

UNTERSUCHUNG VON SILIZIUMKARBIDKRISTALLEN MIT
HILFE DER
POSITRONEN-ANNIHILATIONS-SPEKTROSKOPIE

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium (Dr.rer.nat)

vorgelegt der

Mathematisch-Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät
(mathematisch-naturwissenschaftlicher Bereich) der
Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

von Dipl-Phys. Frank Redmann
geboren am 09.04.1973 in Wurzen

Gutachter:

1. Prof. Dr. R. Krause-Rehberg
2. Prof. Dr. R.-H. Höche
3. Prof. Dr. K. Maier

Halle, den 07.April 2003 (Tag der Verteidigung)

urn:nbn:de:gbv:3-000005074

[<http://nbn-resolving.de/urn/resolver.pl?urn=nbn%3Ade%3Agbv%3A3-000005074>]

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Untersuchungsmethoden	4
1.1 Positronen-Annihilations-Spektroskopie	5
1.1.1 Positron	5
1.1.2 Grundlagen der Positronenannihilation	6
1.1.3 Wechselwirkung der Positronen mit dem Festkörper	6
1.1.4 Positronenquelle	8
1.1.5 Positronen in Halbleitern	8
1.2 Konventionelle Positronen-Lebensdauer-Spektroskopie	12
1.2.1 Messanordnung	12
1.2.2 Trappingmodell	13
1.2.3 Bestimmung der Defektkonzentration	15
1.2.4 Positronen-Lebensdauer-Messplatz	16
1.2.5 Einstellung der Messplätze	17
1.3 Gepulstes Positronen-Lebensdauer-Strahl-System	18
1.4 Doppler-Annihilations-Spektroskopie	19
1.4.1 Grundlagen	19
1.4.2 Messprinzip der Doppler-Annihilations-Spektroskopie	21
1.4.3 Parameter der Annihilationslinie	21
1.4.4 Dopplerspektroskopie monoenergetischer Positronen	23
1.4.4.1 Charakterisierung des Defektprofils	24
1.5 Doppler-Koinzidenz-Spektroskopie	26
2 Defektgenerierung durch Bestrahlung	31
2.1 Grundlagen der Bestrahlungstheorie	31
2.2 Elastische Kernwechselwirkung	33
2.3 Streuung an Gitterelektronen	34
2.4 Implantationscharakteristika	34
2.5 Energetische Betrachtung	35
3 Siliziumkarbid	37
3.1 Kristallzucht und Epitaxie	37
3.1.1 Epitaktisches Wachstum	39
3.2 Defekte im Siliziumkarbid	41

3.2.1	Ergebnisse anderer Messmethoden	42
3.2.2	Diffusion und Löslichkeit von Verunreinigungen in SiC	46
3.3	Umladungsniveaus ausgewählter leerstellenartiger Defekte	47
4	Ergebnisse	53
4.1	Untersuchung von Bulk-Material	53
4.1.1	6H-SiC	53
4.1.2	Optische Aktivierung von Defekten	57
4.1.3	Untersuchung mit monochromatischem Licht	61
4.1.4	Ausheilverhalten der Defekte	61
4.1.5	Dosiserhöhung auf $3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$	63
4.1.6	Doppler-Koinzidenz-Messungen	67
4.1.7	Abhängigkeit der Leerstellenkonzentration von der Stickstoff-Dotierungs- Konzentration	69
4.1.8	Der metastabile Defekt	71
4.1.9	4H-SiC	73
4.2	Untersuchung von Schichtsystemen	78
4.2.1	Elektronen-bestrahltes n-Typ 6H- und 4H-SiC	78
4.2.2	Helium-Implantation in 4H- und 6H-SiC	84
4.2.3	Bor in SiC	87
4.2.4	Das D-Zentrum in SiC	90
4.2.5	Charakterisierung des Oberflächeneffektes	97
5	Zusammenfassung und Ausblick	99
A	Informationen zu Siliziumkarbid	102
A.1	Die Detrappingrate	104
	Literaturverzeichnis	105
	Eidesstattliche Erklärung	113
	Lebenslauf	115
	Danksagung	117

Abbildungsverzeichnis

0.1	Publikationen über SiC in den letzten Jahren	2
1.1	Energieverteilung der Positronen nach der Emission im ^{22}Na	7
1.2	Transmission der Positronen durch die Probe	7
1.3	Wechselwirkung der Positronen mit dem Festkörper	8
1.4	Potenzial von Leerstelle und flacher Falle	10
1.5	Schematischer Temperaturverlauf der mittleren e^+ -Lebensdauer einer negativ geladenen und neutralen Leerstelle	11
1.6	Darstellung des Probensandwiches	12
1.7	Darstellung zweier Trappingmodelle für eine Leerstelle	13
1.8	Positronen-Lebensdauer-Messplatz	16
1.9	Ideales und reales e^+ -Lebensdauerspektrum	17
1.10	PLEPS in München	19
1.11	Dopplerverbreiterung an plastisch deformiertem GaAs	20
1.12	Linienformparameter an plastisch deformiertem GaAs	21
1.13	Positronen-Strahlensystem in Halle	23
1.14	Darstellung der Implantationsprofile für 4 ausgewählte Positronenenergien	25
1.15	Tiefenauflösung von VEPFIT	26
1.16	Zweidimensionales Koinzidenzspektrum von 4H n-Typ SiC Bulk-Material	27
1.17	Reduzierung des Untergrundes durch die Anwendung des Energieerhaltungssatzes	28
1.18	Theoretische Berechnungen des Hochimpulsanteils der Positronenannihilation von 4H-SiC	28
1.19	Elektronen-Aufenthaltswahrscheinlichkeit für Silizium und Kohlenstoff	29
1.20	Verlauf des Hochimpulsanteiles nach theoretischen Rechnungen	29
2.1	Streuquerschnitt	32
2.2	Frenkel-Paare	36
3.1	Induktionsofen für die Herstellung von SiC-Substratmaterial	37
3.2	SiC Kristall mit Mikropipes im Lichtmikroskop	38
3.3	SiC Kristall mit verschiedenen Bereichen an Polytypen	39
3.4	Kohlenstoff- und Siliziumagglomerate und Hohlräume	39
3.5	Schematischer Ablauf des CVD-Verfahrens	40
3.6	Siliziumdampfdruck	41

3.7	Umladungsniveaus der Silizium-Leerstelle auf kubischem Gitterplatz mit und ohne Madelungkorrektur	48
3.8	Umladungsniveaus der Silizium-Leerstelle auf hexagonalem Gitterplatz mit und ohne Madelungkorrektur	49
3.9	Umladungsniveaus der Kohlenstoff-Leerstelle mit und ohne Madelungkorrektur	49
3.10	Relaxation der Einfachleerstellen V_C und V_{Si}	50
3.11	Positronen-Aufenthalts-Wahrscheinlichkeiten der V_{Si} und V_C im 4H-SiC . .	50
3.12	Umladungsniveaus der Doppelleerstelle im 4H-SiC	51
3.13	Positronen-Aufenthalts-Wahrscheinlichkeiten der Doppelleerstellen im Kristallgitter	51
4.1	Positronenlebensdauer n- und p- dotierter SiC Kristalle	53
4.2	Positronen-Aufenthalts-Wahrscheinlichkeit im 6H-SiC	54
4.3	Positronenlebensdauer für n-dotiertes 6H-SiC	56
4.4	Lage verschiedener elektrisch aktiver Defekte im 6H-SiC (DLTS)	57
4.5	e^+ -Lebensdauerspektren von Elektronen-bestrahltem SiC und Referenz-Material 6H n-Typ SiC	58
4.6	Mittlere e^+ -Lebensdauer von Elektronen-bestrahltem n-Typ 6H-SiC unter Beleuchtung und in Dunkelheit	59
4.7	Zerlegung der e^+ -Lebensdauerspektren von Elektronen-bestrahltem n-Typ 6H-SiC unter Beleuchtung und in Dunkelheit	59
4.8	Differenz der mittleren e^+ -Lebensdauer unter Beleuchtung und Dunkelheit .	60
4.9	Mittlere e^+ -Lebensdauer unter monochromatischer Beleuchtung	61
4.10	Mittlere e^+ -Lebensdauer für 2 MeV Elektronen-bestrahltes 6H n-Typ SiC .	62
4.11	Differenz der mittleren e^+ -Lebensdauer zwischen Licht- und Dunkelmessung	63
4.12	Mittlere e^+ -Lebensdauer von Elektronen-bestrahltem n-Typ 6H-SiC unter Beleuchtung und in Dunkelheit	64
4.13	Mittlere e^+ -Lebensdauer von Elektronen-bestrahltem 6H-SiC in Dunkelheit und unter Beleuchtung	65
4.14	Mittlere e^+ -Lebensdauer bei Dosiserhöhung auf $3 \times 10^{17} cm^{-2}$	66
4.15	Intensitätsverteilung zwischen Silizium und Doppelleerstelle	66
4.16	Hochimpulsanteil verschiedener Ausheilstufen von Elektronen-bestrahltem SiC	68
4.17	S(W)-Analyse der Ausheilung von Elektronen-bestrahltem SiC	68
4.18	Mittlere e^+ -Lebensdauer von SiC-Substratmaterial mit verschiedenen Stickstoff-Konzentrationen	69
4.19	Spektrale Zerlegung eines ausgewählten Bulk-Kristalls mit hoher Stickstoff-Konzentration	70
4.20	Konfigurationsdiagramm zweier Ladungszustände	72
4.21	Mittlere e^+ -Lebensdauer der Metastabilität	72
4.22	Transmissionsverhalten von 4H und 6H n-Typ SiC	73

4.23	Mittlere e^+ -Lebensdauer von 4H-Substratmaterial	74
4.24	Mittlere e^+ -Lebensdauer nach Bestrahlung im 4H-SiC	75
4.25	Ausheilung von 4H-SiC nach Elektronen-Bestrahlung	76
4.26	Mittlere e^+ -Lebensdauer nach Ausheilung im 4H-SiC für 3 Temperaturen	77
4.27	S(E)-Analyse nach Elektronen-Bestrahlung	79
4.28	Ausheilverhalten des S-Parameters nach Elektronen-Bestrahlung	80
4.29	S(W)-Analyse des Ausheilverhaltens nach Elektronen-Bestrahlung	81
4.30	Hochimpulsanteil von Elektronen-bestrahltem 4H-SiC	82
4.31	e^+ -Lebensdauerspektren von 4H-Substratmaterial und nach Bestrahlung	82
4.32	Vergleich des Ausheilverhaltens von PAS und DLTS	83
4.33	Simulation der Helium-Implantationen in SiC mit SRIM2000	84
4.34	S-Parameter nach der Helium-Implantation	85
4.35	Ausheilverhalten des S-Parameters nach Helium-Implantation	85
4.36	Vergleich der Ausheilstudien von PAS und DLTS von He-implantierten 4H- und 6H-SiC	86
4.37	Simulation der Koimplantation in SiC	88
4.38	S-Parameter nach der Koimplantation von B mit Si/C in SiC	89
4.39	Breite des Defektprofils als Funktion der Ausheiltemperatur	90
4.40	D-Zentrum nach DLTS-Messungen	91
4.41	S(E)-Analyse aller Ausheilstufen für 6H-SiC	92
4.42	Ausheilverhalten des S-Parameters der Defektschicht nach Koimplantation vom 6H-SiC	92
4.43	Vergleich der Doppler-Verbreiterungs-Spektroskopie mit der Positronenle- bensdauer an getemperten SiC nach Koimplantation von Bor mit Silizium und Kohlenstoff	93
4.44	Ausheilverhalten der mittleren e^+ -Lebensdauer nach Koimplantation	94
4.45	Theoretische e^+ -Lebensdauer ausgewählter Cluster	95
4.46	Oberflächeneffekt	97
4.47	S(E)-Analyse für die 6H n-Typ SiC Referenzprobe	98
A.1	Einfachstes Detrapping-Modell	104

Tabellenverzeichnis

3.1	Ionisationsniveaus einiger ausgewählter Akzeptoren in den verschiedenen Polytypen von SiC	42
3.2	Bestrahlungsdefekte in SiC (Elektronen-Spin-Resonanz-Spektroskopie) . . .	44
3.3	Stapelfolgen unterschiedlicher Polytypen in SiC	44
3.4	Lage der Energieniveaus ausgewählter Verunreinigungen	45
3.5	Angabe der maximalen Löslichkeit ausgewählter Verunreinigungen in SiC .	47
3.6	Diffusionskonstanten von N, B und Al in SiC	47
4.1	Spektrenzerlegung nach Elektronen-Bestrahlung für 4H- und 6H-SiC	83
4.2	Implantationsdaten für die Koimplantationen von B mit Si/C in 6H-SiC . .	88
4.3	Zerlegung der e^+ -Lebensdauerspektren bei einer Energie von 6 keV	94
4.4	Zerlegung der e^+ -Lebensdauerspektren bei einer Energie von 10 keV	95
4.5	Zerlegung der e^+ -Lebensdauerspektren bei einer Energie von 2 keV	97

Einleitung

Ein Rückblick auf die Entwicklung neuer Materialien zeigt, dass nicht immer das Wissen der Menschheit zu einem revolutionären Fortschritt in der Wissenschaft führte. Oftmals war es die Alchemie oder einfach nur Glück, die den entscheidenden Funken und somit Licht ins Dunkel brachte. Mit der Metallforschung begann die Nutzung irdischer Ressourcen und ganze Industriezweige entstanden in kürzester Zeit. Blitzeinschläge in Sand, also in einfaches Siliziumdioxid, waren die Geburtsstunde der Glasphysik, und mit der weiteren Forschung zeichneten sich die ersten zielgerichteten Materialuntersuchungen auf diesem Gebiet ab.

Ein weiterer Meilenstein in der Naturwissenschaft war die Vervollständigung der Elemente im Periodensystem. Hier stand der Nachweis von nicht auf der Erde vorkommenden Elementen im Mittelpunkt. Das Teilchenbild vervollständigte sich, und das Interesse an der Struktur der Materie gewann immer mehr an Bedeutung. Als erste Forschungen in den „Nanokosmos“ vordrangen, stellte sich die begründete Frage: „Wann sind diese Erkenntnisse anwendbar?“. Die Entwicklung elektronischer Strukturen erreichte Dimensionen, die mit den zu diesem Zeitpunkt zur Verfügung stehenden Mitteln experimentell nicht auflösbar waren. Es galt, für die Funktionsweise von elektronischen Mikro- und Nanostrukturen Probleme zu lösen, die in der makroskopischen Physik unbekannt waren. Schnell stellte sich heraus, dass es physikalische Grenzen gibt, die mit den bis dahin verwendeten Materialien nicht zu überwinden waren. Der einzig erkennbare logische Ausweg ist wieder an den Beginn der Forschung zurückzugehen und sich ein neues Material zu suchen, das den neuen Anforderungen genügen kann. Erfahrungsgemäß ist meistens ein neues Material eine ganz neue Welt, und bisherige Erkenntnisse sind nur begrenzt übertragbar. Genau so verhält es sich mit dem Material Siliziumkarbid (SiC), welches im Mittelpunkt dieser Arbeit steht. Bestehend aus den auf der Erde weit verbreiteten Elementen Silizium und Kohlenstoff, birgt es eine Faszination in sich, die ihres gleichen sucht. Die Eigenschaften von SiC sind leicht aus den Einzelementen ableitbar. Dies ist zum einen die vom Diamant stammende extreme Härte und breite Bandlücke und zum anderen die halbleitenden Eigenschaften des Siliziums.

Die Herstellung von einkristallinem SiC ist extrem aufwendig und sehr teuer. Der hohe Herstellungspreis muss derzeit noch akzeptiert werden, jedoch senken sich absehbar die Kosten durch die Herstellung größerer Kristalle.

Die Erforschung und Suche nach neuen Materialien mit breiter Bandlücke ist vielfältig und stark ansteigend. Eine besondere Rolle spielt auch hier wieder das Siliziumkarbid, welches durch seine Polytypie heraussticht. Es existieren derzeit über 150 Polytypen, deren separate Zucht nicht leicht zu beherrschen ist. Ein Polytypwechsel im Kristall verhindert

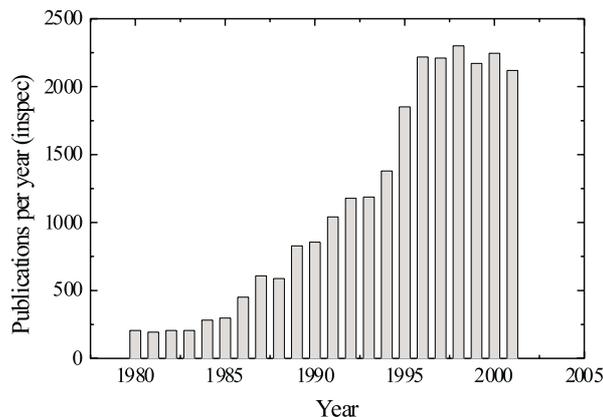


Abbildung 0.1: *Publikationen über SiC in den letzten Jahren. Quelle: inspec*

eine weitere Anwendung. Dies liegt nicht nur daran, dass sich die elektronischen Eigenschaften verändern, sondern es kommt vermehrt zu Wachstumsfehlern.

Die Ziele der Kristallzucht sind große und weitestgehend defektfreie Kristalle. Die enge Zusammenarbeit zwischen Defektanalytikern und Kristallzüchtern drückt sich in der steigenden Qualität der Kristalle aus. Der Gedanke, dass die Kristallzucht, wie sie im Fall von Silizium oder Galliumarsenid beherrscht wird, auf das Material SiC anwendbar ist, kann bei der Komplexität des Materials hinsichtlich seiner Polytypie und Defektkonzentration verworfen werden. Vielmehr ist es nicht trivial, eindeutige Bedingungen zu schaffen, die reproduzierbare Qualitäten der Kristalle garantieren. Die Entwicklungskosten drücken sich in einem extrem hohen Verkaufspreis aus. Umfangreiche Untersuchungen dieses Materials begannen Anfang der 80er Jahre. Die Vereinigten Staaten stellten ein Budget von über 5 Mrd. Dollar für die Erforschung von Siliziumkarbid zur Verfügung. Anhand der Abbildung ist das rapide Anwachsen der Publikationen in den 90er Jahren und somit das steigende Interesse veranschaulicht. Die Ergebnisse der ersten Publikationen waren in sich teilweise widersprüchlich und mussten teilweise widerrufen werden. Dies ist mit der unterschiedlichen Kristallqualität erklärbar. Die Firma Cree[®] ist der momentan führende SiC-Hersteller. Weitere Firmen, wie beispielsweise die SiCrystal in Erlangen, Nippon Steel (Japan) oder das Institut für Kristallzüchtung in Berlin arbeiten daran, das Material zu etablieren und ökonomisch herzustellen.

Die Positronen-Annihilations-Spektroskopie (PAS) untersucht leerstellenartige Defekte. Nun mag der Gedanke aufkommen, dass unter der Vielfalt der Möglichkeiten von Defekten dieser Typ doch eher exotisch ist, jedoch zeigt sich, dass die Leerstellen relativ häufig als strukturelle Defekte vorkommen. Somit hat sich die PAS zu einer anerkannten Methode entwickelt, diese Art von Defekten zu charakterisieren. In dieser Arbeit steht die Untersuchung von Substratmaterial, wie es nach der Herstellung zur Verfügung steht,

und Epitaxiematerial, welches für die Herstellung von elektronischen Bauelementstrukturen einsetzbar ist, im Mittelpunkt. Die Schädigung der Kristalle mittels Elektronenbestrahlung oder Ionenimplantation und ihre Charakterisierung ist ein weiterer Schwerpunkt dieser Arbeit. Beide Schädigungstypen finden in der Industrie für die Herstellung von Bauelementen auf SiC-Basis Anwendung.

Von großer Bedeutsamkeit ist die Kombination verschiedener Untersuchungsmethoden zur besseren Interpretation und Identifikation der Defekte. Hierzu wurden neben Positronenuntersuchungen Ergebnisse aus Photolumineszenz-, Elektronenspinresonanz- und DLTS-Messungen herangezogen, die den Defekten zwar Namen gaben, aber deren chemische Struktur nicht bekannt war. Obwohl die Empfindlichkeitsbereiche der einzelnen Methoden sich teilweise um Größenordnungen unterscheiden, sind Schlussfolgerungen aufgrund gleichen Ausheilverhaltens oder analoger optischer Eigenschaften möglich.

Die vorliegende Arbeit besitzt folgende Gliederung: Das Kapitel 1 beschreibt eine Einführung in die Untersuchungsmethoden, die zur Charakterisierung des Materials beitragen. Im Kapitel 2 sind physikalische Mechanismen mathematisch erfasst, die zur Beschreibung der Defektgeneration durch Bestrahlung erforderlich sind. Das Material Siliziumkarbid und dessen Charakterisierung durch verschiedene Untersuchungsmethoden ist der Schwerpunkt des dritten Kapitels. Im Kapitel 4 sind die Ergebnisse der Positronen-Annihilations-Spektroskopie von Substratmaterial und epitaktischen Schichten zusammengefasst. Das letzte Kapitel befasst sich mit einer zusammenfassenden Diskussion der erworbenen Erkenntnisse und gibt einen Ausblick auf mögliche weiterführende Studien zu diesem Material.

1. Untersuchungsmethoden

Die Positronen-Annihilations-Spektroskopie (PAS) entwickelte sich in den letzten drei Jahrzehnten zu einer bedeutenden Methode, leerstellenartige Defekte im Festkörper zu detektieren. Von der Entdeckung der Positronen im Jahre 1932 durch Anderson [And32] bis zur heutigen Zeit wurden viele Möglichkeiten der Anwendung von Positronen entwickelt. Anwendungsgebiete finden sich in Beschleunigern (Positronenspeicherringen), in der zerstörungsfreien Untersuchung von Festkörpern und in der Medizin mit der Positronen-Emissions-Tomografie (PET). Mittlerweile sind auch schon flüssige und gasförmige Substanzen Gegenstand von Positronenuntersuchungen.

Ausgehend von den Eigenschaften der Elektronen entstanden Mikroskope mit atomarer Auflösung. Die Wechselwirkungen der Elektronen mit dem Festkörper sind sehr vielfältig, was sich auf die verschiedenen spektroskopischen Untersuchungsmethoden überträgt. Die Handhabung der Positronen ist aber nicht mit der der Elektronen vergleichbar. Sie ist um ein Vielfaches schwieriger, jedoch existieren schon Positronenmikroskope mit einer lateralen Auflösung von wenigen μm . Die Auflösung von ca. $1 \mu m$ stellt kein überzeugendes Argument dar, um die Elektronenmikroskopie zu ersetzen, vielmehr ist die parallele Anwendung unter der Ausnutzung der Vorteile beider Techniken erstrebenswert. Positronen können als Sonden für Leerstellen, Versetzungen und Defekte, die mit Leerstellen dekoriert sind, eingesetzt werden, da sich hier die lokale Elektronendichte signifikant ändert. Daraus kann auf die Größe, Ladung und Umgebung des Annihilationszentrums geschlussfolgert werden.

Die Charakterisierung von Defekten ist im oberflächennahen Bereich und im Volumen von Festkörpern möglich. Entscheidend ist dabei die Implantationstiefe der Positronen. Definiert sich diese einerseits in der oberflächencharakterisierenden Methode durch eine fest vorgegebene Energie (0 bis $40 \text{ keV} \Rightarrow$ Implantationstiefe der Positronen: nm bis wenige μm), so dringen andererseits die Positronen (β^+ -Zerfall: $E \Rightarrow 540 \text{ keV}$) bis zu einige hundert μm ein. Man spricht auch von der Untersuchung mit „langsamen“ und „schnellen“ Positronen.

Auf diese Weise gelingt es, leerstellenartige Defekte von Schichtsystemen und Bulk-Materialien (engl. bulk = Volumen) zu qualifizieren und zu quantifizieren. Für die Positronenanwendung zur Untersuchung von Festkörpern existieren drei physikalische Parameter der Interpretation. Die Positronen-Lebensdauer-Spektroskopie untersucht das Zerfallsspektrum des Positrons, ausgehend von seiner Entstehung bis zu seiner Zerstrahlung mit einem Elektron. Auf die Positronen-Winkelkorrelations-Spektroskopie wird in dieser Arbeit nicht eingegangen. Eine weitere Eigenschaft der Zerstrahlung ist die Dopplerverbreiterung der Annihilationslinie, die charakteristisch für verschiedenartige Defekte ist. Diese

physikalischen Eigenschaften enthalten nicht nur Aussagen über Defektkonzentrationen, sondern es steht auch ein Mittel der Defektanalyse zur Verfügung. Eine Identifikation ist deshalb möglich, weil der Hochimpulsanteil der Dopplerverbreiterung elementspezifisch ist. Er befindet sich teilweise im oder nahe des Untergrundes. Die Anwendung der Koinzidenzspektroskopie verbessert das Peak-zu-Untergrund-Verhältnis, so dass die elementspezifische Information nachweisbar ist. Der nächste Abschnitt beschreibt die Eignung der Positronen zum Nachweis leerstellenartiger Defekte.

1.1 Positronen-Annihilations-Spektroskopie

1.1.1 Das Positron

Die Erzeugung von Positronen ist auf verschiedene Weise möglich. Die Paarerzeugung¹ ist eine sehr effektive Methode mit einer großen Ausbeute an Positronen ($10^{10} e^+ / s$). Das Prinzip lässt sich folgendermaßen zusammenfassen: Thermische Neutronen werden in Cadmium eingefangen und generieren hochenergetische γ -Strahlen, die in einer Platinfolie Elektron-Positron-Paare erzeugen.

Eine weitere Möglichkeit der Erzeugung von Positronen ist die Ausnutzung der Bremsstrahlung von MeV -Elektronen, die ebenfalls zur Paarerzeugung führt (Elektron-LINAC (linear accelerator)). Hier erreicht man eine Ausbeute von ca. $10^9 e^+ / s$ in einem diskontinuierlichen Positronenstrahl. Diese Methoden zeigen Nachteile in der Mobilität (große Apparaturen) als auch unter dem finanziellen Gesichtspunkt. Somit haben konventionelle Positronenquellen auch in der heutigen Zeit ihre Berechtigung. Unter konventionellen Quellen ist der Gewinn von Positronen aus dem spontanen Zerfall von $^{22}\text{Natrium}^2$ zu verstehen. Sie besitzen eine Ausbeute von $10^6 e^+ / s$. Alle verwendeten Positronenquellen dieser Arbeit basieren auf dieser Zerfallsreihe.

Die Eigenschaften der Positronen lassen sich einfach ableiten, da sie die Antiteilchen der Elektronen sind. Sie besitzen die entgegengesetzte Ladung und das entgegengesetzte magnetische Moment, jedoch haben sie die gleiche Masse und den gleichen Spin wie Elektronen und sind somit Fermionen.

Bei der Zerstrahlung von Positronen mit Elektronen treten zwei γ -Quanten mit einer Energie von $511 \pm 15 \text{ keV}$ auf. Der $3\text{-}\gamma$ -Zerfall ist eine weitere Möglichkeit der Zerstrahlung, jedoch ist die Wahrscheinlichkeit seines Auftretens so gering ($1/371,3$), dass er in der weiteren Betrachtungsweise vernachlässigt wird. Die eben beschriebenen Zerfälle sind Schlussfolgerungen des Energieerhaltungssatzes. Die Gültigkeit des Impulserhaltungssatzes trifft bei der Annihilation ebenfalls zu. Die Positronen besitzen nach ihrer Thermalisation im Festkörper im Vergleich mit den Elektronen des Kristalls einen relativ kleinen Eigenimpuls, so dass der Positronenimpuls keine wesentliche Rolle bei der Annihilation spielt. Die Annihilationscharakteristika spiegeln folglich die Eigenschaften der Kristallelektronen im Impulsraum wider. Der Impulsraum wird durch die Dopplerverbreiterung der

¹ $1,022 \text{ MeV} \rightarrow e^+ + e^-$

² β^+ Zerfall: $^{22}\text{Na} \rightarrow ^{22}\text{Ne} + \beta^+ + \gamma + \nu$

Annihilationslinie bzw. durch die Winkelkorrelation der Annihilationsquanten zugänglich.

1.1.2 Grundlagen der Positronenannihilation

In diesem Abschnitt steht die Methode der Positronen-Annihilations-Spektroskopie (PAS) im Mittelpunkt. Die bei der Annihilation entstehende Strahlung enthält charakteristische Informationen über die Elektronenstruktur des Festkörpers. Defekte besitzen einen entscheidenden Einfluss auf die Elektronenstruktur im Festkörper, so dass das Positron als Sonde zum Nachweis für leerstellenartige Defekte, negativ geladene Defekte und Komplexe mit Leerstellen geeignet ist. Außerdem sind Ausscheidungen aufgrund ihrer großen räumlichen Ausdehnung mit Positronen nachweisbar [Pet00, KR99]. Aus der Anzahl der möglichen Defekttypen spielen die leerstellenartigen Defekte für Positronen die dominierende Rolle, da das Fehlen von Atomen im Festkörper die lokale Elektronendichte verringert. Diese Arbeit untersucht Punktdefekte im Siliziumkarbid (SiC), jedoch eignet sich die Methode ebenfalls zur Untersuchung von Liniendefekten (Versetzungen) oder beispielsweise größeren offenen Volumendefekten (Clustern). Ist die Konzentration der Defekte hinreichend groß (beispielsweise $> 10^{15} \text{cm}^{-3}$ für Leerstellen), der Ladungszustand neutral oder negativ, so sind die eben genannten Defekte nachweisbar. Das Positron „spürt“ während seiner Diffusion im Festkörper das elektrische Potenzial eines attraktiven Defektes, wobei es in diesem Defekt zum Einfang (engl. trapping) des Positrons kommt. Die Form und Tiefe der vorherrschenden Potenziale sind entscheidend für den Annihilationsprozess. Ist die Tiefe des Potenzials einer Positronenfalle so groß, dass das Positron nicht durch thermische Energie entweichen kann, so bleibt es bis zu seiner Zerstrahlung in diesem Defekt lokalisiert. Das Positron annihiliert mit Elektronen aus der Umgebung des Defektes. Zur Untersuchung der Annihilationscharakteristika stehen zwei Methoden im Positronenlabor in Halle zur Verfügung. Zum einen ist dies die Positronen-Lebensdauer-Spektroskopie und zum anderen die Doppler-Verbreiterungs-Spektroskopie.

1.1.3 Wechselwirkung der Positronen mit dem Festkörper

Nach der Entstehung der Positronen beim β^+ -Zerfall können die Positronen sehr unterschiedliche Energien besitzen. Die Energieverteilung nach der Emission ist in der Abb. 1.1 dargestellt.

Die mittlere Eindringtiefe \bar{z} der Positronen berechnet sich nach Brandt und Paulin [Bra77] zu:

$$\bar{z}[m] = -\frac{\ln(1 - \frac{1}{e})}{1600} \cdot \frac{E_{max}[MeV]^{1.43}}{\rho[g/cm^3]} . \quad (1.1.1)$$

Hierbei ist ρ die Dichte des zu untersuchenden Materials und E_{max} die maximale Energie der Positronen nach ihrer Emission. Die mittlere Eindringtiefe erreicht in den verwendeten SiC-Proben einen Wert von ca. $37 \mu m$. Die untersuchten Proben dürfen eine Dicke von $557 \mu m$ nicht unterschreiten, damit die 99,9 % der Positronen im Substrat annihilieren (vgl. Abb. 1.2). Die angegebene mittlere Eindringtiefe verdeutlicht, dass Volumendefekte Gegenstand der Messmethode mit multienergetischen Positronen sind.

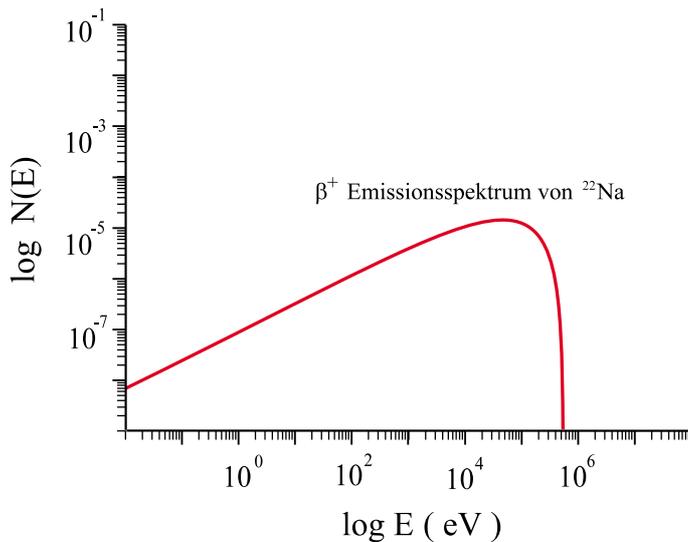


Abbildung 1.1: Energieverteilung der Positronen nach der ihrer Entstehung im ^{22}Na [KR99].

Die Positronen dringen in den Festkörper ein, thermalisieren und geben fast ihre gesamte kinetische Energie an das Gitter ab. Die Abgabe kleiner Energien beschreibt vorwiegend der Mechanismus der Phononen-Wechselwirkung [Ber92]. Bei größeren Energien ist dies die Elektron-Positron-Wechselwirkung. Anschließend bewegt es sich aufgrund der kinetischen Energie $k_B T$ (k_B Boltzmannkonstante, T Temperatur) durch das Kristallgitter weiter. In Abb. 1.3 sind die Wechselwirkungsmechanismen des Positrons mit einem Festkörper dargestellt.

Neben der Annihilation im Volumen oder im Defekt kann es auch zur Annihilation in Oberflächenzuständen kommen. Bei geringen Implantationsenergien der Positronen kann es ausgehend vom Volumen bis zur Oberfläche diffundieren. Während des Diffusionsprozesses besteht die Möglichkeit, dass das Positron in einen Gitterdefekt eingefangen wird, so dass die Wellenfunktion des Positrons in diesem Defektpotenzial bis zur Annihilation lokalisiert ist.

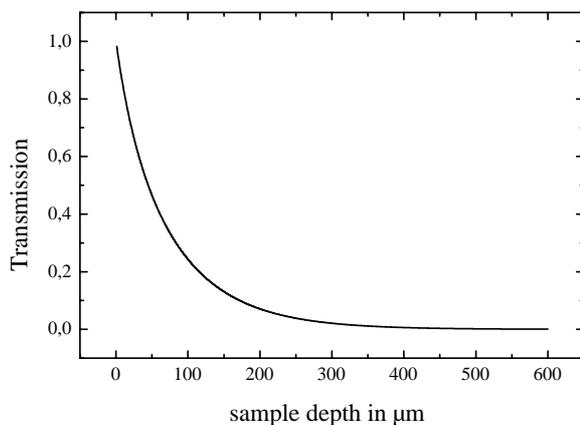


Abbildung 1.2: Transmissionsverhalten der Positronen in Abhängigkeit von der Probendicke in Siliziumkarbid.

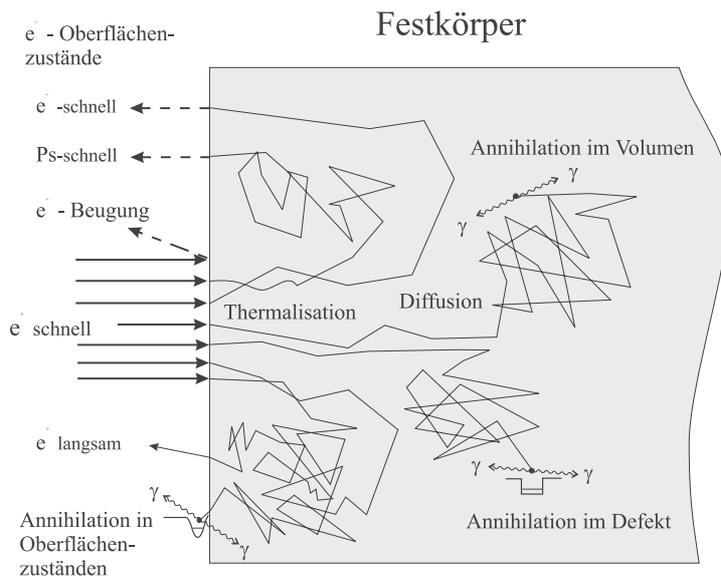


Abbildung 1.3: Darstellung aller bekannten Wechselwirkungsmechanismen der Positronen mit dem Festkörper [Eic94](schematisch).

1.1.4 Positronenquelle

Die in den Experimenten verwendeten Positronenquellen enthalten das Isotop ^{22}Na . Kommerziell erworbene Lösungen von $^{22}\text{NaCl}$ oder $^{22}\text{NaCO}_3$ wurden auf eine Aluminiumfolie der Dicke von $4\ \mu\text{m}$ getropft und das Wasser unter einer Rotlichtlampe verdampft. Die Kristalle sind mit einer dünnen Aluminiumfolie eingekapselt, um den direkten Kontakt des Salzes mit seiner Umgebung zu vermeiden. Die Abmessungen der Quellen von ca. $1 \times 1\ \text{mm}^2$ bis $2 \times 2\ \text{mm}^2$ ergaben sich aus dem Kristallisationsprozess der Salzlösung bei der Herstellung.

Der Vorteil des verwendeten β^+ -Strahlers besteht zum einen in seiner relativ langen Halbwertszeit von 2,6 Jahren³ und zum anderen in der hohen Positronenausbeute von 90,6 % [KR99]. Die Aktivität der hergestellten Quellen variierte zwischen 0,37 bis 3,7 MBq. Der Einsatz geringer Quellintensitäten ist notwendig, da für ein gültiges e^+ -Lebensdauerereignis, die zeitliche Korrelation zwischen Start- und Stopp-Signal nicht von weiteren Ereignissen beeinflusst werden darf. Innerhalb der typischen Positronenlebensdauer ist nur ein Positron in der Probe zulässig, anderenfalls erhöht sich der Untergrund.

1.1.5 Positronen in Halbleitern

Diffundiert das Positron durch das Kristallgitter, so „spürt“ es das Vorhandensein attraktiver Potenziale, wie z. B. das fehlende positive Potenzial eines Atomkerns in einer Leerstelle oder das attraktive negative Coulomb-Potenzial eines Defektes. In einer Leerstelle ist die Elektronendichte deutlich reduziert, vergleicht man diese mit dem ungestörten Material. Folglich verlängert sich im Falle des Einfangs die Positronenlebensdauer im defektreichen Material. Die Annihilationsrate λ , welche reziprok zur e^+ -Lebensdauer τ ist, drückt sich

³Halbwertszeit von ^{58}Co beträgt 71 Tage [Led73]

als Funktion der lokalen Elektronendichte folgendermaßen aus:

$$\lambda = \frac{1}{\tau} = \pi r_0^2 c \int |\psi^+(\vec{r})|^2 n_-(\vec{r}) \gamma d\vec{r}. \quad (1.1.2)$$

$n_-(\vec{r})$...	lokale Elektronendichte
$ \psi^+(\vec{r}) ^2$...	lokale Positronendichte
r_0	...	klassischer Elektronenradius
c	...	Lichtgeschwindigkeit
γ	...	Enhancementfaktor

Der Enhancementfaktor beschreibt die Erhöhung der Elektronendichte am Annihilationsort, die durch die Coulombanziehung zwischen Positron und Elektron hervorgerufen wird. Im Sensitivitätsbereich der Positronen-Annihilations-Spektroskopie muss der Defektabstand so klein sein, dass die mittlere Diffusionsweglänge der Positronen einen Einfang von mindestens 10 % in den Defekt garantiert. Unterhalb dieser Einfangrate ist eine Defektanalyse, d. h. eine Zerlegung der e^+ -Lebensdauerspektren, nicht mehr möglich. Erste Untersuchungen an p-dotiertem Siliziumkarbid ergaben eine mittlere e^+ -Lebensdauer von $\tau_{ave} = 143 \pm 2 \text{ ps}$. Diese e^+ -Lebensdauer stimmt mit theoretischen Rechnungen der e^+ -Lebensdauer von defektfreiem SiC überein (vgl. Abb. 4.2), so dass davon ausgegangen werden kann, dass keine (attraktiven) Einfangzentren mit offenem Volumen in nachweisbarer Konzentration existieren. Die untere Nachweisgrenze der Leerstellenkonzentration der Positronen-Lebensdauer-Spektroskopie beträgt $2,3 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ (für negative Einfach-leerstellen in Silizium bei einer Messtemperatur von 90 K [Geb99]). Steigt die Defektdichte an und überschreitet den Wert von $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, so annihiliert jedes Positron in einem Defekt. Man spricht vom Sättigungseinfang, da sich die mittlere e^+ -Lebensdauer mit zunehmender Leerstellenkonzentration nicht mehr ändert. Oberhalb dieser Grenze ist keine Konzentrationsbestimmung möglich.

Der Bindungszustand des Positrons in einem Defekt lässt sich qualitativ durch eine Potenzialbetrachtung beschreiben. Der Einfang eines Positrons in einer Leerstelle ergibt einen Energiegewinn für das Gesamtsystem (Kristall + Positron) von ca. 1 bis 3 eV. Ist das attraktive Zentrum eine akzeptorartige Verunreinigung, so beträgt die Bindungsenergie des Positrons nur ca. 10 bis 100 meV. Derartige Defekte werden als flache Positronenfalten bezeichnet. In der Abb. 1.4 sind die schematischen Potenziale dieser Einfangzentren dargestellt.

Ein in einer flachen Falle eingefangenes Positron kann diesen gebundenen Zustand durch beispielsweise thermische Energien wieder verlassen und in den ungebundenen Zustand übergehen. Da der Einfang in eine flache Falle kaum zur Änderung der Annihilations-eigenschaften im Vergleich zum defektfreien Material führt, ist deren Existenz nur beim gleichzeitigen Vorhandensein von Leerstellen nachweisbar (Beispiel für eine Änderung: Die effektive Diffusionsweglänge in p-dotiertem Silizium ist im Vergleich zum undotierten Silizium reduziert.). Bei tiefen Temperaturen ($T < 100 \text{ K}$) konkurriert der Einfang in leerstellenartige Defekte und flachen Fallen. In diesem Temperaturbereich ($k_B T$ ist in der

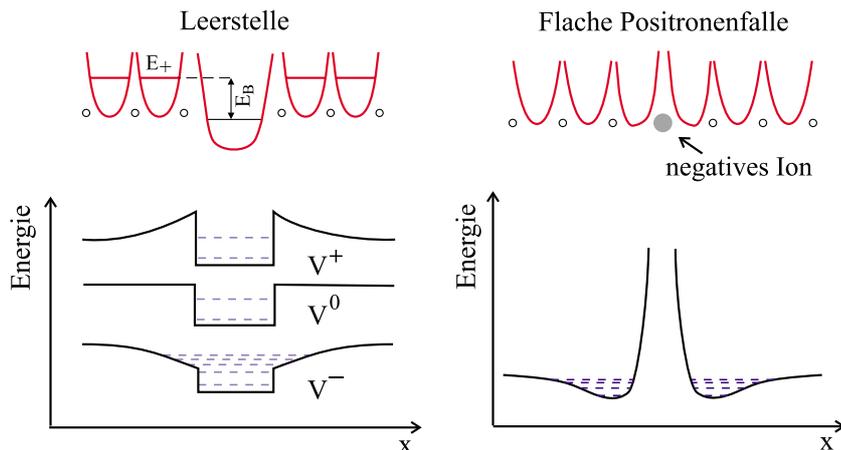


Abbildung 1.4: Schematische Darstellung der Potentiale von Leerstellen und flachen Fallen. Die Tiefe eines Potentialtopfes einer Leerstelle beträgt ca. 1 eV. Dieser ist somit um das Zehnfache tiefer verglichen mit der flachen Falle. Das thermische Entweichen des Positrons aus dem gebundenen Zustand einer Leerstelle ist nicht möglich. [KR99]

Größenordnung der Bindungsenergie des Positrons an einer flachen Falle) ist ein Entweichen des Positrons aus dem lokalisierten Zustand der flachen Falle in den Bulk-Zustand temperaturabhängig und anhand des Temperaturverlaufs der mittleren e^+ -Lebensdauer in Anwesenheit von negativ oder neutral geladenen Leerstellen in entsprechender Konzentration ablesbar.

Die Bestimmung der Leerstellenkonzentration ist bei der Existenz von flachen Fallen nicht trivial. Bei hohen Messtemperaturen (500 bis 600 K) dominiert das Entweichen der Positronen aus den schwach gebundenen Zuständen (vgl. Gl. 1.2.8), so dass deren Anteil an der Annihilation vernachlässigbar ist. Die Angabe der Leerstellenkonzentration in dieser Arbeit bezieht sich deshalb immer auf hohe Messtemperaturen, oder es waren bei tiefen Temperaturen keine flachen Fallen nachweisbar.

Die Defekte im Halbleiter können in Abhängigkeit von der Fermienergie verschiedene Ladungszustände besitzen. Positiv geladene Fremdatome spielen für die Positronen-Annihilations-Spektroskopie keine Rolle, da sie weder ein offenes Volumen noch ein für Positronen attraktives Potenzial besitzen. Das offene Volumen einer Leerstelle mit seiner reduzierten Elektronendichte wirkt für Positronen immer als Einfangzentrum. Die Tiefe des Potentials einer Leerstelle ist unabhängig vom Ladungszustand und besitzt immer den selben Wert. Für Einfachleerstellen ist die Bindungsenergie zwischen Positron und Leerstelle bereits so groß, dass es nach dem Einfang bis zur Annihilation in dieser Leerstelle verbleibt und thermisch nicht entweichen kann. Positiv geladene Leerstellen wurden mit der PAS noch nicht nachgewiesen [Pus90]. Die für Positronen abstoßend wirkende positive Ladung verhindert den Einfang in diese Leerstelle, so dass der Trappingkoeffizient vernachlässigbar klein ist. Für neutrale Leerstellen zeigt der Trappingkoeffizient keine Temperaturabhängigkeit [Pus90] und befindet sich in der Größenordnung von 10^{14} s^{-1} . Der negative Ladungszustand einer Leerstelle besitzt das für Positronen attraktivste Potenzi-

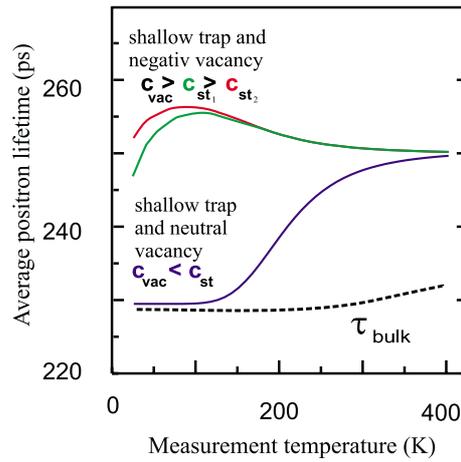


Abbildung 1.5: Schematische Darstellung des Temperaturverlaufs der mittleren e^+ -Lebensdauer verschiedener Trappingzentren. Das Ansteigen der mittleren Lebensdauer des ungestörten Volumens τ_{bulk} (gestrichelte Linie) zu höheren Temperaturen repräsentiert die thermische Ausdehnung der Kristalle. Die Unterschiede im Temperaturverlauf der dargestellten Einfangzentren demonstrieren die unterschiedlichen Einfangquerschnitte der Leerstellen in Abhängigkeit vom Ladungszustand.

al. Der Trappingkoeffizient einer negativ geladenen Leerstelle wird beschrieben durch eine $T^{-1/2}$ -Abhängigkeit [Pus90]. Die Temperaturabhängigkeit der negativ geladenen Leerstelle lässt sich mit der Überlagerung eines Coulomb-Potenzials und dem Potenzial der neutralen Leerstelle erklären. Das langreichweitige Coulomb-Potenzial besitzt flach gebundene Energiezustände, aus denen die Positronen thermisch angeregt wieder entweichen können. Der schwach gebundene Zustand, er wird auch als Rydbergzustand bezeichnet, kann als Vorstufe für den Einfang in die Leerstelle agieren.

Ausgewählte Defekte wurden separat behandelt und deren Temperaturabhängigkeit diskutiert. In den Proben existieren eine Vielzahl von Einfangzentren, die unterschiedliche offene Volumina oder Ladungszustände besitzen können. Der temperaturabhängige Verlauf hängt von den Konzentrationsanteilen der Einfangzentren ab. In der Abb. 1.5 ist der qualitative Verlauf der mittleren Positronenlebensdauer für verschiedene Ladungszustände von Leerstellen und Konzentrationen von flachen Fallen dargestellt. Der konkurrierende Einfang von flachen Fallen (z. B. negativ geladenes Fremdatom) mit neutralen und negativ geladenen Leerstellen ist anhand dieser Darstellung verdeutlicht. Die Konzentration der flachen Fallen bestimmt den Verlauf der mittleren e^+ -Lebensdauer bei tiefen Temperaturen. Mit steigender Akzeptorkonzentration, wie es die grüne Linie darstellt, nimmt der Anteil der in flachen Fallen annihilierenden Positronen zu, was zu einer Abnahme der mittleren e^+ -Lebensdauer führt. Die flachen Fallen besitzen im Vergleich zu den negativ geladenen Leerstellen bei tiefen Temperaturen etwa die gleiche Einfangrate.

Der temperaturabhängige Verlauf der mittleren e^+ -Lebensdauer ändert sich beim konkurrierenden Einfang der flachen Fallen mit neutralen Leerstellen, da die Defekte unterschiedliche Einfangraten besitzen. Bei vergleichbaren Konzentrationsanteilen dominiert im Tieftemperaturbereich der Einfang in flachen Fallen. Es ist somit eine mittlere e^+ -

Lebensdauer (bei vollständigem Einfang) beobachtbar, die der des defektfreien Materials entspricht.

Der negative Anstieg der mittleren e^+ -Lebensdauer für die negativ geladenen Leerstellen kann mittels des Zusammenhangs $\tau_{ave} \sim T^{-1/2}$ beschrieben werden. Akzeptoren im Kristall sind nicht die einzigen Kandidaten für flach gebundene Positronenzustände. Eine negative Leerstelle oder ein negativ geladener Leerstellenkomplex mit relativ kleinem offenen Volumen (A-Zentrum in Silizium) kann durchaus als flache Falle wirken [Pol98].

1.2 Konventionelle Positronen-Lebensdauer-Spektroskopie

1.2.1 Messanordnung

Die Messanordnung lässt sich folgendermaßen zusammenfassen. Zwei identische Proben, zwischen denen sich die e^+ -Quelle befindet, sind durch eine diese Anordnung umschließende Aluminiumfolie fixiert (Sandwichanordnung siehe Abb. 1.6). Auf diese Weise ist es möglich, das Sandwich senkrecht zu platzieren und gleichzeitig zu gewährleisten, dass der Großteil der Positronen weiterhin in den Proben annihiliert.

Aus den vorhandenen Wafern und Kristallen wurden Probenpaare der Abmessung $5 \times 5 \text{ mm}^2$ herausgesägt.

Bevor die Positronen die Proben erreichen, müssen sie das Salz und die Aluminiumfolie überwinden. Dabei zerstrahlen bereits einige Positronen in diesen Materialien, was bei der Auswertung durch eine sogenannte Quellkorrektur Berücksichtigung findet. Diese ist eine Subtraktion der Intensitäten und e^+ -Lebensdauern der Quellterme vom Originalspektrum, die anhand einer Referenzprobe zu bestimmen sind. (Typische Quellterme waren: Aluminium- e^+ -Lebensdauer $\tau_{Al} = 165 \text{ ps}$ mit einer Intensität $I_{Al} = 5 \%$, Salz- e^+ -Lebensdauer $\tau_{salt} = 365 \text{ ps}$ mit einer Intensität $I_{salt} = 5 \%$ und die Positronium- e^+ -

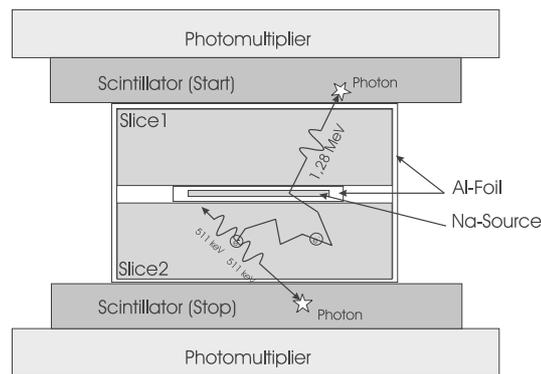


Abbildung 1.6: Darstellung des Probensandwiches mit Positronen-Quelle zwischen den Messsonden (schematisch). Die äußere Aluminiumfolie garantiert die mechanische Stabilität, damit die in der Mitte der Probe befindende Quelle fixiert ist. Das Sandwich befindet sich für temperaturabhängige Messungen in einem Kryostaten, welcher für optische Messungen (ohne Aluminiumfolie) mit einem Quarzglasfenster ausgestattet ist.

Lebensdauer $\tau_{pos} = 1000 - 2000 \text{ ps}$ mit einer Intensität $I_{pos} = 0,1 - 0,2 \%$.)

1.2.2 Trappingmodell

Das Trappingmodell beschreibt die Übergangsraten zwischen verschiedenen Positronenzuständen. Es wird bei der Anwendung dieses Modells völlig auf eine quantenmechanische Beschreibung verzichtet. Connors und West [CW69] sowie Brandt und Seeger [See74, Bra74] entwickelten das Modell der Übergangsraten. Dieses Trappingmodell gilt unter folgenden Voraussetzungen:

- Vernachlässigung der Wechselwirkung der Positronen untereinander. (Durch die Verwendung schwacher Quellen ist dies zutreffend)
- Sensitivität der Positronen bezüglich Defekten besteht nur entlang des Diffusionsweges
- Keine Wechselwirkung der einzelnen Defekte untereinander.

Die schematische Darstellung zweier ausgewählter Trappingmodelle, wie sie in der Arbeit diskutiert werden, ist in Abb. 1.7 zu sehen. Im Modell auf der linken Seite ist der einfachste Fall dargestellt, d. h. der Einfang in einen leerstellenartigen Defekt. Die Erweiterung, in der rechten Abbildung dargestellt, ist die Einbeziehung von flachen Fallen. Aus diesen flachen Fallen kann das Positron wieder in den defektfreien Zustand mit der dazugehörigen Detrappingrate entweichen oder mit der entsprechenden Rate λ_{ion} annihilieren.

Es lassen sich Ratengleichungen angeben, die die Annihilation, den Einfang und das Entweichen von Positronen aus definierten Zuständen beschreiben. Wenn N die Anzahl der verschiedenen Defekte ist und keine Übergänge zwischen den Defekten erlaubt sind,

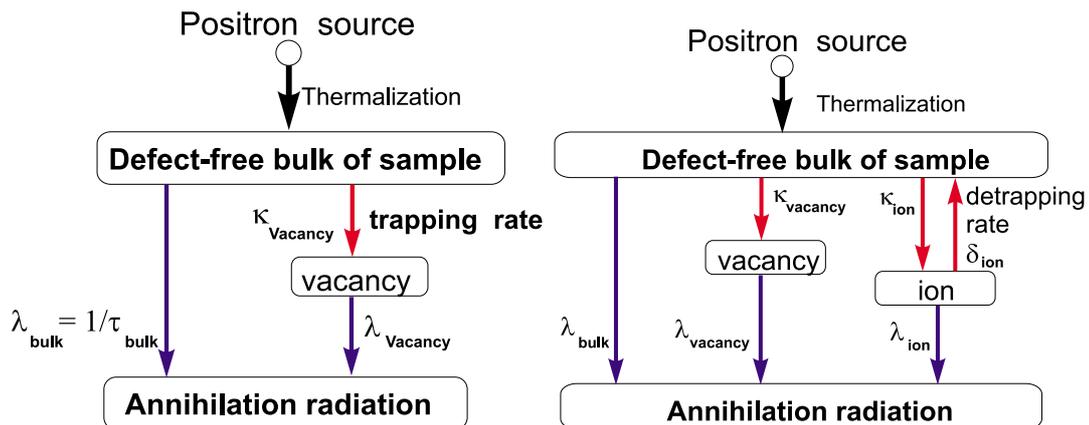


Abbildung 1.7: Darstellung zweier Trappingmodelle für eine Leerstelle (links) und die Kombination aus einer Leerstelle und einer flachen Falle (rechts). Kompliziertere Modelle sind durchaus denkbar, jedoch ist deren mathematische Lösung bereits bei zwei Defekten mit rydbergartigen Zuständen nicht bekannt.

so erhält man $N+1$ gekoppelte Differentialgleichungen:

$$\frac{dn_b}{dt} = - \left(\lambda_b + \sum_{j=1}^N \kappa_{dj} \right) n_b + \sum_{j=1}^N \delta_{dj} n_{dj}, \dots, \frac{dn_{dj}}{dt} = \kappa_{dj} n_b - (\lambda_{dj} + \delta_{dj}) n_{dj} \quad (1.2.1)$$

Mit λ werden die Annihilationsraten, κ die Trappingraten und δ die Detrappingraten der defektfreien Zustände b und der auftretenden Defekte $j = 1 \dots N$ bezeichnet. Die Voraussetzung, dass nur während der Diffusion die Positronen eingefangen werden, führt zur Festlegung der Anfangsbedingungen. Nach der Thermalisation befinden sich alle Positronen im defektfreien Bereich der Probe, so dass $n_b(t=0) = 1$ ist. Für die Anzahl der Positronen bzw. deren Wahrscheinlichkeit in den existierenden Defekten ergibt sich $n_{dj}(t=0) = 0$. Die somit berechneten Wahrscheinlichkeiten des Einfangs in den Bulk-Zustand n_b bzw. in die existierenden Defekte n_{dj} ergeben das Zerfallsspektrum:

$$n(t) = n_b + \sum_{j=1}^N n_{dj} = \sum_{i=1}^{N+1} I_i \exp(-\lambda_i t) \quad (1.2.2)$$

Die Zerfallskonstante λ_i und deren dazugehörige Intensität I_i bestimmt sich aus der Lösung des Differentialgleichungssystems 1.2.1. Die zeitliche Änderung des Zerfallsspektrums beschreibt das Positronen- e^+ -Lebensdauer-Spektrum:

$$-\frac{dn(t)}{dt} = \sum_{i=1}^{N+1} I_i \lambda_i \exp(-\lambda_i t). \quad (1.2.3)$$

In einem e^+ -Lebensdauerspektrum mit N Defekten sind somit $N+1$ e^+ -Lebensdauern enthalten. Für jeden Defekt kann eine defektspezifische e^+ -Lebensdauer ermittelt werden: $\tau_{dj} = 1/\lambda_{dj}$. Anhand der Anfangsbedingungen ergibt sich folgender funktionaler Zusammenhang:

$$-\left. \frac{dn(t)}{dt} \right|_{t=0} = \lambda_b = \sum_{i=1}^{N+1} I_i \lambda_i. \quad (1.2.4)$$

Die mittlere Positronenlebensdauer wird oft in dieser Arbeit diskutiert und ist der Schwerpunkt des e^+ -Lebensdauerspektrums. Dieser ist unabhängig von der Zerlegung und kann mit großer Genauigkeit bestimmt werden. Die mittlere e^+ -Lebensdauer bestimmt sich zu:

$$\tau_{ave} = \frac{\int_0^{\infty} dt t \left(\frac{dn}{dt} \right)}{\int_0^{\infty} dt \left(\frac{dn}{dt} \right)} = \sum_{i=1}^{N+1} I_i \lambda_i = \eta_b \tau_b + \sum_{j=1}^N \eta_{dj} \tau_{dj} \quad (1.2.5)$$

Für die Gleichung gilt:

$$\sum_i I_i = \sum_i \eta_i = 1. \quad (1.2.6)$$

Es ist darauf zu achten, dass die Intensitäten I nicht mit den Wahrscheinlichkeiten η gleichzusetzen sind. Anhand der Gleichungen wird deutlich, dass die mittlere Positronenlebensdauer sich aus den gewichteten e^+ -Lebensdauern der Einfangzentren zusammensetzt. Die Anwendung der PAS zeigt, dass meistens ein oder zwei Defekte aus den e^+ -Lebensdauerspektren separierbar sind. Häufig dominiert ein leerstellenartiger Defekttyp,

so dass das Zerfallsspektrum zweikomponentig ist (vgl. Gl. 1.2.2). In diesem Fall ergeben sich die Zerfallskonstanten mit den dazugehörigen Intensitäten zu:

$$\lambda_1 = \frac{1}{\tau_1} = \lambda_b + \kappa_{d1} , \lambda_2 = \frac{1}{\tau_2} \text{ und } I_2 = \frac{1}{\lambda_b - \lambda_2 + \kappa_{d1}} \quad (1.2.7)$$

Die Einbeziehung von Defekten mit einer Detrappingrate erschwert die Berechnungen, und schon bei zwei Defekten dieser Art ist keine analytische Lösung des Differentialgleichungssystems bekannt [KR99].

Aus dem Verhältnis des thermisch induzierten Entweichens der Positronen aus den flachen Fallen δ und der Einfangrate κ_i kann die Bindungsenergie der Positronen an den Ionen errechnet werden [Man81]:

$$\frac{\delta}{\kappa_i} = \frac{1}{c_i} \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot \exp\left(-\frac{E_b}{k_B T}\right) . \quad (1.2.8)$$

Diese Berechnung gilt nur für einen Typus von „flacher Falle“. Die Verunreinigungen in den untersuchten Proben sind von hoher Komplexität, was eine Berechnung überaus erschwert. Die Lösung des Differentialgleichungssystems für einen Defekt mit Detrappingrate ist im Anhang dargestellt.

1.2.3 Bestimmung der Defektkonzentration

Für Leerstellen, Versetzungen und kleine Leerstellencluster besteht eine sehr einfache Beziehung zwischen Einfangrate κ und Defektkonzentration C_d :

$$\kappa = \mu \cdot C_d . \quad (1.2.9)$$

Mit μ wird hierbei die spezifische Positroneneinfangrate bezeichnet, die defektabhängig ist. Die Einfangrate κ lässt sich für einen dominierenden Defekt (in den meisten Fällen bei hohen Messtemperaturen zutreffend) aus der mittleren Positronenlebensdauer bestimmen:

$$\kappa = \frac{1}{\tau_b} \cdot \frac{\tau_{ave} - \tau_b}{\tau_\nu - \tau_{ave}} . \quad (1.2.10)$$

In der Gleichung steht τ_b für Bulk- e^+ -Lebensdauer, was der Positronenlebensdauer im defektfreien Material entspricht. τ_{ave} bezeichnet die mittlere e^+ -Lebensdauer nach Gleichung 1.2.5. Mit τ_ν wird die dem Defekt zugeordnete e^+ -Lebensdauer bezeichnet. Man erhält somit die Möglichkeit, aus den gemessenen und analytisch bestimmten Positronenlebensdauern die Defektkonzentration zu berechnen. Die spezifische Trappingrate ist für jeden Defekt verschieden. Sie ist durch eine unabhängige experimentelle Methode zu bestimmen und in SiC für viele Leerstellentypen unbekannt. In den Halbleitern Galliumarsenid und Silizium sind gute Korrelationen mit anderen Messmethoden zu verzeichnen. Eine neutrale Einfachleerstelle in Silizium besitzt bei Raumtemperatur eine spezifischen Trappingrate von $0,8 \times 10^{15} s^{-1}$ [KR99], die sich im Falle einer einfach negativen Leerstelle auf das Dreifache erhöht. Da die PAS in ihrem Empfindlichkeitsbereich nur wenig vergleichbare leerstellensensitive Methoden besitzt, wird in dieser Arbeit auf die Angabe

der absoluten Leerstellenkonzentration verzichtet und nur relative Änderungen betrachtet. Die Leerstellenkonzentration ist nach der Gleichung 1.2.10 proportional zur Einfangrate und folgt prinzipiell der mittleren e^+ -Lebensdauer bei einem dominierenden Defekttypen.

1.2.4 Positronen-Lebensdauer-Messplatz

Der Positronen-Lebensdauer-Messplatzes misst die Zeit, die ausgehend von der Entstehung des Positrons bis zu seiner Annihilation mit einem Elektron in der Probe vergeht. Die Differenzierung der beiden zeitlich kurz aufeinander folgenden γ -Quanten ist möglich, da Entstehungs- und Annihilations- γ -Quant unterschiedliche Energien⁴ besitzen.

Beide γ -Quanten erzeugen in den Szintillatoren Photonen, deren elektrische Signale durch einen Sekundärelektronenvervielfacher (SEV) verstärkt werden. Mittels zweier Energiefenster erfolgt die Identifikation der beiden γ -Quanten und die daraus folgende Zuschaltung in die Eingänge des Zeit-Impulshöhenkonverters (TAC - time to amplitude converter). In diesem wird ein Kondensator mit einer Konstantstromquelle aufgeladen, dessen Spannung, die durch die Stopp- und Startimpulse festgelegt ist, sich proportional zur Positronenlebensdauer verhält. Jedes koinzidente Ereignis besitzt eine proportional zur

⁴ $\gamma_{birth}=1,27$ MeV, $\gamma_{annih.}=511$ keV

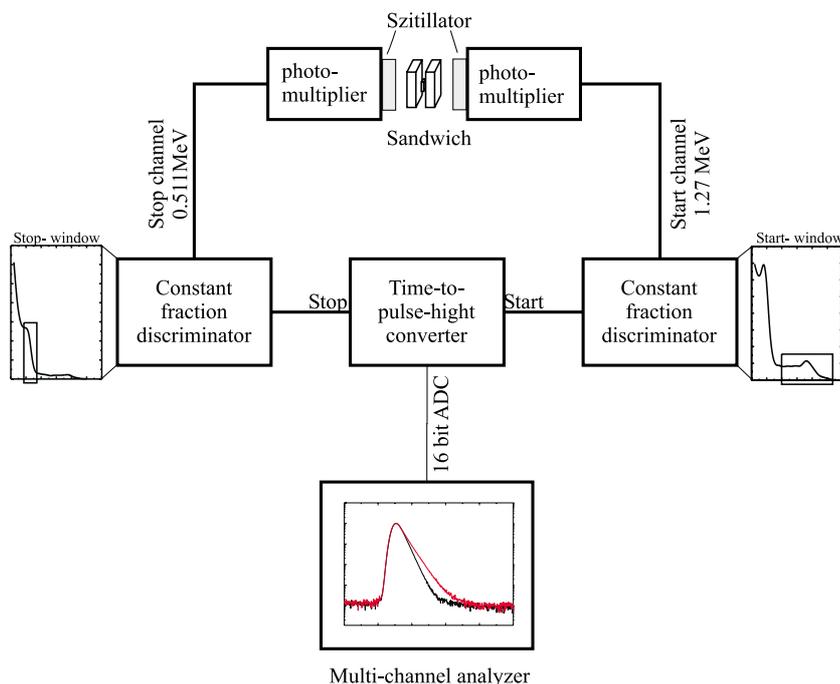


Abbildung 1.8: Schematische Darstellung des Positronen-Lebensdauer-Messplatzes wie er für die Experimente genutzt wurde. Die Verarbeitung der Signale erfolgt vorwiegend auf analoger Basis, bis im Vielkanalanalysator das Spektrum digitalisiert abgespeichert wird. Die Auflösungsfunktion der Apparatur wird durch die Art und Qualität der Szintillatoren und Sekundärelektronenvervielfacher bestimmt.

e^+ -Lebensdauer definierte Spannung, die dem Vielkanalanalysator übergeben wird. Dieser Vielkanalanalysator akkumuliert alle vom TAC kommenden Ereignisse und speichert diese in definierte spannungskorrelierte Kanäle konstanter Breite ab. Nach Beendigung der Messung werden die Ereignisse pro Kanal ausgelesen und weiterverarbeitet. Damit die Start- und Stoppimpulse synchronisiert sind, muss gewährleistet sein, dass sich maximal ein Positron in der Probe aufhält. Dies geschieht unter Verwendung von relativ schwachen Quellen (0,37 bis 3,7 MBq). Die Zeit, welche das Positron benötigt, bis es in die Probe eingedrungen und thermalisiert ist, kann vernachlässigt werden. Diese Zeit ist für alle Positronen annähernd gleich und bedeutend kleiner ($< 10 ps$) als die Positronenlebensdauer [Ber92]. Ein schematischer Aufbau des e^+ -Lebensdauer-messplatzes ist in Abb. 1.8 zu sehen.

1.2.5 Einstellung der Messplätze

Das e^+ -Lebensdauerspektrum (Gl. 1.2.3) wird mit der nicht nur elektronisch bedingten Auflösungsfunktion der Geräte überfaltet, wie es in der Abb. 1.9 zu sehen ist. Die wesentlichen Kriterien für die Auflösungsfunktion sind die Art und Geometrie der Szintillatoren und die Güte des folgenden Sekundärelektronenvervielfachers. Die Spektren werden hinsichtlich dieser Verbreiterung ausgewertet und die Halbwertsbreite jeweils bei der Hälfte des Peakmaximums (FWHM) bestimmt. Je nach Sondenexemplar werden mit den Messplätzen Auflösungsfunktionen zwischen 230 ps und 270 ps erreicht. Ein Kriterium, mit dem man e^+ -Lebensdauern auflösen kann, wird mit einem Viertel der Auflösungsfunktion abgeschätzt. Für die reduzierte e^+ -Lebensdauer ergibt sich hier eine untere Grenze 50 bis 70 ps. Diese Schlussfolgerungen entstammen aus Monte-Carlo-Simulationen von e^+ -Lebensdauerspektren mit verschiedenen Auflösungsfunktionen [Som96]. Um eine gute Zeitauflösung zu erreichen, empfiehlt sich eine enge Wahl der Energiefenster um den 511 keV bzw. 1,27 MeV Peak. Der Untergrund wird reduziert und der gegenseitige Einfluss der beiden γ -Peaks, das heißt dessen Ausläufer, minimiert sich.

Ein weiteres wichtiges Kriterium für die Auswertung der e^+ -Lebensdauerspektren ist

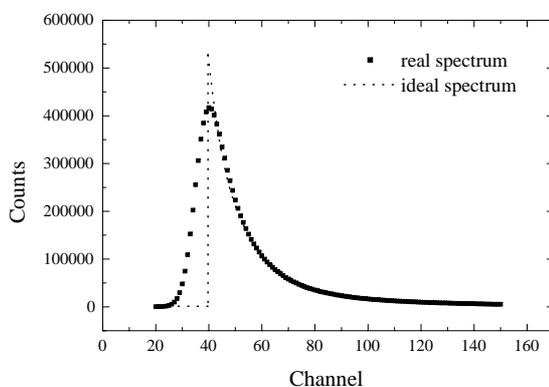


Abbildung 1.9: Darstellung eines idealen und realen e^+ -Lebensdauerspektrums. Das reale Spektrum unterscheidet sich nicht nur durch die Verbreiterung des Peaks aufgrund der Auflösungsfunktion der Apparatur, sondern auch durch die im Spektrum enthaltenen Quellanteile, wie die Anihilation im Aluminium, im Salz und die Positroniumbildung.

Anzahl der akkumulierten Ereignisse. Allgemein gilt: je größer die Statistik, desto zuverlässiger ist die Zerlegung eines Spektrums in seine Komponenten. Durch die engere Wahl der Fenster verringert sich die Zählrate, und man muss einen Kompromiss zwischen Statistik und Auflösungsfunktion eingehen. Generell ist eine hohe Statistik der Auflösungsfunktion vorzuziehen.

Die verwendeten Quellen mussten bei den Messungen öfters erneuert werden. Die unterschiedlichen Aktivitäten der Quellen spiegeln sich in den angepassten Messzeiten wider.

1.3 Gepulstes Positronen-Lebensdauer-Strahl-System

Der vorherige Abschnitt erklärt die e^+ -Lebensdauerspektroskopie unter der Ausnutzung der Zeitmessung zwischen dem Entstehungs- und Zerstrahlungs- γ -Quant einer Isotopenquelle. Dieser funktionelle Zusammenhang ist für die Spektroskopie mit monoenergetischen Positronen im allgemeinen Fall nicht anwendbar. Der zeitliche Zusammenhang zwischen dem Start- und Stopp-Signal geht bei der Moderation verloren. Die Moderation von Positronen ist eine Möglichkeit, monoenergetische Positronen zu erzeugen. Die multienergetischen Positronen der Isotopenquelle treffen auf eine Wolframfolie, dem sogenannten Moderator und thermalisieren teilweise in ihr. Wolfram besitzt eine negative Austrittsarbeit, wodurch die oberflächennahen Positronen spontan mit einer typischen Energie von ca. 3 eV emittieren. Eine Effektivität der Moderation von ca. 10^{-4} induziert die Verwendung intensiver Quellen ($A_0 = 1,9\text{ GBq}$ im e^+ Labor in Halle).

Die monoenergetischen Positronen werden mit einer definierten Energie beschleunigt und in den Festkörper implantiert. Durch diese Vorgehensweise lässt sich die e^+ -Implantationstiefe festlegen, Schichtsysteme untersuchen und direkte Aussagen über die Größe der Leerstellen gewinnen. Für das aus der konventionellen e^+ -Lebensdauerspektroskopie bekannte Entstehungsquant muss ein neuer funktioneller Zusammenhang gefunden werden. Im gepulsten Positronenlebensdauerstrahl an der Universität der Bundeswehr in München ist dies auf folgende Weise realisiert. Die moderierten Positronen, wie sie in dieser Apparatur vorliegen, werden in einer Sägezahnspannung derart beschleunigt oder abgebremst, dass sich Positron in einem kleinen Zeitfenster von 2 ns befindet. Durch eine magnetische Führung ändert der Strahl seine Richtung um 90° und tritt in einen Chopper mit einer Vorspannung von 200 V ein. Dabei werden durch eine eingekoppelte 50 MHz Sinusspannung nur die Positronen weitergeleitet, die sich in dem Zeitfenster von 2 ns befinden. Der Chopper ist weit entfernt vom Detektor angebracht, um den Untergrund zu reduzieren. Nach einer Ablenkung des Strahls um wiederum 90° treten die Positronen in einen weiteren Buncher⁵ ein, bevor die Positronen beschleunigt und mit einer definierten Energie in die Probe implantiert werden. Neuerungen, wie Wien-Filter oder Faraday-Käfig, helfen reemittierte Positronen herauszufiltern, um vorhandene Nebenpeaks zu reduzieren. Die Breite der Auflösungsfunktion der Apparatur (FWHM) beträgt ca. 250 ps und der Strahldurchmesser ist kleiner als 3 mm [Spe97, Wil88, Spe95]. In Abb. 1.10 ist der schematische Aufbau

⁵engl. bunch-bündeln

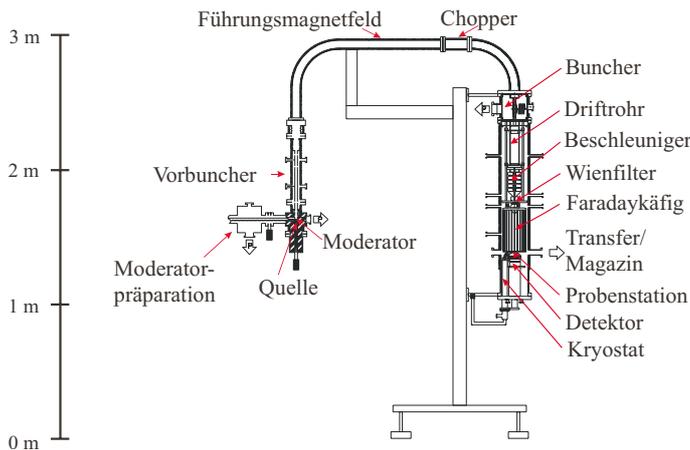


Abbildung 1.10: Schematische Darstellung des Positronen-Lebensdauer-Strahlsystems in München [BK01]

des Systems dargestellt. Dies ist eines der wenigen existierenden Positronenlebensdauer-Strahlsysteme der Welt. Die Phänomene der Positronenbewegung im Festkörper (siehe Abb. 1.3) treffen natürlich auch in diesem System zu, so dass Effekte der Thermalisation, Diffusion und Reemission von Positronen zu diskutieren sind. Ebenso wie Wolfram ist auch n-dotiertes SiC ein Kristall mit negativer Austrittsarbeit. Somit können oberflächennahe Positronen, wie sie bei niedriger Implantationsenergie auftreten, den Festkörper spontan verlassen. Sie „spüren“ dann das Beschleunigungs- und Führungsfeld der Apparatur und treten wieder in das SiC ein. Das e^+ -Lebensdauerspektrum ist beim Auftreten von Reemission nicht auswertbar.

1.4 Doppler-Annihilations-Spektroskopie

1.4.1 Grundlagen

Die zweite in dieser Arbeit verwendete Methode der PAS ist die Doppler-Annihilations-Spektroskopie. Sie analysiert den Annihilationspeak hinsichtlich seiner Dopplerverbreiterung. Mit der Betrachtung der Energie- und Impulserhaltungssätze lässt sich die Gesamtenergie E_s des Elektron-Positron-Paares folgendermaßen ausdrücken:

$$E_s = 2m_0c^2 - E_B = E_1 + E_2 \quad (1.4.1)$$

E_B ist hierbei die Bindungsenergie des Paares an den Festkörper. E_1 und E_2 sind die Energien der beiden nahezu kolliniaren auftretenden Annihilations- γ -Quanten. Der Impuls des Elektron-Positron-Paares p_z in Ausbreitungsrichtung der γ -Quanten führt zu ihrer Dopplerverschiebung, die quantitativ

$$\Delta E = p_z c / 2 \quad (1.4.2)$$

auszudrücken ist. Da der Impuls des Positrons gegenüber dem des Elektrons vernachlässigbar klein ist, eignet sich diese Methode zur Untersuchung der Elektronenstruktur in Festkörpern. Im Gegensatz zu den Elektronen ist höchstens ein Positron im Festkörper

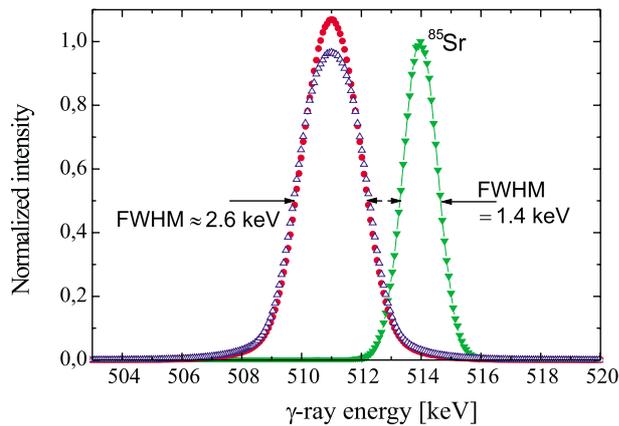


Abbildung 1.11: Darstellung des Annihilationspeaks von plastisch deformiertem GaAs. Die grüne Kurve stellt die Auflösungsfunktion der Apparatur dar. Diese wurde mit einer Messung von ^{85}Sr bestimmt, welche eine charakteristische Strahlung beim Zerfall von 514 keV abgibt. Die blaue Linie stellt undeformiertes Substratmaterial dar. Durch die Deformation ändert sich die Linienform besonders im zentralen Bereich, wie es anhand der roten Kurve zu sehen ist. Die Dopplerverbreiterung ist anhand des Vergleiches der Auflösungsfunktion und der GaAs-Messung deutlich zu sehen [KR99].

vorhanden. Das Positron gibt somit seine gesamte Energie an das Gitter ab und nimmt nach der Fermistatistik den Grundzustand an. Die Registrierung beider Quanten führt zur Dopplerverbreiterung der Annihilationslinie, d. h. je nach Ausbreitungsrichtung zu höheren und zu niedrigeren Energien. In der Abb. 1.11 ist die Änderung der Annihilationscharakteristik nach Deformation von GaAs hinsichtlich der Dopplerverbreiterung dargestellt [KR99]. Die Dopplerverbreiterung wird anhand der Annihilation von 10^6 Ereignissen gemessen. Es zeigt sich eine Verteilung von einer geringen bis zu einer hohen Dopplerverschiebung. Man spricht auch vom Niedrig- und Hochimpulsanteil des Spektrums. Diese Verteilung spielt eine wichtige Rolle und wird anschließend durch Linienformparameter quantifiziert. Die Impulsverteilung der Elektronen des Atoms im Gitter lässt sich in kernnahe Elektronen (Core-Elektronen) und Außenelektronen (Valenz-Elektronen) einteilen. Die kernnahen haben einen im Vergleich zu den Valenz-Elektronen hohen Impuls. Kommt es nun zur Annihilation mit Valenz-Elektronen, so misst man eine kleine Dopplerverbreiterung und im Falle der Core-Elektronen eine große Dopplerverbreiterung (Impuls in Ausbreitungsrichtung z des Detektors). Die delokalisierte Bindung der Valenzelektronen ändert sich in einer Leerstelle. Das freie offene Volumen wird genutzt, um durch neue Bindungen die inneren Coulomb-Kräfte abzubauen. Da vorwiegend Valenzelektronen an den Bindungen im Festkörper beteiligt sind, erhöht sich die Wahrscheinlichkeit ein Valenzelektron in einer Leerstelle anzutreffen. Die Core-Elektronen sind so stark an den Kern gebunden, dass deren Annihilations-Wahrscheinlichkeit gering ist. Folglich wird sich im Falle einer Leerstelle der Anteil des Absolutbetrages der Dopplerverschiebung mit kleinem Impuls zunehmen und der Hochimpulsanteil abnehmen. In der Annihilationslinie drückt sich dies durch eine schmalere und vom Maximalwert erhöhte Kurve aus. Am Beispiel des deformierten GaAs in Abb. 1.11 ist dies deutlich zu sehen, da die Konzentration der Leerstellen durch die Deformation zunimmt.

1.4.2 Messprinzip der Doppler-Annihilations-Spektroskopie

Die Positronen-Lebensdauer-Spektroskopie registriert die Zeitdifferenz zwischen den Start- und Stop- γ -Quanten. Bei der Doppler-Annihilations-Spektroskopie steht der Annihilationspeak und dessen Charakterisierung im Mittelpunkt. Ein energiedispersiver Detektor in Form eines hochreinen Germaniumkristalls findet hier Anwendung. Eine intrinsische Schicht ist von einer n- und p-leitenden Schicht umgeben. Die Eigenleitung der intrinsischen Schicht wird durch Messtemperaturen von 77 K unterdrückt. Trifft ein γ -Quant auf die intrinsische Schicht, so erzeugt es ein Elektron-Loch-Paar. Ein äußeres Feld (Hochspannung) verhindert die spontane Rekombination und der Detektor liefert durch seinen internen Verstärker einen energieproportionalen Stromimpuls. Der Stromimpuls erhält eine weitere Verstärkung, wird in ein Gaußsignal umgewandelt und anschließend mit einem 16-bit AD-Wandler analysiert. Die Höhe des Annihilationsereignisses, die der γ -Quanten-Energie proportional ist, wird in einem Vielkanalanalysator gespeichert. Für ein auswertbares Dopplerspektrum ist eine Statistik von mehr als 5×10^5 gültigen Zerstrahlungsergebnissen notwendig.

1.4.3 Parameter der Annihilationslinie

Die Anteile der Annihilation mit hoch- und niederenergetischen Elektronen des Kristalls verschieben sich mit dem Vorhandensein von Leerstellen bzw. leerstellenartigen Defekten. Für die Bestimmung der Defektkonzentration ist eine Parametrisierung der Annihilationslinie notwendig. Wie in Abb. 1.12 angedeutet, gibt es zwei interessierende Bereiche. Der grün dargestellte Bereich charakterisiert das Zentrum des Peaks. In ihm spiegeln sich vor allem die Anteile der Annihilation mit geringer Dopplerverschiebung d.h. niedrigem Eigenimpuls (Valenzelektronen) wider. Der Zentralbereich des Spektrums normiert auf die

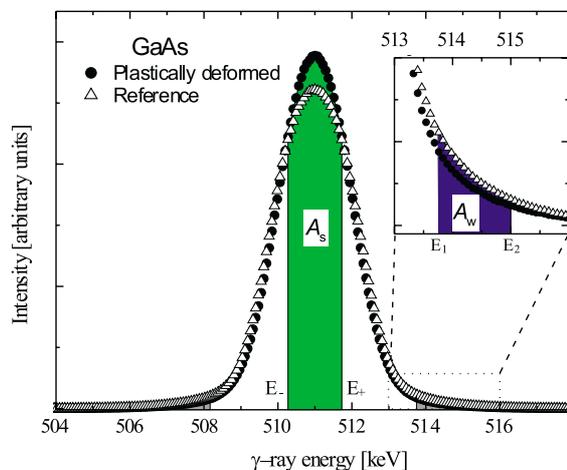


Abbildung 1.12: Darstellung der Linienformparameter an plastisch deformiertem GaAs. Die Fenster für den zentralen Bereich A_S und den Hochenergieanteil A_W resultierten aus den Schnittpunkten der Differenz zwischen bestrahlter und unbestrahlter Probe [KR99].

Gesamtfläche A_0 definiert den S-Parameter:

$$S = \frac{\int_{E_-}^{E_+} f(E)dE}{\int_{-\infty}^{\infty} f(E)dE} = \frac{A_s}{A_0}. \quad (1.4.3)$$

Hierbei ist $f(E)$ das Annihilationsspektrum und E_-, E_+ ein quasi frei wählbares, um das Zentrum gelegenes, symmetrisches Intervall. Der Wert des S-Parameters hängt somit von der Wahl des Intervalls ab, und besitzt keine direkte physikalische Bedeutung. Der Sinn dieses Parameters ergibt sich nur im Vergleich mit anderen S-Parametern bezogen auf das gleiche Auswertintervall. In ähnlicher Weise ist der zweite Parameter des Spektrums definiert. In diesem Fall charakterisiert der W-Parameter den Hochimpulsanteil des Spektrums(Core-Elektronen). Er ist folgendermaßen definiert:

$$W = \frac{\int_{E_1}^{E_2} f(E)dE}{\int_{-\infty}^{\infty} f(E)dE} = \frac{A_W}{A_0}. \quad (1.4.4)$$

Das Intervall $[E_1, E_2]$ ist derart zu wählen, dass sich der Bereich noch nicht im Untergrund befindet. Für die defekt- und materialabhängige Wahl der Intervallgrenzen verwendet man ein Differenzspektrum [AK96, Myl96, Szp96]. Die Normierung der S- und W-Parameter auf das defektfreie Material ermöglicht vergleichende Aussagen aus unterschiedlichen Messungen. Vergleiche mit Parametern anderer Apparaturen sind nur eingeschränkt möglich, da diese vorwiegend durch das Spektrometer (Auflösungsfunktion und Intervallfestlegung) bestimmt sind. Ist der S-Parameter charakteristisch für die Annihilation mit Valenzelektronen, birgt der W-Parameter eine zusätzlich Information in sich. Die rumpfnahen Elektronen stehen im engen Zusammenhang mit dem Element. Folglich enthält der W-Parameter charakteristische Informationen über die chemische Umgebung des Annihilationsortes. Da sich das W-Parameter-Intervall relativ nah am Untergrund befindet, erfordert diese Art der Spektroskopie eine deutliche Erhöhung des Peak-zu-Untergrund-Verhältnisses. Eine Möglichkeit der Realisierung ist die Koinzidenzmessung, wie sie im nächsten Abschnitt vorstellt wird.

Der S-Parameter enthält alle Anteile der Annihilation, die zu einer geringen Dopplerverbreiterung der Annihilationslinie beitragen. Dies ist zum einen der Anteil der Valenzelektronen, die einen geringen Eigenimpuls besitzen, zum anderen sind es die Core-Elektronen deren Dopplerverbreiterung nicht in Ausbreitungsrichtung z stattfand. Der Großteil des S-Parameters wird durch die Valenzelektronen bestimmt. Existieren im Festkörper verschiedene für Positronen attraktive Zentren, so ist der S-Parameter eine Linearkombination aus den verschiedenen Anteilen. Dafür kommen die Oberfläche, die verschiedenen Defektspezies und das ungestörte Material in Frage.

$$S = I_{bulk}S_{bulk} + I_{Oberfl.}S_{Oberfl.} + \sum_i I_{Def.i}S_{Def.i}. \quad (1.4.5)$$

wendet.

Nach der Moderation beschleunigt man Positronen bis zu einer Energie von maximal 40 keV und implantiert sie in den Festkörper. Es ist dabei jede Energie einstellbar, so dass eine tiefenaufgelöste Positronenspektroskopie möglich ist. Der schematische Aufbau des Positronenstrahls an der Universität in Halle ist in der Abb. 1.13 dargestellt. Ausgehend von der Quelle werden die Positronen durch die Wolframfolie moderiert, durch magnetische Felder geführt, mittels Filter die monoenergetischen Positronen separiert und entsprechend der verwendeten Energie beschleunigt, bis sie auf die Probe treffen. Dies geschieht im Hochvakuum, um die mittlere freie Weglänge der Positronen zu vergrößern und somit die Verluste klein zu halten. Ein weiterer Vorteil dieses Systems ist die örtliche Trennung zwischen Positronenquelle und Probe, die eine Reduzierung des Untergrundes um eine Größenordnung ermöglicht. Im Spektrum sind somit kaum Quellanteile vorhanden.

1.4.4.1 Charakterisierung des Defektprofiles

Zur Bestimmung von Eigenschaften dünner Schichten mittels Positronenannihilation müssen die Implantationscharakteristika der Positronen bekannt sein. Dabei spielt die Implantationstiefe eine entscheidende Rolle. Diese ist materialspezifisch und energieabhängig. Das Implantationsprofil lässt sich näherungsweise durch das Makhov-Profil [Val83, Val84, Gho95] beschreiben:

$$\begin{aligned} P(z) &= \frac{mz^{m-1}}{z_0^m} e^{-(z/z_0)^m} \\ z_0 &= \frac{\bar{z}}{\Gamma(1 + \frac{1}{m})} \\ \bar{z} &= \frac{A}{\rho} E^n \end{aligned} \quad (1.4.6)$$

Neben der Implantationsenergie E , der Dichte des Materials ρ und der davon abhängenden mittleren Eindringtiefe \bar{z} wird das Makhov-Profil noch durch empirische Parameter beschrieben. Diese wurden an speziellen Schichtstrukturen experimentell ermittelt [Geb97]. In dieser Arbeit wird der Parametersatz :

$$\begin{aligned} A &= 2,75 \mu\text{g cm}^{-2} \text{keV}^{-n} \\ n &= 1,7 \\ m &= 2 \end{aligned} \quad (1.4.7)$$

verwendet. Dies hinreichend gute Anpassung der Leerstellenproftiefe nach Ionen-Implantationen in SiC und deren Simulation rechtfertigen die Verwendung dieses Parametersatzes. Für ausgewählte Implantationsenergien ist das Makhov-Profil für SiC in Abb. 1.14 dargestellt.

Anhand dieser Abbildung wird das Problem der Tiefenauflösung veranschaulicht. Zeigen Implantationsenergien unterhalb von 5 keV relativ scharfe Positroneneindringprofile, so enthalten höhere Energien Informationen über einen breiten Tiefenbereich, was zur Verschlechterung der Auflösung von Defektprofilen führt.

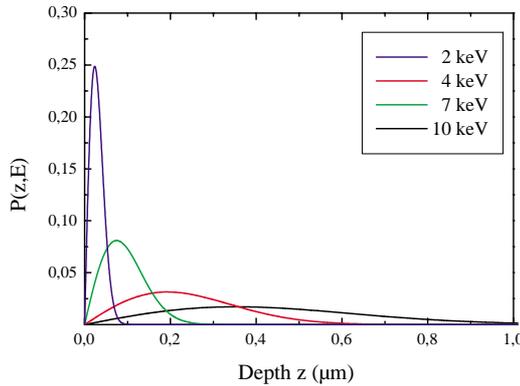


Abbildung 1.14: Darstellung der Implantationsprofile für 4 ausgewählte Positronenenergien. Mit zunehmender Implantationsenergie nimmt die Tiefenauflösung drastisch ab. Defektstrukturen in einer Tiefe größer als $1 \mu\text{m}$ sind somit nicht mehr auflösbar. Da die Oberfläche ebenfalls eine Senke für Positronen ist, muss ein Kompromiss zwischen dem Oberflächeneinfluss und der durch die Implantationsenergie begrenzten Tiefenauflösung getroffen werden.

Nach der Implantation thermalisiert das Positron und diffundiert durch den Festkörper mittels thermischer Energie. Ist der Festkörper homogen, so kann die Diffusion klassisch beschrieben werden. Im eindimensionalen Fall gilt:

$$\frac{\partial}{\partial t}c(z,t) = D_+ \frac{\partial^2}{\partial z^2}c(z,t) - \frac{\partial}{\partial z}(v_d(z)c(z,t)) - \lambda_{eff}c(z,t). \quad (1.4.8)$$

$c(z,t)$ beschreibt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Positrons zur Zeit t in einer Tiefe z . Mit D_+ wird der Positronen-Diffusionskoeffizient und λ_{eff} die effektive Annihilationsrate bezeichnet. v_d ist die feldabhängige Driftgeschwindigkeit. Die mittlere Diffusionsweglänge ist ein Ergebnis aus der Analyse tiefenaufgelöster Positronenspektroskopie. Sie steht mit dem Diffusionskoeffizient in folgendem Zusammenhang [Pus83]:

$$D_+ = L_{+,eff}^2 \lambda_{eff}. \quad (1.4.9)$$

Die Beweglichkeit ist direkt proportional zum Diffusionskoeffizienten und drückt sich nach der Nernst-Einstein-Beziehung:

$$\mu_B = \frac{eD_+}{k_B T} \quad (1.4.10)$$

aus. Die effektiven Diffusionsweglängen in defektfreien Halbleitern besitzen typische Werte von 100 bis 300 nm. Eine direkte Folge der Diffusion ist die Verbreiterung des Positronen-Implantationsprofiles und eine sich daraus resultierende schlechte Tiefenauflösung.

Die Implantation und Diffusion der Positronen in Festkörpern kann durch das Programm VEPFIT [Vee95] simuliert und unter Verwendung von Blockdefektprofilen den experimentellen Daten angepasst werden. Dieses Programm löst numerisch die Diffusionsgleichung unter Berücksichtigung der Positronenenergie und des Defektprofils. Es erfolgt eine äquidistante Zerlegung des Implantationsprofiles in Intervalle und eine Anpassung der Randbedingungen. Ein wichtiges Ergebnis der VEPFIT-Anpassung ist die effektive Diffusionsweglänge, welche in direktem Zusammenhang mit der Defektkonzentration steht. Das Auflösungsvermögen einer Defektstruktur in Abhängigkeit von der Oberfläche ist in Abb. 1.15 dargestellt. Anhand dieser Abbildung wird deutlich, dass derartig komplizierte Defektstrukturen ab einer Tiefe von 100 nm von der Oberfläche nicht mehr auflösbar sind.

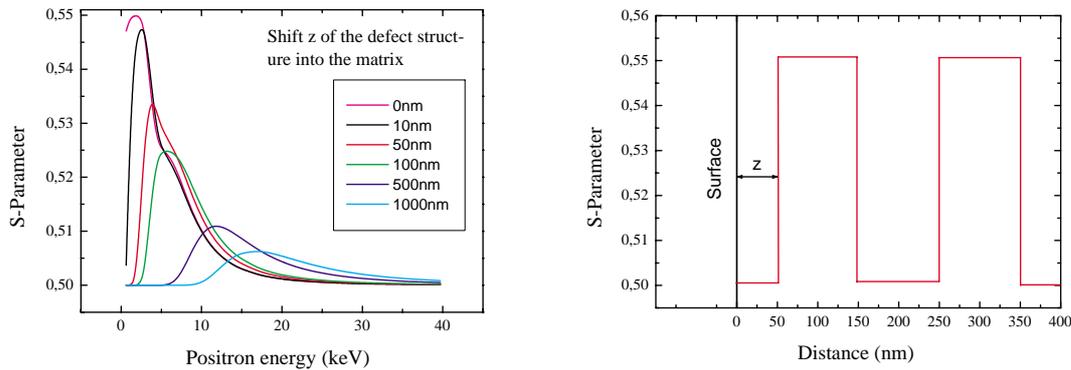


Abbildung 1.15: Simulation der Tiefenauflösung anhand einer Doppelstruktur mit dem Programm VEPFIT. Bei einer Tiefe der Struktur von 500 nm lässt sich das Profil nicht mehr eindeutig nachweisen.

Befinden sich dennoch komplizierte Defektstrukturen in dieser Tiefe, so kann eine Verbesserung der Strukturanalyse durch Abtragen der Oberfläche erreicht werden. Dies wurde erfolgreich an hochenergetisch Silizium-implantiertem (3.5 MeV) Cz-Silizium nachgewiesen [Kra01, Kra00].

1.5 Doppler-Koinzidenz-Spektroskopie

Bei konventioneller Doppler-Spektroskopie befindet sich der Hochimpulsanteil nahe des Untergrundes. Gerade dieser Anteil enthält die chemische Information über die Umgebung des Annihilationsortes. Mit der Nutzung der Koinzidenz beider Annihilations- γ -Quanten wird das Peak-zu-Untergrundverhältnis um ca. eine Größenordnung verbessert. Im Gegensatz zur normalen Doppler-Verbreiterungs-Spektroskopie finden hier zwei Detektoren Anwendung, die beide γ -Quanten in Koinzidenz registrieren. Bei der Annihilation entstehen diese zeitgleich, nahezu kollinear und besitzen etwa die gleiche Energie (Dopplerverschiebung). Durch das Kriterium der zeitgleichen Annihilation, d. h. die Wahl einer geeigneten Koinzidenzzeit (typisch $0,5 \mu\text{s}$), werden ungültige Ereignisse im Spektrum eliminiert und somit der Untergrund reduziert. Eine weitaus größere Reduktion des Untergrundes erhält man unter Ausnutzung des Energieerhaltungssatzes, das heißt, die Summe beider registrierter γ -Quanten ist konstant. Bei dieser Methode misst man die Energie beider Annihilations- γ -Quanten mit zwei unabhängigen Germanium-Detektoren.

Trägt man diese in einen zweidimensionalen Diagramm auf, so entsteht eine Grafik, wie sie in der Abb. 1.16 zu sehen ist. Die Energieerhaltung spiegelt sich in der Diagonalen (gestrichelte Linie) wider, d. h. eine Impulserhöhung im Detektor 1 führt zu einer Impulserniedrigung im Detektor 2. Entlang der Diagonalen empfiehlt es sich, ein Auswertintervall zu verwenden, welches kleiner als die Auflösungsfunktion des Systems ist. Diese wurde mit $0,98 \text{ keV}$ für das verwendete Gesamtsystem bestimmt. Durch die Kombination der

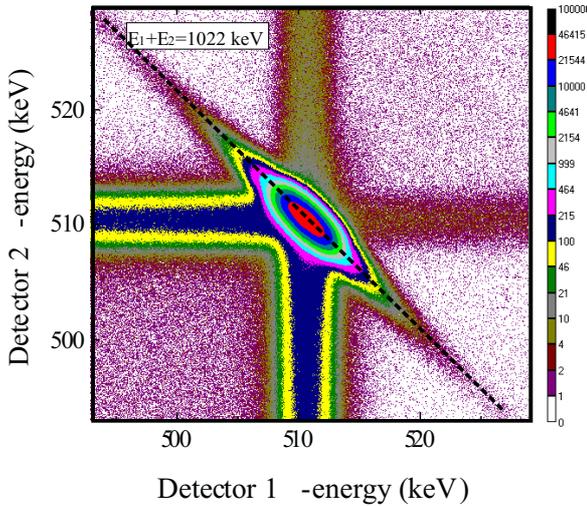


Abbildung 1.16: Zweidimensionales Koinzidenzspektrum von 4H n-Typ SiC Bulk-Material mit einer Statistik von 35 Mio. Ereignissen. Entlang der Diagonalen (gestrichelte Linie) befinden sich die Ereignisse, welche zum einen eine Impulserhöhung und analog dazu eine Impulserniedrigung bei der Annihilation entsprechend des Impulserhaltungssatzes erfuhren. Die breiten parallel zu den Achsen sich befindenden Bänder sind zufällige Untergründereignisse koinzident mit gültigen Annihilationsergebnissen.

Detektoren verbessert sie sich die Auflösungsfunktion theoretisch um den Faktor von $\sqrt{2}$ gegenüber den Einzelsystemen, was experimentell nahezu erreicht wurde. Die Reduktion des Untergrundes mit der Anwendung dieses Systems ist in der Abb. 1.17 verdeutlicht. Das Peak-zu-Untergrund-Verhältnis verbessert sich um drei Größenordnungen. Die Auswertung derartiger Spektren ist nun bis zu einer Impulsverschiebung von $45 \times 10^{-3} m_0 c$ gegenüber $20 \times 10^{-3} m_0 c$ möglich. Allgemein lässt sich die Impulsverteilung der Positronenannihilation wie folgt angeben:

$$\rho(\mathbf{p}) = \pi r_0 c \sum_j \left| \int d\mathbf{r} \exp[-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}] \psi_+(\mathbf{r}) \psi_{-j}(\mathbf{r}) \sqrt{\gamma_j(\mathbf{r})} \right|^2. \quad (1.5.1)$$

- $\psi_{-j}(\mathbf{r})$... Elektronenwellenfunktion
- $\psi_+(\mathbf{r})$... Positronenwellenfunktion
- r_0 ... klassischer Elektronenradius
- c ... Lichtgeschwindigkeit
- $\gamma_j(\mathbf{r})$... Enhancementfaktor
- \mathbf{p} ... Impulsvektor
- \mathbf{r} ... Ortsvektor

Die Summation erfolgt über alle beteiligten Elektronenzustände j . γ_j ist der vom Zustand j abhängige Enhancementfaktor. Die theoretischen Rechnungen zeigen eine gute Übereinstimmung für den Hochenergieanteil des Spektrums [Sta99]. Dieser wird ausschließlich durch die Core-Elektronen bestimmt. Da diese im Vergleich zum isolierten Atom nahezu unverändert sind, d.h. keinen wesentlichen Beitrag an der Bindung im Kristall besitzen, ist der Hochimpulsanteil mit geringem Aufwand berechenbar.

Im binären Halbleiter können die spezifischen Einfachleerstellen relativ einfach beschrieben werden. Liegt beispielsweise im SiC eine Silizium-Leerstelle vor, so ist die nächste Umgebung der Leerstelle von Kohlenstoffatomen bestimmt. Für eine Kohlenstoff-Leerstelle

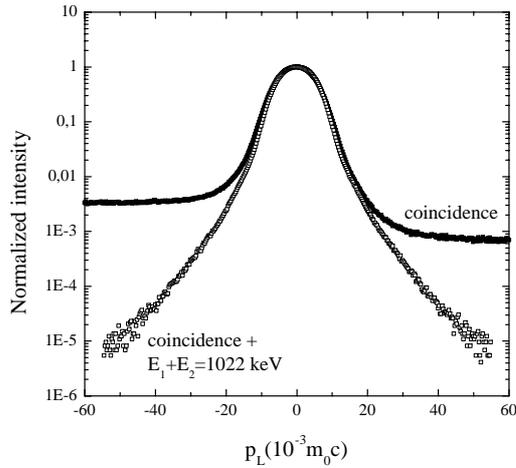


Abbildung 1.17: Darstellung der Reduzierung des Untergrundes eines Koinzidenzspektrums von 4H n-Typ SiC Bulk-Material. Die Anwendung der Koinzidenzanordnung verbessert das Peak-zu-Untergrund-Verhältnisses um eine Größenordnung verglichen mit der Anwendung eines Detektors. Um zwei weitere Größenordnungen verbessert es sich unter Einbeziehung des Energieerhaltungssatzes.

tragen nur die Siliziumelektronen in erster Näherung zur Annihilation bei. Die Bestimmung des Hochimpulsanteils der Annihilation der Elemente Kohlenstoff und Silizium ermöglicht einen Vergleich der dominierenden Einfangzentren im SiC, da sich die Hochimpulsanteile für die Einfachleerstellen im SiC unterscheiden.

Im Falle von größeren Leerstellenkomplexen ist diese Betrachtungsweise nicht geeignet, da die Anteile der an der Annihilation beteiligten Elektronen der einzelnen Spezies nicht gleichverteilt sind. Dies ist leicht einzusehen, wenn man die Elektronen-Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der Abb. 1.19 für Silizium und Kohlenstoff miteinander vergleicht. Die Valenzelektronen der Siliziumatome sind stärker delokalisiert und besitzen deshalb einen größeren Anteil bei der Annihilation.

Berechnungen über Impulsverteilungen liegen für verschiedene Elemente vor [Geb00,

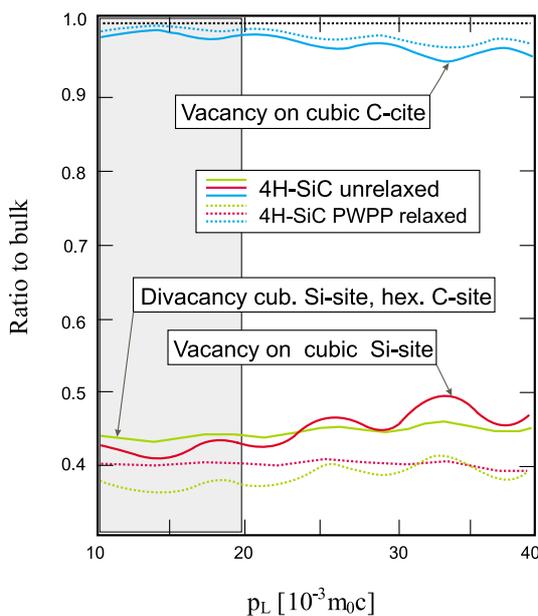


Abbildung 1.18: Theoretische Berechnungen des Hochimpulsanteils der Positronenannihilation von 4H-SiC. Die gestrichelten Linien präsentieren die Ergebnisse unter Berücksichtigung der Relaxation. Die Vergleichbarkeit mit experimentellen Ergebnissen wird mit einer unteren Impulsschwelle von $20 \times 10^{-3} m_0 c$ angegeben. Die Oszillationen sind anhand der experimentellen Daten nicht direkt vergleichbar. [Sta01]

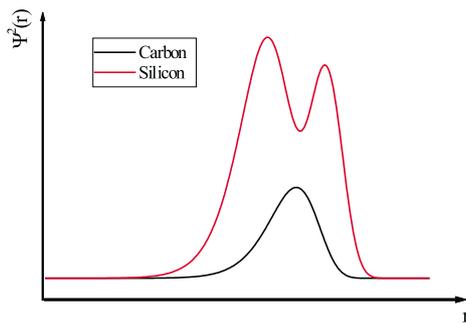


Abbildung 1.19: Schematische Darstellung der Elektronen-Aufenthaltswahrscheinlichkeit von Silizium- und Kohlenstoffatomen [Sta01a].

Sta99]. Die Linienform der berechneten Kurven stimmen im Hochimpulsanteil relativ gut mit dem Experiment überein. Die zu groß bestimmte Intensität erklärt sich mit der unzureichenden Einbeziehung aller an der Annihilation beteiligten Elektronen. Diese Arbeit diskutiert das qualitative Hochimpulsverhalten und vernachlässigt die Intensität. Dies ist notwendig, da für die Annihilation kein vollständiger Einfang der Positronen in die Defekte zu erwarten ist. Um detaillierte Aussagen über die Linienform zu erhalten, werden analog zur Theorie die Spektren auf das defektfreie Material normiert. Die Rechnungen zeigen für die Kohlenstoff- und die Silizium-Leerstelle ein gegenläufiges Verhalten. Für die Silizium-Leerstelle ist ein Ansteigen in der Linienform zu erwarten. Einen etwas flacheren Anstieg liefert die Berechnung der Doppelleerstelle. Von den drei möglichen Doppelleerstellen ($V_C V_{Si}$, $V_C V_C$, $V_{Si} V_{Si}$) wird in dieser Arbeit nur die Doppelleerstelle in nächster Nachbarschaft ($V_C V_{Si}$) betrachtet. In dieser Simulation finden auch Relaxationsprozesse der Leerstellen Berücksichtigung. Am Impulsverhalten der Einzelleerstellen ändert sich dabei qualitativ nicht viel, jedoch hat die Doppelleerstelle einen nahezu konstanten Verlauf.

Ein weiteres Gebiet der Interpretation bietet die Diskussion von Leerstellenkomplexen.

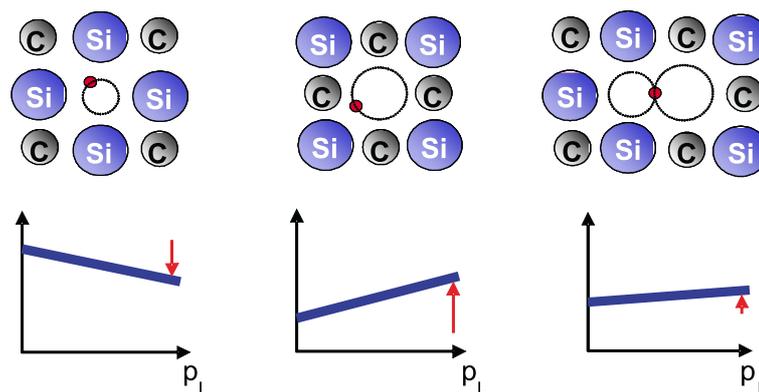


Abbildung 1.20: Schematischer Verlauf des Hochimpulsanteils nach theoretischen Berechnungen für die Kohlenstoff-, Silizium- und Doppelleerstelle in Siliziumkarbid. Für den Hochimpulsanteil der Doppelleerstelle hebt sich das ansteigende Verhalten der Silizium-Leerstelle mit dem abfallenden Verhalten der Kohlenstoff-Leerstelle nahezu auf [Tor02].

Diese enthalten neben der Leerstelle ein oder mehrere Fremdatome. Unterscheidet sich dieses im Hochimpulsanteil des Spektrums von den Elementen der Matrix, so ist eine Identifikation derartiger Komplexe möglich. Diese Methode fand bei der Untersuchung an verschieden dotierten GaAs Kristallen erfolgreich Anwendung [Geb97].

2. Defektgenerierung durch Bestrahlung

Die Herstellung elektronischer Bauelemente auf Siliziumkarbidbasis wird durch Ionenimplantation in Epitaxieschichten verwirklicht. Um die bei der Implantation entstehenden meist auch elektrisch aktiven Defekte zu charakterisieren, schädigt man den Kristall entweder definiert durch Elementarteilchen-Bestrahlung, wie Elektronen, Protonen oder Neutronen, oder durch Ionenimplantation der entsprechenden Dotanten. Ein in ein Festkörper implantiertes Teilchen gibt seine Energie durch verschiedene Wechselwirkungen an die Matrix ab. Dabei kann die Abgabe der Energie vorwiegend mit Wechselwirkungen des Teilchens mit den Atomkernen und den äußeren Elektronenschalen beschrieben werden. Charakteristisch für die Schädigung ist die Art der Teilchen und die Energie, mit der sie implantiert werden.

2.1 Grundlagen der Betrahlungstheorie

Eine wesentliche Größe der Bestrahlung ist der Fluss ϕ , der die Zahl der pro Volumen erzeugten Defekte bestimmt. Er ergibt sich aus dem Produkt der Flächendichte n der Bestrahlungsteilchen und der Geschwindigkeit v der implantierten Teilchen.

$$\phi = n \cdot v. \quad (2.1.1)$$

Die Dichte der primär erzeugten Defekte ν_d pro Zeit ist proportional zum Fluss und zur Atomdichte.

$$\nu_d = \sigma \phi N. \quad (2.1.2)$$

Mit σ wird der Wirkungsquerschnitt für atomare Gitterplatzveränderungen bezeichnet. Um die Konzentration der Defekte durch Bestrahlung zu erhalten, muss die Dosis quantifiziert, d.h. die Anzahl der pro Fläche eingestrahlteten Teilchen bestimmt werden. Die Konzentration der Defekte ergibt sich zu:

$$n_d = \sigma N \Phi. \quad (2.1.3)$$

Kenngrößen der Implantation sind die Energie (E) der eingestrahlteten Teilchen sowie die an das Gitter übertragene Energie (T). Die beiden Größen spiegeln sich im Wirkungsquerschnitt wider, welcher wie folgt definiert ist:

$$\sigma(E) = \int d\sigma(E, T). \quad (2.1.4)$$

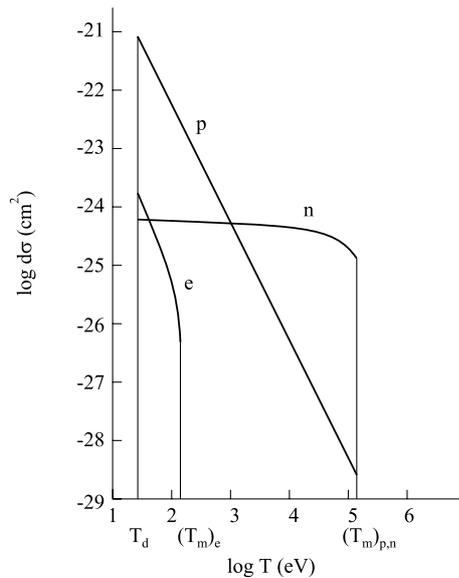


Abbildung 2.1: Darstellung des differentiellen Wirkungsquerschnitts der auf die Atome übertragenen Energie $d\sigma$ für Elektronen, Protonen und Neutronen mit einer Energie von 1 MeV [Cor75].

Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist für unterschiedliche dominierende Wechselwirkungsmechanismen verschieden. So kann er beim Bestrahlen mit neutralen Teilchen nach dem klassischen Kugelmodell beschrieben werden:

$$d\sigma = -2\pi(R_1 + R_2)^2 \cos(\theta) \sin(\theta) d\theta. \quad (2.1.5)$$

R_1 ... Radius des Atoms in der Matrix

R_2 ... Radius des Implantationsatoms

θ ... Streuwinkel

Im Fall von geladenen Teilchen wie Elektronen, Protonen oder Ionen dominiert die Coulombwechselwirkung und man verwendet den Rutherford-Streuquerschnitt:

$$d\sigma = \frac{\pi Z^2 e^2 M dT}{E m_e T^2}. \quad (2.1.6)$$

Z ... Ordnungszahl des Implantats

M ... Masse des eingestrahlteten Teilchens

m_e ... Elektronenmasse

T ... übertragene Energie

e ... Elementarladung

E ... Energie der Teilchen

In Abb. 2.1 werden die Unterschiede der verschieden differentiellen Wirkungsquerschnitte ausgewählter Elementarteilchen deutlich. Für implantierte Teilchen sind die wichtigsten Mechanismen der Energieabgabe die elastischen Kernstöße und die inelastischen Wechselwirkungen mit den Elektronen.

2.2 Elastische Kernwechselwirkung

Für die Beschreibung dieser Wechselwirkung eignet sich wiederum das Kugelmodell, welches repräsentativ für das Teilchenmodell ist. Da die Geometrie im Fall der Festkörperbestrahlung eindeutig festgelegt ist, lässt sich der Mechanismus mit einer Zweikörperwechselwirkung beschreiben. Das Teilchen mit der Energie E_1 gibt einen Teil seiner Energie an das bis dato ruhende Teilchen ab, wobei sich Richtung und Energie beider Teilchen ändern. Quantifiziert man die maximal übertragbare Energie, so folgt aus dem Impuls- und Energieerhaltungssatz :

$$T_m = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E. \quad (2.2.1)$$

Die maximal übertragbare Energie tritt im Fall der gleichen Massen $M_1 = M_2$ auf. Die übertragbare Energie der Teilchen ist ein Produkt aus einem Massenterm und der Energie der Teilchen. Bei der Bestrahlung von Elementarteilchen wie Elektronen, Protonen oder Neutronen ist der Massenterm (Gl. 2.2.1) relativ klein, so dass hier große Energien notwendig sind, um mit Ionen vergleichbare Strahlenschäden zu generieren. Die klassische Beschreibung der Energieabgabe ist hier nicht mehr gültig, so dass relativistische Terme Berücksichtigung finden. Die Gleichung 2.2.1 transformiert sich zu:

$$T_m = 2 \frac{m_e E}{M_2} \left(\frac{E}{m_e c^2} + 2 \right) \quad (2.2.2)$$

für den Fall eines Elektrons. Die übertragene Energie lässt sich unter Berücksichtigung der Geometrie im klassischen Fall wie folgt darstellen:

$$T_n(E, p) = \frac{2M_1M_2E}{(M_1 + M_2)^2} (1 - \cos(\theta)). \quad (2.2.3)$$

Unter Berücksichtigung der Relativistik beträgt die übertragene Energie für Elektronen:

$$T_n(E, p) = \frac{2m_e E}{M_2} \left(\frac{E}{m_e c^2} + 2 \right) (1 - \cos(\theta)). \quad (2.2.4)$$

Die Beschreibung der Schädigung von Kristallen erfolgt unter der Annahme, dass die übertragene Energie größer als die Verlagerungsenergie T_d ist. Im anderen Falle oszilliert anfangs das betroffene Atom etwas stärker um seine Gleichgewichtslage, bevor es die zusätzliche Energie an das Gitter abgibt. Die mechanische Energie wird so ausschließlich in Wärme umgewandelt und führt nicht zu Schädigung des Gitters. Der Wirkungsquerschnitt für Ionen definiert sich nach [Bou83] durch:

$$\sigma(E) = \frac{\pi Z_1^2 Z_2^2 e^4 M_1}{EM_2} \left(\frac{1}{T_d} - \frac{1}{T_m} \right). \quad (2.2.5)$$

Z_1 ... Ordnungszahl des Implantats

Z_2 ... Ordnungszahl des Targetatoms

M_1 ... Masse des eingestrahnten Teilchens

M_2 ... Masse des Targetatoms

m_e ... Elektronenmasse
 E ... Implantationsenergie
 e ... Elementarladung

Der Wirkungsquerschnitt der Elektronenstreuung am Kernpotenzial, wie sie Mott beschreibt [Mot29], lässt sich für Atome mit geringer Masse wie folgt darstellen [McK48]:

$$\sigma(E) = \pi \left[\frac{Ze^2\gamma}{m_e c^2 (\gamma^2 - 1)} \right]^2 \left[\left(\frac{T_m}{T_d} - 1 \right) - \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma^2} \ln \frac{T_m}{T_d} + \alpha \pi Z \sqrt{\frac{\gamma^2 - 1}{\gamma^2}} \left(\sqrt{\frac{T_m}{T_d} - 2} - \ln \frac{T_m}{T_d} \right) \right]. \quad (2.2.6)$$

Mit γ wird der relativistische Ausdruck $\sqrt{1 - v^2/c^2}$ bezeichnet und α ist die Feinstrukturkonstante.

2.3 Streuung an Gitterelektronen

Teilchen mit einer Ladung erzeugen auf ihrem Weg nach der Implantation durch den Festkörper atomare Gitterveränderungen. Sie werden durch Streuung an Elektronen des Festkörpers abgebremst, wobei die Targetatome ionisiert werden können, d.h. es wird ein Elektron von der äußeren Schale des Atoms herausgelöst. Der Energieverlust lässt sich darstellen mit:

$$-\frac{dE}{dx} = N_e \int_{T_{min}}^{T_{max}} T d\sigma(E, T). \quad (2.3.1)$$

Die Elektronendichte ist N_e , und die minimal und maximal übertragbare Energie auf ein Elektron ist T_{min} bzw. T_{max} . Die minimal übertragbare Energie ist die Ionisationsenergie I . Ist die Energie kleiner als die Ionisationsenergie, so kommt es zu keiner merklichen Abbremsung der implantierten Teilchen. Für ein geladenes Teilchen folgt:

$$-\frac{dE}{dx} = N_e \int_I^{4(m/M)E} \frac{\pi Z^2 e^4 dT}{ET}, \quad (2.3.2)$$

was zum Ergebnis:

$$-\frac{dE}{dx} = N_e \frac{T \pi Z^2 e^4 M}{Em} \ln \frac{4mE}{MI} \quad (2.3.3)$$

führt. Diese Gleichung gilt nicht für kleine Energien, da hier Quasiteilchen gebildet werden können, die zu einem Elektronenaustausch zwischen Ion und Targetatom führen können. Für die in dieser Arbeit verwendeten Implantationsenergien spielt diese Betrachtungsweise keine Rolle und wird vernachlässigt.

2.4 Implantationscharakteristika der Teilchen im Festkörper

Elektronische Bauelemente haben einen 3-dimensionalen Charakter. Für die Funktionsfähigkeit eines Bauelementes ist die Lage der implantierten Ionen somit besonders wichtig. Die

mittlere Reichweite lässt sich ausdrücken mit :

$$R(E) = \int_0^E \frac{dE}{-(dE/dx)}. \quad (2.4.1)$$

Für einzelne Teilchen ist der Gesamtweg R nicht messbar, jedoch erhalten wir einen praktischen Zugang durch die sogenannte projizierte Reichweite R_p und deren Standardabweichung ΔR_p . Für leichte Teilchen wie Elektronen, spielt der Energieverlust keine entscheidene Rolle, so dass das Defektprofil aufgrund des geringen Wirkungsquerschnitts nahezu keine Tiefenabhängigkeit besitzt (homogene Schädigung innerhalb des gesamten Kristalls). Für die schwereren Teilchen muss die Wechselwirkung mit der Matrix berücksichtigt werden und es ergibt sich eine Reichweiteverteilung $R(x)$ nach der LSS-Theorie¹:

$$R(x) = \frac{N_D}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \exp\left(-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right). \quad (2.4.2)$$

Die implantierte Dosis ist N_D und die maximal erreichbare Dotierung liegt bei $x = R_p$ und ergibt sich zu:

$$N_{max} = \frac{N_D}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p}. \quad (2.4.3)$$

Diese Betrachtungsweise in Verbindung mit kinetischen Prozessen wird in dem Programm SRIM2000 (The stopping range of ions in matter) verwendet und in dieser Arbeit angewandt, um Defektprofile zu simulieren.

2.5 Energetische Betrachtung der Defektentstehung

Ein Implantationsteilchen, welches mit der Matrix wechselwirkt, kann zur Defektbildung beitragen. Die dazu aufzubringende Energie lässt sich durch drei Anteile beschreiben:

- Die Energie, welche zum Aufbrechen der Bindungen der umliegenden Atome notwendig ist.
- Die Energie, die das Zwischengitter aufweitet, damit das Atom seinen lokalen Platz verlassen kann.
- Die Energie, mit der die entstandene Leerstelle auf die umgebende Matrix wirkt, d.h. sie relaxiert.

Die übertragbare Energie ist abhängig von der Teilchenart und deren Energie. Im Falle der Elektronenbestrahlung mit einer Energie unterhalb 650 keV entstehen Frenkel-Paare. Diese nahen Frenkel-Paare rekombinieren bereits bei geringen thermischen Energien. Erst oberhalb einer Energie von 650 keV sind die Zwischengitteratome soweit von der Leerstelle entfernt, dass sie keine Wechselwirkung miteinander haben. Ein Frenkel-Paar ist somit der einfachste Defekt, der durch Schädigung des Kristalls auftreten kann und folglich mit

¹nach Lindhard, Scharff und Schiøtt benannte Theorie

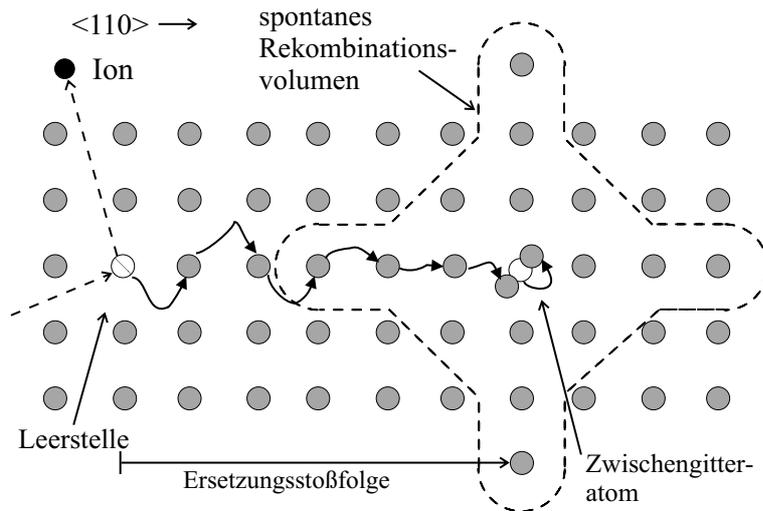


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung der Erzeugung von Frenkel-Paaren nach Ionenimplantation. Das Frenkel-Paar ist stabil, wenn sich die Leerstelle außerhalb des spontanen Rekombinationsvolumens befindet [Ber92].

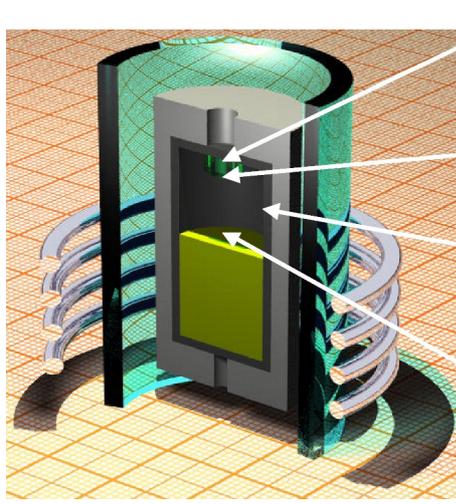
hoher Wahrscheinlichkeit auffindbar ist. Die Zwischengitteratome haben in Festkörpern unterschiedliche Beweglichkeiten, so dass deren thermische Stabilitäten verschieden sind. Besonders bei Hochtemperaturbestrahlung ist dies zu beachten, da hier erzeugte Defekte schon während der Implantation ausheilen können. In der Regel sind Zwischengitteratome oder Leerstellen bereits bei Raumtemperatur beweglich, so dass diese ebenfalls verschwinden. Im Falle von Siliziumkarbid trifft dies jedoch nicht zu, da die Diffusion durch das Gitter mit großen Energien verbunden ist. Die auf die Zwischengitteratome übertragene Energie ist meist größer als die minimal benötigte Energie zur Defektnukleation. Es kommt somit zur sekundären Defektbildung, die zur Ausbildung von Defektkaskaden führt. Dieser Prozess findet vorwiegend bei Ionenimplantation statt, wo das Teilchen durch diverse Wechselwirkungen mit der Matrix seine Energie verliert.

3. Siliziumkarbid

Siliziumkarbid (SiC) hat sich in der letzten Zeit zu einem vielversprechenden Halbleitermaterial entwickelt. Neben Galliumnitrid und Zinkoxid ist es einer der Schwerpunkte im Forschungsbereich der Materialien mit großer Bandlücke. Die Eigenschaften, wie große Widerstandsfähigkeit gegen kosmische Strahlung, hohe Durchbruchfeldstärken oder angepasste Bandlücken durch verschiedene Polytypen sind Ansatzpunkte der Industrie, weitere Forschungen zur Charakterisierung dieses Materials durchzuführen, um mit diesem Material Bauelemente oder Träger für Bauelemente herzustellen. Es werden großen Anstrengungen unternommen, Defekte in diesem Material zu identifizieren und zu quantifizieren, jedoch gibt es keine Untersuchungsmethode, die eine vollständige Analyse der Defekte ermöglicht.

3.1 Kristallzucht und Epitaxie

Die Herstellung von SiC Bulk-Kristallen ist sehr energieaufwendig und somit sehr teuer. Die ökonomische Produktion von elektronischen Bauelementen auf SiC Basis erfordert Kristalle der Dimension, wie sie mit Silizium (~ 30 cm) oder Galliumarsenid (~ 20 cm) vergleichbar sind. Die Realisierung erweist sich aber als deutlich schwieriger, so dass die



at the growth interface
 $\text{Si}_2\text{C}^V + \text{SiC}_2^V \Rightarrow 3\text{SiC}^S$
 $R\langle 11-20 \rangle >_{10-20\%} R\langle 1-100 \rangle_{10-20\%} > R\langle 000-1 \rangle$
 $[\text{N}_2] \uparrow (0001)\text{Si}, (11-20), (1-100) \text{ to } (000-1)\text{C}$

in the vapor phase
 Stefan - and diffusive flow across L
 $\alpha_e(T, t) = [\text{Si}]/[\text{C}]$ (e - dynam. equilibrium)

at the crucible wall
 $\text{Si}^V + \text{C}^S \rightleftharpoons \text{SiC}^V$
 Si - loss

in the source powder
 $4\text{SiC}^s \Rightarrow \text{C}^s + \text{Si}^V + \text{SiC}_2^V + \text{Si}_2\text{C}^V$
 graphitisation and sintering
 (decreasing evaporation coefficient)
 Si-excess (change of α_e)

Abbildung 3.1: Schematische Darstellung eines Induktionsofens für die Herstellung von SiC-Substratmaterial. Auf der rechten Seite sind die dazugehörigen chemischen Prozesse dargestellt [Sic01].

maximale Größe von Bulk-Kristallen momentan 3 Zoll, d. h. ca. 7,5 cm beträgt (In Einzelfällen erzielt man bereits 4 Zoll). Das heteroepitaxiale Wachstum konnte nur im Fall für 3C-SiC erfolgreich durchgeführt werden, wobei die Defektkonzentration akzeptabel ist [ESC00]. Im Sublimationswachstum lagert sich SiC aus der Gasphase an einen Keim mit geringerer Temperatur an (z. B. modifizierte Lely-Methode [Lel55]).

Die Prozess-Parameter für das Kristallwachstum und die Kristallqualität sind die Substrattemperatur, die Quellmaterialtemperatur und der somit entstehende Temperaturgradient zwischen Substrat und Quellmaterial. Die Transportmechanismen im Sublimationswachstum sind komplex. Die Wachstumsrate steigt mit steigender Quellmaterialtemperatur, zunehmendem Abstand zwischen Quellmaterial und Keim, abnehmendem Druck und abnehmendem Kristall-Quell-Material-Abstand. In Abb. 3.1 ist ein Zuchtiegel nach der Lely-Methode dargestellt [Lel55]. Eine entscheidende Modifikation dieser Methode für höhere Wachstumsraten und bessere Qualitäten ist die Kühlung des Zuchtkeimes.

Ein große Herausforderung ist die Minimierung der durch das Wachstum entstehenden Defekte. Besonders Nano- und Mikroröhren (auch Mikropipes genannt), welche eine röhrenförmige langgezogene Struktur besitzen, verschlechtern die Kristallqualität. Eine Epitaxieschicht, welche auf einem Substrat mit hoher Mikropipe-Dichte aufwächst, besitzt ebenfalls eine hohe Konzentration an Mikropipes. Eine Mikroröhre in einem elektronischen Bauelement würde dessen Funktionsfähigkeit zerstören. Ein Kristall mit Mikro- und Nanopipes ist in der folgenden Abb. 3.2 [DFG01] dargestellt:

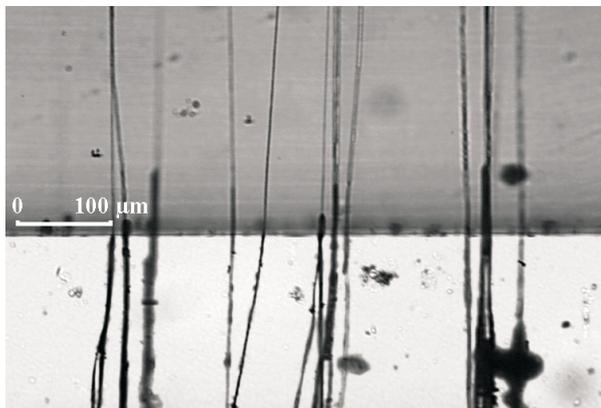


Abbildung 3.2: SiC Kristall mit Mikropipes im Lichtmikroskop [DFG01]

Ein weiteres Problem bei der Herstellung von SiC-Kristallen ist die Homogenität des Polytypes. In einem Kristall kann es zum Polytypwechsel kommen. Dieser wird meist durch eine auf einen Defekt zurückzuführende Gitteranpassung initialisiert. Die Gitterkonstanten der verschiedenen Polytypen unterscheiden sich voneinander, so dass eine leichte Verzerrung des Kristallgitters einen Polytypwechsel zur Folge haben kann. Des weiteren hängt der entstehende Polytyp von der Oberfläche ab, auf der er aufwächst. Ein Kristall mit verschiedenen Domänen an Polytypen ist in Abb. 3.3 [DFG01] zu sehen. In dieser Abbildung ist am Rand die Anwesenheit von Mikropipes nicht zu übersehen. Die farblichen Un-

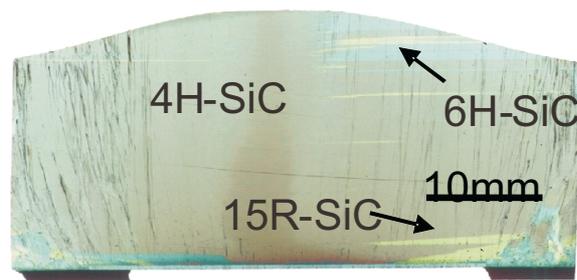


Abbildung 3.3: SiC Kristall mit verschiedenen Bereichen an Polytypen [DFG01]

terschiede der Polytypen ergeben sich aus den unterschiedlichen Absorptionskoeffizienten unter Verwendung von ultraviolettem Licht. Weitere bei der Kristallzucht vorkommende ausgedehnte Defekte sind Versetzungen, Siliziumeinschlüsse oder Kohlenstoffeinschlüsse [DFG01]. Die elektronischen Bauelemente werden ausschließlich auf der Epitaxieschicht

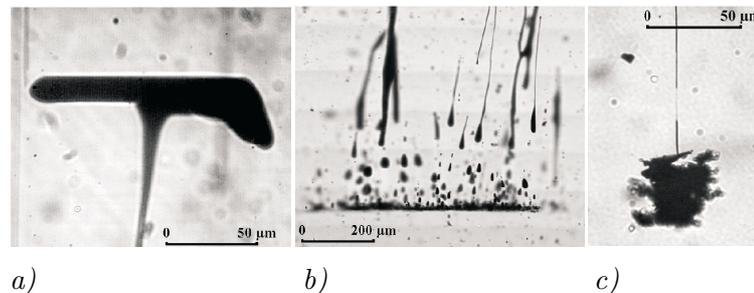


Abbildung 3.4: SiC Kristall mit einem Hohlraum a) sowie Silizium- b) und Kohlenstoffeinschlüssen c) [DFG01]

hergestellt. Ihre Qualität hängt entscheidend von der Substratqualität ab, so dass der Aufwand, Bulk-Kristalle hinsichtlich der Defekte zu charakterisieren, gerechtfertigt ist.

3.1.1 Epitaktisches Wachstum

Für die Herstellung dieser Schichten stehen verschiedene Verfahren zur Verfügung. Diese sind die Sublimationsepitaxie (SE-sublimation epitaxy), die Flüssigphasenepitaxie (LPE-liquid phase epitaxy) und die chemische Gasphasendeposition (CVD-chemical vapor deposition). Die am weitesten verbreitetste Methode zur Herstellung von Epitaxieschichten ist die CVD. Das grundlegende Prinzip fand schon bei der Silizium-Kristallzucht Anwendung und folglich sind die physikalischen Phänomene weitestgehend bekannt. Die Trägergase Argon oder Wasserstoff transportieren die Reaktionsgase ($SiCl_4 + CCl_4$, $HSiCl_3 + C_6H_{14}$, $SiH_4 + C_3H_8$, $SiCl_4 + C_6H_{14}$, $SiCl_4 + C_3H_8$) in die Reaktionskammer, wo sie homo- oder heteroepitaktisch aufwachsen. Aufgrund der hohen Substratpreise (70% der Gesamtkosten) wird auch heutzutage auf dem Gebiet der heteroepitaxialen Zucht geforscht. Die Vorteile des Materials Silizium als Trägersubstrat sind perfekte Kristallstrukturen, große Flächen und eine gute Orientierungskontrolle. Die Gitteranpassung von 20%

(3C-SiC) verhindert ein defektfreies heteroepitaxiales Aufwachsen. Mittlerweile existieren 3C-Epitaxieschichten auf Silizium, die nahezu versetzungsfrei sind [ESC00]. Die Polytypen 6H und 4H werden derzeit ausschließlich homoepitaktisch hergestellt, da die Defektkonzentration der heteroepitaxialen Schicht zu groß für eine industrielle Anwendung ist. Ein schematischer Ablauf für die Herstellung einer Epitaxieschicht im CVD-Verfahren ist in Abb. 3.5 dargestellt. Anhand der Wachstumstemperaturen unterhalb von 1400°C ist zu sehen, dass die Herstellung der Schicht mit weniger Energieaufwand im Vergleich zum Substratmaterial verbunden ist. Der Ablauf lässt sich folgendermaßen beschreiben. Nach einer Ätzzeit erfolgt eine Phase der Karbonisierung bis anschließend die Schicht aufwächst. Die Temperaturverläufe können sich durchaus unterscheiden und wurden empirisch bestimmt. Mit Hilfe dieses Verfahrens sind Schichtdicken von bis zu mehreren hundert μm möglich. Die Karbonisierung wird durch den Propan- und Silanfluss sowie durch die Temperatur bestimmt. Die Wachstumstemperatur des 6H-Polytypes beträgt etwa 1500°C . Die Temperatur reduziert sich weiter, wenn die Kristalle eine Fehlorientierung aufweisen. Diese ist die Ursache für die Erhöhung der Konzentration von Stufen an der Oberfläche, die zur Erhöhung der Keimbildung führt. Die Fehlorientierung ist weiterhin für glatte Oberflächen verantwortlich.

Die Hintergrunddotierung der Epitaxieschichten ist meist durch die Stickstoffkonzentration bestimmt. Diese beträgt in ausgewählten Kristallen $5 \times 10^{15}\text{cm}^{-3}$, was zu einer Ladungsträgerkonzentration in vergleichbarer Größenordnung durch die nahezu vollständige elektrische Aktivierung führte. Eine Reduzierung ist durch die „site-competition“-Zucht möglich, welche durch das Verhältnis von Silizium durch Kohlenstoff unter Zuchtbedingungen bestimmt wird. Die Ladungsträgerkonzentration ist während des Wachstums von $1 \times 10^{14}\text{cm}^{-3}$ bis 10^{15}cm^{-3} einstellbar. Im Fall der p-Dotierung ist es deutlich schwieriger, da hier die Aktivierung der Dotanten Schwierigkeiten bereitet. Es sind hohe Aktivierungstemperaturen erforderlich. Ein entscheidender Einfluss bei der Herstellung von SiC haben

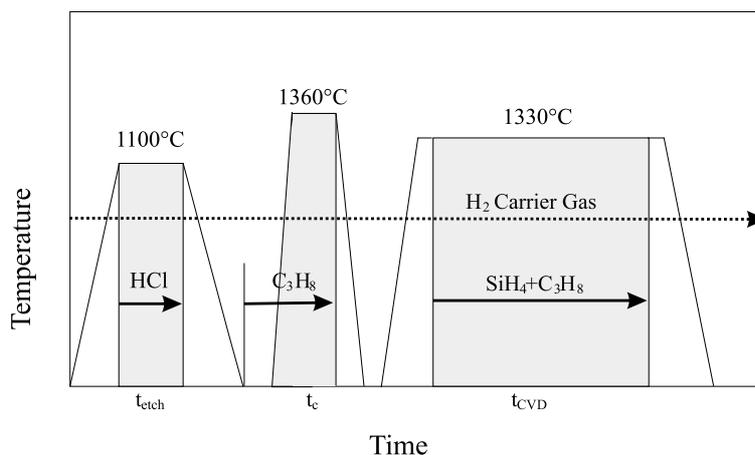


Abbildung 3.5: Schematischer Ablauf des CVD-Verfahrens für (3C-SiC). Mit t_{etch} , t_c , t_{CVD} sind die Ätzzeit, die Karbonisierungszeit und die Wachstumszeit der Schicht bezeichnet [Sic01].

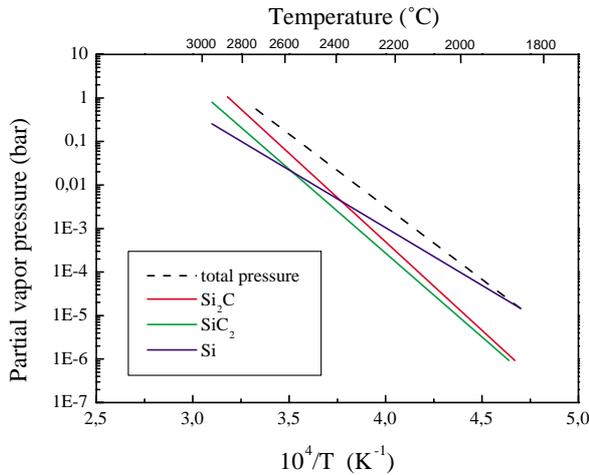


Abbildung 3.6: Darstellung der einzelnen Partialdrücke über Siliziumkarbid. Bei den verwendeten Ausheiltemperaturen wird der Dampfdruck durch das Silizium bestimmt [Sic01].

die Partialdampfdrücke der an der chemischen Reaktion beteiligten Elemente. Bei diesen Temperaturen, wie sie auch beim Ausheilen von Defekten erforderlich sind, kann eine Karbonisierung der Oberfläche durch entweichendes Silizium auftreten. In Abb. 3.1.1 sind die Partialdrücke der beteiligten Elemente über SiC dargestellt. Es ist deutlich zu erkennen, dass hier der Siliziumdampfdruck die dominierende Rolle spielt. Oberhalb der Temperatur von 1500°C kann nicht mehr unter Vakuumbedingungen gearbeitet werden, da die Oberfläche karbonisiert. In dieser Arbeit wurden im Falle der Untersuchung von Schichtsystemen die Ausheilungen oberhalb einer Temperatur von 1200°C unter dem Schutzgas Argon mit einem Druck von 1 bar durchgeführt. Der Siliziumdampfdruck wurde weiterhin durch ein Reservoir an SiC-Substrat eingestellt, um das über die Gasphase entweichende Silizium der Schicht zu minimieren.

3.2 Defekte im Siliziumkarbid

Verschiedene Untersuchungsmethoden versuchen die Defekte zu identifizieren und im Fall keiner eindeutigen Zuordnung, Gemeinsamkeiten in den Eigenschaften (Ausheilverhalten, optische Eigenschaften, etc.) zu finden. Die Positronen-Annihilations-Spektroskopie zeichnet sich durch die Nachweisbarkeit leerstellenartiger Defekte aus. Die Polytypie vervielfacht die Möglichkeiten von Defektkandidaten, da die Anzahl der verschiedenen Gitterplätze für einen Leerstellentyp steigt. Im 6H-SiC besitzt die Silizium-Einfachleerstelle drei voneinander verschiedene Gitterplätze (zwei kubische und einen hexagonalen). Die Anzahl unterscheidbarer Einfachleerstellen erhöht sich bei diesem Polytyp auf 6. Die Doppelleerstelle kann sich aus gleich- oder verschiedenartigen Einfachleerstellen zusammensetzen ($V_C V_C$, $V_{Si} V_{Si}$, $V_C V_{Si}$). Hierbei wurden die unterschiedlich vorhandenen Gitterplätze nicht berücksichtigt. Ausgedehnte Kristalldefekte wie Mikropipes, Nonopipes und verschiedene Ausscheidungen sind bereits im Abschnitt 3.1 erwähnt worden. Die Mikropipes sollten keinen direkten Einfluß auf die Positronenmessung besitzen, da deren Abstand relativ groß im

Vergleich zur Diffusionsweglänge der Positronen ist. Die Mikropipendichte der verwendeten Wafer ist kleiner als 10 cm^{-2} angegeben.

3.2.1 Ergebnisse anderer Messmethoden

Die Untersuchungsmethoden sind genau so vielfältig wie es Defekte im Siliziumkarbid gibt. Siliziumkarbid ein noch relativ wenig untersuchter Halbleiter. Eine einzelne Messmethode ist meist nicht in der Lage, die Defekte eindeutig zu identifizieren. So ist die Kombination der Messmethoden eine Möglichkeit, die Richtigkeit der Interpretation zu untermauern oder zu verwerfen.

Die **Photolumineszenzspektroskopie** ist eine anerkannte zerstörungsfreie Methode der Identifikation von Verunreinigungen oder anderen Defekten in Halbleitern. Sie untersucht den Anteil emittierender Rekombinationsstrahlung der Probe nach optischer Anregung von Elektronen. Elektronen werden aus ihrem Defektniveau angeregt, rekombinieren und geben charakteristische Strahlung ab, die als Photolumineszenzspektrum messbar ist. In der folgenden Tabelle 3.1 sind die Ionisationsenergien (eV) einiger akzeptorartigen Verunreinigungen dargestellt.

Verunreinigung/ Polytyp	Al	B	Be	Ga	Se
3C	0,257 [Fre8a]	0,753 [Yam74]	-	0,344 [Kuw76]	-
4H	0,191 [Ike90]	0,647 [Ike90]	-	0,267 [Ike81]	-
6H	0,249 [Ike90]	0,723 [Ike90]	0,4 [Mas68]	0,333 [Ike90]	0,24 [Tai74]
	0,239 [Ike90]	0,698 [Ike90]	0,6 [Mas68]	0,317 [Ike90]	
15R		0,32 [Sut90]			
	0,236 [Ike90]	0,700 [Ike90]	-	0,320 [Ike90]	
	0,230 [Ike90]	-	-	0,311 [Ike90]	
	0,223 [Ike90]	-	-	0,305 [Ike90]	
	0,221 [Ike90]	0,666 [Ike90]	-	0,300 [Ike90]	
	0,206 [Ike90]	-	-	0,282 [Ike90]	

Tabelle 3.1: Ionisationsniveaus einiger ausgewählter Akzeptoren in den verschiedenen Polytypen von SiC .

Mittels der Methode der Photolumineszenzspektroskopie wurden die verschiedensten Verunreinigungen untersucht. Das Element Stickstoff wirkt als Donator, jedoch konnte kein weiterer Donator (z.B. Phosphor) mit Hilfe dieser optischen Messung nachgewiesen werden. Stickstoff wird als struktureller Defekt (N_C) oder Donator-Komplex (z.B. $N_C V_{Si}$) interpretiert. Dotieratome wie Bor, Gallium oder Aluminium agieren als Akzeptoren, welche aber meist an Donatoren gebunden sind. Vanadium führt auf dem Siliziumgitterplatz zur Emission im infraroten Bereich ($1,3$ und $1,5 \mu\text{m}$). Schäden aufgrund von Ionenimplantationen heilen zum großen Teil bei einer Temperatur oberhalb 1200°C aus, jedoch sind zwei nicht identifizierte Defekte oberhalb einer Temperatur von 1600°C noch stabil und im PL-Spektrum sichtbar. Defekte, die bei der Kristallzucht entstehen, sind vorwiegend

Antistrukturdefekte, wobei die Theorie eine elektrische Inaktivität vorhersagt.

Die **Elektronenspinresonanz-Spektroskopie** (ESR) basiert auf der resonanten Absorption elektromagnetischer Energie von ungepaarten Elektronen im Magnetfeld. In typischen Anlagen wird die Frequenz (typisch 9-10 GHz) konstant gehalten, das magnetische Feld abgestimmt und mit einer kleinen AC-Modulation überlagert, um die phasenempfindliche Absorption zu gewährleisten. Typische Magnetfeldstärken liegen unterhalb von einem Tesla. Diese Messmethode ist geeignet, um eine Vielzahl von Defekten zu charakterisieren. Besonders an Verunreinigungen und strukturellen Defekten des Kristallgitters lassen sich die ungepaarten Elektronen mit der ESR-Spektroskopie nachweisen. Insbesondere gibt die Interaktion von Elektronenspin und Kernspin mittels der Hyperfeinwechselwirkung Rückschlüsse auf die chemische Struktur von Defekten. Winkelaufgelöste Studien von ESR-Spektren geben weiterhin Auskunft über vorhandenen Symmetrien von Defekten.

Die Kombination zwischen den Ausheilstudien verschiedener Messmethoden lässt meist konkrete Aussagen über die Natur des Defektes zu. So wurde dies an kubischen SiC praktiziert, wobei das ESR-Signal mit dem PAS-Signal [Kaw89] im selben Temperaturbereich unterhalb der Nachweisgrenze sank. In dieser Arbeit wird auch gezeigt, dass PAS-Signale mit DLTS-Signalen (eine elektrische Messmethode, die tiefe Störstellen untersucht) korreliert sind. Die ESR-Spektroskopie fand in der Vergangenheit schon oft Anwendung, wobei strukturelle Defekte von verschiedenen Polytypen charakterisiert worden sind. Im Mittelpunkt vieler Untersuchungen stand das Element Stickstoff, als vermeintlich einziger Donator im SiC. Ein asymmetrisches Spektrum lässt aber vermuten, dass ein weiterer Donator vorhanden ist, welcher als Silizium-Leerstelle diskutiert wird. Die Problematik verschärft sich aber noch weiter, da in den verschiedenen Polytypen unterschiedliche Gitterplätze besetzt werden können. Besonderes Interesse gilt aber den strukturellen Defekten, die beispielsweise durch Bestrahlung entstanden sind und mit ESR untersucht worden. Erste Arbeiten dazu findet man von Balona und Loubser [Bal70], die Anfang der 70er Jahre Elektronen- und Neutronen-bestrahltes 3C und 6H untersuchten. Ende der 80er Jahre wurden Untersuchungen an 3C-Schichten durch Itoh et al. [Ito89, Ito90, Ito92, Ito92a] durchgeführt. Sie identifizierten eindeutig die negativ geladene Silizium-Leerstelle (T1) und die positiv geladene Kohlenstoff-Leerstelle (T5). In Tabelle 3.2 sind ausgewählte, durch ESR bestimmte Zentren dargestellt. Eindeutig scheint der substitutionelle Platz des Stickstoffes auf dem Kohlenstoffplatz, der als flacher Donator agiert. Diskussionen gibt es aber noch über den Akzeptor Bor, der nach ESR-Modellen auf dem Siliziumplatz anzufinden ist, jedoch aus PL-Messungen auf dem Kohlenstoffplatz vermutet wird [Zub85, Yam74]. Der Akzeptor Aluminium wurde bisher noch nicht mit ESR untersucht, jedoch wird er anhand von ODMR-Messungen auf dem Siliziumplatz vermutet [Dan80]. Übergangsmetalle wie Titan und Vanadium fand man isoliert auf dem Siliziumplatz oder in Form eines Komplexes mit Stickstoff [Vai86]. Abschließend bleibt zu beachten, dass sich voneinander abweichende Interpretationen mit unterschiedlichen Qualitäten der Kristalle erklären lassen.

Elektrisch aktiven Defekten werden verschiedene Energiezustände in der Bandlücke zugeordnet. So hat man durch Hallmessungen oder Photolumineszenzmessungen Verunreinigungen wie Bor, Aluminium und Gallium charakterisiert und ihre Energiezustände

Polytyp	Zentrum	Modell	g-Tensor	Hyperfine (mT)	Ref
3C	T1	V_{Si}^-	2,0029	$A_{\parallel}=2,86$ (^{13}C) $A_{\perp}=1,18$ (^{13}C) $A \approx -0,29$ (^{29}Si)	[Bal70, Ito89]
3C	T5	V_C^+	$g_1=2,0020$ $g_2=2,0007$ $g_3=1,9951$	$A_{\parallel}=2,02$ (^{29}Si) $A_{\perp}=1,48$ (^{29}Si)	[Ito90]
6H	A	$V_C^0(S=1)$	$g=2,0020$	$A=0,45$	[Sch90]
6H	B	V_C^-	$g_{\parallel}=2,0032$ $g_{\perp}=2,0051$	$A_{\parallel}=0,3$ $A_{\perp}=0,71$	[Sch90] [Sch90]
6H	C	$(V_C + V_C)^+$	$g_{\parallel}=2,0050$ $g_{\perp}=2,0037$	$A=0,41$	[Sch90]
6H	D	?	$g=2,0026$		[Sch90]
6H	E1	V_C^+	$g=2,0034$	$A=0,24$	[Sch90]
	E2	V_C^+	$g_{\parallel}=2,0033$ $g_{\perp}=2,0028$	$A=0,48$	[Sch90]

Tabelle 3.2: Bestrahlungsdefekte in SiC untersucht mittels der Elektronenspinresonanz-Spektroskopie

bestimmt. Diese hängen beim SiC vom Polytyp ab, wobei sich diese nicht nur von der Art der ungleichen Gitterplätze sondern auch von der Anzahl abhängen. Dies wird in der Tabelle 3.3 deutlich.

Polytyp	Stapelfolge	Anzahl von ungleichen Plätzen	
		hexagonal	kubisch
2H	AB	1	0
3C	ABC	0	1
4H	ABAC	1	1
6H	ABCACB	1	2
15 R	ABCACBABCACB	2	3

Tabelle 3.3: Stapelfolgen unterschiedlicher Polytypen in SiC

Dies ist nur eine Auswahl von über 150 möglichen Polytypen, wobei in dieser Arbeit das 4H- und 6H-Material untersucht wurde. Die rein hexagonale Variante des SiC 2H konnte nur in Form von Whiskern hergestellt werden und hat somit momentan noch keine praktische Anwendung. Eine Zusammenfassung der Energieniveaus (meV) der Verunreinigungen der interessierenden Polytypen ist in der Tabelle 3.4 veranschaulicht.

Donatoren wie Stickstoff oder Phosphor besetzen den Kohlenstoffplatz im Kristallgitter. Der Akzeptor Aluminium wurde auf dem Silizium-Untergitter nachgewiesen [Taj82]. Amphotär, d.h. bei beiden Untergittern, wird das Bor eingebaut. Stickstoff ist ein flacher Donator, wobei die anderen Dotanten vorwiegend tiefe Störstellen bilden. Die Abhängigkeit der Lage der Energieniveaus einiger Dotanten ist aus der Tabelle 3.4 ablesbar.

Polytyp	Stickstoff	Aluminium	Gallium	Bor	Methode	Ref.
3C	54,5±0,3	260±15			PL	[Lon70,71,73]
	248+E _x				PL	[Suz77]
	53,6±0,5				PL	[Dea77]
	56,5	254	343	735	PL	[Ike80]
	55			735	PL	[Kuw75]
		230			PL	[Zan68]
	118	179+E _x			PL	[Cho70]
			331+E _x		PL	[Kuw76]
	54				PL	[Fre88]
	48				Hall	[Seg86]
4H		160			Hall	[Yam87]
	80,130	155+E _x			PL	[Hag73]
		168+E _x	249+E _x	628+E _x	PL	[Suz77]
	h:66, k:124	191	267	647	PL	[Ike80]
		160+E _x			PL	[Mat73]
			250		PL	[Suz75]
	h:52,1, k:98,8				IR	[Goe93]
h:45, k:100				Hall	[Goe93]	
40	180			Hall	[Kan73]	
6H	170,200,230				PL	[Ham63]
	h:100, k:155	h:239, k:249	h:317, k:333	h:698, k:723	PL	[Ike80, Ike79]
	100,150	165+E _x			PL	[Hag73]
		231+E _x			PL	[Suz77]
	180,210,240				TL	[Ham63]
		280,390,490			PL/EL	[Kra68]
				430,540,650	EL	[Pav69]
	180				IR	[Pur70]
	h:81,k:138,142				IR	[Sut92]
	150			390	Hall	[Lom65]
		270			Hall	[Daa63]
	81-95				Hall	[Hag70]
	50-70				Hall	[Kan73]
	66				Hall	[Suz76]
h:85, k:125				Hall	[Sut92]	
	190			DLTS	[Sut89]	

Tabelle 3.4: Lage der Energieniveaus ausgewählter Verunreinigungen gemessen mit optischen und elektrischen Methoden.

Eine sehr empfindliche Methode, tiefe Zentren nachzuweisen, ist die **DLTS** (Deep Level Transient Spectroscopy). Sie ist sensitiv für Defekte in einem Bereich von 100 meV bis 1 eV oberhalb der Valenzbandkante oder unterhalb der Leitungsbandkante. Die maximale nachweisbare Konzentration von Defekten liegt bei 10^{15}cm^{-3} . Die Konzentration von Defekten in Bulk-Materialien nach der Kristallzucht ist aber deutlich höher, so dass mit dieser Methode bisher ausschließlich Epitaxieschichten von SiC untersucht werden konnten. Die Methode ist hervorragend geeignet, Defekte energetisch zu beschreiben, jedoch ist es ihr nicht möglich, auf die chemische Natur des Defektes zu schließen. So wurden

die detektierten Defekte mit Namen druchnummeriert wie E_1 , E_2 , Z_1 , Z_2 , R, D_1 -Zentren, deren Struktur bis heute noch nicht geklärt ist. Die Existenz des D-Zentrums konnte nur unter Berücksichtigung von Bor, welches beispielsweise implantiert wird, nachgewiesen werden. Desweiteren scheint die Konzentration des D-Zentrums mit der Intensität der Lumineszenzlinie ($2,42\text{ eV}$) korreliert zu sein [Sut91, Ani90]. Im Gegensatz zum tiefen Akzeptor (D-Zentrum) existieren auch Elektronenfallen wie das R- und S-Zentrum. Detektiert wurden diese Zentren in p-n Übergängen als auch in Strukturen von Schottkybarrieren [Ani91]. Mit der DLTS untersuchte man bestrahltes 6H-SiC, wobei 6 tiefe Zentren gefunden worden. Vier dieser Zentren heilten bis zu einer Temperatur von 1700° C aus, wobei das Signal des Z-Zentrums erhalten blieb [Zha89]. Diese Zentren wurden auch schon in ausgewählten Bulk-SiC gefunden. Es existieren nur wenige DLTS-Untersuchungen an 3C- und 4H-SiC. Die 3C-SiC Kristallzucht ist sehr kompliziert, so dass Schichten meist auf Silizium-Substraten aufgewachsen wurden. Die Qualität der Schichten stieg mit dem homoepitaxialen Wachstum, so dass weitere Ergebnisse zu erwarten sind. Nahezu versetzungsfreie Schichten konnten auch auf Silizium hergestellt werden [ESC00], jedoch sind diese kommerziell nicht erhältlich. Zwei tiefe Akzeptoren wurden nach einer Aluminium-Implantation in 4H-SiC mit einer Energie von 260 meV bzw. 570 meV oberhalb der Valenzbandkante gefunden.

3.2.2 Diffusion und Löslichkeit von Verunreinigungen in SiC

Die Diffusion und Konzentration von Dotanten spielt eine wichtige Rolle im Fabrikationsprozess von Bauelementstrukturen. So können beispielsweise leicht diffundierende Fremdatome geschaffene Strukturen wieder zerstören. Deshalb ist es enorm wichtig, über die Diffusion der relevanten Verunreinigungen und deren Löslichkeit informiert zu sein. Die Diffusion kann aber auch verwendet werden, definierte Strukturen zu erzeugen. In dem folgenden Abschnitt wird deutlich, dass Diffusionsprozesse im SiC keine entscheidende Rolle spielen, da die Diffusionskoeffizienten im handhabbaren Temperaturbereich nahezu vernachlässigbar klein sind. Die einzige Möglichkeit, das Material SiC nach der Kristallzucht zu dotieren, ist die Ionenimplantation. Bei dieser Methode entstehen aber Bestrahlungsdefekte, die die elektronischen Eigenschaften beeinflussen. Aus diesem Grund ist der wesentliche Teil der Arbeit der Charakterisierung von Strahlendefekten gewidmet.

Über das Löslichkeitsverhalten der verschiedenen Dotanten existieren nicht viele Angaben in der Literatur. Insbesondere wurde kaum die Löslichkeit in Abhängigkeit von den verschiedenen Polytypen untersucht. Die Diffusion von Aluminium, Stickstoff, Bor, Gallium und Phosphor ist im 6H-SiC anisotrop [Vod92]. Es zeigt sich, dass für Aluminium, Gallium und Bor die Löslichkeitsgrenze bei Kristallen mit Kohlenstoff-Terminierung kleiner ist. Im Gegensatz dazu ist für die Donatoren Stickstoff und Phosphor die Löslichkeit geringer als bei Kohlenstoff-terminierten Kristallen. Vodakov [Vod92] erklärte dies in der starken Anisotropie des orientierungsabhängigen Dopings. Die maximale Löslichkeit einiger ausgewählter Verunreinigungen ist in der folgenden Tabelle 3.5 dargestellt. Obwohl einige Verunreinigungen wie Stickstoff und Aluminium in relativ hohen Konzen-

Element	Konzentration (cm ⁻³)	Element	Konzentration(cm ⁻³)
Li	$1,2 \times 10^{18}$	Be	$1,2 \times 10^{18}$
Li	$1,2 \times 10^{18}$	Be	$8,0 \times 10^{20}$
B	$2,5 \times 10^{20}$	N	6×10^{20}
Al	$2,0 \times 10^{21}$	P	$2,8 \times 10^{18}$
Sc	$3,2 \times 10^{17}$	Ti	$3,3 \times 10^{17}$
Cr	$3,0 \times 10^{17}$	Mn	$3,0 \times 10^{17}$
Cu	$1,2 \times 10^{17}$	Ga	$2,8 \times 10^{19}$
Ge	$3,0 \times 10^{20}$	As	$5,0 \times 10^{16}$
Y	$9,5 \times 10^{15}$	In	$9,5 \times 10^{16}$
Sn	$1,0 \times 10^{16}$	Sb	$8,0 \times 10^{16}$
Ho	$6,0 \times 10^{16}$	Ta	$2,0 \times 10^{17}$
W	$2,0 \times 10^{17}$	Au	$1,0 \times 10^{17}$

Tabelle 3.5: Angabe der maximalen Löslichkeit ausgewählter Verunreinigungen in SiC

trationen gelöst werden können, ist der Diffusionskoeffizient vernachlässigbar klein, so dass auch Temperaturen oberhalb von 2000° C nicht helfen, die Diffusion entscheidend zu beschleunigen. Dies macht es außerordentlich schwierig, auf Diffusionsbasis elektronische Strukturen zu erzeugen. Die Tabelle 3.6 stellt einige ausgewählte Diffusionskoeffizienten dar:

Verunreinigung	N	B	Al
Temperaturbereich (°C)	1800-2450	1800-2300	1800-2300
eff. Diff.-Koeff (cm ² s ⁻¹)	5×10^{-12}	$2,5 \times 10^{-13}$ - 3×10^{-11}	3×10^{-14} - 6×10^{-12}

Tabelle 3.6: Angabe der Diffusionskonstanten von N, B und Al in SiC bei einer Temperatur oberhalb von 1800° C

3.3 Umladungsniveaus ausgewählter leerstellenartiger Defekte

Die Vielzahl von möglichen Kandidaten, welche als Einfangzentren für Positronen wirken können, zeigten die vorhergehenden Kapitel. Da nicht alle elektrisch aktiven Defekte in die Interpretation einfließen können, ist es sinnvoll, theoretische Rechnungen in die Diskussion mit einfließen zu lassen. Dies geschah in der Vergangenheit mit *ab initio*-Studien an verschiedenen Polytypen. Dabei ist keine eindeutige Schlussfolgerung erkennbar, da sich die Ergebnisse voneinander unterscheiden. So prognostiziert Barthe et al. und Zywiets [Zyw99] ein negatives U-Verhalten der Kohlenstoff-Leerstelle, welches durch kürzliche Studien von Torpo [Tor02] trotz starker Jan-Teller-Verzerrung nicht bestätigt wurde. Die Methode der Berechnung beruhte auf der lokalen Spin-Dichte-Näherung, wobei die Madelung-Korrektur einbezogen worden ist. Desweiteren fanden Relaxationsprozesse der Atome in der Matrix

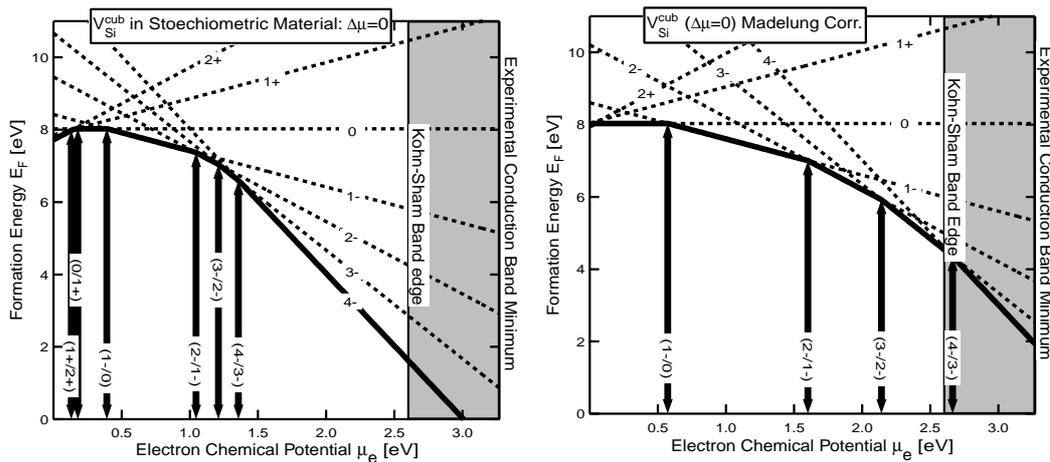


Abbildung 3.7: Darstellung der Umladungsniveaus der Silizium-Leerstelle auf kubischem Gitterplatz mit (rechts) und ohne (links) Madelungkorrektur [Tor01].

Berücksichtigung. Diese wurde durch die Variation der die Leerstelle umgebenden Atome und der Minimierung der Gesamtenergie des Kristalls berechnet. In den folgenden Abbildungen sind die Bildungsenergien verschieden geladener leerstellenartiger Defekte in Abhängigkeit von der Fermienergie dargestellt. Der Ladungszustand einer Leerstelle kann anhand der geringsten Bildungsenergie abgelesen werden, so dass im allgemeinen mit steigendem chemischen Potenzial die Leerstelle negativer wird.

Die sogenannte DFT-LSDA-Methode hat aber einige ungelöste Probleme, welche für die Interpretation der Ionisationsniveaus zu beachten sind. Dies ist zum einen, dass die Bandlücke von Kohn-Sham-Einzelteilchen abgeleitet ist. Somit kann durch die Methode nicht die Lage der Niveaus quantifiziert werden, da nur die totale Energie hinreichend definiert ist. Des weiteren ist die Energielücke zu klein bemessen, vergleicht man diese mit experimentellen Werten ($E_{theo}=2,6$ eV, $E_{exp}=3,27$ eV). Eine weitere Fehlerquelle ist die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den benachbarten Superzellen. Die Korrektur dieser über mehrere Gitterkonstanten vorhandenen Wechselwirkung erweist sich als nicht trivial. Folglich werden hier die Ergebnisse mit und ohne der Madelung-Korrektur präsentiert. Die Silizium-Leerstelle zeigt in der oberen Bandhälfte verschiedene Umladungsniveaus, wobei immer von einer negativen Leerstelle auszugehen ist (siehe Abb. 3.7). Die Unterschiede mit dem Korrekturterm sind offensichtlich. Die Kohlenstoff-Leerstelle hat eine geringere Bildungsenthalpie und wird in der Literatur als positiv geladen interpretiert [Ito90, Tor01]. Die Ladungszustände der Leerstelle in der oberen Bandhälfte sind ebenfalls negativ geladen, so dass bei n-dotierten Proben ebenfalls von negativ geladenen Kohlenstoff-Leerstellen auszugehen ist (siehe Abb. 3.8). Für die Kohlenstoff-Leerstelle fand man aufgrund der starken Jahn-Teller-Verzerrung des Kristalls ein negatives U-Verhalten [Zyw99]. Mit der Anwendung der Madelung-Korrektur verschwand diese Charakteristik bei den theoretischen Berechnungen. Die Berechnungen wurden für die verschiedenen Gitterplätze durchgeführt,

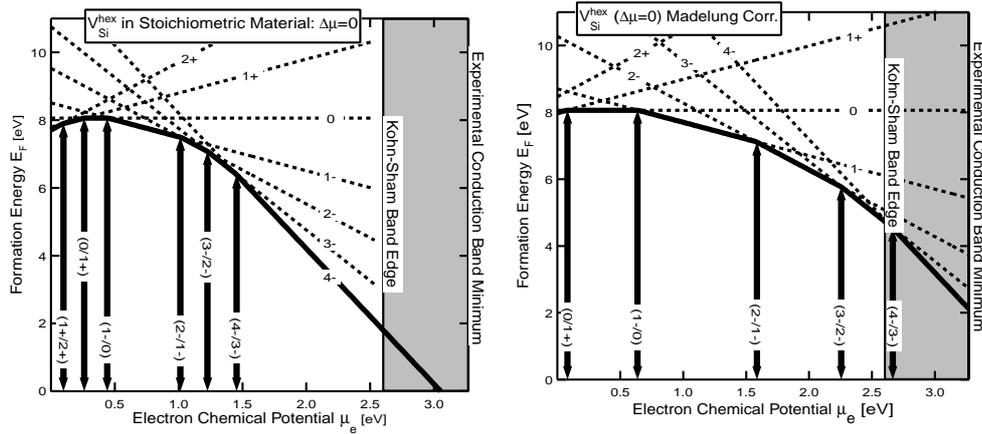


Abbildung 3.8: Umladungsniveaus der Silizium-Leerstelle auf hexagonalem Gitterplatz mit (rechts) und ohne (links) Madelungkorrektur. Die Umladungsniveaus der verschiedenen Gitterplätze im Fall der Silizium-Leerstelle unterscheiden sich nicht sehr voneinander. Für n-dotiertes Material ist von einer negativ geladenen Leerstelle auszugehen [Tor01].

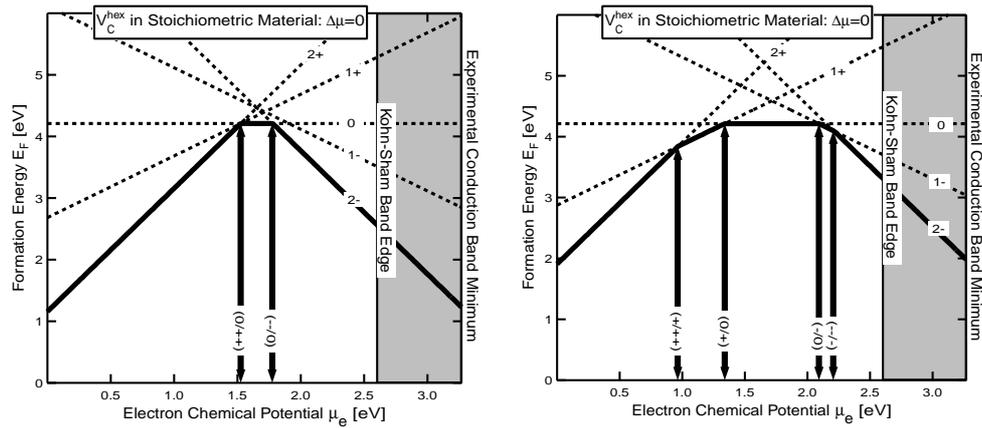


Abbildung 3.9: Darstellung der Umladungsniveaus der Kohlenstoff-Leerstelle mit (rechts) und ohne (links) Madelungkorrektur. Oberhalb der Bandmitte ist die Kohlenstoff-Leerstelle neutral oder negativ geladen. Folglich agiert diese Leerstelle in n-dotierten Kristallen als ein attraktives Einfangzentrum. Das negative U-Verhalten entfällt bei der Berücksichtigung der Madelung-Korrektur [Tor01].

wobei nur kleine Unterschiede zwischen den hexagonalen und kubischen Gitterplätzen zu finden waren. Die Relaxation der Umgebung der Leerstelle hat einen direkten Einfluss auf die lokale Elektronendichte und somit auch auf die Positronenlebensdauer. Die Relaxation der Kohlenstoff-Leerstelle verhält sich entgegengesetzt zur Silizium-Leerstelle und relaxiert nach innen. Die Struktur der relaxierten Leerstelle ist in Abb. 3.10 dargestellt. Die Auswirkungen der Relaxationen auf die Positronenlebensdauer können somit abgeschätzt werden. Die defektspezifische theoretische Positronenlebensdauer der Kohlenstoff-Leerstelle

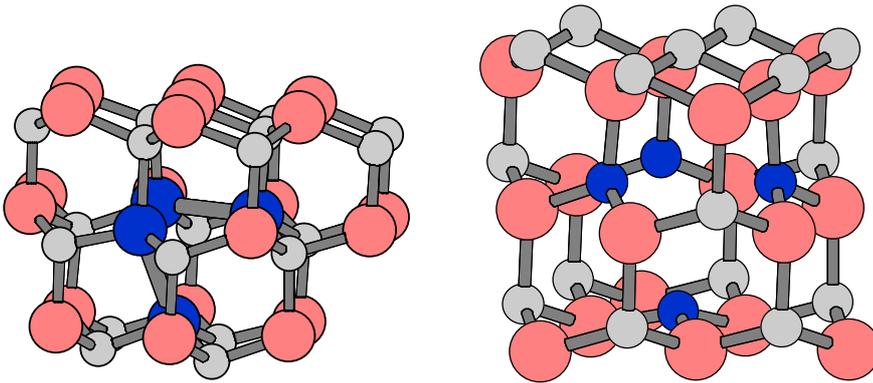


Abbildung 3.10: Darstellung der Simulation der Relaxation der Einfachleerstellen V_{Si} (rechts) und V_C (links) unter Berücksichtigung der Minimierung der Bindungsenergie. Die Kohlenstoff-Leerstelle zeigt eine Verkleinerung des offenen Volumens und die Silizium-Leerstelle relaxiert nach außen. Unter Berücksichtigung dieser Daten muss der Silizium-Leerstelle eine theoretische e^+ -Lebensdauer von ca. 200 ps zugeordnet werden [Tor01].

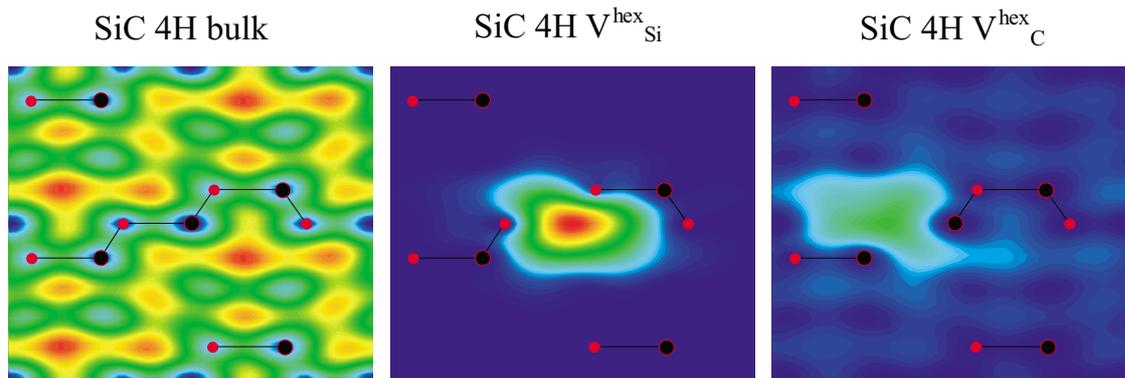


Abbildung 3.11: Darstellung der Positronen-Aufenthalts-Wahrscheinlichkeiten der Silizium- und Kohlenstoff-Leerstelle im 4H-SiC. Die Berechnungen erfolgten unter dem Superpositionsprinzip der Elektronenwellenfunktionen und unter Berücksichtigung der Anwesenheit des Positrons im Kristall. Die x -Achse charakterisiert die (110)- und die y -Achse die (001)-Richtung. Die in der Abbildung dargestellten roten und schwarzen Kreise deuten die Atompositionen der Elemente Silizium(schwarz) und Kohlenstoff(rot) an. Für die Leerstellen sind die Intensitätsverteilungen vergleichbar. Im defektfreien Material deutet sich die größte Annihilationswahrscheinlichkeit der Positronen im Zwischengitterbereich an [Pus99].

ist mit 147 ps nur unwesentlich größer als die e^+ -Lebensdauer des Bulk-Materials von 141 ps. Die Kohlenstoff-Leerstelle ist somit für die Positronen-Lebensdauer-Spektroskopie nicht auflösbar, da sich die beiden e^+ -Lebensdauern kaum unterscheiden. Bezieht man die Relaxation ein, so ist ein noch kleineres offenes Volumen und somit eine kleinere Positronenlebensdauer zu erwarten. Im Gegensatz dazu ist die Positronenwellenfunktion in

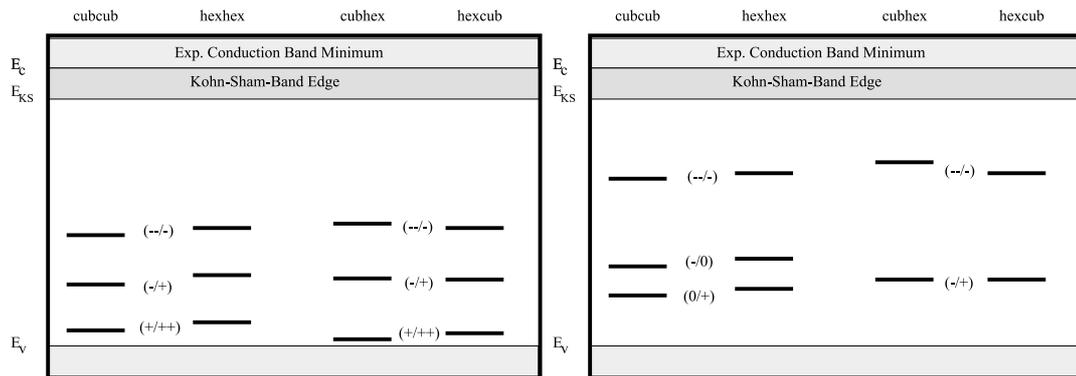


Abbildung 3.12: Darstellung der Umladungsniveaus der Doppelleerstelle im 4H-SiC unter Berücksichtigung der Madelungkorrektur (rechte Abbildung). Die Doppelleerstelle ist ebenfalls in der oberen Bandhälfte negativ geladen und muss deshalb als intrinsischer Defekt bei der Positronenannihilation berücksichtigt werden [Tor01].

der Silizium-Leerstelle stark lokalisiert. Die theoretische Positronenlebensdauer nach dem Superpositionsprinzip der Wellenfunktionen der Atome errechnete sich zu 184 ps [Pus99].

Die theoretische e^+ -Lebensdauer im relaxierten Fall steigt auf ca. 200 ps . Die Berechnungen der theoretischen e^+ -Lebensdauern für die unterschiedlichen Gitterplätze unterscheiden sich nicht merklich voneinander, so dass deren Differenzierung nicht möglich ist. Ein weiterer Defekt, der durch Bestrahlung zu beobachten ist, ist die Doppelleerstelle. Auch hier existieren theoretische Rechnungen [Tor01], welche die Umladungsniveaus der verschiedenen Kombinationsmöglichkeiten betrachten. Diese sind in der Abb. 3.12 dargestellt. Obwohl die Madelungkorrektur die Lage der Niveaus deutlich verschiebt, ist der Ladungszustand der Doppelleerstelle im n-dotierten Fall als neutral oder negativ an-

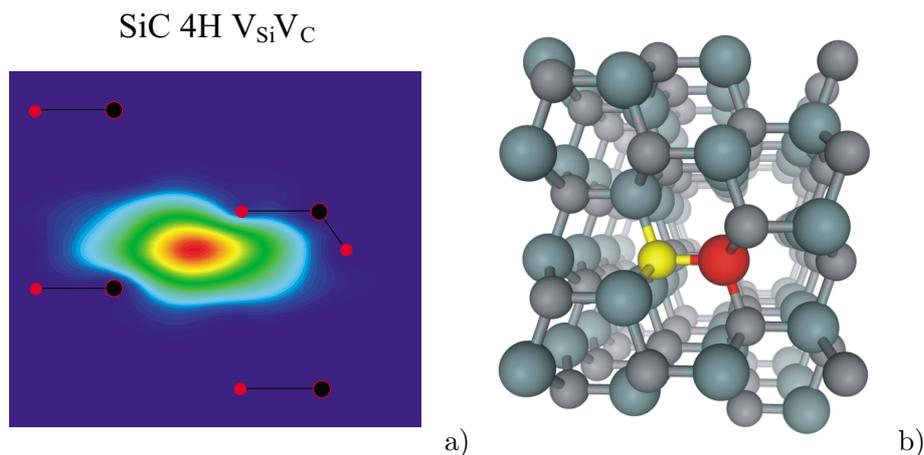


Abbildung 3.13: a) Darstellung der Positronen-Aufenthalts-Wahrscheinlichkeit der Doppelleerstelle im Kristallgitter; b) Silizium- und Kohlenstoffatom, welche für die Doppelleerstelle aus dem Kristallgitter entfernt worden sind.

zusehen. Folglich können alle betrachteten Leerstellen als attraktive Einfangzentren für Positronen wirken. Die theoretische e^+ -Lebensdauer der Doppelleerstelle beträgt 216 ps und sollte sich nach dem gegensätzlichen Verhalten der Relaxation der Einfachleerstellen nicht wesentlich ändern. Demzufolge unterscheiden sich die isolierte Silizium-Leerstelle und die Doppelleerstelle um ca 15 ps voneinander. Die Aufenthalts-Wahrscheinlichkeit der Positronen in einer Doppelleerstelle ist in der Abb. 3.13 dargestellt.

4. Ergebnisse

4.1 Untersuchung von Bulk-Material

4.1.1 6H-SiC

Die Qualität von SiC Bulk-Materialien ist im Verlauf der letzten Jahre deutlich gestiegen. Anfängliche Untersuchungen an diesen Materialien ergaben unterschiedliche, teilweise kontroverse Ergebnisse, so dass Interpretationen alter Publikationen sehr vorsichtig zu behandeln sind. Elektrische Untersuchungen, wie beispielsweise DLTS-Messungen sind heutzutage an Bulk-Materialien möglich, was früher aufgrund von einer zu großen Defektkonzentration unvorstellbar war. Die verbesserte Qualität der Bulk-Materialien reduzierte die Defektkonzentration in epitaktischen Schichten. Die Konzentration der Mikroröhren (engl. micropipe) in der Epitaxieschicht hängt von der Konzentration der Röhren in der Substratschicht ab. Es gibt somit genug Anstoßpunkte, die Bulk-Materialien weitergehend zu untersuchen, obwohl nur in Epitaxieschichten Bauelementstrukturen hergestellt werden. Das n-dotierte 6H Bulk-Material wurde von der Firma Nippon-Steel erworben. Alle anderen in dieser Arbeit untersuchten Materialien wurden von der Firma Cree[®] gekauft.

Die Hintergrunddotierung des n-Typ Materials beträgt $[N] = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Das p-dotierte Material wurde mit Aluminium bis zu einer Konzentration von $5,0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

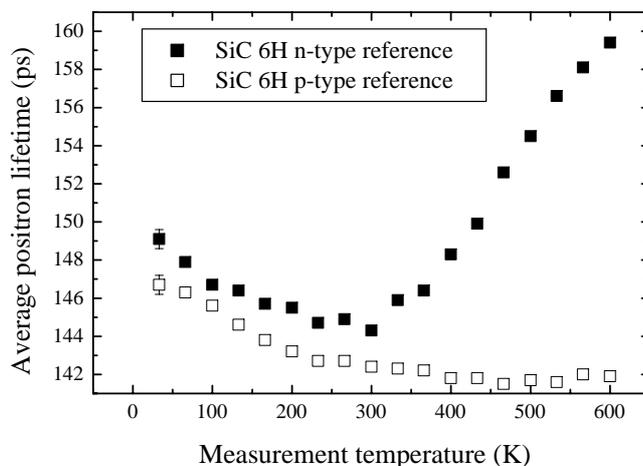


Abbildung 4.1: Positronenlebensdauer als Funktion der Messtemperatur n- und p-dotierter 6H-SiC Kristalle. Die Dicke der Proben betrug nur $300 \mu\text{m}$, so dass beidseitig zwei identische Proben im Sandwich angeordnet wurden.

überkompensiert. Nähere Angaben über die Fremdatomkonzentrationen waren nicht erhältlich. Die Größe der Wafer betrug 2 Zoll und die Dicke der Wafer ist typischerweise $300 \mu\text{m}$. Aufgrund der geringen Dicke der Wafer fand in der Messanordnung eine Doppelsandwichvariante Anwendung (zwei Proben auf jeder Seite). Dies gewährleistete eine Implantation der Positronen von über 99,99 % in das Material. Erste Positronenuntersuchungen ergaben, dass die Referenzmaterialien keineswegs defektfrei sind. Dies ist in der Abb. 4.1 deutlich zu erkennen. Der Verlauf der mittleren Positronenlebensdauer zeigt vom Tieftemperaturbereich bis zur Raumtemperatur für beide Referenzmaterialien ein ähnliches Verhalten. Die mittlere Positronenlebensdauer nimmt mit zunehmender Messtemperatur ab. Dies ist der typische Verlauf einer negativ geladenen Leerstelle bzw. eines Leerstellen-Komplexes. Von Raumtemperatur bis zur maximalen Messtemperatur von 600 K unterscheiden sich die beiden Materialien voneinander. Zeigt im p-dotierten Fall das Material keinen nennenswerten Einfang bis zu hohen Temperaturen, so misst man im n-dotierten Material ein deutliches Leerstellensignal.

Um die Defekte den Untergittern zuzuordnen, wurden die zu den möglichen Defekten zugehörigen theoretischen e^+ -Lebensdauern berechnet. Es ergibt sich für die Kohlenstoff-Leerstelle eine e^+ -Lebensdauer von 148 ps , die sich nur wenig von der e^+ -Lebensdauer im defektfreien Material (143 ps) unterscheidet. Dieser geringe Unterschied von 5 ps ist im Experiment spektroskopisch nicht auflösbar. Im Falle der Silizium-Leerstelle errechnet

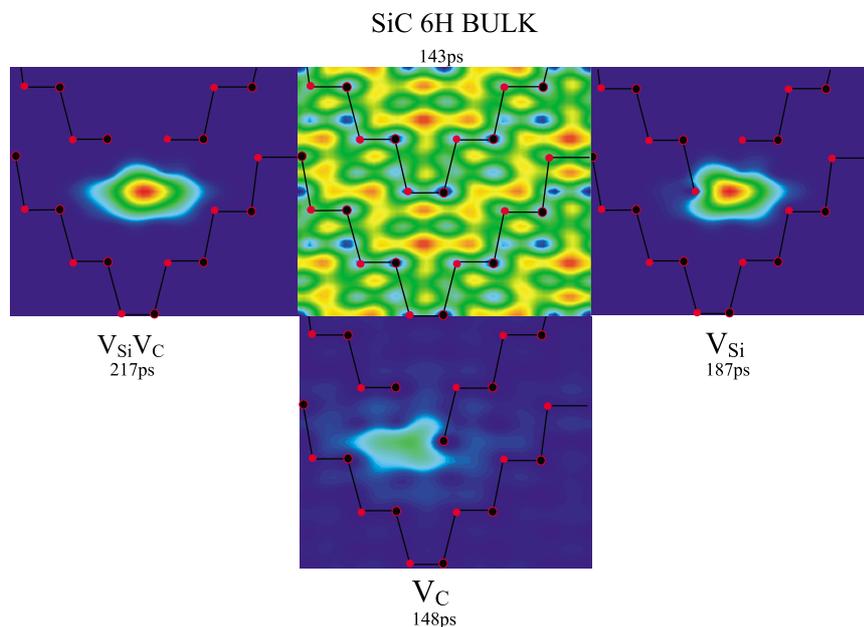


Abbildung 4.2: Positronen-Aufenthalts-Wahrscheinlichkeit im 6H-SiC für die einfachsten Leerstellenarten mit den dazugehörigen e^+ -Lebensdauern. Die x -Achse stellt den Kristall in (110) - und die y -Achse in (001) -Richtung dar. Diese Berechnungen wurden nach dem Superpositionsprinzip der Elektronenwellenfunktion im Kristall ohne Berücksichtigung von Relaxationen durchgeführt [Pus99].

sich eine e^+ -Lebensdauer von 187 ps . Die aus den Rechnungen resultierenden Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der Positronen in der Matrix bzw. in relevanten Defekten sind in der Abb. 4.2 dargestellt.

Analog zum 4H-Material unterscheidet sich das offene Volumen der Kohlenstoff-Leerstelle nicht wesentlich vom defektfreien Substrat. Die errechneten e^+ -Lebensdauern sind mit denen im 4H-Material vergleichbar. Bezieht man Relaxationsprozesse in die theoretischen Berechnungen mit ein, so erhöht sich die e^+ -Lebensdauer der Silizium-Leerstelle auf 200 ps . Der Kristall besitzt eine Hexagonalität von 33 %. Die Silizium-Leerstelle kann sich somit auf zwei verschiedenen Gitterplätzen befinden. Es stehen zwei kubische und ein hexagonaler Gitterplatz zur Verfügung. Die Berechnungen der Silizium-Leerstelle haben einen Unterschied von unter einer Pikosekunde für die verschiedenartigen Gitterplätze ergeben, so dass mit der PAS nicht zwischen dem kubischen und hexagonalen Untergitter unterschieden werden kann. In dieser Arbeit wird deshalb zwischen diesen beiden verschiedenen Möglichkeiten nicht unterschieden. Die Kombination beider Leerstellenarten ergibt die Doppelleerstelle. Ihr wird eine e^+ -Lebensdauer von 217 ps zugeordnet. Unter Einbeziehung der Relaxationen erhöht sich diese auf ca. 220 ps . Die Erhöhung der e^+ -Lebensdauer erklärt sich aufgrund der stärkeren Relaxation der Silizium-Leerstelle verglichen mit der Verkleinerung des offenen Volumens der Kohlenstoff-Leerstelle.

Die Defekte können im Kristall abhängig vom Fermi-niveau eine unterschiedliche Ladung besitzen. Die Lage der Umladungsniveaus im Falle des 4H-Polytypes wurde im Kapitel 3.3 behandelt. Bis auf den Bandabstand, der im 4H-SiC etwas größer ist (3,2 eV), kann man die Lage der Umladungsniveaus im 6H-Polytyp von der Valenzbandkante aus betrachten. Befindet sich das Fermi-Niveau 2,1 eV oberhalb der Valenzbandkante, so ist die Kohlenstoff-Leerstelle nach theoretischen Berechnungen [Tor01] negativ geladen. Für die Silizium-Leerstelle gilt dieser Ladungszustand bereits ab einer Energie von 650 meV oberhalb der Valenzbandkante. Folglich ist die Silizium-Leerstelle im n-dotierten Material negativ geladen und damit für Positronen attraktiv. Betrachtet man den Verlauf der mittleren e^+ -Lebensdauer für tiefe Temperaturen, so sollte die Quelle für das leerstellenartige Defektsignal beider Polytypen die Gleiche sein. Eine Spektrenzerlegung in diesem Temperaturbereich war nicht möglich. Die Kohlenstoff-Leerstelle hat von allen möglichen Leerstellen die kleinste Bildungsenthalpie [Tor01]. Ihr kleines offenes Volumen und die Erhöhung der mittleren e^+ -Lebensdauer bei den tiefsten Messtemperaturen (25 K) von 5 ps sind ein Indiz für eine mögliche Korrelation. Damit die Kohlenstoff-Leerstelle für Positronen nachweisbar ist, muss sie neutral oder negativ geladen sein. Anhand des Verlaufes der mittleren e^+ -Lebensdauer, d. h. einem Ansteigen der e^+ -Lebensdauer zu tiefen Temperaturen, kann nur auf einen negativ geladenen Defekt geschlossen werden. Für den n-Polytyp ist der negative Ladungszustand einsehbar, jedoch nicht für das p-dotierte Material. Hier ist die isolierte Kohlenstoff-Leerstelle positiv geladen. In diesem Material ist die Konzentration von Akzeptoren größer als $1 \times 10^{18} cm^{-3}$. Diese können mit der Kohlenstoff-Leerstelle einen negativ geladenen Komplex bilden (z. B. $V_C Al_{Si}$). In diesem Fall ist die Leerstelle auch im p-dotierten Material für Positronen detektierbar.

Das Verhalten der mittleren e^+ -Lebensdauer im Bereich von der Raumtemperatur bis

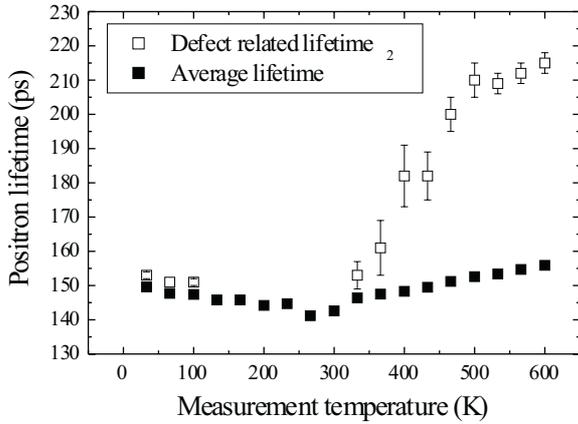


Abbildung 4.3: Positronenlebensdauer als Funktion der Messtemperatur für n-dotiertes 6H-SiC. Die offenen Symbole charakterisieren die defektspezifische Positronenlebensdauer, welche aus der Zerlegung der Spektren abgeleitet wurde.

600 K unterscheidet die Polytypen voneinander. Zeigt der p-Polytyp keine leerstellenartigen Defekte, so misst man eine deutliche Erhöhung der mittleren e^+ -Lebensdauer für das n-dotierte Material. Für die höchste Messtemperatur wurde das Spektrum (siehe Abb. 4.3) analysiert und eine defektspezifische Positronenlebensdauer von 215 ± 3 ps ermittelt. Diese kann der Silizium-Leerstelle, einem Komplex mit einer Silizium-Leerstelle oder der Doppel-leerstelle zugeordnet werden. Der Abfall der mittleren e^+ -Lebensdauer zu tieferen Temperaturen (bis 300 K) ist mit dem konkurrierenden Einfang in die Kohlenstoff-Leerstelle zu erklären, deren Konzentration aufgrund der geringen Bildungsenthalpie von allen Leerstellentypen wahrscheinlich am größten ist. Das Positron ist an die Kohlenstoff-Leerstelle nur schwach gebunden und kann thermisch aus dem lokalisierten Zustand wieder entweichen. Dies ist das typische temperaturabhängige Verhalten einer flachen Falle, wie es für Akzeptoren in Halbleitern oft diskutiert wurde. In diesem Fall ist der rydbergartige Zustand eine Leerstelle, wie es auch mit dem A-Zentrum im Silizium nachgewiesen wurde [Pol98]. Unter Verwendung des spezifischen Einfangkoeffizienten von $\mu_{V^-} = 3 \times 10^{14} s^{-1}$ und den charakteristischen Positronenlebensdauern für die negativ geladene Einfachleerstellen ergibt sich eine Leerstellenkonzentration von $1 \times 10^{17} cm^{-3}$ für die Silizium-Leerstelle und $1 \times 10^{18} cm^{-3}$ für die Kohlenstoff-Leerstelle im n-dotierten Material. Die Voraussetzung für die Konzentrationsbestimmung ist die Annahme, dass bei tiefen Temperaturen nur die Kohlenstoff-Leerstellen und bei hohen Temperaturen nur die Silizium-Leerstellen als Einfangzentren wirken. Diese Annahme ist gerechtfertigt, da die Intensität der entsprechenden Komponente im Vergleich mit der Gültigkeit des Trappingmodells einen dominierenden Defekt schlussfolgern lässt. Der Vergleich beider Referenzmaterialien zeigt eine Erhöhung der mittleren e^+ -Lebensdauer um 2 ps im gesamten Tieftemperaturbereich für das n-dotierte Material. Dieser geringe Unterschied lässt vermuten, dass der leerstellenartige Defekt, wie er bei den hohen Messtemperaturen beobachtet wird, auch bei den geringen Temperaturen einen kleinen Einfluss besitzt, und die mittlere Positronenlebensdauer ansteigen lässt. Dieser Defekt könnte im Fall des p-dotierten Materials nicht als Einfangzentrum wirken, wenn er positiv geladen ist. Ein möglicher Kandidat ist neben

der Silizium-Leerstelle die Doppelleerstelle. Das Umladungsniveau der positiv geladenen Doppelleerstelle ist wesentlich dichter an der Bandmitte verglichen mit dem der Silizium-Leerstelle gelegen (vgl. Abb. 3.12).

4.1.2 Optische Aktivierung von Defekten

Die Kombination verschiedener Untersuchungsmethoden ist für die Interpretation schwieriger physikalischer Zusammenhänge oft die einzige Möglichkeit, aus der Vielfalt von Varianten die „Richtige“ herauszufinden. Im binären Halbleiter existieren sechs native Punktdefekte und deren Kombination mit Verunreinigungen sind noch vielfältiger. Elektrische Messungen sind sehr empfindlich auf die Lage der Defektniveaus in der Bandlücke. Über die chemische Struktur ist meist keine Aussage möglich. Eine elektrische Methode, mit der alle bekannten Polytypen untersucht wurden, ist die „Tiefe Störstellen-Spektroskopie“ (DLTS-**D**eep **L**evel **T**ransient **S**pectroscopy). Mit ihrer Hilfe lassen sich elektrisch aktive Defekte bis zu einer Tiefe von 1 eV von den jeweiligen Bandkanten aus charakterisieren. Im 6H-SiC Material existieren mehrere tiefe Zentren. Besonders interessant sind die Zentren E_1/E_2 und Z_1/Z_2 , da sie nach Teilchenbestrahlung durch DLTS-Messungen detektiert wurden [Zha89]. Ihre thermische Stabilitäten lassen auf leerstellenartige Defekte schließen. Ist das E_1/E_2 -Signal oberhalb einer Ausheiltemperatur von 1500°C nicht mehr nachweisbar, so bleibt das Z_1/Z_2 -Signal noch thermisch stabil. Das Photolumineszenz-Signal zeigte im 6H-SiC für die D1-Linie ein zum Z_1/Z_2 -Defekt vergleichbares Ausheilverhalten [Pat72]. Patrick et al. favorisierten für diesen Defekt die Doppelleerstelle. Desweiteren beobachteten sie ein negatives U-Verhalten, wie es auch für das E_1/E_2 -Zentrum nachgewiesen wurde. Außerdem besitzt das Z_1/Z_2 -Zentrum und die 4349 \AA LTPL-Linie ein gleiches Ausheilverhalten. Es gibt somit viele Ansatzpunkte, dass durch die verschiedenen Messmethoden gleichartige Defekte nachgewiesen werden.

Die erwähnten Zentren sind im Bulk-Material anhand von DLTS-Messungen in gerin-

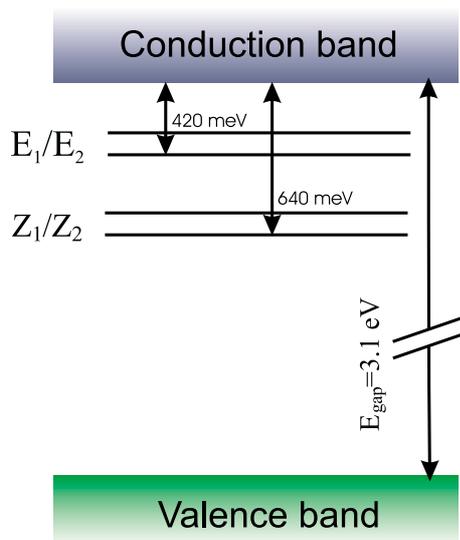


Abbildung 4.4: Darstellung der Lage verschiedener elektrisch aktiver Defekte im 6H-SiC detektiert mit DLTS [Pen00]. Durch die Energiezufuhr mittels Beleuchtung oder Erwärmung können diese Defekte umgeladen werden und somit ihre spezifische Trappingrate ändern.

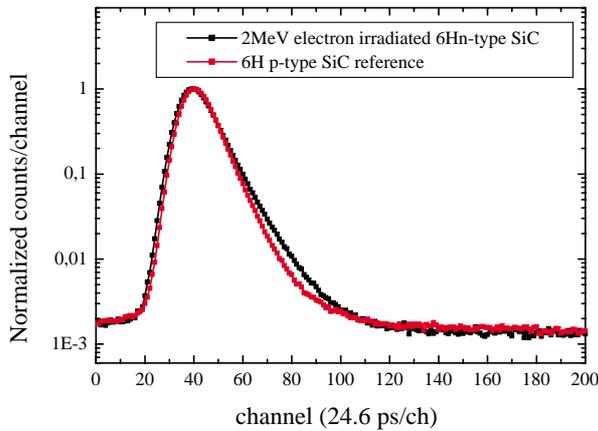


Abbildung 4.5: Darstellung der e^+ -Lebensdauerspektren von Elektronen-bestrahltem SiC und Referenz-Material 6H p-Typ SiC bei einer Messtemperatur von 300 K. Im p-dotiertem Material existieren keine Einfangzentren, so dass die e^+ -Lebensdauer des ungestörten Materials gemessen wird ($\tau_{\text{bulk}} = 143 \pm 2 \text{ ps}$).

ger Konzentration vorhanden. Die Untersuchung an der n-dotierten Referenzprobe ergab bei Messtemperaturen unterhalb von 100 K einen kleinen optischen Effekt in Form einer Reduzierung der mittleren e^+ -Lebensdauer von 2,5 ps. Um die Konzentration der Defekte zu erhöhen, wurden die Proben mit Elektronen bestrahlt. Elektronen, als relativ leichte Teilchen mit einer Energie von 2 MeV, können verschiedene leerstellenartige Defekte erzeugen. Unterhalb der Energie von 500 keV dominiert die Erzeugung von Kohlenstoff-Leerstellen. Die Energie für die Erzeugung einer Kohlenstoff-Leerstelle ist viel kleiner als für eine Silizium-Leerstelle. Bei einer Energie von 2 MeV sind Kohlenstoff-, Silizium- und Doppelleerstellen mögliche Kandidaten der Defektnukleation. Die Konzentration der Kohlenstoff-Leerstellen sollte aufgrund der geringeren notwendigen Energie zum Herauslösen eines Atoms aus der Matrix größer als die der Silizium-Leerstelle sein. Das Ansteigen der mittleren e^+ -Lebensdauer durch die 2 MeV Elektronen-Bestrahlung ist anhand der Spektren in der Abb. 4.5 zu erkennen. Die Dosis der Bestrahlung betrug $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$. Sie wurde in einem weiteren Experiment auf $3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ erhöht.

Unter der Bestrahlung von weißem Licht mit Halogenstrahlern in einem optischen Kryostat, wurde die Temperaturabhängigkeit der mittleren e^+ -Lebensdauer untersucht. Die Motivation für dieses Experiment basiert auf einer DLTS-Messung, wobei ein optischer Effekt bei einer Beleuchtung mit blauem Licht $\lambda = 417 \text{ nm}$ gemessen wurde [Hem99]. Anhand der Abb. 4.6 ist ein Unterschied in der mittleren e^+ -Lebensdauer unterhalb einer Messtemperatur von 120 K zu erkennen. Dieser nimmt bis zu einer Temperatur von 30 K zu, bis er auf einen konstanten Wert einläuft. Die Beleuchtung mit weißem Licht führte zu einer Umladung eines für Positronen attraktiven Zentrums. Durch die Einstrahlung mit Photonen gibt der Defekt ein Elektron an das Leitungsband ab und wird somit positiver. Da die PAS nicht zwischen mehrfach negativ geladenen Leerstellen unterscheiden kann, muss eine Umladung von neutral auf positiv oder von negativ auf neutral vorliegen. In beiden Fällen unterscheiden sich die Einfangraten derart, dass sich die Positronenlebensdauer dementsprechend ändert. Die Einfangquerschnitte der mehrfach negativ geladenen Zustände unterscheiden sich nicht wesentlich und sind somit nicht messbar. Zur

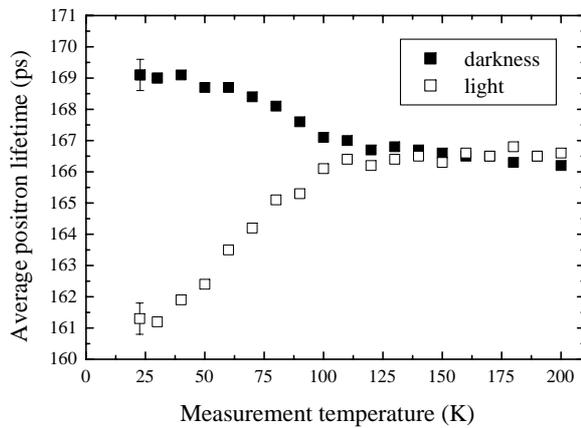


Abbildung 4.6: Darstellung der mittleren e^+ -Lebensdauer als Funktion der Messtemperatur von Elektronen-bestrahltem n-Typ 6H-SiC unter Beleuchtung und in Dunkelheit. Die Beleuchtung erfolgte mit weißem Licht in einem Kryostat mit einem Quarzglasfenster.

Charakterisierung, welcher der möglichen Defekte an der Umladung beteiligt ist, erfolgte die Analyse der e^+ -Lebensdauerspektren. Die Zerlegung ergab eine defektspezifische e^+ -Lebensdauer von 205 ± 7 ps, welche der Silizium-Leerstelle zugeordnet werden kann. Ist dies der einzige Defekt, so sollte nach dem Trappingmodell eine reduzierte erste e^+ -Lebensdauer existieren, d. h. ihr Wert befindet sich unterhalb der e^+ -Lebensdauer des defektfreien Substrats von 143 ps. Die erste e^+ -Lebensdauer wurde nahezu im gesamten

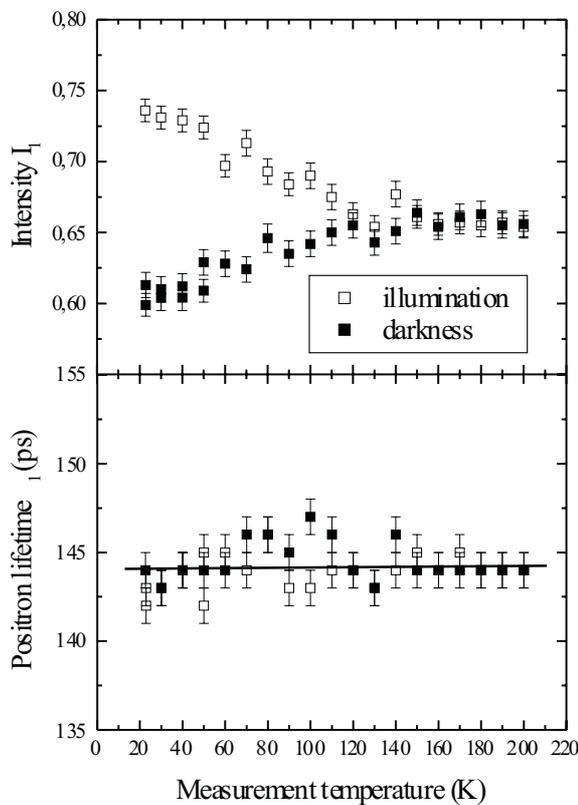


Abbildung 4.7: Darstellung der Zerlegung der e^+ -Lebensdauerspektren als Funktion der Messtemperatur von Elektronen-bestrahltem n-Typ 6H-SiC unter Beleuchtung und in Dunkelheit. Dargestellt ist der Temperaturverlauf der ersten Komponente und die dazugehörigen Intensität.

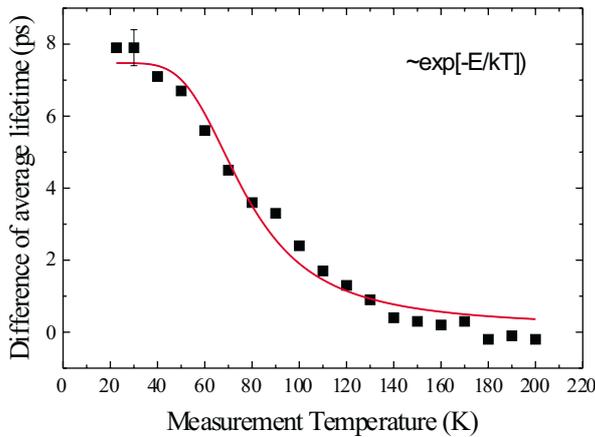


Abbildung 4.8: Darstellung der Differenz der mittleren e^+ -Lebensdauer unter Beleuchtung und Dunkelheit als Funktion der Messtemperatur. Die rote Linie ist das Ergebnis des Fits mit einer Aktivierungsenergie von 35 meV .

Temperaturbereich mit $144 \pm 3 \text{ ps}$ bestimmt (siehe Abb. 4.7). Folglich agiert noch mindestens ein zusätzlicher Defekt als Einfangzentrum, welcher die Kohlenstoff-Leerstelle sein könnte. Die e^+ -Lebensdauer der Kohlenstoff-Leerstelle und die reduzierte e^+ -Lebensdauer können nicht voneinander getrennt werden. Sie ergeben die experimentell bestimmte e^+ -Lebensdauer von 144 ps . Die Intensität der ersten e^+ -Lebensdauer nimmt unter Beleuchtung zu. Dies bedeutet, dass die Silizium-Leerstelle an Intensität verliert. Die optische Anregung der Elektronen aus der Silizium-Leerstelle in das Leitungsband führt zu einer Änderung des Ladungszustandes, der den Einfangquerschnitt für Positronen reduziert. Der Anteil von in Kohlenstoff-Leerstellen annihilierenden Positronen erhöht sich somit. Die Kohlenstoff-Leerstelle besitzt eine defektspezifische e^+ -Lebensdauer von ca. 150 ps , so dass bei steigender Intensität die mittlere e^+ -Lebensdauer sinkt. Das Ansteigen der mittleren e^+ -Lebensdauer mit abnehmender Messtemperatur der unbeleuchteten Probe ist durch die Temperaturabhängigkeit des Trappingkoeffizienten einer negativ geladenen Leerstelle zu erklären (siehe Kap. 1.2.2). Die Zeit, die die Elektronen im angeregten Zustand (im Leitungsband) verbringen, wird auch als Ladungsträger-Lebensdauer bezeichnet. Diese ist temperaturabhängig und zeigt, dass eine Aktivierungsenergie von 35 meV (siehe Abb. 4.8) für den spontanen Übergang auf das Grundniveau notwendig ist. Bei einer Messtemperatur oberhalb von 120 K ist kein Beleuchtungseffekt nachweisbar. Der Ladungszustand der Silizium-Leerstelle hat dann wieder im thermischen Gleichgewicht seinen Grundzustand erreicht, so dass die Rekombination sofort stattfindet.

4.1.3 Untersuchung mit monochromatischem Licht

Die Lage der Niveaus elektrisch aktiver Defekte ist mittels DLTS-Messungen bestimmbar. Das E_1/E_2 -Zentrum wurde als leerstellenartiger Defekt diskutiert [Fra98], jedoch blieb man den Beweis durch eine leerstellensensitive Methode schuldig. Die im vorigen Kapitel vorgestellte optische Aktivierung betrifft mindestens einen Defekt, der mit Positronen messbar ist. Sollte dieser Defekt, hier als Silizium-Leerstelle diskutiert, das E_1/E_2 -Zentrum beschreiben, so kann dieser Defekt erst dann optisch umgeladen werden, wenn die 430 meV an Photonenenergie für die Ionisation zur Verfügung steht. Die Beleuchtung der Probe erfolgte mit Hilfe eines Gittermonochromators DIGIKROM 120. Die Auflösung des Monochromators beträgt 1 nm . Die Beleuchtung, der sich im Vakuum befindenden Probe, realisierte sich durch ein Quarzglasfenster. Die Wellenlängenabhängigkeit (Photonenenergie) der mittleren e^+ -Lebensdauer ist in Abb. 4.9 dargestellt.

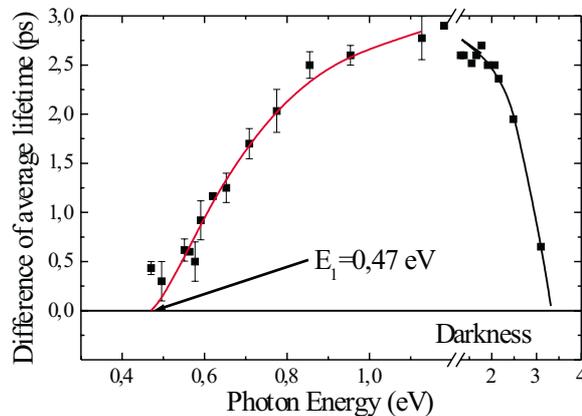


Abbildung 4.9: Darstellung der mittleren e^+ -Lebensdauer unter monochromatischer Beleuchtung bei einer Messtemperatur von 20 K . Die rote Linie resultiert aus dem Fit nach dem Lucovsky-Modell [Luc65]. Die schwarze Linie oberhalb der Energie von 2 eV dient zur Führung des Auges.

Die in der Abbildung dargestellte rote Linie beschreibt den Einfangquerschnitt für die Elektronenanregung vom Grundzustand in ein parabelförmiges und isotropes Band nach dem Lucovsky-Modell [Luc65]. Anhand dieser Anpassung ergab sich eine Aktivierungsenergie von 470 meV . Vergleicht man die beiden Aktivierungsenergien miteinander, so ist das E_1/E_2 -Zentrum und der Beleuchtungseffekt mit der PAS gemessen vom gleichen Ursprung. Dies lässt den Schluss zu, dass das E_1/E_2 -Zentrum ein mit einer Silizium-Leerstelle dekoriertes Defekt ist. Das Abfallen der mittleren e^+ -Lebensdauer zu größeren Energien ($>2\text{ eV}$) erklärt sich aufgrund der Anregung von Elektronen aus dem Valenzband oder von diskreten Defektniveaus in das Leitungsband. Oberhalb der Energie von 3 eV , welche dem Bandabstand entspricht, ist kein Unterschied in der Positronenlebensdauer mit und ohne Beleuchtung zu messen, was die totale Band-zu-Band-Absorption beschreibt.

4.1.4 Ausheilverhalten der Defekte

Die Kombination mehrerer voneinander unabhängiger physikalischer Messmethoden wurde bereits im Kapitel 3.2 angesprochen. In den ersten beiden Abschnitten dieses Kapitels

ist zu sehen, dass die hier untersuchte Silizium-Leerstelle die gleiche Ionisierungsenergie wie das E_1/E_2 -Zentrum besitzt. Ein Beleuchtungseffekt war bereits im Bulk-Material zu messen. Der Unterschied in der mittleren e^+ -Lebensdauer betrug aber nur $2,5\text{ ps}$, so dass durch die Elektronen-Bestrahlung die Konzentration der Defekte zusätzlich zu den intrinsischen Defekten erhöht wurde. Im bestrahlten Zustand erhöhte sich der Beleuchtungseffekt auf 8 ps (siehe Abb. 4.8). Das Ausheilverhalten der Defekte, detektiert mit der DLTS (E_1/E_2) oder PL (D_1), kann ein experimenteller Indiz für gleichartige Defekte sein. Dieses Verhalten sollte sich im Fall einer richtigen Interpretation der bisherigen Ergebnisse auch mit der PAS nachweisen lassen. In Abb. 4.10 ist die Abhängigkeit der mittleren e^+ -Lebensdauer als Funktion der Ausheiltemperatur dargestellt. Das Ausheilverhalten lässt sich in drei Abschnitte einteilen. In der ersten Stufe, d. h. von der Raumtemperatur bis zu einer Ausheiltemperatur von 400°C kommt es zur Rekombination naher Frenkelpaare durch die Beweglichkeit von Zwischengitteratomen und der Ausheilung der mobilen Kohlenstoff-Leerstellen [Kaw89]. Anschließend stabilisiert sich das Positronensignal bis zu einer Ausheiltemperatur von 1000°C . Die mittlere e^+ -Lebensdauer nimmt mit steigender Temperatur ab und besitzt oberhalb von 1400°C den Wert des Substratmaterials. Alle durch die Elektronen-Bestrahlung erzeugten Defekte im SiC sind somit ausgeheilt. Dieses Ausheilverhalten ist dem des E_1/E_2 -Defektes ähnlich [Fra98], so dass eine Korrelation wahrscheinlich ist. In der nächsten Abbildung ist das Ausheilverhalten des Beleuchtungseffektes zu sehen. Das Ausheilverhalten des Beleuchtungseffektes folgt prinzipiell dem der mittleren e^+ -Lebensdauer von Abb. 4.10. Da auch hier zwei Ausheilschritte zu sehen sind, sind mindestens zwei leerstellenartige Defekte für die Änderung der mittleren e^+ -Lebensdauer verantwortlich. Bei einer Ausheiltemperatur oberhalb von 1300°C ist ein verbleibender Beleuchtungseffekt von 2.5 ps zu beobachten. Dieser Effekt ist thermisch stabil und auch im Bulk-Material vorhanden. Eine vergleichbare thermische Stabilität zeigte im Polytypen 4H aus theoretischen Rechnungen die Doppelleerstelle [Tor02]. Sie ist bereits als intrinsischer Defekt im unbehandelten Material nachgewiesen

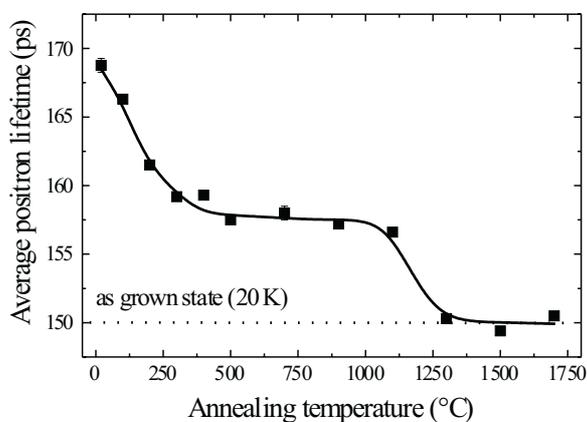


Abbildung 4.10: Darstellung der mittleren e^+ -Lebensdauer als Funktion der Ausheiltemperatur für 2 MeV Elektronen-bestrahltes $6H$ n -Typ SiC. Die Positronenlebensdauer ist für die Messtemperatur von 20 K angegeben.

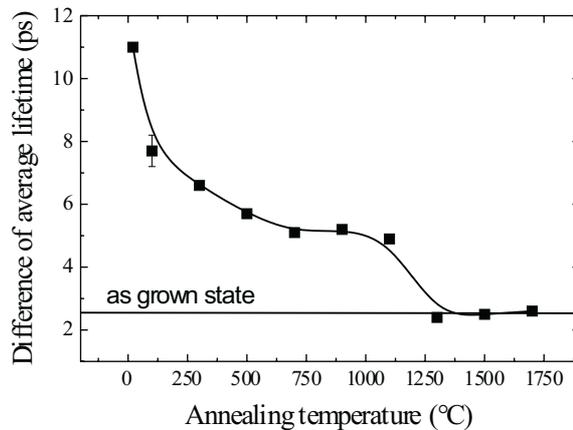


Abbildung 4.11: Darstellung der Differenz der mittleren e^+ -Lebensdauer zwischen Licht- und Dunkelmessung als Funktion der Ausheiltemperatur für 2 MeV Elektronen-bestrahltes 6H n-Typ SiC bei einer Messtemperatur von 20 K.

worden. Da zwischen den verschiedenen Polytypen die möglichen Gitterplätze verschieden sind und keine Abhängigkeit der e^+ -Lebensdauer vom Gitterplatz zu erwarten ist, sollten die Aussagen auch auf den Polytyp 6H übertragbar sein. Der verbleibende optische Effekt wäre mit der Existenz von Doppelleerstellen oder mit der Bildung thermisch stabiler Silizium-Leerstellen-Komplexe zu erklären. Eine weitere mögliche Erklärung für den verbleibenden optischen Effekt sind intrinsischen Defekte (Kohlenstoff- und Doppelleerstellen). Die Silizium-Leerstelle als intrinsischer Defekt ist anhand des bei der Kristallzucht herrschenden hohen Siliziumdampfdruckes nicht unbedingt zu erwarten. Bei tiefen Messtemperaturen ist die Kohlenstoff-Leerstelle das dominierende Einfangzentrum, und die Änderung der mittleren e^+ -Lebensdauer von nur 2,5 ps ein Hinweis, dass sie für den optischen Effekt im Substratmaterial verantwortlich ist.

4.1.5 Dosiserhöhung auf $3 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$

Für weitere Untersuchungen wurde die Dosis der Bestrahlung auf das Dreifache erhöht. Damit nimmt die Defektkonzentration zu und existierende Ausheilstufen kristallisieren sich deutlicher heraus. Die temperaturabhängigen Messungen wurden in Dunkelheit und unter Beleuchtung durchgeführt, um die verschiedenen angeregten Defekte besser identifizieren zu können. Der Verlauf der mittleren e^+ -Lebensdauer ist in Abb. 4.12 dargestellt.

Die mittlere e^+ -Lebensdauer zeigt ein analoges Verhalten zu den Messungen mit der Bestrahlung einer Dosis von $1 \times 10^{17} \text{cm}^{-2}$. Die Erhöhung der mittleren e^+ -Lebensdauer auf nun 172 ps ist mit dem Steigen der Defektkonzentration erklärbar. Die Intensität der defektspezifischen Lebensdauerkomponente stieg von 25 auf 50 %. Der Beleuchtungseffekt ist mit ca. 8 ps konstant geblieben. Da die Konzentration der Defekte zunahm, war eine Erhöhung des Beleuchtungseffektes zu erwarten. Das Transmissionsverhalten verschlechterte sich während der Bestrahlung derart, dass die Proben eine deutlich dunklere Färbung im Vergleich zur ersten Bestrahlung besaßen. Somit kann die Zunahme der Absorptionszentren mit dem Ausbleiben der Erhöhung des Beleuchtungseffektes interpretiert wer-

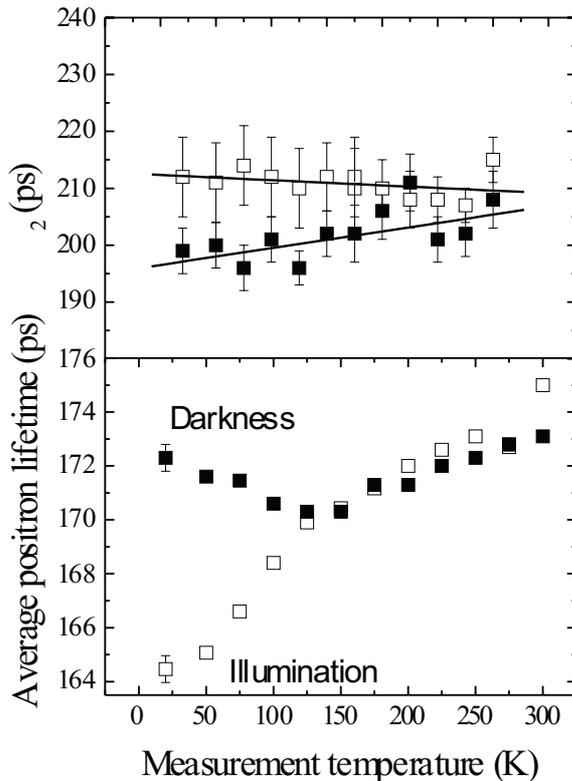


Abbildung 4.12: Darstellung der mittleren e^+ -Lebensdauer als Funktion der Messtemperatur von Elektronen-bestrahltem n -Typ $6H$ -SiC unter Beleuchtung und in Dunkelheit. Die Dosis der Bestrahlung beträgt $3 \times 10^{17} \text{cm}^{-2}$. In der oberen Grafik sind die dazugehörigen defektspezifischen e^+ -Lebensdauern für den jeweiligen Beleuchtungszustand angegeben.

den. Auch hier ist bei einer Messtemperatur oberhalb von 120 K kein Beleuchtungseffekt mehr zu messen, d. h. die mittlere e^+ -Lebensdauer ist nicht unter Beleuchtung reduziert. Das Ansteigen der mittleren e^+ -Lebensdauer zu tiefen Temperaturen basiert auf dem Vorhandensein von negativ geladenen Leerstellen. Unter Beleuchtung wird die Leerstelle in den neutralen Zustand unter Abgabe eines Elektrons an das Leitungsband umgeladen. Der Positroneneinfang einer neutralen Leerstelle besitzt eine andere Temperaturabhängigkeit ($d\kappa(T)/dT = 0$). Die Spektrenzerlegung zeigt, dass sich die defektspezifische e^+ -Lebensdauer unter Beleuchtung ändert. Beträgt sie in Dunkelheit ca. 200 ps (linearer Fit), so erhöht sie sich unter Beleuchtung auf 210 ps . Eine mögliche Schlussfolgerung ist die Existenz von Silizium- und Doppelleerstellen, wobei nur die Silizium-Leerstellen ihren Ladungszustand ändern. Die Intensität I_2 der defektspezifischen Positronenlebensdauer sinkt bei einer Messtemperatur von 20 K von 58% auf 31% . Unter diesem Aspekt kann die Doppelleerstelle kein optisch aktives Zentrum sein, da sich die dem Defekt zugeordnete e^+ -Lebensdauer änderte. Der Vergleich der Umladungsniveaus zwischen der Silizium-Leerstelle und der Doppelleerstelle (siehe Abb. 3.12 und 3.8) zeigt, dass bei gleichem Ladungszustand die Silizium-Leerstelle immer das für Positronen attraktivere Einfangzentrum darstellen sollte.

Abb. 4.13 beschreibt das Ausheilverhalten der mittleren e^+ -Lebensdauer für die Licht- und Dunkelmessung. Vergleicht man es mit der Probe, welche mit einer Dosis von $1 \times$

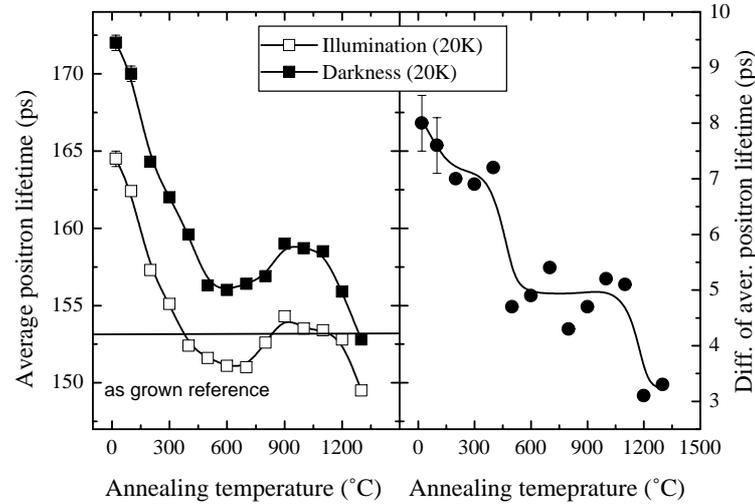


Abbildung 4.13: Darstellung der mittleren e^+ -Lebensdauer als Funktion der Ausheiltemperatur von Elektronen-bestrahltem n -Typ $6H$ -SiC unter Beleuchtung und in Dunkelheit. In der rechten Grafik ist der Unterschied der mittleren e^+ -Lebensdauer zwischen Licht- und Dunkelmessung in Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur angegeben. Die Messtemperatur betrug 20 K. Die durchgezogenen Linien dienen zur Führung des Auges.

10^{17} cm^{-2} bestrahlt wurde, so zeigt sich im Bereich von 900 bis 1100°C ein abweichendes Verhalten. Ausgehend von der ersten Ausheilstufe, bei der die mittlere e^+ -Lebensdauer konstant bleibt, sind bereits 60 % des Beleuchtungseffektes ausgeheilt. Diese Ausheilung erfolgt aufgrund der Rekombination naher Frenkelpaare, wobei Kohlenstoff und Silizium-Leerstellen in ihrer Konzentration reduziert werden. Bei einer Ausheiltemperatur von ca. 300°C sind die Kohlenstoff-Leerstellen beweglich, so dass diese durch die Bestrahlung zusätzlich eingebrachten Defekte verschwinden. Das Ansteigen der mittleren Positronenlebensdauer im Temperaturbereich von 700 bis 1000°C wäre wie für die Bestrahlung mit der geringeren Dosis mit der Bildung des Komplexes $V_{Si}N_C V_{Si}$ zu erklären. Das vergrößerte Volumen der Leerstelle würde die Elektronendichte verringern und die Positronenlebensdauer ansteigen. Dieser Komplex könnte bei einer Temperatur oberhalb von 1100°C dissoziieren, so dass bei einer Temperatur von 1400°C nahezu alle durch Elektronen-Bestrahlung erzeugten Defekte ausgeheilt sind.

Kohlenstoff-Leerstellen werden bei einer Temperatur von ca. 300°C beweglich. Die verbleibende Kohlenstoff-Leerstellenkonzentration höherer Ausheiltemperaturen ist aber noch so groß, dass diese in der weiteren Betrachtung nicht vernachlässigt werden kann. Dies sieht man anhand der temperaturabhängigen Messung bei einer Ausheiltemperatur von 1200°C in Abb. 4.14. Der Verlauf der mittleren e^+ -Lebensdauer zeigt bei tiefen Temperaturen bis zu einer Messtemperatur von 300 K eine negative Temperaturabhängigkeit. Dieses Verhalten basiert auf dem Vorhandensein von negativ geladenen Kohlenstoff-

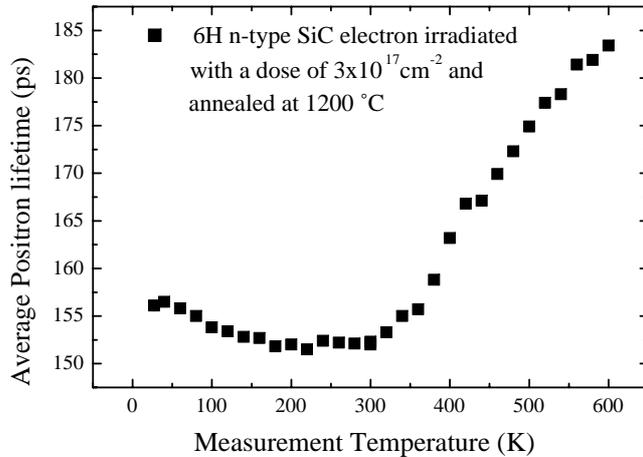


Abbildung 4.14: Darstellung der mittleren e^+ -Lebensdauer als Funktion der Messtemperatur für 2 MeV Elektronen-bestrahltes 6H n-Typ SiC mit einer Dosis von $3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$. Die Probe wurde bei 1200°C 30 min unter Vakuum ausgeheilt.

Leerstellen. Durch ihre geringe Bildungsenthalpie von 3 eV sind diese bereits im Bulk-Material als intrinsische Defekte mit hoher Wahrscheinlichkeit vorhanden. Der schwach gebundene Positronen-Leerstellen-Zustand führt dann zur Erhöhung der mittleren Positronenlebensdauer im Temperaturbereich von 300 bis 600 K. Der hier vorherrschende konkurrierende Einfang von Kohlenstoff- und Silizium- bzw. Doppelleerstellen verschiebt sich bei höheren Temperaturen zugunsten der Silizium- bzw. Doppelleerstellen. Bei der höchsten Messtemperatur ist der Einfluss der Kohlenstoff-Leerstellen am geringsten. Das Ausheilverhalten der mittleren e^+ -Lebensdauer und der Beleuchtungseffekt zeigen auch bei der hoch Elektronen-bestrahlten Probe eine ähnliche Charakteristik, wie sie bei der Bestrahlung mit der Dosis von $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ gefunden wurde. Im Kapitel 4.1.4 wurde die Silizium-Leerstelle bzw. Komplexe von Silizium-Leerstellen mit dem Beleuchtungseffekt in Verbindung gebracht. Die Zerlegung der Spektren bei höchster Messtemperatur zeigten

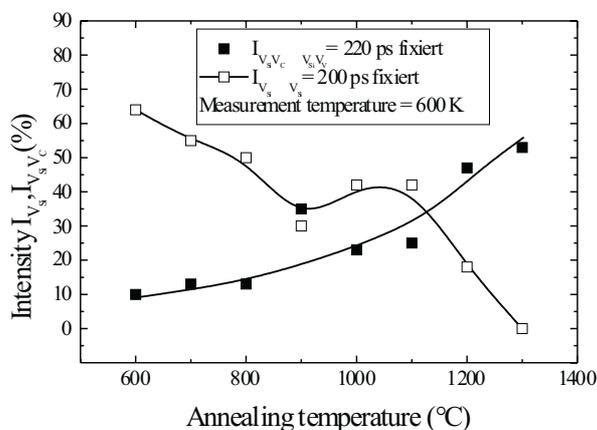


Abbildung 4.15: Darstellung der Intensitätsverteilung von Silizium-Leerstelle und Doppelleerstelle für den Bereich der Ausheiltemperatur von 600 bis 1300°C . Die spezifischen fixierten e^+ -Lebensdauern resultieren aus Ergebnissen der Referenzmaterialien (6H) und der Defektlebensdauer im bestrahlten Zustand. Diese Annahme basiert aufgrund der Gültigkeit des Trapping-modells, welches aus der Zerlegung der Spektren die richtige Bulk- e^+ -Lebensdauer errechnet.

bei den Ausheiltemperaturen von 1000 bis 1300°C ein leichtes Ansteigen der defektspezifischen e^+ -Lebensdauer. Deshalb wurde unter der Annahme des konkurrierenden Einfangs von Silizium (200 ps fixiert) und Doppelleerstelle (215 ps fixiert) für diese Messtemperatur die Intensität der jeweiligen Komponente betrachtet. In der Abb. 4.15 zeigt sich, dass die Silizium-Leerstellen-Intensität I_2 mit zunehmender Ausheiltemperatur sinkt und der Anteil der Annihilation mit Doppelleerstellen zunimmt. Das leichte Ansteigen der Intensität der Silizium-Leerstelle bei 900°C ist mit Bildung von Komplexen aus Silizium-Leerstellen mit Fremdatomen (z. B. $V_{Si}N_C$ oder $V_{Si}N_CV_{Si}$) erklärbar, da diese eine höhere thermische Stabilität besitzen könnten. Beim weiteren Erhöhen der Ausheiltemperatur sollten diese dann endgültig ausheilen. Das Ausheilverhalten der Silizium-Leerstelle ist somit mit dem Ausbleiben des Beleuchtungseffektes in Verbindung zu bringen, wie es schon beim niedrig bestrahlten Material gefunden wurde.

4.1.6 Doppler-Koinzidenz-Messungen

An den bestrahlten Proben mit der Dosis von $3 \times 10^{17} \text{cm}^{-2}$ wurden zur Charakterisierung der chemischen Umgebung Doppler-Koinzidenz-Messungen durchgeführt. Diese untersuchen den Hochimpulsanteil der Annihilationslinie, welche durch einen Germaniumdetektor analysierbar ist. Die Methode der Doppler-Koinzidenz-Spektroskopie wurde im Kapitel 1.5 erläutert. Die Statistik, d. h. die Anzahl der Ereignisse im koinzidenten Spektrum, war im Vergleich zu üblichen Halbleitern wesentlich höher, da schon die theoretische Betrachtung des W-Parameters nur kleine Unterschiede in der Linienform des Annihilationspeakes berechnete [Sta01]. In einem Spektrum befinden sich somit mind. 30 Millionen Ereignisse, da besonders der Hochimpulsanteil größer als $20 m_0c$ aussagekräftig ist. Die Koinzidenzspektren sind auf das 6H-p-Typ-Substratmaterial normiert, um die Unterschiede in der Annihilationscharakteristik deutlich herauszuarbeiten. Abb. 4.16 zeigt die Koinzidenzspektren für verschiedene Ausheilstufen der Elektronen-bestrahlten Proben. Für die Interpretation wird ausschließlich der Bereich $p_z > 15 \times 10^{-3} m_0c$ betrachtet, da nur für ihn die theoretischen Betrachtungen anwendbar ist. Anhand der Linienform ist zu erkennen, dass sich die Linienform des Hochimpulsanteiles im Ausheilverhalten nahezu nicht ändert. Es ist ein leichter Anstieg des Hochimpulsanteils zu beobachten. Das Verschieben des Signals in Richtung des Referenzmaterials (ratio=1, siehe Abb. 4.16) folgt aus der Reduzierung der Konzentration der Defekte mit der Erhöhung der Ausheiltemperatur. Die vergleichbare Linienform lässt vermuten, dass sich während der Ausheilung die chemische Umgebung der Einfangzentren nicht wesentlich ändert. Der leichte Anstieg des Hochimpulsanteils ist ein Indiz für das Vorhandensein von Silizium-Leerstellen oder Doppelleerstellen. Die Linienform für die Kohlenstoff-Leerstelle hat nach theoretischen Rechnungen ein abfallendes Verhalten. Die Leerstelle besitzt als nächste Nachbarn ausschließlich Siliziumatome, so dass der Hochimpulsanteil vom Silizium dominiert wird. Die Koinzidenz-Messung von Silizium ist repräsentativ für den vollständigen Einfang in die Kohlenstoff-Leerstellen dargestellt. Das aus der Theorie vorhergesagte abfallende Verhalten des Hochimpulsanteils ist in der Abbildung deutlich zu erkennen. Eine weitere Interpretationsmöglichkeit der

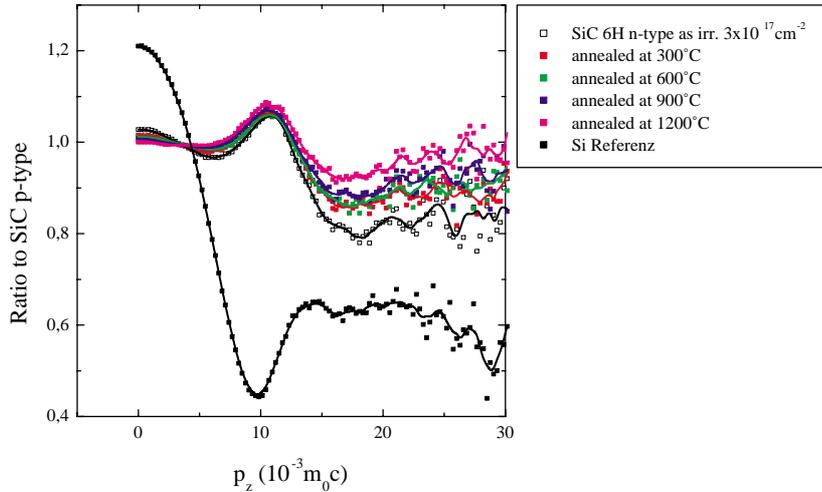


Abbildung 4.16: Darstellung des Hochimpulsanteils der Doppler-Verbreiterungs-Linie für verschiedene Ausheiltemperaturen für Elektronen-bestrahltes 6H n-Typ SiC mit einer Dosis von $3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$. Die Spektren wurden auf das Referenzmaterial 6H p-Typ SiC normiert, da hier keine Trappingzentren vorhanden sind. Die Messtemperatur beträgt 300 K. Vergleichend dazu ist eine defektfreie Siliziumprobe dargestellt, die den Verlauf des Hochimpulsanteils der Kohlenstoff-Leerstelle beschreibt.

Ausheilcharakteristik ist die S-W-Analyse. In ihr steht die Frage im Mittelpunkt, ob sich der elementspezifische W-Parameter in Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur ändert. Anhand von Abb. 4.17 ist ein nahezu geradliniges Ausheilverhalten zu erkennen. Dies lässt

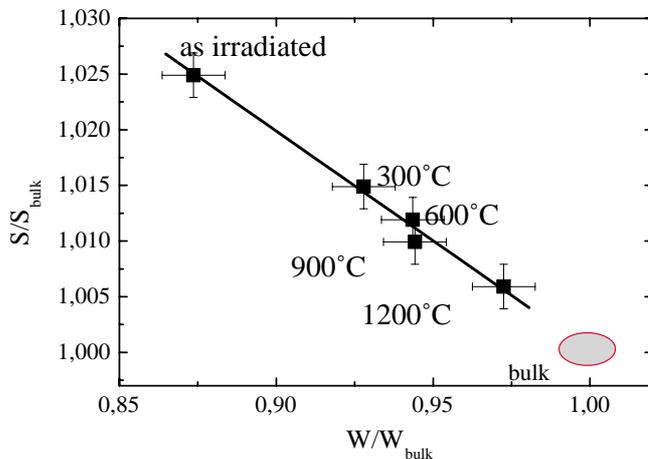


Abbildung 4.17: $S(W)$ -Analyse der isochronen Ausheilung von Elektronen-bestrahltem 6H-SiC. Die durchgezogene Linie dient zur Führung des Auges und deuten das Ausheilverhalten an.

den Schluss zu, dass sich ausschließlich die Konzentration der Defekte aber nicht deren Zusammensetzung ändert.

4.1.7 Abhängigkeit der Leerstellenkonzentration von der Stickstoff-Dotierungskonzentration

Zur weiteren Charakterisierung von 6H-Bulk-Materialien wurden Kristalle aus dem Institut für Kristallzüchtung in Berlin untersucht. Der Schwerpunkt des Interesses liegt in der Abhängigkeit der Leerstellenkonzentration von der Stickstoff-Dotierungskonzentration. Stickstoff ist ein Donator und besetzt das Kohlenstoffuntergitter, wenn er elektrisch aktiv eingebaut wird. Die Stickstoff-Konzentration variierte während der Kristallzucht durch den Partialdampfdruck, so dass eine Netto-Elektronendichte von $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ bis $2,2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ gemessen wurde. Stickstoff ist derzeit das gebräuchlichste Element für n-Dotierung im Siliziumkarbid. Die Proben unterschieden sich in ihrer Farbe und mit steigender Stickstoff-Konzentration nahm die markante Grünfärbung zu.

Im Implantationsprozess, d. h. bei der Erzeugung n-dotierter Schichten für Bauelemente, wird neben Stickstoff auch Phosphor verwendet. Die n-Dotierung über die Gasphase während der Kristallzucht ist bisher nur mit Stickstoff möglich. Die untersuchten Kristalle wurden im Sublimationsverfahren hergestellt (siehe Kap. 3.1), elektrisch analysiert und die Stickstoff-Konzentration massenspektroskopisch (SIMS) bestimmt. Der Vergleich zwischen elektrischen Messungen und SIMS-Messungen ergab eine nahezu vollständige elektrische Aktivierung des Stickstoffes. In Abb. 4.18 sind die mittleren e^+ -Lebensdauern für die verschiedenen n-dotierten 6H-SiC-Kristalle dargestellt. Es zeigt sich für alle Kristalle eine vergleichbare Temperaturabhängigkeit der e^+ -Lebensdauer mit den von Nippon Steel erworbenen Proben. Unterschiede sind im Tief- und Hochtemperaturbereich zu messen. Bei tiefen Temperaturen überwiegt der Einfang in flache Fallen. Akzeptoren wie Bor oder

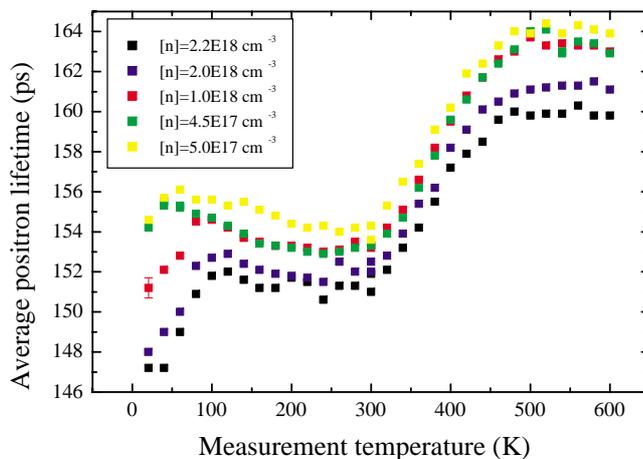


Abbildung 4.18: Darstellung der mittleren e^+ -Lebensdauer als Funktion der Messtemperatur für unterschiedlich Stickstoff-dotierte 6H-SiC Bulk-Kristalle. Die Stickstoff-Konzentration wurde während der Wachstumsphase in der Zuchtapparatur geändert.

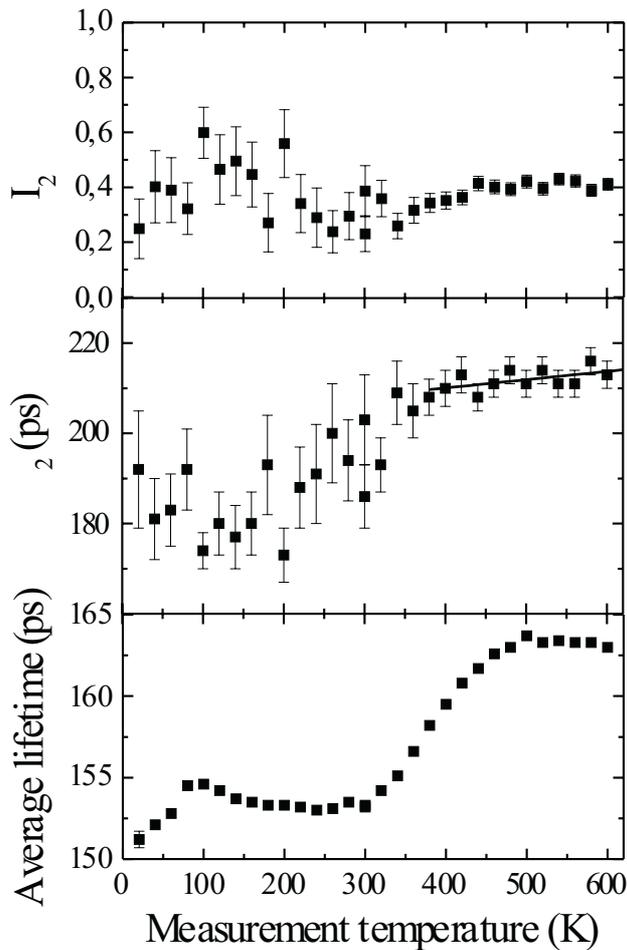


Abbildung 4.19: Darstellung der mittleren e^+ -Lebensdauer, der defektspezifischen e^+ -Lebensdauer und deren Intensität in Abhängigkeit von der Messtemperatur für die Probe mit einer Elektronendichte von $[n] = 2 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$.

Aluminium könnten für das Abfallen der mittleren e^+ -Lebensdauer zu tiefen Temperaturen verantwortlich sein. Es existieren somit zwei für Positronen attraktive Zentren, die das typische Verhalten einer flachen Falle zeigen. Zum einen ist dies die Kohlenstoff-Leerstelle, die im Temperaturbereich von 300 bis 500°C mit der Doppelleerstelle konkurriert und zum anderen sind es die genannten Akzeptoren, die mit den Kohlenstoff-Leerstellen und den Doppelleerstellen bei den tiefsten Messtemperaturen an Einfluss gewinnen. Der Hochtemperaturbereich (500 bis 600 K) unterscheidet sich von den Nippon-Steel-Proben durch eine Sättigung der Positronenlebensdauer. Die Ursache könnte in einer höheren Doppelleerstellen-Konzentration zu finden sein.

Die Konzentration der Akzeptoren dieser Proben ist nicht bekannt. Sie ist im Bereich der Kohlenstoff-Leerstellenkonzentration anzunehmen. Unter Zuchtbedingungen dominiert der Siliziumdampfdruck. Dieser bestimmt die Konzentration von Silizium-Zwischengitteratome, Silizium-Leerstellen und deren Komplexe. Der Verlauf der mittleren e^+ -Lebensdauer kann folgendermaßen erklärt werden: Bei einer Messtemperatur von 25 bis 100 K wird die e^+ -Lebensdauer durch den Einfang in Akzeptoren (hier Aluminium) bestimmt. Die Akzeptor-Konzentration sollte im Kristall während der Zucht konstant sein. Im weiteren

Verlauf ist bis 300 K eine negative Temperaturabhängigkeit der Positronenlebensdauer zu erkennen. Die Positronenlebensdauer steigt bis auf ihren Maximalwert an und ist dann konstant. Das Ansteigen der e^+ -Lebensdauer ist mit dem konkurrierenden Einfang zwischen Kohlenstoff-Leerstellen und Doppelleerstellen zu erklären. Die Spektrenzerlegung aller gemessenen Proben ergab für eine Messtemperatur von 600 K eine defektspezifische e^+ -Lebensdauer von 213 ± 3 ps. Diese wurde bereits in den vorherigen Untersuchungen den Doppelleerstellen zugeordnet. Exemplarisch ist eine Spektrenzerlegung für die Probe mit einer Netto-Elektronen-Konzentration von $[n] = 2 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ dargestellt (Abb. 4.19). Anhand der mittleren e^+ -Lebensdauer in Abb. 4.18 ist die Abhängigkeit des konkurrierenden Einfangs zwischen Akzeptoren und Kohlenstoff-Leerstellen von der Stickstoff-Konzentration zu erkennen. Je höher die Stickstoff-Konzentration ist, desto größer wird der Einfluss der flachen Fallen. Dies ist daran zu erkennen (vgl. Abb. 4.18), dass bei der geringsten Stickstoff-Konzentration in den Proben das PAS-Signal erst bei einer Temperatur von 50 K das typische Verhalten der flachen Fallen (hier Al-Akzeptor) zeigt. Im Gegensatz dazu ist der beschriebene Einfluss für die höchsten Konzentrationen an Stickstoff bis zu einer Temperatur von 120 K messbar. Da Stickstoff auf den Kohlenstoffuntergitter eingebaut wird, sollte die Konzentration der Kohlenstoff-Leerstellen sinken und sich das Verhältnis zugunsten der Akzeptoren (z. B. Al) verschieben. Desweiteren ist eine Abhängigkeit der mittleren e^+ -Lebensdauer von der Stickstoff-Konzentration zu erkennen, wobei mit steigender Stickstoff-Konzentration die mittlere e^+ -Lebensdauer sinkt. Dieses Verhalten zeigt keine Temperaturabhängigkeit und muss folglich mit einem Defekt erklärt werden, der im gesamten Messbereich aktiv ist. Da die Kohlenstoff-Leerstelle für Positronen einen relativ flach gebundenen Zustand darstellt und bei hohen Messtemperaturen an Einfluss verliert, ist die Doppelleerstelle für diesen Effekt verantwortlich, die sich in ihrer Konzentration mit steigender Dotierung verringert. Inwiefern oder ob sich die Doppelleerstelle mit Stickstoff auffüllt ist noch nicht bekannt. Der Ausschluss der Kohlenstoff-Leerstellen folgt aufgrund des Sättigungseinfangs im Temperaturbereich von 500 bis 600 K. Die Reduzierung der Doppel-Leerstellen-Konzentration äußert sich in der Abnahme der Intensität von 60 % auf 40 % der defektspezifischen e^+ -Lebensdauer.

4.1.8 Der metastabile Defekt

Metastabile Defektsysteme sind vielfältig und können für einen gegebenen Ladungszustand verschiedene Konfigurationen aufweisen. Diese sind durch Energiebarrieren voneinander getrennt, so dass durch eine Anregung mittels Energiezufuhr die Elektronenkonfiguration veränderbar ist. Betrachtet man dieses Modell, so kann auch bei der Änderung des Ladungszustandes eine derartige Energiebarriere existieren, die sich in der Lebensdauer der Elektronen im Leitungsband widerspiegelt. Einer Anregung von Elektronen folgt nicht sofort die spontane Rekombination, sondern erst nach einer bestimmten Zeit besetzt das Elektron seinen vorherigen Zustand. Die Energie, die dem System zugeführt werden muss, kann durch thermische oder beispielsweise durch optische Aktivierung erfolgen. In diesem Fall wird das Einkoppeln der Energie über Photonen realisiert. Im schematischen Konfi-

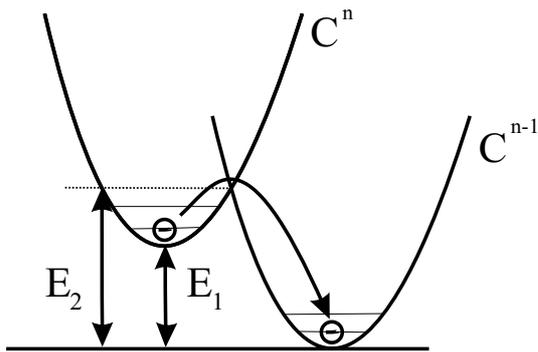


Abbildung 4.20: Schematisches Konfigurationsdiagramm zweier Ladungszustände nach Hemmingsson [Hem99]. Mit C sind die Ladungszustände bezeichnet, welche durch eine Aktivierungsenergie von $E_A = E_2 - E_1$ voneinander getrennt sind.

gurationsdiagramm nach Hemmingsson [Hem99] ist dieser Mechanismus dargestellt. In diesem Diagramm sind C die verschiedenen Konfigurationen, wobei $E_2 - E_1$ die zu überwindende Energiebarriere für die Rekombination ist. Die Temperatur des Systems liefert einen Beitrag zur Gesamtenergie, so dass diese bei der Messung so klein wie möglich (hier 15 K) gehalten wurde.

Die Messprozedur für den Nachweis des metastabilen Zustandes lässt sich folgendermaßen zusammenfassen: Nach einer zehnmütigen Beleuchtung mit weißem Licht folgte die Messung der Positronenlebensdauer in einem einmütigen Fenster bis zu einer Gesamtmesszeit im Dunkeln von 15 Minuten. Diese Prozedur wiederholte sich mehrere Male, so dass die Summe der Ereignisse im separaten Zeit-Fenster 1 Million Ereignisse betrug. Dies ist hinreichend für die Bestimmung der mittleren e^+ -Lebensdauer. Die Ergebnisse der Messungen sind in Abb. 4.21 dargestellt. Anhand dieser Abbildung wird deutlich, dass eine Energiebarriere zwischen den verschiedenen Ladungszuständen existiert. Nach 10 Minuten ist der Beleuchtungseffekt nicht mehr messbar.

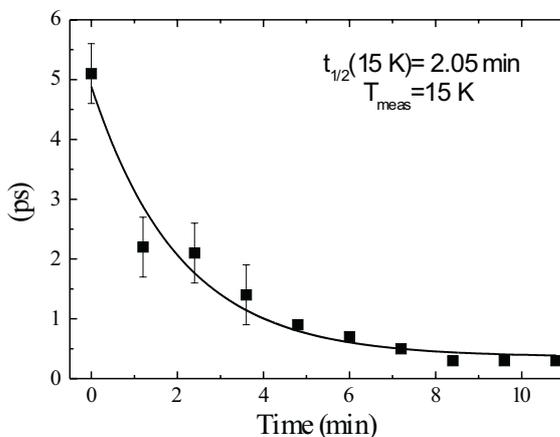


Abbildung 4.21: Zeitabhängige Darstellung des Beleuchtungseffektes der mittleren e^+ -Lebensdauer bei einer Messtemperatur von 15 K. Zum Zeitpunkt $t=0$ min erfolgte die Abschaltung des Lichtes. Die Linie ist ein Fit an die Messdaten.

4.1.9 4H-SiC

Ein weiterer in dieser Arbeit untersuchter Polytyp ist das 4H-Siliziumkarbid. Dieses besitzt verglichen zum 6H-Polytyp eine noch größere Bandlücke und hat eine Hexagonalität von 50 %. Anstatt der im Polytyp 6H vorhandenen zwei kubischen und einem hexagonalen Gitterplatz, sind die kubischen und hexagonalen Plätze im 4H gleich verteilt. In den Vorbetrachtungen wurde bereits erwähnt, dass mit der Positronenlebensdauer nicht zwischen den Gitterplätzen unterschieden werden kann. Somit sind in der Defektchemie keine neuen Komplexe zu erwarten. Die theoretischen Rechnungen zu den e^+ -Lebensdauern der verschiedenen Polytypen unterscheiden sich ebenfalls nicht sehr voneinander, so dass die Interpretationen vom Polytyp 6H teilweise übertragbar sind. In analoger Weise zum 6H-Material ist das Bulk-Material zu charakterisieren. Cree[©] gibt bei diesen Kristallen eine Stickstoff-Hintergrunddotierung von $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ an. Da die verschiedenen Polytypen eine unterschiedliche Dotierungskonzentration aufweisen, wurde das Transmissionsvermögen beider untersucht. Es zeigt sich, dass durch die um eine Größenordnung höhere Stickstoffkonzentration im 4H-Material die Absorption von Licht in analoger Weise ansteigt. Die Transmission für verschiedene Energien ist in Abb. 4.22 dargestellt. In den Energiebereichen größer als 3 eV ist die Band-zu-Band-Absorption zu erkennen. Hier zeigt sich auch der Unterschied in der Bandlücke, der beim 4H-SiC eine Energie von 3,2 eV und beim 6H-SiC 3,0 eV beträgt. Ist beim 6H im Bereich von 1 bis 3 eV ein nahezu konstantes Transmissionsvermögen abzulesen, so unterscheidet sich der 4H-Polytyp durch zwei Absorptionsbanden bei 2,2 eV und 2,7 eV. Die dazugehörigen Defekte könnten die Akzeptoren Bor und Aluminium sein [Fre8a, Yam74]. Desweiteren ist in diesem Material eine Absorptionsbande zu sehen, die bei 0,5 eV etwa 100 % erreicht. Diese Bande deutet sich für das 6H-Material ebenfalls an und könnte mit 470 meV dem Beleuchtungseffekt zugeordnet werden. Die untere Grenze des detektierbaren Energiebereiches des Spektrometers UV-VIS ist 400 meV.

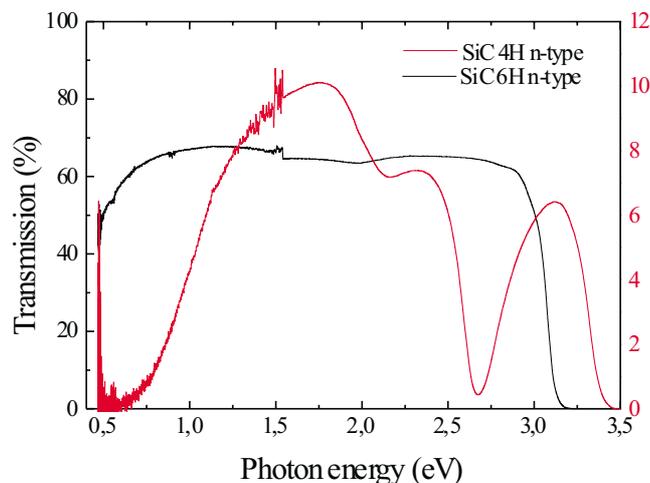


Abbildung 4.22: *Transmissionsverhalten der Referenzmaterialien 6H und 4H n-Typ SiC gemessen am UV-VIS-Spektrometer bei einer Messtemperatur von 300 K*

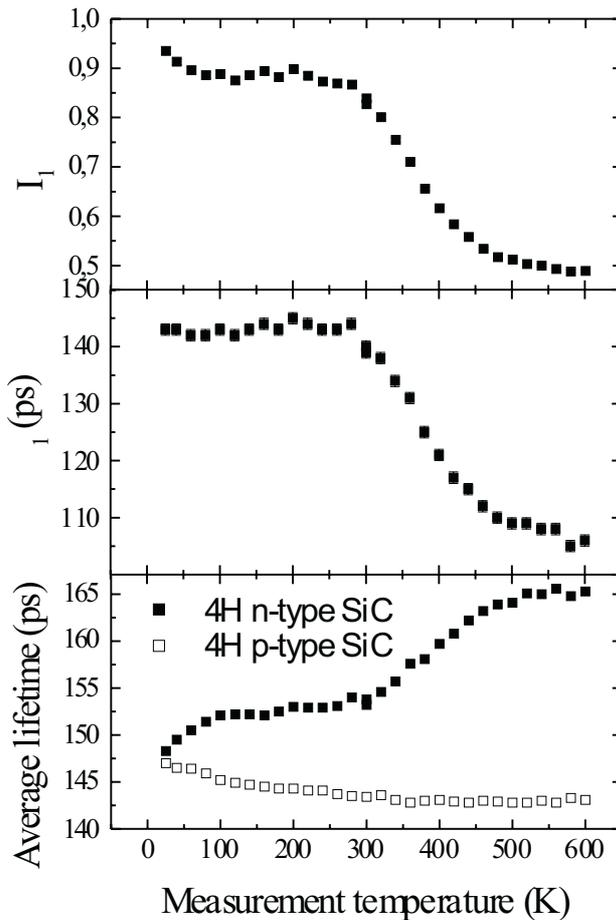


Abbildung 4.23: Darstellung der mittleren e^+ -Lebensdauer, der ersten e^+ -Lebensdauer und der dazugehörigen Intensität als Funktion der Messtemperatur. Die defektbezogene e^+ -Lebensdauer τ_2 ist mit 215 ps fixiert. Diese wurde in einer freien Anpassung für die höchste Messtemperatur unter Berücksichtigung der Richtigkeit des einfachsten Trappingmodells ermittelt. Die offenen Symbole der untersten Abbildung charakterisieren den Verlauf der mittleren e^+ -Lebensdauer einer p -dotierten 4H-SiC Referenzprobe.

Die Abbildung zeigt, dass das 4H-Bulk-Material, wie es gewachsen ist (engl. as-grown), eine hohe Defektkonzentration aufweist. Inwiefern diese mit leerstellenartigen Defekten korreliert sind, zeigt die Positronenlebensdauer-Untersuchung an diesem Material. Die freie Anpassung der defektspezifischen e^+ -Lebensdauer bei einer Messtemperatur von 500 bis 600 K ergab 222 ± 2 ps und kann den Doppelleerstellen zugeordnet werden. Für die weiteren Betrachtungen wird diese Komponente fixiert. Diese Vorgehensweise begründet sich mit der Korrektheit des Trappingmodells bei hohen Messtemperaturen, welches unter der Annahme eines Defektes den Bulk-Wert berechnet.

Der temperaturabhängige Verlauf der mittleren e^+ -Lebensdauer, wie er im untersten Diagramm der Abb. 4.23 dargestellt ist, lässt sich in drei Bereiche einteilen. Für eine Messtemperatur von 500 bis 600 K dominiert der Einfang in die Doppelleerstelle. Das Abfallen der e^+ -Lebensdauer von 500 zu 300 K lässt sich mit dem konkurrierenden Einfang der Doppelleerstelle und dem im Bereich von 100 bis 300 K wirkenden Defekt interpretieren. In diesem Temperaturbereich beträgt die e^+ -Lebensdauer von $\tau_1 = 144 \pm 1$ ps. Sie befindet sich etwas oberhalb des Bulk-Wertes (141 ps aus theoretischen Rechnungen). Die Intensität dieser Komponente beträgt 90 %. In analoger Weise zum 6H-Material kann die Kohlenstoff-Leerstelle als das in diesem Temperaturbereich dominierende Einfangzentrum

interpretiert werden. Nach dem einfachen Trappingmodell (siehe 1.2.2) ist der Einfang in einen Defekt immer mit der Reduzierung der ersten e^+ -Lebensdauerkomponente verbunden.

Da bereits die Doppelleerstelle als Defekt identifiziert worden ist und im gesamten Temperaturbereich als attraktive Positronenfalle wirkt, sollte eine reduzierte ersten e^+ -Lebensdauer zu messen sein. Bei einer Intensität von 10 % für die Doppelleerstelle unterscheidet sich die reduzierte e^+ -Lebensdauer (137 ps) nicht wesentlich von der e^+ -Lebensdauer der Kohlenstoff-Leerstelle (147 ps), so dass sich die gemessene Lebensdauer von $\tau_1 = 144$ ps (20-300 K) als Mischkomponente erklären lässt. Im Tieftemperaturbereich, d. h. von 100 K bis zu 25 K ist eine Abnahme der mittleren e^+ -Lebensdauer zu messen. Diese erklärt sich durch den Einfang des Positrons in flache Fallen, die durch Akzeptoren wie negativ geladene Fremdatome im Kristall existieren können. Die Intensität steigt hierbei auf fast 100 %, so dass die mittlere e^+ -Lebensdauer auf den defektfreien e^+ -Lebensdauerwert absinkt. Die mittlere e^+ -Lebensdauer für p-dotiertes 4H-SiC ist zum Vergleich im untersten Diagramm der Abb. 4.23 dargestellt. Der qualitative Verlauf der mittleren e^+ -Lebensdauer unterscheidet sich nicht wesentlich zwischen den p-dotierten Polytypen 6H und 4H.

Ein vergleichbarer Defekt des E_1/E_2 -Zentrums im 6H-Polytyp existiert unter dem Namen Z_1/Z_2 -Defekt im 4H-SiC. Unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Bandabstände sind die gleichen Eigenschaften bereits beschriebener Defekte zu erwarten. Aus diesem Grund wurden die Kristalle mit 2 MeV-Elektronen einer Dosis von $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ analog zum 6H-Polytyp bestrahlt. Nun zeigte das Transmissionsverhalten der beiden Materialien, dass im 4H-Polytyp eine starke Absorption im gesamten Energiebereich zu messen ist. Ein Beleuchtungseffekt sollte im 4H-Material somit kleiner ausfallen, da die Kristalle eine wesentlich dunklere Färbung besitzen. Diese Färbung entsteht durch Absorptionszentren aufgrund der höheren Stickstoff-Dotierung (um eine Größenordnung höher als im 6H-Polytyp) in den Kristallen. Der temperaturabhängige Verlauf der mittleren e^+ -Lebensdauer nach der Bestrahlung ist in Abb. 4.24 dargestellt. Die mittlere e^+ -Lebensdauer erhöht sich um

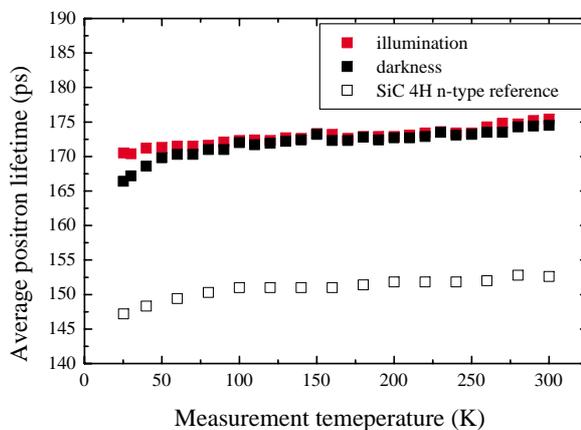


Abbildung 4.24: Darstellung der mittleren e^+ -Lebensdauer als Funktion der Messtemperatur für Elektronen-bestrahltes 4H-SiC mit einer Energie von 2 MeV und einer Dosis von $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$.

20 ps, was vergleichbar mit der Bestrahlung des Materials 6H ist. Unter Beleuchtung mit weißem Licht zeigt sich ein unterschiedliches Verhalten der mittleren e^+ -Lebensdauer. Im 6H-Material besitzt die mittlere e^+ -Lebensdauer eine negative Temperaturabhängigkeit aufgrund der negativ geladenen Kohlenstoff-Leerstelle. In diesem Temperaturbereich ist für das Positronensignal im Referenzmaterial als auch in der bestrahlten Probe ein abfallendes Verhalten der mittleren e^+ -Lebensdauer zu tiefen Temperaturen zu messen, was den Eigenschaften der akzeptorartigen flachen Fallen zuzuordnen ist. Unter der Beleuchtung verschwindet diese Temperaturabhängigkeit, so dass sich die mittlere e^+ -Lebensdauer erhöht. Ab einer Temperatur von 100 K ist kein eindeutiger Unterschied zwischen Hell- und Dunkelmessung messbar. Hier zeigt sich ein wesentlicher Unterschied zum 6H-Material, wo unter Beleuchtung die Positronenlebensdauer bei der tiefsten Messtemperatur einen Unterschied von 8 ps ergab (vgl. Abb. 4.12).

Unter monochromatischen Beleuchtung konnte eine Zuordnung des Beleuchtungseffektes ($E_{\text{photon}}=470 \text{ meV}$) mit der Silizium-Leerstelle und dem E_1/E_2 -Zentrums erfolgen. Dieser Energiebereich zeigt für das 4H-Material eine nahezu vollständige Absorption, so dass auch bei der Existenz des analogen Z_1/Z_2 -Zentrums, keine Änderung des Positronensignals zu erwarten ist. Das Abfallen der mittleren e^+ -Lebensdauer kann somit nur den akzeptorartigen Verunreinigungen zugeschrieben werden, da sich der Unterschied zwischen Hell- und Dunkelmessung auch bei der Ausheilung der durch Elektronen-Bestrahlung erzeugten Defekte nicht ändert. Somit können keine leerstellenartigen Defekte für dieses Verhalten verantwortlich sein. Die Ausheilcharakteristik der mittleren e^+ -Lebensdauer für den 4H-Polytyp ist in der Abb. 4.25 dargestellt.

Das temperaturabhängige Verhalten der mittleren Positronenlebensdauer ändert sei-

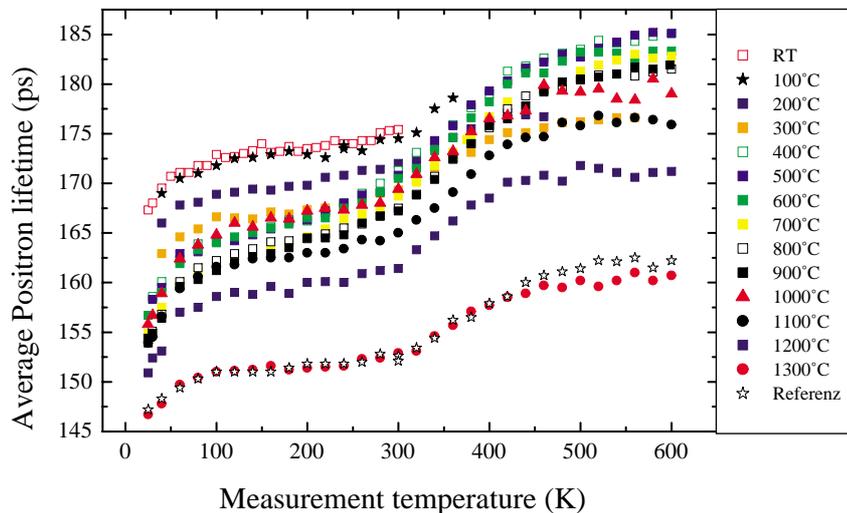


Abbildung 4.25: Darstellung der mittleren e^+ -Lebensdauer als Funktion der Messtemperatur für verschiedene Ausheiltemperaturen von Elektronen-bestrahltem 4H-SiC. Die Ausheilung fand 30 Minuten unter Vakuum (10^{-6} bar) statt.

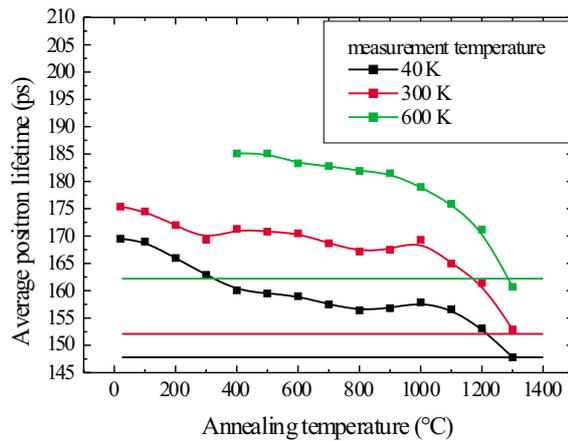


Abbildung 4.26: Darstellung der mittleren e^+ -Lebensdauer als Funktion der Ausheiltemperatur für Elektronenbestrahltes $4H$ -SiC mit einer Energie von 2 MeV und einer Dosis von $1 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$ dreier ausgewählter Messtemperaturen. Die waagerechten Linien deuten die Werte der mittleren e^+ -Lebensdauer der Referenzprobe für die entsprechende Messtemperatur an.

nen Verlauf in Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur nahezu nicht. Bei allen Temperaturen ist der Einfluss der flachen Fallen im Bereich von 30 bis 100 K zu erkennen. Das Plateau von 100 bis 300 K beschreibt den Einfang in die Kohlenstoff-Leerstellen. Der konkurrierende Einfang in die Silizium- oder Doppelleerstellen beginnt bei einer Temperatur von 300 K und endet im Sättigungseinfang dieser Leerstellen bei den höchsten Messtemperaturen. Das Ausheilverhalten dreier ausgewählter Messtemperaturen ist in Abb. 4.26 dargestellt. Es lässt sich wiederum in verschiedene Abschnitte einteilen.

Im Temperaturbereich von 20 bis 300°C sinkt die mittlere e^+ -Lebensdauer durch die Ausheilung naher Frenkelpaare. Im Bereich der Ausheiltemperatur von 500 bis 800°C ist eine leichte Abnahme der Positronenlebensdauer für alle drei Messtemperaturen zu beobachten. Bei 1000°C steigt die mittlere e^+ -Lebensdauer für die Messtemperaturen von 40 und 300 K leicht an, bis anschließend bei einer Temperatur von 1300°C alle durch Elektronen-Bestrahlung eingebrachten leerstellenartigen Defekte ausgeheilt sind. Der temperaturabhängige Verlauf der mittleren e^+ -Lebensdauer der Probe mit einer Ausheiltemperatur von 1300°C ist mit der Referenzprobe nahezu identisch (siehe Abb. 4.25).

4.2 Untersuchung von Schichtsystemen

Im vorherigen Kapitel wurde das Bulk-Material ausführlich untersucht, Defekten e^+ -Lebensdauern zugeordnet und die Ergebnisse mit anderen Messmethoden verglichen. Die Qualität des Bulk-Materials hat sich in den letzten Jahren verbessert, so dass mittlerweile reproduzierbare Ergebnisse vorhanden sind. Die Konzentration intrinsischer Defekte ist dennoch so hoch, dass Bauelemente technologisch nur auf Epitaxieschichten hergestellt werden. Neben der Charakterisierung der Trägersubstrate für die Bauelementstrukturen, ist die Untersuchung der Epitaxieschichten um ein Vielfaches wichtiger. Defekte wirken sich direkt auf die elektronischen Eigenschaften der Bauelemente wie Elektronen- und Löcherbeweglichkeit, Ladungsträgerlebensdauer oder die Lage des Fermi-niveaus aus. Die geringere Defektkonzentration in der Epitaxieschicht ermöglicht es, elektrische Messmethoden, die eine obere Nachweisgrenze von 10^{15} cm^{-3} besitzen, in die Interpretationen einfließen zu lassen. Dies wurde in dieser Arbeit mit der DLTS durchgeführt. Obwohl sich die Empfindlichkeitsbereiche der verschiedenen Messmethoden nur an den Grenzen überschneiden, sind Vergleiche mit Ausheilstufen der Defekte durchaus legitim.

Die konventionelle Positronen-Lebensdauer-Spektroskopie hat eine Informationstiefe von mehreren hundert μm und untersucht Bulk-Materialien. Mit dem Übergang zur Verwendung monoenergetischer Positronen können auch Diffusionsprozesse der Positronen in die Interpretationen einfließen. Die Untersuchung von Schichtsystemen, wie sie im Fall von SiC mit Epitaxieschichten möglich ist, lässt eindeutigere Schlussfolgerungen zu, da der Defektzustand besser definiert ist und eine geringere Konzentration intrinsischer Defekte vorliegt. In Kombination mit DLTS sind beginnend mit der Bestrahlung von Elementarteilchen wie Elektronen auch Strahlenschäden von Helium-, Silizium-, Kohlenstoff- und Bor-Implantationen untersucht worden. Der Diffusionsmechanismus von Bor wird über „Kick-Out“ vermutet [Pen00, Rue01]. Der Nachweis dieses Modells basierte auf der kontrolliert beeinflussten Zwischengitteratom-Konzentrationsänderung des Siliziums in SiC durch Koimplantation mit Silizium oder Kohlenstoff. Der direkte Beweis, dass keine Leerstellen an der Diffusion beteiligt sind, bzw. dass der dominierende Diffusionsmechanismus nicht über das Leerstellen-Modell beschrieben wird, bleibt jedoch noch aus. Desweiteren steht in dieser Arbeit die Struktur des D-Zentrums zur Diskussion, das ausschließlich in Bor-dotiertem SiC zu finden ist [Pen00].

4.2.1 Elektronen-bestrahltes n-Typ 6H- und 4H-SiC

In analoger Weise, wie das Substratmaterial geschädigt wurde, fand eine Elektronen-Bestrahlung mit der Energie von 2 MeV und der Dosis von $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ an Epitaxieschichten statt. Die Kristalle wurden kommerziell von der Firma Cree[©] erworben. Die Epitaxieschichten besitzen eine Dicke von 5 bis 10 μm . Da Elektronen sehr leichte Teilchen sind, führt die Bestrahlung zu einer homogenen Schädigung der gesamten Schicht. Diese gleichmäßige Schädigung ist anhand des nahezu konstanten S-Parameters für die verschiedenen Positronen-Implantationsenergien in Abb. 4.27 dargestellt. Der S-Parameter charakterisiert den Anteil der an der Annihilation beteiligten Valenzelektronen. Ein erhöhter

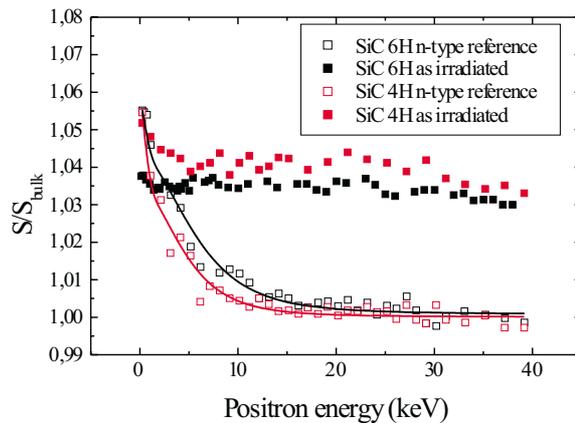


Abbildung 4.27: $S(E)$ -Analyse von Elektronen-bestrahlten 6H und 4H n-Typ SiC mit einer Energie von 2 MeV und einer Dosis von $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Vergleichend dazu sind die unbestrahlten Materialien der jeweiligen Polytypen dargestellt. Die durchgezogenen Linien sind Ergebnisse, die mit dem Programm VEPFIT an die experimentellen Daten angepasst wurden. Die Messtemperatur beträgt 300 K

S-Parameter bedeutet eine größere Defektdichte oder ein größeres offenes Defektvolumen. Anhand der Abbildung ist ein deutlich erhöhter S-Parameter für die bestrahlten Materialien zu sehen. Folglich erzeugte die Bestrahlung leerstellenartige Defekte in der Epitaxieschicht. Die effektive Diffusionsweglänge ist ein Maß für die Defektdichte. Sie erhält man aus dem Fit an die experimentellen Daten (VEPFIT), wobei für die Referenzmaterialien Werte von über 400 nm bestimmt worden sind. Diese Werte sind typisch für Halbleiter mit geringer Defektdichte [KR99]. Das Positron kann durch die Diffusion, obwohl es tief in den Festkörper eingedrungen ist, die Oberfläche erreichen, ohne dabei von einem attraktiven Potenzial eines Defektes eingefangen zu werden. Typische Werte für effektive Diffusionsweglängen in geschädigten Halbleitern liegen unterhalb von 50 nm [KR99]. Die Proben wurden isochron ausgeheilt und für jede Ausheiltemperatur ein Energiescan des S-Parameters gemessen. Die in der Ausheilcharakteristik aufgeführten S-Parameter entstammen aus der Anpassung der experimentellen Daten an zwei Blockprofile mit dem Programm VEPFIT. Das erste Blockprofil beschreibt den Oberflächenzustand, da dieser sich während der Temperung ändern kann. Ist der Oberflächen-S-Parameter gleich dem S-Parameter der Defektschicht, so kann keine effektive Diffusionsweglänge ermittelt werden. Der zweite S-Parameter ist charakteristisch für die Schicht und somit für das Ausheilverhalten der eingebrachten Defekte. Die S-Parameter werden auf den defektfreien S-Parameter normiert. In Abb. 4.28 sind für Elektronen-bestrahltes 4H n-Typ und 6H p- und n-Typ SiC die S-Parameter in Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur dargestellt.

Für alle Proben erhöhte sich der S-Parameter nach der Bestrahlung. Die Größe der S-Parameter der verschiedenen Polytypen ist vergleichbar, so dass etwa die gleiche Konzentration an Defekten erzeugt wurde. Das Ausheilverhalten des S-Parameters aller Proben zeigt in der Form einen ähnlichen Verlauf. Beginnend von den ersten Ausheiltemperaturen (20 bis 300°C), der S-Parameter besitzt einen konstanten Wert, nimmt dieser bei einer Temperatur oberhalb von 300°C deutlich ab. In diesem Bereich werden die Kohlenstoff-Leerstellen beweglich, heilen aus und reduzieren deren Anteil am S-Parameter [Kaw89]. Über die Beweglichkeit von Zwischengitteratomen ist derzeit wenig bekannt. Im Vergleich

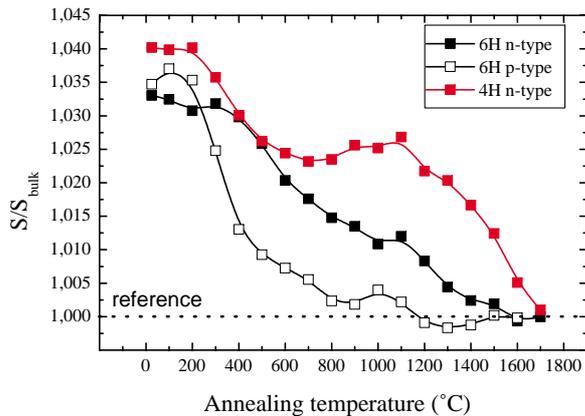


Abbildung 4.28: *S-Parameter-Analyse des Ausheilverhaltens der Elektronen-bestrahlten 4H- und 6H-SiC Kristalle. Die S-Parameter der Defektschicht wurden mit dem Programm VEPFIT an die experimentellen Daten angepasst. Die Messtemperatur betrug 300 K. Die S-Parameter sind auf den S-Parameter des unbestrahlten Materials normiert.*

zu den Leerstellen besitzen diese meist eine höhere Beweglichkeit, so dass in diesem Temperaturbereich eine Rekombination von Frenkelpaaren wahrscheinlich ist. Rekombinierende Frenkel-Paare würden ebenfalls den S-Parameter reduzieren. Vergleicht man das n-dotierte 6H-Material mit dem p-Typ 6H, so ist eine stärkere Abnahme des S-Parameters für das p-dotierte 6H-Material festzustellen. Eine Erklärung wäre auch die Änderung des Fermiveaus aufgrund der Ausheilung elektrisch aktiver Defekte, die zur Änderung des Ladungszustandes eines für Positronen attraktiven Einfangzentrums führt. Die Silizium-Leerstelle könnte ihren Ladungszustand von negativ auf neutral ändern. Der Trappingkoeffizient der Leerstelle verringert sich, so dass sich der in Silizium-Leerstellen annihilierende Anteil des S-Parameters reduzieren würde.

Im weiteren Verlauf ist das Ausheilverhalten beider Polytypen ähnlich, so dass leerstellenartige Defekte ab einer Temperatur oberhalb von 1700°C nicht mehr nachweisbar sind. Der kleine Anstieg des S-Parameters bei der Ausheiltemperatur von 1000 bis 1100°C wäre mit der Bildung eines thermisch stabileren Silizium-Leerstellenkomplexes (z. B. $V_{Si}N_C V_{Si}$) zu erklären, der bei höheren Temperaturen ebenfalls ausheilt. Dieser hätte ein leicht erhöhtes offenes Volumen (195 ps nach theoretischen e^+ -Lebensdauer-Rechnungen), so dass der geringe Anstieg des S-Parameters zu erklären wäre. Im p-Typ SiC dürfte dieser Anstieg nicht zu sehen sein, jedoch wird auch bei der Herstellung der Epitaxialschichten das Material überkompensiert. Die Konzentration der Donatoren in der Schicht ist unbekannt, aber in der Größenordnung von 10^{16} cm^{-3} zu vermuten.

Das Material 4H-SiC unterscheidet sich besonders in der Defektkonzentration vom 6H-SiC, da bei der Temperatur von 1000°C eine deutliche Abweichung im S-Parameter zu sehen ist. Ab einer Ausheiltemperatur von 800°C steigt der S-Parameter an, so dass sich die Konzentration der Leerstellen oder das offene Volumen leicht erhöht. Im 4H-SiC beträgt die Hexagonalität 50 %. Die Silizium-Leerstellen sind auf kubischen und hexagonalen Gitterplätzen gleich verteilt. Die Bildung des thermisch stabileren Komplexes kann gitterplatzabhängig sein, so dass die Konzentration von hexagonalen Silizium-Leerstellen sich im 4H-Polytyp erhöht. Die gleiche Ausheiltemperatur von 1700°C lässt auf den selben Leer-

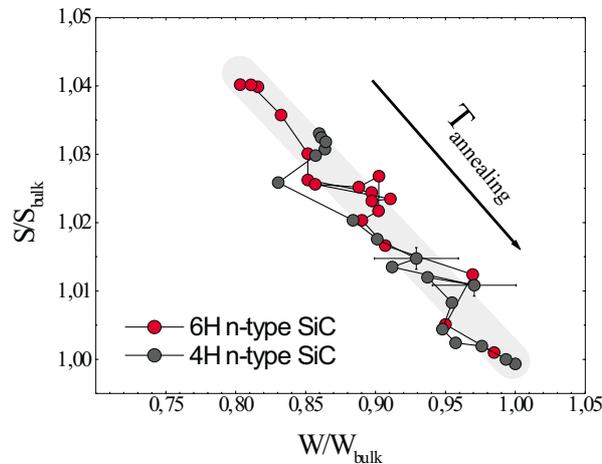


Abbildung 4.29: $S(W)$ -Analyse des Ausheilverhaltens von Elektronen-bestrahlten 6H- und 4H-SiC. Die Messparameter S und W wurden auf die Werte des unbestrahlten Materials normiert. Dieser Zustand wird durch den Wert $S=W=1$ charakterisiert.

stellentyp schließen. In dieser Diskussion wurde die Doppelleerstelle $V_{Si}V_C$ nicht berücksichtigt. Diese Leerstelle besitzt gegenüber den Einfachleerstellen eine deutlich erhöhte thermische Stabilität, so dass mit der Ausheilung aller durch Elektronen-Bestrahlung erzeugten Defekte kein Hinweis auf diesen Defekt existiert.

In der Abb. 4.29 sind für die beiden Polytypen die S - und W -Parameter in Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur dargestellt. Anhand des Verlaufes, welcher für beide Polytypen ähnlich ist, ist deutlich zu erkennen, dass sich während des Ausheilprozesses die chemische Umgebung des Annihilationsortes nicht ändert. Folglich ist der nahezu lineare Zusammenhang mit der Reduzierung der Defektkonzentration zu erklären. Zur besseren Identifikation der chemischen Umgebung der Annihilationsumgebung sind Doppler-Koinzidenz-Messungen an diesen Proben durchgeführt worden (Abb. 4.30). Der Unterschied des Hochimpulsanteils in Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur wurde untersucht. Zusätzlich wurde eine Siliziumreferenz dargestellt. Alle Proben sind normiert auf 4H-SiC-Epitaxie-Material. Nach theoretischen Rechnungen (siehe Kap. 1.5) unterscheiden sich die Hochimpulsanteile der verschiedenen Leerstellen voneinander. Für die Kohlenstoff-Leerstelle war ein abfallender Verlauf im Impulsraum vorhergesagt. Dieses Verhalten ist anhand der Siliziumreferenz zu sehen, da im Fall des vollständigen Einfangs in diese Leerstelle die nächsten Nachbarn ausschließlich Siliziumatome sind. Der entgegengesetzte Anstieg ist für die Silizium-Leerstelle prognostiziert. Da für die bestrahlten Proben ein leichter Anstieg des Hochimpulsanteils zu beobachten ist, sollten die Silizium-Leerstelle bzw. Komplexe mit Silizium-Leerstellen die dominierenden Einfangzentren darstellen. Anhand der Siliziumreferenz ist weiterhin zu sehen, dass der Peak bei $10 \times 10^{-3} m_0 c$ fast ausschließlich dem Fehlen des Kohlenstoffs zuzuordnen ist, da dieser auf fast 50 % absinkt. Dies bedeutet, dass eine Abnahme der Intensität dieses Peaks mit der Zunahme der Kohlenstoff-Leerstellenkonzentration korrelieren könnte. Dieser Fingerprint-Peak bleibt für die bestrahlte Probe nahezu konstant, so dass sich die Kohlenstoff-Leerstellenkonzentration kaum ändert. Am Positronen-Lebensdauer-Strahlsystem in München wurden die bestrahl-

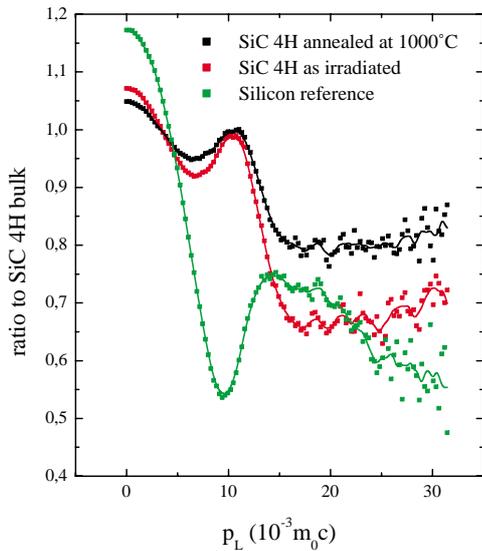


Abbildung 4.30: Darstellung des Hochimpulsanteils der Annihilationslinie für 4H n-Typ SiC im bestrahlten Zustand und nach Ausheilung mit 1000°C. Die Siliziumreferenz wurde beigefügt, um das Verhalten des vollständigen Einfangs in die Kohlenstoff-Leerstelle zu simulieren.

ten Proben untersucht, um anhand der Zerlegung der Spektren die Defektlebensdauer zu bestimmen. Das Einbringen von leerstellenartigen Defekten nach der Bestrahlung ist anhand der e^+ -Lebensdauerspektren in Abb. 4.31 zu erkennen. In Tabelle 4.1 sind die Komponenten einiger Spektren dargestellt. Die defektbezogene e^+ -Lebensdauer wurde für beide Polytypen mit 205 ± 5 ps ermittelt und der Silizium-Leerstelle zugeordnet. Die berechnete defektfreie e^+ -Lebensdauer nach dem einfachen Trappingmodell zeigt, dass durch deren Übereinstimmung mit experimentellen Daten in diesen Proben die Silizium-Leerstelle das für Positronen dominierende Einfangzentrum ist. Das vergleichbare Aushilverhalten der Defekte zwischen den DLTS- und PAS-Messungen zeigt, dass das E_1/E_2 -Zentrums im

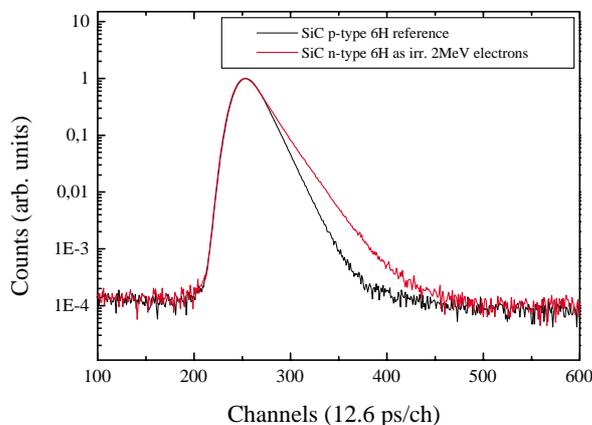


Abbildung 4.31: Darstellung der e^+ -Lebensdauerspektren von Referenzmaterial 6H p-Typ SiC und 2 MeV Elektronen-bestrahltem 6H n-Typ SiC. Die Kanalbreite wurde zu 12,6 ps/ch bestimmt. Die Messtemperatur beträgt 300 K. Die Positionen-Implantationsenergie betrug 16 keV, was einer mittleren Eindringtiefe von 1,11 μm entspricht.

Polytyp	Temperatur	τ_1 in ps	I_1 in %	τ_2 in ps	I_2 in %	berechn. τ_{bulk} nach dem Trapping-Modell (1 Defekt)
6H	RT	72	25	210	75	142
	300°C	98	41	200	59	140
4H	RT	57	18	208	82	141
	300°C	71	23	204	77	143
	600°C	69	25	199	75	141

Tabelle 4.1: Darstellung der Ergebnisse der Zerlegung der e^+ -Lebensdauerspektren nach Elektronen-Bestrahlung für ausgewählte Ausheiltemperaturen. Die Messtemperatur betrug 300 K.

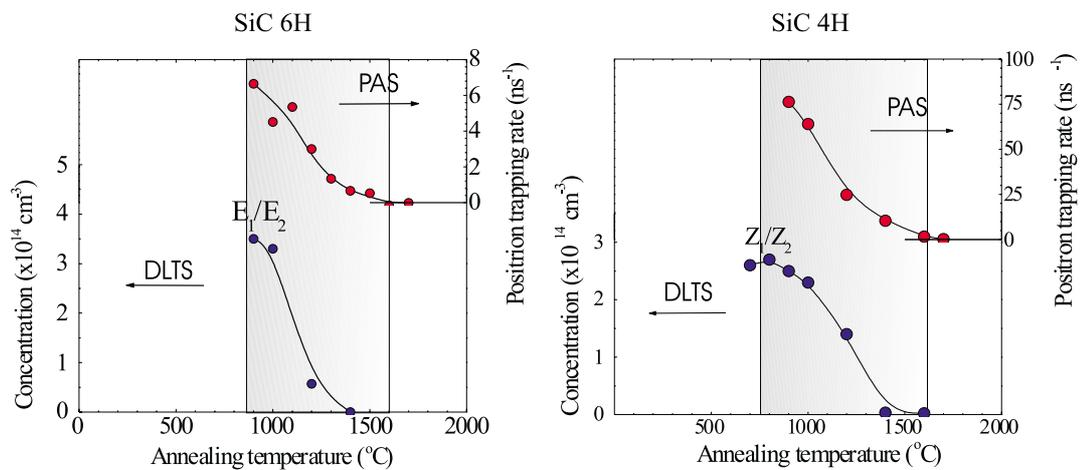


Abbildung 4.32: Vergleich des Ausheilverhaltens von PAS und DLTS an bestrahlten Proben 6H- und 4H-SiC. Die Ausheilung der mit PAS untersuchten Proben fand bis 1300°C unter Vakuum und oberhalb der Temperatur unter 1 bar Schutzgas (Ar) statt. Die Ausheilung der Proben für die DLTS-Messungen wurden ausschließlich unter Schutzgasatmosphäre durchgeführt [Wei01].

6H-SiC und des Z_1/Z_2 -Zentrums im 4H-SiC mit einer Silizium-Leerstelle dekoriert ist.

4.2.2 Helium-Implantation in 4H- und 6H-SiC

Ionenimplantationen spielen eine wichtige Rolle bei der Herstellung von elektronischen Bauelementen in Schichtsystemen. Die Schädigung mit Elementarteilchen wie Elektronen wurde im vergangenen Abschnitt erklärt und deren Komplexität aufgezeigt. Die dominierenden Defekte waren Einzelleerstellen, die mit Hilfe der PAS nachgewiesen wurden. Bei schwereren Implantationsteilchen wie Ionen ist die Art und Anzahl der erzeugten Defekte vielfältiger, so dass zunächst die Implantation mit Helium untersucht wurde.

Die Elektronen-Bestrahlung erzeugte in der Epitaxieschicht ein nahezu homogenes Defektprofil, das mit dem Programm VEPFIT unter der Annahme eines Blockprofils angepasst wurde. Das Implantationsprofil bei Ionenimplantationen ist bei weitem nicht homogen, so dass Mehrfachimplantationen durchgeführt wurden, um eine dem Blockprofil ähnliche Defektstruktur zu erzeugen. In der Abb. 4.33 ist die berechnete Leerstellenkonzentration für die Helium-Implantation nach der Simulation mit dem Programm SRIM2000 dargestellt. Vergleichend dazu zeigt die Abb. 4.34 die Messung des S-Parameters. Der Oberflächen-S-Parameter ist nicht eindeutig definiert und hängt z. B. von der Oberflächenbeschaffenheit oder vom Oxidationszustand der Oberfläche ab. Das Ansteigen im Fall der implantierten Probe und das Abfallen des S-Parameters für die Referenzprobe bei geringen Positronenenergien ist auf die Unbestimmtheit dieses Oberflächenzustandes zurückzuführen. Die Anpassung der S-Parameter an das Defektprofil ergab eine gute Übereinstimmung mit den Simulationsdaten (SRIM2000), wie es durch das graue Rechteck angedeutet ist. Die maximale Leerstellenprofiltiefe aus der Anpassung mit dem Programm VEPFIT wurde mit $2,3 \mu\text{m}$ bestimmt (vgl. Abb. 4.33). Für die folgenden Ausheilstudien werden die mit dem Programm VEPFIT ermittelten S-Parameter der Defektschicht verwendet. Das Ausheilverhalten des S-Parameters im Fall des 6H-Polytypes ist dem des Elektronenbestrahlten Materials sehr ähnlich. Der S-Parameter ist verglichen mit der Elektronenbestrahlung im implantierten Zustand etwas größer. Da sich das Ausheilverhalten aber nicht wesentlich ändert, ist das Ansteigen des S-Parameters mit einer erhöhten Defektdich-

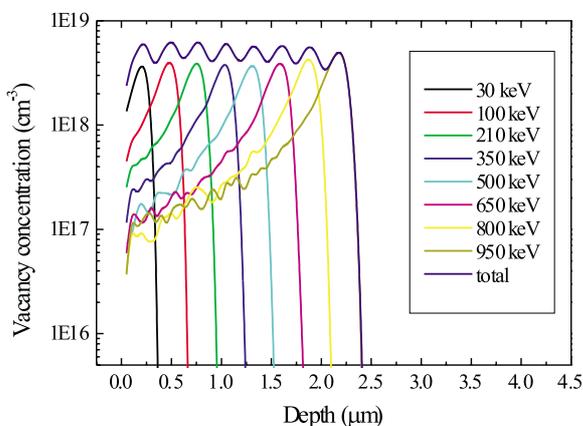


Abbildung 4.33: Darstellung der berechneten Leerstellenkonzentration nach der Helium-Implantation. Die verschiedenen Energien der Helium-Ionen sind für die Erzeugung eines Blockprofils notwendig. Die Simulation wurde mit dem Programm SRIM2000 durchgeführt.

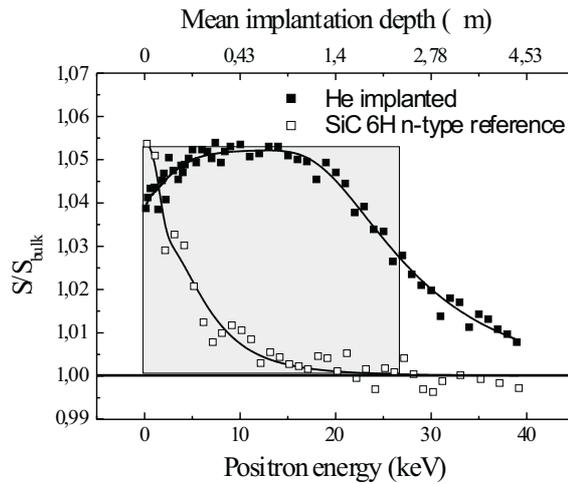


Abbildung 4.34: Darstellung des S -Parameters als Funktion der Positronen-Implantationsenergie nach der Helium-Implantation. Vergleichend dazu ist das Referenzmaterial abgebildet. Die S -Parameter sind auf den Bulk-Wert normiert. Die Linien ergeben sich als Fit an die experimentellen Daten mit dem Programm VEPFIT unter der Annahme eines Block-Defektprofils. Dieses ist als graue Box angedeutet und stimmt gut mit den simulierten Daten überein (SRIM2000).

te zu erklären. Der S -Parameter ist bis zu einer Temperatur von 500°C konstant und sinkt anschließend bis zu einer Temperatur von 800°C ab. Das leichte Ansteigen im weiteren Verlauf bis zu einer Temperatur von 1100°C war bereits bei der Elektronen-Bestrahlung zu messen. Die Schlussfolgerung mit der Bildung von Komplexen aus Silizium-Leerstellen, die eine höhere thermische Stabilität und dazu ein größeres offenes Volumen aufweisen,

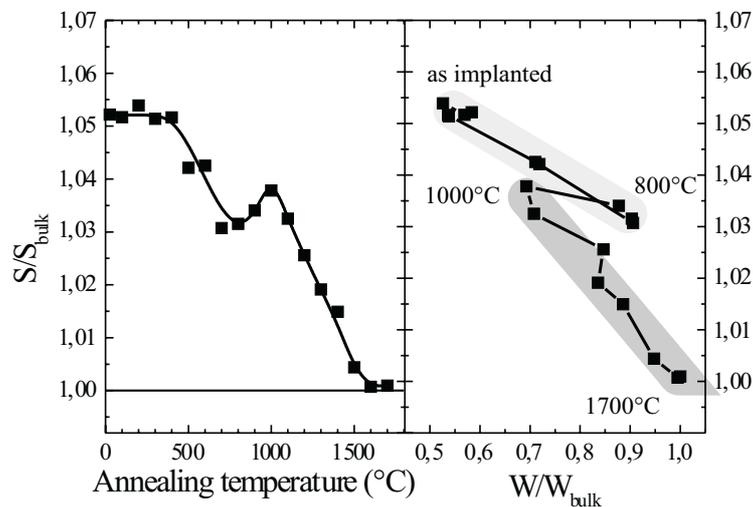


Abbildung 4.35: Darstellung des S -Parameters (links) als Funktion der Ausheiltemperatur für Helium-implantiertes 6H-SiC. Die S -Parameter wurden durch Anpassen der experimentellen Daten an ein Blockdefektprofil ermittelt. Sämtliche Werte sind auf den S -Parameter des defektfreien Materials normiert. Die Linie dient zur Führung des Auges. Die rechte Grafik zeigt die S - W -Analyse für verschiedene Ausheiltemperaturen.

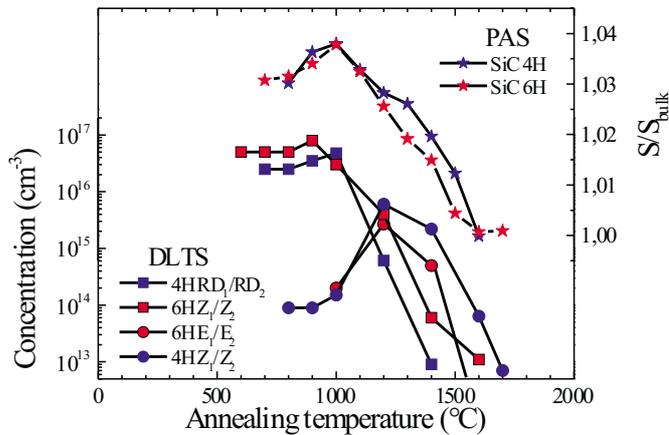


Abbildung 4.36: Darstellung des PAS- und DLTS-Signals als Funktion der Ausheiltemperatur von 4H und 6H implantierten SiC. Die Ausheilung erfolgte in analoger Weise zur Elektronen-Bestrahlung. Die Messtemperatur betrug 300 K [Fra00, Wei01].

ist auch hier zutreffend. Ein weiterer Hinweis für eine derartige Interpretation ist die Änderung des W-Parameters im Temperaturbereich von 800 bis 1000°C. Die Bildung von Doppelleerstellen wäre ebenfalls denkbar, jedoch sollte diese bis weit oberhalb der Temperatur von 1500°C stabil sein [Tor02]. Eine weitere Möglichkeit der Interpretation wäre die Änderung des Fermi-niveaus, welches sich nach der Implantation in Richtung der Bandmitte verschiebt [Kaw87]. Mit fortlaufender Ausheilung der Defekte tendiert es wieder in Richtung des Anfangszustandes. Dabei kann es ein Umladungsniveau (+/0, 0/-) überschreiten, so dass sich die Ladung der Leerstellen ändert. Der auf diese Weise veränderte Einfangquerschnitt für Positronen kann ein starkes Ansteigen des S-Parameters bewirken.

Die Kombination der PAS mit der Methode der DLTS fand bei diesem Experiment ebenfalls Anwendung. Die Sensitivitätsbereiche der beiden Methoden unterscheiden sich derart, dass die Dosis der Implantation für die PAS um zwei Größenordnungen gegenüber den mit DLTS gemessenen Proben erhöht wurde. Die Temperaturbedingungen und Ausheilzeiten waren für die untersuchten Proben beider Messmethoden identisch. Relevante elektrisch aktive Defekte des Polytypes 6H sind das bereits erwähnte E_1/E_2 - und das Z_1/Z_2 -Zentrum. Im 4H-Material wurden die Defekte Z_1/Z_2 und RD_1/RD_2 in vergleichbarer Konzentration zum 6H gefunden. Das Ausheilverhalten dieser Defekte ist zusätzlich zu den PAS-Messungen in Abb. 4.36 dargestellt. Bei einer Temperatur oberhalb von 1000°C ist ein analoges Ausheilverhalten der Defekte Z_1/Z_2 im 6H, RD_1/RD_2 im 4H und dem S-Parameters zu sehen. Im weiteren Temperaturverlauf dominiert das E_1/E_2 -Zentrum im 6H und das Z_1/Z_2 -Zentrum im 4H-Material. Alle beschriebenen elektrisch aktiven Defekte scheinen mit leerstellenartigen Defekten dekoriert zu sein. Das Ansteigen der Konzentration der E_1/E_2 - und Z_1/Z_2 -Defekte ab einer Temperatur von 1000°C kann wiederum mit Änderung des Fermi-niveaus und der daraus folgenden Umladung verstanden werden. Auch bei der Helium-Implantation zeigte sich, dass die Ausheilstufen des E_1/E_2 -Zentrums im 6H-Polytypen und des Z_1/Z_2 -Zentrums im 4H-Material mit dem Positronensignal übereinstimmen.

4.2.3 Bor in SiC

Eine der am meisten untersuchten Verunreinigungen im SiC ist das Bor. Dies liegt nicht nur daran, dass Bor ein häufig verwendeter Akzeptor ist, sondern Bor ist eines der wenigen Atome, die im Siliziumkarbid relativ leicht diffundieren. Das Diffusionsvermögen der verschiedenen Dotanten wurde bereits in Tabelle 3.6 vorgestellt. Die schlechte Diffusion der Dotanten ist die Ursache dafür, dass nur durch Ionen-Implantationen Bauelementstrukturen erzeugt werden können. Für den Diffusionsmechanismus existieren prinzipiell zwei Möglichkeiten:

- Diffusion über Leerstellen $B_{Si} \rightleftharpoons B_i + V_{Si}$, $B_C \rightleftharpoons B_i + V_C$
- Diffusion über das Zwischengitter $B_{Si} + Si_i \rightleftharpoons B_i$, $B_C + C_i \rightleftharpoons B_i$.

Die zwei Modelle beschreiben ein unterschiedliches Diffusionsverhalten, so dass aus den mit SIMS gemessenen Diffusionsprofilen als dominierender Diffusionsmechanismus der Kick-Out-Mechanismus favorisiert wird [Rue01]. In der Arbeit wurde jedoch nur das Silizium-Untergitter in die Betrachtungen einbezogen. Ein weiterer Hinweis für die Gültigkeit dieses Modells basiert auf dem Experiment der Koimplantation von Bor mit Silizium und Kohlenstoff. Bei diesem Experiment wird durch die Koimplantation die Konzentration der Silizium-Zwischengitter-Atome kontrolliert. Ist bei der Koimplantation mit Silizium eine „gute“ Bor-Diffusion beobachtbar, so wird diese bei der Kohlenstoff-Implantation unterdrückt. Die Interpretation für die Reduktion der Diffusion bestand in der Bildung eines thermisch stabilen Komplexes aus Kohlenstoff und Silizium im Zwischengitterbereich. Dieses Experiment schließt den Mechanismus der Diffusion über die Kohlenstoff-Zwischengitter-Atome aus, da mit der Erhöhung der Kohlenstoff-Zwischengitter-Konzentration die Diffusivität sinkt. Die zunehmende Komplexbildung von Si_iC_i reduziert die Silizium-Zwischengitter-Konzentration, so dass die Bor-Diffusion unterdrückt wird [Pen00].

Infolge dieser Interpretationen soll nun gezeigt werden, dass Leerstellen nicht für die Diffusion verantwortlich sind. Dazu wurde eine Koimplantation von Bor mit Silizium und Kohlenstoff in 4H- und 6H-SiC durchgeführt. Die Doppler-Verbreiterungs-Spektroskopie untersucht die durch Mehrfachimplantation erzeugten Defekt-Profile auf ihre Leerstellencharakteristik. Die Implantationsdaten sind in Tabelle 4.2 zusammengefasst. In Abb. 4.37 sind die simulierten Implantationsprofile (SRIM2000) dargestellt. Anhand dieser Daten ist ein Leerstellenblockprofil mit einer Tiefe von ca. $1 \mu m$ zu erwarten. Die errechnete totale Leerstellenkonzentration liegt oberhalb von $10^{20} cm^{-3}$. Aus den Simulationsdaten sind die realen Leerstellenkonzentrationen nicht direkt ablesbar, da keine Rekombinationseffekte in die Rechnungen einfließen. Der Vergleich aus Simulationsdaten (SRIM2000) und experimentellen Ergebnissen ergibt etwa einen Unterschied von ein bis zu zwei Größenordnungen für die Leerstellenkonzentration. Vom Sättigungseinfang aufgrund der hohen Leerstellenkonzentration kann trotzdem ausgegangen werden. Das Ansteigen des S-Parameters in der Doppler-Verbreiterungs-Spektroskopie in Abb. 4.38 zeigt, dass leerstellenartige Defekte durch die Implantation in den Festkörper erzeugt worden sind. Eine Anpassung der S(E)-Daten ergab in guter Übereinstimmung mit der Simulation eine Profiltiefe von ca. $1 \mu m$ für

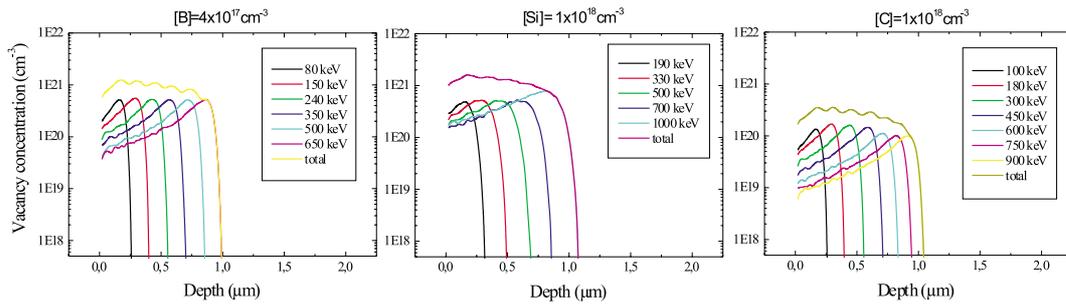


Abbildung 4.37: Darstellung der berechneten Leerstellenkonzentration nach der Implantation mit Bor, Silizium und Kohlenstoff. Die verschiedenen Energie der Ionen sind für die Erzeugung eines Blockprofils notwendig. Die Simulation wurde mit dem Programm SRIM2000 durchgeführt.

beide Implantationen. Die Referenzprobe zeigt einen Oberflächeneffekt, der bei verschiedenen Proben des Wafers nachgewiesen wurde. Dieser Oberflächeneffekt wird im Abschnitt 4.2.5 näher untersucht. In der mittleren Grafik b) der Abb. 4.38 ist die S(W)-Analyse für

Ion	Implantationsenergie in keV	Dosis in 10^{13}cm^{-2}
Si	1000	2,8
	700	1,8
	500	1,7
	330	1,6
	190	1,3
B	650	6,5
	500	6,2
	350	6,2
	240	6,2
	150	6,0
	80	5,2
C	900	1,0
	750	1,0
	600	1,1
	450	1,4
	300	1,5
	180	1,5
	100	1,1

Tabelle 4.2: Implantationsdaten für 6H-SiC. Die totalen Volumen-Konzentrationen der Dotanten in der Schicht betragen für $[\text{Si}] = 1 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$, $[\text{B}] = 4 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$, $[\text{C}] = 1 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$

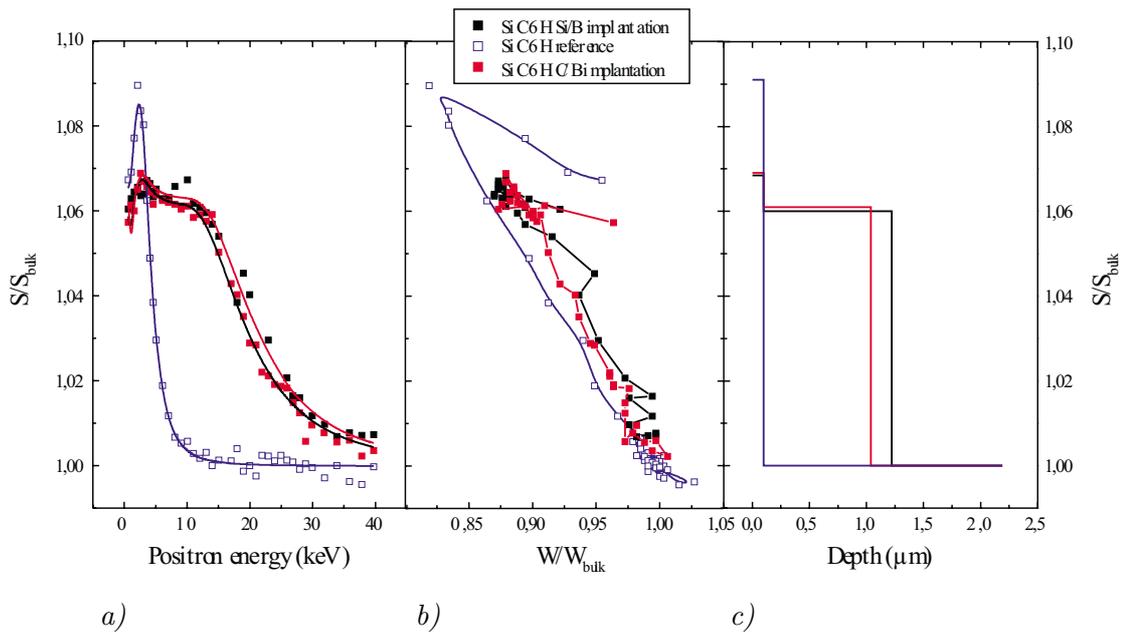


Abbildung 4.38: a) Darstellung des S -Parameters als Funktion der Positronen-Implantationsenergie von implantiertem 6H n -Typ SiC mit Bor, Silizium und Kohlenstoff. Vergleichend dazu ist die Referenzprobe dargestellt. Die durchgezogenen Linien ergeben sich aus einem Fit an die experimentellen Daten unter Annahme von zwei Defektprofilen mit dem Programm VEPFIT. b) S - $W(E)$ -Analyse von der SiC-Referenzprobe und der Proben nach Implantation. Die rechte Abbildung c) stellt die angepasste Breite des Defektprofils dar, welche wiederum gut mit den Simulationsdaten übereinstimmt.

die verschiedenen Positronen-Implantations-Energien dargestellt. Der W -Parameter und der S -Parameter der interessierenden Defektschicht ist nahezu konstant, so dass von einer homogenen Schädigung auszugehen ist.

Für die Bestimmung der Defektproftiefe aus den experimentellen Daten mit dem Programm VEPFIT wurde der Oberflächen-Defektpeak mit berücksichtigt. In Abb. 4.39 ist die Breite des Defektprofils in Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur dargestellt. Das 6H-SiC-Material zeigt für beide Koimplantationen ein Abnehmen der Profiltiefe. Im Fall der Kohlenstoff-Koimplantation ist ein nahezu homogenes Abnehmen der Defektschicht zu beobachten. Für die Kohlenstoff-Implantation war oberhalb von 1400°C keine Profilanpassung mehr möglich, da der Großteil der durch Ionenimplantation erzeugten Defekte ausgeheilt war. Im Falle eines Leerstellenmechanismus sollte eine Verbreiterung des Defektprofils nachzuweisen sein. In der rechten Grafik der Abb. 4.39 ist die Defektschicht für den 4H-Polytyp dargestellt. Dieser zeigt keine Unterschiede für die beiden Koimplantationen. Es ist somit auch hier anzunehmen, dass Leerstellen nicht an der Diffusion von Bor beteiligt sind. Es bestätigt sich somit das interstitielle Modell der Diffusion von Bor in SiC.

Die Anpassung der Defektproftiefe an die $S(E)$ -Kurven ist aufgrund der vielen freien Parameter auch unter der Annahme eines idealen Blockprofils durch die Mehrfachim-

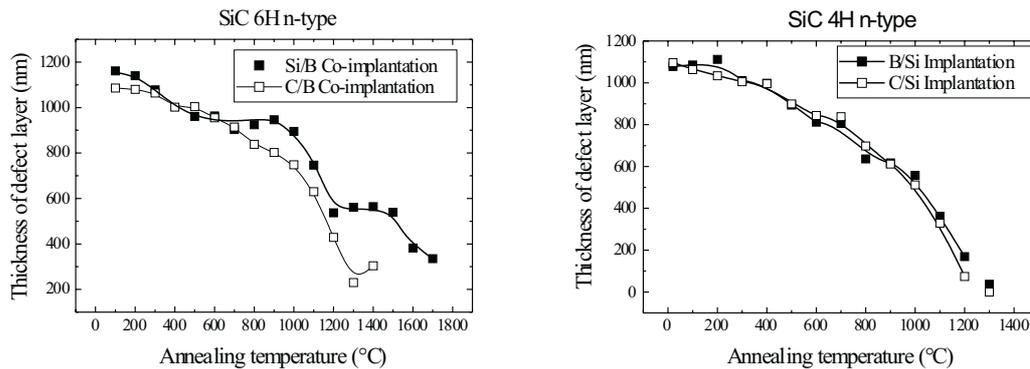


Abbildung 4.39: Darstellung der Breite des Defektprofils nach Anpassung an die experimentellen Daten als Funktion der Ausheiltemperatur für 4H- und 6H-SiC nach der Koimplantation. Die durchgezogenen Linien dienen zur Führung des Auges.

plantation mit einem großen Fehler behaftet [Eic97]. Die Gründe hierfür liegen in der komplizierten Defektstruktur (Anpassung an ein 3-Schicht-Modell). Die ermittelten Werte der Defektprofil-Tiefen sollten somit nur die Tendenz des Ausheilverhaltens aufzeigen, was auf die obige Interpretation keinen Einfluss besitzt.

4.2.4 Das D-Zentrum in SiC

Der vorherige Abschnitt befasste sich mit der Diffusion von Bor nach Implantation. Elektrische Messungen zeigten, dass durch die Bor-Implantation ein Defekt detektiert wird, der als „D-Zentrum“ bezeichnet wird [Sut90, Ani85, Ike80]. Dieser Defekt besitzt eine Ionisationsenergie von 650 meV [Fra98] und entsteht unabhängig vom Polytyp (3C, 4H, 6H). Das D-Zentrum existiert nicht nur nach der Implantation mit Bor, sondern wird auch nach dem Epitaxiewachstum beobachtet (Bor ist in der Gasphase vorhanden)[Fra98]. Die Konzentration des D-Zentrums hängt vom Verhältnis der Silizium- und Kohlenstoff-Partialdrücke während des Epitaxiewachstums ab. DLTS-Messungen untersuchten die Konzentration des D-Zentrums nach der Implantation von Bor und der Ausheilung bei einer Temperatur von 1700°C . Anhand der Abb. 4.40 ist deutlich zu erkennen, dass die Konzentration des D-Zentrums bei der Koimplantation mit Kohlenstoff reduziert wird. Die beiden Proben unterscheiden sich durch die Konzentrationen der implantierten Elemente Silizium und Kohlenstoff um eine Größenordnung (linke Grafik: $[\text{C}]=[\text{Si}]=1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ und rechte Grafik: $[\text{C}]=[\text{Si}]=1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$). Das D-Zentrum ist für die höhere Implantations-Konzentration für die Kohlenstoff-Koimplantation nicht mehr nachweisbar. Über die Struktur dieses Komplexes existieren in der Literatur sehr unterschiedliche Meinungen. Einerseits wird ein Komplex aus Kohlenstoff-Leerstelle und benachbarten Bor auf dem Siliziumgitterplatz [Sut90] und andererseits die Silizium-Leerstelle mit benachbarter Bor-Umgebung

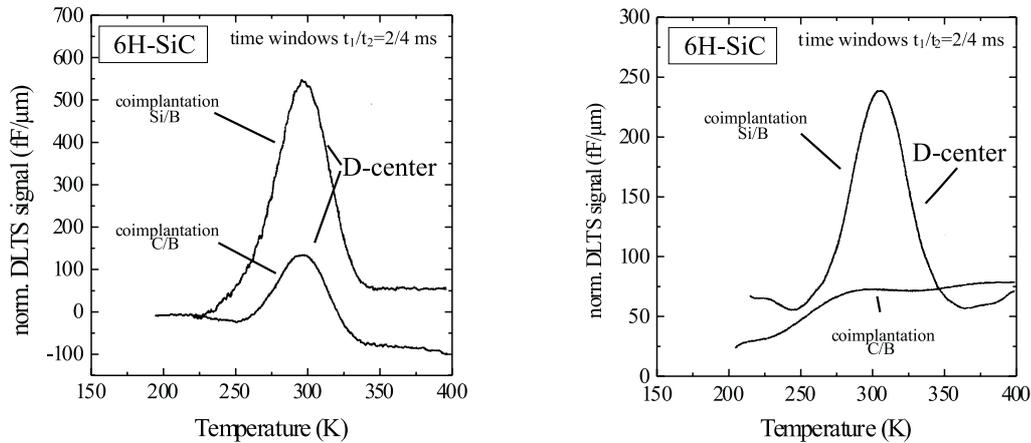


Abbildung 4.40: Darstellung der Konzentration des D-Zentrums nach der Koimplantation von Bor mit Silizium und Kohlenstoff nach Temperung von 1700°C für die Konzentration $[\text{Si}] = [\text{C}] = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (links) und $[\text{Si}] = [\text{C}] = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (rechts) [Fra98]

auf dem Kohlenstoffuntergitter [Arn97] diskutiert. Hier liegt der Ansatzpunkt für die Positronenannihilations-Spektroskopie. Im Falle eines negativen oder neutral geladenen Komplexes mit einer Leerstelle können die Defekte nachgewiesen werden. Die bestrahlten Proben wurden unter Vakuum getempert. Die S(E)-Analyse ist in der Abb. 4.41 dargestellt. Anhand der Abbildung ist das Stufenprofil der Mehrfachimplantation gut zu erkennen.

Das Ausheilverhalten der Defekte wird durch den S-Parameter beschrieben, da dieser die Konzentration und die Größe der Defekte charakterisiert. An die experimentellen Daten wurde ein 3-Schichtprofil angepasst. Die erste Schicht beschreibt den Oberflächeneffekt, auf den im anschließenden Abschnitt noch einmal eingegangen wird. Im Verlauf der Ausheilung ändert der Peak durch die eingebrachten Defekte seine Charakteristik und ist bei der größten Ausheiltemperatur wieder deutlich ausgebildet. Der S-Parameter der zweiten Schicht beschreibt die Defekte, wie sie durch die Implantation erzeugt wurden. In der dritten Schicht charakterisiert der S-Parameter das ungestörte Material. Die maximale Eindringtiefe der Positronen ist bei der höchsten Energie (40 keV ergibt eine mittlere Eindringtiefe der Positronen von $4,5 \mu\text{m}$) kleiner als die Schichtdicke der Epitaxieschicht von $10 \mu\text{m}$, so dass alle Positronen in der Schicht annihilieren. Der S-Parameter für den defektfreien Zustand kann somit bei der höchsten Energie der Referenzprobe abgelesen werden. Die Abhängigkeit des S-Parameters der Defektschicht von der Ausheiltemperatur ist in der Abb. 4.42 dargestellt.

Er steigt bis zu einer Temperatur von 900°C leicht an. Dieses Verhalten ist nahezu identisch für beide Implantationen. Bei der Implantation mit Ionen ist die maximal

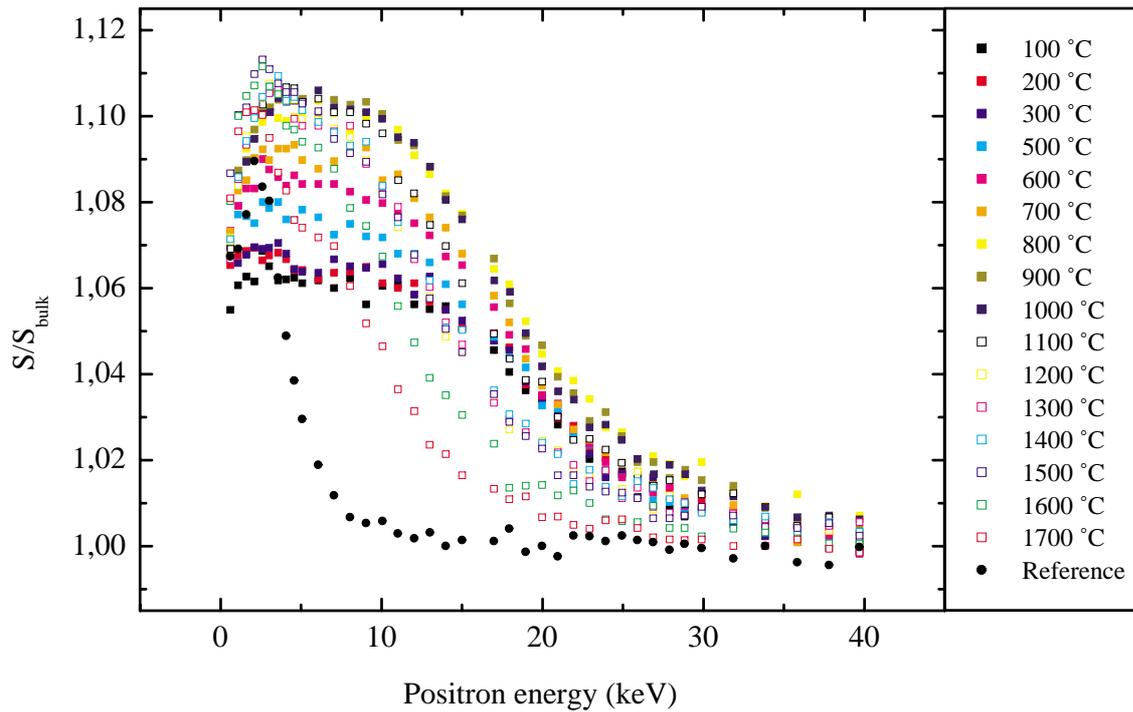


Abbildung 4.41: Darstellung des S-Parameters als Funktion der Positronen-Implantationsenergie für die Koimplantation von Bor mit Silizium. Die S-Parameter wurden auf den S-Parameter-Wert des defektfreien Materials normiert.

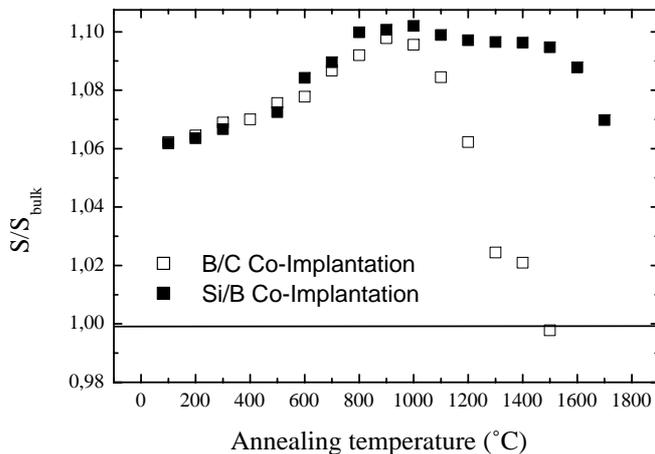


Abbildung 4.42: Darstellung des S-Parameters der Defektschicht im SiC in Abhängigkeit der Ausheiltemperatur. Die S-Parameter wurden an ein zweistufiges Defektprofil angepasst. Sämtliche Werte sind auf den Bulk-Wert normiert.

übertragbare Energie wesentlich höher als für Elektronen. Somit erhöht sich nicht nur die Konzentration der Defekte, sondern es können schon während der Implantation größere Defekte entstehen. Das Anwachsen des S-Parameters bei komplettem Einfang kann mit der Bildung größerer Komplexe wie Cluster bestehend aus mehreren Doppelleerstellen ver-

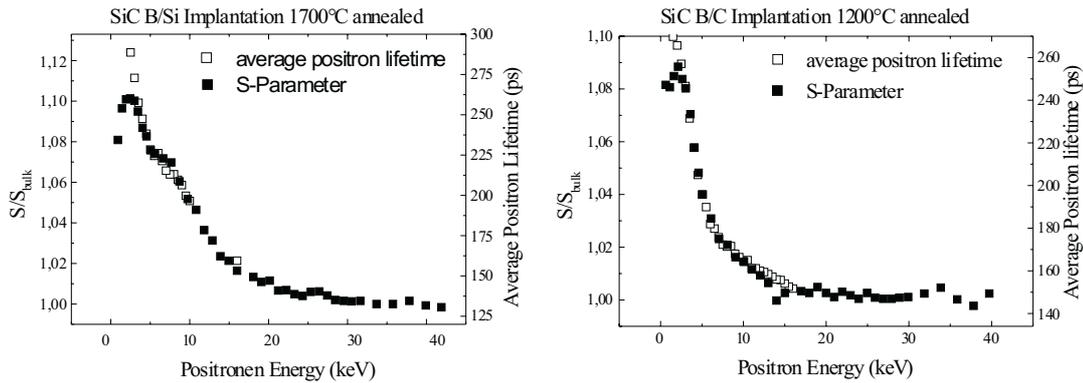


Abbildung 4.43: Vergleich der Doppler-Verbreitungs-Spektroskopie mit der Positronenlebensdauer an getemperten SiC nach Koimplantation von Bor mit Silizium und Kohlenstoff. Dargestellt ist der S-Parameter und die mittlere e^+ -Lebensdauer als Funktion der Positronen-Implantationsenergie.

standen werden. Die Rekombination von Frenkelpaaren sollte zu einer Erniedrigung des S-Parameters führen. Bei einer hohen Defektdichte, wie sie hier mit einer Leerstellenkonzentration oberhalb von 10^{19}cm^{-3} gegeben ist, kann eine Reduzierung der Einfachleerstellenkonzentration zur Erhöhung der Annihilationsanteile anderer Einfangzentren (z. B. größeren Leerstellen) ein Ansteigen des S-Parameters bewirken. Oberhalb der Ausheiltemperatur von 1000°C sind die S-Parameter beider Proben verschieden. Heilen bei der Koimplantation mit Kohlenstoff alle durch Ionenimplantation erzeugten Defekte bis zu einer Temperatur von 1500°C aus, so ist bei der Koimplantation von Silizium bis zur höchsten Ausheiltemperatur ein deutliches Leerstellensignal messbar. Die Ausheilstufe bei 1000°C im Fall der Koimplantation mit Kohlenstoff wurde bereits bei den Elektronen-bestrahlten Proben dem Ausheilverhalten der Silizium-Leerstelle zugeordnet. Die thermische Stabilität des S-Parameters (1000 bis 1700°C) für die Implantation von Silizium und Bor kann nicht mit der isolierten Silizium-Leerstelle interpretiert werden, da auch sie bei diesen hohen Temperaturen ausgeheilt ist. Vielmehr liegt die Vermutung nahe, dass es sich um eine Doppelleerstelle oder Cluster handeln könnte. Aus der Doppler-Annihilations-Spektroskopie ist die Größe der an der Annihilation beteiligten Leerstellen nicht direkt ablesbar. Aus diesem Grund wurden am Positronen-Lebensdauer-Strahlensystem in München für ausgewählte Temperaturen identisch implantierte Proben (vgl. Doppler-Annihilations-Spektroskopie-Messungen) untersucht. Der Vergleich beider Positronen-Annihilations-Methoden in Abb. 4.43 zeigt, dass die mittlere e^+ -Lebensdauer und der S-Parameter die gleiche Information tragen. Es existiert ein Abweichen des Messsignals beider Methoden im Bereich der Implantationsenergie von 0 bis 5 keV , welches durch unterschiedliche Oberflächenzustände zu erklären ist. Für die Charakterisierung des leerstellenartigen Defektes, welcher nach einer Ausheilung von 1700°C in der mit Silizium koimplantierten Probe zu messen ist, wurde bei

Probe	τ_1	I_1	τ_2	I_2	τ_{ave}
B/Si-Impl. 1700°C E=6 keV	134.2±3 ps	47±2 %	293±6 ps	51±2 %	225 ps
C/B-Impl. 1400°C E=6 keV	140±3 ps	74±2 %	300±6 ps	25±2 %	180 ps

Tabelle 4.3: Zerlegung der e^+ -Lebensdauerspektren bei einer Energie von 6 keV zur Charakterisierung des offenen Volumens im interessierenden Defektbereich. Das Spektrum besaß eine lange Komponente >400 ps mit einer Intensität <1 %, welche bei dieser Auswertung fixiert wurde.

einer Energie von 6 keV das Positronen-Lebensdauer-Spektrum analysiert. Die Betrachtung der Lebensdauerspektren mit einer Positronen-Implantations-Energie von 6 keV ist nur unter der Berücksichtigung des Oberflächeneffektes möglich. Bei der mit Kohlenstoff koimplantierten Probe waren nach einer Ausheiltemperatur von 1500°C keine leerstellenartigen Defekte nachweisbar. Folglich sind die ermittelten Lebensdauern dieser Probe bei einer Positronenenergie von 6 keV dem Oberflächeneffekt zuzuordnen. Anhand der Zerlegung (siehe Tabelle 4.3) wird deutlich, dass der Unterschied der mittleren e^+ -Lebensdauer von 225 und 180 ps beider Proben mit der Intensitätsabnahme (I_2) der defektspezifischen e^+ -Lebensdauer (τ_2) korreliert ist. Die defektspezifischen Lebensdauer τ_2 wurde für beide Implantationen mit ca. 300 ps bestimmt. Die thermische Stabilität des S-Parameters für die Silizium koimplantierte Probe oberhalb einer Ausheiltemperatur von 1500°C wäre mit der Existenz großer leerstellenartiger Komplexe erklärbar.

Für beide Implantationen fand eine Charakterisierung des Ausheilverhaltens durch die e^+ -Lebensdauerspektroskopie statt. Das Ausheilverhalten der mittleren e^+ -Lebensdauer ist in Abb. 4.44 zu erkennen. Es zeigt sich wiederum ein ähnliches temperaturabhängiges Verhalten der mittleren e^+ -Lebensdauer wie für das Ausheilverhalten des S-Parameters.

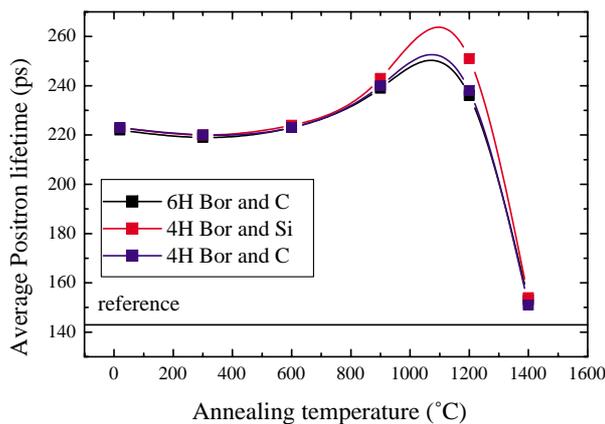


Abbildung 4.44: Darstellung der mittleren e^+ -Lebensdauer als Funktion der Ausheiltemperatur für die Koimplantation von Bor mit Silizium und Kohlenstoff in 6H- und 4H-SiC

Probe	Ausheiltemp.	τ_1	I_1	τ_2	I_2	τ_{ave}
6H C/B-Impl.	20°C	218±3 ps	98±2 %	440	2 %	222 ps
	300°C	208 ps	88 %	299 ps	11 %	219 ps
	600°C	201 ps	73 %	283 ps	27 %	223 ps
	900°C	195 ps	51 %	287 ps	49 %	240 ps
	1200°C	167 ps	50 %	306 ps	50 %	236 ps
	1400°C	153 ps	99 %	478 ps	1 %	158 ps
4H C/B-Impl.	20°C	220±3 ps	99±2 %	500	1%	223 ps
	300°C	208 ps	88 %	297 ps	12 %	219 ps
	600°C	201 ps	72 %	280 ps	28 %	222 ps
	900°C	201 ps	58 %	294 ps	42 %	241 ps
	1200°C	169 ps	48 %	303 ps	52 %	239 ps
	1400°C	151 ps	99,5 %	539 ps	0,5 %	153 ps

Tabelle 4.4: Zerlegung der e^+ -Lebensdauerspektren bei einer Energie von 10 keV zur Charakterisierung des offenen Volumens im interessierenden Defektbereich.

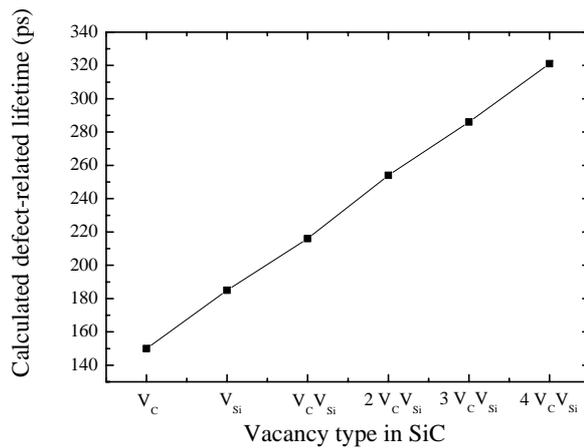


Abbildung 4.45: Darstellung der theoretisch berechneten e^+ -Lebensdauer für größere Leerstellenkomplexe in 3C-SiC [Bra96].

Für die Ausheiltemperatur von 1000°C ist im Falle der Kohlenstoff-Koimplantation die Ausheilung der Silizium-Leerstellen, wie sie im Bulk-Material, im Elektronen-bestrahlten und im Helium-implantierten SiC gefunden wurde, deutlich zu erkennen. Die dazugehörigen defektspezifischen e^+ -Lebensdauern sind in der folgenden Tabelle zusammengefasst. Für diese Proben sind zwei defektspezifische e^+ -Lebensdauern herauszuarbeiten. Zum einen ist dies die lange Komponente des Spektrums, die eine e^+ -Lebensdauer von ca. 300 ps besitzt. In ihr spiegelt sich der große S-Parameter aus der Doppler-Verbreiterungs-Spektroskopie wider. Eine Lebensdauer von 300 ps lässt wiederum auf Leerstellen-Cluster schließen. Ein Vergleich mit den theoretischen e^+ -Lebensdauern zeigt, dass die 280 bis 300 ps dem Positronensignal einer dreifachen Doppelleerstelle entspricht [Bra96]. Die große e^+ -Lebensdauer im unausgeheilten Zustand ist ein Artefakt der Apparatur und war auch

im Referenzmaterial messbar.

Die zweite charakteristische e^+ -Lebensdauer besitzt einen Wert um 200 ps . Sie entspricht der Silizium-Leerstelle und eine Reduzierung dieser Komponente oberhalb der Ausheiltemperatur von $900^\circ C$ stimmt mit dem bekannten Ausheilverhalten der Silizium-Leerstelle überein.

Für die Koimplantation von Bor mit Silizium ist grundsätzlich ein ähnliches Ausheilverhalten zu beobachten, jedoch besitzt die lange Komponente eine höhere thermische Stabilität. Eine mögliche Erklärung wäre die Erzeugung größerer Komplexe während der Implantation aufgrund der größeren Atommasse des Siliziums. Eine Korrelation dieses Unterschieds mit dem D-Zentrum ist nicht wahrscheinlich, da das D-Zentrum auch beim Epitaxiewachstum mit Bor gefunden wurde [Pen00]. Die möglichen Leerstellenkandidaten sind in diesem Fall Einfachleerstellen oder Doppelleerstellen. Das e^+ -Lebensdauersignal der ersten Komponente reduziert sich bei einer Ausheiltemperatur von $1400^\circ C$ fast bis auf dem Wert des defektfreien Materials. Dies war bereits bei den Substratuntersuchungen ein Hinweis auf die Kohlenstoff-Leerstelle, da die erste Komponente nicht reduziert war. Die Kohlenstoff-Leerstelle ist auch hier nicht direkt nachweisbar. Das Verschwinden des Silizium-Leerstellensignals ($\tau \sim 200 ps$) oberhalb der Temperatur von $900^\circ C$ schließt sie als Kandidat für des D-Zentrums aus.

Befindet sich das Fermi-niveau in der Nähe der Bandmitte, so ist die Kohlenstoff-Leerstelle positiv geladen. Das Bor hingegen wird als Akzeptor auf dem Siliziumplatz eingebaut und trägt die entgegengesetzte Ladung. Während der Epitaxie wäre ein Kompensationsmechanismus denkbar, so dass beim elektrisch aktiven Einbau eines Boratoms eine Kohlenstoff-Leerstelle gebildet wird. Dieser Komplex kann dann auch negativ oder neutral geladen und somit nachweisbar sein. Nun besitzt die Kohlenstoff-Leerstelle eine Ausheiltemperatur von ca. 300 bis $500^\circ C$ und sollte bei einer Zuchttemperatur von $1500^\circ C$ nicht mehr beobachtbar sein, jedoch kann der Komplex $V_C B_{Si}$ eine deutlich höhere thermische Stabilität besitzen. Ein weiteres Argument, dass sich hinter dem D-Zentrum die Kohlenstoff-Leerstelle mit einem benachbarten Bor-Atom verbirgt, ist in der Reduzierung der D-Zentrum-Konzentration mit der Kohlenstoff-Koimplantation zu sehen. Hier erhöht sich die Kohlenstoff-Zwischengitter-Konzentration, was die Kohlenstoff-Konzentration reduziert und die Ausbildung des beschriebenen Komplexes unterdrückt.

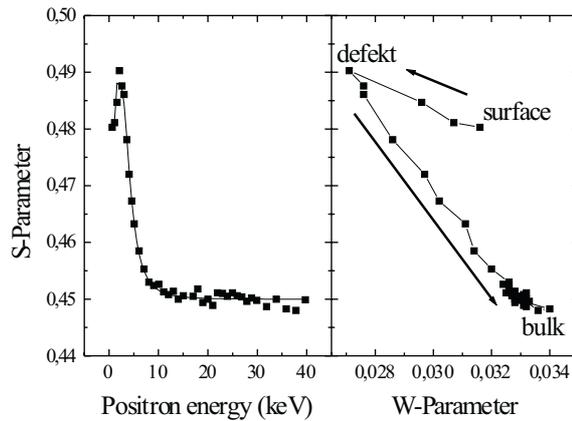


Abbildung 4.46: Darstellung der $S(E)$ -Analyse (links) für die 6H n-Typ SiC Referenzprobe. Die S-W-Darstellung auf der rechten Seite charakterisiert die drei existierenden Zustände (Oberfläche, Defekt und Bulk).

4.2.5 Charakterisierung des Oberflächeneffektes

Das 6H-Material zeigt an der Oberfläche einen charakteristischen Peak (siehe Abb. 4.46), der in bereits untersuchten Materialien (3C, 4H und 6H) mit anderen Wafern nicht zu messen war. Ein derart typisches Verhalten im S-Parameter besitzen epithermische Positronen. Durch epithermische Positronen lassen sich die großen e^+ -Lebensdauern im oberflächennahen Bereich und die erneute Ausprägung des Oberflächen-Peaks bei den hohen Ausheiltemperaturen von Ionen-implantiertem 6H-SiC erklären.

Der Oberflächen-S-Parameter befindet sich unterhalb des S-Parameters der Defektschicht, so dass bei den niedrigsten Implantationsenergien von 0,5 bis 2 keV ein Ansteigen des S-Parameters festzustellen ist. Dieser Verlauf schließt den Oberflächen-S-Parameter als Quelle des Peaks aus. Die besten Anpassungen mit VEPFIT wurden unter der Annahme einer Defektschicht erzielt. Nun ist bei epitaktischen Schichten nicht unbedingt von Defekten an der Oberfläche auszugehen, die eine Erhöhung des S-Parameters von 9 % hervorrufen. Eine Anpassung der Daten bestimmte sich ein Defekt-Schicht-Tiefe von 100 nm. Die Vermutung der Existenz größerer Cluster an der Oberfläche ist mit Hilfe der Positronen-Lebensdauer-Strahlensystem in München untersucht worden. Für eine Implantationsenergie von 2 keV, welche das Zentrum dieses Defektpeaks charakterisiert, das Ergebnis der Spektrenzerlegung in Tabelle 4.5 zusammengefasst.

Probe	τ_1	I_1	τ_2	I_2	τ_{ave}
6H-SiC Referenz E=2 keV	224±4 ps	78 %	448±13 ps	23 %	273 ps

Tabelle 4.5: Zerlegung der e^+ -Lebensdauerspektren bei einer Energie von 2 keV zur Charakterisierung des offenen Volumens im interessierenden Defektbereich.

Die e^+ -Lebensdauern von 224 und 448 ps stehen für ein deutliches Leerstellensignal. Die Größe von 448 ps wären großen Clustern (>5 Doppelleerstellen) zuzuordnen. Die e^+ -Lebensdauer von 224 ps befindet sich im Bereich der einfachen Doppelleestelle. Epi-

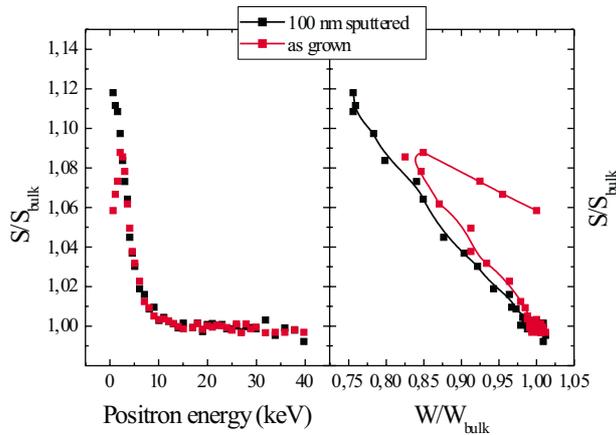


Abbildung 4.47: Darstellung der $S(E)$ -Analyse (links) für die 6H n-Typ SiC Referenzprobe. Die S-W-Darstellung auf der rechten Seite charakterisiert die Änderung des Oberflächen-W-Parameters.

thermische Positronen können aber auch für diese Lebensdauern verantwortlich sein, da sie an der Oberfläche eine lange e^+ -Lebensdauer besitzen.

Die Annahme, dass sich an der Oberfläche eine Defektschicht von 100 nm befindet, ist mit einem weiteren Experiment überprüft worden. Dabei wurde das Verhalten des S-Parameters untersucht, nachdem eine 100 nm-Schicht von der Oberfläche durch Sputtern abgetragen wurde. Die Defektstruktur sollte sich in die Richtung der Oberfläche verschieben. In Abb. 4.47 ist eine Änderung des Oberflächen-S-Parameters nach dem Sputtern festzustellen. Ein Verschieben der Struktur in Richtung der Oberfläche ist nicht zu beobachten, da ab einer Energie von 5 bis 40 KeV die S- und W-Parameter nahezu identisch sind.

Eine eindeutige Identifikation der Ursache des Oberflächen-Peaks war nicht möglich. Das in dieser Arbeit verwendete Oberflächen-Defekt-Modell sollte aber keinen Einfluss auf die bis dato getroffenen Interpretationen haben. Für eine genauere Interpretation dieses Oberflächenverhaltens sind weitere Experimente notwendig. Die Summe der Ergebnisse zur Charakterisierung des Oberflächeneffektes präferiert die epithermischen Positronen als Ursache dieses Verhaltens.

5. Zusammenfassung und Ausblick

Im Mittelpunkt dieser Arbeit steht die Charakterisierung leerstellenartiger Defekte im Siliziumkarbid, wie sie nach der Kristallzucht oder durch Bestrahlung bzw. Ionenimplantation zu finden sind.

Mit der Positronen-Lebensdauer-Spektroskopie und der Doppler-Verbreiterungs-Spektroskopie wurden zunächst 4H- und 6H-Bulk-Materialien untersucht. Es zeigte sich anhand erster Positronenmessungen, dass diese Kristalle bereits nach der Kristallzucht nicht defektfrei sind. Der Ladungszustand der Defekte hängt von der Dotierung ab. So besitzt das n-dotierte SiC-Bulk-Material bei hohen Messtemperaturen zwischen 500 bis 600 K ein deutliches Positronen-Leerstellensignal. Für beide Polytypen ergab sich in diesem Temperaturbereich eine defektspezifische Positronenlebensdauer von 215 ± 5 ps, welche durch den Vergleich mit theoretischen e^+ -Lebensdauer-Berechnungen Doppelleerstellen zuzuordnen ist. Dagegen konnte für die p-dotierten Proben bei dieser Temperatur kein für Positronen attraktives Einfangzentrum nachgewiesen werden, so dass die Konzentration der Doppelleerstellen entweder zu klein ist oder eine positive Ladung vorliegt.

Im Tieftemperaturbereich (20 bis 200 K) existieren bei allen Bulk-Kristallen nachweisbare Leerstellen. Das Ansteigen der mittleren e^+ -Lebensdauer zu tieferen Messtemperaturen deutet auf ein negativ geladenes Einfangzentrum hin. Das kleine offene Volumen, welches aus der geringen defektspezifischen e^+ -Lebensdauer (150 ± 5 ps) abzuleiten ist, korreliert mit der theoretischen e^+ -Lebensdauer der Kohlenstoff-Leerstelle. Diese zeigt das typische Verhalten einer flachen Positronenfalle, deren konkurrierender Einfang mit Doppelleerstellen im Mess-Temperaturbereich von 300 bis 500 K gefunden wurde. Im p-dotierten SiC ist die Kohlenstoff-Leerstelle positiv geladen [Tor02]. Der Komplex aus einer Leerstelle und einem Aluminium-Akzeptor kann ein für Positronen attraktives Zentrum darstellen. Das analoge temperaturabhängige Verhalten der mittleren e^+ -Lebensdauer für verschieden dotierte Bulk-Kristalle deutet auf die Bildung derartiger Komplexe hin.

Die Silizium-Leerstelle konnte als intrinsischer Defekt nicht nachgewiesen werden. Dies kann einerseits daran liegen, dass durch den bei der Kristallzucht dominierenden Siliziumdampfdruck die Bildung der Leerstelle unterdrückt wird, oder andererseits die Silizium-Leerstellen mit den Kohlenstoff-Leerstellen zu Doppelleerstellen reagieren. Die Silizium-Leerstelle ist aber nach Bestrahlung mit 2 MeV-Elektronen vorhanden. Sie besitzt eine defektspezifische e^+ -Lebensdauer von ca. 200 ps. Eine Erhöhung der Doppelleerstellenkonzentration nach einer Ausheilung von 1700 °C der bestrahlten Kristalle war nicht festzustellen. Folglich ist die Bildung von Doppelleerstellen aus Monovakanzen nicht sehr wahrscheinlich.

Das Ausheilverhalten der Silizium-Leerstelle nach Elektronen-Bestrahlung in SiC wur-

de untersucht. Oberhalb einer Temperatur von 1000°C ist für beide Bestrahlungsdosen ein Absenken der mittleren e^+ -Lebensdauer messbar. Es existieren bei einer Ausheiltemperatur von 1500°C keine Silizium-Leerstellen in nachweisbarer Konzentration. Dieses Ausheilverhalten korreliert mit Ergebnissen aus DLTS-Messungen, so dass das E_1/E_2 -Zentrum ein mit einer Silizium-Leerstelle dekoriertes Defekt sein muss. Eine monochromatische Beleuchtung der bestrahlten Probe ergab eine Ionisierungsenergie der negativ geladenen Silizium-Leerstelle von 470 meV . Das Energieniveau des E_1/E_2 -Defektes befindet sich 440 meV unterhalb der Leitungsbandkante, so dass auch hier Gemeinsamkeiten gefunden wurden. Dies gilt als ein weiterer Beweis, dass die Silizium-Leerstelle und das E_1/E_2 -Zentrum vom gleichen Ursprung sind.

Bauelementestrukturen werden ausschließlich auf Epitaxieschichten hergestellt. Die Charakterisierung derartiger Strukturen erfordert die Anwendung der PAS mit monoenergetischen Positronen. Im Gegensatz zu den Bulk-Materialien konnten (bis auf einen Wafer mit einem Oberflächeneffekt) in allen Epitaxieschichten keine Positroneneinfangzentren nachgewiesen werden. Die Konzentration der intrinsischen Defekte liegt somit unterhalb von 10^{15} cm^{-3} . Diese Schichten wurden durch Elektronen-Bestrahlung oder Ionenimplantation definiert geschädigt und anschließend mit der PAS sowie der DLTS untersucht. Für die Elektronen-Bestrahlung und die Heliumimplantation war wiederum ein analoges Ausheilverhalten des S-Parameters, der mittleren e^+ -Lebensdauer und des DLTS-Signals (E_1/E_2 -Zentrum im 6H-Polytyp) zu messen. Die Analyse der e^+ -Lebensdauerspektren nach Elektronen-Bestrahlung bestimmte die Silizium-Leerstelle ($200\pm 5\text{ ps}$) als dominierenden Defekt. Somit konnte aufgrund der gleichen Ausheilverhalten das E_1/E_2 -Zentrum im 6H-SiC und das Z_1/Z_2 -Zentrum im 4H-SiC einem Defekt zugeordnet werden, der mit einer Silizium-Leerstelle dekoriert ist. Dieses Ergebnis wurde mit Doppler-Koinzidenz-Messungen bestätigt. Der elementspezifische Hochimpulsanteil der Annihilationslinie zeigt ein leichtes Ansteigen in der Kurvenform, wie es auch nach theoretischen Berechnungen für die Silizium-Leerstelle gefunden wurde [Sta01].

Ein weiterer Schwerpunkt dieser Arbeit ist der Akzeptor Bor im SiC. Einerseits wurde dessen Diffusionsverhalten untersucht und andererseits das D-Zentrum näher charakterisiert.

Die Diffusion von Bor wurde anhand von Diffusionsprofilen und dem Diffusionsverhalten nach Koimplantation von Bor mit Kohlenstoff und Silizium über den Kick-Out-Mechanismus favorisiert. In dieser Arbeit wurde das Leerstellen-Defekt-Profil für die genannten Koimplantationen näher untersucht. Eine Verbreiterung dieses Profils, welches für einen Leerstellen-Diffusionsmechanismus stehen würde, war nicht messbar. Somit kann die bestehende Auffassung zur Diffusion über den Kick-Out-Mechanismus bestätigt werden.

Nach DLTS-Messungen ist das D-Zentrum ein mit Bor dekoriertes Komplex. Es wurde sowohl nach der Bor-Implantation im SiC als auch beim Epitaxiewachstum (Bor aus der Gasphase) nachgewiesen [Fra98]. Die Interpretationen über die Struktur dieses Komplexes sind verschieden, da Bor amphotär eingebaut wird. Allgemein vermutet man einen Leerstellen-Bor-Komplex. In dieser Arbeit wurde gezeigt, dass das Positronensignal der

Silizium-Leerstelle (nach Implantation von Bor) oberhalb einer Ausheiltemperatur von 1400°C nicht mehr nachweisbar ist. Das Umladungsniveau (0/-) der Silizium-Leerstelle befindet sich nahe der Valenzbandkante, so dass sie im n-dotierten SiC negativ geladen ist. Der Komplex aus Silizium-Leerstelle und Bor wird sich aufgrund der gleichen elektrischen Ladung nicht bilden können. Viel wahrscheinlicher ist der Komplex aus Kohlenstoff-Leerstelle und Bor, da sich die beiden Defekte elektrisch anziehen. Das kleine offene Volumen der Leerstelle korreliert auch mit der gemessenen defektspezifischen e^+ -Lebensdauer von 150 ps nach einer Ausheiltemperatur von 1400°C . Der Komplex $V_C B_{Si}$ ist ebenfalls kompatibel mit der Reduzierung der D-Zentrum-Konzentration durch die Koimplantation mit Kohlenstoff. In diesem Fall erhöht sich die Kohlenstoff-Zwischengitter-Konzentration, welche die Kohlenstoff-Leerstellenkonzentration reduziert.

Die Resultate dieser Arbeit zeigen, dass durch die Kombination der Messmethoden von DLTS und PAS eindeutige Schlüsse der Defektcharakterisierung möglich sind. Der Vergleich der Ergebnisse aus der Untersuchung von Bulk-Materialien und Epitaxieschichten ermöglicht detailliertere Interpretationen der Defekte. Dies liegt darin begründet, dass in Epitaxieschichten intrinsische Defekte keine entscheidende Rolle für das PAS-Signal spielen. Die intrinsischen Defekte von Bulk-Materialien wurden deutlich herausgearbeitet, so dass deren Konzentration durch gezielte Modifikationen während der Kristallzucht reduzierbar ist. Mit den Ergebnissen dieser Arbeit ist man jetzt in der Lage, das Bulk-Material SiC besser zu charakterisieren und somit gezielter auf die Art und Konzentration leerstellenartiger Defekte bei der Kristallzucht einzugehen.

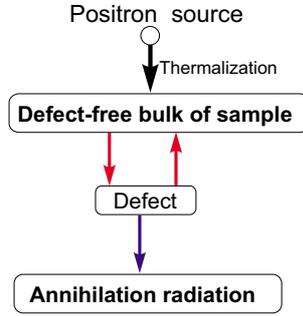
A. Informationen zu Siliziumkarbid

- 1824 J.J. Prezelius: erstmalige Entdeckung
- 1891 A. Cowe, E. Cowe : fine shining in a furnace for melting areas
- 1891 E.G. Acheson: Synthese von SiC während des Schmelzprozesses von Kohlenstoff und Aluminiumsilikaten. Da in der Mineralogie natürlich geschmolzenes Al_2O_3 Corundum heißt, wurde das neue Material Carborundum genannt. Es bestand jedoch nicht aus Al und C sondern aus Si und C.
- 1905 H. Moissan: Entdeckung von Siliziumkarbid in einem Eisenmeteoriten. Daraus entstand der Name Moissanite.
- 1906 W.W. Coblenz: Infrarot Transmissions- und Reflektionsspektroskopie
- 1907 H.J. Round: Erster Beitrag über lichtemittierende Dioden auf Siliziumkarbidbasis
- 1912 H. Baumhauer: Entdeckung der Polytypie am Beispiel von Siliziumkarbid
- 1955 J.A. Lely: Entwicklung eines Sublimationsprozesses mit spontaner Keimbildung an der Reaktorwand für die Herstellung von Siliziumkarbidplättchen
- 1966 H.R. Phillip, E.A. Taft: Unipolartransistor
- 1971 B.G. Dubrovskii: Erstmalige Betrachtung der Polytypen als natürliche Übergitter
- 1977 Yu.M. Tairov: Entwicklung des modifiziertes Lely-Verfahren zum SiC-Kristallwachstum für halbleitertechnisch verwertbare Einkristalle
- 1977 V.F. Tsvetkov: Erste kommerzielle blaue Leuchtdiode auf SiC (SIEMENS)
- 1978 W. von Münch: Bipolartransistor
- 1983 P. Hoeck: Oxidation von SiC
- 1983 S. Nishino, J.A. Powell, H.A. Will : Heteroepitaxie von SiC auf Si
- 1983 F. Neubert, V.V. Lutschinin, A.A. Kalnin: Kontrolliertes lokales Wachstum von Polytypen
- 1987 SiC-Si Heterobipolartransistor
- 1987 UV Photodetektoren
- 1989 1 Zoll SiC Einkristalle
- 1990 V.I. Sankin, A.V. Naumov: Experimentelle Beobachtung des Wannier-Stark-Effektes in SiC Polytypen
- 1992 Nichtflüchtiger Speicher auf SiC-Basis
- 1992 J. Pezoldt, A.A. Kalnin: lokale heteropolytype Strukturen durch Ionenimplantation und Epitaxie (6H-3C-6H-3C und 4H-3C-4H-3C)
- 1993 2 Zoll SiC-Einkristalle
- 1994 3 Zoll SiC-Einkristalle
- 1994 MOS IC bis 300°C
- 1994 2 kV 6H-SiC Gleichrichterdiode Epi Cree

- 1995 4,5 kV 6H-SiC Gleichrichterdiode Epi ABB
- 1995 1,8 kV 4H-SiC Gleichrichterdiode implantiert (SIEMENS)
- 1995 1,1 kV Schottky Diode
- 1995 SiC FET's für 12,6 GHz (kommerziell westinghaus)
- 1995 CMOS IC
- 1995 AlN als epitaxialer Isolator
- 1996 CCD Bauelement
- 1997 2,5 kV Schottky Diode
- 1997 Breitband RF Mixer
- 1997 2,6 kV LDMOS Transistor
- 1998 A. Fissel: Erzeugung von heteropolytypen Schichtsystemen (4H-3C-4H) mit Festquellenmolekularstrahlepitaxie
- 1999 4 Zoll SiC-Einkristalle
- 1999 800 V Thyristor

A.1 Die Detrappingrate

Modell:



Dgl.-System:

$$\begin{aligned} \frac{dn_{bulk}(t)}{dt} &= -\kappa \cdot n_{bulk}(t) + \delta \cdot n_{def}(t) \\ \frac{dn_{def}(t)}{dt} &= \kappa \cdot n_{bulk}(t) - (\lambda + \delta) \cdot n_{def}(t) \end{aligned}$$

Abbildung A.1: Darstellung des einfachsten Detrapping-Modells

Lösung:

$$\begin{aligned} n_{bulk}(t) &= \left(-\frac{1}{2} e^{\frac{1}{2}t \left(-\delta - \kappa - \lambda - \sqrt{-4\kappa\lambda + (\delta + \kappa + \lambda)^2} \right)} + \frac{e^{\frac{1}{2}t \left(-\delta - \kappa - \lambda - \sqrt{-4\kappa\lambda + (\delta + \kappa + \lambda)^2} \right)} \delta}{2\kappa} + \right. \\ &\frac{e^{\frac{1}{2}t \left(-\delta - \kappa - \lambda - \sqrt{-4\kappa\lambda + (\delta + \kappa + \lambda)^2} \right)} \lambda}{2\kappa} - \left. \frac{e^{\frac{1}{2}t \left(-\delta - \kappa - \lambda - \sqrt{-4\kappa\lambda + (\delta + \kappa + \lambda)^2} \right)} \sqrt{-4\kappa\lambda + (\delta + \kappa + \lambda)^2}}{2\kappa} \right) C[1] + \\ &\left(-\frac{1}{2} e^{\frac{1}{2}t \left(-\delta - \kappa - \lambda + \sqrt{-4\kappa\lambda + (\delta + \kappa + \lambda)^2} \right)} + \frac{e^{\frac{1}{2}t \left(-\delta - \kappa - \lambda + \sqrt{-4\kappa\lambda + (\delta + \kappa + \lambda)^2} \right)} \delta}{2\kappa} + \right. \\ &\left. \frac{e^{\frac{1}{2}t \left(-\delta - \kappa - \lambda + \sqrt{-4\kappa\lambda + (\delta + \kappa + \lambda)^2} \right)} \lambda}{2\kappa} + \frac{e^{\frac{1}{2}t \left(-\delta - \kappa - \lambda + \sqrt{-4\kappa\lambda + (\delta + \kappa + \lambda)^2} \right)} \sqrt{-4\kappa\lambda + (\delta + \kappa + \lambda)^2}}{2\kappa} \right) C[2], \\ n_{st}(t) &= e^{\frac{1}{2}t \left(-\delta - \kappa - \lambda - \sqrt{-4\kappa\lambda + (\delta + \kappa + \lambda)^2} \right)} C[1] + e^{\frac{1}{2}t \left(-\delta - \kappa - \lambda + \sqrt{-4\kappa\lambda + (\delta + \kappa + \lambda)^2} \right)} C[2] \end{aligned}$$

Aus der Anfangsbedingung $n_{st}(t=0)$ folgt $C[1] = -C[2]$ und die Gleichungen vereinfachen sich. Die Konstante $C[1]$ bestimmt sich zu:

$$C[1] = -\frac{\kappa}{\sqrt{-4\kappa\lambda + (\delta + \kappa + \lambda)^2}} \quad (\text{A.1.1})$$

$$\begin{aligned} n(t) &= \frac{1}{\left(2\sqrt{-4\kappa\lambda + (\delta + \kappa + \lambda)^2} \right)^2} \left(e^{-\frac{1}{2}t \left(\delta + \kappa + \lambda + \sqrt{\delta^2 + (\kappa - \lambda)^2 + 2\delta(\kappa + \lambda)} \right)} \right. \\ &\left(\left(-1 + e^{t\sqrt{\delta^2 + (\kappa - \lambda)^2 + 2\delta(\kappa + \lambda)}} \right) \delta + \left(-1 + e^{t\sqrt{\delta^2 + (\kappa - \lambda)^2 + 2\delta(\kappa + \lambda)}} \right) \kappa - \right. \\ &\left. \left. \lambda + e^{t\sqrt{\delta^2 + (\kappa - \lambda)^2 + 2\delta(\kappa + \lambda)}} \lambda + \sqrt{\delta^2 + (\kappa - \lambda)^2 + 2\delta(\kappa + \lambda)} + \right. \right. \\ &\left. \left. e^{t\sqrt{\delta^2 + (\kappa - \lambda)^2 + 2\delta(\kappa + \lambda)}} \sqrt{\delta^2 + (\kappa - \lambda)^2 + 2\delta(\kappa + \lambda)} \right) \right) \end{aligned}$$

Diese Lösung vereinfacht sich für $\delta = 0$ zu :

$$n(t) = \frac{\lambda}{\lambda - \kappa} e^{-\kappa t} + \frac{\kappa}{\kappa - \lambda} e^{-\lambda t} \quad (\text{A.1.2})$$

Literaturverzeichnis

- [And32] C.D. Anderson, *Science*, vol. 76, (1932)
- [Ani85] M.M. Anikin, A.A. Lebedev, A.L. Syrkin, A.V. Suvorov, *Sov. Phys.-Semiconductor (USA)*, vol. 19, 69 (1985)
- [Ani90] M.M. Anikin, N.I. Kuznetsov, A.A. Lebedev, A.M. Strel'chuk, A.L. Sykijn, *Sov. Physical Semiconductor (USA)*, vol. 24 no. 8, 869 (1990)
- [Ani91] M.M. Anikin et. al, *Sov. Phys.-Semiconductor (USA)*, vol. 25 no.2, 199 (1991)
- [AK96] P. Asoka-Kumar, M. Atalo, V.J. Gosh, A.C. Kruseman, B. Nielsen, K.G. Lynn, *Phys. Rev. Letters*, vol 77, 2097 (1996)
- [Arn97] A. Arnold, T.Ikoma, O.E. Poluektov, P.G. Baranov, E.N. Mokhov, J. Schmidt, *Phys. Rev B*, 1997
- [Art67] J.R. Arthur, *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 28, 2257-2267 (1967)
- [Bal70] L.A. de S. Balona, J.H.N. Loubser, *J. Phys. C., Solid State Physics (UK)* vol. 3, 2344-2351 (1970)
- [BK01] W. Bauer-Kugelmann, P. Sperr, G. Kögel, W. Triftshäuser, *Materials Science Forum*, vol. 362-365, 529 (2001)
- [Ber92] L. Bergmann, C. Schaefer, *Lehrbuch der Experimentalphysik, Walter de Gruyter Berlin New-York (1992)*, Bd.6
- [Bou83] J. Bourgoin, M. Lannoo, *Point Defects in Semiconductors II, Experimental Aspects, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York*, vol. 35 (1983)
- [Bra74] W. Brandt, *Positron dynamics in solids, Appl. Phys.*, vol 5, 1-23, (1974)
- [Bra77] W. Brandt, R.Paulin, *Phys. Rev. B*, vol. 15, 2511 (1977)
- [Bra96] G. Brauer, W. Anwand, P.G. Coleman, A.P. Knights, F. Plazaola, Y. Pacaud, W. Skorupa, J. Strömer, P. Willutzki, *Phys. Rev. B*, vol.54, 3084 (1996)
- [Cho70] W.J. Choyke, L. Patrick, *Phys. Rev. B (USA)*, vol. 2, 4959 (1970)
- [Cor75] J.W. Corbett, J.C. Bourgoin, *Semiconductors and Molecular Crystals of Point defects in Solids*, vol. 2 (1975)
- [CW69] D.C. Connors und R.N. West, *Positron annihilation and defect in metals, Phys. Lett.*, vol.30, 24-25 (1969)

- [Daa63] H.J. van Daal, W.F. Knippenberg, J.D. Wasscher, *J. Phys. Chem. Solids (UK)*, vol. 24, 109 (1963)
- [Dan80] Le Si Dang, K.M. Lee, G.D. Watkins, W.J. Choyke, *Phys. Rev. Letters*, vol. 45, 390-394 (1980)
- [Dea77] P.J. Dean, W.J. Choyke, L. Patrick, *J. Lumin. (Netherlands)*, vol-15, 299 (1977)
- [DFG01] DFG-Vortrag der Universität Erlangen-Nürnberg, *Alternative Kristallzüchtungsverfahren*, 2001
- [Eic94] S. Eichler, Diplomarbeit, *Aufbau und Inbetriebnahme eines Positronenstrahl-systems zur Untersuchung von oberflächennahen Defekten in Halbleitern*, (1994)
- [Eic97] S. Eichler, *Dissertation*, (1997)
- [ESC00] Mündliche Mitteilung zur ECSRM 2000
- [Fra98] T. Frank, T. Troffer, G. Pensl, N. Nordell, S. Karlson, A. Schöner, *Materials Science For.*, vol. 264-268, (1998)
- [Fra00] T. Frank, G. Pensl, Song Bay, R.P. Devaty, W.J. Choyke, *Materials Science Forum*, vol. 338, 753 (2000)
- [Fre88] J.A. Freitas Jr., W.E. Carlos, S.G. Bishop, *Springer Proc. Phys. (Germany)* vol 34, 135-142 (1988)
- [Fre8a] J.A. Freitas Jr., S.G. Bishop, P.E.R. Nordquist Jr., M.L. Gipe, *Appl. Phys. Lett. (USA)*, vol. 52, 1695 (1988)
- [Geb97] J. Gebauer, R. Krause-Rehberg, C. Dohmke, P. Ebert, K. Urban, *Phys. Rev. Letters* , vol. 78, 3334-3337 (1997)
- [Geb99] J. Gebauer, F. Rudolf, A. Polity, R. Krause-Rehberg, J. Martin, P. Becker *Appl. Phys. A*, vol.68, 411 (1999)
- [Geb00] J. Gebauer, *Dissertation: Native Leerstellen in GaAs- der Einfluss von Stöchiometrie und Dotierung* (2000)
- [Goe93] W. Götz et al, *J. Appl. Phys. (USA)*, vol. 72, 3332 (1993)
- [Gor67] I.S. Gorban, A.F. Gumenyuk, Tu.M. Suleimanov, *Sov. Phys. Solid State (USA)*, vol. 8, 2746 (1967)
- [Gho95] V.J. Ghosh, G.C. Aers, *Phys. Rev. B*, vol. 51, 45 (1995)
- [Ham63] D.R. Hamilton, W.J. Choyke, L. Patrick, *Phys. Rev (USA)*, vol. 131, 127 (1963)
- [Hag70] S.H. Hagen, C.J. Kapteyns, *Philips Res. Rep. (Netherlands)*, vol. 25, 1 (1970)

- [Hag73] S.H. Hagen, A.W.C. van Kemenade, J.A.W. van der Bye, *J. Lumin. (Netherlands)*, vol. 8, 18 (1973)
- [Hem99] C.G. Hemmingsson, N.T. Son, O. Kordina, J.L. Lindström, E. Jansen, *Semiconductor Sci. Technol.*, vol. 14, 251-256 (1999)
- [Ike79] M. Ikeda, H. Matsunami, T. Tanaka, *J. Lumin. (Netherlands)*, vol. 20, 111 (1979)
- [Ike80] M. Ikeda, H. Matsunami, T. Tanaka, *Phys. Rev. B (USA)*, vol. 22, 2842 (1980)
- [Ike81] M. Ikeda, H. Matsunami, *Phys. Status Solidi A*, vol.58, 657-663 (1980)
- [Ike90] M. Ikeda, H. Matsunami, T. Tanaka, *Phys. Rev. B (USA)*, vol. 22, 2842-2854 (1990)
- [Ito89] H. Itoh, N. Hayakawa, I. Nashiyama, E. Sakuma, *J. Appl. Physics (USA)*, vol. 66, 4529-4531 (1989)
- [Ito90] H. Itoh, M.Yoshikawa, I. Nashiyama, S. Misawa, H. Okumura, S. Yoshida, *IEEE Trans. Nucl. Science (USA)*, vol. 37, 1732-1738 (1990)
- [Ito92] H. Itoh, M.Yoshikawa, I. Nashiyama, S. Misawa, H. Okumura, S. Yoshida, *Journal Electronic Matters (USA)*, vol. 21, 707-710 (1992)
- [Ito92a] H. Itoh, M.Yoshikawa, I. Nashiyama, S. Misawa, H. Okumura, S. Yoshida, *Amorphous and Crystalline Silicon Carbide III Eds. G.L. Harris, M.G. Spencer, C.Y. Yang Springer Verlag Berlin*, 143-148 (1992)
- [Kan73] H. Kang, R.B. Hilborn Jr., *Conf. of Silicon Carbide (abstracts), Miami Beach (USA) (University of South Carolina)*, 493 (1973)
- [Kaw87] A. Kawasuso, H. Itoh, T. Ohshima, K. Abe, S. Okada, *J. Appl. Phys.*, vol.82, 3232 (1987)
- [Kaw89] A. Kawasuso, H. Itoh, N. Morishita, M. Yoshikawa, T. Oshima, I. Nashiyama, S. Okada, H. Okumura, S. Yoshida, *Appl. Physics A*, vol. 67, 209-212 (1998)
- [Kaw01] A. Kawasuso, F. Redmann, R. Krause-Rehberg, M. Weidner, T. Frank, G. Pensl, P. Sperr, W. Trifsthäuser, H. Itoh, *J. Appl. Phys.*, vol. 90, 3377-3382 (2001)
- [Kra68] Yu.S. Krasnov, T.G. Kmita, I.V. Ryzhikov, V.I. Pavlichenko, O.T. Sereev, Yu.M. Suleimanov, *Sov. Phys. Solid State (USA)*, vol. 8, 905 (1968)
- [Kra94] R. Krause-Rehberg, H. S. Leipner, A. Kupsch, A. Polity, T. Drost, *Phys. Rev. B*, vol. 49, 2385-2395, (1994)
- [Kra00] R. Krause-Rehberg, F. Börner, F. Redmann, *Appl. Phys. Lett.*, vol. 77, 3932-3934 (2000)

- [Kra01] R. Krause-Rehberg, F. Börner, F. Redmann, J. Gebauer, R. Kögler, R. Klie-
mann, W. Skorupa, W. Egger, G. Kögel, W. Triftshäuser, *Physica B*, vol.
308-310, 442 (2001)
- [KR99] R. Krause-Rehberg, H.S. Leipner, *Positron annihilation in semiconductors.*,
Springer-Verlag Berlin (1999)
- [Kuw75] H. Kuwabara, S. Yamada, *Phys. Status Solidi A (Germany)*, vol. 30, 739
(1975)
- [Kuw76] H. Kuwabara, K.Yamanaka, S. Yamada, *Phys. Status Solidi A (Germany)*,
vol.37, 157-161 (1976)
- [Led73] C. M. Lederer, V.S. Shirley, *Table of Isotops, John Wiley & Sons Inc., New
York*, 7 ed. (1973)
- [Lel55] J.A. Lely *Darstellung von Einkristallen von Siliziumkarbid und Beherrschung
von Art und Menge der eingebauten Verunreinigungen, Ber. Dt. Keram. Ges.*,
vol. 8, 229 (1955)
- [Lom65] G.A. Lomakina, *Sov. Phys. Solid State (USA)*, vol. 7, 475 (1965)
- [Lon70] N.N. Long, D.S. Nedzvetsskii, N.K. Prokofeva, M.B. Riefman, *Opt. Spectrosc.
(USA)* vol. 29, 388 (1970)
- [Lon71] N.N. Long, D.S. Nedzvetsskii, N.K. Prokofeva, M.B. Riefman, *Opt. Spectrosc.
(USA)* vol. 30, 165 (1971)
- [Lon73] N.N. Long, D.S. Nedzvetsskii, *Opt. Spectrosc. (USA)* vol. 35, 645 (1973)
- [Luc65] G. Lucovsky, *Solid State Communications 3*, 299 (1965)
- [Man81] M. Manninen, R.M. Nieminen, *Appl. Phys. A*, vol. 26, 93 (1981)
- [Mas68] Yu.P. Maslokovets, E.N. Mokhov, Yu.A. Vodakov, G.A.Lomakina, *Sov. Phys.
Solid State (USA)*, vol. 10, 634 (1968)
- [Mat73] H. Matsunami, T. Tanaka, *Conf. of Silicon Carbide (abstracts), Miami Beach
(USA) (University of South Carolina)*, 618 (1973)
- [McK48] W.A. McKinley Jr., H. Feshbach, *Phys. Review*, vol. 74, 1759 (1948)
- [Mot29] N.F. Mott, *Proc. Roy. Soc. A*, vol. 124, 426 (1929)
- [Myl96] U. Myler, R.D. Goldberg, A.P. Knights, D.W. Lawther, P.J. Simpson, *Appl.
Phys. Letters*, vol.69, 3333 (1996)
- [Pat72] L. Patrick, W. J. Choyke, *Phys. Rev. B*, vol.5, 3253 (1972)
- [Pav69] V.I. Pvlchenko, I.V. Ryzhikov, *Sov. Phys. Solid State (USA)*, vol. 10, 2977
(1969)
- [Pen00] G. Pensl, V.V. Afanasév, M. Bassler, T. Frank, M. Laube, M. Weidner, *Mat.
Science For.*, vol. 338, 831-836 (2000)

- [Pet00] K. Petters, J. Gebauer, F. Redmann, H.S. Leipner, R. Krause-Rehberg, *Materials Science Forum*, vol. 363-365, 111 (2000)
- [Pol97] A. Polity, F. Rudolf, C. Nagel, S. Eichler, R. Krause-Rehberg, *Phys. Rev. B*, vol. 55, 10467 (1997)
- [Pol98] A. Polity, F. Börner, S. Huth, S. Eichler, R. Krause-Rehberg, *Phys. Rev. B*, vol. 58, 10363 (1998)
- [Pus83] M.J. Puska, R.M. Nieminen, *Physica Scripta*, vol. T4, 79 (1983)
- [Pus90] M.J. Puska, C. Corbel, R. M. Nieminen, *Phys. Rev. B*, vol. 41, 9980 (1990)
- [Pur70] I.M. Putseladze, L.G. Khavtasi, *Sov. Phys. Solid State (USA)*, vol. 12, 1007 (1970)
- [Pus99] M.J. Puska, *Programm zur Berechnung theoretischer Positronenlebensdauern und e^+ Aufenthaltswahrscheinlichkeiten*, (1999)
- [Rue01] K. Rüschemschmidt, H. Bracht, M. Laube, N.A. Stolwijk, G. Pensl, *Physica B*, vol. 308-310, 734-737 (2001)
- [Saa89] K. Saarinen, P. Hautojärvi, R. Krause, *Phys. Rev B*, vol.39, 5287 (1989)
- [Sch90] J. Schneider et al, *Appl. Phys. A*, vol. 56, 1184-1186 (1990)
- [See74] A. Seeger, *The study of defects in crystals by positron annihilation Appl. Phys.*, vol. 4, 183-199 (1974)
- [Seg86] B. Segall, S.A. Alterovitz, E.J. HAugland, L.G. Matus, *Appl. Phys. Lett. (USA)*, vol. 49, 584 (1986)
- [Sic01] D. Siche, *Heraeus Ferienkurs*, 2001
- [Som96] B. Somieski, T. E. M. Staab, R. Krause-Rehberg, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A*, vol. 381, 128-140 (1996)
- [Spe95] P. Sperr, P. Willutzki, M.R. Maier, *Mat. Science Forum*, vol.175-178, 993 (1995)
- [Spe97] P. Sperr, G. Kögel, *Mat. Science Forum*, vol. 255-257, 109 (1997)
- [Sta01] T.E.M. Staab, L.M. Torpo, M.J. Puska, R.M. Nieminen, *Material Science Forum*, vol. 353, 533 (2001)
- [Sta01a] T.E.M. Staab, *Persönliche Mitteilungen*, (2001)
- [Sta99] T.E.M. Staab, *Helsinki University of Technology nicht veröffentlichte Ergebnisse*, (1999)
- [Sut89] W. Suttrop, G. Pensl, P. Lanig, *Full Meeting of the Electroch. Soc. (abstracts)*, nr. 494, 716 (1989)

- [Sut90] W. Suttrop, G. Pensl, P. Lanig, *Appl. Phys. A, Solids Surf. (Germany)*, vol. 51, 231-237 (1990)
- [Sut91] W. Suttrop, G. Pensl, P. Lanig, *Appl. Phys. A, (USA)*, vol. 51, 231 (1991)
- [Sut92] W. Suttrop, G. Pensl, W.J. Choyke, R. Stein, S. Leibenzeder, *J. Appl. Phys. (USA)* vol. 72, 3708 (1992)
- [Suz75] A. Suzuki, H. Matsunami, T. Tanaka, *Jpn. J. Appl. Phys. (Japan)*, vol. 14, 891 (1975)
- [Suz76] A. Suzuki, M. Ikeda, N. Nagao, H. Matsunami, T. Tanaka, *J. Appl. Phys. (USA)*, vol. 47, 4546 (1976)
- [Suz77] A. Suzuki, H. Matsunami, T. Tanaka, *J. Electrochem. Soc. (USA)*, vol. 124, 241 (1977)
- [Szp96] S. Szpala, P. Asoka-Kumar, B. Nielsen, J.P. Peng, S. Hayakawa, K.G. Lynn, H.-J. Gossmann, *Phys. Rev. B*, vol 54, 4722 (1996)
- [Tai74] Yu. M. Tairov, I.I. Khlebnikov, V.F. Tsvetkov, *Phys. Status Solidi (Germany)*, vol. 25, 349 (1974)
- [Taj82] Y. Tajima, W.D. Kingery, *Commun. Am. Ceram. Soc. (USA)*, vol. 65, C27 (1982)
- [Tor01] L. Torpo, M. Marlo, T.E.M. Staab, R.M. Nieminen, *Journal of Phys. Condensed Matter*, vol. 13, 6203-6231 (1991)
- [Tor02] L. Torpo, T.E.M. Staab, R.M. Nieminen, *Phys. Rev. B*, vol. 65, 5202 (2002)
- [Vai86] V.S. Vainer, V.A. Il'in, V.A. Karachinov, Yu.M. Tairov, *Sov. Phys.-Solid State (USA)*, vol. 28, 201-204 (1986)
- [Val83] S. Valkealahti, R.M. Nieminen, *Appl. Phys. A*, vol. 32, 95 (1983)
- [Val84] S. Valkealahti, R.M. Nieminen, *Appl. Phys. A*, vol. 35, 51 (1984)
- [Vee95] A. van Veen, H. Schut, M. Clement, J.M.M. de Nies, A. Kruseman, M.R. Ijpma, *Surf. Science*, vol. 85, 216 (1995)
- [Vod92] Y.A. Vodakov, E.N. Mokhov, M.G. Ramm, A.D. Roenkov, *Springer Proc. Phys. (Germany)*, vol. 56, 329-334 (1992)
- [Wei01] M. Weidner, T. Frank, G. Pensl, A. Kawasuso, H. Itoh, R. Krause-Rehberg, *Physica B*, vol. 308-310, 633 (2001)
- [Wil88] P. Willutzki, J. Strömer, G. Kögel, P. Sperr, D.T. Britton, R. Steindl, W. Triftshäuser, *Mat. Science Tech*, vol. 5, 1 (1988)
- [Yam74] S. Yamada, H. Kuwabara, *Proc 3rd Int. Conf. on Silicon Carbide Eds. R.C. Marshall, J.W. Faust Jr., C.E. Ryan, Miami Beach, Florida (University of South Carolina Press, Columbia)*, 305-312 (1974)

- [Yam87] M. Yamanaka, H. Daimon, E. Sakuma, S. Misawa, S. Yoshida, *J. Appl. Phys. (USA)*, vol. 61, 599 (1987)
- [Zan68] G. Zanmarchi, *J. Phys. Chem. Solids (UK)*, vol. 29, 1727 (1968)
- [Zha89] H. Zhang, G. Pensl, P. Glasow, *Ext. Abstr. Electrochem. Soc. (USA)*, vol. 89-2, 714 (1989)
- [Zub85] A.G. Zubatov, I.M. Zaritskii, S.N. Lukin, E.N. Mokhov, V.G. Stepanov, *Sov. Phys. Solid-State (USA)*, vol. 27, 197-201 (1985)
- [Zyw99] A. Zywietz, J. Furthmüller, F. Bechstedt, *Phys. Rev. B*, vol. 59, 15166 (1999)

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich Eides statt, dass ich die hier vorliegende Arbeit selbständig, und ohne Benutzung nicht angegebener Quellen und Hilfsmittel angefertigt habe. Daten und Fakten aus anderen Arbeiten sind als Zitate mit dem dazugehörigen Quellennachweis gekennzeichnet. Diese Arbeit existiert weder in gleicher noch ähnlicher Form im In- und Ausland.

Halle/Saale, den

Frank Redmann

Lebenslauf

Name: Frank Redmann
geb. am: 09.04.1973
Geburtsort: Wurzen
Familienstand: ledig
Adresse: Küchenbreite 8, 06862 Roßlau

1979-1987 Allgemeinbildende Polytechnische Oberschule
1987-1991 Erweiterte Oberschule (Philanthropinum Dessau)
1991 Abitur (Lessing-Medaille in Silber)
1991-1992 Hochschulstudium an der Universität in Hannover
Fachstudienrichtung Physik
1992-1993 Grundwehrdienst
1993-1999 Hochschulstudium an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
Fachstudienrichtung Physik
1999 Abschluss als Diplom Physiker
seit 1999 Arbeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter an der
Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

Danksagung

Im Rahmen eines vom Land Sachsen-Anhalt geförderten Projektes ermöglichte mir Priv.-Doz. Dr. R. Krause-Rehberg die Bearbeitung eines wissenschaftlichen Themas im Positronenlabor in Halle. Für die Betreuung der Arbeit und die stets kritischen Hilfen möchte ich ihm meinen Dank aussprechen.

Mein Dank gilt auch Dr. A. Kawasuso, der im Rahmen eines Humboldt-Stipendiums für ein Jahr ein Mitglied unseres Labors war. Von ihm gingen viele Impulse aus und er ermöglichte auch die Untersuchungen an den Bulk-Materialien, die er aus Japan zur Verfügung stellte. Für die Bestrahlung mit Elektronen, die in Japan stattfand, möchte ich mich auch bei seinem Kollegen Dr. H. Itoh bedanken.

Auf die Zusammenarbeit verschiedener Arbeitsgruppen habe ich im Verlauf der Arbeit mehrmals hingewiesen. Besonders hervorheben möchte ich aber die Arbeitsgruppe um Herrn Prof. W. Trifftshäuser. Dabei haben mich Dr. P. Sperr, Dr. G. Kögel und W. Egger in die Geheimnisse des Positronen-Lebensdauer-Strahlensystems eingeführt, und ich durfte an ersten Experimenten des Positronenmikroskopes teilnehmen. Für ihr Engagement meinen besonderen Dank.

Für die Implantationen möchte ich mich auch bei Dr. R. Kögler aus dem FZ-Rosendorf bedanken. Desweiteren gilt mein Dank der Arbeitsgruppe um Dr. Siche, der mir die Stickstoff-dotierten Siliziumkarbidkristalle zur Verfügung stellte.

Vergessen möchte ich auf keinen Fall die Spezialisten der DLTS in Erlangen. Auch hier besuchte ich ihre Fakultät mehrere Male und nahm an diversen Seminaren teil. Besonderen Dank gilt hierbei Dr. G. Pensl, der mir mit fruchtbaren Diskussionen immer wieder neue Anstoßpunkte für weitere Ideen gab und natürlich Dr. T. Frank und M. Weidner, welche die DLTS-Messungen an den Proben durchführten.

Die Ausheilungen der Proben nahmen einen Großteil meiner Arbeit ein, so kam ich nicht an kleinen Bastellarbeiten vorbei. Aus den kleinen Problemen wurden große und so stand ich öfter als mir lieb war vor unserer Werkstatt. Für ihre tatkräftige Hilfe und Unterstützung möchte ich mich bei H. Benkwitz, L. Büttner, S. Bölling, A. Busse, L. Hintzsche und G. Jacob bedanken.

Mein Dank gilt auch allen Mitarbeitern des Positronenlabors: K. Petters, Dr. F. Börner, Dr. S. Eichler, Dr. J. Gebauer, Dr. T.E.M. Staab, Dr. C.G. Hübner, Dr. A. Massoud, V. Bondarenko und natürlich Dr. A. Polity.

Die Arbeit wäre ohne das entsprechende Umfeld nicht möglich gewesen, so dass ich mich ganz herzlich bei meiner Familie für deren Rückhalt und Sicherheit bedanke.