



Forschungszentrum Karlsruhe
Technik und Umwelt

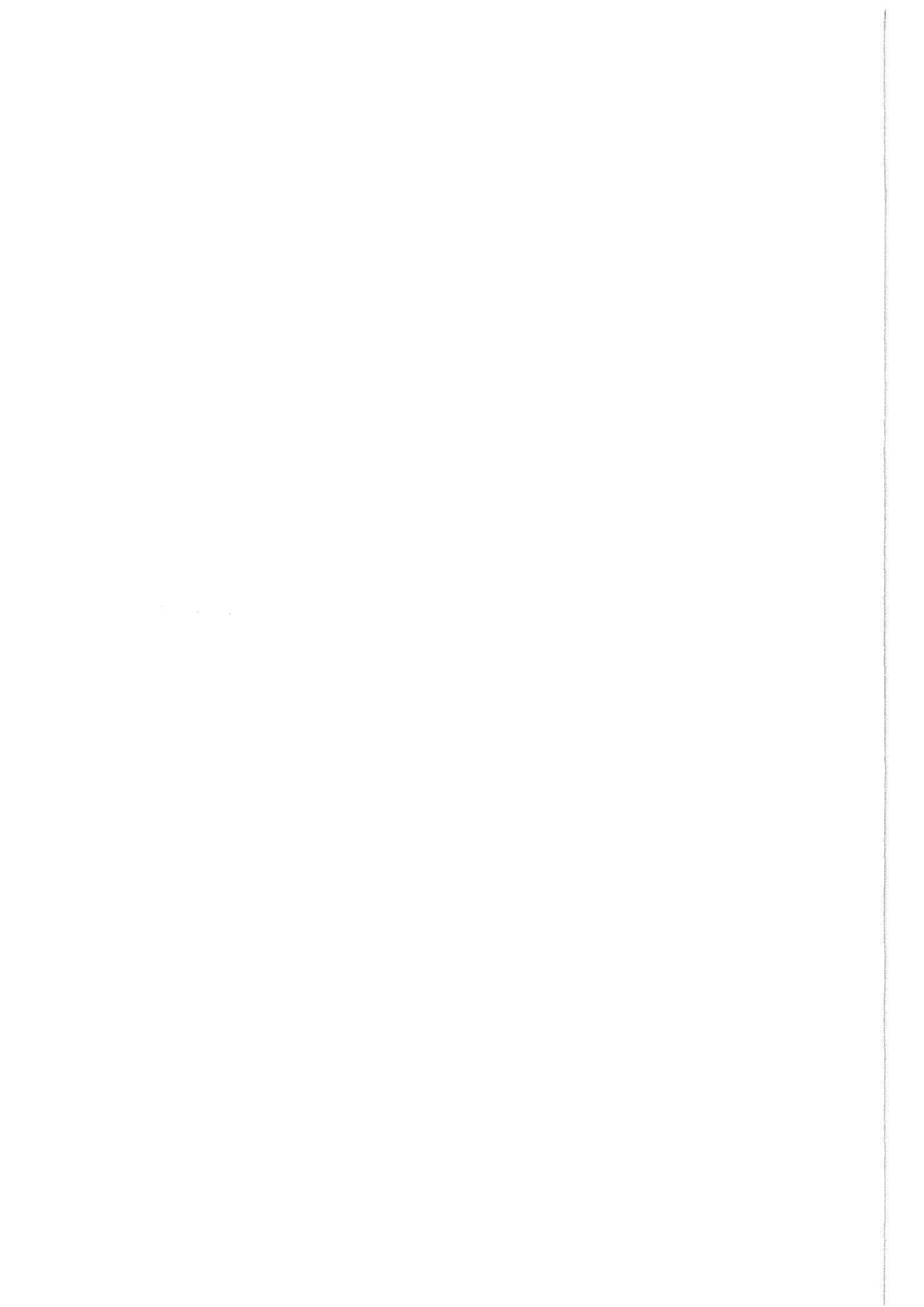
Wissenschaftliche Berichte
FZKA 5805

**Untersuchung der
Gitterplatzbesetzung von
Fremdatomen nach
Implantation in Beryllium-
Einkristallen**

J. Hanßmann

Institut für Nukleare Festkörperphysik

August 1996



Forschungszentrum Karlsruhe
Technik und Umwelt
Wissenschaftliche Berichte
FZKA 5805

**Untersuchung der Gitterplatzbesetzung von Fremdatomen nach
Implantation in Beryllium-Einkristallen***

Jörg Hanßmann

Institut für Nukleare Festkörperphysik

***Von der Fakultät für Physik der Universität Karlsruhe (TH) genehmigte
Dissertation**

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe
1996

**Als Manuskript gedruckt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor**

**Forschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 76021 Karlsruhe**

ISSN 0947-8620

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurden Untersuchungen zur Gitterplatzbesetzung von Fremdatomen nach Implantation in Beryllium-Einkristalle untersucht. Es wurden verschiedene Elemente bei 77K und Raumtemperatur in $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ orientierte Be Einkristalle implantiert. Die Fluenzen lagen hierbei zwischen $1 \cdot 10^{14} \text{at./cm}^2$ und $2.5 \cdot 10^{15} \text{at./cm}^2$, die Energie der Ionen betrug zwischen 100 und 300 keV.

Implantiert wurden die Elemente: Au, Zn, Mn, In, Bi, I, Ca, Xe, Hg, Ga, Sb, Te und Cl. Die Auswahl der Ionensorten erfolgte hierbei anhand der Werte für die Volumenfehl-anpassungsenergie (ΔH_{size}) im Wirtsgitter Be. In situ Rutherford Rückstreu-spektrometrie und die Channeling Methode wurden zur Bestimmung der Gitterplatzbesetzung der Fremdatome benutzt. Bei 77 K zeigten die meisten Elemente einen deutlich höheren substitutionellen Anteil (f_s) als bei 293 K. Zusätzlich wurde festgestellt, daß f_s mit ansteigenden Werten für ΔH_{size} abnimmt. Diese Effekte sind mit dem Einfang von Leerstellen verbunden.

Bei 77 K sind Leerstellen in Beryllium unbeweglich und können durch Fremdatome nur innerhalb der Kollisionskaskade eingefangen werden. Bei 293 K sind Leerstellen beweglich und der Einfang von Leerstellen wird somit bei Implantationen und Nachbestrahlungen möglich. Aufwärmen der bei 77 K implantierten Proben auf Raumtemperatur resultierte in der Besetzung von gleichen Gitterplätzen wie die Implantation bei 293 K. Die Veränderungen in der Gitterplatzbesetzung hängt mit dem Einfang von Leerstellen durch die implantierten Fremdatome zusammen. Es kommt zur Bildung von Fremdatom-Leerstellen Komplexen. In dieser Arbeit wird diskutiert, daß die Volumenfehl-anpassungsenergie der entscheidende Parameter ist, welcher die unterschiedlichen Ergebnisse bei allen experimentellen Bedingungen erklärt.

Lattice site location of implanted species in beryllium single crystals

Abstract

In this work experiments were performed to measure the lattice site occupation of implanted species in beryllium single crystals. Various ions have been implanted into $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Be single crystals at temperatures of 77 K and 293 K with fluences between $1 \cdot 10^{14} \text{at./cm}^2$ and $2.5 \cdot 10^{15} \text{at./cm}^2$ and ion energies between 100 and 300 keV.

Ions with different size mismatch energies, ΔH_{size} , were chosen: Cl, Mn, Zn, Au, Ga, Hg, In, Sb, Bi, Te, I, Ca, and Xe. In situ Rutherford backscattering and channeling with 1.5 MeV He ions was used to determine the lattice location of the implanted species. At 77 K most of the implanted species show a much higher substitutional fraction, f_s , than at 293 K and f_s was found to decrease with increasing ΔH_{size} . These effects are attributed to vacancy trapping.

At 77 K vacancies are not mobile in Beryllium and can be trapped by implanted species only within the collision cascade. At 293 K vacancies are mobile and trapping is effective also during implantation or postirradiation. Warming 77 K implants to 293 K results in a similar lattice site occupation as observed for 293 K implants. The change of the lattice site occupation after warming up is attributed to vacancy trapping of the implanted species. Formation of impurity-vacancy complexes take place. It is discussed that ΔH_{size} is the quantitative parameter controlling the different observations at the various experimental conditions.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Physikalische Grundlagen	4
2.1	Ionenimplantation	5
2.1.1	Elektronischer Energieverlust	5
2.1.2	Nuklearer Energieverlust	7
2.1.3	Defekterzeugung	8
2.1.4	Kaskadenmodelle	9
2.2	Rutherford-Rückstreuung	11
2.2.1	Prinzip der Rutherford-Rückstreuspektrometrie	11
2.2.2	Massentrennung	12
2.2.3	Tiefenskalierung und Energieverlust	13
2.2.4	Atomare Zusammensetzung	14
2.3	Channeling	16
2.3.1	Klassisches Kontinuummodell	17
2.3.2	Monte-Carlo Simulation	20
2.3.3	Anwendungen des Channeling-Effekts	20
2.4	Die <i>hcp</i> -Struktur des Berylliums	21
2.5	Fremdatom-Punktdefekt-Wechselwirkungen	23
2.6	Modelle zur Gitterplatzbesetzung implantierter Fremdatome	25
2.6.1	Ersetzungsstoßtheorie	26
2.6.2	Miedema Modell	28
2.6.3	Volumenfehlpassungsenergie	29
3	Experimentelles	31
3.1	Experimentelle Anordnung	31
3.1.1	Van de Graaff-Beschleuniger und Ionenbeschleuniger	31

3.1.2	Tiefemperatur- und Dreiachsengoniometer	33
3.2	Probenpräparation	33
3.3	Auswahl der Ionensorten	34
4	Resultate und Diskussion	35
4.1	Gitterplatzbesetzung implantierter Fremdatome	35
4.1.1	Gold, Zink und Mangan	35
4.1.2	Indium	40
4.1.3	Bismut	42
4.1.4	Jod	45
4.1.5	Calcium	46
4.1.6	Xenon	48
4.1.7	Quecksilber	49
4.1.8	Gallium, Antimon und Tellur	50
4.1.9	Chlor	53
4.2	Diskussion der Gitterplatzbesetzung	55
4.3	Tiefenabhängigkeit der Gitterplatzbesetzung	60
4.4	Nachbestrahlungsexperimente	66
4.4.1	Nachbestrahlung der Hochdosis Bi-Implantation	66
4.4.2	Nachbestrahlung der Xe-Tiefemperaturimplantation	68
4.4.3	Nachbestrahlung der Zn-Tiefemperaturimplantation	69
4.4.4	Zusammenfassende Diskussion der Nachbestrahlungen	70
4.5	Schädigung des Wirtsgitters	71
5	Zusammenfassung	75
	Literaturverzeichnis	79

1 Einleitung

Die Ionenimplantation hat im Laufe der letzten Jahrzehnte als Technik zur Modifikation von Oberflächen und oberflächennaher Bereiche eine weite Verbreitung gefunden. Mit Hilfe dieses Verfahrens können die physikalischen und chemischen Eigenschaften von Materialien verändert und verbessert werden [HIR80]. Die Anwendungsfelder liegen hierbei z.B. in der Dotierung, Kontaktierung und der Erzeugung isolierender Schichten und in der Herstellung von mikroelektronischen Bauteilen. Bei der industriellen Härtung von Oberflächen wird dieses Verfahren benutzt, um zum Beispiel künstliche Knie- und Hüftgelenken eine längere Lebensdauer zu verleihen.

Der große Vorteil der Ionenimplantation im Vergleich zu anderen Dotierungsmethoden ist die Möglichkeit, jedes Ion in jeden Festkörper zu implantieren, zunächst ohne Beachtung der Regeln der Metallurgie und ohne Beachtung der Gleichgewichtsphasendiagramme. Die so hergestellten Legierungen sind meist in einem metastabilen Zustand. Für das Verständnis und die Vorhersage von Materialeigenschaften implantierter Systeme ist es von großer Bedeutung, die Gitterplatzbesetzung der implantierten Atome zu kennen. Die grundlegenden Prozesse, welche die Fremdatom-Wirtsgitteratom Konfiguration bestimmen, können stoßkinetischer Natur sein oder durch thermodynamische Kräfte, verursacht durch eine lokale Änderung des chemischen Potentials, entstehen. Zusätzlich kann die Wechselwirkung der Fremdatome mit Punktdefekten eine wichtige Rolle spielen. Mögliche Mechanismen, welche die Gitterplatzbesetzung beeinflussen, werden in der Arbeit von Brice [BRI76] in Form von Ersetzungsstößen oder bei Poate et al. [POA77],[POA80] durch Abschrecken aus einer flüssigkeitsähnlichen, dichten Kaskade beschrieben. Es gibt einige Modelle zur Vorhersage der Gitterplatzbesetzung: Hume-Rothery et al. [HUM69], Darken und Gurry [DAR53], Miedema et al. [MIE73,80,92], Chelikowsky [CHE79] und Alonso und Lopez [ALO82] entwickelten phänomenologische Modelle, welche eine Einordnung anhand von physikalischen Parametern zulassen. Das Modell von Singh und Zunger [SIN82] basiert auf quantenmechanischen Rechnungen. Viele Systeme wurden mit diesen Modellen verglichen, und es wurde teilweise eine gute Übereinstimmung gefunden. Systematische Untersuchungen zur Gitterplatzbesetzung sind bisher für die Wirtsgitter Cu ([SOO78]), Fe ([MEY87b],[MEY87c]), V ([AZZ87]) und Al ([KLO87]) durchgeführt worden. In ([MEY87a]) findet man einen Überblick über die Ergebnisse in V, Fe und Al. In der Arbeit von Vianden und Kaufmann [VIA80] wurden verschiedene Beryllium-Implantationsysteme mit dem Miedema Modell verglichen.

Kaufmann et al. [KAU77a],[VIA80] implantierten 25 metallische Elemente in Beryllium bei Raumtemperatur mit Konzentrationen von ca. 0,1%. Die implantierten Fremdatome besetzten hierbei substitutionelle Gitterplätze oder tetraedrische oder oktaedrische Zwischengitterplätze. Die leichte Masse des Beryllium ist von besonderem Interesse, da hier Ersetzungsstöße am Ende der Kaskade zumindest für schwere Projektile (Atommasse größer als $53amu$) unmöglich sind. Desweiteren sind wegen der kleinen Masse der Wirtsgitteratome nahezu alle implantierten Fremdatome innerhalb einer Messung

mit der Rutherford-Rückstreu-spektrometrie vom Signal des Be trennbar. In der Diskussion der von Kaufmann et al. durchgeführten Experimente in [KAU77a],[KAU77b],[KAU77c],[VIA80] wurde die Wechselwirkung zwischen Fremdatomen und Leerstellen nicht berücksichtigt. Es wurde angenommen, daß die Wahrscheinlichkeit einer solchen Wechselwirkung sehr gering ist, da die Erholungsstufe **III** in Beryllium erst bei 340K endet. Daher wurde davon ausgegangen, daß kein Einfluß der Leerstellen auf die Gitterplatzbesetzung vorhanden ist. Unter Benutzung der Miedema Parameter [MIE80] war es möglich, die unterschiedlichen Gitterplatzbesetzungen in einzelne Regionen aufzuteilen und so eine Vorhersage der Gitterplatzbesetzung zu treffen. Dieses Miedema Schema liefert allerdings kein grundsätzliches Verständnis der Prozesse, welche zu der Besetzung eines bestimmten Gitterplatzes führen.

Elektrische Widerstandsmessungen von Beryllium nach der Bestrahlung mit Neutronen und Elektronen zeigten, daß die letzte Erholungsstufe, bei welcher die Leerstellen beweglich werden, zwischen 200 und 340K liegt [SCH69],[NIC68]. Bei Raumtemperatur ist der ursprünglich nach der Bestrahlung vorhandene Widerstand um 95% zurückgegangen. Aufgrund dieses Rückgangs des Widerstandes kann davon ausgegangen werden, daß Leerstellen bei Raumtemperatur eine genügend hohe Beweglichkeit besitzen, um zumindest über kurze Reichweiten mit den implantierten Fremdatomen wechselzuwirken. Damit sollte die Möglichkeit zur Bildung von Fremdatom-Leerstellen Komplexen gegeben sein.

In früheren Arbeiten wurde experimentell festgestellt, daß die Gitterplatzbesetzung, vor allem von nichtlöslichen Fremdatomen in Metallen, maßgeblich von der Wechselwirkung mit Punktdefekten beeinflusst wird. Dies wurde zum Beispiel für implantierte Atome in Aluminium [MEY87a],[GER88] beobachtet. Die Bildung von Fremdatom-Leerstellen Komplexen fand dabei entweder in der Abkühlphase der Kaskade oder durch den Einfang von Leerstellen bei Erwärmen über die Erholungsstufe **III** (170 bis 200K in Al), bei welcher die Leerstellen beweglich werden, statt. Desweiteren wurde ein Zusammenhang zwischen der Volumenfehlpassungsenergie, ΔH_{size} , und dem substitutionellen Anteil, f_s , bei tiefen Temperaturen gefunden [GER88].

Um zu untersuchen, ob es auch im Wirtsgitter des Berylliums mit seinen speziellen Eigenschaften zu einer Bildung von Fremdatom-Leerstellen Komplexen kommt, wurden im Rahmen dieser Arbeit die Gitterplatzbesetzung von Fremdatomen bei verschiedenen Implantationstemperaturen durch in situ Messungen untersucht. Bei tiefen Temperaturen sind Leerstellen unbeweglich, und es kann daher außerhalb der Stoßkaskade zu keiner Wechselwirkung mit den implantierten Fremdatomen kommen. Bei Raumtemperatur sind Leerstellen zumindest über eine begrenzte Reichweite beweglich und können so zur Bildung von Komplexen beitragen. Der Einfluß der Leerstellenbeweglichkeit auf die Gitterplatzbesetzung kann somit durch die Wahl unterschiedlicher Implantationstemperaturen untersucht werden. Die implantierten Atomsorten wurden so gewählt, daß sie einen großen Bereich von verschiedenen Volumenfehlpassungsenergien abdecken. Damit konnte untersucht werden, ob wie in Al eine Abhängigkeit der Gitterplatzbeset-

zung von der Volumenfehlpassungsenergie existiert. In der Literatur wurden bisher keine Experimente zur Gitterplatzbestimmung bei tiefen Temperaturen in Beryllium veröffentlicht.

Im folgenden werden zunächst einige Grundlagen der Ionenimplantation, der Rutherford-Rückstreuung, des Channeling Effekts sowie der Wechselwirkung von Fremdatomen mit Punktdefekten vorgestellt. Anschließend werden kurz die in den Experimenten verwendeten Techniken angesprochen. Im vierten Kapitel werden die experimentellen Ergebnisse vorgestellt und diskutiert.

2 Physikalische Grundlagen

Um die im Rahmen dieser Arbeit benutzten physikalischen Verfahren zu verstehen, werden im folgenden die Ionenimplantation, die Rutherford-Rückstreuanalyse und die Channeling-Methode vorgestellt und erklärt.

Wird ein Festkörper mit Ionen beschossen, so werden diese in einer Reihe von Kollisionen mit den Atomen des Targets abgebremst. Die Reichweite, ihre Verteilung und die Erzeugung von Defekten im Targetmaterial werden vom Energieverlust der Ionen bestimmt ([CAR68],[SIG72],[DEA73]). Bei der Ionenimplantation und -bestrahlung steht der nukleare Energieverlust und damit die Defekterzeugung im Vordergrund; diese Defekterzeugung ist bei der Rutherford-Rückstreuanalyse (**R**utherford **B**ack **S**cattering) unerwünscht. Der elektronische Energieverlust, welcher bei der Rückstreuanalyse eine Tiefenauflösung ermöglicht, verringert bei der Ionenimplantation die Reichweite. Die Channeling Methode nutzt Führungseffekte durch niedrig indizierte Kristallrichtungen oder -ebenen bei der Bewegung von Ionen parallel zu diesen. Dies kann zur Bestimmung der Gitterplatzbesetzung von Fremdatomen genutzt werden. Bei der Ionenimplantation sind Channelingeffekte normalerweise unerwünscht, da sonst die Reichweite und die Reichweitenverteilung der Ionen und damit deren Konzentration unbestimmt wird.

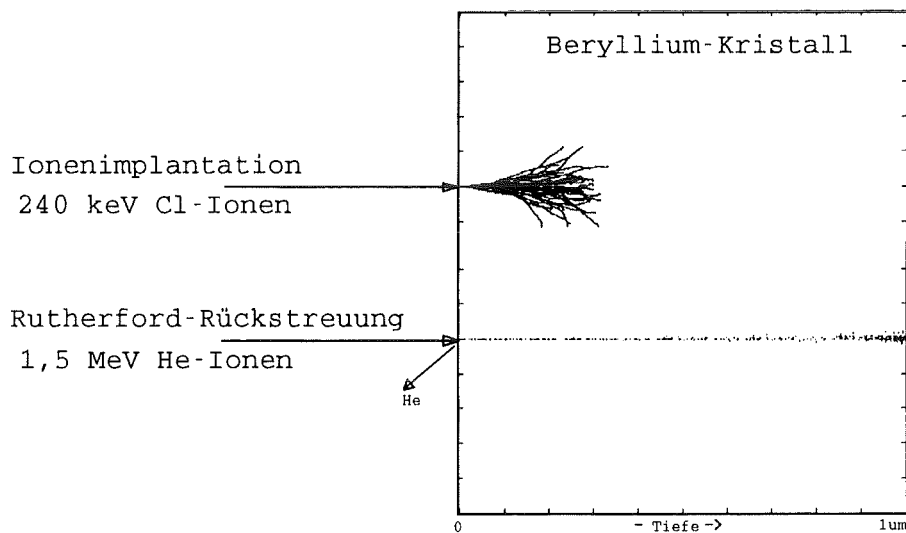


Abb. 1: Darstellung der unterschiedlichen Reichweiten einer TRIM-Simulation von Cl-Ionen mit 240keV und He-Ionen mit 1,5MeV.

In Abb.1 sind Ion-Festkörper Wechselwirkungen am Beispiel eines Beryllium Kristalls gezeigt. Die Berechnung der dargestellten Reichweiten und Verteilung erfolgte mit dem Simulationsprogramm TRIM. Simuliert wurden jeweils 50 einfallende Ionen. Es sind nur die Pfade der Ionen dargestellt und nicht die der verlagerten Wirtsgitteratome. Für die Implantation von Cl mit 240keV erhält man eine Reichweite von ca. 2650Å für die zur Rutherford-Rückstreuanalyse benutzten 1,5MeV He-Ionen 5,21µm. Es ist zu

erkennen, daß die zur Analyse benutzten leichten He-Ionen viel tiefer im Kristall zur Ruhe kommen als die bei niedrigerer Energie implantierten Cl-Atome. Dies bedeutet, daß im Implantationsbereich des Cl keine Defekterzeugung durch das He stattfindet. Damit und mit der wesentlich höheren Reichweite des He kann also der Bereich des implantierten Cl untersucht werden, ohne daß eine wesentliche Beeinflussung durch den Analysestrahl vorhanden ist. Die Reichweiten der von uns im Energiebereich zwischen 100 und 300keV implantierten Ionen lagen im Bereich zwischen 1000 und 3000Å und liegen somit alle in dem dem durch RBS zugänglichen Bereich.

2.1 Ionenimplantation

Die Ionenimplantation dient dazu, Ionen in einer definierten Tiefe und mit einer bestimmten Konzentration in einen Festkörper einzubringen. Hierbei ist der Abbremsvorgang der Ionen, der die Reichweite, die Reichweitenverteilung und die Defekterzeugung bestimmt, von entscheidender Bedeutung. Im folgenden werden die Grundlagen der Wechselwirkungen beschrieben, die den Energiebereich zwischen ca. 100keV und 2MeV, der in dieser Arbeit benutzt wurde, betreffen.

Dringen Ionen in einen Festkörper ein, so werden sie durch Wechselwirkungen mit den Atomen des Targets abgebremst. Dieser Vorgang wird durch den spezifischen Energieverlust dE/dx beschrieben. Er wird im wesentlichen durch zwei Prozesse beschrieben: durch die elastische Streuung an Atomkernen (nuklearer Energieverlust) und die Wechselwirkung mit gebundenen oder freien Elektronen (elektronischer Energieverlust). Nimmt man an, daß diese beiden Prozesse nicht korreliert sind, so gilt:

$$\frac{dE}{dx} = \left(\frac{dE}{dx} \right)_n + \left(\frac{dE}{dx} \right)_e = S_n + S_e \quad (1)$$

Die Wechselwirkung von einfallenden Ionen mit den Atomen des Targets wurde bereits von Lindhard et. al. ([LIN63],[LIN68]) beschrieben. Bei vorgegebenen Massen und Kernladungszahlen von Ion (M_1, Z_1) und Target (M_2, Z_2) hängt der Anteil der Einzelprozesse am gesamten Energieverlust sehr stark von der Energie (bzw. Geschwindigkeit) der Ionen ab. Für hohe Energien wie bei dem in dieser Arbeit verwendeten RBS-Verfahren mit 1,5MeV He⁺ dominiert der elektronische Anteil. Bei kleineren Energien, welche für Ionenimplantationen benutzt werden, spielt auch der nukleare Energieverlust eine Rolle.

2.1.1 Elektronischer Energieverlust

Der elektronische Energieverlust erreicht bei hohen Energien ein Maximum bei der Ionengeschwindigkeit (siehe Abb.2):

$$v_1 = Z_1^{\frac{2}{3}} \cdot v_0 \quad \text{mit} \quad v_0 = \frac{e^2}{\hbar} = \alpha \cdot c \quad (2)$$

v_0 ist hier die Bohr'sche Geschwindigkeit. Für $v > v_1$ nimmt S_e mit $1/E$ ab. Dieser Bereich wird Bethe-Bloch Bereich genannt, hier erfolgt der Energieübertrag auf einzelne Elektronen. Der elektronische Energieverlust ist hier gegeben durch:

$$S_e = -\frac{4\pi Z_1^2 \cdot Z_2 \cdot e^4}{m_e \cdot v^2} \cdot \left(\ln \frac{2mev^2}{I_0} + \dots \right) \quad (3)$$

Bei RBS und Channeling-Messungen mit $1,5 \text{ MeV He}^+$ Ionen liegt man in diesem Energiebereich. In [CHU78] werden die experimentell gefundenen Kurven für S_e durch ein Polynom 6. Grades angenähert.

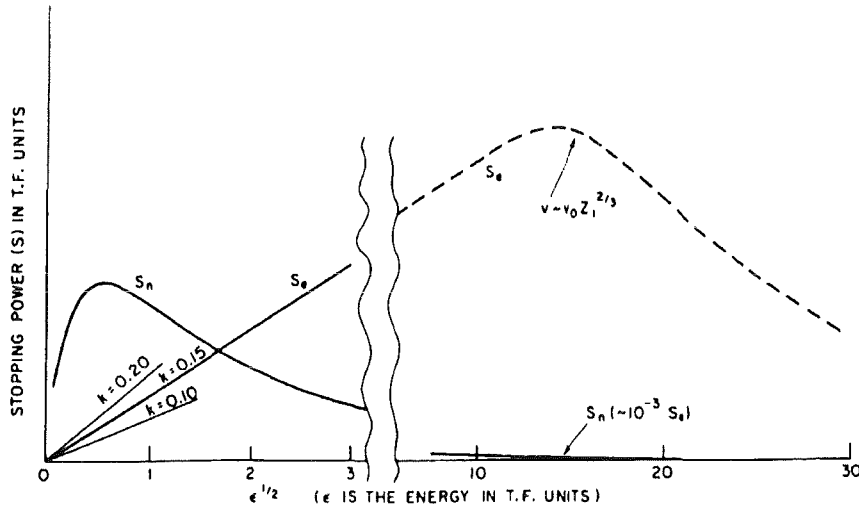


Abb. 2: Abhängigkeit des elektronischen, S_e , und des nuklearen, S_n , Energieverlustes von der reduzierten Energie $\epsilon^{1/2}$ aus [DAV83].

Für den bei Ionenimplantationen benutzten Energiebereich kann der Energieverlust über ein Reibungsmodell näherungsweise als kontinuierlicher Prozeß betrachtet werden, in dem S_e proportional zur Ionengeschwindigkeit ist. Werden dimensionslose Größen für Energie und Reichweite eingeführt ([LIN68]), so ergibt sich:

$$S_e = \frac{d\epsilon}{d\rho} = -k \cdot \epsilon^{\frac{1}{2}} \quad \text{mit} \quad \epsilon = E \cdot \frac{a \cdot M_2}{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2 \cdot (M_1 + M_2)} \quad (4)$$

ϵ ist die reduzierte Energie und $a = 0,8852 \cdot a_0 \cdot (Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}})^{-\frac{1}{2}}$ der Thomas-Fermi Abschirmparameter, mit $a_0 = 0,053 \text{ nm}$ dem Bohr'schen Radius. Die reduzierte Reichweite ρ ist gegeben durch:

$$\rho = x \cdot \frac{4 \cdot \pi \cdot a^2 \cdot N \cdot M_1 \cdot M_2}{(M_1 + M_2)^2} \quad (N = \text{atomare Dichte}) \quad (5)$$

Der Proportionalitätsfaktor k ist gegeben durch ([LIN68]):

$$k = \frac{0.0793 \cdot Z_1^{\frac{2}{3}} \cdot Z_2^{\frac{2}{3}} \cdot (M_1 + M_2)^{\frac{3}{2}}}{Z_1^{\frac{1}{2}} \cdot M_1^{\frac{3}{2}} \cdot M_2^{\frac{1}{2}}} \quad (6)$$

2.1.2 Nuklearer Energieverlust

Der nukleare Energieverlust entsteht durch Wechselwirkung der einfallenden Ionen mit Kernen der Targetatome. Hierbei handelt es sich um eine elastische Wechselwirkung, die als klassisches Zweikörperproblem behandelt werden kann und als primäres Ereignis bezeichnet wird ([THO69]). Der Energieübertrag eines Ions auf ein Targetatom beträgt beim elastischen Stoß:

$$T = T_m \cdot \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \quad (7)$$

T_m ist dabei die maximal übertragbare Energie die bei senkrechtem Stoß auftritt und beträgt:

$$T_m = \gamma \cdot E \quad \text{mit} \quad \gamma = \frac{4 \cdot M_1 \cdot M_2}{(M_1 + M_2)^2} \quad (8)$$

Ist die Energie T , welche auf das Targetatom übertragen wird größer als die Verlagerungsenergie E_D , so kann das Atom seinen Gitterplatz verlassen. E_D ist in Einkristallen abhängig von der Kristallrichtung ([KIN83]) und beträgt für Metalle zwischen 5 und 80 eV ([JUN83],[VAJ77]). Der Wert für Beryllium liegt nach [JUN78] bei 7 eV. Ein verlagertes Atom kann durch elastische Stöße weitere Targetatome verlagern (sekundäre Ereignisse) und damit eine Stoßkaskade auslösen. Die gesamte Verlagerungsenergie ergibt sich durch Integration und beträgt ([THO69]):

$$S_n = \left(\frac{dE}{dx} \right)_n = -N \cdot \int_{E_D}^{\gamma \cdot E} T \cdot \frac{d\sigma}{dT} dT \quad (9)$$

wobei $d\sigma/dT$ ist der differentielle Verlagerungsquerschnitt ist.

Zur Berechnung des Querschnitts braucht man ein Potential, wobei sich das Coulombpotential zur Beschreibung der nuklearen Wechselwirkung von leichten Ionen mit Targetatomen eignet:

$$V(r) = \frac{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2}{r} \cdot \phi \left(\frac{r}{a} \right) \quad (10)$$

Damit ergibt sich der differentielle Verlagerungsquerschnitt zu:

$$\frac{d\sigma}{dT} = \frac{4 \cdot \pi \cdot a_0^2 \cdot M_1 \cdot Z_1^2 \cdot Z_2^2 \cdot E_R^2}{M_2 \cdot E} \cdot \frac{1}{T^2} \quad \text{mit} \quad E_R = \frac{e^2}{2a_0} \quad (11)$$

Der totale Verlagerungsquerschnitt:

$$\sigma_D = \frac{4 \cdot \pi \cdot a_0 \cdot M_1 \cdot Z_1^2 \cdot Z_2^2 \cdot E_R^2 \left(1 - \frac{E_D}{\gamma \cdot E}\right)}{M_2 \cdot E \cdot E_D} \quad (12)$$

Die bei einem primären Ereignis übertragene mittlere Energie ist ([THO60]):

$$\bar{T} = \frac{E_D \cdot \ln \frac{\gamma E}{E_D}}{1 - \frac{E_D}{\gamma \cdot E}} \quad (13)$$

Als Beispiel seien hier Mn-Ionen erwähnt, welche mit 300keV auf einen Beryllium-Kristall geschossen werden. Die mittlere übertragene Energie, \bar{T} , beträgt hierbei ca. 118eV.

Die Wechselwirkung schwerer Ionen mit Targetatomen läßt sich, statt durch das Coulombpotential, besser durch das Nielsen-Potential beschreiben:

$$V(r) = \frac{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2 \cdot a \cdot e^{*-1}}{r^2} \quad \text{mit } e^* = \text{Eulerzahl} \quad (14)$$

Reichweite und Reichweitenstreuung

Die Berechnung der Reichweite R_p und der Reichweitenstreuung ΔR_p , der implantierten Ionen erfolgte mit Hilfe der TRIM-Computersimulation, deren Grundlagen in ([BIE80]) beschrieben sind. Dieses Programm führt eine numerische Simulation durch, bei welcher die oben beschriebenen Gleichungen für den nuklearen und den elektronischen Energieverlust benutzt werden.

2.1.3 Defekterzeugung

Während des Implantationsvorgangs kommt es zur Erzeugung von Defekten im Wirtsgitter. Der von Ionen in Stoßprozesse übertragene Anteil der ursprünglichen Energie wird hierbei durch den nuklearen Energieverlust beschrieben. Hierbei werden Atome aus ihrer Gitterposition verlagert und erzeugen Frenkelpaare. Diese bestehen aus einem Eigenzwischengitteratom und einer Leerstelle. Die Anzahl der erzeugten Frenkelpaare läßt sich durch folgende Gleichung beschreiben ([KIN55]):

$$N(E) = \int \frac{dE'}{S_{tot}(E')} \cdot \int \frac{d\sigma(E', T)}{dT} \nu(T) dT \quad (15)$$

$d\sigma(E', T)/dT$ ist das Energiespektrum der primär angestoßenen Targetatome, $S_{tot}(E')$ der totale Energieverlustparameter und $\nu(T)$ eine Funktion, welche das Maß der Schädigung beschreibt. $\nu(T)$ ist nur vom Material und nicht von der Art der Bestrahlung

abhängig. Sie wird üblicherweise durch das modifizierte Kinchin-Pease Modell ausgedrückt ([KIN55],[NOR75]):

$$\begin{aligned} \nu^{KP} &= 0 && \text{für } T < E_D \\ \nu^{KP} &= 1 && \text{für } E_D < T < 2,5E_D \\ \nu^{KP} &= \frac{0,8 \cdot E_N(T)}{2 \cdot E_D} && \text{für } T > 2,5E_D \end{aligned} \quad (16)$$

Hierbei ist $E_N(T)$ der Anteil der übertragenen Energie T , welcher in nuklearen Stößen deponiert wird.

Ein quantitatives Maß für die Defektproduktion ist der Begriff *dpa* (**d**isplacements **p**er **a**tom). Er gibt an, wie oft ein Targetatom im Mittel während einer Bestrahlung verlagert wird:

$$dpa = \frac{0,8 \cdot F_D \cdot \phi}{2 \cdot E_D \cdot N} \quad (17)$$

Mit E_D : Verlagerungsenergie; N : Atomare Dichte; F_D : (Energie in nukleare Stöße oberhalb E_D)/(Einheitstiefe); ϕ : Fluenz der eingeschossenen Ionen.

Die Energiedifferenz zwischen der Verlagerungsenergie (für Be: $\cong 7eV$ [JUN78]) und der Energie, die zur Bildung eines Eigenzwischengitteratoms nötig ist ($\cong 5eV$), wird nach Beendigung der Versetzungsphase als thermische Anregung an das Gitter abgegeben ([LEH77]). Erhält das primär angestoßene Atom durch den Stoß eine größere Energie, so ist es in der Lage weitere Atome zu verlagern. Diese Atome können ihrerseits wiederum Atome verlagern, was zu einer Stoßkaskade oder einem 'Displacement Spike' führt. Es kommt zur Bildung von individuellen Subkaskaden ([WAL78]).

Erfolgt die Bestrahlung bei tiefen Temperaturen, so nimmt die Anzahl existierender Frenkelpaare mit der primär übertragenen Energie ab. Dies kann aus Messungen des Widerstands während der Bestrahlung geschlossen werden, unter der Annahme, daß jedes Frenkelpaar einen konstanten Beitrag zum spezifischen Widerstand liefert ([AVE82]). Die Kaskadenregion enthält nach Beendigung der Stoßkaskade beträchtliche kinetische Energie, und viele Atome befinden sich in einem instabilen Zustand. Die Defektkonzentration wird durch einen thermisch angeregten Relaxationsprozeß ('Thermal Spike') verringert([VIN76],[AVE82]). Geht man nun zu Temperaturen bei denen Punktdefekte beweglich werden, so können sich aus Frenkelpaaren Defektkonfigurationen, wie Eigenzwischengitteratom- und Leerstellencluster, bilden.

2.1.4 Kaskadenmodelle

Bei Neutronen- und Ionenbestrahlung (bzw. Implantation) ist der Energieübertrag der einfallenden Teilchen auf die Targetatome relativ hoch (im *keV*-Bereich). Dies führt dazu, daß viele sekundäre Verlagerungen stattfinden, und es kommt zur Bildung von Stoßkaskaden. In Abb.3 ist eine Simulation von Stoßkaskaden in Beryllium, am Beispiel Chlor und Bismut zu sehen. Es wurden je drei Ionen auf das Target geschossen und die

einzelnen Subkaskaden berechnet. Für die Implantation von Cl mit 240keV ist zu sehen, daß der Abstand zwischen zwei Stößen relativ groß und die Dichte der Kaskaden gering ist. Im Fall des Bi (300keV) ist der Abstand zwischen zwei Stößen deutlich geringer und die Kaskadendichte wesentlich höher als bei Cl. Die Reichweite der Cl-Ionen ist, trotz geringerer Energie, größer als die des Bi.

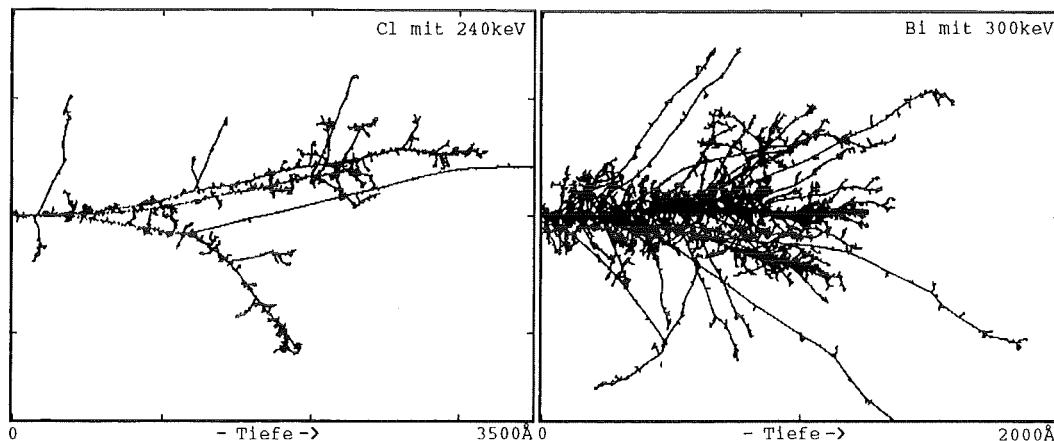


Abb. 3: TRIM-Simulation von Kollisionskaskaden in Be. Links: 240keV Cl-Ionen; rechts: 300keV Bi-Ionen.

Es gibt zwei grundsätzlich verschiedene Entwicklungsmöglichkeiten einer Stoßkaskade:

- Haben die einfallenden Ionen eine hohe Geschwindigkeit oder eine kleine Masse, so ist ihre mittlere freie Weglänge zwischen zwei Stößen und damit die Entfernung zwischen zwei primären Stößen groß. Jedes der primär angestoßenen Atome kann eine eigene Subkaskade einleiten. In dem Bereich, in welchem die verlagerten Atome zum Stillstand kommen, steigt die Wahrscheinlichkeit einer Wechselwirkung untereinander. Die Anhäufung verlagerten Atome am Ende jeder Subkaskade ist die Folge.
- Haben Ion und Target schwere Massen, so ist auch bei einer hohen Geschwindigkeiten des einfallenden Ions die mittlere freie Weglänge relativ klein. Die hohe Dichte der Streueignisse bewirkt ein Überlappen der einzelnen Subkaskaden, zwischen ihnen kann nicht mehr unterschieden werden. Die Kollisionskaskade kann hier durch einen Bereich mit einer großen Dichte an verlagerten Atomen beschrieben werden.

Ein detaillierteres Bild der Entwicklung von Kollisionskaskaden wurde von Guinan und Kinney [GUI81] aufgrund von molekulardynamischen Rechnungen eingeführt. Hiernach kann der zeitliche Verlauf in drei Phasen unterteilt werden:

1. Stufe **I** oder Kollisionsphase ($t < 2 \cdot 10^{-13} \text{ s}$): In dieser Stufe wächst die Anzahl

der Frenkelpaare aufgrund von primären und sekundären Prozessen bis weit über die Defektanzahl, welche in Stufe **III** beobachtet wird, an.

2. Stufe **II** ($t < 0,5 \cdot 10^{-12}s$) nennt man die Relaxationsphase, während der viele benachbarte Frenkelpaare rekombinieren. Am Ende dieser Stufe stimmt die Anzahl der Frenkelpaare gut mit jener überein, welche man aus der modifizierten Kinchin-Pease Formel (Gleichung 16) erhält.
3. Stufe **III** ($t < 2 \cdot 10^{-12}s$) ist die Abkühlphase, auch *Thermal Spike* genannt. Während dieser Phase kommt es, induziert durch große Spannungsfelder, zum Abbau weiterer Defekte. Am Ende dieser Phase ist die Kaskadenregion im thermischen Gleichgewicht mit ihrer Umgebung. Aufgrund der erhöhten Beweglichkeit von Defekten in dieser Phase kann es zur Bildung von Fremdatom-Defekt Komplexen kommen.

2.2 Rutherford-Rückstreuung

Die Rutherford-Rückstreu-spektrometrie (RBS) ist eine Analyse-methode zur Untersuchung oberflächennaher Gebiete in Festkörpern. Heutzutage benutzt man Rutherford Rückstreuexperimente gezielt zur Bestimmung von Diffusionsprofilen und zur Analyse der Zusammensetzung dünner Filme. In dieser Arbeit wurde die RBS gekoppelt mit der Channeling-Methode zur Lokalisierung von Fremdatomen in Be Einkristallen genutzt. Die Vorteile dieser Methode sind hierbei seine Massentrennung, Tiefenauflösung und die Möglichkeit zur Bestimmung der atomaren Zusammensetzung. Die Reichweite der von uns implantierten Ionen (1000-4000Å) liegen im Bereich der Abfragetiefe der Methode (mehrere μm).

2.2.1 Prinzip der Rutherford-Rückstreu-spektrometrie

Eine Prinzipskizze der Rutherford-Rückstreu-spektrometrie (RBS) ist in Abb.4 gezeigt. Ein monoenergetischer Ionenstrahl trifft auf den zu untersuchenden Festkörper (Target). Die Energie der zurückgestreuten Projektilionen wird mit Hilfe eines Detektors, welcher einen bestimmten Raumwinkel erfaßt, registriert. Eine ausführliche Beschreibung dieser Methode findet man z.B. in [CHU78],[MAY77].

Der Rutherford-Rückstreu-spektrometrie liegen vier physikalische Phänomene zugrunde, die jeweils eine bestimmte Eigenschaft dieser Methode nach sich ziehen:

1. Der Energietransfer vom Projektil (m_1, Z_1) auf den Targetkern (m_2, Z_2) erfolgt durch einem elastischen Stoß. Dieser Energieübertrag wird durch den kinematischen Faktors k ausgedrückt und ermöglicht eine Massentrennung.

2. Die Wahrscheinlichkeit eines Stoßereignisses wird durch den differentiellen Wirkungsquerschnitt $d\sigma/d\Omega$ bestimmt. Damit kann, besteht das Target aus mehreren Atomsorten, die quantitative Zusammensetzung bestimmt werden.
3. Während der Bewegung eines Ions durch Materie verliert dieses durch die Wechselwirkung mit den Targetatomen Energie. Dieser Energieverlust führt, da er von der gesamten Weglänge des Projektils im Target abhängt, zu einer Tiefenauflösung.
4. Statistische Schwankungen beim Energieverlust des Projektils (energy straggling) begrenzen die Massen- und Tiefenauflösung.

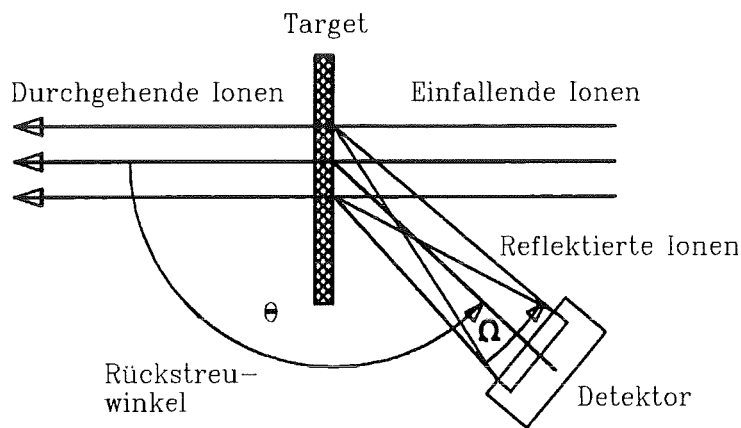


Abb. 4: Prinzipielle Meßanordnung der Rutherford-Rückstreu-spektrometrie [CHU78]

2.2.2 Massentrennung

Trifft ein Projektil der Masse m_1 mit der Energie E_0 auf ein ruhendes Targetatom der Masse m_2 , so wird es durch einen elastischen Stoß in einem Winkel θ gestreut und hat danach die Energie E^* . Das Verhältnis zwischen der Projektilenergie nach dem Stoß (E^*) und der davor (E_0) bezeichnet man als kinematischen Faktor k :

$$k \equiv \frac{\text{Energie nach dem Stoß}}{\text{Energie vor dem Stoß}} = \frac{E^*}{E_0} \quad (18)$$

Mit Hilfe der Energie- und Impulserhaltung kann ein Ausdruck für den kinematischen Faktor hergeleitet werden, welcher nur noch von den Massen m_1, m_2 und dem Rückstreuungswinkel θ abhängt. Im Laborsystem ergibt sich dann folgender Ausdruck:

$$k_{m_2} = \left(\frac{\sqrt{m_2^2 - m_1^2 \cdot \sin^2 \theta} + m_1 \cdot \cos \theta}{m_1 + m_2} \right)^2 \quad (19)$$

Ist das Targetmaterial aus mehreren Atomsorten (m_2, m_3) zusammengesetzt, so werden diese entsprechend der Differenz in den k -Faktoren $\Delta k = k_{m_3} - k_{m_2}$ im Energiespektrum

um die Energiedifferenz $\Delta E = \Delta k \cdot E_0$ auseinanderliegen. Damit ist eine Massenbestimmung der im Target enthaltenen Atome über die Energieanalyse der rückgestreuten Teilchen möglich. Die bestmögliche Massenauflösung erhält man nach Gleichung (19) bei θ gleich 180° . Daher ist man, falls eine hohe Massenauflösung benötigt wird, bestrebt, möglichst große Streuwinkel zu benutzen.

2.2.3 Tiefenskalierung und Energieverlust

Außer der Massentrennung erlaubt die Rutherford-Rückstreuspektrometrie auch eine Bestimmung der Tiefe, in welcher der Streuprozess stattfand. Auf dem Weg durch das

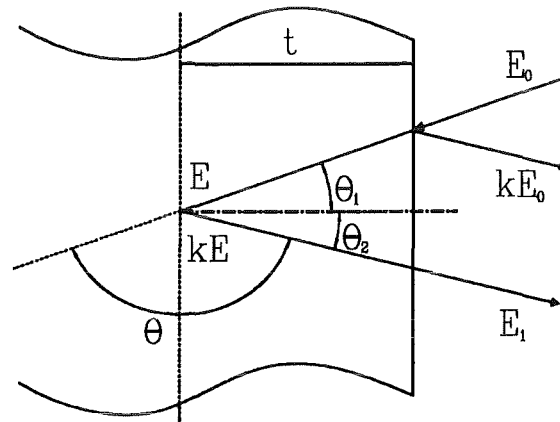


Abb. 5: Ein unter dem Winkel θ_1 mit der Energie E_0 einfallendes Projektil, das in einer Tiefe t im Target unter dem Winkel θ gestreut wird, hat nach dem Verlassen des Targets die Energie E_1 .

Targetmaterial bis in die Tiefe t , wo der Streuprozess stattfindet, und auf dem Rückweg bis an die Probenoberfläche verliert das Projektil Energie. Für diesen Energieverlust sind Wechselwirkungen mit den gebundenen oder freien Elektronen des Targets sowie Wechselwirkungen mit den durch Elektronen teilweise abgeschirmten Targetatomkernen verantwortlich.

Der Energieverlust dE/dx hängt von der verwendeten Ionensorte, der Zusammensetzung des Targets und der Energie der Projektilionen ab. Die Energiedifferenz ΔE zwischen Ionen welche direkt an der Targetoberfläche gestreut werden, und solchen, die in der Tiefe t gestreut werden, beträgt (siehe Abb. 5):

$$\Delta E = k \cdot E_0 - E_1 = [S] \cdot t \quad (20)$$

$[S]$ ist hierbei der sogenannte Rückstreuenergieverlustparameter, der sich wie folgt zusammensetzt:

$$[S] = \left[\frac{k}{\cos \theta_1} \frac{dE}{dx} \Big|_{E_0} + \frac{k}{\cos \theta_2} \frac{dE}{dx} \Big|_{k \cdot E_0} \right] \quad (21)$$

θ_1 ist hierbei der Einfallswinkel, θ_2 der Ausfallswinkel des Projektilions bezüglich der Oberflächennormalen des Targets (siehe Abb.5). Der Zusammenhang zwischen diesen beiden Winkeln und dem Rückstreuwinkel θ ist wie folgt: $\theta = 180^\circ - (\theta_1 + \theta_2)$. Bei der Berechnung von $[S]$ wurde die sogenannte Oberflächennäherung benutzt, bei welcher die relative Änderung der Ionenenergie entlang ihrer Bahn vernachlässigt wird. Das heißt entlang der einlaufenden Bahn wird die Energie E_0 und entlang der auslaufenden Bahn die Energie $k \cdot E_0$ benutzt. Diese Näherung ist nur bei dünnen Filmen und in oberflächennahen Bereichen, wie sie bei der Ionenimplantation erreicht werden, gültig. Der Energieverlust dE/dx ist proportional zur atomaren Dicht N des Targets. Der Bremsquerschnitt ε , welcher durch

$$\varepsilon = \frac{1}{N} \frac{dE}{dx} \quad (22)$$

definiert wird, ist dahingegen ein reiner Materialparameter und unabhängig von N . Setzt man dies in Gleichung (21) ein, so ergibt sich:

$$[S] = N \cdot \left[\frac{k}{\cos \theta_1} \varepsilon(E_0) + \frac{1}{\cos \theta_2} \varepsilon(k \cdot E_0) \right] \equiv N \cdot [\varepsilon] \quad (23)$$

Durch den kinematischen Faktor k ist der Rückstreuverlustparameter $[S]$ für jede Atomsorte unterschiedlich. Hat man ein mehrkomponentiges Target mit der Zusammensetzung $A_m B_n$, dann wird $\varepsilon^{A_m B_n}$ nach der Braggschen Regel berechnet. Der Bremsquerschnitt $\varepsilon^{A_m B_n}$ in einem solchen Target ist gleich der Summe der einzelnen Bremsquerschnitte ε^A und ε^B der einzelnen Komponenten, gewichtet mit deren Konzentrationen:

$$\varepsilon^{A_m B_n} = m \cdot \varepsilon^A + n \cdot \varepsilon^B. \quad (24)$$

Die energieabhängigen Bremsquerschnitte werden in der Praxis durch Polynomfits angenähert. Diese sind in tabellierter Form z.B. in ([ZIE73],[ZIE77]) zu finden.

2.2.4 Atomare Zusammensetzung

Die Wahrscheinlichkeit, daß ein vom Target zurückgestreutes Ion in den von einem Detektor aufgespannten Raumwinkel Ω fällt, ist durch den Streuquerschnitt σ gegeben:

$$\sigma = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (25)$$

Der differentielle Wirkungsquerschnitt $d\sigma/d\Omega$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Ion von einem Targetatom in den Raumwinkel $d\Omega$ gestreut wird. Unter der Annahme, daß die für die Streuung verantwortliche Wechselwirkung durch das Coulombpotential bestimmt wird, hat Rutherford $d\sigma/d\Omega$ berechnet. Damit ergibt sich im Laborsystem

die bekannte Rutherfordsche Streuformel:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E} \right)^2 \frac{4}{\sin^4 \theta} \frac{\left(\sqrt{1 - \left(\frac{m_1}{m_2} \sin \theta \right)^2} + \cos \theta \right)^2}{\sqrt{1 - \left(\frac{m_1}{m_2} \sin \theta \right)^2}} \quad (26)$$

m_1, Z_1 : Masse bzw. Kernladung des Projektilions
 m_2, Z_2 : Masse bzw. Kernladung des Targetatoms
 e : Elementarladung
 E : Energie des Projektilions unmittelbar vor dem Stoß
 θ : Rückstreuwinkel

Fällt der Ionenstrahl senkrecht auf die Probe, und benutzt man die Oberflächennäherung, so beträgt die Zahl H der innerhalb eines Energiefensters ΔE detektierten Teilchen:

$$H = \sigma(E_0) \cdot \Omega \cdot Q \cdot N \cdot \frac{\Delta E}{[S]} \quad (27)$$

Hierbei ist Q die auf die Probe geflossene Ladung und N die atomare Dichte des Targets. $\Delta E/[S]$ entspricht einem Tiefenintervall Δx , welches durch die Wahl eines Energiefensters im Rückstreupektrum gegeben ist. Hat man nun ein zweikomponentiges Target und wendet Gleichung (27) auf die Komponenten A und B an, so ergibt sich nach einer Quotientenbildung:

$$\frac{N_A}{N_B} = \frac{m}{n} = \frac{\sigma_B}{\sigma_A} \cdot \frac{[S]_A^{A_m B_n}}{[S]_B^{A_m B_n}} \cdot \frac{H_A}{H_B} \quad (28)$$

Da der vom Detektor erfaßte Raumwinkel im allgemeinen nur einige Milliradian beträgt, können die Streuquerschnitte näherungsweise durch die differentiellen Wirkungsquerschnitte ersetzt werden. Liegen die Massen der beiden Komponenten A und B nicht allzuweit voneinander, so liegt der Quotient $[S]_A^{A_m B_n} / [S]_B^{A_m B_n}$ nahe 1. Ist die Konzentration von B in einem Wirtsgitter A klein, so kann das Target als reines Element betrachtet werden und es genügt $[S]_A^A$ und $[S]_B^A$, zu berechnen. Im Fall der in dieser Arbeit implantierten Fremdatomkonzentrationen (kleiner 0,2%) in Be kann das Target als reines Element betrachtet werden, damit genügt es also, $[S]_{Be}^{Be}$ und $[S]_{Fremdatom}^{Be}$ zu bestimmen.

Die Anzahl der implantierten Fremdatome in einer Probe, welche in oberflächennahe Bereiche implantiert wurde, kann nun aus dem Rutherford Rückstreupektrum bestimmt werden. Ausgehend von Gleichung (28) und unter Benutzung der weiter oben besprochenen Näherungen, ergibt sich für die Anzahl der implantierten Fremdatome N_i :

$$N_i = \frac{A_i \cdot Z_h^2 \cdot N \cdot \Delta E}{H_h \cdot Z_i^2 \cdot [S_n]} \cdot 10^{-8} \quad (29)$$

A_i : Fläche des Fremdatomsignals [counts]
 Z_h : Kernladung der Wirtsgitteratome

Z_i : Kernladung der Fremdatome
 N : Atomare Dichte des Wirtsgitters [Atome/cm³]
 δE : Energieeichung [keV/Kanal]
 H_h : Zählrate im Wirtsgitter [counts]
 $[S_n]$: Energieverlustparameter [keV/Å]

In dieser Arbeit wurde die Konzentration der Fremdatome im Peakmaximum nach Gleichung (28) bestimmt. Zur Eichung der Energieskala bei den RBS-Spektren wurde eine spezielle Probe verwendet. Sie besteht aus einem Kohlenstoffplättchen, auf das eine sehr dünne Bismut-Schicht aufgedampft wurde. Aus den bekannten Massen der beiden Elemente und der Lage der entsprechenden Signale im Spektrum kann eine Energieeichung festgelegt werden. Mit dieser Eichung kann nach Gleichung (29) die Anzahl der implantierten Fremdatome bestimmt werden.

2.3 Channeling

Beschießt man ein einkristallines Target mit hochenergetischen (MeV -Bereich) Ionen (He^+) parallel zu einer niedrig indizierten Kristallrichtung, so ist die Eindringtiefe der Teilchen deutlich erhöht im Vergleich zum Beschuß einer polykristallinen Probe. Gleichzeitig ist bei diesem orientierten Einschuß die Anzahl der zurückgestreuten Teilchen stark reduziert. Dieses Phänomen wird Channeling-Effekt genannt.

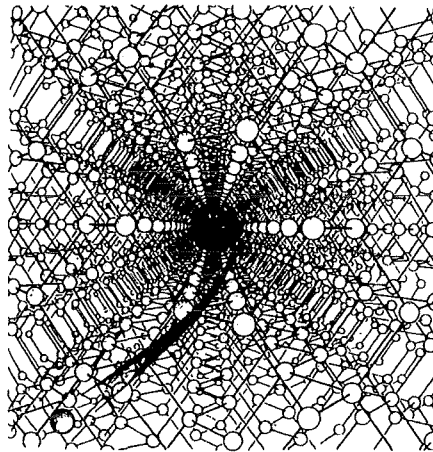


Abb. 6: Künstlerische Darstellung eines im $\langle 110 \rangle$ orientierten Diamantgitter channelnden Teilchens.

Bereits 1912 wurde von Stark ([STA12]) vorgeschlagen, daß ein Kristallgitter die Trajektorie eines energetischen Ions beeinflussen könnte. Diese Idee geriet aber in Vergessenheit. Um 1959 wurde der Channeling-Effekt zufällig bei Computersimulationen zur Reichweitenbestimmung von Ionen in Festkörpern ([ROB63]) entdeckt. Dieses wurde in der nachfolgenden Zeit für verschiedene Projektil-Target Kombinationen expe-

rimentell bestätigt ([PIE63],[LUT63],[NEL63],[ERG64]) Die Grundlagen und Anwendungsmöglichkeiten des Channeling-Effekts sind in zahlreichen Arbeiten beschrieben ([LIN63],[DEA73],[MOR73],[GEM74],[FEL82],[SWA83],[DAV83],[MEY87a]).

Würde die erhöhte Eindringtiefe nur auf der geometrischen Transparenz eines Kristalls beruhen, so wäre der kritische Winkel Ψ_c , bei dem ein einfallendes Ion gerade noch dem Channeling unterliegt, in einer Tiefe von $1\mu m$ kleiner als $0,004^\circ$. Experimentell liegen die Werte für kritische Winkel je nach Material des Einkristalls und Energie der Projektionen jedoch im Bereich von $1 - 3^\circ$. In der Realität beruht das Channeling auf einem Führungseffekt durch Atomketten oder Ebenen. Nimmt man an, daß gechannelte Teilchen unter kleinen Winkeln und unter Erhaltung der transversalen Energie E_\perp an den Atomketten eines Kristalls gestreut werden, so ergibt sich:

$$U(r) + E \cdot \Psi(r) = E_\perp = \textit{konstant} \quad (30)$$

$U(r)$: Wechselwirkungspotential der Ionen mit den Kettenatomen

r : senkrechter Abstand zur Atomkette

E : Energie der Ionen

$\Psi(r)$: momentaner Winkel zwischen Kettenrichtung und Bahntangente

2.3.1 Klassisches Kontinuummodell

Das Kontinuummodell, welches grundlegend zum Verständnis des Channeling-Effekts beiträgt, wurde 1965 von Lindhard [LIN65] veröffentlicht. Die wesentliche Idee liegt darin, die einzelnen Atomketten durch ein Zylinderpotential zu beschreiben. Hierbei wird die korrelierte Folge von Reflektionen eines schnellen Ions an einer Atomkette

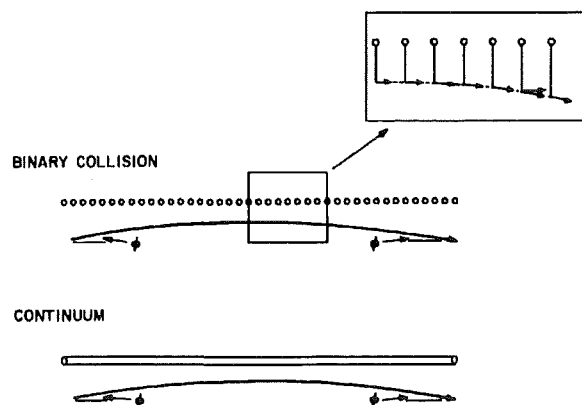


Abb. 7: Ausschnitt aus der Trajektorie eines gechannelten Teilchens. Die aufeinanderfolgenden primären Stöße können durch das Kontinuummodell beschrieben werden. (aus [FEL82])

durch einen Potentialschlauch angenähert, solange ein kritischer Abstand ρ_c nicht unterschritten wird (siehe Abb.7).

Das Modell liefert Näherungen für den kritischen Winkel Ψ_c und die minimalen Ausbeute χ_{min} [FEL82]:

$$\Psi_c(u) = \frac{\Psi_1}{\sqrt{2}} \left[\ln \left(\left(\frac{C \cdot a}{u} \right)^2 + 1 \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (31)$$

$$\text{mit } \Psi_1 = \sqrt{\frac{2 \cdot Z_1 \cdot z_2 \cdot e^2}{E \cdot d}} \quad (32)$$

$$\chi_{min}(u) = N \cdot d \cdot \pi \cdot u^2 \quad (33)$$

Hierbei ist u die mittlere transversale thermische Vibrationsamplitude, d der Gitterabstand, a die Abschirmlänge und C eine Konstante ($C^2 \cong 3$).

Das Kontinuummodell beinhaltet in dieser Form nicht die Abnahme der Ionenenergie durch den elektronischen Energieverlust, welcher aus Kleinwinkelstößen mit Elektronen resultiert. Eine Beschreibung des Channeling-Effekts für einen Kristall mit Defekten oder mit eingelagerten Fremdatomen ist auf diese Art ebenfalls unmöglich, so daß die Anwendung dieses Modells sehr begrenzt ist.

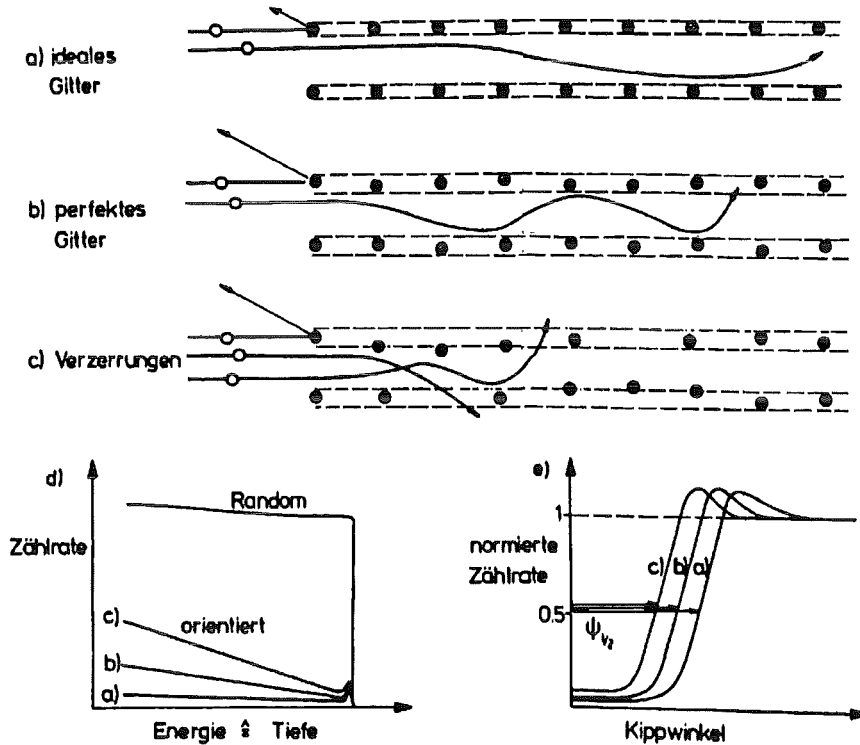


Abb. 8: Trajektorien von Ionen mit ihren entsprechenden Rückstreuspektren und winkelabhängigen Ausbeutekurven

Die transversale Energie ist nur bei der Bewegung eines geführten Teilchens im idealen Kristall erhalten (Abb.8a). Hier bleiben die Teilchen, welche nicht an der Oberfläche zurückgestreut werden, auf oszillierenden Bahnen mit großer Wellenlänge (im

Vergleich zur Gitterkonstanten) im Kanal. Die an der Oberfläche zurückgestreuten Teilchen führen zu einem Oberflächenpeak im RBS-Spektrum (siehe Abb.8d). Zusätzlich können Oxid- oder amorphe Schichten auf der Probenoberfläche zu einem erhöhten Oberflächenpeak führen. In einem perfekten Gitter (Abb.8b) mit thermischen Schwingungen nimmt die transversale Energie mit steigender Eindringtiefe zu und bewirkt schließlich die Streuung des Teilchens. Dieser Prozeß wird auch Dechanneling genannt. Im realen Kristall (Abb.8c) ist das Dechanneling aufgrund von Kristalldefekten wie z.B. Verspannungen oder Versetzungen höher. Die RBS-Rückstreuspektren bei Ausrichtung des Analysestrahl parallel zu einer niedrig indizierten Kristallrichtung (aligned) für die oben diskutierten Fälle sind in Abb.8d dargestellt. Um ein Spektrum zu erhalten, welches dem einer amorphen Probe entspricht (random) wird die Probe einige Grad vom Kanal verkippert und während der Aufnahme der RBS-Rückstreuspektren rotiert. Es hat sich gezeigt, daß auf diese Art reproduzierbare Spektren gewonnen werden.

Um eine winkelabhängige Ausbeutekurve zu erhalten, werden bei verschiedenen Kippwinkeln zum orientierten Einfall RBS-Spektren aufgenommen. Innerhalb dieser Spektren werden über einen bestimmten Tiefenbereich (Energiebereich) Fenster gesetzt und über diese integriert. Die Werte dieser integrierten Zählraten werden anschließend mit dem Spektrum, welches unter Rotation und Verkippung der Probe aufgenommen wurde, normiert. Die Auftragung dieser normierten Werte über dem Kippwinkel (zur orientierten Einfallsrichtung) liefert eine winkelabhängige Ausbeutekurve (Abb.8e). Im Idealfall ist

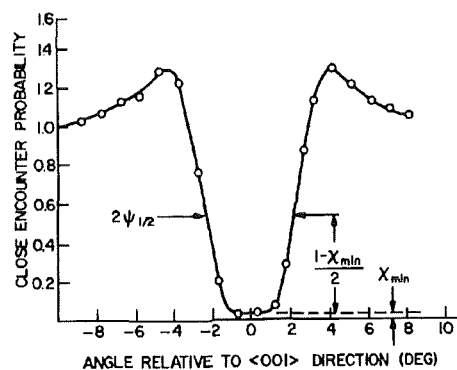


Abb. 9: Normierte winkelabhängige Ausbeutekurve (aus [FEL82])

diese Kurve symmetrisch zum Kippwinkel Null und hat für größere Kippwinkel durch die Normierung den Wert 1 (siehe Abb.9). In der Praxis kann es aufgrund von planaren Channelingeffekten zu Abweichungen von dieser Symmetrie kommen. Dies ist in [RUA87] beschrieben. Für die winkelabhängige Ausbeutekurve gibt es zwei charakteristische Parameter:

- die minimale Ausbeute χ_{min} bei Ausrichtung parallel zum Kanal
- die Halbwertsbreite $\Psi_{1/2}$, welche durch den Winkel gegeben ist, an welchem die Zählrate $(1 - \chi_{min})/2$ beträgt

Diese Parameter sind in realen Kristallen temperaturabhängig. Mit steigender Temperatur nimmt die Halbwertsbreite aufgrund von thermischen Schwingungen der Gitteratome ab. Die minimale Ausbeute steigt bei Erhöhung der Temperatur. Verzerrungen im Gitter aufgrund von Defekten haben einen noch größeren Einfluß auf diese beiden Parameter.

2.3.2 Monte-Carlo Simulation

Um die beim Kontinuummodell auftretenden Einschränkungen zu umgehen, kann man den Channeling-Effekt durch Berechnungen nach der Monte-Carlo Methode simulieren. Damit ist eine Untersuchung der Temperaturabhängigkeit und des Einflusses von Fremdatomen auf die Teilchenbahnen möglich. Solche Simulationen beruhen auf dem binären Stoßmodell und sind in [KAU83], [BAR71] genauer beschrieben. Solche Simulationen werden aufgrund ihres hohen Rechenaufwandes mit Computern durchgeführt.

2.3.3 Anwendungen des Channeling-Effekts

Es gibt zahlreiche praktische Anwendungen des Channeling Effekts wie zum Beispiel die Untersuchung von Gitterfehlern, von Oberflächen und epitaktischen Schichten oder die Gitterplatzbestimmung von Fremdatomen.

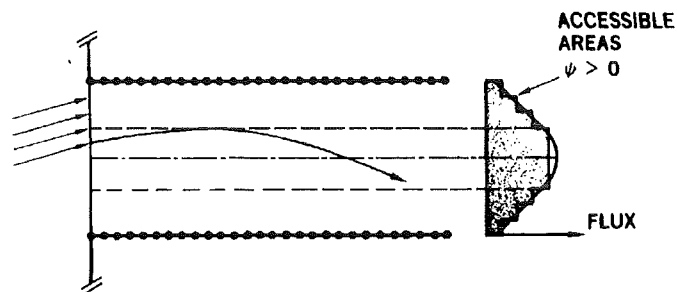


Abb. 10: Schematische Darstellung der Flußverteilung für einen Einfallswinkel $\neq 0$ (aus [FEL82])

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Channelingmethode zur Gitterplatzbestimmung von Fremdatomen in Beryllium genutzt. In diesem Zusammenhang wird ausgenutzt, daß die Rückstreuerausbeute von Fremdatomen auf Zwischengitterplätzen stark von der Wahl der Kristallrichtung abhängt. In *hcp*-Einkristallen läßt sich durch winkelabhängige Ausbeutekurven über die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse der Gitterplatz eindeutig bestimmen. Liegt die Einfallsrichtung parallel oder nahezu parallel zu einer Kristallrichtung, so weist die Flußverteilung ein Maximum in der Kanalmitte auf (siehe Abb.10). Aus diesem Grund zeigt die Rückstreuerausbeute von Fremdatomen, die sich in der Mitte eines Kanals befinden, ebenfalls ein Maximum. Fremdatome auf substitutionellen Gitterplätzen zeigen in

allen Kristallrichtungen die gleichen winkelabhängigen Ausbeutekurven wie die Wirtsgitteratome. Die unterschiedlichen Zwischengitterplätze, welche in Beryllium möglich sind, und deren Auswirkung auf die Ausbeutekurven werden im folgenden Abschnitt besprochen.

Will man den Gitterplatz eines implantierten Fremdatoms in einem Wirtsgitter bestimmen, so erfordert dies eine energetische Trennung der beiden Massen. Das bedeutet, daß die implantierte Ionensorte schwerer sein muß als die Wirtsatome. Da Berylliumatome sehr leicht sind, kann innerhalb der RBS-Spektren nahezu jedes Fremdatomsignal von dem des Wirtsgitters getrennt werden. Durch setzen von Energiefenster in den Spektren und die daraus resultierende winkelabhängige Ausbeutekurve ist es möglich, die Gitterplatzbesetzung der meisten Fremdatomsorten zu bestimmen.

Um eine Aussage über den Prozentsatz der Fremdatome auf regulären Gitterplätzen zu treffen, wird der substitutionelle Anteil, f_s , eingeführt. Hierzu werden im Bereich des Fremdatomsignals (i) und in der korrespondierenden Tiefe des Wirtsgittersignals (h) Energiefenster gesetzt. Aus der Integration über diese Energiefenster, in den Spektren für Ausrichtung des Analysestrahls parallel zu einer niedrig indizierten Kristallrichtung (aligned A) und bei nichtorientiertem Einfall (random, R), errechnet man das Verhältnis dieser beiden Werte (χ_{min}). Es ergeben sich so die minimalen Ausbeuten für das Fremdatom- und Wirtsgittersignal zu:

$$\chi_{min}^h = \frac{R_A^h}{R_R^h} \quad , \quad \chi_{min}^i = \frac{R_A^i}{R_R^i} \quad (34)$$

dabei sind R_A^h und R_R^h die Aligned und Random-Zählraten im Energiefenster des Wirtsgitters, R_A^i und R_R^i die des Fremdatoms. Der substitutionelle Anteil ist definiert durch:

$$f_s = \frac{1 - \chi_{min}^i}{1 - \chi_{min}^h} \quad (35)$$

Diese Gleichung ist eine Näherung und gilt nur, falls gleichzeitig die Halbwertsbreiten ($\Psi_{1/2}$) nahe beieinander liegen. Die Näherung wird ungenau für hohe χ_{min} Werte des Wirtsgitters.

2.4 Die *hcp*-Struktur des Berylliums

In diesem Abschnitt wird die *hcp*-Struktur und die darin möglichen regulären Zwischengitterplätze vorgestellt. Im Hinblick auf die experimentellen Ergebnisse der winkelabhängigen Ausbeutekurven werden anhand von Projektionen der regulären Zwischengitterplätze auf die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Achse und den dazugehörigen Ebenen die Auswirkungen auf deren Aussehen erklärt.

Im Wirtsgitter des Berylliums gibt es zwei bevorzugte Zwischengitterpositionen. Eine dreidimensionale Darstellung dieser Positionen ist in Abb.11 ersichtlich.

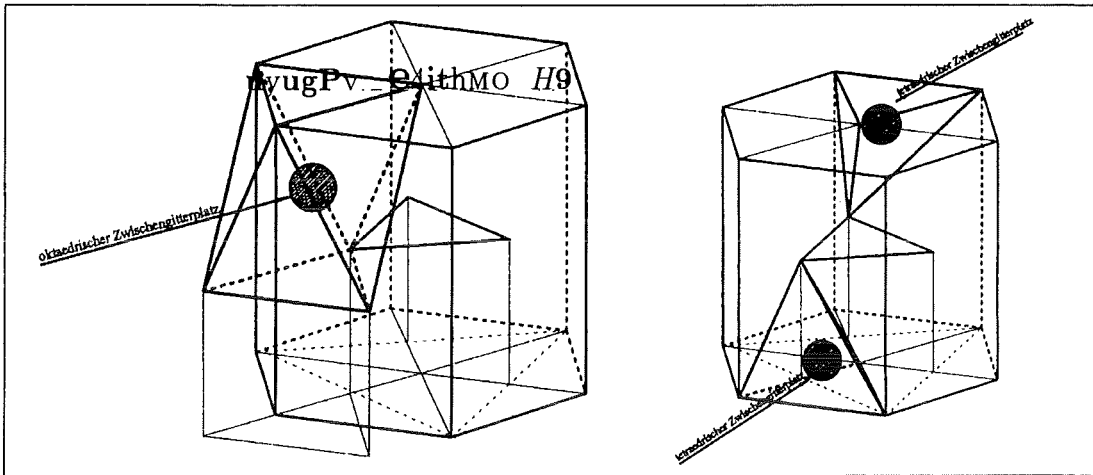


Abb. 11: Oktaedrischer und tetraedrischer Zwischengitterplatz in der hcp-Struktur.

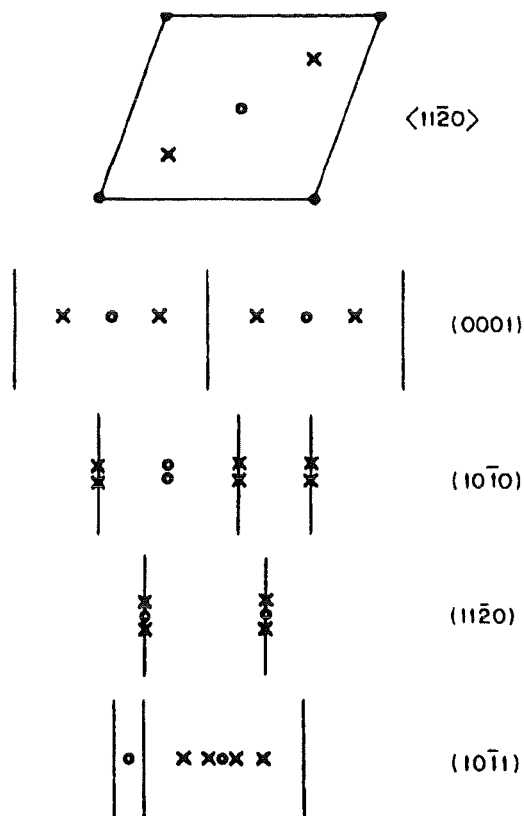


Abb. 12: Projektion des ideal tetraedrischen, x, und des ideal oktaedrischen Zwischengitterplatzes, o, eines hcp Gitters auf die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse und Ebenen.

Die Atome des Berylliums befinden sich in Abb.11 jeweils an den Eckpunkten des Sechsecks und eines in der Mitte davon. Drei Atome befinden sich an den Ecken des Dreiecks in der Mitte des sechskantigen Körpers. Die Schichtfolge der hexagonal dichtest gepackten (*hcp*) Kristallstruktur des Berylliums ist *ABAB*, wobei die Schicht *B* auf den Lücken von *A* sitzt. Die Gitterkonstanten betragen: $a=2,27\text{\AA}$; $c=3,59\text{\AA}$. Die Koordinationszahl von *hcp* Gittern ist 12. Innerhalb dieser Struktur gibt es den oktaedrischen Zwischengitterplatz (Abb.11 links) der sich in der Mitte von 6 Wirtsgitteratompositionen befindet und den tetraedrischen, welcher von 4 solchen Positionen umgeben ist.

Eine Projektion des oktaedrischen und des tetraedrischen Zwischengitterplatzes auf die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse und die dazugehörigen Ebenen ist in Abb.12 gezeigt. Die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Richtung entspricht der *a*-Achse in *hcp* Kristallen. Der ideal tetraedrische Zwischengitterplatz wird durch \times -, der ideal oktaedrische durch \circ -Symbole dargestellt. Die Atome des Wirtsgitters sind als \bullet dargestellt, die Ebenen als Linien.

In dieser Arbeit wurden die winkelabhängigen Ausbeutekurven (Scan) durch verkippen zum $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Kanal gemessen. Das Aussehen dieser Kurven hängt stark von der Wahl der Richtung ab, in welcher die Messung aufgenommen wird. Wählt man einen günstigen Kippwinkel (meistens 20° zur $(10\bar{1}0)$ -Ebene), so kann eine eindeutige Unterscheidung zwischen den beiden bevorzugten Zwischengitterplätzen erreicht werden. Fremdatome, welche sich auf einem oktaedrischen Zwischengitterplatz befinden, liegen in der Mitte des $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Kanals und erzeugen in der winkelabhängigen Ausbeutekurve, da hier der Fluß stark überhört ist, eine deutliche Überhöhung (Peak). Sitzen die Fremdatome hingegen auf tetraedrischen Zwischengitterplätzen, so erwartet man eine Doppelpeakstruktur, deren Höhe nicht so ausgeprägt ist wie im oktaedrischen Fall, da die Flußüberhöhung mit steigendem Kippwinkel zum Kanal abnimmt. Sitzen Fremdatome auf regulären Gitterplätzen (substitutionell), so ist der Verlauf der winkelabhängigen Ausbeutekurve identisch mit der des Wirtsgitters.

2.5 Fremdatom-Punktdefekt-Wechselwirkungen

Das Verhalten von Punktdefekten in Metallen und deren Wechselwirkungen mit Fremdatomen ist in der Literatur beschrieben (siehe z.B. [FEL82], [SWA83] und darin enthaltene Zitate). Defektstrukturen können mit unterschiedlichen Meßmethoden, wie beispielsweise Channeling, Mößbauerspektroskopie, gestörte $\gamma-\gamma$ Winkelkorrelation (PAC) oder Positronenvernichtung analysiert werden. Die Wechselwirkung von Fremdatomen mit Punktdefekten kann durch Channelinguntersuchungen beobachtet werden. In Beryllium hat diese Methode aufgrund der geringen Masse des Wirtsgitters den Vorteil, daß nahezu alle Atomsorten in den Messungen vom Signal des Be getrennt werden können.

In Metallen ist die Aktivierungsenergie von Leerstellen höher als die von Eigenzwischengitteratomen. Dies hat zur Folge, daß das Verhalten dieser unterschiedlichen Punktde-

fekte durch die Vorgabe der Temperatur getrennt untersucht werden kann.

In Abb.13 ist die Erholungskurve des elektrischen Widerstands (Δ) für Neutronenbestrahltes Beryllium dargestellt (siehe [SCH67], [NIC68], [SCH69]). Um die einzelnen Ausheilstufen deutlicher darzustellen ist die Ableitung der Widerstandskurve für zwei unterschiedliche Neutronenfluenzen gezeigt. Die Maxima dieser Kurven entsprechen den einzelnen Ausheilstufen. Unterhalb von ca. 20K findet keine Erholung statt. Die Erholungsstufe I zwischen 20 und 40K entspricht der Rekombination sehr eng benachbarter Frenkelpaare. Die Stufen bei 65K, 90K und 130K entsprechen der Stufe II. In diesem Bereich werden die Eigenzwischengitteratome beweglich. In der letzten Stufe III zwischen 200K und 340K werden Leerstellen beweglich. Bei Raumtemperatur hat die Beweglichkeit der Leerstellen nur eine begrenzte Reichweite, aber der anfängliche elektrische Widerstand hat sich schon zu ca. 95% erholt. Analoge Ergebnisse ergaben sich nach der Bestrahlung mit Elektronen [NIC68].

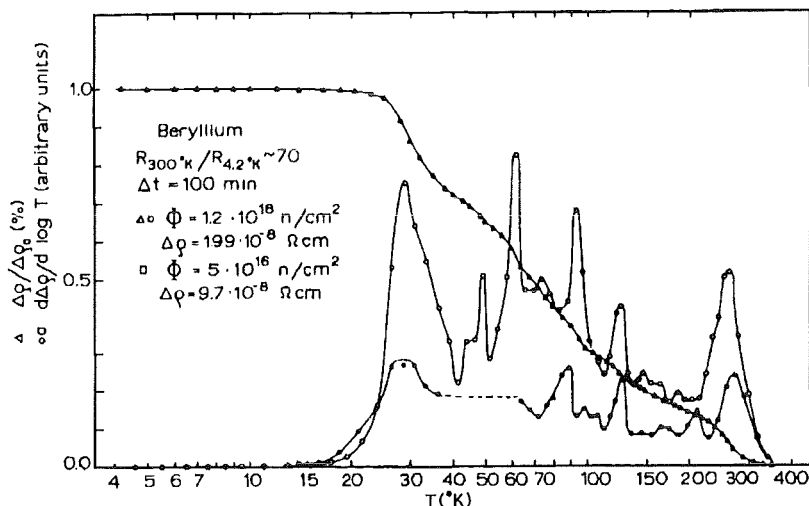


Abb. 13: Isochrone Ausheilkurve des elektrischen Widerstands von Beryllium nach der Bestrahlung mit zwei unterschiedlichen Neutronendosen bei 4,2K (aus [SCH69]).

Werden Fremdatome in kleinen Konzentrationen implantiert, so sind verschiedene Wechselwirkungen mit den Atomen und den Defekten des Wirtsgitters möglich. Je nach Temperatur sind durch die Beweglichkeit von Punktdefekten verschiedene Wechselwirkungen möglich:

- Rekombination von Zwischengitteratomen mit Leerstellen (Defekt-Antidefekt Reaktion). Dies ist schon innerhalb der Erholungsstufe I möglich.
- Auflösung von Defekten an Versetzungen, Korngrenzen oder Oberflächen.
- Einfang von Defekten, insbesondere von Leerstellen, durch Fremdatome. Es kommt zur Bildung von Komplexen von Fremdatomen mit Punktdefekten. Der Einfang

von Leerstellen ist erst ab Stufe **III** möglich.

Sitzt ein Fremdatom auf einem regulären Gitterplatz, so erzeugt es ein Spannungsfeld. Dieses kann von attraktiver oder repulsiver Natur sein, abhängig von der Art der Fremdatome. Benötigen die Fremdatome ein kleineres Volumen als die Atome des Wirtsgitters, so entsteht eine Gitterkontraktion. Im allgemeinen führt dies zu einem bevorzugten Einfang von Eigenzwischengitteratomen. Fremdatome mit einem großen Volumen auf substitutionellen Plätzen bewirken eine Expansion des Gitters, was zu einem bevorzugten Einfang von Leerstellen führt. Auch die chemischen Eigenschaften der implantierten Fremdatome können für die Art der Wechselwirkung von Bedeutung sein. Es kann zur Bildung chemischer Verbindungen oder zum Ausscheiden in der Form von Clustern kommen. Die treibende Kraft für solche Prozesse ist die Minimierung der Verspannungsenergie innerhalb des Kristallgitters.

In vielen Metallen kommt es bei tiefen Temperaturen zur Bildung von gemischten Handeln mit kleinen Fremdatomen und Eigenzwischengitteratomen ([DED78], [EHR78]). Dieser Defekttyp ist allerdings nur bis zur Stufe **III** stabil. Für große Fremdatome ist diese Defektstruktur auch bei tiefen Temperaturen instabil, sie bilden mit einer oder mehreren Leerstellen sogenannte Fremdatom-Leerstellenkomplexe. Stabile Konfigurationen ergeben sich bei Assoziation eines Fremdatoms mit zwei, vier oder sechs Leerstellen. Ein Ausheilen solcher Komplexe findet nach [PLE84] erst zwischen 300 und 500K statt.

Die Wechselwirkung zwischen implantierten Fremdatomen und Punktdefekten bezieht sich im wesentlichen auf die in der Kollisionskaskade erzeugten Punktdefekte (korrelierter Strahlenschaden). Werden implantierte Proben nachbestrahlt, so entstehen zusätzliche Punktdefekte, welche im Hinblick auf die Position der implantierten Fremdatome willkürlich im Gitter verteilt sind (unkorrelierter Strahlenschaden). Die Wechselwirkung dieser nachträglich erzeugten Defekte beruht auf der freien Beweglichkeit dieser Defekte. Die Wechselwirkung von Fremdatomen mit Punktdefekten, besonders im Hinblick auf die Gitterplatzbesetzung, kann gezielt durch die Wahl der Implantationstemperatur untersucht werden.

2.6 Modelle zur Gitterplatzbesetzung implantierter Fremdatome

Die Frage, welche Position die implantierten Atome am Ende ihrer Trajektorien im Wirtsgitter einnehmen, ist von grundlegender Bedeutung. Daher ist es wünschenswert, die Faktoren, welche die Gitterplatzbesetzung bestimmen, zu ermitteln. Die grundlegenden Prozesse, die die Gitterplatzbesetzung bestimmen, können stoßkinetischer Natur, Effekte innerhalb der Kaskade, thermodynamischer Natur, chemische Effekte, mechanisch treibende Kräfte und Wechselwirkungen zwischen Fremdatomen selbst sein. Im

folgenden werden die in der Literatur am häufigsten erwähnten Modelle kurz vorgestellt.

2.6.1 Ersetzungsstoßtheorie

Die Ersetzungsstoßtheorie, welche von Brice [BRI76] formuliert wurde, beruht auf einem rein kinematischen Ansatz zu Beschreibung der Gitterplatzbesetzung implantierter Fremdatome. Ein Ion hoher Energie, das auf einen Festkörper trifft, dringt in ihn ein und verliert seine Energie durch inelastische Wechselwirkung mit den Elektronen und durch elastische Stöße mit den Wirtsgitteratomkernen. Am Ende der Reichweite des Ions dominiert der nukleare Energieverlust. In diesem Bereich besteht die Wahrscheinlichkeit P , daß das Ion ein Wirtsgitteratom von seinem Platz stößt und danach nicht mehr genügend kinetische Energie besitzt, um diesen Gitterplatz zu verlassen. Dieser Prozeß wird Ersetzungsstoß genannt.

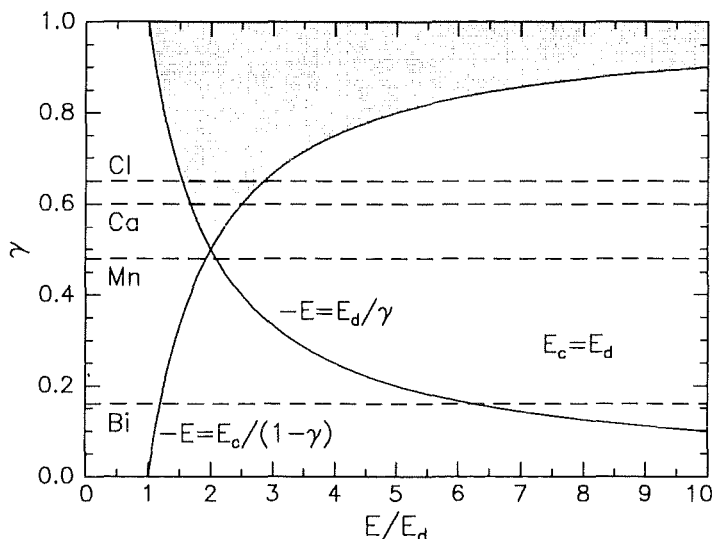


Abb. 14: Darstellung des Bereichs, in welchem Ersetzungsstöße möglich sind (grau dargestellt).

Unter folgenden kinematischen Bedingungen sind Ersetzungsstöße möglich: Das eingeschossene Ion besitzt die Energie $E_1(t)$ und die Masse m_1 . Ein Wirtsgitteratom der Masse m_2 wird von seinem Gitterplatz gestoßen, wenn es eine Energie T erhält, welche größer als die Verlagerungsenergie E_d ist (für Be 7eV). Das Ion wird von der so entstandenen Leerstelle eingefangen, wenn seine verbleibende Energie $(E_1(t) - T) < E_c$ ist, wobei E_c die Einfangenergie ist. Der maximale Wert für T erhält man für den zentralen Stoß mit $T_m = \gamma \cdot E_1(t)$. Hierbei ist γ der bekannte kinematische Faktor: $\gamma = (4m_1m_2)/(m_1 + m_2)^2$. Ein Ersetzungsstoß kann nicht erfolgen, wenn $E_1(t) < E_d/\gamma$ und wenn $E_1(t) > (1 - \gamma)$ sind. Im ersten Fall ist das Ion nicht in der Lage, das Wirtsgitteratom zu verlagern; im zweiten Fall kann es von der Leerstelle nicht eingefangen werden. Diese Bedingungen sind in Abb.14 graphisch dargestellt. Nur in dem

grau gefärbten Bereich sind ErsetzungstöÙe möglich. Für das Wirtsgitter Beryllium sind Beispiele für Cl, Ca, Mn und Bi als gestrichelte Linien eingezeichnet. Es ist aus der Darstellung erkennbar, daß nur für Cl und Ca ErsetzungstöÙe möglich sind. Für alle anderen im Rahmen dieser Arbeit implantierten Elemente, welche schwerer als Mn sind, sind ErsetzungstöÙe unmöglich. Diese Theorie kann hohe substitutionelle Anteile für schwere Fremdatome in Be nicht erklären.

Schnellabschreckung aus der Kaskade

Poate et al. [POA80] haben vorgeschlagen, die erhöhten Löslichkeiten von Fremdatomen durch einen ultraschnellen AbschreckprozeÙ zu erklären. Eine Abschätzung der Abschreckrate führt zu ca. $10^{14} K/s$. Dieses Modell prognostiziert einen hohen substitutionellen Anteil der implantierten Fremdatome.

Darken-Gurry Darstellung

Darken und Gurry [DAR53] benutzen für die Darstellung von substitutionellen Löslichkeiten in der festen Phase die von Hume-Rothery [HUM69] vorgeschlagenen Regeln und Parameter. Diese Regeln besagen in ihrer einfachsten Form, daß Elemente mit gleicher Kristallstruktur und geringer Differenz in der atomaren Größe und Elektronegativität ineinander löslich sein sollten. Als Koordinaten für die Darstellung wurden von ihnen die metallischen Radien für die Koordinationszahl 12 und die Pauling Elektronegativitäten benutzt. Die Hume-Rothery Regeln besagen, daß eine Löslichkeit vorliegt, wenn die Elemente in der Darken-Gurry Darstellung in einer Ellipse mit den Hauptachsen '15% des Radius des Wirtsgitters' und '0,4V Differenz in der Elektronegativität' liegt. Für eine Vorhersage von Löslichkeiten und Nichtlöslichkeiten hat dieses Verfahren einen Erfolg von ca. 50%.

Modell von Alonso und Lopez

Alonso und Lopez [ALO82] trugen den elektronischen Anteil der Lösungswärme $\Delta H_{sol,el}$ über dem atomaren Radius r auf. In dieser Auftragung ist ein Bereich der Substitutionalität empirisch zu ermitteln, er besitzt die Form einer liegenden Ellipse um das Wirtsgitteratom. Diese Darstellung erlaubt die Trennung von substitutionellen und nichtsubstitutionellen Elementen bei metastabilen Lösungen, welche durch Ionenimplantation hergestellt wurden.

Modell von Singh und Zunger

Zur Bestimmung von Löslichkeit und Gitterplatzbesetzung bei der Ionenimplantation verwendeten Singh und Zunger [SIN82] nichtempirische Orbitalradius-Koordinaten. Auf der Basis nicht-lokaler atomarer Pseudopotentialrechnungen wurden Orbitalradien berechnet. Das Modell berücksichtigt nur die Radien der s- und p-Orbitale. Im Gegensatz zu den anderen bisher vorgestellten Koordinaten sind die so bestimmten Radien vom Wirtsgitter abhängig. Der Bereich der Löslichkeit ist allerdings auch hier empirisch zu ermitteln.

2.6.2 Miedema Modell

Von Miedema et al. ([MIE73], [MIE80], [NIE83],[MIE92]) wurde ein halbempirisches Modell entwickelt, durch welches das Vorzeichen und die Größenordnung der Bildungswärme ΔH_f vorhergesagt werden kann. Für die Bildungswärme erhielten sie unter Verwendung der modifizierten Austrittsarbeit Φ^* und der Elektronendichte n_{ws} an der Grenze der Wigner-Seitz Zelle:

$$\Delta H_f = -P(\Delta\Phi^*)^2 + Q(\Delta n_{ws}^{1/3})^2 - R \quad (36)$$

hierbei sind P und Q empirisch zu bestimmende Konstanten. R ist auch eine Konstante, welche nur dann von Null verschieden ist, wenn eine der Komponenten ein Mehrwertiges Metall mit p-Elektronen ist. $n_{ws}^{1/3}$ liefert einen positiven Beitrag zu ΔH_f , da eine Differenz in $n_{ws}^{1/3}$ einen Energieaufwand erfordert, um die Diskontinuität am Rande der Wigner-Seitz Zelle auszugleichen. Eine Differenz in Φ^* liefert einen negativen Beitrag zu ΔH_f , da sie zu einem Ladungstransfer über die Grenzen verschiedener atomarer Zellen führt. Für stark verdünnte Systeme geht die Bildungswärme in die Lösungswärme ΔH_{sol} über, welche benötigt wird, um ein Fremdatom in einer gegebenen Matrix durch ein Wirtsgitteratom zu ersetzen. Damit ergibt sich für den elektronischen Term der Lösungswärme eines stark verdünnten Elements B in einer Matrix A nach [MIE80]:

$$\Delta H_{sol,el}^{B,A} = P \cdot \frac{V_B^{2/3}}{(n_{ws}^{-1/3})_{av}} \cdot \left(-(\Delta\mu^*)^2 + \frac{Q}{P}(\Delta n_{ws}^{1/3})^2 \right) \quad (37)$$

hierbei ist μ^* das chemische Potential und V_B das molare Volumen des Elements B . Dieses halbempirische Modell hat sich als brauchbar zur Vorhersage von Lösungswärmen erwiesen. Mit ihm kann auch eine Vorhersage zur Gitterplatzbesetzung von Fremdatomen getroffen werden. In Abb.15 ist der sogenannte Miedema Plot für Fremdatome in Beryllium dargestellt. Anhand der eingezeichneten Ellipse und der Linien ist zu sehen, daß dieser Plot eine Unterteilung in drei Bereiche erlaubt: substitutionell, tetraedrisch und oktaedrisch. Die Linie und die Ellipse sind hierbei allerdings anhand der bisherigen ([VIA80]) experimentellen Ergebnisse gezogen worden und rein empirisch. Die Werte für Φ^* und $n_{ws}^{1/3}$ sind z. B. in [MIE80] und [MIE92] tabelliert.

Der physikalische Inhalt dieses Modells ist allerdings recht fragwürdig. So verweist zum Beispiel Pettifor [PET87] darauf, daß die Identifizierung des Parameters Φ^* als Austrittsarbeit oder als chemisches Potential von der quantenmechanischen Seite her nicht unterstützt werden kann.

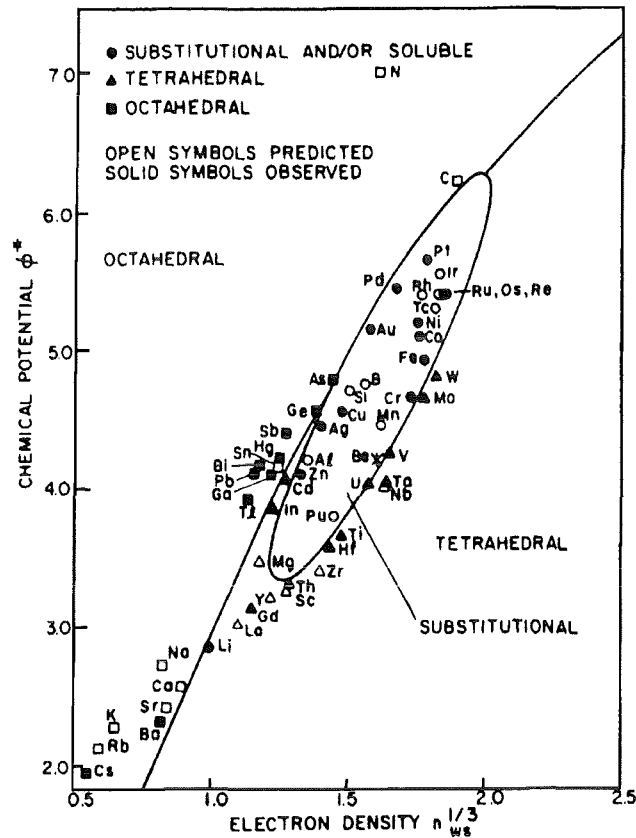


Abb. 15: Miedema Plot für alle in [MIE73] für Be tabellierten Elemente (aus [KAU77a]).

2.6.3 Volumenfehlpassungsenergie

Wie im Rahmen dieser Arbeit gezeigt wird, ist auch ein anderer Parameter dazu geeignet, Vorhersagen über die Gitterplatzbesetzung zu treffen. Dies ist die Volumenfehlpassungsenergie ΔH_{size} . Sie wird nach [ESH53] folgendermaßen abgeschätzt:

$$\Delta H_{size} = 2 \cdot \mu \cdot \frac{V_i - V_h}{3 \cdot \gamma \cdot V_h} \quad \text{mit} \quad \gamma = 1 + \frac{4 \cdot \mu}{3 \cdot K_i} \quad (38)$$

V_i und V_h sind die entsprechenden molaren Volumina von Fremd- und Wirtsgitteratom. K_i ist das Kompressionsmodul des Fremdatoms und μ das Schubmodul des Wirtsgitters.

Diese Gleichung lautet in einer durch Miedema [MIE80] abgeänderter Form und für kleine Konzentrationen:

$$\Delta H_{size} = 1,25 \cdot B \cdot V_m \cdot \delta^2 \quad (39)$$

$$\text{mit } \delta^2 = 2 \cdot \frac{V_{host}^{1/3} - V_{impurity}^{1/3}}{V_{host}^{1/3} + V_{impurity}^{1/3}} \quad (40)$$

$B \cdot V_m$ ist hierbei das Produkt aus Bulkmodul B und Molarvolumen V_m des Wirtsgitters. δ ist der relative Größenunterschied.

3 Experimentelles

3.1 Experimentelle Anordnung

Die Experimente wurden am Institut für Nukleare Festkörperphysik (INFP) des Forschungszentrums Karlsruhe durchgeführt. In diesem Abschnitt werden die zur Ionenimplantation und zur RBS-Analyse benutzten Anlagen kurz beschrieben.

3.1.1 Van de Graaff-Beschleuniger und Ionenbeschleuniger

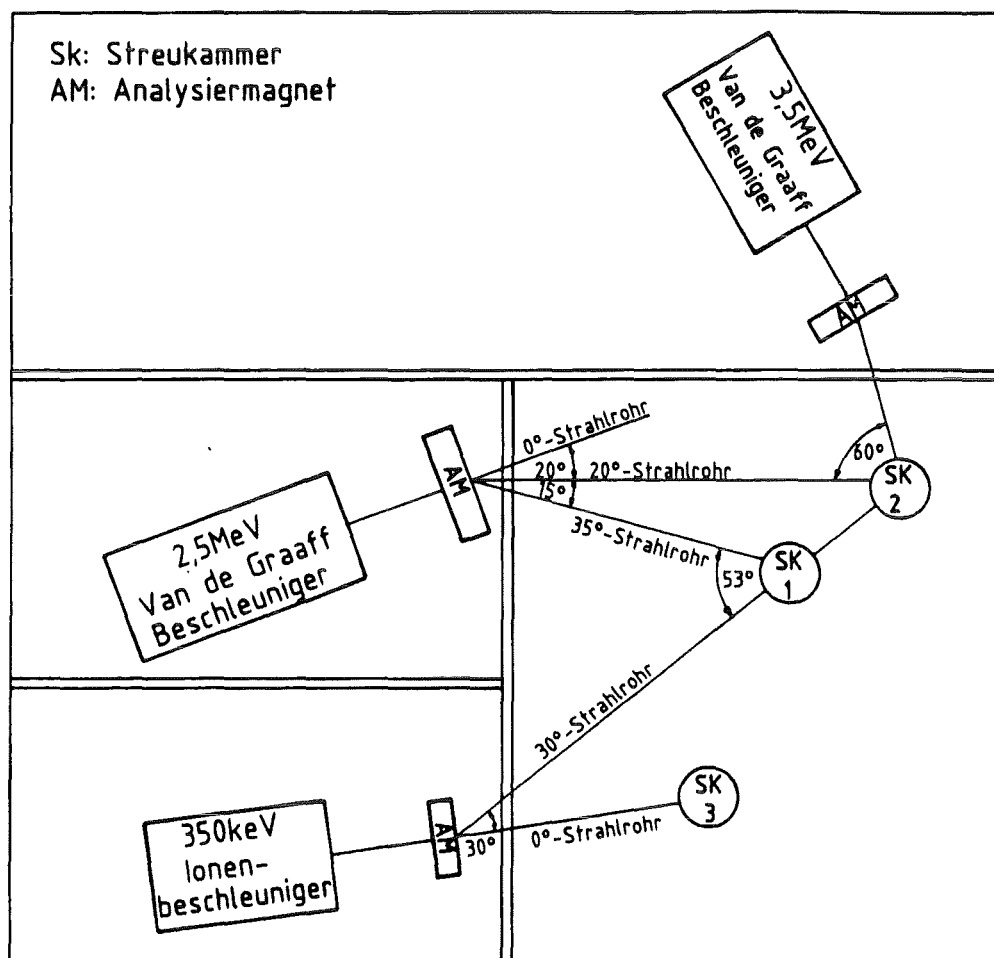


Abb. 16: Anordnung der Beschleuniger, Strahlrohre und Streukammern.

Zur Implantation von Fremdatomen in Beryllium-Einkristalle wurde ein 350 keV Schwerionenbeschleuniger benutzt. Der prinzipielle Aufbau dieses Beschleunigers ist in [LAN77]

und [ZIE78] beschrieben. Mit diesem Beschleuniger ist es möglich, die meisten Ionensorten zu implantieren, nur bei einigen hochschmelzenden Elementen ist mit der vorhandenen Ionenquelle eine Implantation nicht möglich.

Für die Rutherford-Rückstreu- und Channelingexperimente standen zwei Van de Graaf Beschleuniger mit 2 und 3,75 MeV zur Verfügung. Die Messungen wurden mit dem 2 MeV Beschleuniger durchgeführt. Durch einige Vorversuche mit verschiedenen Energien und Blenden zeigte sich, daß bei 1,5 MeV der Untergrund im Bereich des Berylliumsignals innerhalb der RBS-Spektren am geringsten war. Aus diesem Grund wurden sämtliche Messungen in dieser Arbeit bei einer Beschleunigungsenergie von 1,5 MeV für den He^+ Analysestrahl durchgeführt. In Abb.16 ist die Anordnung der Beschleuniger und Meßkammern dargestellt. Gemessen wurde in der Streukammer 1, in welcher in situ implantiert und gemessen werden kann. Der He^+ -Ionenstrahl ist durch ein Blendensystem mit einer Winkeldivergenz von $<0,01^\circ$ sehr gut kollimiert und hat einen Strahldurchmesser von ca. 1 mm. Der für Messungen benutzte Strom der einfallenden He^+ -Ionen lag im Bereich von 10 bis 20 nA.

Die Steuerung der Experimente und die Datenaufnahme erfolgte mit einem OS9-Rechner. Die Auswertung der RBS-Spektren erfolgte mit einem Personal Computer, zum Teil mit dem Programm RUMP, dessen Algorithmen in [DOO85] und [DOO86] beschrieben sind. Einige Auswerterroutinen zum Setzen von Energiefenstern in den RBS-Spektren der winkelabhängigen Ausbeutekurven und deren Normierung wurden im Rahmen dieser Arbeit programmiert.

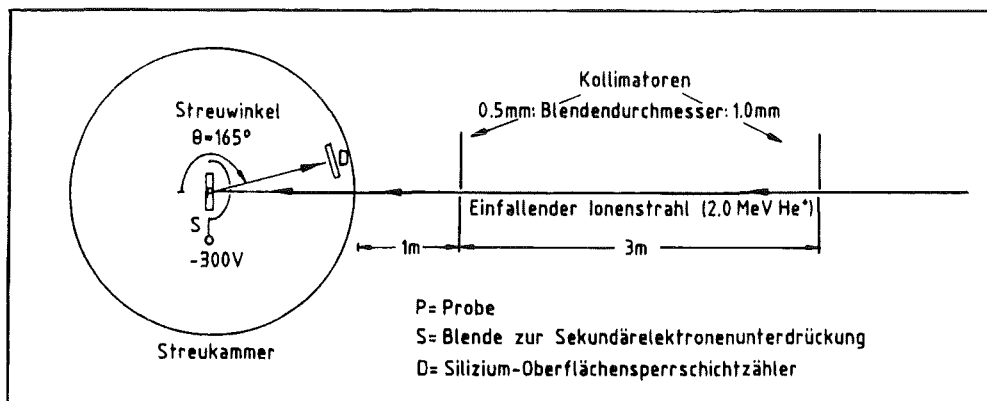


Abb. 17: Strahlengang im Strahlrohr und in der Streukammer

Der Aufbau der Meßkammer ist in Abb.17 skizziert. Der einfallende Ionenstrahl ($1,5 \text{ MeV He}^+$) wird durch zwei Blenden vor der Streukammer kollimiert. Die unter $\theta = 165^\circ$ zurückgestreuten He-Teilchen wurden mit einem Siliziumoberflächensperrschichtdetektor erfaßt und das Energiespektrum über einen AD-Wandler in den Meßrechner eingelesen. Der vom Detektor erfaßte Raumwinkel beträgt $4,6 \text{ msterad}$. Die Energieauflösung des Gesamtsystems liegt bei etwa 20 keV . Um die bei Beschuß mit hochenergetischen

Teilchen entstehenden Sekundärelektronen zu unterdrücken, ist vor der Probe eine Blende angebracht, welche auf einem negativen Potential von $-300V$ liegt. Die Integration über den auf die Probe fließenden Strahlstroms liefert die Ladung, die während der Messung benutzt wurde. Sie wird zur Normierung der Spektren genutzt.

3.1.2 Tieftemperatur- und Dreiachsengoniometer

Zur Messung standen zwei unterschiedliche Goniometer zur Verfügung. Für die Tieftemperaturexperimente wurde ein mit zwei Drehachsen ausgestatteter Kryostat benutzt. Eine genauere Beschreibung dieses Kryostaten findet sich in [KAU83]. Der doppelwandige Kryostat besitzt innen einen Behälter aus einem dünnwandigen Edelstahlrohr, welches an seinem oberen Ende mit einem drehbaren Edelstahlflansch und am unteren Ende mit einem Kupfer Rechteckblock verbunden ist. Der Flansch erlaubt die Drehung und benutzt zur axialen Abdichtung geschmierte Viton-Dichtungen. Außen am Flansch ist ein Zahnkranz angebracht, über welchen sich das Innenteil mittels Schrittmotoren um die vertikale Achse bewegen läßt (θ). Am Boden des Edelstahlbehälters befindet sich ein Cu-Block, in welchen ein Hohlraum gefräst ist. Dieser Hohlraum und der sich darüber befindliche Behälter dienen als Vorratstank, welcher mit flüssigem Helium oder Stickstoff gefüllt werden kann. Die Probe wird zur Messung des Probenstroms isoliert auf einem Probenhalter montiert. Dieser ist über eine Indium-Folie unter Federdruck thermisch an den Cu-Block angekoppelt und um die Oberflächennormale drehbar (ϕ). Der Kryostat besitzt eine äußere Abschirmung, welche mit flüssigem Stickstoff gekühlt wird, und zur thermischen Isolation dient. Die mechanische Reproduzierbarkeit der θ -Achse liegt bei ca. $0,02^\circ$, die der ϕ -Achse ca. $0,2^\circ$.

Für Raumtemperaturmessungen wurde ein Dreiachsengoniometer benutzt, dessen mechanische Reproduzierbarkeit bei allen drei Winkeln ca. $0,01^\circ$ ist. Dieses Goniometer besitzt zusätzlich Verstellmöglichkeiten in x,y und z-Richtung, wodurch die Probe verschoben werden kann, um durch den Analysestrahl induzierte Kohlenstoffablagerungen im Spektrum möglichst gering zu halten.

Der Antrieb der Achsen erfolgte bei beiden Goniometern mit Schrittmotoren, wobei die Winkel durch Absolutwinkelkodierer ausgelesen wurden. Das Vakuum in der Streukammer war bei Raumtemperatur kleiner als $5 \cdot 10^{-5} Pa$ und bei Temperaturen $\leq 77K$ unter $1 \cdot 10^{-6} Pa$.

3.2 Probenpräparation

Für sämtliche in dieser Arbeit durchgeführten Experimente wurden Beryllium-Einkristalle verwendet, deren Oberflächennormale parallel zur a-Richtung ($\langle 11\bar{2}0 \rangle$) orientiert sind. Die Proben waren kreisförmig mit einem Durchmesser von ca. $10mm$ und einer Dicke zwischen 2 und $3mm$. Bei Ätzversuchen der Proben zeigte sich, daß mit einer 1:1

Mischung von H_2SO_4 : Ethanol die glattesten Oberflächen entstanden. Aufgrund der kleinen Ätzrate dieser Lösung wurden die Proben vor den Experimenten für mehrere Stunden geätzt. Um die in Verbindung mit Wasser auf der Probenoberfläche entstehende $\text{Be}(\text{OH})_2$ -Schicht möglichst gering zu halten, wurde diese direkt nach dem Ätzen in wasserfreiem Ethanol gereinigt und unter Stickstoffgas getrocknet.

Die Qualität der geätzten Kristalle wurde durch Aufnahme von Random und Aligned Spektren vor der Implantation überprüft. Die minimale Ausbeute χ_{min} lag bei allen benutzten Einkristallen bei ca. 0,1.

3.3 Auswahl der Ionensorten

Die Auswahl der im Rahmen dieser Arbeit zur Implantation benutzten Ionensorten erfolgte anhand ihrer Volumenfehlpassungsenergie. In der Diskussion der Resultate wird sich zeigen, daß diese ein Parameter ist, mit welchem sich die Ergebnisse in Gruppen einteilen lassen. Mit ihr sind Vorhersagen zum substitutionellen Anteil und der Gitterplatzbesetzung möglich. Im folgenden Kapitel werden die Ergebnisse für die implantierten Elemente Chlor, Mangan, Zink, Gold, Gallium, Quecksilber, Indium, Antimon, Bismut, Tellur, Jod, Calcium und Xenon im einzelnen vorgestellt und diskutiert. Die Volumenfehlpassungsenergien, ΔH_{size} liegen zwischen 7kJ/mol für Cl und 256kJ/mol für Xe.

4 Resultate und Diskussion

4.1 Gitterplatzbesetzung implantierter Fremdatome

In den folgenden Abschnitten werden die Ergebnisse der Gitterplatzbestimmung nach der Implantation im einzelnen vorgestellt und diskutiert. Die Implantationen wurden bei allen Ionensorten bei Raumtemperatur und 77K durchgeführt. Die Channelingmessungen zur Gitterplatzbestimmung erfolgten in situ. Die Tieftemperaturimplantationen dienten dazu, den Einfluß der Leerstellenbeweglichkeit zu untersuchen. Im Fall von Bi wurde eine Implantation bei 5,5K durchgeführt, um den Einfluß der Beweglichkeit von Eigenzwischengitteratomen zu untersuchen. Die Implantationsenergien lagen zwischen 100 und 300keV. Die implantierten Fluenzen lagen zwischen $1 \cdot 10^{14}$ und $5 \cdot 10^{15}$ Atomen pro cm^2 . Dies entspricht Konzentrationen im Peakmaxima von 0,04 bis 0,35%. Die Implantationsfluenzen wurden bei tiefen Temperaturen kleiner gewählt, um die Schädigung des Wirtsgitters möglichst gering zu halten.

Die Ergebnisse für Au, Zn und Mn werden aufgrund des sehr ähnlichen Verhaltens dieser Elemente in einem Abschnitt zusammengefaßt. Anhand der RBS-Spektren der Au Implantation werden die in unseren Messungen aufgetretenen Oberflächenverunreinigungen erklärt. Die in den winkelabhängigen Ausbeutekurven eingezeichneten Linien entsprechen einer Fourierglättung der Meßpunkte und sind nur zur Führung des Auges eingezeichnet.

4.1.1 Gold, Zink und Mangan

Bei Raumtemperatur erfolgte die Implantation von $5 \cdot 10^{14} \text{ Au/cm}^2$ mit 300keV. Abb.18 zeigt das nichtorientierte (Kristall während der Messung verkippt und rotiert), o, und das bei Ausrichtung des Analysestrahls parallel zur $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Richtung aufgenommene, Δ , Rückstreuspektrum. Die Verunreinigungen in diesen Spektren sind typisch für Messungen, welche in dieser Arbeit durchgeführt wurden, und haben verschiedene Ursachen. Ni ist eine Verunreinigung im Be-Einkristall und reichert sich durch den Ätzprozeß auf der Oberfläche an. Der S-Peak kommt von Rückständen der Ätzlösung Schwefelsäure. Eine $\text{Be}(\text{OH})_2$ Schicht an der Kristalloberfläche erzeugt den O-Peak. Aufbrechen von Kohlenwasserstoffen durch den Analysestrahl führt zum Auftreten eines C-Peaks, dessen Größe während der Messung über längere Zeit zunimmt.

Durch Setzen von Energiefenstern, welche als senkrechte Linien in Abb.18 dargestellt sind, ergibt sich nach der Integration über diesen Bereich als minimale Ausbeute für Be nach der Implantation 0,1. Au hat mit einen Wert von 0,1 für die minimale Ausbeute den gleichen Wert wie Be, was darauf hinweist, daß sich nahezu alle implantierten Au-Atome auf substitutionellen Gitterplätzen befinden. Der Implantationspeak von Au ist im RBS-Spektrum unsymmetrisch. Dies kann durch eine Diffusion von Au-Atomen

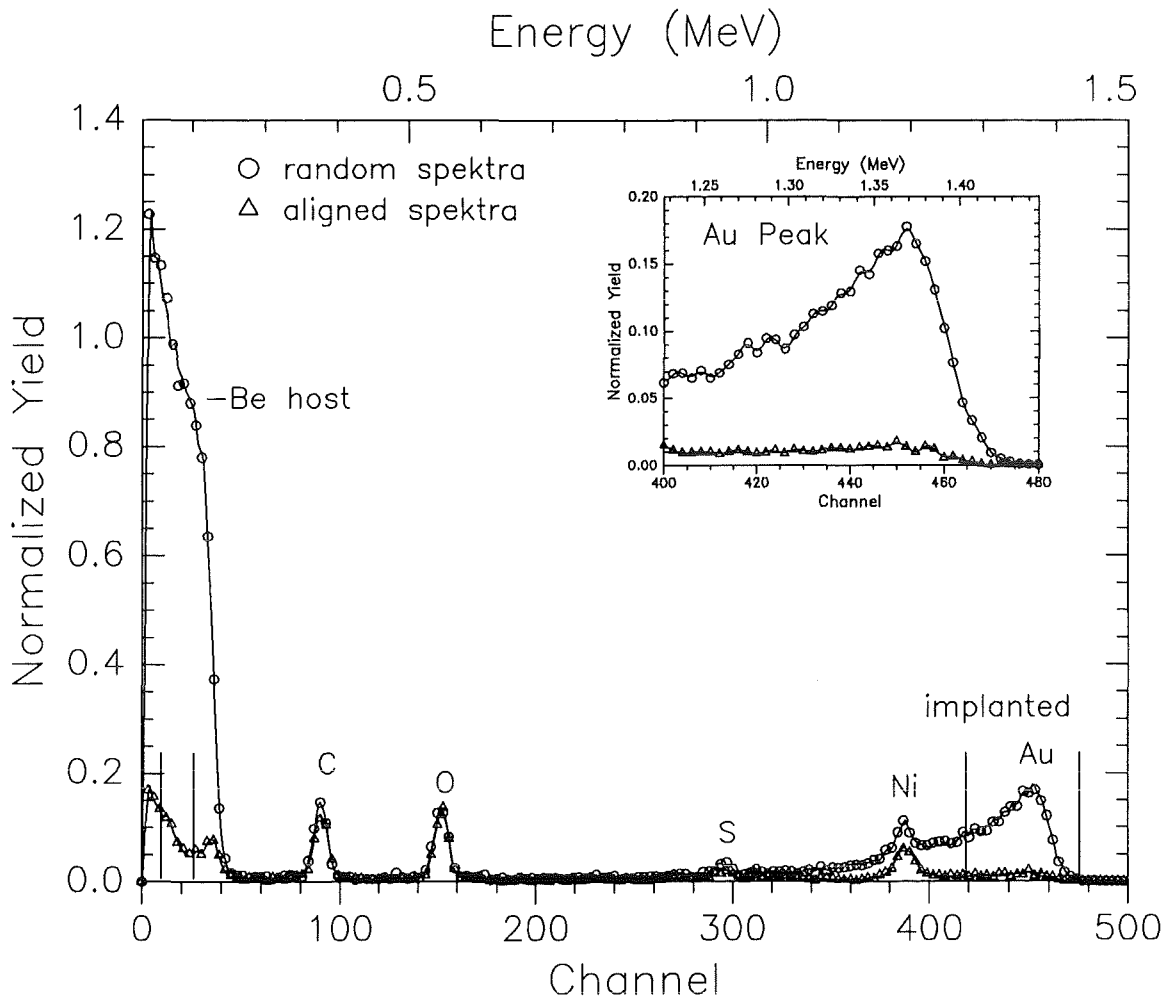


Abb. 18: Random und $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Aligned RBS-Spektrum für einen Be-Einkristall implantiert mit $5 \cdot 10^{14} \text{ Au/cm}^2$ bei Raumtemperatur

in den Be-Kristall erklärt werden und liegt daran, daß Au bei Raumtemperatur eine Löslichkeit von 2-3% besitzt ([GOL73]). Dieses Diffusionsprofil trat bei anderen implantierten Elementen nicht auf.

Um die Gitterplatzbesetzung der Au-Atome im Be-Wirtsgitter genauer zu bestimmen, wurde eine winkelabhängige Ausbeutekurve über die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Richtung aufgenommen. Für die Raumtemperaturimplantation ist diese in Abb.19a dargestellt. Die Kurven für Be und Au haben den gleichen Verlauf, d.h. identische Werte für χ_{min} und $\Psi_{1/2}$ (siehe auch Tab.1). Als substitutionellen Anteil erhält man $f_s = 1,0$, dies bedeutet sämtliche implantierten Au-Atome sitzen auf substitutionellen Gitterplätzen.

In Abb.19b ist das Ergebnis der winkelabhängigen Ausbeutekurve der 77K Implantation von $2 \cdot 10^{14} \text{ Au/cm}^2$ mit 300 keV bei in situ Messung zu sehen. Wiederum sind minimalen Ausbeuten ($\chi_{min}^{Be,Au} = 0,60$) und $\Psi_{1/2}$ -Werte für Wirtsgitter und implantierte

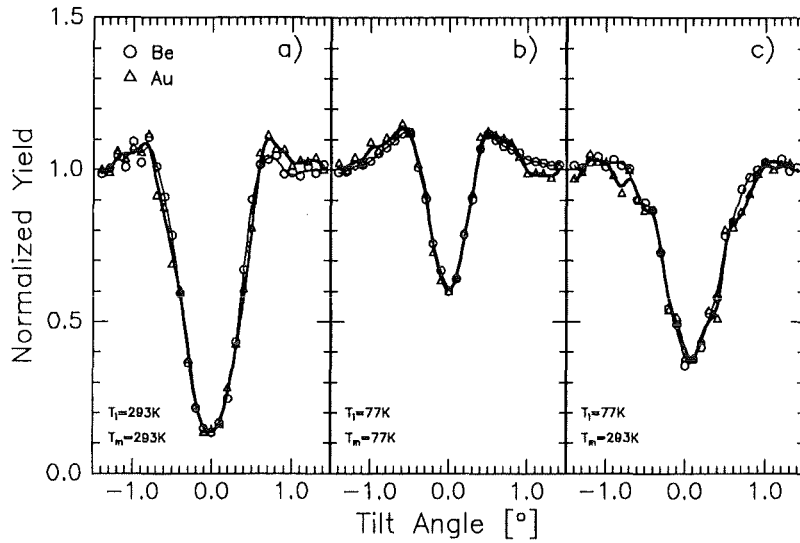


Abb. 19: Winkelabhängige Ausbeutekurven über die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse; a) $5 \cdot 10^{14} \text{ Au/cm}^2$ $T_i = T_m = 293\text{K}$, b) $2 \cdot 10^{14} \text{ Au/cm}^2$ $T_i = T_m = 77\text{K}$, c) erwärmt auf $T_m = 293\text{K}$.

T_i	T_m	Menge $[\frac{\text{Atome}}{\text{cm}^2}]$	χ_{min}^{Be}	χ_{min}^{Au}	$\Psi_{1/2}^{Be} [^\circ]$	$\Psi_{1/2}^{Au} [^\circ]$	f_s
293	293	$5 \cdot 10^{14}$	0,10	0,10	0,44	0,44	1,0
77	77	$2 \cdot 10^{14}$	0,60	0,60	0,23	0,23	1,0
77	293	$2 \cdot 10^{14}$	0,39	0,39	0,38	0,38	1,0

Tab. 1: Zusammenfassung der Ergebnisse für implantiertes Gold

Fremdatome gleich. Das heißt, auch nach der Tieftemperaturimplantation befinden sich die Au-Atome vollständig auf substitutionellen Gitterplätzen (Tab.1). Die χ_{min} -Werte sind relativ groß, was auf eine starke Schädigung des Kristalls durch den Implantationsprozeß und auf durch Defekte aufgebaute Spannungsfelder hindeutet.

Nach Erwärmen der Probe auf 293K gehen die Werte für die minimale Ausbeute sowohl für das Wirtsgitter als auch für das implantierte Au auf 0,39 zurück. Dies deutet auf ein Ausheilen des Kristalls hin, welches mit dem Abbau von Spannungsfeldern durch eine erhöhte Defektmobilität verbunden ist. Die $\Psi_{1/2}$ -Werte sind wiederum für Wirtsgitter und implantiertes Fremdatom gleich und f_s ist auch nach Erwärmen 1,0. Die Au-Atome bleiben also weiterhin vollständig auf substitutionellen Gitterplätzen. Dies bedeutet, daß die Gitterplatzbesetzung während des Aufwärmvorgangs nicht durch eine Wechselwirkung von Leerstellen mit Au-Atomen beeinflusst wird.

Bei einer Temperatur von 293K wurden $1 \cdot 10^{15} \text{ Zink/cm}^2$ mit 300keV implantiert. Die winkelabhängige Ausbeutekurve ist in Abb.20a dargestellt. Zink zeigt im Phasendiagramm keine Löslichkeit in Be ([GOL73]). Die minimale Ausbeute beträgt für Be 0,16

und für Zn 0,18, damit ergibt sich f_s zu 0,98. In Tab.2 sind die $\Psi_{1/2}$ -Werte aufgelistet, welche sich hier für Be und Zn nur geringfügig unterscheiden. Es zeigt sich, daß nahezu alle implantierten Zn-Atome auf substitutionellen Gitterplätzen sitzen, was in guter Übereinstimmung mit der Literatur ist ([KAU77b]).

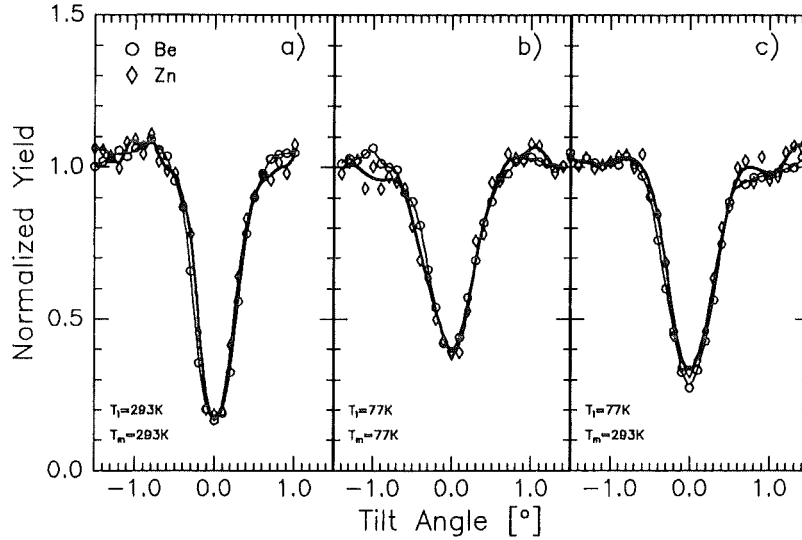


Abb. 20: Winkelabhängige Ausbeutekurven über die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse; a) $1 \cdot 10^{15} \text{ Zn/cm}^2$ $T_i = T_m = 293\text{K}$, b) $1 \cdot 10^{15} \text{ Zn/cm}^2$ $T_i = T_m = 77\text{K}$, c) erwärmt auf $T_m = 293\text{K}$.

Implantiert man $1 \cdot 10^{15} \text{ Zn/cm}^2$ bei 77K mit 300keV und mißt bei der gleichen Temperatur, so ergibt sich ein substitutioneller Anteil von $f_s = 1,0$ wie in Abb.20b gezeigt. Die Schädigung des Wirtsgitters ist auch hier deutlich größer als bei Raumtemperatur

T_i	T_m	Menge [$\frac{\text{Atome}}{\text{cm}^2}$]	χ_{min}^{Be}	χ_{min}^{Zn}	$\Psi_{1/2}^{Be} [^\circ]$	$\Psi_{1/2}^{Zn} [^\circ]$	f_s
293	293	$1 \cdot 10^{15}$	0,16	0,18	0,30	0,28	0,98
77	77	$1 \cdot 10^{15}$	0,40	0,39	0,32	0,34	1,0
77	293	$1 \cdot 10^{15}$	0,27	0,32	0,33	0,32	0,93

Tab. 2: Zusammenfassung der Ergebnisse für implantiertes Zink

($\chi_{min}^{Be} = 0,40$). Die $\Psi_{1/2}$ -Werte von Be und Zn sind nahezu identisch, was die Substitutionalität bestätigt. Wird nun die Probe auf Raumtemperatur erwärmt, so findet eine Verringerung der χ_{min} -Werte auf 0,27 beim Wirtsgitter und 0,32 beim Zn statt. Der Anteil der Zn-Atome auf substitutionellen Plätzen geht leicht zurück mit $f_s = 0,93$. Der Rückgang von χ_{min} kann auch hier wieder durch den Abbau von Verspannungen aufgrund der Rekombination von Defekten verstanden werden. Die Ergebnisse der Zn-Implantationen sind in Tab.2 zusammengefaßt.

Mangan wurde bisher noch nicht in Beryllium implantiert, aber in [VIA80] aus dem Miedema-Plot als substitutionell vorhergesagt. In dieser Arbeit wurden $2 \cdot 10^{15} \text{ Mn/cm}^2$ mit 300 keV bei Raumtemperatur implantiert. Die winkelabhängige Ausbeutekurve ist in Abb.21a dargestellt. Die minimale Ausbeute beträgt sowohl für das Wirtsgitter als auch für das implantierte Mn $0,17$. $\Psi_{1/2}^{Be}$ und $\Psi_{1/2}^{Mn}$ liegen bei $0,44^\circ$. Das bedeutet, die implantierten Mn-Atome sind vollständig auf substitutionellen Plätzen ($f_s = 1$).

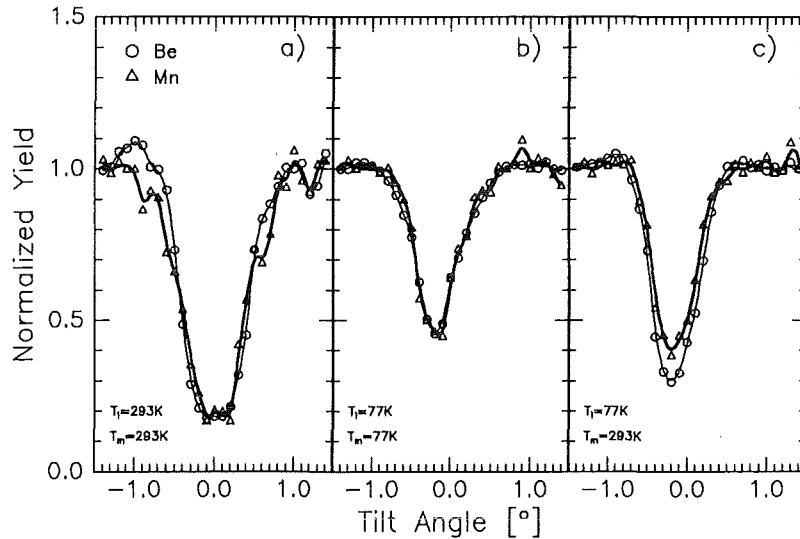


Abb. 21: Winkelabhängige Ausbeutekurven über die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse; a) $2 \cdot 10^{15} \text{ Mn/cm}^2$ $T_i = T_m = 293 \text{ K}$, b) $1,5 \cdot 10^{15} \text{ Mn/cm}^2$ $T_i = T_m = 77 \text{ K}$, c) erwärmt auf $T_m = 293 \text{ K}$.

In Abb.21b ist das Ergebnis der Ausbeutekurve für Implantation von $1,5 \cdot 10^{15} \text{ Mn/cm}^2$ mit 300 keV bei $T = 77 \text{ K}$ gezeigt. χ_{min} und $\Psi_{1/2}$ haben auch hier für Wirtsgitter- und Mn-Atome identische Werte (siehe Tab.3), dies bedeutet einen substitutionellen Anteil von $f_s = 1$.

T_i	T_m	Menge $[\frac{\text{Atome}}{\text{cm}^2}]$	χ_{min}^{Be}	χ_{min}^{Mn}	$\Psi_{1/2}^{Be} [^\circ]$	$\Psi_{1/2}^{Mn} [^\circ]$	f_s
293	293	$2 \cdot 10^{15}$	0,17	0,17	0,44	0,44	1,0
77	77	$1,5 \cdot 10^{15}$	0,45	0,45	0,28	0,28	1,0
77	293	$1,5 \cdot 10^{15}$	0,30	0,37	0,32	0,31	0,9

Tab. 3: Zusammenfassung der Ergebnisse für implantiertes Mangan

Die Schädigung des Wirtsgitters ist trotz kleinerer implantierte Menge deutlich höher als bei Raumtemperaturimplantation ($\chi_{min}^{Be,77K} = 0,45$ im Vergleich zu $\chi_{min}^{Be,293K} = 0,17$).

Wird die bei 77 K implantierte Probe auf Raumtemperatur erwärmt, so heilen Defekte im Wirtsgitter aus, und es ergibt sich die in Abb.21c dargestellte minimale Ausbeute-

kurve. χ_{min}^{Be} geht von 0,45 auf 0,30 zurück, χ_{min}^{Mn} nur auf 0,37. Die Werte für $\Psi_{1/2}$ sind für beide Elemente nahezu gleich (Tab.3). Der substitutionelle Anteil geht auf $f_s = 0,9$ zurück.

4.1.2 Indium

Die Implantation von $5 \cdot 10^{14} \text{In}/\text{cm}^2$ bei Raumtemperatur ergab in unseren Experimenten die in Abb.22a und d dargestellten winkelabhängigen Ausbeutekurven. Abb.22a zeigt für In in der Mitte eine schwache Doppelpeakstruktur mit einem kleinen Minimum beim Kippwinkel 0. Dies deutet auf eine schwache Besetzung von Tetraederplätzen hin. Der Verlauf der Kurve zeigt, daß sich zumindest ein Teil der implantierten Atome auf substitutionellen Gitterplätzen befindet ($f_s=0,24$). Die starke Verengung der Ausbeutekurve von In in Abb.22d deutet auf die Besetzung von tetraedrischen Zwischengitterplätzen mit einem zusätzlichen substitutionellen Anteil hin. Der Kristall wurde durch die Implantation nur geringfügig geschädigt ($\chi_{min}^{Be} = 0,09$). Die beiden Messungen wurden mit unterschiedlichen Kippwinkeln zur $(10\bar{1}0)$ -Ebene aufgenommen und zeigen deutlich die starke Abhängigkeit der Form der Ausbeutekurve und des kritischen Winkels (Abb.22a,d) von der Wahl des Kippwinkels. Bisher wurde von dieser Kippwinkelabhängigkeit in Beryllium nichts berichtet. In der Literatur ([KAU75]) wird berichtet, daß Indium nach der Implantation in Beryllium zu 50% auf tetraedrischen Zwischengitterplätzen und zu 50% random verteilt ist. Dies wurde aus Channeling- und TDPAC-Messungen geschlossen. Diese Ergebnisse werden durch unsere Messungen bestätigt, allerdings schließen wir auf einen zusätzlichen substitutionellen Anteil.

Die winkelabhängigen Ausbeutekurven der Implantation von $2,5 \cdot 10^{14} \text{In}/\text{cm}^2$ bei 77K mit 300keV sind in Abb.22b und e für zwei unterschiedliche Kippwinkel dargestellt. Aus Abb.22b ergeben sich die minimalen Ausbeuten zu 0,50 für Be und 0,75 für In, hieraus ergibt sich ein substitutioneller Faktor von $f_s = 0,5$. In Abb.22e sind $\chi_{min}^{Be} = 0,40$ und $\chi_{min}^{In} = 0,64$, was einem f_s von 0,6 entspricht. Die kritischen Winkel sind in beiden Fällen für Be und In nahezu gleich groß (siehe Tab.4), was die Substitutionalität bestätigt. Die Unterschiede in den f_s -Werten sind statistischer Natur. Die leichte Verengung in Abb.22e deutet darauf hin, daß es einigen In-Ionen gelingt, innerhalb der Implantationskaskade Leerstellen einzufangen und sich so in Richtung der tetraedrischen Zwischengitterplätze zu verschieben. Die minimale Ausbeute des Wirtsgitters beträgt hier $\chi_{min}^{Be} = 0,4$ bzw. 0,5. Dieser Unterschied kann damit erklärt werden, daß bei dem höheren Wert die Kanalmitte nicht exakt getroffen wurde.

Wird die bei 77K implantierte Probe auf Raumtemperatur erwärmt, so ergeben sich die winkelabhängigen Ausbeutekurven wie in Abb.22c und f dargestellt. Die Atome können durch den Einfang von Leerstellen von den substitutionellen Gitterplätzen auf andere reguläre Zwischengitterplätze wechseln. In Abb.22c sieht man einen schwachen, aber relativ breiten Peak in der Mitte der Ausbeutekurve.

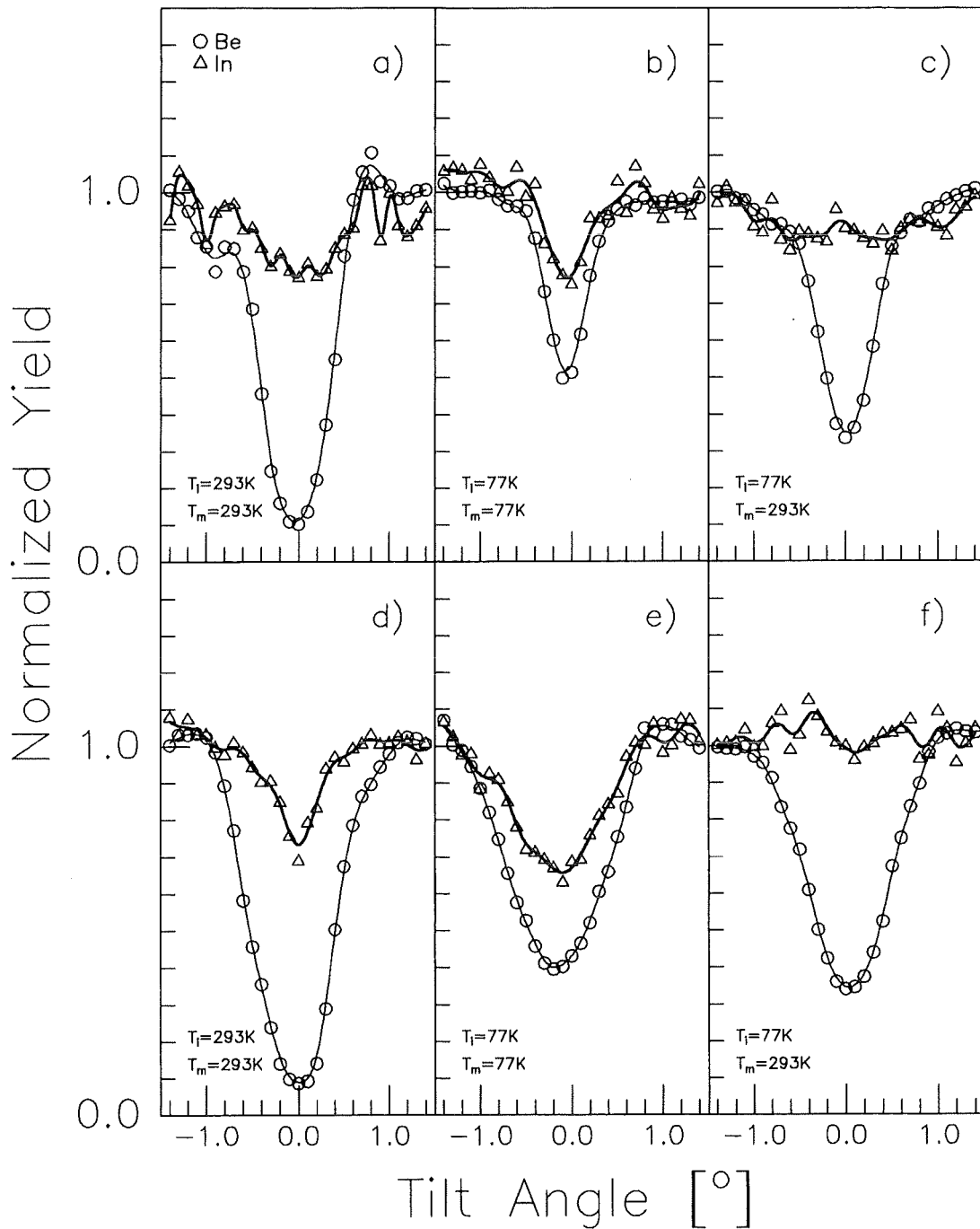


Abb. 22: Winkelabhängige Ausbeutekurven über die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse; a) $5 \cdot 10^{14} \text{ In/cm}^2$ $T_i = T_m = 293 \text{ K}$, Kippwinkel 20° zur $(10\bar{1}0)$ Ebene, b) $2,5 \cdot 10^{14} \text{ In/cm}^2$ $T_i = T_m = 77 \text{ K}$, Kippwinkel 20° zur $(10\bar{1}0)$ Ebene, c) $2,5 \cdot 10^{14} \text{ In/cm}^2$ $T_i = 77 \text{ K}$ $T_m = 293 \text{ K}$, Kippwinkel 20° zur $(10\bar{1}0)$ Ebene; d) wie a), e) wie b) und f) wie c) nur jeweils mit Kippwinkeln von 70° zu $(10\bar{1}0)$.

Dies deutet auf eine gemischte Besetzung von tetraedrischen und oktaedrischen Zwischengitterplätzen hin. Dieses wird bestätigt wenn Abb.22f betrachtet wird. Es ist eine deutliche Doppelpeakstruktur zu sehen (tetraedrisch), welche aber in der Mitte wegen des oktaedrischen Anteils nicht so tief ist wie in Abb.22d. Der Unterschied in der Gitterplatzbesetzung zwischen Implantation bei 77K nach Aufwärmen und 293K könnte darin begründet sein, daß der Kristall mit $\chi_{min}^{Be} = 0,33$ immer noch eine relativ hohe Schädigung und die Leerstellen bei 239K nicht vollständig beweglich sind. Die experimentellen Ergebnisse der Indium Implantationen sind in Tab.4 zusammengefaßt.

Abb.	T_i	T_m	Menge [$\frac{Atome}{cm^2}$]	χ_{min}^{Be}	χ_{min}^{In}	$\Psi_{1/2}^{Be} [^\circ]$	$\Psi_{1/2}^{In} [^\circ]$	Gitterplatz In
22a	293	293	$5 \cdot 10^{14}$	0,09	0,78	0,42	0,48	subst.+(tetra.)
22d	293	293	$5 \cdot 10^{14}$	0,09	0,68	0,50	0,20	subst.+(tetra.)
22b	77	77	$2,5 \cdot 10^{14}$	0,50	0,75	0,25	0,24	subst. $f_s = 0,5$
22e	77	77	$2,5 \cdot 10^{14}$	0,40	0,64	0,60	0,51	subst. $f_s = 0,6$
22c	77	293	$2,5 \cdot 10^{14}$	0,33	—	0,34	—	tetra. + okta.
22f	77	293	$2,5 \cdot 10^{14}$	0,34	—	0,47	—	tetra. + okta.

Tab. 4: Zusammenfassung der Ergebnisse für implantiertes Indium; Abkürzungen: tetra.: tetraedrisch; okta.: oktaedrisch; subst.: substitutionell.

4.1.3 Bismut

In [VIA78] wird berichtet, daß bei Raumtemperatur implantiertes Bismut oktaedrische Zwischengitterplätze besetzt. In dieser Arbeit wurde Bi in unterschiedlichen Mengen bei $T = 293K$ mit $300keV$ implantiert, um die Dosisabhängigkeit der Besetzung von Oktaederplätzen zu untersuchen. Zu Anfang wurden $1 \cdot 10^{14} Bi/cm^2$ implantiert. Aus dem RBS-Spektren für nichtorientierten und orientierten Einfall erhält man als χ^{Bi} -Wert, aus dem Maxima des Implantationspeaks, 1,33. Dies deutet auf die Besetzung von oktaedrischen Zwischengitterplätzen hin. Der Wert von 1,33 ist genauso hoch wie die in der Literatur ([VIA78],[VIA80]) gefundenen Maximalwerte (Bi: 1,35; Cs: 1,35; Xe: 1,34). Für die winkelabhängige Ausbeutekurve (Abb.23a) erhält man einen geringeren Wert (1,17), da jeweils über den gesamten Bi-Peak integriert wurde. Diese unterschiedlichen Werte deuten auf eine Tiefenabhängigkeit hin, welche in einem nachfolgenden Abschnitt getrennt diskutiert wird. Die Schädigung des Wirtsgitters ist mit einer minimalen Ausbeute von 0,14 gering. In Tab.5 sind die Ergebnisse der Implantationen mit unterschiedlichen Fluenzen zusammengefaßt.

In Abb.23b,c werden die Ergebnisse für $7 \cdot 10^{14} Bi/cm^2$ und $1,3 \cdot 10^{15} Bi/cm^2$ gezeigt. Es ist deutlich zu sehen, daß der Peak in der Ausbeutekurve abnimmt, bis er bei $1,3 \cdot 10^{15} Bi/cm^2$ nicht mehr vorhanden ist und eine konstante Rate erreicht. Der Anteil von Fremdatomen auf oktaedrischen Zwischengitterplätzen nimmt also mit steigender

Fluenz ab, und die Bi-Atome scheinen zufällig im Wirtsgitter verteilt zu sein. Dies kann an einer wirklich zufälligen Verteilung, oder an einer Ausscheidung von Bi-Clustern liegen. Mit steigender Fluenz nimmt χ_{min}^{Be} zu, was ein Ansteigen der Schädigung des Wirtsgitters bedeutet. Bei einer Dosis von $1,3 \cdot 10^{15} Bi/cm^2$ ist die minimale Ausbeute für Be auf 0,39 zurückgegangen.

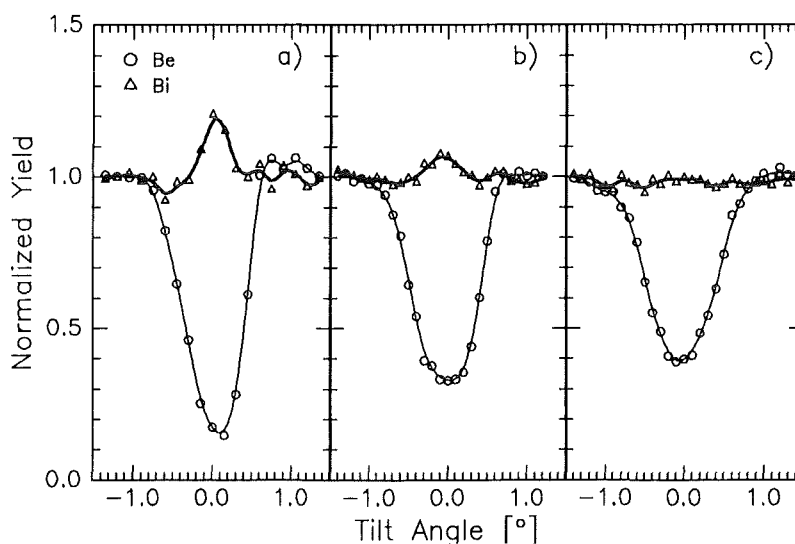


Abb. 23: Winkelabhängige Ausbeutekurven über die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse; a) $1 \cdot 10^{14} Bi/cm^2$, b) $7 \cdot 10^{14} Bi/cm^2$, c) $1,3 \cdot 10^{15} Bi/cm^2$; jeweils $T_i = T_m = 293K$

Um eine mögliche Wechselwirkung der implantierten Bi-Atome mit Eigenzwischengitteratomen zu untersuchen, wurden Tieftemperaturimplantationen durchgeführt. Bei $T = 5,5K$ sind Eigenzwischengitteratome und Leerstellen nur innerhalb der Abkühlphase der Kollisionskaskade beweglich. Es wurden $1 \cdot 10^{14} Bi/cm^2$ bei $T = 5,5K$ mit $300keV$ implantiert. Aus dem nichtorientierten und orientierten Spektrum bei $5,5K$ ergeben sich χ_{min} -Werte von 0,49 für Be und 0,9 für Bi. Diese Ergebnisse deuten auf einen substitutionellen Anteil von ungefähr $f_s = 0,2$ hin. Die winkelabhängige Ausbeutekurve nach Erwärmen dieser Probe auf $77K$ ist in Abb.24a dargestellt. Der Verlauf für Bi zeigt ein deutliches Minimum in der Mitte der Kurve. Die Halbwertsbreiten ($\Psi_{1/2}$) von Bi und Be sind nahezu gleich (Tab.5). Dies deutet darauf hin, daß für Implantation bei $5,5K$ und Messung bei $77K$ ein Teil der Atome auf substitutionellen Zwischengitterplätzen sitzt und der Rest mehr oder weniger zufällig im Wirtsgitter verteilt ist. Die minimalen Ausbeuten lagen hier bei 0,44 für Be und 0,85 für Bi, womit der substitutionelle Anteil 0,27 beträgt. Die Änderung des f_s -Wertes und χ_{min} -Werte beim Aufwärmen von $5,5K$ auf $77K$ sind nur sehr gering und liegen innerhalb der statistischen Schwankungen.

In Abb.24b ist die winkelabhängige Ausbeutekurve nach Erwärmen der bei $5,5K$ implantierten Probe auf Raumtemperatur gezeigt. Die minimale Ausbeute des Wirtsgitters geht stark zurück auf $\chi_{min}^{Be} = 0,11$. Der deutlichste Effekt ist allerdings das Auftreten eines Peaks mit der Höhe 1,2, welcher damit nahezu den gleichen Wert wie bei der

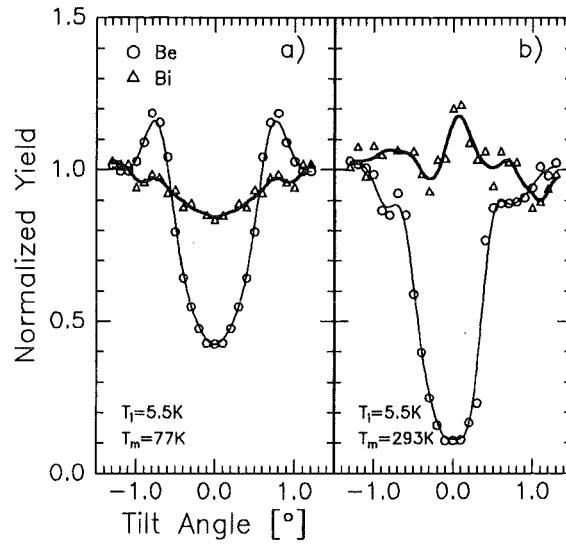


Abb. 24: Winkelabhängige Ausbeutekurven über die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse; a) $1 \cdot 10^{14} \text{ Bi/cm}^2$ $T_i = 5.5K$ $T_m = 77K$, b) erwärmt auf $T_m = 293K$.

Raumtemperaturimplantation annimmt. Dieses Ergebnis legt nahe, daß die Besetzung von regulären Zwischengitterplätzen mit dem Einfang von beweglichen Leerstellen und mit der Bildung von Fremdatom-Leerstellen Komplexen verbunden ist. Die Beweglichkeit der Eigenzwischengitteratome hat keinen Einfluß auf die Gitterplatzbesetzung, da die Ergebnisse bei $5,5K$ und nach Erwärmen auf $77K$ identisch waren.

T_i	T_m	Menge [$\frac{\text{Atome}}{\text{cm}^2}$]	χ_{min}^{Be}	χ^{Bi}	$\Psi_{1/2}^{Be} [^\circ]$	$\Psi_{1/2}^{Bi} [^\circ]$	Gitterplatz Bi
293	293	$1 \cdot 10^{14}$	0,15	1,17	0,44	—	oktaedrisch
293	293	$4 \cdot 10^{14}$	0,25	1,14	0,47	—	oktaedrisch
293	293	$7 \cdot 10^{14}$	0,32	1,07	0,48	—	oktaedrisch
293	293	$1 \cdot 10^{15}$	0,34	1,04	0,48	—	oktaedrisch
293	293	$1.3 \cdot 10^{15}$	0,39	1	0,49	—	random
5,5	77	$1 \cdot 10^{14}$	0,44	0,85	0,45	0,52	subst. $f_s = 0,27$
77	293	s. o.	0,11	1,20	0,42	—	oktaedrisch

Tab. 5: Zusammenfassung der Ergebnisse für implantiertes Bismut

Eine andere Probe wurde $1 \cdot 10^{14} \text{ Bi/cm}^2$ bei $77K$ implantiert. Dies führte aber zu nahezu gleichen Ergebnissen wie die Implantationen bei $5,5K$. Aus dem nichtorientierten und orientierten RBS-Spektrum ergibt sich hier ein substitutioneller Anteil von $f_s = 0.23$. Auch hier zeigte die Auswertung der winkelabhängigen Ausbeutekurven, daß die $\Psi_{1/2}$ -Werte für Bi und Be nahezu identisch sind. Dies bedeutet, daß sich ein Teil der Bi-Atome auf substitutionellen Plätzen befindet. Es gibt also keinen bedeutenden Unterschied in der Gitterplatzbesetzung zwischen den Implantationen bei $5,5$ und $77K$.

Dies bedeutet, daß die Ausheilstufe **I** und der Beginn der Stufe **II** haben keinen Einfluß auf die Gitterplatzbesetzung. Erwärmen der bei 77K implantierten Probe auf 293K führt wiederum zur Besetzung von oktaedrischen Zwischengitterplätzen mit $\chi^{Bi} = 1,2$, und das Ergebnis sieht dem in Abb.24b dargestellten sehr ähnlich.

Die Ergebnisse der Implantationen von Bismut in Beryllium wurden in [HAN96] veröffentlicht.

4.1.4 Jod

In Abb.25a ist das Ergebnis der winkelabhängigen Ausbeutekurve der Implantation von $5 \cdot 10^{14} I/cm^2$ mit 200keV bei 293K dargestellt. Die Energie wurde zu 200keV gewählt, damit der I-Peak in den RBS-Spektren von den Oberflächenverunreinigungen getrennt werden konnte. Die minimale Ausbeute des Wirtsgitters beträgt 0,24. In der Mitte der Ausbeutekurve der implantierten Atome ist ein Peak zu sehen, welcher deutlich breiter ist als für Bi. Dieser Peak deutet auf die Besetzung von oktaedrischen Zwischengitterplätzen hin. Die Verbreiterung dieses Peaks läßt sich durch einen tetraedrischen Anteil der I-Atome erklären. Die Peakhöhe χ^I von 1,2 legt nahe, daß ein großer Anteil des I auf oktaedrischen Plätzen sitzt.

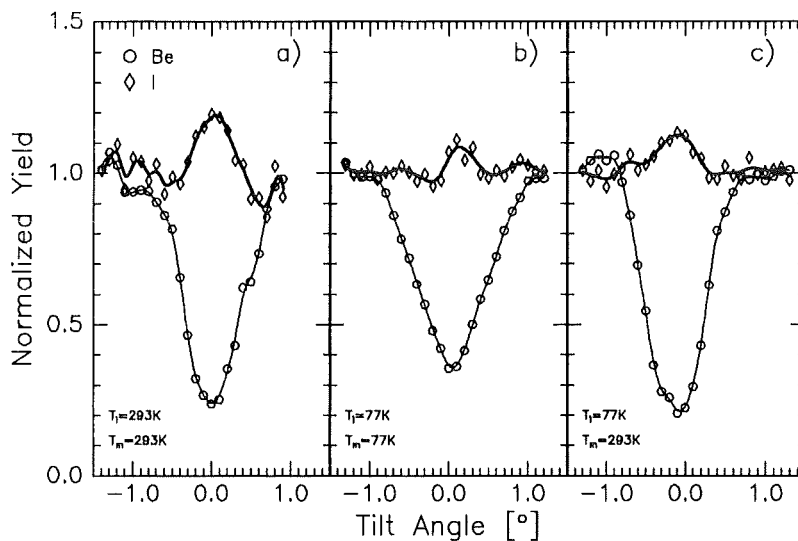


Abb. 25: Winkelabhängige Ausbeutekurven über die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse; a) $5 \cdot 10^{14} I/cm^2$ $T_i = T_m = 293K$, b) $3 \cdot 10^{14} I/cm^2$ $T_i = T_m = 77K$, c) erwärmt auf $T_m = 293K$.

Bei 77K wurden $3 \cdot 10^{14} I/cm^2$ mit 200keV implantiert. Die winkelabhängige Ausbeutekurve dazu ist in Abb.25b dargestellt. Das Wirtsgitter wird trotz geringer Implantationsmenge auch hier stärker geschädigt als bei der 293K Implantation ($\chi_{min}^{I;77K} = 0,35$). Die Ausbeutekurve zeigt wie bei der Raumtemperaturimplantation einen Peak in der Mitte, dessen Höhe allerdings deutlich geringer ist ($\chi^I = 1,1$). Rechts und links dieses

Peaks sind noch zwei kleinere Peaks zu erkennen, welche auf die Besetzung von Tetraederplätzen hindeutet. Gegenüber der Raumtemperaturimplantation verschiebt sich hier das Verhältnis zwischen Atomen auf Oktaeder- und Tetraederplätzen. Der Anteil auf tetraedrigen Zwischengitterplätzen ist größer. Dieses Element zeigt als erstes der hier vorgestellten, eine Besetzung von regulären Zwischengitterplätzen bei Tieftemperaturimplantation. Dies kann durch den Einfang von Leerstellen innerhalb der Kollisionskaskade erklärt werden. Die Möglichkeit hierzu besteht innerhalb der Abkühlphase. Die Fähigkeit zur Bildung von Fremdatom-Leerstellen Komplexen innerhalb der Kollisionskaskade hängt, wie später gezeigt wird, maßgeblich von der Volumenfehlpassungsenergie der implantierten Atomsorte ab.

T_i	T_m	Menge [$\frac{\text{Atome}}{\text{cm}^2}$]	χ_{min}^{Be}	$\Psi_{1/2}^{Be} [^\circ]$	χ^I	Gitterplatz I
293	293	$5 \cdot 10^{14}$	0,24	0,42	1,2	okta.+tetra.
77	77	$3 \cdot 10^{14}$	0,35	0,50	1,1	okta.+(tetra.)
77	293	$3 \cdot 10^{14}$	0,20	0,41	1,13	okta.+(tetra.)

Tab. 6: Zusammenfassung der Ergebnisse für implantiertes Jod; Abkürzungen: tetra.: tetraedrisch; okta.: oktaedrisch.

Wird die bei 77K implantierte Probe auf Raumtemperatur erwärmt, so heilen Defekte im Wirtsgitter aus und χ_{min}^{Be} geht auf 0,2 zurück. Der Peak in der Ausbeutekurve (Abb.25c) ist im Vergleich zu 77K mit 1,13 höher und breiter. Dies deutet darauf hin, daß mehr Jodatome durch Einfang von Leerstellen auf Oktaederplätzen sind. Die Kurve zeigt ein ähnliches Aussehen wie bei Raumtemperatur. Die Ergebnisse der Jodimplantationen sind in Tab.6 zusammengefaßt.

4.1.5 Calcium

In Abb.26a ist die winkelabhängige Ausbeutekurve für die Implantation von $2 \cdot 10^{15} \text{Ca}/\text{cm}^2$ mit 100keV bei 293K dargestellt. Die Implantationsenergie wurde so gewählt, daß der Implantationspeak innerhalb der RBS-Spektren von den Signalen der Oberflächenverunreinigungen getrennt werden konnte. Die hohen Fluenzen waren nötig, um die relativ leichten Atome messen zu können. In der Ausbeutekurve ist beim Winkel 0 ein Peak mit $\chi^{Ca} = 1,18$ zu sehen, welcher auf die Besetzung von oktaedrigen Zwischengitterplätzen hinweist. Rechts und links davon sind zwei kleinere Peaks zu sehen, die auf einen tetraedrigen Anteil hindeuten. Die komplizierte Struktur läßt eine Aussage, ob und in welchem Ausmaß ein tetraedrischer Anteil vorhanden ist, nicht eindeutig machen, da die Ausbeutekurve unsymmetrisch ist. Hier sind auch von substitutionellen Plätzen verlagerte Atome zur Erklärung der seitlichen Peaks möglich. Die minimale Ausbeute des Wirtsgitters ist nach der Implantation 0,13.

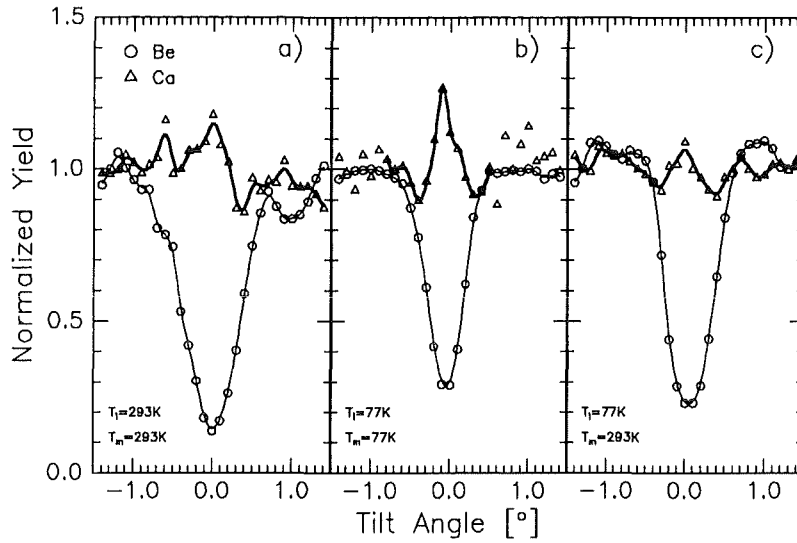


Abb. 26: Winkelabhängige Ausbeutekurven über die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse; a) $2 \cdot 10^{15} \text{Ca}/\text{cm}^2$ $T_i = T_m = 293\text{K}$, b) $2 \cdot 10^{15} \text{Ca}/\text{cm}^2$ $T_i = T_m = 77\text{K}$, c) erwärmt auf $T_m = 293\text{K}$.

T_i	T_m	Menge $[\frac{\text{Atome}}{\text{cm}^2}]$	χ_{min}^{Be}	$\Psi_{1/2}^{Be} [^\circ]$	χ^{Ca}	Gitterplatz Ca
293	293	$2 \cdot 10^{15}$	0,13	0,40	1,18	okta.+(tetra.)
77	77	$2 \cdot 10^{15}$	0,28	0,23	1,27	okta.
77	293	$2 \cdot 10^{15}$	0,22	0,32	1,1	okta.+(tetra.)

Tab. 7: Zusammenfassung der Ergebnisse für implantiertes Calcium; Abkürzungen: tetra.: tetraedrisch; okta.: oktaedrisch.

In Abb.26b ist das Ergebnis der Implantation von $2 \cdot 10^{15} \text{Ca}/\text{cm}^2$ mit 100keV dargestellt. Hier erkennt man einen deutlichen Peak ($\chi^{Ca} = 1,27$), aus welchem auf die Besetzung von oktaedrischen Zwischengitterplätzen geschlossen werden kann. Ein tetraedrischer Anteil ist hier nicht erkennbar. Dies bedeutet, es gelingt einer großen Anzahl Atomen innerhalb der Stoßkaskade genügend Leerstellen einzufangen, um Oktaederkomplexe zu bilden.

Wird diese Probe auf Raumtemperatur erwärmt, so geht die Höhe des Peaks zurück ($\chi^{Ca} = 1,1$) wie in Abb.26c gezeigt. Die Besetzung von oktaedrischen Plätzen ist aber immer noch deutlich erkennbar. Dieser Rückgang des Peaks von 1,27 auf 1,1 ist unerwartet. Er könnte in der Ausscheidung von Ca begründet sein. Die minimale Ausbeute für das Wirtsgitter Be geht von 0,28 auf 0,22 zurück. Eine Zusammenfassung der Ergebnisse ist in Tab.7 gezeigt.

4.1.6 Xenon

In dieser Arbeit wurden $1 \cdot 10^{14} \text{Xe}/\text{cm}^2$ und $5 \cdot 10^{14} \text{Xe}/\text{cm}^2$ mit 300keV bei Raumtemperatur implantiert. Die winkelabhängige Ausbeutekurve für $5 \cdot 10^{14} \text{Xe}/\text{cm}^2$ ist in Abb.27a dargestellt. Ein deutlicher, schmaler Peak ist in der Mitte der Kurve zu sehen. Dies zeigt deutlich die Besetzung von oktaedrischen Zwischengitterplätzen durch die Xe-Atome. Dieses Ergebnis stimmt mit dem in [VIA80] dargestellten überein. Die Ergebnisse für $1 \cdot 10^{14} \text{Xe}/\text{cm}^2$ sind in Tab.8 aufgeführt. Die minimale Ausbeute für das Wirtsgitter Be liegt bei der kleineren Implantationsmenge bei 0,06 und bei der größeren bei 0,22. Hieraus ist ein Abhängigkeit der Schädigung von der Implantationsdosis erkennbar. Die Höhe des Peaks geht von 1,46 auf 1,40 zurück.

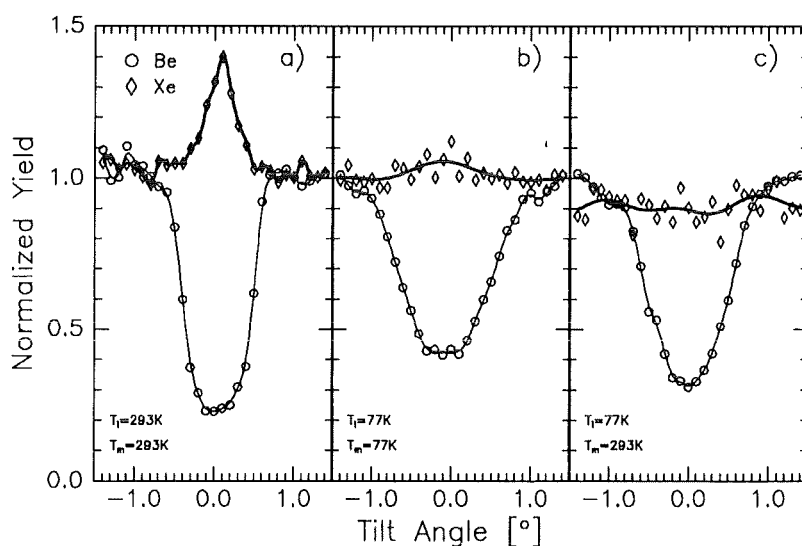


Abb. 27: Winkelabhängige Ausbeutekurven über die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse; a) $5 \cdot 10^{14} \text{Xe}/\text{cm}^2$ $T_i = T_m = 293 \text{K}$, b) $2 \cdot 10^{14} \text{Xe}/\text{cm}^2$ $T_i = T_m = 77 \text{K}$, c) erwärmt auf $T_m = 293 \text{K}$.

In Abb.27b ist die winkelabhängige Ausbeutekurve für $2 \cdot 10^{14} \text{Xe}/\text{cm}^2$ implantiert bei 77K mit 300keV dargestellt. Die Schädigung des Wirtsgitters ist im Vergleich zu den Implantationen bei 293K relativ groß ($\chi_{min}^{Be} = 0,41$). Eine Struktur in der Ausbeutekurve des Xe ist nicht erkennbar. Xenon hat die größte Volumenfehlanspassungsenergie der im Rahmen dieser Arbeit implantierten Elemente und sollte die Fähigkeit besitzen, innerhalb der Stoßkaskade Leerstellen einzufangen. Das fehlen einer Struktur ist erklärbar, wenn angenommen wird, daß sich Fremdatom-Leerstellenkomplexe mit unterschiedlicher Anzahl von Leerstellen bilden. Es ist bekannt, daß Xenon in anderen Wirtsgittern Komplexe mit unterschiedlicher Anzahl von Leerstellen bildet [PIC81]. Eine weitere Erklärungsmöglichkeit ist die Bildung von Xe Ausscheidungen. Edelgase neigen dazu bei der Implantation Blasen innerhalb des Wirtsgitters zu bilden.

Erwärmt man die bei 77K implantierte Probe auf 293K , so ist in der Ausbeutekurve des Xenons immer noch keine Struktur zu sehen. Es findet also keine weitere Wechselwir-

T_i	T_m	Menge [$\frac{\text{Atome}}{\text{cm}^2}$]	χ_{min}^{Be}	$\Psi_{1/2}^{Be} [^\circ]$	χ^{Xe}	Gitterplatz Xe
293	293	$1 \cdot 10^{14}$	0,06	0,44	1,46	okta.
293	293	$5 \cdot 10^{14}$	0,22	0,45	1,40	okta.
77	77	$2 \cdot 10^{14}$	0,41	0,62	—	—
77	293	$2 \cdot 10^{14}$	0,31	0,55	—	—

Tab. 8: Zusammenfassung der Ergebnisse für implantiertes Xenon; Abkürzungen: okta.: oktaedrisch.

kung mit Leerstellen statt, was bedeutet, daß die bei der Tieftemperaturimplantation entstandenen Komplexe oder Blasen relativ stabil sind. Die minimale Ausbeute des Wirtsgitters geht von 0,41 auf 0,31 zurück. Die Ergebnisse der Xe-Implantationen sind in Tab.8 zusammengefaßt.

4.1.7 Quecksilber

Das Ergebnis von $1 \cdot 10^{15} \text{Hg/cm}^2$ implantiert mit 300keV bei 293K ist in Abb.28 gezeigt. Die minimale Ausbeute des Wirtsgitters beträgt $\chi_{min}^{Be} = 0,08$, die der Fremdatome 0,54. Die $\Psi_{1/2}$ -Werte liegen bei 0,46 für Be und 0,30 für Hg. Dieses Ergebnis deutet auf Fremdatome auf substitutionellen Plätzen hin, welche von ihrem Platz versetzt sind. Die Verengung der Ausbeutekurve deutet auf die Besetzung von tetraedrischen Zwischengitterplätzen hin. In der Literatur [KRI78] wurden winkelabhängige Ausbeutekurven über zusätzliche Ebenen aufgenommen, welche darauf schließen lassen, daß ein oktaedrischer Anteil vorhanden ist. Aufgrund unserer Ergebnisse nehmen wir an, daß der Großteil der Fremdatome auf substitutionellen Gitterplätzen sitzt und ein geringer Teil auf tetraedrischen oder oktaedrische Zwischengitterplätzen.

Auch Hg wurde bei tiefen Temperaturen implantiert. Die Implantation von $3 \cdot 10^{14} \text{Hg/cm}^2$ mit 300keV bei $5,5 \text{K}$ führte zu einer starken Schädigung des Wirtsgitters mit $\chi_{min}^{Be} = 0,67$. Die minimale Ausbeute des implantierten Hg betrug hierbei 0,74. Im Gegensatz zur Implantation bei Raumtemperatur liegen die $\Psi_{1/2}$ -Werte hier sehr nahe beieinander (0,39 für Be und 0,40 für Hg). Dies läßt auf einen substitutionellen Anteil von $f_s = 0,77$ schließen. Erwärmen dieser Probe auf 77K führt zu keiner nennenswerten Änderung im Aussehen der Ausbeutekurven. Der substitutionelle Anteil geht auf 0,68 zurück, und die Schädigung des Wirtsgitters bleibt erhalten. Dies führt zu der selben Folgerung wie bei den Bi-Implantationen. Die Beweglichkeit von Eigenzwischengitteratomen hat, im Bezug auf die Gitterplatzbesetzung von implantierten Fremdatomen in Beryllium, keinen Einfluß.

Wird die bei $5,5 \text{K}$ implantierte Probe auf Raumtemperatur erwärmt, so ergibt sich ein ähnliches Bild wie in Abb.28. Nur ist hier die Schädigung des Kristalls weiterhin größer

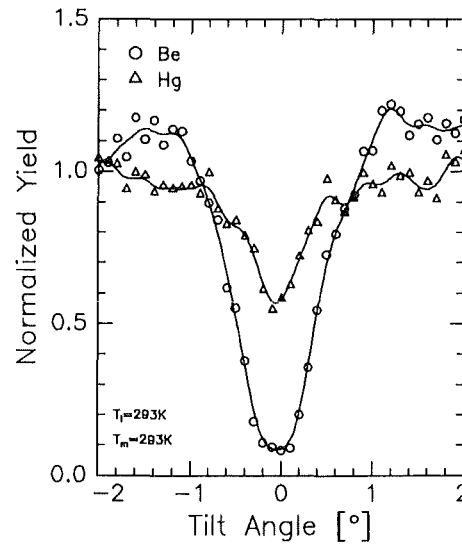


Abb. 28: Winkelabhängige Ausbeutekurven über die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse; $1 \cdot 10^{15} \text{Hg}/\text{cm}^2$
 $T_i = T_m = 293\text{K}$.

mit $\chi_{min}^{Be} = 0,20$. Durch den Einfang von Leerstellen können hier ein Teil der implantierten Fremdatome auf tetraedrische und oktaedrische Zwischengitterplätze wandern. Die Ergebnisse der Hg-Implantationen sind in Tab.9 zusammengefaßt.

T_i	T_m	Menge [$\frac{\text{Atome}}{\text{cm}^2}$]	χ_{min}^{Be}	χ_{min}^{Hg}	$\Psi_{1/2}^{Be} [^\circ]$	$\Psi_{1/2}^{Hg} [^\circ]$	Gitterplatz Hg
293	293	$1 \cdot 10^{15}$	0,08	0,54	0,46	0,30	gemischt
5,5	5,5	$3 \cdot 10^{14}$	0,67	0,74	0,39	0,40	subst. $f_s = 0,77$
5,5	77	s.o.	0,69	0,79	0,38	0,39	subst. $f_s = 0,68$
5,5	293	s.o.	0,20	—	0,47	—	gemischt.

Tab. 9: Zusammenfassung der Ergebnisse für implantiertes Quecksilber; Abkürzungen: tetra.: tetraedrisch; okta.: oktaedrisch; subst.: substitutionell.

4.1.8 Gallium, Antimon und Tellur

Die in diesem Abschnitt vorgestellten Implantationen von Ga, Sb und Te wurden nur bei 77K durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Implantationen sind wichtig für die Diskussion des substitutionellen Anteils, welche anschließend an die Vorstellung der Ergebnisse folgt.

Implantiert man *Gallium* bei Raumtemperatur in Beryllium, so sitzt es zum Teil auf in der (0001) Ebene versetzten oktaedrischen Zwischengitterplätzen [VIA80]. Die in der

Literatur dargestellten Ausbeutekurven deuten allerdings auch auf einen hohen großen substitutionellen Anteil hin. Der oktaedrische Anteil ist nur in der Ausbeutekurve über die $\langle 0001 \rangle$ -Richtung zu sehen. Ein tetraedrischer Anteil ist im Gegensatz zu Hg Implantation nicht zu erkennen.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden $1 \cdot 10^{15} \text{Ga}/\text{cm}^2$ mit 150keV bei 77K implantiert. Nach der Implantation ergab sich ein substitutioneller Anteil von $0,89$. Erwärmen dieser Probe auf 293K resultiert in einem Rückgang des substitutionellen Anteils auf $0,28$. Über die Besetzung von regulären Zwischengitterplätzen kann hier keine Aussage getroffen werden. Es ist durchaus möglich, daß sich wie bei der Raumtemperaturimplantation wiederum ein oktaedrischer Anteil ergibt.

Antimon befindet sich nach der Implantation bei Raumtemperatur auf oktaedrischen Zwischengitterplätzen ([VIA80]). Implantiert man $3 \cdot 10^{14} \text{Sb}/\text{cm}^2$ mit 160keV bei 77K , so ergibt sich die in Abb.29a dargestellte winkelabhängige Ausbeutekurve. Die minimalen Ausbeuten betragen $0,31$ für das Wirtsgitter und $0,63$ für das implantierte Sb. Die Halbwertsbreiten haben mit $0,21$ für Be und $0,15$ für Sb verschiedene Werte. Die Verengung in der Kurve der Fremdatome deutet darauf hin, das ein kleiner Anteil der implantierten Atome auf tetraedrischen Zwischengitterplätzen sitzt, oder der substitutionelle Teil auf verschobenen Plätzen sitzt. Der f_s -Wert beträgt hier $0,53$.

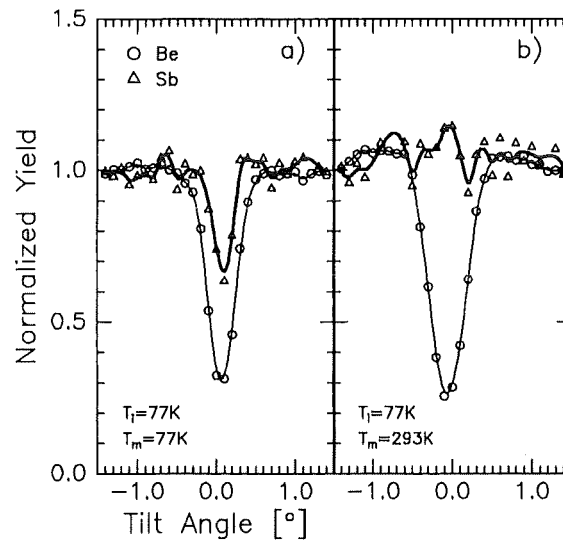


Abb. 29: Winkelabhängige Ausbeutekurven über die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse; a) $3 \cdot 10^{14} \text{Sb}/\text{cm}^2$ $T_i = T_m = 77 \text{K}$, b) erwärmt auf $T_m = 293 \text{K}$.

Nach Erwärmen der bei 77K implantierten Probe auf Raumtemperatur hat die Ausbeutekurve das in Abb.29b dargestellte Aussehen. Es ist deutlich zu sehen, daß die implantierten Antimonatome auf oktaedrische Zwischengitterplätze gehen ($\chi^{\text{Sb}} = 1,15$). Dies ist mit dem Einfang von Leerstellen verbunden, welche bei 293K beweglich sind. Diese Besetzung von Oktaederplätzen steht im Einklang mit der Gitterplatzbesetzung

bei Raumtemperaturimplantation. Eine Zusammenfassung der Ergebnisse von Sb ist in Tab.10 zu finden.

T_i	T_m	Menge [$\frac{\text{Atome}}{\text{cm}^2}$]	χ_{min}^{Be}	χ_{min}^{Sb}	$\Psi_{1/2}^{Be}$ [°]	$\Psi_{1/2}^{Sb}$ [°]	Gitterplatz Sb
77	77	$3 \cdot 10^{14}$	0,31	0,63	0,21	0,15	subst. $f_s = 0,53$
77	293	s.o.	0,25	1,15	0,25	—	okta.

Tab. 10: Zusammenfassung der Ergebnisse für implantiertes Antimon; Abkürzungen: okta.: oktaedrisch; subst.: substitutionell.

Die Implantation von $3 \cdot 10^{14} \text{Tellur}/\text{cm}^2$ mit 180keV bei 77K zeigt den in Abb.30a dargestellten Verlauf der winkelabhängigen Ausbeutekurve. Die Werte für die minimale Ausbeute betragen hier 0,30 für Be und 0,87 für Te. Dieses Ergebnis deutet zusammen mit den $\Psi_{1/2}$ Werten von 0,24 für Be und 0,20 für Te auf einen kleinen substitutionellen Anteil von 0,18 hin.

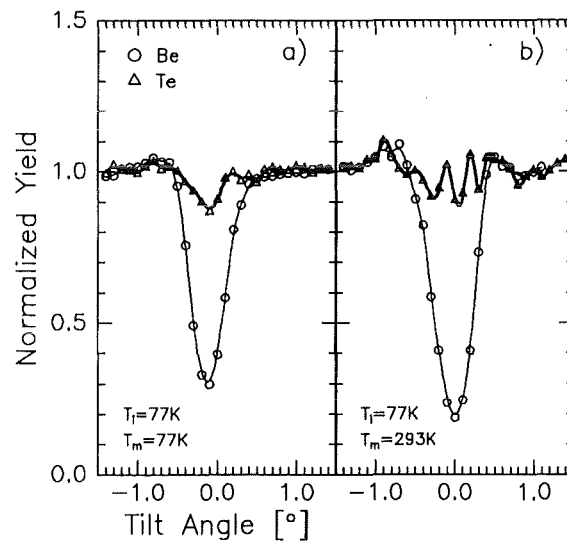


Abb. 30: Winkelabhängige Ausbeutekurven über die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse; a) $3 \cdot 10^{14} \text{Te}/\text{cm}^2$ $T_i = T_m = 77 \text{K}$, b) erwärmt auf $T_m = 293 \text{K}$.

Erwärmen dieser Probe führt zu dem in Abb.30b dargestellten Ergebnis. Die Werte für χ_{min}^{Be} und $\Psi_{1/2}^{Be}$ sind in Tab.11 aufgelistet. In der winkelabhängigen Ausbeutekurve ist eine Doppelpikstruktur zu sehen. Diese Struktur, welche nur ein kleines Minimum in der Mitte aufweist deutet auf die Besetzung von tetraedrischen Zwischengitterplätzen hin. Der Wechsel auf diese Gitterplätze ist mit dem Einfang von Leerstellen verbunden. Tellur sollte nach den Miedema Parametern bei der Raumtemperaturimplantation auf oktaedrische Zwischengitterplätze gehen. Der Grund, daß hier nach dem Aufwärmen keine oder nur sehr wenig oktaedrische Zwischengitterplätze besetzt werden, könnte

T_i	T_m	Menge [$\frac{\text{Atome}}{\text{cm}^2}$]	χ_{min}^{Be}	χ_{min}^{Te}	$\Psi_{1/2}^{Be} [^\circ]$	$\Psi_{1/2}^{Te} [^\circ]$	Gitterplatz Te
77	77	$3 \cdot 10^{14}$	0,30	0,87	0,24	0,20	subst. $f_s = 0,18$
77	293	s.o.	0,18	—	0,28	—	tetra.+(okta.)

Tab. 11: Zusammenfassung der Ergebnisse für implantiertes Tellur; Abkürzungen: tetra: tetraedrisch; okta.: oktaedrisch; subst.: substitutionell.

darin liegen, daß bei 293K die Leerstellen nur über eine begrenzte Reichweite beweglich sind.

4.1.9 Chlor

Chlor bildet eine Ausnahme der hier implantierten Elemente, da es als einziges eine stark negative Lösungswärme besitzt. Um implantiertes Cl in den RBS-Spektren sichtbar zu machen, mußten im Vergleich zu den anderen Implantationen hohe Fluenzen gewählt werden. Aufgrund dieser beiden Faktoren und wegen der großen Elektronegativität kann es zur Verbindungsbildung ($BeCl_2$) oder zu Ausscheidungen kommen. In der Literatur wurde bisher noch nie über die Implantation von Cl in Be berichtet. Bei Raumtemperatur wurden $5 \cdot 10^{15} Cl/cm^2$ mit $240keV$ implantiert. Das Ergebnis der winkelabhängigen

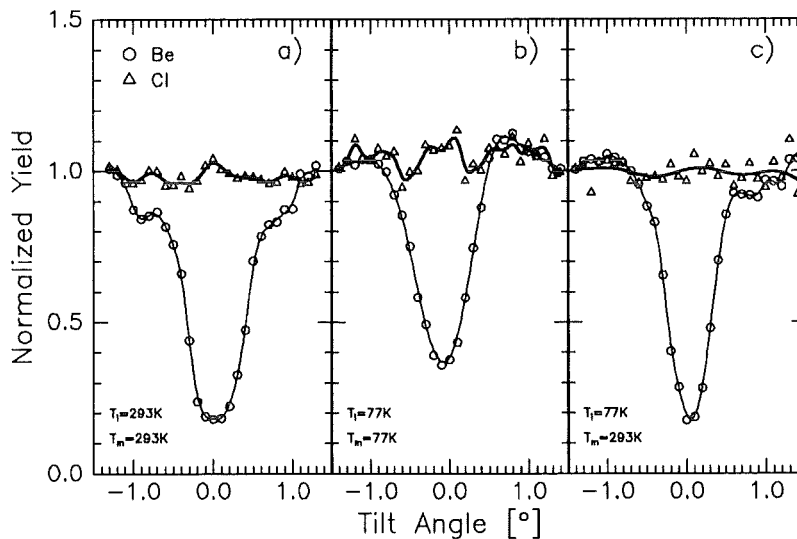


Abb. 31: Winkelabhängige Ausbeutekurven über die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse; a) $5 \cdot 10^{15} Cl/cm^2$ $T_i = T_m = 293K$, b) $3 \cdot 10^{15} Cl/cm^2$ $T_i = T_m = 77K$, c) erwärmt auf $T_m = 293K$.

Ausbeutekurve ist in Abb.31a dargestellt. Das Wirtsgitter wird trotz der hohen Fluenz aufgrund der geringen Masse der Atome nur schwach geschädigt ($\chi_{min}^{Be} = 0,18$). In der Ausbeutekurve des Cl ist in der Mitte ein schwacher Peak zu sehen, der auf eine schwa-

che Besetzung von oktaedrischen Zwischengitterplätzen hindeutet. Wir vermuten, daß ein Großteil der implantierten Cl-Atome in Verbindungen ($BeCl_2$) ausscheidet. Falls diese als kohärente Ausscheidungen auftreten, kann dies die schwachen Strukturen in den Ausbeutekurven erklären.

Die Ergebnisse der Implantation von $3 \cdot 10^{15} Cl/cm^2$ mit $240 keV$ bei $77K$ sind in Abb.31b dargestellt. Die Schädigung des Kristalls ist hier mit $\chi_{min}^{Be} = 0,36$ höher als bei Raumtemperatur. In der Mitte der Ausbeutekurve des Cl ist ein deutlicher, relativ breiter Peak zu sehen. Dieser deutet auf die gemischte Besetzung von oktaedrischen und tetraedrischen Zwischengitterplätzen hin. Eigentlich würden wir aufgrund des im nächsten Abschnitt vorgestellten Modells die Besetzung von substitutionellen Gitterplätzen erwarten. Dies ist hier aber nicht der Fall ist. Wir gehen davon aus, daß sich die Cl-Atome hier direkt auf den regulären Zwischengitterplätzen befinden und nicht wie bei den anderen implantierten Elementen von Leerstellen umgeben sind. Dies ist möglich, da das Volumen der Cl-Atome sehr klein ist und sie somit auf Zwischengitterplätzen innerhalb des Wirtsgitters Platz haben. Eine andere Erklärungsmöglichkeit ist, daß sich schon während der Abkühlphase kohärente Ausscheidungen von $BeCl_2$ bilden, welche diese die Struktur verursacht. Die Ergebnisse der Implantationen von Cl sind in Tab.12 zusammengefaßt.

T_i	T_m	Menge [$\frac{Atome}{cm^2}$]	χ_{min}^{Be}	χ_{min}^{Cl}	$\Psi_{1/2}^{Be} [^\circ]$	$\Psi_{1/2}^{Cl} [^\circ]$	Gitterplatz Cl
293	293	$5 \cdot 10^{15}$	0,18	1,03	0,41	—	okta. + ($BeCl_2$)
77	77	$3 \cdot 10^{15}$	0,36	1,1	0,36	—	okta. + tetra.
77	293	s.o.	0,18	—	0,30	—	($BeCl_2$)

Tab. 12: Zusammenfassung der Ergebnisse für implantiertes Chlor; Abkürzungen: tetra.: tetraedrisch; okta.: oktaedrisch.

Wird die bei $77K$ implantierte Probe auf Raumtemperatur erwärmt, so ergibt sich das in Abb.31c dargestellte Ergebnis. Der Kristall heilt aus und erreicht die gleiche minimale Ausbeute wie nach der Implantation bei $293K$. Die Ausbeutekurve von Cl verliert ihre Struktur und zeigt ein Bild, wie es erwartet werden kann, falls die Cl-Atome zufällig im Wirtsgitter verteilt wären. Dieses Ergebnis läßt sich durch Ausscheidungen oder die Bildung von Verbindungen ($BeCl_2$) erklären.

4.2 Diskussion der Gitterplatzbesetzung

In den vorhergehenden Abschnitten wurden die Ergebnisse für die Gitterplatzbesetzung der implantierten Fremdatome im Einzelnen vorgestellt. Hier wird nun ein Modell entwickelt, welches eine Unterteilung der Elemente bezüglich ihrer Gitterplatzbesetzung zuläßt. Kaufmann und Vianden [VIA80] teilten ihre Implantationen bei Raumtemperatur innerhalb des Miedema-Plots in 3 Regionen ein: substitutionell, tetraedrisch, oktaedrisch. In der nachfolgenden Diskussion wird hier ein Modell vorgestellt, welches eine Eingruppierung der Implantationen bei Raum- und Tieftemperatur erlaubt. Der ordnende Faktor ist hierbei die Volumenfehlpassungsenergie.

In Tab.13 sind die Ergebnisse der Implantation von Fremdatomen zusammengefaßt. Die Tabelle ist sortiert nach der Volumenfehlpassungsenergie (ΔH_{size}), welche nach Gleichung (39) berechnet wurde. In der Tabelle ist auch die Lösungswärme nach Miedema (ΔH_{solv} , Gleichung (37)) enthalten.

Element	ΔH_{size} [kJ/mol]	ΔH_{solv} [kJ/mol]	$T_i=T_m=77K$	$T_i=77K, T_m=293K$	$T_i=T_m=293K$
Cl	7	-361	octa.+tetra.	(BeCl ₂)	(BeCl ₂)
Mn	11	-27	subst. $f_s=1,0$	subst. $f_s=0,9$	subst. $f_s=1,0$
Zn	26	+49	subst. $f_s=1,0$	subst. $f_s=0,93$	subst. $f_s=0,98$
Au	35	-96	subst. $f_s=1,0$	subst. $f_s=1,0$	subst. $f_s=1,0$
Ga	51	+62	subst. $f_s=0,89$	subst. $f_s=0,28$	subst.+octa.
Hg	72	+104	subst. $f_s^{5,5}=0,77$ $f_s^{77}=0,68$	gemischt	gemischt
In	90	+145	subst. $f_s=0,55$	tetra.+okta.	subst.+tetra.
Sb	101	+104	subst. $f_s=0,53$	okta.	[VIA80] okta.
Bi	122	+186	subst. $f_s^{5,5}=0,27$ $f_s^{77}=0,23$	okta.	okta.
Te	145	+29	subst. $f_s=0,18$	tetra.+okta.	—
I	176	+16	okta.+tetra.	okta.	okta.
Ca	179	+172	okta.	okta.	okta.
Xe	256	+258	rand.	rand.	okta.

Tab. 13: Übersicht der Gitterplatzbesetzung von verschiedenen Elementen in Be. Die Volumenfehlpassungsenergie ΔH_{size} wurde nach Gleichung 39 mit den Werten aus [MIE80] berechnet. Abkürzungen: subst.: substitutionell, okta: oktaedrisch, tetra: tetraedrisch.

Aus Tab.13 ist zu sehen, daß die Ergebnisse der Gitterplatzbesetzung in drei Gruppen aufgeteilt werden können. Diese besitzen, abhängig von der Implantationstemperatur und der Volumenfehlpassungsenergie, jeweils ein unterschiedliches Verhalten in Bezug auf die Gitterplatzbesetzung:

1. Elemente mit kleiner Volumenfehlpassungsenergie $\Delta H_{size} < 40 \text{ kJ/mol}$ wie Mangan, Zink und Gold sind vollständig substitutionell nach der Implantation bei 77K. Nach Erwärmen auf Raumtemperatur bleiben diese Elemente substitutionell. Diese Elemente sind auch nach der Implantation bei 293K vollständig substitutionell.
2. Elemente mit mittleren ΔH_{size} -Werten zwischen 40 und 145 kJ/mol wie Gallium, Quecksilber, Indium, Antimon, Bismut und Tellur sind nach der Implantation bei 77K teilweise substitutionell. Der substitutionelle Anteil nimmt hierbei mit steigender Volumenfehlpassungsenergie ab. Nach Erwärmen auf Raumtemperatur verschwindet dieser substitutionelle Anteil und die Atome gehen auf reguläre Zwischengitterplätze. Eine Ausnahme hierbei bilden Hg und Ga, welche immer noch einen kleinen substitutionellen Anteil besitzen. Werden diese Atome bei Raumtemperatur implantiert, so befinden sie sich auf regulären Zwischengitterplätzen, welche bis auf geringe Abweichungen denen der aufgewärmten Tieftemperaturimplantationen entsprechen. Hg und Ga besitzen auch nach der Implantation bei 293K einen kleinen substitutionellen Anteil.
3. Elemente mit hohen Volumenfehlpassungsenergien $\Delta H_{size} > 150 \text{ kJ/mol}$ wie Jod und Calcium sind nach der Implantation bei 77K auf oktaedrischen Zwischengitterplätzen. Nach Erwärmen auf 293K bleiben die Fremdatome auf diesen Zwischengitterplätzen, wobei sich der oktaedrische Anteil leicht ändert. Werden diese Elemente bei Raumtemperatur implantiert, so sitzen sie auf oktaedrischen Zwischengitterplätzen. Xenon mit der größten Volumenfehlpassungsenergie der von uns implantierten Elemente bildet bei Tieftemperaturimplantation eine Ausnahme, welche im folgenden noch genauer beschrieben wird. Nach der Implantation bei 293K sitzt Xe auf oktaedrischen Zwischengitterplätzen.

Eine Ausnahme in unseren Ergebnissen bildet Chlor. Mit seiner geringen Volumenfehlpassungsenergie sollte es nach der obigen Unterteilung auf substitutionellen Gitterplätzen sitzen. Es besitzt allerdings eine sehr große negative Lösungswärme (-361 kJ/mol) und hohe Elektronegativität. Diese Eigenschaften führen dazu, daß die Bildung von Verbindungen und Ausscheidungen begünstigt wird. Für die Implantationen von Cl wurden hohe Fluenzen benutzt. Dies war nötig, um eine Auflösbarkeit in den RBS-Spektren zu ermöglichen. Nach der Implantation bei Raumtemperatur und nach Aufwärmen der 77K Implantation ist in den winkelabhängigen Ausbeutekurven keine Struktur erkennbar. Wir vermuten, daß das implantierte Chlor die Verbindung BeCl_2 bildet, welcher kein definierter Gitterplatz zugeordnet werden kann. Nach der Tieftemperaturimplantation führen die Ausbeutekurven zu dem Schluß, daß oktaedrische und tetraedrische Zwischengitterplätze besetzt werden. Aufgrund der geringen Volumenfehlpassungsenergie vermuten wir, daß die Fremdatome direkt auf diesen Plätzen eingebaut werden können, ohne mit Punktdefekten wechselzuwirken.

Mangan, Zink und Gold besetzen unabhängig von der Implantationstemperatur substitutionelle Gitterplätze. Diese Atome haben kleine ΔH_{size} Werte und passen auf

die regulären Plätze im Wirtsgitter. Mn und Au besitzen außerdem eine negative Lösungswärme. Au und Zn besitzen nach [GOL73] eine Löslichkeit von einigen Prozent bei Raumtemperatur. Diese Argumente erklären die vollständige Substitutionalität der drei Elemente. Mit zunehmender Volumenfehlpassungsenergie führt die Besetzung von substitutionellen Gitterplätzen zu Verspannungen des Wirtsgitters. Wir gehen davon aus, daß Fremdatome dazu tendieren, diese Verspannungen zu reduzieren. Eine Möglichkeit hierfür ist der Einfang von Leerstellen. Bei Raumtemperatur sind die während des Implantationsprozesses erzeugten Leerstellen beweglich. Die Reichweite der Leerstellen in Beryllium ist nicht so groß wie in anderen Metallen, da das Ende der Ausheilstufe **III** bei 293K noch nicht erreicht ist. Die Beweglichkeit reicht aber aus, daß Fremdatome zur Reduzierung der Volumenfehlpassungsenergie Leerstellen einfangen können.

Die Ergebnisse nach den Raumtemperaturimplantationen entsprechen einem metastabilen Gleichgewichtszustand. Elemente mit $\Delta H_{size} < 100kJ/mol$ wie Indium, Gallium und Quecksilber sitzen noch teilweise auf substitutionellen Plätzen. Ein Teil von ihnen besetzt allerdings tetraedrische oder oktaedrische Zwischengitterplätze. Die Besetzung tetraedrischer Zwischengitterplätze läßt sich mit dem Einfang von vier Leerstellen und der Bildung von XV_4 Komplexen erklären. Der oktaedrische Anteil ist mit dem Einfang von 6 Leerstellen verbunden. Es bilden sich XV_6 Komplexe. Ist die Volumenfehlpassungsenergie der implantierten Elemente größer als $100kJ/mol$, so befinden sich die Fremdatome auf oktaedrischen Zwischengitterplätzen. Ein substitutioneller Anteil ist hier nicht mehr erkennbar. Die Ergebnisse können also mit der Wechselwirkung der implantierten Fremdatome mit Leerstellen erklärt werden. Die Bildung von Fremdatom-Punktdefekt Komplexen hängt dabei direkt mit der Größenordnung von ΔH_{size} zusammen. Mit steigendem ΔH_{size} nimmt das Einfangvolumen für Leerstellen zu.

In Abb.32 sind die substitutionellen Anteile über der Volumenfehlpassungsenergie für die Implantationen bei 77K aufgetragen. In der Abbildung ist zu erkennen, daß ein deutlicher Zusammenhang zwischen diesen beiden Werten besteht. Bei tiefen Temperaturen sind Leerstellen nicht beweglich. Der Einfang von Leerstellen durch Fremdatome kann daher nur innerhalb der Abkühlphase der Kollisionskaskade erfolgen. Die Besetzung von tetraedrischen (4 Leerstellen werden benötigt) oder oktaedrischen (6 Leerstellen werden benötigt) Zwischengitterplätzen ist hier schwieriger. Der metastabile Gleichgewichtszustand, der bei den Raumtemperaturimplantationen auftritt, kann hier nicht erreicht werden. Fremdatome mit ΔH_{size} kleiner als $40kJ/mol$ (Au, Mn, Zn) sitzen vollständig auf substitutionellen Gitterplätzen. Atome mit ΔH_{size} -Werten zwischen 40 und $150kJ/mol$ sitzen zum Teil auf substitutionellen Gitterplätzen. Der substitutionelle Anteil sinkt hierbei mit steigender Volumenfehlpassungsenergie. Wir vermuten, daß der nichtsubstitutionelle Anteil Leerstellen einfängt. Diese reichen aber nicht aus, um Tetraeder- bzw. Oktaederkomplexe zu bilden. In den winkelabhängigen Ausbeutekurven ist kein interstitieller Anteil zu erkennen. Dies bestätigt die Aussage, daß die Bildung von XV_4 und XV_6 Komplexen nicht auftritt. Atome mit ΔH_{size} über $150kJ/mol$ ge-

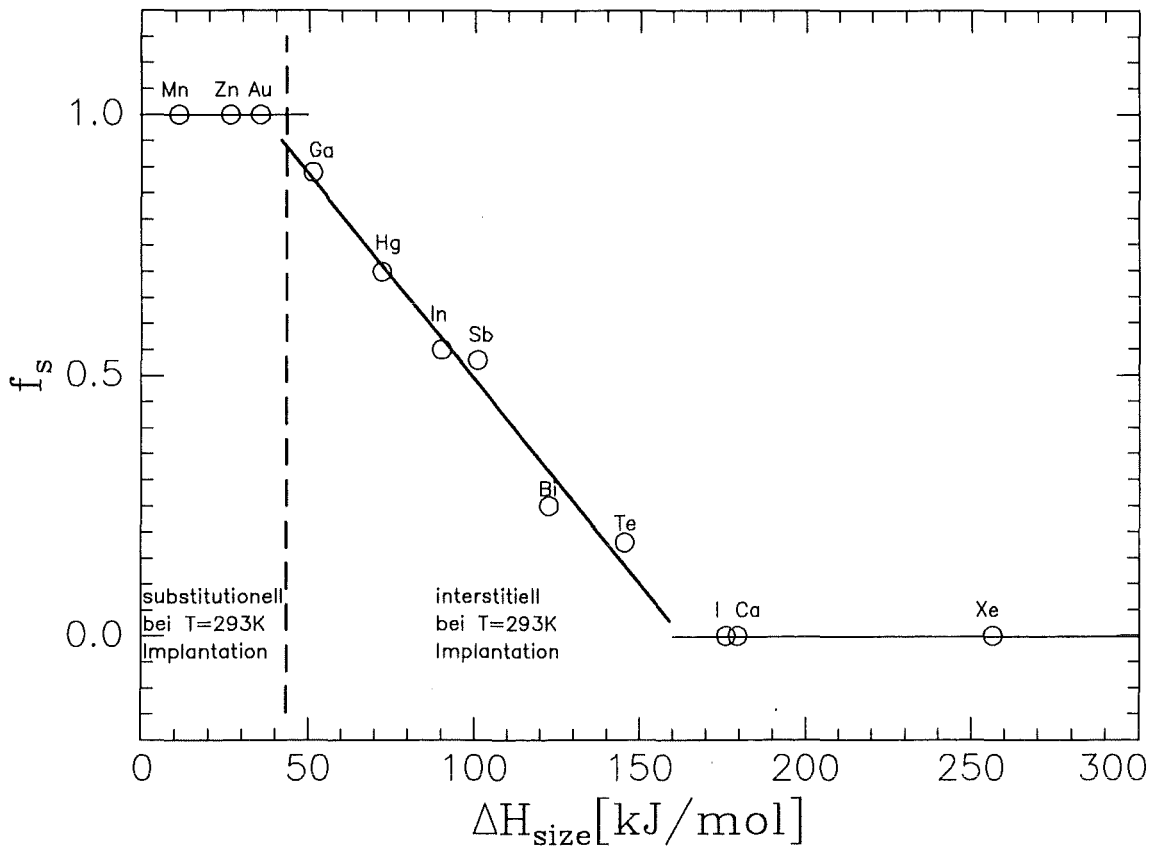


Abb. 32: Abhängigkeit des substitutionellen Anteils, f_s , von der Volumenfehlpassungsenergie, ΔH_{size} in $[\frac{kJ}{mol}]$, für bei 77K in Be implantierte Elemente.

hen auch bei der Tieftemperaturimplantation auf oktaedrische Zwischengitterplätze. Sie können genügend Leerstellen zur Bildung dieses XV_6 -Komplexes innerhalb der Abkühlphase einfangen.

Das Einfangvolumen für Leerstellen ist proportional zum Verspannungsfeld, welches durch übergroße Atome auf substitutionellen Gitterplätzen entsteht. Die Konsequenz daraus ist eine Proportionalität des nichtsubstitutionellen Anteils ($1-f_s$) zu ΔH_{size} . Diese Abhängigkeit ist in Abb.32 ersichtlich. Sie gilt für den ΔH_{size} -Bereich von 40 bis $150 kJ/mol$.

Die Verteilung der Fremdatome auf substitutionelle und nichtsubstitutionelle Plätze nach der Implantation bei tiefen Temperaturen minimiert die Verspannungsenergie. Dieser Zustand ist aber noch weit vom metastabilen Gleichgewicht entfernt, welches bei Raumtemperaturimplantationen beobachtet wird. Das Erwärmen der bei tiefen Temperaturen implantierten Proben auf Raumtemperatur resultiert im Einfang von zusätzlichen Leerstellen. Sie sind bei dieser Temperatur beweglich. Dies führt zu einer Verrückung der implantierten Fremdatome auf reguläre Zwischengitterplätze (tetraedrisch oder oktaedrisch in Abhängigkeit von ΔH_{size}), wie sie direkt nach der Implan-

tation bei Raumtemperatur beobachtet wird. Es bilden sich wiederum XV_4 und XV_6 Komplexe.

Bei der Implantation von Xenon wird ein Verhalten beobachtet, welches sich von denen anderer Fremdatome unterscheidet. Nach Tieftemperaturimplantation von Xe ist dieses nahezu zufällig im Wirtsgitter verteilt mit einem kleinen oktaedrischen Anteil. Daran ändert sich auch nach Erwärmen auf Raumtemperatur nichts. Die fehlende Struktur in den winkelabhängigen Ausbeutekurven kann zwei mögliche Gründe haben: 1) Bei der 77K Implantation bilden sich relativ stabile Xe-Leerstellen-Komplexe mit unterschiedlicher Anzahl von Leerstellen. 2) Es bilden sich Xe-Ausscheidungen, welche sich bei Erwärmen nicht auflösen können.

In dem elastischen Modell aus obiger Diskussion existiert eine Bindungsenergie zwischen Leerstellen und Fremdatomen. Diese wird durch Spannungsfelder verursacht. Wir nehmen an, daß die Fremdatome am Beginn der Abkühlphase der Kaskade auf substitutionellen Gitterplätzen sitzen. Die Fehlanpassung der Fremdatome im Wirtsgitter verursacht Spannungsfelder. Die Einfangwahrscheinlichkeit für Leerstellen wächst mit steigender Volumenfehlanpassungsenergie. Für hohe ΔH_{size} -Werte können Fremdatome innerhalb der Abkühlphase Leerstellen einfangen. Nur I und Ca haben ein genügend großes Einfangvolumen für Leerstellen, um XV_6 -Komplexe innerhalb der Abkühlphase zu bilden. Bei kleinen und mittleren ΔH_{size} -Werten ist die Absättigung mit Leerstellen (zur stabilen XV_4 und XV_6 Komplexbildung) erst bei Raumtemperatur möglich. Daher ist es nicht erstaunlich, daß der substitutionelle Anteil der implantierten Systeme mit steigender Volumenfehlanpassungsenergie abnimmt. Eine Abhängigkeit des substitutionellen Anteils von der Volumenfehlanpassungsenergie wurde auch bei Implantationen in Aluminium beobachtet [GER88]. Die speziellen Eigenschaften des Be sind:

- Ersetzungsstöße am Ende der Kaskade sind durch die leichte Masse von Beryllium physikalisch unmöglich.
- Geringe Kaskadendichten während der Implantation sind auch eine Folge der leichten Masse.
- Bei Raumtemperatur sind Leerstellen noch nicht vollständig beweglich, da das Ende der Ausheilstufe **III** noch nicht erreicht ist.

Unsere Ergebnisse zeigen, daß diese Eigenschaften keinen Einfluß auf die grundlegenden Mechanismen der Gitterplatzbesetzung von implantierten Fremdatomen haben.

Durch die begrenzte Beweglichkeit von Leerstellen bei Raumtemperatur kommt es zu einem interessanten Effekt. Die im nächsten Abschnitt diskutierte Tiefenabhängigkeit der Gitterplatzbesetzung beruht auf einem tiefenabhängigen Leerstellenangebot. Die Ergebnisse dieses Abschnitts werden bestätigen, daß die Wechselwirkung mit Leerstellen von grundlegender Bedeutung für den Einbau von Fremdatomen in das Wirtsgitter ist.

4.3 Tiefenabhängigkeit der Gitterplatzbesetzung

Im vorhergehenden Abschnitt wurde der Einfluß der Leerstellenbeweglichkeit auf die Gitterplatzbesetzung diskutiert. In diesem Abschnitt wird ein weiterer Effekt diskutiert, welcher wiederum durch die Bildung von Fremdatom-Leerstellen Komplexen erklärt werden kann. Bei der Auswertung der RBS-Spektren zeigte sich insbesondere bei Elementen, welche nach der Implantation auf oktaedrischen Plätzen sitzen, eine Tiefenabhängigkeit der Besetzung dieser interstitiellen Plätze.

In Abb.33 ist ein Teil der RBS-Spektren für $7 \cdot 10^{14} \text{Bi}/\text{cm}^2$ implantiert mit 300keV bei Raumtemperatur gezeigt. Im Bild ist die Verteilung des implantierten Bi dargestellt. Die Kreise und die dünne Linie stellen das nichtorientierte Spektrum, die Dreiecke und

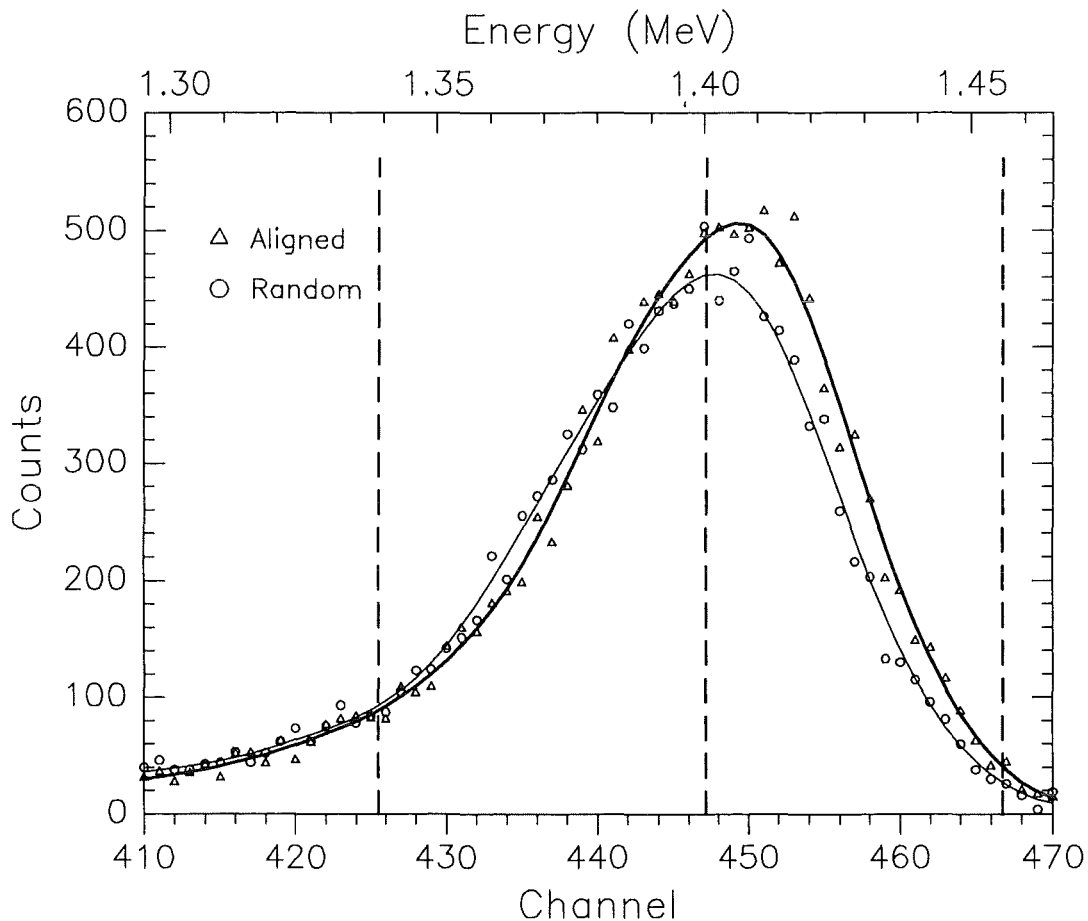


Abb. 33: Tiefenabhängigkeit der Besetzung oktaedrischer Zwischengitterplätze für $7 \cdot 10^{14} \text{Bi}/\text{cm}^2$ implantiert bei 293K mit 300keV . Ausschnitt aus den RBS-Spektren.

die dickere Linie das Spektrum nach Ausrichten der Probe parallel zur $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse dar. Bei höheren Rückstreuenergien (rechts vom Peakmaximum), das bedeutet näher an der Oberfläche des Kristalls, liegt die Kurve des ausgerichteten Spektrums deutlich über

der des nichtorientierten Spektrums. Dies deutet auf die Besetzung von oktaedrischen Zwischengitterplätzen durch Bi-Atome hin. Bei niedrigeren Rückstreuenenergien (links vom Peakmaximum) haben beide Spektren nahezu den gleichen Verlauf, was keine Aussage zur Gitterplatzbesetzung zuläßt.

In Abb.33 sind drei senkrechte Linien eingezeichnet. Sie entsprechen den Grenzen der zur Auswertung der winkelabhängigen Ausbeutekurven benutzten Energiefenster. Wird das Energiefenster über den gesamten Bi-Peak in den RBS-Spektren (linke bis rechte Linie) gesetzt, so ergibt sich das in Abb.34a dargestellte Bild. In der winkelabhängigen Ausbeutekurve des Bi ist eine Überhöhung zu sehen, welche die Besetzung oktaedrischer Plätze anzeigt. Wird das Energiefenster nur im Bereich links vom Peakmaximum gesetzt (Abb.34b), so ist in der Ausbeutekurve keine Struktur mehr zu erkennen. Eine Besetzung von regulären Zwischengitterplätzen ist nicht erkennbar. Im Gegensatz dazu zeigt die in Abb.34c dargestellte Kurve, bei welcher das Energiefenster rechts vom Peakmaximum gesetzt wurde, einen deutlichen Peak. Dieser Peak deutet auf eine star-

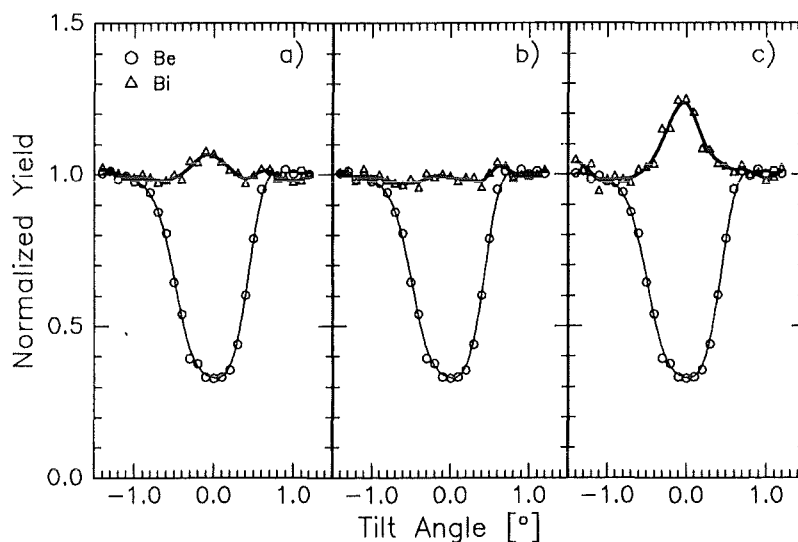


Abb. 34: Winkelabhängige Ausbeutekurven über die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse von Be mit $7 \cdot 10^{14} \text{ Bi/cm}^2$ mit unterschiedlichen Energie(Tiefen)fenstern in den RBS-Spektren: a) Gesamtpeak, b) tiefer im Kristall, c) näher an der Oberfläche.

ke Besetzung von Oktaederplätzen hin. Diese Ergebnisse zeigen, daß die Besetzung von oktaedrischen Zwischengitterplätzen durch Bi tiefenabhängig ist.

Um diesen Effekt der Tiefenabhängigkeit zu verstehen, kann wie bei der vorherigen Diskussion der Gitterplatzbesetzung wiederum auf die Wechselwirkung mit Leerstellen zurückgegriffen werden. Um die Verteilung der implantierten Bi-Atome im Wirtsgitter und die der während der Implantation erzeugten Leerstellen zu erhalten, wurde eine Simulationsrechnung mit dem Programm TRIM [BIE80] durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Simulation sind in Abb.35 dargestellt. Die Dreiecke stellen die Verteilung der

implantierten Bi-Atome dar. Ihre mittlere Reichweite beträgt 1130\AA , die Reichweitenstreuung liegt bei 175\AA . Die Verteilung der erzeugten Leerstellen, welche durch Kreise dargestellt werden, hat ihren höchsten Wert bei ca. 930\AA und liegt im Maximum der Bi-Verteilung nur noch bei ca. 60%. Dieses tiefenabhängige Angebot von Leerstellen im

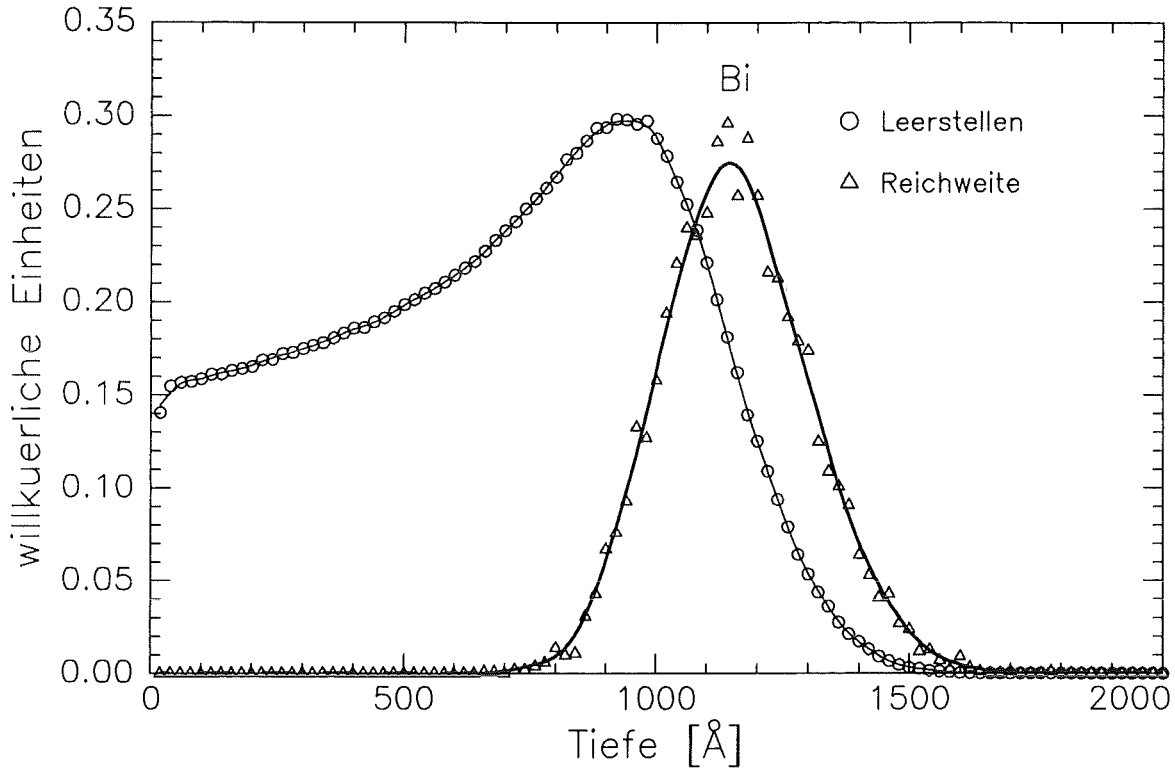


Abb. 35: TRIM-Simulation der Reichweitenverteilung und Leerstellenproduktion für die Implantation von Bi mit 300keV in Be.

Bereich des implantierten Bi führt zu dem in Abb.34 dargestellten Effekt. Es ist einleuchtend, daß sich links vom Implantationsmaximum (näher an der Oberfläche) mehr Oktaederkomplexe bilden können. Das Angebot an Leerstellen ist in diesem Bereich deutlich höher als tiefer im Kristall, und somit sind die Bi-Ionen in der Lage, genügend Leerstellen zur Bildung von BiV_6 -Komplexen einzufangen. Rechts vom Implantationsmaximum ist diese 'Absättigung' mit Leerstellen nicht mehr oder nur in geringerem Umfang möglich, da hier deutlich weniger Leerstellen erzeugt werden. Hier kann also nur ein geringer Teil des Bi BiV_6 Komplexe bilden, der Rest muß sich mit weniger Leerstellen zufrieden geben, und so ergibt sich das in Abb.34b dargestellte Bild, in welchem die Bi-Atome zufällig im Wirtsgitter verteilt zu sein scheinen. Der Anteil von implantierten Bi Atomen auf Oktaederplätzen hängt also direkt mit der Anzahl der angebotenen Leerstellen zusammen. Bei anderen Wirtsgittern wurde dieser Effekt bisher nicht beobachtet. Dies läßt den Schluß zu, daß dies eine spezielle Eigenschaft des Berylliums ist. Erklären kann man dies mit der begrenzten Reichweite von Leerstellen bei Raumtemperatur.

In RBS-Messungen können, bei Ausrichtung des Analysestrahls parallel zu einer niedrig indizierten Kristallebene, Oszillationen im Fluß der zurückgestreuten Teilchen auftreten. Es wäre möglich, daß solche Oszillationen im Fluß den Eindruck einer Tiefenabhängigkeit bewirken. Um den Einfluß solcher Oszillationen auf unsere Ergebnisse auszuschließen, wurden außer für Bi weitere Implantationen tiefenabhängig ausgewertet. Es handelte sich hierbei um die Elemente Xe und Ca, welche nach der Implantation bei Raumtemperatur auf oktaedrischen Zwischengitterplätzen sitzen. Diese Elemente haben im Wirtsgitter eine von Bi verschiedene Reichweite und Reichweitenverteilung. Damit kann dann bei übereinstimmenden Ergebnissen ein Einfluß von Oszillationen ausgeschlossen werden. Im folgenden werden die Ergebnisse für Xe und Ca gezeigt.

Die Ergebnisse der Implantation von $5 \cdot 10^{14} \text{Xe}/\text{cm}^2$ mit 300keV bei Raumtemperatur sind in Abb.36 dargestellt. Bei Setzen des Energiefensters über den gesamten Implantationspeak im Spektrum erhält man Abb.36a. Die starke Überhöhung in der Ausbeutekurve des Xe zeigt deutlich die Besetzung von oktaedrischen Zwischengitterplätzen. In

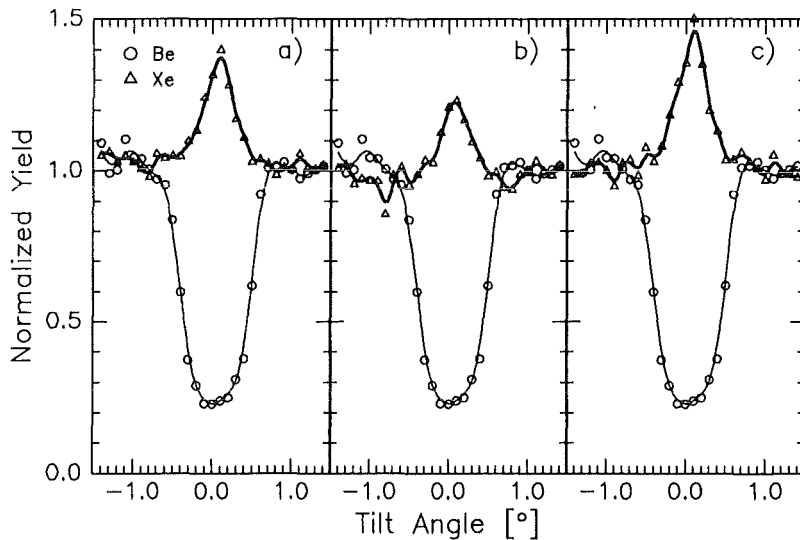


Abb. 36: Winkelabhängige Ausbeutekurven über die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse von Be mit $5 \cdot 10^{14} \text{Xe}/\text{cm}^2$ mit unterschiedlichen Energie(Tiefen)fenstern in den RBS-Spektren: a) Gesamtpeak, b) tiefer im Kristall, c) näher an der Oberfläche.

Abb.36b ist das Ergebnis für Setzen des Energiefensters tiefer im Kristall dargestellt. Hier ist die Überhöhung deutlich niedriger, was bedeutet, daß weniger Atome genügend Leerstellen einfangen können, um XeV_6 -Komplexe zu bilden. Näher an der Oberfläche ist die Überhöhung sehr groß (Abb.36c). Hier kann also ein großer Teil der Fremdatome XeV_6 bilden und auf oktaedrische Zwischengitterplätze gehen. Eine TRIM-Simulation dieser Implantation ergab, daß während des Implantationsvorgangs auf der oberflächennahen Seite der Fremdatomverteilung deutlich mehr Leerstellen erzeugt werden als auf der tiefer im Kristall liegenden Seite. Die Reichweite für Xe beträgt ca. 1280Å und die Reichweitenstreuung ca. 140Å . Trotz der unterschiedlichen Reichweiten von Xe und Bi

kommt es in beiden Fällen zu einer tiefenabhängigen Gitterplatzbesetzung. Damit kann der Einfluß von Flußoszillationen ausgeschlossen werden.

Ca kann bei tiefen Temperaturen innerhalb der Abkühlphase der Kaskade genügend Leerstellen einfangen, um Oktaederkomplexe zu bilden. In Abb.37 sind die Ergebnisse für die Implantation von $2 \cdot 10^{14} \text{Ca}/\text{cm}^2$ mit 100keV bei 77K dargestellt. Auch hier

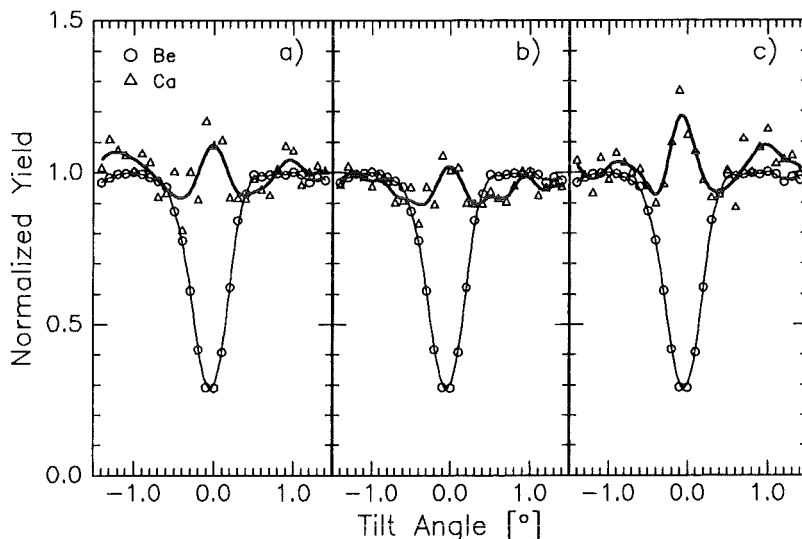


Abb. 37: Winkelabhängige Ausbeutekurven über die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse von Be mit $2 \cdot 10^{15} \text{Ca}/\text{cm}^2$ bei 77K mit unterschiedlichen Energie(Tiefen)fenstern in den RBS-Spektren: a) Gesamtpeak, b) tiefer im Kristall, c) näher an der Oberfläche.

ist, wie bei den Implantationen von Xe und Bi bei Raumtemperatur, eine deutliche Tiefenabhängigkeit zu erkennen. Setzen des Energiefensters näher an der Oberfläche führt zu einem deutlich höheren Peak in der Ausbeutekurve des Ca (Abb.37c), als bei setzen des Energiefensters tiefer im Kristall (Abb.37b). In Abb.37a ist das Ergebnis für die Wahl des Energiefensters über den gesamten Implantationsbereich zu sehen. Eine TRIM-Simulation ergibt auch hier bezüglich der Fremdatom-Leerstellen Verteilung ein ähnliches Bild wie bei Xe und Bi. Hier kann schon bei tiefen Temperaturen eine Tiefenabhängigkeit beobachtet werden, da das Angebot an erzeugten Leerstellen dieselbe Verteilung besitzt wie bei Raumtemperatur. Die mittlere Reichweite der Ca-Ionen liegt bei ca. 1040Å und die Reichweitenstreuung bei ca. 175Å . Die Tatsache, daß der Effekt der tiefenabhängigen Gitterplatzbesetzung für unterschiedliche Elemente mit verschiedenen Reichweiten auftritt, läßt Flußoszillationen als Ursache ausschließen.

Fremdatome, welche nach der Implantation auf oktaedrischen Zwischengitterplätzen sitzen, zeigen eine tiefenabhängige Gitterplatzbesetzung. Diese ist mit dem Angebot an Leerstellen, welche durch den Implantationsprozeß erzeugt werden, korreliert. Das Auftreten dieses Effekts anhand von Flußoszillationen konnte durch die Implantation von unterschiedlichen Elementen in verschiedene Tiefen ausgeschlossen werden.

Der Effekt der tiefenabhängigen Gitterplatzbesetzung nach der Implantation von Fremdatomen, welcher hier vorgestellt wurde, ist eine spezielle Eigenschaft des Berylliums. Bei Raumtemperatur sind Leerstellen in Beryllium nur über eine begrenzte Reichweite beweglich. Die implantierten Fremdatome können damit nur Leerstellen einfangen, welche in deren näheren räumlichen Umgebung erzeugt wurden. Im oberflächennahen Bereich des Implantationsspektrums, wo viele Leerstellen erzeugt werden, ist die Bildung von Fremdatom-Leerstellen Komplexen wahrscheinlicher als tiefer im Kristall. Werden durch eine Nachbestrahlung über den gesamten Implantationsbereich gleichmäßig Leerstellen erzeugt, so existiert, wie im nächsten Abschnitt beschrieben, keine Tiefenabhängigkeit mehr.

4.4 Nachbestrahlungsexperimente

Um die Wechselwirkung von implantierten Fremdatomen mit zusätzlich erzeugten Leerstellen zu untersuchen, wurden Nachbestrahlungsexperimente durchgeführt. Fremdatome können während der Nachbestrahlung weitere Leerstellen einfangen und so den Gitterplatz wechseln. Für die Nachbestrahlungsexperimente in dieser Arbeit wurden Mangan-Ionen benutzt. Sie haben wegen ihrer relativ geringen Masse eine hohe Reichweite innerhalb des Wirtsgitters Be. Diese Tatsache garantiert eine räumliche Trennung im Wirtsgitter von den zuvor implantierten Fremdatomen. Nach der Implantation sind die Mn Atome vollständig substitutionell. Diese Besetzung von substitutionellen Gitterplätzen bedeutet, daß die Mn-Ionen keine Leerstellen einfangen. Damit stehen die erzeugten Leerstellen vollständig für die zuvor implantierten Fremdatome zur Verfügung.

4.4.1 Nachbestrahlung der Hochdosis Bi-Implantation

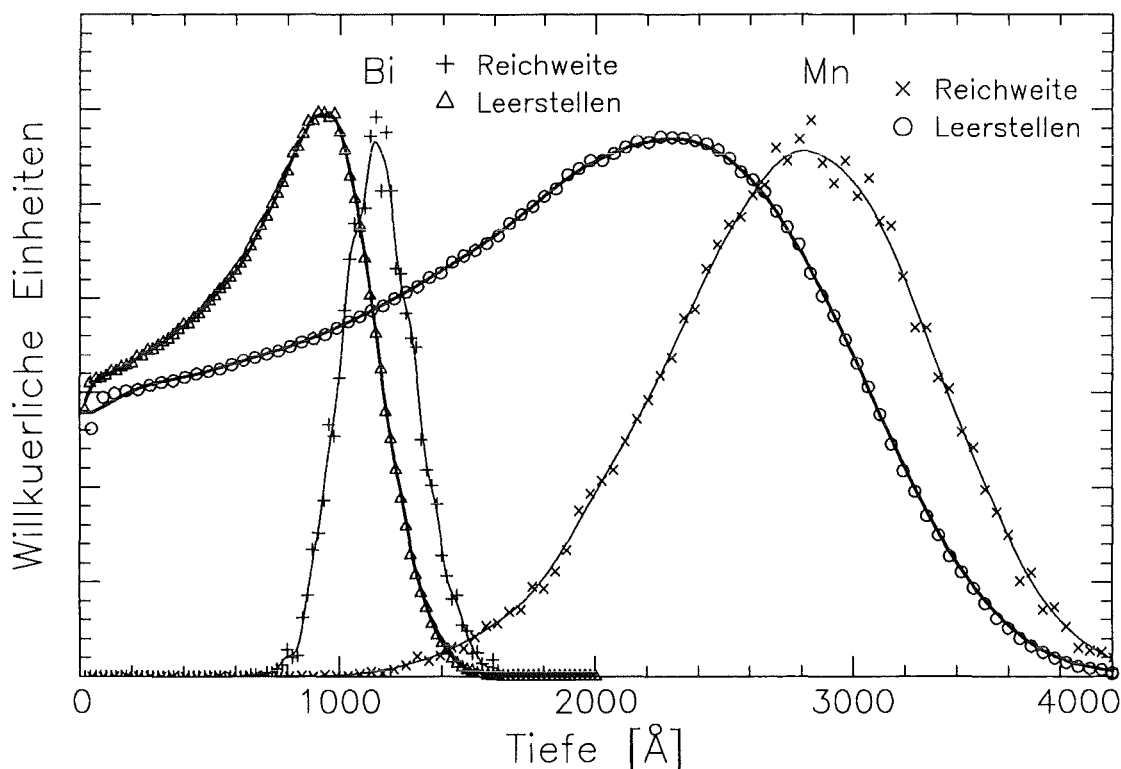


Abb. 38: TRIM-Simulation der Reichweiten und erzeugten Leerstellen von Bi mit 300keV und Mn mit 300keV in einem Be-Wirtsgitter.

In Abb.38 sind TRIM-Simulationen für die Leerstellen- und Reichweitenverteilungen von Bi und Mn für jeweils 300keV dargestellt. Es ist zu sehen, daß die Verteilung des implantierten Mn (\times) von der des implantierten Bi ($+$) getrennt ist. Die durch die Nach-

bestrahlung von Mn erzeugten Leerstellen (o) sind über den Bereich des implantierten Bismuts gleichmäßig verteilt. Sie können von den Bi-Atomen eingefangen werden.

In Abb.39a ist die winkelabhängige Ausbeutekurve einer Implantation von $1,3 \cdot 10^{15} \text{ Bi/cm}^2$ mit 300 keV bei 293 K dargestellt. Die implantierten Bi-Atome sind zufällig im Wirtsgitter verteilt. Die Schädigung des Wirtsgitters ist mit einer minimalen Ausbeute von $0,39$ relativ hoch. Der hohe χ_{\min} Wert entsteht durch Defekte und Verspannungen im Wirtsgitter. Verspannungen können dadurch entstehen, daß bei einer solch hohen Flu-

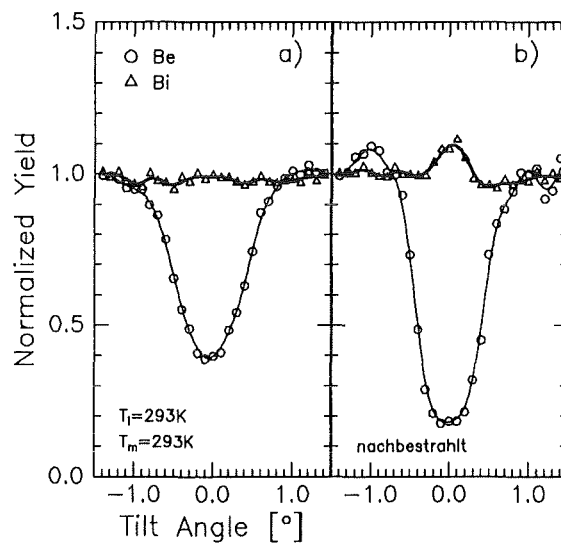


Abb. 39: Winkelabhängige Ausbeutekurven über die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse von Be mit $1,3 \cdot 10^{15} \text{ Bi/cm}^2$, $T_i = T_m = 293 \text{ K}$; a) wie implantiert, b) nachbestrahlt mit $2 \cdot 10^{15} \text{ Mn/cm}^2$.

enz Bi-Atome nicht mehr in der Lage sind, genügend Leerstellen zur Bildung von XV_6 Komplexen einzufangen. Um festzustellen, ob das Angebot von zusätzlichen Leerstellen zum Abbau von Verspannungen führt, wurde eine Nachbestrahlung von $2 \cdot 10^{15} \text{ Mn/cm}^2$ mit 300 keV durchgeführt. Das Ergebnis der winkelabhängigen Ausbeutekurve nach dieser Bestrahlung ist in Abb.39b zu sehen. In der Mitte der Bi-Ausbeutekurve ist ein deutlicher Peak zu sehen. Dieser deutet auf die Besetzung von oktaedrischen Zwischengitterplätzen hin. Gleichzeitig geht die minimale Ausbeute deutlich auf $0,17$ zurück. Durch die Erzeugung der zusätzlichen Leerstellen können Bi-Atome BiV_6 -Komplexe bilden. Die minimale Ausbeute des Be erreicht nach der Bestrahlung den gleichen Wert wie nach der Implantation von Mn allein.

Setzt man in den RBS-Spektren im Bereich des Bi Energiefenster in unterschiedlichen Tiefen, so ergibt sich das in Abb.40 dargestellte Bild. Es ist hier im Gegensatz zu den Implantationen von Bi ohne Nachbestrahlung keine Tiefenabhängigkeit zu erkennen. Durch die Erzeugung von Leerstellen gleichmäßig über der gesamten Bismutverteilung können diese im ganzen Bereich einfangen werden. Dies bestätigt, daß die

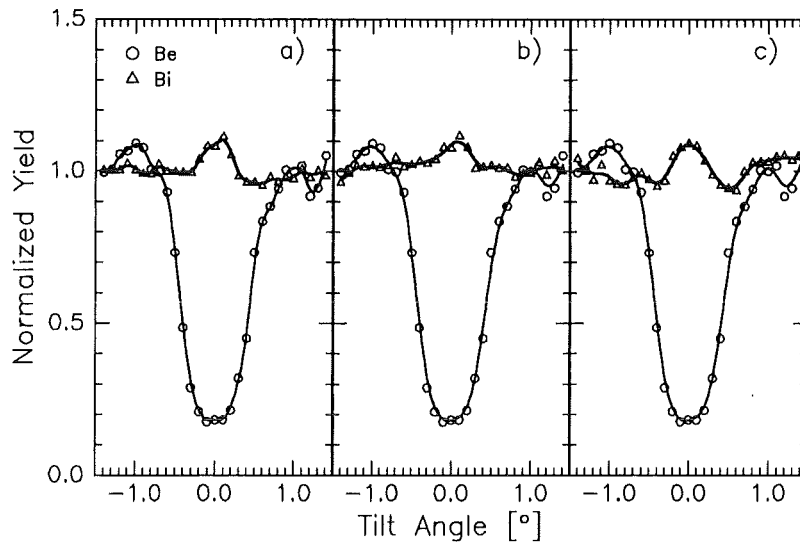


Abb. 40: Winkelabhängige Ausbeutekurven über die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse von Be mit $1,3 \cdot 10^{15} \text{ Bi/cm}^2$ nachbestrahlt mit $2 \cdot 10^{15} \text{ Mn/cm}^2$ mit unterschiedlichen Energie(Tiefen)fenstern in den RBS-Spektren: a) Gesamtpeak, b) tiefer im Kristall, c) näher an der Oberfläche.

Tiefenabhängigkeit wie in Abschnitt 4.3. diskutiert, durch das Leerstellenangebot verursacht wird. Ist nach der Bestrahlung ein tiefenunabhängiges Angebot von Leerstellen vorhanden, so tritt auch keine Tiefenabhängigkeit der Gitterplatzbesetzung auf.

4.4.2 Nachbestrahlung der Xe-Tieftemperaturimplantation

In Abb.41a ist die bei 77K mit $2 \cdot 10^{14} \text{ Xe/cm}^2$ bei 300 keV implantierte Probe gemessen bei Raumtemperatur dargestellt. In der Ausbeutekurve des Xe ist keine Struktur zu sehen. Die minimale Ausbeute des Be beträgt nach Implantation und Erwärmen 0,31. Wie in der Diskussion zur Gitterplatzbesetzung erklärt, bildet Xe eine Ausnahme, da es trotz seiner großen Volumenfehlpassungsenergie weder innerhalb der Abkühlphase noch nach Erwärmen auf 293K auf oktaedrische Zwischengitterplätze geht, als dies bei Raumtemperaturimplantationen der Fall ist. Dies liegt an der Bildung relativ stabiler Fremdatom-Leerstellen Komplexen mit unterschiedlicher Anzahl von Leerstellen oder an Clusterbildung von Xe.

Um zu versuchen, diese Komplexe durch das Erzeugen zusätzlicher Leerstellen aufzulösen, wurde die Probe mit $2 \cdot 10^{15} \text{ Mn/cm}^2$ bei 300 keV und 293K nachbestrahlt. Die winkelabhängige Ausbeutekurve nach dieser Bestrahlung ist in Abb.41b gezeigt. In der Mitte ist ein deutlicher Peak zu sehen, welcher zeigt, daß eine Umordnung stattgefunden hat. Die Xe-Atome sitzen unter der Bildung von XV_6 Komplexen auf oktaedrischen Zwischengitterplätzen. Die minimale Ausbeute geht auf 0,18 zurück. Auch hier zeigte eine TRIM-Simulation, daß die Verteilungen von Xe und Mn räumlich voneinander ge-

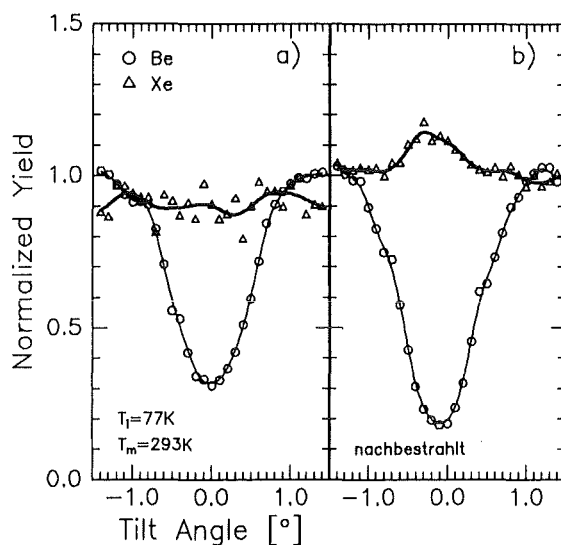


Abb. 41: Winkelabhängige Ausbeutekurven über die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse von Be mit $2 \cdot 10^{14} \text{Xe}/\text{cm}^2$, $T_i=77\text{K}$, $T_m=293\text{K}$; a) wie implantiert, b) nachbestrahlt mit $2 \cdot 10^{15} \text{Mn}/\text{cm}^2$.

trennt sind. Wie oben schon angesprochen, fängt das Mn keine Leerstellen ein und der Einfluß des Mn auf die Komplexbildung des Xe mit Leerstellen ist gering.

4.4.3 Nachbestrahlung der Zn-Tieftemperaturimplantation

Die Nachbestrahlung der Bi Implantation und der Tieftemperaturimplantation von Xe resultierten im Einfang von Leerstellen. Diese wurden durch die Bestrahlung erzeugt. Der Leerstelleneinfang führte zu einer verstärkten Besetzung von oktaedrischen Zwischengitterplätzen. Mit dem Gitterplatzwechsel war eine Reduzierung der minimalen Ausbeute des Wirtsgitters verbunden. Es stellt sich die Frage, ob dieser Rückgang von χ_{min} mit dem Gitterplatzwechsel korreliert ist. Um dies zu untersuchen, wurde die Nachbestrahlung einer Zn-Probe vorgenommen. Hier erwartet man keinen Gitterplatzwechsel, da Zn vollständig substitutionell ist.

Eine bei 77K mit $1 \cdot 10^{15} \text{Zn}/\text{cm}^2$ bei 300keV implantierte und aufgewärmte Probe wurde mit $1,5 \cdot 10^{15} \text{Mn}/\text{cm}^2$ nachbestrahlt. In Abb.42 ist das Ergebnis dieser Nachbestrahlung dargestellt. Die Kurve des Wirtsgitters vor der Bestrahlung wird durch Kreise (o) dargestellt, die danach durch Dreiecke (Δ). Ein Rückgang der minimalen Ausbeute von 0,27 auf 0,15 ist hier deutlich zu sehen. Die Nachbestrahlung heilt also auch Schädigungen des Wirtsgitters aus, wenn sie nicht mit einem Gitterplatzwechsel der zuvor implantierten Fremdatome verbunden ist. Eine Trennung der implantierten Bereiche von Mn und Zn ist leider nicht möglich. Die Reichweite des Mn ist zwar größer, aber es kommt doch zu einem deutlichen Überlapp. Aus den Spektren der winkelabhängigen Ausbeutekurve

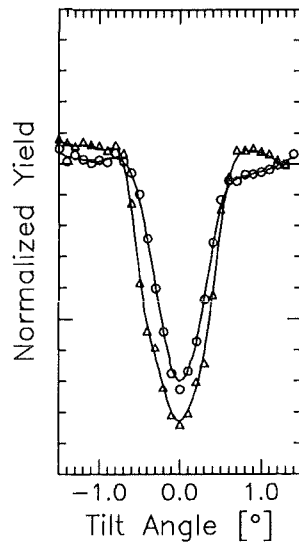


Abb. 42: Winkelabhängige Ausbeutekurven über die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ Achse von Be (o) mit $1 \cdot 10^{15} \text{ Zn/cm}^2$, $T_i = T_m = 293 \text{ K}$; Be (Δ) nachbestrahlt mit $1,5 \cdot 10^{15} \text{ Mn/cm}^2$.

konnte allerdings auf eine vollständige Substitutionalität beider Elemente geschlossen werden.

4.4.4 Zusammenfassende Diskussion der Nachbestrahlungen

Die Ergebnisse der Nachbestrahlungsexperimente zeigen alle einen deutlichen Rückgang in den minimalen Ausbeuten des Beryllium Wirtsgitters (siehe Tab.14). Dieser Rückgang kommt durch den Abbau von Schädigungen im Wirtsgitter zustande. Strahlungsinduziertes Ausheilen ist ein Grund für diesen Abbau. Durch die Bestrahlung können Leerstellencluster und deren Verspannungsfelder aufgelöst werden. Ein weiterer Grund ist die Bildung von Fremdatom-Leerstellen Komplexen, durch die lokale Verspannungsfelder um die implantierten Fremdatome abgebaut werden.

Probe	χ_{min}^{Be}	χ_{min}^{Be} nachbestrahlt	$\Delta\chi_{min}$	Platz- wechsel
Bismut	0,39	0,17	0,22	ja
Xenon	0,31	0,18	0,13	ja
Zink	0,27	0,15	0,11	nein

Tab. 14: Änderung der minimalen Ausbeute durch Nachbestrahlung.

Die Nachbestrahlung der Zn Implantation zeigt einen Rückgang in der minimalen Ausbeute des Wirtsgitters um $\Delta\chi_{min} = 0,11$. Dieser Rückgang zeigt, daß das Aushei-

len des Kristalls nicht hauptsächlich vom Einfang von Leerstellen durch Fremdatome abhängt. Die Änderung in der minimalen Ausbeute ($\Delta\chi_{min}$) ist zwar höher, wenn die Nachbestrahlung von einem Gitterplatzwechsel begleitet wird, aber ein großer Teil des Rückgangs liegt am Abbau anderer Defekttypen.

4.5 Schädigung des Wirtsgitters

Aus den RBS-Spektren wurde für jedes implantierte Element die maximale Peakkonzentration nach Gleichung (31) berechnet:

$$\frac{N_{impurity}}{N_{Be}} = \frac{\sigma_{Be}(1,5MeV)}{\sigma_{impurity}(1,5MeV)} \cdot \frac{[S]_{impurity}^{Be}}{[S]_{Be}^{Be}} \cdot \frac{H_{Be}}{H_{impurity}} \quad (41)$$

Diese Formel gilt unter der Näherung kleiner Raumwinkel und kleiner Konzentrationen der implantierten Elemente. Zur Berechnung der Rückstreuenergieverlustparameter wurde die Oberflächennäherung benutzt (Gleichung (24)). Die hieraus resultierenden Werte für die maximale Peakkonzentrationen (MP) sind in Tab.15 aufgelistet. Zusätzlich sind in dieser Tabelle die Werte für die Fluenz der implantierten Fremdatome tabelliert. Diese wurden direkt aus dem auf die Probe geflossenen Strom bestimmt. Die Implantationskonzentrationen lagen außer beim leichten Element Chlor unter 0,15%. Diese Werte bestätigen, daß die Näherung für kleine Konzentrationen hier gültig ist.

In der Tabelle 15 sind zusätzlich die minimalen Ausbeuten für Tieftemperatur- und Raumtemperaturimplantationen aufgelistet; auch die χ_{min} -Werte nach Erwärmen der 77K-Implantationen auf Raumtemperatur sind gezeigt. Simulationen mit dem Programm TRIM [BIE80] liefern die Werte für die mittlere projektierte Reichweite R_p und die Anzahl der erzeugten Leerstellen pro einfallendem Ion. In die Berechnung der Leerstellen pro Ion geht die Verlagerungsenergie E_D ein (7eV für Be). Die mittlere Anzahl der Verlagerungen pro Wirtsgitteratom dpa wurde nach folgender Gleichung berechnet:

$$dpa = \frac{\frac{Leerstellen}{Ion} \cdot Fluenz}{N \cdot R_p} \quad (42)$$

hierbei ist N die atomare Dichte des Wirtsgitters (für Be: $1,21 \cdot 10^{23} \frac{Atome}{cm^3}$).

Werden die minimalen Ausbeuten nach Raumtemperaturimplantation über die Verlagerungen pro Atom aufgetragen, so ergibt sich das in Abb.43 dargestellte Bild. Es ist zu erkennen, daß die minimale Ausbeute des Wirtsgitters für die Implantation von Bi und Xe mit steigender Anzahl von Verlagerungen pro Atom zunimmt. Die Werte für Xenon liegen hierbei unter denen von Bi. Ein Zusammenhang zwischen dpa und χ_{min} unabhängig vom implantierten Element ist nicht erkennbar. Jede implantierte Atomsorte hat einen eigenen Zusammenhang zwischen diesen beiden Werten.

Element	Fluenz [$\frac{\text{Atome}}{\text{cm}^2}$]	T_i [K]	MP [%]	$Leer./Ion$	χ_{min}^{host}	$\chi_{min}^{h,ann.}$	R_p [Å]	dpa
Cl	$2 \cdot 10^{15}$	77	0,18	919	0,36	0,18	2640	0,575
"	$5 \cdot 10^{15}$	293	0,35	919	0,18		2640	1,438
Mn	$1,5 \cdot 10^{15}$	77	0,097	1591	0,45	0,30	2730	0,722
"	$2 \cdot 10^{15}$	293	0,1	1591	0,17		2730	0,963
Zn	$1 \cdot 10^{15}$	77	0,048	1766	0,40	0,27	2360	0,618
"	$1 \cdot 10^{15}$	293	0,07	1766	0,16		2360	0,618
Au	$2 \cdot 10^{14}$	77	0,026	2317	0,60	0,39	1160	0,330
"	$5 \cdot 10^{14}$	293	0,065	2317	0,1		1160	0,825
Hg	$3 \cdot 10^{14}$	77	0,03	2337	0,67	0,20	1160	0,500
"	$1 \cdot 10^{15}$	293	0,073	2337	0,08		1160	1,665
In	$2,5 \cdot 10^{14}$	77	0,026	2213	0,45	0,33	1610	0,284
"	$5 \cdot 10^{14}$	293	0,039	2213	0,09		1610	0,568
Sb	$3 \cdot 10^{14}$	77	0,024	1354	0,31	0,25	900	0,373
Bi	$1 \cdot 10^{14}$	77	0,007	2333	0,42	0,11	1130	0,171
"	$1 \cdot 10^{14}$	293	0,009	2333	0,14		1130	0,171
"	$4 \cdot 10^{14}$	293	0,043	2333	0,29		1130	0,683
"	$7 \cdot 10^{14}$	293	0,079	2333	0,34		1130	1,194
"	$1 \cdot 10^{15}$	293	0,11	2333	0,40		1130	1,704
"	$1,3 \cdot 10^{15}$	293	0,14	2333	0,43		1130	2,228
Te	$3 \cdot 10^{14}$	77	0,014	1507	0,30	0,18	990	0,377
I	$3 \cdot 10^{14}$	77	0,04	1594	0,35	0,20	1050	0,376
"	$5 \cdot 10^{14}$	293	0,04	1594	0,24		1050	0,627
Ca	$2 \cdot 10^{15}$	77	0,11	616	0,28	0,22	1030	0,989
"	$2 \cdot 10^{15}$	293	0,17	616	0,13		1030	0,989
Xe	$2 \cdot 10^{14}$	77	0,04	1909	0,41	0,31	1280	0,247
"	$1 \cdot 10^{14}$	293	0,015	1909	0,06		1280	0,123
"	$5 \cdot 10^{14}$	293	0,075	1909	0,22		1280	0,616

Tab. 15: Minimale Ausbeuten des Wirtsgitters (χ_{min}^{host}) nach Implantation bei 77K und 293K, sowie nach Erwärmen der 77K Probe auf 293K ($\chi_{min}^{h,ann.}$). Abkürzungen: MP : maximale Peakkonzentration in [%]; dpa : Verlagerungen pro Atom; T_i : Implantationstemperatur; $Leer./Ion$: erzeugte Leerstellen pro einfallendes Ion.

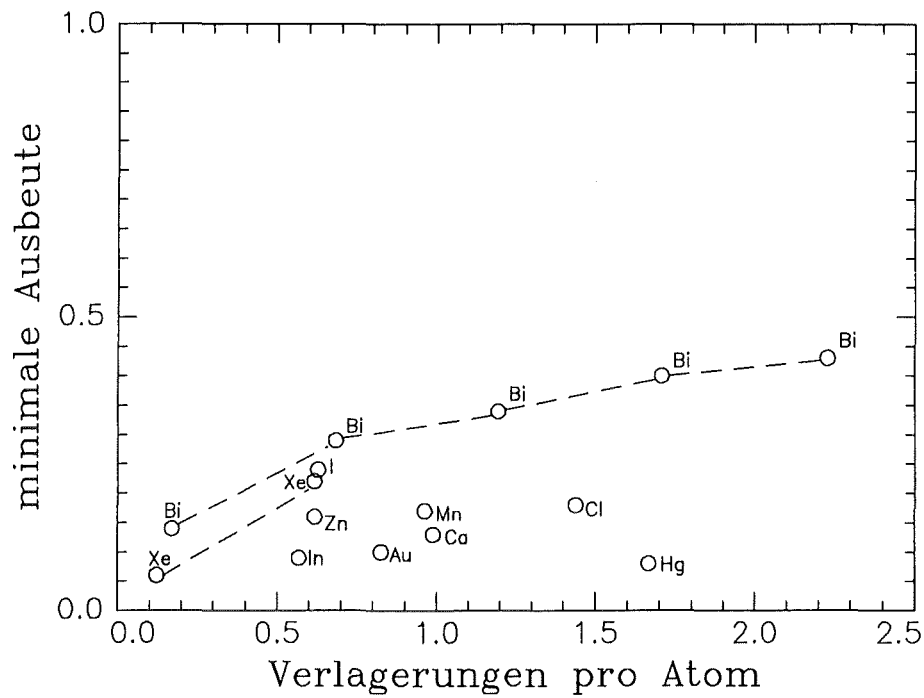


Abb. 43: Minimale Ausbeute nach der Implantation in Abhängigkeit der Verlagerungen pro Atom (dpa) bei $T_i = T_m = 293\text{K}$.

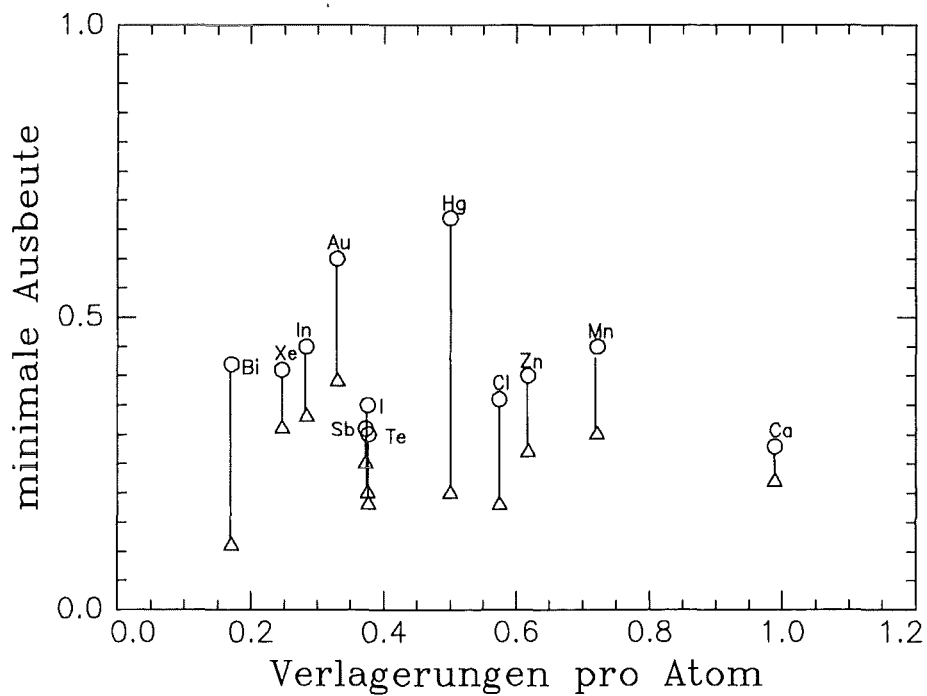


Abb. 44: Minimale Ausbeute nach der Implantation in Abhängigkeit der Verlagerungen pro Atom (dpa) bei $T_i = T_m = 77\text{K}$ (o) und nach Erwärmen auf $T_m = 293\text{K}$ (Δ).

Allgemein kann gesagt werden, daß für jedes implantierte Element die minimale Ausbeute (und damit die Schädigung des Wirtsgitters) mit steigender Anzahl von Verlagerungen pro Atom zunimmt.

In Abb.44 sind die Ergebnisse für die minimalen Ausbeuten nach Implantationen bei 77K (○) und nach Erwärmen auf 293K (△) über der Anzahl von Verlagerungen pro Atom aufgetragen. Hier ist kein direkter Zusammenhang zwischen χ_{min} und dpa erkennbar. Bismut, Gold und Quecksilber zeigen, eine im Verhältnis zu den anderen implantierten Elementen, starke Schädigung des Wirtsgitters nach 77K Implantation. Dies kann bei Bi und Hg an Spannungsfeldern, welche durch die Besetzung von substitutionellen Gitterplätzen erzeugt werden, liegen. Au befindet sich sowohl bei 77K als auch bei 293K Implantation vollständig auf substitutionellen Gitterplätzen. Es liegt nahe den Grund der hohen Schädigung in der hohen Zahl von erzeugten Leerstellen pro einfallendem Ion zu sehen, welcher bei diesen drei Elementen am höchsten ist (zwischen 2300 und 2350 *Leer./Ion*). Betrachtet man die anderen Tieftemperaturimplantationen, so ist auch dort ein Zusammenhang zwischen χ_{min} und *Leer./Ion* erkennbar. Je mehr Leerstellen pro einfallendes Ion erzeugt werden, desto höher ist die Schädigung des Kristalls bei tiefen Temperaturen.

Nach Erwärmen der bei 77K implantierten Proben gehen die χ_{min} -Werte zurück, was ein Ausheilen des Kristalls bedeutet. Dieses Ausheilen beruht auf dem Abbau von Defekten. Für die Elemente Bi, Hg und Au ist die Abnahme der minimalen Ausbeute am höchsten ($\Delta\chi_{min}^{Au}=0,21$; $\Delta\chi_{min}^{Bi}=0,31$; $\Delta\chi_{min}^{Hg}=0,47$). Der Rückgang der Schädigung kann verschiedene Ursachen haben: Leerstellen werden beweglich, Rekombination von Frenkel-Defekten, Wechselwirkung der implantierten Fremdatome mit Leerstellen. Der Wechsel des Gitterplatzes durch den Einfang von Leerstellen bei Bi und Hg erklärt, warum χ_{min} bei diesen Elementen stärker als bei Au zurückgeht. Bei den anderen Elementen beträgt der Rückgang in den minimalen Ausbeuten $\Delta\chi_{min}=0,1-0,15$.

Allgemein ist zu sagen, daß die konzentrationsabhängige Schädigung des Wirtsgitters für ein bestimmtes Element hauptsächlich von der mittleren Anzahl der Verlagerungen pro Atom abhängt. Dies ist bei den Ergebnissen von Bi und Xe zu sehen. Die minimale Ausbeute bei gleicher Konzentration ist elementspezifisch. Bei der Implantation bei 77K hängt der χ_{min} -Wert von der Anzahl der erzeugten Leerstellen pro Ion ab. Mit steigender Zahl von *Leer./Ion* wird der Kristall stärker geschädigt. Nach Erwärmen der 77K Implantationen findet ein Ausheilen der während der Stoßkaskade erzeugten Defekte statt. Dies führt zu einer Verringerung des χ_{min} -Wertes. Dieses Ausheilen wird bei Elementen mit großer Anzahl von *Leer./Ion*, und/oder wenn der Aufwärmvorgang mit dem Einfang von Leerstellen durch Fremdatome verbunden ist, verstärkt.

5 Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurden Untersuchungen zur Gitterplatzbesetzung von Fremdatomen nach Implantation in Beryllium-Einkristalle untersucht. Die wesentlichen Ergebnisse und deren Diskussion werden im folgenden noch einmal zusammengefaßt.

Implantiert wurden die Elemente: Au, Zn, Mn, In, Bi, I, Ca, Xe, Hg, Ga, Sb, Te und Cl. Die Auswahl der Ionensorten erfolgte hierbei anhand der Werte für die Volumenfehlpassungsenergie im Wirtsgitter Be. Die Implantationen wurden bei Raumtemperatur und bei 77K durchgeführt. Tieftemperaturimplantationen dienten dazu, den Einfluß der Leerstellenbeweglichkeit auf die Gitterplatzbesetzung zu untersuchen. Bei Bi und Hg wurden auch Implantationen bei 5,5K durchgeführt, um den Einfluß der Beweglichkeit von Eigenzwischengitteratomen ausschließen zu können.

Die Ergebnisse der Raumtemperaturimplantationen zeigten, daß die Gitterplatzbesetzung abhängig von der Volumenfehlpassungsenergie ist. Elemente mit kleinen ΔH_{size} (Au, Zn, Mn) gehen vollständig auf substitutionelle Gitterplätze. Elemente mit mittleren ΔH_{size} -Werten (Ga, Hg, In) zeigten eine Mischung von unterschiedlichen Gitterplätzen: substitutionell, tetraedrischer und oktaedrischer Zwischengitterplatz. Elemente mit ΔH_{size} -Werten größer 100kJ/mol (In, Sb, Bi, Te, I, Ca, Xe) waren nach der Implantation auf oktaedrischen Zwischengitterplätzen. Erfolgt die Implantation bei 77K, so wurden zum Teil stark abweichende Ergebnisse von den Raumtemperaturimplantationen beobachtet. Fremdatome mit kleiner Volumenfehlpassungsenergie (Au, Zn, Mn) waren auch bei 77K vollständig auf substitutionellen Gitterplätzen. Elemente mit ΔH_{size} -Werten zwischen 50 und 150kJ/mol (Ga, Hg, In, Sb, Bi, Te) gingen nach der Implantation zumindest teilweise auf substitutionelle Gitterplätze. Der Anteil von Fremdatomen auf substitutionellen Gitterplätzen nimmt hierbei mit steigender Volumenfehlpassungsenergie ab. Fremdatome mit sehr hohen Volumenfehlpassungsenergien (I, Ca) gehen bei 77K auf oktaedrische Zwischengitterplätze. Erwärmen der bei 77K implantierten Proben auf Raumtemperatur resultierte bis auf die Ausnahme von Xe in der gleichen Gitterplatzbesetzung wie nach Implantation bei 293K. Xe zeigte nach der Implantation eine zufällig wirkende Verteilung im Wirtsgitter, welche sich auch nach Erwärmen nicht ändert. Die Implantationen von Bi und Hg bei 5,5K zeigten die gleichen Ergebnisse wie bei 77K. Hieraus kann geschlossen werden, daß die Beweglichkeit von Eigenzwischengitteratomen die Gitterplatzbesetzung in Beryllium nicht beeinflusst.

Die Besetzung von tetraedrischen und oktaedrischen Zwischengitterplätzen nach der Implantation bei Raumtemperatur und der Wechsel des Gitterplatzes nach Erwärmen der Tieftemperaturimplantationen lassen sich mit der Wechselwirkung von Fremdatomen mit Leerstellen erklären. In Be liegt die Ausheilstufe **III**, bei welcher Leerstellen beweglich werden, zwischen 200 und 340K. Bei Raumtemperatur sind sie also nur über eine begrenzte Reichweite beweglich. Die Beweglichkeit ist allerdings groß genug, damit Fremdatome Leerstellen einfangen können, und es zur Bildung von Fremdatom-Leerstellen Komplexen kommt. Die Gitterplatzbesetzung kann mit einem in dieser Ar-

beit entwickelten Modell vorhergesagt werden. Wir gehen davon aus, daß alle Fremdatome in der Relaxationsphase der Stoßkaskade zunächst auf substitutionelle Gitterplätze gehen. Die Fremdatome bauen hierbei ein Spannungsfeld auf, welches proportional zur Volumenfehlpassungsenergie (ΔH_{size}) ist. Zur Minimierung dieses Spannungsfeldes fangen die Fremdatome Leerstellen ein. Bei Implantation und in situ Messung bei 77K zeigte sich, daß im Bereich von ΔH_{size} von 50 bis 150kJ/mol der nichtsubstitutionelle Anteil ($1-f_s$) proportional zur Volumenfehlpassungsenergie ist. Fremdatome mit kleinen ΔH_{size} -Werten gehen auf substitutionelle Gitterplätze. Bei größeren ΔH_{size} -Werten können die Fremdatome Leerstellen einfangen. Sie bilden (für mittlere ΔH_{size}) Komplexe mit 4 Leerstellen (XV_4) und gehen auf tetraedrische Zwischengitterplätze, oder sie fangen (für hohe ΔH_{size}) 6 Leerstellen (XV_6) ein und gehen auf oktaedrische Zwischengitterplätze. Elemente mit hohen ΔH_{size} -Werten (I, Ca) sind in der Lage, innerhalb der Kollisionskaskade Leerstellen einzufangen und Oktaederkomplexe zu bilden.

Nachbestrahlungsexperimente einer mit hoher Bi Fluenz implantierten Probe und einer aufgewärmten 77K Implantation von Xe bestätigten den Einfluß von Leerstellen auf die Gitterplatzbesetzung. Nach der Bestrahlung gingen die Fremdatome auf oktaedrische Zwischengitterplätze. Durch das zusätzliche Angebot von Leerstellen ist die Bildung von XV_6 -Komplexen in beiden Fällen möglich.

Durch das Setzen von Energiefenstern in verschiedenen Tiefen der Fremdatomverteilung wurde für die Elemente Bi, Xe und Ca eine Tiefenabhängigkeit der Besetzung oktaedrischer Zwischengitterplätze festgestellt. Über diesen Effekt wurde bisher in der Literatur noch nichts berichtet. Auf der oberflächennahen Seite der Reichweitenverteilung von implantierten Fremdatomen in Beryllium werden deutlich mehr Leerstellen innerhalb der Kollisionskaskade erzeugt als tiefer im Kristall. Dies konnte aus numerischen Simulationen mit dem Programm TRIM geschlossen werden. Eine Folge dieses höheren Angebots von Leerstellen in Oberflächennähe ist die verstärkte Besetzung von Oktaederplätzen durch die Bildung von XV_6 Komplexen. Diese Tiefenabhängigkeit ist eine spezielle Eigenschaft des Be und rührt unserer Meinung nach daher, daß bei Raumtemperatur die Leerstellen aufgrund ihrer eingeschränkten Beweglichkeit nur eine geringe Reichweite innerhalb des Wirtsgitters Be haben. Grund dafür ist, daß das Ende der Erholungsstufe **III** erst bei ca. 340K liegt. Die Beweglichkeit der Leerstellen ist allerdings groß genug, um wie in anderen Implantationssystemen die Bildung von Fremdatom-Leerstellen Komplexen zu erlauben. Nachbestrahlungsexperimente zeigten, daß bei gleichmäßiger Verteilung der Leerstellen über die Reichweite des Fremdatoms keine Tiefenabhängigkeit auftritt. Dies zeigt deutlich, daß die tiefenabhängige Gitterplatzbesetzung direkt mit der Leerstellenverteilung zusammenhängt.

Das Miedema Schema erlaubt die Trennung zwischen substitutionellen, tetraedrischen und oktaedrischen Plätzen. Die Aufteilung in solche Gebiete gibt allerdings keine Antwort darauf, warum eine vorgegebene Sorte von Fremdatomen einen bestimmten Zwischengitterplatz besetzt. In einem Modell von sich berührenden Kugeln ist es nicht möglich, daß große Atome wie Bi, Cs, I oder Xe auf den kleinen Oktaederplätzen sitzen.

In dem in dieser Arbeit entwickelten elastischen Modell entsteht die Bindungsenergie zwischen den implantierten Fremdatomen und den Leerstellen durch ein Spannungsfeld, welches durch die Fehlanpassung der Fremdatome im Wirtsgitter bestimmt ist. Das Einfangvolumen für Leerstellen wächst hierbei mit steigender Volumenfehlanpassungsenergie. Es ist also nicht erstaunlich, daß der substitutionelle Anteil der implantierten Systeme mit steigender Volumenfehlanpassungsenergie abnimmt. Ähnliche Schlussfolgerungen wurden auch schon in auf Aluminium basierenden Implantationssystemen gemacht [GER88]. Die Ergebnisse dieser Arbeit zeigen also, daß die Implantationen in Beryllium ein ähnliches Verhalten zeigen wie andere Implantationssysteme. Die leichte Masse des Berylliums und begrenzte Beweglichkeit von Leerstellen bei Raumtemperatur haben also, soweit es die grundlegenden Mechanismen betrifft, keinen Einfluß auf den Implantationsprozeß. Mit unserem Modell ist es möglich, den substitutionellen Anteil und die Gitterplatzbesetzung bei Raumtemperatur und 77K vorherzusagen.

Literaturverzeichnis

- [ALO82] J. A. Alonso und J. M. Lopez; *Phil. Mag.* **45**(1982)713
- [AVE82] R. S. Averback; *J. Nucl. Mat.* **108/109**(1982)33
- [AZZ87] A. Azzam und O. Meyer; *J. Phys. F: Met. Phys.* **17**(1987)1617
- [BAR71] J. H. Barrett; *Phys. Rev.* **B33**(1971)1527
- [BEE66] J. R. Beeler; *Phys. Rev.* **150**(1966)470
- [BIE80] J. P. Biersack und L. G. Haggmark; *Nucl. Instr. Meth.* **174**(1980)257
- [BRI76] D. K. Brice; *Applications of Ion Beams to Materials*, Inst. Phys. Conf. Ser. No. **28**, Eds. G. Carter, J. S. Colligon und W. A. Grand, Institute of Physics, Bristol(1976)334
- [BUE84] L. Buene, E. N. Kaufmann, R. Hamm, W. C. Marra und M. L. McDonald; *Met. Trans.* **15A**(184)1787
- [CAR68] G. Carter und J. S. Colligon; *Ion Bombardment of Solids*, Heinemann Ed. Books Ltd., London (1968)
- [CHE79] J. R. Chelikowsky; *Phys. Rev.* **B19**(1979)686
- [CHU78] W. K. Chu, J. W. Mayer, M.-A. Nicolet; *Backscattering Spectrometry*, Academic Press, New York (1978)
- [DAR53] L. S. Darken und R. W. Gurry; *Physical Chemistry of Metals*, Mc Graw-Hill, New York(1953)
- [DAV83] J. A. Davies; *Phys. Script.* **28**(1983)294
- [DEA73] G. Dearnaley, J. H. Freeman, R. S. Nelson und J. Stephen; *Ion Implantation*, North-Holland, Amsterdam (1973)
- [DED78] P. H. Dederichs, C. Lehmann, H. R. Schober, A. Scholz und R. Zeller; *J. Nucl. Mat.* **69/70**(1978)350
- [DOO85] L. R. Doolittle; *Nucl. Instr. Meth.* **B9**(1985)344
- [DOO86] L. R. Doolittle; *Nucl. Instr. Meth.* **B15**(1986)227
- [EHR78] P. Ehrhart; *J. Nucl. Mat.* **69/70**(1978)200
- [ERG64] C. ERginsoy, H. Wegener und W. M. Gibson; *Phys. Rev. Lett.* **13**(1964)249
- [ESH56] D. Eshelby; *Solid State Physics* **3**(1956)79

- [FEL82] L. C. Feldman, J. W. Mayer, S. T. Picraux; *Materials Analysis by Ion Channeling*, Academic Press, New York (1982)
- [GEM74] D. E. Gemmel; *Rev. Mod. Phys.* **45**(1974)129
- [GER88] R. Gerber, O. Meyer und G.C. Xiong; *Nucl. Instr. Meth.* **B31**(1988)402
- [GUI81] W. E. Guinan and J. H. Kinney; *J. Nucl. Mater.* **104**(1981)1319
- [GOL73] O. Golbeck; *Atomic Energy Rev. Special Issue* **4**(1973)45
- [HAN96] J. Hanßmann und O. Meyer; *Materials Chemistry and Physics*, zur Veröffentlichung angenommen
- [HIR80] J. K. Hirvonen; *Treatise on Material Science and Technology*, Vol.18 Ion Implantation, Academic Press, New York (1980)
- [HUM69] W. Hume-Rothery, R. E. Smallman und C. W. Haworth; *Structure of Metals and Alloys*, Institute of Metals, London(1969)
- [JUN78] O. Jung; *Radiat. Eff.* **35**(1978)155
- [JUN83] P. Jung; *J. Nucl. Mat.* **117**(1983)70
- [KAU75] E. N. Kaufmann, P. Raghavan, R. S. Raghavan, E. J. Ansaldo und R. A. Naimann; *Phys. Rev. Lett.* **34**(1975)1558
- [KAU77a] E. N. Kaufmann, R. Vianden, J. R. Chelikowsky und J. C. Phillips; *Phys. Rev. Lett.* **39**(1977)1671
- [KAU77b] E. N. Kaufmann; *Phys. Lett.* **61a**(1977)479
- [KAU77c] E. N. Kaufmann; *Phys. Rev.* **B17**(1977)1024
- [KAU83] R. Kaufmann, J. Geerk und F. Ratzel; *Nucl. Instr. Meth.* **205**(1983)293
- [KLO87] M. K. Kloska und O. Meyer; *Nucl. Instr. Meth.* **B19/20**(1987)136
- [KIN55] G. H. Kinchin und R. S. Pease; *Nucl. Instr. Meth.* **18**(1955)1
- [KIN83] W. E. King und R. Benedek; *J. Nucl. Mat.* **117**(1983)26
- [KRI78] K. Krien, H. Saitovitch, K. Freitag und F. Reuschenbach; *Hyp. Int.* **4**(1978)549
- [LAN77] K. G. Langguth; *KfK-Bericht* **2476**(1977)
- [LEH77] C. Lehmann; *Defects in Crystalline Solids*, North-Holland Amsterdam Vol.8(1977)
- [LIN63] J. Lindhard, M. Scharff und H. E. Schiott; *Mat. Fys. Medd.* **33**(1963)14

- [LIN65] J. Lindhard; Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk **34** (1965) 1
- [LIN68] J. Lindhard, V. Nielsen und M. Scharff; Mat. Fys. Medd. **36**(1968)10
- [LUT63] H. Lutz und R. Sizmann; Phys. Lett. **5**(1963)113
- [MAY77] J. W. Mayer und E. Rimini; *Ion Beam Handbook for Material Analysis*, Academic Press, New York(1977)
- [MEY87a] O. Meyer und A. Turos; Mater.Sci.Rep. **2**(1987)371
- [MEY87b] O. Meyer und A. Turos; Nucl. Instr. Meth. **19/20**(1987)136
- [MEY87c] O. Meyer, A. Azzam, M. K. Kloska und A. Turos; Mat. Sci. Forum **15-18**(1987)757
- [MIE73] A. R. Miedema, P. F. de Chatel und F. R. de Boer; J. Phys. **F3**(1973)1558
- [MIE80] A.R. Miedema, P.F. de Chatel und F.R. de Boer; Physica **B100**(1980)1
- [MIE92] A. R. Miedema; Physica B **182**(1992)1
- [MOR73] D. V. Morgan; *Channeling*, John Wiley & Sons, London (1973)
- [NEL63] R. S. Nelson und M. W. Thompson; Phil. Mag. **8**(1963)1677
- [NIC68] J. C. Nicoud, J. Delaplace, J. Hillairet und D. Schumacher; J. Nucl. Mat. **27**(1968)147
- [NIE83] A. K. Niessen, F. R. de Boer, R. Boom, P. F. de Chatel, W. C. M. Mattens und A. R. Miedema; CALPHAD **7**(1983)51
- [NOR75] M. J. Norgett, M. T. Robinson und I. M. Torrens; Nucl. Eng. Des. **33**(1975)50
- [PET87] D. F. Pettifor; Solid State Physics **40**(1987)43
- [PIC81] S. T. Picraux; Nucl. Instr. Meth. **182/183**(1981)413
- [PIE63] G. R. Piercy, F. Brown, J. A. Davies und M. McCargo; Phys. Rev. Lett. **10**(1963)399
- [PLE84] F. Pleitner und K. G. Prasad; Hyp. Int. **20**(1984)221
- [POA77] J. M. Poate, J. A. Borders, A. G. Cullins und J. K. Hirvonen; Appl. Phys. Lett. **30**(1977)365
- [POA80] J. M. Poate und A. G. Cullins; *Tretise on Material Science and Technology*, Vol.18 Ion Implantation, Academic Press, New York (1980)
- [ROB63] M. T. Robinson und O. S. Oen; Appl. Phys. Lett. **5**(1963)113

- [RUA87] J. Ruan, J. Townsend und W. J. Choyde; Nucl. Instr. Meth. **B28**(1987)580
- [SCH67] D. Schumacher, J. C. Nicoud, J. Delaplace und J. Hillairet; Phys. Lett. **25A**(1967)610
- [SCH69] D. Schuhmacher; Vacancies and Interstitials in Metals, conference(1969) Amsterdam
- [SEI56] F. Seitz und J. S. Köhler; Solid State Physics **2**(1956)305
- [SIG72] P. Sigmund; Rev. Roum. Phys. **17**(1972)823
- [SIN82] V. A. Singh und A. Zunger; Phys. Rev. **B25**(1982)907
- [STA12] J. Stark; Z. Phys. **13**(1912)973
- [SOO78] D. K. Sood; Phys. Lett. **68A**(1978)469
- [SWA83] M. L. Swanson und L. M. Howe; Nucl. Instr. Meth. **218**(1983)613
- [THO69] M. W. Thomson; *Defects and Radiation Damage in Metals*, Cambridge University Press (1969)
- [VAJ77] P. Vajda; Rev. Mod. Phys. **49**(1977)481
- [VIA78] R. Vianden and E.N. Kaufmann; Nucl. Instr. Meth. **149**(1978)393
- [VIA80] R. Vianden, E.N. Kaufmann und J.W. Rodgers; Phys. Rev. **B22**(1980)63
- [VIN76] G. H. Vineyard; Rad. Eff. **29**(1976)245
- [WAL78] R. S. Walker und D. A. Thompson; Rad. Eff. **37**(1978)113
- [ZIE73] J. F. Ziegler and W. K. Chu; *Energy Loss and Backscattering of He Ions in Matter*, IBM Research, RC 4288, Yorktown Heights (1973)
- [ZIE77] J. F. Ziegler; *Helium Stopping Powers and Ranges in all Elements*, Pergamon Press, New York (1977)
- [ZIE78] P. Ziemann; Dissertation, KfK-Bericht **2562**(1978)