

H. S. LEIPNER:

Wechselwirkungen zwischen Versetzungen und Punktdefekten in Halbleitern.
Habilitation, Martin-Luther-Universität Halle–Wittenberg 2001.



Mathematisch-Naturwissenschaftlich-Technische Fakultät
der Martin-Luther-Universität Halle–Wittenberg



Habilitationsschrift

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

Wechselwirkungen zwischen Versetzungen und Punktdefekten in Halbleitern

vorgelegt von

Dr. rer. nat. Hartmut S. Leipner
geboren am 6. Oktober 1958 in Cottbus

Gutachter:

1. Prof. H.-R. Höche, Halle
2. Prof. K. Maier, Bonn
3. Prof. W. Schröter, Göttingen

Halle, 28. Mai 2001

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|------------|
| Symbol- und Abkürzungsverzeichnis | iii |
| 1 Einführung | 1 |
| 2 Grundlagen von Versetzungen in Halbleitern | 5 |
| 2.1 Versetzungstopologie | 5 |
| 2.2 Defekte auf der Versetzungslinie | 8 |
| 2.3 Elektrische Eigenschaften von Versetzungen | 10 |
| 2.3.1 Flache und tiefe versetzungskorrelierte Energieniveaus | 10 |
| 2.3.2 Ortsauflösende Spektroskopie von Versetzungen | 14 |
| 3 Plastische Deformation und Versetzungsdynamik | 21 |
| 3.1 Versetzungsgeschwindigkeit und Verformungsparameter | 21 |
| 3.2 Deformationsexperimente | 27 |
| 4 Spektroskopie und Mikroskopie verformungsinduzierter Defekte | 35 |
| 4.1 Grundlagen des Positroneneinfangs in Halbleitern | 35 |
| 4.2 Positronenlebensdauerspektroskopie | 39 |
| 4.3 Wechselwirkung von Positronen mit Versetzungen | 43 |
| 4.4 Positronenannihilationsmessungen an deformationsinduzierten Defekten | 46 |
| 4.4.1 Punktdefekte und Punktdefektagglomerate in Element- und Verbindungshalbleitern | 46 |
| 4.4.2 Bestimmung von Defektdichten aus Positronenlebensdauermessungen | 54 |
| 4.4.3 Positronenmessungen an Versetzungen | 57 |
| 4.4.4 Deformationsexperimente bei Raumtemperatur | 60 |
| 4.5 Optische Spektroskopie und ESR-Untersuchungen von Defekten in deformiertem GaAs | 66 |
| 4.6 Elektronenmikroskopie von Versetzungen | 73 |
| 5 Diskussion von Modellen der Punktdefektgeneration | 79 |
| 5.1 Elementarmechanismen | 79 |
| 5.2 Punktdefektbilanz in deformierten Materialien | 82 |
| 6 Aggregation von Fremdatomen an Versetzungen | 87 |
| 6.1 Experimente zur Wechselwirkung von Versetzungen und Fremdatomen | 87 |
| 6.2 Diffusion im Versetzungsbereich | 93 |
| 7 Zusammenfassung | 97 |

Symbol- und Abkürzungsverzeichnis

| | |
|--|---|
| A | Fläche |
| A_1 | optische Verlustfunktion |
| a | Gitterkonstante |
| a_s | Ableitung im Gleitsystem |
| A_{el} | Parameter der elastischen Wechselwirkung |
| A_W | Vorfaktor in Funktion $\varepsilon = f(\tau_{III})$ |
| B | Konstante |
| $\mathbf{b}, \mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ | Burgersvektor |
| C | Konstante |
| c | Lichtgeschwindigkeit |
| c^* | theoretische Profildfunktion des Katodolumineszenzkontrastes |
| c_0 | Ausgangsdichte |
| c_A | Konzentration positiver Akzeptoren |
| c_{EBIC} | EBIC-Defektkontrast |
| c_j | thermische Konzentration von Sprüngen |
| c_r^* | theoretische Profildfunktion des CL-Kontrastes für die strahlende Rekombination |
| c_{CL} | Katodolumineszenz-Defektkontrast |
| CCR | <i>charge-controlled recombination rate</i> |
| c_d | Defektdichte |
| CL | Katodolumineszenz |
| $c_{n_i}, c_{X^i}^{eq}$ | Gleichgewichtsdichte des Defekts X bei der intrinsischen Ladungsträgerdichte n_i , Gleichgewichtsdichte des Defekts X im Ladungszustand i |
| c_V | Leerstellenkonzentration |
| c_V^a | Annihilationsrate von Leerstellen |
| c_V^f | Bildungsrate von Leerstellen |
| c_x, c_x^m, c_x^p | gemessene Konzentration des Bestandteils x , Konzentration von x in der Matrix, Konzentration von x im Partikel |
| c_X | Dichte des Fremdatoms X |
| Cz | Czochralski |
| d | Aufspaltungsweite von Versetzungen |
| D_+ | Diffusionskonstante von Positronen |
| D_0 | Vorfaktor des Selbstdiffusionskoeffizienten |
| D_0^V | Vorfaktor des Diffusionskoeffizienten der Leerstellen |
| D_{iCu} | Diffusionskonstante von Kupferzwischengitteratomen |
| D_{iGa} | Diffusionskonstante von Galliumatomen im Zwischengitter |
| D_k | Diffusionskonstante der Kinken |
| DLTS | <i>deep level transient spectroscopy</i> |
| DP | <i>double period</i> |
| D_{sd} | Selbstdiffusionskoeffizient |
| DSL | <i>diluted Sirtl-like</i> |

| | |
|--|--|
| D_V | Diffusionskonstante der Leerstellen |
| D_X^{eff} | effektiver Diffusionskoeffizient des Fremdatoms X |
| d | Ausdehnung eines Gleithindernisses |
| d_0 | Gleichgewichtsaufspaltung |
| e | Elementarladung |
| E_b | Positronenbindungsenergie |
| EBIC | <i>electron-beam induced current</i> |
| E_c | Energie der Leitungsbandkante |
| EDX | energiedispersive Röntgenmikroanalyse |
| EELS | Elektronenenergieverlustspektroskopie |
| E_F | Ferminiveau |
| E_f | Leerstellenbildungsenergie |
| E_g | Bandlücke |
| E_k | Kinkenbildungsenergie |
| E_m | Migrationsenergie der Leerstellen |
| E_{max} | maximale Positronenenergie |
| E_q | effektive Aktivierungsenergie des Quergleitens |
| E_q^0 | maximale Quergleitenergie |
| ESR | Elektronenspinresonanz |
| $E_{\text{tot}}^{\text{GaAs}}, E_{\text{tot}}^{\text{Si}}$ | Gesamtenergie der Superzelle für GaAs, Si |
| E_v | Energie der Valenzbandkante |
| F | Kraft |
| f | Orientierungsfaktor |
| F' | Größe in Drift-Diffusions-Gleichung |
| F_k | freie Kinkenbildungsenergie |
| FTIR | <i>Fourier transformation infrared</i> |
| FZ | <i>float zone</i> |
| G | Schubmodul |
| \mathbf{g} | Beugungsvektor |
| H | Bildungsenthalpie |
| $h, \hbar = h/2\pi$ | Plancksches Wirkungsquantum |
| h_2 | Periode des sekundären Peierlspotentials |
| HB | <i>horizontal Bridgman</i> |
| h_j | Sprunghöhe |
| h_p | Periode des Peierlspotentials |
| HREM | hochauflösende Transmissionselektronenmikroskopie |
| I | gemessener elektronenstrahlinduzierter Strom im Defektgebiet |
| i | Zählindex |
| I_0 | elektronenstrahlinduzierter Strom im perfekten Kristall außerhalb des Defektes |
| I_0^{CL} | Katodolumineszenzsignal im perfekten Kristall |
| I_b | Strahlstrom |
| I_{CL} | Katodolumineszenzsignal |
| J | Kinkensprungfrequenz |
| j | Zählindex |
| $J_{\text{CL}}(z)$ | Katodolumineszenzsignal für eine Punktquelle in der Tiefe z |
| I_j | Intensität der j ten Komponente im Zerfallsspektrum |
| K | Reaktionskonstante |
| k | Zahl von Positronenfallen |

| | |
|--------------------------------|---|
| k_+ | thermische Positronenwellenzahl |
| k_B | Boltzmannkonstante |
| L | Diffusionslänge |
| l | Abstand zwischen Leerstellensenken |
| L_+ | Diffusionslänge von Positronen |
| LC | Komplex aus linker Kinke und Rekonstruktionsdefekt |
| L_d | Länge des Versetzungssegments |
| l_{tot} | gesamter Gleitweg |
| LEC | <i>liquid encapsulated Czochralski</i> |
| LK | linke Kinke |
| m | Spannungsexponent |
| m_+ | effektive Positronenmasse |
| M_{ift} | Matrixelement |
| m_S | Schmidfaktor |
| N | Zerfallsspektrum |
| n | Spannungsexponent, Dichte freier Elektronen |
| n_- | Elektronendichte |
| n_+ | Positronendichte |
| $n^{\text{As}}, n^{\text{Ga}}$ | Zahl von As-, Ga-Atomen |
| N_0 | Gesamtzahl der Positronen |
| N_a | Akzeptordichte |
| N_{at} | Zahl der Atome pro Volumeneinheit |
| N_d | Donatordichte |
| n_e | Dichte freier Elektronen |
| $N_{\text{EL2(b)}}$ | Dichte des bleichbaren EL2 |
| n_i | intrinsische Ladungsträgerdichte |
| N_j | Zahl der Positronen im Zustand j |
| N_{jd} | Zahl der emittierten Punktdefekte beim Schneiden von Versetzungen |
| p | Dichte der Löcher |
| \bar{P} | Implantationsprofil unmoderierter Positronen |
| P_i | Positronenbesetzungswahrscheinlichkeit |
| PL | Photolumineszenz |
| POLIS | Positronenlebensdauerspektroskopie |
| p_r | Reaktionsrate |
| Ps | Positronium |
| Q | spektraler Quantenwirkungsgrad |
| q | Versetzungslinienladung |
| \bar{Q} | effektiver Quantenwirkungsgrad |
| Q_{sd} | Aktivierungsenergie der Selbstdiffusion |
| R | Radius des Readzylinders |
| r | radialer Abstand |
| \mathbf{r} | Ortsvektor |
| r_0 | klassischer Elektronenradius |
| $r_a, \Delta r_a$ | Atomradius, Änderung des Atomradius |
| R_b | Eindringtiefe des Elektronenstrahls |
| RC | Komplex aus rechter Kinke und Rekonstruktionsdefekt |
| D | Rekonstruktionsdefekt |

| | |
|----------------|--|
| R_d | äußerer Abschneideradius |
| r_d | Defektradius, Abschneideradius |
| RK | rechte Kinke |
| S | Entropie, S -Parameter der Annihilationslinie |
| s | Reaktionsordnung |
| S_b | S -Parameter für defektfreies Volumen |
| SCC-DFTB | <i>self-consistent charge density-functional based tight binding</i> |
| S_d | charakteristischer S -Parameter für den Defekt d |
| S_{\max} | Maximalwert des S -Parameters |
| SEM | Rasterelektronenmikroskop |
| SI | semi-isolierend |
| SP | <i>single period</i> |
| SRH | Shockley–Read–Hall |
| ss | <i>Shuffle set</i> |
| STEM | Rastertransmissionselektronenmikroskop |
| T | Temperatur |
| t | Zeit |
| T_m | Schmelztemperatur |
| TEM | Transmissionselektronenmikroskopie |
| U | Aktivierungsenergie der Versetzungsbewegung |
| u | Gleitrichtung |
| U_s | Aktivierungsenergie für Schraubenversetzungen |
| U_k | innere Energie einer Doppelkinke |
| U_α | Aktivierungsenergie für α -Versetzungen |
| V | Aktivierungsvolumen |
| v | Versetzungsgeschwindigkeit |
| V_+ | Positronenpotential |
| v_+ | thermische Positronengeschwindigkeit |
| v_j | Geschwindigkeit von Sprüngen entlang der Versetzung |
| v_k | Kinkengeschwindigkeit |
| V_p, V_t | Volumen des Partikels, gesamtes angeregtes Volumen |
| v_s | Geschwindigkeit von Schraubenversetzungen |
| v_α | Geschwindigkeit von α -Versetzungen |
| v_β | Geschwindigkeit von β -Versetzungen |
| V_{sc} | Bandverbiegung |
| W | W -Parameter |
| W_b | W -Parameter für das defektfreie Volumen |
| W_m | Kinkenmigrationsenergie |
| W_{\max} | Maximalwert des W -Parameters |
| y | Koordinate |
| Z | Ordnungszahl |
| z | Koordinate, Tiefe |
| α | Beweglichkeitsverhältnis, Absorptionskonstante |
| $\bar{\alpha}$ | effektive Absorptionskonstante |
| α_+ | Positronenabsorptionskoeffizient |
| α_r | Reaktionsparameter |
| α_s | Temperaturkonstante der Gibbschen Energie der Versetzungsbewegung |
| β | Größenfaktor der Leerstelle |

| | |
|---|--|
| γ | Stapelfehlerenergie |
| γ_+ | <i>Enhancement</i> -Faktor |
| γ_d | Defektstärke |
| Δc | Überschussleerstellenkonzentration |
| ΔG | Änderung der Gibbschen Energie bei der Überwindung von Gleithindernissen |
| ΔG_0 | Aktivierungsenergie der Versetzungsgeschwindigkeit ohne äußere Spannung |
| Δl | punktdefekterzeugender Gleitweg |
| $\Delta\alpha$ | Differenz der Absorptionskoeffizienten |
| δ | Entweichrate aus flachen Positronenzuständen |
| δ_+ | Temperaturkonstante des Trappingkoeffizienten |
| δ_s | Anteil von leerstellenerzeugenden Sprüngen |
| ε | Dehnung |
| $\dot{\varepsilon}$ | Verformungsrate |
| ε_0 | absolute Dielektrizitätskonstante |
| $\dot{\varepsilon}_0$ | Vorfaktor der Verformungsrate |
| $\varepsilon_{\text{elast}}$ | elastische Dehnung |
| ε_i | Elektronenenergie |
| $\varepsilon_i, \varepsilon_f, \varepsilon_t$ | Energie des Ausgangszustands, des Endzustands und des Zustands des eingefangenen Positrons |
| ε_{pl} | plastische Dehnung |
| $\dot{\varepsilon}_{\text{pl}}$ | plastische Dehnungsrate |
| $\dot{\varepsilon}_{\text{elast}}$ | elastische Dehnungsrate |
| ε_r | relative Dielektrizitätskonstante |
| ζ | Defektladung |
| θ | Winkel |
| θ_c | Grenzwinkel der Totalreflektion |
| ϑ | Übergangsrate zwischen flachen und tiefen Positronenniveaus |
| κ | Positroneneinfangrate |
| $\kappa_{d1}, \kappa_{d2}, \kappa_{d3}$ | Positroneneinfangrate in Defekte d_1, d_2, d_3 |
| κ_R | Positroneneinfangrate in Rydbergzustände |
| Λ | mittlerer Abstand zwischen Gleithindernissen |
| λ | Defektstärke |
| $\Lambda_0, \Lambda_1, \Lambda_2$ | Hilfsgrößen der Spektrenzerlegung |
| λ_+ | Annihilationsrate |
| λ_a | Ausheilrate |
| λ_b | Annihilationsrate im defektfreien Volumen |
| λ_d | Annihilationsrate im Defekt |
| λ_{eff} | effektive Annihilationsrate |
| λ_j | Abstand der Sprünge auf der Versetzung |
| λ_j | Zerfallskonstante der j ten Komponente im Zerfallsspektrum |
| λ_k | mittlere freie Weglänge einer Kinke |
| λ_r | Defektstärke der strahlenden Rekombination |
| μ | Trappingkoeffizient |
| μ' | dichtebezogener Trappingkoeffizient |
| μ_0 | temperaturunabhängiger Trappingkoeffizient |
| $\mu_b^{\text{GaAs}}, \mu_b^{\text{Si}}$ | chemisches Potential eines Ga–As-Paares bzw. von Si |
| μ_{dl} | diffusionslimitierter Trappingkoeffizient |
| μ_ℓ | Beweglichkeit der führenden Partialversetzung |

| | |
|---|---|
| μ'_{st} | dichtebezogener Trappingkoeffizient flacher Positronenfallen |
| μ_t | Beweglichkeit der nachfolgenden Partialversetzung |
| μ_{tl} | übergangslimitierter Trappingkoeffizient |
| μ_v | Trappingkoeffizient einer Monovakanz |
| ν | Poissonkonstante, Photonenfrequenz |
| ν_D | Debyefrequenz |
| Ξ_0 | Hilfsgröße der Spektrenzerlegung |
| ξ | Effektivität der Versetzungen als Leerstellensenke |
| ξ_+ | Positronenübergangsrate |
| ξ_1, ξ_2 | Versetzungslinienvektor |
| ρ | Dichte |
| ρ_d | Versetzungsdichte |
| ρ_f, ρ_f^j | Waldversetzungsdichte, Dichte punktdefekterzeugender Waldversetzungen |
| ρ_m, ρ_m^j | Dichte beweglicher Versetzungen, Dichte beweglicher, punktdefekterzeugender Versetzungen |
| σ_+ | Positroneneinfangquerschnitt |
| σ_d | Querschnitt des Versetzungszyllinders mit geänderter Ladungsträgerlebensdauer |
| σ_d^r | Querschnitt des Versetzungszyllinders mit geänderter strahlender Ladungsträgerlebensdauer |
| τ | totale Minoritätsladungsträgerlebensdauer im perfekten Kristall |
| τ' | totale Minoritätsladungsträgerlebensdauer im Defektbereich |
| $\bar{\tau}$ | mittlere Positronenlebensdauer |
| τ_{III} | Schubspannung beim Einsatz vom Bereich III der Spannungs–Dehnungs-Kurve |
| τ_b | Positronenlebensdauer im defektfreien Volumen |
| τ_c | kritische Schubspannung |
| $\tau_d, \tau_{d1}, \tau_{d2}, \tau_{d3}$ | defektspezifische Positronenlebensdauer |
| τ_{eff} | effektive Spannung |
| τ_i | innere Spannung |
| τ_j | jte Positronenlebensdauerkomponente |
| τ_{ly} | untere Fließspannung |
| τ_m | Lebensdauerermischkomponente |
| τ_{nr} | Lebensdauer der nichtstrahlenden Rekombination |
| τ_q | kritische Quergleitspannung |
| τ_r | Lebensdauer der strahlenden Rekombination |
| τ'_r | Lebensdauer der strahlenden Rekombination im Defektbereich |
| τ_s | wirksame Schubspannung im Gleitsystem |
| τ_T | Trescaspannung |
| τ_0 | Fließspannung bei 0 K (Peierlsspannung) |
| ϕ | Versetzungspotential |
| φ | elastisches Wechselwirkungspotential |
| χ | Anteil der Leerstellenbildung an der gesamten Verformungsenergie |
| ψ_i^- | Elektronenwellenfunktion |
| ψ_i^+ | Positronenwellenfunktion |
| Ω | Atomvolumen |
| $\Omega_{GaAs}, \Omega_{Si}$ | Bildungsenergie von Leerstellenagglomeraten in GaAs, Si |

Abbildungsverzeichnis

| | | |
|------|---|----|
| 2.1 | Konstruktion einer 60° -Versetzung | 5 |
| 2.2 | Aufspaltung einer vollständigen 60° -Versetzung | 6 |
| 2.3 | Aufspaltungsweite von Versetzungen | 7 |
| 2.4 | Kernstruktur von Partialversetzungen | 8 |
| 2.5 | Doppelkinke auf der 30° -Partialversetzung | 9 |
| 2.6 | Leerstelle in einer 30° -Partialversetzung | 10 |
| 2.7 | Absorptionskante in plastisch deformiertem GaAs | 10 |
| 2.8 | DSL-Ätzen von GaAs | 14 |
| 2.9 | Versetzungsätzen in GaAs | 15 |
| 2.10 | Volumenrekombinationsmodell | 16 |
| 2.11 | Versetzungslumineszenz in CdTe | 19 |
| | | |
| 3.1 | Kristallorientierung im Kompressionsexperiment | 21 |
| 3.2 | Spannungs–Dehnungs-Kurven | 27 |
| 3.3 | Fließspannung als Funktion der Verformungsrate und der Temperatur für GaAs:Te | 28 |
| 3.4 | Fließspannung als Funktion der Verformungsrate und der Temperatur für undotiertes GaAs | 29 |
| 3.5 | Spannungs–Dehnungs-Kurven von Si | 30 |
| 3.6 | Relaxationsversuche | 31 |
| 3.7 | Aktivierungsvolumen und Aktivierungsenergie | 32 |
| | | |
| 4.1 | Positronenwellenfunktion in GaAs | 36 |
| 4.2 | Positronenpotential von Defekten in Halbleitern | 37 |
| 4.3 | Empfindlichkeitsbereich der Positronenlebensdauerspektroskopie | 41 |
| 4.4 | Lebensdauerspektren von deformiertem Si | 42 |
| 4.5 | Versetzung als kombinierte Positronenfalle | 44 |
| 4.6 | Positroneneinfang in Versetzungen | 45 |
| 4.7 | Mittlere Positronenlebensdauer als Funktion der Temperatur in deformiertem GaAs | 47 |
| 4.8 | Positronenlebensdauer in undotiertem GaAs nach Deformation und Nachtemperung | 47 |
| 4.9 | Isochrone Ausheilung von deformiertem GaAs | 48 |
| 4.10 | Struktur unrelaxierter Leerstellencluster in GaAs | 49 |
| 4.11 | Energie- und Positronenlebensdauerrechnungen für Leerstellencluster in GaAs | 50 |
| 4.12 | Energie- und Positronenlebensdauerrechnungen für Leerstellencluster in Si | 51 |
| 4.13 | Leerstellencluster in Si | 52 |
| 4.14 | Positronenlebensdauermessungen in plastisch deformiertem GaAs | 54 |
| 4.15 | Defektdichten als Funktion des Verformungsgrades | 55 |
| 4.16 | Defektdichten für verschiedene Deformationsachsen | 56 |
| 4.17 | Leerstellendichte als Funktion der Verformungsrate | 56 |
| 4.18 | Leerstellendichte als Funktion der Temperatur | 58 |
| 4.19 | Mittlere Positronenlebensdauer in GaAs deformiert mit unterschiedlicher Verformungsrate | 59 |
| 4.20 | Positroneneinfangrate in Leerstellen als Funktion der Versetzungsdichte | 60 |
| 4.21 | Durch Schleifen induzierte Versetzungen in einem GaAs-Wafer | 61 |
| 4.22 | Versetzungsstruktur an einem Indentereindruck | 62 |
| 4.23 | Versetzungen in gesägten GaAs-Wafern | 63 |
| 4.24 | Positronenlebensdauer für einen GaAs-Wafer nach dem Sägen | 64 |
| 4.25 | Ausheilung der durch Sägen von GaAs-Wafern induzierten Defekte | 65 |
| 4.26 | Versetzungsausbreitung beim <i>in-situ</i> -Heizen eines GaAs-Wafers | 65 |

| | |
|---|----|
| 4.27 FTIR-Spektren von deformiertem GaAs | 66 |
| 4.28 Ausheilverhalten der 0,99 eV-Absorptionsbande | 67 |
| 4.29 IR-Mikroskopie von deformiertem GaAs | 68 |
| 4.30 Transienteneffekte im Absorptionsspektrum von deformiertem GaAs | 69 |
| 4.31 Mittlere Positronenlebensdauer von deformiertem GaAs als Funktion der Proben- temperatur. | 69 |
| 4.32 FTIR-Spektren von deformiertem GaAs | 70 |
| 4.33 Abhängigkeit der EL2-Dichte vom Verformungsgrad | 71 |
| 4.34 ESR-Spektrum des Ga-Antisites | 71 |
| 4.35 TEM von plastisch deformiertem Si | 72 |
| 4.36 TEM von Versetzungen in deformiertem GaAs | 73 |
| 4.37 Deformationsgrad | 74 |
| 4.38 Versetzungsstruktur nach Temperung | 74 |
| 4.39 Versetzungsdipole und prismatische Versetzungsschleifen | 75 |
| 4.40 HREM-Aufnahme eines Versetzungsdipols in Si | 76 |
| 4.41 Versetzungsstrukturen in deformiertem GaAs | 77 |
| | |
| 5.1 Schneiden von Versetzungen | 80 |
| 5.2 Schema des <i>Jog draggings</i> | 80 |
| 5.3 Struktur eines aufgespaltenen Versetzungssprungs | 81 |
| 5.4 Überschussleerstellenkonzentration in Abhängigkeit von der Deformationstemperatur | 84 |
| | |
| 6.1 Versetzungsschleifen an einem Ritz | 88 |
| 6.2 Katodolumineszenzuntersuchungen an kupferdekorierten Versetzungen | 89 |
| 6.3 Ausscheidungsbildung auf Versetzungen | 90 |
| 6.4 Defektstrukturen in kupferdiffundiertem GaAs nach langsamer Abkühlung | 90 |
| 6.5 Zusammensetzung der Ausscheidungen | 91 |
| 6.6 Klettereffekte an Versetzungen mit Ausscheidungen | 92 |
| 6.7 Aggregat einer Cu-reichen Ausscheidung und eines Voids in GaAs | 94 |
| 6.8 Cottrellatmosphäre einer 60°-Versetzung in GaAs | 95 |
| 6.9 Simulation der Nichtgleichgewichts-atmosphäre an Versetzungen bei Ausscheidungsbildung | 96 |
| | |
| 7.1 Schema der Produktion von Leerstellenagglomeraten an Sprüngen | 98 |

Tabellenverzeichnis

| | | |
|-----|--|----|
| 3.1 | Gleitsysteme und Schmidfaktoren m_s im fcc-Gitter bei einer [213]-Kompressionsachse. Der erste Buchstabe bei der Kennzeichnung des Gleitsystems gibt die aktivierte Gleitebene*, beide Buchstaben die Schnittlinie zweier Gleitebenen, also die Gleitrichtung an. Das Hauptgleitsystem ist PQ; der Schmidfaktor ist Null für die Gleitebene Q. | 22 |
| 3.2 | Experimentell bestimmte Parameter der Versetzungsgeschwindigkeit (Gl. 3.2) in undotiertem Si, GaAs und InP [254]. Die letzte Spalte gibt den Temperaturbereich an, in dem die Versetzungsgeschwindigkeit gemessen wurde (T_m Schmelztemperatur). | 23 |
| 3.3 | Parameter der Verformungskurve an der unteren Streckgrenze in Beziehung zu Selbstdiffusionsdaten verschiedener Halbleiter | 33 |

1 Einführung

Gitterbaufehler sind in Halbleitermaterialien aufgrund ihres entscheidenden Einflusses auf die Eigenschaften und die Funktion von Bauelementen von permanentem Interesse. Störungen im Kristallgitter werden durch die zunehmende Miniaturisierung, durch Herstellung ultradünner Schichten oder Bauelementestrukturen im Submikrometerbereich immer wichtiger. Aufgrund der extremen Empfindlichkeit der Leitfähigkeit auf Verunreinigungen oder strukturelle Defekte wurden Halbleiter in den frühesten Untersuchungen als Stoffklasse mit nichtreproduzierbaren Eigenschaften angesehen. Heute stellen sie die reinsten und wohldefiniertesten Materialien dar, die überhaupt hergestellt werden.

Kristallbaufehler kann man in null- bis dreidimensionale Defekte einteilen. Nulldimensionale Defekte sind von atomarer Ausdehnung (Punktdefekte) und ausschlaggebend für elektrische und optische Halbleitereigenschaften. Die gezielte Dotierung mit Fremdatomen erlaubt die genaue Kontrolle der elektrischen Eigenschaften wie Ladungsträgerkonzentration und Dotierung. Es ist klar geworden, dass Eigendefekte wie Leerstellen und Zwischengitteratome wichtige Materialeigenschaften kontrollieren. Das sind z. B. die Diffusion von Fremdatomen [259] oder die Stöchiometrieabweichung von Verbindungshalbleitern [104]. Eigendefekte können einen wichtigen Einfluss auf die Konzentration von freien Ladungsträgern haben. So bestimmt der As_{Ga} -Antisite als EL2-Defekt die semiisolierenden Eigenschaften von GaAs-Substraten [205]. In n-leitendem GaAs wird eine Kompensation der Konzentration freier Elektronen beobachtet, der u. a. auf die Bildung von Defektkomplexen zwischen Dotieratomen und Leerstellen zurückgeführt wird [94].

Versetzungen als linienartige Störungen der Kristallperfektion stehen im unmittelbaren Zusammenhang zu den mechanischen Kristalleigenschaften. Darüberhinaus ist weitgehend akzeptiert, dass Versetzungen entscheidend die Ausbeute, Leistungsdaten, Zuverlässigkeit und die Degradation von Halbleiterbauelementen beeinflussen [88, 154, 155]. In Halbleitern erweisen sie sich als komplizierte, elektrische aktive Defekte. Der Charakter ihrer elektrischen Wirksamkeit ist in Bezug auf die atomare Struktur bis heute wenig verstanden. Die Hauptschwierigkeit dabei ist, zwischen den Eigenschaften der ungestörten (regulären) Versetzungslinie und Punktdefekten im Versetzungskern bzw. im Spannungsfeld zu unterscheiden. Selbst wenn es gelingt, Versetzungen ohne Kontaminationen mit Fremdatomen zu charakterisieren, sind sie niemals völlig frei von intrinsischen Defekten auf der Versetzungslinie wie Kinken, Sprünge, angelagerte Leerstellen usw.

Halbleitermaterialien werden entweder als Wafer oder in Form dünner, epitaktischer Schichten eingesetzt. Beim Wachstum, das weitab vom thermodynamischen Gleichgewicht erfolgen kann, spielen Prozesse der Versetzungsgeneration eine wichtige Rolle. Die grundsätzlichen Probleme von heteroepitaktischen Schichten sind zum Großteil mit der Bildung von Anpassungsversetzungen, die die unterschiedlichen Gitterkonstanten zwischen Substrat und Schicht ausgleichen, oder dem dreidimensionalen Schichtwachstum verbunden [93]. Heterogrenzflächen und die Strukturierung von Bauelementen sind Quelle von Gitterdefekten mit komplexen kristallographischen, sowie elektrischen und optischen Eigenschaften. Gerade mit dem Aufkommen neuer Materialsysteme in der Mikro- und Optoelektronik wie z. B. SiC oder GaN [171, 197], gewinnen Strategien zur Beherrschung von ausgedehnten Defekten in epitaktischen Systemen wieder verstärkt an Bedeutung.

Die Existenz von Versetzungen erlaubte es, die Diskrepanz zwischen theoretischer Schubfestigkeit und tatsächlicher Verformbarkeit zu erklären. Unabhängig voneinander erkannten TAY-

LOR, OROWAN und POLANYI im Jahre 1934 [260, 182, 193], dass die Abgleitung von Kristallbereichen durch die Bewegung von Versetzungen erfolgt. Die Vorstellungen zu den mikroskopischen Mechanismen der Versetzungsdynamik wurden in den folgenden Jahrzehnten stetig weiterentwickelt. Zur Beschreibung der Versetzungsbewegung postulierte PEIERLS 1940 [187] ein periodisches Potential. Bei der Verschiebung der Versetzungslinie von einem Minimum dieses Potentials in das nächste ist eine bestimmte kritische Energie notwendig. Diese Peierlsbarriere wird von der Versetzung nicht als Ganzes überwunden, sondern abschnittsweise durch Bildung von Kinken. Der Zusammenhang zwischen der Kinkenbildung und -bewegung und der Gleitgeschwindigkeit von Versetzungen und die daraus resultierende Verformungsgeschwindigkeit kann empirisch mit dem ALEXANDER–HAASEN-Modell [6] beschrieben werden. Eine andere Modellvorstellung von SCHOECK [218] beschreibt die Versetzungsbewegung als ein Prozess, der von der (thermischen) Überwindung von Gleithindernissen wie Agglomerationen von Punktfehlern, Ausscheidungen etc. dominiert wird. In hochreinen Einkristallen, in denen keine Fremdatome oder Ausscheidungen in signifikanten Konzentrationen auftreten, können nur Eigenpunktdefekte wie Leerstellen oder Zwischengitteratome neben den Versetzungen selbst die Versetzungsbewegung beeinflussen. Obwohl ein konstantes Verhältnis der Aktivierungsenergie der Versetzungsgeschwindigkeit zur Selbstdiffusionsenergie für verschiedene kovalente Materialien gefunden wurde [234], ist das Modell von Alexander und Haasen nicht in der Lage, den Einfluss von Punktdefekten auf die plastische Verformung zu beschreiben. Das Schoeckmodell erlaubt eine Erweiterung insofern, als dass Punktdefekte einbezogen werden können, die als Gleithindernisse von der Versetzung hinterhergeschleppt werden. MOTT [169] schlug als erster vor, dass die durch Schneiden von Versetzungen entstandenen Sprünge solche Hindernisse darstellen können. Er entwickelte die Vorstellung, wie sich eine Schraubenversetzung, die Sprünge enthält, unter Emission oder Absorption von Leerstellen/Zwischengitteratomen bewegen kann (Mechanismus des *Jog dragging*). SEITZ [228] interpretierte Messungen von GYULAI und HARTLY [64] bzw. STEPANOV [250] zur elektrischen Leitfähigkeit von plastisch deformierten NaCl-Kristallen mit der Leerstellengeneration infolge der Versetzungsbewegung. In den vergangenen Jahren wurde in Ionenkristallen, Metallen und Halbleitern mit den verschiedensten experimentellen Methoden die Erzeugung von Punktdefekten durch plastische Deformation nachgewiesen. Daneben wurden Modelle zur Punktdefektgeneration aufgestellt, mit dem primären Ziel, den Einfluss der Bildung von Punktdefekten auf die Versetzungsbewegung quantitativ zu beschreiben [13, 40, 164, 167, 282, 283].

Thema der vorliegenden Arbeit ist der Einfluss von Versetzungen auf die Punktdefektpopulation in Halbleitereinkristallen. Zum einen wird die Punktdefektgeneration während der plastischen Verformung von Element- und Verbindungshalbleitern untersucht, zum anderen geht es um die Beeinflussung der Verteilung von Fremdatomen durch die Anwesenheit von Versetzungen. Ein Zusammenhang wird hergestellt zwischen dem Mechanismus der Versetzungsbewegung und der Bildung von strukturellen Punktdefekten wie Leerstellen, Zwischengitteratomen und *Antisite*-Defekten. Die Analyse verschiedener Bereiche der Verformungskurve kann mit dominierenden Prozessen der Versetzungsbewegung wie Versetzungsschneiden, *Jog dragging*, Quergleiten und Klettern in Beziehung gebracht werden. Verschiedene Typen emittierter Punktdefekte wurden in Abhängigkeit von den Deformationsparametern spektroskopisch erfasst. Gemessene Spannungs-Dehnungs-Kurven wurden mit empirischen Modellen ausgewertet, um die Aktivierungsparameter der Versetzungsbewegung im Zusammenhang mit der Punktdefektgeneration zu bestimmen. Unter Einbeziehung der Ergebnisse der spektroskopischen Untersuchungen zum Punktdefektnachweis können damit theoretische Vorstellungen zur Generation von Punktdefekten verifiziert werden. Das Wissen über die plastische Verformung, das bezüglich der makroskopisch messbaren Größen und bezüglich der Analyse der Substruktur ausgedehnter Defekte wie Versetzungen einen hohen Stand erreicht hat, wird damit um Erkenntnisse zu den beteiligten nulldimensionalen Baufehlern erweitert. Obwohl sie nicht verformungsratenbestimmend sind und nur ein Anteil von einigen

Prozent der gesamten Verformungsenergie in ihre Bildung umgesetzt wird, ist die Existenz von Punktdefekten bedeutsam für mechanische und elektrische Materialeigenschaften.

Neben der Generation von intrinsischen Punktdefekten bei der Versetzungsbewegung werden Prozesse der Aggregation von Fremdatomen an Versetzungen behandelt. Die durchgeführten Modellexperimente zur Diffusion in versetzungsreichen Verbindungshalbleitern zeigen, dass sich ein ausgedehnter Bereich mit geänderten Materialeigenschaften um die Versetzung ausbilden kann. Dieser Bereich steht zum einen mit der Bildung von Ausscheidungen, zum anderen mit der Emission von strukturellen Punktdefekten und deren Reaktionen zu Defektkomplexen und Mikrodefekten im Zusammenhang. Rückwirkungen auf die Versetzungsbewegung werden diskutiert.

2 Grundlagen von Versetzungen in Halbleitern

2.1 Versetzungstopologie

In Kristallen mit Diamant- oder Zinkblendestruktur haben perfekte, gleitfähige Versetzungen einen Burgersvektor $\mathbf{b} = a/2\langle 110 \rangle$ (a ist die Gitterkonstante). Die Gleitebene ist vom Typ $\{111\}$. Die Lage der Gleitebene ist aufgrund der zweiatomigen Basis jedoch nicht eindeutig. Entsprechend Abb. 2.1 kann in einer $[1\bar{1}0]$ -Projektion ein Schnitt entlang 1234 oder 1564 ausgeführt werden, um eine 60° -Versetzung zu konstruieren. Im ersten Fall liegt die Versetzungslinie an den dicht benachbarten, im zweiten an den weit auseinanderliegenden $\{111\}$ -Ebenen. Die Defekte werden *Glide*- bzw. *Shuffle-set*-Versetzungen genannt [85]. Eine lang andauernde Kontroverse besteht über den dominierenden Versetzungstyp in der Diamant- oder Zinkblendestruktur. Während in den frühen Arbeiten [87, 90] davon ausgegangen wurde, dass Versetzungen im *Shuffle set* vorliegen, gelangte man später zu der Auffassung, dass der *Glide set* dominiert [45, 148]. Das Hauptargument lieferte die Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) mit dem Resultat, dass gleitfähige Versetzungen in Partialversetzungen aufgespalten sind. Eine solche Dissoziation ist sehr viel schwieriger im *Shuffle set* möglich, da sie zu hochenergetischen, instabilen Stapelfehlern oder komplizierten Atomverschiebungen führt. Diese Atomverschiebungen beinhalten die Diffusion einer Leerstellenreihe [9], die mit der hohen Beweglichkeit von Partialversetzungen nicht in Übereinstimmung zu bringen ist.

In Deformationsexperimenten mit Verbindungshalbleitern wurden verschiedene Bereiche der Abhängigkeit der kritischen Schubspannung τ_c von der Temperatur T registriert. Die Abweichungen für $T < 300$ K vom $\tau_c(T)$ -Verlauf bei höheren Temperaturen wurde dabei mit dem Gleiten von nichtaufgespaltenen Schraubenversetzungen in Verbindung gebracht [257, 258]. Mit elementaren Überlegungen [231] kommt man zu dem Schluss, dass die Bewegung dieser undissoziierten Versetzungen auf *Shuffle*-Ebenen leichter sein muss: Die Verschiebung bedarf des Aufbrechens einer Bindung pro Elementarschritt für den *Shuffle* und dreier Bindungen für den *Glide set*. Detaillierte theoretische Rechnungen zur Gitterreibung bestätigen diese Vermutung [45].

Die Struktur einer 60° -Versetzung ist in Abb. 2.2 gezeigt. Eine vollständige 60° -Versetzung

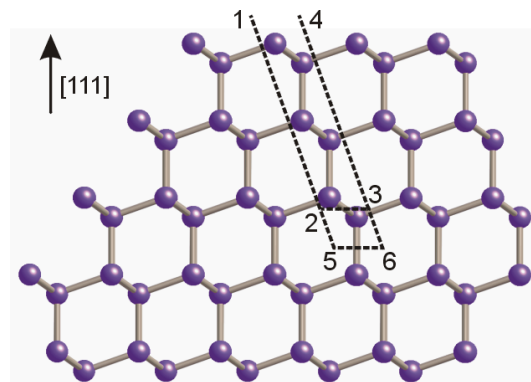


Abb. 2.1: Konstruktion einer 60° -Versetzung in der Diamantstruktur. Eine Versetzung kann durch Entfernen von Material entlang 15–56–64 bzw. 12–23–34 und anschließendes Zusammenfügen der Lücke aufgebaut werden. Die Darstellung ist entlang der $(1\bar{1}0)$ -Ebene.

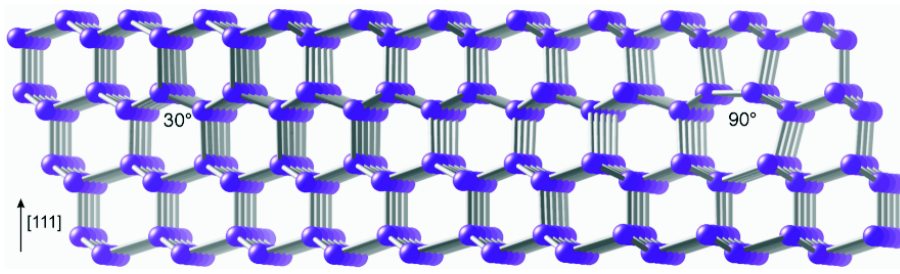


Abb. 2.2: Aufspaltung einer vollständigen 60°-Versetzung in der Diamantstruktur in eine 90°- und eine 30°-Partialversetzung. Zwischen beiden liegt ein intrinsischer Stapelfehler. Die Darstellung ist entlang der (110)-Ebene.

dissoziiert in eine 90°- und eine 30°-Partialversetzung. Die Bezeichnung richtet sich dabei nach dem Winkel zwischen Versetzungslinie und Burgersvektor. In einem Verbindungshalbleiter mit Zinkblendestruktur entspricht die Polarität der beiden Teilversetzungen der der vollständigen 60°-Versetzung. Eine Schraubenversetzung spaltet in zwei 30°-Partialversetzungen auf, deren Polarität unterschiedlich ist,

$$\begin{aligned} 60^\circ \alpha &\longrightarrow 90^\circ \alpha + 30^\circ \alpha, \\ 60^\circ \beta &\longrightarrow 90^\circ \beta + 30^\circ \beta, \\ 0^\circ &\longrightarrow 30^\circ \alpha + 30^\circ \beta. \end{aligned}$$

Nach herkömmlicher Konvention bezeichnet dabei α (bzw. β) in einer AB-Verbindung eine Versetzung mit B-Atomen (bzw. A) im *Glide-set*-Kern* [7]. Die Partialversetzungen sind vom Shockleytyp mit einem Burgersvektor $a/6\langle 112 \rangle$. Zwischen beiden Partialversetzungen liegt ein intrinsischer Stapelfehler (Abb. 2.2). Die Ausdehnung des Stapelfehlers, d. h. die Aufspaltungsweite der vollständigen Versetzung ergibt sich im spannungsfreien Kristall aus der Stapelfehlerenergie γ und der Abstoßungskraft der Partialversetzungen F

$$d_0 = \frac{F}{\gamma}.$$

Mit den elastischen Konstanten aus der linearen Elastizitätstheorie kann die Kraft berechnet werden und die Aufspaltungsweite ergibt sich zu [9]

$$d_0 = \frac{Gb^2}{8\pi\gamma} \frac{2-\nu}{1-\nu} \left(1 - \frac{2\nu}{2-\nu}\right) \cos 2\theta$$

(G Schubmodul, ν Poissonkonstante, b Betrag des Burgersvektors der Partialversetzungen, θ Winkel zwischen Linienrichtung und Burgersvektor der vollständigen Versetzung).

Mit einer wirksamen Schubspannung[†] τ_s ergeben sich unterschiedliche treibende Kräfte auf beide Partialversetzungen, die durch einen Orientierungsfaktor f erfasst werden. Unter Einbeziehung der unterschiedlichen Beweglichkeiten von führender und nachfolgender Partialversetzung μ_ℓ und μ_t folgt für die Nichtgleichgewichtsaufspaltung [271]

$$d = d_0 \left[1 + \frac{1}{2} \left(f - \frac{1-\alpha}{1+\alpha} \right) \frac{b\tau_s}{\gamma} \right]^{-1}$$

*Die ursprüngliche Definition ging von Versetzungen im *Shuffle set* (ss) aus, d. h. α entspricht A(ss). A(ss) sind aber bis auf eine Atomreihe gleichwertig mit B-Versetzungen im *Glide set* (Abb. 2.1). Das entsprechende gilt für β -Versetzungen.

†resolved shear stress

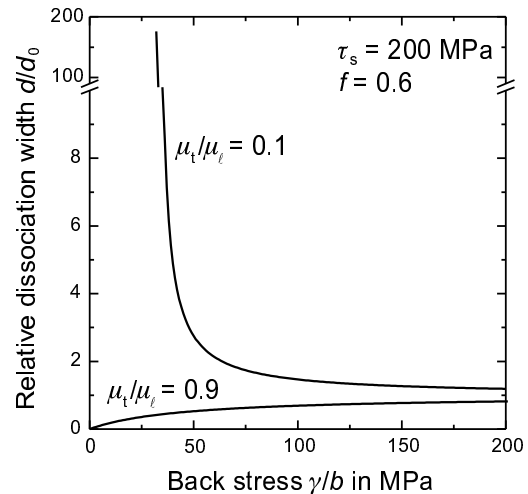


Abb. 2.3: Relative Aufspaltungsweite d/d_0 als Funktion der durch den Stapelfehler verursachten Rückspannung γ/b . Für die wirksame Schubspannung wurde $\tau_s = 200$ MPa gewählt; der Geometriefaktor ist $f = 0,6$. Eine weite Aufspaltung der vollständigen Versetzung kann nur erfolgen, wenn die führende Partialversetzung viel schneller als die nachfolgende ist.

mit $\alpha = \mu_t/\mu_l$. Abb. 2.11 zeigt die Aufspaltungsweite als Funktion der auf den Betrag des Burgersvektors der Partialversetzungen normierten Stapelfehlerenergie für zwei verschiedene Beweglichkeitsverhältnisse. Dabei ist ein Faktor $f = 0,6$ angenommen, wie er sich bei Deformation in [001]-Richtung für Shockleysche Partialversetzungen ergibt (Leipner *et al.* 2000 [144]). Es wird deutlich, dass sich bei hoher äußerer Spannung für bestimmte Beweglichkeitsverhältnisse und Stapelfehlerenergien eine sehr weite Separation der Partialversetzungen ergibt. Bei Verformung unter hohen Spannungen kann die Separation so groß werden, dass praktisch von der Bewegung decorrelierter Partialversetzungen gesprochen werden kann [19]. Damit im Zusammenhang steht eine Änderung des Deformationsmechanismus, die sich in einer anderen Temperaturabhängigkeit der kritischen Fließspannung von der Temperatur äußert. Ein solcher Übergang wurde für verschiedene Halbleitermaterialien diskutiert und ein Zusammenhang mit dem Übergang vom spröden zum duktilen Verhalten (*brittle-ductile transition*) postuliert [191].

Ursprünglich ging SHOCKLEY in seiner Konstruktion der 60° -Versetzung von einer Reihe nicht abgesättigter Bindungen im Versetzungskern aus [231]. Aus experimentellen Untersuchungen – hauptsächlich mittels Elektronenspinresonanz (ESR) – wurde jedoch geschlossen, dass deren Dichte sehr gering ist [8, 268]. In Elementhalbleitern besteht kein Zweifel, dass eine Rekonstruktion der Bindungen des Versetzungskern eintritt. Eine konsistente Struktur für die 30° -Partialversetzung wurde aus verschiedenen *ab-initio*-Clusterrechnungen abgeleitet [73, 97, 159] (Abb. 2.4 a, b). Eine stabile Rekonstruktion erfolgt mit einer Translationsperiode entlang der Versetzungslinie von $2b$, wobei b der Betrag des Burgersvektors der vollständigen Versetzung ist. Eine Bildsimulation des Kerns von 30° -Partialversetzungen konnte zeigen, dass die Abbildung dieser Rekonstruktion mittels hochauflösender Transmissionselektronenmikroskopie (HREM) möglich sein sollte unter der Bedingung, dass der Elektronenstrahl senkrecht auf der Gleitebene steht [256]. Eine direkte experimentelle Verifizierung gelang aber bisher noch nicht.

Die treibende Kraft der Rekonstruktion ist die hohe Energie freier Bindungen. Dem entgegen wirkt die Energie der Gitterverzerrung, die für die 90° -Versetzung höher ist. Ihre Kernstruktur ist demzufolge weniger robust als die der 30° -Partialversetzung. Neben in Abb. 2.4 c gezeigten Struktur mit der Gitterkonstanten b (*single-period reconstruction* – SP) wurde eine alternative Rekonstruktionsstruktur mit doppelter Periode (DP) aus theoretischen Rechnungen [17] abgeleitet (Abb. 2.4 d). Die Energie beider Konfigurationen unterscheidet sich höchstens um einige 0,1 eV/nm. Welche Anordnung die niedrigere Energie hat, hängt stark von der Umgebung ab, in die die Versetzung eingebettet ist [129].

Im Falle der Verbindungshalbleiter ist die Frage der Rekonstruktion schwieriger zu beantworten. Hier entstehen Bindungen zwischen gleichartigen Atomen. Solche Bindungen gibt es auch bei

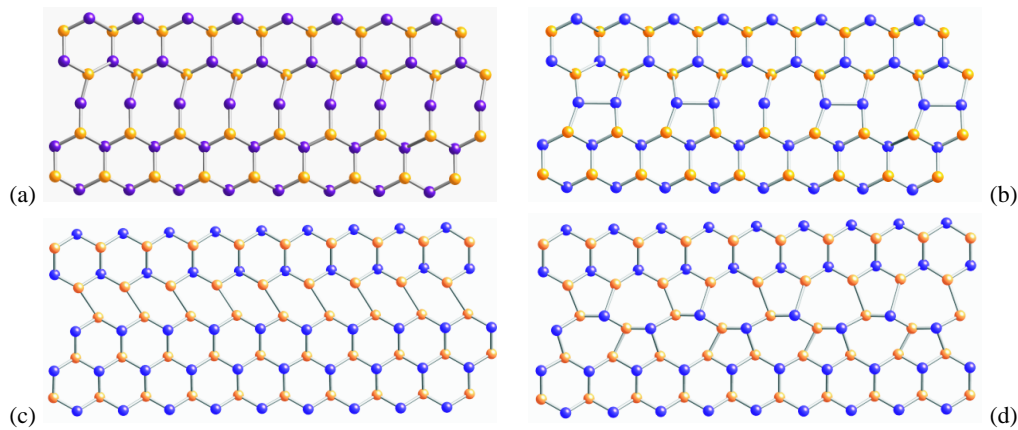


Abb. 2.4: Kernstruktur von Partialversetzungen in Si in der (111)-Gleitebene. Unrekonstruierte (a) und rekonstruierte 30° -Partialversetzung mit einem Rekonstruktionsdefekt (b). Rekonstruierte 90° -Partialversetzung mit Rekonstruktion in einfacher (c) und doppelter Periode (d). Helle und dunkle Kreise entsprechen Si-Atomen in verschiedenen Untergittern.

Antisite-Defekten, die in GaAs eine relativ niedrige Bildungsenergie haben können [12, 150, 175]. Berechnungen mit Dichtefunktional-Clustermethoden zeigen, dass die $90^\circ\beta$ -Partialversetzung in GaAs ähnliche Bindungsstrukturen wie der SP-Kern in Si aufweist [240]. Auf der anderen Seite ist die entsprechende α -Partialversetzung schwächer rekonstruiert. Die Kernstruktur von 30° -Partialversetzungen in der Zinkblendestruktur wurde ebenfalls untersucht [100]. Die mit empirischen Potentialen bzw. Dichtefunktionalmethoden berechneten Strukturen (vgl. Abb. 2.4 b) ergaben kleinere Rekonstruktionsenergien für α - als für β -Versetzungen.

2.2 Defekte auf der Versetzungslinie

Die Rekonstruktion des Versetzungskernes impliziert, dass es auch Rekonstruktionsdefekte geben kann. Die Rekonstruktion der 30° -Partialversetzung ist zweifach entartet. Das bedeutet, es existieren zwei Varianten, die um die Hälfte der Translationsperiode verschoben sind. An der Grenze zwischen diesen Abschnitten entsteht ein Rekonstruktionsdefekt mit einer freien Bindung (Abb. 2.4 b). Solche Rekonstruktionsdefekte (RD) wurden auch Antiphasendefekte [84] oder Solitonen [74] genannt. Der thermisch besonders stabile Defekt Si-R aus ESR-Untersuchungen von plastisch deformiertem Silicium wurde aus *ab-initio*-Rechnungen von CSÁNYI *et al.* [39] mit einem Solitonzustand in Verbindung mit einem fünffach koordinierten Atom auf einer 30° -Partialversetzung identifiziert. Mehrere RD kommen für die 90° -Partialversetzung in Frage. In der SP-Struktur gibt es ein Soliton, während im DP-Kern aus Symmetriebetrachtungen insgesamt fünf verschiedene in Frage kommen [29].

Isolierte Versetzungen im Gleichgewicht oder im homogenen Spannungsfeld richten sich entlang von $\langle 110 \rangle$ -Richtungen aus. Das entspricht den Minima des periodischen Peierlspotentials, das eine Versetzung bei der Bewegung überwinden muss. Versetzungen verlassen die perfekten Ausrichtung in den $\langle 110 \rangle$ -Peierlstälern mit der Bildung von Kinken, die für das Gleiten der Versetzungen von entscheidender Bedeutung sind. Die Ausdehnung von Kinken ist in kovalenten Materialien kaum größer als der Atomabstand. Eine Übersicht über verschiedene Kinkenstrukturen auf 30° und 90° -Partialversetzungen wird von GEORGE [59] gegeben. In Abhängigkeit vom Vorzeichen der Kinke, dem Typ der Rekonstruktion der Versetzung und der Lage der Kinke in der Rekonstruktionsstruktur können auf jeder Partialversetzung verschiedene Kinkentypen gebildet

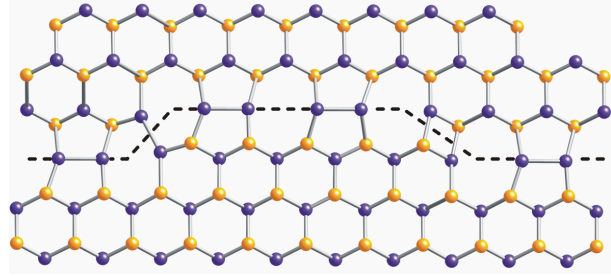


Abb. 2.5: Kinkenpaar (LK und RK) auf der 30°-Partialversetzung. Die Darstellung ist entlang der (111)-Gleitebene.

werden. Kinken können mit oder ohne freie Bindungen aufgebaut werden. Aus reinen Symmetrieüberlegungen kann man ableiten, wann die Struktur einer linken Kinke (LK) von der einer rechten Kinke (RK) verschieden sein muss. LK und RK können nur dann symmetrisch sein, wenn a) eine reine Stufenversetzung vorliegt und die Symmetriegruppe des Gitters ein Spiegelelement enthält oder b) eine reine Schraubenversetzung und eine zweizählige Drehachse des Gitters in Versetzungsrichtung existiert [29]. Für eine gemischte Versetzung wie die 30°-Partialversetzung sind LK und RK* immer verschieden (Abb. 2.5). Bei der 90°-Partialversetzung wird die Spiegelsymmetrie durch die Rekonstruktion des Versetzungskerns (SP oder DP) gebrochen. Es resultieren daraus eine Vielzahl möglicher Kinkenstrukturen: vier für die SP- und acht für die DP-Struktur [17].

Die o. a. Rekonstruktionsdefekte rufen keine Bewegung der Versetzung hervor. Auf der anderen Seite können sie aber mit Kinken wechselwirken. Als Resultat entsteht eine große Vielfalt möglicher Kinken–RD-Komplexe, die für den komplizierten Charakter der Versetzungsbewegung in Halbleitern verantwortlich sind. Generell wird eine Kinke mit freien Bindungen als ein Komplex mit einem Rekonstruktionsdefekt angesehen. So gibt es z. B. für die 30°-Partialversetzung die beiden Komplexe LC und RC, die über die Reaktionen $LK + RD \rightleftharpoons LC$ und $RK + RD \rightleftharpoons RC$ gebildet werden [29]. Die Bildungs- und Migrationsenergien der verschiedenartigen Kinkenkonfigurationen bestimmen letztendlich die Translation der Versetzung und damit die Gleitgeschwindigkeit.

LOUCHET und THIBAUT-DESSEAU [149] haben auf die Möglichkeit der Koexistenz zwischen *Glide*- und *Shuffle-set*-Segmenten auf der Versetzung hingewiesen. Dieser Übergang kann durch Absorption oder Emission von Leerstellen oder Zwischengitteratomen erfolgen. Der Einbau einer Leerstelle in den Kern einer *Glide-set*-Versetzung entspricht einer einzelnen *Shuffle-set*-Stelle und ist in Abb 2.6 gezeigt. In Verbindungshalbleitern entspricht dieser Schritt dem Wechsel des Charakters der Versetzung von bspw. α zu β (siehe Fußnote auf S. 6). Man kann bei diesem *Glide*–*Shuffle-set*-Übergang auch von einem halben Kletterschritt sprechen. Ein vollständiger Kletterschritt bedarf der Absorption bzw. Emission von Punktdefekten in beiden Untergittern, um die ursprüngliche Versetzungskonfiguration wieder herzustellen [60]. Die Möglichkeit des lokalen Übergangs vom *Glide* zum *Shuffle set* hat die direkte Versetzungsabbildung mittels HREM bisher weder unterstützt noch ausgeschlossen [42, 178]. Zumindest wurde ein verschwommener Kontrast des Kerns von 30°-Partialversetzungen gefunden, der mit einer hohen Leerstellenkonzentration interpretiert werden kann [22]. Ein solcher Kontrast trat aber nicht bei 90°-Versetzen auf. Neben der direkten Evidenz des Einbaus von Leerstellen in den Versetzungskern durch spektroskopische Methoden [107, 114] folgt die Stabilität von Punktdefekten im Kern auch aus theoretischen Rechnungen. Unter Benutzung von *ab-initio*-Methoden und Rechnungen mit empirischen Potentialen wurde die Bildungsenergie verschiedener leerstellenartiger Defekte im Versetzungskern berechnet. Sie ist für die 30°-Partialversetzung in Si um mehr als 1 eV [99] und die 90°-Partialversetzung um etwa 2 eV [128] geringer als im freien Volumen. Daraus ergibt sich, dass die Gleichgewichtskonzentration von Leerstellen im Kern einer Shockleyschen Partialversetzung deutlich höher als im Volumen ist. Ähnliche Aussagen sind für Zwischengitteratome zu treffen. Jedoch scheint die Punktdefektkonzentration im Versetzungskern nicht ausreichend, um *Shuffle*-

*welche Kinke LK und welche RK genannt wird, ist willkürlich

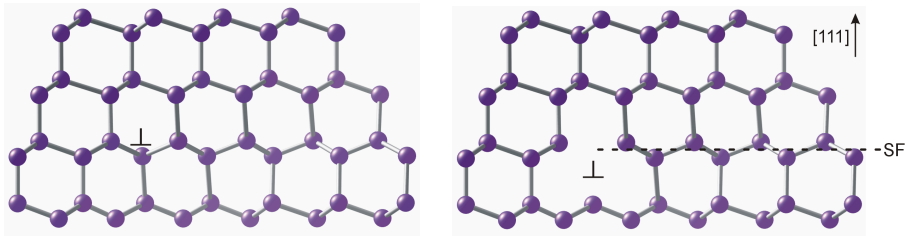


Abb. 2.6: Übergang zu einer *Shuffle-set*-Position einer 30°-Partialversetzung in Si durch Einbau einer Leerstelle. Die Position des Stapelfehlers (SF) bleibt unbeeinflusst. Die Darstellung ist entlang der (1 $\bar{1}$ 0)-Ebene.

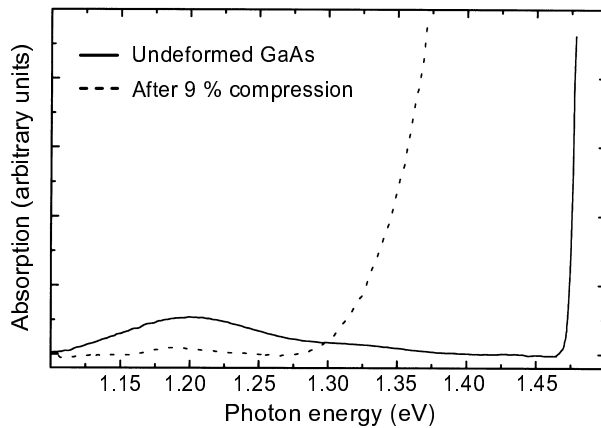


Abb. 2.7: Verschiebung der Absorptionskante in GaAs nach Deformation [251]. Die gestrichelte Linie ist die gemessene Absorption bei 77 K in SI-GaAs nach 9 % Kompression bei 823 K. Die durchgezogene Linie zeigt das analoge Spektrum der unverformten Referenzprobe.

set-Segmente beträchtlicher Länge zu erzeugen. Die Situation mag anders sein bei Punktdefektübersättigung oder für Versetzungen, die sich im Spannungsfeld bewegen.

2.3 Elektrische Eigenschaften von Versetzungen

2.3.1 Flache und tiefe versetzungskorrelierte Energieniveaus

Da Versetzungen die Translationssymmetrie des Kristalls stören, sollten mit ihnen Energieniveaus in der Bandlücke verbunden sein. Das Shockleysche Versetzungsmodell mit der Einführung unabgesättigter Bindungen im Versetzungskern führte unmittelbar zur Annahme eindimensionaler Bänder [231]. In der Tat schienen Halleffektmessungen in plastisch deformiertem Germanium eine hohe Zahl versetzungskorrelierter Akzeptoren zu ergeben [225]. Später stellten sich aber die im Zuge der Verformung generierten Punktdefekte als Ursache der Änderung der gemessenen Ladungsträgerkonzentration heraus [8]. Der jetzige Konsens der starken Rekonstruktion des Versetzungskernes, die nur geringen Änderungen in den Bindungslängen hervorruft, hat Konsequenzen für die elektrische Aktivität der Versetzungen: Die Ausbildung einer kovalenten Bindung führt zur starken Separation von bindenden und antibindenden Zuständen. Das bedeutet, dass es wahrscheinlich nur sehr flache Niveaus in der Bandlücke geben wird [96]. Selbst für Kinkenstrukturen ohne freie Bindungen sollte das zutreffen [73].

Es gibt einige Experimente, die einen Nachweis flacher Versetzungsniveaus liefern. In FTIR-Absorptionsmessungen* in semi-isolierendem (SI) GaAs haben wir eine Verschiebung der bandkantennahen Absorption nach Deformation gefunden (Abb. 2.7). Diese Verschiebung ist abhängig vom Verformungsgrad [251]. Die Spannungsabhängigkeit der Bandlücke durch die weitrei-

*FTIR *Fourier transformation infrared*

chenden Spannungsfelder der Versetzungen kann den Effekt aber nicht erklären, wie von SKORONSKI *et al.* [241] angenommen wurde. Mit dem bekannten Spannungskoeffizienten der Bandlücke [274] müssten die inneren Verspannungen zehnmal größer sein als die wirksame Schubspannung. Tatsächlich werden aber innere Spannungen im Bereich der äußeren Schubspannung gemessen [253]. Mit der Annahme, dass flache Elektronen- und Lochzustände im elastischen Deformationsfeld existieren, lässt sich die gemessene Verschiebung erklären. Berechnungen der Energieniveaus rekonstruierter Versetzungsstrukturen zeigen flache Störstellenbänder, die entweder elektronischen Zuständen im Deformationspotential oder dem Stapelfehler zuzuordnen sind [8, 147]. Es ergab sich eine Distanz der Bänder zur Valenz- bzw. Leitungsbandkante von bis zu 0,100 eV. Die Größenordnung des berechneten Abstands der Versetzungsbänder stimmt mit den Experimenten überein. Aus Abb. 2.7 ergibt sich in GaAs eine Verschiebung der Absorptionskante von 0,120 eV. Messungen der Mikrowellenleitfähigkeit in Silicium ergeben leere und gefüllte Bänder (0,080 eV oberhalb der Valenzbandkante bzw. 0,070 eV unterhalb der Leitungsbandkante) [28]. Ähnliche Bänder folgen aus Messungen der elektrischen Dipolspinresonanz in plastisch verformten Si [267]. Einen Nachweis flacher Versetzungszustände liefern auch Photolumineszenzmessungen, aus denen sich Bindungsenergien von Elektronen und Löchern im Deformationspotential von 0,150 bzw. 0,080 eV für Si ableiten lassen [208].

Die Existenz von Rekonstruktionsdefekten und anderen Zentren mit freien Bindungen in Versetzungskern impliziert, dass es eine bestimmte Versetzungsladung geben muss. Diese Linienladung wird im Halbleiter durch eine Bandverbiegung abgeschirmt. Die Beziehung zwischen der Linienladung q und dem Potential der abgeschirmten Versetzung $\phi(r)$ ist gegeben durch [8]

$$\phi(r) = \frac{q}{\epsilon_0 \epsilon_r \pi R} \left[\frac{R^2 - r^2}{4} + \frac{R^2}{2} \ln \left(\frac{R}{r} \right) \right] \quad (2.1)$$

(ϵ_0 , ϵ_r absolute und relative Dielektrizitätskonstante des Halbleiters, r radialer Abstand).

Die Versetzung ist durch den Radius des Reazyllinders R charakterisiert, der sich für einen n-Halbleiter für $T = 0$ K zu $R = \sqrt{q/[e\pi(N_d - N_a)]}$ ergibt [207]. Dabei ist e die Elementarladung, N_d die Donator- und N_a die Akzeptordichte im Halbleiter. Um die Bandverbiegung im Versetzungskern berechnen zu können, muss ein bestimmter Abschneideradius, z. B. $r = b$, gewählt werden. Mit diesem Modell der Bandverbiegung an Versetzungen wurde es grundsätzlich möglich, den Kontrast von Versetzungen in der EBIC-Abbildung* im Rasterelektronenmikroskop (SEM) und dessen Abhängigkeit von Temperatur und den Anregungsbedingungen zu verstehen [276,277]. Ein alternatives Modell beruht auf der Anwendung der Shockley-Read-Hall-Statistik auf das Problem der Ladungsträgerrekombination an versetzungsgebundenen Zentren [111]. Mit beiden Modellen können Angaben zur energetischen Lage von Versetzungsniveaus und deren Dichte gemacht werden.

Eine wichtige Schlussfolgerung des Modells der Bandverbiegung an Versetzungen ist, dass die Position des Fermi-niveaus E_F in Relation zu den Bandkanten in deformierten Halbleitern mit dem Ort variiert. Daraus ergeben sich ernsthafte Schwierigkeiten bei der Untersuchung der Eigenschaften deformationsinduzierter Defekte. Die Energieniveaus und damit der Ladungszustand der Punktdefekte hängen mit der Variation von E_F vom Abstand zur Versetzung ab. Darüber hinaus ist die Bandverbiegung eine Funktion der effektiven Dotierung $N_d - N_a$. Der Kompensationsgrad bzw. die effektive Dotierung ändern sich aber bei Verformung, da Punktdefekte generiert werden, die Majoritätsladungsträger einfangen. Es ist davon auszugehen, dass Versetzungen eine entscheidende Rolle bei dieser Punktdefektgeneration spielen. Mit der inhomogenen Versetzungsverteilung ist damit eine inhomogene Verteilung der erzeugten Punktdefekte verbunden. Damit muss eigentlich die lokale, effektive Dotierung bekannt sein, um (2.1) berechnen zu können.

In PL-Untersuchungen† von versetzungsreichem Silicium werden charakteristische Linien bei

*EBIC *electron-beam incuded current*

†PL Photolumineszenz

Photonenenergien zwischen 0,812 und 1,000 eV gefunden. Die Interpretation dieser Linien D1 bis D4 ist seit mehr als 20 Jahren kontrovers und Gegenstand umfassender Untersuchungen. Es soll hier keine vollständige Übersicht über diese Experimente gegeben werden. Klar scheint, dass die Charakteristika der D1/D2-Linien sich deutlich von den D3/D4 unterscheiden. Die meisten Autoren stimmen darin überein, dass die D1- und die D2-Linie eher von Punktdefekten herrührt. Diese können u. U. im Spannungsfeld der Versetzung oder auf den intrinsischen Stapelfehlern angereichert sein [168]. SAUER *et al.* [216] stellten eine klare Korrelation zwischen dem Auftreten der D3/D4-Lumineszenz und der Aufspaltungsweite der Versetzungen her. Damit im Zusammenhang steht ihre Interpretation der D4-Linie als ein Paarübergang zwischen einem Donator auf der ersten und einem Akzeptor auf der zweiten Partialversetzung, die zusammen eine vollständige Versetzung ergeben. D3 sollte eine Phononenreplik von D4 sein. Ein anderes Modell geht von eindimensionalen Wannier–Mott-Exzitonen aus, die an eine 90°-Partialversetzung gebunden sind und deren Energie vom Spannungsfeld der 30°-Partialversetzung (beide Partialversetzungen bilden zusammen eine vollständige 60°-Versetzung) beeinflusst wird [208]. Für die Bindungsenergien im Spannungsfeld der Versetzungen wird ein Wert von 0,050 bis 0,200 eV erhalten, wobei die Zahl vom Betrag des Burgersvektors abhängt.

Defekte im Versetzungskern sind mit tiefen Störstellen in der Bandlücke verbunden. Die elektronischen Niveaus einer Leerstelle im Kern einer 90°-Partialversetzung in Si wurde von MARKLUND und WANG [160] berechnet. Sie erhielten als Resultat, dass der dreifach degenerierte Zustand einer Leerstelle im perfekten Gitter bei 0,87 eV zu drei Niveaus im Versetzungskern bei 1,90, 1,10, und 0,26 eV aufspaltet. Leerstellen und Rekonstruktionsdefekte im Versetzungskern sind aufgrund der nichtabgesättigten Bindungen paramagnetisch und können daher mit ESR-Spektroskopie untersucht werden. Insbesondere in Silicium konnten damit wertvolle Informationen gesammelt werden, da die Symmetrie des Defektes direkt zugänglich ist. Eine systematische Untersuchung der mittels ESR in deformiertem Si gefundenen Defekte wurde von KISIELOWSKI [107] durchgeführt. Eine grobe Einteilung kann entsprechend dem Ausheilverhalten gegeben werden: Defekte, die unterhalb 800 K ausheilen, wurden als isolierte Vakanzenkomplexe identifiziert, wie sie auch in elektronenbestrahltem Si vorkommen. Die Ausheilung bestimmter Linien im Bereich von 800 bis 1100 K wurde isolierten Leerstellen und Leerstellenkomplexen auf der Versetzungslinie zugeordnet. Bemerkenswert ist, dass alle ESR-aktiven Zentren, die zu Versetzungen gehören, offenbar ausschließlich den vollständige Schraubenversetzungen bildenden 30°-Partialversetzungen zuzuschreiben sind. Warum 60°-Versetzen (und damit 90°-Partialversetzungen) keine paramagnetischen Zentren zeigen, ist nicht ganz klar. Der Nachweis mittels ESR erfordert einen bestimmten Ladungszustand der Defekte, der für 60°- und Schraubenversetzungen anders sein kann.

Im Gegensatz zur ESR spielt der Ladungszustand bei der DLTS (*deep level transient spectroscopy*) keine Rolle; es können Einfangzentren für Elektronen und Löcher nachgewiesen werden. In plastisch verformtem n-Si werden mehrere charakteristische Peaks gefunden, deren Identifizierung aber schwierig ist. Eine schwache Deformation ist für die DLTS optimal, was aber eine Zuordnung zu den mittels ESR bei höherem Verformungsgrad detektierten paramagnetischen Defekten erschwert. Bei $E_c - 0,27$ eV und bei $E_c - 0,55$ eV werden Linien nachgewiesen* (B- bzw. D-Linie), die ein exponentielles Füllverhalten für Pulslängen $\leq 1 \cdot 10^{-7}$ s zeigen [179]. Für längere Pulse wird die Zeitabhängigkeit logarithmisch, was typisch für das Coulombpotential ausgedehnter Defekte ist. Die Interpretation für diese Linien ist, dass es sich hierbei um Punktdefekte in der Raumladungszone von Versetzungen handelt. Das wird dadurch unterstrichen, dass die Linienform sich mit einem Modell anpassen lässt, das die Verbreiterung im Spannungsfeld der Versetzung berücksichtigt. Für die D-Linie gibt es Hinweise, dass es sich hierbei um Zentren direkt im Versetzungskern handelt. Allerdings konnten CAVALCOLI *et al.* [33] keine Veränderung

* E_c Energie der Leitungsbandkante

der Peakamplitude der D-Linie bei unterschiedlichen Versetzungsdichten feststellen, aber ihr Verschwinden bei Temperung. Dahingegen finden sie eine ähnliche Abhängigkeit von der Länge des Füllpulses für die C-Linie bei $E_c - 0,40$ eV wie oben für die B- bzw. D-Linie angegeben. Es wird angenommen, dass die C-Linie direkt mit Defekten im Versetzungskern zusammenhängt (assoziierte Leerstellen).

In p-Si gibt es nach Verformung ein breites Band sich überlappender Linien. Nach Temperung bleibt eine Linie bei $E_v + 0,33$ eV (E_v Energie der Valenzbandkante), die möglicherweise versetzungskorreliert ist [105]. In GaAs wird nach plastischer Deformation neben tiefen Akzeptoren, die von erzeugten Punktdefekten stammen, ein Einfangzentrum für Elektronen bei $E_c - 0,68$ eV und eins für Löcher bei $E_v + 0,37$ eV gefunden, die eine logarithmische Abhängigkeit von der Länge des Füllpulses haben. Aus diesem Verhalten und der Proportionalität zwischen Konzentration der Fallen und Versetzungsdichte wird auf einen Zusammenhang mit den Kernen von α - oder β -Versetzungen geschlossen [278].

Bei der Untersuchung der elektrischen Aktivität von Versetzungen in Halbleitern muss immer die Frage gestellt werden, inwieweit eine Kontamination mit Fremdatomen ausgeschlossen werden kann. In der Tat werden die physikalischen Eigenschaften der Versetzungen von der Dekoration mit Verunreinigungen im Spannungsfeld oder im Kern entscheidend beeinflusst. Es konnte gezeigt werden, dass unter hochreinen Bedingungen verformtes Si keine D-Band-Lumineszenz zeigt. Erst nach absichtlicher Kontamination mit geringen Mengen von Übergangsmetallen wurden intensive D-Bänder gefunden, wobei im TEM-Bild keine Veränderungen des Versetzungskontrastes auftreten [79]. Daraus wurde geschlossen, dass die D1- bis D4-Linien mit angereicherten Fremdatomen im Verzerrungsfeld der Versetzung zu tun haben. Später wurde das auf die D1/D2-Lumineszenz eingeschränkt [80]. Die PL- und DLTS-Spektren von plastisch deformiertem FZ- und Cz-Si* sind deutlich verschieden, was mit dem Gettern von Sauerstoff an Versetzungen interpretiert wurde [52]. Ausführlich wurde der Einfluss von Übergangsmetallen auf die Rekombinationsaktivität von Versetzungen in Si untersucht. So führt die Eindiffusion von Gold in versetzungsreichem Si zur Bildung von Ausscheidungen auf den Versetzungen mit einer umgebenden Verarmungszone von Ladungsträgern [190].

Die Natur der mittels DLTS gemessenen versetzungskorrelierten Defekte in Verbindungshalbleitern ist weitgehend unbekannt. Zumindest für InP gibt es aber Experimente, die Unterschiede in der Wechselwirkung von Fremdatomen wie Eisen und Chrom mit α - und β -Versetzungen, die durch Härteeindrücke erzeugt wurden, zur Interpretation der DLTS-Signale benutzen [287].

Zusammenfassend haben Versetzungen eine Vielzahl elektrischer Effekte. Sie verändern zumindest lokal die Ladungsträgerkonzentration, wirken also als eine „strukturelle Dotierung“. Die geladene Versetzung ist abgeschirmt durch eine Raumladungszone; sie wirkt als Streuzentrum, als Zentrum strahlender oder nichtstrahlender Rekombination und als linearer Leiter.

Die Identifikation der elektronischen Niveaus von Versetzungszuständen hat damit zu kämpfen, dass es im Experiment sehr schwierig ist, zwischen intrinsischen Versetzungseigenschaften, die der geraden, rekonstruierten Linie zuzuordnen sind, und Zuständen von Punktdefekten und Komplexen im Kern oder Spannungsfeld zu unterscheiden. Die Existenz von Rekonstruktionsdefekten und Kinken, sowie der Einbau von Leerstellen und Zwischengitteratomen im Versetzungskern macht die Einteilung in intrinsische und extrinsische Versetzungseigenschaften sowieso obsolet, wenn man mit extrinsisch nicht die Beeinflussung durch Fremdatome meint. Als Ausweg aus dem Dilemma der Überlagerung der elektrischen Effekte von Versetzungen und Punktdefekten in spektroskopischen Untersuchungen bieten sich ortsauflösende Techniken an, bis hin zur atomaren Auflösung.

*FZ float zone, Cz Czochralski

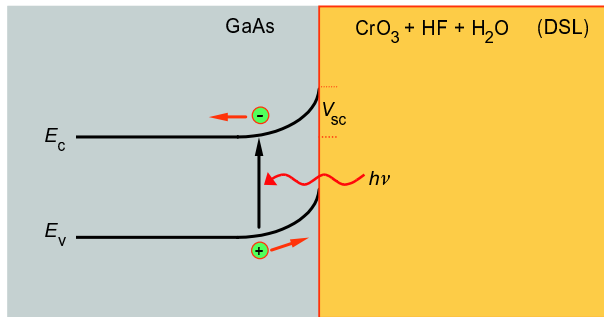


Abb. 2.8: Schema des DSL-Ätzens von GaAs. Die durch Beleuchten der Probe erzeugten Ladungsträger werden in der Raumladungszone an der Oberfläche getrennt.

2.3.2 Ortsauflösende Spektroskopie von Versetzungen

Ein Hauptziel ortsauflösender Untersuchungen von Versetzungen in Halbleitern ist die klare Zuordnung der elektrischen/optischen Aktivität zu bestimmten Versetzungstypen oder sogar Defekten auf der Versetzungslinie. Ein möglicher Zugang zur Charakterisierung von Einzelversetzungen ist die Untersuchung der eindimensionalen Leitfähigkeit von Versetzungen durch mikroskopische Kontaktierung der (angeätzten) Durchstoßpunkte gerader Versetzungen an den gegenüberliegenden Oberflächen. Als Resultat solcher Experimente in Germanium ergaben sich leitende 60° - und nichtleitende Schraubenversetzungen [77]. Die Leitfähigkeit der 60° -Versetzungen wurde mit einem eindimensionalen Band in Verbindung gebracht, das etwa 0,1 eV über dem Valenzband liegt.

Eine simple und effektive Methode zum Studium der Variation der Ladungsträgerkonzentration an Versetzungen ist das photochemische Ätzen von Verbindungshalbleitern. Das chemische Auflösen von III-V-Halbleitern benötigt freie Löcher, die einerseits in n-GaAs als Minoritätsladungsträger zur Verfügung stehen und andererseits von der Ätzlösung geliefert werden. Zusätzlich können sie durch Beleuchten der Probe mit genügend kurzwelligem Licht (Photonenenergie $h\nu \geq E_g$, E_g Bandlücke, ν Photonenfrequenz) erzeugt werden. Häufig wird für GaAs das DSL-Ätzen* mit einer Lösung aus $\text{CrO}_3 + \text{HF} + \text{H}_2\text{O}$ eingesetzt [272]. Durch den Kontakt mit der Ätzlösung bildet sich an der Oberfläche eine Raumladungszone (Bandverbiegung V_{sc}), die zur Trennung der durch die Beleuchtung erzeugten Überschussladungsträger bzw. zur Anreicherung von Löchern nahe der Oberfläche führt (Abb. 2.8). An eingewachsenen Versetzungen in Si-dotiertem GaAs ergibt sich eine Erhöhung der Konzentration freier Elektronen [184]. Damit sinkt gleichzeitig die Löcherkonzentration und die davon abhängige Ätzrate im Versetzungsbereich und ein Hügelchen entsteht. Abb. 2.9 a zeigt angeätzte, eingewachsene Versetzungen in einem Si-dotierten GaAs-Wafer. Die Abhängigkeit der Ätzrate von der lokalen Ladungsträgerkonzentration spiegelt sich auch in dem Oberflächenrelief an den Dotierungsinhomogenitäten im Wafer (*striations*) wider. Das Oberflächenprofil an dem angeätzten Durchstoßpunkt einer Versetzung an der Oberfläche (Abb. 2.9 b) ist ein direktes Maß der Änderung der lokalen Ladungsträgerkonzentration im Versetzungsbereich. Eine Eichung kann z. B. mit Ramanmikroskopie vorgenommen werden [184]. Dabei wird die Tatsache ausgenutzt, dass die Plasmonenfrequenz sehr empfindlich von der Dichte freier Elektronen n_e abhängt. Für die in Abb. 2.9 b gezeigte Probe ergibt sich ein Anstieg von $n_e = 8,0 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ fern von der Versetzung auf $10,3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

Die EBIC-Methode ist inzwischen ein wohletabliertes Verfahren zur Abbildung von Halbleiterstrukturen und zur Defektcharakterisierung im Rasterelektronenmikroskop. Für ein EBIC-Experiment muss die Probe eine Barriere enthalten, die die generierten Elektronen und Löcher trennen kann. Eine gängige Anordnung verwendet eine dünne Oberflächenmetallisierung, durch die eine Schottkydiode erzeugt wird. Der Elektronenstrahl dringt in die Probe bis zu einer von der Beschleunigungsspannung abhängigen Tiefe R_b ein und erzeugt Elektronen-Loch-Paare. Das EBIC-Signal ist im Wesentlichen durch den Diffusionsstrom der Überschuss-Minoritätsladungs-

*DSL diluted Sirtl-like with light

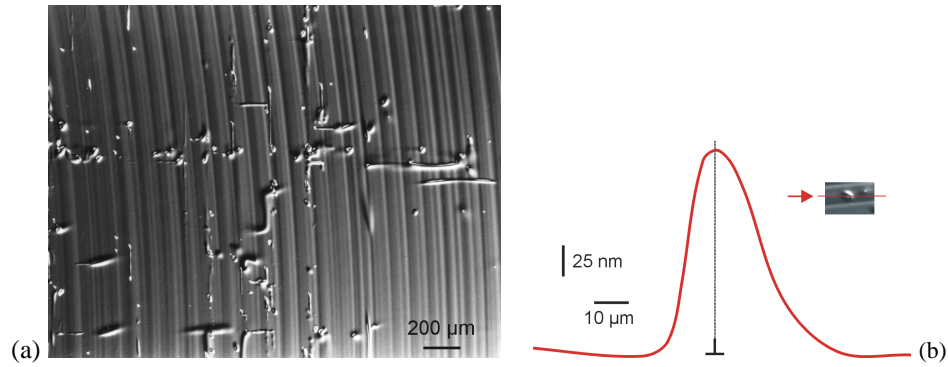


Abb. 2.9: Versetzungsätzen in GaAs. (a) Mit einer Photoätztechnik angeätzte eingewachsene Versetzungen in (001)-GaAs:Si. Die Streifenstruktur rührt von Dotierungsinhomogenitäten (*striations*) her. Auflichtbild im Nomarski-Interferenzkontrast. (b) Oberflächenprofil an dem angeätzten Durchstoßpunkt einer Versetzung an der Oberfläche (Aufnahme C. Frigeri, Parma).

träger gegeben. Ein Kristalldefekt mit erhöhter Ladungsträgerrekombination wird als Dunkelstruktur mit lokal erniedrigtem elektronenstrahlinduzierten Strom abgebildet. Eine phänomenologische Theorie des EBIC-Kontrasts von Defekten wurde von DONOLATO entwickelt [44] und von PASEMANN in einer Störungsrechnung zweiter Ordnung fortgeführt [185]. Dieses Modell beruht auf der Reduktion der totalen Lebensdauer der Minoritätsladungsträger in einem bestimmten Volumenbereich des untersuchten Defekts. Für Versetzungen wird ein Zylinder mit dem Querschnitt σ_d und der Minoritätsladungsträgerlebensdauer $\tau' < \tau$ (τ Ladungsträgerlebensdauer im perfekten Kristall) angenommen. Der Kontrast an Versetzungen,

$$c_{\text{EBIC}} = \frac{I - I_0}{I_0} \quad (2.2)$$

(I_0 Strom im perfekten Kristall außerhalb des Defekts, I gemessener Strom im Defektgebiet), wird durch die Defektstärke oder Linienrekombinationsgeschwindigkeit bestimmt,

$$\gamma_d = \frac{\sigma_d}{\tau'}.$$

Weiterhin ist das Kontrastprofil eine Funktion der Defektgeometrie wie z. B. Tiefenlage, der Anhebungsbedingungen durch den Elektronenstrahl und der Diffusionslänge der Minoritätsladungsträger.

Ausgehend von den Arbeiten von DONOLATO und PASEMANN werden zwei Modelle zur Interpretation des Kontrasts von Versetzungen verwendet. Die Untersuchung von c_{EBIC} als Funktion der Temperatur und des Strahlstroms I_b erlaubt Aussagen zu den Energieniveaus und zur Konzentration der beteiligten Defekte. WILSHAW kommt mit seinem Modell der ladungskontrollierten Rekombinationsrate (CCR – *charge-controlled recombination rate*) zu dem Schluss [277], dass der Versetzungskontrast proportional zur Linienladung ist. Der experimentelle Befund, dass der Kontrast von deformationsinduzierten Versetzungen in Si mit T steigt und mit I_b sinkt, wurde dahingehend interpretiert, dass Versetzungen als eindimensionale Einfangzentren für Majoritätsladungsträger wirken. Das heißt, sie sind in n-Si negativ und in p-Si positiv geladen. Der resultierende Effekt auf die Bandverbiegung an der Versetzung ist beträchtlich, selbst für moderate Linienladungen. Unter der Voraussetzung, dass nur ein Typ von Einfangzentren existiert, ergibt die Auswertung der Messungen in Si mit dem CCR-Modell tiefe Versetzungsniveaus in Übereinstimmung mit DLTS-Resultaten [179]. Es wurden aber keine reproduzierbaren Unterschiede

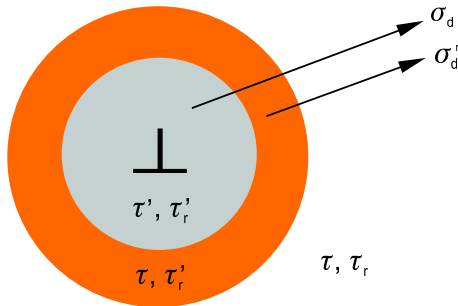


Abb. 2.10: Volumenrekombinationsmodell einer oberflächenparallelen Versetzung. Im Allgemeinen gibt es einen Zylinder um die Versetzung mit geänderter totaler Lebensdauer der Minoritätsladungsträger τ' und einen zweiten mit geänderter strahlender Lebensdauer τ_r' . Außerhalb des Versetzungsbereichs beträgt die Gesamtlebensdauer τ und die der strahlenden Rekombination τ_r .

der Rekombinationsaktivität von 60° - und Schraubenversetzungen gefunden. Gekrümmte Versetzungsabschnitte lieferten dieselbe Dichte an tiefen Einfangzentren wie in $\langle 110 \rangle$ -Richtung verlaufende, gerade Versetzungen. Daraus lässt sich schlussfolgern, dass nicht die Kinken die Zentren sind, die die Versetzungsladung tragen.

Neben der Abhängigkeit des EBIC-Kontrasts wie bei WILSHAW (Typ 1) finden KITTNER und SEIFERT einen zweiten Kontrasttyp (Typ 2), der eine Abnahme von c mit der Temperatur und die Zunahme mit I_0 zeigt [110]. Diese Autoren verwenden als Modell die Shockley–Read–Hall-Rekombinationstheorie. Es wird dabei vorausgesetzt, dass die Rekombination an unabhängigen Zentren erfolgt und nicht wie beim Wilshawmodell an wechselwirkenden ladungskontrollierten Zentren. Die spezielle Form der Abhängigkeit $c_{\text{EBIC}} = f(T)$ hängt von der energetischen Lage der unabhängigen Rekombinationszentren in der Bandlücke ab: Das Typ-2-Verhalten ist mit flachen Niveaus verbunden. Tiefe Zentren liefern den Typ-1-Kontrast mit einer $T^{1/2}$ -Abhängigkeit. Der Unterschied der beiden Kontrasttypen wird auf eine unterschiedliche Kontamination mit Fremdatomen zurückgeführt. Während Typ-2-Versetzungen den relativ „reinen“ Versetzungszustand charakterisieren, weisen dekorierte Versetzungen ein Typ-1-Verhalten auf. Dies konnte mit Dekorationsexperimenten gezeigt werden, wo Kupfer in SiGe-Epitaxieschichten eindiffundiert wurde und sich an Anpassungsversetzungen anlagerte [110].

Der EBIC-Kontrast von deformationsinduzierten Defekten wurde von KUSANAGI *et al.* ebenfalls mit dem SRH-Modell* ausgewertet [124, 125]. Die Temperaturabhängigkeit des Kontrasts lieferte die Energieniveaus verschiedener Versetzungsanordnungen. Für undekorierte 60° - und Schraubenversetzungen ergaben sich Niveaus bei 0,06 eV Abstand zu den Bandkanten. Der Temperaturverlauf des Kontrasts von Stapelfehlerdipolen hingegen konnte nur angepasst werden unter der Annahme von zusätzlichen tiefen Niveaus neben flachen Zuständen bei $E_v + 0,09$ eV und $E_c - 0,09$ eV. Neben der Abhängigkeit von den Deformationsbedingungen wurden charakteristische Veränderungen des Versetzungskontrasts nach dem Gettern von Übergangsmetallen gemessen und mit tiefen Niveaus in Verbindung gebracht.

Die physikalische Bedeutung des CCR- und des SRH-Modells ist nicht ganz klar. Die Annahme im letzteren, dass unabhängige Zentren existieren ohne Überlappung der Wellenfunktionen und Verbreiterung der Niveaus in Bänder, wie sie u. a. aus Leitfähigkeitsmessungen an Versetzungen folgt [126], erscheint unberechtigt. Die plausibleren Annahmen des ersteren Modells erlauben dagegen nicht die Interpretation des Typ-2-Kontrasts un- oder schwach dekorierte Versetzungen.

Neben der EBIC-Abbildung gibt es eine Reihe anderer Verfahren, die auf dem Grundprinzip der lokalen Anregung mit einem Elektronenstrahl oder Licht beruhen und die Verteilung des entsprechenden Signals aufzeichnen. Im Folgenden soll nur auf die Katodolumineszenz (CL) eingegangen werden. Wie mit EBIC wird bei der CL-Abbildung die Rekombinationswirksamkeit von Defekten aufgezeichnet. Die hohe Ortsauflösung im SEM erlaubt das Studium einzelner Versetzungen in Proben mit Versetzungsdichten bis zu 10^8 cm^{-2} . In Abhängigkeit von der Tiefenlage, der Beschleunigungsspannung im SEM, der Diffusionslänge der Minoritätsladungsträger haben

*SRH Shockley–Read–Hall

wir gemessen, dass die Kontraste von frischen, durch plastische Deformation induzierten Versetzungen im CL- oder EBIC-Bild 0,1 bis 1 μm ausgedehnt sind (Schreiber *et al.* 1993 [222]). Die Donolatotheorie wurde von PASEMANN, HERGERT und HILDEBRANDT [186, 75, 82] für den Lumineszenzkontrast erweitert. Der CL-Kontrast ist analog zum EBIC-Kontrast (Gl. 2.2) definiert. Während der Kontrast im EBIC-Bild von der gesamten Ladungsträgerlebensdauer abhängt, gibt es für die CL generell zwei Anteile. Die totale Lebensdauer der Minoritätsladungsträger setzt sich aus der Lebensdauer der strahlenden und der nichtstrahlenden Rekombination zusammen, $1/\tau = 1/\tau_r + 1/\tau_{nr}$. Die Versetzung wird als ein zylindrischer Bereich mit geänderter totaler und strahlender Lebensdauer (τ' und τ'_r) beschrieben (Abb. 2.10). Beide Bereiche werden i. a. mit unterschiedlichen Querschnitten (σ_d und σ_d^i) angenommen. Der Hintergrund ist die experimentelle Beobachtung von Halokontrasten, die im Zusammenhang mit defektgebundener Emission oder der Dekoration durch Fremdatome bzw. Verarmungszonen direkt aus der strahlenden Rekombination resultieren.

Der erste Teil des CL-Kontrastes c_{CL} ist analog dem EBIC-Fall und vom Verhältnis der gesamten Minoritätsladungsträgerlebensdauer im perfekten Kristall und im Defektgebiet, τ/τ' , bestimmt. Hinzu kommt ein Term, der in Beziehung zum Verhältnis der strahlenden Lebensdauern, τ_r/τ'_r , steht [186, 222]:

$$c_{CL} = -\frac{\tau/\tau' - 1}{\tau_r I_0^{CL}} \int_{\sigma_d} j_{CL}(z) p(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{\tau_r/\tau'_r - 1}{\tau_r I_0^{CL}} \int_{\sigma_d^i} A_1(z) p(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

(I_0^{CL} CL-Signal im perfekten Kristall, σ_d^i Querschnitt des Versetzungszyinders mit geänderter strahlender Ladungsträgerlebensdauer, $j_{CL}(z)$ Katodolumineszenzsignal für eine Punktquelle in der Tiefe z , $p(\mathbf{r})$ Dichteverteilung der Überschuss-Minoritätsladungsträger, $A_1(z)$ optische Verlustfunktion).

Das detektierte spektrale CL-Signal,

$$I_{CL}(h\nu) = Q(h\nu) \int_0^{\theta_c} \sin \theta d\theta \int \frac{p(\mathbf{r})}{\tau_r} \exp\left[-\frac{\alpha(h\nu)z}{\cos \theta}\right] d\mathbf{r}$$

($Q(h\nu)$ relative spektrale Verteilung der Rekombinationsstrahlung, θ Winkel, θ_c Grenzwinkel der Totalreflektion, α Absorptionskoeffizient, \mathbf{r} Ortsvektor),

stellt das Integral der strahlenden Rekombinationsrate über das Probenvolumen dar [76, 82]. Eine Korrektur erfolgt mit den Absorptionsverlusten der in der Tiefe z erzeugten Lumineszenzstrahlung und der zu berücksichtigenden Totalreflektion. Im Falle der panchromatischen Detektion werden effektive Werte für die Quantenausbeute \bar{Q} und den Absorptionskoeffizienten $\bar{\alpha}$ genommen. Ausgehend von der Störungstheorie erster Ordnung konnte gezeigt werden, dass der Kontrast von oberflächenparallelen Versetzungen sich berechnen lässt als [81, 82]

$$c_{CL} = \lambda c^* + \lambda_r c_r^*, \quad (2.3)$$

d. h. aus einem Produkt der Defektstärken λ und λ_r und theoretischen Profildfunktionen c^* und c_r^* , die sich aus den konkreten Experiment- und Materialparametern ergeben. Der erste Summand in Gl. 2.3 bezieht sich auf die gesamte, der zweite auf die strahlende Rekombination. In störungstheoretischer Näherung erster Ordnung erhält man für die totale Defektstärke bzw. die Defektstärke der strahlenden Rekombination

$$\lambda = \frac{\sigma_d}{L^2} \left(\frac{\tau}{\tau'} - 1 \right), \quad \lambda_r = \frac{\sigma_d^r}{L^2} \left(\frac{\tau_r}{\tau'_r} - 1 \right), \quad (2.4)$$

mit L als Diffusionslänge der Minoritätsladungsträger. Diese Näherung ist nur für schwache Defekte ($\lambda < 1,2$ [82]) gültig. Die Einbeziehung höherer Ordnungen [185] führt zu modifizierten Ausdrücken der Defektstärken in Gl. 2.4. Für verschiedene Versetzungskonfigurationen in III-V-Halbleitern haben wir die Defektstärken aus den gemessenen Kontrasten bestimmt. Die experimentellen Werte hängen stark vom Dekorationszustand der untersuchten Defekte ab und liegen

zwischen 0,02 und 2,45 [82, 221, 222]. Dabei erfolgte die Berechnung nach Gl. 2.3 unter der Annahme, dass sich die strahlende Lebensdauer im Versetzungsbereich nicht ändert, d. h. $\lambda_r = 0$. Beim Vergleich verschiedener Materialien muss die unterschiedliche Diffusionslänge der Minoritätsladungsträger berücksichtigt werden, und es ergibt sich folgendes Bild: Für frisch induzierte Gleitversetzungen in n-GaAs lagen die experimentellen Werte von λL^2 bei 0,04 bis 2,39, während eingewachsene Versetzungen Werte zwischen 6,33 und 11,81 hatten. Für Anpassungsversetzungen in GaAs_{0,62}P_{0,38}/GaAs-Schichten war $\lambda L^2 = 0,85$ bis 1,94 (Hildebrandt et al. 1998 [82]). Der angegebene Bereich stellt keinen Messfehler, sondern die Variation für Versetzungen in verschiedenen Proben dar. Selbst innerhalb einer Probe wurden starke Unterschiede entlang der Versetzungslinie oder für unterschiedliche Versetzungen gefunden. Dies belegt den Einfluss der Dekoration mit Punktdefekten oder anderer Faktoren wie inhomogene Ladungsträgerkonzentrationen auf den Defektkontrast.

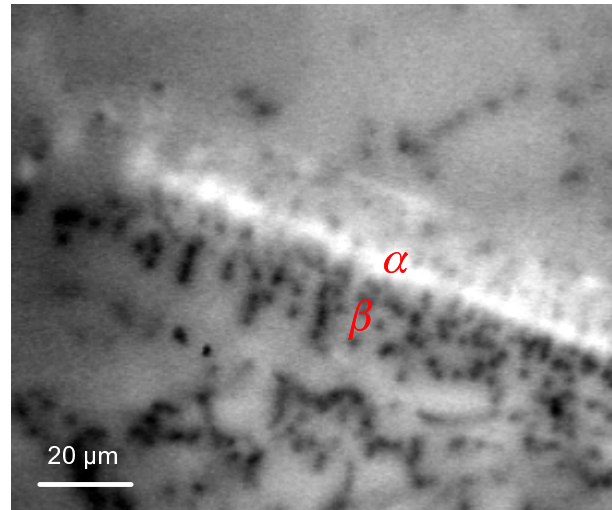
Verschiedene Autoren fanden in n-GaAs einen etwas stärkeren CL-Kontrast von α -Versetzungen im Vergleich zu β -Versetzungen [233, 280]. In p-GaAs hingegen war die Rekombinationsaktivität von β -Versetzungen höher als die der α -Versetzungen. Diese Befunde, die wir aber in eigenen Messungen nicht zweifelsfrei reproduzieren konnten, wurden mit den Zuständen dieser Versetzungen in der Bandlücke in Zusammenhang gebracht. Aus DLTS-Messungen an plastisch deformiertem GaAs konnte abgeleitet werden, dass α -Versetzungen ein Einfangzentrum für Elektronen und β -Versetzungen ein Einfangzentrum für Löcher darstellen, wie bereits oben im Abschn. 2.3.1 angeführt [278]. Diese experimentellen Befunde wurden in Übereinstimmung gesehen mit Dichtefunktional-Clusterrechnungen, die Energieniveaus der $90^\circ\alpha$ -Partialversetzungen in der oberen Hälfte und Energieniveaus der $90^\circ\beta$ -Partialversetzungen in der unteren Hälfte der Bandlücke erhielten [97]. Für $30^\circ\beta$ -Versetzungen hingegen ergaben neuere *ab-initio*-Rechnungen [100] Niveaus nahe der Leitungsbandkante, während die Niveaus der $30^\circ\beta$ -Versetzungen resonant im Valenzband liegen.

Die Rekombinationsmechanismen an Versetzungen in Verbindungshalbleitern sind wegen der Vielzahl möglicher Versetzungsstrukturen sicherlich komplexer als in Si. Bisher liegen nur erste Ansätze zur Entwicklung eines rekombinationstheoretischen Modells für Verbindungshalbleiter vor [223, 233]. Das für den EBIC-Kontrast von Defekten in Si angewandte CCR- bzw. SRH-Modell kann in ähnlicher Weise auf die aus dem Experiment extrahierten Defektstärken angewandt werden. Damit sollten temperatur- und strahlstromabhängige Kontrastmessungen auch für GaAs in der Lage sein, versetzungsbezogene Energieniveaus und Defektdichten zu liefern, wie für Si demonstriert wurde [124, 125].

Die Annahme, dass sich die strahlende Lebensdauer im Versetzungsbereich nicht ändert, d. h. $\lambda_r = 0$, ist insbesondere dann fraglich, wenn Hellkontraste im CL-Bild auftreten. Hellkontraste werden auch im EBIC-Bild gefunden, die dort aus der Änderung der gesamten Lebensdauer resultieren. Sie wurden mit einer versetzungsinduzierten Umverteilung der Dotieratome oder der Getterung von Verunreinigungen und deren Einfluss auf die gesamte Lebensdauer der Minoritätsladungsträger in Verbindung gebracht [109].

Ein deutlicher Unterschied im Verhalten der strahlenden und nichtstrahlenden Rekombination an α - und β -Versetzungen wurde für CdTe festgestellt. Wir konnten zweifelsfrei nachweisen, dass die defektbezogene Lumineszenzbande bei 1,476 eV (Y-Lumineszenz) mit $60^\circ\alpha$ -Versetzungen assoziiert ist [83, 146]. Diese Korrelation wurde durch die CL-Untersuchung von definierten, frischen Gleitversetzungen hergestellt, die durch Indentierung von $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ -, (111)- und (110)-orientiertem CdTe erfolgte (Schreiber et al. 1999 [224]). Mit den bekannten $\langle 1\bar{1}0 \rangle \{111\}$ -Gleitsystemen kann in den gebildeten Versetzungsrosetten im Zusammenhang mit der Bestimmung der Polarität der $\{111\}$ -Flächen eine eindeutige Zuordnung zum Versetzungstyp erfolgen (Abb. 2.11). Die Eigenschaften der Versetzungslumineszenz wurde in temperaturabhängigen Messungen des PL- und CL-Spektrums studiert. Es wird vermutet, dass der strahlende Zerfall eines versetzungsge-

Abb. 2.11: Versetzungslumineszenz an α -Versetzungen in CdTe. Die $60^\circ\alpha$ - und β -Versetzungen gehören zu einer Rosette frisch erzeugter Versetzungen an einem Indentereindruck auf einer $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ Te-Oberfläche. CL-Abbildung im SEM, Proben-temperatur 72 K, Beschleunigungsspannung 20 kV, Strahlstrom 1 nA [83, 146].



bundenen Exzitons beobachtet wird, wobei eine thermische Aktivierungsenergie von $0,011 \pm 0,001$ eV gemessen wird. Diese kann als Summe der Elektronen- und Löcherbindungsenergie im Spannungsfeld der dissoziierten 60° -Versetzung interpretiert werden [208]. ÖBERG [176] berechnete die elektronische Struktur von Partialversetzungen in CdTe und erhielt für die $90^\circ\alpha$ -Partialversetzung ein eindimensionales Band oberhalb $E_v + 0,1$ eV. Dieser Wert steht mit der gemessenen Übergangsenergie in recht guter Übereinstimmung.

Die untersuchten Versetzungen in CdTe wurden durch Raumtemperaturdeformation erzeugt. Ein Einfluss der Kontamination mit Fremdatomen auf die beobachtete Y-Lumineszenz ist somit nahezu auszuschließen (Hildebrandt *et al.* 1997 [83]). Die Frage, ob die Exzitonen an bestimmte lokalisierte Defekte im Kern (wie RD oder Leerstellen) gebunden sind, ist gegenwärtig nicht zu beantworten. Leipner *et al.* (1997) [146] diskutierten die Möglichkeit unterschiedlicher Schneidprozesse der Rosettenversetzungen in Abb. 2.11 mit Versetzungen anderer Gleitsysteme, die höhere Sprungdichten bzw. Leerstellendichten im Kern für α -Versetzungen liefern könnten.

Mit EBIC- und CL-Abbildung im SEM erreicht man eine lokale Auflösung bis in den Submikrometerbereich und kann damit Rekombinationsprozesse zu Versetzungen zuordnen. Die Auflösung ist aber nicht atomar, d. h. es ist keine klare Zuordnung zu bestimmten Zentren im Versetzungskern bzw. im Spannungsfeld der Versetzung möglich. Damit ist die Frage, ob Versetzungszustände oder Fremdatome für die beobachteten Phänomene verantwortlich sind, meistens nicht eindeutig zu beantworten. ALEXANDER [4] hat darauf hingewiesen, dass es auch bei sorgfältigster Versuchsführung sehr schwer ist, Versetzungen ohne jegliche Kontamination zu finden, die die elektrische Aktivität dominieren. Auf der anderen Seite können versetzungsgebundene Zustände durch Wasserstoff passiviert werden [37]. In einer Reihe von Experimenten wurde der EBIC-Kontrast von Versetzungen nach der Eindiffusion von Übergangsmetallen studiert. KUSANAGI *et al.* [124] stellten fest, dass Gleitversetzungen und Franksche Partialversetzungen in Si nur dann rekombinationsaktiv bei $T > 200$ K sind, wenn sie Metallatome gegettert haben. Dem Problem der Lokalisierung der D-Band-Lumineszenz wandten sich HIGGS *et al.* [80] zu: Die Intensität der D1/D2-Linien war am höchsten zwischen den Gleitlinien, die von D3/D4 auf diesen. Charakteristische Änderungen ergeben sich mit dem Kontaminationsgrad: Bei äußerst geringer Konzentration von Fremdatomen gab es keine D-Band-Lumineszenz und keinen EBIC-Kontrast. Mit wachsender Konzentration von Übergangsmetallen gibt es intensive Lumineszenz und starken EBIC-Kontrast. Bei starker Kontamination geht aber die Versetzungslumineszenz verloren und die nichtstrahlende Rekombination dominiert, was sich im starken EBIC-Kontrast äußert. Die Lokalisation der D-Band-Lumineszenz untersuchten mittels CL auch SEKIGUCHI und SUMINO [229]. Vergleichbar

zu HIGGS *et al.* stellten sie eine Assoziation der D3/D4-Banden mit regulären Versetzungslinien fest, wobei eine Beteiligung von Fremdatomen nicht auszuschließen ist. Die D1/D2-Lumineszenz wird mit Produkten der Versetzungsbewegung oder Versetzungsschneidprozessen in Zusammenhang gebracht.

Ein interessanter Ansatz zur Erfassung von Versetzungszuständen ist die kinematische Untersuchungen zur Bewegung der Versetzungen im SEM. Es ist möglich, den Kontrast der bewegten Versetzungen zu messen [89], wobei bei der *in-situ* Deformation bei niedrigen Temperaturen die Kontamination mit Verunreinigungen zu vernachlässigen ist. Bei der Dynamik der Versetzungen im SEM spielt das rekombinationsangeregte Versetzungsgleiten eine wichtige Rolle [153]. Dabei wird die Energie der Elektron–Loch-Rekombination an lokalisierten flachen Zuständen direkt für eine Erniedrigung der Kinkenbildungs- oder Kinkenmigrationsenergie benutzt.

Neue Sondentechniken mit verbesserter Auflösung [63] könnten auch in der Lage sein, Beiträge zur Identifikation von versetzungsgebundenen Zuständen zu liefern. Möglich erscheint die Anwendung der Rastertunnel-Lumineszenz [281], der Einsatz von optischer Nahfeldmikroskopie [261, 38] oder die Katodolumineszenz in Verbindung mit der TEM [248] oder der HREM. Direkter Zugang zu den Bindungen im Versetzungskern erlaubt die hochauflösende Elektronenenergieverlustspektroskopie (EELS). In Verbindung mit der STEM-Abbildung im Z-Kontrast (*high-angle annular dark field*) kann eine Korrelation zwischen den Spektren und bestimmten atomaren Anordnungen im Versetzungskern hergestellt werden. BATSON [14] untersuchte Anpassungsversetzungen in verspannten SiGe-Schichten mit einer Sonde von 0,2 nm Durchmesser bei einer Energieauflösung von 0,2 eV. Aus den Energieverlustspektren wird auf flache Zustände in der Bandlücke nahe des Leitungsbandes geschlossen. Weitere Effekte, wie der Einfluss auf die Bandstruktur aus der gebrochenen Symmetrie durch Anwesenheit des Stapelfehlers und aufgrund der Rekonstruktion sowie Spannungseffekte, können im Detail diskutiert werden. Sowohl die Z-Kontrast-Abbildung der 90°-Partialversetzung als auch die EELS ergeben deutliche Hinweise auf eine DP-Rekonstruktion (Abb. 2.4 d, S. 8).

3 Plastische Deformation und Versetzungsdynamik

3.1 Versetzungsgeschwindigkeit und Verformungsparameter

Die Verformungskurve von Halbleitern weist maximal fünf unterschiedliche Bereiche auf, denen verschiedene physikalische Prozesse der Versetzungsdynamik und -wechselwirkung zugrunde liegen [234]. Am deutlichsten können diese Bereiche mit einem Kompressionsexperiment bei konstanter Verformungsrate in einer [213]-Kristallorientierung sichtbar gemacht werden. Dabei wird ein Gleitsystem bevorzugt angeregt (Einfachgleitung, siehe Tab. 3.1). Die Orientierung der primären Gleitebene zeigt Abb. 3.1.

Bei niedrigen Deformationstemperaturen tritt ein deutlicher Streckgrenzeneffekt (charakterisiert durch eine obere und untere Fließspannung) auf, der bei ansteigender Temperatur abgemildert wird. Die Spannungsüberhöhung kann so groß sein, dass Sprödbruch zur Zerstörung der Probe führt. Zwischen 400 und 900 K wurde bisher zumeist eine Vordeformation angewandt, um eine ausreichende Anzahl von beweglichen Versetzungen zur Verfügung zu stellen [18] und damit den Streckgrenzeneffekt zu verringern. Unterhalb dieses Temperaturbereiches gelang eine plastische Verformung nur, wenn gleichzeitig ein hydrostatischer Druck die Rissausbreitung verhinderte [19]. Die phänomenologische Beschreibung der Versetzungsbewegung an der unteren Streckgrenze als Bildung und Migration von Doppelkinken im Peierlspotential liefert das ALEXANDER-HAASEN-Modell [6]. Danach ergibt sich die untere Fließspannung zu

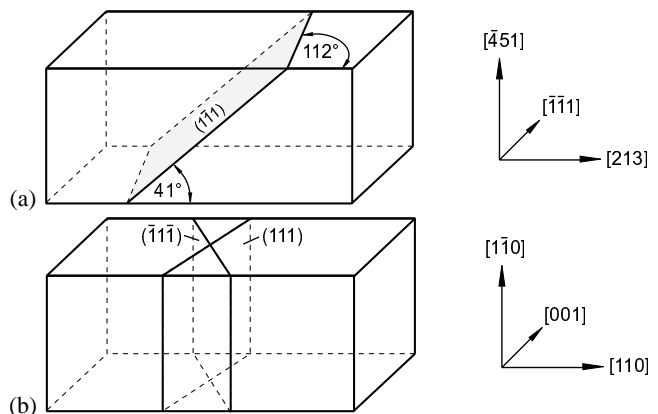
$$\tau_{ly} = C \dot{\epsilon}^{1/(2+m)} \exp \left[\frac{U}{(2+m)k_B T} \right]. \quad (3.1)$$

U und m sind die Aktivierungsenergie und der Spannungsexponent aus der Geschwindigkeit beweglicher Versetzungen,

$$v = B \tau_s^m \exp \left(- \frac{U}{k_B T} \right) \quad (3.2)$$

(B und C Konstanten, k_B Boltzmannkonstante, $\dot{\epsilon}$ Verformungsgeschwindigkeit).

Abb. 3.1: Kristallorientierung im Kompressionsexperiment (a) bei Einfachgleitung in [213]-Orientierung und (b) bei Mehrfachgleitung in [110]-Orientierung. Die primären {111}-Gleitebenen sind eingezeichnet.



Tab. 3.1: Gleitsysteme und Schmidfaktoren m_S im fcc-Gitter bei einer [213]-Kompressionsachse. Der erste Buchstabe bei der Kennzeichnung des Gleitsystems gibt die aktivierte Gleitebene*, beide Buchstaben die Schnittlinie zweier Gleitebenen, also die Gleitrichtung an. Das Hauptgleitsystem ist PQ; der Schmidfaktor ist Null für die Gleitebene Q.

| Gleitsystem | m_S |
|--|-------|
| PQ $(\bar{1}\bar{1}\bar{1}) \pm [011]$ | 0,467 |
| KQ $(1\bar{1}\bar{1}) \pm [101]$ | 0,292 |
| UQ $(111) \pm [1\bar{1}0]$ | 0,175 |
| QP $(\bar{1}\bar{1}1) \pm [011]$ | 0 |
| QK $(\bar{1}\bar{1}1) \pm [101]$ | 0 |
| QU $(\bar{1}\bar{1}1) \pm [1\bar{1}0]$ | 0 |
| PK $(\bar{1}\bar{1}\bar{1}) \pm [110]$ | 0,350 |
| UK $(111) \pm [01\bar{1}]$ | 0,350 |
| KP $(1\bar{1}\bar{1}) \pm [110]$ | 0,175 |
| UP $(111) \pm [10\bar{1}]$ | 0,175 |
| PU $(\bar{1}\bar{1}\bar{1}) \pm [10\bar{1}]$ | 0,117 |
| KU $(1\bar{1}\bar{1}) \pm [01\bar{1}]$ | 0,117 |

* P primäre, K konjugierte, U unerwartete, Q Quergleitebene

Die von SUMINO und YONENAGA [254] experimentell bestimmten Werte aus Gl. 3.2 sind in Tab. 3.2 aufgeführt. Bei GaAs bestehen größere Unterschiede zwischen den Messungen verschiedener Gruppen: U liegt für α -Versetzungen zwischen 0,89 und 1,30 eV, für β zwischen 1,24 und 1,57 eV und für Schrauben zwischen 1,10 und 1,40 eV [5, 163, 183, 252, 254]. Von vielen Autoren werden die von SUMINO und YONENAGA [254] angegebenen gleichen Aktivierungsenergien für α - und β -Versetzungen in GaAs angezweifelt und die Werte von ALEXANDER und GOTTSCHALK [5] mit 1,0 (α) und 1,3 eV (β) für am zuverlässigsten gehalten. Auf alle Fälle gilt aber für undotiertes GaAs: $v_\alpha > v_\beta$, wobei offenbar ein Zusammenhang besteht zwischen der Stärke der Rekonstruktion des Versetzungskerns (s. Abschn. 2.1) und der Versetzungsgeschwindigkeit von α - und β -Versetzungen, v_α und v_β . *Ab-initio*-Clusterrechnungen für 90° -Partialversetzungen lieferten eine Aktivierungsenergie U von 1,9 eV für Si und 0,8 bzw. 1,4 eV für α - bzw. β -Versetzungen in GaAs [177].

Die Kinkenbildung und -migration liefert die Interpretation der empirischen Aktivierungsenergie U . Die Geschwindigkeit eines Versetzungssegments der Länge L_d ist gegeben durch

$$\begin{aligned} v &= h_p L_d J, & \text{wenn } L_d < 2\lambda_k, \\ v &= h_p \lambda_k J, & \text{wenn } L_d > 2\lambda_k \end{aligned} \quad (3.3)$$

(h_p Periode des Peierls potentials, J Bildungsrate von Kinkenpaaren auf der langsameren Partialversetzung). λ_k bezeichnet die mittlere freie Weglänge einer Kinke, bevor sie mit einer zweiten entgegengesetzten Vorzeichens annihiliert,

$$\lambda_k = 2\sqrt{\frac{v_k}{J}}.$$

Für die Kinkengeschwindigkeit v_k lässt sich mit der Diffusionskonstanten der Kinken D_k eine Einsteinbeziehung formulieren,

$$v_k = \frac{bh_p \tau_s}{k_B T} D_k. \quad (3.4)$$

Die Versetzungsgeschwindigkeit für lange Segmente ($L_d > 2\lambda_k$) ergibt sich damit in diesem Mo-

Tab. 3.2: Experimentell bestimmte Parameter der Versetzungsgeschwindigkeit (Gl. 3.2) in undotiertem Si, GaAs und InP [254]. Die letzte Spalte gibt den Temperaturbereich an, in dem die Versetzungsgeschwindigkeit gemessen wurde (T_m Schmelztemperatur).

| Material | Versetzungstyp | B (m/s MPa $^{-m}$) | m | U (eV) | T/T_m (K) |
|----------|----------------|------------------------|-----|----------|-------------|
| Si | 60° | $1,0 \cdot 10^4$ | 1,0 | 2,20 | 0,52 – 0,63 |
| | Schraube | $3,5 \cdot 10^4$ | 1,0 | 2,35 | |
| GaAs | α | $1,9 \cdot 10^3$ | 1,7 | 1,30 | 0,38 – 0,61 |
| | β | $5,9 \cdot 10$ | 1,6 | 1,30 | |
| | Schraube | $1,2 \cdot 10^2$ | 1,8 | 1,40 | |
| InP | α | $4,0 \cdot 10^4$ | 1,4 | 1,60 | 0,51 – 0,78 |
| | β | $5,0 \cdot 10^5$ | 1,8 | 1,70 | |
| | Schraube | $4,0 \cdot 10^4$ | 1,7 | 1,70 | |

dell [85] zu

$$v = \frac{2bh_P^2 h_2 v_D}{k_B T} \tau_s \exp\left(\frac{S}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{W_m + U_k}{k_B T}\right), \quad (3.5)$$

mit der Bildungsrate von Doppelkinken

$$J = \frac{bh_P \tau_s}{h_2^2 k_B T} D_k \exp\left(-\frac{2F_k}{k_B T}\right)$$

und der Diffusionskonstanten

$$D_k = v_D h_2^2 \exp\left(-\frac{W_m}{k_B T}\right)$$

(h_2 Periode des sekundären Peierls-potentials entlang der Versetzungslinie, W_m Höhe des sekundären Peierls-potentials – Kinkenmigrationsenergie, v_D Debye-frequenz, $F_k = U_k - TS$ freie Energie der Kinkenbildung, U_k innere Energie einer Doppelkinke).

Ein Term mit der Entropie S (im Bereich $5 - 7 k_B$ [60]) wurde dabei berücksichtigt. Im längen-abhängigen Regime der Versetzungsgeschwindigkeit ($L_d < 2\lambda_k$) ändert sich sowohl der Vorfaktor als auch die Aktivierungsenergie,

$$v = \frac{bh_P^2 L_d v_D}{k_B T} \tau_s \exp\left(\frac{S}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{W_m + 2U_k}{k_B T}\right). \quad (3.6)$$

Die Aktivierungsenergie U der Versetzungsgeschwindigkeit im längenunabhängigen Bereich (Gl. 3.5) entspricht damit der Summe aus Kinkenbildungs- und Kinkenmigrationsenergie. Bei der Bewertung experimenteller Ergebnisse muss im Detail überprüft werden, ob die Voraussetzungen des HIRTH–LOTHE-Modells [85] erfüllt sind. Der Übergang zwischen den beiden Bereichen (Gl. 3.3) liegt für Si bei einer Versetzungslänge von $0,5 \mu\text{m}$ und bei einigen Mikrometern für GaAs [60].

Der Spannungsexponent findet in dem HIRTH–LOTHE-Modell keine theoretische Begründung. In der Tat findet man für Silicium $m = 1$, während für Verbindungshalbleiter $1 < m < 2$ gemessen wurde (Tab. 3.2). SUMINO argumentiert, dass dieser höhere Wert mit dem *Pinning* von Versetzungen an Verunreinigungen zu tun haben könnte [254]. Die zweite Möglichkeit ist, dass die Spannungen, bei denen die Geschwindigkeitsmessungen durchgeführt wurden, zu hoch sind und damit außerhalb des Geltungsbereichs der Einsteinrelation (3.4) liegen.

Eine langanhaltende Kontroverse bestand darin, welche Energie nun größer ist, W_m oder F_k . Inzwischen ist in ersten Ansätzen eine Untersuchung der Kinkendynamik direkt im Elektronenmikroskop mit einer speziellen hochauflösenden Abbildungsmethode möglich geworden [112].

Folgende Werte wurden in Si gemessen: $F_k = (0,73 \pm 0,15) \text{ eV}$ (90° -Partialversetzung), $F_k = (0,80 \pm 0,15) \text{ eV}$ (30° -Partialversetzung) und $W_m = (1,24 \pm 0,07) \text{ eV}$ (für beide Partialversetzungstypen). Auch aus theoretischen Rechnungen folgt $W_m > F_k$, wengleich F_k in den bisherigen Clustersimulationen wahrscheinlich eher unterschätzt und W_m überschätzt wird [96]. Mit der Kombination atomistischer Rechnungen mit molekuldynamischen Simulationen von aufgespaltenen Versetzungen in Si kommen CAI *et al.* [32] zu dem Schluss, dass W_m bei 1,2 eV und F_k bei 0,7 eV liegen muss.

Der zweite mögliche Zugang zur phänomenologischen Beschreibung der makroskopischen Verformung ergibt sich über den Schoeckformalismus [218] der thermisch aktivierten Versetzungsbewegung. Ausgehend von der Orowanbeziehung $\dot{\epsilon}_{\text{pl}} = \rho_m b v$ kann die (plastische) Verformungsrate ausgedrückt werden durch

$$\dot{\epsilon}_{\text{pl}} = \dot{\epsilon}_0 \exp \left[-\frac{\Delta G(\tau_{\text{eff}}, T)}{k_B T} \right] \quad (3.7)$$

(ρ_m Dichte beweglicher Versetzungen, $\Delta G = f(\tau_{\text{eff}}, T)$ Änderung der Gibbschen Energie, die notwendig ist für die Versetzung, um ein Gleithindernis zu überwinden, $\dot{\epsilon}_0 = \rho_m b v_D / \Lambda$ spannungsunabhängiger Vorfaktor, Λ mittlerer Abstand zwischen den Gleithindernissen, $\tau_{\text{eff}} = \tau_s - \tau_i$, τ_i innere Spannung aus der langreichweitigen elastischen Wechselwirkung zwischen den Versetzungen).

In diesem Fall ist die Aktivierungsenergie abhängig von der Schubspannung. Die Änderung der Enthalpie wird nach

$$\Delta G = \Delta G_0 - V \tau_{\text{eff}}$$

durch die Spannung erniedrigt. $\Delta G_0 = f(T)$ ist die Aktivierungsenergie der Versetzungsgeschwindigkeit ohne äußere Spannung und entspricht U im ALEXANDER–HAASEN-Modell. Die effektive Spannung

$$\tau_{\text{eff}} = \tau_s - G \rho_d^{1/2} \quad (3.8)$$

ergibt sich aus der inneren Spannung $\tau_i = G \rho_d^{1/2}$, die aus der langreichweitigen elastischen Wechselwirkung zwischen den Versetzungen resultiert. Das Aktivierungsvolumen $V = b d \Lambda$ (d Ausdehnung der Gleithindernisse), kann im Spannungsrelaxationsexperiment aus

$$V = k_B T \left(\frac{\partial \ln \dot{\epsilon}_{\text{pl}}}{\partial \tau_s} \right)_T \quad (3.9)$$

bestimmt werden, vorausgesetzt, die Dichte beweglicher Versetzungen ρ_m bleibt dabei konstant. Es ist zu berücksichtigen, dass bei Deformation mit konstanter Verformungsrate (dynamische Verformung), von der Gesamtdehnung ϵ der elastische Anteil abzuziehen ist, um die plastische Dehnung zu erhalten, $\epsilon_{\text{pl}} = \epsilon - \epsilon_{\text{elast}}$. Entsprechend dem thermodynamischen Ansatz von SCHOECK [218] hängt ΔG nicht nur vom Aktivierungsvolumen und der Spannung bei gegebenem T , sondern auch von der Temperaturabhängigkeit des Schubmoduls ab. Kann man diese vernachlässigen und lässt man außerdem die Abhängigkeit von der Entropie außer Acht, ergibt sich aus der Spannungsrelaxation [181]

$$\Delta G(\tau_s) = \int_{\tau_s}^{\tau_0} V d\tau_s. \quad (3.10)$$

Weitere Möglichkeiten des experimentellen Zugangs zu ΔG – die insbesondere nicht die Fließspannung bei 0 K, τ_0 , benötigen – werden von OMRI *et al.* [181] diskutiert.

Die empirische Beschreibung von ALEXANDER und HAASEN repräsentiert die experimentellen Befunde in hochreinen Halbleitern für einen weiten Bereich der Temperaturen und Spannungen besser als das thermodynamische Modell von SCHOECK. Die Parameter C und m besitzen zunächst keine direkte physikalische Bedeutung. ZONGO und FARVACQUE [286] haben den Versuch unternommen, die phänomenologische Beschreibung mit dem thermodynamischen Modell

zu verknüpfen. Der Zusammenhang zwischen Dehnungsrate und plastischer Fließspannung wird im ALEXANDER–HAASEN-Modell nicht über Gl. 3.9, sondern mit

$$2 + m = \left(\frac{\partial \ln \dot{\epsilon}}{\partial \ln \tau_s} \right)_T$$

hergestellt. Es erweist sich, dass der Spannungsexponent m keine Konstante ist, sondern zum zugrundeliegenden Multiplikationsmechanismus der Versetzungen in Beziehung steht. Der Parameter C hängt von τ_i an der unteren Streckgrenze ab.

Wenngleich Gl. 3.7 zur Beschreibung des Deformationsmechanismus bei sehr hoher Spannung* die adäquate Beschreibung darstellt, wird oftmals nur das ALEXANDER–HAASEN-Modell verwendet. Jedoch ergibt sich im Arrheniusplot von Gl. 3.1 eine deutliche Änderung im Anstieg bei hohen Spannungen bzw. niedrigen Temperaturen [258]. In diesem Bereich ergibt sich m zwischen 20 und 50. Sowohl der Spannungsexponent m als auch die Aktivierungsenergie U sind temperaturabhängig. Es wurde postuliert, dass dieses neue Regime der Versetzungsdynamik mit einem Übergang von aufgespaltenen *Glide-set*- zu unaufgespaltenen *Shuffle-set*-Versetzungen zu tun hat. Theoretische Rechnungen zeigen, dass die Peierlsspannung größer im *Glide* als im *Shuffle set* ist [211]. Solange es um aufgespaltene Versetzungen im Experiment geht, scheint dieses Ergebnis irrelevant. Jedoch konnten DUESBERY und JOÓS [45] mit der Berechnung der gesamten elastischen Energie für die Nukleation von Doppelkinken zeigen, dass die Bewegung einer nichtaufgespaltenen Versetzung im *Shuffle set* eine geringere Aktivierungsenergie bei hohen Spannungen hat. Unterhalb $\tau_s \approx 0,01 G$ kehren sich die Verhältnisse um: Dissoziierte Versetzungen im *Glide set* haben eine kleinere Aktivierungsenergie.

Der direkte experimentelle Nachweis der nichtaufgespaltenen *Shuffle-set*-Versetzungen erweist sich als schwierig. Die Rechnungen wurden für Si durchgeführt, demzufolge versuchte man den experimentellen Nachweis auch für dieses Material. Allerdings ist es sehr kompliziert, Si mit Standardverformungstechniken unterhalb von 500 K zu verformen. Man benötigt einen zusätzlichen hydrostatischen Druck zur Vermeidung von Sprödbbruch. Damit induziert man aber Phasenübergänge, wie sie auch von Indentierungsversuchen bekannt sind [101, 173]. Wenn eine Vorverformung bei höheren Temperaturen zur Erzeugung einer ausreichenden Versetzungsdichte angewandt wird, hat das zur Folge, dass diese existierenden Versetzungen zwar eine plastische Deformation bei tiefen Temperaturen ermöglichen, aber keinesfalls einen Übergang zum *Shuffle set* zeigen [206].

In eigenen Experimenten wurde die Versetzungserzeugung in registrierenden Härtemessungen mit einem Nanoindenter (Lasten um 5 mN, Eindringtiefe ~ 10 nm bei einer als sphärisch anzusetzenden Indenterspitze mit dem Radius 1 μm) studiert. Die Trescaspannung τ_T im Deformationsgebiet lässt sich zu 10 GPa abschätzen. Für Si konnten mittels Ramanmikroskopie in der Tat verschiedene Hochdruckphasen entsprechend der Literatur [101] nachgewiesen werden. Im Gegensatz zu Si, wo mittels TEM keine Versetzungen gefunden wurden, treten in GaAs im Bereich der Nanoindentereindrücke ca. 200 nm ausgedehnte Versetzungsrosetten auf (*Leipner et al.* 2001 [140]). Diese Versetzungsbildung stellt die Ursache dar für den in den Belastungskurven gefundenen *Pop-in*-Effekt[†] in GaAs. Die Versetzungen lassen sich mit einer homogenen Versetzungsnukleation erklären, da τ_T im Bereich der Spannung zur Generation kritischer Versetzungsschleifen liegt. Im Gegensatz zu wesentlich größeren Vickersindrücken, wo ausgedehnte Stapelfehlerbänder aufgrund der dekorrelierten Bewegung von 90°- und 30°-Partialversetzungen[‡] vorkommen (*Leipner et al.* 1990 [145]), werden bei den Nanoindentereindrücken nur perfekte Versetzungen mit $\mathbf{b} = a/2\langle 110 \rangle$ gebildet. Die mittels TEM gefundenen 200 nm ausgedehnten Versetzungsrosetten

*bzw. in Materialien mit kleiner Peierlsbarriere

[†]*Pop-in*-Effekt: plötzlicher Anstieg der Eindringtiefe des Indenters bei einer bestimmten Last

[‡]Bei einer bestimmten Spannung wird $d \rightarrow \infty$, vgl. Abb. 2.3, S. 7.

repräsentieren den Zustand nach folgenden Prozessen: a) Generation kritischer Versetzungsschleifen während des *Pop-in*-Effekts, b) weiter lokale plastische Deformation durch Koaleszenz und Ausdehnung der Versetzungsschleifen unmittelbar nach dem Auftreten des *Pop-in*-Effekts, c) Relaxation und Stabilisierung der Versetzungsstruktur bei Entlastung. Ob es sich bei den gebildeten Versetzungen tatsächlich um *Shuffle-set*-Versetzungen handelt, ist noch nicht völlig geklärt, nach dem o. a. Modellen aber wahrscheinlich.

Aus der Analyse der unterschiedlichen Bereiche I bis V der Verformungskurve kann man – insbesondere über die Bestimmung des Zusammenhangs zwischen Spannung und Verformungsgeschwindigkeit bei verschiedenen Temperaturen – Aussagen über die Beteiligung von Punktdefekten treffen. Besonders interessant sind die Bereiche der dynamischen Erholung III und V. Bereich V ist durch Quergleiten von Schraubenversetzungen und Bereich III bei höheren Temperaturen durch Versetzungsklettern bestimmt [238]. Im Kletterregime kann der Zusammenhang zwischen Verformungsgeschwindigkeit und der Spannung am Einsatzzpunkt von Bereich III, τ_{III} , in folgender Weise beschrieben werden [239]:

$$\dot{\epsilon} = A_W \frac{D_0}{k_B T} \tau_{III}^n \exp\left(-\frac{Q_{sd}}{k_B T}\right). \quad (3.11)$$

Es besteht damit eine Beziehung zum Selbstdiffusionskoeffizienten

$$D_{sd} = D_0 \exp\left(-\frac{Q_{sd}}{k_B T}\right) \quad (3.12)$$

(A_W Konstante, n Spannungsexponent, D_0 Vorfaktor).

Erfolgt das Klettern über einen Leerstellenmechanismus, lässt sich Gl. 3.11 in Elementarableitern eindeutig mit der Selbstdiffusion in Zusammenhang bringen. In Verbindungshalbleitern kann die Bedeutung der Parameter nur dann geklärt werden, wenn Typ und Konzentration der dominierenden Punktdefekte bekannt ist. Eine alternative Beschreibung des Bereiches III kann mit dem *Jog-dragging*-Modell von BARRETT und NIX erfolgen, das ebenfalls als Aktivierungsenergie die Selbstdiffusionsenergie enthält [13]. Durch die gezielte Beeinflussung der Bildung von Sprüngen sollte sich eventuell zwischen beiden Modellen unterscheiden lassen, z. B. durch Wahl einer Kristallorientierung für Mehrfachgleitung wie [110], wobei allerdings zu berücksichtigen ist, dass die einzelnen Bereiche u. U. nicht so deutlich sichtbar werden wie bei Einfachgleitung. Eine andere Möglichkeit besteht durch die Beeinflussung der Sprungbildung durch Verunreinigungen. So wurde von FARBER *et al.* in Abhängigkeit vom Sauerstoffgehalt in Silicium eine unterschiedliche Dichte von Sprüngen entgegengesetzten Vorzeichens gemessen [51]. Wie noch zu diskutieren sein wird in Kap. 5, tritt die Bildung von Leerstellen und Zwischengitteratomen durch das Hinterherziehen von Sprüngen nicht nur im Bereich III auf, wird dort aber ratenbestimmend.

Bereich V wurde vereinfacht von ESCAIG [50] in folgender Weise beschrieben:

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_0 \exp\left[-\frac{E_q(\tau_s)}{k_B T}\right]. \quad (3.13)$$

Die effektive Aktivierungsenergie des Quergleitens, $E_q = E_q^0(1 - \tau_s/\tau_q)$ ist spannungsabhängig ($\tau_q = \gamma/3b$ kritische Spannung) und enthält über die maximale Quergleitenergie

$$E_q^0 = \frac{G^2 b^4}{1875\gamma} \left(\ln \frac{Gb}{14,5\gamma}\right)^{1/2} \quad (3.14)$$

außerdem die Stapelfehlerenergie γ [236]. Die Konstante $\dot{\epsilon}_0$ wird mit $2,6 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1}$ angegeben [239]. Bei dominierendem Quergleiten sollten durch Versetzungen generierte Punktdefekte eine geringere Rolle als im Kletterregime spielen.

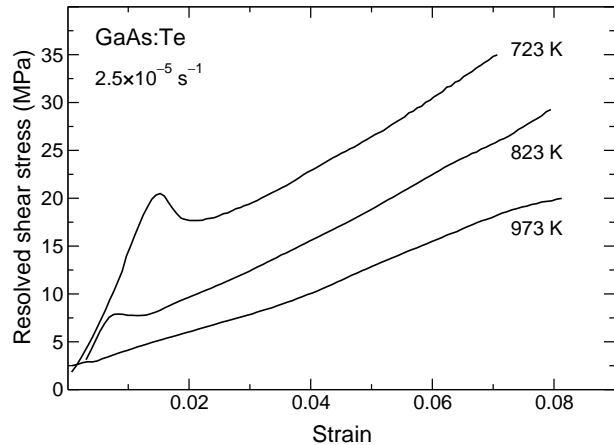


Abb. 3.2: Spannungs–Dehnungs-Kurven für Te-orientiertes GaAs, das in [110]-Richtung bei 723, 823, bzw. 973 K deformiert wurde. Die Verformungsrate war $2,5 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$.

3.2 Deformationsexperimente

Das Hauptziel der durchgeführten Verformungsexperimente bestand in der wohldefinierten Erzeugung von Defekten, die anschließend durch spektroskopische Untersuchungen charakterisiert wurden. Um die Vergleichbarkeit mit Deformationsstudien anderer Gruppen zu ermöglichen, wurden Spannungs–Dehnungs-Kurven zur Charakterisierung der dominierenden Mechanismen gemessen und deren empirische Parameter Spannungsexponent, Aktivierungsenergie, und Aktivierungsvolumen bestimmt. Die spektroskopische Charakterisierung erforderte aber Einschränkungen für die Verformungsbedingungen. So kann die Quantisierung von leerstellenartigen Defekten mit Hilfe der Positronenannihilation nur erfolgen, wenn aufgrund der Sättigung des Positroneneinfangs die Defektdichte einen bestimmten Maximalwert nicht übersteigt. Das hat zur Folge, dass i. a. die in den Bereichen III–V der Deformationskurven vorliegenden Defekte mit dieser Technik nicht quantitativ erfasst werden können.

Die Deformationsexperimente wurden in Kompression bei konstanter Verformungsrate zwischen $1,5 \cdot 10^{-6}$ und $5,5 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ durchgeführt. Die Temperatur lag zwischen 573 und 1173 K. Die untere Temperaturgrenze ist durch das Auftreten von Sprödbruch bei tieferen Temperaturen bei den untersuchten Halbleitern gegeben. Auf eine Vorverformung, die zur Erzeugung beweglicher Versetzungen angewandt werden kann und damit die plastische Deformation von spröden Halbleitern bei tiefen Temperaturen erleichtert, wurde bewusst verzichtet. Es ist bekannt, dass eine solche Vorverformung nicht nur Auswirkungen auf die Spannungs–Dehnungs-Kurve hat [27], sondern insbesondere das Punktdefektspektrum entscheidend verändert [8]. Einige Proben wurden mit Lasten zwischen 30 und 80 MPa statisch verformt (Kriechversuch). Diese Proben wurden ausschließlich spektroskopisch charakterisiert.

Mit der LEC-Technik* gezüchtetes undotiertes und dotiertes GaAs-Material wurde von der Firma Freiburger Compound Materials zur Verfügung gestellt. Die Ausgangsversetzungsdichte lag bei 10^4 cm^{-2} . Das untersuchte Cz- und FZ-Siliciummaterial (phosphordotiert, spezifischer Widerstand ca. $0,7 \Omega \text{ cm}$) stammte von der Wacker Siltronic AG Burghausen. Aus (001)- bzw. (111)-orientierten Scheiben wurden Quader der Dimension $4 \times 4 \times 12 \text{ mm}^3$ herausgesägt. Die Seitenflächen wurden mit Borcarbid (1200er Körnung) geschliffen, um eine gleichmäßige Dichte von Versetzungsquellen an der Oberfläche zu erzeugen und damit eine möglichst homogene Verformung und Defektverteilung zu ermöglichen. Als Deformationsachsen wurden [213]-, [110]- und [001]-Orientierungen gewählt.

Ein wesentlicher Teil der Verformungsversuche wurde mit einer hydraulischen Prüfmaschine der Firma Materials Testing Systems Minneapolis durchgeführt. Sie erlaubt neben schnell-

*LEC liquid encapsulated Czochralski

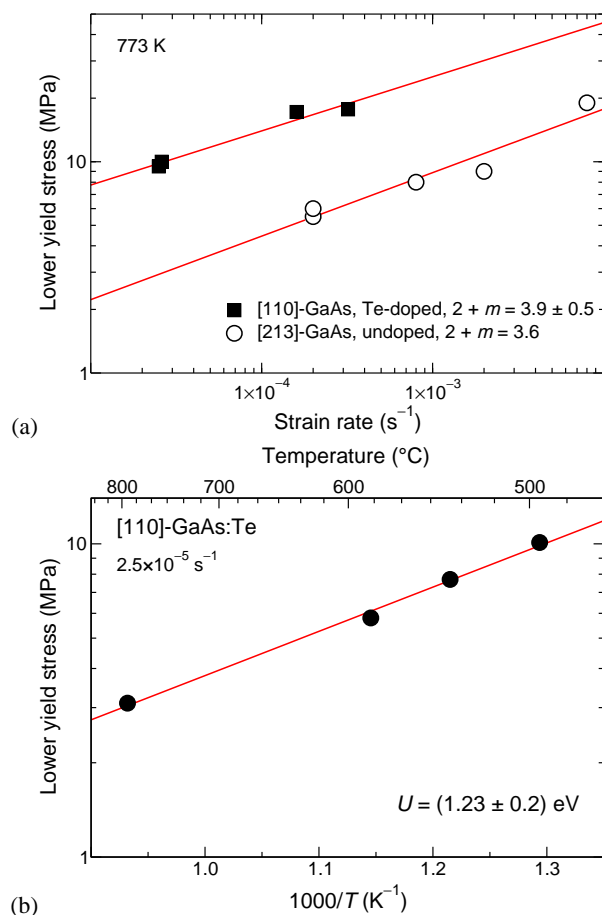


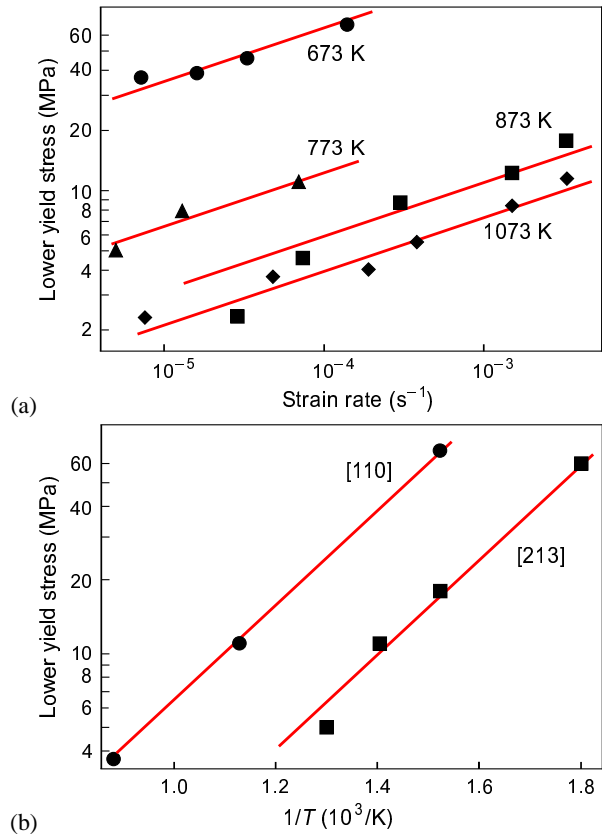
Abb. 3.3: Fließspannung als Funktion der Verformungsrate (a) und der Temperatur (b). Die Experimente wurden mit Te-dotiertem GaAs (Ladungsträgerdichte $2,5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) mit einer [110]-Kompressionsachse durchgeführt. Zum Vergleich sind im linken Bild Werte von SIETHOFF und BEHRENSMEIER [237] für undotiertes GaAs, das in Einfachgleitorientierung deformiert wurde, aufgenommen. Die Linien entsprechen Fits entsprechend Gl. 3.1.

len Wechseln der Dehnungsrate auch niedrigste Verformungsraten bei hervorragender Stabilität. Ein Eigenbauofen (HÜBNER [91]) für diese Maschine gestattet Deformationsexperimente bis zu 1300 K unter Ar-Schutzgas. Die Besonderheit der entwickelten Ofenkonstruktion ist, dass die Proben nach der Deformation sehr schnell unter Last abgekühlt und entnommen werden können. Die Abkühlrate liegt bei ca. 100 K/min. Diese Tatsache ist sehr wichtig für die anschließende Charakterisierung der während der Deformation erzeugten Defektstrukturen, die damit zum Großteil eingefroren werden können. Problematisch kann aber der Anschluss an früheren spektroskopischen Untersuchungen anderer Gruppen sein, die wesentlich kleinere Abkühlraten hatten. Zum Vergleich wurden Verformungsversuche mit einer Instron-Maschine* und einer Ofenkonstruktion von I. Yonenaga (Sendai) angestellt. Diese Apparatur erlaubte das Abkühlen der Proben auf Raumtemperatur innerhalb von 30 min.

Abb. 3.2 zeigt typische Spannungs-Dehnungs-Kurven von Te-dotiertem GaAs mit einer Ladungsträgerkonzentration von $2,5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Die Kompression erfolgte in [110]-Richtung. Die äußere Spannung wurde mit dem entsprechenden Schmidfaktor von $m_s = 0,408$ für diese Probenorientierung auf ein Hauptgleitsystem umgerechnet. Die Verformungsrate der Experimente bei verschiedenen Temperaturen betrug $2,5 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$. Die obere und untere Streckgrenze ist deutlich bei niedrigeren Temperaturen sichtbar. Während der Kurvenverlauf bei 723 und 823 K nach der Streckgrenze weitgehend mit einem konstanten Verfestigungskoeffizienten zu charakterisieren ist und dem *Easy-glide*-Bereich entspricht, wird bei 973 K oberhalb 4 % Kompression das Verlassen dieses Bereiches I festgestellt. Das ist durch einen Anstieg (im Verfestigungsbereich II der Verformungskurve) und einem Abfall (im Entfestigungsbereich III) des Verfestigungskoeffizienten

* am Institute of Materials Research Sendai

Abb. 3.4: Fließspannung als Funktion der Verformungsrate und der Temperatur für undotiertes GaAs. Die Werte in (a) entstammen Deformationsmessungen mit einer [110]-Kompressionsachse [91]; in (b) ist die Arrheniusabhängigkeit der unteren Fließspannung sowohl für [110]-Orientierung (Dehnungsrate $8 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$) als auch [213] (Dehnungsrate $2,5 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$) gezeigt. Die Linien entsprechen Fits nach Gl. 3.1, wobei ein gleicher Anstieg in allen Kurven gewählt wurde.



$d\tau_s/d\epsilon$ gekennzeichnet.

Aus der doppeltlogarithmischen Auftragung der unteren Fließspannung gegen die Verformungsrate (Abb. 3.3 a) erhält man gemäß Gl. 3.1 (S. 21) den Spannungsexponenten m . Es ergibt sich $2 + m = 3,9 \pm 0,5$. Aus dem Arrheniusplot von τ_y (Abb. 3.3 b) wird eine Aktivierungsenergie von $U = (1,23 \pm 0,2) \text{ eV}$ bestimmt. Die erhaltenen Werte liegen nahe der Werte von undotiertem GaAs, die von SIETHOFF und BEHRENSMEIER [237] bei Verformung in [213]-Richtung gemessen wurden. Die geringere Aktivierungsenergie in GaAs:Te im Vergleich zu undotiertem Material ($U = 1,37 \text{ eV}$ [237]) kann mit der Dominanz von α -Versetzungen und deren höheren Geschwindigkeit in n-GaAs [152] im Zusammenhang stehen.

Ergebnisse der Verformung von undotiertem GaAs sind in Abb. 3.4 wiedergegeben. Aus den Experimenten mit [110]-orientierten Proben ergibt sich $2 + m = 3,8 \pm 0,3$, und $U = (1,6 \pm 0,2) \text{ eV}$. Bei undotierten GaAs-Proben in Einfachgleitorientierung wurde $2 + m = 3,2 \pm 0,3$, und $U = (1,35 \pm 0,1) \text{ eV}$ erhalten. Bemerkenswert ist, dass sowohl der Spannungsexponent als auch die Aktivierungsenergie bei Mehrfachgleichorientierung etwas höher sind. Der Anstieg im Arrheniusplot $\tau_y = f(1/T)$ ist aber für beide Fälle gleich und beträgt $U/(2 + m) = 0,42 \text{ eV}$ (Abb. 3.4 b).

Die höheren Werte für m und U bei der [110]-Orientierung könnten damit im Zusammenhang stehen, dass vier Gleitsysteme gleichberechtigt angeregt werden. Damit ist verbunden, dass im Vergleich zur Einfachgleitorientierung deutlich mehr Versetzungsschneidprozesse auftreten. Der gleiche Schmidfaktor für primäre und Quergleitebene hat zur Folge, dass die Quergleitaktivität von Schraubenversetzungen befördert ist. Höhere Werte des Spannungsexponenten können aus der von ZONGO und FARVACQUE [286] getroffenen Aussage über dessen Abhängigkeit vom Versetzungsmultiplikationsmechanismus abgeleitet werden. Bei GaAs erfolgt zu Beginn der plastischen Verformung Versetzungsmultiplikation vornehmlich von Oberflächenquellen aus [3]. Wenn nun die Dichte von Waldversetzungen und die Doppelquergleithäufigkeit höher ist, werden auch effektive Versetzungsquellen innerhalb der Proben erzeugt. Damit steigt die Dichte beweglicher

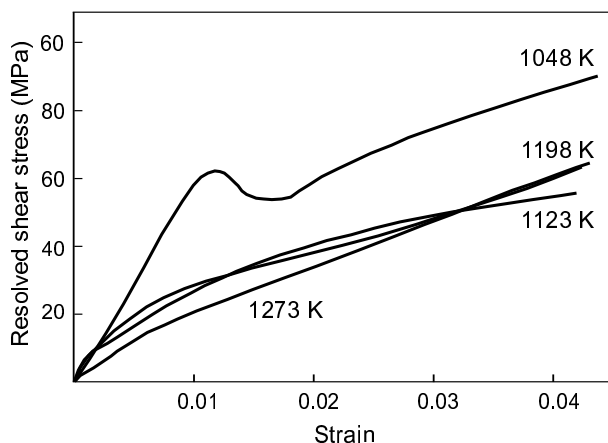


Abb. 3.5: Spannungs-Dehnungs-Kurven von phosphordotiertem Cz-Si [91]. Die Proben wurden bei den angegebenen Temperaturen mit einer Verformungsrate von $1 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ in [110]-Richtung deformiert.

Versetzungen und eine höhere Abgleitrate wird entsprechend der Orowangleichung erzielt. Bei gleicher Spannung heißt das, dass der Spannungsexponent höher wird.

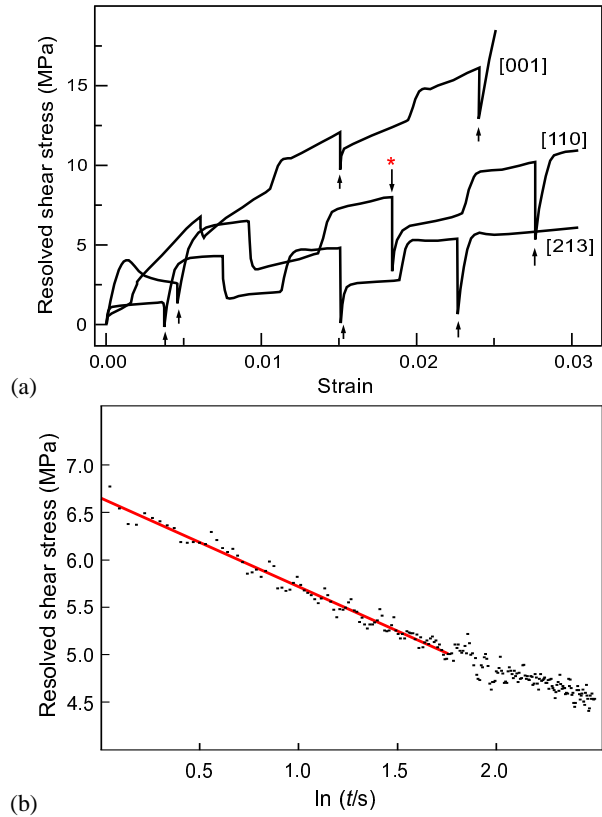
Die höhere Aktivierungsenergie U bei Mehrfachgleitung könnte mit einem wachsenden Einfluss des *Jog draggings* oder einem stärkeren Quergleitanteil bereits an der unteren Streckgrenze erklären werden. Es ist aber zu berücksichtigen, dass der Escaigformalismus (Gl. 3.13, S. 26) strenggenommen nur für hohe Spannungen gilt und demzufolge keinesfalls dominierend im Bereich der unteren Streckgrenze sein kann. Aus Gl. 3.14 (S. 26) ergibt sich für GaAs $E_q^0 = 5,3 \text{ eV}$ und $\tau_q = 41 \text{ MPa}$. BEHRENSMEIER [15] erhielt aus der Analyse von Kriechexperimenten an [111]-orientierten GaAs $E_q^0 = 5,1 \text{ eV}$ und $\tau_q = 55 \text{ MPa}$.

Bei einer [001]-Kompressionsachse unterscheidet sich die Spannungs-Dehnungs-Kurve deutlich von denen der [213]- und [110]-Orientierung. Es gibt acht äquivalente Gleitsysteme mit einem Schmidfaktor von 0,408. Mit Ausnahme der niedrigsten Verformungsrate haben die Kurven eine Parabelform, die typisch für Verformung mit Mehrfachgleitung ist. Die starke Wechselwirkung von Versetzungen unterschiedlicher Gleitsysteme verhindert in diesem Fall das Auftreten eines *Easy-glide*-Bereiches.

Bei der Deformation von Si in Einfachgleitorientierung wurden ähnliche Aktivierungsparameter wie aus der Literatur bekannt gemessen. Für phosphordotiertes FZ-Si wurde bestimmt: $2 + m = 2,3 \pm 0,2$ und $U = (2,3 \pm 0,3) \text{ eV}$. Dieselbe Aktivierungsenergie wurde von SCHRÖTER *et al.* [226] bei einem Spannungsexponenten von $2 + m = 2,9$ für undotiertes Si angegeben. Charakteristisch für die Verformung von Si in einer [110]-Kompressionsachse ist, dass unterhalb 1100 K eine deutliche Streckgrenze zu beobachten ist, während bei höheren Temperaturen ein parabolischer Verlauf der Deformationskurve auftritt (Abb. 3.5). Ein solcher Übergang zwischen einem sigmoidalen und parabolischen Verlauf wurde auch bei [001]-orientiertem GaAs festgestellt: mit einer Deformationstemperatur von 773 K ergab sich bei Verformungsraten unterhalb von $3 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ ein Streckgrenzeneffekt, darüber nicht. Eine ausgeprägte Streckgrenze wird von HAASEN [65] über die plastische Zustandsgleichung als Konkurrenz zweier Prozesse beschrieben: die Multiplikation und die Wechselwirkung von Versetzungen. Wie Abb. 3.5 zeigt, ist der Multiplikationsprozess offenbar stärker von der Temperatur abhängig, als die Wechselwirkung der Versetzungen, die $\tau_s \propto \rho_d^{1/2}$ liefert und damit für den parabolischen Verlauf verantwortlich ist (ρ_d Gesamtversetzungsdichte). Die Versetzungsmultiplikation ist abhängig von der Dichte beweglicher Versetzungen ρ_m und damit von der thermisch aktivierten Versetzungsgeschwindigkeit (Gl. 3.2, S. 21).

Neben der direkten Ermittlung von Aktivierungsparametern der Verformungskurve wurden Relaxationsversuche durchgeführt. Abb. 3.6 zeigt Spannungs-Dehnungs-Kurven von undotiertem GaAs, das in verschiedenen Richtungen verformt wurde. Dabei erfolgten Wechsel der Verformungsrate im Verhältnis 1 : 10. Beim Wechsel auf die höhere Dehnungsrate tritt ein leicht-

Abb. 3.6: Relaxationsversuche in GaAs. (a) Dehnungsratenwechselversuche von undotiertem GaAs in verschiedenen Deformationsrichtungen in Kombination mit Spannungsrelaxationen (Leipner *et al.* 1999 [133]). Die Pfeile zeigen den Deformationspunkt, wo die Relaxation einsetzte. Die Deformationstemperatur war 773 K. Die Hauptdehnungsrate war $7,5 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ bei der [001]-Orientierung und $3,1 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ für die anderen beiden Richtungen. Das Verhältnis der Dehnungsraten betrug 1 : 10. (b) Relaxationskurve (Fließspannung gegen Logarithmus der Relaxationszeit t) der in [110]-Richtung deformierten Probe [91]. Die Relaxation wurde in (a) mit einem Stern markiert. Die Linie zeigt einen Fit an die experimentellen Werte.



ter Streckgrenzeneffekt auf. Neben den Ratenwechselversuchen wurden Spannungsrelaxationen durchgeführt, die mit einem Pfeil in Abb. 3.6 a gekennzeichnet sind.

Mit der exponentiellen Abhängigkeit der Verformungsrate von der Fließspannung im Schoeckmodell kann eine Dehnungsratenempfindlichkeit

$$I = \frac{\partial \tau_s}{\partial \ln \dot{\epsilon}_{pl}}$$

definiert werden, mit der das Aktivierungsvolumen bestimmt werden kann. Da Gl. 3.9 (S. 24) eine konstante Dichte beweglicher Versetzungen voraussetzt, wird die Differenz der Fließspannungsmaxima zur Berechnung von I verwendet. Für die Deformation in [213]- und [110]-Richtung bei 773 K wurde eine Dehnungsratenempfindlichkeit von $I = (1 \pm 0,05) \text{ MPa}$ bestimmt. Das entspricht einem Aktivierungsvolumen von $V = (166 \pm 15)b^3$. ASTIÉ *et al.* [11] fanden für undotiertes GaAs ein Aktivierungsvolumen von $240b^3$ für 773 K. Das Aktivierungsvolumen der in [001]-Richtung deformierten GaAs-Probe lag bei $V = (308 \pm 35)b^3$. Aufgrund des parabolischen Verlaufs der Spannungs-Dehnungs-Kurve tritt bei dieser Orientierung eine stärkere Verfestigung auf, die korrigiert werden muss [122]. Neben dem Wechsel der Verformungsrate wurden auch Spannungsrelaxationsexperimente durchgeführt. Bei bestimmten Werten der Scherspannung wurde die dynamische Verformung gestoppt, d. h. für die Gesamtverformungsrate gilt $\dot{\epsilon} = 0$. Damit entspricht der Betrag der plastischen Verformungsrate dem der elastischen, $\dot{\epsilon}_{pl} = -\dot{\epsilon}_{elast}$. Die Dehnungsratenempfindlichkeit kann in diesem Experiment aus dem Anstieg der wirksamen Scherspannung gegen den Logarithmus der Relaxationszeit bestimmt werden [62]. Eine solche Kurve zeigt Abb. 3.6 b. Das auf diese Weise bestimmte Aktivierungsvolumen beträgt $(179 \pm 2)b^3$ für die

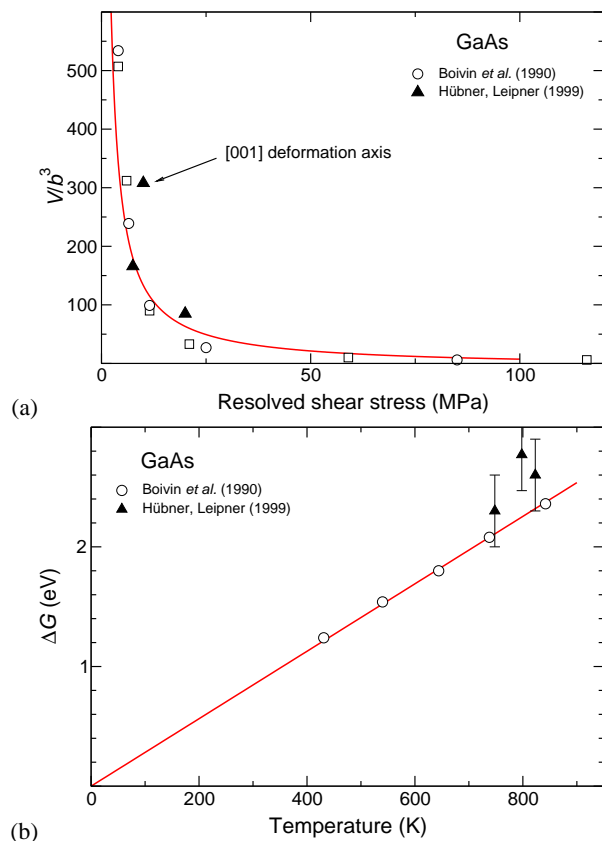


Abb. 3.7: (a) Darstellung des Aktivierungsvolumens als Funktion der Scherspannung. Verglichen sind die eigenen Ergebnisse an undotiertem GaAs [91, 133] mit denen von BOIVIN *et al.* [18] für undotiertes (Vierecke) und Zn-dotiertes GaAs (Kreise). Die durchgezogene Linie entspricht dem Fit $\propto 1/\tau_s$. (b) Temperaturabhängigkeit der Aktivierungsenergie ΔG für undotiertes GaAs. Die Gerade hat den Anstieg $\alpha_s k_B$ mit $\alpha_s = 34$.

[110]-Deformationsachse. Für [213]- und [001]-Orientierung wurden $(173 \pm 2)b^3$ und $(295 \pm 10)b^3$ erhalten. Diese Werte stimmen innerhalb der Fehlergrenzen mit denen aus den Dehnungsratenwechselversuchen überein. Der Vergleich mit Messwerten von BOIVIN *et al.* [18] ist in Abb. 3.7 gezeigt. Die eigenen Werte stimmen – mit Ausnahme des nicht korrigierten Wertes für die [001]-Achse – recht gut mit den Literaturwerten überein. Das Aktivierungsvolumen ist sehr klein für hohe Spannungen ($V \approx 5b^3$ für $\tau_s = 100\text{MPa}$) und steigt mit kleiner werdender Spannung rapide an ($V \approx 500b^3$ für $\tau_s = 5\text{MPa}$). Bei Spannungen kleiner als diese untere Grenze kann die Versetzungsbewegung nicht mehr thermisch aktiviert erfolgen.

Aufgrund der geringen Temperaturabhängigkeit der elastischen Konstanten von III–V-Halbleitern kann ein Entropieterm vernachlässigt werden und die Änderung der Gibbschen Energie kann als Änderung der Enthalpie berechnet werden [180],

$$\Delta G \approx \Delta H = \frac{k_B T}{T} \left(\frac{\partial \tau_s}{\partial T} \right)_{\dot{\epsilon}}$$

Auf diese Weise haben wir aus Temperaturwechselversuchen bei konstanter Dehnungsrate von $8,3 \cdot 10^{-5} \text{s}^{-1}$ einen Wert von $\Delta G = (2,8 \pm 0,3) \text{eV}$ für eine Temperatur von 800 K bestimmt [133]. Die von ASTIÉ *et al.* [11] und BOIVIN *et al.* [18] angegebene Aktivierungsenergie beträgt für diesen Bereich 2,2 eV. Die zweite Möglichkeit der Bestimmung von ΔG liefert Gl. 3.10 (S. 24), aus dem eine lineare Temperaturabhängigkeit mit der Konstanten α_s folgt, $\Delta G = \alpha_s k_B T$. Diese Abhängigkeit ist im Vergleich zu den Werten von BOIVIN *et al.* [18] in Abb. 3.7 b mit einem Koeffizienten $\alpha_s = 34$ dargestellt. Aus Temperaturwechselversuchen [91] wurden neben dem o. a. Wert von 2,8 eV zwei weitere Aktivierungsenergien berechnet. Da für diese Temperaturen die Dehnungsratenempfindlichkeit nicht gemessen wurde, wurden entsprechende Aktivierungsvolumen aus der Kurve in Abb. 3.7 a zur Berechnung herangezogen. Der aus unseren Messwerten berechnete Temperaturkoeffizient liegt bei $\alpha_s = 38$ und kommt dem Wert von ASTIÉ *et al.* [11] ($\alpha_s = 40$) recht

Tab. 3.3: Parameter der Verformungskurve an der unteren Streckgrenze in Beziehung zu Selbstdiffusionsdaten verschiedener Halbleiter

| | $2 + m$ | U/eV | Q_{sd}/eV | Q_{sd}/U | $D_0/\text{m}^2\text{s}^{-1}$ |
|------|---------|---------------|---------------------------|-------------------|-------------------------------|
| Si | 2,3 | 2,30 | 3,5* | 1,52 | $4,6 \cdot 10^{-3}$ * |
| InSb | 3,1* | 0,96* | 1,5* | 1,56* | $1,0 \cdot 10^{-5}$ * |
| InP | 2,9* | 1,43* | 2,3* | 1,61* | $1,8 \cdot 10^{-4}$ * |
| GaAs | 3,2 | 1,35 | 2,0* | 1,48 | $2,5 \cdot 10^{-6}$ * |
| GaSb | 3,0* | 1,20* | 1,7* | 1,42* | $2,1 \cdot 10^{-6}$ * |

* SIETHOFF [235]

nahe.

Bereits von OMRI *et al.* [180] wurde konstatiert, dass bei den meisten III-V-Verbindungen ΔG viel größer als U ist (mit Ausnahme von GaSb). Sie nehmen an, dass bei den Relaxationsversuchen die Annahme einer konstanten Versetzungsstruktur nur ungenügend erfüllt ist, bzw. ein Punktdefekteinfluss vorliegt. Ein solcher Punktdefekteinfluss wurde auch von SIETHOFF [235] aus der Analyse der Daten an der Streckgrenze im ALEXANDER–HAASEN-Modell postuliert. Tab. zeigt die im Rahmen der eigenen Arbeiten gewonnenen Parameter zusammen mit Verformungsdaten anderer Halbleiter. Neben U und m aus Gl. 3.1 auf Seite 21 sind die von SIETHOFF aus Verformungsdaten im Bereich III gewonnenen Größen der Selbstdiffusion (Gl. 3.12 auf Seite 26) aufgenommen. Aus einem konstanten Verhältnis zwischen der Aktivierungsenergie U und der Aktivierungsenergie der Selbstdiffusion in Halbleitern Q_{sd} wurde von SIETHOFF abgeleitet, dass ein elementarer Diffusionsschritt in der Versetzungsgleitbewegung beteiligt ist [234]. Die Q_{sd} -Werte wurden dabei aus Deformationsmessungen im Bereich III der Spannungs–Dehnungs-Kurve mit Gl. 3.11 auf Seite 26 bestimmt und können sich durchaus von den Ergebnissen aus Selbstdiffusionsexperimenten unterscheiden. Die Dominanz des geschwindigkeitsbestimmenden Prozesses der Kinkengeneration und -migration an der unteren Streckgrenze wird dabei nicht in Frage gestellt. Die Analyse der Versetzungskernstruktur mit der Beziehung zwischen Rekonstruktionsdefekten, im Versetzungskern eingebauten Leerstellen und der Kinkenbeweglichkeit (Abschn. 2.2) kann Hinweise darauf geben, wie diese empirische Korrelation zwischen U und Q_{SD} theoretisch zu begründen ist.

Eine mögliche Variation des ratenbestimmenden Mechanismus wurde von SIETHOFF und BEHRENSMEIER [237] mit einer Änderung des Anstiegs der Kurve $\tau_s = f(\dot{\epsilon})$ im Bereich niedriger Verformungsraten für hohe Temperaturen gefunden. Diese Änderung, die mit einem wachsenden Einfluss des *Jog-dragging*-Mechanismus in Zusammenhang gebracht wurde, konnte in den eigenen Arbeiten nicht bestätigt werden. Allerdings können wir einen leichten Anstieg der Aktivierungsenergie bei Mehrfachgleitung konstatieren, die ebenfalls auf einen größeren Anteil von *Jog dragging* oder Quergleiten hindeuten. Auch aus den Relaxationsexperimenten gibt es Hinweise auf eine Variation im Verformungsmechanismus.

Bei Verbindungshalbleitern ist bei der Zurückführung der aus den Deformationsexperimenten bestimmten Aktivierungsenergie U auf die Aktivierungsenergie der thermisch aktivierten Versetzungsgeschwindigkeit nach Gl. 3.2 auf Seite 21 zu berücksichtigen, dass mehrere Versetzungstypen (α -, β - und Schraubenversetzungen) generiert werden. SUMINO [253] und Omri *et al.* [180] kommen zu einer Dominanz der Schraubenversetzungen mit $\dot{\epsilon}_{\text{pl}} = 2\rho_m v_s b$, wobei die Gesamtdichte beweglicher Versetzungen der Dichte beweglicher Schrauben entspricht (v_s Geschwindigkeit von Schraubenversetzungen). Im Gegensatz dazu leiten STEINHARDT und HAASEN [249] aus einem unterschiedlichen Ansatz der Versetzungsmultiplikation folgende Beziehung ab:

$$\dot{\epsilon}_{\text{pl}} = \rho_m b \sqrt{\frac{1}{2} v_\alpha v_s}$$

(v_s, v_α Geschwindigkeit von Schrauben-, α -Versetzungen).

Der erste Ansatz führt auf $U = U_s$, der zweite auf $U = \frac{1}{2}(U_\alpha + U_s)$ mit U_s und U_α als Aktivierungsenergie der Schrauben- und α -Versetzungen. Aus dem Vergleich der experimentellen Werte (Tab. 3.2, 3.3) folgt, dass beide Modelle im Bereich des experimentellen Fehlers liegen.

4 Spektroskopie und Mikroskopie verformungsinduzierter Defekte

Eine Hauptmethode zur Charakterisierung deformationsinduzierter Defekte stellte im Rahmen dieser Arbeit die Positronenlebensdauerspektroskopie (POLIS) dar. Die Grundlagen der Positronenannihilation in Halbleitern sind ausführlich in der Monographie von *Krause-Rehberg* und *Leipner* (1999) [117] dargestellt. Einige wichtige Aspekte werden im Folgenden dargestellt, insoweit sie für die Wechselwirkung von Positronen mit Versetzungen und deformationsinduzierten Punktdefekten und die Ableitung von Defektdichten wichtig sind.

4.1 Grundlagen des Positroneneinfangs in Halbleitern

Die Positronenannihilation als spektroskopische Methode zum Defektnachweis nutzt die Annihilation von implantierten Positronen mit den Elektronen des Festkörpers. Die Charakteristika der resultierenden Annihilationsstrahlung hängen von der Realstruktur des untersuchten Materials ab, was zum empfindlichen Nachweis von Baufehlern genutzt werden kann.

Als Positronenquellen können β^+ -Strahler wie ^{22}Na dienen. Der Zerfall des radioaktiven Na-Isotops ist entsprechend der Reaktion $^{22}\text{Na} \rightarrow ^{22}\text{Ne} + \beta^+ + \nu_e + \gamma$ von der Emission eines γ -Quants der Energie 1,274 MeV begleitet. Die radioaktive Zerfallsreaktion hat zur Folge, dass die Positronen eine breite Energieverteilung besitzen, wobei die maximale Energie der Positronen aus einer Natriumquelle bei 540 keV liegt. Nach dem Eindringen der Positronen in den Festkörper thermalisieren sie innerhalb weniger ps. Das Eindringprofil kann über ein empirisches Extinktionsmodell beschrieben werden [25],

$$\bar{P} = \exp(-\alpha_+ z) \quad \text{mit} \quad \alpha_+ / \text{cm}^{-1} = 17 \frac{\rho / \text{g cm}^{-3}}{(E_{\text{max}} / \text{MeV})^{1,43}} \quad (4.1)$$

(\bar{P} Implantationsprofil unmoderierter Positronen, α_+ Positronenabsorptionskoeffizient, z Tiefe, E_{max} maximale Positronenenergie, ρ Dichte. $E_{\text{max}} = 0,54 \text{ MeV}$ für eine ^{22}Na -Quelle).

Aus der Verteilung folgt eine mittlere Eindringtiefe von etwa $40 \mu\text{m}$ und eine maximale Informationstiefe von etwa $500 \mu\text{m}$. Das bedeutet, dass mit Positronen aus einer radioaktiven Quelle gemittelte Informationen über das Probenvolumen erhalten werden.

Die Annihilation des in den Festkörper eingebrachten Positrons mit einem Elektron nach einer gewissen Positronenlebensdauer resultiert in der Bildung von zwei nahezu kollinearen γ -Quanten mit einer Energie von je 511 keV. Die Wahrscheinlichkeit der Annihilation in drei γ -Quanten ist kleiner als 0,03 in kristallinen Festkörpern und kann vernachlässigt werden.

Sobald die Positronen im Festkörper thermische Energien erreicht haben, kann ihre Bewegung als Diffusion beschrieben werden. Die Diffusionskonstante D_+ liegt bei $1,5 - 3 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ [117]. Die mittlere Diffusionslänge

$$L_+ = (D_+ / \lambda_{\text{eff}})^{1/2}$$

ist beschränkt durch λ_{eff} , d. h. die effektive Annihilationsrate der Positronen im Material. λ_{eff} ergibt sich dabei aus der charakteristischen Annihilationsrate des defektfreien Materials λ_b und durch die

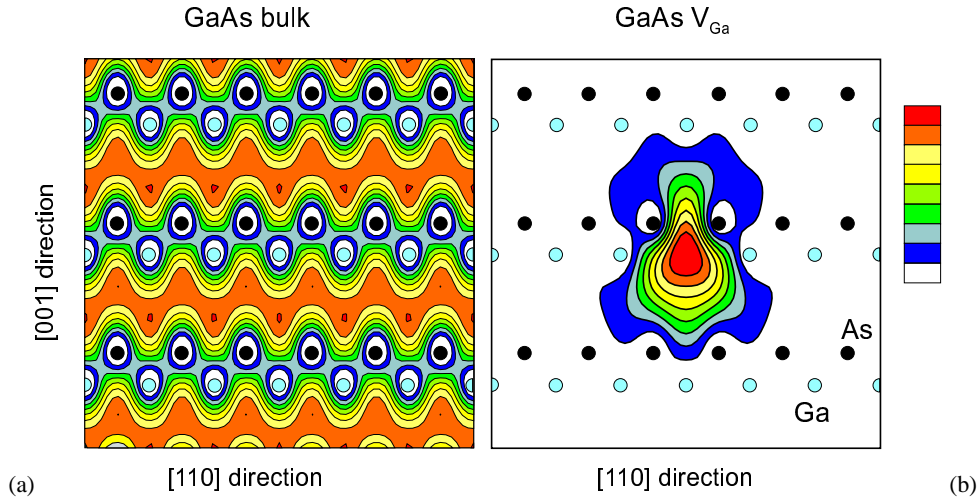


Abb. 4.1: Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Positrons (a) in defektfreiem GaAs und (b) einer Galliumleerstelle [54, 91]. Gezeigt ist eine $(1\bar{1}0)$ -Ebene (Ga-Atome hell, As-Atome dunkel). Die Berechnung erfolgte entsprechend der Methode überlagerter Atompotentiale nach PUSKA und NIEMINEN [202]. Die (relativen) Werte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit sind mit der Skala auf der rechten Seite wiedergegeben.

Annihilation in Kristalldefekten. L_+ liegt in defektfreiem Material bei ~ 100 nm (GaAs: 200 nm, Si: 245 nm [68]).

Das thermalisierte Positron kann über einen delokalisierten Blochzustand beschrieben werden. Die Annihilationsrate λ_+ ist bestimmt durch den Überlapp der Elektronen- und Positronenwellenfunktionen [117]

$$\lambda_+ = \pi r_0^2 c \int n_-(\mathbf{r}) n_+(\mathbf{r}) \gamma_+ d\mathbf{r} \quad (4.2)$$

(r_0 klassischer Elektronenradius, c Lichtgeschwindigkeit, γ_+ *Enhancement*-Faktor, der die Erhöhung der Elektronendichte am Ort des Positrons infolge der Coulombanziehung beschreibt).

$n_-(\mathbf{r}) = \sum_{\varepsilon_i \leq E_F} |\psi_i^-(\mathbf{r})|^2$ und $n_+(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{N_0} |\psi_i^+(\mathbf{r})|^2$ sind die Elektronen- und Positronendichten. ψ_i^- und ψ_i^+ bezeichnen die Elektronen- und Positronenwellenfunktionen; die Zählung läuft bei den Elektronen über die besetzten Zustände $\varepsilon_i \leq E_F$, bei den Positronen bis zur Gesamtzahl N_0 . Im defektfreien Volumen des Halbleiters beträgt die Positronenlebensdauer, das Inverse der Annihilationsrate $\lambda_+ = \lambda_0$, ca. 200 ps (GaAs: 230 ps, Si 219 ps). Dieser Wert kann durch die Anwesenheit von Defekten entscheidend verändert sein. Die Wechselwirkung von Positronen mit Defekten kann zur starken Lokalisierung der Positronenwellenfunktion führen. Defekte, die Positronen einfangen können, sind insbesondere Leerstellen, Leerstellenagglomerate oder Komplexe mit Leerstellen und Versetzungen (Defekte mit offenem Volumen). Das für die Positronen attraktive Potential resultiert aus dem fehlenden (positiven) Atomkern, die elektrostatische Wechselwirkung mit den Elektronen der unabgesättigten Bindungen der Nachbaratome und der veränderten Positron-Elektron-Korrelationsenergie. Die Bindungsenergie an diese Einfangzentren ist so groß (~ 1 eV), dass die Positronen nur mit geringer Wahrscheinlichkeit thermisch entweichen können und bis zur Annihilation gebunden sind. Über diesen Positroneneinfang erhöht sich λ_{eff} und die Diffusionslänge L_+ wird kleiner. Gleichzeitig steigt die Positronenlebensdauer proportional zum offenen Volumen des Defekts aufgrund der lokal geringeren Elektronendichte. Abb. 4.1 zeigt berechnete Aufenthaltswahrscheinlichkeiten von Positronen in defektfreiem GaAs und in einer Galliumleerstelle. Im ungestörten Kristall hat das Positron eine maximale Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Zwischengitterbereich, in der Leerstelle hingegen ist es stark lokalisiert.

Der Übergang des Positrons vom delokalisierten in einen lokalisierten Zustand am Defekt wird

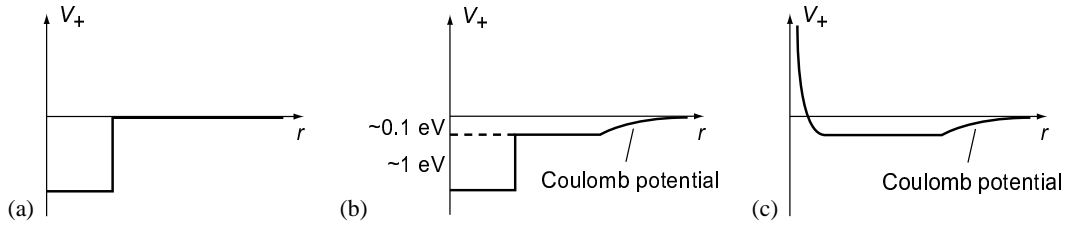


Abb. 4.2: Schema des Positronenpotentials von Defekten in Halbleitern unter Berücksichtigung des Ladungszustands nach PUSKA *et al.* [200]. Das langreichweitige Coulombpotential muss bei Annäherung an den Defekt bei einer bestimmten Abschirmlänge abgeschnitten werden, um die Delokalisierung der Ladung zu berücksichtigen. (a) neutrale Leerstelle, (b) negativ geladene Leerstelle, (c) ionisierter Akzeptor.

als Positroneneinfang oder *Trapping* bezeichnet. Die Einfangrate in einen Defekt d ist proportional zu seiner Konzentration,

$$\kappa = \mu[d]. \quad (4.3)$$

Der Trappingkoeffizient μ wird durch zwei Prozesse bestimmt [23]: durch die Diffusion zum Defekt (μ_{dl}) und durch den Übergang in den gebundenen Zustand (μ_{tl}),

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_{dl}} + \frac{1}{\mu_{tl}}. \quad (4.4)$$

Für Leerstellen und kleine Leerstellenagglomerate ist der Positroneneinfang übergangslimitiert und μ_{dl} kann vernachlässigt werden. μ_{tl} ist charakteristisch für das Material und den spezifischen Defekt. Bei ausgedehnten Defekten wie Leerstellencluster oder Ausscheidungen ist der Positroneneinfang durch die Diffusion bestimmt. Für kugelförmige Einfangzentren mit dem Radius r_d gilt

$$\mu_{dl} = 4\pi D_+ r_d. \quad (4.5)$$

Bedeutsam für Halbleiter ist, dass Defekte eine elektrische Ladung tragen können. Der Ausgangszustand des ungebundenen Positrons ist nicht mehr als ebene Welle sondern als Coulombwelle zu betrachten. Das langreichweitige Coulombpotential induziert gebundene Rydbergzustände für Positronen. Im Resultat wird der Trappingkoeffizient von der Ladung der Leerstelle abhängig: $\mu_{V^+} \ll \mu_{V^0} < \mu_{V^-}$. Im Falle der positiv geladenen Leerstelle entsteht eine Potentialbarriere und der Einfang thermalisierter Positronen wird vernachlässigbar klein. Die flachen Rydbergzustände der negativen Leerstellen befördern den Übergang in den tiefen gebundenen Zustand, da die Energieabgabe des Positrons über mehrere Einzelphononenprozesse ablaufen kann. Die geladenen Defekte werden als Überlagerung des Kastenpotentials mit einem Coulombausläufer angesehen (Abb. 4.2). Der Defekt hat durch die Delokalisierung der Ladung einen bestimmten Abschirmradius, der mit einer Potentialverschiebung der Größenordnung 0,1 eV verbunden ist. Die Berechnung den Positroneneinfangs mit Fermis Goldener Regel führt zu einer $T^{-1/2}$ -Abhängigkeit des direkten Übergangs in den tiefen gebundenen Zustands der negativ geladenen Leerstelle. Weiterhin können die flachen Rydbergzustände als Vorstufe für den Übergang in den tiefen Zustand dienen. Daraus folgt ein zusätzlicher exponentieller Anstieg von μ_{V^-} mit sinkender Temperatur [200].

Ein negativ geladenes Ion* besitzt in Halbleitern ausschließlich flache Energiezustände für Positronen (Abb. 4.2 c), wobei die Bindungsenergie zwischen 0,01 bis 0,1 eV liegt. Das Verhältnis der Entweichrate δ zur Einfangrate κ_R in den Rydbergzuständen ist nach MANNINEN und

* Akzeptoren ohne offenes Volumen wie p-Dotanten oder *Antisite*-Defekte

NIEMINEN [158] im thermodynamischen Gleichgewicht

$$\frac{\delta}{\kappa_R} = \frac{1}{c_A} \left(\frac{m_+ k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_b}{k_B T}\right) \quad (4.6)$$

(c_A Konzentration ionisierter Akzeptoren, m_+ effektive Masse des Positrons, E_b Bindungsenergie des Positrons).

Negative Ionen können aufgrund der geringen Bindungsenergie Positronen nur bei tiefen Temperaturen binden; bei höheren Temperaturen dominiert das Entweichen. Solche Defekte werden flache Positronenfallen genannt. Im Tieftemperaturbereich ist der Trappingkoeffizient der flachen Fallen in der Größenordnung wie für negative Leerstellen, wie von SAARINEN *et al.* [215] und Leipner *et al.* (1997) [134] experimentell bestimmt wurde.

Der Positroneneinfang in geladene Defekte kann zu einem komplexen Verhalten der Anihilationsparameter führen. In Halbleitern ist deshalb immer eine Positronenmessung als Funktion der Temperatur notwendig, um das Defektspektrum eindeutig zu charakterisieren. Der Trappingkoeffizient ist nicht von vorherin bekannt. Über Vergleichsmessungen müssen die Defektkonzentrationen bestimmt werden und mit der aus dem Positronenexperiment bestimmten Einfangrate in Beziehung gesetzt werden, um μ über Gl. 4.3 bestimmen zu können. Für negativ geladene Leerstellen wurde in den meisten Halbleitern bei Raumtemperatur ein Wert von $(1 \pm 0,5 \cdot 10^{15}) \text{s}^{-1}$ gefunden. Eine Kompilation von experimentellen Daten zur Bestimmung des Trappingkoeffizienten ist von Krause-Rehberg und Leipner (1997) [116] vorgenommen worden.

Die Einfangrate in Leerstellenagglomeraten kann generell von beiden Prozessen in Gl. 4.4 bestimmt sein. Der Positronendiffusionskoeffizient hat durch die Dominanz der Streuung an longitudinal-akustischen Phononen eine Temperaturabhängigkeit der Form $D_+ \propto T^{-1/2}$, d. h. je nach Temperatur kann eine Übergangs- oder Diffusionslimitierung vorliegen. Bei tiefen Temperaturen können Positronen sehr weit diffundieren. Die Einfangrate wird damit übergangslimitiert und kann geschrieben werden als

$$\mu = v_+ \sigma_+ = \left(\frac{3k_B T}{m_+} \right) \sigma_+$$

(v_+ thermische Geschwindigkeit der Positronen).

Der Einfangquerschnitt für Positronen kann mit

$$\sigma_+ = \pi(r_d^2 + 1/k_+) \xi_+$$

angenähert werden [262], wobei $\xi_+ = 2\pi/\hbar \sum_{ifl} P_i |M_{ifl}|^2 \delta(\varepsilon_i - \varepsilon_f - \varepsilon_l)$ die eigentliche Übergangsrate aus Fermis Goldener Regel ist [174]. Die thermische Wellenlänge des Positrons ist

$$1/k_+ = h/\sqrt{3D_+ k_B T}$$

(P_i Positronenbesetzungswahrscheinlichkeit des Ausgangszustandes, M_{ifl} Matrixelement, das den Ausgangszustand mit dem Endzustand des Elektronensystems und dem Zustand des eingefangenen Positrons verbindet, ε_i , ε_f , ε_l Energie des Elektronensystems im Ausgangs- und Endzustand, sowie des Positrons im eingefangenen Zustand).

Mit diesem Ansatz erhalten TRUMPY und BENTZON [262]

$$\mu = \mu_0(1 + \delta_+ T), \quad (4.7)$$

wobei δ_+ eine vom Radius des Leerstellenagglomerats r_d abhängige Konstante und μ_0 temperaturunabhängig ist. Mit steigender Temperatur wird der Einfang entsprechend Gl. 4.7 immer weniger übergangslimitiert. Der Einfang ist schließlich davon abhängig, ob das Positron den Defekt erreicht. Dieser Fall der Diffusionslimitierung war bereits mit Gl. 4.5 beschrieben worden. Entsprechend der Proportionalität zu D_+ zeigt μ bei höheren Temperaturen einen $T^{-1/2}$ -Abfall [203].

Für Cluster, die nur eine kleine Zahl von Leerstellen umfassen, ist der Trappingkoeffizient proportional zur Zahl i ,

$$\mu_{V_i} = i\mu_V.$$

Dabei ist μ_V der Trappingkoeffizient einer Einfachleerstelle. Diese Näherung gilt für $i \leq 5$ [174].

4.2 Positronenlebensdauerspektroskopie

Zur qualitativen Interpretation von Positronenannihilationsmessungen wird ein Trappingmodell benutzt, das phänomenologisch den zeitlichen Übergang zwischen verschiedenen Positronenzuständen beschreibt. Die generalisierte Form auf der Grundlage der Waiteschen Theorie diffusionsbegrenzter Reaktionen stammt von Frank und Seeger [53]. Es gelten folgende Voraussetzungen: (a) Zum Zeitpunkt $t = 0$ befinden sich alle Positronen im defektfreien Volumen, d. h. es findet kein Einfang während der Thermalisierung statt. (b) Es gibt keine Wechselwirkung der Positronen untereinander. (c) Die Einfangrate ist proportional zur Defektdichte entsprechend Gl. 4.3, wobei die Defekte homogen über das Kristallvolumen verteilt sind. Der Satz linearer Differentialgleichungen, der die Annihilation als die Änderung der Positronendichte im defektfreien Volumen und im Defekt i beschreibt, kann in Matrizenform als

$$\dot{\mathbf{N}} = \mathbf{A}\mathbf{N} \quad (4.8)$$

geschrieben werden [117]. Es gilt

$$\mathbf{N} = \begin{pmatrix} N_0 \\ N_1 \\ N_2 \\ \vdots \\ N_k \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} -(\lambda_0 + \sum_i \kappa_i) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \kappa_1 & -\lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ \kappa_2 & 0 & -\lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \kappa_k & 0 & 0 & 0 & -\lambda_k \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

(N_j Zahl der Positronen im Zustand j , λ_j Annihilationsraten, κ_i Einfangraten in die Defekte, k Zahl unabhängiger tiefer Positronenfallen, $j = 0 \dots k$, $i = 1 \dots k$; $j = 0$ beschreibt defektfreies Volumen).

Die Anfangsbedingungen sind $N_0(t = 0) = 1$ und $N_i(t = 0) = 0$. Für das Zerfallsspektrum

$$N(t) = \sum_j N_j(t)$$

erhält man als Lösung des Differentialgleichungssystems 4.9

$$N(t) = \sum_j I_j \exp(-\lambda_j t). \quad (4.10)$$

Das Positronenlebensdauerspektrum als experimentell zugängliche Größe ist die Wahrscheinlichkeit für die Annihilation und ergibt sich als Ableitung des Zerfallsspektrums,

$$-\frac{dN}{dt} = \sum_j I_j \lambda_j \exp(-\lambda_j t).$$

Für k Defekte besteht das Lebensdauerspektrum aus $k + 1$ Komponenten. Im Lebensdauerspektrum sind unmittelbar die defektspezifischen Lebensdauern $\tau_i = 1/\lambda_i$ enthalten, die numerisch aus den gemessenen Spektren bestimmt werden können. Der Schwerpunkt des Lebensdauerspektrums wird mittlere Positronenlebensdauer $\bar{\tau}$ genannt,

$$\bar{\tau} = \frac{\int_0^\infty t \frac{dN}{dt} dt}{\int_0^\infty \frac{dN}{dt} dt} = \sum_j I_j \tau_j.$$

Sie stellt eine wichtige Messgröße dar, da sie aus dem experimentellen Lebensdauerspektrum ohne weitere Kenntnis der einzelnen Lebensdauerkomponenten bestimmt werden kann. Die Zerfallskonstanten λ_j (bzw. Lebensdauern τ_j) und die Intensitäten I_j folgen aus der Lösung des Differentialgleichungssystems. Es gilt $\sum I_j = 1$. Die Positronenlebensdauern τ_i hängen nur von den Defekttypen ab, während die Intensitäten I_i von den Defektkonzentrationen bestimmt werden. Wenn eine unabhängige Bestimmung der Lebensdauerkomponenten und Intensitäten numerisch möglich ist, lassen sich unabhängige Informationen zu Defekttyp und Konzentration gewinnen.

Ein einfacher Fall stellt die Dominanz eines einzigen Typs von Positronenfallen dar, d. h. $k = 1$. Damit wird das Zerfallsspektrum zweikomponentig,

$$N(t) = I_0 \exp(-\lambda_0 t) + I_1 \exp(-\lambda_1 t)$$

mit

$$\tau_0 = \frac{1}{\lambda_0} = \frac{1}{\lambda_b + \kappa}, \quad \tau_1 = \frac{1}{\lambda_1} = \frac{1}{\lambda_d} = \tau_d, \quad I_0 = 1 - I_1, \quad I_1 = \frac{1}{\lambda_b - \lambda_d + \kappa}. \quad (4.11)$$

τ_0 wird als reduzierte Volumenlebensdauer bezeichnet. Diese Gleichungen werden zur experimentellen Bestimmung der defektspezifischen Lebensdauer $\tau_d = 1/\lambda_d$ und der Einfangrate κ (und damit der Defektdichte über Gl. 4.3) benutzt. Sind die Positronenlebensdauer im defektfreien Volumen $\tau_b = 1/\lambda_b$ und τ_d bekannt, kann κ am einfachsten aus der mittleren Positronenlebensdauer bestimmt werden,

$$\kappa = \frac{1}{\tau_b} \frac{\bar{\tau} - \tau_b}{\tau_d - \bar{\tau}}. \quad (4.12)$$

Der Positroneneinfang wird wesentlich komplizierter, wenn Defekte einbezogen werden, aus denen das Positron entweichen kann (flache Positronenfallen). Das führt zu zusätzlichen Termen in der Matrix \mathbf{A} (Gl. 4.9). Keine analytischen Lösungen sind bekannt für die Anwesenheit von mehr als einer flachen Falle [117]. Bei der Anwesenheit von zwei tiefen und einer flachen Positronenfalle ergibt sich

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -\lambda_0 - \kappa_1 - \kappa_2 - \kappa_3 & \delta & 0 & 0 \\ \kappa_1 & \delta - \lambda_1 & 0 & 0 \\ \kappa_2 & 0 & -\lambda_2 & 0 \\ \kappa_3 & 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix}.$$

Es ergibt sich ein vierkomponentiges Spektrum, dessen Lösung von *Krause-Rehberg et al.* (1994) [118] angegeben wurde. Unter bestimmten Bedingungen vereinfacht sich das Problem. Wenn die Entweichrate δ bei genügend hohen Temperaturen wesentlich größer als die Annihilationsrate der flachen Falle λ_1 ist, erhält man ein Trappingmodell mit zwei tiefen Positronenfallen; das Positronenlebensdauerspektrum wird dreikomponentig. Es ist dann möglich, die Einfangraten aus den Intensitäten und Annihilationsraten entsprechend

$$\kappa_2 = \frac{I_2}{I_0} [I_3(\lambda_2 - \lambda_3) + (\lambda_0 - \lambda_2)], \quad (4.13)$$

$$\kappa_3 = \frac{I_3}{I_0} [I_2(\lambda_3 - \lambda_2) + (\lambda_0 - \lambda_2)] \quad (4.14)$$

zu berechnen [91]. Wenn man diese bei höheren Temperaturen bestimmten Einfangraten auf den Tieftemperaturbereich extrapoliert, wo zusätzlich die flache Falle wirksam wird, kann die Einfangrate in die flache Falle entsprechend

$$\kappa_1 = \frac{\kappa_2(\tau_2 - \bar{\tau}) + \kappa_3(\tau_3 - \bar{\tau}) - \lambda_b \bar{\tau} + 1}{\bar{\tau} - \tau_b} \quad (4.15)$$

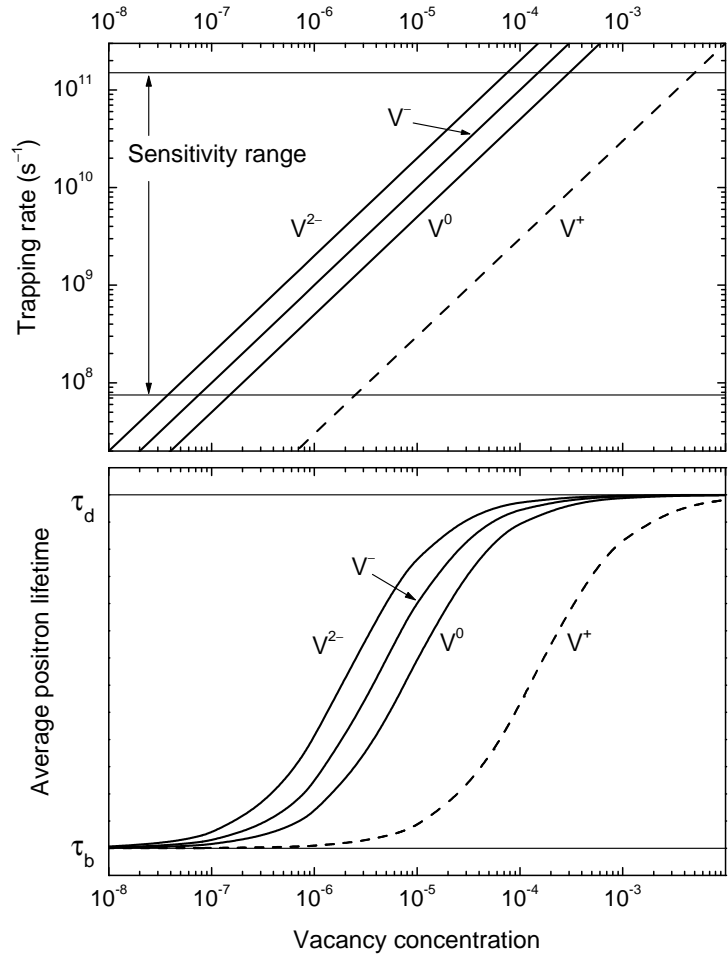


Abb. 4.3: Empfindlichkeitsbereich der Positronenlebensdauerspektroskopie [116]. Die mittlere Positronenlebensdauer wurde als Funktion der Leerstellenkonzentration mit den experimentellen Werten des Trappingkoeffizienten für neutrale und negative Leerstellen ermittelt. Die Lebensdauer ist in normalisierter Form zwischen der Volumenlebensdauer τ_b und der defektbezogenen Positronenlebensdauer τ_d gegeben. Im oberen Teil ist die entsprechende Einfangrate κ dargestellt. Die Empfindlichkeitsgrenzen der Positronenlebensdauerspektroskopie sind als horizontale Linien eingezeichnet.

berechnet werden. Dabei wird vorausgesetzt, dass die Positronenlebensdauer in der flachen Falle der des ungestörten Volumens entspricht, $\tau_1 \approx \tau_b$.

Selbst eine dreikomponentige Zerlegung ist nicht immer verlässlich möglich. Damit bleibt als einziger Ausweg das Studium der mittleren Positronenlebensdauer. Die Temperaturabhängigkeit von $\bar{\tau}$ kann dabei wertvolle Hinweise auf konkurrierende Prozesse des Einfangs in tiefe und flache Positronenfallen liefern.

Ein analytisches Problem besteht, wenn in einem experimentellen mehrkomponentigen Spektrum zwei Positronenlebensdauerkomponenten zu dicht beieinander liegen. Das führt dazu, dass diese nicht mehr getrennt werden können und eine Mischkomponente auftritt. Eine Anpassung des Spektrums mit den beiden Komponenten besitzt die gleiche Varianz wie eine Anpassung mit der Mischkomponente. SOMIESKI *et al.* [243] haben mit Monte-Carlo-Simulation gezeigt, dass eine sichere Trennung zweier Lebensdauerkomponenten mindestens 30 ps Differenz erfordert, wobei die Komponente mit der kürzeren Positronenlebensdauer mindestens 40 % Intensität besitzen muss.

Der Empfindlichkeitsbereich der Positronenlebensdauerspektroskopie kann aus den bekannten Werten für den Trappingkoeffizienten für Leerstellen angegeben werden. Die mittlere Lebensdauer wurde in Abb. 4.3 als Funktion der Leerstellenkonzentration für verschiedene Ladungen berechnet. Daneben wurde die Einfangrate entsprechend dem Trappingmodell mit einer Defektsorte (Gl. 4.12) berechnet. Folgende in Halbleitern experimentell ermittelte Werte für den Trappingkoeffizienten einer Einfachleerstelle in verschiedenen Ladungszuständen wurden dafür genommen [116]: $\mu_{V^{2-}} = 2 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$, $\mu_{V^-} = 1 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$, $\mu_{V^0} = 0,5 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$. Für positive Leerstellen ist

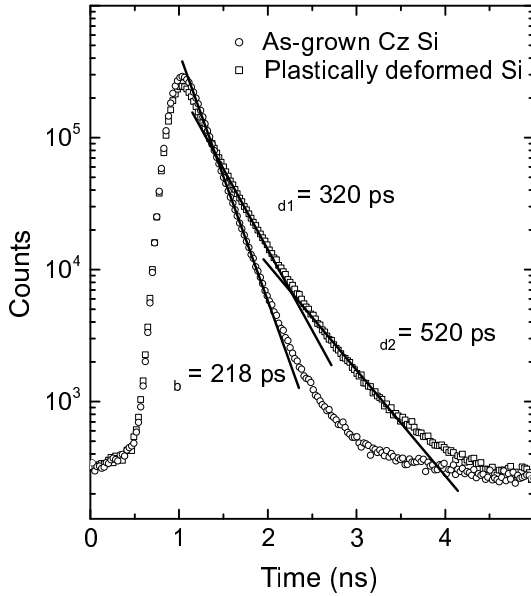


Abb. 4.4: Gemessene Positronenlebensdauerspektren von Cz-Si vor und nach plastischer Deformation (3 % Kompression bei 1048 K). Die durch Zerlegung der Spektren gewonnenen Lebensdauerkomponenten sind als Geraden eingezeichnet [117].

$\mu_{V^+} \ll 0,1 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$ und $3 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$ wurde willkürlich für die Darstellung in Abb. 4.3 gewählt. Die untere Empfindlichkeitsschwelle wurde aus der Annahme berechnet, dass 1 ps Abweichung von der Volumenlebensdauer τ_b bereits messbar ist. Für die obere Grenze wurde eine Abweichung von 2 ps von der defektbezogenen Positronenlebensdauer τ_d angesetzt. Für den Empfindlichkeitsbereich wurde ein Verhältnis von $\tau_d/\tau_b = 1,24$ angesetzt, wie für die Einfachleerstelle in Si gilt. Die obere Empfindlichkeitsgrenze ist durch vollständigen Positroneneinfang gegeben, d. h. alle Positronen werden auf ihrem Diffusionsweg in Defekte eingefangen. In diesem Fall kann eine Konzentration aus Lebensdaueremessungen nicht mehr bestimmt werden. An der unteren Grenze ist die Konzentration so gering, dass das Positron keinen Defekt mehr auf seinem Diffusionsweg erreichen kann. Mit einer erhöhten Trappingkoeffizienten für negative Leerstellen bei tiefen Temperaturen (10^{16} s^{-1} bei 20 K [215]) kann die untere Empfindlichkeitsschwelle aber nach unten verschoben werden [58].

Ein typisches Beispiel für Positronenlebensdauerspektren, wie sie in deformiertem Material und unverformten Referenzproben gemessen wurden, zeigt Abb. 4.4. Die Kurve der verformten Probe liegt signifikant über der der unverformten. Durch die Zerlegung des Spektrums können die Lebensdauerkomponenten bestimmt werden. Die unverformte Probe zeigt nur die Positronenlebensdauer des defektfreien Volumens, $\tau_b = 218$ ps. Drei Positronenlebensdauern werden in dem deformierten Si erhalten. In Abb. 4.4 sind nur die beiden mit Defekten in der Probe im Zusammenhang stehenden Lebensdauern $\tau_1 = \tau_{d1}$ und $\tau_2 = \tau_{d2}$ gezeigt; die reduzierte Volumenlebensdauer τ_0 ist weggelassen. Die Abweichungen bei längeren Zeiten kommen von Annihilationen in der Positronenquelle und vom Untergrund. Diese Beiträge werden üblicherweise vor der Anpassung eliminiert. Die Gausskurvenform des linken Teils spiegelt die Auflösungsfunktion der Spektrometeranordnung wider.

Im Positronenlebensdauerexperiment wird die Zeit zwischen der Emission 1,27 MeV- γ -Quants als Indikators der Entstehung des Positrons und der Aussendung der 511 keV-Annihilationsstrahlung gemessen. Bei der konventionellen POLIS-Methode wird eine Sandwichanordnung der radioaktiven Quelle und zweier identischer Proben benutzt. Als γ -Detektoren dienen Plastszintillatoren kurzer Abklingzeit, die an Photovervielfacher gekoppelt sind. Zur Unterscheidung zwischen Start- und Stoppsignal werden schnelle *Constant-Fraction-Diskriminatoren* eingesetzt. Die Zeitdifferenz wird in einem Zeit-Impulshöhen-Konverter in einen zeitproportionalen Spannungspuls gewandelt und in einem Vielkanalanalysator gespeichert.

Die verwendeten Positronenquellen aus NaCl waren von einer 2 μm dicken Aluminiumfolie umschlossen. Aus Messungen an Proben frei von Positronenfallen können die Lebensdaueranteile aus der Quelle bestimmt werden. Für ein gesamtes Spektrum wurden zwischen $1,5 \cdot 10^6$ bis $6 \cdot 10^6$ koinzidenter Ereignisse registriert. Zur Bestimmung der mittleren Positronenlebensdauer genügt die kleinere Zahl; für eine hinreichend sichere Zerlegung in mehr als zwei Komponenten müssen mehr Ereignisse registriert werden. Zur Spektrenanpassung wurde das Programm LIFESPEC-FIT [198] bzw. MELT [232] verwendet. Beim ersteren Programm muss die Zahl der Komponenten vorgegeben werden, das zweite ermittelt eine kontinuierliche Intensitäts–Positronenlebensdauer-Funktion $I(\tau)$, aus der die Zahl der Lebensdauerkomponenten ermittelt werden kann. Die Positronenlebensdauerspektren wurden als Funktion der Temperatur im Bereich von 12 bis 600 K mit einem Heliumkryostaten der Firma Cryogenics mit geschlossenem Kühlkreislauf gemessen.

4.3 Wechselwirkung von Positronen mit Versetzungen

In der Behandlung von Versetzungen als Positroneneinfangzentren gibt es mehrere Ansätze. Der einfachste Ansatz ist die Behandlung der Versetzung als Defekt mit offenem Volumen, ähnlich einer Reihe von Leerstellen. Damit wird die Einfangrate proportional zu der Versetzungsdichte*, $\kappa = \mu' \rho_d$. Das bedeutet gleichzeitig, dass ein übergangsbegrenzter Einfang angenommen wird, der unabhängig von der Temperatur ist. BRANDT und PAULIN [24] haben darüberhinausgehend den Charakter von Versetzungen als ausgedehnte Defekte berücksichtigt und den diffusionslimitierten Einfang berechnet. Die Versetzung wird dabei als Zylinder vom Radius r_d angesehen, und der diffusionslimitierte Trappingkoeffizient ist

$$\mu'_{dl} = \frac{4\pi D_+}{\ln(\pi \rho_d r_d^2)^{-1}}. \quad (4.16)$$

SMEDSKJAER *et al.* [242] haben als erste das thermisch induzierte Entweichen von Positronen von der Versetzung in die Diskussion gebracht. Die reguläre Versetzungslinie wird als flache Positronenfälle angesehen, aus der Entweichen möglich ist, während bestimmte Defekte auf der Versetzung tiefe Fallen darstellen (Abb. 4.5). Theoretische Rechnungen zeigen, dass die Ausdehnung des Positronenpotentials entlang der Versetzung eine Delokalisierung des Positrons entlang der Versetzungslinie bewirkt [86]. Vergleichbar zu den flachen Rydbergzuständen bei negativ geladenen Defekten in Halbleitern gibt es auch hier ein Quasikontinuum flacher Bindungszustände.

Die tiefen Positronenfallen auf der Versetzung können Leerstellen, Leerstellenketten oder auch Sprünge sein. Die Einbeziehung der detaillierten Versetzungsstruktur (Aufspaltung, Relaxation) in die Berechnung der Positronenlebensdauer ergab bei Al und Cu für reguläre Stufenversetzungen eine Positronenlebensdauer nahe τ_b [67]. Ähnliche Rechnungen wurden von KAMIMURA *et al.* für Fe angestellt [102]. Sie erhielten sowohl für die ungestörte Versetzungslinie einen Wert nahe der Volumenlebensdauer. Bemerkenswerterweise gaben auch Sprünge in ihren Rechnungen keine höhere Positronenlebensdauer. Eine mit der Versetzung assoziierte Leerstelle besitzt eine Positronenlebensdauer, die kürzer als die von Vakanzten im Volumen ist. Als Resultat ihrer molekulardynamischen Simulationen erhielten HÄKKINEN *et al.* [67] eine Positronenbindungsenergie E_b von kleiner 0,080 eV für die reguläre Versetzung als Folge des geringen offenen Volumens. Die Lebensdauerrechnungen wurden durch die experimentellen Ergebnisse in Metallen bestätigt. Die Rechnung ergab ca. 225 ps für eine gebundene Leerstelle oder einen Versetzungssprung in Al [67], was gut den gemessenen Werten von 215 – 240 ps in Abhängigkeit von den Deformationsbedingungen entspricht [78]. Für Versetzungen in Halbleitern liegen bisher noch keine Rechnungen

*Der Trappingkoeffizient μ' ist hier auf eine Dichte bezogen und nicht wie in Gl. 4.3 (S. 37) auf eine Konzentration. Für Volumendichten ist $\mu'/\text{cm}^3\text{s}^{-1} = \mu/\text{s}^{-1} \cdot N_{\text{at}}^{-1}$, wobei N_{at} die Zahl der Atome pro Volumeneinheit ist. Bei Liniendichten gilt $\mu'/\text{cm}^2\text{s}^{-1} = \mu/\text{s}^{-1} \cdot N_{\text{at}}^{-2/3}$.

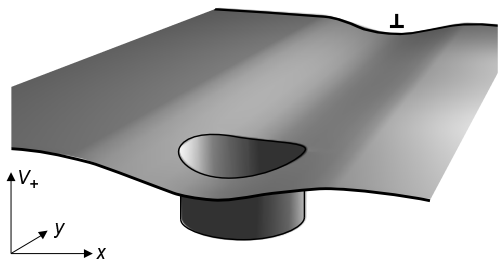


Abb. 4.5: Schema des Positronenpotentials V_+ einer Versetzung als kombinierte Positronenfalle [188]. Die reguläre Versetzungslinie hat nur eine geringe Positronenbindungsenergie, während gebundene Leerstellen als tiefe Fallen wirken.

vor. Nach den Ausführungen in Abschn. 2.2 sollten aber ähnliche Ergebnisse wie für Metalle zu erwarten sein.

Ein Versuch wurde unternommen, eine Abhängigkeit zwischen der Positronenlebensdauer und dem Betrag des Burgersvektors herzustellen [230]. Für eine Reihe von Materialien wurde die Positronenlebensdauer nach verschiedenen Vorbehandlungen wie plastische Verformung, Bestrahlung oder Temperung gemessen. Die Materialbehandlung war vorgenommen worden mit dem Ziel, verschiedene Versetzungsstrukturen wie Gleitversetzungen, prismatische Ringe, oder Franksche Partialversetzungen zu erzeugen. In der Tat wurde ein linearer Anstieg der Positronenlebensdauer mit dem Betrag des Burgersvektors abgeleitet. Allerdings erscheint die durchgeführte Analyse der Lebensdauerspektren zweifelhaft, da erzeugte Punktdefekte ungenügend berücksichtigt wurden.

Der Trappingkoeffizient für Versetzungen wurde in plastisch deformierten Si und Ge durch Kombination von TEM und POLIS bestimmt [114]. Sie lag bei $\mu = 1 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$ (Si) und $4,8 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$ (Ge). Das entspricht $\mu' = 0,7 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ und $4 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$, wenn die Versetzungsdichte in üblichen Einheiten von cm^{-2} angegeben wird. KAWASUSO *et al.* [103] bestimmten $\mu = 5,3 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$ in plastisch deformierten Si. Diese Werte liegen signifikant über dem Trappingkoeffizienten einer neutralen Leerstelle in Halbleitern (Absch. 4.2). Aus der Existenz sowohl eines flachen als auch tiefen Potentials an der Versetzung kann die Schlussfolgerung gezogen werden, dass die flachen Niveaus einen *Precursor*-Zustand für den Einfang in die tiefe Falle bilden. Eine vergleichbare Argumentation bildet die Grundlage der Beschreibung des Positroneneinfangs in eine negativ geladene Leerstelle. Der Trappingkoeffizient vergrößert sich bei V^- , weil Positronen zunächst in den räumlich ausgedehnten Rydbergzuständen gebunden werden. Der Einfachheit halber wird die dichte Serie von Rydbergniveaus durch ein einziges ersetzt [200]. Aus diesem flachen Niveau kann das Positron mit einer Entweichrate δ in den delokalisierten Zustand des defektfreien Volumens zurückkehren oder es kann weiter in dem tiefen Niveau lokalisiert werden mit der Übergangsrate ϑ . Das Modell des Positroneneinfangs in Versetzungen zeigt Abb. 4.6. Die Berechnung in der thermodynamischen Beschreibung von MANNINEN und NIEMINEN [158] ergab für Versetzungen

$$\frac{\delta}{\kappa_{\text{st}}} = \frac{m_+ k_B T}{2\rho_d \hbar^2} \text{erf}^{-1} \left(\sqrt{\frac{E_b}{k_B T}} \right) \exp \left(-\frac{E_b}{k_B T} \right). \quad (4.17)$$

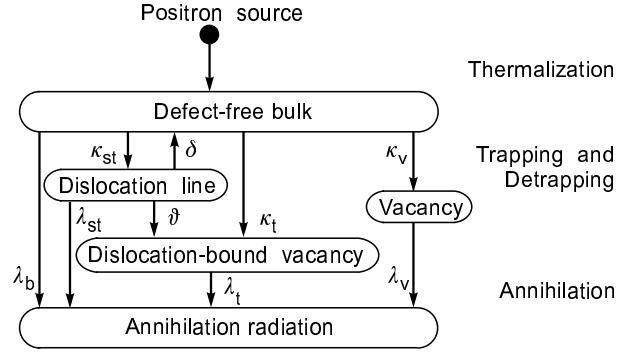
Diese Gleichung unterscheidet sich von Gl. 4.6 (S. 38) in der unterschiedlichen Geometrie und dem Ursprung des flachen Zustands. κ_{st} ist die Einfangrate in die reguläre Versetzungslinie. Um das Termschema in Abb. 4.6 behandeln zu können, werden folgende Voraussetzungen gemacht: Die direkte Einfang in die versetzungsgebundene Leerstelle ist zu vernachlässigen, d. h. $\kappa_t \ll \lambda_b$ und $\lambda_b \ll \vartheta$. Damit kann die Nettoeinfangrate angegeben werden als

$$\kappa = \frac{\kappa_{\text{st}} \vartheta}{\vartheta + \delta}.$$

Mit Gl. 4.17 folgt daraus für den Trappingkoeffizienten

$$\mu' = \frac{\vartheta}{\frac{\vartheta}{\kappa_{\text{st}} \rho_d} + \frac{m_+ k_B T}{2\hbar^2} \text{erf}^{-1} \left(\sqrt{\frac{E_b}{k_B T}} \right) \exp \left(-\frac{E_b}{k_B T} \right)}.$$

Abb. 4.6: Schema des Positroneneinfangs in Versetzungen (Leipner *et al.* 1999 [132]). Eine tiefe Positronenfalle (an die Versetzung gebundene Leerstelle) ist mit einem flachen Precursor-Zustand verknüpft (reguläre Versetzung). Neben den Versetzungsniveaus ist noch eine unabhängige tiefe Falle (Leerstelle) angenommen, die Positronen einfangen kann.



Zur Berechnung der Temperaturabhängigkeit muss berücksichtigt werden, dass der Einfang in die flachen, ausgedehnten Versetzungszustände ein diffusionslimitierter Prozess ist. Mit der Temperaturabhängigkeit $D_+ \propto T^{-1/2}$ folgt $\mu'_{st} = \mu_0 T^{-1/2}$. Der Faktor μ_0 ist eine Funktion des Defektradius und der Dichte entsprechend Gl. 4.16. Es ergibt sich

$$\mu' = \frac{1}{\frac{T^{1/2}}{\mu_0} + \frac{m_+ k_B T}{2\vartheta \hbar^2} \operatorname{erf}^{-1} \left(\sqrt{\frac{E_b}{k_B T}} \right) \exp \left(-\frac{E_b}{k_B T} \right)} \quad (4.18)$$

unter Berücksichtigung von $\mu'_{st} = \kappa_{st}/\rho_d$.

Die Temperaturabhängigkeit der Positroneneinfangrate in Versetzungen wurde von KAWASUSO *et al.* [103] im Detail in plastisch deformierten Si untersucht. Wenngleich eine sehr komplizierte Zerlegungsprozedur des Positronenlebensdauerspektrums vorgenommen wurde, folgt der experimentell gefundene Verlauf einer versetzungskorrelierten Einfangrate mit T dem Modell der Versetzung als kombinierte flache und tiefe Falle. Der Temperaturverlauf ließ sich entsprechend Gl. 4.18 anpassen, wobei implizit vorausgesetzt wurde, dass die Einfangrate in das flache Niveau und die Übergangrate in die versetzungsgebundene Leerstelle etwa gleich sind. Genähert ergab sich damit im Temperaturbereich oberhalb 100 K ein T^{-1} -Verlauf, wie er bereits von KRAUSE-REHBERG *et al.* [114] gefunden worden war. Für negativ geladene Leerstellen wurde experimentell im Tieftemperaturbereich eine $T^{-1/2}$ -Abhängigkeit gemessen, oberhalb 100 K ein $T^{-1,2}$ -Verlauf [127]. Der Fit der T -Abhängigkeit der Einfangrate in die Versetzungen lieferte die Positronenbindungsenergie, $E_b \approx 0,011$ eV. Die Vermutung wurde geäußert, dass diese Energie mit dem Deformationspotential der Versetzung im Zusammenhang steht [103].

Zusätzliche Komplikationen ergeben sich, wenn die Versetzungen im Halbleiter geladen sind. Eine positive Ladung der Versetzung sollte Positronen abstoßen und kein Positroneneinfang zu beobachten sein. Das wurde in der Tat auch in p-dotiertem Si bestätigt [114]. Bei der Beschreibung negativ geladener Versetzungen müsste sich eine Variation der flachen Versetzungszustände aufgrund der Ausbildung von Rydbergniveaus einstellen. Da diese aber in der theoretischen Beschreibung als ein Niveau angenähert werden, sollte sich in der grundsätzlichen Beschreibung des Einfangs von Positronen in Versetzungen (Abb. 4.6) nichts ändern.

Üblicherweise sind in plastisch deformierten Proben neben den Versetzungen noch weitere Positronenfällen vorhanden. In Abb. 4.6 wurde noch eine Leerstelle in das Einfangschemata aufgenommen. Die entsprechend Gl. 4.8 auf Seite 39 für das Schema von Abb. 4.6 angepassten Raten-gleichungen lauten

$$\begin{aligned} \dot{N}_b &= -(\lambda_b + \kappa_t + \kappa_{st} + \kappa_v)N_b + \delta N_{st}, \\ \dot{N}_{st} &= -(\lambda_b + \kappa_t + \kappa_{st} + \kappa_v)N_b + \delta N_{st}, \\ \dot{N}_t &= -\lambda_t N_t + \vartheta N_{st}, \\ \dot{N}_v &= -\lambda_v N_v + \kappa_v N_b. \end{aligned}$$

Die Bedeutung der Indizes j in der Zahl der Positronen N_j , der Einfangrate κ_j und der Annihilationsrate λ_j ist b defektfreies Volumen, t tiefe versetzungsgebundene Positronenfalle, st flaches Versetzungsniveau und V Leerstelle unabhängig von der Versetzung. Die Positronenlebensdauern ergeben sich aus der Lösung dieses Systems (Gl. 4.10, S. 39) mit $k = 3$ als [132]

$$\tau_0 = \frac{2}{\Lambda_0 + \Xi_0}, \quad \tau_1 = \frac{2}{\Lambda_0 - \Xi_0}, \quad \tau_2 = \frac{1}{\lambda_t}, \quad \tau_3 = \frac{1}{\lambda_V} \quad (4.19)$$

und die Intensitäten als

$$\begin{aligned} I_0 &= 1 - (I_1 + I_2 + I_3), \\ I_1 &= \frac{\lambda_{st} + \delta + \vartheta - \Lambda_1}{\Xi_0} \left[1 + \frac{\kappa_{st}}{\lambda_{st} + \delta + \vartheta - \Lambda_1} + \frac{\kappa_t(\lambda_{st} + \delta + \vartheta - \Lambda_1) + \kappa_{st}\vartheta}{(\lambda_t - \Lambda_1)(\lambda_{st} + \delta + \vartheta - \Lambda_1)} + \frac{\kappa_V}{\lambda_V - \Lambda_1} \right], \\ I_2 &= \frac{\kappa_t(\lambda_{st} + \delta + \vartheta - \lambda_t) + \kappa_{st}\vartheta}{(\lambda_t - \Lambda_2)(\lambda_t - \Lambda_1)}, \\ I_3 &= \frac{\kappa_V(\lambda_{st} + \delta + \vartheta - \lambda_V)}{(\lambda_t - \Lambda_2)(\lambda_t - \Lambda_1)}. \end{aligned}$$

Die Abkürzungen sind

$$\begin{aligned} \Lambda_0 &= \lambda_b + \kappa_{st} + \kappa_t + \kappa_V + \lambda_{st} + \delta + \vartheta, \\ \Xi_0 &= \sqrt{(\lambda_b + \kappa_{st} + \kappa_t + \kappa_V - \lambda_{st} - \delta - \vartheta)^2 + 4\delta\kappa_{st}} \end{aligned}$$

und

$$\Lambda_1 = \frac{1}{2}(\Lambda_0 - \Xi_0), \quad \Lambda_2 = \frac{1}{2}(\Lambda_0 + \Xi_0). \quad (4.20)$$

Es ergibt sich also ein vierkomponentiges Positronenlebensdauerspektrum, mit dem das experimentelle Spektrum angepasst werden muss, um die Übergangsraten aus Abb. 4.6 bestimmen zu können. Diese Zerlegung ist ohne zusätzliche Annahmen aus den Messdaten nicht möglich. Ähnliche Vereinfachungen wie in einem System mit einer unabhängigen flachen Positronenfalle (4.14) ergeben sich aber, wenn bei hohen Temperaturen die Entweichrate δ hoch wird.

4.4 Positronenannihilationsmessungen an deformationsinduzierten Defekten

4.4.1 Punktdefekte und Punktdefekttagglomerate in Element- und Verbindungshalbleitern

Die typische Temperaturabhängigkeit der mittleren Positronenlebensdauer in plastisch deformiertem GaAs zeigt Abb. 4.7. Ein deutlicher Anstieg von $\bar{\tau}$ ist im Vergleich zur Referenzprobe erkennbar. Mit sinkender Messtemperatur sinkt die Lebensdauer. Dieses Verhalten kann mit dem Ansteigen der Dichte von Defekten mit offenem Volumen und flachen Positronenfallen als Resultat der Deformation erklärt werden. Für detailliertere Aussagen ist eine Zerlegung der Spektren erforderlich. Es wurde ein Trappingmodell mit zwei tiefen Positronenfallen (d_1 und d_2) einer flachen (d_3) und angewandt (siehe Abschn. 4.2). Eine verlässliche Zerlegung war i. a. nur oberhalb Raumtemperatur möglich* und ergab zwei Lebensdauern, die mit dem Positroneneinfang in Defekte im Zusammenhang stehen[†]. Wir erhielten für die Proben von Abb. 4.7 $\tau_{d1} = 255$ ps und

* d. h. in einem Bereich, wo der Einfluss der flachen Falle zu vernachlässigen ist

[†]Es ergibt sich in der dreikomponentigen Analyse eine weitere Lebensdauer τ_0 , die aber nicht mit dem Charakter der Defekte zu tun hat und hier nicht weiter diskutiert werden soll.

Abb. 4.7: Mittlere Positronenlebensdauer als Funktion der Temperatur in plastisch deformiertem GaAs:Te (Leipner et al. 1993 [138]). Probe A ist die unverformte Referenz. Probe B wurde bei 923 K in [213]-Richtung deformiert (0,5 % Kompression mit einer Rate von $5 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$), Probe C bei 823 K (2,9 % mit $1 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$). Die durchgezogenen Linien sind Fits entsprechend dem Trappingmodell.

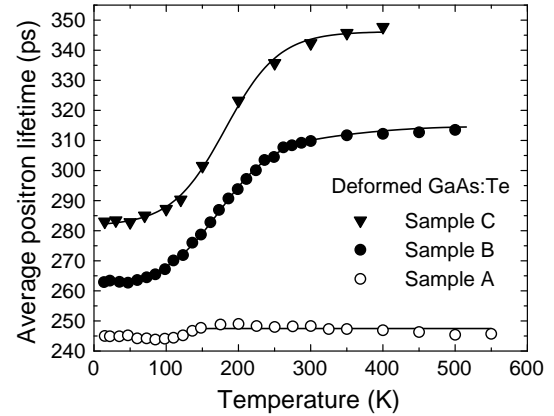
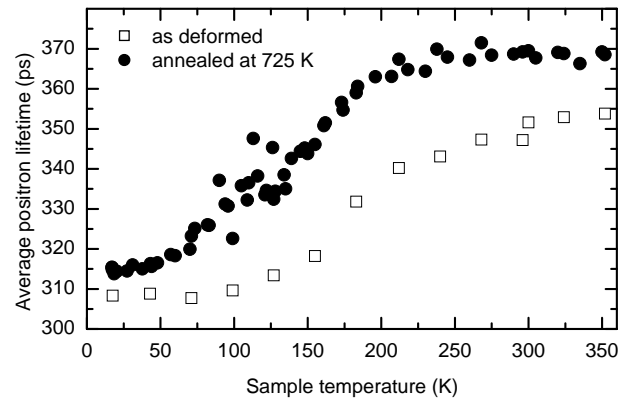


Abb. 4.8: Positronenlebensdauermessungen von undotiertem GaAs nach Deformation und Nachtemperung (Leipner et al. 1996 [131]). Die Probe wurde 3 % in [110]-Richtung mit einer Rate von $1 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ bei 825 K deformiert. Die Temperung erfolgte unter Ar-Schutzgas für 30 min.



$\tau_{d2} = 460 \text{ ps}$. Für eine Vielzahl von Messungen lagen diese Positronenlebensdauern sowohl in n-dotiertem als auch SI-GaAs nach Deformation mit Verformungsraten $\dot{\epsilon} \leq 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ generell bei $\tau_{d1} = (260 \pm 5) \text{ ps}$ und $\tau_{d2} = (477 \pm 20) \text{ ps}$. Bei höheren Kompressionsraten ergab sich in undotiertem GaAs für die d_2 -Komponente ein wesentlich höherer Wert von $509 \pm 5 \text{ ps}$, während der Wert für d_1 sich kaum verändert. Keine weitere systematische Änderung der Lebensdauerwerte mit den Deformationsparametern (Deformationsachse, -temperatur, Verformungsgrad) war erkennbar.

Vergleichbare Messungen wurden in plastisch deformiertem Silicium angestellt [91, 114]. Bei kleinen Deformationsraten ergaben sich hier aus einer dreikomponentigen Zerlegung $\tau_{d1} = (285 \pm 20) \text{ ps}$ und $\tau_{d2} = (485 \pm 20) \text{ ps}$. Hohe Deformationsraten ($> 5 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$) lieferten wie bei GaAs einen höheren Wert für d_2 , $\tau_{d2} = (600 \pm 50) \text{ ps}$. Die angegebenen Fehler betreffen die Schwankungsbreite in mehreren gemessenen Proben. Im Allgemeinen ist festzustellen, dass auch die Messung an einer Probe einen höheren Fehler der d_2 -Komponente liefert, da die dazugehörige Intensität geringer ist.

Für die Interpretation der erhaltenen Positronenlebensdauerwerte muss man einen Vergleich mit anderen Experimenten und theoretischen Rechnungen anstellen. Zunächst ist zu konstatieren, dass in GaAs:Te bereits im undeformierten Zustand eine leerstellenkorrelierte Positronenlebensdauer gemessen wird. Das Problem der Leerstellen in dotiertem GaAs wurde ausführlich von GEBAUER [54] untersucht. Im Gegensatz zu GaAs ohne Positronenfallen, das eine Positronenlebensdauer von ca. $\tau_b = 231 \text{ ps}$ bei Raumtemperatur aufweist [117], tritt in GaAs:Te eine defektspezifische Positronenlebensdauer von $254 \pm 6 \text{ ps}$ auf. Die Größe dieser Lebensdauer deutet in der Korrelation mit theoretischen Rechnungen [117, 204] auf das Vorhandensein von Monovakanzen hin. Diese Leerstellen konnten durch Messung der Dopplerverbreiterung der 511 keV-Annihilationslinie und der daraus abgeleiteten Impulsdichteverteilung der annihilierenden Elektronen als $V_{\text{Ga}}\text{Te}_{\text{As}}$ -Komplexe identifiziert werden [57].

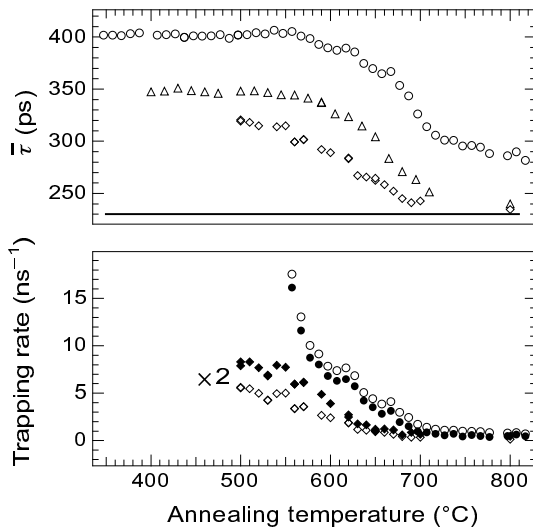


Abb. 4.9: Mittlere Positronenlebensdauer und Einfangraten als Funktion der Ausheiltemperatur in undotiertem GaAs nach plastischer Deformation in [110]-Richtung [91]. Kreise: 10% Deformation bei 673 K, Dreiecke: 3% bei 773 K, Rhomben: 10% bei 1073 K. Die durchgezogene Linie veranschaulicht $\tau_b = 231$ ps. Im unteren Bild bezeichnen die vollen Symbole die Positroneneinfangraten in monovakanzenartige Defekte (d_1) und die offenen Symbole den Einfang in Leerstellencluster (d_2). Zur besseren Sichtbarkeit sind die Einfangraten der bei 1073 K verformten Probe verdoppelt. Die Temperungen erfolgten für 30 min unter As-Schutzgas in einer geschlossenen Ampulle.

In schwach deformierten GaAs-Proben (Probe B, Abb. 4.7) ist kein Anstieg der Einfangrate des Defektes d_1 zu konstatieren, d. h. er ist dort nicht deformationskorreliert und entspricht dem Leerstellenkomplex, der im Ausgangsmaterial gefunden wurde. Bei höheren Verformungsgraden steigt die Einfangrate in den Defekt d_1 . Ein Leerstellensignal trat in undotiertem GaAs im unverformten Zustand nicht auf. Daraus ist abzuleiten, dass sowohl in undotiertem als auch Te-dotiertem GaAs eine Monovakanz bei Deformationsgraden $> 1\%$ gebildet wird. Das trifft auch auf deformiertes Si zu, wenngleich die Lebensdauer der d_1 -Komponente etwas höher liegt als im allgemeinen für die Einfachleerstelle in diesem Material angegeben wird ($\tau_v = 266$ ps bis 275 ps; die Positronenlebensdauer im defektfreien Volumen beträgt 216 ps [117]). Auch in einigen undotierten GaAs-Proben lag nach Deformation die Positronenlebensdauer etwas höher, $\tau_{d1} = (301 \pm 16)$ ps. Dieser Wert liegt zwischen dem einer Monovakanz und dem einer Doppel-leerstelle [55, 201]. Es wurde beobachtet, dass bei einer Temperung von 30 min bei 725 K diese Komponente verschwand, bzw. sich in eine kürzere Lebensdauer von 260 ps umwandelte (*Hübner et al.* 1996 [72]). Abb. 4.8 zeigt die daraus resultierende Änderung der mittleren Positronenlebensdauer. Durch Verminderung bzw. Wegfall des Einfangs in d_1 steigt der relative Einfang von Positronen in d_2 , woraus ein Anstieg in $\bar{\tau}$ resultiert. Hervorzuheben ist, dass die Temperatur, bei der die Nachtemperung erfolgte, unterhalb der Verformungstemperatur von 1073 K lag. Das Ausheilen einer mit dem EL6-Defekt in Verbindung gebrachten Absorptionsbande bei 0,99 eV wurde im selben Temperaturbereich wie das Verschwinden der Positronenlebensdauer bei 300 ps beobachtet [131]. Für den EL6-Defekt wurde u. a. ein Doppelleerstellencharakter diskutiert [209]. Mit dieser Interpretation ist zu schlussfolgern, dass die Positronenlebensdauer bei 300 ps eine Mischkomponente einer im Spektrum nicht aufzulösenden Einfach- und Doppelvakanz darstellt. Eine solche Mischkomponente wurde auch in plastisch deformiertem InP in Korrelation mit Photolumineszenzmessungen identifiziert (*Leipner et al.* 1995 [137]).

Es ist zu konstatieren, dass die hier gefundenen Einfachleerstellen thermisch wesentlich stabiler sind als die nach Tieftemperaturelektronenbestrahlung gefundenen, die bereits unterhalb von Raumtemperatur ausheilen [117, 194]. Eine Stabilisierung der Leerstellen durch Komplexbildung mit während des Deformationsexperimentes bei höheren Temperaturen eindiffundierten Verunreinigungen wird ausgeschlossen. Zur Vermeidung des direkten Kontakts der Proben mit den keramischen Druckstempeln wurden Unterlegscheiben aus hochreinem Quarz verwendet. Vergleichsmessungen an im Deformationsofen getemperten Proben ohne Deformation brachten keinen signifikanten Anstieg der Positronenlebensdauer. Die Schlussfolgerung ist, dass die Leerstellen von den erzeugten Versetzungen stabilisiert werden, das es sich also entsprechend Abb. 4.6 um ver-

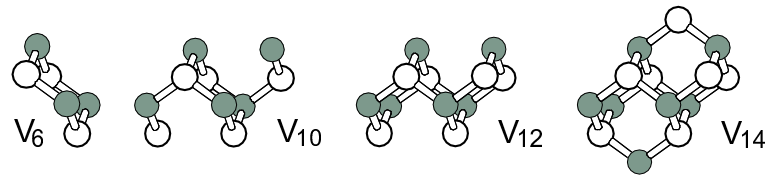


Abb. 4.10: Struktur unrelaxierter Leerstellencluster V_6 , V_{10} , V_{12} und V_{14} in GaAs (Staab *et al.* 1999 [246]). Helle Kugeln stellen As-Leerstellen, dunkle Ga-Leerstellen dar.

setzungsgebundene Defekte handelt. Es besteht eine Korrelation zur Versetzungsdichte: In undotierten Proben mit einer geringen Versetzungsdichte ($< 5 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-2}$) fehlt die d_1 -Komponente. Die thermische Stabilität der bei Deformation erzeugten Defekte wurde in Ausheilexperimenten untersucht. Für Si beginnt die Ausheilung des Defektes d_1 bei 950 K. Eine breite Ausheilstufe der mittleren Positronenlebensdauer setzt für GaAs bei 823 K ein und sie endet bei ca. 1023 K. In schwächer deformierten Proben wird bei dieser Temperatur die Positronenlebensdauer im defektfreien Volumen τ_b erreicht, obwohl die Dichte von Versetzungen oberhalb 10^8 cm^{-2} lag. Bei höheren Verformungsgraden bleibt die mittlere Positronenlebensdauer auch bei 1023 K deutlich über τ_b (Abb. 4.9). Die Positroneneinfangraten bei Raumtemperatur wurden aus einem Trappingmodell unter Zugrundelegung eines Positroneneinfangs in zwei tiefe Positronenfallen d_1 und d_2 errechnet. Obwohl die Versetzungsdichte sich im Verlauf der Temperatur kaum ändert, gibt es bei 1000 K kaum noch Einfang in d_1 . Die Einfangraten als Funktion der Temperatur zeigen, dass beide Defektarten unabhängig von der Deformation nahezu parallel ausheilen. Zwei Möglichkeiten können dafür in Betracht kommen: 1.) Die Ausheilung wird über die Mobilisierung einer bestimmten Defektart realisiert, die mit den Defekten d_1 und d_2 reagiert, oder 2.) beide Defektarten sind miteinander gekoppelt. Diese Kopplung kann zum Beispiel in einer Assoziation mit Versetzungen bestehen. Im Zuge der Temperung wird über die Ausheilung der Defekte d_1 und d_2 die Assoziation aufgehoben und es bleibt nur noch die reguläre Versetzung.

Die längere Lebensdauer τ_{d2} ist sehr viel größer als die von Doppelleerstellen. Die Größe dieser Positronenlebensdauer deutet darauf hin, dass der Positroneneinfang in größere Leerstellenaggregate die Ursache für diese Komponente ist. Aus einfachen Überlegungen zur Elektronendichte im Festkörper hat SEEGER abgeleitet, dass für Defekte in Metallen oder Halbleitern eine Positronenlebensdauer bei 500 ps die maximal mögliche ist [227]. Bisherige theoretische Rechnungen erfolgten höchstens für Aggregate aus acht Leerstellen. Simulationen aus den achtziger Jahren gaben eine Positronenlebensdauer für V_8 von ca. 400 ps [199]. Neuere Dichtefunktionalmethoden ermöglichen es, die Zahl der Atome in einer Superzelle so hoch zu wählen, dass auch größere Leerstellencluster gerechnet werden können. Für kovalente Materialien gibt es im Gegensatz zu Metallen Hinweise, dass Leerstellencluster von bestimmter Größe besonders stabil sein sollen, da eine minimale Zahl unabgesättigter Bindungen angestrebt wird. Das führte CHADI und CHANG zu dem Schluss, dass es gewisse magische Zahlen ($i = 6, 10, 14$) für die Größe von Leerstellenaggregaten in Si gibt [34]. Es ist nun von Interesse, ob in einem Verbindungshalbleiter ähnliche Regeln gelten. Die Existenz unabgesättigter Bindungen verschiedener Atomsorten sollte hier einen großen Einfluss auf die Rekonstruktion und Relaxation haben. Wir studierten die Bildungsenergie von verschiedenen Leerstellenagglomeraten in Si und GaAs und berechneten die dazugehörige Positronenlebensdauer. Eine selbstkonsistente *Tight-binding*-Methode auf der Grundlage der Dichtefunktionaltheorie wurde unter Berücksichtigung des Ladungstransfers verwendet. Die Grundlagen der angewandten Methode wurde von ELSTNER *et al.* [48] dargestellt. Die Implementierung und die Anwendung auf komplexe Systeme in Verbindungshalbleitern beschreiben HAUGK *et al.* [70]. Für die Berechnung der Leerstellencluster in Si und GaAs wurde eine Superzelle von 512 Atomen

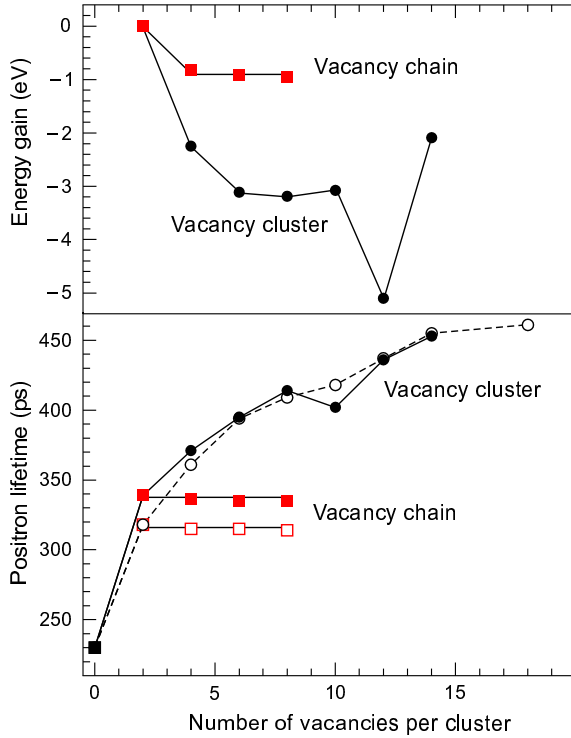


Abb. 4.11: Berechnung des Energiegewinns beim Hinzufügen einer Doppelleerstelle zu einem Cluster von $i - 2$ Leerstellen in GaAs. Die berechnete Positronenlebensdauer im entsprechenden dreidimensionalen Leerstellencluster ist unten im Vergleich zur Berechnung der Lebensdauer von Leerstellenketten der Länge i gezeigt. Die vollen Symbole zeigen die Werte aus der relaxierten Konfiguration der Cluster und Kette, die offenen Symbole die der unrelaxierten [245].

men verwendet, um Defekt–Defekt–Wechselwirkungen zu vermeiden [247, 245]. Es wurden nur ladungsneutrale Superzellen verwendet, das heißt im Falle von GaAs mit einer gleichen Zahl von Ga- und As-Atomen. Die Bildungsenergie neutraler Leerstellenagglomerate von i Leerstellen ergibt sich für Si und GaAs (mit einer gleichen Zahl von Ga- und As-Leerstellen in der Superzelle) zu [284]

$$\begin{aligned}\Omega_i^{\text{Si}} &= E_{\text{tot}}^{\text{Si}} - \mu_{\text{b}}^{\text{Si}}(n^{\text{Si}}), \\ \Omega_i^{\text{GaAs}} &= E_{\text{tot}}^{\text{GaAs}} - \mu_{\text{b}}^{\text{GaAs}}(n^{\text{Ga}} + n^{\text{As}})\end{aligned}$$

($E_{\text{tot}}^{\text{Si}}$, $E_{\text{tot}}^{\text{GaAs}}$ Gesamtenergie der Superzelle für Si bzw. GaAs mit n^{Si} bzw. n^{Ga} und n^{As} Si- bzw. Ga- und As-Atomen; $\mu_{\text{b}}^{\text{Si}}$, $\mu_{\text{b}}^{\text{GaAs}}$ chemisches Potential von Si bzw. eines Ga–As-Paares, das aus der SCC-DFTB-Rechnung* für Si- und GaAs-Volumenmaterial [70] folgt).

Die Berechnung der Positronenlebensdauer und für verschiedene Leerstellencluster wurde mit der Methode überlagerter Atompotentiale [202] entsprechend Gl. 4.2 auf Seite 36 durchgeführt [246]. Dabei wurden sowohl die unrelaxierten Atompositionen als auch die mit der SCC-DFTB-Rechnung erhaltenen benutzt.

Bei der Auswahl der Vielzahl möglicher Konfigurationen von Leerstellenaggregaten wurden solche ausgewählt, die eine möglichst geschlossene Struktur aufweisen. Dabei wurde angenommen, dass gerade diese Aggregate eine minimale Energie aufweisen. Der erste Schritt bestand analog zum Vorgehen von CHADI und CHANG [34] in der Konstruktion von hexagonalen Ringstrukturen. Die Struktur von V_6 und daraus abgeleiteter anderer geschlossener Konfigurationen ist in Abb. 4.10 gezeigt. Um die Energie verschiedener Cluster zu vergleichen, wurde der Energiegewinn beim Anfügen von Leerstellen an eine stabile Clusterkonfiguration berechnet. Für Si wurde eine Monovakanz hinzugefügt, bei GaAs aus Gründen der Ladungsneutralität ein Leerstellenpaar, $V_{\text{Ga}}V_{\text{As}}$. Der Energiegewinn ist gleich der negativen Dissoziationsenergie entsprechend der Reaktion $V_i \rightarrow V_{i-1} + V$ für Si und $V_i \rightarrow V_{i-2} + V_{\text{Ga}}V_{\text{As}}$ für GaAs. Das Ergebnis für GaAs zeigt Abb. 4.11. Als stabilste Struktur erweist sich nach dieser Rechnung in Hinblick auf die Dissozia-

*SCC-DFTB self-consistent charge density-functional based tight binding

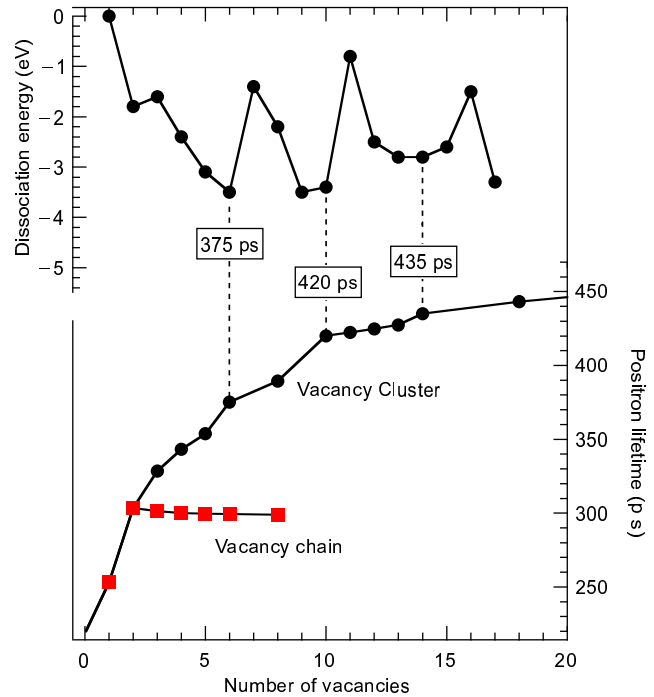


Abb. 4.12: Berechnung des Energiegewinns beim Hinzufügen einer Leerstelle zu einem Cluster von $i - 1$ Leerstellen in Si. Die berechnete Positronenlebensdauer im entsprechenden (unrelaxierten) Leerstellencluster ist unten gezeigt. Die Positronenlebensdauer der stabilsten Cluster ist angegeben [246].

tion ein Cluster V_{12} . Aus der Literatur sind bisher keine Rechnungen zu Leerstellenagglomeraten in GaAs bekannt. Die besondere Stabilität von V_{12} lässt sich aus der Relaxation der Bindungen verstehen (Staab *et al.* 1999 [245]). Entscheidenden Einfluss hat die Ausbildung von stabilisierenden As–As- und Ga–Ga-Dimerbindungen, womit die Zahl nichtabgesättigter Bindungen reduziert wird und die Gesamtenergie sich erniedrigt. Die Bildung von Bindungen gleichartiger Atome ist vergleichbar mit der Rekonstruktion des Versetzungskern von α - und β -Versetzungen, die auch mit einem Energiegewinn einhergeht (Abschn. 2.1). Eine generelle Eigenschaft der relaxierten Leerstellencluster in GaAs ist die sp^2 -Hybridisierung der dreifach koordinierten Ga-Atome durch Leerung der unabgesättigten Bindungen. Im Gegensatz dazu weisen alle dreifach koordinierten As-Atome eine p^3 -Hybridisierung durch Füllen der unabgesättigten Bindungen auf. Diese Änderung in der Hybridisierung ergibt eine weitere Reduktion der Gesamtenergie. Die Ausbildung von Dimerbindungen gleichartiger Atome ist bereits bei V_{10} möglich. Bei dieser Struktur ist aber die sp^2 -Hybridisierung von Ga-Atomen nicht möglich, so dass im Resultat V_{10} weniger stabil als V_{12} ist. Die Rechnungen wurden bis zu einer Clustergröße von $i = 18$ durchgeführt. Allerdings ist bei dieser Größe die Defekt–Defekt-Wechselwirkung nicht mehr vernachlässigbar, so dass die Zuverlässigkeit sinkt.

Neben der Simulation dreidimensionaler Cluster wurden auch Leerstellenketten der Länge i berechnet. Es ergibt sich auch für längere Ketten kein Energiegewinn durch Anfügen neuer Leerstellen. Die Konsequenz ist, dass die Ausgangskonfiguration sich umordnen wird, um einen dreidimensionalen Cluster geringerer Energie zu bilden, wenn die Leerstellen sich entlang der Kette bewegen können.

Die Abhängigkeit der Dissoziationsenergie als Funktion der Zahl der Leerstellen im Agglomerat wurde auch für Si berechnet (Abb. 4.12). Die Ergebnisse sind in Übereinstimmung mit früheren Resultaten auf der Grundlage der simplen Abzählung von nichtabgesättigten Bindungen [34]. Die stabilsten Aggregate sind V_6 , V_{10} und V_{14} . Alle Atome in der Umgebung von V_6 sind vierfach koordiniert, während bei V_{10} vier Atome und bei V_{14} acht Atome in dreifacher Koordination auftreten. Der Energieanstieg durch die Bildung der Dreifachkoordination wird kompensiert durch neue Bindungen, die nahezu die ideale Bindungslänge aufweisen (Abb. 4.13).

Die berechnete Positronenlebensdauer in den betrachteten dreidimensionalen Leerstellenag-

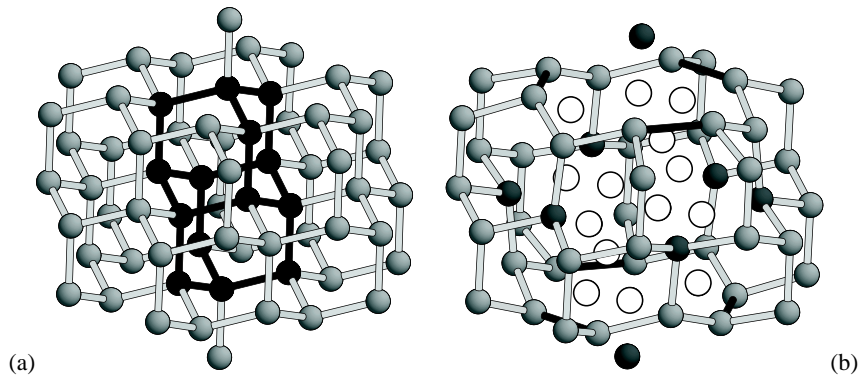


Abb. 4.13: Leerstellencluster V_{14} in Si. (a) Unrelaxierte Konfiguration. Die entfernten Atome und Bindungen sind schwarz gezeichnet. (b) Relaxierte Konfiguration. Die Leerstellen sind als weiße Kreise eingezeichnet. Die acht dreifach koordinierten Atome und die sechs neuen Bindungen sind schwarz [247].

gregaten steigt monoton mit der Zahl der Leerstellen pro Cluster. Bei ca. 450 ps wird ein Sättigungswert erreicht (Abb. 4.11, 4.12). Bei GaAs hat die besonders stabile Konfiguration V_{12} eine Positronenlebensdauer von 440 ps. Sie stellt damit einen möglichen Kandidaten für die beobachtete Lebensdauerkomponente τ_{d2} in plastisch deformiertem GaAs dar. Dabei ist zu berücksichtigen, dass der experimentelle Wert einen großen statistischen Fehler hat* und die theoretischen Rechnung ebenfalls Unsicherheiten aufweisen. Im Falle von Si wurden für die stabilsten Cluster V_6 , V_{10} und V_{14} Positronenlebensdauern von 375, 420 und 435 ps errechnet. Damit könnte die experimentelle Positronenlebensdauerkomponente für d_2 in Si mit dem Auftreten von V_{14} erklärt werden. Mit den bisher erzielten Resultaten der theoretischen Rechnungen ist allerdings auch nicht auszuschließen, dass ein größeres Agglomerat für die Lebensdauer verantwortlich ist. Nach einer empirischen Regel, die für stabile Leerstellencluster in Si entsprechend $i = 4j + 2$ mit $j = 1, 2, 3 \dots$ aufzustellen ist, müsste ein Cluster V_{22} stabil sein. Nimmt man dieselbe Regel für GaAs mit $j = 2, 4, 6 \dots$ ergibt sich V_{20} . Dabei ist fraglich, ob eine solche Extrapolation überhaupt zulässig ist, da die Rekonstruktion der Bindungen mit zunehmender Clustergröße immer komplexer werden können. Auf alle Fälle können Rechnungen zur Stabilität solcher Agglomerate nicht mehr mit einer Superzelle von 512 Atomen durchgeführt werden.

Die hohe Positronenlebensdauer von 600 ps (509 ps), die in Si (GaAs) nach plastischer Deformation mit hoher Verformungsrate gefunden wurden, lassen sich entsprechend der Rechnungen nicht mit einer bestimmten Clustergröße in Zusammenhang bringen. Möglicherweise ist diese hohe Lebensdauer auf die Annihilation an den inneren Oberflächen größerer Agglomerate zurückzuführen. Es ist denkbar, dass die Größe der Leerstellencluster ausreicht, um Positronium zu bilden. Positronium (Ps) stellt einen gebundenen Zustand zwischen einem Positron und einem Elektron dar, der an Oberflächen, in Molekulkristallen und porösem Material auftritt. Es gibt zwei Modifikationen: bei parallelem Spin spricht man von Ortho-Ps, bei antiparallelem Spin von Para-Ps. Die Lebensdauern im Vakuum betragen 142 ns (Ortho-Ps) und 124 ps (Para-Ps). Im Festkörper zerstrahlt Ortho-Ps hauptsächlich durch Wechselwirkung mit Kristallelektronen. Im magnetischen Feld kann man den Anteil von Ortho- und Para-Ps verändern. Aus der Messung der Annihilationsparameter in Abhängigkeit vom äußeren Magnetfeld kann auf die Anwesenheit von Positronium geschlossen werden [117]. Bei Positronenlebensdauer-messungen von plastisch deformiertem Si

*Es sei auf die Arbeit von SOMIESKI *et al.* [243] verwiesen, die die Schwierigkeit der genauen Bestimmung langer Lebensdauerkomponenten im Zusammenhang mit der Quell- und Untergrundkorrektur hervorhoben.

im Magnetfeld* ergaben sich aber keine Änderungen in der Lebensdauerkomponente τ_{d2} , so dass eine Ps-Bildung ausgeschlossen wird. Dieses Resultat steht im Gegensatz zu POGREBYAK [192], der die Existenz von Positronium aus eindimensionalen Winkelkorrelationsmessungen in protonenbestrahlten Halbleitern ableitete, die Leerstellencluster mit dem Radius von etwa 0,1 nm enthielten.

In den durchgeführten Rechnungen blieb die Positronenlebensdauer für die Leerstellenketten immer auf demselben Niveau, unabhängig von der Länge. Die defektbezogene Lebensdauer ist die einer Doppelleerstelle. Damit ist klar, dass die experimentell gefundene Lebensdauer τ_{d2} nicht mit linearen Anordnungen von Leerstellen im Zusammenhang stehen kann. Auf der anderen Seite war in einigen verformten Proben eine Mischkomponente zwischen einer Monovakanz und dem einer Doppelleerstelle gefunden worden. Es ist im Lichte der Ergebnisse der Berechnungen der Lebensdauer gut möglich, dass der im Lebensdauerspektrum nicht aufzulösende Doppelvakanzenanteil von solchen Ketten herrührt. Die im Experiment gefundene geringe Stabilität bei Temperatur nach der Deformation ist in Übereinstimmung mit den Rechnungen zur geringeren energetischen Stabilität der Ketten im Vergleich zu den dreidimensionalen Clustern (Abb. 4.11).

Keine vernünftige Zerlegung der Positronenlebensdauerspektren ist unterhalb einer Messtemperatur von 200 K möglich (Abb. 4.7). Der starke Abfall der für GaAs gezeigten mittleren Positronenlebensdauer kann auf die Anwesenheit flacher Positronenfallen zurückgeführt werden. Die durchgezogenen Linien in Abb. 4.7 stellen Fits der mittleren Positronenlebensdauer dar. Dabei werden die Einfangraten in die dominierenden zwei tiefen Positronenfallen aus einer dreikomponentigen Anpassung oberhalb Raumtemperatur bestimmt. Die Extrapolation dieser Werte in den Tieftemperaturbereich erlaubt die Bestimmung der Einfangrate in die flache Falle (Gl. 4.15 auf Seite 40) und eine Anpassung der Temperaturabhängigkeit von $\bar{\tau}$ unter Berücksichtigung der Entweichrate (Gl. 4.6 auf Seite 38). Als flache Positronenfallen kommen negative Ionen oder Versetzungen in Frage. Die negativen Ionen können akzeptorartige Fremdatome, Zwischengitteratome oder *Antisites* sein. Solche Defekte sind in geringer Dichte bereits im undeformierten GaAs vorhanden, wie das leichte Absinken der mittleren Positronenlebensdauer im Tieftemperaturbereich bei Probe A in Abb. 4.7 zeigt. In dem verwendeten LEC-gezüchteten GaAs kommen als flache Positronenfallen Borverunreinigungen in Frage. Die Gesamtdichte der Borkontamination kann bei etwa 10^{17} cm^{-3} liegen, wobei ein Teil auf Arsenplätzen eingebaut wird und damit als Akzeptor wirkt [1].

Eine signifikante Eindiffusion von Akzeptorverunreinigungen während des Deformationsversuchs kann ausgeschlossen werden: die Einfangrate und damit die Konzentration der flachen Fallen nimmt mit der Deformationsrate, also mit kürzerer Verweilzeit bei der Deformationstemperatur zu.

In elektronenbestrahlten GaAs wurden ebenfalls flache Positronenfallen gefunden [194]. Diese konnten mit erzeugten *Antisites* Ga_{As} in Verbindung gebracht werden. Nach Rechnungen verschiedener Autoren liegen die Umladungsniveaus ($2 - / - / 0$) in der unteren Hälfte der Bandlücke [117]. Damit sollte dieser Defekt in SI- und n-leitendem GaAs negativ geladen sein. Das Positronenpotential hat damit eine Struktur, wie in Abb. 4.2 auf Seite 37 gezeigt. Die Anpassung des Abfalls von $\bar{\tau}$ bei tiefen Temperaturen unter Verwendung von Gl. 4.6 liefert als Anpassparameter die Positronenbindungsenergie. Für eine Vielzahl verformter GaAs-Proben (sowohl undotiert als auch n-leitende) wurde E_b zu $0,040 \pm 0,005 \text{ eV}$ bestimmt. Für die in elektronenbestrahltem GaAs auftretenden Fallen wurden Bindungsenergien zwischen 0,038 und 0,045 eV angegeben [36]. Wengleich die Übereinstimmung der Werte von deformierten zum bestrahlten GaAs keine sichere Identifikation darstellt, so kann sie doch ein Hinweis sein, dass es sich in beiden Fällen um Ga_{As}^- -*Antisites* handelt.

*die Experimente wurden von I. Billard (Strasbourg) durchgeführt

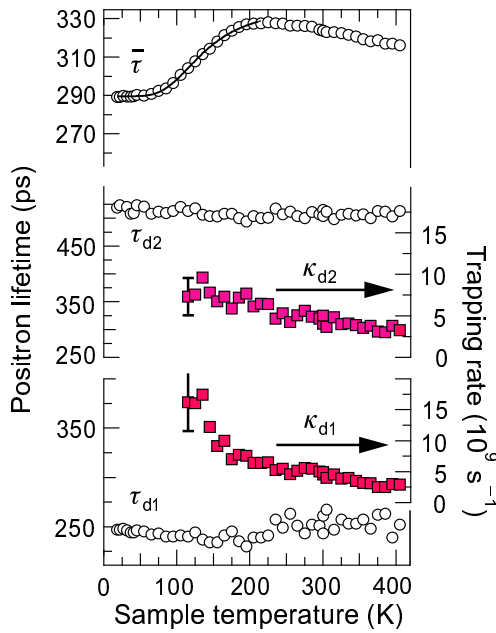


Abb. 4.14: Positronenlebensdauermessungen in plastisch deformierten undotiertem GaAs. Oben ist die mittlere Positronenlebensdauer als Funktion der Temperatur aufgetragen. Der untere Teil zeigt das Ergebnis der Spektrenzerlegung mit den Positronenlebensdauern τ_{d1} , τ_{d2} und den dazugehörigen Einfangraten. Keine Bestimmung der Einfangraten ist unterhalb 110 K möglich aufgrund des kompletten Positroneneinfangs in Defekte. Die Probe wurde bei 1073 K in [110]-Richtung mit einer Verformungsrate von $4,8 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ bis zu 10 % deformiert (Leipner et al. 2000 [135]).

4.4.2 Bestimmung von Defektdichten aus Positronenlebensdauermessungen

Das Resultat einer POLIS-Messung an deformiertem SI-GaAs zeigt Abb. 4.14. Neben der mittleren Positronenlebensdauer ist der Verlauf der Komponenten τ_{d1} und τ_{d2} und der zugehörigen Einfangraten κ_{d1} und κ_{d2} mit der Temperatur aufgetragen. Unterhalb 110 K ist keine Bestimmung von Einfangraten möglich, da durch das Wirksamwerden der flachen Positronenfalle d_3 Positronen nur noch aus Defektzuständen annihilieren (kompletter Einfang). In diesem Temperaturbereich liegt τ_{d1} zwischen 240 und 247 ps. Da die Positronenlebensdauer in flachen Positronenfällen bei $\tau_{d3} \approx \tau_b$ erwartet wird, stellt dieser Wert eine Mischkomponente aus τ_{d3} und τ_{d1} dar. Unterhalb von 200 K bedingt der wachsende Einfluss der flachen Fallen, dass eine dreikomponentige Zerlegung instabil wird, woraus ein deutlicher Anstieg der Einfangraten resultiert. Bei höheren Temperaturen ist zu berücksichtigen, dass der Einfang in die Leerstellenagglomerate d_2 einen diffusionslimitierten Prozess darstellt, der entsprechen Gl. 4.5 auf Seite 37 auf eine Temperaturabhängigkeit führt. Diese Temperaturabhängigkeit entsprechend einem $T^{-1/2}$ -Gesetz wird in der Einfangrate κ_{d2} in Abb. 4.14 sichtbar. Mit der Diffusionskonstanten von $D_+ = 1,3 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ bei Raumtemperatur [213] und der aus den theoretischen Rechnung angenommenen Größe der Leerstellencluster kann aus κ_{d2} eine Defektdichte berechnet werden. Im folgenden wird nicht die Zahl der Cluster, sondern immer die Gesamtzahl der in den Clustern agglomerierten Leerstellen angegeben. Dabei wird ein V_{12} -Agglomerat vorausgesetzt. Wie im vorhergehenden Abschnitt ausgeführt wurde, sind aber auch größere stabile Aggregate denkbar. Damit stellt die angegebene Zahl der Leerstellen in Clustern eine untere Grenze dar.

Bei der Diskussion des Temperaturverlaufs von κ_{d1} ist entscheidend, dass es sich um Leerstellen handelt, die an Versetzungen gebunden sind. Damit muss das in Abschn. 4.3 diskutierte Modell der kombinierten Positronenfalle angewandt werden. In der Tat lässt sich die Einfangrate bei höheren Temperaturen mit einer T^{-1} -Abhängigkeit anpassen. Um die Dichte der versetzungsgebundenen Vakanzen angeben zu können, wird vereinfachend angenommen, dass für $T > 350 \text{ K}$ die Entweichrate aus dem *Precursor*-Niveau hoch ist und nur noch direkter Einfang in das tiefe Leerstellenniveau stattfindet (Abb. 4.6 auf Seite 45). Damit kann der Einfang wie in eine isolierte Leerstelle behandelt werden. Der Trappingkoeffizienten wird dann mit demselben Wert wie für negativ geladene Leerstellen in diesem Temperaturbereich ($1 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$) approximiert.

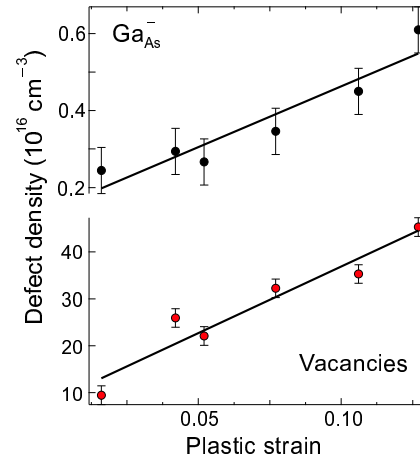


Abb. 4.15: Gesamtzahl von Leerstellen in Agglomeraten und Zahl der Ga_{As}^- -Antisites als Funktion des Verformungsgrades einer GaAs-Probe, die bei 773 K in $[110]$ -Achse mit einer Rate von $1 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ deformiert wurde. Die eingezeichneten Linien illustrieren einen linearen Zusammenhang [132].

Im Bereich oberhalb ca. 200 K dominiert der Beitrag des Temperaturverlaufs der Einfangraten κ_{d1} und κ_{d2} den Verlauf von $\bar{\tau}$ und ein leichtes Absinken wird mit steigender Temperatur sichtbar (Abb. 4.14). Aus der Anpassung der Temperaturabhängigkeit der mittleren Positronenlebensdauer für $T < 200 \text{ K}$, wo der Einfluss der flachen Fallen dominant wird, kann neben der Positronenbindungsenergie an die flachen Positronenfallen auch die Einfangrate aus Gl. 4.6 (S. 38) gewonnen werden. Ist der Trappingkoeffizient bekannt, können Defektkonzentrationen für diesen Defekt aus Positronenlebensdaueremessungen abgeleitet werden. Der Fit des T -Verlaufs von $\bar{\tau}$ erlaubt zwar eine recht genaue Bestimmung der Bindungsenergie E_b , reagiert aber unempfindlich auf Änderungen der Dichte flacher Fallen. Die so abgeleiteten Defektdichten sind somit mit einem großen Fehler behaftet. Genauer ist ein von HÜBNER [91] vorgeschlagenes Verfahren, das den vollständigen Positroneneinfang im Tieftemperaturbereich zur Bestimmung der relativen Einfangraten nutzt. In diesem Fall gilt für das Verhältnis der gemessenen Intensitäten $I_{d1}/I_{d2} = \kappa_1/\kappa_{d2}$. κ_1 ist dabei die Summe der Einfangraten in die flachen Fallen d_3 und in die Vakanzen d_1 . Wird die Einfangrate in die Leerstellencluster auf den Temperaturbereich des vollständigen Einfangs extrapoliert und führt man die Einfangrate der Mischkomponente aus τ_{d3} und τ_{d1} auf die einzelnen Bestandteile zurück mit

$$\kappa_{d3} = \frac{\tau_{d1} - \tau_m}{\tau_m - \tau_{d3}} \kappa_{d1} \quad (4.21)$$

(τ_m ist die gemessene kürzere Positronenlebensdauer zwischen 240 und 247 ps),

kann ein Wert für die Einfangrate in die flachen Fallen κ_{d3} abgeleitet werden. Für die Probe von Abb. 4.14 erhält man bei 15 K $\kappa_{d3} = (10 \pm 2) \text{ ns}^{-1}$. Mit einem Trappingkoeffizienten von $\mu = (2,6 \pm 0,3) \cdot 10^{16} \text{ s}^{-1}$, der aus der Korrelation von ESR- mit POLIS-Messungen für Ga_{As}^- abgeleitet wurde [134] ergibt sich eine Dichte von $(5 \pm 1 \cdot 10^{15}) \text{ cm}^{-3}$. Dabei wird vorausgesetzt, dass in dem deformierten GaAs ausschließlich die Ga_{As}^- -Antisites als flache Fallen wirksam werden. Die Begründung für diese Herangehensweise liegt in der bestimmten Positronenbindungsenergie, die der von elektronenbestrahltem Material entspricht. Bei Dominanz von versetzungskorrelierten flachen Fallen ergab sich ein deutlich geänderter Wert für E_b . Dies wird im nächsten Abschnitt diskutiert.

Die Abhängigkeit der Dichte generierter Punktdefekte vom Verformungsgrad zeigt Abb. 4.15 für eine GaAs-Probe. Die angegebene Zahl der Leerstellen ist die Gesamtzahl der in den Clustern agglomerierten Leerstellen. Bei der Berechnung der Defektdichte entsprechend Gl. 4.5 auf Seite 37 wurde eine stabiler Leerstellencluster V_{12} zugrundegelegt und der entsprechende Radius r_d abgeschätzt. Neben diesen Leerstellen ist die Dichte von Ga_{As}^- -Antisites aufgetragen. Es kann abgeleitet werden, dass für Verformungsgrade $< 15\%$ ein linearer Zusammenhang zwischen Punktdefektdichte und Verformungsgrad besteht. Bei stärkerer Verformung erfolgt kompletter Einfang von Positronen in Defekte und eine Bestimmung von Defektdichten ist mittels POLIS nicht mehr

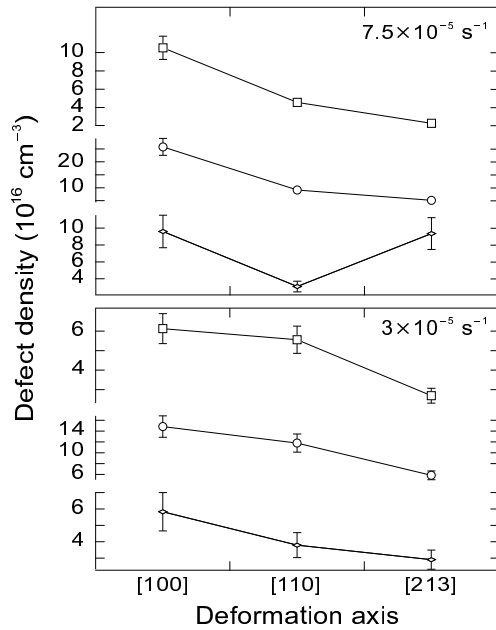


Abb. 4.16: Mit temperaturabhängigen Positronenlebensdauermessungen bestimmte Defektdichten in undotiertem GaAs, das 3% mit einer Rate von $7,5 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ bzw. $3 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ bei 773 K verformt wurde. Vierecke: Leerstellen in Agglomeraten, Kreise: Leerstellen auf Versetzungen, Rhomben: Ga_{As}^- -Antisites [134].

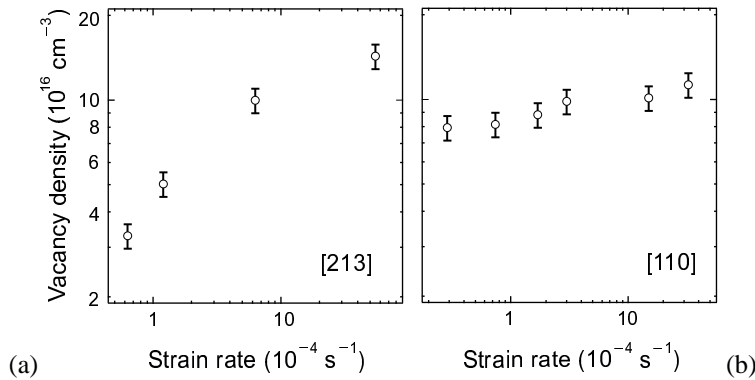


Abb. 4.17: Zahl der in Leerstellenclustern agglomerierten Vakanzen als Funktion der Verformungsrate für undotiertes GaAs, das bei 773 K (a) in Einfachgleitorientierung und (b) in Mehrfachgleitorientierung ([110]-Achse) bis zu 3% verformt wurde [133].

möglich. Aus ESR- oder Absorptionsmessungen ist aber bekannt, dass sich ein Sättigungswert der Defektkonzentrationen einstellt [120, 251].

Die Dichte der Defekte d_1 (Monovakanzen auf Versetzungen), d_2 (Leerstellencluster V_{12}) und d_3 (Ga_{As}^- -Antisites) wurde für die plastische Deformation von GaAs in [001]-, [110]- und [213]-Richtung bestimmt (Abb. 4.16). Diese Orientierungen entsprechen einer unterschiedlichen Zahl äquivalenter Gleitsysteme: ein dominantes System für [213] ($m_S = 0,467$), vier und acht Systeme für [110] und [001] (jeweils mit einem Schmidfaktor von $m_S = 0,408$). Mit einer höheren Zahl gleichwertiger Gleitsysteme wird die Wahrscheinlichkeit von Versetzungsschneidprozessen höher. Es ist klar zu erkennen, dass die Dichte erzeugter Punktdefekte mit der Zahl der betätigten Gleitsysteme korreliert*.

Die bereits in Abb. 4.16 sich widerspiegelnde Abhängigkeit der Punktdefektdichten von der Verformungsrate ist in Abb. 4.17 für die Zahl der Leerstellen in Clustern noch einmal dargestellt. Dabei sind die Ergebnisse für eine [110]- und [213]-Kristallorientierung gegenübergestellt. Während bei der Mehrfachgleitorientierung die Leerstellenkonzentration nahezu konstant bleibt, ist ein deutliches Absinken der Zahl generierter Leerstellen bei niedrigen Deformationsraten für eine Einfachgleitorientierung zu erkennen.

*die Abweichung bei der Ga_{As}^- -Dichte von dieser Regel bei $7,5 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ könnte mit einer größeren Unsicherheit bei der Bestimmung der Einfangrate für diesen Defekt zusammenhängen. Die gezeigten Fehlerbalken sind rein statistische Fehler ohne die Annahmen des Anpassungsmodells zu berücksichtigen.

Trägt man die Leerstellendichte gegen die Deformationstemperatur auf, ergibt sich bei einer bestimmten Temperatur ein Maximum (Abb. 4.18). Die gezeigte Abhängigkeit deutet darauf hin, dass für die gebildeten Überschussleerstellen, die in den Clustern agglomerieren, eine Balance zwischen einem Bildungs- und einem Vernichtungsprozess besteht. Der letztere kann dabei kaum in einer thermischen Ausheilung der Leerstellenaggregate bestehen. Die thermische Ausheilung setzt erst bei höheren Temperaturen ein, wie in den Temperexperimenten nach der Deformation (Abb. 4.7 auf Seite 47) gezeigt wurde. Man kann annehmen, dass beide Prozesse mit der Versetzungsdynamik während der Verformung im Zusammenhang stehen. Als ein effektiver Generationsmechanismus von Punktdefekten kommt das *Jog dragging* in Frage. Damit wäre der Anstieg auf der Tieftemperaturseite mit der Aktivierungsenergie von Sprüngen auf der Versetzungslinie zu korrelieren. Die Versetzungsdichte bleibt allerdings nicht konstant, sondern steigt mit wachsender Verformungstemperatur. Wie bereits im Zusammenhang mit Abb. 3.5 auf Seite 30 diskutiert worden war, steigt mit höher werdender Temperatur der Einfluss der Wechselwirkung der beweglichen Versetzungen mit den Waldversetzungen. Dieser Prozess hat über die Begrenzung der Beweglichkeit der Versetzungen offensichtlich auch Einfluss auf die Zahl der generierten Punktdefekte, denn ein kleinerer Laufweg der Sprünge hat eine geringere Zahl von emittierten Punktdefekten zur Folge. Eine alternative Vorstellung geht davon aus, dass die generierten Leerstellen an Senken wie den Versetzungen annihilieren [166]. Aus Modellrechnungen unter Annahme thermisch generierter Sprünge erhalten DETEMPLE *et al.* [43] damit, dass die Leerstellenkonzentration bis zu einem gewissen Maximum nach einem Arrheniusgesetz ansteigt um dann wieder zu fallen.

Prinzipiell wurden für plastisch verformte Si-Proben ähnliche Abhängigkeiten der Leerstellendichte vom Verformungsgrad und von der Verformungsrate gefunden werden. Im untersuchten Bereich besteht dabei für Einfachgleitorientierung ein Zusammenhang zwischen Defektdichte und Verformungsrate entsprechend $[V_{12}] \propto \dot{\epsilon}^n$ mit $n = 0,7$ [91]. Bei GaAs ergab sich ein mittlerer Exponent bei Einfachgleitung von $n = 0,5$. Im direkten Vergleich zwischen GaAs und Si stellt man fest, dass die Einfangraten für die Leerstellencluster in Si generell geringer sind [139]. Bei einem ähnlichen Trappingkoeffizienten bedeutet das eine geringere Konzentration dieser Defekte bei vergleichbaren Deformationsbedingungen.

4.4.3 Positronenmessungen an Versetzungen

Die Versetzungsdichte ist entsprechend der Orowanbeziehung proportional zur Verformungsrate. Bei höheren Verformungsraten sollte also mit wachsendem ρ_d der Einfluss auf die Positronenlebensdauer steigen. Das gilt umso mehr, als bei Mehrfachgleitorientierung die Dichte der erzeugten Punktdefekte entsprechend Abb. 4.17 konstant bleibt. Es wurde die Positronenlebensdauer an GaAs-Proben gemessen, die mit verschiedenen Verformungsraten deformiert wurden. Das Resultat zeigt Abb. 4.19. Wenn man aus der Anpassung des Temperaturverlaufs der mittleren Positronenlebensdauer nach dem Trappingmodell mit einer flachen und zwei tiefen Positronenfallen die Bindungsenergie des Positron an die flache Falle ableitet, unterscheidet dieser Wert sich deutlich für hohe und niedrige Deformationsraten. Unterhalb $1 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ ergibt sich $E_b = (0,038 \pm 0,013) \text{ eV}$, darüber $0,012 \pm 0,07 \text{ eV}$. Der erste Wert entspricht dem bereits oben angegebenen und ist dem Ga_{As}^- -Antisite zuzuordnen. Der wahrscheinlichste Kandidat für den zweiten Wert ist die reguläre Versetzungslinie. Die Anpassung reagiert nicht sensitiv auf die von MANNINEN und NIEMINEN [158] abgeleiteten Unterschiede der Geometrie der Falle: Sowohl Gl. 4.6 auf Seite 38 als auch Gl. 4.17 auf Seite 44 liefern etwa dieselbe Bindungsenergie.

Bei Vergleich mit Literaturdaten stellt man fest, dass negative Ionen als flache Positronenfallen in Halbleitern Bindungsenergien zwischen 0,040 und 0,100 eV liefern [56, 213, 214]. Die Ursache ist in dem Couloumbfeld zu suchen, d. h. die Bindungsenergie ist nur wenig von der Art des Ions abhängig. Für den niedrigsten Rydbergzustand eines einfach negativ geladenen Ions wurde die Energie zu 0,082 eV abgeschätzt [36].

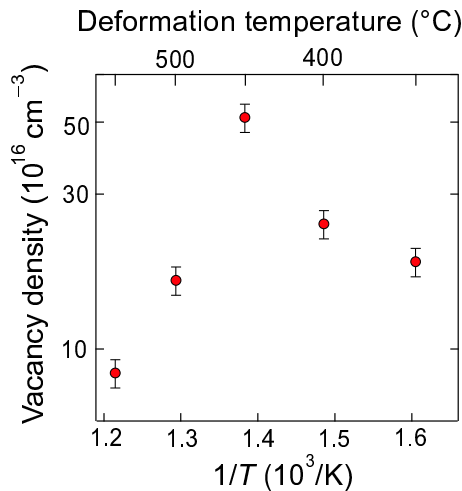


Abb. 4.18: Arrheniusplot der Zahl der in Leerstellenclustern agglomerierten Vakanzen für undotiertes GaAs, das in [001]-Orientierung bis zu 4 % mit einer Rate von $7,5 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ verformt wurde [91].

Die Ursache des flachen Potentials der Versetzungen liegt nicht im Ladungszustand, sondern in der geringen Größe des offenen Volumens*. Bei den Punktdefekten wird ein solchen Effekt bisher nur für das A-Zentrum in Si angenommen. Bei diesem Defekt, der einen Komplex aus Sauerstoff und einer Leerstelle darstellt und ein kleines offenes Volumen besitzt [117], wird in elektronenbestrahltem Si:B eine Positronenbindungsenergie von 0,018 eV bestimmt [195]. Für Versetzungen in Si haben KAWASUSO *et al.* [103] einen Wert von 0,011 eV aus der Anpassung des temperaturabhängigen Positroneneinfangs abgeleitet. Dem entspricht recht gut die hier gefundene Positronenbindungsenergie für reguläre Versetzungslinien in GaAs.

Um die Resultate, die in den GaAs-Proben unmittelbar nach Deformation gewonnen wurden, weiter zu untermauern, wurden temperaturabhängige Positronenlebensdauermessungen nach verschiedenen Ausheilschritten unternommen (Hübner *et al.* 1997 [71]). In Proben, die in [110]-Richtung bei 673 bzw. 873 K zu 10 % deformiert wurden, ergibt sich zunächst ein Temperaturverlauf, der sich mit einer flachen Positronenfalle mit einer Bindungsenergie von $0,038 \pm 0,013 \text{ eV}$ anpassen lässt. Nach einer thermischen Behandlung bei 1030 K ist die mittlere Lebensdauer der bei 873 K verformten Probe nahezu beim Wert der Volumenlebensdauer τ_b . Die 673 K-Probe jedoch zeigt noch einen deutlichen Positroneneinfang. Eine Zerlegung ergibt, dass die kürzere Komponente bei $\tau_b = 255 \text{ ps}$ nach Temperung verschwunden ist und ausschließlich die den Leerstellenclustern zuzuordnende Positronenlebensdauer von 490 ps zu detektieren ist. Der Abfall des $\bar{\tau}(T)$ -Verlaufs dieser Probe im Tieftemperaturbereich lässt sich mit dem Einfang in eine flache Falle mit der Bindungsenergie von $0,028 \pm 0,008 \text{ eV}$ anpassen. Diese Zahl ist nicht so niedrig wie nach den oben beschriebenen Ergebnissen für Versetzungen zu erwarten ist. Sie liegt zwischen dem Wert für den Ga_{As}^- -Antisite und dem für Versetzungen. Dass beide flachen Fallen zu dem gefundenen Temperaturverlauf beitragen ist eher unwahrscheinlich, da die Ga_{As}^- -Antisites in der 873 K-Probe nach Temperung bei 1030 K ausgeheilt waren. Die bei der höheren Temperatur verformte Probe besitzt eine Versetzungsdichte bei $2 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$, die andere bei $1 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$, wie durch TEM-Messungen bestimmt wurde. Im Zusammenhang mit der höheren Dichte an Leerstellenclustern in der deformierten 673 K-Probe wird klar, warum hier ein Effekt zu messen war. Die Leerstellenagglomerate waren noch nicht komplett ausgeheilt und stellen ein konkurrierendes Einfangzentrum zur regulären Versetzungslinie dar, die als flache Positronenfalle eine defektspezifische Positronenlebensdauer nahe der Volumenlebensdauer hat und bei tieferen Messtemperaturen den Abfall in $\bar{\tau}$ bewirkt. Der höhere Wert der Positronenbindungsenergie könnte mit den Veränderungen der Versetzungsstruktur bei der Temperung zu tun haben. Die 873 K-Probe weist ebenfalls Versetzungen mit genügender Dichte auf. Nach Temperung sind alle konkurrierenden Leerstellendefekte

*eine zusätzliche negative Ladung kann aber ebenfalls einen Beitrag liefern

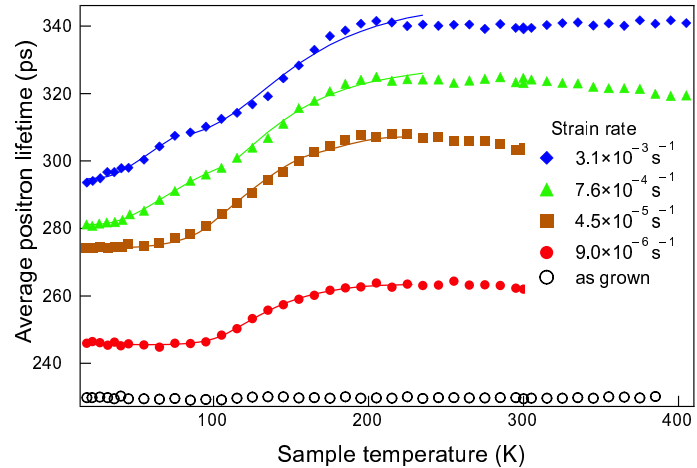


Abb. 4.19: Mittlere Positronenlebensdauer in $[110]$ -orientiertem GaAs deformiert bei 1073 K bis zu 10 % mit unterschiedlicher Verformungsrate. Die Linien entsprechen Fits nach dem Trappingmodell mit flachen und tiefen Positronenfallen [134].

(sowohl Leerstellencluster als auch Leerstellen auf den Versetzungen) aber nahezu verschwunden, so dass nur noch regulären Versetzungen übrig sind und die mittlere Positronenlebensdauer sich τ_b annähert.

Bei der Bestimmung der Konzentration versetzungsgebundener Leerstellen wurde vereinfachend ein Trappingkoeffizient von $1 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$ wie für isolierte Leerstellen angenommen. Das ergibt typischerweise Leerstellendichten von $2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Die Gesamtversetzungsdichte in einer mit $5 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ bei 773 K bis zu 10 % verformten Probe liegt bei $6 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$. Wenn angenommen wird, dass alle Leerstellen auf den Versetzungslinien liegen, wäre ihr Abstand 0,3 nm, was offensichtlich zu gering ist. Man kann nun diskutieren, dass der Trappingkoeffizient aufgrund eines größeren Einfangquerschnitts höher sein müsste. In der Tat ist Gl. 4.16 auf Seite 43 anzusetzen, die aber als unbekannte Größe den Defektradius r_d enthält, dessen physikalische Bedeutung bei einer Versetzung in Halbleitern bisher nicht klar ist. In Frage kommt am ehesten die Ausdehnung des Deformationspotentials der Versetzung, das auch für flache Elektronenzustände verantwortlich ist [8]. Die zweite Möglichkeit ist, dass die Leerstellen nicht alle auf den Versetzungslinie eingebaut sind, sondern aufgrund der elastischen Wechselwirkung sich im Spannungsfeld der Versetzung ansammeln [85].

In Abb. 4.7 auf Seite 47 war die kürzere Positronenlebensdauerkomponente τ_{d1} in der zu nur 0,5 % deformierten GaAs:Te-Probe nicht dem Einfang von versetzungsgebundenen Leerstellen, sondern Leerstellen-Dotierungs-Komplexen zugeordnet worden. Diese Feststellung lässt sich mit der Ermittlung der Versetzungsdichte untermauern, die bei $6 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-2}$ lag. Trägt man die Einfangrate des Defekts d_2 gegen die Versetzungsdichte für eine Reihe von GaAs:Te-Proben mit unterschiedlichen Deformationsgrad auf, ergibt sich folgendes Bild (Abb. 4.20): Erst ab einer bestimmten Versetzungsdichte steigt der Einfang deutlich und ist in dem Te-dotierten Material versetzungsgebundenen Leerstellen zuzuordnen. Bei geringeren Versetzungsdichten werden als Defekt d_1 ausschließlich $V_{\text{Ga}}\text{Te}_{\text{As}}$ -Komplexe nachgewiesen.

Es bleibt die Frage zu diskutieren, ob die Leerstellencluster d_3 in ähnlicher Weise an Versetzungen gebunden sind, wie die Leerstellen d_2 . Aus dem Positronenexperiment ist diese Frage nicht schlüssig zu beantworten. Es bleibt aber die Tatsache, dass beide Defekte parallel im selben Temperaturbereich ausheilen. Die Bewegung und Relaxation der Versetzungsstruktur im Zuge der thermischen Nachbehandlung nach der plastischen Deformation kann für diesen Prozess verantwortlich sein. In jüngsten theoretischen Untersuchungen haben MYERS und FOLLSTADT [170] die Wechselwirkung zwischen Voids und Versetzungen untersucht. Sie kamen aufgrund der elastischen Wechselwirkung unter Einbeziehung von Effekten der Oberflächenspannung und einem Gas in der Kavität zu einer effektiven Kraft zwischen Schraubenversetzungen und Voids, die ab einem kritischen Abstand mit $1/r^3$ abfällt. Bei Stufenversetzungen gibt es unterschiedliche Abhängigkei-

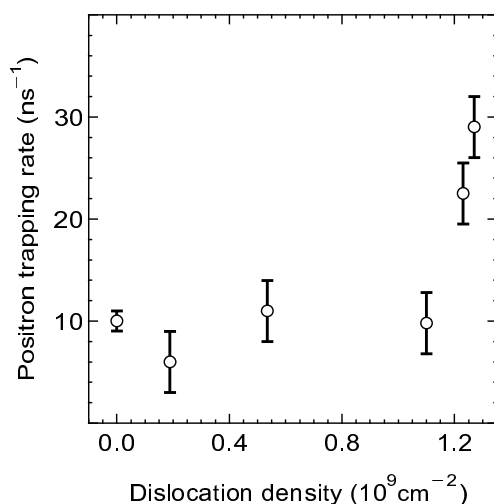


Abb. 4.20: Positroneneinfangrate in die Leerstellen d_1 als Funktion der Versetzungsdichte in deformiertem GaAs:Te [91].

ten für die Gleit- und Kletterrichtungen. Als Fazit können sie die in He-implantierten Halbleitern gefundene Assoziation zwischen Voids und Versetzungen theoretisch begründen. Wenngleich die nach Deformation vorliegenden Leerstellenagglomerate viel kleiner als die Voidstrukturen nach Ionenimplantation sind, so sollte aber trotzdem eine elastische Wechselwirkung bestehen, die zumindest eine Ansammlung der Leerstellencluster nahe der Versetzung wahrscheinlich macht.

4.4.4 Deformationsexperimente bei Raumtemperatur

Die aus den Deformationsexperimenten mittels POLIS-Messungen abgeleitete Dichte erzeugter Leerstellen als Funktion der Temperatur (Abb. 4.18) eröffnet die Frage, ob bei Raumtemperatur oder darunter überhaupt Punktdefekte im Zuge der Deformation generiert werden. Dies ist umso interessanter, als bei niedrigen Temperaturen ein Wechsel des Charakters der Versetzungen diskutiert wird, der deutlichen Einfluss auf die Parameter der Verformungskurve hat [258]. In diesem Bereich sollen vornehmlich nichtaufgespaltene *Shuffle-set*-Versetzungen generiert werden. Bei unseren Nanoindentierungsexperimenten konnte der *ss*-Charakter der Versetzungen zwar noch nicht nachgewiesen werden, aber keine zumindest wurde keine Aufspaltung der Versetzungen in Partialversetzungen gefunden [140].

HÜBNER [91] konnte zeigen, dass in Kupfer- oder Aluminiumproben, die bei 77 K bis zu 5 % deformiert wurden, bereits eine effektive Generation von Leerstellenclustern erfolgt. Die Proben wurden im Stickstoffbad deformiert und anschließend ohne Zwischenerwärmung die Positronenlebensdauer gemessen. In der Zerlegung ergaben sich für deformiertes Kupfer $\tau_{d1} = (170 \pm 5) \text{ ps}$ und $\tau_{d2} = (500 \pm 100) \text{ ps}$.* Zum Vergleich: die Volumenlebensdauer für dieses Material liegt bei 110 ps. Bereits zwischen 200 und 270 K wurde bei einer thermischen Nachbehandlung das Ausheilen der Leerstellenclusterkomponente festgestellt, während die d_1 -Komponente recht stabil bleibt und wie in den verformten Halbleitern Leerstellen auf Versetzungen zugeordnet werden kann.

Ein Kompressionsexperiment ist für Halbleiter unterhalb ca. $0,4T_m$ aufgrund des Übergang vom duktilen zum spröden Verhalten nur sehr schwer möglich. Solche Experimente gelingen nur, wenn die Rissausbildung durch eine zusätzliche hydrostatische Druckkomponente unterdrückt werden kann. Da eine entsprechende Ausrüstung nicht zur Verfügung stand, bot sich als Ausweg die Untersuchung der oberflächennahen Schädigung beim Ritzen oder Schleifen von Wafern an.

Die Tiefenverteilung von Versetzungen, die beim Schleifen eines GaAs-Wafers generiert werden, zeigt Abb. 4.21. Angewandt wurde dabei ein technologisch neuartiges Einzelschleifverfah-

*Der große Fehler von τ_{d2} rührt von der geringen Intensität dieser Komponente her.

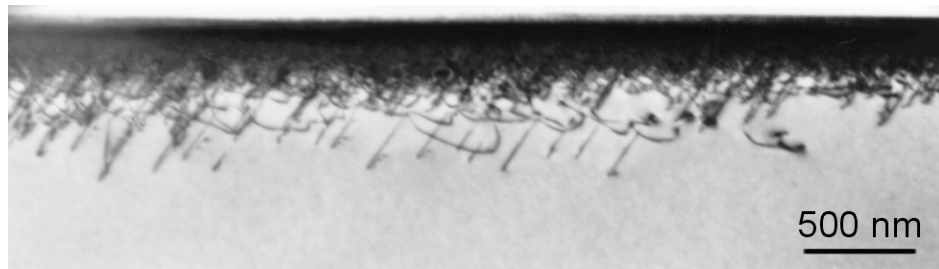


Abb. 4.21: Durch Schleifen induzierte Versetzungen in einem (001)-GaAs-Wafer. Die TEM-Querschnittsaufnahme zeigt die Ausbreitung von Versetzungen in die Tiefe. Deutlich sind zwei Bereiche unterschiedlicher Dichte zu erkennen.

ren*, das Oberflächenrauigkeiten mit nur etwa 50 nm Tiefe erzeugt [21]. Die Versetzungen reichen bis in eine Tiefe von ca. 600 nm, wobei deutlich zwei Bereiche mit unterschiedlicher Defektdichte zu identifizieren sind. Im Bereich nahe der (001)-Waferoberfläche bis zu einer Tiefe von etwa 150 nm können keine einzelnen Versetzungen mehr aufgelöst werden. Trotz der starken Schädigung ist das GaAs dort immer noch kristallin. Weder mit hochauflösender TEM oder Messungen mittels Rutherfordrückstreuung konnte eine Amorphisierung gefunden werden. Der darunterliegende Bereich zeigt Versetzungsschleifen, die meist in $\langle 110 \rangle$ -Richtungen ausgerichtet sind. Ihre Dichte im Schichtbereich zwischen 150 und 600 nm liegt bei $1,4 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, wobei die Verteilung lateral sehr inhomogen sein kann.

Die Ursache für die Ausprägung zweier Bereiche mit unterschiedlichen Defektdichten zeigt Abb. 4.22. Hier wird die Versetzungsrosette gezeigt, die sich in der Nähe eines Vickersindenterindrucks ausbildet. Zur thermischen Stimulierung der Versetzungsbewegung im Restspannungsfeld des erzeugten Eindrucks wurde nach der Indentierung eine zusätzliche Wärmebehandlung bei 623 K vorgenommen. Eine ausgeprägte Bildung von langgestreckten Versetzungsschleifen auf $\{111\}\langle 1\bar{1}0 \rangle$ -Gleitsystemen wird deutlich. Bei Raumtemperatur ohne thermische Nachbehandlung liegt die maximale Ausdehnung der Versetzungsschleifen für diese Indenterlast bei etwa $1 \mu\text{m}$. Wie eine Analyse des Burgersvektors durch Kippexperimente zeigt, weisen die Schleifen lange Schraubensegmente auf, die von 60° -Abschnitten hinterhergezogen werden. Nahe der (001)-Oberfläche findet man neben den Gleitsystemen mit Burgersvektoren, die geneigt zur Waferoberfläche sind, auch Burgersvektoren in der (001)-Ebene. Damit gibt es in Oberflächennähe nicht nur die größte Versetzungsdichte, sondern auch eine sehr hohe Wahrscheinlichkeit für Versetzungsschneidprozesse. Diese Schneidprozesse sollten in eine hohe Dichte von Punktdefekten resultieren. Abb. 4.23 zeigt Versetzungsstrukturen an einer gestörten GaAs-Oberfläche im Detail. Bei dieser Abbildung wurden direkt die Defektstrukturen nach dem Sägen eines Wafers untersucht. Prinzipiell ergeben sich ähnliche Versetzungsanordnungen wie nach dem Schleifen, die Schädigungstiefe ist aber höher. Einzelne Versetzungen wurden bis zu einer Tiefe von $18 \mu\text{m}$ gefunden, die mittlere Reichweite liegt bei $10 \mu\text{m}$. Die Bestimmung des Tiefenbereichs ist schwierig, da die Oberfläche durch Ausbrüche sehr uneben ist. Die starke Strukturierung der Oberfläche geht einher mit einer inhomogenen Versetzungsverteilung. Die mittlere Versetzungsdichte liegt bei $(9 \pm 8) \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$. Aufgrund der Inhomogenität wechseln sich Bereiche mit großer Häufigkeit von Schneidprozessen langgestreckter Schraubenversetzungen (Abb. 4.23 b) mit denen einer ungestörteren Versetzungsausbreitung (Abb. 4.23 a) ab.

Alle Versetzungsstrukturen, die bei der mechanischen Schädigung der Oberfläche gebildet wurden, sind vollständige Gleitversetzungen. Das heißt, sie sind aufgespalten und sollten damit im *Glide set* vorliegen. Im Gegensatz zu Versetzungen an größeren Vickerseindrücken, die eine

*Die Präparation wurde von Freiburger Compound Materials durchgeführt

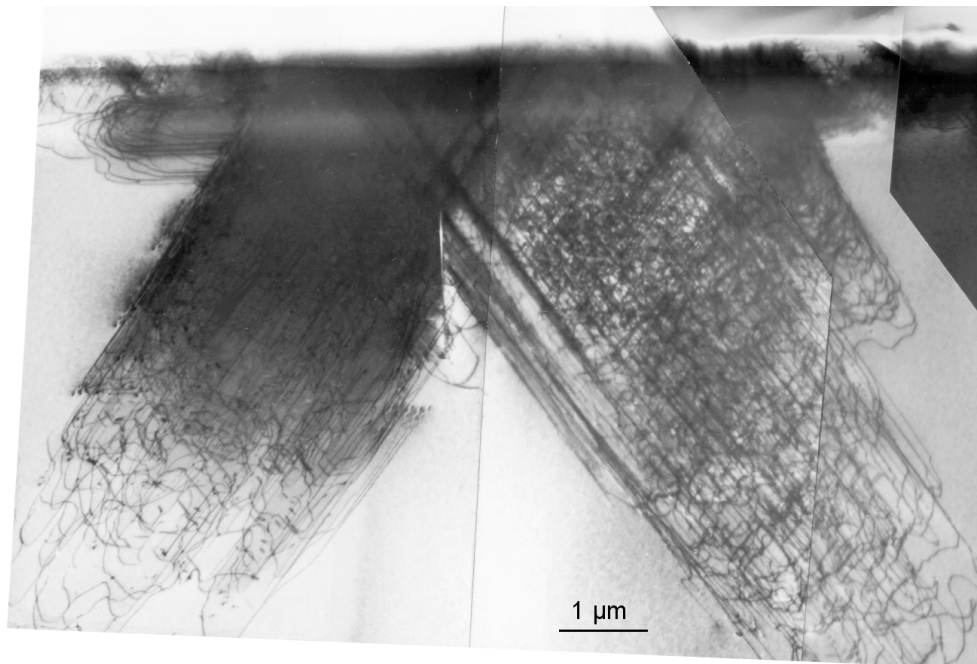


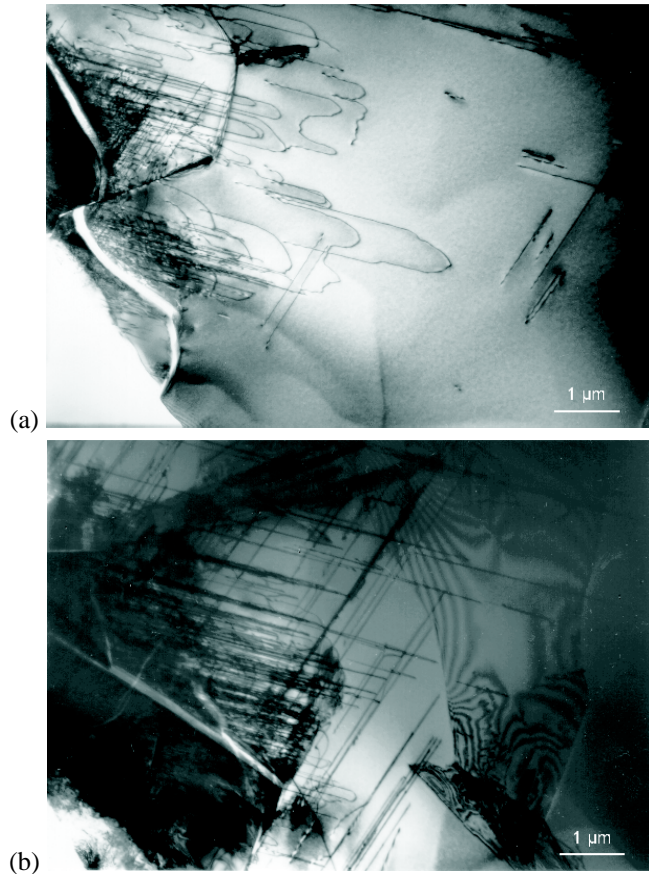
Abb. 4.22: Versetzungsstruktur an einem Indentereindruck auf (001)-GaAs. Der Eindruck wurde mit einer Vickerspyramide bei Raumtemperatur mit einer Last von 50 mN erzeugt. Anschließend erfolgte eine thermische Behandlung bei 623 K für 15 min. TEM-Aufnahme einer $(1\bar{1}0)$ -orientierten Querschnittsfolie im Hellfeld.

dekorrelierte Bewegung von Partialversetzungen vorweisen können [145], wurde bei den Versetzungen nach mechanischer Schädigung keine weite Aufspaltung gefunden. Die Ursache liegt wahrscheinlich darin, dass die Spannung nicht hoch genug ist, um zu einer großen Aufspaltungsweite zu führen (vgl. Abb. 2.3 auf Seite 7).

Um nähere Aussagen zu den infolge der mechanischen Schädigung erzeugten Defekten mit offenem Volumen machen zu können, wurden Positronenannihilationsmessungen durchgeführt. Das Problem der Untersuchung mit konventioneller Positronenlebensdauerspektroskopie besteht darin, dass nur ein kleiner Teil der implantierten Positronen in einer dünnen, oberflächennahen Schicht annihiliert. Positronen aus einem β^+ -Emitter zeigen eine breite Energieverteilung und damit eine breite Verteilung der Eindringtiefen. Um Aussagen zu defektreichen Schichten gewinnen zu können, muss das Eindringprofil der Positronen (Gl. 4.1 auf Seite 35) mit dem Defektprofil gefaltet werden. Das letztere ist aber nicht bekannt, und es können nur Näherungen gemacht werden. Krause-Rehberg *et al.* (1996) [119] benutzten einen einfachen Ansatz mit einer konstanten Defektdichte innerhalb der Störschicht. Durch Messung der mittleren Positronenlebensdauer in Verbindung mit einem schrittweisem Abätzen der Oberfläche wurde eine maximale Defekttiefe von $10\ \mu\text{m}$ bestimmt. Für die verwendeten Proben stimmte dieser Wert recht gut mit der mittels TEM gemessenen Ausdehnung von Versetzungsschleifen bis zu $6 \pm 3\ \mu\text{m}$ Tiefe überein. In einem erweiterten Ansatz wurde das Defektprofil mit Hilfe eines Strahls monoenergetischer Positronen gemessen [20]. Aus dem S -Parameter*, der als Funktion der Positronenenergie gemessen wurde,

*Linienformparameter der 511 keV-Annihilationslinie, der ein charakteristisches Maß für die Annihilation mit Valenzelektronen darstellt. Im Gegensatz dazu charakterisiert der W -Parameter einen Anteil der Annihilation mit Core-Elektronen und ist damit empfindlich auf die chemische Umgebung des Annihilationsorts. Bei Anwesenheit von Defekten mit offenem Volumen steigt S und W sinkt.

Abb. 4.23: Von einer gesägten GaAs-Oberfläche ausgehende Versetzungen. (a) Versetzungshalbschleifen, (b) Schneidprozesse von Schraubenversetzungen. TEM-Querschnittsaufnahmen mit (110)-Probenorientierung. Die ursprüngliche Oberfläche des (001)-Wafers ist an der linken unteren Ecke zu sehen. Der oszillierende Kontrast auf der rechten Seite in Bild gehört zu einem Riss.



kann eine Einfangrate bestimmt werden als Funktion der Tiefe entsprechend

$$\kappa(z) = \frac{1}{\tau_b} \frac{S(z) - S_b}{S_d - S(z)}$$

($S(z)$ S -Parameter für die Tiefe z , S_b S -Parameter für defektfreies Volumen, S_d charakteristischer S -Parameter bei Positroneneinfang in den Defekt d).

Dabei wird ein einziger Defektyp d vorausgesetzt. Mit der so ausgerechneten Einfangrate kann eine defektspezifische Positronenlebensdauer unter Benutzung von Gl. 4.12 auf Seite 40 angegeben werden. Zur Bestimmung der mittleren Positronenlebensdauer wurde der relevante Tiefenbereich in zehn Schichten unterteilt und die Zahl der in jedem Abschnitt annihilierenden Positronen entsprechend Gl. 4.1 auf Seite 35 berechnet. Als Resultat ergibt sich aus der Überfaltung der gemessenen mittleren Positronenlebensdauer mit dem Implantationsprofil eine mittlere Positronenlebensdauer für jeden Schichtbereich. Daraus konnte schließlich $\tau_d = (333 \pm 3)$ ps als Mittelwert verschiedener Proben [20] ermittelt werden. Diese Zahl stellt eine untere Grenze dar, da nicht bekannt ist, wie hoch der Anteil der in Defekten eingefangenen Positronen ist und damit S_d nicht bekannt ist. Es wird angenommen, dass der gemessene Maximalwert S_{\max} des S -Parameters nahe der Oberfläche dem vollständigen Einfang in Positronen S_d entspricht. Bei unvollständigem Einfang verschiebt sich die $\kappa(z)$ -Kurve nach unten und damit steigt die mittlere Positronenlebensdauer und der bestimmte τ_d -Wert.

Bei konventionellen Positronenstrahlsystemen ist es nicht möglich die Positronenlebensdauer zu messen, da keine Korrelation zwischen einem Start- und Stoppsignal wegen des langen Laufwegs der Positronen mehr besteht. Bei Messung mit einem gepulsten Positronenstrahl kann aber ein Startsignal elektronisch erzeugt werden. Das Resultat einer Messung* mit so einem System

* durchgeführt von F. Börner in der Arbeitsgruppe von W. Triftshäuser, München

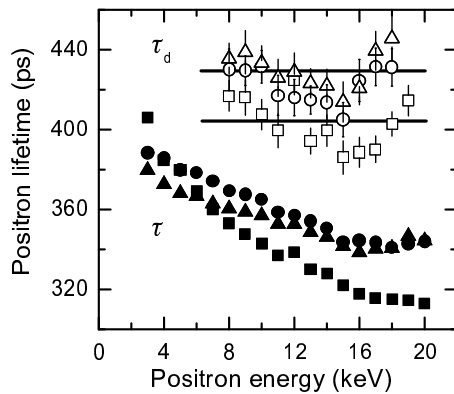


Abb. 4.24: Positronenlebensdauer als Funktion der Positronenenergie für einen GaAs-Wafer nach dem Sägen [21]. Gezeigt ist die mittlere Positronenlebensdauer $\bar{\tau}$ (volle Symbole) und die defektspezifische Lebensdauer (offene Symbole) nach dem Sägen und nach Ausheilung bei 600 K (Kreise) und 800 K (Dreiecke).

im Energiebereich zwischen 3 und 20 keV zeigt Abb. 4.24. Die letztere Energie entspricht dabei einer mittleren Positronenimplantationstiefe von etwa $1 \mu\text{m}$. Für Positronenenergien unterhalb 8 keV ergab eine Zerlegung des Spektrum aufgrund des Positroneneinfangs an der Oberfläche keine zuverlässigen Werte. Bei höheren Energien wurde $\tau_d = (405 \pm 14) \text{ps}$ erhalten, was mit der Abschätzung der unteren Grenze aus der konventionellen Lebensdauerermessung übereinstimmt.

Die Positronenlebensdauer wurde ebenfalls nach thermischer Behandlung der Proben bei 600 und 800 K für 10 min gemessen. Dabei ergab sich ein signifikant höherer Wert von $\tau_d = (430 \pm 8) \text{ps}$. Das Ergebnis eines isochronen Heizexperiments mit dem gemessenen S -Parameter und der konventionell bestimmten mittleren Positronenlebensdauer zeigt Abb. 4.25. Dabei wurde festgestellt, dass der gemessene Maximalwert des S -Parameters bis zu einer Temperatur von 650 K ansteigt, um dann abzusinken. Eine Vergleichstemperung an einem polierten Wafer ohne Oberflächenschädigung konnte keine Änderung des S -Parameters in diesem Temperaturbereich feststellen. Die auf konventionelle Weise gemessene mittlere Positronenlebensdauer zeigt denselben Temperaturverlauf. Trägt man die zueinandergehörenden S - und W -Parameter einer Messung in einem S - W -Diagramm auf, kann man Informationen über den Annihilationsort gewinnen. Bei Normierung der Parameter auf die Werte des defektfreien Volumens S_b und W_b erhält man bei gleicher Defektart mit variierender Konzentration $(W/W_b, S/S_b)$ -Paare, die auf einer Geraden liegen und durch den Punkt $(1, 1)$ für verschwindende Konzentration verlaufen. Legt man bei der Änderung der gemessenen maximalen Linienformparameter während der Temperung eine bloße Variation der Dichte zugrunde, sollten alle Werte auf einer Geraden liegen. Abb. 4.25 b widerspricht dieser Vermutung: Für Temperaturen $> 400 \text{K}$ bilden die $(W_{\text{max}}/W_b, S_{\text{max}}/S_b)$ -Paare eine neue Linie. Damit kann der Schluss gezogen werden, dass im Verlauf der thermischen Behandlung ein neuer Defekttyp gebildet wird. Dies steht in Übereinstimmung mit den Lebensdauerermessungen am gepulsten Positronenstrahl.

Die in Zuge der thermischen Behandlung auftretenden Positronenlebensdauern kann man im Zusammenhang mit den theoretischen Rechnungen (Abb. 4.11 auf Seite 50) diskutieren. Der direkt nach dem Sägen gefundene Wert von 405 ps passt gut zu einem Leerstellenaggregat V_6 oder V_8 . Diese Cluster sind aber weniger stabil als V_{12} . Im Verlauf der Temperung sollte also eine Defektreaktion eintreten, in deren Resultat V_{12} gebildet werden. Die nach 800 K-Temperung experimentell gefundene Positronenlebensdauer von 430 ps stimmt sehr gut mit dem theoretisch berechneten Wert für V_{12} überein. Im Lichte der Resultate der Kompressionsexperimente erscheint aber auch eine andere Interpretation möglich. Die Positronenlebensdauerermessungen an den mechanisch gestörten Oberflächenschichten konnten nur mit einer zweikomponentigen Zerlegung ausgewertet werden. Damit könnten die 405 ps eine nicht aufgelöste Mischkomponente aus Beiträgen von Doppelleerstellen bzw. kurzen Leerstellenketten und dem V_{12} -Cluster darstellen. Eine Komponente von 300 ps war in plastisch verformten GaAs gefunden worden und mit Divakan-

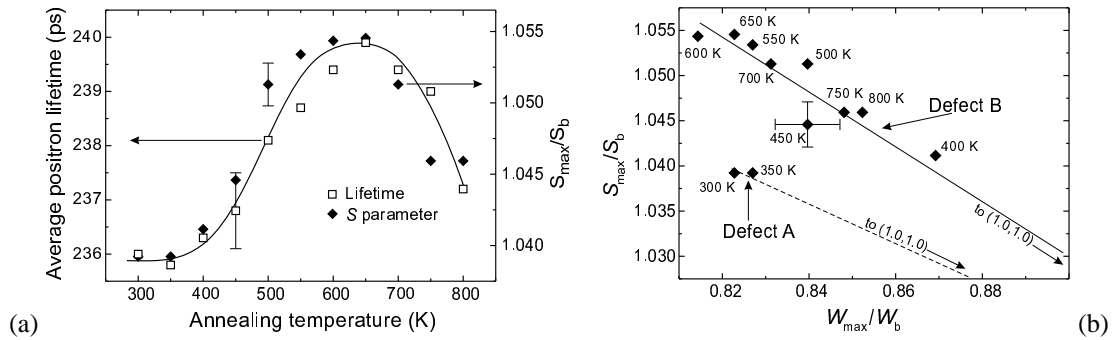


Abb. 4.25: Isochrone Ausheilung der durch Sägen von GaAs-Wafern induzierten Defekte [20]. (a) Messung des maximalen S -Parameters S_{max} einer Positronenstrahlungsmessung mit variabler Energie und der mittleren Positronenlebensdauer als Funktion der Ausheiltemperatur. (b) $S(W)$ -Analyse des Ausheilversuchs. Die aus der Positronenstrahlungsmessung bestimmten Maximalwerte der S - und W -Parameter sind für jeden Temperaturschritt (10 min) gegeneinander aufgetragen. Die Linienformparameter sind auf ihre Werte im defektfreien Volumen normiert. Die beiden Linien mit verschiedenem Anstieg charakterisieren zwei Defekte A und B.

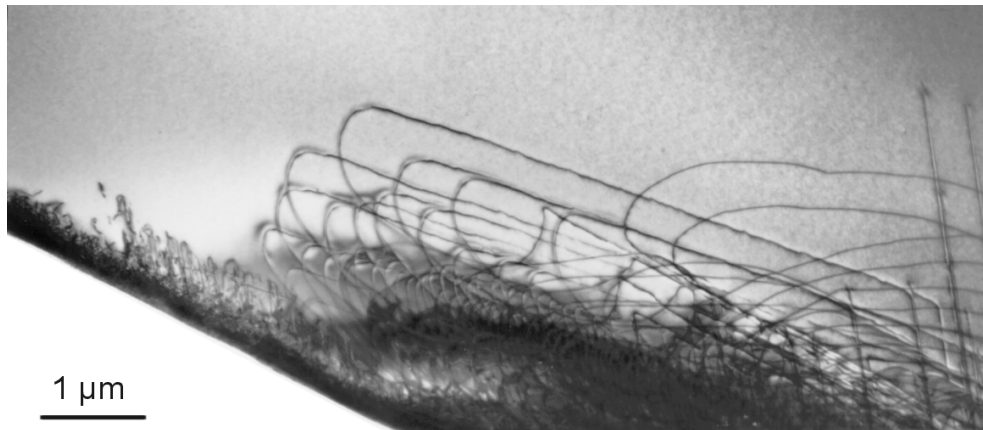


Abb. 4.26: Versetzungsausbreitung beim *in-situ*-Heizen bei 623 K im Höchstspannungselektronenmikroskop. Querschnittsprobe eines GaAs-Wafers nach dem Schleifen. Die Aufnahme erfolgte nach 5 min Heizen bei der angegebenen Temperatur.

zen oder kurzen Ketten in Zusammenhang gebracht worden. Auch diese Komponente hatte nur beschränkte thermische Stabilität und war nach Temperung bei 725 K nicht mehr nachzuweisen. Die alternative Reaktion wäre also ein Ausheilen der Defekte mit Divakanzenlebensdauer und die stabilen V_{12} bleiben übrig.

Das Ausheilen der Doppelleerstellen oder Leerstellenketten kann durch Wechselwirkung mit den Versetzungen geschehen, die im Zuge der thermischen Nachbehandlung beweglich werden. Abb. 4.26 zeigt die Veränderung der Versetzungsstruktur bei einer *in-situ*-Wärmebehandlung im Transmissionselektronenmikroskop. Untersucht wurde eine Querschnittsprobe aus einem GaAs-Wafer nach dem Sägen. Der Ausgangszustand entspricht Abb. 4.21. Die gewählte Heiztemperatur im Elektronenmikroskop lag im Maximum der Kurve von Abb. 4.25 a. Es wird ausgehend von der defektreichen Schicht nahe der Oberfläche eine weitere Ausbreitung von Versetzungsschleifen und eine starke Umordnung der Versetzungsstruktur gefunden. Wegen der spezifischen Situation der abgedünnten TEM-Probe mit lokal unterschiedlichen Spannungsverhältnissen erfolgt die Versetzungsausbreitung sehr inhomogen. Im Lichte dieser Versetzungsgleitprozesse bei Nachtem-

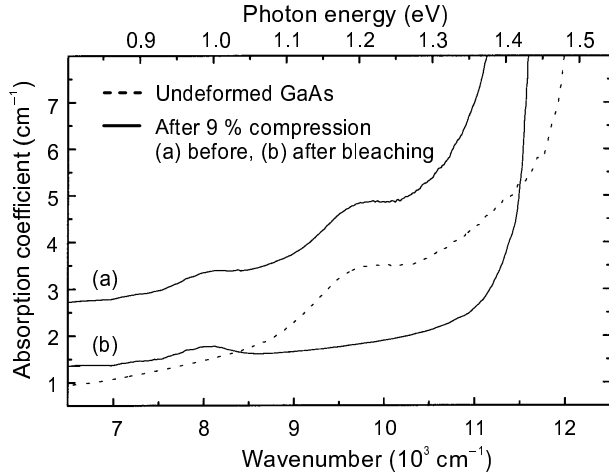


Abb. 4.27: FTIR-Spektren von undotiertem GaAs nach Deformation [251]. Statische Verformung in [110]-Richtung mit 70 MPa bei 823 K, Verformungsgrad 3 %. Die Spektren sind vor und nach dem Bleichen neben dem einer undeformierten Referenzprobe gezeigt. Die Messung erfolgte bei 4 K.

perung erscheint eine Annihilation der doppelvakanzenartigen Defekte mit den Versetzungen als wahrscheinlich, während die größeren Cluster offenbar stabil bleiben können oder neu gebildet werden.

4.5 Optische Spektroskopie und ESR-Untersuchungen von Defekten in deformiertem GaAs

Zum spektroskopischen Nachweis verformungsinduzierter Defekte wurden neben POLIS-Messungen Untersuchungen mittels FTIR-Spektroskopie angestellt. Verwendet wurde dabei ein Fournierspektrometer Bruker IFF 66v. Die Messungen erfolgten im nahen Infrarot bei 4 bzw. 77 K. Neben der Absorptionsbande bei 1,18 eV, die dem EL2-Defekt zuzuordnen ist, trat in diesem Bereich eine zweite Bande bei 0,99 eV auf (Abb. 4.27). Es zeigt sich, dass sich zwar die 1,18 eV-, aber nicht die 0,99 eV-Absorptionsbande signifikant ändert, wenn die Probe mit weißem Licht vor der Messung beleuchtet wurde. Heizexperimente im Anschluss an die Deformation zeigen, dass der zugrundeliegende Defekt (im Folgenden mit H1 bezeichnet) bereits unterhalb der Deformationstemperatur ausheilt. Damit kann erklärt werden, dass die Bande nicht in allen deformierten Proben auftrat, sondern nur in solchen, die eine kurze Zeit deformiert wurden.

Das Ergebnis des isochronalen Heizexperiments (10 min in 25 K-Schritten in geschlossener Ampulle unter Ar-Schutzgas) zeigt Abb. 4.28. Es wird deutlich, dass der Defekt oberhalb 625 K ausheilt. Als ein Maß der relativen Änderung der Defektdichte $\Delta c_d/c_d$ kann man die Änderung des Peakintegrals $\Delta A/A$ nehmen, wenn ein *Intracenter*-Übergang vorausgesetzt wird [66]. Damit kann eine Ausheilrate entsprechend

$$\lambda_a = \frac{\Delta c_d/c_d}{t} = \frac{\Delta A/A}{t}$$

berechnet werden. Auf der anderen Seite erhält man für eine Reaktionskinetik erster Ordnung die Beziehung $\dot{c}_d = -\lambda_a c_d$ mit

$$\lambda_a = \frac{v_D}{J} \exp\left(\frac{S}{k_B}\right) \exp\left(-\frac{H}{k_B T}\right)$$

(H Bildungsenthalpie des Defekts, J durchschnittliche Zahl der atomaren Sprünge bei der Reaktion).

Mit der Abschätzung der Entropie des Prozesses zu $S = 6k_B$ [162] kann die Enthalpie und die Sprungzahl aus der Anpassung an die Messwerte ermittelt werden. Es ergibt sich mit Abb. 4.28 b

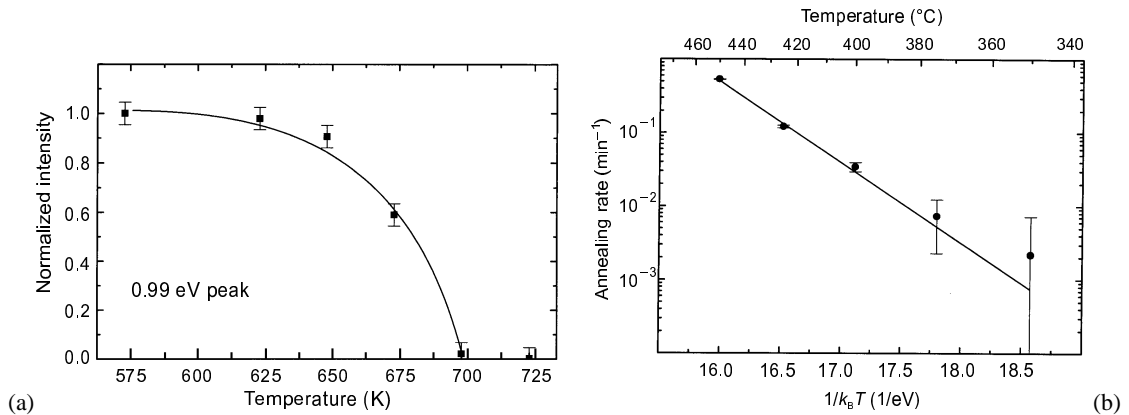


Abb. 4.28: Ausheilverhalten der 0,99 eV-Absorptionsbande. (a) Isochrone Ausheilkurve. Die thermische Behandlung erfolgte in 25 K-Schritten für 10 min. Die durchgezogene Linie dient zur Veranschaulichung. (b) Arrheniusplot der Ausheilrate mit Anpassungsgerade [131].

$H = (2,3 \pm 0,2)$ eV sowie $J = 22 \pm 2$. Diese Werte stimmen recht gut mit dem nach Elektronenbestrahlung in GaAs gefundenen EL6-Defekt überein, das ein Einfangzentrum für Elektronen darstellt [162]. Die Zahl der Sprünge bei der Defektreaktion ist von der Größenordnung, wie man bei einer kurzreichweitigen Defektpaar-Rekombination erwarten sollte. Die thermische Aktivierungsenergie des EL6-Defektes wurde aus DLTS-Messungen mit $E_c - 0,35$ eV bestimmt. Dieser bestrahlungsinduzierte Defekt heilt zwischen 700 und 750 K aus und es wurden $H = 2,7$ eV und $J = 1$ ermittelt. Ebenfalls nach Elektronenbestrahlung wurde mittels Infrarotspektroskopie eine Defektlinie bei 0,98 eV gefunden [156, 157]. Eine Ausheilung des mit P1 bezeichneten Defekts oberhalb 600 K wird angegeben und aus dem angegebenen Arrheniusplot lassen sich $H = (2,3 \pm 0,2)$ eV und $J = 10$ ableiten*.

Die räumliche Verteilung der Absorption im nahen Infrarotbereich der deformierten GaAs-Proben wurde mittels IR-Mikroskopie studiert. Neben der allgemeinen Zunahme der Absorption im benutzten Wellenlängenbereich von 0,8 bis 1,8 μm ist eine starke inhomogene Verteilung zu konstatieren, die mit höherem Deformationsgrad abnimmt. Die lokal stärker absorbierenden Bereiche (dunkle Bereiche in Abb. 4.29) wurden spektroskopiert und zeigten Spektren, die denen einer Probe mit höherem Deformationsgrad entsprechen. Die Proben wurden vor der Untersuchung poliert, d. h. die Dunkelkontraste resultieren nicht aus Oberflächenstrukturen. Bei höherer Vergrößerung wird erkennbar, dass Bereiche starker Absorption eine Streifenstruktur zeigen. Diese Streifen verlaufen in $\langle 110 \rangle$ -Richtung und lassen damit eine Korrelation mit der Position von Versetzungsgleitbändern als naheliegend erscheinen. Daraus folgt, dass die IR-aktiven Defekte in unmittelbarer Beziehung zu den Versetzungen bzw. ihrer Bewegung stehen.

Zu der erhöhten Absorption, die zu dem Dunkelkontrast führt, tragen drei Effekte bei. Zunächst führt die Existenz von flachen Störstellenbändern im Deformationspotential zu einer Verschiebung der Absorptionskante von 0,120 eV (Abb. 2.7 auf Seite 10). Den zweiten Beitrag liefert der EL2-Peak bei 1,18 eV, und den dritten, kleinen Anteil der H1-Peak.

LE BERRE *et al.* [127] berichten über die Zunahme der bandkantennahen Absorption durch die Anwesenheit eines Punktdefekts in gewachsenem GaAs (RC-Defekt). Bei dem RC-Defekt kann eine Korrelation zu der Anordnung von eingewachsenen Versetzung gezeigt werden [26]. Durch den Vergleich mit Positronenannihilationsmessungen wurde ein Zusammenhang zwischen diesem Defekt und As-Leerstellen hergestellt [127]. Der Nachweis dieses Defekts in den Absorptions-

*Die in den Arbeiten von MANASREH und FISCHER [156, 157] angegebenen Werte von $H = 0,78$ eV und $J = 1,8 \cdot 10^5$ beruhen auf einem offensichtlichen Auswertefehler, indem die Temperatur in $^{\circ}\text{C}$ zugrunde gelegt wurde. Obwohl eine Ausheilung bei 400 $^{\circ}\text{C}$ angegeben wird, erstreckt sich der gezeigte Arrheniusplot von 463 – 362 K.

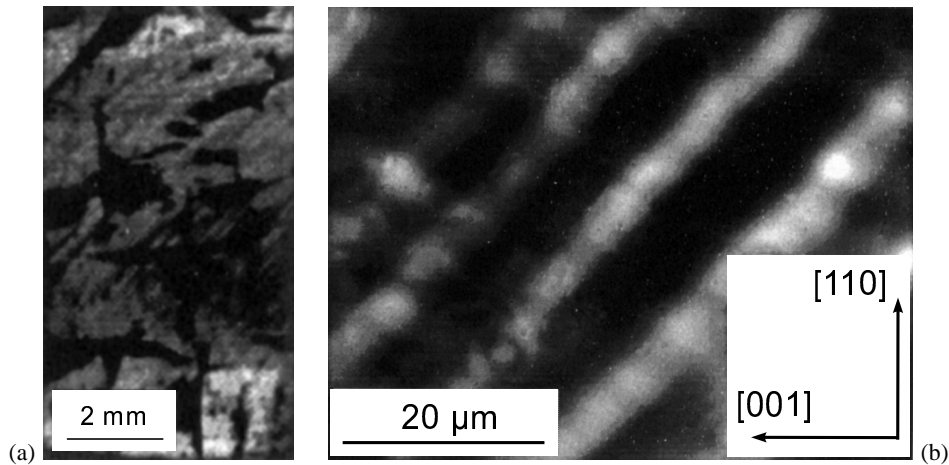


Abb. 4.29: IR-Mikroskopie von deformiertem GaAs [251]. Die abgebildete Probe wurde zu 9 % bei 823 K unter einer Last von $\tau_s = 80$ MPa statisch verformt. Dunkle Bereiche charakterisieren geringe Transmission. Der Wellenlängenbereich der eingesetzten Kamera lag bei 0,8 bis 1,8 µm. (a) Geringe und (b) höhere Vergrößerung.

messungen des plastisch deformierten GaAs ist sicherlich kaum möglich, da dessen Defektbande bei 1,49 eV liegt und damit von den flachen Versetzungsbändern überdeckt wird. Auf der anderen Seite fanden WOSINSKI und FIGIELSKI [279] neben versetzungsinduzierten DLTS-Peaks den EL6-Peak in plastisch deformiertem GaAs. Auch für EL6 wurde eine Identifikation mit V_{As} offeriert [123]. Jedoch mit den Resultaten der Tieftemperaturelektronenbestrahlung [194] erscheint im gewachsenen GaAs die Stabilität isolierter Arsenvakanz fraglich. GEBAUER konnte in GaAs:Si einen Komplex $V_{As}Si_{Ga}$ identifizieren [54]. Für das plastisch verformte GaAs kommt eine Interpretation mit isolierten Arsenleerstellen oder V_{As} -Fremdatom-Komplexen mit den Ergebnissen unserer Positronenmessungen nicht in Frage. Die parallel an denselben Proben wie für die Absorptionsmessungen durchgeführten POLIS-Messungen erbrachten einen Abfall der Positronenlebensdauer im selben Temperaturbereich wie das Ausheilen der 0,99 eV-Absorptionsbande. Die Ursache ist das Verschwinden einer V_2 -artigen Positronenlebensdauer in diesem Temperaturbereich. Nach unseren Untersuchungen erscheint deshalb eine Zuordnung des H1-Defekts zu Doppelleerstellen – bzw. Leerstellenketten, die nach Abb. 4.11 auf Seite 50 eine Positronenlebensdauer wie Doppelleerstellen aufweisen – als wahrscheinlich. Nimmt man die o. a. vergleichbaren Enthalpien, könnte dieser Defekt mit EL6 identisch sein. Dabei ist einzuschränken, dass eigene DLTS-Untersuchungen zum Vorkommen und Ausheilverhalten des EL6-Defekts in plastisch verformten GaAs nicht angestellt wurden.

Aus den Positronenlebensdauermessungen war ein monovakanzenartiges Signal extrahiert worden, dass aufgrund seiner hohen thermischen Stabilität mit Leerstellen im Versetzungskern oder im Spannungsfeld von Versetzungen assoziiert worden war. Wichtige Aussagen zu versetzungsgebundenen Leerstellen stammen aus Untersuchungen von deformiertem Silicium mittels Elektronenspinresonanz. Im ESR-Spektrum wird eine Reihe von Signalen gefunden, die mit Versetzungen zusammenhängen. Die Defekte Si-Y und Si-K1/K2 haben mit dem Einbau von Leerstellen auf der 30° -Partialversetzung zu tun [107]. Sie charakterisieren verschiedene Möglichkeiten des Einbaus auf der Versetzung in Bezug auf die relative Position zur Rekonstruktionsstruktur. Si-Y stellt eine dreifach koordinierte Leerstelle V_{3c} dar. Dieser Defekt besitzt eine hohe Beweglichkeit auf der Versetzungslinie, so dass im Kern Ketten von Leerstellen mit orthorhombischer Symmetrie gebildet werden können. Si-K1 ist eine Leerstelle mit Vierfachkoordination, V_{4c} . Dabei besteht möglicherweise ein Zusammenhang mit Fremdatomen wie Kohlenstoff oder Sauerstoff. K2 ist ein Anregungszustand des Si-K1-Defekts. Es wurde gefunden, dass bis zu 40 % der Plätze

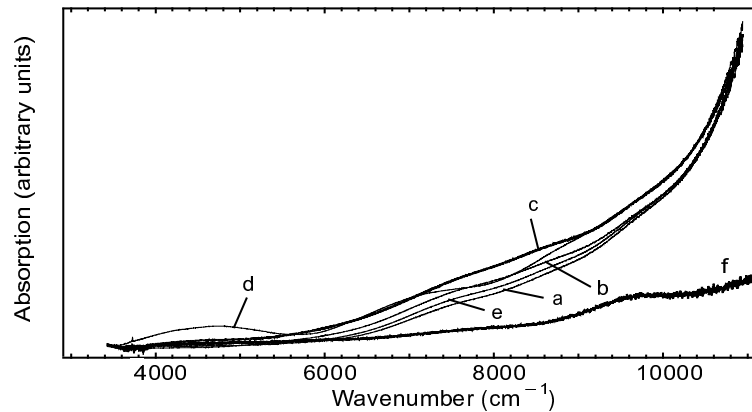
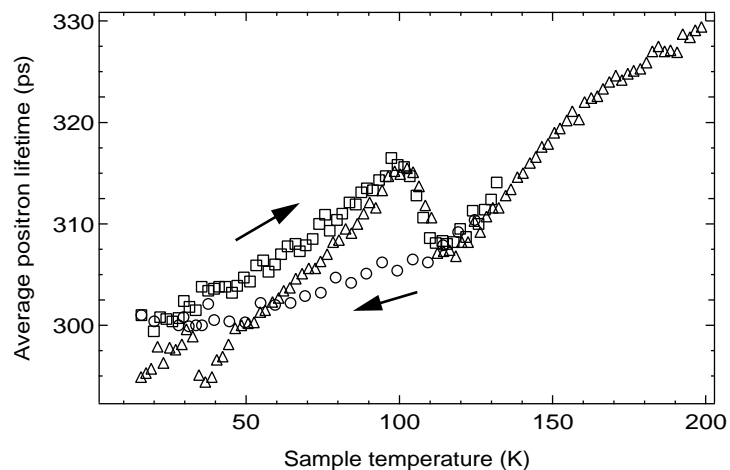


Abb. 4.30: Transienteneffekte im Absorptionsspektrum von deformiertem GaAs. FTIR-Spektren von undotiertem GaAs nach Deformation a) unmittelbar nach Abkühlen auf 20 K, b) nach 1 h, c) nach 3 h, d) nach 12 h Verweilzeit bei dieser Temperatur und e) nach Zwischenerwärmung auf 130 K und erneuter Abkühlung auf 20 K [91]. Spektrum f) wurde an einer undeformierten Referenzprobe gemessen. Deformation in [001]-Richtung bei 873 K mit einer Rate von $1,6 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ zu 12 %.

Abb. 4.31: Mittlere Positronenlebensdauer von deformiertem undotiertem GaAs als Funktion der Probestemperatur [136]. Die Messung von $\bar{\tau}$ erfolgte beim Abkühlen (Kreise) sowie während des Aufheizens (Vierecke). Eine zweite Messung erfolgte nach schneller Abkühlung auf 15 K während des Wiederaufheizens (Dreiecke). Die Messung erfolgte an derselben deformierten Probe wie in Abb. 4.30.



im Kern von 30° -Versetzungen mit Y-Defekten und 5 % mit K1 besetzt sein können. Bei geringeren Dichten sinkt die Beweglichkeit der Schraubenversetzungen rapide [8]. Warum ausschließlich Schraubenversetzungen, bzw. 30° -Partialversetzungen mit Leerstellen assoziiert sind, ist nicht ganz klar. KISIELOWSKI sieht einen Zusammenhang zum Spannungsfeld [107]. Möglicherweise liegt es aber auch an einer höheren Dichte von Schraubenversetzungen in den untersuchten Proben. Aus ESR-Messungen ist nichts zu versetzungsgebundenen Leerstellen in GaAs bekannt. Das Hauptproblem in Verbindungshalbleitern ist das Vorkommen von Kernen mit einem Kernspin ungleich Null. Damit gibt es über die Ligandenhyperfeinwechselwirkung breite unaufgelöste Linien, die eine Bestimmung von Defektstrukturen erschweren.

Der K1-Defekt zeigt eine Bistabilität. Unter Elektroneneinfang wird Si-K2 gebildet entsprechend einer möglichen Reaktion $e^- + V_{4c} \rightleftharpoons V_{3c} + RD$ [107]. Eine solche Bistabilität für versetzungsgebundene Defekte kann auch aus unseren Messungen für GaAs angenommen werden. Im Bereich des nahen Infrarots zeigen Absorptionsmessungen ein Transientenverhalten. Diese Veränderungen traten nur in Proben auf, die unter hoher Last nach der Verformung bei $T < 900 \text{ K}$ und hohen Verformungsraten auf Raumtemperatur abgekühlt wurden. Abb. 4.30 zeigt breite Absorptionsbanden, wie sie unmittelbar nach Abkühlen auf die Messtemperatur von 20 K und nach

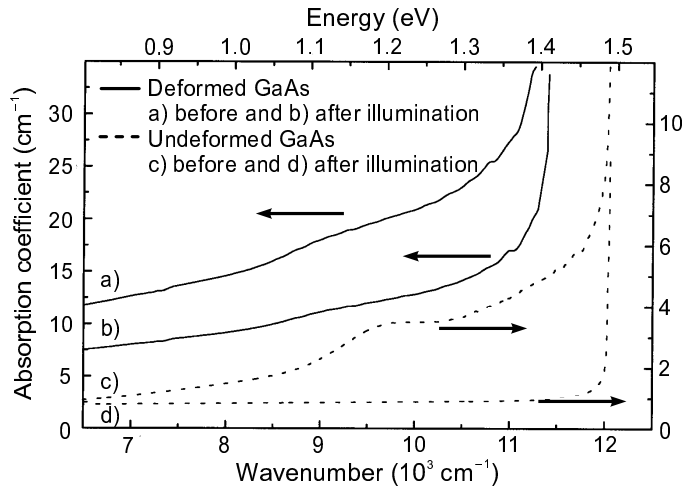


Abb. 4.32: FTIR-Spektren von undotiertem GaAs vor und nach plastischer Deformation [251]. Die Spektren wurden bei 4 K vor und nach Beleuchten mit weißem Licht gemessen. Statische Deformation in $[110]$ -Richtung bis 9 % bei 823 K unter einer Last von $\tau_s = 80$ MPa.

verschiedenen Verweilzeiten aufgenommen wurden. Nach Erhöhung der Temperatur auf 130 K und erneuter Abkühlung auf die Messtemperatur wird das Spektrum reproduziert, das unmittelbar nach dem ersten Abkühlen aufgenommen worden war. Die Veränderungen im Spektrum lassen sich nicht ausschließlich mit den bekannten Banden für EL2 und dem o. a. H1-Defekt in Zusammenhang bringen. Ein Belichtungseffekt trat ausschließlich für die 1,18 eV-Bande auf und steht damit ausschließlich mit der Metastabilität des EL2-Defekts im Zusammenhang. Durch mehrmalige Messung desselben Spektrums wurde auch ein Einfluss des Messlichts ausgeschlossen.

In den Proben, die das Transientenverhalten im FTIR-Spektrum zeigten, wurde ein deutlicher Sprung in der mittleren Positronenlebensdauer um 100 K gemessen (Abb. 4.31). Der Sprung wurde nur während während des langsamen Aufheizvorgangs nach dem vorherigen Abkühlen auf 15 K gemessen; bei Messungen während des Abkühlens trat er nicht auf. Der Effekt ist wiederholbar und kann also nicht mit einem Ausheilvorgang in Zusammenhang gebracht werden. Ebenfalls scheiden Änderungen des Ladungszustands aus, da solche Prozesse wesentlich geringere Zeitkonstanten haben. Bei Lagerung der Probe bei tiefen Temperaturen wurde ein Anstieg der Positronenlebensdauer um 5 bis 10 ps festgestellt. Diese Erholung erfolgte im Zeitraum von ca. 20 h.

Es ist bekannt, dass das DX-Zentrum eine große Stokesverschiebung bei thermisch aktiviertem Elektroneneinfang aufweist. Der Übergang ist mit einem offenen Volumen in einem Zustand verbunden, der im zweiten verschwindet. Dieser Wechsel besteht in einer metastabilen Verrückung eines Donatoratoms und kann mit Positronenlebensdauermessungen verifiziert werden [115]. Ein bestimmtes Spannungsfeld ist notwendig, um das DX-Verhalten hervorzurufen. Diese Spannung kann entweder in Mischkristallen durch Atome mit einem größeren Atomdurchmesser hervorzurufen werden oder durch äußeren hydrostatischen Druck. ISTRATOV und VYVENKO [95] haben durch DLTS- und elektrische Messungen an CdS festgestellt, dass die notwendige Spannung zur Erzeugung eines DX-Zentrums auch von einer Schraubenversetzung herrühren kann. Ein versetzungsgebundenes DX-Zentrum wird damit postuliert. Das in unseren Messungen gefundene Verhalten in deformierten GaAs-Proben kann bisher nicht als sichere Identifikation eines solchen Defekts in GaAs gelten. Sicher ist aber, dass der Effekt nur dann auftritt, wenn eine hohe Restspannung in den nach der Verformung schnell abgekühlten Proben vorliegt. Kein Einfluss einer Beleuchtung bei tiefen Temperaturen konnte nachgewiesen werden. Mit welchen Defekten die deutliche Änderung der Positronenlebensdauer zu tun hat, kann nur spekuliert werden. Es ist fraglich, ob eine einfache Leerstellen als konkurrierendes Einfangzentrum zu den bei tiefen Temperaturen dominierenden flachen Positronenfallen ausreicht, um den deutlichen Anstieg um 5 bis 10 ps hervorzurufen. Von REDDY *et al.* [210] wurde im Zusammenhang mit der Analyse von DLTS-

Abb. 4.33: Abhängigkeit der EL2-Dichte vom Verformungsgrad von plastisch deformiertem GaAs [251]. Die Deformationstemperatur war 823 K. Die durchgezogene Linie entspricht einer sigmoidalen Anpassung.

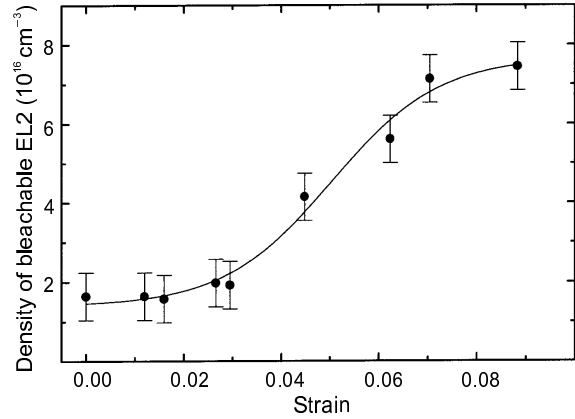
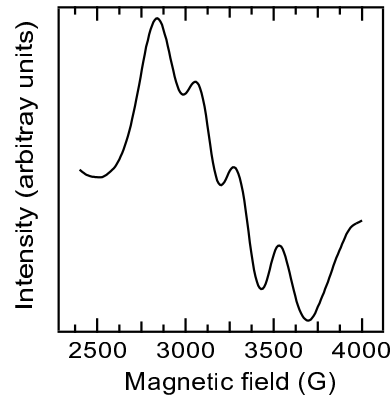


Abb. 4.34: ESR-Spektrum des Ga_{As}^- -Antisites in GaAs [91]. Die Messung erfolgte in plastisch deformiertem undotiertem GaAs. 10 % Deformation in [110]-Richtung bei 673 K. Spektrum bei 6,5 K mit einer Mikrowellenleistung von 200 mW. Die Dichte der Ga_{As}^- -Antisites beträgt in dieser Probe $(8 \pm 1) \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.



Spektren diskutiert, dass das EL6-Zentrum DX-Eigenschaften zeigen sollte.

Im nahen Infrarot wird das Spektrum von undotiertem GaAs durch die 1,18 eV-Absorption des EL2-Defekts dominiert. Nach Beleuchten bei tiefen Temperaturen lässt sich diese Bande bleichen. Nach plastischer Deformation steigt die Absorption in diesem Bereich, wobei eine klare Bande mit zunehmendem Deformationsgrad immer weniger ausgeprägt ist. Dennoch bleibt ein deutlicher Belichtungseffekt erkennbar (Abb. 4.32). Der beobachtete Zuwachs der bleichbaren Komponente des Spektrums wird mit einer Zunahme der EL2-Konzentration interpretiert. Nach dem Martin-kriterium [161] ergibt sich die Dichte des bleichbaren EL2 zu $N_{\text{EL2(b)}} = (0,77 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}) \Delta\alpha$ mit $\Delta\alpha = \alpha(1,18 \text{ eV}) - \alpha(0,75 \text{ eV})$. Dabei stellen $\alpha(1,18 \text{ eV})$ und $\alpha(0,75 \text{ eV})$ die Absorptionskoeffizienten des Differenzspektrums vor und nach dem Bleichen bei 1,18 und 0,75 eV dar. Die Belichtung wurde so lange durchgeführt, bis keine Änderung im Spektrum mehr auftrat. Danach ergibt sich eine Dichte von bleichbarem EL2 im Ausgangsmaterial von $1,6 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Die Dichte wächst nichtlinear mit dem Deformationsgrad und erreicht $7,6 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ bei einem Deformationsgrad von 9 % (Abb. 4.33). Oberhalb von 7 % ist eine Sättigung der Konzentration zu beobachten. Für niedrige Deformationsgrade stimmen die Resultate mit Literaturergebnissen überein [241]. Aus den oben dargestellten POLIS-Ergebnissen ergab sich ein linearer Zusammenhang zwischen Punktdefektdichte und Verformungsgrad bis zu einem Verformungsgrad von ca. 15 %.

KRÜGER und ALEXANDER [121] fanden eine Sättigung bei $6 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ für 11 % Deformation für die nichtbleichbare Komponente von EL2. Der Unterschied zu den hier gezeigten FTIR-Ergebnissen kann zur Ursache haben, dass zum Nachweis die ESR genommen wurde. Während IR-Absorption ungeladenes EL2 detektiert, kann ESR nur geladene EL2-Zentren detektieren. Die Grundlage der Bleichbarkeit liefert das DABROWSKI-SCHEFFLER-Modell [41]. Ein metastabiler Zustand mit einer $\text{V}_{\text{Ga}}\text{I}_{\text{As}}$ -Konfiguration wird durch einen internen Elektronenübergang des As_{Ga} -Antisites realisiert. Vorhandene innere Spannungen können aber einen Übergang in die metastabile

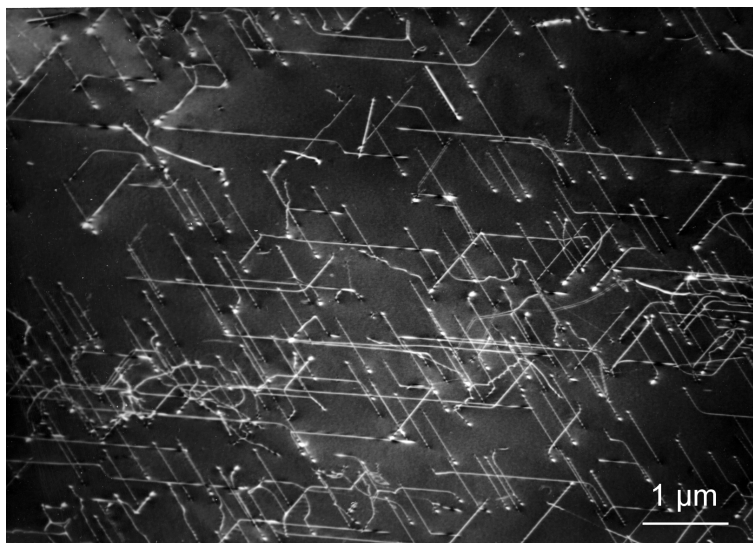


Abb. 4.35: Versetzungen in plastisch deformiertem Si. Statische Deformation in $[213]$ -Richtung bei 663 K mit einer Last von $\tau_s = 200$ MPa, Verformungsgrad 2 %. Die Probenorientierung der TEM-Folie ist (213) , $(\mathbf{g}_{220}, 3\mathbf{g}_{220})$ -Weak-beam-Aufnahme.

Konfiguration verhindern. In gewachsenen undotiertem GaAs gelang der Nachweis der metastabilen Leerstelle des EL2-Zentrums mittels Positronenannihilation [113]. Der Grundzustand ist aufgrund der positiven Ladung abstoßend für Positronen. Eine Detektion von metastabilen EL2-Defekten mittels POLIS war in den plastisch deformierten GaAs-Proben nicht erfolgreich. Wahrscheinlich ist die Konzentration im Vergleich zu den konkurrierenden Positronenfallen zu gering, um einen messbaren Positroneneinfang hervorzurufen.

Die Konzentration von positiv geladenen EL2-Defekten wurde mittels eigener ESR-Messungen untersucht. Die Ergebnisse sind kompatibel mit den FTIR-Daten und entsprechen früheren Ergebnissen [269]. Ein wesentliches Ziel unserer ESR-Studien war der Nachweis und die Bestimmung der Defektkonzentration des mittels POLIS gefundenen Ga_{As}^- -Antisites. Die Messungen erfolgten mit einem modifizierten X-Band-Spektrometer Bruker ER-200 D SRC.* Im Bereich der dritten Linie des As_{Ga}^+ -Signals tritt ein Quadruplett mit einer sehr kurzen Spin-Gitter-Relaxationszeit auf. Es kann bei sehr hoher Mikrowellenleistung und tiefen Temperaturen vom EL2-Signal getrennt werden [120]. Ein solches Spektrum ist in Abb. 4.34 gezeigt. Eine eingehende Analyse des zugrundeliegenden Defekts mit trigonaler Symmetrie wurde von KRÜGER [120] vorgenommen und mit dem Ga_{As}^- -Antisite identifiziert. Ein ähnliches Spektrum wurde von CHRISTOFFEL *et al.* [35] in plastisch verformtem GaAs gefunden und Arsenzwischengitteratomen zugeordnet. Ausgehend von einem vergleichbaren Spektrum in GaP konnten KRÜGER und ALEXANDER [121] jedoch die Zuordnung zu As ausschließen.

Um den Vergleich zu den POLIS-Messungen herzustellen, wurde die absolute Spindichte und damit die Defektdichte durch Vergleich der ESR-Intensität mit einer Referenzprobe ermittelt. Damit ergab sich eine Dichte der Ga_{As}^- -Antisites in der in Abb. 4.34 gezeigten Probe von $(8 \pm 1) \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Die aus den ESR-Messungen gewonnene Dichte dieses Antisite-Defekts lässt sich mit der Einfangrate in die flachen Fallen in Beziehung setzen, die aus der Anpassung des Temperaturverlaufs der mittleren Positronenlebensdauer oder aus Gl. 4.21 auf Seite 55 an denselben Proben bestimmt wurde. Es ergaben sich die gleichen relativen Änderungen der Positroneneinfangrate und der aus der ESR bestimmten Konzentration $[\text{Ga}_{\text{As}}^-]$ mit der Variation der De-

*Die Messungen erfolgten von C. G. Hübner in der Arbeitsgruppe von E. Weber, Berkeley

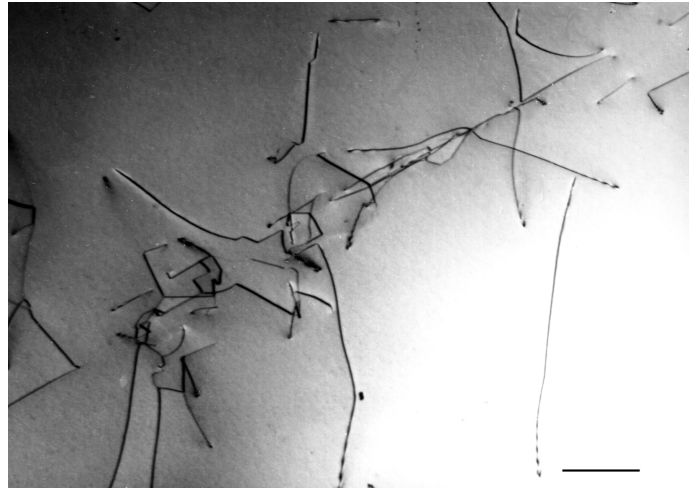


Abb. 4.36: TEM von Versetzungen in undotiertem GaAs nach 1% Deformation bei 823 K in [213]-Richtung. (213)-Folienorientierung, die Markierung entspricht 1 μm .

formationstemperatur, der Verformungsrate und der Orientierung der Deformationsachse. Damit ist es sehr wahrscheinlich, dass derselbe Defekt mit POLIS und ESR gemessen wurde. Mit der unabhängigen Bestimmung von $[\text{Ga}_{\text{As}}^-]$ kann der Trappingkoeffizient für die flache Positronenfalle angegeben werden. Trägt man die Einfangrate gegen diese Konzentration auf, ergibt sich näherungsweise eine Gerade. Der Anstieg dieser Geraden ist der Trappingkoeffizient (vgl. Gl. 4.3 auf Seite 37), der sich zu $(2,6 \pm 0,3) \cdot 10^{16} \text{ s}^{-1}$ ergibt [134]. Bei den o. a. Dichten des Ga_{As}^- wurde dieser Wert benutzt, um aus den Einfangraten zu den Dichten zu gelangen. Der hier bestimmte Wert des Eingfangkoeffizienten liegt nahe bei dem von SAARINEN *et al.* [215] in elektronenbestrahltem GaAs bestimmten Wert von $5 \cdot 10^{16} \text{ s}^{-1}$.

4.6 Elektronenmikroskopie von Versetzungen

Um die Morphologie der durch plastische Deformation erzeugten Versetzungen zu charakterisieren, wurden konventionelle transmissionselektronenmikroskopische Untersuchungen angestellt. Durchstrahlbare Folien wurden in Orientierung der Hauptgleitebene durch übliche Schneid- und Polierprozesse und anschließender chemische Präparation bzw. Ionenstrahlabdünnung mit Ar-Ionen hergestellt. In einigen Fällen wurden die Proben der spektroskopischen Untersuchungen genutzt, die als Scheiben senkrecht zur Deformationsachse aus der Mitte des deformierten Barrens herausgeschnitten wurden. Die TEM-Experimente wurden am Höchstspannungselektronenmikroskop JEM 1000* durchgeführt, das mit einer Beschleunigungsspannung von 1 MV arbeitet. Eine Bestimmung der Burgersvektoren der Versetzungen erfolgte entsprechend der Auslöschungsregel $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$ (\mathbf{g} Beugungsvektor) [47]. Um die Linienrichtung zu bestimmen, wurden Kippexperimente mit großen Winkeln durchgeführt. Versetzungsdichten wurden durch Messung der Gesamtlänge in einem bestimmten Volumen erhalten. Dabei wurde die lokale Probendicke durch Auszählung der Extinktionssteifen unter Zweistrahlbedingung abgeleitet.

Bei Deformation von Si in Einfachgleitorientierung sind die meisten Versetzungen sehr geradlinig und in $\langle 110 \rangle$ -Richtungen ausgerichtet (Abb. 4.35). Das passiert umso prononcierter, je tiefer die Temperatur ist und umso höher die Last. Eine Verformung von Si bei verhältnismäßig tiefen Temperaturen erfordert jedoch eine Vordeformation, um genügend bewegliche Versetzungen zur Verfügung zu stellen. Diese Vorverformung war bei der Probe in Abb. 4.35 bei 1073 K unter einer Last von 12 MPa durchgeführt worden, wobei der Verformungsgrad unter 1% lag. Die Versetzungen in solchen deformierten Proben sind ausführlich von der Alexander-Gruppe in Köln

* am Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik Halle

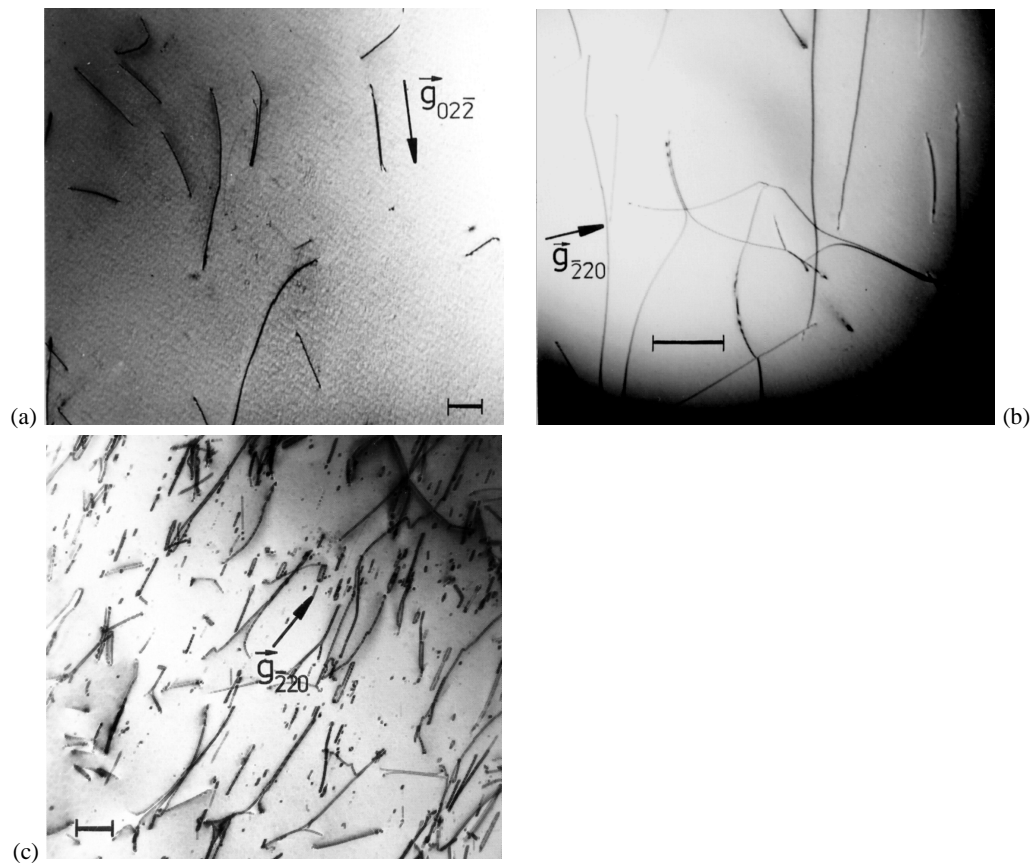


Abb. 4.37: TEM-Aufnahmen von Versetzungen in deformiertem [213]-orientierten GaAs:Te bei unterschiedlichem Deformationsgrad [138]. (a) 0,7% Deformation bei 823 K, (b) 0,5 % Deformation bei 923 K, (c) 2,9 % Deformation bei 823 K. Die Deformationsrate bei allen Proben war $5 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$. (213)-Folienorientierung. Die Markierungen entsprechen 1 μm , der Beugungsvektor ist vom Typ 220.

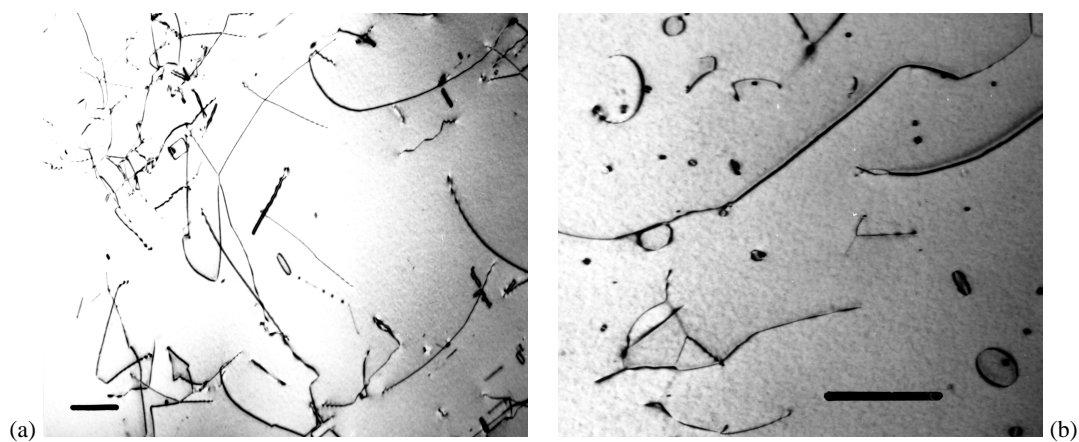
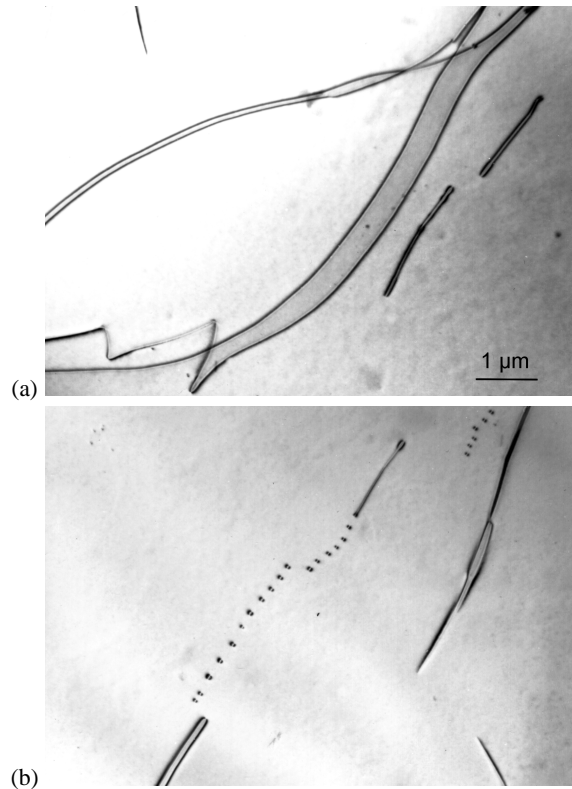


Abb. 4.38: Versetzungsstruktur in plastisch deformiertem GaAs (a) unmittelbar nach der Verformung in [213]-Richtung und (b) nach zusätzlicher Temperung bei 1048 K. Die statische Deformation bis zu 0,9 % war bei 923 K mit einer Last von $\tau_s = 8 \text{ MPa}$. TEM-Hellfeldaufnahmen. Die Markierungen entsprechen 1 μm [139].

Abb. 4.39: TEM von Versetzungsdipolen in plastisch deformiertem GaAs [131]. (a) Multipolanordnung, (b) Abschnürung prismatischer Versetzungsringe. Die Deformation erfolgte in [213]-Richtung, TEM-Aufnahme entlang der primären Gleitebene. Die Vergrößerung ist für beide Aufnahmen dieselbe.



untersucht worden (zur Übersicht siehe ALEXANDER [2]). Diese Methode der Verformung erzeugt reguläre hexagonale Versetzungskonfigurationen von weit aufgepaltenen 60° - und Schraubenversetzungssegmenten, die hauptsächlich in der primären Gleitebene liegen. Versetzungen in anderen Gleitsystemen sind weniger geradlinig. Die Gesamtversetzungsdichte lag in der gezeigten Proben bei $4 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$, wobei der Anteil an Schraubenversetzungen bei 15 % lag.

In GaAs gelingt es nicht, so wohlausgerichtete Versetzungskonfigurationen wie in Si durch ein Kompressionsexperiment zu erzeugen. Dabei spielt nicht nur ein niedrigeres Peierlspotential eine Rolle, sondern auch der Beitrag von Versetzungen unterschiedlicher Polarität mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten. Die (213)-Orientierung der abgebildeten GaAs-Probe in Abb. 4.36 macht deutlich, dass ein höherer Anteil von Störgleitprozessen auf den sekundären Gleitebenen aktiviert wurde, der zu Schneidprozessen mit den Versetzungen des primären Gleitsystems führt. Der Anteil von Störgleitprozessen auf sekundären Gleitebenen steigt mit wachsender Verformungsrate. Trotzdem sind die Gleitprozesse im primären Gleitsystem aber dominant. Die Analyse der Burgersvektoren ergibt, dass etwa 80 % der Versetzungen den primären Burgersvektor $a/2[011]$ besitzen. Das ist auch aus dem deutlich höheren Schmidfaktor des Systems PQ im Vergleich zu den anderen (Tab. 3.1 auf Seite 22) zu erwarten. Die meisten Versetzungen sind vereinzelt bei diesem Deformationsgrad, aber wie Abb. 4.36 zeigt, können Prozesse der subkorngrößenartigen Anordnung von Versetzungen bereits im *Easy-Glide*-Bereich beginnen.

Die Veränderung der Versetzungsstruktur mit dem Verformungsgrad zeigt Abb. 4.37. Um eine Beziehung zu den Positronenexperimenten herzustellen, wurden exakt dieselben Proben, wie bei den POLIS-Messungen für die TEM-Abbildung genommen. Die in Abb. 4.37 b und c gezeigten Versetzungsstrukturen gehören zu den Proben B und C von Abb. 4.7 auf Seite 47. Die Probe von Abb. 4.37 a zeigte ein Lebensdauerspektrum, was identisch mit dem Ausgangsmaterial (Probe A in 4.7) war. Zunächst sind beim niedrigen Verformungsgrad einzelne Versetzungen auszumachen (Abb. 4.37 a), mit beginnender Tendenz zur Dipolbildung (Abb. 4.37 b). Der Anteil von Schraubenversetzungen lag bei ca. 10 %. Die Untersuchung des Aufspaltungsverhaltens mit-

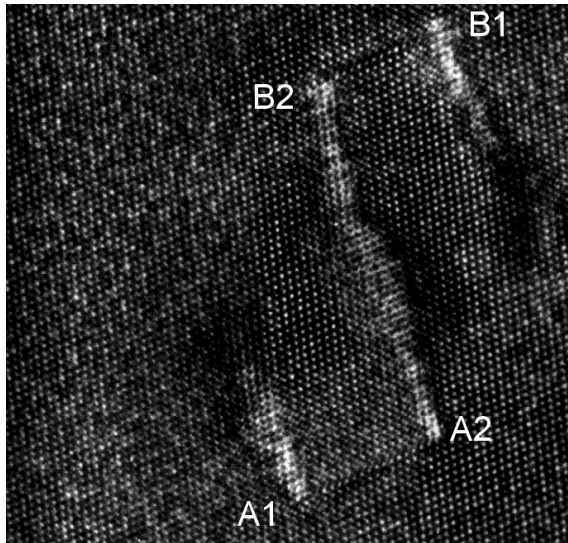


Abb. 4.40: HREM-Aufnahme eines Versetzungsdipols in plastisch deformiertem Si. A1–A2 und B1–B2 bezeichnen die Positionen der beiden Stufenversetzungen mit ihren $a/6\langle 211 \rangle$ -Partialversetzungen. Die Aufspaltungsweite der Stufenversetzungen beträgt 6 nm (Aufnahme P. Werner, Halle).

tels *Weak-beam*-Mikroskopie ergab eine Dissoziation in Shockleysche Partialversetzungen, wobei die Separationsweite ≈ 5 nm betrug. Die Versetzungsdichte steigt von $3 \cdot 10^7$ und $6 \cdot 10^7$ auf $22 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-3}$ (Abb. 4.37 a, b und c). Mit wachsendem Deformationsgrad werden Stufenversetzungsdipole, Knäuel von Versetzungen und Einzelversetzungen, die in Dipole abknicken, dominant. Es treten kleine Versetzungsringe auf, die einen Durchmesser von bis zu 100 nm haben.

Abb. 4.38 zeigt Veränderungen, die in deformiertem GaAs nach zusätzlicher thermischer Behandlung auftreten. Der Ausgangszustand der bei 923 K deformierten Probe zeigt ein irreguläres Netzwerk mit Einzelversetzungen, Dipolen und kleinen Versetzungsringen. Eine genauere Analyse dieser Ringe zeigt, dass es sich zum Großteil um prismatische Versetzungsringe handelt, aber auch einige Frankische Stapelfehlerringe auftreten. Nach Temperung bei 1048 K unter Ar-Schutzgas für 30 min ist die Versetzungsdichte zum Zustand nach der Verformung kaum verändert und beträgt $7 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-3}$. Man findet nun verstärkt prismatische Versetzungsringe, die aus der Einschnürung von Stufenversetzungsdipolen entstanden sind. Zusätzlich treten einige wenige Frankische Versetzungsringe vom Leerstellentyp auf mit einer Dichte $< 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ auf. Das Auftreten dieser Ringe kann mit dem Ausheilen der dreidimensionalen Leerstellagglomerate in Verbindung stehen, das in diesem Temperaturbereich auftritt (Abb. 4.9 auf Seite 48). Die Leerstellencluster sind aufgrund ihrer Kleinheit im TEM nicht sichtbar. In einigen Fällen gelang es, wenige Voids von 50 nm bis 100 nm bis Durchmesser in plastisch deformiertem Si abzubilden und durch ihren Fresnelkontrast [212] zu identifizieren. Die Dichte dieser großen Leerstellenaggregate ist aber viel zu gering, um in der Positronenannihilation einen merklichen Effekt zu erzielen.

Stufenversetzungsdipole bilden das charakteristische Element der Versetzungsstruktur in GaAs bei höheren Verformungsgraden. Diese Dipole können sich zu multipolartigen Gebilden anordnen, wie Abb. 4.39 demonstriert. Die Bildung der Dipole ist über zwei Mechanismen denkbar. Der erste ist die parallele Ausrichtung von Stufenversetzungen unterschiedlichem Burgersvektors aufgrund der elastischen Wechselwirkung. Der dominante Prozess in den untersuchten deformierten GaAs-Proben ist aber die Bildung von Dipolen durch das Gleiten von Schraubenversetzungen. Dieser Mechanismus setzt die Existenz von Sprüngen, bzw. Supersprüngen mit einer Höhe $h_j \gg b$ voraus. Diese Sprünge sind nicht gleitfähig und können der Bewegung der Schraubenversetzung nicht folgen. Für die Existenz gepinnter Sprünge auf Schraubenversetzungen gibt es folgende Möglichkeiten: Solche Sprünge werden zum einen beim Doppelquergleiten der Schraubenversetzungen gebildet, wenn z. B. ein Gleithindernis überwunden werden muss. Der andere Fall ist die Entstehung nichtgleitfähiger Sprünge beim Schneiden von Versetzungen. Als Resultat des Weggleitens der Schraube unter Zurückbleiben des Sprungs wird ein langer Stufendipol ausgezogen. Überschreitet

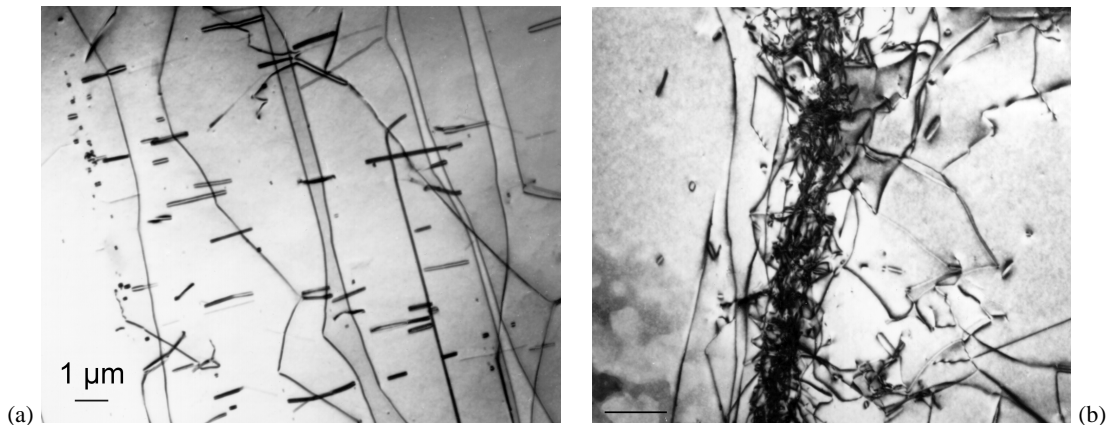


Abb. 4.41: TEM von Versetzungsstrukturen in GaAs, das 4% deformiert wurde bei 773 K (a) in [110]-Richtung, (b) in [001]-Orientierung. TEM-Hellfeldaufnahmen. Die Markierungen entsprechen 1 μm .

die Höhe des Sprungs eine gewisse kritische Distanz, die von der elastischen Wechselwirkung der Stufenversetzungen bestimmt ist, können sich beide Stufenversetzungen aneinander vorbeibewegen und der Dipol driftet auseinander [92]. Im Zusammenhang mit den Stufenversetzungsdipolen werden oft Versetzungsringe bzw. Ketten solcher Ringe gefunden (Abb. 4.39 b). Diese Defekte stellen prismatische Versetzungsringe dar, d. h. der Burgersvektor liegt nicht in der Ringebene. Sie entstehen aus den Dipolen durch Abschnürungsreaktionen der Stufenversetzungen mit entgegengesetztem Vorzeichen des Burgersvektors. Das Vorkommen von Stufenversetzungsdipolen und die Generation von ganzen Reihen von Versetzungsschleifen war auch in plastisch deformiertem InP von LUYSBERG *et al.* [151] gefunden worden. Die HREM-Aufnahme eines Versetzungsdipoles in plastisch deformiertem Si zeigt Abb. 4.40. Die beiden Stufenversetzungen sind in Shockleysche Partialversetzungen aufgespalten und haben eine Aufspaltungsweite von 6 nm. Der Abstand zwischen den beiden Stufen beträgt ca. 14 nm. An den Partialversetzungen ist ein verschwommener Kontrast zu erkennen, wie er schon von BOURRET *et al.* berichtet wurde und der entweder mit dem Spannungsfeld oder dem Einbau von Punktdefekten zusammenhängt [22].

Bei Deformation in Vielfachgleitorientierung beobachtet man häufig das Auftreten von Dipolreihen senkrecht zu den Schraubenversetzungen (Abb. 4.41). Der Anteil der Schraubenversetzungen bei einer Verformungsrate von $1 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ liegt bei 25% und ist damit höher als bei Einfachgleitorientierung. Bei einer Verformungsrate von $1 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ war der Anteil etwa 10% und lag damit im Bereich, der für Einfachgleitorientierung gefunden worden war. Sehr langgestreckte Schraubenversetzungen, von denen Stufenversetzungsdipole an Ausbauchungen ausgezogen werden, sind in Abb. 4.41 a sichtbar. Diese Tatsache wurde auch bei der Verformung von Si konstatiert [106]. Es kommt bedingt durch die Schneidprozesse von Versetzungen gleichberechtigter Gleitsysteme zur Bildung von Versetzungsknoten und -knäuel (Abb. 4.41 b). Versetzungsreaktionen führen zum Auftreten von Lomer-Cottrell-Versetzungen.

5 Diskussion von Modellen der Punktdefektgeneration

5.1 Elementarmechanismen

Die herausragende Eigenschaft in den deformierten Halbleitermaterialien ist das Auftreten einer hohen Konzentration von Leerstellen, die stabilisiert werden durch die Anlagerung an Versetzungen bzw. durch die Bildung von Agglomerationen. Bemerkenswert ist außerdem, dass bei den stabilen Leerstellenclustern im Rahmen der Empfindlichkeit der verwendeten Positronenannihilation kein Wachstumsprozess der Cluster bei variierten Deformationsbedingungen beobachtet werden kann. Damit ergibt sich die Frage nach der Herkunft der Leerstellen.

Es erscheint möglicherweise naheliegend, von einer Emission von Punktdefekten in Folge des einfachen Kletterns von Stufenversetzungen auszugehen. Allerdings sollte dieser Prozess erst bei höheren Temperaturen und Spannungen vonstatten gehen. So haben WEERTMAN und WEERTMAN [270] die Änderung der Gleichgewichtskonzentration von Punktdefekten in der Nähe kletternder Versetzungen für das Hochtemperaturkriechen von Metallen berechnet. In Halbleitern wird i. a. die Entfestigungsstufe III der Spannungs–Dehnungs-Kurve mit Klettern von Versetzungen in Zusammenhang gebracht (Gl. 3.11 auf Seite 26). Bei moderaten Temperaturen kann am Beginn der plastischen Verformung ein Kletterbeitrag ausgeschlossen werden. CUITIÑO und ORTIZ [40] haben darauf hingewiesen, dass die Emission und die Absorption von Leerstellen keine gleichwahrscheinlichen Vorgänge sind. Eine auf der Versetzung eingebaute Leerstelle kann durch *Pipe-Diffusion* unverzüglich zu einem Sprung transportiert werden. Damit wird der Sprung lediglich verschoben und die Linienenergie ändert sich nicht. Die gesamte Energiebilanz ist aber positiv, da die Bildungsenergie der Leerstelle gewonnen wird. Auf der anderen Seite wird die Emission von Leerstellen damit unwahrscheinlich, wenn nicht der Energiegewinn durch den Abbau von Spannungen größer ist als die Bildungsenergie des Punktdefekts. Weiterhin ist beim Einbau von Punktdefekten im Versetzungskern zu berücksichtigen, dass in der Wechselwirkung mit Kinken und Rekonstruktionsdefekten energetisch günstige Konfigurationen entstehen können (Abschn. 2.2). Die reguläre Versetzungslinie ist somit eher eine Senke als eine Quelle von Leerstellen unter den hier betrachteten relativ niedrigen Temperaturen und Spannungen [164].

MOTT [169] war der erste, der ein Modell für eine gleitende Schraubenversetzung mit Sprüngen entwickelte. Die spätere theoretische Beschreibung stammt von BARRETT und NIX [13]. Für Schraubenversetzungen kommen Versetzungsschneidprozesse und Quergleiten als grundlegende Mechanismen zur Entstehung von Sprüngen in Frage. Beide Prozesse sind für eine Reihe von Materialien eingehend studiert worden [10, 16, 165, 265, 266, 285]. Einführende Darstellungen findet man bei HULL, BACON [92] und AMELINCKX [9]. Das Doppelquergleiten von Schraubenversetzungen erzeugt kurze Abschnitte auf der Quergleitebene, die in der Gleitrichtung der Schraube nicht folgen können. Beim Schneiden von Versetzungen werden Verschiebungen der Versetzungslinien erzeugt, die den Beträgen und Richtungen der Burgersvektoren entsprechen. Nach dieser Regel entsteht auf der Versetzung mit dem Burgersvektor \mathbf{b}_1 in Abb. 5.1 ein Sprung, auf der Versetzung mit \mathbf{b}_2 nicht. Je nach Orientierung der Burgersvektoren können die Verschiebungen in der Gleitebene liegen oder auch nicht und demzufolge Kinken oder Sprünge darstellen. Es lässt

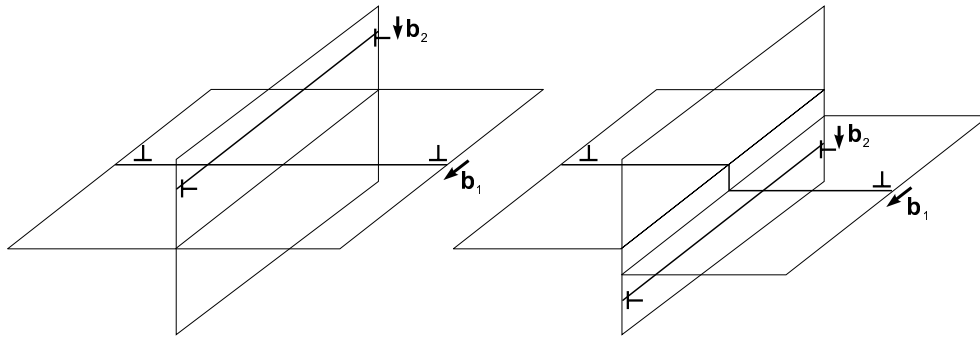


Abb. 5.1: Schneiden von Stufenversetzungen nach HULL und BACON [92]. Die Burgersvektoren \mathbf{b}_1 und \mathbf{b}_2 stehen senkrecht aufeinander. Nach der Abwärtsbewegung der Versetzung mit \mathbf{b}_2 entsteht auf der anderen Versetzung ein Sprung, der als Verschiebung in Richtung \mathbf{b}_2 aufgefasst werden kann. Umgekehrt erzeugt die Versetzung mit \mathbf{b}_1 auch eine entsprechende Verschiebung, die aber parallel zu der ersten Versetzung verläuft und folglich keinen Sprung produziert.

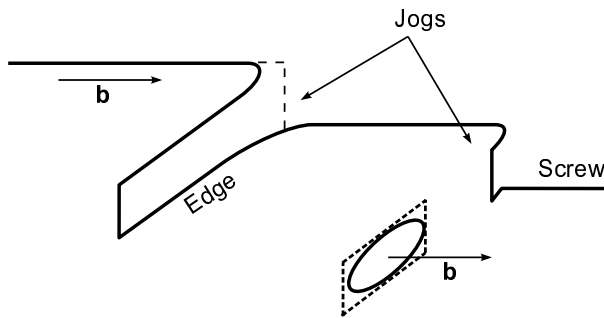


Abb. 5.2: Entstehen von Stufenversetzungsdipolen durch *Jog dragging*. Bei elementarer Sprunghöhe werden Leerstellen oder Zwischengitteratome emittiert. Bei teilweiser Annihilation von Dipolsegmenten entstehen prismaische Versetzungsringe [131].

sich leicht überlegen, dass die Sprünge bzw. Kinken, die auf diese Weise auf reinen Stufenversetzungen entstehen, immer der Bewegung der Versetzung folgen können, also gleitfähig sind. Dagegen werden beim Aufeinandertreffen von Schraubenversetzungen Segmente in Stufenorientierung erzeugt, die zwar entlang der Schraube leicht verschiebbar sind, aber sich nicht mehr konservativ mit dem Gleiten der Versetzung bewegen können. Je nach Sprunghöhe produziert die gleitende Schraubenversetzung verschiedene Resultate. Bei elementarer Höhe werden Punktdefekte emittiert. Bei einem Supersprung* entstehen keine Leerstellen oder Zwischengitteratome mehr, sondern ein Stufenversetzungsdipol wird aufgezogen (Abb. 5.2). Eine teilweise Annihilation des Dipols liefert prismaische Versetzungsringe und führt zur Emission von Punktdefekten. Bei sehr hohen Sprüngen wird die anziehende Wechselwirkung der beiden Stufenversetzungen schwach, und sie können sich unabhängig voneinander bewegen. Der Supersprung stellt dann eine einarmige Frank–Read-Quelle dar. Ein ähnliches Bild ergibt sich beim Doppelquergleiten der Schraubenversetzung.

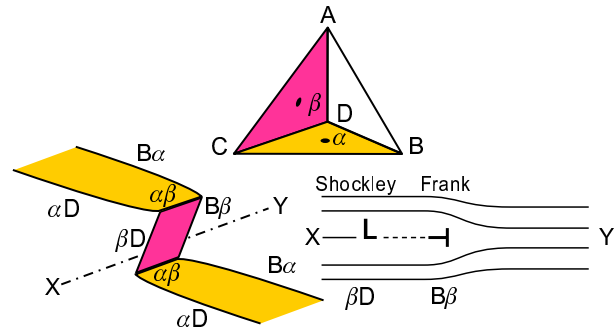
Aus der Geometrie des Schneidprozesses lässt sich bestimmen, wieviel Punktdefekte gebildet werden. AMELINCKX [9] berechnet die Zahl der Punktdefekte pro Längeneinheit als

$$N_{\text{jd}} = \frac{1}{\Omega} \frac{\xi_1 \cdot \mathbf{u} \times \xi_2}{|\xi_1 \cdot \mathbf{u} \times \xi_2|} \mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{u} \times \mathbf{b}_2 \quad (5.1)$$

(Ω Atomvolumen, \mathbf{u} Bewegungsrichtung der Versetzung mit dem Burgersvektor \mathbf{b}_1 und dem Linienvektor ξ_1 , \mathbf{b}_2 und ξ_2 Burgersvektor und Linienrichtung der zweiten Versetzung).

*Diese Sprünge haben in Verbindungshalbleitern entsprechend ihrem unterschiedlichen Vorzeichen eine α - und β -Polarität.

Abb. 5.3: Struktur eines aufgespaltenen Versetzungssprungs auf einer Schraubenversetzung mit Burgersvektor \mathbf{DB} [135]. Die Sprungebene ist unter einem spitzen Winkel zur Gleitebene. Das Thompsonstetraeder zeigt die entsprechenden Gleitebenen und Burgersvektoren. Der Schnitt entlang XY im rechten Teil illustriert die Aufspaltung des Sprungs in eine Shockleysche und Franksche Partialversetzung mit den Burgersvektoren $\beta\mathbf{D}$ und $\mathbf{B}\beta$.



Der erste Faktor bestimmt das Vorzeichen, der zweite über das Volumen $\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{u} \times \mathbf{b}_2$ die Zahl der Defekte. Diese Formel gilt ganz allgemein für Stufen-, Schrauben- und gemischte Versetzungen. Bei positivem Vorzeichen werden Zwischengitteratome emittiert, bei negativem Leerstellen.

In Materialien mit kubisch flächenzentriertem Gitter sind die Vorgänge der Sprungbildung und Punktdefektemission insofern komplizierter, da die Aufspaltung der Versetzungen in Partialversetzungen berücksichtigt werden muss. Die gängige Vorstellung ist, dass sich die Versetzungen beim Schneiden zunächst unter Wirkung der elastischen Verzerrungsfelder einschnüren. Es folgt dann die Aufspaltung der Versetzung in der Sprungebene. Die Art der beteiligten Partialversetzungen ist abhängig vom Charakter der Versetzung und der Orientierung des Sprungs [85]. In Abb. 5.3 ist ein Beispiel für die Struktur eines aufgespaltenen Sprungs auf einer Schraubenversetzung wiedergegeben. Das Abknicken der dissoziierten Versetzungen in die Sprungebene passiert entlang von *Stair-rod*-Versetzungen vom Typ $a/6\langle 110 \rangle$. Die Aufspaltung des Sprungs erfolgt in der Sprungebene in eine Shockleysche und eine Franksche Partialversetzung. Die Franksche Versetzung mit einem Burgersvektor vom Typ $a/3\langle 111 \rangle$ ist eine reine Stufe und ist die punktdefektproduzierende Versetzung*. Beim Abbau der Halbebene entlang XY werden Zwischengitteratome emittiert, im entgegengesetzten Fall Leerstellen. In einer eindrucksvollen molekulardynamischen Simulation konnten ZHOU *et al.* [285] die Emission von Leerstellen und kurzen Leerstellenketten an solchen aufgespaltenen Versetzungssprüngen in Kupfer demonstrieren.

Die Kletterbewegung der Frankschen Partialversetzung impliziert in der Diamant- oder Zinkblendestruktur, dass für die Wiederherstellung einer äquivalenten Versetzungsposition immer die Emission oder Absorption von Punktdefekten beider Untergitter erforderlich ist. Das bedeutet für GaAs, dass entweder immer V_{Ga} und V_{As} oder I_{Ga} und I_{As} erzeugt werden[†]. Das *Jog dragging* sollte also in GaAs bei Sprüngen mit dem entsprechenden Vorzeichen nach Gl. 5.1 in eine Kette von Doppelleerstellen resultieren. Zieht man die Resultate von Abb. 4.11 auf Seite 50 in Betracht, so ergibt sich, dass diese Ketten weniger stabil als dreidimensionale Cluster sind. Es ist also wahrscheinlich, dass sich ein Großteil der emittierten Vakanzen unmittelbar an der gleitenden Schraubenversetzung durch atomare Platzwechsel entlang der Kette so lange umordnen, bis eine stabile Clusterkonfiguration erreicht ist. Neben der im Abschn. 4.4.1 gegebenen Begründung der Ladungsneutralität für die Wahl von Leerstellenaggregaten mit gleicher Zahl V_{Ga} und V_{As} , liefert also auch die Herkunft der Leerstellen aus dem *Jog dragging* eine Begründung für diese Herangehensweise. Im Ergebnis des Gleitens von sprungbehafteten Schraubenversetzungen bilden sich also vornehmlich stabile Leerstellenagglomerate. Die Existenz von Doppelleerstellen oder kurzen Leerstellenketten ist nicht auszuschließen. Eine kleine Aktivierung reicht aber aus, um sie entweder auf der Versetzung einzubauen oder in einen stabilen Leerstellencluster zu überführen. Analoge Aussagen gelten auch für Si, wobei die Größe der stabilen Leerstellencluster eine andere

*In Abb. 5.3 ist für alle Burgersvektoren die Thompsonnotation gewählt worden. Es gilt $\mathbf{AB} = a/2\langle 110 \rangle$, $\mathbf{A}\alpha = a/3\langle 111 \rangle$, $\mathbf{B}\alpha = a/6\langle 112 \rangle$, $\alpha\beta = a/6\langle 110 \rangle$.

[†]Die Absorption von Punktdefekten erfordert eine Übersättigung im Kristall und soll hier im Zusammenhang mit der plastischen Deformation nicht betrachtet werden.

ist.

Die Emission von Zwischengitteratomen über den Abbau der Halbebene der Frankschen Partialversetzung ist ebenso wahrscheinlich wie die Leerstellenbildung. Ein Paar von Sprüngen mit entgegengesetztem Vorzeichen, wie von WIDER *et al.* [273] beschrieben, kann entweder durch Gleitbewegung entlang der Versetzung annihilieren, oder führt zur simultanen Emission von Leerstellen und Zwischengitteratomen. Auch bei den *Interstitials* gilt, dass sie in beiden Untergittern erzeugt werden. Die hohe Beweglichkeit der Eigenzwischengitteratome in Halbleitern führt dazu, dass Sekundärreaktionen auftreten können. Neben der Rekombination der Frenkelpaare $I_{\text{Ga}} + V_{\text{Ga}} \rightarrow 0$ und $I_{\text{As}} + V_{\text{As}} \rightarrow 0$ können *Antisite*-Defekte entsprechend $I_{\text{Ga}} + V_{\text{As}} \rightarrow \text{Ga}_{\text{As}}$ und $I_{\text{As}} + V_{\text{Ga}} \rightarrow \text{As}_{\text{Ga}}$ gebildet werden. Die Positronen- und ESR-Messungen konnten den ersteren, FTIR-Absorption und ESR den zweiten Defekttyp nachweisen. Eine weitere Möglichkeit für Reaktionen der Zwischengitteratome stellt die Bildung von stabilen Clustern von *Interstitials* bzw. die Zusammenlagerung zu Frankschen Stapelfehlerringen vom Zwischengittertyp dar. Solche Ringe waren in einigen TEM-Aufnahmen gefunden worden. Durch die möglichen Sekundärreaktionen ist die aus den spektroskopischen Untersuchungen bestimmte Leerstellendichte nicht identisch mit der ursprünglichen Zahl der gebildeten Vakanzan. Aus den parallelen Verlauf der bestimmten Leerstellen- und *Antisite*-Konzentrationen (Abb. 4.15 auf Seite 55 und Abb. 4.16 auf Seite 56) kann aber davon ausgegangen werden, dass sich ein stationärer Zustand zwischen den genannten Reaktionen einstellt.

5.2 Punktdefektbilanz in deformierten Materialien

Wenn man von einem Generationsmechanismus von Leerstellen über das *Jog dragging* ausgeht, kann man eine Ratengleichung für die Konzentration der so erzeugten Überschussdefekte aufstellen. Die Änderung der Überschussleerstellenkonzentration ergibt sich entsprechend

$$\dot{c}_{\text{V}} = \dot{c}_{\text{V}}^{\text{f}} - \dot{c}_{\text{V}}^{\text{a}} \quad (5.2)$$

aus einem Bildungs- und einem Vernichtungsterm $\dot{c}_{\text{V}}^{\text{f}}$ und $\dot{c}_{\text{V}}^{\text{a}}$. Es soll angenommen werden, dass die Bildung entlang von Sprüngen an Schraubenversetzungen erfolgt. Die thermische Konzentration von Sprüngen [85]

$$c_{\text{j}} = \frac{Gb^3}{4\pi(1-\nu)k_{\text{B}}T},$$

die bei der Hochtemperaturdeformation von Metallen in die Betrachtung einbezogen werden muss [166], soll hier vernachlässigt werden. Als ein empirischen Ansatz für die Generation durch *Jog dragging* und die Annihilation von Leerstellen an Versetzungen während der plastischen Deformation (Leipner *et al.* 1994 [139]) ergibt sich

$$\dot{c}_{\text{V}} = \frac{\delta_{\text{s}} \nu \rho_{\text{d}}}{E_{\text{f}}} - \xi \rho_{\text{d}} c_{\text{V}} D_{\text{V}}.$$

Der Faktor δ_{s} im Bildungsterm $\dot{c}_{\text{V}}^{\text{f}}$ berücksichtigt, dass nur Sprünge auf Schraubenversetzungen – und hier auch nur diejenigen mit dem entsprechenden Vorzeichen nach Gl. 5.1 – Leerstellen erzeugen. ξ im Annihilationsterm $\dot{c}_{\text{V}}^{\text{a}}$ ist die Effektivität der Versetzungen als Leerstellensenke. Die Versetzungsgeschwindigkeit wird mit Gl. 3.2 auf Seite 21 angesetzt. Daraus folgt für den stationären Fall

$$c_{\text{V}} = \frac{B\tau_{\text{s}}^m}{\xi D_{\text{V}}^0} \frac{\delta_{\text{s}}}{E_{\text{f}}} \exp\left(-\frac{E_{\text{m}} - U}{k_{\text{B}}T}\right) \quad (5.3)$$

mit der Diffusionskonstanten der Leerstellen

$$D_{\text{V}} = D_{\text{V}}^0 \exp\left(-\frac{E_{\text{m}}}{k_{\text{B}}T}\right)$$

(D_V^0 Vorfaktor, E_m Migrationsenergie).

Aus Gl. 5.3 ergibt sich, dass die erzeugte Leerstellenkonzentration nicht von der Dichte der Versetzungen abhängt. Trotz der Unsicherheiten der numerischen Faktoren kann man ableiten, dass die Diffusionskonstante der Leerstellen einen entscheidenden Einfluss hat. Mit den von SIETHOFF durch Deformation bestimmten Größen (Tab. 3.3 auf Seite 33) ist deren Diffusivität in dem untersuchten Temperaturbereich in Si höher als in GaAs. Die experimentell gefundene geringere Dichte von agglomerierten Leerstellen könnte also mit einer höheren Rückdiffusionswahrscheinlichkeit der Leerstellen zu den Versetzungen zu tun haben.

Einen ähnlichen Ansatz wie Gl. 5.2 hatten bereits früher MECKING und ESTRIN [164] vorgestellt. Sie führen den Generationsterm als ein Energieanteil χ an der plastischen Verformungsenergie ein, der in die Bildung von Leerstellen gesteckt wird,

$$\dot{c}_V^f = \frac{\chi \tau_s \dot{\epsilon}}{E_f}. \quad (5.4)$$

Die Leerstellenbildungsenergie $E_f = \beta G b^3$ ist sicherlich von derselben Größenordnung wie die thermische Leerstellenenergie. Damit ist der Größenfaktor $\beta \approx 6$ für GaAs. Die Annihilation der Leerstellen geschieht über die Diffusion zu Senken mit dem Abstand l und es ergibt sich

$$\dot{c}_V^a = \frac{D_V}{l^2} \Delta c. \quad (5.5)$$

Nimmt man ausschließlich Versetzungen als Leerstellensenken an, folgt $l^2 = 1/\rho_d$. Für den stationären Fall ist zunächst

$$\frac{\Delta c}{c_V} = \frac{\chi \tau_s \dot{\epsilon}}{\beta G} \frac{l^2}{D_{sd}}$$

unter Einführung des Selbstdiffusionskoeffizienten (Gl. 3.12 auf Seite 26) $D_{sd} = c_V b^3 D_V$. Aus Gl. 3.8 auf Seite 24 ergibt sich, dass die Versetzungsdichte während der Deformation einen Maximalwert von $(\tau_s/G)^2$ nicht überschreiten kann. Damit kann man schreiben

$$\frac{\Delta c}{c_V} = \frac{\chi \dot{\epsilon} b^2 G}{\beta D_{sd} \tau_s}. \quad (5.6)$$

Die Temperaturabhängigkeit dieser Überschussleerstellenkonzentration ergibt sich hier im Wesentlichen aus dem Temperaturverlauf des Selbstdiffusionskoeffizienten. Sie wurde mit den Daten aus Tab. 3.3 exemplarisch für GaAs und InP berechnet und ist in Abb. 5.4 für eine Spannung von 10 MPa und eine Deformationsrate von $1 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ dargestellt*. Für beide III-V-Halbleiter ergibt sich ein identischer Verlauf, wenn die Deformationstemperatur auf die Schmelztemperatur normiert wird. Da es nur um die Abschätzung des prinzipiellen Verlaufs geht, wurde der unbekannte Faktor χ nicht berücksichtigt.

Der damit phänomenologisch begründbare Anstieg der Leerstellenkonzentration mit sinkender Deformationstemperatur wurde auch experimentell gefunden. Allerdings wird beim Unterschreiten einer bestimmten Temperatur ein Absinken beobachtet (Abb. 4.18 auf Seite 58). Die o. a. Beziehungen beschreiben offenbar diesen Bereich nicht mehr richtig. Man kann für Gl. 5.3 annehmen, dass der Faktor δ_s als der Anteil der Sprünge, die Leerstellen produzieren, sich mit der Temperatur ändert. So könnte aus einer kleineren Gleitgeschwindigkeit der Schraubenversetzung bei niedrigen Temperaturen eine größere Beweglichkeit der Sprünge entlang der Versetzung resultieren und damit eine größere Wahrscheinlichkeit der Annihilation von Sprüngen mit unterschiedlichem Vorzeichen.

*Neben den Diffusionsdaten von Tab. 3.3 wurde verwendet: für GaAs: $G = 4,85 \cdot 10^{10} \text{ Pa}$, $b = 4 \cdot 10^{-10} \text{ m}$, $T_m = 1511 \text{ K}$, für InP: $G = 3,6 \cdot 10^{10} \text{ Pa}$, $b = 4,15 \cdot 10^{-10} \text{ m}$, $T_m = 1331 \text{ K}$.

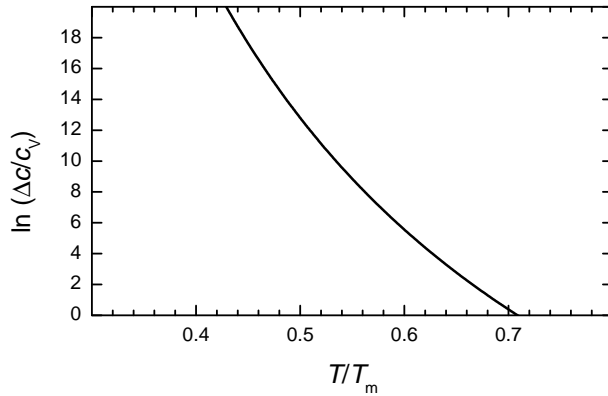


Abb. 5.4: Berechnete Überschussleerstellenkonzentration in GaAs und InP in Abhängigkeit von der Deformationstemperatur nach Gl. 5.6 bei einer Verformungsrate von $1 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ und einer Spannung von 10 MPa mit Selbstdiffusionsdaten aus Tab. 3.3

Gl. 5.6 gibt eine Proportionalität zwischen generierter Leerstellenkonzentration und Verformungsrate an, die mit der Orowanbeziehung auch aus Gl. 5.3 folgt. Beide Gleichungen zeigen keine explizite Abhängigkeit von der Versetzungsdichte. In der von MECKING und ESTRIN [164] abgeleiteten Beziehung wird von einem stationären Zustand ausgegangen, der im Realfall nicht erfüllt ist. Die Versetzungsdichte steigt mit der Verformungsrate, und man kann demzufolge eine Proportionalität von $\Delta c \propto \dot{\epsilon}^{1-1/m}$ erwarten. In Gl. 5.3 kann die Senkeneffektivität ξ eine Funktion der Verformungsrate bzw. Versetzungsdichte sein und damit Abweichungen vom linearen Zusammenhang bewirken. Generell ist zu bemerken, dass Gl. 5.5 von einer Annihilationsreaktion erster Ordnung ausgeht. Ein allgemeiner Ansatz müsste lauten

$$\dot{c}_V^a = K \Delta c^s$$

(K Reaktionskonstante, s Reaktionsordnung),

woraus ebenfalls Abweichungen von der direkten Proportionalität folgen würden.

In den experimentellen Ergebnissen war für niedrige Verformungsraten in der log-log-Darstellung der Defektdichte gegen die Rate ein Anstieg zwischen 0,2 und 0,7 gefunden worden, der mit den theoretischen Ansätzen zu vergleichen wäre. Bei höheren Raten ergab sich ein geringerer Anstieg. Schließlich wurde bei Mehrfachgleitorientierung eine Konstanz der Leerstellenzahl mit Variation der Deformationsrate gefunden (Abb. 4.17 auf Seite 56). Das deutet auf eine Veränderung im Deformationsmechanismus hin. Gl. 5.3 geht von einer Konstanz des Faktors δ_s aus, die aber nicht gegeben ist. In den TEM-Aufnahmen war gefunden worden, dass der Anteil von Schraubenversetzungen bei Mehrfachgleitung höher ist bei geringeren Verformungsraten als bei höheren. Bei der Einfachgleitorientierung blieb der Anteil von Störgleitprozessen auf sekundären Gleitebenen nicht konstant. Damit variiert auch der Anteil leerstellenproduzierender Versetzungen δ_s .

Aus der Bildungsrate der Leerstellen (Gl. 5.4) im Modell von MECKING und ESTRIN [164] gewinnt man durch Integration

$$c_V = \frac{\chi}{E_f} \int \tau_s(\epsilon) d\epsilon.$$

Das würde bedeuten, dass nur im Falle des stationären Kriechens, wenn τ_s konstant ist, sich eine lineare Abhängigkeit der Defektdichte vom Verformungsgrad ergibt. Tatsächlich wurde diese Abhängigkeit aber auch bei dynamischer Verformung, zumindest für kleine Verformungsgrade mit den POLIS-Ergebnissen gefunden. Die Resultate der Absorptions- und ESR-Messungen zeigten sigmoidale Verläufe.

Setzt man die Verformungsarbeit als Integral der Spannungs-Dehnungs-Kurve in Beziehung zur Dichte der gebildeten Punktdefekte, kann man den Anteil χ ausrechnen, der in eine Leerstellenproduktion resultiert. Es ergibt sich für GaAs, das in [213]-Richtung deformiert wurde, ein Wert von ca. 7 % [91]. Eine Korrelation zwischen Deformationsarbeit und Punktdefektkonzentration ist

aber nur dann sinnvoll, wenn der Mechanismus der Versetzungsbewegung sich während der Verformung nicht ändert. Bei Verformung in [110]-Richtung ergibt sich, dass der Anteil der Arbeit, der zur Punktdefektproduktion aufgewendet wird, mit wachsendem Verformungsgrad ändert. Das bedeutet aber, dass das Modell von MECKING und ESTRIN [164] nur eingeschränkte Gültigkeit bei der dynamischen Verformung hat.

Ein mikroskopischer Zugang zur Ableitung der Punktdefektbilanz bei der plastischen Verformung wurde von MOTT, BARRETT, NIX und POPOV *et al.* [169, 13, 196] geliefert. Der Hintergrund ihrer theoretischen Betrachtungen ist die Zahl der Punktdefekte, die pro Längeneinheit des Gleitweges der Schraubenversetzung erzeugt werden, wenngleich für den Einzelsprung zumeist einfachere Annahmen als Gl. 5.1 gemacht wurden. BARRETT und NIX stellen eine Berechnung der Zahl der Leerstellen an, die eine Versetzung auf einem bestimmten Gleitweg erzeugt. Damit ergibt sich mit dem Anteil der beweglichen Versetzungen ρ_m^j , die Punktdefekte erzeugen,

$$c_V = \frac{\Delta l \rho_m^j}{l_{\text{tot}} b^2 m_s} \varepsilon \quad (5.7)$$

(Δl Gleitweg der Versetzungen, die Leerstellen produzieren, l_{tot} gesamter Gesamtgleitweg beweglicher Versetzungen).

Bei konstanter Dichte $\rho_m^j = \delta_s \rho_d$ folgt ein linearer Zusammenhang zwischen Leerstellendichte und Deformationsgrad. Geht man von einer Leerstellendichte von $2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ bei 10 % Verformung aus, kann man die mittlere Sprungdichte nach Gl. 5.7 abschätzen. Es ergibt sich bei einem angenommenen Verhältnis von $\rho_m^j / \rho_m = 0,01$ ein Sprungabstand von einigen Mikrometern, der ausreicht, um diese Leerstellendichte zu produzieren.

Der Ansatz von MOTT [169] oder POPOV *et al.* [196] betrachtet die Generation von Sprüngen als Resultat der Schneidprozesse mit Waldversetzungen in Konkurrenz zur Annihilation von Sprüngen durch Bewegung entlang der Versetzungslinie. Damit erhält MOTT für die auf die Abgleitung im Gleitsystem (a_s) bezogene Konzentration gebildeter Leerstellen

$$\frac{\partial c_V}{\partial a_s} = \frac{b}{4} \sqrt{2\rho_f}$$

(ρ_f Waldversetzungsdichte).

Der Ansatz von POPOV *et al.* ist komplizierter, da er die Bewegung der Sprünge auf der Versetzung detaillierter betrachtet. Das Verhältnis der Gleitgeschwindigkeit der Schraubenversetzung zur Geschwindigkeit der Sprünge auf der Versetzung v_j entscheidet, ob Punktdefekte generiert werden oder nicht. Für $v \leq v_j b / \lambda_j$ werden keine Punktdefekte emittiert (λ_j mittlerer Abstand der Sprünge auf der Versetzung). Im umgekehrten Fall erfolgt Punktdefektgeneration in der Zeit $t = \lambda_j / v_j$ bevor die Sprünge annihilieren können. Die Versetzung legt in dieser Zeit den Gleitweg Δl zurück. Es ergibt sich auf der Schraubenversetzung eine Sprungdichte von

$$c_j = \rho_f^j \Delta l$$

(ρ_f^j Dichte sprungbildender Waldversetzungen).

Diese Sprungzahl ist mit der Zahl der Leerstellen oder Zwischengitteratome zu multiplizieren, die pro Sprung generiert werden, wobei aber ein einfacherer Ansatz als Gl. 5.1 verwendet wurde. Es ergibt sich damit eine Konzentration der gebildeten Leerstellen oder Zwischengitteratome, die auf eine Einheitsabgleitung bezogen wird,

$$\frac{\partial c_V}{\partial a_s} = \frac{1}{2} \rho_f^j b (v/v_j)^{1/2}.$$

Unter Einbeziehung der Orowanbeziehung ergibt sich

$$\frac{\partial c_V}{\partial a_s} = \frac{1}{2} \left(\frac{\rho_f^j b a_s}{\rho_m v_j} \right)^{1/2}. \quad (5.8)$$

Eine analoge Beziehung gilt für Zwischengitteratome. Unter Annahme einer von der Verformungsrate unabhängigen Dichte ρ_f^j , sollte also die Konzentration der pro Abgleitung gebildeten Leerstellen oder Zwischengitteratome proportional der Wurzel der plastischen Dehnungsrate sein. Diese Voraussetzung wird schwerlich erfüllt sein, da die Zusammenlagerungsreaktion der Sprünge zu Supersprüngen von der Versetzungsgeschwindigkeit abhängt. Diese Supersprünge erhöhen aber die Dichte von Waldversetzungen, da sie als Frank–Read-Quellen in sekundären Gleitebenen aktiv sind. Die Temperaturabhängigkeit der Geschwindigkeit der Sprünge auf der Schraubenversetzung v_j bestimmt die Temperaturabhängigkeit der Leerstellenkonzentration in Gl. 5.8. Wird eine Arrheniusabhängigkeit ähnlich wie für die Ausbreitungsgeschwindigkeit von Kinken angenommen, folgt eine Temperaturabhängigkeit wie in Gl. 5.6, d. h. die Dichte sinkt mit steigender Temperatur.

6 Aggregation von Fremdatomen an Versetzungen

Versetzungen sind keine einfachen Linien, die durch den Kristall gespannt werden, sondern stehen in enger Beziehung zu der Punktdefektpopulation. Die elektrische und optische Wirksamkeit von Versetzungen in Halbleitern wird zu einem Großteil von intrinsischen und extrinsischen Punktdefekten bestimmt, die entweder im Kern oder in der Umgebung der Versetzungen angelagert sind. Die Wechselwirkung zwischen Versetzungen und Fremdatomen spielt eine wesentliche Rolle bei der Getterung von Verunreinigungen während der thermischen Materialbehandlung. So wurde als Modellfall ausführlich die Golddiffusion in versetzungsreichem Si untersucht [190]. Als Resultat konnten Ausscheidungen auf Versetzungen nachgewiesen werden. Die daraus resultierende Goldumverteilung an Versetzungen führt über die Beeinflussung der Konzentration von Zwischengitteratomen zu einer beachtlichen Stimulation der interstitiell-substitutionellen Diffusion nahe der Versetzungen. Es wird deutlich, dass das Aggregationsverhalten von Fremdatomen einen bedeutsamen Einfluss auf die strukturellen Punktdefekte hat und umgekehrt beeinflussen vorhandene intrinsische Punktdefekte wiederum die Diffusion von Fremdatomen. Während der Einfluss von Versetzungen in Elementhalbleitern in einem Abbau von Nichtgleichgewichtskonzentrationen während des Diffusionsprozesses besteht, ist es nun interessant, die Rolle von Versetzungen in einem Verbindungshalbleiter wie GaAs in der komplexen Wechselwirkung zwischen Fremdatomen und intrinsischen Punktdefekten zu studieren.

6.1 Experimente zur Wechselwirkung von Versetzungen und Fremdatomen

In Deformationsexperimenten wurden Versetzungen in GaAs erzeugt, um den Mechanismus der Anlagerung von eindiffundierten Fremdatomen an ihnen studieren zu können. Hierbei wurde einerseits das auf dem Kationenuntergitter eingebaute Kupfer, andererseits das auf Anionenplätzen eingebaute Schwefel für Modellexperimente genutzt. Frische, undekorierte Versetzungen haben in GaAs einen verschwindend kleinen Dunkelkontrast im Katodolumineszenzbild (Abschn. 2.3.2). Um wohldefinierte Einzelversetzungen untersuchen zu können, ist ein Kompressionsexperiment weniger geeignet. Eine günstige Konfiguration kann durch Ritzexperimente mit einer Diamantspitze in bestimmten kristallographischen Richtungen erzielt werden. Die auf diese Weise erzeugte Versetzungsdichte war gering genug, um sie mittels Katodolumineszenz abzubilden und spektroskopisch zu untersuchen. Die Bewegung der Versetzung aus ihren Quellen am Ritz bis zu einer Distanz von etwa $150\ \mu\text{m}$ wurde durch eine kurze Wärmebehandlung der Probe bei $623\ \text{K}$ für $10\ \text{min}$ thermisch aktiviert. Die Struktur der sich aus dem Ritz entwickelnden Versetzungsschleifen wurde mittels TEM untersucht (Surowiec et al. 1989 [255]) und ist schematisch in Abb. 6.1 dargestellt. Es entwickeln sich langgestreckte hexagonale Versetzungen parallel zur (001)-Oberfläche auf $(1\bar{1}1)$ - und $(\bar{1}11)$ -Gleitebenen. Schnelle α -Versetzungen bewegen sich vom Ritz fort und ziehen lange Schraubensegmente hinter sich her. Eine Versetzungsgeneration passiert auch auf (111) - und $(1\bar{1}\bar{1})$ -Ebenen. Allerdings bewegen sich die Versetzungen hier ausschließlich in eine Gleitrichtung geneigt zur Oberfläche und sind damit für eine CL-Inspektion weniger geeignet. Die

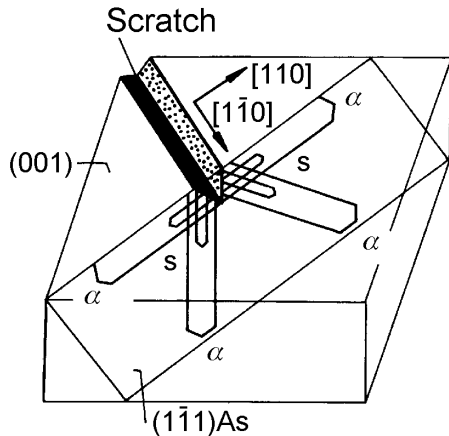


Abb. 6.1: Versetzungsschleifen an einem Ritz auf einer (001)-Oberfläche von GaAs. Mit der Orientierung des Ritzes in $[1\bar{1}0]$ -Richtung werden ausgedehnte Schleifen mit führenden $60^\circ\alpha$ -Versetzungen und langen Schraubensegmenten auf der $(1\bar{1}1)$ - und $(\bar{1}11)$ -Ebene gebildet. Nur eine Gleitebene ist der Übersicht halber in dem Schema eingezeichnet (Leipner et al. 1999 [143]).

so hergestellte Konfiguration von Versetzungen bedeutet, dass in der Katodolumineszenz ein Gemisch aus 60° - und Schraubenversetzungen abgebildet wird. Diese Versetzungen wurden neben der CL-Untersuchung mittels TEM charakterisiert.

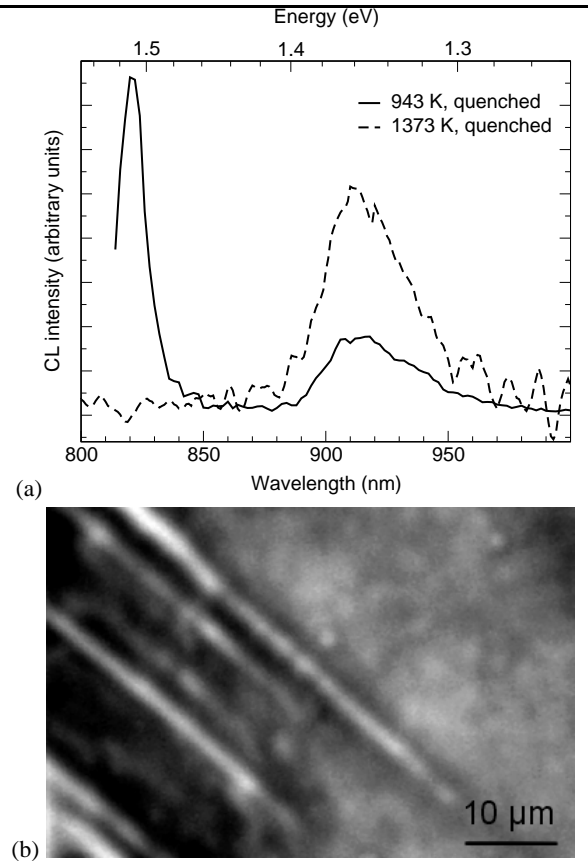
Nach der Versetzungserzeugung durch Ritzen wurden Eindiffusionsexperimente mit Kupfer oder Schwefel unter kontrollierten Bedingungen vorgenommen. Im Falle des Kupfers wurde eine 50 nm-Schicht auf die GaAs-Probe aufgedampft und Temperungen in einer verschlossenen Quarzampulle bei verschiedenen Temperaturen unter einem Arsendampfdruck von 1 bar vorgenommen. Die Glühzeiten lagen zwischen 60 min für eine Temperatur von 973 K und 30 min für 1373 K. Der Dampfdruck in der geschlossenen Ampulle wurde in einem Zweizonenofen mit einer entsprechenden Temperatur der As-Quelle realisiert. Bei den Schwefeleindiffusionsexperimenten wurde eine maximale Konzentration von $5 \mu\text{g cm}^{-3}$ in die Ampulle hinzugegeben, um die Bildung von GaS an der Oberfläche zu vermeiden. Um diese geringen Mengen handhaben zu können, wurde das Schwefel in Benzol gelöst. Eine ausführliche Darstellung der Technik der durchgeführten Diffusionsexperimente erfolgte durch SCHOLZ [219]. Als Probenmaterial wurde für die Kupferdiffusion LEC GaAs:Si mit einer Ladungsträgerdichte von $2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ und für die Schwefeldiffusion undotiertes HB-GaAs* verwendet.

Die in dieser Weise präparierten Proben wurden mit verschiedenen elektronenmikroskopischen Techniken charakterisiert. Im Rasterelektronenmikroskop TESLA BS300 wurden nach Politur der Proben die CL-Spektren gemessen und CL-Verteilungsbilder aufgenommen. Das Mikroskop ist mit einem Heliumkühltsch und einem Oxford MonoCL-System ausgestattet. Die Spektren wurden mit einem auf 77 K gekühlten Ge-Detektor registriert und mit der entsprechenden Empfindlichkeitskurve korrigiert. Um die Zusammensetzung von Agglomeraten zu untersuchen, wurde eine energiedispersive Röntgenmikroanalyse (EDX) in einem Rastertransmissionselektronenmikroskop (STEM) VG HB 501 UX mit einer Beschleunigungsspannung von 100 kV durchgeführt. Weiterhin erfolgte eine Charakterisierung der Defektstrukturen im Höchstspannungselektronenmikroskop JEM 1000 und in einem bei 400 kV arbeitendem Transmissionselektronenmikroskop JEM 400 EX.

Das Resultat der CL-Untersuchungen zweier bei verschiedenen Temperaturen kupferdiffundierten GaAs-Proben ist in Abb. 6.2 zu sehen. Eine dominierende Lumineszenzbande nach Diffusionstemperatur bei 943 K liegt bei 1,36 eV. Sie wurde bereits früher gefunden und dem Cu_{Ga} -Akzeptor zugeordnet [172]. In der bei höheren Temperaturen behandelten Probe taucht die bandkantennahe Lumineszenz bei 1,51 eV nicht mehr auf. Das panchromatische CL-Bild für diese Temperatur repräsentiert demzufolge direkt die Verteilung von Kupfer. Die Versetzungen sind hell und von einer dunklen Bande umgeben, was einem Bereich mit Kupferanreicherung und einen

*HB horizontal Bridgman

Abb. 6.2: Katodolumineszenzuntersuchungen an kupferdekorierten Versetzungen in GaAs [143]. (a) CL-Spektren bei 77 K nach Kupfer-eindiffusion bei zwei verschiedenen Temperaturen. (b) Dekorierter Versetzungen mit Hellkontrast und dunkler Umgebung nach Cu-Eindiffusion bei 1273 K. Panchromatisches CL-Bild bei 10 K [143].



mit Kupferverarmung entspricht. Die Ausdehnung der gesamten Zone mit geänderter Kupferkonzentration liegt bei 2 bis 5 μm . Eine hohe Zahl von Ausscheidungen wird auf den Versetzungen gefunden (Abb. 6.3). Der Durchmesser dieser Ausscheidungen liegt bei 20 – 40 nm bei einem mittleren Abstand von 200 nm. Einige wenige Ausscheidungen wurden in der Matrix fern von Versetzungen gefunden.

Die in Abb. 6.2 und 6.3 gezeigten Ergebnisse wurde mit Proben erzielt, die nach der Diffusion schnell auf Raumtemperatur abgekühlt wurden. Die Abkühlrate wurde zu 350 K/s abgeschätzt. Bei einer wesentlich langsameren Abkühlung mit einer Rate von 0,1 K/s ergab sich ein geändertes Bild der Defektstruktur. Die Versetzungen erscheinen jetzt ausschließlich in einem starken Dunkelkontrast in der Katodolumineszenzabbildung. Ein typisches TEM-Bild einer solchen Probe ist in Abb. 6.4 a zu sehen. Die Versetzungen sind von einem Schlauch von kleinen Versetzungsschleifen umgeben, die sich mit der *inside/outside*-Kontrastregel als Frank'sche Stapelfehlerringe zumeist vom Zwischengittertyp identifizieren lassen. Fern von den Versetzungen bilden diese kleinen Versetzungsringe Kolonien. Diese Kolonien konnten in einer 1 : 1-Korrelation zu dunklen Bereichen im CL-Bild zugeordnet werden. Auf den Versetzungen selbst werden wieder Ausscheidungen gefunden (Abb. 6.4 b).

Die mittels EDX gemessene Zusammensetzung einer versetzungsgebundenen Ausscheidung in einer bei 1373 K diffusionsgetemperten und schnell abgekühlten GaAs-Probe ist in Abb. 6.5 wiedergegeben. Die direkt bestimmte Konzentration von Ar, Cu und Ga entspricht jedoch nicht der tatsächlichen Zusammensetzung der Ausscheidung, da diese nur einen Teil des durch den Elektronenstrahl angeregten Volumens einnimmt. Um den Anteil aus der Matrix und dem Partikel zu separieren, wurden die Konzentrationen der drei möglichen Bestandteile angepasst entsprechend der Beziehung

$$c_x = \frac{V_p}{V} c_x^p + \frac{V - V_p}{V} c_x^m \quad (6.1)$$

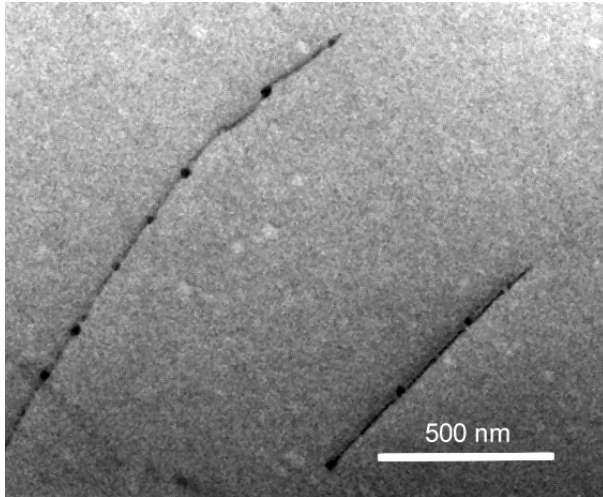


Abb. 6.3: Bildung von Ausscheidungen auf frischen Versetzungen in GaAs nach Kupferdiffusion bei 1373 K und schneller Abkühlung. STEM-Hellfeldabbildung [143].

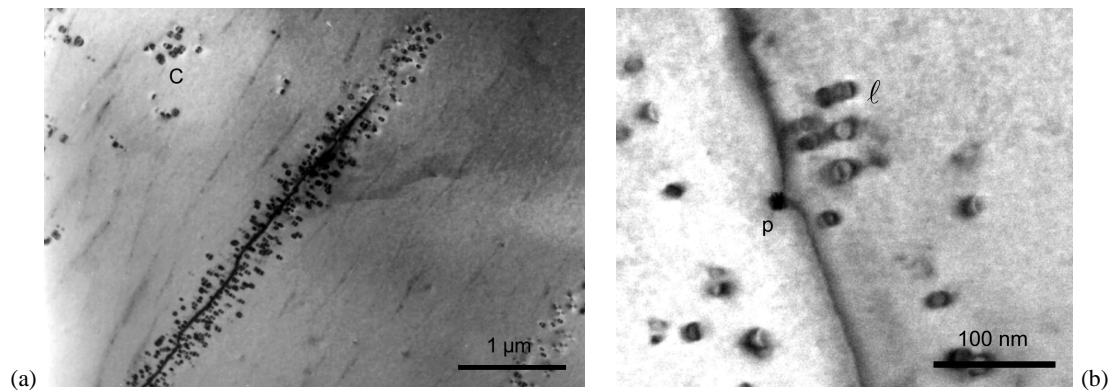
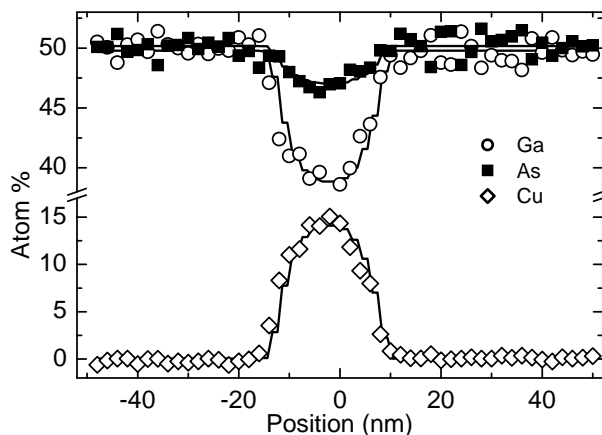


Abb. 6.4: Defektstrukturen in kupferdiffundiertem GaAs (bei 943 K) nach langsamer Abkühlung [143]. (a) TEM-Hellfeldaufnahme, (b) STEM-Bild (C Kolonie kleiner Versetzungsringe, p Ausscheidung, l kleine Versetzungsringe nahe der Versetzung).

(c_x gemessene Konzentration des Bestandteils $x = \text{As, Cu, Ga}$; V gesamtes durch den Elektronenstrahl angeregtes Volumen, V_p Volumen des als Kugel angenommenen Partikels, c_x^p , c_x^m Konzentration von x im Partikel und in der Matrix).

Für die Bestimmung des Gesamtvolumens V wurde eine Aufweitung des Strahldurchmessers entsprechend einer $z^{3/2}$ -Abhängigkeit angenommen. Die Probendicke wurde aus dem Elektronenenergieverlustspektrum am Ort der EDX-Messung bestimmt. Die Anpassung der Messwerte entsprechend Gl. 6.1 zeigen die Linien in Abb. 6.5. Die Zusammensetzung der Ausscheidungen auf den Versetzungen wurde auf diese Weise für mehrere Proben bestimmt. Die Kupferkonzentration lag für eine Reihe von gemessenen Partikeln im Bereich von 62 – 75 at.%, der As-Anteil betrug 38 – 25 at.%. Innerhalb des Messfehlers von 5 at.% konnte kein Ga in den Teilchen nachgewiesen werden. Legt man das Cu–Ga–As-Phasendiagramm von SCHMID-FETZER [217] zugrunde, gibt es nur eine stabile arsenreiche Verbindung, das ist Cu_3As . Um Sicherheit in der Identifikation zu gewinnen, wurden die Ausscheidungen mittels HREM und Feinbereichsbeugung studiert. Aus der Analyse konnte eine Cu_5As_2 -Phase identifiziert werden. Diese Verbindung hat eine orthorhombische Struktur und ist metastabil unterhalb 600 K. Die erhaltene Zusammensetzung aus den EDX-Messungen stimmt damit im Rahmen des Fehlers mit dieser Struktur überein. Die Zusammensetzung in den langsam abgekühlten Proben wurde nur qualitativ mittels EDX untersucht. Es ergab sich hier ein höherer Ga-Anteil von bis zu 35 at.% und ein entsprechend geringerer Anteil

Abb. 6.5: Bestimmung der Zusammensetzung der Ausscheidungen auf Versetzungen in kupferdiffundiertem GaAs. Diffusionsglühung bei 1373 K mit anschließender schneller Abkühlung auf Raumtemperatur. Die Symbole zeigen das direkte Ergebnis der EDX-Messung. Die Linien sind Fits, mit denen die tatsächliche Zusammensetzung bestimmt wurde [143].



von Arsen.

In den CL-Untersuchungen nach Schwefeleindiffusion wurde ebenfalls Anzeichen für eine starke Dekoration der am Ritz erzeugten Versetzungen gefunden. Das Lumineszenzspektrum in der Matrix wird durch eine Bande bei 1,2 eV dominiert, die einem Donator-Schwefel-Komplex zuzuordnen ist [275]. Die Bildung solcher Komplexe als ein möglicher Kompensationsmechanismus der durch die Schwefeldotierung erzeugten freien Ladungsträger wurde ausführlich untersucht (Leipner *et al.* 1999 [142]). Es konnte durch elektrische Messungen, Positronenannihilation und Sekundärionenmassenspektrometrie gezeigt werden, dass diese Defekte $S_{As}V_{Ga}$ -Komplexe darstellen. Zusätzlich zu der 1,2 eV-Linie erscheint im Versetzungsbereich eine sehr breite Bande bei 1 eV, deren Herkunft nicht ganz klar ist, die aber mit der Getterung vom Schwefel an den Versetzungen in direkter Beziehung steht. Die qualitative EDX-Analyse an Einzelversetzungen ergibt einen Anstieg der Schwefelkonzentration im Verhältnis zur Galliumkonzentration um 10 %, während der relative Arsenanteil deutlich abnimmt (Engler *et al.* 1999 [49]). Die Bildung einer Ga_2S_3 - oder GaS -Phase wird vermutet. Die neue Lumineszenzbande im deformierten Bereich führt dazu, dass die Versetzungen im CL-Bild hell erscheinen.

Im Folgenden sollen exemplarisch die Diffusionseigenschaften von Cu in GaAs diskutiert werden, um daraus das Verhalten im Versetzungsbereich ableiten zu können. Für die Interpretation der experimentellen Daten werden die von HALL und RACETTE [69] angegebenen Löslichkeiten von interstitiellem und substitutionell gelöstem Cu herangezogen. Der Diffusionskoeffizienten von Kupferzwischengitteratome wird angegeben [69] mit

$$D_{i_{Cu}} = 0,03 \exp\left(-\frac{0,35 \text{ eV}}{k_B T}\right) \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}.$$

Es wird angenommen, dass Cu – wie die p-Dotierungen Be und Zn in GaAs [263] – über einen *Kick-out*-Mechanismus diffundiert. Damit kann man die Reaktion unter Einbeziehung der Ladungen mit



erhalten. Aus dem Vergleich mit Daten zur Diffusion von Galliumzwischengitteratomen von GÖSELE *et al.* [61],

$$D_{I_{Ga}} = 7 \exp\left(-\frac{4,0 \text{ eV}}{k_B T}\right) \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1},$$

stellt man fest, dass Kupfer wesentlich schneller als I_{Ga} diffundiert. Mit Gl. 6.2 folgt daraus, dass die Kupferdiffusion als ein Nichtgleichgewichtsprozess ablaufen muss. Jedoch ergibt sich durch die Anwesenheit der Versetzungen kein Diffusionsprofil, wie es für eine *Kick-out*-Diffusion typisch ist, da die Nichtgleichgewichtskonzentration der Punktdefekte entscheidend durch die Ver-

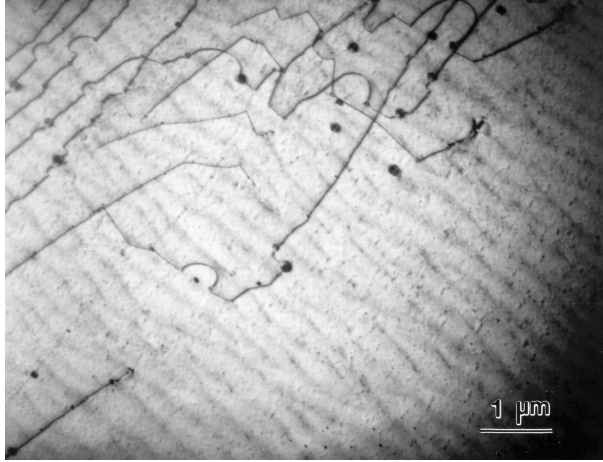


Abb. 6.6: Klettereffekte an Versetzungen mit Ausscheidungen [143]. Die GaAs-Probe wurde nach Cu-Diffusion bei 1373 K für 30 min mit einer Abkühlrate von 0,4 K/s auf Raumtemperatur abgekühlt. TEM-Hellfeldaufnahme.

setzungen gestört wird. Gl. 6.2 führt zu einer hohen Übersättigung an Galliumzwischengitteratomen, die zu interstitiellen Versetzungsringen entsprechend der Reaktion



führt. Das Symbol $\Phi(\Delta l, \Delta A)$ bedeutet, dass ein Versetzungsring seine Länge um Δl bzw. seine Fläche um ΔA durch den Einbau eines Paares von Zwischengitteratomen ändert. Neben den Ga-Zwischengitteratomen sind As-Interstitials erforderlich. Aus Diffusionsexperimenten mit Schwefel haben wir die Diffusionskonstante und die Konzentration von Arsenzwischengitteratomen abgeleitet (Scholz *et al.* 2000 [220]). Es ergab sich, dass die Gleichgewichtsdichte von I_{As} bei 1223 K $3 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ beträgt und damit für die Reaktion 6.3 nicht ausreichen dürfte. Demzufolge ist eine Emission von Arsenleerstellen entsprechend



wahrscheinlicher. Nach Abschrecken können die Versetzungsringe gleichverteilt in der Probe im TEM-Bild gefunden werden. Bei höheren Diffusionstemperaturen von Kupfer wird aber aufgrund der höheren gelösten Cu-Konzentration im Vergleich zur Dotierungskonzentration die Änderung der Ladungsträgerkonzentration bedeutsam. Es muss damit der Einfluss der Position des Fermi-niveaus auf die Konzentration von geladenen Defekten berücksichtigt werden. Nach TAN *et al.* [259] ist die Gleichgewichtsdichte $c_{X^\zeta}^{\text{eq}}$ eines Defekts X mit der Ladung ζ gegeben als

$$c_{X^\zeta}^{\text{eq}} = c_{n_i} \left(\frac{p}{n_i} \right)^\zeta \quad \text{oder} \quad c_{X^\zeta}^{\text{eq}} = c_{n_i} \left(\frac{n}{n_i} \right)^{-\zeta} \quad (6.5)$$

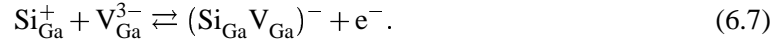
(c_{n_i} Gleichgewichtsdichte des Defekts X bei der intrinsischen Ladungsträgerdichte n_i).

Bei der bei 1373 K diffundierten GaAs-Probe ist die Kupferkonzentration in der Probe höher als das Dotierungsniveau. Daraus folgt, dass die Probe p-leitend wird, wie sich auch durch Halleffektmessungen bestätigen lässt. Geht man von positiv geladenen Ga-Zwischengitteratomen aus ($\zeta = +2$), steigt nach Gl. 6.5 mit wachsender Löcherdichte p ihre Gleichgewichtskonzentration. Daraus folgt, dass die Übersättigung sinkt, und man findet keine Versetzungsringe entsprechend Gl. 6.4 mehr. Die hohe Cu-Übersättigung wird durch die Ausscheidungsbildung an der Versetzung abgebaut. Während des Abschreckvorgangs, der mehrere Sekunden dauert, kann das Kupfer einige Mikrometer diffundieren und damit die Versetzungen erreichen.

Die Kupfermigration zu Senken wird durch einen langsamen Abkühlprozess befördert. Dabei kommt es zu einer Ausdiffusion des Kupfers unter Bildung von Leerstellen,



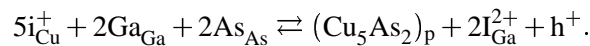
Die so gebildeten Leerstellen sind als Monovakanzen nicht thermisch stabil. Im verwendeten Si-dotierten GaAs können sie mit den Siliciumdonatoren Komplexe bilden [56],



Im CL-Spektrum dieser Proben konnte in der Tat eine diesem Komplex zugeordnete Linie bei 1,27 eV gefunden werden (*Leipner et al.* 1996 [141]). Die Migration der Kupferatome während der langsamen Abkühlung zu den Versetzungen führt über den *Kick-out*-Prozess zu einer Übersättigung von I_{Ga} in Versetzungsnähe. Entsprechend Gl. 6.4 bildet sich ein Schlauch von kleinen interstitiellen Versetzungsringen. Ein Teil der gebildeten Arsenleerstellen wird mit Galliumzwischen-gitteratomen reagieren und Ga_{As} -*Antisites* bilden, ein anderer Teil von der ausgedehnten Versetzung absorbiert werden.

Ein ähnlicher Mechanismus der Übersättigung von I_{Ga} kann um bereits existierende kleine Versetzungsschleifen in der Matrix passieren. Neue interstitielle Versetzungsringe werden in der Nachbarschaft gebildet, und über einen Selbstorganisationsprozess entstehen die beobachteten Kolonien von Versetzungsringen. Die ausgeprägte Atmosphäre von kleinen interstitiellen Ringen um die langgestreckten, frischen Versetzungen ist aufgrund der strahlungslosen Rekombination an diesen Defekten dafür verantwortlich, dass ein starker Dunkelkontrast im Katodolumineszenzbild auftritt.

Mit der aus EDX und TEM abgeleiteten Zusammensetzung der Ausscheidungen ergibt sich eine Reaktion entsprechend



Wenn man eine mögliche Volumenänderung außer Acht lässt, werden infolge des Wachstums der Ausscheidung Ga-Zwischengitteratome emittiert. In Proben, die von hohen Diffusionstemperaturen langsam abgekühlt wurden, kann man Versetzungsklettern in der Nähe der Ausscheidungen beobachten (Abb. 6.6), das auf diese I_{Ga} zurückgeführt werden kann.

Wenn keine Senken wie Donatoren oder Versetzungen für die Leerstellen bei der Ausdiffusion des Kupfers (Gl. 6.6) während des langsamen Abkühlens zur Verfügung stehen, werden stabile Leerstellencluster gebildet. Diese Bildung der Leerstellencluster kann man zusätzlich befördern, wenn nach der Diffusionsglühung bei hohen Temperaturen und anschließender schneller Abkühlung eine thermische Nachbehandlung bis zu 800 K erfolgt. In der Abbildung im STEM zeigt es sich, dass diese Voids immer mit Kupferausscheidungen assoziiert sind (Abb. 6.7). Im Zuge von Ausdiffusionsexperimenten konnte mittels Positronenlebensdauer-messungen auch ein deutlicher Anstieg einer defektbezogenen Lebensdauerkomponente auf 480 ps in solchen Proben festgestellt werden [189].

6.2 Diffusion im Versetzungsbereich

Um die Bildung einer ausgedehnten Defektzone an Versetzungen verstehen zu können, muss die Migration der Fremdatome als ein Diffusionsprozess beschrieben werden, der von einer zusätzlichen Driftbewegung befördert wird, die aus der elastischen Wechselwirkung resultiert. Die Diffusions-Drift-Gleichung an einer geraden Versetzung ergibt sich nach BULLOUGH und NEWMAN [30, 31] zu

$$\frac{\partial c_X(r,t)}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial F'}{\partial r} - \frac{K}{r} c_X(r,t) . \quad (6.8)$$

Entlang der Versetzung wird eine homogene Ausscheidungs-bildung in einem Zylinderbereich angenommen. Die Wachstumsrate dieser Ausscheidungen wird als proportional der Dichte des

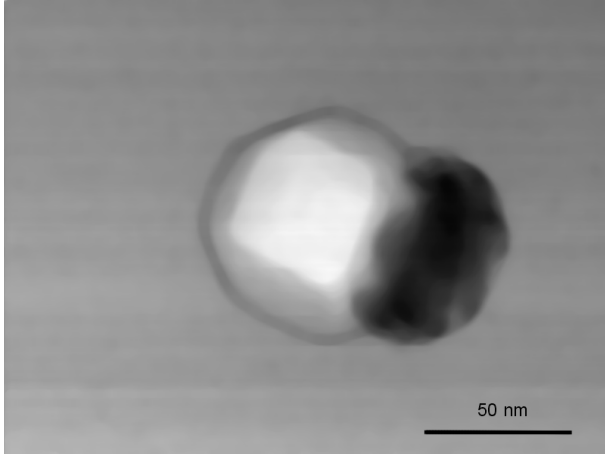


Abb. 6.7: Aggregat einer Cu-reichen Ausscheidung und eines Voids in GaAs. STEM-Hellfeldbild (Aufnahme J. Neumann-Zdralik).

Fremdatoms X (c_X) am Abschneideradius r_d der Versetzung angesetzt. Die Übergangsgeschwindigkeit des Einbaus ist

$$K = p_r r_d \quad \text{mit} \quad p_r = D_X^{\text{eff}} \alpha_r^2 / r_d^2 \quad (6.9)$$

mit der Diffusionskonstanten D_X^{eff} , der Reaktionsrate p_r und der dimensionslosen Konstanten α_r . Diese kann zwischen ∞ und 0 variieren, entsprechend dem schnellstmöglichen Einbau in Ausscheidungen und der Bildung einer Atmosphäre um die Versetzung ohne Ausscheidungsbildung. Weiterhin ist

$$F' = D_X^{\text{eff}} \left(r \frac{\partial c_X(r_0, t)}{\partial r} + \frac{c_X(r, t)}{k_B T} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right),$$

wobei $\varphi = A_{\text{el}}/r$ das radiale elastische Wechselwirkungspotential zwischen Fremdatom und Versetzung ist. Der Parameter A_{el} ergibt sich aus dem Atomradius der Gitteratome r_a und $r_a(1 + \Delta r_a)$ als Radius der Fremdatome zu

$$A_{\text{el}} = \frac{4}{3} G b \Delta r_a r_a^3 \frac{1 + \nu}{1 - \nu}.$$

Es sollen zwei Randbedingungen gelten.

1. Es gibt keinen Fluss im Abstand $r = R_d = (\pi \rho_d)^{1/2}$. Für diesen äußeren Abschneideradius R_d gilt

$$F' = 0 \quad \text{und} \quad c_X(R_d, t) = c_0$$

mit c_0 als die Ausgangskonzentration des Fremdatoms X.

2. Für $t = 0$ beträgt die Dichte überall c_0 . Für jede andere Zeit muss der zeitliche Anstieg der Zahl der Fremdatome im Kern von der Konzentration im Kernbereich $r \leq r_d$ und außerhalb abhängen. Daraus lässt sich ableiten [30]

$$c_X(r_d, t) = c_0 \exp(-p_r t) + \frac{2}{r_d} \exp(-p_r t) \int_0^t \exp(p_r t) F'(r_d, t) dt.$$

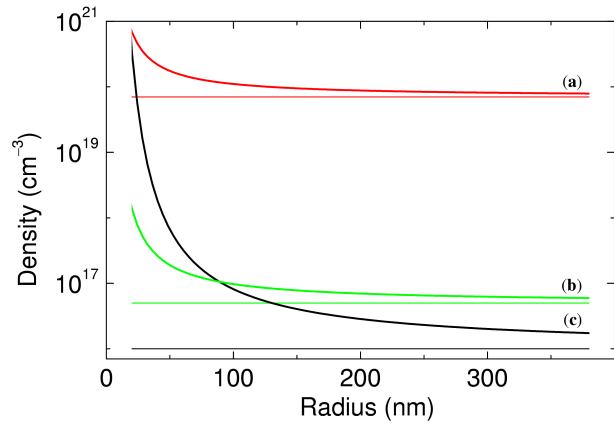
Wenn man die Ausscheidungsbildung vernachlässigen kann, folgt mit $t \rightarrow \infty$ für die Dichte der Fremdatome an einer Versetzung

$$c_X = c_0 \exp\left(-\frac{A_{\text{el}} \sin \theta}{r k T}\right), \quad (6.10)$$

mit θ als dem Polarwinkel um die Versetzung in der Ebene senkrecht zur Versetzungslinie.

Die Kupferanreicherung an einer 60° -Versetzung in GaAs wurde entsprechend Gl. 6.10 berechnet. Abb. 6.8 zeigt die berechnete maximale Dichte senkrecht zur Gleitebene mit $\theta = 1$. Die

Abb. 6.8: Cottrellatmosphäre einer 60° -Versetzung in GaAs. Berechnung der Gesamtdichte von gelöstem Cu an einer 60° -Versetzung in GaAs für verschiedene Temperaturen und Ausgangskonzentrationen. a) $T = 1373\text{ K}$, $c_0 = 7 \cdot 10^{19}\text{ cm}^{-3}$, b) $T = 973\text{ K}$, $c_0 = 5 \cdot 10^{16}\text{ cm}^{-3}$, c) $T = 300\text{ K}$, $c_0 = 1 \cdot 10^{16}\text{ cm}^{-3}$ [143].



für die Rechnung verwendeten elastischen Konstanten stammen von DUNSTAN [46]. Die Atomradien wurden als kovalente Radien nach KITTEL [108] angenommen. Entsprechend den Diffusionstemperaturen ergeben sich verschiedene Löslichkeiten und damit Ausgangskonzentrationen c_0 . Es ist zu erkennen, dass die Wechselwirkung schwächer bei höheren Temperaturen ist. Bei Abkühlung steigt der Einfluss des Spannungsfeldes der Versetzung. Gl. 6.10 beschreibt nur den Gleichgewichtsfall einer Cottrellatmosphäre, die höchstens einige hundert Nanometer ausgedehnt ist. Es wird damit klar, dass dies nicht die ausgedehnten Defektwolken erklären kann, die bei Kupfereindiffusion gefunden wurden.

Es wurden Computersimulationen der Anreicherung von Fremdatomen an Versetzungen unter Einbeziehung der Ausscheidungsbildung mit den oben beschriebenen Modellen durchgeführt. Zur Berechnung der partiellen Differentialgleichungen wurde das ZOMBIE-Paket [98] genutzt. Das Ergebnis einer solchen Rechnung zeigt Abb. 6.9. Die gezeigte Simulation wurde mit dem von HALL und RACETTE [69] angegebenen effektiven Diffusionskoeffizienten für Cu in GaAs durchgeführt. Die gewählte Versetzungsdichte war $1 \cdot 10^4\text{ cm}^{-2}$, der innere Abschneideradius lag bei 1 nm. Gezeigt ist das Ergebnis für verschiedene Übergangsraten (Gl. 6.9). Bei $\alpha_r = 0$ werden keine Cu-Atome in eine Ausscheidung eingebaut, und man findet eine Cottrellatmosphäre wie in Abb. 6.8. Wenngleich die Übergangsrate für den tatsächlichen Fall nicht bekannt ist, so wird doch aus Abb. 6.9 deutlich, dass eine Ausscheidungsbildung entlang der Versetzung eine ausgedehnte Verarmungszone liefert, die mehrere Mikrometer ausgedehnt ist. Wie stark die Verarmung ist, wird im wesentlichen von der Übergangsrate der Cu-Atome in die Ausscheidung bestimmt. Daran schließt sich ein Anreicherungsgebiet an, der von seiner Ausdehnung praktisch dem Fall der Cottrellatmosphäre entspricht.

Vergleichbare Rechnungen wurden zu den Diffusionsexperimenten mit Schwefel an Versetzungen in GaAs durchgeführt. Schwefel ist ein Donator in GaAs und diffundiert über den Kick-out-Mechanismus in der Wechselwirkung mit dem Arsenuntergitter [264]. Unter Nutzung der gemessenen Diffusionsparameter [220] kann man das Verhalten an Versetzungen simulieren. Wie beim Kupfer ergibt sich ebenfalls eine mehrere Mikrometer ausgedehnte Verarmungszone, die den Anreicherungsgebiet umrandet, wenn man die Bildung von Ausscheidungen auf der Versetzung annimmt.

Die gezeigten Modellexperimente mit Kupfer und Schwefel an Versetzungen in GaAs demonstrieren, dass die Agglomeration von Fremdatomen auf der Versetzung zu einem komplexen Verhalten in der Beziehung zu strukturellen Punktdefekten führt. Im Gegensatz zu Si kommt es nicht nur zum Abbau von Nichtgleichgewichtskonzentrationen von Punktdefekten an Versetzungen, sondern es wird das Nichtgleichgewicht auf beide Untergitter verteilt. Es wird deutlich, dass das Temperaturregime des Diffusionsexperiments eine eminent wichtige Rolle spielt. Diese Modellexperimente lassen sich auf die Getterung von Fremdatomen in gewachsenen Kristallen

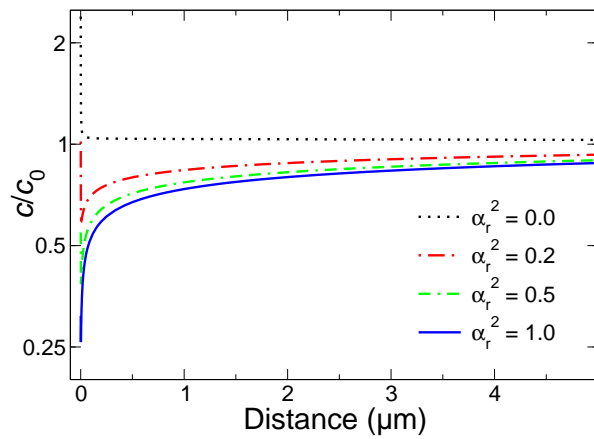


Abb. 6.9: Simulation der Nichtgleichgewichts-atmosphäre an Versetzungen bei Ausscheidungs-bildung [130]. Die Simulation wurde für eine Kupferdiffusion bei 1373 K für 4 h durchgeführt. Die gewählte Versetzungsdichte betrug $1 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-2}$. Die radiale Änderung der Konzentration ist für verschiedene Konstanten α_r gezeigt.

übertragen. Bei Dotierung von GaAs werden ausgedehnte Defektzonen um eingewachsene Versetzungen gefunden, deren Charakter von der Art des Fremdatoms abhängt [244]. Die Analyse dieser Defektzonen erfordert die Untersuchung des dominierenden Diffusionsmechanismus und Experimente zur Ausscheidungs-bildung auf den Versetzungen, um daraus unter Beachtung des Ladungsträgergleichgewichts und des Fermi-niveau-Effekts Rückschlüsse auf die Defektreaktionen im Versetzungsbereich ziehen zu können.

7 Zusammenfassung

Die breit akzeptierte Grundvorstellung der Versetzungsbewegung im Bereich der unteren Streckgrenze von Halbleitern ist das von ALEXANDER und HAASEN [6] ausgehende Modell der thermisch aktivierten Nukleation und Migration von Doppelkinken im Peierlspotential. Dabei ist die Aktivierungsenergie der Fließspannung mit der der Gleitgeschwindigkeit identisch. Die Rolle von Punktdefekten ist klar umrissen in den Erholungsprozessen, die in den Entfestigungsbereichen der Spannungs-Dehnungs-Kurve ablaufen und mit dem Klettern oder Quergleiten von Versetzungen in Zusammenhang gebracht werden. Jedoch gibt es schon seit längerem eindeutige experimentelle Befunde, dass Punktdefekte bereits bei sehr kleinen Spannungen bzw. niedrigen Temperaturen bei der plastischen Deformation entstehen. Versetzungen sind keine einfachen strukturellen Defekte, sondern stehen in einer engen Wechselbeziehung zur Punktdefektpopulation des Kristalls. Die elektrische und optische Wirksamkeit von Versetzungen in Halbleitern wird damit in großem Maße von intrinsischen und extrinsischen Punktbaufehlern in der Umgebung oder im Kern beeinflusst.

Folgende Probleme wurden im Rahmen dieser Arbeit untersucht:

- ▷ Wie kann man die Punktdefektgeneration quantifizieren und mit den Parametern der Verformungskurve bzw. der Versetzungsbewegung in Zusammenhang bringen,
- ▷ wie lässt sich die Bildung von Punktdefekten verstehen im Zusammenhang mit einer dominierenden Gleitbewegung der Versetzungen, die verformungsratebestimmend ist,
- ▷ welche Arten von Punktdefekten werden im Zuge der Versetzungsbewegung generiert und hat diese Punktdefektbildung Rückwirkungen auf die Struktur der Versetzungen,
- ▷ in welcher Beziehung steht die Entstehung einer ausgedehnten Atmosphäre von intrinsischen und extrinsischen Punktdefekten um die Versetzung zu den Eigenschaften der beteiligten Defekte,
- ▷ was für Wechselwirkungen gibt es zwischen intrinsischen und extrinsischen Punktdefekten im Versetzungsbereich.

Es wurden zunächst hochreine Einkristalle von Element- und Verbindungshalbleitern untersucht, in denen keine Verunreinigungen in signifikanten Konzentrationen auftreten. Damit können nur Eigenpunktdefekte wie Leerstellen oder Zwischengitteratome neben den Versetzungen selbst die Versetzungsbewegung beeinflussen. Durch Messung von Parametern der Verformungskurve wurde die Dominanz herkömmlicher Modelle der Versetzungsbewegung bestätigt. Abweichungen ergaben sich bei plastischer Deformation in Mehrfachgleitorientierung, die auf der Wechselwirkung von Versetzungen unterschiedlicher Gleitsysteme und einer daraus resultierenden Punktdefektbildung basiert. Die Emission von Punktdefekten wurde bereits bei geringsten Deformationsgraden festgestellt, d. h. in einem Bereich, wo noch keine makroskopische Abgleitung messbar war. Die Defektdichte wurde mit verschiedenen spektroskopischen Methoden gemessen, wobei die Positronenannihilation als spezifisches Verfahren zur Nachweis leerstellenartiger Defekte die wichtigste Rolle spielte. In diesem Zusammenhang mussten Fragen der Sensitivität der Positronenlebensdauerspektroskopie auf verschiedene deformationsinduzierte Defekte, Probleme der Auswerteverfahren und der Nachweisempfindlichkeit zur Bestimmung von Defektdichten und die Korrelierbarkeit

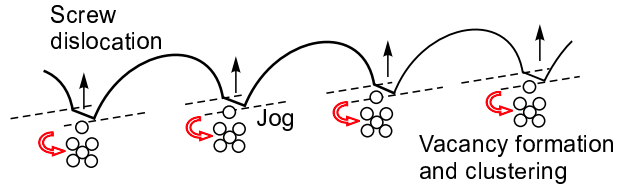


Abb. 7.1: Schema der Produktion von Leerstellenagglomeraten an Sprüngen [245]. Die Umordnung der emittierten Leerstellen zu stabilen Clustern geschieht unmittelbar am Sprung ohne Leerstellendiffusion.

mit anderen spektroskopischen Methoden geklärt werden. Neben Leerstellen und Leerstellenagglomeraten konnten aus der Auswertung von Positronenlebensdauerermessungen sowohl Aussagen zu regulären Versetzungen als auch zu Versetzungen mit Leerstellen im Versetzungskern abgeleitet werden.

Die Versetzung stellt eine komplexe Positronenfalle dar, die einen zweistufigen Positroneneinfang hervorruft. Die reguläre Versetzungslinie ist eine flache Falle, in der die spezifische Positronenlebensdauer nahe dem Wert des defektfreien Volumens liegt. Für die Positronenbindungsenergie wurde ein Wert um die 0,01 eV abgeleitet, ein Wert, der deutlich kleiner als für negative Ionen in Halbleitern ist, die ebenfalls als flache Fallen wirken. Dieses flache Versetzungsniveau wirkt als *Precursor* für den Einfang in eine versetzungsgebundene tiefe Falle, die einer assoziierten Leerstelle zuzuordnen ist. Dieser Defekt besitzt eine Positronenlebensdauer wie für eine Monovakanz, zeichnet sich aber gegenüber der isolierten Leerstelle durch seine hohe thermische Stabilität aus. Leerstellen im Kern von Versetzungen waren bereits früher durch Elektronenspinresonanz in Silicium identifiziert worden. Es ist davon auszugehen, dass dieselben Defekte hier gefunden wurden, wenngleich Positronenlebensdauerermessungen nicht in der Lage sind, die spezifische Koordination der Leerstellen zu sondieren, wie die ESR es kann. Eine zukünftige Entwicklungsmöglichkeit bestünde vielleicht im Einsatz der Doppler-Koinzidenzspektroskopie, bei der man im Zusammenhang mit theoretischen Rechnungen zur Impulsdichteverteilung der Elektronen empfindliche Informationen zur chemischen Umgebung des Annihilationsorts gewinnt. Für eine Versetzung in GaAs bedeutet das, dass man aufgrund der unterschiedlichen Zahl nächster Gallium- und Arsenatome im Prinzip feststellen kann, auf welcher Position in der Rekonstruktionstruktur sich die Leerstelle befindet.

Die dominante Eigenheit der gemessenen Positronenlebensdauerspektren besteht darin, dass man praktisch immer eine sehr lange Lebensdauerkomponente misst, die nur mit der Existenz von Leerstellenagglomeraten in Verbindung gebracht werden kann. Um die experimentellen Ergebnisse interpretieren zu können, wurden theoretische Rechnungen mit Dichtefunktionalmethoden zur Struktur angestellt. Diese Rechnungen fanden Eingang in die Bestimmung der Positronenlebensdauer von Leerstellenagglomeraten. Es konnte abgeleitet werden, dass es für Si bestimmte magische Zahlen für besonders stabile Konfigurationen gibt. Für GaAs wurden erstmals Rechnungen zur Stabilität von Leerstellenclustern angestellt. Während für Si eine empirische Regel eine stabile Clustergröße von $4j + 2$ ergibt ($j = 1, 2, 3 \dots$), erhält man für GaAs einen Cluster von V_{12} mit minimaler Energie. Der Vergleich der experimentell bestimmten Positronenlebensdauerkomponente der Cluster mit den theoretisch ermittelten Werten ergibt eine befriedigende Übereinstimmung für V_{12} in GaAs und V_{14} in Si. Allerdings ist nicht völlig auszuschließen, dass auch Clustergrößen um V_{20} stabil sind und damit die experimentelle Lebensdauer liefern. Die Superzellrechnungen erlaubten Aussagen bis zu Aggregaten von 18 Leerstellen. Wesentlich größere Agglomerate werden offenbar bei höheren Verformungsgraden gebildet, da Positronenlebensdauern um 500 oder 600 ps auftraten, die der Annihilation an der inneren Oberfläche dieser Cluster zuzuordnen sind. Voids mit etwa 50 nm Durchmesser wurden sporadisch im Transmissionselektronenmikroskop gefunden.

Aufgrund der Wirksamkeit als flache Positronenfalle konnte im deformierten GaAs der Ga_{As}^- -*Antisite* gefunden und in der Korrelation mit ESR-Messungen identifiziert werden. Untersuchungen des As_{Ga} -*Antisites* wurden mit Infrarot-Absorptionsmessungen durchgeführt.

Die Dichte der generierten Punktdefekten wurde für eine Reihe von verschiedenen Deforma-

tionsparametern gemessen, um Informationen über den Mechanismus ihrer Entstehung zu gewinnen. So wurde der Verformungsgrad, die Verformungsrate, die Temperatur und die Kompressionsachse variiert. Neben den spektroskopischen Messungen wurde die Versetzungsstruktur mittels Transmissionselektronenmikroskopie studiert. Als Ergebnis dieser Untersuchungen ergab sich ein konsistentes Bild über den Entstehungsmechanismus. Als dominierender Leerstellen und Zwischengitteratome bildender Prozess wurde das Hinterherziehen von Sprüngen (*Jog dragging*) an Schraubenversetzungen identifiziert. Die Sprünge entstehen im Wesentlichen als Folge des Schneidens von Schraubenversetzungen. Im Zusammenhang mit den theoretischen Rechnungen erwies sich, dass nicht lange Ketten von Leerstellen emittiert werden. Kürzere Ketten oder Divakanzen sind thermisch instabil und können leicht ausheilen. Die Bildung von stabilen Leerstellenclustern stellt einen Primärmechanismus dar, der selbst bei Raumtemperatur unmittelbar am Sprung ohne die Diffusion von Leerstellen abläuft (Abb. 7.1). Bei der Deformationstemperatur erweist sich die Bildung und Annihilation von solchen Leerstellenclustern als ein Prozess im dynamischen Gleichgewicht. In bisherigen Modellen zur plastischen Deformation von Metallen wurde ausschließlich von der Bildung von Monovakanzen ausgegangen. Der Einbau von Leerstellen in Agglomerate stellt aber offenbar genau so einen Energiegewinn dar, wie die Inkorporation in den Versetzungskern. Die Unterschiede in der Zahl der generierten Leerstellen bei Variation der Deformationsbedingungen lassen sich zurückführen auf eine Verschiebung des dynamischen Gleichgewichts zwischen Bildung und Annihilation, auf die Änderung des Anteils von Schraubenversetzungen oder auf die Beeinflussung der Dichte von leerstellenproduzierenden Sprüngen. Neben der Generation von Leerstellen läuft analog auch eine Produktion von Zwischengitteratomen über das *Jog dragging*. Diese *Interstitial*-Prozesse wurden indirekt über *Antisite*-Defekte nachgewiesen, die in Sekundärreaktionen gebildet werden.

Die Möglichkeit der Untersuchung der Diffusion von Fremdatomen in ihrer Wechselwirkung mit Versetzungen und intrinsischen Punktdefekten wurde für den Fall von Kupfer und Schwefel in GaAs demonstriert. Der Mechanismus, der einheitlich alle beobachteten Diffusionsphänomene in versetzungsreichem GaAs erklären kann, ist der *Kick-out*-Mechanismus unter Nichtgleichgewichtsbedingungen. Die Wechselwirkung zwischen Fremdatomen, strukturellen Punktdefekten und Liniendefekten führt zu komplexen Reaktionen, die stark vom Temperaturregime abhängen. Aufgrund der Bildung von Punktdefektkomplexen, Mikrodefekten und Ausscheidungen im Zusammenspiel mit der hohen Diffusivität von extrinsischen Zwischengitteratomen ändern sich die elektrischen Eigenschaften in der Umgebung der Versetzung bis zu Entfernungen von mehreren Mikrometern. Die Punktdefekthülle um die Versetzung ist nicht durch eine Cottrellwolke zu beschreiben, sondern stellt eine Nichtgleichgewichtsatmosphäre dar, die mit der Ausscheidungsbildung zusammenhängt.

Literaturverzeichnis

- [1] R. Addinall, R. C. Newman: *Ga_{As} and B_{As} antisite defects in gallium arsenide*. *Semicond. Sci. Technol.* **7** (1992) 1005.
- [2] H. Alexander: *Dislocations in covalent crystals*. In *Dislocations in solids*, Hg. F. Nabarro, Bd. 7, Amsterdam: North Holland (1986) S. 113.
- [3] H. Alexander: *On dislocation generation in semiconductor crystals*. *Rad. Eff. Def. Sol.* **111** (1989) 1.
- [4] H. Alexander: *What information on extended defects do we obtain from beam-injection methods*. *Mater. Sci. Eng. B* **24** (1994) 1.
- [5] H. Alexander, H. Gottschalk: *Mobility of dislocation in gallium arsenide*. *Inst. Phys. Conf. Ser.* **104** (1989) 281.
- [6] H. Alexander, P. Haasen: *Dislocations and plastic flow in the diamond structure*. *Sol. State Phys.* **22** (1968) 28.
- [7] H. Alexander, P. Haasen, R. Labusch, W. Schröter: *Foreword*. *J. Physique* **40** (1979) C6.
- [8] H. Alexander, H. Teichler: *Dislocations*. In *Materials science and technology*, Hg. R. W. Cahn, P. Haasen, E. J. Kramer, Bd. 4, Weinheim: VCH (1991) S. 249.
- [9] S. Amelinckx: *Dislocations in particular structures*. In *Dislocations in solids*, Hg. F. R. N. Nabarro, Bd. 2, Amsterdam: North Holland (1979) S. 67.
- [10] F. Appel: *Versetzungsschneidprozesse und Dipolmechanismen bei der Verformung von Ionenkristallen der NaCl-Struktur*. Habilitation, Martin-Luther-Universität Halle–Wittenberg (1987).
- [11] P. Astié, J. J. Couderc, P. Chomel, D. Quelard, M. Duseaux: *Thermal activation of plastic deformation of undoped GaAs between 528 and 813 K*. *phys. stat. sol. (a)* **96** (1986) 225.
- [12] G. A. Baraff, M. Schlüter: *Binding and formation energies of native defect pairs in GaAs*. *Phys. Rev. B* **33** (1986) 7346.
- [13] C. R. Barrett, W. D. Nix: *A model for steady state creep based on the motion of jogged screw dislocations*. *Acta Metall.* **13** (1965) 1247.
- [14] P. E. Batson: *Structural and electronic characterization of a dissociated 60° dislocation in GeSi*. *Phys. Rev. B* **61** (2000) 16633.
- [15] R. Behrensmeier: *Dynamische Erholung in Verbindungshalbleitern*. Dissertation, Universität Göttingen (1990).
- [16] A. Y. Belov, K. Scheersmidt, U. Gösele: *Extended point defect structures at intersections of screw dislocations in Si: A molecular dynamics study*. *phys. stat. sol. (a)* **171** (1999) 159.
- [17] J. Bennetto, R. W. Nunes, D. Vanderbilt: *Period-doubled structure for the 90° partial dislocation in silicon*. *Phys. Rev. Lett.* **79** (1997) 245.
- [18] P. Boivin, J. Rabier, H. Garem: *Plastic deformation of GaAs single crystals as a function of electronic doping. I: Medium temperatures (150 – 650 °C)*. *Phil. Mag. A* **61** (1990) 619.
- [19] P. Boivin, J. Rabier, H. Garem: *Plastic deformation of GaAs single crystals as a function of electronic doping. II: Low temperatures (20 – 300 °C)*. *Phil. Mag. A* **61** (1990) 647.

- [20] F. Börner, S. Eichler, A. Polity, R. Krause-Rehberg, R. Hammer, M. Jurisch: *Determination of the defect depth profile after saw cutting of GaAs wafers measured by positron annihilation*. J. Appl. Phys. **84** (1998) 2255.
- [21] H. Börner: *Defektcharakterisierung in Halbleiterschichten mit Hilfe der Positronenannihilation*. Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg (2000).
- [22] A. Bourret, J. Desseaux-Thibault, F. Lancon: *La structure du coeur des dislocations dans le silicium cz etudiee par microscopie electronique*. J. Physique **44** (1983) C4/15.
- [23] W. Brandt: *Positron dynamics in solids*. Appl. Phys. **5** (1974) 1.
- [24] W. Brandt, R. Paulin: *Positron diffusion in solids*. Phys. Rev. B **5** (1972) 2430.
- [25] W. Brandt, R. Paulin: *Positron implantation-profile effects in solids*. Phys. Rev. B **15** (1977) 2511.
- [26] L. Breivik, M. Brozel, D. J. Stirland, S. Tüzemen: *A uniformity investigation of undoped, semi-insulating GaAs grown by the vertical Bridgeman technique*. Semicond. Sci. Technol. **7** (1992) A269.
- [27] H. G. Brion, H. Siethoff: *The yield point of as-grown and predeformed GaAs:Zn*. J. Appl. Phys. **84** (1998) 4885.
- [28] M. Brohl, H. Alexander: *Microwave conductivity in plastically deformed silicon*. Inst. Phys. Conf. Ser. **104** (1989) 163.
- [29] V. V. Bulatov, J. F. Justo, W. Cai, S. Yip: *Kink asymmetry and multiplicity in dislocation cores*. Phys. Rev. Lett. **79** (1997) 5042.
- [30] R. Bullough, R. C. Newman: *The flow of impurities to an edge dislocation*. Proc. Roy. Soc. A **249** (1959) 427.
- [31] R. Bullough, R. C. Newman: *The growth of impurity atmospheres round dislocations*. Proc. Roy. Soc. A **266** (1962) 198.
- [32] W. Cai, V. V. Bulatov, J. F. Justo, A. S. Argon, S. Yip: *Intrinsic mobility of a dissociated dislocation in silicon*. Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 3346.
- [33] D. Cavalcoli, A. Cavallini, E. Gombia: *Defect states in plastically deformed n-type silicon*. Phys. Rev. B **56** (1997) 10208.
- [34] D. J. Chadi, K. J. Chang: *Magic numbers for vacancy aggregation in crystalline Si*. Phys. Rev. B **38** (1988) 1523.
- [35] E. Christoffel, T. Benchiguer, A. Goltzene, C. Schwab, W. Guangyu, W. Ju: *EPR evidence for As interstitial-related defects in semi-insulating GaAs*. Phys. Rev. B **42** (1990) 3461.
- [36] C. Corbel, F. Pierre, K. Saarinen, P. Hautojärvi, P. Moser: *Gallium vacancies and gallium antisites as acceptors in electron-irradiated semi-insulating GaAs*. Phys. Rev. B **45** (1992) 3386.
- [37] J. W. Corbett, P. Deak, U. V. Desnica, S. J. Pearton: *Hydrogen passivation of damage centers in semiconductors*. Semicond. Semimet. **34** (1991) 49.
- [38] R. M. Cramer, R. Heiderhoff, L. J. Balk: *Scanning near-field cathodoluminescence investigations*. Scanning **20** (1998) 433.
- [39] G. Csányi, T. D. Engeness, S. Ismail-Beigi, T. A. Arias: *New physics of the 30° partial dislocation in silicon revealed through ab initio calculation*. J. Phys. Cond. Mat. **12** (2000) 10029.
- [40] A. M. Cuitiño, M. Ortiz: *Ductile fracture by vacancy condensation in f. c. c. single crystals*. Acta Mater. **44** (1996) 427.
- [41] J. Dabrowski, M. Scheffler: *Isolated arsenic-antisite defect in GaAs and the properties of EL2*. Phys. Rev. B **40** (1989) 10391.
- [42] B. C. De Cooman, C. B. Carter: *High-resolution microscopy of dissociated screw dislocations in GaAs*. phys. stat. sol. (a) **112** (1989) 473.

- [43] K. Detemple, O. Kanert, J. T. M. De Hosson, K. L. Murty: *In situ nuclear magnetic resonance investigation of deformation-generated vacancies in aluminium*. Phys. Rev. B **52** (1995) 125.
- [44] C. Donolato: *On the theory of SEM charge-collection imaging of localized defects in semiconductors*. Optik **52** (1978) 19.
- [45] M. S. Duesbery, B. Joós: *Dislocation motion in silicon: the shuffle–glide controversy*. Phil. Mag. Lett. **74** (1995) 253.
- [46] D. J. Dunstan: *Bulk modulus of GaAs. Stiffness of GaAs. Compliance of GaAs*. In *Properties of gallium arsenide*, Hg. M. Brozel, G. Stillman, London: Institution of Electrical Engineers, 3. Aufl. (1996) S. 16–22.
- [47] J. W. Edington: *Practical electron microscopy in materials science*. Herndon: TechBooks (1976).
- [48] M. Elstner, D. Porezag, G. Jungnickel, J. Elsner, M. Haugk, T. Frauenheim, S. Suhai, G. Seifert: *Self-consistent-charge density-functional tight-binding method for simulations of complex materials properties*. Phys. Rev. B **58** (1998) 7260.
- [49] N. Engler, H. S. Leipner, R. F. Scholz, P. Werner, F. Syrowatka, J. Schreiber, U. Gösele: *Investigations of extended defects after sulfur diffusion in GaAs*. Sol. State Phen. **69–70** (1999) 443.
- [50] B. Escaig: *Sur le glissement dévié des dislocations dans la structure cubique a faces centrées*. J. Physique **29** (1968) 225.
- [51] B. Y. Farber, H. Gottschalk: *Constrictions in the split dislocations as a tool to study dislocation gettering activity in silicon*. In *Polycrystalline semiconductors II*, Hg. J. H. Werner, H. P. Strunk, Berlin: Springer-Verlag (1991) S. 242.
- [52] O. V. Feklisova, G. Mariani-Regula, B. Pichaud, E. B. Yakimov: *Oxygen effect on electrical and optical properties of dislocations in silicon*. phys. stat. sol. (a) **171** (1999) 341.
- [53] W. Frank, A. Seeger: *Theoretical foundation and extension of the trapping model*. Appl. Phys. **3** (1974) 61.
- [54] J. Gebauer: *Native Leerstellen in GaAs – der Einfluß von Stöchiometrie und Dotierung*. Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle–Wittenberg (2000).
- [55] J. Gebauer, F. Börner, R. Krause-Rehberg, T. E. M. Staab, W. Bauer-Kugelmann, G. Kögel, W. Triftshäuser, P. Specht, R. C. Lutz, E. R. Weber, M. Luysberg: *Defect identification in GaAs grown at low temperatures by positron annihilation*. J. Appl. Phys. **87** (2000) 8368.
- [56] J. Gebauer, R. Krause-Rehberg, C. Domke, P. Ebert, K. Urban: *Identification and quantification of defects in highly Si-doped GaAs by positron annihilation and scanning tunneling microscopy*. Phys. Rev. Lett. **78** (1997) 3334.
- [57] J. Gebauer, M. Lausmann, T. E. M. Staab, R. Krause-Rehberg, M. Hakala, M. J. Puska: *Microscopic identification of native donor Ga-vacancy complexes in Te-doped GaAs*. Phys. Rev. B **60** (1999) 1464.
- [58] J. Gebauer, F. Rudolf, A. Polity, R. Krause-Rehberg, J. Martin, P. Becker: *On the sensitivity limit of positron annihilation: detection of vacancies in as-grown silicon*. Appl. Phys. A **68** (1999) 411.
- [59] A. George: *Plastic deformation of semiconductors: some recent advances and persistent challenges*. Mater. Sci. Eng. A **233** (1997) 88.
- [60] A. George, J. Rabier: *Dislocations and plasticity in semiconductors. I – dislocation structures and dynamics*. Rev. Phys. Appl. **22** (1987) 941.
- [61] U. Gösele, T. Y. Tan, M. Schultz, U. Egger, P. Werner, R. Scholz, O. Breitenstein: *Diffusion in GaAs and related compounds: Recent developments*. Def. Diff. Forum **143–147** (1997) 1079.
- [62] P. Guiu, P. Pratt: *Stress relaxation and the plastic deformation of solids*. phys. stat. sol. **6** (1964) 111.
- [63] A. Gustafsson, M. Pistol, L. Montelius, L. Samuelson: *Local probe techniques for luminescence studies of low-dimensional semiconductor structures*. J. Appl. Phys. **84** (1998) 1715.

- [64] Z. Gyulai, D. Hartly: *Z. Phys.* **51** (1928) 378.
- [65] P. Haasen: *Physikalische Metallkunde*. Berlin: Akademie-Verlag (1985).
- [66] T. Haga, M. Suezawa, K. Sumino: *Defects with deep levels in GaAs induced by plastic deformation and electron irradiation*. *Jpn. J. Appl. Phys.* **27** (1988) 1929.
- [67] H. Häkkinen, S. Mäkinen, M. Manninen: *Edge dislocations in fcc metals: Microscopic calculations of core structure and positron states in Al and Cu*. *Phys. Rev. B* **41** (1990) 12441.
- [68] R. A. Hakvoort: *Applications of positron depth profiling*. Dissertation, Technische Universiteit Delft (1993).
- [69] R. N. Hall, J. H. Racette: *Diffusion and solubility of copper in extrinsic and intrinsic germanium, silicon, and gallium arsenide*. *J. Appl. Phys.* **35** (1964) 379.
- [70] M. Haugk, J. Elsner, T. Frauenheim, T. E. M. Staab, C. D. Latham, R. Jones, H. S. Leipner, T. Heine, G. Seifert, M. Sternberg: *Structures, Energetics and Electronic Properties of Complex III–V Semiconductor Systems*. *phys. stat. sol. (b)* **217** (2000) 473.
- [71] C. G. Hübner, H. S. Leipner, R. Krause-Rehberg: *Deformation induced defects in GaAs – the role of dislocations*. *Mater. Sci. Forum* **255–257** (1997) 497.
- [72] C. G. Hübner, H. S. Leipner, O. Storbeck, R. Krause-Rehberg: *Defect characterization in plastically deformed undoped gallium arsenide*. In *The physics of semiconductors*, Hg. M. Scheffler, R. Zimmermann, Bd. 4, Singapore: World Scientific (1996) S. 2805.
- [73] M. Heggie, R. Jones: *Atomic structure of dislocation and kinks in Si*. *Inst. Phys. Conf. Ser.* **87** (1987) 367.
- [74] M. I. Heggie, R. Jones: *Energy levels and properties of defects on reconstructed dislocations in silicon*. *J. Physique* **44** (1983) C4/43.
- [75] W. Hergert, S. Hildebrandt, L. Pasemann: *Theoretical investigations of combined EBIC, LBIC, CL and PL experiments*. *phys. stat. sol. (a)* **102** (1987) 819.
- [76] W. Hergert, L. Pasemann: *Theoretical study of the information depth of the cathodoluminescence signal in semiconductor materials*. *phys. stat. sol. (a)* **85** (1984) 641.
- [77] J. Hess, R. Labusch: *1D conduction and photoconduction measurements at dislocations in Ge*. *phys. stat. sol. (a)* **138** (1993) 617.
- [78] C. Hidalgo, G. González-Doncel, S. Linderoth, J. San Juan: *Structure of dislocations in Al and Fe as studied by positron-annihilation spectroscopy*. *Phys. Rev. B* **45** (1992) 7017.
- [79] V. Higgs, E. C. Lightowers, P. Kightley: *Dislocation related D-band luminescence: The effects of transition metal contamination*. *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **163** (1990) 57.
- [80] V. Higgs, E. C. Lightowers, C. E. Norman, P. Kightley: *Characterization of dislocations in the presence of transition metal contamination*. *Mater. Sci. Forum* **83–87** (1992) 1309.
- [81] S. Hildebrandt, J. Schreiber, W. Hergert: *Recent results in the theoretical description of CL and EBIC defect contrasts*. *J. Physique IV* **1** (1991) C6/39.
- [82] S. Hildebrandt, J. Schreiber, W. Hergert, H. Uniewski, H. S. Leipner: *Theoretical fundamentals and experimental materials and defect studies using quantitative SEM-CL/EBIC on compound semiconductors*. *Scanning Microsc.* **12** (1998) 535.
- [83] S. Hildebrandt, H. Uniewski, J. Schreiber, H. S. Leipner: *Localization of Y luminescence at glide dislocations in cadmium telluride*. *J. Physique III* **7** (1997) 1505.
- [84] P. B. Hirsch: *A mechanism for the effect of doping on dislocation mobility*. *J. Physique* **40** (1979) C6/117.
- [85] J. P. Hirth, J. Lothe: *Theory of dislocations*. New York: Wiley, 2. Aufl. (1982).
- [86] C. H. Hodges, M. J. Stott: *Positrons in metals with voids, vacancies and surfaces*. *Sol. State Commun.* **12** (1973) 1153.

- [87] D. B. Holt: *Defects in the sphalerite structure*. J. Phys. Chem. Sol. **23** (1962) 1353.
- [88] D. B. Holt: *The role of defects in semiconductor materials and devices*. Scanning Microsc. **10** (1996) 1047.
- [89] L. Höring, J. Schreiber, U. Hilpert: *SEM-CL in-situ observation during dislocation motion in GaAs and CdTe*. Sol. State Phen. (2000) im Druck.
- [90] J. Hornstra: *Dislocations in the diamond lattice*. J. Phys. Chem. Sol. **5** (1958) 129.
- [91] C. G. Hübner: *Punktdefektgeneration bei der Versetzungsbewegung*. Dissertation, Martin-Luther Universität Halle–Wittenberg (1998).
- [92] D. Hull, D. J. Bacon: *Introduction to dislocations*. Oxford: Pergamon Press (1992).
- [93] R. Hull, J. C. Bean: *Misfit dislocations in lattice-mismatched epitaxial films*. Crit. Rev. Sol. State Mater. Sci. **17** (1992) 507.
- [94] D. T. J. Hurle: *A comprehensive thermodynamic analysis of native point defect and dopant solubilities in gallium arsenide*. J. Appl. Phys. **85** (1999) 6957.
- [95] A. A. Istratov, O. F. Vyvenko: *DX-like center generated by uniaxial strains of screw dislocations in CdS*. J. Appl. Phys. **80** (1996) 4400.
- [96] R. Jones: *Do we really understand dislocations in semiconductors?* Mater. Sci. Eng. B **71** (2000) 24.
- [97] R. Jones, A. Umerski, P. Sitch, M. I. Heggie, S. Öberg: *First-principles calculations of dislocations in semiconductors*. phys. stat. sol. (a) **137** (1993) 389.
- [98] W. Jüngling, P. Pichler, S. Selberherr, E. Guerrero, H. Pötzl: *Simulation of critical IC fabrication processes using advanced physical and numerical methods*. IEEE Trans. Electron Dev. **ED-32** (1985) 156.
- [99] J. F. Justo, M. de Koning, W. Cai, V. V. Bulatov: *Vacancy interaction with dislocations in silicon: The shuffle–glide competition*. Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 2172.
- [100] J. F. Justo, A. Fazzio, A. Antonelli: *Dislocation core reconstruction in zinc-blende semiconductors*. J. Phys. Cond. Mat. **12** (2000) 10039.
- [101] A. Kailer: *Lokale Schädigung von Oberflächen und Phasenumwandlungen in harten, spröden Materialien verursacht durch mechanischen Kontakt*. Aachen: Shaker (1999).
- [102] Y. Kamimura, T. Tsutsumi, E. Kuramoto: *Calculations of positron lifetimes in a jog and vacancies on an edge-dislocation line in Fe*. Phys. Rev. B **52** (1995) 879.
- [103] A. Kawasuso, M. Suezawa, M. Hasegawa, S. Yamaguchi, K. Sumino: *Positron annihilations associated with defects in plastically deformed Si*. Jpn. J. Appl. Phys. Pt. 1 **34** (1995) 4579.
- [104] T. A. Kennedy, P. J. Lin-Chung: *Stoichiometric defects in InP*. Semicond. Semimet. **31** (1990) 357.
- [105] L. C. Kimerling, J. L. Patel: *Defect states associated with dislocations in silicon*. Appl. Phys. Lett. **34** (1979) 73.
- [106] F. G. Kirscht, J. Doerschel: *The dislocation structure of plastically deformed silicon with different sample orientation*. phys. stat. sol. (a) **58** (1980) K5.
- [107] C. Kisielowski-Kemmerich: *Vacancies and their complexes in the core of screw dislocations: Models which account for ESR investigations of deformed silicon*. phys. stat. sol. (b) **161** (1990) 11.
- [108] C. Kittel: *Einführung in die Festkörperphysik*. München: Oldenbourg, 12. Aufl. (1999).
- [109] M. Kittler, W. Seifert: *Bright EBIC contrast of crystal defects in silicon*. In *Polycrystalline semiconductors II*, Hg. J. Werner, H. Strunk, Berlin: Springer-Verlag (1991) S. 96.
- [110] M. Kittler, W. Seifert: *Two types of electron-beam-induced current behaviour of misfit dislocations in Si(Ge): experimental observations and modelling*. Mater. Sci. Eng. B **24** (1994) 78.
- [111] M. Kittler, W. Seifert: *EBIC defect characterization: state of understanding and problems of interpretation*. Mater. Sci. Eng. B **42** (1996) 8.

- [112] H. R. Kolar, J. C. H. Spence, H. Alexander: *Observation of moving dislocation kinks and unpinning*. Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 4031.
- [113] R. Krause, K. Saarinen, P. Hautojärvi, A. Polity, G. Gärtner, C. Corbel: *Observation of a monovacancy in the metastable state of the EL2 defect in GaAs by positron annihilation*. Phys. Rev. Lett. **65** (1990) 3329.
- [114] R. Krause-Rehberg, M. Brohl, H. S. Leipner, T. Drost, A. Polity, U. Beyer, H. Alexander: *Defects in plastically deformed semiconductors studied by positron annihilation: silicon and germanium*. Phys. Rev. B **47** (1993) 13266.
- [115] R. Krause-Rehberg, T. Drost, A. Polity, G. Roos, G. Pensl, D. Volm, B. K. Meyer, G. Bischofink, K. W. Benz: *Evidence for a vacancy-related ground state of the DX center in Al_xGa_{1-x}Sb: a positron-annihilation study*. Phys. Rev. B **48** (1993) 11723.
- [116] R. Krause-Rehberg, H. S. Leipner: *Determination of absolute vacancy concentrations in semiconductors by means of positron annihilation*. Appl. Phys. A **64** (1997) 457.
- [117] R. Krause-Rehberg, H. S. Leipner: *Positron annihilation in semiconductors*. Berlin: Springer-Verlag (1999).
- [118] R. Krause-Rehberg, H. S. Leipner, A. Kupsch, A. Polity, T. Drost: *Positron study of defects in as-grown and plastically deformed GaAs:Te*. Phys. Rev. B **49** (1994) 2385.
- [119] R. Krause-Rehberg, H. S. Leipner, A. Polity, F. Rudolf, R. Hammer, M. Jurisch: *Mechanical damage in GaAs wafers introduced by a diamond saw: A study by means of positron annihilation and electron microscopy*. phys. stat. sol. (a) **158** (1996) 377.
- [120] J. Krüger: *ESR-Untersuchungen von Antisite-Defekten in GaAs*. Dissertation, Universität Köln (1992).
- [121] J. Krüger, H. Alexander: *EPR of anion- and kation-antisite-defects in plastically deformed GaAs and GaP*. Mater. Sci. Forum **83-87** (1992) 899.
- [122] L. P. Kubin: *Description de la préplasticité par la théorie des phénomènes thermiquement activés*. Phil. Mag. **30** (1974) 705.
- [123] S. Kuisma, K. Saarinen, P. Hautojärvi, Z.-Q. Fang, D. Look: *Microscopic nature of thermally stimulated current and electrical compensation in semi-insulating GaAs*. J. Appl. Phys. **81** (1997) 3512.
- [124] S. Kusanagi, T. Sekiguchi, B. Shen, K. Sumino: *Electrical activity of extended defects and gettering of metallic impurities in silicon*. Mater. Sci. Technol. **11** (1995) 685.
- [125] S. Kusanagi, T. Sekiguchi, K. Sumino: *Energy states of deformation-induced dislocations in silicon crystals*. Mater. Sci. Forum **196-201** (1995) 1195.
- [126] R. Labusch: *Conductivity and photoconductivity at dislocations*. J. Phys. III **7** (1997) 1411.
- [127] C. Le Berre, C. Corbel, K. Saarinen, S. Kuisma, P. Hautojärvi, R. Fornari: *Evidence of two kinds of acceptors in undoped semi-insulating GaAs: positron trapping at gallium vacancies and negative ions*. Phys. Rev. B **52** (1995) 8112.
- [128] N. Lehto, S. Öberg: *Interaction of vacancies with partial dislocations in silicon*. Phys. Rev. B **56** (1997) R12706.
- [129] N. Lehto, S. Öberg: *Effects of dislocation interactions: Application to the period-doubled core of the 90° partial in silicon*. Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 5568.
- [130] H. Lei, H. S. Leipner, N. Engler: *unpublizierte Ergebnisse* (2000).
- [131] H. S. Leipner, C. Hübner, O. Storbeck, A. Polity, R. Krause-Rehberg: *Defect characterization in plastically deformed gallium arsenide*. In *Semiconducting and insulating materials 1996*, Piscataway: Institute of Electrical and Electronic Engineers (1996) S. 283–286.
- [132] H. S. Leipner, C. G. Hübner, T. E. M. Staab, M. Haugk, R. Krause-Rehberg: *Positron annihilation at dislocations and related point defects in semiconductors*. phys. stat. sol. (a) **171** (1999) 377.

- [133] H. S. Leipner, C. G. Hübner, P. Grau, R. Krause-Rehberg: *Defect investigations in plastically deformed gallium arsenide*. Physica B **273-274** (1999) 710.
- [134] H. S. Leipner, C. G. Hübner, J. Krüger, R. Krause-Rehberg: *Study of plastically deformed semiconductors by means of positron annihilation*. Mater. Sci. Forum **258-263** (1997) 981.
- [135] H. S. Leipner, C. G. Hübner, T. E. M. Staab, M. Haugk, A. Sieck, R. Krause-Rehberg, T. Frauenheim: *Vacancy clusters in plastically deformed semiconductors*. J. Phys. Cond. Mat. **12** (2000) 10071.
- [136] H. S. Leipner, C. G. Hübner, T. E. M. Staab, R. Krause-Rehberg: *Open-volume defects in plastically deformed semiconductors*. Mater. Sci. Forum **363-365** (2001) 61.
- [137] H. S. Leipner, R. Krause-Rehberg, C. Hübner: *Generation of point defects during plastic deformation of InP*. Mater. Sci. Forum **196-201** (1995) 1267.
- [138] H. S. Leipner, R. Krause-Rehberg, A. Kupsch, T. Drost, A. Polity: *Electron microscopy and positron investigations of plastically deformed GaAs*. phys. stat. sol. (a) **138** (1993) 489.
- [139] H. S. Leipner, R. Krause-Rehberg, A. Polity, T. Drost, H. Alexander: *Relation between dislocation motion and formation of intrinsic point defects*. Mater. Sci. Forum **143-147** (1994) 1589.
- [140] H. S. Leipner, D. Lorenz, A. Zeckzer, P. Grau: *Dislocation-related pop-in effect in gallium arsenide*. phys. stat. sol. (b) **183** (2001) R4.
- [141] H. S. Leipner, R. Scholz, F. Syrowatka, H. Uniewski, J. Schreiber: *Study of copper aggregations at dislocations in GaAs*. Mater. Sci. Eng. B **42** (1996) 185.
- [142] H. S. Leipner, R. F. Scholz, N. Engler, F. Börner, P. Werner, U. Gösele: *Diffusivity of arsenic interstitials in GaAs studied by sulfur in-diffusion*. Physica B **273-274** (1999) 697.
- [143] H. S. Leipner, R. F. Scholz, F. Syrowatka, J. Schreiber, P. Werner: *Copper diffusion in dislocation-rich gallium arsenide*. Phil. Mag. A **79** (1999) 2785.
- [144] H. S. Leipner, J. Schreiber, L. Höring: *Defects generated by micro-deformation of cadmium telluride single crystals*. Cryst. Res. Technol. (2000) eingereicht.
- [145] H. S. Leipner, J. Schreiber, M. Surowiec: *Perfect and partial dislocations in microdeformed GaAs*. In *Electron microscopy in plasticity and fracture research of materials*, Hg. U. Messerschmidt, F. Appel, J. Heydenreich, V. Schmidt, Berlin: Akademie-Verlag (1990) S. 193.
- [146] H. S. Leipner, J. Schreiber, H. Uniewski, S. Hildebrandt: *Dislocation luminescence in cadmium telluride*. Scanning Microsc. **11** (1997) 149.
- [147] F. Liu, M. Mostoller, V. Milman, M. F. Chisholm, T. Kaplan: *Electronic and elastic properties of edge dislocations in Si*. Phys. Rev. B **51** (1995) 17192.
- [148] F. Louchet, J. Thibault: *On the shuffle-glide controversy*. Inst. Phys. Conf. Ser. **104** (1989) 47.
- [149] F. Louchet, J. Thibault-Desseaux: *Dislocation cores in semiconductors. From the «shuffle or glide» dispute to the «glide and shuffle» partnership*. Rev. Phys. Appl. **22** (1987) 207.
- [150] K. M. Luken, R. A. Morrow: *Formation energies and charge states of native defects in GaAs: a selected compilation from the literature*. Semicond. Sci. Technol. **11** (1996) 1156.
- [151] M. Luysberg, D. Gerthsen, K. Urban: *High-resolution electron microscopy of dislocation dipoles in plastically deformed InP*. Phil. Mag. Lett. **65** (1992) 121.
- [152] K. Maeda: *A unified view on the Peierls mechanism in covalent crystals*. In *Dislocations in solids*, Hg. H. Suzuki, T. Ninomiya, S. Takeuchi, University of Tokyo Press (1985) S. 425.
- [153] K. Maeda, S. Takeuchi: *Recombination enhanced mobility of dislocations in III-V compounds*. J. Physique **44** (1983) C4/375.
- [154] S. Mahajan: *Growth- and processing-induced defects in semiconductors*. Progr. Mater. Sci. **33** (1989) 1.
- [155] S. Mahajan: *Defects in semiconductors and their effects on devices*. Acta Mater. **48** (2000) 137.

- [156] M. O. Manasreh, D. W. Fischer: *Infrared absorption of electron irradiation induced deep defects in semi-insulating GaAs*. Appl. Phys. Lett. **53** (1988) 2429.
- [157] M. O. Manasreh, D. W. Fischer: *Electron-irradiation effects on the infrared absorption properties of the EL2 defect in GaAs*. Phys. Rev. B **39** (1989) 3871.
- [158] M. Manninen, R. M. Nieminen: *Positron detrapping from defects: A thermodynamic approach*. Appl. Phys. A **26** (1981) 93.
- [159] S. Marklund: *Structure and energy levels of dislocations in silicon*. J. Physique **44** (1983) C4/25.
- [160] S. Marklund, Y.-L. Wang: *Electron states of a vacancy in the core of the 90° partial dislocation in silicon*. phys. stat. sol. (b) **189** (1995) 473.
- [161] G. M. Martin: *Optical assessment of the main electron trap in bulk semi-insulating GaAs*. Appl. Phys. Lett. **39** (1981) 747.
- [162] G. M. Martin, E. Esteve, P. Langlade, S. Makram-Ebeid: *Kinetics of formation of the midgap donor EL2 in neutron irradiated GaAs materials*. J. Appl. Phys. **56** (1984) 2655.
- [163] M. Matsui, T. Yokoyama: *Dislocation velocity in In-doped GaAs crystal*. Inst. Phys. Conf. Ser. **79** (1985) 13.
- [164] H. Mecking, Y. Estrin: *The effect of vacancy generation on plastic deformation*. Scr. Metall. **14** (1980) 815.
- [165] U. Messerschmidt, M. Bartsch: *Interaction between dislocations and precipitates in an Al-Li alloy*. Mater. Sci. Eng. A **164** (1993) 332.
- [166] M. Militzer, W. P. Sun, J. J. Jonas: *Effect of deformation-induced vacancies on recrystallization*. Mater. Sci. Forum **113–115** (1993) 163.
- [167] M. Militzer, W. P. Sun, J. J. Jonas: *Modelling the effect of deformation-induced vacancies on segregation and precipitation*. Acta Metall. Mater. **42** (1994) 133.
- [168] P. M. Mooney, K. Shum: *Dislocation-related electronic states in strain-relaxed Si_{1-x}Ge_x/Si epitaxial layers grown at low temperature*. Mater. Sci. Forum **258–263** (1997) 151.
- [169] N. S. Mott: Trans. Met. Soc. AIME **218** (1960) 962.
- [170] S. M. Myers, D. M. Follstaedt: *Forces between cavities and dislocations and their influence on semiconductor microstructures*. J. Appl. Phys. **86** (1999) 3048.
- [171] S. Nakamura: *The roles of structural imperfections in InGaN-based blue light-emitting diodes and laser diodes*. Science **281** (1998) 956.
- [172] H. Nakashima: *Photoluminescence of donor doped GaAs diffused with copper*. Jpn. J. Appl. Phys. **10** (1971) 1737.
- [173] R. J. Needs, A. Mujica: *First-principles pseudopotential study of the structural phases of silicon*. Phys. Rev. B **51** (1995) 9652.
- [174] R. M. Nieminen, J. Laakkonen: *Positron trapping rate into vacancy clusters*. Appl. Phys. **20** (1979) 181.
- [175] J. E. Northrup, S. B. Zhang: *Dopant and defect energetics: Si in GaAs*. Phys. Rev. B **47** (1993) 6791.
- [176] S. Öberg: *Electronic state calculations of dislocations in cadmium telluride*. phys. stat. sol. (b) **108** (1981) 357.
- [177] S. Öberg, P. K. Sitch, R. Jones, M. I. Heggie: *First-principles calculations of the energy barrier to dislocation motion in Si and GaAs*. Phys. Rev. B **51** (1995) 13138.
- [178] A. Olsen, J. C. H. Spence: *Distinguishing dissociated glide and shuffle set dislocation by high resolution electron microscopy*. Phil. Mag. A **43** (1981) 945.
- [179] P. Omling, E. R. Weber, L. Montelius, H. Alexander, J. Michel: *Electrical properties of dislocations and point defects in plastically deformed silicon*. Phys. Rev. B **32** (1985) 6571.

- [180] M. Omri, J. Michel, A. George: *Plastic deformation of gallium antimonide single crystals: yield stresses, activation parameters and dislocation structures*. Phil. Mag. A **62** (1990) 203.
- [181] M. Omri, C. Tete, J. Michel, A. George: *On the yield point of floating-zone silicon single crystals I. Yield stresses and activation parameters*. Phil. Mag. A **55** (1987) 601.
- [182] E. Orowan: *Zur Kristallplastizität. III. Über den Mechanismus des Gleitvorganges*. Z. Phys. **89** (1934) 634.
- [183] V. B. Osvenskii, L. P. Kholodnyi: *Mobility of individual dislocations in gallium arsenide*. Sov. Phys. Sol. State **14** (1973) 2822.
- [184] O. Paetzold, K. Sonnenberg, G. Irmer: *Defect processes causing free carrier variations around dislocations in n-type doped GaAs*. Mater. Sci. Eng. B **44** (1997) 217.
- [185] L. Pasemann: *A contribution to the theory of the EBIC contrast of lattice defects in semiconductors*. Ultramicrosc. **6** (1981) 237.
- [186] L. Pasemann, W. Hergert: *A theoretical study of the determination of the depth of a dislocation by combined use of EBIC and CL technique*. Ultramicrosc. **19** (1986) 15.
- [187] R. Peierls: Proc. Roy. Soc. **52** (1940) 28.
- [188] K. Petters: *Untersuchung des Bildungs- und Ausheilverhaltens von bestrahlungsinduzierten Defekten in Metallen*. Diplomarbeit, Martin-Luther-Universität Halle–Wittenberg (1998).
- [189] K. Petters, J. Gebauer, H. S. Leipner, R. Krause-Rehberg: *Formation of vacancy clusters during copper diffusion in semiinsulating GaAs*. Mater. Sci. Forum **363–365** (2000) 111.
- [190] B. Pichaud, G. Mariani-Regula, E. B. Yakimov: *Interaction of gold with dislocations in silicon*. Mater. Sci. Eng. B **71** (2000) 272.
- [191] P. Pirouz, A. V. Samant, M. H. Hong, A. Moulin, L. P. Kubin: *On temperature dependence of deformation mechanism and the brittle–ductile transition in semiconductors*. J. Mater. Res. **14** (1999) 2783.
- [192] A. D. Pogrebnnyak: *Positron and positronium states in semiconductors irradiated by supercurrent beams of charged particles*. phys. stat. sol. (a) **86** (1984) 191.
- [193] M. Polanyi: Z. Phys. **89** (1934) 660.
- [194] A. Polity: *Strahlendefekte in Halbleitern*. Habilitation, Martin-Luther-Universität Halle–Wittenberg (1999).
- [195] A. Polity, F. Rudolf, C. Nagel, S. Eichler, R. Krause-Rehberg: *Defects in electron-irradiated GaAs studied by positron lifetime spectroscopy*. Phys. Rev. B **55** (1997) 10467.
- [196] L. E. Popov, V. A. Starenchenko, I. I. Shalygin: *Rate of generation of point defects as a result of plastic deformation*. Fiz. Met. Metalloved. **6** (1990) 31.
- [197] J. A. Powell, D. J. Larkin: *Process-induced morphological defects in epitaxial CVD silicon carbide*. phys. stat. sol. (b) **202** (1997) 529.
- [198] M. Puska: *Elinaikaspektrin sovitusohjelman LIFSPECFIT kehittäminen*. Otaniemi (1978).
- [199] M. J. Puska, C. Corbel: *Positron states in Si and GaAs*. Phys. Rev. B **38** (1988) 9874.
- [200] M. J. Puska, C. Corbel, R. M. Nieminen: *Positron trapping in semiconductors*. Phys. Rev. B **41** (1990) 9980.
- [201] M. J. Puska, S. Mäkinen, R. M. Nieminen: *Screening of positrons in semiconductors and insulators*. Phys. Rev. B **39** (1989) 7666.
- [202] M. J. Puska, R. M. Nieminen: *Defect spectroscopy with positrons: a general calculational method*. J. Phys. F **13** (1983) 333.
- [203] M. J. Puska, R. M. Nieminen: *Theory of positrons in solids and on solid surfaces*. Rev. Mod. Phys. **66** (1994) 841.

- [204] M. J. Puska, A. P. Seitsonen, R. M. Nieminen: *Electron-positron Car–Parinello methods: Self-consistent treatment of charge densities and ionic relaxations*. Phys. Rev. B **52** (1995) 10947.
- [205] H. J. Queisser, E. E. Haller: *Defects in semiconductors: Some fatal, some vital*. Science **281** (1998) 945.
- [206] J. Rabier, J. L. Demenet: *Low temperature, high stress plastic deformation of semiconductors: The silicon case*. phys. stat. sol. (b) **222** (2000) 63.
- [207] W. T. Read: *Theory of dislocations in germanium*. Phil. Mag. **45** (1954) 775.
- [208] Y. T. Rebane, Y. G. Shreter: *Dislocation-related excitons in semiconductors*. In *Polycrystalline semiconductors II*, Hg. J. H. Strunk, H. P. Werner, Berlin: Springer-Verlag (1991) S. 28.
- [209] C. V. Reddy, S. Fung, C. D. Beling: *Nature of the bulk defects in GaAs through high-temperature quenching studies*. Phys. Rev. B **54** (1996) 11290.
- [210] C. V. Reddy, Y. L. Luo, S. Fung, C. D. Beling: *DX-like properties of the EL6 defect family in GaAs*. Phys. Rev. B **58** (1998).
- [211] Q. Ren, B. Joós, M. S. Duesbery: *Test of the Peierls–Nabarro model for dislocations in silicon*. Phys. Rev. B **52** (1995) 13223.
- [212] M. Rühle, M. Wilkens: *Defocusing contrast of cavities I. Theory*. Crystal Lattice Defects **6** (1975) 129.
- [213] K. Saarinen, P. Hautojärvi, A. Vehanen, R. Krause, G. Dlubek: *Shallow positron traps in GaAs*. Phys. Rev. B **39** (1989) 5287.
- [214] K. Saarinen, J. Nissilä, J. Oila, V. Ranki, M. Hakala, M. J. Puska, P. Hautojärvi, J. Likonen, T. Suski, I. Grzegory, B. Lucznik, S. Porowski: *Observation of Ga vacancies and negative ions in undoped and Mg-doped GaN bulk crystals*. Physica B **273–274** (1999) 33.
- [215] K. Saarinen, A. P. Seitsonen, P. Hautojärvi, C. Corbel: *Introduction and recovery of point defects in electron-irradiated Te- and Si-doped GaAs studied by positron lifetime spectroscopy*. Phys. Rev. B **52** (1995) 10932.
- [216] R. Sauer, J. Weber, J. Stolz, E. R. Weber, K. H. Küsters, H. Alexander: *Dislocation-related photoluminescence in silicon*. Appl. Phys. A **36** (1985) 1.
- [217] R. Schmid-Fetzer: *Stability of metal/GaAs-interfaces: A phase diagram survey*. J. Electron. Mater. **17** (1988) 193.
- [218] G. Schoeck: *The activation energy of dislocation movement*. phys. stat. sol. **8** (1965) 499.
- [219] R. F. Scholz: *Untersuchungen zur Diffusion von Eigenpunktdefekten in Silizium und Galliumarsenid*. Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle–Wittenberg (1999).
- [220] R. F. Scholz, P. Werner, U. Gösele, N. Engler, H. S. Leipner: *Determination of arsenic diffusion parameters by sulfur indiffusion in gallium arsenide*. J. Appl. Phys. **88** (2000) 7045.
- [221] J. Schreiber, W. Hergert, S. Hildebrandt: *Combined application of SEM-CL and SEM-EBIC for the investigation of compound semiconductors*. Appl. Surf. Sci. **50** (1991) 181.
- [222] J. Schreiber, S. Hildebrandt, H. S. Leipner: *Studies on carrier recombination at dislocations in compound semiconductors by combined SEM-CL/EBIC measurements*. phys. stat. sol. (a) **138** (1993) 705.
- [223] J. Schreiber, S. Hildebrandt, H. Uniewski, V. Bechstein: *Investigation of the low temperature CL contrasts of dislocations in compound semiconductors*. Mater. Sci. Eng. B **42** (1996) 24.
- [224] J. Schreiber, L. Höring, H. Uniewski, S. Hildebrandt, H. S. Leipner: *Recognition and distribution of A(g) and B(g) dislocations in indentation deformation zones on {111} and {110} surfaces of CdTe*. phys. stat. sol. (a) **171** (1999) 89.
- [225] W. Schröter: *Electronic states at dislocations and their influence on the physical properties of semiconductors*. Inst. Phys. Conf. Ser. **46** (1979) 114.

- [226] W. Schröter, H. Brion, H. Siethoff: *Yield point and dislocation mobility in silicon and germanium*. J. Appl. Phys. **54** (1983) 1816.
- [227] A. Seeger: *The study of defects in crystals by positron annihilation*. Appl. Phys. **4** (1974) 183.
- [228] F. Seitz: *Influence of plastic flow on the electrical and photographic properties of the alkali halide crystals*. Phys. Rev. **80** (1950) 239.
- [229] T. Sekiguchi, K. Sumino: *Cathodoluminescence study on the dislocations in silicon*. J. Appl. Phys. **79** (1996) 3253.
- [230] Y. Shirai, K. Matsumoto, G. Kawaguchi, M. Yamaguchi: *Systematic change in positron lifetime with the magnitude of Burgers vectors of dislocations in metals*. Mater. Sci. Forum **105–110** (1991) 1225.
- [231] W. Shockley: *Dislocations and edge states in diamond crystal structures*. Phys. Rev. **91** (1953) 228.
- [232] A. Shukla, L. Hoffmann, A. Manuel, M. Peter: Mater. Sci. Forum **175–178** (1985) 939.
- [233] B. Sieber, J. L. Farvacque, A. Miri: *Cathodoluminescence evidence of the relative position of As(g) and Ga(g) dislocation-related energy bands in gallium arsenide*. phys. stat. sol. (a) **138** (1993) 673.
- [234] H. Siethoff: *The plasticity of elemental and compound semiconductors*. Semicond. Semimet. **37** (1992) 143.
- [235] H. Siethoff: *Dynamical recovery, dislocation mobility, and diffusion in undoped semiconductors*. phys. stat. sol. (a) **138** (1993) 591.
- [236] H. Siethoff, K. Ahlborn: *A new regime of dynamic recovery in the high-temperature deformation of semiconductors*. Phil. Mag. A **69** (1994) 793.
- [237] H. Siethoff, R. Behrensmeier: *Plasticity of undoped GaAs deformed under liquid encapsulation*. J. Appl. Phys. **67** (1990) 3673.
- [238] H. Siethoff, H. G. Brion, W. Schröter: *Plastic deformation of GaSb and the influence of stacking-fault energy on dynamical recovery of semiconductors*. phys. stat. sol. (a) **125** (1991) 191.
- [239] H. Siethoff, W. Schröter: *New phenomena in the plasticity of semiconductors and fcc metals at high temperatures. Part I: Theoretical models*. Z. Metallkde. **75** (1984) 475.
- [240] P. Sitch, R. Jones, S. Öberg, M. I. Heggie: *Structures of dislocations in GaAs and their modification by impurities*. Phys. Rev. B **50** (1994) 17717.
- [241] M. Skowronski, J. Lagowski, M. Milshtein, C. H. Kang, F. P. Dabkowski, A. Hennel, H. C. Gatos: *Effect of plastic deformation on electronic properties of GaAs*. J. Appl. Phys. **62** (1987) 3791.
- [242] L. C. Smedskjaer, M. Manninen, M. J. Fluss: *An alternative interpretation of positron annihilation in dislocations*. J. Phys. F **10** (1980) 2237.
- [243] B. Somieski, T. E. M. Staab, R. Krause-Rehberg: *The data treatment influence on the spectra decomposition in positron lifetime spectroscopy. Part 1: On the interpretation of multi-component analysis studied by Monte Carlo simulated model spectra*. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A **381** (1996) 128.
- [244] K. Sonnenberg: *Defect studies in GaAs by NIR-microscopy with different contrast techniques*. IFF-Bull. **51** (1997) 14.
- [245] T. E. M. Staab, M. Haugk, T. Frauenheim, H. S. Leipner: *Magic number vacancy aggregates in GaAs: structure and positron lifetime studies*. Phys. Rev. Lett. **83** (1999) 5519.
- [246] T. E. M. Staab, M. Haugk, A. Sieck, T. Frauenheim, H. S. Leipner: *Magic number vacancy aggregates in Si and GaAs – structure and positron lifetime studies*. Physica B **273–274** (1999) 501.
- [247] T. E. M. Staab, A. Sieck, M. Haugk, M. J. Puska, T. Frauenheim, H. S. Leipner: *Stability of large vacancy clusters in silicon*. Phys. Rev. B (2000) eingereicht.
- [248] J. W. Steeds: *Performance and applications of a STEM-cathodoluminescence system*. Rev. Phys. Appl. **24** (1989) 65.

- [249] H. Steinhardt, P. Haasen: *Creep and dislocation velocities in gallium arsenide*. phys. stat. sol. (a) **49** (1978) 93.
- [250] A. Stepanov: Z. Phys. **81** (1933) 560.
- [251] O. Storbeck: *FTIR-Spektroskopie von deformationsinduzierten Defekten in Galliumarsenid*. Diplomarbeit, Martin-Luther-Universität Halle–Wittenberg (1994).
- [252] K. Sumino: *Impurity effects on dynamic behaviour of dislocations in semiconductors*. Inst. Phys. Conf. Ser. **104** (1989) 245.
- [253] K. Sumino: *Mechanical behaviour of semiconductors*. In *Handbook of semiconductors*, Hg. S. Mahajan, Bd. 3A: Materials, properties and preparation, Amsterdam: North-Holland (1994) S. 73.
- [254] K. Sumino, I. Yonenaga: *Dislocation dynamics and mechanical behaviour of elemental and compound semiconductors*. phys. stat. sol. (a) **138** (1993) 573.
- [255] M. R. Surowiec, H. S. Leipner, J. Schreiber: *Dislocations around scratches and indents on $\pm(111)$ surfaces of gallium arsenide*. J. Appl. Cryst. **22** (1989) 606.
- [256] K. Suzuki, N. Maeda, S. Takeuchi: *High resolution electron microscopy of dissociated dislocations in silicon with a normal-incident electron beam*. Phil. Mag. A **73** (1996) 431.
- [257] T. Suzuki, T. Nishisako, T. Taru, T. Yasutomi: *Plastic deformation in InP at temperatures between 77 and 500 K*. Phil. Mag. Lett. **77** (1998) 173.
- [258] T. Suzuki, T. Yasutomi, T. Tokuoka, I. Yonenaga: *Plasticity of III–V compounds at low temperatures*. phys. stat. sol. (a) **171** (1999) 47.
- [259] T. Y. Tan, U. Gösele, S. Yu: *Point defects, diffusion mechanisms, and superlattice disordering in gallium arsenide-based materials*. Crit. Rev. Sol. State Mater. Sci. **17** (1991) 47.
- [260] G. I. Taylor: Proc. Roy. Soc. A **145** (1934) 362.
- [261] M. Troyon, D. Pastré, J. P. Jouart, J. L. Beaudoin: *Scanning near-field cathodoluminescence microscopy*. Ultramicrosc. **75** (1998) 15.
- [262] G. Trumpy, M. D. Bentzon: *Positron trapping at voids in metals: a generalized model*. J. Phys. Cond. Mat. (1992) 419.
- [263] M. Uematsu, K. Wada, U. Gösele: *Non-equilibrium point defect phenomena influencing beryllium and zinc diffusion in GaAs and related compounds*. Appl. Phys. A **55** (1992) 301.
- [264] M. Uematsu, P. Werner, M. Schultz, T. Y. Tan, U. Gösele: *Sulfur diffusion and the interstitial contribution to arsenic self-diffusion in GaAs*. Appl. Phys. Lett. **67** (1995) 2863.
- [265] G. Vanderschaeve, B. Escaig: *Cross-slip of Shockley partial dislocations via the stair-rod mode*. In *Dislocations in solids*, Hg. H. Suzuki, T. Ninomiya, S. Takeuchi, Tokyo: University of Tokyo (1985) S. 319.
- [266] T. Vegge, T. Rasmussen, T. Leffers, O. B. Pedersen, K. W. Jacobsen: *Determination of the rate cross slip of screw dislocations*. Phys. Rev. Lett. **85** (2000) 3866.
- [267] M. Wattenbach, C. Kisielowski-Kemmerich, H. Alexander, V. V. Kveder, T. R. Mchedlidze, Y. A. Ossipyan: *Electric-dipole spin resonance of dislocations in plastically deformed p-type silicon*. phys. stat. sol. (b) **158** (1990) K49.
- [268] E. R. Weber, H. Alexander: *Deep level defects in plastically deformed silicon*. J. Physique **44** (1983) C4/319.
- [269] E. R. Weber, H. Ennen, U. Kaufmann, J. Windscheif, J. Schneider, T. Wosinski: *As_{Ga} in plastically deformed GaAs*. J. Appl. Phys. **53** (1982) 6140.
- [270] J. Weertman, J. R. Weertman: *Mechanical properties, strongly temperature-dependent*. In *Physical metallurgy*, Hg. R. Cahn, P. Haasen, Bd. 2, Amsterdam: Elsevier (1983) S. 1309.
- [271] K. Wessel, H. Alexander: *On the mobility of partial dislocations in Si*. Phil. Mag. **35** (1977) 1523.

- [272] J. Weyher, J. van de Ven: *Selective etching and photoetching of {001} gallium arsenide in CrO₃-HF aqueous solution. I. Influence of composition on etching behaviour*. J. Cryst. Growth **63** (1983) 285.
- [273] T. Wider, S. Hansen, U. Holzwarth, K. Maier: *Sensitivity of positron annihilation to plastic deformation*. Phys. Rev. B **57** (1998) 5126.
- [274] V. A. Wilkinson, A. R. Adams: *Direct bandgap of GaAs, pressure dependence*. In *Properties of gallium arsenide*, Hg. M. R. Brozel, G. E. Stillman, London: The Institution of Electrical Engineers, 3. Aufl. (1996) S. 153.
- [275] E. W. Williams: *Evidence for self-activated luminescence in GaAs: The gallium vacancy-donor center*. Phys. Rev. (1968) 922.
- [276] P. R. Wilshaw, T. S. Fell: *The electronic properties of dislocations in silicon*. Inst. Phys. Conf. Ser. **104** (1989) 85.
- [277] P. R. Wilshaw, T. S. Fell, G. R. Booker: *Recombination at dislocations in silicon and gallium arsenide*. In *Point and extended defects in semiconductors*, Hg. G. Benedek, A. Cavallini, W. Schröter, New York: Plenum Press (1989) S. 243.
- [278] T. Wosinski: *Electronic properties of dislocations in GaAs*. In *Defect control in semiconductors*, Hg. K. Sumino, Amsterdam: Elsevier (1990) S. 1465.
- [279] T. Wosinski, T. Figielski: *Electronic properties of dislocations and associated point defects in GaAs*. Inst. Phys. Conf. Ser. **104** (1989) 151.
- [280] T. Wosinski, A. Zozime, A. Rivière: *Cathodoluminescence and electron-beam-induced current investigations of single dislocations in GaAs*. Mater. Sci. Eng. B **24** (1994) 112.
- [281] K. Yamanaka, K. Suzuki, S. Ishida, Y. Arakawa: *Light emission from individual self-assembled InAs/GaAs quantum dots excited by tunneling current injection*. Appl. Phys. Lett. **73** (1998) 1460.
- [282] M. Zehetbauer: *Cold work hardening in stages IV and V of f. c. c. metals – II. Model fits and physical results*. Acta Metall. Mater. **41** (1993) 588.
- [283] M. Zehetbauer, V. Seumer: *Cold work hardening in stages IV and V of f. c. c. metals – I. experiments and interpretation*. Acta Metall. Mater. **41** (1993) 577.
- [284] S. B. Zhang, J. E. Northrup: *Chemical potential dependence of defect formation energies in GaAs: Application to Ga self-diffusion*. Phys. Rev. Lett. **67** (1991) 2339.
- [285] S. J. Zhou, D. L. Preston, F. Louchet: *Investigation of vacancy formation by a jogged dissociated dislocation with large-scale molecular dynamics and dislocation energetics*. Acta Mater. **47** (1999) 2695.
- [286] I. Zongo, J. L. Farvacque: *Connection between the Schoeck and the Haasen analysis of thermally activated dislocation glide in semiconductors*. phys. stat. sol. (a) **142** (1994) 383.
- [287] A. Zozime, I. Hanke, W. Schröter: *Point defect interaction with α - and β -dislocations in InP*. phys. stat. sol. (a) **138** (1993) 445.

Danksagung

An erster Stelle gebührt mein Dank Herrn Prof. H-R. Höche. Ohne die großzügigen Freiräume, die er mir für meine eigene wissenschaftliche Arbeit schuf, seine beständige Unterstützung und seinen fachlichen Rat wäre diese Arbeit nicht zustande gekommen. Besonderer Dank auch an Dr. R. Krause-Rehberg, der mich mit seiner Euphorie für die Positronenannihilation ansteckte und mit dem ich so manche Stunde in seinem engen Arbeitszimmer vor dem Computer und einem Stapel Papier zubrachte.

Die ersten Anregungen, mich dem Gebiet der Versetzungen und Punktdefekte zuzuwenden, kamen von Prof. H. Alexander. In dessen Kölner Gruppe konnte ich wichtige Erfahrungen in der Deformation und Defektcharakterisierung sammeln und hatte eine Reihe von wichtigen Partnern für die weitere Arbeit getroffen. Eine bedeutsame Rolle für die Ergebnisse dieser Arbeit spielte der Kontakt zu Dr. T. Sekiguchi (Tsukuba) und Prof. K. Sumino (Tokyo), in dessen damaliger Arbeitsgruppe am Institut für Materialwissenschaften Sendai ich längere Zeit tätig sein durfte.

Die Qualität dieser Arbeit wurden durch die Beiträge von O. Storbeck (Dresden), Dr. C. G. Hübner (Zürich), Dr. M. Haugk (Paderborn), Dr. R. F. Scholz (Quedlinburg), Dr. F. (H.) Börner (Freiberg) und Dr. J. Gebauer (Berkeley) im Rahmen ihrer Diplom- und Doktorarbeiten entscheidend geprägt. Wichtige Unterstützung bei experimentellen Arbeiten kam von N. Engler, Dr. P. Werner, Dr. J. Neumann-Zdralik, F. Syrowatka, H. Uniewski, D. Lorenz, A. Zeckzer, W. Fränzel, H. Lei.

Durch die Zusammenarbeit mit Prof. P. Grau, Dr. I. Yonenaga (Sendai), Prof. K. Suezawa (Sendai), Prof. T. Frauenheim (Paderborn), Dr. T. E. M. Staab (Helsinki), Dr. I. Billard (Strasbourg), Dr. C. Frigeri (Parma) und Prof. E. Weber (Berkeley) konnten einige experimentelle und theoretische Zugänge zu Defekten in deformierten Halbleitern geschaffen werden. Nicht zuletzt gehört mein Dank an dieser Stelle auch Dr. J. Schreiber und Dr. S. Hildebrandt (Berlin) für die langjährige fruchtbare Kooperation.

Viele Arbeiten wären nicht möglich gewesen, ohne die experimentellen Möglichkeiten am Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik nutzen zu können. Mein herzlicher Dank gehört für diese Kooperation Prof. U. Gösele und seinen Mitarbeitern.

Probenmaterial wurde von Dr. M. Jurisch (Freiberg) und Dr. W. Zulehner (Burghausen) zur Verfügung gestellt. Aber dieses Kristallmaterial würde noch immer unbeachtet im Schrank liegen, wären die Proben nicht von K. Lehmann zersägt, geschliffen und für alle möglichen Zwecke weiter präpariert worden.

Immer sehr stimulierend war für mich die Atmosphäre im Kristall-Labor, im Zentrum für Materialwissenschaften und im Positronenlabor. Allen Mitarbeitern des Fachbereichs Physik, die am Gelingen meiner Arbeit mitgewirkt haben, möchte ich danken. Dank auch an Carola und Anna-Maria für ihren Rückhalt, ihr Verständnis und ihre Hilfe.

Die Arbeiten wurden durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft, das Japanisch-Deutsche Zentrum Berlin und das Land Sachsen-Anhalt gefördert.

Erklärung

Hiermit erkläre ich an Eides Statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig und ohne fremde Hilfe verfasst und nur die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe. Ergebnisse anderer wissenschaftlicher Arbeiten wurden als solche gekennzeichnet. Diese Arbeit wurde bisher weder im In- noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form in einem Prüfungsverfahren vorgelegt.

Halle, im Mai 2001

Hartmut Leipner

Lebenslauf

Dr. Hartmut S. Leipner, geb. Strobelt
Ernst-Thälmann-Straße 40 a
06179 Holleben

geboren am 6. Oktober 1958 in Cottbus
verheiratet mit Carola Leipner
Tochter Anna-Maria, geboren am 30. September 1996

| | |
|-------------|--|
| 1965 – 1976 | Polytechnische bzw. Erweiterte Oberschule in Cottbus |
| 1976 – 1977 | Arbeiter-und-Bauern-Fakultät Halle (Institut zur Vorbereitung auf das Auslandsstudium) |
| 1977 | Abitur, Lessingmedaille |
| 1977 – 1982 | Studium der Physik an der Karlsuniversität Prag, Mathematisch-Physikalische Fakultät, Diplom |
| seit 1982 | wissenschaftlicher Assistent an der Sektion Physik bzw. am Fachbereich Physik der Martin-Luther-Universität Halle–Wittenberg |
| 1986 | Forschungspreis der Martin-Luther-Universität Halle–Wittenberg als Mitglied der Forschergruppe „Halbleiteroptoelektronik“ |
| 1987 | Promotion zum Dr. rer. nat. |
| 1994 | Forschungsaufenthalt am 金属材料研究所 (Institut für Materialforschung) Sendai, Japan |
| 2000 | Max-von-Laue-Preis der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie |

Halle, im Mai 2001

Hartmut Leipner