespektren war ein Pulser eingeschaltet, der an den Testeingang des Vorverstärkers angeschlossen war. Dessen Pulshöhen wurden exakt auf eine Höhe entsprechend einer Energie von 5,11 MeV eingestellt, wobei die Lage der Energie aus einer vorangegangenen Aufnahme eines Spektrums mit einer ^{208}Po-Eichquelle bekannt ist. Die beschriebene Vorgehensweise der Energiekalibrierung ist in [Wah97] dargestellt. In dem Energiebereich bei 1 - 2 MeV ergibt sich lediglich ein systematischer Fehler in der Größenordnung von 100 keV. Unterhalb von etwa 1 MeV zeigt sich im gemessenen Energiespektrum eine sehr starke Untergrundzählrate, die von den hochenergetischen Elektronen aus dem β^--Zerfall des ^{8}Li stammt. Da diese Elektronen praktisch vollständig durch den Detektor gehen und deswegen auch nur einen Teil ihrer Energie durch die Bildung von Elektron-Lochpaaren abgeben, beträgt der β^--Untergrund im α-Spektrum oberhalb einer gesetzten Diskriminatorschwelle von 1,2 MeV nur etwa 2 %.

5.2.2 ^{24}Na

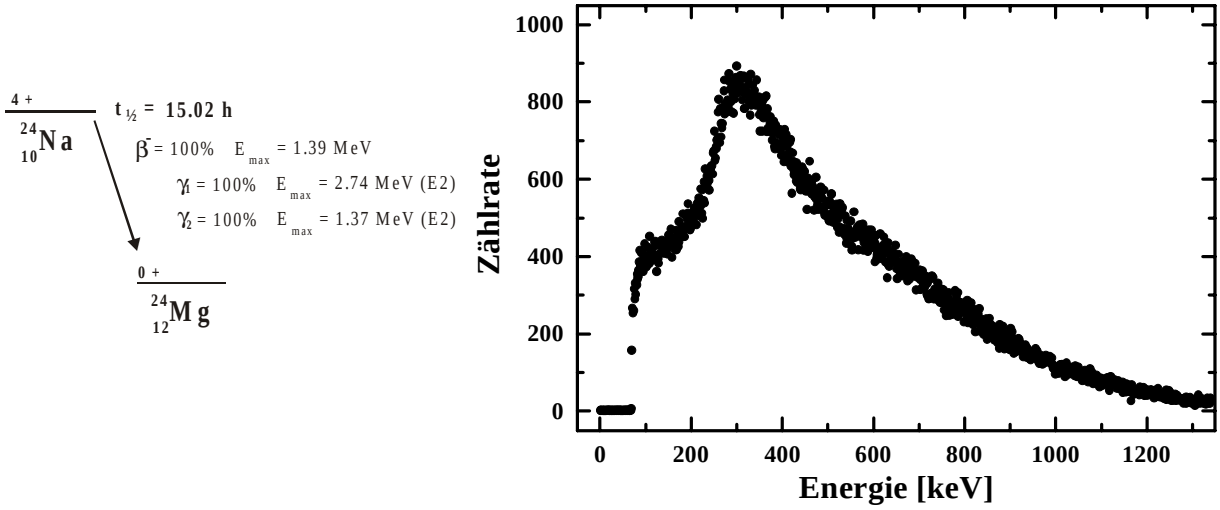

Bild 5.6: Zerfallsschema und Energiespektrum der β^--Elektronen aus dem Zerfall des ^{24}Na gemessen mit einem nulldimensionalen Si-Sperrschichtdetektor mit einer Sperrschichtdicke von 300 µm.

Das Isotop ^{24}Na entsteht als Reaktionsprodukt bei dem Auftreffen des Protonenstrahls auf ein Aluminiumoxid Target. Es zerfällt mit einer Halbwertszeit von 15,02 h durch einen β^--Zerfall (E_{max} = 1,39 MeV) in das Isotop ^{24}Mg. In Bild 5.6 ist das Zerfallsschema und das Energiespektrum der β^--Elektronen aus dem Zerfall des ^{24}Na dargestellt. Der Großteil der restlichen Energie des ^{24}Na ($Q_{\beta-}$ = 5,513 MeV) wird durch die Emission zweier γ-Quanten mit 2,74 MeV und 1,37 MeV abgegeben. Diese hochenergetischen γ-Quanten und die daraus resultierenden Comptonelektronen machen eine Abschirmung durch Teflonblenden, wie in Kap. 3 beschrieben, nötig. Das ^{24}Na wurde in einer Implantationskammer an ISOLDE mit einer Energie von 30 keV in GaN und AlN implantiert und die Probe nach der Implantation in die Meßapparatur am CERN eingebaut.

5.2.3 ^{89}Sr

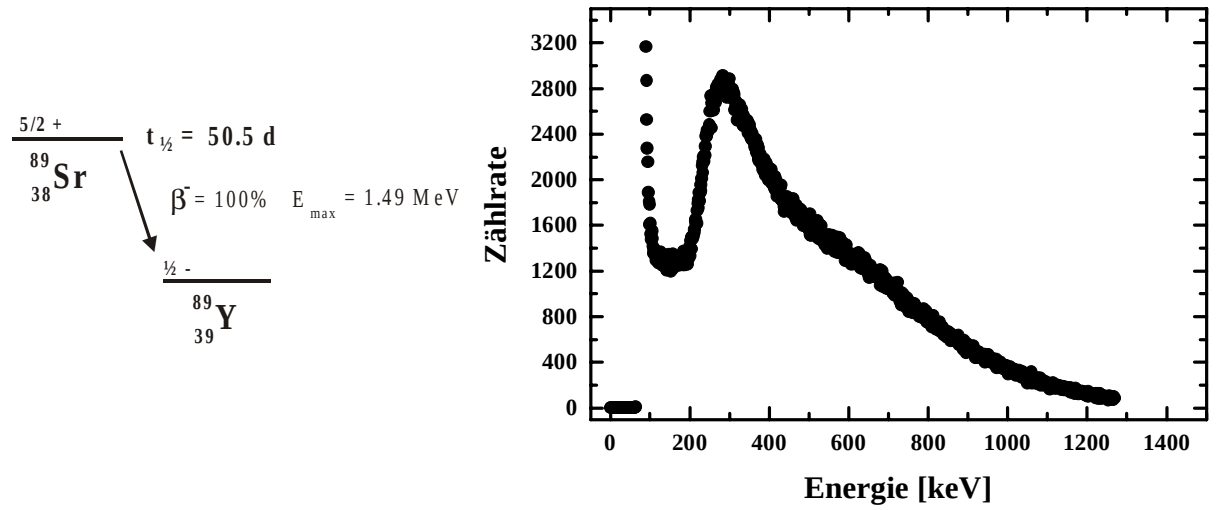

Bild 5.7: Zerfallsschema und Energiespektrum der β^--Elektronen aus dem Zerfall des ^{89}Sr gemessen mit einem nulldimensionalen Si-Sperrschichtdetektor mit einer Sperrschichtdicke von 300 µm.

Das Isotop ^{89}Sr entsteht als Spaltprodukt bei dem Aufteffen des Protonenstrahls auf ein Urancarbid Target. ^{89}Sr zerfällt mit einer Halbwertszeit von 50,5 d durch einen reinen β^--Zerfall ohne Emission weiterer γ-Quanten in das Isotop ^{89}Y. In Bild 5.7 sind das Zerfallsschema und das Energiespektrum der β^--Elektronen aus dem Zerfall des ^{89}Sr, gemessen mit einem nulldimensionalem Si-Sperrschichtdetektor mit einer Sperrschichtdicke von 300 µm, dargestellt. Das ^{89}Sr wurde in der Implantationskammer von ISOLDE mit einer Energie von 60 keV in GaN implantiert, danach nach Konstanz transportiert und dort ausgemessen. Vor der Messung mußte noch einen Monat gewartet werden, da außer ^{89}Sr auch ^{89}Zr implantiert wurde. Dieses zerfällt mit einer Halbwertszeit von 78,4 h über Elektroneneinfang (76,6%), sowie über β^+ -Zerfall (22,3%, E_{max} = 900 keV) in einen angeregten Zustand des ^{89}Y, der über einen γ-Zerfall (E = 909 keV) in den Grundzustand übergeht.

5.2.4 ^{111}In

^{111}In ist das einzige Isotop, das im Verlauf dieser Arbeit nicht an ISOLDE implantiert worden ist. Das radioaktive Indium ist gelöst als $InCl_3$ kommerziell erhältlich. Die Lösung kann in einem Schiffchen aus Stahl eingetrocknet und darin in einer Sideniusquelle ionisiert, danach beschleunigt, massensepariert und implantiert werden. Wie im Zerfallsschema in Bild 5.8 gezeigt, zerfällt das ^{111}In mit einer Halbwertszeit von 2,83 d über einen Elektroneneinfang in einen angeregten Zustand des ^{111}Cd ($t_{½}$ = 12 ns). Dieses geht über eine $\gamma\gamma$-Kaskade mit $E_{\gamma 1}$ = 171 keV und $E_{\gamma 2}$ = 245 keV über einen Zwischenzustand ($t_{½}$ = 85 ns) in den Grundzustand über. Ein Teil der Übergänge findet über die Emission von Konversionselektronen statt, die dann die jeweilige γ-Energie abzüglich der Bindungsenergie der Elektronen besitzen. Die Bindungsenergien sind z. B. in [FelM86] tabelliert. Das Indium wurde am Schwerionenimplantator in Konstanz mit 100 keV in GaN implantiert, um Channelingmessungen an den Konversionselektronen, aber auch um PAC-Messungen (**P**erturbed **A**ngular **C**orrelation) an der $\gamma\gamma$-Kaskade durchzuführen. In Göttingen am II. Physikalischen Institut wurde das Indium mit 285 keV in AlN implantiert. In Bild 5.9 ist das Energiespektrum der Konversionselektronen des Indiumzerfalls, gemessen mit einem

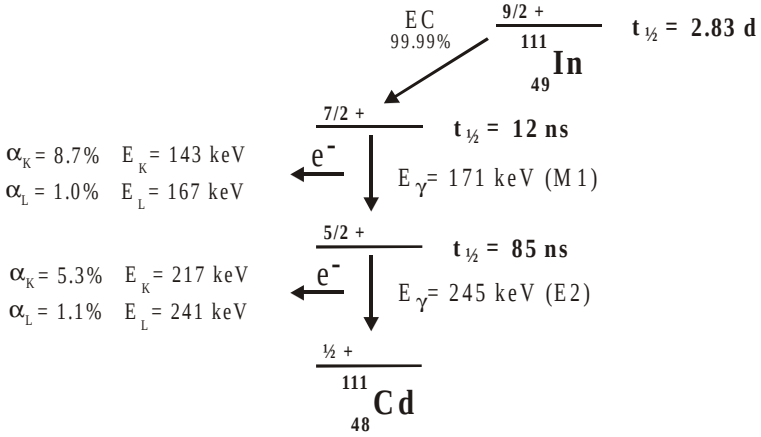

Bild 5.8: Zerfallsschema des ^{111}In.

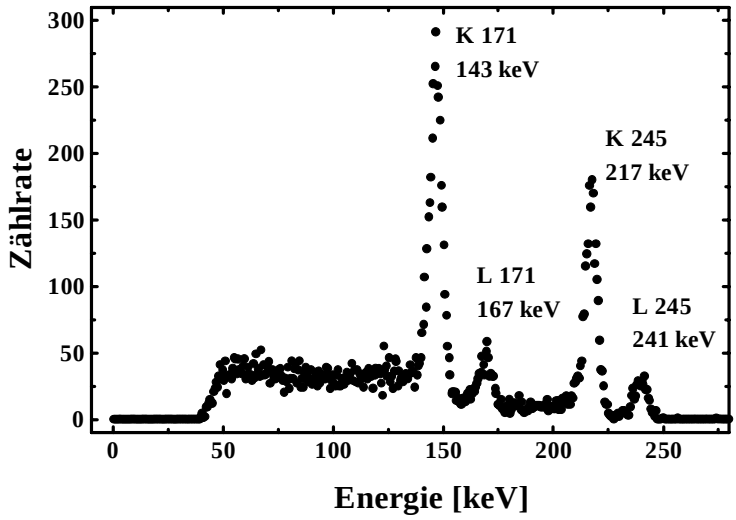

Bild 5.9: Energiespektrum der Konversionselektronen aus dem Zerfall des ^{111}In gemessen mit einem nulldimensionalen Si-Sperrschichtdetektor mit einer Sperrschichtdicke von 300 µm.

nulldimensionalen Si-Sperrschichtdetektor mit einer Sperrschichtdicke von 300 µm, dargestellt. Die EC-Messungen wurden sowohl an den K-Konversionselektronen mit 143 keV und 217 keV sowie an den wegen der geringeren Bindungsenergien relativ zu den K-Konversionselektronen höherenergetischeren, aber weniger häufigen L-Konversionselektronen mit 167 keV und 241 keV durchgeführt.

5.2.5 ^{167}Er und ^{169}Yb

Radioaktive seltene Erden entstehen wie das ^{8}Li in erhöhtem Maße bei der Reaktion des Protonenstrahls mit einem Target aus Tantal. Um die Isotope ^{167}Er und ^{169}Yb zu erhalten, müssen Mutterisotope der gleichen Masse implantiert werden. Im Falle des ^{167}Er wird, wie im Zerfallsschema in Bild 5.10 gezeigt, ^{167}Yb implantiert. Dieses zerfällt mit einer Halbwertszeit von 17,5 Minuten durch Elektroneneinfang in mehrere angeregte Zustände des ^{167}Tm. Das ^{167}Tm zerfällt nun innerhalb $t_{½}$ = 9,25 Tagen ebenfalls durch Elektroneneinfang in angeregte Zustände des ^{167}Er, und zwar zu 23% in den 3/2-Zustand und von dort aus durch einen γ-Zerfall mit E = 57 keV oder durch L-Konversionselektronen (E = 48 keV) in den 1/2-Zustand und zu 75% direkt in den 1/2-Zustand. Dieser Zustand geht durch die Emission von γ-Quanten mit E = 208 keV oder durch Emission von K- (E = 155 keV) oder von L-Konversionselektronen (E = 198 keV) in den Grundzustand über. Gemessen wurde an den Konversionselektronen des letzten Überganges, also an ^{167}Er. In Bild 5.11 ist das Energiespektrum der Konversionselektronen des ^{167}Er, aufgenommen mit einem Si-Sperrschichtdetektor mit einer Sperrschichtdicke von 300 µm, und die Linien der K- und L-Elektronen bei 155 keV bzw. 198 keV, dargestellt. An den Elektronen in diesem Energiebereich wurden die EC-Messungen durchgeführt. Die L-Konversionselektronen der 57 keV γ-Übergänge liegen in einem zu niedrigen Energiebereich.

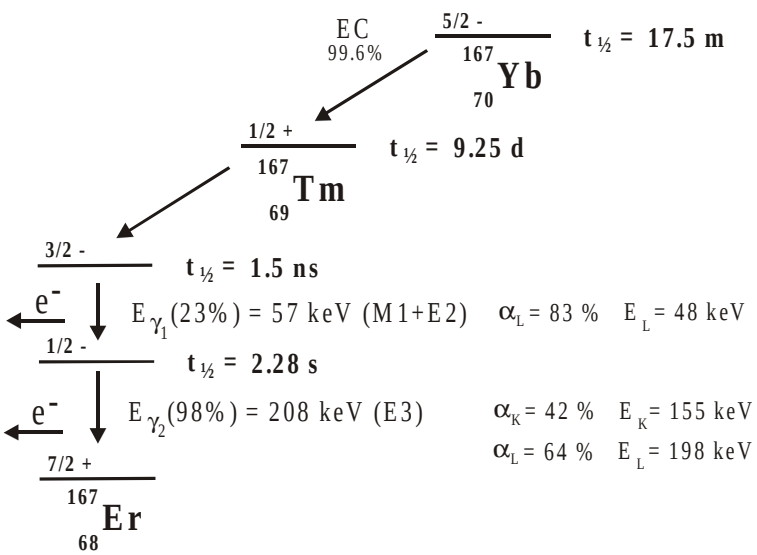

Bild 5.10: Zerfallsschema des ^{167}Yb.

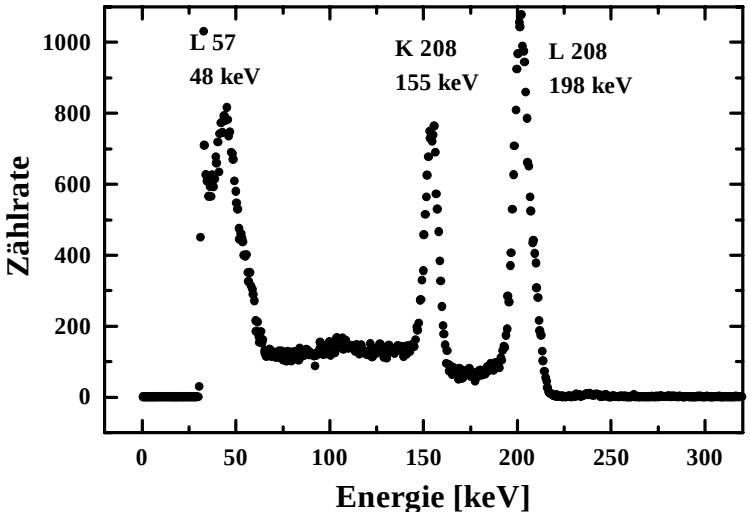

Bild 5.11: Energiespektrum der Konversionselektronen aus dem Zerfall des ^{167}Er gemessen mit einem nulldimensionalen Sperrschichtdetektor mit einer Sperrschichtdicke von 300 µm.

Um noch ein weiters seltenes Erd mit längerer Halbwertszeit zu bekommen, wurde ^{169}Lu in GaN implantiert. Dieses ist wieder nur das Mutterisotop und zerfällt durch Elektroneneinfang $t_{½}$ = 34,1 h ziemlich gleichmäßig verteilt in 14 verschiedene angeregte Zustände des ^{169}Yb. Dadurch entstehen γ-Strahlen mit Energien zwischen 100 und 600 keV. Diese müssen erst abgewartet werden. Die Proben müssen also nach der Implantation erst 14 Tage lang abklingen. Das ^{169}Yb zerfällt nun seinerseits mit $t_{½}$ = 32 Tagen über Elektroneneinfang in verschiedene angeregte Zustände des ^{169}Tm. Daraus resultieren einige zum Teil hochkonvertierende γ-Übergänge. Die wichtigsten Übergangsenergien und die resultierenden Anteile und Energien der Konversionselektronen sind in Bild 5.12 dargestellt. In Bild 5.13 ist das mit einem nulldimensionalen Sperrschichtdetektor mit einer Sperrschichtdicke von 300 µm gemessene Energiespektrum der Konversionselektronen des Zerfalls des ^{169}Yb abgebildet. Es sei darauf hingewiesen, daß die Konversionselektronen eigentlich von dem Isotop ^{169}Tm stammen, also im Prinzip auch an diesem Isotop gemessen wird. Die Rückstoßenergie, die von den Elektronen oder Photonen an den Kern übertragen wird (1,8 eV), reicht aber nicht aus, um den Gitterplatz des Kerns zu verändern. Außerdem sind sich die seltenen Erden elektronisch sehr ähnlich, da die Unterschiede in der elektronischen Struktur nicht in der äußersten Schale liegen. Da der Untergrund unter den Linien der 49 keV und der 69 keV Elektronen zu groß war, wurden für die Messung nur die Elektronen mit einer Energie über 95 keV verwendet.

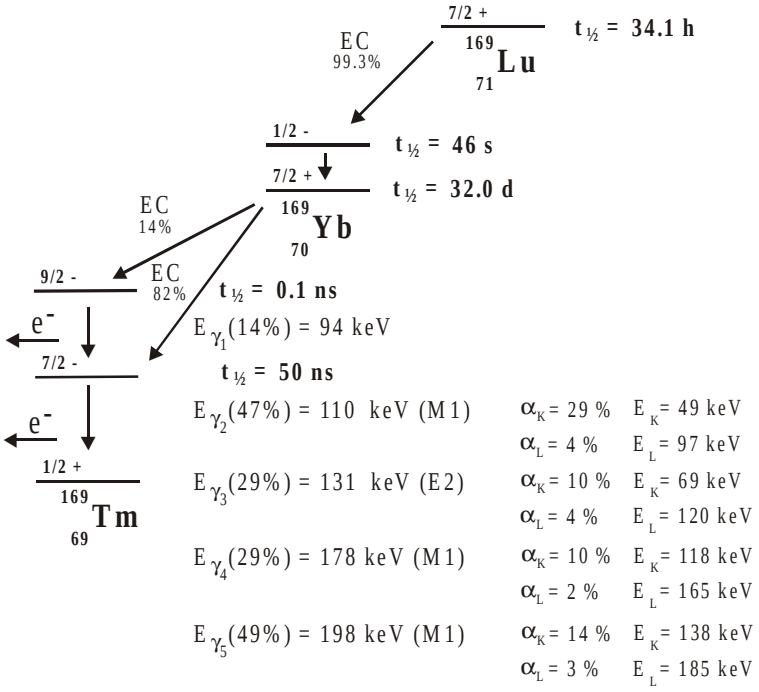

Bild 5.12: Zerfallsschema des ^{169}Lu.

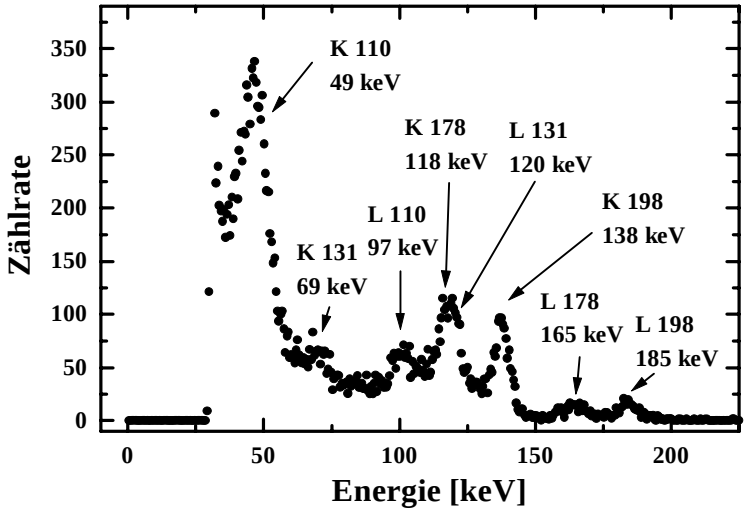

Bild 5.13: Energiespektrum der Konversionselektronen aus dem Zerfall des ^{169}Yb gemessen mit einem nulldimensionalen Sperrschichtdetektor mit einer Sperrschichtdicke von 300 µm.

6. Quantitative Gitterplatzbestimmung

6.1 Theoretisches Modell für die Gitterführung von Alpha-Teilchen

Obwohl in der vorliegenden Arbeit die Channelingeffekte der α-Teilchen nicht simuliert wurden, möchte ich trotzdem kurz auf die theoretische Beschreibung der Gitterführung der α-Teilchen eingehen. Die Wechselwirkungen zwischen Ionen und dem Gitterpotential von Kristallen wurden durch das RBS-Channeling sowohl experimentell als auch theoretisch seit langem erforscht [ChuM78]. Die Anwendung der Erkenntnisse des RBS-Channelings auf die Meßmethode des Emissionschannelings zur Gitterplatzbestimmung von ^{222}Rn wurde bereits von Domeij [Dom66] praktiziert. Es hat sich gezeigt, daß die Streuung von Protonen und damit erst recht diejenige von schwereren Teilchen im Kristallgitter bis in den hohen MeV-Bereich durch die Gesetze der klassischen Mechanik beschrieben werden kann [Lin65]. Die Bewegung des Ions kann durch sukzessive Zweierstöße mit dem am nächsten gelegenen Kristallatom beschrieben werden (Binary Collision Model). Dabei werden als Wechselwirkungspotentiale meist abgeschirmte Coulombpotentiale verwendet. Die gängigen Potentiale, die sich in der Definition der Abschirmungen unterscheiden, sind in [Eck91] angegeben und dort ausführlich diskutiert. Eine weitere Beschreibungsmethode der Ionenbahnen macht sich zu Nutze, daß die Gitterführung von Ionen entlang von Atomreihen erfolgt. Diese Eigenschaft legt nahe, die einzelnen Potentiale der Atome entlang einer Reihe zu einem gemittelten Potential zusammenzufassen (Kontinuums-Modell). Beide Näherungen führen im Falle einer Bewegung des Ions in nahezu paralleler Richtung entlang einer Kristallachse zu dem gleichen Ergebnis. Ein weiteres einfaches Modell, das gute Übereinstimmungen mit den experimentellen Ergebnissen liefert und die Emission eines Teilchens von einem Platz in der Atomreihe betrachtet, ist das HWP- Modell (**H**alf-**W**ay-**P**lane) [Mor73]. Diese Näherung nimmt an, daß die Transversalenergie des α-Teilchens, jeweils in der Mitte zwischen zwei Atomen gemessen, konstant bleibt. In Bild 6.1 ist nun das HWP-Modell skizziert. Dabei ist r der Abstand des Emitters zur Kristallachse zum Zeitpunkt des Zerfalls. Dieser Abstand rührt von den thermischen Schwingungen des Emitters her. Außerdem können Auslenkungen aufgrund gerichteter Atombindungen entlang bestimmter Achsrichtungen zu diesem Abstand beitragen. Φ ist der Winkel zur Kristallachse, in dem das α-Teilchen emittiert wird und d ist der Abstand der Atome entlang der Achse. Die Transversalenergie des Emitters im HPW-Modell ist gegeben durch:

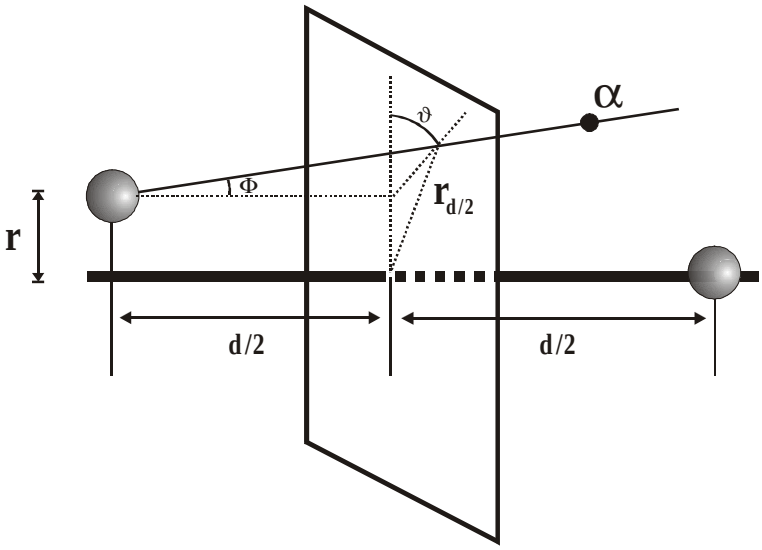

Bild 6.1: Darstellung der Emission eines α-Teilchens von einem Emitter aus einer Atomreihe nach dem Half-Way-Plane Modell nach [Mor73].

$$E_t = E \cdot \Phi^2 + U(r_{d/2}) \tag{6.1}$$

Dabei ist E die Energie des gittergeführten Ions und $U(r_{d/2})$ ein Kontinuumspotential. Üblicherweise wird für $U(r_{d/2})$ das Lindhard-Standardpotential (6.2) verwendet:

$$U_a(d/2) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{d} \ln\left[\left(\frac{ca}{r}\right)^2 + 1\right] \text{ mit } c \approx \sqrt{3},\ \ a = \text{Thomas-Fermi Radius } 0{,}1\text{-}0{,}2\ \text{Å} \qquad (6.2)$$

Es ergibt sich ein von dem Potential und von der Energie des Projektils abhängiger kritischer Winkel Φ_k, bis zu dem eine Gitterführung durch viele Kleinwinkelstreuungen möglich ist [FelM86]:

$$\Phi_k = \sqrt{\frac{U_{r_{min}}}{E}} \qquad (6.3)$$

Dabei ist r_{min} der Abstand zu der Atomreihe bei der eine Großwinkelstreuung einsetzt und E die Energie der Projektils. Die Transversalenergie der Projektile ist also durch die Lage des Emitters im Kristallpotential zum Zeitpunktes des Zerfalles und durch den Emissionswinkel bezüglich der Kristallachse gegeben. Die Transversalenergie ihrerseits bestimmt die möglichen Lagen der Projektile im Transversalpotential während der Propagation durch das Kristallgitter. Um so größer die Transversalenergie ist, um so kleiner wird der kleinstmögliche Abstand zu den Kristallachsen, bis dieser r_{min} erreicht und eine Großwinkelstreuung auftritt. Beim Austritt aus dem Kristallpotential ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Projektils im energetisch möglichen Rahmen im Potential für jede einzelne Transversalenergie gleichverteilt. Alle Projektile können im Potentialminimum aus dem Kristall austreten, die mit größerer Transversalenergie auch an Orten näher der Kristallachse. Die restliche Transversalenergie wird dem Projektil als kinetische Energie senkrecht zur Kristallachse mitgegeben und bestimmt den Emissionswinkel. Die Summe der Emissionswahrscheinlichkeiten für die jeweiligen Transversalenergien der Emitter gewichtet mit ihrer Wahrscheinlichkeit ergeben das Emissionsspektrum.

Um Channelingeffekte von Ionen im Krisall zu berechnen wurde von Smulders und Boerma das Monte-Carlo Programm FLUX [SmuB87] geschrieben. Bei der Simulation definiert das Programm für die Kristallstruktur eine dreidimensionale Elementarzelle, wobei eine Kante in die Hauptkristallachsenrichtung (z-Richtung) zeigt, entlang der sich die schnellen Teilchen bewegen. Die Oberfläche senkrecht zur z-Richtung der Elementarzelle definiert eine xy-Ebene. Als Hauptkristallachsenrichtungen sind in der derzeitigen Programmversion verschiedene Achsen in kubischen Gittern möglich. Die z-Richtung wird in eine Anzahl äquidistanter Intervalle entsprechend der Atomabstände in dieser Richtung unterteilt. Beim Ablauf des Programmes werden die Trajektorien der Teilchen entlang ihres Weges in z-Richtung verfolgt, wobei nach jedem Intervall in z-Richtung die Geschwindigkeit und der Ort des Teilchens neu berechnet wird an dem es die xy-Ebene durchstößt. Das Spezielle bei diesem Programm ist, daß sowohl mit dem BCM-Modell (innerhalb der Elementarzelle) als auch mit Atomreihen in der Kontinuumsnäherung (außerhalb der Elementarzelle) gearbeitet wird. Für das abgeschirmte Coulombpotential wird das Universalpotential in einer von Ziegler, Biersack und Littmark modifizierten Form verwendet [ZieB85].

$$V(r) = \frac{Z_1\, Z_2\, e^2}{r} \sum_{i=1}^{4} \alpha_i \exp\left(-\frac{\beta_i r}{a}\right) \qquad (6.4)$$

mit der Kernladung des Ions Z_1e, des Gitteratomes Z_2e und den Koeffizienten

$\alpha_i = \{0.1818, 0.5099, 0.2802, 0.02817\}$

$\beta_i = \{3.2, 0.9423, 0.4029, 0.2106\}$

und dem Abschirmradius: $a = 0.8853 \frac{a_0}{Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}}$ (6.5)

Das Programm FLUX berücksichtigt außerdem die verschiedenen Energieverluste der Projektile. Dazu gehören der Energieverlust durch die Wechselwirkung mit Gitteratomen, Valenzelektronen und Rumpfelektronen.

Die Ortsinformationen beim Durchdringen des Teilchens durch jede der xy-Ebenen in z-Richtung werden registriert, indem die xy-Ebenen in etwa 2500 Parzellen aufgeteilt sind und jede Parzelle einen Zähler besitzt, dessen Wert um einen bestimmten Betrag erhöht wird, wenn das Teilchen durch diese Parzelle gelaufen ist. Der Betrag wird entsprechend der Verteilung der Fremdatomkonzentration gewichtet und die Werte von allen Ebenen summiert. Die Summation erstreckt sich bis zu einer maximalen Tiefe, die ebenfalls aus der Tiefenverteilung der Fremdatome berechnet wird. Die Tiefenverteilung berechnet FLUX nicht selbst, sondern muß eingegeben werden. Sie kann z. B. durch Simulation mit TRIM98 [ZieB85] erhalten werden.

Bisher wurde beschrieben, wie die Bewegung von einem einzelnen Teilchen in den Kristall hinein im FLUX-Programm behandelt wird. Um nun eine Flußdichteverteilung zu erhalten, werden die Rechnungen für viele Teilchen wiederholt. Für eine ausreichende Genauigkeit haben sich 4000-8000 Teilchen bewährt. Die Flußdichteverteilung hängt von den Anfangswerten von Position, Geschwindigkeit und Geschwindigkeitsrichtung der Teilchen beim Auftreffen auf die erste xy-Ebene des Kristalles ab, die weitere Teilchenbahn ist dann eindeutig bestimmt. Ausgehend von einer Homogenität des Teilchenstrahles muß auch bei der Simulation eine Gleichverteilung der Positionen gewährleistet sein. Erreicht wird dies durch einen Auswahlprozess mit zufälligem Ergebnis, der dem Programm den Beinamen „Monte-Carlo“ gab. Die Position auf der ersten xy-Ebene wird also zufällig ausgewählt durch eine Relation zwischen der x- bzw. y-Variablen und einer Zufallszahl. Die Zufallszahl wird durch einen Zufallszahlengenerator erzeugt. Die Anfangsgeschwindigkeit der Teilchen ist bei einem Ionenstrahlexperiment durch die Beschleunigung der Teilchen in der experimentellen Anordnung, bei einem Emissionschanneling-Experiment durch die Zerfallsenergie vorgegeben. Die Geschwindigkeitsrichtung wird durch Vorgabe des Winkels zur Kristallachsenrichtung festgelegt, die Strahldivergenz durch entsprechende Standardabweichungen (σ_x, σ_y) berücksichtigt. Beim Emissionschanneling-Experiment sind (σ_x, σ_y) durch die Winkelauflösungen der Meßapparatur in x- und y-Richtung gegeben.

FLUX wurde zur Berechnung von Gitterführungseffekten in Festkörpern mit einem externen Ionenstrahl geschrieben. In solchen Experimenten bewegen sich die Teilchen von außen in den Kristall hinein. Bei einem Emissionschanneling-Experiment werden die Teilchen, die beim Zerfall entstehen, aus dem Kristall heraus geführt. Eine Übertragung von FLUX auf das Emissionschanneling ist möglich, wenn das Prinzip der Reversibilität gültig ist. Andersen und Mitarbeiter bestätigten experimentell die Äquivalenz von Ionen- und Emissionschanneling, solange Energieverluste durch irreversible Prozesse vernachlässigbar sind [AndU68]. Dies ist bei unseren experimentellen Gegebenheiten der Fall. Wie Emissionschanneling mit α-Teilchen mit Hilfe dieser Modelle und dem Monte-Carlo Programm Flux simuliert wird, ist z.B. in [Wah97] dokumentiert.

6.2 Theoretisches Modell und Simulation der Gitterführung von Elektronen

Die de Broglie Wellenlänge von Elektronen mit einer Energie von mehreren hundert keV liegt in der Größenordnung der Abstände der Atome im Kristall. Deshalb versagen klassische Modelle, wie sie beim Ionenchanneling Verwendung finden, und es wird eine quantenmechanische Beschreibung nötig. Zudem muß in einem geeigneten Modell auch berücksichtigt werden, daß es sich um relativistische Elektronen handelt. Ein anderes Kriterium dafür, daß eine quantenmechanische Betrachtung nötig wird, ist, daß nur wenige (typ. 1 - 5) gebundene Zustände im transversalen Potential vorhanden sind. In Bild 6.2 ist dargestellt, daß für 198 keV Elektronen (L-Konversionselektronen des ^{167}Er) im transversalen Kontinuumspotential für GaN entlang der c-Achse nur ein einziger gebundener Zustand existiert. Das Kontinuumspotential wird durch Mittelung von Atompotentialen erzeugt. Die Atompotentiale werden über atomare Streufaktoren dargestellt, die bis auf einen Vorfaktor äquivalent zur Fourietransformation des Potentials sind. Die Potentiale der meisten Atome wurden von Doyle und Turner mit der Hartree-Fock-Methode berechnet. Die Potentiale wurden dann als eine Summe von vier Gaußfunktionen in Parameterform dargestellt. Die Parameter können von Doyle und Turner [DoyT68] übernommen werden. Zusätzlich wurde das Potential zweidimensional genähert, indem die Atomreihen senkrecht zur Oberfläche als Kontinuum angesehen werden, da nur die Ausbreitung nahezu parallel zur Gitterachse betrachtet wird. Hier sind jedoch nicht die Fälle berücksichtigt, bei denen die Basis eines zweidimensionalen Gitters auch aus zwei identischen bzw. zwei unterschiedlichen Atomreihen besteht, oder bei denen die Atomreihe selbst sich aus einer oder zwei Atomsorten zusammensetzen kann. In diesen Fällen muß das Kontinuumspotential als Superposition zweier Potentiale berechnet werden.

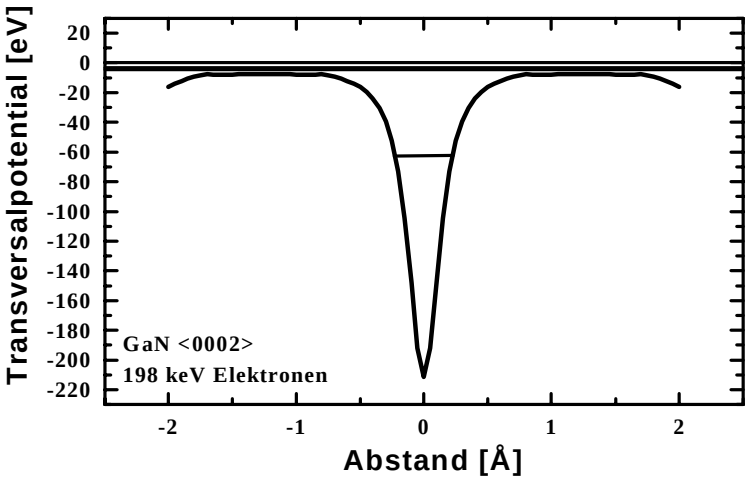

Bild 6.2: Axiales Kontinuumspotential, berechnet für GaN in <0002> Kristallachsenrichtung. Hier ein Schnitt entlang der $(01\bar{1}0)$*- Ebene. Eingezeichnet sind die energetischen Lagen der Elektronenzustände für eine Energie der Elektronen von 198 keV.*

Das axiale Kontinuumspotential nach Doyle-Turner hat die Form:

$$U(r) = -\frac{2e^2 a_0}{d} \sum_{i=1}^{4} \frac{a_i}{b_i/4\pi^2 + \rho^2} e^{-\frac{r^2}{b_i/4\pi^2 + \rho^2}} \tag{6.6}$$

mit:

a_0:	Bohr'scher Radius
d:	Mittlerer Abstand der Atome in der Reihe
a_i und b_i:	Doyle-Turner-Koeffizienten (i = 1 - 4)
ρ^2:	Mittlere quadratische thermische Auslenkung

Die Bewegung des Elektrons müßte eigentlich durch eine Kugelwelle beschrieben werden, die vom Emitter ausgeht. Diese wechselwirkt mit dem periodischen Potential der Gitteratome. Die resultierende Welle wird dann als Blochwelle beschrieben. In der quantenmechanischen Berechnung wird unter Vernachlässigung einer Wechselwirkung des Spins die Klein-Gordon-Gleichung für relativistische Elektronen gelöst. Daraus resultieren Energieeigenwerte und Eigenzustände der Blochwellenfunktionen [HofW94]. Die Blochwelle wandert durch den Kristall nach außen. Außerhalb des Kristalls werden die Elektronen als ebene Welle beschrieben, die zu dem longitudinalen Anteil nun auch eine transversale Komponente besitzt, wodurch sich ein Winkel Θ gegenüber der Kristallnormale bildet.

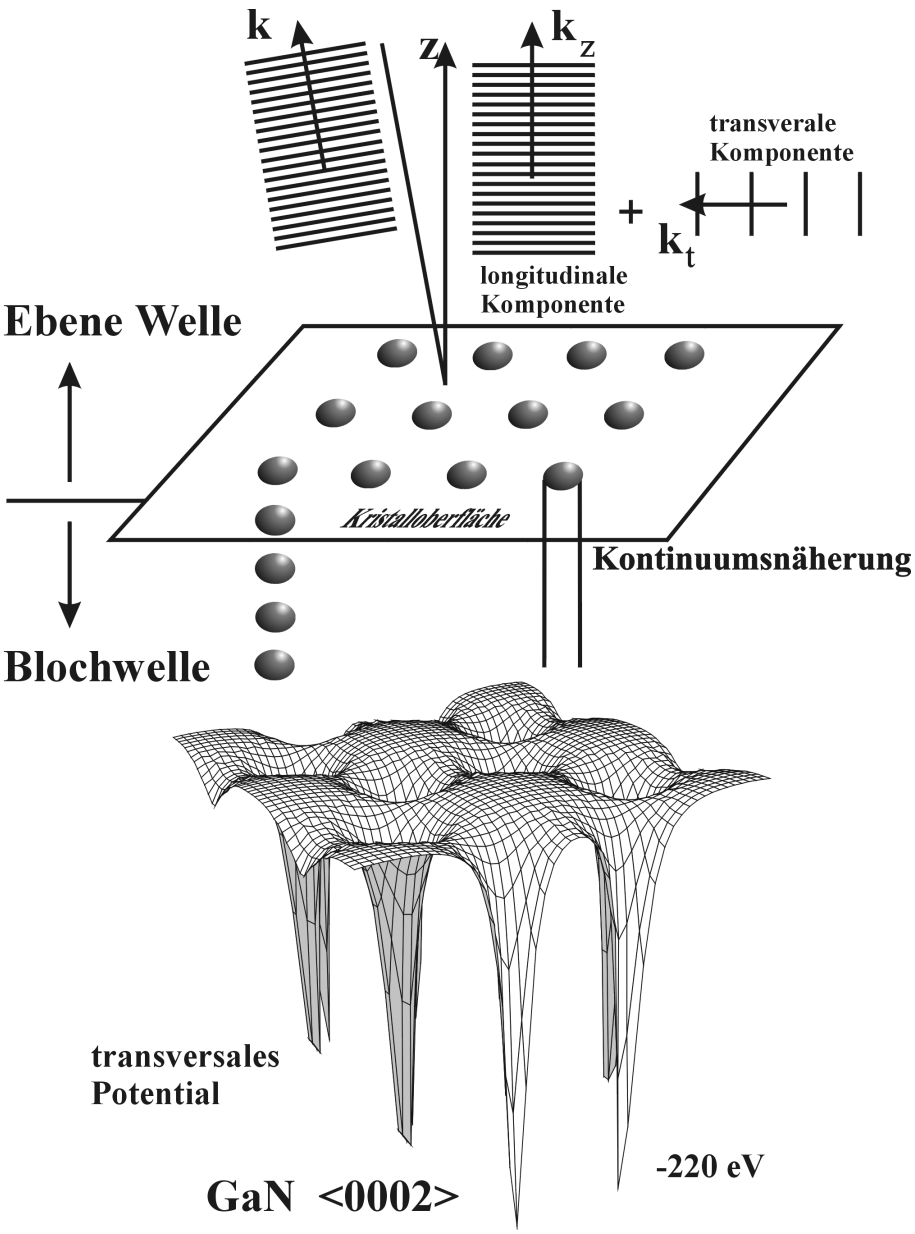

Bild 6.3: Schematisch dargestellt ist hier die Rechenmethode der Manybeam-Simulation. Die transversale Komponente der Elektronenbewegung wird außerhalb als ebene Welle und innerhalb des Kristalls als Blochwelle betrachtet.

Für die Simulation von EC-Spektren wird das sog. Lindhard'sche Reziprozitätstheorem [Lin65] angewendet. Es beruht auf der Umkehrbarkeit von Teilchenbahnen in konservativen Kraftfeldern. Bahnen, die geladene Teilchen in einem Kristall beschreiben, können auch in entgegengesetzter Richtung durchlaufen werden, solange der Energieverlust der Teilchen vernachlässigbar ist [HofL91]. In der Praxis bedeutet das, daß bezüglich der beobachteten Winkelabhängigkeit der Zählrate Experimente mit einem externen Elektronenstrahl äquivalent sind zu EC-Experimenten, bei denen sich die Elektronenemitter der geladenen Teilchen im Kristall selbst befinden, solange die Emitter nicht zu tief unter der Kristalloberfläche sitzen. Das Reziprozitätstheorem ist experimentell bestätigt [AndU68]. Der Vorteil der Anwendung des Reziprozitätstheorems bei der Rechnung ist, daß mit einem einzigen Rechenvorgang die Elektronenflußdichte in Abhängigkeit der Tiefe und des Abstandes des Emitters zu den Atomreihen für einen bestimmten Emissionswinkel berechnet wird. Würden die Elektronen als emittierte Teilchen betrachtet, so müßte für jede Emitterposition eine eigene Rechnung durchgeführt werden. Die Rechenmethode ist schematisch in Bild 6.3 gezeigt.

Prozesse, die eine Verringerung der Anzahl der gittergeführten Elektronen im Kristallgitter bewirken, werden Dechanneling genannt. Klassisch betrachtet sind das Prozesse mit kleinem Stoßparameter. Quantenmechanisch bedeutet Dechanneling die Entvölkerung der gebundenen Zustände der Wellenfunktion durch Übergänge zwischen diesen Zuständen und dem Kontinuum. Dechanneling führt zu einer exponentiellen Abnahme der Elektronenflußdichte mit der freien Weglänge der Elektronen. Im Gegensatz zum Ionenchanneling tritt beim Elektronenchanneling selbst im perfekten Kristall Dechanneling auf. Drei Prozesse sind daran beteiligt: Die Streuung an Phononen, d.h. die thermisch inkohärente Streuung, die Streuung an den Elektronen des Kristalls, d.h. Plasmonenanregung und die Streuung an strukturellen Defekten [AndB82].

Um quantitative Aussagen über die Verteilung der Emitter auf verschiedene Gitterplätze treffen zu können, muß der Channelingeffekt möglichst genau mit dem Manybeam-Formalismus simuliert, und dann mit den experimentellen Messungen verglichen werden. Zuerst werden die Potentiale und die Wellenfunktionen als Fourierreihe entwickelt. Jeder Fourierkomponente entspricht in der Nomenklatur der Elektronenbeugung ein gebeugter Strahl (beam). Eine Rechnung mit N Komponenten wird demzufolge als N-beam Rechnung bezeichnet. Die Lösung reduziert sich somit auf das Eigenwertproblem einer N x N-Matrix. Für die in dieser Arbeit durchgeführten Rechnungen bis zu Emissionswinkeln bezüglich der c-Achse von ± 2° genügten 11 x 11 Fourierkomponenten. Für die Simulation der Effekte über ± 2° hinaus wurde die Rechnung auf 21 x 21 Fourierkomponenten erweitert. Es wird ein Raster von Emissionswinkeln simuliert, indem der Azimut- und der Polarwinkel variiert und die Rechnung für jeden Winkel durchgeführt wird. Das Ergebnis enthält die resultierende Elektronenflußdichte in

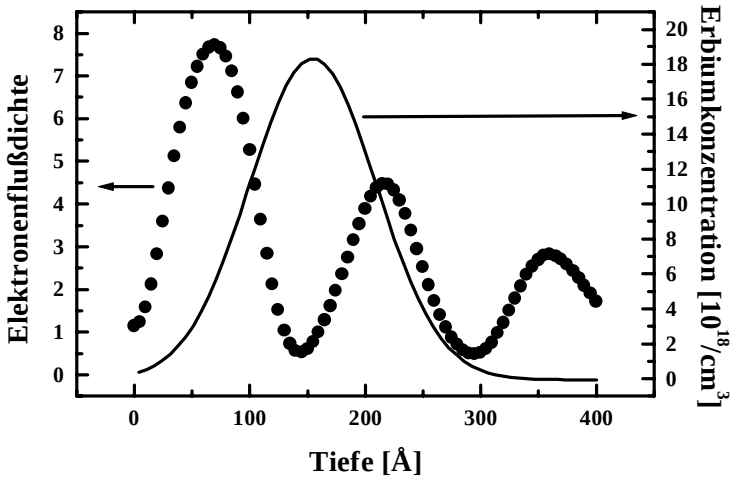

Bild 6.4: Elektronenflußdichte (Punkte), berechnet mit dem Manybeam-Formalismus für 198 keV Elektronen im Wurtzitgitter entlang der c-Achse und das Implantationsprofil (Linie) von ^{167}Er für eine Implantationsenergie von 60 keV simuliert mit TRIM98.

Abhängigkeit der Emittertiefe und des Emissionswinkels. Diese wird mit dem mit TRIM98 berechneten Implantationsprofil gefaltet und ergibt so die normierte Emissionswahrscheinlichkeit der Elektronen in Abhänigkeit des Emissionswinkels. In Bild 6.4 sind die Elektronenflußdichte, berechnet mit der Manybeam-Simulation in Abhängigkeit der Tiefe der Emitter für die L-Elektronen des ^{167}Er in GaN entlang der c-Achse (Punkte), und die Konzentration des Erbiums in Abhängigkeit der Tiefe, berechnet mit TRIM98 für Implantation mit 60 keV und einer Dosis von $2{,}5\cdot10^{13}/cm^2$ (Linie), dargestellt.

6.3 Einfluß experimenteller Parameter auf die Rechnung

Die Gitterführung der Elektronen im Kristall bzw. die der Gitterführung entgegenstehenden Prozesse sind von verschiedenen experimentellen Parametern abhängig. Das bedeutet, daß diese Größen auch in der Simulation berücksichtigt werden müssen. Eine dieser Größen ist die Kristalltemperatur, da das Dechanneling durch thermisch inkohärente Streuung von den Gitterschwingungen des Kristalls abhängt und diese nach der Debyetheorie von der Temperatur des Substrats und der Debyetemperatur bestimmt werden.

$$u^2 = \langle x^2 \rangle = \frac{3\hbar^2}{4Mk_B\Theta_D}\left[1+\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)\int_0^{\Theta_D/T}\frac{x}{e^x-1}dx\right] \tag{6.7}$$

Auch die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Emitters hängt über die thermischen Schwingungen von der Temperatur ab. Hierbei ergibt sich das Problem, daß eine Debyetemperatur für ein einzelnes Atom in einem fremden Gitter nicht immer bekannt ist. Deshalb wird folgende Näherung verwendet, um experimentell nicht bekannte Debyetemperaturen von Fremdatomen zu berechnen [SchP64].

$$\Theta_{(eff)} = \sqrt{\frac{M_1}{M_2}}\,\Theta_D \tag{6.8}$$

M_1 = Masse der Atome des Kristalls mit bekannter Debyetemperatur Θ_D
M_2 = Masse des Fremdatomes

Dabei wird angenommen, daß die Stärke der Bindungen zwischen Gitteratomen und Fremdatomen und zwischen Gitteratomen und Gitteratomen gleich ist [SchP64]. Dadurch ergibt sich eine Schwingungsamplitude des Emitters, die sich derjenigen der Gitteratome anpaßt.

Außerdem hängt das Dechanneling von der Implantationstiefe ab. Die Implantationstiefe kann, wie schon beschrieben, mit TRIM98 [ZieB85] berechnet werden.

Als wichtiger experimenteller Faktor geht die Winkelauflösung der Versuchsanordung in die simulierte Effekthöhe der Channelingspektren ein. Die mit dem Manybeam-Formalismus simulierte Emissionschannelingflußdichte muß mit der experimentellen Winkelauflösung, die sich aus dem Durchmesser des implantierten Gebietes, der aktiven Fläche und der ortsabhängigen Ansprechwahrscheinlichkeit des Detektors ergibt, gefaltet werden. In Bild 6.5 werden zwei Spektren verglichen, ein direkt aus der Simulation ohne Berücksichtigung einer experimentellen Winkelauflösung gewonnenes und eines, bei dem eine experimentelle Winkelauflösung von 0,3° berücksichtigt wurde. Durch die Faltung wird die feine Struktur des Spektrums geglättet und der errechnete Effekt niedriger. Die Faltung bewirkt um so mehr, je schmaler der Channelingeffekt z. B. wegen einer hohen Elektronenenergie ist.

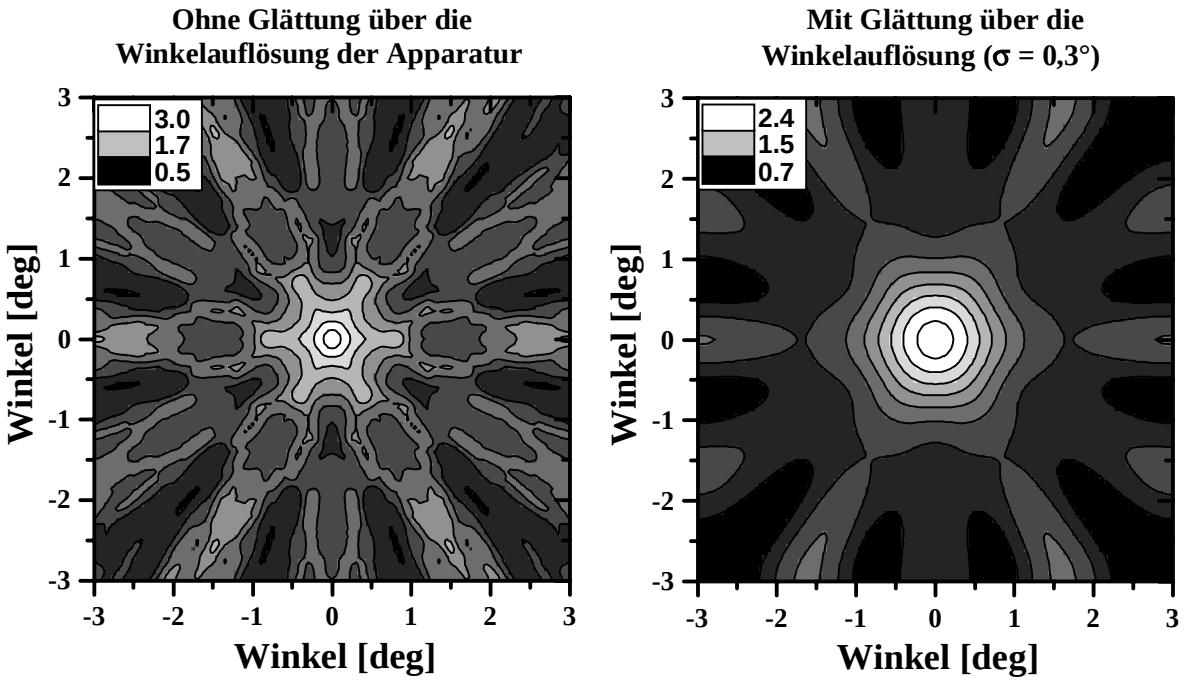

Bild 6.5: *Simulierte Emissionsspektren der L-Konversionselektronen mit 198 keV bei 300 K aus dem Zerfall des ^{167}Er nach Implantation mit 60 keV für einen Einbau der Emitter auf ausschließlich substitutionellen Plätzen. Links: Ohne Berücksichtigung der experimentellen Winkelauflösung. Rechts: Faltung mit einer Winkelauflösung von 0,3°.*

Die Besetzung der Zustände im transversalen Potential hängt von der Energie der Zerfallsprodukte in transversaler Richtung und damit von ihrer Gesamtenergie ab. Deshalb muß die Energie der Elektronen ermittelt, und in der Simulation berücksichtigt werden. Dies stellt beim Channeling von Konversionselektronen kein Problem dar. Bei β^--Elektronen mit einer kontinuierlichen Energieverteilung führt es zu einer neuen Problematik, auf die in Kapitel 6.4 genauer eingegangen wird.

Eine weitere Fragestellung ist die Abhängigkeit der Simulation von der statischen Auslenkung der Emitteratome aus der Kristallachse. Es ist zu klären, bis zu welcher statischen Auslenkung das Atom für uns noch als substitutionell gilt bzw. welche Sensibilität auf Auslenkungen der Emitter erreicht werden kann. Weiterhin könnten Kristallschwingungen den Channelingeffekt auch auf direkte Weise und nicht nur über das Dechanneling beeinflussen, falls die Auslenkungen der Gitteratome die Emitter aus dem Gitterführungspotential führen und die dann emittierten Elektronen in dem Potential nicht mehr geführt werden können. In Bild 6.6 sind Ergebnisse aus Rechnungen für verschiedene statische isotrope Auslenkungen von einem substitutionellen Gitterplatz von 0 Å bis 0,32 Å der Emitter ^{167}Er im GaN Gitter für eine Elektronenenergie von 198 keV gezeigt. Es ergibt sich eine deutliche Reduzierung der Effekte für Abstände über 0,1 Å.

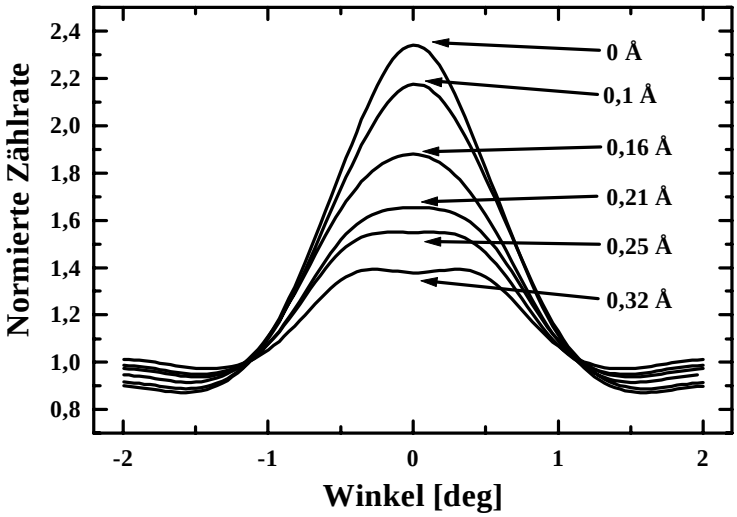

Bild 6.6: *Simulierte Emissionshöhe in Abhängigkeit einer isotropen statischen Auslenkung der Emitter ^{167}Er, mit einer Elektronenenergie von 198 keV, von der c-Achse des GaN-Gitters.*

6.4 Besonderheiten bei der Simulation von β^--Spektren

Beim Channeling mit β^--Elektronen ergeben sich Besonderheiten, da Elektronen aus dem β^--Zerfall mit kontinuierlicher Energie emittiert werden. Wie bereits in Kapitel 6.3 angedeutet, variiert die Channelingeffekthöhe und deren Breite mit der Energie insoweit, daß mit Erhöhung der Energie der kritische Winkel, bei dem Gitterführung möglich ist, kleiner und die erwartete normierte Zählrate entlang der Gitterachsen bei substitutionellem Einbau höher wird. Daraus folgt, daß die Energieverteilung der β^--Elektronen in der Auswertung berücksichtigt werden muß. In Bild 6.7 sind die simulierten Effekte unter Berücksichtigung einer Winkelauflösung von 0,3° entlang der c-Achse des Kristallgitters nach einer Implantation mit ^{24}Na mit 30 keV in GaN für Energien der gittergeführten Elektronen zwischen 100 keV und 500 keV aufgetragen. Dargestellt ist der zu erwartende Anstieg der Zählrate entlang der Achse mit der Energie der Elektronen. Oberhalb einer Energie von 500 keV steigt die Flußdichte entlang der Achse weiter mit der Energie an. Dieser Effekt wird aber dadurch kompensiert, daß die Effekte auch schmaler werden und so durch die nachträgliche Faltung mit der Winkelauflösung der Apparatur auch stärker reduziert werden. Das bedeutet, daß bei Simulationen der Gitterführung von β^--Elektronen unter 500 keV der Channelingeffekt in Abhängigkeit der Energie berechnet und dieser anschließend mit dem Energiespektrum der Elektronen gefaltet werden müßte. Da dies mit der Manybeam-Simulation nicht praktikabel ist, sondern nur Channelingeffekte für einzelne diskrete Energien berechnet werden können, wird als gute Näherung das β^--Spektrum in einige wenige Energiefenster aufgeteilt. Die Channelingeffekte für jeden Energiebereich werden für die jeweilige mittlere Energie berechnet und diese dann, gewichtet mit dem Anteil am Energiespektrum, addiert [Dal96]. Bei β^--Elektronen mit Energien über 500 keV tritt summa summarum nur eine vernachlässigbare Energieabhängigkeit auf. Deshalb können bei den verwendeten Isotopen, für Elektronen aus dem β^--Zerfall mit Energien über 500 keV die Messungen mit einer mittleren Elektronenenergie von 1 MeV simuliert werden.

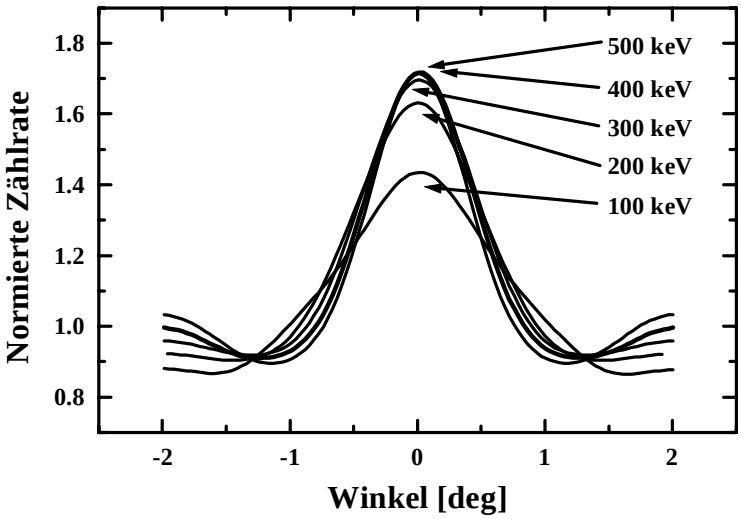

Bild 6.7: Simulierter Channelingeffekt entlang der c-Achse für die Elektronen von ^{24}Na nach einer Implantation in GaN mit 30 keV für Energien der Elektronen im Bereich zwischen 100 keV und 500 keV.

6.5 Anpassung der Simulationen an die experimentellen Daten

Nach dem Messen und dem Simulieren der Spektren müssen die experimentellen Daten mit den aus der Manybeam-Simulation errechneten Werten verglichen werden. Es ist uns zur Zeit nur möglich, die Channelingeffekte entlang der c-Achse zu simulieren. Bei der Wurtzitstruktur reicht aber die Messung entlang der c-Achse aus, um im Vergleich mit der Simulation quantitative Aussagen machen zu können. Eine genauere Betrachtung wird an den jeweiligen Einzelfällen im experimentellen Teil (Kapitel 7 und 8) durchgeführt. Hierzu werden Spektren simuliert, die die normierte Zählrate für reinen substitutionellen und reinen interstitiellen Einbau inmitten des Hexagons widerspiegeln. Aus den gemessenen und den simulierten Spektren werden eindimensionale Profile herausgeschnitten und diese mit Hilfe von drei Parametern aneinander angepaßt. Die drei Parameter

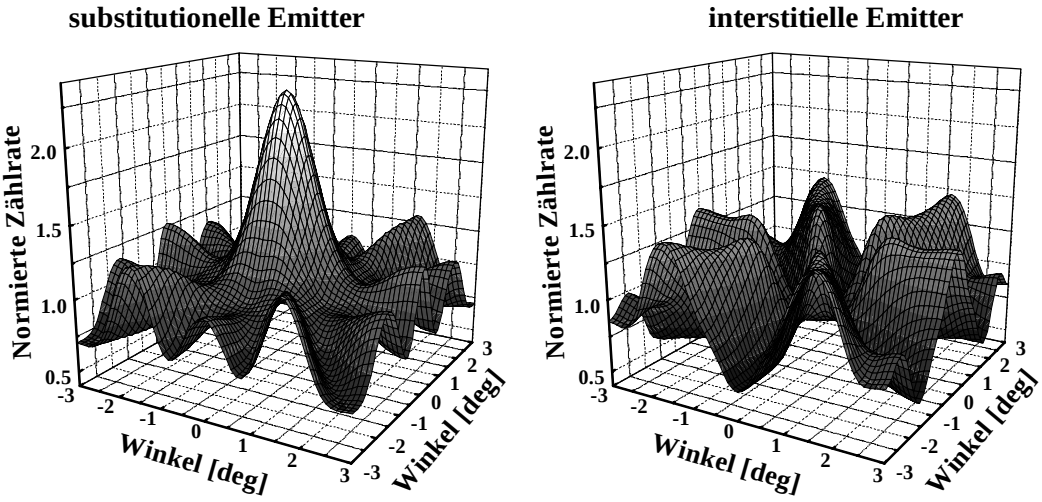

Bild 6.8: Vergleich zwischen den simulierten Emissionschannelingspektren für die 198 keV Elektronen des ^{167}Er in GaN, implantiert mit 60 keV, unter der Annahme, alle Emitter befinden sich auf substitutionellen (links) bzw. interstitiellen Plätzen (rechts).

sind der Anteil auf substitutionellen Plätzen, der Anteil auf interstitiellen Plätzen und der Anteil der sich auf nicht regulären Gitterplätzen (Untergrundanteil) befindenden Emitter. Die Einbeziehung einer Auslenkung der Emitter von den Gitterplätzen ist auch möglich, das allgemeine Verfahren ändert sich dadurch nicht. In Bild 6.8 sind die zu erwartenden Effekte für reinen substitutionellen (links) oder reinen interstitiellen Einbau (rechts) dargestellt. Bei substitutionellem Einbau ergeben sich ein Channelingeffekt entlang der c-Achse sowie drei stark und drei schwächer ausgeprägte Channelingebenen. Im interstitiellen Fall fehlt der Channelingeffekt. Die drei stärkeren Ebeneneffekte verbleiben, anstelle der drei schwächer ausgeprägten Ebeneneffekte im linken Spektrum sind jetzt Blockingebenen ausgebildet. Bereits durch Anpassung der Messungen entlang der c-Achse können Aussagen über eine Gitterplatzverteilung gemacht werden. Die theoretischen Spektren werden mit folgender Formel an die Meßdaten angepaßt und dadurch die Gitterplatzverteilung der Emitter bestimmt:

$$\chi_{\mathrm{fit}}(\Phi,\vartheta) = \mathrm{a}\cdot\left[\mathrm{f_R} + \mathrm{f_S}\cdot\chi_{\mathrm{S}}(\Phi,\vartheta) + \mathrm{f_I}\cdot\chi_{\mathrm{I}}(\Phi,\vartheta)\right] \tag{6.9}$$

Mit:	f_S:	Substitutioneller Anteil der Emitteratome
	f_I:	Interstitieller Anteil der Emitteratome
	f_R:	Anteil der Emitter auf nichtregulären Gitterplätzen
	χ_S (Φ,ϑ):	Theoretisches Spektrum für 100% substitutionelle Emitter
	χ_I $(\Phi,\vartheta,)$:	Theoretisches Spektrum für 100% interstitielle Emitter
	χ_{fit} (Φ,ϑ):	Angepaßtes theoretisches Spektrum für die Gitterplatzverteilung
	a:	Normierungsfaktor (0.95-1.05)

7. Untersuchungen an GaN

7.1 In und Sr in GaN

Im folgenden Kapitel wird das Ausheilverhalten der Implantationsschäden in GaN nach Schwerionenimplantation mit geringen Dosen anhand der EC-Methode mit den Sonden ^{111}In und ^{89}Sr und der PAC-Methode (**P**erturbed **A**ngular **C**orrelation) mit der Sonde ^{111}In untersucht. Aufgrund der großen Bindungsionizität kann GaN mit der für eine Dotierung notwendigen Dosis von 10^{14} Ionen/cm^2 noch nicht amorphisiert werden. Die Implantationsschäden bestehen daher hauptsächlich aus Defektagglomeraten, Versetzungen und planaren Defekten [TanW96]. Die EC-Methode ist dabei sensitiv auf die „Kristallinität“ und auf die Güte der längerreichweitigen Gitterstruktur und nur dann auf lokale Defekte, falls diese zur Auslenkung der Sonden vom Gitterplatz führen. Die PAC dagegen ist sensitiv auf Defekte in unmittelbarer Umgebung der Sonden, die den elektrischen Feldgradienten am Ort der Sonden beeinflussen.

Die einkristallinen GaN Schichten, mit c-Achsen-Orientierung senkrecht zur Probenoberfläche, wurden mit dem zu Gallium isoelektronischen ^{111}In mit einer Energie von 100 keV und ^{89}Sr mit 60 keV bei Raumtemperatur mit einer Dosis von je $3\cdot10^{13}$ cm^{-2} implantiert. TRIM98 Rechnungen ergeben dafür eine maximale Konzentration von etwa 10^{19} Ionen/cm^3. Der Durchmesser des Implantationsflecks betrug 3 mm.

Im Fall von ^{111}In wurden für die EC-Messungen die Konversionselektronen aus dem Zerfall des Tochterkerns ^{111}Cd verwendet. Die Emissionsverteilung der Konversionselektronen wurde im Bereich ± 5° um die c-Achse mit einer Winkelauflösung von $\sigma = 0{,}44°$ als Funktion der Anlaßtemperatur gemessen. Das Messen eines so großen Winkelbereiches um die c-Achse ist nötig, da die Channelingeffekte der 147 keV Elektronen des ^{111}In wegen der relativ geringen Energie breit sind. Deswegen konnte mit einer gröberen Winkelauflösung und der damit verbunden höheren Zählrate gemessen werden. Nach höheren Anlaßtemperaturen mußte wegen der nachlassenden Aktivität der Probe zur Beibehaltung einer guten Statistik die Größe der aufgenommenen Raster auf ± 3,6° reduziert werden. An derselben Probe wurde auch die unmittelbare Umgebung der ^{111}In Sondenatome und die

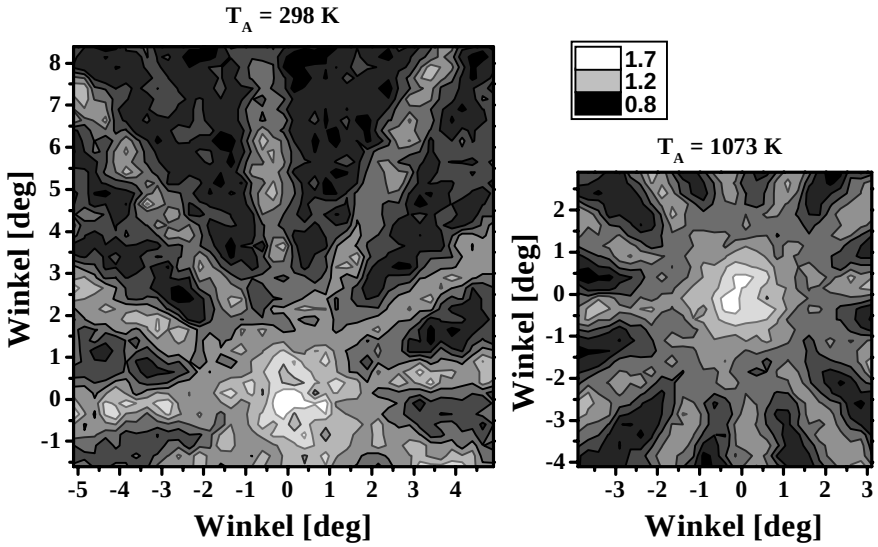

Bild 7.1: EC-Spektren der Konversionselektronen aus dem Zerfall des ^{111}In, gemessen in Richtung der c-Achse, direkt nach der Implantation bei Raumtemperatur mit 100 keV und nach Anlassen der Probe in Schritten von 100°C für jeweils 10 min bis auf 1073 K.

mögliche Wechselwirkung mit anderen Defekten mit der PAC-Methode untersucht. Die Probe wurde dafür im Vakuum für jeweils zehn Minuten in Schritten von 100 K bis auf 1223 K angelassen.

Bild 7.1 zeigt auf der linken Seite das direkt nach der Implantation bei Raumtemperatur gemessene EC-Spektrum entlang der c-Achse des Kristalls. Dargestellt ist die normierte Emissionsintensität nach Korrektur des durch Comptonelektronen verursachten Untergrundes. Es sind eine hohe Intensität entlang der c-Achsenrichtung (normierte Zählrate 1,7) sowie für 6 jeweils um 30° geneigte Ebenen zu erkennen. Sowohl das Maximum in c-Achsenrichtung als auch die 6-zählige Symmetrie des Spektrums zeigen, daß sich die Emitteratome überwiegend auf substitutionellen Plätzen befinden. Anhand dieser Messung kann zwar nicht bestimmt werden, ob das Indium auf einem Gallium- oder Stickstoffplatz zerfallen ist, es ist jedoch aus zwei Gründen zu erwarten, daß das Indium substitutionelle Gallium-Plätze einnimmt: erstens, weil Indium zu Gallium isoelektronisch ist und zweitens, da Indium einen ähnlich großen Ionenradius hat wie Gallium, der des Stickstoffes dagegen um einen Faktor 2,5 größer ist. Wie das Spektrum auf der rechten Seite zeigt, ist nach Anlassen der implantierten GaN Probe auf 1073 K kein Anwachsen der Emissionsintensität entlang der c-Achse oder den Ebenen zu beobachten. Dies bedeutet, daß kein wesentliches Ausheilen struktureller

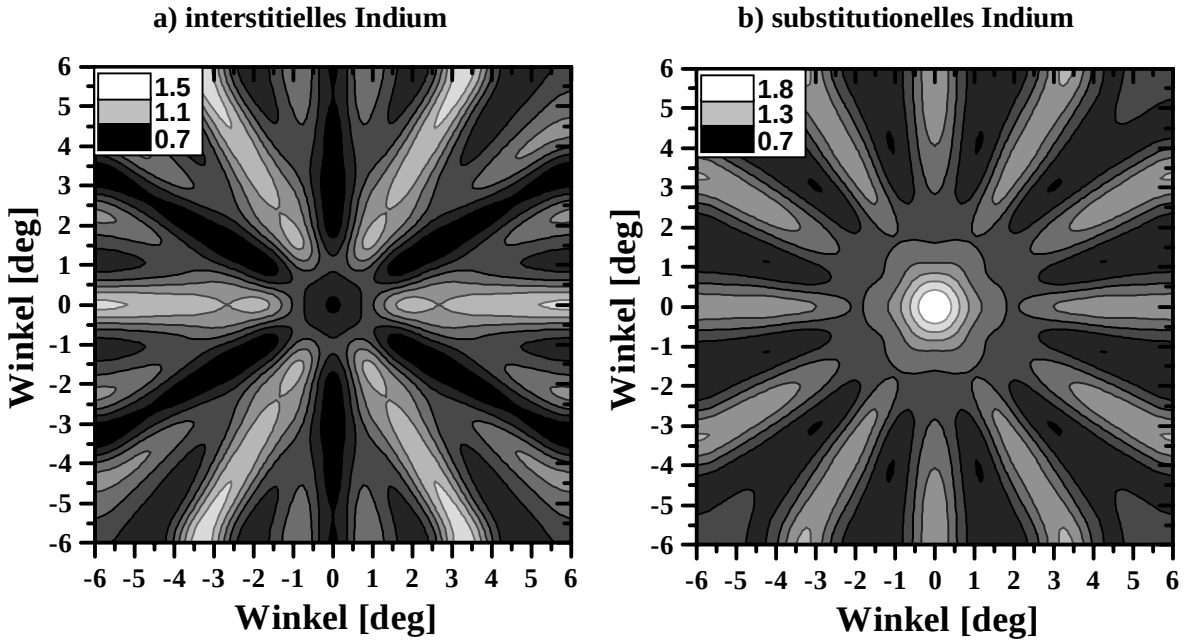

Bild 7.2: Mit dem Manybeam-Formalismus berechnete EC-Spektren für Elektronen mit 147 keV nach Ionenimplantation des ^{111}In mit 100 keV in GaN für a) Emitter auf interstitiellen Plätzen in der Mitte des Hexagons und b) Emitter auf substitutionellen Plätzen.

Implantationsdefekte stattfindet, bzw. kaum welche vorhanden sind. Um zu untersuchen, ob überhaupt für eine Messung mit der EC-Mehtode relevante strukturelle Defekte bei der Implantation gebildet worden sind und um quantitative Aussagen über die Gitterplatzverteilung der ^{111}In Sondenatome treffen zu können, müssen die Messungen mit den für eine Gitterführung in einem perfekten Kristall berechneten Spektren verglichen werden. Diese Spektren sind für (a) interstitielle Plätze des Indiums im Zentrum der c-Achsen Hexagons und (b) substitutionelle Plätze des Indiums in Bild 7.2 dargestellt. Im Fall von interstitiellen Indiumatomen würde das Emissionsspektrum demnach nur drei Channelingebenen und keinen Channelingeffekt entlang der c-Achsenrichtung zeigen. Das für substitutionelle Emitter berechnete Spektrum stimmt dagegen schon sehr gut mit dem gemessenen überein. Eine Anpassung der berechneten Spektren an die experimentellen Daten ergibt einen substitutionellen Anteil von 90 ± 10 %. Der Rest der Emitteratome erscheint auf irregulären Plätzen,

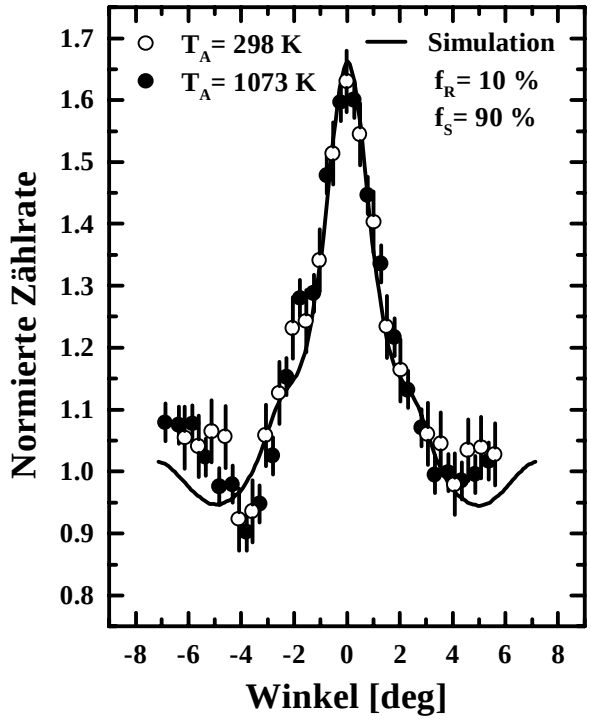

Bild 7.3: Zusammenstellung von EC-Spektren, aufgenommen direkt nach der Implantation von ^{111}In mit 100 keV und nach Anlassen der Probe auf 1073 K. Zum Vergleich ist das Ergebnis der Simulation für 90% der Emitter auf substitutionellen Plätzen gezeigt.

die eine isotrope Emissionsintensität ergeben. In Bild 7.3 sind nun ein eindimensionaler Schnitt des Spektrums, gemessen direkt nach der Implantation (Kreise), einer nach Ausheilen der GaN Probe auf 1073 K (Punkte) und zum Vergleich die Ergebnisse der Simulation unter der Annahme, 90 % der Emitter befinden sich auf substitutionellen Plätzen (Linie), gezeigt.

Um die Auswirkungen des Strahlenschadens durch Ionenimplantation zu untersuchen, wurde als zweite Sonde das Gruppe II Element ^{89}Sr implantiert und die EC-Spektren der β^--Elektronen des Zerfalls verwendet. Hier wurde allerdings ausschließlich mit der EC-Methode gemessen. Auch hier zeigt sich ein von der Ausheiltemperatur unabhängiger Channelingeffekt, der durch die höhere Energie der Elektronen (ca. 1 MeV) deutlich schmaler und höher ist als beim Channeling der Konversionselektronen des ^{111}In. Deshalb mußte bei dieser Messung die Winkelauflösung auf Kosten der Meßzeit auf 0,3° verbessert werden. Dies wurde kompensiert durch eine Reduzierung der Rastergröße auf ± 2,7°, die bei den schmalen Effekten vollkommen ausreichend ist. In Bild 7.4 sind Schnitte durch die gemessenen Raster, nach Ionenimplantation mit ^{89}Sr in GaN und Ausheilen der Probe für 10 min bei 1073 K dargestellt. Im Fall der c-Achse wurde der Channelingeffekt wieder simuliert und an die Meßdaten angepaßt. Beste Übereinstimmung ergibt sich bei einem substitutionellen Anteil von 63 ± 10% und 37 ± 10% auf nichtregulären Plätzen. Zudem wurden hier nicht nur die Channelingeffekte entlang der c-Achse sondern auch Channelingeffekte entlang der

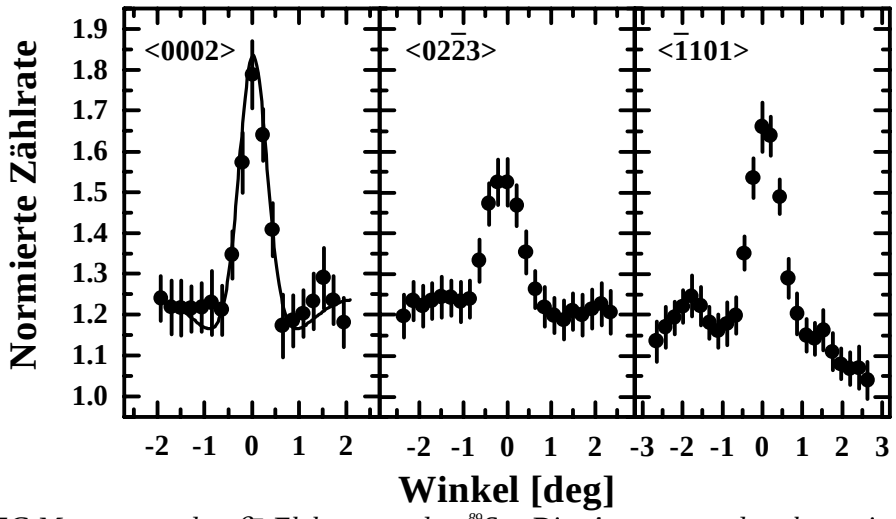

Bild 7.4: EC-Messungen der β^--Elektronen des ^{89}Sr. Die Anpassung des theoretischen Spektrums entlang der c-Achse an die experimentellen Daten ergab einen substitutionellen Anteil der ^{89}Sr Atome von 63 ± 10%. Der Rest befindet sich auf nichtregulären Plätzen.

$<02\bar{2}3>$-Achse, 36° gekippt zur c-Achse (siehe Kapitel 2.1), entlang der $<\bar{1}101>$-Achse und 47° gekippt zur c-Achse, gemessen. Daraus resultiert, daß es sich wirklich um substitutionell eingebaute Emitter handelt.

Die Unabhängigkeit des Channelingeffektes von der Ausheiltemperatur der Konversionselektronen des Indiums, sowie der hohe substitutionelle Anteil des Indiums direkt nach der Implantation zeigt, daß die Implantation mit niedrigen Dosen keine mit der EC-Methode erfassbaren Strahlenschäden erzeugt. Dies stimmt mit anderen Veröffentlichungen überein, die mit der RBS-Methode bei kleinen Dosen ($< 10^{14}$) ebenfalls keine Veränderung beobachten [TanW98]. Um nun die Punktdefekte in direkter Umgebung der Emitter zu untersuchen, bietet sich die Methode der gestörten $\gamma\gamma$-Winkelkorrelation (**PAC**) an. Diese benutzt ebenfalls geeignete radioaktive Sondenkerne zur Untersuchung von Festkörpereigenschaften. Dabei wechselwirken die Kernmomente des Sondenkerns mit den elektromagnetischen Hyperfeinfeldern in der Probe, wodurch Informationen über den elektrischen Feldgradienten und das magnetische Hyperfeinfeld am Kernort des Sondenatoms gewonnen werden. Da sich Gitterdefekte in der näheren Umgebung der Sonde auf den elektrischen Feldgradienten (EFG) auswirken, läßt sich durch PAC-Messungen das Ausheilverhalten eines Kristalls nach Ionenimplantation untersuchen.

Aufgrund der hexagonalen Struktur von GaN wird auch im defektfreien Gitter ein axialsymmetrischer EFG beobachtet ($\eta = 0$). Für unsere Untersuchungen ist nur wichtig, daß verschiedene Defekte in der unmittelbaren Sondenumgebung zu einer breiten Verteilung von Feldgradienten führt. Dieses äußert sich als starke Dämpfung im R(t)-Spektrum. Untersuchungen mit der PAC-Methode zum Ausheilen des Implantationsschadens in GaN, gewachsen auf Saphir, und eine Beschreibung der Methode findet sich in [BurD97].

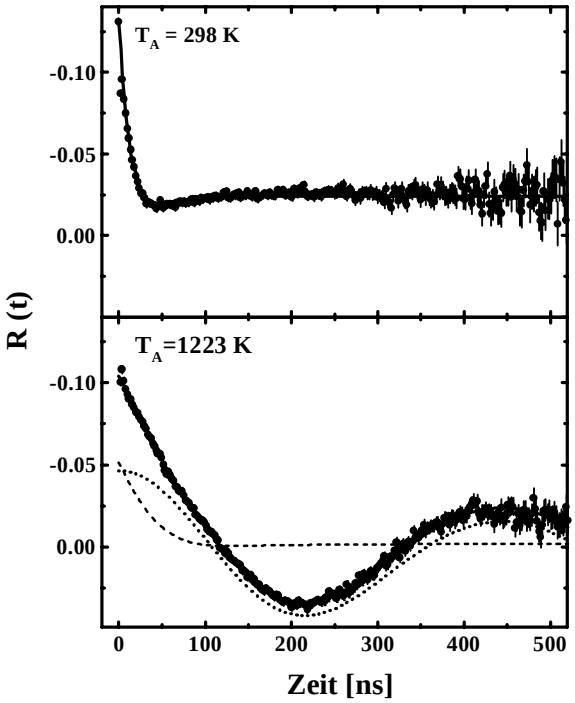

Bild 7.5: R(t)-Spektren von GaN implantiert mit 100 keV ^{111}In bei Raumtemperatur, gemessen direkt nach der Implantation und nach Ausheilen der Probe auf 1223 K.

In Bild 7.5 sind die Ergebnisse der PAC-Messungen direkt nach Implantation des ^{111}In mit 100 keV in GaN bei Raumtemperatur und nach Anlassen auf 1223 K dargestellt. Der rasche Abfall der Anisotropie des Zählratenverhältnisses R(t) in den direkt nach Implantation bei Raumtemperatur gemessenen Spektren zeigt, daß die ^{111}In Sonden einer Verteilung unterschiedlicher elektrischer Feldgradienten (EFG) ausgesetzt sind. Die Umgebung der Sonden ist durch eine Quadrupolkopplungskonstante von ν_Q = 45 MHz mit einer Verteilung der Breite $\Delta\nu_Q$ = 20 MHz charakterisiert. Dementsprechend befinden sich die Sonden direkt nach der Implantation in einer stark gestörten uneinheitlichen Umgebung. Nach Anlassen auf 1223 K befindet sich ein signifikanter Anteil der Sonden in einer Umgebung mit einheitlichem EFG, charakterisiert durch die Kopplungskonstante ν_Q = 7,5 MHz und axiale Symmetrie ($\eta = 0$). Die Amplitude der Modulation (punktierte Linie) ergibt einen Anteil von 53 ± 5% der Sonden auf Plätzen mit diesem einheitlichen EFG. Aus orientierungsabhängigen PAC-Messungen ergibt sich die Hauptachsenrichtung des EFG-Tensors parallel zur c-Achse. Daraus resultiert, daß dieser EFG, der

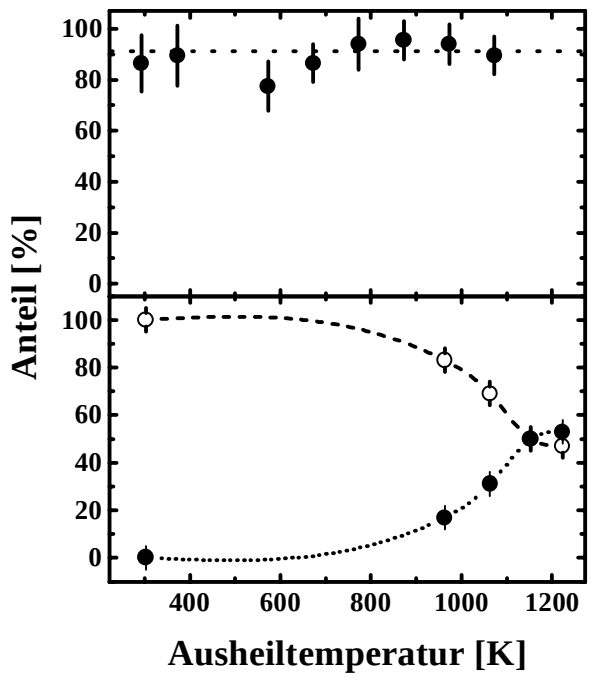

Bild 7.6: Anteil der Emitter auf substitutionellen Plätzen bestimmt aus den Channelingmessungen (oben) und die Anteile der Sonden mit einer gestörten (Kreise) bzw. ungestörten Umgebung (Punkte), ermittelt mit der PAC (unten).

mit dem Zerfall der Indiumatome auf substitutionellen Plätzen gemessen wurde, durch eine ungestörte Umgebung im Wurtzitgitter verursacht wird. Die übrigen Sondenatome befinden sich nach wie vor in einer gestörten Umgebung, allerdings mit einer EFG-Verteilung mit kleineren Werten von ν_Q = 12 MHz mit der Breite $\Delta\nu_Q$ = 5 MHz (gestrichelte Linie). Es handelt sich dabei um substitutionelle Indiumatome mit angelagerten einfacheren Defekten.

In Bild 7.6 sind nun nochmals die Ergebnisse der Messungen mit ^{111}In in Abhängigkeit der Anlaßtemperaturen sowie die Ergebnisse der EC-Messungen dargestellt. Die EC-Experimente (oberer Graph) zeigen, daß die Kristallinität der GaN-Schicht nur unwesentlich durch die Ionenimplantation beeinträchtigt wird. Selbst direkt nach Implantation bei Raumtemperatur befinden sich nahezu alle Sondenatome auf substitutionellen Plätzen. Die PAC-Messungen (unterer Graph) zeigen dagegen, daß nach Ionenimplantation alle Sonden von Defekten in nächster Umgebung umlagert sind, daß es aber möglich ist, zumindest einen Teil der Implantationsdefekte durch Anlassen bis auf 1223 K auszuheilen. Das Ausheilen der Implantationsdefekte beginnt bei ca. 800 K. Eine Ausdiffusion des Indiums wurde in dem betrachteten Temperaturbereich wie erwartet [WilP95] nicht beobachtet.

7.2 Li und Na in GaN

Mit EC-Untersuchungen wurde für viele kubische III-V und II-VI Verbindungshalbleiter gezeigt, daß Lithium bei hinreichend tiefen Temperaturen auf interstitielle Tetraederplätze eingebaut wird. Bei interstitieller Diffusion wechselwirkt das Lithium in Verbindungshalbleitern stark mit Leerstellendefekten. Dies führt zur Bildung von substitutionellem Lithium [Wah97] [WahH92]. Als Gruppe I Element kann Lithium je nach Gitterplatz als Donator im interstitiellen Fall oder als Doppelakzeptor im substitutionellen Fall wirken. Analog zu Wasserstoff kann Lithium auch mit anderen Donatoren und Akzeptoren wechselwirken und durch Paarbildung diese elektrisch passivieren. Photolumineszenzmessungen in GaN haben gezeigt, daß es sich bei Lithium um einen tiefen Akzeptor (750 meV über dem Valenzband) handelt [Edg94] und daß eine Passiverung von Donatoren durch Lithium möglich ist [PanD73]. Um eine mögliche Wechselwirkung von Lithium und Magnesium zu untersuchen, wurde der Gitterplatz des Lithiums in Abhängigkeit von der Temperatur bestimmt. Dazu wurde eine Probe verwendet, die mit $4{,}4\cdot10^{19}$ cm^{-3} Magnesium, dem für Anwendungen aussichtsreichsten Akzeptor für p-Typ GaN, dotiert war (Akzeptorkonzentration: $4{,}4\cdot10^{18}$ cm^{-3}). Die magnesiumdotierte 0,5 µm dicke Schicht wurde dabei auf einer undotierten 1 µm dicken GaN Schicht gewachsen und danach für 30 s bei 800 °C ausgeheilt. Dies ist nötig, um das Magnesium zu aktivieren, da es direkt nach dem Wachstum, vermutlich durch Wasserstoff, passiviert ist [NakT92].

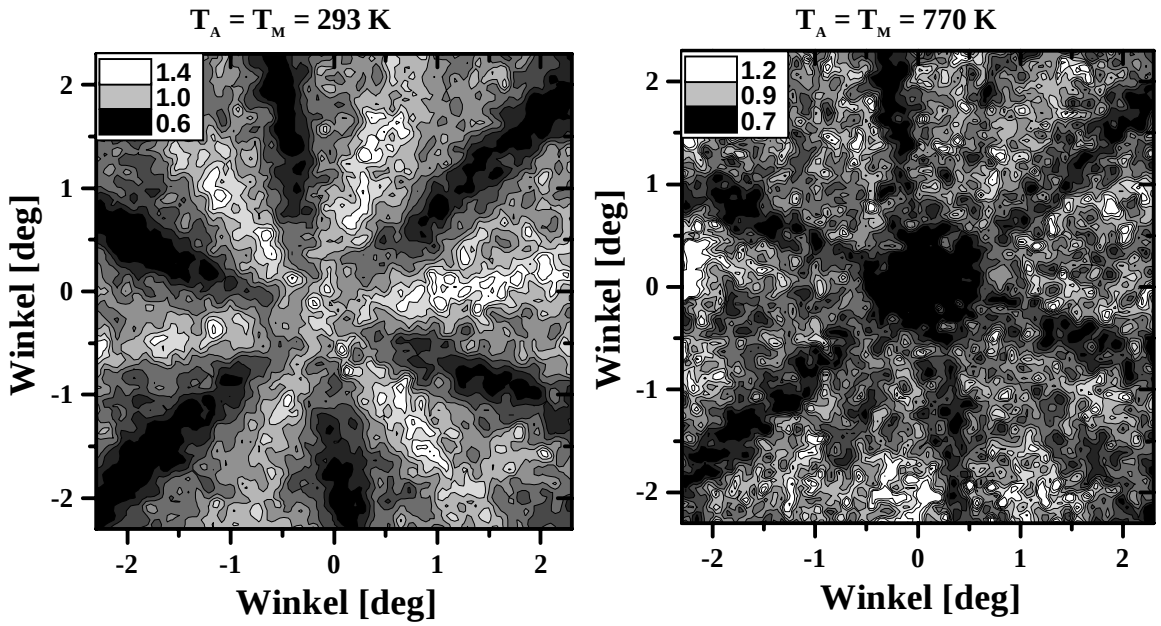

Bild 7.7: *Normierte Zählrate der EC-Messungen der α-Teilchen aus dem ^{8}Li Zerfall in undotiertem GaN entlang der c-Achse, gemessen während Ionenimplantation mit 60 keV. Links: Bei Raumtemperatur. Rechts: Bei 770 K.*

In die einkristallinen Schichten mit c-Achsenorientierung senkrecht zur Probenoberfläche wurde an ISOLDE ^{8}Li mit einer Energie von 60 keV implantiert. Die Implantationsdosis je Meßspektrum betrug etwa $5 \cdot 10^{11}$ Li/cm^2 und die gesamte implantierte Dosis etwa 10^{13} Li/cm^2. Die während der Implantation und Messung maximale erreichte Konzentration des Lithiums liegt wegen der kurzen Lebensdauer des ^{8}Li nur bei etwa 10^{15} cm^{-3}.

In Bild 7.7 ist auf der linken Seite die bei Raumtemperatur gemessene Emissionsverteilung um die c-Achse dargestellt. Die Emissionsverteilung weist eine sechszählige Symmetrie auf. Für drei

$<02\bar{2}3>$ $<\bar{2}201>$

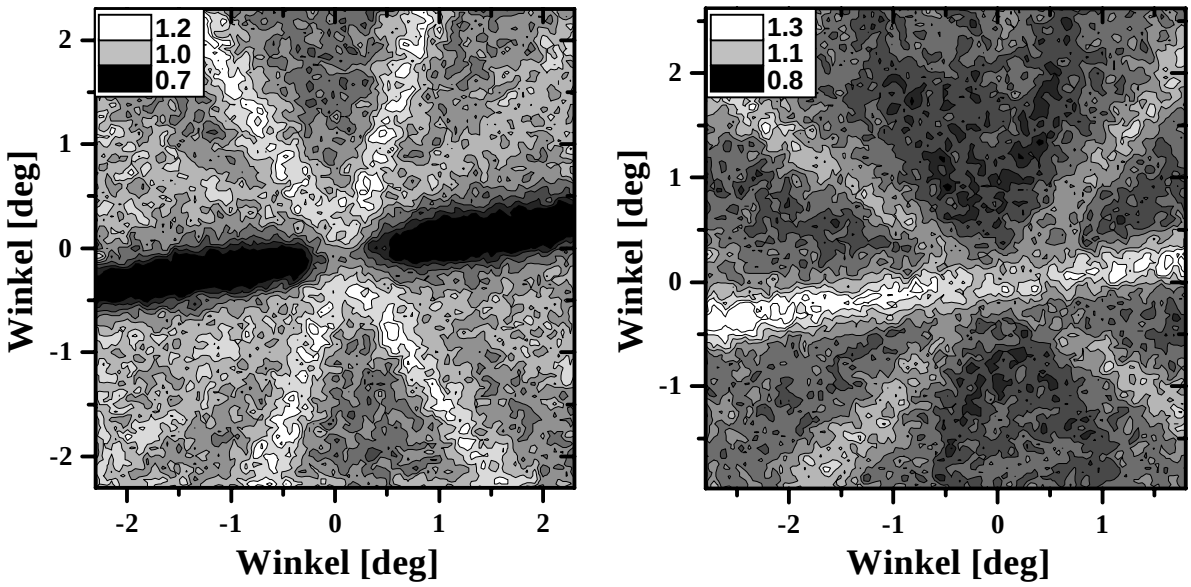

Bild 7.8: *Normierte Zählrate der EC-Messungen der α-Teilchen aus dem ^{8}Li Zerfall in undotiertem GaN, gemessen während Ionenimplantation mit 60 keV bei Raumtemperatur. Links: $<02\bar{2}3>$-Achse. Rechts: $<\bar{2}201>$-Achse*

Ebenen, sowie in c-Achsenrichtung werden ausgeprägte Channelingeffekte und für drei weitere Ebenen Blockingeffekte beobachtet. Die beobachteten Channelingeffekte werden durch Li-Atome hervorgerufen, die sich zwischen den äquivalenten $(\bar{3}120)$-,$(\bar{3}210)$- und $(0\bar{1}10)$-Ebenen befinden. Die Blockingeffekte dagegen resultieren von Lithiumatomen, die sich in den äquivalenten $(\bar{2}110)$-, $(\bar{1}010)$- und $(\bar{1}100)$- Ebenen befinden. Somit befinden sich die ^{8}Li Atome eindeutig im Zentrum der c-Achsen Hexagons. Auf der rechten Seite in Bild 7.7 ist die Emissionsverteilung um die c-Achse für eine Implantationstemperatur von 770 K gezeigt. Hier sind nun drei ausgeprägte, drei schwächere planare Blockingeffekte und auch ein Blockingeffekt in c-Achsenrichtung zu erkennen. Dies ist nur durch überwiegend substitutionell eingebautes Lithium möglich. Für den Gitterplatzwechsel nach Einsetzen der interstitiellen Diffusion ist analog zu den kubischen Verbindungshalbleitern eine durch Coulombwechselwirkung verursachte Reaktion $Li_I^{+} + V^{n-} \Rightarrow Li_S^{(n-1)-}$ verantwortlich. Es ist anzunehmen, daß Lithium wegen der starken Coulombwechselwirkung mit den negativ geladenen Gallium Leerstellen substitutionelle Plätze des Gallium Untergitters besetzt. Würde Leerstellendiffusion bei diesen Temperaturen bereits einsetzen, so sollten auch signifikante Ausheilprozesse nach Schwerionenimplantation mit hohen Dosen beobachten werden. Dies ist jedoch für Temperaturen unterhalb von 800 K nicht der Fall. Bislang sind alle Plätze entlang einer Geraden parallel zur c-Achse und verlaufend durch die Mitte des Hexagons möglich. Durch EC-Messung entlang anderer Achsen bei Raumtemperatur kann der Gitterplatz, den das Lithium besetzt, noch weiter eingeschränkt werden. Dazu wurden die Channeling- und Blockingeffekte entlang der $<02\bar{2}3>$-Achse, die 36° zur c-Achse entlang der $(\bar{2}110)$-Ebene geneigt ist, sowie entlang der $<\bar{2}201>$-Achse, die 52° zur c-Achse entlang der $(\bar{3}120)$-Ebene geneigt ist, gemessen.

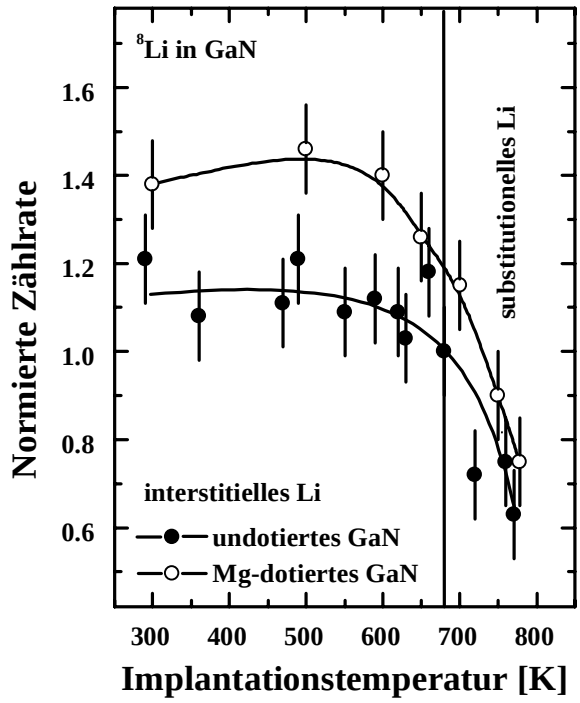

Bild 7.9: Normierte Zählrate der EC-Effekte der α-Teilchen des ^{8}Li Zerfalls in undotiertem GaN entlang der c-Achse während Ionenimplantation mit 60 keV in Abhängigkeit von der Temperatur. Die Punkte sind die Zählraten gemessen an der undotierten Probe, die Kreise diejenigen der mit Magnesium dotierten.

In Bild 7.8 sind die Spektren entlang dieser Achsen gezeigt. Im Fall der $<02\bar{2}3>$-Achse sind der Blockingeffekt entlang der $(\bar{2}110)$-Ebene und Channelingeffekte entlang zweier anderer Ebenen, im Fall der $<\bar{2}201>$-Achse sind der Channelingeffekt der $(\bar{3}120)$-Ebene sowie zwei weitere Channelingeffekte entlang anderer Ebenen zu sehen. Werden diese Effekte der Gitterführung mit der Gitterstruktur (Kap. 2) verglichen, so werden die möglichen Plätze des interstitiellen Lithiums auf zwei äquialente, einen bei 1/4 und einen bei 3/4 des c-Achsenabstands, eingeschränkt.

In Bild 7.9 ist die normierte Effekthöhe für Li in undotiertem sowie für magnesiumdotiertes GaN in c-Achsenrichtung als Funktion der Meßtemperatur aufgetragen. Die etwas höheren normierten Effekthöhen für die mit Magnesium dotierte Probe sind auf einen geringeren Untergrund bei der für diese Messungen verwendeten, neu konzipierten und in Kap. 3 beschriebenen Channeling-Meß-apparatur zurückzuführen. Für beide Proben wird das Einsetzen der interstitiellen Diffusion des Lithium und damit sein Wechsel auf substitutionelle Plätze bei Temperaturen um 700 K beobachtet.

Eine Ausdiffusion des Lithiums, was dem Einsetzen der Diffusion auf substitutionellen Plätzen entspricht, konnte bis 800 K nicht beobachtet werden. Auch andere Gruppen konnten keine Diffusion des Lithiums bis zu 1173 K beobachten (z. B. [WilV95]).

Ein Einfluß der Wechselwirkung zwischen dem Lithium und dem Magnesium auf die Emissionsverteilungen konnte in diesem Experiment wegen der zur Magnesiumkonzentration vergleichsweise hohen lokalen Leerstellenkonzentration nicht beobachtet werden. Daher ist die Übergangstemperatur der beiden Proben gleich. Es kann angenommen werden, daß nur wenige Diffusionsschritte für den Platzwechsel erforderlich sind, da sich implantationsbedingte Leerstellen in unmittelbarer Umgebung der Lithiumatome befinden. Für $n \approx 10$ Diffusionsschritte, ein Zeitfenster von $\Delta t = 1$ s, einer Versuchsfrequenz von $\nu_0 \approx 10^{13}$ Hz und einer Temperatur von $T_A = 700$ K zur Aktivierung der Diffusion des Lithiums ergibt sich eine Aktivierungsenergie für die interstitielle Lithium Diffusion von $E_A = kT_A \cdot \ln(\Delta t \cdot \nu_0 / n) \approx 1{,}6$ eV.

Mit Hilfe der EC-Messungen der emittierten α-Teilchen des ^{8}Li in dem hexagonalen Gitter des GaN wurde gezeigt, daß Lithium bei Raumtemperatur auf interstitiellen Plätzen inmitten der c-Achsen Hexagons eingebaut wird. Oberhalb einer Schwelltemperatur wird Lithium wegen der einsetzenden Lithiumdiffusion und der attraktiven Wechselwirkung zwischen Lithiumion und negativer Leerstelle substitutionell eingebaut.

Natrium, ebenfalls ein Gruppe I Element, wäre bei interstitiellem Einbau ebenfalls ein Donator und würde, falls es substitutionell eingebaut wird, als Doppelakzeptor wirken. Deshalb wurde der Gitterplatz des Natriums nach Ionenimplantation in GaN mit Hilfe der EC-Methode untersucht. In der Literatur existiert bis auf einige Arbeiten in denen Natrium in GaN mit Photolumineszenzspektroskopie [PanH76] und dessen Diffusion mit SIMS untersucht worden ist, [WilV95] nur wenig Information. Dort wurde gezeigt, daß es bis 1173 K keine makroskopische Diffusion des Natriums gibt. Ob bei geringer Temperatur eine interstitielle Diffusion auftritt, oder ob es gelingt, das Natrium substitutionell einzubauen, wurde in der vorliegenden Arbeit mit der EC-Methode untersucht.

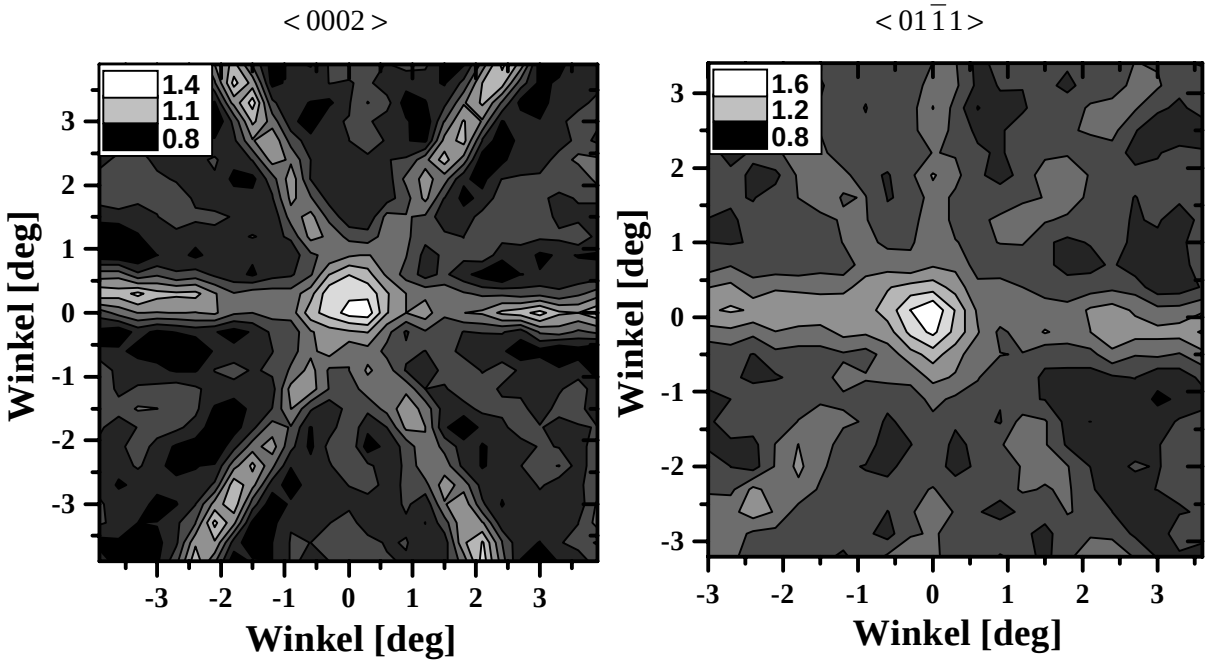

Bild 7.10: Normierte Zählrate der EC-Messung der Elektronen aus dem β^--Zerfall des ^{24}Na in GaN nach Ionenimplantation mit 30 keV bei Raumtemperatur, gemessen direkt nach der Implantation. Links: < 0002 >-Achse. Rechts: < 01$\bar{1}$1 >-Achse, 47° verkippt zur c-Achse.

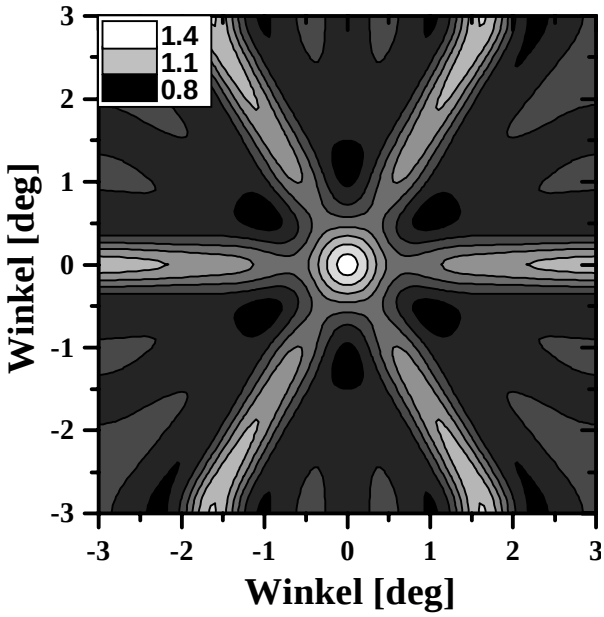

Bild 7.11: Mit dem Manybeam Formalismus simulierter EC-Effekt für die Elektronen aus dem β^--Zerfall des ^{24}Na unter der Annahme einer Gitterplatzverteilung von 44 ± 5% auf substitutionellen und 56 ± 5% auf interstitiellen Plätzen in der Mitte des Hexagons im Wurtzitgitter des GaN.

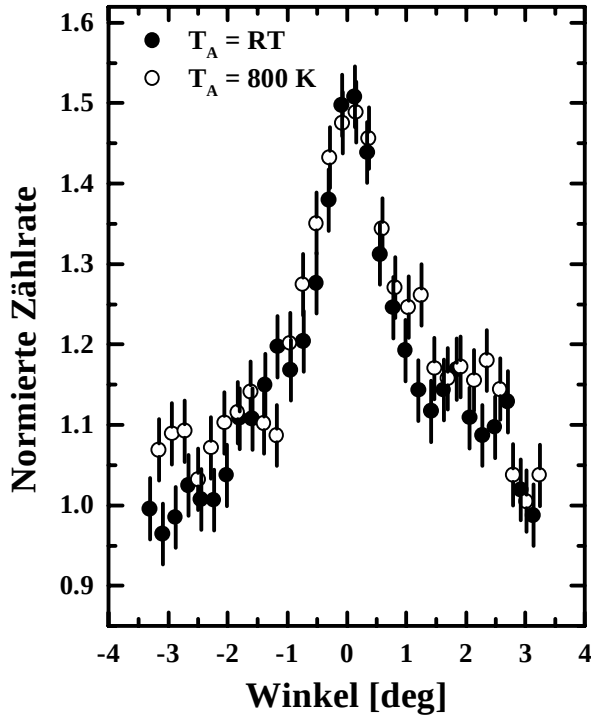

Bild 7.12: Vergleich zwischen den Channelingeffekten der Elektronen des ^{24}Na entlang der c-Achse. Punkte: Messung bei Raumtemperatur nach der Implantation. Kreise: Messung bei Raumtemperatur nach schrittweisem Anlassen der GaN Probe bis auf 800 K.

Hierzu wurde erstmals ^{24}Na am Isotopenseparator ISOLDE am CERN erzeugt, mit 30 keV in kristalline GaN Schichten implantiert und danach die Channelingeffekte der Elektronen aus dem β^--Zerfall gemessen.

Die Elektronen des β^--Zerfalls wurden über den Energieverlust in einem Silizium-Sperrschichtdetektor nachgewiesen. Die β^--Emissionsverteilung wurde jeweils als Raster um die c-Achse des Wurtzitgitters, im Winkelbereich ± 3,3° bzw. ± 3,9° in 0,3° Schritten gemessen. Die experimentelle Winkelauflösung des verwendeten Aufbaus betrug 0,2°. Die gemessen Channelingspektren wurden dann mit entsprechenden, mit dem Manybeam-Formalismus simulierten, Spektren verglichen, und so der Anteil der Emitter auf substitutionellen bzw. interstitiellen Plätzen bestimmt.

In Bild 7.10 ist die gemessene Emissionsverteilung direkt nach der Implantation von ^{24}Na in GaN bei Raumtemperatur in Richtung der c-Achse dargestellt. Der Channelingeffekt entlang der c-Achse läßt auf einen erheblichen substitutionellen Anteil schließen, ebenso die Channelingeffekte entlang der $(\bar{2}110)$, $(\bar{1}010)$ und der $(\bar{1}100)$ Ebenen. Ein anderes Argument für einen substitutionellen Einbau ist der Channelingeffekt entlang der $<01\bar{1}1>$-Achse, 47° verkippt zur c-Achse entlang der $(\bar{2}110)$-Ebene, ebenfalls in Bild 7.10 gezeigt. Bei reinem substitutionellen Einbau werden aber ebenfalls Channelingeffekte entlang der $(\bar{3}120)$, $(\bar{3}210)$, $(0\bar{1}10)$-Ebenen erwartet, wie bereits anhand der Simulation der Effekte für substitutionelle Emitter für das Indium gezeigt wurde. Diese werden jedoch durch Blockingeffekte, verursacht durch interstitielle Emitter, kompensiert.

Als interstitieller Platz wird hier, wie für Li, das Zentrum der c-Achsen Hexagons angenommen. Eine Anpassung des gemessenen Spektrums mit Anteilen von den für jeweils 100% substitutionellen und 100% interstitiellen Emittern simulierten Spektren ergibt einen substitutionellen Anteil von 44 ± 5% und einen interstitiellen Anteil von 56 ± 5%. In Bild 7.11

ist nun das theoretische Spektrum für diese Gitterplatzverteilung der Emitter gezeigt. Die gute Übereinstimmung mit dem experimentellen Spektrum, der Channelingeffekt entlang der c-Achse, sowie die drei oben erwähnten Channelingebenen sind zu erkennen. Um die Veränderung der Gitterplatzverteilung in Abhängigkeit von der Anlaßtemperatur zu untersuchen, wurde die Probe in Schritten von 100 K bis auf 800 K für jeweils 10 min angelassen und nach jedem Schritt die Gitterplatzverteilung bei Raumtemperatur bestimmt. In Bild 7.12 sind die normierten Zählraten der EC-Messungen der Elektronen des ^{24}Na, in Abhängigkeit des Winkels zur c-Achse, gemessen direkt nach der Implantation (Punkte) sowie nach schrittweisem Anlassen auf 800 K (Kreise), aufgetragen. Eine Veränderung des Effektes innerhalb der Fehlerbalken und somit der Gitterplatzverteilung konnte nicht beobachtet werden. Das bedeutet, daß bis 800 K bei GaN im Gegensatz zum Lithium keine interstitielle Diffusion des Natriums stattfindet.

7.3 Er und Yb in GaN

In den letzten Jahren haben Halbleiter, die mit seltenen Erden dotiert sind, zunehmende Bedeutung in der Optoelektronik erlangt. Sie zeichnen sich durch eine charakteristische Lumineszenz im Infrarot (1,54 µm) aus, die aus dem $^4I_{13/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ Übergang in einer inneren Elektronenschale der seltenen Erdatome stammt. Dabei sind seltene Erden gerade auch in Halbleitern mit großer Bandlücke interessant, da die Abnahme der Intensität der Linie im IR mit wachsender Temperatur kleiner ist [HömT97] [WilS94]. Eine Zunahme der Leuchtintensität um bis zu einem Faktor 20 wurde außerdem bei gleichzeitiger Präsenz einer hohen Konzentration von Sauerstoffatomen beobachtet [TorF96]. Die Ursache für die Zunahme der Intensität ist noch unklar. Favorisiert werden drei Möglichkeiten: Eine Reduktion der strahlungslosen Übergänge durch die Abschirmung der Er^{3+} Ionen durch sich anlagernde Sauerstoffatome [And96], die Bildung eines Er-O Komplexes [RimF97] oder Er_2O_3-Komplexen, die als mikroskopische Einfangzentren wirken [TerF97]. Auch der Gitterplatz der seltenen Erden in GaN war bislang noch unklar.

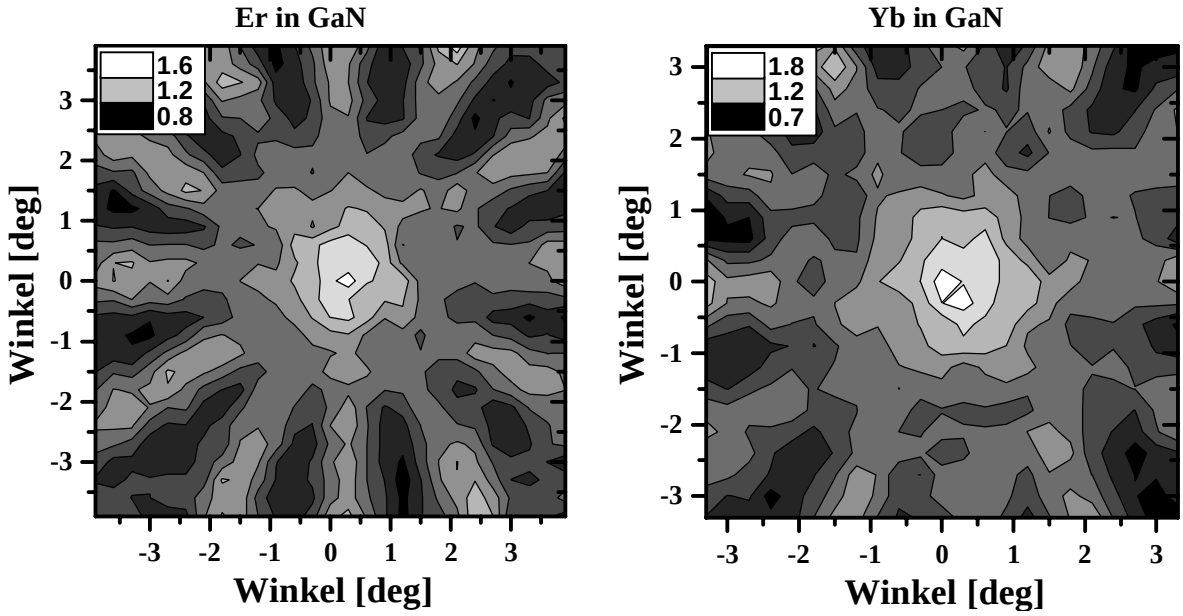

Bild 7.13: EC-Spektren aufgenommen bei Raumtemperatur nach Implantation von ^{167}Tm (links) und ^{169}Lu (rechts) und Anlassen der Proben auf 800°C für 10 min. Aufgetragen ist die Zählrate der Konversionselektronen des ^{167}Er bzw. des ^{169}Yb in Abhängigkeit des Winkel des Detektors zur c-Achse.

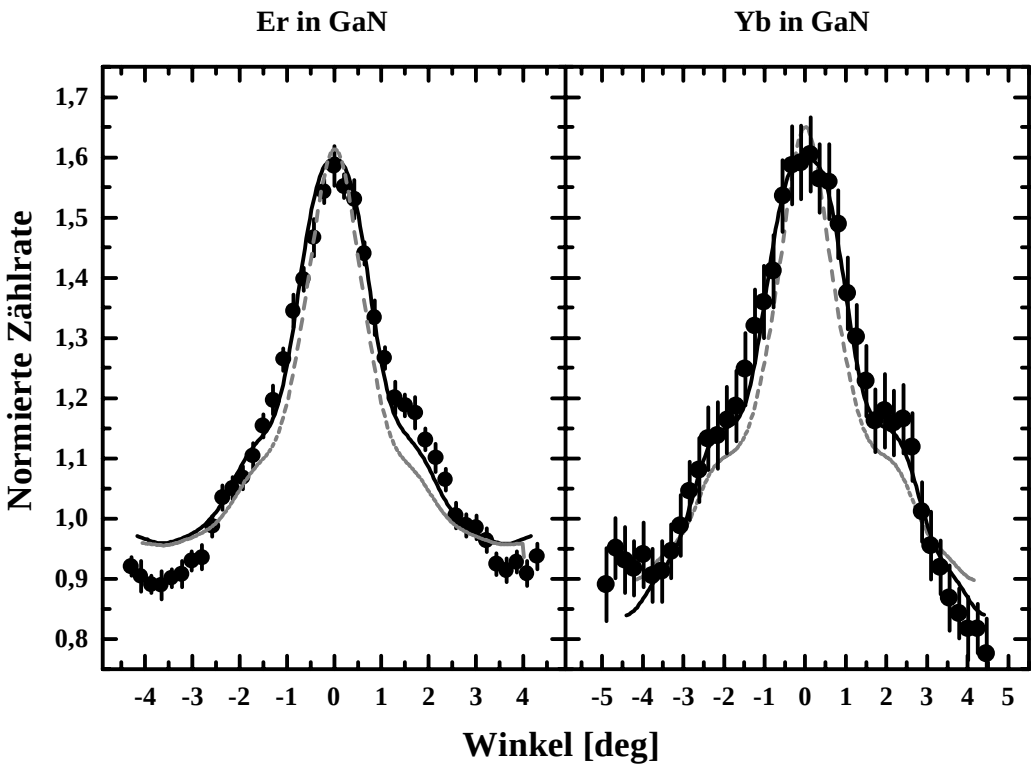

Bild 7.14: Vergleich von Ausschnitten der EC-Messungen von ^{167}Er und ^{169}Yb und den mit dem Manybeam-Formalismus simulierten Effekten. Die gestrichelten grauen Linien zeigen den Effekt für substitutionellen Einbau mit Auslenkungen im Bereich der Gitterschwingungen. Die durchgezogene Linie berücksichtigt eine isotrope Auslenkung der Emitter vom substitutionellen Platz um 0,25 Å und einen Anteil der Emitter auf diesen Plätzen von 90 ± 10%.

Durch Kombination von PL-Messungen und Gitterplatzbestimmungen mit der EC-Methode sollte zur Aufklärung der Struktur der Komplexe aus seltenen Erd- und Sauerstoffatomen beigetragen werden, die die Intensitätssteigerung bewirken, da eine Komplexbildung auch eine Auslenkung des seltenen Erds von seinem ursprünglichen Gitterplatz zur Folge haben kann. Für die Messungen wurde radioaktives ^{167}Tm und ^{169}Yb mit 60 keV in verschiedene GaN-Proben bei Raumtemperatur mit einer Dosis von $2\cdot10^{13}$ cm^{-2} implantiert und anschließend EC- und Photolumineszenzmessungen durchgeführt. Für beide Isotope betrug die maximale Fremdatomkonzentration $1{,}4\cdot10^{19}$ cm^{-3}. Zwei Proben wurden vor der Implantation der seltenen Erden an der Ionendepositionsanlage ADONIS in Konstanz mit Sauerstoff implantiert. Die Energie der Sauerstoffionen wurde auf 13 keV eingestellt, so daß die Implantationstiefe des Sauerstoffes mit derjenigen der seltenen Erden übereinstimmt. Die Implantationsdosis betrug $4\cdot10^{14}$ O^+ cm^{-2}. Die Sauerstoffkonzentration war demzufolge im Implantationsgebiet um ein zehnfaches höher als die Konzentration an Tm bzw. Yb. Dieses Konzentrationsverhältnis führt zu der größten Lumineszenzausbeute im Infraroten [TorQ97].

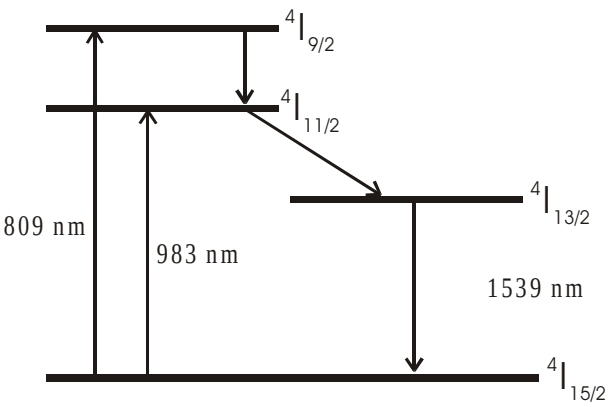

Bild 7.15: Energetische Zustände und interne Übergänge, die an der charakteristischen Lumineszenz des Erbiums bei 1,54 µm beteiligt sind.

Vor den Messungen wurde der Strahlenschaden durch Ausheilen für 10 Minuten bei 800°C in Vakuum reduziert.

Für die Gitterplatzbestimmung des ^{167}Tm sowie des ^{169}Yb mit der EC-Methode wurden die beim Zerfall emittierten Konversionselektronen verwendet. Wegen der geringen Rückstoßenergie von 1,8 eV, die beim Elektroneneinfangprozeß auf den Mutterkern ^{167}Tm wirkt, ändert dieser Kern dabei seine Position im Kristallgitter nicht und somit entspricht der gemessene Gitterplatz eigentlich dem Gitterplatz des implantierten ^{167}Tm. Es ist jedoch keine andere Besetzung der Gitterplätze von Er und Tm in GaN zu erwarten, da beide die gleiche Valenzelektronenkonfiguration haben.

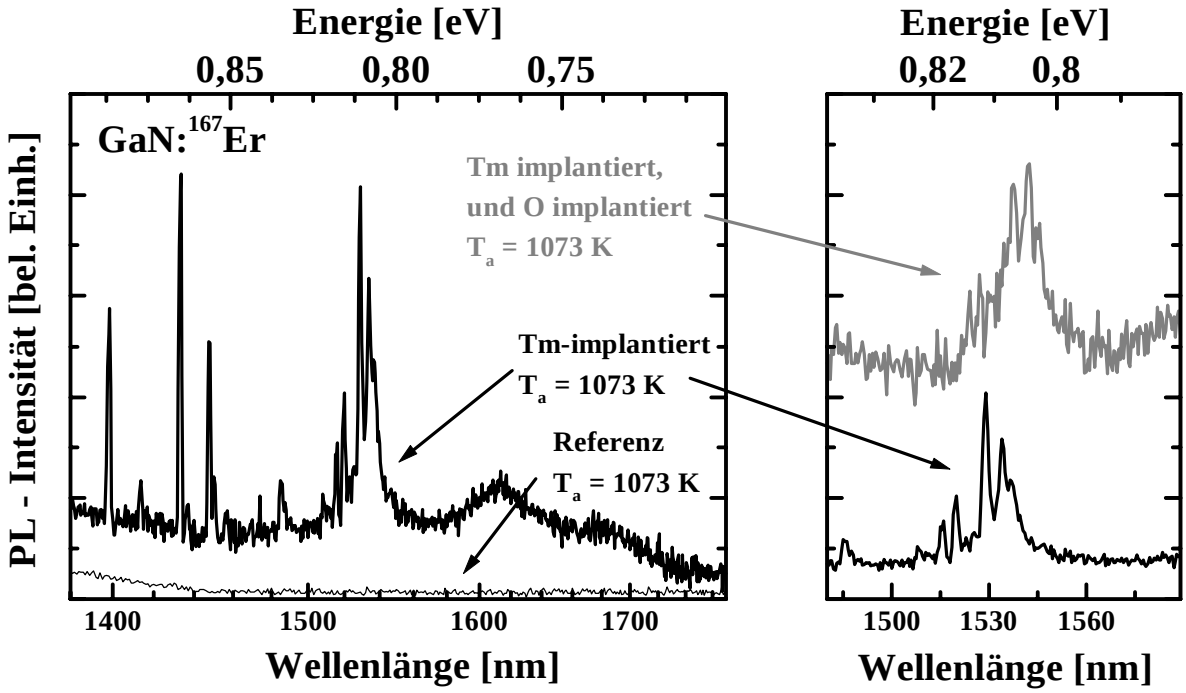

Bild 7.16: Photolumineszenzspektren von Er^{3+} in GaN. Links: Die obere Linie ist das Spektrum aufgenommen an einer mit Erbium implantierten Stelle der Probe, die untere an einer unimplantierten Stelle als Referenz. Rechts: Vergleich zwischen PL-Spektren, das untere Spektrum ist von der nur mit Tm implantierten Probe, das obere ist das Spektrum der mit Sauerstoff koimplantierten Probe.

Für eine nicht mit Sauerstoff vorimplantierte GaN-Probe ist das Channeling-Spektrum entlang der c-Achse nach der Implantation von ^{167}Tm (links) und ^{169}Yb (rechts) in Bild 7.13 dargestellt. In beiden Bildern sind Channeling-Effekte entlang der c-Achse und entlang von 6 Ebenen, die 30° zueinander liegen, zu sehen. Diese Intensitätsverteilung ist charakteristisch für Emitter, die innerhalb von Atomreihen entlang der c-Achse liegen. Zusätzlich zeigen die Aufnahmen in $<\bar{1}101>$ und $<02\bar{2}3>$ Kristallachsenrichtung axiale Channeling-Effekte und damit klar den Einbau der seltenen Erdatome auf substitutionellen Gitterplätzen.

Zur quantitativen Bestimmung der Gitterplatzanteile wurden Intensitätsverteilungen für Emitter auf substitutionellen, interstitiellen sowie auf vom substitutionellen Gitterplatz isotrop ausgelenkten Plätzen simuliert, und mit den gemessenen Spektren verglichen. Einen eindimensionalen Schnitt durch die berechnete Intensitätsverteilung für perfekt substitutionelle Plätze gibt die gestrichelte Linie in Bild 7.14 wieder. Die Anpassung an die experimentellen Daten (Punkte) ist wegen der unterschiedlichen Kurvenbreite nicht zufriedenstellend. Die beste Anpassung zeigt die durchgezogene Linie. Sie ergibt sich aus der Anpassung mit einem Spektrum, dem ein 90 ± 10 prozentiger Gitterplatzanteil auf substitutionellen Plätzen entspricht, bei dem die Emitter aber

isotrop ausgelenkt sind. Für die Auslenkungen der einzelnen Emitter wurde eine Gaußverteilung mit einer Breite von $\sigma = 0{,}025$ nm angenommen. Solche Auslenkungen können entstehen, wenn sich in der unmittelbaren Umgebung der Fremdatome Defektkomplexe befinden. Diese können beim Implantationsvorgang aus Leerstellen oder Zwischengitteratomen gebildet werden. Es ist bekannt, daß bei Anlaßtemperaturen bis über 1000°C solche Defektkomplexe in GaN nicht ausgeheilt werden können. Daneben kann auch das Bindungsverhalten der seltenen Erdatome zu Auslenkungen führen. Perfekte substitutionelle Plätze erfordern eine vierfach koordinierte Bindung und eine $5d^2 6s^2$ Elektronenkonfiguration. Benachbarte N-Atome liefern ein zusätzliches Elektron. Wird jedoch dieses Elektron in die 4f-Schale abgegeben, so ergibt sich nur eine dreifach koordinierte Bindung und damit wird eine Auslenkung wahrscheinlich. Dies ist im Einklang mit Photolumineszenzmessungen anderer Gruppen, die den seltenen Erden mindestens fünf verschiedene Plätze zuordnen [KimR98].

Die Messungen an den mit Sauerstoff vorimplantierten GaN-Proben zeigt die gleichen Intensitätsverteilungen. Hohe Sauerstoffkonzentrationen beeinflussen den Gitterplatz von implantierten seltenen Erdatomen also nicht.

Um detailliertere Aussagen über das Verhalten der seltenen Erden in GaN machen zu können, wurden die gleichen Proben, an denen die EC-Messungen durchgeführt worden sind, auch mit Photolumineszenzspektroskopie gemessen. Hierzu wurde der Zerfall des Thulium in das Erbium abgewartet und das Lumineszenzlicht im Wellenlängenbereich des Infraroten nach Anregung mit einem HeCd-Laser mit einer Energie von 3,25 eV untersucht. Es wurden die Linien des internen $^4I_{13/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ Übergangs (Bild 7.15) des Erbiums beobachtet [TorF97]. In Bild 7.16 sind die deutlichen Photolumineszenzlinien im infraroten Bereich im Vergleich zur Messung an derselben Probe im unimplantierten Bereich als Referenz dargestellt. Ein Vergleich zwischen den Messungen an der mit Sauerstoff koimplantierten Probe (rechts) zeigt, daß Unterschiede in der Intensitätsverteilung der Linien bestehen. Nach Sauerstoffkoimplantation verlagern sich die Intensitäten zugunsten etwas größerer Wellenlängen. Obwohl die koimplantierten Sauerstoffatome in der Umgebung der Erbiumatome diese in ihrem Lumineszenzverhalten stark beeinflussen, verändert sich die Gitterplatzbesetzung des Erbiums nicht.

8. Untersuchungen an AlN

Außer GaN wurde in dieser Arbeit auch noch AlN untersucht. Es handelt sich hierbei um einen Festkörper mit Wurtzitstruktur, der durch besondere Festkörpereigenschaften auffällt. So hat AlN eine direkte Bandlücke von 6,2 eV, ist mechanisch hart [DroA96] und hat damit verbunden eine hohe thermische Leitfähigkeit über Phononen (80% derjenigen von Kupfer [SlaT87]), einen hohen Schmelzpunkt (2275 K [Dav91]) und ist chemisch resistent. Außerdem hat AlN piezoelektrische Eigenschaften und ist zur Herstellung von UV-LED's und Detektoren, die im Sichtbaren nicht ansprechen, sowie für Detektoren im Hochtemperatureinsatz interessant [StrM92]. Wie schon bei GaN wurde zuerst das Verhalten des Kristalls durch Ausheilen nach Schwerionenimplantation mit geringen Dosen untersucht. Danach wurden die Diffusionseigenschaften und die Gitterplatzverteilung von Lithium und Natrium in AlN untersucht.

8.1 In in AlN

Ein großer Vorteil des AlN gegenüber GaN ist, daß bis zu Ausheiltemperaturen von 2000°C keine Stickstoffdesorption stattfindet [Zol97]. AlN kann also auch bei höheren Temperaturen im Vakuum ausgeheilt werden. Im folgenden Kapitel wird das Ausheilverhalten von Implantationsschäden nach Niederdosisimplantation von Schwerionen mit der EC-Methode mit der Sonde ^{111}In beschrieben. Dazu wurden einkristalline AlN Schichten mit einer c-Achsen-Orientierung senkrecht zur Probenoberfläche mit dem zu Aluminium isoelektronischen ^{111}In mit einer Energie von 285 keV bei Raumtemperatur und einer Dosis von $3\cdot10^{13}$ cm^{-2} implantiert. TRIM98 Berechnungen ergaben eine maximale Konzentration von etwa 10^{19} Ionen/cm^3. Die implantierte Probenfläche hatte einen Durchmesser von 3 mm. Es wurden die Konversionselektronen aus dem Zerfall des Tochterkerns ^{111}Cd verwendet. Wie beim Indium in GaN wurde die Emissionsverteilung der Konversionselektronen im Bereich ± 5° um die c-Achse mit einer Winkelauflösung von σ = 0,44° als Funktion der Anlaßtemperatur gemessen. Die Probe wurde in Vakuum für jeweils 10 Minuten in Schritten von 100 K bis auf 1273 K angelassen. Bild 8.1 zeigt einen eindimensionalen Schnitt des direkt nach der Implantation bei Raumtemperatur gemessenen EC-Spektrums entlang der c-Achse. Dargestellt ist die auf eine Zählrate ohne Channelingeffekt normierte Emissionsintensität, nach Korrektur des Untergrundes, der durch die Comptonelektronen verursacht wird. Es ist deutlich eine hohe Emissionsintensität entlang der c-Achsenrichtung (normierte Zählrate ≈ 1,45) zu erkennen. Ein Vergleich der Simulation für Gitterführung in einem perfekten Kristall mit dem Manybeam-Formalismus ergibt einen Anteil von 70 ± 15 % der Emitteratome auf substitutionellen

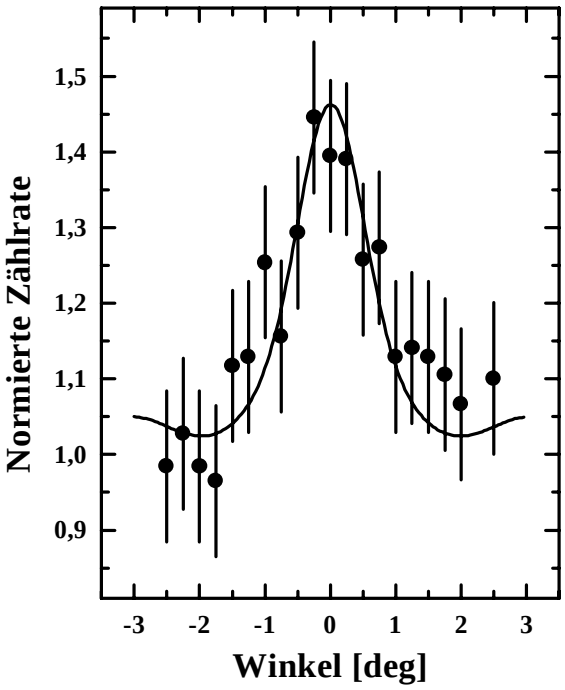

Bild 8.1: Normierte Zählrate der EC-Messung, nach Ionenimplantation von ^{111}In in AlN mit 285 keV, in Abhängigkeit des Winkels zur c-Achse. Gemessen wurden die Konversionselektronen der $\gamma\gamma$-Kaskade des ^{111}Cd.

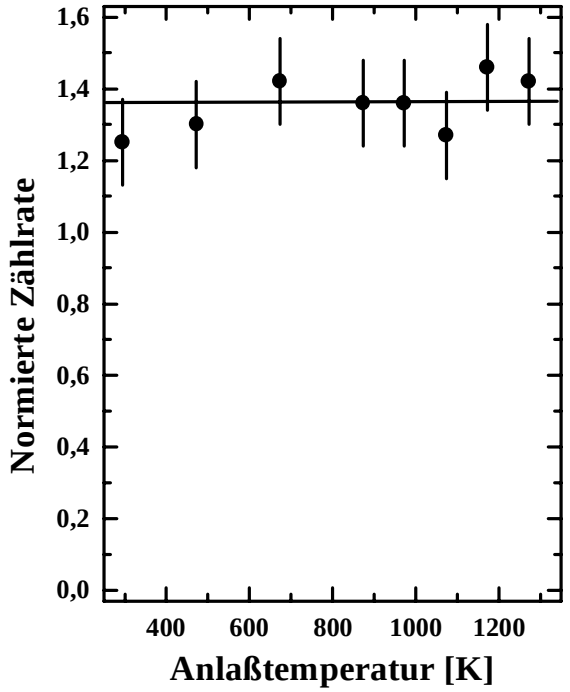

Bild 8.2: Normierte Zählrate der EC-Effekte der Konversionselektronen des ^{111}Cd entlang der c-Achse in Abhängigkeit der Anlaßtemperatur

Plätzen (Linie). Dies bedeutet auch, daß es keine signifikante Störung der Gitterführung durch eventuelle strukturelle Gitterfehler gibt. Zwar kann mit dieser Messung nicht unterschieden werden, ob das Indium auf einem Aluminium- oder einem Stickstoffplatz zerfallen ist, jedoch ist zu erwarten, daß das zu Aluminium isoelektronische Indium substitutionelle Aluminiumplätze einnimmt. Inwieweit sich der Channelingeffekt in Abhängigkeit der Anlaßtemperatur noch verbessert, d. h. doch noch strukturelle Gitterschäden ausgeheilt werden können, wurde untersucht, indem der Channelingeffekt nach schrittweisem Anlassen bis 873 K in 200 K Schritten und darüber bis 1273 K in Schrittweiten von 100 K, gemessen wurde. Wie das Spektrum in Bild 8.2 zeigt, verändert sich die Emissionsintensität entlang der c-Achse innerhalb des Fehlers in der Messung nicht. Dies bedeutet daß, falls bei anderen Isotopen, speziell wenn sie eine kleinere Masse besitzen, mit kleinerer Energie oder mit geringerer Dosis implantiert werden, Veränderungen des Channelingeffektes auftreten, die nicht an der Rekristallisierung des Gitters liegen können, sondern auf andere physikalische Gründe zurückzuführen sind. Um nun die Punktdefekte in direkter Umgebung der implantierten Sonden zu untersuchen, wurde die Probe wie auch GaN mit der Methode der gestörten γγ-Winkelkorrelation (**PAC**) vermessen. Wieder lassen sich die Gitterdefekte in der näheren Umgebung der Sonde, die sich auf den elektrischen Feldgradienten (EFG) auswirken, und das Ausheilverhalten eines Kristalls nach Ionenimplantation untersuchen.

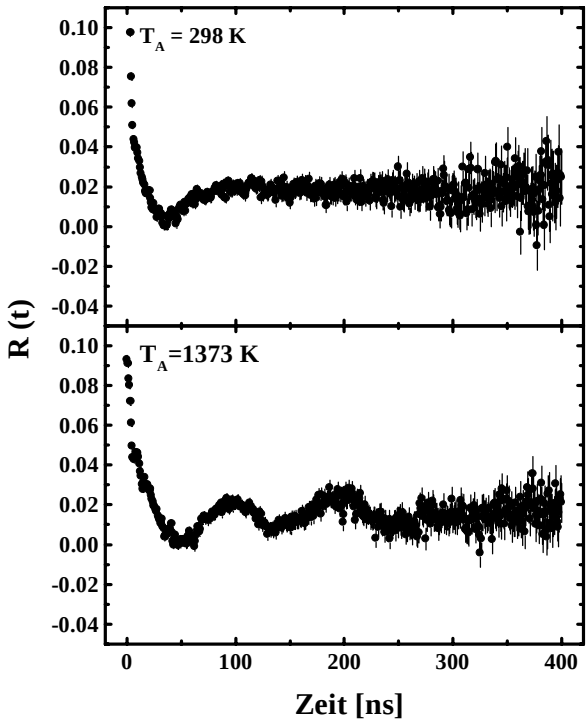

Bild 8.3: R(t)-Spektren von AlN implantiert mit 285 keV ^{111}In bei Raumtemperatur, gemessen direkt nach der Implantation und nach Ausheilen der Probe auf 1373 K.

Defekte in der unmittelbaren Sondenumgebung führen zu einer breiten Verteilung von Feldgradienten. Dieses äußert sich als starke Dämpfung im R(t)-Spektrum. In Bild 8.3 sind die Ergebnisse der PAC-Messungen direkt nach Implantation des ^{111}In mit 285 keV in GaN bei Raumtemperatur und nach Anlassen auf 1373 K dargestellt. Der rasche Abfall der Anisotropie des Zählratenverhältnisses R(t) in den direkt nach Implantation bei Raumtemperatur gemessenen Spektren zeigt, daß die ^{111}In Sonden einer Verteilung unterschiedlicher elektrischer

Feldgradienten (EFG) ausgesetzt sind. Dementsprechend befinden sich die Sonden direkt nach der Implantation in einer stark gestörten uneinheitlichen Umgebung. Nach Anlassen auf 1223 K befindet sich ein signifikanter Anteil der Sonden in einer Umgebung mit einheitlichem EFG, charakterisiert durch die Frequenz im R(t)-Spektrum.

Die EC-Experimente (oberer Graph) zeigen, daß die Kristallinität der AlN-Schicht nur unwesentlich durch die Ionenimplantation beeinträchtigt wird. Selbst direkt nach Implantation bei Raumtemperatur befinden sich ein Großteil der Sondenatome auf substitutionellen Plätzen. Die PAC-Messungen zeigen dagegen, daß nach Ionenimplantation alle Sonden von Defekten in nächster Umgebung umlagert sind, daß es aber möglich ist, zumindest einen signifikanten Teil der Implantationsdefekte durch Anlassen bis auf 1373 K auszuheilen.

8.2 Li und Na in AlN

Bei Untersuchungen von Zuständen in der Bandlücke des AlN wurden experimentell bisher nur die Zustände der Antisites, d. h. Aluminium auf Stickstoffplätzen und umgekehrt, und der Leerstellen berücksichtigt [TanE93], [TanE92]. Über eine Dotierung des AlN mit Fremdatomen gibt es meines Wissens nur eine theoretische Arbeit, die Beryllium und Magnesium als Akzeptoren und Silizium und Kohlenstoff als Donatoren behandelt [FarB99]. Die Niveaus des Beryllium in AlN sollen analog zu GaN bei 0,25 eV und für Magnesium bei 0,45 eV liegen, die Donatorzustände ein bis drei Elektronenvolt unter dem Leitungsband. Als Gruppe I Element können Lithium und Natrium je nach Gitterplatz als Donator im interstitiellen Fall oder als Doppelakzeptor im substitutionellen Fall wirken. Außerdem kann Lithium analog zu Wasserstoff auch mit Donator- und Akzeptoratomen wechselwirken und diese durch Paarbildung elektrisch passiveren. Deswegen wurden die Gitterplätze des Lithiums und des Natriums in Abhängigkeit der Temperatur bzw. der Ausheiltemperatur gemessen. In eine AlN Schicht wurde an ISOLDE am CERN ^{8}Li mit einer Energie von 60 keV implantiert. Die Implantationsdosis pro Meßspektrum betrug, wie auch bei dem Experiment an GaN, etwa $5\cdot10^{11}$ Li/cm^{2}. Die gesamte je Probe implantierte Dosis lag bei etwa 10^{13} Li/cm^{2}. Die während der Implantation erreichte maximale Konzentration liegt wegen der kurzen Lebensdauer des ^{8}Li nur bei etwa 10^{15} cm^{-3}. In Bild 8.4 ist die normierte Zählrate der EC-Effekte der α-Teilchen des ^{8}Li-Zerfalls in AlN entlang der c-Achse während Ionenimplantation mit 60 keV in Abhängigkeit von der Temperatur aufgetragen. Die Übergangstemperatur des Lithiums von interstitiellen zu substitutionellen Plätzen des AlN beträgt wie beim GaN 700 K. Das bedeutet, daß die Aktivierungsenergie für eine interstitielle Diffusion des Lithiums ebenfalls bei ≈ 1,6 eV liegt. Eine Ausdiffusion der Lithiumatome, was das Einsetzen der Diffusion auf substitutionellen Plätzen bedeuten würde, konnte bis zu 800 K nicht beobachtet werden. Die ^{8}Li Atome

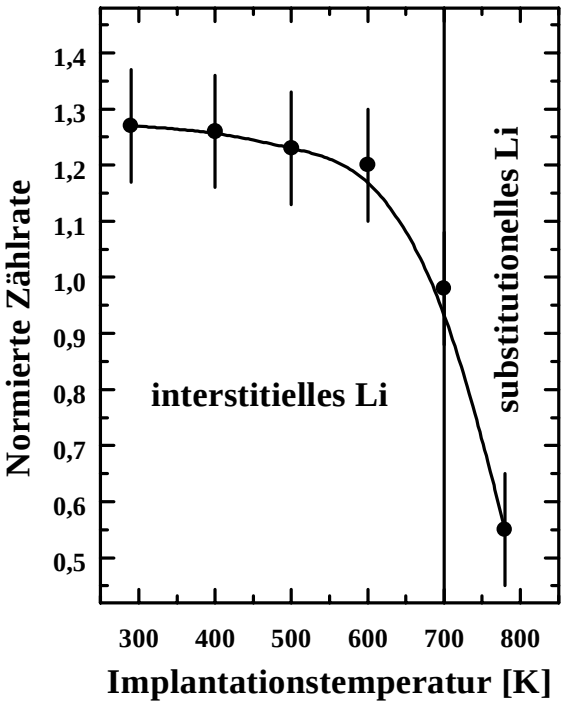

Bild 8.4: Normierte Zählrate der EC-Effekte der α-Teilchen des ^{8}Li Zerfalls in AlN entlang der c-Achse während Ionenimplantation mit 60 keV in Abhängigkeit von der Temperatur.

befinden sich bei Temperaturen unterhalb von 700 K im Zentrum der c-Achsen Hexagons bei 1/4 und 3/4 des c-Achsenabstands. Oberhalb 700 K besetzt das Lithium substitutionelle Galliumplätze (Li_{Ga}).

Des weiteren wurde der Gitterplatz eines Isotopes des nächstgrößeren Atoms der Gruppe I, also Natrium, nach Ionenimplantation in AlN mit Hilfe der EC-Methode untersucht. Für die folgenden Messungen wurde ^{24}Na am Isotopenseparator ISOLDE am CERN mit 30 keV in die AlN Schichten implantiert, und die Channelingeffekte der β^--Elektronen des Zerfalls gemessen. Ebenfalls Gegenstand der Untersuchung war, ob bei Temperaturen unter 1273 K eine interstitielle Diffusion auftritt, und ob es gelingt, das Natrium substitutionell einzubauen. Die Elektronen des β^--Zerfalls wurden über den Energieverlust in einem Silizium-Sperrschichtdetektor nachgewiesen. Die Emissionsverteilung der β^--Elektronen wurde jeweils als Raster um die c-Achse des Wurtzitgitters im Winkelbereich ± 3,3° bzw. ± 3,9° in Schritten von 0,3° gemessen. Die experimentelle Winkelauflösung des verwendeten Aufbaus beträgt 0,2°. Die gemessen Channelingspektren wurden dann mit den entsprechenden, mit dem Manybeam Formalismus simulierten Spektren verglichen, und so der Anteil der Emitter auf substitutionellen bzw. interstitiellen Plätzen bestimmt.

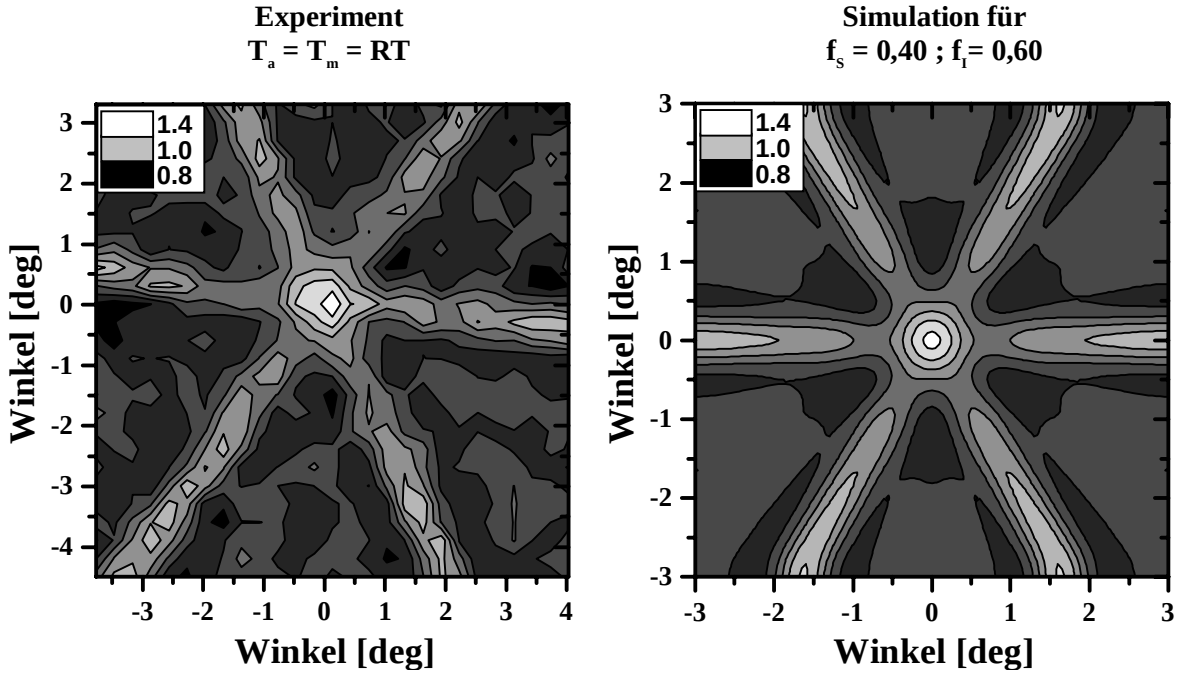

Bild 8.5: Normierte Zählrate der EC-Spektren der Elektronen aus dem β^--Zerfall des ^{24}Na in AlN nach Ionenimplantation mit 30 keV bei Raumtemperatur, gemessen direkt nach der Implantation. Links: Experimentell gemessene Emissionsverteilung entlang der c-Achse. Rechts: Mit dem Manybeam-Formalismus simuliertes EC-Spektrum unter der Annahme, 40% der Emitter besetzten substitutionelle Plätze und 60% der Emitter interstitielle Plätze inmitten der c-Achsen Hexagons.

In Bild 8.5 ist die gemessene Emissionsverteilung direkt nach der Implantation von ^{24}Na in AlN bei Raumtemperatur in Richtung der c-Achse dargestellt (links). Wie schon beim GaN läßt sich die Kombination des Channelingeffektes entlang der c-Achse und die dreizählige Symmetrie der Ebeneneffekte nur erklären, wenn Anteile sowohl auf substitutionellen wie auch auf interstitiellen Plätzen zugelassen werden. Eine Anpassung der berechneten Spektren ergibt die beste Übereinstimmung für einen Anteil von 40 ± 5% auf substitutionellen und 60 ± 5% auf interstitiellen Plätzen. Als interstitieller Platz wird hier, wie für Lithium, das Zentrum der c-Achsen Hexagons angenommen. Die Simulation für diese Gitterplatzverteilung ist auf der rechten Seite von Bild 8.5 gezeigt. Um nun die Veränderung der Gitterplatzverteilung in Abhängigkeit der Anlaßtemperatur zu untersuchen wurde

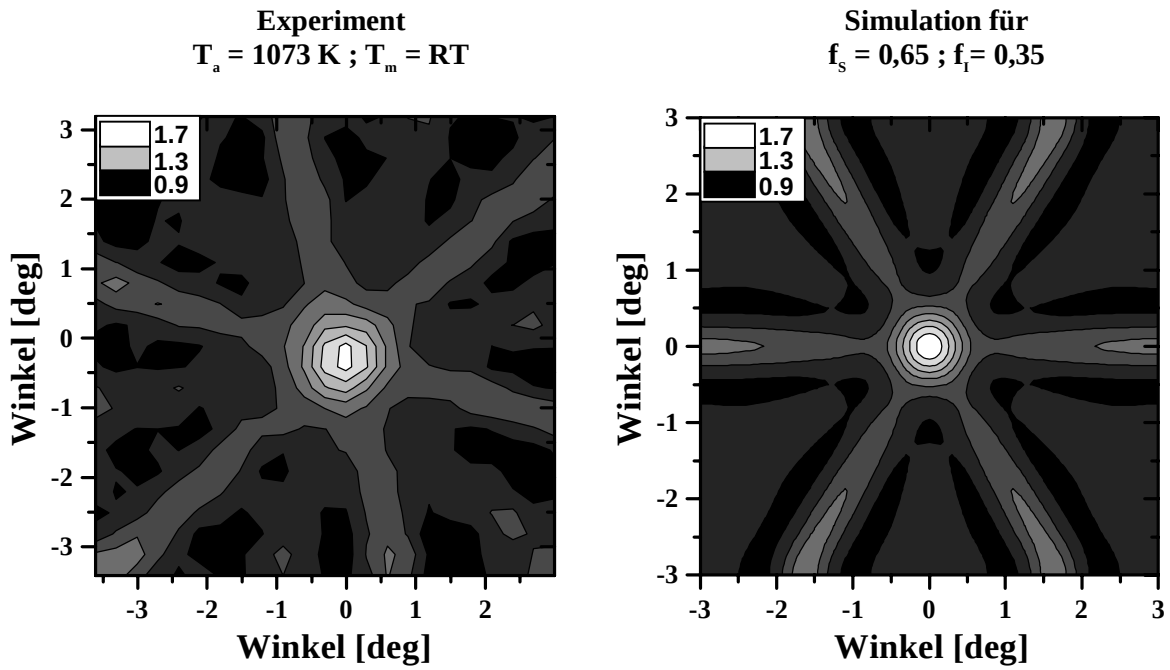

Bild 8.6: *Normierte Zählrate der EC-Spektren der Elektronen aus dem β^--Zerfall des ^{24}Na in AlN nach Ionenimplantation mit 30 keV bei Raumtemperatur, gemessen nach schrittweisem Anlassen der Probe auf 1073 K. Links: Experimentelle Emissionsverteilung entlang der c-Achse. Rechts: Mit dem Manybeam-Formalismus simuliertes EC-Spektrum unter der Annahme, 65% der Emitter besetzten substitutionelle Plätze und 35% der Emitter interstitielle Plätze inmitten der c-Achsen Hexagons.*

die Probe in Schritten von 100 K bis auf 1073 K für jeweils 10 min angelassen und nach jedem Schritt die Gitterplatzverteilung bei Raumtemperatur bestimmt. Im Gegensatz zu den Untersuchungen an GaN, bei denen sich keine Abhängigkeit des Channelingeffektes und somit der Gitterplatzverteilung nach Implantation von ^{24}Na ergab, nimmt die normierte Zählrate entlang der c-Achse nach Anlassen der AlN Probe bis auf 1073 K kontinuierlich zu. In Bild 8.6 ist auf der linken Seite das gemessene Spektrum nach schrittweisem Ausheilen bis auf 1073 K gezeigt. Auf der rechten Seite ist das, an das Experiment angepaßte simulierte Spektrum für einen Anteil der Emitter von 65 ± 5% auf substitutionellen und 35 ± 5% auf interstitiellen Plätzen gezeigt. In Bild 8.7 sind zum Vergleich die normierten Zählraten der EC-Messungen der Elektronen des ^{24}Na in Abhängigkeit des Winkels zur c-Achse, gemessen einmal nach der Implantation (Kreise) sowie nach schrittweisem Anlassen auf 1073 K (Punkte) aufgetragen, um den deutlichen Anstieg der normierten Zählrate nochmals zu verdeutlichen. Nachdem durch die Messung des ^{111}In in AlN gezeigt werden konnte, daß Veränderungen der EC-Spektren durch Rekristallisationsvorgänge auszuschließen sind, kommt als Grund nur eine Veränderung der Gitterplatzverteilung in Frage.

Hier stellt sich aber nun die Frage, warum bei AlN ein Gitterplatzwechsel in dem beobachteten Temperaturbereich vorhanden ist und dieser bei GaN nicht auftritt. Wichtig für einen substitutionellen Einbau ist die lokale Leerstellenkonzentration an dem Ort, bei dem das implantierte Ion zur Ruhe kommt. Die Leerstellenkonzentration, die durch die Implantation erzeugt wird, ist in unmittelbarer Umgebung des Ions sehr viel größer als die im nicht implantierten Material. Deswegen ist die durch Implantation erzeugte Leerstellenkonzentration und nicht die Leerstellenkonzentration des Ausgangsmaterials ausschlaggebend. Die Leerstellenkonzentrationen in GaN und AlN, die durch die Ionenimplantation erzeugt werden, sind ungefähr gleich, daher ist dieser Effekt auszuschließen. Eine andere Möglichkeit wäre, daß das Natrium in AlN im Gegensatz zu GaN, bei dem der

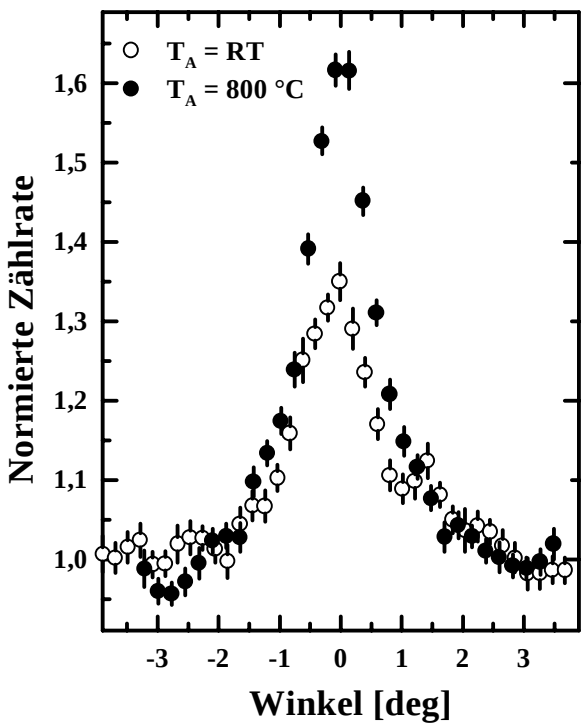

Bild 8.7: Normierte Zählraten der EC-Messungen der Elektronen des ^{24}Na in Abhängigkeit des Winkels zur c-Achse, gemessen direkt nach der Implantation (Kreise) sowie nach schrittweisem Anlassen auf 1073 K (Punkte). Der Vergleich zeigt eine deutliche Zunahme des Channelingeffektes der angelassenen Probe.

interstitielle Platz des Natriums energetisch im Gleichgewicht günstiger ist [NeuW99], auch energetisch eher substitutionell eingebaut werden kann. Da die Potentiale der beiden Gruppe III-Nitride aber sehr ähnlich sind, ist dies auch eher unwahrscheinlich. Eine dritte Möglichkeit ist, daß das Natrium auf interstitiellen Plätzen in GaN Defektkomplexe bildet, die im AlN nicht gebildet werden. Eine genauere Untersuchung müsste hier mit anderen Meßmethoden durchgeführt werden, um genauere Aussagen machen zu können.

Literatur

Ajz84 F. Ajzenberg-Selove
"Energy Levels of Light Nuclei A = 5 - 10"
Nuclear Physics **A413** (1984) 1

Aka98 I. Akasaki
"The Evolution of Nitride Semiconductors"
Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **482** (1998) 3

Amb98 O. Ambacher
"Growth and applications of Group III-nitrides"
J. Phys. D: Appl. Phys. **31** (1998) 2653

And96 F.G. Anderson
"Role of codopands in the luminescent output from Si:Er"
Appl Phys. Lett. **68** (1996) 2421

AndB82 J.U. Andersen, E. Bonderup, E. Laegsgaard, B.B. Marsh and A.H. Sorensen
"Axial Channeling Radiation from MeV Electrons"
Nucl. Instr. Meth. **194** (1982) 209

AndU68 J.U. Andersen and E. Uggerhoj
"Investigation of the energy and temperature dependence of the string effect"
Can. Jour. Phys. **46** (1968) 517

BilG97 A. Billeb, W. Grieshaber, D. Stocker, E.F. Schubert and R.F. Karlicek, Jr.
"Microcavity effects in GaN epitaxial films and in Ag/GaN/sapphire structures"
Appl. Phys. Lett. **70** (1997) 2790

BjoH86 T. Bjornstad, E. Hagebo, P. Hoff, O.C. Johnsson, E. Kugler, H.L. Ravn, S. Sundell, B. Vosicki, and the ISOLDE Collabotarion
"Methods for Production of Intense, Beams of Unstable Nuclei: New Developments at ISOLDE"
Physica Scripta **34** (1986) 578

Boh13 N. Bohr
"On the Theorie of the Decrease of Velocity of Moving Electrified Particles on passing through Matter"
Phil. Mag. **25** (1913) 10

Boh15 N. Bohr
"On the Decrease of Velocity of Swiftly Moving Electrified Particles in passing through Matter"
Phil. Mag. **30** (1915) 581

Bri98 R.D. Bringans
"Application of blue Laser to Printing"
Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **482** (1998) 1203

BurD97 A. Burchard, M. Deicher, D. Forkel-Wirth, E.E. Haller, R. Magerle, A. Prospero, A. Stötzler and the ISOLDE-Collaboration
"Implantation doping and hydrogen passivation of GaN"
Mat. Sci. For. **258-263** (1997) 1099

ChiT94 V.W. Chin, T.L. Tansley and T. Osotchan
"Electron mobilities in gallium, indium, and aluminium nitrides"
J. Appl. Phys. **75** (1994) 7365

ChuM78 W.K. Chu, J.W. Mayer, M.A. Nicolet
"Backscattering Spectrometry"
Academic Press New York, San Francisco, London (1978)

Dal96 M. Dalmer
"Gitterführungsexperimente an ionenimplantierten Halbleitern"
Diplomarbeit, Universität Konstanz (1996)

Dav91 R.F. Davis
"III-V Nitrides for Electronic and Optoelectronic Applications"
Proc. of the IEEE **79** No 5 (1991) 702

Dav93 R.F. Davis
"Thin films and devices of diamond, silicon carbide and gallium nitride"
Physica B **185** (1993) 1

DavW97 R.F. Davis, T.W. Weeks Jr, M.D. Bremser, S. Tanaka, R.S. Kern, Z. Sitar, K.S. Ailey, W.G. Perry and C. Wang
"Growth of AlN and GaN thin films via OMVPE and gas source MBE and their characterisation"
Sol. Stat. Elec. **41** No 2 (1997) 129

Die73 C.F. Dietrich
"Uncertainty, Calibration and Probability"
Hilger, London (1973)

Dom66 B. Domeij
"On the motion of α - particles in a crystal lattice studied by means of a monocrystalline α - source"
Arkiv för Fysik **32** 10 (1966) 179

DoyT68 P.A. Doyle and P.S. Turner
"Relativistic Hartree-Fock X-ray and Electron Scattering Factors"
Acta. Cryst. **A24** (1968) 390

DroA96 M.D. Drory, J.W. Ager III, T. Suski, I. Grzegory and S. Porowski
"Hardness and fracture toughness of bulk single crystal gallium nitride"
Appl. Phys. Lett. **69** (1996) 4044

Eck91 W. Eckstein
"Computer Simulation of Ion-Solid Interactions"
Spriner Verlag, Berlin, Heidelberg, New York (1991)

Edg94 J.H. Edgar
"Properties of Group III Nitrides"
INSPEC London (1994)

FarB99 A. Fara, F. Bernardini and V. Fiorentini
"Theoretical evidence for the semi-insulating character of AlN"
J. Appl. Phys. **85** (1999) 2001

FelM86 L.C. Feldman, J.W. Mayer
"Fundamentals of Surface and thin Film analysis"
Elvier Science, New York, Amsterdam, London (1986)

GroG74 R. Groh, G. Gerey, L. Bartha and J. I. Pankove
"On the thermal decomposition of GaN in vacuum"
Phys. Stat. Sol. **A 26** (1974) 353

HaaB97 D. Haase, M. Burkard, M. Schmid, A. Dörnen, H. Schweizer, H. Bolay and F. Scholz
"Electrical and optical characterisation of defects in GaN generated by ion implantation"
Mat. Sci. For. **258-263** (1997) 1093

Hof87 H. Hofsäss
"Channeling von Elektronen und Positronen zur Lokalisierung von radioaktiven Sondenatomen in Metallen und Halbleitern"
Dissertation Universität Konstanz 1997

Hof99 D.M. Hofmann
"Werkstoffe für blaue Leuchtdioden und Laser"
Physik in unserer Zeit **30** Nr. 2 (1999) 69

HofD97 H. Hofsäss, M. Dalmer, M. Restle and C. Ronning
"Substitutional phosphorus doping of diamond by ion implantation"
J. Appl. Phys. **81** (1997) 2566

HofL91 H. Hofsäss and G. Lindner
"Emission Channeling and Blocking"
Physics Reports **201** (1991) 121

HofW94 H. Hofsäss, U. Wahl and S.G. Jahn
"Impurity lattice location and recovery of structural defects in semiconductors studied by emission channeling"
Hyperf. Inter. **84** (1994) 27

HömT97 U. Hömmerich, M. Thaik, T. Robinson-Brown, J.D. MacKenzie, C.R. Abernathy, S.J. Pearton, R.G. Wilson, R.N. Schwarz and J.M. Zavada
"High temperature photoluminescense and photoluminescence exitation spectroscopy of Er doped GaN"
Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **482** (1998) 685

Hor98 H. Horeis
"Mit Blaulicht an die Spitze"
Bild der Wissenschaft 4 (1998) 32

IBM96 IBM
"Full Color Active Matrix Display Based on GaN Lateral Light Emitting Diode Structures"
IBM Technical Disclosure Bull. **39** no.08 (1996) 75

Joh65 E.O Johnson
"Physical limitation on frequency and power parameters of transistors"
RCA Review **26** (1965) 163

Jun93 E.D. Jungbluth
"Gallium nitride: will it impact semiconductor technology?"
Laser Focus World **29** (1993) 33

JuzH38 R. Juza und H. Hahn
"Über die Kristallstrukturen von Cu_3N, GaN und InN Metallamine und Metallnitride"
Zeitschrift für anorg. und allg. Chemie **239** (1938) 282

KarP84 J. Karpinski and S. Porowski
"High pressure thermodynamics of GaN"
J. Crystal Growth **66** (1984) 11

Key72 R.W. Keyes
"Figure of Merit for Semiconductors for High-Speed Switches"
Proc. of IEEE February (1972) 225

KimR98 S. Kim, S.J. Rhee, X. Li, J.J. Coleman and S.G. Bishop
"Photoluminescence and photoluminescence exitation spectroscopy of multiple Nd^{3+} sites in Nd-implanted GaN"
Phys. Rev. B **57** (1998) 14588

KugF92 E. Kugler, D. Fianden, B. Jonson, H. Haas, A. Przewloka, H.L. Ravn, D.J. Simon, K, Zimmer, and the ISOLDE Collaboration
"The new CERN-ISOLDE on-line mass-seperator facility at the PS-Booster"
Nucl. Inst. & Meth. in Phys. Res. **B70** (1992) 41

Lin65 J. Lindhard
"Influence of crystal lattice on motion of energetic charged particles"
Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 34, no 14 (1965)

LinW89 G. Lindner, S. Winter, H. Hofsäss, S. Jahn, S. Blässer, E. Recknagel and G. Weyer
"Site Changes of Ion-Implanted Li in GaAs below 300 K"
Phys. Rev. Lett. **63** (1989) 179

Mat92 T. Matsuoka
"Current status of GaN and related compounds as wide-gap semiconductors"
J Crystal Growth **124** (1992) 433

MayE70 J.W. Mayer, L. Eriksson, J.A. Davies
"Ion implantation in semiconductors"
Academic Press New York, London (1970)

MelR98 Edited by M. Melloch and M.A. Reed
"Compound Semiconductors 1997"
Proc. IEEE **156** Institute of Physics Publishing, Bristol and Phyildelphia

MolL93 R.J. Molar, T. Lei and T.D. Moustakas
"Electron transport mechanism in gallium nitride"
Appl. Phys. Lett. **62** (1993) 72

Mor73 D.V. Morgan
"Channeling"
John Wiley & Sons London, New York (1973)

MorS94 H. Morkoç, S. Strite, G.B. Gao, M.E. Lin, B. Sverdlov and M. Bruns
"Large-band-gap SiC, III-V nitride, and II-VI ZnSe-based semiconductor device technologies"
J. Appl. Phys. **76** (1994) 1363

Nak97 S. Nakamura
"III-V Nitrides Based Light - Emitting Devices"
Sol. Stat. Com. **102** no. 2-3 (1997) 237

Nak98 S. Nakamura
"InGaN/GaN/AlGaN-based Laser Diodes with an estimated Lifetime of longer than 10000 Hours"
Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **482** (1998) 1145

NakF97 S. Nakamura and G. Fasol
"The Blue Laser Diode - Gallium-Nitride based Light Emitters and Laser"
Springer-Verlag (1997)

NakT92 S. Nakamura, T. Mukai, M. Senoh and N. Iwasa
"Thermal Annealing Effects on P-Type Mg-Doped GaN Films"
Jpn. J. Appl. Phys. **31** (1992) L139

Neu66 H. Neuert
"Kernphysikalische Meßverfahren"
Verlag Braun, Karlsruhe (1966)

NeuW99 J. Neugebauer and C.G. Van de Walle
"Chemical trends for acceptor impurities in GaN"
J. Appl. Phys. **85** (1999) 3003

OhuT97 Y. Ohuchi, K. Tadatomo, H. Nakayama, N. Kaneda, T. Detchprohm, K. Hiramatsu and N. Sawaki
"New dopant precursors for n-type and p-type GaN"
J. Crystal Growth **170** (1997) 325

Ott24 H. Ott
"Das Gitter des Aluminiumnitrids (AlN)"
Zeitschrift für Physik **22** (1924) 201

PanD73 J.I. Pankove, M.T. Duffy, E.A. Miller and J.E. Berkeyheiser
"Luminescence of insulating Be-doped and Li-doped GaN"
J. Luminescence **8** (1973) 89

PanH76 J.I. Pankove and J.A. Hutchby
"Photoluminescence of ion-implanted GaN"
J. Appl. Phys. **47** (1976) 5387

Pea97 Edited by S.J. Pearton
"GaN and Related Materials"
OPA (Overseas Publishers Association) published by Gordon and Breach Publishers Netherlands 1997

PonB97 F.A. Ponce and D.P. Bour
"Nitride-based semiconductors for blue and green light-emitting devices"
Nature **386** (1997) 351

Res96 M. Restle
"Emissionschanneling-Untersuchungen an ionenimplantierten Halbleitern mit großer Bandlücke"
Dissertation Universität Konstanz (1996)

RimF97 E. Rimmini, A. La Ferla, G. Galvagno, S. Coffa, G. Franzo and F. Priolo
"Oxygen-impurity interactions in crystalline silicon: The cases of aluminium and erbium"
Nucl. Inst. & Meth. in Phys. Res. **B121** (1997) 18

RonD97 C. Ronning, M. Dalmer, M. Restle, M.D. Bremser, R.F. Davis and H. Hofsäss
"Recovery of structural defects in GaN after heavy ion implantation"
Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **468** (1997) 407

Rut11 E. Rutherford
"The scattering of α and β Particles by Matter and the Structure of the Atom"
Phil. Mag. **21** (1911) 669

SaaL97 K. Saarinen, T. Laine, S. Kuisma, J. Nissilä, P. Hautojärvi, L. Dobrzynski, J.M. Baranowski, K. Pakula, R. Stepniewski, M. Wojdak, A. Wysmolek, T. Suski, M. Leszczynski, I. Grzegory and S. Porowski
"Observation of Native Ga Vacancies in GaN by Positron Annihilation"
Phys. Rev. Lett. **79** (1997) 3030

SalK96 A. Salvador, W. Kim, Ö. Aktas, A. Botchkarev, Z. Fan and H. Morkoç
"Near ultraviolet luminescence of Be dpoed GaN grown by reactive molecular beam epitaxy using ammonia"
Appl. Phys. Lett. **69** (1996) 2692

SchP64 J.P. Schiffer, P.N. Parks and J. Heberle
"Mössbauer Effect for Fe57 in Beryllium, Copper, Tungsten, and Platinum"
Phys. Rev. **133** (1964) A1553

SchS97 P. Schlotter, R. Schmidt and J. Schneider
"Luminescence converions of blue light emitting diodes"
Appl. Phys. A **64** (1997) 417

SchW92 G. Schatz, A. Weidinger
"Nukleare Festkörperphysik"
Teubner Stuttgart (1992)

Sig69 P. Sigmund
"On the number of atoms displaced by implanted ions or energetic recoil atoms"
Appl. Phys. Lett. **14** (1969) 114

Sla73 G.A. Slack
"Nonmetallic crystals with high thermal conductivity"
J, Phys. Chem. Solids **34** (1973) 321

SlaT87 G.A. Slack, R.A. Tanzilli, R.O. Pohl and J.W. Vandersande
"The intrinsic thermal conductivity of AlN"
J. Phys. Chem. Solids **48** (1987) 641

SmuB87 P.J.M. Smulders and D.O. Boerma
"Computer simulation of channeling in single crysals"
Nucl Inst. Meth. **B29** (1987) 471

StrM92 S. Strite and H. Morkoç
"GaN, AlN, and InN: A review"
J. Vac. Sci. Technol. **B 10(4)** (1992) 1237

Sze98 Edited by S.M. Sze
"Modern semiconductor device physics"
John Wiley & sons, Inc 1998 New York

TanE92 T.L. Tansley and R.J. Egan
"Point - defect energies in the nitrides of aluminium, gallium, and indium"
Phys. Rev. B **45** (1992) 10942

TanE93 T.L. Tansley and R.J. Egan
"Defects, optical absorption and electron mobility in indium and gallium nitrides"
Physica B **185** (1993) 190

TanW96 H.H. Tan, J.S. Williams, J. Zou, D.J.H. Cockayne, S.J. Pearton and R.A. Stall
"Damage to epitaxial GaN layers by silicon implantation"
Appl. Phys. Lett. **69** (1996) 2364

TanW98 H.H. Tan, J.S. Williams, J. Zou, D.J.H. Cockayne, S.J. Pearton, Zolper and R.A. Stall
"Annealing of ion implanted gallium nitride"
Appl. Phys. Lett. **72** (1998) 1190

TerF97 A. Terrasi, G. Franzò, S. Coffa, F. Priolo, F.D´Acapito and S. Mobilio
"Evolution of the local environment around Er upon thermal annealing in Er and O-co-implanted Si"
Appl. Phys. Lett. **70** (1997) 1712

TorF96 J.T. Torvik, R.J. Feuerstein, J.I. Pankove, C.H. Qiu and F. Namavar
"Electroluminescence from erbium and oxygen coimplanted GaN"
Appl. Phys. Lett. **69** (1996) 2098

TorF97 J.T. Torvik, R.J. Feuerstein, C.H. Qiu, J.I. Pankove and F. Namavar
"Photoluminescence exitation measurements on erbium implanted GaN"
J. Appl. Phys. **82** (1997) 1824

TorQ97 J.T. Torvik, C.H. Qiu, R.J. Feuerstein, J.I. Pankove and F. Namavar
"Photo-, cathodo-, and electroluminescence from erbium and oxygen co-implanted GaN"
J. Appl. Phys. **81** (1997) 6343

Wah97 U. Wahl and ISOLDE Collaboration
"Emission Channeling Studies of Li in Semiconductors"
Physics Reports **280** (1997) 145

WahH92 U. Wahl, H. Hofsäss, S.G. Jahn, S. Winter, E. Recknagel and ISOLDE-Collaboration
"Lattice site changes of ion implanted ^{8}Li in InP studied by alpha emission channeling"
Nucl. Inst. & Meth. in Phys. Res. **B64** (1992) 221

WahV97 U. Wahl, A. Vantomme,J. De Wachter, R. Moons, G. Langouce, J.G. Marques, J.G. Correia and ISOLDE Collaboration
"Direkt Evidence for Tetrahedral Interstitial Er in Si"
Phys. Rev. Lett. **79** (1997) 2069

WilP84 J.S. Williams, J.M. Poate
"Ion Implantation and Beam Processing"
Academic Press Sydney New York, San Francisco, San Diego, Tokyo, Toronto, London (1984)

WilP95 R.G. Wilson, S.J. Pearton, C.R. Abernathy and J.M. Zavada
"Thermal stability of implanted dopants in GaN"
Appl. Phys. Lett. **66** (1995) 2238

WilS94 R.G. Wilson, R.N. Schwarz, C.R. Abernathy, S.J. Pearton, N. Newman, M. Rubin, T. Fu and J.M. Zavada
"1.54 µm photoluminescence from Er - implanted GaN and AlN"
Appl. Phys. Lett. **65** (1994) 992

WilV95 R.G. Wilson, C.B. Vartuli, C.R. Abernathy, S.J. Pearton and J.M. Zavada
"Implantaion and redistribution of dopants and isolation species in GaN and related compounds"
Solid-State Electr. **38** (1995) 1329

ZieB85 J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark
"The Stopping and Range of Ions in Solids"
Pergamon Press (1985)

Zol97 J.C. Zolper
"Ion implantation in group III-nitride semiconductors: a tool for doping and defect studies"
J Crystal Growth **178** (1997) 157

ZolS96 J.C. Zolper, R.J. Shul, A.G. Baca, R.G. Wilson, S.J. Pearton and R.A. Stall
"Ion-implanted GaN junction field effect transistor"
Appl. Phys. Lett. **68** (1996) 2273

ZolW96 J.C. Zolper, R.G. Wilson, S.J. Pearton and R.A. Stall
"Ca and O implantation doping of GaN"
Appl. Phys. Lett. **68** (1996) 1945