

Augerelektronenspektroskopie und niederenergetischer Ionenbeschuss von Siliziumkarbid

Dissertation
zur Erlangung des akademischen Grades
Doktoringenieur

vorgelegt der
Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik
der Technischen Universität Ilmenau

von
Rastislav Kosiba
geboren am 28.08.1974 in Bratislava, Slowakei

Berichterstatter: Univ.-Prof. Dr. rer. nat. habil. Oliver Ambacher, TU Ilmenau
Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. rer. nat. Christian Knedlik, TU
Ilmenau
Associate Professor Juraj Breza, PhD., Fakultät
Elektrotechnik und Informationstechnik der STU, Bratislava,
Slowakei

vorgelegt am: 19.05.2004
Tag der wissenschaftlichen Aussprache: 01.02.2005

Kurzzusammenfassung

Die vorliegende Arbeit behandelt den Einsatz der Augerelektronenspektroskopie bei der Untersuchung von SiC-Schichten und -Einkristallen mit besonderem Augenmerk auf die Wirkung des Ionenstrahls auf die SiC-Oberfläche beim Sputtern. Die Augerelektronenspektroskopie eignet sich zur Bestimmung vieler Eigenschaften einer SiC-Oberfläche nach dem Beschuss mit Edelgasionen. Der theoretische Teil beinhaltet einen Beitrag zur Anwendung der Faktorenanalyse bei der Auswertung von Auger-Spektren. Ein weiteres Thema des theoretischen Teils ist die Sputtertheorie. Hier wird eine Korrektur der Sigmundschen Formel zur Berechnung der Sputterausbeuten präsentiert. Im experimentellen Teil der Arbeit werden Aussagen über die Abweichungen der Oberflächenzusammensetzung nach dem Sputtern und über die Konzentration der eingebauten Edelgase getroffen. Aus dem Vergleich zwischen den experimentell gemessenen und theoretisch berechneten bzw. simulierten Werten der Sputterausbeuten wird die effektive Oberflächenbindungsenergie von 4 eV/Atom für das Sputtern von SiC mit Edelgasen bestimmt. Sowohl der Nachweis der Änderungen der elektronischen Struktur bei den durch Ionenbeschuss zerstörten einkristallinen SiC-Oberflächen bzw. -Schichten als auch die Bestimmung des Leitungstyps mittels Augerelektronenspektroskopie erweitern das Einsatzgebiet dieser analytischen Methode in der SiC-Technologie.

The presented thesis deals with the application of Auger electron spectroscopy to investigate SiC layers and single crystals with emphasis on ion beam induced changes of the SiC surface during ion sputtering. Auger electron spectroscopy is well suited for determining many silicon carbide surface properties after exposure to noble gas ion beams. The theoretical part contains a contribution to the application of the factor analysis to the evaluation of Auger spectra as well as a contribution to the sputter theory. The latter presents corrections to Sigmund's formula for calculation of the sputtering yield. In the experimental part, evidence for composition changes at the SiC surface after sputtering is given. Data related to the incorporation of the sputtering ions into the SiC surface are also presented. The measured sputtering yields have been compared with simulation and theory resulting in an effective surface binding energy of 4 eV per atom for silicon carbide sputtered by noble gas ions. Detection of changes in the electronic structure of the single crystalline silicon carbide surface modified by ion beam sputtering or within the silicon carbide layer together with determination of the conduction type, both possible by Auger electron spectroscopy, open new application fields of this analytical technique in SiC technology.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	5
2. Theoretische Grundlagen	7
2.1 Prinzip der Augerelektronenspektroskopie, Augerprozess	7
2.2 Quantitative AES	10
2.2.1 Der Rückstreufaktor	13
2.2.2 Informationstiefe der AES	15
2.3 Auswertung der Augerspektren bei veränderten Peakformen	17
2.3.1 Das lineare Anpassen mittels der kleinsten Fehlerquadrate	17
2.3.2 Faktorenanalyse	18
2.3.2.1 Hauptkomponentenanalyse	19
2.3.2.2 Transformation	22
2.3.3 Anwendung der Faktorenanalyse in der AES	26
2.4 Sputtern von Festkörperoberflächen mittels Ionenstrahlen	29
2.4.1 Theorie des Sputterns von Festkörperoberflächen	31
2.4.1.1 Sigmunds Sputtertheorie im Regime der linearen Kaskaden	31
2.4.1.2 Erweiterung zu niedrigen Ionenenergien	42
2.4.2 Computersimulation	43
2.5 Zusammenfassung	45
3. Quantitative AES von SiC	46
3.1 Si(LVV)-Augerspektren	49
3.2 Si(KLL)-Augerspektren	55
3.3 Vergleich mit den Ergebnissen aus der Literatur	58
3.4 Zusammenfassung	59
4. Abtragsraten und Sputterausbeuten für SiC	60
4.1 Experimentelle Bestimmung der Sputterausbeuten	60
4.1.1 Vergleich mit der Literatur, Simulation und Theorie	67
4.2 Winkelabhängigkeit der Sputterausbeuten	70
4.3 Zusammenfassung	75
5. Sputterinduzierte veränderte Zone auf SiC-Oberflächen	76
5.1 Einbau von Edelgasen in SiC	77
5.1.1 Einbau von Argon und Xenon in SiC	78
5.1.2 Einbau von Neon in SiC und Si	87

5.2 AES-Messungen und dynamische MC-Simulationen zu ionenstrahl- induzierten Oberflächenkonzentrationsänderungen von SiC	93
5.3 Änderungen der Si- und C-Augerpeaks hervorgerufen durch Sputtern	102
5.3.1 Experimenteller Nachweis des Leitungstyps von 6H-SiC mittels AES	110
5.4 Tiefenprofilierung der durch Ionenbeschuss erzeugten veränderten Zonen in SiC	115
5.4.1 Senkrechter Primärbeschuss	117
5.4.2 Streifender Beschuss	126
5.5 Zusammenfassung	129
6. Zusammenfassung und Ausblick	131
Literaturverzeichnis	134
Definition verwendeter Größen und Symbole	142

1. Einleitung

Siliziumkarbid (SiC) ist aufgrund einer Reihe hervorragender Eigenschaften und seiner Möglichkeit zur Bildung von Polytypen eines der faszinierendsten Halbleitermaterialien. Die große Bandlücke im Bereich zwischen 2.4 eV und 3.3 eV und seine Härte, seine chemische und seine Strahlungsresistenz und seine sehr gute Wärmeleitfähigkeit machen das Material außerordentlich attraktiv für Anwendungen auf dem Gebiet der Hochtemperatursensorik und -elektronik, sowie für andere Extremwendungen. Bis heute sind von SiC mehr als 150 Polytypen bekannt. Als Polytypie ist die Fähigkeit von Kristallen anzusehen, unterschiedliche Kristallstrukturen hervorzubringen, die sich nur in der Lage- oder Zusammensetzungsvariation von Kristallebenen entlang einer kristallographischen Richtung unterscheiden. Dadurch ist in solche Kristalle ein natürliches Übergitter mit all seinen Konsequenzen entlang dieser Achse integriert. Jede dieser Kristallstrukturen verfügt über eine spezifische indirekte Bandlücke.

Aufgrund seiner besonderen Eigenschaften wird der Markt für SiC in der Halbleiterindustrie weiter wachsen. Von großer Bedeutung ist hierbei auch die Möglichkeit der Heteroepitaxie verschiedener Polytypen sowie die Heteroepitaxie von qualitativ hochwertigen SiC-Schichten auf Si-Substraten. Letztere ist deshalb besonders problematisch, da zwischen dem Si-Substrat und der SiC-Schicht eine große Fehlanpassung, sowohl in der Gitterkonstanten als auch im thermischen Ausdehnungskoeffizienten, besteht. Weltweit wird an der Technologie von SiC-Heteroschichten intensiv geforscht.

Das Material SiC eröffnet sich einen weiteren Massenmarkt als Substratmaterial für optoelektronische Bauelemente auf der Basis von Galliumnitrid, als Halbedelstein in der Schmuckindustrie, als Funktionskeramik, als Verschleiß- und Korrosionsschutzschichten z.B. in Fusionsreaktoren sowie als Hartstoffschichten in der Mikrosystemtechnik [Pez].

Augerelektronenspektroskopie (AES) als oberflächenempfindliche Methode für die atomar-chemische Analyse von Festkörperoberflächen gehört neben der Photoelektronenspektroskopie (XPS, UPS) und der Massenspektroskopie der sekundären Ionen (SIMS) zu den Standardverfahren der Qualitätskontrolle in der halbleitertechnologischen Forschung und Entwicklung, von der Herstellung dünner Schichten über die Prozessierung der Oberflächen bis zur Herstellung von Bauelementen. Die Vorteile der AES gegenüber anderen analytischen Methoden liegen vor allem in der einfachen Probenpräparation, der hohen lateralen Auflösung, der relativ einfachen Quantifizierung und der Möglichkeit, Aussagen über die chemischen Bindungen an der Oberfläche zu treffen. Somit befindet sich die AES mit ihren Möglichkeiten auf einer Stelle zwischen der XPS, die leistungsfähiger in der Analyse der chemi-

schen Bindungen ist, aber über eine schlechtere laterale Auflösung verfügt, und der SIMS, die eine weit höhere Nachweisgrenze bei der elementaren Analyse besitzt, aber kaum Aussagen zu den Bindungszuständen ermöglicht und schwer zu quantifizieren ist.

Die Aufgabe der Dissertation war, die Möglichkeiten der AES in der SiC-Technologie zu testen und zu erweitern. Der Schwerpunkt der Arbeit wurde insbesondere auf die Wirkung der niederenergetischen Ionenstrahlen auf die SiC-Oberfläche gelegt. Die Bestrahlung mit Ionen ist ein Bestandteil vieler technologischer Schritte, von der Ionenimplantation bis zum Reinigen der Oberflächen. Jeder dieser Schritte kann neben der gewünschten Wirkung auch einen negativen Einfluss auf die Qualität der elektronischen Bauelemente ausüben. Von entscheidender Bedeutung ist auch die Kenntnis des Ionenstrahleinflusses in der Analytik. Der Abtrag mittels Ionenstrahlen (bekannt auch als Sputtern) ist ein Mittel zur Messung von Konzentrationstiefenprofilen. Die Kenntnis der Abtragsrate und der Wirkung des Ionenstrahls auf die Festkörperoberfläche ist wichtig, um aus den gemessenen Tiefenprofilen die ursprünglichen Profile zu rekonstruieren und auf die Eigenschaften der Proben zurückzuschließen.

Die vorliegende Arbeit ist in fünf Teile gegliedert. In Kapitel zwei werden theoretischen Konzepte der AES dargestellt. Zusätzlich wird in diesem Kapitel die Faktorenanalyse als das Auswertungsverfahren in der AES vorgestellt. Das Haupteinsatzgebiet von niederenergetischen Ionenstrahlen in der Halbleitertechnologie, der Materialabtrag von der Oberfläche, wird am Ende dieses Kapitels theoretisch behandelt und die korrigierte Sigmund-Theorie des Sputterns präsentiert. Im Kapitel drei wird über die Aspekte der quantitativen AES-Analyse an SiC-Oberflächen diskutiert. Im vierten Kapitel erfolgt die Darstellung der experimentell ermittelten Sputterausbeuten von SiC beim Beschuss mit Edelgasionen. Die experimentellen Ergebnisse werden mit Theorie und Computersimulation verglichen. Das fünfte Kapitel befasst sich mit den Veränderungen der einkristallinen SiC-Oberfläche durch den Ionenbeschuss. In diesem Kapitel werden experimentelle Untersuchungen zum Einbau der Edelgasionen in die SiC-Oberfläche dargestellt. Weiterhin werden hier die Konzentrationsänderungen der SiC-Oberfläche behandelt, die der Ionenbeschuss hervorruft. Die Peakformänderungen der SiC-Augerspektren nach dem Ionenbeschuss und die sich daraus ergebenden Möglichkeiten der Zerstörungs-, Leitungstyp- und Polytypieuntersuchungen mittels AES werden im Anschluss dargestellt. Am Ende werden die Tiefenprofile der veränderten Zonen behandelt.

2. Theoretische Grundlagen

2.1 Prinzip der Augerelektronenspektroskopie, Augerprozess

Augerelektronenspektroskopie (AES) ist eine analytische Methode, mit der die Präsenz von Elementen und deren chemischer Zustand nachgewiesen werden kann. Beim Einsatz der AES für die Festkörperanalyse ist diese Methode oberflächenempfindlich mit einer Informationstiefe von einigen atomaren Monolagen bis zu einigen zehn Monolagen. Die Nachweisgrenze für die elementare Analyse der Festkörperoberflächen liegt bei 0.1 bis 1 at%. Das Prinzip der AES ist an einem einzelnen Atom dargestellt. Abb. 2.1 zeigt die elektronische Konfiguration eines Stickstoffatoms. Dieses Atom wird durch Interaktion mit Elektronen, Photonen oder Ionen an der K-Schale ionisiert. Der freigewordene Zustand auf der K-Schale wird mit einem Elektron aus der L-Schale gefüllt, wobei eine Energie (K-L) frei wird. Diese Energie kann an ein anderes Elektron, z.B. aus der $L_{2,3}$ -Schale, abgegeben werden, wodurch das Elektron jetzt genug Energie besitzt, um das Atom verlassen zu können. Dieses Elektron ist ein sogenanntes Augerelektron und der beschriebene Deexzitavorgang ist der Augerprozess, benannt nach Pierre Auger, der diesen Prozess 1925 in Gas beobachtet und beschrieben hat [Aug25]. Das Elektron kann dann mit Hilfe eines Analysators erfasst werden und seine kinetische Energie wird gemessen. In der ersten Näherung beträgt die kinetische Energie des freien Elektrons $E_{kin}(KL_1L_{2,3}) = E(K) - E(L_1) - E(L_{2,3})$. Die Energie der Schalen bezieht sich auf das Vakuumniveau. Dennoch ist der Zustand des Atoms in dem Moment, wenn das Elektron das Atom verlässt, unterschiedlich im Vergleich zur Ausgangssituation, die durch die Energien der K- und L-Schalen beschrieben wird. Der Endzustand des Atoms beinhaltet zwei freie Zustände auf den L-Schalen (s.g. Löcher - *holes*). Das Atom geht beim Vorhandensein der zwei Löcher in einen neuen Zustand über: es relaxiert. Dadurch wird eine Energie R^{ia} frei (Superskript *ia* bezeichnet *intraatomic relaxation*). Die Interaktion der zwei freien Zustände, die positiv geladen sind, verbraucht eine Energie $F(x)$. Die Energie des Augerelektrons kann dann folgendermaßen berechnet werden [Wag76]:

$$E_{kin}^g(KL_1L_{2,3}) = E(K) - E(L_1) - E(L_{2,3}) - F(x) + R^{ia} . \quad (2.1)$$

Wenn sich ein Atom im Festkörper befindet, beeinflussen zwei neue Effekte die kinetische Energie des Augerelektrons [Wag76]:

- durch die Bindung mit benachbarten Atomen verändern sich die Energieniveaus der Elektronen im Atom ($\Delta\varepsilon(K,L)$),
- die Elektronen der benachbarten Atome tragen zum Relaxationsprozess bei (R^{ea} , *extraatomic relaxation*).

Demnach wird die Energie des Augerelektrons, das aus einem Atom im Festkörper emittiert wird, gemäß:

$$E_{kin}^s(KL_1L_{2,3}) = E_{kin}^g(KL_1L_{2,3}) + \Delta\varepsilon(K) - \Delta\varepsilon(L_1) - \Delta\varepsilon(L_{2,3}) + R^{ea} \quad (2.2)$$

berechnet. Die Gleichungen 2.1 und 2.2 gelten für beliebige Elektronenschalen X, Y und Z. Für Elemente mit höheren Atomzahlen ergeben sich mehrere Augerübergänge, so dass für ein Element eine ganze Serie von Augerelektronen mit unterschiedlichen Energien beobachtet werden kann. Da die Energieniveaus der Elektronen für jedes Element charakteristisch sind, ist anhand der kinetischen Energie der Augerelektronen eine Zuordnung zu einem Element möglich. Weiterhin kann man aus den Verschiebungen, die durch die Veränderungen der Energieniveaus aufgrund der Bindungen im Festkörper bzw. durch außeratomare Relaxationsprozesse zustande kommen, auf den chemischen Zustand des Atoms im Festkörper schließen.

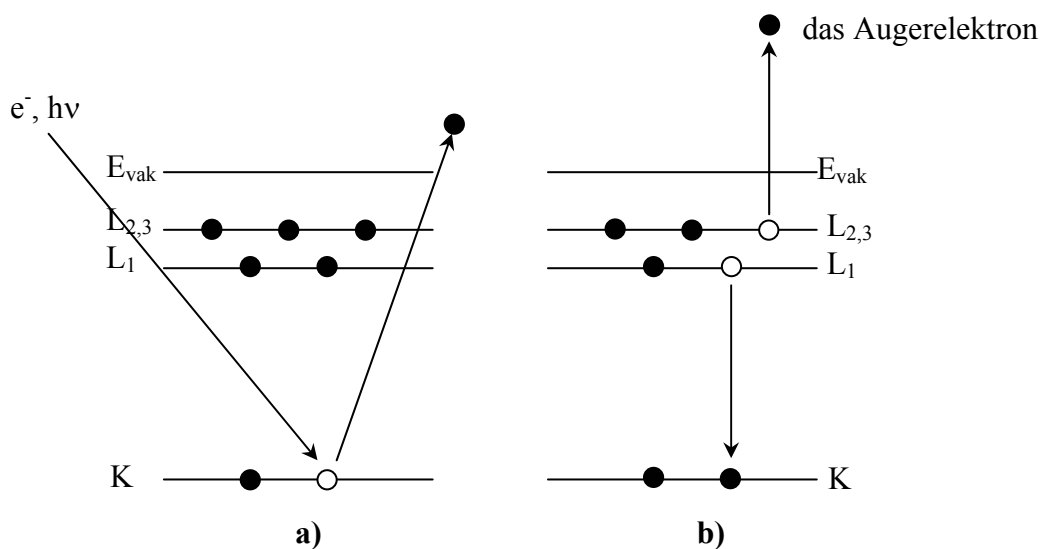


Abb. 2.1 Das Prinzip der AES: (a) die Ionisation einer tieferen (K) Elektronenschale mittels Elektronen- oder Photonenstrahl, (b) die Emission des Augerelektrons durch die Freigabe der Energie beim Übergang eines Elektrons von der L₁-Schale auf die ionisierte K-Schale.

Für die Durchführung der Oberflächenanalyse mittels AES sind zwei Prozesse erforderlich: die Anregung der Atome und die Analyse der emittierten Elektronen. In Messapparaturen, die ausschließlich für die AES bestimmt sind, ist die Anregung mit einem Elektronenstrahl üblich. Die Beschleunigungsspannung für die anregenden Elektronen beträgt üblicherweise 1 bis 10 kV. Der Anregungsstrom bewegt sich im Bereich von einigen nA bis zu einigen μA . Die laterale Auflösung der elektronenangeregten AES verschafft dieser analytischen Methode einen großen Vorteil im Vergleich zu Photoelektronenspektroskopien (XPS, UPS). Die modernen Augerspektrometer bieten eine laterale Auflösung von etwa 10 nm, was bei dem 0.1 at%- Detektierungslimit den Nachweis einer Menge von 50 Atomen an der Oberfläche ermöglicht.

Ein Teil der aus dem Festkörper emittierten Elektronen wird in einem Analysator gesammelt, hier wird ihre Energieverteilung gemessen. Die meisten Spektrometer sind entweder mit einem Zylinderspiegelanalysator oder mit einem Halbkugelanalysator ausgestattet. Der Vorteil des Zylinderspiegelanalysators gegenüber dem Halbkugelanalysator besteht in seiner hohen Transmission und seiner großen Eingangsapertur, durch die Elektronen aus einem größeren Raumwinkel analysiert werden können. Daraus resultieren ein größeres Signal und die Reduktion der Abschattungseffekte bei rauen Proben. Der Vorteil des Halbkugelanalysators besteht in seiner exzellenten Energieauflösung.

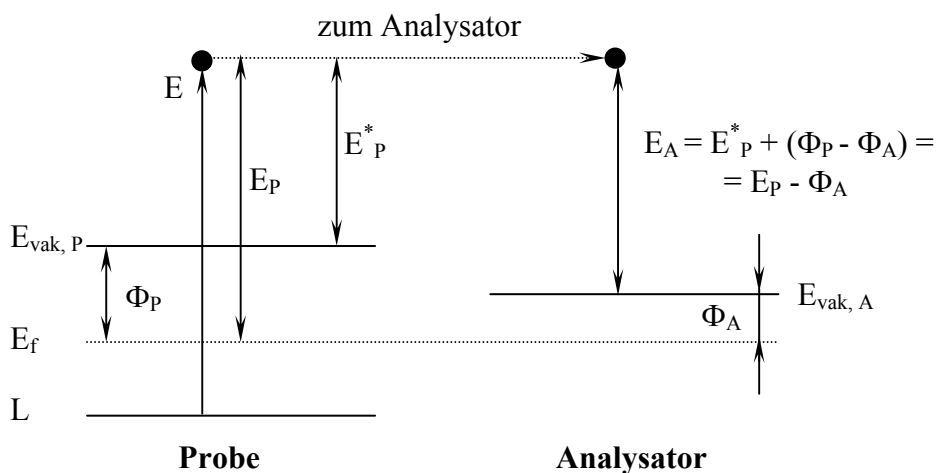


Abb. 2.2 Diagramm zur Bestimmung der kinetischen Energie eines Elektrons, das eine Probe mit der Austrittsarbeit Φ_P verlässt, mittels eines Analysators mit der Austrittsarbeit Φ_A (s. Text).

Gl. 2.2 beschreibt die kinetische Energie der Augerelektronen. Hierbei sind alle Schalenenergien auf das Vakuumniveau bezogen. Dennoch ist auch die Lage des Fermi-niveaus für die Berechnung der energetischen Lage der Augerpeaks von entscheidender Bedeutung. In Abb. 2.2 ist eine Situation dargestellt, in der ein Elektron aus der Schale L eine Energie E erhält und die Probe verlässt. Die energetische Lage der Schale L, bezogen auf das Vakuumniveau, ist $E(L)$. Das Elektron bewegt sich mit einer kinetischen Energie E_P^* zum Analysator. Die kinetische Energie E_P^* ist auf das Vakuumniveau der Probe bezogen und ist gleich der Differenz $E - E(L)$. Besteht zwischen der Probe und dem Analysator ein elektrischer Kontakt, ist die Lage des Fermi-niveaus für die Probe und den Analysator gleich. Generell kann angenommen werden, dass die Austrittsarbeiten der Probe Φ_P und des Analysators Φ_A unterschiedlich groß sind. Dann ändert sich die kinetische Energie des Elektrons in der Nähe des Analysators um die Differenz der Austrittsarbeiten $E_A = E_P^* + (\Phi_P - \Phi_A)$. Die Energie E_A wird mittels des Analysators gemessen. Wenn aber die Schalenenergie auf das Fermi-niveau bezogen wird ($E_P = E_P^* + \Phi_P$), entfällt der Einfluss der Austrittsarbeit des Festkörpers (die im Gegenteil zu der des Analysators meist unbekannt ist) und die gemessene kinetische Energie ist immer nur um die Austrittsarbeit des Analysators kleiner als die aus Gl. 2.2 berechnete Energie.

2.2 Quantitative AES

In der AES werden grundsätzlich zwei Modi zur Messung des Signals angewandt. Als Erstes kann das direkte energetische Spektrum der Elektronen, die die Probe verlassen, aufgenommen werden. Die zweite Möglichkeit besteht darin, das direkte Spektrum zu differenzieren. Dies erfolgt entweder elektronisch oder numerisch. Abhängig vom angewandten Messmodus wird dann das entsprechende Augersignal definiert. Die präziseste und physikalisch sinnvollste Methode ist die Bestimmung der Fläche unter dem Augerpeak im direkten Spektrum als Maß für das Auger-Signal. Dazu ist es jedoch notwendig, den Untergrund inelastisch gestreuter Elektronen zu subtrahieren, was bei komplizierteren oder niederenergetischen Augerübergängen zu Schwierigkeiten führen kann. Zu den einfacheren Methoden bei der Bestimmung des Augersignals im direkten Spektrum gehören die Bestimmung der Peakhöhe [Sek84] oder des Peak/Untergrund-Verhältnisses ([Lan84], [Bat89], [Mis91]). Im differenzierten Modus wird am häufigsten die Peak-zu-Peak-Höhe (*p-ph*) als Augersignal definiert. Jede Veränderung der Peakform führt jedoch zu Ungenauigkeiten in der Quantifizierung mittels *p-ph*. Weniger

geläufig ist die Bestimmung des Augersignals unter Berücksichtigung von pph und der Breite w zwischen Maximum und Minimum im differenzierten Spektrum: $I = pph \cdot w^2$ [Hal77]. Bei asymmetrischen Augerübergängen wird der pph -Wert durch die Höhe der negativen Seite des Peaks ersetzt (*peak to background*, $p-b$) und auch die Breite w wird an diesem Peakteil bestimmt (Abb. 3.1b). Der Vorteil bei dieser Methode für die Bestimmung des Auger-Signals liegt in der Unempfindlichkeit gegenüber den Spektrometereinstellungen (Modulationsspannung, Auflösung des Analysators [Sea90]). Die Vorgänge bei der Bestimmung der Augersignale werden im Kapitel 3 näher erläutert.

Der Gesamtstrom der Augerelektronen (entspricht dem Augersignal) kann unter Berücksichtigung einer Reihe von Einflussfaktoren wie folgt gemessen und berechnet werden:

- Der Festkörper wird mit einem Elektronenstrahl des Stroms I_P und der Energie E_P unter einem Winkel α in Bezug auf die Probennormale angeregt.
- Der Ionisationsquerschnitt eines Atoms in der Energieschale X durch Elektronen mit Energie E_P ist $\sigma_X(E_P)$.
- Das im Kernniveau X ionisierte Atom relaxiert durch Emission eines Augerelektrons durch den XYZ-Augerübergang mit der Wahrscheinlichkeit γ_{XYZ} .
- Der Beitrag der zurückgestreuten Elektronen zur Ionisation der Atome wird mit einem Rückstreufaktor $r(E_P, X, \alpha)$ berücksichtigt.
- Das emittierte Augerelektron mit der Energie $E(XYZ)$ kann sich über eine mittlere Länge $\lambda(E(XYZ))$ im Festkörper bewegen, bevor es inelastisch gestreut wird, so dass es nicht mehr zum Augerstrom beitragen kann.
- Θ ist der Eingangswinkel des Analysators zur Probennormale (gemessen werden die Elektronen, die unter diesem Winkel den Festkörper verlassen).
- Die Augerelektronen werden mit einem Analysator mit der Transmission $T(E(XYZ))$ und der Detektoreffizienz $D(E(XYZ))$ detektiert.

Der Augerstrom I_A des Elements A im Festkörper kann dann mit folgender Gleichung berechnet werden (die Bezeichnung des Augerübergangs XYZ wurde weggelassen) [Sea90]:

$$I_A = I_P \gamma \sigma(E_P) \frac{1}{\cos(\alpha)} [1 + r(E_P, \alpha)] T(E) D(E) \int_0^\infty N_A(z) \exp\left[-\frac{z}{\lambda(E) \cos(\Theta)}\right] dz, \quad (2.3)$$

wobei $N_A(z)$ die atomare Dichtenverteilung des Elements A im Festkörper über die Probentiefe z ist. Diese Gleichung berücksichtigt nur Analysatoren mit einer kleinen Raumwinkelaper-

tur. Bei einer homogenen Tiefenverteilung von Element A kann das Integral zu $N_A \lambda(E) \cos(\Theta)$ reduziert werden.

Gleichung 2.3 wird in der Regel nicht angewandt, um die Konzentrationen in Mehrkomponentenmaterialien (z.B. AB) zu berechnen. Vielmehr wird das Verhältnis I_A/I_B mit dem Verhältnis I_A^∞/I_B^∞ , das von reinen Standardproben A und B gewonnen wurde, verglichen, um einige Terme aus Gleichung 2.3 zu eliminieren. Dann gilt:

$$\frac{I_A/I_B}{I_A^\infty/I_B^\infty} = \frac{N_A N_B^\infty [1+r_{AB}(E_A)] [1+r_B(E_B)] \lambda_{AB}(E_A) \lambda_B(E_B)}{N_B N_A^\infty [1+r_{AB}(E_B)] [1+r_A(E_A)] \lambda_{AB}(E_B) \lambda_A(E_A)}, \quad (2.4)$$

wobei N_A^∞ und N_B^∞ die atomaren Dichten der reinen Materialien A und B sind. Die relative Konzentration von Element A in AB kann dann gemäß:

$$c_A = \frac{I_A/I_B}{\sum_B F_{BA}^A I_B/I_B^\infty} \quad (2.5)$$

berechnet werden, wobei

$$F_{BA}^A = \frac{[1+r_{AB}(E_A)] [1+r_B(E_B)] \lambda_M(E_A) \lambda_B(E_B) a_A^3}{[1+r_{AB}(E_B)] [1+r_A(E_A)] \lambda_M(E_B) \lambda_A(E_A) a_B^3}, \quad (2.6)$$

wenn $N_{A,B}^\infty = a_{A,B}^{-3} \cdot a_{A,B}^3$ das Volumen ist, das ein Atom in der Standardprobe A bzw. B einnimmt. Der Term F_{BA}^A ist der s.g. Empfindlichkeitsfaktor des Elements A in Bezug auf das Element B. In der AES werden die Empfindlichkeitsfaktoren oft auf ein einziges Element bezogen (Ag oder Cu) und die Konzentration wird dann mittels dieser Werte folgendermaßen berechnet [Hed95]:

$$c_A = \frac{I_A/S_A}{\sum_i I_i/S_i}. \quad (2.7)$$

Hierbei ist S_i der relative Empfindlichkeitsfaktor des Elements i bezogen auf das Standardelement.

2.2.1 Der Rückstreufaktor

Die Ionisation der Atome in der oberflächennahen Region, die dann zur Emission von Augerelektronen führt, erfolgt nicht nur durch den primären Elektronenstrahl mit der Energie E , sondern auch durch Elektronen, die aus der Tiefe der Probe zurück in die Oberflächenregion gestreut werden und die noch genügend Energie zur Ionisation besitzen. Dieser Effekt wird durch den Term $[1 + r(E_p, \alpha)]$ in Gleichung 2.3 berücksichtigt. Hierbei ist r der Rückstreufaktor, der als Integral des Produkts von Tiefenanregungsverteilungsfunktion und Tiefenemissionsverteilungsfunktion definiert werden kann [Jab02]. Shimizu führte umfangreiche Monte Carlo-Simulationen zur Berechnung des Rückstreufaktors bei elementaren Materialien ($Z = 6 \div 80$) für verschiedene Winkel durch [Shi83]. Die Ergebnisse konnten in folgenden Ausdrücken für die analytische Berechnung des Rückstreufaktors zusammengefasst werden:

$$\begin{aligned}
 r &= (2.34 - 2.1Z^{0.14})U^{-0.35} + (2.58Z^{0.14} - 2.98) \quad \text{für } \alpha = 0^\circ, \\
 r &= (0.462 - 0.777Z^{0.20})U^{-0.32} + (1.15Z^{0.20} - 1.05) \quad \text{für } \alpha = 30^\circ, \\
 r &= (1.21 - 1.39Z^{0.13})U^{-0.33} + (1.94Z^{0.13} - 1.88) \quad \text{für } \alpha = 45^\circ,
 \end{aligned} \tag{2.8}$$

wobei Z die Ordnungszahl der Atome und $U = E/E_X$ ist (E_X ist bei einem XYZ-Übergang die Ionisationsenergie der X-Schale). Abb. 2.3 zeigt die Abhängigkeiten des Rückstreufaktors r von der Ordnungszahl des Substrats für 3 keV Primärelektronenenergie. Die Werte wurden für die N(KLL)- ($E_X = 410$ eV), Ga(LMM)- (1300 eV) und Al(KLL)- (1560 eV) Augerübergänge berechnet. Aus Abb. 2.3 ist ersichtlich, dass der Rückstreufaktor mit zunehmender Ordnungszahl des Substrats und sinkender Ionisationsenergie der X-Schale größer wird. Bei Mehrkomponentenmaterialien wird für die Ordnungszahl der gewichtete Mittelwert aller beteiligten Elemente verwendet.

Es ist wichtig zu bemerken, dass sich der Rückstreufaktor beim Quantifizieren von dünnen Schichten ($< \text{einige } 10 \text{ nm}$) auf das Substrat und nicht auf die Schicht bezieht. Abb. 2.4 zeigt ein Auger-Tiefenprofil eines GaN/AlN-Mehrschichtensystems. An diesem Beispiel kann die Wirkung des Rückstreufaktors auf die Intensität der Augersignale (hier als pph dargestellt) veranschaulicht werden. Innerhalb der GaN-Schicht nehmen die Ga- und N-Augersignale aufgrund der sich der Oberfläche nähernden AlN-Schicht, die eine niedrigere mittlere Ordnungszahl besitzt, ab. Umgekehrt nehmen die Augersignale in der AlN-Schicht mit der sich nähernden Grenzfläche zur GaN-Schicht zu, da diese eine höhere mittlere Ord-

nungszahl hat. Diese Ergebnisse stehen in qualitativer Übereinstimmung mit den Ergebnissen von Shimizu (Gl. 2.8).

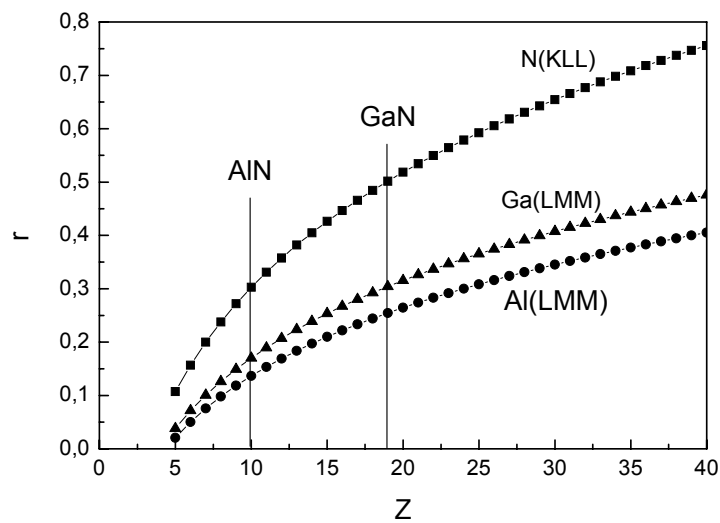


Abb. 2.3 Der Rückstreufaktor berechnet nach Gl. 2.8 für den senkrechten Beschuss mit einem 3 keV Elektronenstrahl, berechnet für Al(KLL)-, Ga(LMM)- und N(KLL)-Augerübergänge in Abhängigkeit von der Ordnungszahl Z .

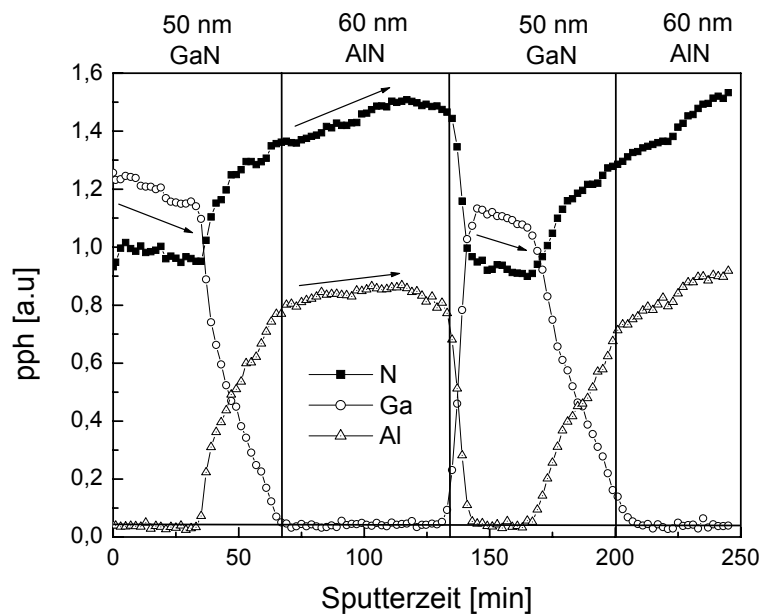


Abb. 2.4 AES Tiefenprofil einer GaN/AlN-Mehrschichtstruktur (Bragg-Reflektor). Die angezeichneten An- und Abstiege im Augersignal demonstrieren den Effekt des Rückstreufaktors (s. Text). Die breitere GaN/AlN-Grenzfläche (im Vergleich zu der schmalen GaN/AlN-Grenzfläche) ist durch die Schichtherstellung verursacht worden.

2.2.2 Informationstiefe der AES

Der Koeffizient $\lambda(E)$, die Dämpfungslänge, beschreibt die Informationstiefe der Augerelektronen mit der Energie E . 63% aller Augerelektronen kommen aus den Tiefen $\leq \lambda(E)$ und 95% aus den Tiefen $\leq 3\lambda(E)$. Die Dämpfungslänge ist eng mit den inelastischen mittleren freien Weglängen der Elektronen $\lambda_i(E)$ im Festkörper verbunden. Der Zusammenhang zwischen $\lambda(E)$ und $\lambda_i(E)$ kann folgendermaßen beschrieben werden [Sea90]:

$$\frac{\lambda}{\lambda_i}(E) = (1 - 0.028Z^{0.5})[0.501 + 0.0681\ln(E)], \quad (2.9)$$

wobei Z die Ordnungszahl ist. Die Notwendigkeit der Einführung der Dämpfungslänge anstelle der mittleren freien Weglänge ergibt sich aus der Tatsache, dass Elektronen, bevor sie inelastisch gestreut werden und Energie verlieren, auch elastische Stöße durchführen. Dadurch wird die effektive freie Weglänge reduziert. Für die Berechnung der mittleren freien Weglänge hat sich in den letzten zehn Jahren die Formel TPP-2M, benannt nach ihren Autoren Tanuma, Powell und Penn, etabliert [Tan93]. Für Elektronen mit der Energie E wird die TPP-2M-Formel folgendermaßen geschrieben:

$$\lambda_i = \frac{E}{E_p^2 [\beta \ln(\gamma E) - (C/E) + (D/E^2)]}, \quad (2.10)$$

wobei

$$\beta = -0.1 + 0.944(E_p^2 + E_g^2)^{1/2} + 0.069\rho^{0.1}, \quad (2.10a)$$

$$\gamma = 0.191\rho^{-0.5}, \quad (2.10b)$$

$$C = 1.97 - 0.91U, \quad (2.10c)$$

$$D = 53.4 - 20.8U, \quad (2.10d)$$

$$U = N_V \rho / M = E_p^2 / 829.4, \quad (2.10e)$$

$$E_p = 28.8(N_V \rho / M)^{1/2}. \quad (2.10f)$$

In Gl. 2.10 werden die folgenden Größen verwendet:

- λ_i - inelastische mittlere freie Weglänge [\AA],
- ρ - Massendichte des Materials [g/cm^3],

- N_V - Anzahl der Valenzelektronen,
- M - molare Masse [g/mol],
- E_g - Bandlücke in [eV],
- E_p - Plasmonenergie der freien Elektronen [eV].

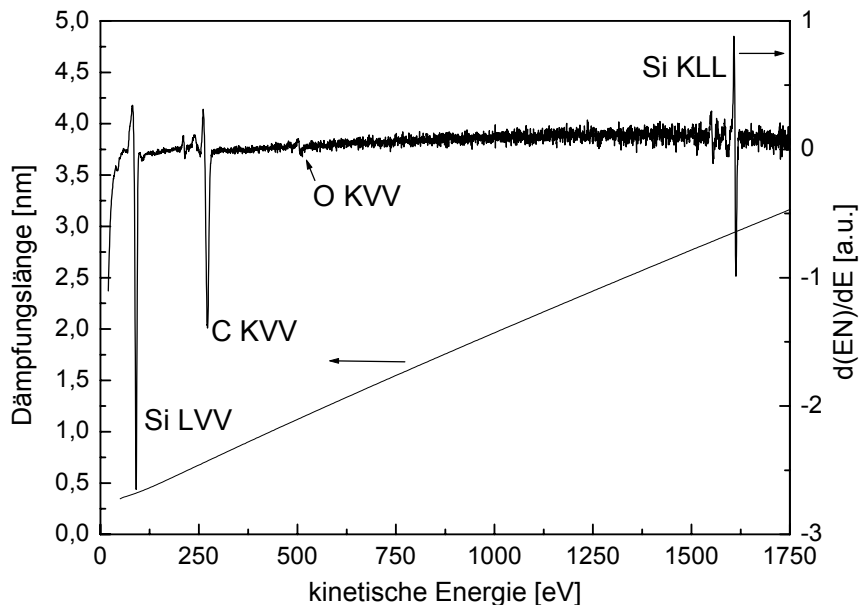


Abb. 2.5 Energieabhängigkeit der Dämpfungslänge der Elektronen in SiC berechnet nach den Formeln 2.9 und 2.10. Das differenzierte Spektrum der aus SiC emittierten Elektronen umfasst alle Augerübergänge von Si, C und O (Kontaminierung).

Gleichung 2.10 ist für Elektronen im energetischen Bereich 50 bis 2000 eV anwendbar. Der Vergleich mit den freien Weglängen, die aus den optischen Daten gewonnen wurden, zeigt, dass die Übereinstimmung im niederenergetischen Bereich schlechter als für höhere kinetische Energien ist. Der Vergleich über den ganzen Energiebereich ergibt die mittlere quadratische Abweichung von 2.3% für Si und 3.2% für SiC. Hiermit gehören Si und SiC zu den Materialien mit der besten Übereinstimmung zwischen experimentellen Daten und denen aus der Berechnung mit der TPP-2M-Formel.

2.3 Auswertung der Augerspektren bei veränderten Peakformen

Während der Tiefenprofilierung kann es zu Veränderungen der Auger-Peakform des gemessenen Elementes (s. z.B. Si-Augerpeaks von reinem Silizium und in SiC, Kap. 3) oder zu einer Überlagerung mit einem Augerübergang eines anderen Elements kommen. In solchen Fällen ist die quantitative Auswertung der Augersignale erschwert und erfordert den Einsatz von Methoden, die die Peakformänderungen berücksichtigen. Zu solchen Methoden gehören das Anpassen der Peakform mittels der kleinsten Fehlerquadrate oder die Faktorenanalyse. Beide Methoden basieren auf der Auswertung von ganzen Spektren oder deren Teilen. Mit Hilfe dieser Methoden werden die einzelnen Spektren in eine lineare Kombination von Basisspektren zerlegt. Diese Basisspektren repräsentieren die Basiszustände der Elemente im Tiefenprofil bzw. unterschiedliche Elemente innerhalb eines Energiefensters. So können s.g. chemische Tiefenprofile erstellt, bzw., nachdem den Basisspektren eine quantitative Information (die Konzentration) zugeordnet wurde, auch die Konzentrationsprofile dargestellt werden. Im Folgenden werden diese Methoden vorgestellt und verglichen und einige Aspekte ihrer Anwendung diskutiert.

2.3.1 Das lineare Anpassen mittels der kleinsten Fehlerquadrate

Die Idee der Methode des linearen Anpassens mittels der kleinsten Fehlerquadrate (*linear least square fitting* - LLS) besteht in der Annahme, dass alle gemessenen Spektren S , die aus m -Messpunkten s_1, s_2, \dots, s_m bestehen, mit linearen Kombinationen einer begrenzten Anzahl von Referenzspektren R_1, R_2, \dots, R_k mit den Anteilen c_1, c_2, \dots, c_k beschrieben werden können:

$$S = c_1 R_1 + c_2 R_2 + \dots + c_k R_k. \quad (2.11)$$

Für das j -te gemessene Spektrum gilt:

$$\begin{pmatrix} s_{1,i} \\ s_{2,i} \\ \vdots \\ s_{m,i} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_{1,1} & r_{1,2} & \cdots & r_{1,k} \\ r_{2,1} & r_{2,2} & \cdots & r_{2,k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r_{m,1} & r_{m,2} & \cdots & r_{m,k} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_{1,i} \\ c_{2,i} \\ \vdots \\ c_{k,i} \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Mit Hilfe des Matrizenformalismus kann diese Situation wie folgt ausgedrückt werden:

$$\mathbf{D}_{m,n} = \mathbf{R}_{m,k} \cdot \mathbf{C}_{k,n} \cdot \quad (2.13)$$

$\mathbf{D}_{m,n}$ ist die Datenmatrix, die n gemessene Spektren mit jeweils m Messpunkten als Spalten enthält. $\mathbf{R}_{m,k}$ ist eine Matrix, die k Referenzspektren als Spalten beinhaltet. In der Matrix $\mathbf{C}_{k,n}$ befinden sich die Anteile der Referenzspektren, die zu berechnen sind. Bei der Analyse der Spektren eines Tiefenprofils entspricht n der Anzahl der Messpunkte innerhalb des Tiefenprofils, bzw. einem Ausschnitt aus dem Tiefenprofil. Die Gleichung 2.11 stellt n -Systeme von m linearen Gleichungen mit k Unbekannten dar. Alle n -Systeme der linearen Gleichungen sind überdeterminiert, weil die Anzahl der Referenzspektren in der Regel immer kleiner als die Anzahl der Messpunkte, aus denen die Spektren bestehen, ist ($k < m$).

Wenn die Referenzspektren bekannt oder gewählt worden sind, kann man die Matrix $\mathbf{C}_{k,n}$ mit Hilfe der Methode der kleinsten Fehlerquadrate berechnen:

$$\mathbf{C} = (\mathbf{R}' \cdot \mathbf{R})^{-1} \cdot (\mathbf{R}' \cdot \mathbf{D}), \quad (2.14)$$

so dass

$$\mathbf{D} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{C} + \mathbf{E} \cdot \quad (2.15)$$

Die Matrix \mathbf{E} stellt den durch die Fitprozedur übriggebliebenen Fehler zusammen. Der schwerwiegendste Punkt dieser Analyse ist die Wahl der Referenzspektren und deren Anzahl. Diese Schritte können durch das Kontrollieren der Fehlermatrix \mathbf{E} optimiert werden. Dennoch hängt es stark von den Kenntnissen über die gemessene Probe und von Erfahrungen des Anwenders ab, wie erfolgreich die Auswertung mittels dieser Methode ist.

2.3.2 Faktorenanalyse

Obwohl die Faktorenanalyse (FA) manchmal vom Fitten mittels der Methode der kleinsten Quadrate getrennt wird [Ste92, Mor98], ist sie selbst eine Art von LLS [Mal02]. So wie auch bei der LLS-Methode, wird mittels der Faktorenanalyse die Datenmatrix \mathbf{D} in eine Multiplikation einer \mathbf{R} - Matrix und einer \mathbf{C} - Matrix zerlegt, wie es in Gleichung 2.13 beschrieben wird. Im Gegensatz zur LLS-Methode verlangt die Faktorenanalyse keine Referenzspektren für die Berechnung der \mathbf{R} - und \mathbf{C} - Matrix. Jedoch besitzen die in der Matrix \mathbf{R} zusammengestellten

Basisspektren, die aus der Faktorenanalyse in ihrem ersten Schritt hervorgehen, in der Regel keine physikalisch sinnvolle Form und eine Transformation sowohl der \mathbf{R} -Matrix als auch der \mathbf{C} -Matrix ist notwendig.

Die Faktorenanalyse kann anhand geometrischer Vorstellungen folgendermaßen dargestellt werden: Die aus m Punkten bestehenden gemessenen Spektren S repräsentieren die Endpunkte der $\mathbf{s} = (s_1, s_2, \dots, s_m)$ -Vektoren im m -dimensionalen Euklidischen Raum. Besteht die Datenmenge aus n gemessenen Spektren, so erhält man n Punkte in diesem Raum. Das erste Ziel der Faktorenanalyse ist, einen Raum zu finden, der die kleinste Dimension k besitzt, so dass sich alle Punkte in diesem Raum befinden. Dieser Raum wird der Faktorenraum genannt. Die Basis dieses Raumes besteht aus k linear unabhängigen Vektoren, s.g. Hauptvektoren oder Hauptkomponenten. Das heißt, dass alle n Punkte als lineare Kombination der Hauptkomponenten bestimmt werden können. Dieser Teil der Faktorenanalyse wird Hauptkomponentenanalyse genannt (*principal component analysis* - PCA). Das zweite Ziel der Faktorenanalyse ist die Transformation der Hauptkomponenten in eine physikalisch sinnvolle Form. Die in der PCA ermittelten Hauptkomponenten tragen keine spektroskopische Information, in ihrer spektroskopischen Form werden sie oft als abstrakte Spektren bezeichnet. Die Umwandlung der Hauptkomponenten in spektroskopisch sinnvolle Formen erfolgt in der Regel durch die Rotation der Hauptkomponenten oder durch Anwendung externer Spektren, die auf den Faktorenraum projiziert werden, ihre Projektion bildet dann die neue Basis für den Faktorenraum.

2.3.2.1 Hauptkomponentenanalyse

Im ersten Schritt der Faktorenanalyse wird die Datenmatrix $\mathbf{D}_{m,n}$, wie sie im Kapitel 2.3.1 definiert wurde, als Produkt der Multiplikation zweier Matrizen $\mathbf{R}_{m,n}$ und $\mathbf{C}_{n,n}$ zerlegt:

$$\mathbf{D}_{m,n} = \mathbf{R}_{m,n} \cdot \mathbf{C}_{n,n} \quad (2.16)$$

Die Elemente der Matrix $\mathbf{R}_{m,n}$ werden Schritt für Schritt mit Hilfe der Methode der kleinsten Fehlerquadrate berechnet (Kap. 3 in [Mal02]).

1. Näherung:

$$\mathbf{D}_{m,n}(1) = \mathbf{r}_1 \mathbf{c}'_1 \quad (2.17a)$$

$$\mathbf{E}_{m,n}(1) = \mathbf{D}_{m,n} - \mathbf{D}_{m,n}(1) = \mathbf{D}_{m,n} - \mathbf{r}_1 \mathbf{c}'_1. \quad (2.17b)$$

2. Näherung:

$$\mathbf{D}_{m,n}(2) = \mathbf{r}_1 \mathbf{c}'_1 + \mathbf{r}'_2 \mathbf{c}'_2, \quad (2.18a)$$

$$\mathbf{E}_{m,n}(2) = \mathbf{D}_{m,n} - \mathbf{D}_{m,n}(2) = \mathbf{E}_{m,n}(1) - \mathbf{r}_2 \mathbf{c}'_2. \quad (2.18b)$$

⋮

k . Näherung ($k < n$):

$$\mathbf{D}_{m,n}(k) = \mathbf{r}_1 \mathbf{c}'_1 + \mathbf{r}'_2 \mathbf{c}'_2 + \dots + \mathbf{r}_k \mathbf{c}'_k, \quad (2.19a)$$

$$\mathbf{E}_{m,n}(k) = \mathbf{E}_{m,n}(k-1) - \mathbf{r}_k \mathbf{c}'_k. \quad (2.19b)$$

⋮

n . Näherung:

$$\mathbf{D}_{m,n}(n) = \mathbf{r}_1 \mathbf{c}'_1 + \mathbf{r}'_2 \mathbf{c}'_2 + \dots + \mathbf{r}_n \mathbf{c}'_n, \quad (2.20a)$$

$$\mathbf{E}_{m,n}(n) = \mathbf{E}_{m,n}(n-1) - \mathbf{r}_n \mathbf{c}'_n = \mathbf{0}. \quad (2.20b)$$

Der Vektor \mathbf{r}_1 , gesehen als Spektrum, stellt die erste Näherung zu allen Daten (Spektrern) dar, der Vektor \mathbf{r}_2 fittet am besten den von der ersten Näherung übriggebliebenen Fehler und jeder weitere Vektor \mathbf{r}_k fittet den residualen Fehler der vorherigen $k-1$ -Näherungen. Die n -te Näherung reproduziert die Datenmatrix \mathbf{D} restlos, ohne Fehler. Die Vektoren $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_n$ können mit Hilfe der linearen Algebra ermittelt werden. Es kann gezeigt werden, dass die Eigenvektoren der Kovarianzmatrix $\mathbf{Z} = \mathbf{D}' \cdot \mathbf{D}$ den Vektoren $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2 \dots \mathbf{c}_n$ gleich sind, wenn die Eigenvektoren nach ihrer Größe geordnet sind.

$$\begin{aligned} \mathbf{Z} \mathbf{c}_1 &= \lambda_1 \mathbf{c}_1 \\ \mathbf{Z} \mathbf{c}_2 &= \lambda_2 \mathbf{c}_2 \\ &\vdots \\ \mathbf{Z} \mathbf{c}_n &= \lambda_n \mathbf{c}_n. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Hierbei sind $\lambda_{1,2, \dots, n}$ die entsprechenden Eigenwerte. Da für die Eigenvektoren $\mathbf{c}'\mathbf{c} = 1$ gilt, können die dazugehörigen \mathbf{r} -Vektoren folgendermaßen berechnet werden:

$$\begin{aligned}
\mathbf{r}_1 &= \mathbf{D}_{m,n} \mathbf{c}_1 \\
\mathbf{r}_2 &= \mathbf{E}_{m,n}(1) \mathbf{c}_2 \\
&\vdots \\
\mathbf{r}_n &= \mathbf{E}_{m,n}(n-1) \mathbf{c}_n.
\end{aligned} \tag{2.22}$$

Nach der Dekomposition der Datenmatrix \mathbf{D} ist zu entscheiden, wie viele Näherungen oder wie viele abstrakte Basisspektren notwendig sind, um die Datenmatrix gut genug zu reproduzieren. Die abstrakten Basisvektoren sind in der Matrix \mathbf{R} nach ihrer Wichtigkeit so geordnet, dass nur die ersten zur Reproduktion des nützlichen Signals in der Datenmatrix beitragen und die restlichen abstrakten Basisvektoren das Rauschen reproduzieren. Wenn die gemessenen n Spektren nur aus wenigen Basisspektren bestünden, sagen wir k , so wäre die Fehlermatrix $\mathbf{E}(k)=0$ und somit auch alle Vektoren $\mathbf{r}_i = 0$ für $k < i \leq n$. Dennoch tritt bei allen Messungen Rauschen auf, so dass alle Vektoren $\mathbf{r}_i \neq 0$ sind.

Es existiert eine Menge von Methoden, mit denen die Anzahl der abstrakten Basisvektoren bestimmt werden kann. Eine Übersicht und eine neuere Methode zur Bestimmung der Anzahl der Hauptkomponenten sind in der Dissertation von Pieterwas zu finden [Pie00, Pie01]. Jedoch ist eine absolut zuverlässige Methode für diese Bestimmung nicht vorhanden, aus diesem Grund ist eine visuelle Kontrolle der Fehlermatrix $\mathbf{E}(k)$ notwendig [Rei99]. Dabei ist entscheidend, dass die Fehlervektoren \mathbf{e} in ihrer spektroskopischen Form außer Rauschen keine anderen, einem Spektrum ähnelnden Züge besitzen.

Nachdem die Anzahl der abstrakten Basisspektren bestimmt wurde, bilden die Vektoren $\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_k$, die im Folgenden als Hauptkomponenten bezeichnet werden, den sogenannten reduzierten Faktorenraum. Für die Datenmatrix gilt dann:

$$\mathbf{D}_{m,n}^* = \mathbf{R}_{m,k}^* \cdot \mathbf{C}_{k,n}^* \approx \mathbf{D}_{m,n}. \tag{2.23}$$

Hierbei sind $\mathbf{R}_{m,k}^*, \mathbf{C}_{k,n}^*$ die reduzierten Matrizen $\mathbf{R}_{m,n}, \mathbf{C}_{n,n}$ aus der Gleichung (2.16) und $\mathbf{D}_{m,n}^*$ ist die reproduzierte Datenmatrix. k ist also die niedrigste Dimension eines Raumes, in dem sich alle gemessenen Daten befinden. Die auf diese Weise ermittelten Hauptkomponenten besitzen aus der spektroskopischen Sicht eine abstrakte Form. Um die Messdaten physikalisch sinnvoll interpretieren zu können, muss eine neue Basis für den reduzierten Faktoren-

raum gefunden werden. Die Methoden für eine solche Transformation der abstrakten Basis des Faktorenraumes werden im folgenden Kapitel vorgestellt.

2.3.2.2 Transformation

Die Hauptkomponentenanalyse liefert einen minimalen Satz von abstrakten Spektren, mit denen alle gemessenen Spektren S beschrieben werden können. Diese abstrakten Spektren, gesehen als Vektoren, bilden eine orthogonale Basis eines k -dimensionalen Raumes. Alle Spaltenvektoren der Datenmatrix $\mathbf{D}_{m,n}$ werden auf diesen Raum senkrecht projiziert. Die projizierten Vektoren bilden dann die reproduzierte Datenmatrix $\mathbf{D}_{m,k}^*$. Jeder der Spaltenvektoren \mathbf{d}_i^* kann mit Hilfe der abstrakten Basisvektoren \mathbf{r} und der Wichtungsfaktoren c berechnet werden:

$$\mathbf{d}_i^* = \sum_{j=1}^k \mathbf{r}_j c_{j,i}. \quad (2.24)$$

Um die reproduzierte Datenmatrix $\mathbf{D}_{m,k}^*$ physikalisch sinnvoll interpretieren zu können, müssen die Basisvektoren \mathbf{r} in ihrer spektroskopischen Form einem realen Spektrum zugeordnet werden, so dass Gleichung 2.24 in solcher Form wie 2.11 geschrieben werden kann. So müssen innerhalb des reduzierten Faktorenraumes reale Spektren gefunden werden, die dann die neue Basis für den Faktorenraum bilden und alle Spektren der Datenmatrix mit relevanten Anteilen reproduzieren können. Die Suche nach solchen Spektren kann auf zwei Arten erfolgen: erstens durch die Rotation der abstrakten Basisvektoren (bekannt als abstrakte Rotationen) oder zweitens durch das Prüfen externer Spektren auf ihre Präsenz im reduzierten Faktorenraum (bekannt als *target testing*). Beim *target testing* wird ein Testvektor, der ein externes Spektrum repräsentiert, auf den reduzierten Faktorenraum projiziert. Ist die Differenz zwischen der Projektion und dem Testvektor klein, bzw. besteht keine Differenz (der Testvektor liegt im Faktorenraum), kann der projizierte Vektor als Basisvektor für den reduzierten Faktorenraum akzeptiert werden. Somit kann das entsprechende Spektrum auch als Referenzspektrum angesehen werden. Der mathematische Vorgang der Projektion kann folgendermaßen beschrieben werden:

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{R}^* \cdot \left((\mathbf{R}^*)' \cdot \mathbf{R}^* \right)^{-1} (\mathbf{R}^*)' \cdot \mathbf{x}, \quad (2.25)$$

wobei \mathbf{x} der Testvektor und $\hat{\mathbf{x}}$ seine Projektion auf den reduzierten Faktorenraum ist. Der Operator (\cdot^{-1}) steht für die Inversionsmatrix und (\cdot) steht für die transponierte Matrix. Wenn die Bedingung:

$$\hat{\mathbf{x}} \cong \mathbf{x} \quad (2.26)$$

innerhalb des erlaubten Fehlers erfüllt ist, ist der Targettest als erfolgreich zu betrachten und einer der abstrakten Basisvektoren kann durch $\hat{\mathbf{x}}$ ersetzt werden. Wenn k linear unabhängige reale Spektren erfolgreich getestet und als neue Basis angenommen wurden, dann können alle Spaltenvektoren der \mathbf{R}^* -Matrix mit den Projektionen der Testvektoren ersetzt werden. Die entsprechende Matrix mit den Anteilen muss neu berechnet werden:

$$\hat{\mathbf{C}} = (\hat{\mathbf{R}}' \cdot \hat{\mathbf{R}})^{-1} \cdot (\hat{\mathbf{R}}' \cdot \mathbf{D}^*), \quad (2.27)$$

wobei die Matrix $\hat{\mathbf{R}}$ die aus den Targettests gewonnenen Vektoren als Spaltenvektoren beinhaltet.

Die Datenmatrix \mathbf{D}^* kann dann mit Hilfe der in der Matrix $\hat{\mathbf{R}}$ enthaltenen Referenzspektren und in der Matrix $\hat{\mathbf{C}}$ enthaltenen Anteilen folgendermaßen reproduziert werden:

$$\mathbf{D}^* = \hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{C}}. \quad (2.28)$$

Liegen keine externen Spektren zum Prüfen vor, können auch Spektren aus der Datenmatrix benutzt werden. Dabei muss aber kein zusätzlicher Targettest durchgeführt werden, weil die reproduzierte Datenmatrix \mathbf{D}^* bereits alle Projektionen beinhaltet.

Die Methode der abstrakten Rotationen verlangt keine externen Spektren, dafür aber Vorstellungen davon, wie ein Referenzspektrum aussehen könnte und mit welchen Anteilen es in den gemessenen Daten zu finden ist. Das Konzept dieser Methode besteht darin, dass beliebige k linear unabhängige Vektoren innerhalb des reduzierten Faktorenräume dessen Basis formen. Die Prozedur der abstrakten Rotationen ist an folgendem Beispiel näher erläutert. Abb. 2.6 stellt einen zweidimensionalen Faktorenräume mit den Vektoren \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 als Basis dar. In diesem Raum befindet sich ein Punkt I mit den Koordinaten $(c_{1,i}, c_{2,i})$ bezüglich der Basis $[\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2]$. Lassen wir die Vektoren $\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2$ eine neue Basis dieses Raumes bilden. Sie

können als Rotation der Vektoren \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 interpretiert werden. Die Länge der Vektoren muss dabei nicht erhalten bleiben. Die Koordinaten von \mathbf{I} im neuen Koordinatensystem $[\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2]$ sind $(\hat{c}_{1,i}, \hat{c}_{2,i})$. Die Berechnung der neuen Koordinaten kann nach Gleichung 2.27 erfolgen. Wenn die Vektoren $\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2$ in ihrer spektroskopischen Form relevant erscheinen, können sie als reale Basisvektoren und somit reale Basisspektren angenommen werden.

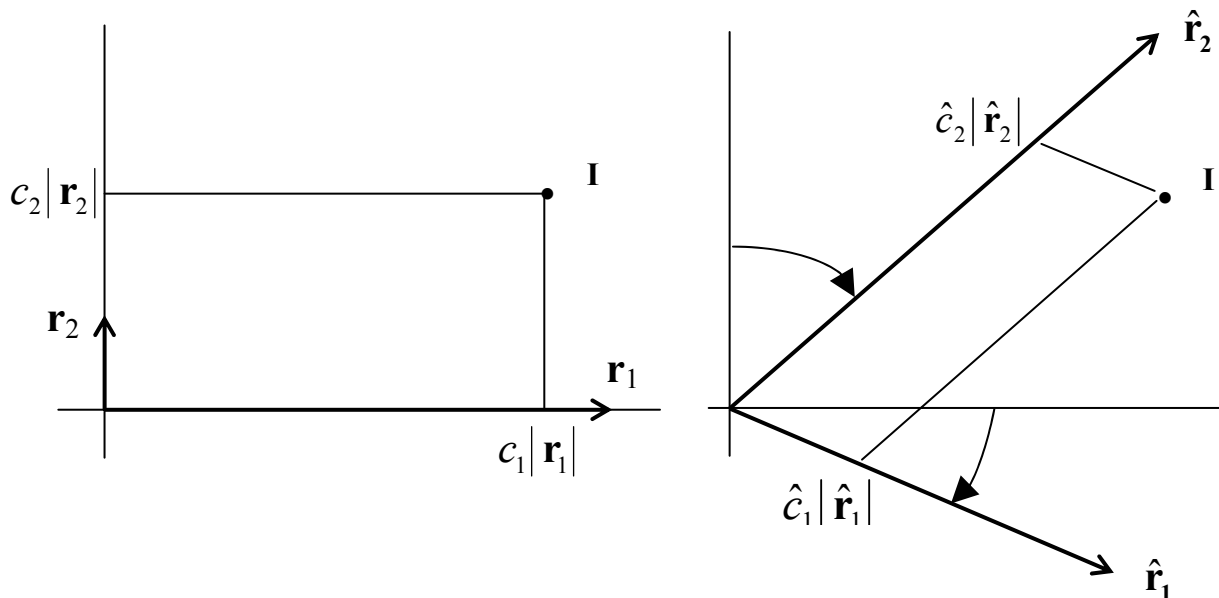


Abb. 2.6 Graphische Darstellung der Transformation mittels abstrakter Rotationen der Hauptkomponenten.

Bei der Suche nach einer neuen Basis mittels Rotation der abstrakten Basisvektoren können einige Überlegungen, die für die Anwendung bei AES und auch XPS relevant sind, behilflich sein. Erstens kann der Suchraum um den Teilraum, der durch die äußersten Punkte der reproduzierten Datenmatrix im Faktorenraum bestimmt wird, reduziert werden, wenn negative Anteile der Referenzspektren in gemessenen Spektren unerwünscht sind. Eine derartige Reduktion im zweidimensionalen Fall ist in Abb. 2.7 dargestellt. Zweitens hat die Länge des Vektors im Faktorenraum keinen Einfluss auf die spektroskopischen Züge (Eigenschaften) des dazugehörigen Spektrums. Deswegen kann die Suche nach einer neuen Basis mittels Rotation weiter beschränkt werden. Hier wird vorgeschlagen, dass die Länge der rotierten Vektoren konstant bleibt. Dann wird der Suchraum innerhalb des reduzierten Faktorenraumes um eine Dimension verringert. Im zweidimensionalen Faktorenraum beschränkt sich die Suche auf einen Kreis mit seiner Mitte im Anfang des Koordinatensystems, im dreidimensionalen Fall auf eine Kugeloberfläche. Bei höheren Dimensionen geht die Anschaulichkeit verloren.

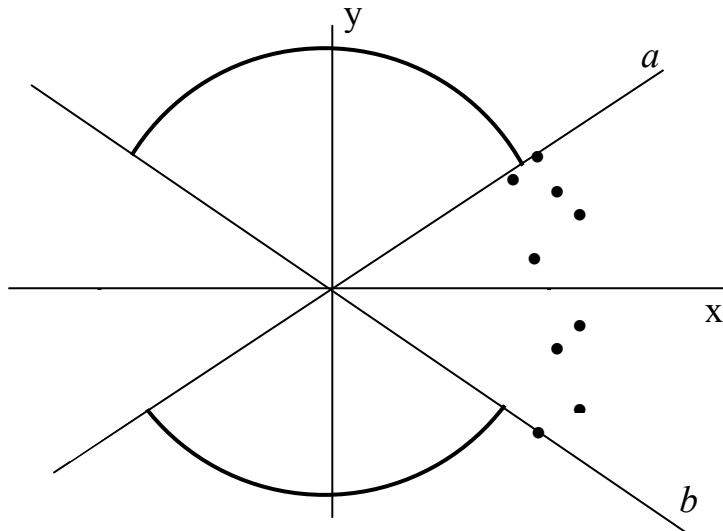


Abb. 2.7 Graphische Darstellung der Einschränkung für mögliche neue Basisvektoren unter der Nebenbedingung, dass keine negativen Anteile der Basispektren erlaubt sind. Die Endpunkte aller möglichen Basisvektoren liegen in 2 Quadranten, die mit den Geraden *a* und *b* ausgegrenzt sind und an den Quadrant angrenzen, in dem die gemessenen Spektren liegen. Vektoren mit derselben Länge liegen auf den Kreisausschnitten.

In der Literatur zur Applikation der FA in der AES oder XPS findet man eine andere Einschränkung zur Suche nach neuen Basispektren [Koo94]. Es wird verlangt, dass die Summe aller Anteile gleich eins ist:

$$\sum_{j=1}^k c_{j,i} = 1. \quad (2.29)$$

Wenn die Bedingung 2.29 gelten würde, müssten sich alle Punkte innerhalb des reduzierten Faktorenraums in einem Unterraum mit der Dimension $k-1$ befinden, der nicht den Anfang des Koordinatensystems einschließt. Im zweidimensionalen Fall würden alle Punkte auf einer Geraden liegen, in einem dreidimensionalen Fall in einer Ebene, die zwischen den Endpunkten der Basisvektoren aufgespannt würde. Dennoch muss diese Bedingung nicht immer erfüllt werden. Als Beispiel wird in Abb. 2.8 das Ergebnis einer Auswertung mittels Faktorenanalyse gezeigt, die am Kohlenstoffpeak aus einem Tiefenprofil einer Ni/C-Multischicht durchgeführt wurde [Lid01]. Es ist ersichtlich, dass sich die Punkte nicht auf einer Geraden befinden und so die Summe der Anteile der Basisvektoren für beliebige Basisvektoren nicht immer 1 sein kann. Es gibt viele Gründe dafür, dass die Summe der Anteile nicht eins sein muss, z.B. der Einfluss des Rückstrefaktors auf das Augersignal oder Änderungen der Konzentration des

beobachteten Elements, die nicht von Änderungen der chemischen Bindungen begleitet werden.

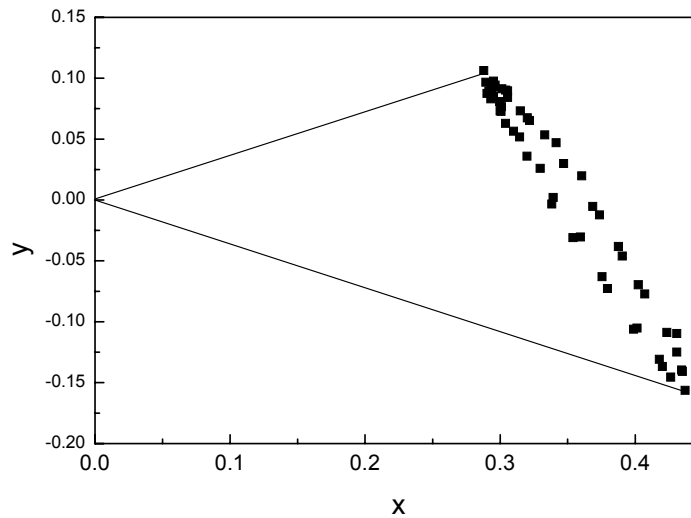


Abb. 2.8 Projektionen der gemessenen $C(KVV)$ -Spektren auf den mittels PCA ermittelten Faktorenraum. Die Spektren wurden während der Tiefenprofilierung einer Ni/C-Multistruktur aufgenommen [Lid01]. Da die Projektionen nicht auf einer Geraden liegen, können keine solchen Basisvektoren gefunden werden, so dass die Summe der Anteile immer 1 ist.

2.3.3 Anwendung der Faktorenanalyse in der AES

Die erste Applikation der Faktorenanalyse in der AES wurde 1979 von Garenstrom publiziert [Gaa79]. Seither stieg die Anzahl der Publikationen mit diesem Thema jedes Jahr und kulminierte Mitte der 90er Jahre bei über 70 Publikationen pro Jahr [Pie01]. So kann man die FA als eine etablierte Standardmethode für die Auswertung der Augerspektren betrachten. Dennoch existieren noch heute einige Unstimmigkeiten über den Einsatz der FA in der AES, wie z.B. die Anwendung der FA an differenzierten Spektren, die Normierung und die Verkettung der Spektren vor der Analyse, die hier diskutiert werden sollen.

Kooi und Sommers [Koo94] haben in ihrer Arbeit postuliert, dass die Anwendung der FA auf differenzierte Spektren unzulässig sei. Als Grund dafür führten sie an, dass bei den differenzierten Spektren keine Normierung durchgeführt werden kann. Die von ihnen vorgeschlagene Prozedur war die Normierung auf dieselbe Fläche unter den Peaks, nachdem der Untergrund abgezogen wurde. Solche Normierung ist im Sinne der Gleichung 2.29. Jedoch ist eine Normierung der Spektren, wenn sie unter gleichen Bedingungen gemessen wurden, nicht notwendig, um an ihnen die FA erfolgreich durchführen zu können. Angenommen, ein beliebiges direktes Spektrum S ist eine lineare Zusammensetzung von k Referenzspektren mit An-

teilen $c_{1...k}$, wie in Gl. 2.11 dargestellt. Eine Differenzierung dieser Gleichung ist eine erlaubte Operation und liefert neue Referenzspektren $\frac{dR_{1...k}(E)}{dE}$, die mit denselben Anteilen das zusammengesetzte differenzierte Spektrum $\frac{dS(E)}{dE}$ beschreiben:

$$\frac{dS(E)}{dE} = c_1 \frac{dR_1(E)}{dE} + c_2 \frac{dR_2(E)}{dE} + \dots + c_k \frac{dR_k(E)}{dE}. \quad (2.30)$$

Damit sind die Voraussetzungen für die Anwendung der FA nicht verletzt und die Faktorenanalyse kann auch auf die differenzierten Spektren in der AES angewandt werden. Die Tatsache, dass in der AES oft nicht $\frac{dN(E)}{dE}$ -Spektren sondern $\frac{dEN(E)}{dE}$ -Spektren gemessen werden, ändert nicht die Aussage über die Anwendbarkeit der FA an den differenzierten Spektren.

Die Normierung nach Gl. 2.29 erscheint relevant für die Anwendung in der Spektroskopie, weil sie den Anteilen der Referenzspektren in den gemessenen Spektren direkt den Sinn von Konzentrationen verleiht. Deswegen wird sie häufig benutzt [Fie93, Koo94]. Dennoch kann eine solche Normierung zu einer Verzerrung der Ergebnisse führen, weil sich die Augersignale auf die absoluten Atom- und nicht auf die Relativkonzentrationen beziehen. Falls eine derartige Normierung erwünscht ist, sollte sie erst nach der Durchführung der Analyse angewandt werden. Schöpke und Kelling haben eine Normierung für die differenzierten Spektren vorgeschlagen [Sch97]. Nach [Sch97] sollen vor der Faktorenanalyse alle Spektren auf dieselbe *p_{ph}*-Intensität normiert werden. Während die Normierung auf dieselbe Fläche in den direkten Spektren einen vorhersehbaren Effekt bewirkt, und zwar dass die Summe der Anteile 1 ist (s. Gl. 2.29), hat die Normierung auf dieselbe Peakhöhe in den differenzierten Spektren einen unvorhersehbaren Einfluss auf die Anteile der Referenzspektren in den gemessenen Spektren. Abb. 2.9a zeigt drei Spektren. Die Spektren S1 und S2 dienen hier als Referenzspektren, das Spektrum S3 wurde als lineare Kombination der Spektren S1 und S2 mit Anteilen von jeweils 0.5 berechnet. Nach der Normierung auf dieselbe *p_{ph}*-Intensität kann das normierte Spektrum S3 mit den ebenso normierten Referenzspektren S1 und S2 mit den Anteilen 0.67 und 0.72 gefittet werden (Abb. 2.9b). Durch diese Normierung kommt es also nicht nur zu Änderungen der absoluten Anteile der Referenzspektren in den gefitteten Spektren, sondern auch zu Änderungen des Anteilsverhältnisses und so auch der relativen Konzentrationen. Deswegen wird hier die Normierung nach [Sch97] nicht empfohlen.

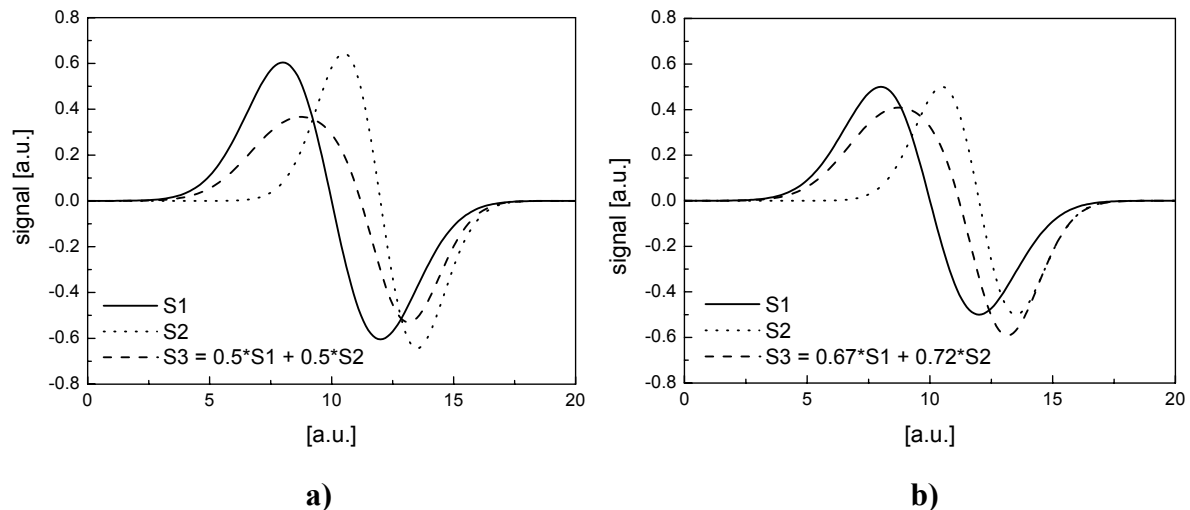


Abb. 2.9 Modellierung der Normierung im differenzierten Modus nach [Sch97]: (a) künstliche Referenzspektren $S1$ und $S2$ und das aus diesen Spektren berechnete Spektrum $S3 = 0.5(S1+S2)$. (b) Die Spektren $S1$, $S2$ und $S3$ aus (a) nach der Normierung auf dieselbe Peakhöhe. Nach der Normierung erhöhen sich die Anteile der $S1$ - und $S2$ -Spektren in $S3$ auf 0.67 und 0.72.

Die Verkettung der Spektren vor der Faktorenanalyse ist eine problematische Operation. Bei der Anwendung der FA in der AES werden meistens einzelne Augerübergänge bzw. einzelne Energiefenster ausgewertet. Falls diese Energiefenster schmal genug sind, d.h. bis zu 100 eV, kann den Elektronen aus diesem Energiefenster die gleiche Informationstiefe zugeordnet werden. Wird das Energiefenster breiter oder werden einzelne, voneinander mehr als 100 eV entfernte Energiefenster verkettet, ändert sich die Informationstiefe innerhalb des Energiefensters oder der verketteten Spektren (s. Abb. 2.5). Dies ist besonders kritisch bei der Auswertung der Tiefenprofile an Grenzflächen, aber auch z.B. bei der Auswertung von Wachstumsprozessen. Aufgrund der unterschiedlichen Informationstiefen reagieren die Spektren in unterschiedlichen Energiefenstern beim Tiefenprofilieren unterschiedlich auf die sich nähernde Grenzfläche. Da die verketteten Spektren als eine Einheit (als ein Vektor) behandelt werden, kann es bei der Auswertung mittels Faktorenanalyse zum Erscheinen einer zusätzlichen Geistkomponente kommen oder es ergeben sich bei der LLS-Auswertung negative Anteile von Referenzspektren [Kov00]. Obwohl schon mehrere Warnungen vor diesem Effekt publiziert wurden [Bub96, Bub00, Osw01], werden verkettete Spektren häufig mittels FA ausgewertet [Sch95, Bau99, Kov00]. Aus den o.g. Gründen werden in der vorliegenden Arbeit lediglich einzelne Energiefenster mittels der Faktorenanalyse ausgewertet.

2.4 Sputtern von Festkörperoberflächen mittels Ionenstrahlen

In der Technologie ist der Beschuss von Festkörperoberflächen mit Ionen von großer Bedeutung [Ram02]. Zu den Anwendungsgebieten gehören z.B. die Reinigung der Oberflächen, das Ätzen und die Abscheidung von dünnen Schichten. Für die Festkörperanalytik sind Ionenstrahlen sowohl in der Probenpräparation (TEM, REM), als auch als Sonden für das Erproben des Materials (SIMS, RBS, ISS) bedeutsam. Eine weitere wichtige Anwendung ist die Kombination des Ionenstrahlabtrags mit anderen oberflächenempfindlichen analytischen Methoden, wie z.B. AES oder XPS, für die Bestimmung der Konzentrationstiefenprofile. Abb. 2.10 veranschaulicht das Wechselspiel zwischen dem Ionenabtrag an der Oberfläche und der Analyse des Kraterbodens mittels AES bei der Ermittlung der Tiefenprofile. Zum Zerstäuben von Oberflächen werden meist die Ionen der Edelgase (Ne, Ar, Kr, Xe) benutzt, weil die Oberfläche im Kraterboden möglichst chemisch unverändert bleiben soll. Dies steht im Kontrast zu SIMS, wo die Anwendung von reaktiven Ionen, wie z.B. O₂, Cs, von Vorteil ist. Für die Interpretation bzw. die Quantifizierung der gemessenen Tiefenprofile ist es wichtig, die Abtragsrate r zu kennen. Diese kann aus der folgenden Gleichung berechnet werden:

$$r = \frac{M}{\rho N_A e} Y j_p, \quad (2.31)$$

wobei

- M - molare Masse [g/mol],
- ρ - Massendichte [g/cm³],
- N_A - Avogadrozahl ($6.02 \times 10^{26} \text{ mol}^{-1}$),
- e - elementare Ladung ($1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$),
- Y - Sputterausbeute [Atom/Ion] und
- j_p - Ionenstromdichte [$\mu\text{A}/\text{m}^2$].

Eine besonders wichtige Größe dieser Gleichung ist die Sputterausbeute Y . Diese Größe ist sowohl von den Parametern des Ionenstrahls (Masse der Ionen, Ionenenergie, Einfallswinkel des Ionenstrahls) als auch von dem bestrahlten Material selbst abhängig. Im Folgenden werden theoretische Konzepte vorgestellt, die zur Bestimmung der Sputterausbeute angewandt werden.

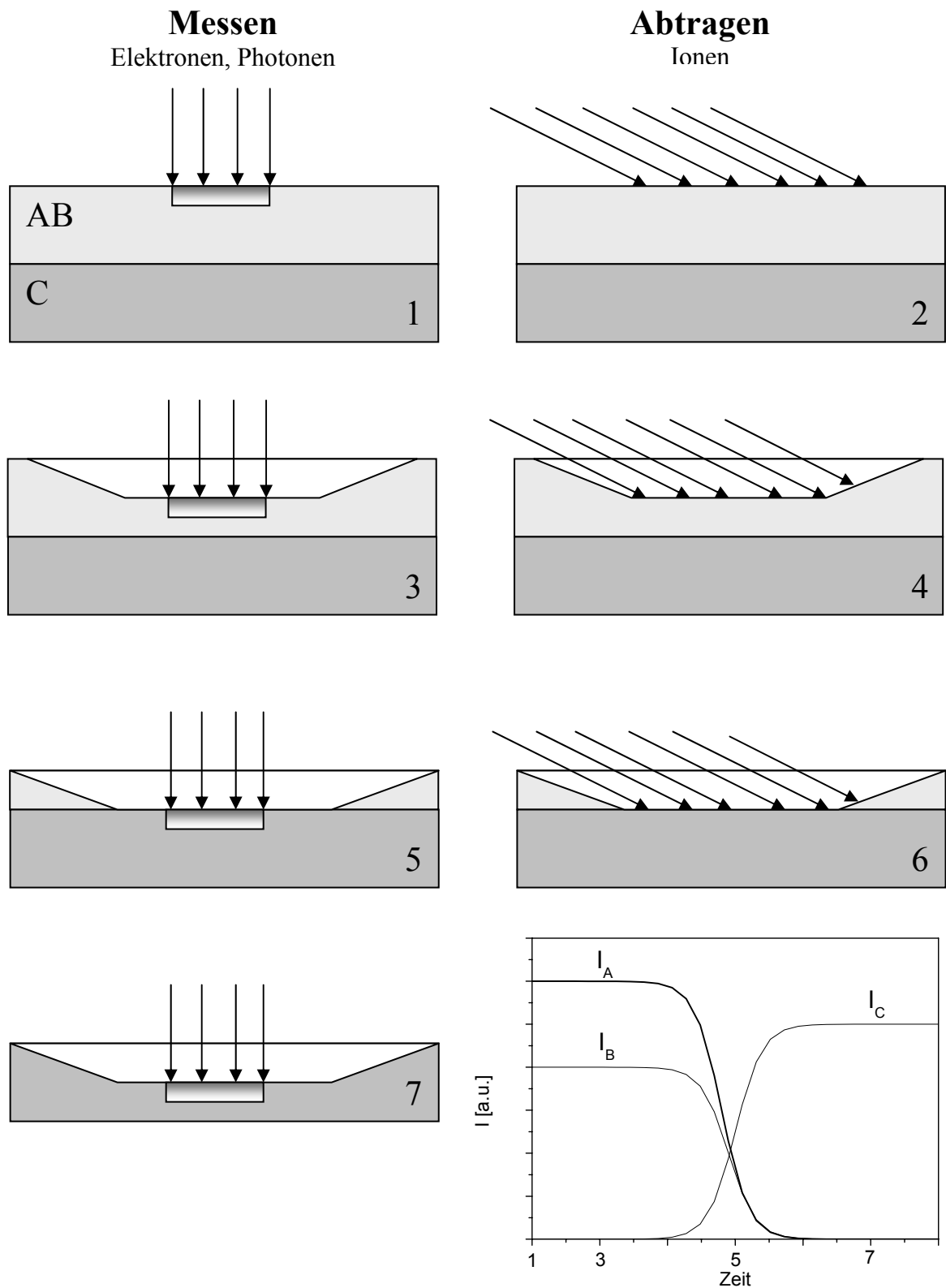


Abb. 2.10 Das Prinzip der Messung von Konzentrationstiefenprofilen mittels Kombination von Ionenabtrag und einer oberflächenempfindlichen analytischen Methode (z.B. AES, XPS). Die Messung erfolgt im Wechsel mit dem Ionenabtrag. Als Messergebnis liegen die Messsignale als Funktion der Abtragszeit vor.

2.4.1 Theorie des Sputterns von Festkörperoberflächen

2.4.1.1 Sigmunds Sputtertheorie im Regime der linearen Kaskaden

Die Grundlagen zur Theorie des Sputterns wurden von Peter Sigmund im Jahr 1969 veröffentlicht [Sig69]. Das Regime der linearen Kaskaden („*linear cascade regime*“) ist eines der drei möglichen Regime. In diesem Regime wird der Abtrag der Atome durch Kaskaden verursacht, an denen nur die Atome des Festkörpers beteiligt sind. Das einfallende Ion trägt zum Abtrag nur indirekt bei. Die einzelnen Kaskaden sind voneinander unabhängig, sie überlappen sich nicht. Die anderen zwei Sputterregime sind das „*single knock-on*“- und das „*thermal spike*“-Regime. Im erstgenannten Regime werden Atome durch die zurückgestreuten Primärteilchen aus dem Festkörper ausgelöst. Dies ist der Fall, wenn ein schweres Material (hohe Ordnungszahl) mit leichten Teilchen bestrahlt wird. Die "*thermal spikes*" sind ein Regime, in dem in der Oberfläche Energie mit einer hohen Dichte deponiert wird und sich die ausgelösten Kaskaden überlappen. Bei der Annahme eines isotropen und homogenen Mediums löste Sigmund die linearisierte Form der Boltzmannschen integro-differentiellen Transportgleichung. Obwohl mehrere Autoren versuchten, neuere Theorien zu entwickeln oder eine Verbesserung von Sigmunds Theorie zu erreichen [Tho81, Kel84, Fal87, Fal93, Mah97, Ste02], gilt Sigmunds Arbeit noch heute als die am weitesten verbreitete und anerkannte Sputtertheorie. Der Ansatz bei der Berechnung der Sputterausbeuten ist:

- (i) zu bestimmen, wie viel Energie in der oberflächennahen Region deponiert wird,
- (ii) diese Energie in eine Anzahl der niederenergetischen Atome in der ausgelösten Kaskade zu konvertieren,
- (iii) zu ermitteln, wie viele dieser Atome bis zur Oberfläche kommen,
- (iv) die Atome zu selektieren, die genügend Energie besitzen, um die Bindungskräfte an der Oberfläche überwinden zu können.

Gl. 2.32 stellt das Hauptergebnis von Sigmunds Theorie dar. Für ein Teilchen (Ion) mit einer Energie E unter dem Einfallswinkel Θ kann die Sputterausbeute aus folgender Gleichung berechnet werden:

$$Y = \Lambda F_D(E, \Theta). \quad (2.32)$$

Der Faktor Λ beinhaltet alle materialspezifischen Eigenschaften und der zweite Faktor in Gl. 2.32, $F_D(E, \Theta)$, repräsentiert die Energie, die an der Oberfläche deponiert wurde und zum Ausstoßen von Atomen genutzt werden kann.

Der Term Λ wird berechnet als:

$$\Lambda = \frac{\Gamma_m}{8(1-2m)} \frac{1}{NC_m U_0^{1-2m}}, \quad (2.33)$$

wobei N - atomare Dichte des Festkörpers und
 U_0 - Oberflächenbindungsenergie ist.

m ist der Exponent aus der Energieabhängigkeit des differentiellen Bremsquerschnitts $d\sigma(E, T)$ [Lin68]:

$$d\sigma(E, T) = C_m E^{-m} T^{-1-m} dT. \quad (2.34)$$

Hier ist T der Energieübertrag nach der Kollision. Der Term Γ_m ergab sich bei der Lösung der Transportgleichung und kann folgendermaßen beschrieben werden:

$$\Gamma_m = \frac{m}{\psi(1) - \psi(1-m)}, \quad (2.35)$$

$\psi(x)$ ist die Digammafunktion, definiert als $\psi(x) = \Gamma'(x)/\Gamma(x)$. Die Berechnung des C_m -Terms hängt vom Exponenten m ab [And74, Sig87]:

$$C_m = \frac{\pi}{2} \lambda_m a_{12}^2 \left(\frac{M_1}{M_2} \right)^m \left(\frac{2Z_1 Z_2 e^2}{a_{12}} \right)^{2m} \quad \text{für } m \geq 0.25, \quad (2.36a)$$

$$C_m = \frac{\pi}{2} \lambda_m a_{BM}^2 \left(\frac{M_1}{M_2} \right)^m (2A_{BM})^{2m} \quad \text{für } m < 0.25, \quad (2.36b)$$

wobei λ_m eine Konstante, Z die Ordnungszahl und M die molare Masse ist. Die Indizes 1 und 2 stehen für unterschiedliche Atome. a_{12} ist die Abschirmlänge für die Coulombschen Kräfte bei der Interaktion zwischen den Atomen 1 und 2, die durch folgende Gleichung gegeben ist:

$$a_{12} = \left(\frac{9\pi^2}{198} \right)^{1/3} a_B (Z_1^x + Z_2^x)^{-y} = 0.4685 (Z_1^x + Z_2^x)^{-y}. \quad (2.37)$$

a_B ist der Bohrsche Radius (0.529 Å) und die Exponenten x und y können die Werte 2/3 und 1/2 (Lindhards Abschirmlänge [Lin68]), 1/2 und 2/3 (Abschirmlänge nach Firsov [Fir58]) oder 0.23 und 1 (Abschirmlänge nach Biersack [Bie82]) annehmen. a_{BM} und A_{BM} sind die Parameter des Born-Mayer zwischenatomaren Potentials:

$$V_{BM}(r) = A_{BM} \exp(-r/a_{BM}), \quad (2.38)$$

das in [Sig69] und [Vic89] für die Beschreibung der Wechselwirkungen zwischen den kollidierenden Teilchen im Festkörper benutzt wurde (r ist der Abstand zwischen den Teilchen). Das Gleichungsglied U_0 in Gl. 2.32 stellt die Oberflächenbindungsenergie dar. Darauf wird am Ende des Kapitels näher eingegangen.

Der zweite Faktor in Gl. 2.32, $F_D(E, \Theta)$, repräsentiert die Energie, die an der Oberfläche deponiert wurde und zur Emission von Atomen genutzt werden kann. Diese Energie hängt von den Eigenschaften des Ionenstrahls und seines Verhältnisses zum Festkörper ab und kann folgendermaßen berechnet werden:

$$F_D(E, \Theta) = \alpha(\Theta) N S_n(E). \quad (2.39)$$

Die nukleare Bremsstärke $S_n(E)$ ist definiert als:

$$S_n(E) = \int_0^E T d\sigma = \frac{1}{1-m} C_m \gamma^{1-m} E^{1-2m}, \quad (2.40)$$

wobei $\gamma E = 4M_1M_2/(M_1+M_2)^2 E$ die maximal übertragbare Energie im Zusammenstoß zwischen zwei Teilchen mit den Massen M_1 and M_2 ist. Üblicherweise wird die nukleare Bremsstärke in einer kompakten Form geschrieben [Lin68]:

$$S_n(E) = 4\pi\alpha_{pt} Z_p Z_t e^2 \frac{M_p}{M_p + M_t} s_n(\varepsilon), \quad (2.41)$$

wobei $s_n(\varepsilon)$ der universale nukleare Bremsquerschnitt, der von der detaillierten Form des abgeschirmten coulombschen Potential abhängt und ε die reduzierte Energie (wird später eingeführt) ist. Die Indizes t und p stehen hier für *target* (Festkörper) und *projectile* (Ion). Das Gleichungsglied α ist eine dimensionslose Funktion des M_t/M_p -Verhältnisses und des Einfallswinkels Θ . Diese Funktion wird am Ende dieses Kapitels zusammen mit der Oberflächenbindungsenergie behandelt.

Nachdem die Gleichungsglieder Λ und F_D erklärt wurden, kann Gl. 2.32 umformuliert werden. Sigmund hat in seiner Arbeit vorgeschlagen, dass $m = 0$ und eine konstante Born-Mayer-Abschirmlänge von 0.219 \AA für die Berechnung von C_m angewandt werden soll. Dies ergab die bekannteste Formel für die Sputterausbeute:

$$Y = 0.042 \alpha \left(\frac{M_t}{M_p}, \Theta \right) \frac{S_n(E, M_{t,p}, Z_{t,p})}{U_0}. \quad (2.42)$$

Diese Formel wird sehr häufig benutzt, um die Zerstäubungsausbeute theoretisch zu berechnen oder experimentelle Ergebnisse mit der Theorie zu vergleichen. 20 Jahre nach seiner grundlegenden Publikation publizierte Sigmund zusammen mit Vicanek und Jimenez Rodriguez eine Arbeit, in der sie eine Korrektur des in [Sig69] angewendeten Bremsquerschnitts angaben. Diese Korrektur ergab sich aus numerischen Berechnungen des in [Sig69] angewandten Bremsquerschnitts, die bis in die Region der Energien, bei denen Atome aus dem Festkörper ausgestoßen werden, hineinreichen. Die Rechnungen ergaben einen Wert von $m > 0.1$ zusammen mit $\lambda_{0.1} < 10$. Durch die Korrektur wurde erreicht, dass die theoretischen Ergebnisse und Computersimulationswerte für die Tiefe der gesputterten Teilchen übereinstimmen. Sie betrifft den Exponenten m und dementsprechend wird die Formel 2.42 verändert. Obwohl die Autoren angedeutet haben, dass "*the full consequences will have to be discussed separately*" [Vic89, S. 135], wurde bisher keine Arbeit dieser Autoren zu diesem Thema veröffentlicht. Als Grund dafür kann angesehen werden, dass Gl. 2.42 bis heute unverändert zur Berechnung der Sputterausbeuten zitiert und angewandt wird (s. z.B. eine Übersichtsarbeit von J. Malherbe [Mal94] oder [Gna99], [Gal00], [Witt03]). Einen Versuch, durch einen Exponenten $m > 0$ die Gl. 2.32 neu zu formulieren, unternahmen García-Rosales et al. [Gar94]. In dieser Arbeit wurde eine große Menge experimenteller Ergebnisse zu Sputterausbeuten für verschiedene Materialien und Ionen zusammengefasst und mit der Theorie verglichen. Diese Ergebnisse wurden am Max-Planck-Institut für Plasmaphysik in Garching über mehrere Jahre gewonnen und sind im Bericht [Eck93] detailliert vorgestellt. In [Gar94] wurde der Exponent

$m = 0.16$ in die Gl. 2.32 und die darin enthaltenen Terme eingesetzt. Dabei sind den Autoren zwei Fehler unterlaufen. An dieser Stelle wird nun der Ansatz aus [Gar94] wiederholt und die Fehler korrigiert.

In der Theorie der linearen Kaskaden wird angenommen, dass die Atome durch Kollisionen untereinander aus der Oberfläche ausgestoßen werden. Deshalb beziehen sich alle Parameter in den Gleichungen 2.33 - 2.36 auf Festkörper [Sig81], d.h. $M_1 = M_2 = M_t$, $Z_1 = Z_2 = Z_t$ und $a_{12} = a_{tt}$). Diesen Fakt haben García et al. in ihrer Arbeit übersehen. Somit kann Gl. 2.32 wie folgt neu formuliert werden [Gar94]:

$$Y = q_m f_m(Z_{p,t}, M_{p,t}) \alpha \left(\frac{M_t}{M_p}, \Theta \right) s(\varepsilon) U_0^{2m-1}, \quad (2.43)$$

wobei in q_m alle numerischen Größen und in f_m alle festkörper- und ionenbezogenen Größen zusammengefasst werden. Für $m \geq 0.25$ gilt aus Gl. 2.33 und 2.36a:

$$q_m = \frac{\Gamma_m}{1-2m} \frac{e^{2(1-2m)}}{4^m \lambda_m} (0.4685)^{2m-1}, \quad (2.44)$$

$$f_m(Z_{p,t}, M_{p,t}) = \left[(2Z_t^x)^{-y} \right]^{2(m-1)} (Z_p^x + Z_t^x)^{-y} Z_t^{1-4m} Z_p \frac{M_p}{M_p + M_t}, \quad (2.45)$$

und für $m < 0.25$ aus Gl. 2.36b gilt:

$$q_m = \frac{\Gamma_m}{1-2m} \frac{e^2}{2^m \lambda_m} \frac{0.4685}{a_{BM}^2}, \quad (2.46)$$

$$f_m(Z_{p,t}, M_{p,t}) = \frac{1}{A_{BM}^{2m}} (Z_p^x + Z_t^x)^{-y} Z_t Z_p \frac{M_p}{M_p + M_t}. \quad (2.47)$$

Für die Berechnung kann entweder der universelle Parametersatz eingesetzt werden ($a_{BM} = 0.219\text{\AA}$ und $A_{BM} = 52Z_t^{3/2} \text{ eV}$ [And65]), oder man sucht materialspezifische Parameter (z.B. beinhaltet Ecksteins Buch eine Kompilation [Eck91]).

Gl. 2.43 unterscheidet sich von der von García et al. angegebenen Gleichung durch die bereits erwähnte Anwendung der Festkörperparameter in 2.36 bei der Berechnung des Terms f_m und durch die Erweiterung für kleinere Exponenten m . Diese Gleichung repräsentiert zusammen mit Gl. 2.44 bis 2.47 die Gl. 2.32 in einer Form, die direkt zur Berechnung von Sputerausbeuten angewandt werden kann. Vor der Anwendung müssen allerdings der Exponent m , das Modell für die Abschirmlänge, die Funktion α und die Oberflächenbindungsenergie bestimmt werden.

Der Exponent m kann aus dem Anstieg des nuklearen Bremsquerschnitts bei niedrigen Energien berechnet werden. Dies kann durch die Gleichstellung von Gl. 2.40 und 2.41 erreicht werden:

$$2\pi\alpha_u Z_t^2 e^2 s_n(\varepsilon) = \frac{1}{1-m} C_m E^{1-2m}. \quad (2.48)$$

Es erweist sich als günstig, wenn aus der Gegenüberstellung von Gl. 2.40 und 2.41 direkt der Parameter C_m berechnet wird, denn danach entfällt die mühsame Anwendung der Gl. 2.36a, b. Der Verlauf des universalen Bremsquerschnittes $s(\varepsilon)$ hängt vom zwischenatomaren Potential ab. Häufig werden abgeschirmte Coulombsche Potentiale benutzt in der Form:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right) = \frac{C}{r/a} \Phi\left(\frac{r}{a}\right), \quad (2.49)$$

wobei $\Phi\left(\frac{r}{a}\right)$ die Abschirmfunktion und r der Kernabstand ist. Neben dem von Sigmund angewandten Born-Mayer-Potential werden häufig auch andere zwischenatomare Potentiale für die Beschreibung der Wechselwirkungen bei atomaren Zusammenstößen eingesetzt. Hier werden zwei universale nukleare Bremsstärken $s(\varepsilon)$ präsentiert, die aus den Kr-C [Wil77] und ZBL [Zie85] Potentialen abgeleitet wurden:

$$s_n^{Kr-C}(\varepsilon) = \frac{0.5 \ln(1 + 1.2288\varepsilon)}{\varepsilon + 0.1728\sqrt{\varepsilon} + 0.008\varepsilon^{0.1504}}, \quad (2.50)$$

$$s_n^{ZBL}(\varepsilon) = \frac{0.5 \ln(1 + 1.383\varepsilon)}{\varepsilon + 0.1013218\varepsilon^{0.21226} + 0.19594\varepsilon^{0.5}}, \quad (2.51)$$

wobei ε die reduzierte Energie ist:

$$\varepsilon = E \frac{M_t}{M_t + M_p} \frac{a_p}{Z_t Z_p e^2}. \quad (2.52)$$

Abb. 2.11 zeigt den Verlauf von universalen Bremsstärken $s_n^{ZBL,Kr-C}$, die für die Abbremsung der Si-Ionen (oder auch Atome) im Silizium berechnet wurden. Aus Anschaulichkeitsgründen wurde die x -Achse als Energie E und nicht, wie üblich, als reduzierte Energie ε dargestellt. Zum Vergleich ist außerdem die Thomas-Fermi universale Bremsstärke abgebildet [Gar94]. Wie man in Abb. 2.11 sehen kann, existieren nur sehr kleine Unterschiede zwischen den Kr-C- und ZBL-Kurven, während die Thomas-Fermi-Kurve für kleinere Energien einen kleineren Anstieg aufweist als die anderen beiden Kurven. Aus diesem Anstieg in der niederenergetischen Region kann der Exponent m berechnet werden. Der Fit bis 100 eV mit einer Potenzfunktion $f(x)=ax^b$ ergab:

$a = 0.0087$ und $b = 0.535$ für ZBL Bremsquerschnitt,

$a = 0.0086$ und $b = 0.546$ für Kr-C Bremsquerschnitt und

$a = 0.019$ und $b = 0.42$ für Thomas-Fermi Bremsquerschnitt.

Für die Abschirmlängen wurden bei der ZBL-Bremsstärke die Form von Biersack und für die Kr-C- und Thomas-Fermi-Bremsstärken die Lindhardsche Form eingesetzt. Daraus ergeben sich nach dem Vergleich mit Gl. 2.48 $m_{ZBL} = m_{Kr-C} = 0.23$ und $m_{T-F} = 0.29$. Der erste Wert stimmt mit dem Wert für eine C-C Interaktion bei 10 eV überein [Vic93]. Es soll hier aber bemerkt werden, dass der Exponent m für Elemente mit einer höheren Ordnungszahl kleiner wird [Vic93] und die folgenden Parameter nur für Elemente mit der Atomzahl um Si gelten. Die entsprechenden Koeffizienten λ_m wurden aus den Gleichungen 2.36a und 2.48 ermittelt, für Kr-C- und ZBL-Bremsstärken ergibt sich $\lambda_m = 4.2$ und für die Thomas-Fermi-Bremsstärke $\lambda_m = 1.86$. In der Literatur wird darauf hingewiesen, dass die Thomas-Fermi-Abschirmfunktionen die Kollisionen im niederenergetischen Bereich nicht ausreichend beschreiben. Da die von Kr-C- und ZBL-Potentialen abgeleiteten Bremsstärken sehr ähnlich sind, wird im Folgenden nur eine davon benutzt, und zwar Kr-C zusammen mit Lindhards Abschirmlänge. Als weitere Vereinfachung wurde aus dem Fit zur Kr-C-Bremsstärke die Konstante $C_{m=0.23} = 13.2 \text{ \AA}^2$ für spätere Berechnungen bestimmt.

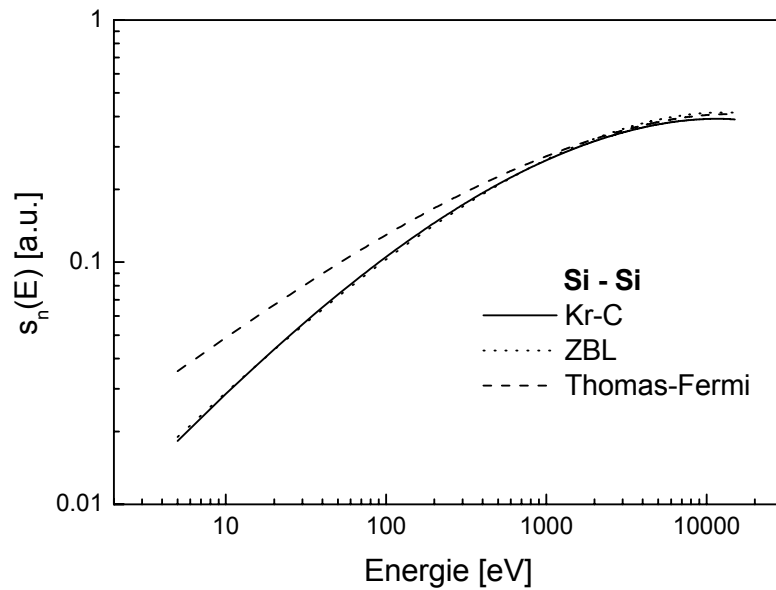


Abb. 2.11 *Universale nukleare Bremsstärke $s_n(E)$ für Si-Si-Wechselwirkung berechnet für Kr-C, ZBL und Thomas-Fermi interatomare Potentiale.*

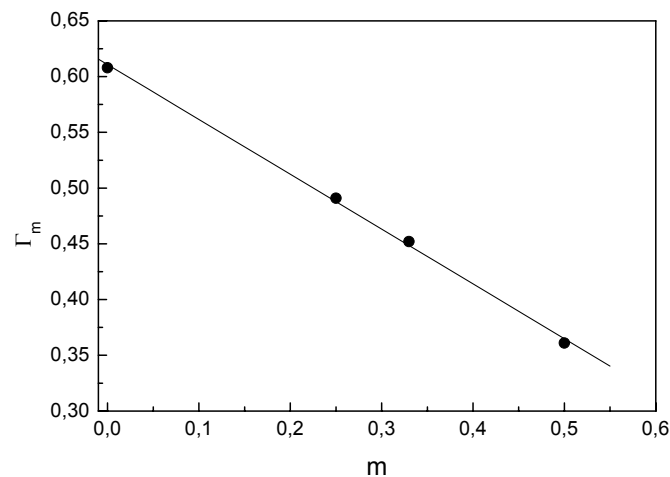


Abb. 2.12 *Lineare Anpassung der Γ_m -Werte aus [Sig81] als Funktion des Exponenten m .*

Die Werte der Konstante Γ_m für verschiedene m Werte sind in [Zha99] tabelliert und können aus einem linearen Fit im Bereich 0 - 0.5 abgelesen werden (Abb. 2.12). So erhält man $\Gamma_{0.23} = 0.5$, $\Gamma_{0.17} = 0.525$ und $\Gamma_{0.1} = 0.563$. Die elementare Ladung wird hier günstigerweise als $e^2 = 14.4 \text{ eV\AA}$ eingesetzt.

Unter Anwendung von $m = 0.23$, $\lambda_m = 4.2$, $q_{0.23} = 2.755$ und Lindhards Abschirmlänge kann Gl. 2.42 wie folgt erstellt werden:

$$Y = 1.019 Z_t^{-0.265} (Z_p^{2/3} + Z_t^{2/3})^{-1/2} \frac{Z_p M_p}{M_p + M_t} \alpha \left(\frac{M_t}{M_p}, \Theta \right) S_n^{KrC}(\varepsilon) U_0^{-0.54}. \quad (2.53)$$

Gl. 2.53 repräsentiert die Formel für die Berechnung von Sputterausbeuten beim Beschuss von monoatomaren Festkörpern mit der Ordnungszahl Z_t und der Masse M_t mit Ionen mit der Ordnungszahl Z_p und der Masse M_p für die Kr-C-Approximation der nuklearen Bremsstärke. Um Gl. 2.53 in eine Form zu bringen, die direkt mit der bekannten Formel für die Berechnung der Sputterausbeute (Gl. 2.42) vergleichbar ist, wird die Konstante $C_{m=0.23} = 13.2 \text{ \AA}^2$ direkt benutzt. Dann kann Gl. 2.53 für Elemente mit niedriger Ordnungszahl (< 20) folgendermaßen reduziert werden:

$$Y_{0.23} = 0.0082 \alpha \left(\frac{M_t}{M_p}, \Theta \right) \frac{S_n(E, M_{t,p}, Z_{t,p})}{U_0^{0.54}}. \quad (2.54)$$

Für den verbesserten Verlauf der nuklearen Bremsstärke für das Born-Mayer-Potential findet man in [Vic89] die Energieabhängigkeiten für m und λ_m in der Form $m, \lambda_m = f(E_r/A_{BM})$, wobei $E_r = M_2 E / [(M_1 + M_2) A_{BM}]$. Für $Z = 10$ (die mittlere Ordnungszahl bei SiC) und $E = 10 \text{ eV}$ erhält man aus Abb. 6 in [Vic89] die Werte $m = 0.17$ und $\lambda_m = 5$. Für $Z = 92$ ergeben sich die Werte $m = 0.10$ und $\lambda_m = 10$. Mit der Anwendung des universellen Parametersatzes für das Born-Mayer-Potential ergibt sich die korrigierte Sigmundsche Formel:

$$Y_{0.17} = 0.017 \alpha \left(\frac{M_t}{M_p}, \Theta \right) \frac{S_n(E, M_{t,p}, Z_{t,p})}{U_0^{0.66}} \quad \text{für } Z = 10 \quad (2.55a)$$

und

$$Y_{0.1} = 0.021 \alpha \left(\frac{M_t}{M_p}, \Theta \right) \frac{S_n(E, M_{t,p}, Z_{t,p})}{U_0^{0.8}} \quad \text{für } Z = 92. \quad (2.55b)$$

Um den Unterschied zwischen der alten Formel (Gl. 2.42) und den zwei hier neu aufgeführten Formeln (Gl. 2.54 und 2.25) zu verdeutlichen, zeigt Abb. 2.13 die Sputterausbeuten berechnet für $m = 0, 0.1, 0.17$ und 0.23 nach Gl. 2.42, 2.54 und 2.55a und b in Abhängigkeit von der Oberflächenbindungsenergie U_0 . Es zeigt sich, dass die niedrigsten Sputterausbeuten erwartungsgemäß für $m = 0.23$ erreicht werden. Eine kuriose Situation stellt sich für die Sputterausbeuten berechnet für $m = 0.1$ und 0.17 ein. Während für $U_0 < 5 \text{ eV}$ die Sputterausbeuten

der Tendenz von niedriger Ausbeute bei höherem m folgen, wird für $U_0 > 5$ eV diese Tendenz gebrochen. Dies ist das Resultat der verstärkten Wirkung des U_0^{1-2m} -Terms auf die Sputterausbeute bei höheren U_0 -Werten.

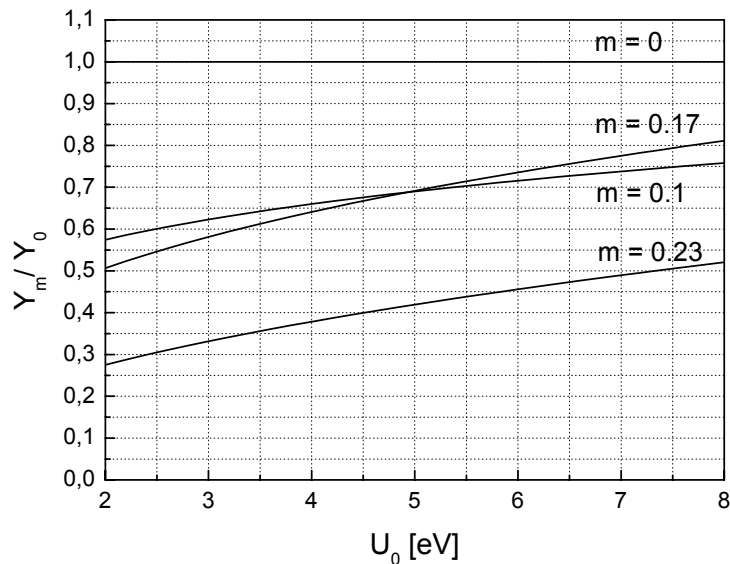


Abb. 2.13 Die Änderung der Sputterausbeuten mit der Anwendung von $m > 0$ in Abhängigkeit von der Oberflächenbindungsenergie.

Für die quantitative Bestimmung der Sputterausbeuten aus der Theorie der linearen Kaskaden muss notwendigerweise noch die Beschreibung der Funktion α und die Diskussion zur Oberflächenbindungsenergie herangezogen werden. Die Funktion α bestimmt, wie viel der deponierten Energie an Atome übergeben wird, die sich in der Stoßkaskade aus dem Festkörper herausbewegen. Zalm [Zal83] approximiert die ursprüngliche α -Funktion von Sigmund [Sig69] und erhielt folgenden Ausdruck:

$$\alpha\left(\frac{M_t}{M_p}\right) = 0.15 + 0.13 \frac{M_t}{M_p}. \quad (2.56)$$

García-Rosales [Gar94] hat eine andere Form für α vorgeschlagen, die sich aus der Anpassung einer größeren Menge experimenteller Daten ergab:

$$\alpha\left(\frac{M_t}{M_p}\right) = \frac{0.15 + 0.05 M_t/M_p}{1 + 0.05 (M_t/M_p)^{1.6}}. \quad (2.57)$$

Abb. 2.14 zeigt die Verläufe unterschiedlich definierter Funktionen α . Zusammen mit den hier vorgestellten Funktionen (Gl. 2.56 und 2.57) wurden außerdem zwei weitere Funktionen in Abb. 2.14 dargestellt [And75, Ste85]. Die größten Unterschiede treten beim Sputtern schwererer Materialien mit leichten Ionen auf, während für $M_t / M_p < 0.5$ Differenzen unter 25% beobachtet werden können. Die Abweichungen für $M_t / M_p \sim 5$ sind allerdings beträchtlich, vor allem Gl. 2.57 ergibt viel niedrigere Werte als die anderen Funktionen. In diesem Bereich handelt es sich um das Sputtern von schweren Elementen mit leichten Ionen und die Theorie der linearen Kaskaden verliert ihre Gültigkeit.

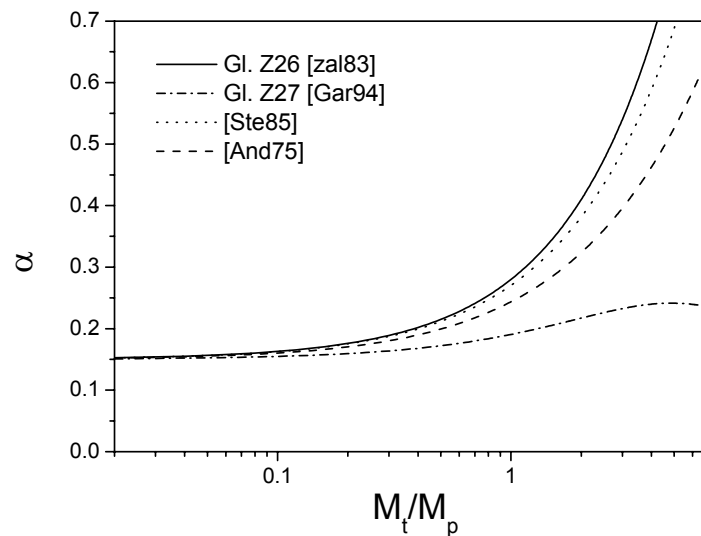


Abb. 2.14 Verlauf der Funktion α für verschiedene Definitionen.

Die Funktion α beinhaltet auch die Abhängigkeit der Ionenausbeute vom Einfallswinkel Θ in der folgenden Form [Sig69]:

$$\alpha(\Theta) = \alpha(0^\circ) \cos^{-f}(\Theta). \quad (2.58)$$

Dieser Ausdruck ist gültig für Einfallswinkel kleiner als 60° . Der Koeffizient f besitzt einen Wert aus dem Intervall $\frac{5 \pm 2}{3}$ [Sig69]. Yamamura [Yam84] hat für größere Einfallswinkel eine Erweiterung vorgeschlagen, die allerdings für das Sputtern mit leichten Ionen abgeleitet wurde:

$$\alpha(\Theta) = \alpha(0^\circ) \cos^{-f}(\Theta) \exp \left[\Sigma \left(1 - \frac{1}{\cos(\Theta)} \right) \right]. \quad (2.59)$$

Der erste Teil der Gleichung entspricht Gl. 2.58 und repräsentiert die Vergrößerung der Ionenreichweiten in der Nähe der Oberfläche mit größerem Einfallswinkel. Der zweite Teil beinhaltet die Winkelabhängigkeit der Ionenpenetrationswahrscheinlichkeit. Σ ist eine Fitkonstante, wobei das Maximum der Ionenausbeute bei dem Winkel $\cos(\Theta) = \Sigma/f$ liegt.

Der letzte Parameter aus Gl. 2.32, der noch zu behandeln ist, ist die Oberflächenbindungsenergie U_0 . Diese Energie stellt eine Potentialbarriere dar, die ein Atom auf seinem Weg aus dem Festkörper überwinden muss. Diese Potentialbarriere hat eine planare Form. Diese Annahme wurde mehrmals experimentell bestätigt. Es gibt einige Ansätze zur Berechnung der Oberflächenbindungsenergie. Das Problem der Bestimmung der Oberflächenbindungsenergie wurde ausführlich in [Mal94] diskutiert. Die einfachste Methode bei monoatomaren Materialien ist die Verwendung der Sublimationswärmern an Stelle der Oberflächenbindungsenergie. Für Legierungen und Verbindungen wird der entsprechend gewichtete Mittelwert der elementaren Sublimationsenergien für die Potentialbarriere eingesetzt.

2.4.1.2 Erweiterung zu niedrigen Ionenenergien

Sigmunds Sputtertheorie ist allgemein gültig bis zu Energien von einigen keV. Die Sputterprozesse, die sowohl in der Halbleitertechnologie als auch für analytische Zwecke eingesetzt werden, wenden jedoch Ionen im Energiebereich bis zu 10 eV an. Der Grund für diese Begrenzung ist die Annahme isotroper Kaskaden. Diese Annahme gilt für niedrigere Beschussenergien nicht mehr und Abweichungen von der Theorie sind zu erwarten. Eine Korrektur der Anisotropie schlug Falcone vor [Fal88], diese ist aber nicht leicht anzuwenden, weil die Kenntnis des Anisotropiefaktors vorausgesetzt wird. Aus diesem Grund wird häufig ein empirischer Ansatz angewandt, um den niederenergetischen Bereich in Sputterprozessen zu beschreiben. Bohdansky [Boh84] stellte eine empirische Formel vor, die auf der Theorie von Sigmund basiert und bis hin zu niedrigen Ionenenergien eingesetzt werden kann. Diese Formel wurde später von García-Rosales [Gar94] revidiert und an einer großen Menge von experimentellen und computersimulierten Daten getestet [Eck93]. Die revidierte Bohdansky-Formel für die Berechnung von Sputterausbeuten hat für einen senkrechten Einfallswinkel die folgende Form:

$$Y = Q_s^{KrC}(\varepsilon) \left(1 - \left(\frac{E_{th}}{E} \right)^{2/3} \right) \left(1 - \frac{E_{th}}{E} \right)^2. \quad (2.60)$$

E ist die Energie der Ionen, $s_n^{KrC}(\varepsilon)$ ist der universale Bremsquerschnitt (Gl. 2.50), Q ist eine Konstante und E_{th} ist die Schwellenergie für den Zerstäubungsprozess. Die ersten zwei Terme der Gl. 2.60 entsprechen Sigmunds Theorie und der dritte Term zieht die Abtragsschwelle in Betracht. Eine große Zahl experimenteller und computersimulierter Schwellenergien ermöglichte eine Skalierung der Schwellenergie mit dem Massenverhältnis M_t/M_p [Gar94]:

$$\frac{E_{th}}{U_0} = 7 \left(\frac{M_t}{M_p} \right)^{-0.54} + 0.15 \left(\frac{M_t}{M_p} \right)^{1.12} . \quad (2.61)$$

Abb. 2.15a zeigt die Schwellenergien zum Sputtern von Silizium als Funktion der Ionenmasse ($U_0 = 4.7$ eV). Abb. 2.15b stellt den Verlauf des Schwellenenergiterms der Gl. 2.60 in Abhängigkeit von der Ionenenergie für das Sputtern von Silizium mit Argon und Xenon dar.

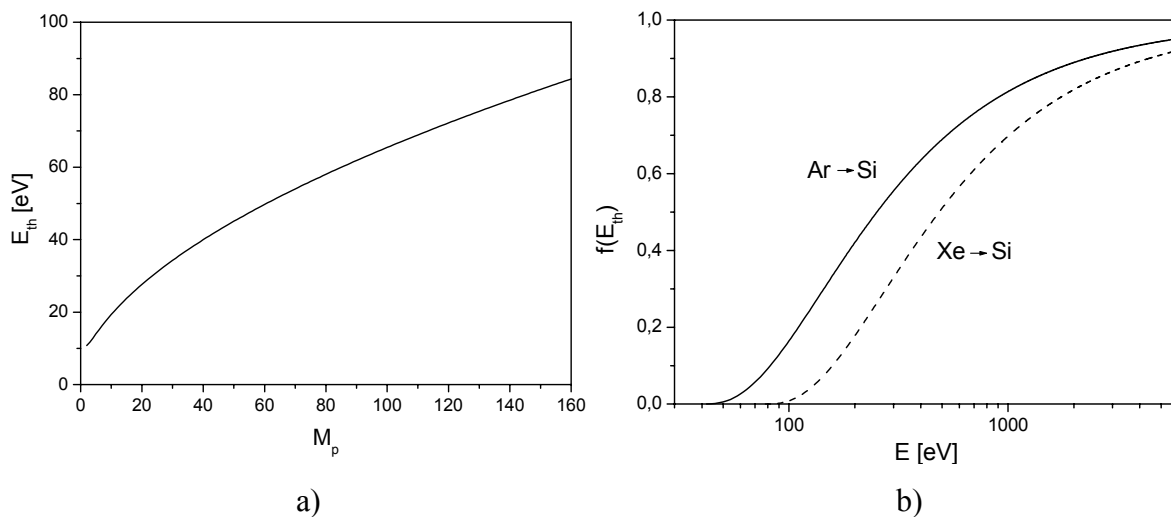


Abb. 2.15 (a) Abhängigkeit der Sputterschwelle von der Ionenmasse für das Sputtern von Silizium ($U_0 = 4.7$ eV). (b) Zwei Beispiele für den Verlauf des Schwellenenergiterms $f(E_{th})$, einmal für das Sputtern von Silizium mit Argon und einmal für Xenon.

2.4.2 Computersimulation

Für die Berechnung der Ionen-Festkörper-Wechselwirkungen werden oft Computersimulationen eingesetzt. Die Simulationsprogramme können in zwei Gruppen eingeteilt werden. Es handelt sich einerseits um Monte-Carlo-(MC) Programme und andererseits um auf klassischer Dynamik basierende Programme, oft als molekulardynamische (MD) Programme benannt. Einen sehr guten Überblick über Computersimulation von Ionen-Festkörper-Wechselwirkungen bietet [Eck91]. Die erste Gruppe der Programme wird sehr häufig für die Beschrei-

bung der Sputtereffekte angewandt. Die MD-Programme erweitern die Möglichkeiten der MC-Programme um Gebiete wie z.B. das Sputtern im "*thermal spike*"-Regime, die Clusteremission, die Entwicklung der Oberflächentopographie oder chemische Effekte [Urb97].

Monte-Carlo-Simulationsprogramme benutzen eine sogenannte Zweierstoß-Näherung (*binary collision approximation*, BCA). Das einfallende Ion löst eine Stoßkaskade aus, die die Atome im Festkörper versetzen kann. Im BCA-Modell wird die Bewegung von Ionen und Atomen im Festkörper als eine Serie von binären Zusammenstößen behandelt. Die Energieübertragung und die Streuung beim Zweierstoß werden mit Hilfe der Energie- und Momentenerhaltungssätze berechnet. Die Atome und Ionen werden jedoch nicht als harte Kugeln betrachtet, sondern als Teilchen mit einer bestimmten Ladungsverteilung. Diese wird durch die Anwendung eines zwischenatomaren Potentials in die Berechnungen einbezogen. Die Potentiale sind in den meisten Fällen repulsiv (ZBL [Zie85], Kr-C [Wil77]), obwohl bereits Versuche unternommen wurden, auch Potentiale mit attraktivem Teil in die MC-Simulationsprogramme einzubetten [Eck92]. Der Festkörper wird in der Simulation entweder als amorph (TRIM [Bie84], TRIRS [Ber97]) oder als kristallin (MARLOWE [Rob74], OKSANA [Shu83]) betrachtet. Die durch das einfallende Ion entstandene Kaskade von Atomen im Festkörper wird im Falle eines repulsiven zwischenatomaren Potentials mit Hilfe von weiteren externen Parametern gesteuert. Die Rolle dieser Parameter ist der Ersatz fehlender Anziehungskräfte, die neben den abstoßenden Kräften bei den Zusammenstößen von Atomen wirken. Zu den Parametern gehören die Verschiebungsenergie, die Volumenbindungsenergie und die Oberflächenbindungsenergie. Außerdem muss ein weiterer Parameter bestimmt werden, die sogenannte *cut-off*-Energie, die einen Schwellwert für die Verfolgung der Atome in der Stoßkaskade darstellt. Die Verschiebungsenergie spielt keine Rolle, falls das Sputtern das Ziel der Simulation ist, deshalb wird sie an dieser Stelle nicht diskutiert. Die Volumenbindungsenergie stellt eine Energie dar, die beim Lösen eines Atoms aus seinem Platz im Festkörper verbraucht wird. Bei kristallinen Materialien kann diese Energie als die Erhöhung des Gesamtpotentials des Festkörpers durch die Entstehung einer Leerstelle im Gitternetz definiert werden. Diese Energie beträgt für Metalle ~ 1 eV, für SiC ~ 2.5 eV [Hua94]. Allerdings wird dieser Parameter in den Simulationen von Sputterprozessen häufig vernachlässigt. Mit der Anwendung von Volumenbindungsenergie in den MC-Simulationen fällt die Sputterausbeute generell niedriger aus. Der Kernparameter für die Simulation der Sputterprozesse ist die Oberflächenbindungsenergie. Diese Energie stellt so wie in der Theorie eine planare Potentialbarriere für das Austreten der Atome aus dem Festkörper dar. Im Gegensatz zur Theorie

berücksichtigen die Simulationsprogramme die Energieverluste durch Wechselwirkungen der Atome mit den Elektronen, das s.g. elektronische Bremsen.

2.5 Zusammenfassung

In diesem theoretischen Kapitel wurden neben dem Augerprozess und den Grundlagen der quantitativen AES zwei weitere Gebiete behandelt, die Faktorenanalyse und die Sputtertheorie. Die Faktorenanalyse wurde anhand geometrischer Darstellungen erklärt und ihre Anwendung in der AES diskutiert. Es wurde gezeigt, dass der Einsatz der Faktorenanalyse bei der Auswertung von differenzierten Auger-Spektren erlaubt ist. Die Frage der Normierung der Spektren vor der Analyse wurde sowohl für direkte als auch für differenzierte Spektren behandelt. Am Ende des Beitrages zur Faktorenanalyse wurde eine Warnung vor der Verkettung der Spektren vor der Analyse ausgesprochen. Im letzten Kapitelabschnitt wurde die Sigmundsche Theorie des Sputterns vorgestellt. Hier wurde unter Berücksichtigung des korrigierten Verlaufs der nuklearen Bremsstärke für das Born-Mayer-Potential eine neue Formel für die Berechnung der Sputterausbeuten abgeleitet. Weiterhin wurden die Erweiterungen der Sputtertheorie für niedrigere Ionenenergien und unterschiedliche Einfallswinkel des Ionenstrahls vorgestellt. Zum Schluss wurden kurz die Konzepte für die Simulation von Sputtern erläutert. Die in diesem Kapitel vorgestellten theoretischen Grundlagen bilden die Basis für die Auswertung und die Interpretation der experimentellen Daten in den folgenden drei Kapiteln.

3. Quantitative AES von SiC

AES-Messungen an Siliziumkarbid werden schon seit mehr als 20 Jahren durchgeführt. Trotzdem sind die Ergebnisse verschiedener Autoren teilweise sehr widersprüchlich. Bei der quantitativen Analyse mittels oberflächenempfindlicher Methoden wie AES oder XPS spielt das natürliche Oxid, das nach dem Luftkontakt immer an der SiC-Oberfläche präsent ist, eine wichtige Rolle. Die Entfernung dieses Oxides erfolgt in der Regel durch Sputtern mittels Edelgasen. Durch das Sputtern der Oberfläche werden ihre Eigenschaften im Vergleich zu den *in vacuo* präparierten Oberflächen (rekonstruierte Oberflächen) in der Regel verändert. Insbesondere Veränderungen in der Zusammensetzung der Oberfläche durch Vorzugseffekte werden erwartet (s. Kap. 5.2). Quantitative AES-Analysen von SiC-Oberflächen, die mit Ionenstrahlen gereinigt wurden, ergaben eine Anreicherung der Oberfläche mit Silizium, unveränderte stöchiometrische SiC-Oberflächen und auch eine Kohlenstoff-Anreicherung an der Oberfläche. Eine Übersicht der Literaturdaten bietet Tabelle 3.1. In diesem Kapitel wird gezeigt, dass die meisten AES-Ergebnisse auf einer falschen Quantifizierungsmethode basieren.

Für das Experiment wurde das Tiefenprofil einer SiC/Si-Heterostruktur (95 nm 3C-SiC auf Si) in einem Augerspektrometer VG Microlab 350 gemessen, die Messung wurde bei VG/East Grinstead durchgeführt. Die Energie des Primärelektronenstrahles mit einem Strom von 10 nA betrug 10 keV. Der Elektronenstrahl fiel während der Messung senkrecht auf die Probe. Das Spektrometer war mit einem Halbkugelanalysator ausgestattet, die Energieauflösung betrug 0.05% und die Position 60° zur Probennormale. Das Sputtern wurde mittels einer VG EX5-Ionenkanone durchgeführt, der Einfallswinkel des Ionenstrahls betrug 68° zur Probennormale. Der Ionenstrahl wurde über eine Fläche von ca. 3 mm² gerastert. Die Energie der Ionen betrug 1 keV, der Gesamtionenstrom, gemessen auf der Probe, war 1.6 µA. Die Probe rotierte während des Sputterns mit einer Frequenz von 6 Umdrehungen pro Minute. Die Tiefenprofilierung wurde im sequentiellen Modus durchgeführt, d.h. abwechselnd Abtrag mit dem Ionenstrahl und Analyse mit dem Elektronenstrahl (s. Abb. 2.10). Die in diesem Kapitel diskutierten SiC-Spektren stammen von dem Gebiet ca. 10 nm vor der SiC/Si-Grenzfläche, die im Substrat gemessenen Spektren wurden für die Auswertung des reinen Siliziums eingesetzt.

Tab. 3.1 Zusammenstellung der Literaturangaben zum Einfluss des Sputterns auf die Zusammensetzung der SiC-Oberfläche.

Material	Ionen, Energie, α	Methode	Ergebnisse	Referenz
Einkristall (0001)	H ⁺ , He ⁺ 1 ÷ 5 keV	AES	Si-Anreicherung	[Fuk84]
3C (100)	Ar ⁺ 1 ÷ 5 keV	AES pph	Si-reiche Spektren	[Bel86]
6H	Ar ⁺ , 3 keV, 75°	AES <i>pph</i> , $(p-b)w^2$, eigene Referenzspektren von Si und C	starke C-Anreicherung, wenn <i>pph</i> verwendet, schwache C-Anreiche- rung bei Anwendung der $(p-b)w^2$ Intensitäten	[Jør90]
n-Typ β (100)	Ar ⁺ 0.8 ÷ 5 keV	AES <i>pph</i> , Empfindlich- keitsfaktoren aus der Literatur	C-Anreicherung	[Bec97]
n type 6H (0001)	Ne ⁺ 3 keV	EAES <i>pph</i> PAES* Integral der gesam- ten Direktspektren	C-Anreicherung (gemessen mittels elektronenangeregter AES) Si-Anreicherung (aus der positro- nenangeregten AES)	[Nan02]
Einkristall (100)	Ar ⁺	AES <i>pph</i>	C-angereichert (bei Anwendung des Si(LVV)/C-Verhältnisses) Stöchiometrisch (bei Anwendung des Si(KLL)/C-Verhältnisses)	[Ke96]
SiC _x sputterab- geschieden	Ne ⁺ 1 keV	AES <i>pph</i>	bevorzugter Abtrag von Si	[Mor85]
SiC _x :H CVD	Ar ⁺ 1 keV	XPS	stöchiometrisch	[Lee80]

6H (0001)	He ⁺ , Ne ⁺ , Ar ⁺ , Xe ⁺ 0.2 ÷ 2 keV	AES <i>p-ph</i>	C-angereichert bei niedrigen Energien, fast stöchiometrisch bei 1.5 keV, unterschiedliche Anreicherungsgrade bei unterschiedlichen Kristallpolaritäten	[Bat03]
n-Type β (100)	Ar ⁺ 1, 2 keV	AES <i>p-ph</i> Empfindlichkeitsfaktoren aus der Literatur	Si-Anreicherung	[Miz86]
n-Type 6H	Ar ⁺ 3.5 keV, 30°	XPS	leichte Si-Anreicherung aus der XPS-Quantifizierung, aber die winkelaufgelösten Messungen zeigen keine Anreicherung	[Osw99]
Mischung 15R + 6H (0001)	Ar ⁺ 1 keV	AES, XPS	stöchiometrisch	[Mue86]
Si _{1-x} C _x LPCVD	Ar ⁺ 5 keV, 75°	AES <i>(p-b)</i> , <i>(p-b)w²</i>	kein bevorzugter Abtrag (innerhalb einer Genauigkeit von 10%)	[Gal93]
3C, 6H	Ar ⁺ 0.5 ÷ 5 keV, 45°, 60°, 80°	AES <i>p-ph</i>	C-Anreicherung (verglichen mit der TRIM -Simulation)	[Pez95, Eck99]

* PAES (positronangeregte AES) misst nur die oberste Atomlage des Festkörpers.

3.1 Si(LVV)-Augerspektren

Für die Berechnung der Konzentration von Silizium wird hier der Ansatz von Jørgensen und Morgen [Jør90] benutzt. Diese Autoren haben die AES-Messungen an SiC an einzelnen Augerübergängen mit Hilfe von elementaren Referenzmaterialien (Si-Substrat und Graphit) quantifiziert. Ihr Ansatz kann durch die modifizierte Gleichung 2.4 beschrieben werden:

$$\frac{I_{Si}^{SiC}}{I_{Si}^{Si}} = \frac{N_{Si}^{SiC}}{N_{Si}} \frac{[1 + r_{SiC}(E)] \lambda_{SiC}(E)}{[1 + r_{Si}(E)] \lambda_{Si}(E)}, \quad (3.1)$$

wobei $N_{Si} = 49 \text{ at/nm}^3$ die atomare Dichte des Siliziums und $N_{SiC} = 48 \text{ at/nm}^3$ die atomare Dichte des Siliziums in Siliziumkarbid ist. Die Dämpfungslängen λ_{Si} und λ_{SiC} werden für die Energie 90 eV (entsprechend dem Si(LVV)-Augerübergang) aus den Gleichungen 2.9 und 2.10 berechnet. Für die Anzahl der Valenzelektronen $N_V = 4$, $\rho_{Si} = 2.3 \text{ g/cm}^3$, $\rho_{SiC} = 3.2 \text{ g/cm}^3$, $M_{Si} = 28$ und $M_{SiC} = 20$ erhält man:

$$\lambda_{Si}(90 \text{ eV}) = 0.37 \text{ nm}$$

und $\lambda_{SiC}(90 \text{ eV}) = 0.40 \text{ nm}$.

Da die Spektren für SiC von einer Schicht mit einer Dicke von ca. 10 nm auf Si-Substrat stammen, wird der Einfluss des Rückstreufaktors auf die Quantifizierung ausgeschlossen. Die atomare Konzentration von Silizium in SiC, ermittelt aus der Analyse der Si(LVV)-Augerspektren, kann als:

$$N_{Si}^{SiC} = 0.925 N_{Si} \frac{I_{Si}^{SiC}}{I_{Si}^{Si}} \quad (3.2)$$

berechnet werden. Die folgende Aufgabe besteht in der Bestimmung des Augersignals I . Die Augerspektren wurden im direkten $EN(E)$ -Modus aufgenommen. Daraus ergibt sich die Möglichkeit, unterschiedliche Quantifizierungsverfahren sowohl an den direkten als auch an differenzierten Spektren durchführen und vergleichen zu können.

Abb. 3.1a zeigt Augerspektren von Silizium, die während der Tiefenprofilierung der SiC-Schicht aufgenommen wurden. Hier werden die Spektren in der $EN(E)$ -Darstellung gezeigt, so wie sie gemessen wurden. Diese Spektren wurden rechnerisch differenziert und die differenzierten Spektren in Abb. 3.1b dargestellt. Um den Einfluss der Multiplikation der Spektren mit der Energie E zu bestimmen, wurden die $EN(E)$ -Spektren durch die kinetische

Energie E dividiert. Die korrigierten Spektren wurden anschließend wiederum differenziert. Die korrigierten $N(E)$ -Spektren sind zusammen mit ihrer differenzierten Form $dN(E)/dE$ in Abb. 3.2 präsentiert.

Zunächst wurden die differenzierten Spektren der quantitativen Analyse unterzogen. Die zur Quantifizierung notwendigen Größen werden in Abb. 3.1b eingeführt. Für die Auswertung wurden drei Größen eingesetzt: die Peak-zu-Peak-Höhe (pph), die Höhe des negativen Peakteils bezogen auf den Untergrund ($p-b$) und das Produkt des ($p-b$)-Wertes mit dem Quadrat der Peakbreite w ($(p-b)w^2$). Diese Größen wurden in Gl. 3.2 an Stelle der Augersignale I eingesetzt. Die Quantifizierungsgrößen und -ergebnisse sind in Tab. 3.2 und 3.3 zusammengefasst.

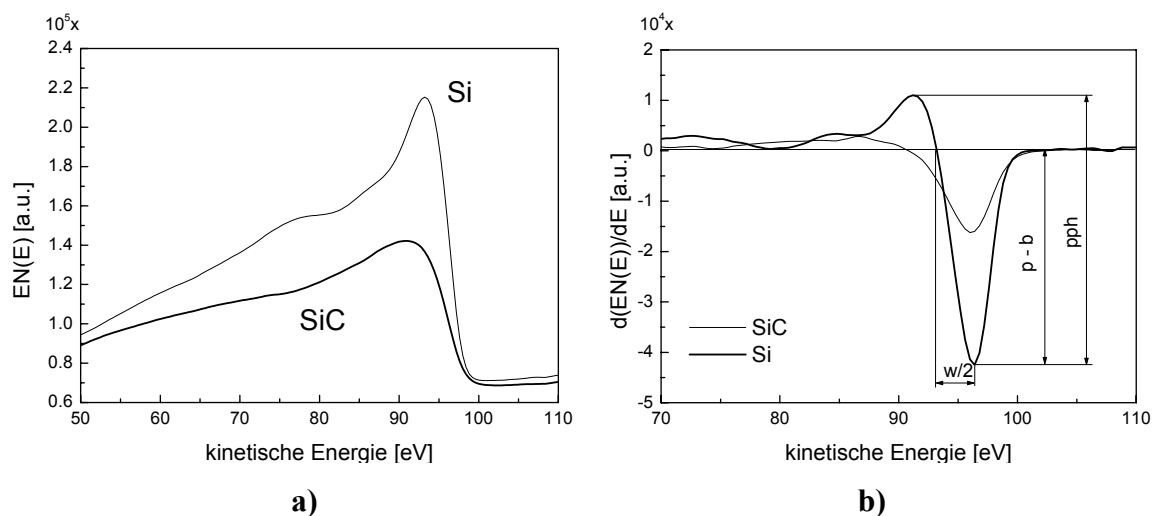


Abb. 3.1 Direkte Spektren der Si(LVV)-Augerübergänge gemessen an Si und SiC in der $EN(E)$ -Form (a) und ihre Differenzierung (b).

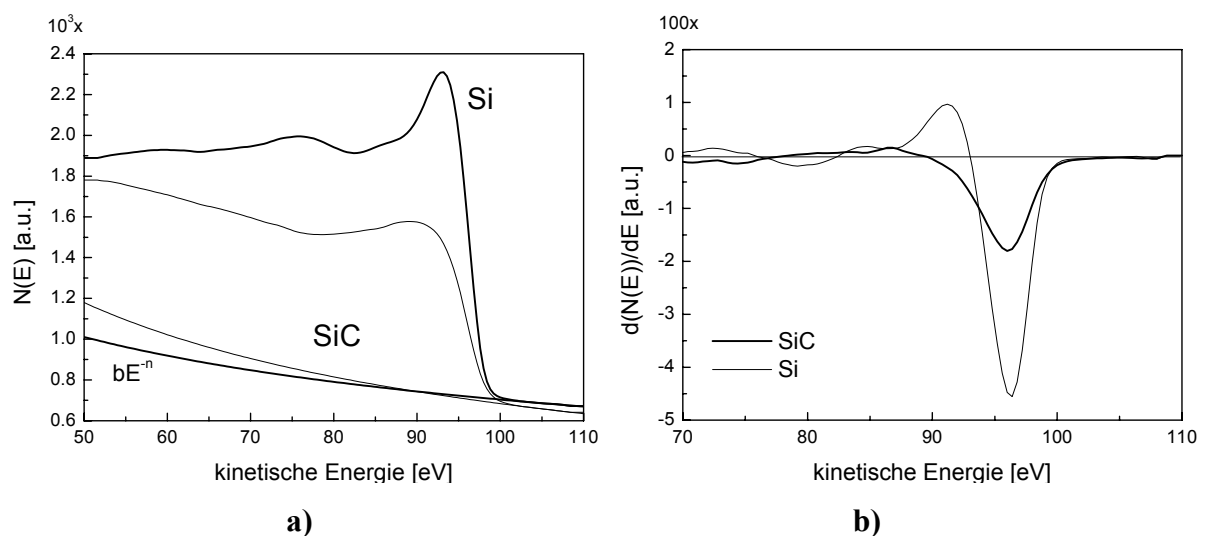


Abb. 3.2 Direkte Spektren der Si(LVV)-Augerübergänge gemessen an Si und SiC in der $N(E)$ -Form (a) und ihre Differenzierung (b). Die direkten Spektren wurden durch Dividieren der Spektren in Abb. 3.1a durch die kinetische Energie E erzeugt.

$\frac{d(EN(E))}{dE}$	I_{Si}			
	pph [a.u.]	(p-b) [a.u.]	w/2 [eV]	(p-b)·w ² [a.u.]
SiC	19250	16200	5.5	1.96·10 ⁶
Si	53500	42100	3.2	1.72·10 ⁶
N_{Si}^{SiC} [at/nm ³]	16.3	17.4		51.6

Tab. 3.2 *Quantitative Auswertung der differenzierten Si(LVV)-Augerspektren in $\frac{d(EN(E))}{dE}$ -Form mittels verschiedener Methoden.*

	$\frac{d(N(E))}{dE}$				N(E)	
	pph [a.u.]	(p-b) [a.u.]	w/2 [eV]	(p-b)·w ² [a.u.]	Fläche (Halbpeak) [a.u.]	Fläche (SE+Shirley) [a.u.]
SiC	194	180	6.4	29.5·10 ³	4438	5273
Si	551	454	3.4	21.0·10 ³	4821	6748
N_{Si}^{SiC} [at/nm ³]	15.9	17.9		63.7	41.7	35.4

Tab. 3.3 *Quantitative Auswertung der differenzierten Si(LVV)-Augerspektren in der $\frac{d(N(E))}{dE}$ -Form und der direkten N(E)-Spektren mittels verschiedener Methoden. Die Bezeichnung „Fläche (Halbpeak)“ steht hier für die Flächenbestimmung wie sie in Abb. 3.3a durchgeführt wurde. Die Bezeichnung „Fläche (SE+Shirley)“ steht für die Auswertung nach dem Abzug vom Untergrund der Sekundärelektronen und der inelastisch gestreuten Augerelektronen mittels der Shirley-Methode.*

Aus den Tabellen 3.2 und 3.3 ist ersichtlich, dass die Nutzung der pph - und $(p-b)$ -Werte zu einer scheinbar stark an Si verarmten SiC-Oberfläche führt ($\sim 17 \text{ at/nm}^3$). Dies ändert sich, wenn man die $(p-b) \cdot w^2$ Werte für das Augersignal I_{Si} einsetzt. Bei dieser Auswertung zeigten sich allerdings Unterschiede zwischen der Auswertung der $d(EN(E))/dE$ - und der Auswertung der $d(N(E))/dE$ -Spektren. Während die $d(EN(E))/dE$ -Spektren eine atomare Konzentration von 51.6 at/nm^3 ergeben, erhält man mit $d(N(E))/dE$ einen Wert von 63.7 at/nm^3 . Diese Differenz entsteht aufgrund unterschiedlicher Verschiebungen der Maxima der Si-Peaks in Si und SiC, nachdem die $EN(E)$ -Spektren in die $N(E)$ -Form umgewandelt wurden. Diese Verschiebungen betragen 0.9 eV für SiC und nur 0.2 eV für Si. Eine Verschiebung der Wendepunkte an der hochenergetischen Seite beider Spektren, die den Minima in den differenzierten Spektren entsprechen, war nicht zu beobachten. So entspricht die Verschiebung der Maxima in den direkten Spektren genau der Erhöhung der Peakbreite w in der differenzierten Form.

Die quantitative Analyse der direkten Spektren kann an den gemessenen und unbehandelten Spektren durchgeführt werden oder an Spektren nach der Eliminierung des Untergrunds. Vor der Untergrundsubtraktion werden die Spektren in die $N(E)$ -Form umgerechnet. Dies ist aber nicht die Regel, weil z.B. für den Untergrundabzug nach Tougaard [Tou88] die $EN(E)$ -Form verlangt wird. Nach Abzug des Untergrunds kann der Augerelektronenstrom direkt durch Integration über den Augerpeak ermittelt werden. Der Untergrund in den Augerspektren besteht aus drei Teilen: dem Beitrag der echten Sekundärelektronen, dem Beitrag der inelastisch gestreuten Primärelektronen und dem Beitrag der inelastisch gestreuten Augerelektronen. Der zweite Beitrag ist in der Region um 100 eV vernachlässigbar. Das Spektrum der echten Sekundärelektronen kann mit bE^{-n} gefittet werden [Sic77]. Abb. 3.2a zeigt die Spektren und die Beiträge der Sekundärelektronen zu den Augerspektren von Silizium in Si und SiC im Energiebereich zwischen 50 eV und 110 eV . Die Fitprozeduren mit der Funktion bE^{-n} wurden an den hochenergetischen Seiten der Spektren durchgeführt. Nachdem die Untergrundspektren, die den Kaskaden der echten Sekundärelektronen zuzuordnen sind, von den gemessenen Spektren subtrahiert wurden, gelangt man zu Si(LVV)-Spektren, die aus dem Original-Augerelektronenspektrum und dem Beitrag der inelastisch gestreuten Augerelektronen bestehen (Abb. 3.4a). Aus diesen korrigierten Spektren ergibt sich eine Möglichkeit der Quantifizierung, die die Idee der Auswertung mittels $(p-b)w^2$ im differenzierten Modus übernimmt. Als Augersignal kann die Fläche unter dem Halbpeak an der hochenergetischen Seite benutzt werden (Abb. 3.3b). Diese Auswertung ergibt eine Verarmung der Oberfläche an Silizium (41.7 at/nm^3). Dies steht im Gegensatz zur Auswertung der differenzierten Spektren mittels der $(p-b)w^2$ -Methode, die eine Anreicherung von Silizium in SiC mit einer atomaren

Dichte von 63.7 at/nm^3 ergab (Tab. 3.3). Der Grund dafür ist der Fakt, dass eine Bedingung für die Auswertung mit der $(p-b)w^2$ -Methode nicht erfüllt wurde. Bei der Auswertung mittels der $(p-b)w^2$ -Methode wird vorausgesetzt, dass die Auswertung an solchen Spektren durchgeführt wird, die mit der gleichen Funktion beschrieben werden können. Dies ist aber nicht der Fall bei den Siliziumspektren, die von Siliziumeinkristall und SiC stammen, was an der Form der negativen Teile der Spektren im differenzierten Modus zu erkennen ist. Deswegen erweisen sich alle Auswertungsmethoden im differenzierten Modus als stark fehlerbehaftet und damit ungeeignet zur absoluten Quantifizierung von Si in SiC mit Hilfe des Si(LVV)-Augerspektrums.

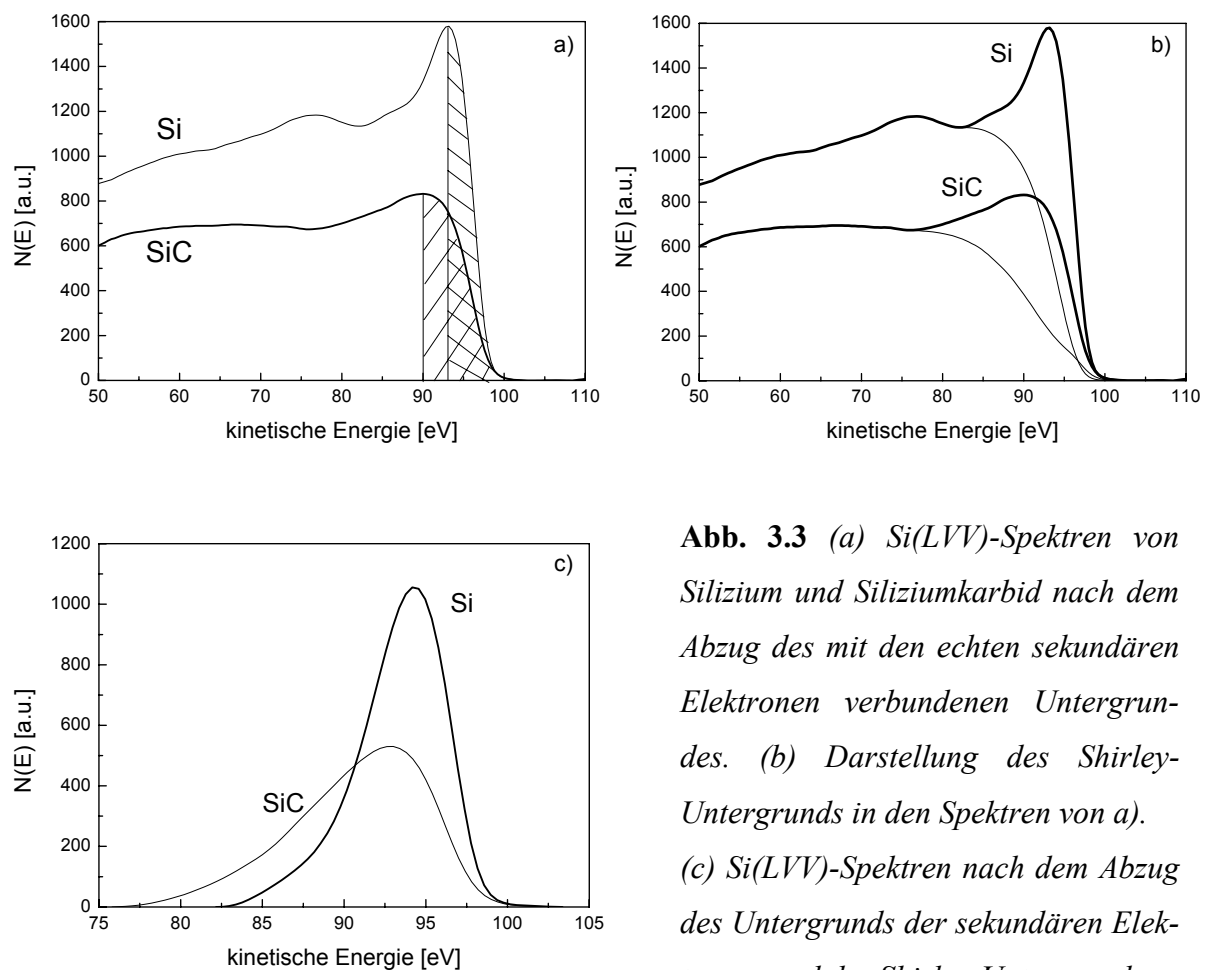


Abb. 3.3 (a) Si(LVV)-Spektren von Silizium und Siliziumkarbid nach dem Abzug des mit den echten sekundären Elektronen verbundenen Untergrundes. (b) Darstellung des Shirley-Untergrunds in den Spektren von a). (c) Si(LVV)-Spektren nach dem Abzug des Untergrunds der sekundären Elektronen und des Shirley-Untergrunds.

Der Abzug des von den inelastisch gestreuten Augerelektronen stammenden Untergrunds ist jedoch schwieriger als bei dem Sekundärelektronenuntergrund, insbesondere bei den Augerübergängen, die das Valenzband involvieren. Die beste Methode zur Trennung des Augersignals von seinem inelastischen Untergrund verlangt nach einer zusätzlichen Messung der Verlustfunktion mittels Elektronenverlustspektroskopie. Durch die Entfaltung des Augerspektrums mit der Verlustfunktion kann das wirkliche Augerspektrum vom inelastischen

Untergrund getrennt werden. Eine einfachere Möglichkeit, die zum Abzug des inelastischen Untergrunds angewandt werden kann, ist die Methode von Shirley [Shi72]. Diese Methode basiert auf der Annahme, dass der Untergrund die Integralform des wirklichen Spektrums besitzt. Diese Methode wurde auch hier eingesetzt. Abb. 3.3b präsentiert die Untergrundkorrektur nach Shirley, die an den hinsichtlich der Sekundärelektronen korrigierten Spektren durchgeführt wurde. Die aus diesen Korrekturen resultierenden Spektren sind in Abb. 3.3c dargestellt. Derselben Vorgehensweise beim Untergrundabzug von Si(LVV)-Augerspektren, gemessen an Si und SiC, bedienten sich auch Gat et al. [Gat93]. Die in Abb. 3.3c abgebildeten, hinsichtlich des Untergrunds korrigierten Spektren stimmen mit denen von Gat et al. gut überein. Wenn wir das Si(LVV)-Augerspektrum von SiC nach der Shirley-Korrektur mit einem mittels Verlustfunktion korrigierten Augerspektrum [DeS93] vergleichen, werden wir keine deutlichen Unterschiede erkennen. Im Fall des reinen Siliziums weist das nach Shirley korrigierte Spektrum kleine Abweichungen im Bereich um 87 eV im Vergleich zum mittels Verlustfunktion korrigierten Augerspektrum auf [Hou77]. Aus diesem Vergleich geht hervor, dass das nach Shirley korrigierte Si(LVV)-Spektrum eine kleinere Fläche als das mit der Verlustfunktion korrigierte Spektrum ergibt, demzufolge ist auch das daraus resultierende Augersignal kleiner.

Aus den Flächen unter den hinsichtlich des Untergrunds korrigierten Spektren ergibt sich eine siliziumverarmte SiC-Oberfläche mit einer Konzentration der Si-Atome von 35.4 at/nm^3 . Anhand der Ungenauigkeit beim Untergrundabzug im Falle von reinem Silizium kann man von einer noch stärkeren Verarmung der SiC-Oberfläche an Silizium ausgehen.

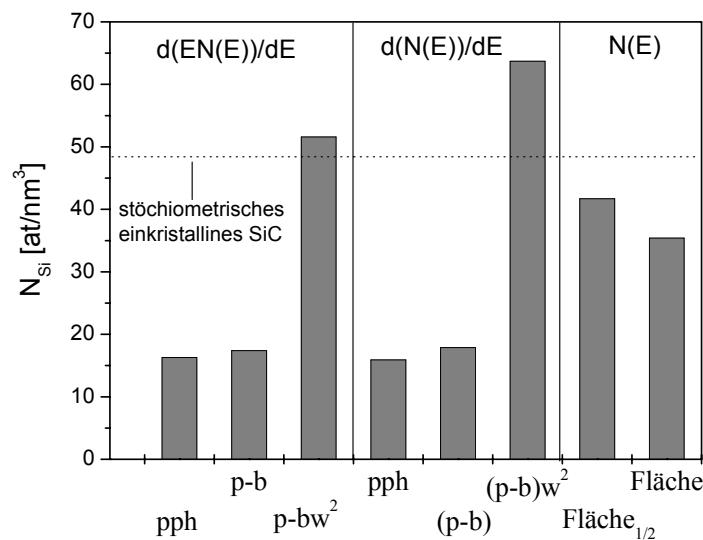


Abb. 3.4 Zusammenfassung der mit unterschiedlichen Methoden berechneten Si-Konzentration an der SiC-Oberfläche nach der Auswertung der Si(LVV)-Augerspektren. ‚Fläche_{1/2}‘ steht für die Bestimmung der Intensität nach Abb. 3.3c.

3.2 Si(KLL)-Augerspektren

Die Quantifizierung der Si(KLL)-Augerspektren erfolgte in der gleichen Form wie die der Si(LVV)-Spektren. Zunächst musste die Dämpfungslänge neu berechnet werden. Für die Energie von 1615 eV erhält man aus den Gleichungen 2.9 und 2.10 folgende Werte für die Dämpfungslänge:

$$\lambda_{\text{Si}}(1615 \text{ eV}) = 3.2 \text{ nm}$$

und $\lambda_{\text{SiC}}(1615 \text{ eV}) = 3.0 \text{ nm}$.

So kann die Gleichung 3.2 für den KLL-Übergang neu geschrieben werden:

$$N_{\text{Si}}^{\text{SiC}} = 1.07 N_{\text{Si}}^{\text{Si}} \frac{I_{\text{Si}}^{\text{SiC}}}{I_{\text{Si}}^{\text{Si}}} . \quad (3.3)$$

Abb. 3.5 zeigt die Si(KL_{2,3}L_{2,3})-Augerspektren gemessen an Silizium und SiC. Die hohe Energieauflösung des Analysators ermöglichte die Trennung des ¹S-Überganges vom Hauptübergang ¹D. Für die quantitative Analyse ist jedoch der Hauptübergang repräsentativ und wird hier analysiert. Die Spektren in Abb. 3.5 werden in der N(E)-Form dargestellt. Diese Spektren wurden rechnerisch differenziert (Abb. 3.6), um sie weiter auszuwerten. Die (KLL)-Spektren wurden mit einigen Abweichungen im Vergleich zur Auswertung des Si(LVV)-Spektrums behandelt. Die Weite der Spektren im differenzierten Modus wurde aus dem Abstand zwischen Maximum und Minimum bestimmt. Da es sich um sehr schmale Peaks handelt, werden die Weiten mit der Fehlerangabe ± 0.125 eV angegeben, welche dem Abstand zwischen den einzelnen Messpunkten entspricht. Der Untergrund bei den N(E) Spektren wurde nur mit der Shirley-Methode berechnet. Die daraus resultierende Spektren sind in Abb. 3.6 dargestellt.

Ähnlich wie bei der Auswertung der Si(LVV)-Spektren erhält man auch bei der Auswertung der differenzierten Si(KLL)-Spektren mittels *pph* und der (*p-b*)-Werte eine stark Si-verarmte SiC-Oberfläche (Tab. 3.4). Wird die Peakbreite *w* einbezogen, geht die Silizium-Verarmung in eine Anreicherung über, aber der Ungenauigkeitsfaktor ist aufgrund der schmalen Peaks sehr hoch (± 25%). Die Auswertung der Flächen unter den Spektren nach dem Abzug des Untergrunds ergibt eine, in Bezug auf einkristallines, unzerstörtes und adsorbatfreies Material, an Silizium verarmte SiC-Oberfläche (39.7 at/nm³, s. Tab. 3.4). Die hier nachgewiesene Si-Verarmung fällt nicht so stark aus wie die, die aus der Auswertung der Si(LVV)-Peaks hervortrat. Da die Si(KLL)-Augerelektronen eine größere Informationstiefe als die Si(LVV)-

Augerelektronen besitzen, kann diese Differenz als eine stärkere Si-Verarmung direkt an der SiC-Oberfläche interpretiert werden.

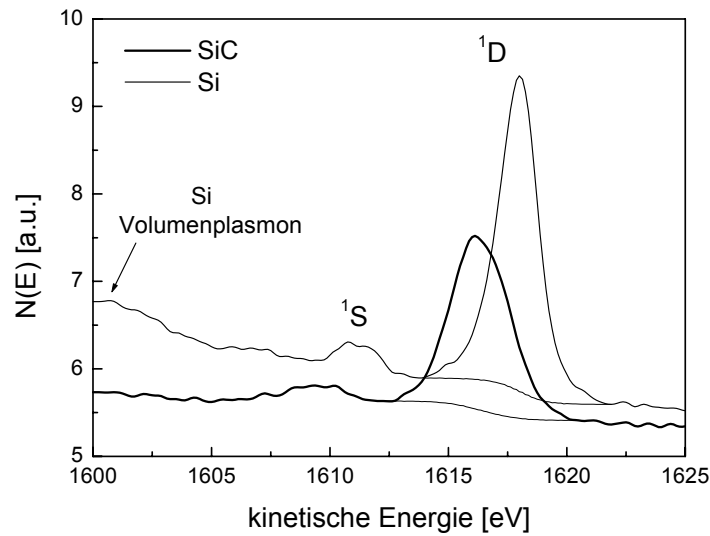


Abb. 3.5 *Si(KLL)-Augerspektren gemessen an SiC und Si mit einer hohen Energieauflösung des Analysators (0.05%). In beiden Spektren sind sowohl der Hauptpeak des $(KL_{2,3}L_{2,3})$ -Augerüberganges 1D als auch der kleine Vorpeak 1S zu erkennen. Die Erhebung um 1600 eV im Falle des reinen Siliziums wird durch das Volumenplasmon verursacht. Die Linien unterhalb der Hauptpeaks stellen den Shirley-Untergrund dar.*

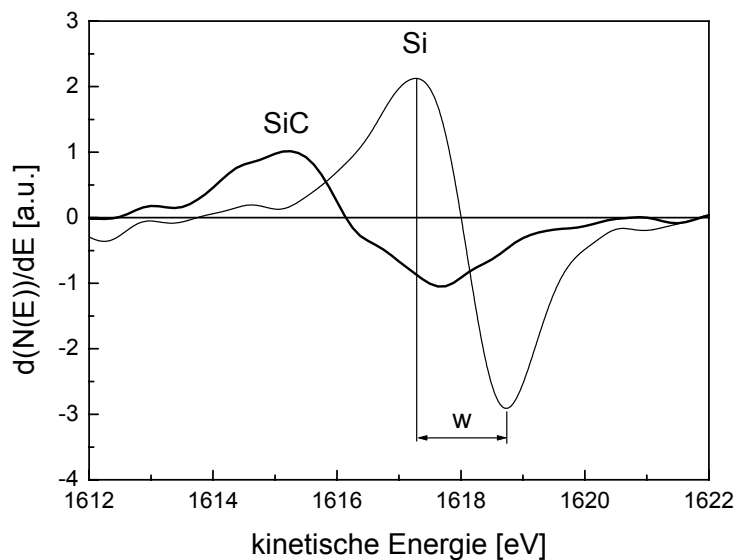


Abb. 3.6 *Differenzierte 1D -Peaks der $Si(KL_{2,3}L_{2,3})$ -Augerübergänge für die quantitative Auswertung.*

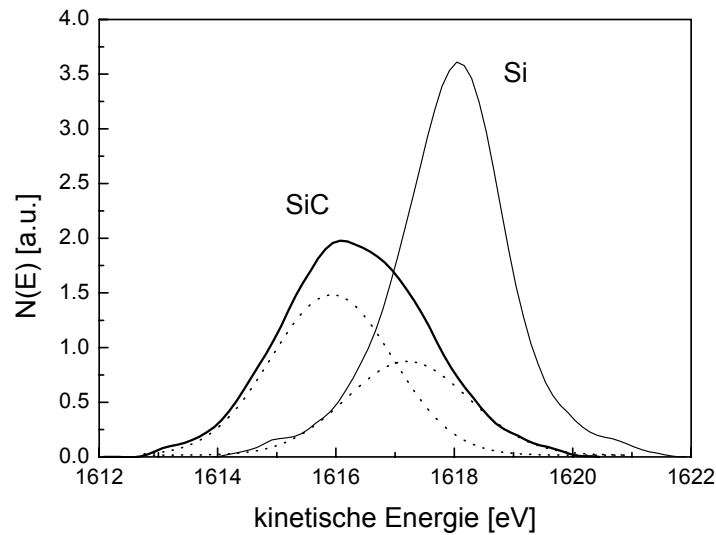


Abb. 3.7 Details der ^{1}D -Augerpeaks des $Si(KL_{2,3},L_{2,3})$ -Augerübergangs nach dem Untergrundabzug. Es ist ersichtlich, dass der an SiC gemessene Peak eine Überlagerung zweier separater Peaks darstellt. Diese zwei Peaks deuten auf zwei unterschiedliche Zustände der Si-Atome in der Oberflächenregion des SiC nach dem Sputtern hin (s. Kap. 5.3).

	$\frac{d(N(E))}{dE}$				N(E)
	p-ph	(p-b)	w	(p-b) w^2	Fläche [a.u.]
SiC	2.15	1.09	2.5 ± 0.125	6.81 ± 0.70	6.13
Si	5.11	3.00	1.5 ± 0.125	6.75 ± 1.14	8.09
N_{Si}^{SiC} [at/nm 3]	22.1	19.4		52.9 ± 13.2	39.7

Tab. 3.4 Quantitative Auswertung der differenzierten und direkten $Si(KL_{2,3},L_{2,3})$ -Augerspektren.

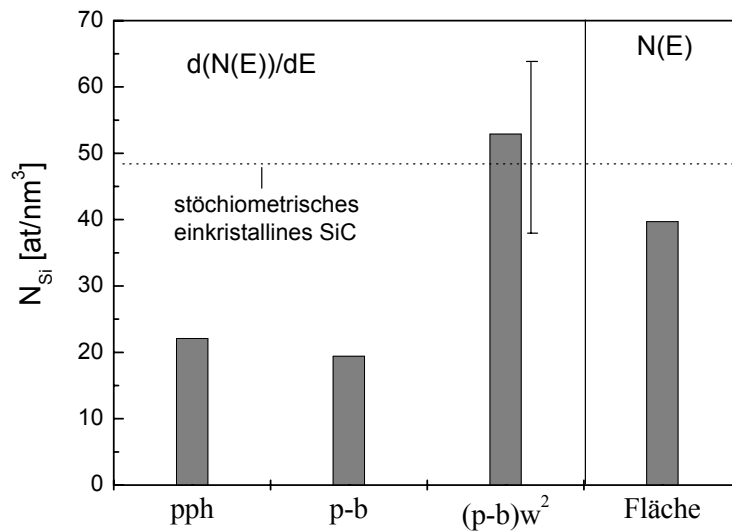


Abb. 3.8 Zusammenfassung der mit unterschiedlichen Methoden berechneten Si-Konzentration an der SiC-Oberfläche nach der Auswertung der Si(KLL)-Augerspektren.

3.3 Vergleich mit den Ergebnissen aus der Literatur

Tabelle 3.1 enthält einen Überblick der Ergebnisse zum Einfluss des Ionensputterns auf die Zusammensetzung der SiC-Oberflächen. Leider wurden bei mehreren Arbeiten die Einfallswinkel des Ionenstrahls nicht angegeben, so dass ein genauer Vergleich der Ergebnisse erschwert ist. Außer den Ergebnissen der XPS-Analyse, die sich auf die Fläche unter den jeweiligen Rumpfniveaueaks beziehen, wurden alle AES-Experimente mittels *pph*-Intensitäten in differenzierten Spektren ausgewertet. Ausnahmen bilden die Arbeiten von Jørgensen und Morgen [Jør90] und Gale [Gal93], die sich auch der $(p-b)w^2$ -Methode bedienen. Besonders die Arbeit von Jørgensen und Morgen ist interessant, weil sie sich mit dem Einfluss der Auswertungsmethoden auf die Ergebnisse der quantitativen Analyse von SiC-Oberflächen befasst. In dieser Arbeit wurden, so wie in der hier vorliegenden, einzelne Augerübergänge (Si(LVV) und C(KVV), nicht Si(KLL)) ausgewertet. In den restlichen Arbeiten wurden die Konzentrationen von Si und C mit Hilfe der Gleichung 2.7 oder mittels Elementempfindlichkeitsfaktoren bestimmt. Bei einer solchen Auswertung tritt sowohl bei Silizium als auch bei Kohlenstoff ein Fehler auf, so dass sich diese Fehler gegenseitig eliminieren. Demnach können die in dieser Arbeit präsentierten Ergebnisse nur mit den Ergebnissen von Jørgensen und Morgen direkt verglichen werden. Nach der Auswertung mittels *pph*-Intensitäten erhielten sie für das Si(LVV)-Spektrum eine Siliziumkonzentration von 16 at/nm³ (16.3 at/nm³ in dieser

Arbeit), während sie nach der Korrektur durch die Verwendung von $(p-b)w^2$ Intensitäten auf 47.2 at/nm^3 (51.6 at/nm^3 in dieser Arbeit) kamen.

Die in diesen Kapiteln belegte Verarmung der SiC-Oberfläche an Si erhält einen anderen Grad, wenn man die Volumenvergrößerung und die damit verbundene Dichtesenkung in Betracht zieht. SiC wird durch Ionensputtern amorphisiert und die SiC-Massendichte kann dadurch von 3.2 gcm^{-3} bis auf 2.8 gcm^{-3} sinken [Hee97]. Dieser Effekt ist bei reinem Silizium vernachlässigbar [Hee97]. Das Ergebnis der quantitativen Analyse des Si(KLL)-Peaks von 39.7 at/nm^3 erscheint in Bezug auf amorphisiertes Material nur als eine leichte Si-Verarmung von 47.6%, für Si(LVV) ergibt sich demnach 42.1% Silizium an der SiC-Oberfläche nach dem Sputtern mit Ar^+ -Ionen unter 68° .

3.4 Zusammenfassung

Die quantitative Analyse der Si(LVV) und $-(\text{KL}_{2,3}\text{L}_{2,3})$ -Augerspektren hat gezeigt, dass es mehrere, unterschiedlich geeignete Verfahren zur Berechnung des Augersignals aus den gemessenen Spektren gibt. Diese unterscheiden sich hinsichtlich Aufwand, Genauigkeit und Leistungsfähigkeit. Die Auswertung ergab, dass die Anwendung von differenzierten Spektren für die Quantifizierung der Augersignale von SiC irreführend ist, wenn man die atomare Konzentration bestimmt. Dennoch kann man in anderen Fällen die differenzierten Spektren zur Auswertung der relativen Veränderungen sicher heranziehen, solange es zu keinen Peakformänderungen kommt. Die unter den gegebenen experimentellen Bedingungen gesputterte und gemessene SiC-Oberfläche erwies sich als Si-verarmt.

4. Abtragsraten und Sputterausbeuten für SiC

Die Messung der Abtragsraten und der damit verbundenen Sputterausbeuten für SiC, die durch den Beschuss mit Edelgasionen hervorgerufen werden, ist aus mehreren Gründen interessant. Zum Ersten sind diese Werte für die Technologie von Bedeutung, wo Edelgase zum Ätzen eingesetzt werden. Zum Zweiten wird SiC in Fusionsreaktoren genutzt [Rot76]. Dort wird es einer Teilchenstrahlung, vor allem von leichteren Elementen (H, D, He, Ne), ausgesetzt. Die Abtragsrate des Materials ist auch hier entscheidend, weil sie die Lebensdauer der Anlagen bestimmt. Zum Dritten ist die Kenntnis der Abtragsraten für die atomar-chemischen analytischen Methoden, die Ionenstrahlen zum Abtrag des Materials einsetzen, wichtig. Hier wird die Abtragsrate für die Bestimmung der gesputterten Tiefe und damit zur Berechnung von Konzentrationsstiefenprofilen benötigt. Bei Konzentrationsprofilen von Schichtfolgen ist die Kenntnis der Abtragsraten aller Schichten von Interesse, weil dadurch Aussagen über die Grenzflächen getroffen werden können (Grenzflächenrauheit, Diffusion) [Hof98]. Zum Vierten sind die experimentellen Werte der Sputterausbeuten sowohl für die Theorie als auch für die Simulationen von Ionen-Festkörper-Wechselwirkungen bedeutsam, weil nur eine Übereinstimmung zwischen Experiment und Theorie bzw. Simulation den letzteren den Gültigkeitsstatus verleiht.

4.1 Experimentelle Bestimmung der Sputterausbeuten

Die Sputterausbeute ist definiert als Anzahl der abgetragenen Atome aus dem Festkörper pro ein auf den Festkörper einfallendes Teilchen, in unserem Fall ein Ion. Deswegen ist es für ein präzises Experiment von Wichtigkeit, beide Mengen messen zu können, d.h. sowohl die Bestrahlungsdosis als auch die Menge des abgetragenen Materials. Die Bestrahlungsdosis oder das Produkt aus Ionenstromdichte und Bestrahlungszeit wird in den meisten Fällen mittels eines Faraday-Kollektors gemessen. Dabei ist bedeutsam, dass die effektive Fläche der Blende, die sich am Eingang des Kollektors befindet, bekannt ist. Wenn der Ionenstrahldurchmesser sehr groß gegenüber dem Blendendurchmesser ist, wird aus der Messung des Stroms und der Fläche der Blende die Ionenstromdichte berechnet. Für die Bestimmung des abgetragenen Materials können mehrere Methoden angewandt werden. Diese können in zwei Gruppen unterteilt werden: Messungen am Festkörper und das „Zählen“ des abgetragenen Materials. Zur ersten Methode gehören das Wiegen des Festkörpers vor und nach der Bestrahlung, die Messung der Dickenänderungen oder das Durchsputtern von dünnen Schichten. Die zweite Grup-

pe der Messungen beinhaltet statische und dynamische Techniken. Zu den letzteren gehört die Anwendung von kalibrierten Massenspektrometern. Statische Techniken verwenden das Einsammeln des abgetragenen Materials, dessen Menge anschließend bestimmt wird.

Um die Abtragsraten und die Sputterausbeuten von Siliziumkarbid zu erfassen, wurden Tiefenprofile einer heteroepitaktischen SiC-Schicht bekannter Dicke unter verschiedenen Beschussbedingungen gemessen. Diese Schicht wurde mittels Molekularstrahlepitaxie auf Si-Substrat aufgewachsen [Pez01]. Als Sputtergase wurden Neon, Argon und Xenon benutzt. Die Beschussenergie variierte von 500 eV bis 5 keV. Die Winkelabhängigkeit der Sputterausbeute wurde für den Beschuss mit Argon für 1 und 5 keV gemessen. Die Abtragsrate wurde aus der bekannten Dicke der SiC-Schichten und der Zeit, bei der das Kohlenstoffsignal auf 50% fiel, bestimmt. Die Ionenstromdichte wurde mit einem Faradaykollektor gemessen, der Ionenstrahl über eine Fläche 1 - 4 mm² gerastert. Die Stromdichten betragen 10 - 25 μAcm⁻², abhängig von der Ionenenergie und Ionenart. Nachdem die Messungen durchgeführt waren, wurde die Blende des Faraday-Kollektors mittels REM ausgemessen, um die Fläche zu bestimmen. Die Fläche der benutzten Blende betrug 3.8×10³ μm², die Blende befand sich senkrecht zum Ionenstrahl. Die Sputterausbeuten wurden gemäß:

$$Y = \frac{r N e}{j_p} \quad (4.1)$$

berechnet, wobei r die Abtragsrate, N die atomare Dichte des Festkörpers, e die elementare Ladung und j_p die Ionenstromdichte ist.

Wie Andersen und Bay bemerkt haben, kann die Bestimmung der Sputterausbeuten mittels des Durchsputterns dünner Schichten durch die Durchmischungsprozesse an der Grenzfläche zum Substrat beeinflusst werden [And81]. Die Position und Breite der Grenzfläche beim Durchsputtern dünner Schichten auf einem Substrat hängt von mehreren Faktoren ab:

- i) Parameter des Ionenstrahls (Energie der Ionen, Ionenmasse, Einfallswinkel),
- ii) Eigenschaften der Probe (Oberflächen- und Grenzflächenrauheit, molare Masse der Elemente in der untersuchten Schicht und im Substrat u.a.).

Die atomare Durchmischung an Grenzflächen während des Sputtertiefenprofilierens kann mit Hilfe von dynamischen Monte Carlo-Simulationen erfolgreich beschrieben werden [Kup94, Eck97]. Hier wurde das Programm TRIDYN eingesetzt [Möl88], um den Einfluss der Durchmischungsprozesse zu untersuchen. Abb. 4.1 zeigt die berechneten Konzentrationsprofile von Kohlenstoff beim Durchsputtern einer 120 nm dicken SiC-Schicht auf Si-Substrat.

Die Sputterbedingungen für die Simulationen wurden so gewählt, dass die Durchmischungseffekte am größten sind, also die höchste im Experiment angewandte Energie (5 keV) und für alle drei Ionenarten (Ne^+ , Ar^+ , Xe^+). Die ersten Erscheinungen der Durchmischung treten in einer Tiefe von 112 nm auf. Für alle Ionen fällt die Kohlenstoffkonzentration auf 50% in der Tiefe 120 nm, d.h. die Position der Grenzfläche bleibt unverändert. Danach fällt die Kohlenstoffkonzentration langsamer ab und erreicht den 10%-Wert bei 130 nm für Xenon, 136 nm für Argon und 139 nm für Neon. Diese Reihenfolge steht in Übereinstimmung sowohl mit der Implantationstiefe (und somit auch der Dicke der Durchmischungszone) als auch mit der Größe des Energieübertrages auf die Kohlenstoffatome, die am kleinsten für die Xenonionen ist und am höchsten für die Neonionen. Die Folge für die Bestimmung der Abtragsrate ist, dass die letzten 8 nm der Schicht unter veränderten Bedingungen gesputtert werden.

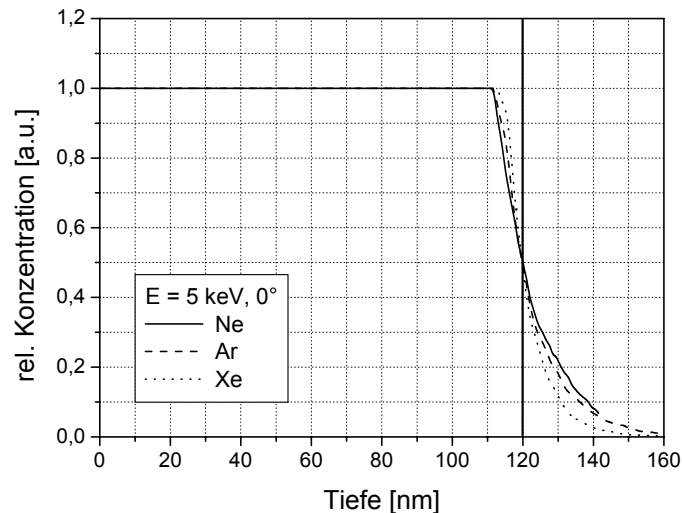


Abb. 4.1 Mittels TRIDYN berechnete Konzentrationsprofile für Kohlenstoff als Demonstration des atomaren Durchmischungseffektes an der SiC/Si-Grenzfläche während des Durchsputterns einer 120 nm SiC-Schicht auf Si-Substrat.

Weiteren Einfluss auf die Abtragsrate und auch auf die Verbreitung der Grenzfläche können die Oberflächenrauheit der Schicht und ihre Entwicklung während des Sputterns ausüben. Änderungen der Rauheit und damit der lokalen Einfallswinkel können den Abtrag beschleunigen oder verlangsamen [Wöh98]. Die untersuchte SiC-Schicht weist eine glatte Oberfläche mit typischer Oberflächenstruktur und Standardrauheit auf [Pez01] (Abb. 4.2). Der *rms*-Wert der Rauheit beträgt für Flächen $5 \times 5 \mu\text{m}^2$ den Wert von 1.0 - 1.4 nm. Der Einfluss des Sputterns auf die Oberflächenrauheit wurde mittels Rasterkraftmikroskopie (AFM – *atomic force microscopy*) untersucht. Nach dem Durchsputtern der Schichten wurde die Topographie auf den Kraterrändern mit AFM gemessen (TopoMetrix TPX2000). Die genaue Tiefe im Kraterrand konnte jedoch nicht ermittelt werden. Deshalb wurden mehrere Messungen in

der unteren Hälfte des Kraterrandes durchgeführt. Demnach entsprechen die folgenden Ergebnisse der abgetragenen Dicke von 60 - 120 nm. Abb. 4.2 zeigt die $5 \times 5 \mu\text{m}^2$ Aufnahmen der SiC-Oberfläche nach dem senkrechten Beschuss mit Ne^+ -Ionen und Xe^+ -Ionen jeweils mit den Energien 0.5 und 5 keV. Aus der Sicht der Sputtertiefenprofilierung sind die *rms*-Werte der Rauheit wichtig, um die Verschmierung der Grenzfläche aufgrund der Rauheit einzuschätzen [Hof98]. In allen Fällen wurde eine Verkleinerung oder höchstens Beibehaltung der *rms* im Vergleich zur ursprünglichen Oberfläche beobachtet. Im Vergleich zu den Effekten, die an der Grenzfläche als Folge der atomaren Durchmischung stattfinden, kann der Einfluss der Oberflächenrauheit vernachlässigt werden.

Zuletzt wird an dieser Stelle der mögliche Einfluss der Kristallinität erwähnt. Es ist typisch für Metalle, dass Oberflächen mit unterschiedlicher Kristallorientierung eine unterschiedliche Sputterausbeute aufweisen. Dies geschieht als Folge des *channelings* der einfallenden Ionen (bevorzugter stoßfreier Transport in bestimmten Kristallrichtungen), weil Metalle ihre kristalline Struktur nach dem Ionenbeschuss beibehalten. Bei Halbleitermaterialien wird aber die Oberfläche nach dem Ionenbeschuss amorphisiert und SiC bildet dabei keine Ausnahme [Pez95]. Durch die Amorphisierung der Oberfläche werden die Ionen gleich nach ihrem Eindringen in den Festkörper gestreut und damit wird ein *channeling* verhindert. Aus diesem Grund wird im Falle des SiC keine Abhängigkeit der Sputterausbeuten von der Kristallinität erwartet.

Abb. 4.3 zeigt zwei Augertiefenprofile einer 120 nm dicken SiC-Schicht auf Si-Substrat. Die Dicke der Schicht wurde mittels Spektrellipsometrie und aus der bekannten Wachstumsrate genau bestimmt. Beispielhaft wurden diejenigen Tiefenprofile ausgesucht, bei denen aufgrund der Ionenstrahlparameter die kleinste und die größte Verschmierung der SiC/Si-Grenzfläche erwartet wurde, nämlich 500 eV Xe^+ und 5 keV Ne^+ . Definiert man die Verschmierung der Grenzfläche am Abfall des Kohlenstoffsignals von 90% auf 50% gemäß:

$$\Delta z_{50} = \frac{t_{50} - t_{90}}{t_{50}} \times 120 \text{ nm}, \quad (4.2)$$

so erhält man $\Delta z_{50} = 5.7 \text{ nm}$ für 5 keV Ne^+ und 3.0 nm für 0.5 keV Xe^+ -Ionen. Diese Werte deuten auf eine niedrige Grenzflächenrauheit hin [Hof98] und bestimmen die angewandte Schicht als günstiges Objekt für die Messungen der Sputterausbeuten. Die gemessenen Abtragsraten, normiert auf die Ionenstromdichte, sind, zusammen mit den aus Gl. 4.1 berechneten Sputterausbeuten, in Tab. 4.1 zusammengefasst.

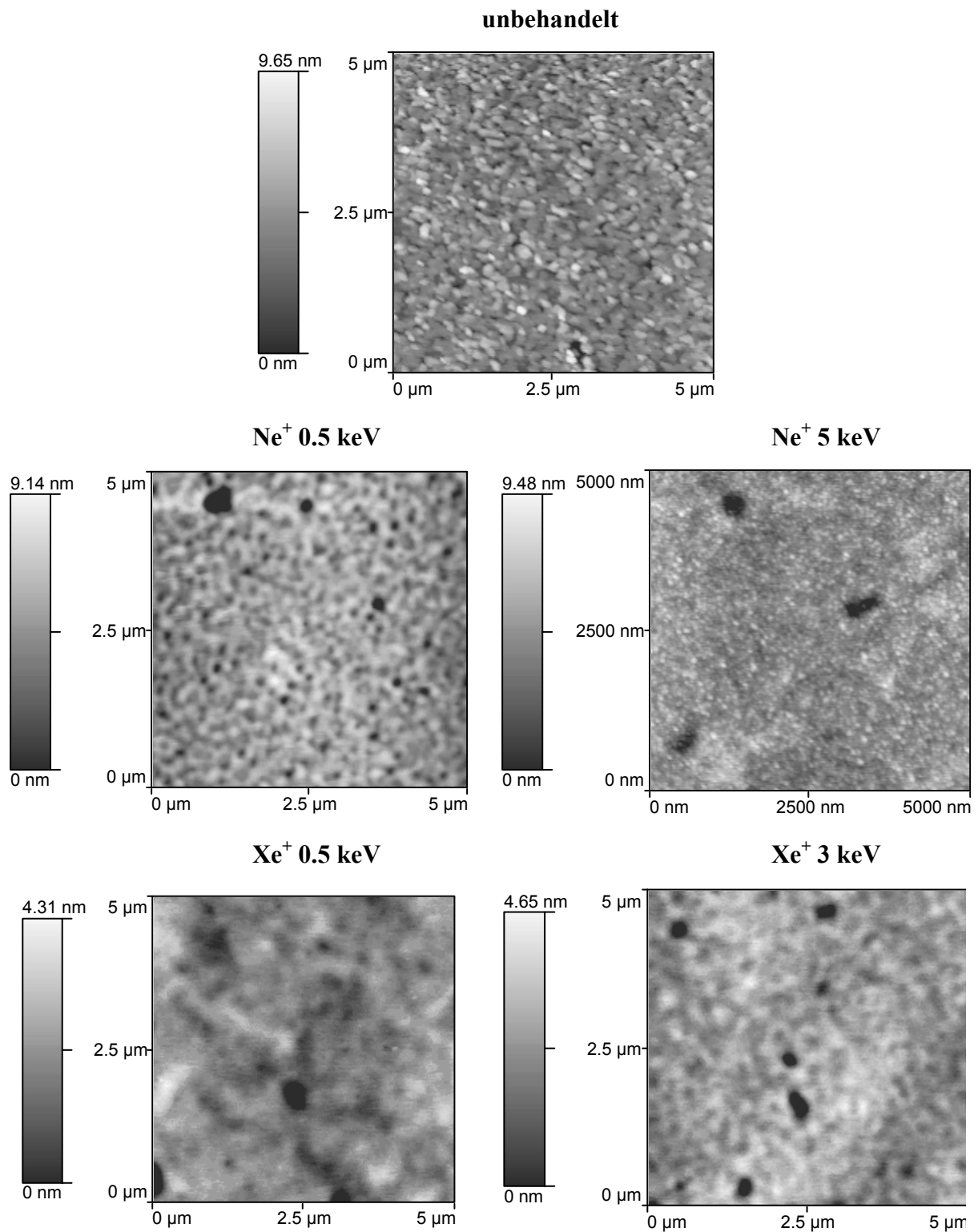


Abb. 4.2 AFM-Aufnahmen von 3C-SiC-Oberflächen nach dem Beschuss mit Ne⁺ und Xe⁺ Ionen mit unterschiedlichen Energien. Die rms-Werte der Rauheit waren 1.4 nm für die unbehandelte Oberfläche, 0.7 nm für die mit Xenon beschossene Oberfläche. Für Neon betrug die Rauheit 1.5 nm nach dem Beschuss mit 500 eV und 1.1 nach 5 keV.

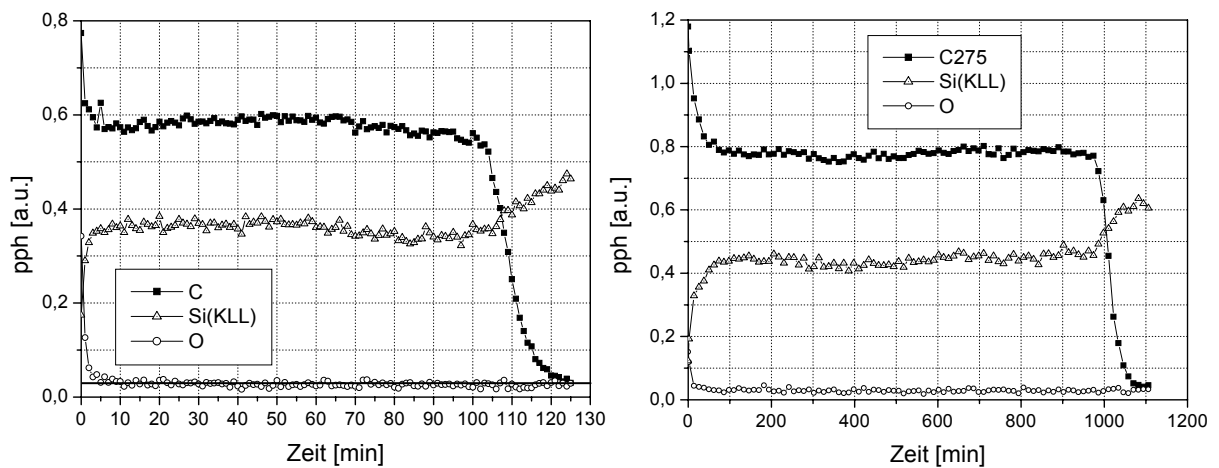


Abb 4.3 AES-Tiefenprofile einer 120 nm dicken SiC-Schicht auf Si. Der Abtrag erfolgte durch den Beschuss mit 5 keV Ne⁺ und 0.5 keV Xe⁺ Ionen unter senkrechtem Einfallswinkel. Die Ionenstromdichte betrug 26.7 μAcm^{-2} für Neon und 10.3 μAcm^{-2} für Xenon.

E [keV]	Ne		Ar		Xe	
	Norm. Abtragsrate [nmcm ² / μAmin]	Ausbeute [Atom/Ion]	Norm. Abtragsrate [nmcm ² / μAmin]	Ausbeute [Atom/Ion]	Norm. Abtragsrate [nmcm ² / μAmin]	Ausbeute [Atom/Ion]
0.5	0.0160	0.41	0.0125	0.32	0.0117	0.30
1	0.0297	0.76	0.0305	0.78	0.0266	0.68
3	0.0426	1.09	0.0566	1.45	0.0613	1.57
5	0.0430	1.10	0.0625	1.60	0.0891	2.28

Tab. 4.1 Experimentell bestimmte Abtragsraten und Sputterausbeuten für SiC beim senkrechten Beschuss mit Neon-, Argon- und Xenonionen.

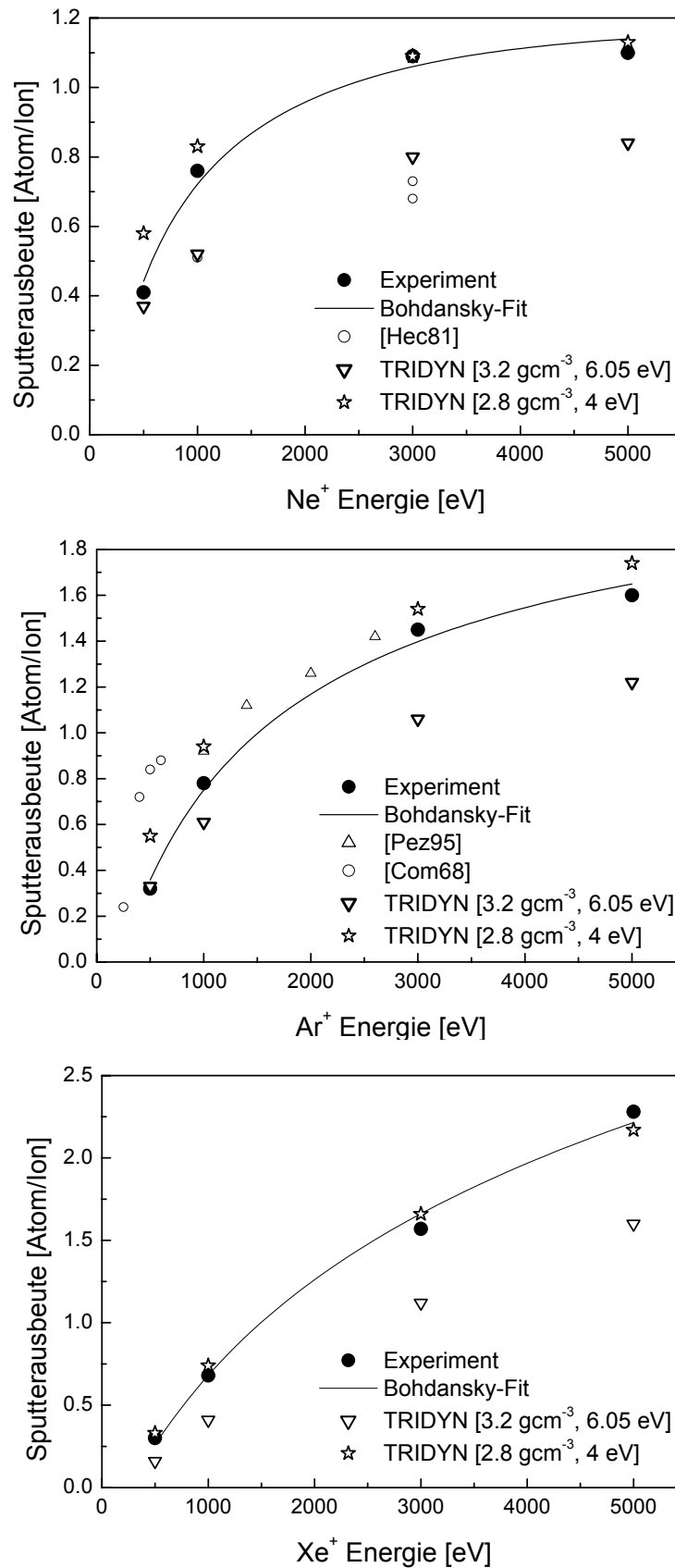


Abb. 4.4 Graphische Darstellung der gemessenen SiC-Sputterausbeuten zusammen mit den Werten anderer Autoren und mit den Simulationsergebnissen. Die Linien in den Graphiken sind die Anpassungskurven zu den gemessenen Sputterausbeuten nach Bohdansky (Gl. 2.60).

4.1.1 Vergleich mit der Literatur, Simulation und Theorie

In der Literatur findet man nur wenige Ergebnisse zu Sputterausbeuten von SiC, die mit den hier präsentierten Werten verglichen werden können. Die meisten Arbeiten behandeln das Sputtern von SiC mit leichten Ionen wie H^+ , D^+ , He^+ [Rot80, Moh78, Eck93, Pla96]. Vergleichbare Ergebnisse für Neonbeschuss findet man in [Hech81], für Argonbeschuss in [Com68, Moh78, Pez95], während für Xenonbeschuss in der Literatur keine Hinweise existieren. Die hier gezeigten Sputterausbeuten für Neon sind um ca. 50% höher als die von Hecht et al. gemessenen Ausbeuten [Hec81] (Abb. 4.4). Die Daten von Pezoldt et al. [Pez95] für Argonbeschuss stimmen mit den gegenwärtigen Sputterausbeuten besser überein, die Abweichung beträgt weniger als 20% (Abb. 4.4). Die Sputterausbeuten von SiC für Argonenergien kleiner als 1 keV, wie sie bei Comas und Cooper zu finden sind, erscheinen aber zu hoch im Vergleich zu den hier dargelegten Ergebnissen ($> 250\%$). Die Ergebnisse von Mohri et al. [Moh78] zeigen sich dagegen als viel zu klein ($Y = 0.1$ Atom/Ion für 6 keV Ar^+ -Beschuss). Während die zuletzt genannte Arbeit sehr wahrscheinlich fehlerbehaftete Ergebnisse präsentiert, sind die Gründe für die Abweichungen in Bezug auf Hechtls und Comas' Daten unklar.

Die experimentellen Daten werden im Folgenden mit der Simulation verglichen. Für die Simulationen wurde das dynamische MC-Programm TRIDYN angewandt [Möl88]. In diesem Programm wird für die Beschreibung der zwischenatomaren Stöße das Kr-C-Potential eingesetzt. Die Energieverluste durch die Wechselwirkung mit den Elektronen im Festkörper wurden mittels eines non-lokalen Modells berechnet. Das Sputtern von SiC wurde bis zum Gleichgewicht verfolgt und die dargelegten Ergebnisse entsprechen dann dem Gleichgewichtszustand. Das Gleichgewicht beim Sputtern von SiC ist als der Zustand definiert, in dem die partiellen Sputterausbeuten für Si und C gleich sind. Die Volumenbindungsenergie wurde nicht beachtet ($E_B = 0$). Die Oberflächenbindungsenergie wurde für Si und C gleichgesetzt. Der Wert für die Oberflächenbindungsenergie $U_0 = 6.05$ eV wurde aus den Sublimationswärmern des Siliziums (4.7 eV) und des Kohlenstoffs (7.4 eV) als ihr Mittelwert berechnet. Die Massendichte von 3.21 gcm^{-3} wurde bei den ersten Simulationen als Standardwert gesetzt. Die mit den o.g. Werten berechneten Sputterausbeuten fielen immer niedriger als die gemessenen aus (Abb. 4.4). Folgende Überlegungen können die Übereinstimmung zwischen den Messwerten und der Simulation verbessern: Erstens spielt die Dichte des Materials in den Simulationen auch eine Rolle (im Gegensatz zu Sigmunds Theorie) [Shu02]. Die SiC-Oberfläche wird durch Sputtern amorphisiert und die Materialschwellung ist ein begleitender Effekt der Amorphisierung. Die Massendichte von durch Ionenstrahl amorphisiertem SiC

beträgt 2.8 gcm^{-3} [Hee97]. Also betrifft die erste Korrektur der Simulationsparameter die Massendichte des SiC. Zweitens wird der Wert für die Oberflächenbindungsenergie verkleinert, um eine Übereinstimmung mit den gemessenen Sputterausbeuten zu erreichen. Die beste Übereinstimmung wird bei $U_0 = 4 \text{ eV}$ erzielt (Abb. 4.4). Diesen Wert kann man als eine effektive Oberflächenbindungsenergie betrachten, die mehrere Effekte berücksichtigt, die zur Vergrößerung der Sputterausbeute beitragen. Zu diesen Effekten gehören die Erhöhung der deponierten Energie an der Oberfläche aufgrund der eingebauten Sputterionen (für schwere Ionen [Bla79]) und die Schwächung der Bindungen auf der Oberfläche durch die Amorphisierung der Oberfläche und Defektbildung [Sie83, Mar97]. Eigene Rechnungen zum Einfluss des Xenoneinbaus in SiC und Si [Eck02], bestätigt auch durch die Ergebnisse von Sielanko und Szyszko [Sie86], zeigten, dass der Einbau von schweren Ionen nur einen geringen Einfluss auf die Sputterausbeute ausübt. Deshalb wird hier die Schwächung der Bindungen an der Oberfläche als Ursache für die niedrigere effektive Oberflächenbindungsenergie angenommen.

Die experimentellen Ergebnisse werden im Weiteren mit der Sputtertheorie verglichen. Der Vergleich mit der Theorie von Sigmund kann nur für den Beschuss mit 5 keV Ionen unternommen werden, da diese Theorie ihre Gültigkeit bei niedrigeren Energien verliert. Die experimentellen und theoretischen Ergebnisse sind in Tab. 4.2 zusammengestellt. Die theoretischen Sputterausbeuten wurden für die Exponenten $m = 0, 0.17$ und 0.23 aus den Gleichungen 2.42, 2.55a und 2.54 berechnet. Für die Funktion α wurde Zalm's Näherung angewandt (Gl. 2.57), als Oberflächenbindungsenergie wurde zum Einen der Wert 6.05 eV und zum Anderen der aus den Simulationen ermittelte Wert 4 eV eingesetzt. Als universaler Bremsquerschnitt $s(\varepsilon)$ wurde die KrC-Näherung benutzt (Gl. 2.50). In die Berechnung der nuklearen Bremsstärke S_n wurde die Lindhardsche Abschirmlänge einbezogen (Gl. 2.37). Aus Tabelle 2 geht hervor, dass die theoretischen Werte für $m = 0.23$ immer niedriger als die experimentellen Werte liegen. Deswegen kann der Exponent $m = 0.23$ als zu hoch eingeschätzt werden. Eine gute Übereinstimmung kann für die Kombinationen $[m, U_0] = [0, 6.05 \text{ eV}]$ und $[0.17, 4 \text{ eV}]$ festgestellt werden. Der Exponent $m = 0$, der in der ursprünglichen Theorie auftritt, ist zu niedrig, wie durch Sigmund selbst und auch durch die Simulation bestätigt wurde (s. Kapitel 2.4 und [Bie84]). Daher erscheint nur die Kombination $[m, U_0] = [0.17, 4 \text{ eV}]$ als plausibel. Das erlaubt, für den Wert $U_0 = 4 \text{ eV}$ eine gute Korrelation der hier dargelegten Sputterausbeuten sowohl mit der Theorie als auch mit der Simulation zu folgern.

Ionen	Sputterausbeute [Atom/Ion]						
	Exp.	m = 0 (Gl. 2.42)		m = 0.17 (Gl. 2.55)		m = 0.23 (Gl. 2.54)	
		U ₀ [eV]		U ₀ [eV]		U ₀ [eV]	
		6.05	4	6.05	4	6.05	4
Ne	1.10	1.07	1.60	0.79	1.07	0.49	0.59
Ar	1.60	1.64	2.48	1.21	1.66	0.75	0.91
Xe	2.28	1.93	2.90	1.42	1.94	0.89	1.07

Tab. 4.2 Vergleich der gemessenen Sputterausbeuten (Spalte Exp.) für den Beschuss mit 5 keV Ne⁺-, Ar⁺- und Xe⁺-Ionen mit Sigmunds theoretischen Werten.

Für den Vergleich mit der Theorie im niederenergetischen Bereich ist die Anwendung der modifizierten Bohdansky-Formel erforderlich. Die Kurven in den Abbildungen 4.4 stellen die Anpassung der gemessenen Sputterausbeuten mit der Bohdansky-Formel dar. Aus diesen Fits ergaben sich die zwei charakteristischen Parameter Q und E_{th} . Die einzelnen Werte dieser Fitparameter sind in Tab. 3 zusammengestellt. Zum Vergleich werden in Tab. 4.3 auch die theoretischen Werte präsentiert. Die theoretischen Werte von Q wurden für $m = 0.17$ aus den Gleichungen 2.46 und 2.47 zusammen mit der Näherung von Zalm für α berechnet. Die aus dem Vergleich mit der Simulation hervorgehende Oberflächenbindungsenergie 4 eV wurde auch hier eingesetzt. Die Abschirmlänge im Term für die nukleare Bremsstärke wurde nach Lindhard berechnet (Gl. 2.37). Aus dem Vergleich der experimentellen mit den theoretischen Werten in Tabelle 4.3 geht hervor, dass die theoretischen Werte für Q in allen drei Fällen (Sputtern mit Ne, Ar und Xe) größere Abweichungen aufweisen als bei entsprechenden theoretischen Ergebnissen für den Beschuss mit 5 keV (Tab. 4.2). Die größeren Abweichungen sind auf die zu hohen Sputterschwelleenergien E_{th} , die aus den Fits gewonnen wurden, zurückzuführen. Durch diese hohen Werte besitzt der Schwellwertterm $f(E_{th})$ auch noch bei einer Ionenenergie von 5 keV einen Wert kleiner als eins (~ 0.9) und erzwingt damit die Erhöhung des Q -Wertes. Die zu hohen Fitwerte für die Sputterschwelleenergien E_{th} sind dem Fakt zuzuschreiben, dass keine Sputterausbeute im Energiebereich unter 500 eV vorliegt und dadurch der Fit nicht auf diesen wichtigen Bereich erweitert werden konnte. Trotz der hohen Werte

spiegeln die aus den Fits gewonnen Sputterschwellenergien die theoretische Tendenz wider, indem sie mit steigender Ordnungszahl des Ions größer werden.

Ionen	$Q_{\text{exp.}}$ [Atom/Ion]	$Q_{\text{theor.}}$ [Atom/Ion]	$E_{\text{th, exp.}}$ [eV]	$E_{\text{th, theor.}}$ [eV]
Ne	3.21 ± 0.14	2.74	77 ± 15	29
Ar	5.31 ± 0.21	4.68	118 ± 18	41
Xe	13.65 ± 0.65	10.30	136 ± 28	79

Tab. 4.3 Vergleich der aus den Anpassungen ermittelten Fitparameter Q und E_{th} (Abb. 4.4) mit den theoretischen Werten.

4.2 Winkelabhängigkeit der Sputterausbeuten

Der Einsatz des Sputterns für analytische Zwecke verlangt in den meisten Fällen einen streifenden Einfallswinkel. Der Grund dafür ist die durch atomare Vermischung hervorgerufene Verzerrung der Grenzflächen, die mit der Reichweite der eingedrungenen Ionen eng verbunden ist. Um diese Eindringtiefe zu verringern, wird der Einfallswinkel vergrößert. Auch in der Technologie können nicht senkrechte physikalische Ätz- und Säuberungsverfahren eingesetzt werden [Lab98, Bre00]. Die Kenntnis der Abtragsraten für unterschiedliche Einfallswinkel ist außerdem wichtig für das Modellieren der Rauheits- bzw. Strukturentwicklung bei rauen oder strukturierten Oberflächen [Whö98, Kös98], weil sich mit der Änderung des Einfallswinkels des Ionenstrahls auch die Sputterausbeute ändert.

Abb. 4.5 zeigt die gemessene Winkelabhängigkeit der Zerstäubungsausbeuten von Siliziumkarbid beim Beschuss mit Argon mit den Energien 1 und 5 keV. Die Werte sind auf die Sputterausbeuten beim senkrechten Beschuss normiert. In beiden Fällen wurde die maximale Sputterausbeute für den Einfallswinkel 80° gemessen. Aus Abb. 4.5 ist ersichtlich, dass bis 60° nur kleine Unterschiede zwischen den normierten Zerstäubungsausbeuten für 1 und 5 keV Beschuss existieren. Dieser Winkelbereich kann mit der Funktion $\cos^2(\theta)$ beschrieben werden, wie aus Sigmunds Theorie hervorgeht (Gl. 2.58). Die Annäherung der Messwerte

mit dieser Funktion sind in Abb. 4.6 dargestellt. Die Übereinstimmung zwischen den Anpassungskurven und den Messwerten ist jedoch nur mäßig. Aus den Fits wurden die exponentiellen Faktoren $f=2.4$ für 1 keV Beschuss und $f=2.7$ für 5 keV Beschuss ermittelt. Diese Werte sind höher, als die Theorie erwarten lässt. Dennoch können in der Literatur solche großen f -Werte gefunden werden [Frö90, Sch96, Chi92]. Die Anpassung mittels der Yamamura-Formel (Gl. 2.59), wie sie in Abb. 4.6 präsentiert ist, ist insbesondere für Winkel $< 60^\circ$ unzureichend. Dies ist allerdings nicht verwunderlich, weil Yamamura seine Formel für das Sputtern mit leichten Ionen entwickelt hat. Ein weiterer Versuch, die Winkelabhängigkeit der Sputterausbeuten zu beschreiben, erfolgte mittels TRIDYN-Simulationen. Die Sputterausbeuten wurden für $\rho_{\text{SiC}} = 2.8 \text{ gcm}^{-3}$ und $U_0 = 4 \text{ eV}$ berechnet. Während die Simulationen für 1 keV Ar^+ -Beschuss zumindest im Winkelbereich bis 70° noch gut den Messwerten folgen können, sind die simulierten Sputterausbeuten für 5 keV Beschuss im ganzen Winkelbereich kleiner als die gemessenen Werte.

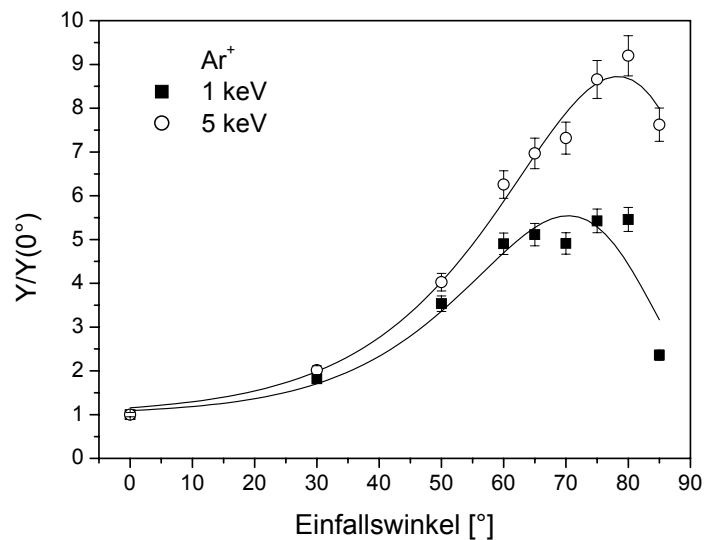


Abb. 4.5 Die Winkelabhängigkeit der Sputterausbeuten von SiC beim Beschuss mit 1 und 5 keV Ar^+ -Ionen. Die Werte wurden auf die Sputterausbeute $Y(0^\circ)$ normiert. Die Kurven haben nur eine Orientierungsfunktion.

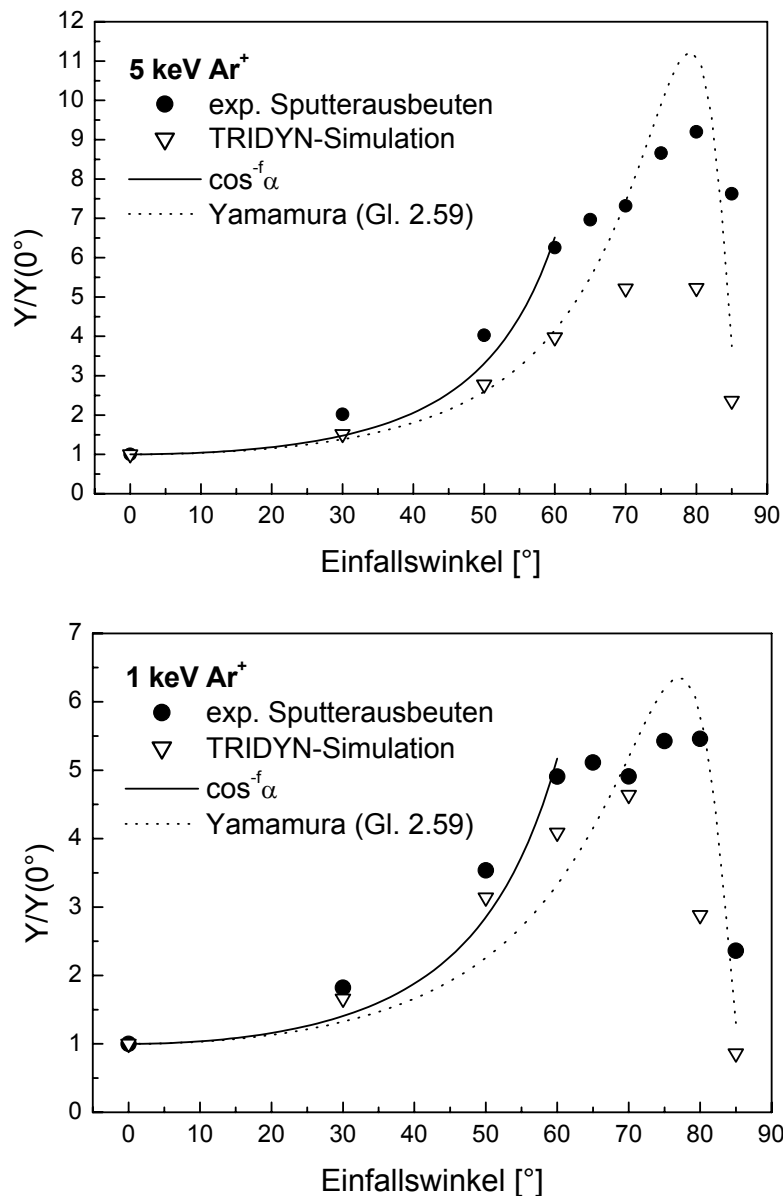


Abb. 4.6 Vergleich der experimentell bestimmten Winkelabhängigkeit der SiC-Sputterausbeuten mit Theorie und Computersimulation.

In der Ermittlung der Messwerte für größere Einfallswinkel kann die Oberflächenrauheit eine Rolle spielen. Bei rauen Oberflächen wirkt sich die Präsenz von kleinen Flächen mit unterschiedlichen Kippungswinkeln auf die effektive Sputterausbeute aus [Whö98]. Aus diesem Grund wurde die Topographie der SiC-Oberfläche am Sputterkraterrand gemessen. Abb. 4.7 zeigt die AFM-Aufnahmen von SiC-Oberflächen nach dem Beschuss mit 1 und 5 keV unter 0°, 65° und 80° Einfallswinkel. Im Gegensatz zum senkrechten Beschuss wurde eine leichte Aufrauung der Oberfläche beobachtet. Eine typische Lokalwinkelverteilung der Kippungswinkel für die unter 80°, Ar⁺, 5 keV gesputterte Oberfläche ist in Abb. 4.8b dargestellt.

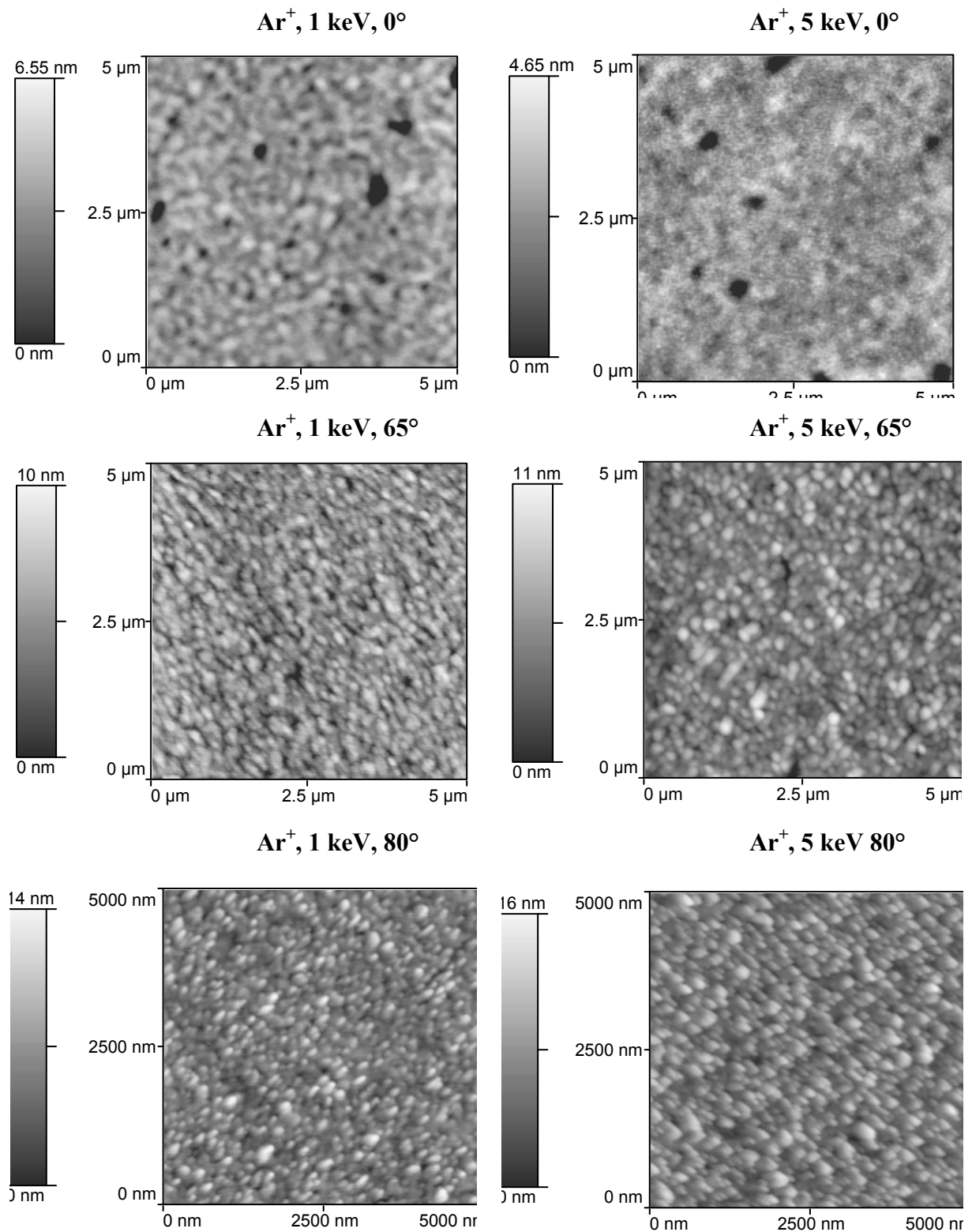


Abb. 4.7 AFM-Aufnahmen von 3C-SiC Oberflächen nach dem Beschuss mit 1 und 5 keV Ar⁺-Ionen unter verschiedenen Einfallswinkeln. Die rms-Werte der Rauheit betragen 1.0, 1.8 und 2.1 nm für 1 keV Beschuss und 0°, 65° und 80°. Für 5 keV liegen die rms-Werte bei 0.8, 1.7 und 2.4 nm.

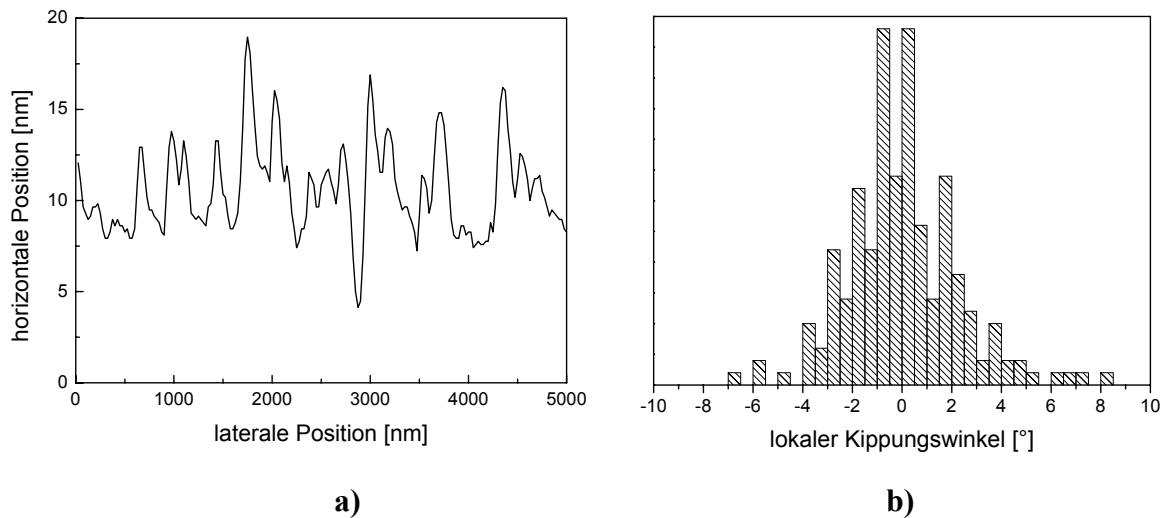


Abb. 4.8 (a) Ein Linienscan über eine SiC-Oberfläche nach dem Beschuss mit 5 keV Ar⁺ unter 80°. (b) Die Verteilung der lokalen Winkel im Linienscan.

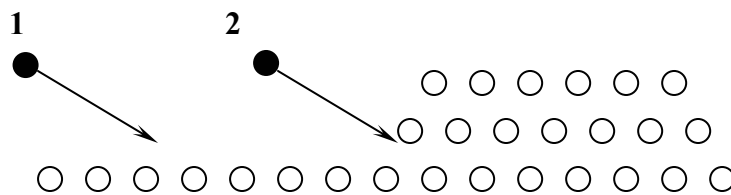


Abb. 4.9 Schematische Darstellung zum Beitrag der atomaren Rauheit zur Erhöhung der Sputterausbeute: das Ion 1 trägt weniger Atome aus dem Festkörper ab als das Ion 2. Die Stufe im Falle des zweiten Ions verhindert die Ionenreflektion und vergrößert die an der Oberfläche deponierte Energie. Zu einem höheren Abtrag trägt auch die niedrigere Oberflächenbindungsenergie der Atome in Kink-Lagen bei.

Der mittlere Winkel beträgt 2.5°, d.h., dass der mittlere lokale Einfallswinkel für den Ionenstrahl $80 \pm 2.5^\circ$ betrug. Diese Abweichung vom nominalen Einfallswinkel ist jedoch zu klein, um die effektive Sputterausbeute bedeutend ändern zu können. Deshalb kann die sputterinduzierte Rauheit, wie sie mittels AFM gemessen wurde, nicht als die Ursache für die Unterschiede zwischen den gemessenen und theoretischen bzw. simulierten Sputterausbeuten betrachtet werden. Eine mögliche Ursache für die hohen experimentellen Werte im Vergleich zu den simulierten Sputterausbeuten ist die Oberflächenrauheit auf atomaren Abmessungen. Die Simulation rechnet mit einer atomar glatten Oberfläche, d.h. der maximale Höhenunter-

schied der Atome auf der Oberfläche ist eine Monolage. In der Realität existieren auf der Oberfläche Stufen und Cluster, die mittels AFM nicht aufgelöst werden. Dringt ein Ion in die Seite einer Stufe ein, kann er einen massiven Abtrag der Atome verursachen (Abb. 4.9). In [Yam87] wurden die Winkelabhängigkeiten der Sputterausbeute in Abhängigkeit von der Oberflächenstruktur mittels des MC-Programms ACAT untersucht. Der Effekt der Erhöhung der Sputterausbeute bei höheren Einfallswinkeln, wenn die Oberfläche rauer wird, wurde in dieser Arbeit bestätigt [Yam87]. Auch Ruzics Gruppe hat sich in mehreren Arbeiten mit dem Prozess des Sputterns und der Ionenreflektion von rauen Oberflächen beschäftigt [Ruz89, Ruz90, Sha93]. Sie erweiterten das TRIM-Programm, indem sie eine Fraktal-Oberfläche in atomarer Abmessung in das Programm implementierten. Auch in diesen Arbeiten wurde eine Erhöhung der Sputterausbeuten im Vergleich zu planaren Oberflächen beobachtet.

4.3 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurden experimentelle Ergebnisse zu Sputterausbeuten von SiC nach dem Beschuss mit Ne^+ -, Ar^+ - und Xe^+ -Ionen präsentiert. Es wurde gezeigt, dass heteroepitaktische SiC-Schichten, gewachsen auf Si-Substraten, ein geeignetes Untersuchungsobjekt für die Messung der Sputterausbeuten sind. Als Gründe dafür wurden die glatten Ober- und Grenzflächen, die Glättung oder nur geringe Aufrauung der Oberfläche nach dem Ionenbeschuss und der niedrige Einfluss der atomaren Durchmischung an der Grenzfläche zu Si aufgelistet. Für die Oberflächenbindungsenergie 4 eV und den senkrechten Einfallswinkel des Ionenstrahls wurde eine gute Übereinstimmung zwischen den Messergebnissen und sowohl der Theorie als auch der Simulation festgestellt. Für den Beschuss mit 1 und 5 keV Ar^+ -Ionen wurde die Winkelabhängigkeit der Sputterausbeute von SiC gemessen. Die höchste Sputterausbeute von 14.7 Atom/Ion wurde für einen 80° Einfallswinkel gemessen. Im Gegensatz zum senkrechten Beschuss konnte keine gute Übereinstimmung zwischen den gemessenen Winkelabhängigkeiten und der Theorie erreicht werden. Die Simulation folgte den Messwerten nur bei 1 keV Beschussenergie bis 70° . Die größten Abweichungen wurden für die Einfallswinkel 80° und 85° beobachtet. Als wahrscheinlicher Grund für die Abweichungen der simulierten Werte von den gemessenen wurde die Oberflächenrauheit auf atomaren Abmessungen diskutiert.

5. Sputterinduzierte veränderte Zone auf SiC-Oberflächen

Wenn sich ein Festkörper unter Ionenbeschuss befindet, werden nicht nur Atome aus der oberflächennahen Region abgetragen, wie in den Kapiteln 2.4 und 4 behandelt, sondern auch die Eigenschaften der Oberfläche verändern sich. In den meisten Fällen ändert sich nach dem Ionenbeschuss die Zusammensetzung der Oberfläche. Das geschieht:

- (i) als Folge des Ioneneinbaus in den Festkörper,
- (ii) aufgrund der Vorzugseffekte bei den Stoßkaskaden im Festkörper bei Mehrkomponentenmaterialien (bevorzugtes Sputtern, bevorzugte Implantation der Oberflächenatome, atomare Durchmischung) und
- (iii) als Folge der ioneninduzierten Diffusion und Segregation.

An den Oberflächen kristalliner Materialien werden Defekte im Kristallgitter erzeugt und die Oberfläche kann durch den Ionenstrahl amorphisiert werden. So verhält es sich im Fall von Halbleiteroberflächen [Hol88, Boc93, Pez95, Gna95, Bar98, Mut02]. Diese Änderungen gehen mit der Wandlung der elektronischen Eigenschaften einher. Als weiterer Effekt, der den Ionenbeschuss begleiten kann, seien die Änderungen der Morphologie der bestrahlten Oberflächen genannt. Die Ionenbestrahlung kann zum Glätten der Oberfläche führen oder sie verursacht eine Vergrößerung der Oberflächenrauheit. Durch Ionenbeschuss können regelmäßige Strukturen wie z.B. eine wellige Oberfläche (*ripples*) erzeugt werden.

Die Kenntnis der Veränderungen, die durch die Bestrahlung mit Ionen auftreten, ist sowohl aus der Sicht der Technologie als auch für den Analytiker bedeutsam. So wird z.B. das Sputterätzen bei der Abscheidung von Kontakten zur Vorreinigung der Oberfläche angewandt. Die Änderungen der Probenoberfläche nach dem Reinigungsschritt können dann einen Einfluss auf die Grenzflächeneigenschaften haben. Als Beispiel dafür soll erwähnt werden, dass die Vorbehandlung von Silizium mit Argonionen vor dem Aufbringen der Kontakte Änderungen der Schottkybarriere verursacht [Zhu01]. In den oberflächenanalytischen Methoden wie AES oder XPS wird das Sputtern zum Abtrag der Oberflächenatome zwecks Reinigung oder Tiefenprofilierung eingesetzt. Die durch den Ionenbeschuss hervorgerufenen Veränderungen der Oberfläche erschweren die Interpretation der gemessenen Daten und können zu falschen Ergebnissen leiten. Die Amorphisierung der Oberfläche kann Veränderungen in der Peakform (AES) oder das Erscheinen zusätzlicher Peaks (XPS) zur Folge haben. Die Implantation der Ionen und die Vorzugseffekte beim Sputtern verursachen Abweichungen von den ursprünglichen Beschaffenheiten der Oberfläche bzw. der Schicht.

In diesem Kapitel werden AES-Untersuchungen zu Ionenstrahlinduzierten Effekten an einkristallinen SiC-Oberflächen präsentiert. Im ersten Teil wird der Einbau der Edelgasionen in die SiC-Oberfläche behandelt. Im zweiten Teil werden die durch den Ionenstrahl induzierten Zusammensetzungsänderungen der SiC-Oberfläche diskutiert. Der dritte Teil präsentiert Untersuchungen zur Peakformänderungen der Si- und C-Augerspektren, die durch den Ionenstrahl hervorgerufen wurden. Zusätzlich wird in diesem Teil die Möglichkeit, den Leitungstyp eines 6H-SiC-Einkristalls mittels AES nachzuweisen, vorgestellt. Im vierten Teil werden gemessene Tiefenprofile der veränderten Zone gezeigt, die mittels Faktorenanalyse ausgewertet wurden.

Die AES Messungen wurden in der Anlage ASC 2000 (Riber) durchgeführt, die mit einer differential gepumpten Ionenkanone VG X5 ausgestattet war. Die Energie des Primärelektronenstrahles mit einem Strom von 1 μA betrug 3 keV. Die emittierten Elektronen wurden in einem Zylinderspiegelanalysator, in dessen Mitte sich die Elektronenkanone befand, mit der Energieauflösung $\Delta E/E = 0.3\%$ analysiert. Der Winkel zwischen der Elektronen- und Ionenkanone war durch das Spektrometer festgelegt. Für den senkrechten Einfall des Elektronenstrahles stand die Ionenkanone 80° zur Probennormale, für den senkrechten Ionenbeschuss stand die Elektronenkanone 68° zur Probennormale.

5.1 Einbau von Edelgasen in SiC

Der Einbau der Ionen in den Festkörper während des Ionenbeschusses ist bei Raumtemperatur ein Effekt, der nur durch eine starke Senkung der Ionenenergie umgegangen werden kann. Für Silizium beispielsweise beginnt der Einbau der Argonionen in die Oberfläche bereits bei 20 eV, wie es in [Lau93] mittels RBS nachgewiesen wurde. Solche niedrigen Energien sind aber für den Abtrag des Materials nicht geeignet, was der eigentliche Sinn des Sputterns ist. Der Einbau der Edelgasionen in Metalle ist seit vielen Jahren Objekt der Forschung [Sch83, Don91, Bab92]. Bei Halbleitern beschränkte sich das Interesse auf Silizium [Wit78, Kem78, Men81, Fil89, Saw90, Hua94b, Pan96] oder, in viel kleinerem Umfang, auf GaAs [Sin81]. Der Einbau von Edelgasen in Graphit wurde in [Cho93, Kim02] behandelt. SiC als Material für die nukleare Technologie war öfter ein Objekt der Untersuchungen zum Einbau leichter Ionen, wie H^+ , D^+ und He^+ [Hoj98, Che99, Iga02]. Der Einbau der Edelgasionen in die Oberfläche während der Tiefenprofilierung wird in der Literatur meistens ignoriert. Während der Bestimmung der Sputterraten und Sputterausbeuten für SiC (s. Kapitel 4) wurden auch die

Augersignale der jeweiligen Edelgase verfolgt. Abb. 5.1 präsentiert als Beispiel zwei Tiefenprofile ein und derselben 3C-SiC-Schicht, die mittels MBE auf Si-Substrat aufgewachsen wurde. Für diese Tiefenprofile wurden 0.5 keV Ar⁺- und Xe⁺-Ionen zum Abtrag der Schicht eingesetzt, der Einfallswinkel der Ionen betrug 0°.

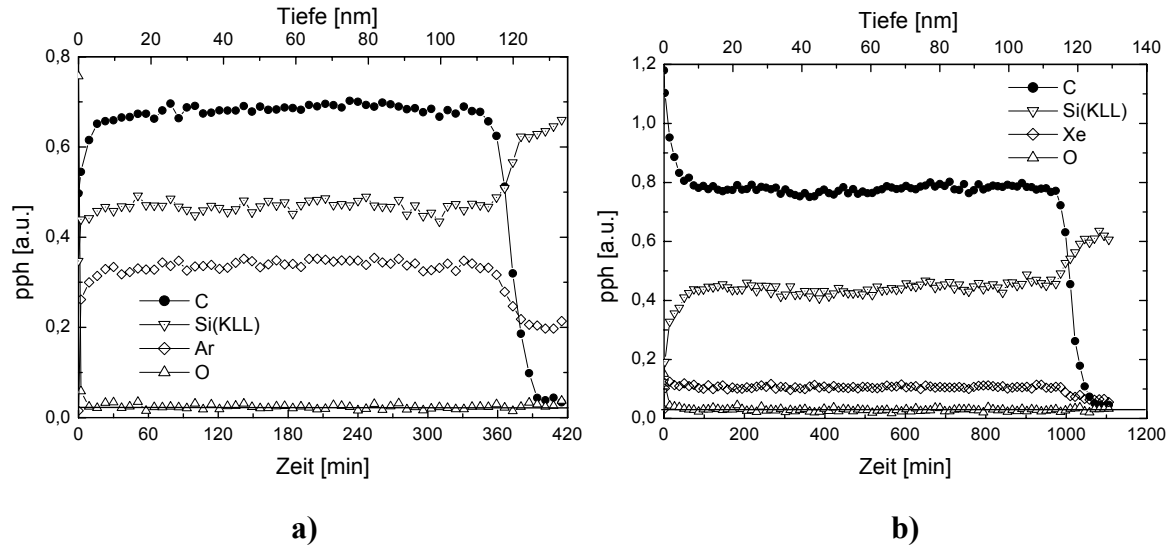


Abb. 5.1 AES-Tiefenprofile einer 3C-SiC-Schicht auf Si, der Abtrag der Schicht erfolgte durch das Sputtern mittels Ar⁺-Ionen (a) und Xe⁺-Ionen (b) mit einer Energie von 500 eV und unter senkrechtem Einfall. Die waagerechten Linien stellen in beiden Graphiken das Rauschniveau dar.

5.1.1 Einbau von Argon und Xenon in SiC

Die gemessenen Augersignale von eingebautem Argon und Xenon weisen während der Messungen keine Peakformänderungen auf, deshalb können die Peak-zu-Peak-Höhen (*pph*) in differenzierten Spektren als Maß für die Konzentration der jeweiligen Edelgase angewandt werden (Abb. 5.2). Abb. 5.3 zeigt die Abhängigkeiten der gemessenen *pph*-Werte für Argon- und Xenon-Augerübergänge von der Beschussenergie beim senkrechten Beschusswinkel. Da für Edelgase in der AES keine Empfindlichkeitsfaktoren existieren [Hed95] und auch kein Bezug zu Werten aus der Literatur gefunden werden konnte, bleibt die Quantifizierung der Xenonimplantation aus. Mehrere Arbeiten haben sich hingegen mit der Implantation von Argon in Silizium [Kem78, Kir79, Pan96] beschäftigt. Diese Tatsache erwies sich als günstig, weil Silizium als Substrat für die epitaktischen SiC-Schichten benutzt wurde und aus der Argon-Implantation im Si-Substrat direkt die Implantation von Argon in Siliziumkarbid auch quantitativ beschrieben werden konnte. Pan et al. haben die Implantation von 1 keV Argon in Si (100) beim senkrechten Beschuss mittels winkelaufgelöster XPS gemessen und fanden

1.5% Argon in Silizium. Dieser Wert wurde für einen großen Winkel zwischen der Probe und dem Analysator gemessen, so dass die Informationstiefe der Photoelektronen mit der Informationstiefe der Augerelektronen vergleichbar ist. Das Verhältnis der Augersignale von Argon, implantiert in SiC und Si, betrug 1.7. Das ergibt, unter Berücksichtigung der Unterschiede zwischen den atomaren Dichten von Si und amorphisiertem SiC, 1.6 ± 0.2 at.% Argon an der SiC-Oberfläche nach dem Beschuss unter 0° mit 1 keV Argon. Dieser Wert gilt als Referenz für die Quantifizierung von Argonimplantationen in SiC. Der angegebene Fehler berücksichtigt die vernachlässigten Matrizeneffekte wie die Änderung der Austrittstiefe der Augerelektronen und der Einfluss des Rückstrefaktors. Die Konzentration des implantierten Xenon wird in einem ähnlichen Bereich erwartet.

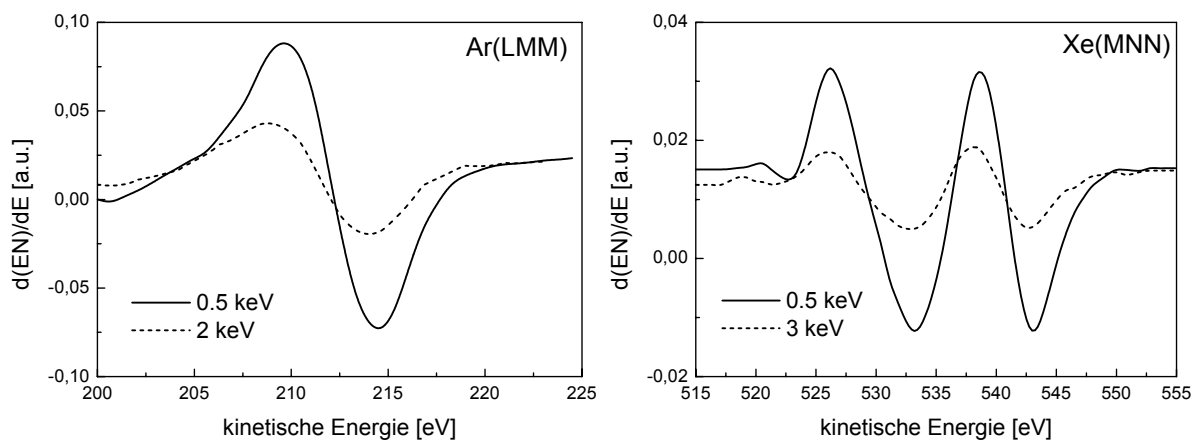


Abb. 5.2 Augerübergänge der im SiC eingebauten Argon- und Xenonionen für unterschiedliche kinetische Energien der Ionen beim senkrechten Beschuss.

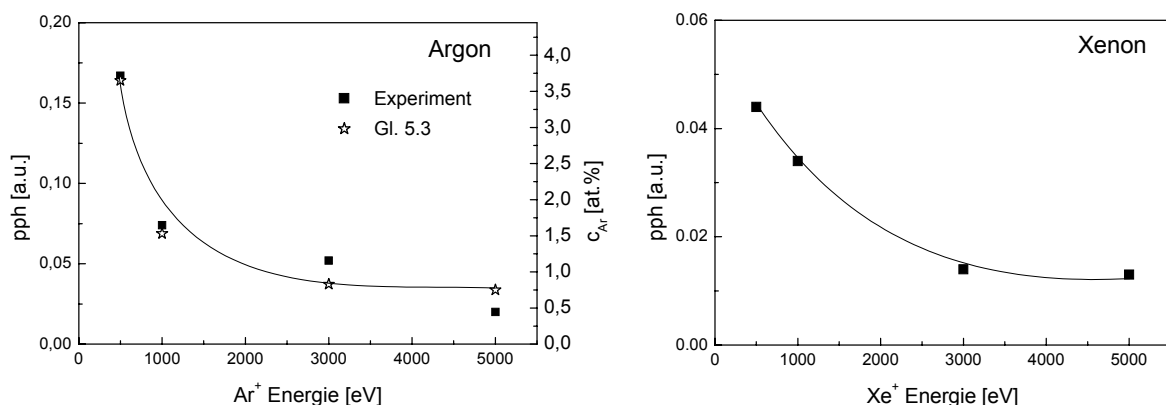


Abb. 5.3 Abhängigkeit der stationären Argon- und Xenon-Auger-Signale von der Beschussenergie (senkrechter Einfallswinkel).

Aus der klassischen Implantationstheorie kann man die Konzentrationsprofile von implantierten Teilchen in Sättigung wie folgt berechnen [Rys78]:

$$N(z) = \frac{N}{2Y} \operatorname{erfc} \left(\frac{z - R_p}{\sqrt{2} \Delta R_p} \right), \quad (5.1)$$

wobei N die atomare Dichte des Festkörpers, R_p die Ionenreichweite und ΔR_p die Halbwertsbreite der Ionenverteilung (gilt für die gaußsche Verteilungsfunktion) ist. Das Maximum liegt an der Oberfläche ($z = 0$) und für $R_p > 3\Delta R_p$ kann man schreiben:

$$N_{\max} \approx \frac{N}{Y}. \quad (5.2)$$

N ist die atomare Dichte des implantierten Festkörpers und Y ist die Sputterausbeute, die größer als 1 sein muss. Da alle Sputterausbeuten für Energien 0.5 und 1 keV kleiner als 1 waren, kann Formel 5.2 nicht angewandt werden. Auch für die Energien 3 und 5 keV liefert Gl. 5.2 unglaubliche Werte [Kem78, Sin81]. So erhält man beispielsweise für SiC, implantiert mit 5 keV Ar ($Y = 1.60$), eine maximale Ar-Konzentration von 63%. Dieser Wert liegt offensichtlich unrealistisch hoch. Trotz dieser Diskrepanz wurde in [Kir79] berichtet, dass die Argon-Oberflächenkonzentration beim Beschuss von Silizium mit $1/Y$ skaliert. Ein ähnliches Verhalten beobachteten Singer et al. beim Argoneinbau in GaAs. Kudriavtsev hat eine andere Formel vorgeschlagen, die auch für $Y < 1$ einsetzbar ist [Kud00]:

$$C_i^s \approx \frac{\beta}{Y(M_t/M_i)^{2m} (U_t/U_i)^{1-2m} + \beta}. \quad (5.3)$$

In Gl. 5.3 ist β der Akkommodationskoeffizient, $M_{i,t}$ sind die atomaren Massen des Ions und der Festkörperatome, $U_{i,t}$ sind die entsprechenden Oberflächenbindungsenergien und m ist der Exponent aus der E^{1-2m} -Näherung der nuklearen Bremsstärke. Bei der Anwendung der Sputterausbeuten aus Tab. 4.1, der Oberflächenbindungsenergie 4 eV für die Atome des Festkörpers und 0.03 eV für das eingebaute Argon [Vee86] bleibt nur der Akkommodationskoeffizient β als Fitparameter übrig. Die beste Übereinstimmung mit den gemessenen Argonkonzentrationen konnte für $\beta = 0.24$ erreicht werden (Abb. 5.3). Der Akkommodationskoeffizient beschreibt die Menge der im Festkörper verbleibenden Ionen. Für Argon ist bei kleinen Fluenzen ($< 10^{15} \text{ cm}^{-2}$) und Energien ≥ 1 keV, $\beta \approx 1$. Bei höheren Fluenzen sinkt β auf ~ 0.1 [Vee88]. Der aus der Anpassung ermittelte Akkommodationskoeffizient ist zu hoch, bezogen auf den experimentellen Wert. Dennoch kann, angesichts der Ungenauigkeit in der Oberflächenbindungsenergie des eingebauten Argon und der Messgenauigkeit, das Modell von Kudriavtsev als ausreichend für die Beschreibung des Argoneinbaus in SiC betrachtet werden.

Die Abhängigkeit der *p_{ph}*-Werte für das eingebaute Xenon in SiC von der Beschussenergie weist auch eine Senkung der Xenonkonzentration an der Oberfläche mit der Ionenenergie auf. Die Steilheit dieser Abhängigkeit ist jedoch kleiner als die beim Argon.

Die Notwendigkeit eines zusätzlichen Prozesses zum Abtrag der implantierten Edelgase durch Sputtern konnte auch mit Hilfe der Simulation nachgewiesen werden. Das Programm TRIDYN wurde benutzt, um die Implantation von Ionen während des Sputterns zu berechnen. Die Schwellenergie für die Bewegung der Teilchen im Festkörper (Edelgasatome und auch die an den Stoßkaskaden beteiligten Festkörperatome) wurde auf 0.2 eV gesetzt. Die Verschiebungsenergie von 8 eV wurde für die Festkörperatome verwendet, so dass unterhalb dieser Energie kein Massentransport stattgefunden hat, sondern nur das Moment weitergegeben wurde. Die Verschiebungsenergie und die Oberflächenbindungsenergie für die bereits implantierten Edelgasatome wurde auf 0.2 eV gesetzt. Die Anwendung des aus der Literatur bekannten Wertes 0.03 eV als Oberflächenbindungsenergie wäre nicht korrekt, weil die Kaskaden nur bis 0.2 eV verfolgt wurden. Obwohl die Anwendung des BCA-Ansatzes in der Simulation unterhalb einiger eV begrenzt ist [Eck91], erlauben die Simulationen einen Einblick in die mögliche Entwicklung der Situation in der oberflächennahen Region während des Sputterns unter Einbeziehung der Ionenimplantation, wenn nur ballistische Effekte wirksam sind. Abb. 5.4 zeigt die Konzentrationsprofile unterhalb der Oberfläche von SiC nach dem Beschuss mit 500 eV Ar⁺-Ionen unter 0° mit einer Fluenz von $7 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$. Die Sputterausbeute für Argon war an dieser Stelle ~ 1 , d.h. der Gleichgewichtszustand wurde bereits erreicht (im Gleichgewicht ist die Ausbeute für vorher implantierte Teilchen in Abwesenheit der Reflexion gleich 1). Die niedrige Oberflächenbindungsenergie für Argon und die niedrige Verschiebungsenergie für die Festkörperatome (Si und C) sorgten für eine niedrige Argonkonzentration an der Oberfläche (4.8%). Unterhalb der Oberfläche bildete sich aus den implantierten Teilchen eine stark mit Argon angereicherte Schicht mit einem Maximum von 61% in der Tiefe von 2.5 nm. Eine Schicht mit einem so hohen Anteil an Edelgasatomen kann nicht stabil sein, ein solcher Zustand ist unrealistisch. Die Schlussfolgerung besteht darin, dass die in der Simulation berücksichtigten Effekte (Stoßkaskaden) nicht allein die Implantation von Edelgasen in den Festkörper während des Sputterns erklären können, sondern zusätzliche Prozesse, wie z.B. die Diffusion zur Oberfläche und das Ausgasen, stattfinden müssen.

Das Programm TRIDYN bietet zwei einfache Modelle zur Behandlung der implantierten Teilchen während des Sputterns. In beiden Modellen wird zuerst eine maximal erlaubte Konzentration von Beschussteilchen im Festkörper festgelegt. Wenn dieser Wert überschritten wird, wird die über dem Grenzwert liegende Menge

- a) aus dem Festkörper entfernt (Reemission),
- b) in Richtung Oberfläche verschoben, der Überschuss an der Oberfläche verlässt den Festkörper.

Abb. 5.4 zeigt die mit den beiden o.g. Modellen berechneten Tiefenprofile von Argon in SiC nach dem Abtrag mit 0.5 und 3 keV unter 0° Einfallswinkel. Die Parameter der Simulation wurden genauso gesetzt wie im Fall der unbegrenzten Implantation (s. oben). Die maximale Konzentration wurde auf 3% gesetzt. Die mit dem einfachen Diffusionsmodell (b) berechneten Tiefenprofile weisen eine konstante Argonkonzentration von der Oberfläche bis 2.5 nm für 0.5 keV Beschuss und bis 7.5 nm für 3 keV Argonenergie auf. Nach der Anwendung des Reemissionsmodells (a) zur Implantation des Argons in SiC erhält man einen Anstieg der Argonkonzentration auf den ersten 0.4 nm für 500 eV, für 3 keV weitet sich die Anstiegsregion bis ca. 1 nm auf. Weiterhin verlaufen beide Tiefenprofile genauso, wie es mit dem Diffusionsmodell berechnet wurde. Dennoch ist auch die Anwendung der o.g. Modelle nicht ausreichend, um die gemessenen Energieabhängigkeiten in Abb. 5.3 zu beschreiben.

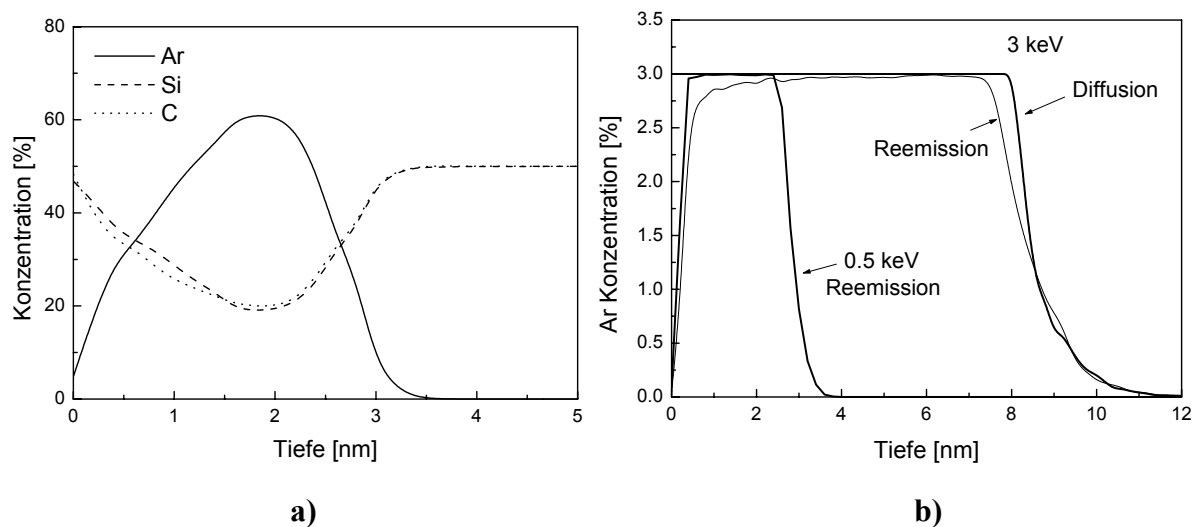


Abb. 5.4 (a) Mittels TRIDYN berechnetes Konzentrationsprofil, das sich beim Sputtern von SiC mit 0.5 keV Ar^+ unter 0° im Sputtergleichgewicht einstellt. Die Fluenz der Ionen betrug $7 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$. In die Simulation wurden nur ballistische Effekte einbezogen, d.h. alle Argonionen, die am Kaskadenende im Festkörper verbleiben, werden eingebaut. (b) Argonkonzentrationsprofile, berechnet mit TRIDYN, für unterschiedliche Modelle zur Behandlung der implantierten Ionen (Diffusion zur Oberfläche oder Reemission) mit maximal erlaubter Konzentration von 3%.

Die Winkelabhängigkeit der Implantation wurde für Argon mit den Energien 1 und 5 keV gemessen. Die Ergebnisse sind in Abb. 5.5 dargestellt. Weil der Winkel zwischen dem

Elektronenanalysator und der Ionenkanone in der Messanlage festgesetzt war und die Winkeländerung durch Positionierung der Probe zur Ionenkanone und dadurch auch zum Analysator geändert wurde, war eine Normierung der gemessenen Signale notwendig. Zu diesem Zweck wurden die Augersignale von Argon auf die Summe der Kohlenstoff- und Silizium-Augersignale $pph_{Si} + pph_C$ normiert. Aus Abb. 5.5 geht hervor, dass für den Beschuss mit 1 keV Argonionen die Konzentration der implantierten Teilchen an der Oberfläche mit Erhöhung des Einfallswinkels zunächst steigt und ein Maximum erreicht. Danach, für Winkel $> 50^\circ$, fällt die Argonkonzentration mit steigendem Einfallswinkel. Im Fall von 5 keV Beschuss steigt die Argonkonzentration mit wachsendem Einfallswinkel und erreicht ein flaches Maximum bei 70° . Bei diesem Winkel wurden gleiche Argonkonzentrationen für beide Beschussenergien (1 und 5 keV) gemessen. Für Einfallswinkel größer als 70° wurde eine Wandlung der Energieabhängigkeit der Argonimplantation festgestellt. Für Winkel $> 70^\circ$ fällt die Argonkonzentration an der Oberfläche mit steigendem Einfallswinkel ab. Gl. 5.3 ist unzureichend für die Beschreibung dieser Abhängigkeiten und ein anderes Modell steht zur Zeit noch nicht zur Verfügung.

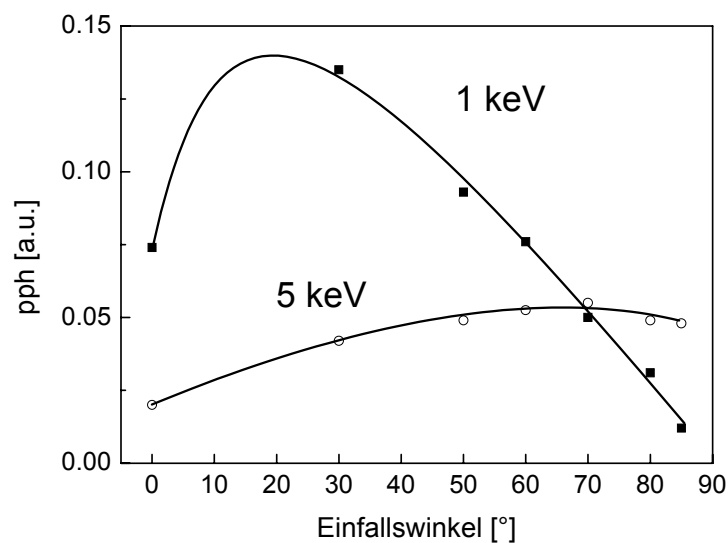


Abb. 5.5 Winkelabhängigkeit des Argoneinbaus in 3C-SiC für die kinetischen Energien der Ionen von 1 und 5 keV.

Im folgenden Abschnitt werden Messungen zu Tiefenprofilen der eingebauten Ionen vorgestellt. Bei der Messung der Tiefenprofile des eingebauten Argons wurde darauf geachtet, dass die Wirkung des einfallenden Ionenstrahls während des Sputterns auf das bereits eingebaute Argon minimal war. Dazu wurde die Energie des Argonstrahls auf 300 eV reduziert und der Einfallswinkel bei 80° gehalten. Unter diesen Bedingungen konnte keine zusätzliche Implantation von Argon beobachtet werden und die von Stoßkaskaden betroffene Region wurde

mit Hilfe einer Simulation kleiner als 1 nm berechnet. Die Abtragsrate für diese Beschussbedingungen wurde mittels Kratertiefenmessungen bestimmt. Abb. 5.6 zeigt die gemessenen Tiefenprofile von Argon, das während des Sputterns in SiC implantiert wurde. Für das Experiment mit senkrechtem Einfallswinkel wurden SiC-Schichten vorgespüttet. Das Vorsputtern dauerte so lange, bis sich die Augersignale, gemessen an der behandelten Oberfläche, mit fortschreitendem Sputtern nicht mehr veränderten. Dieser Zustand indizierte das Erreichen des Gleichgewichts. Die Experimente mit dem Beschuss unter 80° wurden an 6H-SiC-Einkristallen durchgeführt.

In allen Fällen kann ein monotoner Abfall der Argonkonzentration über die Tiefe beobachtet werden. Die Ausnahme bildet das Argonprofil nach dem Beschuss mit 5 keV Ionen unter 0° Einfallswinkel. Hier steigt zuerst das Argonsignal bis in die Tiefe von 6 nm, wo es ein flaches Maximum erreicht. Die Existenz eines Maximums kann jedoch für alle Argonprofile vermutet werden. Die Oberfläche (gemeint sind die ersten 2 bis 3 Monolagen) wird auf jeden Fall weniger Argon beinhalten als die tieferen Regionen. Die Ursache dafür ist die sehr niedrige Oberflächenbindungsenergie und die Rückstoßimplantation der bereits eingebauten Argonatome (*recoil implantation*). Diese Maxima konnten hier nicht aufgelöst werden. Die bei dem Tiefenprofilierungsprozess eingesetzten Ionen wirken auf die Oberfläche bis ca. 0.6 nm Tiefe ein. Die dadurch eingebrachte Energie trägt dann zur erhöhten Diffusion der bereits eingebauten Argonatome bei, die sich dann in Richtung Oberfläche entlang der Defekte bewegen und dort den Festkörper verlassen (das Gassputtern [Ere69]). Die Informationstiefe der Ar-Augerelektronen, abgeleitet von der Dämpfungslänge der Augerelektronen (0.6 nm), verursacht eine Verschmierung der gemessenen Profile ($\Delta z_\lambda = 0.7\lambda = 0.4 \text{ nm}$). Die Oberflächenrauheit der benutzten Proben betrug 0.8 nm für einen Beschuss unter 0° und 0.6 nm für 80° (*rms*-Werte). Die Tiefenaufösung der Messung kann aus dem quadratischen Mittelwert aller Beiträge berechnet werden [Hof98]:

$$\Delta z = \sqrt{\sum_k^{m,r,i} \Delta z_k^2}, \quad (5.4)$$

die Indizes r und i stehen für atomare Durchmischung, Rauheit und Informationstiefe. Für den senkrechten Beschuss ergibt sich die Auflösung 1.2 nm und für 80° Einfallswinkel 1 nm.

Die experimentell ermittelten Argonprofile wurden berechneten Argonprofilen gegenübergestellt. Die theoretischen Implantationsprofile $N(z)$ wurden wie in [Rys78] gemäß

$$N(z) = \int_0^t g(z + rt', t') dt' \quad (5.5)$$

berechnet. In Gl. 5.5 steht z für Tiefe, t für Sputterzeit und r für Sputterrate. Die Verteilungsfunktion $g(z)$ für die Implantation wurde mit dem statischen MC-Programm TRIM.CAS berechnet. Für $t \rightarrow 4$ wird eine Sättigung erreicht. Die Maximalkonzentration liegt an der Oberfläche ($z = 0$) und hängt von der Sputterrate und dem Akkommodationskoeffizienten ab. Für den Vergleich mit den Messungen wurden die berechneten Profile auf das Argonsignal auf der Oberfläche normiert. Abb. 5.6 präsentiert den Vergleich bei senkrechtem Beschuss. Für beide Energien, 1 und 5 keV, dehnen sich die gemessenen Argonprofile weiter als die theoretischen aus. Als eine plausible Erklärung für diese Diskrepanz und auch für das Maximum im gemessenen Argonprofil für 5 keV kann die Rückstoßimplantation betrachtet werden. Dieser Prozess, der zum Transport der im SiC schon vorhandenen Argonatome tiefer in den Festkörper beiträgt, ist in Gl. 5.5 nicht berücksichtigt. Im Kontrast zum senkrechten Beschuss stehen die Ergebnisse zum Beschuss unter streifendem Einfallswinkel. Die gemessenen Argonprofile weisen einen flacheren Einbau auf als die Theorie vorhersagt (Abb. 5.7). Die Differenz kann zum Teil auf die Tiefenauflösung der Messung und zum Teil auf die Nachweisgrenze der AES zurückgeführt werden. Die systematisch kleinere Einbautiefe lässt aber vermuten, dass der Effekt der Rückstoßimplantation bei streifendem Beschuss keine Rolle spielt.

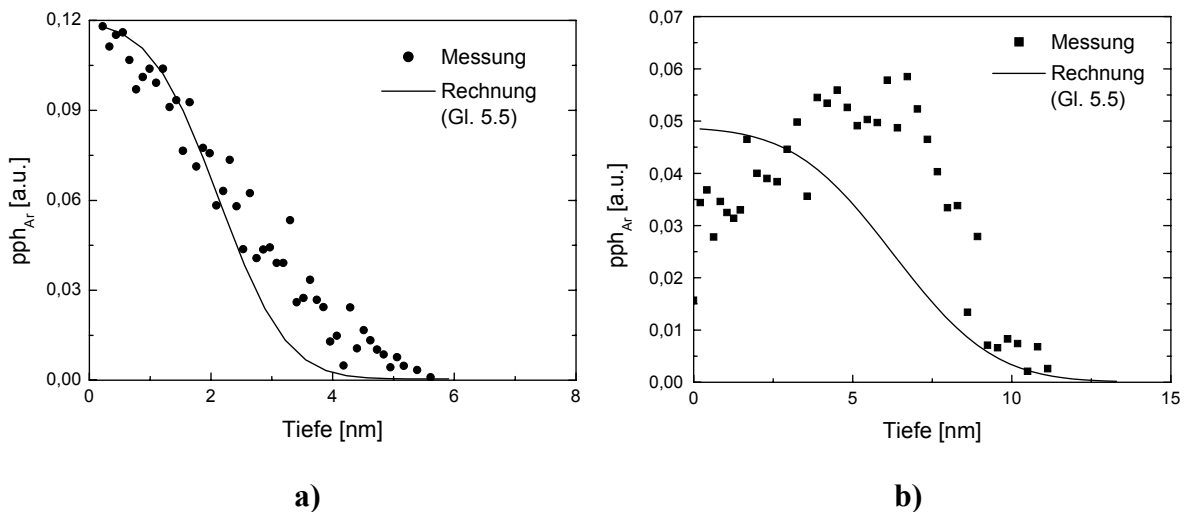


Abb. 5.6 Vergleich zwischen den gemessenen und theoretisch berechneten Argonprofilen in SiC beim Sputtern mit 1 keV (a) und 5 keV (b) Ar^+ -Ionen unter senkrechtem Einfallswinkel. Von dem gemessenen Signal wurde bereits der Rauschpegel abgezogen.

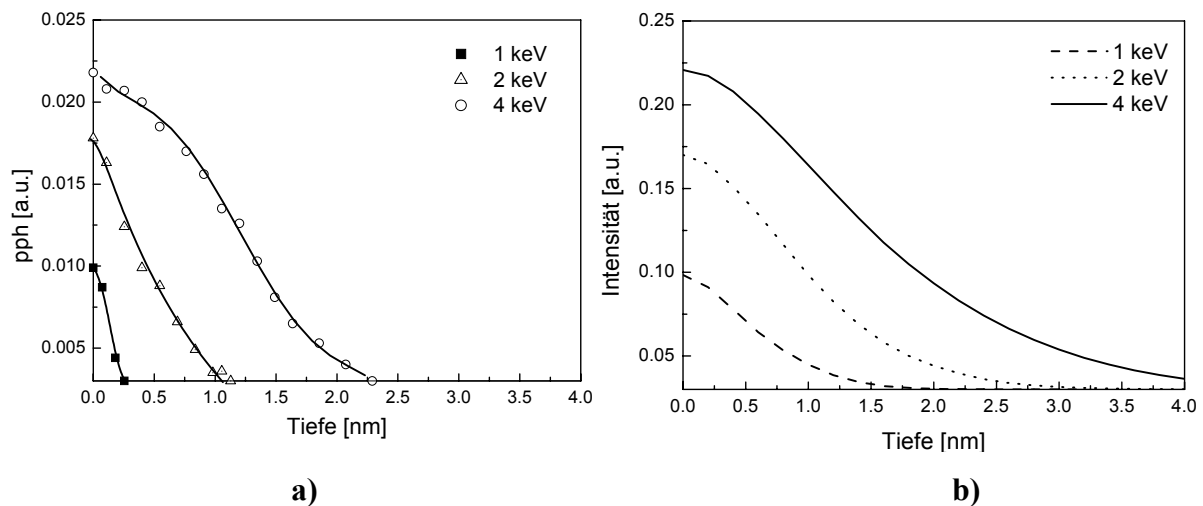


Abb. 5.7 a) Die gemessenen Argonprofile in SiC nach dem Beschuss unter 80° mit 1, 2 und 4 keV Ar^+ -Ionen. b) Aus Gl. 5.5 berechnete Argonprofile für dieselben Bedingungen wie (a), die Ergebnisse wurden so dargestellt, dass ein einfacher Vergleich mit den Messdaten möglich ist.

Die vorgeschlagene Methode zur Messung der Argontiefenprofile konnte anhand der Ergebnisse aus der Literatur verifiziert werden. Der Vergleich wurde für ein im Argonplasma gereinigtes (100) Si-Substrat durchgeführt. Im Plasmaätzprozess fielen die Argonionen senkrecht auf die Oberfläche mit einer Energie von 1.5 - 2 keV. Anschließend wurde die Probe in das Spektrometer transferiert und ein Tiefenprofil gemessen. Abb. 5.8 zeigt das gemessene Argonprofil. Aufgrund des Probentransfers an der Luft kam es zur Kontaminierung der Oberfläche, deshalb konnte auf der Oberfläche anfänglich kein Argon nachgewiesen werden. Nach den ersten 3 Sputterschritten war die Adsorbatschicht entfernt und auf diese Stelle wurde der Nullpunkt der Tiefenskala gesetzt. Vergleichen wir das gemessene Argonprofil mit dem von Huang et al. [Hua94b], ergibt sich eine hinreichende Übereinstimmung. In [Hua94b] wurde das Tiefenprofil des in Si eingebauten Argons mittels der nichtdestruktiven MEIS-Methode (*medium-energy ion scattering*) ermittelt. Für eine Argonenergie von 1.5 keV wurde eine gaußähnliche Profilkurve mit dem Maximum bei 4 nm gemessen. Das Argonprofil in Abb. 5.7 weist ebenfalls ein Maximum bei 4 nm. Aufgrund der höheren mittleren kinetischen Energie der Argonionen (bis 2 keV) erwartet man die Position des Maximums tiefer als in [Hua94b]. Die aufgetretene Verschiebung liegt unterhalb der erreichbaren Messgenauigkeit.

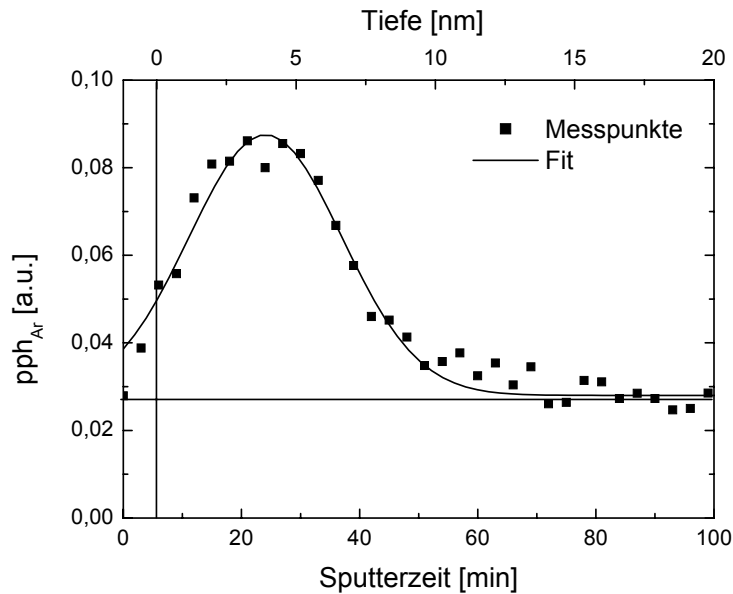


Abb. 5.8 Das gemessene Tiefenprofil von in Si eingebautem Argon nach dem Sputterätzreinigungsprozess in Ar-Plasma. Die kinetische Energie der Ar^+ -Ionen betrug 1.5 - 2 keV. Die horizontale Linie stellt das Rauschniveau dar, die vertikale Linie repräsentiert die Grenzfläche zwischen der Adsorbat- bzw. Oxidschicht und dem Substrat.

5.1.2 Einbau von Neon in SiC und Si

Eine andere Situation als beim Argon- und Xenonsputtern von SiC stellte sich bei der Anwendung von Neon ein. Während bei Argon und Xenon keine Änderungen in der Form und der Lage ihrer Augerübergänge beobachtet werden konnten, wies der Augerübergang von in SiC eingebautem Neon Änderungen auf, wenn die Ionenenergie variierte. Um dennoch eine Quantifizierung zu ermöglichen, wurden die Augerpeaks von Neon integriert und anschließend der lineare Untergrund abgezogen. Nach dieser Prozedur wurden die Flächen unter den Peaks gemessen, die als Maß für die Konzentration in Abb. 5.9 dargestellt sind. Auch hier ist, wie im Fall von Argon und Xenon, ein Abfall der Konzentration vom implantierten Gas an der Oberfläche mit steigender Ionenenergie zu beobachten. Die sehr kleine negative Steigung in dieser Abhängigkeit kann auf die hohe Informationstiefe der zu Neon zugehörigen Augerelektronen (2 nm bei 810 eV in Si) zurückgeführt werden. So wie im Fall von Xenon war eine genauere Angabe über die Konzentration von Neon in der oberflächennahen Region aufgrund fehlender Referenzen nicht möglich.

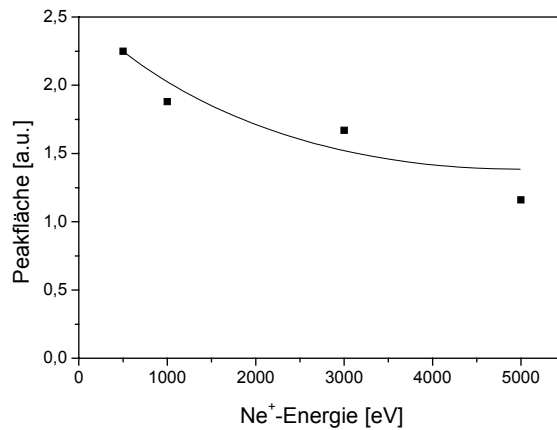


Abb. 5.9 Abhängigkeit der Peakfläche der Ne-Augerpeaks als Maß für die Oberflächenkonzentration von eingebautem Neon von der kinetischen Energie der einfallenden Ne^+ -Ionen.

Die Veränderungen der Neon-Augerpeaks wurden durch das Erscheinen eines zusätzlichen Peaks verursacht. Beim Sputtern mit einer Energie von 0.5 keV wies der Augerübergang von Neon nur einen Peak bei 816.5 eV auf (Abb. 5.10). Mit Erhöhung der Energie auf 1 keV verbreiterte sich der Augerübergang von Neon in Richtung der niedrigeren Energien und bei 5 keV tauchte ein neuer Peak bei 811 eV auf, so dass ein deutlicher Doppelpack beobachtet werden konnte. Ein ähnlicher Effekt zeigte sich beim Einbau von Neon in das Si-Substrat. Abb. 5.10b präsentiert Augerpeaks von Neon, das in Silizium unter Beschussenergien von 0.5, 1 und 5 keV implantiert wurde. Diese Peaks werden am Ende der Tiefenprofilierungsprozesse aufgenommen, nachdem die SiC-Schicht abgetragen ist. Dabei wurden die folgenden Unterschiede zur Neonimplantation in SiC festgestellt. Die Anzeichen für einen Doppelpack sind schon beim Beschuss mit 1 keV erkennbar. Bei 5 keV ist der Peak bei 811 eV dominanter als der Peak bei 816.5 eV. Diese Effekte können wie folgt kurz zusammengefasst werden: beim Sputtern von SiC und Si mit Neon ist zusätzlich zum Augerpeak bei 816.5 eV vom implantierten Neon ein neuer Peak bei 811 eV zu bemerken. Die Intensität des zusätzlichen Peaks steigt mit der Energie des Ionenstrahls und ist bei derselben Energie höher bei dem in Silizium eingebauten Neon als im Siliziumkarbid.

Die Edelgasionen (inzwischen schon neutralisiert), die sich nach dem Eindringen in den Festkörper am Ende ihrer Bewegung befinden, können entweder eingebaut werden oder sie diffundieren zur Oberfläche. Die diffundierenden Atome können auch auf ihrem Weg zur Oberfläche eingefangen werden. Im Kristallgitter werden die Einbau- und Einfangstellen für Edelgase vor allem durch Leerstellen gebildet. In einem stark gestörten Einkristall, also auch im Fall des Sputterns von SiC bzw. von Si, können die mit Edelgasen gefüllten Leerstellen Komplexe bilden. So entstehen im Festkörper Gasblasen. In diesen Blasen herrscht ein so

hoher Druck, dass das Gas zum Festkörper werden kann. Die Existenz solcher Gasblasen in Metallen ist gut dokumentiert (s. z.B. [Don91]). Als direkte Beweise für die Entstehung von Ar-Gasblasen in Si stellten Bangert [Ban86] und Sawyer [Saw90] TEM-Aufnahmen solcher Gebilde vor. Indirekt konnte die Existenz von Ar-Blasen in Si mittels thermischer Desorptionsspektrometrie [Fil89], Flugzeit-Massenspektrometrie [Vee86] und aus der Feinstruktur der Ar-Absorptionskante [Hua94b] nachgewiesen werden. Ein Nachweis für die Bildung von Ne-Blasen in nichtmetallischen Materialien war in keiner Publikation zu finden. Zwei Hinweise auf die Bildung von Ne-Blasen in Si und Graphit geben die Arbeiten von Markwitz et al. [Mar03] und Kim et al. [Kim02]. In der erstgenannten Arbeit wurden große Krater auf einer Si-Oberfläche mittels AFM beobachtet, nachdem das Silizium einem 20 keV Neonstrahl ausgesetzt und danach getempert worden war. In der zweiten Arbeit wird über Anomalien im Reemissionspektrum des Neons bei der Bestrahlung von Graphit berichtet. In der Realität spricht nichts gegen eine Bildung von Ne-Blasen in SiC bzw. in Si. Wenn sich diese Blasen innerhalb der Informationstiefe der Auger- oder Photoelektronen bilden würden (~ 1.8 nm), sollten sie mittels AES bzw. XPS nachweisbar sein.

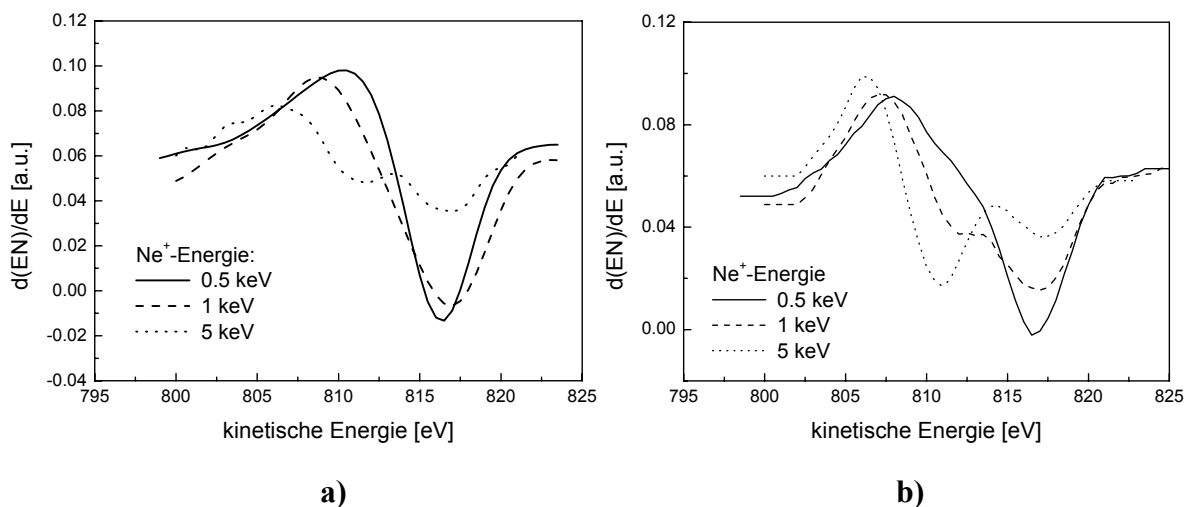


Abb. 5.10 $KL_{2,3}L_{2,3}$ -Augerpeaks von eingebautem Neon gemessen an SiC- (a) und Si-Oberflächen (b) nach dem Beschuss mit 0.5, 1 und 5 keV Ne^+ -Ionen.

Da die im Festkörper eingebauten Edelgase keine chemischen Bindungen mit ihrer Umgebung eingehen, wird die Energie der Auger- und Photoelektronen nur von der außeratomaren Relaxationsenergie beeinflusst (Gl. 2.2). Die außeratomare Relaxationsenergie R^{ea} ist mit der Polarisierbarkeit der Umgebung und damit mit der dielektrischen Konstante verbunden. Das Verhältnis zwischen der außeratomaren Relaxationsenergie und der dielektrischen Konstante ϵ_r ist [Wag76]:

$$R^{ea} = \frac{e^2}{2r} \left(1 - \frac{1}{\epsilon_r} \right), \quad (5.6)$$

wobei e die Ionenladung und r der minimale Abschirmradius der Elektronen ist. Die dielektrische Konstante von Ne als Festkörper ist ~ 1.4 [Dew03], also kleiner als die von SiC (9.8) oder Si (12). Wird ein Elektron aus einem Ne-Atom emittiert, das sich innerhalb einer Ne-Blase befindet, wird seine Energie aufgrund der kleineren Polarisierbarkeit der Umgebung niedriger, als wenn sich das emittierende Atom im Festkörper einzeln, nur von Si- oder C-Atomen umgeben, befinden würde. Nach diesen Überlegungen kann der neue Peak bei 811 eV im Augerspektrum von Neon der Bildung von Neonblasen zugeordnet werden.

Die Vermutung, dass die Asymmetrie in den Photoelektronenspektren des 1s-Niveaus von Neon auf die Existenz von zwei unterschiedlichen Zuständen des in Cu eingebauten Neons zurückzuführen ist, sprachen schon Citrin und Hamman aus [Cit74]. Abb. 5.11 zeigt 1s- und 2s- Photoelektronenspektren von Neon, das in Silizium während des Sputterns unter 45° eingebaut wurde. Die XPS-Messungen wurden im Oberflächenanalytikmodul der MBE-Anlage von Omicron realisiert. Das Sputtern wurde mit 0.5 und 5 keV durchgeführt. Aus diesen Spektren geht eindeutig hervor, dass mindestens zwei Peaks notwendig sind, um die gemessenen Spektren beschreiben zu können. Alle Peaks wurden in zwei Komponenten zerlegt. Die Komponente mit niedrigerer kinetischer Energie entspricht den von Neon umgebenen Neon-Atomen, diejenige mit höherer kinetischer Energie kann den einzeln verstreuten Ne-Atomen im Silizium zugeordnet werden. Die Anteile der zu Ne-Blasen zugeordneten Komponenten sind für die höhere Sputterenergie größer (54% für beide Ne(1s)- und (2s)-Peaks) als für die niedrige Sputterenergie (33% für Ne(1s) und 43% für Ne(2s)). Das korreliert mit den Ergebnissen der AES an senkrecht gesputterten SiC- und Si-Oberflächen. Wenn sich Neon, eingebaut im Festkörper, einzeln verstreut oder in Blasen befinden soll, müsste noch ein zusätzlicher Zustand beobachtbar sein. Dieser Zustand ist mit den äußersten Ne-Atomen der Ne-Blasen verbunden. Einen Hinweis auf mehr als zwei Zustände von Neon im Silizium geben die hochaufgelösten röntgenstrahlangeregten Augerspektren, die gleichzeitig mit den Photoelektronenspektren aufgenommen wurden. Der Ne(KL_{2,3}L_{2,3})-Augerübergang findet in zwei Konfigurationen statt: 1S_0 und 2D_2 . Die Intensität des zweiten Überganges ist 6 mal höher als die Intensität des ersten Übergangs. Die kinetische Energie der entsprechenden Augerelektronen in der Gasphase beträgt 800.6 und 804.2 eV [Mat73, Sch97b]. Es ist zu erwarten, dass sich sowohl die Intensitätsverhältnisse als auch die Differenz in der energetischen Lage bei im Festkörper eingebautem Neon nicht ändern. Abb. 5.12 zeigt die geglätteten, röntgenangereg-

ten Ne(KL_{2,3}L_{2,3})-Augerspektren, die zusammen mit den Photoelektronenspektren in Abb. 5.11 aufgenommen wurden. Die größere Trennung zwischen den einzelnen Augerpeaks im Vergleich zu den Photoelektronenspektren entsteht aufgrund der höheren Relaxationsenergie bei Augerprozessen. Im Augerspektrum von Neon in Silizium nach dem Sputtern mit 5 keV konnten vier Augerübergänge identifiziert werden (Abb. 5.12a). Der Übergang A kann zu Neon innerhalb der Blasen zugeordnet werden, der B-Übergang repräsentiert die von Si-Atomen umgebenen Neon-Atome. Einer der Übergänge C und D kann der Außenhülle der Blasen zugeordnet werden. Die Existenz des vierten Übergangs lässt einen weiteren Einfangmechanismus für die implantierten Ne-Atome vermuten, z.B. in einer Di- oder Trivakanz.

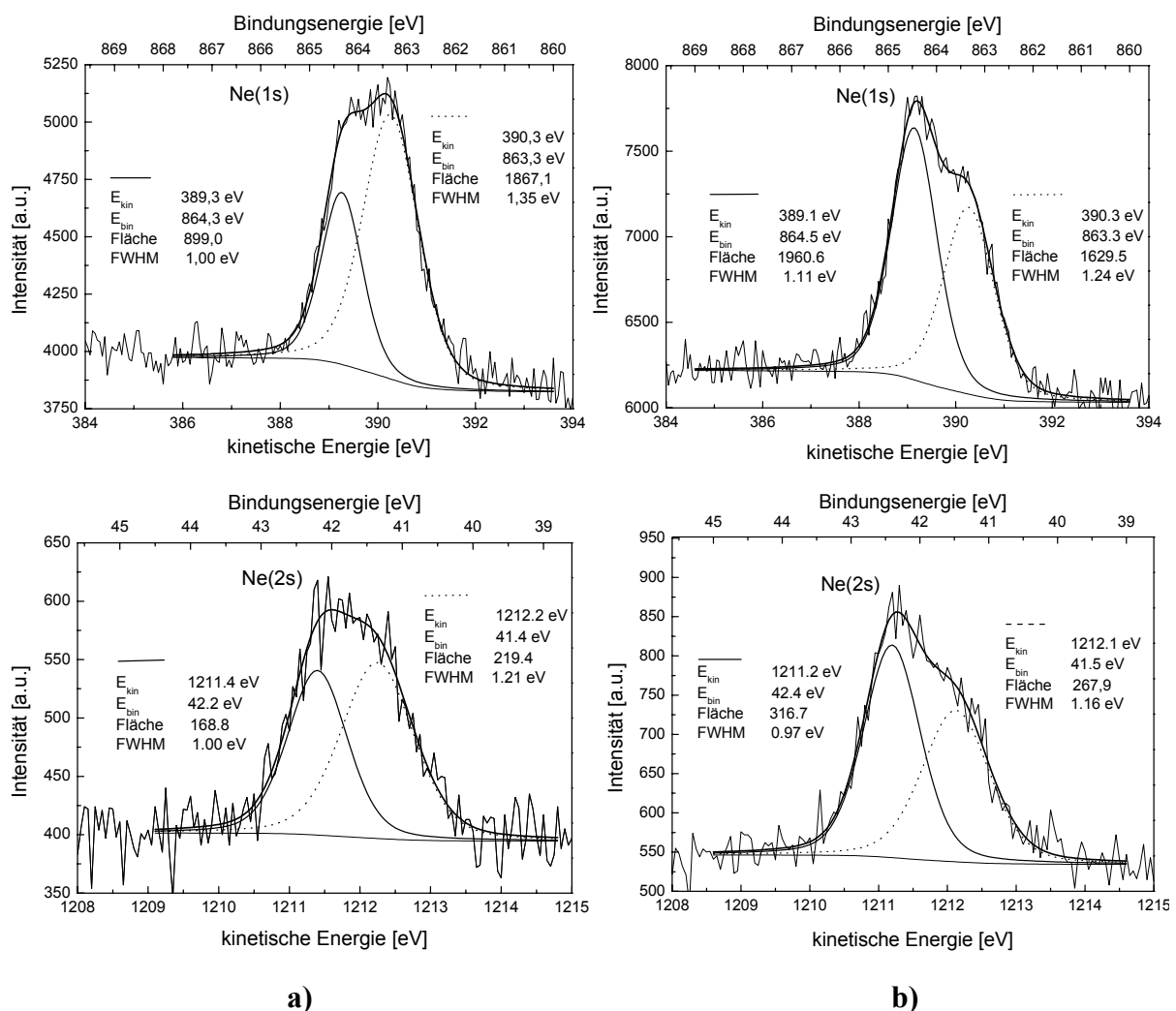


Abb. 5.11 Ne(1s)- und (2s)-Rumpfniveauspektren gemessen an Silizium nach dem Sputtern mit 0.5 (a) und 5 keV (b) Ne⁺-Ionen unter 45°. Die Photoelektronenspektren wurden mit Mg K α -Strahlung angeregt. Die Spektren wurden in jeweils zwei Peaks zerlegt. Die Parameter der einzelnen Spektren (Peaklage, Peakfläche, Halbwertsbreite (FWHM)) sind in den Graphiken aufgeführt.

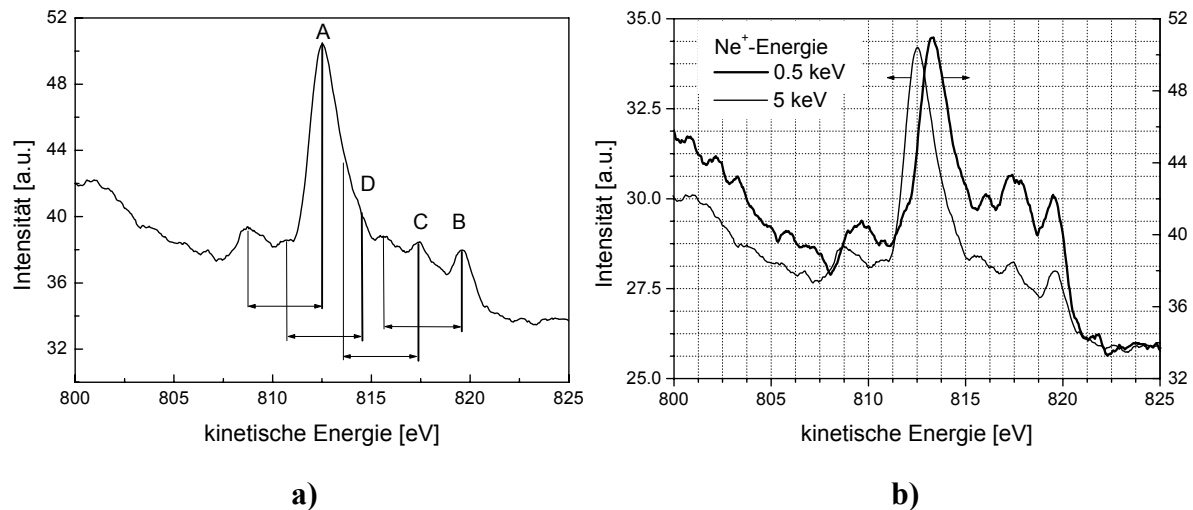


Abb. 5.12 Röntgenstrahlangeregte (XAES) $Ne(KL_{2,3}L_{2,3})$ -Spektren von in Silizium eingebautem Neon. (a) Identifizierung von verschiedenen $KL_{2,3}L_{2,3}$ -Spektren im Gesamtspektrum von Neon nach dem Beschuss mit 5 keV. Die Hauptübergänge 2D_2 sind mit einer dicken Linie gekennzeichnet, der dazugehörige 1S_0 -Übergang, dessen Position 3.6 eV tiefer liegt, ist mit einer dünnen Linie markiert. (b) Vergleich zwischen den XAES-Spektren nach dem Beschuss mit 0.5 und 5 keV Ne^+ -Ionen. Die Anreicherung der B- und C-Übergänge, wie sie in (a) identifiziert wurden, ist in dem Spektrum nach Ionenbeschuss mit einer Energie von 0.5 keV markant.

Die präsentierten Augerspektren zeigen die Komplexität des Neoneinbaus in SiC und Si. Die Frage, warum keine Ar- oder Xe-Blasen beobachtet werden konnten, erscheint an dieser Stelle berechtigt. Die mittels TEM nachgewiesenen Ar-Blasen in Si wurden nur für getemperte Proben beobachtet. Die Auflösung der in [Saw90, Ban86] präsentierten TEM-Aufnahmen war jedoch zu klein, um Ar-Komplexe, die nur aus wenigen Ar-Atomen bestehen, nachweisen zu können. Die anderen Nachweismethoden, wie z.B. die thermische Desorptionsspektroskopie [Fil89] oder die Messung der Feinstruktur der Ar-Absorptionskante, sind empfindlich genug, um auch die kleineren Ar-Strukturen anzeigen zu können. Mit diesen Methoden wird das gesamte Oberflächenvolumen analysiert, während die AES sehr oberflächenempfindlich ist. Das bedeutet, dass die AES-Ergebnisse die Existenz von Ar-Blasen innerhalb der Informationstiefe der Augerelektronen ausschließen. Dieselben Überlegungen gelten auch für den Xenoneinbau.

5.2 AES-Messungen und dynamische MC-Simulationen zu Ionenstrahlinduzierten Oberflächenkonzentrationsänderungen von SiC

Zusätzlich zum Einbau der Sputterionen in den Festkörper sind Vorzugseffekte beim Sputtern und in den Stoßkaskaden eine weitere Ursache für die Veränderungen der Zusammensetzung der Oberfläche nach dem Ionenbeschuss. Ungünstigerweise erwies sich die quantitative Analyse der Oberflächenzusammensetzung von SiC mittels AES bei differenzierten Spektren als unzureichende Methode (Kap. 3). Dadurch konnten im Rahmen dieser Arbeit keine quantitativen Aussagen über die Zusammensetzung der SiC-Oberfläche in Abhängigkeit von den Ionenbeschussparametern getroffen werden. Das folgende Kapitel wird lediglich qualitative Darlegungen zum Ionenstrahleinfluss auf die Zusammensetzung der SiC-Oberfläche beinhalten.

Der Parameterraum für den Ionenstrahl, in dem eine qualitative AES-Analyse möglich ist, beschränkt sich auf die Beschussbedingungen, bei denen die Augerpeaks keine Peakformänderungen aufweisen. Unter Beibehaltung dieser Bedingungen können die Augerpeaks anhand der *p_{ph}*-Werte ausgewertet und die Messungen untereinander qualitativ verglichen werden. Für die Beschussenergie der Ionen $E > 0.5$ keV besitzen die Si- und C-Augerspektren die gleiche, von der Energie der Ionen unabhängige Form. Abweichungen der Peakform von Si(LVV)- und C(KVV)-Augerpeaks treten erst bei der Anwendung von sub-keV-Ionen und bei einem streifenden Einfallswinkel auf. Dadurch war es möglich, alle Experimente zur Bestimmung der Sputterausbeuten von SiC (Kap. 4) auch bezüglich der Ionenstrahlinduzierten Zusammensetzungsänderungen auszuwerten.

Abb. 5.13 zeigt die Abhängigkeit der $p_{ph_{Si(LVV)}} / p_{ph_{C(KVV)}}$ -Verhältnisse, die sich auf der SiC-Oberfläche nach dem senkrechten Beschuss mit Ne-, Ar- und Xe-Ionen eingestellt haben, von der Beschussenergie. Die Kontrolle der Si(LVV)- und C(KVV)-Augerübergänge für alle Parameter des Ionenbeschusses bestätigte, dass keine Änderungen in der Peakform beider Peaks auftreten. Der Si(KLL)-Peak wird nicht ausgewertet, weil die mit ihm verbundene Informationstiefe zu hoch ist. Die Informationstiefen der niederenergetischen Si- und C-Augerpeaks sind dagegen ähnlich groß; aus dem Verhältnis dieser Signale kann eine brauchbare Information gezogen werden. Die Dämpfungslängen für die niederenergetischen Si- und C-Augerelektronen betragen 0.4 und 0.7 nm, also beschreiben diese Elektronen die Oberfläche empfindlich. Es zeigt sich, dass das Si/C-Verhältnis in Abhängigkeit von der Beschussenergie der Neonionen mit steigender Ionenenergie sinkt. Im Fall der Argonionen kann keine Abhängigkeit festgestellt werden. Im Gegensatz zu Neon wurde beim Beschuss mit Xenon ein

Anstieg des $p_{ph_{Si(LVV)}} / p_{ph_{C(KVV)}}$ -Verhältnisses mit der Ionenenergie beobachtet. Aus der quantitativen Sicht bezeugen die beobachteten Änderungen nur kleine Abweichungen im Prozentbereich. Führen wir zum Vergleich eine hypothetische quantitative Analyse der auf Xenon bezogenen Daten durch, die die größten Veränderungen aufweisen. Angenommen, beim Beschuss mit 5 keV Xe^+ -Ionen entspricht das Verhältnis $p_{ph_{Si}} / p_{ph_{C}} = 2.27$ einer stöchiometrischen SiC-Oberfläche. Für das p_{ph} -Verhältnis von 1.87 beim Beschuss mit 500 eV Xe^+ -Ionen ergibt sich eine kohlenstoffangereicherte Oberfläche mit 55% C und 45% Si. In dieser Rechnung wurde die Xenonimplantation nicht berücksichtigt.

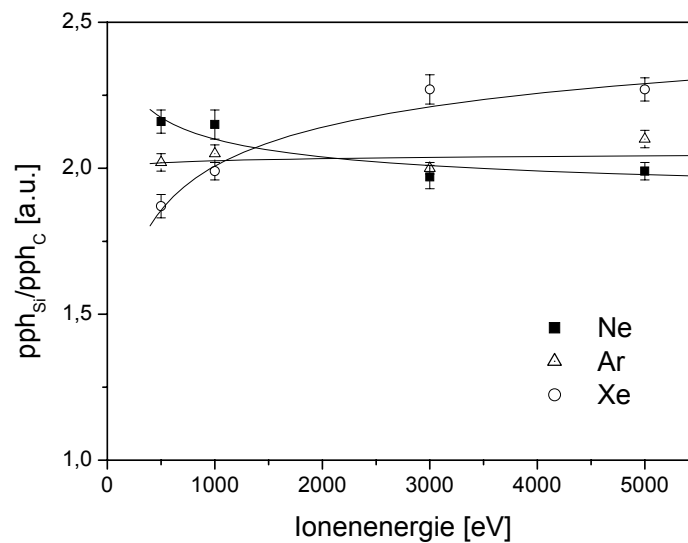


Abb. 5.13 Abhängigkeit der p_{ph} -Verhältnisse der Si(LVV)- und C(KVV)-Augerpeaks von der Ionenenergie als Maß für die ionenstrahlinduzierten Konzentrationsveränderungen an der SiC-Oberfläche. Die AES-Messungen werden an 3C-SiC-Oberflächen nach dem senkrechten Beschuss mit Neon-, Argon- und Xenonionen durchgeführt.

Die Winkelabhängigkeit der $p_{ph_{Si(LVV)}} / p_{ph_{C(KVV)}}$ -Verhältnisse wurde für den Beschuss mit 1 und 5 keV Argonionen ausgewertet (Abb. 5.14a). Aus dieser Abbildung geht hervor, dass bei senkrechtem Einfallswinkel die Zusammensetzung der Oberfläche unabhängig von der Beschussenergie der Argonionen ist, mit Erhöhung des Einfallswinkels die Oberfläche jedoch siliziumärmer für 1 keV Beschuss im Vergleich zu 5 keV wird. Für Xenon bleibt die Tendenz vom senkrechten Beschuss bestehen, d.h. eine Vergrößerung des Si/C-Verhältnisses mit steigender Energie, auch für größere Einfallswinkel, wird beibehalten (Abb. 5.14b).

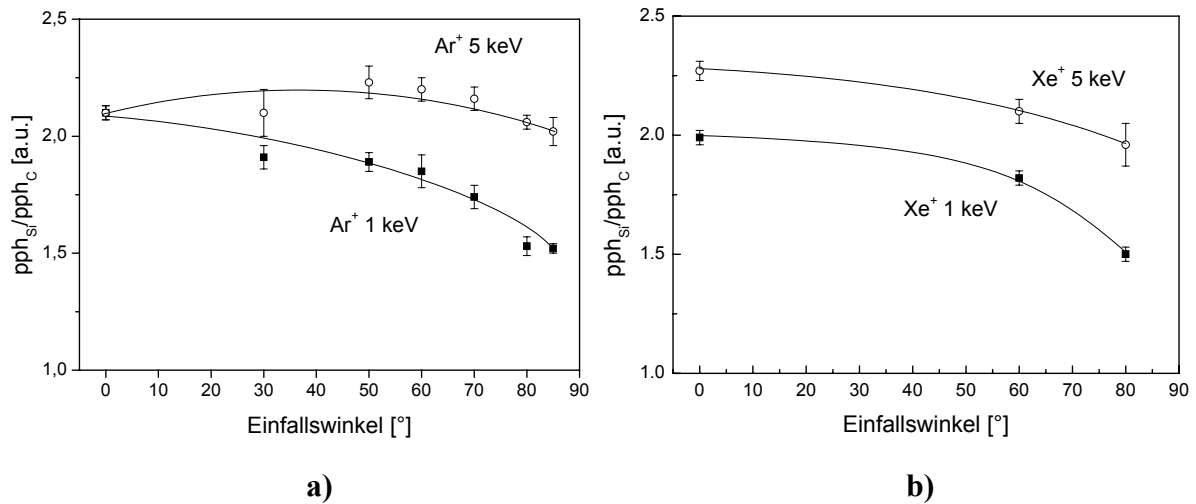


Abb. 5.14 Die Winkelabhängigkeit der *pph*-Verhältnisse der Si(LVV)- und C(KVV)-Augerpeaks für 1 und 5 keV Argon- (a) und Xenonbeschuss (b).

Auch wenn die in diesem Kapitel vorgestellten Messergebnisse nicht quantifiziert werden können, soll anhand der Theorie und der Simulationen erläutert werden, wie die Zusammensetzungsänderungen der Oberfläche beim Sputtern von Mehrkomponentenmaterialien zustande kommen. Im Anfangsstadium des Sputterns eines Materials mit der Zusammensetzung AB sind die partiellen Sputterausbeuten Y_A und Y_B nicht nur von den Konzentrationen c_A und c_B der Elemente A und B abhängig, sondern auch von deren Massen M_A und M_B . Die Bindungskräfte an der Oberfläche, U_A und U_B , werden ebenfalls eine Rolle spielen. Aus Sigmunds Sputtertheorie ergibt sich, dass die partiellen Sputterausbeuten in folgendem Zusammenhang stehen [And74]:

$$\frac{Y_A}{Y_B} = \frac{c_A}{c_B} \left(\frac{M_B}{M_A} \right)^{2m} \left(\frac{U_B}{U_A} \right)^{1-2m} \quad (5.7)$$

Dies bedeutet, dass die leichteren und die schwächer gebundenen Atome bevorzugt abgetragen werden. Dieser Prozess ist von der Ionenenergie und Ionenmasse unabhängig. Im Gleichgewicht stellen sich an der Oberfläche die Konzentrationsverhältnisse so ein, dass die partiellen Sputterausbeuten im gleichen Verhältnis wie die Volumenkonzentrationen stehen:

$$\frac{c_A^s}{c_B^s} = \frac{c_A^b}{c_B^b} \left(\frac{M_A}{M_B} \right)^{2m} \left(\frac{U_A}{U_B} \right)^{1-2m} \quad (5.8)$$

Die oberen Indizes s und b stehen für Oberfläche und Volumen. Die Oberflächenregion, auf die sich Gl. 5.8 bezieht, umfasst die Tiefen, in denen das Sputtern stattfindet (bis 3 Monolagen [Vic89]). So wie es bevorzugte Effekte im Sputterprozess gibt, existieren jene auch bei der atomaren Durchmischung und der Rückstoßimplantation. Diese beeinflussen dann die Konzentrationsverläufe tiefer unter der Oberfläche. Laut Theorie werden die leichteren Elemente nahe der Oberfläche verarmt und in den tieferen Regionen angereichert [Sig89, 95 und 00]. Des Weiteren werden die theoretischen Vorhersagen den Computersimulationen von SiC-Sputtern gegenübergestellt.

Die Simulationen der ionenstrahlinduzierten Effekte an der SiC-Oberfläche wurden mit dem Monte-Carlo-Programm TRIDYN durchgeführt [Möl88]. TRIDYN ist eine dynamische Version des TRIM.SP Programms [Bie84], die zur Simulationen von Ionenstrahlprozessen mit hoher Dosis angewandt werden kann. Mit diesem Programm können die Abtragsprozesse von Mehrkomponentenmaterialien und damit verbundene Konzentrationsänderungen innerhalb des Festkörpers berechnet werden. Auch die Abscheidung von dünnen Schichten mit Hilfe des Ionenstrahls kann simuliert werden. Die Berechnung der Stoßkaskaden erfolgt wie bereits in Kapitel 2.4 erläutert. In TRIDYN wird das Kr-C-Potential benutzt, um die zwischenatomaren Zweierstöße zu berechnen. Der Festkörper wird für die Simulation in äquidistante Schichten geteilt, deren Dicke nicht kleiner als die Gitterkonstante sein soll ($d \geq N^{-1/3}$, N ist die atomare Dichte des Festkörpers). Die Dicke dieser Schichten kann während der Simulation variieren, abhängig davon, ob Atome in der Kaskade aus der jeweiligen Schicht in eine andere Schicht verschoben wurden oder Atome von einer anderen Schicht hinzugekommen sind. Sobald der Wert der aktuellen Schichtdicke d_a nicht mehr innerhalb des erlaubten Intervalls ($0.5d, 1.5d$) liegt, werden die Inhalte dieser und der benachbarten Schichten neu bestimmt. Dies ist der s.g. Prozess der dynamischen Relaxation.

Die hier präsentierten Ergebnisse stellen immer den Gleichgewichtszustand dar, in dem sich der Zustand der oberflächennahen Region (die ionenstrahlinduzierten Konzentrationsprofile) nicht mehr mit der Ionendosis ändert. Für die Simulation des bevorzugten Sputterns verfügt das TRIDYN-Programm neben den festgesetzten Werten der Oberflächenbindungsenergie für jedes Element auch über ein einfaches Modell zur Berechnung der aktuellen Oberflächenbindungsenergie. In diesem Modell ist die aktuelle Oberflächenbindungsenergie von der Zusammensetzung der Oberfläche (die erste Schicht) abhängig. Für ein Material AB mit der aktuellen Oberflächenzusammensetzung A_xB_{1-x} wird die Oberflächenbindungsenergie des Elements A gemäß:

$$U_{A,x} = xU_A + (1-x)\frac{U_A + U_B}{2} \quad (5.9)$$

berechnet, wobei für die einzelnen Werte U_A und U_B die elementaren Sublimationswärmern angewandt werden können. Abb. 5.15 zeigt die simulierten Kohlenstoffkonzentrationsprofile unter der Oberfläche nach dem Beschuss mit 0.5 und 5 keV Xe^+ -Ionen unter 0° . Als Oberflächenbindungsenergie wurden für Silizium und Kohlenstoff einmal die elementaren Sublimationswärmern eingesetzt, einmal deren Mittelwert für beide Si- und C-Atome und einmal wurde das mit Gl. 5.9 beschriebene Modell benutzt. Wenn die Bindungskräfte an der Oberfläche für Si- und C-Atome gleich sind, sollten laut (5.8) nur die Massen der Elemente eine Rolle spielen und die Oberfläche mit dem schwereren Element angereichert werden. Dies wurde durch die Simulation bestätigt, die Oberfläche weist ca. 37% Kohlenstoff auf. Dieses Ergebnis kann aber nicht direkt mit der Theorie (Gl. 5.8) verglichen werden, da Gl. 5.8 nur die bevorzugten Effekte beim Sputtern und keine weiteren ballistischen Effekte, wie die atomare Durchmischung und die Rückstoßimplantation, berücksichtigt. Die Übereinstimmung zwischen Theorie und Simulation sollte eher über Gl. 5.7 überprüft werden, d.h. im Anfangszustand des Sputterns. Tab. 5.1 zeigt die partiellen Sputterausbeuten Y_{Si} und Y_{C} am Beginn des Sputterns für 5 keV Ne^+ -, Ar^+ - und Xe^+ -Beschuss, die für $U_{\text{Si}} = U_{\text{C}} = 6.05$ eV simuliert wurden. Aus den partiellen Sputterausbeuten wurde anschließend der Exponent m berechnet (Gl. 5.7), für den sich eine Übereinstimmung der Simulation mit der Theorie ergibt. Die berechneten Exponenten sind nur sehr wenig größer als der Exponent, der für die Kalkulation der Sputterausbeuten eingesetzt wurde ($m = 0.17$). Demzufolge kann aus Tabelle 5.1 eine gute Übereinstimmung zwischen der TRIDYN-Simulation und der Theorie gefolgert werden.

	Y_{Si} [at./ion]	Y_{C} [at./ion]	m
Ne^+	0.35	0.48	0.186
Ar^+	0.53	0.72	0.180
Xe^+	0.63	0.85	0.177

Tab. 5.1 Partielle Sputterausbeuten am Beginn des Sputterprozesses berechnet mittels TRIDYN für senkrechten Beschuss von SiC mit 5 keV Ne^+ -, Ar^+ -, und Xe^+ -Ionen. Der Exponent m wurde aus Gl. 5.7 für $U_{\text{Si}} = U_{\text{C}} = 6.05$ eV berechnet.

Bei unterschiedlichen Oberflächenbindungsenergien wirken die Effekte der Masse und der Bindung im Falle von SiC einander entgegen. Aus Gl. 5.8 für $m = 0.177$ (Tab. 5.1) ergibt sich, dass die Oberfläche stöchiometrisch sein sollte. Die Simulation zeigt aber, dass die Oberfläche stark an Silizium verarmt ist (40%). Diese Situation stellt sich offensichtlich aufgrund der Durchmischungsprozesse ein, die zur Si-Verarmung an der Oberfläche und der daraus folgenden Anreicherung von Si in den tieferen Regionen beitragen.

Die Konzentrationsprofile, die mit dem Modell der konzentrationsabhängigen Oberflächenbindungsenergie berechnet werden, weisen eine fast stöchiometrische Oberfläche auf. D.h., dass die Oberflächenbindungsenergie im Gleichgewichtszustand für Si ~ 5.4 eV und für C ~ 6.7 eV beträgt. Dass Silizium an der SiC-Oberfläche schwächer gebunden ist, bestätigt auch der Fakt, dass die Oberfläche beim Heizen von SiC-Einkristallen durch den Siliziumverlust graphitisiert [Bel86b]. Der Wert für die Si-Oberflächenbindungsenergie, wie er aus der Simulation ermittelt wurde, unterscheidet sich nur wenig von der Aktivierungsenergie des Graphitisierungsprozesses von 3C-SiC. Bellina und Zeller [Bel86b] untersuchten diesen Prozess mittels AES und berichten über eine Aktivierungsenergie von 5.2 eV.

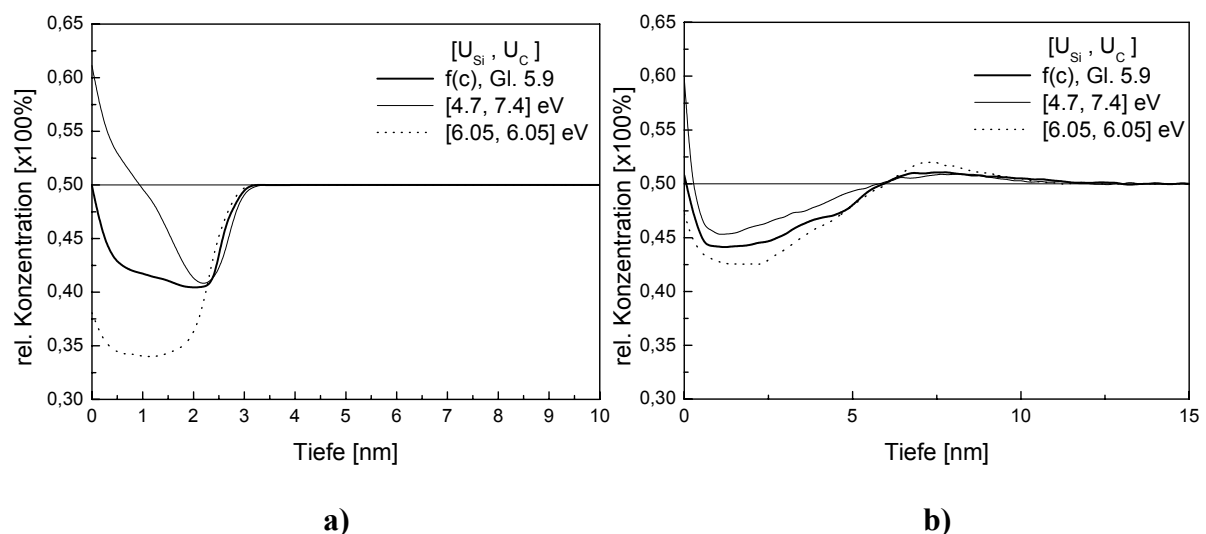


Abb. 5.15 Kohlenstoffprofile unterhalb der Oberfläche im Sputtergleichgewicht. Die Profile wurden mit TRIDYN für Xe^+ -Sputtern unter 0° für 0.5 (a) und 5 keV (b) berechnet. Als Parameter der Simulation variierten die Modelle für die Oberflächenbindungsenergie der Si- und C-Atome. Die waagerechte Linie stellt den Ausgangszustand vor dem Sputtern dar.

Der Effekt der Anreicherung von leichteren Elementen in der Tiefe bei gleichzeitiger Verarmung nah der Oberfläche tritt bei der Simulation des Xenonbeschusses nur bei der 5 keV Beschussenergie auf. Die Anreicherung der leichteren Elemente ergibt sich aus einer

höheren Reichweite derselben bei ihrer Bewegung im Festkörper. Die Möglichkeit, dass die leichteren Atome beim Zusammenstoß mit einem schwereren Atom zurückgestreut werden können, mildert den Effekt der Reichweite. Betrachtet man die Energieübertragung von Primärionen auf die Festkörperatome genauer, entdeckt man einen beträchtlichen Unterschied zwischen den $\text{Xe} \rightarrow \text{Si}$ - und $\text{Xe} \rightarrow \text{C}$ -Wechselwirkungen. Bei einem $\text{Xe} \rightarrow \text{Si}$ -Zusammenstoß kann maximal 58% der Xenonenergie auf ein Si-Atom übertragen werden, während bei einer $\text{Xe} \rightarrow \text{C}$ -Kollision ein Kohlenstoffatom höchstens 31% der Xenonenergie erhalten kann. Die Reichweite der Si-Atome ist dadurch leicht größer als die der C-Atome ($\sim 7\%$) und der Einfluss der Zurückstreuung kann überwiegen. Aus diesen Überlegungen ergibt sich, dass die Anreicherung der leichteren Atome in der Tiefe möglicherweise abhängig von der Ionenmasse ist. Dies wird in Abb. 5.16 demonstriert. Hier werden die Konzentrationsprofile von Kohlenstoff unterhalb der Oberfläche nach dem senkrechten Beschuss mit Ne^+ , Ar^+ und Xe^+ dargestellt. In diesen Rechnungen wurde das Modell der konzentrationsabhängigen Oberflächenbindungsenergie verwendet. Der Grad der Kohlenstoffanreicherung in der Tiefe ist für Neonsputtern am höchsten, gefolgt von Argon- und Xenonsputtern. Diese Tendenz spiegelt die maximal übertragbare Energie der Ionen auf die Kohlenstoffatome wider. Für $\text{Ne} \rightarrow \text{C}$ -Wechselwirkungen ergibt sich ein maximaler Energieübertrag von 94%, für $\text{Ar} \rightarrow \text{C}$ sind das 71%. Die $\text{Ne} \rightarrow \text{Si}$ - und $\text{Ar} \rightarrow \text{Si}$ -Kollisionen können maximal 97% bzw. 96% auf das Si-Atom übertragen.

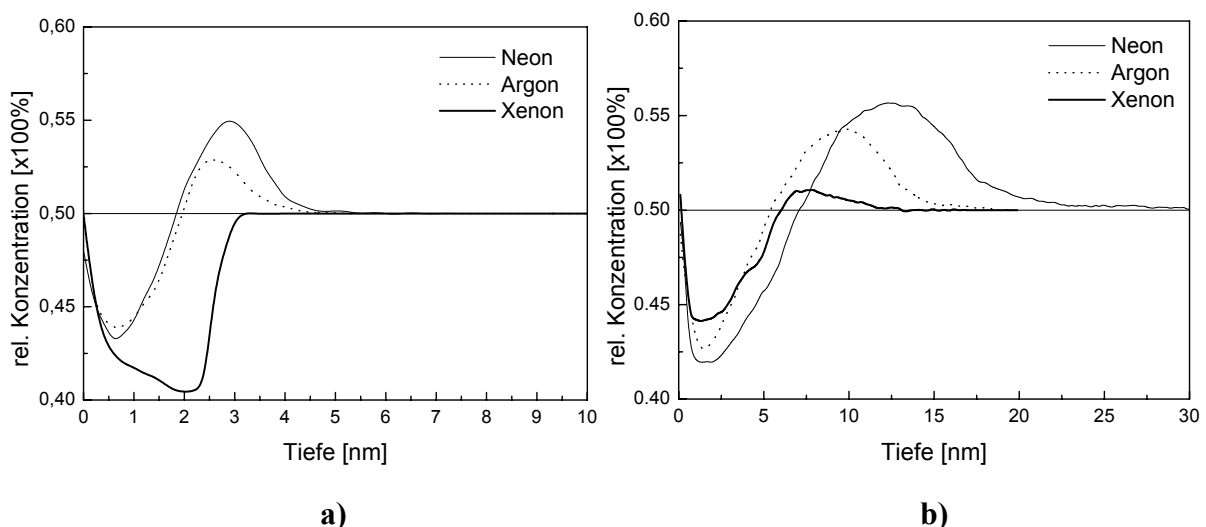


Abb. 5.16 Kohlenstoff-Konzentrationsprofile unter der Oberfläche berechnet mit TRIDYN: Vergleich zwischen den Gleichgewichtszuständen beim SiC-Sputtern mit Neon, Argon und Xenon mit Energien von 0.5 (a) und 5 keV (b) unter 0° .

Der Einfluss der Volumenbindungsenergie auf den Gleichgewichtszustand der SiC-Oberfläche ist nur geringfügig [Kos02] und wird hier nicht weiter behandelt. Einen tieferen Einblick in die Problematik der Volumenbindungsenergie bietet die Arbeit von Urbassek et al. [Urb95]. Beim nächsten Parameter, der Verschiebungsenergie, zeigte sich jedoch, dass dieser Wert, sobald er nicht gleich groß für beide Elemente (Si und C) ist, einen erheblichen Einfluss auf das Konzentrationsprofil unter der Oberfläche im Sputtergleichgewicht haben kann. Der Einfluss der Verschiebungsenergie wird nun am Beispiel des SiC-Sputterns mit Ar^+ -Ionen unter 0° mit Energien 0.5 und 5 keV dargelegt. Die Bindungen an der Oberfläche wurden mit Hilfe des konzentrationsabhängigen Modells beschrieben (Gl. 5.8). Abb. 5.17 zeigt die Gleichgewichtsprofile von Kohlenstoff unter der Oberfläche, berechnet für folgende Kombinationen der Verschiebungsenergie: $[E_{D,\text{Si}}, E_{D,\text{C}}] = [8, 8]$, $[8, 4]$ und $[4, 8]$ eV. Die erste Kombination entspricht den von den TRIDYN-Autoren empfohlenen Werten, die zweite Kombination wurde aus der Literatur übernommen [Lul99] und die dritte Kombination stellt einen hypothetischen Fall dar. Wenn die Verschiebungsenergien gleich sind, stellt sich in der Tiefe eine kohlenstoffangereicherte Zone ein, die einer kohlenstoffverarmten Region nahe der Oberfläche folgt. Mit der Kombination $[E_{D,\text{Si}}, E_{D,\text{C}}] = [8, 4]$ eV wurde der Effekt der Kohlenstoffanreicherung verstärkt. Bei $[E_{D,\text{Si}}, E_{D,\text{C}}] = [4, 8]$ eV kann eine Aufhebung der Kohlenstoffanreicherung erreicht werden, es wird kein Maximum im Kohlenstoffprofil mehr beobachtet. Der Grad der Veränderungen aufgrund unterschiedlicher Verschiebungsenergien ist größer für eine niedrigere kinetische Energie der Ionen. Über diesen Effekt, allerdings für einen streifenden Einfall der Ionen, wurde schon in [Kos03] berichtet. Hier stellt sich die Frage, ob es sinnvoll ist, unterschiedliche Werte für die Verschiebungsenergie einzusetzen. In der Literatur zur Computersimulation der Sputtereffekte findet man nur selten eine Auseinandersetzung mit dieser Frage [Rou82]. Generell kann man erwarten, dass die Verschiebungsenergie in Mehrkomponentenmaterialien, definiert als Energie für die Bildung eines Frenkelpaars, für einzelne Elemente unterschiedlich ist. So verhält es sich auch im Falle von SiC, wo sowohl die Simulationen [Hen98, Dev00] als auch die Experimente [Lul99] auf einen Unterschied $E_{D,\text{Si}}/E_{D,\text{C}} \approx 2$ hinweisen. Besonders die experimentellen Ergebnisse von Lulli et al., die an durch Ionenstrahl amorphisiertem Material durchgeführt wurden, verleihen dem Einsatz von unterschiedlichen Verschiebungsenergien in der Simulation eine Berechtigung.

Der Einfluss des Einfallswinkels auf die Simulationsergebnisse wurde ebenfalls untersucht. Weil dabei keine grundsätzlichen Unterschiede zum senkrechten Beschuss festgestellt wurden, werden diese Untersuchungen nicht weiter behandelt.

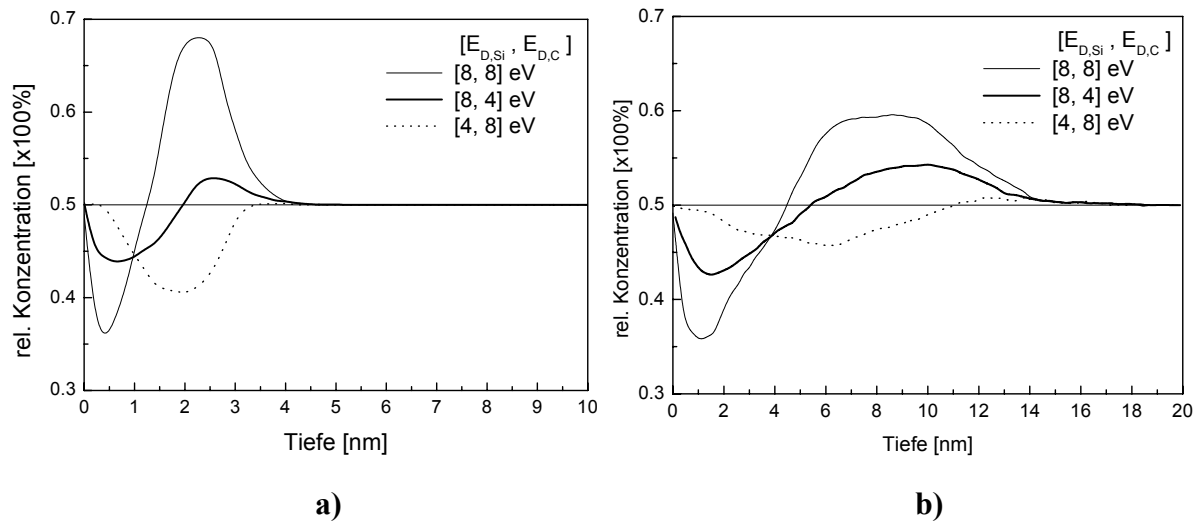


Abb. 5.17 Kohlenstoffprofile unterhalb der Oberfläche im Sputtergleichgewicht. Die Profile wurden mit TRIDYN für Ar^+ -Sputtern unter 0° für 0.5 (a) und 5 keV (b) berechnet. Als Parameter der Simulation variierten die Verschiebungsenergien der Si- und C-Atome im Festkörper. Die waagerechte Linie stellt den Ausgangszustand vor dem Sputtern dar.

Ein Versuch, die Messungen anhand der Simulationsergebnisse zu erklären (Abb. 5.13, 5.14), wird hier nicht unternommen. Die Prozesse, die beim Beschuss des einkristallinen SiC auftreten, sind komplexer, als die MC-Simulationen berücksichtigen können. Die Hochdosis-Sputterexperimente, wie sie hier durchgeführt wurden, können in der Zukunft mittels molekulardynamischer Simulationen modelliert werden. Zur Zeit sind solche Simulationen nur für Silizium bekannt [Mar97, Had03]. Die Effekte, die beim Sputtern von Materialien wie SiC auftreten, wie z.B. die Vergrößerung des Volumens durch die Amorphisierung oder der Einbau der Ionen in die Matrix, müssen dabei berücksichtigt werden.

5.3 Änderungen der Si- und C-Augerpeaks hervorgerufen durch Sputtern

Die kinetische Energie der Augerelektronen ermöglicht nicht nur die Elementerkennung sondern auch Aussagen zur chemischen Umgebung des entsprechenden Elements im Festkörper (s. Kap. 2.1). Die Natur der Augerübergänge, die ein oder zwei Elektronen aus dem Valenzband involvieren, gewährleistet außer der Identifizierung des Elementes eine zusätzliche Aussage über die chemischen Bindungen des Atoms. Die sogenannten *ccv*-Übergänge (*core-core-valence*) bilden die Zustandsdichte des Valenzbandes gefaltet mit den Zustandsdichten der tieferen Elektronenschalen ab, die *cvv*-Übergänge (*core-valence-valence*) stellen in der ersten Näherung eine Selbstfaltung der Valenzbandzustandsdichte dar [Fei77, Ons78, Mad81]. Die Zustandsdichte im Valenzband spiegelt wiederum die Bindungszustände im Festkörper wider. Die Änderungen der Lage ein und desselben *ccc*- (*core-core-core*) Augerüberganges, z.B. Si(KLL), in verschiedenen Materialien (Si, SiC, SiO, SiN) können anhand der Änderungen der Bindungsenergie tieferer Schalen zusammen mit der Änderung der außeratomaren Relaxationsenergie erklärt werden [Bec83]. Mit Si(LVV)-, Si(KLL)- und C(KVV)-Augerspektren verfügt man über drei Indikatoren für die chemische Analyse der SiC-Oberfläche, davon tragen zwei die Information über das Valenzband.

Die Beobachtung der Augerpeakänderungen nach dem Ionenbeschuss von SiC wurde Anfang der 80er Jahre dokumentiert. Kny berichtete 1980 über eine Verschiebung des Kohlenstoff-Augerpeaks um 1 eV zu höheren kinetischen Energien nach dem Beschuss [Kny80]. Kaplan beschreibt in seiner Publikation, wie das Ionensputtern der 3C-SiC-Oberfläche die Feinstruktur der Augerpeaks verändert [Kap84]. In dieser Publikation sind keine Hinweise auf Peakverschiebung zu finden. Die Feinstruktur der Augerpeaks, die mit der Oberflächenkristallinität verbunden ist [Kap80, Bel86], kann durch Heizen bei 650°C während des Ionenbeschusses beibehalten werden [Kap84] oder auch nachträglich wiederhergestellt werden [Bel86]. Eine Untersuchung zum Einfluss der Ionenstrahlparameter auf die Form der Augerpeaks wurde jedoch noch nicht durchgeführt.

Um zur Peakform einer ungestörten, adsorbatfreien SiC-Oberfläche zu gelangen, wurden kleine Stücke n-leitender 6H-SiC-Einkristalle (Cree Research) im Vakuum innerhalb der Analysechamber des Spektrometers gebrochen. Für diese Zwecke wurde ein spezieller Probenhalter konstruiert. Nachdem die Proben gebrochen waren, wurden die Oberflächen der Bruchkanten mit AES untersucht. Die Zeit zwischen Brechen und Messung betrug ca. 1 bis 2 Minuten. Während des Experiments herrschte in der Kammer ein Vakuum $< 10^{-6}$ Pa. Abb. 5.18 zeigt die Si(LVV)- und C(KVV)-Augerpeaks, die an verschiedenen Bruchkanten aufge-

nommen wurden. Beide Peaks weisen eine auffallend große Streuung der Peaklagen innerhalb 2.4 eV auf. Diese Streuung ist aber nicht zufällig. Der Energieabstand zwischen den jeweiligen Si- und C-Peaks ist bei allen Proben gleich 183.6 eV. Dieser Abstand korreliert mit dem Wert 184 eV, der an *in situ* präparierten 3C-SiC-Oberflächen bestimmt wurde [Kap84]. Da 3C- und 6H-SiC die gleiche elektronische Struktur besitzen [Lün99], ist der vorherige Vergleich und die daraus gefolgerte Korrelation relevant. Die Erklärung für die beobachteten Peakverschiebungen wird in diesem Kapitel später abgegeben. Einige der Bruchkanten wurden anschließend mit 1 keV Argonionen unter 80° beschossen. Der lokale Einfallswinkel unterschied sich möglicherweise von Probe zu Probe leicht aufgrund nicht definierter Neigung der Bruchkanten. Abb. 5.19 zeigt die Entwicklung der Si- und C-Augerspektren, nachdem die Oberfläche für unterschiedliche Zeiten unter Argonbeschuss stand. Eine Verschiebung zu höheren kinetischen Energien kann bei allen Augerspektren beobachtet werden. Bei beiden Proben war das Verschwinden der Peakstrukturen an der niederenergetischen Seite der Si(LVV)- und C(KVV)-Spektren ersichtlich. Zusätzlich verschwindet beim C(KVV)-Spektrum der Knick im Hauptpeak am Übergang vom positiven zum negativen Teil. Diese Beobachtungen stehen im Einklang mit [Kap84, Bel86].

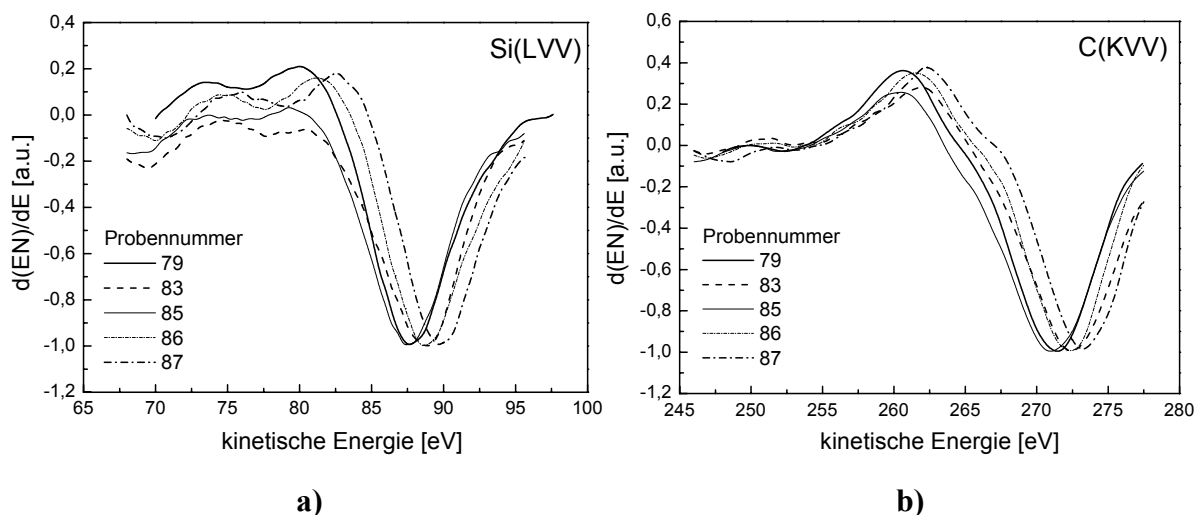


Abb. 5.18 Si(LVV)- und C(KVV)-Augerspektren gemessen an Bruchkanten im Vakuum gebrochener SiC-6H-Einkristalle. Aus Anschaulichkeitsgründen wurden alle Peaks normiert, so dass die Minima jeweils den y-Wert -1 besitzen.

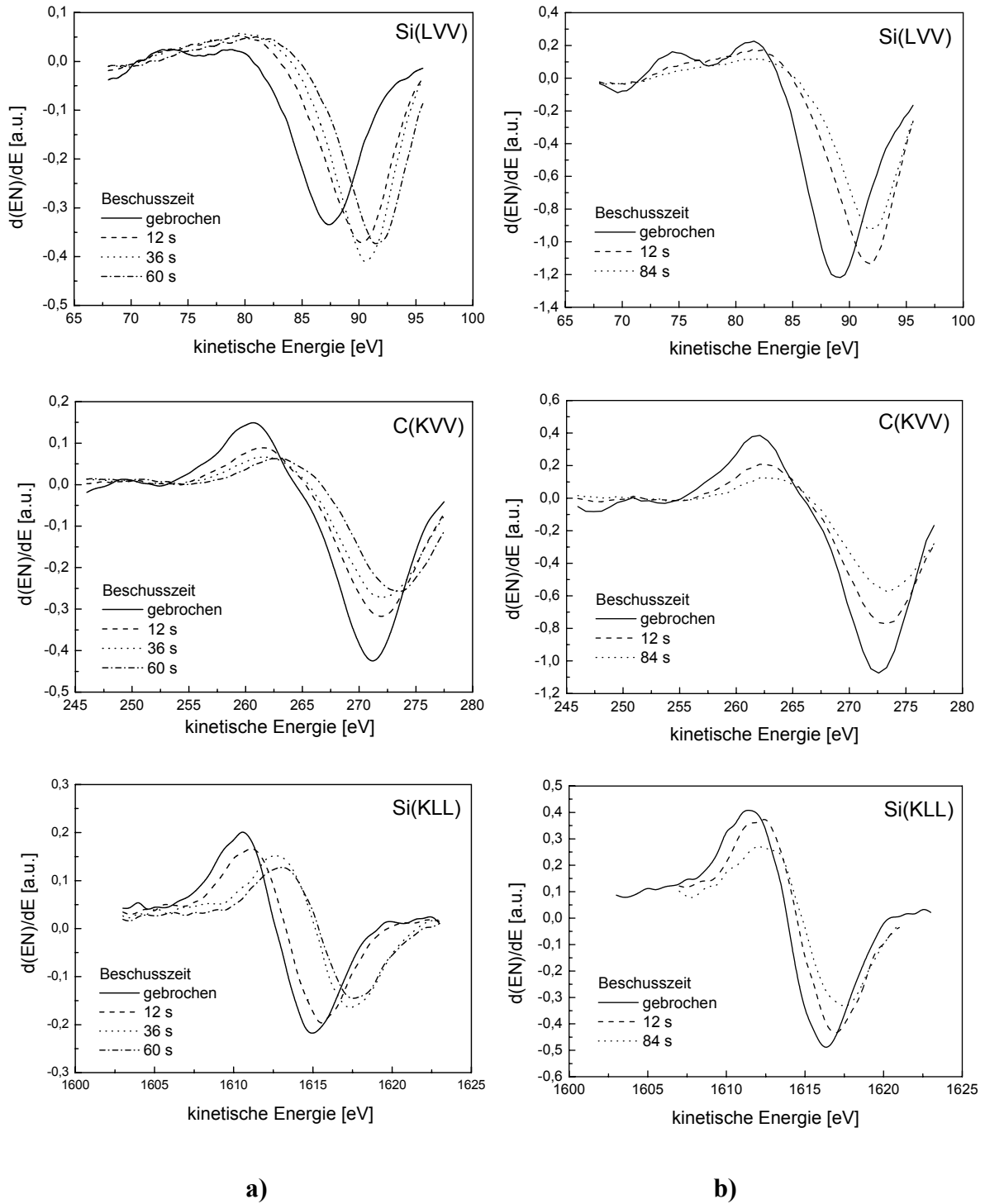


Abb. 5.19 Entwicklung der einzelnen Augerübergänge, die nach dem Bruch der Proben im Vakuum gemessen wurden, mit dem Beschuss von 1keV Argonionen unter 80° bei Probe 79 (a) und 82 (b). 60 s Beschusszeit entsprechen einem Ionenfluss von $3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$. Die Augersignale wurden nicht normiert, um die Entwicklung der jeweiligen Signalgrößen demonstrieren zu können.

Der Einfluss der Ionenenergie auf die Augerpeaks beim Sputtern von SiC wurde für Argon und für 60° und 80° Einfallswinkel untersucht. Auch für diese Untersuchung wurden 6H-SiC-Proben benutzt, die von demselben Substrat stammten, das für die Brechversuche gewählt wurde. Die Proben wurden ohne vorherige Behandlung in die Vakuumkammer eingeschleust und danach dem Ionenstrahl ausgesetzt. Die kinetische Energie der Ionen wurde von 0.3 bis 5 keV variiert. Die Proben wurden zuerst mit der niedrigsten Energie beschossen. Nachdem der Gleichgewichtszustand erreicht war, wurden aus statistischen Gründen mehrere Spektren aufgenommen. Der Gleichgewichtszustand wurde anhand konstanter *pph*-Werte identifiziert. Danach wurde die Energie erhöht und die Prozedur wiederholt.

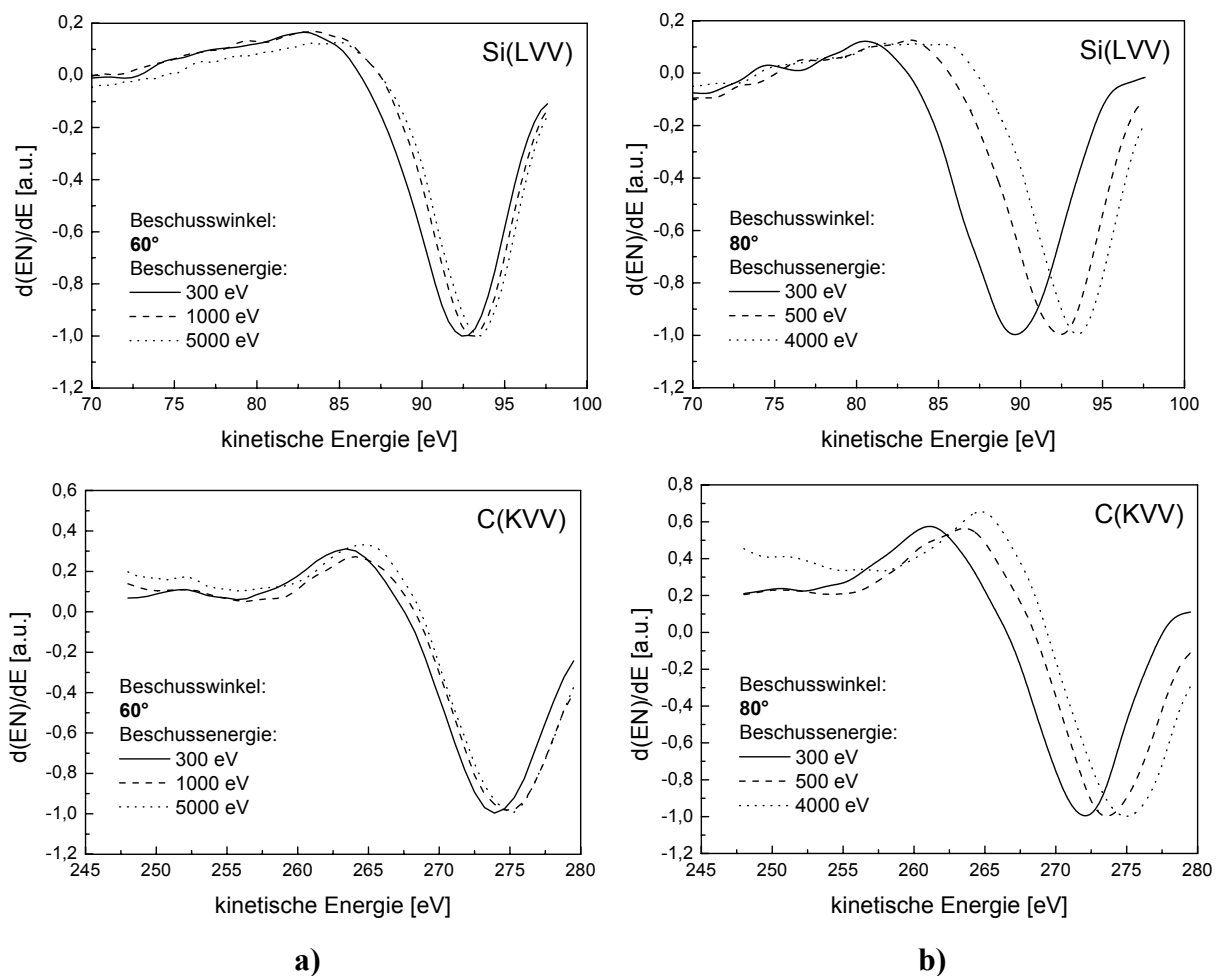


Abb. 5.20 Si(LVV)- und C(KVV)-Augerspektren gemessen an 6H-SiC-Einkristallen nach dem Beschuss der Oberfläche unter 60° (a) und 80° (b) mit Argonionen mit unterschiedlichen Energien.

Abb. 5.20 präsentiert die Si(LVV)- und C(KVV)-Spektren, die von SiC-Oberflächen nach dem Beschuss unter unterschiedlichen Einfallswinkeln und bei unterschiedlichen Ionen-

energien aufgenommen wurden. Bei allen Spektren kann dieselbe Tendenz beobachtet werden: die Erhöhung der kinetischen Energie der Ionen verursacht eine Verschiebung der Augerpeaks zu höheren kinetischen Energien. Die Verschiebung ist stärker für den 80° Einfallswinkel als für den Beschuss unter 60°.

Für die Erklärung der Peakverschiebung zwischen den Augerspektren gemessen an den SiC-Bruchkanten lassen wir uns das Bänderdiagramm für Si-Atome in SiC zeichnen. An dieser Stelle soll noch einmal betont werden, dass bei der Messung der kinetischen Energien der Augerelektronen alle relevanten Bindungsenergien auf das Fermi-niveau bezogen werden. Abb. 5.21 zeigt das Bänderdiagramm für Silizium in einem n-dotierten 6H-SiC-Einkristall. Das Fermi-niveau liegt flach unterhalb der Leitungsbandkante. Wird ein SiC-Kristall im Vakuum gebrochen, entstehen an der Oberfläche der Bruchkante s.g. Oberflächenzustände. Diese Zustände werden durch die offenen Bindungen der Atome in der obersten Schicht und durch beim Brechen entstandene Defekte gebildet und verursachen neue energetische Zustände in der Bandlücke zwischen Valenz- und Leitungsband [Hol00]. Diese Zustände werden mit Elektronen aus dem Leitungsband (SiC-eigene Elektronen oder injizierte Anregungselektronen während der AES-Messung) und aus dem Donatorniveau gefüllt, somit wird die Oberfläche negativ aufgeladen. Die Aufladung verursacht eine Bandverbiegung in der oberflächennahen Region. Der Grad der Aufladung bestimmt die Bandverbiegung an der Oberfläche und damit auch die kinetische Energie der Augerelektronen. Da bei den Brechversuchen saubere, aber nicht definierte Oberflächen entstehen, kann die Bandverbiegung von Probe zur Probe variieren, was die unterschiedlichen Peaklagen der Augerelektronen bei unterschiedlichen Brechversuchen erklärt. Für eine Bandverbiegung Δ , wie sie in Abb. 5.21 dargestellt wird, ändert sich die kinetische Energie des KLL-Augerelektrons $E(KLL)$ genau um den Wert Δ :

$$\begin{aligned} E(KLL) &= K - 2L, \\ E(K \pm \Delta, L \pm \Delta, L \pm \Delta) &= (K \pm \Delta) - (L \pm \Delta) - (L \pm \Delta) = E(KLL) \mp \Delta. \end{aligned} \tag{5.10}$$

Das heißt, dass die Bandverbiegung dann direkt in die Energie der Augerelektronen übergeht.

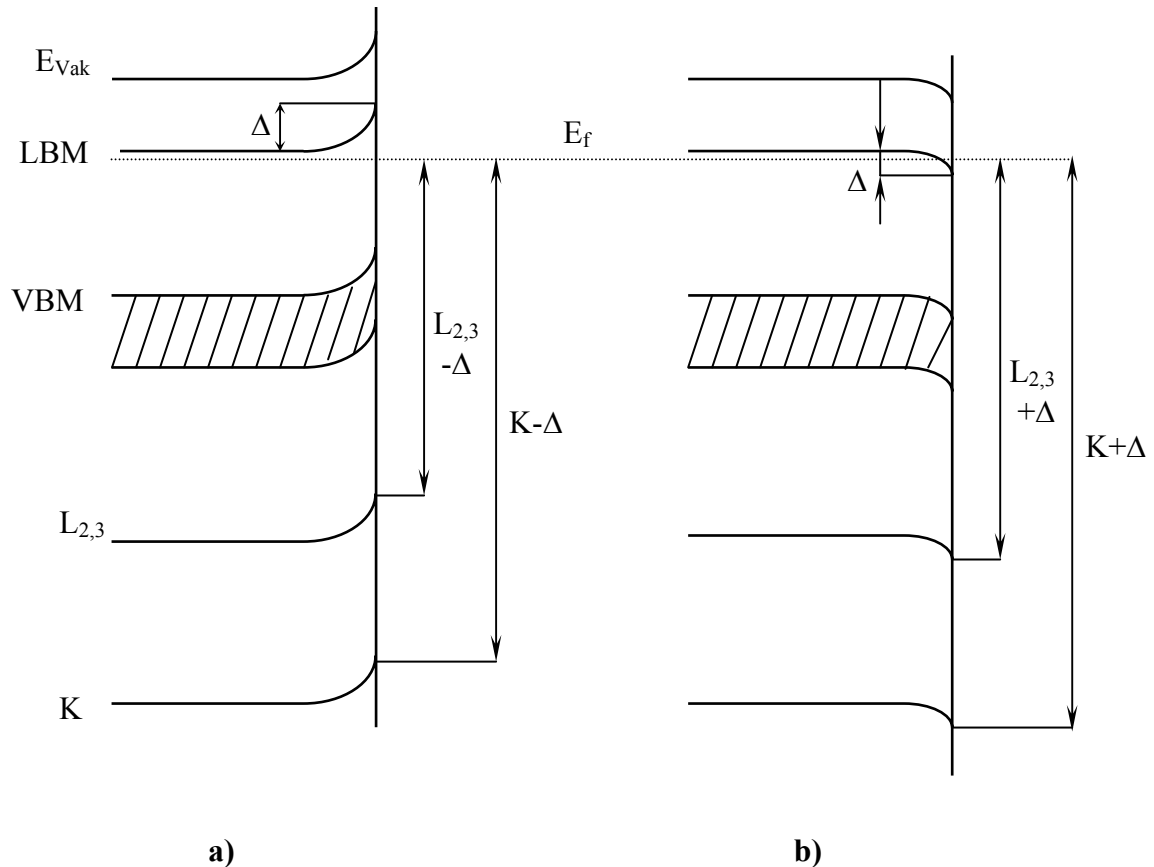


Abb. 5.21 Schematische Darstellung der Bandverbiegung an der Oberfläche und deren Einfluss auf die effektiven Elektronenbindungsenergien (bezogen auf das Fermienergielevel E_f) bei einer negativen (a) und einer positiven (b) Aufladung der Oberfläche. LBM und VBM stehen hier für das Leitungsbandminimum und das Valenzbandmaximum.

Wenn die einkristalline SiC-Oberfläche mit Ionen bestrahlt wird, entstehen in der Oberflächenregion Defekte, die Fernordnung des Kristallgitters zerstört [Pez95]. Die Nahordnung, charakterisiert durch die Anzahl der heteronuklearen Si-C-Bindungen, wird allerdings teilweise beibehalten. Einkristallines SiC besteht aus Tetraedern, in deren Mitte sich ein Si- oder C-Atom befindet, welches von vier C- oder Si-Atomen umgeben ist. MD-Simulationen von ionenstrahlinduzierter Amorphisierung von SiC zeigten, dass in amorphisiertem SiC durchschnittlich 3 der 4 nächsten Nachbaratome anderer Art sind [Gao02]. Diese Ergebnisse wurden mittels XPS-Messungen an amorphen SiC-Schichten bestätigt [DeS93, Mar03]. Die homonuklearen Bindungen rufen zusammen mit den Defekten Änderungen in der elektronischen Struktur der Oberflächenregion hervor, die sich vor allem in der Valenzbandzustandsdichte widerspiegeln. Da in den Si(LVV)- und C(KVV)-Augerübergängen das Valenzband involviert ist, ist jede Änderung der Form dieser Spektren mit einer Wandlung der Valenzbandzustandsdichte verbunden. Das erklärt auch die beobachteten Differenzen

zwischen den Augerpeaks von unbehandelten und mit Ionen bestrahlten SiC-Oberflächen. Die unterschiedliche Form der Si(LVV)- und C(KVV)-Augerspektren kann auf die Differenzen in der energetischen Verteilung der Si- und C-angehörigen Valenzbandelektronen zurückgeführt werden. Abb. 5.22 (aus [Lün99]) präsentiert die experimentell gewonnenen Zustandsdichten der Si- und C-Valenzelektronen in 3C-SiC. Während die Si-Elektronen vor allem die 3s-Orbitale belegen (~ 8 eV), befinden sich die C-Valenzelektronen auf den 2p-Orbitalen (~ 1.5 eV unterhalb der Valenzbandkante). Die Präsenz der homonuklearen Bindungen im amorphen SiC verschmiert die ausgeprägte Struktur [DeS93]. Das wird als Ursache dafür angesehen, weshalb die Augerpeakstruktur nach dem Ionenbeschuss (und damit verbundener Amorphisierung) verschwindet (Abb. 5.19, 5.20). Das heißt aber auch, dass das Vorhandensein der Peakstrukturen, wie sie an ungesputterten, sauberen SiC-Oberflächen beobachtet wurden, in den Augerpeaks von SiC-Oberflächen nach dem Sputtern mit 300 eV unter 80° auf die Beibehaltung der ursprünglichen tetraedrischen Anordnung hindeutet (Abb. 5.20). Dieser Fakt bestimmt die o.g. Sputterbedingungen zum Tiefenprofilieren von SiC-Schichtstrukturen, wenn die Präsenz von homonuklearen Bindungen und damit der Grad der Zerstörung von SiC nachgewiesen werden soll (z.B. nach Ionenimplantation). Allerdings verursachen die vorgeschlagenen Sputterbedingungen selbst Änderungen in den Augerspektren und rufen damit einen bestimmten Zerstörungsgrad hervor. Dies stellt die natürliche Grenze für die nachweisbare Zerstörung dar.

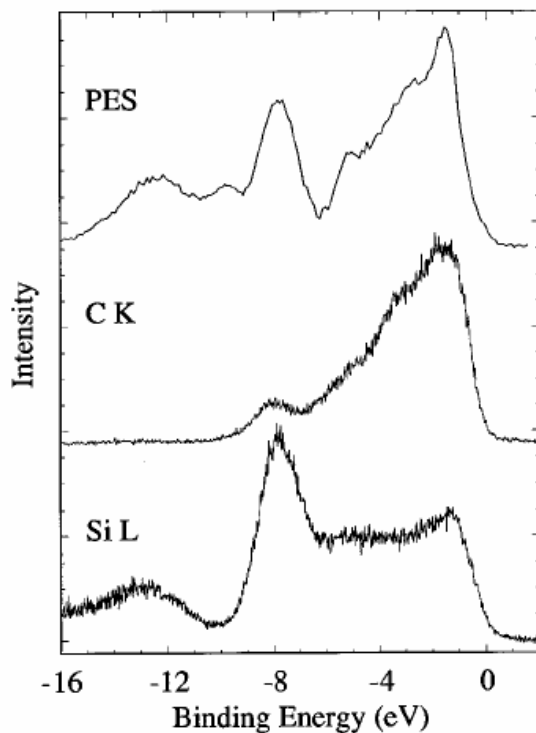


Abb. 5.22
 Röntgen-Emissionsspektren der VB \rightarrow Si- $L_{2,3}$ und VB \rightarrow C-K-Übergänge als Abbildung der lokalen Valenzbandzustandsdichte. Zum Vergleich ist ein Photoemissions-Elektronenspektrum dargestellt. Die Abbildung wurde aus [Lün99] übernommen.

Die Verschiebung der Augerpeaks zu höheren kinetischen Energien mit steigender Ionenenergie kann als Aufladungseffekt erklärt werden. In der Oberflächenregion werden durch Ionenbeschuss energetische Zustände produziert, die als Elektronenfallen wirken, was zu einer Akkumulation von negativer Ladung führt. Das kann innerhalb des Bändermodells als negative Bandverbiegung ($-\Delta$, Abb. 5.21), die zur Erhöhung der kinetischen Energie der Augerelektronen beiträgt, geschildert werden. Beim Übergang vom Beschuss mit 300 eV Ar^+ auf 500 eV (80°) ist die Peakverschiebung nicht allein durch Aufladungseffekte zu erklären. Die kinetische Energie der Augerelektronen wird dabei auch durch die Verschiebung der inneren K-Schale zu höheren Bindungsenergien im Kohlenstoff [Osw99] und durch die Erhöhung des p -Anteils der Si-Valenzbandelektronen vergrößert. Der Beweis für eine negative Aufladung der Oberfläche kann anhand der Position der eingebauten Ar-Augerelektronen erbracht werden. Die Position des Ar-2p-Peaks in der Photoelektronenspektroskopie wurde schon früher als interne Energiereferenz für das Kalibrieren der Energieachse vorgeschlagen und angewandt [Osw97, 99]. Argon als Edelgas ändert nicht seine elektronische Struktur im Festkörper. Demnach reflektiert die Lage des Ar-Augerpeaks den elektronischen Zustand des Festkörpers genauso gut wie die Lage des Ar(2p)-Peaks. Abb. 5.23 zeigt jeweils zwei Augerspektren von Argon und Kohlenstoff, die an einem n-6H-SiC-Einkristall nach dem Sputtern mit 1.2 und 2 keV Ar^+ unter 80° gemessen wurden. Beide Spektren weisen eine Verschiebung von 2 eV zu höheren kinetischen Energien nach der Erhöhung der Ionenenergie auf. Die Verschiebung des Argonpeaks kann nur anhand der Änderung des elektrischen Potentials auf der Oberfläche erklärt werden. Die Richtung der Verschiebung impliziert eine negative Aufladung der Oberfläche, die auch die Verschiebung des C-Peaks hervorruft. Die steigende Verschiebung der Augerpeaks mit steigender Ionenenergie lässt sich qualitativ anhand der Dichte der Elektronenfallen an der Oberfläche erklären. Diese Dichte ist mit der in der Oberfläche deponierten Energie und dadurch mit der Energie des Ionenstrahls eng verbunden. Der Effekt der Augerpeakverschiebung mit steigender Argonenergie wurde auch für n-GaAs beobachtet [Kos02b].

Die Elektronenfallen, die durch Ionenbeschuss entstanden sind, werden bei Abwesenheit von äußeren Wirkungen (z.B. ein Elektronenstrahl) im Falle eines n-leitenden Materials mit Elektronen aus dem Volumen gefüllt. Die Elektronen, die sich im Leitungsband oder auf dem Donatorniveau befinden, gelangen zur Oberfläche und gehen auf die energetisch günstigeren Positionen über, um die gesamte Energie des Systems zu minimieren. In einem p-Halbleiter existieren allerdings keine Elektronen, die die Zustände in der Bandlücke füllen könnten. Wenn die Elektronenfallen mit Elektronen von auswärts gefüllt werden können, wie

z.B. während der klassischen elektronenangeregten AES, bestünde die Möglichkeit, dasselbe Halbleitermaterial in Hinsicht auf seinen dominierenden Ladungsträgertyp zu unterscheiden. Ein Beweis, dass dies für SiC möglich ist, wird im folgenden Kapitel erbracht.

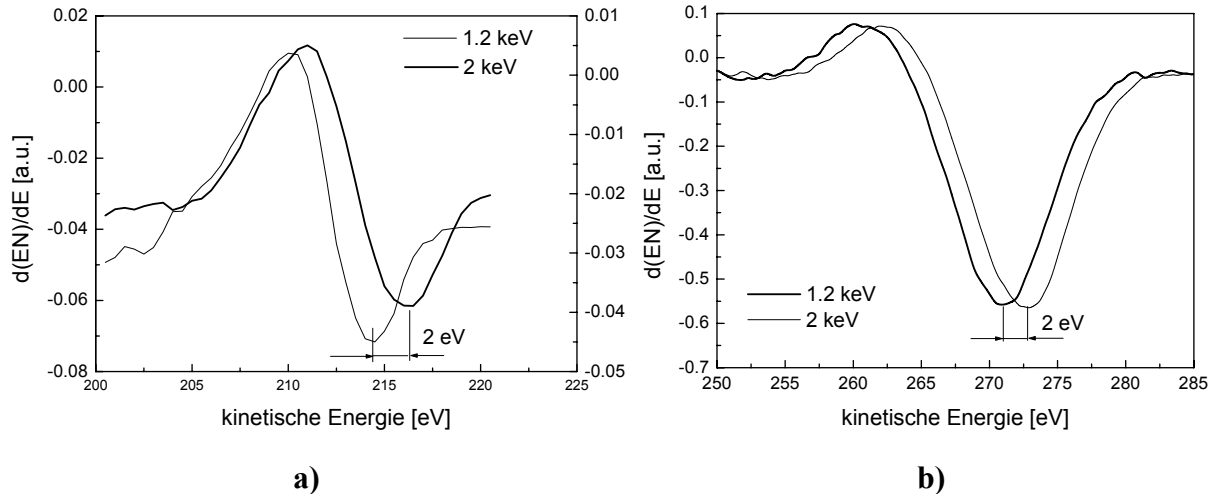


Abb. 5.23 (a) Ar(LMM)- und (b) C(KVV)-Augerspektren aufgenommen von einem n-6H-SiC-Einkristall nach dem Beschuss mit 1.2 und 2 keV Ar^+ -Ionen unter 80° .

5.3.1 Experimenteller Nachweis des Leitungstyps von 6H-SiC mittels AES

Der Einfluss des Fermi-niveaus auf die kinetische Energie der Augerelektronen bietet die Möglichkeit, anhand dieser Energie die Dotierung des Halbleiters bestimmen zu können. Dennoch wurde in der Literatur über diesen Effekt nur selten berichtet [Vas85, Kes95], obwohl z.B. die Firma Thermo VGScientific diesen Effekt an n- und p-dotiertem Silizium seit mehreren Jahren in ihren Prospekten erwähnt. In den Unterlagen zum Augerelektronenspektrometer Microlab 350 wird eine Differenz von 0.6 eV in der Peaklage des Si(KLL)-Peaks, gemessen an p- und n-dotiertem Silizium, präsentiert. Diese Differenz bleibt auch nach dem Beschuss mit Argonionen erhalten. Derselbe Effekt wird hier an n- und p-dotiertem 6H-SiC demonstriert.

Abb. 5.24 zeigt die Bänderdiagramme von n- und p-leitenden 6H-SiC-Einkristallen zusammen mit n-leitendem 3C-SiC. In der Abbildung werden Flachbandbedingungen angenommen, d.h. es existiert keine Bandverbiegung an der Oberfläche. Wie bereits erwähnt, wird bei der Emission eines Augerelektrons aus dem Festkörper seine kinetische Energie in Bezug auf das Fermi-niveau gemessen. Das Fermi-niveau liegt in einem p-Halbleiter in der Nähe der Valenzbandkante und in einem n-Halbleiter in der Nähe der Leitungsbandkante. Die Stickstoff-Donatoren bilden in 6H-SiC zwei Zustände in der Bandlücke, einmal 100 meV und ein-

mal 155 meV unter der Leitungsbandkante. Die Aluminium-Dotanten bilden zwei Akzeptorzustände in der Bandlücke, einmal 239 meV und einmal 249 meV über der Valenzbandkante [Har95]. Bei der Temperatur 0 K liegt das Fermi-niveau genau in der Mitte zwischen der Bandkante und dem Dotantenniveau in der Bandlücke. Die Lage des Fermi-niveaus hängt außer von der Temperatur auch von der Art und Konzentration der Dotanten ab. In weiteren Rechnungen wird angenommen, dass in n-6H-SiC das Fermi-niveau 0.1 eV unter der Leitungsbandkante und für p-6H-SiC 0.2 eV über der Valenzbandkante liegt. Epitaktische 3C-SiC-Schichten sind immer n-dotiert (unbeabsichtigte Dotierung durch Defektbildung während des Wachstums). Im Folgenden wird die Lage des Fermi-niveaus bei 0.1 eV unter der Leitungsbandkante angenommen. Für die angenommenen Lagen des Fermi-niveaus und die Bandlücken von 3.0 eV für 6H- und 2.4 eV für 3C-SiC sollten die Augerpeaks die folgenden Positionen zueinander einnehmen (Abb. 5.24):

- i) die minimale Energie besitzen die Augerelektronen aus n-6H-SiC,
- ii) danach folgt im Abstand von 0.6 eV n-3C-SiC und
- iii) die maximale kinetische Energie, + 2.7 eV in Bezug auf n-6H, besitzen die Augerelektronen aus p-6H-SiC.

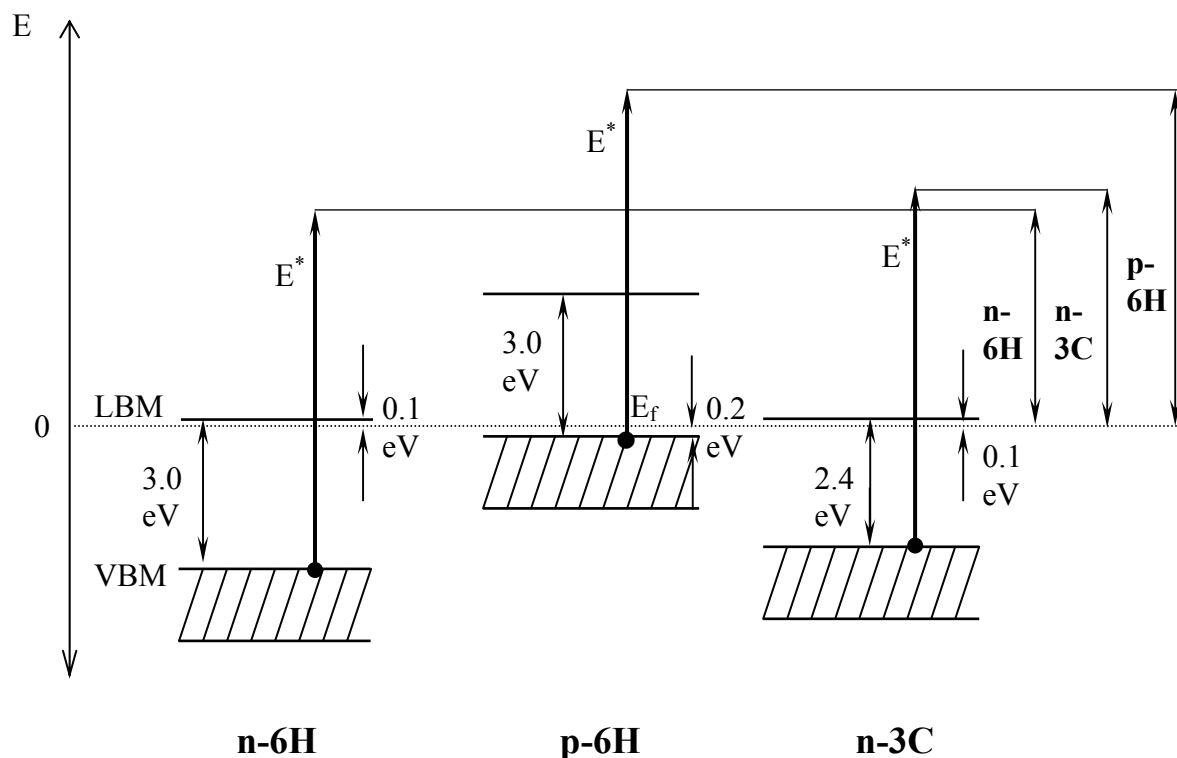


Abb. 5.24 Schematische Darstellung der Emission eines Elektrons mit der Energie E^* aus dem Valenzband eines n-6H-, p-6H- und n-3C-SiC-Einkristalls. Die Darstellung ist für die Elektronenemission aus jedem beliebigen energetischen Niveau gültig.

Die Situation ändert sich, sobald die Oberflächen mit Ionen beschossen werden. Die Flachbandbedingung wird nicht mehr erfüllt, die Oberfläche wird amorphisiert. Der Amorphisierungsgrad, charakterisiert auch durch die Anzahl der Elektronenfallen, ist vom Leitungstyp unabhängig. Die Wirkung der Dotanten in der gestörten Region ist vernachlässigbar, da ihre Konzentration im Vergleich zur Störstellenkonzentration zu niedrig ist. Wenn die Fallen mit Elektronen von außen gefüllt werden können, werden sich sowohl die Oberfläche eines n-leitenden SiC-Einkristalls als auch die Oberfläche eines p-leitenden SiC-Einkristalls gleichermaßen aufladen. Dabei kommt es zur gleichen Bandverbiegung an der Oberfläche beider (n- und p-leitender) SiC-Einkristalle. Damit bleiben die aus Abb. 5.24 abgeleiteten Erwartungen auch für Einkristalle mit gleich gestörten Oberflächen erhalten.

Für den Nachweis, dass die Augerelektronenspektroskopie die Dotierung in SiC unterscheiden kann, wurden zwei 6H-SiC-Kristalle, n- und p-dotiert, ausgewählt. Das n-6H-SiC war mit Stickstoff dotiert, die p-dotierte Probe war eine homoepitaktische p-6H-SiC-Schicht, gewachsen auf einem n-6H-SiC-Einkristall, mit Aluminium als Dotierstoff. Beide Proben stammen von Cree Research, Inc. Die Ladungsträgerkonzentrationen, bestimmt mittels CV-Messungen, betragen in beiden Fällen $3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Die Proben wurden ohne Behandlung in die Kammer des Spektrometers eingeschleust. Schon die von unbehandelten Oberflächen aufgenommenen Augerspektren wiesen eine Peakverschiebung auf, und zwar für alle Augerübergänge (Si(KLL) und -(LVV), C(KVV), O(KVV)). Dann wurden die Proben mit Argonionen unter 80° Einfallswinkel beschossen. Die beiden Proben wurden auf dem Probenhalter nebeneinander positioniert, so dass die Rasterfläche des Ionenstrahls beide Proben gleichmäßig erfasste. Nach dem Beschuss wurden von den beschossenen Flächen abwechselnd (p- und n-Proben) Spektren aufgenommen. Aus statistischen Gründen wurde diese Prozedur mehrmals wiederholt. Die Beschussenergie der Ionen wurde von anfänglichen 400 eV auf 700, 1200 bis zu 2000 eV erhöht und für jede Energie wurden Spektren aufgenommen. In Abb. 5.25 werden Si(LVV)-, C(KVV)- und Si(KLL)-Spektren gezeigt, die von mit 400 und 2000 eV Argonionen beschossenen p- und n-SiC-Oberflächen aufgenommen wurden. Bei allen Spektren kann eine Differenz in der energetischen Lage zwischen den n- und p-SiC-Spektren festgestellt werden.

Die Messungen wurden mit einem Elektronenstrom von $1 \mu\text{A}$ bei einem Strahldurchmesser von $\sim 10 \mu\text{m}$ durchgeführt. Um einen Effekt der Elektronenstromdichte des anregenden Strahls ausschließen zu können, wurden einige Messungen mit auf die Hälfte und auf ein Drittel reduziertem Primärelektronenstrom der anregenden Elektronen realisiert. Da sich bei diesen Messungen die Position der Augerpeaks nicht veränderte, können sowohl Span-

nungsabfälle über die Probe als auch Kontaktprobleme zwischen den Proben und dem Probenhalter ausgeschlossen werden.

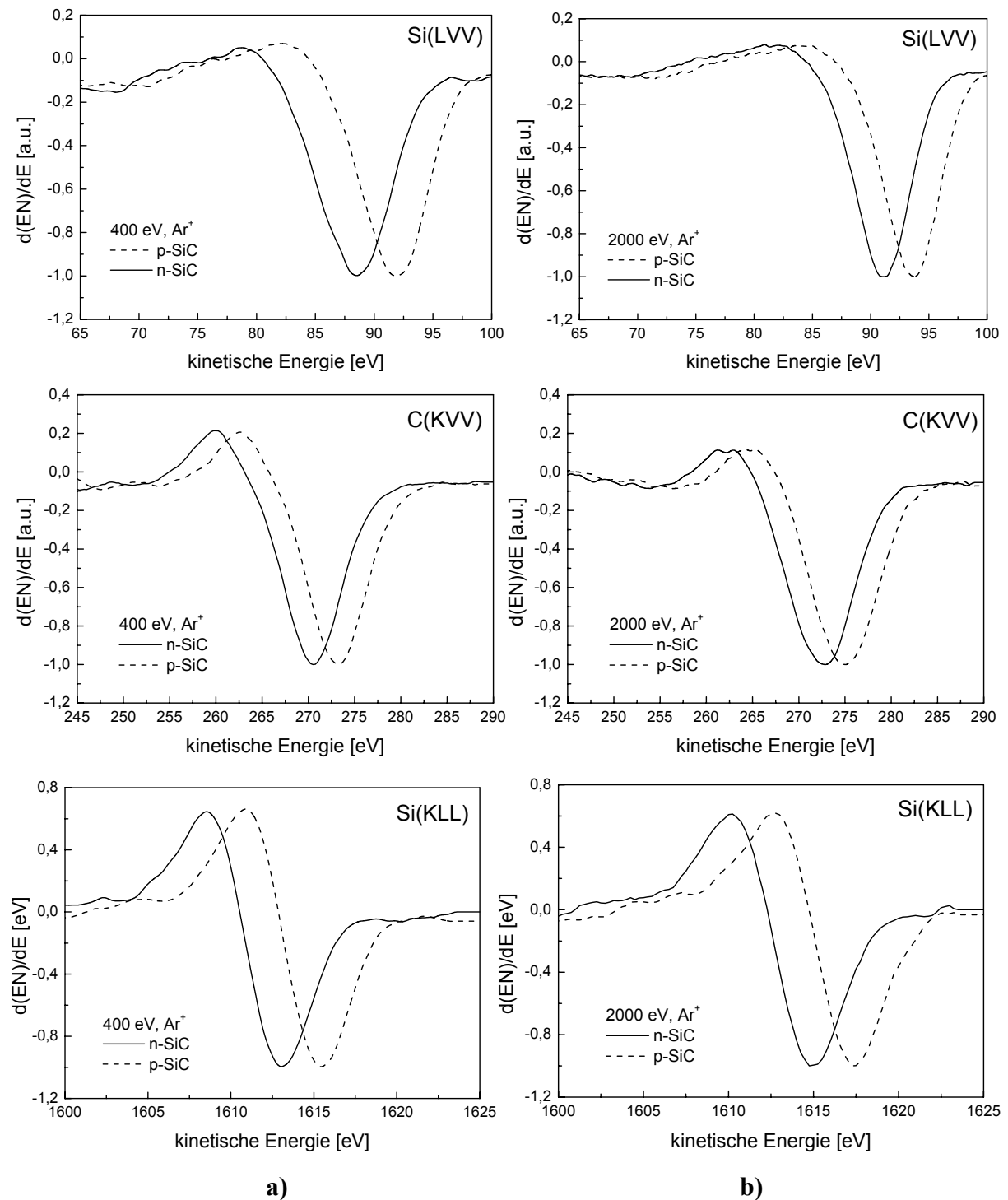


Abb. 5.25 *Si(LVV)*-, *C(KVV)*- und *Si(KLL)*-Augerspektren gemessen an *n*-6H- und *p*-6H-SiC-Einkristallen nach dem Beschuss mit 0.4 (a) und 2 keV (b) unter 80°.

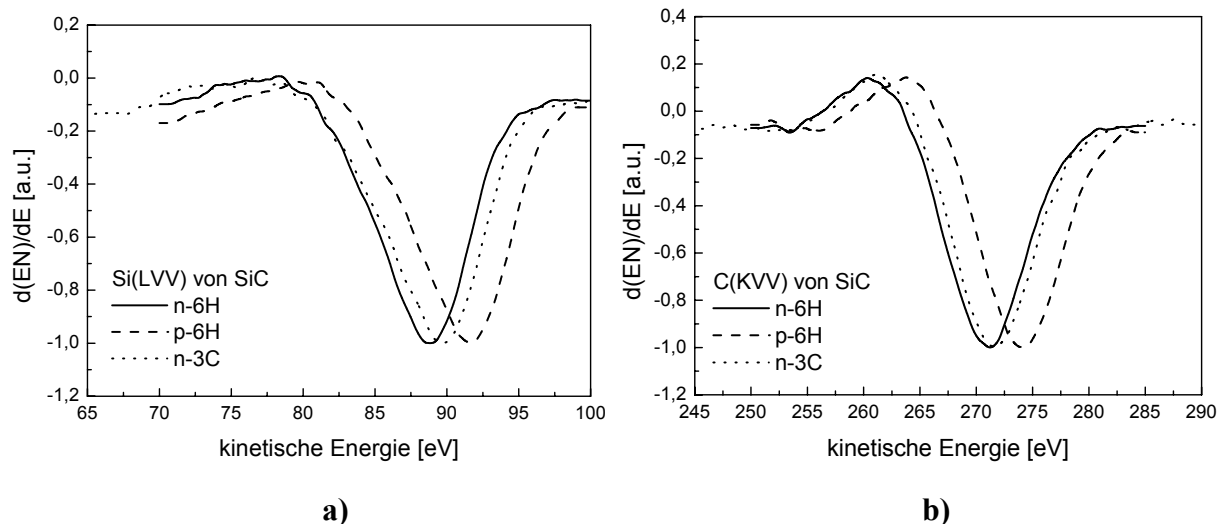


Abb. 5.26 Vergleich zwischen den normierten (a) Si(LVV)- und (b) C(KVV)-Augerspektren gemessen an n-6H-, p-6H- und n-3C-SiC-Einkristallen nach dem Sputtern mit 2 keV Ar⁺ unter 80°.

Die Differenz in der Peaklage betrug für Si(LVV)- und C(KVV)-Spektren 2.75 ± 0.25 eV, bei den Si(KLL)-Spektren lag der Unterschied in der Peakposition bei 2.25 ± 0.25 eV. Der Unterschied bei den niederenergetischen Augerpeaks stimmt mit der theoretischen Vorhersage sehr gut überein. Die Abweichung bei den hochenergetischen Si(KLL)-Peaks ist auf die Energieauflösung des Analysators und die Stabilität des Spektrometers bei höheren kinetischen Energien zurückzuführen. Anhand der Überlegungen am Anfang dieses Kapitels sollte auch n-3C-SiC von n-6H-SiC zu unterscheiden sein. Abb. 5.26 zeigt die Si(LVV)- und C(KVV)-Augerspektren gemessen an n-6H-, -3C- und p-6H-SiC-Oberflächen nach dem Sputtern mit 2 keV Ar⁺-Ionen unter 80°. Als n-3C-SiC-Probe wurde eine epitaktische SiC-Schicht benutzt. Diese Schicht wurde mittels MBE auf Si aufgewachsen und während des Wachstums mit Stickstoff dotiert. Die genaue Ladungsträgerkonzentration war nicht bekannt. Eine offensichtliche Peakagedifferenz von $0.5 \div 0.75$ eV (die Messschritte betragen 0.25 eV, die Energieauflösung 0.3 eV) zwischen n-6H- und n-3C-Polytypen bestätigt, dass die AES in der Lage ist, neben dem Leitungstyp auch die Polytypen zu unterscheiden.

Diese Ergebnisse eröffnen dem Einsatz der AES in der SiC-Technologie eine Menge neuer Möglichkeiten: Tiefenprofilierung von p-n- und Polytyp-Übergängen, laterale Auflösung von Dotierung und Polytypen an den Oberflächen usw.

5.4 Tiefenprofilierung der durch Ionenbeschuss erzeugten veränderten Zonen in SiC

Bei den Untersuchungen der ionenstrahlinduzierten veränderten Zonen an Mehrkomponentenmaterialien sind vor allem die veränderten Konzentrationsprofile unterhalb der Oberfläche von Interesse. Diese Änderungen werden häufig mittels winkelaufgelösten Elektronenspektroskopien untersucht [Buss88, Sul95]. Eine weitere Methode ist die Anwendung niederenergetischer Ionenstrahlen zum Abtrag der Oberfläche in Kombination mit SIMS oder einer anderen oberflächenempfindlichen Methode (Spektroskopie der gestreuten Ionen - *ion scattering spectroscopy*, AES) [Val90, Sca96, Wit97, Cao00]. Die Bedingung für diese Methode ist, dass der Einfluss des niederenergetischen Ionenstrahls auf die Oberfläche möglichst gering gehalten wird, d.h. zusätzliche Veränderungen sollen unterdrückt werden. Die Energien für den Ionenstrahl für diese Anwendung hängen von der Dicke der veränderten Zone ab. Miotello et al. setzten für die Tiefenprofilierung einer durch 30 keV Ar zerstörten SiC-Oberfläche 4 keV Argonionen ein [Mio93]. Cao und Oechsner nutzten Argonionen mit einer Energie < 200 eV zur Tiefenprofilierung der Mikroprofile an Metall-Silizid-Oberflächen, die vorher mit 1 bis 5 keV Ar-Ionen senkrecht beschossen wurden [Cao00].

In Kap. 5.3 wurde gezeigt, dass die Änderungen der Struktur von kristallinem SiC durch Ionenbeschuss mittels AES nachgewiesen werden können. Neben der Peakverschiebung, die als Folge der Aufladung der Oberfläche erklärt wurde, ändern sich auch die spektralen Züge der Valenzband-Augerübergänge. Bei diesen Untersuchungen wurden Sputterbedingungen identifiziert, bei denen der Ionenstrahleinfluss so gering ist, dass die spektralen Züge der Augerspektren eines ungesputterten SiC-Einkristalls beibehalten und die Aufladungseffekte minimiert werden. Gemeint ist das Sputtern mit 300 eV Ar^+ -Ionen unter 80° . 300 eV ist die minimale Energie der Ar-Ionen in der Ionenkanone VG X5, die zur Tiefenprofilierung im Augerelektronenspektrometer ASC 2000 für die in dieser Arbeit dargestellten Experimente eingesetzt werden konnte. Bei einem Einfallswinkel des Ionenstrahls von 80° in Bezug auf die Probennormale wird die Tiefe der Veränderungen an der Oberfläche durch den Ionenbeschuss so reduziert, dass diese Sputterbedingungen denen von Cao und Oechsner vergleichbar werden [Cao00]. Die o.g. Sputterbedingungen wurden zum Tiefenprofilieren der veränderten Zonen an SiC-Oberflächen eingesetzt. Die Ergebnisse dieser Messungen werden in diesem Kapitel vorgestellt.

Die veränderten Zonen an SiC-Oberflächen wurden durch den Beschuss mit Ar-Ionen mit Energien von 1 bis 5 keV initiiert und zwar sowohl für den senkrechten Beschuss als auch für einen streifenden Einfallswinkel von 80° . Die Messprozedur ist in Abb. 5.27 veranschau-

licht. Die Untersuchungen für den streifenden Primärbeschuss wurden an n-leitenden 6H-SiC-Einkristallen durchgeführt. Der Ionenbeschuss wurde bis zum Gleichgewichtszustand, der mit Hilfe der AES anhand sich nicht mehr ändernder *pph*-Werte identifiziert wurde, fortgesetzt. Nach dem primären Beschuss mit höheren Ionenenergien wurde die Beschleunigungsspannung der Ionen auf 300 eV reduziert und anschließend das Tiefenprofil durch die erzeugte veränderte Zone gemessen. Die Untersuchungen für den senkrechten Primärbeschuss wurden an 3C-SiC- epitaktischen Schichten durchgeführt. Nach dem primären Beschuss wurden die Proben aus der Vakuumkammer entnommen und an der Luft auf einen anderen Proben­tisch montiert, so dass die Tiefenprofilierung mit streifendem Einfallswinkel des Ionenstrahls erfolgen konnte. Während der Tiefenprofilierung wurden die Augersignale Si(LVV), Si(KLL), C(KLL), Ar(KLL) und O(KLL) aufgenommen. Die Abtragsrate von SiC für den Beschuss mit 300 eV Ar⁺ Ionen unter 80° wurde durch die Erzeugung einer Kante am 6H-SiC-Einkristall bestimmt. Die Höhe der Kante wurde mittels AFM gemessen. Die aus diesen Messungen gewonnenen Argonprofile wurden bereits im Kap. 5.1 vorgestellt.

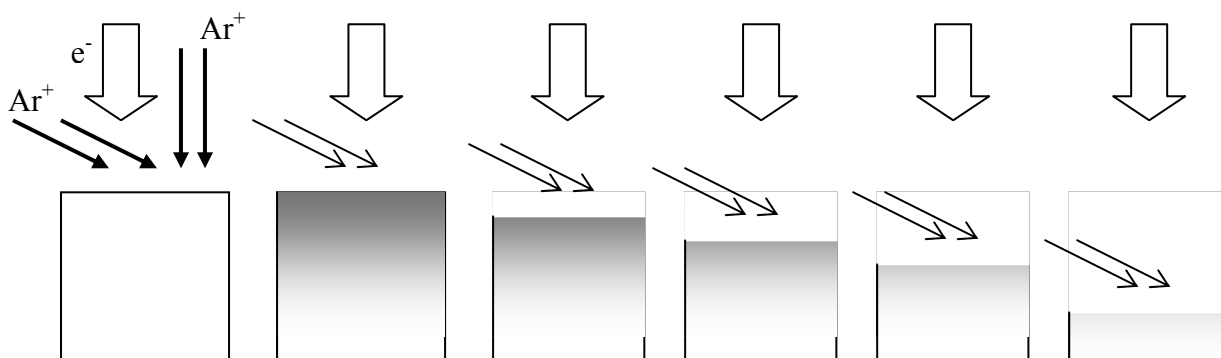


Abb. 5.27 Prinzip der Tiefenprofilierung der veränderten Zonen mit Hilfe niederenergetischer Ionenstrahlen. Die veränderten Zonen werden durch senkrechten oder streifenden Beschuss mit Ar⁺-Ionen mit einer Energie ≥ 1 keV erzeugt. Danach wird die Ionenenergie reduziert und eventuell der Einfallswinkel vergrößert.

Um die Wirkung des Beschusses mit 300 eV Ar⁺-Ionen unter 80° an den untersuchten Oberflächen zu bestimmen und die Eignung der eingesetzten Ionenstrahlparameter zur Messung der Tiefenprofile zu prüfen, wurden statische TRIM-Simulationen durchgeführt [Bie84]. Abb. 5.28a zeigt die berechneten Vakanzprofile, die durch den senkrechten Beschuss mit 1 und 5 keV Ar⁺-Ionen unter der SiC-Oberfläche erzeugt wurden. In Abb. 5.28b sind die Vakanzprofile für den Beschuss unter 80° dargestellt. Die Verschiebungsenergie wurde für Silizium- und Kohlenstoffatome auf 8 eV gesetzt. Die Vakanzprofile repräsentieren hier die

Defektdistribution nach dem Beschuss mit einem einzelnen Ion und sind dadurch direkt mit der veränderten Zone verbunden. Zusammen mit diesen Profilen wird in den beiden Abbildungen auch das Vakanzenprofil gezeigt, das durch den Argonbeschuss unter den Tiefenprofilierungsbedingungen (300 eV, 80°) erzeugt wird. Diese Ergebnisse demonstrieren, dass die Bedingungen für die Tiefenprofilierung aller veränderten Zonen geeignet sind, mit Ausnahme der veränderten Zone, die durch den Beschuss mit 1 keV Ar⁺ unter 80° erzeugt wurde. In diesem Fall ist die Breite der veränderten Zone zu gering, um vom Ionenbeschuss während der Tiefenprofilierung nicht beeinflusst zu werden.

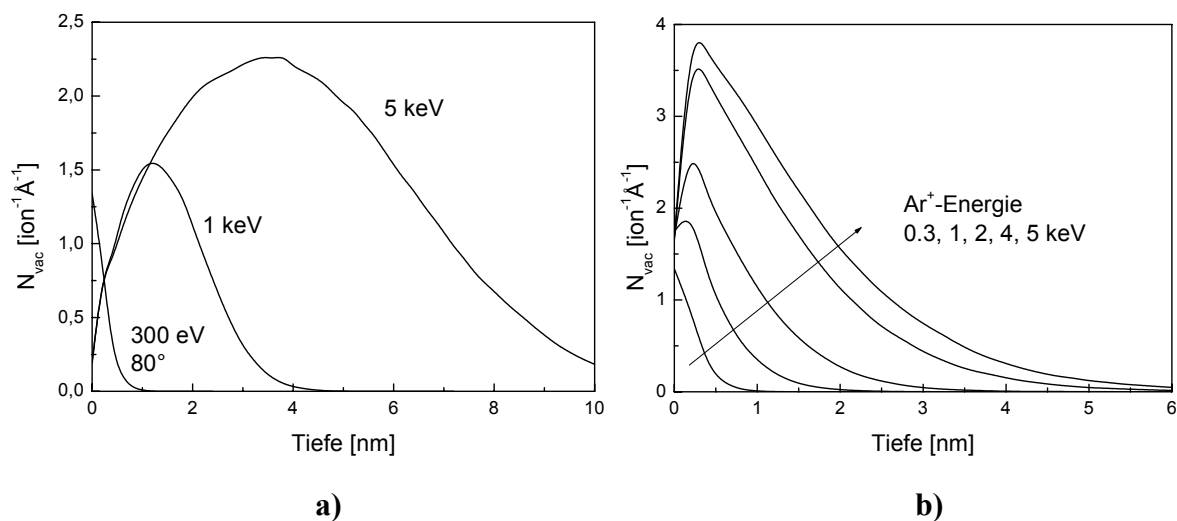


Abb. 5.28 Vakanzenverteilung in SiC nach dem Beschuss mit einem einzelnen Ion berechnet mittels TRIM: a) senkrechter Beschuss, b) Beschuss unter 80°.

5.4.1 Senkrechter Primärbeschuss

Abb. 5.29a und 5.30a zeigen die gemessenen Tiefenprofile durch veränderte Zonen an der SiC-Oberfläche, die durch senkrechte Bestrahlung mit 1 und 5 keV Argonionen erzeugt wurden. Als Maß für die Konzentration der Elemente sind die Peakhöhen der entsprechenden Augerpeaks in differenzierter Form dargestellt. Die Auswertung der gemessenen Profile in der dargestellten Form ist aus mehreren Gründen mit Schwierigkeiten verbunden. Eine Anwendung der Elementempfindlichkeitsfaktoren, wie in Kapitel 2.2 vorgestellt, ist aufgrund des problematischen Bezugs auf Standards (reines Silizium, Kohlenstoff) auszuschließen. Auch wenn es möglich wäre, einen Bezug auf Standards herzustellen, steht einer erfolgreichen quantitativen Analyse der gemessenen Tiefenprofile ein weiteres Hindernis entgegen. Es kann gezeigt werden, dass für den Einsatz der Elementempfindlichkeitsfaktormethode zur

Quantifizierung der Tiefenprofile folgende Gleichung gelten muss (s. Gl. 2.5 mit der Randbedingung, dass $c_A + c_B = 1$) [Cao00]:

$$I_A + kI_B = const, \quad (5.11)$$

wobei beide Konstanten k und $const$ positiv sind. Wenn aber die Abhängigkeiten $pph_{Si(LVV)}$ vs. pph_C für die beiden Tiefenprofile gezeichnet werden, kann daraus keine lineare Abhängigkeit mit einer positiven Steigung erkannt werden (Abb. 5.29b, 5.30b). Die $pph_{Si(KLL)}$ - vs. pph_C -Kurven werden sowohl wegen des großen Unterschieds in den inelastischen mittleren freien Weglängen der entsprechenden Elektronen als auch wegen des Fakts, dass die hier gemessenen Tiefenbereiche mit der Informationstiefe der Si(KLL)-Augerelektronen vergleichbar sind, nicht in Betracht gezogen. In den beiden Tiefenprofilen wurde am Anfang Sauerstoff detektiert, der zur Verfälschung der Darstellung bei den ersten Messpunkten beiträgt. Das Sauerstoffsignal sinkt allerdings schnell unter die Nachweisgrenze und hat keinen weiteren Einfluss auf die quantitative Analyse. Aus den beiden Plots wird deutlich, dass ein linearer Fit mit einer positiven Steigung nicht möglich ist. Deshalb kann hier eine übliche Quantifizierungsmethode nicht eingesetzt werden.

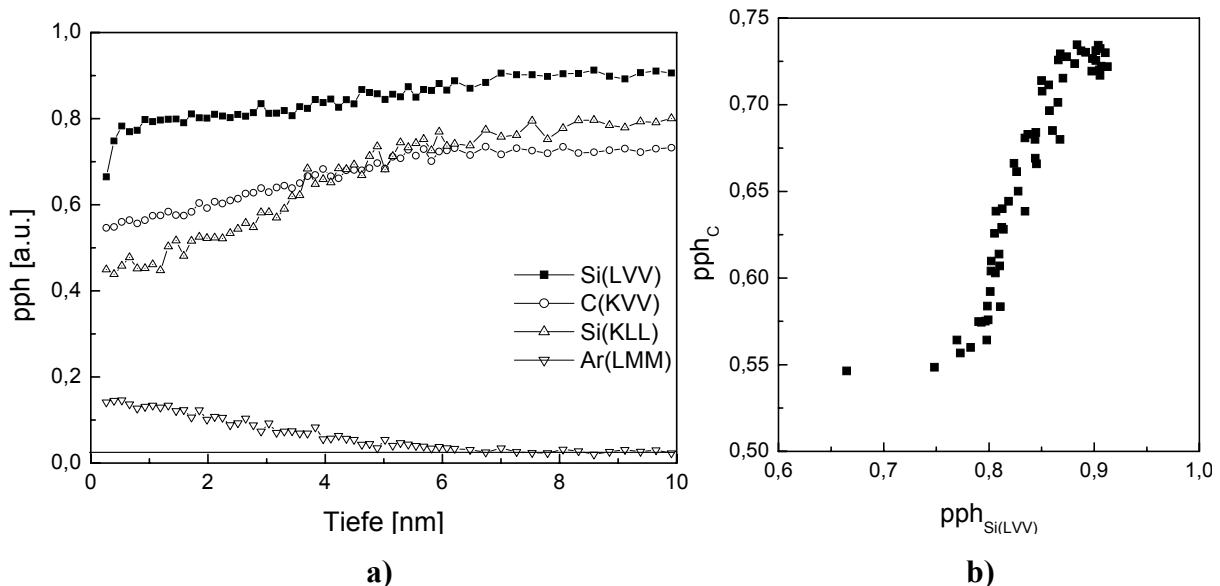


Abb. 5.29 (a) AES-Tiefenprofil gemessen an der SiC-Oberfläche, nachdem sie senkrecht mit 1 keV Ar^+ -Ionen beschossen worden war, in (b) ist die entsprechende $pph_{Si(LVV)} / pph_C$ – Abhängigkeit abgebildet.

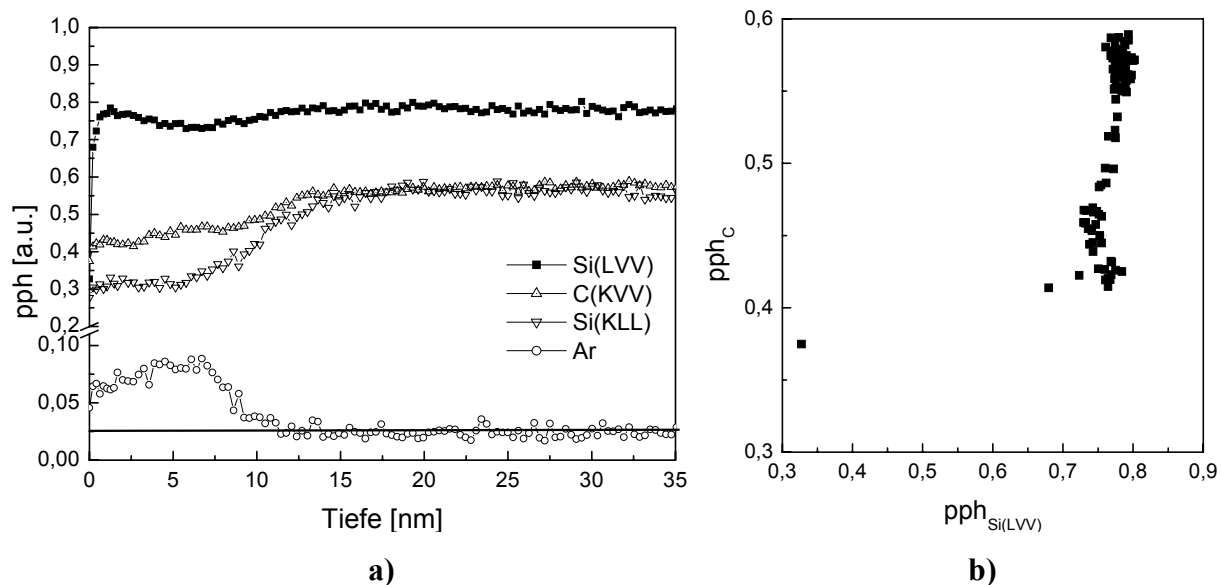


Abb. 5.30 (a) AES-Tiefenprofil gemessen an der SiC-Oberfläche, nachdem sie senkrecht mit 5 keV Ar⁺-Ionen beschossen worden war, in (b) ist die entsprechende $pph_{Si(LVV)}/pph_C$ -Abhängigkeit abgebildet.

Einer der möglichen Gründe für diese Situation ist die Änderung der Peakformen und -positionen bei allen Augerübergängen außer für Argon. Diese Änderungen können allerdings von Vorteil sein, wenn man den Einsatz der Faktorenanalyse für die Auswertung der Tiefenprofile in Betracht zieht. Die Faktorenanalyse wurde für das Tiefenprofil der veränderten Zone, die durch 1 keV Ar⁺-Ionen erzeugt wurde, an den C(KVV)- und Si(LVV)-Augerpeaks durchgeführt. Die Hauptkomponentenanalyse hat für beide Augerpeaks gezeigt, dass nur zwei Spektren notwendig sind, um alle gemessenen Spektren linear fitten zu können. Abb. 5.31 präsentiert die Projektionen der gemessenen Spektren auf den in der Hauptkomponentenanalyse ermittelten Faktorenraum.

Die neuen Basisvektoren PC1 und PC2 können den äußersten Punkten zugeordnet werden. PC1 im 4. Quadrant repräsentiert die Oberfläche und PC2 im 1. Quadrant ist mit dem Ende des Tiefenprofils verbunden. Nach der Diskussion im vorherigen Kapitel können die neuen Basisvektoren und die ihnen entsprechenden Basisspektren wie folgt interpretiert werden: Die Spektren, die am Beginn des Tiefenprofils aufgenommen wurden, repräsentieren die Zerstörung und dadurch auch die veränderte Zone. Die Spektren vom Ende des Tiefenprofils können der unzerstörten Region zugeordnet werden. Die Anteile der zwei Basisspektren in jedem einzelnen Spektrum im Tiefenprofil sagen dann etwas über die Zerstörung in den entsprechenden Positionen (Tiefen) im Tiefenprofil aus. Abb. 5.32 zeigt die für Si(LVV) und C(KVV) ermittelten Basisspektren (PC1, PC2). Die Komponentenprofile der Basisspektren über die abgetragene Tiefe sind in Abb. 5.33 dargestellt. Aus den Komponentenprofilen ist

ersichtlich, dass im Fall von 1 keV Argon-Vorbeschuss kein homogenes Zerstörungsprofil nachweisbar ist. Die Anteile der mit der zerstörten Oberfläche verbundenen Spektren sinken in beiden Fällen (Si(LVV) und C(KVV)) monoton von der Oberfläche in die Tiefe. Definieren wir an dieser Stelle die Dicke der veränderten Zone als Senkung der mit der Oberfläche verbundenen Anteile auf 10%, beträgt die Dicke der veränderten Zone an der SiC-Oberfläche nach dem senkrechten Beschuss mit 1 keV Ar^+ -Ionen 7.3 nm. Zusammen mit den Komponentenprofilen ist in Abb. 5.33 auch das gemessene Argontiefenprofil abgebildet. Die Komponentenprofile der Basisspektren, die die veränderte Zone repräsentieren, folgen anfänglich dem Argonprofil, aber ab einer Tiefe von ca. 3 nm fällt das Argonprofil steiler ab. Das heißt, dass die veränderte Zone, wie sie hier definiert wurde, etwas tiefer als das Argonprofil reicht.

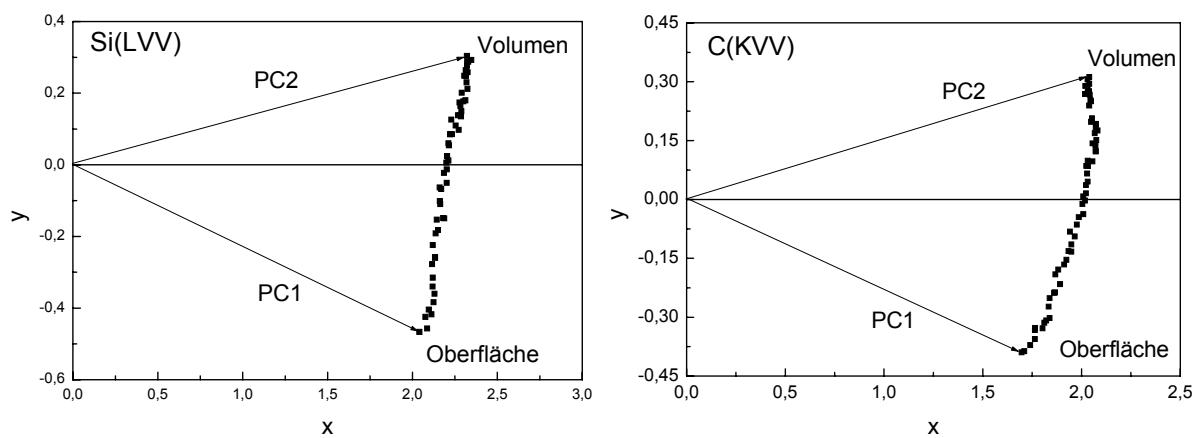


Abb. 5.31 Die Projektionen der Si(LVV)- und C(KVV)- Spektren, die bei der Tiefenprofilierung der SiC-Oberfläche nach dem senkrechten Beschuss mit 1 keV Ar^+ -Ionen gemessen wurden, auf die jeweiligen mittels Hauptkomponentenanalyse ermittelten zweidimensionalen Faktorenräume. Die Vektoren PC1 und PC2 wurden als neue Basis für die Faktorenräume bestimmt.

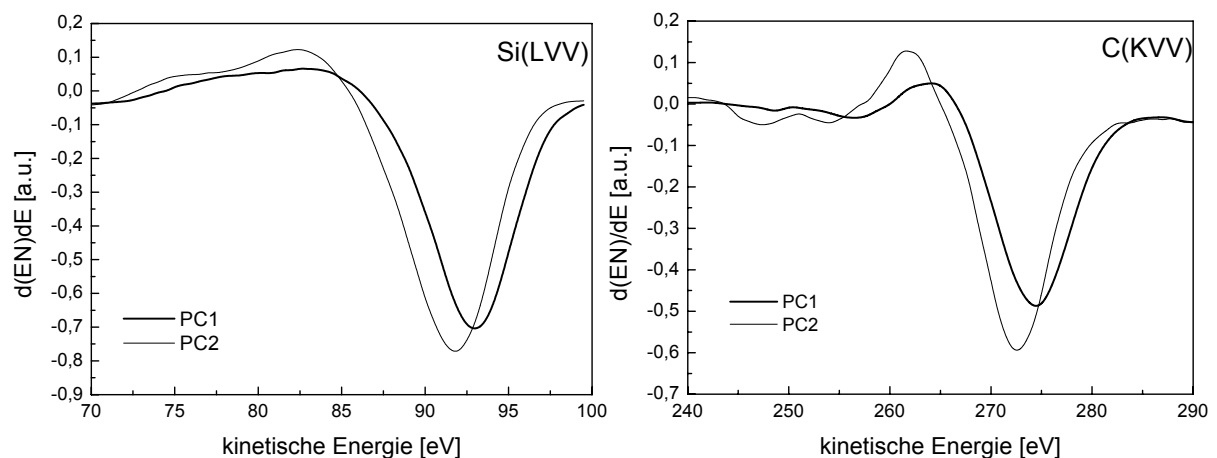


Abb. 5.32 Spektrale Form der Basisvektoren PC1 und PC2, die aus den Faktorenräumen für Si (LVV)- und C(KVV)-Spektren (Abb. 5.31) gewonnen wurden.

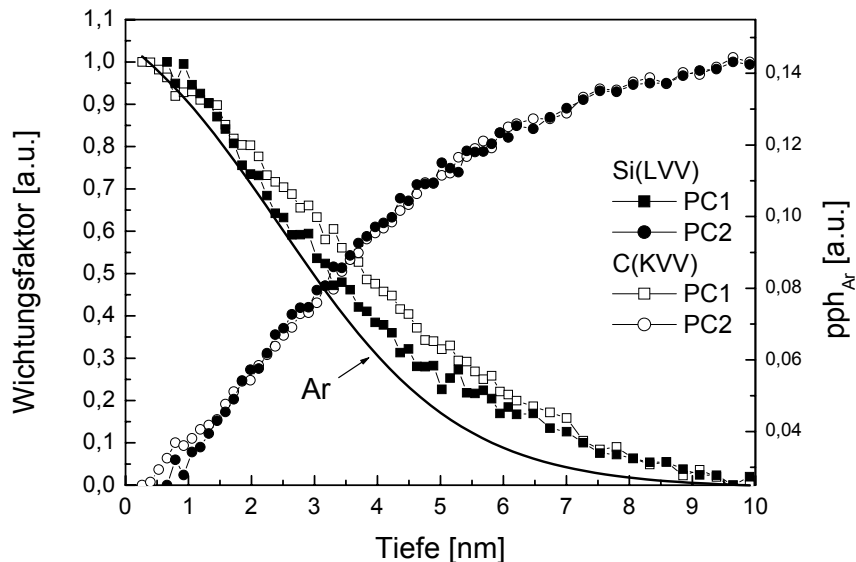


Abb. 5.33 Die Komponentenprofile der Basisvektoren PC1 und PC2 aus Abb. 5.32 über die abgetragene Tiefe. Das gemessene Argonprofil ist zusätzlich dargestellt.

Das Tiefenprofil der durch den 5 keV Ar^+ -Beschuss erzeugten veränderten Zone wurde mittels Faktorenanalyse an den Si(LVV)-, C- und Si(KLL)-Augerpeaks ausgewertet. Im Gegensatz zum vorherigen Tiefenprofil zeigte die Hauptkomponentenanalyse, dass für die ausreichende Datenreproduzierung aller drei Datensätze (Si(LVV) und –(KLL), C) drei Komponenten notwendig sind. Abb. 5.34 veranschaulicht die Projektion der gemessenen Si (KLL)-Augerspektren auf den aus der Hauptkomponentenanalyse ermittelten dreidimensionalen Faktorenraum.

Um die Situation anschaulicher darstellen zu können, werden einzelne Projektionen auf die xy-, yz- und xz-Ebenen in separaten Abbildungen vorgestellt (Abb. 5.35). In allen Abbildungen kann ein Übergang zwischen zwei Clustern beobachtet werden. Der mit A bezeichnete Cluster repräsentiert die Spektren vom Anfang des Tiefenprofils, der B-Cluster ist mit dem Profilende verbunden. Die Punkte, die den Übergang zwischen diesen beiden Clustern bilden, liegen nicht auf einer Geraden, sondern auf einer gekrümmten Linie im 3D-Faktorenraum. Diese Krümmung ist für die Notwendigkeit einer dritten Komponente für die Reproduzierung der gemessenen Spektren verantwortlich. Die neuen Basisspektren, die mit der gestörten Oberfläche bzw. mit der ungestörten Region unterhalb der Oberfläche korrespondieren, wurden aus den Mitten der Cluster gewählt. Das dritte Basisspektrum wurde mit Hilfe der Projektionen auf die xy-, xz- und yz-Ebenen ausgesucht. Als Hauptbedingung bei der Suche wurde die Unterdrückung negativer Anteile bestimmt. Als Annahme galt, dass die Summe aller Anteile nur kleine Abweichungen von eins aufweist. Geometrisch gesehen bedeutet diese Annahme, dass alle Projektionen (Punkte) in einem 3D-Faktorenraum auf einem

Dreieck liegen, dessen Ecken durch die Endpunkte der Basisvektoren bestimmt werden. Dabei gilt auch, dass alle auf die xy -, yz - und xz -Ebenen projizierten Punkte innerhalb eines Dreiecks liegen, das zwischen den auf diese Ebenen projizierten Basisvektoren aufgespannt wurde. Die ersten zwei Punkte eines solchen Dreiecks sind durch die zu den Clustern zugeordneten Basisspektren gegeben. Der dritte Punkt dieses Dreiecks wurde so ausgesucht, dass in allen drei Projektionen auf die xy -, yz - und xz -Ebenen alle Punkte innerhalb des Dreiecks liegen. Als dritter Punkt und damit als drittes Basisspektrum wurde der Punkt mit den Koordinaten $[1, 0.6, 0.45]$ ausgewählt. Die oben beschriebene Prozedur wurde auch an den Si(LVV)- und C-Augerspektren durchgeführt. Die sich daraus ergebenden Basisspektren sind in Abb. 5.36 vorgestellt.

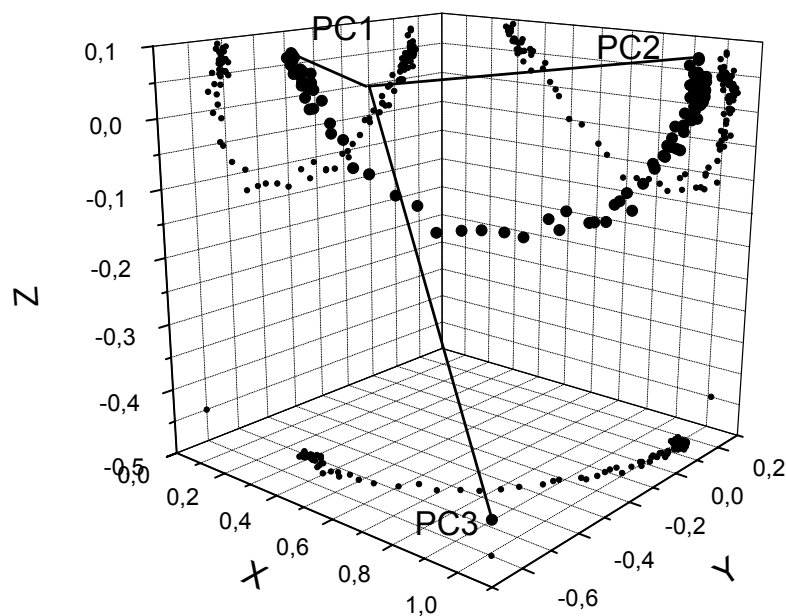


Abb. 5.34 Die Projektionen der gemessenen Si(KLL)-Spektren, die bei der Tiefenprofilierung der SiC-Oberfläche nach dem senkrechten Beschuss mit 5 keV Ar^+ -Ionen gemessen wurden, auf den mittels Hauptkomponentenanalyse ermittelten dreidimensionalen Faktorenraum. Die Vektoren PC1, PC2 und PC3 wurden als neue Basis für den Faktorenraum bestimmt.

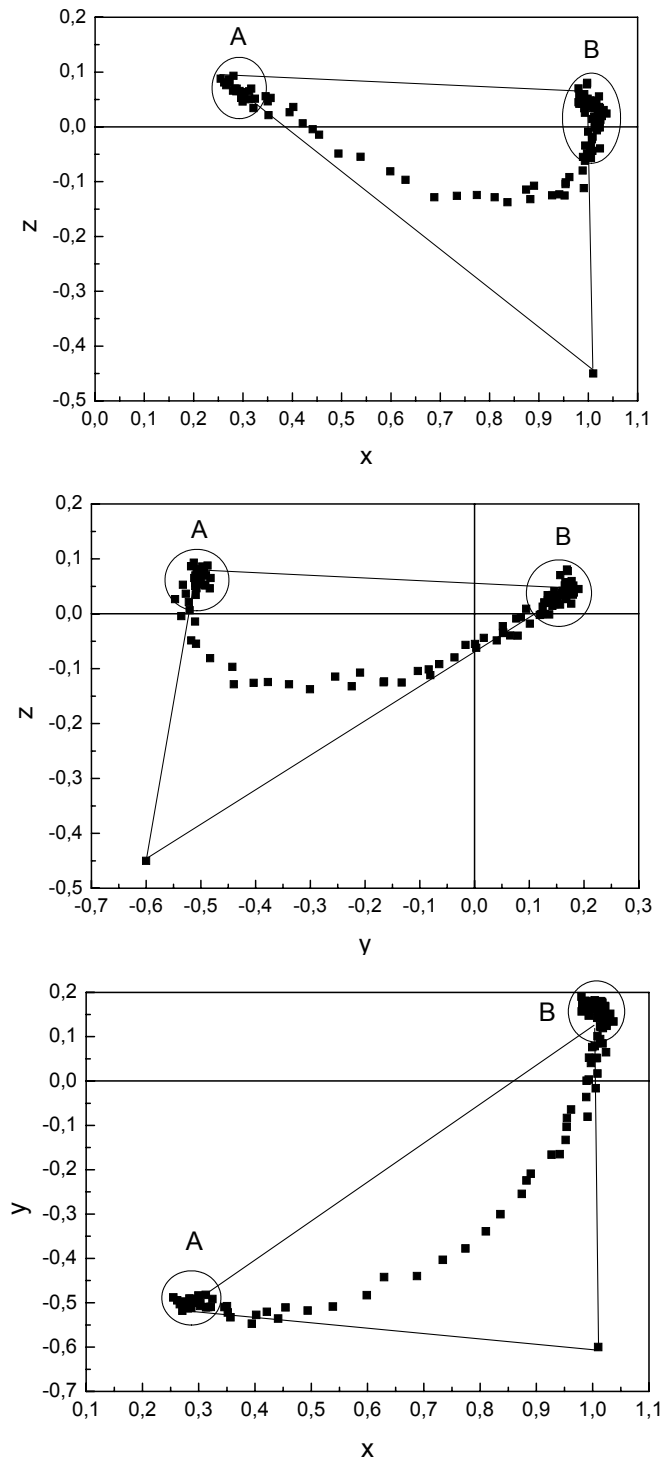


Abb. 5.35 Die Projektionen aller gemessenen Si(KLL)-Spektren auf die xz -, yz - und xy -Ebenen des dreidimensionalen Faktorenraumes (s. Abb. 5.34). Die Hilfslinien veranschaulichen den im Text beschriebenen Prozess der Suche nach dem dritten Basisvektor.

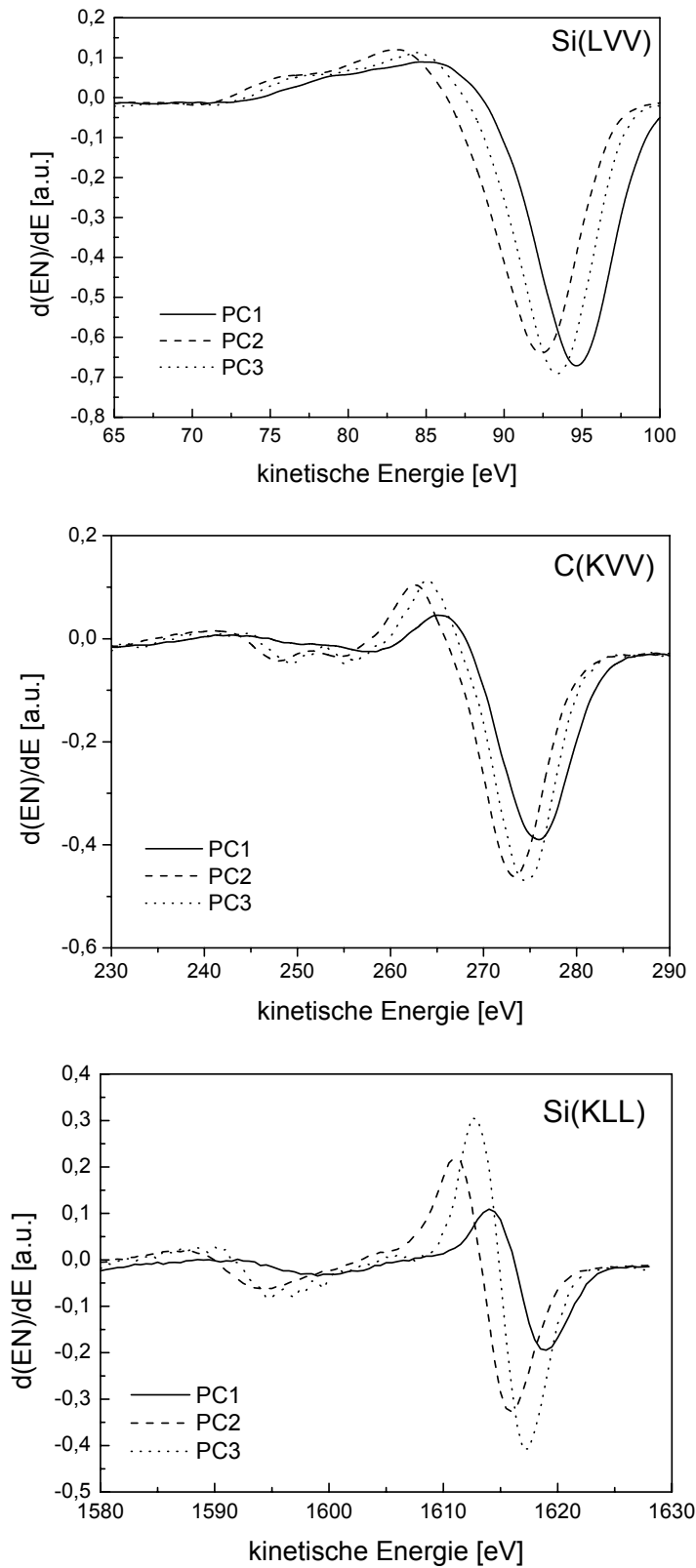


Abb. 5.36 Die neuen Basisspektren PC1, PC2 und PC3, die aus der Faktorenanalyse der gemessenen Si(LVV)-, C(KLL)- und Si(KLL)-Augerspektren für das Tiefenprofil in Abb. 5.30 ermittelt wurden.

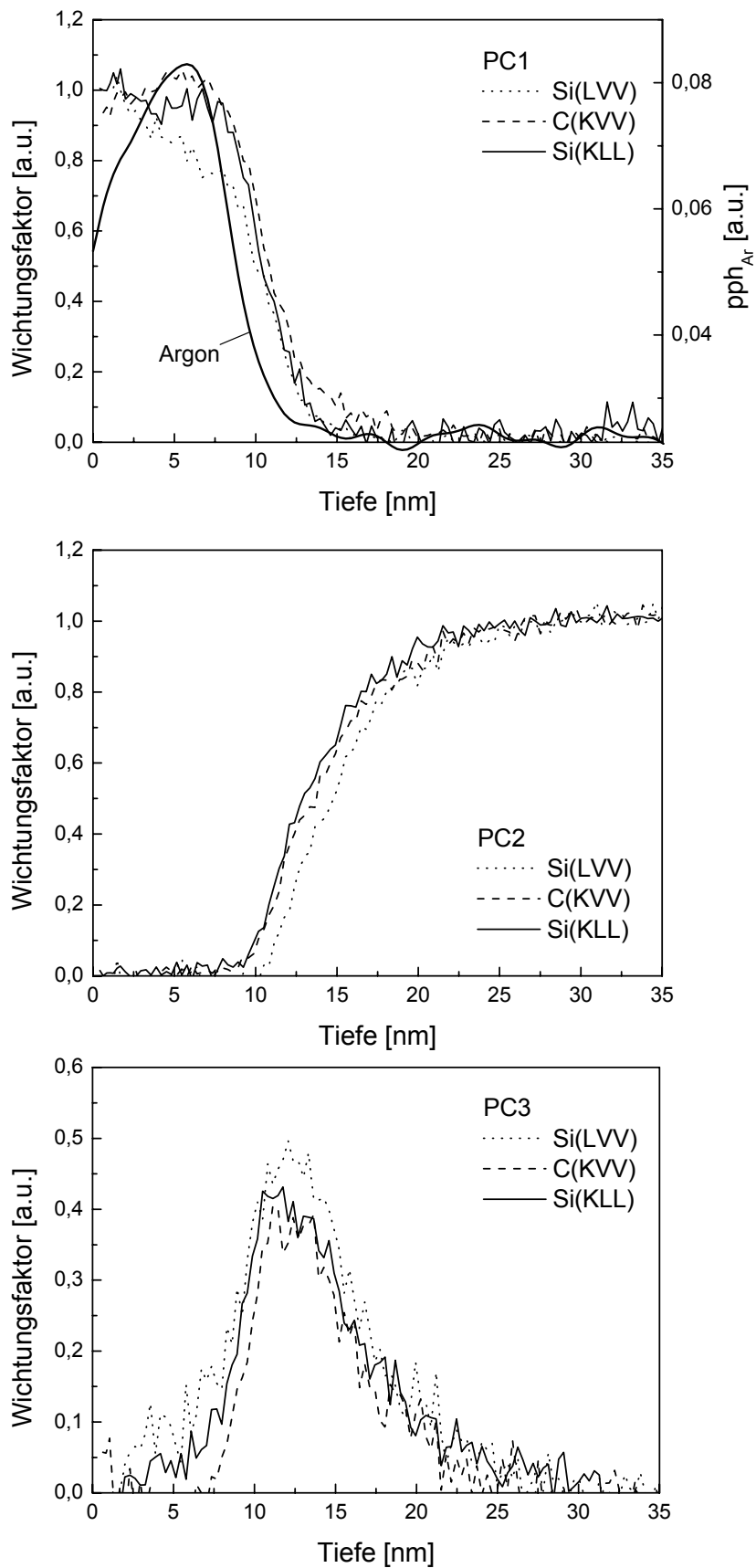


Abb. 5.37 Komponentenprofile der Basisspektren PC1, PC2 und PC3 (Abb. 5.36) über die abgetragene Tiefe. In jeder Grafik sind Anteilprofile aus der Faktorenanalyse der Si(LVV), C(KVV) und Si(KLL) dargestellt.

Abb. 5.37 zeigt die Komponentenprofile der Basisspektren über die Probertiefe. Anders als bei dem Tiefenprofil der durch 1 keV Argonbeschuss erzeugten veränderten Zone, bilden die mit der Oberfläche verbundenen Basisspektren am Anfang der Profile Plateaus. Die Ausnahme ist das Si(LVV)-Basisspektrum, das kein eindeutiges Plateau an der Oberfläche aufweist. Dieses Ergebnis spricht gegen eine homogene Verteilung der Defekte an der Oberfläche, die die Plateaus bei C(KVV)- und Si(KLL)-Übergängen vermuten lassen. Gemessen am Abfall des Anteils auf 10% beträgt die Dicke der veränderten Zone nach dem senkrechten Beschuss mit 5 keV Argonionen 14.2 ± 0.7 nm. Auch hier, wie beim Beschuss mit 1 keV Ar^+ , kann man feststellen, dass die veränderte Zone sich leicht (ca. 2 nm) bis hinter das gemessene Argontiefenprofil ausbreitet.

Bei einer genaueren Betrachtung der dritten Basisspektren PC3 fällt auf, dass sie dieselben spektralen Züge aufweisen wie die zweiten Basisspektren PC2, die mit der unzerstörten Oberfläche verbunden sind. Der Diskussion im vorherigen Kapitel folgend, repräsentieren die dritten Basisspektren PC3 denselben Zerstörungszustand der Oberfläche wie die Basisspektren PC2, nur die Position des Fermi-niveaus, die durch unterschiedliche Aufladung der Oberfläche verursacht wird, variiert.

5.4.2 Streifender Beschuss

Für die Bestimmung der veränderten Zone durch streifenden Beschuss mit Argonionen war es nicht notwendig, die Probe aus dem Spektrometer an die Luft zu bringen. Sowohl der Vorbeschuss als auch die Tiefenprofilierungsprozedur fand unter dem Einfallswinkel 80° zur Probennormale statt. Dadurch konnte eine Kontamination durch Luft vermieden werden. Abb. 5.38 zeigt das gemessene Tiefenprofil einer durch Beschuss mit 4 keV Ar^+ -Ionen erzeugten veränderten Zone, welches im Anschluss an das Vorsputtern aufgenommen wurde. Die Zeit für die Umstellung der Ionenkanone von 4 kV auf 300 V Beschleunigungsspannung betrug ca. 6 Minuten bei einem Druck von 1×10^{-7} Pa. Nach der Umstellung sank das Si(LVV)-Signal deutlich. Der Grund dafür war die Kontaminierung der Oberfläche mit Sauerstoff während der Umstellung der Ionenkanone. Die C- und Si(KLL)-Signale änderten sich nur minimal. In Abb. 5.39 sind zwei Si(LVV)-Augerübergänge dargestellt, von denen einer vor der Umstellung der Ionenkanone, der andere nach dieser Prozedur aufgenommen wurde. Eine Verbreiterung des Augerpeaks um 0.8 eV ist durch die Si-O-Bindungen verursacht. Nach demselben Vergleich an Kohlenstoffübergängen konnten keine deutlichen Änderungen festgestellt werden. Dieser Fakt bestätigt, dass Sauerstoff an SiC-Oberflächen an Siliziumatome gebunden ist

und nicht an Kohlenstoff [Kap84, Miz86, Jør86]. Der Fakt, dass keine Änderungen am Si(KLL)-Übergang festgestellt werden konnten, kann der großen Informationstiefe dieser Elektronen (Kontaminierung beeinflusst nur die oberste Schicht) und auch der geringen Empfindlichkeit dieses Überganges zusammen mit der niedrigen Energieauflösung des Analysators im entsprechenden Energiebereich zugeschrieben werden.

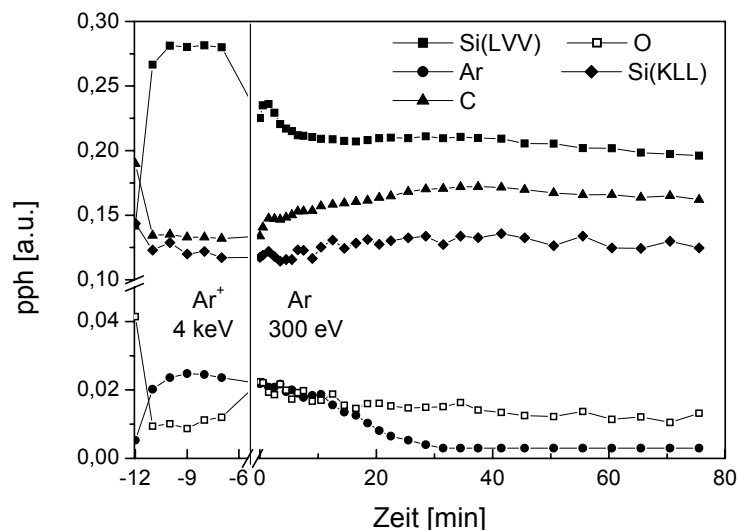


Abb. 5.38 Gemessenes Tiefenprofil einer durch 4 keV Ar^+ -Ionen erzeugten veränderten Zone an der SiC-Oberfläche. Die Zone wurde durch den sechsminütigen Beschuss unter 80° erstellt. Nach ca. 6 Minuten, die zur Umstellung der Ionenkanone auf 300 eV notwendig waren, fing bei der Zeit Null die Tiefenprofilierungsprozedur durch die zerstörte Schicht an.

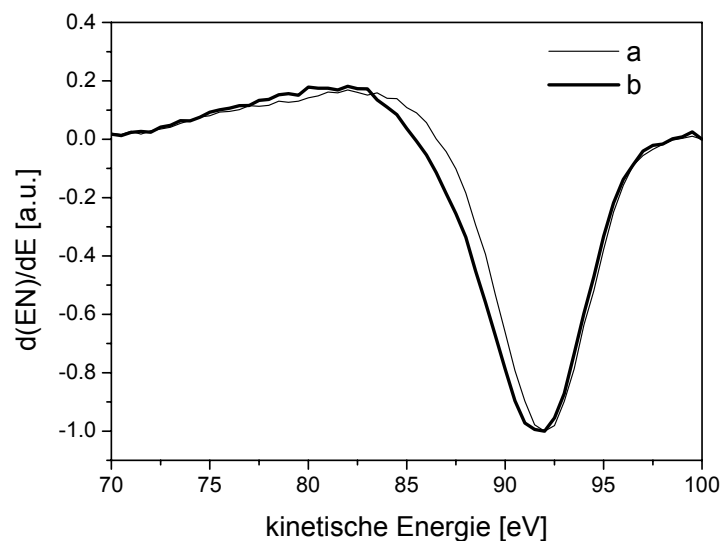


Abb. 5.39 Demonstration des Sauerstoffeinflusses auf den Si(LVV)-Übergang: a) nach dem Beschuss mit 4 keV Ar^+ -Ionen, sauerstofffreie Oberfläche, b) nach 6 Minuten im Vakuum (10^{-7} Pa).

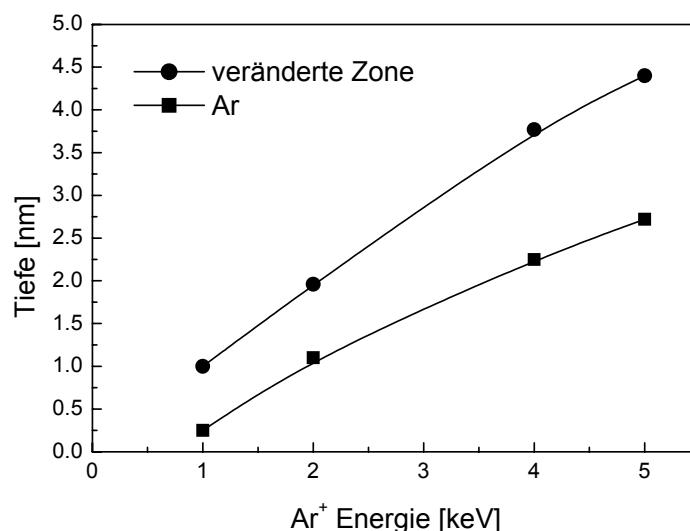


Abb. 5.40 Die Abhängigkeit der Dicke der veränderten Zone und der Tiefe des Argoneinbaus von der Energie der Argonionen beim Beschuss unter 80° .

Leider war Sauerstoff an der Oberfläche während der ganzen Tiefenprofilierungs-Prozedur präsent, was die Auswertung des Si(LVV)-Überganges erschwerte. Das Vorhandensein des Sauerstoffs an der Oberfläche hat seine Gründe wahrscheinlich in einer niedrigen Ionenstromdichte, die zu dieser Zeit mit der Ionenkanone bei 300 eV erreicht werden konnte und die damit die Abtragsrate verkleinerte. Die Unempfindlichkeit des Kohlenstoffs gegenüber Sauerstoff ermöglichte jedoch, dieses Problem zu umgehen. Außer dem Vorbeschuss mit 4 keV wurden auch die Energien 1, 2 und 5 keV benutzt, um eine veränderte Zone zu erzeugen. In allen Fällen trat das Problem durch Kontamination mit Sauerstoff an der Oberfläche auf. Deswegen wurde die Faktorenanalyse nur an Kohlenstoffübergängen durchgeführt. Die Hauptkomponentenanalyse ergab in allen vier Fällen die Notwendigkeit, nur zwei Komponenten für eine erfolgreiche Reproduzierung der gemessenen Daten heranzuziehen. Die Auswertung wurde analog wie im Fall des senkrechten Vorbeschusses mit 1 keV Ar⁺ durchgeführt. Die Dicke der veränderten Zone wurde am Abfall des Anteils des mit der Oberfläche verbundenen Basisspektrums (PC1) auf 10% bestimmt. Abb. 5.40 zeigt die Abhängigkeit der Dicke der veränderten Zone und der Einbautiefe des Argons von der Beschussenergie der Argonionen für einen Einfallswinkel von 80° . Die Werte für den Vorbeschuss mit 1 keV Ar⁺ sind allerdings fehlerbehaftet, da die Beschussbedingungen während der Tiefenprofilierung nicht optimal waren (s. Abb. 5.28 und die dazugehörige Diskussion). Wie auch beim senkrechten Beschuss beobachtet, reicht beim streifenden Einfallswinkel die veränderte Zone um 0.5 bis 1.5 nm tiefer als der Argoneinbau.

5.5 Zusammenfassung

Dieses Kapitel behandelte die Wirkung des Ionenbeschusses auf die SiC-Oberflächen in vier Punkten:

- (i) Einbau der Ionen,
 - (ii) Änderungen der Oberflächenkonzentration,
 - (iii) Änderungen der Augerspektren und
 - (iv) die Tiefenprofilierung der veränderten Zonen.
- (i) Die AES-Untersuchungen zeigten, dass der Ioneneinbau in die SiC-Oberfläche sowohl von der Energie der Ionen als auch vom Einfallswinkel abhängig ist. Der generelle Trend, also eine sinkende Oberflächenkonzentration der eingebauten Ionen mit steigender Ionenenergie, wurde beim senkrechten Beschuss für Neon-, Argon- und auch Xenonionen beobachtet. Für Argon besteht diese Tendenz bis zu einem Einfallswinkel von 70° . Für Einfallswinkel $> 70^\circ$ kippt die Tendenz und der Einbau steigt mit steigender Ionenenergie. Der Argoneinbau konnte quantifiziert werden, die maximale Konzentration von 3.7% wurde für das senkrechte Sputtern mit 500 eV festgestellt. Das Modell von Kudriavtsev [Kud00] erwies sich als tauglich, die gemessene Energieabhängigkeit des Argoneinbaus zu beschreiben. Die Erscheinung eines zusätzlichen Augerpeaks im Spektrum von Neon wird als Nachweis für die Bildung von Ne-Blasen im Festkörper betrachtet.
- (ii) Die Messungen der Zusammensetzungsänderungen anhand der *pph*-Verhältnisse zwischen Si(LVV)- und C(KVV)-Augersignalen ergaben, dass für den senkrechten Beschuss im Energiebereich von 0.5 bis 5 keV nur kleine Änderungen auftreten. Im Falle von Xenon wurde festgestellt, dass die Oberfläche siliziumärmer wird, wenn die Ionenenergie niedrig ist. Diese Tendenz wird mit der Erhöhung des Einfallswinkels beibehalten. Für Argon sind die Konzentrationsänderungen beim senkrechten Beschuss unabhängig von der Ionenenergie. Diese Unabhängigkeit geht mit der Vergrößerung des Einfallswinkels in eine Verarmung der Oberfläche an Si mit sinkender Ionenenergie über, wie es auch bei Xenon beobachtet wurde. Die Vorgänge, die die Änderungen der Oberflächenzusammensetzung während des Sputterns hervorrufen, wurden mittels dynamischer MC-Simulationen untersucht. Dabei wurde die Wichtigkeit der Verschiebungsenergie als einer der Simulationsparameter erkannt und ihre Wirkung auf die Gleichgewichtskonzentrationsprofile demonstriert.
- (iii) Mit der Verkleinerung der Ionenenergie bei den Einfallswinkeln von 60° und 80° wurden Veränderungen sowohl in der Peaklage als auch in den spektralen Zügen der Si-

und C-Augerspektren festgestellt. Die Peakverschiebung der Augerpeaks zu höheren kinetischen Energien wurde anhand der Oberflächenaufladung erklärt. Diese Aufladung ist mit der Defektproduktion in der oberflächennahen Region und damit auch mit der Ionenenergie verbunden. Die Änderungen in den spektralen Zügen der Si(LVV)- und C(KVV)-Augerspektren wurden nach dem Vergleich mit den Spektren, die auf ungesputterten SiC-Oberflächen gemessen wurden, auf die Aufhebung der ursprünglich tetraedrischen Kristallordnung und der ausschließlich heteronuklearen Bindungen zurückgeführt. Im Abschluss wurde die Möglichkeit gezeigt, anhand der Peaklage der Augerspektren die Zuordnung zu einem Leitungstyp, bzw. zu einem Polytyp, experimentell nachweisen zu können.

- (iv) Die Zuordnung der Peakform zu einer „zerstörten“ oder einer „unzerstörten“ SiC-Oberfläche zusammen mit sehr weichen Sputterbedingungen, die die Oberfläche nur wenig zerstören, ermöglichte es, die Sputtertiefenprofilierung durch die ionenstrahlerzeugten veränderten Zonen an SiC-Oberflächen messen zu können. Für die Auswertung der gemessenen Tiefenprofile wurde die Faktorenanalyse eingesetzt. Diese zeigte, dass für die Auswertung der Tiefenprofile generell nur zwei Komponenten notwendig sind. Eine Ausnahme bildete das Tiefenprofil der mit 5 keV Ar^+ unter 0° beschossenen SiC-Oberfläche, bei dessen Auswertung drei Komponenten notwendig waren. Unter den hier angewandten Sputterbedingungen konnten auch die Tiefenprofile des eingebauten Argons gemessen werden.

6. Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wird die Augerelektronenspektroskopie an Siliziumkarbid behandelt. Besonderer Augenmerk gilt dabei dem Einfluss des Beschusses der Oberfläche dieses Halbleitermaterials mit niederenergetischen Ionen.

Nach einer Einleitung im ersten Kapitel werden im zweiten Kapitel die theoretischen Grundlagen behandelt. Nach der Erklärung des Augerprozesses und einer Einführung in die quantitative AES werden hier das Prinzip der Faktorenanalyse und die Sputtertheorie ausführlich vorgestellt. Bei der Faktorenanalyse wird das Gewicht auf die geometrische Darstellung gelegt. Obwohl die Faktorenanalyse seit mehreren Jahren als ein etabliertes Werkzeug zur Auswertung von Auger- und Photoelektronenspektren eingesetzt wird, ist ihre Anwendung in der AES noch immer mit einigen offenen Fragen behaftet. Es wird gezeigt, dass die Anwendung der Faktorenanalyse an differenzierten Spektren kein Hindernis darstellt. Die Problematik der Normierung der Spektren wird sowohl für die direkten als auch für die differenzierten Spektren behandelt. Es wird eine Warnung davor ausgesprochen, die Spektren zur Auswertung zu verketten, da dies zu fehlerhaften Ergebnissen führen kann. Ausgehend von der Sigmundschen Sputtertheorie wird die Hauptwirkung des Ionenbeschusses auf einen Festkörper, der Abtrag oder auch das Sputtern, am Ende des theoretischen Teils dieser Arbeit behandelt. Dabei wird die Sigmundsche Sputtertheorie modifiziert und eine neue Formel für die Berechnung der Sputterausbeuten im Regime linearer Kaskaden abgeleitet.

Das dritte Kapitel stellt die Arbeiten zur quantitativen Auswertung der SiC-Augerspektren dar. Es wird gezeigt, dass die differenzierten Augerspektren zur quantitativen Analyse problematisch und daher ungeeignet sind. Dieser Fakt kann auch als Quelle der Unstimmigkeiten zwischen den Literaturangaben zur Veränderung der SiC-Oberflächenzusammensetzung nach dem Ionenbeschuss betrachtet werden. Die quantitative Analyse der direkten Spektren ergibt eine an Si verarmte SiC-Oberfläche, nachdem diese mit Argonionen bombardiert wurde.

Der Ionenbeschussinduzierte Abtrag von SiC ist das Thema des vierten Kapitels. Zur Messung der Sputterausbeuten von SiC beim Beschuss mit Edelgasionen wurde die AES-Tiefenprofilierung eingesetzt. Der Vergleich zwischen den Messergebnissen und der Theorie, bzw. Computersimulation ergab die effektive Oberflächenbindungsenergie von 4 eV beim Sputtern von SiC. Dieser Wert ist kleiner als der durch die Theorie vorhergesagte. Der Unterschied wird mit der Schwächung der Bindungskräfte an der Oberfläche durch die Amorphisierung und mit der Defektbildung erklärt. Auch wenn für den senkrechten Beschuss eine gute

Übereinstimmung zwischen den gemessenen Sputterausbeuten und den theoretischen bzw. den simulierten Werten demonstriert werden kann, wurde für die größeren Einfallswinkel der Ionen diese Korrelation nicht erreicht. Als Grund für die Differenzen wird in Einheit mit den Simulationsergebnissen aus der Literatur die Oberflächenrauheit in den atomaren Abmessungen angenommen.

Im fünften Kapitel wird die durch den Ionenbeschuss verursachte veränderte Zone an der Oberfläche des SiC behandelt. Es werden Messungen zur Energieabhängigkeit und für Argon auch zur Winkelabhängigkeit des Edelgaseinbaus in die SiC-Oberfläche dargestellt. Die Messungen werden zum Teil auch quantifiziert. Zusätzliche Peaks in den Ne-Augerspektren werden als Folge einer Blasenbildung von eingebauten Ne-Atomen erklärt. XPS-Messungen an Ne-bombardierte Si-Substraten unterstützen diese Behauptung. Die Zusammensetzungsänderungen der SiC-Oberfläche auf Grund des Sputterns werden vor allem mittels dynamischen Monte-Carlo-Simulationen untersucht. In diesem Teil der Arbeit wird die Rolle und der Einfluss der Verschiebungsenergie auf die berechneten Gleichgewichtskonzentrationsprofile erstmalig identifiziert und untersucht. Die Peakformänderungen der Si- und C-Augerspektren, die nach dem Ionenbeschuss von sauberen, einkristallinen SiC-Oberflächen beobachtet werden, können mit der Oberflächenamorphisierung und mit Aufladungseffekten erklärt werden. Diese Änderungen in den Augerspektren dienen als Grundlage für die Tiefenprofilierung der veränderten Zonen. Für die Tiefenprofilierung sind solche Sputterbedingungen nötig, die während des Sputterns nur zu geringfügigen Änderungen der Augerspektren im Vergleich zu einer ungeschädigten SiC-Oberfläche führen (Ar^+ , 300 eV, 80°). Diese Sputterbedingungen ermöglichen zusammen mit der Faktorenanalyse eine Tiefenprofilanalyse der durch den Ionenbeschuss veränderten Zonen. Somit können sowohl die Tiefe der Zerstörung als auch der Einbau des Argons experimentell bestimmt werden. Ein weiteres sehr interessantes Ergebnis dieser Arbeit ist der Nachweis, dass mit der AES die Leitungstypen und z.T. auch die Polytypen von SiC unterschieden werden können.

Vor allem die letzten Ergebnisse, der Zerstörungs-, Leitungstyp- und Polytypnachweis bei SiC mittels AES, öffnet neue Einsatzbereiche der AES in der SiC-Technologie. Das verlangt von modernen Augerelektronenspektrometern, dass sie mit leistungsfähigen Ionenkanonen ausgerüstet werden. Diese Ionenkanonen sollten sehr variabel sein im Hinblick auf die möglichen Ionen, den einstellbaren Beschusswinkel und insbesondere sollten sie möglichst kleine Beschussenergien erlauben. Solche Ionenkanonen ermöglichen Messungen von Zerstörungsprofilen bis in Tiefen, die z.B. für die Ionenimplantation relevant sind. Wie gezeigt wird,

ist zur Analyse von Leitungstypen und Polytypen jedoch nicht unbedingt dieser ‚schonende‘ Ionenbeschuss mit kleinsten Energien unter streifendem Einfall notwendig.

Die Darstellungen zeigen, dass die AES und die Auger-Tiefenprofilierung noch mehr Potential für die Begleitung technologischer Entwicklungen an alternativen und innovativen Halbleitermaterialien wie SiC in sich bergen. Dieses Potential kann vor allem noch durch die hohe laterale Auflösung der AES verstärkt werden, die zusammen mit der Tiefenprofilierungsmöglichkeit zu dreidimensionalen Leitungstyp-, Polytyp- oder Zerstörungsabbildungen mit höchster lateraler und Tiefenauflösung führen kann.

Die in der vorgelegten Arbeit dargestellten Untersuchungen, Ergebnisse und Ideen können auch als Hinweis verstanden werden, künftig ähnliche Untersuchungen an andern Materialien wie z.B. Gruppe-III-Nitriden durchzuführen, da hier zum Teil ähnlich nützliche Ergebnisse zu erwarten sind.

Literaturverzeichnis

- [And65] H.H. Andersen, P. Sigmund, Nucl. Instrum. Methods 38 (1965) 238.
- [And74] N. Andersen, P. Sigmund, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 39 (3) (1974).
- [And75] H.H. Andersen, H.L. Bay, J. Appl. Phys. 46 (1975) 2416.
- [And81] H.H. Andersen, H.L. Bay, in Sputtering by Particle Bombardment, R. Behrisch (Ed.), (1981).
- [Aug25] P. Auger, J. Phys. Radium. 6 (1925) 205.
- [Bab92] Y. Baba, H. Yamamoto, T.A. Sasaki, Nucl. Instr. and Meth. B 66 (1992) 424.
- [Ban86] U. Bangert, P.J. Goodhew, C. Jeynes, I.H. Wilson, J. Phys. D 19 (1986) 589.
- [Bar98] A. Barna, B. Pécz, M. Menyhard, Ultramicroscopy 70 (1998) 161.
- [Bat89] D.R. Batchelor, H.E. Bishop, J.A. Venables, Surf. Interface Anal. 14 (1989) 709.
- [Bat03] G. Battistig, J.L. Lábár, S. Gurbán, A. Sulyok, M. Menyhard, I.C. Vickridge, E. Szilagy, J. Malherbe, Q. Odendaal, Surf. Sci. 526 (2003) L133.
- [Bau99] S. Baunack, S. Oswald, H.K. Tönshoff, F. von Alvensleben, T. Temme, Fresenius J. Anal. Chem. 365 (1999) 173.
- [Bec83] F. Bechstedt, R. Enderlein, J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena 31 (1983) 134.
- [Bec97] H.L. Beck, M.-H. Lee, F.S. Ohuchi, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 438 (1997) 253.
- [Bel86] J.J. Bellina, Jr., J. Ferrante, M.V. Zeller, J. Vac. Sci. Technol. A 4 (1986) 1692.
- [Bel86b] J.J. Bellina, Jr, M.V. Zeller, Appl. Surf. Sci. 25 (1986) 380.
- [Ber97] B.J. Ber, V.S. Kharlamov, Yu. A. Kudrjavitsev, A.V. Merkulov, Yu.V. Trushin, E.E. Zhurkin, Nucl. Instr. and Meth. B 127/128 (1997) 286.
- [Bie82] J.P. Biersack, J.F. Ziegler, Nucl. Instrum and Method. 194 (1982) 93.
- [Bie84] J.P. Biersack, W. Eckstein, Appl. Phys. A 34 (1984) 73.
- [Bla79] P. Blank, K. Wittmaak, J. Appl. Phys. 50 (1979) 1519.
- [Boc93] W. Bock, H. Gnaser, H. Oechsner, Surf. Sci. 282 (1993) 333.
- [Boh84] J. Bohdanský, Nucl. Instr. and Meth. B 2 (1984) 587.
- [Bre00] O. Breitschädel, J.T. Hsieh, B. Kuhn, F. Scholz, H. Schweizer, Appl. Phys. Lett. 76 (2000) 1899.
- [Bub96] H. Bubert, T. Niebuhr, J. Microscopy Soc. Am. 2 (1996) 35.

- [Bub00] H. Bubert, H. Hillig, *Microchim. Acta* 133 (2000) 95.
- [Bus88] T.D. Bussing, P.H. Holloway, Y.X. Wang, J.F. Moulder, J.S. Hammond, *J. Vac. Sci. Technol. B* 6 (1988) 1514.
- [Cao00] Z. Cao, H. Oechsner, *Nucl. Instr. and Meth. B* 168 (2000) 192.
- [Che99] J. Chen, P. Jung, H. Trinkaus, *Phys. Rev. Lett.* 82 (1999) 2709.
- [Chi92] T. Chini, S.R. Bhattacharyya, D. Ghose, D. Basu, *Nucl. Instr. and Meth. B* 72 (1992) 355.
- [Cho93] W. Choi, C. Kim, H. Kang, *Surf. Sci.* 281 (1993) 323.
- [Cit74] P.H. Citrin, D.R. Hamann, *Phys. Rev. B* 10 (1974) 4984.
- [Dev00] R. Devanathan, W.J. Weber, *J. Nucl. Mater.* 278 (2000) 258.
- [Dew03] A. Dewaele, J.H. Eggert, P. Loubeyre, R. Le Toullec, *Phys. Rev. B* 67 (2003) 094112.
- [DeS93] M. De Seta, S.L. Wang, F. Fumi, F. Evangelisti, *Phys. Rev. B* 47 (1993) 7041.
- [Don91] S.E. Donnelly, J.H. Evans, (Eds.), *Fundamental Aspects of Inert Gases in Solids*, Plenum Press, New York, 1991.
- [Eck91] W. Eckstein, *Computer Simulation of Ion-Solid Interactions*, Springer Series in Materials Science 10, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 1991.
- [Eck92] W. Eckstein, S. Hackel, D. Heinemann, B. Fricke, *Z. Phys. D* 24 (1992) 171.
- [Eck93] W. Eckstein, C. García-Rosales, J. Roth, W. Ottenberger, *Sputtering Data*, Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, Report IPP 9/26 (1993).
- [Eck97] G. Ecke, H. Rößler, Th. Wohner, V. Cimalla, J. Scheiner, S. Hofmann, *Proceedings of the 7th European Conference on Applications of Surface and Interface Analysis*, I. Olefjord, L. Nyborg, D. Briggs (Eds.) 288.
- [Eck99] G. Ecke, R. Kosiba, J. Pezoldt, H. Rößler, *Fresenius J. Anal. Chem.* 365 (1999) 195.
- [Eck02] G. Ecke, R. Kosiba, V. Kharlamov, Y. Trushin, J. Pezoldt, *Nucl. Instr. and Meth. B* 196 (2002) 39.
- [Ere69] K. Erents, B. Navinsek, G. Carter, *Br. J. Appl. Phys.* 18 (1967) 587.
- [Fal87] G. Falcone, *Surf. Sci.* 187 (1987) 212.
- [Fal88] G. Falcone, *Phys. Lett. A* 129 (1988) 188.
- [Fal93] G. Falcone, *Il Nuovo Cimento* 15 (1993) 1159.
- [Fei77] P.J. Feibelman, E.J. McGuire, K.C. Pandey, *Phys. Rev. B* 15 (1977) 2202.
- [Fie93] J.N. Fiedor, A. Proctor, M. Houalla, D.M. Hercules, *Surf. Interface Anal.* 20 (1993) 1.

- [Fil89] H.A. Filius, A. van Veen, K.R. Bijkerk, *Radiat. Eff. and Def. In Solids* 108 (1989) 1.
- [Fir58] O.B. Firsov, *Soviet Physics JETP* 6 (1958) 534.
- [Frö90] O. Fröhlich, H. Baumann, K. Bethge, *Nucl. Instr. and Meth. B* 50 (1990) 436.
- [Fuk84] S. Fukuda, M. Mohri, T. Yamashina, *Fusion Technology* 6 (1984) 420.
- [Gaa79] S.W. Gaarenstrom, *J. Vac. Sci. Technol.* 16 (1979) 600.
- [Gal93] I.G. Gale, *Phillips J. Res.* 47 (1993) 333.
- [Gal00] A. Galdikas, L. Pranevicius, *Interaction of Ions with Condensed Matter*, Nova Science Publishers, Inc., 2000.
- [Gao02] F. Gao, W.J. Weber, *Phys. Rev. B* 66 (2002) 024106.
- [Gar94] C. García-Rosales, W. Eckstein, J. Roth, *J. Nucl. Mat.* 218 (1994) 8.
- [Gat93] E. Gat, B. Cros, R. Berjoan, J. Durand, *Appl. Surf. Sci.* 64 (1993) 345.
- [Gna95] H. Gnaser, B. Heinz, W. Bock, H. Oechsner, *Phys. Rev. B* 52 (1995) 14086.
- [Gna99] H. Gnaser, *Low Energy Ion Irradiation Of Solid Surfaces*, Springer-Verlag Berlin-Heidelberg, 1999.
- [Had03] E.F.C. Haddeman, B.J. Thijsse, *Nucl. Instr. and Meth. B* 202 (2003) 161.
- [Hal77] P.M. Hall, J.M. Morabito, D.K. Conley, *Surf. Sci.* 62 (1977) 1.
- [Har95] G.L. Harris (Ed.), *Properties of Silicon Carbide*, INSPEC, London (1995), S. 88.
- [Hed95] C.L. Hedberg (Ed.), *Handbook of Auger Electron Spectroscopy*, 3rd Edition, Physical Electronics, Inc. (1995).
- [Hee97] V. Heera, W. Skorupa, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* 438 (1997) 241.
- [Hen98] H. Hensel, H.M. Urbassek, *Nucl. Instr. and Meth. B* 142 (1998) 287.
- [Hof98] S. Hofmann, *Rep. Prog. Phys.* 81 (1998) 827.
- [Hoj98] K. Hojou, S. Furuno, K.N. Kushita, N. Sasajima, K. Izui, *Nucl. Instr. and Meth. B* 141 (1998) 148.
- [Hol88] A.H.M. Holtslag, A. van Silfhout, *Phys. Rev. B* 38 (1988) 10 556.
- [Hol00] M. Hollering, *Dissertation*, Friedrich-Alexandr-Universität Erlangen Nürnberg, 2000.
- [Hou77] J.E. Houston, G. Moore, M.G. Lagally, *Solid State Comm.* 21 (1977) 879.
- [Hua94] H. Huang, N. Ghoniem, *J. Nucl. Mater.* 212-215 (1994) 148.
- [Hua94b] L.J. Huang, W.M. Lau, H.T. Tang, W.N. Lennard, I.V. Mitchell, P.J. Schultz, M. Kasrai, *Phys. Rev. B* 50 (1994) 18 453.
- [Iga02] S. Igarashi, S. Muto, T. Tanabe, *J. Nucl. Mat.* 307-311 (2002) 1126.

- [Jab02] A. Jablonski, Surf. Sci. 499 (2002) 219.
- [Jør86] B.Jørgensen, P. Morgen, J. Vac. Sci. Technol. A 4 (1986) 1701.
- [Jør90] B. Jørgensen, P. Morgen, Surf. Interface Anal. 16 (1990) 199.
- [Kap84] R. Kaplan, J. Appl. Phys. 56 (1984) 1636.
- [Ke96] R. Ke, R.T. Haasch, N. Finnegan, L.E. Dottl, R.C. Alkire, H.H. Farrel, J. Vac. Sci. Technol. A 14 (1996) 80.
- [Kel84] R. Kelly, Radiat. Eff. 80 (1984) 273.
- [Kem78] J. Kempf, Appl. Phys. 16 (1978) 43.
- [Kes95] V.G. Kesler, L.M. Logvinsky, I.P. Petrenko, K.K. Svitashv, Proceedings of the 6th European Conference on Applications of Surface and Interface Analysis, H.J. Mathieu, B. Reihl, D. Briggs (Eds.) 288.
- [Kim02] Y.M. Kim, V. Philipps, M. Rubel, E. Vietzke, A. Pospieszczyk, B. Unterberg, R. Jaspers, J. Vac. Sci. Technol. A 20 (2002) 138.
- [Kir79] J. Kirschner, H.W. Etzkorn, Appl. Surf. Sci. 3 (1979) 251.
- [Koo94] B.J. Kooi, M.A.J. Somers, Surf. Interface Anal. 21 (1994) 501.
- [Kny80] E. Kny, J. Vac. Sci. Technol. 17 (1980) 658.
- [Kos02] R. Kosiba, G. Ecke, Nucl. Instr. and Meth. B 187 (2002) 36.
- [Kos02b] R. Kosiba, G. Ecke, J. Breza, J. Liday, Proceedings of the 4th International Conference on Advanced Semiconductor Devices and Microsystems, Smolenice, Slovakia, (2002) 203.
- [Kos03] R.Kosiba, G. Ecke, O. Ambacher, M. Menyhard, Radiat. Eff. and Def. in Solids 158 (2003) 721.
- [Kov00] J. Kovač, T. Bogataj, A. Zalar, Surf. Interface Anal. 30 (2000) 190.
- [Kud00] Yu. Kudriavtsev, Nucl. Instr. and Meth. B 160 (2000) 307.
- [Kup94] G. Kupris, Dissertation, TU Ilmenau (1994).
- [Küs98] M. Küstner, W. Eckstein, V. Dose, J. Roth, Nucl. Instr. and Meth. B 145 (1998) 320.
- [Lab98] J.G.C. Labanda, , S.A. Barnett, L. Hultman, J. Vac. Sci. Technol. B 16 (1998) 1885.
- [Lan84] J.P. Langeron, L. Minel, J.L. Vignes, S. Bouquet, F. Pellerin, G. Lorang, P. Ailloud, J. Le Héricy, Surf. Sci. 138 (1984) 610.
- [Lau93] W.M. Lau, I. Bello, L.J. Huang, X. Feng, M. Vos, I.V. Mitchell, J. Appl. Phys. 74 (1993) 7101.
- [Lee80] W.-Y. Lee, J. Appl. Phys. 51 (1980) 3365.

- [Lid01] J. Liday, M. Čatárová, E. Matušková, R. Kosiba, G. Ecke, P. Vogrinčič, J. Breza, *J. Electr. Eng.* 52, 5 (2001) 162.
- [Lin68] J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff, *K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.* 36 (10) (1968).
- [Lul99] G. Lulli, E. Albertazzi, M. Bianconi, R. Nipoti, *Nucl. Instr. and Meth.B* 148 (1999) 573.
- [Lün99] J. Lüning, S. Eisebitt, J.-E. Rubensson, C. Ellmers, W. Eberhardt, *Phys. Rev. B* 59 (1999) 10 573.
- [Mad81] H.H. Madden, *J. Vac. Sci. Technol.* 18 (1981) 677.
- [Mah97] J.E. Mahan, A. Vantomme, *J. Vac. Sci. Technol. A* 15 (1997) 1976.
- [Mal94] J.B. Malherbe, *Crit. Rev. Solid State and Mat. Sci.* 19 (1994) 55.
- [Mal02] E.R. Malinowski, *Factor Analysis in Chemistry*, 3rd Edition, John Wiley and Sons, Inc. (2002).
- [Mar97] L.A. Marqués, J.E. Rubio, M. Jaraíz, L.A. Bailón, J.J. Barbolla, *J. Appl. Phys.* 81 (1997) 1488.
- [Mar03] T. Maruyama, S. Mitani, *J. Non-Crystal. Sol.* 319 (2003) 219.
- [Mat73] D.L. Matthews, B.M. Johnson, J.J. Mackey, C.F. Moore, *Phys. Lett.* 45A (1973) 447.
- [Men81] M. Menzel, K. Wittmaak, *Nucl. Instrum. Methods* 191 (1981) 235.
- [Mio93] A. Miotello, L. Calliari, R. Kelly, N. Laidani, M. Bonelli, L. Guzman, *Nucl. Instr. and Meth. B* 80/81 (1993) 931.
- [Mis91] S. Mischler, H.E. Bishop, *Surf. Interface Anal.* 17 (1991) 315.
- [Miz86] Y. Mizokawa, K.M. Geib, C.W. Wilmsen, *J. Vac. Sci. Technol. A* 4 (1986) 1696.
- [Moh78] M. Mohri, K. Watanabe, T. Yamashina, H. Doi, K. Hayakawa, *J. Nucl. Mater.* 75 (1978) 309.
- [Möl88] W. Möller, W. Eckstein, J.P. Biersack, *Comput. Phys. Communications* 51 (1988) 355.
- [Mor85] P. Morgen, K.L. Seaward, T.W. Barbee, Jr., *J. Vac. Sci. Technol A* 3 (1985) 2108.
- [Mor98] T. Morohashi, T. Hoshi, H. Nikaido, M. Kudo, *J. Vac. Sci. Technol A* 16 (1998) 2257.
- [Mue86] L. Muehlhoff, W.J. Choyke, M.J. Bozack, J.T. Yates, Jr., *J. Appl. Phys.* 60 (1986) 2842.

- [Mut02] S. Muto, J. Asami, T. Tanabe, Nucl. Instr. and Meth. B 196 (2002) 324.
- [Nan02] A. Nangia, J.H. Kim, A.H. Weiss, G. Brauer, J. Appl. Phys. 91 (2002) 2818.
- [Ons78] J.H. Onsgaard, P. Morgen, R.P. Creaser, J. Vac. Sci. Technol. 15 (1978) 44.
- [Osw97] S. Oswald, S. Baunack, Surf. Interface Anal. 25 (1997) 942.
- [Osw99] S. Oswald, H. Wirth, Surf. Interface Analysis 27 (1999) 136.
- [Osw01] S. Oswald, R. Reiche, Appl. Surf. Sci. 179 (2001) 308.
- [Pan96] J.S. Pan, A.T.S. Wee, C.H.A. Huan, H.S. Tan, K.L. Tan, J. Appl. Phys. 79 (1996) 2934.
- [Pez] J. Pezoldt, www.tu-ilmenau.de/EI/FKE/NT/forschung/sic/index.htm
- [Pez95] J. Pezoldt, B. Stottko, G. Kupris, G. Ecke, Mat. Sci. Eng. B 29 (1995) 94.
- [Pez01] J. Pezoldt, B. Schröter, V. Cimalla, Th. Stauden, R. Goldhahn, H. Romanus, L. Spieß, Mater. Sci. Forum 353-356 (2001) 179.
- [Pie00] R. Pieterwas, G. Ecke, R. Kosiba, H. Rößler, Fresenius J. Anal. Chem. 368 (2000) 326.
- [Pie01] R. Pieterwas, Dissertation, TU Ilmenau (2001).
- [Pla96] H. Plank, R. Schwörer, J. Roth, Nucl. Instr. and Meth. B 111 (1996) 63.
- [Ram02] M.V. Ramana Murty, Surf. Sci. 500 (2002) 523.
- [Rei99] R. Reiche, R. Thielsch, S. Oswald, K. Wetzig, J. Electron Spectrosc. Phenom. 104 (1999) 161.
- [Rob74] M.T. Robinson, I.M. Torrens, Phys. Rev. B 9 (1974) 5008.
- [Rot76] J. Roth, J. Bohdanský, W. Poschenrieder, M.K. Sinha, J. Nucl. Mater. 63 (1976) 222.
- [Rot80] J. Roth, J. Bohdanský, A.P. Martinelli, Rad. Eff. 48 (1981) 213.
- [Rou82] M.L. Roush, T.D. Andreadis, F. Davarya, O.F. Goktepe, Appl. Surf. Sci. 11/12 (1982) 235.
- [Ruz89] D. Ruzic, H. Chiu, J. Nucl. Mater. 162-163 (1989) 904.
- [Ruz90] D. Ruzic, Nucl. Instr. And Meth. B 47 (1990) 118.
- [Saw90] W.D. Sawyer, J. Weber, G. Nabert, J. Schmäzlin, H.-U. Habermeier, J. Appl. Phys. 68 (1990) 6179.
- [Sca96] A. Scandurra, A. Licciardello, A. Torrisi, R. Weigert, O. Puglisi, Appl. Surf. Sci. 103 (1996) 19.
- [Sch83] B.M.U. Scherzer, Kap. 7 in Sputtering by Particle Bombardment, R. Behrisch (Ed.), Springer-Verlag, Berlin, 1983.
- [Sch95] U. Scheithauer, Fresenius J. Anal. Chem. 353 (1995) 464.

- [Sch96] P. Schneider, L. Bischoff, J. Teichert, E. Hesse, Nucl. Instr. and Meth. B 117 (1996) 77.
- [Sch97] A. Schöpke, S. Kelling, Surf. Interface Anal. 25 (1997) 5.
- [Sch97b] V. Schmidt, Kap. 3 in Electron spectrometry of atoms using synchrotron radiation, Cambridge University Press (1997).
- [Sea90] M.P. Seah, Kap.5 in Practical Surface Analysis, vol. 1, Auger and X-ray Photoelectron Spectroscopy, D. Briggs and M.P. Seah (Eds.), John Wiley and Sons, Ltd. (1990).
- [Sek84] T. Sekine, A. Mogami, M. Kudoh, K. Hirata, Vacuum 34 (1984) 631.
- [Sha93] M.A. Shaheen, D.N. Ruzic, J. Vac. Sci. Technol. A 11 (1993) 3085.
- [Shi72] D.A. Shirley, Phys. Rev. B 5 (1972) 4709.
- [Shi83] R. Shimizu, Jap. J. Appj. Phys. 22 (1983) 1631.
- [Shu83] V.I. Shulga, Radiat. Eff. 70 (1983) 65, 82 (1984) 169, 84 (1985) 1.
- [Shu02] V.I. Shulga, Nucl. Instr. And Meth. B 187 (2002) 178.
- [Sic77] E.N. Sickafus, Phys. Rev. B 16 (1977) 1436.
- [Sie83] J. Sielanko, M. Sowa, Nucl. Instr. And Meth. 209/210 (1983) 483.
- [Sie86] J. Sielanko, W. Szyszko, Nucl. Instr. and Meth. B 16 (1986) 340.
- [Sig69] P. Sigmund, Phys. Rev. 184 (1969) 383.
- [Sig87] P. Sigmund, Nucl. Instr. And Meth. B 18 (1987) 375.
- [Sig89] P. Sigmund, J. Vac. Sci. Technol. A 7 (1989) 585.
- [Sig95] P. Sigmund, Appl. Phys. Lett. 66 (1995) 433.
- [Sig00] P. Sigmund, L.G. Glazov, Nucl. Instr. and Meth. B 164-165 (2000) 453.
- [Sin81] I.L. Singer, J.S. Murday, L.R. Cooper, Surf. Sci. 108 (1981) 7.
- [Ste85] Ch. Steinbrüchel, Appl. Phys. A 36 (1985) 37.
- [Ste92] H.J. Steffen, . Hofmann, Surf. Interface Anal. 19 (1992) 157.
- [Ste02] M. Stepanova, S.K. Dew, J. Appl. Phys. 92 (2002) 1699.
- [Sul95] J.L. Sullivan, W. Yu, S.O. Saied, Appl. Surf. Sci. 90 (1995) 309.
- [Tan93] S. Tanuma, C.J. Powell, D.R. Penn, Surf. Interface Anal. 21 (1993) 165.
- [Tho81] M.W. Thompson, Phys. Rep. 69 (1981) 335.
- [Tou88] S. Tougaard, Surf. Interface Anal. 11 (1988) 453.
- [Urb95] H.M. Urbassek, G. Mayer, H. Gades, M. Vicanek, Nucl. Instr. and Meth. B 103 (1995) 275.
- [Urb97] H.M. Urbassek, Nucl. Instr. and Meth. B 122 (1977) 427.
- [Val90] S. Valerie, M. Lolli, Surf. Interface Anal. 16 (1990) 59.

- [Vas85] M.G. Vasilyev, D.V. Klyachko, V.G. Krigel, I.V. Razumovskaya, *Poverchnost' N1* (1985) 97.
- [Vee86] G.N.A. van Veen, F.H.M. Sanders, J. Dieleman, A. van Veen, D.J. Oostra, A.E. de Vries, *Phys. Rev. Lett.* 57 (1986) 739.
- [Vee88] A. van Veen, P.C. de Jong, K.R. Bijkerk, H.A. Filius, J.H. Evans, *Mat. Res. Soc. Proc.* 100 (1988) 231.
- [Vic89] M. Vicanek, J.J. Jimenez Rodriguez, P. Sigmund, *Nucl. Instr. and Meth. B* 36 (1989) 124.
- [Vic93] M. Vicanek, U. Conrad, H.M. Urbassek, *Phys. Rev. B* 47 (1993) 617.
- [Whö98] Th. Wöhner, G. Ecke, H. Rößler, S. Hofmann, *Surf. Interface Anal.* 26 (1998) 1.
- [Wil77] W.D. Wilson, L.G. Haggmark, J.P. Biersack, *Phys. Rev. B* 15 (1977) 2458.
- [Wit78] K. Wittmaack, P. Blank, W. Wach, *Radiat. Eff.* 39 (1978) 81.
- [Wit97] K. Wittmaack, *Phys. Rev. B* 56 (1997) R5701.
- [Wit03] K. Wittmaack, *Phys. Rev. B* 68 (2003) 235211.
- [Yam84] Y. Yamamura, *Nucl. Instr. and Meth. B* 2 (1984) 578.
- [Yam87] Y. Yamamura, C. Mössner, H. Oechsner, *Radiat. Eff.* 103 (1987) 25.
- [Zal83] P.C. Zalm, *J. Appl. Phys.* 54 (1983) 2660.
- [Zha99] Z.L. Zhang, *Nucl. Instr. And Meth. B* 149 (1999) 272.
- [Zhu01] S. Zhu, C. Detevernier, R.L. van Meirhaeghe, F. Cardon, A. Blondeel, P. Clauws, G.-P. Ru, B.-Z. Li, *Semicond. Sci. Technol.* 16 (2001) 83.
- [Zie85] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark, *The Stopping and Range of Ions in Solids*, Pergamon Press, New York, 1985.

Definition verwendeter Größen und Symbole

α	-	Einfallswinkel des Elektronenstrahls [°]
a	-	Abschirmlänge [Å]
a_B	-	Bohrscher Radius (0.219 Å)
AES	-	Augerelektronenspektroskopie
AFM	-	Atomkraftmikroskopie
β	-	Akkommodationskoeffizient
BCA	-	Zweierstoß-Näherung
c	-	relative Konzentration [$\times 100\%$]
	-	Element einer C -Matrix
c	-	Zeilenvektor der Matrix C
C	-	Matrix der Wichtungsfaktoren
D	-	Detektoreffizienz
D	-	Datenmatrix
ε	-	reduzierte Energie
$\Delta\varepsilon$	-	chemische Verschiebung der Schalenenergie [eV]
ε_0	-	Permittivität des Vakuums (8.848×10^{-12} F/m)
ε_r	-	relative Permittivität
e	-	elementare Ladung (1.602×10^{-19} C)
E	-	kinetische Energie [eV]
$E(K), E(L), \dots$	-	Schalenenergien [eV]
E_D	-	Verschiebungsenergie [eV]
E_f	-	Energie des Fermi-niveaus bezogen auf das Vakuumniveau [eV]
E_g	-	Bandlücke [eV]
E_p	-	Energie des Elektronenstrahls [eV]
E_{th}	-	Schwellenergie [eV]
E_{vak}	-	Energie des Vakuumniveaus [eV]
Φ	-	Austrittsarbeit [eV]
	-	Abschirmfunktion
F	-	Empfindlichkeitsfaktor
FA	-	Faktorenanalyse
$F(x)$	-	Wechselwirkungsenergie der unbesetzten elektronischen Zustände im Atom nach dem Augerprozess [eV]

γ	-	Wahrscheinlichkeit eines Augerübergangs
I	-	Augersignal
I_p	-	Primärstrom der Elektronen oder Ionen [μA , nA]
ISS	-	Spektroskopie der gestreuten Ionen
j_p	-	Ionenstromdichte [$\mu\text{A}/\text{cm}^2$]
Kr-C	-	Bezeichnung für das zwischenatomare Potential nach [Wil77]
λ	-	Dämpfungslänge [Å]
	-	Matrix-Eigenwert
λ_i	-	inelastische mittlere freie Weglänge [Å]
LBM	-	Leitungsbandminimum
LLS	-	lineares Anpassen mittels der kleinsten Fehlerquadrate
m	-	Exponent des Energieterms im differentiellen nuklearen Bremsquerschnitt $d\sigma$
M	-	molare Masse [g/mol]
MBE	-	Molekularstrahlepitaxie
MC	-	Monte-Carlo
MD	-	molekulardynamisch
N	-	atomare Dichte [at/nm ³]
N_A	-	Avogadrozahl ($6.02 \times 10^{26} \text{ mol}^{-1}$)
$N(E)$	-	energetisches Spektrum der emittierten Elektronen
p - b	-	Peak-zu-Untergrund-Höhe
PC	-	Basisvektor, Hauptkomponente
PCA	-	Hauptkomponentenanalyse
pph	-	Peak-zu-Peak-Höhe
$\psi(x)$	-	Digammafunktion
ρ	-	Massendichte [g/cm ³]
r	-	Rückstreufaktor
	-	Abtragsrate [nm/min]
	-	Abstand zwischen Atomen bei einer Kollision [Å]
	-	Element der Matrix \mathbf{R}
\mathbf{r}	-	Spaltenvektor der Matrix \mathbf{R} , Vektorform eines Referenzspektrums R
R	-	Referenzspektrum
\mathbf{R}	-	Matrix der Referenzspektren
$R^{ia, ea}$	-	intraatomare bzw. extraatomare Relaxationsenergie [eV]

R_P	-	Ionenreichweite [nm]
ΔR_P	-	Halbwertsbreite der Ionenverteilung [nm]
RBS	-	Rutherford-Spektroskopie der gestreuten Ionen
REM	-	Rasterelektronenmikroskopie
rms	-	mittlere quadratische Abweichung
σ	-	Ionisations- oder Bremsquerschnitt [cm ⁻²]
s	-	Vektorform eines Spektrums S
S	-	relativer Elementempfindlichkeitsfaktor
	-	Bezeichnung eines Spektrums
s_n	-	universale nukleare Bremsstärke
S_n	-	nukleare Bremsstärke [eV/nm]
SE	-	Untergrund der sekundären Elektronen
SIMS	-	Massenspektroskopie der sekundären Ionen
Θ	-	Eingangswinkel des Analysators [°]
	-	Einfallswinkel des Ionenstrahls [°]
t	-	Sputterzeit [min]
T	-	Transmission des Analysators
	-	Energieübertrag bei einem Zusammenstoß
TEM	-	Transmissionselektronenmikroskopie
TPP-2M	-	Abkürzung für die Formel zur Berechnung der inelastischen mittleren freien Weglänge nach Gl. 2.10
TRIDYN	-	dynamisches Monte-Carlo-Simulationsprogramm zur Berechnung von Ionen-Festkörper-Wechselwirkungen
TRIM	-	statisches Monte-Carlo-Simulationsprogramm zur Berechnung von Ionen-Festkörper-Wechselwirkungen
U_0	-	Oberflächenbindungsenergie [eV]
UPS	-	Ultraviolettlichtangeregte Photoelektronenspektroskopie
VB	-	Valenzband
VBM	-	Valenzbandmaximum
w	-	Peakbreite
XPS	-	Röntgenstrahlangeregte Photoelektronenspektroskopie
Y	-	Sputterausbeute [Atom/Ion]
z	-	Tiefe [nm]
Δz	-	Tiefenauflösung [nm]

- Z - Ordnungszahl
- \mathbf{Z} - Kovarianzmatrix
- ZBL - Bezeichnung für das zwischenatomare Potential nach [Zie85]

Danksagung

Gernot Ecke danke ich für die uneingeschränkte Unterstützung während der gesamten Promotionszeit, die sowohl tatkräftig bei der Durchführung der Experimente als auch inspirierend bei deren Interpretation in Erscheinung trat.

Ilona Marquardt und Silvia Probst sage ich Dank für die technische Begleitung, Ilona ist zusätzlich zu verdanken, dass die Anzahl der orthografischen Fehler minimiert werden konnte.

Die Diskussionen mit Jozef Liday, Volker Cimalla, Jörg Pezoldt und Oliver Ambacher brachten mich auf dem Weg zum Abschluss stets weiter. Dafür gebührt Ihnen mein Dank.

Ohne die Hilfe der Fachgebiete Technische Physik und Werkstoffe der Elektrotechnik, die mir einerseits mit ihren Messmöglichkeiten und andererseits mit der Bereitstellung der Proben Unterstützung gewährten, wäre die Dissertation nicht so weit gediehen.

Theodor Doll danke ich für die Übernahme der Betreuung als Hochschullehrer in den ersten zwei Jahren der Promotionszeit.

Mein letzter Dank gilt meiner Frau Peggy, die sich große Mühe gegeben hat, der Rechtschreibung Genüge zu tun und meine Ausführungen dem Leser verständlicher zu machen.

Erklärung

Ich versichere, dass ich die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe. Die aus anderen Quellen direkt oder indirekt übernommenen Daten und Konzepte sind unter Angabe der Quelle gekennzeichnet.

Bei der Auswahl und Auswertung folgenden Materials haben mir die nachstehend aufgeführten Personen (Firmen) in der jeweils beschriebenen Weise unentgeltlich geholfen:

1. Gernot Ecke – Betreuer,
2. M. Himmerlich – Auswertung der XPS-Messungen,
3. A. Löffert und V. Yanev – Durchführung der XPS-Messungen,
4. ThermoVG – Durchführung der AES-Experimente in Kapitel 3.

Weitere Personen waren an der inhaltlich-materiellen Erstellung der vorliegenden Arbeit nicht beteiligt. Insbesondere habe ich hierfür nicht die entgeltliche Hilfe von Vermittlungs- bzw. Beratungsdiensten (Promotionsberater oder anderer Personen) in Anspruch genommen. Niemand hat von mir unmittelbar oder mittelbar geldwerte Leistungen für Arbeiten erhalten, die im Zusammenhang mit dem Inhalte der vorgelegten Dissertation stehen.

Die Arbeit wurde bisher weder im In- noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer Prüfungsbehörde vorgelegt.

Ich bin darauf hingewiesen worden, dass die Unrichtigkeit der vorstehenden Erklärung als Täuschungsversuch angesehen wird und den erfolglosen Abbruch des Promotionsverfahrens zu Folge hat.

Ilmenau, den 19.05.2004