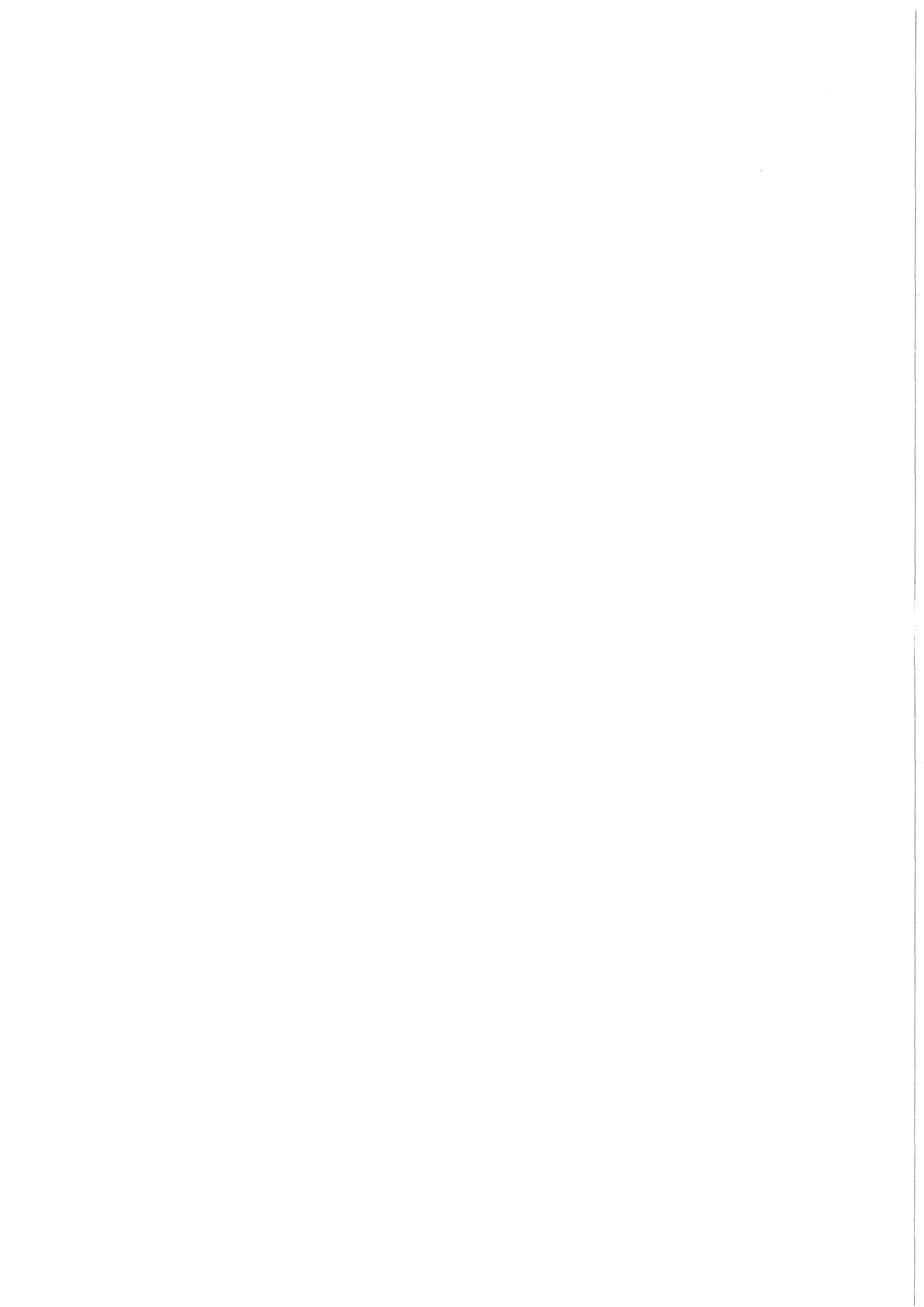


KfK 3959
November 1985

Untersuchung zur Kristallisation von V_3Si mit A15-Struktur aus kurzlebigen Schmelzen

T. Kleiser
Institut für Nukleare Festkörperphysik

Kernforschungszentrum Karlsruhe



KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Institut für Nukleare Festkörperphysik

KfK 3959

Untersuchung zur Kristallisation von V_3Si mit
A15-Struktur aus kurzlebigen Schmelzen*

Thomas Kleiser

DA	Bearbeiter
PB	
EDWINIS	
MATH	
ZDM	
DEL	
SIGLE	
NTIS	
ANST	

vormerken für:

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

*von der Fakultät für Physik der Universität Karlsruhe
genehmigte Diplomarbeit

Als Manuskript vervielfältigt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 7500 Karlsruhe 1

ISSN 0303-4003

Zusammenfassung

Mit einer Gleichspannungszerstäubungsanlage wurden V-Si Schichten auf polierten und geläpften Saphirsubstraten kristallin und amorph im UHV hergestellt. Die Schichten wurden mit Hilfe von Rutherford-Rückstreuung, Röntgenbeugung und Messungen des spezifischen Widerstands und der Sprungtemperatur zur Supraleitung charakterisiert.

An einer amorphen und einer kristallinen Schicht wurde ein isochroner Temperprozeß mit halbstündiger Heizdauer durchgeführt. Nach Tempern zwischen 600 und 650°C setzte Supraleitung der zuvor amorphen Probe ein. Nach Tempern mit 1100°C wurde das maximale T_c von 17°K und die größte A15 Korngröße von 880Å erreicht. Bei höheren Temperaturen nahm das T_c stark ab.

Einige amorphe Proben wurden mit einem Elektronenpuls mit einer Pulshalbwertsbreite von etwa 0,6µs kurzzeitgetempert. Für diese Schichten wurde für die Bildung der A15 Phase eine Schwelle der Bestrahlungsenergiedichte von 1,5-1,7J/cm² bei maximalen Elektronenenergien von 18-25 keV beobachtet. Einige Schichten wurden mit Wismut implantiert um die Schmelzschwelle aus der Veränderung der Wismutprofile bei Diffusion in der flüssigen Phase zu bestimmen. Der Elektronenstrahl wies am Probenort Inhomogenitäten auf, die schon unterhalb der Schmelzschwelle der ganzen Probe von 1,7-1,9 J/cm² lokale Bereiche aufschmolzen. Eine Bildung von A15 durch Bestrahlung amorpher Proben wurde nur festgestellt wenn die Proben geschmolzen waren. Durch das Kurzzeittempern mit dem Elektronenpuls wurde das T_c von anfangs weniger als 1,5°K auf 13°K erhöht, das Restwiderstandsverhältnis blieb etwa konstant 1, die Korngrößen des A15 Materials waren kleiner als 250Å. Etwa 10% des geschmolzenen Material transformierte in die A15 Phase wie aus Röntgenintensitätsmessungen geschlossen wurde.

Zum besseren Verständnis des Kurzzeittemperprozesses wurde ein Rechnerprogramm zur Lösung der Wärmediffusionsgleichung bei Elektronenpulsheizung erstellt. Dieses Programm wurde für einige einkomponentige Festkörper mit Erfolg getestet. Bei Berechnungen für V₃Si wurde die Schmelzschwelle um etwa 20% zu hoch ermittelt. Nach Schmelzen der obersten 3000Å für etwa 0,5µs Dauer wurden Abkühlraten von 1-4*10⁸ Grad/s an der Oberfläche und eine Geschwindigkeit für die Bewegung der Schmelzfront zur Oberfläche beim Erstarren von 1,1-1,5m/s berechnet. Trotz dieser hohen berechneten Erstarrungsgeschwindigkeit fror die Schmelze in den Experimenten nicht amorph ein, sondern die A15 Phase bildete sich und wuchs innerhalb von 500ns.

Regrowth of V_3Si with A15 structure from a Short-Lived Melt

Abstract

Amorphous and crystalline V-Si films have been deposited on polished and lapped sapphire substrates by a direct current (DC) sputtering system in a UHV recipient. The samples have been characterized by means of Rutherford backscattering (RBS), X-ray diffraction, measurements of the specific resistivity and of the transition temperature to superconductivity T_c .

Isochronal annealing series with a process time of a half hour have been performed with one amorphous and one crystalline sample. The amorphous sample became superconducting after annealing at 600-650°C. The maximum value of T_c of 17°K which was accompanied by the maximum grain size of the A15 phase of 880Å has been achieved after annealing at 1100°C. Using higher annealing temperatures leads to a decrease of T_c .

Several amorphous films have been short time annealed by means of an electron pulse of 0.6µs full width at half maximum. A threshold value for the energy density of the electron pulse of 1.5-1.7J/cm² was sufficient to initiate the formation of the A15 phase. In this case the maximum energy of the electrons in the pulse was 18-25 keV. The melt threshold of 1.7-1.9J/cm² was determined by monitoring the profile of implanted Bi ions using RBS. Below the threshold we detected local melting on the sample, that is caused by inhomogenities in the electron beam. We concluded that melting of the sample is necessary for the initiation of the A15 phase in amorphous V-Si films by electron pulse processing. The formation of the A15 phase was studied using X-ray diffraction. About 10% of the molten material is transformed into the A15 phase. T_c was increased from below 1.5°K up to 13°K, the residual resistivity ratio remained constant at a value of 1 and the grain size of A15 was smaller than 250Å.

The heat flow equation has been applied to simulate the melting and cooling process in the material. We tested our program successfully for several monatomic solids. Calculating for a V_3Si target with several unknown material qualities we found a threshold value for the melt, that is about 20% higher than the experimental value. For a melt depth of 3000Å we calculated cooling rates of $1-4 \cdot 10^8$ grad/sec at the surface and a velocity of solidification of 1.1-1.5 m/sec. Despite this high velocity of solidification the melt did not freeze amorphous, but the A15 phase nucleates and grows within 500 ns.

INHALTSVERZEICHNIS :

		Seite
0	Abstract	
1	Einleitung	5
2	Apparatives und experimentelle Grundlagen	8
2.1	Kathodenzerstäubung und DC- Sputteranlage	8
2.1.1	Gasentladung und Zerstäubung	8
2.1.2	Beschreibung der DC-Sputteranlage	10
2.2	Messung der Übergangstemperatur zur Supraleitung und des temperaturabhängigen Widerstands	13
2.3	Strukturanalyse mit Röntgenstrahlung	14
2.3.1	Experimenteller Aufbau	14
2.3.2	Wechselwirkungen der Röntgenstrahlung	16
2.3.3	Gitterparameter und Verspannung	17
2.3.4	Strukturamplitude	18
2.3.5	Kristallitgröße	19
2.4	Rückstreuungsmessung	20
2.4.1	Experimenteller Aufbau	20
2.4.2	Rutherford-Streuung	21
2.4.3	Schichtdickenanalyse	22
2.4.4	Bestimmung der Zusammensetzung der Proben	25
2.4.5	Pile-up Korrektur	26
2.5	Kurzzeittempern mit dem Elektronenpulsgenerator	28
2.5.1	Aufbau und Funktionsweise des Elektronenpuls- generators	28
2.5.2	Energie-Stromdichte-Zeit-Kennlinie des Elektronenpuls	30
2.5.3	Reflexion der Elektronen	34
2.5.4	Energieverlust der Elektronen	35
2.5.5	Reichweite der Elektronen	40
2.6	Langzeittempern der Proben	41
2.7	Ionenimplantation	42

3	Rechnerische Simulation des Kurzzeittemperns	44
3.1	Energieverlust und Wärmetransport	44
3.2	Wärmediffusion	45
3.2.1	Bedingung für die analytische Lösung	46
3.2.2	Numerische Beschreibung	46
3.2.3	Vorwärtsmethode	48
3.2.4	Crank-Nicolson-Methode	50
3.2.5	Vergleich der Methoden	52
3.3	Die Wärmequelle	52
3.3.1	Reichweitenbeziehungen	53
3.3.2	Wärmedepositions- Tiefen Funktion	53
3.3.3	Wärmedepositions- Zeit Abhängigkeit	55
3.4	Eigenschaften des Festkörpers	56
3.4.1	Materialparameter	56
3.4.2	Schmelzen und Erstarren	58
3.5	Testrechnungen	59
4	Experimentelle Ergebnisse	64
4.1	Schichtherstellung	64
4.1.1	Sputterausbeute	64
4.1.2	Schichtzusammensetzung	66
4.1.3	Strukturelle und supraleitende Eigenschaften	67
4.2	Langzeittemperversuche	70
4.3	Kurzzeittemperversuche	73
4.3.1	Bestimmung der Schmelzschwelle	73
4.3.2	Wismut-Diffusion in V_3Si	75
4.3.3	Supraleitende und strukturelle Eigenschaften	77
4.3.4	Vergleich mit Rechnungen	83
5	Zusammenfassung und Diskussion	89
	Literaturverzeichnis	95
A	Anhang	98
A.1	Ablaufschema des Programms PEBA	98
A.2	Ein- und Ausgabedaten des Programms	100
A.3	Programmliste	105

1 Einleitung

A15 Verbindungen der β -Wolfram Struktur sind spröde intermetallische Phasen mit oft hohen Übergangstemperaturen zur Supraleitung. Die A15 Verbindung Nb_3Ge besitzt das bisher höchste T_c von $23,2^\circ K$. Die A15 Struktur der Verbindung A_3B wird aufgebaut von B-Atomen (z.B. Ge), die auf Plätzen eines kubisch raumzentrierten Gitters sitzen, und von metallischen A-Atomen (z.B. Nb), von denen je zwei auf den Oberflächen der kubischen Einheitszelle so sitzen, daß sie 3 orthogonale, sich nicht schneidende Ketten bilden. Diese Ketten aus metallischen Atomen werden nach jetzigen Erkenntnissen für die supraleitenden Eigenschaften verantwortlich gemacht. Die Sprungtemperatur reagiert empfindlich auf Defekte und Abweichungen von der stöchiometrischen Zusammensetzung: in beiden Fällen nimmt T_c ab. Viele A15 Verbindungen mit hohem T_c sind metastabile Phasen. Diese Phasen können aus der Schmelze durch eine peritektische Reaktion gebildet werden. Die stabilen A15 Phasen bilden sich beim Abkühlen kongruent aus der Schmelze oder aus einer kristallinen A2 Phase. In Referenz 33 wird eine Übersicht der existierenden Phasendiagramme gegeben.

Ein andere Möglichkeit der Herstellung der A15 Phasen besteht in der Kristallisation aus einer amorphen Mischung mit Hilfe eines Langzeittemperprozesses. Weil die Substanz bereits atomar gemischt ist, sind langreichweitige Diffusionsprozesse nicht notwendig um stöchiometrische Kristalle zu bilden. Nach der Keimbildung der kristallinen Phase genügen Grenzflächendiffusionsprozesse für das weitere Wachstum. Die Aktivierungsenergie für den Transformationsprozess hängt dabei vom Grad der Störung ab (Ref.53).

In der vorliegenden Arbeit sollte untersucht werden, ob sich die kristalline A15 Phase von V_3Si mit Hilfe eines Kurzzeittemperprozesses aus einer amorphen Mischung und aus dem flüssigen Zustand herstellen läßt. Auch bei diesen Kurzzeittemperprozessen spielt in der festen Phase die Diffusion der Atome im Festkörper die entscheidende Rolle. Das Atomgitter geht in einen Zustand kleinerer Energie und transformiert vom amorphen zum kristallinen Zustand. Wegen der kleinen Diffusionskonstanten in der festen Phase liegt die Wachstumsgeschwindigkeit bei einigen nm/s. Eine andere Möglichkeit ist es, die kristalline Struktur durch Abschrecken aus der flüssigen Phase herzustellen. Durch Schmelzen von Proben mit Kurz-

zeitwärmepulsen und schneller Diffusion der Wärme in die Umgebung erhält man hohe Abkühlraten und Erstarrungsgeschwindigkeiten von einigen m/s. In der vorliegenden Arbeit wurde die stabile A15 Verbindung V_3Si als Vertreter ausgewählt, da sich V_3Si kongruent aus der Schmelze bildet. Sollte die Kristallisation von A15 V_3Si mit diesem sehr kurzen Wärmepuls nicht erfolgen, so kann man bei metastabilen A15 Verbindungen, die sich durch eine peritektische Reaktion aus der Schmelze bilden, kaum erwarten, daß die A15 Phase mit dem Kurzzeittempern gebildet werden kann.

Zum Kurzzeittempern stand ein Elektronenpulsgenerator zur Verfügung. Durch Messungen und Lösung der Wärmediffusionsgleichung sollte die Dynamik von PEBA (Pulsed Electron Beam Annealing) untersucht werden. Insbesondere interessierten uns die Pulslänge des Elektronenstrahls, das Energiespektrum des Strahls, die Temperaturen, die Schmelztiefe, die Schmelzdauer, das Abkühlverhalten und die Erstarrungsgeschwindigkeit der Schmelze.

In dieser Arbeit wurden die Schichten mit einer Gleichspannungszerstäubungsanlage hergestellt. Zur Probenuntersuchung wurden Rutherford-Rückstreuung, Röntgenstreuung und Messung der Übergangstemperatur der Supraleitung angewendet. Zum Vergleich mit PEBA wurde eine isochrone Langzeittemperreihe durchgeführt. Nach den Kurzzeittemperversuchen wurde die T_c Erhöhung, die Bildung von A15 Körnern und die Schmelzschwelle der Schichten untersucht. Zum besseren Verständnis der Elektronenstrahlheizung wurden Messungen während des Elektronenpulses durchgeführt (Kapitel 2.5.2). Ferner wurde die Wärmediffusionsgleichung mit dem Elektronenstrahl als Wärmequelle mittels eines Rechnerprogramms gelöst.

In Kapitel 2 werden die experimentellen Methoden und die Wechselwirkungen von α -Teilchen, Deuteronen, Röntgenquanten und Elektronen mit Materie beschrieben, soweit es zum Verständnis der Versuche notwendig ist. Dem 2. Kapitel sind Messungen und Abschätzungen der Elektronenpulsbreite und des Energiedepositionsprofils monochromatischer und energiekontinuierlicher Elektronenstrahlen beigelegt. Im 3. Kapitel wird die Lösung der Wärmediffusionsgleichung beschrieben. Im Abschnitt 3.5 werden Vergleiche zwischen diesen Rechnungen und experimentellen Ergebnissen für die Festkörper Al,Si und V gezogen. Kapitel 4 befaßt sich mit den experimentellen Ergebnissen der Schichtherstellung und Ausheilung von V_3Si , und zieht Vergleiche mit Rechnungen. In Kapitel 5 werden die

Ergebnisse zusammengefaßt. Im Anhang befindet sich eine Programmliste, ein schematisches Flußdiagramm und eine Beschreibung der Ein- und Ausgabegrößen des Simulationsprogramms von PEBA.

2 Apparatives und experimentelle Grundlagen

2.1 Kathodenzerstäubung und DC- Sputteranlage

2.1.1 Gasentladung und Zerstäubung

Treffen energiereiche Ionen oder Atome auf einen Festkörper, so wird ihr Impuls auf die Festkörperatome übertragen. Sigmund beschreibt die Zerstäubung eines ungeordneten Targets durch einen Ionenstrahl qualitativ wie folgt (Ref.2): ein einfallendes Ion durchläuft eine Serie von Stößen im Target und die zurückgestoßenen Targetkerne führen sekundäre Stöße aus, soweit sie genug Energie haben. Dadurch entsteht eine weitere Generation zurückgestoßener Atome. Der Impuls des einfallenden Ions wird so auf viele Targetatome verteilt. Erhält ein Atom durch einen dieser Stöße genügend Impuls Richtung Targetoberfläche, so kann es den Festkörper verlassen. Oberflächennahe Atome werden bevorzugt zerstäubt.

Handelt es sich bei den einfallenden Teilchen um positive Ionen die auf ein negativ geladenes Festkörpertarget treffen, so spricht man auch von Kathodenzerstäubung. Die Zerstäubungsausbeute ist weitgehend unabhängig von der Temperatur. Bei hohen Temperaturen tritt neben dem Zerstäuben auch ein Verdampfen des Targets auf. Die Phänomene der Kathodenzerstäubung werden in Ref.1 behandelt.

Sigmund hat gefunden, daß die Zerstäubungsausbeute Y (d.h. die Zahl der abgelösten Targetatome pro einfallendes Ion) proportional zum Energieverlust der einfallenden Ionen ist. Die modifizierte Sigmund Formel für normalen Einfall der Projektile lautet (Ref.3):

$$Y = \frac{0,420}{U_s} \cdot \alpha \cdot S_n \left(1 - \left(E_{th}/E \right)^{\frac{1}{2}} \right) \quad (2.1)$$

α ist eine Funktion vom Quotienten der Massen des Targetatoms und des Ions, U_s ist die Sublimationsenergie, S_n ist der elastische Energieverlust in den Einheiten $eV \cdot cm^2 / 10^{15}$ Atome, E ist die Energie der Ionen und E_{th} ist die Schwellenenergie für das Zerstäuben der Targetatome durch die Ionen. Die Werte von α , U_s und S_n sind in Ref.3 tabelliert. In Ref.3 werden auch gerechnete und gemessene Sputterausbeuten verglichen. Für $Ar \rightarrow V$ erhält man bei einer Ionenenergie von 1-4 keV eine Zerstäubungsausbeute von 2 - 2,5, für $Ar \rightarrow Si$ entsprechend 1,5 - 2.

Im Gegensatz zum Verdampfen beruht das Zerstäuben auf einem Impulsübertrag. Deshalb wählt man etwa gleich große Massen für Target und Zerstäubungionen. Als Quelle der Beschußteilchen verwendet man beim Gleichspannungszerstäuben die Ionen des Glimmentladungsplasmas. Man legt beim DC- Zerstäuben eine Gleichspannung zwischen zwei Elektroden an und bringt zwischen sie ein hochreines Gas. Bei geeigneten Drücken und Spannungen baut sich dann eine Glimmentladung auf. Nahe der Kathode kann man den Kathodendunkelraum und das negative Glimmlicht beobachten. Über den Kathodendunkelraum fällt praktisch die gesamte anliegende Spannung ab. Das zur Anode hin anschließende Plasma ist praktisch neutral. Im Kathodendunkelraum werden die geladenen Gasteilchen erzeugt und auf die Kathode beschleunigt. Beim Aufschlagen der Gasionen auf die Kathodenoberfläche werden pro einfallendes Ion etwa 0,1 Elektronen und etwa 1 Atom oder Ion des Festkörpers freigesetzt (siehe oben). Die Elektronen werden zum negativen Glimmlicht beschleunigt und ionisieren pro Elektron 8-10 Gasteilchen. Weiter regen sie Gasteilchen zur Photoemission an, was besonders deutlich am negativen Glimmlicht zu sehen ist. Die Photonen und Ionen aus dem negativen Glimmlicht, die auf die Kathode treffen, tragen ebenfalls zur Sekundärelektronenproduktion bei. Die Glimmentladung ist eine selbständige Entladung, weil sie Verluste von Ladungsträgern aus dem Einfang an den Elektroden und aus der Diffusion aus der Entladungszone durch die Bildung neuer Ladungsträger an der Kathode und im Kathodendunkelraum ausgleicht. Weitere Einzelheiten über die Gasentladung sind in Ref.1 und 4 zu finden.

Im Gegensatz zur Hochfrequenzzerstäubung fließt beim DC- Zerstäuben ein Gleichstrom durch die Kathode und das Target. Während der Glimmentladung treffen auf die Kathode Ladungen auf, die durch das Targetmaterial abfließen. Bei Verwendung von Isolatoren oder Halbleitern als Targetmaterial wird dieser Ladungstransport verhindert oder erschwert. Die Targetoberfläche lädt sich gegen die Kathode der Hochspannungsquelle auf und die Spannung am Kathodendunkelraum wird verringert. Dadurch wird der Ionenstrom auf das Target, die Energie der Ionen und die Sputterausbeute verringert. Aus diesem Grund sind Isolatoren und Halbleiter als Target für Gleichspannungszerstäubung schlecht geeignet.

2.1.2 Beschreibung der DC - Sputteranlage

Bild 2.1.1 zeigt den prinzipiellen Aufbau der neu in Betrieb genommenen Gleichspannungszerstäubungsanlage. Die gezeigten Elemente befinden sich in einer Vakuumkammer mit der ein Druck von 10^{-8} Torr mit einer UHV- Turbomolekularpumpe erreicht werden kann. Gesputtert wurde

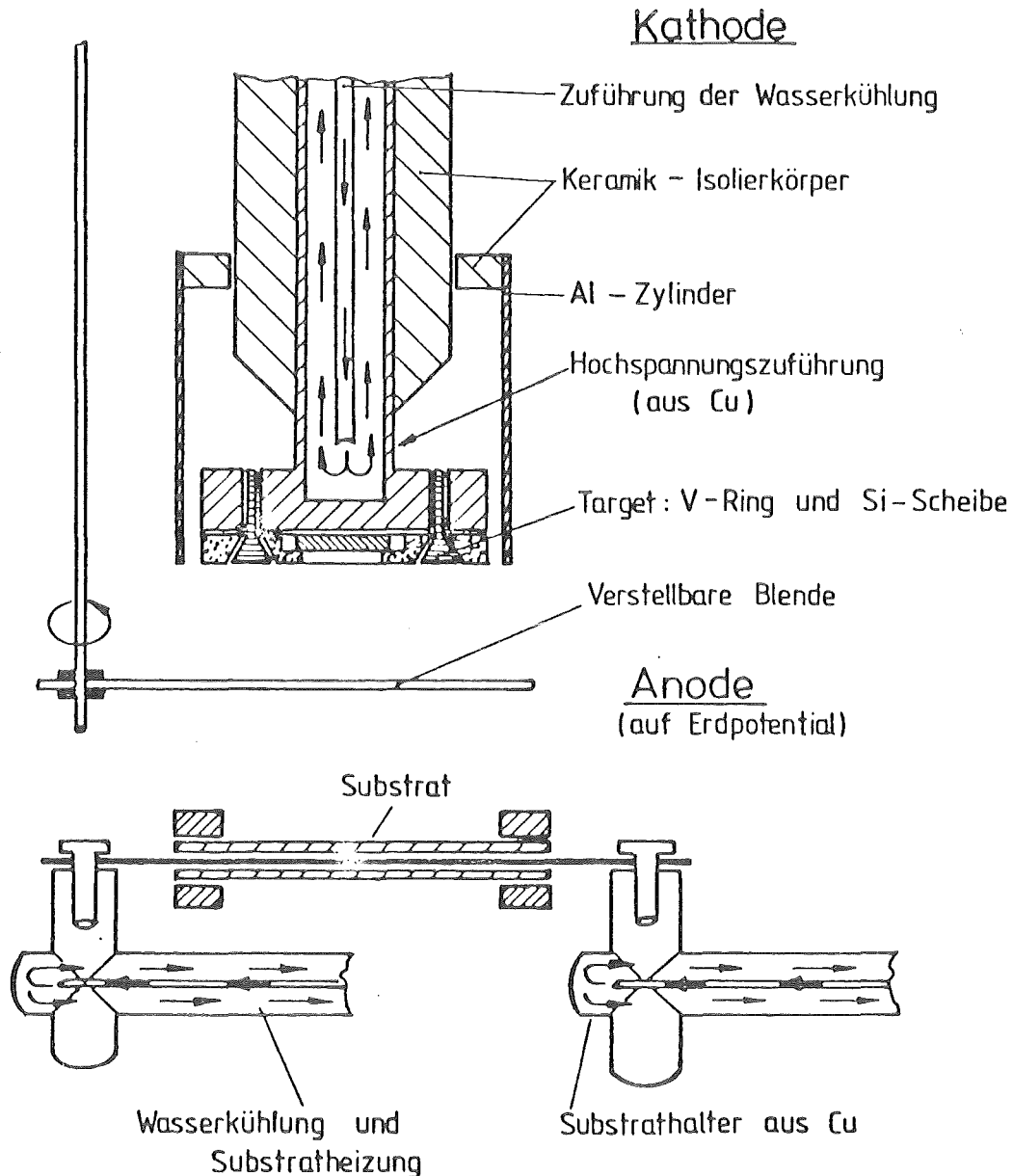


Bild 2.1.1 Schematischer Aufbau der DC- Sputteranlage

bei Drücken von 0,04-0,4 Torr Argonatmosphäre mit Gleichspannungen bis 4 kV. Als Zerstäubungsgas wurde 99,9999% Argon verwendet. Zur Druckmessung standen für Drücke von 10^{-11} - 10^{-3} Torr eine Bayard-Alpert-

Röhre und für Drücke von 10^{-3} -760 Torr ein Wärmeleitungsvakuummeter zur Verfügung. Die Hochvakuumröhre wurde nahe der Kathode installiert. Die Drücke während der Gasentladung wurden nahe der Argoneinführung etwas abseits von der Gasentladung gemessen. Die hohen Drücke während der Gasentladung wurden durch Einleiten von Argon und Schließen einer Drosselklappe zwischen dem Rezipienten und der UHV - Turbomolekularpumpe erzeugt.

Als Target wurde eine Vanadiumringscheibe mit einem Außendurchmesser von 29 mm und einem Innendurchmesser von 14 mm verwandt. Er wurde mit Vanadiumschrauben an der Kupferhochspannungsdurchführung befestigt und hielt dabei ein Reinstsiliziumblättchen. Sichtbar war demnach eine Siliziumscheibe von 14 mm Durchmesser. Somit war das Flächenverhältnis V/Si gleich 3,3. Durch das Aufkleben befand sich die Siliziumoberfläche etwa 1 mm unter dem Niveau der Vanadiumoberfläche. Um das Zerstäuben von Kupfer der Hochspannungsdurchführung zu vermeiden liegt ein isolierter Aluminiumzylinder um die Kathode. Ist der Abstand zwischen Zylinder und Kathode kleiner als die Dicke des Kathodendunkelraumes, so kann sich zwischen Zylinder und Kathode keine Gasentladung aufbauen. Durch Erhöhen der Spannung und des Druckes verringert sich die Dicke des Kathodendunkelraumes. Bei hohen Drücken wurde deshalb ein sprunghaftes Ansteigen des Elektronenstromes oberhalb der Schwellenspannung beobachtet, das durch die Gasentladung auf den Aluminiumzylinder verursacht wird.

Zwischen Kathode und Anode befindet sich eine einführbare Blende, die auf Erdpotential liegt. Durch Einführen der Blende war es möglich die Kathodenoberfläche durch Oberflächenzerstäubung zu reinigen ohne auf den Substraten eine Schicht zu kondensieren. Diese Reinigung wurde nach Evakuierung der Anlage und vor der eigentlichen Probenherstellung durchgeführt.

Die Substrate wurden etwa 3 cm unterhalb der Kathode auf der Anode aufgespannt. Die Substrate konnten durch Aufkleben auf ein stromführendes Tantalband geheizt werden oder im Kontakt zu den wassergekühlten Substrathaltern auf Raumtemperatur gehalten werden.

Auf den Substraten schlugen sich die zerstäubten Atome nieder. Die auffallenden Atome befinden sich in der Gasphase und werden an die freien Gitterplätze an der Substratoberfläche angezogen. Solange das ankommende Atom noch genug Energie hat, kann es von der Oberfläche reflektiert werden oder es wandert zwischen Potentialmulden der Oberfläche entlang und

verliert schließlich soviel Energie, daß es absorbiert wird. Wegen der hohen Energie der abgesputterten Atome im Vergleich zu verdampften Atomen dringen diese energetischen Teilchen in das Substrat ein. Deshalb haften durch Zerstäubung hergestellte Schichten besser auf den Substraten als aufgedampfte Schichten.

Bei geeigneter Wahl von Substrat und Substrattemperatur findet ein epitaktisches Wachstum der Schichten auf den einkristallinen Substraten statt. Als epitaktisches Wachstum bezeichnet man das orientierte Wachstum einer Substanz auf der Kristalloberfläche einer fremden Substanz. Das gerichtete Wachstum einer Substanz auf sich selbst bezeichnet man als Auto-Epitaxie. Für das Auftreten der Epitaxie ist es nicht notwendig, daß Substrat und wachsende Schicht die gleiche Kristallstruktur besitzen. Die Orientierung des Niederschlags hängt aber von der Orientierung und Kristallstruktur des Substrats ab. Für die Epitaxie gibt es eine kritische Temperatur, unterhalb der sie nicht perfekt ist. Diese Temperatur ist nicht nur vom Substrat und dem Niederschlag abhängig sondern auch von den Herstellungsbedingungen.

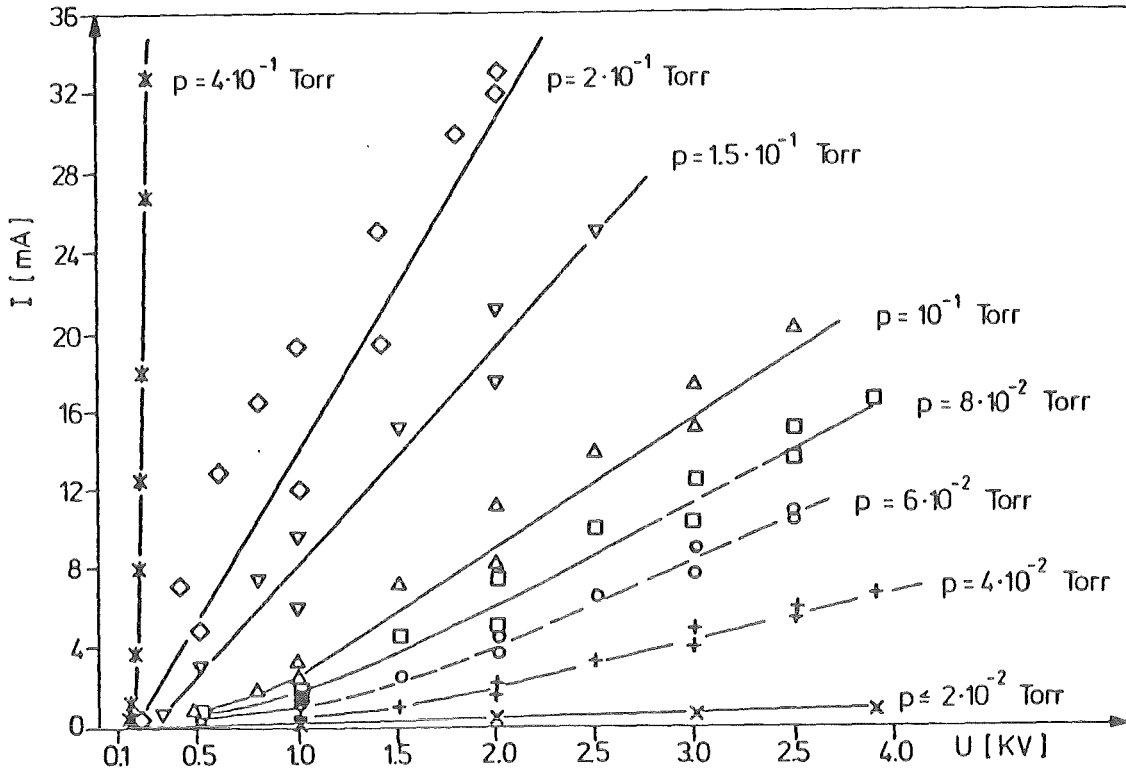


Bild 2.1.2 Strom- Spannungs- Kennlinien der DC- Sputteranlage bei verschiedenen Drücken

Zur Inbetriebnahme der Apparatur wurden einige Versuche durchgeführt. Bild 2.1.2 zeigt die Strom-Spannungskennlinien der DC-Apparatur. Bei Drücken kleiner oder gleich 0,02 Torr bestand bei Spannungen bis 4 kV keine sichtbare Gasentladung. Der Widerstand betrug 5 M Ω . Oberhalb dieses Druckes sind die Glimmentladungskennlinien an dem nicht linearen Strom-Spannungszusammenhang in Bild 2.1.2 erkennbar. Bei hohen Spannungen geht die Glimmentladung in eine Bogenentladung über, was zu einem Zusammenbrechen der Entladung führte.

2.2 Messung der Übergangstemperatur zur Supraleitung und des temperaturabhängigen Widerstandes

Zur Messung der Übergangstemperatur zur Supraleitung (T_c) wurden in dieser Arbeit zwei Phänomene der Supraleitung verwendet. Zum einen wurde das Verschwinden des elektrischen Widerstandes für Gleichströme an den Proben mit einer Vierpunkt Strom-Spannung-Messung untersucht. Durch die Probe wurde ein konstanter Gleichstrom geleitet und der Spannungsabfall am Widerstand der Probe wurde dem Eingang eines X-Y Schreibers zugeführt. Diese Methode wird als resistive Methode der Messung der kritischen Temperatur der Supraleitung T_c bezeichnet. Zur Temperaturmessung wurde der Widerstand einer Siliziumdiode verwendet. Das Widerstandsverhalten dieser Diode war für tiefe Temperaturen bekannt.

Die zweite Methode der induktiven Messung verwendet den Meißner-Ochsenfeld Effekt: die Feldverdrängung aus einer supraleitenden Probe wird gemessen. Dazu wird ein wechselndes Magnetfeld in einer kegelförmigen Spule durch Anlegen einer 1 kHz Wechselspannung erzeugt. Zwischen dieser Feldspule und der Probe wird das Magnetfeld von einer Sensorspule gemessen. Im supraleitenden Zustand wird die Probe diamagnetisch und verdrängt das Magnetfeld ganz oder teilweise aus sich hinaus. Nun wird der magnetische Fluß durch die Sensorspule geringer und es wird dort weniger Spannung induziert. Das induzierte Spannungssignal wird einem X-Y Schreiber zugeführt. Zur Temperaturmessung dient hier der Widerstand einer Germaniumdiode. Die Temperaturen bei 90% und 50% des Sprungs werden als Onset und Mitte des Phasenübergangs bezeichnet. Die Temperaturdifferenz zwischen den Temperaturen bei 90 und 10% des Sprunges wird als Breite des Übergangs bezeichnet.

Dieselben Bezeichnungen gibt es auch für die resistive Messung des Phasenübergangs zur Supraleitung. Mit der resistiven Messung wird auch das Restwiderstandsverhältnis r bestimmt. Darunter versteht man das Verhältnis der Widerstände bei Raumtemperatur und oberhalb des Übergangs zur Supraleitung:

$$r = \frac{\rho(\text{Raumtemperatur})}{\rho(\text{oberhalb } T_c)}$$

Zur Kühlung der Proben wurde flüssiges ^4He verwendet. Durch Pumpen konnten Temperaturen bis $1,0^\circ\text{K}$ erreicht werden.

2.3 Strukturanalyse mit Röntgenstrahlung

2.3.1 Experimenteller Aufbau

Röntgenstrahlung ist eine elektromagnetische Welle. Sie kann von beschleunigten Ladungen als Bremsstrahlung und als charakteristische Strahlung der Atomelektronen erzeugt werden. In den Versuchen wurden dazu eine Kupferanodenhochspannungsröhre und eine Chromanodenhochspannungsröhre zur Erzeugung der Röntgenstrahlung verwendet. Mit einem Germaniumeinkristall wurde die Strahlung monochromatisiert. Für die Streuexperimente standen nach der Monochromatisierung die $\text{Cu } K\alpha_1$ mit einer Wellenlänge von $1,5405\text{\AA}$ und die $\text{Cr } K\alpha_1$ mit einer Wellenlänge von $2,2897\text{\AA}$ zur Verfügung. Die Fokussierung des Strahls nach Seeman-Bohlin zeigt die Abbildung 2.3.1. Der Öffnungsspalt der Röntgenquelle wird über den Monochromator und das Präparat auf den Film oder den Detektor abgebildet. Bei Verwendung eines Detektors befindet sich vor diesem ein schmaler Schlitz. Der Kippwinkel ϑ der Probe gegen den Strahl ist auf 10° justiert. Bei Verwendung der $\text{Cr } K\alpha_1$ Strahlung wurde ein Photofilm von der gestreuten Strahlung geschwärzt. Bei den $\text{Cu } K\alpha_1$ Streuexperimenten wurde ein Halbleiterdetektor auf dem Fokussierkreis der gebeugten Strahlung mit konstanter Winkelgeschwindigkeit gefahren. Die Zählraten in einem gewissen Winkelabschnitt wurden entsprechend den Winkeln in 2021 Kanäle abgespeichert. Die Winkelauflösung betrug $0,025^\circ$ in Bezug auf den Winkel θ . Aus der Winkelgeschwindigkeit, der Meßzeit für jeden Einzelkanal, dem Startwinkel und der Geometrie des Versuchs lassen sich die gemessenen Reflexe den Streuwinkeln 2θ zuordnen. Eine genaue Zuordnung wird durch

Verwendung einer Goldeichprobe mit einem Gitterparameter von $a_0 = 4,018 \text{ \AA}$ sowohl für die Diffraktometer- als auch für die Filmaufnahmen durchgeführt.

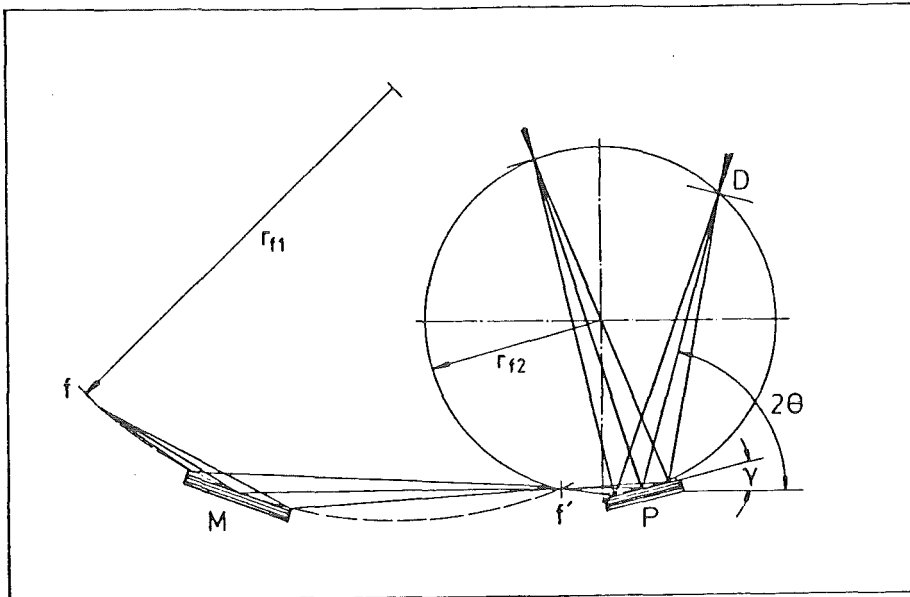


Bild 2.3.1 Fokussierungsprinzip nach Seeman-Bohlin

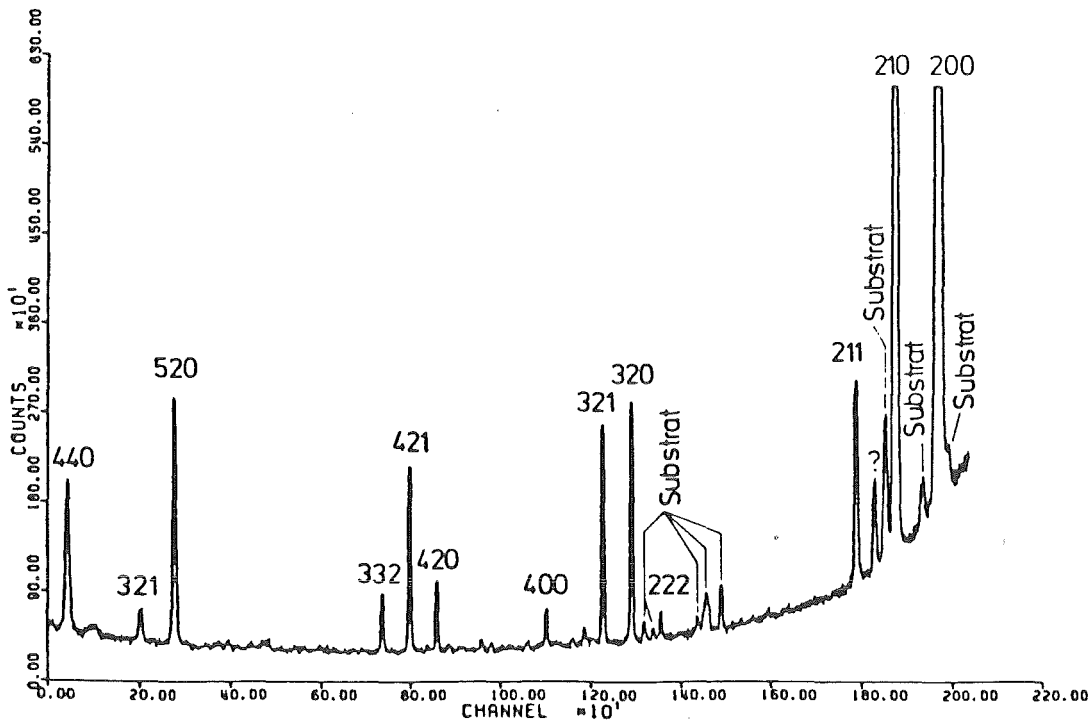


Bild 2.3.2 Röntgenspektrum der Probe VT51

Abbildung 2.3.2 zeigt ein Winkelspektrum einer Al₅V₃Si Probe, wie man es mit dem Cu K α_1 Einkreisdiffraktometer erhält. Die Intensitäten der 200 und 210 Reflexe wurden abgeschnitten um die anderen Reflexe besser zu erkennen. Diese Probe wurde auf ein geläpptes Saphirsubstrat gesputtert. Deshalb beobachtet man neben den Reflexen der Schicht auch Reflexe der kristallinen Substratoberfläche. Bei nicht geläppten und dann einkristallinen Substraten würde man nur dann die Substratreflexe beobachten, wenn die entsprechenden Netzebenen hkl gerade in der Detektorebene reflektieren würden. Bei der Photofilmmethode ergeben sich statt der Peaks unterschiedlich stark geschwächte Linien.

2.3.2 Wechselwirkungen der Röntgenstrahlung

Von der Wechselwirkung der Röntgenstrahlung mit der Materie sind die Wechselwirkungen mit den Elektronen wegen ihrer kleineren Masse im Vergleich zu den Atomkernen am wahrscheinlichsten (Ref.6).

Läuft ein Photonenstrahl durch Materie so wird ein Teil seiner Intensität absorbiert. Dabei gilt nach Ref. 5 :

$$I(x) = I_0 \cdot e^{-\frac{\mu}{\rho} \rho x} \quad (2.3.1)$$

x ist der Weg der Strahlung durch die Materie, I₀ die Intensität für x=0, I(x) die Intensität nach dem Weg x, ρ die Dichte der Materie und μ/ρ der Massenabsorptionskoeffizient. Die absorbierte Intensität wird zum Teil in Wärme umgesetzt. Die absorbierte Energie kann aber auch die charakteristische Strahlung eines Atoms anregen. Bei Verwendung der Cu K α_1 Strahlung werden in Vanadium K α und K β Linien erzeugt. Diese neue Strahlung würde den Untergrund der Messung vergrößern. Deshalb filtert man die Vanadiumstrahlung mit einer Aluminiumfolie vor dem Detektor. Aluminium absorbiert Vanadium K α und K β Strahlung stärker als die Cu K α_1 Strahlung. Es entsteht Aluminium K α und K β Strahlung, die aber nur zu einem geringen Teil in den Detektor trifft.

Zum Untergrund trägt auch die Comptonstreuung bei. Die Comptonstreuung ist eine inelastische Streuung der Röntgenquanten an den Elektronen (Ref.6).

Die uns interessierende Wechselwirkung ist die elastische Streuung der Röntgenwelle an den Elektronen. Dieser Prozess wird auch als Thompson-

Streuung bezeichnet und wird in Ref.6 beschrieben. Bei dieser Streuung der Röntgenwelle entstehen Kugelwellen an den Streuzentren. Die Kugelwellen verschiedener Zentren interferieren miteinander. Für die mathematische Beschreibung dieser Interferenzen ist die Verwendung des reziproken Raums, des Raums der Wellenvektoren ein wichtiges Hilfsmittel.

2.3.3 Gitterparameter und Verspannung

Bragg hat die Streuung der Röntgenstrahlung am Festkörper als Reflexion des Strahls an Atomnetzebenen beschrieben. Die Bedingung für das Auftreten eines Reflexes lautet (Ref.6,7):

$$n \cdot \lambda = 2 \cdot d \cdot \sin \theta \quad (2.3.2)$$

d ist der Abstand der Gitterebenen, 2θ der Streuwinkel, λ die Wellenlänge der Strahlung und n eine ganze Zahl. θ wird als Reflexions- oder Glanzwinkel bezeichnet.

Aus den θ Werten der Reflexe kann man die Abstände der Gitternetzebenen bestimmen. Die Netzebenen werden durch die Millerschen Indizes hkl beschrieben (Ref.6). Als Streuvektor der Ebenenschar hkl bezeichnet man den Vektor \vec{s} des reziproken Gitters:

$$\vec{s} = h \cdot \vec{e}_1^* + k \cdot \vec{e}_2^* + l \cdot \vec{e}_3^* \quad (2.3.3)$$

\vec{e}_i^* , $i=1,2,3$ sind Basisvektoren des reziproken Raumes. Der Gitterabstand d ist dann gegeben durch:

$$d_{hkl} = \frac{1}{|\vec{s}|} \quad (2.3.4)$$

Im kubischen Gitter gilt einfach :

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (2.3.5)$$

wobei a der Gitterparameter des Ortsgitters ist.

Die hergestellten Schichten wurden auf Verspannungen untersucht. Verspannungen können bei der Schichtherstellung und beim Tempern der Schichten aufgrund verschiedenen thermische Ausdehnungskoeffizienten von Schicht und Substrat entstehen. Mit Hilfe der Röntgenstreuung können Verspan-

nungen der Schichten untersucht werden, indem man die durch Verspannung geänderten Gitterparameter bestimmt (Ref.7,8,10). Der Grad der Änderung des Gitterparameters ist vom Winkel ϕ zwischen der streuenden Netzebene und der Oberfläche der Schicht abhängig. Wird an eine Schicht parallel zur Oberfläche eine Zugspannung angelegt, so vergrößern sich die Translationsvektoren parallel zur Oberfläche, während die Vektoren senkrecht zur Oberfläche abnehmen. Somit gibt es dazwischen einen Winkel unter dem man die unveränderten Translationsvektoren beobachten kann. Mit dem zuvor eingeführten Winkel γ (siehe Bild 2.3.1) gilt:

$$\theta = \phi + \gamma \quad (2.3.6)$$

Für $\phi=45^\circ$ heben sich die Dehnungen auf, für $\phi=0^\circ, 90^\circ$ ist die Dehnung maximal. Durch Auftragen der Gitterparameter der einzelnen Reflexe über $\cos(2\phi)$ erhält man für $\cos(2\phi)=0$ ($\phi=45^\circ$) den Wert des unverspannten Gitterparameters a . Durch Auftragen der Gitterparameteränderung $\Delta a/a$ über $\cos(2\phi)$ erhält man für $\cos(2\phi)=-1$ den Dehnungswert ϵ_1 . $\epsilon_1 > 0$ entspricht einer (parallel zur Schichtoberfläche) gedehnten Schicht, $\epsilon_1 < 0$ entspricht einer kompressiv verspannten Schicht. Zum Beispiel bedeutet $\epsilon_1=10^{-3}$, daß die Translationsvektoren parallel zur Oberfläche um den Faktor 10^{-3} vergrößert sind.

2.3.4 Strukturamplitude

Obwohl die Elektronen die Streuzentren der Röntgenstrahlung sind, kann man annehmen, daß die Streuzentren am Ort der Atomkerne liegen. Man schreibt einem Atom j einen Atomstreufaktor f_j zu. Der Atomstreufaktor ist eine Funktion der Elektronenzahl des Atoms und des Streuwinkels. Mathematisch wird die Interferenz der gebeugten Strahlung durch Summation der von den Streuorten \vec{r}_j ausgehenden Kugelwellen beschrieben. Diese Summe wird als Strukturamplitude bezeichnet:

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^N f_j \cdot e^{2\pi i \vec{r}_j \cdot \vec{s}} \quad (2.3.7)$$

Die Strukturamplitude bezieht sich auf eine Ebenenschar hkl. Es wird über N Streuzentren summiert. Der Streuvektor s wurde bereits in Gleichung (2.3.3) definiert.

Die Intensität eines Reflexes am Ort der Messung, also im Detektor oder auf dem Film ist proportional zum Betragsquadrat der Strukturamplitude. Bezüglich der genauen Berechnung des Strukturfaktors sei auf Ref.6 verwiesen. Aus Gleichung (2.3.7) läßt sich auch berechnen welche Reflexe hkl ausgelöscht werden. Dazu ist die Kenntnis der Lage der Streuzentren Voraussetzung. Tabellen dazu findet man in Ref. 5 und 11.

V_3Si kristallisiert in der β -Wolfram Struktur mit der Raumgruppe $Pm\bar{3}n$. Die Lage der Atome in der Elementarzelle sind:

Vanadium Atome : $1/4, 0, 1/2$; $1/2, 1/4, 0$; $0, 1/2, 1/4$
 $3/4, 0, 1/2$; $1/2, 3/4, 0$; $0, 1/2, 3/4$

Silizium Atome : $0, 0, 0$; $1/2, 1/2, 1/2$

Die Silizium Atome bilden ein kubischraumzentriertes Untergitter. Deshalb nehmen Si-Atome an Reflexen hkl mit $h+k+l \neq 2n$ (n ist eine natürliche Zahl) nicht teil. Dies kann mit Gleichung (2.3.7) berechnet werden. Eine Tabelle solcher Berechnungen für die $A15$ -Struktur ist in Ref.9 zu finden.

2.3.5 Die Kristallitgröße

Aus der Breite der Reflexe läßt sich die Kristallitgröße bestimmen (Ref.7). Die Halbwertsbreite $\beta_{\frac{1}{2}}$ der Reflexe ist nach der Scherrerformel gegeben als:

$$\beta_{\frac{1}{2}} = \frac{k \cdot \lambda}{h \cdot \cos \theta} \quad (2.3.8)$$

2θ ist der Streuwinkel der Röntgenstrahlung, λ ihre Wellenlänge, h die Kristallitgröße und k ein Geometriefaktor des Kristallits. Für kubische Kristallite setzt man $k=1,0$. Neben den Kristallitgrößen tragen Gitterverzerrungen der Kristallite und instrumentelle Einflüsse zur Verbreiterung der Reflexe bei. Trägt man $\beta_{\frac{1}{2}} \cdot \cos \theta$ über θ auf, so erkennt man

Einflüsse der Verspannungen auf die Reflexbreite (Ref.7). Es wurden keine Reflexverbreiterung durch Verspannungen bei den Messungen der Schichten beobachtet. Die instrumentellen Einflüsse auf die Breite der Reflexe wurde vernachlässigt. Das bedeutet, daß die Kristallitgrößen eher zu klein bestimmt wurden. Der prozentuale Fehler der Größenbestimmung nimmt für kleine Kristallite ab. Der Fehler der Kristallitgrößenbestimmung wird bei Korngrößen bis 250Å auf weniger als 10% geschätzt.

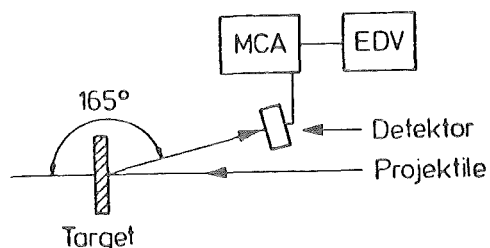
2.4 Rückstreuung

2.4.1 Experimenteller Aufbau

In Abbildung 2.4.1 ist in schematischer Darstellung die Versuchsanordnung und die Datenverarbeitung der Detektorsignale gezeigt. Ein Van de Graaff Beschleuniger liefert ionisierte, monochromatische Projektile bis 3 MeV. In den Versuchen wurden Deuteronen und α -Teilchen als Projektile verwendet. Der Teilchenstrahl trifft das Substrat mit einem Durchmesser von 1-2mm. Der Strahl ist am Probenort etwa parallel, mit einem Divergenzwinkel von weniger als 0,01 Grad. Die in einem Winkel von 165° rückgestreuten Projektile durchlaufen eine Gegenspannung von 200V, die Sekundärelektronen abschirmt, und treffen auf einen Halbleiterdetektor. Der Halbleiterdetektor mißt die Energie der Teilchen an Hand ihres Ionisationsvermögens in seiner Sperrschicht. Die Teilchen werden in der Sperrschicht vollständig abgebremst.

Bild 2.4.1

Schematische Darstellung
der Versuchsanordnung



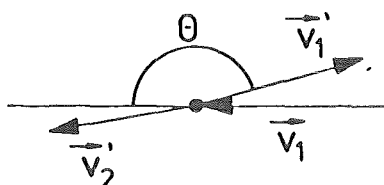
Eine Energieeichung der Detektorsignale wird mit einer Eichprobe durchgeführt. Die Eichprobe wurde durch Aufdampfen von Gold, Germanium, Silizium und Aluminium auf ein Kohlenstoffsubstrat hergestellt. Durch Oxidation befindet sich auch Sauerstoff auf der Probenoberfläche.

Die Stromimpulse des Detektors werden integriert, verstärkt und digitalisiert. Entsprechend der Ladung des Detektorsignals werden die Strompulse in ein 512 kanalumfassendes Energiespektrum sortiert. Die Elektronik wirkt somit wie ein Vielkanalanalysator (MCA) und führt die Signale einem Kleincomputer zur Speicherung zu (EDV).

2.4.2 Rutherford-Streuung

Bild 2.4.2

Geometrie des Stoßes
im Laborsystem



Unter Rutherford-Streuung versteht man die elastische Streuung eines geladenen Partikels an dem zentralen Coulombfeld eines Atomkerns. Abbildung 2.4.2 zeigt die Geometrie der Streuung im Laborsystem. \vec{v}_1 und \vec{v}_1' sind die Geschwindigkeiten des Projektils vor und nach dem Stoß. $v_2=0$ und \vec{v}_2' sind die Geschwindigkeiten des Targetkern vor und nach dem Stoß. θ ist der Winkel zwischen \vec{v}_1 und \vec{v}_1' : der Streuwinkel. Aufgrund von Impuls- und Energieerhaltungssatz läßt sich der Energieverlust des einfallenden Teilchens als Funktion des Streuwinkels und der Massen des Projektils und des Targets berechnen. Definiert man den kinematischen Faktor gemäß

$$K_M = \frac{\text{Energie des rückgestreuten Projektils}}{\text{Energie des Projektils vor dem Stoß}}$$

dann gilt:

$$K_M = \left(\frac{m \cdot \cos\theta + \sqrt{M^2 - m^2 \cdot \sin^2\theta}}{m + M} \right)^2 \quad (2.4.1)$$

Hier sind m und M die Massen des Projektils und des Targetkerns. Bei festem Winkel ist es somit möglich eine Massenanalyse der Targetprobe durchzuführen.

Der differentielle Wirkungsquerschnitt einer Rutherford-Streuung mit dem Streuwinkel θ ist im Laborsystem gegeben gemäß:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) = \left[\frac{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2}{2 \cdot E \cdot \sin 2\theta} \right]^2 \left[\frac{\cos\theta + \sqrt{1 - (m/M \cdot \sin\theta)^2}}{\sqrt{1 - (m/M \cdot \sin\theta)^2}} \right]^2 \quad (2.4.2)$$

Z_1, Z_2 sind die Ordnungszahlen von Projektil und Target, e die Elementarladung und E die Energie des Projektils vor dem Stoß.

Wichtig sind Wechselwirkungen des Projektils mit den Festkörperelektronen des Targets: die Projektile regen die Elektronen an oder ionisieren sie und verlieren dabei Energie. Aufgrund dieses Energieverlustes ist eine Schichtdickenanalyse möglich.

2.4.3 Schichtdickenanalyse

Für eine Verbindung oder ein Mischkristall $A_n B_m$ der Dichte ρ mit den Massen M_A und M_B definiert man den atomaren Bremsquerschnitt der Komponenten pro Atom wie folgt:

$$\epsilon_A = \frac{1}{N_A} \cdot \frac{dE}{dx} \Big|_A \quad \text{beziehungsweise} \quad \epsilon_B = \frac{1}{N_B} \cdot \frac{dE}{dx} \Big|_B \quad (2.4.3)$$

N_A (N_B) ist die Anzahl der A-Atome (B-Atome) pro Volumeneinheit. $dE/dx|_A$ ist der Energieverlust pro Tiefe für die Atomsorte A. Der atomare Bremsquerschnitt ist unabhängig von der Dichte der Proben aber abhängig von der Energie der Projektile. Er ist in Tabellenwerken zu finden (Ref.12,13).

Für ein zusammengesetztes Target gilt das Bragg'sche Gesetz der linearen Überlagerung atomarer Bremsquerschnitte:

$$\epsilon_{A_n B_m} = m \cdot \epsilon_A + n \cdot \epsilon_B \quad (2.4.4)$$

oder

$$\epsilon_{A_n B_m} = \frac{1}{N_{A_n B_m}} \cdot \frac{dE}{dx} \Big|_{A_n B_m} = \frac{1}{N_{A_n B_m}} \cdot \frac{dE}{dx} \Big|_A + \frac{1}{N_{A_n B_m}} \cdot \frac{dE}{dx} \Big|_B \quad (2.4.5)$$

mit

$$N_{A_n B_m} = \frac{N_0 \cdot \rho}{n \cdot M_A + m \cdot M_B} \quad (2.4.6)$$

N_0 ist die Avogadro'sche Zahl. $N_{\overset{A}{m} \overset{B}{n}}$ ist die Anzahl von $\overset{A}{m} \overset{B}{n}$ -Formel-einheiten pro Volumeneinheit. Der Energieverlust nach Durchlaufen einer Dicke t des Targets ist dann :

$$\Delta E = \int_0^t \frac{dE}{dx} \Big|_{\overset{A}{m} \overset{B}{n}} dx \approx t \cdot N_{\overset{A}{m} \overset{B}{n}} \cdot (m\varepsilon_A + n\varepsilon_B) \quad (2.4.7)$$

Diese Näherung gilt nur für kleine t , wenn nämlich dE/dx etwa konstant ist (Oberflächennäherung). Sucht man den Energieverlust für eine große Tiefe, so teilt man die Tiefe in kleine Schritte auf und rechnet mit Gleichung (2.4.7) sukzessive.

Im Folgenden wird mit ΔE die Energiedifferenz von einem an der Atomsorte A oberflächengestreuten Projektil und einem an der Atomsorte A in der Tiefe t gestreuten Projektil bezeichnet. Es ergibt sich in der Oberflächennäherung:

$$\Delta E = t \cdot N_{\overset{A}{m} \overset{B}{n}} \cdot \left\{ \underbrace{K_M(A) \cdot [m\varepsilon_A + n\varepsilon_B] \Big|_E}_{\text{Weg in das Target}} + \frac{1}{|\cos\theta|} \underbrace{[m\varepsilon_A + n\varepsilon_B] \Big|_{E \cdot K_M(A)}}_{\text{Weg aus dem Target}} \right\} \quad (2.4.8)$$

$K_m(A)$ ist der kinematische Faktor der Atomsorte A bei Streukinkel θ analog Gleichung (2.4.1). Es wird senkrechter Einfall der Projektile auf das Target angenommen. In der Oberflächennäherung werden die atomaren Bremsquerschnitte bei der Energie E der einfallenden Teilchen und bei der Energie $E \cdot K_m(A)$ der an der Atomsorte A rückgestreuten Teilchen ohne Abzug der Ionisationsverluste verwendet. Gleichung (2.4.8) läßt sich vereinfachen zu:

$$\Delta E = t \cdot [S]_{\overset{A}{m} \overset{B}{n}} \quad (2.4.9)$$

wobei $[S]_{\overset{A}{m} \overset{B}{n}}$ der Energieverlustfaktor der Rückstreuung heißt.

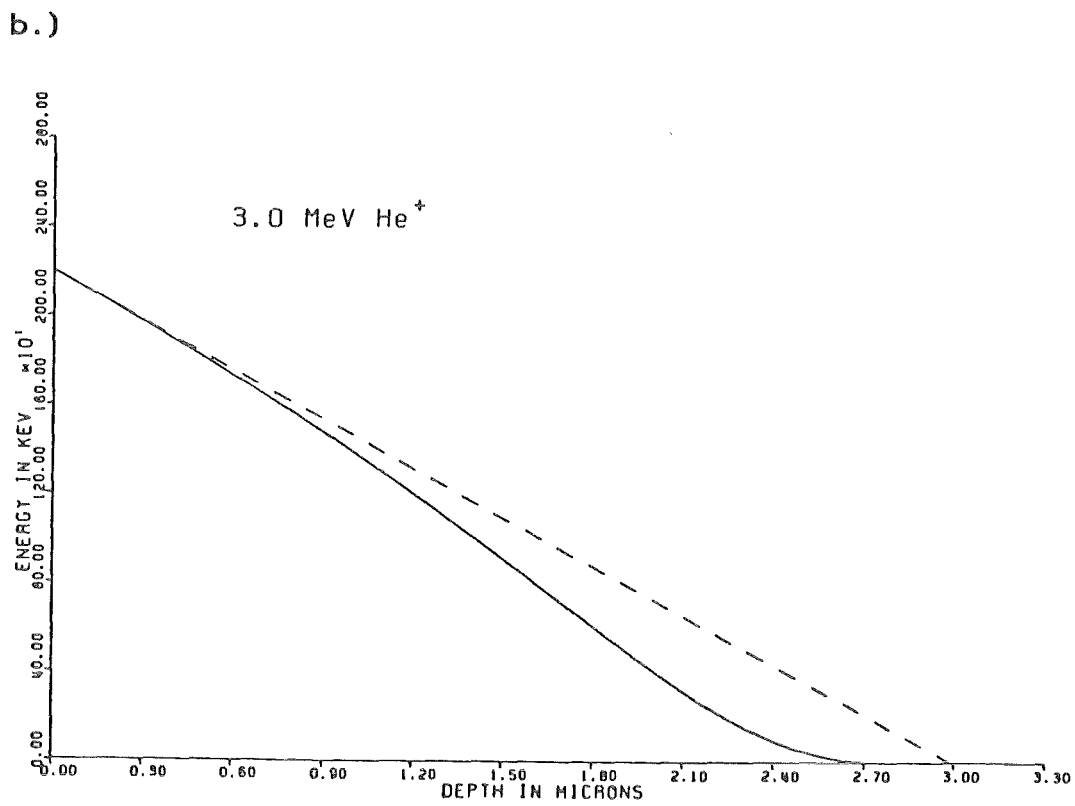
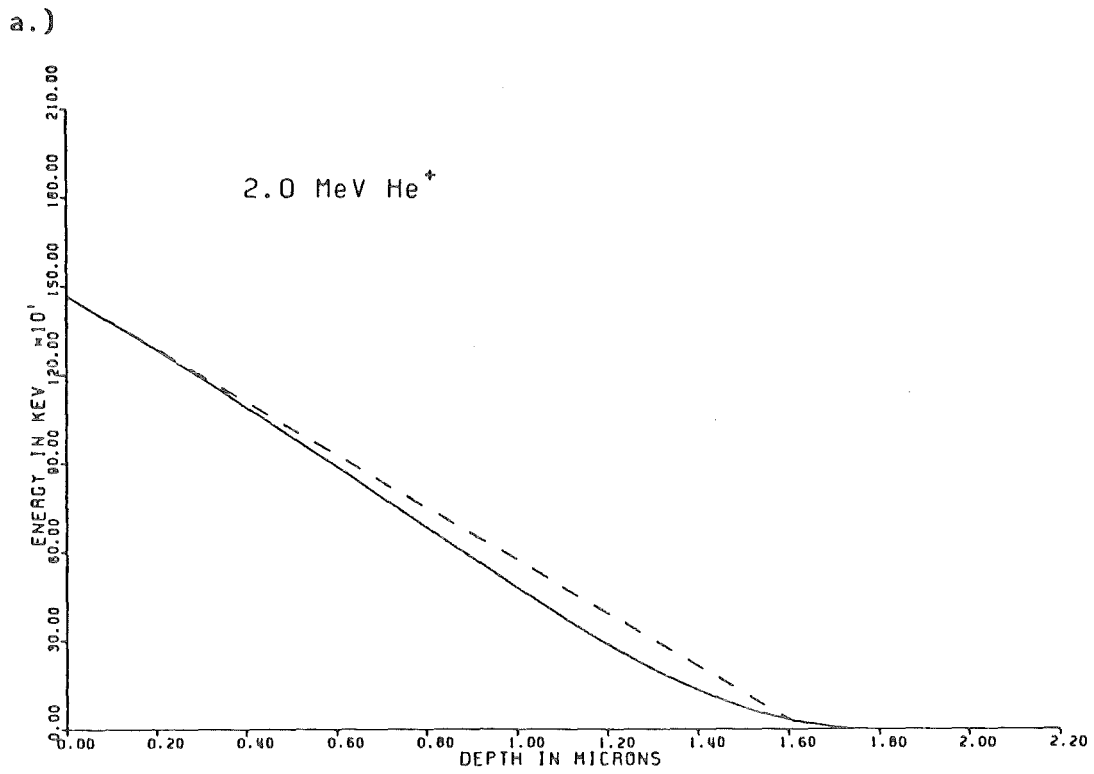


Bild 2.4.3 a-c Energie verschiedener rückgestreuter Projektile als Funktion der Tiefe des Streuorts

c.)

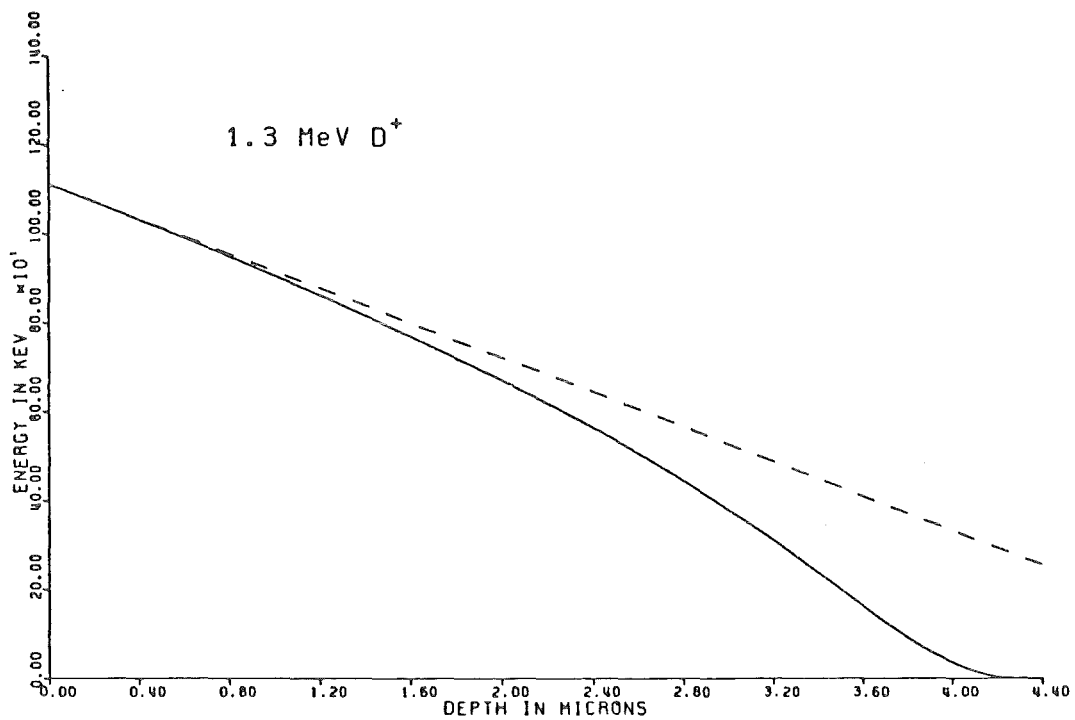


Abbildung 2.4.3 a-c zeigt die Ergebnisse von Energieverlustrechnungen in der Oberflächennäherung und nach Rechnung mit Gleichung (2.4.7). Als bremsende Substanz wird V_3Si mit einer Dichte von $5,33g/cm^3$ (Ref.14) angenommen. Es sind die Energien der an Vanadium Atomen rückgestreuten Projektile für $\theta=165^\circ$ als Funktion der Tiefe des Rückstreuworts dargestellt. Die Bremsquerschnitte von α -Teilchen und Deuteronen in Vanadium und in Silizium sind Ref.13 entnommen. Die gestichelten Linien geben die Oberflächennäherung gemäß Gleichung (2.4.9) wieder. Die durchgezogenen Kurven wurden gewonnen durch sukzessive Rechnungen nach Gleichung (2.4.7) bis in die Tiefe der Rückstreuung und wieder zurück zur Oberfläche. Aufgrund dieser Berechnungen war eine genaue Schichtdickenanalyse auch für Schichten möglich, die dicker als $1\mu m$ sind.

2.4.4 Bestimmung der Zusammensetzung der Proben

Zur Bestimmung der Zusammensetzung der Probenoberfläche wurde eine Zählratenanalyse durchgeführt. Unter Verwendung des in Gleichung (2.4.2) definierten differentiellen Wirkungsquerschnitts ergibt sich bei einem zusammengesetzten Target $A_m B_n$ für die Zählraten H_A und H_B der A- und B-Atome an der Oberfläche (Ref.12):

$$\frac{H_A}{H_B} = \frac{\sigma_A}{\sigma_B} \cdot \frac{[\varepsilon]_B^{A B m n}}{[\varepsilon]_A^{A B m n}} \cdot \frac{N_A^{A B m n}}{N_B^{A B m n}} = \frac{Z_A^2}{Z_B^2} \cdot \frac{[\varepsilon]_B^{A B m n}}{[\varepsilon]_A^{A B m n}} \cdot \frac{N_A^{A B m n}}{N_B^{A B m n}} \quad (2.4.10)$$

$$\text{mit} \quad [\varepsilon]_A^{A B m n} = \frac{1}{(n+m) \cdot N_{A B m n}^{A B m n}} \cdot [S]_A^{A B m n} \quad (2.4.11)$$

$[\varepsilon]$ heißt atomarer Energieverlustfaktor für Rückstreuung. Diese $[\varepsilon]$ sind abhängig von der Schichtzusammensetzung. Tabelle 2.4 zeigt die Berechnungen nach Gleichung (2.4.10) in $V_x Si_{1-x}$ für $0,75 \leq x \leq 0,8$. Bei gemessenem Zählratenverhältnis können aus der Tabelle die Zusammensetzung und die atomaren Energieverlustfaktoren für Rückstreuung in der Oberflächennäherung bestimmt werden.

2.4.5 Pile-up Korrektur

Treffen zwei oder mehr Projektile innerhalb der Sammelzeit in der Sperrschicht im Detektor ein, so überlagern sich die Ströme, die sie im Detektor verursachen. Die Elektronik kann die einzelnen Signale nicht mehr trennen und erkennt stattdessen ein Summensignal, das einem Teilchen höherer Energie entsprechen würde. Dieser Meßfehler wird als Pile-up bezeichnet.

Das Pile-up läßt sich durch Verringerung des Projektilstroms verkleinern. Der Pile-up stört, wenn eine geringe Anzahl von Teilchen, die schwerer als die Probenkomponenten sind, untersucht werden soll. Bei Rückstremessungen von Proben mit implantiertem Wismut liegt das Wismutprofil auf dem Pile-up Profil. Der Pile-up konnte durch eine Exponentialfunktion angefitet werden und dann von dem gemessenen Spektrum subtrahiert werden. Durch solche Fits wurde gefunden, daß die Höhe des Pile-up vor dem Vanadium von den Zählraten der Vanadiumkante abhängen.

Tabelle 2.4 Zählratenverhältnis in Abhängigkeit von der atomaren Siliziumkonzentration, dem Vanadium- Silizium Verhältnis und den Bremsquerschnitten der Rückstreuung in $eV/(10^{15} \text{Atome/cm}^2)$ bei Verwendung von 3 MeV α - Teilchen. In der letzten Spalte ist die geringe Änderung des Verhältnisses der Bremsquerschnitte der Rückstreuung erkennbar.

$\frac{H_V}{H_{Si}}$ [$\cdot 10^{-1}$]	Konz. Si	$\frac{V}{Si}$	$[\epsilon] \frac{V_3^{Si}}{V}$	$[\epsilon] \frac{V_3^{Si}}{Si}$	$\frac{[\epsilon] \frac{V_3^{Si}}{V}}{[\epsilon] \frac{V_3^{Si}}{Si}}$
0,91343	0,200	4,00	107,712	106,207	1,0142
0,94207	0,205	3,88	107,524	106,031	1,0141
0,97107	0,210	3,76	107,336	105,855	1,0140
1,00043	0,215	3,65	107,147	105,678	1,0139
1,03017	0,220	3,55	106,959	105,502	1,0138
1,06028	0,225	3,44	106,770	105,325	1,0137
1,09079	0,230	3,35	106,582	105,149	1,0136
1,12168	0,235	3,26	106,394	104,973	1,0135
1,15298	0,240	3,17	106,205	104,796	1,0134
1,18469	0,245	3,08	106,017	104,620	1,0134
1,21661	0,250	3,00	105,828	104,443	1,0133

2.5 Kurzzeittempern mit dem Elektronenpulsgenerator

2.5.1 Aufbau und Funktionsweise des Elektronenpulsgenerators

Zum Kurzzeittempern der Proben wurde ein Elektronenpulsgenerator verwendet, der in Ref.15 beschrieben ist. In Bild 2.5.1 ist der schematische Aufbau der Anlage aufgezeichnet, zusammen mit einem Strom- und Spannungsmeßaufbau.

Durch Triggerung einer Gasentladung kann dieser Generator sehr kurze Strompulse produzieren. Zwischen Kathode und Anode liegt eine Gleichspannung von 0-25 kV, die jedoch nicht zur Bildung einer Gasentladung ausreicht. Zwischen den Elektroden herrscht ein Argongasdruck von etwa 10^{-4} mbar .

Bei Betrieb der Anlage wird über den Zündschalter und den Zündkondensator ein Stromkreis geschlossen. Der Zündkondensator entlädt sich über den hochohmigen Graphitblock-Röhrchen Kontakt. An dieser heißen Stelle entsteht durch Verdampfen ein Plasma. Dieses Plasma gelangt durch das Röhrchen in den Raum zwischen Kathode und Anode. Das Hilfsplasma bewirkt dort das Einsetzen der Vakuum- Plasmaentladung zwischen Kathode und Anode. Die positiven Ionen werden auf die Kathode beschleunigt. Durch diesen Ionenbeschuß der Kathode entstehen einige besonders heiße Zentren in denen wiederum die Kathodenbrennflecke entstehen können. Diese Orte emittieren eine besonders große Anzahl von Elektronen und Metall- dampf. Die Eigenschaften der Kathodenbrennflecke und der Vakuumentlad- ung werden in Referenz 51 und 55 beschrieben. Die Kathodenbrennflecke wandern auf der Kathode und spalten sich bei hohen Strömen auf. Die Elektronenströme aus den Brennflecken stoßen sich durch ihr Magnetfeld ab. Die freigesetzten Elektronen und der Metaldampf bewegen sich von den Kathodenbrennflecken in Trichterform mit einem Öffnungshalbwinkel von etwa 30° auf die Anode zu. Deshalb herrscht vor der Anode eine homogenere Energiedichte als vor der Kathode. Trotzdem bildet sich bei hohen Energiedichten des Elektronenstrahls ein Intensitätsmaximum mit stark abfallender Flanke aus (Ref.15). Dieses Intensitätsmaximum ist jedoch breit verglichen mit den Kathodenbrennflecken. In Referenz 15 wird angenommen, daß sich bei hohen Bestrahlungsstärken anodische Brennflecken bilden. Diese anodischen Brennflecken entstehen durch Verdampfen des Anodenmaterials und bewirken eine Strahlbündelung, die zu hohen Stromdichten in den Anodenbrennflecken führt (Ref.15,51,55). Dies führt

zu Inhomogenitäten des Elektronenstrahls am Probenort. Im Gebiet der Kathode und der Anode herrscht ein Potential von weniger als 50V (Ref.51). Deshalb wird die Ladespannung des Stoßkondensators von einigen kV fast nur für die Beschleunigung der Elektronen verwandt.

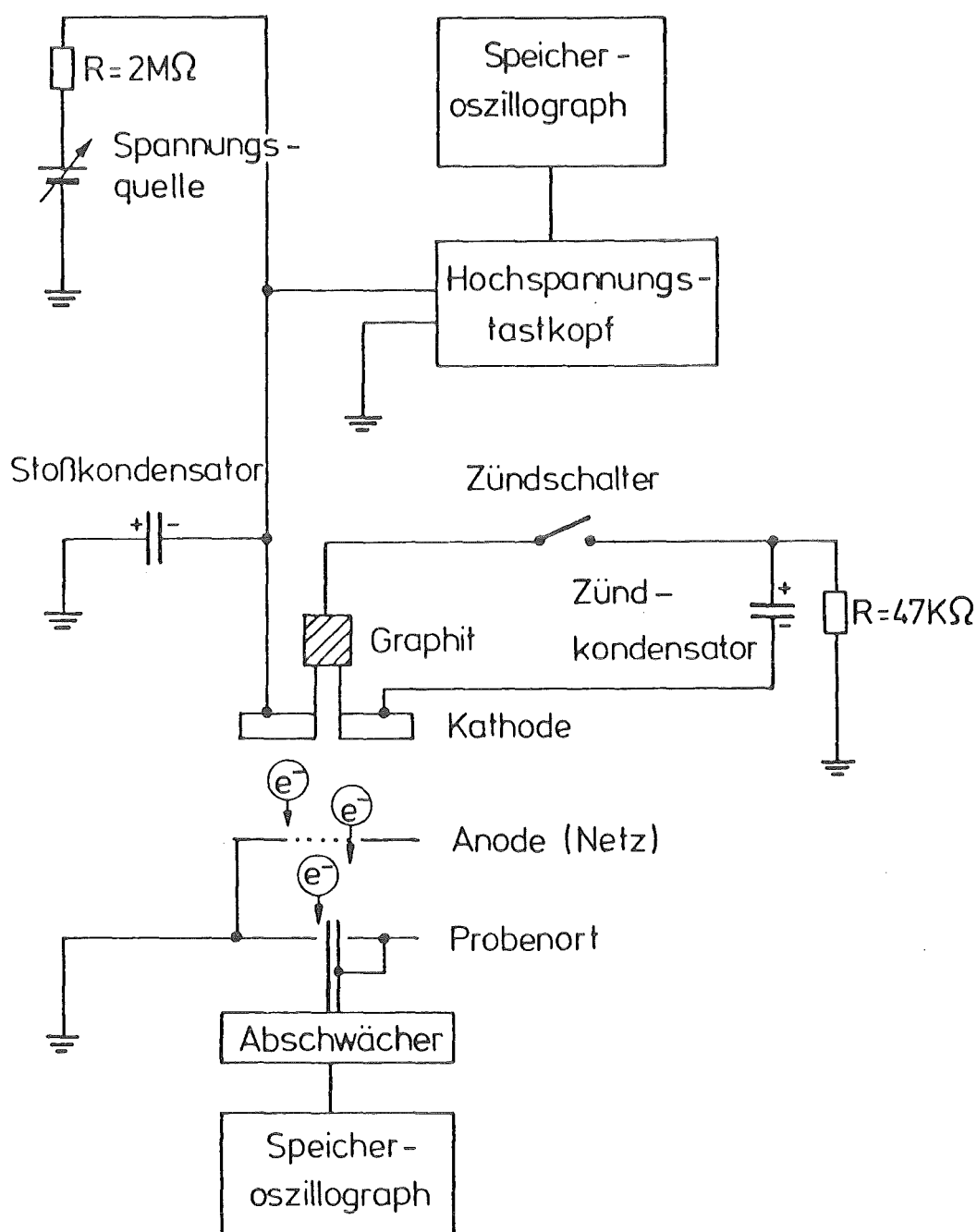


Bild 2.5.1 Schematischer Aufbau des Elektronenpulsenerators
Die Strom- und Spannungsmeßglieder, die in Kapitel 2.5.2 beschrieben werden, sind beigelegt.

Am Probenort etwa 1 cm vom Bestrahlungszentrum entfernt befindet sich ein Thermoelement mit einem aufgelöteten Kupferblättchen mit Lötzinüberzug. Aus Masse, Wärmekapazität und Temperaturänderung des Sensorblättchens (die mit dem Thermoelement bestimmt wird) läßt sich die eingedrungene Energie berechnen. Durch Division dieser Energie durch die Fläche des Sensorblättchens, die vom Elektronenstrahl getroffen wird, erhält man die Bestrahlungsenergiedichte des Elektronenschusses (Ref.27). Bei einem oben beschriebenen ausgeprägtem Intensitätsmaximum des Elektronenstrahls ist es möglich, daß der Sensor der Energiedichtemessung etwas abseits des Maximums in einem Bereich geringerer Energiedichte liegt und die Energiedichte des Strahls zu klein bestimmt. Bei Ausbildung von anodischen Brennflecken auf dem Energiedichtefühler ist auch eine zu große Angabe der Energiedichte im Bezug auf die an der Probe wirkende Bestrahlung denkbar.

2.5.2 Energie-Stromdichte-Zeit Kennlinie des Elektronenpuls

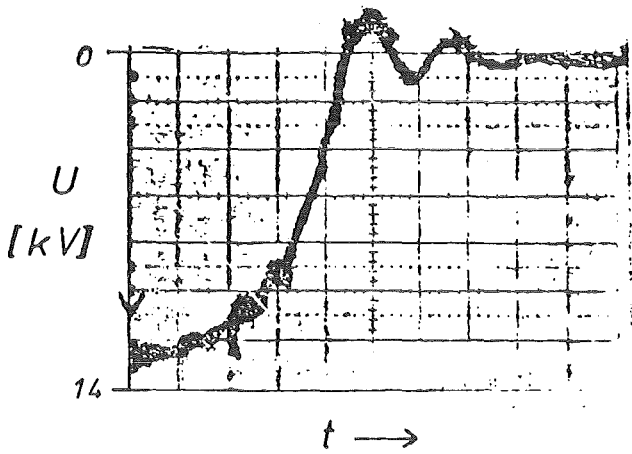
Bild 2.5.1 zeigt den Aufbau der Messung. Die Energie der Elektronen am Probenort ist etwa gegeben durch die anliegende Beschleunigungsspannung. Das Spannungssignal wurde gegen Erde mit einem Hochspannungstastkopf (Ref.21) abgenommen. Der Abschwächer des Tastkopfs verkleinert das Signal auf 1:1000. Zur Messung der Elektronenstromdichte am Probenort wurde versucht den Strom über einen Widerstand abzuleiten und den Spannungsabfall am Widerstand dem Oszillographen zuzuführen. Trotz Verwendung eines induktivitätsarmen Widerstands und Abgleichung auf 50Ω BNC-Kabel traten erhebliche Reflexionen und Störschwingungen auf. Deshalb wurde als Maß für den Elektronenstrom die Spannung zwischen zwei Drahtenden am Probenort gemessen, wie dies in Bild 2.4.1 unten zu sehen ist. Das Spannungssignal wurde über einen Abschwächer einem Speicheroszillographen zugeführt.

Die Verfälschung der Hochfrequenzsignale durch die R-C-Bausteine des Abschwächers wurde durch Versuche mit einem Rechteckpulsgenerator untersucht. Bis 10MHz wurden die Signale befriedigend wiedergegeben, bei 25MHz traten größere Abweichungen auf. Das bedeutet, daß Spannungsänderungen, die $0,1\mu s$ (10MHz) dauern, richtig wiedergegeben werden, während Spannungsänderungen, die $40ns$ (25MHz) dauern, langsamer und mit Einschwingvorgängen wiedergegeben werden. Da die Abschwächer das Signal um weniger als $0,1\mu s$ verfälschen, kann die Signaländerung durch die Abschwächer vernachlässigt werden.

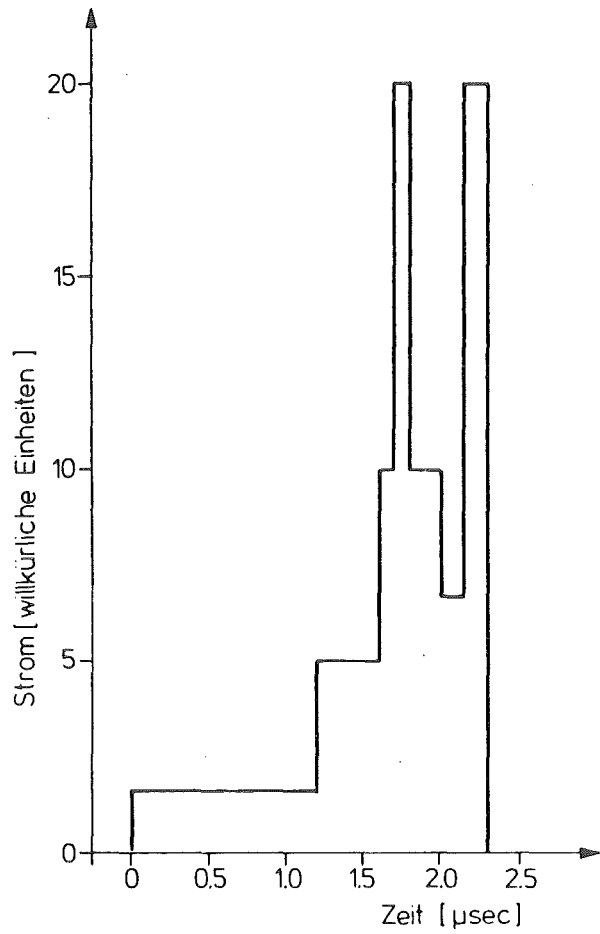
a.)

vertikal: 2kV/div.

horizontal: 0,5 μ s/div.

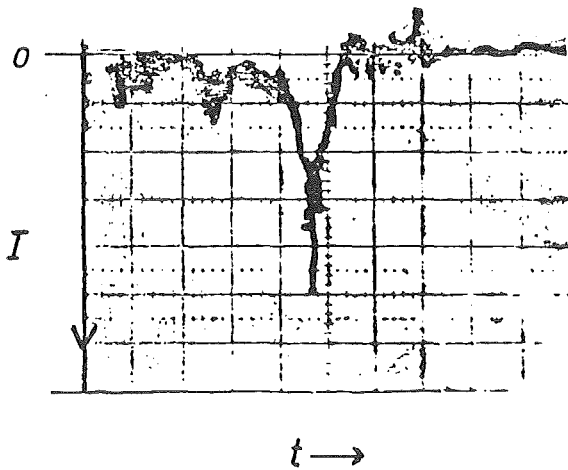


c.)



b.)

horizontal: 0,2 μ s/div.



d.)

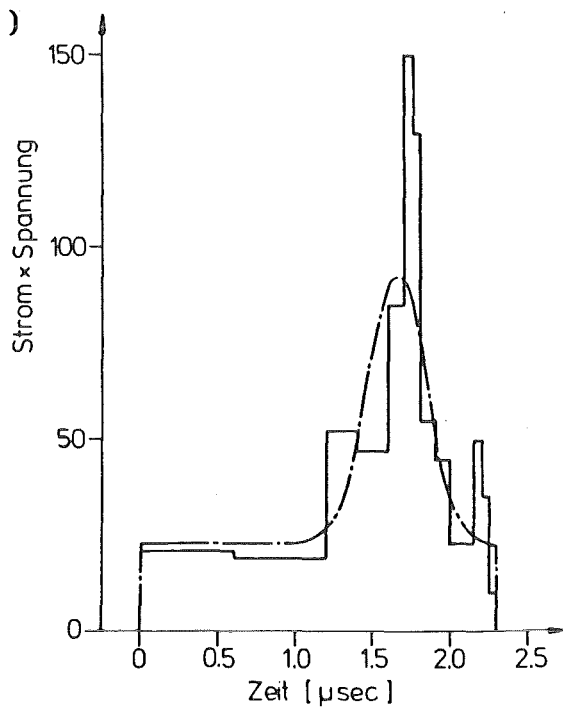


Bild 2.5.2 a-d Das Spannungs- Strom- Zeit Verhalten während PEBA (Beschreibung siehe Text)

Bild 2.5.2 a-b zeigen den gemessenen Spannungs-Strom Verlauf eines Impulses. Die Zeitmaßstäbe haben nicht den gleichen Nullpunkt. Bei der externen Triggerung der beiden Oszillographen, mit der ein gemeinsamer zeitlicher Nullpunkt erzeugt wird, wird über das Triggerkabel eine Erdschleife aufgebaut, die die Signale verfälscht. Deshalb wurden die Signale unabhängig voneinander intern getriggert.

Die gemessenen Spannungs- Zeit- Kurven zeigten alle einen ähnlichen Verlauf. Unterschiedlich war die Zeit des Entladevorgangs. Die gemessenen Strom- Zeit Kurven wiesen unterschiedlich breite Peaks auf. Bei einigen Messungen traten auch 2 oder 3 Peaks auf. Dem starken Abfall der Spannung in Bild 2.5.2 a müßte der Strompeak in Bild 2.5.2 b entsprechen. Allgemein waren die Strompeaks aber zeitlich kürzer als der Abfall der Spannung (man beachte die unterschiedliche Zeitverstärkung der Oszillographenbilder).

Die Entladungskurven waren auch bei gleichen Versuchsbedingungen nicht reproduzierbar. Zwischen starken Entladungen treten einige schwächere Entladungen auf. Die stärksten Spannungsänderungen bei starken Entladungen dauern $0,3-1,5\mu\text{s}$. Die Meßkurven aus Bild 2.5.2 a-b stellen einen typischen Spannungs- Strom- Verlauf dar. Für die Erzeugung von kurzen, intensitätsstarken Elektronenpulsen ist die Ausbildung vieler Kathodenbrennflecken Bedingung. Bei Untersuchungen der Existenz von Kathodenbrennflecken in Abhängigkeit von Spannung und Strom wurden Schwankungen festgestellt (Ref.51). So ist es zu erklären, daß die Entladungszeit und die maximalen Stromstärken verschiedener Entladungen bei gleichen Versuchsbedingungen nicht reproduzierbar waren. Durch die Messung der Spannung wird die Energie der Elektronen bestimmt. Durch die Strommessung kann nur die Stromdichte an einer bestimmten Stelle der Probe bestimmt werden. Da die Strompeaks zeitlich kürzer als die Spannungsabfälle an der Kathode sind, wird angenommen, daß diese kurzen Strompeaks von anodischen Brennflecken verursacht werden. Demnach existieren diese anodischen Brennflecken nicht während der ganzen Entladungsdauer an den Probenstellen. Das Auftreten von mehr als einem Strompeak an einer Probenstelle während einer Entladung könnte verursacht werden durch eine Wanderung der anodischen Brennflecke mit dann allerdings hohen Geschwindigkeiten oder durch ein Auseinanderfließen und eine Wiederentstehung der anodischen Brennflecke an der gleichen Probenstelle.

Durch zeitliche Integration der Meßkurven aus Bild 2.5.2 a-b wurde versucht die Verteilung der Elektronen in Abhängigkeit von der Energie,

also das Energiespektrum zu bestimmen. Dies gelang nicht, weil kein gemeinsamer Zeitnullpunkt der beiden Messungen bekannt ist. Durch Verschieben der beiden Kurven gegeneinander konnte ebenfalls kein zuverlässiges Ergebnis gewonnen werden, weil die zeitliche Breite des Strompeaks und die Flanke des Spannungsabfalls unterschiedlich waren.

Greenwald et al (Ref.16) haben eine solche Untersuchung durchgeführt und haben eine Verteilungsfunktion für das Energiespektrum gefunden, die von der minimalen Energie 0 bis zu der maximalen Energie (die etwa der Ladespannung des Kondensators entspricht) etwa konstant ist.

Wenn Q die Ladung einer Kapazität C bei einer Spannung U ist, so gilt:

$$Q = C \cdot U \quad (2.5.1)$$

Bei der Entladung um eine Spannungsdifferenz ΔU ist dann $\Delta Q \sim \Delta U$. Das bedeutet, daß die Verteilung der Elektronen über die Energie konstant ist, wie Greenwald et al gefunden haben (Ref.16). Nimmt man nun an, daß die Energieverteilung der Elektronen am Probenort des Elektronenpuls-generators ebenfalls konstant ist, dann läßt sich aus der Spannungsmessung 2.5.2 a ein Stromverlauf konstruieren. Abbildung 2.5.2 c zeigt den so konstruierten Stromverlauf. Der zweite Strompeak bei $2,2\mu s$ ist Folge einer vereinfachenden Annahme, bei der die Spannungsschwingungen im Auslauf der Entladung vernachlässigt wurden. Von dem zweiten Peak abgesehen unterscheidet sich der konstruierte Stromverlauf von der Messung 2.5.2 b vor allem durch den breiteren Stromhauptpeak. Man beachte wieder den unterschiedlichen Zeitmaßstab. Der Verlauf von Kurve 2.5.2 c stellt ein durchschnittliches Stromdichte- Zeit- Verhalten vor der Anode dar und berücksichtigt nicht die Inhomogenitäten der Stromdichte am Probenort aufgrund der anodischen Brennflecken.

Das Ziel der Überlegungen zeigt Bild 2.5.2 d: die zeitliche Abhängigkeit der am Probenort vorhandenen mittleren Bestrahlungsstärke sollte bestimmt werden. Sie wurde durch Multiplikation der Strom-Spannungswerte der Abbildungen 2.5.2 a und c gewonnen. Der zweite Strompeak aus Bild 2.5.2 c wird jetzt auf Grund der kleineren Energien klein. Gestrichelt ist in Bild 2.5.2 d eine vereinfachte Funktion zur Beschreibung der Bestrahlungsstärke eingetragen. Diese Funktion ist die Summe eines Rechteckpulses und einer Gaußfunktion und wird bei der rechnerischen Simulation des Kurzzeittempers in Kapitel 3 verwendet. Die Abweichungen dieser Simulationsfunktion von der konstruierten Funktion

sind offensichtlich. Wegen der Nichtreproduzierbarkeit der Entladungen ist eine exaktere Beschreibung aber nicht angebracht. Die Gültigkeit der Näherungen muß durch Vergleiche von Rechenergebnissen mit experimentell bestimmten Größen überprüft werden.

2.5.3 Reflexion der Elektronen

Für einen monochromatischen Elektronenstrahl der Energiedichte ED und Elektronen der Energie E_0 gilt nach Ref. (17):

$$ED_{\text{Loss}} = ED \cdot \eta \cdot \frac{\langle E_B \rangle}{E_0} \quad (2.5.2)$$

ED_{Loss} ist der Verlust an Energiedichte, η ist der Rückstreuoeffizient und $\langle E_B \rangle$ die mittlere Energie der rückgestreuten Elektronen.

Ein Bruchteil η der Elektronen wird reflektiert. Diese Elektronen hinterlassen aber ein Teil ihrer Energie im Target. Der Rückstreuoeffizient ist energieabhängig: langsame Elektronen werden stärker reflektiert als schnelle.

Bishop hat die Rückstreuoeffizienten monochromatischer Elektronenstrahlen für verschiedene Materialien und Elektronenenergien gemessen (Ref.18). Ein Fit seiner 10keV Elektronen Daten ergibt:

$$\eta(Z) = -0,21 - 5,41 \cdot 10^{-3} \cdot Z + 0,128 \cdot Z^{\frac{1}{2}} \quad (2.5.3)$$

Z ist die Ordnungszahl des Targets. Der Fit ist gültig für $6 \leq Z \leq 92$.

Sternglass hat die mittlere Energie der rückgestreuten Elektronen für Einfallenergien $0,2 \text{keV} \leq E_0 \leq 4 \text{keV}$ bestimmt (Ref.19). Er nimmt durch Vergleich mit anderen Autoren an:

$$\frac{\langle E_B \rangle}{E_0} = (0,45 + 2 \cdot 10^{-3} \cdot Z) \pm 5\% \quad (2.5.4)$$

für $0,2 \text{keV} \leq E_0 \leq 32 \text{keV}$

Matsukawa et al geben für 10 und 30keV gewisse Abweichungen von der Sternglass-Formel an, die am oberen Rand der Fehlerabschätzung liegen (Ref.20).

Im Experiment war die mittlere Elektronenenergie 10keV. Die Stern-glass-Formel und die 10keV Bishop Werte sind daher für die Reflexions-korrektur gut geeignet.

Für die eindringende Energiedichte ED_{in} eines Elektronenstrahls der Energiedichte ED und Elektronen der Energie E_0 gilt:

$$ED_{in} = ED \cdot (1 - \eta \cdot \langle E_B \rangle / E_0) \quad (2.5.5)$$

Tabelle 2.5.1 zeigt den nach den Gleichungen (2.5.2-4) berechneten Energieverlust in einigen Targets. Für die Berechnung bei zusammen-gesetzten Targets wird ein gemitteltetes Z verwendet.

Tabelle 2.5.1

Target	Lötzinn	Cu	V	V ₃ Si	Si	Al
ED_{Loss}/ED	26,7%	16,4%	13,9%	12,8%	9,2%	8,6%

2.5.4 Energieverlust der Elektronen

Die eingeschossenen Elektronen verlieren ihre Energie im Festkörper hauptsächlich durch Anregung und Ionisation der Festkörperelektronen. Durch Elektronen- Elektronen- und Elektronen- Phononen-Wechselwirkungen wird die kinetische Energie der Elektronen in Wärmeenergie des Gitters übertragen: der Festkörper wird aufgeheizt. Bremsstrahlung, charakteristische Röntgenemission und andere Prozesse sind für den Energieverlust der Elektronen und die Erhitzung des Festkörpers von geringerer Bedeutung.

Der Energieverlust eines monochromatischen Elektronenstrahls in verschiedenen Festkörpertargets wurde in zahlreichen Arbeiten gemessen oder mit Hilfe von Monte-Carlo-Methoden und einer Energieverlusttheorie berechnet (Ref. 20,22,23,24).

Die durchgezogenen Linien in Bild 2.5.3 stammen aus Referenz 20 und zeigen den Energieverlust monochromatischer Elektronenstrahlen in verschiedenen Targets. Diese Kurven wurden auf zwei Methoden angefitet:

$$a.) \quad y(x) = \sum_{i=1}^6 AX(i) \cdot \left\{ \frac{x}{RW} \right\}^{i-1} \quad (2.5.6)$$

$$b.) \quad y(x) = a_3 \cdot \exp \left[- \left(\frac{x - RW}{RW - RW \cdot a_1} \cdot \sqrt{a_2} \right)^2 \right] \quad (2.5.7)$$

x ist die Tiefe im Festkörper, RW ist die Reichweite der Elektronen.

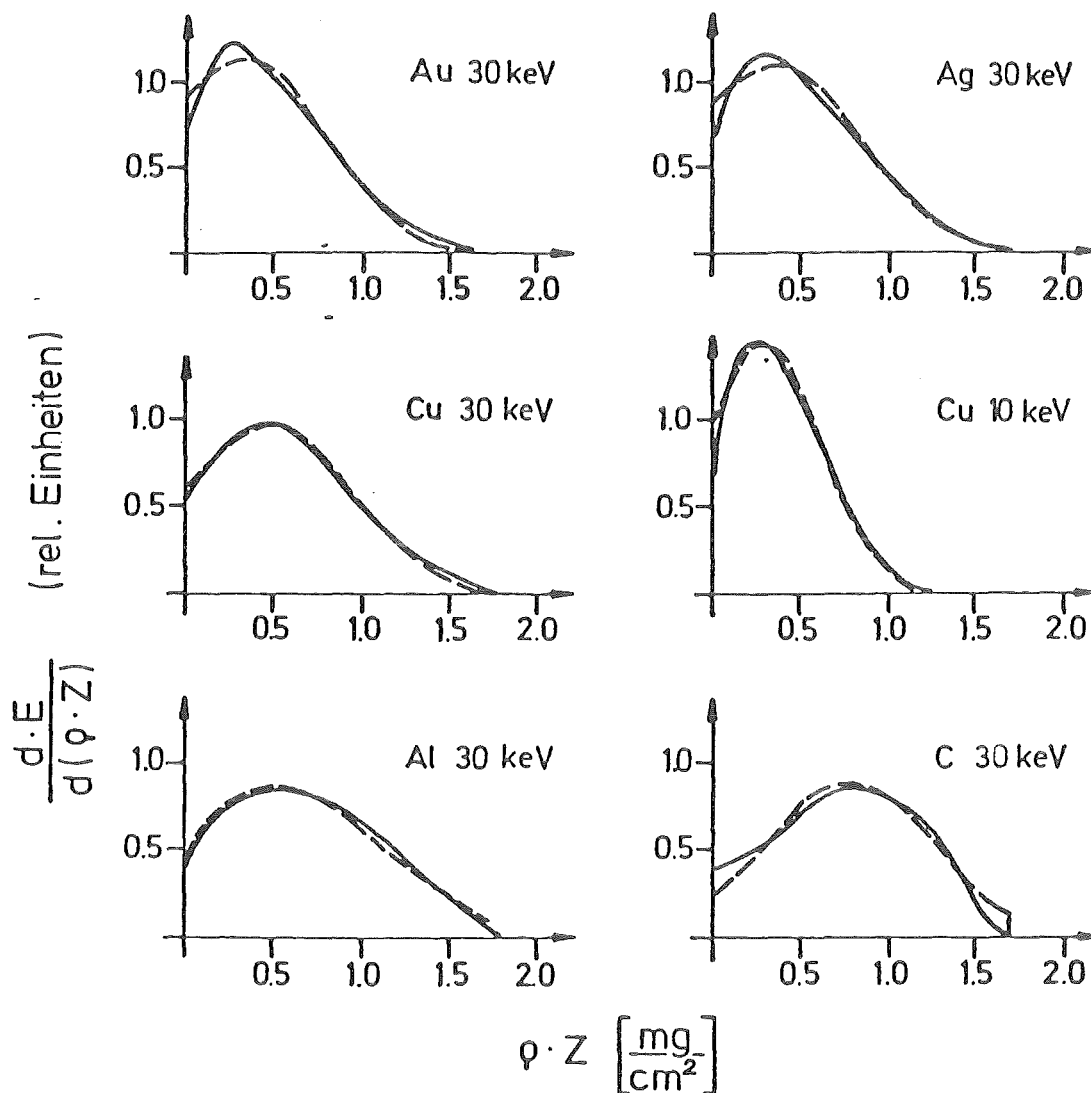


Bild 2.5.3 Energiedepositionsprofile monochromatischer Elektronen in verschiedenen Festkörpern. Die durchgezogenen Linien stammen aus Ref. 20, die gestrichelten Linien sind gefittete Gaußfunktionen

Mit der Polynomfunktion lassen sich die Kurven sehr gut anfitten. Zwischen den Koeffizienten $AX(i)$ aus Gleichung (2.5.6) für verschiedene Targets besteht aber kein erkennbarer Zusammenhang.

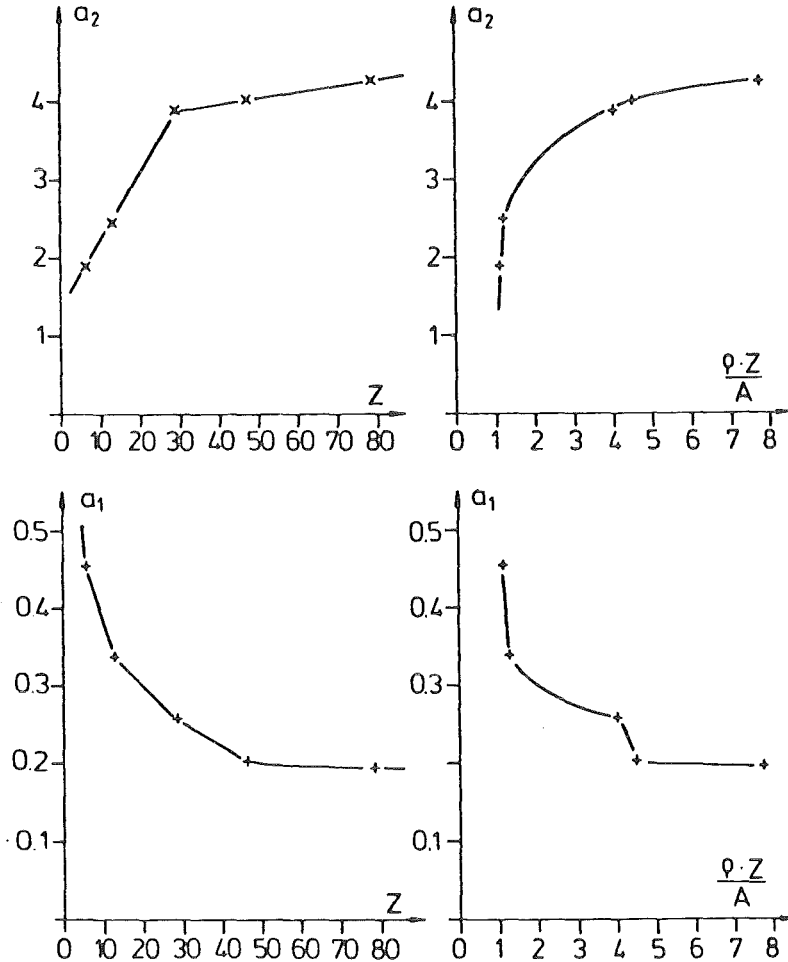


Bild 2.5.4 Die Koeffizienten der Gaußfunktionen in Abhängigkeit von der Ordnungszahl und der Elektronendichte der Festkörper

Die gestrichelten Kurven in Bild 2.5.3 zeigen die nach Gleichung (2.5.7) gefitteten Gaußfunktionen. Die Integration der Gaußfunktion wird mit Hilfe der Tabelle in Referenz 52 durchgeführt. Das Integral nicht tabellierter Zwischenpunkte wird durch lineare Interpolation berechnet. Es sind Abweichungen von den Sollfunktionen für sehr große und kleine Z festzustellen. Der Koeffizient a_3 der Gaußfunktion ist ein Normierungsfaktor und ist nicht von Belang. Für die Koeffizienten a_1 und a_2 von Gleichung (2.5.7) wurde ein Zusammenhang zwischen der Ordnungszahl Z und der Größe $\rho \cdot Z/A$ des Festkörpers gefunden. Wenn ρ die Dichte des Festkörpers und A sein Atomgewicht oder sein mittleres Atomgewicht (für ein zusammengesetzten Festkörper) sind, dann ist die Größe $\rho \cdot Z/A$ proportional

zur Elektronendichte im Festkörper. Bild 2.5.4 zeigt die Koeffizienten a_1 und a_2 als Funktion der Ordnungszahl Z und als Funktion von $\rho \cdot Z/A$. Der Koeffizient a_1 bestimmt die Tiefe des Maximums der Energieverlustfunktion. a_1 zeigt in Bild 2.5.4 eine Abhängigkeit von der Ordnungszahl der Kerne. Der Koeffizient a_2 bestimmt die Tiefenspreizung des Energiedepositionsprofils und ist von der Dichte der bremsenden Elektronen abhängig.

Mit Hilfe der Abbildung 2.5.4 wurden die Energiedepositionsprofile in verschiedenen Targets bestimmt. Die Tabelle 2.5.2 zeigt 3 Beispiele.

Tabelle 2.5.2 Beschreibung siehe Text

Target	Z	$\rho Z/A$	a_1	a_2
V	23	3,1	0,28	3,4
V ₃ Si	20,75	2,5	0,29	3,2
TaZr	56,4	4,6	0,20	4,1

Durch Aufsummieren verschiedener monochromatischer Depositionsprofile wurde das Energiedepositionsprofil eines energie-kontinuierlichen Elektronenstrahls berechnet. Dabei wurde angenommen, daß die Elektronen über die Energie gleichverteilt sind. Dies wurde auch schon in Kapitel 2.5.2 angenommen. Da dies nur eine Näherung ist, wurde auch die unterschiedliche Reflexion der Elektronen verschiedener Energien vernachlässigt. Bei der Summierung der Gaußprofile wurde weiter angenommen, daß die Energiedepositionsprofile verschiedener Energien die gleiche Form haben, daß sie sich nur durch die Reichweite und die Fläche unter der Kurve unterscheiden (Energiewichtung).

Bild 2.5.5 zeigt die so entstandenen Summenkurven von Gaußprofilen für Targets mit hoher und kleiner Ordnungszahl Z : Au, Al und C. Das Cu Profil liegt etwa in der Mitte zwischen Gold und Aluminium. Das Silberprofil liegt nahe beim Goldprofil. Die abgebildeten Kurven haben die gleiche Fläche und enden bei der reduzierten Reichweite, die hier beim Punkt 25 auf der Abszissenachse liegt. Man sieht, daß das Maximum der Energiedeposition jetzt an der Oberfläche liegt.

Beim Vergleich der Summe von überlagerten Gauß- und Polynomfunktionen waren nur kleine Unterschiede festzustellen. Geringe Unterschiede treten

auch auf, wenn man bei der Überlagerung der Energieverlustfunktionen für Kupfer einmal das 10keV- und dann das 30keV- Energieverlustprofil verwendet. Die Unterschiede der Summenprofile beim Vergleich der Aluminium 30keV Polynomfunktion mit der Gaußfunktion und dem Polynom 3.Grades von Everhart und Hoff (Ref.22) waren ebenfalls klein.

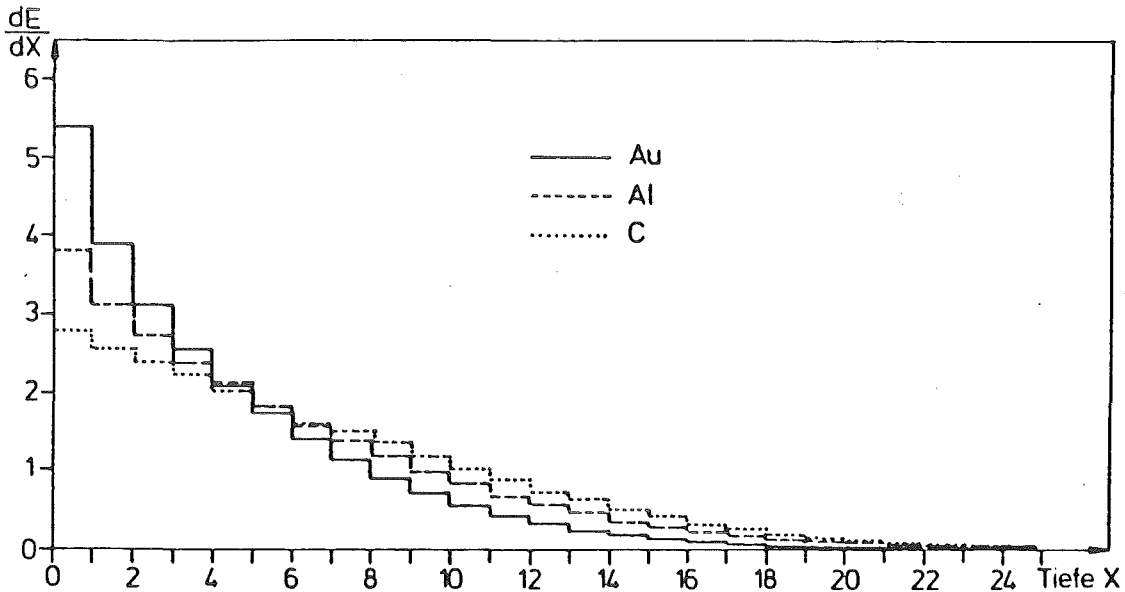


Bild 2.5.5 Berechnete Energiedepositionsprofile energie-
-kontinuierlicher Elektronenstrahlen

Zusammenfassend kann man sagen, daß die Energiedepositionsprofile von 30keV Elektronenstrahlen in verschiedenen Festkörpern mit $6 \leq Z \leq 79$ abgeschätzt werden können. Berechnet man das Energiedepositionsprofil eines energie- kontinuierlichen Elektronenstrahls durch Summierung der monochromatischen Profile so beobachtet man dort geringere Unterschiede zwischen Profilen verschiedener Festkörpertargets als zwischen den monochromatischen Profilen verschiedener Festkörpertargets. Daraus wurde gefolgert, daß die Depositionsprofile in den Targets für einen kontinuierlich-energetischen Elektronenstrahl gut mit den Koeffizienten a_1 und a_2 aus Abbildung 2.5.4 bestimmt werden können.

2.5.5 Reichweite der Elektronen

Für die Reichweitenberechnung stehen verschiedene Formeln zur Verfügung, die sich hauptsächlich durch den Exponenten unterscheiden, mit der die Elektronenenergie in die Berechnung eingeht. Im Simulationsprogramm, das in Kapitel 3 besprochen wird, stehen dem Benutzer 3 Formeln zur Auswahl, die nun vorgestellt werden. Die hier verwendeten Abkürzungen der physikalischen Größen sind in Übereinstimmung mit dem Simulationsprogramm gewählt.

Grün hat die Reichweite von Elektronen in Gasen gemessen (Ref.21):

$$RW = \frac{4,57 \cdot 10^{-6}}{RHO} \cdot E^{1,75} \quad (2.5.8)$$

RW ist die Reichweite in cm, RHO die Dichte des Targets in g/cm³, und E die Elektronenenergie in keV.

Aus den Daten neuerer Messungen und Computersimulationen (Ref.20,22,23,24) wurde die Gleichung (2.5.8) geändert:

$$RW = \frac{4,41 \cdot 10^{-6}}{RHO} \cdot E^{1,75} \quad (2.5.9)$$

Ardenne gibt für die Tiefe, in der hochenergetische Elektronen mit 10keV < E < 100keV noch 1% ihrer Energie besitzen, an (Ref.25):

$$RW = \frac{2,1 \cdot 10^{-6}}{RHO} \cdot E^2 \quad (2.5.10)$$

Feldman findet für niederenergetische Elektronen mit 1keV < E < 10keV (Ref.26):

$$RW = \frac{2,5 \cdot 10^{-6} \cdot A}{RHO} \cdot \left\{ \frac{E}{\sqrt{Z}} \right\}^{FNE} \quad (2.5.11)$$

$$\text{mit } FNE = \frac{1,2}{1 - 0,29 \cdot \log_{10} Z}$$

Hier ist A das Atomgewicht des Targets. Für ein zusammengesetztes Target gilt das mittlere Atomgewicht.

In dem Computerprogramm sind die Gleichungen (2.5.9) bis (2.5.11) aufrufbar. Für die Berechnungen der Koeffizienten a₁ und a₂ der Gleichung (2.5.7) und Tabelle 2.5.2 wurde die Reichweitenbeziehung (2.5.9) verwendet.

2.6 Langzeittempern der Proben

Zur Ausheilung der Proben wurden diese etwa eine halbe Stunde lang im Hochvakuum getempert. Für Temperaturen bis 900°C wurden die Schichten in ein evakuiertes Rohr gelegt. Das Rohr mit der Probe wurde beheizt. Im beheizten Zustand stieg der Druck im Rohr auf $1 \cdot 10 \cdot 10^{-6}$ mbar. Für höhere Tempertemperaturen wurden die Proben auf einem beheizbaren Tantalstreifen gespannt. Hier stellten sich während der Heizung Drücke von 10^{-7} mbar ein.

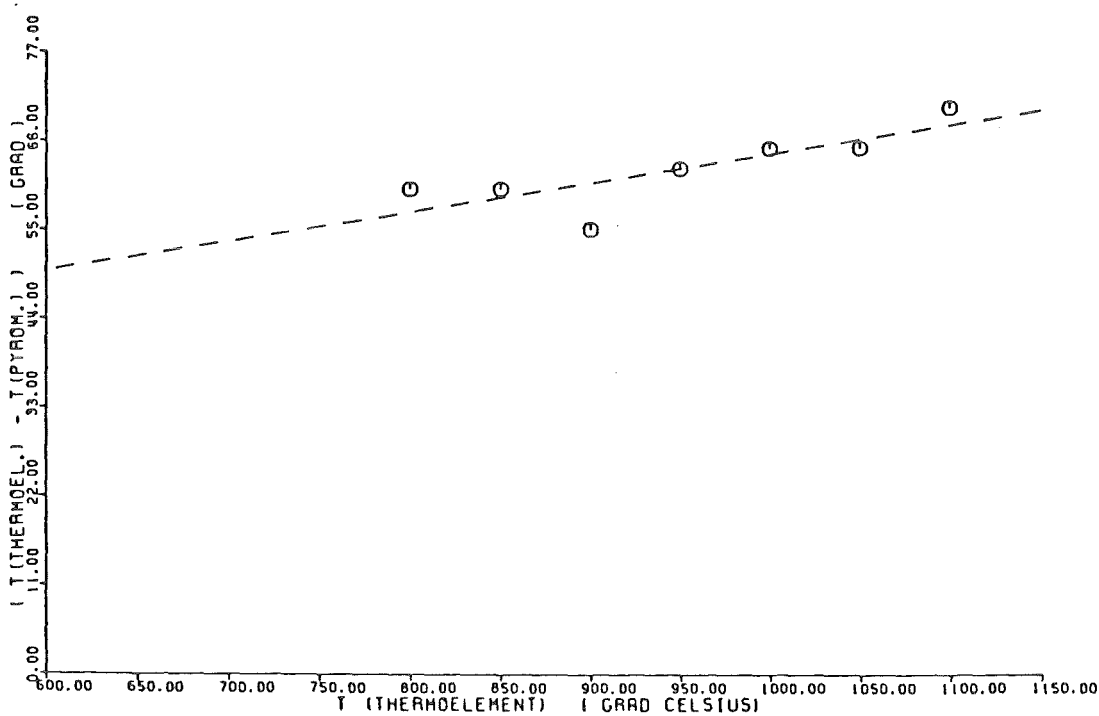


Bild 2.6.1 Eichung des Pyrometers mit Hilfe eines Thermoelements

Für die Temperaturmessung stand bei der Rohrheizung ein Thermoelement zur Verfügung, das in der Heizröhre installiert war. Die Temperatur der Probe selbst konnte nicht gemessen werden. Man kann aber annehmen, daß die Temperaturen des Ofens und der Probe sich nach einer Einstellzeit am Heizbeginn nicht wesentlich unterscheiden.

Die Temperaturmessungen der auf dem Heizband getemperten Proben wurden mit einem Pyrometer durchgeführt. Bei der Messung wird ein Glühfaden des Pyrometers geheizt. Die Emission des Glühfadens wird mit der Emission der

Probe mit dem Auge verglichen. Da beide Stoffe, Glühfaden und Probe, keine gleich starken Strahler und keineswegs schwarze Strahler sind, wurden Vergleichsmessungen durchgeführt. Dazu wurde der beheizbare Rohrofen mit dem Pyrometer beobachtet. Bild 2.6.1 zeigt die Versuchsergebnisse. Die mit dem Pyrometer gemessenen Temperaturen waren zwischen 55 und 70 Grad kleiner als die mit dem Thermoelement gemessenen Temperaturen des Rohrofens. Aufgrund der verwendeten Linse des Pyrometers ist zu erwarten, daß die Temperaturen um nur 5-9 Grad zu gering gemessen werden. Bei den Temperexperimenten wurde die Abbildung 2.6.1 zur Korrektur der Temperaturmessung mit dem Pyrometer verwendet. Es wurde angenommen, daß die Proben etwa gleiche Strahler sind wie die Wände des Rohrofens. Die Richtigkeit der Pyrometereichung mußte in Temperexperimenten nachgewiesen werden.

2.7 Ionenimplantation

Zur Untersuchung der Schmelzschwelle von V_3Si bei PEBA wird die Änderung des Tiefenprofil eines Implantats beobachtet. Im festen Zustand des Festkörpers diffundiert ein Implantat auch über längere Zeit kaum. Im flüssigen Zustand erhöht sich die Diffusion um einige Größenordnungen. Die Änderung des Tiefenprofils eines Implantats ist ein empfindlicher Nachweis zur Existenz der Schmelze, auch wenn das Material nur kurze Zeit im flüssigen Zustand ist.

Aus diesem Grund wurden einige Schichten mit Wismut implantiert. Wismut ist ein schwer lösliches Element und besitzt den Vorteil schwerer als die Elemente der Schichten Vanadium und Silizium zu sein. Deshalb ist das Wismut-Tiefenprofil mit Rutherford-Rückstreuung gut zu beobachten. Dies gilt auch wegen des höheren Wirkungsquerschnitts für Rückstreuung für Bi gegenüber V und Si (siehe Gleichung (2.4.2)).

Wismut wurde einfach ionisiert auf 330keV beschleunigt und auf wassergekühlte Proben geschossen. Es wurde eine Fluenz von $5 \cdot 10^{14} \text{Bi/cm}^2$ implantiert. Die Wismutatome sind dann mit dem Profil einer Gauß'schen Glockenkurve in Bezug auf die Schichttiefe verteilt. Dies bedeutet, daß im Peak der Wismutverteilung etwa 500Å unter der Probenoberfläche der Wismutanteil etwas weniger als 1 Atomprozent beträgt.

Unter der Annahme einer Dichte von $5,33\text{g/cm}^3$ (Ref.14) der Probe wurde das Eindringen der Wismutatome in die Schicht mit einem Monte-Carlo Programm berechnet (Ref.28). Außerdem wurde die Wismutverteilung experimentell mit der Rutherford Rückstreuung untersucht. Die Ergebnisse zeigt die Tabelle 2.7.1 .

Tabelle 2.7.1 Tiefenverteilung von implantiertem Wismut

	Maximum der Tiefenverteilung	Standartbreite der Tiefenverteilung
Programm	622Å	356Å
Experiment	430Å	255Å

3 Rechnerische Simulation des Kurzzeittemperns

3.1 Energieverlust und Wärmetransport

In diesem Kapitel soll die Erhitzung eines Festkörpers durch einen gepulsten Elektronenstrahl untersucht werden. In Kapitel 2.5.4 wurde die Reflexion der Elektronen besprochen. Die Reflexion der Elektronen bedingt, daß nicht die ganze Energie des gepulsten Elektronenstrahls in den Festkörper eindringt. Wenn der Festkörper dünner als die Reichweite der Elektronen wäre, würde ein Teil der Energie durch Transmission verloren gehen. Diesen Fall wollen wir nicht betrachten.

In Paragraph 2.5.6 haben wir gesehen, wo die Energie der Elektronen im Festkörper deponiert und als Wärme freigesetzt wird. Wir wollen uns jetzt damit befassen was mit dieser Wärme geschieht.

Es gibt 3 Möglichkeiten des Wärmetransports: Wärmediffusion, Wärmekonvektion und Wärmestrahlung. Die Wärmestrahlung wird in Kapitel 3.2 besprochen. Die Träger der Wärmediffusion sind Elektronen und Phononen. Die Wärmekonvektion tritt in Flüssigkeiten und Gasen auf. Aufgrund der kurzen Zeiten, in der die Schmelze besteht, und wegen der geringen Abmessungen der Schmelze dominiert in unserem Fall die Wärmediffusion über die Wärmekonvektion.

Die Wärmestrahlung ist im Gegensatz zur Wärmeleitung und Wärmekonvektion nicht materiegebunden und kann sich als elektromagnetische Welle auch im Vakuum ausbreiten. Das Stefan-Boltzmannsche Gesetz gibt die Wärmemenge pro Zeit- und Oberflächeneinheit ΔE an, die ein Strahler der absoluten Temperatur T mit der Ausstrahlung α an seine Umgebung mit der absoluten Temperatur T_0 abgibt (Ref.32):

$$\Delta E = \sigma \cdot \alpha \cdot (T^4 - T_0^4) \quad (3.1)$$

$$\text{mit } \sigma = 5,67 \cdot 10^{-12} \text{ J}/(\text{cm}^2 \cdot \text{K}^4 \cdot \text{sec})$$

σ heißt Stefan-Boltzmann Konstante. Im Fall unseres erhitzten Festkörpers ist die Abstrahlung an der Oberfläche am größten, weil hier die größte Temperaturdifferenz auftritt. Nehmen wir den Fall größter

Wärmeabstrahlung an: unser Festkörper sei ein schwarzer Strahler und $\alpha=1$. Die Temperatur der Festkörperoberfläche betrage 5 μ s lang 4000°C , seine Umgebungstemperatur 20°C , dann wird eine Energie von $9 \cdot 10^{-3} \text{ J/cm}^2$ abgestrahlt. Bei einer Temperatur von 2000°C sind es in 5 μ s nur noch $7,5 \cdot 10^{-4} \text{ J/cm}^2$, die abgestrahlt werden. Im Vergleich zu den typischen Bestrahlungsstärken von über 1 J/cm^2 ist der Verlust durch Wärmestrahlung bei Temperaturen unter 4000°C vernachlässigbar.

3.2 Wärmediffusion

Besteht ein Temperaturgradient in einer Substanz, so fließt ein Wärmestrom zur kälteren Seite hin. Die Wärmediffusionsgleichung beschreibt die zeitliche Entwicklung eines Temperaturgefälles. Im eindimensionalen Fall lautet die Wärmediffusionsgleichung (Ref.29):

$$\rho \cdot c \cdot \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K \cdot \frac{\partial u}{\partial x} \right) + A \quad (3.2)$$

Dabei bedeuten ρ, c, K die Dichte, spezifische Wärme und Wärmeleitfähigkeit des Festkörpers, u seine Temperatur, x die Tiefe, t die Zeit und A der Beitrag der Wärmequelle mit der Dimension Energie pro Volumen- und Zeiteinheit.

Zur Simulation der Erhitzung eines Festkörpers durch einen gepulsten Elektronenstrahl wurde die eindimensionale Wärmediffusionsgleichung mit Wärmequelle gelöst. Die Elektronen verlieren Energie in ihrer Reichweite, das ist eine Tiefe von 1-2 μm . Der Durchmesser des Elektronenstrahls ist wesentlich größer als die Reichweite der Elektronen. Aus diesem Grund und unter der Annahme eines homogenen Elektronenstrahls kann die Wärmediffusion eindimensional betrachtet werden.

Die Wärmeleitfähigkeit ist ein Tensor 2. Stufe, das heißt in verschiedenen Kristallrichtungen können unterschiedliche Wärmeleitfähigkeiten auftreten (Ref.30). Bei einem kubischen Einkristall sind die Wärmeleitfähigkeiten in allen Richtungen gleich. In einer amorphen, kristallinen oder geschmolzenen Probe sind keine Richtungen ausgezeichnet. Der Übergang von der 3-dimensionalen zur 1-dimensionalen Wärmediffusionsgleichung ist somit für kubische Einkristalle sowie für amorphe, kristalline oder flüssige Festkörper beliebiger Struktur gerechtfertigt.

Über die Lösung der Wärmediffusionsgleichung für verschiedene Wärmequellen gibt es zahlreiche Publikationen, zum Beispiel die Referenzen 29,44 und 45.

3.2.1 Bedingung für die analytische Lösung

Die analytische Form von Gleichung (3.2) läßt sich vereinfachen, wenn man annimmt, daß die Wärmeleitfähigkeit eine Konstante ist. Dann findet man die vereinfachte Form:

$$\frac{1}{\kappa} \cdot \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{A}{K} \quad (3.3)$$

$$\text{mit } \kappa = \frac{K}{\rho \cdot c} \quad (3.4)$$

κ heißt Temperaturleitwert. Gleichung (3.3) ist eine lineare partielle Differentialgleichung 2. Ordnung. Für diese Gleichung gibt es analytische Lösungen (Ref.29). Für die nichtlineare partielle Differentialgleichung (3.2) mit temperaturabhängiger Wärmeleitfähigkeit existiert dagegen keine analytische Lösung. Deshalb wurde die Gleichung (3.2) numerisch gelöst.

3.2.2 Numerische Beschreibung

Ort und Zeit werden in ein Gitter von Orts- und Zeitpunkten aufgeteilt. Bild 3.1 zeigt das verwendete Orts- und Zeitgitter. Zwischen der Startzeit "0" und einer Anzahl JZSP von Zeitintervallen der Länge Δt wird der Festkörper durch den Elektronenpuls erhitzt. Danach kühlt der Festkörper ab. Nach JZSZ Zeitintervallen wird die Rechnung beendet. Die Reichweite wird in I' Intervalle der Länge Δx aufgeteilt. Die Ortsgitterpunkte liegen in der Mitte der Intervalle. Die Oberfläche des Festkörpers liegt in der Mitte zwischen Ortsgitterpunkten 1 und 2 an der Grenze der Intervalle. Die Reichweite liegt in der Mitte zwischen den Ortspunkten $I'+1$ und $I'+2$. Um die Wärmediffusion in den Festkörper zu berechnen wird über die Reichweite hinaus bis zu einem Randpunkt I'' gerechnet.

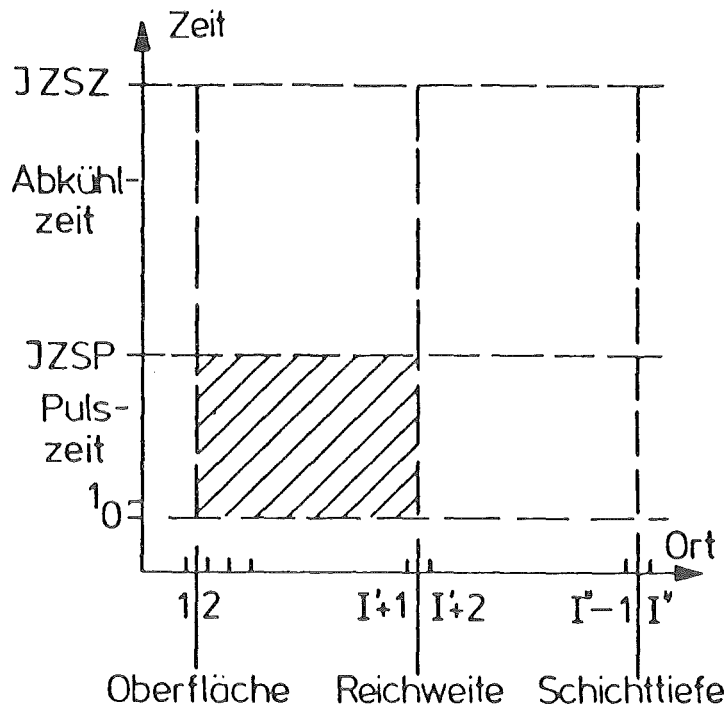


Bild 3.1 Das Orts- Zeitgitter für die numerische Lösung
 Im schraffierten Gebiet wird die Energie des
 Elektronenpulses deponiert.

Die partiellen Differentiale aus Gleichung (3.2) werden als Differenzen in diesem Orts-Zeit Gitter berechnet. Eine ausführliche Beschreibung ist in Referenz 31 zu finden. Die Taylorentwicklungen werden nach den ersten Ableitungen aufgelöst und man erhält die erste Orts- und Zeit-ableitung.

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_{i,n} = \frac{u_{i+1,n} - u_{i,n}}{\Delta x} - \left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_{i,n} \cdot \frac{\Delta x}{2!} - \left(\frac{d^3u}{dx^3}\right)_{i,n} \cdot \frac{(\Delta x)^2}{3!} + \dots \quad (3.5)$$

$$\left(\frac{du}{dt}\right)_{i,n} = \frac{u_{i,n+1} - u_{i,n}}{\Delta t} - \left(\frac{d^2u}{dt^2}\right)_{i,n} \cdot \frac{\Delta t}{2!} - \left(\frac{d^3u}{dt^3}\right)_{i,n} \cdot \frac{(\Delta t)^2}{3!} + \dots \quad (3.6)$$

Die Indizes i und n beziehen sich auf die Koordinatenpunkte des Orts- und Zeitgitters. Läßt man die höheren Ableitungen der rechten Seiten der Gleichungen (3.5) und (3.6) weg, so begeht man einen Fehler proportional zu Δx beziehungsweise Δt . Eine Verbesserung erhält man durch Subtraktion zweier Taylorreihen, die an verschiedenen Orten entwickelt werden.

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_{i,n} = \frac{u_{i+1,n} - u_{i-1,n}}{2\Delta x} - \left(\frac{d^3u}{dx^3}\right)_{i,n} \cdot \frac{(\Delta x)^2}{6} - \dots \quad (3.7)$$

Bei einer Vernachlässigung der höheren Ableitungen wird der Fehler jetzt proportional zu $(\Delta x)^2$. Eine entsprechende Verbesserung läßt sich auch für das zeitliche Differential erreichen.

Entsprechend kann man auch nach höheren Ableitungen auflösen.

3.2.3 Vorwärtsmethode

Die Vorwärtsmethode ist eine einfache numerische Methode zur Lösung der Wärmediffusionsgleichung. Die Ortsableitung wird analog Gleichung (3.7) mit einem Fehler proportional $(\Delta x)^2$ gewonnen. Die Zeitableitung wird nach Gleichung (3.6) mit einem Fehler proportional Δt ermittelt. Die Temperaturen aller Ortsgitterpunkte zu einer Zeit n seien bekannt. Die Temperatur am Ortsgitterpunkt i in der um Δt späteren Zeit $n+1$ ergibt sich dann aus den Gleichungen (3.2), (3.6) und (3.7):

$$u_{i,n+1} = u_{i,n} + \frac{Q(i) \cdot \text{FAKZ}}{\rho_i \cdot c_i} + \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} \frac{1}{\rho_i \cdot c_i} [K_{i+\frac{1}{2}} \cdot (u_{i,n} - u_{i-1,n}) - K_{i-\frac{1}{2}} \cdot (u_{i,n} - u_{i-1,n})] \quad (3.8)$$

für $2 \leq i \leq I''-1$

Die spezifische Wärme, Wärmeleitfähigkeit und Dichte beziehen sich auf die Zeit n . In den eckigen Klammern stehen die Differenzen der Ableitungen an den Zwischengitterpunkten $i+\frac{1}{2}$ und $i-\frac{1}{2}$. Die Wärmeleitfähigkeiten der Zwischengitterpunkte werden aus dem arithmetischen Mittel der Temperaturen der angrenzenden Ortsgitterpunkte bestimmt. Dies ist genauer als eine Mittelung der Wärmeleitfähigkeiten der benachbarten Ortsgitterpunkte (Ref.31, Seite 65). Wie die Dichte, spezifische Wärme und Wärmeleitfähigkeit an den Ortsgitterpunkten aus der Temperatur und der Phase dieser Punkte bestimmt werden, wird in Kapitel 3.4.1 besprochen.

Die Wärmequelle ist in einen orts- und zeitabhängigen Anteil aufgespalten: $Q(i)$ und FAKZ. $Q(i) \cdot \text{FAKZ}$ ist die im Ortsintervall um den Punkt i zwischen der Zeit n und $n+1$ deponierte Energie pro Einheitsvolumen.

Entsprechend ist $Q(i) \cdot \text{FAKZ} / (\rho_i \cdot c_i)$ die Temperaturerhöhung am Ortsgit-
terpunkt i durch die Wärmequelle.

Die Randbedingungen an der Oberfläche und in der Tiefe des Festkörpers
wurden angenommen zu:

$$u_{1,n} = \text{WVO} \cdot u_{2,n} \quad (3.9)$$

$$u_{I'',n} = \text{WVS} \cdot u_{I''-1,n} \quad (3.10)$$

für alle n mit $0 \leq \text{WVO} \leq 1$ und $0 \leq \text{WVS} \leq 1$

Die Wärmeverlustfaktoren WVO an der Oberfläche und WVS am Randpunkt I''
werden vom Programm benutzer eingegeben. $\text{WVO}=\text{WVS}=1$ entspricht der Annahme,
daß keine Wärme aus der betrachteten Schicht verlorengeht. $\text{WVO}=\text{WVS}=0$
würde einem vollständigen Verlust der Wärme an den Grenzflächen ent-
sprechen.

Weil bei dieser Methode der numerischen Lösung aus den physikalischen
Größen der Zeit n die Temperaturen der späteren Zeit $n+1$ berechnet werden,
heißt diese Methode Vorwärtsmethode.

Löst man die analytisch lösbare Gleichung (3.3) mit der Vorwärts-
methode, so ergibt sich ein zu Gleichung (3.8) analoger Ausdruck mit dem
Unterschied, daß $K_{i+\frac{1}{2}}$ und $K_{i-\frac{1}{2}}$ durch K_i zu ersetzen sind. Für diese modi-
fizierte Gleichung ist eine Stabilitätsbetrachtung analog Referenz 31
durchführbar und man erhält als Stabilitätsbedingung für die Konvergenz
der Lösung:

$$\Delta t \leq \frac{(\Delta x)^2}{2\kappa} \quad (3.11)$$

κ ist der Temperaturleitwert (siehe Gleichung (3.4)). Ein Temperatur-
gefälle, das sich über eine Distanz d erstreckt, wird abgebaut in einer
Zeit der Größenordnung τ (Ref.41):

$$\tau = \frac{d^2}{\kappa} \quad (3.12)$$

Da sich bei der Vorwärtsmethode die neuen Temperaturen aus den alten
Temperaturen in einer Umgebung Δx um den Punkt berechnet werden, muß der
Zeitschritt der Rechnung kleiner als die thermische Relaxationszeit τ
sein. Dies ist die physikalische Interpretation der Stabilitätsbedingung
(3.11). Ob diese Stabilitätsbedingung der modifizierten Wärmedif-
fusionsgleichung auch für die Wärmediffusionsgleichung (3.8) gilt, wurde
untersucht indem die Zeitschritte Δt variiert wurden. Die Stabilitätsbe-

dingung (3.11) wurde bestätigt: für einen zu großen Zeitschritt wachsen die berechneten Temperaturen stark an.

In den Rechnungen wurde gesetzt:
$$\Delta t \leq \frac{1}{6} \frac{(\Delta x)^2}{\kappa} \quad (3.13)$$

Dabei wird der größte Temperaturleitwert aus der festen und flüssigen Phase vom Programm ausgewählt.

3.2.4 Crank-Nicolson Methode

Der Unterschied zwischen der Vorwärtsmethode und der Crank-Nicolson Methode ist der Zeitpunkt, bei dem die Ableitungen bei der Crank-Nicolson Methode entwickelt werden. Man wählt die Zeit $n+\frac{1}{2}$ und findet:

$$\left(\frac{du}{dt}\right)_{i,n+\frac{1}{2}} = \frac{u_{i,n+1} + u_{i,n}}{\Delta t} - \left(\frac{d^3u}{dt^3}\right)_{i,n+\frac{1}{2}} \cdot \frac{(\Delta t)^2}{24} - \dots \quad (3.14)$$

Beim Fortlassen der höheren Ableitungen begeht man nur noch einen Fehler proportional zu $(\Delta t)^2$. Die Lösung der Gleichung (3.2) lautet nun:

für alle $i: 1 \leq i \leq I'' \quad (3.15)$

$$THA(i) \cdot u_{i-1,n+1} + THB(i) \cdot u_{i,n+1} + THC(i) \cdot u_{i+1,n+1} = THD(i)$$

für $2 \leq i \leq I''-1$ gilt:

$$THA(i) = K_{i-\frac{1}{2},n+\frac{1}{2}} / (2 \cdot (\Delta x)^2)$$

$$THC(i) = K_{i+\frac{1}{2},n+\frac{1}{2}} / (2 \cdot (\Delta x)^2)$$

$$THB(i) = -(THA(i) + THC(i) + \rho_{i,n+\frac{1}{2}} \cdot c_{i,n+\frac{1}{2}} / \Delta t)$$

$$THD(i) = -u_{i-1,n} \cdot THA(i) - u_{i+1,n} \cdot THC(i) - Q(i) \cdot FAKZ / \Delta t + u_{i,n} \cdot (THA(i) + THC(i) - \rho_{i,n+\frac{1}{2}} \cdot c_{i,n+\frac{1}{2}} / \Delta t)$$

Die Randbedingungen analog Gleichung (3.9) und (3.10) lauten:

$$THA(1) = THD(1) = THC(I'') = THD(I'') = 0$$

$$THB(1) = THB(I'') = 1$$

$$THC(1) = -WVO$$

$$THA(I'') = -WVS$$

Es sei auf Abschnitt 3.2.3 verwiesen, wo schon über Randbedingungen, über die Berechnung der Wärmeleitfähigkeit und über den Wärmequellenterm

Q(i)•FAKZ gesprochen wurde. Das Gleichungssystem (3.15) wird mit dem Thomas-Algorithmus gelöst (Ref.31). Man erhält die Temperaturen zur Zeit n+1 aus den Werten der physikalischen Größen zur Zeit n und $n+\frac{1}{2}$.

Die Größen zur Zeit $n+\frac{1}{2}$ sind aber noch unbekannt. Zur Berechnung der Temperaturen der Zeit $n+\frac{1}{2}$, aus denen die Dichte, spezifische Wärme und Wärmeleitfähigkeit bestimmt werden, wird eine zentrierte Taylorreihenvorwärtsprojektion angewendet (Ref.31). Man entwickelt die Ableitungen zur Zeit $n+\frac{1}{2}$ verwendet aber die physikalischen Größen der Zeit n. Die Fehler der numerischen Ableitungen sind proportional zu $(\Delta t/2)^2$ beziehungsweise $(\Delta x)^2$, also kleiner als bei der Vorwärtsmethode. Man erhält ein Gleichungssystem, das mit dem Thomas-Algorithmus gelöst werden kann:

$$\text{Für alle } i: 1 \leq i \leq I'' \text{ gilt:} \quad (3.16)$$

$$\text{THA}(i) \cdot u_{i-1, n+\frac{1}{2}} + \text{THB}(i) \cdot u_{i, n+\frac{1}{2}} + \text{THC}(i) \cdot u_{i+1, n+\frac{1}{2}} = \text{THD}(i)$$

Für $2 \leq i \leq I''-1$ gilt:

$$\text{THA}(i) = K_{i-\frac{1}{2}, n} / (2 \cdot (\Delta x)^2)$$

$$\text{THC}(i) = K_{i+\frac{1}{2}, n} / (2 \cdot (\Delta x)^2)$$

$$\text{THB}(i) = -(\text{THA}(i) + \text{THC}(i) + 2 \cdot \rho_{i, n} \cdot c_{i, n} / \Delta t)$$

$$\begin{aligned} \text{THD}(i) = & -u_{i-1, n} \cdot \text{THA}(i) - u_{i+1, n} \cdot \text{THC}(i) - Q(i) \cdot \text{FAKZ} / \Delta t \\ & + u_{i, n} \cdot (\text{THA}(i) + \text{THC}(i) - 2 \cdot \rho_{i, n} \cdot c_{i, n} / \Delta t) \end{aligned}$$

Die Randbedingungen für $i=1$ und $i=I''$ sind die gleichen wie in Gleichung (3.15). Der Wärmequellenterm in Gleichung (3.16) ist der gleiche wie in Gleichung (3.15), weil einerseits nur die halbe Energie von der Quelle freigegeben wird, aber andererseits die Zeit auch nur halb so groß ist.

Die Crank-Nicolson Methode ist auch dann stabil, wenn eine un stabile Methode zur Gewinnung der Temperaturen im halben Zeitschritt verwendet wird (Ref.31). Der Thomas-Algorithmus konvergiert unter der Bedingung:

$$| \text{THB}(i) | \geq | \text{THA}(i) + \text{THC}(i) | \quad (3.17)$$

Diese Bedingung wird von den Gleichungssystemen (3.15) und (3.16) immer erfüllt, wenn physikalisch sinnvolle Werte für die Dichte, spezifische Wärme und die Randbedingungen verwendet werden. Um solche Fehler des Programm benutzers zu erkennen, führt das Programm selbständig die Konversionskontrolle an Hand der Gleichung (3.17) durch.

3.2.5 Vergleich der Methoden

Die in den letzten Abschnitten beschriebene Vorwärtsmethode und Crank-Nicolson Methode sollen im Folgenden gegenübergestellt werden.

Die Vorwärtsmethode berechnet die Temperaturen am Ort i zu einer neuen Zeit aus den physikalischen Größen an den Orten $i-1$, i und $i+1$ zur alten Zeit. Deshalb wird die Lösung mit der Vorwärtsmethode instabil, wenn der Rechenzeitschritt größer als die thermische Relaxationszeit τ wird. Bei der Crank-Nicolson Methode gehen bei der Temperaturberechnung eines einzelnen Punktes der neuen Zeit die physikalischen Größen aller Ortsgitterpunkte der alten und der halben projektierten Zeit ein. Die Lösung mit der Crank-Nicolson Methode ist immer stabil.

Die Genauigkeit der Crank-Nicolson Methode ist größer als bei der Vorwärtsmethode wegen des geringeren Fehlers in der zeitlichen Ableitung: der Fehler bei der Crank-Nicolson Methode ist proportional $(\Delta t)^2$, bei der Vorwärtsmethode proportional Δt . Die Fehler bezüglich der Ortsableitung beider Methoden ist proportional $(\Delta x)^2$. Die Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität und Dichte an den Ortsgitterpunkten werden in Gleichung (3.16) der Vorwärtsprojektion für die Crank-Nicolson Methode nicht zum richtigen Zeitschritt $n+\frac{1}{2}$ bestimmt. Daraus ergeben sich zusätzliche Fehler in der zeitlichen Entwicklung der Crank-Nicolson Methode.

Aufgrund der Stabilitätsbedingung (3.11) benötigt man für die Vorwärtsmethode sehr kleine Zeitschritte und somit hohe Rechenzeit, wenn man genaue Informationen im Ortsgitter wünscht. Bei einer Ortsschrittweite von $\Delta x=1000\text{\AA}$ benötigt man für Silizium mit einem Temperaturleitwert $\kappa(RT)=0,8\text{cm}^2/\text{s}$ einen Zeitschritt $\Delta t \leq 6,25 \cdot 10^{-11}\text{s}$ nach Gleichung (3.11), beziehungsweise $\Delta t \leq 2 \cdot 10^{-11}\text{s}$ nach (3.13). Bei einer Pulszeit von $2,3\mu\text{s}$ waren mit der Crank-Nicolson Methode mit einem Zeitschritt von $\Delta t=4,6\text{ns}=PZ/500$ genaue Rechnungen mit etwa 100 mal größerem Zeitschritt durchführbar und das für beliebig kleinen Ortsschritt.

3.3 Die Wärmequelle

Der Term der Wärmequelle in der Wärmediffusionsgleichung (3.2) wird in den Rechnungen in einen orts- und zeitabhängigen Anteil separiert (siehe auch Abschnitt 3.2.3 und 3.2.4). In Kapitel 2.5 wurde Orts- und Zeit-

abhängigkeit der Energiedeposition des gepulsten Elektronenstrahls gemessen und beschrieben. Mit dem Computerprogramm kann eine beliebige Wärmequelle zwischen der Schichtoberfläche und einer Tiefe, Reichweite genannt, mit mathematischen Funktionen berechnet werden. Es wird berücksichtigt, daß ein Teil der Energie reflektiert wird (siehe Abschnitt 2.5.3).

3.3.1 Reichweitenbeziehungen

Dem Programm benutzer sind 3 Reichweitenformeln verfügbar. Der Benutzer steuert die Auswahl durch eine Eingabegröße, die mit IRWF bezeichnet wird.

IRWF = 1 entspricht Gleichung (2.5.9)

IRWF = 2 entspricht Gleichung (2.5.10)

IRWF = 3 entspricht Gleichung (2.5.11)

Für Elektronen des Pulsgenerators mit Energien zwischen 0 und 25 keV ist Gleichung (2.5.9) die geeignetste Reichweitenformel.

3.3.2 Wärmedepositions-Tiefen Funktion

Der Programm benutzer steuert die Tiefenabhängigkeit der deponierten Energie durch die Eingabedaten A1, A2, AX(1-10), IAE, EE und EEMIN.

Das Depositionsprofil der Energie eines monochromatischen Elektronenstrahls wird durch die Polynomkoeffizienten AX(i) mit $1 \leq i \leq 10$ gemäß Gleichung (2.5.6) oder durch die Koeffizienten der Gaußfunktion gemäß Gleichung (2.5.7) berechnet. Ist $A2=0$ wird Gleichung (2.5.6) benützt, sonst wird Gleichung (2.5.7) verwendet. In Kapitel 2.5.5 sind die Koeffizienten A1 und A2 für verschiedene Festkörper beschrieben.

Es wird bei der rechnerischen Simulation angenommen, daß gleichzeitig Elektronen aller Energien zwischen einer minimalen Energie EEMIN und einer maximalen Energie EE auf den Festkörper auftreffen. Dadurch ändert sich die Wärmedepositions-Ort Funktion während der Pulszeit qualitativ nicht. Nur die Höhe des Wärmedepositionsprofils ändert sich in der Zeit.

In Referenz 42 werden Vergleichsrechnungen mit Elektronenstrahlen für Aluminium als Target durchgeführt. Bei der Annahme zu jeder Zeit Elek-

tronen aller Energien auftreffen zu lassen (polychromatischer Strahl), erhält man die maximale Energiedeposition und die höchsten Temperaturen immer an der Schichtoberfläche (vergleiche Bild 2.5.5 und Bild 3.2). In Referenz 42 wurden die Elektronenenergie und damit die Depositionsprofile während der Pulszeit verändert: die Elektronenenergie nahm während der Pulszeit ab. Dieser Fall wurde mit einem monochromatischen Elektronenpuls und einem polychromatischen Elektronenpuls verglichen. Bei einem monochromatischen Elektronenpuls ist die Energiedeposition unterhalb der Oberfläche am größten (siehe Bilder 2.5.3): der Festkörper schmilzt zuerst unterhalb der Oberfläche. Beim polychromatischen Elektronenpuls schmilzt der Festkörper von der Oberfläche aus nach innen. Bei zeitlich abnehmender Elektronenenergie läuft das Maximum der Energiedeposition aus einer Schichttiefe an die Oberfläche hin. Das Schmelzen beginnt umso tiefer in der Schicht je höher die gesamte deponierte Energie und je kürzer die Pulszeit ist. Zur Simulation der Wärmedeposition des Strahls vom Elektronenpulsgenerator ist die Annahme eines polychromatischen Elektronenstrahls wegen der Nichtreproduzierbarkeit des Elektronenpulses in den Messungen und wegen des mangelhaften Wissens des Elektronenenergie-Stromdichte-Zeit Zusammenhangs ausreichend (vergleiche Kapitel 2.5.2).

Zur Berechnung des polychromatischen Elektronenstrahls werden IAE monochromatische Energiedepositionsprofile zwischen einer maximalen Energie E_E und einer minimalen Energie $E_{E_{MIN}}$ gewichtet nach ihrer Energie addiert. Im allgemeinen wurde $IAE=100$ und $E_{E_{MIN}}=0$ verwendet. Das Summenprofil solcher Rechnungen wurde schon in Abbildung 2.5.5 gezeigt. Die Energieabhängigkeit der Reflexion wurde vernachlässigt. Es wird der Reflexionskoeffizient R bei 10keV Elektronenenergie berechnet (siehe Kapitel 2.5.3) und verwendet. Die Wärmedepositionsprofile werden normiert:

$$\sum_{i=2}^{I'+2} Q(i) = \frac{ED \cdot (1-R)}{\Delta x \cdot JZSP} \quad \text{mit } R = \eta \cdot \frac{\langle E_B \rangle}{E_0} \quad (3.18)$$

ED ist die Bestrahlungsstärke des Elektronenpulses vor der Probe in J/cm^2 . Es wird in Gleichung (3.18) über alle Ortsgitterpunkte summiert, in denen Energie deponiert wird. Die $Q(i)$ haben somit die Dimension Energie pro Einheitsvolumen und Rechenzeitschritt.

3.3.3 Wärmedepositions-Zeit Abhängigkeit

Es stehen 4 Möglichkeiten der Zeitabhängigkeit der Wärmedeposition zur Verfügung. Die Auswahl erfolgt durch die Eingabegröße IEIZP des Rechnerprogramms. Die verschiedenen Zeitfunktionen sind normiert:

$$\int_0^{PZ} f(t) dt = \sum_{n=1}^{JZSP} \int_{(n-1)\Delta t}^{n\Delta t} f(t) dt = \sum_{n=1}^{JZSP} FAKZ = JZSP \quad (3.19)$$

Daraus ergibt sich der Zeitfaktor FAKZ der Gleichungen (3.8), (3.15), und (3.16).

a) IEIZP = 1

Zwischen dem Zeitpunkt "0" und der Pulszeit $PZ = \Delta t$ JZSP ist die Wärmedeposition konstant. Die Zeitabhängigkeit entspricht einem Rechteckpuls:

$$f(t) = \text{const.} \quad \text{für } 0 \leq t \leq PZ \quad (3.20)$$

b) IEIZP = 2

Zur Zeit "0" ist die Wärmedeposition maximal, zur Zeit PZ gleich Null. Dazwischen nimmt die Wärmedeposition linear ab, einem abfallendem Sägezahn entsprechend:

$$f(t) = f_{\max} \cdot (1-t/PZ) \quad \text{für } 0 \leq t \leq PZ \quad (3.21)$$

c) IEIZP = 3

Die Zeitabhängigkeit wird \sin^2 - förmig angenommen:

$$f(t) = f_{\max} \cdot \sin^2(\pi \cdot t/PZ) \quad \text{für } 0 \leq t \leq PZ \quad (3.22)$$

d) IEIZP = 4

Analog zu IEIZP=1 wird ein Rechteckpuls generiert, der aber nur einen Teil der deponierten Energie umfaßt. Dem Rechteck wird ein Gaußprofil überlagert:

$$f(t) = C_1 + C_2 \cdot \exp\left(-\left(\frac{t-PZM}{PZ} \cdot \sqrt{PZH}\right)^2\right) \quad (3.23)$$

für $0 \leq t \leq PZ$

In der Zeit PZM liegt das Maximum der Gaußkurve, PZH bestimmt die Spreizung der Gaußkurve. Die Integration der Gaußfunktion wird mit Hilfe einer Tabelle aus Referenz 52 durchgeführt. Die Integration für Zwischen-gitterpunkte wird mit linearer Interpolation berechnet.

Der Benutzer gibt außer IEIZP=4 und PZ die Größen PZM, PZH und C0 ein.

$$C0 = C1/(C1+C2)$$

C0 gibt den Bruchteil der Energie an, die im Rechteckpuls liegt. Bei Messungen des Elektronenpulses in Abschnitt 2.5.2 wurde der gemessene Verlauf angenähert mit den Daten: PZ=2,3·10⁻⁶s, PZM=1,65·10⁻⁶s, PZH=75,0 und C0=0,61=61% .

Bild 2.5.2 d zeigt diese Funktion als gestrichelte Linie

3.4 Eigenschaften des Festkörpers

3.4.1 Materialparameter

In diesem Abschnitt sollen die Namen der physikalischen Größen, ihre Eingabe und Berechnung im Rechenprogramm erläutert werden. Diese Größen findet man in verschiedenen Tabellenwerken und Publikationen (Ref.14,32, 33,35-37)

a) Schmelztemperatur und Schmelzwärme

Die Schmelztemperatur in Grad Celsius wird als ST bezeichnet. Die Schmelzwärme in cal/g wird als SW abgekürzt.

b) Zusammensetzung und Dichte

Der Festkörper kann aus maximal 3 Komponenten bestehen. Die Anzahl der Komponenten IANAT wird ins Programm eingegeben. Die Atomgewichte und Ordnungszahlen der Komponenten werden in die Felder AG(1-3) und IZ(1-3) gespeichert. Diese Größen werden für die Berechnung der Reichweite und Energiedeposition benötigt. Für die Dichte wird je ein Wert für den festen und flüssigen Zustand benötigt. Die Dichten werden in g/cm³ eingegeben.

c) Spezifische Wärme und Wärmeleitfähigkeit

Für jeden Punkt i des Ortsgitters werden die spezifische Wärme c_i und die Wärmeleitfähigkeit FK_i aus der Temperatur der Ortsgitterpunkte bestimmt. Für die spezifische Wärme wird im festen und flüssigen Zustand angenommen:

$$C = \sum_{i=1}^6 \text{SPEZ}(i) \cdot T^{i-1} + \frac{\text{SPEZ}(7)}{[T - \text{SPEZ}(8)]^2} \quad (3.24)$$

Für die Wärmeleitfähigkeit im festen Zustand soll gelten:

$$\text{FK} = \sum_{i=1}^7 \text{WAEL}(i) \cdot T^{i-1} + \frac{\text{WAEL}(8)}{[T - \text{WAEL}(9)]^{\text{WAEL}(10)}} \quad (3.25)$$

und im flüssigen Zustand unabhängig von der Temperatur

$$\text{FK} = \text{FKS}$$

T ist die absolute Temperatur in Grad Kelvin. Die Felder SPEZ(1-8) und WAEL(1-10) sowie der Wert FKS sind Eingabedaten des Programmes. Die verwendeten Einheiten sind für die spezifische Wärme cal/(Grad g) und für die Wärmeleitfähigkeit cal/(Grad·s·cm).

Findet man keine Daten für einen speziellen Festkörper in den Tabellenwerken so macht man folgende Abschätzungen:

Für die spezifische Wärme bei Raumtemperatur gilt das Dulong-Petitsche Gesetz:

$$c_p \cdot A \approx 6 \text{ cal/Grad} \quad (3.26)$$

c_p ist die spezifische Wärme bei konstantem Druck, A das Atomgewicht. Die spezifische Wärme der Festkörper ist oberhalb der Debye-Temperatur etwa konstant. Sie ändert sich bei vielen Festkörpern beim Phasenübergang vom festen zum flüssigen Zustand nur wenig. Für einen zusammengesetzten Festkörper gilt das Kopp-Neumann Gesetz (Ref.32) als eine Ausweitung des Dulong-Petitschen Gesetzes. Besteht ein Festkörper aus den Elementen 1,2,3...n mit den atomaren Anteilen $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ und den atomaren spezifischen Wärmen bei konstantem Druck $c_{p_1}, c_{p_2}, c_{p_3}, \dots, c_{p_n}$ so ergibt sich die atomare spezifische Wärme c_p des Festkörpers bei konstantem Druck zu:

$$c_p = \sum_{i=1}^n x_i \cdot c_{p_i} \quad \text{mit} \quad \sum_{i=1}^n x_i = 1 \quad (3.27)$$

In der Nähe von Phasenübergängen können Abweichungen auftreten. Tests des Kopp- Neumann Gesetzes haben gute Übereinstimmungen mit experimentellen Daten ergeben (Ref.32).

Die Wärmeleitfähigkeit ist von der Kristallstruktur des Festkörpers abhängig (vergleiche Abschnitt 3.1). Das Festkörpergitter beeinflusst sowohl den elektronischen Anteil der Wärmeleitfähigkeit als auch die Wärmeleitung durch Gitterschwingungen. Deshalb ändert sich die Wärmeleitfähigkeit beim Übergang vom festen, geordneten Zustand zum flüssigen Zustand. Flüssige und amorphe Festkörper zeigen ähnliche physikalische Eigenschaften (Ref.43). Deshalb ist die Wärmeleitfähigkeit einer amorphen Substanz etwa gleich groß wie ihre Leitfähigkeit im flüssigen Zustand.

Waren keine Daten der Leitfähigkeit in der Schmelze gegeben, so wurde die Leitfähigkeit in der Schmelze halb so groß wie beim kristallinen Material unterhalb der Schmelze angenommen. Aluminium verhält sich so (Ref.32).

Für metallische Festkörper kann die Wärmeleitfähigkeit mit dem Widemann-Franz'schem Gesetz abgeschätzt werden. Es gilt:

$$\frac{K}{\sigma \cdot T} = \text{const.} = 2,443 \cdot 10^{-8} \cdot \left(\frac{V}{\text{Grad}}\right)^2 \quad (3.28)$$

σ ist die elektrische Leitfähigkeit, K die Wärmeleitfähigkeit und T die absolute Temperatur. Das Gesetz gilt auch für geschmolzene Metalle (Ref. 34). Bedingung für das Widemann- Franz Gesetz ist das Vorhandensein eines freien Elektronengases. In Halbleitern und Isolatoren gilt das Gesetz nicht.

3.4.2 Schmelzen und Erstarren

Die Simulation des Vorgangs des Schmelzens und Erstarrens im Computerprogramm erfolgt folgendermaßen:

Bei Erreichen der Schmelztemperatur wird die Temperatur eines Ortsgitterpunktes konstant gehalten. Die Temperaturdifferenz ΔT des Ortsgitterpunktes zur Schmelztemperatur wird in eine Energiedifferenz ΔQ umgerechnet:

$$\Delta Q = m \cdot c \cdot \Delta T \quad (3.29)$$

Dabei sind m die Masse und c die spezifische Wärme.

Reicht die abgespeicherte Energie aus um die Schmelzwärme aufzubringen, so findet ein Phasenübergang statt. Dieser Prozess läuft analog für das Schmelzen und Festwerden des Festkörpers ab.

Ergibt sich beim Erreichen der Schmelzwärme ein Überschuß der abgespeicherten Energie, so wird dieser Energieüberschuß analog der obigen Gleichung (3.29) in eine Temperaturdifferenz umgerechnet. Im Programm wird dabei die Wärmediffusionsgleichung umgangen. Dadurch kommt es bei Phasenübergängen einzelner Tiefenintervalle zu Schwingungen der Temperaturen in der Nähe des transformierten Intervalls. Im Temperatur-Zeit Plot des Bildes 3.2 sind diese Schwingungen beim Flüssigwerden und Erstarren zu erkennen. Durch Verringerung des Zeitschritts werden diese Schwingungen verkleinert.

3.5 Testrechnungen

Das Programm wurde mit Rechnungen für verschiedene Festkörper getestet. Die Ergebnisse der Berechnungen wurden mit experimentellen Daten verglichen. Für Silizium, Aluminium und Vanadium lagen Daten der benötigten physikalischen Eigenschaften des Festkörpers von Kapitel 3.4.1 vor. Diese sind den Referenzen 14,32,33,35-37 sowie 44 und 45 entnommen und in Tabelle 3.1 zusammengefaßt. Gab es unterschiedliche Daten, so wurde gemittelt. Für die Wärmeleitfähigkeit von flüssigem Silizium lagen die Werte $0,15 \text{ cal}/(\text{cm}\cdot\text{s}\cdot\text{Grad})$ (Ref.44) und $0,018 \text{ cal}/(\text{cm}\cdot\text{s}\cdot\text{Grad})$ (Ref.45) vor. Für Silizium und Vanadium wurde für die Wärmeleitfähigkeit der Schmelze der halbe Wert der Wärmeleitfähigkeit der festen Phase an der Schmelztemperatur verwendet.

Für Silizium und Aluminium ist das Energiedepositionsprofil eines monochromatischen Elektronenstrahles bekannt. Die Bestimmung eines gaußförmigen Energiedepositionsprofils für Vanadium ist in Kapitel 2.5.6 besprochen worden. Für alle drei Substanzen wurde die Energiedeposition eines polychromatischen Elektronenstrahls durch Summation von IAE=100 energiegewichteten, monochromatischen Energiedepositionsprofilen bestimmt. Die zeitliche Abhängigkeit der Energiedeposition wurde gemäß Gleichung (3.23) und dem in Abschnitt 3.3.3 d) Gesagtem angenommen.

Tabelle 3.1 Eingabedaten von Al-, Si- und V-Rechnungen

siehe auch Kapitel 3.4.1

es gilt: SPEZ(3-6) = WAEL(3-7) = 0

	Si	Al	V
Komponentenzahl IANAT	1	1	1
Atomgewichte AG(1) AG(2)	28,086 0,0	26,982 0,0	50,942 0,0
Ordnungszahl IZ(1) IZ(2)	14 0	13 0	23 0
Schmelztemp. ST	1411,0	660,0	1910,0
Schmelzwärme SW	400,0	95,0	82,4
Dichte (g/cm ³) im festen Zustand RHOF in der Schmelze RHOS	2,33 2,52	2,7 2,7	6,1 6,1
Wärmekapazität SPEZ(1) SPEZ(2) SPEZ(7) SPEZ(8)	0,181869 $4,33833 \cdot 10^{-5}$ $-2,75387 \cdot 10^{+2}$ $1,76991 \cdot 10^{+2}$	0,1505 $1,65 \cdot 10^{-4}$ 0,0 0,0	$1,0429 \cdot 10^{-1}$ $4,57 \cdot 10^{-5}$ 0,0 0,0
Wärmeleitfähigkeit WAEL(1) WAEL(2) WAEL(8) WAEL(9) WAEL(10) in der Schmelze FKS	$6,32244 \cdot 10^{-2}$ 0,0 $4,00121 \cdot 10^{10}$ $-3,33331 \cdot 10^{+2}$ 4,0 0,03	0,566 $-9,5 \cdot 10^{-5}$ 0,0 0,0 0,0	$6,51 \cdot 10^{-1}$ $2,82 \cdot 10^{-5}$ 0,0 0,0 0,0 0,06
Energiedeposition IAE A1 A2	100 0,3384 2,475	100 0,3384 2,475	100 0,28 3,4

Tabelle 3.2 zeigt Ergebnisse der Rechnungen und Experimente, die mit dem hier besprochenen Elektronenpulsgenerator durchgeführt wurden. Die Ergebnisse der Simulationsrechnungen zeigen gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten und rechtfertigen die getroffenen Annahmen eines polychromatischen Elektronenpulses und die Bestimmung des Energie-depositionsprofils von Vanadium.

Tabelle 3.2 Bestimmung der Schmelzschwelle

Target	Ergebnisse der Rechnungen		Experimentelle Ergebnisse	
	Erreichen der Schmelztemp.	Schmelzen bis 2000Å	Schmelzschwelle aus Ref.	
Al	1,4-1,5J/cm ² 16-17kV	1,5J/cm ² 17-18kV	1,6-1,7J/cm ² 17-18kV	(38)
Si	1,2J/cm ² 16-17kV	1,4J/cm ² 16kV	0,9-1,0J/cm ² 15kV	(40)
V	2,4-2,5J/cm ² 19kV	2,6J/cm ² 21kV	2,6-2,8J/cm ² 20-21kV	(39)

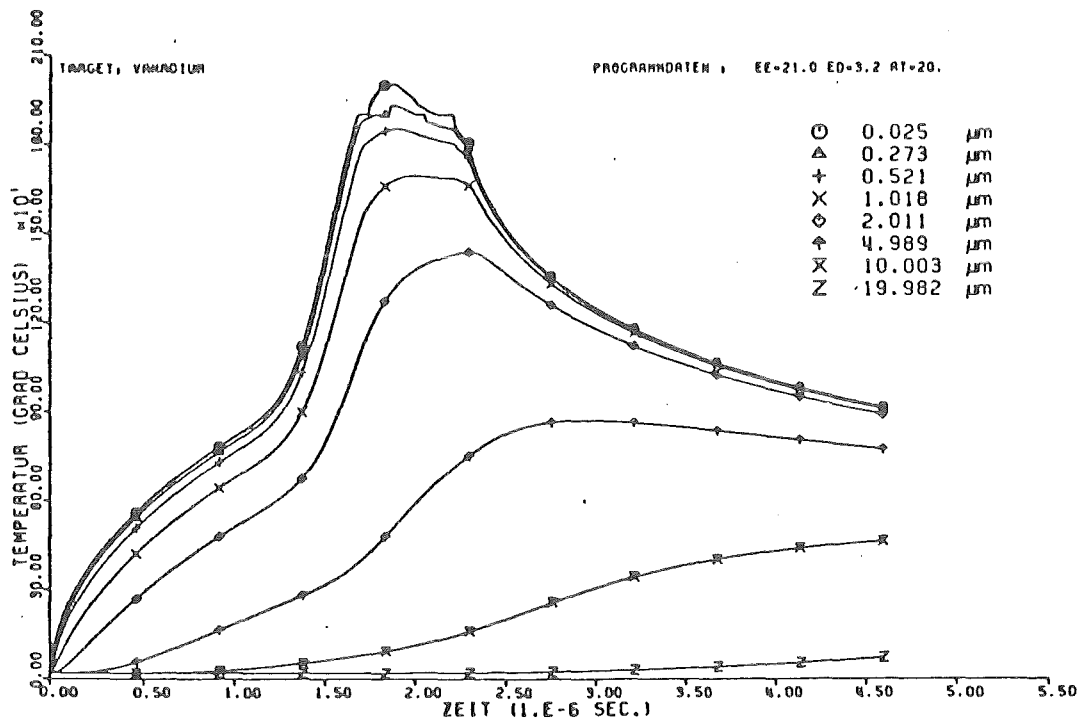


Bild 3.2 Berechnetes Temperatur- Zeit Verhalten bei PEBA in verschiedenen Tiefen eines Vanadium Festkörpers

Die angegebenen Bestrahlungsstärken beziehen sich auf die von einem Festkörper mit Lötzinnoberfläche absorbierte Energiedichte, die bei den Experimenten gemessen wurden. Die Reflexion von Elektronenstrahlen an einer Lötzinnoberfläche ist größer als für die Festkörper Si, Al und V (siehe Tabelle 2.5.1). Deshalb sind die Energiedichten des Strahls und die

absorbierten Energiedichten in den 3 gerechneten Festkörpern größer als in Tabelle 3.2 angegeben und können aus Gleichung (2.5.5) oder Tabelle 2.5.1 bestimmt werden.

Bild 3.2 zeigt die Temperaturen eines Vanadium Festkörpers in verschiedenen Tiefen bei einer maximalen Elektronenenergie $EE=21\text{keV}$, einer von V absorbierten Energiedichte $ED=3,2\text{J/cm}^2$ ($\approx 2,7\text{J/cm}^2$ absorbiert von der Lötzinnoberfläche) sowie einer Anfangstemperatur $AT=20^\circ\text{C}$. Man erkennt, daß die Temperatur bei Erreichen der Schmelztemperatur einige Zeit konstant bleibt bis die Schmelzwärme aufgebracht ist. Man sieht ferner die in Kapitel 3.4.2 erläuterten Temperaturschwüngen beim Phasenübergang einzelner Tiefenintervalle (siehe Erstarren in der Tiefe $0,273\mu\text{m}$).

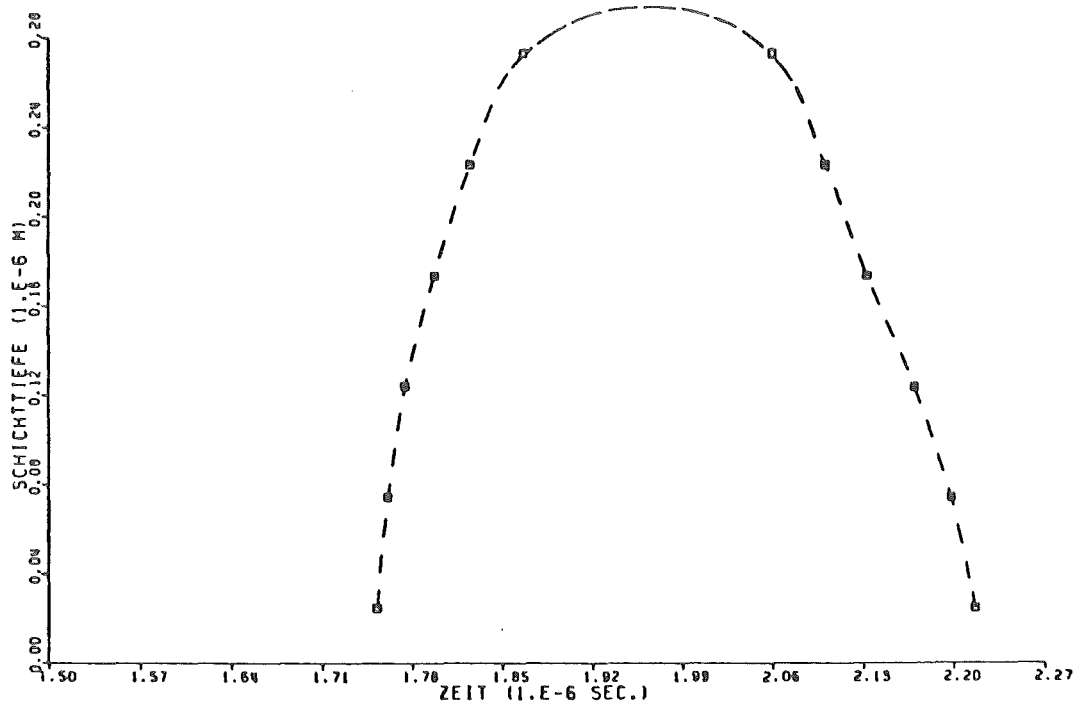


Bild 3.3 Bewegung der Schmelzfront in einer rechnerischen Simulation von PEBA für den Festkörper Vanadium

Bild 3.3 zeigt die Wanderung der Schmelzfront mit der Zeit für den gleichen Elektronenpuls wie Bild 3.2. Aus den Plots der Abbildungen 3.2 und 3.3 lassen sich die Abkühlungsrate und die Erstarrungsgeschwindigkeit der Schmelze bestimmen. Tabelle 3.3 zeigt die Abkühlraten und Erstarrungsgeschwindigkeiten für Al, Si und V bei den Elektronenpulsen, die in Tabelle 3.2 zum Schmelzen der ersten 2000\AA notwendig waren. Es ergeben sich typische Ergebnisse. Bei Aluminium und Vanadium ist die Schmelzdauer

im Vergleich zu Silizium kürzer, weil die Schmelzwärmen von Al und V geringer sind als von Si. Bei Silizium und Vanadium ist die Schmelztemperatur wesentlich höher als bei Al. Dies führt zu stärkeren Temperaturgradienten für die Si und V Versuche und damit zu einer erhöhten Abkühlungsrate. Die hohe Erstarrungsgeschwindigkeit der Schmelze für Aluminium hängt sicher mit der hohen Wärmeleitfähigkeit in der Schmelze (im Vergleich zu Si und V) zusammen.

Tabelle 3.3 Abkühlrate und Erstarrungsgeschwindigkeit nach Schmelzen der obersten 2000Å

Target	Dauer der Schmelze an der Oberfläche	Abkühlrate 10^8 Grad/s	Erstarrungsgeschwindigkeit
Al	0,3µs	1,4	3,4m/s
Si	0,6µs	3,1	2,0m/s
V	0,3µs	3,9	2,0m/s

4 Experimentelle Ergebnisse

4.1 Schichtherstellung

Es wurden etwa 100 Vanadium- Silizium Schichten mit einer Gleichspannungszerstäubungsanlage im UHV hergestellt und mit Rutherford-Rückstreuung auf ihre Zusammensetzung untersucht. Einige dieser Schichten wurden mit Hilfe der Röntgenstreuung und Messung der Übergangstemperatur zur Supraleitung untersucht.

4.1.1 Sputterausbeute

In Kapitel 2.1.1 Gleichung (2.1) ist die modifizierte Sigmund Formel für die Sputterausbeute gegeben. Mit Argon als Gas der Entladung ergeben sich für Spannungen von 1 bis 4kV Sputterausbeuten von 2 bis 2,5 für Vanadium, beziehungsweise 1,5 bis 2 für Silizium bei normalem Einfall der Argonprojekteile auf die Sputtertargets (Ref.3).

Die Sputterausbeute wurde experimentell bestimmt durch Messung der Ionenzahl, die auf die Kathode trifft, Bestimmung der Dicke und Zusammensetzung des Substrats an der Anode sowie der Berechnung des Bruchteils aller zerstäubten Teilchen, die am Probenort ankommen. Die Anzahl der Ionen, die die Kathode treffen, wurde aus dem Strom der Gasentladung und der Herstellungsdauer bestimmt. Da jedes Ion etwa 0,1 Elektronen auf der Kathode freisetzt, werden 91% des Stroms von den Ionen verursacht. Aus der Dicke der deponierten Schicht und der Dichte von V_3Si von $5,33g/cm^3$ (Ref.14) wurde die Anzahl der deponierten Atome pro Flächeneinheit berechnet. Bei Vergleichen der berechneten Sputterausbeuten von Substraten, die bei Raumtemperatur hergestellt wurden, mit den Sputterausbeuten von Substraten, die während der Herstellung geheizt wurden, ergaben sich Unterschiede: die Sputterausbeute bei geheizten Substraten schien um den Faktor 3 kleiner zu sein, weil weniger Atome auf diesen Substraten kondensierten. Nimmt man an, daß der Haftfaktor von Substraten auf Raumtemperatur 1 beträgt, so ergibt sich ein Haftfaktor von $1/3$ für Substrate, die auf Temperaturen von $800-900^{\circ}C$ geheizt wurden. Die Schicht auf dem Substrat ist nicht homogen: in der Mitte des Substrates, die etwa 3cm unterhalb der Kathodenmitte liegt, findet man die maximale Dicke der kondensierten Schicht. Etwa 10mm neben der Substratmitte betrug die Dicke

noch etwa 70% des Wertes von der Substratmitte. Da sich in der Kathodenmitte die Siliziumscheibe befindet, ist der Siliziumanteil in der darunterliegenden Substratmitte maximal. Der atomare Siliziumanteil nahm 10mm neben der Substratmitte auf 80-95% des Maximalwertes in der Substratmitte ab.

Für die folgenden Berechnungen wurde angenommen, daß alle Richtung Substrat fliegenden Atome absorbiert werden (Haftfaktor=1). Bei einer Kathodenflächenbelegung V/Si gleich 3,3 wurden Schichten mit einer Zusammensetzung V/Si \approx 3 ausgewählt. Mit den Berechnungen wurde der Teil der von der Kathode zerstäubten Atome bestimmt, der in die Substratmitte in einem Abstand von 3cm von der Kathode trifft. Für die Winkelverteilung der zerstäubten Teilchen wurden zwei Funktionen angenommen: 1.) $I(\vartheta) = I_0 \cdot \cos\vartheta$ und 2.) $I(\vartheta) = I_0 \cdot \vartheta$. ϑ ist der Winkel der Teilchen gegen die Oberflächennormale. Es wurde weiter angenommen, daß an jedem Ort der Kathode gleichviele Atome zerstäubt werden. Wegen der etwa gleichgroß erwarteten Sputterausbeuten von V und Si entspricht dies der Annahme, daß der Ionenfluß homogen über die Kathodenoberfläche ist. Es ergibt sich dann eine Sputterausbeute für Silizium von 4,4 ($I(\vartheta) = I_0 \cdot \cos\vartheta$) bis 8,7 ($I(\vartheta) = I_0$) sowie für Vanadium eine Sputterausbeute von 36,1 bis 92,2 ($I(\vartheta) = I_0$). Es wurde deshalb angenommen, daß die Winkelverteilung der zerstäubten Teilchen dem Lambert'schen Kosinus Gesetz folgt.

Bei einer DC-Sputteranlage mit Glimmentladung erfolgt der Ionenbeschuß der Kathode aus allen Richtungen wegen Kollisionen der Ionen in der Kathodendunkelraumzone (Ref.1). Bei schrägem Einfall der Ionen aus einem Winkel von 50-70° gegen die Normale erhöht sich die Sputterausbeute um einen Faktor von 3 bis 5 gegenüber dem Wert für den normalen Einfall. Berücksichtigt man dies, so ergibt sich für Silizium eine zu hohe experimentell bestimmte Sputterausbeute. Es wird deshalb angenommen, daß durch eine elektrische Aufladung der Siliziumoberfläche das elektrische Feld vor der Kathode inhomogen wird. In die Kathodenmitte treffen auf Grund der Aufladung der Siliziumoberfläche weniger und energieärmere Ionen ein. Am Rand der Siliziumoberfläche herrscht auf dem Vanadiumring eine hohe Feldliniendichte. Hier treffen viele Ionen auf die Kathode und zerstäuben eine große Anzahl von Vanadium Atomen. Nur eine starke Vanadiumzerstäubung nahe der Kathodenmitte kann die hohe Vanadiumdeposition in der Substratmitte erklären.

4.1.2 Schichtzusammensetzung

Wie in Kapitel 2.1.1 beschrieben wurde, sind elektisch schlecht leitende Materialien als DC-Sputtertargets weniger geeignet. Es wurde versucht den Halbleiter Silizium gleichzeitig mit Vanadium zu zerstäuben.

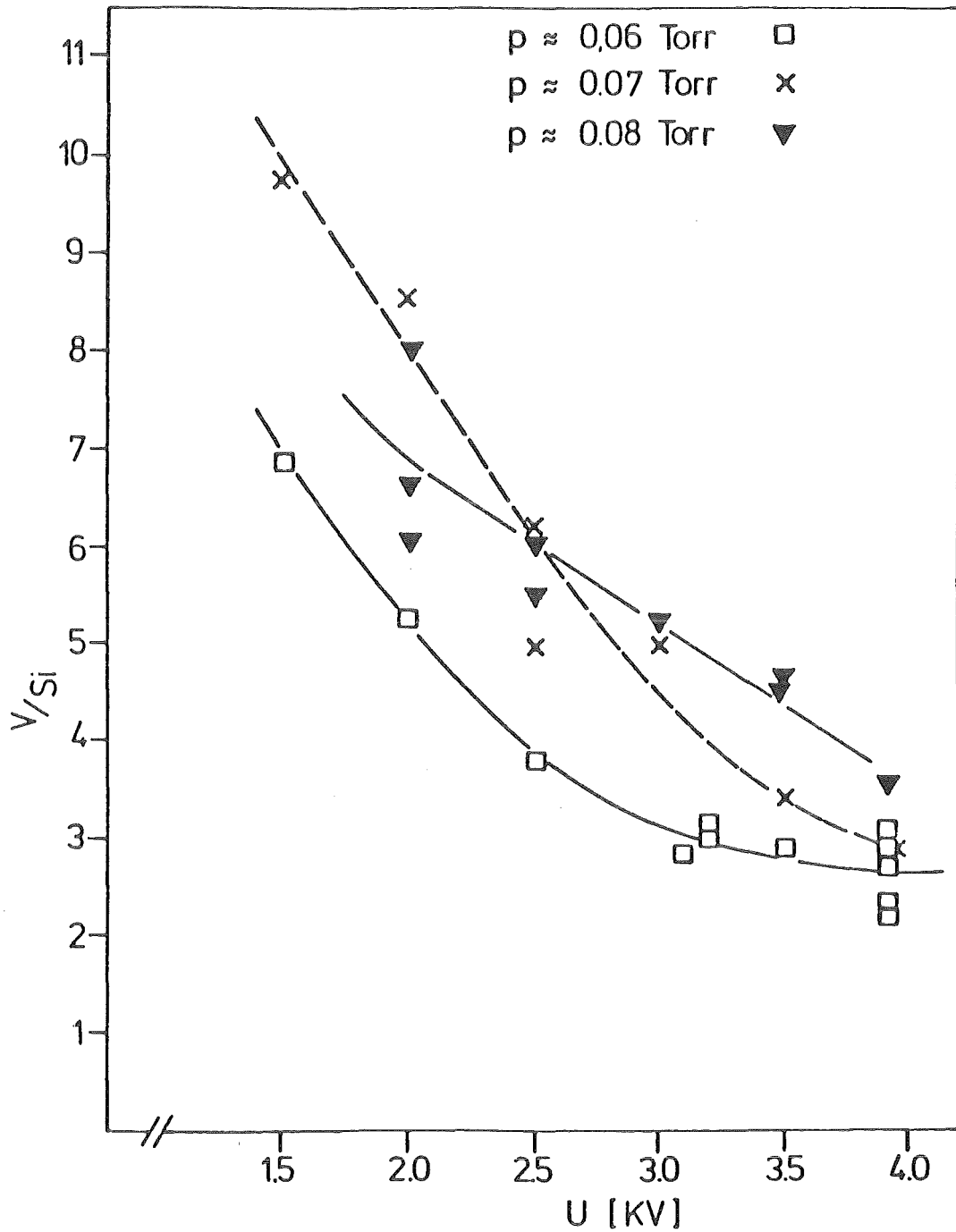


Bild 4.1 Mittleres V/Si- Verhältnis in Proben, die unter verschiedenen Bedingungen hergestellt wurden.

Bild 4.2 zeigt das mittlere V/Si - Verhältnis verschiedener Schichten mit Dicken von 1000-4000Å, die bei kalter Anode, unterschiedlichen Argongasdrücken und elektrischen Spannungen hergestellt wurden. Die hergestellten Schichten waren nicht homogen: befand sich die Substratmitte unter der Kathodenmitte so war dort der Siliziumanteil und die Schichtdicke maximal. Deshalb wurden die Proben an verschiedenen Stellen analysiert. In Tabelle 4.2 sind deshalb Mittelwerte der Schichtzusammensetzung eingetragen.

In Bild 4.2 erkennt man bei geringeren Drücken eine höhere Siliziumkonzentration auf den Substraten. Vergleicht man mit Bild 2.1.2 so sieht man, daß bei kleineren Drücken kleinere Ströme durch das Target fließen. Zur Überwindung des Siliziumwiderstands ist es günstig bei hohen Spannungen und kleinen Strömen (Drücken) zu arbeiten. Dadurch verhindert man das Aufladen der Siliziumoberfläche und die Verminderung der Sputterausbeute von Silizium (vergleiche Abschnitt 2.1.1).

Erhitzt man die Anode und die darauf gespannten Substrate während der Kathodenzerstäubung so ergibt sich ein anderes Resultat. Durch Wärmestrahlung erhöht sich die Oberflächentemperatur der naheliegenden Kathode. Die elektrische Leitfähigkeit von Vanadium nimmt mit hoher Temperatur ab (metallisches Verhalten), die Leitfähigkeit von Silizium nimmt dagegen zu. Man findet, daß der Vanadiumanteil auf den heißen Substraten abnimmt. Die Erhöhung der Leitfähigkeit von Silizium verhindert die Aufladung und erhöht dadurch die Siliziumdeposition.

Ein ähnlicher Effekt wird für das Überschneiden der V/Si über Spannung Kurven bei den Argongasdrücken 0,08 und 0,07 vermutet. Bei höheren Drücken ergeben sich höhere Ströme, die die Kathodenoberfläche erwärmen.

Zur Erzeugung der Schichten mit einem Stöchiometrieverhältnis V/Si = 3 wurden bei Drücken von 0,06 Torr Spannungen von 3,0 - 3,9 kV verwendet.

4.1.3 Strukturelle und supraleitende Eigenschaften

Waren die Schichten auf wassergekühlter Anode hergestellt worden, so war entweder kein Übergang zur Supraleitung festzustellen oder die T_c -Onsetwerte waren kleiner als 3°K. Die Kühlung war ausreichend, wenn die Schichten auf eine Kupferplatte aufgespannt wurden, die guten thermischen Kontakt zur Wasserkühlung der Anode besaß. War der thermische Kontakt

nicht ausreichend oder war die Wasserkühlung nicht in Betrieb, so ergaben sich T_c Onsetwerte bis 6°K . Die kalt hergestellten Schichten weisen keine oder schwache Al5 Reflexe auf.

Bei Herstellung der Schichten auf geheizte Substrate ergaben sich bei Heiztemperaturen von $800-900^{\circ}\text{C}$ während der Schichtbildung und einem V/Si Verhältnis von $2 < V/Si < 6$ resistiv gemessene T_c Onsets von $14-16^{\circ}\text{K}$. Bei höheren Vanadiumkonzentrationen und Herstellung auf heiße Substrate wurden noch T_c Onsetwerte über $5,3^{\circ}\text{K}$, der Übergangstemperatur von Vanadium gefunden. Bei $V/Si < 1,5$ wurde auch bei Verwendung erhitzter Substrate (850°C) kein T_c oberhalb $1,4^{\circ}\text{K}$ gefunden.

Tabelle 4.1 Eigenschaften einiger Schichten direkt nach der Herstellung, (*): bei diesen Schichten wurde zusätzlich der Gitterparameter bestimmt:

VT31 $a=4.732\text{\AA}$, VT51 $a=4.731\text{\AA}$, VT90 $a=4.757\text{\AA}$

Probe	Substrat- temperatur [$^{\circ}\text{C}$]	Resistives T_c jeweils Onset, Mitte, Breite [$^{\circ}\text{K}$]	Induktives T_c Mitte, Breite	r	V/Si
VT31 (*)	790-850	16,0/15,7/0,4	15,1/15,0/0,2	8,9	2,9
VT45	780-850	<1,4	-	3,8	1,4
VT46	850	16,0/15,7/0,4	14,5/14,4/0,3	5,5	2,4
VT51 (*)	≈ 20	5,6/4,4/2,4	-	1,1	1,9
VT90 (*)	20	<1,0	-	0,92	2,9

Mit Hilfe der Röntgenstreuung wurde die Struktur der Schichten untersucht. Ein Ausschnitt des Phasendiagramms des Systems V-Si ist in Bild 4.2 gezeigt (aus Ref.56). Die gemessenen Reflexe wurden mit den berechneten Reflexen von V,Si, $V_3\text{Si}$, geläpptem und ungeläpptem Saphirsubstrat, Si_3V_5 (hexagonal), $V_6\text{Si}_5$ (orthorombisch), VSi_2 (hexagonal), Si_3V_5 (tetragonal, hohe Temperatur) und $V_3\text{Al}$ verglichen. Die Linien von

V_3Si ($a_0=4,721\text{\AA}$) erscheinen bei größeren Reflexwinkeln als die von V_3Al ($a_0=4,83\text{\AA}$). Aufgrund der T_c Werte der Supraleitung konnte die Bildung von V_3Al mit Aluminium aus den Substraten ausgeschlossen werden, auch wenn die Gitterparameter einiger Schichten größer als $4,83\text{\AA}$ waren.

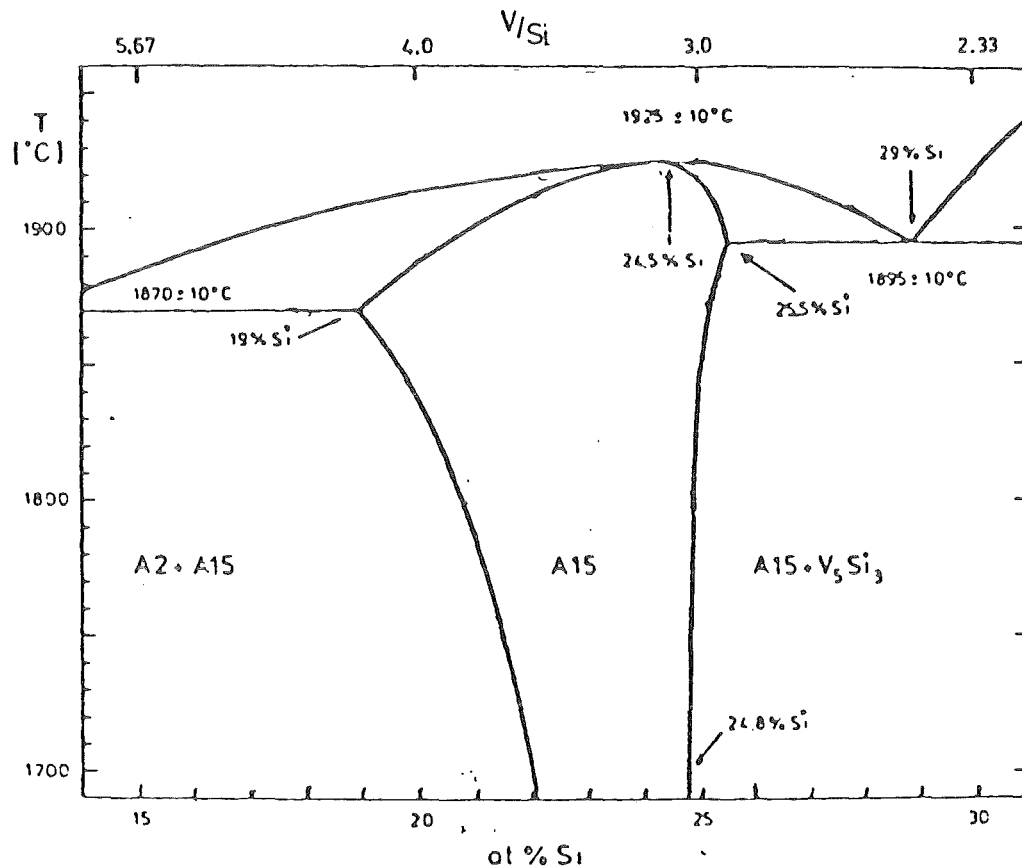


Bild 4.2 Ausschnitt des Phasendiagramms des Systems V-Si aus Referenz 56

Die beobachteten Reflexe konnten der V_3Si Struktur oder dem Substrat zugeordnet werden. Es traten jedoch auch einzelne weitere Reflexe auf. Diese Reflexe konnten keiner Kristallstruktur zugeordnet werden, weil sie nicht in ausreichender Zahl vorhanden waren.

Tabelle 4.1 zeigt Eigenschaften einiger der hergestellten Schichten.

4.2 Langzeittemperversuche

Langzeittemperversuche wurden in einem Ofen gemäß Abschnitt 2.6 durchgeführt. Durch Erhöhung der Temperatur vergrößert man die Diffusionskonstante für Atome und Defekte des Gitters. Defekte können durch Rekombinationen und durch Wandern an Oberflächen oder Korngrenzen abgebaut werden. Die kritische Temperatur der Supraleitung, das Restwider-

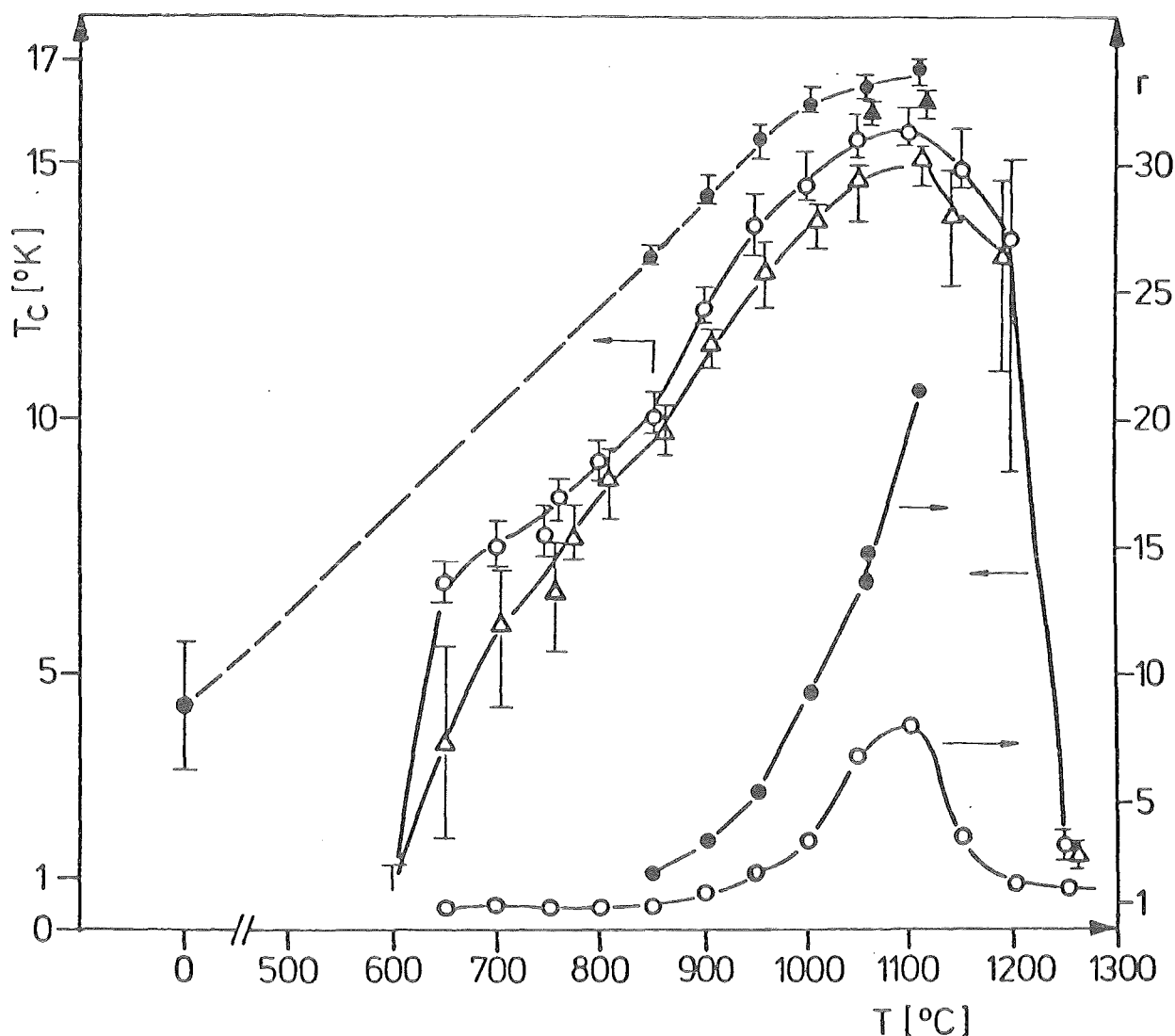


Bild 4.3 T_c und Restwiderstandsverhältnis als Funktion der Temperatur, Sprungmitte und Sprungbreite des resistiv (\square) und induktiv bestimmten T_c (\triangle), sowie das Restwiderstandsverhältnis (\bullet) für die Probe VT51. Entsprechend \square , \triangle , \circ für die Probe VT90.

standsverhältnis, der Gitterparameter und Gitterverspannungen sind physikalische Größen, die durch Ausheilen von Defekten geändert werden und somit ein Maß für Mikrostruktur und Defekte einer Schicht sind.

Bild 4.3 zeigt die Änderung der Übergangstemperatur zur Supraleitung und des Restwiderstandsverhältnisses durch einen isochronen Temperprozeß.

Die Probe VT51 besaß zu Beginn ein T_c - Onset von $5,6^{\circ}\text{K}$ und ein Restwiderstandsverhältnis von 1,1. Die Probe wurde mehrmals je eine halbe Stunde lang auf einem Tantalband getempert. Die höchsten T_c Werte ergaben sich nach Tempern bei einer Temperatur von 1110°C : resistiver Onset $16,7^{\circ}\text{K}$, Sprungbreite $0,3\text{K}$, $r=19$, induktiver Onset $16,4^{\circ}\text{K}$, Sprungbreite $0,6\text{K}$.

Der Gitterparameter wuchs von $4,731\text{Å}$ vor dem Tempern auf $4,761\text{Å}$ nach Tempern bei einer Temperatur von 1005°C und nahm dann auf $4,725\text{Å}$ nach Tempern bei einer Temperatur von 1110°C ab. Allerdings wurde die erste Messung nicht an der gleichen Probenstelle wie bei den anderen Messungen vorgenommen. Die Linienschärfe nahm durch das Tempern zu, das heißt die Korngröße erweiterte sich. Nach Tempern bei einer Temperatur von 1110°C betrug die Korngröße $(881\pm 33)\text{Å}$. Das ist die größte gemessene Korngröße aller untersuchten Schichten. Die Reflexe dieser Probe sind in Bild 2.3.2 abgebildet. Neben 13 A15 Reflexen treten 8 Reflexe auf, die dem geläpften, kristallinen Substrat zuzuordnen sind. Ein Reflex zwischen A15 210 und 211 kann weder der A15 Struktur noch dem Substrat zugeteilt werden.

Die Zusammensetzung der Probe VT51 betrug $\text{V/Si} \approx 1,9$. Die Schichtdicke betrug etwa $5,5\mu\text{m}$, wie Messungen mit Rutherford-Rückstreuung mit 2 MeV -Deuteronen ergaben. Nach Ende der Temperreihe hatte Sauerstoff das Silizium an der Oberfläche bis in eine Tiefe von etwa 1200Å verdrängt, wie sich aus Analysen mit Rutherford-Rückstreuung ergab. Die Vanadiumkonzentration an der Oberfläche war dann um etwa 10% gegenüber dem Wert bei größeren Tiefen verringert.

Zum Vergleich mit den Kurzzeittemperversuchen (Kap. 4.3) wurde eine isochrone Langzeittemperreihe an einer dicken Probe mit sehr kleiner supraleitender Übergangstemperatur T_c unternommen. Die Probe VT90 (vergleiche Tabelle 4.1) besaß anfangs eine Dicke von $2,2\mu\text{m}$ und eine mittlere Zusammensetzung $\text{V/Si} \approx 2,9$. Die Übergangstemperatur T_c war bis Tempern bei einer Temperatur von 550°C kleiner als $1,0^{\circ}\text{K}$ (Meßgrenze). Bei 600°C war ein resistiver T_c Onset von $1,3^{\circ}\text{K}$ zu beobachten, die Mitte des Phasenübergangs lag unter 1°K . Nach Tempern bei einer Temperatur von 650°C

war sowohl resistiv als auch induktiv der Übergang der ganzen Probe in die supraleitende Phase oberhalb 1°K zu beobachten. Bis 850°C wurde die Probe $1/2$ h Temperprozeßen im Rohofen ausgesetzt. Ab 900°C wurden die Proben auf stromleitende Tantalstreifen geklemmt und wieder eine halbe Stunde lang getempert. Die Temperatur wurde mit dem Pyrometer bestimmt und gemäß Bild 2.6.1 korrigiert. Zum Beispiel entspricht die Temperatur von 900°C einer mit dem Pyrometer abgelesenen Temperatur von $840-850^{\circ}\text{C}$. Der Verlauf der supraleitenden Temperaturen und des Restwiderstandsverhältnisses in Bild 4.3 bestätigt die Korrektheit der Temperaturkorrektur des Pyrometers.

Das größte T_c und das größte Restwiderstandsverhältnis wurde nach $1/2$ h Tempern einer Temperatur von 1100°C erreicht : resistiver Onset $16,1^{\circ}\text{K}$, Sprungmitte $15,6^{\circ}\text{K}$, Breite $0,7\text{K}$, $r=8,0$, induktiv : Onset $15,4^{\circ}\text{K}$, Mitte $15,0^{\circ}\text{K}$, Breite $0,8\text{K}$.

Das Restwiderstandsverhältnis nahm kontinuierlich von anfangs $0,92$ auf $0,73$ nach Tempern bei einer Temperatur von 600°C ab. Oberhalb 600°C stieg das Restwiderstandsverhältnis bis Tempertemperaturen von 1100°C an. Nach Temperprozessen bei höheren Temperaturen nahm das Restwiderstandsverhältnis ab. Die Übergangsbreiten der Supraleitung verbreiterten sich nach Tempern bei Temperaturen oberhalb 1100°C erst, dann nahm die kritische Temperatur der Supraleitung stark ab.

Zusammenfassend kann man sagen, daß es eine Schwellentemperatur von $600-650^{\circ}\text{C}$ für das Ausheilen amorpher Proben bei halbstündigem Tempern gibt. Das Restwiderstandsverhältnis ist vermutlich ein Maß für die Mikrostruktur des Gitters. Erst ab 900°C verbessert sich die Mikrostruktur merklich oder es heilen langreichweitige Defekte aus. Dies gilt für beide Schichten VT51 und VT90. Die Sprungtemperatur und das Restwiderstandsverhältnis sind von der Vorgeschichte der Proben abhängig. Die mit einer kritischen Temperatur von $5,6^{\circ}\text{K}$ resistivem Onset hergestellte Probe VT51 erreicht nach Tempern höhere Sprungtemperaturen und insbesondere ein sehr hohes Restwiderstandsverhältnis. Die ausgeprägte Mikrostruktur der Probe VT51 nach Tempern bei einer Temperatur von 1110°C wird durch die Röntgenbeugung anhand scharfer Reflexlinien und einer Korngröße von 880Å bestätigt. Nach Tempern oberhalb 1100°C verschlechtern sich die supraleitenden Eigenschaften.

4.3 Kurzzeittemperversuche

PEBA-Versuche (Pulsed Electron Beam Annealing) wurden mit einem Elektronenpulsgenerator bei Drücken von 10^{-3} Torr Argon durchgeführt. Auf Grund von Strom- und Spannungsmessungen aus Abschnitt 2.5.2 und Simulationsrechnungen aus Kapitel 3 wird angenommen, daß durch die Elektronenbestrahlung die Probenoberfläche für eine Dauer von etwa 0.3 bis 2 μ s aufgeschmolzen werden kann, sowie daß über eine Dauer von einigen μ sec eine Temperatur besteht, die wesentlich von der anfangs herrschenden Temperatur der Proben verschieden ist.

Die untersuchten Schichten waren mit einer Zusammensetzung von $2,4 \leq V/Si \leq 5,6$ bei Raumtemperatur hergestellt worden und besaßen keine oder geringe T_c Werte oberhalb $1^{\circ}K$. Die Dicke der meisten der 15 untersuchten Schichten lag über $2,3\mu m$, der Reichweite von 25 keV Elektronen in V_3Si . Die Elektronen verloren dann ihre Energie in der Schicht und heizten das Substrat nicht direkt.

4.3.1 Bestimmung der Schmelzschwelle

Um die Schmelzschwelle von V_3Si zu bestimmen wurden Wismutatome in die Oberfläche zweier Substrate VT89 und VT92 an 6 Stellen implantiert (vergleiche Abschnitt 2.7). Diese Substrate besaßen ein Kompositionsverhältnis $V/Si \approx 3$ und Dicken von $1,2-2,9\mu m$. Die Wismut-Tiefenprofile hatten an allen Stellen das gleiche Aussehen.

Im festen Zustand diffundiert das schwer lösliche Wismut praktisch nicht in der Schicht. Bei Existenz einer Schmelze diffundiert das Wismut um Größenordnungen schneller (vergleiche Abschnitt 4). Deshalb kann das Tiefenprofil des Implantats und seine Veränderung als empfindliche Untersuchung der Schmelzschwelle eingesetzt werden.

Innerhalb der elektronenbestrahlten Bereiche der Proben wurden Tiefenprofilmessungen mit Rutherford-Rückstreuung an verschiedenen Stellen im mm-Abstand durchgeführt. Nach einer Bestrahlung mit $1,5 J/cm^2$ wurden im beschossenen Abschnitt in einigen Bereichen ein verbreitertes Bi-Profil gemessen, während der Rest, auch die Mitte des bestrahlten Bereichs, keine Veränderung des implantierten Bi-Tiefenprofils aufwies.

Diese Probe besaß dann ein resistives T_c von $10,8^0\text{K}$ Onset, $5,2\text{ K}$ Breite und ein Restwiderstandsverhältnis von $r=0,97$. In Bild 4.4 sind die Wismutprofile an zwei Probenstellen vor und nach PEBA mit $1,5\text{J}/\text{cm}^2$ dargestellt. Nach Bestrahlungen mit weniger als $1,5\text{J}/\text{cm}^2$ und mit $1,7\text{ J}/\text{cm}^2$ wurde an verschiedenen Meßstellen keine Veränderung des Bi-Profiles gefunden. Ab $1,9\text{ J}/\text{cm}^2$ wurde die Verbreiterung des Wismutprofils über den ganzen bestrahlten Bereich nachgewiesen. Es wurde geschlossen, daß der Elektronenstrahl am Probenort nicht homogen ist, daß er besonders starke Strahlbereiche aufweist, die $1\text{-}2\text{mm}^2$ groß sein könnten. In Übereinstimmung mit Referenz 15 wird das Auftreten von anodischen Brennflecken für diese Intensitätsmaxima der Elektronenbestrahlung verantwortlich gemacht (vergleiche Kapitel 2.5.1 und 2.5.2).

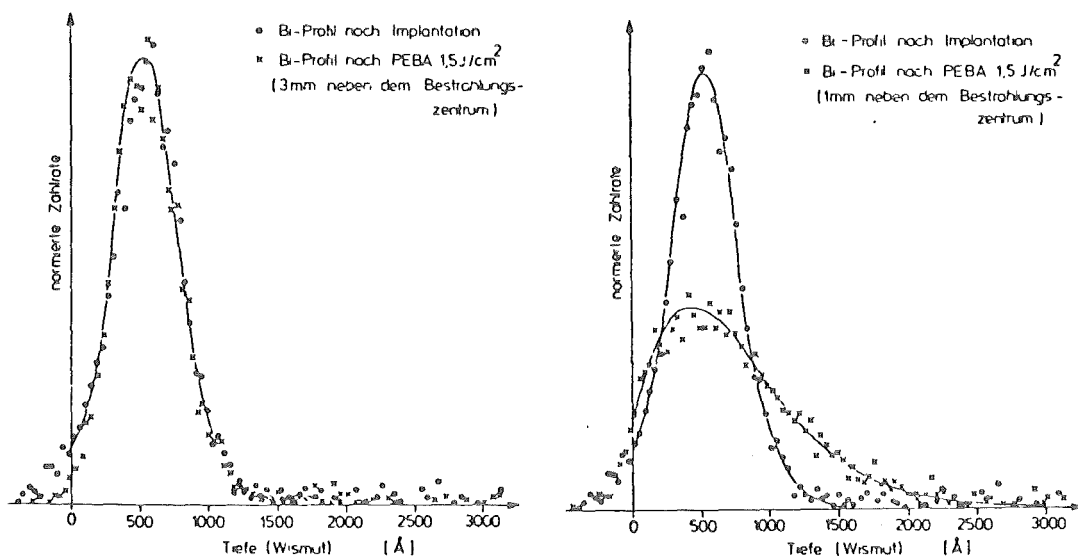


Bild 4.4 Wismut- Tiefenprofile vor und nach PEBA mit $1,5\text{J}/\text{cm}^2$ an zwei verschiedenen Orten im Bestrahlungsbereich

Die Schwelle für das Schmelzen liegt zwischen $1,7$ und $1,9\text{ J}/\text{cm}^2$. Unterhalb dieser Schwelle können Teile der Proben geschmolzen werden, die von Flußspitzen des Elektronenstrahls getroffen werden.

Bild 4.5 zeigt Wismut-Tiefenprofile nach Implantation und nach einer Bestrahlung mit $1,9\text{ J}/\text{cm}^2$ bei 21kV . Eine Pile-up Korrektur wurde durchgeführt (vergleiche Kapitel 2.4.5). Das diffundierte Wismut kann bis

in eine Tiefe von $0,35\mu\text{m}$ beobachtet werden. Wegen der Vanadiumkante ist bei Verwendung von 2 MeV α -Teilchen keine Auswertung des Wismut-Tiefenprofils in größeren Tiefen möglich. Die Berechnung des in Bild 4.5 eingezeichneten Diffusionsprofil wird im folgenden Abschnitt besprochen.

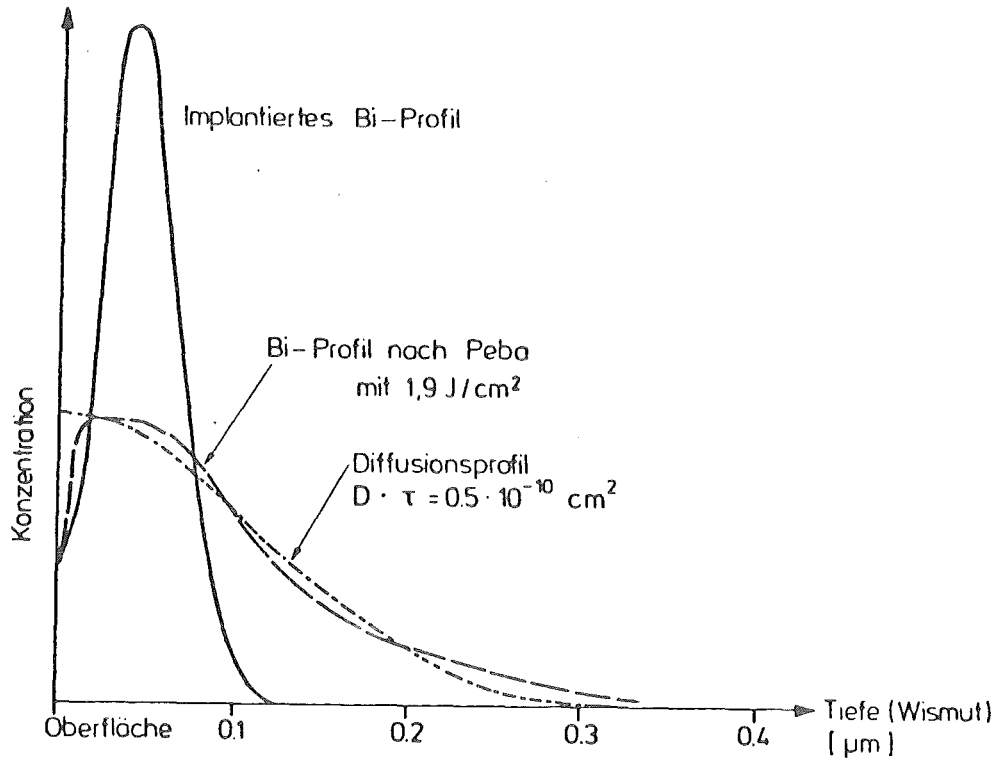


Bild 4.5 Wismut- Tiefenprofil nach Implantation und nach PEBA mit $1,9\text{J/cm}^2$. Zum Vergeich ist ein gerechnetes Diffusionsprofil aus Bild 4.6 mit $t=0,5\mu\text{s}$ aufgenommen.

4.3.2 Wismut-Diffusion in V_3Si

Der Transport von Masse kann mittels Konvektion und Diffusion ablaufen. Wie beim Wärmetransport vernachlässigen wir die Konvektion, weil sie Platz und Zeit benötigt. Wir untersuchen aber die Konzentrationsänderung einer Teilchensorte in einer Schicht von einigen 1000\AA Dicke innerhalb einer Zeit von einigen μs .

Das 1. Ficksche Gesetz besagt, daß bei einem Konzentrationsgefälle einer Teilchensorte ein Teilchenstrom in die Richtung niedriger Konzentration einsetzt. Der Teilchenstrom ist proportional zum Konzentrationsgradienten und zur Diffusionskonstanten. Die Diffusionskonstante D_n ist abhängig von der Atomsorte n des Dotanden, von der umgebenden Substanz,

und von der Temperatur. Der Diffusionskoeffizient im festen Zustand des Gitters ist um Größenordnungen kleiner als der Diffusionskoeffizient in der flüssigen Phase.

Das 2.Ficksche Gesetz gibt die zeitliche Änderung der Konzentration in Abhängigkeit vom Konzentrationsgradienten und der Diffusionskonstanten an:

$$D_n \cdot \frac{\partial^2 C_n}{\partial z^2} = \frac{\partial C_n}{\partial t} \quad (4.1)$$

Dieses Gesetz, die Diffusionsgleichung, ähnelt sehr der Wärmediffusionsgleichung (3.2) und wird analog gelöst. Wird die Diffusionskonstante als konstant angenommen, so läßt sich die Diffusionsgleichung analytisch lösen. Es existieren Publikationen für verschiedene Startprofile der Konzentrationen (Ref.46,47).

Zur Lösung der Diffusionsgleichung wurde das numerische Programm aus Kapitel 3 modifiziert. Man setzt dazu die Größen der Gleichungen (3.8), (3.15) und (3.16) wie folgt:

$$\begin{aligned} c_{i,n} &= \rho_{i,n} = 1 \\ FK_{i,n} &= \text{Diffusionskonstante} \\ Q(i) &= 0 \end{aligned}$$

Weiter sind WVO und WVS Verluste der Teilchen an den Grenzflächen. Die Werte $u_{i,n}$ entsprechen jetzt Konzentrationen. Vor Beginn der Diffusionsrechnungen wird ein beliebiges Profil durch Überlagerung von Gaußfunktionen oder Polynomfunktionen erzeugt. Außer für die Anfangsbedingungen sind die Elektronenstrahleingabedaten und Formeln nicht von Bedeutung.

Nach Referenz 46 und 48 beträgt die Diffusionskonstante oberhalb der Schmelztemperatur in Metallen 10^{-4} - 10^{-5} cm²/s. Bei höheren Temperaturen nimmt die Diffusionskonstante zu.

Bild 4.6 zeigt das Ergebnis von Diffusionsrechnungen mit einer Diffusionskonstanten von 10^{-4} cm²/s für verschiedene Zeiten. Bei einer Diffusionskonstanten von 10^{-5} cm²/s ergeben sich die gleichen Profile nach der 10-fachen Zeit. Es wurde angenommen, daß keine Teilchenverluste an den Oberflächen auftreten. Zur Zeit $t=0$ wird ein gaußförmiges Konzentrationsprofil angenommen. Analog dem implantierten Wismutprofil (siehe Abschnitt 2.7 und Bilder 4.4 und 4.5) wird das Maximum der Verteilung in

der Tiefe 430\AA und die Halbwertshöhen bei 130\AA und 730\AA angenommen. Die Tiefe, in die das Wismut in der Zeit τ eindringt, ist größenordnungsmäßig $(D \tau)^{\frac{1}{2}}$ (vergleiche auch Gleichung (3.12)).

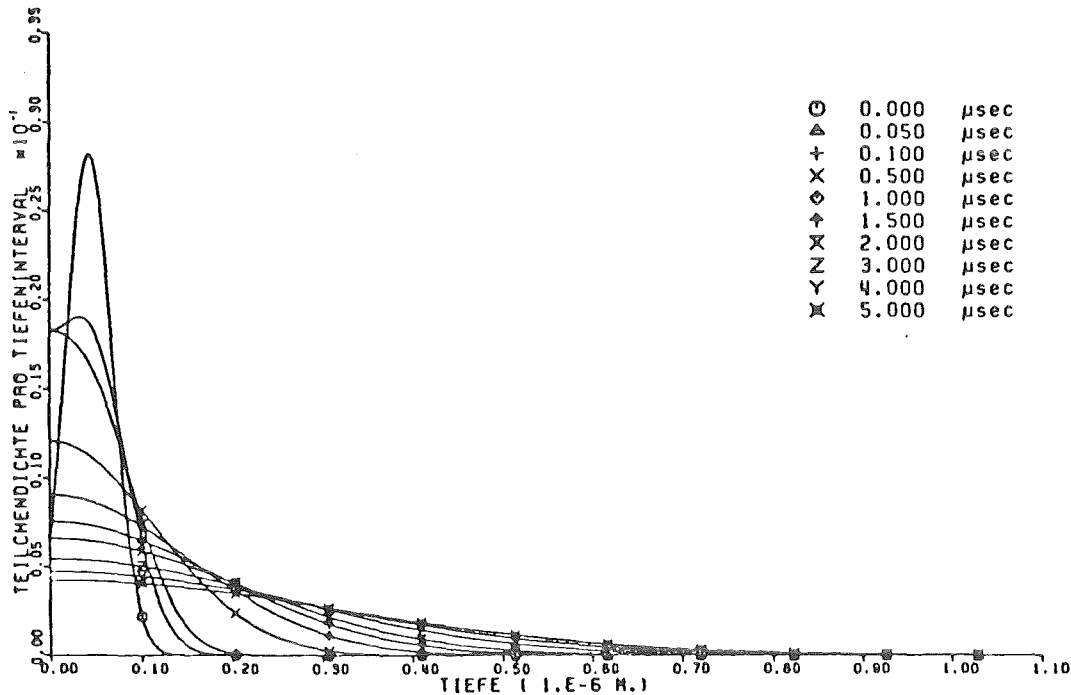


Bild 4.6 Startprofil und gerechnete Profile nach Diffusion mit $D=10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$ in verschiedenen Zeiten.

Die beste Übereinstimmung zwischen dem Wismutprofil nach Bestrahlung mit $1,9 \text{ J/cm}^2$ und den gerechneten Diffusionsprofilen besteht nach einer Diffusionszeit von $0,5 \mu\text{s}$ bei einer Diffusionskonstanten von $10^{-4} \text{ cm}^2/\text{sec}$ (siehe Bild 4.5). Bei einer Diffusionskonstanten von $10^{-5} \text{ cm}^2/\text{sec}$ wäre eine Zeit von $5 \mu\text{sec}$ zur Erreichung des gleichen Profils notwendig.

4.3.3 Supraleitende und strukturelle Eigenschaften

Die Ergebnisse resistiver Messungen der kritischen Temperatur T_c zeigt Bild 4.7 : es wurden die höchsten Übergangstemperaturen eingetragen.

Besaßen die Proben vor der Elektronenbestrahlung eine Übergangstemperatur von mehr als $1,5^\circ\text{K}$, so zeigte sich schon bei Elektronenbestrahlungen mit weniger als $1,3 \text{ J/cm}^2$ eine T_c Erhöhung, die in Bild 4.7 nicht eingetragen wurde. Eine T_c Erhöhung amorpher Proben wurde in diesem niederenergetischen Bestrahlungsgebiet, das dem Kurzzeittempern in der

festen Phase entspricht, nicht beobachtet (siehe Tabelle 4.2). Bei Bestrahlungen bis $1,6\text{J}/\text{cm}^2$ bildeten sich keine A15 Linien in zuvor röntgenamorphen Proben wie sich aus Röntgenstreuungsmessungen ergab.

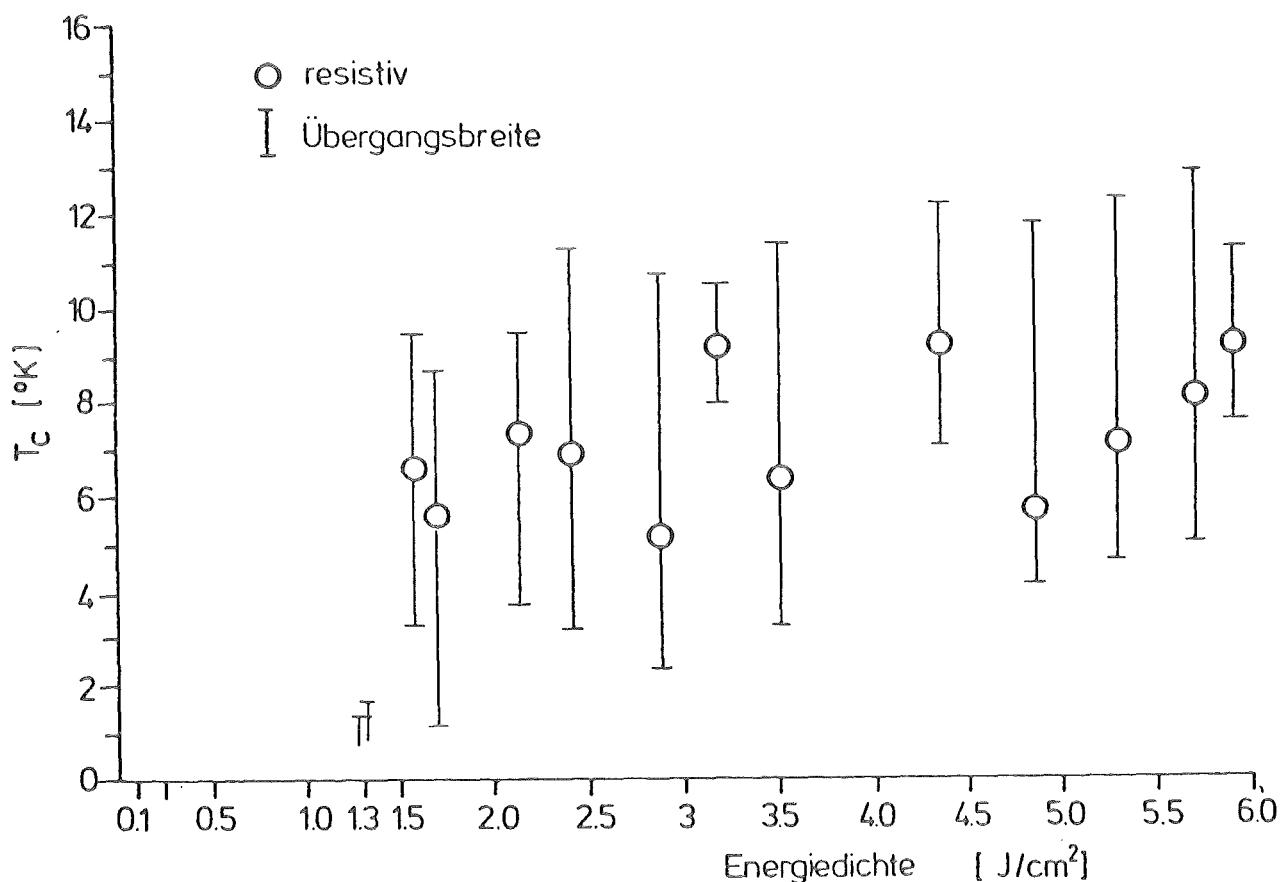


Bild 4.7 Resistiv bestimmtes T_c mit Sprungmitte und Übergangsbreite als Funktion der PEBA- Energiedichte

Zwischen $1,5$ und $1,7\text{J}/\text{cm}^2$ ist die Ausheilschwelle für einige Proben erreicht, die anfangs noch kein wesentliches T_c hatten. Die größte Elektronenenergiedichte, nach der noch kein T_c über 1°K bestand, betrug $1,6\text{J}/\text{cm}^2$ (siehe Tabelle 4.2). In diesem Bestrahlungsbereich wird die Schmelzschwelle erreicht. Oberhalb $1,7\text{J}/\text{cm}^2$ steigt die Übergangstemperaturen nur noch langsam an. Die T_c Werte von etwa gleich stark beschossenen Schichten schwanken besonders stark im Bereich von $1,3$ bis $2,5\text{J}/\text{cm}^2$. Wie wir in Kapitel 4.3.1 gesehen haben, ist der Elektronenstrahl am Probenort nicht homogen über den bestrahlten Probenabschnitt. Es treten Probenorte auf, die durch die Bestrahlung besonders stark erhitzt werden. Im Bestrahlungsbereich von $1,5$ - $2,5\text{J}/\text{cm}^2$ gibt es neben Probenorten die

noch nicht schmelzen andere Orte, die nur kurz schmelzen und die einige 100 nsec im flüssigen Zustand bleiben.

Tabelle 4.2 PEBA Experimente in der festen Phase der Proben
 Die Angaben unter T_c sind jeweils Onset/Mitte/Breite der resistiv bestimmten Sprungtemperatur in °K.
 (*): 11 Bestrahlungen zwischen 0,5 und 1,0J/cm²

Schicht Position	V/Si	Vor PEBA		PEBA-Schuß [J/cm ²]	Nach PEBA	
		T_c [°K]	r		T_c [°K]	r
VT53 R15	2,3	3,1/2,5/1,4	1,0	1,0	5,8/5,6/1,0	1,0
VT53 R25	2,1	3,1/2,5/1,4	1,0	1,5	7,4/6,7/0,4	1,0
VT84 R35	2,7	< 1,1	0,92	1,6	< 1,0	0,96
VT93 R25	3,6	1,2/<1,1	0,94	(*)	1,2/<1,0	0,94

Versuche durch Mehrfachbestrahlung der Proben mit etwa gleichgroßen Energiedichten höhere T_c Werte zu erhalten als mit einer einzelnen Bestrahlung, brachten nur im Bereich von 2 bis 2,5 J/cm² Erfolg. In Tabelle 4.3 sind einige Beispiele für Mehrfachbestrahlungen mit etwa gleichen Energiedichten sowie Beispiele für Bestrahlungen mit einer hohen und einer wesentlich geringeren Energiedichte angegeben. Da die Schichten durch Bestrahlungen in diesem Energiebereich aufgeschmolzen werden, wird vorhandenes Al₅ Material zerstört und kann erst bei der Erstarrung der Schicht wieder neu gebildet werden. Bei Mehrfachbestrahlung wird somit Al₅ Material, das durch die erste Bestrahlung erzeugt wurde, bei der nachfolgenden Bestrahlung durch Aufschmelzen zerstört. Die T_c - Erhöhung durch Mehrfachbestrahlung wird auf Inhomogenitäten des Elektronenstrahls zurückgeführt, die sich in diesem Bestrahlungsbereich stark auswirken. Ein Beispiel für eine Mehrfachbestrahlung im niederenergetischen Bestrahlungsbereich (bis zu 1.6J/cm²) ist in Tabelle 4.2 unten gegeben.

Tabelle 4.3 PEBA Experimente im Bereich von 2,0 - 2,5J/cm³
 Angegeben sind die intensivsten Bestrahlungen
 Die Angaben unter T_c sind jeweils Onset/Mitte/Breite
 der Sprungtemperatur in °K vor und nach den angege-
 benen PEBA- Experimenten

Schicht Position	V/Si	Vor PEBA		PEBA- Schuß [J/cm ³]	Nach PEBA	
		T _c [°K]	r		T _c [°K]	r
VT93 R35	4,3	1,1/<1,1	0,94	2,1/2,1/2,0	9,5/7,4/5,4	0,89
VT93 R25	3,6	1,2/<1,1	0,94	2,2	7,2/3,6/5,4	0,92
VT94 R25	3,6	1,2/<1,1	0,96	2,4/1,9	11,3/7,0/8,0	0,99
VT95 R25	3,1	< 1,2	0,94	2,2/1,1	4,4/2,5/>3,4	0,92
VT95 R35	2,7	< 1,2	0,94	2,2/2,2/1,9	8,5/5,2/6,7	0,88

Oberhalb 2 J/cm² wurde das Ablösen einiger Schichten von den Substraten beobachtet. Die dann durchsichtigen Proben weisen aber meist bessere supraleitende Eigenschaften auf als vor der letzten Bestrahlung.

Die Verringerung der Schichtdicke nach Bestrahlung kann erklärt werden durch ein Verdampfen der Oberfläche oder durch Absprengung der Schicht durch mechanische Spannungen innerhalb der Schicht sowie zwischen Schicht und Substrat während dem Erhitzen, Schmelzen und Abkühlen. In Kapitel 3.3.2 wurde besprochen, daß die Schichten bei großen Bestrahlungstärken nicht an der Oberfläche sondern im Inneren zu Schmelzen beginnen. In Ref. 42 ist dies rechnerisch nachgewiesen worden. Durch Änderung der Dichte beim Phasenübergang kann es dann bei starken Bestrahlungen zu großen mechanischen Spannungen kommen.

Neben der resistiven Messung wurde auch das Restwiderstandsverhältnis bestimmt. Dieses änderte sich aber nur geringfügig. Die Restwiderstandsverhältnisse der einzelnen Proben schwankten vor und nach Bestrahlung von 0,9 bis 1,1 .

Mit der induktiven Meßmethode konnte die Übergangstemperatur zur Supraleitung nicht bestimmt werden. Aufgrund thermischer Effekte nimmt das Signal der Meßspule bei Temperaturverringern ab. Bei einem geringen Volumenanteil der supraleitenden Substanz und bei großen Übergangsbreiten ergibt sich nur eine geringe Änderung des Meßsignals aufgrund des Phasenübergangs. Bei den meisten untersuchten Proben konnte wegen des thermischen Effekts der Signaländerung der induktive Übergang nicht bestimmt oder nicht einmal erkannt werden. Proben die schon nach der Herstellung eine beobachtbare Phasenumwandlung aufwiesen, lieferten die einzigen sicheren induktiven T_c Werte.

Probenuntersuchungen mit Rutherford-Rückstreuung vor und nach der Elektronenbestrahlung zeigten, daß sich die Zusammensetzung der Proben an den Oberflächen nicht wesentlich ändert: innerhalb der Fehlergrenzen blieb die Zusammensetzung der Proben konstant. Bei durchsichtigen, sehr dünnen Proben kann das Silizium der Schicht mit der Rückstreuung nicht mehr ausreichend vom Aluminium des Substrats getrennt werden, um die Zusammensetzung sicher zu bestimmen. Aber auch hier scheint die Zusammensetzung unverändert. Im Vergleich zu den Langzeittemperversuchen wurde keine so große Bindung von Sauerstoff in den Probenoberflächen gefunden. Dies ist sicher ein Vorteil der Kurzzeittempermethode.

An einigen Schichten wurden Röntgenuntersuchungen durchgeführt. Bei Proben, die keine oder schwache A15-Linien besaßen, wurden nach Bestrahlung mit Energien oberhalb der Schwelle $1,7 \text{ J/cm}^2$ A15 Reflexe gefunden. Die Intensitäten der Reflexe nahm durch Bestrahlung leicht zu, ebenso die Korngrößen. Die größte gemessene mittlere Korngröße betrug 240 \AA bei einem Gitterparameter von $4,732 \text{ \AA}$, einem resistiven T_c von $10,5 \text{ K}$ und einer Übergangsbreite von $2,5 \text{ K}$. Die Reflexintensitäten nach PEBA waren schwach, verglichen mit den Intensitäten der Probe VT51 nach Langzeittempern bei einer Temperatur von $1100 \text{ }^\circ\text{C}$ (siehe Kapitel 4.2 und Bild 2.3.2). Unter Berücksichtigung der Probendicke wurde aus den gemessenen Intensitäten der Röntgenreflexe abgeschätzt, daß durch PEBA etwa 10% des Probenmaterials zu A15 transformiert, wenn man annimmt, daß in der Probe VT51 100% der Schicht aus A15 besteht. Diese Volumenanteilbestimmung wurde an der Probe VT84 nach PEBA mit $3,2 \text{ J/cm}^2$ durchgeführt. Die Probenstelle besaß vor der Bestrahlung eine Dicke von etwa 8300 \AA . Nach Ergebnissen von Berechnungen mit dem in Kapitel 3 besprochenen Simulationsprogramm wird

angenommen, daß die ganze Probe durch PEBA aufgeschmolzen wurde. Nach dem Schmelzen wurde eine Veränderung der Probenoberfläche mit einem mechanischen Abtastinstrument festgestellt: es haben sich Schmelzberge und Täler auf der Probe gebildet. Dies erschwert eine Bestimmung des noch vorhandenen Probenvolumens. Der A15 Volumenanteil wurde unter der Annahme berechnet, daß kein Probenmaterial durch Abdampfen oder Abplatzen verloren gegangen ist.

Die Ausheilversuche mit Kurzzeittempern brachten also keine so guten Ergebnisse wie das Langzeittempern. Die Ursachen liegen darin, daß zum einen die Schichten bei hohen Bestrahlungsstärken abplatzten und zum anderen, daß die Erstarrungsfront an der Grenze zwischen der festen und flüssigen Phase sehr schnell wandert, mit etwa 1 bis 2 m/sec (siehe Tabellen 3.3 und 4.7). Durch das schnelle Einfrieren der Atome der Schmelze an der Oberfläche des Festkörpers werden kleine A15 Kristallite gebildet und es ist zu erwarten, daß eine Fehlbesetzung der V- und Si-Gitterplätze vorliegt.

Um die Erstarrungsgeschwindigkeit zu verringern könnte man das Substrat aufheizen und so den Abkühlprozess durch Verringerung des Temperaturgradienten verlangsamen. In diesem Fall kann man die Ausheilung einmal durch den Elektronenpuls und einmal durch die lang anhaltende Substratheizung nicht trennen. Nach den Langzeittemperergebnissen von Bild 4.3 müßten die Substrate mit Temperaturen unter 600°C geheizt werden, um ein Langzeittempern zu verhindern. Für diese Temperaturen würde sich die Erstarrungsgeschwindigkeit aber noch nicht stark ändern, wie Simulationrechnungen im nächsten Kapitel zeigen.

Tabelle 4.4 PEBA-Versuche auf geheizten Proben

Substrat- temperatur	PEBA- Schuß	Am PEBA Ort		Neben dem PEBA-Ort	
		T _c Onset, Mitte, Breite	r	T _c Onset, Mitte, Breite	r
600°C	≈5J/cm ²	13,0/11,0/4,4	1,3	8,0/5,2/≈4,0	1,1
700°C	≈5J/cm ²	12,7/11,4/2,3	1,6	11,6/9,8/3,6	1,0

Tabelle 4.4 zeigt Versuchsergebnisse von Proben, die während der Elektronenbestrahlung beheizt wurden. Die Zusammensetzung der Proben betrug $V/Si \approx 3$. Die Substrattemperatur war während der Einstellphase größer als in Tabelle 4.4 angegeben.

Die T_c Werte nach Bestrahlung sind etwas höher als ohne gleichzeitige Substratheizung (Bild 4.7). Das Restwiderstandsverhältnis ist ebenfalls höher. Zwischen der bestrahlten und unbestrahlten Stellen der geheizten Proben herrscht aber kein wesentlicher Unterschied.

4.3.4 Vergleich mit Rechnungen

Analog zum Kapitel 3.5 wurden Simulationsrechnungen der Elektronenstrahlheizung durchgeführt. Für den Festkörper V_3Si sollten errechnete und gemessene Daten verglichen werden

Tabelle 4.5 zeigt die Eingabedaten für die V_3Si -Rechnungen. Die meisten Daten wurden Ref.14,32,33,35-37 entnommen. Die Parameter A1 und A2 der Energiedeposition sind in Kapitel 2.5.5 bestimmt worden und in Tabelle 2.5.2 aufgelistet (sie werden dort a_1, a_2 genannt). Für die Wärmeleitfähigkeit und die Schmelzwärme lagen keine Werte für V_3Si oder ein anderes Al5 Material vor. Für die Schmelzwärme wurde der Wert von 80 cal/g verwendet, etwa der Wert von Vanadium. Die Wärmeleitfähigkeit wurde mit dem Widemann-Franz'schen Gesetz aus Gleichung (3.28) abgeschätzt. Bei einem spezifischen elektrischen Widerstand von $100 \mu\Omega cm$ für eine amorphe Probe bei $300^\circ K$ ergibt sich eine Wärmeleitfähigkeit von 0,08 cal/(cm·sec·Grad). Es wurde angenommen, daß dieser Wert für höhere Temperaturen konstant bleibt, in der Schmelze aber auf den halben Wert sinkt.

Tabelle 4.6 zeigt die zum Schmelzen notwendige Energiedichte für V_3Si . Bei den Simulationsrechnungen wird eine 10-20% höhere Bestrahlungsenergie zum Schmelzen benötigt als in den Experimenten. In Anbetracht der unsicheren Eingabedaten der Wärmeleitfähigkeit und der Schmelzwärme ist die Übereinstimmung von Rechnung und Experiment befriedigend. Bei den Simulationsrechnungen für Aluminium und Vanadium, für die mehr Eingabedaten bekannt sind, war die Übereinstimmung besser, für Silizium dagegen schlechter als für V_3Si (vergleiche Tabelle 3.3). Bild 4.8 zeigt die Temperaturen in verschiedenen Schichttiefen während des PEBA Pulses und danach. Bild 4.9 veranschaulicht die Wanderung der Schmelzfront im

Verlauf der Bestrahlung. Die maximale Energiedeposition findet zur Zeit $t=1,65\mu\text{sec}$ statt (vergleiche Bild 2.5.2 d). Die maximale Temperatur und Schmelztiefe werden kurz danach erreicht. Die beiden Bilder gehören zu einem PEBA Puls von $2,2\text{J}/\text{cm}^2$ bei einer Elektronenenergie EE von 0-21kV, einer Substrattemperatur $AT=20^\circ\text{C}$, und einer PEBA Pulsdauer $PZ=2,3\mu\text{sec}$.

Tabelle 4.5 Eingabedaten von $V_3\text{Si}$ - Rechnungen
(vergleiche mit Kapitel 3.4.1)
 $\text{SPEZ}(3-8) = \text{WAEL}(2-10) = 0$

Komponentenzahl IANAT	2
Atomgewichte AG(1) AG(2)	28,086 50,942
Ordnungszahl IZ(1) IZ(2)	14 23
Schmelztemp. ST	1925,0
Schmelzwärme SW	80,0
Dichte (g/cm^3) im festen Zustand RHOF in der Schmelze RHOS	5,33 5,33
Wärmekapazität SPEZ(1) SPEZ(2)	0,1085 $3,915 \cdot 10^{-5}$
Wärmeleitfähigkeit WAEL(1) in der Schmelze FKS	0,08 0,04
Energiedeposition IAE A1 A2	100 0,29 3,2

Es wird nochmals darauf hingewiesen, daß in dieser Arbeit immer die Energiedichten angegeben werden, die eine Oberfläche aus Lötzinn absorbiert (siehe Abschnitt 2.5.3). Zum Vergleich ist in den Bildern 4.8 und 4.9 die von $V_3\text{Si}$ absorbierte Energiedichte $ED=2,6\text{J}/\text{cm}^2$ angegeben.

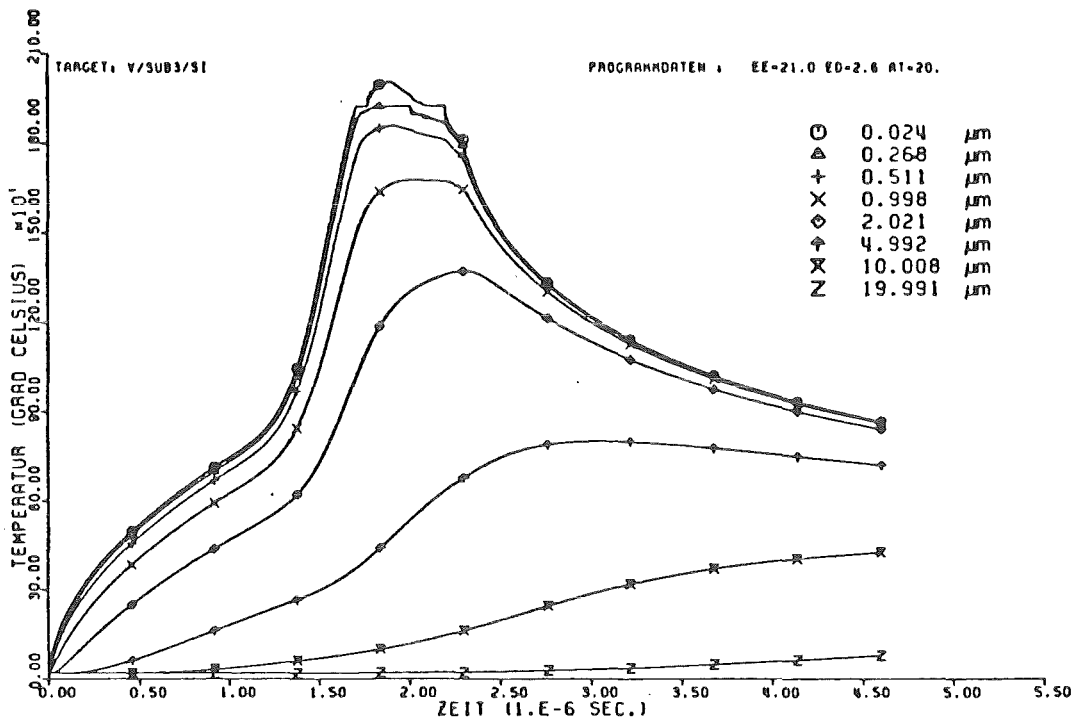


Bild 4.8 Berechnetes Temperatur- Zeit- Verhalten bei PEBA in verschiedenen Tiefen eines V_3Si - Festkörpers.

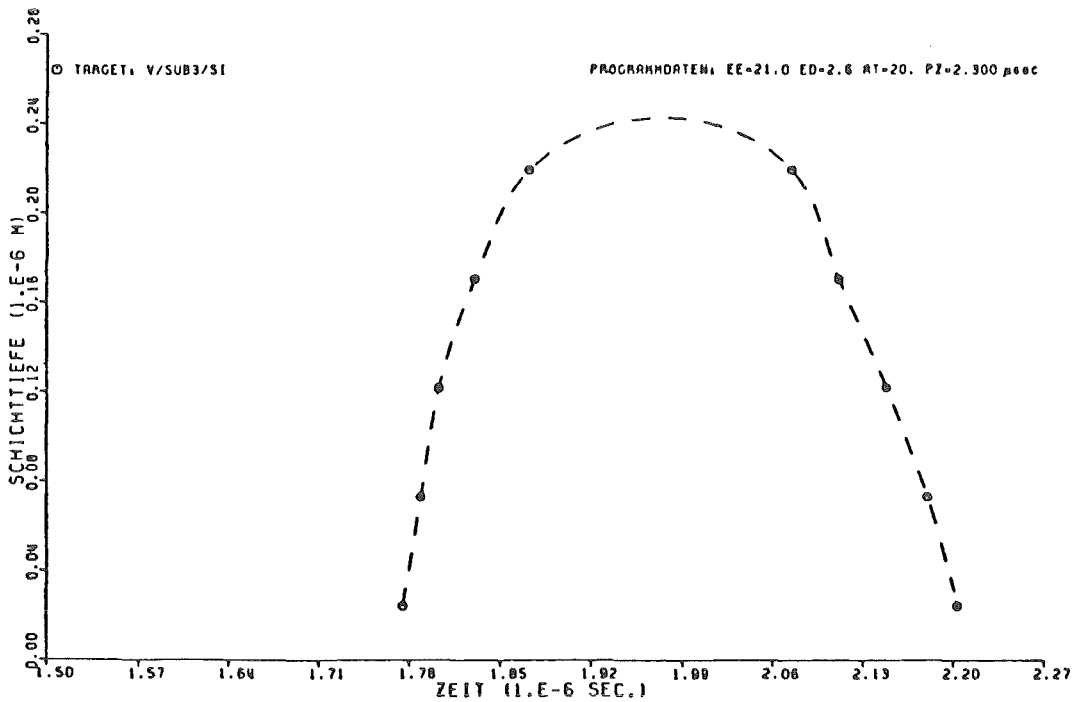


Bild 4.9 Bewegung der Schmelzfront in einer rechnerischen Simulation von PEBA für den Festkörper V_3Si

Nun soll noch etwas zu den Messungen des Diffusionsprofils von Wismut und den zugehörigen Diffusionsrechnungen gesagt werden. Wie am Ende von Kapitel 4.3.2 beschrieben war ergab sich eine gute Übereinstimmung des gerechneten Tiefenprofils von Wismut für eine Diffusionskonstante von $10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$ und einer Diffusionszeit von $0,5 \mu\text{s}$ mit dem gemessenen Tiefenprofil nach einer Bestrahlung von $1,9 \text{ J/cm}^2$ bei 21kV . Die Diffusionszeit stimmt gut mit der Schmelzdauer der Simulationsrechnungen (Tabelle 4.7, $2,2\text{J/cm}^2, 21\text{kV}$) überein. Die Wismut Atome wanderten bis in Tiefen von $3000\text{-}4000\text{\AA}$ des Substrats (Bild 4.5). Es ergibt sich eine größere Abweichung zwischen Experiment und Rechnung für die Schmelztiefe beim Elektronenbeschuß.

Tabelle 4.6 V_3Si - Schmelzschwelle

Ergebnisse der Simulationsrechnung		Experimentelle Ergebnisse
Erreichen der Schmelztemp.	Schmelzen bis 2000\AA	Schmelzschwelle aus Bi-Profilmessungen
$2,0 \text{ J/cm}^2$ 18 kV	$2,1\text{-}2,2 \text{ J/cm}^2$ 19-21 kV	$1,7\text{-}1,9 \text{ J/cm}^2$ 19-21 kV

Tabelle 4.7 zeigt Ergebnisse der Schmelze und Abkühlung aus den Simulationsrechnungen. T ist die Temperatur des Festkörpers vor PEBA, t_s ist die Dauer der Schmelze an der Oberfläche, T_{max} ist die größte Temperatur während der Erhitzung des Festkörpers und v_{Erst} ist die Erstarrungsgeschwindigkeit. Unter Erstarrungsgeschwindigkeit wird die Geschwindigkeit der Schmelzfront beim Festwerden bezeichnet. Es ergeben sich ähnliche Werte wie für Al_3Si und V (Tabelle 3.3). Die Abkühlrate von V_3Si ist etwa so groß wie die von V , entsprechend einer etwa gleich großen Schmelztemperatur. Die Temperatur der Schmelze ist für den Temperaturgradienten der Schichten und damit für die Abkühlgeschwindigkeit maßgeblich. Die Erstarrungsgeschwindigkeit von V_3Si ist auffällig geringer als bei den Substanzen V, Al und Si : bei Raumtemperatur des Substrats ergab sich der Wert von $1,5\text{m/s}$.

Tabelle 4.7 Simulationsergebnisse betreffend das Schmelzen von V_3Si durch PEBA

PEBA - Bestrahlung	AT	t_s	Schmelztiefe	T_{max}	Abkühlrate [$10^8 \cdot \frac{Grad}{sec}$]	v_{Erst} [m/sec]
2,2J/cm ² 21kV	20°C	0,43µs	2700Å	2010°C	4,2	1,5
2,2J/cm ² 21kV	600°C	1,34µs	11200Å	2540°C	4,2	2,0
1,6J/cm ² 17kV	600°C	0,56µs	3050Å	2020°C	3,1	1,1

Zur Untersuchung des Einflusses der Substrattemperatur auf die Schmelze und die Erstarrung wurden Rechnungen bei einer Substrattemperatur von 600°C durchgeführt. Tabelle 4.7 zeigt das Ergebnis solcher Rechnungen.

Bei zwei identischen Elektronenbestrahlungen einmal auf ein 20°C Substrat, einmal auf ein 600°C heißes Substrat ergibt sich: die Schmelzdauer und die Schmelztiefe des heißen Substrats sind erheblich größer als bei dem Substrat, das sich auf Raumtemperatur befindet. Die Differenz der maximalen Temperaturen ist geringer als die Differenz der Substrattemperaturen, weil bei geringeren Temperaturen die spezifische Wärme kleiner ist, was das Erwärmen weniger bremst. Die Abkühlrate von der maximalen Temperatur bis etwa 1100 Grad unter T_{max} ist für beide Substrattemperaturen etwa gleich. Die mittlere Erstarrungsgeschwindigkeit ist bei der heißen Probe (600°C) größer als bei der 20°C-Rechnung. Bei der 20°C-Rechnung erstarrt die Probe noch während der Pulszeit von 2,3µs Dauer. Der Probe wird also noch während der Erstarrung Wärme zugeführt, was die Erstarrung verlangsamt. Bei der 600°C-Rechnung beginnt die Erstarrung der Probe erst nach der Pulszeit. Deshalb erhält man hier eine größere Erstarrungsgeschwindigkeit. Es wurde deshalb noch eine Rechnung mit heißem Substrat durchgeführt, wobei der Elektronenschuß so gewählt wurde, daß sich etwa die gleiche Schmelzdauer wie bei der RT-Rechnung ergibt. Bei einer Elektronenbestrahlung mit 1,6 J/cm² bei 17kV und einer Substrattemperatur von 600°C erhält man etwas höhere Werte für Schmelztiefe, Schmelzdauer und T_{max} . Die Abkühlrate ist jetzt bei der heißen Probe geringer wegen des kleineren Temperaturgradienten. Außerdem

erreicht man jetzt eine kleinere Erstarrungsgeschwindigkeit. Bei dieser Rechnung erstarrt die Probe wie bei der 20°C - Rechnung während der Pulszeit.

Um eine kleine Erstarrungsgeschwindigkeit zu erhalten sollte man somit die Substrattemperatur erhöhen und die Energiedeposition des Elektronenstrahls vermindern.

Nicht zu vergessen ist, daß in den Tabellen 3.3 und 4.7 eine mittlere Erstarrungsgeschwindigkeit angegeben ist. In Bild 4.9 ist die Tiefe der Schmelze in Abhängigkeit von der Zeit dargestellt. Im Erstarrungsabschnitt, wenn die Schmelztiefe abnimmt, erkennt man, daß die Geschwindigkeit der Erstarrungsfront von kleinen Werten erst beschleunigend zunimmt und schließlich konstant wird. Auch bei der Rechnung für 600°C Substrattemperatur und $2,2 \text{ J/cm}^2$ beginnt die Erstarrung der Schmelze erst langsam. Gemittelt über die 11200\AA ergibt sich eine größere Geschwindigkeit der Erstarrung ($2,0\text{m/s}$) als wenn man nur über die Erstarrung der ersten 2000\AA mitteln würde ($1,5\text{m/s}$).

5 Zusammenfassung und Diskussion

Ziel der Arbeit war es Effekte des Kurzzeittemperns mit einem Elektronenpuls an einer Al₅ Verbindung zu untersuchen.

Dazu wurden V-Si Schichten durch Kathodenzerstäubung in einer Gleichspannungsglimmentladung hergestellt. Bei gleichzeitiger Zerstäubung des Halbleitermaterials Silizium und Vanadium treten Schwierigkeiten auf, weil der hohe Widerstand des Siliziumtargets eine Abführung der Ladungen behindert. Eine Aufladung der Siliziumoberfläche gegen das Kathodenpotential verringert die Anzahl und Energie der Ionen, die das Silizium treffen. Dies hat eine Verringerung der Zerstäubungsrate von Silizium zur Folge. Die Aufladung der Siliziumoberfläche konnte durch Anlegung hoher Spannungen bei Verwendung kleiner Ströme vermindert werden. Um kleine Ströme bei hohen Spannungen zu erhalten verwendet man geringe Gasdrücke (vergleiche Bild 2.1.2). Durch die Verwendung unterschiedlicher Gasdrücke und Spannungen gelang es Schichten mit einer V/Si- Zusammensetzung zwischen 1,2 und 11 herzustellen, wie Analysen mit Rutherford-Rückstreuung zeigten. Bei der Schichtdeposition auf heiße Substrate wurden Al₅ V₃Si Schichten mit hohem T_c produziert. Als Ausgangsmaterial für die Temperprozesse wurde nicht-kristallines Ausgangsmaterial gewünscht. Bei Verwendung von wassergekühlten Substraten gelang es röntgenamorphe Schichten mit einem T_c von weniger als 1°K (Meßgrenze) herzustellen.

Zum Vergleich mit dem Kurzzeittemperprozeß wurden eine amorphe und eine kristalline Probe einem isochronen Langzeittemperprozeß unterworfen. Nach Tempern der amorphen Probe bei Temperaturen von 600 bis 650°C wurden erstmals für diese Probe T_c - Werte oberhalb der Meßgrenze von 1°K beobachtet. Die höchsten T_c - Werte und das größte Restwiderstandsverhältnis für beide Proben wurden nach Tempern bei einer Temperatur von 1100°C erreicht. Bei Fortsetzung des Temperprozesses bei der anfangs amorphen Probe wurde bei Temperaturen oberhalb 1100°C das supraleitende Material zerstört: die Sprungbreite nahm zu, die Sprungtemperatur und das Restwiderstandsverhältnis nahmen ab. Nach Tempern bei einer Temperatur von 1250°C nahm die Übergangstemperatur auf einen Wert unter 2°K ab.

Nach Theorien der Transformation von amorphem zu kristallinem Material im festen Zustand der Probe steht zu Beginn die Bildung kristalliner Keime mit einer darauffolgenden Transformation des Probenvolumens zu einem kristallinen Festkörper mit Fehlordnung. Ein solcher Prozeß kann

für die Bildung nachweisbaren supraleitenden Materials nach Tempern bei Temperaturen von 600 bis 650°C verantwortlich gemacht werden. Durch das Tempern bei höheren Temperaturen wird die Fernordnung der Struktur verbessert. Die Ursache für die Zersetzung des supraleitenden A15 Materials durch Tempern bei Temperaturen oberhalb 1100°C ist die Aufnahme von Sauerstoff in die Schicht und die Verdrängung von Silizium. Durch den Langzeittemperprozeß wurde nachgewiesen, daß eine amorphe V-Si Schicht in eine A15 Struktur mit T_c -Werten von 15 bis 16°K und mit einem Restwiderstandsverhältnis von 8 transformiert werden kann.

Um bei der Elektronenpulsheizung der Proben die Kristallisation aus der festen Phase und aus der flüssigen Phase zu unterscheiden, wurde die Schmelzschwelle von V_3Si durch Messung der Verbreiterung eines implantierten Wismutprofils bestimmt. Nach Elektronenpulsheizung der Schichten mit einer Energiedichte von 1,7 bis 1,9J/cm², gemessen mit einem Sensor mit Lötzinnoberfläche, bei maximalen Elektronenenergien von 18 bis 21 keV wurde eine Verbreiterung des Wismutprofils im ganzen bestrahlten Bereich der Probe beobachtet: die Probe war geschmolzen und das Wismut diffundierte in der Schmelze. Bei Bestrahlungen mit einer Energiedichte von 1,5J/cm² absorbiertes Energiedichte im Sensor wurde das Schmelzen der Probe innerhalb von Bereichen mit 1 bis 2mm Durchmesser beobachtet. Dieses lokale Schmelzen wird auf Inhomogenitäten der Elektronenbestrahlung am Probenort zurückgeführt, die von den in Abschnitt 2.5.1-2 beschriebenen anodischen Brennflecken verursacht werden.

Nach Kurzzeittempern kristalliner V_3Si Schichten mit T_c -Werten oberhalb 1°K vor der Bestrahlung wurde eine Erhöhung der T_c -Werte schon in der festen Phase beobachtet. Ähnliche Ergebnisse wurden auch nach gepulster Laserbestrahlung auf kristalline V_3Si Schichten gefunden (Ref.49,54). Nach PEBA von amorphen Proben ergab sich ein anderes Resultat: die amorphen Schichten zeigten bei Bestrahlungen bis zu 1,7J/cm² keine Röntgenreflexe einer V-Si Struktur und es konnte kein T_c -Wert oberhalb 1°K gefunden werden, wenn die Proben nicht geschmolzen waren. Die kurze Temperzeit von einigen µs ist offenbar zu kurz um Keime der A15 Struktur oder einer anderen V-Si Struktur in der festen Phase zu bilden.

Bei Bestrahlung amorpher Proben mit energiereichen Elektronenpulsen, die die Oberfläche der V-Si Schichten aufschmelzen, kristallisiert die erstarrende Schmelze beim Abkühlen auf der amorphen festen Substanz auf. Bilden sich beim Erstarren der Schmelze A15 Keime, so könnte auf ihnen ein

epitaktisches Wachstum aus der Schmelze stattfinden. Auf dem Weg zur Oberfläche beschleunigt die Erstarrungsfront ihre Geschwindigkeit von kleineren Werten bis zu einem Endwert. Trotz der hohen Erstarrungsgeschwindigkeit von 1-2 m/s fand die Bildung kristallinen Materials aus der Schmelze statt.

Bei einem Teil der Schichten wurde schon unterhalb der Schmelzschwelle bei Energiedichten der Bestrahlung von 1,3 bis 1,7J/cm² optisch eine Oberflächenänderung durch lokales Schmelzen beobachtet. Dies wird auf Inhomogenitäten des Elektronenstrahls am Probenort zurückgeführt. Bei Bestrahlungsenergiedichten von 1,3 bis 1,5J/cm² wurde bereits ein Teil der Schichten supraleitend. Im Bereich von 1,5 bis 1,7J/cm² wurde eine starke Erhöhung der Übergangstemperatur zur Supraleitung beobachtet. Die Erhöhung der T_c - Werte der zuvor amorphen Schichten erfolgt fast nur im Bereich von 1,5 bis 2,0J/cm², also dort wo das Schmelzen der Proben einsetzt. Oberhalb der Schmelzschwelle der ganzen Probe steigt der T_c - Wert nur noch leicht an. Durch PEBA wurde der Onsetwert der Übergangstemperatur zur Supraleitung von anfangs weniger als 1,5°K auf bis zu 13°K erhöht. Die Übergangsbreiten lagen zwischen 3 und 8 Grad. Bei Röntgenbeugungsversuchen wurden Reflexe der A15 Struktur und des geläppten Saphirsubstrats gefunden. Dies bedeutet, daß die Keimbildung für die kristalline A15 Phase aus der Schmelze offenbar viel höher ist als die Keimbildungsrate für ungeordnete kristalline Mischungen. Trotz der kurzen Erstarrungszeit bildeten sich A15 Keime. Die mittlere Korngröße der A15 Kristallite wurde durch Röntgenintensitätsmessungen bestimmt. Sie überstieg nach PEBA nicht den Wert von 250Å. Der Volumenanteil von A15 Material wurde ebenfalls aus Messungen der Röntgenintensitäten bestimmt und wurde auf etwa 10% der Schicht geschätzt. Das restliche Probenvolumen blieb amorph. Andere V-Si Phasen als V₃Si wurden mit Röntgenbeugungsversuchen nicht nachgewiesen.

Die Zusammensetzung der bestrahlten Schichten betrug 2,4<V/Si<5,6, die Dicke 1-3µm. Die Zusammensetzung der Proben spielte keine Rolle für die T_c Werte nach der Bestrahlung. Für die Erreichung der großen Werte der Übergangsbreiten und der nicht allzu hohen T_c Werte ist es nicht erforderlich, daß die Stöchiometrie V/Si=3 in allen Schichtbereichen exakt erfüllt wird. Die durch Rutherford- Rückstreuung bestimmte Schichtzusammensetzung änderte sich durch Bestrahlung nicht. Dagegen nahm die Schichtdicke bei hohen Bestrahlungsenergiedichten durch Abplatzen der Schichten ab, obgleich die Proben auf geläppte Saphirsubstrate gesputtert waren. Die

minimale Änderung des Restwiderstandsverhältnisses, die große Übergangsbreite der resistiv gemessenen Übergangstemperatur und die erfolglosen Versuche der induktiven Messung der Übergangstemperatur zeigten, daß nur wenig Al₅ Material mit hoher Übergangstemperatur gebildet wird und daß noch viele Defekte bestehen. Der hohe Restwiderstand der Proben nach PEBA kann auf kleine Körner oder auf nicht voll ausgebildete Ordnung zurückgeführt werden.

In einer kürzlich erschienenen Arbeit wurden Proben aus aufeinandergestapelten V- und Si- Schichten mit einem gepulstem Rubidium Laser bestrahlt, der eine Pulsdauer von 15ns aufwies (Ref. 49). Es wurde eine T_c Erhöhung bis auf 9°K beobachtet. Diese niederen T_c Werte werden durch die schlechte Kopplung des Laserstrahls an V-Si Oberflächen und durch die Bildung von Defekten durch den Laserstrahl erklärt.

Die höheren T_c Werte nach PEBA können mit der besseren Kopplung des Elektronenstrahls an V-Si Schichten und der längeren Pulsdauer des Elektronenstrahls erklärt werden. Die längere Erhitzung wegen der größeren Pulsdauer bei PEBA verringert den Temperaturgradienten in der Schicht bevor die Abkühlung einsetzt. Dadurch erhält man bei PEBA geringere Werte für die Abkühlrate und die Erstarrungsgeschwindigkeit.

Bei weiteren Experimenten mit PEBA an Al₅ Verbindungen sollte deshalb versucht werden, die Erstarrungsgeschwindigkeit durch Verlängerung des Elektronenpulses oder durch gleichzeitiges Heizen des Substrats zu verringern. Bei hohen Substrattemperaturen ergibt sich allerdings die Schwierigkeit, daß zwischen der Kristallisation der Schichten durch den kurzen Elektronenpuls und der längeren Substrateheizung nicht unterschieden werden kann.

Die Lösung der Wärmediffusionsgleichung für PEBA sollte das Verständnis der Dynamik des Erhitzungsprozesses erweitern. Die Wärmediffusionsgleichung wurde mit Hilfe von zwei numerischen Methoden gelöst, wobei die Crank- Nicolson Methode wegen ihrer höheren Rechengenauigkeit bei kürzerer Rechenzeit der Vorwärtsmethode überlegen war.

Die Ergebnisse der zeitabhängigen Strom- und Spannungsmessungen während der Entladung wurden verwendet, um die Zeitabhängigkeit der Bestrahlungsintensität rechnerisch zu simulieren. Bei diesen Messungen ergab sich, daß bereits vor der Hauptentladung ein kleiner Elektronenstrom die Proben trifft. Wegen der hohen Energie dieser Elektronen kann die Aufheizung durch diesen kleinen Strom nicht vernachlässigt werden. Dieser

kleine Anfangsstrom wird verursacht von einer Glimmentladung, die durch Ionisation der Gasmoleküle vor der Kathode durch die aus der Hilfsentladung stammenden Photonen und Elektronen entsteht. Die Ionen der Hilfsentladung gelangen wegen ihrer geringeren Geschwindigkeit später als die Photonen und Elektronen in den Raum vor die Kathode und bewirken durch einen stärkeren Ionenbeschuß der Kathode, die Ausbildung von Kathodenbrennflecken und die Transformation der Glimmentladung zu einer Vakuum-Plasmaentladung mit hohen Stromstärken. Dies wurde in Kapitel 2.5.1-2 ausführlich beschrieben. Zur rechnerischen Simulation des Kurzzeittemperns wurde aus einer repräsentativen Spannungsmessung unter der Annahme einer gleichmäßigen Energieverteilung der Elektronen ein mittlerer Stromverlauf und ein mittlerer Intensitätsverlauf abgeschätzt (siehe Bild 2.5.2 d).

Tabelle 5 Experimentelle Ergebnisse und berechnete Größen für PEBA: t_s ist die Dauer der Schmelze an der Oberfläche, v_{Erst} ist die Erstarrungsgeschwindigkeit der Schmelze.

Target	Experiment.Ergeb.		Ergebnisse der Berechnungen					
	PEBA-schuß	Schmelz-tiefe [Å]	PEBA-Schuß	Schmelz-tiefe [Å]	t_s [µs]	T_{max} [°C]	Abkühl-rate [$10^8 \frac{\text{Grad}}{\text{s}}$]	$v_{\text{Erst.}}$ [m/s]
Al	1,7J/cm ² 18kV	<1000 (Ref.38)	1,5J/cm ² 18kV	3000	0,3	670	1,4	3,4
Al	2,3J/cm ² 22kV	>7000 (Ref.38)	2,3J/cm ² 22kV	30000	1,65	1000	2,0	3,8
Si	1,0J/cm ² 17kV	2500 (Ref.40)	1,4J/cm ² 16kV	2400	0,62	1440	3,1	2,0
V	2,5J/cm ² 19kV	≈3000 (Ref.39)	2,6J/cm ² 21kV	1900	0,3	1940	3,9	2,0
V ₃ Si	1,9J/cm ² 21kV	≈3500	2,2J/cm ² 22kV	2700	0,43	2010	4,2	1,5

Das Tiefenprofil der Energiedeposition der Elektronen für die Festkörper V und V₃Si mußte aus einem Vergleich mit bekannten Energiedeposi-

tionsprofilen anderer Festkörper bestimmt werden. Die Energiedepositionsprofile wurden durch eine Gaußfunktion angenähert und in Abhängigkeit von Ordnungszahl und Elektronendichte des Festkörpers bestimmt.

Bei der Lösung der Wärmediffusionsgleichung wurden die Abhängigkeiten der spezifischen Wärme, der Wärmeleitfähigkeit und der Dichte von Temperatur und Phase des Festkörpers berücksichtigt. Der Phasenübergang fest \leftrightarrow flüssig wurde rechnerisch simuliert unter Berücksichtigung der latenten Wärme des Festkörpers.

Tabelle 5 zeigt einen Vergleich von berechneten und experimentellen Ergebnissen für die Festkörper Al, Si, V und V_3Si . Alle zitierten Ergebnisse wurden mit dem hier beschriebenen Elektronenpulsgenerator durchgeführt. Die Schmelzschwelle konnte mit dem Rechenprogramm befriedigend bestimmt werden. Für die Schmelztiefe ergaben sich dagegen größere Unterschiede zwischen Experiment und Rechnung, die möglicherweise auf Inhomogenitäten in der Energiedichteverteilung zurückgeführt werden können. Die Schmelztiefe wurde experimentell durch Messung der Tiefe bestimmt, in die ein Implantat diffundiert war. Diese Diffusionstiefe kann kleiner als die Schmelztiefe sein. Durch Erstarren der Schmelze entsteht eine hügelige Oberflächenstruktur, die zu einer Überschätzung der Diffusionstiefe bei Messung mit Rutherford- Rückstreuung führt. Die Größe dieses Fehlers ist etwa durch die Höhendifferenz zwischen Tälern und Bergen gegeben und wird auf Grund von Oberflächenmessungen mit einem mechanischen Abtastinstrument auf einige 1000\AA geschätzt. Die Schmelzdauer, die Abkühlrate und die Erstarrungsgeschwindigkeit der verschiedenen Festkörper liegen im gleichen Größenordnungsbereich. Die unterschiedlichen Werte dieser drei Größen für die 4 Festkörper können durch unterschiedliche Werte der physikalischen Größen Schmelztemperatur, Schmelzwärme und Wärmeleitfähigkeit erklärt werden:

Literaturverzeichnis :

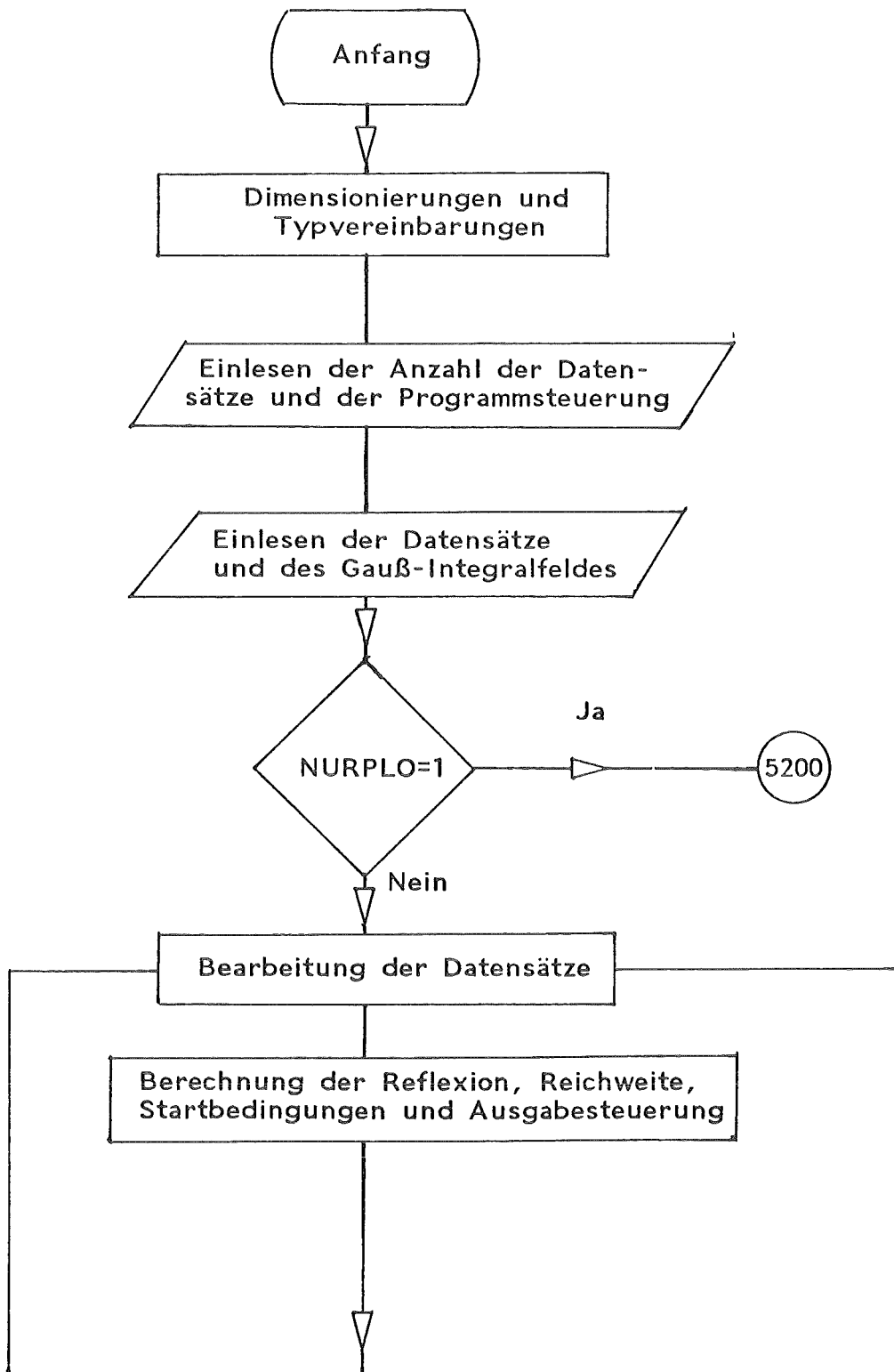
1. K.L.Chopra, Thin Film Phenomena, McGraw-Hill Book Company, New York (1969).
2. P.Sigmund, Phys.Rev., 184, 383 (1969)
3. N.Matsunami et al, Energy Dependence of Sputtering Yields of Monatomic Solids, /Nagoya University, Japan, IPPJ-AM-14 (1980)
4. G.Francis, in Handbuch der Physik, ed.: S.Flügge, Springer Verlag, Berlin 1956, Band XXII, S.53
5. International Tables for X-Ray Crystallography, Kynoch Press, Birmingham, Vol.I and III
6. M.M.Woolfson, An Introduction to X-Ray Crystallography, Cambridge, University Press (1970)
7. H.Neff, Grundlagen und Anwendungen der Röntgenfeinstrukturanalyse R.Oldenbourg, München (1962)
8. R.Feder, B.S.Berry, J.Appl.Cryst., 3(5), 372 (1970)
9. U.Schneider, Diplomarbeit, Universität Karlsruhe, 1981
10. G.Linker, Dissertation, Universität Karlsruhe, veröffentlicht als KFK Bericht, KFK 3146 (1981)
11. ASTM X-Ray Powder Data File, American Society for Testing and Materials
12. Ion Beam Handbook for Material Analysis, eds.: J.W.Mayer and E.Rimini, Academic Press, New York (1977)
13. The Stopping and Ranges of Ions in Matter, eds.: H.H.Andersen and J.F.Ziegler, Pergamon Press, New York 1977
14. Gmelins Handbuch der anorganischen Chemie, Verlag Chemie GmbH, Weinheim, Band 15, 35, 48
15. J.Geerk, F.Ratzel, Kernforschungszentrum Karlsruhe, KFK 2912 (1980)
J.Geerk and O.Meyer, Rad.Effects, 63, 133 (1982)
16. Greenwald, Kirkpatrick, Little, Minnuci, J.Appl.Phys., 50(2), 783 (1979)
17. M.v.Allmen, in: Laser and Electron Beam Processing of Materials, eds.: C.W.White and P.S.Peercy, Academic Press, New York 1980, S.6-19
18. H.E.Bishop, in Quantitative Scanning Electron Microscopy, eds.: D.B.Holt, M.D.Muir, P.R.Grant and I.M.Boswarva, Academic Press, London 1974, S.41-64
19. E.J.Sternglass, Phys.Rev., 95, 345 (1954)
20. T.Matsukawa, K.Murata, R.Shimizu, phys.stat.sol(b), 55, 371 (1973)
21. A.E.Grün, Z.Naturwiss., 12a, 89-95 (1957)
22. T.E.Everhart, P.H.Hoff, J.Appl.Phys, 42, 5837 (1971)

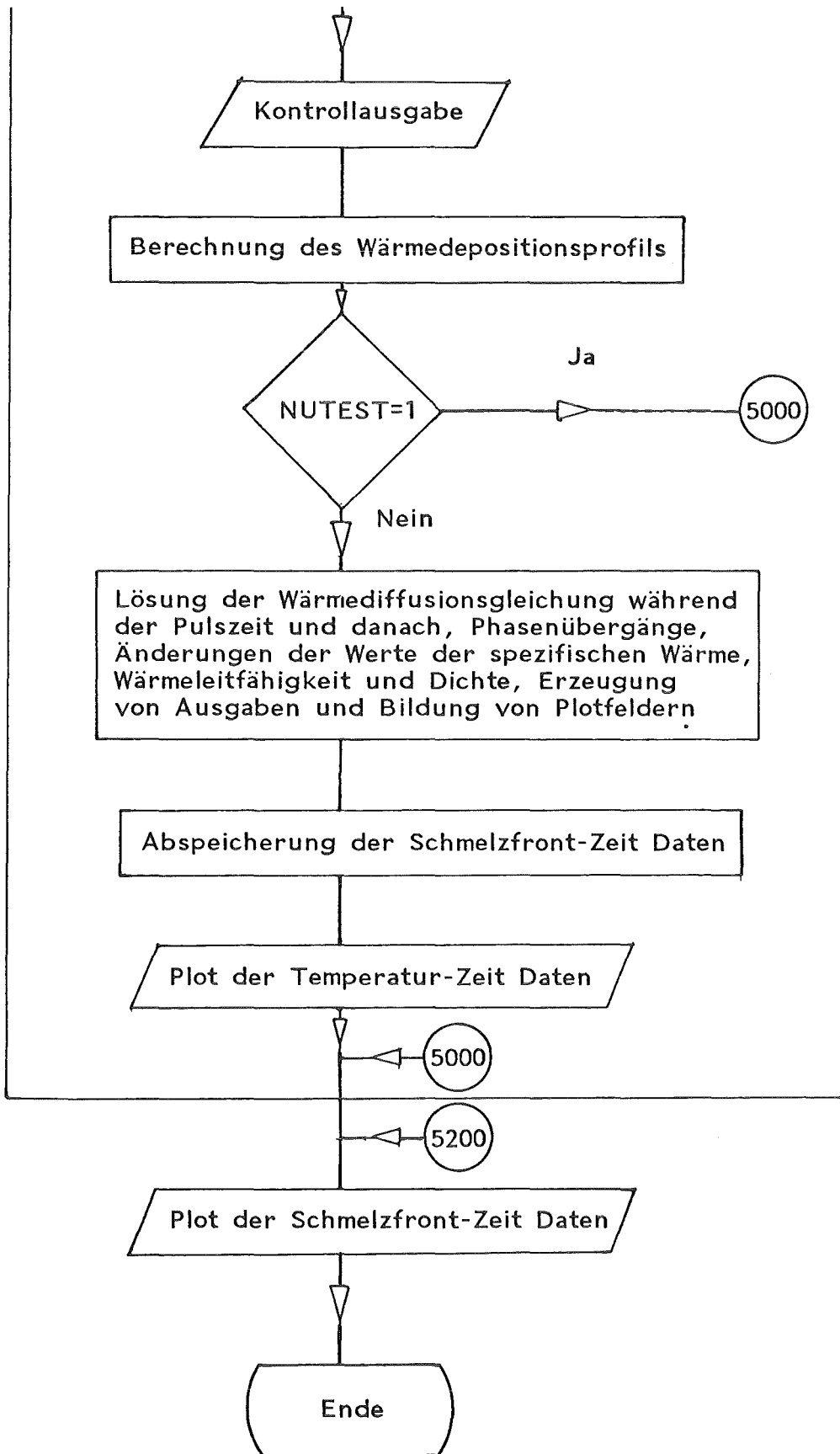
23. M.S.Chung et al, in: Electron Microscopy and Structure of Materials, eds.:G.Thomas,R.M.Fulrath,R.M.Fisher,California Press,Berkley, 1972,S.171
24. T.Matsukawa et al,J.Appl.Phys.,Vol 45,733(1974)
25. Tabellen zur angewandten Physik,ed.:M.v.Ardenne,VEB Verlag der Wissenschaften,Berlin 1962,Band I,S.159
26. Ch.Feldman,Phys.Rev.,117,455(1960)
27. J.Geerk,Private Mitteilungen
28. J.P.Biersack and L.G.Haggmark,Nucl.Instr. and Methods,174(1980)
29. Conduction of Heat in Solids,eds.:H.S.Carslaw and J.C.Jaeger, Clarendon Press,Oxford 1959,Chapter I
30. Tensors and Group Theorie,eds.:W.A.Wooster,Clarendon Press Oxford 1973,Chapter I.2
31. D.U.v. Rosenberg,Methods for the Numerical Solution of Partial Differential Equations,Elsevier,New York 1969,Chapter 1,2,5
32. Thermophysical Properties of Matter,eds.:Y.S.Touloukian,C.Y.Ho, Plenum Press,New York 1970,Band 1,2,4 und 5
33. R.Flückiger,in Superconductor Material Science,eds.:S.Foner and B.B.Schwartz,Plenum Press ,New York 1981,S.511
34. R.W.Powell,in Thermal Conductivity,eds.:C.Y.Ho and R.E.Taylor, Plenum Press,New York 1969,S.357
35. Landolt-Börnstein,ed.:K.Schäfer,Springer Verlag,Berlin 1968, Band II 5b
36. D.R.Stull,G.C.Sinke,Thermodynamic Properties of the Elements American Chemical Society,Washington 1956
37. Handbook of Thermophysical Properties of Solid Materials, eds.:A.Goldsmith,T.E.Waterman and H.J.Hirschhorn,Macmillan, New York 1961,Band 1
38. T.Hussain and G.Linker,Sol.State Com.,44,745(1982)
39. J.Lombard,O.Meyer,Rad.Effects,69,239(1983)
40. A.Turos,J.Geerk,Appl.Phys.,22,385(1980)
41. Physik,eds.:Gerthsen,Kneser,Vogel,Springer Verlag,Berlin 1977, Kapitel 5.3.2
42. L.F.Donna dalle Rose,A.Miotello,R.Brotto,Rad.Effects,1982

43. H.Günderodt, in Winterkolloquium: Eigenschaften von stark gestörten und amorphen Metallen, Schleching(Oberbayern), 19.2-23.2.73, veranstaltet von der Deutschen Forschungsgemeinschaft, Jülich, April 1973, S.323
44. M.Toulemonde, P.Siffert, Appl.Phys., 25, 139(1981)
45. P.G.Merli, Optik, 56, No 3, 205-222(1980)
46. Fundamentals of Physical Metallurgy, eds.: J.D.Verhoeven, John Wiley & Sons, New York 1969
47. C.W.White et al, J.Appl.Phys., 50(5), 3261(1979)
48. Diffusion in Solids, Liquids, Gases, ed.: W.Jost, Academic Press New York 1969
49. B.Stritzker, B.R.Appleton, C.W.White, Sol.State Com., 48, 2055(1977)
50. A.C.Greenwald, R.G.Little, Solid State Techn., 143, April 1979
51. M.P.Reece, Proceedings IEE, 110, 793(1963)
52. Bronstein-Semendjajew, Taschenbuch der Mathematik, Verlag Harri Deutsch, Zürich 1976, S.65-66
53. O.Meyer and G.Linker, J.Low Temp.Phys., 38, 747(1980)
54. O.Meyer, in Trends in Physics 1981, eds.: I.A.Dorobantu, Central Institute of Physics, Bukarest 1982, 821
55. J.M.Lafferty, Proceedings of the IEEE, 54, 23(1966)
56. J.L.Jorda and J.Muller, J.Less-Common Metals, 84, 39(1982)

Anhang

A1 Ablaufschema des Programms Peba





A2 Beschreibung der Ein- und Ausgabedaten des Programms

Erläuterungen zu den Eingabegrößen

Die Dateneingabe erfolgt in die Datenspeicher PEPAl-5.Data, die wie Liste A2.1 aufgebaut sind. Die Eingabedaten sind unter die Zeichen < ... > oder zwischen dem Rand und den Zeichen ...<- unterzubringen. Die Namen der Eingabegrößen sind angegeben. Diese werden nun in der Reihenfolge der Liste A1 erläutert.

Name	Format	Bedeutung
Steuerdaten des Programms		
NUTEST	I5	Siehe Ablaufschema
NOPLOT	I5	NOPLOT=1 unterdrückt das Plotten
NURPLO	I5	Siehe Ablaufschema
NOTEXT	I5	NOTEXT=1 unterdrückt Text in den Plots
PLFACT	F10.0	Veränderung der Plotgröße, PLFACT=1 entspricht DinA4
JAGITT	I5	...=1 zeichnet ein Gitter in die Plots
LAUF	I5	Anzahl der Datensätze, die eingelesen werden sollen
IGA	I5	...=1 : Ausdruck des Gauß-Integralfelds
Daten des Festkörpers (vergleiche Kapitel 3.4.1)		
TARGET	4A4	Name des Festkörpers
JAUSF	I5	...=1 liefert ausführliche Ausgaben, sonst 0 setzen
IANATF	I5	Anzahl der Festkörperkomponenten
AG(1-3)	F10.0	Atomgewichte der Komponenten
IZ(1-3)	I5	Ordnungszahl der Komponenten
STOE(1-3)	F10.0	Atomarer Anteil der Komponenten
FKSF	F10.0	Wärmeleitfähigkeit in der Schmelze [cal/(cm s Grad)]
RHOFF	F10.0	Dichte in der festen Phase [g/cm ³]
RHOSF	F10.0	Dichte in der flüssigen Phase [g/cm ³]
STF	F10.0	Schmelztemperatur [°C]
SWF	F10.0	Schmelzwärme [cal/g]
ATF	F10.0	Anfangstemperatur des Festkörpers [°C]
SPEZ(1-10)	E14.7	Feld zur Berechnung der spezifischen Wärme
WAEI(1-10)	E14.7	Feld zur Berechnung der Wärmeleitfähigkeit


```

0<- NUTEST
0<- NOPLO
0<- NURPLO
1<- NOTEXT
1. <-PLFACT
0<- JAGITT
1<- LAUF
0<- IGA
++ DATEN DES ERSTEN LAUFES ++++++
SILIZIUM <- TARGET(1-4,LAUF1)
0<- JAUSF(LAUF1)
1<- IANATF(LAUF1)
< AG(1,..)>< AG(2,..)>< AG(3,..)><
28.086
IZ(1>IZ(2>IZ(3><
14
<STOEA(1.)<STOEA(2.)<STOEA(3.)<
1.
<FKSF(.)><RHOFF(.)><RHOSF(.)><
0.03 2.33 2.52
<STF(..)><SWF(..)><ATF(..)><
1411. 400.0 20.
<SPEZ(1,LAUF1)><SPEZ(2,LAUF1)><SPEZ(3,LAUF1)><SPEZ(4,LAUF1)><SPEZ(5,LAUF1)>
+0.1818690E+00+0.4338330E-04+0.0 E+00+0.0 E+00+0.0 E+00
<SPEZ(6,LAUF1)><SPEZ(7,LAUF1)><SPEZ(8,LAUF1)><SPEZ(9,LAUF1)><SPEZ(10,..)>
+0.0 E+00+0.0 2.753870E+03+0.1766910E+03+0.0 E+00+0.0 E+00
<WAE(1,LAUF1)><WAE(2,LAUF1)><WAE(3,LAUF1)><WAE(4,LAUF1)><WAE(5,LAUF1)>
+0.6322440E-01+0.0 E+00+0.0 E+00+0.0 E+00+0.0 E+00
<WAE(6,LAUF1)><WAE(7,LAUF1)><WAE(8,LAUF1)><WAE(9,LAUF1)><WAE(10,..)>
+0.0 E+00+0.0 E+00+0.4001210E+11-0.3333310E+03+0.4000000E+01
<ED(LAUF1)><PZ(LAUF1)><EE(LAUF1)><EEMIN(..)>
2.0463847 +.2300E-05 17. 0.
<PZH(LAUF)><PZH(LAUF)><COF(LAUF)><
75. +.1650E-05 0.61
IRWF>IEIZP<A1(LAUF1)><A2(LAUF1)><IAE.<
3 4 0.3384 2.475 100
< AX(1,LAUF1)>< AX(2,LAUF1)>< AX(3,LAUF1)>< AX(4,LAUF1)>< AX(5,LAUF1)>
+0.6000000E+00+0.6210000E+01-0.1240000E+02+0.5690000E+01+0.0 E+00
< AX(6,LAUF1)>< AX(7,LAUF1)>< AX(8,LAUF1)>< AX(9,LAUF1)>< AX(10,..)>
+0.0 E+00+0.0 E+00+0.0 E+00+0.0 E+00+0.0 E+00
<IWDL<IOSR<IOSZ<
2 30 1000
500<- JZSPF(LAUF1)
VPZ(LAUF1)<TABKUE(.)<
2. 20.0
<WVOF(.)><WVSF(.)><
1. 1.
< >< > AUSH(1-2,LAUF1)
10. 2.
7<- IT2AB(LAUF1)
7<- IT2PL(LAUF1)
0<- IPPKTE(LAUF1)
< >< >< >< >< >< >< >> IIPKTE(1-10,LAUF1)
2 4 6 11 20 47 93 185
++ DATEN DES ZWEITEN LAUFES ++++++
VANADIUM <- TARGET(1-4,LAUF1)
0<- JAUSF(LAUF1)
1<- IANATF(LAUF1)
< AG(1,..)>< AG(2,..)>< AG(3,..)><

```

```

50.942
IZ(1>IZ(2>IZ(3><
23
<STOEA(1.)<STOEA(2.)<STOEA(3.)<
1.
<FKSF(.)><RHOFF(.)><RHOSF(.)><
0.06 6.1 6.1
<STF(..)><SWF(..)><ATF(..)><
1900. 82.4 20.
<SPEZ(1,LAUF1)><SPEZ(2,LAUF1)><SPEZ(3,LAUF1)><SPEZ(4,LAUF1)><SPEZ(5,LAUF1)>
+0.1042900E+00+0.4570000E-04+0.0 E+00+0.0 E+00+0.0 E+00
<SPEZ(6,LAUF1)><SPEZ(7,LAUF1)><SPEZ(8,LAUF1)><SPEZ(9,LAUF1)><SPEZ(10,..)>
+0.0 E+00+0.0 E+00+0.0 E+00+0.0 E+00+0.0 E+00
<WAE(1,LAUF1)><WAE(2,LAUF1)><WAE(3,LAUF1)><WAE(4,LAUF1)><WAE(5,LAUF1)>
+0.6510000E-01+0.2820000E-04+0.0 E+00+0.0 E+00+0.0 E+00
<WAE(6,LAUF1)><WAE(7,LAUF1)><WAE(8,LAUF1)><WAE(9,LAUF1)><WAE(10,..)>
+0.0 E+00+0.0 E+00+0.0 E+00+0.0 E+00+0.0 E+00
<ED(LAUF1)><PZ(LAUF1)><EE(LAUF1)><EEMIN(..)>
2.86494 +.2300E-05 16. 0.
<PZH(LAUF)><PZH(LAUF)><COF(LAUF)><
75. +.1650E-05 0.61
IRWF>IEIZP<A1(LAUF1)><A2(LAUF1)><IAE.<
3 4 0.28 3.4 100
< AX(1,LAUF1)>< AX(2,LAUF1)>< AX(3,LAUF1)>< AX(4,LAUF1)>< AX(5,LAUF1)>
+0.0 E-00+0.0 E+00+0.0 E+00+0.0 E+00+0.0 E+00
< AX(6,LAUF1)>< AX(7,LAUF1)>< AX(8,LAUF1)>< AX(9,LAUF1)>< AX(10,..)>
+0.0 E+00+0.0 E+00+0.0 E+00+0.0 E+00+0.0 E+00
<IWDL<IOSR<IOSZ<
2 35 1000
100<- JZSPF(LAUF1)
VPZ(LAUF1)<TABKUE(.)<
2. 20.0
<WVOF(.)><WVSF(.)><
1. 1.
< >< > AUSH(1-2,LAUF1)
10. 2.
16<- IT2AB(LAUF1)
16<- IT2PL(LAUF1)
10<- IPPKTE(LAUF1)
< >< >< >< >< >< >< >> IIPKTE(1-10,LAUF1)
2 5 8 10 18 35 68 166 332 662
++ DATEN DES DRITTEN LAUFES ++++++
.....
++ DATEN DES VIERTEN LAUFES ++++++
.....
++ DATEN DES ZEHNTEN LAUFES ++++++
.....
+++++ ENDE DES EINGABENSPEICHERS ++++++

```

Liste A2.1

Name	Format	Bedeutung
Daten des Elektronenstrahls		
ED	F10.0	Energiedichte des Elektronenstrahls in J/cm ²
PZ	E10.4	Pulsdauer in Sekunden
EE	F10.0	maximale Energie des Elektronenstrahls in keV
EEMIN	F10.0	entsprechend minimale Energie
PZH	F10.0	siehe Gleichung (3.23)
PZM	E10.4	wie oben
COF	F10.0	wie oben
IRWF	I5	siehe Kapitel 3.3.1
IEIZP	I5	siehe Kapitel 3.3.2
A1	F10.0	wie oben
A2	F10.0	wie oben
IAE	I5	wie oben
AX(1-10)	E14.7	wie oben
Daten für die numerische Lösung		
IWDL	I5	..=1 ergibt die Verwendung der Vorwärtsmethode ..=2 ergibt die Verwendung der Crank-Nicolson Methode
IOSR	I5	Die Reichweite wird in IOSR Intervalle geteilt
IOSZ	I5	Bis zu IOSZ Tiefenintervallen wird gerechnet
JZSPF	I5	Die Pulszeit wird in JZSPF Intervalle geteilt
VPZ	F10.0	Die Berechnungen werden bis VPZ Pulszeit fortgesetzt
TABKUE	F10.0	Wird die Temperatur TABKUE unterschritten, wird die Berechnung beendet
WVOF	F10.0	entspricht WVO in Kapitel 3.2
WVSF	F10.0	entspricht WVS in Kapitel 3.2
Daten der Ausgabesteuerung		
AUSH(1-2)	F10.0	Ausgabefrequenz pro Zeiteinheit der Pulsdauer PZ (1) während und (2) nach der Pulszeit

Name	Format	Bedeutung
		Schmelzfront - Zeit Plot
IT2AB	I5	Wenn die Variablen IT2AB oder IT2PL zwischen 16 und 35 liegen werden über den Kanal IT2AB
IT2PL	I5	Schmelzfront-Zeit Daten in den Datensatz T2PLOT*.DATA mit *=IT2AB-16 abgespeichert und über den Kanal IT2PL zum Plotten gelesen
		Temperatur - Zeit Plot
IPPKTE	I5	In den Temperatur-Zeit Plots werden die Temperaturen in IPPKTE Tiefen wiedergegeben
IIPKTE	I5	Die Tiefen IIPKTE(1-IPPKTE) werden gezeichnet

Erläuterung der Ausgabegrößen

Im Wesentlichen kommen in der Ausgabe die gleichen Größen wie in der Eingabe vor oder sie werden durch Text erläutert. Einige Abweichungen davon sind wie folgt:

Name	Bedeutung
FKAPAF	Temperaturleitwert bei der Temperatur AT in cm^2/s
FKAPAS	Temperaturleitwert in der flüssigen Phase bei der Temperatur ST in cm^2/s
ED1	Energiedichte des Strahls in J/cm^2
ED	absorbierte Energiedichte in J/cm^2
THALB2	Halbwertsbreite des Peaks des Elektronenpulses in Sekunden
JZSZ	Maximale Zahl der Zeitschritte JZSZ=JZSP VPZ
X0	Tiefe des Maximums der Gaußfunktion: X0=RW A1
RW	Reichweite in cm
X	Tiefenintervallbreite in cm: X=RW/IOSR
T	Zeitintervall in Sekunden : T=PZ/JZSP
Ortsfeld	Tiefe der Intervallzentren in cm
Q(i)	Wärmequelle in der Tiefe i [$\text{cal}/(\text{cm}^3 \text{T})$]
D(i)	Energiespeicherfeld bei Phasenumwandlung [cal/g]

Name	Bedeutung
FK(i)	Wärmeleitfähigkeit [cal/(cm s Grad)]
C(i)	Spezifische Wärme [cal/(Grad g)]
RHO(i)	Dichte [g/cm ³]
IZUS(i)	Phasenangabe: 1=fest, 2=flüssig, 3 in Phasenumwandlung von 2->1, 4 in Phasenumwandlung 1->2
FAKZ	siehe Kapitel 3.3.3

```

C *****
C * 06.07.82 *
C * P E B A *
C * PROGRAMM ZUR BERECHNUNG DES *
C * TEMPERATUR - ZEIT - VERHALTENS IN *
C * VERSCHIEDENEN TARGET - TIEFEN BEI *
C * GEPULSTER ELEKTRONENBESTRAHLUNG *
C * IN ABHAENIGKEIT VON VERSCHIE - *
C * DENEN PARAMETERN *
C * TH. KLEISER *
C *****
COMMON DATE, TIME, EE(10), ED(10), PZ(10), X, T, SPEZ(10, 10), DMAX,
1U(1002, 2), DELTAT(1002), Q(1002), RHO(1002), C(1002), FK(1002),
2WAEL(10, 10), D(1002), FKS, RHOF, RHOS, WVO, WVS, AT, SW, ST, TARGET(4, 10),
3IOSZ, IAUMAX, JSCHR, IT2AB(10), LAUF1, IZUS(1002), IFELD, IORTSO
DIMENSION DEPTH(1002), DAT(232), AG(3, 10), IZ(3, 10), STOE(A(3, 10),
1JAUSF(10), IANATF(10), AX(10, 10),
2EEMIN(10), IOSR(10), IOSZF(10), JZSPF(10),
3VPZ(10), TABKUE(10), FKSF(10), RHOFF(10), PZH(10), PZM(10), COF(10),
4RHOSF(10), STF(10), SWF(10), ATF(10), IRWF(10), IEIZP(10), IWDL(10),
5A1(10), A2(10), IAE(10), WVOF(10), WVSF(10),
6YFELD(1102, 10), XFELD(1102), STERN(33),
7IPPKTF(10), IIPKTE(10, 10), IT2PL(10), AUSH(2, 10)
DOUBLE PRECISION QS, DQ, TIME, DATE
DATA STERN/33*'*'*'*' /
IFELD=1002
C -----
C E I N G A B E N
C -----
READ(5, 8040)NUTEST
READ(5, 8040)NO PLOT
READ(5, 8040)NURPLO
READ(5, 8040)NOTEXT
READ(5, 8250)PLFACT
READ(5, 8040)JAGITT
IF(NO PLOT.EQ.1)GO TO 30
C
C I N I T I A L I S I E R U N G D E S P L O T T E R S
C
CALL PLOTS(0, 0, 0)
PLFACT=PLFACT*0.9
IF(PLFACT.GT.23./9.2)PLFACT=23./9.2
IPEN=1
IF(PLFACT.GT.0.50)IPEN=3
IF(PLFACT.GT.1.0)IPEN=5
C
C 30 READ(5, 8040)LAUF
IF(LAUF.GT.10)LAUF=10
READ(5, 8040)IGA
C -----
C E I N G A B E - S C H L E I F E
C -----
DO 300 LAUF=1, LAUF
READ(5, 8045)DUMMY
READ(5, 8000)(TARGET(I, LAUF1), I=1, 4)
READ(5, 8040)JAUSF(LAUF1)

```

```

DO 80 I=2, 3
AG(I, LAUF1)=0.0
IZ(I, LAUF1)=0.0
STOE(A(I, LAUF1)=0.0
80 CONTINUE
C
C E I N G A B E V O N M A T E R I A L D A T E N
C
READ(5, 8040)IANATF(LAUF1)
IANAT=IANATF(LAUF1)
READ(5, 8045)DUMMY
READ(5, 8140)(AG(I, LAUF1), I=1, IANAT)
READ(5, 8045)DUMMY
READ(5, 8180)(IZ(I, LAUF1), I=1, IANAT)
READ(5, 8045)DUMMY
READ(5, 8140)(STOE(A(I, LAUF1), I=1, IANAT)
READ(5, 8045)DUMMY
READ(5, 8140)FKSF(LAUF1), RHOF(LAUF1), RHOSF(LAUF1)
READ(5, 8045)DUMMY
READ(5, 8140)STF(LAUF1), SWF(LAUF1), ATF(LAUF1)
READ(5, 8045)DUMMY
READ(5, 8170)(SPEZ(I, LAUF1), I=1, 5)
READ(5, 8045)DUMMY
READ(5, 8170)(SPEZ(I, LAUF1), I=6, 10)
READ(5, 8045)DUMMY
READ(5, 8170)(WAEL(I, LAUF1), I=1, 5)
READ(5, 8045)DUMMY
READ(5, 8170)(WAEL(I, LAUF1), I=6, 10)
C
C E I N G A B E V O N E L E K T R O N E N S T R A H L - D A T E N
C
READ(5, 8045)DUMMY
READ(5, 8150)ED(LAUF1), PZ(LAUF1), EE(LAUF1), EEMIN(LAUF1)
READ(5, 8045)DUMMY
READ(5, 8150)PZH(LAUF1), PZM(LAUF1), COF(LAUF1)
READ(5, 8045)DUMMY
READ(5, 8160)IRWF(LAUF1), IEIZP(LAUF1), A1(LAUF1), A2(LAUF1),
1IAE(LAUF1)
READ(5, 8045)DUMMY
READ(5, 8170)(AX(I, LAUF1), I=1, 5)
READ(5, 8045)DUMMY
READ(5, 8170)(AX(I, LAUF1), I=6, 10)
C
C E I N G A B E V O N S C H R I T T P A R A M E T E R N
C
READ(5, 8045)DUMMY
READ(5, 8180)IWDL(LAUF1), IOSR(LAUF1), IOSZF(LAUF1)
READ(5, 8040)JZSPF(LAUF1)
READ(5, 8045)DUMMY
READ(5, 8205)VPZ(LAUF1), TABKUE(LAUF1)
C
C E I N G A B E D E R W A E R M E V E R L U S T E
C
READ(5, 8045)DUMMY
READ(5, 8205)WVOF(LAUF1), WVSF(LAUF1)
C
C P L O T - E I N G A B E N U N D A U S G A B E H A U F I G K E I T
C

```

A3 Programmliste

```

READ(5,8045)DUMMY
READ(5,8205)(AUSH(I,LAUF1),I=1,2)
READ(5,8040)IT2AB(LAUF1)
READ(5,8040)IT2PL(LAUF1)
READ(5,8040)IPPKTE
READ(5,8045)DUMMY
READ(5,8230)(IPPKTE(I,LAUF1),I=1,IPPKTE)
IPPKTF(LAUF1)=IPPKTE
300 CONTINUE
-----
C   E N D E   D E R   E I N G A B E N
C   -----
      IF(NURPLO.EQ.1)GO TO 5200
-----
C   GAUSS - INTEGRAL - FELD   EINLESEN
C   -----
350 READ(15,8251)(DAT(I),I=1,232)
      IF(IGA.NE.1)GO TO 400
      WRITE(6,9100) (DAT(I),I=1,232)
C
C *****
C *
C *   L A U F   -   S C H L E I F E   D E S   P R O G R A M M E S
C *
C *****
C
400 DO 5000 LAUF1=1,LAUF
      CALL DATUM(DATE,TIME)
      FKS=FKSF(LAUF1)
      RHOF=RHOFF(LAUF1)
      RHOS=RHOSF(LAUF1)
      ST=STF(LAUF1)
      SW=SWF(LAUF1)
      AT=ATF(LAUF1)
      ED1=ED(LAUF1)
      IANAT=IANATF(LAUF1)
      IOSZ=IOSZF(LAUF1)
      IPPKTE=IPPKTF(LAUF1)
      JZSP=JZSPF(LAUF1)
      WVO=WVOF(LAUF1)
      WVS=WVSF(LAUF1)
      TMAX=0.
      IH=IOSR(LAUF1)+2
      IF((IH-1).GE.IOSZ)IH=IOSZ-1
C
-----
C
C   B E R E C H N U N G E N
C   -----
      IOSZ=IOSZ+2
      IF(IOSZ.GT.IFELD)IOSZ=IFELD
      IF(IOSR(LAUF1).GT.IOSZ)IOSR(LAUF1)=IOSZ
      CALL SPEZWA(AT,CC)
      CALL WAELEI(AT,1,1,FFK)
      FKAPAF=FFK/(CC*RHOF)
      CALL SPEZWA(ST,CC)
      FKAPAS=FKS/(CC*RHOS)
      Z=0.0

```

```

AGM=0.0
SUMST=0.
I=0
DO 500 I=1,IANAT
  Z=STOEA(I,LAUF1)*IZ(I,LAUF1)+Z
  AGM=STOEA(I,LAUF1)*AG(I,LAUF1)+AGM
  SUMST=SUMST+STOEA(I,LAUF1)
500 CONTINUE
  AGM=AGM/SUMST
  Z=Z/SUMST
C
C   R E F L E K T I O N   A B Z I E H E N
C
  ETA=-0.21-5.41E-3*Z+1.28E-1*SQRT(Z)
  STERNG=0.45+2.E-3*Z
  ED(LAUF1)=ED(LAUF1)*(1.-ETA*STERNG)
C
C   ORTS-ZEIT-GITTER PARAMETER UND KONSTANTEN
C
  CALL REIWEI(Z,EE(LAUF1),RHOF,AGM,IRWF(LAUF1),RW)
  X=RW/FLOAT(IOSR(LAUF1))
  X0=A1(LAUF1)*RW
  IF(IWDL(LAUF1)-1)520,530,540
520 WRITE(6,9150)
      GO TO 5000
530 T1=(1./6.)*X*X/FKAPAF
      T=(1./6.)*X*X/FKAPAS
      IF(T1.GT.T)T1=T
      T=PZ(LAUF1)/FLOAT(JZSP)
      IF(T.GT.T1)T=T1
      JZSP=IFIX(PZ(LAUF1)/T+.5)
      GO TO 550
540 T=PZ(LAUF1)/FLOAT(JZSP)
550 JZSZ=IFIX(PZ(LAUF1)*VPZ(LAUF1)/T+.5)
      ZSP=FLOAT(JZSP)
      PI=ARCOS(-1.0)
      FAK2=2.*PI/PZ(LAUF1)
      FAK0=2./T
      RINT1=0.
      IF(IEIZP(LAUF1).NE.4)GO TO 1290
C
C   N O R M I E R U N G   F U E R   I E I Z P ( L A U F 1 )   =   4
C
  TA=SQRT(2.*PZH(LAUF1))*PZM(LAUF1)/PZ(LAUF1)
  PTA=ABS(TA)
  CALL RUND(PTA,I1TA,I2TA,GTA)
  PHITA=DAT(I1TA)+GTA*(DAT(I2TA)-DAT(I1TA))
  TB=SQRT(2.*PZH(LAUF1))*(PZ(LAUF1)-PZM(LAUF1))/PZ(LAUF1)
  PTB=ABS(TB)
  CALL RUND(PTB,I1TB,I2TB,GTB)
  PHITB=DAT(I1TB)+GTB*(DAT(I2TB)-DAT(I1TB))
  C0=COF(LAUF1)/T
  C1=PZ(LAUF1)/2.*SQRT(PI/PZH(LAUF1))*(PHITA+PHITB)
  C1=(ZSP-C0*PZ(LAUF1))/C1
  C2=C1*PZ(LAUF1)/2.*SQRT(PI/PZH(LAUF1))
  THALB2=(C1-C0)/(2.*C1)
  THALB2=(-1.)/PZH(LAUF1)*ALOG(THALB2)
  THALB2=2.*PZ(LAUF1)*SQRT(THALB2)

```

```

      PHIT2=PHITA
C
C   O R T S F E L D
C
1290 I=0
1300 I=I+1
      DEPTH(I)=FLOAT(I-1)*X-X/2.
      IF(I.LT.IOSZ)GO TO 1300
C
C   F E L D E R   A U F   S T A R T W E R T E   O D E R   N U L L   S E T Z E N
C
      DO 1450 I=1,IOSZ
      U(I,1)=AT
      Q(I)=0.0
      DELTAT(I)=0.
      D(I)=0.
1450 CONTINUE
      IF(ST-AT)1460,1470,1470
1460 DO 1465 I=1,IOSZ
      RHO(I)=RHOS
      IZUS(I)=2
1465 CONTINUE
      IAUMAX=IOSZ
      GO TO 1490
1470 DO 1480 I=1,IOSZ
      IZUS(I)=1
      RHO(I)=RHOF
1480 CONTINUE
      IAUMAX=2
1490 CALL WAELEI(AT,IZUS(I),IZUS(I),FFK)
      CALL SPEZWA(AT,CC)
      DO 1500 I=1,IOSZ
      FK(I)=FFK
      C(I)=CC
1500 CONTINUE
C
C   W E I T E R E   B E R E C H N U N G E N
C
      JAUS=0
      ZEIT=0.0
      JSCHR=0
      IF(IPPKTE.LT.1)GO TO 1530
      DO 1510 I1=1,1102
      XFELD(I1)=0.
      DO 1510 I2=1,10
      YFELD(I1,I2)=0.
1510 CONTINUE
      IPSCHR=0
      ISTEP=0
1530 QS=0.
      FAK1=T/(X*X)
C -----
C
C   K O N T R O L L - A U S G A B E   D E R   P R O G R A M M D A T E N
C
      WRITE(6,9300)(STERN(I),I=1,33)
      WRITE(6,9305)(STERN(I),I=1,33)

```

```

      WRITE(6,9307)
      WRITE(6,9310)DATE,TIME
      WRITE(6,9307)
      WRITE(6,9350)(TARGET(I,LAUF1),I=1,4)
      WRITE(6,9307)
      WRITE(6,9360)(I,AG(I,LAUF1),I,IZ(I,LAUF1),I,STOEA(I,LAUF1),I=1,
      IANAT)
      WRITE(6,9307)
      WRITE(6,9370)IANAT,Z,AGM
      WRITE(6,9307)
      WRITE(6,9380)FKS,RHOF,RHOS,FKAPAF,FKAPAS
      WRITE(6,9307)
      WRITE(6,9398)(SPEZ(I,LAUF1),I=1,10)
      WRITE(6,9307)
      WRITE(6,9399)(WAEI(I,LAUF1),I=1,10)
      WRITE(6,9307)
      WRITE(6,9385)ST,SW,AT
      WRITE(6,9307)
      WRITE(6,9390)ED1,ED(LAUF1),PZ(LAUF1),EE(LAUF1),EEMIN(LAUF1),
      ITHALB2
      WRITE(6,9307)
      WRITE(6,9500)COF(LAUF1),CO,C1,C2,PZM(LAUF1),PZH(LAUF1)
      WRITE(6,9307)
      WRITE(6,9395)A1(LAUF1),A2(LAUF1),X0,RW,X,T
      WRITE(6,9307)
      WRITE(6,9397)(AX(I,LAUF1),I=1,10)
      WRITE(6,9307)
      WRITE(6,9400)IOSR(LAUF1),IOSZ,JZSP,JZSZ,VPZ(LAUF1),
      ITABKUE(LAUF1),WVO,WVS
      WRITE(6,9307)
      WRITE(6,9410)IRWF(LAUF1),IEIZP(LAUF1),
      IIAE(LAUF1),IWDL(LAUF1)
      WRITE(6,9307)
      WRITE(6,9420)(AUSH(I,LAUF1),I=1,2),IT2AB(LAUF1),IT2PL(LAUF1)
      WRITE(6,9307)
      WRITE(6,9425)IPPKTE
      WRITE(6,9306)
      WRITE(6,9430)(IIPKTE(I,LAUF1),I=1,IPPKTE)
      WRITE(6,9307)
      WRITE(6,9435)JAGITT,PLFACT,NOPLT,NURPLO,NUTEST,NOTEXT
      WRITE(6,9307)
      WRITE(6,9320)(DEPTH(I),I=1,IOSZ)
      WRITE(6,9308)
      WRITE(6,9306)
      WRITE(6,9305)(STERN(I),I=1,33)
      WRITE(6,9440)(STERN(I),I=1,33)
C -----
C
C   B E R E C H N U N G E N   D E R   Q ( I )   :   ( C A L / C M ** 3 )
C -----
C
      CALL WAEDEP(A1,A2,DAT,EEMIN,Z,AGM,ZSP,SUMQI,
      IAX,IAE(LAUF1),IRWF(LAUF1))
      JSCHR=0
      IF(NUTEST.NE.1)GO TO 1620
      SUMQT=0.
      ED1=ED1*IOSR(LAUF1)
      DO 1610 I=1,IOSZ

```

```

Q(I)=Q(I)*ED1/SUMQI
SUMQT=SUMQT+Q(I)
1610 CONTINUE
IOSRH=IOSR(LAUF1)+3
IF(IOSRH.GT.IFELD)IOSRH=IFELD
WRITE(6,9720)(Q(I),I=1,IOSRH)
WRITE(6,9725)SUMQT
GO TO 5000
-----
C
C   AUSGABE   DER   STARTWERTE
C
C -----
1620 CALL FOUT(JAUS,ZEIT,IOSR(LAUF1),0,1)
JAUSKO=0
JAUSH1=IFIX(AUSH(1,LAUF1))+1
JAUS=0
-----
C
C   B E R E C H N U N G E N   W A E H R E N D   D E R   P U L S Z E I T
C
C -----
IOSRH=IOSR(LAUF1)+2
IF(IOSRH.GT.IFELD)IOSRH=IFELD
WRITE(6,9300)(STERN(I),I=1,33)
WRITE(6,9305)(STERN(I),I=1,33)
DO 2100 J=1,JZSP
FJ=FLOAT(J)
JSCHR=JSCHR+1
C
C   Z E I T A B H A E N G I G K E I T   D E R   I N T E N S I T A E T
C
IF(IEIZP(LAUF1).LT.3)GO TO 1930
IF(IEIZP(LAUF1).EQ.3)GO TO 1925
C
C   I E I Z P ( L A U F 1 )   =   4
PHIT1=PHIT2
T2=SQRT(2.*PZH(LAUF1))*(FJ*T-PZM(LAUF1))/PZ(LAUF1)
PT2=ABS(T2)
CALL RUND(PT2,I1T2,I2T2,GT2)
PHIT2=DAT(I1T2)+GT2*(DAT(I2T2)-DAT(I1T2))
IF(FJ*T.LE.PZH(LAUF1))GO TO 1720
IF((FJ-1.)*T.LE.PZM(LAUF1))GO TO 1710
IF(FJ*T.GT.PZ(LAUF1))GO TO 1705
FAKZ=C0*T+C2*(PHIT2-PHIT1)
GO TO 1940
1705 FAKZ=C0*T+C2*(PHITB-PHIT1)
GO TO 1940
1710 IF(FJ*T.GT.PZ(LAUF1))GO TO 1715
FAKZ=C0*T+C2*(PHIT2+PHIT1)
GO TO 1940
1715 FAKZ=C0*T+C2*(PHITB+PHIT1)
GO TO 1940
1720 FAKZ=C0*T+C2*(PHIT1-PHIT2)
GO TO 1940
C
C   I E I Z P ( L A U F 1 )   =   3
1925 RINT2=FAKO*(FJ*T/2.-1.)/(2.*FAK2)*SIN(FAK2*T*FJ)

```

```

FAKZ=RINT2-RINT1
RINT1=RINT2
GO TO 1940
C
C   I E I Z P ( L A U F 1 )   =   1   O D E R   2
1930 FAKZ=2.*(1.-(FJ-.5)/ZSP)
IF(IEIZP(LAUF1).EQ.1)FAKZ=1.
1940 DO 1950 I=2,IOSRH
DELTAT(I)=FAKZ*Q(I)/(C(I)*RHO(I))
QS=QS+FAKZ*Q(I)
1950 CONTINUE
C
C   W A E R M E D I F F U S I O N   W A E H R E N D   P Z
C
2000 IF(IWDL(LAUF1)-1)2001,2010,2020
2001 WRITE(6,9770)
STOP
2010 CALL WAEDIF(FAK1)
IF(J-JAUSKO)2080,2050,2050
2020 IKONV=0
CALL CRNI(FAKZ,IKONV)
IF(IKONV.EQ.1)GO TO 5000
IF(J.LT.JAUSKO)GO TO 2080
2050 JAUS=JAUS+1
JAUSKO=IFIX(PZ(LAUF1)*FLOAT(JAUS)/(T*AUSH(1,LAUF1))+.5)
ZEIT=FJ*T
WRITE(6,9550)JAUS,FAKZ
CALL FOUT(JAUS,ZEIT,IOSR(LAUF1),0,JAUSF(LAUF1))
2080 IF(IPPKTE.LT.1)GO TO 2090
IF(JSCHR.LT.IPSCHR)GO TO 2090
ISTEP=ISTEP+1
CALL PLOFEL(U,JSCHR,T,XFELD,YFELD,IPPKTE,IIPKTE,ISTEP,
1LAUF1)
IPPSCHR=IPPSCHR+IFIX(JZSZ/1100.+1.)
2090 DO 2095 I=2,IH
IF(TMAX.GE.U(I,1))GO TO 2095
TMAX=U(I,1)
ITMAX=I
JTMAX=J
2095 CONTINUE
2100 CONTINUE
IF(JAUS.EQ.JAUSH1)GO TO 2110
JAUS=JAUS+1
ZEIT=FJ*T
CALL FOUT(JAUS,ZEIT,IOSR(LAUF1),0,1)
-----
C
C   W A R M E D I F F U S I O N   N A C H   A U F H E I Z E N
C
C -----
2110 WRITE(6,9811)
JAUSKO=0
FAKZ=0.
DO 2120 I=1,IOSZ
DELTAT(I)=0.0
2120 CONTINUE
JZSPN=JZSP+1
DO 3000 J=JZSPN,JZSZ

```



```

9360 FORMAT(1H+,10X,'AG(' ,I1,' )=' ,F9.4,5X,'IZ(' ,I1,' )=' ,I3,5X,
1'STOEA(' ,I1,' )=' ,F6.3,2(/1H , '***' ,128X,'**'/1H+,10X,'AG(' ,I1,' )=' ,
2F9.4,5X,'IZ(' ,I1,' )=' ,I3,5X,'STOEA(' ,I1,' )=' ,F6.3))
9370 FORMAT(1H+,10X,'IANAT=' ,I3,5X,'Z=' ,F10.5,5X,'AGM=' ,F7.3)
9380 FORMAT(1H+,10X,'FKS=' ,E10.4,2X,'RHOF=' ,F7.4,2X,
1'RHOS=' ,F7.4,2X,'FKAPAF=' ,E13.6,2X,'FKAPAS=' ,E13.6)
9385 FORMAT(1H+,10X,'ST=' ,F7.2,5X,'SW=' ,F7.2,5X,'AT=' ,F7.2)
9390 FORMAT(1H+,10X,'ED1=' ,F7.4,2X,'ED=' ,F7.4,2X,'PZ=' ,E10.4,2X,
1'EE=' ,F6.2,2X,'EEMIN=' ,F6.2,10X,'THALB2=' ,E12.6)
9395 FORMAT(1H+,10X,'A1=' ,F6.4,2X,'A2=' ,E9.3,2X,'X0=' ,E12.6,2X,
2'RW=' ,E12.6,2X,'X=' ,E12.6,8X,'T=' ,E10.4)
9397 FORMAT(1H+,10X,'AX(1-10,LAUF1)=' ,2(/1X,'***' ,8X,
15(E12.6,2X),50X,'**'))
9398 FORMAT(1H+,10X,'SPEZ(1-10,LAUF1)=' ,2(/1X,'***' ,8X,
15(E12.6,2X),50X,'**'))
9399 FORMAT(1H+,10X,'WAEI(1-10,LAUF1)=' ,2(/1X,'***' ,8X,
15(E12.6,2X),50X,'**'))
9400 FORMAT(1H+,10X,'IOSR=' ,I3,2X,'IOSZ=' ,I4,2X,'JZSP=' ,I5,2X,
1'JZSZ=' ,I6,2X,'VPZ=' ,F5.2,2X,'TABKUE=' ,F8.3,
210X,'WVO=' ,F4.2,5X,'WVS=' ,F5.3)
9410 FORMAT(1H+,10X,'IRWF=' ,I2,2X,'IEIZP=' ,I2,2X,
1'IAE=' ,I3,2X,'IWDL=' ,I2)
9420 FORMAT(1H+,10X,'AUSH(1-2,LAUF1)=' ,2(E10.4,2X),'IT2AB=' ,I2,2X,
1'IT2PL=' ,I2)
9425 FORMAT(1H+,10X,'IPPKTE=' ,I2,10X,
2'IIPKTE(1-IPPKTE,LAUF1)=' )
9430 FORMAT(1H+,10X,10(1X,I3,3X))
9435 FORMAT(1H+,10X,'JAGITT=' ,I2,3X,'PLFACT=' ,F6.3,3X,'NOPL0T=' ,
I12,3X,'NURPLOT=' ,I2,3X,'NUTEST=' ,I2,3X,'NOTEXT=' ,I2)
9440 FORMAT(1H ,33A4/1H1)
9500 FORNAT(1H+,10X,'CO(LAUF1)=' ,E12.6,3X,'CO=' ,E12.6,3X,'C1=' ,E12.6,
13X,'C2=' ,E12.6,3X,'PZM=' ,E12.6,3X,'PZH=' ,E12.6)
9550 FORMAT(1H0,'JAUS=' ,I4,5X,'FAKZ=' ,E12.6)
9720 FORMAT(1H0,5X,'Q(I)=' /(1X,10(1X,E12.6)))
9725 FORMAT(1H0,'SUMME UEBER Q(I)=' ,E15.6/1H0)
9770 FORNAT(1H0,'STOP BEI 2001')
9811 FORMAT(1H0,'BERECHNUNGEN NACH DER PULSZEIT GESTARTET')
9805 FORNAT(1H0,'STOP BEI 2205')
9880 FORNAT(1H0,'DATEN BEI PROGRAMMENDE')
9900 FORNAT(1X,'SUMME UEBER ENERGIEN (SOLLWERT=' ,F6.3,' ) : ' ,D25.18/
11H0,'ABWEICHUNG: (ED-QS)/ED=' ,D25.18)
9910 FORMAT(1H0/1H0,'MAXIMUM VON D(' ,I4,' )=' ,E12.6,2X,'ENTSPRICHT ' ,
1F7.3,' PROZENT DER SCHMELZWAERME'/1H0,5X,'DIE SCHICHT SCHMILZT ' ,
2' HOECHSTENS BIS ZUR TIEFE ' ,E12.6,' ( CM )')
9920 FORNAT(1H0/1H0,5X,'TEMPERATURMAXIMUM IM ZEITSCHRITT ' ,
I15,' ZUR ZEIT ' ,E12.6,' SEC. AM ORTSGITTERPUNKT ' ,I5,
27X,'TMAX=' ,F10.3,' GRAD CELSIUS')
END

```

```

SUBROUTINE FOUT(JAUS,ZEIT,IOSR,IDELTA,JAUSF)
C *****
C *
C *   U N T E R P R O G R A M M   *
C *   Z U R   A U S G A B E   V O N   D A T E N   *
C *
C *****
COMMON DATE,TIME,EE(10),ED(10),PZ(10),X,T,SPEZ(10,10),DMAX,
1U(1002,2),DELTAT(1002),Q(1002),RHO(1002),C(1002),FK(1002),
2WAEI(10,10),D(1002),FKS,RHOF,RHOS,WVO,WVS,AT,SW,ST,TARGET(4,10),
3IOSZ,IAUMAX,JSCHR,IT2AB(10),LAUF1,IZUS(1002),IFELD,IORTSO
DOUBLE PRECISION TIME,DATE
IO=IOSR+2
IF(IO.GT.IFELD)IO=IFELD
IF(IAUMAX.GT.IFELD)IAUMAX=IFELD
WRITE(6,100)JAUS,JSCHR,ZEIT
100 FORMAT(1H0,'JAUS=' ,I3,3X,I5,'-TER ZEITSCHRITT , ZEIT(SEC.)=' ,
1E12.6)
WRITE(6,150)IAUMAX,(IZUS(I),I=1,IAUMAX)
150 FORMAT(1X,'IAUMAX=' ,I3,2X,'IZUS(1-IAUMAX)=' ,50I2/(1X,27X,50I2))
IF(JAUSF.NE.1)GO TO 225
IF(IDELTA.EQ.1) GO TO 225
WRITE(6,200)IO,(DELTAT(I),I=1,IO)
200 FORMAT(1X,'DELTAT(1-' ,I4,' )=' ,8(E13.6,1X)/(1X,15X,8(E13.6,1X)))
225 WRITE(6,250)IAUMAX,(D(I),I=1,IAUMAX)
250 FORMAT(1X,'D(1-' ,I4,' )=' ,15(F7.2,1X)/(1X,10X,15(F7.2,1X)))
IF(JAUSF.NE.1)GO TO 900
WRITE(6,300)IAUMAX,(FK(I),I=1,IAUMAX)
300 FORMAT(1X,'FK(1-' ,I4,' )=' ,8(1X,E13.6)/(1X,11X,8(1X,E13.6)))
WRITE(6,350)IAUMAX,( RHO(I),I=1,IAUMAX)
350 FORMAT(1X,'RHO(1-' ,I4,' )=' ,18(F5.2,1X)/(1X,11X,18(1X,F5.2)))
WRITE(6,400)IAUMAX,( C(I),I=1,IAUMAX)
400 FORMAT(1X,'C(1-' ,I4,' )=' ,1X,18(1X,F5.3)/(1X,11X,18(1X,F5.3)))
900 WRITE(6,1000)IOSZ,(U(I,1),I=1,IOSZ)
1000 FORNAT(1H0,'TEMPERATURFELD :U(1-' ,I4,' )=' /14(1X,F8.3))
WRITE(6,1200)
1200 FORNAT(1H0)
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE PLOFEL(U,JSCHR,T,XFELD,YFELD,IPPKTE,IIPKTE,ISTEP,
1LAUF1)
C *****
C *
C *   U N T E R P R O G R A M M   *
C *   Z U R   E R Z E U G U N G   D E R   T E M P E R A T U R   -   *
C *   -   Z E I T   P L O T   -   F E L D E R   *
C *
C *****
DIMENSION U(1002,2),YFELD(1102,10),XFELD(1102),IIPKTE(10,10)
IF(ISTEP.LE.1100)GO TO 500
ISTEP=1100
IF(IH.GT.10)GO TO 1500
IH=IH+1
WRITE(6,200)
200 FORMAT(1H0,'200 FORMAT IN UP PLOFEL,ISTEP>1100,UNTERDRUECKUNG')

```

```

GO TO 1500
500 IH=0
XFELD(ISTEP)=T*FLOAT(JSCHR)
DO 1000 I=1, IPPKTE
IY=IIPKTE(I, LAUF1)
YFELD(ISTEP, I)=U(IY, 1)
1000 CONTINUE
1500 RETURN
END

```

```

IF(YMIN.GT.RMIN)YMIN=RMIN
IF(YMAX.LT.RMAX)YMAX=RMAX
800 CONTINUE
IF(YMIN.EQ.0.)GO TO 820
CALL MAGNIT(YMIN, IMY)
YMIN=10.**IMY*IFIX(YMIN*10.**(-IMY)+1)
820 YSTEP=(YMAX-YMIN)/AYLEN
CALL MAGNIT(YSSTEP, IMY)
YSSTEP=10.**IMY*IFIX(YSSTEP*10.**(-IMY)+1)
YYFELD(1101)=YMIN
YYFELD(1102)=YSSTEP

```

```

C
C U M R A N D U N G   Z E I C H N E N
C

```

```

CALL PLOT(0., 0., +3)
CALL PLOT(13.0, 0.0, 2)
CALL PLOT(13.0, 9.2, 2)
CALL PLOT(0.0, 9.2, 2)
CALL PLOT(0.0, 0.0, 2)
CALL PLOT(1., .7, -3)

```

```

C
C A C H S E N K R E U Z   Z E I C H N E N
C

```

```

CALL AXIS(0., 0., 'ZEIT (1.E-6 SEC.)', -17, AXLEN, 0.,
1XFELD(1101), XFELD(1102))
CALL AXIS(0., 0., 'TEMPERATUR (GRAD CELSIUS)', +25, AYLEN, 90.,
1YYFELD(1101), YYFELD(1102))
IF(JAGITT.NE.1)GO TO 900

```

```

C
C G I T T E R   Z E I C H N E N
C

```

```

LMASK1=LMASK1-2**16
CALL GRIDV(0., 0., 11, 1., 7, 1., LMASK1)
LMASK2=LMASK2-2**16
CALL GRIDV(0., 0., 44, 0.25, 28, 0.25, LMASK2)

```

```

C
C K U R V E N   Z E I C H N E N
C

```

```

900 DO 1500 I1=1, IPPKTE
DO 1000 I2=1, ISTEP
1000 YYFELD(I2)=YFELD(I2, I1)
DO 1100 I2=ISTEP, 1100
XFELD(I2)=XFELD(ISTEP)
YYFELD(I2)=YYFELD(ISTEP)
1100 CONTINUE
CALL LINE(XFELD, YYFELD, 1100, 1, 0, 0)
1500 CONTINUE

```

```

C
C S Y M B O L E   I N   K U R V E N   Z E I C H N E N
C

```

```

LINTYP=ISTEP/10
IF(LINTYP.LT.1)LINTYP=1
IH=1
DO 2000 I1=1, ISTEP
IF(I1.LT.IH*LINTYP)GO TO 2000
IH=IH+1
XNORM=XFELD(I1)/XFELD(1102)-XFELD(1101)
DO 1800 I=1, IPPKTE

```

```

SUBROUTINE T1PLOT( DATE, TIME, XFELD, YFELD, IPPKTE, IIPKTE, TARGET,
1EE, ED, ATF, JAGITT, ISTEP, LAUF1, X, NOTEXT)
C *****
C * U N T E R P R O G R A M M *
C * F U E R   D I E   T E M P E R A T U R - Z E I T - P L O T S *
C *
C *****
DIMENSION YFELD(1102, 10), YYFELD(1102), XFELD(1102),
1IIPKTE(10, 10), TARGET(4, 10), TARGEZ(4)
DOUBLE PRECISION DATE, TIME
DATA XMIN, XMAX, YMIN, YMAX/4*0.0/, AXLEN, AYLEN/11., 7./
DATA LMASK1, LMASK2/ZFFFF, Z000F/
WRITE(6, 100)
100 FORMAT(1H1, 10X, ' UNTERPROGRAMM T1PLOT')
DO 200 I=1, 4
TARGEZ(I)=TARGET(I, LAUF1)
200 CONTINUE
IF(ISTEP.GT.1100)ISTEP=1100
DO 500 I=1, ISTEP
500 XFELD(I)=XFELD(1)*1.E6
DO 550 I=ISTEP, 1100
XFELD(I)=XFELD(ISTEP)
550 CONTINUE
C
C M A S S S T A B   B E S T I M M E N
C
IF(XMIN.GT.XFELD(1))XMIN=XFELD(1)
XMAX=XFELD(ISTEP)
IF(XMIN.EQ.0.)GO TO 580
CALL MAGNIT(XMIN, IMX)
XMIN=10.**IMX*IFIX(XMIN*10.**(-IMX)+1)
580 XSTEP=(XMAX-XMIN)/AXLEN
CALL MAGNIT(XSTEP, IMX)
XSTEP=10.**IMX*IFIX(XSTEP*10.**(-IMX)+1)
XFELD(1101)=XMIN
XFELD(1102)=XSTEP
DO 800 I1=1, IPPKTE
DO 650 I2=1, ISTEP
650 YYFELD(I2)=YFELD(I2, I1)
DO 660 I2=ISTEP, 1100
YYFELD(I2)=YYFELD(ISTEP)
660 CONTINUE
RMIN=R4MIN(YYFELD, ISTEP)
RMAX=R4MAX(YYFELD, ISTEP)

```

```

    YNORM=YFELD(I1,I)/YYFELD(1102)-YYFELD(1101)
    CALL SYMBOL(XNORM,YNORM,0.1,I,0.,-1)
1800 CONTINUE
2000 CONTINUE
    IF(NOTEXT.EQ.1)GO TO 2100
C
C   T E X T   Z E I C H N E N
C
    CALL SYMBOL(0.5,7.1,0.2,'TEMPERATUR UEBER ZEIT IN ',0.,24)
    CALL SYMBOL(5.5,7.1,0.2,'VERSCHIEDENEN TIEFEN : ',0.,22)
    CALL SYMBOL(2.6,6.8,.1,'PROGRAMM VOM ',0.,13)
    CALL SYMBOL(999.,6.8,.1,DATE,0.,8)
    CALL SYMBOL(4.9,999.,0.1,TIME,0.,8)
1500 CALL SYMBOL(0.1,6.8,0.1,'TARGET:',0.,7)
    CALL SYMBOL(0.8,6.8,0.1,TARGEZ,0.,16)
    CALL SYMBOL(6.0,6.8,.1,'PROGRAMMDATEN : ',0.,16)
    CALL SYMBOL(7.8,6.8,.1,'EE=',0.,3)
    CALL NUMBER(999.,999.,0.1,EE,0.,1)
    CALL SYMBOL(999.,999.,0.1,'ED=',0.,4)
    CALL NUMBER(999.,999.,0.1,ED,0.,1)
    CALL SYMBOL(999.,999.,0.1,'AT=',0.,4)
    CALL NUMBER(999.,999.,0.1,ATF,0.,0)
C
C   A N G A B E N   Z U   D E N   E I N Z E L N E N   K U R V E N   Z E I C H N E N
C
    DO 3000 I=1,IPPKTE
    FPN=(FLOAT(IPPKTE(I,LAUF1))-1.5)*X*1.E4
    WRITE(6,1550)FPN
1550 FORMAT(1H0,'FPN=',E12.6)
    YPAGE=6.30-0.25*FLOAT(I)
    CALL SYMBOL(8.5,YPAGE+.075,0.15,I,0.,-1)
    CALL NUMBER(9.0,YPAGE,0.15,FPN,0.,3)
    CALL SYMBL3(10.,YPAGE,0.15,'M',0.,2)
    CALL SYMBL1(999.,999.,0.15,'M',0.,1)
3000 CONTINUE
C
C   E N D E   D E S   P L O T E N S
C
    CALL PLOT(-1.0,-0.7,-3)
    CALL PLOT(0.,0.,-999)
C
    RETURN
    END

```

```

SUBROUTINE T2PLOT(IT2PL,LAUF,JAGITT,NOTEXT)
C *****
C *
C *   U N T E R P R O G R A M M
C *   F U E R   D I E   S C H M E L Z F R O N T - Z E I T   P L O T S
C *
C *****
    DIMENSION XFELD(106),YFELD(106),IT2PL(10),EE(10),
    1ED(10),AT(10),PZF(10),XXFELD(104,10),YYFELD(104,10),
    2TARGEZ(4),TARGET(4,10)

```

```

    DOUBLE PRECISION DATE(10),TIME(10)
    DATA XMIN,XMAX,YMIN,YMAX/1.E6,3*0.0/,AXLEN,AYLEN/11.,7./
    DATA LMASK1,LMASK2/ZFFFF,Z000F/
    WRITE(6,100)
100 FORMAT(1H1,10X,' UNTERPROGRAMM T2PLOT')
    DO 900 LAUF2=1,LAUF
    IF(IT2PL(LAUF2).LT.16)GO TO 900
C
C   E I N G A B E   D E R   Z U   P L O T T E N D E N   D A T E N   A U S   D E N   S P E I C H E R N
C
    IOUTST=IT2PL(LAUF2)
    REWIND IOUTST
    DO 300 I=1,106
    XFELD(I)=0.
    YFELD(I)=0.
300 CONTINUE
    READ(IOUTST,400)DATE(LAUF2),TIME(LAUF2),(TARGET(I,LAUF2),I=1,4)
400 FORMAT(2A8,4A4)
    WRITE(6,407)DATE(LAUF2),TIME(LAUF2),(TARGET(I,LAUF2),I=1,4)
407 FORMAT(1H0,'DATE=',A8,5X,'TIME=',A8,5X,'TARGET : ',4A4)
    READ(IOUTST,410)EE(LAUF2),ED(LAUF2),AT(LAUF2),PZF(LAUF2)
410 FORMAT(1X,3F10.0,E14.8)
    READ(IOUTST,500)LAUF1,ISTEP
500 FORMAT(2I5)
580 WRITE(6,590)ISTEP
590 FORMAT(1H0,'ISTEP=',I5,10X,'XFELD,YFELD :')
    IF(ISTEP.LE.104)GO TO 599
    ISTEP=104
    GO TO 580
599 READ(IOUTST,600)(XFELD(I),YFELD(I),I=1,ISTEP)
600 FORMAT(E14.8,2X,E14.8)
    WRITE(6,605)(XFELD(I),YFELD(I),I=1,ISTEP)
605 FORMAT(1X,2(2(E14.8,2X),5X))
    DO 610 I=1,ISTEP
    XFELD(I)=XFELD(I)*1.E6
610 CONTINUE
    DO 620 I=ISTEP,104
    XFELD(I)=XFELD(ISTEP)
    YFELD(I)=YFELD(ISTEP)
620 CONTINUE
    DO 650 I=1,104
    XXFELD(I,LAUF2)=XFELD(I)
    YYFELD(I,LAUF2)=YFELD(I)
650 CONTINUE
C
C   M A S S S T A B   B E S T I M M E N
C
    IF(ISTEP.EQ.0)GO TO 900
    RMIN=R4MIN(XFELD,ISTEP)
    RMAX=R4MAX(XFELD,ISTEP)
    IF(XMIN.GT.RMIN)XMIN=RMIN
    IF(XMAX.LT.RMAX)XMAX=RMAX
    RMIN=R4MIN(YFELD,ISTEP)
    RMAX=R4MAX(YFELD,ISTEP)
    IF(YMIN.GT.RMIN)YMIN=RMIN
    IF(YMAX.LT.RMAX)YMAX=RMAX
900 CONTINUE
    IF(XMIN.EQ.0.)GO TO 920

```

```

XMIN=XMIN*0.9
CALL MAGNIT(XMIN,IMX)
XMIN=10.**(-IMX-1)*IFIX(XMIN*10.**(-IMX+1))
920 XSTEP=(XMAX-XMIN)/AXLEN
CALL MAGNIT(XSTEP,IMX)
XSTEP=10.**IMX*IFIX(XSTEP*10.**(-IMX)+1)
XFELD(105)=XMIN
XFELD(106)=XSTEP
IF(YMIN.EQ.0.)GO TO 940
CALL MAGNIT(YMIN,IMY)
YMIN=10.**IMY*IFIX(YMIN*10.**(-IMY)+1)
940 YSTEP=(YMAX-YMIN)/AYLEN
CALL MAGNIT(YSSTEP,IMY)
YSSTEP=10.**IMY*IFIX(YSSTEP*10.**(-IMY)+1)
YFELD(105)=YMIN
YFELD(106)=YSSTEP
C
C U M R A N D U N G   Z E I C H N E N
C
CALL PLOT(0.,0.,+3)
CALL PLOT(13.0,0.0,2)
CALL PLOT(13.0,9.2,2)
CALL PLOT(0.0,9.2,2)
CALL PLOT(0.0,0.0,2)
CALL PLOT(1.,-7,-3)
C
C A C H S E N K R E U Z   Z E I C H N E N
C
CALL AXIS(0.,0.,'ZEIT (1.E-6 SEC.)',-17,AXLEN,0.,
1XFELD(105),XFELD(106))
CALL AXIS(0.,0.,'SCHICHTTIEFE (1.E-6 M)',+22,AYLEN,90.,
1YFELD(105),YFELD(106))
IF(JAGITT.NE.1)GO TO 1100
C
C G I T T E R   Z E I C H N E N
C
LMASK1=(2**16-LMASK1)*(-1)
CALL GRIDV(0.,0.,11,1.,7,1.,LMASK1)
LMASK2=-2**16+LMASK1
CALL GRIDV(0.,0.,44,0.25,28,0.25,LMASK2)
C
C T E X T   Z E I C H N E N
C
1100 IF(NOTEXT.EQ.1)GO TO 1200
CALL SYMBOL(.1,7.1,0.20,'SCHMELZTIEFE UEBER ZEIT',0.,23)
CALL SYMBOL(999.,999.,0.20,' BEI VERSCHIEDENEN EX',0.,21)
CALL SYMBOL(999.,999.,0.20,'PERIMENTEN',0.,10)
1200 ISYMBL=-1
YPAGE=7.05
DO 5000 LAUF2=1,LAUF
IF(IT2PL(LAUF2).LT.16)GO TO 5000
C
C U M S P E I C H E R N   D E R   Z U   P L O T T E N D E N   D A T E N   I N   A R B E I T S F E L D E R
C
DO 1300 I=1,104
XFELD(I)=XXFELD(I,LAUF2)
YFELD(I)=YYFELD(I,LAUF2)
1300 CONTINUE

```

```

DO 1310 I=1,4
1310 TARGEZ(I)=TARGET(I,LAUF2)
C
C T E X T   Z U   D E N   E I N Z E L N E N   K U R V E N   I N   D I E   P L O T S   E I N T R A G E N
C
PZ=1.E6*PZF(LAUF2)
YPAGE=YPAGE-0.25
ISYMBL=ISYMBL+1
CALL SYMBOL(0.1,YPAGE+0.05,0.1,ISYMBL,0.,-1)
CALL SYMBOL(0.3,YPAGE,.1,'TARGET:',0.,7)
CALL SYMBOL(1.0,YPAGE,0.1,TARGEZ,0.,16)
IF(NOTEXT.EQ.1)GO TO 4000
CALL SYMBOL(2.9,YPAGE,.1,'PROGRAMM VOM ',0.,13)
CALL SYMBOL(999.,YPAGE,.1,DATE(LAUF2),0.,8)
CALL SYMBOL(5.1,999.,0.1,TIME(LAUF2),0.,8)
4000 CALL SYMBOL(6.0,YPAGE,.1,'PROGRAMMDATEN:',0.,14)
CALL SYMBOL(999.,YPAGE,.1,' EE=',0.,4)
CALL NUMBER(999.,999.,0.1,EE(LAUF2),0.,1)
CALL SYMBOL(999.,999.,0.1,' ED=',0.,4)
CALL NUMBER(999.,999.,0.1,ED(LAUF2),0.,1)
CALL SYMBOL(999.,999.,0.1,' AT=',0.,4)
CALL NUMBER(999.,999.,0.1,AT(LAUF2),0.,0)
CALL SYMBOL(999.,999.,0.1,' PZ=',0.,4)
CALL NUMBER(999.,999.,0.1,PZ,0.,3)
CALL SYMBL3(999.,YPAGE,0.1,' M',0.,2)
CALL SYMBL1(999.,999.,0.1,'SEC',0.,3)
C
C K U R V E   U N D   S Y M B O L E   I N   K U R V E   Z E I C H N E N
C
CALL CURVE(XFELD,YFELD,-104,-2)
CALL LINE(XFELD,YFELD,104,1,-1,ISYMBL)
5000 CONTINUE
C
C E N D E   D E S   P L O T E N S
C
CALL PLOT(-1.0,-0.7,-3)
CALL PLOT(0.,0.,-999)
RETURN
END

SUBROUTINE MAGNIT(X,IX)
C *****
C *   U N T E R P R O G R A M M   *
C *   Z U R   B E S T I M M U N G   D E R   G R O E S S E   E I N E R   Z A H L   X   *
C *****
IF(X.NE.0.)GO TO 1000
IX=0
GO TO 2000
1000 XX=ABS(X)
IX=IFIX(ALOG10(XX))
IF(XX.LT.1.0)IX=IX-1
2000 RETURN
END

```

```

SUBROUTINE WADEP(A1,A2,DAT,EEMIN,Z,AGM,ZSP,SUMQI,
1AX,IAE,IRWF)
C *****
C *
C *   U N T E R P R O G R A M M   Z U R   B E R E C H N U N G   *
C *   D E S   W A E R M E D E P O S I T I O N S   P R O F I L S   *
C *
C *****
COMMON DATE,TIME,EE(10),ED(10),PZ(10),X,T,SPEZ(10,10),DMAX,
1U(1002,2),DELTAT(1002),Q(1002),RHO(1002),C(1002),FK(1002),
2WAEI(10,10),D(1002),FKS,RHOF,RHOS,WVO,WVS,AT,SW,ST,TARGET(4,10),
3IOSZ,IAUMAX,JSCHR,IT2AB(10),LAUF1,IZUS(1002),IFELD,IORTSO
DOUBLE PRECISION DATE,TIME
DIMENSION DAT(232),A1(10),A2(10),EEMIN(10),AX(10,10)
IF(A2(LAUF1).NE.0.)GO TO 500
C *****
C   N O R M I E R U N G   A U F   E D ( L A U F 1 )   *
C   B E R E C H N U N G   V O N   F A K 3 , F A K 5   U N D   R I N T E G   *
C *****
RINTEG=0.
DO 200 I0=1,10
200 RINTEG=RINTEG+AX(I0,LAUF1)/FLOAT(I0)
GO TO 1050
500 GL=SQRT(2.*A2(LAUF1))
GR=GL*A1(LAUF1)/(1-A1(LAUF1))
CALL RUND(GR,IG1GR,IG2GR,G3GR)
CALL RUND(GL,IG1GL,IG2GL,G3GL)
PHIGR=DAT(IG1GR)+G3GR*(DAT(IG2GR)-DAT(IG1GR))
PHIGL=DAT(IG1GL)+G3GL*(DAT(IG2GL)-DAT(IG1GL))
RINTEG=PHIGR+PHIGL
1050 FIAE=FLOAT(IAE)
FAK4=FIAE*EEMIN(LAUF1)/(EE(LAUF1)-EEMIN(LAUF1))
SUFAK5=(FIAE+1)*FIAE/2+FIAE*FAK4
FAK3=ED(LAUF1)/(4.184*ZSP*X*SUFAK5*RINTEG)
C *****
C   E N E R G I E S C H L E I F E   *
C *
C *
C *****
DO 1750 I1=1,IAE
FI1=FLOAT(I1)
FAK5=FI1+FAK4
EI=EEMIN(LAUF1)+(EE(LAUF1)-EEMIN(LAUF1))*FI1/FIAE
CALL REIWEI(Z,EI,RHOF,AGM,IRWF,RWEI)
IOSRI=IFIX(RWEI/X+.5)+1
IF(IOSRI.GT.IFELD-1)IOSRI=IFELD-1
IF(A2(LAUF1).NE.0.)GO TO 1500
C
C -----
C   P O L Y N O M - I N T E G R A T I O N
C
XL=0.
C   O R T S S C H L E I F E
DO 1300 I=1,IOSRI

```

```

FI=FLOAT(I)
XR=XL
XL=FI*X/RWEI
IF((FI-1.)*X.GE.RWEI)GO TO 1710
IF(XL.GT.1.)XL=1.
DO 1200 I0=1,10
Q(I+1)=Q(I+1)+AX(I0,LAUF1)*FAK3*FAK5*(XL**I0-XR**I0)/FLOAT(I0)
1200 CONTINUE
1300 CONTINUE
C
C   E N D E   D E R   P O L Y N O M I N T E G R A T I O N
C -----
C   G O   T O   1 7 1 0
C -----
C   G A U S S - F U N K T I O N   I N T E G R I E R E N
C
1500 X0I=RWEI*A1(LAUF1)
IG1UL=IG1GR
PHIUL=PHIGR
C   O R T S S C H L E I F E
DO 1700 I=1,IOSRI
FI=FLOAT(I)
IF((FI-1.)*X.GE.RWEI)GO TO 1710
UL=SQRT(A2(LAUF1))*(FI*X-A1(LAUF1)*RWEI)/(RWEI*(1.-A1(LAUF1)))
UL=SQRT(2.)*UL
IG1UR=IG1UL
PUL=ABS(UL)
CALL RUND(PUL,IG1UL,IG2UL,G3UL)
IF(IG1UR.EQ.231)GO TO 1700
PHIUR=PHIUL
PHIUL=DAT(IG1UL)+G3UL*(DAT(IG2UL)-DAT(IG1UL))
IF(FI*X.LE.X0I)GO TO 1620
IF((FI-1.)*X.LE.X0I)GO TO 1610
IF(FI*X.GT.RWEI)GO TO 1605
Q(I+1)=FAK3*FAK5*(PHIUL-PHIUR)+Q(I+1)
GO TO 1700
1605 Q(I+1)=Q(I+1)+FAK3*FAK5*(PHIGL-PHIUR)
GO TO 1700
1610 IF(FI*X.GT.RWEI)GO TO 1615
Q(I+1)=FAK3*FAK5*(PHIUL+PHIUR)+Q(I+1)
GO TO 1700
1615 Q(I+1)=Q(I+1)+FAK3*FAK5*(PHIGL+PHIUR)
GO TO 1700
1620 Q(I+1)=FAK3*FAK5*(PHIUR-PHIUL)+Q(I+1)
1700 CONTINUE
C
C   E N D E   D E R   I N T E G R A T I O N   D E R   G A U S S K U R V E
C -----
C
1710 IF(I1.EQ.1) GO TO 1720
IF(I1.NE.1)GO TO 1750
1720 SUMQI=0.0
DO 1740 I=1,IOSZ
SUMQI=SUMQI+Q(I)
1740 CONTINUE

```

```

IOSRI1=IOSRI+1
WRITE(6,9715)I1,EI,RWEI,IOSRI1
WRITE(6,9720)(Q(I),I=1,IOSRI1)
WRITE(6,9725)SUMQI
1750 CONTINUE
C *****
C
C   E N D E   D E R   E N E R G I E S C H L E I F E
C
C *****
9715 FORMAT(1H0,' I1=' ,I3,2X,'EI=' ,E10.3,2X,'RWEI=' ,E10.3,5X,'Q(1-' ,I4,
1')=' )
9720 FORMAT((1X,10(1X,E12.6)))
9725 FORMAT(1H0,'SUMME UEBER Q(I)=' ,E15.6)
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE RUND(X,IG1,IG2,G3)
C *****
C *   U N T E R P R O G R A M M   Z U R   L I N E A R E N
C *   I N T E R P O L A T I O N   F U E R   D A S
C *   G A U S S - I N T E G R A L - F E L D
C *****
XX=X*100.
IG1=0
IG2=0
G3=0.0
IF(XX.LE.0.0)GO TO 250
IF(XX.LT.200.)GO TO 10
IF(XX.LT.300.)GO TO 50
IF(XX.LT.400.)GO TO 200
IG1=232
IG2=232
G3=0.0
RETURN
10 IS=1
IG1=IFIX(XX)
IX=IG1
20 IG1=IG1+1
IG2=IG1+1
G3=(XX-FLOAT(IX))/FLOAT(IS)
RETURN
50 IS=5
IG1=200+IFIX((XX-200.)/FLOAT(IS))
IX=200+IS*(IG1-200)
GO TO 20
200 IS=10
IG1=220+IFIX((XX-300)/FLOAT(IS))
IX=300+IS*(IG1-220)
GO TO 20
250 IF(XX.EQ.0.0) GO TO 300
WRITE(6,230)
230 FORMAT(1H0,'X KLEINER ALS 0.0 , FEHLER'/1X,
1'STOP BEI 250 IN U.P. RUND')

```

```

STOP
300 IG1=1
IG2=1
G3=0.0
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE REIWEI(Z,E,RHO,A,IRWF,RW)
C *****
C *   U N T E R P R O G R A M M   Z U R   B E R E C H N U N G
C *   D E R   R E I C H W E I T E
C *****
RW=0.0
IF(IRWF.EQ.3)GO TO 1000
IF(IRWF.EQ.2)GO TO 100
C
C   I R W F = 1
RW=2.1E-6*E*RHO
GO TO 5000
C
C   I R W F = 2
100 FNE=1.2/(1.-.29*ALOG10(Z))
RW=2.5E-6*A/RHO*((E/SQRT(Z))**FNE)
GO TO 5000
C
C   I R W F = 3
1000 RW=4.41E-6*(E**1.75)/RHO
5000 RETURN
END

```

```

SUBROUTINE CRNI(FAKZ,IKONV)
C *****
C *
C *   U N T E R P R O G R A M M   Z U R   L O E S U N G   D E R   W A E R M E D I F F U S I O N S G L E I C H U N G   M I T   H I L F E
C *   D E R   C R A N K - N I C O L S O N   G L E I C H U N G   U N D   E I N E R   Z E N T R I E R T E N   T A Y L O R - R E I H E N
C *   P R O J E K T I O N
C *
C *****
COMMON DATE,TIME,EE(10),ED(10),PZ(10),X,T,SPEZ(10,10),DMAX,
1U(1002,2),DELTAT(1002),Q(1002),RHO(1002),C(1002),FK(1002),
2WAE(10,10),D(1002),FKS,RHOF,RHOS,WVO,WVS,AT,SW,ST,TARGET(4,10),
3IOSZ,IAUMAX,JSCHR,IT2AB(10),LAUF1,IZUS(1002),IFELD,IORTSO
DIMENSION THA(1002),THB(1002),THC(1002),THD(1002)
DOUBLE PRECISION TIME,DATE
IOSZH=IOSZ-1
C -----
C   B E R E C H N U N G   D E R   W A E R M E L E I T F A E H I G K E I T   I M   H A L B E N   O R T S S C H R I T T
C   F K ( I )   E N T S P R I C H T   F K ( I + 1 / 2 )
C -----
DO 100 I=1,IOSZH

```

```

UH=(U(I,1)+U(I+1,1))/2.
CALL WAELEI(UH,IZUS(I),IZUS(I+1),FFK)
FK(I)=FFK
100 CONTINUE
C -----
C ZENTRIERTE TAYLOR-REIHEN PROJEKTION UM HALBEN ZEITSCHRITT
C -----
DO 150 I=1,IOSZ
150 U(I,1)=U(I,1)-AT
DO 200 I=2,IOSZH
THAI=FK(I-1)/(2.*X*X)
THA(I)=THAI
THCI=FK(I)/(2.*X*X)
THC(I)=THCI
THB(I)=(-1.)*(THAI+THCI+2.*RHO(I)*C(I)/T)
THDI=-U(I-1,1)*THAI+U(I,1)*(THAI+THCI-2.*RHO(I)*C(I)/T)
THD(I)=THDI-U(I+1,1)*THCI-Q(I)*FAKZ/T
200 CONTINUE
C -----
C R A N D B E D I N G U N G E N
C -----
THA(1)=0.0
THB(1)=+1.0
THC(1)=-WVO
THD(1)=0.0
THA(IOSZ)=-WVS
THB(IOSZ)=+1.0
THC(IOSZ)=0.0
THD(IOSZ)=0.0
CALL THALGO(THA,THB,THC,THD,U,IOSZ,IKONV,JSCHR)
IF(IKONV.EQ.1)GO TO 5000
DO 300 I=1,IOSZ
U(I,2)=U(I,2)+AT
300 CONTINUE
C -----
C P H A S E N U M W A N D L U N G ?
C -----
CALL PHASE(1)
C -----
C BERECHNUNG DER WAERMELEITFAEHIGKEIT IN T/2 - PROJEZierter ZEIT
C UND IN HALBEN ORTSCHRITTSINTERVALLEN SOWIE DER SPEZIFISCHEN
C WAERME IN T/2 - PROJEZierter ZEIT
C FK(I,2) ENTSpricht FK(I+1/2,1+1/2)
C C(I,2) ENTSpricht C(I,1+1/2)
C -----
DO 500 I=1,IOSZH
UH=(U(I,2)+U(I+1,2))/2.
CALL WAELEI(UH,IZUS(I),IZUS(I+1),FFK)
FK(I)=FFK
UH1=U(I,2)
CALL SPEZWA(UH1,CC)
C(I)=CC
500 CONTINUE
C -----
C C R A N K N I C O L S O N
C -----

```

```

DO 700 I=2,IOSZH
THAI=FK(I-1)/(2.*X*X)
THA(I)=THAI
THCI=FK(I)/(2.*X*X)
THC(I)=THCI
THB(I)=- (THAI+THCI+RHO(I)*C(I)/T)
THDI=-U(I-1,1)*THAI-U(I,1)*(RHO(I)*C(I)/T-THAI-THCI)-U(I+1,1)*THCI
THD(I)=THDI-Q(I)*FAKZ/T
700 CONTINUE
C -----
C R A N D B E D I N G U N G E N
C -----
THA(1)=0.
THB(1)=1.
THC(1)=-WVO
THD(1)=0.
THA(IOSZ)=-WVS
THB(IOSZ)=+1.0
THC(IOSZ)=0.0
THD(IOSZ)=0.0
CALL THALGO(THA,THB,THC,THD,U,IOSZ,IKONV,JSCHR)
IF(IKONV.EQ.1)GO TO 5000
DO 800 I=1,IOSZ
800 U(I,2)=U(I,2)+AT
C -----
C P H A S E N U M W A N D L U N G ?
C -----
CALL PHASE(0)
C -----
C N E U E T E M P E R A T U R E N U M S P E I C H E R N
C -----
DO 1000 I=1,IOSZ
UH=U(I,2)
U(I,1)=UH
CALL WAELEI(UH,IZUS(I),IZUS(I),FFK)
FK(I)=FFK
CALL SPEZWA(UH,CC)
C(I)=CC
1000 CONTINUE
5000 RETURN
END

SUBROUTINE THALGO(THA,THB,THC,THD,U,IOSZ,IKONV,JSCHR)
C *****
C *
C * U N T E R P R O G R A M M D E S *
C * T H O M A S - A L G O R I T H M U S *
C *
C *****
DIMENSION THA(1002),THB(1002),THC(1002),THD(1002),U(1002,2),
1BETA(1002),GAMMA(1002)
IF(JSCHR.LE.1)JH=0
C -----
C K O N V E R S I O N S T E S T
C -----

```



```

DO 250 I=1,IOSZ
B=ABS(THB(I))
AC=ABS(THA(I)+THC(I))
IF(B.GE.AC) GO TO 250
WRITE(6,240)I,THA(I),THB(I),THC(I)
240 FORMAT(1H0,'KEINE KONVERSION IM THOMAS-ALGORITHMUS'/1X,
1'I,THA(I),THB(I),THC(I) =' ,I4,2X,3(E12.6,3X))
IKONV=1
250 CONTINUE
IF(IKONV.EQ.1) GO TO 2000
-----
C      T H O M A S - A L G O R I T H M U S
-----
BETA(1)=THB(1)
GAMMA(1)=THD(1)/THB(1)
IOSZH=IOSZ-1
IO=1
DO 500 I=2,IOSZ
BETA(I)=THB(I)-THA(I)*THC(I-1)/BETA(I-1)
IF(IO.EQ.0)GO TO 470
GAMMA(I)=(THD(I)-THA(I)*GAMMA(I-1))/BETA(I)
IF(ABS(GAMMA(I)).EQ.0.0)GO TO 500
IF(ABS(GAMMA(I)).GT.1.E-72)GO TO 500
JH=JH+1
IO=0
IF(JH.LT.20)GO TO 400
IF(JH.GT.20)GO TO 470
WRITE(6,350)
350 FORMAT(1H0,13X,'WARNUNG : OVERFLOW DES EXPONENTENREGISTERS DROHT'/
11H0,9X,'ES WERDEN KEINE OVERFLOW-MELDUNGEN MEHR AUSGEDRUCKT'/1H+,
28X,' /1H0)
GO TO 470
400 WRITE(6,450)JSCHR,I,GAMMA(I)
450 FORMAT(1H0,'WARNUNG : OVERFLOW DES EXPONENTENREGISTERS DROHT',
110X,' JSCHR=' ,I6,5X,' GAMMA(' ,I4,' )=' ,E12.6)
WRITE(6,460)JSCHR,I,IOSZ
460 FORMAT(1H0,' JSCHR=' ,I6,5X,' ALLE GAMMA(I),MIT ' ,I4,
1'=< I =< ' ,I4,2X,' NULL GESETZT')
470 GAMMA(I)=0.0
500 CONTINUE
U(IOSZ,2)=GAMMA(IOSZ)
DO 1000 I=1,IOSZH
IH=IOSZ-I
U(IH,2)=GAMMA(IH)-THC(IH)*U(IH+1,2)/BETA(IH)
1000 CONTINUE
RETURN
2000 WRITE(6,2001)
2001 FORMAT(1H0,'STOP IN U.P. THALGO')
RETURN
END

```

SUBROUTINE WAEDIF(FAK1)

```

C *****
C *
C *      U N T E R P R O G R A M M   Z U R   L O E S U N G
C *

```

```

C *      D E R   W A E R M E D I F F U S I O N S G L E I C H U N G      *
C *      M I T   H I L F E   D E R   V O R W A E R T S M E T H O D E      *
C *
C *****
COMMON DATE,TIME,EE(10),ED(10),PZ(10),X,T,SPEZ(10,10),DMAX,
1U(1002,2),DELTAT(1002),Q(1002),RHO(1002),C(1002),FK(1002),
2WAE(10,10),D(1002),FKS,RHOF,RHOS,WVO,WVS,AT,SW,ST,TARGET(4,10),
3IOSZ,IAUMAX,JSCHR,IT2AB(10),LAUF1,IZUS(1002),IFELD,IORTSO
DOUBLE PRECISION TIME,DATE
IOSZH=IOSZ-1
-----
C      B E R E C H N U N G   D E R   W A E R M E L E I T F A E H I G K E I T   I M   H A L B E N   O R T S S C H R I T T
C      F K ( I )   E N T S P R I C H T   F K ( I + 1 / 2 )
-----
DO 100 I=1,IOSZH
UH=(U(I,1)+U(I+1,1))/2.
CALL WAELEI(UH,IZUS(I),IZUS(I+1),FFK)
FK(I)=FFK
100 CONTINUE
-----
C      V O R W A E R T S B E R E C H N U N G
-----
DO 200 I=1,IOSZ
U(I,1)=U(I,1)-AT
200 CONTINUE
DO 400 I=2,IOSZH
FAK2=(FK(I))*U(I+1,1)-U(I,1)
FAK2=FAK2-(FK(I-1))*U(I,1)-U(I-1,1)
U(I,2)=U(I,1)+DELTAT(I)+FAK1*FAK2/(RHO(I)*C(I))
400 CONTINUE
-----
C      R A N D P U N K T E   -   B E R E C H N U N G
-----
U(1,2)=WVO*U(2,2)
U(IOSZ,2)=WVS*U(IOSZH,2)
DO 600 I=1,IOSZ
IF(U(I,2).LT.0.)U(I,2)=0.
U(I,2)=U(I,2)+AT
600 CONTINUE
-----
C      P H A S E N U M W A N D L U N G   ?
-----
CALL PHASE(0)
-----
C      N E U E   T E M P E R A T U R   I M   F E L D   U ( I , 1 )   A B S P E I C H E R N
-----
DO 800 I=1,IOSZ
UH=U(I,2)
U(I,1)=UH
CALL WAELEI(UH,IZUS(I),IZUS(I),FFK)
FK(I)=FFK
CALL SPEZWA(UH,CC)
C(I)=CC
800 CONTINUE
RETURN
END

```



```

C I Z U S I = 4 , D I > 0 . , U I 2 < S T
C FESTKOERPER WIRD VOR FLUESSIGWERDEN ABGEGUEHLT
C
2050 IF(DI.GT.(ST-UI2)*CI)GO TO 2100
      UI2=UI2+DI/CI
      DI=0.
      IZUSI=1
      IPHAEN=1
      GO TO 3030
2100 DI=DI+(UI2-ST)*CI
      UI2=ST
3000 IF(IPROJE.EQ.1)GO TO 3048
      IF(IPHAEN.NE.1) GO TO 3045
      IF(I.EQ.1)GO TO 3045
      ZEIT=T*FLOAT(JSCHR)
      IF(IT2AB(LAUF1).LT.16)GO TO 3030
      GO TO(3010,3010,3030,3030),IZUSI
3010 IF(IZUSI+IZUSIH.EQ.5)GO TO 3030
-----
C P L O T T F E L D B E R E C H N E N
-----
      IPSTEP=IPSTEP+1
      Y1FELD(IPSTEP)=ZEIT
      X1FELD(IPSTEP)=X*(FLOAT(I)-1.5)*1.E4
-----
C
C WEITER GEHTS
C
3030 WRITE(6,8000)JSCHR,ZEIT,I,IZUSI,I,DI,I,UI2
3045 D(I)=DI
      DMAXF(I)=DMAXFI
      IZUS(I)=IZUSI
3048 C(I)=CI
      RHO(I)=RHOI
      U(I,2)=UI2
3050 CONTINUE
-----
C *****
C
C ENDE DER ORTSSCHLEIFE DES
C PHASENUEBERGANSPROGRAMMES
C
C *****
      IF(DMAX.LT.DMAXF(IORTS0))DMAX=DMAXF(IORTS0)
      GO TO 7000
-----
C P L O T T F E L D A U S L E S E N
-----
6000 IOUTST=IT2AB(LAUF1)
      REWIND IOUTST
      WRITE(6,8010)IOUTST
      WRITE(IOUTST,8015)DATE,TIME,(TARGET(I,LAUF1),I=1,4)
      WRITE(6,8020)DATE,TIME,(TARGET(I,LAUF1),I=1,4)
      WRITE(IOUTST,8025)EE(LAUF1),ED(LAUF1),AT,PZ(LAUF1)
      WRITE(6,8025)EE(LAUF1),ED(LAUF1),AT,PZ(LAUF1)
      WRITE(IOUTST,8030)LAUF1,IPSTEP
      WRITE(6,8030)LAUF1,IPSTEP
      IF(IPSTEP.EQ.0)Y1FELD(1)=0.0
      IF(IPSTEP.EQ.0)X1FELD(1)=0.0

```

```

      WRITE(IOUTST,8040)(Y1FELD(I),X1FELD(I),I=1,IPSTEP)
      WRITE(6,8040)(Y1FELD(I),X1FELD(I),I=1,IPSTEP)
-----
C A U S G A B E - F O R M A T E
-----
8000 FORMAT(1X,'JSCHR=',I5,5X,'ZEIT=',E13.6,' SEC.',5X,'IZUS(',I4,')=',
      1I2,5X,'D(',I4,')=',E9.3,5X,'U(',I4,')=',F6.1)
8010 FORMAT(1H1,20X,'U.P. P H A S E'/1H0,5X,
      1'AUSLESEN DER SCHMELZZEITDATEN IN SPEICHER T2PLOT(',
      2I2,'-15')')
8015 FORMAT(2A8,4A4)
8020 FORMAT(1X,A8,5X,A8,5X,4A4)
8025 FORMAT(1X,3F10.5,E14.8)
8030 FORMAT(2I5)
8040 FORMAT(2(E14.8,2X))
-----
C
C 7000 RETURN
      END
-----
      SUBROUTINE SPEZWA(UH,CC)
C *****
C * UNTERPROGRAMM ZUR BERECHNUNG *
C * DER SPEZIFISCHEN WAERME *
C *****
      COMMON DATE,TIME,EE(10),ED(10),PZ(10),X,T,SPEZ(10,10),DMAX,
      1U(1002,2),DELTAT(1002),Q(1002),RHO(1002),C(1002),FK(1002),
      2WAEL(10,10),D(1002),FKS,RHOF,RHOS,WVO,WVS,AT,SW,ST,TARGET(4,10),
      3IOSZ,IAUMAX,JSCHR,IT2AB(10),LAUF1,IZUS(1002),IFELD,IORTS0
      DOUBLE PRECISION DATE,TIME
      DIMENSION SPEZAF(6),ISPEZA(7)
      IF(JSCHR.GT.1)GO TO 400
-----
C E R S T E L L U N G E I N E S ' S C H N E L L E N ' F E L D E S
-----
      IH=1
      DO 300 I=1,6
      SPEZAF(I)=SPEZ(I,LAUF1)
      IF(SPEZAF(I).EQ.0)GO TO 300
      ISPEZA(IH)=I
      IH=IH+1
300 CONTINUE
      ISPEZA(IH)=0
      AH=SPEZ(7,LAUF1)
      BH=SPEZ(8,LAUF1)
-----
C B E R E C H N U N G D E R S P E Z . W A E R M E
-----
400 TEMP=UH+273.2
      CC=0.
      DO 500 I=1,6
      J=ISPEZA(I)
      IF(J.EQ.0)GO TO 510
      JH=J-1

```

```

      CC=CC+SPEZAF(J)*TEMP**(JH)
500 CONTINUE
510 IF(AH.EQ.0.)GO TO 1000
      CC=CC+AH/((TEMP-BH)**2)
1000 RETURN
      END

```

```

      GO TO 600
570 FFK=FFK+AH/((TEMP-BH)**CH)
600 IF(UH.NE.ST)GO TO 1000
      IF(IZUS1.NE.IZUS2)GO TO 800
      IF(IZUS1.EQ.1)GO TO 1000
      IF(IZUS1.EQ.4)GO TO 1000
      FFK=FKS
      GO TO 1000
800 FFK=(FKS+FFK)/2.
1000 RETURN
      END

```

SUBROUTINE WAELEI(UH,IZUS1,IZUS2,FFK)

```

C *****
C *   U N T E R P R O G R A M M   Z U R   B E R E C H N U N G   *
C *   D E R   W A E R M E L E I T F A E H I G K E I T   *
C *****

```

```

      COMMON DATE,TIME,EE(10),ED(10),PZ(10),X,T,SPEZ(10,10),DMAX,
      1U(1002,2),DELTAT(1002),Q(1002),RHO(1002),C(1002),FK(1002),
      2WAEL(10,10),D(1002),FKS,RHOF,RHOS,WVO,WVS,AT,SW,ST,TARGET(4,10),
      3IOSZ,IAUMAX,JSCHR,IT2AB(10),LAUF1,IZUS(1002),IFELD,IORTSO
      DOUBLE PRECISION DATE,TIME
      DIMENSION WAELAF(7),IWAELEA(8)
      IF(JSCHR.GT.1)GO TO 400

```

```

C-----
C   E R S T E L L U N G   E I N E S ' S C H N E L L E N '   F E L D E S
C-----

```

```

      IH=1
      DO 300 I=1,7
      WAELAF(I)=WAEL(I,LAUF1)
      IF(WAELAF(I).EQ.0.)GO TO 300
      IWAELEA(IH)=I
      IH=IH+1
300 CONTINUE
      IWAELEA(IH)=0
      AH=WAEL(8,LAUF1)
      BH=WAEL(9,LAUF1)
      CH=WAEL(10,LAUF1)
      IF(CH-IFIX(CH).NE.0.)GO TO 400
      IICH=IFIX(CH)
      CH=0.

```

```

C-----
C   B E R E C H N U N G   D E R   W A E R M E L E I T F A E H I G K E I T
C-----

```

```

400 TEMP=UH+273.2D00
      FFK=0.
      IF(UH.LE.ST)GO TO 500
      FFK=FKS
      GO TO 1000
500 TEMP=UH+273.2
      DO 550 I=1,6
      J=IWAELEA(I)
      IF(J.EQ.0)GO TO 560
      JH=J-1
      FFK=FFK+WAELAF(J)*TEMP**(JH)
550 CONTINUE
560 IF(AH.EQ.0.0)GO TO 600
      IF(CH.NE.0.0)GO TO 570
      FFK=FFK+AH/((TEMP-BH)**IICH)

```