

MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR PLASMAPHYSIK
GARCHING BEI MÜNCHEN

Zusammenhang zwischen Strahlenschäden und
Wasserstoffeffang in Graphit und Siliziumkarbid

Relation between radiation damage and hydrogen
trapping in graphite and silicon carbide

Rainer Siegele

IPP 9/87

August 1991

*Die nachstehende Arbeit wurde im Rahmen des Vertrages zwischen dem
Max-Planck-Institut für Plasmaphysik und der Europäischen Atomgemeinschaft über die
Zusammenarbeit auf dem Gebiete der Plasmaphysik durchgeführt.*

August 1991

Abstract

HOPG graphite and β -SiC have been implanted with deuterium fluences in the range from 10^{15} to 10^{18} D/cm² for various temperatures. The damage due to the implantation was measured by Rutherford backscattering in a channeling direction (RBS-C). At low implantation temperatures (295–573 K), the damage initially increases proportional to the energy deposited via nuclear collisions. In contrast to this result the damage after implantation at 773 K is stabilized by the implanted deuterium and later on grows by the capture of mobile defects. In spite of the different damage of the target for low fluences all the implanted deuterium is trapped in the whole temperature range observed (295–773 K).

Annealing experiments show the formation of different kinds of damage at implantation temperatures of 295 and 773 K. At 295 K are initially small defects formed, which can be annealed at temperatures up to 1073 K. While the damage is increased they agglomerate and form more stable defects, which do not anneal up to this temperature. In contrast to these results at 773 K the immediate formation of more stable defects is observed.

After implantation at 295 K and 773 K, the deuterium is located at different trapping sites in the lattice. While the deuterium shows an ordering in the host lattice after room temperature implantation, no ordering is observed after implantation at 773 K. The damaging behaviour and the deuterium location can be explained by the occurrence of different kinds of defects.

* This report is identical with a dissertation under the same title which was submitted to the Technische Universität München in May 1991.

August 1991

Zusammenfassung

HOPG-Graphit und β -SiC wurden bei verschiedenen Targettemperaturen mit Deuteriumfluenzen von 10^{15} bis 10^{18} D/cm² implantiert und die Schädigung mit Rutherford-Rückstreuung in Gitterführungsgeometrie (RBS-C) gemessen. Bei niedrigen Temperaturen (295–573 K) wächst die Schädigung bei kleinen Fluenzen proportional zur deponierten Energie. Im Gegensatz dazu stabilisiert das implantierte Deuterium bei 773 K die Defekte, die im weiteren Verlauf durch den Einfang mobiler Defekte wachsen. Dadurch ergibt sich in beiden Temperaturbereichen ein unterschiedlicher Verlauf der Schädigung als Funktion der Fluenz. Trotz der unterschiedlichen Schädigung wird bei kleinen Fluenzen das gesamte Deuterium im untersuchten Temperaturbereich (295–773 K) zurückgehalten.

Ausheilexperimente zeigen die Bildung unterschiedlicher Defekttypen bei Implantationstemperaturen von 295 und 773 K. Bei 295 K werden zunächst überwiegend kleine Defekte gebildet, die schon bei Temperaturen bis 1073 K ausheilen. Erst bei stärkerer Schädigung der Proben wachsen diese zu ausgedehnten Defekten heran, die bei dieser Temperatur stabil sind. Im Gegensatz dazu sind bei 773 K schon bei geringer Schädigung ausgedehnte, stabile Defekte vorhanden, die bis 1073 K nicht mehr ausheilen.

Das Deuterium zeigt nach der Implantation bei 295 K und 773 K deutliche Unterschiede bezüglich seiner Gitterposition im Kristall. Während das Deuterium nach Implantation bei 295 K eine Ordnung im Kristallgitter zeigt, erscheint es nach 773 K völlig ungeordnet im Gitter. Das Schädigungsverhalten und die Unterschiede in der Orientierung in beiden Temperaturbereichen können auf verschiedene Defekttypen zurückgeführt werden.

* Diese Arbeit ist identisch mit der Dissertation gleichen Titels, die im Mai 1991 bei der Technischen Universität München eingereicht wurde.

Meinen Eltern

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Aufgabenstellung	1
2	Verhalten von leichten Ionen in Materie	5
2.1	Energieverlust	5
2.1.1	Elektronische Abbremsung	6
2.1.2	Nuklearer Energieverlust	7
2.1.3	Bragg'sche Regel	9
2.2	Gitterfehler und Strahlenschäden	10
2.2.1	Erzeugung von Strahlenschäden	13
2.2.2	Struktur und Eigenschaften von Graphit	21
2.2.3	Defekte in Graphit	22
2.2.4	Struktur und Eigenschaften von Siliziumkarbid	25
2.2.5	Defekte in Siliziumkarbid	26
2.3	Wasserstoffefang und Wasserstoffrückhaltevermögen	27
2.3.1	Graphit	29
2.3.2	Siliziumkarbid	30
2.4	Gitterposition von Deuterium in verschiedenen Materialien	30
3	Experimentelle Methoden und Apparatur	33
3.1	Rutherford-Rückstreuung	33
3.2	Der Gitterführungseffekt	35
3.2.1	Aufteilung in geführten und nicht-geführten Strahl	38
3.2.2	Zunahme des nicht-geführten Strahls mit der Eindringtiefe	42
3.2.3	Reichweite und Energieverlust in Einkristallen	44
3.2.4	Bestimmung der Strahlenschäden	45
3.2.5	Unterscheidung von verschiedenen Defekten	48
3.2.6	Bestimmung der Gitterposition von Fremdatomen	50

3.3	Bestimmung der implantierten Deuteriummenge	51
3.4	Apparatur	51
3.4.1	Aufbau der Probenkammer	52
3.4.2	Modifikation des Aufbaus zur Messung der Gitterposition von Deuterium	54
3.4.3	Strahlablenvorrichtung	55
3.4.4	Ablauf der Messung	55
3.5	Meßfehler	57
3.5.1	Einfluß des Analysestrahls	57
3.5.2	Meßfehler der implantierten Deuteriummenge	58
3.5.3	Meßfehler der Defektkonzentration	59
3.6	Probenpräparation	59
3.6.1	Graphit	59
3.6.2	Siliziumkarbid	61
3.7	Untersuchung der Proben mit dem Licht- und Elektronenmikroskop	61
4	Meßergebnisse	63
4.1	Deuteriumeinfang in Graphit	63
4.2	Strahlenschäden in Graphit	65
4.3	Deuteriumeinfang in SiC	72
4.4	Strahlenschäden in SiC	75
4.5	Ausheilen von Strahlenschäden und thermische Desorption von Deuterium	79
4.6	Gitterposition des Deuteriums	85
5	Diskussion	89
5.1	Strahlenschäden	89
5.2	Deuteriumeinfang	100
6	Zusammenfassung	111
7	Literatur	113

Verzeichnis der Symbole

a_{TF}	Thomas-Fermi-Abschirmradius $\frac{0.8853a_0}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}}$ nach Lindhard
a_0	$\hbar^2/(me^2) = 0,528 \text{ \AA}$, Bohr'scher Radius
a, b, c	Kristallachsen
$c/2$	Ebenenabstand im Graphitgitter
d	Abstand der Atome in einer Kette
e	$1,602 \cdot 10^{-19} \text{C}$, Elementarladung ($e^2 = 14,4 \text{ eV \AA}$)
E_0	Energie des einfallenden Projektils
E_1	Energie des reflektierten Projektils an der Oberfläche nach Energieverlust
E_0^*	Energie des einfallenden Projektils in der Tiefe x nach Energieverlust
E_1^*	Energie des reflektierten Projektils
$E_{\perp c}$	kritische Energie (senkrecht zu den Ketten) für Gitterführung
E_d	Verlagerungsenergie
E_V^f, E_I^f	Bildungsenergie für Defekte, für Leerstellen, für Zwischengitteratome
E^m	Aktivierungsenergie für die Bewegung von Defekten
E_n	nuklearer Anteil des Energieverlusts
$F(\vec{r})$	Flußdichteverteilung der Projektile
f	Streufaktor
I	Mittlere Anregungsenergie der Targetatome
k	$8,62 \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{K}}$, Boltzmann-Konstante
k_m	$\left(\frac{M_1 \cos \theta \pm \sqrt{M_2^2 - M_1^2 \sin^2 \theta}}{M_1 + M_2} \right)^2$, kinematischer Faktor
M_1	Masse des einfallenden Teilchens (Projektile)
M_2	Masse des Gitteratoms (Target)
M_0	$\frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$, reduzierte Masse
$n(x)$	Defektverteilung
$N, N(x)$	Teilchendichte im Festkörper
r_c	kritischer Radius für Gitterführung
T_{max}	maximaler Energieübertrag bei Stoß

v_0	$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar}$, Orbitalgeschwindigkeit auf der ersten Bohrschen Bahn
Z_1	Ordnungszahl des einfallenden Teilchens (Projektile)
Z_2	Ordnungszahl des Gitteratoms (Target)
ψ	Winkel der Projektillbahn zu dichtgepackten Gitterachsen
ψ_1	$\sqrt{\frac{2Z_1Z_2e^2}{Ed}}$, charakteristischer Winkel
ψ_c	kritischer Winkel für Gitterführung
χ_{min}	normierte Intensität im Minimum
$\chi_R(x)$	nicht-geführter Strahlanteil
$\chi_R^*(x)$	nicht-geführter Strahlanteil in geschädigter Probe
$\chi_D(x)$	normierte Rückstreuintensität der geschädigten Probe
$\chi_v(x)$	normierte Rückstreuintensität der ungeschädigten Probe
$\chi(x)$	normierte Rückstreuintensität
ρ_L	reduzierter Weg nach Lindhard
σ_{DC}	<i>Dechanneling Factor</i>
ϵ_L	reduzierte Energie nach Lindhard
$\epsilon \ \epsilon_e, \epsilon_n$	Bremsquerschnitt, elektronischer, nuklearer Bremsquerschnitt
ϵ_0	$1,4184 \cdot 10^{-30} \frac{C^2}{eV_m}$, elektrische Feldkonstante
α	Einfallswinkel des Projektils zur Targetnormalen
β	Ausfallswinkel des reflektierten Projektils zur Targetnormalen
ϑ	Streuwinkel in Laborkoordinaten
Θ	Streuwinkel im Schwerpunktsystem
$d\sigma$	differentieller Wirkungsquerschnitt
ν_0	charakteristische atomare Schwingungsfrequenz
$\Delta\Omega$	Raumwinkel des Detektors
α -Graphit	hexagonaler Graphit
β -Graphit	rhomboedrischer Graphit
α -SiC	hexagonales bzw. rhomboedrisches Siliziumkarbid
β -SiC	kubisches Siliziumkarbid

1 Einleitung und Aufgabenstellung

Bei der Verschmelzung leichter Atomkerne wird Energie freigesetzt. In zukünftigen Fusionsreaktoren soll dieser Prozeß in kontrollierter Form zur Energiegewinnung ausgenutzt werden. Die Umwandlung von Deuterium und Tritium in Helium und Neutronen in einem magnetisch eingeschlossenen Plasma stellt zur Zeit die aussichtsreichste Möglichkeit zur Nutzung der Kernfusion dar. Neutronen, neutrale Atome und, wegen des unvollständigen magnetischen Einschlusses auch Ionen, verlassen das Plasma und treffen auf die Wand. Diese ist hohen Flüssen von Ionen und Atomen, vor allem von Wasserstoffisotopen, ausgesetzt. Die Wechselwirkung der Atome mit der Wand führt zur Erosion des Wandmaterials und zur Deposition von Wasserstoff in oberflächennahen Schichten. Dort finden verschiedene Vorgänge statt, die unter dem Begriff Plasma-Wand-Wechselwirkung zusammengefaßt werden.

Während die Neutronen mit Energien von einigen MeV weit in feste Materialien eindringen oder diese ganz durchdringen können, ist die Reichweite der Ionen mit einigen keV auf oberflächennahe Bereiche beschränkt, da sie eine starke Abbremsung im Festkörper erfahren. Beide verursachen jedoch Strahlenschäden, indem sie Gitteratome anstoßen. Es entstehen Stoßkaskaden, sofern ein angestoßenes Gitteratom genügend Energie besitzt, um weitere Atome von ihren Plätzen zu lösen. Den Vorgang, bei dem Atome infolge einer oberflächennahen Stoßkaskade den Festkörper verlassen, nennt man Zerstäubung.

In heutigen Fusionsexperimenten finden Graphit und verschiedene Karbide als Limiter und als kachelartiger Schutz der Wand des Plasmagefäßes Verwendung. Die Wechselwirkung dieser Materialien mit dem Plasma ist deshalb von besonderer Bedeutung. In einem Fusionsreaktor ist neben der Zerstäubung des Wandmaterials die Gesamtmenge des Wasserstoffs in der Wand sowie seine thermische und ioneninduzierte Freisetzung relevant. Während die Zerstäubung der Wandmaterialien zu unerwünschten Verunreinigungen und damit zur Verminderung der Energie-Einschlußzeit führt, besitzt das Wasserstoff-

Recycling, also das Einlagern und Wiederfreisetzen von Wasserstoff im Wandmaterial, großes Gewicht für die Teilchenbilanz im Plasma.

Vor allem die Deposition und das Verhalten von Wasserstoff in Graphit und verschiedenen Karbiden war der Gegenstand zahlreicher Untersuchungen im Bereich der Plasma-Wand-Wechselwirkung, deren Ergebnisse in verschiedenen Arbeiten zusammenfassend beschrieben wurden [137, 133, 210]. Die implantierten Ionen, in den meisten Fällen Wasserstoff- oder Heliumionen, können im Gitter des Wandmaterials diffundieren und dieses schließlich wieder verlassen. Neben einer im Gitter gelösten Form kann der Wasserstoff auch an Haftstellen im Gitter festgehalten werden. Das Verhalten des implantierten Wasserstoffs in der Wand hängt von seinem Einfang an diesen Haftstellen ab. Als Haftstellen werden vor allem Gitterdefekte vermutet. In Graphit ist bisher ungeklärt, ob Gitterdefekte zur Bindung des Wasserstoffs notwendig sind. Bisherige Arbeiten von Sone und McCracken [187], Scherzer et al. [177] und Wampler et al. [204] geben Hinweise, daß dies der Fall ist. Außerdem deutet die hohe Bindungsenergie sowohl in Graphit [68, 69] als auch in SiC [144] darauf hin, daß der Wasserstoff chemisch gebunden ist. Auch in diesem Fall ist ungeklärt, ob die Bindung des Wasserstoffs an Defekten erfolgt.

Außer in der Kernforschung finden Graphit und Kohlenstoffverbindungen wegen ihrer Eigenschaften auch in anderen Bereichen großes Interesse. Dies gilt insbesondere für amorphe Kohlenwasserstoff-Schichten, sog. a-C:H-Schichten. Diese Schichten sind nichtleitend und können, abhängig vom Wasserstoffgehalt, unterschiedlich hart sein. Sie werden in der Regel durch Abscheiden aus einer Plasmaentladung hergestellt. In harten a-C:H Schichten beträgt der Wasserstoffanteil ungefähr 40 at%. Dieser Anteil entspricht etwa der Sättigungskonzentration von Wasserstoff nach Ionenimplantation. Um die Bildung dieser Schichten besser zu verstehen, ist es deshalb von großem Interesse, die Vorgänge während der Implantation, wie Schädigung des Gitters, Wasserstoffefang und ihre gegenseitige Beeinflussung, zu untersuchen. Auch hier ist die Frage nach der Art der Bindung des Wasserstoffs von zentraler Bedeutung.

SiC ist wegen seiner guten thermischen Eigenschaften als Halbleiter für extreme Anwendungen geeignet. β -SiC hat eine große Bandlücke (2,2 eV) und besitzt physikalische und elektrische Eigenschaften, die es als Material für Bauelemente mit hohen Schaltgeschwindigkeiten, und für hohe Temperaturen geeignet erscheinen lassen. Zur Herstellung von SiC Halbleitern sind Implantationsschritte notwendig, die zur Schädigung der SiC

Kristalle führen. Durch Implantation wurden bisher p-n Dioden [57, 58] und MOS-FET Transistoren aus β -SiC [156] hergestellt. Bei der Herstellung von Bauelementen ist das Ausheilverhalten und die Art der Strahlenschäden von besonderer Bedeutung.

Seitdem es gelungen ist, hydriertes amorphes Silizium zu dotieren [188], stieg auch das Interesse an Wasserstoff in Silizium und anderen Halbleitermaterialien an. Insbesondere die Aussicht, aus mit Wasserstoff passivierten amorphen Halbleitermaterialien billige Bauelemente herzustellen, erklärt das Interesse am Bindungsverhalten von Wasserstoff in Silizium. Die Passivierung von Störstellen in Siliziumbauelementen durch Wasserstoff ist ein gängiges Verfahren. Da in Zukunft auch SiC als Material zur Herstellung von Bauelementen eingesetzt werden soll, ist das Bindungsverhalten von Wasserstoff in SiC von großem Interesse.

Aufgabenstellung

Ziel dieser Arbeit ist es, die Art des Einfangs von Wasserstoff in Graphit und Siliziumkarbid zu untersuchen. Zentrale Bedeutung gewinnt hierbei die Frage, ob zum Einfang des Wasserstoffs Strahlenschäden notwendig sind oder nicht. Mit ^3He Rutherford-Rückstreuung in einer Gitterführungsorientierung ist es möglich, gleichzeitig Strahlenschäden und die zurückgehaltene Deuteriummenge zu messen. Insbesondere bei hohen Temperaturen, bei denen wenig Strahlenschäden erzeugt werden, wird erwartet, daß sich ein Einfluß der Strahlenschäden auf die zurückgehaltene Deuteriummenge zeigt. Umgekehrt sollte dieser Zusammenhang auch beim Erhitzen der Proben und dem damit verbundenen Ausheilen der Strahlenschäden bzw. der Desorption des Wasserstoffs sichtbar werden. Zusätzlich soll die Gitterposition des Wasserstoffs untersucht werden, da man erwartet, daß Wasserstoff, der im geordneten, ungestörten Gitter gebunden wird, eine deutliche Orientierung im Gitter zeigt.

2 Verhalten von leichten Ionen in Materie

2.1 Energieverlust

Die Bewegung eines geladenen Teilchens in einem Kristallgitter wird durch eine Vielzahl von Stößen mit den Kristallatomen und Elektronen beeinflusst. Die Wechselwirkung der Projektile mit den Atomkernen und Elektronen des Festkörpers bestimmt ihre Reichweite, aber auch die Entstehung von Gitterdefekten. Die theoretische Beschreibung der Abbremsung von Ionen in Materie geht im wesentlichen auf Bohr [30, 31], Bethe [19, 20, 21], Bloch [25, 26], Firsov [76, 77, 78, 79] und Lindhard [116, 117, 120, 119, 121, 123] zurück. Ihre Ergebnisse wurden inzwischen in verschiedenen Abhandlungen über Ionenstrahlen in Materie zusammenfassend beschrieben [3, 24, 45, 46, 73, 127, 183, 216, 217]. Schon sehr früh gliederte Bohr den Energieverlust in zwei Komponenten: eine elastische (nukleare) Komponente, die die Stöße mit den Atomkernen behandelt, und eine inelastische (elektronische), verursacht durch die Wechselwirkung mit den Elektronen.

Die Bahn der Ionen im Festkörper wird vor allem durch die elastische Wechselwirkung bestimmt, da Stöße mit den Elektronen auf Grund der großen Massendifferenz zwischen Elektron und Ion nur sehr kleine Richtungsänderungen der Ionenbahnen bewirken. Andererseits wird der Energieverlust bei großen Ionenenergien ($E > Z_1$ (in keV), mit Z_1 Kernladungszahl des Projektils) vor allem durch die inelastische Komponente bestimmt, die eine nahezu kontinuierlichen Abnahme der Ionenenergie zur Folge hat.

Allgemein wird die Energie dE , die ein Teilchen auf seinem Weg dx durch einen Festkörper mit der Teilchendichte N verliert, durch den differentiellen Energieverlust $\left(\frac{dE}{dx}\right)$ bzw. den Bremsquerschnitt ϵ beschrieben.

$$\epsilon = \frac{1}{N} \left(-\frac{dE}{dx} \right) = \frac{1}{N} \left[\left(-\frac{dE}{dx} \right)_e + \left(-\frac{dE}{dx} \right)_n \right] \quad (1)$$

mit $\left(\frac{dE}{dx} \right)_{e,n}$ = differentieller elektronischer (e)
bzw. nuklearer (n) Energieverlust

Sowohl für den elektronischen als auch den nuklearen Bremsquerschnitt gilt:

$$\varepsilon_{e,n} = \int T d\sigma_{e,n} \quad (2)$$

wobei T den Energieübertrag und $d\sigma_{e,n}$ den differentiellen Wirkungsquerschnitt des Streueignisses darstellen.

Für sehr schnelle (relativistische) Teilchen muß der Energieverlust noch durch einen zusätzlichen Term, der die Erzeugung von Photonen beschreibt (Bremsstrahlung, Cerenkovstrahlung), ergänzt werden. Dieser Term führt bei höheren Energien zu einer Zunahme des Bremsquerschnitts. Für nicht relativistische Geschwindigkeiten kann dieser Anteil jedoch vernachlässigt werden.

2.1.1 Elektronische Abbremsung

Die theoretische Behandlung der elektronischen Abbremsung ist sehr komplex, da der elektronische Energieverlust durch verschiedene Prozesse verursacht wird:

- Direkter Energieübertrag auf Targetelektronen, vor allem durch Elektron-Elektron-Stöße,
- Anregung und Ionisation von stark gebundenen (lokalen) Targetelektronen,
- Anregung von schwach gebundenen (nicht lokalisierten) Band- und Leitungselektronen,
- kollektive Anregungen (Plasmonen),
- Anregung, Ionisation oder Elektroneneinfang des Projektils selbst.

Der elektronische Energieverlust wird im allgemeinen in zwei Energiebereiche mit Projektilgeschwindigkeiten größer und kleiner als $v_0 = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar$ (Orbitalgeschwindigkeit auf der ersten Bohrschen Bahn) gegliedert.

Solange sich die Projektile schnell im Vergleich zu den Elektronen auf der innersten Bahn bewegen ($v \gg Z_1^{2/3} v_0$), sind sie vollständig ionisiert. Die Abbremsung kann dann durch die Wechselwirkung eines Teilchens mit der Ladung $Z_1 e$ und einem Elektronenplasma, bestehend aus den Targetelektronen unter Berücksichtigung ihrer Bindung an die Atomkerne, beschrieben werden. Nach Bethe und Bloch [19, 25] ergibt sich folgender

Zusammenhang:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e \propto \frac{1}{E} \ln \frac{E}{I} \quad \text{für } v \gg v_0 \quad (3)$$

mit $I =$ Mittlere Anregungsenergie der Targetatome

Bei $v = Z_1^{2/3} v_0$, oft auch als „Thomas-Fermi-Geschwindigkeit“ bezeichnet, durchläuft der Bremsquerschnitt $\left(\frac{dE}{dx}\right)_e$ ein Maximum. In diesem Bereich sind die Projektile nicht mehr vollständig ionisiert und die Bethe-Bloch-Theorie muß mit immer umfangreicheren Korrekturtermen versehen werden. Dieser Bereich wird meist angenähert durch [198, 22, 3, 216]:

$$\frac{1}{\epsilon_e} = \frac{1}{(\epsilon_e)_{v \ll v_0}} + \frac{1}{(\epsilon_e)_{v \gg v_0}} \quad (4)$$

Bei kleinen Ionenenergien ($v \ll Z_1^{2/3} v_0$) tragen die inneren Elektronen der Gitteratome immer weniger zum Bremsquerschnitt bei, ebenso sind die Projektionen nicht mehr vollständig ionisiert. Der Energieverlust ist in diesem Fall proportional zur Geschwindigkeit (Lindhard, Scharff und Schiøtt [116, 117, 120, 118], Firsov [79]).

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e \propto \sqrt{E} \quad \text{für } v \ll v_0 \quad (5)$$

Die Theorie von Lindhard, Scharff und Schiøtt (kurz LSS) beruht auf der elastischen Streuung von freien Targetelektronen im statischen Feld einer abgeschirmten Punktladung, die das Projektil darstellt. Das Modell von Firsov dagegen geht von einem Impulsübertrag zwischen Projektil und Targetatomen beim Durchdringen der Elektronenwolken aus.

2.1.2 Nuklearer Energieverlust

Neben dem elektronischen Energieverlust kann das Projektil seine Energie auch in nuklearen Stößen mit den Gitteratomen abgeben. In Metallen ist nur der nukleare Energieverlust für die Erzeugung von Strahlenschäden bei der Ionenimplantation verantwortlich, während in Isolatoren und Halbleitern auch die elektronische Anregung bzw. Ionisation der Gitteratome zu Defekten führen können [1, 196].

Der durch Kernstöße übertragene Impuls kann, abhängig vom Stoßparameter bzw. Streuwinkel, sehr groß sein. Nach der klassischen Mechanik ist die beim Stoß auf das

Projektilenergie	Projektil	Targetatom	Energieübertrag
12 keV	D	Si	2,98 keV
12 keV	D	C	5,87 keV
8 keV	D	C	3,92 keV

Tab. 1: Maximaler Energieübertrag auf die Targetatome bei den verwendeten Projektilenergien.

Targetatom übertragene Energie T gegeben durch:

$$T = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_0 \sin^2 \frac{\Theta}{2}$$

mit Θ = Streuwinkel im Schwerpunktsystem

M_1 = Masse des Projektils (6)

M_2 = Masse des Targetatoms

E_0 = Energie des Projektils

Zwischen dem Streuwinkel Θ im Schwerpunktsystem und ϑ in Laborkoordinaten besteht folgender Zusammenhang:

$$\tan \vartheta = \frac{M_2 \sin \Theta}{M_1 + M_2 \cos \Theta} \quad (7)$$

Aus Gleichung 6 ergeben sich für die verwendeten Deuteriumenergien von 12 keV und 8 keV die in Tabelle 1 angegebenen Werte für den maximalen Energieübertrag.

Der nukleare Bremsquerschnitt kann aus Gleichung 2 bestimmt werden, falls der differentielle Wirkungsquerschnitt des Streueignisses und somit das zugehörige Wechselwirkungspotential bekannt ist. Im Bereich großer Ionenenergien kann die Wechselwirkung durch das Coulomb-Potential beschrieben werden, während mit abnehmender Energie auf Grund der abschirmenden Wirkung der Elektronen dieses nicht mehr gültig ist. In diesem Fall gibt es verschiedene Näherungen, die die abschirmende Wirkung der Elektronen hinreichend gut beschreiben [211, 138]. Bei sehr kleinen Energien wiederum kann die elastische Streuung hinreichend gut durch Stöße zwischen harten Kugeln (*Harte-Kugel-Stöße*) beschrieben werden.

Die Gültigkeit verschiedener Potentiale in verschiedenen Energiebereichen macht eine einheitliche Beschreibung des nuklearen Energieverlusts über das gesamte Energiespektrum unmöglich. Um den nuklearen Energieverlust für praktische Anwendungen trotzdem allgemeingültig beschreiben zu können, gibt es verschiedene Näherungen, die für alle Kombinationen aus Projektilen und Gitteratomen gelten [211, 217, 154, 180]. Diese benutzen reduzierte Größen für die Energie und den Weg, die von Lindhard und seinen Mitarbei-

tern [123] eingeführt wurden. Die reduzierte Energie ϵ_L und die reduzierte Längeneinheit ρ_L sind wie folgt definiert:

$$\epsilon_L = \frac{4\pi \epsilon_0 a_{TF} M_2}{Z_1 Z_2 e^2 (M_1 + M_2)} E \quad (8)$$

$$\rho_L = \pi a_{TF}^2 N \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} x \quad (9)$$

mit dem Thomas-Fermi-Abschirmradius (nach Lindhard, abweichende Abschirmradien werden von Firsow [78] und Ziegler [217] angegeben):

$$a_{TF} = \frac{0,8853a_0}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \quad (10)$$

$$a_0 = 0,529\text{\AA} \quad \text{Bohrscher Radius.}$$

Basierend auf einem Thomas-Fermi-Potential berechnen Wilson et al. [211] den nuklearen Energieverlust ϵ_n in reduzierten Einheiten zu:

$$\epsilon_n = \frac{0,5 \ln(1 + \epsilon_L)}{\epsilon_L + 0,107 \epsilon_L^{0,375}} \quad (11)$$

ϵ_n ist in LSS (Lindhard, Scharff, Schiøtt) reduzierten Einheiten angegeben und kann durch Multiplikation mit

$$\frac{e^2 a_{TF} Z_1 Z_2 M_1}{\epsilon_0 (M_1 + M_2)} \quad (12)$$

in eV/(Atom cm⁻²) umgerechnet werden. Damit kann der nukleare und elektronische Energieverlust für elementare Substanzen einfach aus den angegebenen Formeln berechnet werden.

2.1.3 Bragg'sche Regel

Der Energieverlust in Verbindungen und Legierungen wird mit der Bragg'schen Regel [35] bestimmt. Die Bragg'schen Regel geht davon aus, daß der Energieverlust eines einzelnen Gitteratoms unabhängig von dessen Bindungszustand ist. Das heißt, ein einzelnes Atom verursacht in einer Verbindung die gleiche Abbremsung wie im elementaren Festkörper. Unter dieser Annahme kann der Energieverlust einer Verbindung als das gewichtete Mittel der atomaren Energieverluste berechnet werden.

$$\epsilon_{A_n B_m} = \frac{n\epsilon_A + m\epsilon_B}{n + m}$$

$$\text{mit } \epsilon_{A_n B_m} = \text{Bremsquerschnitt der Verbindung aus A und B} \quad (13)$$

$$\epsilon_A, \epsilon_B = \text{Bremsquerschnitte der Elemente A und B}$$

$$n, m = \text{relativer Anteil von A und B}$$

Projektilenergie	Projektil	Probe	nukl. Energieverlust
12 keV	D	SiC	1,23 keV
10 keV	D	C	1,27 keV
8 keV	D	C	1,18 keV
3,3 keV	D	C	0,84 keV

Tab. 2: *Integral des nuklearen Energieverlusts.*

Abweichungen von der Bragg'schen Regel werden vor allem in Verbindungen erwartet, deren elektronische Struktur stark von der in elementaren Substanzen abweicht. Die Abweichungen von der Bragg'schen Regel sind deshalb in metallischen Legierungen und in Energiebereichen, in denen der Beitrag der Valenzelektronen zum Energieverlust klein ist, gering. Deutliche Abweichungen von der Bragg'schen Regel wurden insbesondere für C-H Verbindungen gemessen [34, 159]. Da für SiC keine Messungen des Energieverlusts vorliegen, muß in diesen Fall auf die Bragg'sche Regel zurückgegriffen werden.

Verschiedene Isotope, also Wasserstoff und Deuterium bzw. ^4He und ^3He , erfahren bei gleicher Geschwindigkeit die gleiche elektronische Abbremsung. Abbildung 1 zeigt die Abhängigkeit des Energieverlusts, wie sie von Andersen und Ziegler [3] aus zahlreichen Experimenten für Wasserstoff in Graphit ermittelt wurde (umgerechnet auf Deuterium). Die Kurven für SiC wurden aus den Werten für Silizium und Kohlenstoff nach der Bragg'schen Regel berechnet.

Das Integral des nuklearen Energieverlusts eines mit der Energie E_1 implantierten Teilchens kann aus dem bisher beschriebenen berechnet werden. Für Kohlenstoff und Siliziumkarbid ist das Integral des nuklearen Energieverlusts als Funktion der Deuteriumenergie in Abbildung 2 dargestellt. Die berechneten Werte sind für die in dieser Arbeit verwendeten Deuteriumenergien nochmals in Tabelle 2 angegeben.

2.2 Gitterfehler und Strahlenschäden

Die einfachste Form von Gitterdefekten sind Punktdefekte, die entweder aus einem fehlenden Gitteratom (Leerstelle) oder einem zusätzlichen Atom auf einem Zwischengitterplatz (Zwischengitteratom) bestehen. Eine einfache Leerstelle, also ein fehlendes Atom oder Ion auf einem Gitterplatz, bezeichnet man als Schottky-Defekt. In einem idealen Kristall wird ein Schottky-Defekt erzeugt, indem ein Atom von seinem Gitterplatz im Innern des Kristalls auf einen Gitterplatz an der Oberfläche überführt wird. Aufgrund der erhöhten

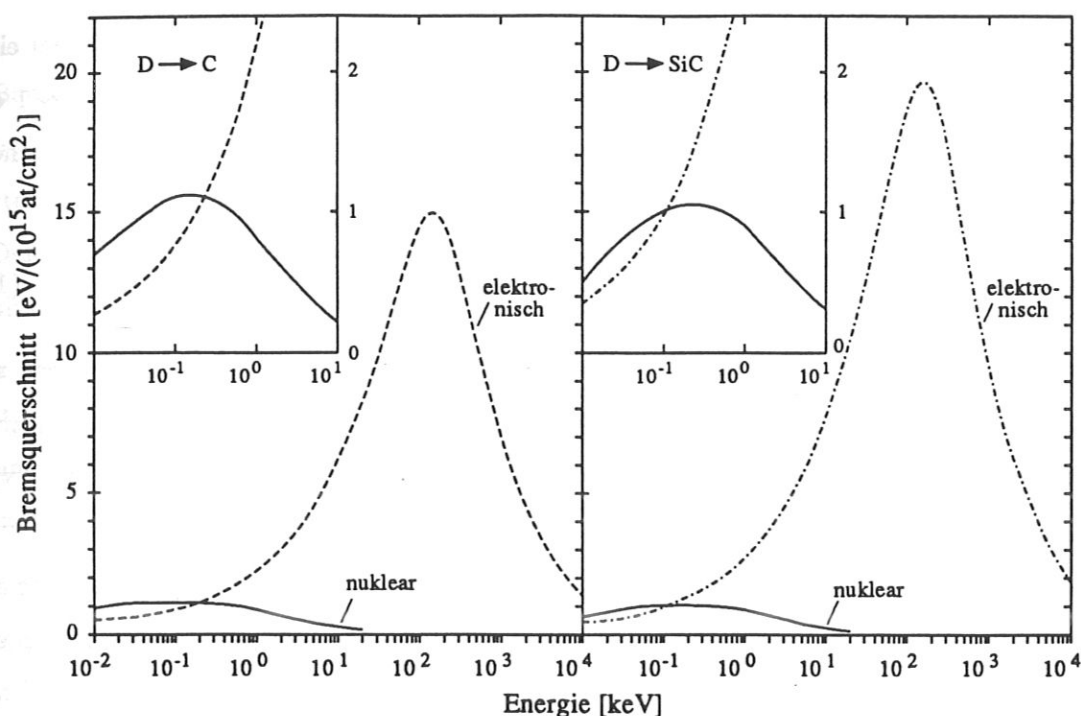


Abb. 1: Nuklearer und elektronischer Energieverlust für Deuterium in Kohlenstoff und Siliziumkarbid (berechnet nach der Bragg'schen Regel, siehe Kapitel 2.1.3) nach Anderson und Ziegler [3] und Wilson et al. [211]. In den eingesetzten Diagrammen ist der Bereich um das Maximum des nuklearen Energieverlusts vergrößert dargestellt.

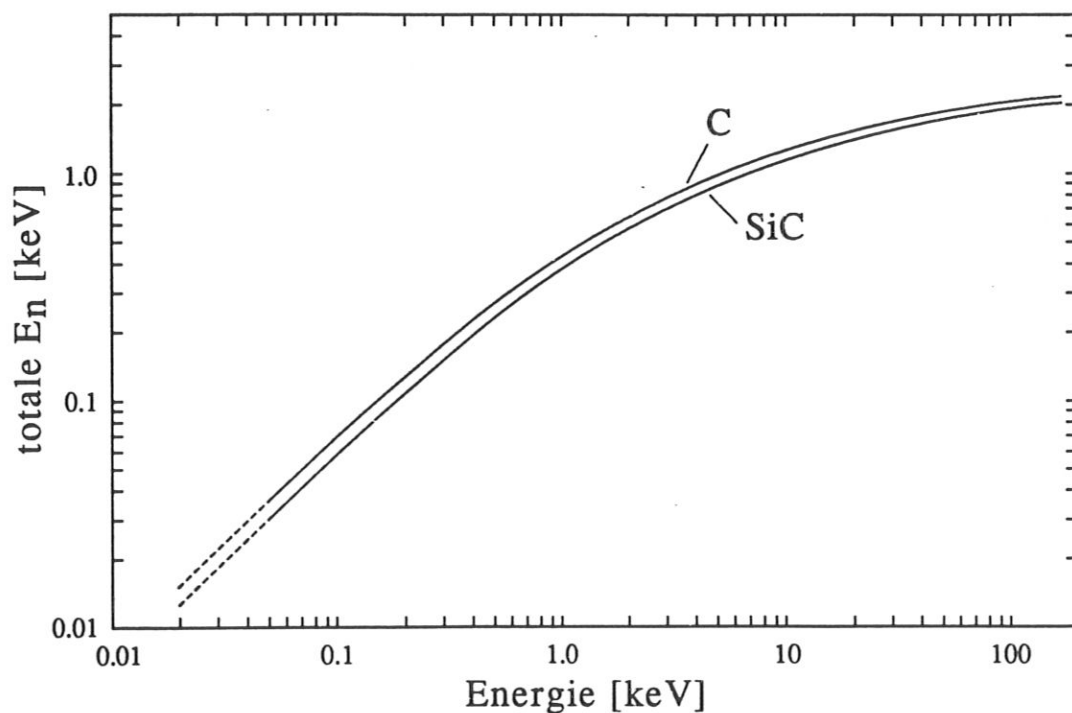


Abb. 2: Integral des nuklearen Energieverlusts von Deuterium in Kohlenstoff und Siliziumkarbid (berechnet nach der Bragg'schen Regel, siehe Kapitel 2.1.3) für verschiedene Energien.

Entropie ist im thermischen Gleichgewicht in einem ansonsten idealen Kristall immer eine gewisse Anzahl von Leerstellen vorhanden, da ihre Bildungsenergie klein ist ($E_V^f \sim 1$ eV in Metallen). Die Wahrscheinlichkeit P , daß ein Gitterplatz nicht besetzt ist, ist im thermischen Gleichgewicht proportional zum Boltzmannfaktor [109]:

$$P \propto \exp\left(-\frac{E_V^f}{kT}\right). \quad (14)$$

E_V^f ist die Energie, die benötigt wird, um ein Atom von einem Gitterplatz im Innern auf einen Gitterplatz an der Oberfläche zu bringen. Die Wahrscheinlichkeit für die thermische Entstehung von Zwischengitteratomen ist wegen der höheren Bildungsenergie sehr viel kleiner, als die Bildung von Leerstellen.

Ein weiterer einfacher Gitterdefekt entsteht, wenn ein Atom von seinem Gitterplatz auf einen Zwischengitterplatz verlagert wird, also gleichzeitig eine Leerstelle und ein Zwischengitteratom gebildet werden. Ein solches Defektpaar wird Frenkeldefekt oder Frenkelpaar genannt. In Metallen entstehen Frenkeldefekte nur durch Strahlung, da sie bei Temperaturen, bei denen sie thermisch gebildet werden, auf Grund der hohen Beweglichkeit der Zwischengitteratome instabil sind.

Defekte können sich durch thermische Aktivierung im Kristallgitter bewegen. Die Bewegung von Leerstellen im Kristallgitter geht so vor sich, daß ein benachbartes Atom die Leerstelle auffüllt, und sich dadurch die Leerstelle an dessen ursprünglichen Gitterplatz bewegt. Für die Bewegung von Zwischengitteratomen gibt es zwei Möglichkeiten: Das Zwischengitteratom springt von seinem Zwischengitterplatz auf einen benachbarten Zwischengitterplatz, oder es verdrängt ein benachbartes Gitteratom, das dann auf einen Zwischengitterplatz springt [2, 109]. Die Beweglichkeit der Defekte ist temperaturabhängig und wird mit einer Sprungfrequenz ν beschrieben [109]:

$$\nu = \nu_0 \exp\left(-\frac{E^m}{kT}\right) \quad (15)$$

wobei E^m die Aktivierungsenergie für die Bewegung und ν_0 die charakteristische atomare Schwingungsfrequenz sind.

In Metallen und Halbleitern sind Zwischengitteratome schon bei sehr niedrigen Temperaturen (20-50 K) beweglich. Leerstellen werden i.a. erst bei Raumtemperatur oder darüber beweglich werden, da zu ihrer Bewegung benachbarte Gitteratome beitragen, deren verbliebene Bindungen im Verlauf der Bewegung gelöst werden müssen. In diesem Fall ist die Aktivierungsenergie sehr groß [2, 109].

Bei großen Punktdefektkonzentrationen können sich Punktdefekte auf Grund ihrer Beweglichkeit zu ausgedehnten Defekten, sog. Defektclustern, zusammenlagern. Die einfachste Form von Defektclustern sind Zweifach- oder Dreifachdefekte, bestehend aus Leerstellen oder Zwischengitteratomen. Die Voraussetzung zur Bildung von ausgedehnten Defektclustern sind „Kondensationskeime“, die in der Lage sind, mobile Punktdefekte zu binden [148, 207].

In vielen Kristallen entstehen ausgedehnten Defekte wie Versetzungen, Stapelfehler etc. schon während ihres Wachstums. Ein Stapelfehler ist ein ebener Defekt, der durch eine zusätzliche oder fehlende Gitterebene verursacht wird. An der Defektgrenze entsteht eine Diskontinuität bezüglich der Lage der Atomketten und Ebenen, d.h. die Ebenen sind an dieser Stelle gegeneinander verschoben. Stufenversetzungen entstehen ebenfalls durch das Einschieben einer zusätzlichen Gitterebene. Im Gegensatz zum Stapelfehler ist das Gitter in diesem Fall an der Defektgrenze verzerrt, d.h. im Bereich der eingeschobenen Zwischengitterebene werden die Atome zusammengedrängt, während sie außerhalb auseinandergezogen werden. Eine andere Art der Versetzung ist die Schraubenversetzung, bei der ein Teil des Kristalls entlang einer Gitterebene verschoben wird, während der andere Teil haften bleibt. Andere Arten von Versetzungen entstehen durch Kombination von Stufen- und Schraubenversetzungen. Im Vergleich zu Punktdefekten haben solche ausgedehnten Defekte eine sehr kleine Beweglichkeit.

2.2.1 Erzeugung von Strahlenschäden

Defekte in Kristallen können durch verschiedene Prozesse erzeugt werden:

- Kristallwachstum bzw. spezielle Präparation beim Wachstum
- Thermische und thermochemische Behandlung
- Mechanische Behandlung (Deformation)
- Ionenimplantation und Bestrahlung

Im folgenden wird die Erzeugung von Defekten durch Ionenimplantation betrachtet. Durch Ionenimplantation können im Gegensatz zur Bestrahlung mit Elektronen bzw. γ -Strahlung wegen des großen Energieübertrags auch ausgedehnte Defekte erzeugt werden, da durch ein angestoßenes Gitteratom weitere Atome verlagert werden können. Bei der Ionenimplantation werden Strahlenschäden durch nuklearen und elektronischen Energieverlust

verursacht. Während bei der nuklearen Energiedeposition durch den kinetischen Energieübertrag Gitteratome aus ihrer Position verlagert werden, führt der elektronische Energieverlust zur Anregung der Gitteratome. Diese elektronische Anregung kann zur Auflösung der Bindungen im Gitter führen und durch eine dadurch erfolgende Umgruppierung der Gitteratome Defekte zur Folge haben. In Metallen werden auf Grund des Bindungscharakters keine Strahlenschäden durch elektronische Anregung erzeugt, während dies in Isolatoren und Halbleitern durchaus der Fall sein kann.

In ionischen Verbindungen kann die elektronische Anregung zur Neutralisation der Gitteratome führen. Dadurch wird die chemische Bindung gelöst und das neutrale Atom kann seinen Gitterplatz verlassen. Es entsteht eine Leerstelle und ein Zwischengitteratom. Auf diese Weise können in Alkalihalogeniden mit UV-Licht Strahlenschäden erzeugt werden [2] (z.B. Silberhalogenide in der Fotografie). Neben der direkten Erzeugung von Strahlenschäden sind auch synergetische Effekte denkbar, bei denen die Schwellenenergie für die Verlagerung durch nukleare Stöße infolge elektronischer Anregung erniedrigt wird [2].

Die Erzeugung von Defekten durch elektronische Anregung wurde im wesentlichen an ionischen Substanzen untersucht. Für die Erzeugung von Strahlenschäden durch elastische Stöße existieren dagegen eine Fülle von experimentellen und theoretischen Untersuchungen an Metallen, Halbleitern und Isolatoren. Im folgenden wird vor allem die Erzeugung von Strahlenschäden durch elastische Stöße behandelt. In typischen Implantationsexperimenten werden durch elastische Stöße Energien von einigen eV bis zu einigen keV von den Projektilen auf die Gitteratome übertragen. Das Energiespektrum der angestoßenen Gitteratome hängt vom Wirkungsquerschnitt des Streuprozesses und somit vom Wechselwirkungspotential ab. Übersteigt die auf ein Gitteratom übertragene Energie einen Schwellenwert, kann dieses seinen Gitterplatz verlassen und wird permanent verlagert. Das angestoßene Atom kann sich, abhängig von seiner Energie, über viele Gitterkonstanten im Kristall bewegen und dabei seinerseits durch weitere Stöße Gitteratome verlagern.

Da in den meisten Fällen Projektilen und Gitteratome unterschiedliche Massen haben, unterscheidet man zwischen Stößen von Projektilen und denen von angestoßenen Gitteratomen mit den ruhenden Gitteratomen. Erstere werden primäre Stöße und die angestoßenen Gitteratome primäre Rückstoßatome genannt, während man bei Stößen zwischen Gitteratomen von sekundären Stößen spricht. Sind die Massen von Projektilen und Gitteratomen stark unterschiedlich, haben die primären Rückstoßatome sehr viel kleinere

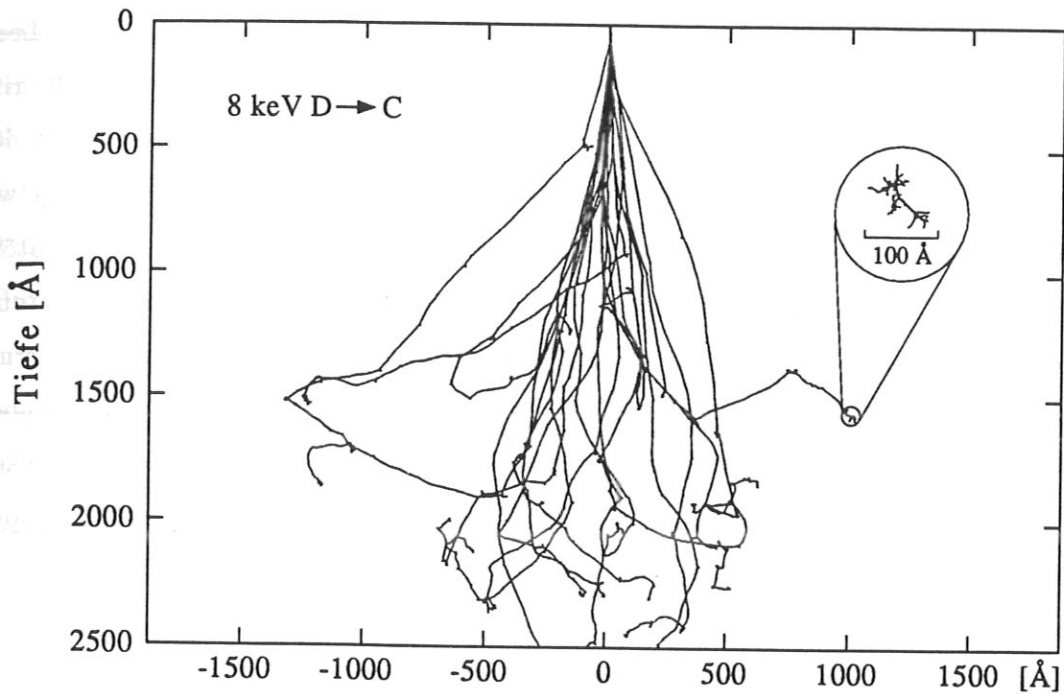


Abb. 3: Verlauf von Stoßkaskaden von 8 keV Deuterium in Kohlenstoff, berechnet mit TRIM.SP. Der Kreis zeigt vergrößert die Subkaskaden, die durch angestoßene Kohlenstoffatome erzeugt werden.

Energien als die Projektile. Da die Streuquerschnitte für kleinere Energien größer werden, ist die mittlere freie Weglänge der primären Rückstoßatome klein und diese erzeugen in der Nähe des primären Stoßprozesses eine Subkaskade.

Zum Verständnis der Entstehung von Strahlenschäden bzw. deren Verteilung ist eine genaue Kenntnis der Stoßkaskaden notwendig. Die Form der erzeugten Stoßkaskaden hängt von der Proben- und Projektilmasse ab. Beschießt man schwere Materialien mit etwa gleich schweren Projektilen, können große Energien auf die Gitteratome übertragen werden. Wegen der großen Streuquerschnitte für schwere Materialien ist der zentrale Bereich der Stoßkaskade sehr klein. Dadurch entstehen ausgeprägte Stoßkaskaden mit sehr vielen Stößen, infolge derer viele Gitteratome verlagert werden. Im Zentralbereich der Kaskade bildet sich eine Ansammlung von Leerstellen, die von Zwischengitteratomen umgeben ist [40]. Diese Anordnung kann sich leicht in eine komplexe Defektstruktur umordnen.

Im Gegensatz dazu ist in leichteren Materialien (z.B. Al) die Stoßkaskade über ein größeres Volumen verteilt. Dies hat eine gleichmäßige Verteilung der entstandenen Leerstellen und Zwischengitteratome über ein großes Volumen zur Folge. Dieser Fall trifft auch für die Deuteriumimplantation in Kohlenstoff und SiC zu. Abbildung 3 zeigt den Verlauf einer typischen Stoßkaskade für 8 keV Deuterium in Kohlenstoff. Sie zeigt wenig ausgeprägte Stoßkaskaden, in denen die angestoßenen Gitteratome nur wenige Stöße machen, bevor sie zur Ruhe kommen. Die Subkaskaden der angestoßenen Gitteratome entstehen zudem weit voneinander entfernt, sodaß nur wenige, weit voneinander entfernte Verlagerungen entstehen. Solange sich bei kleinen Fluenzen die einzelnen Kaskaden noch nicht überlappen, bestehen die erzeugten Strahlenschäden im wesentlichen aus Frenkel-paaren. Deshalb können bei kleinen Fluenzen im Gegensatz zu schweren Metallen noch keine ausgedehnten Defektcluster durch die Implantation erzeugt werden.

Die durch Strahlung erzeugten Punktdefekte können sich durch thermische Aktivierung im Gitter bewegen. Dadurch ist nicht nur eine Rekombination von Zwischengitteratomen und Leerstellen möglich, sondern es können sich bei erhöhter Temperatur auch ausgedehnte Defektcluster bilden. Die zeitliche Änderung der Punktdefektkonzentration erfolgt durch folgende Prozesse: (1) Produktion durch Strahlung, (2) Verlust an Senken wie z.B. Versetzungen oder ausgedehnten Defekten und (3) Verlust durch Rekombination. Sie läßt sich wie folgt beschreiben:

$$\frac{dc_v}{dt} = K - \alpha_v \nu_v \lambda^2 c_v - \nu_v Z (c_v + c_v^0) c_i$$

$$\frac{dc_i}{dt} = K - \alpha_i \nu_i \lambda^2 c_i - \nu_i Z (c_v + c_v^0) c_i$$

- mit c_i, c_v, c_v^0 = Konzentration von Zwischengitteratomen und Leerstellen (16)
 K = Produktionsrate durch Strahlung
 α_i, α_v = Dichte der Senken für Zwischengitteratome und Leerstellen
 Z = Rekombinations-Koordinationszahl ~ 1
 λ = Sprungweite der Defekte, $\lambda^2 \sim 10^{-15} \text{cm}^2$
 ν_i, ν_v = Sprungfrequenz der Zwischengitteratome und Leerstellen

Nimmt die Fluenz zu, überlagern sich die Stoßkaskaden und die Konzentration der Punktdefekte steigt an, bis Bildung von Defektclustern (Leerstellen- und Zwischengitteratomcluster) einsetzt. Man nimmt an, daß in leichten Materialien die Bildung von

Leerstellen- und Zwischengitteratomclustern gleichzeitig einsetzt [148]. Steigt die Fluenz weiter, werden Punktdefekte, die nicht rekombinieren, von den vorhandenen Defektclustern eingefangen. Diese Defektcluster wachsen dadurch ständig weiter, bis sie ein kompliziertes Netz von Verlagerungen bilden [148]. In der Praxis zeigt sich, daß bei niedrigen Temperaturen die Rekombination den Verlust von Punktdefekten bestimmt, während bei höheren Temperaturen der Einfang an festen Senken (ausgedehnten Defekten) der dominierende Prozess ist [148].

Um die Prozesse, die zur Bildung von ausgedehnten Defekten führen, genauer zu verstehen, ist es wichtig, die Anzahl der primär gebildeten Punktdefekte zu kennen. Nimmt man an, daß der nukleare Energieverlust im wesentlichen für die Defektbildung verantwortlich ist, ist die Anzahl der gebildeten Defekte proportional zur nuklear deponierten Energie. Aus dem Verlauf des nuklearen und elektronischen Energieverlusts als Funktion der Energie kann die gesamte nukleare Energiedeposition eines zur Ruhe gekommenen Projektils bestimmt werden. Abbildung 2 zeigt den totalen nuklearen Energieübertrag von Deuterium auf Kohlenstoff und Siliziumkarbid bei verschiedenen Energien.

Bei der Abschätzung der Anzahl der verlagerten Atome geht man davon aus, daß ein Atom seinen Gitterplatz verlassen kann, wenn die beim Stoß übertragene Energie einen Schwellenwert überschreitet. Diese Energie wird Verlagerungsenergie E_d genannt und hängt vom beobachteten Material ab. Schon sehr früh wurde E_d von S. Seitz [179] als die vierfache Sublimationenergie abgeschätzt. P. Jung [101] gibt eine empirische Formel an, mit der sich die Verlagerungsenergie aus dem Bulk-Modulus und dem Atomabstand berechnen läßt. Für Kohlenstoff und Silizium werden die in Tabelle 3 aufgeführten Werte für die Verlagerungsenergie angegeben. Im allgemeinen ist die Verlagerungsenergie anisotrop, d.h. abhängig von der Einschußrichtung der Projektile in den Kristall [71], weshalb für Graphit mit seiner stark anisotropen Struktur Verlagerungsenergien parallel und senkrecht zur hexagonalen Achse angegeben werden.

Eine der ersten zusammenfassenden Arbeiten über die Erzeugung von Strahlenschäden stammt von Kinchin und Pease [107]. Sie geben eine einfache Abschätzung, mit der die Anzahl der pro Projektilatom verlagerten Gitteratome bestimmt werden kann.

Die elastische Streuung der Projektile an Gitteratomen kann in drei Fälle unterteilt werden. Ist die kinetische Energie der Projektile sehr klein (d.h. E_{kin} ist kleiner als die Coulombwechselwirkung beider Kerne im Abstand ihrer Abschirmradien), kann man auf

Element		E_d (eV)	Ref
Kohlenstoff	Diamant	80	[44]
	Graphit c	25	[62, 184]
	Graphit $\perp c$	30-60	[139, 96]
Silizium		13;14	[124][182]
SiC		17-30	[92]

Tab. 3: Verlagerungsenergien E_d für Kohlenstoff in seinen verschiedenen Modifikationen, Silizium und Siliziumkarbid.

Projektil	Probe	E_A	Projektil	Probe	E_A
H	C	0,4 keV	H	Si	1,0 keV
D	C	0,4 keV	D	Si	1,0 keV
C	C	5,0 keV	C	Si	9,9 keV
Si	C	23,0 keV	Si	Si	36,3 keV

Tab. 4: Werte von E_A für verschiedene Projektilatome und primäre Rückstoßatome.

Grund der vollständigen Abschirmung des Kernpotentials durch die Elektronen, die Stöße der Projektile mit den Gitteratomen als Harte-Kugel-Stöße betrachten. Bei höheren Energien, bei denen sich die Kerne sehr viel stärker annähern können, werden die Projektile an abgeschirmten und bei noch höheren Energien schließlich an nicht abgeschirmten Coulombpotentialen gestreut, und die sehr vereinfachende Harte-Kugel-Näherung ist nicht mehr gültig. Man spricht dann von Rutherford-Stößen bzw. Rutherfordstreuung. Kinchin und Pease bestimmen eine maximale Energie E_A , bei der die Harte-Kugel-Näherung noch gültig ist. Die Werte für E_A , die sich für die in dieser Arbeit verwendeten Projektil-Gitteratom Kombinationen ergeben, sind in Tabelle 4 angegeben. Sie sind für angestoßene Kohlenstoff- und Siliziumatome größer als die maximale Energie, die von Deuteriumprojektilen mit 12 bzw. 8 keV auf diese übertragen wird (siehe Tabelle 1). Deshalb gilt für die primären Rückstoßatome die Harte-Kugel-Näherung.

Die Anzahl der verlagerten Atome wird von Kinchin und Pease unter folgenden vereinfachenden Annahmen abgeschätzt: Die Abbremsung der Projektile erfolgt durch statistisch verteilte elastische Stöße (d.h. keine Gitterführung), die als Harte-Kugel-Stöße betrachtet werden können (d.h. $E < E_A$). Ist die übertragene Energie größer als E_d , entsteht eine stabile Verlagerung, es wird aber keine Energie für die Verlagerung verbraucht (z.B. zum Aufbrechen der Bindungen des Atoms). Ist die übertragene Energie kleiner als E_d , geht diese Energie für die Erzeugung von Verlagerungen verloren. Ein Atom mit der

Energie $E - T < E_d$ macht einen Austauschstoß.

Für die Anzahl N_d der durch primäre Rückstoßatome mit der Energie E verlagerten Gitteratome ergibt sich somit (für $E < E_A$):

$$N_d = \begin{cases} 0 & : \text{für } E \leq E_d \\ 1 & : \text{für } E_d < E < 2E_d \\ \frac{E}{2E_d} & : \text{für } 2E_d < E \end{cases} \quad (17)$$

Unter Verwendung eines realistischeren Streupotentials als der Harte-Kugel-Näherung ergibt sich eine modifizierte Kinchin und Pease-Gleichung [182, 129]. Mit dieser Gleichung kann die Anzahl der verlagerten Atome aus dem nuklearen Anteil des Energieverlusts auch für Energien größer als E_A bestimmt werden.

$$N_d = \frac{\xi E_n}{2E_d}$$

mit ξ = Faktor, i.a. < 1 (18)

E_n = nuklearer Anteil des Energieverlust

Für ξ wird meist ein Wert von 0,8 angegeben [182, 129].

Eine weitere Möglichkeit, sowohl die Anzahl der pro Projektil verlagerten Atome, als auch deren Tiefenverteilung sowie die Tiefenverteilung der implantierten Ionen zu bestimmen, bieten Monte-Carlo-Simulationen, wie z.B. TRIM.SP [23]. Das TRIM.SP Programm wurde als effizientes Programm mit hoher Genauigkeit zur Berechnung des Transports von Ionen im Materie entwickelt. TRIM.SP basiert auf der Annahme eines amorphen Targetmaterials, kann aber auch für polykristalline Proben mit statistisch verteilter Orientierung der Kristallite als gute Näherung angesehen werden.

In TRIM.SP werden sowohl die Bahnen der Projektile als auch die der angestoßenen Gitteratome solange verfolgt, bis ihre Energie kleiner als eine vorher bestimmte *Abschneide-Energie* ist (i.a. 5 eV). Beide Arten von Teilchen werden im Programm gleich behandelt. Die Energie, die die Teilchen (Projektile oder Rückstoßatome) auf ihrem Weg durch den Kristall durch elastischen (nuklearen) und inelastischen (elektronischen) Energieverlust abgeben, werden berechnet und getrennt aufsummiert.

Die Teilchen bewegen sich jeweils um eine mittlere freie Weglänge $\lambda = N^{1/3}$, bevor sie einen weiteren Stoß mit einem Gitteratom erfahren. Der Stoßparameter und der azimutale Winkel des Stoßes werden durch Zufallszahlen gegeben. Aus dem Stoß werden die übertragene Energie T , sowie die weitere Bewegungsrichtung und Energie beider Stoßpartner

	E_n	$E_d=15\text{ eV}$		$E_d=25\text{ eV}$	
		Gl. 17	TRIM.SP	Gl. 17	TRIM.SP
3,3 keV D in C	0,84 keV	28,0	27,1	16,8	14,1
8,0 keV D in C	1,18 keV	39,3	39,8	23,6	20,5
10,0 keV D in C	1,27 keV	42,3	42,7	25,4	22,3
12,0 keV D in SiC	1,23 keV	41,0	23,8	24,6	13,1
			C		20,5

Tab. 5: Anzahl der verlagerten Atome, berechnet nach Gleichung 17 bzw. mit TRIM.SP.

berechnet. Zur Berechnung der elastischen Streuung an den Kernen wird in TRIM.SP das Kr-C Potential [211] benutzt. Wie viele andere Programme berechnet TRIM.SP den elastischen Energieverlust basierend auf dem Zweierstoßmodell, d.h. die Stöße der Teilchen erfolgen sequentiell einer nach dem anderen. Ein angestoßenes Gitteratom verläßt seinen Gitterplatz und wird in der weiteren Berechnung als sich im Gitter bewegendes Atom behandelt und weiterverfolgt, wenn seine Energie nach dem Stoß größer als die *Abschneide-Energie* ist. Ist seine Energie außerdem größer als die Verlagerungsenergie E_d , wird es als dauerhaft verlagertes Atom betrachtet und die übertragene Energie nochmals getrennt (als nuklearer Energieverlust, der zu Strahlenschäden führt) aufsummiert. Wie bei Kinchin und Pease wird auch hier keine Energie für die Bildung des Defekts aufgewandt.

Zwischen zwei Kernstößen verlieren die Teilchen Energie durch elektronische Anregung. Bei kleinen Energien wird der elektronische Energieverlust in TRIM.SP durch den Mittelwert aus Lindhard-Scharff [116] und Oen-Robinson [155] berechnet, während bei größeren Energien die analytische Näherung von Anderson und Ziegler [3] benutzt wird.

Das Programm berücksichtigt weder chemische noch Diffusionseffekte, auch gehen dynamische Ausheilprozesse während der Implantation nicht in die Berechnung ein. Die Anzahl der in Graphit und Siliziumkarbid durch Deuteriumimplantation erzeugten Verlagerungen kann mit Gleichung 17 berechnet werden. Die berechneten Werte sind zusammen mit den TRIM.SP-Resultaten in Tabelle 5 angegeben.

2.2.2 Struktur und Eigenschaften von Graphit

Eine stabile Form des Kohlenstoffs bei Raumtemperatur ist der Graphit. Sein Gitter ist hexagonal mit 4 Atomen in der Einheitszelle bei $(0,0,0)$, $(0,0,\frac{1}{2})$, $(\frac{1}{3},\frac{2}{3},0)$ und $(\frac{2}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{2})$. Graphit besitzt eine sog. Schichtstruktur, in der jedes Kohlenstoffatom innerhalb einer Schicht eine kovalente Bindung mit drei benachbarten Kohlenstoffatomen besitzt. Die Kohlenstoffatome sind sp^2 -hybridisiert und bilden mit drei ihrer vier Außenelektronen lokalisierte σ -Bindungen zu den drei Atomnachbarn aus. Die vierten Valenzelektronen sind in delokalisierten π -Molekülorbitalen untergebracht, die aus einer Kombination der an der Hybridisierung nicht beteiligten, zu den sp^2 -Hybridorbitalen senkrecht orientierten p-Atomorbitalen, resultieren. Somit sind die Kohlenstoffatome in einer Ebene sowohl durch σ - als auch durch π -Bindungen miteinander verknüpft und zeigen eine wesentlich geringere elektrische Leitfähigkeit. Die delokalisierten π -Bindungen bedingen die metallische Leitfähigkeit parallel zu den Graphitschichten. Untereinander sind die Graphitschichten nur schwach durch Van der Waals Kräfte gebunden.

In der (0001) Ebene bilden die Atome regelmäßige Sechsecke. Bei Raumtemperatur hat die Einheitszelle die Kantenlängen $c = 6,7 \text{ \AA}$ und $a = 2,46 \text{ \AA}$. Somit ist das Verhältnis c/a mit 2,72 (zum Vergleich hexagonaler Diamant $c/a = 1,63$ und α -SiC $c/a = 1,60$) sehr groß. Daraus ergibt sich in den Schichtebenen ein Atomabstand von $1,42 \text{ \AA}$ ($\sim a\sqrt{3}$) (zum Vergleich: Diamant $1,54 \text{ \AA}$) und ein Schichtabstand von $3,35 \text{ \AA}$.

Die Schichten des Graphits sind entlang der c-Achse angeordnet, wobei die Sechseringe immer gleich orientiert, aber so verschoben sind, daß sich nur die Hälfte der Atome direkt über Atomen der vorherigen Lage befinden. Die Stapelfolge im hexagonalen Graphit (α -Graphit, siehe Abbildung 4) ist ABAB, während sie im rhomboedrischen (β -Graphit) ABCABC ist. In natürlichem Graphit beträgt der Anteil von β -Graphit bis zu 30%, während künstlich hergestellte Graphite in der Hauptsache aus α -Graphit bestehen [83].

Selbst bei der als amorph bezeichneten Kohle ist noch eine sechseckige Anordnung der Kohlenstoffatome vorhanden. Die einzelnen Ebenen umfassen hier jedoch nur eine geringe Anzahl von Atomen und sind zueinander nicht parallel. Durch Glühen bei hohen Temperaturen verschwindet langsam die anfängliche Unordnung und es entsteht eine mehr und mehr geordnete Struktur. Die einzelnen Ebenen richten sich parallel aus. Die fortschreitende Ausrichtung der Ebenen wird Graphitisierung genannt. Durch Wärme und Druckbehandlung bei Temperaturen über 2800 K kann eine weitere Graphitisierung

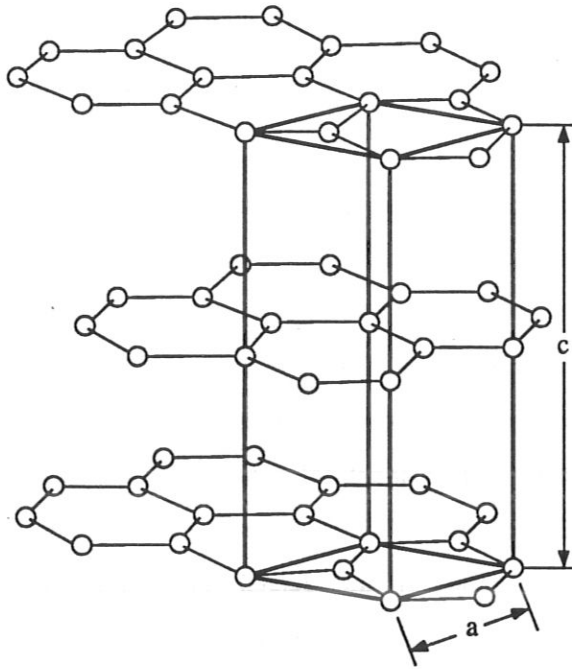


Abb. 4: Gitterstruktur von hexagonalem (α -) Graphit.

erreicht werden, die schließlich zu Mosaikbreiten kleiner als $0,3^\circ$ führt [83]. Derartig behandelter Graphit wird unter der Bezeichnung HOPG (hoch orientierter pyrolitischer Graphit) oder auch als Graphit-Pseudoeinkristalle gehandelt.

HOPG ist ein polykristalliner Graphit, in dem die c -Achsen der einzelnen Kristallite bis auf Bruchteile eines Grades parallel zueinander ausgerichtet sind. Die einzelnen Kristallite sind aber beliebig um die c -Achse gegeneinander verdreht. Die Ausdehnung der Kristallite senkrecht zur c -Achse ist sehr viel größer als entlang der c -Achse und kann einige μm betragen. Die Dichte künstlich hergestellter Graphite beträgt, je nach Herstellungsverfahren, zwischen $1,5$ und $2,26 \text{ g/cm}^3$, während sie in einem vollkommenen Kristall $2,26 \text{ g/cm}^3$ beträgt.

2.2.3 Defekte in Graphit

Zum Verständnis der Bildung einfacher und ausgedehnter Defekte während der Ionenimplantation sowie deren Ausheilverhalten ist die Kenntnis der Aktivierungsenergien der zugrunde liegenden Prozesse notwendig. Messungen und Rechnungen über die Aktivierungsenergien zur Bildung von Zwischengitteratomen und Leerstellen sowie deren Bewegung sowohl senkrecht als auch parallel zur hexagonalen Achse wurden von verschiedenen Autoren mit unterschiedlichen Methoden durchgeführt. Die Zusammenfassung der Ergeb-

Energie	Zwischengitteratom	Leerstelle
E^f	$7,0 \pm 1,5 \text{ eV}$	$7,0 \pm 0,5 \text{ eV}$
E^{ma}	$0,1 \text{ eV}$	$3,1 \pm 0,2 \text{ eV}$
E^{mc}	$> 5 \text{ eV}$	$> 5,5 \text{ eV}$

Tab. 6: Bildungs- E^f und Migrationsenergie E^{ma}, E^{mc} für Punktdefekte im Graphitgitter.

nisse nach Thrower und Mayer [195] ist in Tabelle 6 angegeben.

Im Gegensatz zu Metallen, in denen die Bildungsenergie von Zwischengitteratomen meist die der Leerstellen bei weitem übertrifft, sind diese Energien im Graphit etwa gleich. Wie in den meisten Materialien ist die Aktivierungsenergie für die Bewegung von Leerstellen deutlich höher als die für Zwischengitteratome. Auf Grund der anisotropen Struktur des Graphits hängt die Beweglichkeit von Leerstellen und Zwischengitteratomen von der Bewegungsrichtung ab. Für beide Defekttypen ist die Beweglichkeit senkrecht zur hexagonalen Achse (c-Achse) größer als entlang der c-Achse.

Über die Erzeugung von Defekten durch schnelle Neutronen und deren Agglomeration gibt es zahlreiche Arbeiten, die von Kelly [106] zusammengefaßt wurden. Die erzeugten Zwischengitteratome sind im Graphit im wesentlichen an zwei Prozessen beteiligt, nämlich der Rekombination mit Leerstellen und der Zusammenlagerung mit anderen Zwischengitteratomen zu Clustern zwischen den Gitterebenen [106]. Bei der Rekombination von Zwischengitteratomen mit Leerstellen muß eine Aktivierungsenergie überwunden werden [164]. Zwischengitteratomcluster bilden sich nach Woolley [212] überwiegend homogen im Graphit verteilt, während die heterogene Nukleation an Korngrenzen, Versetzungen und Verunreinigungen demgegenüber vernachlässigbar ist.

Von verschiedenen Autoren [85, 91, 97, 165] wird eine unterschiedliche thermische Stabilität von Zwischengitteratomclustern gemessen, die sich wie folgt zusammenfassen läßt. Ab etwa 200 K beginnen sich die Zwischengitteratome zu C_2 bzw. C_3 -Clustern zusammenzulagern, die oberhalb 300 K bzw. 400 K beweglich werden. Bei noch höheren Temperaturen ($T \geq 500 \text{ K}$) werden die Cluster instabil und beginnen sich aufzulösen [98, 96, 97]. Im Gegensatz zu Zwischengitteratomen werden Leerstellen erst ab 1000 K beweglich. Neben der Rekombination mit Zwischengitteratomen können sich Leerstellen auch zu sog. Leerstellenlinien zusammenlagern, die dann in einer Linie kollabieren.

Eine typische Beobachtung bei neutronenbestrahltem Graphit ist das „Neutronenschwellen“. Darunter versteht man eine Ausdehnung des Materials senkrecht zu den

Gitterebenen und ein Schrumpfen parallel zu diesen. Kelly et al. [103] entwickelten ein Modell, das diese Dimensionsänderung erklärt. In diesem Modell wird das Schwellen in der c-Richtung durch die Bildung von Zwischengitterclustern gedeutet, die zu Zwischengitterebenen heranwachsen. Das Schrumpfen in der a-Richtung entsteht durch den Kollaps von Leerstellenlinien. Auch in diesem Modell wird eine Aktivierungsenergie für die Rekombination eines Zwischengitteratoms mit einer Leerstelle angenommen (0,3 eV). Eine weitere Modifikation des Modells berücksichtigt zusätzlich die Sättigung der Strahlenschäden [105].

Weniger detaillierte Informationen existieren über die Schädigung von Graphit durch Ionenbeschuß. Im Gegensatz zur Neutronenbestrahlung wird beim Ionenbeschuß nur eine kleine Oberflächenschicht geschädigt. Eine für Graphit charakteristische Art der Schädigung durch Ionenbeschuß ist die Aufspaltung der Kristallite in kleinere Bruchstücke. Dies wird sowohl im optischen Mikroskop als auch im SEM beobachtet [11, 10, 150, 149]. Die Aufspaltung setzt bei 295 K bei einer Fluenz von $(5 - 6) \cdot 10^{15} \text{D/cm}^2$ (25 keV D^+) und bei 773 K bei etwa $(5 - 6) \cdot 10^{16} \text{D/cm}^2$ ein [149]. Die Kristallite spalten senkrecht zu den Kohlenstoffebenen, sodaß ihre Ausdehnung senkrecht zur c-Achse d.h. L_a kleiner wird. Diese Aufspaltung ist eine Folge innerer Spannungen in den Kristalliten. Tuinstra und Koenig [197] haben gezeigt, daß die Intensität der Raman-Linie bei 1355 cm^{-1} zum Kehrwert der Kristallitgröße L_a proportional ist. Diese Linie verbreitert sich mit steigender Schädigung, ebenso wie die im einkristallinen Graphit vorhandene Linie bei 1580 cm^{-1} , bis sich beide schließlich überlagern und eine breite Linie bei 1525 cm^{-1} entsteht. Diese breite Linie wird als Zeichen für die Amorphisierung des Graphits angesehen [49, 186]. Die Linie bei 1355 cm^{-1} tritt schon bei kleinen Deuteriumfluenzen ($1 \cdot 10^{16} \text{D/cm}^2$ 25 keV) auf [194]. Raman-Untersuchungen zeigen, daß bei 673 K etwa die zehnfache Fluenz notwendig ist, um den Graphit ähnlich wie bei 295 K zu schädigen [194]. Neben der Spaltung der Kristallite wird auch das Entstehen von Defektclustern beobachtet [149]. Deren Größe nimmt mit steigender Implantationstemperatur zu, während ihre Anzahl abnimmt. Mit TEM wird (in Graphitfasern) eine kontinuierliche Abnahme der Kristallitgröße von 100 \AA auf 5 \AA gefunden [87]. Gleichzeitig steigt der Ebenenabstand bei Fluenzen über $1 \cdot 10^{15} \text{H/cm}^2$ (1 keV) von $3,36 \text{ \AA}$ auf $5,2 \text{ \AA}$ [87]. Bei hohen Fluenzen läßt sich Graphit sowohl bei 295 K als auch bei 773 K durch Deuteriumimplantation amorphisieren. Niwase et al. [149] zeigen, daß Graphit bei 295 K (25 keV) nach Implantation von $(5 - 6) \cdot 10^{16} \text{D/cm}^2$ und bei

773 K nach $(2 - 3) \cdot 10^{18} \text{D/cm}^2$ amorph wird. Andererseits gibt es keine Unterschiede in der Schädigung durch Wasserstoff- oder Heliumbeschuß [149], was darauf hindeutet, daß die Schädigung nur durch die deponierte Energie bestimmt wird und chemische Effekte eine untergeordnete Rolle spielen. Trotzdem zeigt die Blasenbildung nach Heliumbeschuß, die bei Wasserstoff-Implantation nicht auftritt, daß der Wasserstoff chemisch gebunden wird, während sich Helium in Blasen sammelt.

Das Ausheilen von Strahlenschäden in Graphit wird von Elman et al. [67, 174] als zweistufiger Prozess beschrieben. Elman et al. finden eine zweidimensionale Ordnung nach Erhitzen auf 1770 K bis 2570 K, während eine dreidimensionale Ordnung erst bei Temperaturen über 2570 K eintritt. Nach Erhitzen auf 2770 K sind jedoch alle Strahlenschäden vollständig ausgeheilt. Ist die dreidimensionale Ordnung nicht völlig zerstört, kann das Gitter schon bei niedrigeren Temperaturen wiederhergestellt werden [36].

Venkatesan et al. [199, 200] finden bei der Implantation von C und As, daß Strahlenschäden, die zwar groß genug sind, um Gitterführung von Ionen zu verhindern, aber noch keine vollständige Zerstörung der Graphitstruktur zur Folge haben, schon bei Temperaturen von 570–1370 K deutlich ausheilen, während Bereiche die so stark geschädigt sind, daß die Graphitstruktur völlig zerstört ist, bis zu dieser Temperatur nicht ausheilen. Diese Ergebnisse werden von Roth et al. [171] für Wasserstoff in Graphit bestätigt.

2.2.4 Struktur und Eigenschaften von Siliziumkarbid

SiC ist ein kristallines Material, das in reinem Zustand farblos ist und je nach Art bzw. Konzentration der Verunreinigungen verschiedene Farben von gelb über grün bis schwarz annehmen kann. Es zeichnet sich durch hohe Festigkeit, gute Temperaturbeständigkeit sowie hohe Abriebfestigkeit aus.

Eine der herausragenden Eigenschaften von SiC ist, daß es in mehr als 170 kristallographischen Strukturen auftritt. Allen Modifikationen, Polytypen genannt, ist gemeinsam, daß ein Kohlenstoffatom von vier Siliziumatomen umgeben ist. Jedoch können die verschiedenen Polytypen kubische (3C), rhomboedrische (15R, 21R,...) oder hexagonale (2H, 4H, 6H,...) Symmetrie besitzen. Die Zahlen geben jeweils die Anzahl der Si-C-Doppellagen senkrecht zur c-Achse in der Einheitszelle an. Die kubische Modifikation wird β -SiC genannt, während die hexagonalen und rhomboedrischen Modifikationen als α -SiC zusammengefaßt werden. Eine Übersicht über die verschiedenen Untertypen von

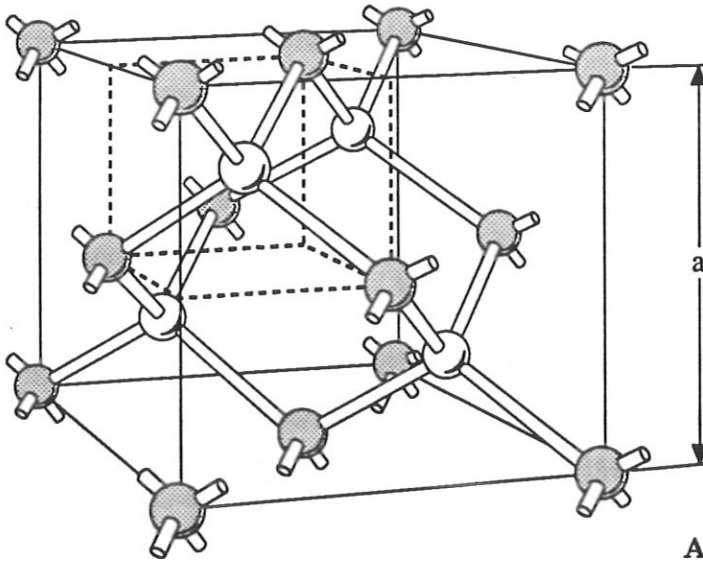


Abb. 5: Gitterstruktur von kubischem (β -) Siliziumkarbid.

SiC ist bei Wyckoff bzw. Gmelin [214, 84] zu finden.

Im kubischen (β) SiC beträgt die Kantenlänge der Einheitszelle $a = 4,36 \text{ \AA}$ und somit der Abstand der nächsten Nachbarn $1,89 \text{ \AA}$ ($= \sqrt{\frac{3}{16}}a$, zum Vergleich: Diamant $a = 3,56 \text{ \AA}$, Silizium $a = 5,43 \text{ \AA}$). Die Dichte von β -SiC beträgt $3,216 \text{ g/cm}^3$. In hexagonalem SiC sind die Gitterkonstanten $a = 3,25 \text{ \AA}$ und $c = 5,21 \text{ \AA}$ (zum Vergleich: hexagonaler Diamant $a = 2,52 \text{ \AA}$ und $c = 4,12 \text{ \AA}$).

2.2.5 Defekte in Siliziumkarbid

Strahlenschäden in SiC durch Implantation verschiedener Projektionen wurden mit verschiedenen Methoden wie z.B. dem Gitterführungseffekt, TEM und Ramanspektroskopie untersucht [59, 29, 189]. Nach Implantation bei 95 K und 300 K wird in TEM-Untersuchungen für Fluenzen von $8 \cdot 10^{16} \text{ H/cm}^2$ bzw. $4 \cdot 10^{17} \text{ H/cm}^2$ (80 keV), bei denen die Rückstreuung im RBS-C Spektrum den Wert von amorphem SiC erreicht hat, Amorphisierung beobachtet [42]. Die Dicke der amorphen Schicht entspricht etwa der Tiefe, aus der eine erhöhte Rückstreuung im RBS-C beobachtet wird. Im Gegensatz dazu kann SiC bei 800 K durch Wasserstoff-Implantation nicht amorphisiert werden, wie TEM Aufnahmen zeigen [42]. Es geht aus der Arbeit aber nicht klar hervor, bis zu welcher maximalen Fluenz implantiert wurde, ohne eine Amorphisierung zu erreichen. Ergebnisse von Bacon et al. [11], die nach Implantation von $5 \cdot 10^{18} \text{ He/cm}^2$ bei 973 K im TEM ebenfalls noch keine Amorphisierung finden, scheinen dies zu bestätigen. Die Amorphisierung von

SiC durch Ionenbeschuß bei 295 K konnte auch für andere Projektile (Al, P, Si und Cr) gezeigt werden [56, 128]. Mit diesen Projektilen wird die Amorphisierung etwa bei der gleichen Fluenz erreicht, bei der im RBS-C Spektrum die Rückstreuung aus der geschädigten Tiefe amorphem SiC entspricht. Diese Resultate werden zusätzlich durch Ergebnisse mit Raman-Spektroskopie gestützt [128].

Spitznagel et al. [189] bestimmten die Anzahl der pro Wasserstoffatom verlagerten Siliziumatome zu 5 (bei 80 keV). Nagata et al. [144] geben für 10 keV Deuterium etwa 20 verlagerte Siliziumatome pro Projektil an. Hart et al. [92] berechnen aus der Anzahl der verlagerten Kohlenstoff- und Siliziumatome eine Verlagerungsenergie E_d von 17–30 eV für SiC. Der Tiefenbereich, in dem SiC geschädigt wird, stimmt ungefähr mit der Reichweite der implantierten Ionen überein.

Bohn et al. [29] unterteilen das Ausheilverhalten von Strahlenschäden nach 295 K Implantation in zwei Fälle. Für deponierte Energien unterhalb einer kritischen Energie läßt sich die Schädigung bis 1273 K fast vollständig ausheilen. Dieses Ergebnis wird von Hart et al. [92] bestätigt. Übersteigt die deponierte Energie und somit die Schädigung einen Grenzwert, findet bis 1673 K nur ein schwaches epitaktisches Ausheilen der Schäden aus dem Kristallinneren statt. Bei etwa 1773 K beobachten Bohn et al. ein sehr rasches, schlagartiges Ausheilen der Schädigung in einem schmalen Temperaturintervall. Nach etwa 24 Stunden bei 1773 K sind die Strahlenschäden auch in diesem Fall vollständig ausgeheilt. Im Gegensatz dazu zeigen Raman-Untersuchungen an stark geschädigten Proben schon bei niedrigeren Temperaturen (923–1073 K) als im RBS-C ein Ausheilen der Strahlenschäden [29]. Ob es sich hierbei um einen experimentellen Effekt der Raman-Spektroskopie handelt, oder ob SiC polykristallin rekristallisiert und sich die Kristallite bei 1773 K schlagartig ordnen, konnte nicht geklärt werden.

Bei der Implantation bei 1023 K entstehen sehr viel weniger Strahlenschäden als bei 295 K, was durch dynamisches Ausheilen während der Implantation erklärt werden kann [29].

2.3 Wasserstoffefang und Wasserstoffrückhaltevermögen

Nach der Abbremsung des implantierten Wasserstoffs auf Energien, die der Temperatur des Gitters entsprechen, stehen festkörperphysikalische Prozesse im Mittelpunkt der Wechselwirkung des implantierten Wasserstoffs mit dem Kristallgitter. In diesen Bereich fallen

die Diffusion der Wasserstoffatome, deren Einfang an Gitterdefekten und die Rekombination zu Wasserstoffmolekülen mit nachfolgender Reemission. Bei tiefen Temperaturen sind die zur Ruhe gekommenen Wasserstoffprojekte nicht in der Lage, sich innerhalb des Gitters fortzubewegen. Das Aufsammelverhalten für implantierten Wasserstoff kann man in drei Bereiche unterteilen: vollständiges Aufsammeln des Wasserstoffs, Übergang zur Sättigung und vollständige Sättigung der zurückgehaltenen Wasserstoffmenge.

In vielen Festkörpern, wie z.B. Metallen, kann der Wasserstoff in gelöster Form vorliegen. Besonders in Elementen der Gruppen IIIa-IIb (Übergangsmetalle) können hohe Konzentrationen von Wasserstoff gelöst sein [94]. Bei höheren Wasserstoffkonzentrationen geht das Wasserstoff-Metall-System von der sog. α -Phase, in der die Wasserstoffatome statistisch verteilt sind, in die Hydrid-Phase über, bei der ein geordnetes, vom reinen Metall verschiedenes Gitter im Festkörper entsteht. Daten über Löslichkeit gibt es für viele Metall-Wasserstoff-Systeme, aber auch für Graphit und Karbide [113].

Das Abweichen der Aufsammelkurve von ihrem anfangs linearen Anstieg wird begleitet vom Einsetzen der Wasserstoffreemission, die sich mit fortschreitender Implantationsdauer der 100 %-Reemission der nachgeschossenen Wasserstoffatome annähert. Mehrere Modelle sind entwickelt worden, die das beobachtete Sättigungs- und Reemissionsverhalten befriedigend wiedergeben [191, 51, 132]. Die Mechanismen, die zur Wiederfreisetzung des Wasserstoffs führen, sind jedoch nicht eindeutig geklärt.

Bei höheren Temperaturen können sich die Wasserstoffatome in der Probe durch Diffusion ausbreiten, woraus Teilchenflüsse zur Oberfläche oder ins Innere resultieren. Im Gegensatz zur Diffusion in nicht implantierten Systemen wird der Transport des Wasserstoffs in implantierten Systemen durch Strahlenschäden beeinflusst. Auf seinem Weg durch den Festkörper kann der Wasserstoff an Haftstellen eingefangen werden. Diese Haftstellen können Punktdefekte (z.B. Leerstellen oder Zwischegitteratome), aber auch andere, ausgedehnte Einfangzentren (Defektcluster, Gasblasen) sein. Diese entstehen entweder bereits während der mechanischen Bearbeitung des Materials oder erst im Verlauf der Bestrahlung. Durch thermisch Aktivierung wird der Wasserstoff z.T. wieder aus seinen Haftstellen freigesetzt und kann weiterdiffundieren. Diejenigen Wasserstoffatome, die die Oberfläche erreichen, werden entweder molekular reemittiert oder in kleineren Anteilen durch ionenstrahlinduzierte Desorption atomar freigesetzt. Die thermische Freisetzung von Wasserstoff bei Temperaturen unter 2000 K kann vernachlässigt werden, da dieser

Prozeß stark endothermen Charakter besitzt.

Der Einfang von Wasserstoff bzw. Deuterium in verschiedenen Materialien war Gegenstand vieler Untersuchungen. Die Menge des zurückgehaltenen Wasserstoffs wurde entweder durch Ionenstrahlanalysen bestimmt oder aus der Wasserstoffreemission berechnet.

2.3.1 Graphit

Bisher wurden viele Experimente durchgeführt, um die Implantation von Wasserstoff in Graphit zu untersuchen [4, 37, 41, 51, 52, 112, 172, 176, 191]. Auch in Graphit wird bei niedrigen Fluenzen, mit Ausnahme des reflektierten Anteils, der gesamte Wasserstoff zurückgehalten. Bei Energien im Bereich von einigen keV ist der reflektierte Anteil mit wenigen Prozent jedoch sehr klein. Bei höheren Fluenzen, abhängig von der Energie der Wasserstoffprojekte und somit ihrer Reichweite bzw. der Proben temperatur, beginnt die zurückgehaltene Wasserstoffmenge zu sättigen, bis schließlich der gesamte implantierte Wasserstoff reemittiert wird.

Umfangreiche Untersuchungen bei niedrigen Energien (einige eV bis 1 keV) stammen von Staudenmaier et al. [191], die das Rückhaltevermögen für Deuterium in Papyrex mit Hilfe der Ionenstrahlanalyse und Reemissionsmessungen untersucht haben. Für Energien über 200 eV finden Staudenmaier et al. bei kleinen Fluenzen ein Rückhaltevermögen von 100 % für Deuterium. Die niedrigste von ihnen verwendete Fluenz liegt bei 10^{16} D/cm². Staudenmaier et al. leiten für die Deuteriumsättigungsmenge in Graphit folgenden empirischen Zusammenhang her.

$$F_{sat} [D/cm^2] = 3,5 * 10^{14} E^{0,9} [eV] \quad (19)$$

Die Sättigungskonzentration ist unabhängig von der Implantationsenergie und wird mit 0,4–0,5 Wasserstoffatomen pro Kohlenstoffatom angegeben [191].

Aus Desorptionsexperimenten wird eine Bindungsenergie von 2,0–4,3 eV für den Wasserstoff in Graphit bestimmt [69, 38, 89]. Da diese Energie im Bereich der C–H Bindung liegt, nimmt man an, daß der Wasserstoff chemisch an Kohlenstoffatome gebunden ist. Diese Ergebnisse werden von Ashida et al. [7, 6] mit XPS und SIMS bestätigt, die aus ihren Ergebnissen auf mindestens zwei verschiedene Formen der Bindung des Wasserstoffs an die Kohlenstoffatome schließen. Sie nehmen an, daß eine der Bindungen mit strahleninduzierten Defekten zusammenhängt. Weitere Einflüsse von Strahlenschäden auf das

Deuteriumrückhaltevermögen wurden von Sone und McCracken [187], Scherzer et al. [177] und Wampler et al. [204] gefunden.

Trotzdem ist es weiterhin eine offene Frage, ob zum Einfang des Wasserstoffs im Graphit Strahlenschäden notwendig sind oder ob der Wasserstoff auch im ungeschädigten Gitter (z.B. durch Bildung von C-H Bindungen) gebunden wird. In den meisten Untersuchungen sind die Implantationsfluenzen so hoch, daß durch die Implantation bereits genügend Defekte gebildet wurden, um das Rückhaltevermögen von 100 % zu erklären. Abweichungen von diesem Wert sind höchstens bei sehr kleinen Fluenzen zu erwarten, wurden aber bisher nicht gefunden.

2.3.2 Siliziumkarbid

Im Gegensatz zu Graphit gibt es wenige Untersuchungen über das Wasserstoffrückhaltevermögen von SiC. Erents [69] mißt eine Deuteriumreemission von 4 % bei Targettemperaturen von 295 K und 773 K. Diese erscheint ihm jedoch zu hoch, um sie allein durch reflektiertes Deuterium zu erklären. Takahiro et al. [192] und Choyke et al. [42] geben für kleine Fluenzen ein Deuteriumrückhaltevermögen von 100 % an, sodaß man davon ausgehen kann, daß in SiC, wie in Graphit, bei kleinen Fluenzen das gesamte Deuterium zurückgehalten wird.

Auf Grund der thermischen Desorption wird für das Deuterium in SiC ebenfalls eine sehr hohe Bindungsenergie von 3,3–4,0 eV angegeben [69, 144]. Da die Dissoziationsenergie für die Si-H und C-H Bindung in diesem Bereich liegt, nimmt man an, daß der Wasserstoff wie in Graphit chemisch gebunden ist. Aus der Deuteriumsättigungskonzentration wird ein Deuterium zu Gitteratom Verhältnis von 0,5 bestimmt [144], das etwa dem von Wasserstoff in Graphit entspricht.

2.4 Gitterposition von Deuterium in verschiedenen Materialien

Über die Gitterposition von Deuterium in Graphit bzw. SiC gibt es bisher keine Messungen. Für Graphit gibt es jedoch verschiedene theoretische Überlegungen zur Chemisorption des Wasserstoff an einzelnen Gitterebenen [54, 53, 55, 12], die die energetischen Verhältnisse verschiedener Kohlenstoff-Wasserstoff-Systeme aufzeigen. Dovesi et al. haben mit einer selbstkonsistenten Hartree-Fock-Näherung Bindungslängen und Bindungsenergien für verschiedene regelmäßige Graphit-Wasserstoff-Systeme berechnet. Für ein Wasserstoff

zu Kohlenstoffverhältnis von 1:1 finden sie die größte Adsorptionsenergie ($-3,30$ eV) und die Ausbildung von typischen C-H Bindungen. Die Stabilität wird noch etwas größer, wenn bei gleicher Konfiguration die Ebenen des Graphitgitters, ähnlich wie im Diamantgitter eine sog. Sessel-(chair)-Form annehmen, d.h. die Ebenen wellenartig geknickt werden ($-5,03$ eV). In diesem Fall wird der Wasserstoff nicht an der Oberfläche adsorbiert, sondern von beiden Seiten an der Graphitebene gebunden.

Nach Dovesi führt die Chemisorption von Wasserstoff auf Graphit zur Bildung fester Bindungen, vergleichbar denen in Kohlenwasserstoffen. Alle theoretischen Überlegungen führen zu dem Schluß, daß eine Wasserstoffposition direkt über den Kohlenstoffatomen die energetisch günstigste ist. Wegen der Schichtstruktur von Graphit mit einem sehr großem Ebenenabstand und geringen Bindungskräften zwischen den Ebenen können diese Überlegungen auch auf das Graphitvolumen übertragen werden. Gotoh et al. [87, 181] führen die Zunahme des Ebenenabstandes auf dieses Modell zurück.

Während über die Gitterposition von Wasserstoff in Graphit und SiC keine Messungen vorliegen, gibt es mehrere Arbeiten über die Gitterposition von Wasserstoff in Silizium [157, 13, 15, 16]. Picraux und Vook bestimmen in Gitterführungsexperimenten bei 300 K für Deuterium eine Gitterposition entlang der $\langle 111 \rangle$ -Richtung, etwa $1,6$ Å vom Siliziumatom entfernt gegenüber der Si-Si Bindung. Im Gegensatz dazu finden Bech-Nielsen et al. nach 30 K Implantationen 80 % des Deuteriums auf einer Position nahe dem Zentrum der Si-Si Bindung (BC) und die restlichen 20 % auf der tetraedriscen Position im Si-Gitter. Bech-Nielsen nimmt an, daß Deuterium auf der Position im Zentrum der Si-Si Bindung an einer freien Si-Bindung infolge einer Leerstelle gebunden ist, während das Deuterium auf tetraedriscen Positionen im Siliziumgitter gelöst ist. Beim Erhitzen auf 150 K wird er eine Änderung der Gitterposition des Deuteriums beobachtet. Deuterium auf Positionen im Zentrum der Si-Si Bindung wird auf tetraedrische Positionen verlagert. Weiteres Erhitzen auf 500 K macht diesen Prozess wieder rückgängig und bei 500 K befinden sich ungefähr 85 % im Zentrum der Bindung und 15 % auf einer tetraedriscen Position. Die Änderung der Gitterposition der Deuteriumatome bei 150 K wird mit der Beweglichkeit von Zwischengitteratomen und Leerstellen bei dieser Temperatur erklärt, während bei 500 K kleine Defektcluster beweglich werden.

In TiC wird ebenfalls eine Ordnung von Deuterium im Gitter beobachtet [146]. Das Deuterium wird in unterstöchiometrischem TiC an Kohlenstoffstellen gebunden. Erst

bei hohen Fluenzen, bei denen schon viele Defekte vorhanden sind, wird ein Teil des Deuteriums auch an diesen Defekten gebunden.

3 Experimentelle Methoden und Apparatur

Zur Untersuchung der zurückgehaltenen Wasserstoffmenge und der erzeugten Strahlenschäden bei der Deuteriumimplantation in Graphit und SiC werden in erster Linie Ionenstrahlanalysemethoden verwendet. Die Bestimmung der aufgesammelten Deuteriummenge erfolgt mit einem 790 keV ^3He -Strahl über die Kernreaktion $\text{D}(^3\text{He}, \alpha)\text{p}$, wobei aus der Summe der nachgewiesenen Protonen die aufgesammelte Deuteriummenge berechnet wird. Die Strahlenschäden werden durch Rutherford-Rückstreuung in Gitterführungsgeometrie gemessen. Dazu ist die Probe auf einem Zwei-Achsen-Goniometer montiert, mit dem die Kristallachsen mit einer Genauigkeit von $0,01^\circ$ gegen einen hochenergetischen Ionenstrahl ausgerichtet werden können. Bei einer solchen Ausrichtung hängt die Intensität der zurückgestreuten Ionen stark von der Dichte der verlagerten Atome ab. Zusätzlich wurden ausgewählte Proben vor und nach dem Experiment im Licht- bzw. Elektronenmikroskop untersucht, um die Oberflächenbeschaffenheit zu prüfen und gröbere Schädigungsstrukturen nachzuweisen.

3.1 Rutherford-Rückstreuung

Die Rutherford-Rückstreu-Analyse (RBS) ist eine Methode zur Aufnahme von Tiefenprofilen einer Fremdatomverteilung in Festkörpern. Ihre Grundlagen sind in verschiedenen zusammenfassenden Arbeiten beschrieben worden [45, 127].

Wie in Kapitel 2.1 beschrieben, erleiden die mit der Energie E_0 auf die Probe auftreffenden Projektile beim Durchgang durch Materie einen Energieverlust $\frac{dE}{dx}$, der von ihrer Energie, der Projektilart und der Probenzusammensetzung abhängt. Es besteht eine durch den Wirkungsquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ gegebene Wahrscheinlichkeit, daß die Projektile mit einem Gitteratom (bzw. Fremdatom) zusammenstoßen, dabei einen Teil ihrer Energie und ihres Impulses auf den Stoßpartner übertragen und dadurch ihre Bewegungsrichtung ändern. Am Ort des Stoßes haben die Projektile auf Grund des Energieverlusts die Energie E_0^* ,

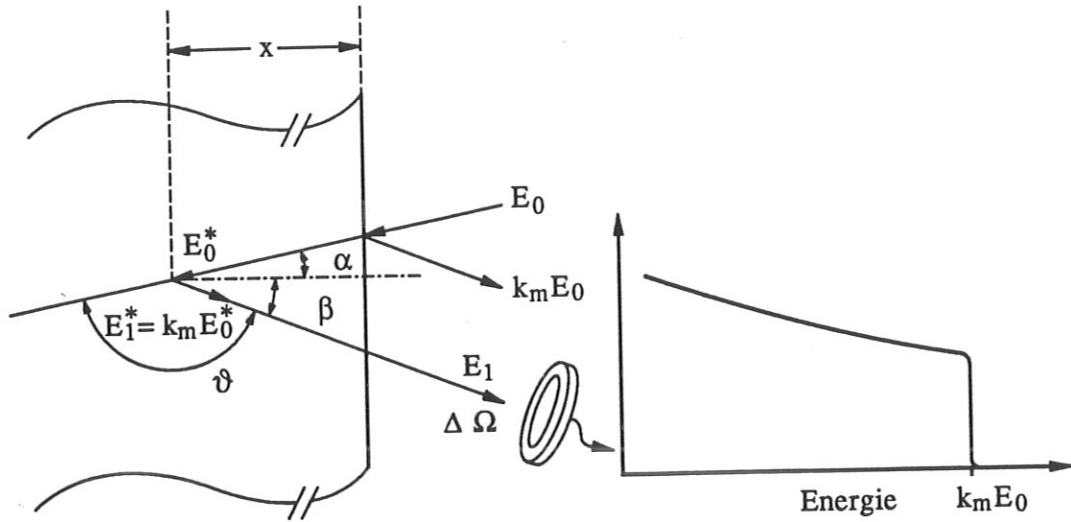


Abb. 6: Schematische Darstellung der Rückstreuung eines Ions aus der Tiefe x .

die gegeben ist durch

$$E_0^* = E_0 - \int_0^{\frac{x}{\cos \alpha}} \frac{dE}{dx'} dx' . \quad (20)$$

Da Stöße mit Gitteratomen für energiereiche, leichte Ionen sehr selten sind, bewegen sich diese auf nahezu geraden Bahnen durch den Festkörper. Man kann in guter Näherung annehmen, daß die Rückstreuung in einem einzigen Stoß erfolgt. Der Energieübertrag und die Richtungsänderung sind durch den Stoßparameter, die Massen der Stoßpartner sowie die Energie des Projektils bestimmt. Die Energie der gestreuten Projektilatome ist

$$E_1^* = k_m E_0^* , \quad (21)$$

wobei der kinematische Faktor k_m im Laborsystem gegeben ist durch

$$k_m = \left\{ \frac{M_1 \cos \vartheta \pm \sqrt{M_2^2 - M_1^2 \sin^2 \vartheta}}{M_1 + M_2} \right\}^2 \quad (22)$$

mit ϑ = Streuwinkel im Laborsystem

M_1 = Masse des Projektils

M_2 = Masse der Targetatome.

Werden die Projektile so stark abgelenkt, daß ihre Bewegungsrichtung nach dem Stoß einen Winkel $\beta < 90^\circ$ zur Oberflächennormalen einschließt, kann das Projektil die Probe

nach erneuter Abbremsung mit der Energie E_1 wieder verlassen,

$$E_1 = E_1^* - \int_{\frac{x}{\cos \beta}}^0 \frac{dE}{dx'} dx' \quad (23)$$

und in einem Detektor nachgewiesen werden.

Die Zahl der an Gitter- bzw. Fremdatomen in einer Tiefe x zurückgestreuten Projektile, die in einem Detektor mit der Energie E_1 in einem Energieintervall ΔE nachgewiesen werden, ist gegeben durch:

$$Y(x) = N_1 \Delta \Omega \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{E_0^*} \frac{\Delta E}{\frac{k_m}{\cos \alpha} \varepsilon(E_0^*) + \frac{1}{\cos \beta} \varepsilon(E_1^*)} \frac{\varepsilon(E_1^*)}{\varepsilon(E_1)}$$

mit N_1 = Anzahl der auftreffenden Projektile (24)
 $\Delta \Omega$ = Raumwinkel des Detektors
 $\varepsilon(E) = \frac{1}{N} \left. \frac{dE}{dx} \right|_E$ Bremsvermögen bei E

Dies gilt jedoch nur bei einer ungeordneten Verteilung der Festkörperatome. In ausgezeichneten Richtungen von Einkristallen kann die Intensität der rückgestreuten Projektile sehr stark vermindert sein.

3.2 Der Gitterführungseffekt

Bereits im Jahre 1912 entdeckten J. Stark und G. Wendt [190] einen Einfluß der geordneten Gitterstruktur auf die Bewegung von energiereichen Ionen in Einkristallen, den sie durch das ungehinderte Eindringen der Ionen in die „Kanäle“ der Kristallebenen erklärten. In einem Einkristall können sich die Ionen entlang dichtgepackter Gitterrichtungen auf Bahnen bewegen, die nicht mehr durch eine zufällige Folge von Stößen mit den Gitteratome bestimmt sind. Durch korrelierte Kleinwinkelstöße an mehreren benachbarten Atomen erfolgt eine streifende Reflektion der Projektile an den dicht gepackten Atomketten oder Ebenen des Kristalls (siehe Abbildung 7). Dadurch wird eine dichte Annäherung der Projektile an die Kettenatome und somit Stöße mit großen Richtungsänderungen verhindert. Die Projektile behalten im wesentlichen ihre ursprüngliche Bewegungsrichtung bei, und bewegen sich auf sog. *geführten Bahnen*. Projektile auf *geführten Bahnen* können sehr tief in den Kristall hineinlaufen, ohne zurückgestreut zu werden. Die Rückstreuintensität wird in diesem Fall sehr klein.

Diesen Effekt nennt man Gitterführung, in der englischsprachigen Literatur wird er allgemein als „channeling“ bezeichnet. Bei Rutherford-Rückstreu-Analysen, die diesen Effekt

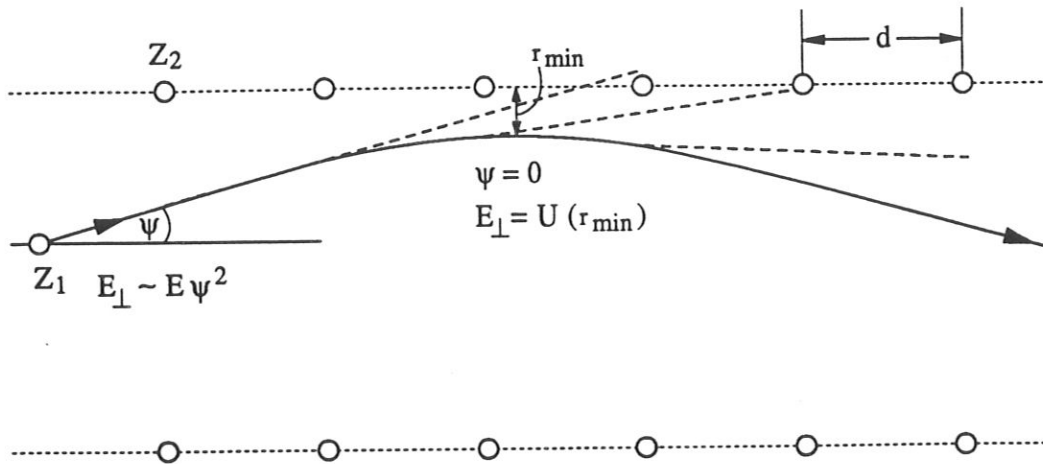


Abb. 7: Gitterführung an einer Atomkette.

benutzen, spricht man von RBS-C. Das theoretische Modell über richtungsabhängige Effekte bei der Bewegung von energiereichen Ionen in Einkristallen wurde von C. Lehmann und G. Leibfried [114], C. Erginsoy [72] und J. Lindhard [122] entwickelt, und ist inzwischen von verschiedenen Autoren zusammenfassend beschrieben worden [75, 141, 45, 81, 50].

Die elastische Wechselwirkung zwischen dem Projektil und einem Gitteratom wird durch das Potential $V(r)$ beschrieben.

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \varphi_0 \left(\frac{r}{a_{TF}} \right) \quad (25)$$

$V(r)$ kann durch das Coulombpotential des Kerns mit einem zusätzlichen Term $\varphi_0(\frac{r}{a_{TF}})$, der die Abschirmung durch die Elektronen beschreibt, angenähert werden. Dieser Term wird im allgemeinen als

$$\varphi_0 \left(\frac{r}{a_{TF}} \right) = \sum_{i=1}^3 a_i \exp \left(-b_i \frac{r}{a_{TF}} \right) \quad (26)$$

geschrieben. Am häufigsten werden für $V(r)$ die Näherungen von Lindhard [123], Molière [138] oder Bohr [31] verwendet.

Die mathematische Beschreibung des Gitterführungseffekts erfolgt durch das *Kontinuum-Modell*. Ist der Winkel ψ , unter dem das Projektil zu einer dichtgepackten Gitterrichtung verläuft, klein, kann man statt der Wechselwirkung des Projektils mit den einzelnen Atomen seine Wechselwirkung mit der ganzen Atomkette betrachten. Das Wechselwirkungspotential dieser Atomkette kann durch ein zylindersymmetrisches Potential

angenähert werden.

$$U(\vec{r}, z) \simeq U(\vec{r}) \simeq U_1(r)$$

mit \vec{r} = Abstandsvektor
 r = Abstand von der Atomkette
 z = Position entlang der Atomkette

(27)

An diesem Zylinderpotential erfährt das Projektil immer eine abstoßende Kraft senkrecht zur Atomkette, deren Größe nur von seinem Abstand r zur Kette, nicht jedoch von seiner Position z entlang der Kette, abhängt. Dadurch wird das Ion „sanft“ von der Atomkette weggestoßen und so zwischen den Atomketten geführt (siehe Abbildung 7). Eine einfache Näherung für das Potential des *Kontinuum-Modells* läßt sich aus dem Lindhard-Potential ableiten [122]:

$$U_1(r) = \frac{2Z_1Z_2e^2}{d} \xi\left(\frac{r}{a_{TF}}\right)$$

mit

$$\xi\left(\frac{r}{a_{TF}}\right) = \ln\left\{\left(\frac{Ca_{TF}}{r}\right)^2 + 1\right\}$$
(28)

und

d = Abstand der Atome in einer Kette

C = $\sqrt{3}$ (nach Lindhard [122])

Die Näherung durch das *Kontinuum-Modell* ist nur richtig, wenn sich die Projektile in einem genügend großen Abstand zur Atomkette bewegen. Sie wird falsch, wenn ihre transversale Energie E_{\perp} groß genug ist und die Projektile den Atomen der Kette so nahe kommen können, daß Stöße mit großen Winkeländerungen möglich werden. Diese Grenzbedingung kann auf drei Arten beschrieben werden. Zum einen durch einen kritischen Abstand r_c für die Annäherung an die Atomkette, weiter durch einen kritischen Winkel ψ_c der Bahn zur Kettenachse oder durch eine kritische transversale Energie $E_{\perp c}$ für die Bewegung senkrecht zu den Atomketten. Zwischen diesen besteht folgende Beziehung:

$$U(r_c) \simeq E\psi_c^2 = E_{\perp c}. \quad (29)$$

Im allgemeinen wird ein Grenzwinkel ψ_c angegeben, für den gilt: Energiereiche Teilchen, die sich unter einem Winkel kleiner als ψ_c relativ zu einer dichtgepackten Atomkette bewegen, laufen in einem konservativen Potential und bewegen sich auf *geführten Bahnen*. Nach Lindhard [122] erhält man für den kritischen Winkel folgenden Wert (in rad):

$$\psi_c = \frac{\psi_1}{\sqrt{2}} \sqrt{\xi\left(\frac{r_{min}}{a_{TF}}\right)} \quad (30)$$

mit dem charakteristischen Winkel ψ_1 :

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{2Z_1Z_2e^2}{E_0d}}, \quad (31)$$

wobei r_{min} im allgemeinen gleich der mittleren thermischen Auslenkung $\rho_{R.M.S.}$ der Atome gesetzt wird. Der kritische Winkel nimmt mit abnehmender Energie und steigender Ordnungszahl der Gitter- und Projektilatome zu. Er wächst ebenfalls, wenn die Atome innerhalb einer Kette dichter gepackt sind.

Mit dieser Gleichung läßt sich für die in dieser Arbeit untersuchten Materialien Graphit und Siliziumkarbid der charakteristische Winkel für die verwendeten Energien berechnen.

	400 keV H	790 keV He	1,5 MeV He
HOPG c	0,53°	0,53°	0,39°
SiC <100> C-Kette		0,57°	
SiC <100> Si-Kette		0,88°	

Da in SiC die Atomketten entlang der <100>-Richtung entweder nur aus Silizium- oder Kohlenstoffatomen bestehen, ergibt sich ein unterschiedlicher charakteristischer Winkel für die Gitterführung an Silizium- bzw. Kohlenstoffatomketten. Für die Streuung an Siliziumatomen ist der charakteristische Winkel für Silizium maßgebend. Der Abstand der Atome entlang der <100>-Richtung beträgt 4,36 Å. In Graphit gibt es entlang der c-Achse Atomketten, in denen die Kohlenstoffatome einen Abstand von c (6,7 Å) haben und solche, in denen der Atomabstand c/2 (3,35 Å) beträgt. Der charakteristische Winkel wurde mit einem mittleren Atomabstand $\bar{d} = 5,03$ Å berechnet [65].

3.2.1 Aufteilung in geführten und nicht-geführten Strahl

Trifft ein Ionenstrahl parallel zu einer dichtgepackten Gitterrichtung oder -ebene auf einen Kristall, so laufen die Projektile je nach ihrer Ablenkung an den Oberflächenatomen unter mehr oder weniger kleinen Winkeln zur dichtgepackten Richtung in den Kristall hinein. Nur ein kleiner Teil der Ionen wird an Oberflächenatomen so stark abgelenkt, daß die regelmäßige Struktur des Kristalls auf seine weitere Bahn keinen wesentlichen Einfluß hat. Ihre Bewegung unterscheidet sich nicht wesentlich von der in einem polykristallinen oder amorphen Festkörper.

Der größte Teil der einfallenden Projektile wird parallel zu den Atomketten unter korrelierten Stößen nach dem oben beschriebenen Modell im Kristall geführt. Man teilt

deshalb den einfallenden Strahl in zwei Teile und spricht von Ionen auf *geführten* bzw. *nicht-geführten* Bahnen. Die beiden Teile werden im angelsächsischen Sprachgebrauch als „aligned“ und „random Beam“ bezeichnet und sollen im folgenden kurz *geführter* und *nicht-geführter Strahl* genannt werden. Analog nennt man ein Spektrum, bei dem der Ionenstrahl zu einer Gitterrichtung ausgerichtet wurde ein „aligned Spektrum“ oder ein *ausgerichtetes* Spektrum. Das Spektrum eines nicht ausgerichteten Kristalls bzw. polykristallinen oder amorphen Festkörpers bezeichnet man als *nicht ausgerichtetes* Spektrum oder „random Spektrum“. Der Anteil des *nicht-geführten Strahls* hängt vom Einfallswinkel ψ des Strahls zur Atomkette und der Oberflächenbeschaffenheit des Kristalls ab.

Wie bereits erwähnt, können Ionen auf *geführten Bahnen* den Atomen der Ketten nicht beliebig nahe kommen. Aus dieser Tatsache läßt sich eine inhomogene Flußdichteverteilung $F(\vec{r})$ der Projektile im Kanal herleiten, da sich Projektile auf *geführten Bahnen* durch korrelierte Kleinwinkelstöße vorzugsweise im Zentrum des Kanals bewegen [142, 202]. Man kann die Ursache dieses Effekts folgendermaßen verstehen. Dringt ein Ionenstrahl unter einem Winkel ψ in den Kristall ein, so erhalten die Ionen, abhängig vom Ort \vec{r}_{in} ihres Eindringens in die Oberfläche und dem dort herrschenden Potential $U(\vec{r})$, eine unterschiedliche transversale Energie E_{\perp} .

$$E_{\perp} = U(\vec{r}_{in}) + E\psi^2 \quad (32)$$

Man erhält somit eine Verteilungsfunktion $g(E_{\perp}, 0)$ für die transversale Energie der Ionen an der Oberfläche. Diese bleibt nicht erhalten, sondern ändert sich als Funktion der Eindringtiefe $g(E_{\perp}, x)$ (siehe Kapitel 3.2.2). Auf Grund seiner transversalen Energie bleibt die Bewegung des Projektils auf Bereiche beschränkt, für die gilt:

$$U(\vec{r}) < E_{\perp} . \quad (33)$$

Die Fläche, für die dies gilt, wird mit $A(E_{\perp})$ bezeichnet. Ist der Strahl parallel zu einer dichtgepackten Gitterrichtung ausgerichtet, d.h. $\psi = 0$, können sich alle Projektile im Bereich $U(\vec{r}) = 0$ bewegen, während sich in Bereichen für $U(\vec{r}) > U_c$ jedoch nur Teilchen mit einer transversalen Energie $E_{\perp} > U_c$ bewegen können.

Mit dieser Argumentation kann die Flußdichteverteilung $F(\vec{r})$ der Projektile berechnet werden, wenn man davon ausgeht, daß sich Teilchen mit der transversalen Energie E_{\perp} mit der gleichen Wahrscheinlichkeit im gesamten für sie möglichen Bereich $A(E_{\perp})$ aufhalten können. Die Erhöhung der Flußdichte im Zentrum des Kanals wird *Flux-Peaking*

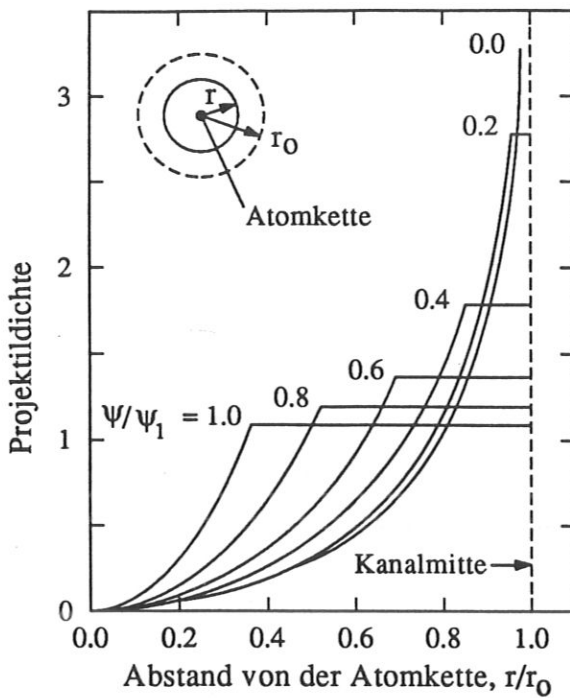


Abb. 8: Flußdichteverteilung der Projektile für verschiedene Einfallswinkel ψ . Der Einfallswinkel ψ ist in Einheiten von ψ_1 ausgedrückt. Der Abstand r von der Atomkette ist in Einheiten von r_0 , dem Radius des Gitterführungschanals, aufgetragen. Entnommen aus [75].

genannt. Qualitative Berechnungen über diese Erhöhung wurden u.a. von van Vliet durchgeführt [202].

Abbildung 8 zeigt die Flußdichteverteilung der Projektile für verschiedene Einfallswinkel. Wie die Abbildung zeigt, ist für $\psi = 0$ die Flußdichteverteilung $F(\vec{r})$ unabhängig von der Analyseenergie, während der Einfluß der Analyseenergie auf die Flußdichteverteilung für $\psi \neq 0$ in das Verhältnis ψ/ψ_1 eingeht. Da ψ_1 mit zunehmender Energie kleiner wird, wird die Flußdichteverteilung breiter und flacher, wenn der Einfallswinkel ψ gleich bleibt und die Energie zunimmt.

Projektile auf *geführten Bahnen* haben eine sehr kleine transversalen Energie E_{\perp} und kommen deshalb den Gitteratomen nicht näher als $0,1 - 0,2 \text{ \AA}$. Dieser Abstand ist viel zu groß, um Stöße mit großen Winkeländerungen zu machen. Nur Ionen auf *nicht-geführten Bahnen*, die den Kristall wie einen amorphen Festkörper durchlaufen, haben die Möglichkeit, Gitteratome zentral oder fast zentral zu treffen und damit große Richtungsänderungen zu erfahren.

Für den Einfallswinkel ψ des Ionenstrahls zu einer dichtgepackten Gitterrichtung kann man zwei Fälle unterscheiden. Erstens, der *nicht-ausgerichtete* Fall, für den ψ größer als der kritische Winkel ψ_c für Gitterführung ist. Die Projektile bewegen sich im Kristall auf *nicht-geführten Bahnen*, und die Rückstreuung erfolgt wie in einem polykristallinen

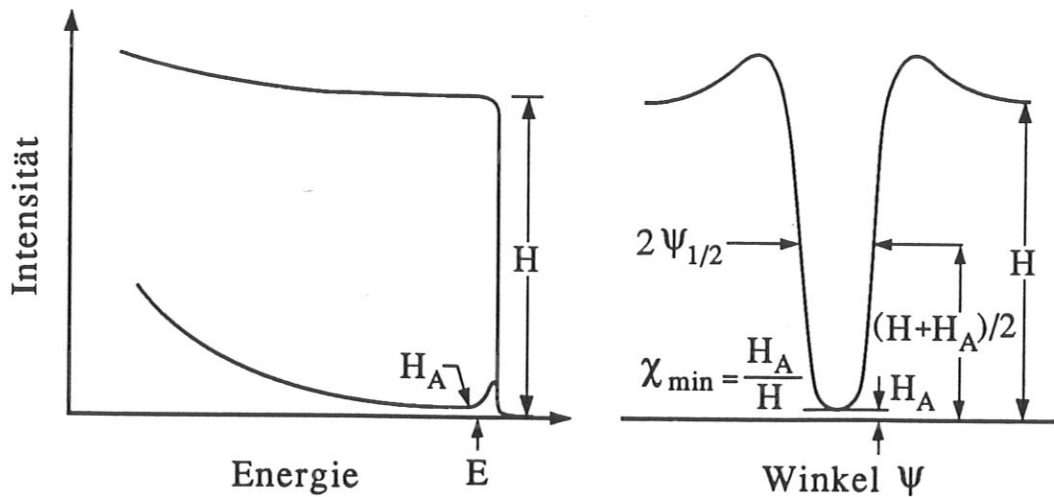


Abb. 9: Schematische Darstellung der Energiespektren eines ausgerichteten und nicht ausgerichteten Kristall („aligned“ und „random“ Spektrum). Der zweite Teil der Abbildung zeigt die Rückstreuintensität in Abhängigkeit vom Einfallswinkel ψ der Projektile zu einer dichtgepackten Gitterrichtung. In der Abbildung sind die experimentellen Definitionen von $\psi_{1/2}$ und χ_{min} angegeben.

oder amorphen Material. Zweitens, der *ausgerichtet* Fall für $\psi < \psi_c$, in dem der Strahl in eine *geführte* und eine *nicht-geführte* Komponente aufgespalten wird. Ein großer Teil der einfallenden Ionen läuft auf *geführten Bahnen* und kann keine Stöße mit großen Richtungsänderungen erfahren. Die Wahrscheinlichkeit für Stöße mit den Gitteratomen unter kleinen Stoßparametern kann dadurch um bis zu einem Faktor 50 reduziert werden. Die Rückstreuintensität für einen Ionenstrahl, der parallel zu einer dichtgepackten Gitterrichtung auf einen Kristall trifft, nimmt drastisch ab. Man kann sagen, daß die Gitteratome für Projektile auf *geführten Bahnen* „unsichtbar“ sind.

Abbildung 9 zeigt schematisch die Energiespektren für einen zum Ionenstrahl *ausgerichtet* bzw. *nicht ausgerichtet* Kristall. Im *ausgerichtet* Fall ist deutlich die sehr viel geringere Rückstreuintensität zu erkennen. Neben der erniedrigten Intensität ist im *ausgerichtet* Fall auch ein kleines Maximum an der Probenoberfläche zu erkennen. Dieser *Oberflächenpeak* entsteht dadurch, daß für den Ionenstrahl an der Oberfläche zunächst noch keine Gitterführung vorliegt. Gitterführung und die damit verbundene Erniedrigung der Rückstreuintensität erfolgt erst mit dem Eindringen in den Kristall. Der zweite Teil der Abbildung zeigt die Rückstreuintensität in Abhängigkeit des Einfallswinkels ψ der

Projekteile zu einer dichtgepackten Gitterrichtung des Kristalls.

Das Verhältnis der Rückstreuintensität in einer *ausgerichteten* zu einer *nicht ausgerichteten* Orientierung des Kristalls wird als normierte Rückstreuintensität $\chi_R(x)$ bezeichnet (i.a. normiertes Rückstreupektrum genannt) und entspricht dem Anteil des *nicht-geführten* Strahls am Gesamtstrahl. Der Wert von $\chi_R(x)$ an der Oberfläche $\chi_R(0)$ wird als χ_{min} bezeichnet. Dieser Wert hängt von der Oberflächenbeschaffenheit der Probe ab und ist ein Maß für die Güte der Probe für die Gitterführung.

3.2.2 Zunahme des nicht-geführten Strahls mit der Eindringtiefe

In einem realen Kristall ist auf Grund von Gitterschäden und der thermischen Bewegung der Gitteratome eine starre Trennung zwischen *geführtem* und *nicht-geführtem Strahl* nicht möglich, da auch unter Winkeln $\psi < \psi_c$ die transversale Energie E_{\perp} nicht streng erhalten bleibt und für $\psi \simeq \psi_c$ unter Umständen noch Gitterführung stattfindet. Dadurch sind Übergänge zwischen *geführten* und *nicht-geführten Bahnen* möglich.

Dringen die Ionen tiefer in den Kristall ein, wird ihre transversale Energie E_{\perp} durch Stöße mit Gitterdefekten oder Gitteratomen, die durch die thermische Schwingung aus ihrer Position verlagert sind, aber auch durch Wechselwirkung mit den Elektronen, größer. Dadurch nimmt der *nicht-geführte Strahl* mit wachsender Eindringtiefe zu, ein Vorgang, der in der englischsprachigen Literatur als „*dechanneling*“ bezeichnet wird.

Die Zunahme des *nicht-geführten Strahls* kann durch die Wahrscheinlichkeit $P_{DC}(x)$ beschrieben werden, mit der das Projektil in der Tiefe x von einer *geführten* auf eine *nicht-geführte Bahn* übergeht. Diese Übergänge können in zwei Teile unterteilt werden: (1) Übergänge, die auch in einem perfekten Kristall erfolgen, z.B. durch Gitterschwingungen (dP_V), und (2) Übergänge, die in einem geschädigten Kristall durch Defekte verursacht werden (dP_D). Damit läßt sich dP_{DC} wie folgt schreiben.

$$\begin{aligned} dP_{DC}(x) &= dP_D(x) + dP_V(x) + g(P_D, P_V) \\ dP_{DC}(x) &\approx dP_D(x) + dP_V(x) \end{aligned} \tag{34}$$

Der Term $g(P_D, P_V)$ beschreibt die Kopplung beider Anteile. Die Näherung, daß die beiden Übergangswahrscheinlichkeiten voneinander unabhängig sind (d.h. $g(P_D, P_V) = 0$) wird als *Additionsregel* bezeichnet. Bei der Analyse von Strahlenschäden mit dem Gitterführungseffekt wird die Gültigkeit der Additionsregel vorausgesetzt [61, 45, 95].

Die Übergangswahrscheinlichkeit $P_D(x)$ für eine gegebene Defektverteilung $n_D(x)$ kann auch geschrieben werden als

$$\frac{dP_D(x)}{dx} = \sigma_{DC} n_D(x), \quad (35)$$

worin $\sigma_{DC}(x)$ den Einfluß der einzelnen Defekte auf die Übergänge beschreibt. Der Faktor $\sigma_{DC}(x)$ wird in der englischsprachigen Literatur „dechanneling factor“ genannt, und kann für verschiedene Defekttypen verschiedene Werte annehmen.

Da die Summe des *geführten* und *nicht-geführten Strahls* eins ist, ergibt sich die Änderung des *geführten Strahls* $[1 - \chi_R(x)]$ zu

$$\frac{d[1 - \chi_R(x)]}{dx} = -[1 - \chi_R(x)] \frac{dP_{DC}(x)}{dx}. \quad (36)$$

Die Integration dieser Gleichung führt zu

$$\begin{aligned} \ln \frac{1 - \chi_R(x)}{1 - \chi_R(0)} &= - \int_0^x dP_{DC}(x') \\ &= - \int_0^x dP_D(x') - \int_0^x dP_V(x'). \end{aligned} \quad (37)$$

In einem perfekten Kristall, in dem keine Defekte vorhanden sind, ist $dP_D(x) = 0$, sodaß sich für diesen Fall

$$1 - \chi_V(x) = \exp \left[- \int_0^x dP_V(x') \right] [1 - \chi_V(0)] \quad (38)$$

ergibt. Da im geschädigten Kristall an der Oberfläche noch keine Übergänge von *geführten* auf *nicht-geführten* Bahnen erfolgt sein können, muß der *geführte Strahlanteil* in beiden Fällen gleich sein

$$[1 - \chi_V(0)] = [1 - \chi_R(0)]. \quad (39)$$

Daraus ergibt sich für den geschädigten Kristall

$$\frac{1 - \chi_R(x)}{1 - \chi_R(0)} = \left[\exp \left(- \int_0^x dP_D(x') \right) \right] \left[\frac{1 - \chi_V(x)}{1 - \chi_V(0)} \right]. \quad (40)$$

Durch Einsetzen von Gleichung 35 ergibt sich der Verlauf des *nicht-geführten Strahls* mit der Eindringtiefe:

$$\chi_R(x) = \chi_V(x) + [1 - \chi_V(x)] \left[1 - \exp \left(- \int_0^x \sigma_{DC} n_D(x') dx' \right) \right]. \quad (41)$$

Dies läßt sich für kleine Defektkonzentrationen schreiben als

$$\chi_R(x) = \chi_V(x) + [1 - \chi_V(x)] \int_0^x \sigma_{DC} n_D(x') dx'. \quad (42)$$

Der *nicht-geführte Strahl* in einer geschädigten Probe kann also betrachtet werden als die Summe aus dem *nicht-geführten Strahl* in einem perfekten Kristall $\chi_V(x)$ und dem Strahlanteil, der durch die Defektverteilung $n_D(x)$ von *geführten* auf *nicht-geführte Bahnen* gebracht wird. In der Näherung für kleine Defektkonzentrationen ist letzterer proportional zum Integral der Defekte von der Oberfläche bis zur Eindringtiefe x .

3.2.3 Reichweite und Energieverlust in Einkristallen

Wie in Kapitel 2.1 beschrieben, unterliegen energiereiche Ionen in einem Kristallgitter der Wechselwirkung mit Gitteratomkernen und Elektronen. Außer der Verringerung von Kernstößen mit großen Ablenkwinkeln werden für *geführte* Teilchen auch die Stöße mit den Elektronen reduziert, da die Elektronendichte im Zentrum der Kanäle kleiner ist als in der Nähe der Gitteratome. Dies führt zu einer Reduktion des elektronischen Energieverlusts für *geführte* Teilchen, die in verschiedenen Materialien auch experimentell nachgewiesen wurde [5, 60, 61, 82].

Betrachtet man den Energieverlust im Kristallgitter kann man zwei Fälle unterscheiden. Bei kleinen Energien werden die kritischen Winkel für Gitterführung sehr groß. Dadurch überlagern sich die Kanäle verschiedener Achsen und der Gitterführungseffekt verschwindet. Bei hohen Energien ist der kritische Winkel klein und der elektronische Energieverlust überwiegt den nuklearen. Auch der elektronische Energieverlust ist für den *geführten Strahl* niedriger als für den *nicht-geführten*.

Für große Energien gilt die Bethe-Bloch-Gleichung 3. Aus der Herleitung dieser Gleichung ergibt sich, daß der Energieverlust durch Projektil-Elektron-Stöße in zwei ungefähr gleich große Komponenten zerlegt werden kann:

- Resonante Stöße mit großem Stoßparameter und kleinem Impulsübertrag
- Stöße mit kleinem Stoßparameter und großem Impulsübertrag.

Der Energieverlust durch Stöße mit kleinem Stoßparameter ist proportional zur Elektronendichte auf der Projektilbahn, während Stöße mit großen Stoßparametern nahezu unabhängig von der Elektronendichte sind. Basierend auf dieser Annahme gibt Lindhard [122] folgenden Zusammenhang für den Energieverlust *geführten Ionen* an:

$$\frac{dE}{dx}(\vec{x}) = \frac{4\pi Z_1^2 e^2}{mv^2} L_e[(1 - \alpha)N Z_2 + \alpha\epsilon(\vec{x})] \quad (43)$$

mit der Elektronendichte $\epsilon(\vec{x})$ am Ort \vec{x} und dem Faktor $\alpha \simeq \frac{1}{2}$, der die Aufteilung in beide Komponenten beschreibt. Diese Gleichung besagt, daß die am besten *geführten* *Projektil*e mindestens den halben Energieverlust von *nicht-geführten* *Projektil*en haben. Man bezeichnet das Verhältnis des Energieverlusts von *geführten* und *nicht-geführten* *Projektil*en mit α_{hkl} . Experimentelle Ergebnisse entlang verschiedener Gitterrichtungen ergeben für α_{hkl} Werte von 0,5–0,95 für 0,1–1,0 MeV ^4He in Silizium bzw. Germanium [60]. α_{hkl} nimmt mit zunehmendem Durchmesser des Gitterführungschanals zu [43] und liegt für die $\langle 100 \rangle$ Richtung in Silizium zwischen 0,65–0,85.

Als Folge des niedrigeren Energieverlusts ist die Reichweite der Ionen längs niedrig indizierter Gitterrichtungen oder Ebenen gegenüber *nicht-geführten Bahnen* erhöht. Rechnungen [168, 169] und Messungen [158, 147, 125] haben diese Überreichweiten für *geführte Ionen* bestätigt. Deshalb unterscheiden sich auch die Tiefenverteilungen implantierter Teilchen mittlerer Energie in Einkristallen von denen in polykristallinem oder amorphem Material.

3.2.4 Bestimmung der Strahlenschäden

Die Bestimmung von Strahlenschäden mit dem Gitterführungseffekt ist von verschiedenen Autoren beschrieben worden [18, 27, 75, 167, 215].

Teilt man den Ionenstrahl wie vorher beschrieben in zwei Komponenten, dann hat der *nicht-geführte Strahl* $\chi_R(x)$ die gleiche Rückstreuwahrscheinlichkeit wie ein Ionenstrahl, der auf eine amorphe bzw. polykristalline Probe trifft. Der *nicht-geführte Strahl* besteht in der Tiefe x aus Ionen, die seit ihrem Eindringen in den Kristall auf *nicht-geführten Bahnen* verlaufen und solchen, die im Verlauf ihres Wegs durch den Kristall auf *nicht-geführten Bahnen* übergegangen sind. Defekte und Strahlenschäden im Kristall bewirken diese Zunahme des *nicht-geführten Strahls*. Die normierte Rückstreuintensität eines geschädigten Kristalls, der entlang einer dichtgepackten Gitterrichtung zum Analysestrahl ausgerichtet ist, sei $\chi_D(x)$. Zwischen $\chi_D(x)$, dem nicht-geführten Strahlanteil $\chi_R(x)$ und der Defektverteilung $n_D(x)$ besteht folgender Zusammenhang:

$$\chi_D(x) = \chi_R(x) + [1 - \chi_R(x)] \frac{f n_D(x)}{N}. \quad (44)$$

f wird dabei als Streufaktor bezeichnet, der die unterschiedliche Effektivität verschiedener Defekte für die Streuung beschreibt. Gleichung 44 ist zu entnehmen, daß sich

die Rückstreuintensität eines geschädigten Kristalls aus an allen Gitteratomen gestreuten *nicht geführten* Projektilen und nur an verlagerten Atomen gestreuten *geführten* Projektilen zusammensetzt. Ist $\chi_R(x)$ bekannt, kann die Verteilung der Defekte berechnet werden mit

$$n_D(x) = \frac{N}{f} \frac{\chi_D(x) - \chi_R(x)}{1 - \chi_R(x)}. \quad (45)$$

In Gleichung 45 wird $\chi_R(x)$ aus Gleichung 41 bzw. 42 eingesetzt. Da in $\chi_R(x)$ die Defektverteilung $n_D(x)$ selbst eingeht, ist ein iteratives Verfahren notwendig, um diese zu berechnen.

Die Auswertung der Spektren wurde mit einem Computerprogramm durchgeführt, dessen wesentliche Schritte im folgenden kurz beschrieben werden. Neben dem Spektrum der geschädigten Probe in Gitterführungsrichtung wird das Spektrum der ungeschädigten Probe ebenfalls in Gitterführungsrichtung und in *nicht ausgerichteter* Orientierung (*random* Spektrum) benötigt. Aus den Spektren der geschädigten und ungeschädigten Probe werden mit dem *random* Spektrum die normierten Rückstreuenspektren berechnet (d.h. $\chi_D(x)$ und $\chi_V(x)$). Hierbei geht man davon aus, daß Projektile, die mit der gleichen Energie E im Detektor nachgewiesen werden, in der gleichen Tiefe gestreut wurden. Dies ist nur näherungsweise richtig, da der Energieverlust für Projektile auf *geführten Bahnen* kleiner ist als für *nicht-geführte* Projektile. Das heißt, Projektile auf *geführten Bahnen*, die mit der gleichen Energie nachgewiesen werden, wurden in größeren Tiefen gestreut. Der dadurch entstehende Fehler ist jedoch gering, da alle nachgewiesenen Projektile nach dem Stoß auf *nicht geführten* Bahnen verlaufen. Unter der Annahme von $\alpha_{<100>} = 0,75$ (für Siliziumkarbid) ergibt sich für Projektile aus dem *geführten Strahlenteil* eine um 10% größere Rückstretiefe gegenüber Projektilen auf *nicht geführten Bahnen*. Entsprechend sind die Streuquerschnitte der *geführten Projektile* um etwa 10 % kleiner gegenüber denen *nicht geführter Projektile*, die mit gleicher Energie nachgewiesen werden. Ausgehend von den Ergebnissen in Silizium [60] kann $\alpha_{<100>} = 0,75$ als gute Abschätzung angesehen werden. Der dadurch verursachte Fehler in der Normierung der Rückstreuintensität ist damit 10%. Die normierten Spektren sind in Abbildung 10a dargestellt.

Im zweiten Schritt wird das normierte Spektrum der ungeschädigten Probe von dem der geschädigten Probe subtrahiert. Geht man von der Gültigkeit der Additionsregel aus, kann damit der Einfluß der ungeschädigten Probe auf Übergänge von *geführten Bahnen* auf *nicht-geführte* eliminiert werden. Das gewonnene Differenzspektrum setzt sich aus an

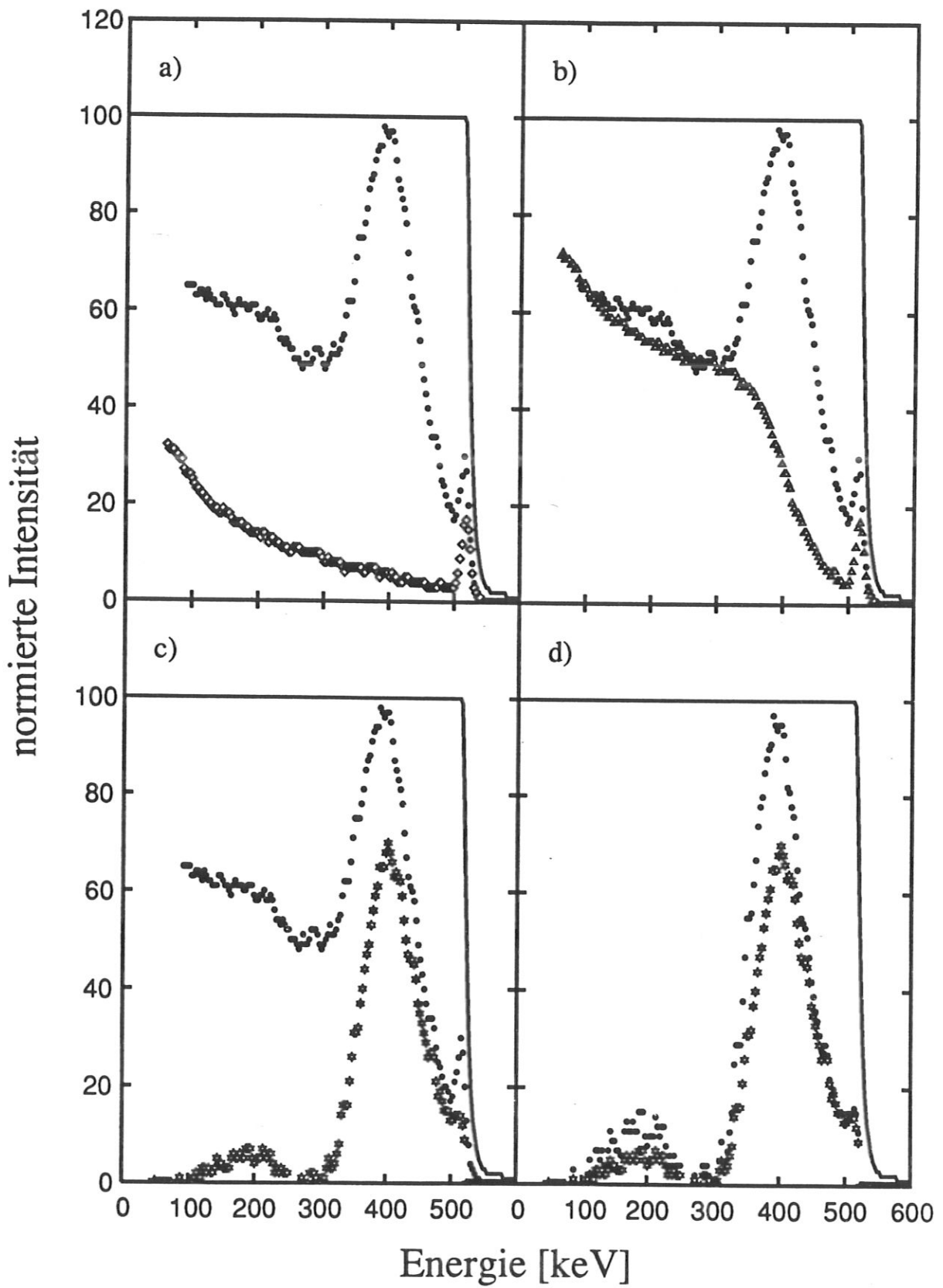


Abb. 10: Bestimmung der verlagerten Atome.

Strahlenschäden gestreuten Projektilen und der durch Defekte verursachten Zunahme des *nicht-geführten Strahls* zusammen. Die Zunahme des *nicht-geführten Strahls* wird durch die Gleichungen 41 bzw. 42 beschrieben. Sie ist proportional zum Integral der Defekte von der Oberfläche bis zur Tiefe x (siehe Gleichungen 41, 42). Zunächst wird ein linearer Verlauf für die Zunahme des *nicht-geführten Strahls* $\chi_R^*(x)$ angenommen und damit die Defektverteilung sowie die Proportionalitätskonstante σ_{DC} berechnet. Mit diesem Ergebnis wird $\chi_R^*(x)$ erneut berechnet und σ_{DC} solange iteriert, bis in der Tiefe unterhalb der geschädigten Schicht $\chi_R^*(x) = \chi_D(x)$ ist. Die so berechnete Funktion $\chi_R^*(x)$ beschreibt den *nicht-geführten Strahlanteil*, der durch Defekte verursacht wird. Um den gesamten *nicht-geführten Strahl* $\chi_R(x)$ zu erhalten, muß man wieder den *nicht-geführten Strahlanteil* des ungeschädigten Kristalls addieren. Diese Summe ist in Abbildung 10b gezeigt.

$\chi_R(x)$ beschreibt einerseits den Anteil *nicht-geführter* Projektilen, die zurückgestreut werden, aber auch den *nicht-geführten Strahlanteil* selbst. Subtrahiert man $\chi_R(x)$ vom Spektrum der geschädigten Probe, erhält man die Energieverteilung der an Defekten gestreuten *geführten* Projektilen. Diese ist in Abbildung 10c gezeigt. Um die Verteilung der Defekte zu erhalten, muß diese noch mit dem Anteil der *geführten Projektilen* normiert werden. Das Ergebnis der Normierung ist in Abbildung 10d gezeigt. Mit der Dichte der Probe und einer Tiefeneichung kann aus dieser Verteilung die Anzahl der verlagerten Atome bestimmt werden.

Die oben beschriebene Berechnung der Defektverteilung geht von folgenden Voraussetzungen aus: (1) Der Streufaktor f der beobachteten Defekte ist eins, also gleich dem Streufaktor von statistisch verteilten Punktdefekten. (2) Bei den Defekten handelt es sich um gleichartige Defekte mit gleichem *Dechanneling Faktor* σ_{DC} und die Änderung von σ_{DC} ist im beobachteten Energieintervall klein.

3.2.5 Unterscheidung von verschiedenen Defekten

Verschiedene Defekttypen können mit RBS-C mit Hilfe des Streufaktors f und des *Dechanneling Faktors* σ_{DC} , sowie deren Änderung mit der Projektilenergie, unterschieden werden. Der *Dechanneling Faktor* σ_{DC} für statistisch verteilte Punktdefekte kann einfach hergeleitet werden.

Für ein isoliertes Atom im Kanal entspricht σ_{DC} dem Streuquerschnitt für Winkel größer ψ_c . Der Wirkungsquerschnitt für Rutherford-Stöße im Schwerpunktsystem ist ge-

geben durch

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E \sin^2 \frac{\Theta}{2}} \right]^2 \quad (46)$$

Integration für Winkel größer ψ_c ergibt dann (mit der Näherung für $\sin \Theta$ für kleine Winkel)

$$\begin{aligned} \sigma_{DC} &= \int_{\psi_c}^{\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \\ &\approx \frac{\pi Z_1^2 Z_2^2 e^4}{E^2 \psi_c^2} \end{aligned} \quad (47)$$

Durch Ersetzen von ψ_1 für ψ_c ergibt sich daraus

$$\sigma_{DC} \approx \frac{\pi Z_1 Z_2 e^2 d}{2 E} \quad (48)$$

Für Punktdefekte ergibt sich somit eine $\frac{1}{E}$ Energieabhängigkeit von σ_{DC} . In der Herleitung wurde vorausgesetzt, daß der Übergang von *geführten* auf *nicht geführte Bahnen* in einem einzigen Stoßprozess erfolgt. Dies gilt nur für kleine Defektkonzentrationen. Bei größeren Defektkonzentrationen müssen auch Übergänge von *geführten* auf *nicht geführte Bahnen* durch mehrere Stöße berücksichtigt werden. Eine genauere Analyse ergibt für Punktdefekte folgenden Zusammenhang: $\sigma_{DC} \propto 1/\sqrt{E}$ [143, 100, 163]. Die Energieabhängigkeit von σ_{DC} wurde in verschiedenen theoretischen und experimentellen Arbeiten für verschiedene Defekttypen untersucht. Die Ergebnisse sind in Tabelle 7 zusammengefaßt.

Defekttyp	Energieabhängigkeit	Zitat
Punktdefekte	$E^{-1}; E^{-\frac{1}{2}}$	[75] [143, 100, 163]
Stapelfehler (stacking faults)	energieunabhängig	[143]
Versetzungen (dislocations)	$E^{\frac{1}{2}}$	[75, 166, 163, 80]
Blasen + Löcher (bubbles + cavities)	energieunabhängig	[143]
amorphe Schicht	E^{-1}	[75]

Tab. 7: Energieabhängigkeit des Dechanneling Faktors σ_{DC} .

Neben dem *Dechanneling Faktor* σ_{DC} kann der Streufaktor f benutzt werden, um Defekte qualitativ zu unterscheiden. Der Streufaktor f beschreibt die Effektivität eines Defekts für die Rückstreuung im Vergleich zu einem Atom einer ungeordneten Probe. Ist $n(\vec{r})$ die Verteilung der Defekte, dann ist der Streufaktor definiert durch

$$f = \frac{\int F(\vec{r})n(\vec{r})dr}{\int n(\vec{r})dr} \quad (49)$$

mit der Flußdichteverteilung $F(\vec{r})$ der Ionen. Daraus ergibt sich, daß f für statistisch verteilte Punktdefekte eins ist. Der Streufaktor f berücksichtigt Effekte, die durch die Flußdichteverteilung der Projektile im Kanal entstehen. Dies bedeutet, daß der Streufaktor für verlagerte Atome, die genau im Zentrum des Kanals liegen, größer als eins ist, entsprechend der erhöhten Flußdichte an dieser Stelle. Im Gegensatz dazu ist der Streufaktor für Atome, die nur wenig aus ihrer Gitterposition verlagert sind, kleiner als eins, und kann sogar Null werden.

Ähnliche Überlegungen können für Versetzungen angestellt werden. Im Gegensatz zu Zwischengitteratomen ist der Beitrag von Versetzungen zur direkten Rückstreuung gering, während ihr Beitrag zum *Dechanneling* (d.h. σ_{DC}) groß ist. Dies bedeutet, Defekte können durch ihren unterschiedlichen Beitrag zum *Dechanneling Faktor* σ_{DC} und Streufaktor f unterschieden werden.

Das Verhalten des Streufaktors mit der Analyseenergie kann sehr leicht aus der Flußdichteverteilung $F(\vec{r})$ hergeleitet werden. Nimmt man an, daß der Ionenstrahl auf Grund der apparativen Genauigkeit nicht exakt zur Gitterrichtung ausgerichtet werden kann, d.h. ψ zwar klein, aber nicht Null ist, dann ist auch das Verhältnis ψ/ψ_1 ungleich Null. Erhöht man die Analyseenergie, wird ψ_1 kleiner und somit das Verhältnis ψ/ψ_1 größer, wenn man annimmt, daß die bestmögliche Ausrichtung (d.h. ψ) gleich bleibt. Dies bedeutet, die Flußdichteverteilung wird bei höherer Energie flacher und breiter, wie man der Abbildung 8 entnehmen kann. Dadurch wird der Streufaktor für Defekte, die im Zentrum des Kanals für Gitterführung liegen, mit zunehmender Energie kleiner, während er für geringfügig aus der Atomkette verlagerte Atome größer wird.

3.2.6 Bestimmung der Gitterposition von Fremdatomen

Für Fremdatome gilt prinzipiell das gleiche wie für verlagerte Atome des Gitters. Sie sind für den *geführten* Strahl nur „sichtbar“, wenn sie nicht in einer Kette mit den Gitteratomen liegen. Liegen die Fremdatome genau im Zentrum eines Kanals, erfolgt eine erhöhte Rückstreuung, da an diesem Ort die Flußdichte $F(\vec{r})$ der Projektile auf Grund des *Flux Peaking Effekts* erhöht ist. Man kann deshalb die Gitterposition von Fremdatomen bestimmen, indem man den Einfallswinkel des Strahls in kleinen Schritten ($\frac{1}{20}\psi_c$) variiert und die Intensität der an Fremdatomen und an Gitteratomen gestreuten Projektile als Funktion des Einfallswinkels aufnimmt. Die Rückstreuintensität an Fremdatomen für verschiedene

Einfallswinkel ψ ist proportional zur Flußdichteverteilung $F(\vec{r})$ am Ort des Fremdatoms (siehe Abbildung 8). Dies bedeutet, man erhält für jede Position des Fremdatoms im Kanal der Gitterführung einen charakteristischen Verlauf in der Rückstreuintensität.

Hat die Intensität der an Fremdatomen gestreuten Projektile den gleichen Verlauf wie die Rückstreuintensität an Gitteratomen (mit einem Minimum bei paralleler Ausrichtung des Ionenstrahls), dann liegen die Fremdatome in einer Kette mit den Gitteratomen. Entsteht jedoch ein Maximum in der Rückstreuintensität an Fremdatomen (bei Ausrichtung des Strahls), dann liegen die Fremdatome im Zentrum der Gitterführungs Kanäle. Beobachtet man keine Abhängigkeit der Rückstreuintensität vom Einfallswinkel, sind die Fremdatome gleichmäßig im Gitter verteilt.

Fremdatome können sich aber auch auf mehreren, definierten Positionen befinden. Um diese zu unterscheiden muß der Verlauf der Rückstreuintensität als Funktion des Einfallswinkels entlang verschiedener Gitterrichtungen gemessen werden. In HOPG ist dies aber auf Grund der polykristallinen Struktur nicht möglich.

3.3 Bestimmung der implantierten Deuteriummenge

Mit Hilfe der Kernreaktion $D(^3\text{He},\alpha)\text{H}$ kann aus der α -Teilchen- bzw. Protonenintensität die in der Probe aufgesammelte Deuteriummenge bestimmt werden. Dazu beschießt man die implantierte Probe mit einem ^3He -Strahl im Energiebereich von 1 MeV. Der Vorteil dieser Methode gegenüber anderen, wie z.B. SIMS, liegt in der zerstörungsfreien Analyse der Probe und ihrer einfachen Anwendbarkeit. Außerdem können bei Ausrichtung des Kristalls parallel zu einer Gitterrichtung gleichzeitig Strahlenschäden gemessen werden. Da die Energie der α -Teilchen und Protonen aus der Kernreaktion sehr viel größer ist als die Energie der gestreuten ^3He Ionen, kann deren Intensität nahezu untergrundfrei bestimmt werden.

3.4 Apparatur

Die meisten Messungen zu dieser Arbeit wurden an der Beschleunigeranlage des Bereichs Oberflächenphysik am Max-Planck-Institut für Plasmaphysik in Garching durchgeführt. Einige Messungen, bei höheren Energien, konnten am Tandem-Beschleuniger des Oak Ridge National Laboratories in Oak Ridge durchgeführt werden. An der Beschleunigeranlage des Max-Planck-Institut für Plasmaphysik stand zur Implantation des Deuteriums

der 10–150 kV Beschleuniger PHARAO [17] zur Verfügung, während ein 2,5 MV Van de Graaf-Beschleuniger den Analysestrahl lieferte. Die Anlage ist so aufgebaut, daß der Implantations- und Analysestrahl ohne Probenbewegung auf die Probe gebracht werden können. Durch diese Anordnung ist gewährleistet, daß das Zentrum des Implantationsflecks analysiert wird.

3.4.1 Aufbau der Probenkammer

Implantations- und Analysestrahl gelangen über das gleiche Strahlrohr in die Vakuumkammer und passieren ein Blendensystem, bestehend aus einer Viersektorenblende und zwei strahlbegrenzenden Blenden. Die Viersektorenblende (\varnothing 3,0 mm) dient zur Ausrichtung des Strahls und befindet sich direkt hinter der Eintrittsöffnung in die Kammer. Anschließend folgen die beiden strahlbegrenzenden Blenden mit 3,0 mm (Eintrittsblende) und 2,0 mm (Austrittsblende) Durchmesser, die 159 mm voneinander entfernt sind. Die zweite, den Strahl begrenzende Blende, ist 60 mm von der Probenoberfläche entfernt, um die volle Drehung des Goniometers nicht einzuschränken. Durch eine einschwenkbare Blende (\varnothing 1,0 mm) auf Höhe dieser Blende kann der Analysestrahl auf das Zentrum des implantierten Bereichs begrenzt werden. Dies soll sicherstellen, daß nur der zentrale Bereich mit homogener Implantation und nicht die Randbereiche analysiert werden.

Die Analyse- und Implantationsdosis werden über den Targetstrom mit Hilfe eines Stromintegrators bestimmt. Um Fehler in der Strommessung durch Sekundärelektronenemission zu vermeiden, ist der Probenhalter von einem Käfig umgeben, der gegen die Probe negativ vorgespannt ist (240 V). Dieser Käfig ist mit Öffnungen für den einfallenden Strahl und die gestreuten Ionen versehen.

Die Probe selbst ist auf einem Zwei-Achsen-Goniometer mit einer Einstellgenauigkeit von $0,01^\circ$ montiert. Für Hochtemperatur-Implantationen kann das Goniometer mit einem heizbaren Probenhalter ausgerüstet werden, mit dem die Probe auf 1100 K erhitzt werden kann. Damit sind auch in situ Ausheilexperimente möglich. Die Spannungsversorgung der Heizung erfolgt über einen Akkumulator, um durch eine hochohmige Trennung von der Gerätemasse Messungen des Probenstroms im Nanoamperbereich mit einer Genauigkeit von 5 % zu ermöglichen. Die Temperatur wird mit einem auf der Probenoberfläche festgeklemmten Thermoelement gemessen. Die Genauigkeit der Temperaturmessung (3–5 %) ist sehr viel besser als die Stabilität der Temperaturregelung (10–15 %).

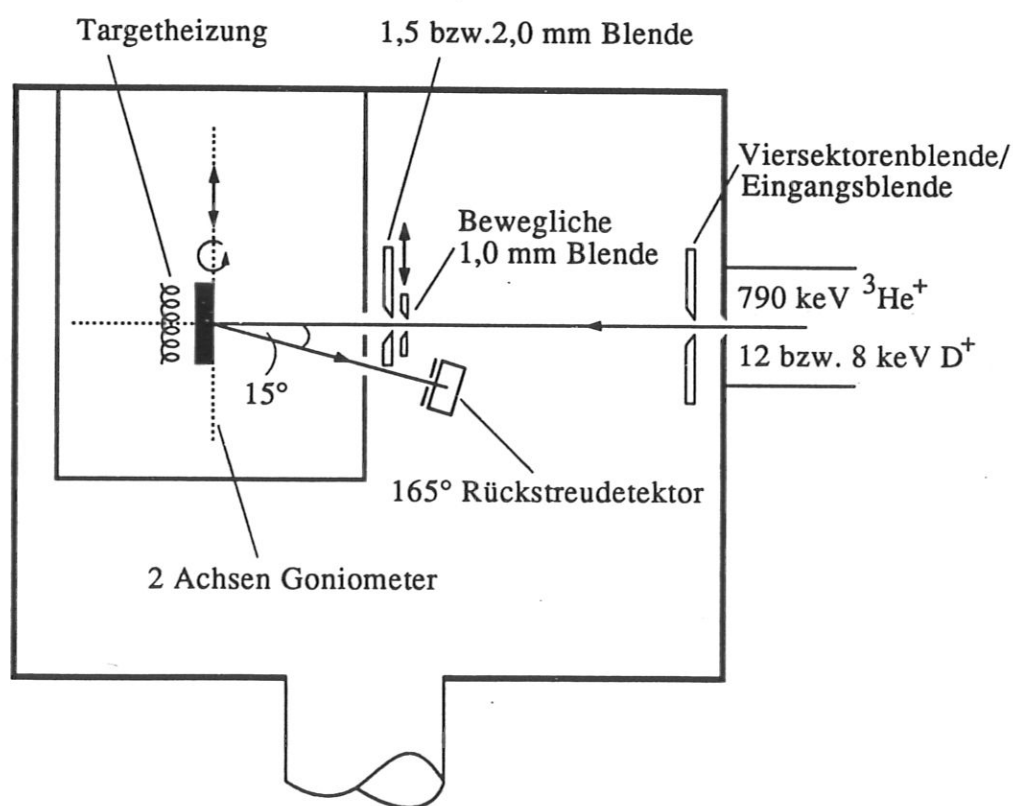
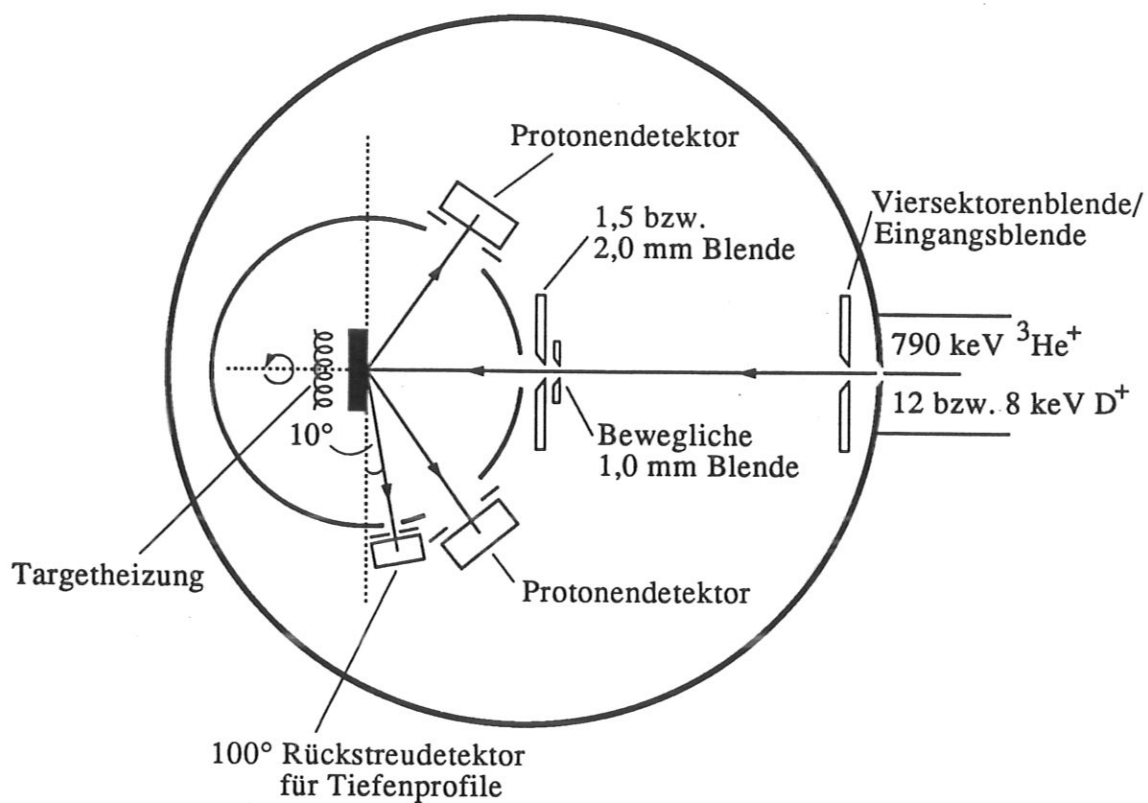


Abb. 11: Experimenteller Aufbau.

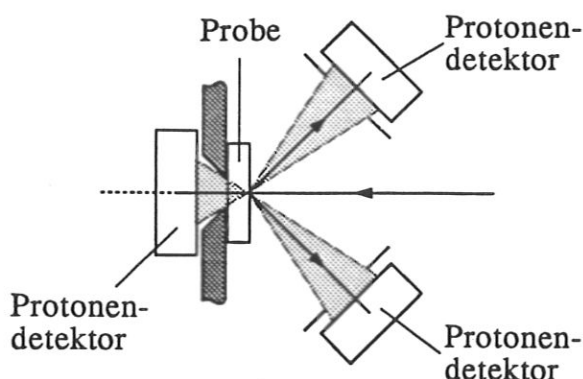


Abb. 12: Modifizierter Aufbau.

Zur Energieanalyse der gestreuten Ionen bzw. α -Teilchen aus der Kernreaktion befindet sich unter einem Winkel von 165° zum einfallenden Strahl ein Silizium-Oberflächensperrschichtdetektor. Die Energieauflösung des gesamten Detektorsystems, zusammengesetzt aus Detektorauflösung, Streugeometrie und Elektronikuntergrund, beträgt 19–21 keV. Der Detektor erfährt einen Raumwinkel von $3,06 \cdot 10^{-3}$ sr. Zusätzlich sind rechts und links vom Strahl zwei großflächige Silizium-Detektoren angebracht, um die Protonen aus der Kernreaktion unter einem größeren Raumwinkel ($\sim 9,28 \cdot 10^{-2}$ sr) nachzuweisen. Diese Detektoren sind mit Folien versehen, um gestreute ^3He Ionen abzuschirmen.

3.4.2 Modifikation des Aufbaus zur Messung der Gitterposition von Deuterium

Um die statistischen Fehler der Rückstreuanalyse bzw. die Schädigung der Probe durch den Analysestrahl zu verringern, wurde für Messungen zur Bestimmung der Gitterposition des Deuteriums der Raumwinkel der Protonendetektoren vergrößert. Da in diesem Fall nur die Winkelabhängigkeit der Kernreaktionsprodukte wichtig ist und keine absolute Bestimmung der implantierten Deuteriumfluenz erforderlich ist, wurde der Käfig zur Unterdrückung der Sekundärelektronen entfernt, um die Siliziumdetektoren näher an der Probe montieren zu können. Dadurch erhöht sich der Raumwinkel etwa um einen Faktor sechs.

Um den Raumwinkel noch weiter zu vergrößern, wurde zusätzlich ein Siliziumdetektor direkt hinter der Probe montiert. Dieser Aufbau ist in Abbildung 12 gezeigt. Da die Reichweite der Protonen (~ 14 MeV) größer ist als die Dicke der Proben, können damit Protonen gemessen werden, die die Probe durchdringen. Dadurch ist es möglich, bei

gleicher Statistik die Implantations- bzw. Analysefluenz zu verringern.

3.4.3 Strahlableitvorrichtung

Um eine homogene Implantation zu erreichen, kann der Implantationsstrahl mit Hilfe eines variablen Magnetfeldes in vertikaler Richtung periodisch abgelenkt werden [160]. Bei niedrigeren Deuteriumenergien (3,3 keV–10 keV) läßt sich jedoch keine so gute Homogenität der Implantation erreichen, wie sie für 20 keV Deuterium von Presinger gemessen wurde [160]. Implantierte Siliziumproben zeigen eine homogene Implantation ($\pm 10\text{--}20\%$) in einem Bereich von 1,3 mm (bei $\varnothing 1,5$ mm Blende) bzw. 1,8 mm (bei $\varnothing 2,0$ mm Blende) Durchmesser. Der Randbereich ist auf Grund des großen Abstandes zwischen der strahlbegrenzenden Blende und der Probe mit etwa 0,3–0,5 mm doppelt so groß wie der von Presinger angegebene. Da das Stromdichteprofil in diesem Bereich schwankt, ergibt sich eine große Unsicherheit in der Bestimmung der Deuteriumfluenz.

3.4.4 Ablauf der Messung

Der Vorteil von ^3He als Analyseionen liegt darin, daß gleichzeitig die Schädigung der Probe gemessen und die zurückgehaltene Deuteriummenge über die Kernreaktion bestimmt werden können. Mit 790 keV wurde die Energie der Heliumionen so gewählt, daß diese in der Tiefe des implantierten Deuteriums eine Energie haben, für die der Wirkungsquerschnitt der Kernreaktion maximal ist. In diesem Energiebereich ist die Änderung des Wirkungsquerschnitts über 150–200 keV klein ($\sim 10\%$) und man kann ihn in guter Näherung als konstant annehmen.

Von jeder untersuchten Probenposition wurde zunächst ein Rückstreupektrum der ungeschädigten Probe gemessen, bevor dieselbe Probenposition schrittweise bis zu einer maximalen Fluenz (bis max. $5 \cdot 10^{18}\text{D}/\text{cm}^2$) implantiert wurde. Zwischen den einzelnen Implantationsschritten wurde jeweils eine Analyse zur Bestimmung der zurückgehaltenen Deuteriummenge und der Strahlenschäden durchgeführt.

Außerdem wurde an jeder Probenposition ein Rückstreupektrum in einer *nicht ausgerichteten* Orientierung, d.h. ein *random Spektrum*, aufgenommen. In HOPG-Graphit ist es einfach, ein solches *random Spektrum* zu erhalten, da die einzelnen Kristallite des polykristallinen HOPG-Graphits um die hexagonale Achse beliebig gegeneinander gedreht sind. Dreht man die Probe weit genug aus dem Minimum der Rückstreuung ($\sim 3^\circ$) heraus,

hat sie für die Projektionen eine völlig ungeordnete Struktur. In einkristallinen Proben wie SiC ist es sehr viel schwieriger, eine Orientierung zu finden, in der die Atome ungeordnet erscheinen. Man behilft sich deshalb damit, dies durch Rotation der Probe während der Analyse herbeizuführen. Die Probe wird aus dem Rückstreuminimum gedreht und rotiert während der Analyse um die Probennormale. Der Ionenstrahl durchläuft dann während der Analyse sowohl Orientierungen, in denen Gitterführung parallel zu Ebenen erfolgt, als auch Orientierungen in denen die Rückstreuung gegenüber einer ungeordneten Probe erhöht ist (siehe Abbildung 9). Dreht man den Kristall vor der Rotation so weit aus dem Rückstreuminimum, daß man sich genau auf der Schulter in Abbildung 9 befindet, erhält man bei der Rotation um die Probennormale ein Rückstreupektrum, das sehr gut dem einer ungeordneten Probe entspricht.

Gleichzeitig mit gestreuten Projektilen werden im 165° Detektor die α -Teilchen (und die Protonen) aus der Kernreaktion gemessen. Aus der α -Teilchen- bzw. Protonenintensität wird die aufgesammelte Deuteriummenge bestimmt. Um eine gute Tiefenauflösung zu erreichen ist der Raumwinkel des 165° Detektors sehr klein. Deshalb sind bei kleinen Implantationsfluenzen ($< 10^{17}\text{D}/\text{cm}^2$) hohe Analysefluenzen erforderlich, um eine ausreichend hohe α -Zählrate zu erhalten. Um auch bei kleinen Implantationsfluenzen mit einer kleinen Analysefluenz auszukommen, bedient man sich der Tatsache, daß die Anzahl der gemessenen α -Teilchen proportional zur Anzahl der Protonen ist. Deren Intensität wird mit einem sehr viel kleineren statistischen Fehler in den beiden großflächigen Detektoren gemessen. Das Verhältnis zwischen Protonen und α -Teilchen-Intensität entspricht dem Raumwinkelverhältnis der Detektoren. Da die Protonen- bzw. α -Teilchen-Intensität proportional zur implantierten Deuteriummenge ist, muß diese nur einmal über ein α -Spektrum berechnet werden, um den Proportionalitätsfaktor zu bestimmen. Aus den Protonenintensität resultieren schließlich bei vergleichsweise kleinen Analysefluenzen Deuterium-Aufsammlerdaten mit akzeptablen Fehlergrenzen. Am Ende jeder Meßreihe wurde jeweils ein α -Spektrum mit hoher Analysefluenz aufgenommen, um den Proportionalitätsfaktor zu bestimmen. In den übrigen Messungen wurde die zurückgehaltene Deuteriummenge aus der integralen Protonenzählrate bestimmt.

Nach Implantation bei erhöhter Probentemperatur, wurden die Proben vor der Analyse auf unter 308 K abgekühlt, da die Gitterführung der Analyseionen von der thermischen Bewegung der Gitteratome beeinflusst wird. Die Analyse mit hochenergetischen He-Ionen

beeinflusst das Verhalten von HOPG-Graphit beim Erhitzen über 600 K. Erhitzt man eine mit Helium analysierte Graphitprobe über 600 K, wölben sich die obersten Graphitschichten im Analysefleck blasenartig nach oben. Die entstehende Wölbung hat zu Folge, daß Gitterführung nur für einen Teil des Analysestrahls erfolgt. Im Rückstreupektrum (RBS-C) beobachtet man eine erhöhte Rückstreuintensität im gesamten Energiebereich. Eine Analyse der durch die Deuteriumimplantation erzeugten Strahlenschäden wird dadurch unmöglich. Die Aufwölbung der obersten Schichten erfolgt auch ohne vorherige Deuteriumimplantation und kann auch durch sehr kleine Analysefluenzen nicht vollständig unterdrückt werden. Sie tritt aber erst beim Erhitzen über ~ 600 K auf.

Aus diesem Grund war zur Messung der Schädigung durch Deuteriumimplantation bei 773 K ein anderer Ablauf der Messung notwendig. Die Graphitproben wurden jeweils ohne vorherige Analyse implantiert. Um das Rückstreupektrum des ungeschädigten Graphits zu erhalten, wurde eine Probenposition in der Nähe der Implantation untersucht, wodurch der Fehler bei der Bestimmung der Defektkonzentration vergrößert wird. Deshalb setzt sich die Meßreihe der 773 K Implantationen aus Messungen an verschiedenen Proben mit unterschiedlichem Ausgangszustand zusammen.

Zusätzlich wurde die Schädigung in Graphit mit 400 keV Protonen untersucht. Mit Protonen als Analyseionen ist es weiterhin möglich, Graphitproben abwechselnd zu analysieren und bei 773 K zu implantieren. Es ist jedoch nicht möglich, gleichzeitig die Deuteriummenge zu bestimmen. Darüber hinaus ist die Auflösung der Tiefenprofile schlechter.

3.5 Meßfehler

3.5.1 Einfluß des Analysestrahls

Der ^3He Analysestrahl kann die Messung auf zwei Arten beeinflussen. (1) Durch ionenstrahlunterstützte Emission wird in der Probe zurückgehaltenes Deuterium freigesetzt und somit die Messung der implantierten Deuteriummenge verfälscht. (2) Durch den Analysestrahl werden zusätzlich Strahlenschäden induziert, die die Bestimmung der erzeugten Defekte verfälschen.

Die ionenstrahlunterstützte Freisetzung von Deuterium ist konzentrationsabhängig und wächst mit steigender Deuteriumkonzentration [145]. Dies gilt sowohl für Graphit als auch für SiC. Bei den verwendeten Analysefluenzen ($3,2 - 6,4 \cdot 10^{14} \text{at/cm}^2$) ist die induzierte Freisetzung jedoch kleiner als der statistische Fehler der Messung ($\sim 5\%$), wie auch eigene

Messungen bestätigen.

In SiC werden auch bei hohen Analysefluenzen (einige 10^{16} at/cm²) keine mit dem Gitterführungseffekt beobachtbaren Strahlenschäden erzeugt. Im Gegensatz dazu wird bei Graphit bei den gleichen Fluenzen die Rückstreuintensität um etwa 5–10% (abhängig von der Ausgangsqualität der Probe) erhöht. Um die Schädigung der Graphitproben durch den Analysestrahl so gering wie möglich zu halten, wurden meist kleine Analysefluenzen verwendet (einige 10^{14} at/cm²), bei denen keine zusätzliche Schädigung meßbar ist.

3.5.2 Meßfehler der implantierten Deuteriummenge

Die größte Unsicherheit der Messungen ergibt sich bei der Bestimmung der Deuteriumfluenz. Der Fehler setzt sich zusammen aus dem Fehler der Größe der implantierten Fläche und der Abschätzung der Inhomogenität der Implantation im Randbereich. Durch die große Entfernung (60 mm) der letzten Blende vor der Probe kann sich bei einer Änderung der Fokussierung des Implantationsstrahls die Größe des Implantationsbereichs ändern. Deshalb ist es wünschenswert, diese strahlbegrenzende Blende möglichst nahe an der Probe anzubringen, was auf Grund des apparativen Aufbaus nicht möglich ist. Die Größe des Implantationsflecks auf der Probe muß deshalb entweder optisch oder mit Hilfe der Ionenstrahlanalyse ausgemessen werden und sie läßt sich nur auf $\pm 20\%$ bestimmen. Innerhalb einer Messung sind die Schwankungen wegen der konstanten Strahleinstellung erheblich kleiner.

Auf implantierten Siliziumproben wurde der Durchmesser der Fläche mit homogener Implantation ($\pm 10\text{--}20\%$) mit 1,3 mm bzw. 1,8 mm bestimmt (bei $\varnothing 1,5$ mm bzw. $\varnothing 2,0$ mm Blende), während der gesamte Implantationsfleck mit Randbereich einen Durchmesser von 1,6–1,8 mm bzw. 2,1–2,3 mm hat. Daraus ergibt sich für die Bestimmung der implantierten Deuteriumfluenz eine Unsicherheit von mindestens 20%.

Bei Implantationen mit erhöhter Proben temperatur ergibt sich eine weitere Fehlerquelle durch das Auftreten von Thermospannungen durch Temperaturdifferenzen in der Probe, die die Strommessung verfälschen. Um diesen Fehler so klein wie möglich zu halten, wurde vor der Implantationen so lange gewartet, bis sich ein Temperaturgleichgewicht in der Probe eingestellt hat. Trotzdem kann wegen der Temperaturregelung nicht vermieden werden, daß während der Implantation Temperaturdifferenzen auftreten. Der daraus resultierende Fehler ist schwer abzuschätzen. Der Vergleich der erwarteten mit der

tatsächlichen Implantationszeit zeigt, daß der Fehler nicht größer als 10% ist. Damit ergibt sich eine untere Fehlergrenze für die Bestimmung der implantierten Deuteriumfluenz von 22%.

3.5.3 Meßfehler der Defektkonzentration

Der Fehler bei der Bestimmung der Defektkonzentration setzt sich aus dem statistischen Fehler der Messung, dem Fehler bei der rechnerischen Modellierung des *Dechanneling* und der Ungenauigkeit der Streu- bzw. Bremsquerschnitte zusammen. Ein systematischer Fehler ergibt sich aus dem unterschiedlichen Energieverlust für Ionen auf *geführten* und *nicht-geführten* Bahnen. Bei den Messungen an HOPG wurde, um eine zusätzliche Schädigung der Proben durch die Analyse zu vermeiden, mit einer kleinen Analysefluenz gemessen, was zu einer schlechten Statistik in der Messung führt. Ein genaue Analyse ergibt für die Bestimmung der Strahlenschäden einen Meßfehler von 15–20% in HOPG und 10–15% in SiC Proben.

Da in Graphit bei Implantation über ~ 600 K keine vorherige Analyse der Probe möglich ist, ist der Ausgangszustand der Probe schlecht bekannt, was insbesondere in Graphit (mit großen Schwankungen in der Qualität bezüglich Gitterführung) einen unbekannt systematischen Fehler bei der Berechnung der Defekte zur Folge hat.

3.6 Probenpräparation

3.6.1 Graphit

Die Aufbereitung der HOPG-Proben für RBS-C Analysen senkrecht zur hexagonalen Achse (c-Achse) ist auf Grund der Schichtstruktur des Graphits relativ einfach. Wegen der schwachen Bindung der einzelnen Ebenen untereinander läßt sich HOPG Graphit senkrecht zur c-Achse einfach spalten.

Um eine unversehrte Oberfläche für RBS-C Analysen zu erhalten, werden die obersten Schichten der HOPG-Proben mit einem Tesafilm abgezogen. Diese Prozedur wird solange wiederholt, bis eine für das Auge glatte, metallisch spiegelnde Oberfläche ohne Stufen entsteht. Mit dem Lichtmikroskop wurde anschließend die Beschaffenheit der Oberfläche auf mit dem Auge nicht sichtbare Schäden (z.B. kleine Stufen) untersucht und die oben beschriebene Prozedur gegebenenfalls wiederholt.

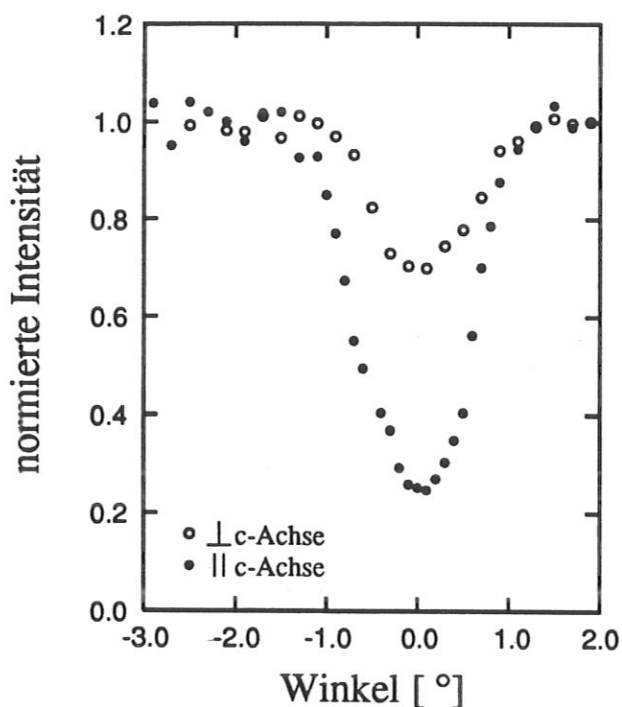


Abb. 13: Integral der Rückstreuintensität im Bereich der Oberfläche für verschiedene Einfallswinkel senkrecht und parallel zur c-Achse.

Die Intensität der rückgestreuten Ionen unter verschiedenen Winkeln ist in Abbildung 13 dargestellt. Für Gitterführung entlang der hexagonalen Achse ergibt sich der kritische Winkel $\psi_{1/2} = (0,52 \pm 0,02)^\circ$. Dies ist in guter Übereinstimmung mit dem theoretischen Wert von $0,53^\circ$. Mit dieser Behandlung läßt sich die Oberfläche so präparieren, daß man bei RBS-C Analysen entlang der c-Achse eine auf 15–20 % reduzierte Intensität der rückgestreuten Ionen gegenüber amorphem Graphit erhält.

Beim Schneiden der Proben wird die Oberfläche parallel zur c-Achse stark geschädigt und die Kristallite an der Schnittfläche werden gegeneinander verkippt. Für Messungen senkrecht zu c-Achse müssen die Proben deshalb besonders präpariert werden. Die einzige Möglichkeit besteht im Abtragen der geschädigten Schicht ohne mechanische Belastung. Deshalb wurden die Proben 15–20 Minuten unter Sauerstoffatmosphäre auf 1100 K erhitzt, um die geschädigte Oberflächenschicht durch Oxidation zu entfernen. Danach wurden sie unter Vakuum für 20 Minuten auf ~ 1900 K erhitzt, um noch verbleibende Schäden an der Oberfläche auszuheilen. Nimmt man eine gleichmäßige Erosion auf allen Oberflächen an, errechnet sich aus dem Masseverlust die Dicke der erodierten Schicht zu 100–200 μm .

Die Winkelabhängigkeit der Rückstreuintensität senkrecht zur hexagonalen Achse, für eine auf diese Art präparierte Probe ist in Abbildung 13 gezeigt. Aus der Abbildung ergibt sich eine minimale Intensität χ_{min} von 70–75 % und ein kritischer Winkel von

$\psi_{1/2} = (0,59 \pm 0,04)^\circ$. Mit einer ähnlichen Methode konnten D. Schroyen et al. [178] etwa den gleichen Wert für χ_{min} erreichen. Der charakteristische Winkel für Gitterführung an einer Ebene ist gegeben als [75]

$$\psi_2 = \sqrt{\frac{2\pi Z_1 Z_2 e^2 a_{TF} N d_p}{E}} \quad (50)$$

mit dem Abstand der Ebenen d_p . Daraus ergibt sich für 790 keV ^3He ein charakteristischer Winkel von $0,57^\circ$ für Gitterführung an Ebenen, was gut mit dem gemessenen Wert übereinstimmt.

3.6.2 Siliziumkarbid

Die verwendeten SiC Proben bestehen aus β -SiC Filmen, die mit CVD von SiH_4 und CH_4 auf der $\langle 100 \rangle$ Oberfläche von Siliziumscheiben abgeschieden wurden [115]. Die abgeschiedenen Filme wachsen epitaktisch zum Siliziumgitter auf und sind bis zu $15 \mu\text{m}$ dick. Die SiC Proben wurden ohne weitere Aufbereitung für die Implantation und Messung verwendet. Wie die HOPG Proben wurden die SiC Proben vor und nach der Implantation mit einem Rasterelektronenmikroskop (SEM) untersucht.

3.7 Untersuchung der Proben mit dem Licht- und Elektronenmikroskop

Die behandelten HOPG Proben zeigen unter dem Lichtmikroskop eine sehr glatte Oberfläche ohne Struktur. Nur wenn Kohlenstoff-Lagen, bestehend aus mehreren Gitterebenen, nicht vollständig abgezogen werden, entstehen Stufenstrukturen. In HOPG-Graphit mit etwas schlechterer Mosaikbreite ist eine wellige Oberfläche zu beobachten, die auch schon mit dem bloßen Auge sichtbar ist. Auch mit dem Elektronenmikroskop (SEM) können auf nicht implantierten HOPG-Probe keine weiteren Strukturen aufgelöst werden.

Die unbehandelten SiC Proben weisen unter dem Elektronenmikroskop eine schwach sichtbare plattige Struktur auf. Kleine blasenartige Strukturen in den Probe erweisen sich in Bereichen, in denen die SiC-Schicht beim Brechen der Proben abgeplatzt ist, als pyramidenförmige Löcher in der Silizium-Unterlage.

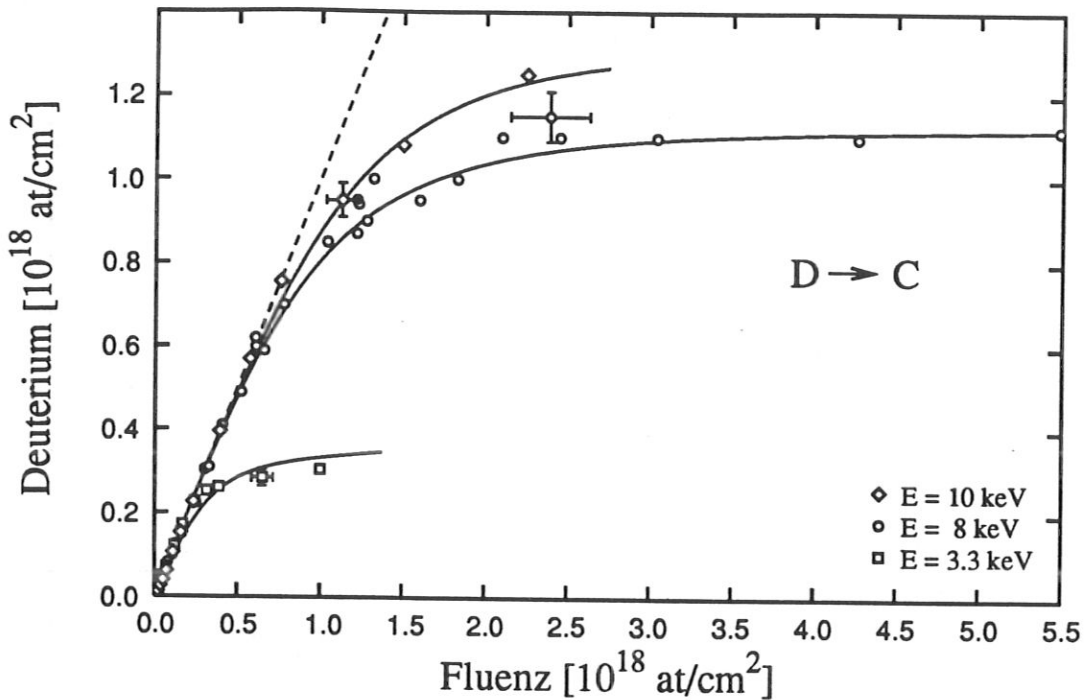


Abb. 14: In HOPG-Graphit zurückgehaltene Deuteriummenge als Funktion der Fluenz für verschiedene Deuteriumenergien.

4 Meßergebnisse

4.1 Deuteriumefang in Graphit

Abbildung 14 zeigt die zurückgehaltene Deuteriummenge als Funktion der Implantationsfluenz für verschiedene Deuteriumenergien von 3,3 bis 10 keV. Für diese Energien wird bei kleinen Fluenzen ($< 2,0 \cdot 10^{17} \text{D/cm}^2$) das gesamte Deuterium in der Probe zurückgehalten. Mit steigender Fluenz kann das implantierte Deuterium nicht mehr vollständig zurückgehalten werden, die Deuteriummenge steigt langsamer an und erreicht schließlich einen Sättigungswert. Diese Sättigungsmenge hängt von der Implantationstemperatur und der Deuteriumenergie ab. Sie nimmt mit steigender Deuteriumenergie zu.

Außerdem wurde Deuterium mit 8 keV bei verschiedenen Proben temperaturen implantiert und die zurückgehaltene Deuteriummenge als Funktion der Fluenz gemessen. Die Ergebnisse sind in Abbildung 15 dargestellt. Bei erhöhter Proben temperature ergibt sich qualitativ der gleiche Verlauf wie bei 295 K. Auch bei erhöhter Implantationstemperatur wird bei kleinen Fluenzen das gesamte Deuterium in der Probe zurückgehalten, allerdings wird der Fluenzbereich, in dem dies der Fall ist, kleiner. Bei sehr hohen Fluenzen erreicht

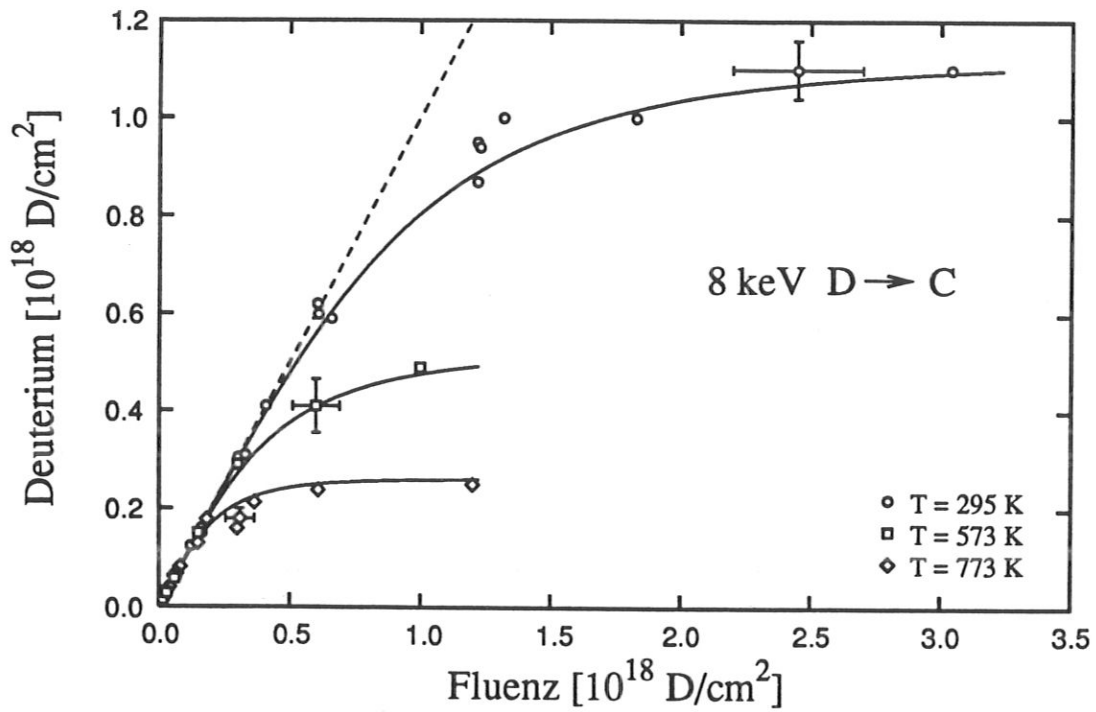


Abb. 15: Zurückgehaltene Deuteriummenge in Graphit nach 8 keV Deuteriumimplantation als Funktion der Fluenz bei verschiedenen Probertemperaturen.

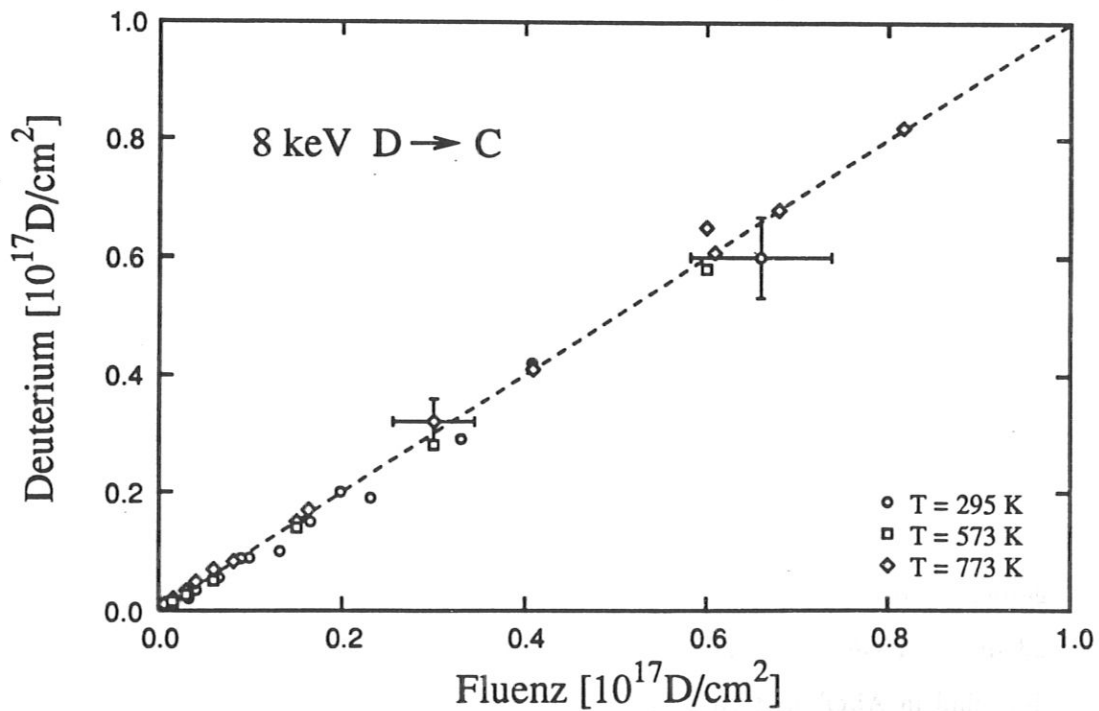


Abb. 16: Zurückgehaltene Deuteriummenge in Graphit nach 8 keV Deuteriumimplantation als Funktion der Fluenz bei verschiedenen Probertemperaturen (Ausschnitt von Abbildung 15).

man schließlich Sättigung. Die Sättigungsmenge nimmt mit steigender Temperatur ab und geht bei einer Implantationstemperatur von 773 K auf etwa ein Viertel ihres Wertes bei 295 K zurück. In Abbildung 16 (Ausschnitt von Abbildung 15) ist die zurückgehaltene Deuteriummenge nochmals für kleine Fluenzen dargestellt. Die Abbildung zeigt deutlich, daß für Temperaturen bis 773 K im Fluenzbereich bis ungefähr $1 * 10^{17} \text{D/cm}^2$ das gesamte Deuterium in HOPG-Graphit zurückgehalten wird.

4.2 Strahlenschäden in Graphit

Wie in Kapitel 3.2.4 beschrieben, können Strahlenschäden in einkristallinen Festkörpern direkt mit Rutherford-Rückstreuung in Gitterführungsgeometrie (RBS-C) gemessen werden. Abbildung 17 zeigt 790 keV ^3He Rückstreuspektren von HOPG-Graphit nach Implantation mit verschiedenen Deuteriumfluenzen zusammen mit dem Spektrum der nicht implantierten Probe sowie einem *random* Spektrum. Die Rückstreuspektren des implantierten Graphits zeigen ein lokales Maximum in der Intensität bei etwa 200–210 keV. Die erhöhte Rückstreuintensität bei dieser Energie ist eine Folge der durch die Implantation induzierten Strahlenschäden. Schon bei sehr kleinen Deuteriumfluenzen ($\sim 1 * 10^{15} \text{D/cm}^2$) ist dieses Maximum zu erkennen. Mit zunehmender Deuteriumfluenz nimmt die Schädigung des Graphits und somit die Rückstreuintensität stetig zu, bis die Intensität im Maximum der von polykristallinem bzw. amorphem Graphit entspricht, d.h. die Intensität des *random* Spektrums erreicht ist. Dann ist die Probe in dem entsprechenden Tiefenbereich so stark geschädigt, daß der Ionenstrahl wie in einem Material ohne kristalline Struktur gestreut wird und die mit RBS-C beobachtbare Schädigung ist gesättigt. Implantiert man die Probe weiter mit Deuterium, dehnt sich die geschädigte Schicht bis zur Oberfläche und geringfügig ins Kristallvolumen aus. Schließlich erhält man eine geschädigte Oberflächenschicht, deren kristalline Struktur so stark zerstört ist, daß in ihr keine Reduktion der Rückstreuung durch Gitterführung beobachtet wird.

Die Fluenzen, bei denen die Schädigung in der Tiefe der maximalen Schädigung bzw. bis zur Oberfläche *gesättigt* ist, d.h. die Rückstreuintensität des *random* Spektrums erreicht wird, sind in Tabelle 8 angegeben. Die Werte der Tabelle ergeben sich aus einer Vielzahl von Experimenten an verschiedenen HOPG-Proben. Auf Grund der unterschiedlichen Güte der HOPG-Proben gegenüber Gitterführung streuen die Ergebnisse stark, weshalb in der Tabelle jeweils ein Fluenzbereich statt eines Mittelwerts angegeben ist.

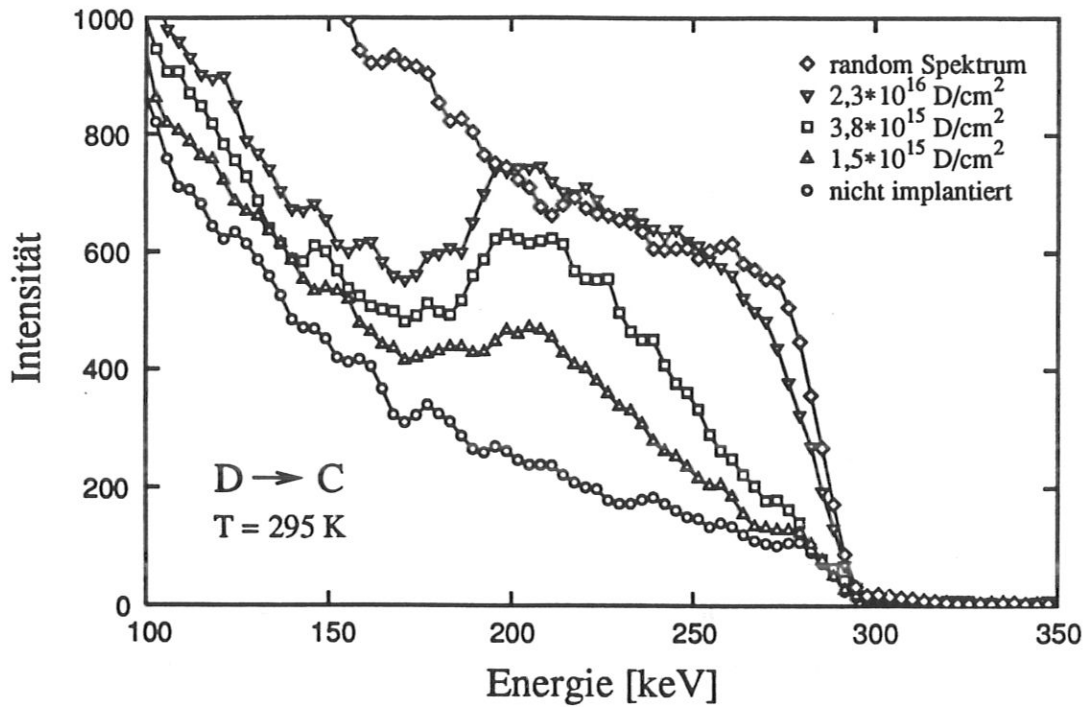


Abb. 17: 790 keV ^3He RBS-C Spektren einer HOPG-Probe, die mit verschiedenen Deuteriumfluenzen bei 295 K implantiert wurde, zusammen mit dem Spektrum der nicht implantierten Probe und einem random Spektrum.

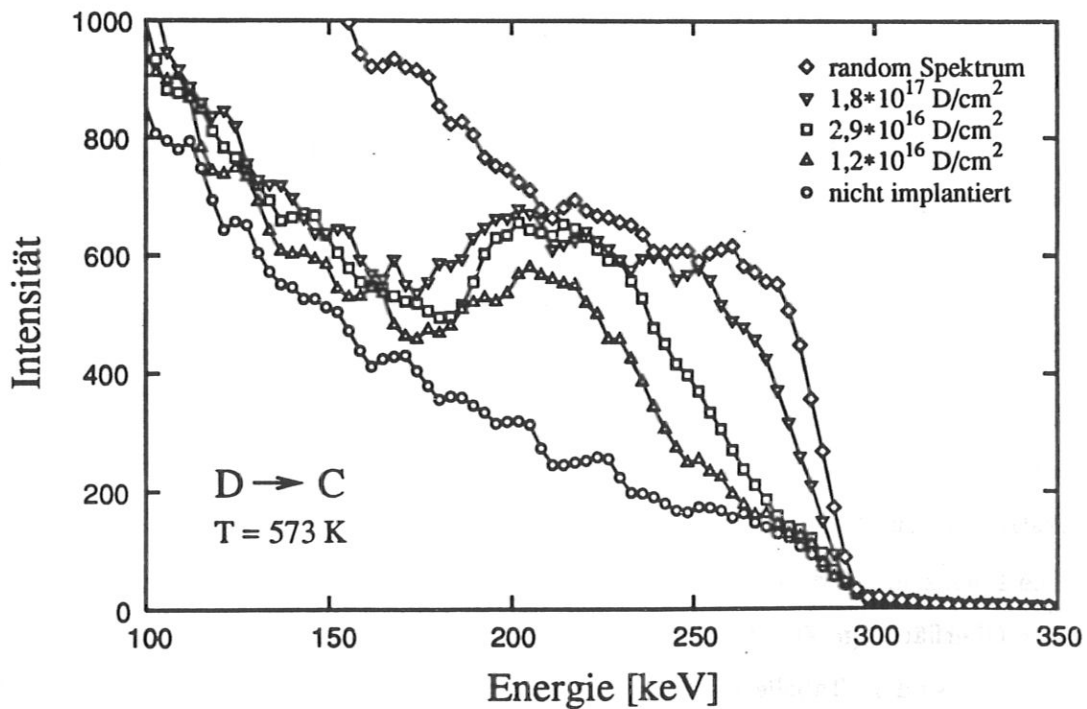


Abb. 18: 790 keV ^3He RBS-C Spektren einer HOPG-Probe, die mit verschiedenen Deuteriumfluenzen bei 573 K implantiert wurde, zusammen mit dem Spektrum der nicht implantierten Probe und einem random Spektrum.

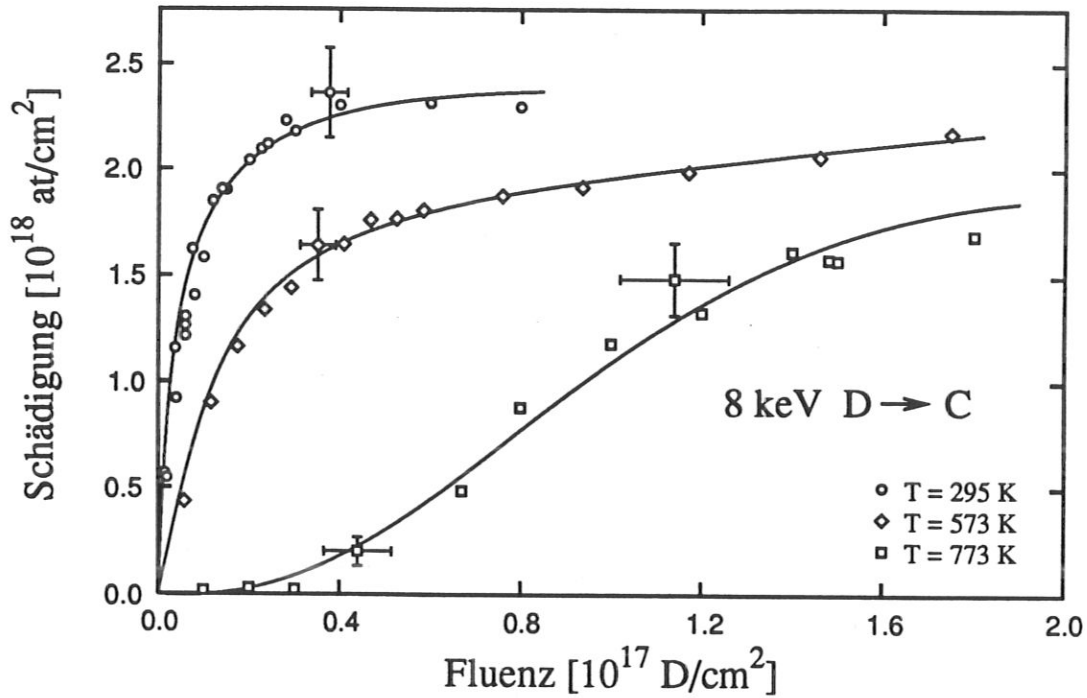


Abb. 19: Integral der verlagerten Kohlenstoffatome bei verschiedenen Implantationstemperaturen berechnet aus 790 keV ^3He Rückstreupektren.

Außer bei 295 K wurde die Schädigung auch nach Implantation bei Proben-temperaturen von 573 K und 773 K gemessen. Auch bei diesen Temperaturen entsteht ein lokales Maximum in der Rückstreuintensität. Allerdings wird erst bei sehr viel höheren Deuteriumfluenzen etwa die gleiche Rückstreuintensität wie bei 295 K erreicht. Bei 573 K ist etwa die 7–10fache Deuteriumfluenz notwendig, um die gleiche Rückstreuintensität wie bei 295 K zu erreichen, während bei 773 K sogar die 20–30fache Fluenz benötigt wird.

Gleichzeitig mit der Rückstreuung aus der geschädigten Tiefe nimmt auch die Rückstreuintensität aus tieferen Bereichen (bei Energien < 170 keV) zu. Dies ist auf Übergänge geführter Ionen auf nicht geführte Bahnen (*Dechanneling*) in der zerstörten oberflächennahen Schicht zurückzuführen.

Nach der in Kapitel 3.2.4 beschriebenen Methode wurde der Anteil der Rückstreuintensität, der durch Übergänge geführter Projektile auf nicht geführte Bahnen entsteht, vom Rückstreupektrum subtrahiert und die Tiefenverteilung der verlagerten Atome bzw. deren Gesamtzahl berechnet. Abbildung 19 zeigt das Integral der verlagerten Atome als Funktion der Deuteriumfluenz. Die Anzahl der verlagerten Atome wurde unter den in Kapitel 3.2.4 angegebenen Annahmen berechnet.

790 keV ^3He			
	295 K	573 K	773 K
Sättigung im Maximum [D/cm ²]	4,0–7,0*10 ¹⁵	1,5–2,5*10 ¹⁶	1,2–1,4*10 ¹⁷
Sättigung bis Oberfläche [D/cm ²]	3,0–4,0*10 ¹⁶	2,5–3,0*10 ¹⁷	3,0–4,0*10 ¹⁷
400 keV H			
	295 K	573 K	773 K
Sättigung im Maximum [D/cm ²]	2,0–5,0*10 ¹⁵	4,0–6,0*10 ¹⁶	n. auflösbar
Sättigung bis Oberfläche [D/cm ²]	2,5–3,0*10 ¹⁶	1,0–1,5*10 ¹⁷	1,0–1,5*10 ¹⁷
1,5 MeV ^3He			
	295 K	573 K	
Sättigung im Maximum [D/cm ²]	3,0–5,0*10 ¹⁵	2,0–3,0*10 ¹⁶	
Sättigung bis Oberfläche [D/cm ²]	1,3–2,0*10 ¹⁶	1,5–2,0*10 ¹⁷	

Tab. 8: Deuteriumfluenzen bei denen die Rückstreuintensität des random Spektrums in der Tiefe der maximalen Schädigung bzw. bis zur Oberfläche beobachtet wird.

Nach Implantation bei 295 K wächst die Schädigung zunächst linear mit der Fluenz und weicht bei etwa $5 \cdot 10^{15} \text{D/cm}^2$ vom linearen Verlauf ab. Bei dieser Fluenz entspricht die Rückstreuintensität aus der Tiefe der maximalen Schädigung der des *random* Spektrums und die mit RBS-C meßbare Schädigung ist in dieser Tiefe gesättigt. Bei höheren Fluenzen nimmt die Schädigung zu, indem sie sich bis zur Oberfläche bzw. geringfügig ins Probenvolumen ausdehnt. Der Verlauf der Schädigung bei 573 K ist dem bei 295 K sehr ähnlich. Auch bei dieser Temperatur steigt die Schädigung zunächst linear mit der Fluenz, bis sie in einem Tiefenintervall gesättigt ist und die Rückstreuintensität der des *random* Spektrums entspricht ($2 \cdot 10^{16} \text{D/cm}^2$).

Wegen dem in Kapitel 3.5.1 beschriebenen Einfluß der He-Analyseionen auf das Verhalten der HOPG-Proben beim Erhitzen über 600 K haben die Ergebnisse nach 773 K Implantation grundsätzlich einen größeren Fehler, da der Ausgangszustand der implantierten Probenposition nicht gemessen werden kann. Trotz des größeren Fehlers zeigen die Meßwerte ein grundsätzlich anderes Verhalten der Schädigung in Abhängigkeit von der Deuteriumfluenz als bei niedrigeren Temperaturen. Bis zu einer Fluenz von $0,4 \cdot 10^{17} \text{D/cm}^2$ ist nur ein geringes Anwachsen der Rückstreuintensität zu erkennen, d.h. die erzeugte Schädigung ist sehr klein. Bei höheren Fluenzen nimmt die Schädigung stärker zu, um, sobald

sie im Maximum gesättigt ist ($1,3 \cdot 10^{17} \text{D}/\text{cm}^2$), in einen flacheren Verlauf überzugehen. Die Zunahme im Bereich von $0,4 - 1,3 \cdot 10^{17} \text{D}/\text{cm}^2$ ist trotzdem erheblich langsamer als bei 295 K und 573 K. Der Anstieg bei Fluenzen über $1,3 \cdot 10^{17} \text{D}/\text{cm}^2$ wird durch die Ausdehnung der Schädigung zur Oberfläche verursacht.

Um den Einfluß der Analyseenergie bzw. des charakteristischen Winkels ψ_1 zu untersuchen, wurden die Strahlenschäden auch mit 1,5 MeV ^3He analysiert. Bei dieser Energie ist der charakteristische Winkel etwa um ein Drittel kleiner als bei 790 keV. Trotzdem ergibt sich mit 1,5 MeV qualitativ das gleiche Verhalten wie für die niedrigere Analyseenergie von 790 keV. Rückstreuenspektren nach Implantation mit verschiedenen Deuteriumfluenzen bei Probertemperaturen von 295 K und 573 K sind in Abbildung 20 und 21 gezeigt. Im Vergleich zur niedrigeren Analyseenergie ist bei 1,5 MeV die relative Zunahme der Rückstreuung aus Tiefen unterhalb der geschädigten Schicht, bezogen auf die ungeschädigte Probe (d.h. Übergänge von *geführten* Ionen auf *nicht-geführte* Bahnen), geringer. Ansonsten sind die Fluenzen, bei denen *Sättigung* im Maximum der Schädigung bzw. bis zur Oberfläche beobachtet wird, etwa gleich. Diese Fluenzen sind zusammen mit den Ergebnissen der Messungen mit 400 keV Protonen in Tabelle 8 angegeben. Messungen mit 400 keV Protonen wurden zusätzlich durchgeführt, da Protonen das Verhalten des Graphits beim Erhitzen über 600 K nicht beeinflussen und sich deshalb die Schädigung bei 773 K einfacher untersuchen läßt. 400 keV Protonen haben etwa den gleichen charakteristischen Winkel ψ_1 für Gitterführung wie 790 keV Helium. Wegen der geringeren Tiefenauflösung von 400 keV Protonen sind die Spektren nicht sehr aussagekräftig und werden hier nicht gezeigt.

Das Integral der Verlagerungen, berechnet aus RBS-C-Spektren mit 1,5 MeV ^3He und 400 keV H, ist in den Abbildungen 22 und 23 dargestellt. Diese Ergebnisse bestätigen im wesentlichen die Resultate für 790 keV ^3He . Insbesondere der Verlauf der Schädigung bei 773 K wird durch die Messungen mit 400 keV Protonen erhärtet.

Zusätzlich zur Schädigung bei verschiedenen Probertemperaturen wurde die Schädigung mit verschiedenen Deuteriumenergien untersucht. Abbildung 24 zeigt die Tiefenverteilung der Schädigung in HOPG, der mit verschiedenen Deuteriumenergien implantiert wurde. Die Schädigung ist jeweils über die gesamte Reichweite des Deuteriums *gesättigt*, so daß durch eine Steigerung der Deuteriumfluenz mit dem Gitterführungseffekt keine weitere Zunahme der Schädigung zu beobachten ist. Die Abbildung zeigt, daß die maximale

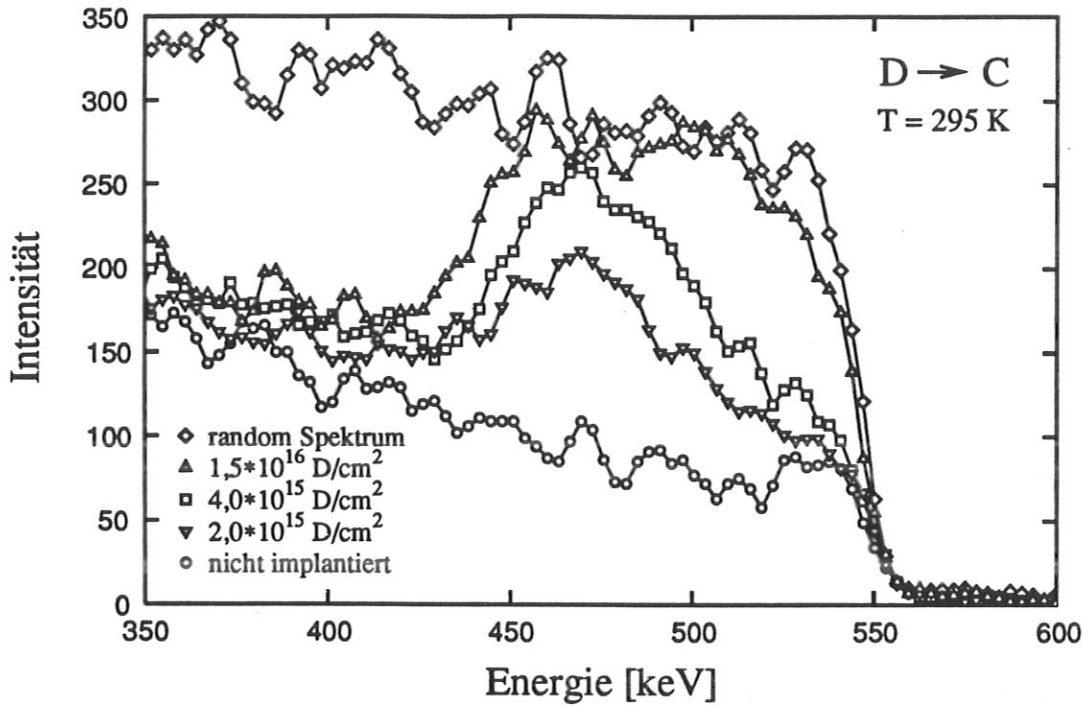


Abb. 20: 1,5 MeV ³He RBS-C Spektren einer HOPG Probe, die mit verschiedenen Deuteriumfluenzen bei 295 K implantiert wurde, zusammen mit dem Spektrum der nicht implantierten Probe und einem random Spektrum.

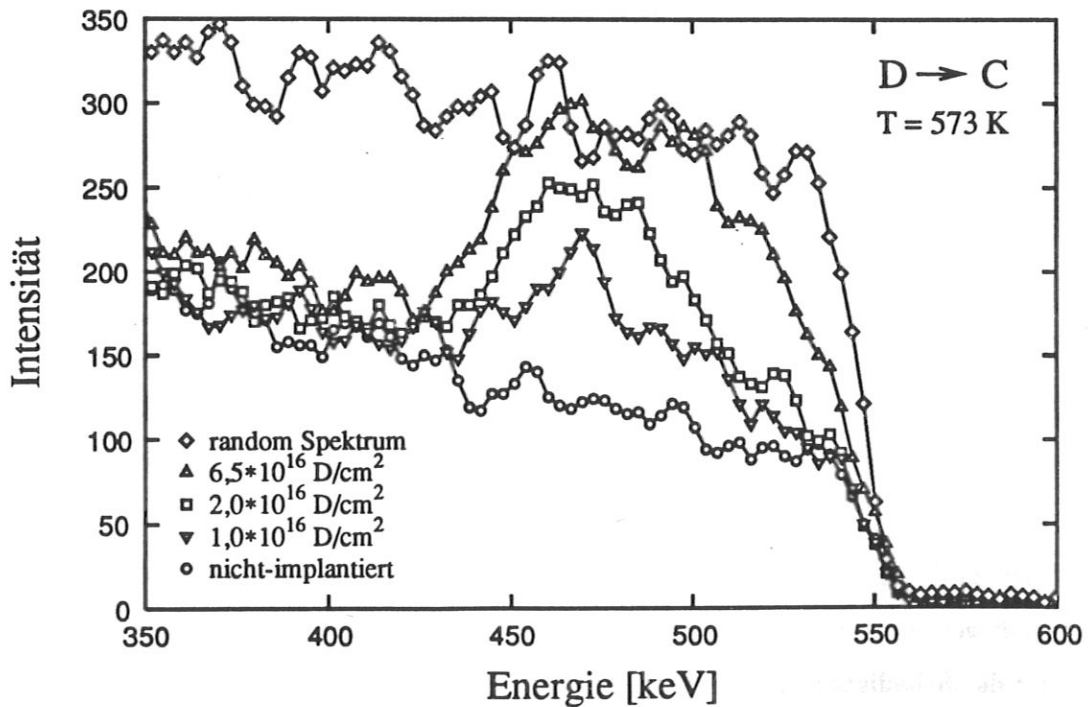


Abb. 21: 1,5 MeV ³He RBS-C Spektren einer HOPG Probe, die mit verschiedenen Deuteriumfluenzen bei 773 K implantiert wurde, zusammen mit dem Spektrum der nicht implantierten Probe und einem random Spektrum.

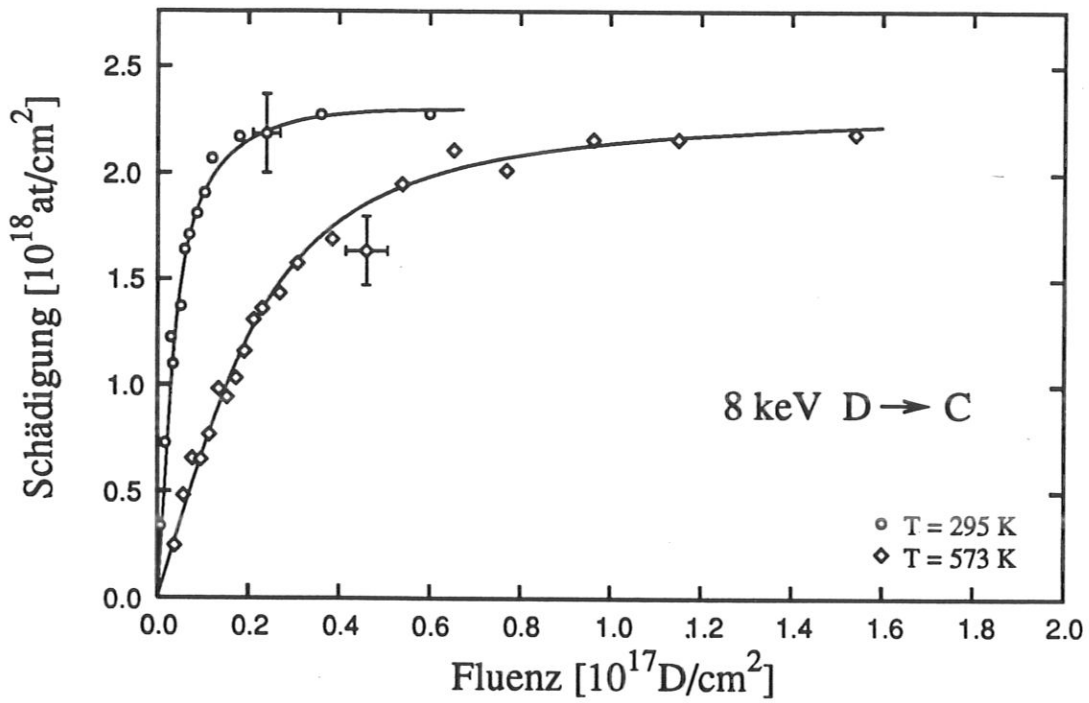


Abb. 22: Integral der verlagerten Kohlenstoffatome bei verschiedenen Implantations-temperaturen, berechnet aus 1,5 MeV ³He Rückstreuenspektren.

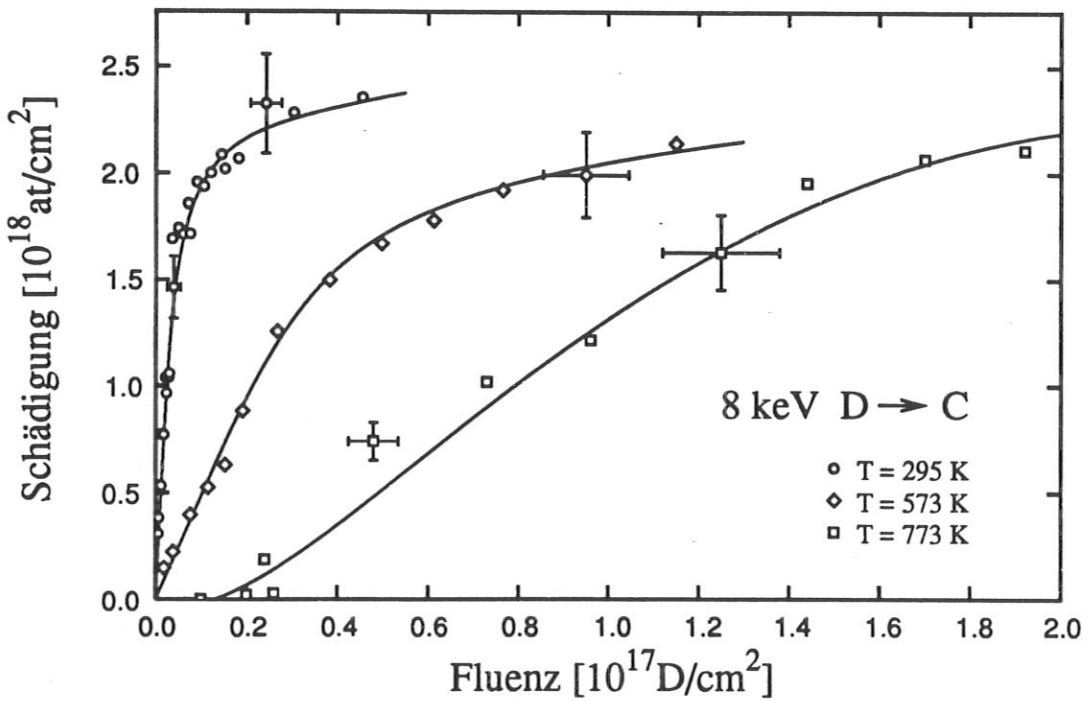


Abb. 23: Integral der verlagerten Kohlenstoffatome bei verschiedenen Implantations-temperaturen, berechnet aus 400 keV H Rückstreuenspektren.

	3,3 keV	8 keV	10 keV
Tiefe der Schädigung	1000 Å	1800 Å	2100 Å
Max. Reichweite (TRIM.SP)	900 Å	2250 Å	2350 Å
Sättigung im Maximum	$4-7 \cdot 10^{15} \text{D/cm}^2$	$4-7 \cdot 10^{15} \text{D/cm}^2$	$6-8 \cdot 10^{15} \text{D/cm}^2$
Sättigung bis Oberfläche	$8-10 \cdot 10^{15} \text{D/cm}^2$	$3-5 \cdot 10^{16} \text{D/cm}^2$	$3-4 \cdot 10^{16} \text{D/cm}^2$

Tab. 9: Maximale Tiefe der Schädigung und zum Vergleich die Reichweite von Deuterium, berechnet mit TRIM.SP.

Reichweite der Schädigung mit steigender Ionenenergie zunimmt. Die Tiefen, bis zu denen es möglich ist, HOPG-Graphit mit verschiedenen Deuteriumenergien zu schädigen, sind in Tabelle 9 angegeben. Zum Vergleich sind die entsprechenden maximalen Reichweiten von Deuterium, berechnet mit TRIM.SP, aufgeführt. Die maximale Tiefe der Schädigung entspricht etwa der maximalen Reichweite des implantierten Deuteriums.

Abbildung 25 zeigt das Integral der verlagerten Kohlenstoffatome bei verschiedenen Deuteriumenergien als Funktion der Implantationsfluenz. Bei allen drei Energien nimmt die Schädigung zunächst linear mit der Deuteriumfluenz zu. Die Zunahme der Schädigung hängt von der Deuteriumenergie ab und wächst mit steigender Energie. Sobald in der Tiefe der maximalen Schädigung *Sättigung* erreicht ist, weicht die Schädigung vom linearen Verlauf ab und wächst nur noch langsam an, bis sie über die gesamte Eindringtiefe des Deuteriums *gesättigt* ist. Der Sättigungswert der *verlagerten Atome* für verschiedenen Deuteriumenergien ergibt sich aus der Anzahl der Atome bis zur maximalen Eindringtiefe des Deuteriums.

4.3 Deuteriumeinfang in SiC

In SiC wurde 12 keV Deuterium bei 295 K und einer erhöhten Proben temperatur von 773 K implantiert. Die zurückgehaltene Deuteriummenge in Abhängigkeit von der Fluenz ist in Abbildung 26 dargestellt. Auch in SiC wird bei niedrigen Fluenzen bei beiden Proben temperaturen (295 K und 773 K) das implantierte Deuterium vollständig zurückgehalten. Dies ist für kleine Fluenzen nochmals in Abbildung 27 dargestellt. Bei 773 K wird bis etwa $3,5 \cdot 10^{17} \text{D/cm}^2$ das gesamte Deuterium zurückgehalten, während dies bei 295 K bis etwa $8,0 \cdot 10^{17} \text{D/cm}^2$ erfolgt.

Bei hohen Fluenzen setzt wieder ein Sättigungsverlauf ein. Mit steigender Proben tem-

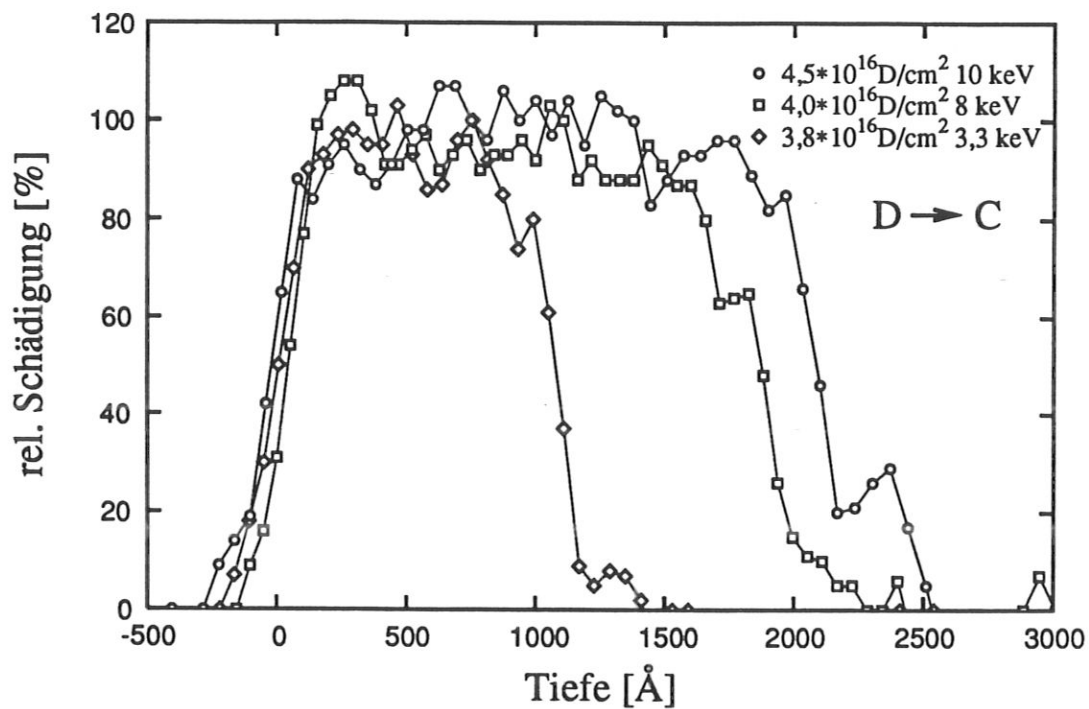


Abb. 24: Tiefenverteilung der Schädigung von HOPG-Graphit nach der Implantation von Deuterium mit verschiedenen Energien.

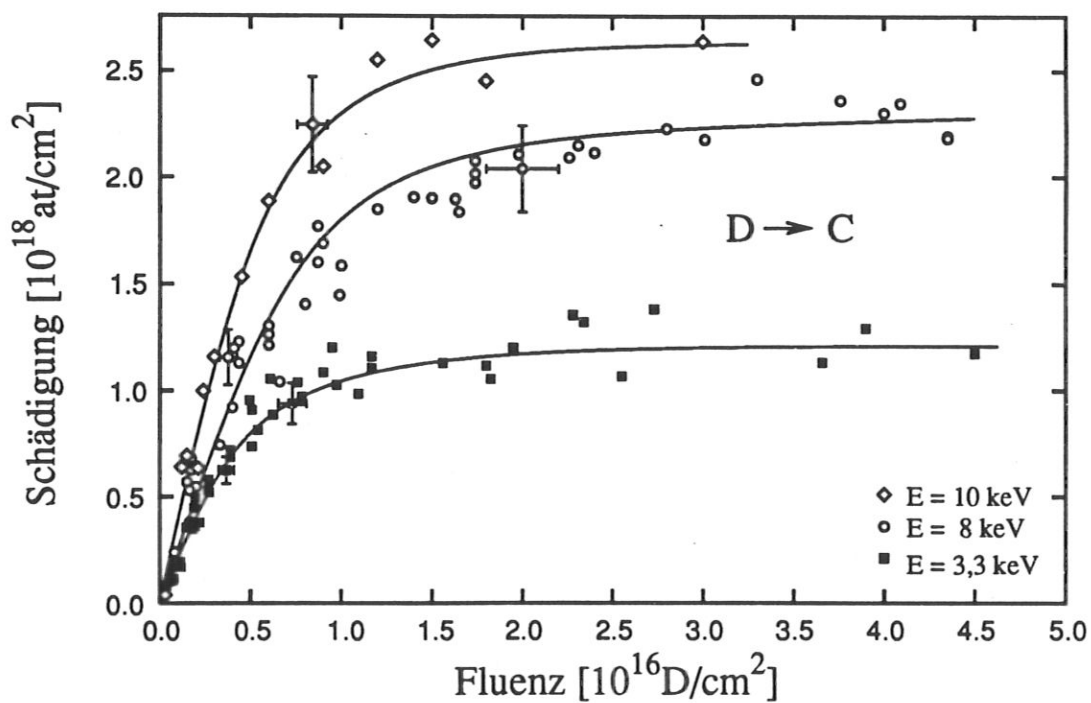


Abb. 25: Integral der verlagerten Kohlenstoffatome als Funktion der Deuteriumfluenz bei verschiedenen Energien.

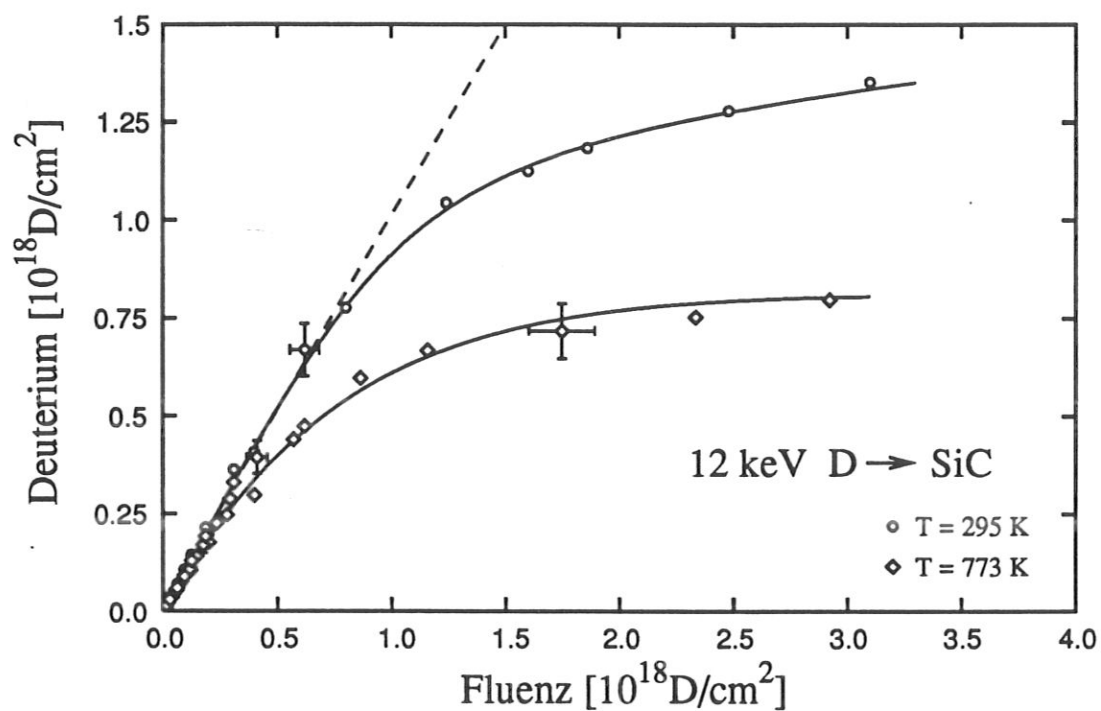


Abb. 26: Deuteriumeinfang in SiC bei 295 K und 773 K Probertemperatur.

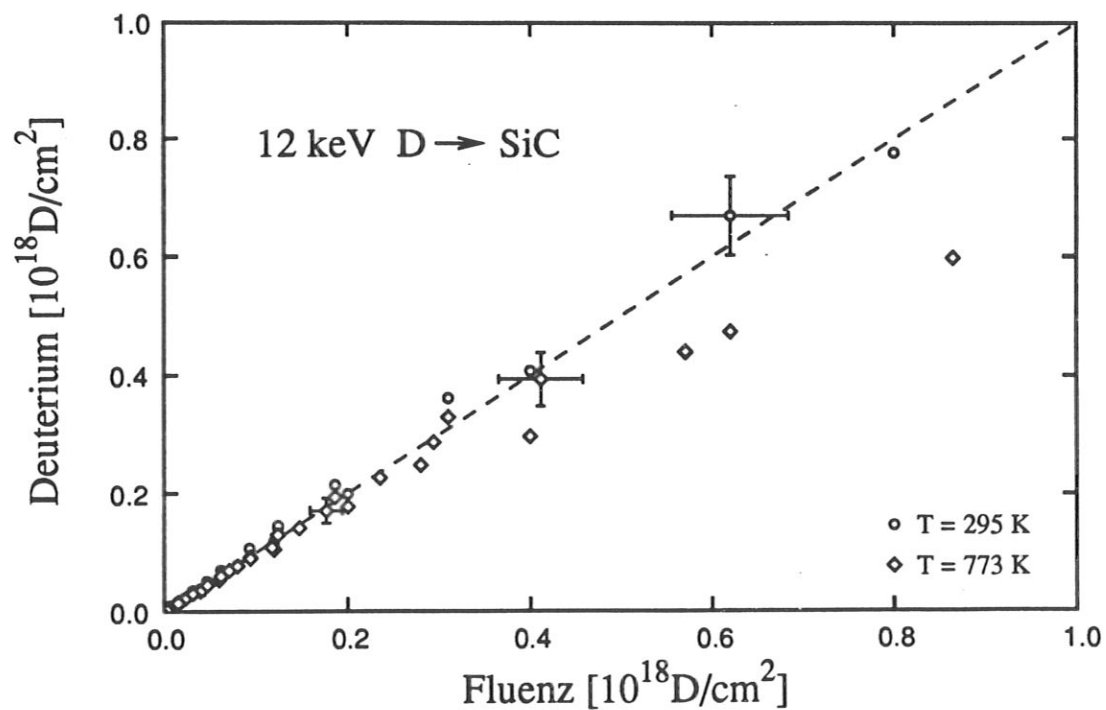


Abb. 27: Deuteriumeinfang in SiC bei 295 K und 773 K Probertemperatur für kleine Fluenzen (Ausschnitt von Abbildung 26).

peratur nimmt die Deuteriumsättigungsmenge jedoch weniger stark ab als in Graphit. In der Sättigung wird bei 773 K etwa halb soviel Deuterium zurückgehalten wie bei 295 K.

4.4 Strahlenschäden in SiC

Abbildung 28 zeigt RBS-C Spektren einer SiC-Probe, die mit verschiedenen Deuteriumfluenzen bei 12 keV implantiert wurde. Neben den Spektren der implantierten Probe ist zum Vergleich das Spektrum der Probe vor der Implantation sowie ein *random* Spektrum gezeigt.

Das SiC-Spektrum vor der Implantation zeigt, daß die SiC-Proben bezüglich Gitterführung sehr viel bessere Eigenschaften besitzen als HOPG-Graphit. Die minimale normierte Rückstreuintensität χ_{min} an der Oberfläche betrug im besten Fall 1,5% und war in den untersuchten Proben nie schlechter als $\sim 3\%$. Die Rückstreuanteile im *random* Spektrum bei etwa 517 keV entsteht durch Rückstreuung an Siliziumoberflächenatomen. Projektilen, die an Kohlenstoffoberflächenatomen gestreut werden, haben eine Energie von etwa 288 keV und verursachen die Stufe in der Intensität des *random* Spektrums unterhalb von 300 keV. Im Gegensatz zu HOPG tritt aufgrund der besseren Eigenschaften des SiC in der nicht implantierten Probe an der Oberfläche ein Maximum auf. Dieser *Oberflächenpeak* entsteht dadurch, daß für den Analysestrahl an der Oberfläche zunächst noch keine Gitterführung vorliegt. Gitterführung und die damit verbundene Erniedrigung der Rückstreuintensität erfolgt erst mit dem Eindringen in den Kristall. Der *Oberflächenpeak* durch Streuung an Kohlenstoffoberflächenatomen bei etwa 288 keV ist wegen des kleineren Streuquerschnitts von Kohlenstoff gegenüber Silizium nicht zu erkennen.

Implantiert man SiC-Proben mit 12 keV Deuterium, so entsteht schon bei kleinen Fluenzen ein weiteres Maximum in der Rückstreuintensität bei etwa 350–400 keV. Dieses wird durch die vermehrte Rückstreuung an verlagerten Siliziumatomen verursacht. Außerdem steigt die Rückstreuintensität hinter dem Maximum durch den Übergang von *geführten* Ionen auf *nicht geführte* Bahnen (*Dechanneling*). Die vermehrte Rückstreuung an verlagerten Kohlenstoffatomen bei einer Energie von etwa 180–200 keV ist in den Spektren nicht zu erkennen. Diese kann auf Grund des kleineren Streuquerschnitts nur in Einzelfällen aufgelöst werden. Im normierten Rückstreuspektrum wird die Rückstreuung an verlagerten Kohlenstoffatomen jedoch in den meisten Fällen sichtbar. Ein Beispiel für ein normiertes Rückstreuspektrum ist in Abbildung 10 gezeigt. Abbildung 29 zeigt die aus den Spektren

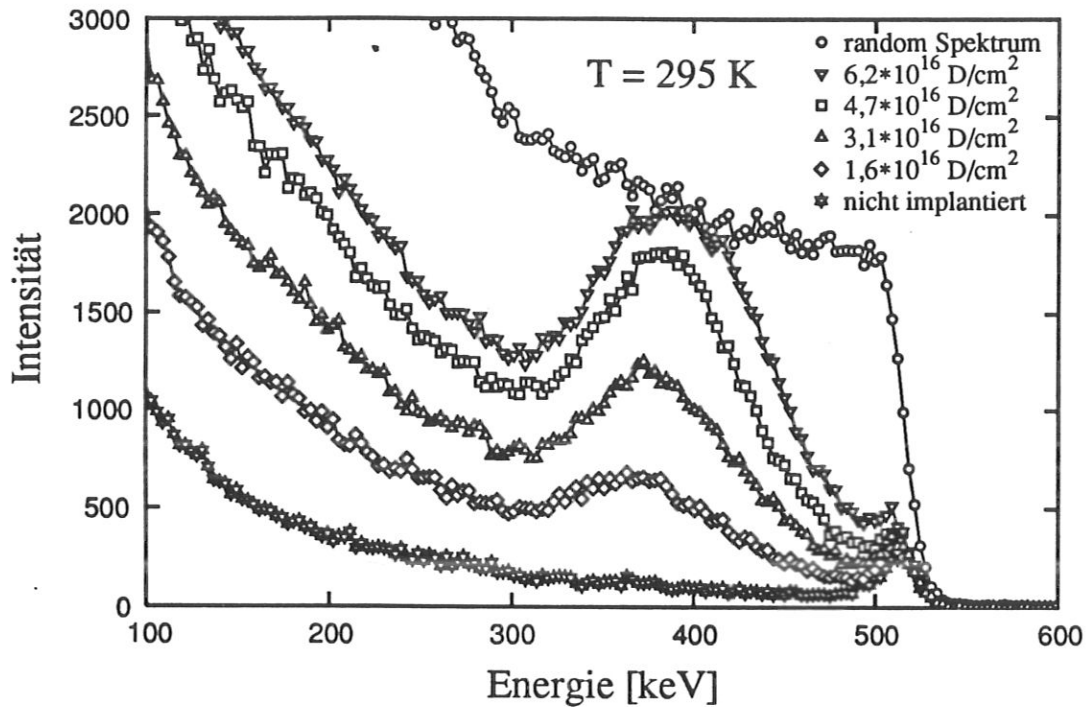


Abb. 28: $790 \text{ keV } ^3\text{He}$ RBS-C Spektren einer SiC-Probe in $\langle 100 \rangle$ Richtung, die bei 295 K mit verschiedenen Fluenzen implantiert wurde. Zum Vergleich ist das Spektrum der nicht implantierten Probe sowie ein random Spektrum dargestellt.

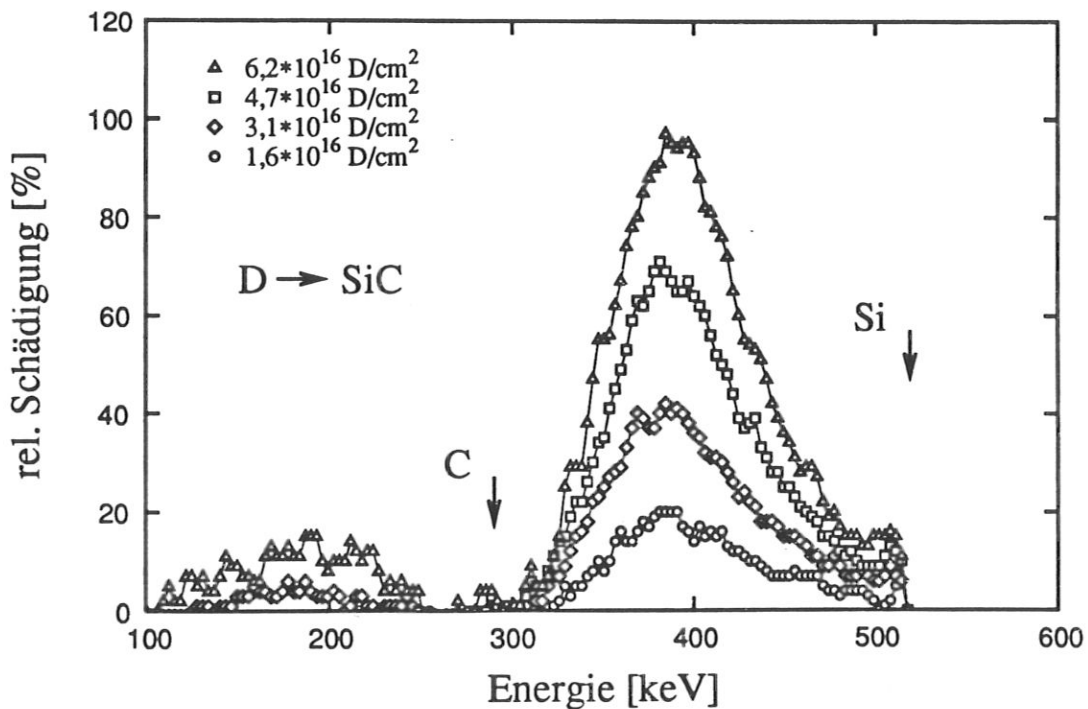


Abb. 29: Verteilung der Verlagerungen nach Implantation mit verschiedenen Deuteriumfluenzen bei 295 K . Die Verteilungen wurden aus den Spektren von Abbildung 28 berechnet.

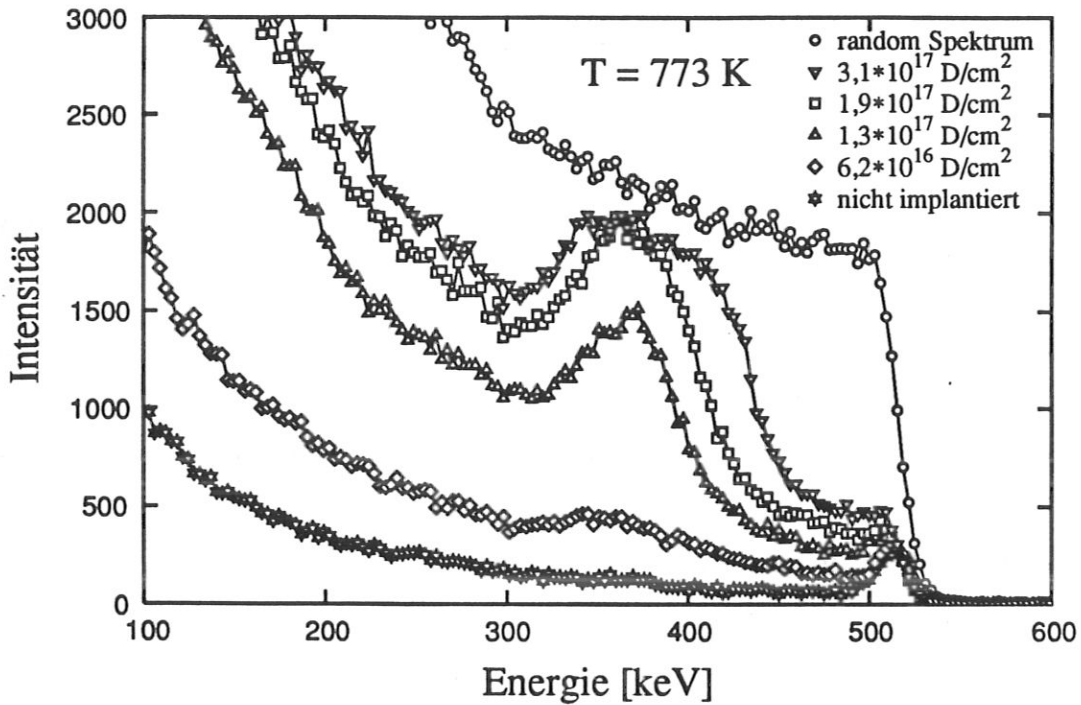


Abb. 30: 790 keV ^3He RBS-C Spektren einer SiC-Probe in $\langle 100 \rangle$ Richtung, die bei 773 K mit verschiedenen Fluenzen implantiert wurde. Zum Vergleich ist das Spektrum der nicht implantierten Probe sowie ein random Spektrum dargestellt.

von Abbildung 28 berechneten Energieverteilungen der Schädigung. Bei Energien kleiner als 300 keV ist ein Maximum zu erkennen, das auf verlagerte Kohlenstoffatome zurückgeht. Die Skala der relativen Schädigung bezieht sich nur auf den Teil der Energieverteilung, der durch verlagerte Siliziumatome verursacht wird. Da der Wirkungsquerschnitt für Stöße mit Kohlenstoffatomen um $(\frac{6}{14})^2$ kleiner ist als der für Silizium, muß der Teil der Kurven, der auf verlagerte Kohlenstoffatome zurückgeht, mit dem Kehrwert von $(\frac{6}{14})^2$ multipliziert werden, um verlagerte Kohlenstoff- und Siliziumatome vergleichen zu können. Aus der Energieverteilungen kann man abschätzen, daß im Rahmen des statistischen Fehlers ($\pm 20\%$) etwa gleich viele Kohlenstoff- und Siliziumatome verlagert werden. Außerdem sind die Tiefenverteilungen der verlagerten Kohlenstoff- und Siliziumatome etwa gleich.

Das Maximum in der Rückstreuintensität und somit die Schädigung wächst zunächst mit zunehmender Implantationsfluenz, bis die Rückstreuintensität im Maximum der Schädigung der des *random* Spektrums entspricht. Die Fluenz, bei der dies erreicht wird, ist in Tabelle 10 angegeben.

Mit steigender Fluenz nimmt die Rückstreuintensität aus dem Bereich zwischen dem Maximum der Schädigung und der Oberfläche zu, bis schließlich die Probe über die ge-

790 keV ^3He	295 K	773 K
Sättigung im Maximum	$6,0 - 7,0 * 10^{16}\text{D}/\text{cm}^2$	$1,0 - 1,5 * 10^{17}\text{D}/\text{cm}^2$
Sättigung bis Oberfläche	$1,3 - 2,0 * 10^{17}\text{D}/\text{cm}^2$	$0,8 - 1,0 * 10^{18}\text{D}/\text{cm}^2$

Tab. 10: Deuteriumfluenzen, bei denen im Maximum der Schädigung bzw. bis zur Oberfläche Sättigung erreicht wird.

samte Eindringtiefe des Deuteriums geschädigt ist. Das Rückstreuspektrum bleibt dann, auch bei einer weiteren Steigerung der Implantationsfluenz, unverändert. Erst bei sehr großen Fluenzen nimmt die Rückstreuintensität aus der Tiefe, in die das Deuterium implantiert wird, ab, da in diesem Tiefenintervall der elektronische Energieverlust durch das implantierte Deuterium erhöht wird.

Nach Implantation bei 773 K ergibt sich in den RBS-C Spektren qualitativ das gleiche Verhalten, d.h. es entsteht ein Maximum in der Intensität bei etwa der gleichen Energie (siehe Abbildung 30). Die Fluenzen bei denen eine ähnliche Rückstreuintensität erreicht wird jedoch sind sehr viel größer. Sie sind in Tabelle 10 angegeben. Neben diesem quantitativen Unterschied ist die geschädigte Schicht sehr viel schmäler als nach Implantation bei 295 K. Außerdem dehnt sich die Schädigung nur sehr langsam zur Oberfläche hin aus, so daß erst bei sehr hohen Fluenzen von $(0,8 - 1,0) * 10^{18}\text{D}/\text{cm}^2$ die Probe über die gesamte Reichweite des Deuteriums geschädigt ist.

Wie für Graphit wurde auch für SiC aus den Spektren die Anzahl der verlagerten Siliziumatome bestimmt. Auf Grund des hohen Siliziumuntergrunds kann die Anzahl der verlagerten Kohlenstoffatome nicht ausgewertet werden, weshalb im folgenden nur die verlagerten Siliziumatome betrachtet werden. Abbildung 31 zeigt den Zunahme der verlagerten Siliziumatome als Funktion der Deuteriumfluenz für verschiedenen Proben-temperaturen.

Die Anzahl der verlagerten Siliziumatome verläuft ähnlicher wie in HOPG-Graphit. Nach Implantation bei 295 K steigt die Zahl der verlagerten Siliziumatome zunächst linear mit der Fluenz. Ist die Schädigung des SiC-Kristalls im Maximum der Schädigung gesättigt, geht die Kurve in einen Sättigungsverlauf über. Im Gegensatz dazu bleibt die Schädigung nach 773 K Implantation bis zu einer Fluenz von $1,0 * 10^{17}\text{D}/\text{cm}^2$ sehr klein. Im Bereich von $1 * 10^{17}\text{D}/\text{cm}^2$ bis $2 * 10^{17}\text{D}/\text{cm}^2$ nimmt die Schädigung sehr schnell zu, jedoch immer noch langsamer als bei 295 K. Bei etwa $2 * 10^{17}\text{D}/\text{cm}^2$ ist im Maximum der

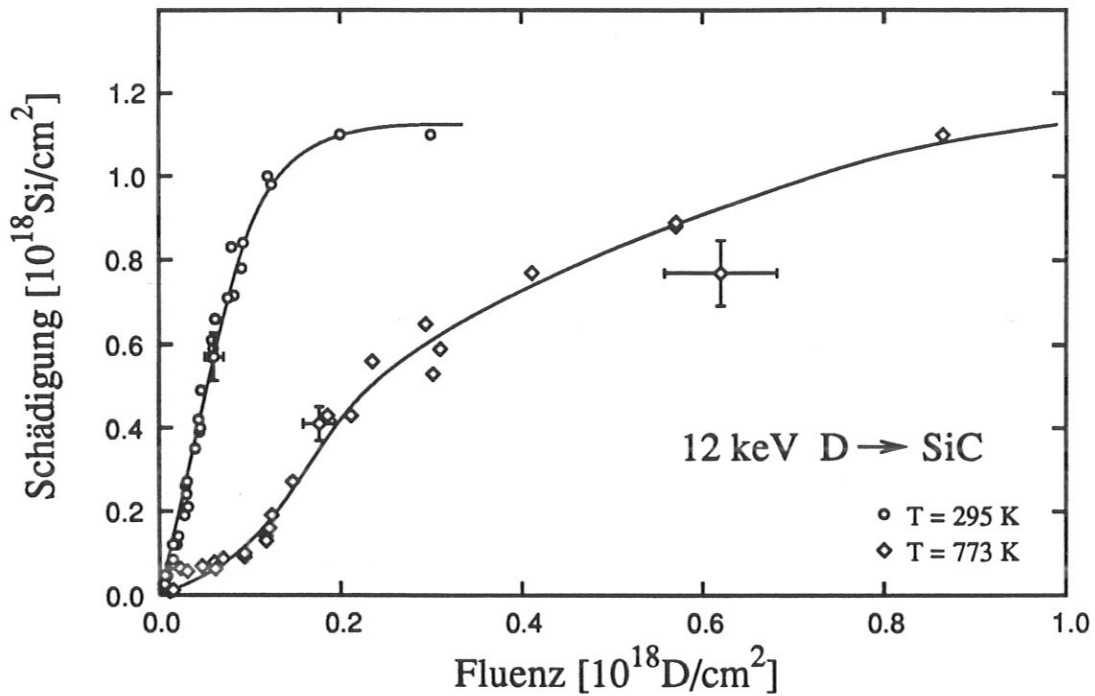


Abb. 31: Anzahl der verlagerten Siliziumatome als Funktion der Deuteriumfluenz bei 295 K und 773 K Probertemperatur.

Schädigung Sättigung erreicht und die Schädigung steigt im weiteren Verlauf langsamer.

Bei einer höheren Analyseenergie von 3,4 MeV wird die Verlagerung der Kohlenstoffatome deutlicher sichtbar. Bei dieser Energie erfolgt neben der Rutherfordstreuung an Kohlenstoffatomen auch eine resonante Streuung der ^4He Projektile am Kernpotential [93]. Dadurch wird der Streuquerschnitt erhöht, die Stöße erfolgen aber immer noch elastisch. Abbildung 32 zeigt Rückstreuenspektren an SiC mit 3,4 MeV ^4He . Bei dieser Energie ist im Spektrum der nicht implantierten Probe neben dem Siliziumoberflächenpeak auch der des Kohlenstoffs bei 700 keV deutlich zu erkennen. Das Spektrum der implantierten Probe zeigt, daß ungefähr gleich viele Kohlenstoff- und Siliziumatome verlagert werden.

4.5 Ausheilen von Strahlenschäden und thermische Desorption von Deuterium

Abbildung 33 zeigt die Tiefenverteilung der Schädigung einer Probe, die mit $6,5 \cdot 10^{16} \text{D/cm}^2$ implantiert wurde, sowie die Schädigung nach dem Ausheilen für 10 Minuten bei verschiedenen Temperaturen. Nach dem Erhitzen auf 1073 K nimmt die Schädigung stark ab und geht auf etwa ein Fünftel ihres ursprünglichen Wertes zurück. Dies gilt für verlagerte

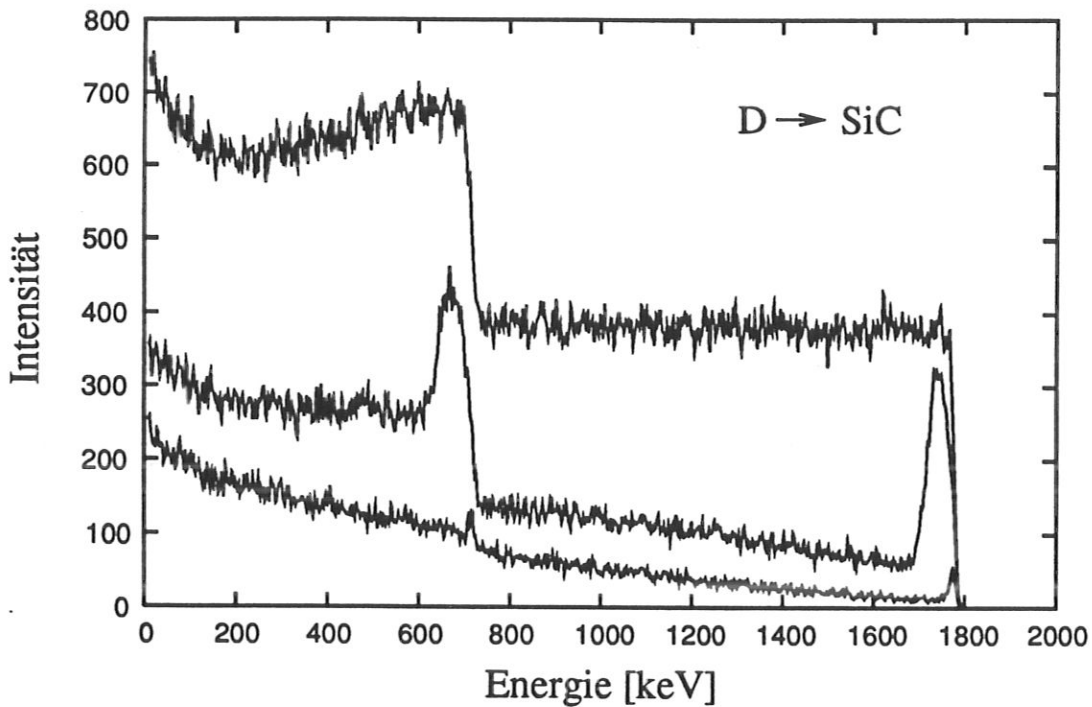


Abb. 32: 3,4 MeV ^4He RBS-C Spektren einer implantierten SiC-Probe in $\langle 100 \rangle$ Richtung. Zum Vergleich wird das Spektrum der nicht-implantierten Probe sowie ein random Spektrum gezeigt.

Silizium- und Kohlenstoffatome gleichermaßen, wie die Verteilungen im Bereich zwischen 100 und 270 keV zeigen.

Im Gegensatz dazu zeigen Proben, die mit höheren Fluenzen (ab $9,0 \cdot 10^{16} \text{D}/\text{cm}^2$) implantiert werden, ein deutlich geringeres Ausheilen der Strahlenschäden (siehe Abbildung 34). In diesem Fall verringert sich vor allem die Schädigung in den Tiefen, in denen sie noch nicht *gesättigt* ist, während in Tiefen, in denen die Schädigung *gesättigt* ist, kein Ausheilen stattfindet. Auch in diesem Fall verhalten sich verlagerte Kohlenstoff- und Siliziumatome etwa gleich.

Das Ausheilverhalten nach Implantation bei 295 K kann in zwei Fälle unterteilt werden. Bei kleinen Fluenzen ($\leq (6 - 7) \cdot 10^{16} \text{D}/\text{cm}^2$) erreicht die Schädigung des Kristalls in keinem Bereich der Tiefenskala einen kritischen Wert (wahrscheinlich Amorphisierung) und läßt sich schon bei Temperaturen bis 1073 K fast vollständig ausheilen. Ist die Fluenz jedoch groß genug, um den Kristall über diesen Grenzwert so zu schädigen, so daß die kristalline Struktur völlig zerstört wird, dann heilt die Schädigung bis 1073 K nicht aus. In Bereichen, in denen der Kristall nur teilweise geschädigt ist, heilen die Strahlenschäden schon bei niedrigeren Temperaturen aus. Außerdem wird ein epitaktisches Ausheilen aus

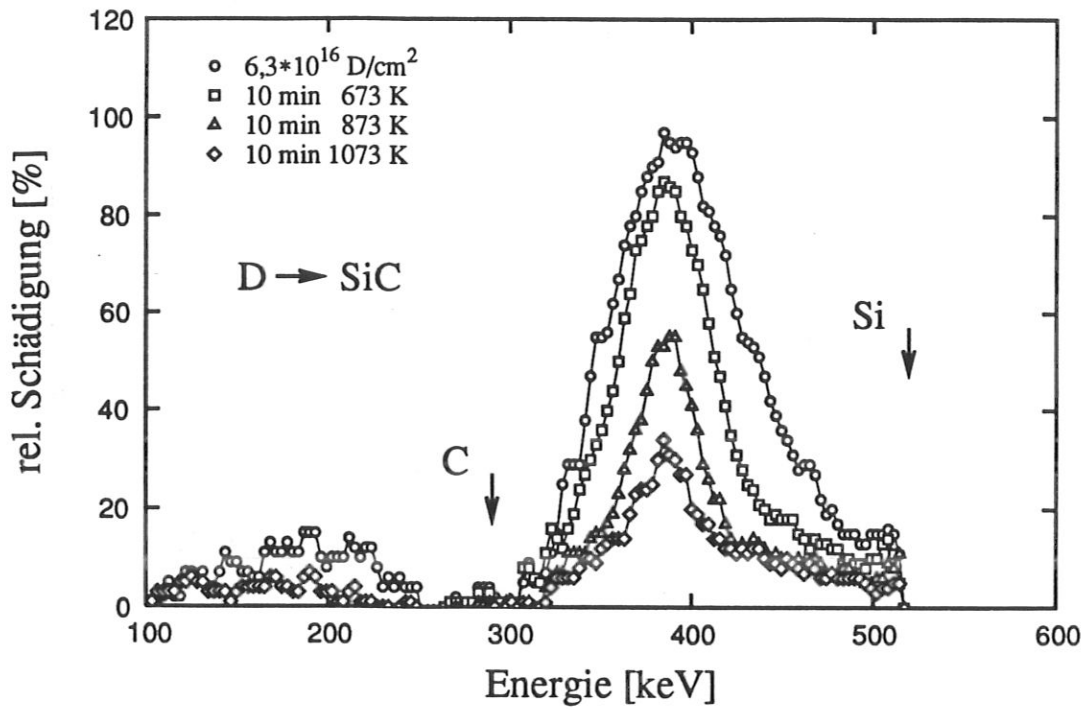


Abb. 33: Tiefenverteilung der Schädigung einer mit $6,5 \cdot 10^{16} \text{ D/cm}^2$ implantierten Probe und die Schädigung derselben Probe nach 10 min. Ausheilen bei verschiedenen Temperaturen.

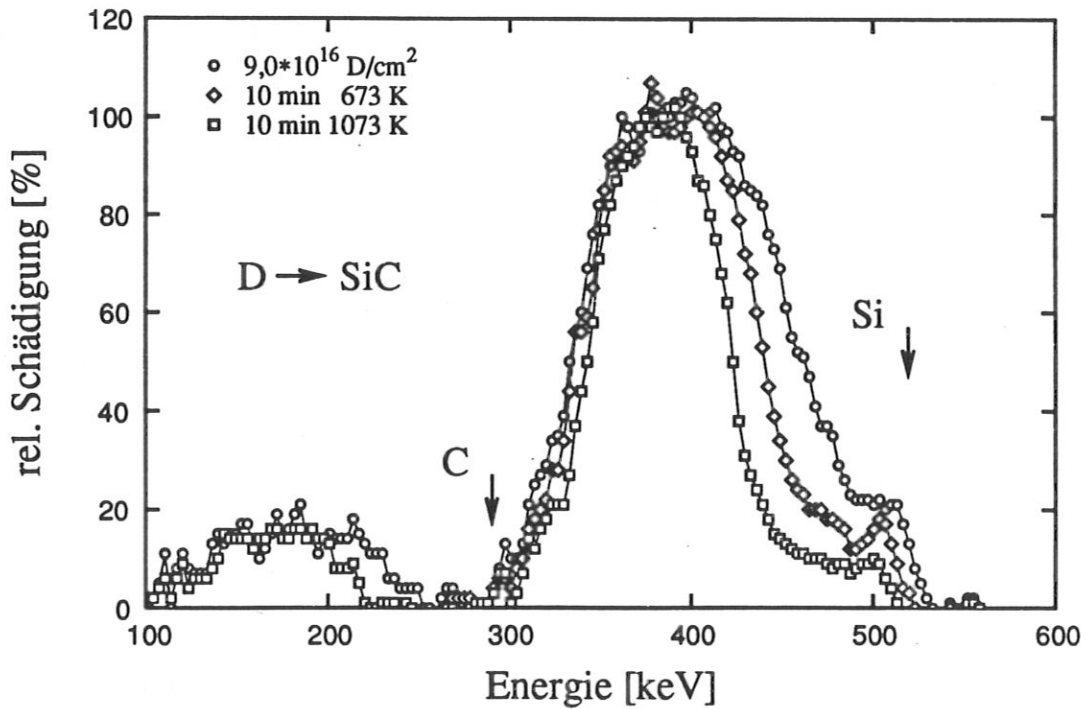


Abb. 34: Tiefenverteilung der Schädigung einer mit $9,0 \cdot 10^{16} \text{ D/cm}^2$ implantierten Probe und die Schädigung derselben Probe nach 10 min. Ausheilen bei verschiedenen Temperaturen.

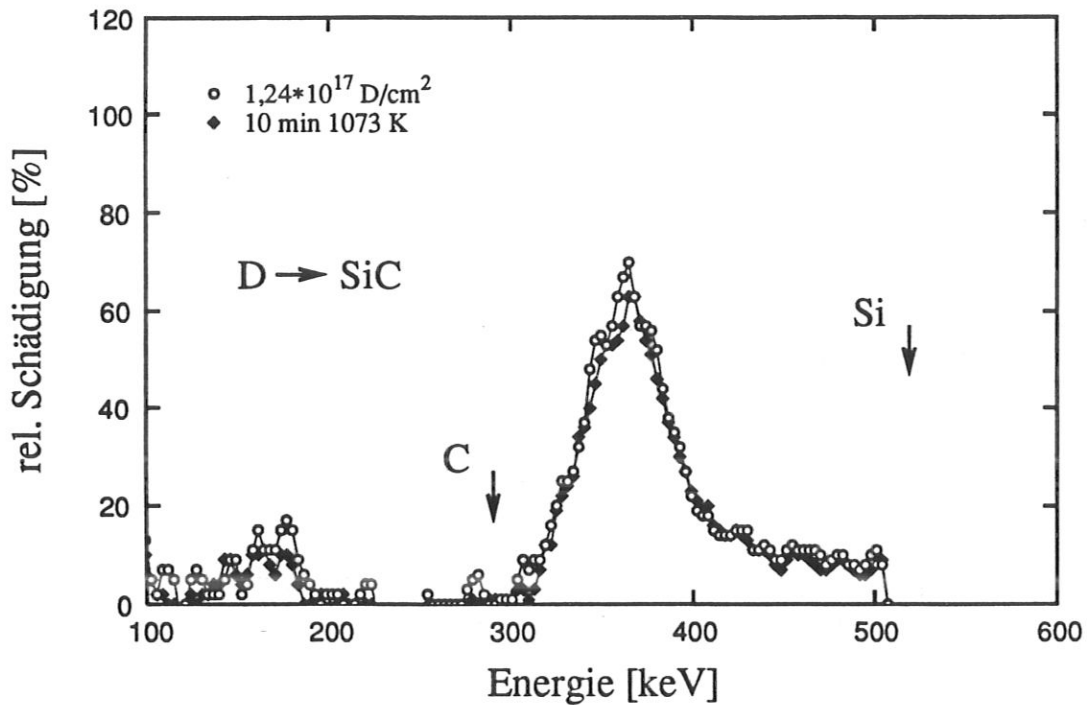


Abb. 35: Tiefenverteilung der Schädigung einer mit $1,24 \cdot 10^{17} \text{D/cm}^2$ implantierten Probe und die Schädigung derselben Probe nach 10 min. Ausheilen bei verschiedenen Temperaturen.

kristallinen Bereichen beobachtet. Die Schädigungsverteilung wird dadurch schmaler und beschränkt sich auf amorphisierte Bereiche.

Ein anderes Verhalten ergibt sich beim Ausheilen von Proben, die bei 773 K implantiert wurden. Abbildung 35 zeigt die Tiefenverteilung der Schädigung einer mit $1,24 \cdot 10^{17} \text{D/cm}^2$ implantierten Probe. Die Verteilung der Schädigung zeigt, daß in der Tiefe der maximalen Schädigung noch deutlich sichtbar eine kristalline Struktur vorhanden ist. Trotzdem ist nach dem Erhitzen auf 1073 K (für 10 Minuten) nur ein geringfügiges bzw. kein Ausheilen der Schädigung zu beobachten. Bei höheren Deuteriumfluenzen wird dasselbe Verhalten beobachtet, d.h. Strahlenschäden, die durch Implantation bei 773 K erzeugt werden, lassen sich bis 1073 K nicht oder nur sehr geringfügig ausheilen. Verlagerte Kohlenstoff- und Siliziumatome zeigen auch in diesem Fall ein sehr ähnliches Verhalten.

Gleichzeitig mit den Strahlenschäden wurde die zurückgehaltene Deuteriummenge gemessen. Abbildung 37 zeigt die in SiC verbleibende Deuteriummenge nach dem Erhitzen auf verschiedene Temperaturen. Die Menge ist jeweils auf die implantierte Deuteriummenge normiert. Die Abbildung zeigt, daß bis 1073 K in allen Fällen das gesamte Deuterium im SiC zurückgehalten wird, selbst wenn, wie bei $6 \cdot 10^{16} \text{D/cm}^2$, ein Großteil der

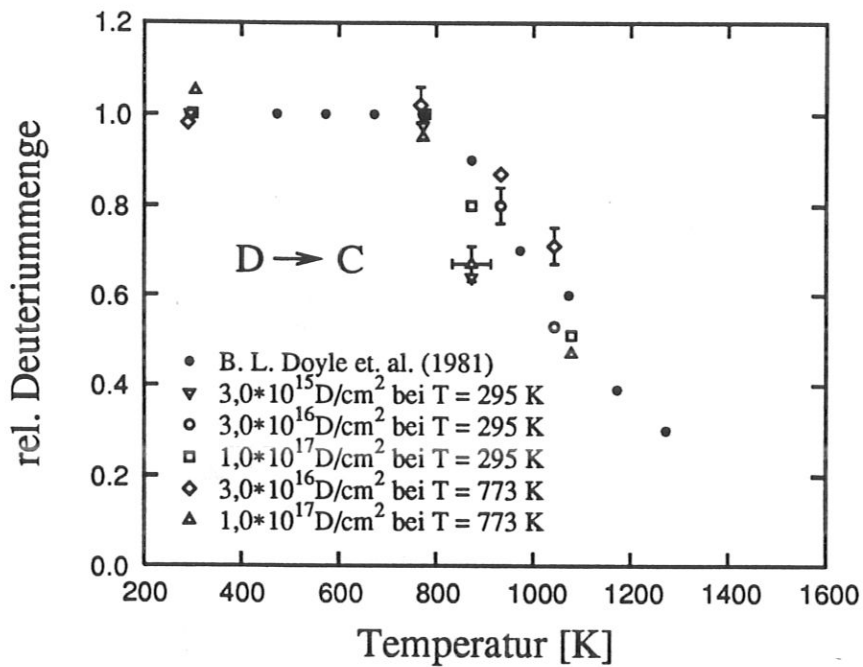


Abb. 36: Deuteriummenge in HOPG nach Erhitzen als Funktion der Proben temperatur.

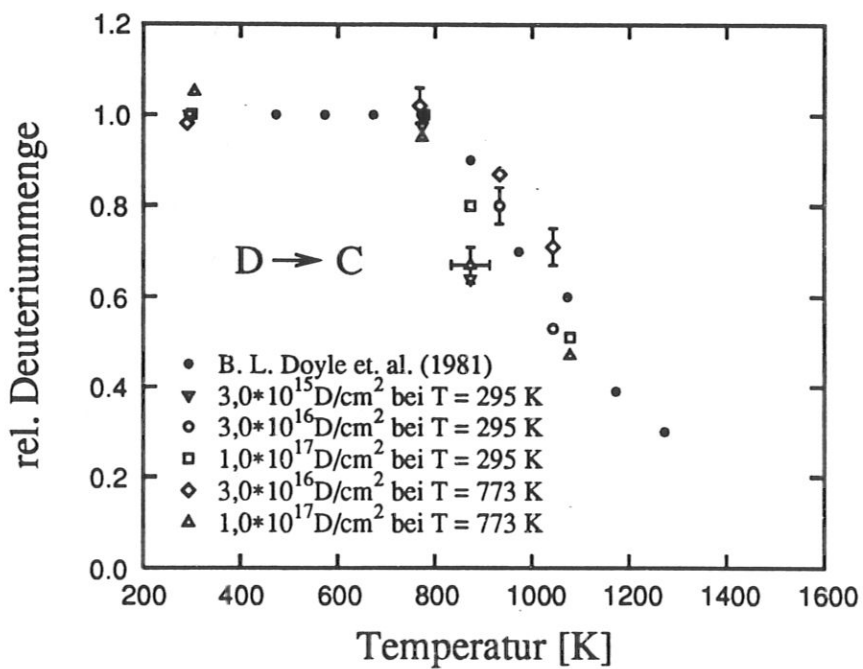


Abb. 37: Deuteriummenge in SiC nach Erhitzen als Funktion der Proben temperatur.

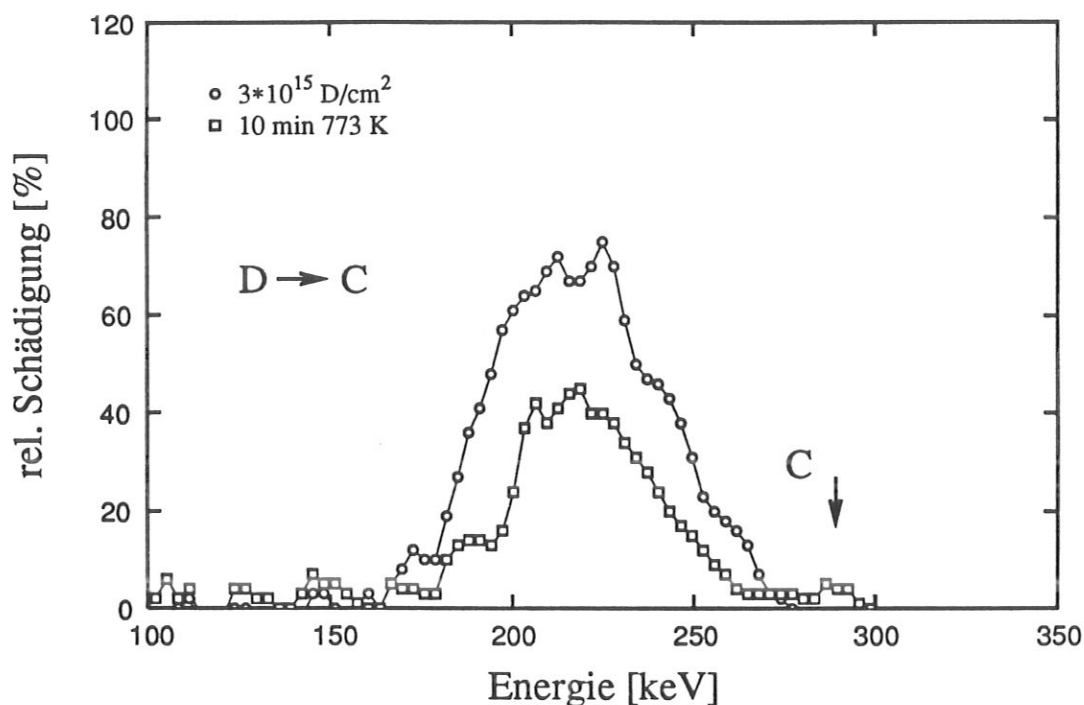


Abb. 38: Tiefenverteilung der Schädigung in HOPG-Graphit vor und nach Erhitzen auf 773 K.

Strahlenschäden ausheilt. Erst ab 1100 K beginnt die thermische Desorption des Deuteriums. Das Desorptionsverhalten des Deuteriums in SiC ist im untersuchten Fluenzbereich unabhängig von der Implantationstemperatur und somit der Schädigung.

In Graphit wurde das Ausheilverhalten von Strahlenschäden nur für eine geringe Schädigung nach Raumtemperaturimplantation untersucht. Abbildung 38 zeigt die Schädigungsverteilung einer HOPG-Probe, sowie die Verteilung bei derselben Probe nach Ausheilen bei 773 K. Die implantierte Probe zeigt in der Tiefe der maximalen Schädigung noch eine kristalline Struktur. Die Schädigung geht beim Erhitzen auf 773 K ungefähr auf die Hälfte des ursprünglichen Werts zurück. Wegen des Einflusses der ³He Analyseionen auf das Verhalten von HOPG-Graphit beim Erhitzen, konnte das weitere Verhalten der Strahlenschäden nach dem Erhitzen auf noch höhere Temperaturen nicht untersucht werden.

Obwohl bis 773 K in Graphit ungefähr die Hälfte der Strahlenschäden ausheilt, bleibt etwa 95% des Deuteriums in der Probe. Dieser Wert entspricht dem beobachteten Desorptionsverhalten von Deuterium in Graphit bei kleinen Fluenzen, wie Abbildung 36 zeigt. Der Abbildung ist zu entnehmen, daß auch in Graphit das Desorptionsverhalten des Deu-

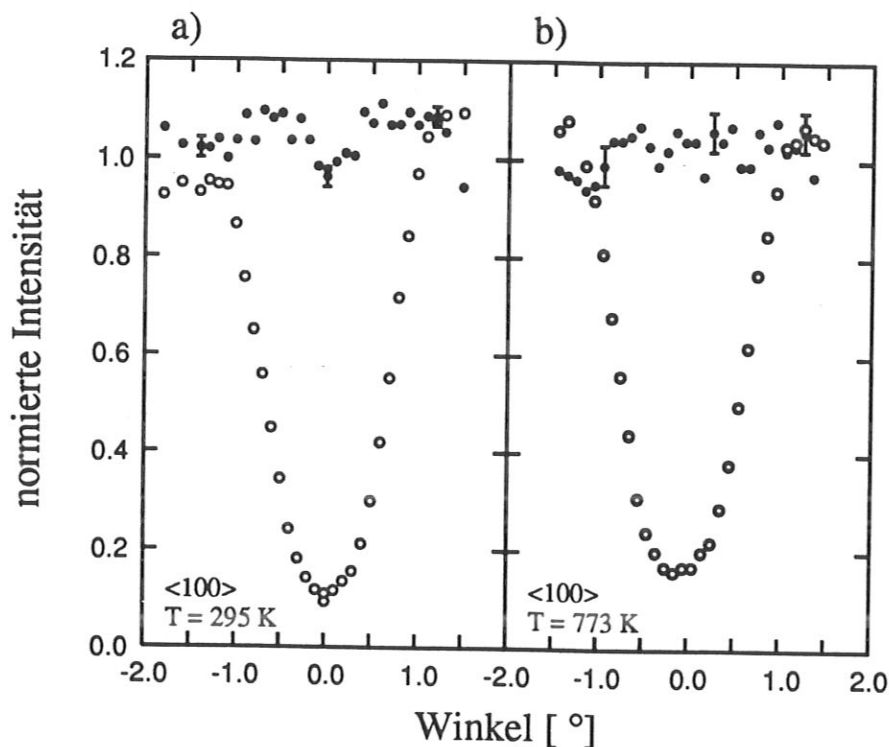


Abb. 39: Normierte Intensität der rückgestreuten ^3He Ionen sowie der Protonen aus der Kernreaktion $\text{D}(^3\text{He}, \text{p})\alpha$ nach Implantation bei 295 K und 773 K Proben­temperatur.

teriums im untersuchten Fluenzbereich unabhängig von der Implantationstemperatur ist. Es wird kein Zusammenhang zwischen dem Ausheilen der Strahlenschäden und der thermischen Desorption von Deuterium beobachtet.

4.6 Gitterposition des Deuteriums

Um weitere Hinweise über den Rückhaltmechanismus des Deuteriums in SiC zu erhalten, wurde die Rückstreuintensität und die Protonenausbeute aus der Reaktion $\text{D}(^3\text{He}, \text{p})\alpha$ für verschiedene Einfallswinkel ψ des ^3He Strahls aufgenommen. Der Einfallswinkel ψ der Projektile wurde zur $\langle 100 \rangle$ Richtung des SiC-Gitters variiert. Abbildung 39 zeigt die Intensität der am Siliziumuntergitter gestreuten Projektile, sowie die Protonenintensität als Funktion des Einfallswinkels ψ . Abbildung 39a zeigt den Verlauf nach Implantation bei 295 K, während Abbildung 39b die Ergebnisse nach 773 K Implantation zeigt.

Der Verlauf der Protonenintensität unterscheidet sich in beiden Fällen durch ein kleines Minimum von 10–15 % bei 295 K. Dieses Minimum ist flacher und schmaler als das Minimum der Rückstreuintensität an Siliziumatomen. Weitere Strukturen im Verlauf der Protonenintensität sind im Rahmen der Statistik nicht zu erkennen. Dieser Verlauf

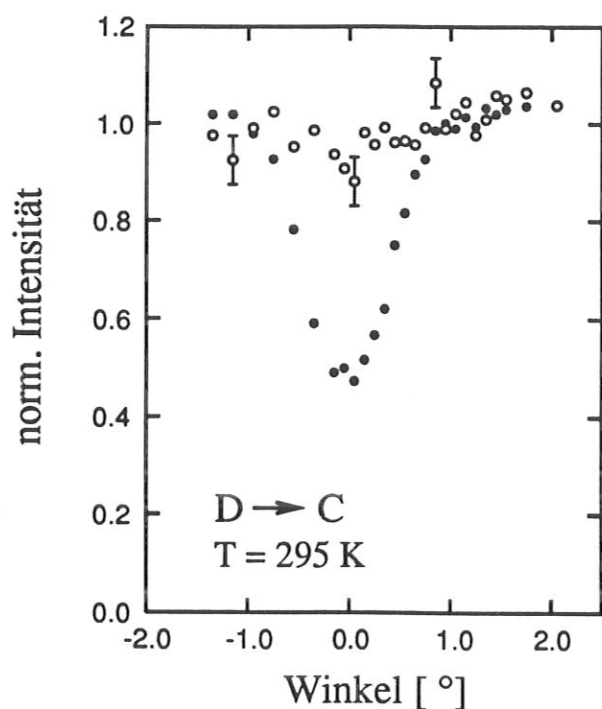


Abb. 40: Normierte Intensität der rückgestreuten ^3He Ionen sowie der Protonen aus der Kernreaktion nach Implantation von $3,0 \cdot 10^{15}\text{D}/\text{cm}^2$ bei 295 K in Graphit.

der Protonenintensität konnte für Implantationsfluenzen von $1,5$ bis $8,0 \cdot 10^{15}\text{D}/\text{cm}^2$ bei 295 K mehrfach reproduziert werden. Bei höheren Deuteriumfluenzen steigt die Schädigung des Kristallgitters an und das Minimum verschwindet.

Im Gegensatz dazu wird nach Implantation bei 773 K kein Minimum in der Protonenausbeute beobachtet. Es sind auch keine anderen reproduzierbaren Strukturen erkennbar. Die Protonenausbeute ist im Rahmen der statistischen Fehler konstant. Bei dieser Targettemperatur wurde der Fluenzbereich ab $4,5 \cdot 10^{15}\text{D}/\text{cm}^2$ untersucht (bis $2,5 \cdot 10^{16}\text{D}/\text{cm}^2$), da bei dieser Temperatur die Schädigung kleiner ist. Im gesamten untersuchten Fluenzbereich konnte keine reproduzierbare Struktur im Verlauf der Protonenintensität gefunden werden.

In Graphit wurde ebenfalls die Winkelabhängigkeit der Protonenausbeute gemessen. Da Graphit durch die Implantation, aber auch durch die Analyse, sehr viel stärker geschädigt wird als SiC, sind die möglichen Implantations- und Analysefluenzen kleiner, weshalb die statistischen Fehler größer werden. Insbesondere auf Grund der Schädigung des Graphits durch den Analysestrahl ist es sehr schwierig, die Winkelabhängigkeit mit ausreichender Statistik zu messen, ohne das Ergebnis zu verfälschen. Trotzdem konnte auch in Graphit in einigen Messungen ein kleines Minimum gefunden werden, das allerdings nicht eindeutig reproduzierbar ist. Das beste Ergebnis für die Winkelabhängigkeit

der Protonenintensität in HOPG ist in Abbildung 40 dargestellt.

Vergleicht man nur die Protonenintensität bei Ausrichtung des Analysestrahls entlang der hexagonalen Achse mit der für einen nicht ausgerichteten Strahl, so ergibt sich entlang der hexagonalen Achse eine 5-10 % geringere Protonenintensität. Dieses Ergebnis konnte mehrfach reproduziert werden, verschwand aber aufgrund der Schädigung durch den Analysestrahl bei dem Versuch, es mit Messungen unter verschiedenen Einfallswinkeln zu untermauern. Bei höherer Implantationstemperatur konnte, wie in SiC, keine Abhängigkeit der Protonenausbeute vom Einfallswinkel gefunden werden.

5 Diskussion

5.1 Strahlenschäden

Zunächst muß die Frage diskutiert werden, wie die mit RBS-C gewonnenen Ergebnisse zu interpretieren sind. Die RBS-C Methode erlaubt die Bestimmung der Tiefenverteilung der Schädigung, auf die Art der Defekte kann jedoch nur indirekt geschlossen werden. Die Berechnung der Defektkonzentration aus den RBS-C Ergebnisse ist aber nur unter der Annahme eines bestimmten Defekttyps (d.h. eines Streufaktors) möglich. Die in Kapitel 5 angegebenen Defektkonzentrationen wurden unter der Annahme von homogen verteilten Punktdefekten berechnet. Da verschiedene Defekttypen unterschiedlich zur Rückstreuung beitragen, können bei gleicher Rückstreuintensität unterschiedliche Defekte in verschiedenen Konzentrationen vorliegen.

Sobald die Rückstreuintensität des *random* Spektrums erreicht ist, kann eine weitergehende Schädigung mit RBS-C nicht mehr beobachtet werden, da die Rückstreuintensität diesen Wert nicht übersteigen kann. Um Aussagen über die Schädigung machen zu können, ist es deshalb notwendig, die RBS-C Ergebnisse mit denen anderer Methoden zu vergleichen. Besondere Bedeutung hat hierbei die Frage, wie stark bzw. auf welche Art das Kristallgitter geschädigt ist, wenn die Rückstreuintensität des *random* Spektrums erreicht ist. Anders ausgedrückt stellt sich die Frage, ob die Probe bei dieser Fluenz bereits vollständig amorphisiert ist. Man kann drei Fälle unterscheiden, für die die Rückstreuintensität des *random* Spektrums erreicht wird:

- Die Probe ist amorph.
- Die Probe ist polykristallin, mit statistisch verteilter Orientierung der Kristallite.
- Die vorhandenen Defekte haben einen Streufaktor größer als eins. Dadurch kann schon bei wenigen Defekten die Rückstreuintensität des *random* Spektrums erreicht werden.

Der letzte Punkt der Aufzählung soll im folgenden genauer erläutert werden. Die Nachweisempfindlichkeit der RBS-C Methode ist für verschiedene Defekttypen unterschiedlich.

Sie wird durch den Streufaktor f beschrieben. Dieser ist für homogen verteilte Punktdefekte eins, kann aber auch größer bzw. kleiner als eins sein. Ist f größer als eins, kann die Rückstreuintensität des *random* Spektrums erreicht werden, ohne daß die Probe amorph oder polykristallin ist. Der Streufaktor f wird durch die Flußdichteverteilung $F(\vec{r})$ der Projektilen im Kanal bestimmt, die vom Einfallswinkel ψ abhängt (siehe Abbildung 8). Aufgrund der Überhöhung der Flußdichte im Zentrum der Gitterführungs Kanäle ist der Streufaktor für verlagerte Atome, die auf dieser Position liegen, größer als eins. Für solche Defekte ändert sich die Rückstreuintensität, wenn die Probe um einen kleinen Winkel ψ gegen den Analysestrahl verdreht wird [167].

In Graphit entspricht die Rückstreuintensität nach Implantation von etwa $5 * 10^{15} \text{D/cm}^2$ aus der Tiefe der maximalen Schädigung und nach $3 * 10^{16} \text{D/cm}^2$ über die gesamte Reichweite des Deuteriums der *random* Spektrums. Nach Implantation dieser Deuteriumfluenzen ist HOPG-Graphit noch nicht amorph. Mit TEM und Raman-Spektroskopie wird eine Amorphisierung erst bei $(2 - 4) * 10^{17} \text{D/cm}^2$ beobachtet [149, 153, 194]. Diese Fluenz ist fast zwei Größenordnungen größer, als die Fluenz, bei der die *Sättigung* der mit RBS-C beobachtbaren Schädigung erreicht ist. Bei Fluenzen, für die im RBS-C Spektrum die *random* Intensität erreicht wird, ist im TEM nur eine sehr geringe Schädigung sichtbar [173]. Zur Berechnung der in Kapitel 5 angegebenen *verlagerten Atome* wurde von homogen verteilten Punktdefekten ausgegangen, für die *random* Intensität erreicht ist, sobald *alle* Atome verlagert sind, d.h. die Probe amorph ist. Der Vergleich mit TEM Ergebnissen zeigt, daß diese Annahme in Graphit nicht richtig ist. Dies erklärt die sehr große Anzahl von *verlagerten Atomen*, die aus den RBS-C Spektren berechnet wird und bedeutet insbesondere, daß diese viel zu groß ist.

Die sehr hohe Rückstreuintensität im RBS-C-Spektrum kann ausgehend von den vorausgegangenen Überlegungen, mehrere Ursachen haben. Diese sollen im folgenden diskutiert werden. Die naheliegendste Erklärung ist die Entstehung eines polykristallinen Materials¹. Ab einer Fluenz von $5 * 10^{15} \text{D/cm}^2$ beobachten Niwase et al. [153] die Aufspaltung großer Kristallite in kleinere. Man kann sich leicht vorstellen, daß die c-Achsen der Kristallite bei der Aufspaltung um einen kleinen Winkel gegeneinander verkippen. Da der charakteristische Winkel für Gitterführung für 790 keV ^3He in Graphit sehr klein ist

¹HOPG-Graphit ist polykristallin in der a- und b-Richtung, aber geordnet in c-Richtung. Die Vorstellung ist, daß zusätzlich die Ausrichtung der c-Achsen der Kristallite verloren geht.

($0,54^\circ$), reicht ein Verkippen um weniger als 1° aus, um die Gitterführung zu verhindern.

Bei geringer Schädigung heilen Strahlenschäden in Graphit jedoch schon bei 773 K aus. Die Schädigung kann deshalb nicht auf ein Verkippen der Kristallite zurückgeführt werden, weil, wie Elman et al. [66] zeigen, erst über 2573 K ein Ausrichten der c-Achsen stattfindet. Auch in TEM-Untersuchungen wird kein Verkippen der Kristallite beobachtet [173]. Außerdem tritt die Aufspaltung der Kristallite erst auf, wenn im RBS-C Spektrum schon die maximale Intensität erreicht ist. Man kann deshalb ausschließen, daß die starke Erhöhung der Rückstreuintensität durch ein Verkippen der Kristallite, d.h. die Entstehung eines polykristallinen Materials, verursacht wird.

Die zweite oben beschriebene Möglichkeit, *random* Intensität zu erreichen, ist die Bildung von Defekten mit einem Streufaktor deutlich größer als eins. Dies gilt für Punktdefekte, die bevorzugt im Zentrum der Gitterführungs Kanäle liegen. Auf Grund der polykristallinen Struktur des HOPG-Graphits, in dem die c-Achsen der einzelnen Kristallite gegeneinander verkippt sind (max. $0,3^\circ$), ist das Maximum der Flußdichteverteilung $F(\vec{r})$ der Projektile nicht so hoch wie in einem einkristallinen Material (siehe Abbildung 8). In HOPG ergibt sich für das Verhältnis ψ/ψ_1 im günstigsten Fall ein Wert von 0,28. Abbildung 8 zeigt, daß in diesem Fall der Streufaktor für im Zentrum der Kanäle liegende Atome einen Wert von 2–2,5 annimmt. Werden verlagerte Atome bevorzugt im Zentrum der Gitterführungs Kanäle angelagert, ist die Rückstreuintensität um diesen Faktor gegenüber statistisch verteilten Punktdefekten erhöht, d.h. die tatsächliche Anzahl der *verlagerten Atome* ist um diesen Faktor kleiner. Selbst unter dieser Annahme ist die mit RBS-C bestimmte Schädigung immer noch größer als die durch TEM gemessene. Für verlagerte Atome, die sich genau im Zentrum der Gitterführungs Kanäle befinden, ändert sich außerdem die Rückstreuintensität bei Änderung des Einfallswinkels ψ [167]. Eine solche Änderung der Rückstreuintensität mit dem Einfallswinkel wurde jedoch nicht beobachtet. Man kann deshalb ebenfalls ausschließen, daß die starke Erhöhung der Rückstreuintensität auf verlagerte Atome im Zentrum der Gitterführungs Kanäle zurückzuführen ist.

Damit scheiden diese beiden Erklärungen für die hohe Rückstreuintensität aus. Es ist trotzdem anzunehmen, daß dieser Effekt auf die besonderen Eigenschaften der Gitterführungsmethode bzw. von HOPG-Graphit zurückzuführen ist. Im Gegensatz zu TEM können mit dem Gitterführungseffekt Punktdefekte nachgewiesen werden. Deshalb ist es sehr wahrscheinlich, daß es sich um Punktdefekte handelt. Die Flußdichteprofile von

Abbildung 8 zeigen, daß für $\psi/\psi_1 \neq 0$ im Vergleich zu $\psi/\psi_1 = 0$ die Projektildichte in der Nähe der Atomketten größer ist. Deshalb tragen unter einem kleinen Einfallswinkel ψ (d.h. $\psi/\psi_1 \neq 0$) geringfügig verlagerte Atome stärker zur Rückstreuintensität bei als für $\psi = 0$ [167]. Im polykristallinen HOPG ist ψ/ψ_1 immer größer als Null, weshalb geringfügig aus ihrer Gitterposition verlagerte Atome verstärkt zur Rückstreuintensität beitragen. Dieser Effekt wird größer, wenn der kritische Winkel kleiner, d.h. die Analyseenergie größer wird. Dies bedeutet, geringfügig verlagerte Atome tragen bei höherer Analyseenergie sogar noch stärker zur Rückstreuintensität bei. Bei einer Analyseenergie von 1,5 MeV wird dies tatsächlich beobachtet, wie die Abbildung 41 zeigt. Dies ist ein Hinweis darauf, daß in HOPG sehr viele dieser Defekte vorhanden sind. Über die Entstehung dieser Defekte kann nur spekuliert werden. Man kann vermuten, daß eine lokale Umlagerung der Atome in der Nähe von Defekten (Zwischengitteratomen oder Leerstellen) stattfindet, die eine kleine Verlagerung vieler Gitteratome bewirkt. In einer zweidimensionalen Struktur wie der von Graphit, in der die stärksten Bindungen in einer Ebene liegen, ist dies sehr viel wahrscheinlicher als in einem dreidimensionalen Gitter, in dem einfache Defekte noch keine wesentliche Gitterverzerrung bewirken [47].

Gotoh et al. [87] beobachten an Graphitfasern schon bei sehr kleinen Fluenzen eine Zunahme des Ebenenabstandes mit TEM und Niwase et. al. [150] führen die Aufspaltung der Kristallite auf innere Spannungen zurück. Diese Spannungen und Verzerrungen, die letztendlich zur Aufspaltung der Kristallite führen, haben eine geringfügige Verlagerung bzw. Umordnung vieler Atome zur Folge. Diese Defekte werden im RBS-C Spektrum nachgewiesen.

Mit den vorhandenen Daten ist die starke Zunahme der Rückstreuintensität in HOPG zwar nicht eindeutig erklärbar. Es ist jedoch plausibel, daß diese eine Folge lokaler Umordnungen ist, die in Graphit um die Strahlenschäden (Leerstellen, Zwischengitteratome) herum entstehen.

Bei 295 K nimmt die Schädigung zunächst linear mit der Deuteriumfluenz zu, d.h. sie wächst proportional zur deponierten Energie. Aus dem linearen Anstieg der Schädigung für kleine Fluenzen (siehe Abbildung 41) kann die Schädigung pro Deuteriumprojektil berechnet werden. Tabelle 11 zeigt zusammenfassend die Schädigung pro Projektil für verschiedene Energien. In der Tabelle ist zusätzlich das Integral des nuklearen Energieverlusts angegeben. Für verschiedene Energien ist die Schädigung ungefähr proportional zum

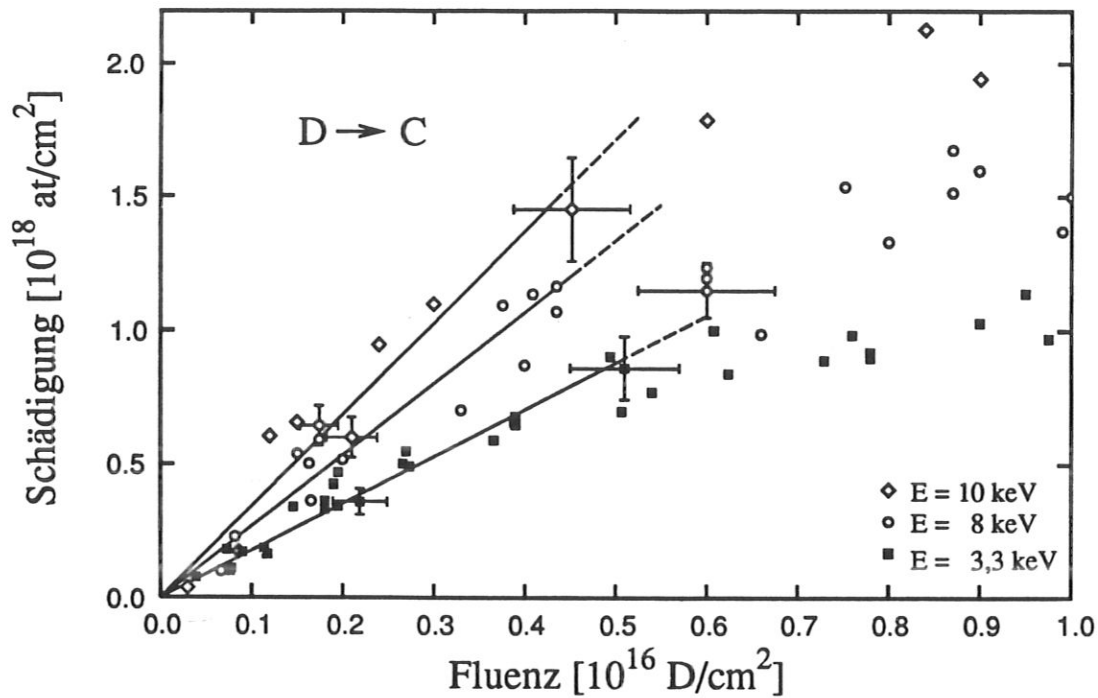


Abb. 41: Integral der Schädigung als Funktion der Deuteriumfluenz für verschiedene Ionenenergien im Bereich kleiner Fluenzen.

	3,3 keV	8 keV	10 keV
Schädigung pro Projektil	165 ± 50	265 ± 60	330 ± 80
deponierte nukleare Energie	840 eV	1180 eV	1270 eV

Tab. 11: Schädigung pro Deuteriumprojektil, zum Vergleich ist die in nuklearen Stößen deponierte Energie angegeben.

nuklearen Energieverlust. In kovalent gebundenen Festkörpern ist es sehr wahrscheinlich, daß auch der elektronische Energieverlust, zur Bildung von Defekten beiträgt [2]. Unter der Annahme, daß zusätzlich zum nuklearen Energieverlust ein Teil (10 %) des elektronischen Energieverlusts zu Defekten führt, wird der lineare Zusammenhang zwischen deponierter Energie und Schädigung besser. Dies ist ein Hinweis, daß in HOPG auch der elektronische Energieverlust zur Schädigung beiträgt.

Auch nach Implantation bei 573 K nimmt die Schädigung zunächst linear mit der Fluenz zu, bis sie im Maximum gesättigt ist. Allerdings wächst die Schädigung langsamer als bei 295 K, da ein Teil der Defekte schon während der Implantation ausheilt. Trotzdem zeigt der lineare Anstieg, daß auch bei dieser Temperatur die Schädigung proportional zur

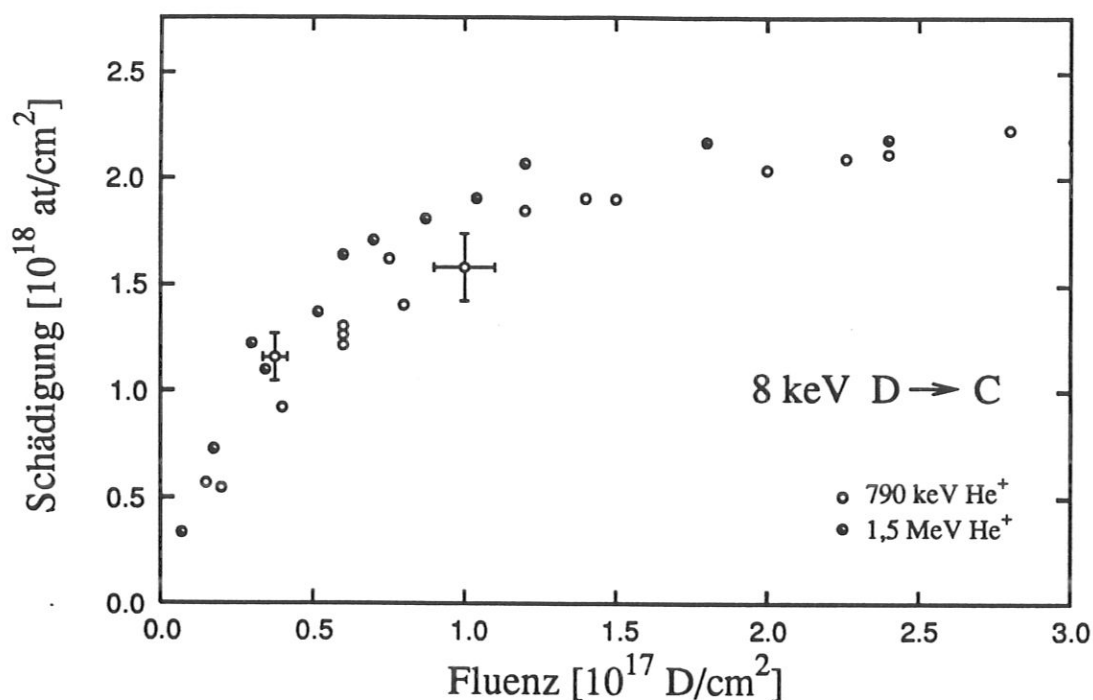


Abb. 42: Integral der Schädigung als Funktion der Deuteriumfluenz, berechnet aus RBS-C Spektren mit verschiedenen Analyseenergien.

D in HOPG, bei 8 keV	295 K	573 K 8	773 K
Schädigung pro Projektil < $4,0 \cdot 10^{16} \text{D/cm}^2$	300 ± 100	60 ± 20	6 ± 6
< $1,5 \cdot 10^{17} \text{D/cm}^2$			14 ± 7

Tab. 12: Schädigung pro Deuteriumprojektil (Durchschnitt aus allen Messungen) für verschiedene Proben temperaturen.

der deponierten Energie wächst.

Ein ganz anderes Verhalten ergibt sich nach der Implantation bei 773 K. Bei dieser Temperatur werden bei kleinen Fluenzen (bis $3 \cdot 10^{16} \text{D/cm}^2$) nur sehr wenige stabile Defekte erzeugt. Nimmt die Deuteriumfluenz zu, steigt die Schädigung stärker an, bis sie im Maximum gesättigt ist und im weiteren Verlauf ein Sättigungsverhalten beobachtet wird. Außerhalb der Sättigung kann die Zunahme der Schädigung in zwei Bereiche gegliedert werden. Bei kleinen Fluenzen ist die Schädigung sehr klein (bis $3 \cdot 10^{16} \text{D/cm}^2$), während bei höheren Fluenzen ($3,0 \cdot 10^{16} - 1,4 \cdot 10^{17} \text{D/cm}^2$) eine stärkere Schädigung erfolgt. Diese Zweiteilung kann dadurch erklärt werden, daß in beiden Fluenzbereichen verschiedene Prozesse für den Aufbau der Schädigung verantwortlich sind.

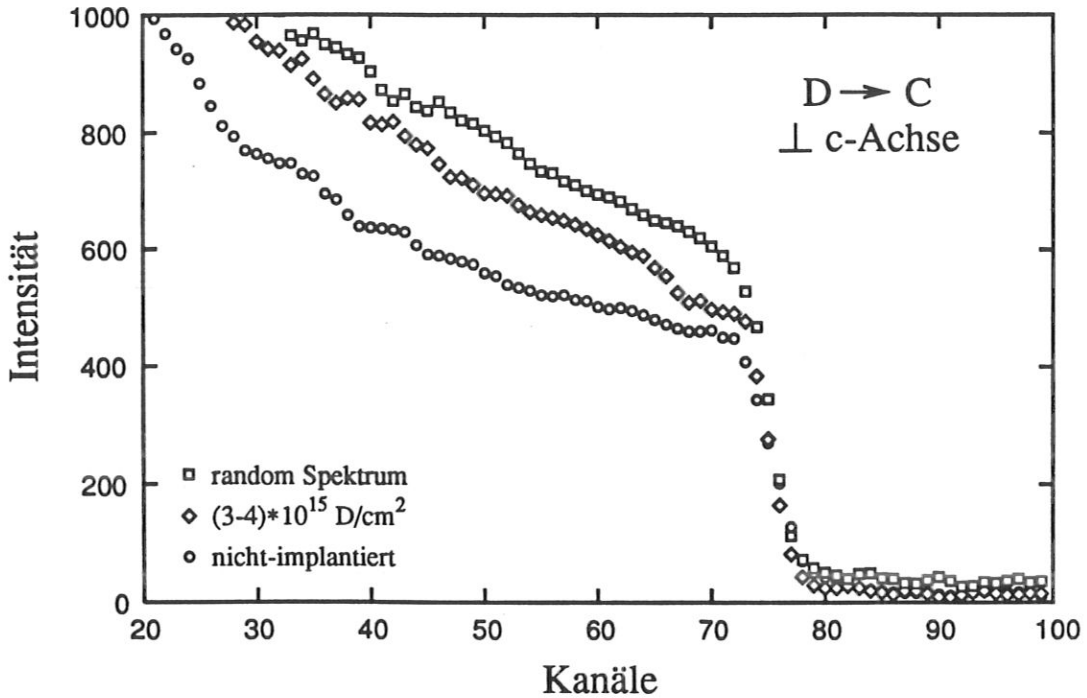


Abb. 43: Rückstreuungsspektren mit $790 \text{ keV } ^3\text{He}$ senkrecht zur c -Achse in HOPG-Graphit. Die Abbildung zeigt das Spektrum der nicht implantierten Probe, das Spektrum nach Implantation von $(3 - 4) \cdot 10^{15} \text{ D/cm}^2$ sowie ein random Spektrum.

Die durch Deuteriumimplantation in Graphit erzeugten Stoßkaskaden sind nicht sehr ausgeprägt, da auf angestoßene Gitteratome nicht genügend Energie übertragen wird, um viele Verlagerungen zu erzeugen. Bei kleinen Fluenzen, bei denen sich die einzelnen Stoßkaskaden noch nicht überlagern, entstehen deshalb vor allem Frenkeldefekte und kleine Defektcluster.

Bei höheren Temperaturen sind Zwischengitteratome sehr beweglich, sodaß ein Großteil der Defekte rekombiniert. Ein kleiner Teil lagert sich zu ausgedehnten Defekten zusammen, die auch bei 773 K stabil sind. Die Bildung größerer Defekte bei höheren Implantationstemperaturen wurde von Niwase et al. [149] mit TEM beobachtet. Während bei niedrigen Temperaturen viele kleine Defekte gebildet werden, entstehen bei höheren Temperaturen weniger, aber dafür ausgedehntere Defekte [149]. Sind genügend dieser stabilen Defekte gebildet, gewinnt deren Wachstum durch den Einfang beweglicher Defekte an Bedeutung für die Bilanz der Strahlenschäden. In diesem Fall wächst die Schädigung nicht mehr linear mit der Fluenz, da die Zunahme sowohl von der deponierten Energie als auch von der Anzahl der vorhandenen Defekte abhängt.

Zusätzliche Informationen über die in HOPG-Graphit gebildeten Defekte geben RBS-C

Spektren senkrecht zur *c*-Achse. Abbildung 43 zeigt Rückstreuenspektren einer implantierten Probe, zusammen mit dem Spektrum der nicht implantierten Probe. Der Analysestrahl ist in diesem Fall parallel zu den Ebenen des Graphitgitters ausgerichtet. Im Spektrum der implantierten Probe ist eine Zunahme der Rückstreuintensität infolge der Schädigung zu erkennen, allerdings tritt dabei kein Intensitätsmaximum auf. Dies zeigt, daß die erzeugten Defekte überwiegend einen Übergang von *geführten* auf *nicht geführte* Bahnen zur Folge haben und nur wenig zur direkten Rückstreuung beitragen, d.h. der *Dechanneling Faktor* σ_{DC} ist groß, während der Streufaktor *f* klein ist. Ein solches Verhalten ist typisch für Versetzungen, wie sie durch Zwischengitterebenen erzeugt werden [75]. Mit der Bildung von Zwischengitterebenen wird auch das Schwellen von Graphit bei der Neutronenbestrahlung erklärt [103]. Da die minimale Rückstreuintensität für Gitterführung senkrecht zur *c*-Achse sehr hoch ist, kann dieses Resultat bei höheren Deuteriumfluenzen nicht bestätigt werden. Deshalb kann dieses Ergebnis nur als zusätzlicher Hinweis für die Bildung von Zwischengitterebenen betrachtet werden.

Im Gegensatz zu Graphit ist SiC amorph, wenn die Rückstreuintensität des *random* Spektrums erreicht ist. Dies wurde von verschiedenen Autoren mit TEM gezeigt [128, 56, 42]. Insbesondere für die Implantation von Wasserstoff bei 95 K und 295 K konnten Choyke et al. [42] zeigen, daß SiC amorph ist, wenn im Rückstreuenspektrum die *random* Intensität erreicht ist. Sowohl Choyke et al. [42] wie auch Bohn et al. [29] schließen eine Amorphisierung von SiC bei höheren Temperaturen (800 K bzw. 1023 K) aus. In beiden Arbeiten werden Rückstreuenspektren gezeigt, in denen noch keine *random* Intensität erreicht ist. Es bleibt jedoch unklar, ob die *random* Intensität auch mit einer höheren Implantationsfluenz nicht erreicht werden kann. Choyke et al. [42] zeigen das Ausbleiben der Amorphisierung zusätzlich mit TEM, allerdings auch ohne die maximale Wasserstofffluenz anzugeben. Die Ergebnisse der vorliegenden Arbeit zeigen, daß auch bei 773 K Implantation die *random* Intensität im RBS-C Spektrum erreicht werden kann. Deshalb aufgrund der Ergebnisse von Choyke et al. nicht geschlossen werden, daß auch in diesem Fall keine Amorphisierung vorliegt.

Wie in Graphit wächst die Schädigung in SiC bei 295 K zunächst linear mit der Deuteriumfluenz. Da SiC im Gegensatz zu Graphit amorph ist, wenn die *random* Intensität erreicht ist, kann aus dem linearen Anstieg die Anzahl der pro Deuteriumatom verlagerten Siliziumatome berechnet werden. Diese ist in Tabelle 13 angegeben. Die Anzahl von 9,5

790 keV ^3He ; D in SiC	12 keV 295 K	12 keV 773 K
Schädigung pro Projektil	$< 1,3 \cdot 10^{17} \text{D/cm}^2$	$1,2 \pm 0,4 \text{ Si-At.}$
	$< 3,0 \cdot 10^{17} \text{D/cm}^2$	$9,5 \pm 1,5 \text{ Si-At.}$
	$> 3,0 \cdot 10^{17} \text{D/cm}^2$	$2,9 \pm 0,7 \text{ Si-At.}$
Verlagerungen TRIM	25 eV	$1,0 \pm 0,5 \text{ Si-At.}$
	13 Si-Atome	
	11 C-Atome	
nukleare deponierte Energie	1200 eV	

Tab. 13: Anzahl der verlagerten Siliziumatome pro einfallendem Deuteriumprojektil für verschiedene Probertemperaturen.

verlagerten Siliziumatomen läßt sich nicht ohne weiteres mit den bisher in der Literatur angegebenen Werten von 5 Verlagerungen für 80 keV H^+ [189] bzw. 20 für 10 keV D^+ [144] vergleichen. Für den Vergleich der Schädigung durch Wasserstoff- und Deuteriumionen ist in beiden Fällen die Schädigung in Relation zum nuklearen Energieverlust zu setzen, wenn man annimmt, daß nur dieser zu Defekten führt. Das Integral des nuklearen Energieverlusts beträgt für 80 keV H^+ 890 eV und für 12 keV D^+ 1200 eV. Da der nukleare Energieverlust für 80 keV H^+ kleiner ist als für 12 keV D^+ ist es verständlich, daß in diesem Fall weniger Defekte entstehen. Nach der Gleichung von Kinchin und Pease [107] ergibt sich in den beiden Fällen eine Verlagerungsenergie E_d von 45 eV bzw. 30 eV, wenn man annimmt, daß etwa gleich viele Kohlenstoff- und Siliziumatome verlagert werden. Damit sind beide Ergebnisse etwa vergleichbar, während die 20 Verlagerungen für 10 keV D^+ insbesondere dann zu groß sind, wenn man die niedrigere Energie in Betracht zieht. Eine Verlagerungsenergie von 30 eV stimmt auch gut mit dem von Hart et al. [92] angegebenen Wert von 17–30 eV überein, der aus der Schädigung mit Antimon bestimmt wurde. Auch TRIM.SP liefert mit einer Verlagerungsenergie von 25 eV (nach Hart et al. [92]) ein vergleichbares Ergebnis (siehe Tabelle 13). Der Wert der Verlagerungsenergie in SiC liegt zwischen den Werten von Silizium (13–14 eV [124]) und Diamant (80 eV [44]), was aufgrund der strukturellen Übereinstimmung plausibel ist.

Bei 295 K und kleinen Deuteriumfluenzen werden zunächst Frenkeldefekte und andere kleine Defekte erzeugt, während ausgehte Defekte auf Grund der wenig ausgeprägten Stoßkaskaden nicht entstehen. Sowohl in Graphit wie auch in SiC bestätigen die Ausheilexperimente die Bildung von Punktdefekten und kleinen Defektclustern bei kleinen

Fluenzen. Diese heilen in SiC bis 1073 K fast vollständig und in Graphit bis 773 K zu einem großen Teil aus. In Graphit lösen sich bei 773 K kleinere Defektcluster auf [98], worauf die Abnahme der Schädigung bei dieser Temperatur zurückzuführen ist. Auch in SiC heilen bei dieser Temperatur vorwiegend kleine Defektcluster aus, während ausgedehnte Defekte stabil sind.

SiC ist amorph, wenn die Rückstreuintensität des *random* Spektrums erreicht ist. Deshalb findet in diesem Fall nur ein langsames epitaktisches Ausheilen aus ungeschädigten Bereichen statt. Im amorphen Bereich wird mit RBS-C kein Ausheilen der Schädigung beobachtet. Auf Grund der RBS-C Ergebnisse kann jedoch nicht ausgeschlossen werden, daß das SiC in diesem Bereich polykristallin rekristallisiert. Elektronenmikroskopische Untersuchungen ergeben bis 1173 K jedoch keine Hinweise für die Bildung eines polykristallinen Materials [185].

Bei 773 K Implantation verhält sich SiC ähnlich wie Graphit. Anders als bei 295 K steigt die Schädigung bei dieser Temperatur nicht linear mit der Fluenz, vielmehr läßt sich der Verlauf der Schädigung wieder in zwei Bereiche gliedern. Bei kleinen Fluenzen (etwa bis $1 \cdot 10^{17} \text{D}/\text{cm}^2$) werden nur wenige stabile Defekte erzeugt, während bei höheren Fluenzen die Schädigung schneller ansteigt, bis sie gesättigt ist.

Während bei kleinen Fluenzen nur die Bildung stabiler Defekte zur Schädigung beiträgt, wächst die Schädigung bei hohen Fluenzen vor allem durch den Einfang mobiler Defekte. Die Entstehung ausgedehnter Defekte bei 773 K wird durch Ausheilexperimente bestätigt. Nach 295 K Implantation heilen in SiC Strahlenschäden unterhalb der Amorphisierung schon bei 1073 K aus. Im Gegensatz dazu heilen Strahlenschäden nach 773 K Implantation bis 1073 K überhaupt nicht aus, es findet auch keine epitaktische Rekristallisation statt. Dies bedeutet, die bei dieser Temperatur gebildeten Defekte sind sehr stabil. Es muß sich deshalb im Gegensatz zu den Defekten nach 295 K Implantation um ausgedehnte Defektcluster handeln. Dies zeigt, daß bei 773 K auch schon bei geringer Schädigung ausgedehnte Defektcluster vorhanden sind. Diese entstehen aufgrund der größeren Beweglichkeit kleiner Defekte, die sich dadurch zusammenlagern können [148]. Durch fortschreitendes Wachstum werden diese Defekte immer größer und stabiler. Man kann auch vermuten, daß es sich bei diesen Defekten um Blasen handelt, in denen sich der Wasserstoff sammelt. Mit SEM konnten jedoch in keiner Probe bis zu einer maximalen Auflösung von $0,2 \mu\text{m}$ keine Blasen nachgewiesen werden. Trotzdem kann nicht vollständig ausgeschlossen wer-

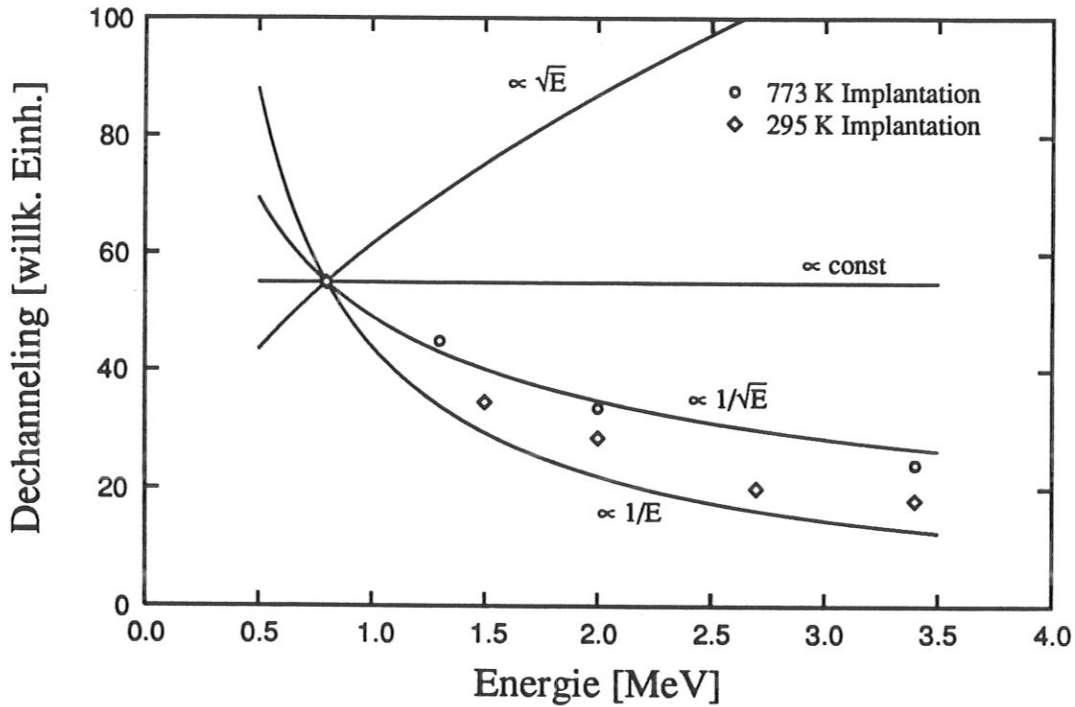


Abb. 44: Integral von σ_{DC} über alle Defekte als Funktion der Analyseenergie für 295 K und 773 K Implantationstemperatur.

den, daß sehr kleine Blasen entstehen, die mit SEM nicht sichtbar sind. Auch die Bildung von polykristallinem SiC kann aufgrund der RBS-C Untersuchungen nicht ausgeschlossen werden.

Um die entstandenen Defekte zu unterscheiden, wurde die Energieabhängigkeit des *Dechanneling Faktors* der Defekte untersucht (siehe Tabelle 7). Abbildung 44 zeigt das Integral von σ_{DC} über alle Defekte. Das Integral von σ_{DC} zeigt bei beiden Implantationstemperaturen eine sehr ähnliche Energieabhängigkeit zwischen $\frac{1}{E}$ und $\frac{1}{\sqrt{E}}$. Die Energieabhängigkeit bei 295 K zeigt, daß in diesem Fall vor allem Punktdefekte gebildet werden, für die der *Dechanneling Faktor* σ_{DC} eine Energieabhängigkeit von $\frac{1}{\sqrt{E}}$ hat. Die Defektdichte in dieser Probe war jedoch sehr hoch, weshalb die Energieabhängigkeit nahe $1/E$ (für amorphe Schicht) liegt. Die bei 773 K implantierte Probe zeigt einen sehr ähnlichen Verlauf, die Energieabhängigkeit liegt hier jedoch näher bei $1/\sqrt{E}$. Auch in dieser Probe lag eine sehr hohe Schädigung, mit einer Rückstreuintensität nahe der *random* Intensität, vor. Da bei dieser Implantationstemperatur Punktdefekte ausgeschlossen werden können, werden bei 773 K auch Defekte gebildet, für die σ_{DC} mit wachsender Energie zunimmt oder zumindest konstant bleibt. Dies gilt für Stapelfehler, Versetzungen, aber auch für

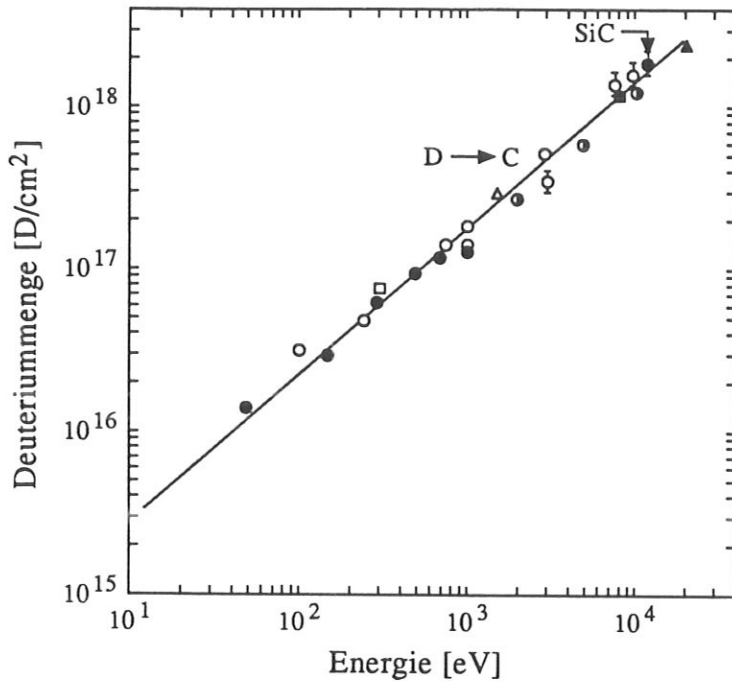


Abb. 45: Sättigungsmenge von Deuterium in Graphit nach Implantation bei 295 K für verschiedene Deuteriumenergien (mit Fehlerbalken: Ergebnisse dieser Arbeit, \circ \bullet : [191], \square : [68] \blacktriangle : [70], \triangle [52], \circ : [37]).

Gasblasen (siehe Tabelle 7). Man kann jedoch ausschließen, daß die Schädigung bei 773 vorwiegend aus Stapelfehler, Versetzungen oder Gasblasen besteht.

5.2 Deuteriumeinfang

Die bei großen Fluenzen gemessenen Sättigungsmengen für Deuterium sind in den Tabellen 14, 15 und 16 angegeben. Zusätzlich ist die Sättigungsmenge, die sich aus der von Staudenmaier et al. [191] angegebenen Formel ableitet, sowie die Fluenz, bis zu der das gesamte Deuterium zurückgehalten wird, angegeben.

Die in HOPG-Graphit gemessenen Sättigungsmengen stimmen sehr gut mit den berechneten überein. In Abbildung 45 sind die Sättigungsmengen zusammen mit bisher veröffentlichten Ergebnissen gezeigt. Die Gerade zeigt die von Staudenmaier et al. [191] abgeleitete Fitfunktion. Es zeigt sich, daß sich HOPG-Graphit, zumindest bezüglich seines Rückhaltevermögens für Deuterium, gleich verhält wie andere Graphite.

Zur Berechnung der maximalen Deuteriumkonzentration ist die Implantationstiefe des Deuteriums notwendig. Abbildung 46 zeigt Tiefenprofile des implantierten Deuteriums in

	3,3 keV	8 keV	10 keV
100% D-Einfang bis	$0,20 * 10^{18} \text{D/cm}^2$	$0,75 * 10^{18} \text{D/cm}^2$	$0,85 * 10^{18} \text{D/cm}^2$
Sättigungsmenge	$0,38 * 10^{18} \text{D/cm}^2$	$1,15 * 10^{18} \text{D/cm}^2$	$1,30 * 10^{18} \text{D/cm}^2$
Sättigungsmenge nach [191]	$0,51 * 10^{18} \text{D/cm}^2$	$1,14 * 10^{18} \text{D/cm}^2$	$1,39 * 10^{18} \text{D/cm}^2$
max. Reichweite (TRIM.SP)	900 Å	2250 Å	2350 Å
D/C Verhältnis	$0,37 \pm 0,05$	$0,45 \pm 0,06$	$0,49 \pm 0,07$

Tab. 14: Sättigungsmenge und Sättigungskonzentration von Deuterium in Graphit nach 3,3–10 keV Deuteriumimplantation sowie die Reichweiten des Deuteriums, berechnet mit TRIM.SP.

	295 K	573 K	773 K
100% D-Einfang bis	$0,75 * 10^{18} \text{D/cm}^2$	$0,35 * 10^{18} \text{D/cm}^2$	$0,15 * 10^{18} \text{D/cm}^2$
Sättigungsmenge	$1,15 * 10^{18} \text{D/cm}^2$	$0,50 * 10^{18} \text{D/cm}^2$	$0,25 * 10^{18} \text{D/cm}^2$
D/C Verhältnis	$0,45 \pm 0,06$	$0,14 \pm 0,02$	$0,09 \pm 0,01$
D/C Verhältnis nach [51]	0,49	0,30	0,08

Tab. 15: Sättigungsmenge und Sättigungskonzentration von Deuterium in Graphit nach 8 keV Implantation für verschiedene Proben temperaturen.

	295 K	773 K
100% D-Einfang bis	$0,80 * 10^{18} \text{D/cm}^2$	$0,35 * 10^{18} \text{D/cm}^2$
Sättigungsmenge	$1,40 * 10^{18} \text{D/cm}^2$	$0,80 * 10^{18} \text{D/cm}^2$
Sättigungsmenge nach [191] in C	$1,64 * 10^{18} \text{D/cm}^2$	
in Si	$0,64 * 10^{18} \text{D/cm}^2$	
max. Reichweite (TRIM.SP)	2750 Å	2750 Å
D/Wirtsatom Verhältnis	$0,52 \pm 0,07$	$0,30 \pm 0,04$
D/Wirtsatom Verhältnis nach [144]	0,50	

Tab. 16: Sättigungsmenge und Sättigungskonzentration von Deuterium in SiC nach 12 keV Implantation für verschiedene Proben temperaturen.

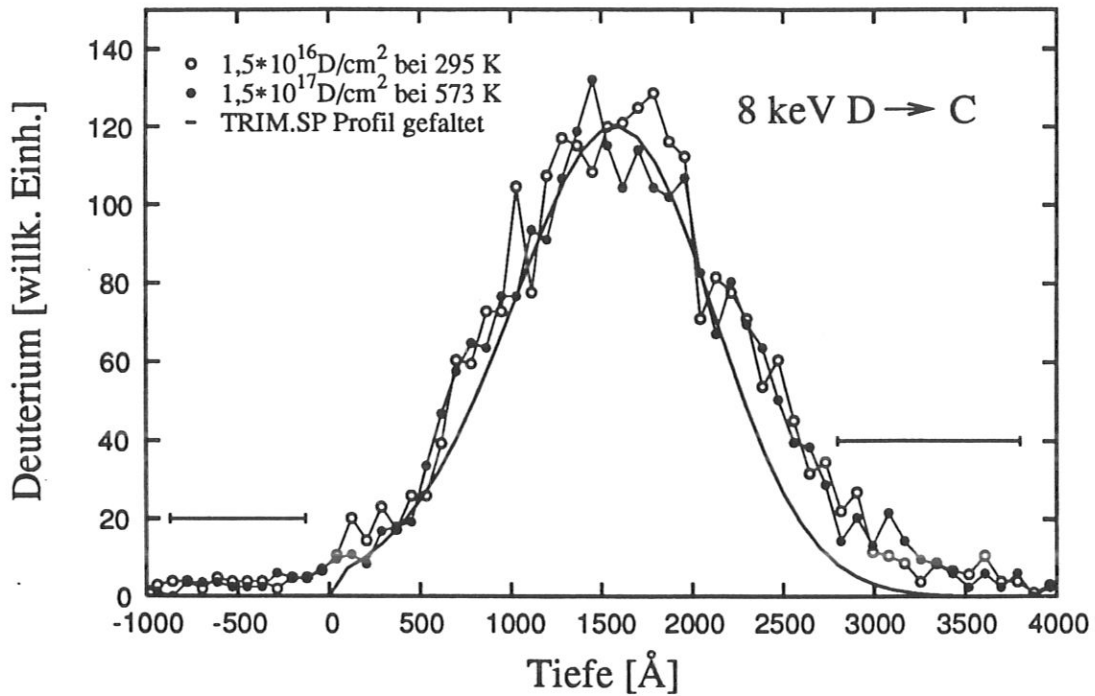


Abb. 46: Deuterium-Tiefenprofile in HOPG-Graphit nach Implantation bei verschiedenen Proben-temperaturen. Das mit TRIM.SP berechnete Profil ist mit der Auflösung der Meßapparatur gefaltet.

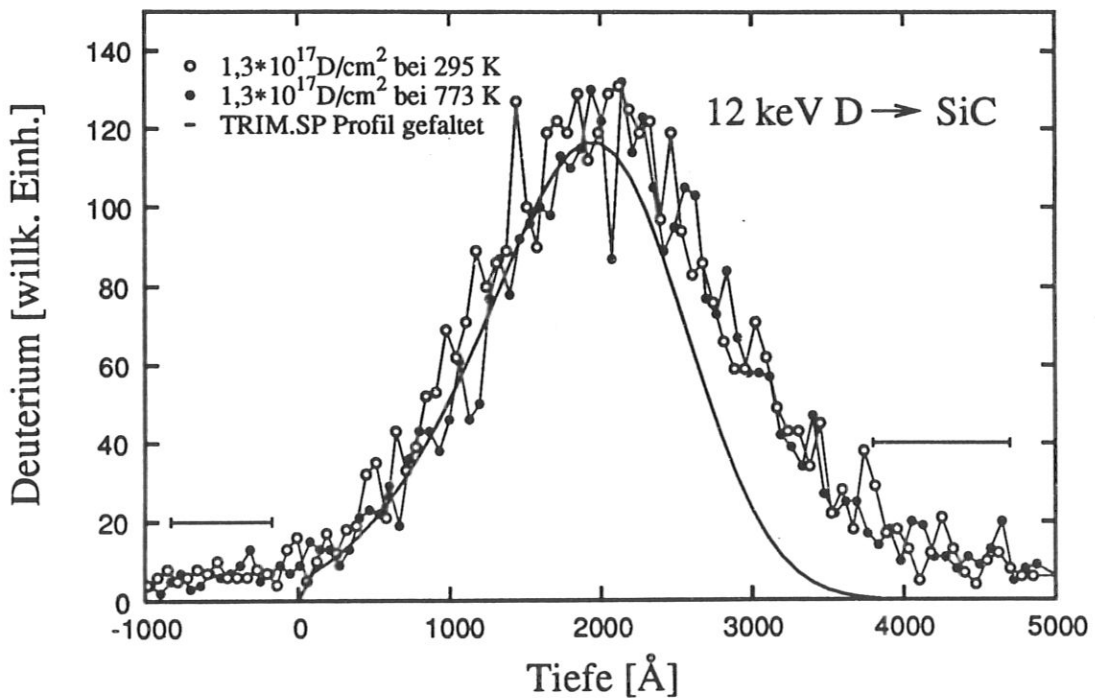


Abb. 47: Deuterium-Tiefenprofile in SiC nach Implantation bei verschiedenen Proben-temperaturen. Das mit TRIM.SP berechnete Profil ist mit der Auflösung der Meßapparatur gefaltet.

Graphit sowohl nach Implantation bei 295 K als auch bei 573 K. Das gemessene Tiefenprofil für 295 K Implantation ist mit einem Faktor 10 multipliziert, um die Profile besser vergleichen zu können. Für beide Temperaturen liegen die Deuteriumfluenzen in dem Bereich, in dem das gesamte Deuterium zurückgehalten wird. Die Abbildung zeigt, daß die Tiefenverteilung des Deuteriums für beide Implantationstemperaturen gleich ist. In Abbildung 47 sind Tiefenprofile des Deuteriums in SiC bei verschiedenen Implantationstemperaturen dargestellt. Auch in SiC ergibt sich im Rahmen der Meßgenauigkeit kein Unterschied in der Deuteriumverteilung.

Neben den gemessenen Tiefenprofilen sind in den Abbildungen mit TRIM.SP gerechnete Tiefenverteilungen gezeigt, die mit der Auflösung der Meßapparatur gefaltet sind. Die Abbildungen zeigen, daß sowohl in Graphit als auch in SiC die gemessenen Tiefenprofile gut mit den mit TRIM.SP berechneten übereinstimmen. Obwohl TRIM.SP die kristalline Struktur nicht berücksichtigt, beschreibt es die Tiefenverteilung des Deuteriums bei dieser Energie sehr gut. Vergleiche von Monte-Carlo-Simulationen, die die kristalline Struktur berücksichtigen (MARLOWE), bzw. nicht berücksichtigen (TRIM), haben gezeigt, daß beide in diesem mittleren Energiebereich nur geringfügig verschiedene Tiefenverteilungen liefern [130]. Die Übereinstimmung der Meßergebnisse mit den Resultaten von TRIM.SP bedeutet, daß das Deuterium am dem Ort, an dem es zur Ruhe kommt, eingefangen wird und auch bei der höheren Temperatur keine merkliche Diffusion stattfindet.

Die in den Tabellen 14, 15 und 16 angegebenen Sättigungskonzentrationen des Deuteriums sind mit Hilfe der maximalen Reichweiten der TRIM.SP Tiefenverteilungen berechnet. Zum Vergleich sind die von Doyle et al. [51] für Graphit und von Nagata et al. [144] für SiC angegeben Werte eingetragen, mit denen die Ergebnisse sehr gut übereinstimmen.

Die Deuteriumsättigungskonzentrationen in Graphit und SiC sind bei 295 K etwa gleich. Im Gegensatz dazu ist die Sättigungskonzentration bei 773 K in SiC etwa drei mal so groß wie in Graphit. Dies stimmt mit der Tatsache überein, daß auch die thermische Desorption in SiC erst bei einer höheren Temperatur einsetzt als in Graphit. Trotzdem stehen beide Ergebnisse im Gegensatz zur höheren Dissoziationsenergie der C-H Bindung (4,56 eV in Methan [48]) gegenüber der Si-H Bindung (3,90 eV in Silan [48]).

In den Abbildungen 49 und 48 ist die in HOPG und SiC zurückgehaltene Deuteriummenge als Funktion der Fluenz für verschiedene Probertemperaturen aufgetragen. Die Ergebnisse in Graphit bestätigen den von verschiedenen Autoren [191, 37, 176, 112] gemess-

senen linearen Verlauf der zurückgehaltenen Deuteriummenge. Sie zeigen, daß schon sehr kleinen Fluenzen ($1 \cdot 10^{15} \text{D/cm}^2$) für Implantationstemperaturen von 295 K bis 773 K das gesamte Deuterium zurückgehalten wird.

Auch in SiC, für das nur wenige Messungen der zurückgehaltenen Deuteriummenge existieren [192, 42], kann zum ersten Mal gezeigt werden, daß über einen weiten Fluenzbereich ($1 \cdot 10^{15} - 5 \cdot 10^{17} \text{D/cm}^2$), sowohl bei 295 K, als auch bei 773 K, das gesamte Deuterium zurückgehalten wird.

Vergleicht man den Verlauf des implantierten Deuteriums mit dem Verlauf der Strahlenschäden, so gibt es keine Anzeichen dafür, daß zuerst ein gewisse Anzahl von Defekten vorhanden sein muß, bevor das Deuterium vollständig zurückgehalten werden kann. Bei 295 K werden wesentlich mehr Defekte gebildet als Deuterium implantiert wird. Deshalb ist für Energien über 1 keV das Deuteriumrückhaltevermögen bei dieser Temperatur unabhängig von der Schädigung der Probe vor der Implantation.

Im Gegensatz dazu entstehen bei 773 K und kleinen Deuteriumfluenzen etwa gleich viele stabile Defekte, wie Deuterium zurückgehalten wird. Trotzdem wird auch in diesem Fall sowohl in SiC als auch in Graphit das gesamte Deuterium zurückgehalten. Für dieses Verhalten sind zwei Erklärungen möglich. Entweder erfolgt der Deuteriumeinfang unabhängig von der Schädigung des Materials, da es sehr unwahrscheinlich ist, daß das implantierte Deuteriumatom einen der wenigen stabilen Defekt findet und an diesem eingefangen wird. Andererseits werden bei 773 K ebenso viele Gitteratome verlagert wie bei 295 K, von denen die meisten jedoch rekombinieren. Wenn nur diejenigen Defekte nicht ausheilen, die durch ein gebundenes Deuteriumatom stabilisiert werden, ergibt sich etwa die gleiche Defektkonzentration wie Deuteriumkonzentration. Dies wird bei kleinen Fluenzen auch tatsächlich beobachtet. In beiden Fällen wird das Deuterium an der Stelle zurückgehalten, an der es zur Ruhe kommt, was auch tatsächlich gemessen wird.

Nimmt man andererseits an, daß das Deuterium solange in der Probe diffundiert, bis es an einen Defekt gebunden wird, dann wird bei höherer Temperatur wegen der größeren Diffusion und der geringeren Schädigung ein verbreiteres und eventuell verschobenes Deuteriumprofil erwartet. Dies wird weder in Graphit noch in SiC beobachtet, weshalb diese Möglichkeit ausgeschlossen werden kann.

Die Abbildungen 50 und 51 zeigen Tiefenprofile der Strahlenschäden in SiC nach Implantation bei 295 K und 773 K. In beiden Fällen sind die Deuteriumfluenzen so gewählt,

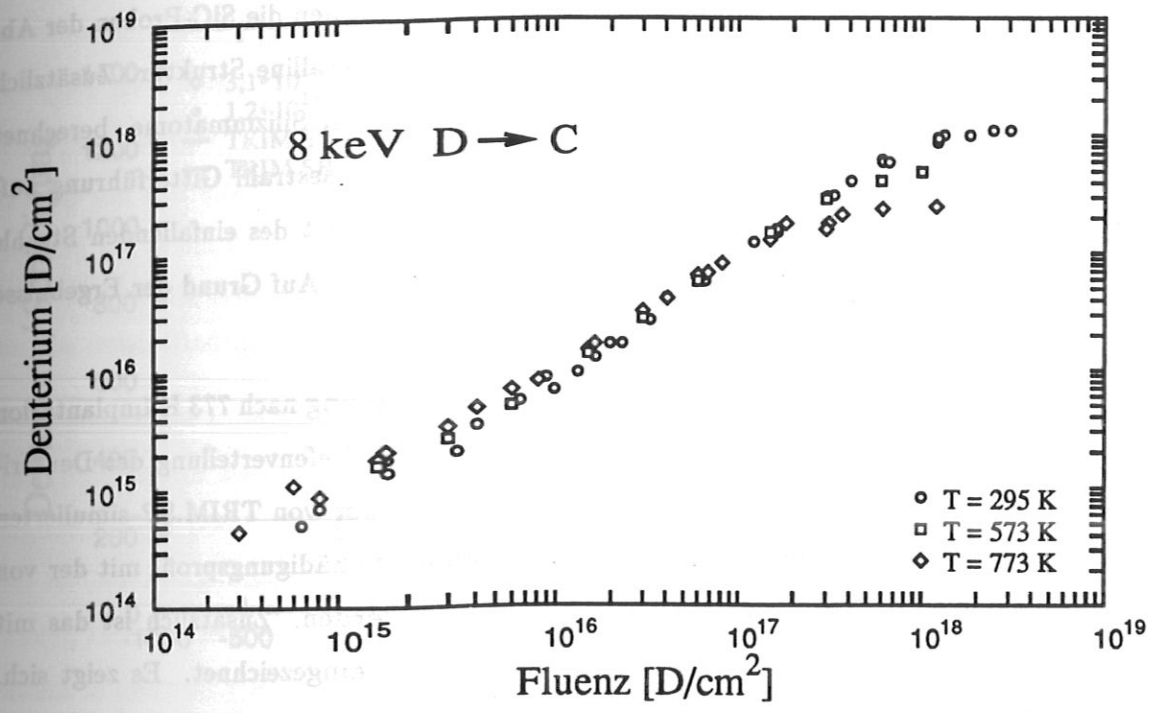


Abb. 48: Implantierte Deuteriummenge in HOPG-Graphit als Funktion der Fluenz für verschiedene Probertemperaturen.

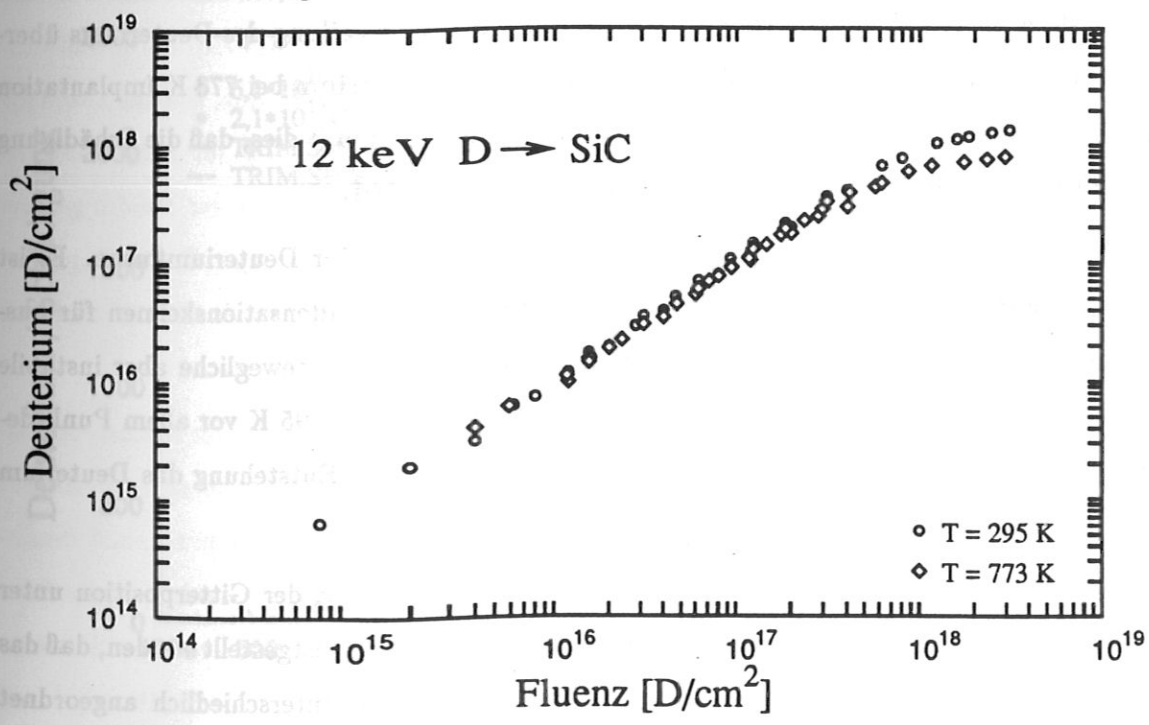


Abb. 49: Implantierte Deuteriummenge in SiC als Funktion der Fluenz für verschiedene Probertemperaturen.

daß das Maximum der Schädigung ungefähr gleich ist. Während die Schädigungsprofile in Abbildung 50 von stark geschädigten Proben stammen, haben die SiC-Proben der Abbildung 51 auch im Maximum der Schädigung noch eine kristalline Struktur. Zusätzlich sind Tiefenverteilungen des Deuteriums sowie der verlagerten Siliziumatome, berechnet mit TRIM.SP, eingezeichnet. Da für den einfallenden Analysestrahl Gitterführung auftritt, wurde zur Berechnung der Tiefenskala der Energieverlust des einfallenden Strahls mit 75 % des Energieverlusts in amorphem SiC angenommen. Auf Grund der Ergebnisse an Silizium ist dies ein plausibler Wert [60].

Beide Abbildungen zeigen, daß das Maximum der Schädigung nach 773 K Implantation tiefer liegt und sehr viel schmaler ist als bei 295 K. Da die Tiefenverteilung des Deuteriums bei beiden Temperaturen gleich ist und sehr gut mit der von TRIM.SP simulierten übereinstimmt (siehe Abbildung 47), kann das gemessene Schädigungsprofil mit der von TRIM.SP simulierten Deuteriumverteilungen verglichen werden. Zusätzlich ist das mit TRIM.SP berechnete Profil der verlagerten Siliziumatome eingezeichnet. Es zeigt sich, daß die gemessene Schädigungsverteilung nach 295 K Implantation mit dem gerechneten Profil der verlagerten Siliziumatome sehr gut übereinstimmt. Im Gegensatz dazu stimmt das Profil nach 773 K Implantation besser mit der Tiefenverteilung des Deuteriums überein. Dies bestätigt die Annahme, daß das implantierte Deuterium bei 773 K Implantation eine Stabilisierung der Strahlenschäden bewirkt. Außerdem zeigt dies, daß die Schädigung bei 295 K durch den nuklearen Energieverlust bestimmt wird.

Bei 773 K steigt die Schädigung jedoch nicht linear mit der Deuteriumfluenz. Es ist daher anzunehmen, daß der Wasserstoff zur Bildung von Kondensationskeimen für ausgedehnte Defekte führt. Diese fangen, wie bereits beschrieben, bewegliche aber instabile Defekte ein. Nach dem bisher entwickelten Bild, entstehen bei 295 K vor allem Punktdefekte, während bei 773 K nur ausgedehnte Defekte, zu deren Entstehung das Deuterium beiträgt, überleben.

Es stellt sich die Frage, wie die Ergebnisse zur Bestimmung der Gitterposition unter diesen Voraussetzungen erklärt werden können. Zunächst kann festgestellt werden, daß das Deuterium bei beiden Implantationstemperaturen im Gitter unterschiedlich angeordnet ist. Während bei 295 K eine Ordnung des Deuteriums im Gitter festzustellen ist, ist es bei 773 K ungeordnet gebunden. Da das Deuterium bei 773 K zur Stabilisierung der Defekte beiträgt, ist zumindest ein Teil an Defekten gebunden. Bei diesen Defekten handelt es sich

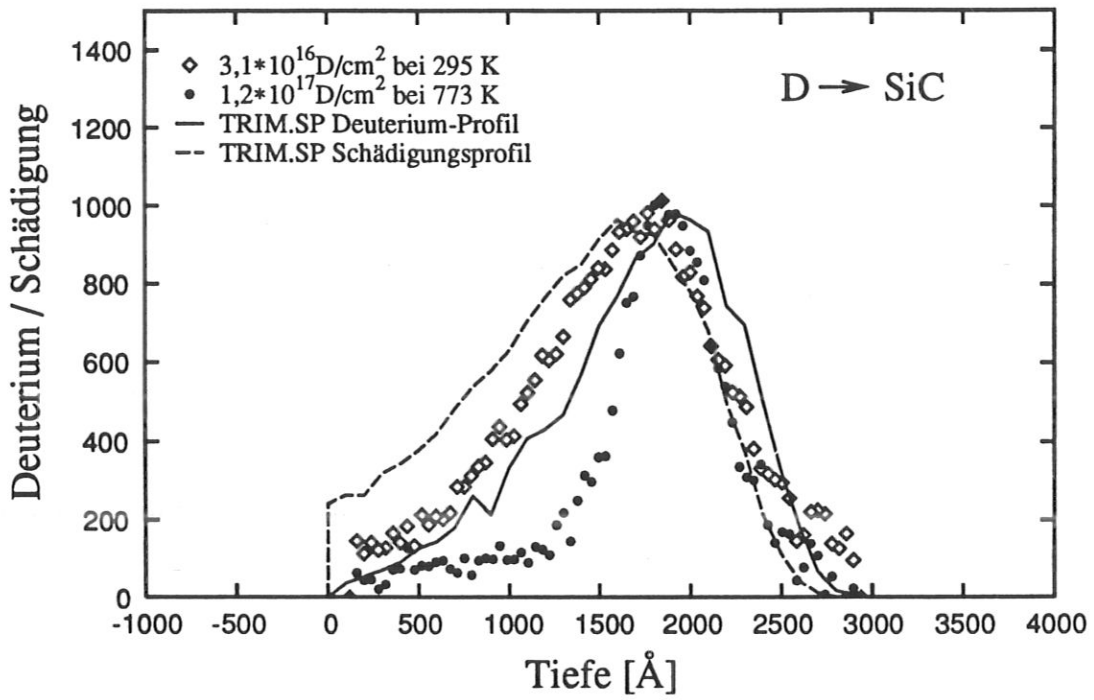


Abb. 50: Tiefenverteilung der verlagerten Siliziumatome nach Implantation bei 295 K und 773 K Proben temperatur und geringer Schädigung.

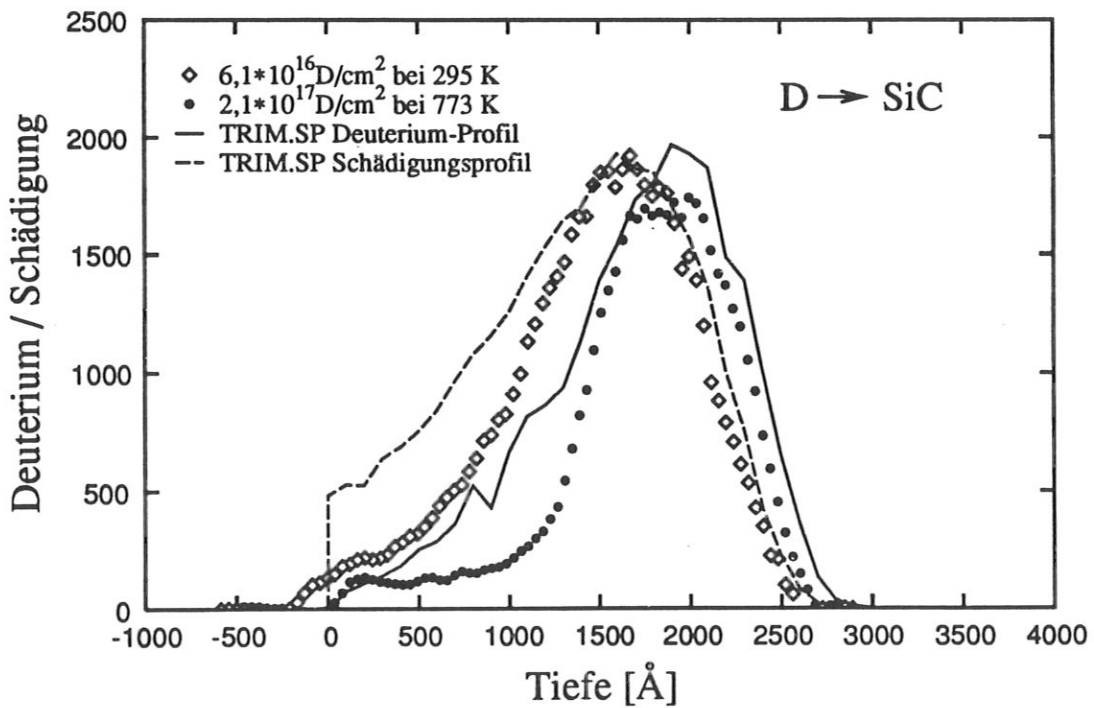


Abb. 51: Tiefenverteilung der verlagerten Siliziumatome nach Implantation bei 295 K und 773 K Proben temperatur und großer Schädigung.

jedoch um ausgedehnte Defekte, wie ihr Ausheilverhalten zeigt. Innerhalb eines solchen ausgedehnten Defektkomplexes zeigt das keine Orientierung im SiC-Gitter.

Anders verhält es sich nach Implantation bei 295 K. Bei dieser Temperatur zeigt das Deuterium eine Ordnung im SiC-Gitter. Der sehr kleine Effekt in der Winkelabhängigkeit der Protonenintensität läßt drei mögliche Erklärungen zu. Erstens kann sich nur ein Teil des Deuteriums auf regelmäßigen Gitterpositionen befinden, zweitens kann es auf mehrere regelmäßige Gitterpositionen verteilt sein, oder es befindet sich als dritte Möglichkeit nicht genau auf einer Gitterposition, sondern ist leicht von dieser verlagert.

Bisher konnte in TiC eine regelmäßige Anordnung des Deuteriums im Kristallgitter nachgewiesen werden [146]. In TiC nimmt das Deuterium einen freien Kohlenstoffgitterplatz ein. Die Ordnung des Deuteriums in TiC ist umso größer, je mehr Kohlenstoffgitterplätze im Kristallgitter von nicht stöchiometrischem TiC frei bleiben. In TiC ist der Effekt sehr viel deutlicher als in SiC. Im Gegensatz zu SiC, das zu den kovalent gebundenen Karbiden zählt, wird TiC zu den metallischen Karbiden, mit überwiegend metallischem Bindungscharakter, gerechnet [94]. In diesem Fall kann man erwarten, daß auch die Bindung des Deuteriums im Gitter überwiegend metallischen Charakter hat, während in SiC der kovalente Charakter der Bindung vorherrscht. In TiC zeigt sich der metallische Bindungscharakter auch in der schwächeren Bindung des Deuteriums, die im Desorptionsverhalten sichtbar wird [52]. Eine starke kovalente Bindung hat zur Folge, daß das Deuterium nicht genau auf einem Gitterplatz, sondern, entsprechend der Bindungslänge der C-H bzw. Si-H Bindung, etwas näher beim Bindungspartner liegt. Dadurch ragt es in den Kanal für die Gitterführung. Aus diesem Grund ist der Effekt in SiC, ähnlich wie in Silizium [13, 15, 16], nicht so deutlich wie in TiC [145].

Die geringe Breite des Minimums der Protonenausbeute gegenüber der Rücksteuintensität zeigt, daß das Deuterium entlang der $\langle 100 \rangle$ Achse nicht genau in einer Kette mit den Silizium- bzw. Kohlenstoffatomen liegt. Andererseits zeigt das Minimum, daß zumindest ein Teil des Deuteriums in der Nähe der Ketten angeordnet ist. Aus dem Verlauf der Kurven kann man abschätzen, daß das Deuterium etwa $(0,55 \pm 0,2) \text{ \AA}$ von den Silizium- bzw. $(0,22 \pm 0,2) \text{ \AA}$ von den Kohlenstoffatomketten in den $\langle 100 \rangle$ Gitterführungskanal hineinragt. Nimmt man an, daß das Deuterium an einer Silizium- bzw. Kohlenstoffstelle eine der freien Bindungen einnimmt, so ergibt sich ein Abstand von $(1,22 \pm 0,2) \text{ \AA}$ zum benachbarten Kohlenstoff- und $(1,61 \pm 0,2) \text{ \AA}$ zum Siliziumatom. Dieser Abstand ent-

spricht etwa der Bindungslänge des Wasserstoffs an Kohlenstoff ($1,09 \text{ \AA}$ in Methan [48]) bzw. an Silizium ($1,48 \text{ \AA}$ in Silan [48]). Dies ist nur eine Abschätzung, da für die Bindung des Deuteriums an Silizium- und Kohlenstoffatome eine Überlagerung beider Fälle betrachtet werden muß.

Trotzdem kann gezeigt werden, daß das Deuterium nach 295 K geordnet im SiC gebunden wird. Im Gegensatz dazu zeigt Deuterium 773 K Implantation keine Ordnung. Man kann deshalb vermuten, daß das Deuterium bei 295 K ähnlich wie in Silizium [13, 15, 16] an den freien Bindungen einer Leerstelle gebunden wird. Da bei 773 K einfache Leerstellen entweder rekombinieren oder sich zu größeren Leerstellenclustern zusammenlagern, ist bei dieser Temperatur keine Ausrichtung des Deuteriums im Gitter feststellbar.

6 Zusammenfassung

HOPG-Graphit und β -SiC wurden bei verschiedenen Targettemperaturen mit Deuteriumfluenzen von 10^{15} bis 10^{18} D/cm² implantiert. Die Schädigung der Proben wurde mit Rutherford-Rücksteuerung in Gitterführungsgeometrie (RBS-C) untersucht. Bei niedrigen Temperaturen (295 K–573 K) nimmt die Schädigung in beiden Materialien zunächst linear mit der deponierten Energie zu. Dies bedeutet, daß die Schädigung durch den Energieverlust der Projektile bestimmt wird. In Siliziumkarbid wird aus den mit RBS-C erzielten Ergebnissen für die Anzahl der pro Deuteriumatom verlagerten Siliziumatome ein Wert von $9,5 \pm 1,5$ und eine Verlagerungsenergie von 30 eV berechnet. In Graphit wird mit RBS-C im Vergleich zu anderen Methoden eine sehr viel größere Schädigung gemessen. Diese ist wahrscheinlich auf eine lokale Umordnung der Atome zurückzuführen.

Bei hohen Temperaturen (773 K) wächst die Schädigung in beiden Materialien nicht mehr linear mit der Deuteriumfluenz. Der Verlauf der Schädigung kann in zwei Bereiche unterteilt werden, in denen verschiedene Prozesse den Aufbau der Schädigung dominieren. Bei kleinen Fluenzen heilen Punktdefekte aus und der Aufbau der Schädigung wird durch die Stabilisierung der Defekte durch das Deuterium bestimmt. Bei höheren Fluenzen, bei denen genügend stabile Defekte vorhanden sind, wird die Zunahme der Schädigung durch den Einfang mobiler Defekte an diesen dominiert. Die Bildung unterschiedlicher Defekttypen bei verschiedenen Temperaturen wurde durch Ausheilexperimente gezeigt.

Gleichzeitig mit der Schädigung wurde die zurückgehaltene Deuteriummenge mit Hilfe der Kernreaktion $D(^3\text{He}, p)\alpha$ bestimmt. Sowohl in Graphit als auch in SiC wird bei kleinen Fluenzen im gesamten untersuchten Temperaturbereich das Deuterium vollständig im Material zurückgehalten. Bei hohen Fluenzen setzt schließlich Sättigung ein. Mit steigender Implantationstemperatur nimmt die Sättigungsmenge ab. Sie ist in Graphit und SiC bei 295 K etwa gleich, während bei 773 K in SiC die dreifache Menge wie in Graphit zurückgehalten wird. Dies ist auf eine höhere Bindungsenergie des Deuteriums in SiC zurückzuführen.

Bei hohen Temperaturen und kleinen Fluenzen werden etwa gleich viele Defekte gebildet, wie Deuterium zurückgehalten wird. Schädigungstiefenprofile zeigen, daß im Gegensatz zur Implantation bei 295 K die Schädigung nicht von der deponierten Energie, sondern vom implantierten Deuterium abhängt. Da das Deuterium auch bei dieser Temperatur nicht merklich diffundiert, wird es an Defekten gebunden und stabilisiert diese.

Andererseits kann gezeigt werden, daß der Deuteriumeinfang nicht durch vorher bereits vorhandene Defekte beeinflußt wird, da in beiden Materialien wenige (HOPG) bzw. sehr wenige (SiC) Defekte vorhanden sind und trotzdem schon bei sehr kleinen Fluenzen das gesamte Deuterium zurückgehalten wird.

Das Deuterium wird bei verschiedenen Implantationstemperaturen an unterschiedliche Positionen im Gitter gebunden. Bei 295 K ist das Deuterium zumindest teilweise im Kristallgitter orientiert und wird an Leerstellen gebunden. Da einfache Defekte bei 773 K ausheilen, wird in diesem Fall keine Orientierung des Deuteriums im Gitter gefunden. Innerhalb der ausgedehnten Defektstrukturen, die bei dieser Temperatur entstehen und durch Deuterium stabilisiert werden, wird keine Orientierung des Deuteriums zum Kristallgitter beobachtet. Auf die Art der Defekte bei dieser Temperatur lassen sich aus den Ergebnissen keine Rückschlüsse ziehen.

7 Literatur

- [1] L. H. Abu-Hassan und P. D. Townsend, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **19** (1986) 99.
- [2] F. Agullo-Lopez, C. R. W. Catlow und P. D. Townsend, *Point Defects in Materials*, (Academic Press, London 1988).
- [3] H. H. Anderson und F. J. Ziegler, *Hydrogen Stopping Powers and Ranges in all Elements*, (Pergamon Press, New York 1977).
- [4] T. G. Armstrong und P. B. Johnson, *J. Nucl. Mater.* **60** (1976) 241.
- [5] B. R. Appelton, C. Erginsoy und W. M. Gibson, *Phys. Rev.* **161** (1967) 330.
- [6] K. Ashida, K. Ichimura, M. Matsuyama, H. Miyake und K. Watanabe, *J. Nucl. Mater.* **111 & 112** (1982) 769.
- [7] K. Ashida, K. Ichimura und K. Watanabe, *J. Vac. Sci. Technol.* **A1** (3) (1983) 1465.
- [8] K. Ashida, K. Ichimura, M. Matsuyama und K. Watanabe, *J. Nucl. Mater.* **128 & 129** (1984) 792.
- [9] K. Ashida, K. Kanamori, K. Ichimura, M. Matasuyama und K. Watanabe, *J. Nucl. Mater.* **137** (1986) 288.
- [10] D. J. Bacon und A. S. Rao, *J. Nucl. Mater.* **91** (1980) 178.
- [11] D. J. Bacon, I. Dümmler und A. S. Rao, *J. Nucl. Mater.* **103 & 104** (1981) 427.
- [12] V. Barone, F. Lelj, C. Minichino, N. Russo und M. Toscano, *Surf. Sci.* **189/190** (1987) 185.
- [13] B. Bech-Nielsen, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **59** (1986) 487.
- [14] B. Bech-Nielsen und J. U. Andersen, *Phys. Rev. B* **35** (6) (1987) 2732.

- [15] B. Bech-Nielsen und J. U. Andersen, Phys. Rev. Lett. **60** (4) (1988) 321.
- [16] B. Bech-Nielsen, Phys. Rev. **B 37** (11) (1988) 6353.
- [17] R. Behrisch, Vak. Technik **10** (1967) 250.
- [18] R. Behrisch und J. Roth, in: *Ion Beam Surface Layer Analysis Vol 2*, Hrsg.: O. Meyer, G. Linker, F. Köppler (Plenum Publishing Corporation, New York 1976) pp. 539.
- [19] H. A. Bethe, Ann. Phys. **5** (1930) 325.
- [20] H. A. Bethe, Z. f. Physik **76** (1932) 283.
- [21] H. A. Bethe und W. Heitler, Proc. Roy. Soc. **A 146** (1934) 83.
- [22] J. P. Biersack und D. Fink, in: *Atomic Collisions in Solids*, Hrsg.: S. Datz, B. R. Appelton, C. D. Moak, (Plenum Press, London - New York 1975) pp. 737.
- [23] J. P. Biersack und W. Eckstein, Appl. Phys. **A 34** (1984) 73.
- [24] J. R. Bird und J. W. Williams (Hrsg.), *Ion Beams for Materials Analysis*, (Academic Press, Australia 1989).
- [25] F. Bloch, Ann. Phys. **16** (1933) 285.
- [26] F. Bloch, Z. f. Physik **81** (1933) 363.
- [27] E. Bøgh, Can. J. Phys. **46** (1968) 653.
- [28] P. Børgesen, J. Bøttiger und W. Möller, J. App. Phys. **49** (8) (1978) 4401.
- [29] H. G. Bohn, J. M. Williams, C. J. McHargue und G. M. Begun, J. Mater. Res. **2** (1) (1987) 107.
- [30] N. Bohr, Phil. Mag. **23** (1912) 901.
N. Bohr, Phil. Mag. **30** (1915) 581.
- [31] N. Bohr, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **18** (8) (1948).
- [32] W. Bollman und G. R. Henning, Carbon **1** (1964) 525.

- [33] J. C. Bourgoin, in: *Radiation Damage Processes in Materials*, Hrsg.: C. H. S. Dupuy, (Noordhoff, Leyden 1975) pp. 339.
- [34] D. Boutard, W. Möller und B. M. U. Scherzer, *Phys. Rev.* **38** (5) (1988) 2988.
- [35] W. H. Bragg und R. Kleeman, *Phil. Mag.* **10** (1905) 318.
- [36] G. Braunstein, B. S. Elman, M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus und T. Venkatesan, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **27** (1984) 475.
- [37] M. Braun und B. Emmoth, *J. Nucl. Mater.* **128 & 129** (1984) 657.
- [38] R. A. Causey, T. S. Elleman und K. Verghese, *Carbon* **17** (1979) 323.
- [39] R. A. Causey, M. I. Baskes und K. L. Wilson, *J. Vac. Sci. Technol.* **A4** (3) (1986) 1189.
- [40] L. T. Chadderton, *Radiation Damage in Crystals*, (John Wiley & Sons Inc., 1965).
- [41] C. K. Chen, B. M. U. Scherzer und W. Eckstein, *Appl. Phys. A* **33** (1984) 265.
- [42] W. J. Choyke, R. B. Irwin, J. N. McGruer, J. R. Townsend, K. Q. Xia, N. J. Doyle, B. O. Hall, J. A. Spitznagel und S. Wood, 13th Conference on Defects in Semiconductors (TMS-Aime, Colorado, CA 1984) 789.
- [43] G. J. Clark, D. V. Morgan und J. M. Poate, *Atomic Collisions Phenomena in Solids*, Hrsg.: D. W. Palmer et al. (North Holland, Amsterdam, 1970) pp. 388.
- [44] E. D. Clarke, *Disc. Faraday Soc.* **31** (1961).
- [45] W. K. Chu, J. W. Mayer und M. A. Nicolet, *Backscattering Spectrometry* (Academic Press, New York 1978).
- [46] W. K. Chu, in: *Materials Characterisation Using Ion Beams*, Hrsg.: J. P. Thomas, A. Cachard, (Plenum Press, London - New York, 1978), pp. 3.
- [47] J. W. Corbett, J. P. Karins und T. Y. Tan, *Nucl. Instrum. Methods* **182 & 183** (1981) 457.
- [48] CRC Handbook of Chemistry and Physics 66th Edition, (CRC Press Inc., Boca Raton Florida 1985).

- [49] B. L. Crowder, J. E. Smith, M. H. Brodsky und M. I. Nathan in: *Ion Implantation in Semiconductors* Hrsg.: I. Ruge, J. Graul, (Springer Verlag, New York, 1971), pp. 255.
- [50] S. Datz, C. Erginsoy, G. Leibfried und H. O. Lutz, *Ann. Rep. of Nuclear Science* **17** (1967) 129.
- [51] B. L. Doyle, W. R. Wampler, D. K. Brice und S. T. Picraux, *J. Nucl. Mater.* **93 & 94** (1980) 551.
- [52] B. L. Doyle, W. R. Wampler und D. K. Brice, *J. Nucl. Mater.* **103 & 104** (1981) 513.
- [53] R. Dovesi, C. Pisani, F. Ricca und C. Roetti, *J. Chem. Phys.* **6** (8) (1976) 3075.
- [54] R. Dovesi, C. Pisani, F. Ricca und C. Roetti, *Surf. Sci.* **72** (1978) 140.
- [55] R. Dovesi, C. Pisani und C. Roetti, *Chem. Phys. Lett.* **81** (3) (1981) 498.
- [56] J. A. Edmonds, S. P. Withrow, H. J. Kong und R. F. Davis, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **51** (1986) 395.
- [57] J. A. Edmonds, S. P. Withrow, W. Wadlin und R. F. Davis, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* (1987) 193.
- [58] J. A. Edmonds, K. Das und R. F. Davis, *J. Appl. Phys.* **63** (1988) 922.
- [59] J. A. Edmonds, R. F. Davis, S. P. Withrow und K. L. More, *J. Mater. Res.* **3** (2) (1988) 321.
- [60] F. H. Eisen, G. J. Clark, J. Böttiger und J. M. Poate, *Rad. Effects.* **13** (1972) 93.
- [61] F. H. Eisen, in: *Channeling*, Hrsg.: D. V. Morgan, (Wiley, New York, 1973).
- [62] D. T. Eggen, Report NAA-SR-69 (1950).
- [63] B. S. Elman, M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, E. M. Maby und H. Mazurek, *Phys. Rev. B* **24** (2) (1981) 1027.
- [64] B. S. Elman, M. Shayega, M. S. Dresselhaus, H. Mazurek und G. Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **25** (6) (1982) 4142.

- [65] B. S. Elman, G. Braunstein, M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, T. Venkatesan und B. Wilkens, *J. Appl. Phys.* **56** (7) (1984) 2114.
- [66] B. Elman, G. Braunstein, M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, T. Venkatesan und J. M. Gibson, *Phys. Rev. B* **29** (8) (1984) 4703.
- [67] B. S. Elman, G. Braunstein, M. S. Dresselhaus und T. Venkatesan, *Nucl. Instrum. Methods B* **7/8** (1985) 493.
- [68] S. K. Erents, C. M. Braganza und G. M. McCracken, *J. Nucl. Mater.* **63** (1976) 399.
- [69] S. K. Erents, *Inst. Phys. Conf. Ser. No. 28* (1976) p. 318.
- [70] S. K. Erents, G. M. McCracken und J. Vince, *J. Phys.* **D11** (1978) 227.
- [71] C. Erginsoy, G. H. Vineyard und A. Englert, *Phys. Rev.* **133** (A2) (1964) A595.
- [72] C. Erginsoy, *Phys. Rev. Lett.* **15** (1965) 360.
- [73] U. Fano, *Annual Review of Nuclear Science* **13** (1963) 1.
- [74] L. C. Feldman und J. W. Rodgers, *J. Appl. Phys.* **41** (1970) 3376.
- [75] L. C. Feldman, J. W. Mayer und S. T. Picraux, *Materials Analysis by Ion Channeling*, (Academic Press, London 1982).
- [76] O. B. Firsov, *Zh. ETF.* **32** (1957) 1464.
- [77] O. B. Firsov, *Zh. ETF.* **33** (1957) 696.
- [78] O. B. Firsov, *Zh. ETF.* **34** (1958) 447. engl. Übersetzung *Sov. Phys. JETP* **7** (1958) 308.
- [79] O. B. Firsov, *Zh. ETF.* **36** (1959) 1517, engl. Übersetzung *Sov. Phys. JETP* **9** (1959) 1076.
- [80] G. Foti, S. T. Picraux, S. V. Campisano, E. Rimini und R. A. Kant, in: *Ion Implantation in Semiconductors 1976* Hrsg.: F. Chernow, J. A. Borders und D. K. Brice, (Plenum Press, New York 1976).
- [81] D. S. Gemmel, *Rev. of Mod. Phys.* **46** (1974) 129.

- [82] W. M. Gibson, C. Erginsoy, H. E. Wegner und B. R. Appelton, *Phys. Rev. Lett.* **15** (1965) 357.
- [83] Gmelins Handbuch der anorganischen Chemie: Kohlenstoff Teil B, Lieferung 2, 408, Seriennummer 14, (Verlag Chemie, Weinheim 1968).
- [84] Gmelins Handbook of Inorganic Chemistry: Silicon, Supplement Volume B 2 (Springer Verlag, Berlin, 1984).
- [85] P. R. Goggin und W. N. Reynolds, *Phil. Mag.* **8** (1963) 265.
- [86] A. N. Goland, in: *Radiation Damage in Metals*, Hrsg.: N. L. Petersen und S. D. Harkness, (ASM, Metals Park, Ohio 1976) pp. 366.
- [87] Y. Gotoh, H. Shimizu und H. Murakami, *J. Nucl. Mater.* **162-164** (1989) 851.
- [88] Y. Gotoh, *J. Nucl. Sci. Technol.* **18** (1981) 641.
- [89] Y. Gotoh, *Fusion Technol.* **6** (1984) 424.
- [90] Y. Gotoh und O. Okada, *J. Nucl. Science and Technol.* **21** [3] (1984) 205.
- [91] H. Harker und J. B. Horsley, *Phil. Mag.* **16** (1967) 23.
- [92] R. R. Hart, H. L. Dunlap und O. J. Marsh, *Rad. Effects* **9** (1971) 261.
- [93] R. W. Hill, *Phys. Rev.* **90**(5) (1953) 845.
- [94] A. F. Holleman und E. Wiberg, *Lehrbuch der Anorganischen Chemie*, (Walter de Gruyter, Berlin 1985).
- [95] L. M. Howe, M. L. Swanson und A. F. Quenneville, *Nucl. Instrum. Methods* **132** (1976) 241.
- [96] T. Iwata und T. Nihira, *Phys. Lett.* **23** (1966) 631.
- [97] T. Iwata und T. Nihira, *J. Phys. Soc. Japan* **31** (1971) 1761.
T. Iwata, H. Maeta und S. Okuda, *Phys. Lett.* **53A** (1975) 295.
- [98] T. Iwata, T. Nihira und H. Matsuo, *J. Phys. Soc. Japan* **33** (1972) 1060.
- [99] M. de Jong und J. S. Koehler, *Phys. Rev.* **128** (1963) 40.

- [100] J. C. Jousset, J. Mory und J. J. Quillico, *J. Physique lettres* **35** (1974) L-229.
- [101] P. Jung, *Radiat. Eff.* **35** (1978) 155.
- [102] J. L. Kaae, *J. Nucl. Mater.* **57** (1975) 82.
- [103] B. T. Kelly, W. H. Martin, A. M. Price und J. T. Bland, *Phil. Mag.* **14** (1966) 343.
- [104] B. T. Kelly, *Irradiation Damage in Solids*, (Pergamon Press, London 1966).
- [105] B. T. Kelly, *Carbon* **15** (1977) 117.
- [106] B. T. Kelly, *Physics of Graphite*, (Applied Science Publishers, London 1981).
- [107] G. H. Kinchin und R. S. Pease, *Rep. Prog. Phys.* **18** (1955) 1.
- [108] M. Kitajima, K. Aoki und M. Okada, *J. Nucl. Mater.* **149** (1987) 269.
- [109] Ch. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik*, (Oldenburg Verlag, München 1988),
und *Introduction to Solid State Physics*, (John Wiley & Sons, New York 1971).
- [110] C. A. Klein, *Rev. Mod. Phys.* **34** (1) (1962).
- [111] R. A. Langley, S. T. Picraux und F. L. Vook, *J. Nucl. Mater.* **53** (1974) 257.
- [112] R. A. Langley, B. M. U. Scherzer und J. Roth, *J. Nucl. Mater.* **76 & 77** (1978) 313.
- [113] R. A. Langley, J. Bohdansky, W. Eckstein, P. Mioduszewiski, J. Roth, E. Taglauer,
E. W. Thomas, H. Verbeek und K. L. Wilson: *Data Compendium for Plasma-Surface
Interactions*, *Nucl. Fus. Special Issue* (1984).
- [114] Ch. Lehmann und G. Leibfried, *J. Appl. Phys.* **34** (1963) 2821.
- [115] H. P. Liawn und R. F. Davis, *J. Electrochem. Soc.* **132** (1985) 642.
- [116] J. Lindhard und M. Scharff, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **27** (15) (1953).
- [117] J. Lindhard, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **28** (8) (1954).
- [118] J. Lindhard und M. Scharff, *Phys. Rev.* **124** (1961) 128.
- [119] J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff und P. V. Thomsen, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid.
Selsk.* **33** (10) (1963).

- [120] J. Lindhard, M. Scharff und H. E. Schiøtt, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **33** (14) (1963).
- [121] J. Lindhard und A. Winther, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **34** (4) (1964).
- [122] J. Lindhard, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **34** (14) (1965).
- [123] J. Lindhard, J. Nielsen und M. Scharff, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **36** (10) (1968).
- [124] J. Loferski und P. Rappenport, *Phys. Rev.* **111** (1958) 432.
- [125] H. Lutz und R. Sizmann, *Phys. Rev. Lett.* **5** (1963) 113.
- [126] J. W. Mayer, *Rad. Effects* **8** (1971) 269.
- [127] J. W. Mayer und E. Rimini (Hrsg.), *Ion Handbook for Material Analysis*, (Academic Press, New York 1977).
- [128] C. J. McHargue, C. W. White, B. R. Appleton, G. C. Farlow und J. M. Williams, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **27** (1984) 385.
- [129] K. L. Merkle, in: *Radiation Damage in Metals*, Hrsg.: N. L. Petersen und S. D. Harkness, (ASM, Metals Park, Ohio, 1976).
- [130] W. Möller und W. Eckstein, *Nucl. Instrum. Methods* **194** (1982) 121.
- [131] W. Möller, F. Besenbacher und J. Böttiger, *Appl. Phys. A* **27** (1982) 19.
- [132] W. Möller, B. M. U. Scherzer und J. Ehrenberg, *J. Nucl. Mater.* **111 & 112** (1982) 669.
- [133] W. Möller und J. Roth, in: *Physics of Plasma-Wall Interactions in Controlled Fusion*, Hrsg.: D. E. Post und R. Behrisch, (Plenum Publishing Corporation, New York 1986).
- [134] W. Möller, P. Børgesen und B. M. U. Scherzer, *Nucl. Instrum. Methods B* **19/20** (1987) 826.
- [135] W. Möller und B. M. U. Scherzer, *Appl. Phys. Lett.* **50** (26) (1987) 1870.
- [136] W. Möller und B. M. U. Scherzer, *J. Appl. Phys.* **64**(10) (1988) 4860.

- [137] W. Möller, *J. Nucl. Mater.* **162-164** (1989) 138.
- [138] G. Molière, *Z. Naturforsch. A* **2** (1947) 133.
- [139] G. L. Montet und G. E. Myers, *Carbon* **9** (1971) 179.
- [140] D. V. Morgan und D. van Vliet, *Rad. Effects* **12** (1972) 203.
- [141] D. V. Morgan (Hrsg.), *Channeling*, (John Wiley & Sons, London 1973).
- [142] J. Mory und Y. Query, *Rad. Effects* **13** (1972) 57.
- [143] J. Mory, Rapport CEA-R-4745 (1976).
- [144] S. Nagata, S. Yamaguchi, Y. Fujino, M. Hirabayashi und K. Kamada, *J. Nucl. Mater.* **128 & 129** (1984) 760.
- [145] S. Nagata, S. Yamaguchi, H. Bergsäker und B. Emmoth, *Nucl. Instrum. Methods* **B33** (1988) 739.
- [146] S. Nagata, S. Yamaguchi, H. Naramoto und Y. Kazumata, *Nucl. Instrum. Methods* **B48** (1990) 231.
- [147] R. S. Nelson und M. W. Thompson, *Philos. Mag.* **8** (1963) 1677.
- [148] R. S. Nelson, in: *Radiation Damage Processes in Materials*, Hrsg.: C. H. C. Dupuy, (Noordhoff, Leyden, 1975) pp. 261.
- [149] K. Niwase, M. Sugimoto, T. Tanabe und F. E. Fujita, *J. Nucl. Mater.* **155-157** (1988) 303.
- [150] K. Niwase, T. Tanabe, M. Sugimoto und F. E. Fujita, *J. Nucl. Mater.* **162-164** (1989) 856.
- [151] K. Niwase, K. Nakamura, T. Shikama und T. Tanabe, *J. Nucl. Mater.* **170** (1990) 106.
- [152] K. Niwase, K. Nakamura, T. Tanabe, Y. Miyamoto und T. Tanabe, *J. Nucl. Mater.* in press.
- [153] K. Niwase, und T. Tanabe, *J. Nucl. Mater.* in press.

- [154] O. S. Oen, J. Narayan und T. S. Noggle, in: *Applications of Ion Beams to Metals*, Hrsg.: S. T. Picraux, E. P. Eernisse und F. L. Vook, (Plenum Press, New York, 1974).
- [155] O. S. Oen und M. T. Robinson, *Nucl. Instrum. Methods* **132** (1976) 647.
- [156] J. W. Palmour, H. S. Kong und R. F. Davis, *Appl. Phys. Lett.* **51** (1987) 2028.
- [157] S. T. Picraux und F. L. Vook, *Phys. Rev. B* **18** (5) (1978) 2066.
- [158] G. R. Piercy, F. Brown, J. A. Davis und M. McCargo, *Phys. Rev. Lett.* **10** (1963) 399.
- [159] D. Powers, W. K. Chu, R. J. Robinson und A. S. Lodhi, *Phys. Rev. A* **6** (1972) 1425.
- [160] D. Presinger, Dissertation, TU München, 1986.
- [161] Y. Quere, *Phys. Stat. Sol.* **30** (1968) 713.
- [162] Y. Quere, *J. Nucl. Mater.* **53** (1974) 262.
- [163] Y. Quere, in: *Ion Implantation in Semiconductors 1976* Hrsg.: F. Chernow, J. A. Borders und D. K. Brice, (Plenum Press, New York 1976).
- [164] W. N. Reynolds und P. A. Thrower, *Sym. on Irr. Dam., Venice (IAEA)*, 1962.
- [165] W. N. Reynolds und P. R. Goggin, *Phil. Mag.* **5** (1960) 1049.
- [166] E. Rimini, S. V. Campisano, G. Foti, P. Baeri und S. T. Picraux, *Int. Conf. on Ion Beam Surface Analysis, Karlsruhe* (1976).
- [167] E. Rimini, in: *Materials Characterisation Using Ion Beams*, Hrsg.: J. P. Thomas, A. Cachard, (Plenum Press, London - New York, 1978), pp. 455.
- [168] M. T. Robinson, O. K. Holms und O. S. Oen, *Col. int. le bombardment ionique* (1961) Paris Bellevue.
- [169] M. T. Robinson und O. S. Oen, *Appl. Phys. Lett.* **2** (1963) 30.
- [170] M. T. Robinson, in: *Radiation Damage in Metals*, Hrsg.: N. L. Petersen und S. D. Harkness, (ASM, Metals Park, Ohio 1976) pp. 1.

- [171] J. Roth, R. A. Zuhr, S. P. Withrow und W. P. Eatherly, *J. Appl. Phys.* **63** (8) (1988) 2603.
- [172] J. Roth, B. M. U. Scherzer, R. S. Blewer, D. K. Brice, S. T. Picraux und W. R. Wampler, *J. Nucl. Mater.* **93 & 94** (1980) 601.
- [173] J. Roth, private Mitteilung.
- [174] L. Salamanca-Riba, G. Braunstein, M. S. Dresselhaus, J. M. Gibson und M. Endo, *Nucl. Instrum. Methods B* **7/8** (1985) 487.
- [175] B. M. U. Scherzer, R. A. Langley, W. Möller, J. Roth und R. Schultz, *Nucl. Instrum. Methods* **194** (1982) 497.
- [176] B. M. U. Scherzer, R. Behrisch, W. Eckstein, U. Littmark, J. Roth und M. K. Sinha, *J. Nucl. Mater.* **63** (1976), 100.
- [177] B. M. U. Scherzer, R. A. Langley, W. Möller, J. Roth und R. Schulz, *Nucl. Instrum. Methods*, **194** (1982) 497.
- [178] D. Schroyen, M. Bruggeman, I. Dezi und G. Langouche, *Nucl. Instrum. Methods B* **15** (1986) 341.
- [179] F. Seitz und J. S. Koehler, *Solid State Physics* **2** (1956) 307.
- [180] K. Shimizu und H. Kawakatsu, *Jap. J. Appl. Phys.* **13** (1974) 1161.
- [181] H. Shimizu, S. Suginuma und Y. Gotoh, *J. Nucl. Mater.* **176 & 177** (1990) 1000.
- [182] P. Sigmund, *Appl. Phys. Lett.* **14**(3) (1969) 114.
- [183] P. Sigmund, in: *Radiation Damage Processes in Materials*, Hrsg.: C. H. S. Dupuy, (Noordhoff, Leyden, 1975) pp. 3.
- [184] J. H. W. Simmons, *Irradiation Damage in Graphite*, (Pergamon Press, New York 1965).
- [185] P. S. Sklad, P. Angelini, C. J. McHargue und J. M. Williams, in: *the Proceedings of the 42nd Annual Meeting of the Elektron Microscopy Society of America*, (San Francisco, 1984) pp. 416.

- [186] S. A. Solin und R. J. Kobliska, in: *Amorphous and Liquid Semiconductors*, Hrsg.: J. Stake, W. Brenig, (John Wiley and Sons Inc., New York, 1974), pp. 1251.
- [187] K. Sone und G. M. McCracken, *J. Nucl. Mater.* **111 & 112** (1982) 606.
- [188] W. E. Spear und P. G. LeComber, *Solid State Commun.* **17** (1975) 1193, und *Phil. Mag.* **33** (1976) 935.
- [189] J. A. Spitznagel, S. Wood, W. J. Choyke, N. J. Doyle, J. Bradshaw und S. G. Fishman, *Nucl. Instrum. Methods* **B16** (1986) 237.
- [190] J. Stark und G. Wendt, *Ann. Phys.* **38** (1912) 921.
- [191] G. Staudenmaier, J. Roth, R. Behrisch, J. Bohdansky, W. Eckstein, P. Staib, S. Mattesen und S. K. Erents, *J. Nucl. Mater.* **84** (1979) 149.
- [192] K. Takahiro, H. Nakajima, S. Yamaguchi, Y. Fujino und H. Naramoto, *Nucl. Instr. Methods* **B33** (1988) 734.
- [193] T. Tanabe, K. Niwase und K. Nakamura, *J. Nucl. Mater.* **168** (1986) 191.
- [194] T. Tanabe, K. Niwase und K. Nakamura, *J. Nucl. Mater.* **168** (1989) 191.
- [195] P. A. Thrower und R. M. Mayer, *Phys. Status Solidi (A)* **47** (1978) 11.
- [196] P. D. Townsend, *Rep. Prog. Phys.* **50** (1987) 501.
- [197] F. Tuinstra und J. L. Koenig, *J. Chem. Phys.* **53** (1970) 1126.
- [198] C. Varelas und J. P. Biersack, *Nucl. Instr. Methods* **79** (1970) 213.
- [199] T. Venkatesan, B. S. Elman, G. Braunstein, M. S. Dresselhaus und G. Dresselhaus, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **27** (1984) 467.
- [200] T. Venkatesan, B. S. Elman, G. Braustein, M. S. Dresselhaus und G. Dresselhaus, *J. Appl. Phys.* **56** (11) (1984) 3232.
- [201] D. van Vliet, *Phys. Stat. Sol. A* **2** (1970) 521.
- [202] D. van Vliet, *Rad. Effects* **10** (1971) 137.
- [203] W. R. Wampler und S. M. Myers, *J. Nucl. Mater.* **111 & 112** (1982) 616.

- [204] W. R. Wampler, B. L. Doyle, R. A. Causey und K. L. Wilson, *J. Nucl. Mater.* **176** & **177** (1990) 983.
- [205] Y. Watanabe, T. Tanabe und S. Imoto, *Fusion Engineering and Design* **9** (1989) 143.
- [206] M. S. Whittingham und A. J. Jacobson, *Intercalation Chemistry*, (Academic Press 1982).
- [207] H. Wiedersich, in: *Radiation Damage in Metals*, Hrsg.: N. L. Petersen und S. D. Harkness, (ASM, Metals Park, Ohio 1976) pp. 157.
- [208] L. Wieluński, D. Wieluńska, G. Della Mea und A. Tuross, *Nucl. Instrum. Methods* **168** (1980) 323.
- [209] J. M. Williams, C. J. McHargue und B. R. Appleton, *Nucl. Instrum. Methods* **209/210** (1983) 317.
- [210] K. L. Wilson und W. L. Hsu, *J. Nucl. Mater.* **145-147** (1987) 121.
- [211] W. D. Wilson, L. G. Haggmark und J. P. Biersack, *Phys. Rev.* **B15** (5) (1977) 2458.
- [212] R. L. Woolley, *Brit. Journ. Appl. Phys.* **14** (1963) 778.
- [213] R. B. Wright, R. Varma und D. M. Gruen, *J. Nucl. Mater.* **63** (1976) 415.
- [214] R. W. G. Wyckoff, *Crystal structures*, (Interscience 2nd ed., 1963).
- [215] J. F. Ziegler, *J. Appl. Phys.* **43** (1972) 2973.
- [216] J. F. Ziegler, *Helium Stopping Powers and Ranges in all Elements*, (Pergamon Press, New York 1977).
- [217] J. F. Ziegler, J. P. Biersack und U. Littmark, *The Stopping and Range of Ions in solids*, (Pergamon Press, New York 1985).

Danksagung

Herrn Prof. Dr. K. Pinkau danke ich für die akademische Betreuung der Arbeit und seine Bereitschaft zur Übernahme der Dissertation.

Besonderen Dank schulde ich den Herren Dr. J. Roth und Dr. B. M. U. Scherzer, für die Anregung dieses Thema zu bearbeiten, sowie ihre Diskussionsbereitschaft und Unterstützung bei der Planung und Ausführung der Experimente. Insbesondere danke ich Ihnen für die geduldige und kritische Durchsicht des Manuskripts. Mein besonderer Dank gilt auch Herrn Dr. S. P. Withrow für die sehr fruchtbare Zusammenarbeit während seines halbjährigen Aufenthalts am Institut. Herrn Dr. J. Bumgarner von der North Carolina State University danke ich für die Überlassung der SiC-Proben. Herrn Dr. W. Eckstein danke ich für zahlreiche Diskussionen und Anregungen, sowie die Ausführung der TRIM.SP Rechnungen. Den Herren Dr. W. Möller, Dr. B. Söder und Dr. O. Petitpierre sowie Frau Dr. D. Boutard bin ich für viele Diskussionen und zahlreiche Hilfen im Umgang mit der Rechenanlage dankbar. Herrn C. Linsmeier sowie meinem Bruder danke ich ebenfalls für die kritische Durchsicht des Manuskripts.

Herrn Prof. Dr. V. Dose danke ich für die freundliche Aufnahme in seine Abteilung am IPP.

Die Herren H. Schmidl, H. Wacker, L. Beck und A. Wiederer waren durch ihre stete Hilfsbereitschaft und kompetente Unterstützung in technischen Fragen eine wesentliche Stütze der Arbeit. Für die Unterstützung bei der Anfertigung der Zeichnungen danke ich Frau Treske.

Lebenslauf

Name: Rainer Siegele

Eltern: Heinrich Siegele (Teilkonstrukteur)
Else Siegele, geb. Müller

Geburtsort: Lauffen a/N

Geburtsdatum: 04.01.1959

1966 – 1969 Grundschule in Lauffen a/N

1969 – 1972 Hölderlin-Gymnasium in Lauffen a/N

1972 – 1978 Gymnasium in Walldorf (Baden)

20.04.78 Erwerb der allgemeinen Hochschulreife

SS 78 – WS 85 Physikstudium an der
Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg;
Werkstudent bei der Siemens AG in Karlsruhe;

Jun. 83 – Jul. 85 Diplomarbeit am
Institut für Umweltphysik;
studentische Hilfskraft;

12.12.85 Diplomprüfung in Physik

Jan. 86 – Apr. 87 Zivildienst am Institut für Strahlenschutz der
Gesellschaft für Strahlen und Umweltforschung
in Neuherberg;

Mai – Jul.87 Werkstudent in der Entwicklungsabteilung
der Siemens AG in München-Neuperlach

seit Nov. 87 Doktorarbeit am Max-Planck-Institut für
Plasmaphysik in Garching