

WISSENSCHAFTLICH-TECHNISCHE BERICHTE

FZR-279

November 1999

ISSN 1437-322X



Archiv-Ex.:

Lars Rebohle

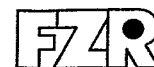
**Lumineszenzeigenschaften
ionenimplantierter nanokristalliner
SiO₂- Schichten**

Herausgeber:
FORSCHUNGSZENTRUM ROSSENDORF
Postfach 51 01 19
D-01314 Dresden
Telefon +49 351 26 00
Telefax +49 351 2 69 04 61
<http://www.fz-rossendorf.de/>

Als Manuskript gedruckt
Alle Rechte beim Herausgeber

FORSCHUNGSZENTRUM ROSSENDORF

WISSENSCHAFTLICH-TECHNISCHE BERICHTE



FZR-279

November 1999

Lars Rebohle

**Lumineszenzeigenschaften
ionenimplantierter nanokristalliner
SiO₂- Schichten**

Dissertation

Lumineszenzeigenschaften ionenimplantierter nanokristalliner SiO₂-Schichten

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

Doctor rerum naturalium
(Dr. rer. nat.)

vorgelegt
der Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften
der Technischen Universität Dresden

von

Lars Rebohle
geboren am 15.02.1970 in Leipzig

Gutachter: Prof. Dr. C. Buchal, FZ Jülich
Prof. Dr. K. Leo, TU Dresden
Prof. Dr. W. Möller, FZ Rossendorf

Eingereicht am: 26. April 1999
Tag der Verteidigung: 4. November 1999

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Lichtemission auf Siliziumbasis	3
2.1	Anforderungen der Optoelektronik	3
2.2	Si-basierte Lumineszenzmaterialien	5
2.2.1	Er-dotiertes Si	5
2.2.2	Poröses Silizium	7
2.2.3	Eisendisilizid	8
2.2.4	Silizium- oder Germaniumreiches SiO ₂	9
2.2.4.1	Photolumineszenz oberhalb 500 nm	9
2.2.4.2	Photolumineszenz im blauen und violetten Spektralbereich . . .	10
2.2.4.3	Elektrolumineszenz	12
2.3	Zur Struktur von thermischem SiO ₂	13
2.3.1	Thermisches SiO ₂ und die Si-SiO ₂ -Grenzfläche	13
2.3.2	SiO ₂ während der Ionenimplantation	15
2.4	Lumineszenzmodelle	15
2.4.1	Quanten-Confinement	16
2.4.2	Rekombination an der Clusteroberfläche	17
2.4.3	Sauerstoffmangeldefekte	19
2.5	Spektroskopie des Triplett-Zustandes	22
2.5.1	Modell eines Zweielektronensystems	22
2.5.2	Die Coulomb- und Spinaufspaltung des ersten angeregten Zustandes . . .	23
2.5.3	Spin-Bahn-Kopplung und Heavy-Atom-Effekt	24
2.5.4	Spektroskopisches Erscheinungsbild	26
3	Experimentelles	28
3.1	Probenpräparation	28
3.1.1	Genereller Aufbau der MOS-Strukturen	28
3.1.2	Implantationsbedingungen	29
3.1.3	Ausheilung	30
3.1.4	Zur Probennotation	30
3.2	Optische Messungen	30
3.2.1	Kontinuierliche Photolumineszenz	30
3.2.2	Zeitaufgelöste Photolumineszenz	32
3.3	Verwendete Analysemethoden	32

4	Mikrostruktur	34
4.1	Implantation	34
4.1.1	Implantationsprofil	34
4.1.2	Nukleare und elektronische Schädigung	36
4.2	Effekte der Ausheilung	37
4.2.1	Ge-implantierte SiO ₂ -Schichten	37
4.2.2	Sn-implantierte SiO ₂ -Schichten	42
4.2.3	Allgemeines Szenario zur Entwicklung der Mikrostruktur	46
5	Optische Charakterisierung	47
5.1	Grundlagen der Lumineszenzmessung	47
5.1.1	Die Unsicherheit der Lumineszenzmessung	47
5.1.2	Interferenzeffekte	49
5.1.3	Datenauswertung	50
5.1.4	Leistungseffizienz	51
5.2	Kontinuierliche Photolumineszenz	53
5.2.1	Die PL von unimplantierten und Ar-implantierten SiO ₂ -Schichten	53
5.2.2	Si-implantierte SiO ₂ -Schichten	53
5.2.2.1	UV- und B-Bande	54
5.2.2.2	R- und NC-Bande	57
5.2.3	Ge-implantierte SiO ₂ -Schichten	58
5.2.3.1	B-Bande: Peakposition und Halbwertsbreite	58
5.2.3.2	B-Bande: Intensität	60
5.2.3.3	UV-Bande	61
5.2.3.4	Anregungsspektren	63
5.2.3.5	Implantation bei Raumtemperatur	63
5.2.4	Sn-implantierte SiO ₂ -Schichten	64
5.2.4.1	B-Bande	64
5.2.4.2	UV-Bande	67
5.2.4.3	Anregungsspektren	68
5.3	Zeitaufgelöste Photolumineszenz	68
5.3.1	Die analytische Beschreibung nichtexponentieller Abfälle	68
5.3.2	Abklingkonstanten Ge- und Sn-implantierter SiO ₂ -Schichten	71
5.4	Tiefenaufgelöste Photolumineszenz	72
5.4.1	Struktur	72
5.4.2	Photolumineszenz der einzelnen Schichten	73
5.5	Der Vergleich mit gesputterten SiO ₂ -Schichten	74
5.6	Zusammenfassung	75
6	Elektrische Eigenschaften	78
6.1	Elektrolumineszenz	78
6.1.1	Spektrale Charakteristik	78
6.1.2	Intensität und EL-Effizienz	81
6.1.3	Stabilität und Lebensdauer	84
6.2	Elektrische Diagnostik	85
6.2.1	I-U-Kennlinie	85
6.2.2	C-U-Kennlinie	86
6.3	Modell der Elektrolumineszenz	88

6.3.1	Injektions- und Leitungsmechanismus	88
6.3.2	Elektrische Anregung der Lumineszenzzentren	90
7	Zusammenfassung und Ausblick	91
A	Interferenz in dünnen Schichten	95
A.1	Grundlagen	95
A.2	Reflexion und Transmission im Mehrschichtsystem	96
A.3	Interferenz der anregenden Strahlung	97
A.4	Die Abstrahlung einer isotropen Dipolverteilung	100
A.5	Berechnung der Korrekturfunktion	103
A.6	Das System SiO ₂ -Si	104
B	Experimentelle Bestimmung der Leistungseffizienz	107
B.1	Die abgestrahlte Leistung P_{em}	107
B.2	Die Leistung der anregenden Strahlung P_{ex}	108
B.3	Die Bestimmung der Korrekturfunktion f_{LE}	109
	Abkürzungen und Symbole	110
	Literaturverzeichnis	114

Kapitel 1

Einleitung

Als mit der Demonstration des ersten funktionstüchtigen Transistors im Jahre 1947 durch WALTER BRATTAIN, JOHN BARDEEN und WILLIAM SHOCKLEY [Bar48] die Ära der Mikroelektronik begann, ahnte noch niemand, wie tief diese Erfindung die Kultur und Technik in den nächsten 50 Jahren verändern sollte. Gemäß dem Mooreschen Gesetz verdoppelte sich die Komplexität mikroelektronischer Schaltungen alle anderthalb bis zwei Jahre [Moo65], und in unmittelbarer Zukunft ist keine Änderung dieser Entwicklung zu erwarten. Aufgrund seiner hervorragenden elektrischen Eigenschaften ist Si bereits seit dem Ende der 50er Jahre das dominierende Material der Mikroelektronik gewesen.

Mit zunehmender Miniaturisierung nähert man sich jedoch immer mehr den physikalischen Grenzen, die durch die Materialeigenschaften von Si bestimmt werden. Das mit schwindender Strukturgröße einhergehende Wachstum der Leitungswiderstände und der entsprechenden parasitären Kapazitäten steht einer weiteren Verkleinerung und der Erhöhung der Taktfrequenz entgegen. Die elektromagnetische Interferenz zweier benachbarter stromführender Leiter bei hohen Modulationsfrequenzen führt zur sogenannten Pin-Limitierung, d.h. ein integrierter Schaltkreis gegebener Größe kann nur mit einer bestimmten Anzahl elektrischer Anschlüsse versehen werden.

Gleichzeitig mit diesen Problemen hat die enorme Entwicklung der Kommunikationstechnik einen hohen Bedarf an optoelektronischen Funktionseinheiten geschaffen, die in der Lage sind, optische Signale zu generieren, zu modulieren und zu verarbeiten. Aber gerade hier offenbart Si seinen größten Schwachpunkt: Mit einer indirekten Bandlücke von etwa 1.1 eV ist Si als Lichtemitter denkbar ungeeignet. Ein wichtiger Aspekt der heutigen Materialforschung besteht daher in der Suche und Charakterisierung von lumineszierenden Materialien, die einerseits Si ersetzen, sich aber andererseits möglichst gut in die bisherige Si-Technologie integrieren lassen.

Während für die optische Signalverarbeitung schon eine Vielzahl annehmbarer Lösungen existieren, gibt es für die Umwandlung elektrischer in optische Signale innerhalb integrierter Schaltkreise noch keine befriedigende Lösung. Für Displayanwendungen haben sich zwar diskrete Bauelemente auf der Basis von Verbindungshalbleitern oder Polymeren etabliert, aber die Schwierigkeiten, diese Materialien in mikroelektronische Schaltungen zu integrieren, wurden trotz intensiver Forschungsarbeit noch nicht überwunden. Bei der Suche nach alternativen Lumineszenzmaterialien ist dabei das Gebiet der Materialien auf Si-Basis besonders attraktiv, da man den Nachteil der indirekten Bandlücke bei Si umgehen und gleichzeitig die meisten positiven Eigenschaften von Si beibehalten könnte.

Für einige Si-basierte Materialien wurde die prinzipielle Möglichkeit, Licht durch elektrische Anregung zu emittieren, bereits nachgewiesen. Um aber für eine Anwendung in Betracht zu kommen, müssen diese Materialien, wie in Kap. 2.1 noch ausführlicher dargelegt wird, auch

anderen Anforderungen genügen. Viele charakteristische Eigenschaften, wie z.B. Effizienz und Zeitverhalten, erreichen noch nicht die Qualität, die ein ernsthafter Einsatz in Industrie und Technik erfordern würde. Vom heutigen Standpunkt aus ist daher noch nicht abzuschätzen, welche der möglichen Materialien dereinst die Anwendung dominieren werden. Sicher ist aber, daß auch die Forschung zu den Materialien, die sich später nicht durchsetzen werden, den Wissensstand auf dem Gebiet der Si-basierten Lumineszenzmaterialien vorantreibt. Weiterhin besteht die Möglichkeit, daß die untersuchten Strukturen auch für andere, ursprünglich nicht geplante Bereiche von Vorteil sind.

In diesem Sinne versucht auch diese Arbeit, ihren Beitrag zur Entwicklung neuer Materialien in der Optoelektronik zu leisten und zu zeigen, daß implantierte SiO_2 -Schichten eine erfolgversprechende Alternative innerhalb der Si-basierten Lumineszenzmaterialien darstellen. Die Vor- und Nachteile gegenüber anderen Si-basierten Materialien werden in Kap. 2.2 diskutiert, während die verschiedenen Lumineszenzmodelle in Kap. 2.4 vorgestellt werden. Die mikrostrukturellen, optischen und elektrischen Eigenschaften implantierter SiO_2 -Schichten werden dann ausführlich in Kapitel 4, 5 und 6 behandelt. In Kapitel 7 werden die im Rahmen dieser Arbeit gewonnenen Erkenntnisse zusammengefaßt und Möglichkeiten für eine weitergehende Forschung erörtert.

Kapitel 2

Lichtemission auf Siliziumbasis

2.1 Anforderungen der Optoelektronik

Alternative Materialien, die zur Generierung optischer Signale dienen sollen, müssen gewissen Anforderungen genügen. Die wesentlichsten davon lauten:

- möglichst gute Integrierbarkeit in die herkömmliche Si-Technologie,
- hohe Quanteneffizienz,
- möglichst kurze Abklingkonstante und
- ausreichende Lebensdauer eines möglichen Bauelementes.

Hinsichtlich der Integrierbarkeit in die bestehende Si-Technologie sind Lumineszenzmaterialien auf Si-Basis besonders geeignet, da der Einsatz anderer Materialien sehr hohe Kosten verursachen würde. Neben dem Aufbau völlig neuer Fertigungslinien ist dabei zu bedenken, daß die Si-Technologie gegenüber anderen Materialien einen Entwicklungsvorsprung von bis zu 50 Jahren besitzt. Schließlich gehört Si und sein Oxid zu den billigsten und weitverbreitetsten Verbindungen in der Natur. Die reinen Materialkosten für GaAs wären beispielsweise um den Faktor 100 höher als für Si [Mal96].

Eine möglichst hohe Quanteneffizienz ist natürlich immer von Vorteil. Selbst wenn die Effizienz der Elektrolumineszenz (EL) in gewissen Grenzen nicht von Belang wäre, würde die produzierte Abwärme die erreichbare Integrationsdichte und die Kosten ungünstig beeinflussen. Während für Displayanwendungen ein Wirkungsgrad oberhalb 10 % bereits Standard ist, könnte bei der Datenübertragung innerhalb von Computern, je nach Empfindlichkeit des Empfängers, bereits ein Wirkungsgrad im Prozent- oder Promillebereich für die Industrie relevant sein.

Eine schnelle Lumineszenz ist für Anwendungen in der Datenverarbeitung von größter Bedeutung. Bei zukünftigen Taktraten im Bereich 1 bis 10 GHz sollte die technisch erreichbare Abklingkonstante im Bereich weniger ns liegen. Wie das Beispiel Er-implantierter Si-Wafer zeigt, kann aber die intrinsische Abklingkonstante um Größenordnungen langsamer als die technisch erreichbare sein (siehe Kap. 2.2.1).

Jedes optoelektronische Bauelement muß eine gewisse Mindestlebensdauer aufweisen. Dieser Punkt umfaßt hauptsächlich die mechanischen und chemischen Eigenschaften der Lumineszenzmaterialien und den Injektionsmechanismus bei der EL.

Die Tabelle 2.1 ist im Verlauf einer Diskussionsrunde während des Treffens der Europäischen Materialforschungsgesellschaft [EMRS98] entstanden. Sie listet für einige Si-basierte Materialien

Material	EQE	Frequenz	Wellenlänge	FWHM	Stabilität
SiGe	$< 10^{-4}$ *	10 MHz	1.32 μm	100 meV	stabil
Si:Er	$5 \cdot 10^{-4}$	1 MHz	1.54 μm	15 meV	Wochen
poröses Si	10^{-3}	1 MHz	650-850 nm	200 meV	Wochen
Si- o. Ge-reiche Oxide	$5 \cdot 10^{-4}$ **	?	400 nm	200 meV	Stunden
Silizide	$2 \cdot 10^{-4}$?	1.5 μm	3.5 meV	stabil
Mehrfachschichten	10^{-4}	?	500-800 nm	200 meV	Stunden bis Wochen

* interne Quanteneffizienz ** Leistungseffizienz

Tabelle 2.1: Für optoelektronische Anwendungen relevante Materialwerte einiger, auf Si basierender Materialien. Zur Definition der verschiedenen Effizienzen siehe Kap. 5.1.4.

die bei der EL erreichte externe Quanteneffizienz (EQE)¹, die bisher erreichte Modulationsfrequenz, die Emissionswellenlänge, die energetische Halbwertsbreite (FWHM) und einige grobe Angaben zur Stabilität auf. Auch wenn diese Daten sehr subjektiv sind und die Zahlenangaben allenfalls die Größenordnung richtig wiedergeben, kann man die folgenden zwei Sachverhalte aus der Tabelle herauslesen: Obwohl in den einzelnen Fachgebieten zum Teil erhebliche Fortschritte erzielt wurden, sind alle Materialien noch weit davon entfernt, irgendeine anwendungsrelevante Rolle zu spielen. Die besten Materialwerte bezüglich der EQE und des Zeitverhaltens sind mindestens noch ein bzw. zwei bis drei Größenordnungen von den Werten entfernt, ab dem das entsprechende Material für eine Anwendung interessant wird. Auch die Stabilität läßt bei vielen Materialien noch zu wünschen übrig. Zum anderen haben sich etwa vier führende Materialgruppen herauskristallisiert: Er dotiertes Si, poröses Si, FeSi₂ und Si- bzw. Ge-reiche Oxide, wobei in den letzten beiden Gruppen der Ionenstrahlsynthese eine herausragende Bedeutung zukommt.

Er-dotiertes Si ist wegen seiner günstigen Emissionswellenlänge von 1.54 μm , bei der die Absorption im Glasfaserkabel ein absolutes Minimum erreicht, auf dem Gebiet der Datenfernübertragung zum aussichtsreichen Kandidaten einer möglichen Anwendung geworden. Zudem ist dieses Material ein gutes Beispiel dafür, wie bestimmte physikalische, scheinbar unumgängliche Grenzen durch das Auftauchen neuer Aspekte gegenstandslos geworden sind (siehe Kap. 2.2.1). Poröses Silizium ist das Material, dem bisher die meiste Forschungsarbeit auf dem Gebiet der Si-basierten Lumineszenzmaterialien gewidmet wurde. Der bereits von Anfang an sehr hohen Effizienz der Photolumineszenz (PL) und einer gewissen Durchstimmbareit der Emissionswellenlänge stehen aber massive Probleme hinsichtlich der Robustheit und Degradation des Materials gegenüber. Si- oder Ge-reiche Oxide zeichnen sich durch die guten mechanischen, chemischen und dielektrischen Eigenschaften des SiO₂ sowie die gute Reproduzierbarkeit bei der Anwendung der Ionenimplantation zur Erzeugung solcher Schichten aus. Problematisch ist hierbei noch der Injektionsmechanismus bei der EL, der hohe Anforderungen an die Oxidqualität stellt bzw. intelligente Lösungen für die Entwicklung nichtdegradierender Injektionsmethoden erfordert.

Die folgenden Abschnitte beschäftigen sich näher mit dem bisherigen Entwicklungsstand bei Er-dotiertem Si, porösem Si, FeSi₂ und Si- oder Ge-reichen Oxiden, wobei der Schwerpunkt bei letzterem liegt. Eine Übersicht über die Anwendung der Ionenstrahlsynthese für die Herstellung von Er-dotiertem Si, FeSi₂ und Si- bzw. Ge-reichem SiO₂ findet sich in [Sko99].

¹Zur Definition der einzelnen Effizienzen siehe Abschnitt 5.1.4.

2.2 Si-basierte Lumineszenzmaterialien

2.2.1 Er-dotiertes Si

Die Lumineszenz bei Er-dotiertem Si entsteht durch einen elektronischen Übergang im Inneren der 4f-Schale des Er^{3+} -Ions. Abb. 2.1 (aus [Coff98]) zeigt das Energieniveauschema eines solchen Ions im Si-Kristall sowie die wesentlichen Prozesse der elektrischen Anregung und der nichtstrahlenden Rekombination. Die elektrische Anregung kann zum einen durch die Rekombi-

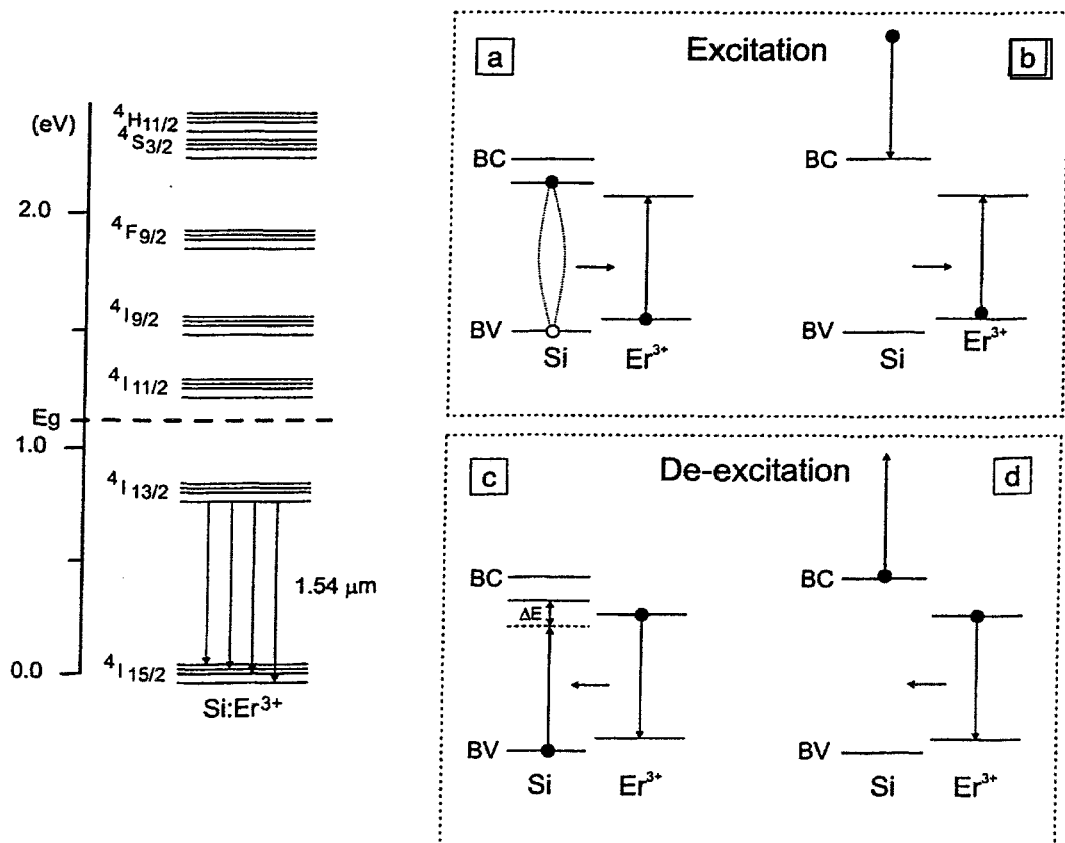


Abbildung 2.1: Energieniveauschema des Er^{3+} -Ions im Si-Kristall (links) und die wesentlichen An- und Abregungsprozesse: (a) Rekombination eines Exziton mit Energieübertrag auf das Er^{3+} -Ion, (b) Stoßanregung, (c) Backtransfer, (d) Augerprozess. Die Abkürzungen BV und BC bezeichnen das Valenz- bzw. Leitungsband von Si. (entnommen aus [Coff98])

nation eines Exzitons mit anschließendem Energieübertrag auf das Er^{3+} -Ion (Abb. 2.1a) erfolgen. Dabei wird das Exziton in einem Störstellenniveau gefangen, das zwischen dem Si-Leitungsband und dem ersten angeregten Zustand des Er^{3+} -Ion liegen muß. Zum anderen kann das Er^{3+} -Ion durch Stöße heißer Elektronen angeregt werden (Abb. 2.1b). Der sogenannte „Backtransfer“ (Abb. 2.1c) ist der thermisch aktivierte Umkehrprozess zur Rekombination eines Exzitons an der Störstelle. Unter Mitwirkung eines Phonons wird ein Elektron vom Valenzband in das Niveau der

Störstelle gehoben. Beim Augerprozeß (Abb. 2.1d) wird die freiwerdende Energie zur Anregung freier Ladungsträger im Leitungsband benutzt.

Nachdem ENNEN *et al.* [Enn83, Enn85] die Möglichkeit demonstriert hatten, PL und EL aus Er-dotierten Si zu erhalten, setzte eine intensive Forschung bezüglich der strukturellen, elektrischen und optischen Eigenschaften dieses Materials ein. Anfang der 90er Jahre hatte man einen Stand erreicht, der noch weit hinter den Erfordernissen elektrooptischer Anwendungen zurücklag, bei dem aber die Möglichkeit, Effizienz und Zeitverhalten weiter zu verbessern, bereits ausgeschöpft schien: Die niedrige Löslichkeit von Er in Si limitierte die erreichbare Konzentration optisch aktiver Zentren auf etwa $5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, die Lumineszenzintensität verringerte sich beim Übergang von 77 K zu Raumtemperatur (RT) um mehr als 3 Größenordnungen, und die relativ lange Lebensdauer von $\sim 1 \text{ ms}$ machte eine Signalverarbeitung oberhalb 1 kHz illusorisch [Coff98].

Bereits 1991 fanden MICHEL *et al.*, daß sich die Lumineszenzausbeute von Er-dotierten Fz-Si

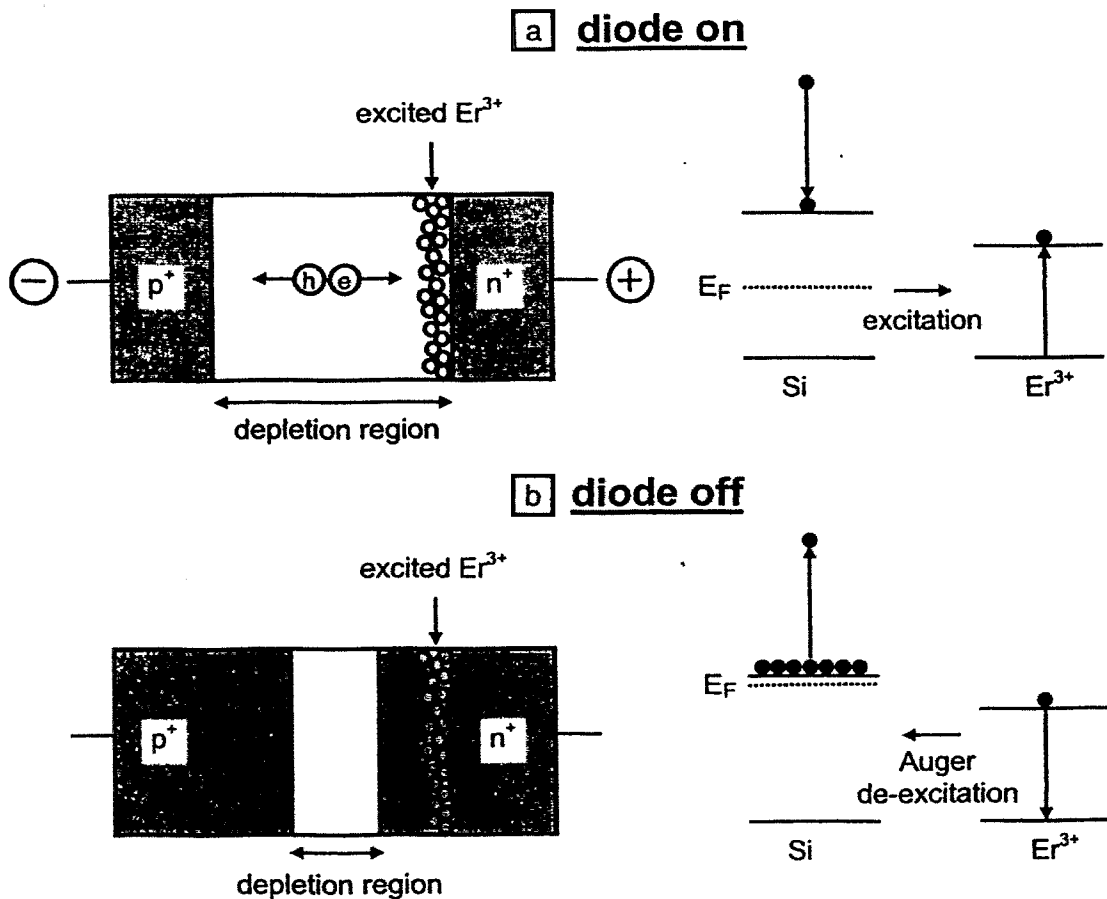


Abbildung 2.2: Schematische Arbeitsweise einer Er-basierten LED: (a) Diode in Sperrichtung geschaltet, (b) Diode ausgeschaltet.

(entnommen aus [Coff98])

und Cz-Si² erheblich voneinander unterschieden: Während die Intensität von Fz-Si mit zunehmender Ausheilung kontinuierlich zurückging, konnte bei dem sauerstoffreichen Cz-Si mittels Ausheilung bei 900°C eine Intensitätssteigerung von mehr als einer Größenordnung erreicht werden [Mich91]. Mit Hilfe der Koimplantation von Er und O wurde die Konzentration optisch aktiver Zentren auf über 10^{19} cm^{-3} gesteigert [Coff93]. In dem dabei entstehenden Er-O-Komplex ist das Er-Atom von 6 Sauerstoffatomen umgeben [Adl92]. Das durch den Er-O-Komplex entstandene Störstellenniveau liegt etwa 0.15 eV unterhalb des Si-Leitungsbandes [Lib95], wodurch die Aktivierungsenergie für den Backtransfer und die Energie zur thermischen Aktivierung eines in der Störstelle gefangenen Exzitons ziemlich hoch ist. Daher setzt die thermische Lumineszenzlöschung, die durch die beiden soeben genannten Prozesse bedingt wird, erst bei höheren Temperaturen ein.

Die heutzutage besten auf Er basierten Leuchtdioden (LED) werden in Sperrichtung betrieben, da diese Betriebsart gegenüber dem Betrieb in Durchlaßrichtung eine weitere Erhöhung der EL-Intensität bewirkt [Fra97]. Ist die Diode in Sperrichtung geschaltet (Abb. 2.2a), werden Elektronen in Richtung der Er-reichen Schicht beschleunigt, wo sie die Lumineszenzzentren durch Stoß anregen. Die Er-reiche Schicht befindet sich noch in der Verarmungszone, so daß die Anzahl der Elektronen im Leitungsband gering und somit die nichtstrahlende Rekombination durch Augerprozesse minimal ist. Beim Ausschalten (Abb. 2.2b) schrumpft die Verarmungszone zusammen, die Er-reiche Schicht wird mit Elektronen überflutet, und die Lumineszenz bricht innerhalb kürzester Zeit ($\sim 50 \text{ ns}$) zusammen. Gegenwärtige Er-basierte LED erreichen bei RT eine interne Quanteneffizienz von $5 \cdot 10^{-4}$ und lassen sich bei Frequenzen bis zu 10 MHz betreiben [Coff98].

2.2.2 Poröses Silizium

Poröses Si wird durch elektrochemisches Ätzen von Si in einer HF-Lösung hergestellt. Im Ergebnis entsteht eine schwammartige, aus kleinsten Poren und filigranen Si-Strukturen bestehende Schicht mit einer sehr großen inneren Oberfläche. Ein wichtiger Parameter zur Charakterisierung von porösem Si ist die Porösität, die als Verhältnis der Leerräume einer solchen Schicht zum Gesamtvolumen definiert ist. Bei einer Porösität von 50 % ist demnach die Hälfte des ursprünglich vorhandenen Materials herausgeätzt worden. Für weitere Details der Herstellung und Topologie von porösem Si sei auf die Literatur (z.B. [Cull97]) verwiesen.

Die Entdeckung roter PL bei porösem Si [Can90, Goe91] ließ die Forschungstätigkeit auf diesem Gebiet sprunghaft ansteigen. Durch Veränderung der Herstellungsparameter, insbesondere der Porösität, ließ sich die Emissionswellenlänge innerhalb des roten und infraroten Spektralbereichs verschieben [Voo95], was von den meisten Autoren durch Effekte des Quanten-Confinement (QC) erklärt wird [Coo96, Komu96]. Die mit Hilfe einer gezielten Oxidation nachgewiesene blaue PL wird dagegen auf Suboxide (SiO_x mit $x < 2$) zurückgeführt [Kon94, Chen96].

Während bei der PL leicht eine EQE von 3 bis 7 % erreicht werden konnte [Koz92], lag diese bei der EL jahrelang unterhalb von 10^{-4} [Can96]. Erst in den letzten Jahren konnte bei roter EL eine EQE oberhalb von 10^{-3} im Gleichstrom- [Lon95] bzw. im Pulsbetrieb [Lal96, Kuz98] verwirklicht werden. Kürzlich erzielten NISHIMURA *et al.* rote EL mit einer EQE von $8 \cdot 10^{-3}$, bei der die Leistungseffizienz jedoch um eine Größenordnung niedriger lag [Nish98]. Auch das Erreichen blauer EL war wesentlich schwieriger zu realisieren als im Falle der PL. STEINER *et al.* erreichten bei In-dotiertem porösem Si eine Wellenlänge von 482 nm und eine EQE von $5 \cdot 10^{-5}$ [Ste94]. CHEN *et al.* untersuchten eine Diode mit einer porösen und einer amorphen Si-Schicht

²mittels Float-Zone-Prozeß (Fz) oder Czochalski-Verfahren (Cz) gezüchtete Si-Kristalle

und beobachteten beim Anlegen hoher Feldstärken die Herausbildung eines EL-Peaks bei 455 nm [Chen97].

Ein weiteres Problem bildet die hohe Degradationsrate sowohl bei einfacher Lagerung als auch unter Betriebsbedingungen. PAVESI *et al.* untersuchten die Degradation von porösem Si unter Dauerbetrieb und stellten einen von der Anregungsleistung relativ unabhängigen Abfall der PL-Intensität um die Hälfte innerhalb weniger Minuten fest [Pav94]. Bei elektrischer Anregung ist das Ergebnis noch drastischer: der Abfall der EL-Intensität um die Hälfte bewegt sich hier auf einer Zeitskala von Millisekunden [Kna97, Lal96]. Die Degradation kann durch eine entsprechende Passivierung der Oberfläche, d.h. Hochtemperaturausheilung in inerter oder in Sauerstoffatmosphäre, verhindert werden, so daß heutige, auf porösem Si basierte LED eine Lebensdauer von mehreren Wochen aufweisen können [Tsy96].

Hinzu kommt, daß sich die Materialeigenschaften von porösem Si mit wachsender Porösität verschlechtern (siehe [Fau98]). So sinkt beispielsweise die Härte bei einer Porösität von 80 %, einem üblichen Wert für effiziente PL oder EL, auf ein Drittel ab. Die thermische Leitfähigkeit und die Beweglichkeit der Elektronen verringern sich sogar um 2 bzw. 7 Größenordnungen. Die Frequenz, mit der ein Pulsbetrieb der LED noch möglich ist, wird daher nicht nur durch die Abklingkonstante der Lumineszenz, sondern auch durch die Zeit, die ein Elektron zum Durchqueren einer Schicht porösen Si benötigt, bestimmt.

Schließlich sind die naßchemischen Verfahren zur Herstellung von porösem Si schwer in die gegenwärtige Fertigungstechnik von mikroelektronischen Bauelementen zu integrieren. Obwohl poröses Si in vielen Eckdaten ähnlich gute Werte aufweist wie andere auf Si basierte Lumineszenzmaterialien, ist es aufgrund der relativ starken Nachteile nicht sehr wahrscheinlich, daß zukünftige elektrooptische Anwendungen durch poröses Si dominiert werden.

2.2.3 Eisendisilizid

Der Vollständigkeit halber sei auch kurz auf die Eignung von FeSi_2 als Lichtemitter eingegangen. Hierbei ist die halbleitende orthorhombische β -Phase, die sich oberhalb von 937°C in die metallische tetragonale α -Phase umwandelt, von besonderem Interesse. β - FeSi_2 hat gegenüber den meisten anderen auf Si basierenden Lumineszenzmaterialien den Vorteil, eine direkte Bandlücke von 0.85 eV zu besitzen. Die genaue Bandstruktur, insbesondere die Existenz einer indirekten Bandlücke wenige meV unterhalb der direkten Bandlücke, ist in der Literatur noch umstritten. Die Autoren in [Rad94] und [Gia92] fanden bei ionenstrahlsynthetisiertem bzw. mittels Fe-Abscheidung und anschließender Temperung hergestelltem β - FeSi_2 eine indirekte Bandlücke von 0.78 bzw. 0.83 eV. Demgegenüber konnten YANG *et al.* in ihren mittels Ionenstrahlsynthese hergestellten β - FeSi_2 -Schichten nur eine direkte Bandlücke von 0.83 eV bei RT nachweisen [Yang95b].

Zur Erzeugung von EL existieren bereits erste Teststrukturen auf der Basis einer Si-Diode, die in der p-leitenden Si-Schicht eine vergrabene Schicht von einkristallinen β - FeSi_2 -Präzipitaten besitzt [Leon97]. Die Vorteile liegen in dem sicherlich unproblematischen Injektionsmechanismus und der für die Datenfernübertragung günstigen Emissionswellenlänge von rund $1.5 \mu\text{m}$. Weiterhin wurde in ionenstrahlsynthetisierten β - FeSi_2 -Schichten die Löchermobilität bei einer Löcherkonzentration von $9 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$ zu $\sim 100 \text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ bestimmt, was den Si-Wert von $65 \text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ (bei einer Löcherkonzentration von rund 10^{19}cm^{-3}) sogar übersteigt [Rad94].

Diese Struktur besitzt vordergründig zwei Nachteile. Zur Formierung der β - FeSi_2 -Schicht sind entweder lange Ausheilzeiten oder hohe Temperaturen vonnöten, die aber zu einer unerwünschten Diffusion der Dotanden im Si führt. Die in [Leon97] angewandte, ungewöhnlich lange Temperung von 900°C , 18 h stellt einen Kompromiß zwischen der Formierung einer β -

FeSi₂-Schicht und der Dotandendiffusion in Si dar. Gravierender ist aber die Tatsache, daß die EL-Intensität beim Übergang von 80 K zur RT um zwei Größenordnungen zurückgeht.

Schließlich sei noch auf die Möglichkeit, die direkte Bandlücke von 0.85 eV durch die Beimischung von Co gezielt zu senken, hingewiesen [Pan96].

2.2.4 Silizium- oder Germaniumreiches SiO₂

Die Palette der möglichen Herstellungsmethoden umfaßt plasmagestützte Abscheideverfahren, Techniken der Laserablation, die Mischverdampfung, die Oxidation von Mischschichten aus Si und Ge, das Dotieren von Gläsern sowie die Ionenimplantation. Um den Rahmen dieser Arbeit nicht zu sprengen, liegt der Schwerpunkt dieser Literaturübersicht auf den folgenden zwei Materialgruppen: implantierte SiO₂-Schichten und dotierte Gläser, wobei für letztere bereits eine umfangreiche Literatur zur Spektroskopie und möglichen Struktur lumineszierender Defekte im SiO₂ existiert. Weiterhin beschränkt sich die Übersicht auf PL und EL, die bei RT erreicht wurden.

2.2.4.1 Photolumineszenz oberhalb 500 nm

Die Messung der PL-Eigenschaften ist ein Standardverfahren zur optischen Charakterisierung derartiger Materialsysteme. Leider ist ein direkter Vergleich der Ergebnisse verschiedener Autoren durch die Verwendung willkürlicher Einheiten für die Angabe der PL-Intensität in Publikationen und die starke Abhängigkeit des PL-Spektrums von der verwendeten Anregungswellenlänge nahezu unmöglich. Bei vielen nicht-stöchiometrischen Oxiden wurde nur rote PL beobachtet, da die meisten zur Anregung benutzten Laserlinien im blauen Spektralbereich lagen.

GHISLOTTI *et al.* beobachteten bei Si-implantierten SiO₂-Schichten und einer Anregungswellenlänge von 464 nm einen grünen Peak (550 nm) unter moderaten Ausheiltemperaturen (500 bis 800°C) und einen infraroten Peak (~ 800 nm) nach Ausheilung mit 1000°C, die die Autoren Defekten bzw. der Anwesenheit von Nanoclustern zuschrieben [Ghi97]. Lumineszenz im Bereich 650 bis 900 nm nach Hochtemperaturausheilung Si-implantierter Oxide wurde auch bei anderen Autoren festgestellt [Zan96, Kach97, Lan97, Chou98, Val99]. In [Bro98] konnte die Emissionswellenlänge durch gezielte Oxidation Si-implantierter SiO₂-Schichten bei 1000°C zwischen 680 und 900 nm verändert werden. SHIMIZU-IWAYAMA *et al.* veröffentlichten mehrere Arbeiten zur roten PL Si-implantierter SiO₂-Schichten, in denen bei Anregungswellenlängen im Bereich 460 bis 515 nm PL zwischen 650 und 800 nm beobachtet wurde (z.B. [Shi94, Shi96, Shi98]). Hier wird die Lumineszenz nicht mehr auf einen reinen QC-Effekt zurückgeführt, sondern auf ein kombiniertes Modell mit kristallinem Clusterkern, einer amorphen Zwischenschicht und dem stöchiometrischen SiO₂ als Matrixmaterial (siehe Abschnitt 2.4.2). IM *et al.* implantierten thermische SiO₂-Schichten bei RT bzw. 400°C mit Si und stellten fest, daß die Implantation bei 400°C die Intensität der gelben PL bei 580 nm um 50 bis 100 % erhöht [Im99]. Bezüglich der roten PL von Si-reichen Oxiden, die nicht mittels Ionenstrahlsynthese hergestellt wurden, sei auf die folgenden Arbeiten verwiesen: [Hay93, Kaw93, Wick95, Ser96, Ehb97, Kane97, Kanz97].

Rote PL bei Ge-implantierten Oxiden wurde wesentlich seltener erreicht. YANG *et al.* erhielten eine breitbandige Lumineszenz zwischen 600 und 800 nm bei starker Anregung durch einen Ar-Laser bei 457 nm [Yang95a]. YE *et al.* [Ye98] beobachteten einen gelb-orangen Peak bei 600 nm und einen rot-infraroten Peak bei 780 nm (Anregung bei 248 nm). Eine ähnliche Lumineszenzbande erhielten WANG *et al.* unter Anregung bei 514.5 nm [Wang96]. In allen drei Arbeiten wird die PL als Absorption im Ge-Nanocluster mit nachfolgender Emission an einem Defekt an oder nahe der Oberfläche des Clusters verstanden. MIN *et al.* hingegen konnten zeigen, daß die bei Ge-implantierten SiO₂-Schichten mit 457.9 nm angeregte PL durch eine von

der Größe der Nanocluster unabhängigen Emissionswellenlänge von 680 nm gekennzeichnet war [Min96, Bro98]. Auch die Abklingkonstanten mit weniger als 100 ns standen im Widerspruch zu den Voraussagen des QC-Effektes (Kap. 2.4.1).

Für den grünen Spektralbereich von etwa 492 bis 580 nm wurde PL in einigen wenigen Arbeiten gezeigt. MUTTI *et al.* und PIFFERI *et al.* stellten bei Si-implantierten Oxiden eine grüne PL-Bande bei 500 nm fest, benutzten aber unterschiedliche Anregungswellenlängen von 292 [Mut95] bzw. 413 nm [Pif97]. Bei Ge-reichen Oxiden ist grüne PL nur von gesputterten oder abgeschiedenen Schichten bekannt. Unter einer Anregungswellenlänge von 418.5 und 488 nm wurden PL-Banden bei 580 nm [Dut96] und um 550 nm [Kane92, Oka96] beobachtet. Während die Autoren in [Mut95] und [Dut96] die beobachtete grüne PL auf QC-Effekte im Nanocluster zurückführen, gehen PIFFERI *et al.* von Defekten aus, die eventuelle Vorläufer von Si-Nanoclustern sein könnten. KANEMITSU *et al.* und OKAMOTO *et al.* betrachten zwar Nanocluster noch als Ursache der beobachteten PL, schreiben die Emission aber Oberflächendefekten der Nanocluster [Oka96] oder diskreten Übergängen in kleinen Ge-Clustern unterhalb 4 nm [Kane92] zu.

2.2.4.2 Photolumineszenz im blauen und violetten Spektralbereich

Die Arbeiten zur blauen und violetten PL bei Si-, Ge- oder Sn-reichen Oxiden lassen sich zum großen Teil zwei Gruppen zuordnen. In der ersten Gruppe werden bei Anregungswellenlängen zwischen 300 und 370 nm verschiedene Lumineszenzbanden zwischen 400 und 470 nm beobachtet. Die zweite Gruppe zeichnet sich durch wohldefinierte Anregungskanäle bei 240 bzw. 250 nm und feste Emissionsbanden bei 280-300 nm (UV-Bande) sowie 380 bis 400 nm bei Ge- bzw. Sn-reichem SiO₂ und 460 bis 470 nm bei Si-reichem SiO₂ aus (B-Bande). Weiterhin ist diese Materialgruppe fast ausschließlich von implantierten SiO₂-Schichten und dotierten Gläsern dominiert.

SKORUPA *et al.* erhielten bei Si-implantiertem SiO₂ und unter Benutzung einer Anregungswellenlänge von 378 nm PL-Peaks bei 417 und 438 nm [Sko96a]. Bei einer Anregung von 325 nm tauchen die gleichen Peaks zusammen mit einem weiteren Peak bei 467 nm bei nanokristallinem Si auf [Zhao94]. MORISAKI *et al.* fanden ebenfalls einen Peak bei 470 nm ($\lambda_{ex} = 370$ nm) bei abgeschiedenen Si-reichen Oxiden [Mor93]. PL bei 410 bis 420 nm wurde bei gesputterten Ge-Schichten mit Anregungswellenlängen von 300 [Yue97] und 364 nm [Zach97] nachgewiesen. NOZAKI *et al.* beobachteten bei abgeschiedenen, sauerstoffreichen Ge-Schichten eine PL bei 428 nm ($\lambda_{ex} = 313$ nm) [Noz97]. Dabei ist der Umstand interessant, daß die auf stickstoffgekühlten Si-Targets abgeschiedenen Schichten einen deutlich höheren Anteil an GeO_x enthalten und eine wesentlich höhere PL-Intensität aufweisen als die bei RT abgeschiedenen Schichten. Schließlich fanden WEIGAND *et al.* bei Anregung mit 325 nm eine PL-Bande bei 410 nm in Si_xGe_yO_{1-x-y} Verbindungen mit einem Sauerstoffanteil von 30 bis 65 at. % [Wei98].

Die zur zweiten Materialgruppe gehörende Literatur ist in den Tabellen 2.2 und 2.3 für Si- bzw. Ge- und Sn-reiche Oxide aufgelistet. In der Literatur herrscht Konsens über die Tatsache, daß die im Bereich 240 bis 250 nm angeregte PL auf Sauerstoffmangeldefekte (ODC) zurückzuführen ist. Die Frage nach der konkreten molekularen Struktur konnte jedoch noch nicht eindeutig beantwortet werden, da diese nur indirekt aus den verschiedenen Messungen abgeleitet werden kann. Die zwei hauptsächlich in der Literatur diskutierten ODC sind das zweifach koordinierte Si-Atom (Si₂⁰) und die neutrale Sauerstoffvakanz (NOV bzw. ≡Si-Si≡). Ein ähnliches Bild ergibt sich für Ge- bzw. Sn-reiches Oxid, wenn in beiden Modellen ein Si-Atom durch ein Ge- oder Sn-Atom substituiert wird.

Die Arbeiten von SONG *et al.* [Song98] und TONG *et al.* [Tong97] lassen sich schwer den bereits benannten Materialgruppen zuordnen. Ersterer erzielte bei 1000°C ausgeheilten, gesput-

Autor	Anregung (nm)	UV-Bande		B-Bande		Bemerkung	Zuordnung
		λ (nm)	τ (ns)	λ (nm)	τ (ms)		
[Bos96] u.	182,248	282	4.1			a-SiO ₂	ODC, Konfig. 1
[Bos99]	163	282	4.1				ODC, Konfig. 2
[Cann97]	182,248	281	4.1			a-SiO ₂	ODC, Konfig. 1
	151-177,243	291	5.5				ODC, Konfig. 2
[Imai88]	163	288				CVD-SiO ₂	$\equiv\text{Si-Si}\equiv$, relaxiert
	248	288					$\equiv\text{Si-Si}\equiv$, unrelaxiert
[Leo97]	248	288		388		a-SiO ₂	Si ₂ ⁰
[Liao96a]	250			460		therm. SiO ₂ , impl.	$\equiv\text{Si-Si}\equiv$
[Nis97]	180,248	282	4.2			{ therm. SiO ₂	ODC, Konfig. 1
	163	282	2.3			{ CVD, SIMOX	ODC, Konfig. 2
[Pio90]	250	279				a-SiO ₂	ODC, intrinsisch 1
	255			460			ODC, intrinsisch 2
	243	292					ODC, extrinsisch 1
	242			400			ODC, extrinsisch 2
[Reb97a]	250			470		therm. SiO ₂ , impl.	$\equiv\text{Si-Si}\equiv$
[Seol96a]	248	288	4	460	9.7	therm., SIMOX	$\equiv\text{Si-Si}\equiv$, unrelaxiert
	168	288	2.4				$\equiv\text{Si-Si}\equiv$, relaxiert
[Seol99]	185,248	288	4.2			a-SiO ₂ , SIMOX	ODC, Konfig. 1
	170	288	*				ODC, Konfig. 2
[Sku92]	248			460	~10	a-SiO ₂	Si ₂ ⁰
[Song97a]	250			470		therm. SiO ₂ , impl.	$\equiv\text{Si-Si}\equiv$
[Toh89]	248	282	6500	460	10.2	a-SiO ₂	$\equiv\text{Si-Si}\equiv$
[Zha98a]	250			460		therm. SiO ₂ , impl.	$\equiv\text{Si-Si}\equiv$

* nichtexponentieller Abfall

Tabelle 2.2: Publikationen zu PL-Banden im ultravioletten bis blauen Spektralbereich in Si-reichen SiO₂-Schichten, die ODC zugeschrieben werden. Zur Struktur der einzelnen Defekte siehe Abschnitt 2.4.3.

terten SiO₂-Schichten und unter 250 nm Anregung eine starke PL bei 370 nm, deren Intensität mit der von porösem Si vergleichbar ist. TONG *et al.* beobachtete bei mittels CVD abgeschiedenen a-Si:H:O-Schichten zwei Lumineszenzbanden bei 340 bis 370 nm und bei 400 bis 430 nm. Beide Banden wurden mit 240 nm angeregt.

Schließlich bleibt noch die Frage, ob bereits eine einfache Schädigung des Oxides ausreicht, um blaue oder violette PL hervorzurufen. Bereits in einigen der in Tabelle 2.2 aufgelisteten Arbeiten wird deutlich, daß aufgrund von immer vorhandenen, lokalen Abweichungen von der idealen Stöchiometrie des SiO₂-Netzwerkes, insbesondere an der SiO₂-Si-Grenzfläche, blaue PL von sehr geringer Intensität nachweisbar ist. SKORUPA *et al.* [Sko96b], GAO *et al.* [Gao97] und REBOHLE *et al.* [Reb97a] implantierten thermisches SiO₂ mit Ar und fanden, daß in der Tat eine Erhöhung der blauen PL gegenüber unimplantierten SiO₂ auftritt, die jedoch um Größenordnungen geringer ist als die der entsprechenden, mit Ge bzw. Si implantierten SiO₂-Schichten. SEOL *et al.* [Seol96b] untersuchte den Einfluß der Implantation verschiedener Elemente wie He, Ar, Kr, B und P auf die blaue PL-Intensität, die sich im Vergleich zum unimplantierten Material um den Faktor 2 bis 3 erhöhte. Die größte Erhöhung wurde dabei mit den höchsten Dosen und den schwersten Elementen erreicht.

Es ist aber zu bemerken, daß der quantitative Vergleich zu unimplantierten SiO₂ stark von der Qualität des Oxides abhängt. Bei Verwendung von Oxiden hoher Reinheit und Güte kann natürlich eine beachtliche Erhöhung der PL-Intensität bei Implantation von Edelgasen statt-

Autor	Anregung (nm)	UV-Bande		B-Bande		Bemerkung	Zuordnung
		λ (nm)	τ (ns)	λ (nm)	τ (ms)		
[All97]	248			400		Glas, 1.4-9 mol.% Ge	Ge-ODC
[Ane97]	248	303	10	409	111	Glas, 2 at.% Ge	Ge-ODC, Volumen
		291	8	386	94		Ge-ODC, OF
[Bao97]	240			396		therm. SiO ₂ , impl.	Ge ₂ ⁰
[Cor95]	248			394		Glas, 2 at.% Ge	Ge-ODC
[Cri96]	188,240	295		400		Glas, 2 at.% Ge	Ge-ODC
[Dia97]	248	292		394		Glas, 7-10 mol.% Ge	Ge-ODC
[Fuji97]	177,194,248	288	9	400	113	99 SiO ₂ :1 GeO ₂	Ge ₂ ⁰
[Gall93]	248	290	<30	400	~100	Glas, Ge-dotiert	Ge ₂ ⁰
[Gao97]	240	286		396		therm. SiO ₂ , impl.	Ge ₂ ⁰
[Hos92]	245	288				{ SiO ₂ :GeO ₂	≡Ge-Ge≡
	240	288		388		{ 90:10 und 95:5	Ge ₂ ⁰
[Mart97]	218	335				{ Glas, 10 at.% Ge +	Sn-ODC
	210	354				{ 0.2 at.% Sn	Sn-ODC
[Mart98]	170,188,230	288		400		{ Glas, 0.03, 2, 10	Ge-ODC
	243	282				{ at.% Ge	Ge-ODC
	177,264	318		427			Ge-ODC
[Reb97a]	240			395		therm. SiO ₂ , impl.	Ge-ODC
[Sku92]	248			400	113	90 SiO ₂ : 10 GeO ₂	Ge ₂ ⁰
	248			394	10.3	SiO ₂ +0.1 at.% Sn	Sn ₂ ⁰
[Tsai94]	240*					Glas, 100-180 ppm Ge	Ge-Divakanz
[Zha98b]	250			400		therm. SiO ₂ , impl.	≡Ge-Ge≡
				425			≡Si-Ge≡

* Absorptionsmessungen

Tabelle 2.3: Publikationen zu PL-Banden im ultravioletten bis blauen Spektralbereich in Ge- bzw. Sn-reichen SiO₂-Schichten, die ODC unter Beteiligung von Ge (Ge-ODC) oder Sn (Sn-ODC) zugeschrieben werden. Zur Struktur der einzelnen Defekte siehe Abschnitt 2.4.3.

finden, die aber nicht durch eine hohe absolute Intensität der implantierten Schichten, sondern durch eine entsprechend geringe Intensität des unimplantierten Oxides bedingt ist. Allen mit Edelgasen implantierten SiO₂-Schichten ist jedoch gemein, daß die durch die Implantation hervorgerufene PL bereits bei moderaten Ausheiltemperaturen fast vollständig verschwindet [Sko96b, Seo197].

2.2.4.3 Elektrolumineszenz

Die Zahl der Arbeiten zur EL Si- oder Ge-reicher Oxide ist im Vergleich zu den Publikationen zur PL deutlich geringer. LIAO *et al.* [Liao96b], SONG *et al.* [Song97b] und LALIC *et al.* [Lal98] erhielten rote EL aus Si-implantierten SiO₂-Systemen. Ähnliche Ergebnisse wurden auch bei abgeschiedenen oder gesputterten Si-reichen SiO₂-Schichten erzielt [Qin96, Tong96, Nass98]. In [Bai98] wurde rote EL von einer 3 nm dicken, natürlichen SiO₂-Schicht beobachtet. MATSUDA *et al.* [Mat97] beobachteten bei Si-implantiertem SiO₂ eine breitbandige EL, die, von geringfügigen, durch Interferenz verursachten Modulationen abgesehen, keinerlei spektrale Strukturen im Meßbereich von 420 bis 900 nm erkennen ließ.

ZHANG *et al.* [Zha97] erhielten bei Ge-implantierten Oxiden in Abhängigkeit von der angelegten Spannung rote EL zwischen 600 und 780 nm. Leider fehlt bei allen Autoren eine Angabe zur erreichten Quanteneffizienz. SHCHEGLOV *et al.* [Shc95] implantierte SiO₂-Schichten mit Ge und beobachtete eine breite Emission im Infraroten (IR) mit einer Leistungseffizienz von 10⁻⁵

bis 10^{-4} .

Es konnte gezeigt werden, daß EL auch bei Ar-implantiertem SiO_2 nachweisbar ist, wobei in diesen Arbeiten [Bota96, Gar97] die für Si-reiches Oxid typischen Banden um 288, 460 und 650 nm reproduziert wurden. In beiden Fällen verschwand die EL jedoch nach moderater Temperaturensheilung. Der EL-Peak um 460 nm ist auch in [Koz97] zu finden, nur unterscheiden sich die PL- und EL-Spektren der dort untersuchten Si-implantierten SiO_2 -Schichten erheblich voneinander. FORSYTHE *et al.* [For95] erhielten bei Si-reichem Oxid, hergestellt durch Abscheidung aus einem $\text{SiH}_4:\text{N}_2\text{O}$ Gasgemisch, einen UV-Peak bei rund 380 nm und einen infraroten Peak bei etwa 800 nm. Ähnliche Ergebnisse wurden unter Verwendung eines $\text{SiH}_4:\text{GeH}_4:\text{N}_2\text{O}$ Gasgemisches erreicht [Tom94], wobei die Peakpositionen aber bei 370 und 630 nm lagen. Leider fehlt auch bei diesen Arbeiten jegliche Angabe zur erreichten Quanteneffizienz.

Kürzliche Untersuchungen zeigten, daß die Erzeugung violetter EL bei Ge-implantierten bzw. blauer EL bei Si-implantierten SiO_2 -Schichten mit einer Leistungseffizienz von $5 \cdot 10^{-4}$ bzw. $\lesssim 10^{-4}$ möglich ist [Reb97b, Reb98a]. Die Ergebnisse für Si wurden in [Kna98] bestätigt; allerdings wurde dort nur eine EQE von $6 \cdot 10^{-7}$ erreicht.

2.3 Zur Struktur von thermischem SiO_2

In diesem Abschnitt sollen die für diese Arbeit relevanten Eigenschaften von SiO_2 kurz dargestellt werden. Dabei wurde im wesentlichen auf die Arbeiten [Wee64, Rev83, Grun86, Grun87, Him88, Gri91, War92, Gar94, Kos98] zurückgegriffen. Abschnitt 2.3.1 beschäftigt sich mit dem strukturellen Aufbau von thermischem SiO_2 und seiner Grenzfläche zu kristallinem Si, während Abschnitt 2.3.2 auf die mikrostrukturelle Schädigung des SiO_2 bei einer Hochdosisimplantation eingeht. Strukturelle Defekte im SiO_2 , insbesondere E' -Zentren und die NOV, werden im Abschnitt 2.4.3 behandelt.

2.3.1 Thermisches SiO_2 und die Si- SiO_2 -Grenzfläche

Grundbaustein des SiO_2 ist der SiO_4 -Tetraeder, der aus einem zentralen Si-Atom und vier O-Atomen besteht. Die Tetraeder sind über die Ecken miteinander verbunden und bilden Ringe mit 3 bis 8 Tetraedern, aus denen sich schließlich das SiO_2 -Netzwerk zusammensetzt. Aufgrund der variablen Ringgröße kann der Winkel zwischen den Tetraedern Werte zwischen 120° und 180° annehmen. Der Schwerpunkt der Verteilungen liegt im amorphen SiO_2 bei etwa 6 Tetraedern im Ring und bei einem Si-O-Si Winkel von rund 144° . Entsprechend dieser Verteilung

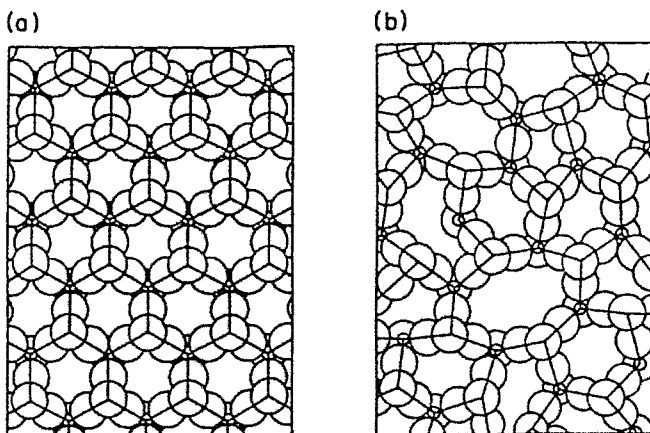


Abbildung 2.3: Projektion des SiO_2 -Netzwerkes von α -Quartz (a) und amorphem SiO_2 (b) in die Ebene. (entnommen aus [Grun86])

variieren auch andere physikalische Parameter des SiO_2 , wie z.B. die Dichte, der Brechungsindex und die Bandlücke. Abb. 2.3 vermittelt einen Eindruck des SiO_2 -Netzwerkes im α -Quartz und im amorphen SiO_2 .

Wegen des höheren Elektronegativitätswertes von Sauerstoff sind die 4 Valenzelektronen des Si-Atoms vorwiegend in den Ecken des SiO_4 -Tetraeders lokalisiert. Der Oxidationszustand des Si-Atoms kann daher mit +4 beschrieben werden. Ist das Si-Atom von weniger Sauerstoffatomen umgeben, wird sein Oxidationszustand analog mit Si^{+1} , Si^{+2} und Si^{+3} bezeichnet. Es sei darauf hingewiesen, daß diese Beschreibung rein formaler Natur ist und nicht mit der tatsächlichen Nettoladung des Si-Atoms korrespondiert.

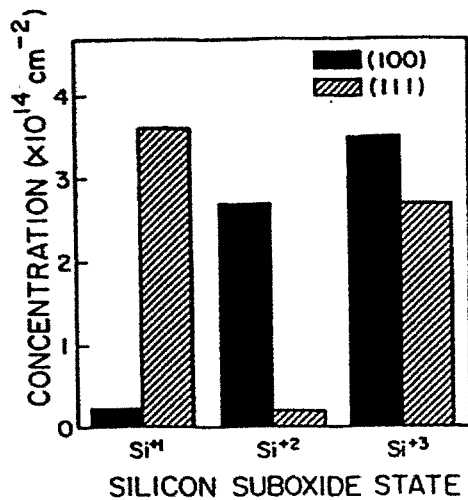


Abbildung 2.4: Konzentration der Suboxide Si^{+1} , Si^{+2} und Si^{+3} in der Grenzschicht Si-SiO₂ für eine (100) und (111) Orientierung des Si-Substrates. (entnommen aus [Grun86])

Aufgrund des um etwa 30% niedrigeren Abstands der Si-Atome im kristallinen Si im Vergleich zum SiO_2 erfolgt der Übergang vom Si zum Oxid nicht abrupt, sondern in einer Übergangsschicht. Unmittelbar an der Grenzfläche sollten Ringe mit 3 oder 4 Tetraedern dominieren und innerhalb der nächsten 25 Å die Werte des ausgedehnten SiO_2 annehmen. Gleiches gilt für die Dichte und den Brechungsindex. In Abb. 2.4 sind die Ergebnisse von XPS-Untersuchungen [Grun86] an der Si-SiO₂-Grenzfläche dargestellt. Die unterschiedliche Konzentration von Si^{+1} - und Si^{+2} -Suboxiden bei einer (100)- und (111)-Grenzfläche resultiert aus der unterschiedlichen Terminierung der Si-Grenzfläche mit Sauerstoffatomen innerhalb der ersten Monolage. Beide Suboxide treten nur innerhalb der ersten 5 bis 6 Å auf, während Si^{+3} -Suboxide bis in eine Entfernung von 10 bis 30 Å von der Grenzfläche nachweisbar sind. Da Si^{+3} -Suboxide an der idealen Si-SiO₂-Grenzfläche nur bei der Terminierung von Versetzungsschleifen entstehen, ist es zunächst unverständlich, wieso die Konzentration von Si^{+3} -Suboxiden die gleiche Größenordnung erreicht wie die von Si^{+1} - bzw. Si^{+2} -Suboxiden. Grenzflächenmodelle, die einen ausgedehnten Übergang über mindestens drei Atomlagen vorsehen, enthalten Si-Atome, die mit drei Sauerstoffatomen und einem weiteren Si-Atom verbunden sind [Him88]. Diese Übergangszone kann als Region mit lokalem Si-Überschuß angesehen werden. Neben der Si-Si Bindung können Si^{+3} -Suboxide auch durch die Anlagerung von Wasserstoff oder die Zerstörung der Sauerstoffbrücke zwischen den SiO_4 -Tetraedern mittels Elektronen- oder Ionenbeschuß entstehen. In XPS-Untersuchungen der Si-SiO₂-Grenzfläche gesputterter SiO_2 -Schichten liegt die Konzentration des Si^{+3} -Suboxides deutlich über der Konzentration des Si^{+1} - bzw. Si^{+2} -Suboxides und verändert sich bei Ausheilung bis 820°C nur unwesentlich [Kos98].

2.3.2 SiO₂ während der Ionenimplantation

Durch die Implantation in eine dünne SiO₂-Schicht auf einem kristallinem Si-Substrat kommt es zur Schädigung des SiO₂-Netzwerkes und je nach Reichweite der implantierten Ionen zur Schädigung der Grenzfläche und des benachbarten Si. Dabei muß zwischen einer elektronischen und einer nuklearen Schädigung unterschieden werden. Die elektronische Schädigung besteht in dem Aufbrechen von Netzwerkbindungen, während die nukleare Schädigung zum Versetzen von Matrixatomen führt und die spezifische Ringanordnung der SiO₄-Tetraeder zerstört.

Die durch die Implantation verursachten Schäden wachsen im allgemeinen linear mit der Implantationsdosis, bis sie bei hohen Dosen in einen Sättigungswert übergehen. Diese Sättigung kann als „maximale“ Schädigung des SiO₂ bezeichnet werden. Der Wert der nuklearen bzw. elektronischen Energiedeposition, bei der eine solche „maximale“ Schädigung des SiO₂ eintritt, hängt natürlich von der Art der betrachteten Defekte ab. Mißt man die Verdichtung des SiO₂ während der Implantation, so erreicht diese bereits bei einer nuklearen Energiedeposition von $\approx 3 \cdot 10^{23} \text{ eV cm}^{-3}$ einen Sättigungswert [Eer74]. Die Intensität der Absorptionsbande der Si-O-Bindung im infraroten Spektralbereich bei Ar-implantierten SiO₂-Schichten strebt bei einer nuklearen Energiedeposition von $10^{24} \text{ eV cm}^{-3}$ gegen einen Minimalwert [Gar94]. Häufig spricht man auch von einer maximalen Schädigung, wenn jedes Targetatom im Schnitt einmal verlagert wurde. Im SiO₂ mit einer angenommenen Dichte von 2.24 g cm^{-3} und einer zur Verlagerung der Atome notwendigen Energie von rund 20 eV entspräche dies einer nuklearen Energiedeposition von $1.4 \cdot 10^{24} \text{ eV cm}^{-3}$.

Die Ursache für dieses Sättigungsverhalten liegt in der Tatsache, daß sich das SiO₂-Netzwerk noch während der Implantation zum Teil regeneriert. Die elektronische Energiedeposition führt zur Erzeugung von E'-Zentren (siehe Kap. 2.4.3), deren Konzentration bei RT jedoch kaum einen Wert von $\sim 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ übersteigt [Wee64]. Dieser Wert ist sehr niedrig; er entspricht etwa einem E'-Zentrum auf 200 SiO₄-Tetraeder. Für den Fall einer Implantation mit gekühltem Target erwartet man eine höhere Konzentration von E'-Zentren, die erst bei Erwärmung auf RT zurückgeht. Beispielsweise erhöht sich die Intensität der dem E'-Zentrum zugeschriebenen Absorptionsbande im UV um den Faktor 10, wenn die Schädigung des SiO₂ und die Messung bei 77 K statt bei RT erfolgen [Wee64]. Bei der Ausheilung der E'-Zentren muß die ursprüngliche Bindung nicht unbedingt wiederhergestellt werden. So wurde z.B. ein erhöhter Anteil von gestreckten Si-O-Si-Bindungen mit einem Bindungswinkel im Bereich 100...110° gegenüber dem typischen Wert von 144° nach Neutronenbeschuß festgestellt [Rev83]. Schließlich kann es durch eine massive nukleare Energiedeposition zur Ausbildung lokaler Si-reicher und Si-armer Gebiete kommen [Rev99].

2.4 Lumineszenzmodelle

In diesem Kapitel sollen die drei gängigen Modelle für die PL in Si- oder Ge-reichen SiO₂ kurz vorgestellt werden. In den ersten beiden Fällen handelt es sich um die Absorption in Nanoclustern und die anschließende Rekombination im oder an der Oberfläche des Clusters. Im letzten Fall handelt es sich um stark lokalisierte Punktdefekte oder molekulartige Strukturen, die relativ fest definierte Anregungs- und Emissionsbanden besitzen. Die Diskussion soll an dieser Stelle auf ODC beschränkt bleiben. Der Einfluß von Siloxenen, SiH_x-Komplexen und anderen Si-Verbindungen wird beispielsweise in [Pro96] und [Pioc97] diskutiert.

2.4.1 Quanten-Confinement

QC-Effekte beschreiben die Änderung der Materialeigenschaften bestimmter Verbindungen oder Elemente in Abhängigkeit von der Kristallit- oder Clustergröße. Während über die qualitativen Auswirkungen des QC-Effektes auf Halbleitermaterialien wie Vergrößerung der Bandlücke und Erhöhung der strahlenden Rekombinationsrate in der Literatur Konsens herrscht, differieren die quantitativen Beschreibungen zum Teil noch erheblich voneinander.

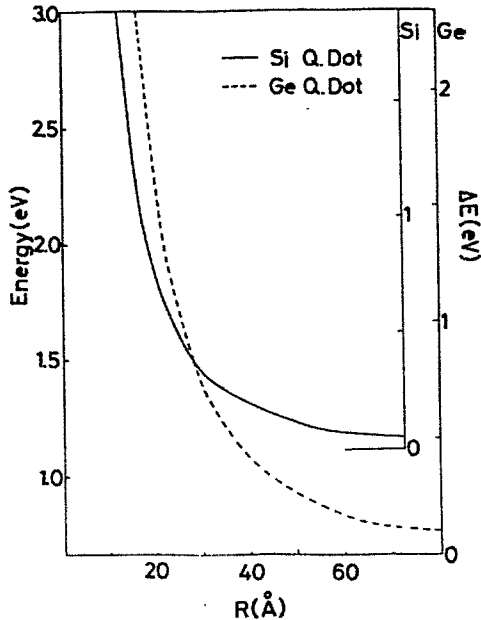


Abbildung 2.5: Bandlücke von Si und Ge Nanokristallen in Abhängigkeit vom Clusterradius. Die rechten Ordinatenachsen bezeichnen die Zunahme der Bandlücke ΔE_{BL} gegenüber dem Wert des ausgedehnten Festkörpers. (entnommen aus [Tak92])

Eine der wesentlichsten Voraussagen des QC-Effektes ist die Vergrößerung der Bandlücke von Si und Ge bei kleiner werdenden Präzipitatabmessungen. Bereits die einfache Lösung der eindimensionalen Schrödingergleichung liefert für die Energieeigenwerte eines Elektrons im rechteckigen Potentialtopf mit unendlich hohen Potentialwänden die Werte

$$E_n = \frac{\pi n^2 \hbar^2}{2m_e R^2} \quad (2.1)$$

mit R als Abmessung des Potentialtopfes [Land79]. Für reale Systeme kann die Zunahme der Bandlücke nicht mehr mit $\Delta E_{BL} \sim R^{-2}$ beschrieben werden. Berechnungen der Bandlücke als Funktion der Clustergröße finden sich in den Arbeiten [Ren92, Tak92, Est96, Yor96, Vep97, Buu98]. Darüber hinaus enthalten die Arbeiten [Kim97, Vep97, Buu98, Trw98] Vergleiche zwischen mehreren Autoren sowie zwischen Theorie und Experiment. Allen Berechnungen ist gemein, daß die Bandlücke für kleine Kristallite oder Cluster, bei denen ein strahlender Band-zu-Band Übergang schon im sichtbaren Bereich liegt, stark von der Größe abhängt. Kleine Veränderungen der Clustergröße würden bereits eine deutliche Verschiebung der Emissionswellenlänge verursachen. Eine solche Abhängigkeit der Bandlücke vom Clusterradius ist in Abb. 2.5 wiedergegeben. Dabei ist der Anstieg der Bandlücke mit schwindender Clustergröße bei Ge deutlich stärker als bei Si.

Ein weiterer QC-Effekt ist die Erhöhung der strahlenden Rekombinationsrate k_R von Exzitonen mit kleiner werdender Kristallitabmessung. Sowohl Si als auch Ge besitzen einen indirekten Bandübergang, so daß die Abklingkonstante eines Exzitons für strahlende Rekombination sehr

hoch ist und sich das Exziton über relativ große Entfernungen bewegen kann. Dabei ist die Wahrscheinlichkeit, unterwegs auf ein Störzentrum zu treffen und dort nichtstrahlend zu rekombinieren, um Größenordnungen größer als die Wahrscheinlichkeit einer strahlenden Rekombination. Mit abnehmender Kristallitgröße sinkt die Zahl der Störzentren, mit dem das Exziton wechselwirken kann. Bei kleinen Clusterradien spaltet sich das Ensemble von Nanolustern in zwei Gruppen auf: defektfreie, „optisch aktive“ Kristallite, in denen ein Exziton vorzugsweise strahlend rekombiniert, und „optisch inaktive“ Kristallite mit Defekten, in denen die Exzitonen mit großer Wahrscheinlichkeit nichtstrahlend rekombinieren. Im allgemeinen gilt, daß der Anteil optisch aktiver Kristallite mit abnehmender Clustergröße zunimmt. Dabei ist aber zu bemerken, daß die Abhängigkeit der strahlenden Rekombinationsrate k_R von der Kristallitgröße nicht monoton erfolgen muß. Nimmt man einen bestimmten Bewegungsradius des Exzitons und eine bestimmte Dichte von Volumen- und Oberflächendefekten an, gibt es eine Clustergröße, bei der die Wahrscheinlichkeit P_R , kein Störzentrum zu finden, minimal wird. Bei einem angenommenen Bewegungsradius von 50 nm und Defektdichten von 10^{16} cm^{-3} im Volumen und 10^{11} cm^{-2} an der Oberfläche liegt der Clusterradius mit minimalem P_R in der Größenordnung von 50 bis 100 nm [Est96].

Bei einem indirekten Bandübergang muß bei der strahlenden Rekombination ein Phonon beteiligt sein, daß im ausgedehnten Halbleiter einen genau definierten Impuls übernimmt. Je kleiner der Kristall wird, desto stärker ist das Exziton lokalisiert. Da aber die Heisenbergsche Unschärferelation

$$\Delta p \cdot \Delta x \gtrsim \frac{\hbar}{2} \quad (2.2)$$

gilt, bedeutet eine starke Lokalisierung eine große Unbestimmtheit des Impulses. Mit abnehmender Clustergröße wird der Impulsübertrag an das Phonon immer variabler, und k_R steigt. Schließlich ist bei sehr kleinen Clustern die Unsicherheit Δk größer als der Abstand der Extremwerte des Leitungs- bzw. Valenzbandes im k -Raum, so daß kein Phonon mehr benötigt wird [Vep97]. Der Übergang von einer indirekten zur direkten Bandlücke in Si-Clustern bei $\Delta E_{BL} \approx 0.7 \text{ eV}$ wird ausführlich in [Kov98] behandelt.

Ein weiterer, erwünschter QC-Effekt ist die Unterdrückung von Augerprozessen, bei der ein Exziton nichtstrahlend rekombiniert und seine Energie an einen dritten Ladungsträger, Elektron oder Loch, abgibt. Dieser im ausgedehnten Halbleiter sehr effiziente Prozeß hängt quadratisch von der Konzentration der jeweiligen Ladungsträgerart ab. Mit abnehmender Clustergröße sinkt natürlich die Anzahl der Exzitonen im einzelnen Cluster und geht im Idealfall gegen 1, wo kein Augerprozeß mehr stattfindet. Die Augerprozesse limitieren daher die Anzahl gleichzeitig in einem Cluster vorhandenen Exzitonen auf 1 [Lann95]. Für eine quantitative Berechnung muß aber beachtet werden, daß auch die Augerkoeffizienten von der Clustergröße abhängen.

Ein weiterer, aber mehr für die elektrische Anregung bei porösem Si interessanter QC-Effekt ist die Abnahme von Mobilität und Driftgeschwindigkeit von Ladungsträgern in langen, dünnen Drähten mit sinkendem Drahtdurchmesser [San93].

2.4.2 Rekombination an der Clusteroberfläche

In mehreren Arbeiten wurde festgestellt, daß sich die beobachteten Emissionswellenlängen bei Si- und Ge-reichen Oxiden, die Nanokristallite enthalten, nicht mit der Größe der Cluster korrelieren lassen [Kane92, Yang95a, Lan97, Whi98]. Gleichzeitig wurde jedoch eine Abhängigkeit der PL-Intensität von der Clustergröße beobachtet [Kane93]. Um diese experimentellen Funde zu erklären, wurden Modelle entwickelt, nach denen die Absorption zwar im Cluster stattfindet, daß dort entstandene Exziton jedoch in einer Zwischenschicht zur SiO_2 -Matrix oder in Oberflächenzuständen gefangen wird und dort strahlend rekombiniert.

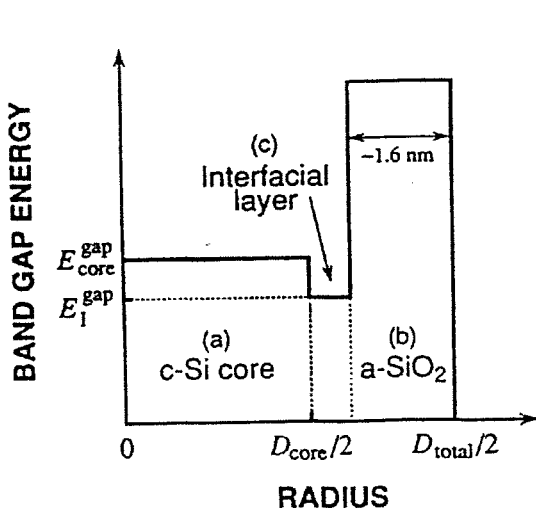


Abbildung 2.6: Banddiagramm eines oxidierten Si-Nanokristalls mit kristallinem Kern, einer Zwischenschicht SiO_x und SiO_2 Hülle. (entnommen aus [Kane93])

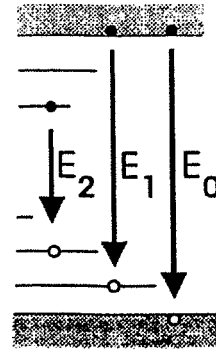


Abbildung 2.7: Banddiagramm eines Nanokristalls mit Oberflächendefekten. Prozeß 0 ist der Band-zu-Band Übergang im Nanokristall, bei Prozeß 1 ist ein Ladungsträger des Exzitons in einem Oberflächenzustand lokalisiert, und im Prozeß 2 sind beide Ladungsträger in Oberflächenzuständen gebunden. (entnommen aus [Koch93])

In dem von KANEMITSU *et al.* [Kane93] vorgeschlagenem Modell besteht der Nanokristall aus einem kristallinen Kern und einer SiO_x -Zwischenschicht, die vom Matrixmaterial umgeben ist (siehe Abb. 2.6). Dabei wird angenommen, daß für bestimmte Si:O-Verhältnisse direkte Bandübergänge existieren, deren Bandlücke kleiner als die des kristallinen Kerns ist. In [Kane93] und [Lan97] wird der Bandlücke der SiO_x -Zwischenschicht eine Energie von 1.65 bis 1.7 eV zugeordnet, die bei Clusterabmessungen unterhalb 4 bis 7 nm kleiner als die Bandlücke des kristallinen Kerns sein sollte. Die beobachtete Temperaturabhängigkeit der PL-Intensität, die mit wachsender Meßtemperatur ansteigt und oberhalb von 200 K in Sättigung geht, wird mit einer thermisch aktivierten Diffusion des Exzitons zur SiO_x -Zwischenschicht erklärt. Dieses Modell wurde in [Shi98] erweitert, um die Verschiebung der Emissionswellenlänge in Si-implantiertem SiO_2 bei hohen Dosen zu erklären. Bei Si-Überschußkonzentrationen von 10 % und mehr liegen die Nanocluster derart eng zusammen, daß zwei Cluster nur noch durch eine relativ dünne SiO_2 -Wand getrennt sind. Die dadurch begünstigte Wechselwirkung der Cluster untereinander senkt die Energie der Bandlücke der SiO_x -Zwischenschicht ab.

Im Ergebnis von Raman- und Absorptionsmessungen im IR an porösem und nanokristallinem Si stellten KOCH *et al.* fest, daß die Oberfläche der Nanocluster keineswegs perfekt war, sondern Defekte in relativ hoher Konzentration enthielt [Koch93]. Diese Defekte führen dazu, daß sich sogenannte Oberflächenzustände in Form von einzelnen Niveaus in der Bandlücke des Nanoclusters ausbilden (siehe Abb. 2.7), die einen oder beide Partner eines Exzitons einfangen können. Die beobachteten PL-Banden mit relativ festen Emissionswellenlängen wären dann der strahlenden Rekombination an diesen Oberflächenzuständen zuzuordnen.

Weitere Variationen dieses Modells beinhalten das Tunneln von Exzitonen zu nahe gelegenen Lumineszenzzentren [Qin97] und die Übertragung dieses Modells auf Ge-Nanocluster [Ye98].

2.4.3 Sauerstoffmangeldefekte

Die vielfältigen spektroskopischen Untersuchungen, die bisher an Si- und Ge-reichen Oxiden durchgeführt wurden, zeichnen ein relativ klares Bild über das Energieniveauschema der ODC. Dies kommt auch deutlich in den geringen Unterschieden der in Tabelle 2.2 und 2.3 aufgelisteten Zahlenwerte zum Ausdruck. Spektroskopische Untersuchungen lassen aber leider keine oder nur sehr indirekte Schlüsse auf die zugrundeliegende Mikrostruktur zu. Die beiden hauptsächlich in der Literatur diskutierten Zentren im Si-reichen SiO_2 sind die NOV und das zweifach koordinierte Si-Atom (Si_2^0) sowie die entsprechenden Analoga für Ge- bzw. Sn-reiches SiO_2 .

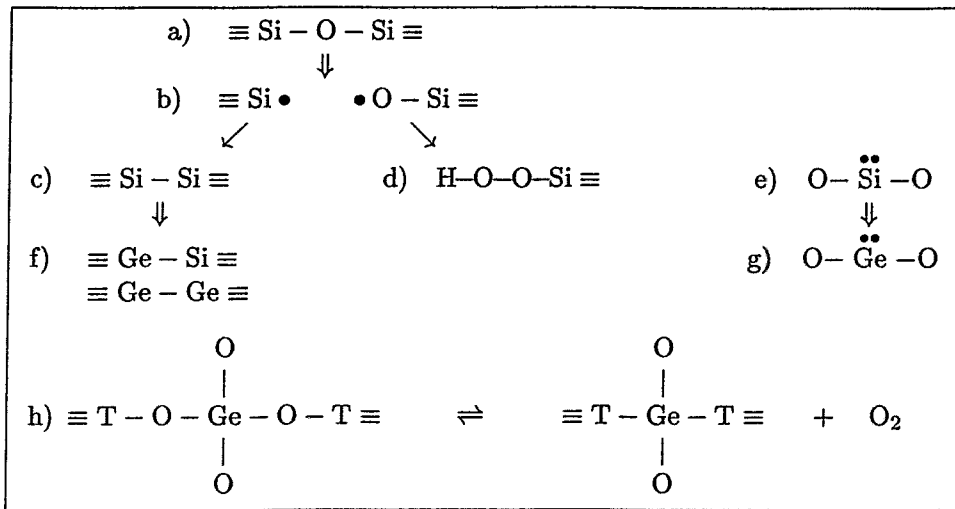


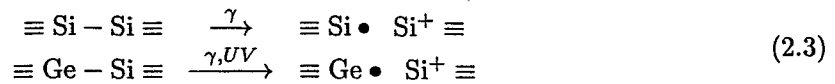
Abbildung 2.8: Mögliche strukturelle Defekte im SiO_2 : a) ungestörtes SiO_2 , b) E' -Zentrum (links) und NBOH-Zentrum (rechts), c) NOV, d) Peroxybindung, e) Si_2^0 -Zentrum, f) Ge-NOV, g) Ge_2^0 -Zentrum, h) von [Tsai94] propagierte Reaktion zur Entstehung einer Divakanz (rechte Seite) mit T wahlweise als Si oder Ge.

Abb. 2.8a zeigt die ungestörte Bindung im SiO_2 -Netzwerk. Dabei symbolisieren die drei waagerechten Linien die Bindungen der Si-Atome an die restlichen drei Sauerstoffatome. Wird bei einer Implantation die Bindung zwischen einem Si- und einem Sauerstoffatom aufgebrochen, entstehen das sogenannte E' -Zentrum (Abb. 2.8b links) und das nichtbrückende Sauerstoffzentrum (NBOH-Zentrum, siehe Abb. 2.8b rechts), die beide durch den ungepaarten Spin des einzelnen Elektrons (schwarzer Punkt) mittels Elektronen-Spin-Resonanz (ESR) sichtbar sind. Das E' -Zentrum, von dem es eine Vielzahl, von der unmittelbaren chemischen Umgebung abhängige Varianten gibt [War92], wird als Vorläufer der NOV angesehen (Abb. 2.8c). Dies ist vor allem dann der Fall, wenn ein brückendes Sauerstoffatom während der Implantation vollständig aus seiner Position herausgeschlagen wird. Aus dem NBOH-Zentrum kann durch Anlagerung einer OH-Gruppe eine Peroxybindung entstehen (Abb. 2.8d), der in [Kana97] eine Lumineszenzbande bei 3.5 eV (355 nm) zugeordnet wird. Werden gleichzeitig zwei Sauerstoffbrücken eines Si-Atoms zerstört, kann es zur Herausbildung des sogenannten zweifach koordinierten Si-Atoms (Si_2^0 -Zentrum, Abb. 2.8e) kommen.

Im Falle eines Ge-reichen Oxides können die Si-Atome durch Ge-Atome substituiert werden, wobei im Falle der NOV zwei mögliche neue Zentren entstehen (Abb. 2.8f), während die Substitution beim Si_2^0 -Zentrum nur zur Entstehung eines neuen Zentrums, dem zweifach koordinierten Ge-Atom (Ge_2^0 -Zentrum, Abb. 2.8g), führt. Schließlich gibt noch die Möglichkeit, daß eine soge-

nannte Divakanz (Abb. 2.8h) gebildet wird, wobei das Symbol T wahlweise durch Si oder Ge zu ersetzen ist. Für Sn-reiche Oxide ergeben sich die gleichen Defektstrukturen wie für Ge-reiche Oxide, wenn die entsprechenden Ge-Atome durch Sn-Atome ersetzt werden.

Wie bereits erwähnt, ist die Zuordnung der PL zu den einzelnen Zentren sehr schwierig. Meist sind beide Zentren, d.h. NOV oder Si_2^0 , gleichzeitig in den untersuchten Oxiden vorhanden, und es gibt experimentelle Belege für die Beteiligung sowohl der NOV als auch des Si_2^0 -Zentrums an der blau-violetten PL. Das von TOHMOM *et al.* [Toh89] präferierte Modell der NOV für Si-reiches SiO_2 wird durch kombinierte ESR- und PL-Messungen gestützt, in denen die PL-Intensität in dem Maße ansteigt, wie die Konzentration an E'-Zentren als Vorläufer der NOV zurückgeht [Liao96a]. Auch der umgekehrte Prozeß, das Absinken der PL nach intensiver UV-Bestrahlung und das gleichzeitige Anwachsen des entsprechenden ESR-Signals, stützen diese These [Gri91]. MARSHALL *et al.* konnten die Bildung von NOV nach Neutronenbeschuß und die anschließenden Reaktionen



beobachten [Mars97]. CHIODINI *et al.* wiesen erstmals die dem E'-Zentrum verwandte Struktur $\equiv \text{Sn} \bullet$ in Sn-dotierten Gläsern nach [Chio98]. TSAI *et al.* schlossen aufgrund der wurzelförmigen Abhängigkeit der PL-Intensität von der Ge-Konzentration in dotierten Gläsern Zentren mit nur einem Ge-Atom als Ursache der Lumineszenz aus [Tsai94], und schlugen dagegen eine Divakanz vor (Abb. 2.8h). Auf der anderen Seite favorisieren PL-Messungen mit polarisiertem Licht [Sku92] und XPS-Messungen das Si_2^0 - bzw. Ge_2^0 -Zentrum. Beispielsweise konnten WU *et al.* [Wu97] zwar das Vorhandensein von Si-Ge Bindungen mittels Raman-Untersuchungen nachweisen, fanden aber eine deutliche Korrelation des Ge^{2+} -Signals im XPS mit der PL-Intensität, wie es beim Ge_2^0 -Zentrum erwartet wird.

Auch die theoretische Berechnung der Übergangsenergien von ODC bringt keine weiteren Informationen darüber, welches Zentrum welcher PL-Bande zuzuordnen sei. Abb. 2.9 zeigt die energetische Lage der Absorptionsbanden typischer Defekte im SiO_2 in der Bandlücke des Oxides nach Berechnungen von PACCHIONI *et al.* [Pac98a]. Leider ist die Situation, daß bestimmte Absorptionsbanden wie die Anregung bei 5 eV in Si-implantiertem SiO_2 gar nicht oder nur mit großer Unsicherheit reproduziert wird, noch sehr häufig. STEFANOV *et al.* berechneten für den $S_0 \rightarrow S_1$ und den $S_0 \rightarrow S_2$ Übergang des Si_2^0 -Zentrums eine Energie von 5.2 bzw. 7.6 eV [Stef97a]. Demgegenüber erhielten sie für das $\equiv \text{Si}-\text{Si} \equiv$, $\equiv \text{Si}-\text{Ge} \equiv$ und das $\equiv \text{Ge}-\text{Ge} \equiv$ -Zentrum Anregungsenergien um 7 eV [Stef97b]. Die Berechnungen in [Pac98b] sagen für den $T_1 \rightarrow S_0$ -Übergang des Si_2^0 -, Ge_2^0 - und Sn_2^0 -Zentrums eine Energie von 2.6...2.9 eV voraus. In [Sil85] wird argumentiert, daß die Bildungsenergie eines Si_2^0 -Zentrums aus dem SiO_2 -Netzwerk geringer sei als die der NOV. Dieses in einer sehr groben Abschätzung gewonnene Ergebnis dürfte aber bei der massiven Energiedeposition während einer Implantation keine Rolle spielen. DIANOV *et al.* stellten fest, daß für die NOV zwei energetische Minima existieren, die einem Abstand der beiden Si-Atome von 0.27 bzw. 0.425 nm entsprechen [Dia92]. Diese beiden Konfigurationen werden oft als „relaxierte“ bzw. „unrelaxierte“ NOV bezeichnet. DIANOV *et al.* berechneten eine Anregungsenergie von 7.8 eV für die relaxierte und 5.3 eV für die unrelaxierte NOV. SULIMOV *et al.* stellten bei der Berechnung von Energieniveaus der NOV fest, daß diese stark von der Struktur des SiO_2 -Netzwerkes abhängig sind [Sul95]. Bei der Untersuchung von 16 verschiedenen SiO_2 -Typen lag die berechnete Anregungsenergie zwischen 4.41 und 5.53 eV, die Energie der UV-Bande zwischen 4.03 und 4.98 eV sowie die Energie der „blauen“ Bande gar zwischen 0.85 und 2.84 eV.

Zusammenfassend ist festzustellen, daß die von den ODC verursachte Lumineszenz noch

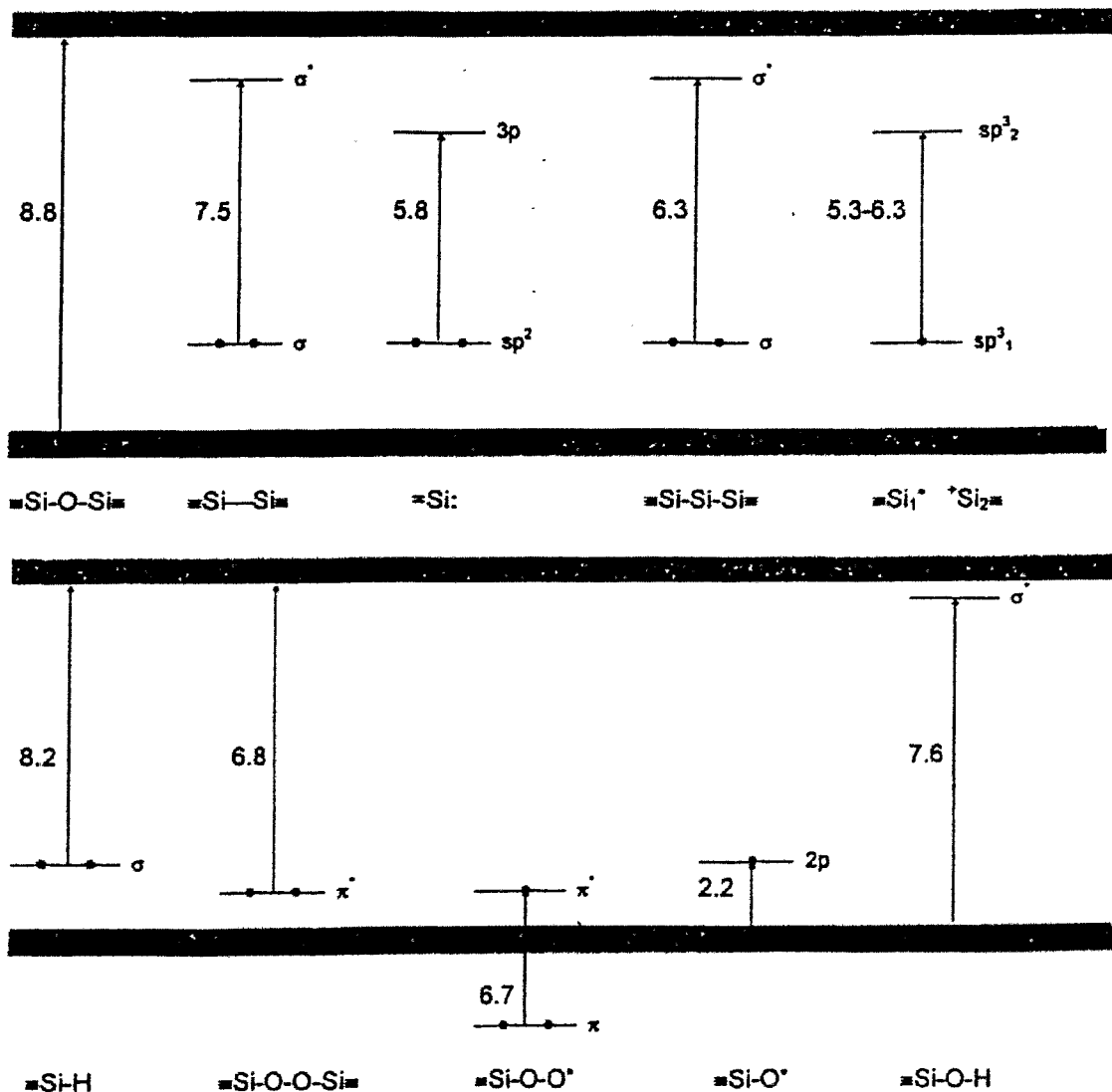


Abbildung 2.9: Berechnete Bandlücke von SiO₂ und energetische Lage der Absorptionsbanden typischer Defekte im SiO₂ in eV (entnommen aus [Pac98a])

keiner konkreten Mikrostruktur zugeordnet werden konnte. Die Lumineszenz ist durch eine Absorptionsbande um 5 eV (248 nm), eine UV-Bande um 4.3 eV (288 nm) und eine PL-Bande im sichtbaren Spektralbereich bei 2.7 eV (460 nm) bei Si-reichen bzw. 3.1 eV (400 nm) bei Ge-reichen Oxiden gekennzeichnet. Diesen Banden werden in der Regel die Übergänge $S_0 \rightarrow S_1$, $S_1 \rightarrow S_0$ bzw. $T_1 \rightarrow S_0$ zugeordnet (siehe auch folgendes Kapitel). Für den inneren Übergang $S_1 \Rightarrow T_1$ wurde aus temperaturabhängigen PL-Messungen eine thermische Aktivierungsenergie von rund 70 meV bestimmt [Leo97, Nis97], wodurch die relativ starke Lumineszenz bei RT plausibel erscheint.

2.5 Spektroskopie des Triplett-Zustandes

Dieses Kapitel beinhaltet eine zusammenfassende Darstellung über das Energieniveauschema einer molekularen Struktur. Zweck dieser kurzen Abhandlung ist, mittels einfacher, quantenmechanischer Ansätze die zu erwartenden spektroskopischen Konsequenzen zu beschreiben, um sie in Abschnitt 5.6 mit den experimentellen Ergebnissen dieser Arbeit zu vergleichen. Dabei wurde versucht, weniger Wert auf eine detaillierte und umfassende quantenmechanische Beschreibung als auf eine möglichst verständliche Darstellungsweise zu legen. Für weitergehende Details sei auf die Fachliteratur, insbesondere [Mack59, Gly69, Schu76], verwiesen.

2.5.1 Modell eines Zweielektronensystems

Die folgenden Überlegungen gelten prinzipiell für jedes lokalisierte Mehrelektronensystem mit einer geradzahigen Anzahl von Elektronen, das sich im Grundzustand befindet. Meist reicht es aber aus, nur die beiden Elektronen des obersten besetzten Zustandes zu betrachten und die Elektronen tieferer Energiezustände als „Rumpf“ zu vernachlässigen. Die folgenden Überlegungen beziehen sich daher auf ein Zweielektronensystem. Im weiteren ist zwischen dem Energiezustand des Systems (S_0, S_1, T_1) und dem Energieniveau eines Elektrons zu unterscheiden.

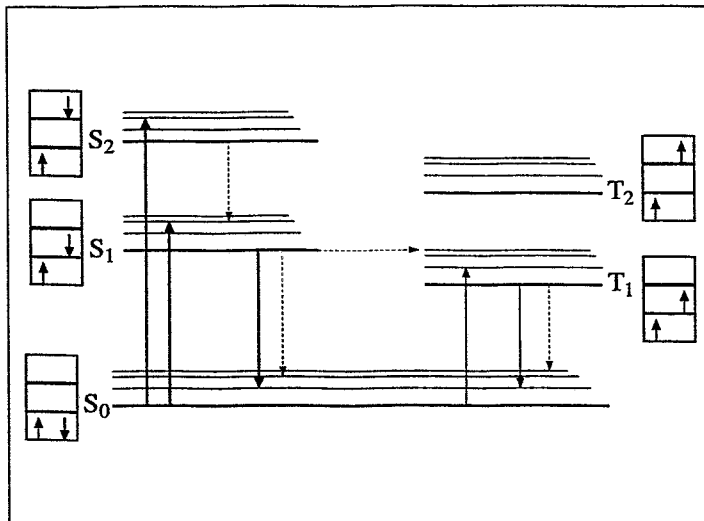


Abbildung 2.10: Schematisches Energieniveauschema eines Zweielektronensystems

Abb. 2.10 zeigt das schematische Energieniveauschema eines Zweielektronensystems. Die neben den Energiezuständen des Systems abgebildeten Kästchen symbolisieren die elektronischen Energieniveaus; der Spinzustand der Elektronen wird durch einen nach oben oder unten gerichteten Pfeil dargestellt. Durchgezogene Linien stellen strahlende, gestrichelte Linien nichtstrahlende Übergänge dar.

Im Grundzustand S_0 des Systems befinden sich beide Elektronen auf dem untersten elektronischen Energieniveau mit antiparalleler Spineinstellung. Im ersten angeregten Zustand des Systems befindet sich ein Elektron weiterhin auf dem untersten elektronischen Niveau, während das zweite in das nächsthöhere Niveau gehoben wird. Da sich beide Elektronen energetisch unterscheiden, sind jetzt zwei Spinorientierungen möglich: bei antiparalleler Spineinstellung befindet sich das System im ersten angeregten Singulettzustand S_1 , bei paralleler Spineinstellung im ersten angeregten Triplettzustand T_1 .

Jedem Energiezustand des Systems (S_0, S_1, T_1) ist eine Schar weiterer Energiezustände gleicher elektronischer Besetzung überlagert, die aus Molekülschwingungen, leicht veränderten Bindungslängen, Bindungswinkeln etc. resultieren. Eine adäquate Beschreibung wäre das Auftragen

der Energie über einen Konfigurationsparameter, wobei das Minimum den in Abb. 2.10 dick gezeichneten Energieniveaus entspräche. Befindet sich das System auf einem solchen Unterniveau, relaxiert es in relativ kurzen Zeiten kleiner 10^{-12} s in das energetisch tiefste Unterniveau.

Bei photonischer Anregung geht das System von S_0 nach S_1 über, von wo es im wesentlichen drei Prozesse der Abregung gibt. Das System kann sowohl nichtstrahlend als auch über die Emission eines Photons in den Grundzustand S_0 zurückkehren. Die dritte und interessanteste Möglichkeit ist der nichtstrahlende Übergang von S_1 nach T_1 (Intersystem Crossing), von wo das System wiederum nichtstrahlend oder unter Emission eines Photons in den Grundzustand zurückkehren kann. Bei Anregung des Systems in den Zustand S_1 sollte man also zwei Emissionsbanden, nämlich $S_1 \rightarrow S_0$ und $T_1 \rightarrow S_0$, beobachten.

Übergänge zwischen Zuständen gleicher Multiplizität sind im allgemeinen optisch erlaubt, die zwischen verschiedenen verboten. Daher ist die direkte optische Anregung von T_1 (Übergang $S_0 \rightarrow T_1$) aufgrund der geringen Übergangswahrscheinlichkeit nur sehr schwach ausgeprägt. Dies gilt jedoch nicht für nichtoptische Anregungen, wie z.B. Elektronenstoß. Aus gleichem Grunde ist der nichtstrahlende Übergang von T_1 nach S_0 wahrscheinlicher als der strahlende. Die Emissionsbande $T_1 \rightarrow S_0$ kann jedoch in ihrer Intensität die selbe Größenordnung wie der Übergang $S_1 \rightarrow S_0$ erreichen, wenn T_1 mittels Intersystem Crossing sehr stark bevölkert wird.

2.5.2 Die Coulomb- und Spinaufspaltung des ersten angeregten Zustandes

Der Hamiltonoperator eines Zweielektronensystems im Zentralfeld kann in sehr grober Näherung als

$$H = H_1 + H_2 + H_{Col} \quad \text{und} \quad H_{Col} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Ze^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (2.4)$$

mit H_1 und H_2 als Hamiltonoperatoren der einzelnen Elektronen beschrieben werden. Die Gesamtwellenfunktion des Systems Ψ ergibt sich aus den einzelnen Wellenfunktionen ϕ_1 und ϕ_2 der Elektronen zu

$$\Psi_{\pm} = \sqrt{\frac{1}{2}} [\phi_1(r_1)\phi_2(r_1) \pm \phi_1(r_2)\phi_2(r_2)] = a \pm b \quad (2.5)$$

Damit kann die Energie der beiden Zustände Ψ_+ und Ψ_- , so sie existieren, aus der Schrödingergleichung berechnet werden:

$$\langle \Psi | H_1 + H_2 + H_{Col} | \Psi \rangle = E_0 + \langle a \pm b | H_{Col} | a \pm b \rangle = E_0 + \Delta E \quad (2.6)$$

$$\Delta E = \langle a | H_{Col} | a \rangle + \langle b | H_{Col} | b \rangle \pm \langle a | H_{Col} | b \rangle \pm \langle b | H_{Col} | a \rangle \quad (2.7)$$

Die ersten beiden Terme in (2.7) werden als Coulomb-Energie bezeichnet und führen zu einer generellen Erhöhung der Energieniveaus. Die beiden letzten Terme heißen Austauschenergie und führen zur Separation der Energieniveaus mit symmetrischer (Ψ_+) und antisymmetrischer (Ψ_-) Wellenfunktion. Im Falle abstoßender Wechselwirkung (positives Vorzeichen von H_{Col}) liegt das Energieniveau der symmetrischen Wellenfunktion um den doppelten Betrag der Austauschenergie höher als das entsprechende Energieniveau der antisymmetrischen Wellenfunktion. Die Aufspaltung des ersten angeregten Energieniveaus in zwei Niveaus ist also eine Folge der Coulomb-Wechselwirkung der Elektronen untereinander und ist noch nicht an die Existenz eines Spins gebunden. Die Namensgebung „Singlett“ und „Triplett“ leitet sich jedoch aus der Spinaufspaltung der zu Ψ_+ bzw. Ψ_- gehörenden Niveaus ab.

Mit der Einführung des Spins ist die Gesamtwellenfunktion Φ jetzt sowohl von Spin- als auch Ortskoordinaten abhängig. Wenn Spin- und Ortskoordinaten entkoppelt sind, läßt sich die Gesamtwellenfunktion Φ als Produkt $\Psi\chi$ der bereits eingeführten Ortswellenfunktion Ψ und der

Spinwellenfunktion χ darstellen. Bezeichnet man die beiden möglichen Spinwellenfunktionen der Elektronen mit α bzw. β und die beiden möglichen Werte der Spinkoordinate mit 1 und 2, so ergeben sich vier von null verschiedene Spinwellenfunktionen:

$$\begin{aligned}
 \chi_+^1 &= [\alpha(1)\alpha(2)] && \text{symmetrisch} \\
 \chi_+^2 &= \sqrt{\frac{1}{2}} [\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1)] && \text{symmetrisch} \\
 \chi_+^3 &= [\beta(1)\beta(2)] && \text{symmetrisch} \\
 \chi_- &= \sqrt{\frac{1}{2}} [\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)] && \text{antisymmetrisch}
 \end{aligned} \tag{2.8}$$

Bisher wurde nicht beachtet, daß Elektronen als Fermionen dem Pauliprinzip genügen müssen. Im Bild der Wellenfunktion bedeutet dies, daß die Gesamtwellenfunktion Φ antisymmetrisch sein muß. Für den elektronischen Grundzustand Ψ_0 gilt $\phi_1 = \phi_2$, und somit liefert nur die symmetrische Ortswellenfunktion einen von null verschiedenen Wert. Damit Φ antisymmetrisch wird, muß χ antisymmetrisch sein, und es ergibt sich für S_0 nur die Möglichkeit:

$$S_0 = \Psi_+^0 \cdot \chi_- \tag{2.9}$$

Analog ergeben sich für den ersten angeregten Zustand die Möglichkeiten:

$$S_1 = \Psi_+^1 \cdot \chi_- \quad \text{und} \quad T_1 = \Psi_-^1 \cdot \chi_+^{1,2,3} \tag{2.10}$$

Somit bestehen Singlettzustände aus nur einem Niveau mit symmetrischer Ortswellenfunktion und antisymmetrischer Spinwellenfunktion, Triplettzustände aus drei Niveaus mit antisymmetrischer Ortswellenfunktion und symmetrischer Spinwellenfunktion. Die Spinaufspaltung des Triplettzustandes ist im allgemeinen wesentlich geringer als die Coulombaufspaltung zwischen Singlett- und Triplettzustand und dürfte nur wenige meV betragen.

2.5.3 Spin-Bahn-Kopplung und Heavy-Atom-Effekt

Das Elektron besitzt aufgrund des Spins ein magnetisches Dipolmoment. Bewegt sich ein magnetischer Dipol im elektrischen Feld, erfährt er eine der Geschwindigkeit proportionale Kraftwirkung. Die Geschwindigkeit des Elektrons kann auch adäquat durch seinen Bahndrehimpuls ausgedrückt werden. Damit gibt es eine Wechselwirkung des Spins eines Elektrons mit dem eigenen Bahndrehimpuls, die sogenannte Spin-Bahn-Kopplung (SBK). Die Energie eines bewegten Dipols mit dem magnetischen Moment $\vec{\mu}$ im elektrischen Feld ist

$$E = -\vec{\mu} \cdot (\vec{E} \times \vec{v}) \quad \text{mit} \quad \vec{\mu} = \frac{|e|\vec{s}}{m_e c^2} \tag{2.11}$$

Ersetzt man die klassischen physikalischen Größen durch die entsprechenden quantenmechanischen Operatoren, erhält man als zusätzlichen Term im Hamiltonoperator

$$H_{SBK} = \sum_i \zeta(r_i) \vec{l}_i \cdot \vec{s}_i \tag{2.12}$$

mit \vec{l}_i bzw. \vec{s}_i als Bahndrehimpuls und Spin des Elektrons i . Die Funktion $\zeta(r_i)$ enthält neben den Ortskoordinaten r_i auch den Feldgradienten $\partial V / \partial r_i$. Bei dieser Beschreibung wird vorausgesetzt, daß die Wechselwirkung des Spins eines Elektrons mit Spin oder Bahndrehimpuls anderer Elektronen vernachlässigt werden kann. Bereits für zwei Elektronen wird die Berechnung von $\zeta(r_i)$ sehr kompliziert, so daß $\zeta(r_i)$ in der Regel numerisch berechnet wird. Im einfachen Fall

wasserstoffähnlicher Atome kann man $\zeta(r_i)$ und dessen Erwartungswert ζ_{nl} analytisch angeben, und speziell für letzteren gilt:

$$\zeta_{nl} = \frac{m_e c^2 \alpha_0^4 Z^4}{4n^3(l+1)(l+\frac{1}{2})l} \cdot \left\{ \begin{array}{ll} l & \vec{l} \text{ und } \vec{s} \text{ parallel} \\ -(l+1) & \vec{l} \text{ und } \vec{s} \text{ antiparallel} \end{array} \right\} \quad (2.13)$$

Da meßbare physikalische Größen über Erwartungswerte ausgedrückt werden, ist ζ_{nl} ein Maß für die Stärke der SBK. Im Fall wasserstoffähnlicher Atome steigt die SBK mit Z^4 und n^{-3} . Geht man in der Betrachtung zu Molekülen über, kann die Abhängigkeit der SBK von Z nicht mehr einfach durch Z^4 ausgedrückt werden. Es ist jedoch zu erwarten, daß der prinzipielle Trend, nämlich das starke Ansteigen der SBK mit Z , erhalten bleibt. Weiterhin ist Z nicht mehr einfach die Ordnungszahl des entsprechenden Atoms, sondern die effektive Kernladung, die das Elektron spürt. Experimentelle Ergebnisse zeigen, daß die SBK mit steigender Ordnungszahl ansteigt, jedoch auf Grund von Abschirmeffekten schwächer als mit Z^4 . Dieser Effekt wird Heavy-Atom-Effekt genannt.

Aufgrund der SBK kann die Gesamtwellenfunktion nicht mehr nach Spin- und Bahnkoordinaten separiert werden. Bei kleiner SBK wird jedoch die ursprüngliche Wellenfunktion nur wenig verändert. In der Störungstheorie erster Ordnung wird diese Änderung als Zumischung anderer Zustände ausgedrückt. T_1 ist jetzt kein „reiner“ Triplettzustand mehr, sondern enthält einen bestimmten Anteil an Singlett-Wellenfunktionen. Bezeichnet (S_0, S_1, T_1) das System ohne und (S'_0, S'_1, T'_1) das System mit SBK, so ergibt sich für die veränderten Wellenfunktionen:

$$S'_0 = S_0 + \sum_{r=-1}^1 \frac{\langle T_1^r | H_{SBK} | S_0 \rangle}{E(S_0) - E(T_1)} \cdot T_1^r \quad \text{und} \quad T_1^r = T_1^r + \sum_{k=0,1} \frac{\langle S_k | H_{SBK} | T_1^r \rangle}{E(T_1) - E(S_k)} \cdot S_k \quad (2.14)$$

Hierbei wurde der Einfluß von höher angeregten Zuständen wie S_2 oder T_2 vernachlässigt. Weiterhin kann man annehmen, daß der Energieabstand $E(T_1) - E(S_0)$ groß ist gegen $E(T_1) - E(S_1)$, so daß alle Terme mit $E(T_1) - E(S_0)$ im Nenner vernachlässigt werden können. Damit ergibt sich:

$$S'_0 \approx S_0 \quad \text{und} \quad T_1^r \approx T_1^r + \frac{\langle S_1 | H_{SBK} | T_1^r \rangle}{E(T_1) - E(S_1)} \cdot S_1 \quad (2.15)$$

Für die strahlende Übergangsrates k_T von T_1 nach S_0 gilt:

$$k_T \sim \nu_T^3 \sum_r |\langle S'_0 | \vec{r} | T_1^r \rangle|^2 \quad (2.16)$$

und mit dem Einsetzen der Gleichungen aus (2.15):

$$k_T \sim \nu_T^3 \sum_r \left| \frac{\langle S_1 | H_{SBK} | T_1^r \rangle}{E(S_1) - E(T_1)} \right|^2 |\langle S_1 | \vec{r} | S_0 \rangle|^2 \quad (2.17)$$

$$k_T \sim k_S \left(\frac{\nu_T}{\nu_S} \right)^3 \sum_r \left| \frac{\langle S_1 | H_{SBK} | T_1^r \rangle}{E(S_1) - E(T_1)} \right|^2 \quad (2.18)$$

Dabei bezeichnet k_S die strahlende Übergangsrates von $S_1 \rightarrow S_0$ und ν_S bzw. ν_T die Frequenz der strahlenden Übergänge $S_1 \rightarrow S_0$ bzw. $T_1 \rightarrow S_0$. Nach den obigen Überlegungen zur Z -Abhängigkeit der SBK kann man annehmen, daß das Matrixelement in der letzten Gleichung eine tendenziell ähnliche Z -Abhängigkeit besitzt wie im Falle wasserstoffähnlicher Atome. Die Lebensdauer oder Abklingkonstante τ eines Überganges mit der Rate k bestimmt sich zu $\tau = k^{-1}$ und sollte mit steigender SBK sinken.

2.5.4 Spektroskopisches Erscheinungsbild

Zum besseren Verständnis der spektroskopischen Charakteristika eines derartigen Elektronensystems soll noch kurz auf die Bilanz der Übergangsraten eingegangen werden.

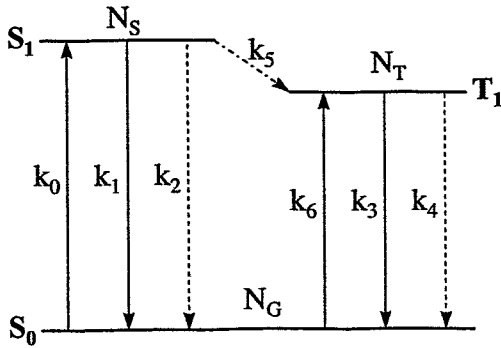


Abbildung 2.11: Übergänge im Zweielektronensystem

k_0	Pumprate
k_1, k_3	strahlende Übergänge $S_1 \rightarrow S_0$ und $T_1 \rightarrow S_0$
k_2, k_4	nichtstrahlende Übergänge $S_1 \rightarrow S_0$ und $T_1 \rightarrow S_0$
k_5	Intersystem Crossing
k_6	optische Anregung über $S_0 \rightarrow T_1$
N_G, N_S, N_T	Systeme im Zustand S_0, S_1 und T_1
N_0	Gesamtzahl der Systeme

Abb. 2.11 zeigt die Energieniveaus S_0, S_1 und T_1 sowie die entsprechenden Übergänge. Befindet sich das System bei kontinuierlicher Anregung im Gleichgewicht, müssen die partiellen Ableitungen der Niveaubesetzungen nach der Zeit verschwinden, und man erhält das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \dot{N}_S &= k_0 N_G - (k_1 + k_2 + k_5) N_S = 0 \\ \dot{N}_T &= k_5 N_S - (k_3 + k_4) N_T = 0 \\ N_S + N_T + N_G &= N_0, \end{aligned} \tag{2.19}$$

das die Lösungen

$$\begin{aligned} N_S &= \frac{N_0 k_0 (k_3 + k_4)}{k_0 (k_3 + k_4 + k_5) + (k_3 + k_4) (k_1 + k_2 + k_5)} \\ N_T &= \frac{N_0 k_0 k_5}{k_0 (k_3 + k_4 + k_5) + (k_3 + k_4) (k_1 + k_2 + k_5)} \end{aligned} \tag{2.20}$$

liefert. Beobachtet werden die Raten $k_1 N_S$ und $k_3 N_T$. Um die Abhängigkeit der Ergebnisse von k_0 und N_0 zu eliminieren, kann das relative Intensitätsverhältnis der beiden Emissionsbanden gebildet werden:

$$\nu = \frac{k_3 N_T}{k_1 N_S} = \frac{k_3 k_5}{k_1 (k_3 + k_4)}. \tag{2.21}$$

Allgemein wird folgendes Erscheinungsbild erwartet:

1. Es treten zwei Emissionsbanden auf, die im weiteren als UV-Bande und B-Bande bezeichnet und den strahlenden Übergängen $S_1 \rightarrow S_0$ bzw. $T_1 \rightarrow S_0$ zugeordnet werden.
2. Die UV-Bande besitzt eine vergleichsweise schnelle, die B-Bande eine relativ langsame Abklingkonstante.
3. Das relative Intensitätsverhältnis ν aus (2.21) ist klein.
4. Im Anregungsspektrum treten zwei Absorptionsbanden auf, die den Übergängen $S_0 \rightarrow S_1$ bzw. $S_0 \rightarrow T_1$ entsprechen. Der Übergang $S_0 \rightarrow T_1$ sollte nur sehr schwach ausgeprägt sein.

Eine wachsende SBK sollte die Übergangsrates k_1 nur geringfügig beeinflussen, während der Heavy-Atom-Effekt für eine Erhöhung von k_3 sorgt. Mit steigender SBK sind demnach folgende Effekte zu erwarten:

1. Die Energie des Zustandes T_1 und damit des Überganges $T_1 \rightarrow S_0$ erhöht sich.
2. Gemäß Gleichung (2.18) sinkt die Abklingkonstante $\tau = k_T^{-1}$.
3. Das relative Intensitätsverhältnis ν steigt.

Während die Energieerhöhung von T_1 in der Regel nur wenige Prozent beträgt und nicht unbedingt signifikant sein muß, beträgt die Änderung von τ und ν ein bis zwei Größenordnungen und sollte leicht verifizierbar sein.

Kapitel 3

Experimentelles

Der Sinn dieses Kapitels ist es, die experimentellen Rahmenbedingungen, angefangen von der Präparation der untersuchten Proben bis hin zu den einzelnen experimentellen Aufbauten, an geeigneter Stelle und in kurzer, übersichtlicher Form zusammenzustellen. Die Darstellung beschränkt sich dabei im wesentlichen auf technische Daten.

3.1 Probenpräparation

3.1.1 Genereller Aufbau der MOS-Strukturen

Zur Herstellung der Proben wurden n-dotierte Si-Wafer mit einer (100)-orientierten Oberfläche verwendet. Mit Hilfe einer feuchten Oxidation bei 1000°C wurde eine 500 nm dicke SiO_2 -Schicht thermisch aufgewachsen. In einigen Fällen wurden auch Schichtdicken von 100 und 50 nm benutzt, wobei die Oxidation bei 1000°C in trockener Sauerstoffatmosphäre erfolgte. Danach wurden die Wafer implantiert und mechanisch in Proben mit einer ungefähren Größe von $6 \times 12 \text{ mm}^2$ zerteilt, die anschließend bei verschiedenen Temperaturen zwischen 400 und 1200°C getempert wurden. Vor der Oxidation, der Implantation und der Ausheilung erfolgte eine Reinigung in $\text{H}_2\text{O}_2/\text{H}_2\text{SO}_4$, bei der die Proben einer Temperaturbelastung von 130°C für 15 min ausgesetzt waren. Der schematische Aufbau der Proben nach den verschiedenen Präparationsschritten ist

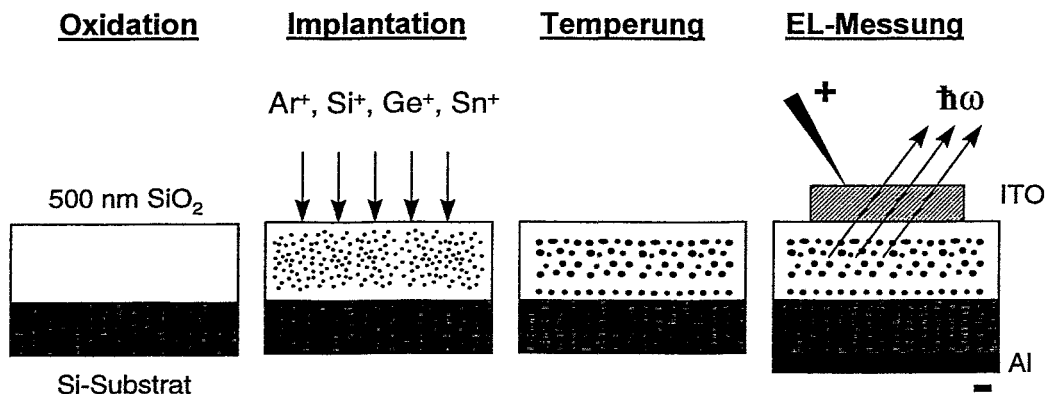


Abbildung 3.1: Schematischer Aufbau der Proben nach der Oxidation, der Implantation, der Ausheilung und der Präparation für die Messung der EL.

in Abb. 3.1 wiedergegeben.

Für die EL-Messung wurden die Proben mit einer transparenten Deckelektrode aus Indium-Zinn-Oxid (ITO) und einer rückseitigen Elektrode aus Al versehen. Die beiden gesputterten Schichten hatten eine Dicke von 300 nm. Die Deckelektrode wurde in Form einer Matrix von kreisförmigen Kontakten mit einem Durchmesser von 1 mm und einem Abstand von 2 mm lithographisch strukturiert. Die Metallisierung der Rückseite erfolgte ganzflächig, wobei die natürliche Oxidschicht zuvor entfernt wurde. Anschließend erfolgte eine Temperung bei 400°C für 30 min, um das ohmsche Verhalten der Kontakte zu verbessern. Für die Messungen der elektrischen Eigenschaften wurde die Deckelektrode aus Al gefertigt. Im Gegensatz zum ITO hatten diese Kontakte einen Durchmesser von 0.5 mm.

Die im Kapitel 5.5 zum Vergleich herangezogenen Si- oder Ge-reichen SiO₂-Schichten wurden durch reaktives Magnetron-Sputtern an einer Sputteranlage vom Typ NORDIKO 2000 hergestellt. Die Anlage arbeitete bei einer Frequenz von 13.6 MHz, einer Sputterleistung von 1.5 kW, einem Ar-Druck von $1.5 \cdot 10^{-1}$ Pa und einer Abscheidetemperatur von 20°C. Dem Ar-Gas wurde Sauerstoff beigemischt. Als Sputtertargets wurden ein 8" Si-Wafer oder ein Mosaiktarget aus SiO₂ und Ge benutzt. Es wird angenommen, daß die Zusammensetzung der gesputterten Schicht über die Tiefe einigermaßen homogen ist. Für weiterführende Details sei auf [Seif98] verwiesen.

3.1.2 Implantationsbedingungen

Die Implantation der Proben erfolgte für die Elemente Si, Ge und Ar an einem 500 kV-Implanter der Firma *High Voltage Engineering Europa B.V.* und für Sn an einem 3 MeV-Tandetron des gleichen Unternehmens im Forschungszentrum Rossendorf. Dabei wurden die Isotope ⁴⁰Ar, ²⁸Si, ⁷⁴Ge und ¹²⁰Sn benutzt. Während der Implantation wurde teilweise mit flüssigem N₂ gekühlt. Die Temperatur lag bei Strahlströmen bis zu $0.3 \mu\text{Acm}^{-2}$ zwischen -190 und -95°C für die gekühlten (LNT) bzw. unterhalb 40°C für die ungekühlten Targets (RT).

Die Proben wurden doppelt (DI) oder einfach (SI) implantiert. Im Falle der DI erfolgte die Implantation mit der höheren Energie zuerst. Bei der Implantation wurden folgende Energien verwendet:

	DI Ar	DI Si	DI Ge	DI Sn	SI Ge	
Dicke	500 nm				500 nm	100 nm
Energie	250 keV + 170 keV	200 keV + 100 keV	430 keV + 230 keV	700 keV + 350 keV	350 keV	75 keV

Tabelle 3.1: Bei der Implantation verwendete Energien.

Die Dosen und Energien der DI wurden so gewählt, daß das Profil der implantierten Ionen in einer Tiefe von 100 bis 400 nm unter der Oberfläche einem ungefähren Kastenprofil entspricht. Das Profil der SI ist näherungsweise gaußförmig und liegt im Zentrum der SiO₂-Schicht. Zur besseren Vorstellung werden die verschiedenen SiO₂-Schichten in dieser Arbeit nicht durch die verwendeten Dosen charakterisiert, sondern durch die resultierende Konzentration der implantierten Ionen im Maximum des Implantationsprofils. Die Konzentration bezieht sich dabei auf die atomare Dichte, so daß z.B. die intrinsische Si-Konzentration im unimplantierten thermischen SiO₂ 33.3 % beträgt. Die Tabelle 3.2 listet die Konzentration der Ionen im Peak des Implantationsprofils für Oxide mit DI auf. Um eine Konzentration von 3 % zu erreichen, waren Dosen von $3.0 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ (höhere Energie) und $1.8 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ (niedrigere Energie) notwendig. Die tatsächlich implantierte Dosis bei einer anderen Konzentration kann näherungsweise durch

	Konzentration (%)								
	0.03	0.09	0.3	0.67	1.25	2.0	3.0	4.5	6.3
DI Si									
DI Ge	0.023	0.085	0.3	0.67	1.25	2.0	3.0	4.5	6.3
DI Sn		0.12	0.3	0.67	1.2		3.0		
DI Ar							3.0		

Tabelle 3.2: Konzentration von Ionen im Peak des Implantationsprofils für Oxide mit DI.

einfache Skalierung ermittelt werden. Bei Ge-implantierten SiO_2 -Schichten mit SI wurde eine Dosis von $3.0 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ (500 nm) und $1.2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ (100 nm) benutzt, was in beiden Fällen zu einer Ge-Konzentration von 3 % führt.

3.1.3 Ausheilung

Die Ausheilung erfolgte in einem Quarzrohrföfen bei Temperaturen zwischen 400 und 1200°C unter N_2 -Atmosphäre. Das verwendete N_2 -Gas hatte eine Reinheit von 5.0, so daß sich die maximale Konzentration von H_2O auf 3 ppm, von O_2 auf 2 ppm, von H_2 auf 1.5 ppm und von Kohlenwasserstoffen auf 0.5 ppm beschränkt (Herstellerangaben). Die typische Dauer der Ausheilung betrug 30 oder 60 min. Die Proben wurden langsam in den sich bereits auf Arbeitstemperatur befindlichen Ofen eingefahren und mit der gleichen Geschwindigkeit wieder ausgefahren. Diese Prozedur nimmt etwa 2 bis 3 min in Anspruch.

Zur Untersuchung der elektrischen Eigenschaften einschließlich EL wurden einige Proben bei kurzen Zeiten mittels Kurzzeitausheilung (RTA) oder Blitzlampe (FLA) getempert. Die Prozeßführung bei der hier verwendeten RTA war wie folgt: Nach 30 s Spülen in N_2 erfolgte ein möglichst schnelles Hochheizen auf 500°C (Rampe 200 Ks^{-1}), eine Vorheizung bei dieser Temperatur von 10 s und ein erneutes Hochfahren der Temperatur auf 1000°C. Nachdem diese Temperatur 1 s lang gehalten wurde, kühlte sich die Probe innerhalb der nächsten 20 s auf unter 300°C ab. Bei FLA wird die Kapazität mehrerer parallel geschalteter Kondensatoren über eine Blitzlampenanordnung entladen. Der Entladestrom über der Zeit hat die Form eines Plateaus mit 20 ms Breite. Beide Tempervarianten erfolgten in einer N_2 -Atmosphäre.

3.1.4 Zur Probennotation

Um den Aufwand, ein bestimmtes Oxid genau zu spezifizieren und Mißverständnisse auszuschließen, gering zu halten, werden die folgenden Konventionen eingeführt. Eine bestimmte Probe wird durch die Angabe SI oder DI, die Angabe des implantierten Ions, der Konzentration im Maximum des Implantationsprofils und der Ausheiltemperatur spezifiziert. Erfolgen keine weiteren Angaben, wird davon ausgegangen, daß die Probe eine Oxiddicke von 500 nm besitzt, bei LNT implantiert und 30 min lang in einer N_2 -Atmosphäre ausgeheilt wurde.

3.2 Optische Messungen

3.2.1 Kontinuierliche Photolumineszenz

Die allgemein zur Lumineszenzmessung benötigte Apparatur läßt sich grob in drei Teile untergliedern: das Anregungssystem, den Probenraum und das Detektionssystem. Das Anregungssystem muß nicht notwendigerweise ein optisches sein; bei Messung der EL wird die entsprechen-

de Spannungs- oder Stromquelle als Anregungssystem verstanden. Ein optisches Anregungssystem liefert einen Lichtstrahl, dessen Intensität I_{ex} von spektralen Parametern wie Wellenlänge λ_{ex} , Polarisation ϕ_{ex} etc. abhängt. In analoger Weise wird das Spektrum der aus dem Probenraum einfallenden Strahlung durch die Detektorcharakteristik D modifiziert. Die Frage, inwieweit Interferenzeffekte im Innern der Probe das Spektrum der zu untersuchenden Lumineszenz verfälschen, wird im Abschnitt 5.1.2 behandelt.

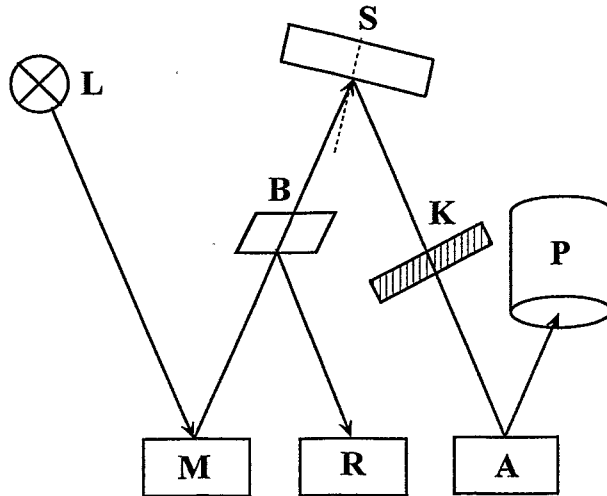


Abbildung 3.2: Schematischer Aufbau einer Lumineszenzapparatur am Beispiel des Spex Fluoromax Spektrometers zur Aufnahme kontinuierlicher PL-Spektren. L - Lampe, M - Monochromator, B - Strahlteiler, R - Referenzdiode, S - Probe, K - Kantenfilter, A - Analysator, P - Photomultiplier.

Für die in dieser Arbeit behandelten Messungen ist nur die Abhängigkeit der Korrekturfunktionen I_{ex} und D von der Wellenlänge von Bedeutung. Die Messungen wurden bei RT an einem kommerziellen Gerät, dem *Spex Fluoromax Spektrometer*, am Institut für Angewandte Photophysik der Technischen Universität Dresden durchgeführt. Als Detektionssystem diente ein Hamamatsu Photomultiplier R928. Abb. 3.2 zeigt den schematischen Aufbau dieser Lumineszenzmeßapparatur.

Das Anregungssystem besteht aus einer Xe-Lampe mit kontinuierlichem Spektrum, aus dem mittels eines Monochromators M eine bestimmte Wellenlänge selektiert wird. Mit Hilfe des Strahlteilers B wird ein Teil des Lichts auf eine Referenzdiode R geleitet, um die Intensität I_{ex} der Lampe zu messen. Der anregende Lichtstrahl trifft nahezu senkrecht auf die Probe S, während die Lumineszenz der Probe unter einem Winkel von 22.5° zur Oberflächennormale detektiert wird. Ein Kantenfilter K blendet das diffus reflektierte Anregungslicht aus. Dessen Transmissionskurve ist im Durchlaßbereich annähernd konstant und liegt je nach Filter zwischen 85 und 95%. Der über den Analysator A ausgewählte Teil des Lumineszenzspektrums wird schließlich mit Hilfe des Photomultipliers P detektiert.

Da sowohl A als auch M spektral variiert werden können, ergeben sich damit zwei verschiedene Meßregime: Bei einem *Emissionsspektrum* (PL) ist M fixiert und A variabel; bei einem *Anregungsspektrum* (PLE) wird M verändert und A festgehalten. Diesbezüglich unterscheidet sich auch die Korrektur der Meßspektren:

$$\text{PL: } I_w(\lambda) = I_M \frac{D(\lambda)}{I_{ex}(\lambda_{ex})} \quad \text{PLE: } I_w(\lambda) = I_M \frac{D(\lambda_{em})}{I_{ex}(\lambda)} \quad (3.1)$$

Dabei ist I_w das „wahre“, korrigierte Spektrum, I_M das Meßspektrum, λ die variierte Wellenlänge und λ_{ex} bzw. λ_{em} die entsprechende, bei der Messung festgehaltene Wellenlänge. Alle im weiteren Verlauf der Arbeit gezeigten Spektren wurden entsprechend Gleichung 3.1 korrigiert.

3.2.2 Zeitaufgelöste Photolumineszenz

Abb. 3.3 zeigt den experimentellen Aufbau, wie er zur Messung zeitaufgelöster PL an der Friedrich-Schiller-Universität Jena benutzt wurde. Als Anregungssystem L diente ein gepulster

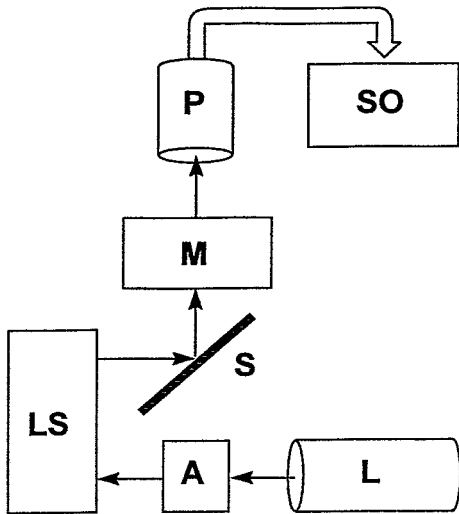


Abbildung 3.3: Schematische Apperatur zur Messung zeitaufgelöster PL. L - Laser, A - Strahlschwächer, LS - Linsensystem, S - Probe, M - Monochromator, P - Photomultiplier, SO - Speicheroszillograph.

KrF-Laser mit einer Emissionswellenlänge von 248 nm und einer Pulslänge von 20 ns, der bei 24 kV und einer Wiederholrate von 5 Hz betrieben wurde. Die Energie pro Puls lag unter 20 mJ. Dem Laser folgt ein Strahlschwächer A zur Regelung der Strahlintensität und ein Linsensystem LS. Die Probe ist so angeordnet, daß der Laserstrahl unter 45° einfällt und das emittierte Licht unter gleichem Winkel detektiert wird. Das mit Hilfe des Monochromators M selektierte Licht wird im Photomultiplier P detektiert und das Signal über einen elektronischen Speicheroszillographen ausgelesen. Der Photomultiplier vom Typ M 12 FS 35¹ hatte zwölf Dynoden und eine Frontkathode aus Cs-Sb. Die Zeitauflösung des Oszillographen betrug 10...12 μ s bei der Messung Ge-implantierter und 0.2...0.5 μ s bei der Messung Sn-implantierter SiO₂-Schichten.

3.3 Verwendete Analysemethoden

RBS Die Tiefenprofile der implantierten Ge- oder Sn-Atome wurden mit Hilfe der Rutherford-Rückstreuung (RBS) an einem Van-de-Graaf Beschleuniger gemessen. Die dazu benutzten He⁺-Ionen hatten eine Energie von 1.7 MeV, wurden senkrecht eingeschossen und unter einem Winkel von 10° zur Oberflächennormalen detektiert. Die Proben wurden nicht nicht in Kanalrichtung orientiert. Der Strahlfleck auf der Probe hatte einen Durchmesser von etwa 1 mm. Zur Simulation der Gesamtdosis und des Tiefenprofils der Ge- bzw. Sn-Atome wurde das RUMP-Programm benutzt.

TEM Für die Transmissions-Elektronenspektroskopie (TEM) stand ein Mikroskop vom Typ Phillips CM300 mit einer Linienauflösung von 0.14 nm zur Verfügung. Die Bestimmung der Clusterradien erfolgte mit Hilfe der Software ImageC, Version 2.22a.

¹nach DIN 44020, Bl. 2

STEM-EDX Das Tiefenprofil der Ge- bzw. Sn-Atome konnte auch mit Hilfe der energiedispersiven Röntgenspektroskopie (STEM-EDX) aufgenommen werden. Durch den Beschuß der Probe mit Elektronen im Elektronenmikroskop werden in den Atomen Vakanzen in der K-Schale der Elektronenhülle erzeugt. Beim Auffüllen dieser Vakanzen durch andere Hüllenelektronen wird eine für jedes Element charakteristische Röntgenstrahlung frei, die mit Hilfe eines Röntgendetektors aufgenommen wird. Die Intensität des Signals spiegelt die relative Konzentration des Elementes wieder. Dabei wurde der Elektronenstrahl auf etwa 10 nm fokussiert.

Kapitel 4

Mikrostruktur

4.1 Implantation

4.1.1 Implantationsprofil

Die Implantation bei konstanter Energie führt zu einer Verteilung der implantierten Ionen über einen bestimmten Tiefenbereich. Diese Verteilung kann durch die projizierte Reichweite R_p und die Reichweitestreuung ΔR_p charakterisiert werden, die dem ersten bzw. zweiten Moment der Verteilung entsprechen. Mit zunehmender Implantationsenergie wächst auch die Asymmetrie bzw. Schiefe der Verteilung¹, was aber im folgenden nicht weiter diskutiert wird. Die projizierte Reichweite muß daher nicht dem Maximum der Verteilung entsprechen. Bei einer Mehrfachimplantation ergibt sich dann das Gesamtprofil aus der Summe der Einzelprofile.

Abb. 4.1 zeigt die Implantationsprofile für die DI von Si, Ge, Sn und Ar in eine 500 nm dicke SiO_2 -Schicht, wie sie mit Hilfe des TRIM-Programms² berechnet wurden. Im Falle von Si, Ge

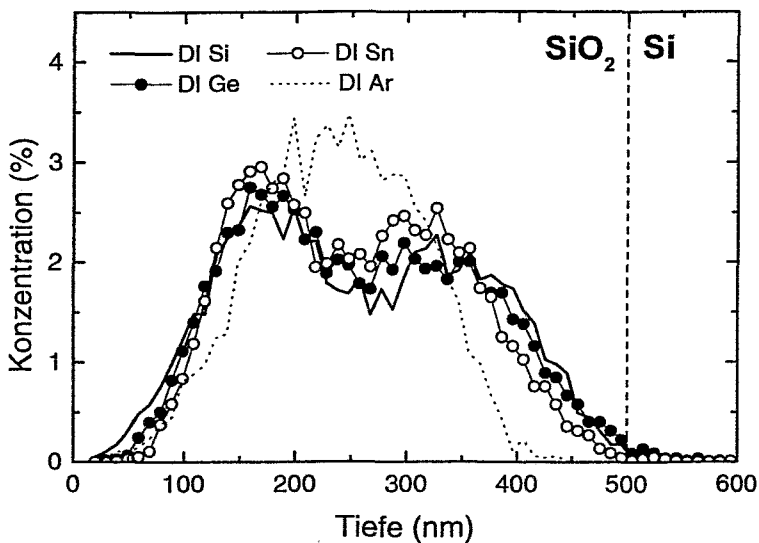


Abbildung 4.1: Mit TRIM berechnete Implantationsprofile für die DI von Si, Ge, Sn und Ar in eine 500 nm dicke SiO_2 -Schicht.

und Sn sollte das Implantationsprofil in einer Tiefe von 100 bis 400 nm näherungsweise eben verlaufen. Um diesen flachen Verlauf zu erreichen, muß für die Implantation in den hinteren

¹drittes Moment der Verteilung

²transport of ions in matter, Version 91.14

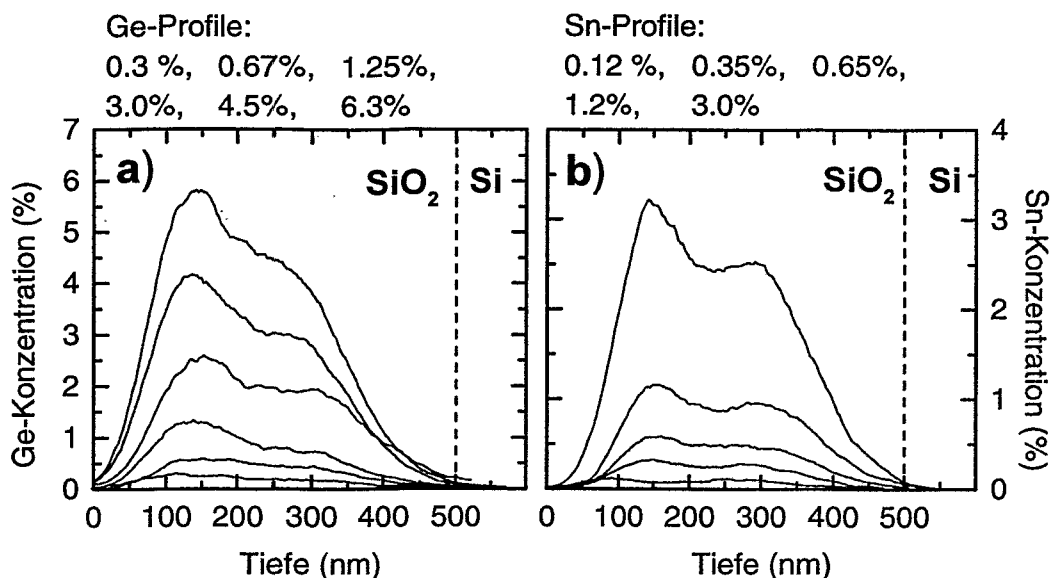


Abbildung 4.2: Mittels RBS gemessene Implantationsprofile für die DI von Ge (a) und Sn (b) in eine 500 nm dicke SiO₂-Schicht. Die Konzentration nimmt in aufsteigender Reihenfolge der Profile zu. Zur Umrechnung der Flächendichte in eine Tiefenskala wurde eine atomare Dichte von $6.6 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ angenommen.

Bereich eine etwa um den Faktor 1.67 höhere Dosis als für die Implantation in den vorderen Bereich benutzt werden. Der Ausläufer des grenzflächennahen Implantationsprofils reicht dabei in die Grenzfläche hinein. Die folgende Tabelle 4.1 listet die ebenfalls mit dem TRIM-Programm berechneten projizierten Reichweiten R_p und Reichweitestreuung ΔR_p auf. Die berechneten

Element	1. Implantation (hohe Energie)			2. Implantation (niedrige Energie)		
	Energie (keV)	R_p (nm)	ΔR_p (nm)	Energie (keV)	R_p (nm)	ΔR_p (nm)
DI Si	200	310	79	100	149	45
DI Ge	430	304	60	230	151	34
DI Sn	700	295	48	350	151	28
SI Ge	350	233	48			

Tabelle 4.1: Mit Hilfe des TRIM-Programms berechneten projizierten Reichweiten R_p und Reichweitestreungen ΔR_p der verwendeten Implantationen. Die Implantationsenergien sind der besseren Übersicht wegen nochmals angegeben.

projizierten Reichweiten R_p liegen aufgrund der Asymmetrie bzw. Schiefe der Verteilung systematisch 10 bis 15 % unter dem Maximum der Verteilung, wie man es aus den Profilen der Abb. 4.1 erhalten würde. Weiterhin wird deutlich, daß ΔR_p mit zunehmender Ordnungszahl abnimmt. Damit werden die Konzentrationspeaks der Einzelimplantationen stärker separiert, und das Implantationsprofil weicht zunehmend vom Kastenprofil ab.

Wie der Vergleich zwischen Abb. 4.1 und Abb. 4.2 zeigt, entsprechen die berechneten Profile nur begrenzt den tatsächlichen, mittels RBS gemessenen Implantationsprofilen. Sowohl für Ge- als auch für Sn-implantierte SiO₂-Schichten erhält man bei einer Konzentration von 0.67 % und darunter ein breites, homogenes Profil. Oberhalb von 0.67 % nimmt der bimodale Charakter der Implantationsprofile zu, wobei gleichzeitig der oberflächennahe Konzentrationspeak

überproportional stark anwächst. Entsprechend der niedrigeren Reichweitestreuung ΔR_p sind die Konzentrationspeaks des Sn-Profiles schärfer voneinander getrennt. Die Ursache liegt darin, daß der vordere Bereich durch die erste Implantation sehr stark geschädigt wurde. Aus der hohen Konzentration im vorderen Teil des Profils kann man schlußfolgern, daß der differentielle Energieverlust dE/dx wegen der während der Implantation einsetzenden Verdichtung und dem Eintrag von Fremdatomen ansteigt. In der Profilberechnung von TRIM wird aber von einem ungeschädigten SiO_2 ausgegangen. Die Näherung, man könne das Implantationsprofil der verschiedenen Dosen durch einfaches Skalieren simulieren, ist daher nur für kleine Ge- bzw. Sn-Konzentrationen gerechtfertigt. Schließlich sei noch darauf hingewiesen, daß die Konzentrationsmaxima der einzelnen Implantationen, wie man sie aus den RBS-Profilen in Abb. 4.2 erhält, systematisch unter denen der TRIM-Profile in Abb. 4.1 liegen.

Im Falle der DI von Si konnte das Implantationsprofil nicht gemessen werden, da die Genauigkeit der hier benutzten RBS-Messung nicht ausreicht, die vergleichsweise geringe Konzentration von implantierten Si-Atomen von dem Untergrund der intrinsisch im SiO_2 vorhandenen Si-Atome zu trennen. Es wird angenommen, daß das Implantationsprofil dem von Ge bzw. Sn ähnelt. Aufgrund der größeren Reichweitestreuung ΔR_p ist zu erwarten, daß die beiden Konzentrationspeaks nicht so gut separiert werden und das Profil etwas von seinem bimodalen Aussehen verliert. Auch für Si sollte das Profil für eine Konzentration von mehr als 0.67 % im vorderen Bereich der SiO_2 -Schicht überproportional hoch sein.

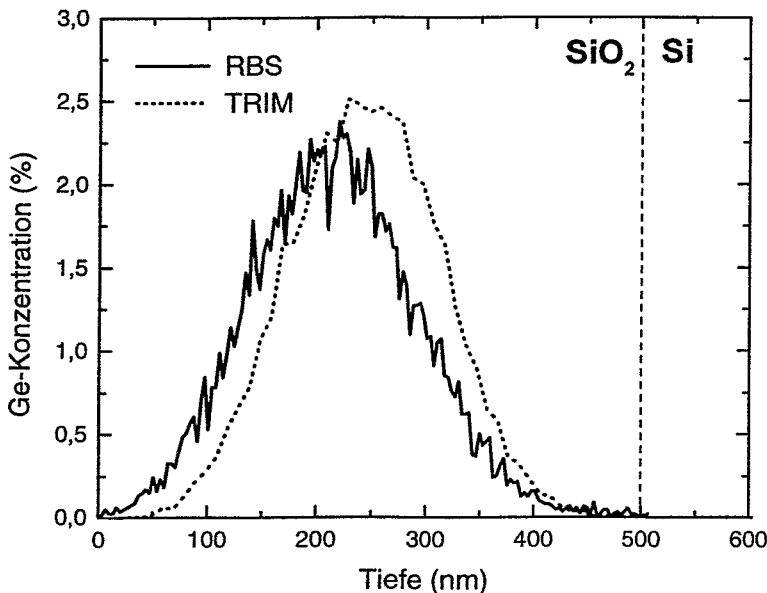


Abbildung 4.3: Mit TRIM berechnetes (gestrichelte Linie) und mittels RBS gemessenes Implantationsprofil (durchgezogene Linie) für eine SI Ge in die Mitte der SiO_2 -Schicht.

Abb. 4.3 zeigt das mit TRIM berechnete und mittels RBS gemessene Implantationsprofil für SI Ge in die Mitte der SiO_2 -Schicht. Die verwendete Dosis betrug $3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$. Das TRIM-Profil ist gegenüber dem tatsächlichen Profil um rund 30 nm verschoben. Im Gegensatz zur DI ist die Ge-Konzentration im Ausläufer des Implantationsprofils, der noch in die Grenzfläche hineinragt, viel geringer.

4.1.2 Nukleare und elektronische Schädigung

Abb. 4.4 zeigt das mittels TRIM berechnete Profil der nuklearen und elektronischen Energie-deponierung einer DI Si, Ge oder Sn in eine 500 nm dicke SiO_2 -Schicht. Die dabei zugrunde

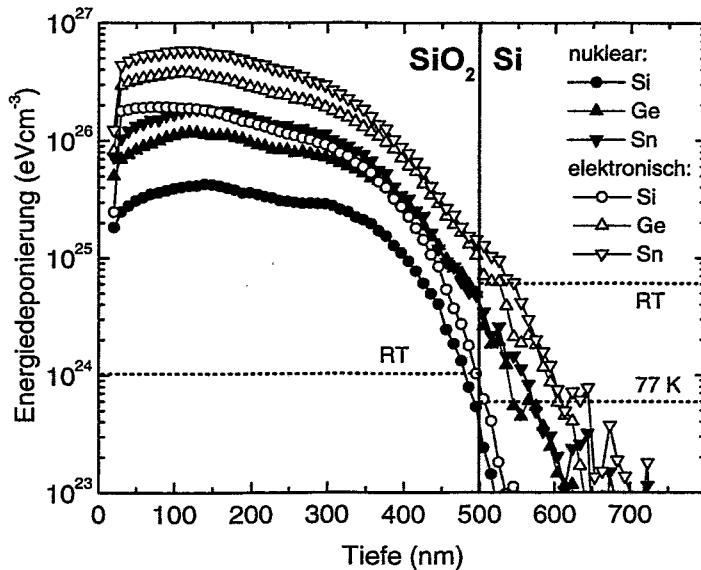


Abbildung 4.4: Mit TRIM berechnetes Profil der nuklearen (schwarze Symbole) und elektronischen (offene Symbole) Energiedeposition einer DI Si, Ge bzw. Sn in eine 500 nm dicke SiO_2 -Schicht mit einer Konzentration von Fremdatomen von 3 %. Die gestrichelte Linie markiert den bei RT bzw. 77 K zur Amorphisierung von Si sowie den bei RT zur maximalen Schädigung von amorphen SiO_2 notwendigen Betrag der Energiedeposition.

gelegten Dosen führen zu einer Konzentration von Fremdatomen von 3 % im SiO_2 . Die gestrichelte Linie markiert den bei RT bzw. 77 K zur Amorphisierung von Si [Chr81, Sko85] sowie den bei RT zur maximalen Schädigung von amorphen SiO_2 notwendigen Betrag der Energiedeposition S_{krit} (siehe Kap. 2.3.2). Da das Target in den meisten Fällen während der Implantation gekühlt wurde, liegt der tatsächliche Grenzwert für SiO_2 noch darunter. Weiterhin wird sichtbar, daß die elektronische Energiedeposition durchweg um den Faktor 3 bis 5 größer als die nukleare Energiedeposition ist. Mit steigendem Atomgewicht des implantierten Ions nimmt die Energiedeposition ebenfalls zu.

Auch wenn man das Profil der Energiedeposition auf die niedrigsten, noch verwendeten Dosen herunterskaliert, liegen dessen Werte noch mindestens eine Größenordnung über S_{krit} . Das SiO_2 -Netzwerk der im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Oxidschichten ist nach der Implantation mit Sicherheit maximal geschädigt (siehe auch Kap. 2.3.2). Für Ge, Sn und hohe Si-Konzentrationen ist weiterhin eine bis zu 100 nm dicke amorphe Si-Schicht an der Grenzfläche zum SiO_2 zu erwarten.

4.2 Effekte der Ausheilung

Mit zunehmender Ausheiltemperatur kommt es zu einer Reihe von strukturellen Veränderungen, angefangen von der Ausheilung von Strahlenschäden bis hin zur Umverteilung der implantierten Ionen. Im Falle Ge- oder Sn-implantierter SiO_2 -Schichten ließ sich die Entwicklung der Mikrostruktur gut mit RBS, STEM-EDX und TEM verfolgen. Aufgrund der bereits im SiO_2 vorhandenen Si-Atome war dies bei Si-implantierten Schichten nicht möglich. In den ersten beiden Kapiteln werden daher die experimentellen Ergebnisse für Ge- bzw. Sn-reiche Oxide vorgestellt. Im Kapitel 4.2.3 wird dann versucht, die Entwicklung der Mikrostruktur allgemein zu beschreiben und den Fall Si-implantierter Oxide mit einzuschließen.

4.2.1 Ge-implantierte SiO_2 -Schichten

Abb. 4.5 zeigt das Profil einer DI mit einer Ge-Konzentration von 3 % in Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur, wie es mittels RBS (a) bzw. STEM-EDX (b) gemessen wurde. In beiden

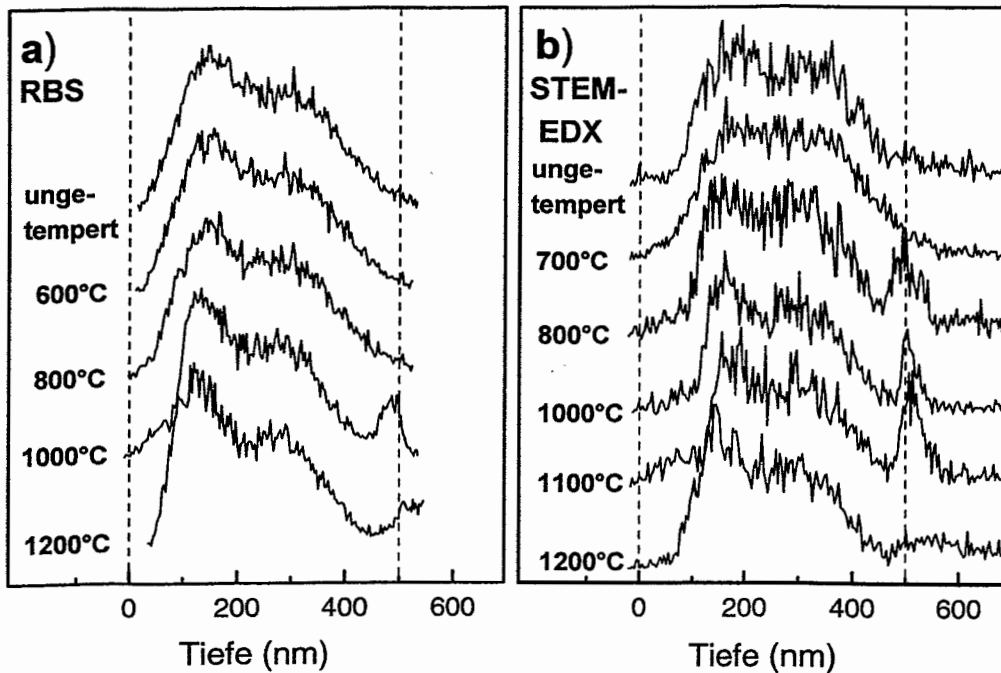


Abbildung 4.5: Mittels RBS (a) und STEM-EDX (b) ermittelte Profile einer DI Ge, 3 %, bei verschiedenen Ausheiltemperaturen. Der Tiefenskala bei RBS liegt eine atomare Dichte von $6.6 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ zugrunde.

Fällen ist die gleiche Entwicklung zu erkennen: Während das Profil bis zu einer bestimmten Temperatur unverändert bleibt, kommt es bei höheren Ausheiltemperaturen zu einer Ge-Diffusion in Richtung Grenzfläche, wo sich noch im SiO_2 ein weiterer Konzentrationspeak bildet. Im Unterschied zum RBS tritt der Ge-Peak in Grenzflächennähe im STEM-EDX bereits bei 800°C auf. Ein Teil dieses Ge-Peaks befindet sich bereits im Si und wächst mit zunehmender Temperatur an. Bei 1200°C ist im Si eine breite Verteilung von Ge bis in eine Entfernung von 200 nm von der Si-SiO₂-Grenzfläche nachweisbar. Die mit STEM-EDX ermittelten Profile besitzen eine bessere Tiefenaufösung, spiegeln im Gegensatz zum RBS aber nur den lokalen, im TEM sichtbaren Bereich wieder.

Abb. 4.6 zeigt die Entwicklung der Mikrostruktur anhand einer bei RT implantierten SiO₂-Schicht, DI Ge, 3 %, wie sie mittels Querschnitts-TEM verfolgt werden kann. Nach der Implantation ist deutlich eine etwa 60 nm breite amorphe Si-Schicht und ein dunkles Band von Strahlenschäden im Si sichtbar. Bei 500°C kann man die beginnende Rekristallisation der amorphen Si-Schicht an der etwas geringeren Dicke dieser Schicht erkennen. In der Übersichtsaufnahme ist auch bei 500°C noch keine Clusterbildung zu sehen. Erste Ge-Ansammlungen werden jedoch bei einer stärkeren Vergrößerung sichtbar.

Bei 800°C ist die Rekristallisation der amorphen Si-Schicht abgeschlossen. In einer Tiefe von rund 70 nm bleibt jedoch ein Schadensband (end-of-range-Defekte) zurück, dessen Lage gut mit der Lage der Grenzfläche zwischen amorphem und schwer geschädigtem kristallinen Si nach der Implantation korrespondiert. Gleichzeitig hat sich im SiO₂ eine breite clusterhaltige Schicht ausgebildet, die zumeist noch amorphe Ge-Cluster enthält. Diese sind relativ gleichmäßig über die Tiefe verteilt und besitzen eine durchschnittliche Größe von etwa 2 nm. In Oberflächennähe hat sich eine clusterfreie, etwa 110 nm breite Zone gebildet, die aber laut den Ergebnissen von

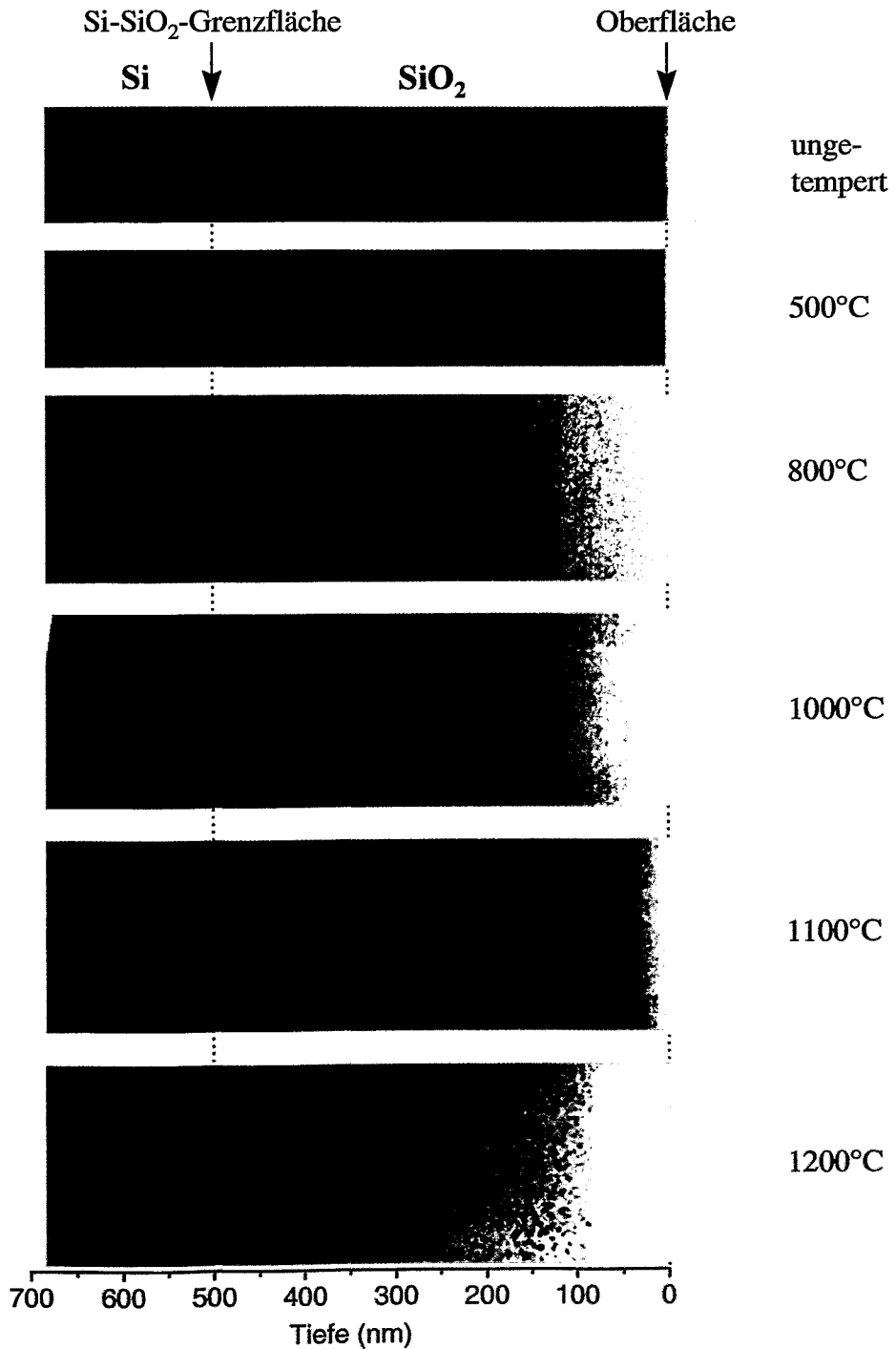


Abbildung 4.6: TEM-Übersichtsaufnahmen einer DI Ge, 3 %, RT, bei verschiedenen Ausheiltemperaturen. Zur besseren Darstellung wurden Kontrast und Helligkeit der Originalaufnahmen verändert.

RBS und STEM-EDX noch soviel Ge enthält, daß sich Cluster bilden könnten. In vergleichbaren Ge-implantierten Oxidschichten wurde festgestellt, daß der während der Ausheilung von der Oberfläche eindiffundierende Sauerstoff das Ge weitgehendst aufoxidiert hat. Aus den XPS-Messungen wird geschlußfolgert, daß das Ge dieser Zone nur noch in den Oxidationsstufen Ge^{+3} und Ge^{+4} vorkommt [Hei99].

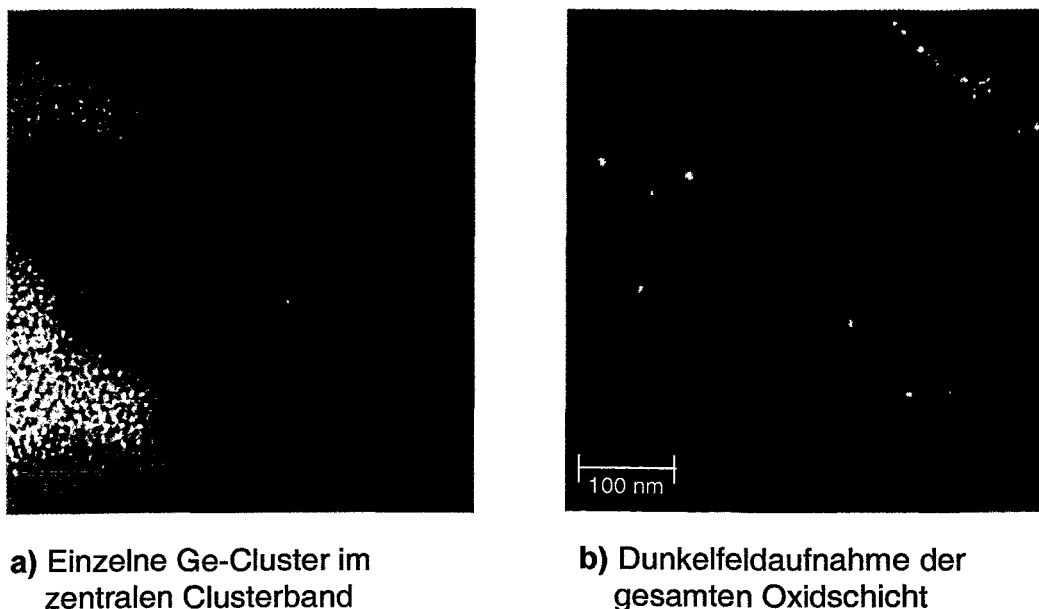


Abbildung 4.7: TEM-Aufnahme von kristallinen Ge-Clustern bei DI Ge, 6 %, 1000°C (a). Die (111)-Netzebenen mit einem Abstand von 0.325 nm sind gut erkennbar. In der Dunkelfeldaufnahme (b) sind die Ge-Nanokristalle als helle weiße Punkte zu sehen. Zur Abbildung wurde der (111)-Reflex benutzt.

Nach Ausheilung bei 1000°C sind die Cluster gegenüber 800°C nur geringfügig angewachsen; ihr Durchmesser beträgt nun zwischen 2.5 und 3 nm. Wie aus den Dunkelfeldaufnahmen (siehe auch Abb. 4.7b) hervorgeht, sind jetzt die meisten Cluster kristallin. Mit zunehmender Ausheiltemperatur kommt es zur Ausbildung eines separaten schmalen Clusterbandes von etwa 10 nm Breite in unmittelbarer Nähe der Grenzfläche (≈ 10 nm). Zwischen diesem Clusterband und dem zentralen Clusterband um R_p existiert eine clusterfreie Zone von etwa 40 nm Breite. Diese Entwicklung läßt sich in den TEM-Bildern bei 1000°C, 1100°C und 1200°C gut verfolgen.

Bei 1200°C wird ein schwarzer dunkler Streifen an der Grenzfläche sichtbar. Unter Berücksichtigung der entsprechenden Profile aus Abb. 4.5, in denen eine Ge-Diffusion in das Si-Substrat sichtbar wurde, wird vermutet, daß an der Grenzfläche ein Si-Ge-Mischkristall entstanden ist. Ein ähnliches Phänomen wurde auch in [Mark98] beobachtet.

Abb. 4.7a zeigt kristalline Ge-Nanokristalle einer SiO_2 -Schicht mit DI Ge, 6 %, 1000°C. Der Abstand der hier sichtbaren (111)-Netzebenen wurde zu 0.325 nm bestimmt. In der Dunkelfeldaufnahme 4.7b sind die Ge-Nanokristalle als helle weiße Punkte zu sehen. Zur Abbildung wurde der (111)-Reflex benutzt.

Mit steigender Ausheiltemperatur und Ge-Konzentration erwartet man eine Zunahme der Clustergröße. Die Zunahme mit steigender Ausheiltemperatur kann qualitativ in Abb. 4.6 ver-

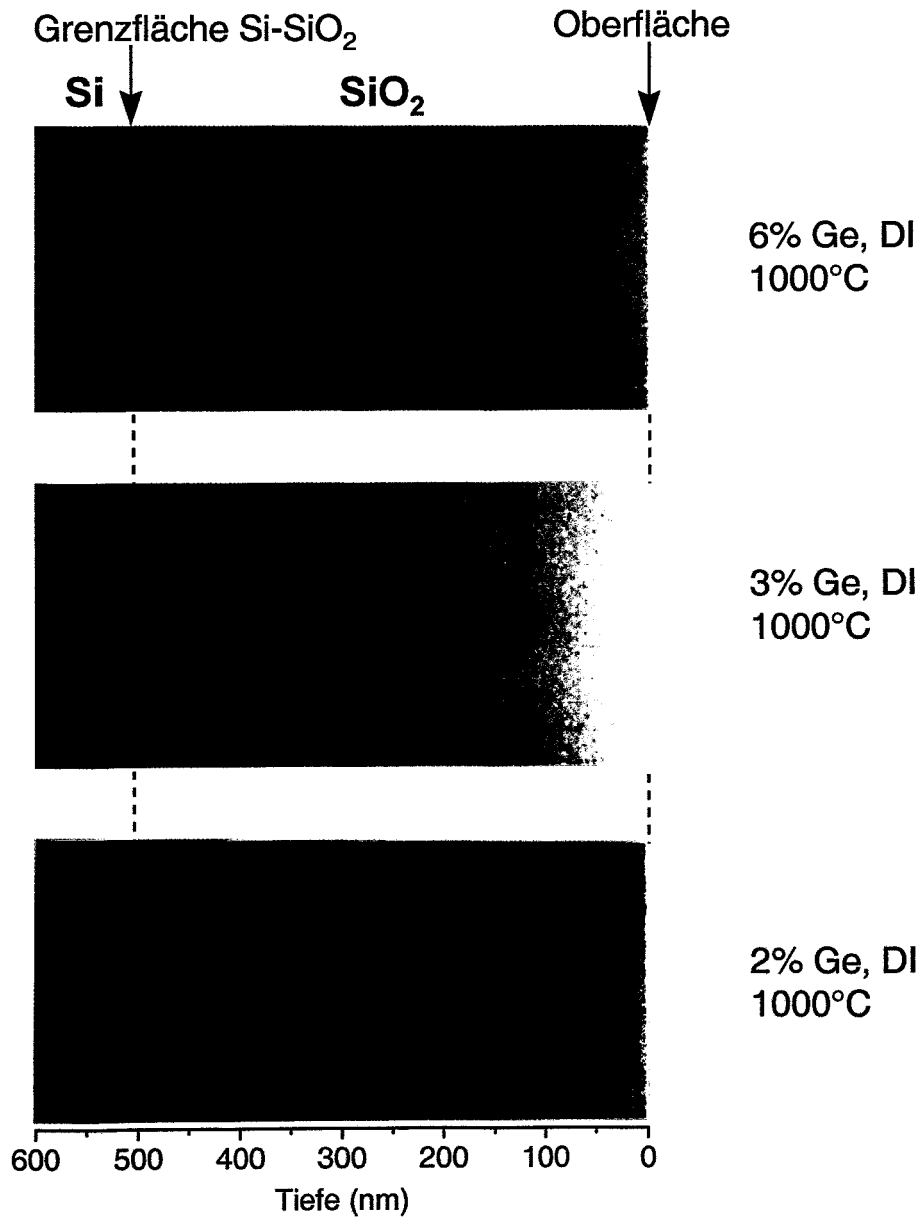


Abbildung 4.8: TEM-Aufnahme eines Ge-implantierten Oxides mit DI Ge, 1000°C bei verschiedenen Ge-Konzentrationen. Zur besseren Darstellung wurde Kontrast und Helligkeit der Originalaufnahmen verändert.

folgt werden, wo der Sprung zwischen 1000 und 1100°C besonders deutlich ist. Die Zunahme der Clustergröße mit steigender Ge-Konzentration zeigt sich tendenziell in Abb. 4.8, wo die TEM-Aufnahmen eines Ge-implantierten Oxides mit DI Ge, 1000°C bei verschiedenen Ge-Konzentrationen abgebildet sind.

Schließlich sei noch auf den Unterschied zwischen SI und DI eingegangen. Abb. 4.9 zeigt die TEM-Aufnahme Ge-implantierter Oxide mit SI Ge (a) und DI Ge (b) bei 3 % Ge und 1000°C.

a) Ge 3%, SI, 1000°C



b) Ge 3%, DI, 1000°C

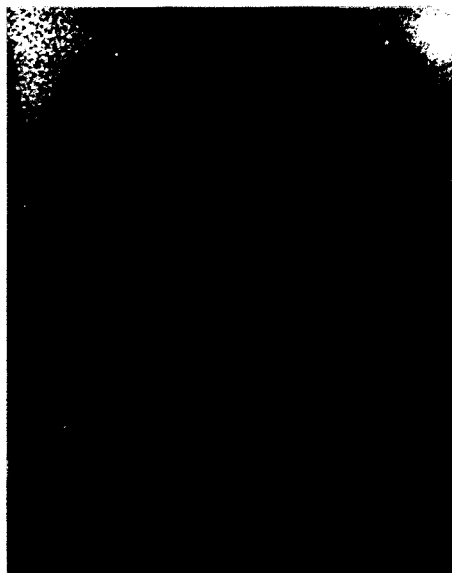


Abbildung 4.9: TEM-Aufnahme eines Ge-implantierten Oxids mit SI Ge (a) und DI Ge (b). Beide Strukturen enthalten 3 % Ge und wurden bei 1000°C ausgeheilt.

Von der Oberfläche beginnend weisen beide SiO_2 -Schichten eine clusterfreie Zone von 140 (SI) bzw. 115 nm (DI) Breite und ein zentrales Clusterband in der Mitte der Oxidschicht auf. Der Übergang zwischen beiden Zonen erfolgt sehr abrupt (siehe auch [Hei99]). Das durch SI entstandene zentrale Clusterband besitzt eine relativ breite Verteilung der Clusterdurchmesser von etwa 2 bis 10 nm. Zudem sind die Cluster nicht gleichmäßig über die Tiefe verteilt: große Cluster sammeln sich vorzugsweise im Zentrum des Clusterbandes, kleine in den Randgebieten. Zwischen dem Clusterband und der Si-SiO₂-Grenzfläche liegt eine verhältnismäßig breite clusterfreie Zone. Im Gegensatz dazu sind die Cluster im Falle einer DI wesentlich homogener verteilt, und das Clusterband reicht näher an die Grenzfläche heran. Die Größe der Cluster schwankt nur geringfügig um den Mittelwert von 2.5 bis 3 nm. Weiterhin existiert ein schmales Clusterband in unmittelbarer Nähe der Grenzfläche.

Mittels TEM konnten keine signifikanten Unterschiede zwischen Oxidschichten festgestellt werden, die bei LNT bzw. RT implantiert wurden.

In Ergänzung zu den hier vorgestellten mikrostrukturellen Untersuchungen sei noch auf die Ergebnisse in [Bor97, Mark98, Reb98b, Hei99, Mark99a, Reb99] hingewiesen.

4.2.2 Sn-implantierte SiO₂-Schichten

Ähnlich wie im Fall von Ge führt die Ausheilung Sn-implantierter SiO₂-Schichten bei hohen Temperaturen zur Umverteilung der implantierten Ionen und zur Clusterbildung. Im Unterschied zu Ge ist dieser Prozeß jedoch sehr beschleunigt. In Abb. 4.10 ist das mittels RBS gemessene Profil der implantierten Sn-Atome in Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur für eine DI Sn, 1.2 %, dargestellt. Während das Implantationsprofil bis 600°C erhalten bleibt, beginnt bei etwa

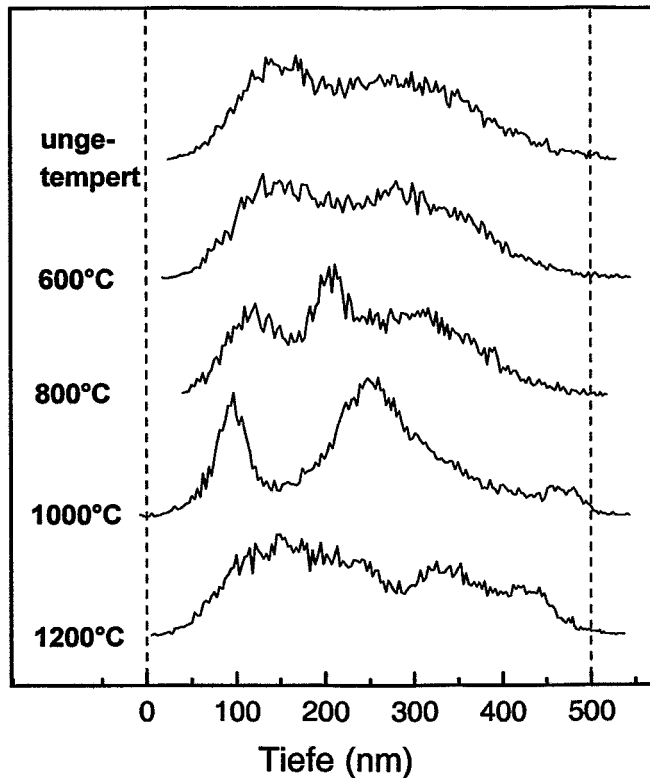


Abbildung 4.10: Die Verteilung implantierter Sn-Atome in Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur für eine DI Sn, 1.2 %. Die Profile wurden mittels RBS gemessen (angenommene atomare Dichte $6.6 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$).

800°C eine radikale Umstrukturierung, in deren Folge sich drei Konzentrationspeaks in einer Entfernung von 120, 200 und 320 nm von der SiO₂-Oberfläche ausbilden. Bei einer Ausheiltemperatur von 1000°C sind die beiden vorderen Konzentrationspeaks stärker ausgeprägt und befinden sich jetzt in einer Tiefe von 100 und 250 nm, während der hintere Sn-Peak in Richtung Si-SiO₂-Grenzfläche gewandert ist. Bei 1200°C werden diese Peaks nivelliert, und es setzt eine verstärkte Diffusion von Sn in Richtung Si-SiO₂-Grenzfläche ein. Dies wird in der Ausbildung eines breiten Konzentrationsmaximums deutlich, das sich in einer Tiefe von 300 bis 450 nm befindet.

Diese Umstrukturierung ist mittels TEM sehr gut zu beobachten. Abb. 4.11 zeigt die Entwicklung der Mikrostruktur in einer Oxidschicht mit einer DI Sn, 3 %, in Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur. Bei 600°C entstehen erste Cluster im zentralen Teil der Oxidschicht. Bei 800°C haben sich, von der Si-SiO₂-Grenzfläche beginnend, drei Clusterbänder ausgebildet: ein Clusterband an der Grenzfläche, ein zentrales Clusterband und ein oberflächennahes Clusterband. Das erste Clusterband hat einen durchschnittlichen Abstand von 7 nm zur Si-SiO₂-Grenzfläche und dehnt sich rund 20 nm aus. Die darin enthaltenen Cluster haben einen Durchmesser von etwa 10 nm. Daran schließt sich ein breites, zentrales Clusterband an, das durch jeweils eine clusterfreie Zone vom Clusterband an der Grenzfläche und dem oberflächennahen Clusterband getrennt ist. Der Clusterdurchmesser schwankt hier erheblich; er reicht von wenigen nm bis 55 nm. Dabei sind die riesigen Cluster vorzugsweise in der Mitte des zentralen Clusterbandes angeordnet. In einer Entfernung von 105 nm von der Oberfläche hat sich ein weiteres Band von Sn-haltigen Clustern mit einem Durchmesser kleiner als 2 nm gebildet.

Bei 1000°C sind wiederum alle drei Clusterbänder sichtbar. Das Clusterband an der Si-SiO₂-Grenzfläche hat sich nicht wesentlich verändert; sein Abstand zur Grenzfläche, seine Ausdehnung

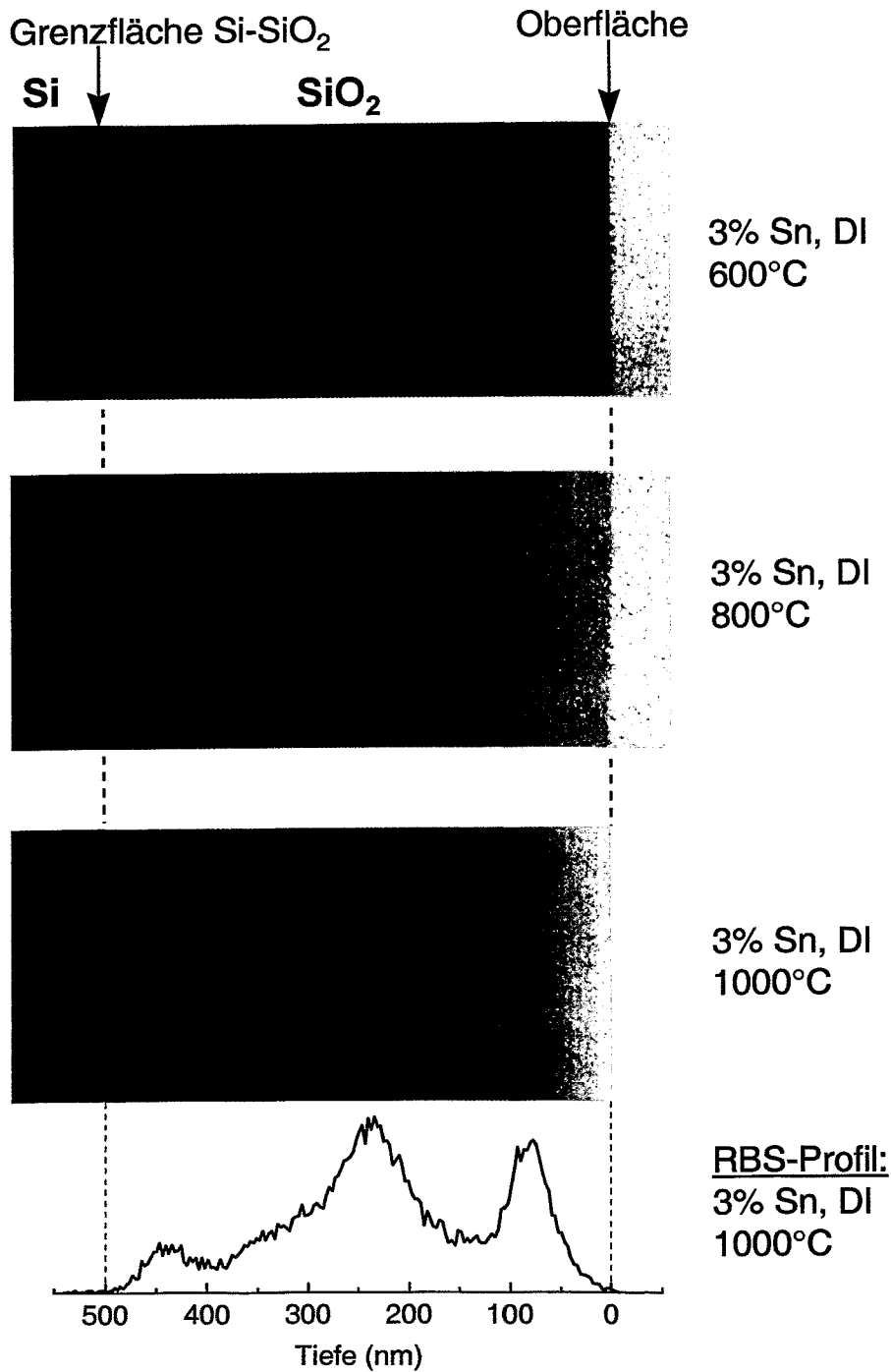


Abbildung 4.11: TEM-Aufnahmen einer SiO₂-Schicht mit DI Sn, 3 %, bei verschiedenen Ausheiltemperaturen. Zur besseren Darstellung wurde Kontrast und Helligkeit der Originalaufnahmen verändert.

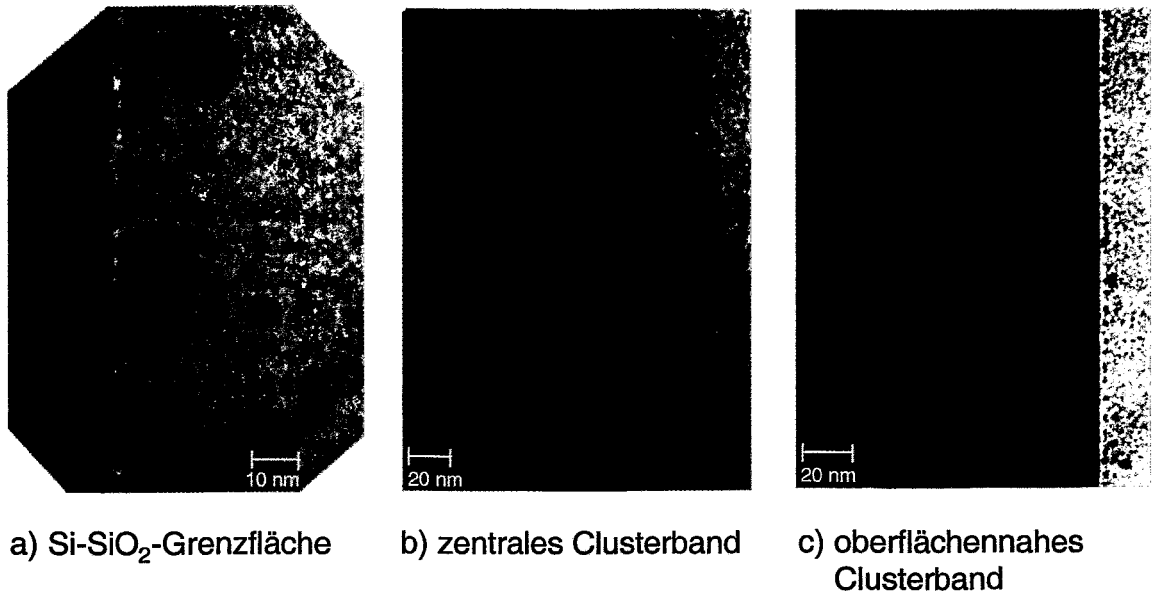


Abbildung 4.12: Detailaufnahmen einer SiO₂-Schicht mit DI Sn, 3 %, 1000°C . Die TEM-Bilder zeigen die Si-SiO₂-Grenzfläche mit benachbartem Clusterband (a), einen Ausschnitt des zentralen Clusterbandes (b) sowie das oberflächennahe Clusterband (c).

und die durchschnittliche Clustergröße sind konstant geblieben. Demgegenüber hat sich jetzt eine merkliche Menge Sn an der Grenzfläche angelagert, was durch die Ausbildung eines schwarzen Streifens in Abb. 4.11 zu erkennen ist. Wie die Detailaufnahme in Abb. 4.12a zeigt, geschieht dies jedoch nicht so gleichmäßig wie im Falle von Ge. Auch das Aussehen des zentralen Clusterbandes hat sich gewandelt. Die Zahl der Cluster, insbesondere mit geringem Durchmesser, ist bei gleichzeitigem Wachstum der Cluster zurückgegangen. Ihre Größe liegt jetzt zwischen 10 und 65 nm mit einer Häufung bei einem Durchmesser von rund 30 nm (siehe auch Abb. 4.12b). Die interessanteste Veränderung hat jedoch das oberflächennahe Clusterband erfahren (Abb. 4.12c). Es erstreckt sich in einer Entfernung von 50 bis 110 nm von der Oberfläche und enthält Cluster mit einem Durchmesser von 2 bis 10 nm. Die Tiefenverteilung der Cluster richtet sich streng nach ihrer Größe: die größten befinden sich an dem inneren, der Si-SiO₂-Grenzfläche zugewandtem Rand des Clusterbandes, während die kleinsten am oberflächennahen Rand angeordnet sind.

Eine mögliche Erklärung für diese Struktur wäre das Aufeinandertreffen zweier Diffusionsfronten in diesem Gebiet. Während der Ausheilung diffundiert Sauerstoff von der Oberfläche in Richtung SiO₂-Grenzfläche und trifft dabei auf Sn, das seinerseits in Richtung Oberfläche diffundiert. Im Gebiet des oberflächennahen Clusterbandes bilden sich zwei gegensätzliche Konzentrationsgefälle aus. Die Konzentration von Sn fällt, vom inneren Rand des Clusterbandes beginnend, in Richtung Oberfläche auf Null ab, während die Konzentration von Sauerstoff zur Oberfläche hin zunimmt. Am inneren Rand des Clusterbandes ist relativ viel Sn vorhanden, so daß sich größere Cluster bilden als am oberflächennahen Rand. Gleichzeitig werden diese Cluster durch Sauerstoff wieder aufoxidiert, und zwar am oberflächennahen Rand stärker als am inneren. Ob die im TEM sichtbaren Cluster aus reinem Sn, einem Sn-Kern und einer SnO_x-Hülle oder durchweg aus SnO_x bestehen, konnte nicht ermittelt werden. Die Bindung an Sauerstoff verhindert eine weitere Diffusion von Sn-Atomen in Richtung des zentralen Clusterbandes. Das Absau-

gen von elementarem Sn durch die riesigen Cluster im zentralen Clusterband könnte auch die Ursache für die überaus scharfe Grenze zwischen dem oberflächennahen Clusterband und der anschließenden clusterfreien Zone sein. Für eine detailliertere Darstellung sei auf [Hei99, Mark99b] verwiesen. Ähnliche experimentelle Ergebnisse bezüglich des grenzflächennahen Bandes von Sn-Clustern finden sich in [Nak97, Nak98].

4.2.3 Allgemeines Szenario zur Entwicklung der Mikrostruktur

Mit der Implantation wird das SiO_2 -Netzwerk völlig zerstört und die Stöchiometrie durch das Einbringen von Fremdatomen zuungunsten von Sauerstoff verändert. Die tiefe Implantationstemperatur wirkt einer beschleunigten, ionenstrahlinduzierten Rekonstruktion der SiO_2 -Matrix entgegen und verhindert die Nukleation von Si, Ge oder Sn an eventuell schon gebildeten Keimen. Häufigste Defekte sind wahrscheinlich das E' -Zentrum, das NBOH-Zentrum und erste ODC.

ODC entstehen nicht nur im Zentrum des Implantationsprofils, sondern auch in unmittelbarer Nähe der Grenzfläche. Wird das Oxid in Grenzflächennähe hinreichend stark geschädigt, so diffundiert während der Implantation ein Teil des Sauerstoffs, der wesentlich mobiler als Si ist, in Richtung Grenzfläche. Dort werden Teile der ersten Monolage des Si oxidiert. In dem Gebiet, aus dem dieser Sauerstoff stammte, existiert damit ein lokaler Sauerstoffmangel, der zur Bildung von ODC führt. Zur Bildung des grenzflächennahen Clusterbandes siehe auch [Hei99].

Mit beginnender Temperung werden Defekte, insbesondere mit abgerissenen Bindungen, ausgeheilt. Da jedoch eine Unterstöchiometrie von Sauerstoff besteht, können nicht mehr alle SiO_4 -Tetraeder über eine Sauerstoffbrücke miteinander verbunden werden. Dabei können sich benachbarte E' -Zentren in NOV umwandeln, bei denen zwei SiO_4 -Tetraeder durch eine Si-Si-Bindung miteinander verbunden sind. Dieser Umwandlungsprozeß wird durch die Arbeit von LIAO *et al.* [Liao96a] unterstützt, die eine Antikorrelation zwischen PL-Intensität und der Konzentration von E' -Zentren im Si-implantierten SiO_2 feststellten (siehe auch Kapitel 2.4.3). Im Falle von Ge oder Sn wäre die NOV durch die entsprechenden Analoga zu ersetzen, die sich durch die Substitution eines oder beider Si-Atome durch Ge- bzw. Sn-Atome ergeben. Das Tempern bis etwa 600°C führt also zur Ausheilung der meisten Strahlenschäden und zur Bildung von ODC. Unabgesättigte Bindungen dürften kaum noch existieren, während die durch den nuklearen Schaden verursachte Verdichtung des Oxids erst bei der Wachstumstemperatur des Oxides wieder vollständig zurückgeht [Eer74].

Mit zunehmender Ausheilung entstehen kleine Cluster durch Nukleation, die durch das Ostwaldreifen weiter anwachsen. Auf Einzelheiten dieser Prozesse soll hier nicht weiter eingegangen werden; als Literatur sei z.B. auf [Rei896, Wog97, Hei99] verwiesen. Im Ergebnis entstehen mehrere Clusterbänder, deren Eigenschaften jedoch von den Ausheil- und Implantationsbedingungen abhängen.

Es kann angenommen werden, daß sich die ODC bei hohen Ausheiltemperaturen auflösen und deren Material zum weiteren Clusterwachstum beiträgt. Gleichzeitig findet eine Diffusion von überschüssigen Si, von Ge bzw. von Sn in Richtung Grenzfläche statt. Dieses Material lagert sich einerseits an der Grenzfläche an, trägt aber andererseits zum Wachstum des Clusterbandes an der Grenzfläche bei.

Betrachtet man die ODC als Ursache der PL, so kann man sich zwei grundlegende Konfigurationen vorstellen. Bei niedrigen Konzentrationen und moderaten Ausheiltemperaturen werden die ODC als isolierte Zentren im Volumen existieren. Bei hohen Konzentrationen und Ausheiltemperaturen können ODC in der Übergangsschicht von Si-, Ge- oder Sn-Clustern zur SiO_2 -Matrix vorkommen.

Kapitel 5

Optische Charakterisierung

5.1 Grundlagen der Lumineszenzmessung

5.1.1 Die Unsicherheit der Lumineszenzmessung

Will man ein Material hinsichtlich einer bestimmten Eigenschaft untersuchen, so läßt sich diese Untersuchung im allgemeinen in drei Phasen unterteilen: die Probenherstellung, die Messung und die Datenauswertung. Jedes Stadium bietet dabei eine Fülle von Möglichkeiten, das Endergebnis zu verfälschen und die entsprechende Unsicherheit zu erhöhen. Die folgende Aufzählung listet die wichtigsten Fehlerquellen auf, die die PL-Ergebnisse von implantierten SiO₂-Schichten beeinflussen könnten:

1. Probenherstellung
 - Implantation
 - Ausheilung
 - Lagerung
2. Messung
 - lumineszierende Verschmutzungen
 - Gerätekorrektur
 - Interferenzkorrektur
 - statistische Meßfehler
3. Datenauswertung
 - willkürliches Fehlerquadrat
 - Topologie der χ^2 -Funktion
 - Symmetrische Gaußpeaks
 - Zahl der freien Parameter

Es zeigt sich, daß zwei unter nominell gleichen Bedingungen hergestellte Proben nicht identisch sein müssen. Unterschiede können durch Schwankungen von Energie und Dosis bei der Implantation, Schwankungen der Ausheiltemperatur sowie durch die Alterung der Proben bei längerer Lagerung entstehen. Während diese Abweichungen jeweils in der Größenordnung von 10 % und darunter liegen sollten, ist der Einfluß des Restgases, insbesondere bei hohen Ausheiltemperaturen, wesentlich unbestimmter. Die Prozedur des Ein- und Ausfahrens in den Ofen ist ebenfalls kritisch. Diese Fehler beeinflussen weniger die direkte Datenauswertung eines einzelnen Spektrums, erschweren aber den Vergleich unterschiedlicher Proben und verfälschen die Abhängigkeit bestimmter PL-Merkmale von den Herstellungsparametern, wie z.B. die Intensität in Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur.

Die zweite Kategorie von Fehlerquellen wird im wesentlichen durch die Unsicherheit der verschiedenen Korrekturen bei der Messung bestimmt. Wie der Vergleich mit Ar-implantierten SiO₂-Schichten (siehe Abschnitt 5.2.1) zeigt, spielt die Lumineszenz von Verunreinigungen eine untergeordnete Rolle. Auch der statistische Fehler kann bei typischen Emissionsraten der Proben von 10¹¹ Photonen je Sekunde vernachlässigt werden. Selbst wenn man einen Raumwinkel von 10⁻⁴ bis 10⁻⁵ ansetzt und die den Detektor erreichenden Photonen noch auf mehrere Kanäle aufteilt, liegt der entsprechende Fehler weit unter 1%. Die spektrale Auflösung während der Messung betrug etwa 6 nm (ca. 45 meV bei 3.1 eV) und ist damit klein gegen die Breite der gemessenen Lumineszenzbanden. Gegenüber den durch den experimentellen Aufbau bedingten Korrekturen wie Detektoreffizienz, Lampenspektrum etc. liefert die Interferenzkorrektur die größte Unsicherheit. Sie führt durch eine Verzerrung der Spektrenform direkt zur Veränderung charakteristischer PL-Merkmale wie Position und Peakfläche. Kap. 5.1.2 beschäftigt sich mit den unmittelbaren Auswirkungen der Interferenzkorrektur, während Anhang A detailliert auf die mathematische Modellierung eingeht.

Aus den Unsicherheiten der ersten beiden Fehlerkategorien folgt, daß man den einzelnen Meßpunkten eines Spektrums kein sinnvolles Gaußsches Fehlerquadrat zuordnen kann. Die Freiheit, ein solches Fehlerquadrat und die Anzahl der freien Parameter willkürlich festzulegen, spaltet die Ergebnisse der Datenauswertung in zwei Gruppen auf. Solange man nur integrale Fitparameter betrachtet, wie z.B. die gesamte Peakfläche einer Emissionsbande, ist die durch die Datenauswertung verursachte Unsicherheit klein gegen die Unsicherheiten der ersten beiden Fehlerkategorien. In Kap. 5.2.3 und 5.2.4 wird die violette Emissionsbande in drei Komponenten zerlegt, wobei eine der Komponenten der im Kap. 5.2.2 behandelten Emission zugeschrieben wird. Für die ermittelten Fitparameter der einzelnen Komponenten wirken sich aber die Unsicherheiten der Datenanalyse voll aus. Es ist daher nicht sinnvoll, für die einzelnen Peakparameter einen Wert mit einer bestimmten Unsicherheit anzugeben. Dagegen läßt sich fast immer ein Intervall angeben, in dem der entsprechende Peakparameter aller Voraussicht nach liegt. Der Abschnitt 5.1.3 beschäftigt sich ausführlicher mit den Unsicherheiten der Datenauswertung.

Ein weiterer Punkt ist die Umrechnung der Wellenlängenskala in eine Energieskala. Wird, wie in dieser Arbeit, die Wellenlängenskala ohne Transformation des Spektrums in eine Energieskala umgerechnet, ändert sich die Bedeutung des Integrals über einen Teil des Spektrums. Bei Integration über die Wellenlängenskala entspricht das Integral der Gesamtzahl der Photonen, bei Integration über die Energieskala dem gesamten Energieeintrag der Photonen. Bei einer flächentreuen Abbildung über

$$f(\lambda)d\lambda = f'(E)dE \quad \text{bzw.} \quad f'(E) = f(\lambda) \frac{2\pi\hbar c}{E^2} \quad (5.1)$$

bleibt das Integral über einen beliebigen Teil des Spektrums erhalten, aber die Abbildung 5.1 führt zu einem Anheben der niederenergetischen Flanke gegenüber der hochenergetischen Flanke eines Peaks und damit zu einer Verschiebung der Peakposition in Richtung niedriger Energien. Diese Verschiebung nimmt mit steigendem Verhältnis μ zwischen FWHM und Peakposition zu. Betrachtet man einen gaußförmigen Peak, so wächst die Peakverschiebung in erster Näherung quadratisch mit μ . Die typischen Werte für μ in dieser Arbeit liegen zwischen 0.08 und 0.2, was einer Peakverschiebung von 0.16 % bis 1.04 % entspricht und durch einige Vergleichsrechnungen gut bestätigt wird. Die durch unterschiedliche Umrechnung der Wellenlängenskala in eine Energieskala entstehenden Abweichungen sind klein gegen die Unsicherheiten der Fitprozedur und können vernachlässigt werden.

Welche Signifikanz haben nun die Ergebnisse, die man aus der Messung und der anschließenden Datenauswertung erhält? Die energetische Lage der Emissionsbanden läßt sich ziemlich

genau bestimmen; ihre Unsicherheit dürfte in der Größenordnung von 5% für Si-implantiertes SiO_2 bzw. 10% für Ge- und Sn-implantiertes SiO_2 liegen. Gleiches gilt für die Breite der Lumineszenzbanden. Die PL-Intensität reagiert dagegen wesentlich empfindlicher auf Schwankungen der Herstellungsparameter, so daß man Unterschiede in der PL-Intensität erst ab Faktor 1.5 bis 2 als signifikant betrachten sollte. Peaklage, Intensität und FWHM der einzelnen Komponenten der blau-violetten Lumineszenzbande sind allesamt als Hypothese zu betrachten, die nur unter bestimmten Annahmen gültig ist. Wirklich signifikant ist nur die Tatsache, daß die violette Lumineszenzbande bei Ge- bzw. Sn-implantierten Oxiden aus *mindestens* zwei Komponenten besteht.

5.1.2 Interferenzeffekte

Durch Mehrfachreflexion in der Oxidschicht kommt es zu einer von der Wellenlänge abhängigen Verstärkung oder Schwächung des emittierten Lichts. Diese Effekte können durch die Multiplikation mit einer Korrekturfunktion berücksichtigt werden. Mit den Einzelheiten der mathematischen Modellierung beschäftigt sich Anhang A, während dieser Abschnitt nur kurz auf die Auswirkungen der Interferenzkorrektur eingeht. Die Berechnung der Korrekturfunktion beruht auf Annahmen, die zum Teil nur in grober Näherung erfüllt werden können. Zum einen wird die Kenntnis der Lumineszenzzentrenverteilung vorausgesetzt, zum anderen wurde die implantierte Oxidschicht mit den optischen Konstanten von thermischem SiO_2 beschrieben. Bezüglich der Lumineszenzzentrenverteilung wird angenommen, daß diese breiter als die kritische Größe von etwa 50 nm ist.

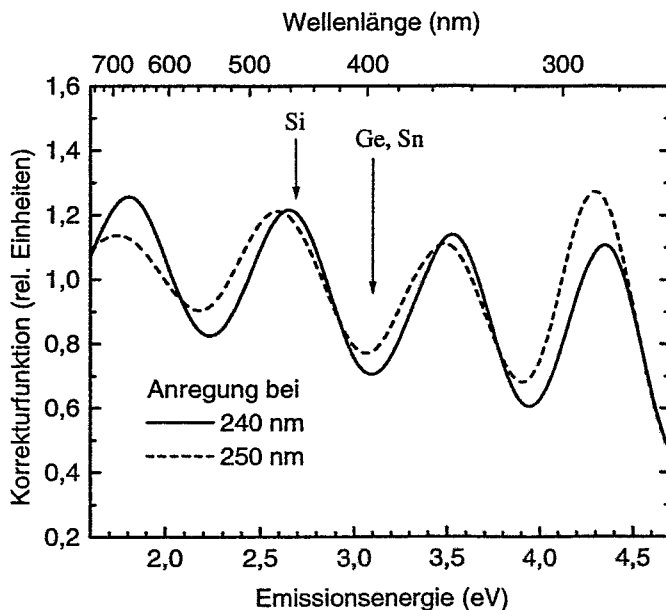


Abbildung 5.1: Korrekturfunktion für eine 500 nm dicke Oxidschicht und optischer Anregung bei 240 nm (5.17 eV) und 250 nm (4.96 eV). Die Verteilung der Lumineszenzzentren entspricht hier dem Tiefenprofil eines DI. Die ungefähre energetische Lage der Emissionsbanden für Si, Ge und Sn-implantiertes SiO_2 ist angegeben. Die Normierung erfolgte so, daß die Korrekturfunktion f_K für 240 nm die Bedingung

$$\frac{1}{E_e - E_a} \int_{E_a}^{E_e} f_K dE = 1$$

mit $E_a = 1.6$ eV und $E_e = 4.7$ eV erfüllt.

Abb 5.1 zeigt exemplarisch die Korrekturfunktion für eine 500 nm dicke Oxidschicht. Es wird deutlich, daß sich die relative Intensität von PL-Peaks im blauen Spektralbereich (Si) gegenüber denen im violetten (Ge, Sn) erhöht, wenn das gemessene Spektrum mit der Korrekturfunktion multipliziert wird. Beispielsweise stellt sich die Frage, ob ein aus zwei Komponenten bestehendes Spektrum (z.B. Ge-implantiertes SiO_2 , siehe Abschnitt 5.2.3) korrekt beschrieben wird oder nicht. Die Auswertung korrigierter und nicht korrigierter Spektren zeigt, daß die Parameter dieser Peaks nur dann sehr ungenau bzw. falsch ermittelt werden, wenn beide sehr dicht benach-

bart sind und sich in ihrer Intensität erheblich unterscheiden. In diesem Falle ist die durch den entsprechenden Fitalgorithmus hervorgerufene Unsicherheit der kleinen Komponente sowohl bei korrigierten als auch unkorrigierten Spektren so groß, daß ohnehin keine quantitative Aussage mehr getroffen werden kann.

Schließlich sei bemerkt, daß die Ergebnisse der Interferenzkorrektur mit den Ergebnissen der Arbeit [Holm82] in den dort behandelten Fällen (SiO_2 auf Si unter idealisierten Bedingungen) übereinstimmen. Die durch die Benutzung einer näherungsweise Interferenzkorrektur verursachten Unsicherheiten werden geringer eingeschätzt als diejenigen, die durch die Vernachlässigung von Interferenzeffekten entstehen würden.

5.1.3 Datenauswertung

Wie bereits erwähnt, läßt sich den einzelnen Meßpunkten eines Spektrums kein sinnvolles Gaußsches Fehlerquadrat zuordnen. Dadurch wird verhindert, die Güte eines bestimmten Fits mit Hilfe der reduzierten χ^2 -Funktion zu bewerten. Zur Durchführung eines Fits ist zwar die Festlegung eines Fehlers notwendig, aber die konkrete Wahl bleibt in jedem Falle willkürlich. Bei der Anpassung eines Modells mit mehreren freien Parametern wird versucht, die χ^2 -Funktion zu minimieren. Ob der Algorithmus das globale Minimum findet oder sich in einem lokalen Minimum festläuft, ist mathematisch nicht entscheidbar. Ein weiteres Problem könnte darin bestehen, daß die χ^2 -Funktion sehr flach verläuft und große Änderungen der Parameterwerte nur geringfügige Änderungen der χ^2 -Funktion verursachen. Dies ist insbesondere der Fall, wenn „zu viele“ freie Parameter benutzt werden. Für die praktische Handhabung wurde ein Fit für gut befunden, wenn sich der Wert der χ^2 -Funktion mit fortlaufender Iteration einem bestimmten Wert näherte und die Modellkurve visuell gut mit der Meßkurve übereinstimmte. Der hier zur Anpassung benutzte Levenberg-Marquard-Algorithmus liefert zwar für jeden Parameterwert ein gewisses Fehlerintervall, das aber aus den oben genannten Gründen ebenfalls willkürlich ist und allenfalls für relative Vergleiche benutzt werden kann.

Zur Modellierung wurde angenommen, daß sich die Spektren auf der Energieskala als Summe Gaußscher Verteilungen darstellen lassen. Dabei ergibt sich das Problem, mit wie vielen Peaks ein Spektrum dargestellt werden soll. Bekanntlich führt das Hinzufügen weiterer freier Parameter immer zur Erniedrigung der χ^2 -Funktion, aber nicht notwendigerweise zur Verbesserung des Fits. Glücklicherweise muß nicht jedes Spektrum isoliert für sich angepaßt werden. Es sei angenommen, daß sich die Spektren für ein bestimmtes implantiertes Ion immer aus den gleichen Peaks zusammensetzen, deren Charakteristika wie Position E_i , FWHM σ_i und Intensität I_i jedoch leicht mit der Dosis D und der Ausheiltemperatur T_A variieren können. Dabei spielt die Peakposition gegenüber der FWHM und der Intensität eine wichtigere Rolle, da sie die verschiedenen Peaks identifiziert und im allgemeinen auch am genauesten ermittelt werden kann. Da ein simultanes Anpassen aller in Frage kommender Spektren nicht möglich war, wurde versucht, die Datenauswertung iterativ durchzuführen. Im ersten Schritt wurden die Spektren mit einer Minimalzahl von Peaks ohne Beschränkung der freien Parameter angepaßt, und die sich daraus ergebenden Häufungspunkte von Peakpositionen benutzt, um die Anzahl der notwendigen Peaks und deren Position festzulegen.

Das Fitproblem läßt sich nun so formulieren: Alle Spektren werden mit einer bestimmten Anzahl von Peaks gefittet, deren Parameter Funktionen von D und T_A sind:

$$E_i = f(D, T_A) \quad \sigma_i = g(D, T_A) \quad I_i = h(D, T_A) \quad (5.2)$$

Um eine analytische Formulierung von f , g und h zu vermeiden, wurde ihr Verlauf mit D und T_A visuell bewertet und eventuell durch das Setzen von Randbedingungen für den nächsten Fit

korrigiert. Dabei wurde gefordert, daß die Funktionen f , g und h nur schwach von D und T_A abhängen sollen und ihr Verlauf möglichst monoton ist oder maximal einen Extremwert aufweist. Dieses schrittweise Korrigieren und Anpassen ähnelt dem Gradientenverfahren zur Suche eines Minimums in einem mehrdimensionalen Parameterraum, bei dem alle Parameter bis auf einen fixiert werden und das Minimum nur in Abhängigkeit von einem freien Parameter gesucht wird.

Welche Aussagen lassen sich nun mit welcher Sicherheit aus den Ergebnissen der oben beschriebenen Fitprozedur treffen? Wie bereits ausgeführt, ist es nicht sinnvoll, für die einzelnen Peakparameter einen Wert mit einer bestimmten Unsicherheit anzugeben. Dagegen läßt sich fast immer ein relativ enges Intervall angeben, in dem der entsprechende Peakparameter aller Voraussicht nach liegt. Die qualitative Abhängigkeit der Peakparameter von T_A ließ sich ebenfalls gut beschreiben. Dagegen war die Abhängigkeit von D meist nicht signifikant.

5.1.4 Leistungseffizienz

Will man die Ergebnisse der eigenen Arbeit mit den Ergebnissen anderer Autoren vergleichen, stößt man auf das Problem, daß die Lumineszenzintensität in der Literatur fast ausschließlich in willkürlichen Einheiten angegeben wird. Neben der Möglichkeit, die Lumineszenzintensität auf eine Vergleichsprobe zu normieren, bietet sich die Angabe einer Lumineszenzausbeute an, die sich durch den Vorteil auszeichnet, von der Anregungsintensität, den geometrischen Verhältnissen während der Messung etc. unabhängig zu sein. Der Begriff „Ausbeute“ ist je nachdem, inwieweit interne Prozesse wie Energiedispersion oder Absorptionsverluste im Inneren der Probe berücksichtigt werden, unterschiedlich definiert.

In dieser Arbeit wird der Begriff *Leistungseffizienz*, oder kurz *Effizienz*, benutzt und als Verhältnis zwischen emittierter Leistung P_{em} und eingebrachter Leistung P_{ex} definiert. Die Anregung kann sowohl optisch (PL) als auch elektrisch (EL) erfolgen. Absorptionsverluste und Energiedispersion im Inneren der Probe gehen in die Effizienz η ein; die Probe wird als „Black Box“ betrachtet.

In der Literatur wird häufig der Begriff *externe Quanteneffizienz* (EQE) verwendet. Darunter versteht man das Verhältnis $\eta_{EQE} = n_{em}/n_{ex}$ mit n_{em} als Zahl der ausgestrahlten Photonen und n_{ex} als Zahl der anregenden Teilchen. Im Falle der PL ist demnach η_{EQE} das Verhältnis ausgestrahlter zu eingestrahlt Photonen, im Falle der EL das Verhältnis ausgestrahlter Photonen zu injizierten Elektronen. Bei elektrischer Anregung ist zu beachten, daß ein Elektron unter geeigneten Bedingungen (z.B. hohe angelegte Spannung) mehr als ein Lumineszenzzentrum anregen kann. Wie bei der Leistungseffizienz wird die Probe bei der EQE als „Black Box“ betrachtet. Berücksichtigt man aber innere Prozesse wie Energiedispersion und Absorptionsverluste, erhält man die *interne Quanteneffizienz* η_{IQE} . Es gilt die Ungleichung

$$\eta_{IQE} > \eta_{EQE} > \eta. \quad (5.3)$$

Zur Bestimmung der Effizienz muß P_{ex} und P_{em} ermittelt werden. Bei EL-Spektren bestimmt

λ (nm)	P_{ex} (μW)	τ_D
240	35.6	0.00985
250	71.6	0.0172

Tabelle 5.1: Apparative Anregungsleistung für die PL-Messung und Empfindlichkeitsfaktor der Referenzdiode τ_D bei den beiden verwendeten Anregungsenergien 5.17 eV (240 nm) und 4.96 eV (250 nm).

sich P_{ex} zu $P_{ex} = U \cdot I$, bei PL-Spektren kann P_{ex} der Tabelle 5.1 entnommen werden. Die

λ (nm)	f_{LE} (pWnm ⁻¹)	$\frac{\Delta f_{LE}}{f_{LE}}$	λ (nm)	f_{LE} (pWnm ⁻¹)	$\frac{\Delta f_{LE}}{f_{LE}}$
270	6.83	0.86	390	2.4	0.52
280	3.97	1.1	400	1.7	0.45
290	0.777	1.07	410	0.56	0.47
300	0.626	1.1	420	1.75	0.54
310	2.07	1.07	430	1.8	0.54
320	2.59	0.86	440	1.92	0.51
330	2.55	1.1	450	1.54	0.55
340	3.32	0.54	460	1.6	0.53
350	3.004	0.5	470	1.74	0.54
360	2.99	0.48	480	1.72	0.49
370	2.49	0.45	490	1.63	0.5
380	2.53	0.42	500	1.47	0.5

Tabelle 5.2: Werte der Korrekturfunktion

emittierte Leistung kann über

$$P_{em} \approx 3.41 \cdot r_D \cdot \sum_{\lambda_i} I(\lambda_i) f_{LE}(\lambda_i) \Delta \lambda_i \quad (5.4)$$

berechnet werden, wobei $I(\lambda_i)$ die Intensität des Spektrums in den hier verwendeten, relativen Einheiten bezeichnet und der Korrekturterm f_{LE} in Tabelle 5.2 aufgelistet ist. Bei PL-Messungen wurde die Intensität der Lampe automatisch mit berücksichtigt. Um die in Tabelle 5.2 aufgelistete Korrekturfunktion zu verwenden, muß das PL-Spektrum mit dem Empfindlichkeitsfaktor der Referenzdiode r_D in Tabelle 5.1 multipliziert werden. Im Falle der EL gilt $r_D = 1$. Wegen der hohen Unsicherheit des Korrekturterms kann Gleichung 5.4 in dem Bereich, wo sich f_{LE} nur wenig ändert, zu

$$P_{em} \approx 3.41 \cdot r_D A_0^\lambda f_{LE}(\lambda_0) \quad (5.5)$$

vereinfacht werden. Hierbei sind A_0^λ und λ_0 die Peakfläche und Position des entsprechenden Lumineszenzpeaks. Wurde die Peakfläche auf der Energieskala berechnet, kann diese näherungsweise mit

$$A_0^\lambda = A_0^E \frac{C_0}{E_0^2} \quad \text{mit} \quad C_0 \approx 1240 \text{ nm} \cdot \text{eV} \quad (5.6)$$

umgerechnet werden. Es ist jedoch zu beachten, daß die mit diesem Verfahren ermittelten Effizienzen eine Unsicherheit von etwa Faktor 2 im blau-violetten und etwa Faktor 3 im ultravioletten Spektralbereich besitzen.

Aufgrund der hohen Unsicherheit ist es nicht sinnvoll, das gemessene Spektrum mit dem Korrekturterm f_{LE} zu multiplizieren und die sonst üblichen relativen Einheiten durch die Einheit einer differentiellen Leistungseffizienz $d\eta/dE$ zu ersetzen, da die Schwankungen von f_{LE} das Spektrum stark verzerren würden. Will man die in dieser Arbeit gezeigten Spektren in eine Effizienz umrechnen, so wird empfohlen, die Peakfläche eines Spektrums nach Gleichung 5.5 und 5.6 umzurechnen. Für eine ausführlichere Darstellung der Bestimmung einer Leistungseffizienz sei auf den Anhang B verwiesen.

5.2 Kontinuierliche Photolumineszenz

5.2.1 Die PL von unimplantierten und Ar-implantierten SiO₂-Schichten

Dieser kurze Abschnitt soll die Frage klären, ob herstellungsbedingte Defekte von thermischem SiO₂ oder der reine Strahlenschaden einer Implantation ausreichen, um eine Lumineszenz nennenswerter Intensität zu erzeugen. In Abb. 5.2 wird deutlich, daß bereits intrinsische Defekte im SiO₂ zur Lumineszenz im sichtbaren und ultravioletten Spektralbereich führen können. Gleiches gilt für Ar-implantierte SiO₂-Schichten, die in diesem Beispiel eine erhöhte UV-Bande aufweisen. Die Spektren können in ihrer Form stark variieren, weisen jedoch immer eine sehr niedrige Intensität auf. Beiden ist gemeinsam, daß die Lumineszenz bereits bei moderaten Ausheiltemperaturen verschwindet.

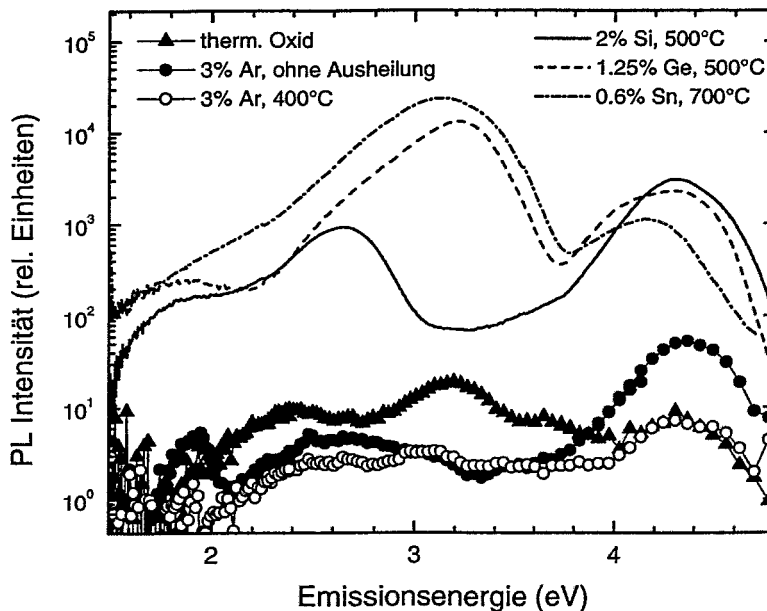


Abbildung 5.2: PL von thermischem SiO₂ im Vergleich mit Ar-, Si-, Ge- und Sn-implantierten SiO₂-Schichten.

Im Gegensatz dazu erreichen Si-, Ge- oder Sn-implantierte SiO₂-Schichten eine um zwei bis vier Größenordnungen (!) höhere Intensität, wobei das Maximum erst nach einer Ausheilung mit mindestens 400°C auftritt. Damit können intrinsische Defekte im SiO₂ sowie reine Strahlenschäden als Ursache der Lumineszenz in Si-, Ge- oder Sn-reichem Oxid ausgeschlossen werden.

5.2.2 Si-implantierte SiO₂-Schichten

Abbildung 5.3 zeigt am Beispiel einer niedrigen und einer hohen Si-Überschußkonzentration, wie sich die PL Si-implantierter SiO₂-Schichten mit zunehmender Ausheiltemperatur verändert. Die beobachteten Peaks lassen sich entsprechend ihrer energetischen Lage bzw. ihrer Herkunft vier verschiedenen Banden zuordnen: der UV-Bande, der B-Bande, der R-Bande und der NC-Bande. Die UV-Bande tritt im relativ engen Energieintervall zwischen 4.27 und 4.39 eV auf. Die B- und R-Bande befinden sich im sichtbaren Spektralbereich zwischen 2.55 und 2.73 eV (blau) bzw. zwischen 1.79 und 2.05 eV (rot). Demgegenüber variiert die Emissionsenergie der NC-Bande sehr stark und reicht von 1.4 eV (infrarot) bis fast 2.2 eV (gelb).

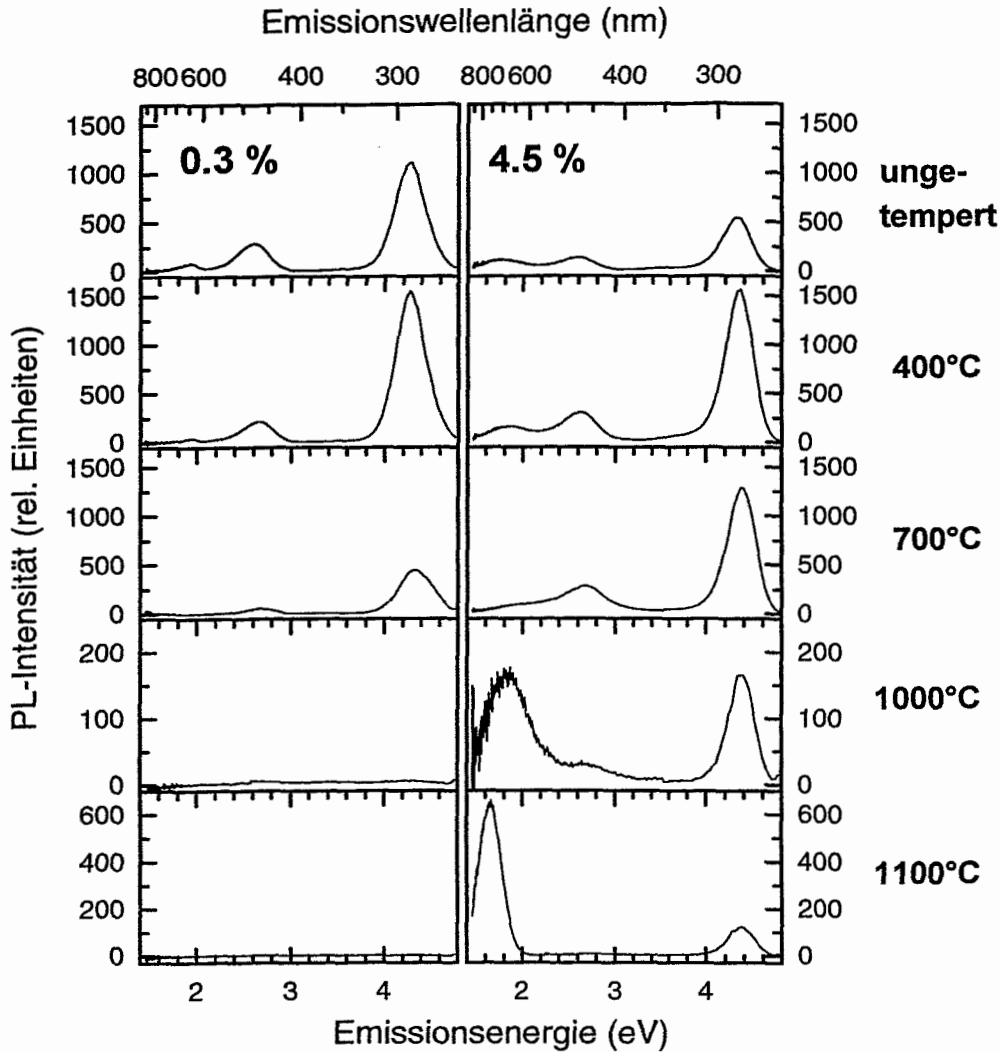


Abbildung 5.3: Das PL-Spektrum Si-implantierter SiO_2 -Schichten für eine Si-Überschußkonzentration von 0.3 % (linke Spalte) und 4.5 % (rechte Spalte) als Funktion der Ausheiltemperatur ($\lambda_{ex} = 250 \text{ nm}$). Man beachte den teilweise unterschiedlichen Wertebereich der PL-Intensität in den einzelnen Teilbildern. Die in relativen Einheiten angegebene Intensität der Spektren ist untereinander vergleichbar.

5.2.2.1 UV- und B-Bande

Das PL-Spektrum aus Abb. 5.3 wird in seiner Intensität durch die UV-Bande dominiert. Weiterhin ist zu sehen, daß die ultraviolette Emission sehr oft durch die etwas schwächere Emission der B-Bande begleitet wird. Es stellt sich daher die Frage, ob diese beiden Emissionsbanden durch ein und dasselbe Zentrum verursacht werden.

Um diese Frage zu klären, betrachte man die in Abb. 5.4 dargestellten Anregungsspektren. Die UV-Bande zeigt bei einer Si-Überschußkonzentration von 0.3 und 3 % einen Anregungspeak bei 5.05 eV, während der Anregungspeak der B-Bande bei 0.3 % zu 4.9 eV verschoben ist. Der

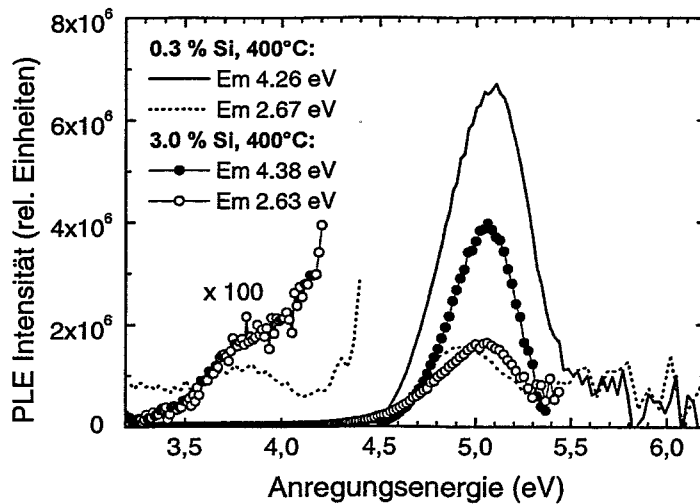


Abbildung 5.4: PLE-Spektren Si-implantierter SiO_2 -Schichten für eine Si-Überschußkonzentration von 0.3 bzw. 3 % und eine Ausheiltemperatur von 400°C . In den PLE-Spektren der B-Bande ist in 100facher Vergrößerung ein schwacher Anregungspeak bei 3.8 eV zu sehen.

Anregungspeak der B-Bande bei 3 % liegt zwar ebenfalls bei 5.05 eV, zeigt jedoch eine deutliche Schulter auf der niederenergetischen Seite. Damit läßt sich die folgende Hypothese aufstellen: Die UV-Bande und die B-Bande werden durch ein Lumineszenzzentrum verursacht, dessen molekulares Energieniveauschema, wie in Kapitel 2.5 beschrieben, aus einem Grundzustand S_0 und den ersten angeregten Zuständen S_1 und T_1 besteht. Der Anregungspeak bei 5.05 eV sowie die UV- und B-Bande entsprechen dann den Übergängen $S_0 \rightarrow S_1$, $S_1 \rightarrow S_0$ und $T_1 \rightarrow S_0$. Der nur sehr schwach ausgeprägte Anregungspeak um 3.8 eV läßt sich dem Übergang $S_0 \rightarrow T_1$ zuordnen. Die B-Bande wird jedoch von einer weiteren Emission im blauen Spektralbereich überlagert, deren Anregungsenergie etwas geringer als 5.05 eV ist. Der Emissionspeak der B-Bande läßt sich nicht in zwei oder mehrere Komponenten zerlegen. Ob diese weitere Lumineszenz lediglich durch eine geringfügig veränderte Konfiguration des Lumineszenzzentrums oder durch Defekte verursacht wird, läßt sich anhand der vorliegenden spektroskopischen Daten nicht entscheiden.

Die Hypothese, daß die B- und UV-Bande gleichen Ursprungs wären, jedoch durch eine weitere Emission im blauen Spektralbereich schwach überlagert werden, erhärtet sich bei einer genaueren Spektrenauswertung. Abb. 5.5a und 5.5b zeigen die PL-Effizienz der UV- bzw. B-Bande als Funktion der Ausheiltemperatur. Das Verhalten beider Emissionspeaks ist ähnlich: bei geringem Si-Überschuß sinkt die PL-Effizienz kontinuierlich mit der Ausheiltemperatur, während bei höherem Si-Überschuß ein Maximum bei einer optimalen Ausheiltemperatur T_{Opt} erreicht wird. Maximale Intensität wird dabei im Konzentrationsbereich von 0.67 bis 2 % und bei Ausheiltemperaturen von $400 \dots 500^\circ\text{C}$ erreicht. Bei genauerer Betrachtung fällt aber auf, daß T_{Opt} für die UV-Bande geringfügig, aber systematisch höher liegt als für die B-Bande. Diese Differenz könnte man damit erklären, daß die die B-Bande schwach überlagernde Lumineszenz vor allem im ungetemperten Zustand und bei niedrigen Ausheiltemperaturen präsent ist, während sie bei höheren Ausheiltemperaturen verschwindet.

Die konkrete Mikrostruktur des Lumineszenzzentrums bestimmt die Energie, bei der ein Photon emittiert wird. Die im Spektrum gemessene Peakposition und Halbwertsbreite spiegeln daher die Verteilung der Mikrostruktur wieder, d.h. die Verteilung von Bindungswinkeln, Bindungslängen etc. Wie in Abb. 5.5c ersichtlich, steigt die Peakposition beider Emissionsbanden mit zunehmender Ausheiltemperatur leicht an. Eine Deutung dieses Trends ist nur möglich, wenn die Abhängigkeit der Emissionsenergie von bestimmten Konfigurationsparametern des Lumineszenzzentrums bekannt ist. Diese Information erhält man aber, wenn überhaupt, nur durch

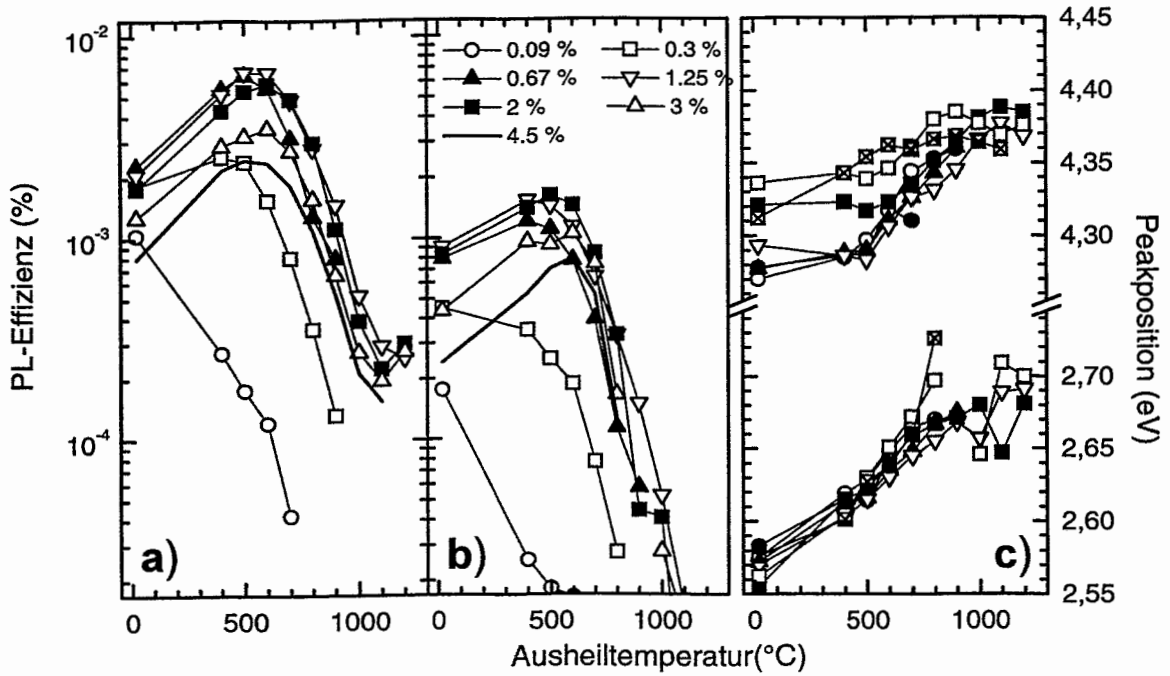


Abbildung 5.5: PL-Effizienz der UV- (a) und der B-Bande (b) sowie deren Peakposition (c) für verschiedene Si-Überschußkonzentrationen und Ausheiltemperaturen.

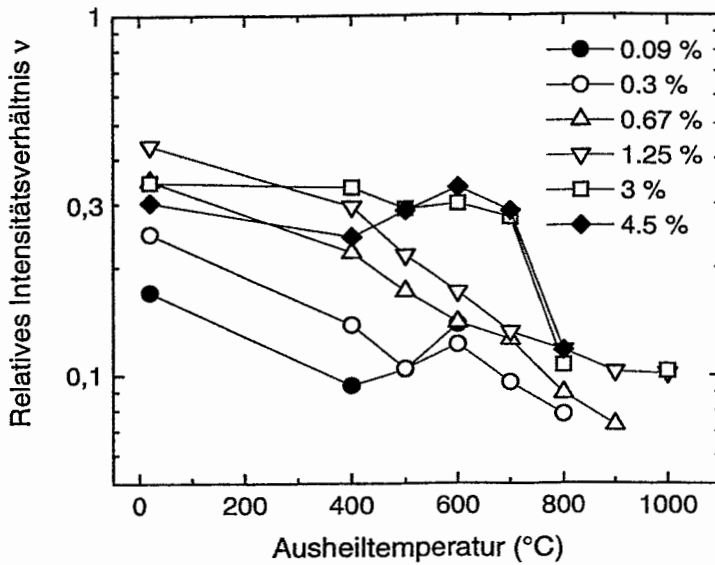


Abbildung 5.6: Relatives Intensitätsverhältnis ν der B- zur UV-Bande in Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur.

umfangreiche numerische Berechnungen.

Die Breite der Lumineszenz ist ein Maß für die Streubreite möglicher Konfigurationen eines Lumineszenzzentrums. Mit zunehmender Ausheiltemperatur wird diese Streubreite eingeschränkt; energetisch weniger günstige Konfigurationen wandeln sich in energetisch günstigere um. Als Folge davon sollte man eine Verringerung der Halbwertsbreite beobachten, die in eini-

gen Fällen auch zu erkennen ist. Die Schwankungen der Halbwertsbreite sind aber bei beiden Banden so groß, daß dieser Trend nicht als signifikant bezeichnet werden kann.

Ein weiteres Indiz für den gemeinsamen Ursprung der B- und UV-Bande liefert der Verlauf des relativen Intensitätsverhältnisses ν beider Banden über der Ausheiltemperatur. Werden die UV- und die B-Bande von dem gleichen Zentrum verursacht, so sollte sich dieses Verhältnis im Idealfall nicht mit der Ausheiltemperatur oder der Si-Überschußkonzentration ändern. Wie in Abb. 5.6 ersichtlich, liegt ν zwar fast ausschließlich zwischen 0.1 und 0.5, zeigt aber mit zunehmender Ausheiltemperatur und sinkendem Si-Überschuß einen fallenden Trend. Im ungetemperten Zustand und bei niedrigen Ausheiltemperaturen wird ν aufgrund der zusätzlichen Emission im blauen Bereich zu hoch geschätzt, während es bei hohen Ausheiltemperaturen zusehends schwieriger wird, die B-Bande vom Untergrund zu trennen. Für eine detailliertere Betrachtung sei auf das Kapitel 5.2.3.3 verwiesen.

5.2.2.2 R- und NC-Bande

Die mit sehr geringer Intensität vorkommende R-Bande zeigt das typische Verhalten defektartiger Lumineszenzzentren (siehe Abb. 5.3). Mit zunehmender Ausheiltemperatur sinkt die Intensität der R-Bande und ist oberhalb 600...700°C vollständig verschwunden.

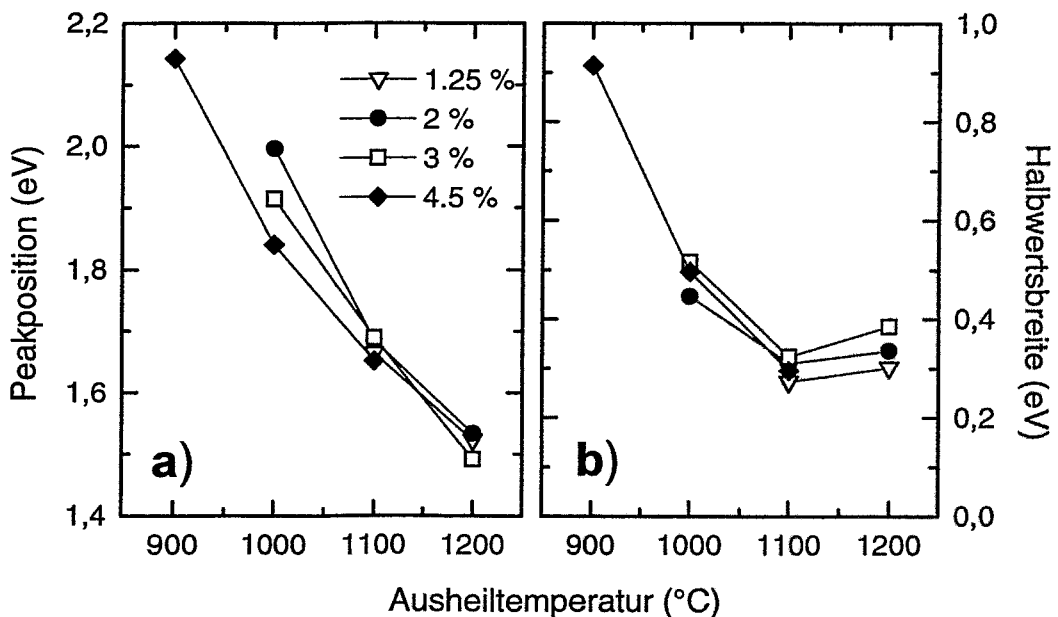


Abbildung 5.7: Peakposition (a) und Halbwertsbreite (b) der NC-Bande als Funktion der Ausheiltemperatur und Si-Überschußkonzentration.

Die NC-Bande, die nur bei hohen Ausheiltemperaturen und hohen Si-Überschußkonzentrationen zu finden ist, zeigt ein wesentlich interessanteres Verhalten. Nach den Ausführungen des Kapitels 2.4.1 zu den Effekten des QC erwartet man mit steigender Clustergröße eine Verringerung der Emissionsenergie (siehe Abb. 2.5). Da bei kleinen Clustern geringe Größenschwankungen bereits eine drastische Änderung der Emissionsenergie bewirken, sollte die PL eines Clusterensembles mit kleinen Durchmessern sehr breit sein. Mit zunehmender Clustergröße werden die Auswirkungen einer Größenschwankung auf die Emissionsenergie immer geringer, und man beobachtet eine Verringerung der Halbwertsbreite der PL. Abb. 5.7 zeigt die Abhängig-

keit von Peakposition (a) und Halbwertsbreite (b) der NC-Bande von der Ausheiltemperatur. Mit zunehmender Ausheiltemperatur erwartet man ein Anwachsen der Cluster, und in völliger Übereinstimmung mit den Voraussagen des QC-Effekts verringern sich die Emissionsenergie und die Halbwertsbreite der PL. Die geringe Variation der Emissionsenergie mit dem Si-Überschuß für eine feste Ausheiltemperatur deutet darauf hin, daß ein erhöhtes Angebot an Si bei gleichen Ausheiltemperaturen primär nur zur Erhöhung der Clusterzahl, aber nicht zur Vergrößerung der Cluster selbst führt. Schließlich sei noch darauf hingewiesen, daß die hier zur Anpassung der NC-Bande benutzte Gaußverteilung nur eine äußerst grobe Näherung ist.

5.2.3 Ge-implantierte SiO₂-Schichten

Ge-implantierte SiO₂-Schichten erreichen im Vergleich zum Si wesentlich höhere PL-Intensitäten. Abb. 5.8 zeigt die Abhängigkeit des PL-Spektrums Ge-implantierter SiO₂-Schichten von der Ausheiltemperatur für Ge-Konzentrationen von 0.3 und 4.5 %. Wie bei Si besteht das Spektrum aus einer UV-Bande und einer Bande im sichtbaren Spektralbereich, die aber gegenüber Si zu höheren Energien verschoben ist. Diese violette Bande besteht aus mindestens zwei Komponenten und weist im Vergleich zur UV-Bande eine höhere Intensität auf.

Im ungetemperten Zustand taucht ebenfalls eine schwache rote Bande bei 1.9 eV auf, die aber schon bei moderaten Ausheiltemperaturen verschwindet. Eine auf Nanocluster zurückführbare Lumineszenzbande konnte in dem hier untersuchten Meßbereich von 1.38 bis 4.77 eV allerdings nicht festgestellt werden.

5.2.3.1 B-Bande: Peakposition und Halbwertsbreite

In allen Spektren war es notwendig, das Spektrum im Bereich von 2.5 bis 3.7 eV (335 bis 500 nm) durch drei Peaks anzufitten. Während man die beiden Peaks mit der höheren Energie auf ein durch die Präsenz von Ge verursachtes Lumineszenzzentrum zurückgeführt werden kann, wird der Peak mit der niedrigsten Energie einem Lumineszenzzentrum zugeordnet, das sich nur durch Si-Überschuß bildet. Dessen Peakposition wird während der Anpassung bei einem Wert von 2.7 eV festgehalten, wie er für Si-implantierte SiO₂-Schichten typisch ist. Die beiden anderen Peaks werden entsprechend ihrer energetischen Lage als Niedrigenergiepeak (NE-Peak) bzw. Hochenergiepeak (HE-Peak) bezeichnet.

Abb. 5.9 stellt die charakteristischen Parameter Position, Halbwertsbreite und Intensität der beiden Peaks als Funktion der Ausheiltemperatur dar. Die Abbildung beschränkt sich exemplarisch auf drei verschiedene Ge-Konzentrationen. Der HE-Peak liegt dabei im Bereich 3.2 bis 3.45 eV (360 bis 387 nm) und der NE-Peak im Bereich 2.85 bis 3.15 eV (394 bis 435 nm). Mit steigender Ausheiltemperatur ist ein deutlicher Anstieg der Peakposition zu verzeichnen, der beim NE-Peak stärker als beim HE-Peak ausgeprägt ist. Dieser Anstieg verläuft bei geringen Ge-Konzentrationen flacher, und ist für den HE-Peak bei Ge-Konzentrationen kleiner 2 % nicht mehr signifikant.

Abb. 5.9d-f zeigen den Verlauf der Halbwertsbreite als Funktion der Ausheiltemperatur. Mit zunehmender Ausheilung verringert sich zunächst die Halbwertsbreite, die jedoch bei hohen Temperaturen wieder leicht ansteigt. Nach den Ausführungen des Abschnitts 5.2.2.1 stellt die Halbwertsbreite ein Maß für die Streubreite möglicher Konfigurationen des Lumineszenzzentrums dar, und die Verringerung der Halbwertsbreite entspricht dem erwarteten Verlauf. Die bei hohen Ausheiltemperaturen wieder einsetzende Verbreiterung ist ein Indiz für neue Konfigurationen, die das Lumineszenzzentrum bilden kann. Eine solche neue Konfiguration wäre beispielsweise die Oberfläche eines Ge-Clusters. Mit dieser Interpretation ließe sich auch das Verhalten der Halbwertsbreite des NE-Peaks bei einer Ge-Konzentration von 6.3 % erklären:

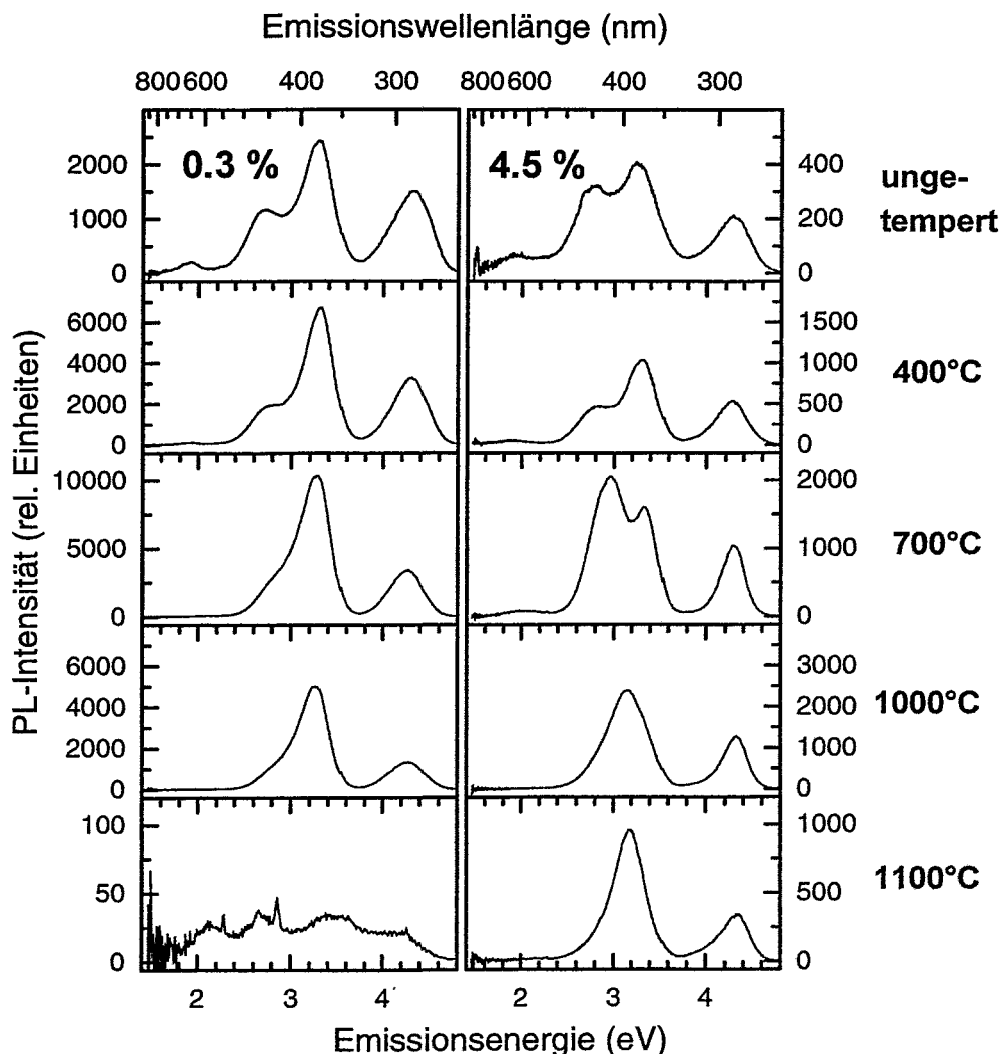


Abbildung 5.8: Das PL-Spektrum Ge-implantierter SiO_2 -Schichten für eine Ge-Konzentration von 0.3 % (linke Spalte) und 4.5 % (rechte Spalte) als Funktion der Ausheiltemperatur ($\lambda_{ex} = 240 \text{ nm}$). Man beachte den teilweise unterschiedlichen Wertebereich der PL-Intensität in den einzelnen Teilbildern. Die in relativen Einheiten angegebene Intensität der Spektren ist untereinander vergleichbar.

Der Übergang von isolierten Zentren im Volumen zu Zentren auf der Clusteroberfläche findet bereits bei Temperaturen von 700 bis 800°C statt (Abb. 5.9f). Bei dieser Interpretation wird allerdings angenommen, daß die energetische Verschiebung der Lumineszenz beim Übergang zur Clusteroberfläche so gering ist, daß kein eigener Peak bei der Spektrenanpassung nötig ist.

Weiterhin kann man feststellen, daß die Breite des HE-Peaks in den meisten Fällen geringer als die des NE-Peaks ist.

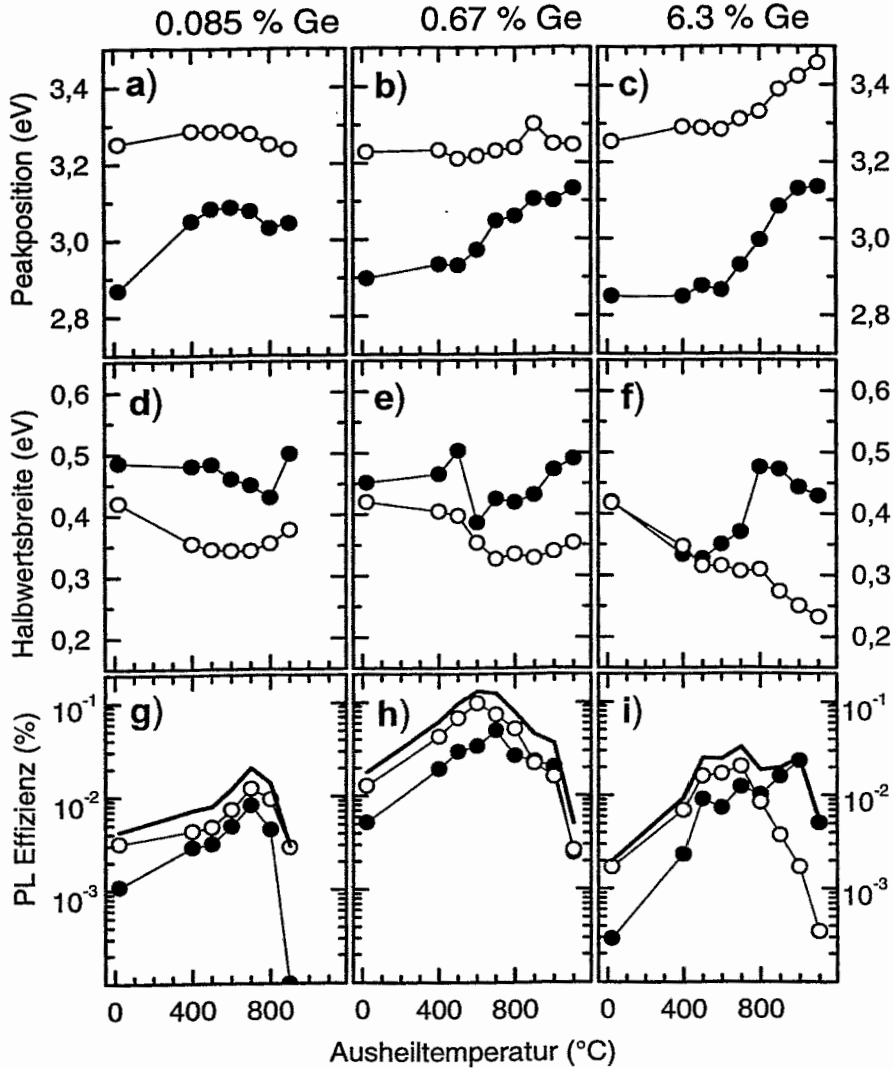


Abbildung 5.9: Abhängigkeit der Parameter Peakposition (a-c), Halbwertsbreite (d-f) und Intensität (g-i) des NE- (schwarze Kreise) und HE-Peaks (offene Kreise) von der Ausheiltemperatur. Die Abbildung beschränkt sich auf Ge-Konzentrationen von 0.085 % (a,d,g), 0.67 % (b,e,h) und 6.3 % (c,f,i). Die Intensität wurde in eine PL-Effizienz umgerechnet. Dabei entspricht die durchgezogene Linie in (g-i) der Summe der einzelnen PL-Effizienzen.

5.2.3.2 B-Bande: Intensität

Abb. 5.9g-i zeigen die in eine PL Effizienz umgerechnete Intensität des NE- und HE-Peaks als Funktion der Ausheiltemperatur. Leider unterscheiden sich die Abhängigkeiten dieser beiden Peaks von Ausheiltemperatur und Ge-Konzentration so geringfügig, daß keine Zuordnung dieser Peaks zu einer bestimmten Mikrostruktur des Lumineszenzzentrums, wie $\equiv\text{Si-Ge}\equiv$ oder $\equiv\text{Ge-Ge}\equiv$, möglich ist. Der NE-Peak zeigt zwar eine leichte Tendenz, bei höheren Ge-Konzentrationen und Ausheiltemperaturen zu dominieren, aber mit Ausnahme der höchsten Ge-Kon-

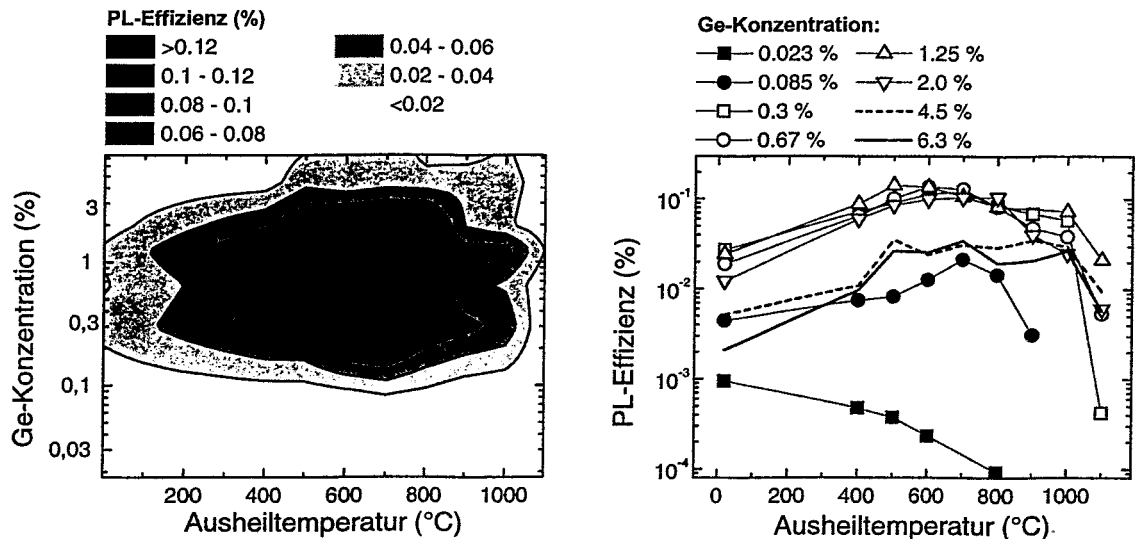


Abbildung 5.10: Abhängigkeit der PL-Intensität als Funktion der Ausheiltemperatur und der Ge-Konzentration. Darstellung als Höhenplot (links) und als Kurven konstanter Ge-Konzentration (rechts).

zentration ist dieser Trend viel zu gering, um als Indiz für eine bestimmte Mikrostruktur zu dienen.

Durch die Auswertung integraler Lumineszenzmerkmale, wie z.B. die Gesamtintensität der B-Bande, können wesentlich eindeutigere Aussagen getroffen werden. Abb. 5.10 zeigt links die Intensität der B-Bande als Funktion der Ge-Konzentration und der Ausheiltemperatur. Die optimale Ge-Konzentration liegt dabei im Bereich 0.2 bis 2 %, die optimale Ausheiltemperatur im Bereich 500 bis 800°C . Auf der rechten Seite von Abb. 5.10 sind Schnitte konstanter Ge-Konzentration dargestellt, anhand derer eine weitere interessante Eigenschaft deutlich wird: Hohe Ge-Konzentrationen sind „resistenter“ gegenüber Hochtemperaturausheilung. Während bei niedrigen Konzentrationen im Bereich 0.023 bis 0.3% die Temperatur, bei der die PL sehr stark oder sogar vollständig zurückgegangen ist, von 800 auf 1100°C ansteigt, weisen höhere Konzentrationen auch bei 1100°C noch eine respektable Restintensität auf.

5.2.3.3 UV-Bande

Da ein Lumineszenzzentrum nach den bisherigen Vorstellungen sowohl zur Lumineszenz in der B- als auch UV-Bande beiträgt, sollte man für die UV-Bande eine analoge Substruktur wie bei der B-Bande erwarten. In fast allen Fällen ist jedoch die energetische Aufspaltung zu gering, um eine sinnvolle Anpassung mit zwei Peaks zu ermöglichen. Die bei Anpassung mit einem Peak gewonnene Peakposition zeigt nur geringe Variationen mit der Ausheiltemperatur und liegt im Bereich von 4.21 bis 4.35 eV (285 bis 295 nm). Analog wie bei der B-Bande sinkt die Halbwertsbreite mit steigender Ausheiltemperatur; der kurze Anstieg bei Temperaturen oberhalb 900°C ist nicht so deutlich ausgeprägt.

Aus der Intensität der UV-Bande lassen sich interessante Schlußfolgerungen ableiten, wenn die Intensitäten der B- und UV-Bande zueinander ins Verhältnis gesetzt werden. Abb. 5.11 zeigt das relative Intensitätsverhältnis ν der B- zur UV-Bande in Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur. Mit steigender Ausheiltemperatur wächst ν an, erreicht einen Sättigungswert und sinkt

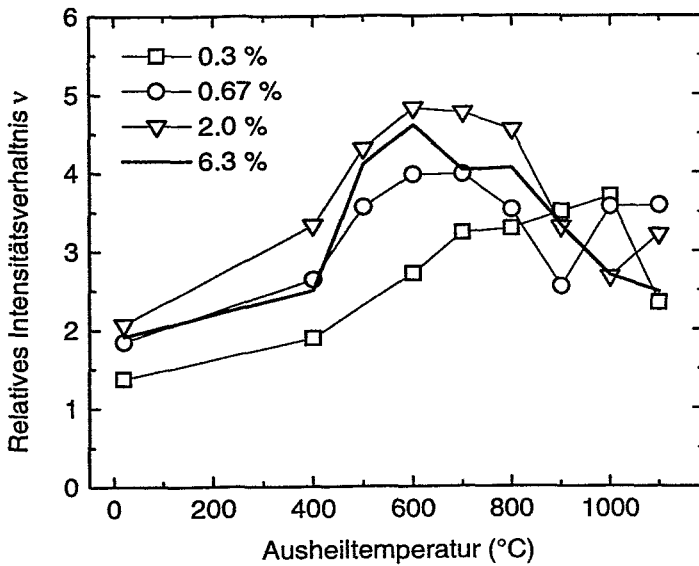


Abbildung 5.11: Relatives Intensitätsverhältnis ν der B-Bande zur UV-Bande in Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur.

bei Temperaturen oberhalb 900 bis 1000°C wieder leicht ab.

Neben der Interpretation der Temperaturabhängigkeit ist auch zu erklären, wieso die PL des optisch verbotenen Überganges $T_1 \rightarrow S_0$ eine höhere Intensität erreichen kann als die des optisch erlaubten Überganges $S_1 \rightarrow S_0$. Betrachtet man Gleichung 2.21 (Kap. 2.5.4), so ist ν zunächst einmal vom Verhältnis k_5 zu k_1 abhängig. Es wird angenommen, daß der Übergang $S_1 \Rightarrow T_1$ ein sehr effizienter Prozeß ist, der für eine wesentlich stärkere Bevölkung von T_1 gegenüber S_1 sorgen kann. Ist $k_5 \gg k_1$, kann ν sehr wohl Werte größer 1 annehmen. Weiterhin ist ν vom Anteil des strahlenden Überganges $T_1 \rightarrow S_0$ an allen zur Entvölkerung von T_1 beitragenden Übergängen abhängig. Ist dieser Anteil wie im Bsp. von Si gering ($k_3 \ll k_4$), so reicht das Verhältnis k_5 zu k_1 nicht aus, den Wert von ν über 1 zu heben. Aufgrund der SBK erhöht sich jedoch k_3 , so daß ν im Falle Ge-implantierter SiO_2 -Schichten Werte zwischen 1.5 und 5 annimmt.

Für die Temperaturabhängigkeit von ν ist entscheidend, daß k_4 empfindlich von der Defektdichte, insbesondere von Defekten mit ungepaarten Elektronen, abhängt. Demgegenüber sollten sich die Übergänge k_1 , k_3 und k_5 bei wechselnder Defektdichte nicht so stark ändern. ν kann demnach als Indikator für die Defektdichte im Material dienen: Je größer ν , desto geringer die Defektdichte. Mit zunehmender Ausheiltemperatur sinkt die Anzahl von Defekten, die zu verstärkter nichtstrahlender Rekombination führen könnten. Als Konsequenz dessen steigt ν an, bis eine gewisse Minimalkonzentration von Defekten erreicht ist. Bei hohen Temperaturen kommt es zur verstärkten Auflösung lokaler Lumineszenzzentren und zur Bildung von Ge-Clustern. Wenn bei hohen Ausheiltemperatures noch Lumineszenzzentren existieren, werden sich diese vorzugsweise an der Clusteroberfläche oder in der Übergangsschicht vom Cluster zur SiO_2 -Matrix befinden. Wenn man annimmt, daß die Umgebung dieser Lumineszenzzentren „gestörter“ als die Umgebung der isoliert im Volumen vorkommenden Lumineszenzzentren ist, kann das Absinken von ν bei hohen Ausheiltemperatures mit der Abnahme von isolierten Lumineszenzzentren im Volumen und der Zunahme von Lumineszenzzentren in unmittelbarer Nähe der Clusteroberfläche erklärt werden. Es sei jedoch erwähnt, daß die Temperaturabhängigkeit von ν lediglich eine Hypothese darstellt.

5.2.3.4 Anregungsspektren

Prinzipiell erwartet man im Anregungsspektrum der B- und UV-Bande den Übergang $S_0 \rightarrow S_1$. Desgleichen sollte der Übergang $S_0 \rightarrow T_1$ auftauchen, allerdings mit stark verminderter Intensität. Dieses Verhalten wird in Abb. 5.12 bestätigt. Der dem Übergang $S_0 \rightarrow S_1$ zugeordnete

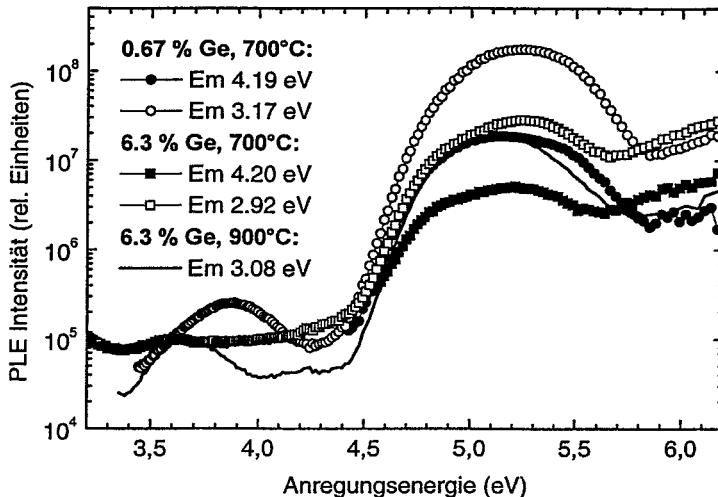


Abbildung 5.12: Anregungsspektren Ge-implantierter SiO_2 -Schichten bei einer Ausheiltemperatur von 700°C und einer Ge-Konzentration von 0,67 % (Kreise) bzw. 6,3 % (Quadrate). Die durchgezogene Linie zeigt das Anregungsspektrum von Ge-implantierten SiO_2 mit 3 % Ge und bei 900°C . Die Emissionswellenlängen wurden entsprechend der Legende fixiert.

Anregungspeak läßt sich wieder in zwei Komponenten zerlegen, deren Peakposition sich im Bereich 4,9 bis 5,15 eV (240 bis 253 nm) bzw. 5,2 bis 5,6 eV (220 bis 238 nm) bewegt. Die maximale Intensität liegt aber fast ausschließlich im Bereich 5,1 bis 5,3 eV, weshalb die bei allen Emissionsspektren verwendete Anregungswellenlänge von 240 nm (5,17 eV) gewählt wurde. Der dem Übergang $S_0 \rightarrow T_1$ zugeordnete und um drei Größenordnungen schwächere Anregungspeak im Energieintervall von 3,5 bis 4,0 eV (310 bis 355 nm) läßt sich nicht weiter in Komponenten zerlegen, zeigt aber bei höheren Ge-Konzentrationen einen interessanten Nebeneffekt: Während der Anregungspeak bei moderaten Ausheiltemperaturen (Abb. 5.12, 6,3 %, 700°C) kaum aus dem Untergrund aufragt, ist derselbe Peak bei 900°C deutlich sichtbar.

Ähnlich wie bei der UV-Bande lassen sich keine charakteristischen Abhängigkeiten der Peakparameter von der Ausheiltemperatur und der Ge-Konzentration feststellen. Weiterhin fällt auf, daß die Anregungsspektren der UV- und B-Bande einer Probe im Energiebereich oberhalb 4,5 eV bis auf einen Skalierungsfaktor identisch verlaufen. Dies unterstreicht die Annahme, daß die PL der B- und UV-Bande von ein und demselben Lumineszenzzentrum hervorgerufen wird.

5.2.3.5 Implantation bei Raumtemperatur

Zum Schluß soll noch auf den Unterschied in der PL von Ge-implantierten SiO_2 -Schichten eingegangen werden, die bei RT bzw. bei LNT implantiert wurden. Abb. 5.13 zeigt die PL-Effizienz Ge-implantierter SiO_2 -Schichten mit einer DI Ge, 3%, für LNT und RT in Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur. In beiden Fällen steigt die PL-Effizienz mit der Ausheiltemperatur an, erreicht bei 500°C bzw. 600°C ein Maximum und fällt bei höheren Ausheiltemperaturen wieder ab. Die bei LNT implantierten Oxidschichten zeigen bei 500°C bzw. 600°C eine mehr als doppelt so hohe PL-Intensität wie die bei RT implantierten SiO_2 -Schichten, obwohl mittels TEM keine Unterschiede feststellbar waren (Kap. 4.2.1). Hinsichtlich der Spektrenform gibt es keine signifikanten Unterschiede zwischen den bei LNT und den bei RT implantierten Oxiden.

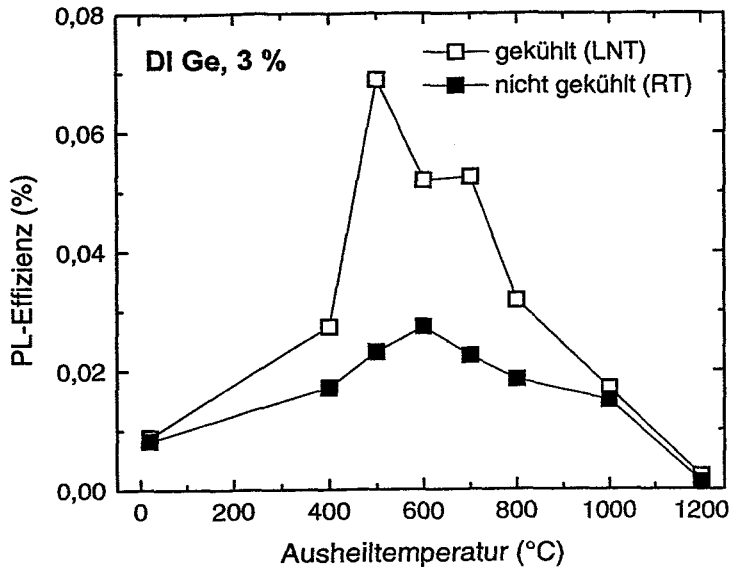


Abbildung 5.13: PL-Effizienz Ge-implantierter SiO_2 -Schichten mit DI Ge, 3%, für LNT (weiße Quadrate) und RT (schwarze Quadrate) in Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur.

Es wird angenommen, daß die Implantation bei LNT im Vergleich zur Implantation bei RT wegen der geringeren Rekonstruktion des SiO_2 -Netzwerkes während der Implantation eine größere Menge von E' -Zentren erzeugt. Eine größere Menge von E' -Zentren würde dann bei Ausheiltemperaturen von 400 bis 800°C zu einer größeren Zahl von Lumineszenzzentren führen. Diese Überlegungen müßten aber noch durch experimentelle Belege, wie z.B. ESR-Untersuchungen an implantierten, aber nicht ausgeheilten SiO_2 -Schichten, untermauert werden.

5.2.4 Sn-implantierte SiO_2 -Schichten

Sn-implantierte SiO_2 -Schichten erreichen gegenüber Ge eine nochmalige Intensitätssteigerung, die aber mit 50 bis 100 % relativ gering ausfällt. Die Spektren in Abb. 5.14 bestehen ebenfalls aus einer B- und einer UV-Bande, wobei erstere eine zu Ge analoge Substruktur aufweist. Augenfällig ist jedoch die deutlich niedrigere Intensität der UV-Bande.

Die Spektren Ge- und Sn-implantierter SiO_2 -Schichten gleichen sich in vielerlei Hinsicht, so daß sich auch die Ergebnisse der Datenauswertung in nur wenigen Punkten unterscheiden. Insbesondere gelten für die Erklärung der Temperaturabhängigkeit der Halbwertsbreite und des relativen Intensitätsverhältnisses ν die gleichen Überlegungen wie bei Ge-implantierten SiO_2 -Schichten. Daher werden die Ergebnisse der Spektrenanpassung in sehr gestraffter Form vorgestellt. Unterschiede und Gemeinsamkeiten zwischen Si, Ge und Sn werden im Abschnitt 5.6 ausführlicher behandelt.

5.2.4.1 B-Bande

Der Bereich zwischen 2.0 und 3.7 eV (335 und 620 nm) wurde mit vier Peaks angefitet, wobei der schwache Peak nahe 2.0 eV nur bei hohen Sn-Konzentrationen und moderaten Ausheiltemperaturen auftrat. Der zweite Peak wird wie bei Ge einem durch reinen Si-Überschuß gebildeten Zentrum zugeordnet und in seiner Position bei etwa 2.7 eV festgehalten. Die beiden anderen Peaks werden wieder als Niedrigenergiepeak (NE-Peak) bzw. Hochenergiepeak (HE-Peak) bezeichnet.

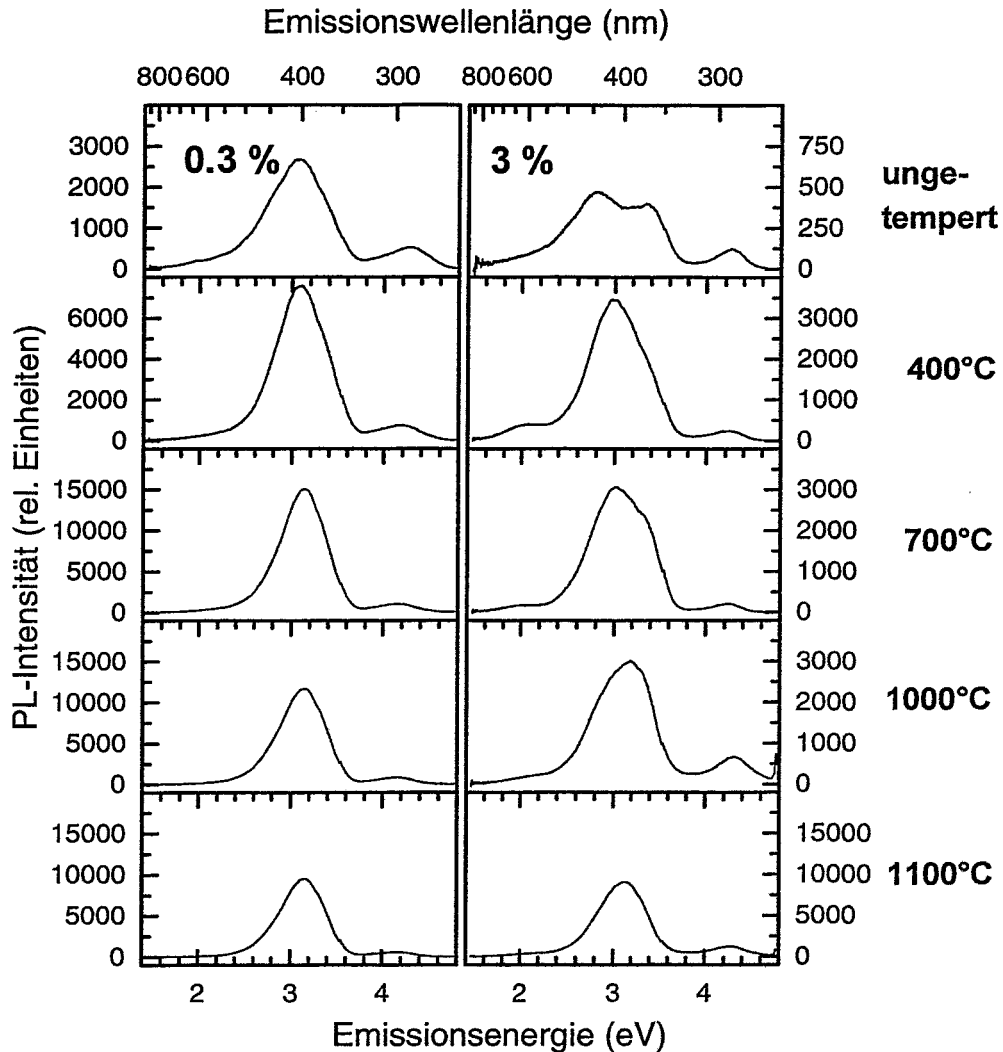


Abbildung 5.14: Das PL-Spektrum Sn-implantierter SiO_2 -Schichten für eine Sn-Konzentration von 0.3 % (linke Spalte) und 3 % (rechte Spalte) als Funktion der Ausheiltemperatur ($\lambda = 250 \text{ nm}$). Man beachte den teilweise unterschiedlichen Wertebereich der PL-Intensität in den einzelnen Teilbildern. Die in relativen Einheiten angegebene Intensität der Spektren ist untereinander vergleichbar.

In Abb. 5.15 sind die charakteristischen Parameter Position, Halbwertsbreite und Intensität des NE- und HE-Peaks über der Ausheiltemperatur aufgetragen. Der HE-Peak bewegt sich zwischen 3.3 und 3.45 eV (360 und 376 nm), der NE-Peak zwischen 2.9 und 3.2 eV (388 und 428 nm). Ein Anstieg der Peakposition mit der Ausheiltemperatur ist nur für den NE-Peak zu beobachten. Auch hier ist der Anstieg bei hohen Konzentrationen stärker als bei niedrigeren Konzentrationen.

Mit steigender Ausheiltemperatur fällt die Halbwertsbreite ab, erreicht eine Sättigung und steigt in einigen Fällen bei hohen Ausheiltemperaturen wieder etwas an. Die Halbwertsbreite

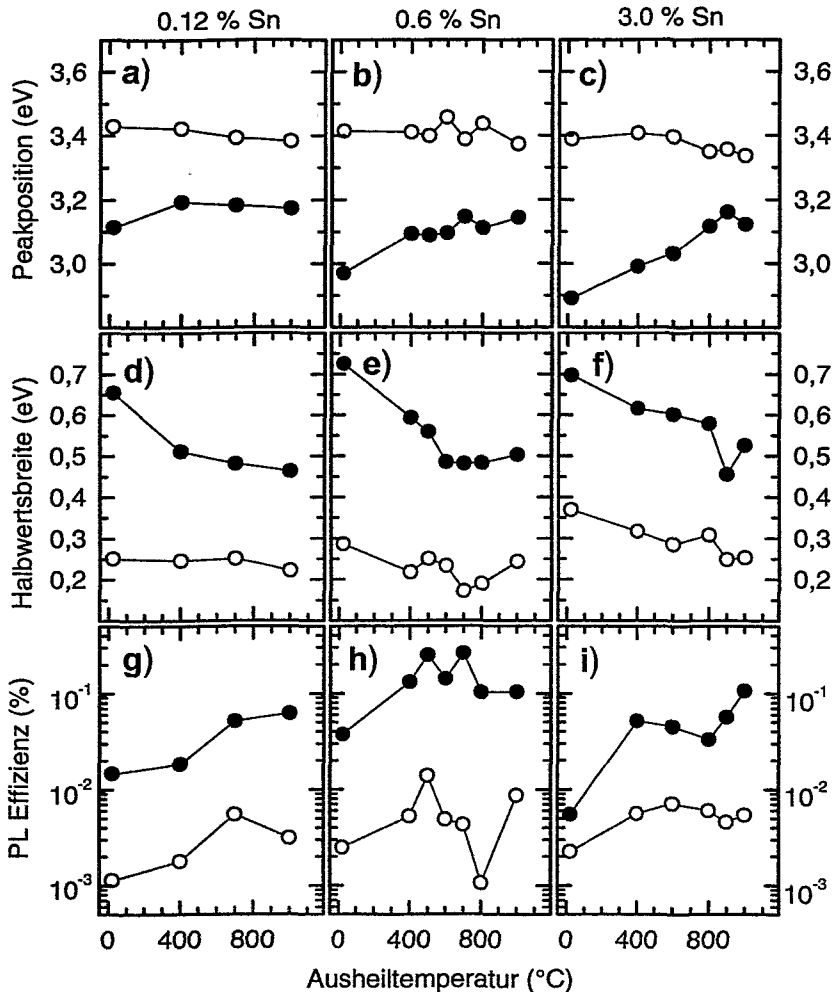


Abbildung 5.15: Abhängigkeit der Parameter Peakposition (a-c), Halbwertsbreite (d-f) und Intensität (g-i) des NE- (schwarze Kreise) und HE-Peaks (offene Kreise) von der Ausheiltemperatur. Die Abbildung beschränkt sich auf die Sn-Konzentrationen von 0.12 % (a,d,g), 0.6 % (b,e,h) und 3.0 % (c,f,i). Die Intensität wurde in eine PL-Effizienz umgerechnet.

des HE-Peaks ist dabei deutlich geringer als die des NE-Peaks.

Die in Abb. 5.15-g-i aufgetragene Intensitätsabhängigkeit des NE- und HE-Peaks erlaubt keine Zuordnung zu einer bestimmten Mikrostruktur. Die Intensität des NE-Peaks ist jedoch in allen Spektren um fast eine Größenordnung stärker als die des HE-Peaks. Betrachtet man die integrale Intensität der B-Bande in Abhängigkeit von Temperatur und Konzentration (Abb. 5.16), erweist sich der Konzentrationsbereich zwischen 0.2 und 1 % sowie das Temperaturintervall zwischen 400 und 800°C als optimal. Im Gegensatz zu Ge sind alle untersuchten Sn-Konzentrationen „resistent“ gegenüber einer Ausheilung bei hohen Temperaturen. Alle Konzentrationen oberhalb 0.3 % weisen bei 1000°C noch eine PL-Effizienz von rund 0.1 % auf; nur bei der niedrigsten Sn-Konzentration ist die PL-Effizienz auf 0.06 % zurückgegangen.

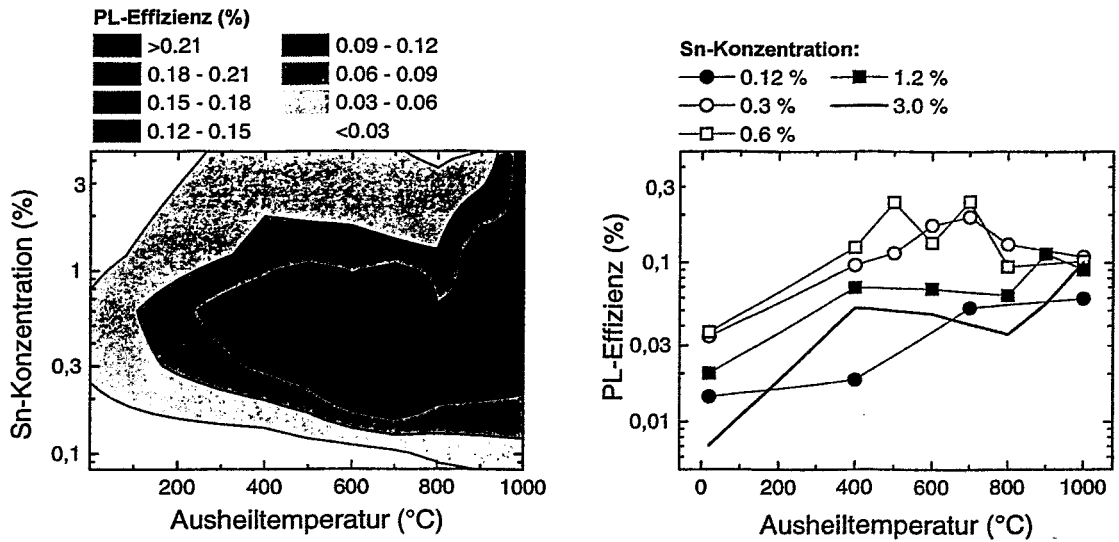


Abbildung 5.16: Abhängigkeit der PL-Intensität als Funktion der Ausheiltemperatur und der Sn-Konzentration. Darstellung als Höhenplot (links) und als Kurven konstanter Sn-Konzentration (rechts).

5.2.4.2 UV-Bande

Die UV-Bande zeigt sich aus zwei Peaks im Energieintervall von 3.85 bis 4.05 eV (306 bis 322 nm) bzw. 4.15 bis 4.35 eV (285 bis 299 nm) zusammen, wobei letzterer eindeutig dominiert. Es liegt daher nahe, diesen Peak dem NE-Peak der B-Bande zuzuordnen.

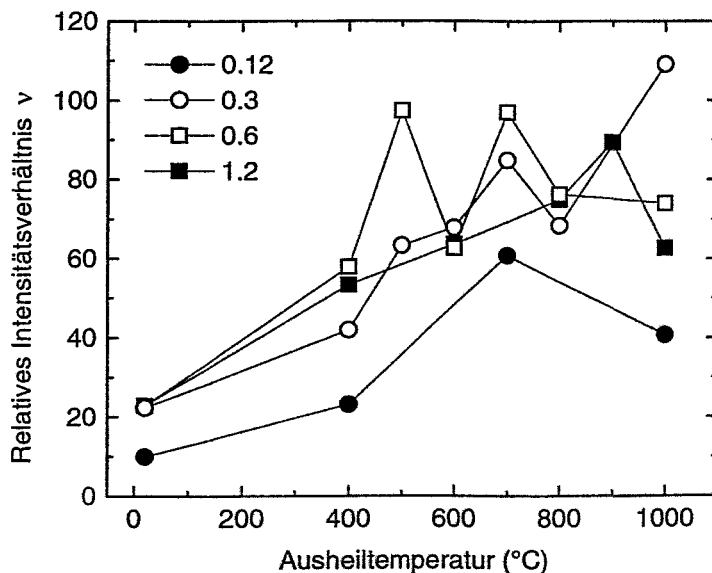


Abbildung 5.17: Relatives Intensitätsverhältnis ν der B-Bande zur UV-Bande in Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur.

Das in Abb. 5.17 dargestellte relative Intensitätsverhältnis ν der B- zur UV-Bande zeigt prinzipiell die gleiche Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur wie bei Ge-reichen Oxiden. Das Verhältnis ν hat sich jedoch entscheidend zugunsten der B-Bande verändert. Während es im Falle

Ge-implantierter SiO_2 -Schichten allenfalls einen Wert von 5 erreichte, liegt ν jetzt meistens im Bereich 50 bis 100.

5.2.4.3 Anregungsspektren

Die in Abb. 5.18 sichtbaren Lumineszenzpeaks werden den Übergängen $S_0 \rightarrow T_1$ (um 3.7 eV) und $S_0 \rightarrow S_1$ (4.6 bis 5.2 eV) zugeordnet. Dabei ist der Übergang $S_0 \rightarrow T_1$ nur noch um zwei

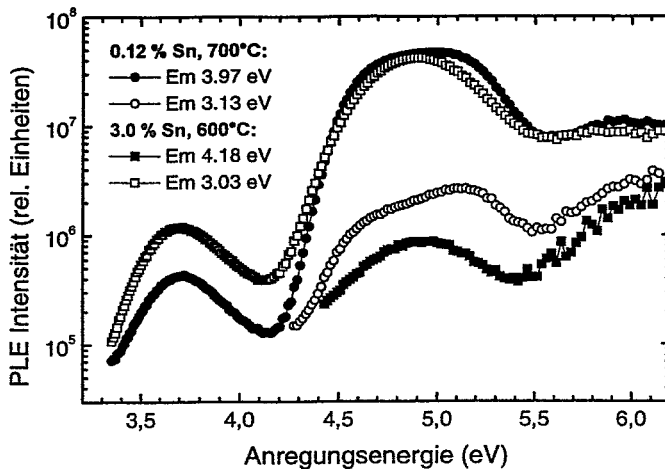


Abbildung 5.18: Anregungsspektren Sn-implantierter SiO_2 -Schichten für 0.12 % Sn, 700°C (Kreise) bzw. 3.0 % Sn, 600°C (Quadrate). Die Emissionswellenlängen wurden entsprechend der Legende fixiert.

Größenordnungen schwächer als der Übergang $S_0 \rightarrow S_1$. Letzterer läßt sich deutlich in zwei Komponenten zwischen 4.6 und 4.8 eV (258 und 270 nm) bzw. zwischen 5.0 und 5.15 eV (241 und 248 nm) zerlegen, wobei die Komponente zwischen 5.0 und 5.15 eV dominiert.

Die hinreichend gute energetische Trennung und der deutliche Intensitätsunterschied der beiden Komponenten in der B-Bande, der UV-Bande und in den Anregungsspektren ermöglicht es, folgende Hypothese aufzustellen: Die Lumineszenz Sn-implantierter SiO_2 -Schichten wird durch zwei einander sehr ähnliche Lumineszenzzentren oder durch zwei Konfigurationen ein und desselben Lumineszenzzentrums verursacht. Den für die Lumineszenz relevanten Übergängen können dabei die folgenden Energien zugeordnet werden:

	$S_0 \rightarrow S_1$	$S_1 \rightarrow S_0$	$T_1 \rightarrow S_0$
Zentrum 1:	5.0 - 5.15 eV	4.15 - 4.35 eV	2.9 - 3.2 eV
Zentrum 2:	4.6 - 4.8 eV	3.85 - 4.05 eV	3.3 - 3.45 eV

5.3 Zeitaufgelöste Photolumineszenz

5.3.1 Die analytische Beschreibung nichtexponentieller Abfälle

Die Differentialgleichung

$$\dot{N} = -k_0 N \quad \text{mit} \quad N(0) = N_0 \quad (5.7)$$

liefert den einfachen monoexponentiellen Zerfall

$$N(t) = N_0 \exp(-k_0 t) \quad (5.8)$$

mit k_0 als Zerfallsrate oder inverse Abklingkonstante $k_0 = 1/\tau$. Die meisten gemessenen Zeitspektren lassen sich aber nicht durch einen einzelnen monoexponentiellen Abfall darstellen. Für die analytische Behandlung gibt es nun mehrere Möglichkeiten:

1. Die Wahl einer geeigneten Parametrisierung, die nicht an ein physikalisches Modell gebunden sein muß.
2. Die Berücksichtigung von Augerprozessen.
3. Die Entfaltung einer Verteilung von Übergangsraten aus der Meßkurve.
4. Die Anpassung mit mehreren monoexponentiellen Zerfällen.

Abb. 5.19 zeigt den zeitlichen Verlauf der Abklingkurve für eine Ge-implantierte SiO₂-Schicht ohne Ausheilung und einer Ge-Konzentration von 2 % bei einer Emissionswellenlänge von 390 nm (3.18 eV). Während eine einzelnen Exponentialfunktion (5.8) die Zerfallskurve nur ungenügend

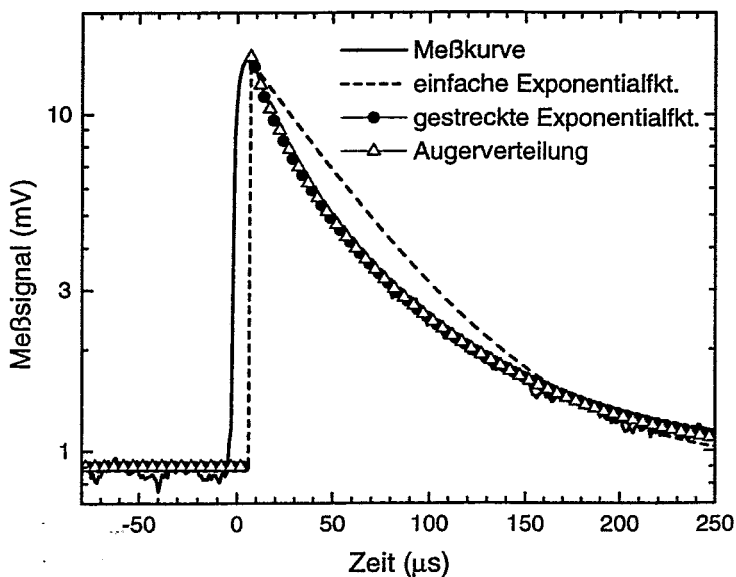


Abbildung 5.19: Abklingkurve für eine Ge-implantierte SiO₂-Schicht ohne Ausheilung und einer Ge-Konzentration von 2 % bei einer Emissionswellenlänge von 390 nm (3.18 eV). Die für die Anpassung benutzten Parameter lauten:

Exponentialfkt.:

$$k_0^{-1} = 52 \mu\text{s}$$

gestreckte Exponentialfkt.:

$$k_0^{-1} = 23 \mu\text{s} \quad \beta = 0.63$$

Augerverteilung:

$$k_0^{-1} = 78 \mu\text{s} \quad c_A = 2240 \text{ s}^{-1}$$

wiedergibt, liefert die Benutzung der gestreckten Exponentialfunktion (5.9) oder einer Verteilung mit Berücksichtigung von Augerprozessen (5.13) wesentlich bessere Ergebnisse. Wie im folgenden gezeigt, weisen diese alternativen Beschreibungen aber Mängel hinsichtlich ihrer physikalischen Interpretation auf.

Die gestreckte Exponentialfunktion

$$N(t) = N_0 \exp \left[-(k_0 t)^\beta \right]. \quad (5.9)$$

oder deren erste Ableitung nach der Zeit sind eine in der Literatur sehr beliebte Parametrisierung zur Beschreibung nichtexponentieller Zerfälle [Kane96, Bro98, Seol96a, Nis97]. Dabei kann k_0 als Schwerpunkt und β als Maß für die Breite einer Verteilung von Zerfallsraten gedeutet werden. Nachteil dieser Parametrisierung ist, daß sie ohne physikalischen Hintergrund eine bestimmte Klasse von Verteilungen bevorzugt. Wie am Ende des Abschnitts noch gezeigt wird, entsprechen deutlich von 1 abweichende Werte einer sehr unrealistischen Verteilung von k .

Augerprozesse, bei denen ein angeregtes Lumineszenzzentrum strahlungslos in den Grundzustand zurückkehrt und seine Energie an ein anderes angeregtes Lumineszenzzentrum abgibt¹,

¹Ein angeregtes Lumineszenzzentrum wird dabei als Exziton betrachtet

können in erster Näherung als quadratisches Glied (siehe auch Kap. 2.4.1) in Gleichung (5.7) dargestellt werden:

$$\dot{N} = -k_0 N - c_A N^2 \quad \text{mit} \quad N(0) = N_0 \quad (5.10)$$

Hierbei ist c_A der Augerkoeffizient. 5.10 liefert mit $\gamma = k_0/c_A$:

$$\frac{dN}{(\gamma + N)N} = \frac{1}{\gamma} \left(\frac{dN}{N} - \frac{dN}{(\gamma + N)} \right) = -c_A dt \quad (5.11)$$

$$\ln N - \ln(\gamma + N) = -k_0 t + c \quad (5.12)$$

$$N(t) = \frac{\gamma C_0(t)}{1 - C_0(t)} \quad \text{mit} \quad C_0(t) = \frac{N_0}{\gamma + N_0} \exp(-k_0 t) \quad (5.13)$$

Die Meßspektren lassen sich zwar meistens mit Gleichung (5.13) anpassen, aber in vielen Fällen ist ein unrealistisch hoher Augerkoeffizient notwendig. Zudem sollte die Größe von c_A stark von der Konzentration der Lumineszenzzentren abhängen, was in diesem Maße aber nicht beobachtet wurde. Neben der Beschreibung mit zwei exponentiellen Zerfällen wäre diese Beschreibung noch am ehesten denkbar.

Bei einer allgemeinen Betrachtung geht man davon aus, daß bei einer großen Zahl von Lumineszenzzentren eine Verteilung $g(k)$ von Zerfallsraten existiert, und sich die Meßkurve $f(t)$ wie folgt darstellen läßt:

$$f(t) = \int_0^{\infty} g(k) \exp(-kt) dk \quad (5.14)$$

Gleichung 5.14 kann auch als Laplace-Transformation mit $f(t)$ als Bildfunktion, $g(k)$ als Originalfunktion und $\exp(-kt)$ als Kern aufgefaßt werden. Die Rücktransformation ergibt sich dann zu

$$g(k) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \exp(kt) f(t) dt. \quad (5.15)$$

Strebt $g(k)$ für $k \rightarrow \infty$ nicht stärker als $\exp(\alpha k)$ gegen unendlich, so konvergiert $f(t)$ in der rechten Halbebene der komplexen Zahlenebene² für $\Re(t) > \alpha$. Obwohl sich die Konvergenzbedingung leicht erfüllen läßt und man ohne Umstände eine geeignete Parametrisierung für $f(t)$ findet, die sich analytisch ins Komplexe fortsetzen läßt, ist die physikalische Interpretation einer komplexen Zeit sehr fragwürdig. Abb. 5.20a zeigt verschiedene Verteilungen $g(k)$, wenn die Meßkurve mit einer gestreckten Exponentialfunktion angepaßt wurde. Es wird deutlich, daß stark von 1 abweichende Werte für β Verteilungen liefern, bei denen k -Werte über mehr als eine Größenordnung hinweg deutlich zur Lumineszenz beitragen würden. Hinzu kommt die numerische Instabilität des Integrales 5.15 bei der Verwendung der herkömmlichen Rechengenauigkeit. Theoretisch hängt $g(k)$ nicht von c ab (soweit nur $c > \alpha$ gilt) und ist reell. Praktisch ist der Imaginärteil von $g(k)$ vier bis fünf Größenordnungen geringer als der Realteil, und die unterschiedlichen k -Werte, ab denen 5.15 instabil wird, können der Abb. 5.20b entnommen werden. Schließlich wäre noch zu prüfen, ob die so entfaltenen Verteilungen $g(k)$ tatsächlich von der Wahl einer bestimmten Parametrisierung unabhängig sind.

Als Quintessenz muß man feststellen, daß alle hier vorgestellten Varianten der Beschreibung nichtexponentieller Zerfälle erhebliche Mängel oder Unsicherheiten aufweisen. Aus Abschnitt 5.2.3 bzw. 5.2.4 ist bekannt, daß die B-Bande von Ge- und Sn-implantierten SiO_2 -Schichten aus mindestens zwei Komponenten besteht. Es erscheint daher vernünftig, die Zeitspektren mit zwei

²siehe z.B. [Bron93], S. 466f.

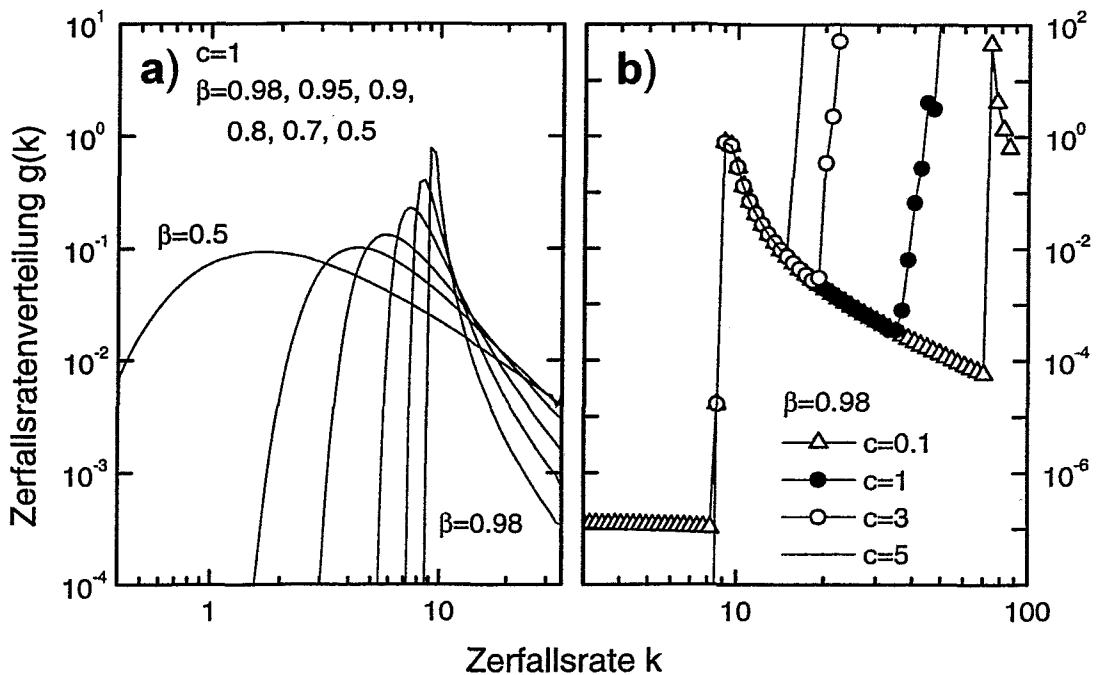


Abbildung 5.20: Über die Laplace-Transformation entfaltete Verteilung $g(k)$ von Zerfallsraten k , wenn die Meßkurve mit einer gestreckten Exponentialfunktion angepaßt wurde (a). Die unterschiedliche Wahl der Integrationskonstanten c bildet $g(k)$ in gleicher Weise ab, solange die numerische Rechnung stabil ist (b).

monoexponentiellen Zerfällen anzupassen. Die probeweise Anpassung der Spektren mit allen hier vorgestellten Methoden zeigt, das die Ergebnisse gut übereinstimmen, wenn $\beta \lesssim 1$ und $c_A \ll k_0$ gilt.

5.3.2 Abklingkonstanten Ge- und Sn-implantierter SiO_2 -Schichten

Das Zeitspektrum einer bestimmten Probe wurde bei verschiedenen Emissionswellenlängen aufgenommen, um die beiden Komponenten der B-Bande spektral zuzuordnen zu können. Leider sind die Unsicherheiten der bei einer Anpassung mit zwei monoexponentiellen Zerfällen erhaltenen Parameter so groß, daß man allenfalls die Existenz einer zweiten Komponente feststellen kann. Alle Zeitspektren wurden von einer starken Komponente dominiert, deren Abklingkonstante in Tabelle 5.3 und 5.4 aufgelistet ist. Bei den Zeitspektren aller untersuchten Ge-reichen Oxide

	ungetempert	600°C	900...1000°C
0.67 %	90 μs	102 μs	105 μs
2.0 %	76 μs	99 μs	90 μs
6.3 %		108 μs	100 μs

Tabelle 5.3: Abklingkonstanten Ge-implantierter SiO_2 -Schichten

	Abklingkonstante
0.3 %, 600°C	9 μs
0.67 %, 600°C	7 μs
1.2 %, 600°C	7.5 μs
3.0 %, 400°C	6 μs

Tabelle 5.4: Abklingkonstanten Sn-implantierter SiO_2 -Schichten

und bei der höchsten Sn-Konzentration trat eine zweite Komponente mit einer Abklingkonstante von 20...40 μs bzw. 15 μs auf. Die geringe Intensität sowie die Unsicherheit bei der Anpassung verhindern eine Zuordnung dieser schwachen Komponente. Die Unsicherheit der in Tabelle 5.3 und 5.4 angegebenen Abklingkonstanten wird auf etwa 20% geschätzt.

Die gemessene Abklingkonstante setzt sich aus den Abklingkonstanten des strahlenden und des nichtstrahlenden Überganges zusammen. Die nichtstrahlende Übergangsrate hängt aber, wie in Kapitel 5.2.3.3 ausgeführt wurde, von der Defektdichte im Material ab. Bei einer hohen Defektdichte erwartet man eine hohe Übergangsrate des nichtstrahlenden Überganges und demzufolge eine niedrige Abklingkonstante. Demgegenüber sollte die Abklingkonstante bei einer niedrigen Defektdichte maximal werden. Qualitativ würde die Temperaturabhängigkeit der Abklingkonstante wie die Temperaturabhängigkeit des relativen Intensitätsverhältnisses ν aus Kapitel 5.2.3.3 verlaufen: Mit zunehmender Ausheiltemperatur steigt der Wert der Abklingkonstante an, erreicht einen Maximalwert und sinkt bei hohen Ausheiltemperatures wieder leicht ab. Ein solcher Trend ist für die ersten beiden Ge-Konzentrationen in Tabelle 5.3 zu erkennen, obwohl bei einer Unsicherheit von 20% allenfalls der Sprung von 76 auf 99 μs signifikant ist.

Die Messung zweier Si-implantierter SiO_2 -Schichten lieferte keine konsistenten Ergebnisse.

5.4 Tiefenaufgelöste Photolumineszenz

5.4.1 Struktur

Für die tiefenaufgelöste PL wurde eine Ge-implantierten SiO_2 -Schicht mit SI bei RT und 1 % Ge benutzt, die bei 1000°C 60 min lang getempert wurde. Wie in Abb. 5.21 ersichtlich, kam es während der Ausheilung zu einer starken Umverteilung des implantierten Ge, so daß jetzt deutlich drei verschiedene Bereiche zu erkennen sind: eine oberflächennahe, Ge-reiche Zone (OF-Zone), ein Clusterband im Zentrum der SiO_2 -Schicht und ein Ge-Peak nahe der Grenzfläche (GF-Zone). Analog zu den TEM-Bildern in Kap. 4.2.1, insbesondere Abb. 4.9a, sind in der OF-Zone keine Strukturen zu erkennen, was darauf hindeutet, daß die in dieser Schicht existierenden Lumineszenzzentren nur als isolierte Zentren im Volumen vorkommen. Demgegenüber enthält sowohl das Clusterband als auch die GF-Zone Ge-Nanocluster.

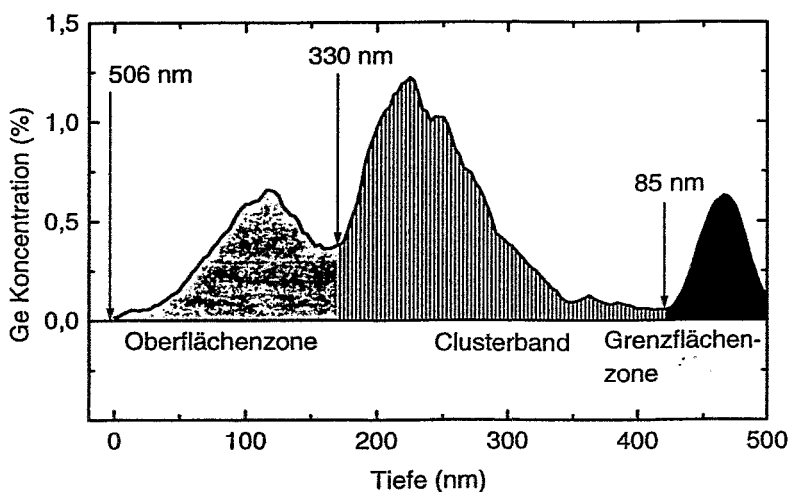


Abbildung 5.21: Mittels RBS gemessene Ge-Verteilung in einer Ge-implantierten SiO_2 -Schicht mit SI bei RT und 1% Ge nach einer Ausheilung von 1000°C, 60 min und N_2 -Atmosphäre. Die expliziten Längenangaben im Profil bezeichnen die verbleibende Schichtdicke nach den einzelnen Ätzschritten.

5.4.2 Photolumineszenz der einzelnen Schichten

Das Oxid wurde mit Hilfe einer gepufferten HF-Lösung schrittweise abgeätzt und die PL der verbleibenden SiO_2 -Schicht gemessen. Die verbleibende Schichtdicke nach den einzelnen Ätzschritten ist in Abb. 5.21 angegeben.

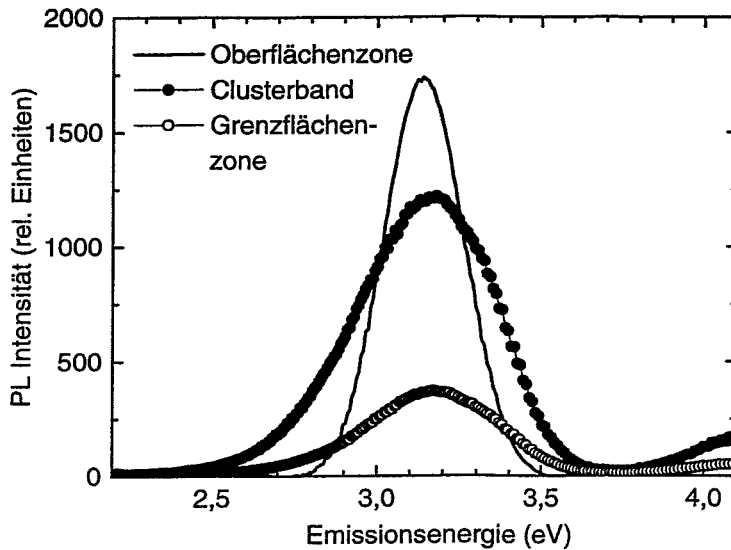


Abbildung 5.22: PL-Spektren aus den drei Ge-haltigen Bereichen einer Ge-implantierten SiO_2 -Schicht (SI, RT, 1% Ge, 1000°C , 60 min). Die Spektren entstanden durch Differenzbildung der Meßspektren, nachdem diese bezüglich der Interferenz korrigiert wurden.

Als Ergebnis erhält man drei Spektren, die die PL der gesamten Probe, die PL des Clusterbandes und der GF-Zone sowie nur die PL der GF-Zone beinhalten. Nach der Korrektur von Interferenzeffekten erhält man die PL der einzelnen Bereiche durch Subtraktion der Einzelspektren. Die PL-Spektren der einzelnen Zonen ist in Abb. 5.22 wiedergegeben, wobei zwei Sachverhalte sofort sichtbar werden. Zum einen tragen alle drei Bereiche deutlich zur PL der gesamten Probe bei. Damit befinden sich die Lumineszenzzentren sowohl in der clusterfreien OF-Zone als auch im Clusterband und der GF-Zone. Zum anderen ist die Halbwertsbreite des PL-Peaks der OF-Zone geringer als die der beiden anderen Ge-haltigen Zonen. Wie bereits ausgeführt, ist die Halbwertsbreite ein Maß für die Streubreite möglicher Konfigurationen der Lumineszenzzentren. In der OF-Zone, in der der bei der Ausheilung eingedrungene Sauerstoff größere Ge-Ansammlungen oxidiert haben sollte, existieren nur die Konfigurationen des einzelnen, im Volumen isolierten Zentrums. In den mit Ge-Clustern angereicherten Zonen sind neben diesen Konfigurationen auch Konfigurationen in der Zwischenschicht des Ge-Clusters zum SiO_2 oder direkt auf der Oberfläche des Clusters denkbar.

Die Ergebnisse sind noch einmal in Abb. 5.23 zusammengefaßt. Abb. 5.23a zeigt die Peakposition der PL der einzelnen Ge-Zonen, deren geringe Drift keineswegs signifikant ist. Abb. 5.23b quantifiziert die bereits diskutierten Unterschiede in der Halbwertsbreite. Eine weitere interessante Aussage erhält man, wenn man die PL-Intensität der einzelnen Schichten zum Ge-Gehalt der einzelnen Zonen ins Verhältnis setzt. Die derartig gewonnene relative PL-Intensität ist in Abb. 5.23c wiedergegeben, wobei der Ge-Gehalt durch Integration des entsprechenden Peaks im RBS-Profil von Abb. 5.21 bestimmt wurde. In Relation zu seinem Ge-Gehalt ist das Clusterband unterrepräsentiert, was man sich durch die Tatsache erklären könnte, daß das Ge im Innern der Ge-Cluster sicherlich nicht zur Lumineszenz beiträgt, aber bei der RBS-Messung mit erfaßt wird. Da unbekannt ist, wieviel Prozent des Ge überhaupt an der Bildung von Lumineszenzzentren beteiligt ist, ist die Interpretation dieses Ergebnisses nicht eindeutig.

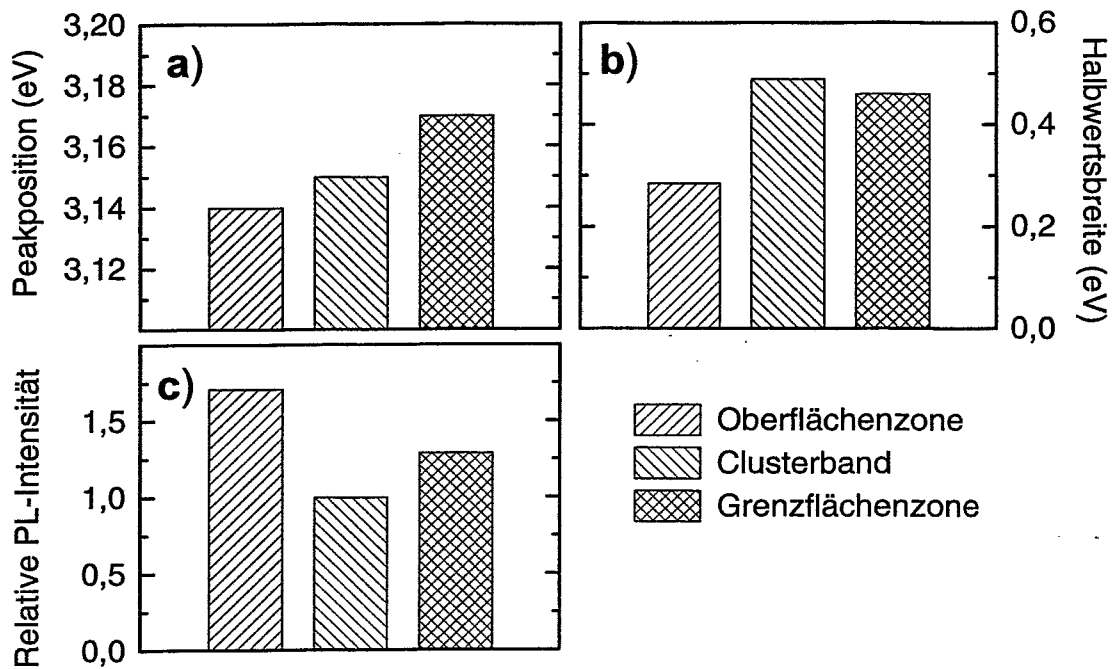


Abbildung 5.23: Peakposition (a), Halbwertsbreite (b) und zum Ge-Gehalt relative PL-Intensität (c) der PL-Spektren aus Abb. 5.22.

5.5 Der Vergleich mit gesputterten SiO_2 -Schichten

Aus den bisherigen Ergebnissen ergibt sich die Frage, ob zur Erzeugung von Lumineszenzzentren in SiO_2 -Schichten ein Ionenimplantationsschritt notwendig ist. Im Rahmen dieser Arbeit war nur der Vergleich mit Si- und Ge-reichen Schichten möglich, die durch reaktives Magnetron-Sputtern hergestellt wurden.

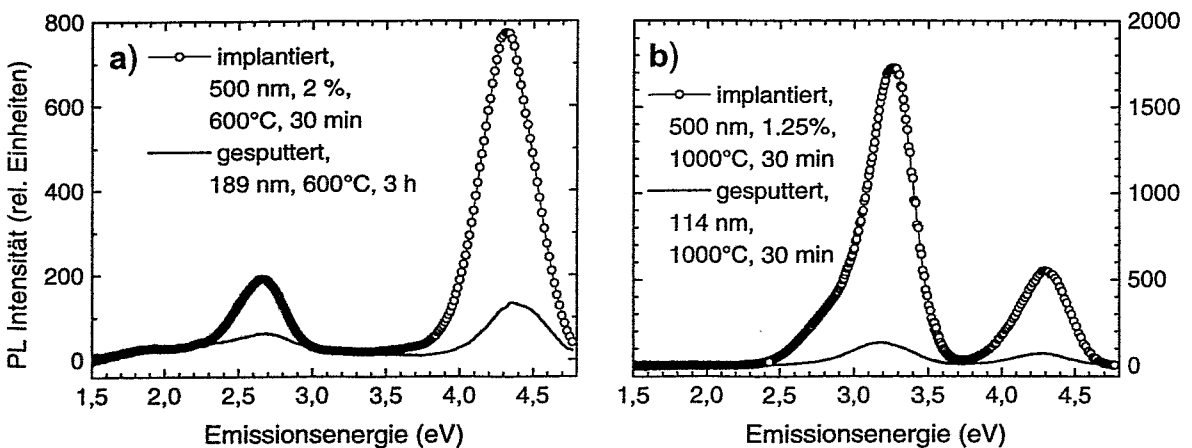


Abbildung 5.24: PL-Spektren gesputterter und implantierter SiO_2 -Schichten mit geringem Si- (a) und Ge-Überschuß (b) im Vergleich.

Abb. 5.24 zeigt die PL von Si- und Ge-reichen gesputterten SiO_2 -Schichten im Vergleich zu ionenimplantierten Schichten. Das PL-Spektrum der in Abb. 5.24a gezeigten, Si-reichen Sputterschicht weist wie Si-implantierte Schichten eine UV- und eine B-Bande auf, deren Emissionsenergien mit denen von Si-implantierten SiO_2 übereinstimmen. Allerdings ist die Intensität der gesputterten Schichten deutlich geringer. Bei Ge-reichen Schichten kann das gleiche Verhalten festgestellt werden (Abb. 5.24b).

Obwohl ein direkter Vergleich wegen der teilweise verschiedenen Herstellungsparameter, insbesondere der Schichtdicke, schwierig ist, kann man folgendes feststellen: Implantierte und gesputterte SiO_2 -Schichten enthalten bei geringem Si- oder Ge-Überschuß die gleichen Lumineszenzzentren, aber die Intensität der PL ist bei implantierten Schichten deutlich höher. Es sei angemerkt, daß für den Vergleich gesputterte SiO_2 -Schichten mit maximaler PL-Intensität herangezogen wurden, während die entsprechenden Maxima für implantierte SiO_2 -Schichten bei anderen Ausheiltemperaturen liegen. Dies gilt insbesondere für die Ge-implantierte Oxidschicht, deren Maximum bei 500°C liegt. Will man für eine Abschätzung die Dicke skalieren, so sind die Dicken der gesputterten Schichten nicht mit 500 nm, sondern mit der Breite des Implantationsprofils zu vergleichen (etwa 300 nm). Weiterhin sei erwähnt, daß auch die PL-Intensität Si-reicher, mittels Mischverdampfung hergestellter SiO_2 -Schichten im blauen Spektralbereich deutlich geringer ist als bei Si-implantierten SiO_2 -Schichten [Kre97].

Um diesen Intensitätsunterschied zu begründen, betrachte man den unterschiedlichen Zustand des SiO_2 -Netzwerkes nach der Implantation bzw. der Abscheidung. Beim reaktiven Sputtern werden eine gewisse Anzahl von Lumineszenzzentren zusammen mit dem Wachsen des SiO_2 -Netzwerkes erzeugt. Dieses Netzwerk weist aber eine geringere Schädigung auf als ein SiO_2 -Netzwerk nach einer Hochdosisimplantation. Durch die fast vollständige Zerstörung der Netzwerkbindungen bei der Implantation haben Vorläufer der Lumineszenzzentren, insbesondere E' -Zentren, größere Möglichkeiten während der Ausheilung, sich in Lumineszenzzentren umzuwandeln. Bei gesputterten Schichten sind diese Möglichkeiten eingeschränkter. Diese Erklärung ist lediglich eine Hypothese, die durch mikrostrukturelle Untersuchungen weiter gestützt werden müßte. Beispielsweise wäre zu prüfen, ob bei gesputterten Schichten überhaupt so viele E' -Zentren wie bei der Ionenstrahlsynthese entstehen.

5.6 Zusammenfassung

In Anbetracht des umfangreichen Datenmaterials zu den optischen Eigenschaften ionenimplantierter SiO_2 -Schichten erscheint es ratsam, an dieser Stelle eine Zusammenfassung einzufügen. Im folgenden sind die spektroskopischen Eigenschaften der PL sowie deren Interpretation in Form einfacher Aussagen aufgelistet.

Spektroskopisches Erscheinungsbild Si-, Ge- und Sn-implantierte SiO_2 -Schichten weisen eine starke PL im blau-violetten Spektralbereich (B-Bande) auf. Die Intensität bei Ge und Sn ist dabei noch um ein bis zwei Größenordnungen stärker als bei Si. Die B-Bande wird durch eine Emission im nahen UV-Bereich (UV-Bande) begleitet.

Ursache der Lumineszenz Die PL im blau-violetten Spektralbereich wird durch ein molekülartiges Lumineszenzzentrum verursacht, das fest definierte Anregungs- und Emissionsenergien besitzt. QC-Effekte in Nanoclustern können als Ursache der PL definitiv ausgeschlossen werden. Zum einen gibt es SiO_2 -Schichten, die eine starke PL aufweisen, aber keine Nanocluster enthalten (Schichten ohne Ausheilung oder mit geringer Konzentration von Si, Ge oder Sn). Zum

anderen widersprechen die konstanten, von Ausheiltemperatur und Konzentration unabhängigen Anregungs- und Emissionsenergien den Vorhersagen des QC-Effektes (Kap. 2.4.1). Weiterhin zeigt der Vergleich mit thermischen und Ar-implantiertem SiO_2 (Kap. 5.2.1), daß intrinsische Defekte und reine Strahlenschäden bei der Implantation als Ursache der PL gleichfalls nicht in Betracht kommen.

Das E' -Zentrum wird als Vorläufer des molekulartigen Lumineszenzzentrums angesehen. Die höhere PL-Intensität von bei LNT implantierten SiO_2 -Schichten gegenüber bei RT implantierten SiO_2 -Schichten wird daher auf die höhere Zahl von E' -Zentren, die bei der Implantation entstehen, zurückgeführt.

Zuordnung der Übergänge Das Energieniveauschema des Lumineszenzzentrums entspricht Abb. 2.11 und besteht aus einem Singlett-Grundzustand S_0 , einem ersten angeregtem Singlettzustand S_1 und einem ersten angeregtem Triplettzustand T_1 . Den einzelnen Übergängen können dabei die in Tab. 5.5 aufgelisteten Energien zugeordnet werden. Diese Zuordnung wird dabei durch die folgenden Indizien gestützt:

1. Die Anregungsspektren für die B- und die UV-Bande sind einander sehr ähnlich.
2. Das relative Intensitätsverhältnis ν bewegt sich für eine Ionenart und für alle Konzentrationen bzw. Ausheiltemperaturen nur innerhalb einer Größenordnung. Zudem läßt sich die Temperaturabhängigkeit bei Ge und Sn erklären.
3. Der Übergang $T_1 \rightarrow S_0$ ist mit Abklingkonstanten im Mikrosekundenbereich ein verbotener Übergang.

Ion	$S_0 \rightarrow S_1$	$S_0 \rightarrow T_1$	$S_1 \rightarrow S_0$ UV-Bande	$T_1 \rightarrow S_0$ B-Bande
Si	4.9...5.1	~ 3.8	4.27...4.39	2.55...2.73
Ge	4.87...5.43	3.8...3.96	4.1...4.4	2.85...3.45
Sn 1	5.0...5.15	3.62...3.78	4.15...4.35	2.9...3.2
Sn 2	4.6...4.8	3.62...3.78	3.85...4.05	3.3...3.45

Tabelle 5.5: Übergangsenergien der Übergänge $S_0 \rightarrow S_1$, $S_0 \rightarrow T_1$, $S_1 \rightarrow S_0$ und $T_1 \rightarrow S_0$ in eV

Heavy-Atom-Effekt Die Lumineszenzzentren für Ge- und Sn-reiches Oxid entstehen aus dem Lumineszenzzentrum für Si-implantierte SiO_2 -Schichten durch die Substitution von einem oder mehreren Si-Atomen durch Ge- bzw. Sn-Atome. Aufgrund des Heavy-Atom-Effektes (Kap. 2.5.3 und 2.5.4) erwartet man eine Erhöhung der Emissionsenergie für die B-Bande, eine Erhöhung des relativen Intensitätsverhältnis ν und eine Verringerung der Abklingkonstante. Wie in Abb. 5.25 ersichtlich, wurden diese Voraussagen hervorragend bestätigt.

Zuordnung einer Mikrostruktur Laut den Ergebnissen der tiefenaufgelösten PL in Kap. 5.4 kann das Lumineszenzzentrum sowohl im Volumen als auch in Oberflächennähe von Nanoclustern sowie in der Nähe des Si- SiO_2 -Grenzfläche vorkommen. Anhand der spektroskopischen Daten läßt sich dem Lumineszenzzentrum keine konkrete Mikrostruktur zuordnen. Die Tatsache, daß bei der PL von Si-implantiertem SiO_2 offenbar nur ein Lumineszenzzentrum und bei Ge- bzw. Sn-implantiertem SiO_2 zwei Zentren oder Konfigurationen beteiligt sind, ist ein Indiz für die Neutrale Sauerstoffvakanz. Die Lumineszenzzentren hätten dann die folgende Struktur:

Si: $\equiv\text{Si-Si}\equiv$

Ge: $\equiv\text{Si-Ge}\equiv$ und $\equiv\text{Ge-Ge}\equiv$

Sn: $\equiv\text{Si-Sn}\equiv$ und $\equiv\text{Sn-Sn}\equiv$

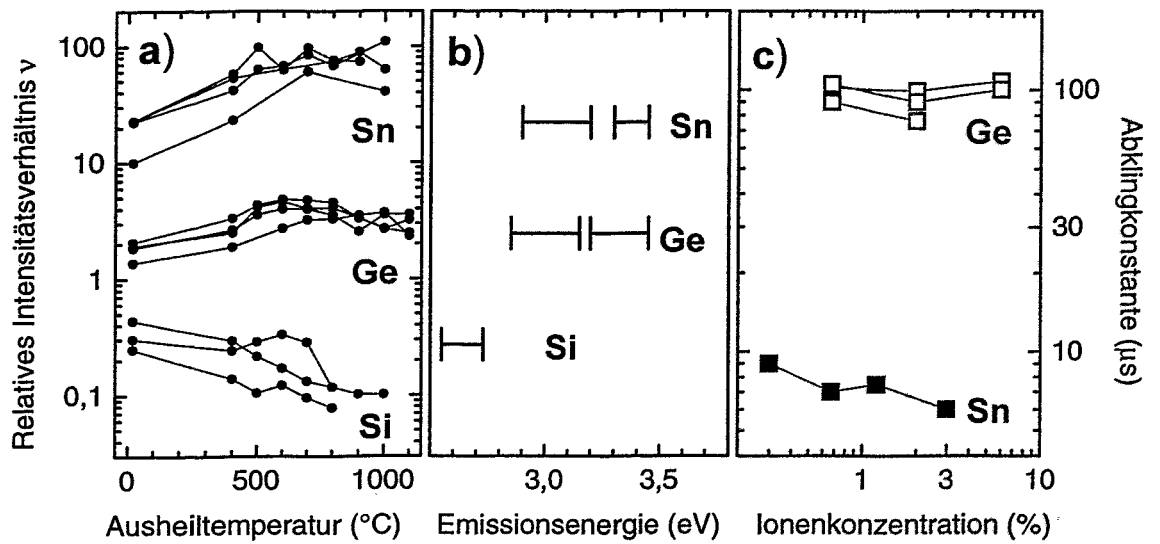


Abbildung 5.25: Auswirkungen des Heavy-Atom-Effektes auf verschiedene spektroskopische Parameter der B-Bande: Relatives Intensitätsverhältnis der B- zur UV-Bande (a), Emissionsenergie (b) und Abklingkonstante (c).

Kapitel 6

Elektrische Eigenschaften

6.1 Elektrolumineszenz

6.1.1 Spektrale Charakteristik

Die Probenpräparation zur Messung der EL und anderer elektrischer Eigenschaften ist wesentlich aufwendiger als zur Messung der PL. Aus diesem Grunde war es nicht möglich, den Einfluß der verschiedenen Herstellungsparameter auf die EL so systematisch und umfassend zu untersuchen wie bei der Messung der PL. Tabelle 6.1 listet die Herstellungsparameter der untersuchten Strukturen auf.

Dicke ¹	Implantation		Ausheilung	EL	PL		
500 nm	Si	DI	200+ (3+1.8)	500°C , 60 min	keine	mittel	
			100 keV	$\cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$	1000°C , 60 min	mittel	keine
					1100°C , 60 min	schwach	schwach
500 nm	Ge	DI	350+ (2.8+1.8)	1000°C , 60 min	stark	stark	
550 nm			230 keV	$\cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$	1000°C , 30 min	stark	stark
570 nm					500°C , 30 min + RTA ²	stark	stark
540 nm	Ge	SI	350 keV $3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$	1000°C , 30 min	mittel	stark	
125 nm			110 keV $2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$	400°C , 30 min	schwach	stark	
100 nm			75 keV $1.5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$	1000°C , 30 min	keine	keine	
95 nm			75 keV $1.2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$	500°C , 30 min + RTA ²	schwach	stark	
75 nm			75 keV $1.2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$	FLA ³	keine	mittel	
85 nm			75 keV $1.2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$	RTA ²	schwach	stark	
100 nm			100 keV $1.5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$	1000°C , 30 min	keine	keine	
40 nm			35 keV $6 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$	1000°C , 30 min	keine	keine	
30 nm			35 keV $6 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$	500°C , 30 min	keine	schwach	
				+ RTA ²			

¹ Dicke des implantierten Oxides
² Kurzzeitausheilung 1000°C , 1 s
³ Blitzlampenausheilung 1000°C , 20 ms

Tabelle 6.1: Herstellungsparameter der MOS-Strukturen, an denen EL und andere elektrische Eigenschaften untersucht wurden.

Die Schichtdicke wurde durch optische Reflektometrie bestimmt. Aufgrund herstellungsbedingter Schwankungen kann die Schichtdicke zweier MOS-Strukturen um bis zu 10 nm differieren. Durch die Veränderung der Brechzahl der SiO_2 -Schicht während der Implantation unterscheiden sich die optischen Schichtdicken einer implantierten und einer unimplantierten Oxidschicht ebenfalls um bis zu 10 nm. Aus diesen Abweichungen resultiert die Streuung der in Tabelle 6.1 angegebenen Schichtdicken, insbesondere für dünne Oxide. Im weiteren werden Oxide mit einer Dicke ≥ 500 nm als „dick“, Oxide mit einer Dicke ≤ 125 nm als „dünn“ bezeichnet. Zur genauen Prozeßführung bei RTA und FLA sei auf Kap. 3.1.3 verwiesen.

In den letzten beiden Spalten der Tabelle 6.1 wurde die Intensität der EL und PL qualitativ bewertet. Die Bezeichnung „schwach“ wurde dabei für SiO_2 -Schichten gebraucht, deren PL-Effizienz unter $2 \cdot 10^{-5}$ lag oder die keine Injektionsstromdichten größer $10 \mu\text{A cm}^{-2}$ erlaubten. Demgegenüber wurde der Ausdruck „stark“ zur Beschreibung von Oxidschichten verwendet, deren PL-Effizienz den Wert von $2 \cdot 10^{-4}$ überstieg oder die Injektionsstromdichten von mehr als $100 \mu\text{A cm}^{-2}$ zuließen.

Aus dieser qualitativen Einschätzung lassen sich bereits zwei Schlußfolgerungen für Ge-implantierte SiO_2 -Schichten treffen: Dicke Oxide erreichen zum einen eine wesentliche höhere absolute EL-Intensität, obwohl die PL-Intensität dünner Oxidschichten mit der dicker Oxidschichten vergleichbar ist. Wie in Kapitel 6.1.2 noch gezeigt wird, liegt der Grund nicht in einer niedrigeren EL-Effizienz, sondern in den geringeren Injektionsströmen, die kurz vor dem Durchbruch erreicht werden. Zum anderen zeigen nur die dünnen, mit Ge implantierten Oxidschichten eine schwache EL, die keinem Temperaturschritt von 1000°C und 30 min ausgesetzt waren. Es wird angenommen, das die Umverteilung des Ge in der dünnen Oxidschicht schneller vonstatten geht als in einer dicken Oxidschicht, so daß nach 1000°C , 30 min sich die meisten Lumineszenzzentren wieder aufgelöst haben. Eine Ausheilung bei höheren Temperaturen ist aber erforderlich, um das SiO_2 -Netzwerk wieder soweit herzustellen, daß es hinsichtlich seiner elektrischen Eigenschaften der Qualität des unimplantierten SiO_2 möglichst nahe kommt. Am Beispiel der reinen FLA wird deutlich, daß eine Temperaturbelastung von 1000°C , 20 ms noch nicht ausreichend

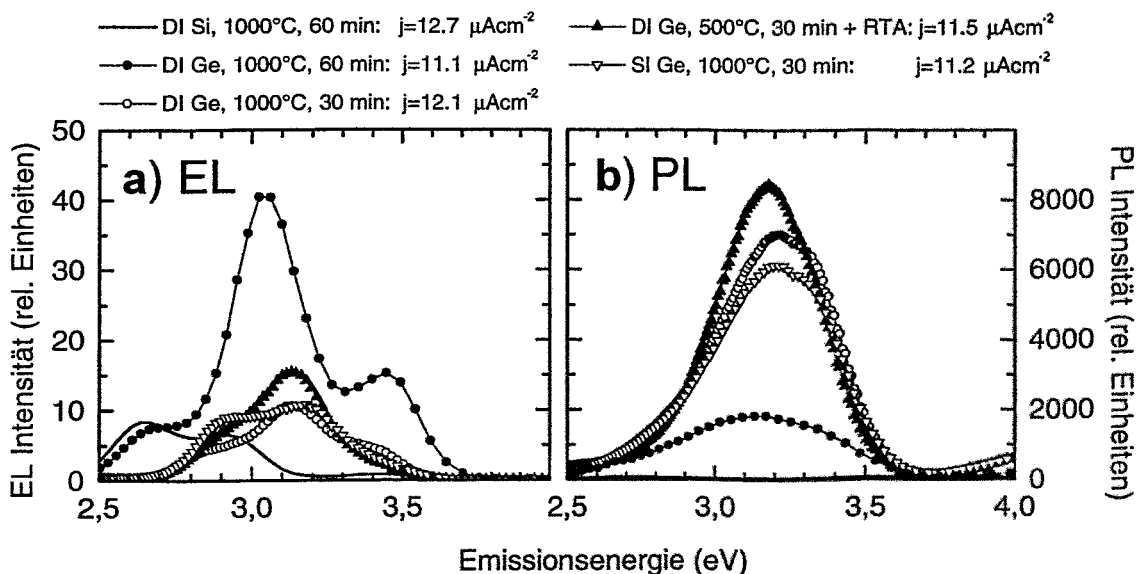


Abbildung 6.1: EL-Spektren Si- oder Ge-implantierter SiO_2 -Schichten mit einer Schichtdicke von 500 bis 560 nm im Vergleich zu den entsprechenden PL-Spektren.

ist.

Abb. 6.1 zeigt die EL-Spektren dicker Si- oder Ge-implantierter SiO₂-Schichten im Vergleich zu den entsprechenden PL-Spektren. Die EL-Spektren wurden bei einem angelegten elektrischen Feld von 7.3 bis 8.0 MV cm⁻¹ aufgenommen. Die PL wurde mit einer Wellenlänge von 240 nm (Ge) bzw. 250 nm (Si) angeregt.

Die EL-Spektren Ge-implantierter SiO₂-Schichten zeigen eine breite Emissionsbande im violetten Spektralbereich, jedoch keinen ultravioletten Peak mit einer Energie kleiner als 4.13 eV ($\lambda > 300$ nm), wie dies bei der PL Ge-implantierter Oxide der Fall ist. Die violette Bande zerfällt deutlich in drei Einzelpeaks zwischen 2.64 und 2.93 eV, zwischen 2.92 und 3.17 eV sowie zwischen 3.39 und 3.43 eV. Im Gegensatz zu den entsprechenden PL-Spektren ist die Breite der Einzelpeaks deutlich geringer. Um die Gemeinsamkeiten und die Unterschiede der EL- und PL-

	Peakposition (eV)		FWHM (eV)		rel. Anteil (%)	
	EL	PL	EL	PL	EL	PL
DI Si, 1000°C , 60 min	2.647		0.239		49.4	
	2.921	keine	0.257	keine	43.4	keine
	3.397		0.326		7.2	
DI Ge, 1000°C , 60 min	2.693	2.720	0.267	0.381	11.3	9.1
	3.050	3.128	0.267	0.503	63.0	82.1
	3.427	3.395	0.291	0.251	25.7	8.8
DI Ge, 1000°C , 30 min	2.889	2.889*	0.261	0.426	24.5	17.5
	3.140	3.203	0.237	0.382	54.2	72.9
	3.389	3.367	0.223	0.203	21.3	9.6
DI Ge, 500°C , 30 min + RTA	2.933	2.906	0.248	0.673	30.3	13.8
	3.142	3.176	0.221	0.378	59.1	83.4
	3.362	3.350	0.239	0.159	10.6	2.8
SI Ge, 1000°C , 30 min	2.915	2.915	0.229	0.412	35.0	21.0
	3.168	3.144	0.279	0.314	57.4	44.8
	3.430	3.342	0.213	0.276	7.6	34.2

* Wert wurde während der Anpassung fixiert.

Tabelle 6.2: Ergebnisse der Spektrenanpassung von EL- und PL-Spektren der Abb. 6.1 im Vergleich

Spektren aus Abb. 6.1 besser quantifizieren zu können, wurden die entsprechenden Spektren mit jeweils drei Gaußschen Verteilungen auf der Energieskala angepaßt. Diese Ergebnisse sind in Tabelle 6.2 dargestellt. Dabei ist anzumerken, daß die Anpassung der PL-Spektren mit drei Peaks eigentlich zu viele freie Parameter enthält. Um jedoch den Vergleich zwischen EL und PL nicht zu stark einzuschränken, wurde die Anzahl der freien Parameter nur in einem Fall herabgesetzt (siehe Peakposition bei DI Ge, 1000°C, 30 min in Tab. 6.2). Die durch die Anpassung verursachte Unsicherheit ist daher bei den Peaks mit einem geringen Anteil an der Gesamtfläche besonders hoch; eine Quantifizierung dieser Unsicherheiten verbietet sich aber aus den gleichen, in Kapitel 5.1.3 bereits dargelegten Gründen.

Vergleicht man die Ergebnisse für EL und PL, so überwiegen die Gemeinsamkeiten deutlich. Beide Spektren lassen sich durch drei Einzelpeaks modellieren, wobei die Peakpositionen um nicht mehr als 90 meV differieren. Auch die relative Intensität zueinander wird qualitativ richtig wiedergegeben. Dagegen sind die beiden niederenergetischen Komponenten in den PL-Spektren

deutlich breiter als im Falle der EL. Der Vergleich zwischen PL und EL läßt den Schluß zu, daß sowohl PL als auch EL durch das gleiche Lumineszenzzentrum verursacht werden.

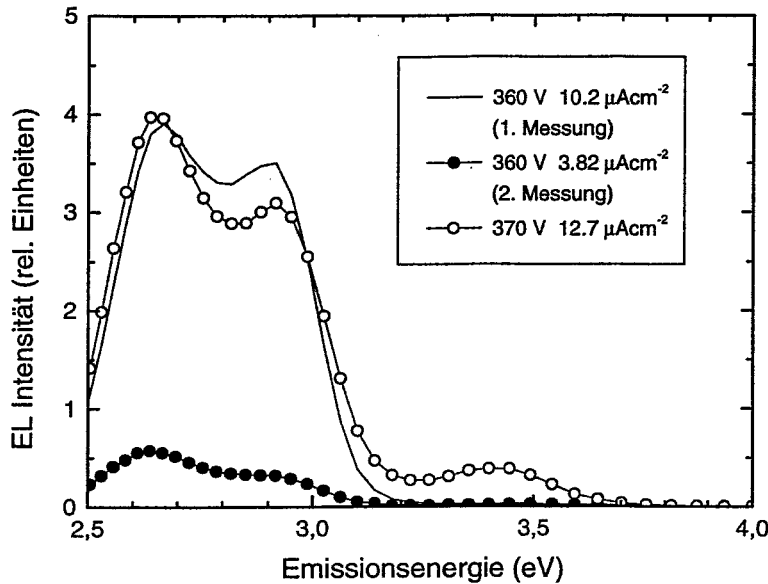


Abbildung 6.2: EL-Spektren einer Si-implantierten SiO_2 -Schicht, DI in 500 nm, 1000°C , 60 min bei verschiedenen Anregungsbedingungen.

Dieser Schluß kann im Falle Si-implantierter SiO_2 -Schichten keineswegs gezogen werden. Während das PL-Spektrum nach einer Ausheilung von 1000°C keine nennenswerte Emission im blauen Spektralbereich mehr aufweist (siehe Abb. 6.1b oder Abb. 5.3, Kap. 5.2.2), besitzt das EL-Spektrum eine breite EL-Bande mittlerer Intensität zwischen 2,6 und 3,0 eV (477 und 413 nm). Abb. 6.2 zeigt derartige EL-Spektren für eine Si-implantierte SiO_2 -Schicht, DI in 500 nm, 1000°C , 60 min mit verschiedenen Anregungsbedingungen. Bei unterschiedlichen Injektionsstromdichten existieren auch gewisse Unterschiede im EL-Spektrum, insbesondere bei 3,35 eV. Weiterhin wird sichtbar, daß sich die Injektionsstromdichte bei konstant angelegter Spannung erheblich ändern kann; die beiden Spektren bei 360 V wurden zeitlich hintereinander aufgenommen. Ein solches Verhalten legt den Verdacht nahe, daß ein Teil der Lumineszenzzentren während der Injektion erst generiert oder zumindest verändert wird.

Abb. 6.3 zeigt die EL und PL-Spektren dünner Ge-implantierter SiO_2 -Schichten im Vergleich. Wie im Falle dicker Schichten zeigen sowohl PL als auch EL eine Emission im blau-violetten Spektralbereich, die sich aus drei Einzelpeaks zusammensetzt. Aufgrund der geringen Intensität sind die EL-Spektren teilweise stärker deformiert. Interessanterweise zeigen viele dünne Oxidschichten eine starke PL. Dies impliziert, daß diese Schichten potentiell eine hinreichend große Menge an Lumineszenzzentren enthalten, die Qualität hinsichtlich der elektrischen Eigenschaften aber schlecht ist.

6.1.2 Intensität und EL-Effizienz

In Abb. 6.4a ist die Abhängigkeit des EL-Spektrums von der Injektionsstromdichte am Beispiel einer 500 nm dicken, Ge-implantierten SiO_2 -Schicht (DI Ge, 1000°C , 30 min) dargestellt. Obwohl die Injektionsstromdichte über drei Größenordnungen variiert, bleibt die Spektralförmigkeit völlig unverändert. Dieses Ergebnis gilt für alle Ge-implantierten SiO_2 -Schichten, läßt sich aber nur bedingt auf den Fall von Si übertragen. Bei letzterem ist die EL zwar immer auf den Bereich von 2,5 bis 3 eV beschränkt, aber die relative Intensität der einzelnen Komponenten verschiebt

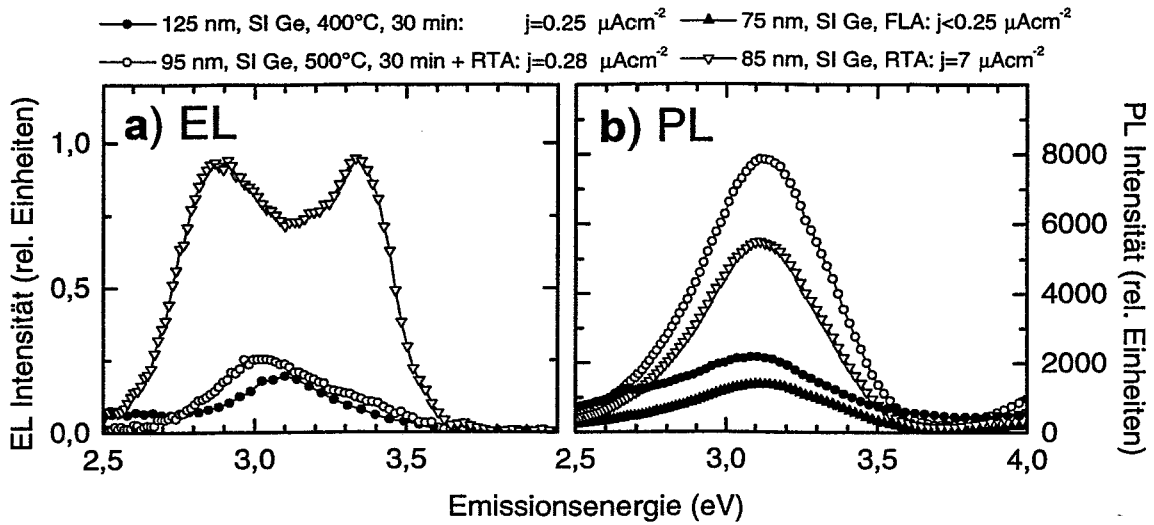


Abbildung 6.3: EL und PL-Spektren dünner Ge-implantierter SiO_2 -Schichten im Vergleich.

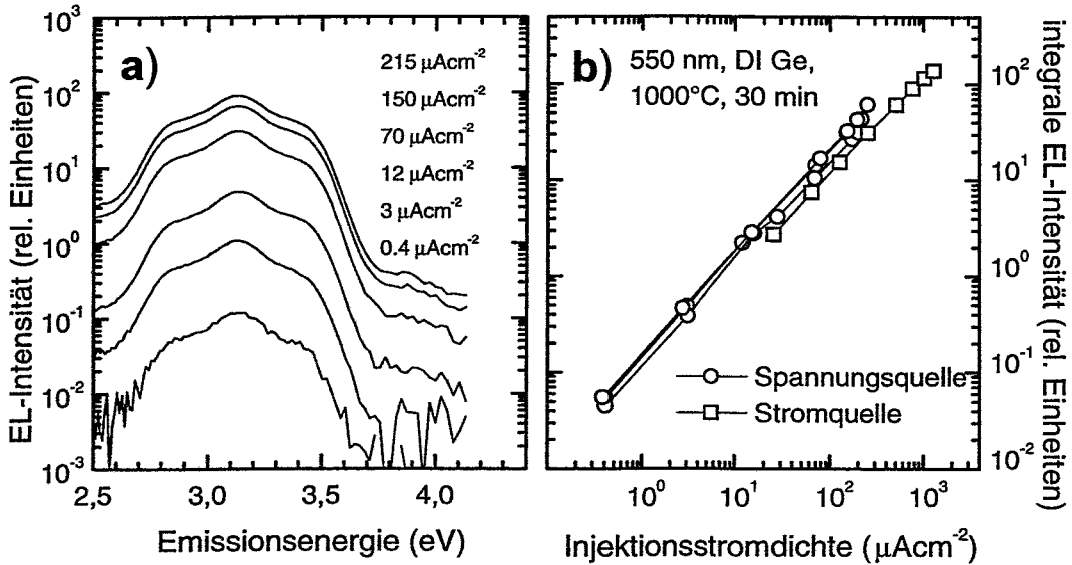


Abbildung 6.4: Abhängigkeit der EL einer Ge-implantierten SiO_2 -Schicht (550 nm, DI Ge, 1000°C , 30 min) von der Injektionsstromdichte. Das linke Diagramm zeigt das EL-Spektrum bei verschiedenen Injektionsstromdichten (a). Das rechte Diagramm (b) zeigt die integrale EL-Intensität als Funktion der Injektionsstromdichte bei zeitlich konstanter Spannung (Kreise) und zeitlich konstantem Injektionsstrom (Quadrate).

sich in Abhängigkeit von der Injektionsstromdichte (siehe Abb. 6.2).

In Abb. 6.4b ist die Abhängigkeit der integralen EL-Intensität von der Injektionsstromdichte dargestellt, wobei die integrale EL-Intensität dem Integral zwischen 2.5 und 3.7 eV der in 6.4a

abgebildeten Spektren entspricht. Diese integrale EL-Intensität wächst über drei Größenordnungen hinweg linear mit der Injektionsstromdichte j . Zur besseren Illustration wurden die in Abb. 6.4b gezeigten Abhängigkeiten mit der Funktion j^n angepaßt. Die dabei für den Exponenten n ermittelten Werte lagen zwischen 1.029 und 1.094 bei konstant angelegter Spannung und bei 0.963 für einen konstant vorgegebenen Injektionsstrom. Zum Unterschied von konstanter Spannung und konstantem Injektionsstrom sei auf Abschnitt 6.1.3 verwiesen. Dieses Ergebnis gilt für alle untersuchten Si- bzw. Ge-implantierten Oxidschichten.

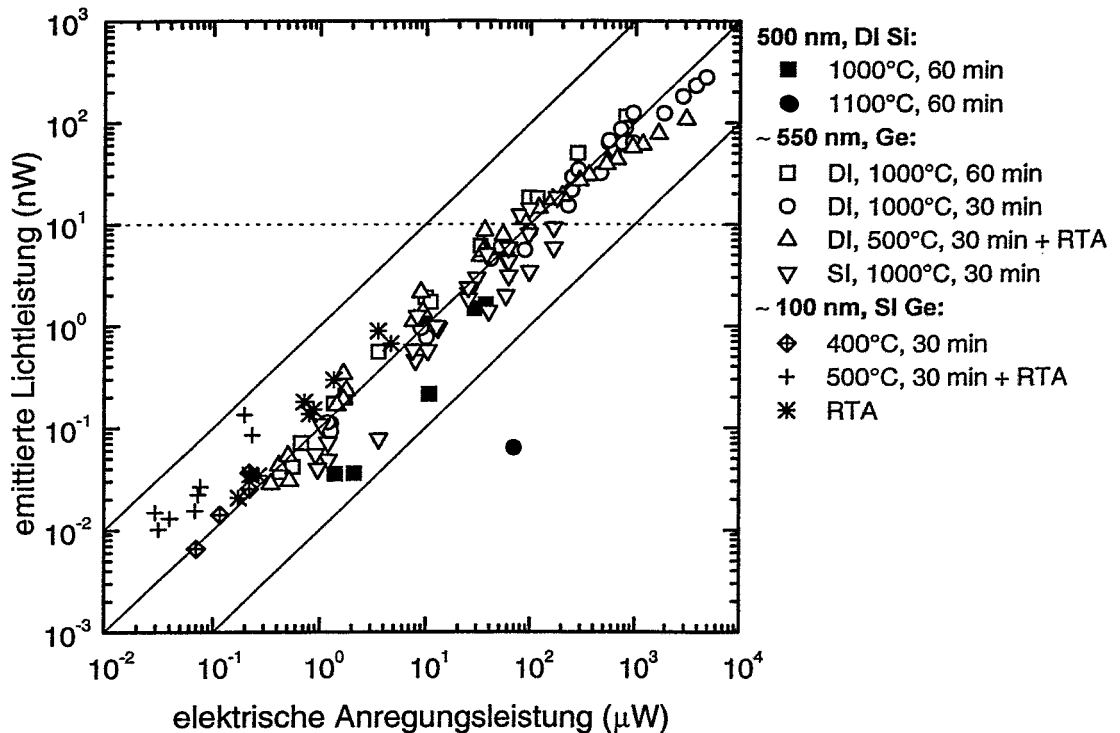


Abbildung 6.5: Emittierte Lichtleistung in Abhängigkeit von der elektrischen Eingangsleistung für Si- und Ge-implantierte SiO_2 -Schichten. Die elektrische Eingangsleistung wurde mit $U \cdot I$ berechnet, die emittierte Lichtleistung nach Kap. 5.1.4 bestimmt. Die durchgezogenen Linien entsprechen in aufsteigender Reihenfolge einer EL-Effizienz von 10^{-5} , 10^{-4} und 10^{-3} . Die gestrichelte Linie symbolisiert die ungefähre Grenze, ab der die EL mit bloßem Auge sichtbar wird.

Abb. 6.5 zeigt die Abhängigkeit der emittierten Lichtleistung (siehe Kap. 5.1.4) von der elektrischen Eingangsleistung ($U \cdot I$) für alle untersuchten Si- und Ge-implantierten SiO_2 -Schichten, bei denen eine EL nachweisbar ist. Die durchgezogenen Linien entsprechen in aufsteigender Reihenfolge einer EL-Effizienz von 10^{-5} , 10^{-4} und 10^{-3} , während die gestrichelte Linie die ungefähre Grenze symbolisiert, ab der die EL mit bloßem Auge sichtbar wird.

Bis auf eine Ausnahme zeigen alle Schichten eine EL-Effizienz zwischen $2 \cdot 10^{-5}$ und $7 \cdot 10^{-4}$. Weiterhin ist der Verlauf der emittierten Leistung über mehrere Größenordnungen hinweg linear; lediglich bei sehr hohen Injektionsströmen sinkt der Anstieg unter den einer Gerade. Dies ergibt sich auch aus Abb. 6.4b, da in erster Näherung die emittierte Leistung proportional zur integralen EL-Intensität (Näherungsformel 5.5) und die Anregungsleistung proportional zum Injektionsstrom ist. Das geringfügige Ansteigen der angelegten Spannung zum Erreichen höherer

Injektionsströme wurde dabei vernachlässigt. Die emittierte Leistung hat eine Unsicherheit von Faktor 2.

In Abb. 6.5 werden Unterschiede zwischen bestimmten Herstellungsparametern sichtbar. Bei gleichen Implantations- und Ausheilbedingungen liegt die EL-Effizienz von Ge-implantierten Schichten (weiße Quadrate) um den Faktor 3 bis 5 über der von Si-implantierten Schichten (schwarze Quadrate). Zudem erlauben erstere wesentlich höhere Injektionsströme, was sich positiv auf die absolut erreichbare EL-Intensität sowie die Zeit zum Erreichen eines Durchbruchs auswirkt (siehe Diskussion in Kap. 6.1.3). Im Vergleich zu Ge-implantierten Schichten mit DI (weiße Quadrate, Kreise und kopfstehende Dreiecke) weisen Oxide mit SI (weiße aufrechte Dreiecke) eine vergleichbare EL-Effizienz auf, erreichen jedoch nicht so hohe Injektionsströme. Am interessantesten ist der Vergleich zwischen dünnen und dicken SiO_2 -Schichten. Obwohl die EL-Intensität dünner Oxide nur knapp über der Detektionsgrenze liegt, ist ihre EL-Effizienz genauso gut wie die dicker SiO_2 -Schichten. Die kombiniert bei 500°C , 30 min und mit RTA ausgeheilten SiO_2 -Schichten erreichen sogar noch bessere Werte als die untersuchten dicken Oxidschichten. Dies läßt den optimistischen Schluß zu, daß dünne Oxide unter geeigneten Ausheilbedingungen auch bei hohen Injektionsströmen das gleiche Lumineszenzvermögen aufweisen wie dicke Oxidschichten. Das Problem der geringen EL-Intensität ist damit ein Problem der Oxidqualität hinsichtlich der Hochfeldinjektion.

6.1.3 Stabilität und Lebensdauer

Abb. 6.6 zeigt die Entwicklung der EL-Intensität über der Zeit bei konstantem Injektionsstrom (a) und konstant angelegter Spannung (b). Bei konstanter Stromeinspeisung bleibt die EL-Intensität mit Ausnahme des DI Ge, 500°C für 30 min + RTA, auch zeitlich konstant, bis sie bei Erreichen des Durchbruchs abrupt auf Null abfällt. Demgegenüber nimmt die EL-Intensität bei konstant angelegter Spannung langsam und kontinuierlich ab. Dieses Verhalten kann qualitativ mit dem Ausbilden einer Raumladungszone (RLZ) durch die im Oxid eingefangene Elektronen erklärt werden. Die Ausbildung eines negativen Potentials im Oxid verringert den Spannungsabfall im Bereich der Si-SiO₂-Grenzfläche und erschwert die Injektion der Elektronen von der Substratseite her (siehe Kap. 6.2.1). Hinsichtlich einer potentiellen Anwendung erscheint daher der Betrieb mit konstanter Stromeinspeisung günstiger.

Die Zeit t_{DB} , in der eine bestimmte Struktur bis zum Erreichen des Durchbruchs als Lichtemitter arbeitet, ist für eine mögliche Applikation von besonderem Interesse. In Abb. 6.6 ist ersichtlich, daß diese Zeit erheblich schwanken kann. Um von den spezifischen Betriebsbedingungen unabhängig zu sein, wurde die Zeit bis zum Erreichen des Durchbruchs in eine Ladung Q_{DB} umgerechnet, die während dieser Zeit pro Flächeneinheit durch das Oxid floß. Betrachtet man die EL als proportional zur Injektionsstromdichte, errechnet sich Q_{DB} zu

$$Q_{DB} = \int_0^{t_{DB}} j(t) dt \quad (6.1)$$

mit $j(t)$ als zeitlichem Verlauf der Injektionsstromdichte. Die Ergebnisse für die einzelnen Kurven aus Abb. 6.6 sind in Tabelle 6.3 zusammengetragen. Die genaue Zuordnung der Ladungen zu den einzelnen Kurven ist dabei weniger relevant. Die Tabelle zeigt noch einmal die Schwankungen innerhalb einer Probe sowie die Tatsache, daß Ladungen bis zu 25 mC cm^{-2} durch das Oxid fließen können. Wenn die Herstellung eine solche Qualität erreicht, daß eine gewisse Mindestladung Q_{DB} , die ohne Durchbruch durch das Oxid fließt, garantiert werden kann, ließe sich dann auch eine Mindestlebensdauer angeben. Eine Halbierung der Injektionsstromdichte würde dann einer Verdopplung der Mindestlebensdauer entsprechen.

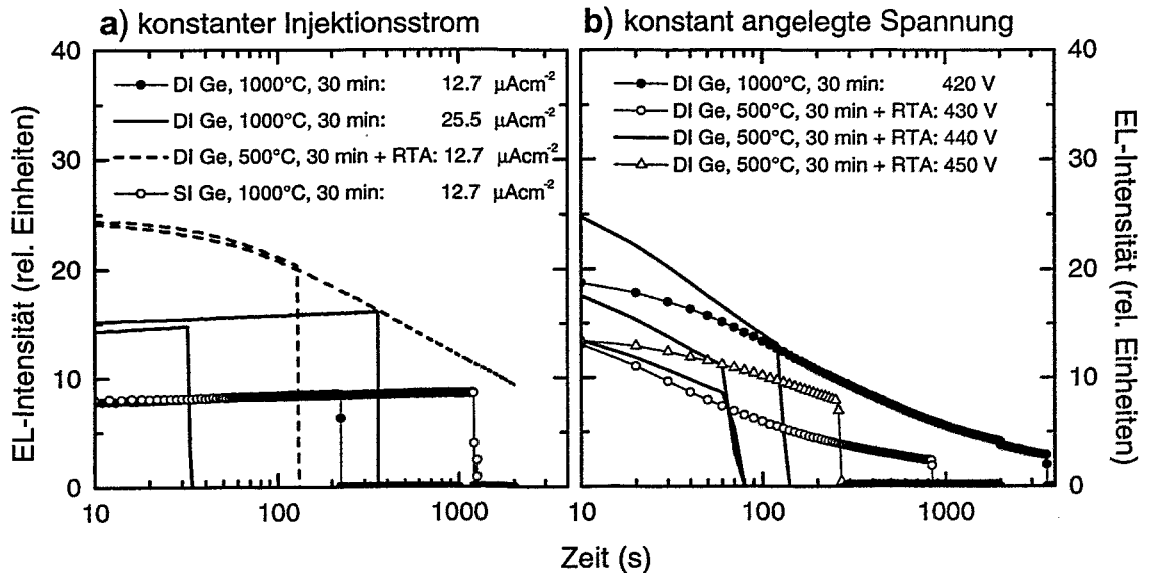


Abbildung 6.6: Entwicklung der EL-Intensität über der Zeit bei konstantem Injektionsstrom (a) und konstant angelegter Spannung (b). Einige MOS-Strukturen wurden mehrmals gemessen.

MOS-Struktur	Ladung (mC cm^{-2})
DI Ge, 550 nm, 1000°C, 30 min	0.84 2.9 8.9
DI Ge, 560 nm, 500°C, 30 min + RTA	1.7 11.7 >25
SI Ge, 540 nm, 1000°C, 30 min	0.98 2.9 4.2
	1.22 3.3 15.3

Tabelle 6.3: Bis zum Durchbruch durch das Oxid geflossene Ladung. Die verschiedenen Werte innerhalb einer Zeile verdeutlichen die Schwankungen bei verschiedenen Messungen.

6.2 Elektrische Diagnostik

Aufgrund der besseren EL-Effizienz und dem besseren Durchbruchverhalten von Ge-implantierten Oxidschichten gegenüber Si-implantierten Oxidschichten wird die weitere Darstellung auf erstere beschränkt.

6.2.1 I-U-Kennlinie

Abb. 6.7 zeigt die I-U-Kennlinie für Ge-implantierte SiO_2 -Schichten mit einer Dicke von 500 nm bzw. für 75 bis 100 nm dicke Oxide. Zur besseren Vergleichbarkeit wurde die angelegte Spannung in ein angelegtes elektrisches Feld und die Stromstärke in eine Stromdichte umgerechnet. Die mittlere Rampe des elektrischen Feldes, mit der die I-U-Kennlinien aufgenommen wurde, betrug etwa $0.1 \text{ MVcm}^{-1}\text{s}^{-1}$.

Die I-U-Kennlinien lassen sich deutlich in drei Bereiche untergliedern. Bei niedrigen und mittleren elektrischen Feldstärken bis etwa 6 MV cm^{-1} steigt die Stromdichte linear zum angelegten elektrischem Feld, wobei der spezifische Widerstand bei allen untersuchten Strukturen im Bereich $4 \dots 16 \cdot 10^{13} \Omega \text{ cm}$ liegt. Bei höheren elektrischen Feldstärken werden zunehmend Elektronen durch Fowler-Nordheim (FN)-Tunneln injiziert (siehe auch Diskussion in Kap. 6.3.1), bis schließlich ein Durchbruch induziert wird.

Gegenüber dem unimplantierten Oxid erreicht die I-U-Kennlinie Ge-implantierter SiO_2 -

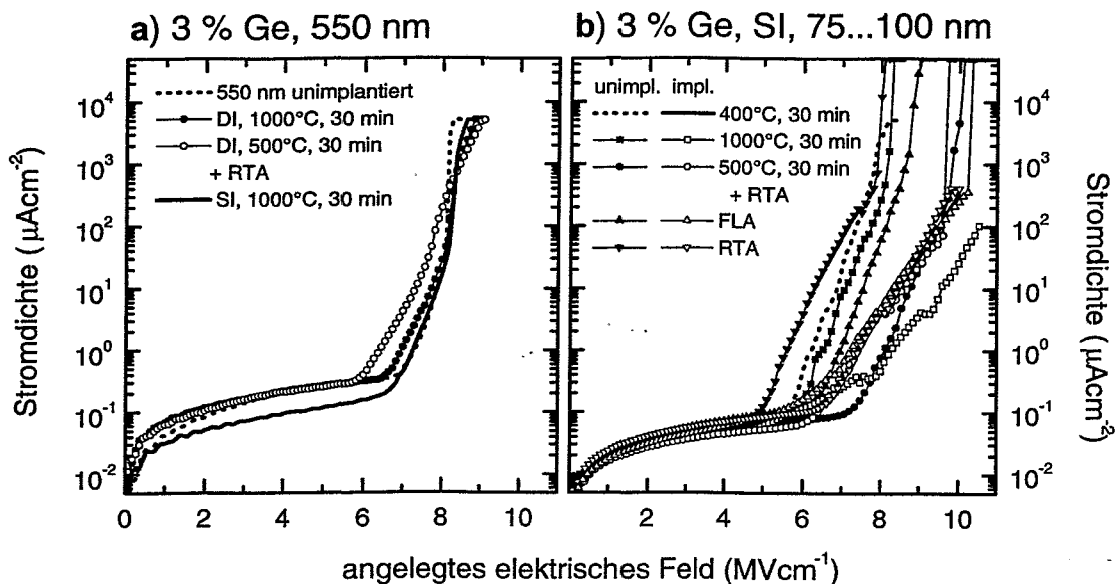


Abbildung 6.7: I-U-Kennlinie für Ge-implantierte SiO_2 -Schichten mit einer Dicke von 500 nm (a) bzw. 75 bis 100 nm (b). Der besseren Vergleichbarkeit wegen wurde die angelegte Spannung in ein angelegtes elektrisches Feld und die Stromstärke in eine Stromdichte umgerechnet. Die mittlere Rampe des elektrisches Feldes, mit der die I-U-Kennlinien aufgenommen wurden, betrug etwa $0.1 \text{ MVcm}^{-1}\text{s}^{-1}$.

Schichten die Region der FN-Injektion eher, der Anstieg in diesem Gebiet ist geringer, und der Durchbruch wird erst bei höheren elektrischen Feldstärken erreicht. Während dieses Verhalten bei dicken SiO_2 -Schichten eindeutig beobachtet werden kann (Abb. 6.7a), gilt diese Aussage für dünne SiO_2 -Schichten nur tendenziell (Abb. 6.7b). Obwohl der Durchbruch bei den dünnen Oxiden erst bei höheren Feldstärken eintritt, erreichen diese jedoch eine geringere Stromdichte. Kurz vor dem Durchbruch werden bei dicken Oxiden Stromdichten von 5 mA cm^{-2} und mehr erreicht, die damit mindestens eine Größenordnung über den Stromdichten bei dünnen Oxiden liegen.

Hinsichtlich der Reproduzierbarkeit zeigen implantierte dünne Oxide wesentlich größere Schwankungen als dicke. Dies gilt insbesondere für die aus den Kennlinien ermittelte Durchbruchfeldstärke $|\vec{E}_{DB}|$, die um bis zu 20 % schwanken kann. Im Extremfall (SI Ge in 30 nm Oxid, 500°C für 30 min + RTA) gab es auch Durchbrüche unterhalb von 1 MV cm^{-1} (nicht in Abb. 6.7 gezeigt).

6.2.2 C-U-Kennlinie

Abb. 6.8 zeigt die C-U-Kennlinie für 500 nm und 75 bis 100 nm dicke, Ge-implantierte SiO_2 -Schichten. Die Kennlinien wurden mit einer Spannungsrampe von 5 bzw. 1 Vs^{-1} aufgenommen. Der Spannungsrampe wurde ein hochfrequentes Meßsignal von 25 mV und 100 kHz überlagert.

Bei dicken SiO_2 -Schichten ist die Kurve der implantierten Oxide um den Betrag ΔU_{FB} gegenüber der Kurve der unimplantierten Oxide verschoben. Als Bezugspunkt dient dabei die Flachbandspannung U_{FB} , bei der an den Grenzflächen des Oxides keine Bandverbiegung auftritt. Mit einer Austrittsarbeit zum SiO_2 von 4.1 eV für Al und 4.35 eV für undotiertes Si liegt U_{FB} bei etwa -0.25 V [Sze81]. Demgegenüber zeigen die meisten dünnen Oxide keine eindeutige

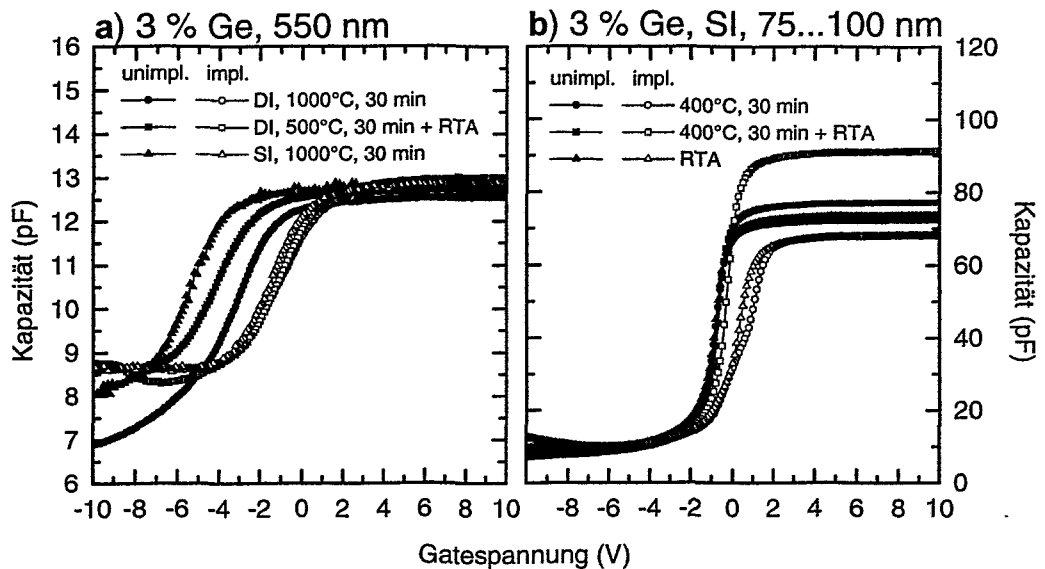


Abbildung 6.8: C-U-Kennlinie für Ge-implantierte SiO₂-Schichten mit einer Dicke von 500 nm (a) bzw. 75 bis 100 nm (b). Die Kennlinien wurden mit einer Spannungsrampe von 5 Vs⁻¹ aufgenommen. Der Spannungsrampe wurde ein hochfrequentes Meßsignal von 25 mV und 100 kHz überlagert.

Verschiebung der Flachbandspannung beim Übergang vom unimplantierten zum implantierten Oxid.

Zur Diskussion der C-U-Kennlinien sei kurz auf deren prinzipiellen Verlauf eingegangen. In grober Näherung kann man sich die Gesamtkapazität einer idealen MOS-Struktur als Reihenschaltung zweier Plattenkondensatoren vorstellen:

$$\frac{1}{C_i} = \frac{1}{C_{OX}} + \frac{1}{C_{HL}} \quad (6.2)$$

Dabei ist C_{OX} die Kapazität des Oxides und C_{HL} die Kapazität der RLZ im Si an der Si-SiO₂-Grenzfläche. Für einen Plattenkondensator gilt allgemein

$$C = \frac{\epsilon_r \epsilon_0 A}{d} \quad (6.3)$$

mit ϵ_r als relative Dielektrizitätszahl des Mediums zwischen den Platten, A als Fläche der Kondensatorplatten und d als deren Abstand.

Bei angelegter positiver Spannung (Anreicherung) bildet sich eine räumlich eng begrenzte RLZ mit Elektronen an der Si-SiO₂-Grenzfläche aus. Aufgrund der geringen Ausdehnung ist C_{HL} sehr groß, und die Kapazität C_i ist konstant mit $C_i = C_{OX}$. Bei kleiner angelegter negativer Spannung (Verarmung) entsteht eine Verarmungszone an der Si-SiO₂-Grenzfläche. Da je Raumeinheit nicht mehr Löcher als Donatoren vorhanden sein können, kann sich die Verarmungszone über mehrere 100 nm ausdehnen. Mit wachsender negativer Spannung wächst die Breite der Verarmungszone, ihre Kapazität nimmt ab, und als Ergebnis sinkt C_i . Schließlich erreicht die Verarmungszone einen Maximalwert, bei dem die Inversion einsetzt. Die zusätzliche Generierung von Ladungsträgern während der Inversion ist jedoch ein langsamer Prozeß, der dem hochfrequenten Meßsignal nicht folgen kann. Daher bleibt C_i für hohe Frequenzen bei weiterer Erhöhung der negativen Spannung konstant.

MOS-Struktur	C_{OX}^{Ref} (pF)	C_{OX}^{imp} (pF)	$ \Delta U_{FB} $ (V)	Q_{imp} (pC)
DI Ge, 550 nm, 1000°C, 30 min	12.5	12.8	1.7	-22
DI Ge, 560 nm, 500°C, 30 min + RTA	12.7	13.0	2.5	-32
SI Ge, 540 nm, 1000°C, 30 min	12.8	12.9	4.0	-52
SI Ge, 100 nm, 1000°C, 30 min	72	68	1.6	-109
SI Ge, 95 nm, 500°C, 30 min + RTA	74	76	<0.3	<23*
SI Ge, 75 nm, FLA	76	91	0.4...0.8	-72...-36
SI Ge, 85 nm, RTA	78	79	<0.7	<55*
SI Ge, 100 nm, 1000°C, 30 min	73	67	1.0	-67
SI Ge, 40 nm, 1000°C, 30 min	162	148	<0.4	<60*
SI Ge, 30 nm, 500°C, 30 min + RTA	205	170	<0.2	<34*

Tabelle 6.4: Kapazität des unimplantierten (C_{OX}^{Ref}) und des implantierten (C_{OX}^{imp}) Oxids sowie die Verschiebung der Flachbandspannung ΔU_{FB} und die zusätzlich im implantierten Oxid gespeicherte Ladung Q_{imp} . Sowohl ΔU_{FB} als auch Q_{imp} sind negativ. Die mit * markierten Werte sind eine obere Grenze für den Betrag der Ladung.

Aus der Verschiebung der Flachbandspannung kann die zusätzlich im implantierten Oxid vorhandene Ladung mittels

$$Q_{imp} = \Delta U_{FB} \cdot C_{OX}^{imp} \quad (6.4)$$

abgeschätzt werden [Bar86]. Dabei haben Ladungen in der Nähe der Si-SiO₂-Grenzfläche einen größeren Einfluß auf die Verschiebung ΔU_{FB} als weiter entfernte Ladungen. Die Werte der Oxidkapazität im implantierten und unimplantierten SiO₂ sowie die Verschiebung der Flachbandspannung ΔU_{FB} und die zusätzlich im implantierten Oxid gespeicherte Ladung Q_{imp} sind in Tabelle 6.4 aufgelistet. Leider ist wegen der großen Schwankungen bei dünnen Oxidschichten kein eindeutiger Vergleich zwischen dünnen und dicken Oxiden möglich. Bei den dicken Oxidschichten kann festgestellt werden, daß die Oxidschichten mit SI eine größere Ladung enthalten als die mit DI. Die Verschiebung der Flachbandspannung ΔU_{FB} allein läßt jedoch noch keinen Schluß über die Verteilung der Ladung innerhalb der Oxidschicht zu, so daß die Ursache für die Differenz von SI und DI nicht bekannt ist. Schließlich kann man aus dem gleichen Anstieg der C-U-Kennlinien für implantierte und unimplantierte Oxide ableiten, daß die Implantation keinen Zuwachs an schnellen Grenzflächenzuständen verursacht, die sich an der Si-SiO₂-Grenzfläche befinden und umladbar sind.

6.3 Modell der Elektrolumineszenz

6.3.1 Injektions- und Leitungsmechanismus

Abb. 6.9 zeigt eine idealisierte MOS-Struktur unter positiver Vorspannung (Anreicherung). Als Injektionsmechanismus kommt im wesentlichen nur das FN-Tunneln (Prozeß 1) in Betracht. Aufgrund der Barrierenhöhe von etwa 4.35 eV vom Si zum SiO₂ scheiden thermisch aktivierte Injektionsmechanismen aus. Das direkte Tunneln durch die gesamte Oxidschicht kann bei Dicken von 50 bis 500 nm auch ausgeschlossen werden. Existieren jedoch Ge-Nanocluster in der Nähe der Si-SiO₂-Grenzfläche, ist es denkbar, daß ein gewisser Teil der Elektronen durch direktes Tunneln in diese Cluster injiziert wird.

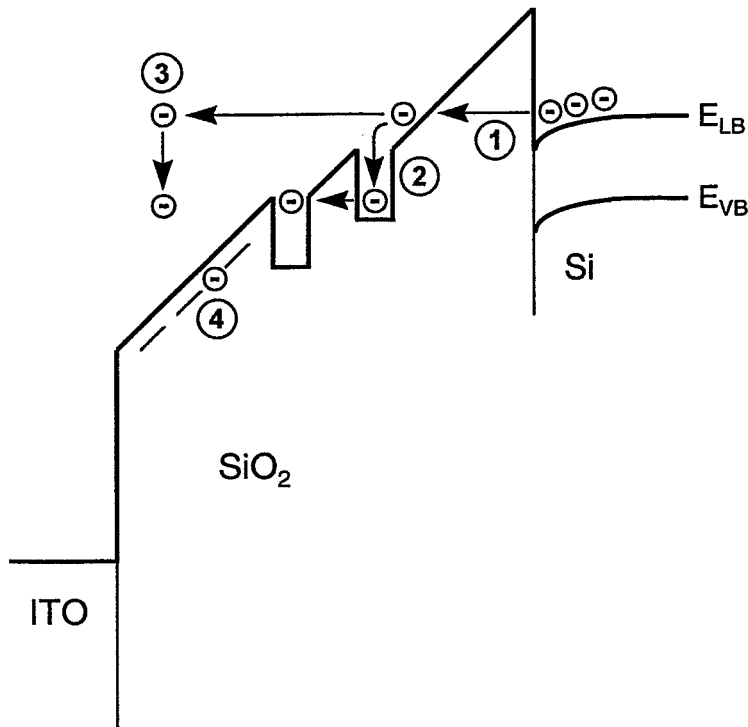


Abbildung 6.9: Ideale MOS-Struktur unter positiver Vorspannung (Anreicherung). Nachdem Elektronen via FN-Tunneln in das Oxid gelangt sind (1), gibt es folgende Möglichkeiten der Stromleitung: Tunneln zwischen Nanoclustern (2), Transport im Leitungsband mit unelastischer Streuung (3) und Hopping-Leitung (4).

Nachdem Elektronen durch FN-Tunneln in das Oxid gelangt sind, gibt es mehrere Möglichkeiten der Stromleitung. Zum einen könnten Elektronen, die im Potentialtopf eines Nanoclusters gefangen sind, von einem Nanocluster zum anderen tunneln (Prozeß 2). Ein solcher Strom wurde bei Anlegen niedriger Spannungen an eine Ge-reiche, gesputterte SiO_2 -Schicht beobachtet [Fuj98]. Der dabei gemessene spezifische Widerstand für eine Oxidschicht mit 4.5 % Ge war mit $10^{13} \Omega \text{ cm}$ etwa eine Größenordnung geringer als der der hier untersuchten Oxidschichten (3 % Ge). Es wird angenommen, daß dieser Strom neben dem Verschiebestrom $I = C_{OX} dU/dt$ die I-U-Kennlinien aus Abb. 6.7 für niedrige Feldstärken bis etwa 6 MV cm^{-1} bestimmt.

Eine zweite Möglichkeit besteht darin, daß sich die Elektronen frei im Leitungsband des SiO_2 bewegen, und die Stromabhängigkeit durch die Streueignisse beim Durchqueren des Oxides bestimmt wird (Prozeß 3). Diese Leitung ähnelt dem Pool-Frenkel-Strom, bei dem sich Ladungsträger von einer Störstelle zur anderen bewegen, aber eine Energie größer als die jeweilige Barriere besitzen.

Schließlich könnte der Ladungstransport durch Hopping-Leitung erfolgen (Prozeß 4), bei der die Elektronen von Störstelle zu Störstelle tunneln. Diese Leitung wird bei hohen angelegten Feldern in ähnlicher Weise begünstigt wie bei der FN-Injektion: bei entsprechend hohen Feldstärkegradienten kann sich die zu durchtunnelnde Distanz erheblich verkürzen.

Die Frage, welcher Leitungstyp bei hohen angelegten Feldstärken dominierend ist, kann anhand des vorliegenden experimentellen Materials nicht entschieden werden. Hinzu kommt, daß sich wahrscheinlich Effekte der Injektion und der Stromleitung überlagern. Bei niedrigen und mittleren Strömen kann man davon ausgehen, daß die Stromstärke allein durch die Injektion limitiert wird. Bei hoher Strominjektion wird die Stromstärke jedoch zunehmend durch den Transportmechanismus selbst begrenzt.

6.3.2 Elektrische Anregung der Lumineszenzzentren

Welche von den soeben beschriebenen Leitungsmechanismen können zur Anregung der Lumineszenzzentren führen? Es wurde bereits festgestellt (siehe Kap. 5.6), daß die PL in keiner Weise mit einem QC-Effekt in Nanokristallen erklärt werden kann. In Kap. 6.1.1 wurde deutlich, daß PL und EL durch das gleiche Zentrum verursacht werden. Es kann daher ausgeschlossen werden, daß die beobachtete EL durch die Rekombination von Elektron-Loch-Paaren in Ge-Nanokristallen verursacht wird.

Die freie Bewegung der Elektronen im Leitungsband des Oxids kann zur Anregung des Lumineszenzzentrums führen. Auf die Elektronen wirkt einerseits durch die angelegte Spannung eine konstante Beschleunigung in Richtung Metallelektrode. Andererseits werden die Elektronen durch ständige Streuereignisse abgebremst, und es bildet sich eine mittlere Energieverteilung der Elektronen heraus. Der Hauptteil der Elektronen wird niedrige Energien besitzen, die nicht zur Anregung der Lumineszenzzentren ausreichen. Der hochenergetische Ausläufer dieser Verteilung hat aber potentiell die Energie, die zur Anregung der Lumineszenzzentren benötigt wird. Mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit können diese heißen Elektronen an einem sich im Grundzustand S_0 befindlichen Lumineszenzzentrum streuen, und die dabei übertragene Energie könnte zur Anregung des Lumineszenzzentrums dienen. Welche Energie ist dabei mindestens vonnöten? In Kap. 2.5 wurde ausgeführt, daß der Übergang $S_0 \rightarrow T_1$ aufgrund der optischen Auswahlregeln ein verbotener sei und die optische Anregung hauptsächlich über $S_0 \rightarrow S_1$ erfolge. Diese Einschränkung ist bei Stoßanregung durch Elektronen nicht mehr gegeben, so daß die Lumineszenzzentren direkt nach T_1 angeregt werden können. Die Mindestenergie der Elektronen sollte daher in etwa der Energie des Überganges $S_0 \rightarrow T_1$ entsprechen, also rund 3.8 eV.

Eine Anregung der Lumineszenzzentren kann aber auch bei der Hopping-Leitung geschehen, wenn die Lumineszenzzentren selber als Hopping-Zentren agieren. In diesem Szenario werden die Lumineszenzzentren durch die Bildung von Elektron-Loch-Paaren ionisiert, was im Energieveauschema gleichbedeutend mit der Anregung in einen „ionisierten“ Zustand ist. Das Elektron bewegt sich in Richtung Metallelektrode, und läßt das Lumineszenzzentrum positiv geladen zurück. Wird ein neues Elektron eingefangen, so kann sich das Zentrum relaxieren und gelangt - wahrscheinlich zum größten Teil - zurück in den Zustand S_0 . Mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit kann es aber auch in den Zustand T_1 relaxieren. Die Frage, ob das Zentrum auch nach S_1 gelangen kann, hängt von der Energie des „ionisierten“ Zustandes ab.

Der strahlende Übergang $T_1 \rightarrow S_0$ wäre dann in beiden Fällen die Ursache für die beobachtete EL.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

Ziel der vorliegenden Arbeit war die Untersuchung der Lumineszenzeigenschaften von ionenstrahlmodifizierten SiO₂-Schichten. Im Falle von Si-, Ge- oder Sn-implantierten SiO₂-Schichten konnte eine starke PL im blauen (Si) bzw. violetten Spektralbereich (Ge und Sn) festgestellt werden, die in allen Fällen von einer Lumineszenzbande im UV-Bereich begleitet wurde. Während diese Lumineszenzbanden in dotierten Gläsern bereits bekannt sind [Toh89, Sku92], ist ihr Auftreten in ionenstrahlmodifizierten SiO₂-Schichten neu. Der erstmalige Nachweis blau-violetter PL bei Si- bzw. Ge-implantierten SiO₂-Schichten [Sko96a, Reb97a] erfolgte zeitgleich, aber unabhängig voneinander mit [Liao96a, Bao97]. Letztere behandelten die Fälle Si und Ge getrennt, während die Intensität und die energetische Lage Si- und Ge-implantierter SiO₂-Schichten in [Reb97a] direkt verglichen wurden. Zum ersten Mal wurde im Rahmen dieser Arbeit eine starke violette PL bei Sn-implantierten SiO₂-Schichten beobachtet. Die Unterschiede und Gemeinsamkeiten in der PL Si-, Ge- und Sn-implantierter SiO₂-Schichten wurde auf der Grundlage des Heavy-Atom-Effekts ausführlich diskutiert. Weiterhin wurde der erstmalige und bisher einzige Nachweis einer starken violetten EL mit einer Leistungseffizienz von bis zu $5 \cdot 10^{-4}$ bei Ge-implantierten SiO₂-Schichten in [Reb97b] veröffentlicht. Die Implantations- und Temperbedingungen wurden hinsichtlich der Intensität der blau-violetten PL optimiert.

Darüber hinaus konnte die Natur der Lumineszenzzentren zum größten Teil aufgeklärt werden. Im Vergleich mit Ar-implantierten SiO₂-Schichten wurde nachgewiesen, daß die Präsenz von überschüssigem Si oder zu Si isoelektronischen Atomen wie Ge oder Sn zur Bildung der Lumineszenzzentren notwendig ist. Im Falle Ge-implantierter SiO₂-Schichten sind die Lumineszenzzentren in allen Ge-haltigen Bereichen der Oxidschicht zu finden, d.h. in der oberflächennahen, keine Ge-Cluster enthaltenden Schicht, im zentralen Clusterband sowie in den Ge-Ansammlungen in der Nähe der Si-SiO₂-Grenzfläche. Wegen der völligen Unabhängigkeit der Anregungs- und Emissionsenergien von der Ausheiltemperatur und der Konzentration der implantierten Ionen sowie der starken PL aus clusterfreien Oxidschichten scheiden QC-Effekte in Nanoclustern definitiv als Ursache der PL aus.

Aufgrund des umfangreichen spektroskopischen Materials konnte die Emission im UV sowie im blau-violetten Spektralbereich einem S₁→S₀ bzw. T₁→S₀ Übergang eines molekularen Lumineszenzzentrums zugeordnet werden. Hauptargumente für diese Zuordnung sind die identischen Anregungsspektren der blau-violetten und der UV-Bande, das für eine Ionenart in gewissen Grenzen konstante relative Intensitätsverhältnis ν zwischen diesen beiden Lumineszenzbanden und die gemessenen Abklingkonstanten der blau-violetten PL für Ge- und Sn-implantierte SiO₂-Schichten. Die Erhöhung der Emissionsenergie für die blau-violette PL-Bande, das Ansteigen von ν und die Verringerung der Abklingkonstante mit zunehmender Ordnungszahl des implantierten Ions läßt sich mit Hilfe des Heavy-Atom-Effekts sehr gut erklären.

Die Frage nach der konkreten Mikrostruktur des Lumineszenzzentrums konnte noch nicht zufriedenstellend beantwortet werden; die spektroskopischen Befunde favorisieren jedoch die NOV und deren Analoga für Ge- und Sn-reiche Oxide. Aus den ESR-Untersuchungen implantierter Oxide in der Literatur, insbesondere [Liao96a], wird geschlußfolgert, daß E'-Zentren oder adäquate Strukturen mit Ge- bzw. Sn-Atomen die Vorläufer der Lumineszenzzentren bilden.

Der Vergleich mit gesputterten SiO₂-Schichten unterstreicht die Bedeutung der Ionenstrahl-synthese, die zwar prinzipiell nicht zur Herstellung der Lumineszenzzentren erforderlich ist, aber zum Erreichen hoher Lumineszenzintensitäten benötigt wird. Es wird angenommen, daß während der Implantation eine höhere Zahl von E'-Zentren entsteht, die sich dann in Lumineszenzzentren umwandeln können. Es wird vermutet, daß auch die höhere PL-Intensität Ge-implantierter Oxide, die gegenüber RT bei LNT implantiert wurden, auf die erhöhte Zahl von E'-Zentren zurückgeführt werden kann. Da aber im Rahmen dieser Arbeit keine ESR-Untersuchungen durchgeführt wurden, ist diese Begründung hypothetisch.

Die Eignung Ge-implantierter SiO₂-Schichten für optoelektronische Anwendungen wurde mit dem Erreichen einer starken violetten EL unter Hochfeldinjektion erstmalig demonstriert. Für die EL-Effizienz wurden dabei Werte bis zu $5 \cdot 10^{-4}$ erreicht. Aus der hervorragenden Übereinstimmung der EL- mit den PL-Spektren konnte geschlußfolgert werden, daß sowohl die PL als auch die EL durch das gleiche Lumineszenzzentrum verursacht werden. Dabei wuchs die EL-Intensität über mehr als drei Größenordnungen hinweg linear mit dem Injektionsstrom, ohne daß sich die Spektrenform der EL veränderte. Die elektrischen Messungen ergaben, daß das I-U-Verhalten durch die Elektroneninjektion vom FN-Typ dominiert wird.

Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen stehen am Anfang der Entwicklung eines lumineszierenden optoelektronischen Bauelementes. Diese Entwicklung, beginnend mit der Entdeckung und physikalischen Beschreibung einer bestimmten Materialeigenschaft bis hin zu deren technischen Verwertung, ist ein komplizierter und oft langwieriger Prozeß. Die Schwerpunkte dieser Arbeit lagen daher in dem Nachweis, daß ionenstrahlmodifizierte SiO₂-Schichten überhaupt eine effiziente blau-violette Lumineszenz zeigen können, in der physikalischen Beschreibung dieser Lumineszenzfähigkeit und in den Untersuchungen zur Natur der Lumineszenzzentren. Dementsprechend konzentrierte sich die Arbeit mehr auf die PL- als auf die EL-Eigenschaften. Es wurde gezeigt, daß ionenstrahlmodifizierte SiO₂-Schichten, insbesondere Ge-implantierte SiO₂-Schichten, innerhalb der Si-basierenden Lumineszenzmaterialien eine erfolgversprechende Alternative für optoelektronische Anwendungen darstellen. Für die weitere Forschungsarbeit in Richtung einer möglichen Anwendung ergeben sich aus den Ergebnissen dieser Arbeit eine Fülle weiterer Fragestellungen.

Obwohl man aus dem Vergleich von PL- und EL-Spektren auf das gleiche Lumineszenzzentrum und den gleichen Abregungsmechanismus schließen konnte, blieb der elektrische Anregungsmechanismus noch im Dunkeln. Dieser ist wiederum eng mit der Frage gekoppelt, welcher Leitungsmechanismus neben der FN-Injektion wirksam ist. Die verschiedenen Typen der Stromleitung, wie z.B. Hopping-Leitung oder Tunnelströme, unterscheiden sich hauptsächlich in ihrer Abhängigkeit von der Meßtemperatur. Es wäre daher hilfreich, die I-U-Kennlinien der untersuchten MOS-Strukturen bei verschiedenen Temperaturen aufzunehmen.

Wie bei der PL stellt sich für die EL die Frage, ob die Ionenstrahl-synthese ein notwendiges Verfahren zur Herstellung Ge-reicher Oxide ist, die eine starke EL aufweisen. Für diesen Zweck könnte man einen Vergleich der EL-Eigenschaften Ge-reicher Oxide, die mit verschiedenen Verfahren hergestellt wurden, durchführen. Um die Ergebnisse eines solchen Vergleichs bewerten zu können, empfiehlt es sich, die Konzentration der E'-Zentren mittels ESR zu messen.

Bei dicken Oxidschichten, die eine sehr hohe absolute EL-Intensität aufwiesen, wurden Span-

nungen in der Größenordnung von 400 V angelegt. Dies ist für die meisten Anwendungen nicht akzeptabel. Die weiteren Untersuchungen müssen sich daher immer mehr auf dünne Oxide und damit niedrigere Spannungen konzentrieren. Die Schwierigkeit liegt darin, eine Verschlechterung der Stabilität und eine Verringerung der absoluten EL-Intensität mit der Abnahme der Oxiddicke zu vermeiden.

Die Güte einer MOS-Struktur konnte unter anderem durch die Ladung Q_{DB} charakterisiert werden, die bis zum Erreichen des Durchbruchs durch das Oxid fließt. Diese Ladung wies für eine bestimmte Struktur noch erhebliche Schwankungen auf. Man sollte daher bestrebt sein, diese Schwankungen zu verringern und die Herstellung der MOS-Struktur so zu verbessern, daß man eine möglichst hohe Mindestladung Q_{DB} garantieren kann. Ansatzpunkte für eine solche Verbesserung ergeben sich bei der Herstellung des Oxides und bei der Modifizierung der Ladungsträgerinjektion.

Schließlich spielt das Zeitverhalten der EL für die Frage, für welche Anwendung der Einsatz Ge-implantierter SiO_2 -Schichten sinnvoll ist, eine wichtige Rolle. Die Ergebnisse aus den Messungen der zeitaufgelösten PL lassen sich dabei nur sehr bedingt auf die EL übertragen. So ist zur Zeit weder das Zeitverhalten der elektrischen Anregung noch der Einfluß des hohen elektrischen Feldes auf das Zeitverhalten der optischen Abregung bekannt.

Die EL-Untersuchungen waren im Rahmen dieser Arbeit auf Si- bzw. Ge-implantierte SiO_2 -Schichten beschränkt. Die um etwa Faktor 2 höhere PL-Intensität und die um Faktor 10 geringere Abklingkonstante der PL Sn-implantierter SiO_2 -Schichten gegenüber Ge-implantierten Schichten lassen Sn-implantierte Schichten für die EL interessant erscheinen. Es wäre zu prüfen, ob Sn-implantierte SiO_2 -Schichten ähnlich gute elektrische Eigenschaften wie Ge-implantierte SiO_2 -Schichten aufweisen oder ob die radikalere Umstrukturierung während der Ausheilung auch zu einer deutlichen Verschlechterung der elektrischen Eigenschaften führt.

Abschnitt 2.1 beschäftigte sich u.a. mit den Anforderungen an ein elektrolumineszierendes Material in der Optoelektronik. Auf der Grundlage der in dieser Arbeit erzielten Erkenntnisse soll die Eignung ionenimplantierter SiO_2 -Schichten für ein optoelektronisches Bauelement kurz diskutiert werden.

Für die Integration in die bereits bestehende Si-Technologie sind die drei wesentlichen Herstellungsprozeduren, thermische Oxidation, Implantation und Ausheilung unterhalb 1000°C , hervorragend geeignet. Hinzu kommen die guten mechanischen, chemischen und elektrischen Eigenschaften von SiO_2 . Weiterhin führt ein relativ breiter Bereich von Herstellungsparametern zu einer effizienten Lumineszenz, so daß die konkreten Herstellungsbedingungen eines Bauelementes an die Erfordernisse der Industrie angepaßt werden können. So würde man sicherlich einen geringen Intensitätsverlust bei der Implantation in Kauf nehmen, um eine aufwendige Kühlung der Targets zu vermeiden.

Die erreichte Leistungseffizienz der violetten EL von Ge-implantierten SiO_2 -Schichten von $5 \cdot 10^{-4}$ ist für einen optisch verbotenen Übergang beachtlich, und es ist nicht sehr wahrscheinlich, daß diese Effizienz in den Bereich von 10 % gesteigert werden kann. Der Einsatz dieser Schichten in Displayanwendungen ist daher illusorisch. Wenn das generierte Lichtsignal jedoch nicht vom menschlichen Auge, sondern von einem empfindlichen Photodetektor empfangen werden soll, ist eine derart hohe Leistungseffizienz nicht mehr vonnöten. Durch eine entsprechende Optimierung in den Herstellungsbedingungen für die EL, insbesondere der in diesem Zusammenhang noch nicht untersuchten Ge-Konzentration, ist eine Steigerung der EL-Effizienz um ein, maximal zwei Größenordnungen realistisch.

Die bei der PL Ge-implantierter SiO_2 -Schichten gemessene Abklingkonstante von $\sim 100 \mu\text{s}$ spricht im ersten Moment gegen einen Betrieb dieser Schichten bei hohen Modulationsfrequen-

zen. Dabei ist zu bemerken, daß zum einen die Abklingkonstante bei der EL noch nicht bekannt ist und zum zweiten die intrinsische Abklingkonstante durch eine geeignete Architektur des Bauelementes (siehe z.B. Kap. 2.2.1, Abb. 2.2) erheblich verringert werden kann. An dieser Stelle wäre zu prüfen, ob der Einsatz von Sn wegen der um eine Größenordnung geringeren Abklingkonstante der PL vorteilhaft ist.

Bezüglich der Stabilität und der Lebensdauer einer bestimmten MOS-Struktur erreichen die hier untersuchten Schichten noch nicht die Qualität, die für eine Anwendung benötigt wird. Dies betrifft sowohl die Ausfallquote als auch die Schwankungen in der Durchbruchfestigkeit. Diese Unzulänglichkeiten sind mit hoher Wahrscheinlichkeit präperativ bedingt und sollten sich durch entsprechende Verbesserungen bei der Herstellung des Oxides stark reduzieren lassen. Demgegenüber ist die Reproduzierbarkeit des EL-Spektrums hervorragend.

Für welche potentiellen Anwendungen kämen Ge-implantierte SiO_2 -Schichten in Betracht? Die Umwandlung elektrischer in optische Signale ist neben Displayanwendungen bei der Datenübertragung mittels Lichtleiter von Bedeutung. Hierbei ist nach der Distanz, über die die Daten übertragen werden sollen, zu unterscheiden. Bei Abständen über mehrere Kilometer hinweg ist es wichtig, daß die benutzte Wellenlänge dem Absorptionsminimum von Glas, das sich bei ca. $1.5 \mu\text{m}$ befindet, möglichst nahe kommt. Die Datenübertragung über sehr kurze Entfernungen, d.h. innerhalb integrierter Schaltungen, wird in absehbarer Zukunft auch weiterhin elektrisch erfolgen. Bei chip-to-chip oder board-to-board Verbindungen, bei denen die Signale Wegstrecken von wenigen Millimetern bis einigen Metern zurücklegen müssen, ist die Absorption von violettem sichtbarem Licht im Glasfaserkabel noch vernachlässigbar, so daß Ge-implantierte SiO_2 -Schichten bei dieser Anwendung als Sender verwendet werden können.

Neben der Eignung als Lichtemitter für die Datenübertragung können Ge-implantierte SiO_2 -Schichten auch in Optokopplern eingesetzt werden. Diese bestehen aus einem Sender und einem Empfänger, die galvanisch voneinander getrennt sind. Mit dieser Anordnung lassen sich Signale rückwirkungsfrei und potentialfrei übertragen. Während diskrete Optokoppler auf der Basis von Verbindungshalbleitern bereits existieren, ist der Einsatz von Ge-implantierten SiO_2 -Schichten für integrierte Optokoppler von großem Interesse.

Anhang A

Interferenz in dünnen Schichten

In Abschnitt 5.1.2 wurde der Einfluß von Interferenzeffekten auf die beobachtete Lichtemission aus dünnen Schichten anhand von Korrekturfunktionen diskutiert. In diesem Kapitel sollen die Grundlagen, auf denen die Berechnung der Korrekturfunktionen basiert, kurz dargestellt werden. Für eine ausführlichere und detailliertere Darstellung, als es hier möglich ist, sei auf die Literatur [Holm82, Azz87, Hea91] verwiesen.

A.1 Grundlagen

Im stationären Fall kann eine ebene Lichtwelle mit Hilfe der komplexen Amplitude

$$A = a \exp\left\{i \frac{2\pi z \cdot n}{\lambda}\right\} \quad (\text{A.1})$$

beschrieben werden. Dabei ist λ die Wellenlänge, z eine Längenkoordinate in Ausbreitungsrichtung und n die Brechzahl des Mediums, in dem sich die Lichtwelle ausbreitet. Physikalisch meßbar ist jedoch nur die Intensität $|A|^2$. Bei Überlagerung mehrerer ebener, räumlich kohärenter Wellen kann die resultierende Welle durch die Summe der komplexen Amplituden dargestellt werden. Das Betragsquadrat der Summe liefert wieder die meßbare physikalische Intensität der Lichtwelle.

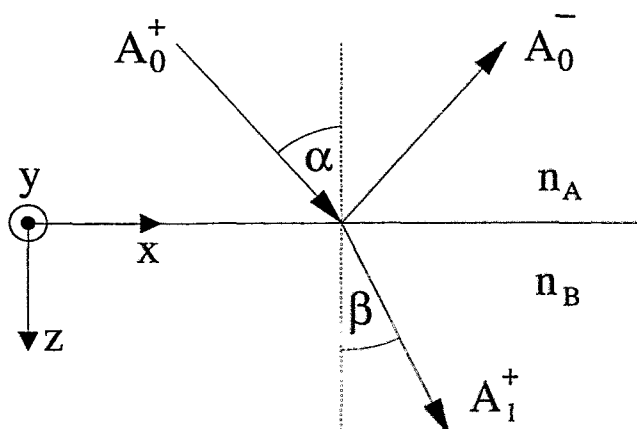


Abbildung A.1: Reflexion und Transmission an der Grenzfläche zweier Medien.

Zur mathematischen Behandlung der Interferenz muß das Verhalten der Lichtwelle an der Grenzfläche zweier Medien A und B betrachtet werden. In Abb. A.1 fällt der Strahl A_0^+ vom

Medium A unter dem Winkel α ein und spaltet sich in den reflektierten Strahl A_0^- und den unter β gebrochen Strahl A_1^+ auf. Beide Strahlen können in die Komponenten senkrecht (Index s) und parallel (Index p) zur Einfallsebene zerlegt werden, die in Abb. A.1 parallel zur Zeichenebene liegt. Die optischen Eigenschaften der Medien werden durch die komplexen Brechzahlen n_A und n_B beschrieben. Es gilt das Brechungsgesetz:

$$n_A \sin \alpha_A = n_B \sin \alpha_B \tag{A.2}$$

Die Amplituden der Strahlen A_0^+ , A_0^- und A_1^+ sind über die Fresnelschen Koeffizienten miteinander gekoppelt:

$$A_0^- = r_{AB}^{p/s} A_0^+ \quad A_1^+ = t_{AB}^{p/s} A_0^+ \tag{A.3}$$

$$\begin{aligned} r_{AB}^p &= \frac{n_B \cos \alpha_A - n_A \cos \alpha_B}{n_A \cos \alpha_B + n_B \cos \alpha_A} & r_{AB}^s &= \frac{n_A \cos \alpha_A - n_B \cos \alpha_B}{n_A \cos \alpha_A + n_B \cos \alpha_B} \\ t_{AB}^p &= \frac{2n_A \cos \alpha_A}{n_A \cos \alpha_B + n_B \cos \alpha_A} & t_{AB}^s &= \frac{2n_A \cos \alpha_A}{n_A \cos \alpha_A + n_B \cos \alpha_B} \end{aligned} \tag{A.4}$$

A.2 Reflexion und Transmission im Mehrschichtsystem

In diesem Abschnitt soll der oben behandelte Fall zweier homogener Medien auf ein Mehrschichtsystem mit beliebig vielen Schichten erweitert werden. Ein solches System ist in Abb. A.2 dargestellt. Die einzelnen Schichten werden durch den komplexen Brechungsindex n_i und die

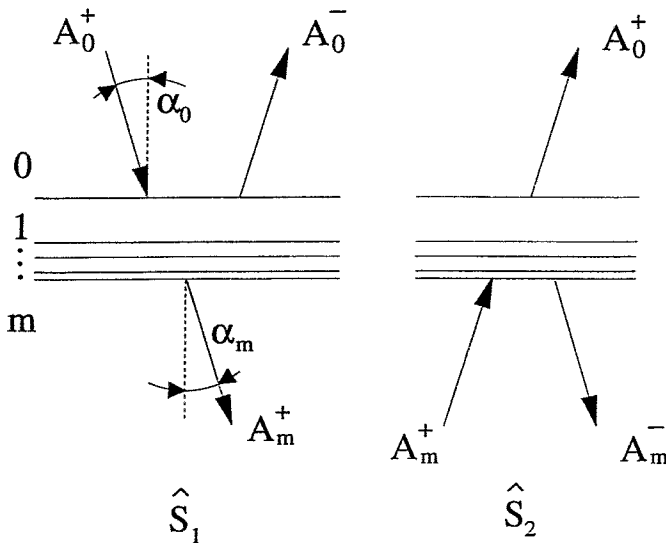


Abbildung A.2: Reflexion und Transmission an einem Mehrschichtsystem.

Dicke d_i charakterisiert. Die Schichten 0 und m sind dabei in den oberen bzw. unteren Halbraum unendlich ausgedehnt. Beim Übergang von der Schicht i zu $i+1$ treten die Fresnelschen Koeffizienten $r_{i(i+1)}^{p/s}$ und $t_{i(i+1)}^{p/s}$ auf.

In jeder Schicht gibt es eine vorwärts- und rückwärts laufende Welle A_i^+ und A_i^- , die in dem Vektor

$$\vec{A}_i = \begin{pmatrix} A_i^+ \\ A_i^- \end{pmatrix} \tag{A.5}$$

zusammengefaßt werden kann. Jede Änderung, die der Vektor \vec{A}_i durch das Passieren eines optischen Systems erfährt, kann durch die Multiplikation mit einer Streumatrix \hat{S} beschrieben

werden. Legt man ein System wie in Abb. A.1 zugrunde, sind die Strahlen A_0^+ , A_0^- und A_1^+ über

$$\begin{pmatrix} A_0^+ \\ A_0^- \end{pmatrix} = \hat{I}_{AB} \begin{pmatrix} A_1^+ \\ 0 \end{pmatrix} \quad \hat{I}_{AB} = \frac{1}{t_{AB}} \begin{pmatrix} 1 & r_{AB} \\ r_{AB} & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

gekoppelt [Azz87]. Das Durchqueren einer Schicht i mit Brechungsindex n_i kann durch die Matrix \hat{L}_i beschrieben werden:

$$\hat{L}_i = \begin{pmatrix} e^{i\chi} & 0 \\ 0 & e^{-i\chi} \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

Hierbei ist χ die zusätzliche Phasendrehung beim Durchqueren der Schicht i :

$$\chi = \frac{2\pi d_i n_i}{\lambda} \cos \alpha_i. \quad (\text{A.8})$$

Verallgemeinert man die vorangegangenen Überlegungen auf ein Mehrschichtsystem wie in Abb. A.2, erhält man

$$\begin{pmatrix} A_0^+ \\ A_0^- \end{pmatrix} = \hat{S}_1 \begin{pmatrix} A_m^+ \\ 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_1 = \hat{I}_{01} \hat{L}_1 \hat{I}_{12} \hat{L}_2 \dots \hat{L}_{m-1} \hat{I}_{(m-1)m} \quad (\text{A.9})$$

Wie in Gleichung A.4 ersichtlich, gilt $t_{AB} \neq t_{BA}$, so daß der Strahlverlauf nicht einfach umgekehrt werden kann. Für einen aus der Schicht m auf die Grenzfläche $m(m-1)$ treffenden Strahl A_m^+ gilt dann

$$\begin{pmatrix} A_m^+ \\ A_m^- \end{pmatrix} = \hat{S}_2 \begin{pmatrix} A_0^+ \\ 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_2 = \hat{I}_{m(m-1)} \hat{L}_{m-1} \dots \hat{L}_2 \hat{I}_{21} \hat{L}_1 \hat{I}_{10}, \quad (\text{A.10})$$

wobei die Reihenfolge der Indizes zu beachten ist.

A.3 Interferenz der anregenden Strahlung

Das im vorangegangenen Abschnitt verwendete Mehrschichtsystem wird um die Schicht $m+1$ erweitert und die Frage gestellt, wie sich die Intensität einer eingestrahnten Welle $S_0^+ = 1$ über die Dicke d_m der Schicht m verhält. Die geometrischen Verhältnisse in diesem System sind in Abb. A.3 wiedergegeben. Der einfallende Strahl $S_0^+ = 1$ wird in S_0^- und S_m^+ aufgespalten, die sich entsprechend (A.9) berechnen lassen:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ S_0^- \end{pmatrix} = \hat{S}_1 \begin{pmatrix} S_m^+ \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad \begin{pmatrix} 1/S_m^+ \\ S_0^-/S_m^+ \end{pmatrix} = \hat{S}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.11})$$

Der Reflexionskoeffizient an der Grenzfläche $m/m+1$ sei r , der an der Grenzfläche $m/m-1$ R_0 . Anhand der Strahlen A_0^+ , A_1^- und \tilde{A}_0^+ und unter Berücksichtigung der Beziehungen

$$A_1^- = R_0 A_0^+ \quad \tau = A_0^+ / \tilde{A}_1^- \quad (\text{A.12})$$

kann R_0 über

$$\begin{pmatrix} \tau \\ R_0 \tau \end{pmatrix} = \hat{S}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.13})$$

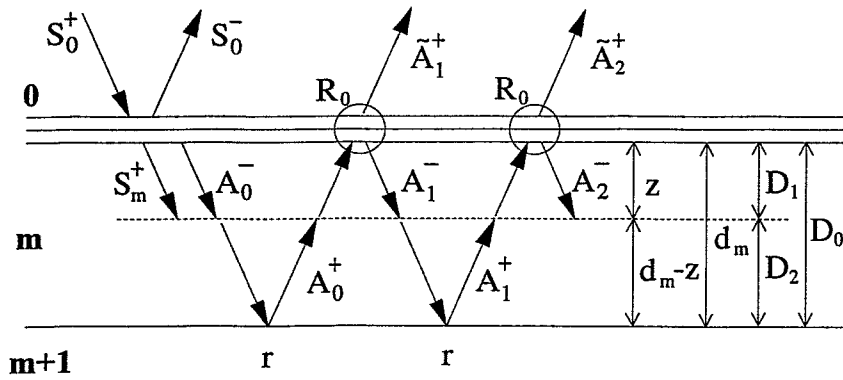


Abbildung A.3: Strahlengang in der Schicht m.

berechnet werden. Gesucht ist die Intensität $I_{ex}(z)$ der Lichtwelle am Ort z . Beim Durchqueren der in Abb. A.3 eingezeichneten Strecken z , $d_m - z$ und d_m erfährt der Strahl eine Phasendrehung D_1 , D_2 und D_0 :

$$\begin{aligned}
 D_1 &= \exp\left\{i \frac{2\pi}{\lambda_{ex}} z n_m \cos \alpha_m\right\} \\
 D_2 &= \exp\left\{i \frac{2\pi}{\lambda_{ex}} (d_m - z) n_m \cos \alpha_m\right\} \\
 D_0 &= D_1 D_2 = \exp\left\{i \frac{2\pi}{\lambda_{ex}} d_m n_m \cos \alpha_m\right\}.
 \end{aligned}
 \tag{A.14}$$

Damit lassen sich die Amplituden der Strahlen $A_0^-, A_0^+, A_1^-, A_1^+, \dots$ am Ort z durch

$$\begin{aligned}
 A_0^- &= S_m^+ D_1 & A_0^+ &= S_m^+ D_0 D_2 r \\
 A_1^- &= S_m^+ D_1 D_0^2 r R_0 & A_1^+ &= S_m^+ D_0^3 D_2 r^2 R_0 \\
 A_2^- &= S_m^+ D_1 D_0^4 r^2 R_0^2 & A_2^+ &= S_m^+ D_0^5 D_2 r^3 R_0^2 \\
 A_k^- &= S_m^+ D_1 (D_0^2 r R_0)^k & A_k^+ &= S_m^+ D_0 D_2 r (D_0^2 r R_0)^k
 \end{aligned}
 \tag{A.15}$$

ausdrücken. Mit der Summation über die geometrische Reihe ergibt sich die Gesamtamplitude A^+ bzw. A^- am Ort z zu

$$A^+ = \sum_{k=0}^{\infty} (A_k^+) = S_m^+ \frac{D_1}{1 - D_0^2 r R_0} \quad \text{und} \quad A^- = \sum_{k=0}^{\infty} (A_k^-) = S_m^+ \frac{D_0 D_2 r}{1 - D_0^2 r R_0}
 \tag{A.16}$$

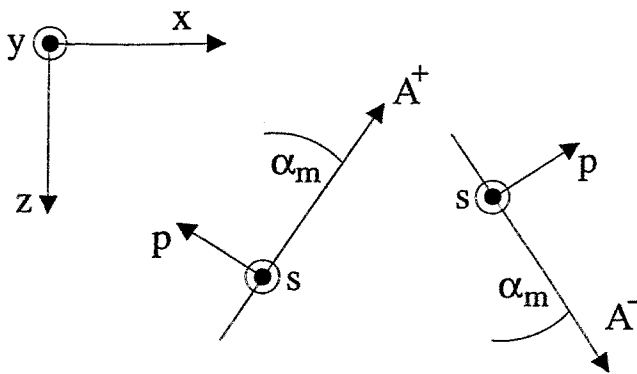


Abbildung A.4: Lage der lokalen Koordinatensysteme der ein- und auslaufenden Welle zum bisher benutzten Koordinatensystem (x, y, z) .

Bei der Überlagerung beider Strahlen ist die Lage der lokalen Koordinatensysteme der ein- und auslaufenden Welle zum bisher benutzten Koordinatensystem (x, y, z) zu beachten (Abb. A.4). Die Projektion in das Koordinatensystem (x, y, z) ergibt dann:

$$\begin{aligned} A_x^+ &= -A^{p,+} \cos \alpha_m & A_x^- &= A^{p,-} \cos \alpha_m \\ A_y^+ &= A^{s,+} & A_y^- &= A^{s,-} \\ A_z^+ &= -A^{p,+} \sin \alpha_m & A_z^- &= -A^{p,-} \sin \alpha_m \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Die Intensität I_{ex} berechnet sich dann als Betragsquadrat des Strahls A :

$$\begin{aligned} I_{ex}^p &= |A_x^+ + A_x^-|^2 + |A_z^+ + A_z^-|^2 = |(A^{p,-} - A^{p,+}) \cos \alpha_m|^2 + |-(A^{p,+} + A^{p,-}) \sin \alpha_m|^2 \\ I_{ex}^s &= |A_y^+ + A_y^-|^2 = |(A^{s,+} + A^{s,-})|^2 \\ I_{ex} &= I_{ex}^p + I_{ex}^s \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Für den Grenzfall $\alpha_m \rightarrow 0$ verschwindet der Unterschied zwischen parallel und senkrecht polarisiertem Licht. In diesem Falle gilt $r^s = -r^p$ bzw. $R_0^s = -R_0^p$ und folgerichtig $A^{p,+} = A^{s,+}$ bzw. $A^{p,-} = -A^{s,-}$ (A.4). Gleichungen (A.18) liefern $I_{ex}^s = I_{ex}^p$ und damit

$$I_{ex} = 2 |A_x^+ + A_x^-|^2 = 2 \left| S_m^+ \frac{D_1 + D_0 D_2 r}{1 - D_0^2 r R_0} \right|^2 \quad (\text{A.19})$$

Zur näheren Bestimmung von I_{ex} betrachte man das Betragsquadrat $|a|^2$ des Produkts bzw. der Summe zweier komplexer Zahlen $\rho_1 e^{i\phi_1}$ und $\rho_2 e^{i\phi_2}$:

$$|a|^2 = |\rho_1 e^{i\phi_1} \cdot \rho_2 e^{i\phi_2}|^2 = \rho_1^2 \rho_2^2 \quad \text{und} \quad (\text{A.20})$$

$$|a|^2 = |\rho_1 e^{i\phi_1} \pm \rho_2 e^{i\phi_2}|^2 = \rho_1^2 + \rho_2^2 \pm 2\rho_1 \rho_2 \cos(\phi_1 - \phi_2). \quad (\text{A.21})$$

Bezeichnet man die Beträge und Argumente der komplexen Zahlen (D_0, D_1, D_2, r, R_0) mit $(\rho_0, \rho_1, \rho_2, \rho_r, \rho_R)$ bzw. $(\phi_0, \phi_1, \phi_2, \phi_r, \phi_R)$, ergibt sich für I_{ex} :

$$I_{ex}(z) = 2 |S_m^+|^2 \frac{\rho_1^2 + \rho_0^2 \rho_2^2 \rho_r^2 + 2\rho_0 \rho_1 \rho_2 \rho_r \cos(\phi_1 - \phi_0 - \phi_2 - \phi_r)}{1 + \rho_0^4 \rho_r^2 \rho_R^2 + 2\rho_0^2 \rho_r \rho_R \cos(2\phi_0 + \phi_r + \phi_R)} \quad (\text{A.22})$$

Ist die Schicht transparent, vereinfacht sich die eben genannte Formel zu

$$I_{ex}(z) = 2 |S_m^+|^2 \frac{1 + \rho_r^2 + 2\rho_r \cos\left(\frac{4\pi n_m}{\lambda_{ex}}(z - d_m) \cos \alpha_m - \phi_r\right)}{1 + \rho_r^2 \rho_R^2 + 2\rho_r \rho_R \cos\left(\frac{4\pi n_m}{\lambda_{ex}} d_m \cos \alpha_m + \phi_r + \phi_R\right)}, \quad (\text{A.23})$$

wobei n_m jetzt reell ist. In Gleichung (A.23) ist lediglich das Argument des Kosinus im Zähler von z abhängig, und die Anregungsdichte $I_{ex}(z)$ verläuft sinusförmig über die Tiefe mit der Periode $\lambda_{ex}/2n_m$. Das Verhältnis zwischen maximaler und minimaler Anregung beträgt dabei

$$V = \left(\frac{1 + \rho_r}{1 - \rho_r} \right)^2. \quad (\text{A.24})$$

Es ist zu beachten, daß V nicht von d_m abhängt und daher das Interferenzphänomen mit steigender Schichtdicke nicht verschwindet.

A.4 Die Abstrahlung einer isotropen Dipolverteilung

Es soll angenommen werden, daß sich ein in der Tiefe z befindliches Lumineszenzzentrum als Dipol beschreiben läßt. Im allgemeinen Fall werden die Dipole nicht kohärent angeregt, so daß die Strahlen eines Dipols nicht mit denen eines anderen interferieren können. Es interferieren aber dann die beiden in Abb. A.6 eingezeichneten Strahlen A und B miteinander, die bezüglich der z -Achse unter dem Winkel β bzw. $\pi - \beta$ emittiert werden. Die Interferenz des Strahls A mit sich selbst wird auch Interferenz mit Mehrfachreflexion genannt, während die des Strahls A mit Strahl B als Weitwinkelinterferenz bezeichnet wird.

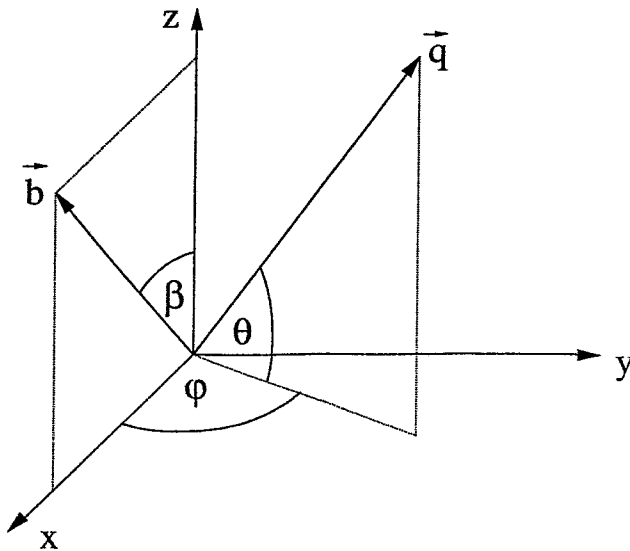


Abbildung A.5: Lage des Dipols.

Für die Beschreibung der Dipolabstrahlung wird ein kartesisches Koordinatensystem gewählt, dessen xy -Ebene parallel zu den Grenzflächen des bisher behandelten Systems liegt (Abb. A.5). Der Einheitsvektor in Beobachtungsrichtung, \vec{b} , kann ohne Beschränkung der Allgemeinheit in die xz -Ebene gelegt werden. Die Abstrahlung eines Dipols ist proportional zur zweiten Ableitung des Dipolmomentes nach der Zeit, die hier mit dem Vektor \vec{q} bezeichnet werden soll. \vec{q} habe den Betrag 1 und wird durch die Kugelkoordinaten φ und θ beschrieben. Für \vec{b} und \vec{q} ergibt sich dann in der Vektordarstellung:

$$\vec{b} = \begin{pmatrix} \sin \beta \\ 0 \\ \cos \beta \end{pmatrix}, \quad \vec{q} = \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \varphi \\ \cos \theta \sin \varphi \\ \sin \theta \end{pmatrix} \quad (\text{A.25})$$

Unter Vernachlässigung von Vorfaktoren und der Zeitabhängigkeit kann das in Richtung \vec{b} abgestrahlte elektrische Feld beschrieben werden durch

$$\vec{E} = \vec{b} \times (\vec{b} \times \vec{q}). \quad (\text{A.26})$$

Es ergibt sich

$$\vec{T} = \vec{b} \times \vec{q} = \begin{pmatrix} b_y q_z - b_z q_y \\ b_z q_x - b_x q_z \\ b_x q_y - b_y q_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\cos \beta \cos \theta \sin \varphi \\ \cos \beta \cos \theta \cos \varphi - \sin \beta \sin \theta \\ \sin \beta \cos \theta \sin \varphi \end{pmatrix} \quad (\text{A.27})$$

$$\vec{E} = \vec{b} \times \vec{T} = \begin{pmatrix} b_y T_z - b_z T_y \\ b_z T_x - b_x T_z \\ b_x T_y - b_y T_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \beta \sin \beta \sin \theta - \cos^2 \beta \cos \theta \cos \varphi \\ -\cos \theta \sin \varphi \\ \cos \beta \sin \beta \cos \theta \cos \varphi - \sin^2 \beta \sin \theta \end{pmatrix} \quad (\text{A.28})$$

Die durch \vec{E} beschriebene Welle trifft auf die zur xy -Ebene parallelen Grenzfläche. Die Einfallsebene wird durch \vec{b} und die z -Achse aufgespannt und liegt parallel zur xz -Ebene. Damit ist die y -Komponente von \vec{E} der Anteil senkrecht polarisierten Lichtes der einfallenden Welle. Für die Vektoren erhält man

$$\vec{E}^s = \begin{pmatrix} 0 \\ -\cos \theta \sin \varphi \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{E}^p = \begin{pmatrix} \cos \beta \sin \beta \sin \theta - \cos^2 \beta \cos \theta \cos \varphi \\ 0 \\ \cos \beta \sin \beta \cos \theta \cos \varphi - \sin^2 \beta \sin \theta \end{pmatrix} \quad (\text{A.29})$$

und für die Betragsquadrate:¹

$$|\vec{E}_A^s|^2 = \cos^2 \theta \sin^2 \varphi \quad (\text{A.30})$$

$$\begin{aligned} |\vec{E}_A^p|^2 &= \cos^2 \beta \sin^2 \beta \sin^2 \theta + \cos^4 \beta \cos^2 \theta \cos^2 \varphi - 2 \cos^3 \beta \sin \beta \cos \theta \sin \theta \cos \varphi \\ &\quad + \cos^2 \beta \sin^2 \beta \cos^2 \theta \cos^2 \varphi + \sin^4 \beta \sin^2 \theta - 2 \cos \beta \sin^3 \beta \cos \theta \sin \theta \cos \varphi \\ &= \cos^2 \beta \sin^2 \beta \sin^2 \theta + (1 - \sin^2 \beta) \cos^2 \beta \cos^2 \theta \cos^2 \varphi - 2 \cos \beta \sin \beta \cos \theta \sin \theta \cos \varphi \\ &\quad + \cos^2 \beta \sin^2 \beta \cos^2 \theta \cos^2 \varphi + (1 - \cos^2 \beta) \sin^2 \beta \sin^2 \theta \\ &= \cos^2 \beta \cos^2 \theta \cos^2 \varphi + \sin^2 \beta \sin^2 \theta - 2 \cos \beta \sin \beta \cos \theta \sin \theta \cos \varphi \\ &= (\cos \beta \cos \theta \cos \varphi - \sin \beta \sin \theta)^2 \end{aligned}$$

Der Index A kennzeichnet den direkt unter β emittierten Strahl. Für den Winkel $\pi - \beta$ gilt dann

$$\begin{aligned} |\vec{E}_B^s|^2 &= \cos^2 \theta \sin^2 \varphi \\ |\vec{E}_B^p|^2 &= (-\cos \beta \cos \theta \cos \varphi - \sin \beta \sin \theta)^2 \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

Die Summation erfolgt ausschließlich über auslaufende Wellen, deren p-Achse parallel verläuft.

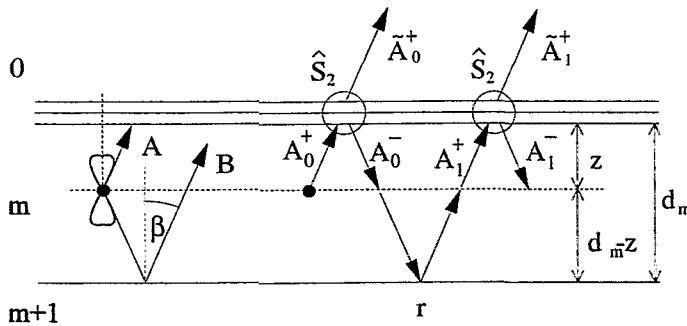


Abbildung A.6: Strahlengang bei Emission des Dipols in der Schicht m.

Analog Abschnitt A.3 ergibt sich für die Strahlen \vec{A}_k^+ und \vec{B}_k^+ :

$$\vec{A}_k^+ = |\vec{E}_A| D_1 T_0 (D_0^2 r R_0)^k \quad \text{und} \quad \vec{B}_k^+ = |\vec{E}_B| D_2 r D_0 T_0 (D_0^2 r R_0)^k \quad (\text{A.32})$$

¹Für den „einfachen Betrag“ sollen auch negative Werte zugelassen werden, um das Vorzeichen des Mischterms $|\vec{E}_A^p| |\vec{E}_B^p|$ korrekt zu berechnen

Mit Hilfe der Beziehungen

$$A_0^- = R_0 A_0^+ \quad \tilde{A}_0^+ = T_0 A_0^+ \quad (\text{A.33})$$

lassen sich die Konstanten R_0 und T_0 über

$$\begin{pmatrix} A_0^+ \\ A_0^- \end{pmatrix} = \hat{S}_2 \begin{pmatrix} \tilde{A}_0^+ \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} 1/T_0 \\ R_0/T_0 \end{pmatrix} = \hat{S}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.34})$$

berechnen. Schließlich erhält man

$$S_{tot} = \sum_{k=0}^{\infty} (\tilde{A}_k^+ + \tilde{B}_k^+) = T_0 \frac{|\vec{E}_A| D_1 + |\vec{E}_B| D_0 D_2 r}{1 - D_0^2 r R_0} \quad (\text{A.35})$$

und

$$\begin{aligned} I_{em}(z) &= |S_{tot}|^2 \\ &= \frac{\rho_T^2 \left[|\vec{E}_A|^2 \rho_1 + |\vec{E}_B|^2 \rho_0^2 \rho_2^2 \rho_r^2 + 2 |\vec{E}_A| |\vec{E}_B| \rho_0 \rho_1 \rho_2 \rho_r \cos(\phi_1 - \phi_0 - \phi_2 - \phi_r) \right]}{1 + \rho_0^4 \rho_r^2 \rho_R^2 - 2 \rho_0^2 \rho_r \rho_R \cos(2\phi_0 + \phi_r + \phi_R)}. \end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

Jetzt wird angenommen, daß das Volumenelement am Ort z mehrere Dipole in isotroper Verteilung enthält. Eine Mittelung über alle Richtungen bedeutet die Integration über den gesamten Raumwinkel. Der Mittelwert der Größe A über alle Richtungen wird demnach definiert als

$$\bar{A} = \frac{1}{4\pi} \int_{\theta=-\pi/2}^{\theta=+\pi/2} \int_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} A \cos \theta d\theta d\varphi \quad (\text{A.37})$$

Für senkrecht polarisiertes Licht gilt $|\vec{E}_A^s| = |\vec{E}_B^s|$, und es muß nur der Mittelwert $\overline{|\vec{E}_A^s|^2}$ berechnet werden:

$$\begin{aligned} \overline{|\vec{E}_A^s|^2} &= \frac{1}{4\pi} \iint \cos^3 \theta \sin^2 \varphi d\theta d\varphi = \frac{1}{4} \int \cos^3 \theta d\theta \\ &= \frac{1}{4} \left[\sin \theta - \frac{1}{3} \sin^3 \theta \right]_{\theta=-\pi/2}^{\theta=+\pi/2} = \frac{1}{3}. \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

Für parallel polarisiertes Licht erhält man:

$$\overline{|\vec{E}_{A,B}^p|^2} = \frac{1}{4\pi} \iint \left[\cos^2 \beta \cos^3 \theta \cos^2 \varphi + \sin^2 \beta \cos \theta \sin^2 \theta \mp 2 \cos \beta \sin \beta \cos^2 \theta \sin \theta \cos \varphi \right] d\theta d\varphi \quad (\text{A.39})$$

$$\overline{|\vec{E}_A^p| |\vec{E}_B^p|} = \frac{1}{4\pi} \iint \left[-\cos^2 \beta \cos^3 \theta \cos^2 \varphi + \sin^2 \beta \cos \theta \sin^2 \theta \right] d\theta d\varphi \quad (\text{A.40})$$

Die 3 Summanden in (A.39) werden mit T_1 , T_2 und T_3 bezeichnet, und man erhält:

$$\begin{aligned} T_1 &= \frac{\cos^2 \beta}{4\pi} \iint \cos^3 \theta \cos^2 \varphi d\theta d\varphi = \frac{1}{3} \cos^2 \beta \\ T_2 &= \frac{1}{2} \sin^2 \beta \int \cos \theta \sin^2 \theta d\theta = \frac{1}{3} \sin^2 \beta \\ T_3 &= \frac{\cos \beta \sin \beta}{4\pi} \iint \cos^2 \theta \sin \theta \cos \varphi d\theta d\varphi = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.41})$$

Damit ergeben sich für die Mittelwerte:

$$\begin{aligned} \overline{|\vec{E}_A^p|^2} &= T_1 + T_2 - 2T_3 = \frac{1}{3} \\ \overline{|\vec{E}_B^p|^2} &= T_1 + T_2 + 2T_3 = \frac{1}{3} \\ \overline{|\vec{E}_A^p| |\vec{E}_B^p|} &= T_2 - T_1 = \frac{1}{3} (\sin^2 \beta - \cos^2 \beta) = -\frac{1}{3} \cos 2\beta \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

und für die Intensitäten in Gleichung (A.36):

$$\begin{aligned} I_{em}^s(z) &= \frac{1}{3} (\rho_T^s)^2 \frac{\rho_1 + \rho_0^2 \rho_2^2 (\rho_r^s)^2 + 2\rho_0 \rho_1 \rho_2 \rho_r^s \cos(\phi_1 - \phi_0 - \phi_2 - \phi_r^s)}{1 + \rho_0^4 (\rho_r^s)^2 (\rho_R^s)^2 - 2\rho_0^2 \rho_r^s \rho_R^s \cos(2\phi_0 + \phi_r^s + \phi_R^s)} \\ I_{em}^p(z) &= \frac{1}{3} (\rho_T^p)^2 \frac{\rho_1 + \rho_0^2 \rho_2^2 (\rho_r^p)^2 - 2\rho_0 \rho_1 \rho_2 \rho_r^p \cos 2\beta \cos(\phi_1 - \phi_0 - \phi_2 - \phi_r^p)}{1 + \rho_0^4 (\rho_r^p)^2 (\rho_R^p)^2 - 2\rho_0^2 \rho_r^p \rho_R^p \cos(2\phi_0 + \phi_r^p + \phi_R^p)} \end{aligned} \quad (\text{A.43})$$

Ist das Medium m transparent, vereinfachen sich die Gleichungen (A.43) zu

$$\begin{aligned} I_{em}^s(z) &= \frac{1}{3} (\rho_T^s)^2 \frac{1 + (\rho_r^s)^2 + 2\rho_r^s \cos\left(\frac{4\pi n_m}{\lambda}(z - d_m) \cos \beta - \phi_r^s\right)}{1 + (\rho_r^s)^2 (\rho_R^s)^2 - 2\rho_r^s \rho_R^s \cos\left(\frac{4\pi n_m}{\lambda} d_m \cos \beta + \phi_r^s + \phi_R^s\right)} \\ I_{em}^p(z) &= \frac{1}{3} (\rho_T^p)^2 \frac{1 + (\rho_r^p)^2 - 2\rho_r^p \cos 2\beta \cos\left(\frac{4\pi n_m}{\lambda}(z - d_m) \cos \beta - \phi_r^p\right)}{1 + (\rho_r^p)^2 (\rho_R^p)^2 - 2\rho_r^p \rho_R^p \cos\left(\frac{4\pi n_m}{\lambda} d_m \cos \beta + \phi_r^p + \phi_R^p\right)} \end{aligned} \quad (\text{A.44})$$

A.5 Berechnung der Korrekturfunktion

Sind die Lumineszenzzentren mit $n(z)$ verteilt, ergibt sich für die gesamte, bei einer bestimmten Emissionswellenlänge und unter einem bestimmten Winkel aus dem Schichtsystem abgestrahlte Intensität

$$I_M(\lambda_{em}) = \int_0^{d_m} (I_{em}^p(z) + I_{em}^s(z)) n(z) I_{ex}(z) dz. \quad (\text{A.45})$$

Bei homogener Anregung, wie z.B. EL, kann $I_{ex}(z) = \text{const}$ gesetzt werden. Gesucht ist das wahre Spektrum I_w des einzelnen Lumineszenzzentrums, das man messen würde, wenn die Lumineszenzzentren nicht in ein Schichtsystem eingebettet wären. Dieses Spektrum erhält man, wenn alle Reflexionskoeffizienten gegen 0 und alle Transmissionskoeffizienten gegen 1 gehen. $I_{em}^{p/s}(z)$ geht in eine Konstante über, nämlich $1/3$, und es kann direkt über $n(z)$ integriert werden:

$$I_w(\lambda_{em}) = \frac{2}{3} \int_0^{d_m} n(z) dz. \quad (\text{A.46})$$

Das Anregungsprofil ist dabei konstant gesetzt worden. Ein gemessenes Spektrum I_M wird durch Multiplikation mit einer Korrekturfunktion K korrigiert:

$$I_w = K \cdot I_M \quad (\text{A.47})$$

Die simulierten Spektren I_w und I_M können dabei als Bestimmungsgleichung für die Korrekturfunktion K benutzt werden.

Nach einer vergleichsweise umfangreichen Berechnung wie dieser stellt sich die Frage, ob die berechnete Korrekturfunktion auch die tatsächlichen physikalischen Gegebenheiten widerspiegelt, oder ob im Zuge der mathematischen Modellierung zu stark abstrahiert wurde. Daher sollen die grundlegenden Annahmen und Näherungen, unter denen die Korrekturfunktion berechnet wurde, noch einmal kurz diskutiert werden.

Bei der Berechnung wurde von planparallelen, homogenen Schichten ausgegangen, deren optische Konstanten bekannt sind. Da die möglicherweise auftretenden Rauigkeiten oder Unebenheiten im Bereich weniger nm weit unter den relevanten Wellenlängen liegen, dürfte die Näherung planparalleler Schichten der wirklichen Situation sehr nahe kommen. Die Annahme optisch homogener Schichten mit bekannten Brechungsindizes ist bei implantierten Schichten schon fragwürdiger. Die Implantation führt wegen dem Eintrag von Fremdatomen und aufgrund der Strahlenschädigung zu einer tiefenabhängigen Änderung der Brechzahl. Diese Änderung ist im allgemeinen nicht bekannt, sollte bei den verwendeten Dosen aber im Bereich weniger Prozent liegen. Die Auswirkungen auf die Korrekturfunktion liegt daher in der selben Größenordnung.

Weiterhin wird angenommen, daß die Lumineszenzzentren dipolartig abstrahlen und die Intensität proportional zur Leistungsdichte der Anregung ist. Die Entwicklung eines Strahlungsfeldes nach Multipoltermen unter allgemeinsten Voraussetzungen ist ein gängiges Verfahren der Elektrodynamik, und daher gerechtfertigt. Die zweite Annahme, die Abstrahlungsintensität sei proportional zur Leistungsdichte der Anregung, ist nicht selbstverständlich, da z.B. bei optischer Anregung eine ähnlich Winkelcharakteristik wie bei der Emission einer isotropen Dipolverteilung (siehe Gleichung A.43) denkbar wäre. Eine derartige Behandlung setzt aber die detaillierte Kenntnis des Anregungsprozesses voraus. Da im Falle der PL-Messung die anregende Strahlung fast senkrecht auf die Probe fällt, stellt die Entkopplung von An- und Abregung der Lumineszenzzentren eine gerechtfertigte Annahme dar.

Der kritischste Punkt ist die Tatsache, daß zur Berechnung der Korrekturfunktion die Verteilung der Lumineszenzzentren bekannt sein muß. Die sich daraus ergebenden Komplikationen können abgeschätzt werden, wenn man das Verhalten der Korrekturfunktion unter verschiedenen hypothetischen Verteilungen untersucht. Wie im folgenden Abschnitt ausgeführt, ändert sich die Korrekturfunktion bei optischer Anregung erst dann wesentlich, wenn die typische Ausdehnung der Lumineszenzzentrenverteilung die effektive Wellenlänge $\lambda_{ex}/2n$ deutlich unterschreitet. Die Änderung der Korrekturfunktion beschränkt sich dabei im wesentlichen auf eine Größenskalierung, d.h. die ungefähre Lage lokaler Extrema bleibt erhalten.

A.6 Das System SiO₂-Si

In diesem Abschnitt soll kurz das Verhalten der Korrekturfunktion an einem konkreten Beispiel untersucht werden. Gewählt wurden das für diese Arbeit relevante System Luft-SiO₂-Silizium. Laut Gleichung A.23 hat die Intensität der anregenden Strahlung einen sinusförmigen Verlauf über die Tiefe. Das Verhältnis zwischen maximaler und minimaler Anregung ist jedoch beträchtlich; das Einsetzen der entsprechenden optischen Konstanten in die Näherungsformel A.24 liefert ($V \approx 43$).

Unter vereinfachten Annahmen kann man zu einer analytischen Näherung für die Korrekturfunktion K gelangen. Bei homogener Anregung und einer gleichmäßigen Verteilung der Lumineszenzzentren kann in Gleichung A.45 direkt über z integriert werden, und für eine **senkrechte**

Detektionsrichtung erhält man:²

$$K = \frac{I_w}{I_M} = \frac{d_m}{(\rho_T^s)^2} \frac{1 + (\rho_r^s)^2 (\rho_R^s)^2 - 2\rho_r^s \rho_R^s \cos(k_z d_m + \phi_r^s + \phi_R^s)}{\int_0^{d_m} (1 + (\rho_r^s)^2 + 2\rho_r^s \cos(k_z z - k_z d_m - \phi_r^s)) dz} \quad \text{mit } k_z = \frac{4\pi n_m}{\lambda} \quad (\text{A.48})$$

$$K = \frac{1}{(\rho_T^s)^2} \frac{1 + (\rho_r^s)^2 (\rho_R^s)^2 - 2\rho_r^s \rho_R^s \cos(k_z d_m + \phi_r^s + \phi_R^s)}{1 + (\rho_r^s)^2 + \frac{2\rho_r^s}{k_z d_m} [\sin(k_z d_m + \phi_r^s) - \sin \phi_r^s]} \quad (\text{A.49})$$

Für $k_z d_m \gg 2\rho_r^s$ (dicke Schichten) verschwinden die Sinusterme von Gleichung (A.49), und K geht in eine Konstante plus Kosinusschwingung über. Analog zu Gleichung (A.24) ist das Verhältnis benachbarter Maxima und Minima

$$V \approx \left(\frac{1 + \rho_r^s \rho_R^s}{1 - \rho_r^s \rho_R^s} \right)^2. \quad (\text{A.50})$$

Im umgekehrten Fall, $k_z d_m \rightarrow 0$ (dünne Schichten), geht sowohl Nenner als auch Zähler in eine Konstante über.

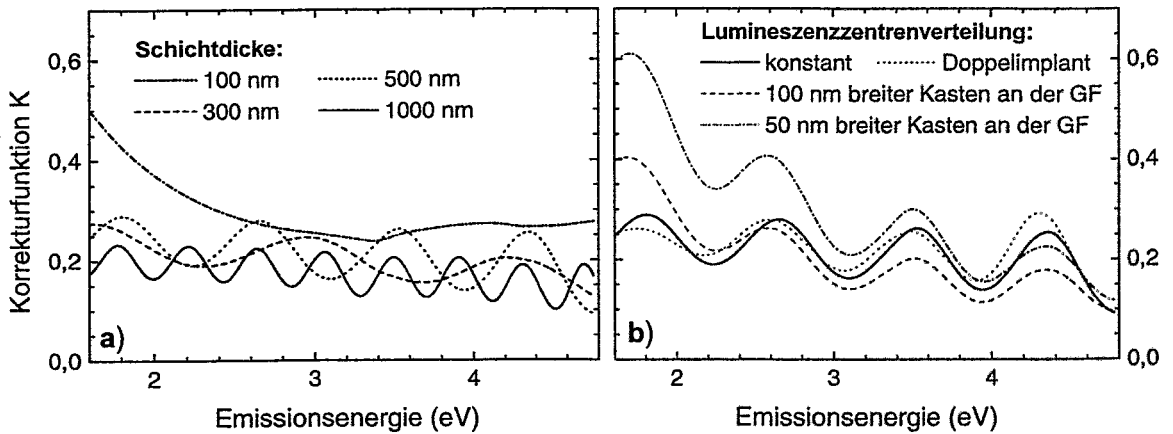


Abbildung A.7: Korrekturfunktion für das System Luft-SiO₂-Silizium bei optischer Anregung mit 5.17 eV (240 nm) für a) unterschiedliche Dicken der Oxidschicht bei homogener Zentrenverteilung und für b) verschiedene angenommene Verteilungen der Lumineszenzzentren in einer 500 nm dicken Oxidschicht. Der Detektionswinkel ist 22.5°.

Abb. A.7a zeigt die Korrekturfunktion für das System Luft-SiO₂-Silizium bei optischer Anregung mit 5.17 eV (240 nm), homogener Zentrenverteilung und verschiedenen Dicken der Oxidschicht. Für größere Schichtdicken verläuft K periodisch mit der Emissionsenergie; das Verhältnis benachbarter Maxima und Minima beträgt nach (A.50) etwa $V \approx 1.7$. Für kleinere Schichtdicken geht K zunehmend in eine monotone Funktion über, die zu kleinen Energien hin ansteigt. In Abb. A.7b ist die Korrekturfunktion für verschiedene angenommene Verteilungen in einer 500 nm dicken Oxidschicht bei optischer Anregung mit 5.17 eV dargestellt. Wie bereits am Beginn dieses Abschnittes festgestellt, verläuft die Intensität der einfallenden Strahlung sinusförmig über die

²Wegen $r^s = -r^p$ bei senkrechtem Einfall und den Ersetzungen $\beta = 0$, $\phi_r^p = \phi_r^s + \pi$, $\phi_R^p = \phi_R^s + \pi$ geht I_{zx}^p in Gleichung A.44 in I_{zx}^s über.

Tiefe. Die Periode ist etwa 80 nm, d.h. Minima und Maxima wechseln sich alle 40 nm ab. Erst wenn die typische Ausdehnung, über die die Lumineszenzzentren verteilt sind, diese Größenordnung erreicht, kommt es zu einer merklichen Abweichung der Korrekturfunktion von den Werten einer breiten Lumineszenzzentrenverteilung. In erster Näherung kann diese Änderung als Skalierung angesehen werden, bei der die charakteristische Form und die Lage der lokalen Extrema unverändert bleibt. Je nachdem, ob die schmale Verteilung sich in einem Maximum oder Minimum der Intensität der optischen Anregung befindet, ist der Skalenfaktor größer oder kleiner 1.

Anhang B

Experimentelle Bestimmung der Leistungseffizienz

Dieser Anhang führt aus, wie die in Kap. 5.1.4 benutzte Korrekturfunktion f_{LE} berechnet wurde. Diese Darstellung gliedert sich in drei Teile. Kap. B.1 und B.2 erläutern, wie die Emissions- bzw. Anregungsleistung gemessen wurde. Die Berechnung der Korrekturfunktion f_{LE} und ihre Unsicherheit wird schließlich in Kap. B.3 behandelt.

B.1 Die abgestrahlte Leistung P_{em}

P_{em} läßt sich zusammensetzen aus

$$P_{em} = \iiint P_{\Omega}(\lambda, \theta, \varphi) d\lambda d\Omega \quad \text{mit} \quad d\Omega = \cos \theta d\theta d\varphi \quad (\text{B.1})$$

Dabei ist P_{Ω} die je Wellenlängenintervall $d\lambda$ und Raumwinkel $d\Omega$ emittierte Leistung. Die Emission der Probe hängt im allgemeinen vom Winkel β zwischen Beobachtungsrichtung und Flächennormale ab. Daher wird das Kugelkoordinatensystem so gewählt, daß die Meridianebene auf der Oberfläche der Probe liegt und die Beziehung $\beta = 90^{\circ} - \theta$ gilt. Damit ist P_{Ω} nicht mehr von φ abhängig:

$$P_{em} = \iint P_{\Omega}(\lambda, \theta) d\lambda d\Omega \quad (\text{B.2})$$

P_{Ω} wird wie folgt aufgespalten:

$$P_{em} = \iint P_0(\lambda) g_p(\lambda, \theta) d\lambda d\Omega \quad (\text{B.3})$$

Die Strahlungscharakteristik g_p ist nur von der Probe abhängig. Die Lumineszenz wird unter festem Winkel $\theta_1 = 67.5^{\circ}$ bzw. Raumwinkel $\Delta\Omega_1$ detektiert. Die bei der Wellenlänge λ_i nach $\Delta\Omega_1$ emittierte Leistung beträgt damit

$$P_1(\lambda_i) = P_0(\lambda_i) g_p(\lambda_i, \theta_1) \Delta\Omega_1 \Delta\lambda_i. \quad (\text{B.4})$$

Gleichzeitig kann man definieren:

$$P_1(\lambda_i) = \chi(\lambda_i) I(\lambda_i) \Delta\lambda_i. \quad (\text{B.5})$$

χ ist eine allgemeine Korrekturfunktion zwischen P_1 und dem Integral $I(\lambda_i)\Delta\lambda_i$ über einen Teil des Meßspektrums. Es ergibt sich:

$$P_0(\lambda_i) = f_{LE}(\lambda_i) \frac{I(\lambda_i)}{g_p(\lambda_i, \theta_1)} \quad \text{mit} \quad f_{LE}(\lambda) = \left[\frac{\chi(\lambda)}{\Delta\Omega_1} \right] \quad (\text{B.6})$$

Wird die Integration über λ durch eine Summation ersetzt, erhält man:

$$P_{em} = \sum_{\lambda_i} \int P_0(\lambda_i) g_p(\lambda_i, \theta) \Delta\lambda_i d\Omega \quad (\text{B.7})$$

$$P_{em} = \sum_{\lambda_i} \int f_{LE}(\lambda_i) \frac{I(\lambda_i)}{g_p(\lambda_i, \theta_1)} g_p(\lambda_i, \theta) \Delta\lambda_i d\Omega \quad (\text{B.8})$$

$$P_{em} = \sum_{\lambda_i} \frac{I(\lambda_i) \Delta\lambda_i}{g_p(\lambda_i, \theta_1)} f_{LE}(\lambda_i) \int g_p(\lambda_i, \theta) d\Omega \quad (\text{B.9})$$

Hierbei ist der Ausdruck f_{LE} nur von der Meßapparatur und g_p nur von der Probe abhängig.

B.2 Die Leistung der anregenden Strahlung P_{ex}

Zuerst wurde die Größe des Brennflecks mit Hilfe von Millimeterpapier zu

$$A_0 = (10 \pm 0.5) \text{ mm} \times (2.0 \pm 0.5) \text{ mm} = (20 \pm 5) \text{ mm}^2. \quad (\text{B.10})$$

bestimmt. An der Stelle der Probe wurde nun eine kreisrunde Blende mit einem Durchmesser b ($3 \text{ mm} < b < 5 \text{ mm}$) positioniert. Unmittelbar dahinter befand sich ein Powermeter, das die eingestrahelte Leistung direkt mißt. Die Messung erfolgte bei 3 verschiedenen Durchmessern. Die daraus ermittelte Leistung je Fläche p_{ex}^F wurde gemittelt, wobei die Schwankungen von p_{ex}^F unter 10 % lagen. Dieser Wert wurde unter Vernachlässigung der Unsicherheit des Powermeters linear zur Unsicherheit der Fläche des Brennflecks addiert und liefert 35 % für die Unsicherheit von p_{ex}^F (auf die quadratische Addition der Unsicherheiten wurde verzichtet, da in die Berechnung der durch die Blende beleuchteten Fläche die Breite des Brennflecks mit eingeht).

λ (nm)	r_D	p_{ex}^F (mWcm ⁻²)	P_{ex} (μW)	
240	0.00985	0.178	35.6	interpoliert
250	0.0173	0.358	71.6	gemessen
260	0.0230	0.555	111	gemessen
270	0.0324	0.828	166	gemessen
280	0.0434	1.14	228	gemessen
290	0.0606	1.43	286	gemessen
300	0.0799	1.64	328	gemessen

Tabelle B.1: Anregungsleistung

B.3 Die Bestimmung der Korrekturfunktion f_{LE}

An der Stelle der Probe wurde ein Streustrahler mit der Strahlcharakteristik

$$g_s \sim \cos \beta \quad (\text{B.11})$$

positioniert und das gestreute Signal der anregenden Strahlung gemessen. P_1 ist dabei wieder die bei λ_i unter dem Winkel θ_1 in den Raumwinkel $\Delta\Omega_1$ des Detektors emittierte Leistung. Gleichzeitig wird die unter dem Winkel θ_2 in den Raumwinkel $\Delta\Omega_2$ emittierte Leistung P_2 vom Powermeter direkt gemessen. Es ist zu beachten, daß in diesem Fall nicht über i summiert wird, sondern λ_i die bei jeder Einzelmessung i fest eingestellte Anregungswellenlänge ist.

Mit Hilfe von Gleichung (B.4) ergibt sich:

$$P_1 = P_0(\lambda_i)g_s(\lambda_i, \theta_1)\Delta\lambda_i\Delta\Omega_1 \quad (\text{B.12})$$

$$P_2 = P_0(\lambda_i)g_s(\lambda_i, \theta_2)\Delta\lambda_i\Delta\Omega_2 \quad (\text{B.13})$$

$$P_1 = P_2(\lambda_i)\frac{g_s(\lambda_i, \theta_1)\Delta\Omega_1}{g_s(\lambda_i, \theta_2)\Delta\Omega_2} \quad (\text{B.14})$$

Einsetzen von (B.5) und (B.11) liefert:

$$f_{LE}(\lambda_i) = P_2(\lambda_i)\frac{\cos \beta_1}{\cos \beta_2\Delta\Omega_2} \cdot \frac{1}{I_{ges}} \quad \text{mit} \quad I_{ges} = I(\lambda_i)\Delta\lambda_i. \quad (\text{B.15})$$

I_{ges} bezeichnet das Integral über das gemessene Spektrum der Anregungslinie, das nur einen Bereich von 20 bis 30 nm umfaßt (entspricht etwa dem Bereich $\Delta\lambda_i$). Aufgrund der hohen Intensität wurden 2 oder 3 Filter benutzt, die die Intensität um den Faktor 10^3 bis 10^4 abgeschwächt haben. Haben die Filter die Transmission $T = 10^{-\alpha(\lambda)}$, ergibt sich I_{ges} zu

$$I_{ges} = \int_{-\infty}^{\infty} I(\lambda) \cdot 10^{\alpha(\lambda)} d\lambda = \int_{-\infty}^{\lambda_i} I(\lambda) \cdot 10^{\alpha(\lambda)} d\lambda + \int_{\lambda_i}^{\infty} I(\lambda) \cdot 10^{\alpha(\lambda)} d\lambda = I_L + I_R. \quad (\text{B.16})$$

Für kleine λ_i konnten nur solche Filter benutzt werden, deren Absorptionszahl α für kleine Wellenlängen stark anwuchs. Damit war der Anstieg des Faktors 10^α bei kleiner werdender Wellenlänge stärker als der entsprechende Abfall des Meßspektrums auf Null - das Integral I_L divergiert. Für größere Wellenlängen konvergiert zwar I_L , aber liegt systematisch höher als I_R . Es wird angenommen, daß I_R aufgrund der niedrigeren Absorption „korrekter“ als I_L ist, und das Integral wird zu $I_{ges} = 2I_R$ berechnet. Die Unsicherheit für I_{ges} kann man abschätzen zu:

$$\frac{\Delta I_{ges}}{I_{ges}} = \frac{(I_L + I_R) - 2I_R}{2I_R} = \frac{I_L - I_R}{2I_R} \quad (\text{B.17})$$

Divergiert I_L , wird 100 % angenommen. Weiterhin muß man davon ausgehen, daß die Absorption α nicht genau bekannt ist. Läßt man Abweichungen von $\alpha \approx 0.1$ je Filter zu, ergibt sich eine zusätzliche Unsicherheit für I_{ges} von 37 % bei Verwendung von 2 Filtern und 45 % bei der Verwendung 3 Filtern.

Durch quadratische Addition mit der weiter oben aufgeführten Unsicherheit ergibt sich die totale, in Tabelle 5.2 aufgeführte Unsicherheit für den Ausdruck f_{LE} . Die Winkel β_1 und β_2 betragen beide etwa 22.5° . Der Raumwinkelanteil $\Delta\Omega_2$ mit Normierung auf 4π berechnet sich zu

$$\Delta\Omega_2 = \frac{\Delta A}{r^2} = \frac{\pi/4 b^2}{r^2} \quad (\text{B.18})$$

Dies liefert mit $b = (4.4 \pm 0.2)$ mm und $r = (48 \pm 2)$ mm einen Raumwinkelanteil $\Delta\Omega_2 = 0.0066$ sr mit etwa 12.3 % Unsicherheit, die jedoch vernachlässigt werden kann.

Abkürzungen und Symbole

B-Bande	Lumineszenzbande im blau-violetten Spektralbereich
CVD	chemische Abscheidung aus der Gasphase
DI	Doppelimplantation
EDX	energiedispersive Röntgenspektroskopie
EL	Elektrolumineszenz
EQE	externe Quanteneffizienz
ESR	Elektronen-Spin-Resonanz
FLA	Blitzlampenausheilung
FN	Fowler-Nordheim
FWHM	Halbwertsbreite
GF	Grenzfläche, speziell Si-SiO ₂ -Grenzfläche
HE-Peak	Hochenergiepeak
IR	Infrarot
ITO	Indium-Zinn-Oxid
LED	Leuchtemitterdiode
LNT	Targettemperatur bei Kühlung mit flüssigem Stickstoff, zwischen -190°C und -95°C
MOS	Schichtsystem Metall-Oxid-Halbleiter
NBOH-Zentrum	nichtbrückendes Sauerstoffzentrum
NC	Nanocluster
NE-Peak	Niedrigenergiepeak
NOV	Neutrale Sauerstoffvakanz
ODC	Sauerstoffmangeldefekt
OF	Oberfläche
PL	Photolumineszenz
PLE	PL-Anregung
QC	Quanten-Confinement
R-Bande	Lumineszenzbande im roten Spektralbereich
RBS	Rutherford-Rückstreuung
RLZ	Raumladungszone
RT	Raumtemperatur
RTA	Kurzzeitausheilung (rapid thermal annealing)
SBK	Spin-Bahn-Kopplung
SI	Einzelimplantation
SIMOX	Sauerstoff-implantiertes Silizium (separation by implanted oxygen)
STEM	scanning TEM
TEM	Transmissions-Elektronenmikroskopie
UV	Ultraviolett

XPS	Spektroskopie röntgeninduzierter Photoelektronen (X-ray photoelectron spectroscopy)
A	komplexe Amplitude einer Lichtwelle
\vec{A}	Zusammenfassung aus A^+ und A^-
A^+, A^-	vorwärts und rückwärts laufende Lichtwelle
A_0^A, A_0^E	Peakfläche auf der Wellenlängen- bzw. Energieskala
B	komplexe Amplitude einer Lichtwelle
b	Anhang B: Blendendurchmesser
\vec{b}	Einheitsvektor in Beobachtungsrichtung
c	Kap. 5.3: allgemeine Integrationskonstante sonst: Lichtgeschwindigkeit im Vakuum
c_A	Augerkoeffizient
C_{HL}	Kapazität der RLZ im Halbleiter
C_i	Kapazität einer idealen MOS-Struktur
C_{OX}	Kapazität der Oxidschicht
C_{OX}^{imp}	Kapazität der implantierten Oxidschicht
C_{OX}^{Ref}	Kapazität der unimplantierten Oxidschicht
D	Kap. 5.1.3: Dosis Anhang A: Phasendrehung sonst: Detektorcharakteristik
d	Dicke der Oxidschicht
E	Energie; Peaklage auf der Energieskala
e	Elementarladung
\vec{E}	elektrische Feldstärke
ΔE_{BL}	Zunahme der Bandlücke bei Nanokristallen
\vec{E}_{DB}	elektrische Feldstärke beim Erreichen des Durchbruchs
$f(E), f(\lambda)$	gemessenes Spektrum auf der Energie- bzw. Wellenlängenskala
f_K	Interferenzkorrektur, normiert
f_{LE}	Korrekturfunktion zur Berechnung einer Leistungseffizienz
$f(t)$	gemessenes Zeitspektrum
g_s, g_p	Strahlcharakteristik des Streustrahlers und der Probe
$g(k)$	Zerfallsratenverteilung
H	Hamiltonoperator
H_{Col}	Hamiltonoperator der Coulombwechselwirkung
H_{SBK}	Hamiltonoperator der SBK
\hbar	Plancksche Konstante
\hat{I}	Streumatrix eines Lichtstrahls beim Durchgang durch die Grenzfläche zweier Medien
i	Anhang A: imaginäre Einheit
I_{ex}	Intensität der anregenden Strahlung
I_L, I_R, I_{ges}	Anhang B: Integral über das Meßspektrum
I_M	Meßspektrum
I_w	„wahres“, korrigiertes Spektrum
j	Stromdichte
K	Interferenzkorrektur, nicht normiert
k	Zerfalls- oder Übergangsrate
k_0	Kap. 2.5: Übergangsrate der optischen Anregung $S_0 \rightarrow S_1$

	Kap. 5.3: allgemeine Zerfallsrate
k_1, k_S	strahlende Übergangsrate $S_1 \rightarrow S_0$
k_2, k_A	nichtstrahlende Übergangsrate $S_1 \rightarrow S_0$ bzw. $T_1 \rightarrow S_0$
k_3, k_T	strahlende Übergangsrate $T_1 \rightarrow S_0$
k_5	nichtstrahlende Übergangsrate $S_1 \Rightarrow T_1$ (Intersystem Crossing)
k_6	Übergangsrate der optischen Anregung $S_0 \rightarrow T_1$
k_R	strahlende Übergangsrate
k_z	Anhang A: Abkürzung $k_z = 4\pi n_m / \lambda$
\vec{l}, l	Bahndrehimpuls und dessen Betrag
\vec{L}	Streumatrix eines Lichtstrahls beim Durchgang durch ein Medium
m_e	Ruhemasse des Elektrons
N	allgemein Bevölkerung eines Zustandes
n	Kap. 2.4 und 2.5: Hauptquantenzahl
	Anhang A: komplexer Brechungsindex
N_0	Kap. 2.5: Summe von N_G , N_S und N_T
	sonst: Anfangsbevölkerung eines Zustandes
n_{em}	Zahl emittierter Photonen
n_{ex}	Zahl anregender Teilchen (Photonen oder Elektronen)
N_G, N_S, N_T	Bevölkerung der Zustände S_0, S_1, T_1
P	Leistung
P_{em}	optische Emissionsleistung
P_{ex}	Anregungsleistung
P_{ex}^F	Anregungsleistung je Fläche
P_R	Wahrscheinlichkeit, daß ein Exziton im Cluster kein Störzentrum zur nichtstrahlenden Rekombination findet
\vec{q}	Dipolvektor
Q_{DB}	Ladung, die bis zum Erreichen eines Durchbruchs durch ein Oxid fließt
Q_{imp}	Ladung, die durch die Implantation zusätzlich im Oxid gespeichert wird
R	Kap. 2.4.1: Abmessung eines Potentialtopfes
r	Anhang A: Fresnelsche Koeffizienten
	Anhang B: Kugelkoordinate
\vec{r}	Ortsvektor
R_0	komplexer Reflexionskoeffizient
r_D	Empfindlichkeitsfaktor der Referenzdiode
R_p	projizierte Reichweite implantierter Ionen
ΔR_p	Reichweitestreuung
S	komplexe Amplitude einer Lichtwelle
\vec{S}	allgemeine Streumatrix
\vec{s}	Spin
S_0, S_1	Singlett-Grundzustand, erster angeregter Singlettzustand
S_{krit}	notwendige Energiedeposition zur maximalen Schädigung von amorphem SiO_2
\vec{T}	Anhang A: Abkürzung $\vec{T} = \vec{b} \times \vec{q}$
T	Anhang B: Transmission
T_0	Anhang A: komplexer Transmissionskoeffizient
T_1	erster angeregter Triplettzustand
T_A	Ausheiltemperatur

T_{Opt}	optimale Ausheiltemperatur, bei der die PL-Intensität maximal wird
t	Anhang A: Fresnelsche Koeffizienten sonst: Zeit
t_{DB}	Zeit bis zum Erreichen eines Durchbruchs
U_{FB}	Flachbandspannung
ΔU_{FB}	Verschiebung der Flachbandspannung
V	Anhang A: Verhältnis zweier benachbarter lokaler Extrema
\vec{v}	Geschwindigkeit
x, y, z	kartesische Koordinaten
Z	Ordnungszahl oder effektive Kernladung
α	Kap. 2.5: Spinwellenfunktion Kap. 5.3: Konvergenzparameter Anhang A: Einfallswinkel Anhang B: Absorptionszahl
α_0	Feinstrukturkonstante
β	Kap. 2.5: Spinwellenfunktion Kap. 5.3: Parameter der gestreckten Exponentialfunktion sonst: Brechungswinkel oder Winkel zwischen Beobachtungsrichtung und Oberflächennormale
γ	Kap. 5.3: Abkürzung $\gamma = k_0/c_A$
ϵ_0, ϵ_r	Dielektrizitätskonstante, Dielektrizitätszahl
η	Leistungseffizienz
θ	Kugelkoordinate
λ	Wellenlänge
λ_{em}	Wellenlänge der emittierten Strahlung
λ_{ex}	Wellenlänge der anregenden Strahlung
μ	Verhältnis zwischen FWHM und Peakposition
$\vec{\mu}$	magnetisches Moment
ν	relatives Verhältnis der PL-Intensität zwischen der blau-violetten und der ultravioletten Lumineszenzbande
ν_S, ν_T	Frequenz der strahlenden Übergänge $S_1 \rightarrow S_0$ bzw. $T_1 \rightarrow S_0$
$\xi(r)$	ortsabhängiger Anteil der SBK
ξ_{nl}	Erwartungswert von $\xi(r)$
ρ	Betrag einer komplexen Zahl
σ	Halbwertsbreite
τ	Anhang A: Abkürzung: $\tau = A_0^+/\tilde{A}_1^+$ sonst: Abklingkonstante
Φ	Gesamtwellenfunktion
ϕ	Kap. 2.5: Wellenfunktion eines Elektrons Anhang A: Argument einer komplexen Zahl
φ	Kugelkoordinate
χ	Kap. 2.5: Spinwellenfunktion Anhang A: Phasendrehung Anhang B: Korrekturfunktion
Ψ	Gesamt- oder Ortswellenfunktion
Ω	Raumwinkel

Literaturverzeichnis

- [Adl92] D.L. Adler, D.C. Jacobson, D.J. Eaglesham, M.A. Marcus, J.L. Benton, J.M. Poate und P.H. Citrin, *Appl. Phys. Lett.* 61:18 (1992) 2181.
- [All97] L.B. Allard, J. Albert, J.L. Brebner und G.R. Atkins, *Optics Lett.* 22:11 (1997) 819.
- [Ane97] A. Anedda, C.M. Carbonaro, R. Corpino und A. Serpi, *J Non-Cryst. Solids* 216 (1997) 19.
- [Azz87] R.M.A. Azzam und N.M. Bashara, *Ellipsometry and Polarized Light*, Elsevier Sci. Publ. B.V., North-Holland, 1987.
- [Bai98] G.F. Bai, Y.Q. Wang, Z.C. Ma, W.H. Zong und G.G. Qin, *J. Phys. Cond. Matt.* 10 (1998) L717.
- [Bao97] X.M. Bao, T. Gao, F. Yan und S. Tong, *Mat. Res. Soc. Proc.* 438 (1997) 477.
- [Bar48] J. Bardeen und W.H. Brittain, *Phys. Rev.* 74 (1948) 230.
- [Bar86] G. Barbottin und A. Vapaille (Editoren), *Instabilities in Silicon Devices*, Elsevier Sci. Publ. B.V., North-Holland, 1986.
- [Bor97] J. von Borany, R. Grötzschel, K.H. Heinig, A. Markwitz, W. Matz, B. Schmidt und W. Skorupa, *Appl. Phys. Lett.* 71 (1997) 3215.
- [Bos96] R. Boscaino, M. Cannes, F.M. Gelardi und M. Leone, *J. Phys. Cond. Matt.* 8 (1996) L545.
- [Bos99] R. Boscaino, M. Cannes, F.M. Gelardi und M. Leone, *J. Phys. Cond. Matt.* 11 (1999) 721.
- [Bota96] S. Bota, B. Garrido, J.R. Morante, A. Baraban und P.P. Konorov, *Solid State Electr.* 39:3 (1996) 355.
- [Bro98] M. Brongersma, Dissertation, Universität Utrecht, 1998.
- [Bron93] I.N. Bronstein, K.A. Semendjajew, G. Musiol und H. Mühlig, *Taschenbuch der Mathematik*, Verlag Harry Deutsch, Frankfurt M. 1993.
- [Buu98] T. van Buuren, L.N. Dinh, L.L. Chase, W.J. Siekhaus und L.J. Terminello, *Phys. Rev. Lett.* 80:17 (1998) 3803.
- [Can90] L.T. Canham, *Appl. Phys. Lett.* 57 (1990) 1046.
- [Can96] L.T. Canham, T.I. Cox, A. Loni und A.J. Simons, *Appl. Surf. Sci.* 102 (1996) 436.

- [Cann97] M. Cannes, R. Boscaino, F.M. Gelardi und M. Leone, *J. non-cryst. Solids* 216 (1997) 99.
- [Chen96] Q.W. Chen, J.S. Zhu, C.G. Fan, Y.H. Zhang, *Phys. Lett. A* 220 (1996) 293.
- [Chen97] Y.A. Chen, B.F. Chan, W.C. Tsay, L.H. Laih, M.N. Chang, J.I. Chyi, J.W. Hong und C.Y. Chang, *Solid-State Elec.* 41:5 (1997) 757.
- [Chio98] N. Chiodini, F. Meinardi, F. Morazzoni, A. Paleari, R. Scotti und G. Spinolo, *Phys. Rev. B* 58:15 (1998) 9615.
- [Chou98] S.T. Chou, J.H. Tsai und B.C. Sheu, *J. Appl. Phys.* 83: 10 (1998) 5394.
- [Chr81] L.A. Christel, J.F. Gibbons und W.T. Sigmon, *J. Appl. Phys.* 52 (1981) 7143.
- [Coff93] S. Coffa, F. Priolo, G. Franzó, V. Bellani, A. Carnera und C. Spinella, *Phys. Rev. B* 48 (1993) 11782.
- [Coff98] S. Coffa, G. Franzó und F. Priolo, *Mat. Res. Soc. Bulletin* (Apr 1998) 25.
- [Coo96] D.W. Cooke, B.L. Bennett, E.H. Farnum, W.L. Hulst, K.E. Sickfus, J.F. Smith, J.L. Smith, T.N. Taylor, P. Tiwari und A.M. Portis, *Appl. Phys. Lett.* 68 (1996) 1663.
- [Cor95] A. Corazza, B. Crivelli, M. Martini und G. Spinolo, *J. Phys. Cond. Matt.* ? (1995) 6739.
- [Cri96] B. Crivelli, M. Martini, F. Meinardi, A. Paleari und G. Spinolo, *Phys. Rev. B* 54 (1996) 16637.
- [Cull97] A.G. Cullis, L.T. Canham und P.D.J. Calcott, *J. Appl. Phys.* 82:3 (1997) 909.
- [Dia92] E.M. Dianov, V.O. Sokolov und V.B. Sulimov, *J. Non-Cryst. Solids* 149 (1992) 5.
- [Dia97] E.M. Dianov, V.M. Mashinsky, V.B. Neustruev, O.D. Sazhin, V.V. Brazhkin und V.A. Siderov, *Optics Lett.* 22:14 (1997) 1089.
- [Dut96] A.K. Dutta, *Appl. Phys. Lett.* 68:9 (1996) 1189.
- [Eer74] E.P. EerNisse und C.B. Norris, *J. Appl. Phys.* 45 (1974) 5196.
- [Ehb97] M. Ehbrecht, B. Kohn, F. Huisken, M.A. Laguna und V. Paillard, *Phys. Rev. B* 56:11 (1997) 6958.
- [EMRS98] EMRS Spring Meeting, Strasbourg 1998, Paneldiskussion während des Symp. „Light Emission from Silicon: Progress Towards Si-based Optoelectronics“.
- [Enn83] H. Ennen, J. Schneider, G. Pomrenke und A. Axmann, *Appl. Phys. Lett.* 43 (1983) 943.
- [Enn85] H. Ennen, G. Pomrenke, A. Axmann, K. Eisele, W. Haydl und J. Schneider, *Appl. Phys. Lett.* 46 (1985) 381.
- [Est96] M.J. Estes und G. Moddel, *Phys. Rev. B* 54:20 (1996) 14633.
- [Fau98] P.M. Fauchet, J. von Behren, K.D. Hirschman, L. Tsybeskov und S.P. Duttagupta, *phys. stat. sol. (a)* 165:3 (1998) 3.

- [For95] E.W. Forsythe, E.A. Whittaker, D.C. Morton, B.A. Khan, B.S. Sywe, Y. Lu, S. Liang, C. Gorla und G.S. Tompa, *Mat. Res. Soc. Proc.* 405 (1996) 253.
- [Fra97] G. Franzó, S. Coffa, F. Priolo und C. Spinella, *J. Appl. Phys.* 81:6 (1997) 2784.
- [Fuji97] M. Fujimaki, Y. Ohki und N. Nishikawa, *J. Appl. Phys.* 81:3 (1997) 1042.
- [Fuj98] M. Fujii, O. Mamezaki, S. Hayashi und K. Yamamoto, *J. Appl. Phys.* 83:3 (1998) 1507.
- [Gall93] M. Gallagher und U. Osterberg, *J. Appl. Phys.* 74:4 (1993) 2771.
- [Gao97] T. Gao, X.M. Bao, F. Yan und S. Tong, *Phys. Lett. A* 232 (1997) 321.
- [Gar94] B. Garrido, J. Samitier, J.R. Morante, J. Montserrat und C. Domínguez, *Phys. Rev. B* 49:21 (1994) 14845.
- [Gar97] B. Garrido, J. Samitier, S. Bota, J.A. Moreno, J. Montserrat und J.R. Morante, *J. Appl. Phys.* 81:1 (1997) 126.
- [Ghi97] G. Ghislotti, B. Nielsen, P. Asoka-Kumar, K.G. Lynn, L.F. Di Mauro, C.E. Bottani, F. Corni, R. Tonini und G.P. Ottaviani, *J. Electrochem. Soc.* 144:6 (1997) 2196.
- [Gia92] C. Giannini, S. Lagomarsino, F. Scarinci und P. Castrucci, *Phys. Rev. B* 45 (1992) 8822.
- [Gly69] S.P. McGlynn, T. Azumi und M. Kinoshita, *Molecular Spectroscopy of the Triplet State*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1969.
- [Goe91] V. Lehmann und U. Goesele, *Appl. Phys. Lett.* 58 (1991) 856.??
- [Gri91] D.L. Griscom, *J. Ceramic Soc. of Jpn.* 99 (1991) 899.
- [Grun86] F.J. Grunthaner und P.J. Grunthaner, *Mat. Sci. Reports* 1 (1986) 65.
- [Grun87] P.J. Grunthaner, M.H. Hecht, F.J. Grunthaner und N.M. Johnson, *J. Appl. Phys.* 61:2 (1987) 629.
- [Hay93] S. Hayashi, T. Nagareda, Y. Kanzawa, K. Yamamoto, *Jpn. J. Appl. Phys.* 32 (1993) 3840.
- [Hea91] O.S. Heavens, *Optical Properties of thin solid films*, Dover Publications, Inc., Mineola, NY.
- [Hei99] K.H. Heinig, B. Schmidt, A. Markwitz, R. Grötzschel, M. Strobel und S. Oswald, *Nucl. Instr. Meth. B* 148 (1999) 969.
- [Him88] F.J. Himpsel, F.R. McFeely, A. Taleb-Ibrahimi und J.A. Yarmoff, *Phys. Rev. B* 38:9 (1988) 6084.
- [Holm82] R.T. Holm, S.W. Knight, E.D. Palik und W. Lukosz, *Appl. Optics* 21:14 (1982) 2512.
- [Hos92] H. Hosono, Y. Abe, D.L. Kinser, R.A. Weeks, K. Muta und H. Kawazoe, *Phys. Rev. B* 46:18 (1992) 11445.

- [Im99] S. Im, J.Y. Jeong, M.S. Oh, H.B. Kim, K.H. Chae, C.N. Whang und J.H. Song, *Appl. Phys. Lett.* 74:7 (1999) 961.
- [Imai88] H. Imai, K. Arai, H. Imagawa, H. Hosono und Y. Abe, *Phys. Rev. B* 38:17 (1988) 12772.
- [Kach97] G.A. Kachurin, K.S. Zhuravlev, N.A. Pazdnikov, A.F. Leier, I.E. Tyschenko, V.A. Volodin, W. Skorupa und R.A. Yankov, *Nucl. Instr. Meth. B* 127/128 (1997) 583.
- [Kana97] T. Kanashima, M. Okuyama und Y. Hamakawa, *Jpn. J. Appl. Phys.* 36 (1997) 1448.
- [Kane92] Y. Kanemitsu, H. Uto und Y. Masumoto, *Appl. Phys. Lett.* 61:18 (1992) 2187.
- [Kane93] Y. Kanemitsu, T. Ogawa, K. Shiraishi und K. Takeda, *Phys. Rev. B* 48:7 (1993) 4883.
- [Kane96] Y. Kanemitsu, N. Shimizu, T. Komoda, L.F. Hemment und B.J. Sealy, *Phys. Rev. B* 54:20 (1996) R14329.
- [Kane97] Y. Kanemitsu und S. Okamoto, *Mat. Sci. Engin.* B48 (1997) 108.
- [Kanz97] Y. Kanzawa, T. Kageyama, S. Takeoka, M. Fujii, S. Hayashi und K. Yamamoto, *Solid State Comm.* 102:7 (1997) 533.
- [Kaw93] T. Kawaguchi und S. Miyazima, *Jpn. J. Appl. Phys.* 32 (1993) L215.
- [Kim97] K. Kim, M.S. Suh, D.H. Oh, Y.H. Lee, C.J. Youn, K.B. Lee und H.J. Lee, *J. Korean Phys. Soc.* 30:3 (1997) 580.
- [Kna97] P. Knápek, K. Luterová, J. Kočka, A. Fejfar, I. Pelant, J. Linnros und N. Lalic, *J. Luminesc.* 72-74 (1997) 992.
- [Kna98] P. Knápek, B. Rezek, D. Muller, J.J. Grob, R. Lévy, K. Luterová, J. Kočka, und I. Pelant, *phys. stat. sol. (a)* 167 (1998) R5.
- [Koch93] F. Koch, V. Petrova-Koch, T. Muschik, A. Nikolov und V. Gavrilenco, *Mat. Res. Soc. Proc.* 283 (1993) 197.
- [Komu96] S. Komuro, T. Kato, T. Morikawa, P. O'Keeffe und Y. Aoyagi, *J. Appl. Phys.* 80:3 (1996) 1749.
- [Kon94] A.J. Kontkiewicz, A.M. Kontkiewicz, J. Siejka, S. Sen, G. Nowak, A.M. Hoff, P. Sakthivel, K. Ahmed, P. Mukherjee, S. Witanachchi und J. Lagowski, *Appl. Phys. Lett.* 65:11 (1994) 1436.
- [Kos98] N. Koshizaki, H. Umehara und T. Oyama, *Thin Solid Films* 325 (1998) 130.
- [Kov98] D. Kovalev, H. Heckler, M. Ben-Chorin, G. Polisski, M. Schwartzkopff und F. Koch, *Phys. Rev. Lett.* 81:13 (1998) 2803.
- [Koz92] F. Kozłowski, M. Sauter, P. Steiner, A. Richter, H. Sandmaier und W. Lang, *Thin Solid Films* 222 (1992) 196.
- [Koz97] F. Kozłowski, H.E. Porteanu, V. Petrova-Koch und F. Koch, *Mat. Res. Soc. Proc.* 452 (1997) 657.

- [Kre97] M. Kreter, Diplomarbeit, Technische Universität Dresden, 1997.
- [Kuz98] V.A. Kuznetsov, I. Andrienko und D. Haneman, Appl. Phys. Lett. 72:25 (1998) 3323.
- [Lal96] N. Lalic und J. Linnros, J. Appl. Phys. 80:10 (1996) 5971.
- [Lal98] N. Lalic und J. Linnros, EMRS Konferenz (1998) B-II/P13.
- [Lan97] A.D. Lan, B.X. Lui und X.D. Bai, J. Appl. Phys. 82:10 (1997) 5144.
- [Land79] L.D. Landau und E.M. Lifschitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik*, Bd. III: *Quantenmechanik*, Akademie-Verlag Berlin 1979.
- [Lann95] M. Lannoo, C. Delerue, G. Allan und E. Martin, Mat. Res. Soc. Proc. 358 (1995) 13.
- [Leo97] M. Leone, R. Boscaino, M. Cannes und F.M. Gelardi, J. Non-Cryst. Solids 216 (1997) 105.
- [Leon97] D. Leong, M. Harry, K.J. Reeson und K.P. Homewood, Nature 387 (1997) 686.
- [Liao96a] L.S. Liao, X.M. Bao, N.S. Li, X.Q. Zheng und N.B. Min, J. Luminesc. 68 (1996) 199.
- [Liao96b] L.S. Liao, X.M. Bao, N.S. Li, X.Q. Zheng und N.B. Min, Solid State Comm. 97 (1996) 1039.
- [Lib95] S. Libertino, S. Coffa, G. Franzó und F. Priolo, J. Appl. Phys. 78:6 (1995) 3867.
- [Lon95] A. Loni, A.J. Simons, T.I. Cox, P.D.J. Calcott und L.T. Canham, Electr. Lett. 31 (1995) 1288.
- [Mack59] W. Macke *Lehrbuch der Theoretischen Physik*, Bd. III: *Quanten*, Akadem. Verlagsges. Geest & Portig K.-G., Leipzig 1959.
- [Mal96] M.S. Malone, *Der Mikroprozessor*, Springer-Verlag, Berlin, 1996, S.301.
- [Mark98] A. Markwitz, B. Schmidt, W. Matz, R. Grötzschel und A. Mücklich, Nucl. Instr. Meth. B 142 (1998) 338.
- [Mark99a] A. Markwitz, L. Rebohle, H. Hofmeister und W. Skorupa, Nucl. Instr. Meth. B 147 (1999) 361.
- [Mark99b] A. Markwitz, R. Grötzschel, K.H. Heinig, L. Rebohle und W. Skorupa, Nucl. Instr. Meth. B (1999) im Druck.
- [Mars97] C.D. Marshall, J.A. Speth und S.A. Payne, J. Non-Cryst. Solids 212 (1997) 59.
- [Mart97] M. Martini, F. Meinardi, A. Paleari, G. Spinolo, A. Vedda, D. Di Martino und F. Negrisolo, Phys. Rev. B 55:23 (1997) 15375.
- [Mart98] M. Martini, F. Meinardi, A. Paleari, G. Spinolo und A. Vedda, Phys. Rev. B 57:7 (1998) 3718.
- [Mat97] T. Matsuda, M. Nishio, T. Ohzone und H. Hori, Solid State Electr. 41:6 (1997) 887.

- [Mich91] J. Michel, J.L. Benton, R.F. Ferrante, D.C. Jacobson, D.J. Eaglesham, E.A. Fitzgerald, Y.H. Xie, J.M. Poate und L.C. Kimerling, *J. Appl. Phys.* 70:5 (1991) 2672.
- [Min96] K.S. Min, K.V. Shcheglov, C.M. Yang, H.A. Atwater, M.L. Brongersma und A. Polman, *Appl. Phys. Lett.* 68:18 (1996) 2511.
- [Moo65] G.E. Moore, *Electronic Magazine* 38:8 (1965) 114.
- [Mor93] H. Morisaki, H. Hashimoto, F.W. Ping, H. Nozawa und H. Ono, *J. Appl. Phys.* 74:4 (1993) 2977.
- [Mut95] P. Mutti, G. Ghislotti, S. Bertoni, L. Bonoldi, G.F. Cerofolini, L. Meda, E. Grilli und M. Guzzi, *Appl. Phys. Lett.* 66:7 (1995) 851.
- [Nak97] A. Nakajima, T. Futatsugi, N. Horiguchi und N. Yokoyama, *Appl. Phys. Lett.* 71:25 (1997) 3652.
- [Nak98] A. Nakajima, T. Futatsugi, H. Nakao, T. Usuki, N. Horiguchi und N. Yokoyama, *J. Appl. Phys.* 84:3 (1998) 1316.
- [Nass98] A.G. Nassiopoulou, V. Ioannou-Souglideridis, P. Photopoulos, A. Travlos, V. Tsakiri und D. Papadimitriou, *phys. stat. sol. (a)* 165 (1998) 79.
- [Nis97] N. Nishikawa, Y. Miyake, E. Watanabe, D. Ito, K.S. Seol, Y. Ohki, K. Ishii, Y. Sakurai und K. Nagasawa, *J. Non-Cryst. Solids* 222 (1997) 221.
- [Nish98] K. Nishimura, Y. Nagao und N. Ikeda, *Jpn. J. Appl. Phys.* 37 (1998) L303.
- [Noz97] S. Nozaki, S. Sato, H. Ono, H. Morisaki und M. Iwase, *Nucl. Instr. Meth. B* 121 (1997) 455.
- [Oka96] S. Okamoto und Y. Kanemitsu, *Phys. Rev. B* 54:23 (1996) 16421.
- [Pac98a] G. Pacchioni und G. Ieranó, *Phys. Rev. B* 57:2 (1998) 818.
- [Pac98b] G. Pacchioni und R. Ferrario, *Phys. Rev. B* 58:10 (1998) 6090.
- [Pan96] D. Panknin, E. Wieser, W. Skorupa, W. Henrion und H. Lange, *Appl. Phys. A* 62 (1996) 155.
- [Pav94] L. Pavesi, M. Ceschini, G. Mariotti, E. Zhanghellini, O. Bisi, M. Anderle, L. Calliari, M. Fedrizzi und L. Fedrizzi, *J. Appl. Phys.* 75:2 (1994) 1118.
- [Pif97] A. Pifferi, P. Taroni, A. Torricelli, G. Valentini, P. Mutti, G. Ghislotti und L. Zhanghier, *Appl. Phys. Lett.* 70:3 (1997) 348.
- [Pio90] F. Pio, M. Guzzi, G. Spinolo und M. Martini, *phys. stat. sol. (b)* 159 (1990) 577.
- [Pioc97] H. Pioch, J.U. Schütz, H.C. Wolf und U. Dettlaff-Weglikowska, *Chem. Physics Lett.* 277 (1997) 89.
- [Pro96] S.M. Prokes, *J. Mat. Res.* 11:2 (1996) 305.
- [Qin96] G.G. Qin, A.P. Li und Y.X. Zhang, *Phys. Rev. B* 54 (1996) R11122.
- [Qin97] G. Qin und G.G. Qin, *J. Appl. Phys.* 82:5 (1997) 2572.

- [Rad94] K. Rademacher, R. Carius und S. Mantl, Nucl. Instr. Meth. B 84 (1994) 163.
- [Reb97a] L. Rebohle, I.E. Tyschenko, H. Fröb, K. Leo, R.A. Yankov, J. von Borany und W. Skorupa, Microelectr. Engineering 36 (1997) 107.
- [Reb97b] L. Rebohle, J. von Borany, R.A. Yankov, W. Skorupa, I.E. Tyschenko, H. Fröb und K. Leo, Appl. Phys. Lett. 71:19 (1997) 2809.
- [Reb98a] L. Rebohle, J. von Borany, R. Grötzschel, A. Markwitz, B. Schmidt, I.E. Tyschenko, W. Skorupa, H. Fröb und K. Leo, phys. stat. sol. (a) 165 (1998) 31.
- [Reb98b] L. Rebohle, I.E. Tyschenko, J. von Borany, B. Schmidt, R. Grötzschel, A. Markwitz, R.A. Yankov, H. Fröb und W. Skorupa, Mat. Res. Soc. Proc. 486 (1998) 175.
- [Reb99] L. Rebohle, J. von Borany, W. Skorupa, I.E. Tyschenko und H. Fröb, J. Luminesc. 80 (1999) 275.
- [Rei996] S. Reiß, Dissertation, TU Dresden 1996.
- [Ren92] S.Y. Ren und J.D. Dow, Phys. Rev. B 45:12 (1992) 6492.
- [Rev83] A. Revesz und G.E. Walrafen, J. non-cryst. solids 54 (1983) 323.
- [Rev99] A. Revesz, private Mitteilung, 1999.
- [San93] G.D. Sanders, C.J. Stanton und Y.C. Chang, Mat. Res. Soc. Proc. 283 (1993) 419.
- [Schu76] C.J.H. Schutte, *The Theory of Molecular Spectroscopy, Vol. 1*, North-Holland Publ. Comp., Amsterdam, 1976.
- [Seif98] H. Seifarth, R. Grötzschel, A. Markwitz, W. Matz, P. Nitzsche und L. Rebohle, Thin Solid Films 330 (1998) 202.
- [Seol96a] K.S. Seol, A. Ieki, Y. Ohki, H. Nishikawa und M. Tachimori, J. Appl. Phys. 79:1 (1996) 412.
- [Seol96b] K.S. Seol, Y. Ohki, H. Nishikawa, M. Takiyama und Y. Hama, J. Appl. Phys. 80:11 (1996) 6444.
- [Seol97] K.S. Seol, T. Karasawa, Y. Ohki, H. Nishikawa und M. Takiyama, Microelectr. Engineering 36 (1997) 193.
- [Seol99] K.S. Seol, M. Fujimaki, Y. Ohki und H. Nishikawa, Phys. Rev. B 59:3 (1999) 1590.
- [Ser96] A.A. Seraphin, S.T. Ngiam und K.D. Kohlenbrandner, J. Appl. Phys. 80:11 (1996) 6429.
- [Shc95] K.V. Shcheglov, C.M. Yang, K.J. Vahala und H.A. Atwater, Appl. Phys. Lett. 66 (1995) 745.
- [Shi94] T. Shimizu-Iwayama, K. Fujita, S. Nakato, K. Saitoh, T. Fujita und N. Itoh, J. Appl. Phys. 75:12 (1994) 7779.
- [Shi96] T. Shimizu-Iwayama, S. Nakato und K. Saitoh, Nucl. Instr. Meth. B 120 (1996) 97.

- [Shi98] T. Shimizu-Iwayama, N. Kurumado, D.E. Hole und P.D. Townsend, *J. Appl. Phys.* 83:11 (1998) 6018.
- [Sil85] A.R. Silin und L. Skuja, *J. Non-Cryst. Solids* 71 (1985) 443.
- [Sko85] W. Skorupa und E. Hensel, Dissertation, TU Dresden, 1985.
- [Sko96a] W. Skorupa, R.A. Yankov, I.E. Tyschenko, H. Fröb, T. Böhme und K. Leo, *Appl. Phys. Lett.* 68 (1996) 2410.
- [Sko96b] W. Skorupa, R.A. Yankov, L. Rebohle, H. Fröb, T. Böhme, K. Leo, I.E. Tyschenko und G.A. Kachurin, *Nucl. Instr. Meth. B* 120 (1996) 106.
- [Sko99] W. Skorupa, Proc. 12th Int. Conf. Ion Impl. Techn. 1998, Edt.: I. Yamada, K. Matsuda, Y. Akasaka und H. Komiya, IEEE Publications 1999, im Druck.
- [Sku92] L. Skuja, *J. Non-Cryst. Solids* 149 (1992) 77.
- [Song97a] H.Z. Song und X.M. Bao, *Phys. Rev. B* 55:11 (1997) 6988.
- [Song97b] H.Z. Song, X.M. Bao, N.S. Li und J.Y. Zhang, *J. Appl. Phys.* 82:8 (1997) 4028.
- [Song98] H.Z. Song, X.M. Bao, N.S. Li und X.L. Wu, *Appl. Phys. Lett.* 72 (1998) 356.
- [Stef97a] B.B. Stefanov und K. Raghavachari, *Appl. Phys. Lett.* 71:6 (1997) 770.
- [Stef97b] B.B. Stefanov und K. Raghavachari, *Phys. Rev. Lett.* 56:9 (1997) 5035.
- [Ste94] P. Steiner, F. Kozlowski, M. Wielunski und W. Lang, *Jpn. J. Appl. Phys.* 33 (1994) 6075.
- [Sul95] V.B. Sulimov und V.O. Sokolov, *J. Non-Cryst. Solids* 191 (1995) 260.
- [Sze81] S.M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1981.
- [Tak92] T. Takagahara und K. Takeda, *Phys. Rev. B* 46:23 (1992) 15578.
- [Toh89] R. Tohmon, Y. Shimogaichi, H. Mizuno, Y. Ohki, K. Nagasawa und Y. Hama, *Phys. Rev. Lett.* 62 (1989) 1388.
- [Tom94] G.S. Tompa, D.C. Morton, B.S. Sywe, Y. Lu, E.W. Forsythe, J.A. Ott, D. Smith, J. Khurgin und B.A. Khan, *Mat. Res. Soc. Proc.* 358 (1994) 701.
- [Tong96] S. Tong, X.N. Liu, L.C. Wang, F. Yan und X.M. Bao, *Appl. Phys. Lett.* 69 (1996) 596.
- [Tong97] S. Tong, X.N. Liu, T. Gao und X.M. Bao, *Appl. Phys. Lett.* 71 (1997) 698.
- [Trw98] P.F. Trwoga, A.J. Kenyon und C.W. Pitt, *J. Appl. Phys.* 83:7 (1998) 3789.
- [Tsai94] T.E. Tsai, E.J. Friebele, M. Rajaram und S. Mukhopadhyay, *Appl. Phys. Lett.* 64 (1994) 1481.
- [Tsy96] L. Tsybeskov, S.P. Duttgupta, K.D. Hirschman und P.M. Fauchet, *Appl. Phys. Lett.* 68:15 (1996) 2058.

- [Val99] M.Y. Valakh, V.A. Yukhimchuk, V.Y. Bratus', A.A. Konchits, P.L.F. Hemment und T. Komoda, *J. Appl. Phys.* 85:1 (1999) 168.
- [Vep97] S. Vepřek, *Thin Solid Films* 297 (1997) 145.
- [Voo95] M. Voos, C. Delalande, M. Ben Dahan, J. Wainstain und A.N. Titkov, *Solid State Comm.* 94:8 (1995) 651.
- [Wang96] Y. Wang, Y. Yang, Y. Guo, J. Yue und R. Gan, *Mat. Lett.* 29 (1996) 159.
- [War92] W.L. Warren, E.H. Pointdexter, M. Offenberg und W. Müller-Warmuth, *J. Electrochem. Soc.* 139:3 (1992) 872.
- [Wee64] R.A. Weeks und E. Lell, *J. Appl. Phys.* 35 (1964) 1932.
- [Wei98] R. Weigand, M. Zacharias, J. Bläsing, P. Veit, J. Christen und E. Wendler, *Superlatt. and Microstruc.* 23:2 (1998) 349.
- [Whi98] C.W. White, J.D. Budai, S.P. Withrow, J.G. Zhu, E. Sonder, R.A. Zhur, A. Meldrum, D.M. Hembree Jr., D.O. Henderson und S. Prawer, *Nucl. Instr. Meth. B* 141 (1998) 228.
- [Wick95] P. Wickbold, P.M. Cheong, D. Pang, J.H. Chen und W. Paul, *Mat. Res. Soc. Proc.* 358 (1995) 127.?
- [Wog97] U. Woggon, *Optical properties of semiconductor quantum dots*, Springer-Verlag Berlin 1997.
- [Wu97] X.L. Wu, T. Gao, X.M. Bao, F. Yan, S.S. Jiang und D. Feng, *J. Appl. Phys.* 82:5 (1997) 2704.
- [Yang95a] C.M. Yang, K.V. Shcheglov, K.J. Vahala und H.A. Atwater, *Nucl. Instr. Meth. B* 106 (1995) 433.
- [Yang95b] Z. Yang, K.P. Homewood, M.S. Finney, M.A. Harry und K.J. Reeson, *J. Appl. Phys.* 78:3 (1995) 1958.
- [Ye98] Y.H. Ye, J.Y. Zhang, X.M. Bao, X.L. Tan und L.F. Chen, *Appl. Phys. A* 67 (1998) 213.
- [Yor96] H. Yorikawa, H. Uchida und S. Muramatsu, *J. Appl. Phys.* 79:7 (1996) 3619.
- [Yue97] L. Yue und Y. He, *J. Appl. Phys.* 81:6 (1997) 2910.
- [Zan96] L. Zanghieri und L. Meda, *Nuovo Cimento* 18D:10 (1996) 1167.
- [Zach97] M. Zacharias und P.M. Fauchet, *Appl. Phys. Lett.* 71:3 (1997) 380.
- [Zha97] J.Y. Zhang, X.L. Wu und X.M. Bao, *Appl. Phys. Lett.* 71:17 (1997) 2505.
- [Zha98a] J.Y. Zhang, X.M. Bao, N.S. Li und H.Z. Song, *J. Appl. Phys.* 83:7 (1998) 3609.
- [Zha98b] J.Y. Zhang, X.M. Bao, Y.H. Ye und X.L. Tan, *Appl. Phys. Lett.* 73:14 (1998) 1790.
- [Zhao94] X. Zhao, O. Schoenfeld, J. Kusano, Y. Aoyagi und T. Sugano, *Jpn. J. Appl. Phys.* 33 (1994) L649.

Versicherung

Hiermit versichere ich, daß ich die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe; die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht. Die Arbeit wurde bisher weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

Diese Arbeit wurde am Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung des Forschungszentrums Rossendorf e.V. unter Betreuung von Dr. Skorupa angefertigt.

Die Promotionsordnung der Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften der Technischen Universität Dresden in der Fassung vom 27.09.1994 wird anerkannt.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich ganz herzlich bei allen bedanken, die mit zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Mein besonderer Dank gilt

- dem Leiter des Instituts für Ionenstrahlphysik und Materialforschung, Herrn Prof. Dr. W. Möller, für die Unterstützung dieses Themas und sein großes Engagement für die Belange der Doktoranden,
- dem Leiter der Abteilung 'Neue Materialien', Herrn Dr. W. Skorupa, für die intensive Betreuung dieser Arbeit, die vielen anregenden und produktiven Diskussionen sowie die stete Hilfsbereitschaft in organisatorische Fragen,
- Herrn Dr. H. Fröb und Herrn Prof. Dr. K. Leo vom Institut für Angewandte Photophysik, Technische Universität Dresden, die durch ihre gute Zusammenarbeit die umfangreichen PL-Messungen ermöglichten,
- Herrn Dipl.-Phys. S. Niedermeier vom Institut für Optik und Quantenelektronik, Friedrich-Schiller-Universität Jena, für die Unterstützung bei der Messung der Abklingkonstanten der PL,
- Herrn Dr. W. Fukarek für anregende Diskussionen zum Thema Interferenzkorrektur und den ellipsometrischen Messungen gesputterter ITO-Schichten,
- Frau Dr. I. Tyschenko vom Institut of Semiconductor Physics, Nowosibirsk, für ihre gute Zusammenarbeit, die anregenden Diskussionen und die elektrischen Messungen während ihres Aufenthaltes am FZR,
- Herrn Dr. J. von Borany und Herrn Dipl.-Phys. T. Gebel für die Durchführung der elektrischen Messungen und die Unterstützung bei der Messung der EL,
- Herrn Dr. A. Markwitz und Herrn Dr. M. Klimenkov sowie den Mitarbeitern der TEM-Präparation für die Durchführung von TEM- und STEM-EDX-Untersuchungen,
- Herrn Dr. M. Voelskow für die Durchführung von RBS-Messungen,
- den Mitarbeitern der Implantergruppe, insbesondere Herrn J. Schneider, für die Durchführung einer Vielzahl von Implantationen,
- den Mitarbeitern des chemischen Labors, insbesondere Frau G. Schnabel und Frau I. Beatus, für die Präparation unzähliger kleiner Probenstücke,
- Frau R. Aniol für das Zerkleinern dicker Si-Wafer,

- Herrn Dr. R. Kögler, Herrn R. Kliemann und Herrn K. Müller für die Durchführung bzw. Unterstützung bei der Temperung mittels RTA, FLA und Quarzrohrofen,
- Herrn Dr. H. Seifarth für die Zusammenarbeit bezüglich gesputterter SiO₂-Schichten,
- Frau U. Fromm, Frau Dr. G. Vinel, Herrn Dr. M. Schlett, Herrn A. Geyer und Herrn N. Schmeißer für die Hilfe bei Problemen mit der Rechentchnik
- sowie den übrigen Mitarbeitern des Instituts für Ionenstrahlphysik und Materialforschung für die angenehme und anregende Arbeitsatmosphäre
- und nicht zuletzt meinen Eltern und meiner Lebensgefährtin Ines Aehnelt für ihre kontinuierliche Unterstützung und ihr Verständnis.

Lebenslauf

- geboren am 15.02.1970 in Leipzig
- Polytechnische Oberschule 1976 bis 1984
- Spezialschule für Mathematik und Physik 1984 bis 1988
- Abitur 1988
- Wehrdienst November 1988 bis Juli 1989
- Immatrikulation September 1989 an der TU Dresden in der Fachrichtung Physik
- 1994 Diplomarbeit zum Thema „Bestimmung von Koppelfaktoren der K-Serie der charakteristischen Röntgenstrahlung neutraler Atome nach Photonenanregung“
- Abschluß Diplom am 23.5.1995 und Erlangung des akademischen Grades Diplom-Physiker
- seit Februar 1996 Dissertation am Forschungszentrum Rossendorf zum Thema „Lumineszenzeigenschaften ionenimplantierter nanokristalliner SiO₂-Schichten“