

Selbstdiffusion in Silizium–Germanium-Legierungen

Von der Fakultät Physik der Universität Stuttgart
zur Erlangung der Würde eines Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)
genehmigte Abhandlung

vorgelegt von

ANDREAS STROHM

aus Großbottwar

Hauptberichter: Prof. Dr. W. Frank
Mitberichter: Prof. Dr. U. Schumacher

Tag der mündlichen Prüfung:
19. Dezember 2002

MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR METALLFORSCHUNG
STUTTGART
UND
INSTITUT FÜR THEORETISCHE UND ANGEWANDTE PHYSIK
UNIVERSITÄT STUTTGART

2002

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Silizium–Germanium-Legierungen	5
2.1	Herstellung	5
2.2	Versetzungen	5
2.3	Atomistische Struktur	6
2.4	Anwendungsmöglichkeiten	8
2.4.1	<i>SiGe-Schichten auf dem Weg zur Marktreife</i>	8
2.4.2	<i>SiGe:C – eine Legierung für die Zukunft?</i>	9
3	Grundlagen der Diffusion	11
3.1	Diffusionstheorie	11
3.1.1	<i>Phänomenologische Beschreibung der Diffusion</i>	11
3.1.2	<i>Atomistische Beschreibung der Diffusion</i>	12
3.2	Diffusionsmechanismen in Halbleitern	13
3.2.1	<i>Direkte Diffusionsmechanismen</i>	13
3.2.2	<i>Indirekte Diffusionsmechanismen</i>	13
3.2.3	<i>Interstitiell–substitutionelle Austauschmechanismen</i>	14
3.3	Selbstdiffusion in Si	16
3.3.1	<i>Historie</i>	16
3.3.2	<i>Neuere Experimente und heutiges Bild</i>	17
3.4	Selbstdiffusion in Ge	22
3.5	Selbstdiffusion in SiGe	22
3.6	C-Diffusion in SiGe	23
4	Diffusionsexperimente	24
4.1	Ausgangsmaterial	24
4.1.1	<i>Materialcharakterisierung</i>	24
4.1.2	<i>Übersicht über das verwendete SiGe-Material</i>	25
4.2	Radiotracer-Verfahren	28
4.2.1	<i>Diffusionsmessungen von ⁷¹Ge in SiGe</i>	29
4.2.2	<i>Messung der Diffusion kurzlebiger Radioisotope</i>	32
5	Meßergebnisse	35
5.1	Optimierung der Plasma-Ionenquelle	35
5.1.1	<i>Strahlneutralisation</i>	35
5.1.2	<i>Wahl der Beschleunigungsspannung</i>	35

5.1.3	<i>Laterale Abtragehomogenität</i>	35
5.1.4	<i>Zeitliche Konstanz der Abtragerate</i>	36
5.2	Diffusion von ^{71}Ge in SiGe	36
5.2.1	<i>Implantationsprofile</i>	36
5.2.2	<i>Zur Auswertung der Diffusionsprofile</i>	36
5.2.3	<i>Übersicht: Diffusionsdaten von ^{71}Ge in SiGe</i>	40
5.3	Diffusion von ^{31}Si in SiGe	41
5.4	Diffusion von ^{11}C in Ge	43
6	Diskussion	45
6.1	Zur Einstellung des Fehlstellengleichgewichts	45
6.2	Diffusion von ^{71}Ge und ^{31}Si in SiGe	48
6.2.1	<i>Wechsel des Diffusionsmechanismus bei $y \approx 0,35$</i>	48
6.2.2	<i>Wechsel des Diffusionsmechanismus mit der Temperatur</i>	52
6.2.3	<i>Vergleich zwischen ^{31}Si- und ^{71}Ge-Diffusion in SiGe</i>	53
6.3	Vergleich mit Literaturdaten zur Fremddiffusion	54
6.3.1	<i>Sb-Diffusion in SiGe</i>	54
6.3.2	<i>B-Diffusion in SiGe</i>	55
6.3.3	<i>P-Diffusion in SiGe</i>	57
6.3.4	<i>Au-Diffusion in SiGe</i>	57
6.3.5	<i>Ausblick</i>	58
6.4	Diffusion von ^{11}C in Ge	58
6.4.1	<i>C-, Si- und Ge-Diffusion in Ge im Vergleich</i>	58
6.4.2	<i>Diffusion von Gruppe-IV-Elementen in Ge im Vergleich</i>	59
7	Zusammenfassung	60
	Anhang	63
	Literaturverzeichnis	68
	Tabellen	75
	Abbildungen	88
	Abkürzungen und Symbole	198
	Danksagung	201
	Lebenslauf	203
	Summary	204

1 Einleitung

Silizium–Germanium-Legierungen haben in der jüngeren Vergangenheit eine Renaissance erlebt [Schä97]. Ursache dafür war u.a. die Erkenntnis in der Si-dominierten Mikroelektronik, daß das Bestreben nach einer Steigerung der Leistungsfähigkeit von Mikrochips durch immer weitere Miniaturisierung der elektronischen Schaltungen schon bald an seine physikalischen, durch die Quantenmechanik vorgegebenen Grenzen stoßen würde. Demgegenüber bieten SiGe-Legierungen den Vorteil, daß durch geeignete Wahl der Zusammensetzung und weiterer Parameter wie der Gitterverspannung ihre Bandstruktur gezielt eingestellt und damit auch die Elektronen- und Löcherbeweglichkeiten im Vergleich zu Si deutlich erhöht werden können. Dadurch erreichen Bauelement-Prototypen wie der SiGe-basierte Heterobipolartransistor (HBT) mittlerweile Rekordwerte mit Schaltfrequenzen weit über 100 GHz. Aus Kostengründen ist es besonders wichtig, daß sich die neuartigen SiGe-Bauelemente vergleichsweise leicht in die bestehende Si-Prozeßtechnik integrieren lassen.

Im Zusammenhang mit der Halbleitertechnik spielen Diffusionsprozesse v.a. bei der gezielten Dotierung als auch bei der Bauelement-Degradation durch unerwünschte Eindiffusion von Verunreinigungen eine wichtige Rolle. Vom wissenschaftlichen Standpunkt her erlauben Diffusionsmessungen die Aufklärung von Diffusionsmechanismen, die wiederum Rückschlüsse auf die im thermodynamischen Gleichgewicht dominierenden Eigenfehlstellen ermöglichen. Auch aus diesem Grund ist in den vergangenen drei Jahrzehnten wohl kaum ein Material besser untersucht worden als das Si. Dennoch sind gerade in bezug auf die Si-Selbstdiffusion einige Details noch nicht vollständig geklärt [FGMS84, FGP89, Fra91, BHC98]. Noch sehr viel mehr gilt dies für die Selbstdiffusion in SiGe. Ziel dieser Arbeit war es daher, einen Beitrag für das bessere Verständnis der Selbstdiffusion in SiGe zu leisten und insbesondere die Frage zu beantworten, wie es sich damit verhält, daß in Si sowohl Eigenzwischengitteratome als auch Leerstellen an der Selbstdiffusion beteiligt sind, in Ge aber nur Leerstellen, so daß folglich beim Übergang von Si zu Ge ein Aussterben des Eigenzwischengitteratombeitrags zur Selbstdiffusion zu beobachten sein sollte. Diffusionsmessungen in SiGe sind aber auch deshalb von Interesse, weil SiGe Mustersystem für Diffusionsstudien an ungeordneten Legierungen ist, da es keine Mischungslücke besitzt.

Trotz des ständig wachsenden Interesses an Diffusionsuntersuchungen in SiGe wird bisher in der Literatur nur über wenige Ergebnisse für die Selbst- und Fremdatom-Diffusion berichtet. Dies hat seine Ursache in erster Linie darin, daß bis vor wenigen Jahren die Herstellung von SiGe in für Diffusionsmessungen ausreichender Dicke und Qualität praktisch nicht möglich war. Dank neuer Herstellungsverfahren standen für diese Arbeit eine Vielzahl von SiGe-Schichten und SiGe-Volumenkristallen zur Verfügung, so daß

erstmalig die Selbstdiffusion in SiGe systematisch über den gesamten Zusammensetzungsbereich gemessen werden konnte. Als Grundlage dieser Diffusionsuntersuchungen diente ein modifiziertes Radiotracer-Verfahren, bei dem die radioaktiven Isotope ^{71}Ge und ^{31}Si in die SiGe-Proben implantiert wurden. Wegen der für Diffusionsexperimente sehr kurzen Halbwertszeit von ^{31}Si von 2,6 h wurde eine Vakuumkammer zur weltweit ersten mobilen Apparatur zur Messung der Diffusion kurzlebiger Radioisotope umgebaut und erfolgreich in Betrieb genommen. Damit eröffnen sich breite Einsatzmöglichkeiten in den weiten Feldern der Si-basierten Halbleitertechnik und der Si-basierten nichtoxidischen Keramiken. Auch das große Gebiet der organischen (kohlenstoffhaltigen) Materialien wird so für die Diffusion des kurzlebigen Kohlenstoff-Radioisotops ^{11}C mit einer Halbwertszeit von 20 min erschlossen.

Die Möglichkeit, Diffusivitäten von ^{11}C zu messen, wurde in dieser Arbeit durch ^{11}C -Diffusionsmessungen in reinem Ge erfolgreich demonstriert. Die Diffusion von C in Si, SiGe und Ge ist deshalb von technischem und wissenschaftlichen Interesse, weil durch Zulegierung einer geringen Menge C zu SiGe in den letzten Jahren SiGe:C-Schichten hergestellt werden konnten, deren elektronische und optische Eigenschaften denen von SiGe teilweise deutlich überlegen sind. Bisher wurde allerdings nur die C-Diffusion in reinem Si genauer untersucht und verstanden.

2 Silizium–Germanium-Legierungen

2.1 Herstellung

Laut Phasendiagramm besitzt SiGe keine Mischungslücke [SK39, OA84] (Abb. 1), d.h., die Komponenten Si und Ge sind im festen wie im flüssigen Zustand miteinander mischbar. Dennoch ist die Herstellung von SiGe, insbesondere von SiGe mit hohem Ge-Gehalt, aufgrund des starken Segregationsverhaltens von Ge äußerst schwierig. Bisher können *SiGe-Volumenkristalle* nur bis zu einem maximalen Ge- bzw. Si-Gehalt von ca. 15 At.-% annähernd defektfrei aus der Schmelze gezogen werden. Dagegen wurden in den vergangenen Jahren bei der Herstellung von *monokristallinen, epitaktischen SiGe-Schichten* beachtliche Fortschritte erzielt. Dabei bedeutet „epitaktisch“, daß die aufwachsende SiGe-Schicht die gleiche Kristallstruktur besitzt wie das Substrat. So können beispielsweise mit der Molekularstrahlepitaxie (*Molecular Beam Epitaxy*, MBE) bei relativ niedrigen Temperaturen (typischerweise 550 bis 850 °C) SiGe-Schichten mit beliebigem Ge-Gehalt auf Si-, SiGe- oder Ge-Substraten hergestellt werden, wobei die maximale Dicke dieser Schichten wegen der geringen Wachstumsraten (ca. 5 Å/s) nur wenige µm beträgt. Beim epitaktischen Abscheiden aus der Gasphase (*Chemical Vapour Deposition*, CVD) werden höhere Wachstumsraten erzielt. Aufgrund der i.a. höheren Wachstumstemperaturen von ca. 1100 °C weisen diese Schichten eine hohe thermische Stabilität auf; qualitativ hochwertige Schichten sind jedoch nur bis zu ca. 30 At.-% Ge herstellbar. Durch CVD-Verfahren im *Ultrahochvakuum* (UHV/CVD) können die Wachstumstemperaturen auf 400 °C abgesenkt und die Schichtqualität verbessert werden [Mey92]. Besonders dicke SiGe-Schichten mit beliebigem Ge-Gehalt können mit LEPECVD (*Low-Energy Plasma-Enhanced CVD*) [KRD02] produziert werden.

2.2 Versetzungen

Die Kristallstruktur von Si und SiGe sowie von Ge ist das Diamantgitter, wobei die Gitterkonstante von Ge (5,658 Å) größer ist als die von Si (5,431 Å). Dies entspricht einer maximalen Gitterfehlpassung zwischen Ge und Si von 4,2 %. Die Gitterkonstante von SiGe folgt im wesentlichen dem Gesetz von VEGARD [Veg21] und variiert linear zwischen den beiden Grenzwerten, wobei bei Ge-Gehalten zwischen 25 und 75 % leichte Abweichungen zu kleineren Gitterkonstanten gemessen wurden [DEP64] (Abb. 2). Die epitaktische Herstellung von SiGe-Schichten auf Si-, SiGe- oder Ge-Substraten ist daher je nach Ge-Gehalt mit unterschiedlich starken Verspannungen des SiGe-Gitters verbunden. Bis zu einer kritischen Schichtdicke d_{krit} [Mer62], welche im wesentlichen mit steigendem Ge-Gehalt

und mit steigender Wachstumstemperatur abfällt und auch vom gewählten Substrat abhängt, wird die SiGe-Schicht plastisch deformiert und paßt sich der Gitterkonstanten des Substrats an. Dadurch entstehen sog. pseudomorphe, verspannte Schichten [KHK75]. Gemäß der Matthews–Blakeslee-Theorie [MB74] liegen die kritischen Schichtdicken unter $1\ \mu\text{m}$. Allerdings sind die experimentell bestimmten kritischen Schichtdicken teilweise um bis zu einer Größenordnung höher (metastabiles Schichtwachstum) [BFF84, Schä97]. Ist die Schichtdicke $d > d_{\text{krit}}$, so werden die Gitterverspannungen aus energetischen Gründen durch Bildung von Versetzungen abgebaut und die dadurch relaxierte SiGe-Schicht nimmt die Gitterkonstante gemäß des Vegardschen Gesetzes an. Im Bereich der Grenzfläche zwischen Substrat und SiGe-Schicht entsteht in einer Ebene parallel zur Grenzfläche ein Netzwerk von sog. Gitterfehlpassungsversetzungen (misfit dislocations); außerdem bilden sich die ganze SiGe-Schicht durchdringende Durchstoßversetzungen (threading dislocations) aus [Fitz91]. Die Versetzungsdichte ρ_D solcher Durchstoßversetzungen liegt typischerweise zwischen 10^{10} und $10^{11}\ \text{cm}^{-2}$ [Lar00].

Deutlich bessere Schichtqualitäten können erzielt werden, wenn die SiGe-Schichten auf sog. SiGe-Gradientenpuffer aufgewachsen werden [Fitz92, LMM92, Schä92]. Dabei wird auf ein Si-Substrat zunächst eine SiGe-Schicht mit von 0 % aus ansteigendem Ge-Gehalt (typischerweise 10 bis 20 % Ge/ μm) abgeschieden, die dann als "virtuelles Substrat" für die aufzuwachsene relaxierte SiGe-Schicht dient. Solche relaxierten SiGe-Schichten sind in ihrer strukturellen, optischen und elektrischen Qualität nahezu mit perfekten Si-Einkristallen vergleichbar und können für beliebige Ge-Gehalte und in beliebigen Schichtdicken hergestellt werden. In der Literatur werden Dichten für die Durchstoßversetzungen zwischen 10^4 und $10^6\ \text{cm}^{-2}$ angegeben (z.B. [LMM92, Fitz92, STH92]). Grund für diese geringen Versetzungsdichten ist eine erhöhte Annihilationswahrscheinlichkeit der Durchstoßversetzungen in der SiGe-Pufferschicht. Das Netzwerk von Gitterfehlpassungsversetzungen bleibt auf die SiGe-Pufferschicht begrenzt. Die dadurch verursachten mechanischen Spannungsfelder haben eine ausgeprägte Schraffierung (Mosaik-Struktur, sog. cross-hatch pattern) auf der Oberfläche der relaxierten SiGe-Schichten zur Folge [LHJ94]. Eine Alternative zur Herstellung relaxierter SiGe-Schichten mit reduzierter Versetzungsdichte besteht darin, direkt auf ein Si-Substrat zunächst eine ca. 100 nm dünne SiGe-Schicht in der gewünschten Zusammensetzung, anschließend eine ca. 50 nm dünne Si-Schicht und schließlich die eigentliche SiGe-Schicht in beliebiger Dicke aufzuwachsen; dabei blockiert die dünne Si-Schicht die Ausbreitung von Durchstoßversetzungen in die relaxierte SiGe-Schicht [LCL00].

2.3 Atomistische Struktur

Wie bereits ausgeführt, folgt die Gitterkonstante von relaxiertem SiGe im wesentlichen dem Vegardschen Gesetz. Dabei ist die Gitterkonstante ein Maß für den Mittelwert über alle in der Legierung vorhandenen Bindungslängen von Si–Si, Si–Ge und Ge–Ge. Die Gitter-

konstante kann z.B. mittels Röntgen-Beugung gemessen werden, die Bindungslänge z.B. mittels EXAFS (*Extended X-ray Absorption Fine-Structure Spectroscopy*). Über die Details der atomistischen Struktur von relaxiertem SiGe existiert allerdings in der Literatur kein einheitliches Bild. Bezüglich der Gleichgewichtseinstellung von Bindungslängen und Bindungswinkeln konkurrieren zwei Modelle:

- (i) *Vegard-Modell*: In diesem Fall ist die Dehnung von Bindungen energetisch begünstigt. Alle Arten von Bindungslängen haben dieselbe Länge und variieren linear mit dem Ge-Gehalt [Veg21].
- (ii) *Bragg–Pauling-Modell*: In diesem Fall ist die Biegung von Bindungen energetisch bevorzugt. Die Atomradien bleiben unverändert, d.h., die verschiedenen Bindungen sind unterschiedlich lang, und die Bindungslängen verändern sich nicht mit dem Ge-Gehalt; dafür weichen die Bindungswinkel vom Tetraederwinkel ab [Brag20, Pau67].

Zusammenfassend kann aus experimentellen Untersuchungen [MT93, ANS94, ATH99, RYG99] und theoretischen Modellen [VDS01, YJD01] zur atomistischen Struktur von SiGe festgehalten werden, daß Bindungslängen und Bindungswinkel eher durch den unter (ii) vorgestellten Grenzfall beschrieben werden können: Die mittleren Bindungslängen von Si–Si, Si–Ge und Ge–Ge besitzen nur eine schwache Abhängigkeit vom Ge-Gehalt; diese Abhängigkeit ist nahezu linear und für die verschiedenen Bindungen unterschiedlich stark ausgeprägt: Während die Si–Si-Bindung praktisch kaum eine Abhängigkeit vom Ge-Gehalt besitzt, ist diese bei der Ge–Ge-Bindung deutlicher ausgeprägt. Die Bindungslänge von Si–Ge liegt sehr nahe am Mittelwert der Bindungslängen von Si–Si und Ge–Ge.

Der Bindungscharakter der kovalenten Si–Si-, Si–Ge- und Ge–Ge-Bindungen kann folgendermaßen beschrieben werden: Während die Si–Si-Bindungen kurz und damit hart sind, sind die Si–Ge-Bindungen etwas länger und damit weniger hart und Ge–Ge-Bindungen vergleichsweise lang und damit locker und weich. Dieser Bindungscharakter manifestiert sich beispielsweise darin, daß Schmelzpunkt, elastische Konstanten und Kohäsionsenergie von reinem Si um 20 bis 40 % größer sind als von reinem Ge.

Eindeutig fest steht, daß Si- und Ge-Atome keine Präferenz zur Ausbildung von Si–Si oder Ge–Ge-Paaren besitzen, sondern daß Si und Ge, wie bereits erwähnt, voll mischbar sind [YJD01]. Damit stellt das System SiGe ein ideales Modell für ungeordnete Legierungen dar. In ihm sind die Si- und Ge-Atome statistisch gemäß einer Binomialverteilung auf die Gitterplätze verteilt. Die Topologie wird in [PCS75] und [Kir73] beschrieben bzw. modelliert und ist in Abb. 3 dargestellt. In einer ungeordneten Legierung $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ ($y = \text{Ge-Gehalt}$), die keinerlei Tendenz zur Phasenseparation zeigt, sind die Si- und Ge-Atome in statistisch gebildeten, unregelmäßig geformten Clustern mit einem großen Oberfläche–Volumen-Verhältnis verteilt. Bei hohen Si- bzw. Ge-Konzentrationen sind die Atome der Minoritätsspezies ausschließlich in isolierten Monomeren und Dimeren zu finden, während bei mittleren Konzentrationen Si- und Ge-Cluster stark miteinander verwoben sind. In bezug auf das Perkulationsverhalten der ungeordneten Legierung $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ ergibt sich im Detail

folgendes Bild: Für Konzentrationen $0 \leq y \leq 0,35$ besteht die Legierung aus einem makroskopischen, (unendlich) ausgedehnten Si-Gebiet, in dem rein statistisch isolierte Ge-Monomere, Ge-Dimere oder auch kurze Ge-Ketten verteilt sind. Bei $y \approx 0,35$ bilden sich erste größere Ge-Cluster aus, so daß einzelne Si-Atome vollständig von Ge-Atomen umgeben und somit von den (unendlich) ausgedehnten Si-Clustern abgetrennt sind; die Zusammensetzung $y \approx 0,35$ stellt damit eine kritische Konzentration in SiGe-Legierungen dar. Von $y \approx 0,35$ bis $y \approx 0,43$ wachsen die Ge-Cluster weiter an, ohne daß sich jedoch durchgehende Ge-Pfade ausbilden. Schließlich treten bei der Diamantgitterperkolationsgrenze $y \approx 0,43$ [DDS64] schlagartig makroskopische, (unendlich) ausgedehnte Ge-Cluster auf, die das ganze Gitter durchdringen. Im Bereich $0,43 \lesssim y \lesssim 0,57$ koexistieren dann makroskopische, (unendlich) ausgedehnte Ge- und Si-Cluster, die eng miteinander verflochten sind. Für $0,57 \lesssim y \lesssim 0,65$ durchdringen die Si-Cluster die Legierung nicht mehr vollständig, und für $y \gtrsim 0,65$ sind lediglich isolierte Si-Monomere, Si-Dimere oder kurze Si-Ketten rein statistisch in einem makroskopischen, (unendlich) ausgedehnten Ge-Gebiet verteilt.

2.4 Anwendungsmöglichkeiten

2.4.1 SiGe-Schichten auf dem Weg zur Marktreife

Der Siegeszug von Bauelementen auf Si-Basis hatte seine Ursache in der Kombination eines vergleichsweise einfach verfügbaren Halbleiters (Si) mit dessen natürlichem Oxid (SiO_2), das zugleich als Passivierungs- und Isolationsschicht dient. Das System Si– SiO_2 befindet sich jedoch in bezug auf Schaltfrequenzen und optoelektronischen Eigenschaften längst an seiner Leistungsgrenze, die von III–V-Verbindungshalbleitern leicht durchbrochen werden kann. Diese Verbindungshalbleiter besitzen allerdings kein stabiles natürliches Oxid oder andere chemische Verbindungen mit Isolationscharakter, so daß sie für die industrielle Massenproduktion bisher nicht in Frage kommen. In diese Lücke stoßen nun Si–SiGe-Heterostrukturen, die mittlerweile ähnliche Leistungsmerkmale wie Heterostrukturen aus III–V-Verbindungshalbleitern besitzen und zudem ohne großen technischen Zusatzaufwand und damit auch ohne große Zusatzkosten in das bestehende ULSI-(Ultra Large Scale Integration) Si-Verfahren integriert werden können [Paul98].

Anfängliche Probleme mit der Dotierung und mit der gezielten Einstellung der durch die Gitterfehlpassung zwischen Si und Ge erzeugten Verspannungen in SiGe-Schichten sind inzwischen zum Großteil gelöst. Nach wie vor aber stellen mangelnde Kenntnisse über das Diffusionsverhalten der Dotieratome [WK93] und über die Bildung elektrisch aktiver Komplexe Einschränkungen für den zuverlässigen Betrieb der SiGe-Bauelemente dar. Trotzdem werden heute von den Elektronikkonzernen bereits zahlreiche innovative und profitable Produkte auf SiGe-Basis serienmäßig hergestellt und erfolgreich vermarktet [BSM02].

Die meisten Anwendungsmöglichkeiten von SiGe-Legierungen gehen darauf zurück, daß wichtige physikalische Eigenschaften, z.B. die Ladungsträgerbeweglichkeiten, von der (indirekten) Bandlücke abhängig sind. Diese kann durch gezielte Wahl der Zusammensetzung zwischen den Werten von reinem Si (1,11 eV) und reinem Ge (0,66 eV) in der gewünschten Weise eingestellt werden. Zusätzlich können durch entsprechende Wahl des Substrats (Si, Ge oder SiGe-Pufferschichten) bei der Herstellung von SiGe-Schichten unterschiedliche Gitterfehlpassungen so eingebaut werden, daß die Bandstruktur und die elektronischen Eigenschaften der Schicht auf die technischen Erfordernisse zugeschnitten werden können. Dadurch werden in SiGe-Bauelementen deutlich größere Ladungsträgerbeweglichkeiten erzielt als in herkömmlichen Bauelementen aus reinem Si. Dies findet u.a. Anwendung beim Heterobipolartransistor (HBT), dessen Basis aus einer pseudomorphen SiGe-Schicht besteht. Derartige HBTs erreichen Schaltfrequenzen deutlich über 100 GHz [KKH94, Kön94] und weisen sehr kleines Rauschen auf [JDW01]. Dagegen werden relaxierte SiGe-Puffer als virtuelle Substrate für MODFETs (*Modulation-Doped Field-Effect Transistors*) oder MOSFETs (*Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistors*) gebraucht [Paul99]. Letztere werden in der Regel als Gradientenpuffer gewachsen, um aufsteigende Durchstoßversetzungen in der aktiven Schicht möglichst zu unterdrücken, und besitzen gezielt ein ausgeprägtes Netzwerk von Gitterfehlpassungsversetzungen. Für optoelektronische Anwendungen, z.B. für Infrarot-Photodetektoren, die im Wellenbereich 1,3 bis 1,55 μm , entsprechend der indirekten Bandlücke von SiGe, empfindlich sind, spielen komplexe Übergitterstrukturen eine Rolle [Peop86]. Im Bereich der Photovoltaik kann durch Modifikation von Bandstruktur und Bandlücke eine höhere Quantenausbeute erreicht werden, was relaxierte SiGe-Schichten mit geringen Versetzungsdichten und großer effektiver Diffusionslänge der Minoritätsladungsträger für Anwendungen in der Solarzellentechnik interessant macht [SPC99]. Auch Wellenleiter und Lichtemitter auf SiGe-Basis sind heute Gegenstand intensiver Forschung [PKJ92].

2.4.2 SiGe:C – eine Legierung für die Zukunft?

Auch wenn SiGe-basierte HBTs mittlerweile den Sprung zur Marktreife erfolgreich absolviert haben, bleiben einige bedeutende Einschränkungen bestehen. So verhindert die Existenz der kritischen Schichtdicke das Wachsen von perfekten pseudomorphen Schichten in der erforderlichen Dicke, da gewährleistet sein muß, daß die SiGe-Schichtdicke immer kleiner bleibt als die kritische Schichtdicke, die aber bereits für einen Ge-Gehalt von 20 % in der SiGe-Schicht weniger als 20 nm beträgt. Dies ist für viele Anwendungen zu gering.

Diese Probleme werden möglicherweise schon bald durch die Verwendung von SiGe:C-Schichten überwunden. Durch Zulegierung von C können die Gitterspannungen in der SiGe-Schicht gezielt moduliert werden. Grund dafür ist der extreme Unterschied von 40 % zwischen den Längen der Bindungen Si–Si und C–C. Bereits die Zulegierung von 0,1 % C gewährleistet eine höhere thermische Stabilität der Schichten und eine deutlich größere kritische Schichtdicke. Obwohl die Löslichkeit von C in Si sehr klein ist [DN94], können

epitaktische SiGe:C-Schichten mit CVD und MBE mit mehr als 1% C-Gehalt bereits hergestellt werden. Dabei wirkt sich das Verhältnis von substitutionell und interstitiell gelöstem C, das von der Wachstumstemperatur abhängt, besonders kritisch für die elektrischen und optischen Eigenschaften der SiGe:C-Schichten aus. Defekte aus C-Zwischengitteratomen tragen dabei wesentlich zur Degradation der elektrischen und optischen Eigenschaften von SiGe:C-Schichten bei. Intensive Forschungsarbeiten wurden in den vergangenen Jahren an HBTs mit Si–SiGe:C–Si Heterostrukturen durchgeführt [JDW01], bei denen die Ausdiffusion von in die Basis-Schicht implantiertem B unterdrückt und gleichzeitig höhere Schaltfrequenzen erreicht werden können [RH00]. Erste SiGe:C-HBTs wurden bereits erfolgreich eingesetzt [OLK97]. Auch in der bipolaren CMOS-Technik verspricht man sich große Einsatzmöglichkeiten. Besonders vielversprechend sind zudem auch monolithisch mittels MBE auf Chips aufgebrachte thermoelektrische SiGe:C-Mikrokühler; damit ist die Herstellung von Chip und Kühler in einem einzigen integrierten Prozeß möglich [FZL01].

3 Grundlagen der Diffusion

3.1 Diffusionstheorie

3.1.1 Phänomenologische Beschreibung der Diffusion

Unter Diffusion versteht man den Materietransport in einem Medium über makroskopische Entfernungen, welcher durch statistische atomare Bewegungen auf mikroskopischer Skala hervorgerufen wird. Diffusionsströme sind stets so gerichtet, daß sie zu einem Ausgleich von Konzentrationsunterschieden führen. Dieser Sachverhalt wird quantitativ durch das 1. Ficksche Gesetz beschrieben:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = -D \operatorname{grad} C(\vec{r}, t) \quad (3.1)$$

(\vec{j} = Teilchenfluß, \vec{r} = Ortsvektor, t = Zeit, D = Diffusionskoeffizient [Tensor 2. Stufe], C = Konzentration der diffundierenden Teilchen). Ist die Teilchenzahl während der Diffusion eine Erhaltungsgröße, d.h., werden Teilchen weder erzeugt noch vernichtet, so gilt die Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial C(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\operatorname{div} \vec{j}(\vec{r}, t) \quad (3.2)$$

Durch Verknüpfung der Kontinuitätsgleichung mit dem 1. Fickschen Gesetz erhält man die Diffusionsgleichung in ihrer allgemeinen Form:

$$\frac{\partial C(\vec{r}, t)}{\partial t} = \operatorname{div} (D \operatorname{grad} C(\vec{r}, t)) \quad (3.3)$$

Für einen ortsunabhängigen Diffusionskoeffizienten kann dieser vor das Differentiationszeichen gezogen werden. Im folgenden wird neben dieser Einschränkung angenommen, daß das Medium isotrop ist. Dadurch wird der Diffusionskoeffizient zu einem Skalar, und die Diffusionsgleichung vereinfacht sich zum 2. Fickschen Gesetz, welches für die Koordinate x wie folgt lautet:

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} \quad (3.4)$$

Lösungen dieser partiellen linearen Differentialgleichung zweiter Ordnung für verschiedene Anfangs- und Randbedingungen findet man in [CJ47] und [Cra56].

Die in dieser Arbeit experimentell realisierten Fälle lassen sich durch gaußförmige Anfangsverteilungen der Teilchen um einen Schwerpunkt x_0 mit einer Streuung σ in einem Halbraum $x \geq 0$ modellieren:

$$C(x, t = 0) = C_0 \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (3.5)$$

(C_0 = Konzentration im Maximum). Als Randbedingung muß der Einfluß der Probenoberfläche bei $x = 0$ berücksichtigt werden. Die Probenoberfläche kann für die diffundierenden Teilchen sowohl als Reflexionsebene,

$$\left. \frac{\partial C(x, t)}{\partial x} \right|_{x=0} = 0 \quad , \quad (3.6)$$

als auch als Senke,

$$C(x = 0, t) = 0 \quad , \quad (3.7)$$

wirken. Für diese beiden Fälle erhält man die Lösungen

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2Dt}{\sigma^2}}} \left[\operatorname{erfc} \left(-\frac{\frac{x_0}{2\sigma^2} + \frac{x}{4Dt}}{\sqrt{\frac{1}{2\sigma^2} + \frac{1}{4Dt}}} \right) \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2 + 4Dt}\right) \right. \\ \left. \pm \operatorname{erfc} \left(-\frac{\frac{x_0}{2\sigma^2} - \frac{x}{4Dt}}{\sqrt{\frac{1}{2\sigma^2} + \frac{1}{4Dt}}} \right) \exp\left(-\frac{(x + x_0)^2}{2\sigma^2 + 4Dt}\right) \right] \quad , \quad (3.8)$$

wobei das Pluszeichen vor dem zweiten Term in der eckigen Klammer für den Fall einer vollständig reflektierenden Oberfläche gilt, das Minuszeichen für den Fall, daß die Oberfläche als perfekte Senke wirkt.

3.1.2 Atomistische Beschreibung der Diffusion

Diffusion in Festkörpern ist die Folge vieler atomarer Platzwechselfvorgänge, bei denen, unter isotherm–isobaren Bedingungen, die diffundierenden Teilchen lokale Barrieren der freien Enthalpie überwinden müssen. Diese Platzwechselfvorgänge sind thermisch aktiviert. In einfachen Fällen, in denen alle Barrieren gleich hoch sind, folgt die Temperaturabhängigkeit des Diffusionskoeffizienten einem *Arrhenius-Gesetz*,

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{H}{k_B T}\right) \quad , \quad (3.9)$$

wobei der präexponentielle Faktor als

$$D_0 = K a^2 \nu_0 \exp\left(\frac{S}{k_B}\right) \quad (3.10)$$

geschrieben werden kann. H bzw. S ist die Diffusionsenthalpie bzw. -entropie (k_B = Boltzmann-Konstante, T = Temperatur, a = Gitterkonstante, ν_0 = Anlauffrequenz gegen die Potentialbarriere). Die Größe K hängt von der Kristallstruktur und Details des Diffusionsmechanismus ab.

Im folgenden werden verschiedene Beispiele für thermisch aktivierte Diffusionsmechanismen in kristallinen Halbleitern vorgestellt. Da in dieser Arbeit ausschließlich die Diffusion von (radioaktiv) „markierten“ Atomen betrachtet wird, wird der oben eingeführte Ausdruck für den Diffusionskoeffizienten D auf diesen Fall, in dem der sog. Tracer-Diffusionskoeffizient D^T gemessen wird, spezialisiert.

3.2 Diffusionsmechanismen in Halbleitern

3.2.1 Direkte Diffusionsmechanismen

Bei direkten Diffusionsmechanismen sind keine atomaren Eigenfehlstellen als Diffusionsvehikel an der Diffusion beteiligt. Der einzige in kristallinen Festkörpern relevante direkte Diffusionsmechanismus ist der direkte Zwischengitteratommechanismus (interstitial mechanism). Bei diesem Mechanismus springt ein interstitiell gelöstes Fremdatom von Zwischengitterplatz zu Zwischengitterplatz. Dieser Mechanismus kommt z.B. bei der Diffusion von H, Li oder Ni in Si oder Ge vor.

3.2.2 Indirekte Diffusionsmechanismen

An den indirekten Diffusionsmechanismen sind atomare Eigenfehlstellen (z.B. Leerstellen, Eigenzwischengitteratome) als Diffusionsvehikel beteiligt. Wichtige Beispiele indirekter Diffusionsmechanismen sind der (indirekte) Leerstellenmechanismus und der indirekte Eigenzwischengitteratommechanismus (interstitialcy mechanism).

3.2.2.1 (Indirekter) Leerstellenmechanismus

Beim Leerstellenmechanismus (Abb. 4) diffundieren die Leerstellen thermisch aktiviert von einem Gitterplatz zum benachbarten Gitterplatz (unkorrelierte Diffusion). Wenn eine Leerstelle (V) auf ein substitutionelles Fremdatom (X_s) bzw. im Fall der Selbstdiffusion auf ein (radioaktiv „markiertes“) Eigenatom trifft, kann ein Platzwechsel zwischen diesem Atom und der Leerstelle erfolgen. Die Diffusion der Fremd- bzw. Eigenatome ist damit korreliert mit den Sprüngen der Leerstellen (korrelierte Diffusion). In Germanium diffundieren die Elemente der Gruppe IV und die Dotierelemente der Gruppen III und V, die „flache“ Energieniveaus in der Energielücke des Ge erzeugen (B, Al, Ga, P, As, Sb), über diesen

Leerstellenmechanismus. Ein weiteres Beispiel für den Leerstellenmechanismus ist die Selbstdiffusion in Ge.

3.2.2.2 Indirekter Eigenzwischengitteratommechanismus

Beim indirekten Eigenzwischengitteratommechanismus verdrängt ein Eigenzwischengitteratom (I) ein substitutionelles Fremdatom (X_s) bzw. im Fall der Selbstdiffusion ein (radioaktiv „markiertes“) Eigenatom ins Zwischengitter und nimmt selbst dessen substitutionellen Gitterplatz ein. Das Fremd- bzw. Eigenatom im Zwischengitter diffundiert allerdings nicht im Zwischengitter, sondern nimmt wieder einen benachbarten substitutionellen Gitterplatz ein, indem es ein benachbartes, reguläres Gitteratom ins Zwischengitter verdrängt (Abb. 5). Der indirekte Zwischengitteratommechanismus trägt zur Selbstdiffusion in Si bei und dominiert die Fremddiffusion von substitutionellen Dotierelementen der Gruppe III (z.B. von B oder Al) und von P in Si.

Für die Selbstdiffusion unter Beteiligung von Leerstellen (V) bzw. Eigenzwischengitteratomen (I) ergibt sich folgender Ausdruck für den Tracer-Diffusionskoeffizienten D^T :

$$D^T = D_0^T \exp\left(-\frac{H_v^M + H_v^F}{k_B T}\right), \quad (3.11)$$

wobei der präexponentielle Faktor in der Form

$$D_0^T = f_v g_v a^2 \nu_{0,v} \exp\left(\frac{S_v^M + S_v^F}{k_B}\right) \quad (3.12)$$

geschrieben werden kann (f_v = Korrelationsfaktor, g_v = Geometriefaktor). Die für die Diffusionsvehikel v (= V bzw. I) charakteristischen Aktivierungsparameter haben folgende Bedeutung: H_v^M = Wanderungsenthalpie, H_v^F = Bildungsenthalpie, S_v^M = Wanderungsentropie, S_v^F = Bildungsentropie. Im Diamantgitter ist im Falle des Leerstellenmechanismus $f_v = 1/2$ [CH56] und $g_v = 1/8$ und im Falle des Eigenzwischengitteratommechanismus bei Betrachtung von Eigenzwischengitteratomsprüngen von Tetraederplatz zu Tetraederplatz $f_I \approx 0,73$ [CH58] und $g_I = 1/4$.

3.2.3 Interstitiell–substitutionelle Austauschmechanismen

Bei der Diffusion von Übergangsmetallen in Halbleitern spielen neben dem direkten Zwischengitteratommechanismus noch die sog. interstitiell–substitutionellen Austauschmechanismen eine wichtige Rolle, und zwar bei Fremdatomen, sog. Hybriden, die sowohl auf interstitiellen als auch auf substitutionellen Gitterplätzen eingebaut werden können. Während die Löslichkeit dieser Hybride in vielen Fällen im Zwischengitter wesentlich kleiner ist als auf substitutionellen Plätzen ($C_i^{\text{eq}} \ll C_s^{\text{eq}}$), ist ihre Diffusivität im Zwischengitter (D_i) deutlich höher als ihre indirekte Diffusivität über substitutionelle Plätze ($D_s \approx 0$). Der Übergang interstitieller Fremdatome (X_i) in die substitutionelle Konfiguration

(X_s), und umgekehrt, geschieht in einer Austauschreaktion unter Beteiligung atomarer Eigenfehlstellen. Beim sog. Verdrängungsmechanismus [GFS80] (kick-out mechanism) sind es die Eigenzwischengitteratome (I), beim sog. dissoziativen Mechanismus [FT56] (auch Frank–Turnbull-Mechanismus genannt) die Leerstellen (V), durch die diese Platzwechsel bewerkstelligt werden. Die beiden Mechanismen sind schematisch in den Abbn. 6 und 7 dargestellt. Die Differentialgleichungen zur theoretischen Beschreibung der Austauschmechanismen sind in der Literatur mehrfach erwähnt [GFS80, FGMS84]; im folgenden werden nur einige wichtige Ergebnisse vorgestellt.

Für den Verdrängungsmechanismus lautet die interstitiell–substitutionelle Austauschreaktion



und für den dissoziativen Mechanismus



In Proben, die innere Senken oder Quellen für atomare Eigenfehlstellen besitzen (z.B. versetzungsreiche Proben), können die Löslichkeiten C_v^{eq} der Eigenzwischengitteratome ($v = I$) oder Leerstellen ($v = V$) sehr schnell in der gesamten Probe eingestellt werden. In diesem Fall ist der effektive Diffusionskoeffizient $D_{s,\text{eff}}$ der substitutionellen Hybrid-Komponente durch die interstitielle Diffusion von (X_i) kontrolliert:

$$D_{s,\text{eff}} = D_i^* \equiv \frac{C_i^{\text{eq}} D_i}{C_s^{\text{eq}}} \quad , \quad (3.15)$$

unabhängig davon, welcher der beiden interstitiell–substitutionellen Austauschmechanismen die Diffusion dominiert. Fehlen jedoch innere Senken und Quellen (z.B. versetzungsfreie Proben), so unterscheiden sich die Ausdrücke für $D_{s,\text{eff}}$ für die beiden interstitiell–substitutionellen Austauschmechanismen. Im Falle des Verdrängungsmechanismus wird $D_{s,\text{eff}}$ durch den Fluß $C_1^{\text{eq}} D_1$ der durch die Austauschreaktion (3.13) produzierten Eigenzwischengitteratome zur Oberfläche kontrolliert:

$$D_{s,\text{eff}} = \left[\frac{C_s^{\text{eq}}}{C_s^2(x,t)} \right]^2 D_1^* \quad (3.16)$$

mit

$$D_1^* \equiv \frac{C_1^{\text{eq}} D_1}{C_s^{\text{eq}}} \quad (3.17)$$

(C_s = lokale, momentane Konzentration substitutioneller Fremdatome, D_1 = Diffusionskoeffizient der Eigenzwischengitteratome). Im Falle des dissoziativen Mechanismus wird $D_{s,\text{eff}}$ durch den Fluß $C_v^{\text{eq}} D_v$ der Leerstellen von der Probenoberfläche ins Probeninnere, wo diese bei der Austauschreaktion (3.14) verbraucht werden, kontrolliert:

$$D_{s,\text{eff}} = D_V^* \equiv \frac{D_V C_V^{\text{eq}}}{C_s^{\text{eq}}} \quad (3.18)$$

(D_V = Diffusionskoeffizient der Leerstellen). Aus den Gleichungen (3.16) und (3.17) bzw. (3.18) wird deutlich, daß im Falle des I-kontrollierten Verdrängungsmechanismus bzw. des V-kontrollierten dissoziativen Mechanismus bei bekannter Löslichkeit C_s^{eq} der Eigen-zwischengitteratomfluß bzw. der Leerstellenfluß berechnet werden kann (vgl. Abschn.3.3.2)

Als Beispiele für die Diffusion über den Verdrängungsmechanismus seien die Diffusion von Au [SSH83], Pt [HFS89, LSM95] und Zn [SPM88, PSC89, BSM95, GBS00] in Si sowie von Au in SiGe [FFL99] genannt. In Ge diffundieren Cu, Ag [ABM91] und Au [SMF01] über den dissoziativen Mechanismus.

3.3 Selbstdiffusion in Si

3.3.1 Historie

Der Selbstdiffusionsmechanismus in Si ist auch nach über 30 Jahren Forschung im Detail noch nicht vollständig verstanden [SC68, FGMS84, FGP89, Fra91, BHC98]. Historisch ergaben sich zunächst experimentelle Schwierigkeiten bei der Durchführung von Radiotracer-Selbstdiffusionsexperimenten, da das einzig verfügbare Radioisotop ^{31}Si nur eine Halbwertszeit von 2,6 h besitzt, wodurch aufgrund der daraus resultierenden kurzen Experimentierzeiten die Diffusionsexperimente auf Temperaturen nahe des Schmelzpunktes von Silizium beschränkt waren. Die Entwicklung des Ionenstrahlzerstäubungsverfahrens (Sputtern) und die Verwendung des stabilen Isotops ^{30}Si in Verbindung mit SIMS (Sekundärionenmassenspektroskopie) lieferten zwar Si-Selbstdiffusionsdaten über einen größeren Temperaturbereich, aber die Diffusionsdaten von verschiedenen Autoren in intrinsischem Si (Abb. 8 und Tabelle 1) zeigen dennoch Abweichungen von mehreren 100 %, was die bis heute vorhandenen Schwierigkeiten bei Si-Selbstdiffusionsmessungen und deren Interpretation verdeutlicht. Wie aus Tabelle 1 ersichtlich, schwanken die Ergebnisse für H zwischen 3,92 eV und 5,33 eV und die Ergebnisse für D_0^T zwischen $5,8 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ und $1,03 \cdot 10^{+1} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$.

Bereits 1957 wurden von PETROV et al. [PSA57] Ge-Diffusionsexperimente in Si durchgeführt, um damit die Si-Selbstdiffusion zu simulieren. Diese Idee war dadurch motiviert, daß Si und Ge isoelektrisch sind und sich ihr kovalenter Bindungsradius in Si kaum unterscheidet. Außerdem ermöglichte das Isotop ^{71}Ge mit einer Halbwertszeit von 11,2 d die Ausdehnung der Diffusionsmessungen zu tieferen Temperaturen. Zahlreiche Ge-Diffusionsexperimente in intrinsischem Si lieferten Diffusionsdaten, die im Rahmen der Meßgenauigkeit gut mit den Si-Diffusionsdaten übereinstimmen (Abb. 8 und Tabelle 1). Allerdings zeigen auch die Ge-Diffusionsdaten eine Streuung von mehreren 100 %.

3.3.2 Neuere Experimente und heutiges Bild

In Silizium sind im thermodynamischen Gleichgewicht sowohl Leerstellen (V) als auch Eigenzwischengitteratome (I) vorhanden, die beide als Diffusionsvehikel einen Beitrag zur Selbstdiffusion leisten (vgl. z.B. [TG85]). Dies wurde durch Oberflächenoxidationsexperimente (Injektion von Eigenzwischengitteratomen) und -nitridierungsexperimente (Injektion von Leerstellen) eindeutig gezeigt [FGSM84, FIS89, FIS90]; in beiden Fällen wird eine Erhöhung des Tracer-Selbstdiffusionskoeffizienten gemessen. Bei der Interpretation der Selbstdiffusionsdaten in Si wurde von SEEGER und CHIK [SC68] schon früh vorgeschlagen, daß die Selbstdiffusion im Hochtemperaturbereich ($T \gtrsim 1000$ °C) vom indirekten Eigenzwischengitteratommechanismus dominiert wird, während im Tieftemperaturbereich ($T \lesssim 1000$ °C) der Leerstellenmechanismus dominiert. Mit diesem Modell ließen sich auch die Ergebnisse weiterer Diffusionsexperimente (z.B. Fremdatom-Diffusion in Si, Selbstdiffusion unter Druck, Dotierabhängigkeit der Selbstdiffusion, Diffusionsexperimente unter Oberflächenoxidation in Si, vgl. [FGSM84, FGP89]) interpretieren. In allen einschlägigen Übersichtsartikeln [FGMS84, FGP89, Fra91, BHC98] wird ebenfalls von einem Wechsel des Diffusionsmechanismus beim Übergang vom Hochtemperaturbereich zum Tieftemperaturbereich ausgegangen.

Aufgrund der Koexistenz von Eigenzwischengitteratomen und Leerstellen im thermodynamischen Gleichgewicht läßt sich der Tracer-Selbstdiffusionskoeffizient D^T von Si als die Summe aus einem Eigenzwischengitteratombeitrag $D_I^T = f_I C_I^{\text{eq}} D_I$ und einem Leerstellenbeitrag $D_V^T = f_V C_V^{\text{eq}} D_V$ zur Selbstdiffusion schreiben:

$$D^T = f_I C_I^{\text{eq}} D_I + f_V C_V^{\text{eq}} D_V \quad (3.19)$$

mit

$$C_v^{\text{eq}} = \exp\left(\frac{S_v^{\text{F}}}{k_B}\right) \exp\left(-\frac{H_v^{\text{F}}}{k_B T}\right) \quad (3.20)$$

und

$$D_v = g_v a^2 \nu_{v,0} \exp\left(\frac{S_v^{\text{M}}}{k_B}\right) \exp\left(-\frac{H_v^{\text{M}}}{k_B T}\right) \quad (3.21)$$

($v = \text{I oder V}$, $\nu_{v,0} \approx$ Debye-Frequenz $\approx 10^{13} \text{ s}^{-1}$). Mit (3.20) und (3.21) kann (3.19) geschrieben werden als

$$D^T = \sum_{v=\text{I,V}} D_{v,0}^T \exp\left(-\frac{H_v}{k_B T}\right) \quad (3.22)$$

mit den präexponentiellen Faktoren

$$D_{v,0}^T = f_v g_v a^2 \nu_{v,0} \exp\left(\frac{S_v}{k_B}\right) \quad , \quad (3.23)$$

der Selbstdiffusionsenthalpie

$$H_v = H_v^F + H_v^M \quad (3.24)$$

und der Selbstdiffusionsentropie

$$S_v = S_v^F + S_v^M \quad . \quad (3.25)$$

Der von SEEGER und CHIK [SC68] vorgeschlagene Wechsel des Diffusionsmechanismus in Si bei ca. 1000 °C sollte sich gemäß Gleichung (3.19) in einer Krümmung des Verlaufs von D^T in der Arrhenius-Darstellung bemerkbar machen, da i.a. davon auszugehen ist, daß sich die Arrhenius-Parameter H_v und $D_{v,0}^T$ von D_v^T und die Arrhenius-Parameter H_I und $D_{I,0}^T$ von D_I^T unterscheiden. Ein Blick auf die Vielzahl der experimentellen Daten (Abb. 8 und Tabelle 1) zeigt allerdings, daß fast allen Si- und Ge-Diffusionsdaten in intrinsischem Si gemeinsam ist, daß die gemessenen Daten für D^T durch eine einzige, *effektive* Arrhenius-Gerade der Form

$$D^T = D_0^T \exp\left(-\frac{H}{k_B T}\right) \quad (3.26)$$

angepaßt werden können, wie man es erwarten würde, wenn die Selbstdiffusion nur über eine Sorte von Defekten ablief. Lediglich Ge-Diffusionsdaten in intrinsischem Si von HETTICH et al. [HMM79] zeigten eine starke Krümmung in der Arrhenius-Auftragung der Tracer-Selbstdiffusionskoeffizienten im Temperaturbereich 1000–1030 °C. Die von Hettich beobachtete Krümmung von D^T in intrinsischem Si konnte jedoch nie reproduziert werden; nur BOUCHETOUT et al. [BTM86] messen in B-dotiertem Si bei einer Temperatur (1000 °C) höhere Diffusionskoeffizienten als die Anpassung und Extrapolation ihrer bei Temperaturen oberhalb 1050 °C erhaltenen Diffusionskoeffizienten erwarten lassen würde. Allerdings fällt auch auf (Abb. 8 und Tabelle 1), daß bei höheren Temperaturen (≥ 1000 °C) gemessene Si- und Ge-Diffusionskoeffizienten in Si tendentiell durch größere Werte für H und D_0^T beschrieben werden als bei tieferen Temperaturen (≤ 1000 °C) gemessene Si- und Ge-Diffusionskoeffizienten, was wiederum für eine Krümmung in der Arrhenius-Auftragung von D^T sprechen könnte, die aber möglicherweise so schwach ausgeprägt ist, daß sie nur sichtbar wird, wenn Selbstdiffusionsdaten in intrinsischem Si über einen möglichst großen Temperaturbereich hinweg aufgetragen werden.

Im vergangenen Jahrzehnt eröffnete die Möglichkeit der Herstellung isotonenreiner Si-Heterostrukturen die Chance, in Verbindung mit der Sekundärionenmassenspektroskopie die Si-Selbstdiffusion über einen weiten, die erwartete Übergangstemperatur von ca. 1000 °C deutlich überstreichenden Temperaturbereich zu messen. Derartige Diffusionsexperimente wurden in jüngster Zeit von BRACHT et al. [BHC98] im

Temperaturbereich zwischen 855 und 1388 °C durchgeführt. Die Autoren können ihre Diffusionsdaten durch eine einzige, effektive Arrhenius-Gerade gemäß (3.26) beschreiben:

$$D^T = 5,3 \cdot 10^{-2} \exp\left(-\frac{4,75 \text{ eV}}{k_B T}\right) \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \quad . \quad (3.27)$$

Eine sichtbare Krümmung in der Arrhenius-Darstellung ist demnach nicht zu erkennen. Die Daten von BRACHT et al. konnten von URAL et al. [UGP99], die Si-Selbstdiffusionsdaten ebenfalls an isotoopenreinen Si-Heterostrukturen bestimmten, hervorragend bestätigt werden. URAL et al. erhielten in ihren Si-Selbstdiffusionsmessungen

$$D^T = 5,6 \cdot 10^{-2} \exp\left(-\frac{4,76 \text{ eV}}{k_B T}\right) \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \quad . \quad (3.28)$$

Die Tatsache, daß die Autoren BRACHT et al. und URAL et al. ihre Selbstdiffusionsdaten durch jeweils nur einen einzigen Wert für H bzw. D_0^T beschreiben können, läßt aber keinesfalls den zwingenden Schluß zu, daß es keinen Wechsel des Diffusionsmechanismus gibt bzw. daß nur eine Eigenfehlstellenspezies (I oder V) die Selbstdiffusion im gesamten untersuchten Temperaturbereich dominiert. Vielmehr scheint die Krümmung in der Arrhenius-Darstellung von D^T zufällig so schwach ausgeprägt zu sein, daß sie in der logarithmischen Auftragung nicht identifiziert werden kann, was letztlich bedeutet, daß sich Eigenzwischengitteratom- und Leerstellenbeitrag zur Selbstdiffusion im gemessenen Temperaturbereich nicht deutlich unterscheiden. Dafür sprechen auch folgende Ergebnisse: Da die Übergangsmetalle Au und Pt in versetzungsfreiem Si über einen eigenzwischengitteratomkontrollierten Verdrängungsmechanismus diffundieren (Abschn. 3.2.2), kann gemäß der Gleichungen (3.16) und (3.17) der Eigenzwischengitteratombeitrag zur Selbstdiffusion berechnet werden. Dies wurde erstmals von STOLWIJK et al. [SSH83, SSH84] durchgeführt; sie erhielten für den Eigenzwischengitteratomfluß $C_I^{\text{eq}} D_I$ in Si

$$C_I^{\text{eq}} D_I = 6,0 \cdot 10^{-2} \exp\left(-\frac{4,80 \text{ eV}}{k_B T}\right) \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \quad . \quad (3.29)$$

Mit Hilfe von Leerstellendaten aus [WLF64] und [MSM83] schätzten TAN und GÖSELE [TG85] den Leerstellenfluß $C_V^{\text{eq}} D_V$ in Si ab:

$$C_V^{\text{eq}} D_V \approx 6 \cdot 10^{-5} \exp\left(-\frac{4,03 \text{ eV}}{k_B T}\right) \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \quad . \quad (3.30)$$

Dieses Ergebnis konnte von BRACHT et al. [BSM95, BHC98] und GIESE et al. [GBS00] durch Diffusionsmessungen von Zn, das in Si sowohl über einen Verdrängungsmechanismus als auch über einen dissoziativen Mechanismus diffundiert, bestätigt werden. Aus Zn-Eindiffusionsdaten in Si [BSM95] wurde

$$C_1^{\text{eq}} D_1 = 3,0 \cdot 10^{-1} \exp\left(-\frac{4,95 \text{ eV}}{k_B T}\right) \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \quad (3.31)$$

und aus Zn-Ausdiffusionsdaten in Si [GBS00]

$$C_V^{\text{eq}} D_V = 2,1 \cdot 10^{-4} \exp\left(-\frac{4,24 \text{ eV}}{k_B T}\right) \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \quad (3.32)$$

bestimmt. Unter Berücksichtigung der Korrelationsfaktoren ergibt sich aus (3.31) und (3.32) bei Bildung der Summe $f_1 C_1^{\text{eq}} D_1 + f_V C_V^{\text{eq}} D_V$ exakt wieder der tatsächlich gemessene Tracer-Selbstdiffusionskoeffizient aus (3.27). Auch Ergebnisse von Molekulardynamiksimulationen von TANG et al. [TCZ97], die für $H_1 = 5,13 \text{ eV}$ und für $H_V = 4,07 \text{ eV}$ finden, sowie von JÄÄSKELÄINEN et al. [JCN01], die ebenfalls aus Molekulardynamiksimulationen

$$C_1^{\text{eq}} D_1 = 1,16 \exp\left(-\frac{5,17 \text{ eV}}{k_B T}\right) \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \quad (3.33)$$

und

$$C_V^{\text{eq}} D_V = 7,8 \cdot 10^{-5} \exp\left(-\frac{4,07 \text{ eV}}{k_B T}\right) \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \quad (3.34)$$

erhalten, unterstützen die genannten Überlegungen. Abb. 9 zeigt in einer Übersicht die berechneten Beiträge $f_V C_V^{\text{eq}} D_V$ und $f_1 C_1^{\text{eq}} D_1$ zur Selbstdiffusion für einige der o.g. Autoren.

Für die Leerstellenbildungsenthalpie H_V^{F} in Si werden in der Literatur experimentell bestimmte Werte zwischen 3,6 eV und 4,0 eV [FKS01] angegeben, die Leerstellenwanderungsenthalpie wurde zu weniger als 0,45 eV [WTC79] abgeschätzt; die Summe beider Werte ist in guter Übereinstimmung mit den Werten in Gleichungen (3.30), (3.32), und (3.34).

Es fällt auf, daß der präexponentielle Faktor $D_{1,0}^{\text{T}}$ in Si (Gleichungen (3.29), (3.31) und (3.33)) um ca. vier Größenordnungen größer ist als die Werte für D_0^{T} in kristallinen Metallen ($10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \lesssim D_0^{\text{T}}(\text{Metall}) \lesssim 10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$), in denen die Selbstdiffusion über einen Leerstellenmechanismus abläuft, wobei die Leerstellen richtige atomare Fehlstellen mit einer Ausdehnung von ca. einem Atomvolumen sind ($S_V \approx 1$ bis $2 k_B$). Mangels einer besseren Erklärung des außergewöhnlich hohen $D_{1,0}^{\text{T}}$ -Wertes für die Si-Selbstdiffusion geht man davon aus, daß die Eigenzwischengitteratome über ca. 10 Atomvolumina ausgeschmiert sind, was zu einer größeren Selbstdiffusionsentropie ($S_1 \approx 10 k_B$) und damit wegen (3.23) zu einem größeren präexponentiellen Faktor $D_{1,0}^{\text{T}}$ führt [SC68]. Demgegenüber ist die Größenordnung des präexponentiellen Faktors $D_{V,0}^{\text{T}}$ in Si vergleichbar mit den präexponentiellen Faktoren bei der Selbstdiffusion in Metallen. Es handelt sich folglich bei den Leerstellen in Si um Punktdefekte, d.h., die Leerstellen sind nicht über mehrere Atomvolumina ausgeschmiert.

Zusammenfassend kann nach obigen Ausführungen folgendes festgehalten werden: Oberhalb einer Übergangstemperatur, die gemäß (3.29) und (3.30) bzw. (3.31) und (3.32) zwischen 805 °C und 960 °C liegt, dominiert ein indirekter Eigenzwischengitteratommechanismus die Selbstdiffusion in Si, während sie unterhalb dieser Temperatur von einem Leerstellenmechanismus dominiert wird. Dieses Bild wurde von FAHEY et al. untermauert, die aus Diffusionsexperimenten in oxidierender Atmosphäre zeigen konnten, daß der Eigenzwischengitteratombeitrag zur Selbstdiffusion bei 1050 °C [FIS89] und 950 °C [FIS90] bei 35±5 % liegt, so daß bei diesen relativ tiefen Temperaturen die Leerstellen dominieren. Dieses Bild wird ferner durch ein weiteres Resultat aus Oxidationsexperimenten von COWERN et al. [CKD96] gestützt, die bei 875 °C einen Leerstellenbeitrag von ca. 78±4 % bestimmten.

Im Widerspruch zu diesem Gesamtbild der Selbstdiffusion in Si stehen allerdings vergleichende Messungen der Selbst- und der B- und P-Diffusion in oxidierender Atmosphäre von URAL et al. [UGP99]; diese Autoren erhielten

$$C_V^{\text{eq}} D_V = 6,36 \cdot 10^{-2} \exp\left(-\frac{4,86 \text{ eV}}{k_B T}\right) \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \quad (3.35)$$

und

$$C_I^{\text{eq}} D_I = 1,49 \cdot 10^{-2} \exp\left(-\frac{4,68 \text{ eV}}{k_B T}\right) \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \quad (3.36)$$

Da Aktivierungsenthalpien und Vorfaktoren in (3.35) und (3.36) sich kaum unterscheiden, würde dies bedeuten, daß Leerstellen- und Eigenzwischengitteratombeitrag zur Selbstdiffusion über einen weiten Temperaturbereich hinweg annähernd gleich groß sind, wobei der Eigenzwischengitteratombeitrag für alle Temperaturen überwiegen würde, für niedrigere Temperaturen sogar mehr als für höhere. Außerdem würde der große Vorfaktor des Leerstellenbeitrags im Gegensatz zur bisherigen Diskussion nahelegen, daß die Leerstelle in Si ausgeschmiert wäre, sogar mehr als das Eigenzwischengitteratom. Kritisch ist bei der Vorgehensweise von URAL et al. anzumerken, daß nicht wie von BRACHT et al. [BSM95, BHC98] und GIESE et al. [GBS00] Eigenzwischengitteratom- und Leerstellenbeitrag unabhängig voneinander bestimmt wurden, sondern beide Beiträge unter der Randbedingung, daß sie addiert exakt wieder den tatsächlich gemessenen Tracer-Selbstdiffusionskoeffizienten aus (3.28) ergeben, ermittelt wurden.

Insgesamt verdeutlichen die Ausführungen in diesem Abschnitt die Schwierigkeiten, die Vielzahl experimenteller und auch theoretischer Ergebnisse in einem schlüssigen Gesamtbild zu interpretieren. Vereinfachend können diese aber wie folgt zusammengefaßt werden: Für Temperaturen $T \geq 900$ °C (und damit für den Temperaturbereich, in dem die große Mehrheit der Selbstdiffusionsexperimente durchgeführt wurde) dominiert der

indirekte Eigenzwischengitteratommechanismus die Selbstdiffusion in intrinsischem Si, während für Temperaturen $T \lesssim 900$ °C der Leerstellenbeitrag dominiert. Dieses Bild wird letztlich auch durch die Ergebnisse dieser Arbeit und deren Interpretation (Abschn. 6.2) bestätigt.

3.4 Selbstdiffusion in Ge

Für die Selbstdiffusion in Ge ergibt sich im bisher untersuchten Temperaturbereich 535 °C $\leq T \leq 928$ °C ein vergleichsweise einheitliches und einfaches Bild. Die in der Literatur veröffentlichten Selbstdiffusionsdaten sind in Abb. 10 eingezeichnet und in Tabelle 2 aufgelistet. Die von den verschiedenen Autoren angegebenen Werte für die effektiven Arrhenius-Parameter H bzw. D_0^T schwanken zwischen $2,95$ eV und $3,14$ eV bzw. zwischen $7,8 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ und $8,1 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$. Schon 1968 interpretierten Seeger und Chik [SC68] diese Daten im Rahmen eines Leerstellenmechanismus, d.h. $H \equiv H_V$ und $D_0^T \equiv D_{V,0}^T$. Messungen der Dotier- [HMM79] und Druckabhängigkeit [WMH85] der Selbstdiffusion sowie der dissoziativen Cu-Diffusion [SFH85] bestätigten diese Interpretation. Der im Vergleich zur Leerstellendiffusion in Metallen um einen Faktor von ca. 100 größere Wert für D_0^T bei der Selbstdiffusion in Germanium kann durch eine große Selbstdiffusionsentropie ($S_V^{SD} \approx 7 k_B$) der Leerstelle erklärt werden; dies wurde von Seeger und Chik auf eine Verschmierung der Leerstelle über ca. 5 Atomvolumina zurückgeführt.

Bisher wurden in Ge im thermodynamischen Gleichgewicht keine Eigenzwischengitteratome beobachtet. Ihr Nachweis wäre zudem schwierig, weil beispielsweise keine Oxidations- und Nitridierungsexperimente wie im Falle des Si durchgeführt werden können, da es keine stabilen Oxide bzw. Nitride des Ge gibt. Dennoch kann die Existenz von Eigenzwischengitteratomen in Ge nicht von vorn herein ausgeschlossen werden [Fra91]. Beispielsweise diskutieren MITHA et al. [MAS96, MAS97] im Zusammenhang mit Messungen der As-Diffusion in Ge bei 575 °C unter hydrostatischem Druck die Möglichkeit der Beteiligung von Eigenzwischengitteratomen als Diffusionsvehikel (Abschn. 6.2.2.2).

3.5 Selbstdiffusion in SiGe

Da zur Selbstdiffusion in Si sowohl Eigenzwischengitteratome als auch Leerstellen beitragen, die Selbstdiffusion in Ge jedoch im gesamten untersuchten Temperaturbereich nur über Leerstellen abläuft, läßt sich für die Selbstdiffusion in SiGe folgendes Szenario erwarten:

- (i) Beim Übergang von Si nach Ge sollte in SiGe-Legierungen mit steigendem Ge-Gehalt der indirekte Eigenzwischengitteratommechanismus aussterben.
- (ii) Es besteht die Hoffnung, daß die in Abschn. 3.3 beschriebene, praktisch nicht sichtbare Krümmung in der Arrhenius-Darstellung des Tracer-Selbstdiffusions-

koeffizienten D^T für die Selbstdiffusion in SiGe deutlicher ausgeprägt ist. Die Hoffnung ist deshalb begründet, weil durch die zu erwartende Abnahme der Selbstdiffusionsenthalpie H_V des Leerstellenbeitrags beim Übergang von reinem Si ($H_V \approx 4,2$ eV) zu reinem Ge ($H_V \approx 3,0$ eV) die Arrhenius-Geraden des Leerstellenbeitrags mit steigendem Ge-Gehalt flacher würden. Allerdings kann über den Verlauf des Eigenzwischengitteratombeitrags an dieser Stelle keine Aussage gemacht werden.

Bisher durchgeführte aber noch ausführlich und kritisch zu diskutierende Selbstdiffusionsmessungen in SiGe (Abschn. 5.2.3) von MCVAY und DUCHARME [MD74, MD75] und von ZANGENBERG et al. [ZHF01] scheinen die Aussage (i) zu bestätigen; allerdings zeigen die bei diesen Messungen bestimmten Diffusionskoeffizienten bei gegebener Zusammensetzung keine Abweichung vom einem einfachen Arrhenius-Gesetz, wie es gemäß (ii) erwartet werden könnte.

Ziel dieser Arbeit ist es daher, die unter (i) und (ii) aufgestellten Thesen durch systematische Selbstdiffusionsmessungen mit den Radiotracer-Isotopen ^{71}Ge und ^{31}Si in SiGe-Legierungen im gesamten Zusammensetzungsbereich an qualitativ hochwertigem Material zu überprüfen, um daraus eventuell Rückschlüsse auf die Eigenzwischengitteratom- bzw. Leerstellenbeiträge zur Selbstdiffusion in SiGe ziehen zu können.

3.6 C-Diffusion in SiGe

Wie in Abschn. 2.4.2 dargelegt, können die elastischen und elektronischen Eigenschaften von SiGe-Schichten durch die Zulegierung von geringen Mengen C deutlich verändert werden, wobei ein besonders kritischer Parameter das Verhältnis von interstitiell zu substitutionell gelöstem C ist. Es ist außerdem bekannt, daß substitutioneller C aufgrund der in Si etwas höheren Löslichkeit als in Ge bevorzugt in Si-reichen Gebieten der SiGe-Legierung eingebaut wird.

Da SiGe:C erst seit wenigen Jahren erforscht wird, sind Literaturdaten zur Diffusion nur in sehr begrenztem Umfang vorhanden. Um allerdings zu einem Verständnis der (Selbst-) Diffusion in SiGe:C gelangen zu können, muß zuvor das Diffusionsverhalten von C in Si, SiGe und Ge geklärt werden. In Si diffundiert C über den Verdrängungsmechanismus [KLG84, RSM89, WGJ98], was die Existenz sowohl einer interstitiellen als auch einer substitutionellen C-Komponente voraussetzt. Jüngste Untersuchungen von C-Komplexen in SiGe mit einem Ge-Gehalt $\leq 50\%$ [NBR01] legen nahe, daß bei diesen Zusammensetzungen C ebenfalls sowohl interstitiell als auch substitutionell vorliegt. Das Vorhandensein von interstitiellem wie auch substitutionellem C auch in reinem Ge würde für die C-Diffusion in Ge eventuell einen dissoziativen Mechanismus erwarten lassen. Um dies zu prüfen, wurden in dieser Arbeit auch C-Diffusionsmessungen in Ge durchgeführt.

4 Diffusionsexperimente

4.1 Ausgangsmaterial

Für die in dieser Arbeit durchgeführten Diffusionsuntersuchungen wurden relaxierte, monokristalline, epitaktisch aus der Gasphase abgeschiedene, intrinsische $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ -Schichten sowie monokristalline, intrinsische $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ -Volumenkristalle (sog. „bulk“-Material) verschiedener Zusammensetzung y verwendet, die zunächst durch eine Reihe unterschiedlicher Verfahren genauer charakterisiert wurden.

4.1.1 Materialcharakterisierung

4.1.1.1 Ge-Gehalt

Zur Bestimmung der Zusammensetzung des in dieser Arbeit verwendeten SiGe-Materials kamen mehrere Meßverfahren zur Anwendung. Das empfindlichste Verfahren ist die Messung der Gitterkonstanten mit hochauflösender Röntgenbeugung (*High-Resolution X-Ray Diffraction*, HRXRD) und anschließender Berechnung des Ge-Gehalts mit Hilfe des Vegardschen Gesetzes. Mit diesem Verfahren kann bei hinreichend langer Meßzeit der Ge-Gehalt mit einer Meßgenauigkeit von deutlich weniger als 1 Ge-% bestimmt werden. Weitere Verfahren zur Messung der Zusammensetzung sind die Rutherford-Rückstreuungsspektroskopie (*Rutherford Backscattering Spectroscopy*, RBS), die energieauflösende Röntgen-Spektroskopie (*Energy Dispersive X-Ray Spectroscopy*, EDX), die wellenlängenauflösende Röntgen-Spektroskopie (*Wavelength Dispersive X-Ray Spectroscopy*, WDX) sowie die optische Transmissionsspektroskopie.

4.1.1.2 Schichtdicke

Die SiGe-Schichtdicke von kann mit RBS-Messungen (bis zu einigen 100 nm) oder durch Querschnittaufnahmen einer SiGe-Probe im Rasterelektronenmikroskop bestimmt werden. Bei SiGe-Schichten, die aufgrund ihrer Dotierung von einem anderen Leitungstyp (n- bzw. p-leitend) sind als das Si-Substrat, kann die Tiefe des so erzeugten pn-Übergangs durch Messung des Ausbreitungswiderstands ermittelt werden.

4.1.1.3 Qualität des Kristallgitters

Die Qualität des Kristallgitters des SiGe-Materials kann aus RBS-Messungen bestimmt werden, die sowohl in einer Kristallrichtung, in der Gitterführungseffekte auftreten (sog. *channelling direction*), als auch in einer zufälligen, d.h. nichtgitterführenden Kristallrichtung (sog. *random direction*), durchgeführt werden. Setzt man die im ersten Fall

erhaltene Rückstreuintensität χ_{chan} ins Verhältnis zur im zweiten Fall erhaltenen Rückstreuintensität χ_{rand} , so erhält man als Maß für die Qualität des Kristallgitters die sog. *minimale RBS-Ausbeute*

$$\chi_{\text{min}} = \frac{\chi_{\text{chan}}}{\chi_{\text{rand}}} \quad (4.1)$$

χ_{min} wird umso kleiner, je perfekter das Kristallgitter ist. Für einen perfekten Si-Kristall beträgt $\chi_{\text{min}} \approx 3\%$; für SiGe erhält man mittlerweile Werte für χ_{min} von 3–4 %.

4.1.1.4 Versetzungsdichten

Die Dichte der Durchstoßpunkte von Versetzungen an der Oberfläche kann durch geeignete Defektätzungen bestimmt werden. Solche Defektätzungen werden in der Regel mittels chemischen Ätzlösungen, wie sie im Anhang A ausführlich beschrieben werden, oder in seltenen Fällen durch thermische Ätzung der Proben im Vakuum durchgeführt. In beiden Fällen ist die chemische Abtragerate bzw. die Abdampftrate in unmittelbarer Umgebung der Durchstoßpunkte der Versetzungen an der Oberfläche stark erhöht, wodurch Ätzgrübchen entstehen, die unter dem Lichtmikroskop deutlich sichtbar sind und abgezählt werden können. Versetzungen können auch unter dem Transmissionselektronenmikroskop (TEM) untersucht werden. Da aber bei solchen TEM-Aufnahmen nur Versetzungsdichten mit $\rho > 10^6 \text{ cm}^{-2}$ sichtbar gemacht werden können, kommt dieses Verfahren insbesondere bei der Untersuchung des Versetzungsnetzwerks in SiGe-Pufferschichten zum Einsatz.

4.1.2 Übersicht über das verwendete SiGe-Material

Bei der Auswahl des in dieser Arbeit verwendeten SiGe-Materials wurde, soweit möglich, größtmöglicher Wert auf möglichst geringe Versetzungsdichten gelegt. Bei fast allen im folgenden aufgeführten Materialien (s. auch Tabelle 3) wurde der Ge-Gehalt y mittels HRXRD bestimmt; sofern y ausschließlich oder zusätzlich mit anderen Verfahren bestimmt wurde, wird dies im folgenden explizit erwähnt:

(i) $y = 0$ (reines Silizium)

Von der Firma *Wacker-Siltronic* (Burghausen) wurde eine (111)-orientierte, nach dem Zonenschmelzverfahren hergestellte, 0,9 mm dicke Scheibe hochreinen, versetzungsfreien Si mit einem spezifischen Widerstand von mehr als 15 k Ω cm (n-typ) zur Verfügung gestellt.

(ii) $y = 0,04$

Vom *Institut für Elektronik der Akademie der Wissenschaften von Usbekistan* (Taschkent, Usbekistan) wurden (100)-orientierte, 11 μm dicke Si_{0,96}Ge_{0,04}-Schichten, die bei 1100 °C aus der Gasphase abgeschieden worden waren, zur Verfügung gestellt. Eine alternative Messung des Ge-Gehalts mit RBS ergab $y = 0,036$, eine weitere

Messung mit WDX lieferte $y = 0,026$. Die mittels Defektätze nach Secco bestimmte Dichte der Durchstoßversetzungen beträgt $\rho_D \approx 2 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-2}$. Details des Herstellungsverfahrens und der Probencharakterisierung wurden von BRULEY et al. [BEL92] sowie von FISCHER [Fis99] ausführlich beschrieben.

(iii) $y = 0,10; 0,25$

Von der Firma *Okmetik Ltd.* (Vantaa, Finnland) wurden (100)-orientierte, 0,4 μm dicke $\text{Si}_{0,90}\text{Ge}_{0,10}$ -Schichten und (100)-orientierte, 1,05 μm dicke $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ -Schichten, die mittels CVD auf einen linearen Gradientenpuffer aufgewachsen worden waren, zur Verfügung gestellt. Das verwendete Si-Substrat war vom p-Typ mit einem spezifischen Widerstand von 0,02 Ωcm . RBS-Messungen des Ge-Gehalts bestätigen die obengenannten Zusammensetzungen. Die Versetzungen in den Schichten wurden durch TEM-Untersuchungen am Niels-Bohr-Institut (Kopenhagen, Dänemark) untersucht (Abb. 11). Neben dem Netzwerk von Gitterfehlpassungsversetzungen in der SiGe-Pufferschicht sind zudem einige Stapelfehler in der relaxierten SiGe-Schicht zu erkennen. Thermische Defektätzen für beide Zusammensetzungen ergab $\rho_D \lesssim 10^5 \text{ cm}^{-2}$ für die Dichte der Durchstoßversetzungen (Abb. 12). Bei diesen Proben wurde außerdem die Kristallqualität mittels RBS-Channelling untersucht (Abb. 13). Dabei zeigte sich, daß die Qualität der Schichten mit der von (nahezu defektfreien) Si-Kristallen vergleichbar war ($\chi_{\min}(\text{SiGe}) \lesssim 4 \%$).

(iv) $y = 0,17; 0,35; 0,43$

Das *DaimlerChrysler Forschungszentrum* (Ulm) stellte (100)-orientierte, 0,98 μm dicke $\text{Si}_{0,83}\text{Ge}_{0,17}$ -Schichten, (100)-orientierte, 0,98 μm dicke $\text{Si}_{0,65}\text{Ge}_{0,35}$ -Schichten sowie (100)-orientierte, 0,45 μm dicke $\text{Si}_{0,57}\text{Ge}_{0,43}$ -Schichten zur Verfügung [HKG98]. In einem MBE-Verfahren wurde für die Herstellung der $\text{Si}_{0,83}\text{Ge}_{0,17}$ -Schichten auf ein Si-Substrat (n-Typ; 4 $\text{m}\Omega\text{cm}$) zunächst eine 100 nm dicke Si-Schicht aufgewachsen und danach eine 50 nm dicke $\text{Si}_{0,95}\text{Ge}_{0,05}$ -Schicht aufgebracht. Anschließend wurde eine 1,1 μm dicke SiGe-Schicht mit einem parabolischen Gradientenpuffer bis 17 % Ge-Anteil abgeschieden, worauf am Schluß die eigentliche $\text{Si}_{0,83}\text{Ge}_{0,17}$ -Schicht mit einem konstanten Ge-Gehalt aufgewachsen wurde. Entsprechend wurden die $\text{Si}_{0,65}\text{Ge}_{0,35}$ -Schichten mit einem 1,5 μm dicken Gradientenpuffer (Si-Substrat p-Typ; ca. 7 Ωcm) und die $\text{Si}_{0,57}\text{Ge}_{0,43}$ -Schichten mit einem 2,1 μm dicken Gradientenpuffer (Si-Substrat p-Typ; > 1000 Ωcm) hergestellt. In TEM-Bildern konnten in den relaxierten SiGe-Schichten keine Versetzungen gefunden werden; die Versetzungsdichte kann daher zu $\rho_D < 10^6 \text{ cm}^{-2}$ abgeschätzt werden.

(v) $y = 0,50$

Vom *Institute of Physics and Astronomy* (Aarhus, Dänemark) konnten (100)-orientierte, 4 μm dicke $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$ -Schichten auf einem 5 μm dicken linearen Gradientenpuffer zur Verfügung gestellt werden. Eine zusätzliche RBS-Messung des

Ge-Gehalts ergab $y = 0,50$. Die SiGe-Schichten wurden mit einem MBE-Verfahren hergestellt. Die Versetzungsdichte wurde von den Herstellern mit Hilfe von TEM-Aufnahmen und einer Versetzungsätze bestimmt. Die Versetzungsdichte in der SiGe-Schicht beträgt $\rho_D \lesssim 5 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-2}$, während die Dichte des Versetzungsnetzwerks in der Gradientenpuffer-Schicht (Abb. 14) um zwei Größenordnungen höher liegt. Die Dichte der elektrisch aktiven Defekte wurde von den Herstellern mit dem DLTS-Verfahren (*Deep Level Transient Spectroscopy*) zu 10^{12} – 10^{13} cm^{-3} bestimmt. Details über die Herstellung der Schichten und ihre Charakterisierung wurden von LARSEN et al. in [LHJ94] beschrieben.

(vi) $y = 0,65; 0,80$

Vom *Laboratorium für Festkörperphysik der ETH Zürich* (Zürich, Schweiz) wurden (100)-orientierte, jeweils 4 μm dicke $\text{Si}_{0,35}\text{Ge}_{0,65}$ - und $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$ -Schichten, die mit dem LEPECVD-Verfahren auf lineare SiGe-Pufferschichten (10 %/ μm) von 6,5 μm bzw.

8 μm Dicke aufgewachsen worden waren, zur Verfügung gestellt [KRD02]. TEM-Aufnahmen der SiGe-Schichten zeigten keine Versetzungen in der SiGe-Schicht ($\rho_D \lesssim 10^6 \text{ cm}^{-2}$); die Pufferschichten enthielten dagegen ein ausgeprägtes Versetzungsnetzwerk. Abb. 15 zeigt exemplarisch ein typisches HRXRD-Spektrum einer $\text{Si}_{0,35}\text{Ge}_{0,65}$ -Probe.

(vii) $y = 0,85; 0,90$

Vom *Kristallographischen Institut der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg* (Freiburg) wurden (100)-orientierte, nach dem vertikalen Bridgman-Verfahren oder dem Zonenschmelzverfahren hergestellte SiGe-Einkristalle mit einem spezifischen Widerstand von ca. 1000 Ωcm zur Verfügung gestellt. Der Ge-Gehalt wurde von den Herstellern mittels EDX gemessen. Mit Hilfe einer Defektätze wurde die Versetzungsdichte in der Probenmitte zu $\rho_D = 6 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-2}$ und am Probenrand zu $\rho_D \lesssim 10^7 \text{ cm}^{-2}$ bestimmt [Barz99]. Weitere Details über Züchtung bzw. Charakterisierung der SiGe-Einkristalle werden von DOLD et al. in [BDK98] bzw. [DBR98] beschrieben.

(viii) $y = 0,95$

Vom *Institut für Kristallzüchtung* (Berlin) wurden (111)-orientierte, Czochralski-gezogene SiGe-Einkristalle mit einem Si-Gehalt von 5 % und einem spezifischen Widerstand kleiner als 50 Ωcm (n-Typ) bereitgestellt. Der Ge-Gehalt der Proben wurde durch optische Transmissionsspektroskopie der Proben ermittelt [DGW94]. Die mittels Defektätze bestimmte Versetzungsdichte beträgt ca. 10^7 cm^{-2} [Abb. 16]. Weitere Details des Herstellungsverfahrens und der Materialcharakterisierung werden von den Herstellern ABROSIMOV et al. in [ART97] erläutert.

(ix) $y = 1,0$ (reines Germanium)

Vom *Lawrence Berkeley Laboratory* (Kalifornien, USA) stand ein (113)-orientierter, unter Wasserstoffatmosphäre nach dem Czochralski-Verfahren gezogener Ge-Einkristall zur Verfügung, der mit Hilfe von Laue-Aufnahmen zunächst in (100)-Richtung orientiert wurde. Eine Defektätze zeigte, daß der Kristall nahezu versetzungsfrei war. Die Konzentrationen von O, H und Si lagen zwischen 10^{14} und 10^{15} cm^{-3} . Die Konzentration flacher Störstellen wurde von den Herstellern mit weniger als $2 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ P und weniger als $2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ Al und B angegeben, woraus sich eine Netto-Akzeptorkonzentration von ca. 10^{11} cm^{-3} ergibt. Die Hersteller wiesen zudem auf die Existenz von Doppelleerstellen–Wasserstoff-Komplexen in versetzungsfreiem Germanium hin, die flache Störstellen mit einer Energie von 0,071 eV oberhalb des Valenzbandes darstellen. Diese Defekte dissoziieren bei Temperaturen oberhalb 400 °C irreversibel, und der freiwerdende Wasserstoff diffundiert aus. Weitere Details über das verwendete Ge-Material wurden von HALLER et al. in [HHG81] beschrieben.

Aus dem unter (i) bis (ix) beschriebenen Material wurden jeweils quadratische Proben zwischen $5 \times 5 \text{ mm}^2$ und $9 \times 9 \text{ mm}^2$ ausgesägt, die anschließend mit Reinst-Ethanol und Reinst-Aceton gereinigt und in Reinst-Ethanol bis zur weiteren Bearbeitung gelagert wurden.

4.2 Radiotracer-Verfahren

Beim Radiotracer-Verfahren werden radioaktive Tracer-Atome, z.B. durch Aufdampfen, auf eine Probenoberfläche aufgebracht. Nach der Diffusionstemperatur kann das Diffusionsprofil bestimmt werden, indem man die Probe in Schichten teilt und die Radioaktivität der einzelnen Schichten in einem Detektor mißt. Die Radioaktivität einer Schicht ist proportional zur Konzentration der Radiotracer-Atome in der jeweiligen Schicht. Durch Auftragung der gemessenen Radioaktivität über der Eindringtiefe in die Probe kann das Diffusionsprofil konstruiert werden. Implantationsprofile werden entsprechend bestimmt.

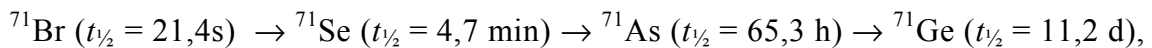
Häufig schränken Oberflächeneffekte (bei SiGe-Proben v.a. dünne Oxidschichten auf der Oberfläche) die Anwendung dieses “konventionellen” Radiotracer-Verfahrens ein. Ein elegantes Verfahren, um die mit Oberflächeneffekten zusammenhängenden Probleme zu umgehen, ist die Implantation radioaktiver Isotope (“modifiziertes” Radiotracer-Verfahren). Allerdings müssen auch hier Nachteile, wie die in bezug auf Diffusionsuntersuchungen wichtigen Implantationsschäden, in Kauf genommen werden.

4.2.1 Diffusionsmessungen von ^{71}Ge in SiGe

4.2.1.1 Implantation von radioaktiven ^{71}Ge -Isotopen

Die Implantationen von ^{71}Ge mit einer für das Radiotracer-Verfahren bequemen Halbwertszeit $t_{1/2} = 11,2$ d wurden teils am Massenseparator der Universität Bonn, teils am On-line-Isotopenseparator ISOLDE (*IS*otope *On-Line* *DE*vice) am Europäischen Kernforschungszentrum (CERN) in Genf [Meh87] durchgeführt. Die Isotope wurden an beiden Beschleunigern mit einer Energie von 60 keV und – um Gitterführungseffekte zu vermeiden – unter einem Winkel von 8° gegenüber der Oberflächennormalen der Proben implantiert. Die Implantationstiefe der ^{71}Ge -Isotope in reinem Si betrug 38 nm, in reinem Ge 19 nm. Insgesamt wurden pro Probe ca. $1 \cdot 10^{11}$ bis $5 \cdot 10^{11}$ ^{71}Ge -Isotope implantiert.

Am Massenseparator der Universität Bonn wurde 9 Tage lang neutronenaktiviertes Germanium (ca. 2 mg) verdampft, ionisiert, beschleunigt, massensepariert und implantiert. Der Strahlstrom betrug ca. $1 \cdot 10^8$ bis $5 \cdot 10^8$ Ionen/s bei einem Strahlquerschnitt von ca. 18 mm^2 . Am On-line-Isotopenseparator ISOLDE werden verschiedene radioaktive Isotope durch Beschuß eines Targets mit hochenergetischen Protonen (1,4 GeV) durch Spallation erzeugt. Um ^{71}Ge bzw. dessen Mutterisotope zu erhalten, wurde entweder ein Target aus Nb-Folie oder ein Target aus ZrO eingesetzt. In beiden Fällen konnte ^{71}Ge aus einer Kette schneller radioaktiver Zerfälle erhalten werden:



wobei der Strahlstrom von ^{71}As mit ca. 10^9 Ionen/s (Nb-Folie) bzw. ca. $6 \cdot 10^8$ Ionen/s (ZrO) mehr als einen Faktor 10 größer war als die Strahlströme aller anderen Isotope. Der Strahlstrom des ebenfalls produzierten Verunreinigungselements $^{71\text{m}}\text{Zn}$ ($t_{1/2} = 3,96$ h) war geringer als 10^7 Ionen/s und damit vernachlässigbar. Bei den ^{71}Ge -Implantationen an ISOLDE betrug der Strahlquerschnitt ca. 7 mm^2 .

4.2.1.2 Probenreinigung und Diffusionstemperung

Nach der Implantation wurden die Proben einer intensiven Reinigungsprozedur unterzogen. Dabei wurden Standard-Reinigungsverfahren für reines Si und reines Ge für das SiGe-Material z.T. leicht modifiziert, um Degradationseffekte an den Oberflächen zu vermeiden. Es wurde ferner in Kauf genommen, daß die Probenoberflächen leicht angeätzt wurden, d.h., daß während der Reinigung wenige nm SiGe-Material von der Oberfläche abgetragen wurden. Um später definierte Anfangsbedingungen für die Auswertung der Diffusionsprofile gewährleisten zu können, wurden auch Implantationsprofile nur an entsprechend gereinigten Proben gemessen. Bei Si-reichen SiGe-Proben wurden zunächst Klebstoffe und andere organische Verunreinigungen mittels Aceton und Wasser, entstehende Oxidschichten durch Flußsäure, Verunreinigungselemente wie Edelmetalle oder 3d-Übergangselemente durch RCA-Reinigungsschritte sowie weitere Metallverunreinigungen mittels Zitronensäure entfernt. Für Ge-reiche SiGe-Proben wurde ein KCN-Reinigungsverfahren angewandt.

Details der Reinigungsprozeduren sind im Anhang B beschrieben. Durch Messungen des Ausbreitungswiderstands vor und nach der Diffusionstemperung [Str99] kann festgestellt werden, ob während der Temperung elektrisch aktive Fremdatome in die Proben eindiffundiert sind. Solche Fremdatome können auch nach der Reinigung aus der Luft oder durch Kontakt mit Pinzetten (z.B. Cu, Fe) oder aus dem Ofen und den Quarzampullen (z.B. Alkalimetalle) in die Proben eindiffundieren. Stichprobenartige Messungen des Ausbreitungswiderstands nach erfolgter Diffusionstemperung ergaben kein Absinken des Ausbreitungswiderstands im Vergleich zu nicht getemperten Proben und damit keine nennenswerte Eindiffusion von elektrisch aktiven Verunreinigungen.

Im Anschluß an die Reinigung wurden die Proben in Quarzampullen abgeschmolzen. Um Oxidationseffekte, die zu einer Degradation der ursprünglich spiegelnden Probenoberfläche während der Temperung sowie zur Materialabtragung von der Probenoberfläche beitragen, soweit wie möglich zu reduzieren, wurden ein Reihe von Vorkehrungen getroffen: Bei der Auswahl des Quarzglases wurde auf hohe Herstellungsreinheit und möglichst geringen Wassergehalt geachtet; diese Anforderungen erfüllte Quarzglas vom Typ HSQ300 (Hersteller: *Heraeus Quarzglas GmbH*) am besten. Vor Einbringen der Proben wurden die Ampullen mit Reinst-Wasser gereinigt, dann 15 min in Königswasser und weitere 15 min in Flußsäure geätzt, anschließend mit reichlich Reinst-Wasser, Reinst-Aceton und Reinst-Ethanol gespült und abschließend unter Hochvakuum (10^{-8} mbar) ausgeheizt. Das Hochvakuum wurde in einem eigens dafür aufgebauten Turbomolekular-Pumpstand erzeugt, an den jeweils 4 Glasampullen mittels CF-Metall-Glas-Übergängen angeflanscht werden konnten. Nach Einbringen der Proben (die zum Schutz der Oberfläche mit einer weiteren, nichtimplantierten Probe desselben Materials nach dem Sandwich-Prinzip abgedeckt wurden) in die Ampullen, wurden diese mehrfach mit einem Schutzgasgemisch aus 15% H_2 –85%Ar mit 99,9999 % Reinheit gespült. Das Schutzgasgemisch wurde durch spezielle, elektrolytisch polierte, VCR-gedichtete, orbitalverschweißte Edelstahlrohre (Firma *Dockweiler*) und Ventile (Firma *B.E.S.T.*) sowie durch ein Oxisorbssystem (Firma *Messer*) geleitet, das Restwasser und Restsauerstoff, welche im Gas noch vorhanden sind, adsorbiert. Testweise wurde als Schutzgas auch Ar, N_2 oder H_2 verwendet. In diesen Fällen war eine leichte Degradation der Oberflächen zu beobachten, ohne daß dies jedoch das Diffusionsverhalten wesentlich beeinflusste. Zuletzt wurden die Proben unter 200 mbar des o.g. Schutzgasgemisches abgeschmolzen. Vor dem unmittelbaren Einschub in die Öfen wurden die Außenbereiche der Ampullen nochmals mit Aceton gereinigt, um schädliche Spuren von Alkali- und Erdalkaliverbindungen zu entfernen.

Die Diffusionstemperungen wurden im Regelfall in konventionellen Rohröfen der Firma *Gero* im Temperaturbereich 643 bis 1263 °C zwischen 1,5 und 553 h durchgeführt. Temperaturen bis 1000 °C wurden dabei mit einem NiCr–NiAl-Thermoelement (Typ K), Temperaturen oberhalb 1000 °C mit einem Pt10%Rh–Pt-Thermoelement (Typ S) gemessen. Die Temperatur konnte bis auf ± 1 K konstant gehalten werden. Fast allen Diffusionstemperungen ging eine 30minütige Vortemperung bei einer Temperatur deutlich unterhalb

der Schmelz- bzw. Solidustemperatur voraus, mit dem Ziel, mögliche Strahlenschäden auszuheilen.

4.2.1.3 Schichtenteilung und Bestimmung der Radioaktivität

Zur Bestimmung der Eindringprofile mußte eine Schichtenteilung der Proben vorgenommen werden. Da die Eindringtiefe der Tracer-Atome in allen Fällen weniger als 2 μm betrug, wurde das Verfahren der Ionenstrahlzerstäubung (Sputter-Verfahren) angewandt, mit dem Schichtdicken im Bereich von wenigen Nanometern abgetragen werden können [MMH78]. Im Rahmen dieser Arbeit wurde dazu eine neuartige Ionenstrahlzerstäubungsanlage in Betrieb genommen, die in bezug auf Abtragehomogenität sowie Konstanz und maximale Größe der Abtragerate einer bereits vorhandenen Anlage deutlich überlegen war. Eine schematische Darstellung dieser Ionenstrahlzerstäubungsanlage zeigt Abb. 17. Sie besteht aus zwei Teilen, einer Plasma-Ionenquelle [AWN00] der Firma *tectra GmbH* und einer Arbeitskammer. In der Plasma-Ionenquelle werden mit Hilfe eines Mikrowellengenerators Moleküle des Arbeitsgases ionisiert und anschließend mit Hilfe einer Gitteroptik mit 0,6 bis 1,8 kV auf die Probe zu beschleunigt. Es besteht die Möglichkeit, durch ein heizbares Filament unmittelbar nach der Gitteroptik den Ionenstrahl zu neutralisieren. Die Probe ist mit Leit-C auf einem geerdeten und rotierenden Kupferhalter aufgeklebt. Eine Druckregelung sorgt für einen konstanten Druck von $5 \cdot 10^{-4}$ mbar in der Arbeitskammer. Das vom Ionenstrahl von der Probe abgetragene Material wird auf einer Folie aufgesammelt, die wie ein Film in einer Kamera auf einem Halter aufgewickelt ist. In jeweils gleichen Zeitintervallen wird die Folie automatisch weitertransportiert.

Zur Bestimmung der Abtragerate wurde vor der Zerstäubung auf der Oberfläche der Probe ein kleiner Bereich mit Leit-C abgedeckt. Die Höhe der durch die Zerstäubung entstandenen Stufe wurde anschließend bestimmt, wozu für Abtragehöhen $\lesssim 1000$ nm ein computergesteuertes, interferometrisches Höhenmeßgerät mit einer Genauigkeit bei der Bestimmung der Stufenhöhe von ± 5 nm und für Abtragehöhen $\gtrsim 1000$ nm ein mechanisches Höhenmeßgerät der Firma *Dektak* mit einer Genauigkeit von ± 10 nm eingesetzt wurden. Beide Höhenmeßgeräte wurden regelmäßig mit Hilfe eines Höhenstandards geeicht. Beste Oberflächenqualität nach der Schichtenteilung sowie beste Abtragehomogenität und höchste Abtrageraten wurden bei Verwendung von filtergetrockneter Luft als Arbeitsgas erzielt. Bei einer Beschleunigungsspannung der Luftmolekülionen von 1,2 kV betrug die Abtragerate von Si 6 nm/min und von Ge 90 nm/min, bei einer Beschleunigungsspannung von 0,8 kV betrug die Abtragerate von Si 2,5 nm/min und von Ge 10 nm/min.

Durch Elektroneneinfang zerfällt ^{71}Ge ohne Aussendung von γ -Quanten zu ^{71}Ga [LS78]; in einem Szintillationszähler können dann Auger-Elektronen, die aus der nach dem Elektroneneinfang angeregten Elektronenhülle entstehen, nachgewiesen werden. Dazu werden die einzelnen Folienabschnitte in mit Szintillationsflüssigkeit gefüllte Zählfläschchen verpackt und so die Radioaktivität der einzelnen Folienabschnitte bestimmt.

4.2.2 Messung der Diffusion kurzlebiger Radioisotope

Die insgesamt für Diffusionsmessungen an einer Probe zur Verfügung stehende Gesamtzeit ist auf 5 bis 6 Halbwertszeiten des implantierten Radioisotops begrenzt. Bei Diffusionsmessungen unter Verwendung der Radioisotope ^{31}Si ($t_{1/2} = 2,62 \text{ h}$) und ^{11}C ($t_{1/2} = 20,38 \text{ min}$) kann aufgrund der kurzen Halbwertszeit dieser Isotope das unter 4.2.1 beschriebene modifizierte Radiotracer-Verfahren nur angewandt werden, wenn die Arbeitsschritte Radiotracer-Implantation, Diffusionstemperung, Ionenstrahlzerstäubung und Radioaktivitätsmessung nicht in verschiedenen Apparaturen oder sogar an verschiedenen Orten, sondern nach Möglichkeit „on beamline“ und „in situ“ durchgeführt werden. Zu diesem Zweck wurde eine vorhandene Vakuumkammer zu einer mobilen Apparatur zur Messung der Diffusion kurzlebiger Radioisotope umgebaut (Abb. 18) [VSM02]. Durch Optimierung aller Arbeitsschritte war es sogar möglich, die Diffusion von so kurzlebigen Radioisotopen wie ^{29}Al ($t_{1/2} = 6,6 \text{ min}$) erfolgreich zu messen.

4.2.2.1 Radiotracer-Implantation

Die Implantationen von ^{31}Si wurden teils an ISOLDE, teils am On-Line-Isotopenseparator IGISOL (*Ion-Guide Isotope-Separator On-Line*) der Universität Jyväskylä in Finnland [Den97] durchgeführt, die Implantation von ^{11}C ausschließlich an ISOLDE. Dazu mußte die Meßkammer an vorhandene Strahlrohre angeflanscht und justiert werden. Die zu implantierende Probe, die zwischen 2 Keramikstäben eingeklemmt war, wurde dabei in der Mitte der Meßkammer positioniert und – um Gitterführungseffekte zu vermeiden – um 8° gegenüber der Oberflächennormalen gegen die Strahlrichtung verkippt. Die Implantation erfolgte bei einem Druck von $2 \cdot 10^{-6} \text{ mbar}$ und einer Beschleunigungsspannung von 37 kV für ^{31}Si und 24 kV für ^{11}C . Insgesamt wurden in die Proben ca. $1,5 \cdot 10^7$ ^{31}Si -Atome in eine Tiefe zwischen 51 nm in Si bzw. 43 nm in Ge und ca. 10^9 ^{11}C -Atome in eine Tiefe von 58 nm in Ge implantiert.

Für die ^{31}Si -Diffusionsmessungen an ISOLDE wurden zunächst durch Beschuß eines UC-Targets mit Protonen der Energie 1,4 GeV radioaktive ^{31}Al -Isotope erzeugt, die mit einer Halbwertszeit von 644 ms in ^{31}Si zerfallen. Der Strahlstrom von ^{31}Al betrug ca. 10^4 Ionen/s bei einem Strahlquerschnitt von 7 mm^2 . Die Strahlströme der Verunreinigungsisotope ^{31}P und ^{31}S waren um mehr als einen Faktor 10 kleiner und damit vernachlässigbar. Allerdings war der Strahlstrom von dreifach geladenem ^{93}Y ($t_{1/2} = 3,96 \text{ h}$) von vergleichbarer Größenordnung wie der ^{31}Al -Strom und konnte nur bei zwei Messungen durch geschickte Massenseparation unterdrückt werden. Eine zuverlässigere Quelle für ^{31}Si -Strahlen stellt die IGISOL-Anlage dar. In ihr wurde ein isotopenreiner ^{31}Si -Strahl durch eine $^{30}\text{Si}(\text{d,p})^{31}\text{Si}$ -Reaktion erzeugt, indem 19 MeV-Deuteronen auf ein $0,5 \text{ mg/cm}^2$ dickes und zu 98% mit ^{30}Si angereichertes, durch Ionenstrahlzerstäubung auf eine dünne Havar-Folie abgeschiedenes Si-Target geschossen wurden. Damit konnte ein Strahlstrom von ca. 10^3 Ionen/s bei einem Strahlquerschnitt von ca. 7 mm^2 erzeugt werden.

Zur Erzeugung von ^{11}C -Isotopen wurde an ISOLDE ein TiO -Target mit 1,4 GeV-Protonen beschossen. Dabei entstand ^{11}C in Form von $^{11}\text{C}^{16}\text{O}$ -Molekülen, die – nach Beschleunigung mit 60 keV – bereits beim Auftreffen auf der Probenoberfläche zerplatzen, so daß ^{11}C mit einer Energie von nur 24 keV in die Probe implantiert wurde. Es wurden $^{11}\text{C}^{16}\text{O}$ -Strahlströme von ca. $5 \cdot 10^4$ bis $5 \cdot 10^5$ Ionen/s bei einem Strahlquerschnitt von 18 mm^2 gemessen.

4.2.2.2 Probenreinigung

Bei allen Diffusionsexperimenten mit den kurzlebigen Radioisotopen ^{31}Si und ^{11}C wurden die Proben vor dem Einbau in die Apparatur nach den im Anhang B beschriebenen Prozeduren gereinigt. Teilweise wurden einmal in die Meßkammer eingebaute Proben auch mehrfach verwendet und jeweils vor Beginn der nächsten Messung für einige Minuten durch Ionenstrahlzerstäubung gereinigt.

4.2.2.3 Diffusionstemperaturen

Die Diffusionstemperaturen bei den ^{31}Si -Diffusionsmessungen wurden zwischen 843 und 1273 °C und (effektiven) Temperzeiten von 20 bis 90 min, bei den ^{11}C -Diffusionsmessungen zwischen 750 und 890 °C und (effektiven) Temperzeiten von 564 s bis 106,3 min durchgeführt. Dazu wurde ein rohrförmiges BN-Heizelement über die Probe geschoben. Sowohl das Rohr als auch die Rohröffnung waren mit mehreren Lagen Ta-Folie abgedeckt. Dieses Ta-Schild reduzierte die Temperaturinhomogenität im Ofen auf $\pm 10 \text{ K}$ und wirkte gleichzeitig als Gettermaterial für den in der Kammer bei einem Vakuum von $5 \cdot 10^{-7} \text{ mbar}$ noch reichlich vorhandenen Sauerstoff. Dadurch waren in den meisten Experimenten die Probenoberflächen auch nach den Diffusionstemperaturen noch spiegelnd; außerdem konnte so auch das Abdampfen von Probenmaterial durch Bildung von flüchtigem GeO reduziert werden. Die Temperatur der Proben wurde mit einem direkt an der Probe angebrachten W5%Re-W26%Re-Termoelement (Typ C) gemessen. Die Heizleistung des Ofens wurde mit einem PID-Regelkreis so gesteuert, daß die gewünschte Temperatur auf $\pm 1 \text{ K}$ konstant war. Mit dieser Anordnung konnten Aufheizraten von bis zu 500 K/min erzielt werden. Eine Vortemperatur der implantierten Proben erfolgte nicht.

Da die Temperzeiten insgesamt sehr kurz waren, mußten die Aufheiz- und Abkühlzeiten der Proben durch eine numerisch berechnete effektive Temperatur

$$t_{\text{eff}} = t + \frac{1}{D_0} \int_{T_a}^T \frac{D(T')}{(dT'/dt)} dT' + \frac{1}{D_0} \int_T^{T_e} \frac{D(T')}{(dT'/dt)} dT' \quad (4.2)$$

korrigiert werden (t = Temperaturzeit ohne Berücksichtigung von Aufheiz- und Abkühlzeit, T_a = Probenoberfläche zu Beginn der Heizrampe, T_e = Probenoberfläche am Ende des Kühlvorgangs, T = Temperatur der Diffusionstemperatur).

4.2.2.4 Schichtenteilung und Radioaktivitätsmessung

Unmittelbar nach der Diffusionstemperung wurden die Diffusionsprofile mittels Schichtenteilung durch Ionenstrahlzerstäubung bestimmt, wie bereits für die ^{71}Ge -Diffusionsexperimente in Abschn. 4.2.1.3 ausführlich beschrieben wurde. Zur Bestimmung der Abtragerate wurde diese vor Durchführung der Diffusionsexperimente auf den auf der Probe gemessenen Ionenstrom der Plasma-Ionenquelle sowie zusätzlich auf einen in die Meßkammer eingebauten Schwingquarz geeicht. Bei ^{31}Si -Diffusionsmessungen wurde teilweise nach der Diffusionstemperung die Vakuumkammer geöffnet, um die Probe mit Silber-Leit auf einen rotierenden Kupferhalter aufzukleben. Dabei wurde auch – wie bei ^{71}Ge -Diffusionsmessungen – ein kleiner Teil der Probenoberfläche mit leitfähigem Material abgedeckt, so daß nach der Schichtenteilung direkt die Höhe der entstandenen Stufe gemessen werden konnte.

^{31}Si zerfällt unter Aussendung von β^- -Strahlung mit der Maximalenergie 1,49 MeV in das Phosphorisotop ^{31}P [LS78]. Ein geringerer Bruchteil von 0,07 % geht in einen angeregten Zustand von ^{31}P über mit nachfolgender Aussendung von γ -Quanten der Energie 1,26 MeV. Die β^- -Strahlung wurde mit einem Si-Sperrschichtdetektor der Firma *Ortec* (ladungsträgerverarmte Sperrschicht 2 mm, aktive Zone 200 mm²) gemessen, der vom Institut für Strahlen- und Kernphysik der Universität Stuttgart zur Verfügung gestellt worden war.

^{11}C zerfällt unter β^+ -Emission in das stabile ^{11}B [LS78]. Die bei der Zerstrahlung der Positronen mit Elektronen entstandenen 511 keV γ -Quanten wurden mit Hilfe eines Ge-Detektors nachgewiesen.

5 Meßergebnisse

5.1 Optimierung der Plasma-Ionenquelle

Wie bereits in Abschn. 4.2.1.3 erwähnt, wurde zur Schichtenteilung bei der Messung der ^{71}Ge -Profile eine neue Ionenstrahlzerstäubungsanlage in Betrieb genommen. Durch eine Serie von Tests wurden die Parameter zum Betrieb dieser Anlage zunächst so optimiert, daß bestmögliche laterale Abtragehomogenität sowie eine zeitlich konstante und gleichzeitig möglichst hohe Abtragerate erzielt wurden.

5.1.1 Strahlneutralisation

In früheren Ionenstrahlzerstäubungsexperimenten an halbleitenden Materialien [Hor97] waren massive Probleme mit der lateralen und zeitlichen Homogenität der Abtragerate aufgrund der starken elektrischen Aufladung der Proben durch den Ionenbeschuß aufgetreten. Deshalb wurde zunächst geprüft, ob eine Strahlneutralisation einen Einfluß auf die Form der Profile hat. Abb. 19 zeigt zwei ^{71}Ge -Implantationsprofile in $\text{Si}_{0,83}\text{Ge}_{0,17}$, von denen das eine mit, das andere ohne Strahlneutralisation gemessen wurde. Beide Profile sind identisch, weshalb im folgenden bei allen Diffusionsexperimenten auf die Strahlneutralisation verzichtet wurde.

5.1.2 Wahl der Beschleunigungsspannung

Aus vielen Ionenstrahlzerstäubungsexperimenten ist bekannt, daß es bei höheren Beschleunigungsspannungen aufgrund eines Impulsübertrags auf die Atome in der Probe zu einem „Vorantreiben“ der Radiotracer-Atome in größere Probentiefen kommen kann. Der Einfluß der Beschleunigungsspannung auf die Form der Profile wurde untersucht, indem ^{71}Ge -Implantationsprofile in Si mit verschiedenen Beschleunigungsspannungen abgetragen wurden. In Abb. 20 ist das bei der höchsten Beschleunigungsspannung (1,6 kV) gemessene Profil zusammen mit dem bei der niedrigsten Beschleunigungsspannung (0,64 kV) gemessenen Profil dargestellt; eine Abhängigkeit der Profilform von der Beschleunigungsspannung ist nicht zu erkennen. Bei den vorgenommenen Ionenstrahlzerstäubungen wurden Werte zwischen 0,8 und 1,2 kV für die Beschleunigungsspannung verwendet.

5.1.3 Laterale Abtragehomogenität

Die laterale Abtragehomogenität wurde geprüft, indem auf den Probenhalter ein $2,5\text{ cm} \times 2,5\text{ cm}$ großes Si-Plättchen mit zahlreichen Leit-C-Punkten aufgeklebt wurde. Durch geeignete Fokussierung des Ionenstrahls mit Hilfe der Gitteroptik gelang es, in der Mitte der

Probe in einem kreisförmigen Bereich mit einem Durchmesser von ca. 15 mm eine Abtragehomogenität von besser als ± 1 % zu erreichen. Zum Rand des Si-Plättchens jedoch fiel der Gesamtabtrag von der Probe um bis zu 10 % ab, weshalb bei den Diffusionsmessungen nur Proben mit einem Durchmesser kleiner als 15 mm verwendet wurden.

5.1.4 Zeitliche Konstanz der Abtragerate

Um die zeitliche Konstanz der Abtragerate zu prüfen, wurden insgesamt drei ^{71}Ge -Implantationsprofile in Si, die zur internen Tiefenskalierung verwendet wurden, mit verschiedenen Gesamtabstäubedauern bestimmt. Die Beschleunigungsspannung betrug jeweils 1,04 kV; als Gesamtabstäubedauern wurden 45 min, 85 min und 170 min gewählt. Die drei so bestimmten Implantationsprofile sind in Abb. 21 dargestellt. Im Rahmen der Meßgenauigkeit sind die drei Profile identisch, woraus geschlossen werden kann, daß sich die Abtragerate mit der Zerstäubungsdauer nicht wesentlich ändert.

5.2 Diffusion von ^{71}Ge in SiGe

Diffusionskoeffizienten von ^{71}Ge in SiGe wurden im Temperaturbereich zwischen 643 und 1263 °C für alle in Abschn. 4.1.2 aufgelisteten Legierungszusammensetzungen bestimmt, wobei die Temperzeiten zwischen 1,5 und 553 h lagen. Außerdem wurde in jeder Zusammensetzung ein Implantationsprofil gemessen.

5.2.1 Implantationsprofile

In den Abbn. 19 bis 33 sind die für die verschiedenen SiGe-Zusammensetzungen gemessenen ^{71}Ge -Implantationsprofile sowie die numerischen Anpassungen von Gauß-Kurven an diese Profile dargestellt. Es fällt auf, daß die gemessenen ^{71}Ge -Implantationsprofile in größeren Eindringtiefen von einer idealen Gauß-Verteilung abweichen. Obwohl alle Probenoberflächen bei der Implantation um ca. 8° gegen die Strahlrichtung verkippt waren, ist die Entstehung der Profilausläufer nur durch Gitterführungseffekte erklärbar [Rim95]. Vergleicht man die gemessenen Implantationsprofile mit Implantationsprofilen, die durch das weitverbreitete Implantationssimulationsprogramm SRIM berechnet wurden, so zeigt sich eine gute Übereinstimmung für die Streuung σ , während die Lage der Implantationsmaxima x_0 bei den gemessenen Implantationsprofilen deutlich zur Oberfläche hin verschoben ist. Dies ist eine direkte Folge des in Abschn. 4.2.1.2 erwähnten Materialabtrags von der Oberfläche durch die Reinigungsprozeduren.

5.2.2 Zur Auswertung der Diffusionsprofile

Gemäß Abschn. 3.1.1 kann für eine gaußförmige Anfangsverteilung der implantierten Isotope eine analytische Lösung der Diffusionsgleichung für die Randbedingungen „Oberfläche als perfekte Reflexionsebene“ bzw. „Oberfläche als perfekte Senke“ angegeben

werden. Obwohl die Implantationsprofile von der idealen Gauß-Form abweichen, stellt die Gauß-Funktion eine hervorragende Näherung für die Anfangsverteilung und damit für die numerische Simulation der Diffusionsprofile dar. Löst man testweise die Diffusionsgleichung numerisch mit dem realen Implantationsprofil als Anfangsverteilung, so sind die so bestimmten Diffusionskoeffizienten nur um weniger als 1 % kleiner.

In den Abbn. 34 und 35 sind zwei typische Diffusionsprofile dargestellt, an denen exemplarisch erläutert werden soll, welche Schwierigkeiten sich bei der Bestimmung der Diffusionskoeffizienten ergaben. Beide Profile haben folgendes gemeinsam:

- (i) In unmittelbarer Nähe der Oberfläche ($x \lesssim 20$ nm) sind die gemessenen Radioaktivitäten pro Schicht i.a. kleiner als nach der Anpassung der Lösung der Diffusionsgleichung erwartet wird.
- (ii) Ungefähr in der Tiefe, in der die zugehörigen Implantationsprofile ihr Maximum besitzen, besitzen auch die Diffusionsprofile noch eine deutlich erhöhte Radioaktivität.
- (iii) In Probentiefen $\gtrsim 100$ nm ist eine hervorragende Anpassung der gemessenen Aktivitäten durch eine geeignete Lösung der Diffusionsgleichung möglich.

Die beobachteten Effekte waren bei allen gemessenen ^{71}Ge -Diffusionsprofilen je nach Zusammensetzung, Temperatur und Temperdauer unterschiedlich deutlich ausgeprägt oder teilweise auch nicht vorhanden. Zur Erklärung dieser Effekte müssen die Einflüsse von Oberflächenoxidation und eventuell von Strahlenschädigungen berücksichtigt werden.

5.2.2.1 Oberflächenoxidation

Der in den Quarzampullen in geringen Mengen vorhandene Restsauerstoff kann die Proben an der Oberfläche oxidieren. Derartige Oxidationsvorgänge sind in reinem Si bestens untersucht und verstanden. In Si wächst an der Oberfläche stabiles SiO_2 nach einem linear-parabolischen Wachstumsgesetz auf. Dies ist auch in Si-reichem SiGe der Fall. In solchen Proben wird an der Oberfläche nur das Si oxidiert; Ge-Atome werden von der SiO_2 -Si-Reaktionsfront immer weiter ins Probeninnere geschoben (sog. "Schneepflugeffekt") [FHW87, HWF87, LRM89, NKW90, PLN94]. Dies führt zu einer Entleerung des oberflächennahen Bereichs an ^{71}Ge und zu einer ^{71}Ge -Konzentrationserhöhung unmittelbar nach der SiO_2 -Si-Grenzschicht. Dies könnte die beobachteten Profilformen befriedigend erklären. Mit zunehmendem Ge-Gehalt der Proben sollte dieser Effekt schwächer werden, da im Grenzfall des reinen Ge kein stabiles Oxid mehr entsteht, sondern leichtflüchtiges GeO abdampft [RA85]. In der Tat wird auch bei den gemessenen Diffusionsprofilen tendentiell die Entleerung von ^{71}Ge in Oberflächennähe mit steigendem Ge-Gehalt geringer. Daß tatsächlich dieser Schneepflugeffekt wirksam ist, kann auch durch folgendes Experimenten bestätigt werden: Wird vor der Ionenstrahlzerstäubung die Oxidschicht mit einem kurzen Eintauchen der Proben in HF beseitigt, so verschwindet der ^{71}Ge -entleerte Bereich im gemessenen Profil.

Das aufwachsende Oxid in Si-reichem SiGe wirkt zugleich als Schutzschicht für die Probe, während in Ge-reichen Proben Oxidationseffekte sowie der relativ hohe Dampfdruck von Ge zu einem Materialabtrag von der Probe führen. Dieser Sachverhalt kann auch die Beobachtung schlüssig erklären, daß mit steigendem Ge-Gehalt der Proben während der Diffusionstemperung bei vergleichbaren Temperaturen und Diffusionsdauern ein verstärkter Radioaktivitätsverlust beobachtet wird, der in reinem Ge in extremen Fällen bis zu 30 % erreichte. Der Materialverlust ist aber trotzdem auf maximal 1 bis 2 nm begrenzt und damit bei den vorkommenden mittleren Diffusionsverbreiterungen vernachlässigbar. Zu beachten ist auch, daß sich für das Abdampfen von Ge allein durch den großen Dampfdruck von Ge in der Ampulle rasch ein Gleichgewicht einstellt, das einem weiteren Abdampfen entgegen wirkt. In allen Fällen kommt auch die Oxidation im Laufe der Diffusionstemperungen zum Stillstand, sobald der Restsauerstoff in den Ampullen verbraucht ist.

Um sicherzustellen, daß auch das an Si-reichen Proben aufwachsende Oxid so dünn war, das es die Diffusion der ^{71}Ge -Tracer nicht entscheidend beeinträchtigte, wurden Proben aus reinem Si, $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$ bzw. reinem Ge für 2 h bei relativ hohen Temperaturen von 1300 °C, 1050 °C bzw. 900 °C unter Schutzgas getempert. Anschließend wurde die Dicke des dabei aufgewachsenen Oxids mittels Ellipsometrie und XPS (*X-Ray Photoelectron Spectroscopy*) gemessen (Abb. 36). Die Dicke der auf die Si-Probe aufgewachsenen SiO_2 -Schicht betrug 6 nm (was einem Si-Verbrauch von ca. 2,6 nm Dicke entspricht [FPS88]) und ist somit für die Diffusionsmessungen vernachlässigbar. Die im XPS-Spektrum in Abb. 36 ebenfalls erkennbare hohe C-Konzentration an der Probenoberfläche unterstreicht die Notwendigkeit eines äußerst gründlichen Reinigungsverfahrens vor den Diffusionstemperungen. Das Oxid auf der $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$ -Probe bestand neben SiO_2 auch aus GeO_2 und war ca. 5 nm dick. Von der Bildung eines gemischten Oxides an der Oberfläche von SiGe-Schichten bei geeigneten Temperatmosphären wird auch in [ELK91] und [TSA02] berichtet. Gemäß [FW87] und [HZH97] beschleunigt die Anwesenheit von Ge-Atomen die Oxidation von Si, was zu höheren Oxidationsraten führt. Dieser Effekt wurde bei der Probe aus $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$ durch die im Vergleich zur Temperung der Si-Probe deutlich kleinere Temperatur allerdings kompensiert. Auf der Ge-Probe konnte kein Oxid festgestellt werden; vielmehr ist davon auszugehen, daß leichtflüchtiges GeO von der Probenoberfläche abgedampft ist, ohne daß aber eine Schwärzung der Ampulle, in der die Temperung durchgeführt wurde, erkennbar war. Demnach ist der Oxidationseffekt auch in reinem Ge für die Diffusionsuntersuchungen vernachlässigbar, zumal der Abdampfeffekt durch Abdeckung der Oberfläche mit einer Probe desselben Materials weiter unterdrückt werden konnte.

Die unter Beobachtung (iii) genannte hervorragende Anpassung der Diffusionsprofile in großen Tiefen bestätigt die Annahme, daß o.g. Oberflächeneffekte die Diffusion in großer Probentiefe praktisch nicht beeinflussen.

5.2.2.2 Strahlenschädigung

Man könnte vermuten, daß zusätzlich zum eben bereits zur Erklärung der Beobachtung (i) erwähnten Schneepflugeffekt auch ^{71}Ge -Isotope, die am Strahlenschaden festgehalten werden, zu einer Erhöhung der gemessenen Radioaktivität beitragen. Dies könnte aus Beobachtung (ii) gefolgert werden. Um dies zu prüfen, wurde bei einer Probe auf die sonst durchgeführte Vortemperung zum Ausheilen des Strahlenschadens verzichtet bzw. bei einer weiteren Probe die Vortemperungsdauer verachtacht. Dies hatte jedoch keine Auswirkung auf die Form des Diffusionsprofils. Es ist deshalb davon auszugehen, daß allenfalls eine geringe Konzentration von ^{71}Ge -Radiotracer an immobilen, stabilen Fehlstellenagglomeraten eingefangen werden, die als Folge der Strahlenschädigung gebildet werden. Wie später noch gezeigt wird, ist dies z.B. bei der ^{11}C -Diffusion in Ge der Fall.

5.2.2.3 Mathematisch Konsequenzen

Nach obigen Überlegungen gelten in den meisten Fällen die Randbedingungen (3.6) oder (3.7) nicht exakt. Das Verhalten der Diffusionsprofile in Oberflächennähe legt in der Tat nahe, daß ein Oberflächenbereich existiert, dessen Ausdehnung vor allem zu Beginn der Diffusionstemperung anwächst und der sowohl Reflexions- als auch Senkencharakter besitzt. Mathematisch wurde diesem Verhalten dadurch Rechnung getragen, daß in Gleichung (3.8) vor der zweiten Klammer das Zeichen \pm durch $+k$ ersetzt und $-1 \leq k \leq +1$ zugelassen wurde. Außerdem wurde der der Normierung auf die Gesamtteilchenzahl dienende Vorfaktor vor der eckigen Klammer in Gleichung (3.8) durch \tilde{C}_0 ersetzt, da er im numerischen Anpassungsprozeß lediglich als freier Parameter dient. Damit ergibt sich als modifizierte Lösung

$$C(x,t) = \tilde{C}_0 \left[\operatorname{erfc} \left(- \frac{\frac{x_0 + x}{2\sigma^2 + 4Dt}}{\sqrt{\frac{1}{2\sigma^2} + \frac{1}{4Dt}}} \right) \exp \left(- \frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2 + 4Dt} \right) + k \cdot \operatorname{erfc} \left(- \frac{\frac{x_0 - x}{2\sigma^2 - 4Dt}}{\sqrt{\frac{1}{2\sigma^2} + \frac{1}{4Dt}}} \right) \exp \left(- \frac{(x+x_0)^2}{2\sigma^2 + 4Dt} \right) \right], \quad (5.1)$$

die weiterhin eine Gauß-Verteilung als Anfangsverteilung voraussetzt, allerdings mit der Diffusionsdauer t veränderliche Randbedingungen besitzt, die analytisch nicht angegeben werden können. In Abb. 37 sind für feste mittlere Diffusionsverbreiterungen $x_D \equiv \sqrt{4Dt}$ Simulationen für variierende Werte von k dargestellt. Die Simulation zeigt, daß das Verhalten der durch (5.1) eingeführten semi-empirischen Lösung sehr gut den Verlauf der tatsächlichen Diffusionsprofile beschreibt. Insbesondere erhält man exakt für $k = 1$ wieder den Fall einer perfekt reflektierenden Oberfläche, für $k = -1$ den Fall einer perfekten Senke.

Wird ein Diffusionsprofil mit der Lösung aus (5.1) angepaßt, so erhält man für die so bestimmte mittlere Diffusionsverbreiterung $x_D(k)$ einen Wert, der wie erwartet zwischen den Werten liegt, die man für die Anpassung einer perfekten Reflexionslösung, d.h. $x_D(k = +1)$, und der Anpassung einer perfekten Senkenlösung, d.h. $x_D(k = -1)$, erhält: $x_D(k = -1) \leq x_D(k) \leq x_D(k = +1)$. In den meisten der in dieser Arbeit auftretenden Fälle unterscheiden sich $x_D(k = -1)$ und $x_D(k = +1)$ allerdings um weniger als 5 %, in Ausnahmefällen jedoch kann die Differenz bis zu 25 % betragen. Da außerdem die unter Abschn. 5.2.2., (i) und (ii), beschriebenen Oberflächeneffekte umso weniger Einfluß auf die Auswertung der Diffusionsprofile haben, je größer die mittlere Diffusionsverbreiterung ist, wurde x_D in dieser Arbeit nach Möglichkeit größer als 150 nm gewählt.

5.2.3 Übersicht: Diffusionsdaten von ^{71}Ge in SiGe

In den Abbn. 38 bis 182 sind alle weiteren ^{71}Ge -Diffusionsprofile dargestellt. Die aus diesen Profilen ermittelten Tracer-Selbstdiffusionskoeffizienten D^T sind in den Tabellen 4 bis 17 für die verschiedenen Zusammensetzungen zusammengestellt. Trägt man die bei verschiedenen Temperaturen und in den verschiedenen Zusammensetzungen ermittelten D^T -Werte in einer Arrhenius-Darstellung auf (Abb. 183), so ergibt sich folgendes Gesamtbild:

- (i) Die Tracer-Selbstdiffusionskoeffizienten D^T zeigen in der Arrhenius-Auftragung keine sichtbare Krümmung und folgen für jede Zusammensetzung einer einzigen effektiven Arrhenius-Geraden gemäß Gleichung (3.26). Die zugehörigen Arrhenius-Parameter H und D_0^T sind in Tabelle 18 zusammengestellt.
- (ii) Die Ge-Diffusivität bei fester Temperatur steigt mit zunehmendem Ge-Gehalt der Proben monoton an.

Letzteres ist auch in Abb. 184 zu sehen, in der D^T für verschiedene Temperaturen (900 °C, 1000 °C und 1100 °C) als Funktion des Ge-Gehaltes y aufgetragen ist. Auffällig in dieser Darstellung ist, daß bei $y \approx 0,35$ ein Knick im monotonen Anstieg der D^T -Werte mit dem Ge-Gehalt auftritt. Trägt man außerdem die aus den Arrhenius-Geraden bestimmten Werte für D_0^T und H als Funktion des Ge-Gehalts auf (Abb. 185), so beobachtet man auch hier sowohl für die $D_0^T(y)$ - als auch die $H(y)$ -Kurve einen Knick bei $y \approx 0,35$.

Aus Abb. 183 wird weiter deutlich, daß die D_0^T -Werte nicht davon abhängen, ob die Selbstdiffusionsmessungen an epitaktischen Schichten oder an Volumenkristallen durchgeführt wurden, so daß im folgenden nicht mehr zwischen Ergebnissen an epitaktischen Schichten und Volumenkristallen unterschieden werden muß.

Ein interessantes Detail ist aus Tabelle 19 ersichtlich. Dort sind die mit Hilfe der Arrhenius-Parameter aus Tabelle 18 berechneten Tracer-Selbstdiffusionskoeffizienten für die Ge-Diffusion in SiGe am Schmelz- bzw. Liquiduspunkt zusammengestellt. Es ist bemerkenswert, daß alle Werte für D^T innerhalb eines eng begrenzten Bereichs von

$3,5 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ bis $2,4 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ liegen. Außerdem fällt auf, daß diese Werte ebenfalls bei $y = 0,35$ ein Minimum besitzen.

Die vorgestellten ^{71}Ge -Diffusionsdaten in reinem Si sind in guter Übereinstimmung mit den Literaturdaten über die Ge-Diffusion in Si (Abb. 8 und Tabelle 1). Die in dieser Arbeit bestimmten ^{71}Ge -Selbstdiffusionsdaten in Ge sind ebenfalls in guter Übereinstimmung mit Ge-Selbstdiffusionsdaten aus der Literatur (Abb. 10 und Tabelle 2). Die vorgestellten ^{71}Ge -Diffusionsdaten in SiGe unterscheiden sich aber deutlich von den Daten von MCVAY und DUCHARME [MD74, MD75], deren ^{71}Ge -Selbstdiffusionskoeffizienten teilweise um mehr als zwei Größenordnung über den in dieser Arbeit gemessenen Werten für D^T liegen. Die genannten Autoren führten ihre ^{71}Ge -Diffusionsmessungen an polykristallinem SiGe mittels des Radiotracer-Verfahrens in Verbindung mit mechanischer Schichtenteilung durch Schleifen durch. Die Tatsache, daß die Messungen an polykristallinem Material durchgeführt wurden, ist allerdings weniger kritisch, da die mittlere Korngröße des Materials ca. 3 mm betrug und damit deutlich größer war als die mittleren Diffusionsverbreiterungen der Diffusionsprofile. Die ^{71}Ge -Diffusionsprofile zeigen jedoch für $y < 0,5$ in der $\log D-x^2$ -Auftragung einen Knick in mit zunehmendem Ge-Gehalt abnehmender Proben tiefe, während für $y > 0,5$ dieser Knick verschwindet. Die Ursache dieses Abknickens ist bis heute ungeklärt und stellt die Auswertung der Diffusionsprofile und damit alle weiteren Ergebnisse (u.a. ein Knick in den Kurven von $H(y)$ und $D_0^T(y)$ bei $y \approx 0,35$) der Arbeiten von MCVAY und DUCHARME in Frage. Demgegenüber liegen die Ergebnisse für D^T von kürzlich mittels SIMS durchgeführten Messungen der ^{72}Ge -Selbstdiffusion in Heterostrukturen von ZANGENBERG et al. [ZHF01] für die Zusammensetzungen $y = 0; 0,10; 0,20; 0,30; 0,40$ und $0,50$ in der gleichen Größenordnung wie die D^T -Daten aus dieser Arbeit. Die ^{72}Ge -Messungen ergaben für die Aktivierungsenthalpie $H(y)$ tendentiell eine Abnahme von 4,66 eV bei $y = 0$ auf 3,23 eV bei $y = 0,50$, während sich für den Verlauf von $D_0^T(y)$ aufgrund der großen Streuung der D_0^T -Werte kein einheitliches Bild (Abb. 186) ergab. Die Streuung hat ihre Ursache darin, daß der bei den Diffusionsmessungen abgedeckte Temperaturbereich 75–125 K vergleichsweise klein war. Erfahrungsgemäß ist die Zuverlässigkeit der Werte für D_0^T und auch für H für solch kleine Temperaturbereiche aufgrund der Empfindlichkeit bei der numerischen Anpassung des Arrhenius-Gesetzes eingeschränkt bzw. zumindest geringer als bei den ^{71}Ge -Messungen in dieser Arbeit, in der grundsätzlich Temperaturbereiche $> 150 \text{ K}$ abgedeckt wurden.

5.3 Diffusion von ^{31}Si in SiGe

Diffusionskoeffizienten von ^{31}Si wurden im Temperaturbereich zwischen 843 und 1273 °C für Ge-Gehalte von $y = 0$, $y = 0,50$, $y = 0,80$ und $y = 1,0$ bestimmt, wobei die (effektiven) Temperzeiten zwischen 20 und 90 min lagen. Außerdem wurde für jede Zusammensetzung ein Implantationsprofil gemessen. In den Abbn. 187 bis 190 sind die ^{31}Si -Implantationsprofile für die vier untersuchten SiGe-Zusammensetzungen dargestellt. Bemerkenswert ist,

daß die Konzentration von ^{31}Si im Implantationsmaximum maximal 0,0015 ppm ist. Auch hier ist wie bei den ^{71}Ge -Implantationsprofilen in dem der Probenoberfläche abgewandten Teil des Profils ein Profilausläufer als Folge von Gitterführungseffekten zu beobachten. Über ähnliche Ausläufer in Implantationsprofilen bei Implantationen von ^{30}Si in (100)-orientierte Ge-Proben, deren Probenoberflächen um 8° gegen die Strahlrichtung verkippt waren, berichten beispielsweise RÄISÄNEN et al. [RHA81]. Die durch die Ionenimplantation verursachte Strahlenschädigung ist aufgrund der deutlich geringeren Ionendosis als bei der ^{71}Ge -Implantation (Abschn. 4.2.2.1) sowie der geringeren Beschleunigungsenergie und Masse von ^{31}Si vernachlässigbar.

Bezüglich der Auswertung der ^{31}Si -Diffusionsprofile gelten die Überlegungen aus Abschn. 5.2.2 entsprechend; deshalb wurde Gleichung (5.1) zur numerischen Anpassung herangezogen. In den Abbn. 191 bis 203 sind ^{31}Si -Diffusionsprofile in SiGe sowie numerische Anpassungen der Gleichung (5.1) an dieselbigen dargestellt. Es ist zu beachten, daß einige Diffusionsprofile an der Oberfläche eine stark erhöhte ^{31}Si -Konzentration zeigen. Diesen Profilen ist gemeinsam, daß sie an Proben gemessen wurden, die bei der Diffusionstemperatur nicht mit einer nichtimplantierten Probe gleicher Zusammensetzung abgedeckt waren. Das hatte zur Folge, daß ^{31}Si -Atome, die auf ihrem Diffusionsweg durch die Probe an die Oberfläche gelangten, dort durch Reaktion mit vorhandenem Restsauerstoff als nicht-flüchtiges SiO_2 gebunden wurden, wie es z.B. auch bei den ^{30}Si -Diffusionsprofilen in [RHA81] zu sehen ist. An solchen Proben war die Senkenwirkung der Oberfläche besonders groß. Die aus den Diffusionsprofilen ermittelten Diffusionskoeffizienten sind in den Tabellen 20 bis 23 aufgelistet und in Abb. 204 zusammen mit den ^{71}Ge -Diffusionsdaten in den entsprechenden Zusammensetzungen dargestellt. Es fällt auf, daß für $y = 1,0$ und $y = 0,80$ die ^{31}Si -Diffusion unwesentlich langsamer abläuft als die ^{71}Ge -Diffusion. Die ^{31}Si -Diffusionskoeffizienten können im Falle von $y = 1$ durch die Arrhenius-Gerade

$$D^T = 4,3 \cdot 10^{-3} \exp\left(-\frac{3,19 \text{ eV}}{k_B T}\right) \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \quad (5.2)$$

beschrieben werden, im Falle von $y = 0,80$ durch die Arrhenius-Gerade

$$D^T = 7,5 \cdot 10^{-3} \exp\left(-\frac{3,52 \text{ eV}}{k_B T}\right) \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \quad (5.3)$$

Die Aktivierungsenthalpien für die ^{31}Si -Diffusion sind damit geringfügig höher als die entsprechenden Werte für die ^{71}Ge -Diffusion. Die präexponentiellen Faktoren sind für die ^{31}Si -Diffusion im Rahmen der Meßgenauigkeit geringfügig kleiner als für die ^{71}Ge -Diffusion. Für $y = 0,50$ fallen ^{31}Si - und ^{71}Ge -Diffusionsdaten im Rahmen der Meßgenauigkeit zusammen. Für $y = 0$ liegt der gemessene Wert für D_0^T ungefähr auf der extrapolierten Arrhenius-Geraden der ^{71}Ge -Selbstdiffusion in Si. Für die ^{31}Si -Selbstdiffusionsmessungen dieser Arbeit gelten die in Abschn. 5.2.3, (i) und (ii), für die ^{71}Ge -Selbstdiffusion gemachten Aussagen entsprechend. Die für $y = 0,80$ und $y = 1,0$ aus den ^{31}Si -Diffusionskoeffizienten

bestimmten Werte für H und D_0^T sind zusammen mit den Ergebnissen aus den ^{71}Ge -Diffusionsexperimenten in Abb. 185 dargestellt und in Tabelle 24 eingetragen. Wie aus Abb. 185 ersichtlich ist, fügen sich die ^{31}Si -Arrhenius-Parameter sehr gut in die Gesamtverläufe der $H(y)$ - und $D_0^T(y)$ -Kurven für ^{71}Ge ein.

Der einzige in dieser Arbeit gemessene Wert für die ^{31}Si -Selbstdiffusion bei 1273 °C ($D^T = 2,8 \cdot 10^{-17}\text{ m}^2\text{s}^{-1}$) ist in guter Übereinstimmung mit den Si-Selbstdiffusionsdaten von BRACHT et al. [BHC98] und URAL et al. [UGP99] (Abb. 8 und Tabelle 1). Die Diffusion von Si in reinem Ge wurde bisher nur von RÄISÄNEN et al. [RHA81] mit Hilfe des Isotops ^{30}Si untersucht (Abb. 10 und Tabelle 2). Diese Autoren erhielten aus ihren Messungen im Temperaturbereich zwischen 650 und 900 °C eine Aktivierungsenthalpie von $2,9\text{ eV}$, die gut mit dem in dieser Arbeit bestimmten Wert von $3,19\text{ eV}$ übereinstimmt. Jedoch ist der in [RHA81] bestimmte präexponentielle Faktor mit $2,4 \cdot 10^{-5}\text{ m}^2\text{s}^{-1}$ um zwei Größenordnungen kleiner als der in der vorliegenden Arbeit bestimmte Wert. RÄISÄNEN et al. merken in [RHA81] selbst jedoch kritisch an, daß die verwendete hohe Implantationsdosis von bis zu $4 \cdot 10^{16}\text{ Ionen/cm}^2$, die – neben der enormen Strahlenschädigung – zu hohen Tracer-Konzentrationen von bis zu $2,5\text{ At.-%}$ im Implantationsmaximum führt, die Ergebnisse stark beeinflussen. Außerdem ist die in [RHA81] verwendete Lösung der Diffusionsgleichung nicht geeignet, um den offensichtlich vorhandenen Effekt der Tracer-Ausdiffusion bzw. der Tracer-Segregation an der Oberfläche zu berücksichtigen. Da in [RHA81] zwei Diffusionsprofile bei 700 °C bzw. 850 °C abgebildet sind, wurden diese mit der in dieser Arbeit verwendeten Lösung der Diffusionsgleichung aus (5.1) neu angepaßt. Das Resultat ist in Abb. 205 dargestellt. Für das Diffusionsprofil bei 700 °C wurde $D^T = 3,17 \cdot 10^{-20}\text{ m}^2\text{s}^{-1}$ erhalten, in guter Übereinstimmung mit den in [RHA81] erhaltenen Werten von $2,5 \cdot 10^{-20}$ bis $3,4 \cdot 10^{-20}\text{ m}^2\text{s}^{-1}$. Dagegen wurde für das Diffusionsprofil bei 850 °C aus Anpassung von Gleichung (5.1) ein Wert $D^T = 4,39 \cdot 10^{-18}\text{ m}^2\text{s}^{-1}$ erhalten, der deutlich über den in [RHA81] erhaltenen Werten von $2,3 \cdot 10^{-18}\text{ m}^2\text{s}^{-1}$ bis $2,6 \cdot 10^{-18}\text{ m}^2\text{s}^{-1}$ liegt. Aus den beiden neu bestimmten Werten für D^T erhält man nach Anpassung einer Arrhenius-Beziehung die Arrhenius-Parameter $H = 3,2\text{ eV}$ und $D_0^T = 1,1 \cdot 10^{-3}\text{ m}^2\text{s}^{-1}$, in guter Übereinstimmung mit den in dieser Arbeit erhaltenen Arrhenius-Parametern $H = 3,19\text{ eV}$ und $D_0^T = 4,3 \cdot 10^{-3}\text{ m}^2\text{s}^{-1}$.

5.4 Diffusion von ^{11}C in Ge

Diffusionskoeffizienten von ^{11}C in Ge wurden im Temperaturbereich zwischen 750 und 890 °C bestimmt, wobei die (effektiven) Temperzeiten zwischen 564 s und $106,3\text{ min}$ lagen. Außerdem wurde ein Implantationsprofil gemessen. In Abb. 206 sind das ^{11}C -Implantationsprofil sowie zwei ausgewählte ^{11}C -Diffusionsprofile wiedergegeben. Es fällt auf, daß sich die ^{11}C -Profile deutlich von den bereits dargestellten ^{71}Ge - bzw. ^{31}Si -Diffusionsprofilen unterscheiden. Obwohl der Ionenstrom bei den ^{11}C -Implantationen deutlich kleiner war als bei den ^{71}Ge -Implantationen (Abschn. 4.2.1.1), sind die Folgen der Strahlenschädigung so groß, daß der weitaus größte Teil der implantierten Radiotracer auch während der

Diffusionstemperatur an den Strahlenschaden gebunden bleibt und das eigentliche Diffusionsprofil sich nur in logarithmischer Auftragung der Schichtaktivitäten deutlich vom Untergrund abhebt. Als Ursache für die auch während der Diffusionstemperatur stabile „Dekoration“ des Strahlenschadens kommen mehrere Möglichkeiten in Betracht: Zum einen könnte aufgrund der Implantation von ^{11}C in Form von $^{11}\text{C}^{16}\text{O}$ der Kohlenstoff an ebenfalls implantiertem ^{16}O gebunden sein. Da allerdings davon auszugehen ist, daß die $^{11}\text{C}^{16}\text{O}$ -Moleküle beim Aufprall auf die Oberfläche zerplatzen, und da die ^{11}C - bzw. ^{16}O -Konzentration selbst im Maximum der jeweiligen Implantationsprofile (die beide in fast identische Tiefe liegen) deutlich kleiner als 1 ppm ist, ist die Wahrscheinlichkeit der Bildung einer ^{11}C - ^{16}O -Bindung verschwindend klein. Aus demselben Grund ist auch die Ausscheidung von ^{11}C in Form von ^{11}C -Agglomeraten, die aufgrund der extrem kleinen Löslichkeit von C in Ge (ca. 10^{-5} ppm am Schmelzpunkt [HHL82]) erwartet werden könnte, auszuschließen. Die extrem geringe C-Löslichkeit führt aber auch dazu, daß C die Tendenz besitzt, sich an Oberflächen und Defekten auszuschleiden. Dies kann auch bei den ^{11}C -Diffusionsprofilen beobachtet werden, die an der Oberfläche eine drastisch erhöhte ^{11}C -Konzentration zeigen. Geht man davon aus, daß bei der Implantation in geringem Maße Leerstellenagglomerate von atomaren Abmessungen entstehen, in denen implantierte ^{11}C -Atome festgehalten werden, so werden solche ^{11}C -Atome die Rekombination der verlagerten Ge-Atome mit den Leerstellen-Clustern verhindern. Dies könnte die „Dekoration“ des Strahlenschadens erklären. Eine alternative Erklärung wird in [SCN02] angedeutet: Demnach neigt C zur Bildung von stabilen SiC-Ausscheidungen. Zu solchen Ausscheidungen kann es insbesondere im Bereich des Strahlenschadens leicht kommen, da hier Si-Atome mit nicht abgesättigten Bindungen vorhanden sind.

Zur Anpassung der ^{11}C -Diffusionsprofile wurde Gleichung (5.1) verwendet. Weitere ^{11}C -Diffusionsprofile sind in den Abbn. 207 bis 212 dargestellt. Die zugehörigen Diffusionskoeffizienten sind in Tabelle 25 zusammengestellt und in Abb. 204 zusammen mit ^{71}Ge - und ^{31}Si -Diffusionsdaten aufgetragen. Alle ^{11}C -Diffusionskoeffizienten in Ge können durch ein Arrhenius-Gesetz beschrieben werden:

$$D^T = 1,9 \cdot 10^{-3} \exp\left(-\frac{3,01 \text{ eV}}{k_B T}\right) \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \quad . \quad (5.4)$$

Die Abbn. 206 bis 212 bestätigen auch die Zuverlässigkeit der in Abschn. 4.2.2.4 beschriebenen Eichung der Abtrageraten auf den Strahlstrom: Alle aufgrund des Strahlenschadens stehengebliebenen Implantationsprofile haben ihr Maximum wie physikalisch zu erwarten in fast exakt derselben Probentiefe.

6 Diskussion

Die Ergebnisse der ^{71}Ge - und ^{31}Si -Diffusion in SiGe werden im folgenden auf Grundlage des in Abschn. 3.3.2 vorgestellten Bildes über die Selbstdiffusion in reinem Si und reinem Ge diskutiert. Zuvor muß aber darüber nachgedacht werden, warum die diesem Bild zugrundeliegende Annahme haltbar ist, daß die Produktion bzw. die Vernichtung der als Diffusionsvehikel dienenden atomaren Eigenfehlstellen vorwiegend an ausgedehnten Defekten erfolgt, auch in solch strukturell außerordentlich perfekten Kristallen, wie sie in dieser Arbeit als auch bei den meisten der in den Tabellen 1 und 2 ausgeführten Arbeiten zur Selbstdiffusion in Si und Ge verwendet wurden.

Die ^{11}C -Diffusionsergebnisse in reinem Ge werden durch Vergleich mit ^{71}Ge - und ^{31}Si -Diffusionsdaten interpretiert und mit dem Diffusionsverhalten von anderen Gruppe-IV-Elementen in Ge verglichen.

6.1 Zur Einstellung des Fehlstellengleichgewichts

Bei Diffusionsuntersuchungen wird in der Regel davon ausgegangen, daß sich das thermodynamische Gleichgewicht der als Diffusionsvehikel dienenden atomaren Eigenfehlstellen (im Falle von SiGe also Eigenzwischengitteratome und Leerstellen) durch Emission und Absorption der atomaren Eigenfehlstellen an ausgedehnten Defekten, z.B. Fehlstellenagglomeraten, Versetzungen, Stapelfehlern, Korngrenzen und Oberflächen, einstellt (freies Gleichgewicht). Mit zunehmender Perfektion der Halbleiterkristalle könnte allerdings die Einstellung des Gleichgewichts der atomaren Eigenfehlstellen kinetisch gehemmt sein (gehemmtes Gleichgewicht), was zu anderen Gleichgewichtskonzentrationen und Aktivierungsenthalpien für die Selbstdiffusion führen würde als im Falle des freien Gleichgewichts. In derartig perfekten Kristallen könnte nämlich die Produktion von Eigenzwischengitteratomen und Leerstellen durch spontane Frenkel-Paar-Produktion eine dominierende Rolle spielen (Abb. 213). Derartige Szenarien können im Rahmen eines Ratengleichungsansatzes beschrieben werden:

$$\frac{dC_I}{dt} = P_I - K_R C_I C_V (D_I + D_V) - K_I C_I C_S D_I \quad (6.1)$$

und

$$\frac{dC_V}{dt} = P_V - K_R C_I C_V (D_I + D_V) - K_V C_V C_S D_V \quad (6.2)$$

(C_v = Konzentration des Fehlstellentyps v [= V oder I], P_v = Produktionsrate des Fehlstellentyps v , K_R = Rekombinationskoeffizient, K_v = Effizienz für die Vernichtung der Defekte des Fehlstellentyps v an ausgedehnten Senken, C_s = Konzentration ausgedehnter Defekte). In diesen Gleichungen beschreiben die 2. bzw. 3. Terme die Rekombination von Eigenzwischengitteratomen und Leerstellen bzw. deren Vernichtung an ausgedehnten Defekten. Mit diesem Ansatz können die thermodynamischen Gleichgewichtskonzentrationen der atomaren Eigenfehlstellen als die Konzentrationen in dem stationären Zustand, in dem genauso viele atomare Eigenfehlstellen produziert wie vernichtet werden, berechnet werden:

$$\frac{dC_I}{dt} = \frac{dC_V}{dt} = 0 \quad . \quad (6.3)$$

Solche Fälle werden in [Fra02, SVF02] diskutiert. Auf zwei ausgewählte Fälle soll an dieser Stelle kurz eingegangen werden: (a) Zum einen auf den (eher akademischen) Fall des perfekten, unendlich ausgedehnten Kristalls ohne ausgedehnte Defekte ($C_s = 0$), in dem Eigenzwischengitteratome und Leerstellen ausschließlich durch Frenkel-Paar-Bildung produziert und durch Rekombination vernichtet werden können. (b) Zum anderen auf den realistischeren Fall eines Kristalls mit sehr geringer Konzentration ausgedehnter Defekte, in dem Eigenzwischengitteratome und Leerstellen sowohl an ausgedehnten Defekten als auch durch Frenkel-Paar-Produktion erzeugt werden können, die Vernichtung von Eigenzwischengitteratomen und Leerstellen aber vorwiegend durch Rekombination von Eigenzwischengitteratomen und Leerstellen erfolgt, d.h., in dem die Annihilation von atomaren Eigenfehlstellen an ausgedehnten Defekten eine untergeordnete Rolle spielt. Im Fall (a) erhält man für die Aktivierungsenthalpien der D^T -Beiträge der Eigenzwischengitteratome, $f_I C_I^{\text{eq}} D_I$,

$$H_I = \frac{1}{2}(H_I^F + H_V^F) + H_I^M \quad (6.4)$$

und der Leerstellen, $f_V C_V^{\text{eq}} D_V$,

$$H_V = \frac{1}{2}(H_I^F + H_V^F) + H_V^M \quad , \quad (6.5)$$

also andere Werte als in der in Abschn. 3.3.2 vorgestellten Theorie [Gleichung (3.24)]. Im Fall (b) ergibt sich für die Eigenzwischengitteratom- und Leerstellenbeiträge zur Selbstdiffusion sogar exakt dieselbe, ebenfalls von Gleichung (3.24) abweichende Aktivierungsenthalpie

$$H_{I,V} = \frac{1}{2}(H_{\text{FP}}^F + H_I^M + H_V^M) \quad (6.6)$$

(H_{FP}^F = Frenkel-Paar-Bildungsenthalpie). Im letzteren Fall dürfte die Arrhenius-Darstellung von D^T keine Krümmung aufweisen, was im Einklang mit den in dieser Arbeit gemachten Beobachtungen zu sein scheint.

Eine Entscheidung darüber, ob die Frenkel-Paar-Produktion bei Selbstdiffusionsmessungen an Si, SiGe und Ge tatsächlich eine Rolle spielt, kann aufgrund qualitativer und quantitativer Analysen der Vielzahl von Übergangsmetalldiffusionsexperimenten in nahezu perfekten Si-Einkristallen getroffen werden. Wie bereits in Abschn. 3.2.3 erwähnt, können durch die Diffusion von Au [SSH84], Pt [HFS89, LSM95] und Zn [SPM88, PSC89, BSM95, GBS00] in Si über den Verdrängungsmechanismus bzw. durch die Diffusion von Cu in Ge [SFH85] über den dissoziativen Mechanismus die Eigenzwischengitteratom- bzw. Leerstellenkonzentrationsverteilungen „dekoriert“ und damit indirekt sichtbar gemacht werden. Diese Experimente zeigen eindeutig, daß in nahezu perfekten Kristallen die Gleichgewichtsverteilung der Eigenzwischengitteratom- bzw. Leerstellenkonzentrationen von ausgedehnten Defekten im Probeninneren und von der Oberfläche her erfolgt, d.h., die Fehlstellenproduktion durch Frenkel-Paar-Bildung spielt eine zu vernachlässigende Rolle. Daher werden die Ergebnisse dieser Arbeit im Rahmen des in Abschn. 3.3.2 vorgestellten Modells diskutiert, das übrigens direkt aus den Ratengleichungen (6.1) und (6.2) unter Annahme der vorwiegenden Produktion und Vernichtung der atomaren Fehlstellen an ausgedehnten Defekten abgeleitet werden kann.

Die genannten Experimente zur Diffusion über den Verdrängungsmechanismus in versetzungsfreiem Si bzw. über den dissoziativen Mechanismus in versetzungsfreiem Ge zeigen deutlich, daß in einem perfekten Kristall die Oberfläche die einzige effektive Quelle für die Produktion atomarer Eigenfehlstellen ist. Bei einem Temperaturwechsel werden die neuen Gleichgewichtskonzentrationen C_v^{eq} ($v = \text{I}, \text{V}$) der atomaren Eigenfehlstellen zuerst an der Oberfläche, die eine Quelle für Eigenzwischengitteratome und Leerstellen darstellt, eingestellt, und breiten sich dann mit dem Diffusionskoeffizienten D_{I} bzw. D_{V} in größere Probentiefen aus. Da die Selbstdiffusion über Eigenzwischengitteratome bzw. Leerstellen mit den viel kleineren Diffusionskoeffizienten $f_{\text{I}}C_{\text{I}}^{\text{eq}}D_{\text{I}}$ bzw. $f_{\text{V}}C_{\text{V}}^{\text{eq}}D_{\text{V}}$ erfolgt und da bei den Selbstdiffusionsexperimenten in dieser Arbeit die Radiotracer-Atome nur wenige nm unter der Oberfläche deponiert wurden, fand die Tracer-Selbstdiffusion immer in Bereichen statt, in denen die Gleichgewichtskonzentrationen der Eigenfehlstellen bereits eingestellt war. Für die Selbstdiffusion in Si konnten BRACHT et al. [BSM95] den Leerstellendiffusionskoeffizienten bestimmen und $D^{\text{T}} \ll D_{\text{V}}$ in der Tat bestätigen. Da die Diffusionsfront der Radiotracer deutlich hinter der Equilibrationsfront der atomaren Eigenfehlstellen verläuft, ist es für die Radiotracer-Selbstdiffusion auch unerheblich, ob Versetzungen oder andere ausgedehnte Defekte in der Probe vorhanden sind, die möglicherweise zu einer schnelleren und homogenen Einstellung der Gleichgewichtskonzentrationen der atomaren Eigenfehlstellen in der gesamten Probe beitragen. Deshalb hat die Versetzungsdichte der Proben keinen Einfluß auf die Selbstdiffusion.

6.2 Diffusion von ^{71}Ge und ^{31}Si in SiGe

Wie bereits in Abschn. 5.2.3 beschrieben, zeigen sowohl die Auftragung der ^{71}Ge -Tracer-Selbstdiffusionskoeffizienten in Abhängigkeit vom Ge-Gehalt y bei konstanten Temperaturen (Abb. 184) als auch die Auftragung von H und D_0^T als Funktion von y (Abb. 185) einen Knick bei $y \approx 0,35$. Die ebenfalls in Abb. 185 eingetragenen Werte für H und D_0^T aus den ^{31}Si -Diffusionsexperimenten fügen sich hervorragend in den von den ^{71}Ge -Werten vorgegebenen Gesamtverlauf ein. Es liegt nun die Annahme nahe, daß das Knicken der $D^T(y)$ -, $H(y)$ - und $D_0^T(y)$ -Kurven etwas mit dem zumindest für hohe Temperaturen erwarteten Wechsel des Diffusionsmechanismus vom indirekten Eigenzwischengitteratommechanismus auf der Si-Seite zum Leerstellenmechanismus auf der Ge-Seite der Legierung zu tun hat. Diese nicht ins Detail gehende Interpretation ist naheliegend, weil insbesondere D_0^T wesentliche Größen enthält, welche für die Diffusionsmechanismen typisch sind (z.B. Entropien, vgl. Abschn. 3.1.2) und so eine Änderung des Diffusionsmechanismus sich in erster Linie in einer Änderung von D_0^T zeigen wird.

Die in Abschn. 2.3 vorgestellte Beschreibung der Bindungsverhältnisse und der atomistischen Struktur von SiGe-Legierungen führt nun im folgenden zu einer detaillierten Interpretation der im Rahmen dieser Arbeit erhaltenen Selbstdiffusionsdaten, die die bereits oben gemachte Annahme eines Wechsels des Diffusionsmechanismus bei $y \approx 0,35$ in einem schlüssigen Gesamtbild erscheinen läßt.

6.2.1 Wechsel des Diffusionsmechanismus bei $y \approx 0,35$

Als Diskussionsgrundlage dient Abb. 214, in der H und D_0^T in Abhängigkeit vom Ge-Gehalt y wie in Abb. 185 dargestellt sind. Außerdem sind in Abb. 214 drei zusätzliche Linien eingezeichnet: (i) Die gestrichelte Linie gibt die Aktivierungsenthalpie H_V des Leerstellenbeitrags zur Selbstdiffusion wieder. (ii) Die punktierte Linie ist eine Obergrenze für den Verlauf des präexponentiellen Faktors $D_{V,0}^T$ des Leerstellenbeitrags. (iii) Die strichpunktierte Linie ist eine Obergrenze für den Verlauf des präexponentiellen Faktors $D_{I,0}^T$ des Eigenzwischengitteratombeitrags. Wie man zu diesen Verläufen kommt, wird qualitativ an entsprechender Stelle im Detail erläutert. Eine quantitative Abschätzung für $D_{V,0}^T$ und $D_{I,0}^T$ erfolgt am Ende dieses Abschnitts.

Ausgangspunkt der folgenden Interpretation der Selbstdiffusionsdaten dieser Arbeit sind folgende Erkenntnisse über die atomistische Struktur und die Bindungscharakteristika in SiGe-Legierungen [MT93, ANS94, RYG99, ATH99]: Die Ge–Ge-Bindungen in SiGe-Legierungen sind lang und weich und werden mit zunehmendem Ge-Gehalt länger bis zu ihrem Gleichgewichtswert in reinem Ge. Die Si–Si-Bindungen in SiGe-Legierungen sind vergleichsweise kurz und starr und ändern sich praktisch nicht mit dem Ge-Gehalt. Der Bindungscharakter der Si–Ge-Bindungen liegt zwischen dem für die Si–Si- und die Ge–Ge-Bindungen. Schließlich ist die Zunahme der Si–Ge-Bindungslängen mit steigendem Ge-Gehalt schwächer ausgeprägt als für die Ge–Ge-Bindungen.

Aufgrund der beschriebenen Bindungsverhältnisse ergibt sich, daß das Gitter von reinem Si starr und hart ist. Dagegen ist das Gitter von reinem Ge im Vergleich zum Si-Gitter locker und weich. Aufgrund der lockeren und weichen Struktur von Ge wird leicht verständlich, daß beim Erzeugen einer Leerstelle in Ge die der Leerstelle benachbarten Ge-Atome sich in den entstanden Hohlraum hinein bewegen. Dies führt zu einer Erhöhung der Bildungs- und somit auch der Selbstdiffusionsentropie, was sich in $D_{V,0}^T$ -Werten von ca. $10^{-2} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ widerspiegelt. Die Leerstelle ist also über mehrere Atomvolumina ausgeschmiert. Dadurch ist die Atomdichte lokal erniedrigt, d.h., die ausgeschmierte Leerstelle entspricht einem amorphen Bereich, der in das ansonsten kristalline Ge eingebettet ist. Über derartig ausgeschmierte Leerstellen läuft, wie in Abschn. 3.4 ausgeführt, die Selbstdiffusion in Ge ab.

Der Charakter der ausgeschmierten Leerstelle bleibt auch in der Legierung im Bereich $1,0 \geq y \geq 0,35$ erhalten, was aus der nur unwesentlichen Abnahme von D_0^T mit abnehmendem Ge-Gehalt folgt. Dies legt den Schluß nahe, daß sich auch der Diffusionsmechanismus nicht ändert, d.h., daß die Selbstdiffusion in SiGe-Legierungen für $y \geq 0,35$ über einen Leerstellenmechanismus abläuft und somit in diesem Bereich $D_0^T \equiv D_{V,0}^T$ und $H \equiv H_V$ gilt. Die Tatsache, daß D_0^T mit abnehmendem Ge-Gehalt leicht abnimmt, läßt sich ebenfalls verstehen: Je Si-reicher die Legierung wird, desto Si-reicher wird auch die Nachbarschaft um die Leerstelle herum. Da Si-Si- und auch Si-Ge-Bindungen starrer als Ge-Ge-Bindungen sind, wird mit abnehmendem Ge-Gehalt das Gitter starrer und die Ausschmierung der Leerstellen und S_V nehmen ab. Dies äußert sich in einer Abnahme des präexponentiellen Faktors $D_{V,0}^T$. Gleichzeitig steigt H_V mit abnehmendem Ge-Gehalt monoton an; denn je mehr Si-Atome in der Legierung vorhanden sind, desto mehr Si-Ge- und Si-Si-Bindungen gibt es, und desto größer ist die Wahrscheinlichkeit, daß bei der Bildung einer Leerstelle starre Si-Ge- oder Si-Si-Bindungen gebrochen werden müssen. Hinzu kommt, daß auch die Ge-Ge-Bindung starrer wird, weil ihre Bindungslänge mit abnehmendem Ge-Gehalt kleiner wird. All dies führt zu einer Erhöhung der Leerstellenbildungsenthalpie H_V^F und somit zu einer Erhöhung der Selbstdiffusionsenthalpie H_V . Diese Vorstellung setzt voraus, daß sich die Leerstellenwanderungsenthalpie H_V^M nur geringfügig ändert, was wegen $H_V^M \approx 0,3 \text{ eV}$ [BM71] für Ge und $H_V^M \lesssim 0,45 \text{ eV}$ [WTC79] für Si wohl auch für die Legierung zu erwarten ist. Der beobachtete Verlauf von $H_V^F(y)$ ist in hervorragender Übereinstimmung mit systematischen ab-initio-Rechnungen von VENEZUELA et al. [VDS02].

Interessant ist, daß an der Perkulationsgrenze der SiGe-Legierungen bei $y \approx 0,43$ keine Unstetigkeiten in den $H(y)$ - und $D_0^T(y)$ -Kurven auftreten. Dies hätte man aus folgendem Grund erwarten können: Da die Diffusion von Ge und Si in reinem Ge bei fester Temperatur um Größenordnungen schneller abläuft als in reinem Si, könnte man davon ausgehen, daß die Selbstdiffusion im wesentlichen in den ausgedehnten Ge-Pfaden, die es im Bereich $y \geq 0,43$ gibt, abläuft. Demnach sollte sich im Bereich $y \lesssim 0,43$, in dem die Ge-Pfade von ausgedehnten Si-Pfaden unterbrochen sind, das Diffusionsverhalten deutlich ändern, da nun

die Diffusion der Tracer-Atome auch durch Si-Gebiete hindurch erfolgen muß. Daß die Perkolationsgrenze aber offensichtlich keine kritische Zusammensetzung in bezug auf die Selbstdiffusion darstellt, läßt den Schluß zu, daß die im Experiment bestimmte Größe H_V nicht die Leerstellenbildungsenthalpie H_V^F in den Ge-Pfaden widerspiegelt, sondern daß H_V^F und somit H_V vielmehr einen Legierungsmittelwert darstellen.

Mit abnehmendem Ge-Gehalt wechselt bei $y \approx 0,35$ die SiGe-Legierung ihren Charakter drastisch: Für $y \lesssim 0,35$ gibt es keine Ge-Cluster mehr, d.h., die Wahrscheinlichkeit, daß ein Si-Atom ausschließlich von Ge-Atomen umgeben ist, wird verschwindend klein. Statt dessen dominieren ausgedehnte Si-Cluster und somit die kurzen und starren Si-Si-Bindungen. Die SiGe-Legierung wird Si-artig, d.h., die Bindungen werden härter, und das Gitter wird starrer. Deshalb sind in Si-reichen SiGe-Legierungen die Leerstellen nicht ausgeschmiert, und $D_{V,0}^T$ (punktierete Linie in Abb. 214) nimmt zwischen $y \approx 0,35$ ($D_{V,0}^T = 5,7 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$) und $y = 0$ ($D_{V,0}^T = 2,1 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ [GBS00]) rasch ab, d.h., die Leerstellen werden zu richtigen „Punktdefekten“ ähnlich wie in Metallen. Da für $y \lesssim 0,35$ die Zahl der Si-Si-Bindungen die aller anderen Bindungen bei weitem übertrifft, kann davon ausgegangen werden, daß sich die Natur der nichtausgeschmierten Leerstellen in diesem Zusammensetzungsbereich nicht ändert, so daß H_V bereits bei $y \approx 0,35$ seinen Si-Wert von ca. 4,2 eV angenommen hat [GBS00] und sich somit im Bereich $0,35 \gtrsim y \geq 0$ nicht mehr ändert (gestrichelte Linie in Fig. 214).

Was die Eigenzwischengitteratome in Si-reichen SiGe-Legierungen anbetrifft, sollte man erwarten, daß diese aufgrund der Starrheit des Kristallgitters überhaupt nicht gebildet werden, da sie von enormen Verzerrungsfeldern umgeben sein und somit sehr große Bildungsenthalpien erfordern sollten. Allerdings besitzt Si ähnlich wie Wasser eine ausgeprägte Dichteanomalie, d.h., die Dichte von Si nimmt beim Schmelzen um ca. 10 % zu. Nach dem Prinzip vom kleinsten Zwang (Prinzip von Braun und LeChâtelier) gibt das Gitter dem bei der Bildung eines Eigenzwischengitteratoms erzeugten lokalen Verzerrungsfeld nach und wird lokal in einem Bereich von einigen Atomvolumina flüssig. In Folge dessen ist das Eigenzwischengitteratom Teil eines Flüssigkeitströpfchens und daher über mehrere Atomvolumina ausgeschmiert. Die Summe aus Bildungs- und Wanderungsentropie derartig ausgeschmierter Eigenzwischengitteratome beträgt in Si ca. $10 k_B$ und ist somit um ein Vielfaches größer als der entsprechende Wert für nichtausgeschmierten Leerstellen ($S_V^F + S_V^M \approx 2 k_B$). Der präexponentielle Faktor des Eigenzwischengitteratombeitrags zur Selbstdiffusion, $D_{I,0}^T$, ist deshalb sehr groß. Dies führt beim Absinken von y unter 0,35 zur Bildung von Eigenzwischengitteratomen, was sich in einem drastischen Anwachsen von $D_{I,0}^T$ äußert (Verlauf von $D_{I,0}^T(y)$ in Abb. 214). Als Folge dominieren die Eigenzwischengitteratome für $y \lesssim 0,35$ die Selbstdiffusion, und dies umso mehr, da gleichzeitig der Leerstellenbeitrag aufgrund des Verlaufs von $D_{V,0}^T(y)$ für $y \lesssim 0,35$ mit abnehmendem Ge-Gehalt stark abnimmt. Dies gilt allerdings nur für hohe Temperaturen, wo, wegen $D_{I,0}^T \gtrsim D_0^T > D_{V,0}^T$, $D_I^T > D_V^T$ ist trotz $H_I \gtrsim H > H_V \approx 4,2 \text{ eV}$. Für tiefe Temperaturen dominiert dagegen der Leerstellenbeitrag D_V^T über den Eigenzwischengitter-

atombeitrag D_1^T . Das ständige Anwachsen von D_0^T und H im Bereich $y \lesssim 0,35$ mit abnehmendem Ge-Gehalt hat folgenden Grund: Je mehr man sich reinem Si nähert, desto kleiner wird die Gitterkonstante. Dadurch steigt die Atomdichte in der Legierung an, und immer mehr Nachbaratome geraten in die ausgeschmierten Bereiche der Eigenzwischengitteratome. Außerdem nimmt die Zahl der weichen Si–Ge- und Ge–Ge-Bindungen mit abnehmendem Ge-Gehalt weiter ab, wodurch die durch die Eigenzwischengitteratome hervorgerufenen Verzerrungen immer weniger durch Dehnung der Bindungen kompensiert werden können. Da mit abnehmendem Ge-Gehalt immer mehr Atome an einem ausgeschmierten Zwischengitteratom beteiligt sind, steigt auch die Aktivierungsenthalpie H_1 mit abnehmendem Ge-Gehalt an.

Nach der vorangegangenen Interpretation bestimmen die Entropien der Eigenfehlstellen, welche Fehlstellensorte die Selbstdiffusion in einer SiGe-Legierung gegebener Zusammensetzung dominiert. Auf der Ge-ähnlichen Seite der Legierung ($0,35 \lesssim y \leq 1$) führt die Weichheit und Lockerheit des Kristallgitters dazu, daß Leerstellen ausgeschmiert sind und deshalb – wegen ihres großen $D_{V,0}^T$ -Wertes – die Selbstdiffusion dominieren. Auf der Si-ähnlichen Seite ($0 \leq y \lesssim 0,35$), wo das Kristallgitter hart und starr ist, führt die Dichteanomalie zur Ausschmierung der Eigenzwischengitteratome und somit zu deren Dominanz der Selbstdiffusion, zumindest bei hohen Temperaturen.

Auf der Grundlage dieses Bildes können auch die Verläufe von $H_V(y)$ und $D_{V,0}^T(y)$ im Bereich $0 \leq y \lesssim 0,35$ und von $D_{1,0}^T(y)$ im Bereich $y \gtrsim 0,35$ unter Berücksichtigung der Selbstkonsistenz der Ergebnisse dieser Arbeit quantitativ abgeschätzt werden.

- (i) Wie in Abschn. 3.3.2 ausgeführt, wird für $H_V(y)$ in reinem Si ein Wert von ca. 4,2 eV angegeben. Außerdem ist der Verlauf von H_V im Bereich $0,35 \lesssim y \leq 1$ nach der obigen Interpretation bekannt. Insbesondere ist für $y = 0,35$ $H_V = 4,18$ eV, also praktisch identisch mit H_V in reinem Si. Da in der Si-reichen Legierung keine drastischen Änderungen des Leerstellencharakters erfolgen, liegt es nahe, im gesamten Bereich $0 < y \lesssim 0,35$ $H_V \approx 4,2$ eV anzunehmen.
- (ii) Mit der Annahme (i) für den Verlauf von $H_V(y)$ in Si-reichen SiGe-Legierungen kann auch eine obere Grenze für $D_{V,0}^T$ im Bereich $0 < y \lesssim 0,35$ angegeben werden, wobei für $y = 0$ wieder der in Abschn. 3.3.2 angegebene Wert von $D_{V,0}^T \approx 2 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ gewählt wird. Da die gemessenen Tracer-Selbstdiffusionskoeffizienten D^T sich stets aus Eigenzwischengitteratom- und Leerstellenbeitrag zusammensetzen,

$$D^T = f_1 C_1^{\text{eq}} D_1 + f_V C_V^{\text{eq}} D_V \quad , \quad (6.7)$$

muß für jede Zusammensetzung $y \lesssim 0,35$ gemäß der obigen Interpretation, derzufolge der Eigenzwischengitteratombeitrag in diesem Bereich die Selbstdiffusion dominiert, der Leerstellenbeitrag kleiner als der gemessenen Tracer-Selbstdiffusionskoeffizienten sein. Mit $H_V \approx 4,2$ eV in diesem Bereich kann somit eine obere Grenze für $D_{V,0}^T$ abgeschätzt werden.

- (iii) Eine Abschätzung für H_1 und $D_{1,0}^T$ für $0 < y \leq 1$ erweist sich als schwieriger. Im Bereich $0 < y \lesssim 0,35$, in dem sowohl Eigenzwischengitteratome als auch Leerstellen zur Selbstdiffusion beitragen, kann aufgrund von (i) und (ii) abgeschätzt werden, daß H_1 und $D_{1,0}^T$ etwas größer sein müssen als die tatsächlich gemessenen Werte H und D_0^T . Da für $y \gtrsim 0,35$ die Leerstellen die Selbstdiffusion dominieren, muß in diesem Bereich der Eigenzwischengitteratombeitrag sehr klein sein. Dies kann vor allem durch ein drastisches Absinken von D_0^T geschehen, was aufgrund der Abnahme von D_0^T im Bereich $0 \leq y \lesssim 0,35$ auch wahrscheinlich ist. Da nicht davon auszugehen ist, daß D_0^T deutlich kleiner wird als $10^{-5} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$, dem typischen Wert für Diffusion über nicht ausgeschmierte Defekte, darf für $y \gtrsim 0,35$ die Selbstdiffusionsenthalpie H_1 höchstens geringfügig kleiner sein als H_v , da sonst bei tieferen Temperaturen der Eigenzwischengitteratombeitrag zur Selbstdiffusion wieder dominieren würde.

Die Abschätzung in (iii), nach der $D_{1,0}^T$ mit zunehmendem Ge-Gehalt drastisch abfällt, ist in Einklang mit der Vorstellung, daß in der Ge-reichen Legierung mit steigendem Ge-Gehalt zum einen die Dichteanomalie immer weiter abnimmt und daß zum anderen die Länge und die Weichheit der immer mehr dominierenden Ge–Ge-Bindungen immer weiter zunimmt, so daß die Ausschmierung der Eigenzwischengitteratome verschwindet. Dies hat zur Folge, daß bei der Produktion von Eigenzwischengitteratomen die nächsten Nachbarn um das entstandene Eigenzwischengitteratom nur leicht auseinandergeschoben und die Eigenzwischengitteratome zu Punktdefekten werden mit $D_{1,0}^T$ zwischen 10^{-4} und $10^{-5} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$. Gleichzeitig kann erwartet werden, daß in Folge der Weichheit und Lockerheit des Ge-reichen Kristallgitters die Eigenzwischengitteratombildungsenthalpie H_1^F und somit H_1 relativ klein werden. Konsequenzen aus dieser Abschätzung für die mögliche Existenz von Eigenzwischengitteratomen in reinem Ge werden in Abschnitt 6.2.2.2 diskutiert.

6.2.2 Wechsel des Diffusionsmechanismus mit der Temperatur

6.2.2.1 Koexistenz von Eigenzwischengitteratomen und Leerstellen für $y \lesssim 0,35$

Das oben vorgestellte Bild über die Selbstdiffusion in SiGe-Legierungen läßt nicht nur einen eindeutigen Schluß über den Wechsel des Diffusionsmechanismus beim Übergang von Si nach Ge mit steigendem Ge-Gehalt zu. Es erlaubt zusätzlich Rückschlüsse über den Wechsel des Diffusionsmechanismus mit der Temperatur bei festem Ge-Gehalt und somit auch über die mehrfach angesprochene, letztlich nicht sichtbare Krümmung in der Arrhenius-Darstellung des Verlaufs des Tracer-Selbstdiffusionskoeffizienten.

Wenn man aus den Verläufen der Arrhenius-Parameter $H_v(y)$, $D_{v,0}^T(y)$, $H_1(y)$ und $D_{1,0}^T(y)$ die Eigenzwischengitteratom- und Leerstellenbeiträge zur Selbstdiffusion bestimmt und in einer Arrhenius-Darstellung aufträgt (Abbn. 215 und 216), so findet man – weil der Schnitt der beiden Kurven immer schleifender wird –, daß die schon in Si kaum vorhandene Krümmung mit zunehmendem Ge-Gehalt immer noch schwächer wird, bis schließlich bei $y \approx 0,35$ nur noch die Leerstellen zu D^T beitragen. Es wird außerdem deutlich, daß für alle

untersuchten Legierungen im Zusammensetzungsbereich $0 < y \lesssim 0,35$ für oberhalb etwa 900 °C der Eigenzwischengitteratombeitrag und bei tieferen Temperaturen der Leerstellenbeitrag die Selbstdiffusion dominiert.

6.2.2.2 Existenz von Eigenzwischengitteratomen in der Ge-reichen Legierung?

Auf Grundlage von Abb. 215 kann über einen möglichen Eigenzwischengitteratombeitrag zur Selbstdiffusion in der Ge-reichen Legierung bzw. in reinem Ge spekuliert werden. Wie am Ende von Abschn. 6.2.1 bereits ausgeführt, kann man für den Eigenzwischengitteratombeitrag in Ge eine kleine Bildungsenthalpie sowie einen kleinen präexponentiellen Faktor $D_{i,0}^T$ erwarten. Da der präexponentielle Faktor aufgrund des Punktdefektcharakters der Eigenzwischengitteratome wohl nicht kleiner als ca. $10^{-5} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ ist, würde z.B. in reinem Ge bereits eine Aktivierungsenthalpie H_1 , die nur geringfügig kleiner ist als H_V ($H_1 < H_V \approx 3,1 \text{ eV}$) ausreichen, damit bei tiefen Temperaturen ($\lesssim 600 \text{ °C}$), bei denen bisher die Selbstdiffusion noch nicht gemessen wurde und bei denen daher ein Beitrag der Eigenzwischengitteratome zur Selbstdiffusion nicht ausgeschlossen werden kann, die Eigenzwischengitteratome über die Leerstellen dominieren. Die Spekulation über die Existenz von Eigenzwischengitteratomen in reinem Ge wird dadurch genährt, daß von MITHA et al. [MAS96, MAS97] eine leichte Erhöhung der As-Diffusivität unter hohem hydrostatischem Druck (4 GPa) bei $T = 575 \text{ °C}$ gemessen wurde, wie es für die Selbstdiffusion unter Beteiligung von Eigenzwischengitteratomen erwartet wird.

6.2.3 Vergleich zwischen ^{31}Si - und ^{71}Ge -Diffusion in SiGe

Die Diffusion von ^{31}Si erfolgt in reinem Ge und in $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$ etwas langsamer als die ^{71}Ge -Diffusion. Dabei gilt für die Selbstdiffusionsenthalpien $H(^{71}\text{Ge}) < H(^{31}\text{Si})$ und für die präexponentiellen Faktoren $D_0^T(^{71}\text{Ge}) > D_0^T(^{31}\text{Si})$. Dies kann wie folgt erklärt werden: Die kleineren D_0^T -Werte für die ^{31}Si -Diffusion deuten darauf hin, daß die Leerstelle bei Anwesenheit eines ^{31}Si -Atoms in der direkten Nachbarschaft der Leerstelle weniger relaxiert ist. Da Si–Ge-Bindungen vergleichsweise härter sind als Ge–Ge-Bindungen, trägt nämlich das diffundierende ^{31}Si -Atom zur Stabilisierung des Gitters in der Nachbarschaft der Leerstelle und somit zu einer verminderten Relaxation des Gitters in der Nähe der Leerstelle bei. In der Legierung $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$, für die nur drei ^{31}Si -Diffusionsprofile gemessen wurden, wobei ein Diffusionsprofil (Abb. 193) nicht eindeutig auswertbar war, und in reinem Si, in dem der einzige in dieser Arbeit gemessene ^{31}Si -Datenpunkt zwar hervorragend mit den in dieser Arbeit erzielten ^{71}Ge -Diffusionsdaten übereinstimmt, in dem aber ansonsten eine große Streuung der Si- und Ge-Selbstdiffusionsdaten besteht (Abschn. 3.3.1), ist eine entsprechend detaillierte Interpretation nicht möglich.

Für die unterschiedlichen Aktivierungsenthalpien der Diffusion von ^{71}Ge und ^{31}Si können mehrere Ursachen verantwortlich sein. Da das Si-Atom einen etwas kleineren kovalenten Bindungsradius als das Ge-Atom besitzt, ist eine geringe abstoßende Wechselwirkung zwischen Si-Atom und Leerstelle aus elastischen Gründen zu erwarten.

Dies könnte die etwas höhere Aktivierungsenthalpie der Si-Diffusion im Vergleich zu der des Ge erklären. Über elektrische Wechselwirkungen kann an dieser Stelle keine Aussage gemacht werden. Auch eine andere Erklärung im Anschluß an die obigen Ausführungen über den Vergleich der präexponentiellen Faktoren bietet sich an: In reinem Ge und in $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$ sind die diffundierenden Si-Atome von anderen Si-Atomen isoliert. Dies bedeutet, daß im Falle der Si-Diffusion bei Bildung einer Leerstelle auf einem Nächsten-Nachbar-Platz des Si drei weiche Ge–Ge-Bindungen und eine vergleichsweise härtere Si–Ge-Bindung gebrochen werden müssen, im Falle der Ge-Diffusion jedoch nur weiche Ge–Ge-Bindungen. Dies trägt zu einer Erhöhung der Bildungsenthalpie und somit zu einer Erhöhung der Aktivierungsenthalpie der Si-Diffusion im Vergleich zur Ge-Diffusion bei.

6.3 Vergleich mit Literaturdaten zur Fremddiffusion

Die Interpretation der Ergebnisse dieser Arbeit über die Selbstdiffusion in relaxiertem, intrinsischem SiGe (Abschn. 6.2.2) setzt voraus, daß im thermodynamischen Gleichgewicht im gesamten Zusammensetzungsbereich Leerstellen und, zumindest bis zu einem Ge-Gehalt von ca. 35 %, Eigenzwischengitteratome vorhanden sind. Außerdem sollten gemäß dem in Abb. 214 skizzierten Verlauf der entsprechenden Arrhenius-Parameter die Produkte $C_V^{\text{eq}} D_V$ im Bereich $0 \leq y \leq 1$ und $C_I^{\text{eq}} D_I$ im Bereich $0 \leq y \leq 0,35$ mit zunehmendem Ge-Gehalt y ansteigen (Abbn. 215 und 216). Im folgenden werden Literaturdaten vorgestellt, die diese Annahmen bestätigen. Das Hauptaugenmerk soll dabei auf das Element Sb, das als Sonde für Leerstellen dient, sowie auf die Elemente B, P und Au, die zumindest in Si-reichem SiGe als Sonde für Eigenzwischengitteratome dienen, gerichtet sein.

6.3.1 Sb-Diffusion in SiGe

In der Literatur besteht Einigkeit darüber, daß die Diffusion von Sb sowohl in Ge [Sha90] als auch – aufgrund der Atomgröße von Sb – in Si [FGP89] fast ausschließlich über Leerstellen erfolgt. Für die Sb-Diffusion in Si konnte aus Oberflächenoxidations- und -nitridationsexperimenten geschlossen werden, daß die Sb-Diffusion zu mehr als 98 % über Leerstellen erfolgt [FGP89]. Dies legt nahe, daß die Sb-Diffusion auch in SiGe fast ausschließlich über Leerstellen erfolgt. Die Aktivierungsenthalpie für die Sb-Diffusion in Si ist mit 4,1 eV nahezu identisch mit der Aktivierungsenthalpie H_V ($\approx 4,2$ eV) des Leerstellenbeitrags zur Selbstdiffusion in Si. Für die Aktivierungsenthalpie der Sb-Diffusion in Ge werden Werte zwischen 2,08 eV und 2,9 eV angegeben [LB89], die kleiner sind als die Aktivierungsenthalpie H_V der Selbstdiffusion über Leerstellen in Ge. Die Sb-Diffusion in relaxiertem SiGe-Legierungen wurde in [PMW95] und [KLS96, LK96] untersucht; übereinstimmend wird – ähnlich wie bei der Selbstdiffusion in SiGe – von einem monotonen Anstieg der Sb-Diffusivität mit steigendem Ge-Gehalt berichtet. Die umfangreichsten Messungen der Sb-Diffusion in relaxierten SiGe-Schichten stammen von LARSEN und KRINGHØJ et al. [KLS96, LK96]. Diese bestimmten die Sb-Diffusion von $y = 0$ bis $y = 0,50$.

Die von ihnen erhaltenen Werte für $H(\text{Sb})$ und $D_0^T(\text{Sb})$ für die Sb-Diffusion in SiGe sind in Abb. 186 zusammen mit den in dieser Arbeit erhaltenen Werten sowie den Daten von ZANGENBERG et al. [ZHF01] für die Selbstdiffusion in SiGe dargestellt. Ähnlich wie der Verlauf von H_V bei der Selbstdiffusion bleibt $H(\text{Sb})$ in der Si-reichen Legierung zunächst konstant ($\approx 4,1$ eV) und fällt bei $y \approx 0,30$ auf den Wert in reinem Ge ab. Aufgrund des Sondencharakters von Sb für Leerstellen bestätigen die Sb-Diffusionsexperimente den in Abschn. 6.2.2 vorgestellten Verlauf von H_V und somit die Interpretation der Selbstdiffusionsdaten dieser Arbeit gut. Obwohl die Werte $D_0^T(\text{Sb})$ für die Sb-Diffusion stark streuen, ist auch bei ihnen ein Trend zu einem monotonen Anstieg von Si zu Ge zu erkennen, was ebenfalls mit dem Verlauf von $D_{V,0}^T$ des Leerstellenbeitrags zur Selbstdiffusion in SiGe übereinstimmt. Ebenfalls in guter Übereinstimmung mit der Interpretation der Selbstdiffusionsdaten dieser Arbeit ist ein theoretisches Modell von HU [Hu73], demzufolge die Aktivierungsenthalpie für die Sb-Diffusion über Leerstellen aufgrund einer anziehenden Wechselwirkung zwischen Sb-Atomen und Leerstellen kleiner sein sollte als die Selbstdiffusionsenthalpie H_V des Leerstellenbeitrags zur Selbstdiffusion. Nach Abb. 186 ist dies für die Daten aus dieser Arbeit in der Tat im gesamten Zusammensetzungsbereich der Legierung der Fall, nicht aber für die Daten von ZANGENBERG et al. für $y \geq 0,20$ [ZLF01]. Wie bereits in Abschn. 5.2.3 erwähnt, ist dies unter Umständen auf Unsicherheiten der Messungen von ZANGENBERG et al. zurückzuführen.

Da auch Sn sowohl in Si als auch in Ge ausschließlich über Leerstellen diffundiert, liegt es nahe, auch Sn als Sonde für Leerstellen in SiGe zu verwenden. KRINGHØJ und ELLIMAN [KE94] führten daher Sn-Diffusionsexperimente in relaxierten SiGe-Legierungen durch – allerdings nur für zwei Zusammensetzungen ($y = 0,21$ und $y = 0,53$) – sowie in reinem Si und reinem Ge. Sie beobachteten für die Aktivierungsenthalpie einen ähnlichen Verlauf wie bei der Sb-Diffusion. Was die präexponentiellen Faktoren angeht, ist wegen der Streuung der Daten eine klare Aussage nicht möglich.

6.3.2 B-Diffusion in SiGe

B ist das chemische Element, dessen Diffusion sowohl in verspanntem als auch in relaxiertem SiGe aufgrund seiner großen technischen Bedeutung als Akzeptor bisher am umfangreichsten untersucht wurde [KHG93, MFL93, CZS94, KHG95a-c]. Während B in reinem Ge über Leerstellen diffundiert [Sha90, WBP99, UWB01], läuft die B-Diffusion in reinem Si vorwiegend mittels Eigenzwischengitteratomen ab [FGMS84]. Der Eigenzwischengitteratomanteil der B-Diffusion bei 850 °C wird von FANG et al. [FFG96] in Si mit 80 % und in $\text{Si}_{0,80}\text{Ge}_{0,20}$ mit 82 % angegeben. Letzteres Ergebnis zeigt eindeutig, daß zumindest bis $y = 0,20$ Eigenzwischengitteratome im thermodynamischen Gleichgewicht existieren. Weitere B-Diffusionsexperimente unter Oberflächenoxidation für $y \leq 0,18$ [KHG95b] und $y = 0,10$ [BWD01] bestätigen die Existenz von Eigenzwischengitteratomen in Si-reichem SiGe. KUO et al. [KHG95c] finden in relaxierten SiGe-Schichten eine Abnahme der B-Diffusion bis zu einem Ge-Gehalt von ca. 40 %, was durch B-Diffusions-

messungen im Bereich $0 \leq y \leq 0,24$ von Zangenberg et al. [ZFH01] bestätigt wurde. Dies könnte durch eine Abnahme des Produkts $C_1^{\text{eq}} D_1$ erklärt werden, stünde dies nicht im Widerspruch zu der aus den Selbstdiffusionsmessungen dieser Arbeit gewonnenen Erkenntnis (Abbn. 215 und 216). KUO et al. interpretieren die Abnahme der B-Diffusivität jedoch durch Paarbildung zwischen dem größeren Ge-Atom und dem kleineren B-Atom, wodurch die B-Atome immobilisiert werden. Die B-Diffusionsdaten bis $y \approx 0,40$ können so im Rahmen eines Modells über fallenverzögerte Diffusion [Koi82] verstanden werden. Über die Ausbildung von B-Ge-Komplexen in SiGe wird auch in [HZA01] berichtet.

Im Rahmen des in dieser Arbeit entwickelten Bildes über die Eigenzwischengitteratom- und Leerstellenbeiträge zur Selbstdiffusion in relaxiertem SiGe können die B-Diffusionsdaten in relaxiertem SiGe noch weiter im Detail verstanden werden. Betrachtet man den von KUO et al. [KHG95c] beschriebenen Abfall der B-Diffusion bei fester Temperatur (800 °C) mit zunehmendem Ge-Gehalt bis $y = 0,40$ genauer, so stellt man fest, daß der Diffusionskoeffizient von B in SiGe für $0 \leq y \lesssim 0,20$ stark, dann aber bis $y \approx 0,40$ nur noch leicht abnimmt und anschließend für $y \gtrsim 0,60$ wieder ansteigt. Wie bereits mehrfach ausgeführt, ist die SiGe-Legierung bis ca. 35 % Ge-Gehalt ausgesprochen Si-artig. Sie besteht aus ausgedehnten Si-Bereichen mit wenigen, darin verteilten Ge-Monomeren und -Dimeren. Daher ist es nicht überraschend, daß B in Si-reichem SiGe, ähnlich wie in reinem Si, vorwiegend über Eigenzwischengitteratome diffundiert, wobei allerdings die Ge-Cluster als Fallen wirken und so die Diffusion verzögern. Je mehr Ge-Monomere bzw. -Dimere durch Zulegierung von Ge in den ausgedehnten Si-Bereichen verteilt werden, desto höher wird die Fallenkonzentration und desto mehr wird die B-Diffusion fallenverzögert. Für $y \gtrsim 0,35$ treten erste ausgedehnte Ge-Cluster auf, wodurch die Legierung ihren Charakter ändert, der Eigenzwischengitteratomfluß auszusterben und der Leerstellenfluß deutlich zu wachsen beginnen. Für die B-Diffusion im Bereich 20 bis 40 % Ge bedeutet dies, daß B-Atome weiterhin an Ge-Atome gebunden und damit immobilisiert sein können, wobei aber die mittlere Fallenkonzentration kaum mehr zunimmt, weil die zulegierten Ge-Atome mit immer höherer Wahrscheinlichkeit an Ge-Cluster angelagert werden und nicht mehr als Einzelatome oder Dimere in den ausgedehnten Si-Bereichen isoliert als hocheffektive Fallen wirken können. Insgesamt nimmt deshalb die Gesamtdiffusivität von B nur noch leicht ab. Außerdem ist davon auszugehen, daß B-Atome zunehmend über Leerstellen, den in diesem Zusammensetzungsbereich zunehmend dominierenden Eigenfehlstellen, diffundieren. Da deren Fluß, wie beschrieben, zunimmt (Abbn. 215 und 216), wirkt auch dies der Abnahme der Diffusivität entgegen. Daß im Bereich $y \gtrsim 0,35$ die B-Diffusion tatsächlich im wesentlichen über Leerstellen abläuft, ist aus folgender Überlegung verständlich: Würden die B-Atome auch für $y \gtrsim 0,35$ – also in dem Bereich, in dem gemäß der Selbstdiffusionsmessungen der Eigenzwischengitteratomfluß zusammenbricht – im wesentlichen über Eigenzwischengitteratome diffundieren, würde dies zu einem drastischen Einbruch des B-Diffusionskoeffizienten führen, da zudem die Fallenkonzentration weiter leicht zunimmt. Dies wird aber nicht beobachtet.

Für $y \geq 0,60$ beobachten KUO et al. [KHG95c] ein Wiederansteigen der B-Diffusivität und erwarten, daß sich dieser Anstieg kontinuierlich fortsetzt bis zu reinem Ge. Dieser Anstieg könnte unter der Voraussetzung, daß die B-Diffusion in Ge-reichem SiGe im wesentlichen über Leerstellen erfolgt, durch den Anstieg von $C_V^{\text{eq}} D_V$ mit steigendem Ge-Gehalt erklärt werden, zumal für $y > 0,50$ die Ge-Atome als Majoritätsspezies nicht mehr als Fallen wirken können und eine Paarbildung von Si und B wegen deren gegenseitiger elastischer Abstoßung ausgeschlossen werden kann.

6.3.3 P-Diffusion in SiGe

Als weitere Sonde für die Diffusion über Eigenzwischengitteratome dient das Element P. Allerdings wurde die P-Diffusion bisher nur in verspannten SiGe-Schichten bis zu einem Ge-Gehalt von 22 % untersucht [CKR01]. Dabei konnte gezeigt werden, daß die P-Diffusion bis zu diesem Ge-Gehalt unter Beteiligung von Eigenzwischengitteratomen als Diffusionsvehikel abläuft, was wiederum ein direkter Hinweis auf deren Existenz in Si-reichem SiGe ist.

6.3.4 Au-Diffusion in SiGe

Einen wichtigen Hinweis auf die Existenz von Eigenzwischengitteratomen in Si-reichem $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ ergaben Au-Diffusionsmessungen im Zusammensetzungsbereich $0 \leq y \leq 0,24$ von FISCHER et al. [FFL99, Fis99]. Nach diesen diffundiert Au für $0 \leq y \leq 0,09$ über einen eigenzwischengitteratomkontrollierten Verdrängungsmechanismus und für $0,09 < y \leq 0,24$ über einen Au-zwischengitteratomkontrollierten Verdrängungsmechanismus. Daraus folgt zwangsläufig die Existenz von Eigenzwischengitteratomen im genannten Zusammensetzungsbereich, im Einklang mit der Interpretation der Selbstdiffusionsdaten dieser Arbeit.

Gemäß den Gleichungen (3.16) und (3.17) kann im eigenzwischengitteratomkontrollierten Fall bei bekannter Löslichkeit von Au in SiGe und unter Berücksichtigung eines Korrelationsfaktors von $f_1 \approx 0,73$ für den Eigenzwischengitteratombeitrag zur Selbstdiffusion die Größe $f_1 C_1^{\text{eq}} D_1$ berechnet werden. Im vorliegenden Fall gestaltet sich dies allerdings schwierig, weil zum einen die Au-Löslichkeiten in SiGe nicht bekannt sind und zum anderen die von FISCHER et al. bestimmten Daten für D_1^* bei ein und derselben Temperatur bis zu einem Faktor 10 schwanken. Hinzu kommt, daß FISCHER et al. bei ihren numerischen Simulationen für die Au-Löslichkeit in SiGe vereinfachend die Au-Löslichkeit in Si verwendeten und außerdem nicht zwischen verschiedenen Au-Ladungszuständen unterschieden. Um dennoch zu einer, wenn auch mit starken Unsicherheiten behafteten Abschätzung für $f_1 C_1^{\text{eq}} D_1$ zu gelangen, wurden für die Zusammensetzungen $y = 0,05$ und $y = 0,09$ die Au-Löslichkeiten in SiGe aus den Au-Löslichkeiten in Si und Ge durch lineare Interpolation bestimmt und aus dem jeweils größten, bei einer festen Temperatur bestimmten Wert für D_1^* von FISCHER et al. eine obere Grenze für $f_1 C_1^{\text{eq}} D_1$ abgeschätzt. Die Ergebnisse sind in Abb. 216 gezeigt. Das Ergebnis der Au-Diffusion für $y = 0,05$ bzw. $y = 0,09$ wird darin mit dem Ergebnis der Selbstdiffusion für $y = 0,04$ bzw. $y = 0,10$

verglichen. Wie zu erwarten war, gilt für alle Zusammensetzungen $f_1 C_1^{\text{eq}} D_1 < D^{\text{T}}$. Die berechneten Werte für D_1^{T} unterscheiden sich zwar um bis zu eine Größenordnung von den in dieser Arbeit vorgeschlagenen Werten; doch aufgrund der obengenannten Unsicherheiten bei der Berechnung des Eigenzwischengitteratombeitrags zur Selbstdiffusion aus Au-Diffusionsdaten ist dies nicht verwunderlich. Abschließend sei angemerkt, daß die von FISCHER in [Fis99] vorgenommene Berechnung des Eigenzwischengitteratombeitrags zur Selbstdiffusion in reinem Si in sehr guter Übereinstimmung mit Literaturdaten ist.

6.3.5 Ausblick

Um weitere Hinweise über die Zwischengitteratom- und Leerstellenbeiträge zur Selbstdiffusion in SiGe bzw. über die Existenz von Eigenzwischengitteratomen in SiGe zu erhalten, wäre es notwendig, in zukünftigen Experimenten die Druckabhängigkeit der Selbstdiffusion zu untersuchen sowie Selbst- und Fremdatomdiffusionsexperimente unter Oberflächenoxidation- bzw. -nitridation durchzuführen.

6.4 Diffusion von ^{11}C in Ge

Die Resultate der ^{11}C -Diffusion in Ge werden zunächst mit den ^{71}Ge - und den ^{31}Si -Diffusionsergebnissen in Ge aus dieser Arbeit verglichen. Anschließend wird die Diffusion weiterer Gruppe-IV-Elemente in Ge diskutiert.

6.4.1 C-, Si- und Ge-Diffusion in Ge im Vergleich

Die Aktivierungsenthalpie für die ^{11}C -Diffusion in Ge ist mit 3,01 eV nur geringfügig kleiner als die in dieser Arbeit bestimmte Aktivierungsenthalpie für die Selbstdiffusion in Ge (3,14 eV). Da auch die präexponentiellen Faktoren für die ^{11}C - bzw. ^{71}Ge -Diffusion von gleicher Größenordnung sind, $1,9 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ für ^{11}C und $8,1 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ für ^{71}Ge , legt dies den Schluß nahe, daß C in Ge über einen Leerstellenmechanismus diffundiert. Eine Diffusion über den dissoziativen Mechanismus ist auszuschließen, da bei der Diffusion der Elemente Cu, Ag und Au in Ge über den dissoziativen Mechanismus (Abschn. 3.2.3) andere Arrhenius-Parameter (H zwischen 0,45 eV und 1,52 eV, D_0^{T} zwischen $1,62 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ und $5,5 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$) als für die C-Diffusion erhalten wurden und zudem die absoluten Diffusivitäten mehrere Größenordnungen über den Selbstdiffusionskoeffizienten für Ge liegen, während die ^{11}C -Diffusionskoeffizienten nur etwa 3 bis 4mal größer als die Selbstdiffusionskoeffizienten sind.

Vergleicht man Aktivierungsenthalpien und präexponentielle Faktoren der ^{11}C -, ^{31}Si - und ^{71}Ge -Diffusion in Ge miteinander, so erhält man folgendes Ergebnis:

$$H(\text{Si}) > H(\text{Ge}) > H(\text{C}) \text{ und } D_0^{\text{T}}(\text{Ge}) > D_0^{\text{T}}(\text{Si}) > D_0^{\text{T}}(\text{C}).$$

Der Vergleich von Si- und Ge-Diffusion wurde bereits in Abschn. 6.2.3 durchgeführt. Betrachtet man $D_0^T(C)$, so ergibt obiger Vergleich, daß die Leerstelle bei der Diffusion von C weniger ausgeschmiert ist als bei der Ge-Selbstdiffusion bzw. der Si-Diffusion in Ge. Dies liegt daran, daß Ge–C-Bindungen sehr viel kürzer und härter als die Si–Ge- und Ge–Ge-Bindungen sind. Nach [BBK01] sind die Ge–C-Bindungen fast 20 % kürzer als die Ge–Ge-Bindungen, während sich Si–Ge- und Ge–Ge-Bindungslängen nur um wenige Prozent unterscheiden. Somit tragen die Ge–C-Bindungen in der Nachbarschaft einer Leerstelle zu einer Stabilisierung des Gitters und folglich zu einer deutlich verringerten Relaxation der Leerstelle bei.

In bezug auf die Aktivierungsenthalpie der ^{11}C -Diffusion in Ge könnte man aufgrund der extrem kleinen Löslichkeit und der damit verbundenen starken Segregationstendenz von C in Ge eine anziehende Wechselwirkung zwischen Leerstelle und C-Atom erwarten. Wie bereits mehrfach erwähnt, sind die Leerstellen in Ge über ca. 5 Atomvolumen ausgeschmiert, wodurch lokal Gebiete geringerer Dichte entstehen, die tendentiell den Charakter einer inneren Oberfläche besitzen. Wegen ihres Bestrebens, ihre Überkonzentration im Ge-Gitter abzubauen, werden sich die C-Atome bevorzugt im Bereich von ausgeschmierten Leerstellen aufhalten, wodurch sich die vorhandene Bindung der C-Atome an die Leerstellen und die damit verbundene Erniedrigung von H im Vergleich zur ^{71}Ge -Diffusion erklären ließe.

6.4.2 Diffusion von Gruppe-IV-Elementen in Ge im Vergleich

Interessant ist ein Vergleich der Diffusion aller Gruppe-IV-Elemente in Ge mit der Ge-Selbstdiffusion. Die Daten der ^{31}Si - und ^{11}C -Diffusion wurden bereits im Detail in den Abschn. 6.2 und 6.4.1 im Rahmen eines Leerstellenmechanismus diskutiert. Wegen der Atomgröße von Sn und Pb und der Tatsache, daß in Ge – zumindest bei für Diffusionsuntersuchungen zugänglichen Temperaturen – allein Leerstellen als Diffusionsvehikel wirken können, ist auch bei der Diffusion von Sn und Pb von einem Leerstellenmechanismus auszugehen. Die Diffusion von Sn in Ge wurde von mehreren Autoren untersucht. Während die Daten von VALENTA [Val58], KRINGHØJ et al. [KE94] sowie FRIESEL et al. [FSG95] mit Werten für H zwischen 3,05 und 3,26 eV und für D_0^T zwischen $7,0 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ und $8,4 \cdot 10^{-2} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ in befriedigender Übereinstimmung sind, weichen die von BOLTAKS et al. [Bol63] bestimmten Arrhenius-Parameter ($H = 1,9 \text{ eV}$ und $D_0^T = 1,7 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$) deutlich davon ab (Tabelle 26). Die Daten von BOLTAKS sind daher wohl unsicher, ebenso wie die einzigen verfügbaren Daten über die Pb-Diffusion in Ge, die ebenfalls von BOLTAKS [Bol63] stammen. Allerdings ist die Pb-Diffusion anscheinend nur bei einer Temperatur gemessen worden, so daß unklar bleibt, wie die zugehörigen Arrhenius-Parameter bestimmt wurden. Auch beim Außer-Acht-Lassen von Boltaks' Sn-Diffusionsdaten ergibt sich für die Sn-Diffusion in Ge im Vergleich zur Ge-, Si- und C-Diffusion aufgrund der unterschiedlichen H - und D_0^T -Werte kein einheitliches Bild.

7 Zusammenfassung

SiGe-Legierungen sind in den vergangenen Jahren immer mehr in den Blickpunkt von Wissenschaft und Technik gerückt und sind nach ihrer Integration in die bestehende, auf Si basierende Halbleitertechnik zu einem unverzichtbaren Bestandteil leistungsfähiger und profitabler Produkte geworden. Hauptgrund für die Renaissance von SiGe-Legierungen ist der Umstand, daß ihre Bandstruktur und Ladungsträgerbeweglichkeiten durch geeignete Wahl der Zusammensetzung und weiterer Parameter, z.B. der Gitterverspannung, gezielt eingestellt werden können.

Im Zusammenhang mit der Halbleitertechnik spielen Diffusionsprozesse v.a. bei der gezielten Dotierung von Bauelementen mit Elementen der III. und V. Hauptgruppe, aber auch bei Degradationsprozessen durch unerwünschte Eindiffusion von Verunreinigungen, z.B. Übergangsmetallen, eine wichtige Rolle. Vom Standpunkt der Grundlagenforschung aus ist die Untersuchung der Selbstdiffusion in SiGe aus zwei Gründen von großem Interesse: Zum einen stellt das System SiGe eine ungeordnete Legierung dar, so daß Diffusionsuntersuchungen an SiGe als Musterbeispiel für Diffusionsuntersuchungen in ungeordneten Legierungen dienen können. Da SiGe keine Mischungslücke besitzt, können Diffusionsuntersuchungen im gesamten Zusammensetzungsbereich durchgeführt werden. Zum anderen wird beim Übergang von Si zu Ge ein Wechsel des Selbstdiffusionsmechanismus erwartet. In Si läuft die Selbstdiffusion sowohl über Eigenzwischengitteratome als auch über Leerstellen ab – wobei bei hohen Temperaturen ($\geq 900\text{--}1000\text{ °C}$) der indirekte Eigenzwischengitteratommechanismus, bei tieferen Temperaturen ($\leq 900\text{--}1000\text{ °C}$) der Leerstellenmechanismus dominiert –, in Ge jedoch ausschließlich über Leerstellen. Es war das Hauptziel dieser Arbeit, diesen Wechsel des Selbstdiffusionsmechanismus experimentell nachzuweisen.

Für die Experimente wurden monokristalline, intrinsische $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ -Proben verwendet, wobei sowohl relaxierte epitaktische Schichten mit Schichtdicken zwischen $0,4$ und $10\text{ }\mu\text{m}$ als auch Volumenkristalle zur Verfügung standen, mit denen der gesamte Zusammensetzungsbereich $0 \leq y \leq 1$ abgedeckt werden konnte. Der Ge-Gehalt der Proben wurde mittels verschiedener Verfahren wie HRXRD, RBS, EDX oder WDX ermittelt. Die Versetzungsdichten wurden mit Hilfe von TEM-Querschnittsaufnahmen oder chemischem Defektätzen bestimmt. Die Diffusionsuntersuchungen wurden mit einem modifizierten Radiotracer-Verfahren durchgeführt. Für die Ge-Selbstdiffusionsmessungen wurden am Massenseparator der Universität Bonn bzw. am Isotopenseparator ISOLDE am CERN in Genf radioaktive ^{71}Ge -Isotope (Halbwertszeit $11,2\text{ d}$) implantiert. Die nachfolgenden Diffusionstemperaturen wurden in einem konventionellen Rohrofen durchgeführt, wobei die Proben unter Schutzgas in Quarzampullen abgeschmolzen waren. Nach den Diffusions-

temperungen wurden die Proben zur Bestimmung der Eindringprofile der Radiotracer-Isotope mittels Ionenstrahlzerstäubung in Schichten geteilt. Durch Messen der Radioaktivität der abgetragenen Schichten konnten die Eindringprofile konstruiert werden. Anschließend wurden durch Anpassung einer numerischen Lösung der Diffusionsgleichung an die Diffusionsprofile die Tracer-Selbstdiffusionskoeffizienten ermittelt. Für Si-Selbstdiffusionsmessungen mit einem Radiotracer-Verfahren steht das Radioisotop ^{31}Si zur Verfügung, das jedoch eine Halbwertszeit von nur 2,6 h besitzt. Daher war es nötig, eine Apparatur aufzubauen, mit der die Diffusion kurzlebiger Radioisotope (Halbwertszeiten kleiner 1 d) bequem gemessen werden kann. Kernstück dieser Apparatur ist eine Vakuumkammer, die an ein Beschleunigerstrahlrohr angeflanscht werden kann und in die ein Heizelement sowie eine Ionenstrahlzerstäubungsanlage integriert ist, so daß die Diffusionsmessungen *on beamline* und *in situ* durchgeführt werden können. Mit dieser Anlage wurden ^{31}Si -Diffusionsexperimente am Massenseparator IGISOL an der Universität Jyväskylä in Finnland durchgeführt.

Die Ergebnisse dieser Arbeit liefern zusammen mit Literaturdaten ein geschlossenes Gesamtbild der Selbstdiffusion in monokristallinen, relaxierten, intrinsischen SiGe-Legierungen. Die Auftragung der ermittelten Tracer-Selbstdiffusionskoeffizienten D^T für die ^{71}Ge -Diffusion in einer Arrhenius-Darstellung ergab, daß die D^T -Werte für jede Zusammensetzung einem Arrhenius-Gesetz mit einer Aktivierungsenthalpie H und einem präexponentiellen Faktor D_0^T folgen. Dabei nimmt die ^{71}Ge -Diffusivität bei fester Temperatur mit steigendem Ge-Gehalt monoton zu, unabhängig davon, ob die Diffusionsmessungen an epitaktischen Schichten oder an Volumenkristallen durchgeführt wurden. Es muß daher nicht zwischen Diffusionsdaten, die an epitaktischen Schichten oder Volumenkristallen gemessen wurden, unterschieden werden. Dasselbe Gesamtbild ergab sich auch für die ^{31}Si -Diffusion. Diese ist für $y > 0,50$ unwesentlich langsamer als die ^{71}Ge -Diffusion in den entsprechenden Legierungen; für $y \lesssim 0,50$ sind die ^{31}Si - und ^{71}Ge -Selbstdiffusionskoeffizienten näherungsweise gleich. Sowohl die ^{71}Ge - als auch die ^{31}Si -Daten in reinem Si bzw. in reinem Ge sind in guter Übereinstimmung mit den in großer Zahl existierenden Literaturdaten. Deutliche Hinweise auf den erwarteten Wechsel des Selbstdiffusionsmechanismus mit steigendem Ge-Gehalt y der $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ -Legierungen ergeben sich aus dem Verlauf der Kurven für $D^T(y)$ bei fester Temperatur, $H(y)$ und $D_0^T(y)$. Diese Kurven zeigen alle einen deutlichen Knick bei $y \approx 0,35$.

Der Ge-Gehalt $y \approx 0,35$ stellt für das SiGe-Diamantgitter eine kritische Größe bezüglich der atomistischen Struktur der SiGe-Legierung dar. Für $y \lesssim 0,35$ sind lediglich isolierte Ge-Monomere und -Dimere in ausgedehnten Si-Bereichen verteilt. Aufgrund der Dominanz der kurzen und harten Si-Si-Bindungen besitzt diese Si-reiche Legierung ein starres Kristallgitter und ist somit Si-ähnlich. Für $y \gtrsim 0,35$ dagegen ist die Legierung Ge-ähnlich. Es dominieren weiche und lockere Si-Ge- und Ge-Ge-Bindungen, und das Kristallgitter ist vergleichsweise weich und locker. Davon ausgehend ergibt sich für die Interpretation der Selbstdiffusionsdaten dieser Arbeit ein selbstkonsistentes Bild, das sich wie folgt

beschreiben läßt. In den Ge-ähnlichen Legierungen ($y \gtrsim 0,35$) sind die Leerstellen stark relaxiert, d.h. über mehrere Atomvolumina ausgeschmiert („amorphe“ Leerstellen), während Eigenzwischengitteratome – sofern sie überhaupt in diesem Zusammensetzungsbereich existieren – nicht ausgeschmiert (d.h. „punktförmig“) sind. Dies spiegelt sich in einem deutlich erhöhten präexponentiellen Faktor des Leerstellenbeitrags im Vergleich zu dem präexponentiellen Faktor des Eigenzwischengitteratombeitrags zur Selbstdiffusion wider. Daher dominiert der Leerstellenbeitrag die Selbstdiffusion für $y \gtrsim 0,35$. In den Si-ähnlichen, starren Legierungen sind dagegen die Leerstellen „punktförmig“. Allerdings führt die bei diesen Legierungen stark ausgeprägte Dichteanomalie (Dichte im flüssigen Zustand ist größer als im festen Zustand) dazu, daß gemäß des Prinzips von Braun und LeChâtelier das Gitter dem durch Einbau eines zusätzlichen Atoms ins Zwischengitter erzeugten Spannungsfeld durch lokale „Verflüssigung“ nachgibt. Es entstehen auf diese Weise Eigenzwischengitteratome, die über mehrere Atomvolumina ausgeschmiert sind, was zu einem ungewöhnlich großen präexponentiellen Faktor des Eigenzwischengitteratombeitrags im Vergleich zum präexponentiellen Faktor des Leerstellenbeitrags zur Selbstdiffusion führt. Daher dominiert oberhalb etwa 900 °C der Eigenzwischengitteratombeitrag die Selbstdiffusion für $y \lesssim 0,35$. Gemäß dieser Interpretation wird die Dominanz von Eigenzwischengitteratomen bzw. von Leerstellen bei der Selbstdiffusion durch entropische Effekte bestimmt.

Die neue Apparatur zur Messung der Diffusion kurzlebiger Isotope eröffnete auch die Möglichkeit, die Diffusion von ^{11}C (Halbwertszeit 20,38 min) in Ge zu messen. Dies ist deshalb von Interesse, weil man durch Zulegierung einer geringen Konzentration von C zu SiGe-Schichten sog. SiGe:C-Schichten erhält, mit denen die Leistungsfähigkeit von Halbleiterbauelementen auf SiGe-Basis weiter verbessert werden kann. Über die Diffusion von C in SiGe, Si bzw. Ge ist bisher nur bekannt, daß C in Si über den Verdrängungsmechanismus diffundiert. Die ^{11}C -Diffusionsexperimente im Rahmen dieser Arbeit wurden am Isotopenseparator ISOLDE am CERN in Genf durchgeführt. Die gemessenen Tracer-Selbstdiffusionskoeffizienten D^T folgen dem Arrhenius-Gesetz

$$D^T = 1,9 \cdot 10^{-3} \exp\left(-\frac{3,01 \text{ eV}}{k_B T}\right) \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \quad , \quad (7.1)$$

dessen Arrhenius-Parameter denen der Ge-Selbstdiffusion sehr ähnlich sind. Dies legt nahe, daß die C-Diffusion in Ge über einen Leerstellenmechanismus abläuft.

Anhang

A Defektätzungen

Zur Bestimmung der Versetzungsdichten im verwendeten SiGe-Material wurden die Proben in der Regel chemisch geätzt. Nach erfolgreicher Defektätzung sind die an der Oberfläche endenden Versetzungen als Ätzgrübchen unter einem Lichtmikroskop leicht zu erkennen. Die Versetzungsätzgrübchen sind dabei anhand ihrer quadratischen Form und ihrer ausgeprägten Spitze in der Mitte der Ätzgrübchen deutlich von Löchern und Fehlstellenagglomeraten zu unterscheiden. Durch Abzählung der Ätzgrübchen kann die Versetzungsdichte abgeschätzt werden.

A.1 Defektätzungen an Proben mit $y \leq 0,65$

Auf eine Politurätze vor der eigentlichen Defektätze wurde bei diesen SiGe-Zusammensetzungen verzichtet, da die Proben in allen Fällen bereits spiegelnde Oberflächen besaßen.

Defektätze nach Secco [Sec72, LKZ90]:

33	Vol.-%	0,15 molare $K_2Cr_2O_7$ (4,41 g $K_2Cr_2O_7$ + 100 ml H_2O)
67	Vol.-%	Flußsäure HF (48%ig)

Die Defektätze wird bei Raumtemperatur durchgeführt. Eine Ätzdauer von maximal 2 min erwies sich als ausreichend.

A.2 Defektätzungen an Proben mit $y > 0,65$

Vor der eigentlichen Defektätzung wurden die Probenoberflächen mit einer Politurätzung von kleineren Kratzern und Löchern befreit:

Politurätzung [HB98, Hol62, Bog67]:

75	Vol.-%	HNO_3 (konzentriert)
25	Vol.-%	Flußsäure HF (48%ig)

Diese Lösung wirkt bei Raumtemperatur als Politurbeize. Die Ge-Proben wurden ca. 1 bis 3 min geätzt. Da die Lösung rasch warm wird, muß ihr zwischen den einzelnen Ätzprozessen ausreichend Zeit zum Abkühlen gegeben werden. Die Lösung färbt sich während des Ätzvorgangs gelb-orange. Nach einer Probenreinigung erfolgt die Defektätzung:

Defekttätzung (Ätzlösung Nr. 1) [Hol62, Bog67]:

25	Vol.-%	Cu(NO ₃) ₂ -Lösung (10 %ig)
25	Vol.-%	HNO ₃ (konzentriert)
50	Vol.-%	Flußsäure HF (48%ig)

Als günstige Arbeitstemperatur für die Defekttätzung wird 23 °C vorgeschlagen. Als optimale Ätzdauer werden 1 bis 2 min empfohlen. In dieser Arbeit wurden die Proben 1 min geätzt.

B Reinigungsprozeduren

Für die verschiedenen Reinigungsverfahren wurden möglichst reine Chemikalien verwendet: Aceton (VLSI-Selectipur), Ethanol (Rotipur), HCl (reinst), HF (Suprapur), HNO₃ (Selectipur), H₂O₂ (Suprapur), NH₄OH (reinst), Zitronensäure (reinst). Für jeden Reinigungsschritt wurde ein ausschließlich für diesen Reinigungsschritt vorgesehenes Teflontopf verwendet. Außerdem empfiehlt es sich, Teflonpinzetten zu verwenden.

B.1 Reinigung von Si-Proben

Zur Entfernung organischer Verunreinigungen und elektrisch aktiver Fremdatome von den Oberflächen der Si-Proben wurden Standardreinigungsverfahren aus der Literatur [Bog67, KP70, LKZ90] in geeigneter Weise kombiniert:

- 1) Reinigung in Aceton im us-Bad (5 min),
- 2) Reinigung in Reinraum-Wasser im us-Bad (5 min),
- 3) Reinigung in HF (48%ig) (10 s),
- 4) Reinigung in Aceton im us-Bad (5 min),
- 5) Reinigung in Reinraum-Wasser im us-Bad (5 min),
- 6) RCA-I Reinigungsschritt (H₂O:NH₄OH(27%ig):H₂O₂(30%ig) = 5:1:1),
- 7) RCA-II Reinigungsschritt (H₂O:H₂O₂(30%ig):HCl(30%ig) = 6:1:1) bei 80°C (15 min),
- 8) Reinigung in Reinraum-Wasser im us-Bad (5 min),
- 9) Reinigung in HF (48%ig) (10 s),
- 10) Reinigung in Reinraum-Wasser im us-Bad (5 min),
- 11) Reinigung in Zitronensäure (10%ig) im us-Bad (5 min),
- 12) Reinigung in Reinraum-Wasser im us-Bad (5 min),
- 13) Reinigung und Lagerung in Ethanol.

B.2 Reinigung von Ge-Proben

Zur Entfernung organischer Verunreinigungen und elektrisch aktiver Fremdatome von den Oberflächen der Ge-Proben wurde eine intensive Reinigungsprozedur mit 10%iger KCN-Lösung durchgeführt. Dabei wurde in folgenden Schritten vorgegangen:

- 1) Reinigung in Aceton im us-Bad (2 x 7 min),
- 2) Reinigung in Reinraum-Wasser im us-Bad (6 min),
- 3) Reinigung in KCN-Lösung (10%ig), d.h. 1 g KCN + 9 g H₂O (= 9 ml H₂O) (3 x 9 min, mit je ca. 5 min Pause, damit die Lösung nicht zu warm wird),
- 4) Reinigung in Reinraum-Wasser, 1. Becherglas,
- 5) Reinigung in Reinraum-Wasser, 2. Becherglas, im us-Bad (3 min),
- 6) Reinigung in Reinraum-Wasser, 3. Becherglas,
- 7) Reinigung (3. Becherglas) im us-Bad (3 min),
- 9) Reinigung und Lagerung in Ethanol.

B.3 Reinigung von SiGe-Proben

Zur Reinigung von SiGe-Proben mit Ge-Gehalten kleiner als 65 % konnte im wesentlichen die Reinigungsprozedur für reines Si verwendet werden. Allerdings mußte auf Schritt 6) (RCA-I Reinigung) verzichtet werden, da dieser zu sichtbarer Schädigung der Oberflächen der SiGe-Proben führte. Zur Reinigung von SiGe-Proben mit Ge-Gehalten von 65 % und mehr konnte die Reinigungsprozedur für reines Ge ohne Einschränkung verwendet werden.

C Fehlerbetrachtung

Aufgrund der Vielzahl der in die Meßergebnisse eingehenden Parameter ist eine genaue, quantitative Fehlerbetrachtung nicht möglich. Statt dessen soll eine qualitative Betrachtung angefügt werden, in der die wesentlichen Fehlerquellen vorgestellt und deren Größe ungefähr abgeschätzt werden soll.

C.1 Temperdauer und Temperatur

Bei den Diffusionstemperaturen der mit ⁷¹Ge implantierten Proben in konventionellen Rohröfen wurden die Aufheiz- und Abkühlzeiten aufgrund der hinreichend langen Temperzeiten nicht berücksichtigt. Im Falle der kürzeren Diffusionstemperaturen bei den ³¹Si- und ¹¹C-Diffusionsexperimenten war jedoch deren Berücksichtigung in der Regel notwendig. Die Korrektur der Temperdauern der Diffusionsmessungen einer gegebenen SiGe-Zusammensetzung erfolgte durch iterative Anwendung der Gleichung (4.2) bis zur

Konvergenz der entsprechenden Arrhenius-Parameter von D^T . Durch dieses Korrekturverfahren entfällt im folgenden der Fehler Δt in der Temperdauer t , d.h., $\Delta t \approx 0$.

Die mit einem NiCr–NiAl- oder Pt10%Rh–Pt-Thermoelement bestimmte Temperatur der Rohröfen, in denen die ^{71}Ge -Experimente durchgeführt wurden, war mit ± 1 K sehr genau. Jedoch waren Temperaturgradienten im Ofen nicht vernachlässigbar. Die Unsicherheit bei der Temperaturmessung im Rohröfen war daher mit ± 3 K relativ hoch. Auch in der Apparatur zur Messung der Diffusion kurzlebiger Radioisotope konnte die Temperatur auf ± 1 K konstant gehalten werden. Allerdings beträgt die vom Hersteller angegebene Toleranz des verwendeten W5%Re–W26%Re-Thermoelements bis zu 0,5% von der Ist-Temperatur und ist damit vergleichsweise hoch (z.B. ± 5 K bei 1000 °C).

C.2 Abtragehöhe und mittlere Diffusionslänge

Wie bereits in Abschn. 5.1 dargelegt, stellen Abweichungen von der lateralen Abtragehomogenität und der zeitlichen Konstanz der Abtragerate vernachlässigbare Fehlerquellen dar. Das Auflösungsvermögen des optischen bzw. mechanischen Höhenmeßgeräts, das jeweils zur Bestimmung der Gesamthöhe der von der Probe abgetragenen Schichten verwendet wurde, beträgt 5 bzw. 10 nm und liegt somit in der Größenordnung der lateralen Abtrageinhomogenität. Da bei der Ionenstrahlzerstäubung der Diffusionsprofile grundsätzlich mehr als 200 nm Material von den Proben abgetragen wurde, kann der relative Fehler in der Diffusionsverbreiterung Δx_D aufgrund der genannten Fehlerquellen auf maximal 5 % abgeschätzt werden.

Wie in Abschn. 5.2.2 gezeigt wurde, kann der sich ergebende Unterschied zwischen der Anpassung einer Lösung der Diffusionsgleichung mit einer perfekten Reflexionsebene und einer perfekten Senke als Randbedingung zu Abweichungen in der mittleren Diffusionsverbreiterung von bis zu 5 %, in einigen extremen Fällen sogar bis zu 25 % führen. Dies ist mit Abstand die größte Fehlerquelle bei der Bestimmung der mittleren Diffusionsverbreiterung. Da der in Gleichung (5.1) verwendete Parameter k besonders auf die Krümmungen des Diffusionsprofils in Oberflächennähe empfindlich ist, kann der oben genannte Fehler bei der Anpassung des Profils weiter verringert werden, indem nur die Meßpunkte in großer Probetiefe, in der der Profilverlauf nahezu unabhängig von k ist (Abb. 37), bei Anpassung der Gleichung (5.1) berücksichtigt werden. Dies wurde für alle Profile, deren Profilverlauf in großen Probetiefen dies zuließ, so gehandhabt. Dadurch konnte in den meisten Fällen erreicht werden, daß die Unsicherheit bei der Bestimmung von x_D sowohl aufgrund der numerischen Anpassung als auch aufgrund der bereits diskutierten Unsicherheiten bei der Bestimmung der Abtragehöhe kleiner als 10 % war.

C.3 Diffusionskoeffizient

Nach dem Fehlerfortpflanzungsgesetz beträgt der Fehler bei der Bestimmung des Tracer-Selbstdiffusionskoeffizienten

$$\Delta D^T = \sqrt{\left(\frac{2x_D \Delta x_D}{4t}\right)^2 + \left(\frac{x_D^2 \Delta t}{4t^2}\right)^2}, \quad (\text{A1})$$

wobei der Fehler Δt vernachlässigbar ist (Abschn. C.1). Mit der in C.2 abgeschätzten Unsicherheit Δx_D und bei für diese Arbeit typischen Werten für t und x_D (Tabellen 4 bis 18 und 20 bis 25) ist i.a. $\Delta D^T/D^T \lesssim 10\%$, in wenigen Fällen allerdings $\lesssim 40\%$.

Zur Abschätzung der Fehler für H und D_0^T wurden bei allen in der Legierung $\text{Si}_{0,57}\text{Ge}_{0,43}$ bestimmten ^{71}Ge -Diffusionskoeffizienten in der Arrhenius-Darstellung die Fehlerbalken für D^T gemäß Gleichung (A1) sowie für T gemäß Abschn. C.1 eingetragen und so maximale bzw. minimale Werte für H und D_0^T bestimmt. Dabei ergab sich für H ein Fehler von $\pm 0,2$ eV, für D_0^T hingegen von -50% bis über $+300\%$. Da bei den Diffusionsmessungen in $\text{Si}_{0,57}\text{Ge}_{0,43}$ nur ein vergleichsweise kleiner Temperaturbereich überstrichen wurde ($\Delta T = 167$ K), kann davon ausgegangen werden, daß der Fehler von H und D_0^T bei den ^{71}Ge -Diffusionsmessungen in den anderen SiGe-Zusammensetzungen in der gleichen Größenordnung liegt oder sogar kleiner ist. Für die ^{31}Si - und ^{11}C -Diffusionsmessungen müssen Fehler in der genannten Größenordnung angenommen werden, da hier die überstrichenen Temperaturbereiche sehr gering waren.

Literaturverzeichnis

- [ABM91] A. Almazouzi, J. Bernardini, E. G. Moya, H. Bracht, N. A. Stolwijk und H. Mehrer, *J. Appl. Phys.* **70**, 1345 (1991)
- [ANS94] D. B. Aldrich, R. J. Neumann und D. E. Sayers, *Phys. Rev. B* **50**, 15026 (1994)
- [ART97] N. V. Abrosimov, S. N. Rossolenko, W. Thieme, A. Gerhardt und W. Schröder, *J. Cryst. Growth* **174**, 182 (1997)
- [ATH99] J. C. Aubry, T. Tylliszczak, A. P. Hitchcock, J.-M. Baribeau und T. E. Jackman, *Phys. Rev. B* **59**, 12872 (1999)
- [AWN00] R. Anton, Th. Wiegner, W. Naumann, M. Liebmann, C. Klein und C. Bradley, *Rev. Sci. Instr.* **71**, 1177 (2000)
- [Barz99] A. Barz, Dissertation, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg (1999)
- [BBK01] A. Benzair, B. Bouhafs, B. Khelifa, C. Mathieu und H. Aourag, *Phys. Lett. A* **282**, 299 (2001)
- [BDK98] A. Barz, P. Dold, U. Kerat, S. Recha, K. W. Benz, M. Franz und K. Pressel, *J. Vac. Sci. Technol. B* **16**(3), 1627 (1998)
- [BEL92] J. Bruley, F. Ernst und K. Ljutovich, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **238**, 469 (1992)
- [BFF84] J. C. Bean, L. C. Feldman, A. T. Fiory, S. Nakahara und I. K. Robinson, *J. Vac. Sci. Technol. A* **2**, 436 (1984)
- [BHC98] H. Bracht, E. E. Haller und R. Clark-Phelps, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 393 (1998)
- [BM71] J. C. Bourgoin und F. Mollot, *Phys. Stat. Sol. (b)* **43**, 343 (1971)
- [Bog67] A. F. Bogenschütz, *Ätzpraxis für Halbleiter*, Hanser, München 1967
- [Bol63] B. I. Boltaks, *Diffusion in Semiconductors*, Infosearch, London 1963
- [Brag20] W. L. Bragg, *Philos. Mag.* **40**, 169 (1920)
- [BSM95] H. Bracht, N. A. Stolwijk und H. Mehrer, *Phys. Rev. B* **52**, 16542 (1995)
- [BSM02] J. Berntgen, A. Schueppen, P. Maier, M. Ortschanoff, W. Kraus und M. Averweg, *Mat. Sci. Eng.* **B89**, 13 (2002)
- [BTM86] A. L. Bouchetout, N. Tabet und C. Monty, *Mat. Sci. Forum* **10–12**, 127 (1986)
- [BWD01] J. M. Bonar, A. F. Willoughby, A. H. Dan, B. M. McGregor, W. Lerch, D. Loeffelmacher, G. A. Cooke und M. G. Dowsett, *J. Mat. Sci.: Materials in Electronics* **12**, 219 (2001)
- [CH56] K. Compaan und Y. Haven, *Trans. Faraday Soc.* **52**, 786 (1956)
- [CH58] K. Compaan und Y. Haven, *Trans. Faraday Soc.* **54**, 1498 (1958)
- [CJ47] H. S. Carslaw und J. C. Jaeger, *Conduction of Heat in Solids*, Clarendon Press, Oxford 1947

- [CKD96] N. E. B. Cowern, W. J. Kersten, R. M. C. De Kruif, J. M. G. Van Berkum, W. B. De Boer, D. J. Gravenstein und C. W. T. Bulle-Liewma, in: *Proceedings of the Fourth International Symposium on Process Physics and Modeling in Semiconductor Technology*, Electrochem. Soc., Pennington 1996
- [CKR01] J. S. Christensen, A. Y. Kuznetsov, H. H. Radamson und B. G. Svensson, *Def. Diff. Forum* **194–199**, 271 (2001)
- [Cra56] J. Crank, *The Mathematics of Diffusion*, Clarendon Press, Oxford 1956
- [CZS94] N. E. B. Cowern, P. C. Zalm, P. van der Sluis, D. J. Gravenstein und W. B. de Boer, *Phys. Rev. Lett* **72**, 2585 (1994)
- [DBR98] P. Dold, A. Barz, S. Recha, K. Pressel, M. Franz und K. W. Benz, *J. Cryst. Growth* **192**, 125 (1998)
- [DDS64] N. W. Dalton, C. Domb und M. F. Sykes, *Proc. Phys. Soc. Lond.* **83**, 496 (1964)
- [Den97] P. Dendooven, *Nucl. Instr. and Meth. B* **126**, 182 (1997)
- [DEP64] J. P. Dismukes, L. Ekstrom und R. J. Pfaff, *J. Phys. Chem.* **68**, 3021 (1964)
- [DGP84] P. Dorner, W. Gust, B. Predel, U. Roll, A. Lodding und H. Odelius, *Phil. Mag. A* **49**, 557 (1984)
- [DGW94] J. Donecker, A. Gerhardt und J. Wollweber, *Mat. Sci. Eng.* **B28**, 18 (1994)
- [DKM83] F. J. Demond, S. Kalbitzer, H. Mannsperger und H. Damjantschitsch, *Phys. Lett.* **93A**, 50 (1983)
- [DN94] G. Davies und R. C. Newman, in: *Handbook on Semiconductors*, Vol. 3a, T. S. Moss (Hrg.), Elsevier Science B. V., Amsterdam 1994, S. 1557
- [ELK91] J. Eugene, F. K. LeGoues, V. P. Kesan, S. S. Iyer und F. M. d’Heurle, *Appl. Phys. Lett.* **59**, 78 (1991)
- [FAF91] Th. Frommhold, W. Arnold, H. Friedrichs, R. Göbel, R. D. Heil, U. Kneissl, U. Seemann und F. Steiper, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research* **A310** (1991), 657
- [FFG96] T. T. Fang, W. T. C. Fang, P. B. Griffin und J. D. Plummer, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 791 (1996)
- [FFL99] R. Fischer, W. Frank und K. Lyutovich, *Physica B* **273–274**, 598 (1999)
- [FGMS84] W. Frank, U. Gösele, H. Mehrer und A. Seeger, in: *Diffusion in Crystalline Solids*, A. S. Nowick und G. Murch (Hrg.), Academic Press, Orlando 1984, S. 63
- [FGP89] P. M. Fahey, P. B. Griffin und J. D. Plummer, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 289 (1989)
- [FHW87] D. Fathy, O. W. Holland und C. White, *Appl. Phys. Lett.* **51**, 1337 (1987)
- [FIS89] P. Fahey, S. S. Iyer und G. J. Scilla, *Appl. Phys. Lett.* **54**, 843 (1989)
- [FIS90] P. Fahey, S. S. Iyer und G. J. Scilla, in: *Proceedings of the 14th Nordic Semiconductor Meeting*, O. Hansen (Hrg.), Royal Swedish Academy of Sciences, Stockholm 1990
- [Fis99] R. Fischer, Dissertation, Universität Stuttgart (1999)
- [Fitz91] E. A. Fitzgerald, *Mater. Sci. Rep.* **7**, 87 (1991)

- [Fitz92] E. A. Fitzgerald, *J. Vac. Sci Technol. B* **10**, 1807 (1992)
- [FKS01] N. Fukata, A. Kasuya und M. Suezawa, *Jpn. J. Appl. Phys.* **40**, L854 (2001)
- [FM67] J. M. Fairfield und B. J. Masters, *J. Appl. Phys.* **38**, 3148 (1967)
- [FPS88] E. C. Frey, N. R. Parikh, M. L. Swanson, M. Z. Numan und W. K. Chu, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **105**, 277 (1988)
- [Fra91] W. Frank, *Def. Diff. Forum* **75**, 121 (1991)
- [Fra02] W. Frank, persönliche Mitteilung
- [FSG95] M. Friesel, U. Södervall und W. Gust, *J. Appl. Phys.* **78**, 5351 (1995)
- [FT56] F. C. Frank und D. Turnbull, *Phys. Rev.* **104**, 617 (1956)
- [FWH95] H. D. Fuchs, W. Walukiewicz, E. E. Haller, W. Dondl, R. Schorer, G. Abstreiter, A. I. Rudnev, A. V. Tikhomirov und V. I. Ozogin, *Phys. Rev. B* **51**, 16817 (1995)
- [FZL01] X. Fan, G. Zeng, C. LaBounty, J. E. Bowers, E. Croke, C. C. Ahn, S. Huxtable, A. Majumdar und A. Shakouri, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 1580 (2001)
- [GBS00] A. Giese, H. Bracht, N. A. Stolwijk und D. Baither, *Mat. Sci. and Eng.* **B71**, 160 (2000)
- [GFS80] U. Gösele, W. Frank und A. Seeger, *Appl. Phys.* **23**, 361 (1980)
- [Gho66] R. N. Ghostagore, *Phys. Rev. Lett.* **16**, 890 (1966)
- [HA79] J. Hirvonen und A. Anttila, *Appl. Phys. Lett.* **35**, 703 (1979)
- [HB98] E. E. Haller und J. Beeman, persönliche Mitteilung (1998)
- [HFM89] J. Hauber, W. Frank und H. Mehrer, *Mater. Sci. Forum* **38–31**, 707 (1989)
- [HFS89] J. Hauber, W. Frank und N. A. Stolwijk, *Mater. Sci. Forum* **38–41**, 6347 (1989)
- [HHG81] E. E. Haller, W. L. Hansen und F. S. Goulding, *Advances in Physics* **30**, 93 (1981)
- [HHL82] E. E. Haller, W. L. Hansen, P. Luke, R. McMurray und B. Jarrett, *IEEE Trans. On Nucl. Sci.* **NS-29**, 745 (1982)
- [HKG98] T. Hackbarth, H. Kibbel, M. Glueck, G. Hoeck und H.-J. Herzog, *Thin Solid Films* **321**, 136 (1998)
- [HMM79] G. Hettich, H. Mehrer und K. Maier, *Inst. Phys. Conf. Ser.* **46**, 500 (1979)
- [Hol62] P. J. Holmes, *The Electrochemistry of Semiconductors*, Academic Press, London 1962
- [Hor97] M. Horz, Dissertation, Universität Stuttgart (1997)
- [Hu73] S. M. Hu, *Phys. Stat. Sol B* **60**, 595 (1973)
- [HWF87] O. W. Holland, C. White und D. Fathy, *Appl. Phys. Lett.* **51**, 520 (1987)
- [HZA01] J. Hattendorf, W.-D. Zeitz, N. V. Abrosimov und W. Schröder, *Physica B* **108–110**, 535 (2001)
- [HZH97] P.-E. Hellberg, S.-L. Zhang, F. M. d’Heurle und C. S. Petersson, *J. Appl. Phys.* **82**, 5779 (1997)

- [JCN01] A. Jääskeläinen, L. Colombo und R. Nieminen, Phys. Rev. B **64**, 233203-1 (2001)
- [JDW01] S. C. Jain, S. Decoutere, M. Willander und H. E. Maes, Semicond. Sci. Technol. **16**, R67 (2001)
- [KE94] P. Kringhøj und R. G. Elliman, Appl. Phys. Lett. **65**, 324 (1994)
- [KHG93] P. Kuo, J. L. Hoyt, J. F. Gibbons, J. E. Turner, R. D. Jacowitz und T. I. Kamins, Appl. Phys. Lett. **62**, 612 (1993)
- [KHG95a] P. Kuo, J. L. Hoyt, J. F. Gibbons, J. E. Turner und D. Lefforge, Appl. Phys. Lett. **66**, 580 (1995)
- [KHG95b] P. Kuo, J. L. Hoyt, J. F. Gibbons, J. E. Turner und D. Lefforge, Appl. Phys. Lett. **67**, 706 (1995)
- [KHG95c] P. Kuo, J. L. Hoyt, J. F. Gibbons, J. E. Turner und D. Lefforge, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **379**, 373 (1995)
- [Kir73] S. Kirkpatrick, Rev. Mod. Phys. **45**, 574 (1973)
- [KKH94] E. Kasper, H. Kibbel, H.-J. Herzog und A. Gruhle, Jpn. J. Appl. Phys. **33**, 2415 (1994)
- [KLG84] J. P. Kalejs, L. A. Ladd und U. Gösele, Appl. Phys. Lett. **45**, 268 (1984)
- [KLS96] P. Kringhøj, A. N. Larsen und S. Y. Shirayev, Phys. Rev. Lett. **76**, 3372 (1996)
- [Koi82] M. Koiwa, Acta metall. **30**, 1069 (1982)
- [Kön94] U. König, Microelectronic Eng. **23**, 3 (1994)
- [KP70] W. Kern und D. A. Puotinen, RCA Review **31**, 187 (1970)
- [KS80] L. Kalinowski und R. Seguin, Appl. Phys. Lett. **36**, 171 (1980)
- [KRD02] M. Kummer, C. Rosenblad, A. Dommann, T. Hackbarth, G. Höck, M. Zeuner, E. Müller und H. von Känel, Mat. Sci. Eng. **B89**, 299 (2002)
- [Lar00] A. N. Larsen, Mat. Sci. Eng. **B71**, 6 (2000)
- [LB89] Landoldt–Börnstein, New Series III/22b, *Impurities and Defects in Group-IV Elements and III–V Compounds*, M. Schulz (Hrg.), Springer, Berlin 1989
- [LCL00] G. L. Luo, P. Y. Chen, X. F. Lin, P. Tsien und T. W. Fan, Appl. Phys. A. **70**, 449 (2000)
- [LHJ94] A. N. Larsen, J. L. Hansen, R. S. Jensen, S. Y. Shiryayev, P. R. Ostergaard, J. Hartung, G. Davies, F. Jensen und J. W. Petersen, Physica Scripta **T54**, 208 (1994)
- [LK96] A. N. Larsen und P. Kringhøj, Appl. Phys. Lett. **68**, 2684 (1996)
- [LKZ90] H. Löwe, P. Keppel und D. Zach, *Halbleiterätzverfahren*, Akademie, Berlin 1990
- [LMM92] F. K. LeGoues, B. S. Meyerson, J. F. Morar und P. D. Kirchner, Appl. Phys. **71**, 4230 (1992)
- [LPS56] H. Letaw, W. M. Portnoy und L. Slifkin, Phys. Rev. **102**, 636 (1956)
- [LRM89] F. K. LeGoues, R. Rosenberg und B. S. Meyerson, Appl. Phys. Lett. **54**, 644 (1989)

- [LS78] C. M. Lederer und V. S. Shirley, *Table of Isotopes*, Wiley, New York 1978
- [LSM95] W. Lerch, N. A. Stolwijk, H. Mehrer und Ch. Poisson, *Semicond. Sci. Technol.* **10**, 1257 (1995)
- [MAS96] S. Mitha, M. J. Aziz, D. Schiferl und D. B. Poker, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 922 (1996)
- [MAS97] S. Mitha, M. J. Aziz, D. Schiferl und D. B. Poker, *Def. Diff. Forum* **143-147**, 1041 (1997)
- [MB74] J. W. Matthews und A. E. Blakeslee, *J. Cryst. Growth* **27**, 118 (1974)
- [MD73] G. L. McVay und A. R. Du Charmé, *J. Appl. Phys.* **44**, 1409 (1973)
- [MD74] G. L. McVay und A. R. Du Charmé, *Phys. Rev. B* **9**, 627 (1974)
- [MD75] G. L. McVay und A. R. Du Charmé, *Inst. Phys. Conf. Ser.* **23**, 91 (1975)
- [Mer62] J. H. van der Merwe, *J. Appl. Phys.* **34**, 123 (1962)
- [Meh87] H. Mehrer, *Phys. Stat. Sol. (a)* **104**, 247 (1987)
- [Mey92] B. S. Meyerson, *Proc. of the IEEE* **80**, 1592 (1993)
- [MFL93] N. Moriya, L. C. Feldman, H. S. Luftman, C. A. King, J. Bevk und B. Freer, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 883 (1993)
- [MMH78] H. Mehrer, K. Maier, H. J. Mayer und G. Rein, *J. Nucl. Mater.* **69 & 70**, 545 (1978)
- [MMM77] H. J. Mayer, H. Mehrer und K. Maier, *Inst. Phys. Conf. Ser.* **31**, 186 (1977)
- [MSM83] F. Morehead, N. Stolwijk, W. Meyberg und U. Gösele, *Appl. Phys. Lett.* **42**, 690 (1983)
- [MT93] N. Mousseau und M. F. Thorpe, *Phys. Rev. B* **48**, 5172 (1993)
- [NBR01] A. N. Larsen, A. Bro Hansen, D. Reitze, J.-J. Goubel, J. Fage-Pedersen und A. Mesli, *Phys. Rev. B* **64**, 233202-1 (2001)
- [NKW90] D. Nayak, K. Kamjoo, J. C. S. Woo, J. S. Park und K. L. Wang, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 66 (1990)
- [OOW82] M. Ogino, Y. Oano und M. Watanabe, *Phys. Stat. Sol. A* **72**, 535 (1982)
- [OA84] R. W. Olesinski und G. J. Abbaschian, *Bull. Alloy Phase Diagrams* **5**, 180 (1984)
- [OLK97] J. J. Osten, G. Lippert, D. Knoll, R. Barth, B. Heinemann, H. Rücker und P. Schley, in: *Technical Digest IEDM*, IEEE, Piscataway 1997, S. 803
- [Pau67] L. Pauling, *The Nature of the Chemical Bond*, Cornell University Press, Ithaca 1967
- [Paul98] D. J. Paul, *Thin Solid Films* **321**, 172 (1998)
- [Paul99] D. J. Paul, *Adv. Mater.* **11**, 191 (1999)
- [PCS74] G. E. Pike, W. J. Camp, C. H. Seager und G. L. McVay, *Phys. Rev. B* **10**, 4909 (1974)
- [Pea66] R. F. Peart, *Phys. Stat. Sol.* **15**, K119 (1966)
- [Peop86] R. People, *IEEE J. of Quantum Electronics* **QE-22**, 1696 (1986)

- [PKJ92] H. Presting, H. Kibbel, M. Jaros, R. M. Turton, U. Menczigar, G. Abstreiter und H. G. Grimmeiss, *Semicond. Sci. Technol.* **7**, 1127 (1992)
- [PLN94] S.-G. Park, W. S. Liu und M.-A. Nicolet, *J. Appl. Phys.* **75**, 1764 (1994)
- [PMW95] A. D. N. Paine, M. Morooka, A. F. W. Willoughby, J. M. Bonar, P. Philips, M. G. Dowsett und G. Cooke, *Mat. Sci. Forum* **196–201**, 345 (1995)
- [PSA57] D. A. Petrov, Y. M. Shaskov und I. P. Akimchenko, in: *Voprosy Metallurgii i Fiziki Poluprovodnikov. Trudy Soveshaniya po Poluprovodnikouym Materialam*, D. A. Petrov (Hrg.), Akad. Nauk SSSR, Moskau 1957, S. 130
- [PSC89] M. Perret, N. A. Stolwijk und L. Cohausz, *J. Phys. Condens. Matter* **1**, 6347 (1989)
- [RA85] N. V. Rozhanskii und V. A. Arslambekov, *Phys. Chem. Mech. Surfaces* **3**, 2780 (1985)
- [RH00] H. Rücker und B. Heinemann, *Solid-State Electronics* **44**, 783 (2000)
- [RHA81] J. Räisänen, J. Hirvonen und A. Anttila, *Solid-State Electronics* **24**, 333 (1981)
- [RHW90] C. Rank, J. Horváth, M. Werner und W. Frank, *Vakuum in der Praxis* **4**, 286 (1990)
- [Rim95] E. Rimini, *Ion Implantation: Basics to Device Fabrication*, Kluwer Academic Press, Boston 1995
- [RSM89] F. Rollert, N. A. Stolwijk und H. Mehrer, *Mat. Sci. Forum* **38–41**, 753 (1989)
- [RYG99] M. C. Ridgway, K. M. Yu, C. J. Glover, G. J. Foran, C. Clerc, J. L. Hansen und A. N. Larsen, *Phys. Rev. B* **60**, 10831 (1999)
- [SC68] A. Seeger und K. P. Chik, *Phys. Stat. Sol.* **29**, 455 (1968)
- [Schä92] F. Schäffler, *Semicond. Sci. Technol.* **7**, 260 (1992)
- [Schä97] F. Schäffler, *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 1515 (1997)
- [SCN02] D. De Salvador, A. Coati, E. Napolitani, M. Berti, A. V. Drigo, M. S. Carroll, J. C. Sturm, J. Stangl, G. Bauer und L. Lazzarini, *Appl. Phys. A* **75**, 667 (2002)
- [SD69] I. R. Sanders und P. S. Dobson, *Phil. Mag.* **20**, 881 (1969)
- [Sec72] F. Secco D'Aragona, *J. Electrochem. Soc.* **119**, 948 (1972)
- [SFH85] N. A. Stolwijk, W. Frank, J. Hölzl, S. J. Pearton und E. E. Haller, *J. Appl. Phys.* **57**, 5211 (1985)
- [Sha90] B. L. Sharma, *Def. Diff. Forum* **70&71**, 1 (1990)
- [SK39] H. Stöhr und W. Klemm, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **241**, 305 (1939)
- [SMF01] A. Strohm, S. Matics und W. Frank, *Def. Diff. Forum* **194–199**, 629 (2001)
- [SPC99] K. Said, J. Poortmans, M. Caymax, R. Loo, A. Daami, G. Bremond, O. Kruger und M. Kittler, *Thin Solid Films* **337**, 85 (1999)
- [SPM88] N. A. Stolwijk, M. Perret und H. Mehrer, *Def. Diff. Forum* **59**, 79 (1988)
- [SSH83] N. A. Stolwijk, B. Schuster, J. Hölzl, H. Mehrer und W. Frank, *Physica* **116B**, 335 (1983)
- [SSH84] N. A. Stolwijk, B. Schuster und J. Hölzl, *Appl. Phys. A* **33**, 133 (1984)

- [STH92] F. Schäffler, D. Többen, H.-J. Herzog, G. Abstreiter und B. Holländer, *Semicond. Sci. Technol.* **7**, 260 (1992)
- [Str99] A. Strohm, Diplomarbeit, Universität Stuttgart (1999)
- [SVF02] A. Strohm, T. Voss, W. Frank, P. Laitinen und J. Räisänen, *Z. Metallkd.* **93**, 737 (2002)
- [TCZ97] M. Tang, L. Colombo, J. Zhu und T. Diaz de la Rubia, *Phys. Rev. B* **55**, 14279 (1997)
- [TG85] T. Y. Tan und U. Gösele, *Appl. Phys. A* **37**, 1 (1985)
- [TSA02] A. Terrasi, S. Scalese, R. Adorno, E. Ferlito, M. Spadafora und E. Rimini, *Mat. Sci. Eng.* **B89**, 269 (2002)
- [UGP99] A. Ural, P. B. Griffin und J. D. Plummer, *Phys. Rev. Lett* **83**, 3454 (1999)
- [UWB01] S. Uppal, A. F. W. Willoughby, J. M. Bonar, A. G. R. Evans, N. E. B. Cowern, R. Morris und M. G. Dowsett, *Physica B* **308–310**, 525 (2001)
- [Val58] M. W. Valenta, *Bull. Am. Phys. Soc.* **2**, 102 (1958)
- [VDS01] P. Venezuela, G. M. Dalpian, A. J. R. da Silva und A. Fazzio, *Phys. Rev. B* **64**, 193202-1 (2001)
- [VDS02] P. Venezuela, G. M. Dalpian, A. J. R. da Silva und A. Fazzio, *Phys. Rev. B* **65**, 193306-1 (2002)
- [Veg21] L. Vegard, *Z. Phys.* **5**, 17 (1921)
- [VHM83] G. Vogel, G. Hettich und H. Mehrer, *J. Phys. C* **16**, 6197 (1983)
- [VR57] M. W. Valenta und C. Ramasastry, *Phys. Rev.* **106**, 73 (1957)
- [VSM02] T. Voss, A. Strohm, S. Matics, P. Scharwaechter und W. Frank, *Z. Metallkd.* **93**, 1077 (2002)
- [WBP99] A. F. W. Willoughby, J. M. Bonar und A. N. D. Paine, *Mater. Res. Soc. Sym. Proc.* **568**, 253 (1999)
- [WG61] H. Widmer und G. R. Gunther-Mohr, *Helv. Phys. Acta* **34**, 635 (1961)
- [WGJ98] P. Werner, H.-J. Gossmann, D. C. Jacobson und U. Gösele, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 2465 (1998)
- [WK93] K. L. Wang und R. P. G. Karunasiri, *J. Vac. Sci. Technol. B* **11**(3), 1159 (1993)
- [WLF64] W. R. Wilcox, T. J. La Chapelle und D. H. Forbes, *Appl. Phys.* **35**, 240 (1964)
- [WMH85] M. Werner, H. Mehrer und H. D. Hochheimer, *Phys. Rev. B* **32**, 3930 (1985)
- [WTC79] G. D. Watkins, J. R. Troxell und A. P. Chatterjee, *Inst. Phys. Conf. Ser.* **46**, 16 (1979)
- [YJD01] M. Yu, C. S. Jayanthi, D. A. Drabold und S. Y. Wu, *Phys. Rev. B* **64**, 165205-1 (2001)
- [ZFH01] N. R. Zangenberg, J. Fage-Pedersen, J. Lundsgaard Hansen und A. N. Larsen, *Def. Diff. Forum* **194–199**, 703 (2001)
- [ZHF01] N. R. Zangenberg, J. Lundsgaard Hansen, J. Fage-Pedersen und A. N. Larsen, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 125901-1 (2001)

Tabellen

Isotop	H [eV]	D_0^T [m^2s^{-1}]	T -Bereich [$^{\circ}\text{C}$]	Verfahren	Zitat
^{31}Si	4,77	$1,8 \cdot 10^{-1}$	1200–1400	Handschleifen	[Pea66]
^{30}Si	4,72	$1,2 \cdot 10^{-1}$	1178–1300	n-Aktivierung, chemische Schichtenteilung	[Gho66]
^{31}Si	5,13	$9,0 \cdot 10^{-1}$	1100–1300	Elektrochemische Schichtenteilung	[FM67]
$^{\text{nat}}\text{Si}$	4,1	$5,8 \cdot 10^{-4}$	970–1070	Ausheilen von I-Ringen	[SD69]
^{31}Si	5,02	$1,46 \cdot 10^{-1}$	1047–1387	Sputtern	[MMM77]
^{30}Si	4,1	$8,0 \cdot 10^{-4}$	900–1100	(p, γ)-Resonanz	[HA79]
^{30}Si	4,64	$1,55 \cdot 10^{-2}$	855–1175	SIMS	[KS80]
^{30}Si	4,4	$2,0 \cdot 10^{-3}$	830–1200	(p, γ)-Resonanz	[DKM83]
$^{29,30}\text{Si}$	4,75	$5,3 \cdot 10^{-2}$	855–1388	SIMS	[BHC98]
^{30}Si	4,76	$5,6 \cdot 10^{-3}$	800–1100	SIMS	[UGP99]
^{71}Ge	5,28	$6,3 \cdot 10^{+1}$	1150–1350	Schleifen	[PSA57]
^{71}Ge	4,7	$1,54 \cdot 10^{-1}$	1200–1380	Schleifen	[MD73]
^{71}Ge	4,97	$2,5 \cdot 10^{-1}$	1030–1302	Sputtern	[HMM79]
	3,93	$3,5 \cdot 10^{-5}$	855–1000		
^{71}Ge	5,08	$7,55 \cdot 10^{-1}$	1100–1300	SIMS	[OOW82]
^{71}Ge	5,34	$1,03 \cdot 10^{+1}$	876–1388	SIMS	[DGP84]
^{72}Ge	4,92	$2,44 \cdot 10^{-1}$	850–1100	SIMS	[FIS90]
^{72}Ge	4,66	$3,1 \cdot 10^{-2}$	925–1050	SIMS	[ZHF01]
^{71}Ge	4,88	$2,1 \cdot 10^{-1}$	1062–1214	Sputtern	diese Arb.

Tabelle 1: Übersicht: Si- und Ge-Diffusionsdaten in reinem Si.

Isotop	H [eV]	D_0^T [m^2s^{-1}]	T -Bereich [$^\circ\text{C}$]	Verfahren	Zitat
^{71}Ge	2,95	$7,8 \cdot 10^{-4}$	766–928	Schleifen	[LPS56]
^{71}Ge	3,1	$3,2 \cdot 10^{-3}$	750–870	Schleifen	[VR57]
^{71}Ge	3,12	$4,4 \cdot 10^{-3}$	731–915	Steigmann-Verfahren	[WG61]
	2,99	$1,08 \cdot 10^{-3}$		Gruzin-Verfahren	
^{71}Ge	3,0	$1,1 \cdot 10^{-3}$	731–916	Schleifen	[MD74]
^{71}Ge	3,14	$2,48 \cdot 10^{-3}$	549–891	Sputtern	[VHM83]
^{71}Ge	3,09	$1,36 \cdot 10^{-3}$	535–904	Sputtern	[WMH85]
$^{70,74}\text{Ge}$	3,05	$1,2 \cdot 10^{-3}$	543–690	SIMS	[FWH95]
^{71}Ge	3,14	$8,1 \cdot 10^{-3}$	643–847	Sputtern	diese
^{30}Si	2,9	$2,4 \cdot 10^{-5}$	650–900	(p, γ)-Resonanz	[RHA81]
^{31}Si	3,19	$4,3 \cdot 10^{-3}$	843–904	Sputtern	diese

Tabelle 2: Übersicht: Ge- und Si-Diffusionsdaten in reinem Ge.

Ge-Gehalt y	Schichtdicke d [μm]	Orientierung	Herstellungsverfahren	Versetzungsdichte ρ_D [cm^{-2}]
0 (Si)	bulk	(111)	Zonenschmelze	≈ 0
0,05	11	(100)	CVD	$2,4 \cdot 10^6$
0,10	0,4	(100)	CVD	$\lesssim 10^5$
0,17	0,98	(100)	MBE	$\lesssim 10^6$
0,25	1,05	(100)	CVD	$\lesssim 10^5$
0,35	0,98	(100)	MBE	$\lesssim 10^6$
0,43	0,45	(100)	MBE	$\lesssim 10^6$
0,50	4	(100)	MBE	$\lesssim 10^5$
0,65	4	(100)	LEPECVD	$\lesssim 10^6$
0,80	4	(100)	LEPECVD	$\lesssim 10^6$
0,85	bulk	(100)	Zonenschmelze	$\approx 6 \cdot 10^5$

0,90	bulk	(100)	Zonenschmelze	$\approx 6 \cdot 10^5$
0,95	bulk	(111)	Czochralski	$\approx 10^7$
1,0 (Ge)	bulk	(100)	Czochralski	≈ 0

Tabelle 3: Zusammenstellung der Materialdaten der $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ -Proben.

Abb.	T [°C]	t	D^T [m^2s^{-1}]	x_D [nm]
38	1214	2,5 h	$5,97 \cdot 10^{-18}$	464
39	1209	2,75 h	$5,29 \cdot 10^{-18}$	458
40	1156	458 min	$1,29 \cdot 10^{-18}$	377
41	1130	15,5	$6,01 \cdot 10^{-19}$	366
42	1098	45 h	$2,41 \cdot 10^{-19}$	395
43	1079	63,5 h	$1,35 \cdot 10^{-19}$	351
44	1062	7 d	$7,73 \cdot 10^{-20}$	432

Tabelle 4: Zusammenstellung der Diffusionskoeffizienten D^T und der mittleren Diffusionsverbreiterungen x_D von ^{71}Ge in Si.

Abb.	T [°C]	t	D^T [m^2s^{-1}]	x_D [nm]
45	1263	160 min	$2,68 \cdot 10^{-17}$	1014
46	1187	2,25 h	$3,88 \cdot 10^{-18}$	355
47	1133	15,25 h	$8,54 \cdot 10^{-19}$	433
48	1095	18 h	$2,47 \cdot 10^{-19}$	253
49	1092	18 h	$2,4 \cdot 10^{-19}$	249
50	1057	113,5 h	$8,7 \cdot 10^{-20}$	283
51	1043	38,5 h	$4,9 \cdot 10^{-20}$	165
52	991	16 d	$1,01 \cdot 10^{-20}$	236
53	973	626 h	$5,82 \cdot 10^{-21}$	229

Tabelle 5: Zusammenstellung der Diffusionskoeffizienten D^T und der mittleren Diffusionsverbreiterungen x_D von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,96}\text{Ge}_{0,04}$.

Abb.	T [°C]	t	D^T [m ² s ⁻¹]	x_D [nm]
54	1143	6 h	$1,83 \cdot 10^{-18}$	394
55	1141	2,5 h	$2,14 \cdot 10^{-18}$	275
56	1123	4,25 h	$1,07 \cdot 10^{-18}$	259
57	1102	17,25 h	$6,26 \cdot 10^{-19}$	396
58	1076	15 h	$2,77 \cdot 10^{-19}$	246
59	1049	17,5 h	$1,57 \cdot 10^{-19}$	201
60	1029	53,67 h	$7,03 \cdot 10^{-20}$	233
61	1019	88,5 h	$4,81 \cdot 10^{-20}$	247
62	992	11 d	$1,99 \cdot 10^{-20}$	275
63	965	337,5 h	$9,78 \cdot 10^{-21}$	218
64	939	10 d	$3,68 \cdot 10^{-21}$	113
65	897	3,5 d	$8,0 \cdot 10^{-22}$	31

Tabelle 6: Zusammenstellung der Diffusionskoeffizienten D^T und der mittleren Diffusionsverbreiterungen x_D von ⁷¹Ge in Si_{0,90}Ge_{0,10}.

Abb.	T [°C]	t	D^T [m ² s ⁻¹]	x_D [nm]
66	1151	2,5 h	$4,86 \cdot 10^{-18}$	418
67	1132	3,5 h	$2,61 \cdot 10^{-18}$	363
68	1114	7 h	$1,59 \cdot 10^{-18}$	388
69	1095	8,5 h	$1,1 \cdot 10^{-18}$	367
70	1075	18 h	$5,99 \cdot 10^{-19}$	394
71	1028	65 h	$1,48 \cdot 10^{-19}$	372
72	1003	160,25 h	$6,36 \cdot 10^{-20}$	383
73	939	238,75 h	$7,09 \cdot 10^{-21}$	156

Tabelle 7: Zusammenstellung der Diffusionskoeffizienten D^T und der mittleren Diffusionsverbreiterungen x_D von ⁷¹Ge in Si_{0,83}Ge_{0,17}.

Abb.	T [°C]	t	D^T [m ² s ⁻¹]	x_D [nm]
74	1174	140 min	$9,16 \cdot 10^{-18}$	555
75	1153	2,25 h	$6,05 \cdot 10^{-18}$	443
76	1142	3 h	$5,33 \cdot 10^{-18}$	480
77	1140	2,5 h	$5,0 \cdot 10^{-18}$	424
78	1130	5,5 h	$3,41 \cdot 10^{-18}$	520
79	1117	265 min	$2,96 \cdot 10^{-18}$	434
80	1095	6,75 h	$1,73 \cdot 10^{-18}$	410
81	1083	8,25 h	$1,25 \cdot 10^{-18}$	385
82	1068	23,1 h	$5,68 \cdot 10^{-19}$	468
83	1066	5,75 h	$8,06 \cdot 10^{-19}$	258
84	1046	13,16 h	$4,49 \cdot 10^{-19}$	292
85	1045	17,5 h	$4,0 \cdot 10^{-19}$	317
86	1038	64 h	$2,89 \cdot 10^{-19}$	524
87	1029	43,25 h	$2,42 \cdot 10^{-19}$	388
88	1013	17,25 h	$1,49 \cdot 10^{-19}$	192
89	992	13 h	$8,48 \cdot 10^{-20}$	126
90	958	91 h	$3,12 \cdot 10^{-20}$	202
91	947	477 h	$2,15 \cdot 10^{-20}$	384
92	918	278,25 h	$6,47 \cdot 10^{-21}$	161
93	891	28 h	$2,8 \cdot 10^{-21}$	33
94	883	498,5 h	$1,76 \cdot 10^{-21}$	112

Tabelle 8: Zusammenstellung der Diffusionskoeffizienten D^T und der mittleren Diffusionsverbreiterungen x_D von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$.

Abb.	T [°C]	t	D^T [m ² s ⁻¹]	x_D [nm]
95	1102	3 h	$3,91 \cdot 10^{-18}$	411
96	1071	5 h	$1,66 \cdot 10^{-18}$	346
97	1055	7 h	$1,21 \cdot 10^{-18}$	349
98	1022	18 h	$4,58 \cdot 10^{-19}$	345
99	996	47,25 h	$2,25 \cdot 10^{-19}$	391
100	971	66 h	$8,84 \cdot 10^{-20}$	290
101	917	478,25 h	$1,32 \cdot 10^{-20}$	302

Tabelle 9: Zusammenstellung der Diffusionskoeffizienten D^T und der mittleren Diffusionsverbreiterungen x_D von ⁷¹Ge in Si_{0,65}Ge_{0,35}.

Abb.	T [°C]	t	D^T [m ² s ⁻¹]	x_D [nm]
102	1032	200 min	$1,6 \cdot 10^{-18}$	277
103	1007	4,5 h	$7,72 \cdot 10^{-19}$	224
34	980	8,5 h	$3,96 \cdot 10^{-19}$	220
104	967	16,75 h	$2,19 \cdot 10^{-19}$	229
105	939	39,5 h	$1,03 \cdot 10^{-19}$	242
106	918	88 h	$5,1 \cdot 10^{-20}$	254
107	894	64,5 h	$2,34 \cdot 10^{-20}$	147
108	865	450 h	$8,87 \cdot 10^{-21}$	240

Tabelle 10: Zusammenstellung der Diffusionskoeffizienten D^T und der mittleren Diffusionsverbreiterungen x_D von ⁷¹Ge in Si_{0,57}Ge_{0,43}.

Abb.	T [°C]	t	D^T [m ² s ⁻¹]	x_D [nm]
109	1066	1,5 h	$8,32 \cdot 10^{-18}$	424
110	1054	3 h	$5,72 \cdot 10^{-18}$	497
111	1044	3 h	$4,07 \cdot 10^{-18}$	419
112	1023	5,25 h	$3,11 \cdot 10^{-18}$	323
113	1003	3,25 h	$1,35 \cdot 10^{-18}$	254
114	978	23,5 h	$6,54 \cdot 10^{-19}$	470
115	964	40,75 h	$4,47 \cdot 10^{-19}$	512
116	960	33,5 h	$4,23 \cdot 10^{-19}$	452
117	945	19,75 h	$2,6 \cdot 10^{-19}$	271
118	922	136,5 h	$1,3 \cdot 10^{-19}$	505
119	893	205,5	$4,7 \cdot 10^{-20}$	373
120	865	450 h	$1,85 \cdot 10^{-20}$	346

Tabelle 11: Zusammenstellung der Diffusionskoeffizienten D^T und der mittleren Diffusionsverbreiterungen x_D von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$.

Abb.	T [°C]	t	D^T [m ² s ⁻¹]	x_D [nm]
121	1000	2,75 h	$1,84 \cdot 10^{-17}$	854
122	946	3 h	$4,11 \cdot 10^{-18}$	421
35	924	3 h	$1,79 \cdot 10^{-18}$	278
123	897	6 h	$8,93 \cdot 10^{-19}$	278
124	876	21 h	$4,37 \cdot 10^{-19}$	364
125	859	22,5 h	$2,21 \cdot 10^{-19}$	268
126	806	87,5 h	$3,77 \cdot 10^{-20}$	218
127	787	310,5 h	$1,41 \cdot 10^{-20}$	260
128	756	553 h	$4,21 \cdot 10^{-21}$	183

Tabelle 12: Zusammenstellung der Diffusionskoeffizienten D^T und der mittleren Diffusionsverbreiterungen x_D von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,35}\text{Ge}_{0,65}$.

Abb.	T [°C]	t	D^T [m ² s ⁻¹]	x_D [nm]
129	903	3 h	$7,47 \cdot 10^{-18}$	568
130	886	3 h	$4,92 \cdot 10^{-18}$	461
131	870	4,5 h	$2,92 \cdot 10^{-18}$	435
132	848	15,5 h	$1,45 \cdot 10^{-18}$	569
133	828	22 h	$8,7 \cdot 10^{-19}$	525
134	804	63,5 h	$3,31 \cdot 10^{-19}$	445
135	795	111,4 h	$2,17 \cdot 10^{-19}$	590
136	785	66 h	$1,59 \cdot 10^{-19}$	389
137	760	64,5 h	$5,87 \cdot 10^{-20}$	738
138	760	64,5 h	$5,89 \cdot 10^{-20}$	740
139	745	47,25 h	$3,65 \cdot 10^{-20}$	158
140	730	424 h	$1,89 \cdot 10^{-20}$	340
141	730	424 h	$2,0 \cdot 10^{-20}$	349

Tabelle 13: Zusammenstellung der Diffusionskoeffizienten D^T und der mittleren Diffusionsverbreiterungen x_D von ⁷¹Ge in Si_{0,20}Ge_{0,80}.

Abb.	T [°C]	t	D^T [m ² s ⁻¹]	x_D [nm]
142	880	185 min	$5,86 \cdot 10^{-18}$	510
143	841	4 h	$1,89 \cdot 10^{-18}$	330
144	808	21,25 h	$6,48 \cdot 10^{-19}$	409
145	791	45 h	$3,17 \cdot 10^{-19}$	453
146	774	40 h	$2,11 \cdot 10^{-19}$	348
147	743	67,25 h	$4,93 \cdot 10^{-20}$	218
148	711	143,5 h	$1,27 \cdot 10^{-20}$	162

Tabelle 14: Zusammenstellung der Diffusionskoeffizienten D^T und der mittleren Diffusionsverbreiterungen x_D von ⁷¹Ge in Si_{0,15}Ge_{0,85}.

Abb.	T [°C]	t	D^T [m ² s ⁻¹]	x_D [nm]
149	875	2,5 h	$1,5 \cdot 10^{-17}$	735
150	836	182 min	$4,23 \cdot 10^{-18}$	430
151	821	3 h	$2,49 \cdot 10^{-18}$	328
152	786	15,5 h	$7,66 \cdot 10^{-19}$	413
153	765	25 h	$3,69 \cdot 10^{-19}$	364
154	765	15,25 h	$3,66 \cdot 10^{-19}$	284
155	743	67,25 h	$1,64 \cdot 10^{-19}$	399
156	721	145,5 h	$5,98 \cdot 10^{-20}$	354

Tabelle 15: Zusammenstellung der Diffusionskoeffizienten D^T und der mittleren Diffusionsverbreiterungen x_D von ⁷¹Ge in Si_{0,10}Ge_{0,90}.

Abb.	T [°C]	t	D^T [m ² s ⁻¹]	x_D [nm]
157*	944	12,5 min	$2,5 \cdot 10^{-16}$	784
158*	921	30 min	$1,22 \cdot 10^{-16}$	937
159	898	130 min	$6,1 \cdot 10^{-17}$	1380
160	875	2 h	$4,0 \cdot 10^{-17}$	1073
161	851	2 h	$1,4 \cdot 10^{-17}$	635
162	821	3 h	$6,0 \cdot 10^{-18}$	509
163	800	3 h	$2,29 \cdot 10^{-18}$	315
164	785	545 min	$2,08 \cdot 10^{-18}$	522
165	780	15,25 h	$1,9 \cdot 10^{-18}$	658
166	762	18,3 h	$9,16 \cdot 10^{-19}$	492
167	740	41 h	$3,37 \cdot 10^{-19}$	446
168	718	17,5 h	$1,96 \cdot 10^{-19}$	222
169	715	87,5 h	$1,56 \cdot 10^{-19}$	448
170	700	66,5 h	$6,83 \cdot 10^{-20}$	256

171	687	73 h	$4,03 \cdot 10^{-20}$	206
172	664	65,5 h	$1,44 \cdot 10^{-20}$	117
173	656	5 d	$1,15 \cdot 10^{-20}$	141

Tabelle 16: Zusammenstellung der Diffusionskoeffizienten D^T und der mittleren Diffusionsverbreiterungen x_D von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,05}\text{Ge}_{0,95}$. In den mit * gekennzeichneten Fällen erfolgte die Temperung in einem Lampenofen [RHW90], der Aufheizraten von bis zu 50 K/s erlaubt.

Abb.	T [°C]	t	D^T [m^2s^{-1}]	x_D [nm]
174	847	2,75 h	$2,45 \cdot 10^{-17}$	985
175	814	3 h	$8,7 \cdot 10^{-18}$	613
176	791	2,5 h	$3,29 \cdot 10^{-18}$	344
177	783	250 min	$2,98 \cdot 10^{-18}$	423
178	783	250 min	$2,73 \cdot 10^{-18}$	405
179	709	66 h	$1,95 \cdot 10^{-19}$	434
180	686	55 h	$7,46 \cdot 10^{-20}$	243
181	680	70 h	$5,68 \cdot 10^{-20}$	239
182	643	477 h	$1,3 \cdot 10^{-20}$	299

Tabelle 17: Zusammenstellung der Diffusionskoeffizienten D^T und der mittleren Diffusionsverbreiterungen x_D von ^{71}Ge in Ge .

Ge-Gehalt y	H [eV]	D_0^T [m^2s^{-1}]	T -Bereich [°C]
0,00	4,88	$2,1 \cdot 10^{-1}$	1062–1214
0,05	4,83	$1,7 \cdot 10^{-1}$	973–1263
0,10	4,69	$9,8 \cdot 10^{-2}$	897–1143
0,17	4,55	$4,5 \cdot 10^{-2}$	939–1151
0,25	4,34	$1,2 \cdot 10^{-2}$	883–1174
0,35	4,18	$5,7 \cdot 10^{-3}$	917–1102

0,43	4,04	$5,0 \cdot 10^{-3}$	865–1032
0,50	3,93	$5,1 \cdot 10^{-3}$	865–1066
0,65	3,73	$9,5 \cdot 10^{-3}$	756–1000
0,80	3,48	$8,1 \cdot 10^{-3}$	730–903
0,85	3,42	$9,8 \cdot 10^{-3}$	711–880
0,90	3,32	$8,3 \cdot 10^{-3}$	721–875
0,95	3,31	$2,1 \cdot 10^{-2}$	656–944
1,00	3,14	$8,1 \cdot 10^{-3}$	643–847

Tabelle 18: Zusammenstellung der Arrhenius-Parameter H und D_0^T für die Diffusion von ^{71}Ge in SiGe Legierungen.

Ge-Gehalt y	T_m [°C]	D^T [m^2s^{-1}]
0,00	1415	$5,7 \cdot 10^{-16}$
0,05	1397	$5,4 \cdot 10^{-16}$
0,10	1385	$5,4 \cdot 10^{-16}$
0,17	1371	$5,1 \cdot 10^{-16}$
0,25	1349	$4,0 \cdot 10^{-16}$
0,35	1321	$3,5 \cdot 10^{-16}$
0,43	1294	$5,1 \cdot 10^{-16}$
0,50	1271	$7,6 \cdot 10^{-16}$
0,65	1206	$1,9 \cdot 10^{-15}$
0,80	1126	$2,4 \cdot 10^{-15}$
0,85	1090	$2,2 \cdot 10^{-15}$
0,90	1050	$1,9 \cdot 10^{-15}$
0,95	994	$1,5 \cdot 10^{-15}$
1,00	937	$8,9 \cdot 10^{-16}$

Tabelle 19: Berechnete ^{71}Ge -Tracer-Selbstdiffusionskoeffizienten D^T in SiGe am Schmelz- bzw. Liquiduspunkt T_m .

Abb.	T [°C]	t	D^T [m ² /s]	x_D [nm]
191	1273	1 h	$2,8 \cdot 10^{-17}$	635

Tabelle 20: Diffusionskoeffizient D^T und mittlere Diffusionsverbreiterung x_D von ^{31}Si in Si.

Abb.	T [°C]	t	D^T [m ² /s]	x_D [nm]
192	1045	25 min	$3,96 \cdot 10^{-18}$	154
193	1015	20 min	$1,9 \cdot 10^{-18}$	96
194	975	90 min	$5,64 \cdot 10^{-19}$	110

Tabelle 21: Zusammenstellung der Diffusionskoeffizienten D^T und der mittleren Diffusionsverbreiterungen x_D von ^{31}Si in $\text{Si}_{0.50}\text{Ge}_{0.50}$.

Abb.	T [°C]	t_{eff}	D^T [m ² /s]	x_D [nm]
195	952	21,2 min	$1,47 \cdot 10^{-17}$	273
196	924	20,9 min	$6,82 \cdot 10^{-18}$	185
197	897	51,1 min	$2,60 \cdot 10^{-18}$	179
198	869	21,1 min	$1,28 \cdot 10^{-18}$	81
199	859	90 min	$9,14 \cdot 10^{-19}$	141

Tabelle 22: Zusammenstellung der Diffusionskoeffizienten D^T und der mittleren Diffusionsverbreiterungen x_D von ^{31}Si in $\text{Si}_{0.20}\text{Ge}_{0.80}$ (t_{eff} = korrigierte Dauer der Diffusionstemperatur).

Abb.	T [°C]	t_{eff}	D^T [m ² /s]	x_D [nm]
200	904	44,1 min	$4,27 \cdot 10^{-17}$	672
201	899	23,2 min	$4,0 \cdot 10^{-17}$	472
202	869	23,7 min	$1,57 \cdot 10^{-17}$	298
203	843	29,1 min	$8,0 \cdot 10^{-18}$	237

Tabelle 23: Zusammenstellung der Diffusionskoeffizienten D^T und der mittleren Diffusionsverbreiterungen x_D von ^{31}Si in Ge (t_{eff} = Dauer der Diffusionstemperatur).

Ge-Gehalt y	H [eV]	D_0^T [m^2s^{-1}]	T -Bereich [$^{\circ}\text{C}$]
0,80	3,52	$7,5 \cdot 10^{-3}$	859–952
1,00	3,19	$4,3 \cdot 10^{-3}$	843–904

Tabelle 24: Zusammenstellung der Arrhenius-Parameter H und D_0^T für die Diffusion von ^{31}Si in SiGe Legierungen.

Abb.	T [$^{\circ}\text{C}$]	t_{eff}	D^T [m^2/s]	x_D [nm]
207	890	564 s	$1,71 \cdot 10^{-16}$	621
206	869	18,55 min	$1,43 \cdot 10^{-16}$	798
208	853	23,52 min	$8,19 \cdot 10^{-17}$	680
209	843	18,51 min	$6,37 \cdot 10^{-17}$	532
206	828	17,63 min	$3,27 \cdot 10^{-17}$	372
210	800	38,48 min	$1,75 \cdot 10^{-17}$	402
211	770	56,46 min	$5,5 \cdot 10^{-18}$	273
212	750	106,3 min	$2,9 \cdot 10^{-18}$	272

Tabelle 25: Zusammenstellung der Diffusionskoeffizienten D^T und der mittleren Diffusionsverbreiterungen x_D von ^{11}C in Ge (t_{eff} = korrigierte Dauer der Diffusionstemperatur).

Element	H [eV]	D_0^T [m^2s^{-1}]	T -Bereich	Zitat
C	3,01	$1,9 \cdot 10^{-3}$	643–847	diese Arb.
Sn	3,05	$7,0 \cdot 10^{-3}$	798–846	[Val58]
Sn	1,9	$1,7 \cdot 10^{-6}$	keine Angabe	[Bol63]
Sn	3,05	$1,05 \cdot 10^{-2}$	700–900	[KE94]
Sn	3,26	$8,4 \cdot 10^{-2}$	555–930	[FSG95]
Pb	3,6	$1,6 \cdot 10^{-1}$	keine Angabe	[Bol63]

Tabelle 26: Zusammenstellung der Diffusionsdaten von C, Sn und Pb in Ge.

Abbildungen

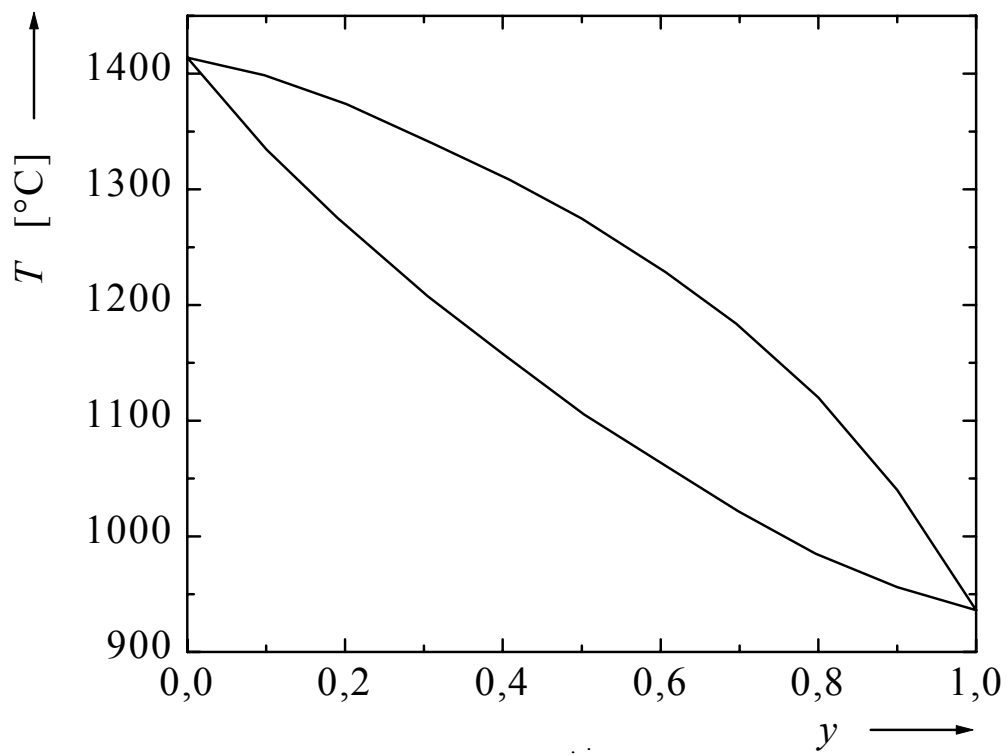


Abbildung 1: Phasendiagramm von Silizium–Germanium [SK39, OA84].

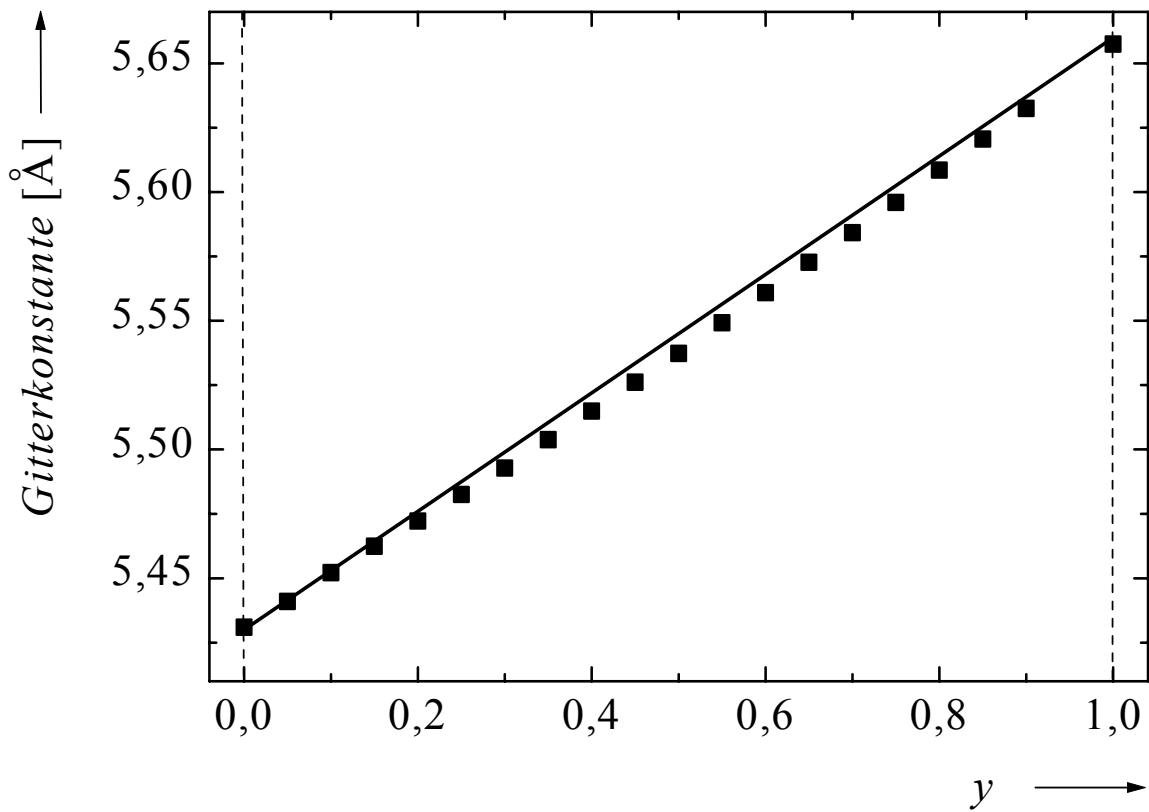


Abbildung 2: Abhängigkeit der Gitterkonstanten von relaxiertem SiGe vom Ge-Gehalt y : Vegardsches Gesetz (—) [Veg21] und experimentelle Daten (■) [DEP64].

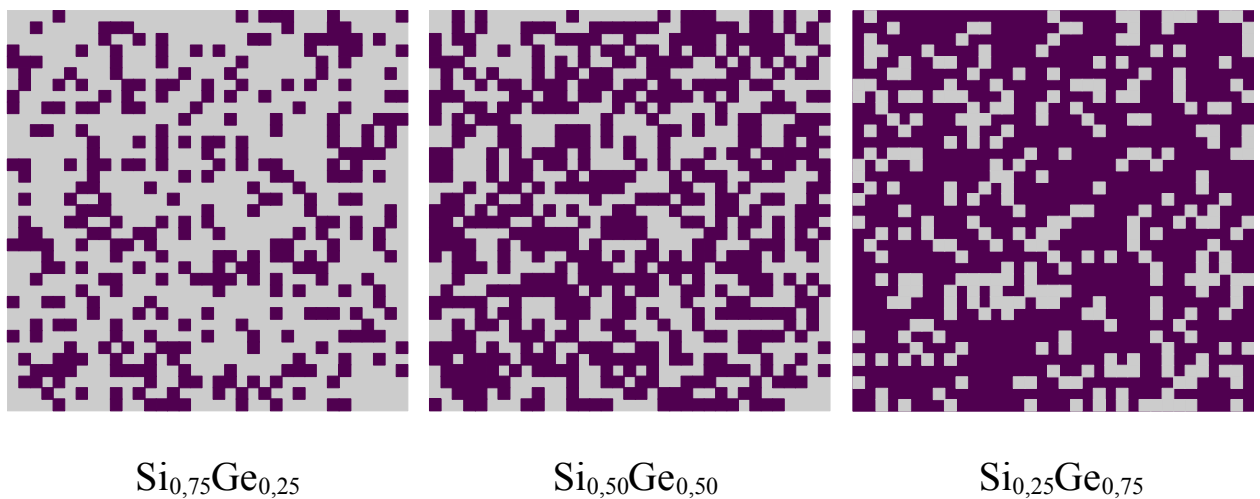


Abbildung 3: Statistische Verteilung von Si-Atomen (grau) und Ge-Atomen (schwarz) in SiGe-Legierungen verschiedener Zusammensetzung.

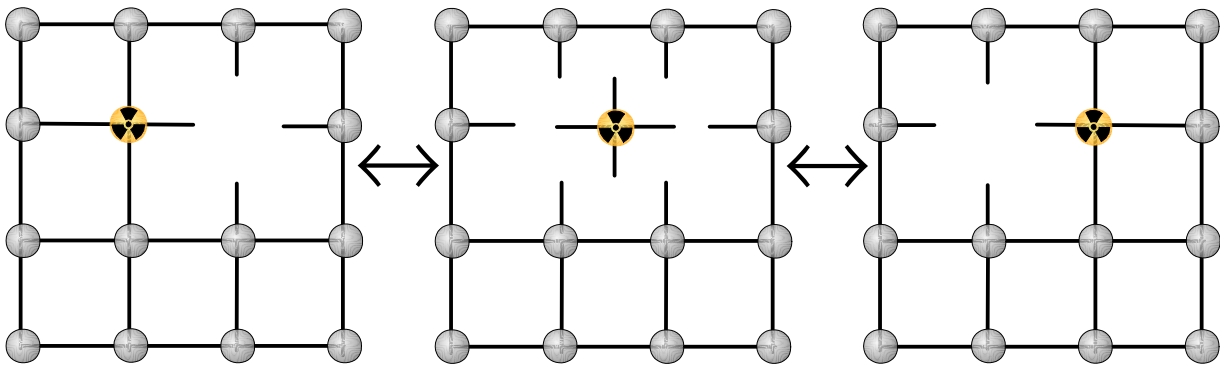


Abbildung 4: Leerstellenmechanismus: Platzwechsel eines substitutionellen (hier radioaktiv „markierten“) Atoms durch Sprung in eine benachbarte Leerstelle.

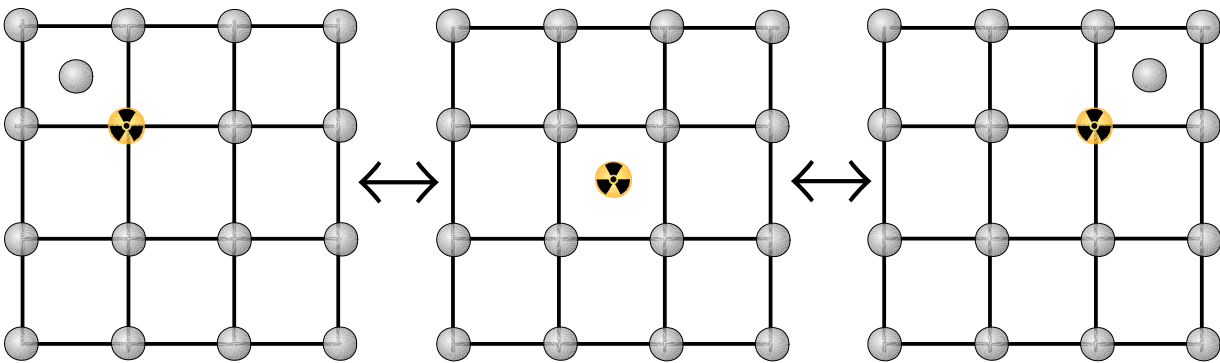


Abbildung 5: Indirekter Zwischengitteratommechanismus: Ein Eigenzwischengitteratom verdrängt ein (hier radioaktiv „markiertes“) reguläres Gitteratom ins Zwischengitter. Das dadurch entstandene (radioaktiv „markierte“) Zwischengitteratom verdrängt anschließend ein benachbartes reguläres Gitteratom ins Zwischengitter und nimmt selbst den freiwerdenden Gitterplatz ein.

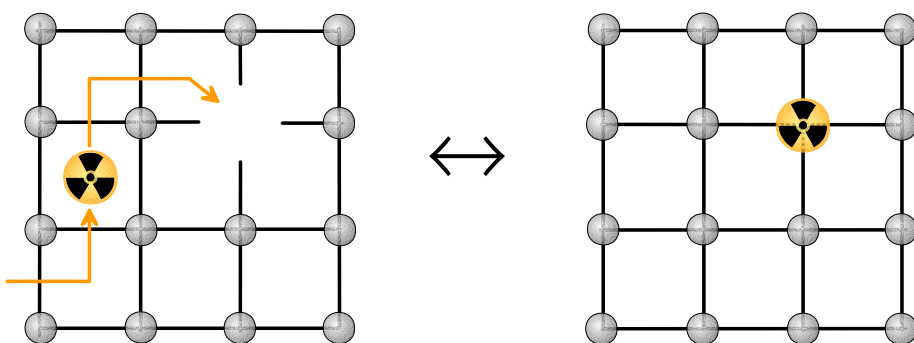


Abbildung 6: Dissoziativer Mechanismus: Ein (radioaktiv „markiertes“) interstitielles Fremdatom diffundiert eine gewisse Wegstrecke im Zwischengitter und nimmt dann einen substitutionellen Gitterplatz ein, indem es eine Leerstelle besetzt. Der Prozeß ist umkehrbar, d.h., ein substitutionelles Fremdatom kann in ein interstitielles Fremdatom plus eine Leerstelle dissoziieren.

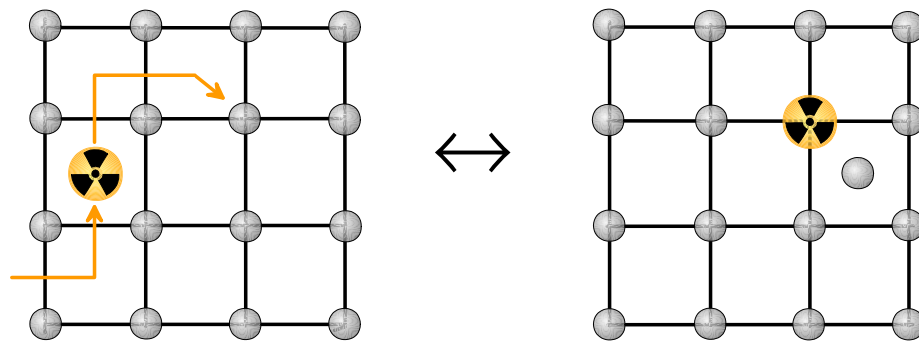


Abbildung 7: Verdrängungsmechanismus: Ein (radioaktiv „markiertes“) interstitielles Fremdatom diffundiert eine gewisse Wegstrecke im Zwischengitter und verdrängt dann ein reguläres Gitteratom ins Zwischengitter, um selbst dessen Platz als substitutionelles Fremdatom einzunehmen. Der Prozeß ist umkehrbar, d.h., ein Eigenzwischengitteratom kann ein substitutionelles Fremdatom ins Zwischengitter verdrängen.

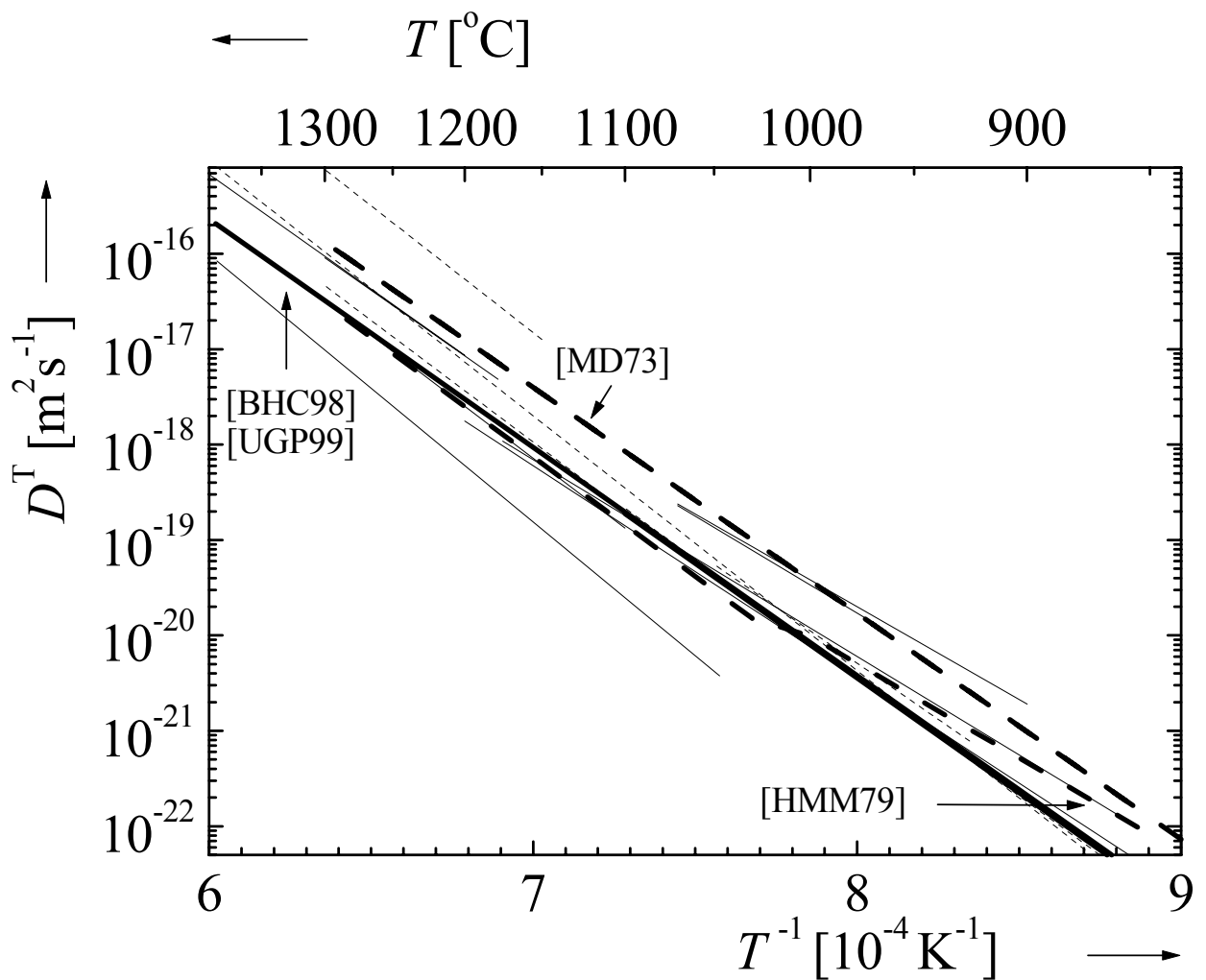


Abbildung 8: Arrhenius-Darstellung der Literaturdaten über die Diffusion von Si (durchgezogene Linien) und Ge (gestrichelte Linien) in reinem Si. Durch Fettdruck hervorgehoben sind die Daten, auf die im Text näher eingegangen wird.

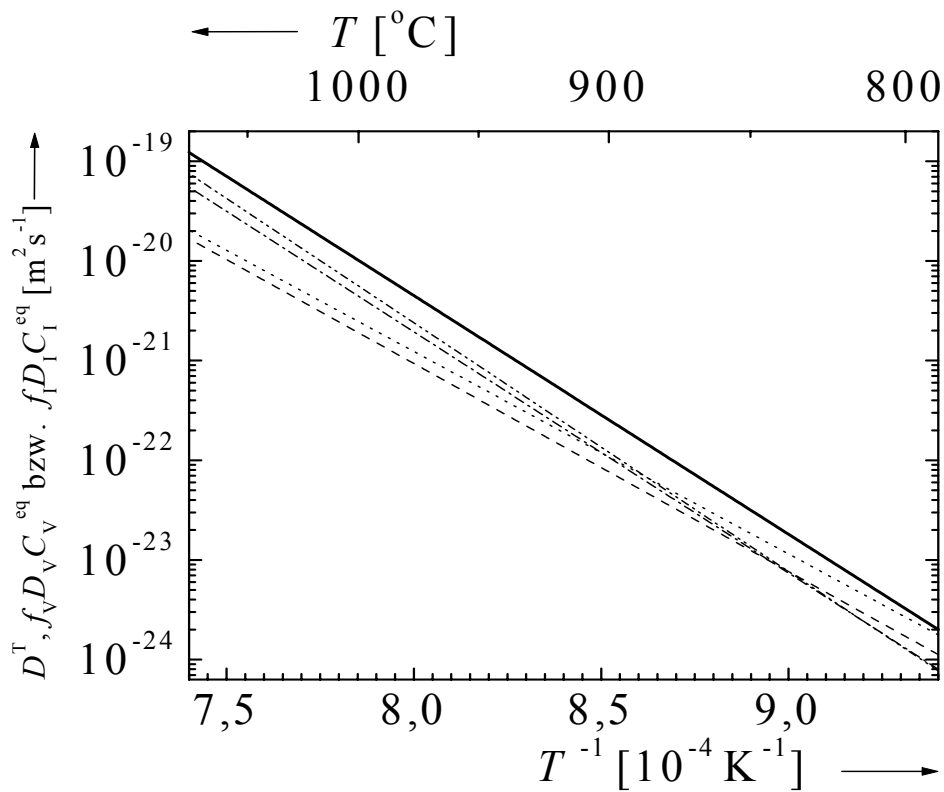


Abbildung 9: Beiträge von Leerstellen- (---- [BHC98] bzw. [TG85]) und Eigenzwichengitteratomen (--- [BHC98] bzw. -.- [SSH83]) zum Tracer-Selbstdiffusionskoeffizienten D^T (— [BHC98]) in Si.

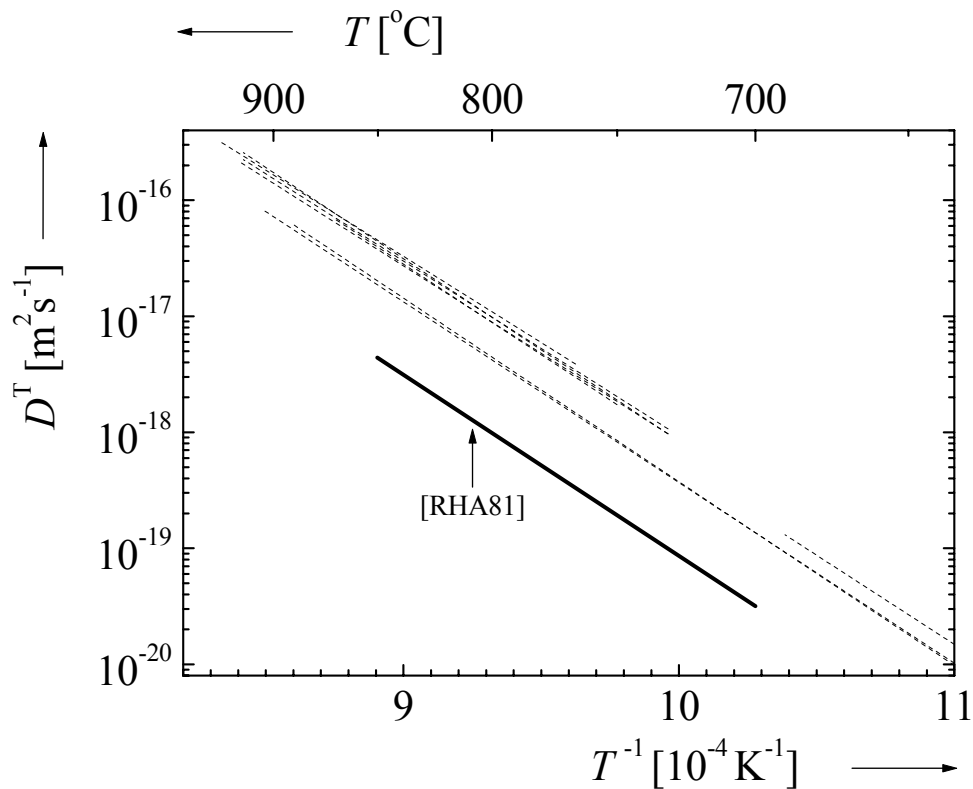


Abbildung 10: Arrhenius-Darstellung der Literaturdaten über die Diffusion von Ge (gestrichelte Linien) und Si (durchgezogene Linie) in reinem Ge.

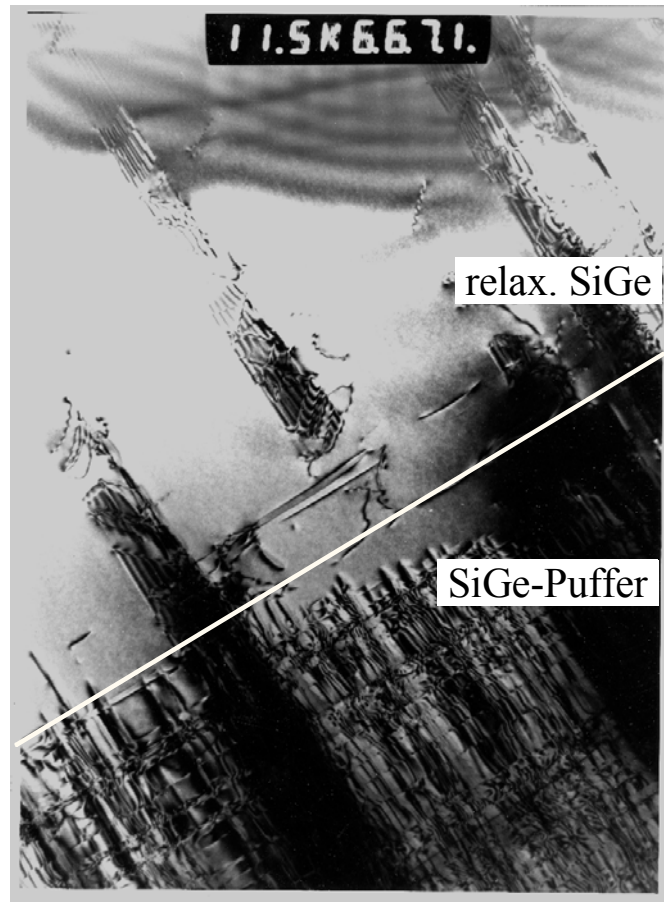


Abbildung 11: TEM-Querschnittsbild der Grenzfläche zwischen relaxierter $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ -Schicht (mit einigen Stapelfehlern) und SiGe-Gradientenpuffer-Schicht (mit ausgeprägtem Versetzungsnetzwerk).

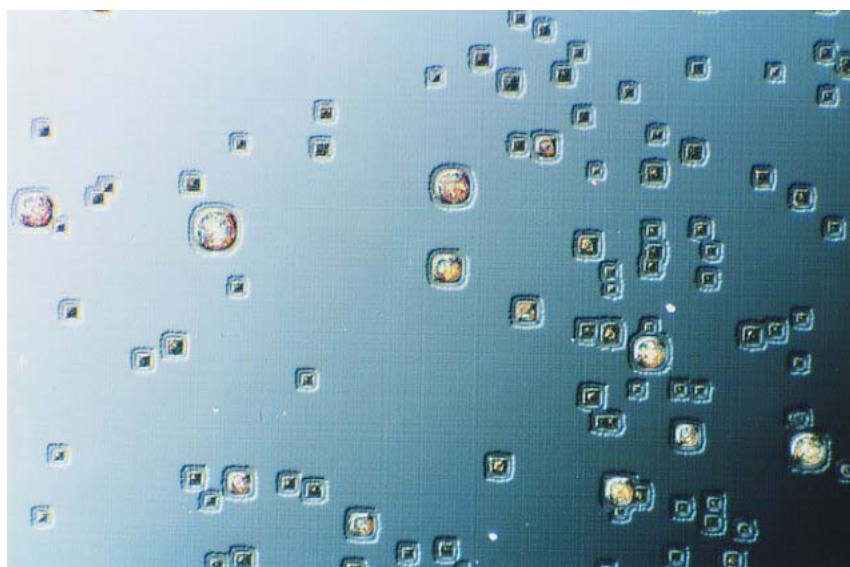


Abbildung 12: Ätzgrübchen von Durchstoßversetzungen auf einer (100)-Oberfläche einer $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ -Probe nach Temperung bei 900 °C für 2 h unter dynamischem Vakuum.

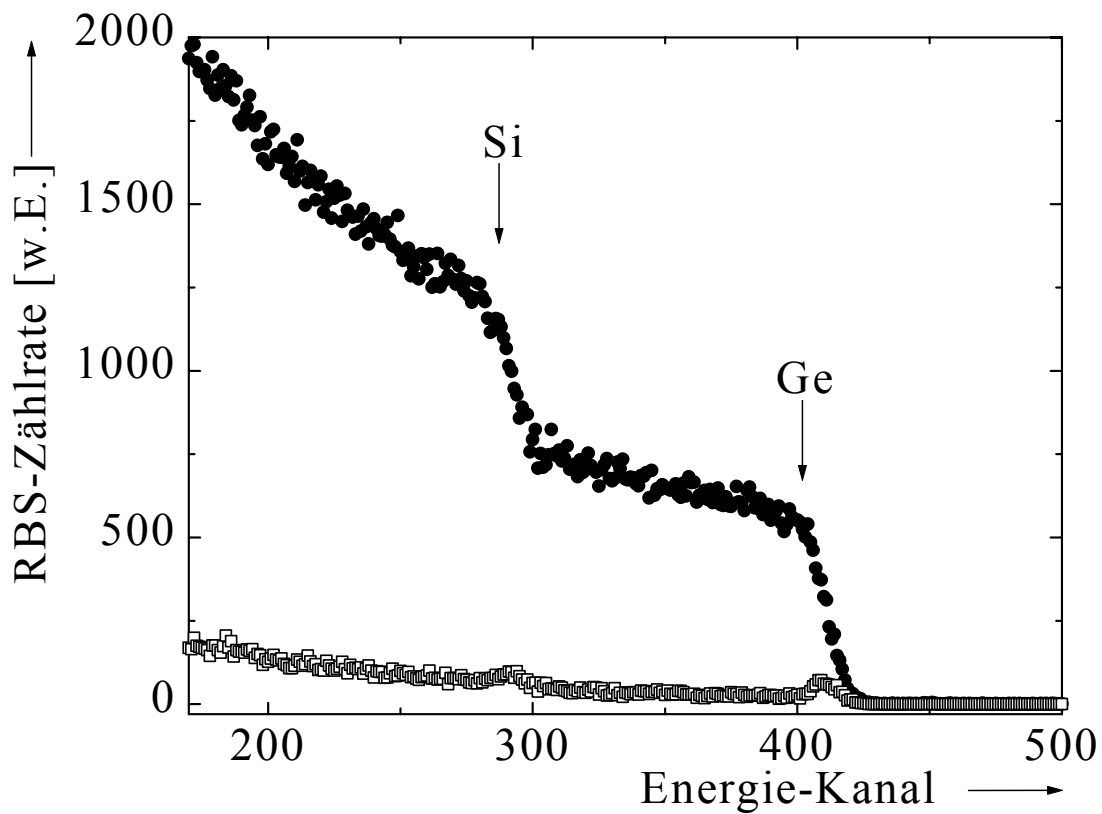


Abbildung 13: RBS-Spektren einer (100)-orientierten $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ -Probe, gemessen unter 8° Abweichung von der Oberflächennormalen (nichtgitterführende Richtung, ●) bzw. senkrecht zur Oberfläche (gitterführende Richtung, □).

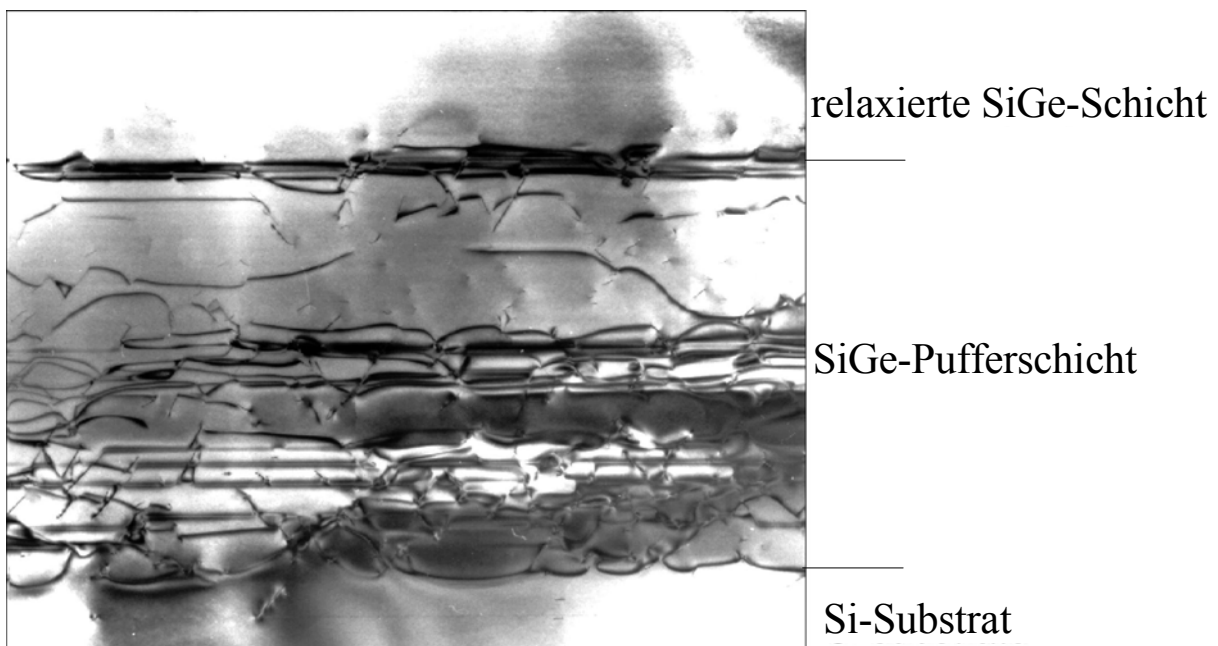


Abbildung 14: TEM-Querschnittsbild einer Probe mit relaxierter $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$ -Schicht sowie einer SiGe-Gradientenpuffer-Schicht auf Si-Substrat.

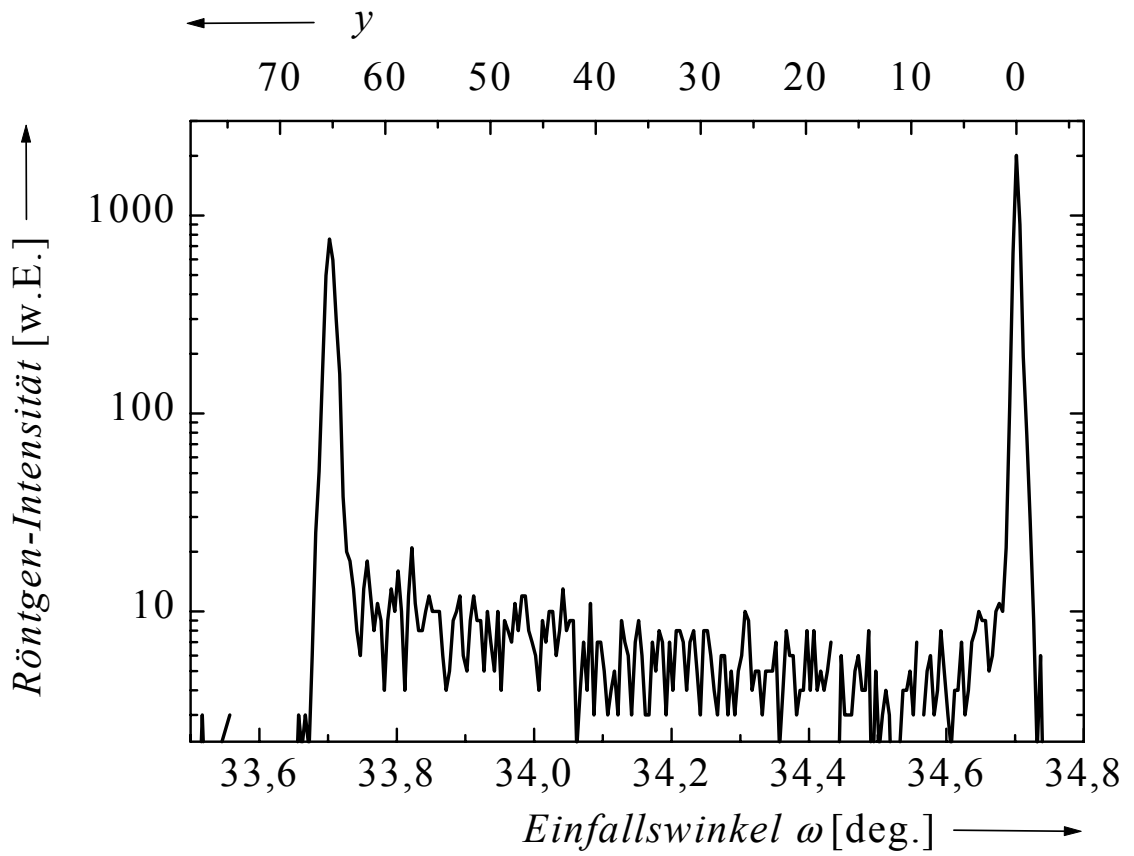


Abbildung 15: HRXRD-Messung (Typ ω - 2θ) an einer $\text{Si}_{0,35}\text{Ge}_{0,65}$ -Schicht.

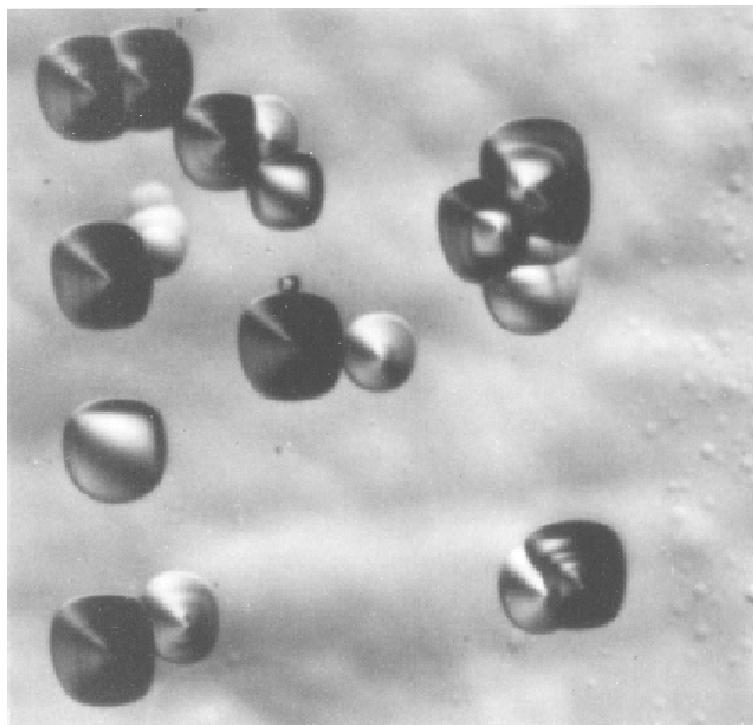


Abbildung 16: (100)-Ätzdefekte in $\text{Si}_{0,05}\text{Ge}_{0,95}$.

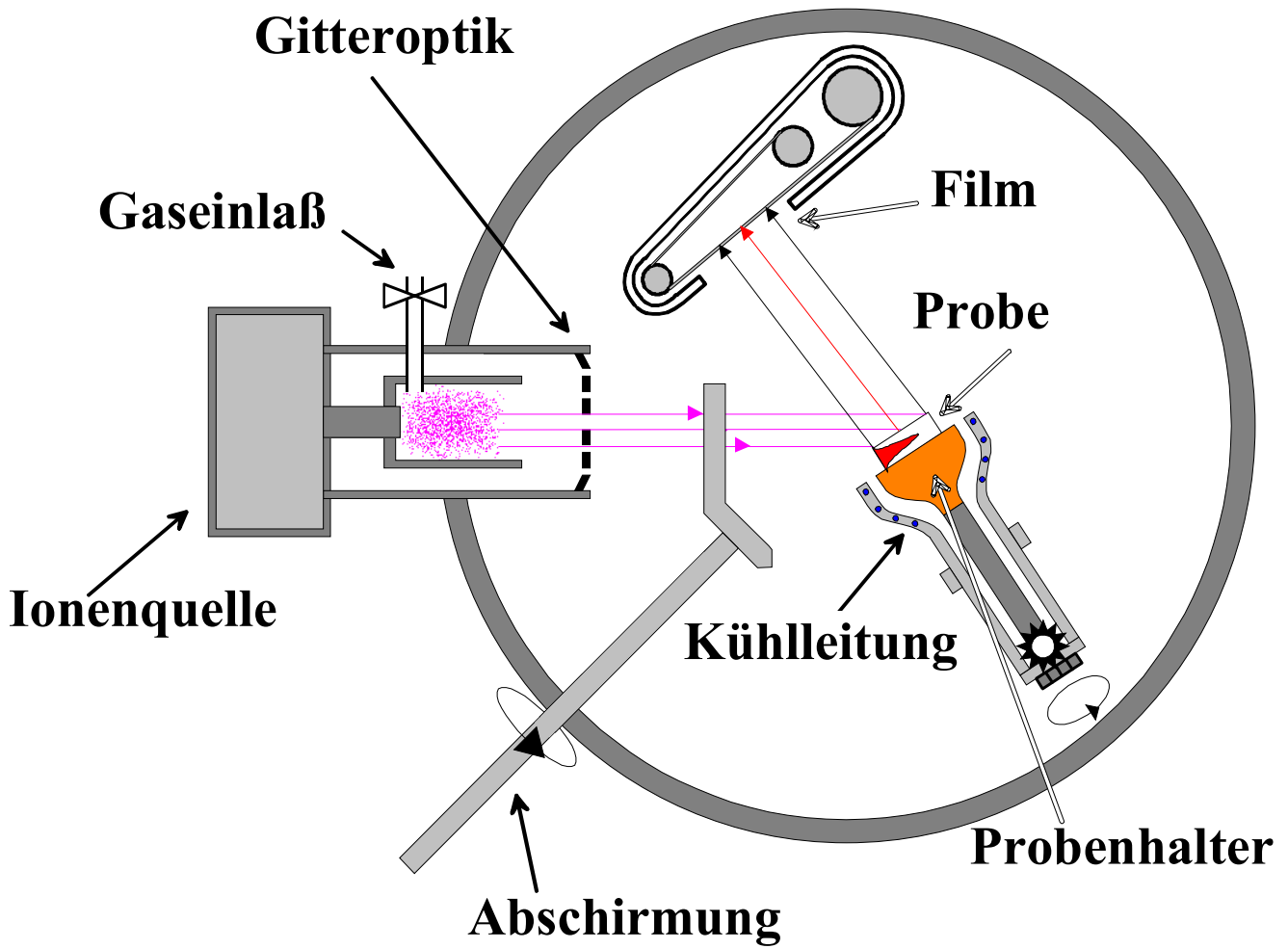


Abbildung 17: Ionenstrahlzerstäubungsanlage zur Messung der Diffusion langlebiger Radioisotope (schematisch).

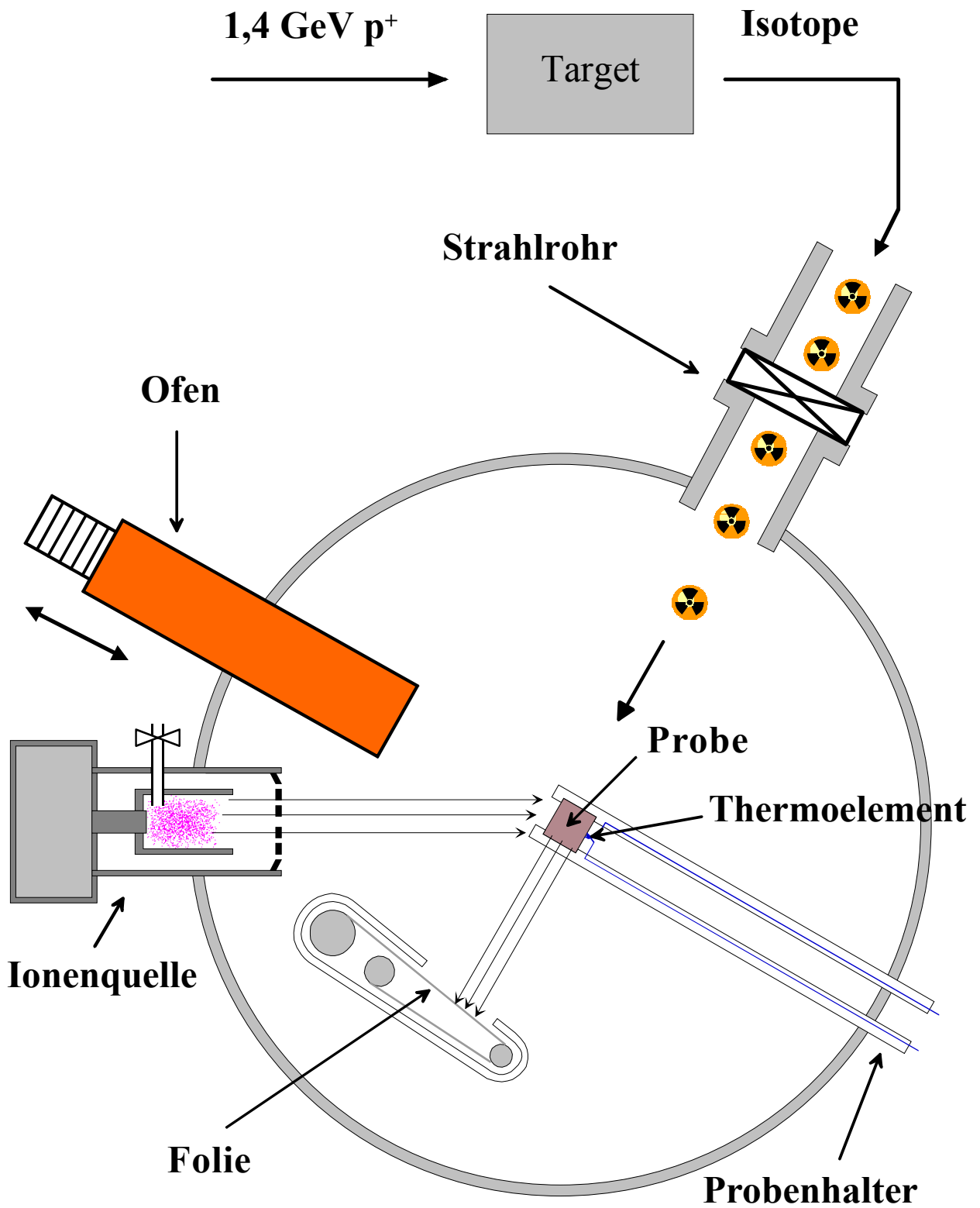


Abbildung 18: Neue mobile Apparatur zur Messung der Diffusion kurzlebiger Radioisotope (schematisch).

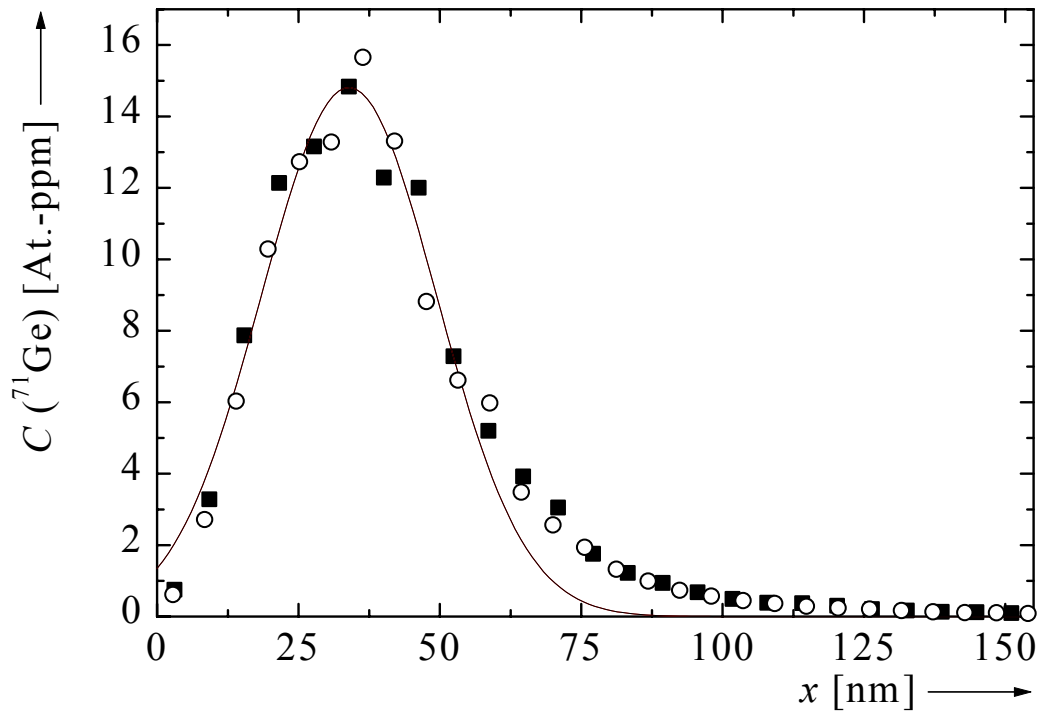


Abbildung 19: Implantationsprofile von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,83}\text{Ge}_{0,17}$ nach Ionenstrahlzerstäubung mit (■) und ohne (○) Strahlneutralisation. An die Meßpunkte ist gemäß (3.5) eine Gauß-Kurve (—) mit $x_0 = 33$ nm und $\sigma = 17$ nm angepaßt.

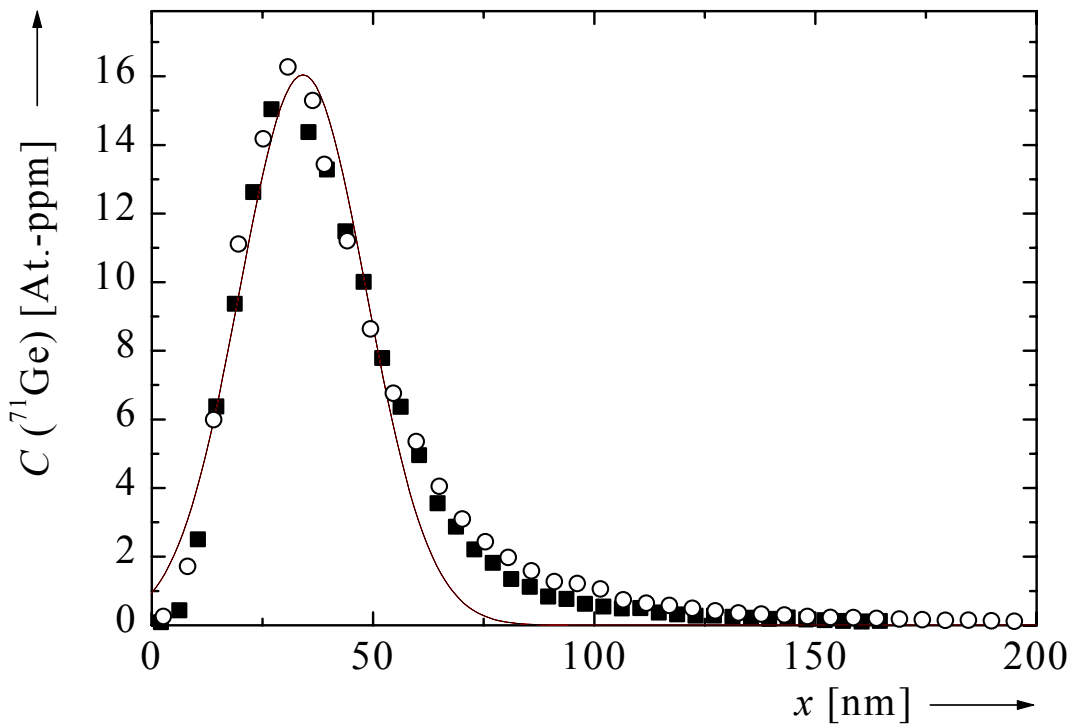


Abbildung 20: Implantationsprofile von ^{71}Ge in Si nach Ionenstrahlzerstäubung mit 0,64 kV (■) bzw. 1,6 kV (○). An die Meßpunkte ist gemäß (3.5) eine Gauß-Kurve (—) mit $x_0 = 35$ nm und $\sigma = 18$ nm angepaßt.

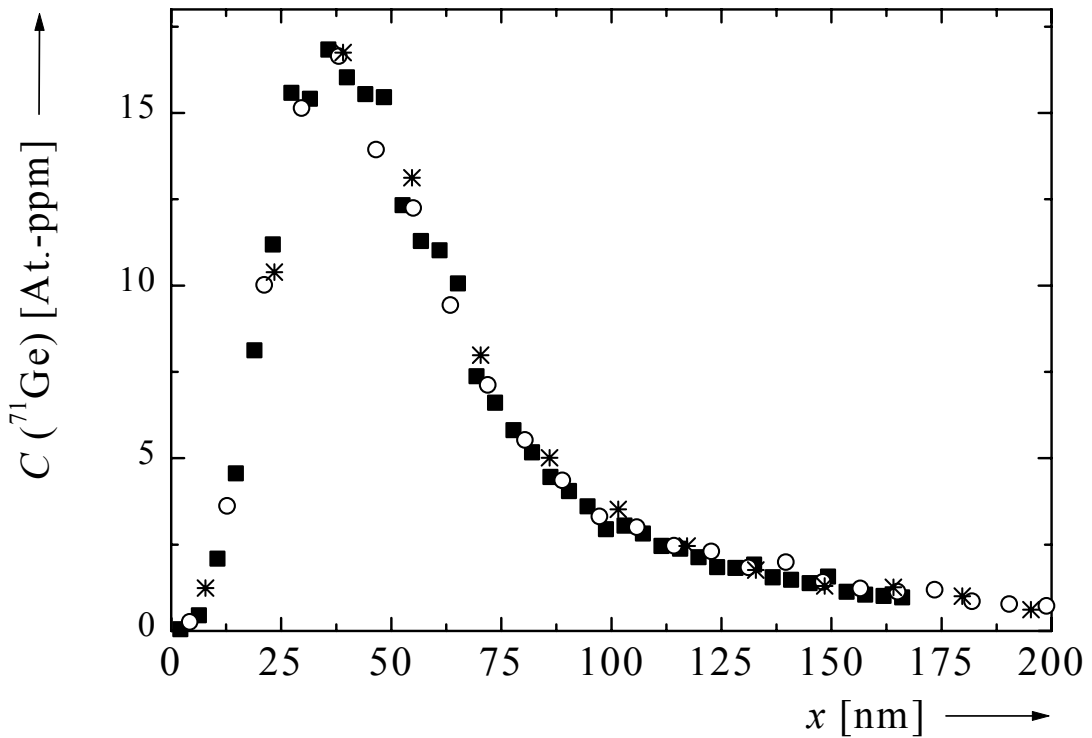


Abbildung 21: Implantationsprofile von ^{71}Ge in Si nach Ionenstrahlzerstäubung mit einer Beschleunigungsspannung von 1,04 kV und variierenden Gesamtstäubedauern von 45 min (■), 85 min (○) und 170 min (*).

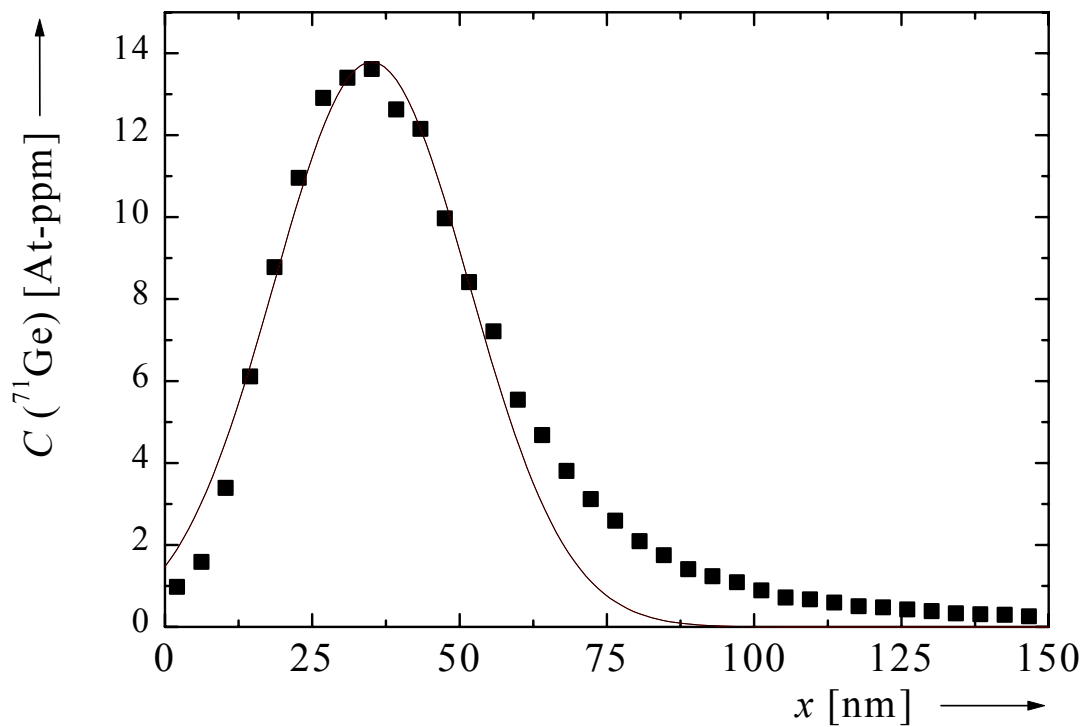


Abbildung 22: Implantationsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,95}\text{Ge}_{0,05}$ (■). An die Meßpunkte ist gemäß (3.5) eine Gauß-Kurve (—) mit $x_0 = 35$ nm und $\sigma = 17$ nm angepaßt.

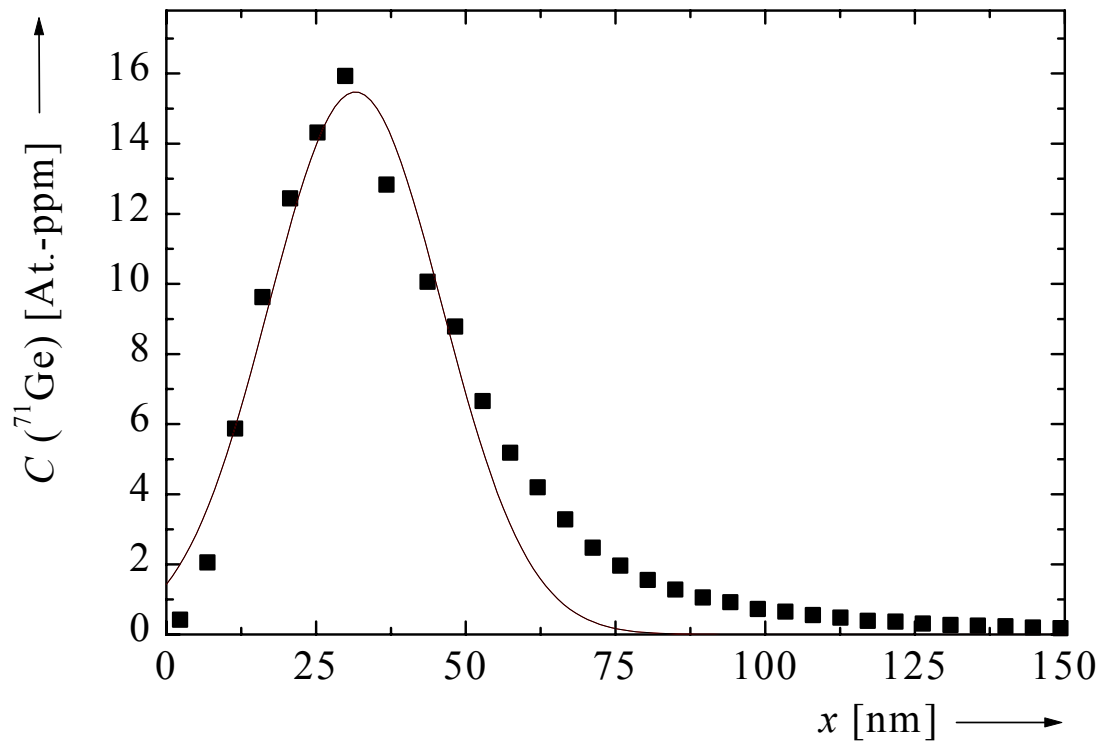


Abbildung 23: Implantationsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,90}\text{Ge}_{0,10}$ (■). An die Meßpunkte ist gemäß (3.5) eine Gauß-Kurve (—) mit $x_0 = 34$ nm und $\sigma = 17$ nm angepaßt.

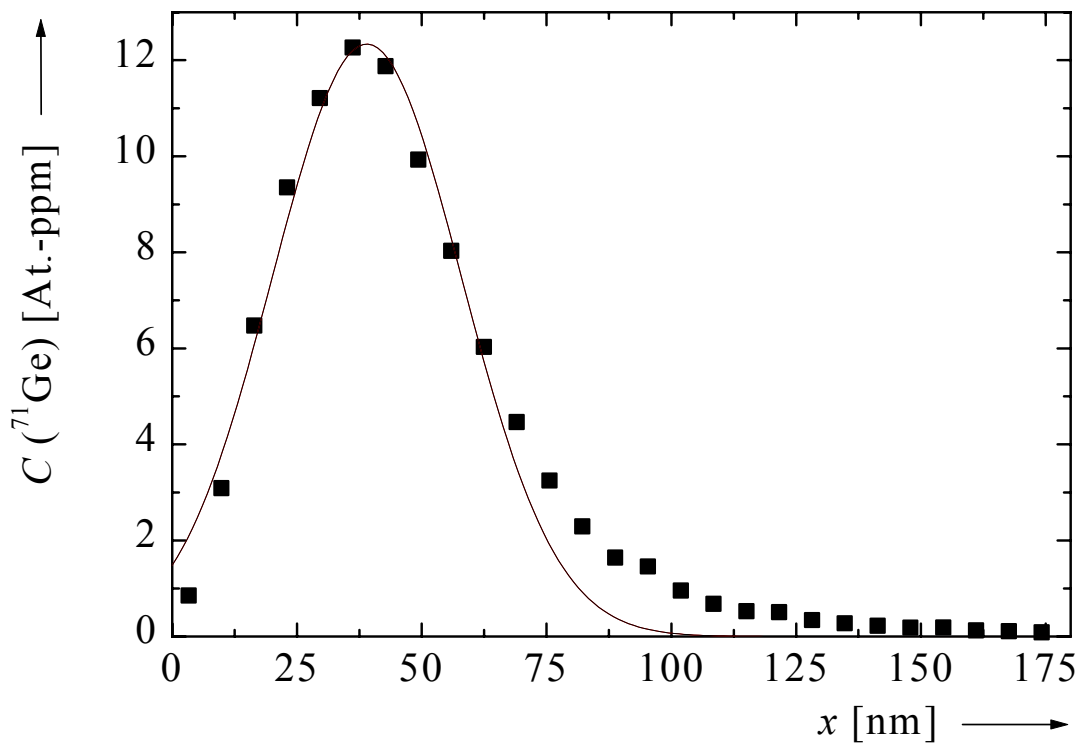


Abbildung 24: Implantationsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,80}\text{Ge}_{0,20}$ (■). An die Meßpunkte ist gemäß (3.5) eine Gauß-Kurve (—) mit $x_0 = 33$ nm und $\sigma = 16$ nm angepaßt.

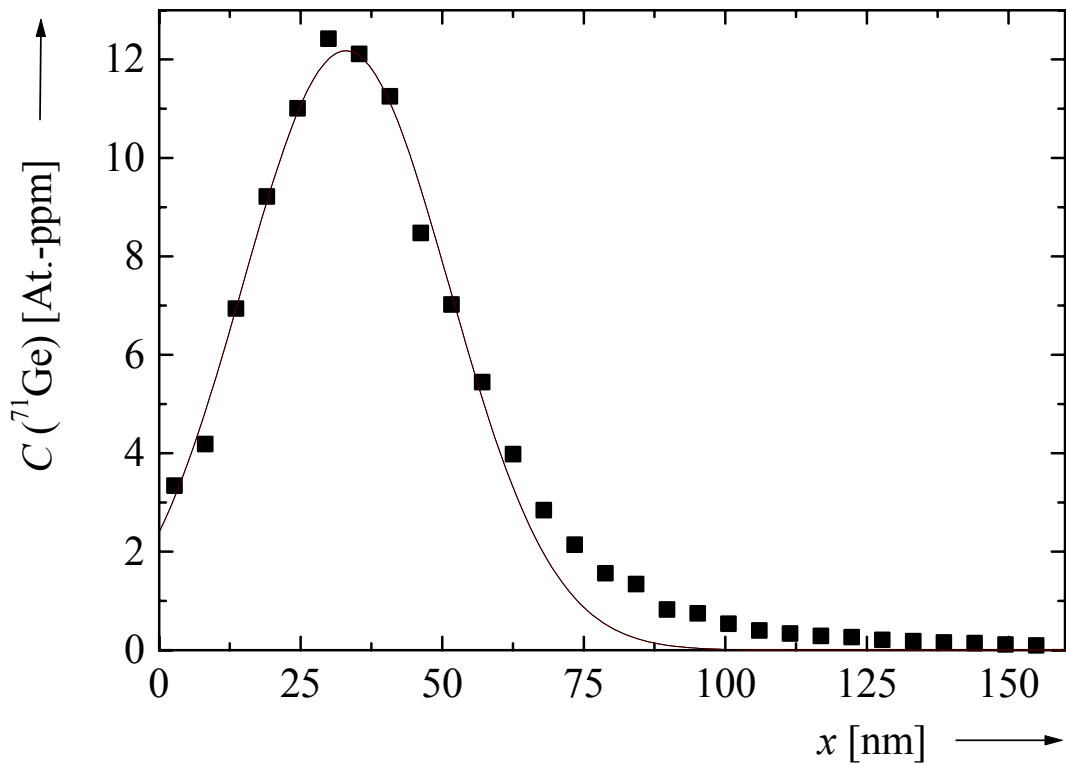


Abbildung 25: Implantationsprofil von ⁷¹Ge in Si_{0,65}Ge_{0,35} (■). An die Meßpunkte ist gemäß (3.5) eine Gauß-Kurve (—) mit $x_0 = 33$ nm und $\sigma = 16$ nm angepaßt.

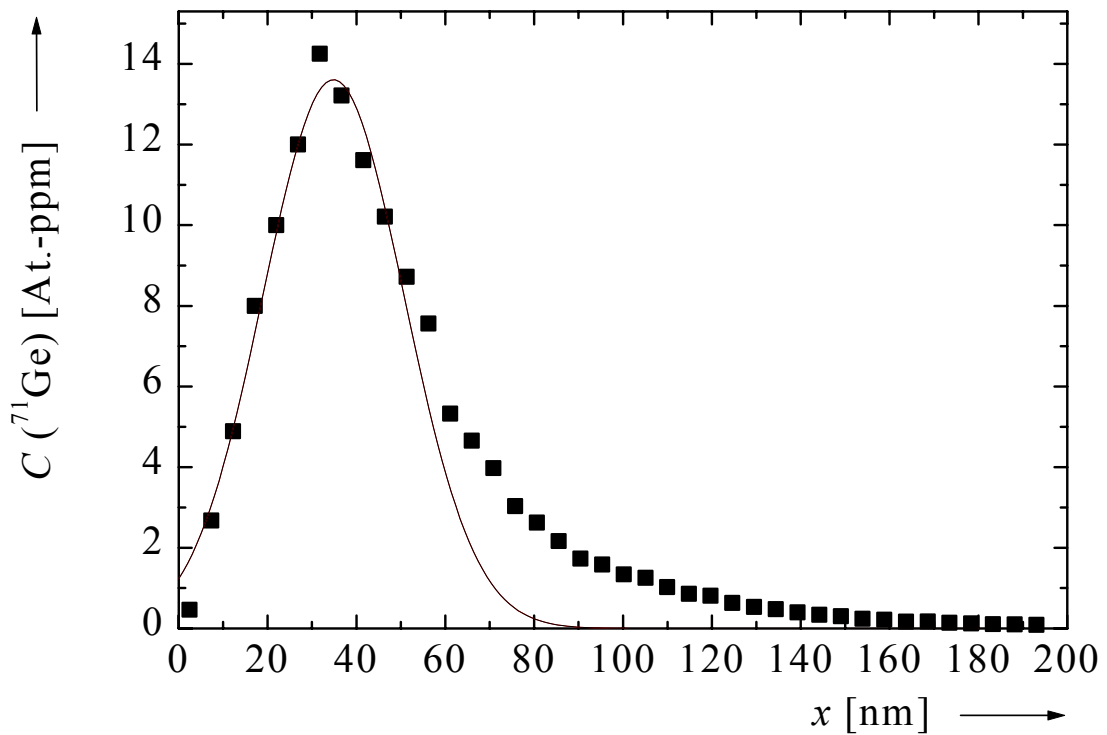


Abbildung 26: Implantationsprofil von ⁷¹Ge in Si_{0,57}Ge_{0,43} (■). An die Meßpunkte ist gemäß (3.5) eine Gauß-Kurve (—) mit $x_0 = 34$ nm und $\sigma = 16$ nm angepaßt.

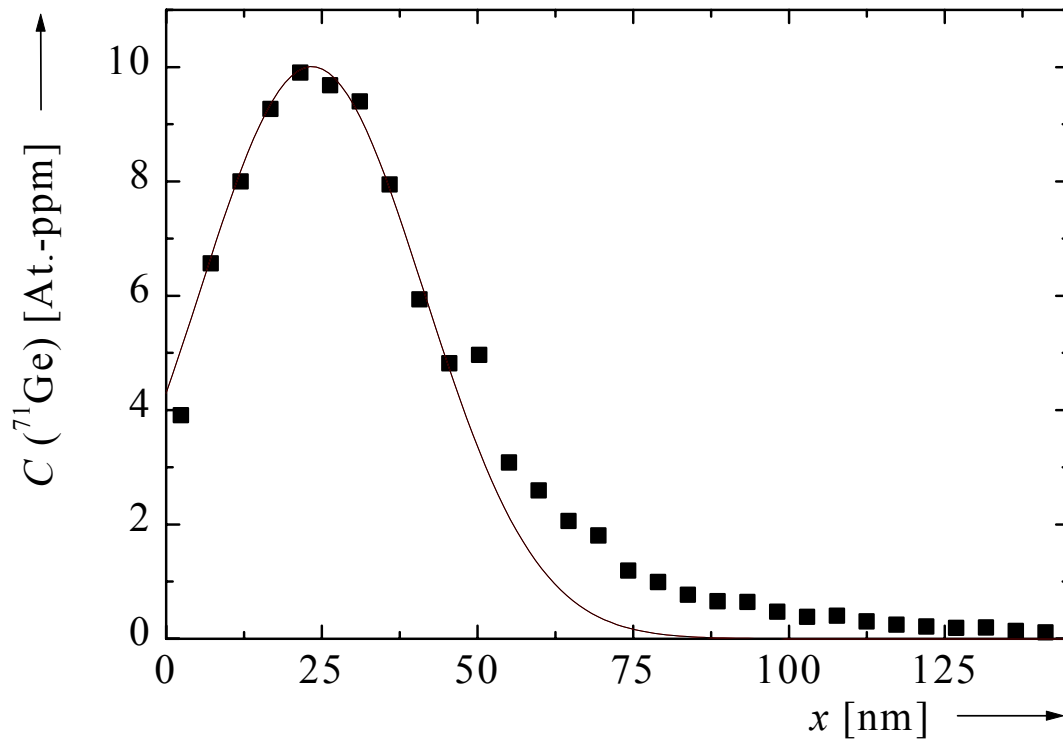


Abbildung 27: Implantationsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$ (■). An die Meßpunkte ist gemäß (3.5) eine Gauß-Kurve (—) mit $x_0 = 31$ nm und $\sigma = 17$ nm angepaßt.

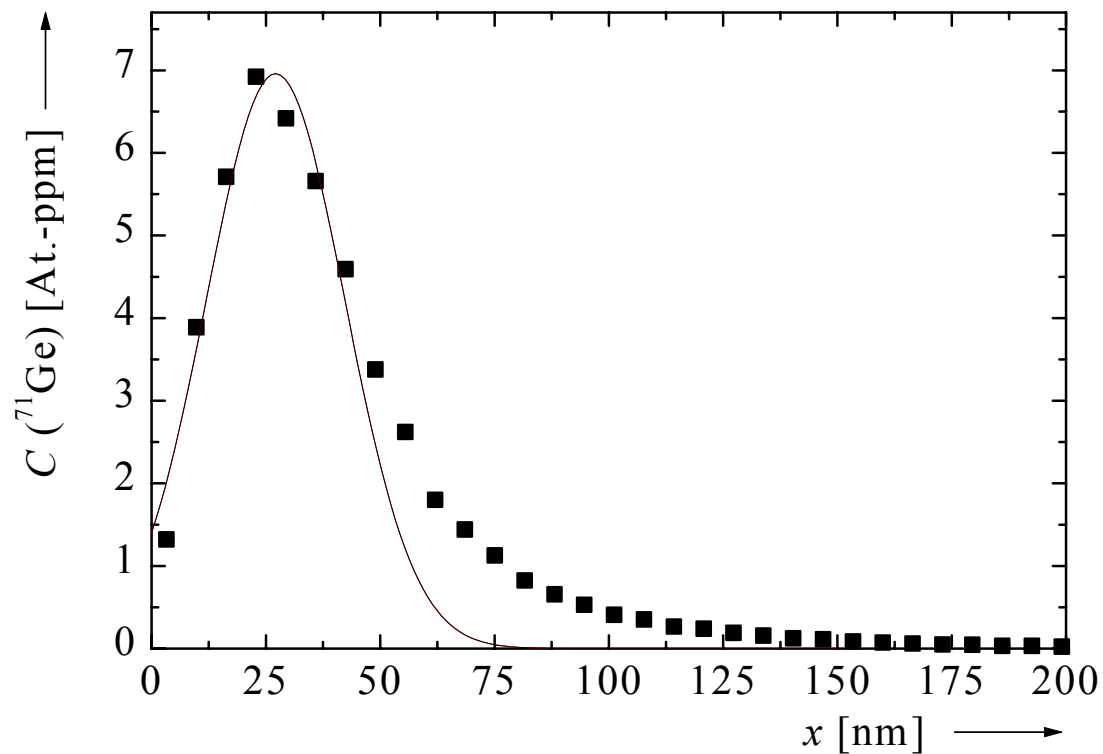


Abbildung 28: Implantationsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,35}\text{Ge}_{0,65}$ (■). An die Meßpunkte ist gemäß (3.5) eine Gauß-Kurve (—) mit $x_0 = 28$ nm und $\sigma = 15$ nm angepaßt.

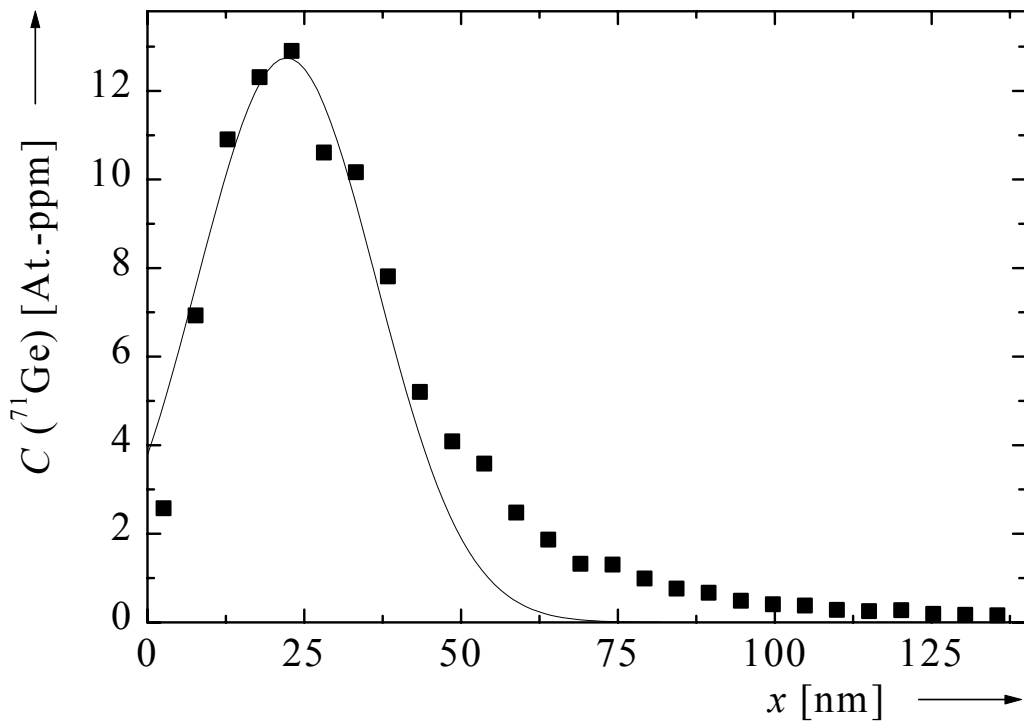


Abbildung 29: Implantationsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$ (■). An die Meßpunkte ist gemäß (3.5) eine Gauß-Kurve (—) mit $x_0 = 27$ nm und $\sigma = 15$ nm angepaßt.

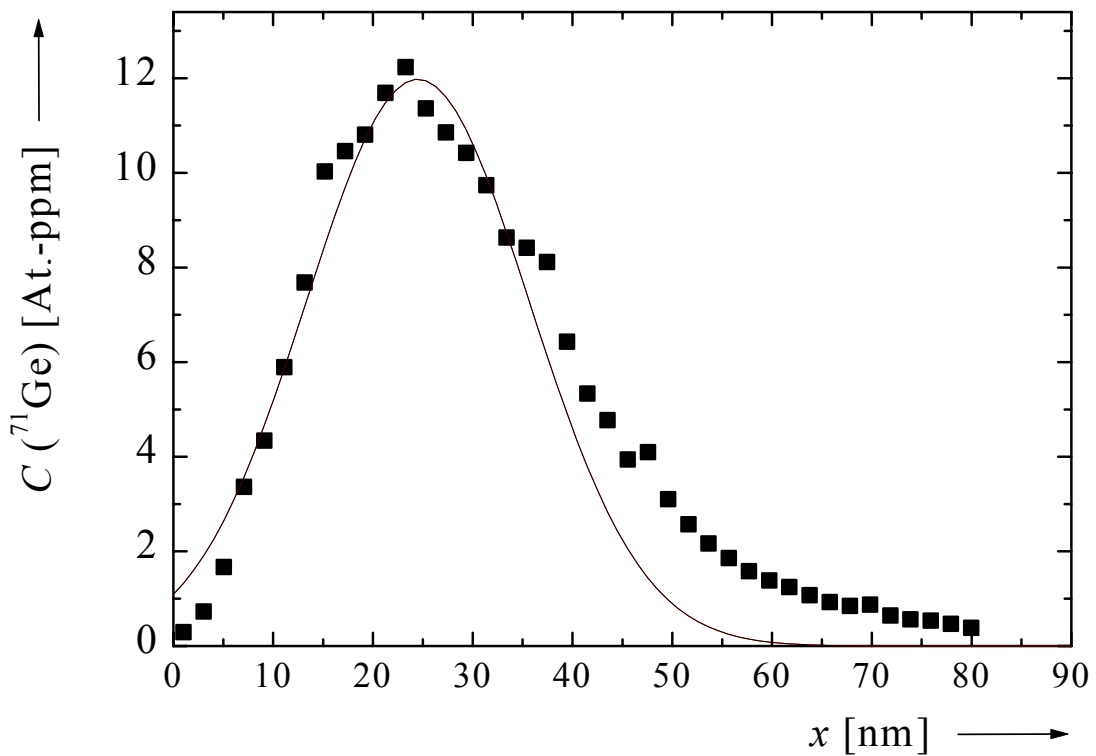


Abbildung 30: Implantationsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,15}\text{Ge}_{0,85}$ (■). An die Meßpunkte ist gemäß (3.5) eine Gauß-Kurve (—) mit $x_0 = 25$ nm und $\sigma = 14$ nm angepaßt.

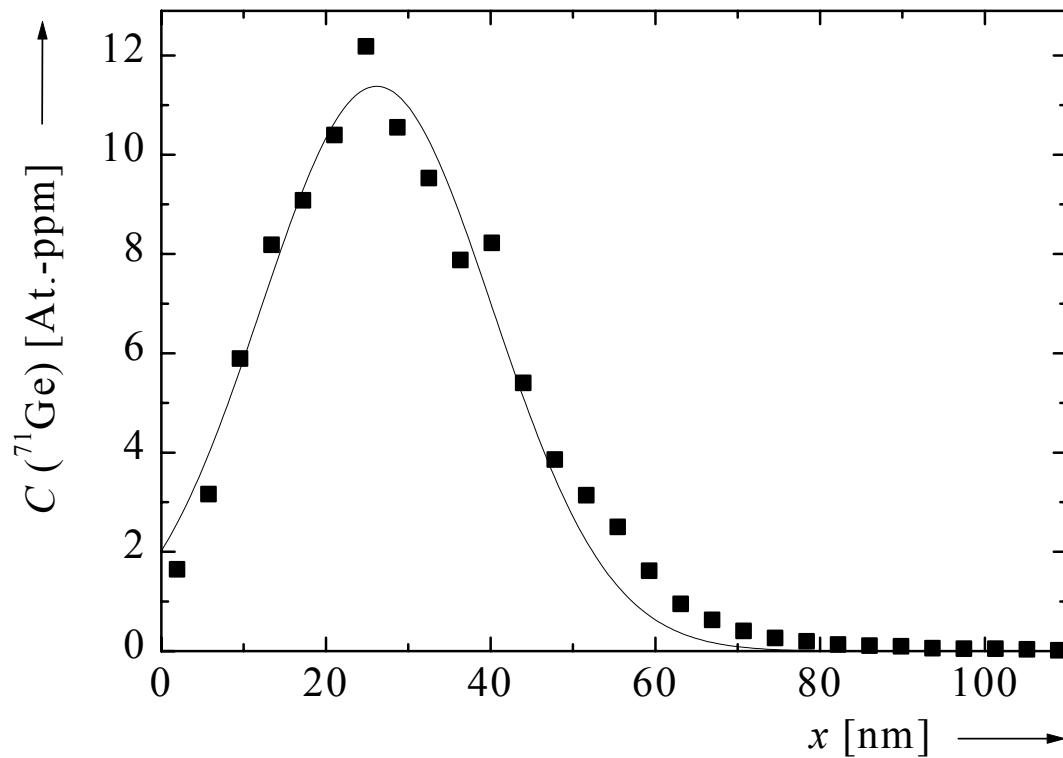


Abbildung 31: Implantationsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,10}\text{Ge}_{0,90}$ (■). An die Meßpunkte ist gemäß (3.5) eine Gauß-Kurve (—) mit $x_0 = 26$ nm und $\sigma = 14$ nm angepaßt.

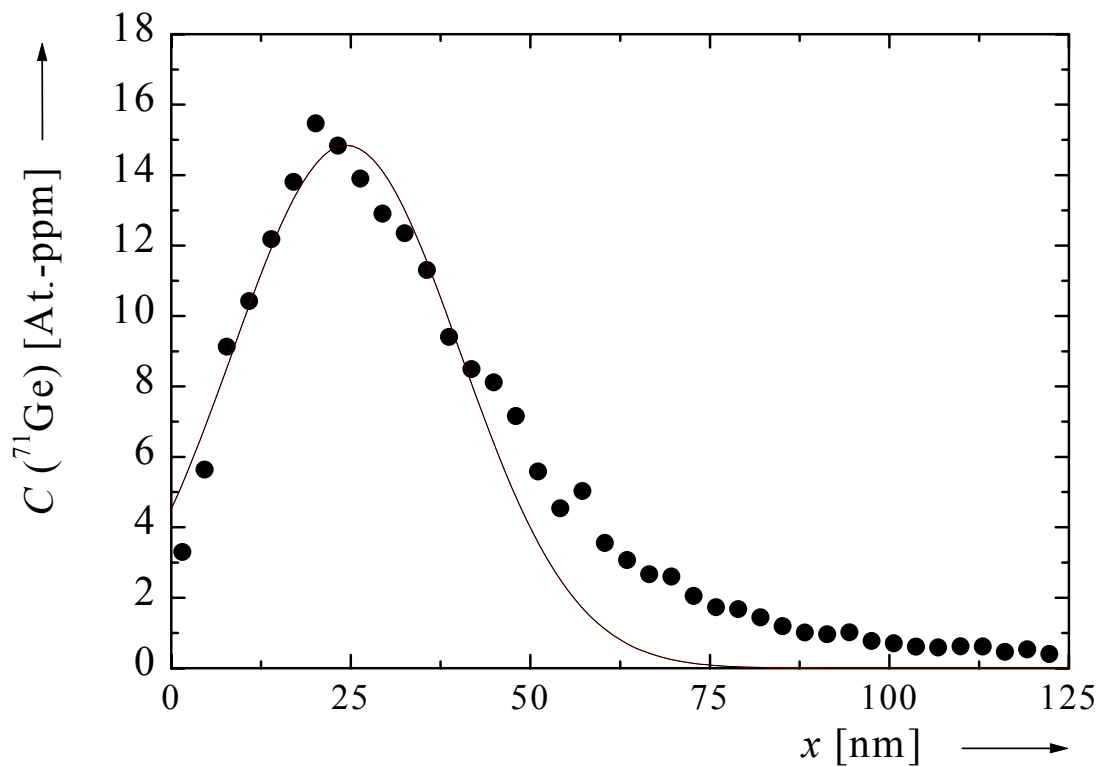


Abbildung 32: Implantationsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,05}\text{Ge}_{0,95}$ (■). An die Meßpunkte ist gemäß (3.5) eine Gauß-Kurve (—) mit $x_0 = 25$ nm und $\sigma = 14$ nm angepaßt.

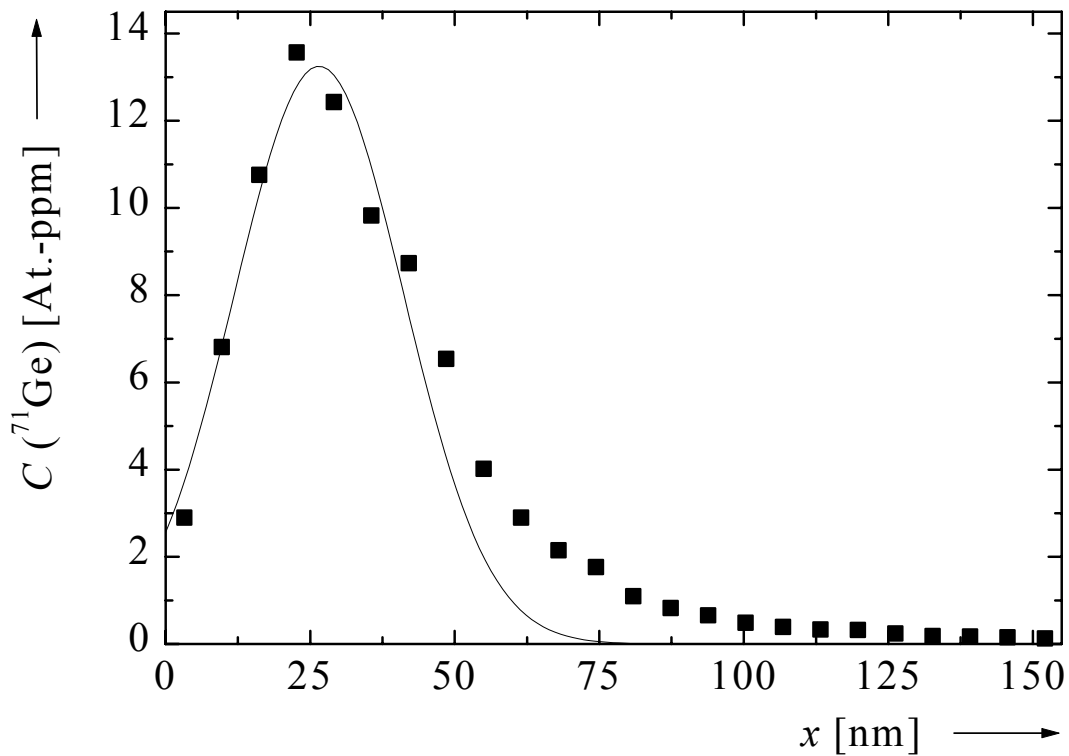


Abbildung 33: Implantationsprofil von ⁷¹Ge in Ge (■). An die Meßpunkte ist gemäß (3.5) eine Gauß-Kurve (—) mit $x_0 = 25$ nm und $\sigma = 14$ nm angepaßt.

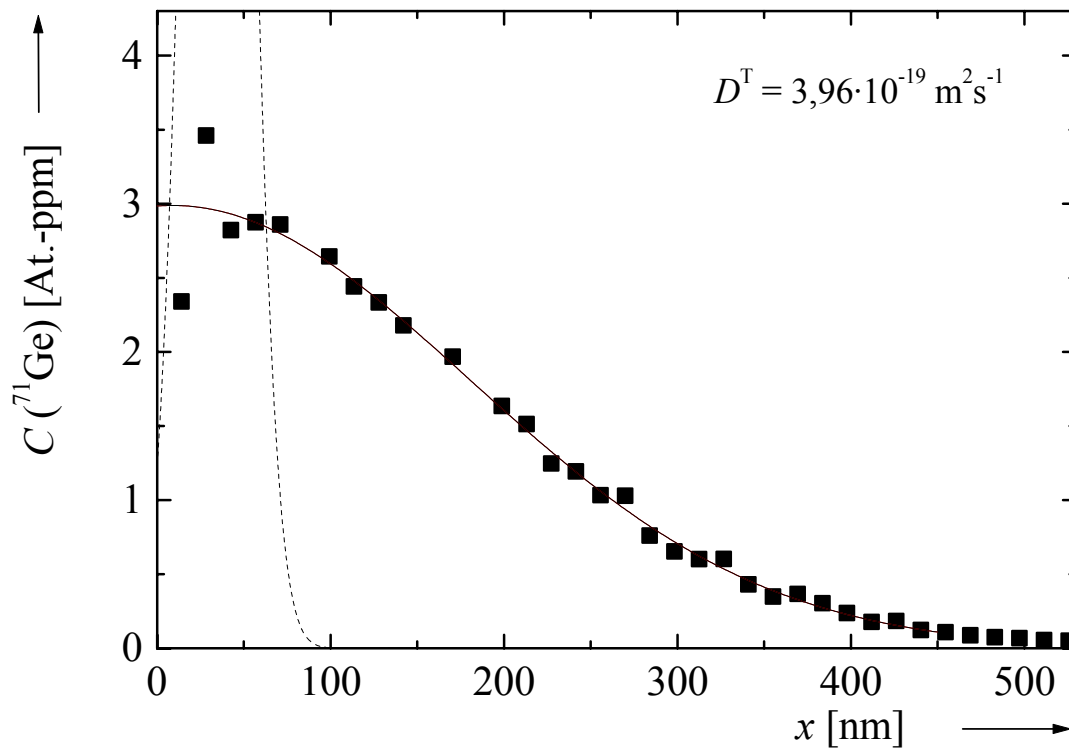


Abbildung 34: Diffusionsprofil von ⁷¹Ge in Si_{0,57}Ge_{0,43} nach Temperung bei 980 °C für 8,5 h (■). An die Meßpunkte ist die Lösung (5.1) der Diffusionsgleichung angepaßt (—). Die gestrichelte Kurve zeigt den Verlauf des Implantationsprofils.

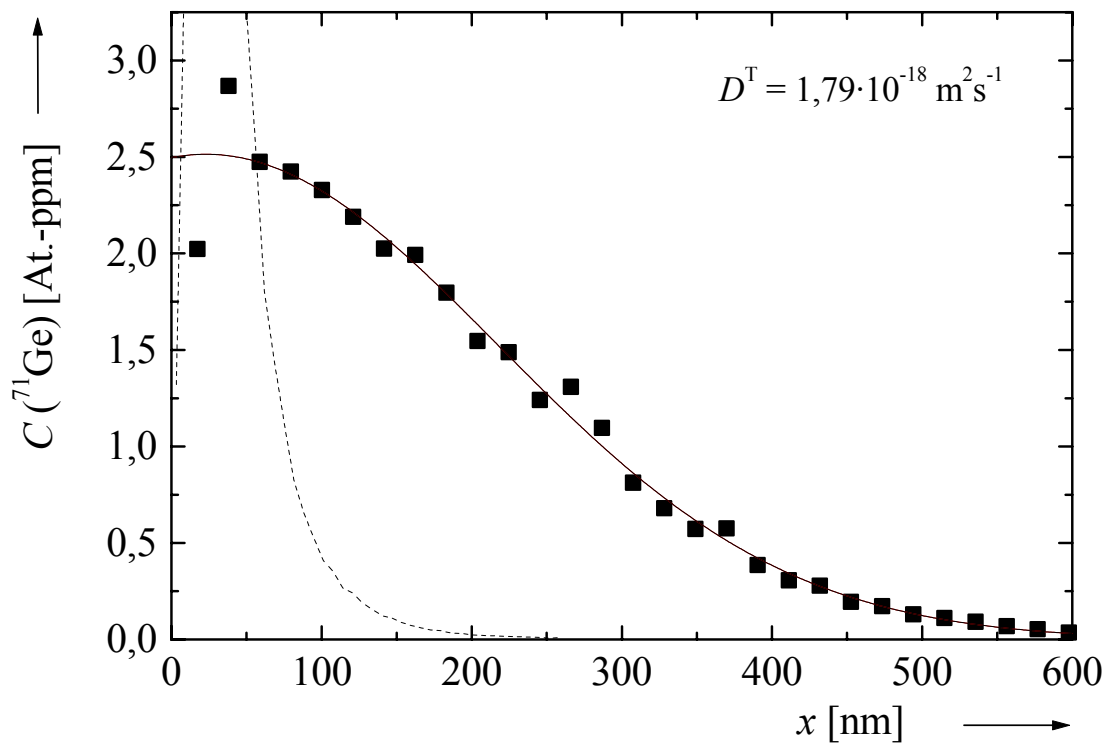


Abbildung 35: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,35}\text{Ge}_{0,65}$ nach Temperung bei 924 °C für 3 h (■). An die Meßpunkte ist die Lösung (5.1) der Diffusionsgleichung angepaßt (—). Die gestrichelte Kurve zeigt den Verlauf des Implantationsprofils.

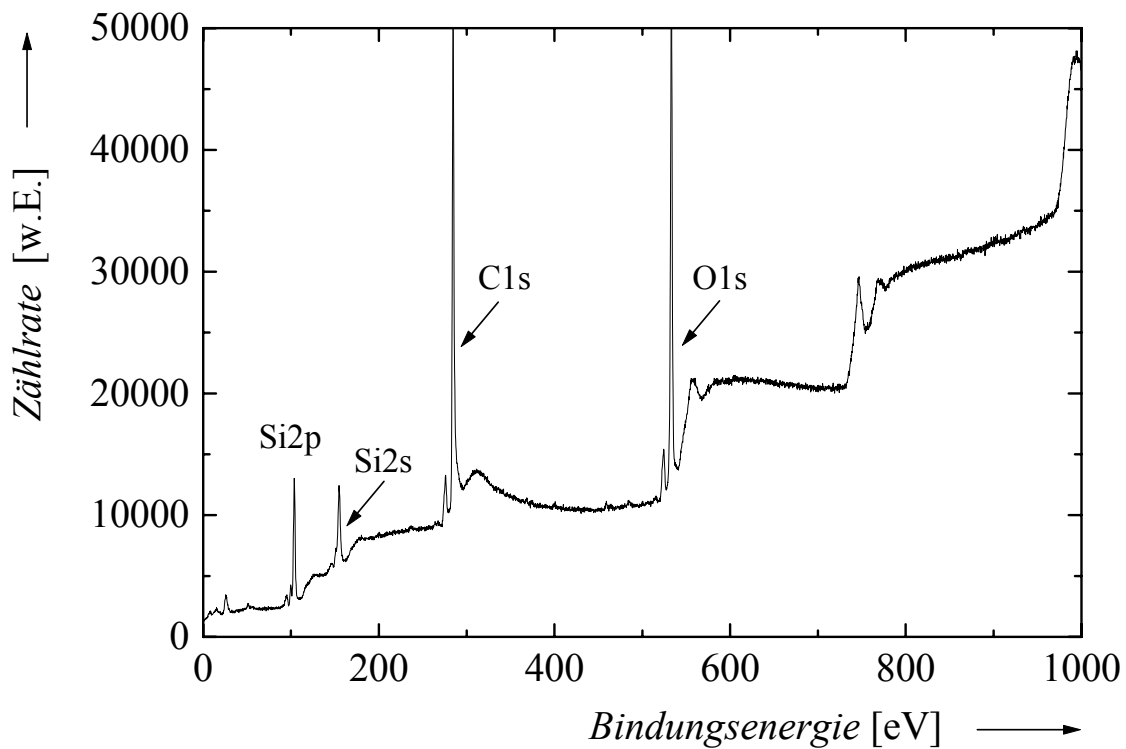


Abbildung 36: XPS-Spektrum einer Si-Probe mit einer 6 nm dicken SiO_2 -Schicht.

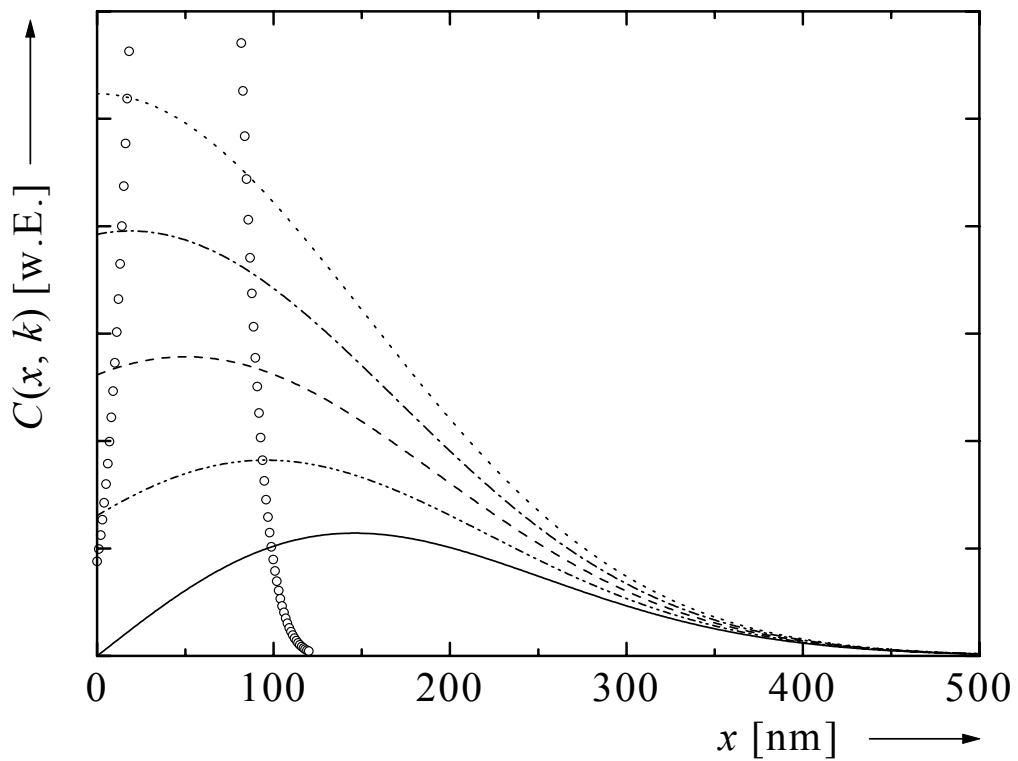


Abbildung 37: Simulation der Verbreiterung eines Implantationsprofils ($x_0 = 50$ nm, $\sigma = 20$ nm, \circ) gemäß Gleichung (5.1) für $k = 1$ (····), $k = 0,5$ (·-·-), $k = 0$ (- - -), $k = -0,5$ (- - - -) und $k = -1$ (—) bei vorgegebener mittlerer Diffusionsverbreiterung $x_D = 200$ nm.

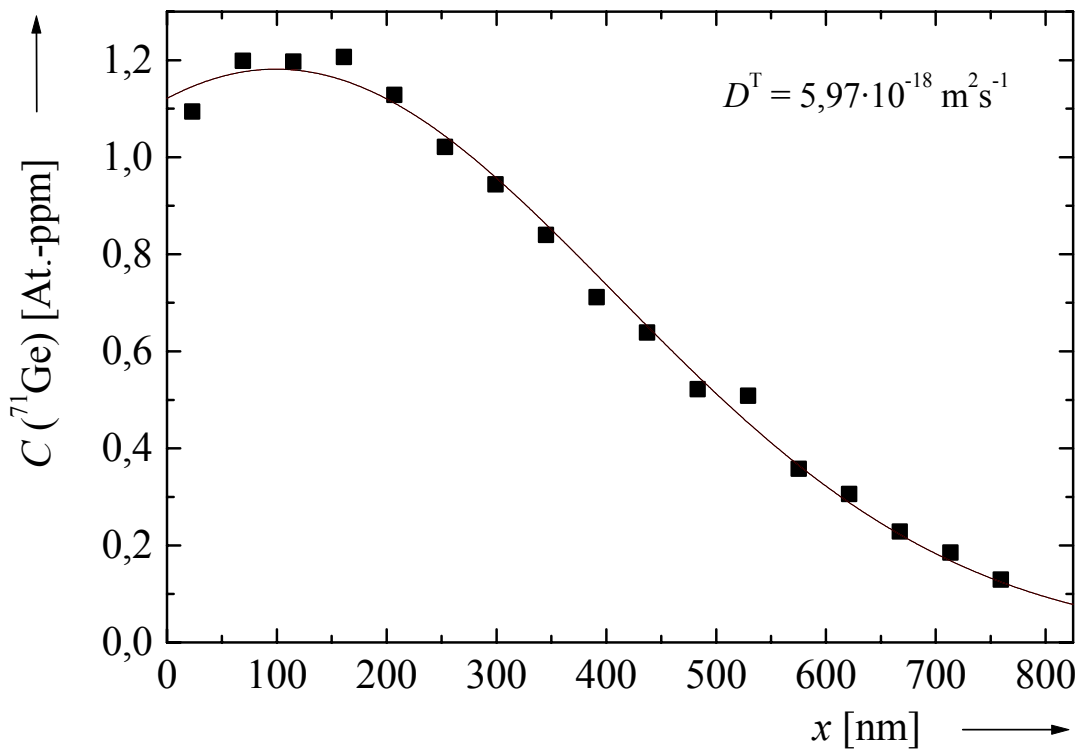


Abbildung 38: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in Si nach Temperung bei 1213 °C für $2,5$ h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

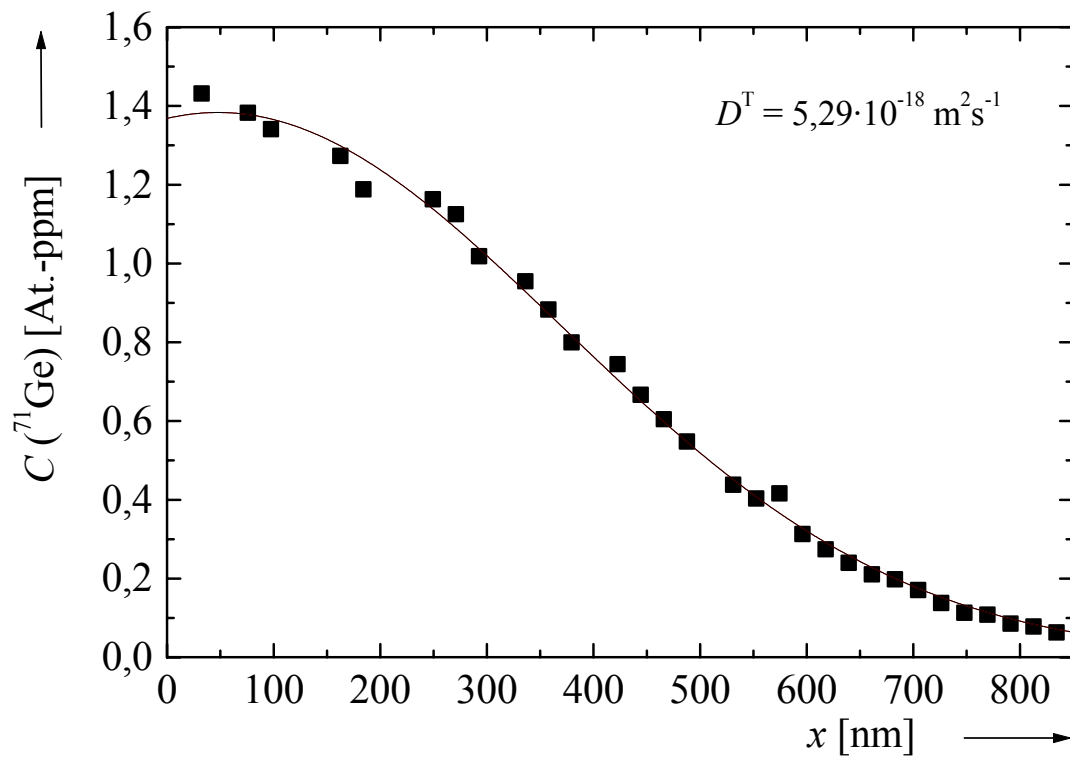


Abbildung 39: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in Si nach Temperung bei 1209 °C für $2,75\text{ h}$ (\blacksquare). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

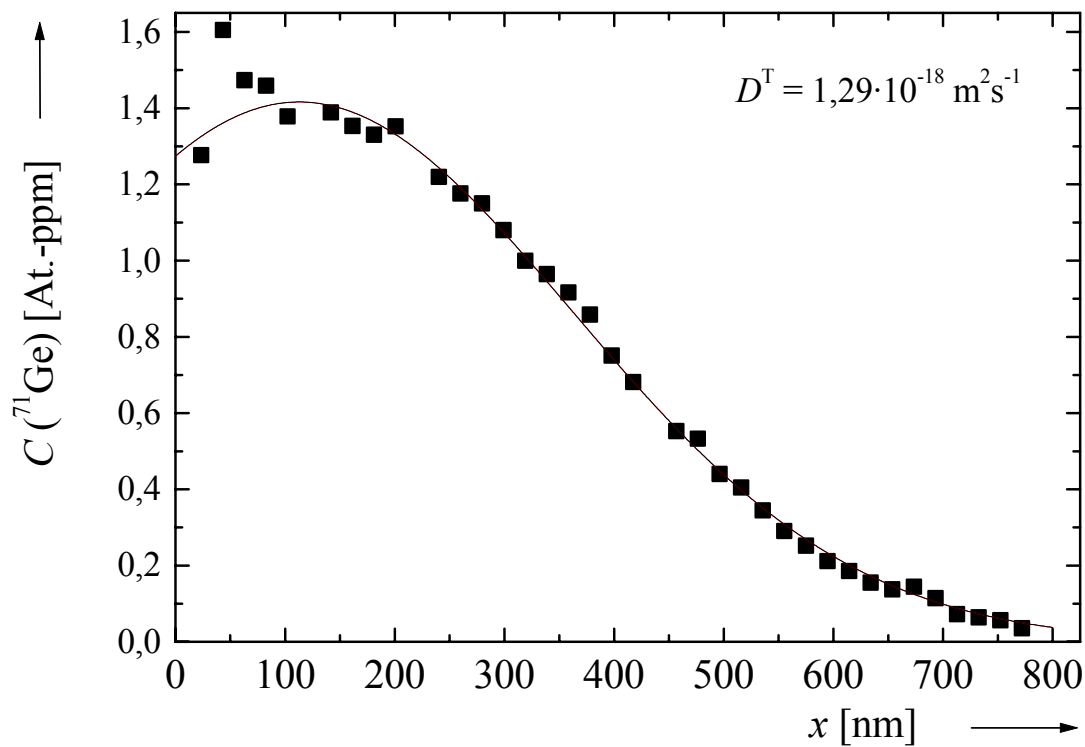


Abbildung 40: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in Si nach Temperung bei 1156 °C für 458 min (\blacksquare). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

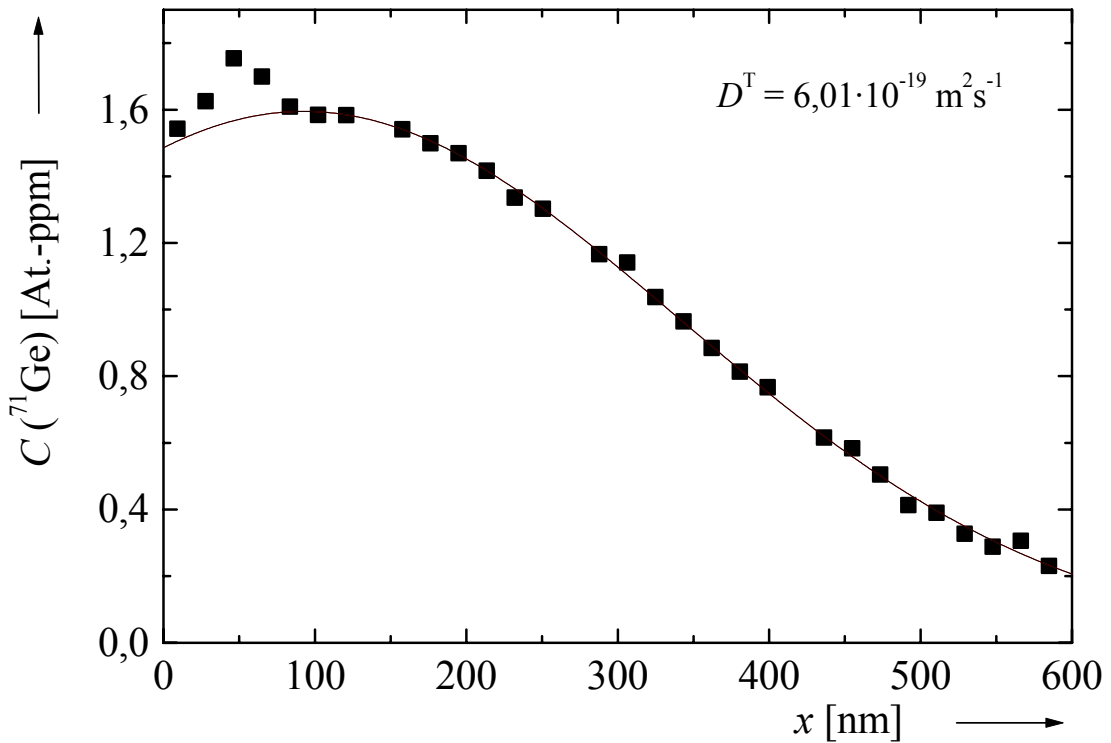


Abbildung 41: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in Si nach Temperung bei 1130 °C für $15,5\text{ h}$ (\blacksquare). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

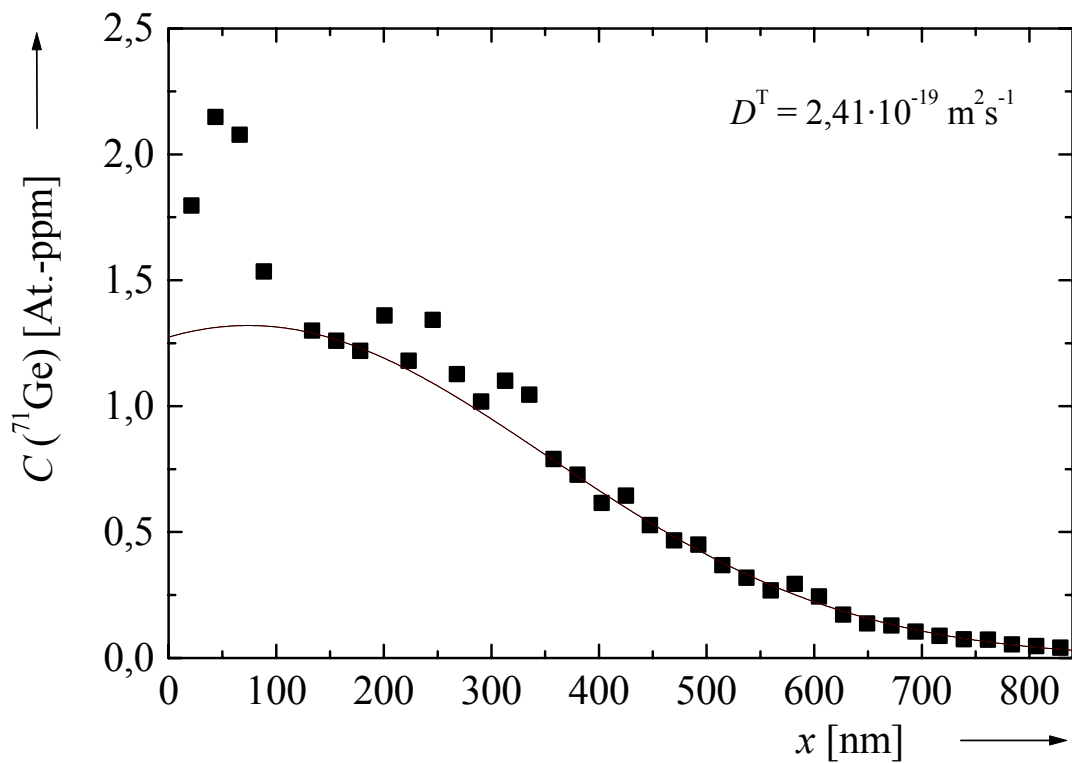


Abbildung 42: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in Si nach Temperung bei 1098 °C für 45 h (\blacksquare). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

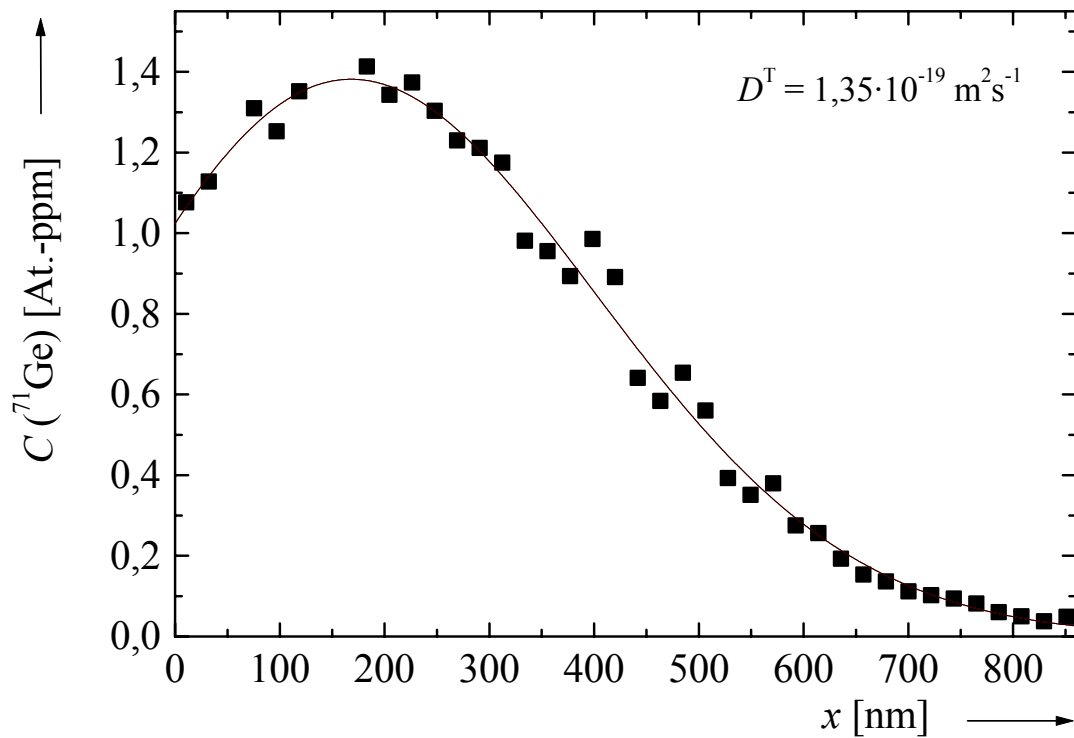


Abbildung 43: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in Si nach Temperung bei 1079 °C für $63,5\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

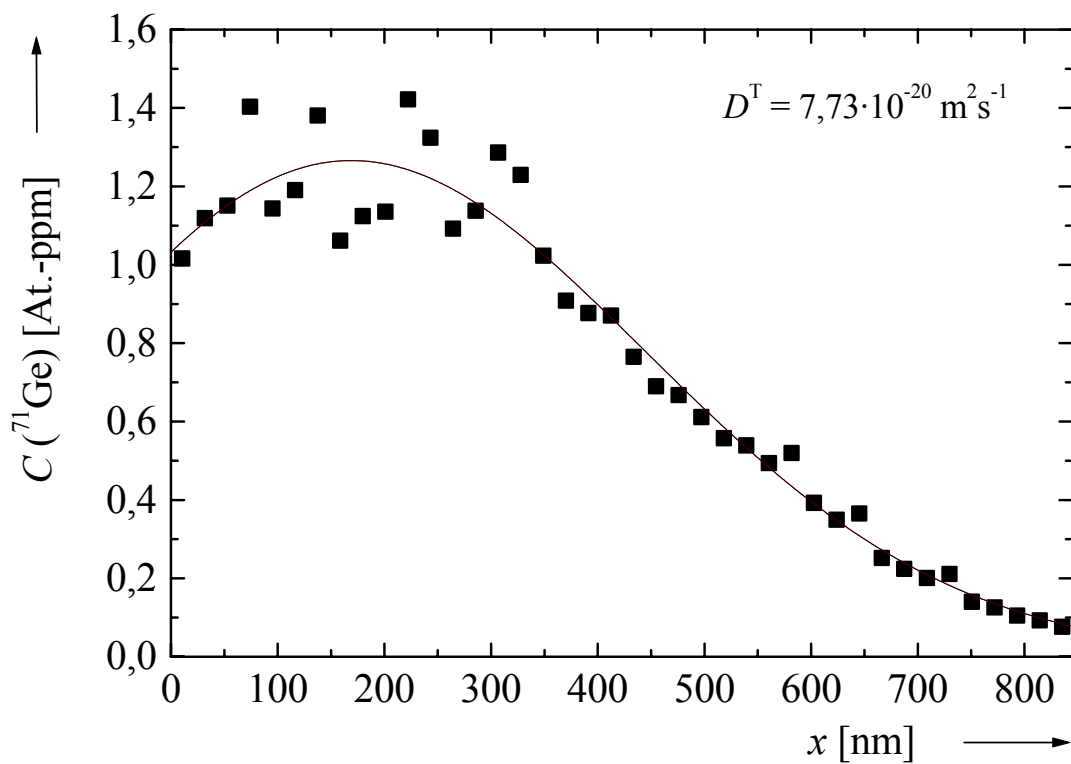


Abbildung 44: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in Si nach Temperung bei 1062 °C für 7 d (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

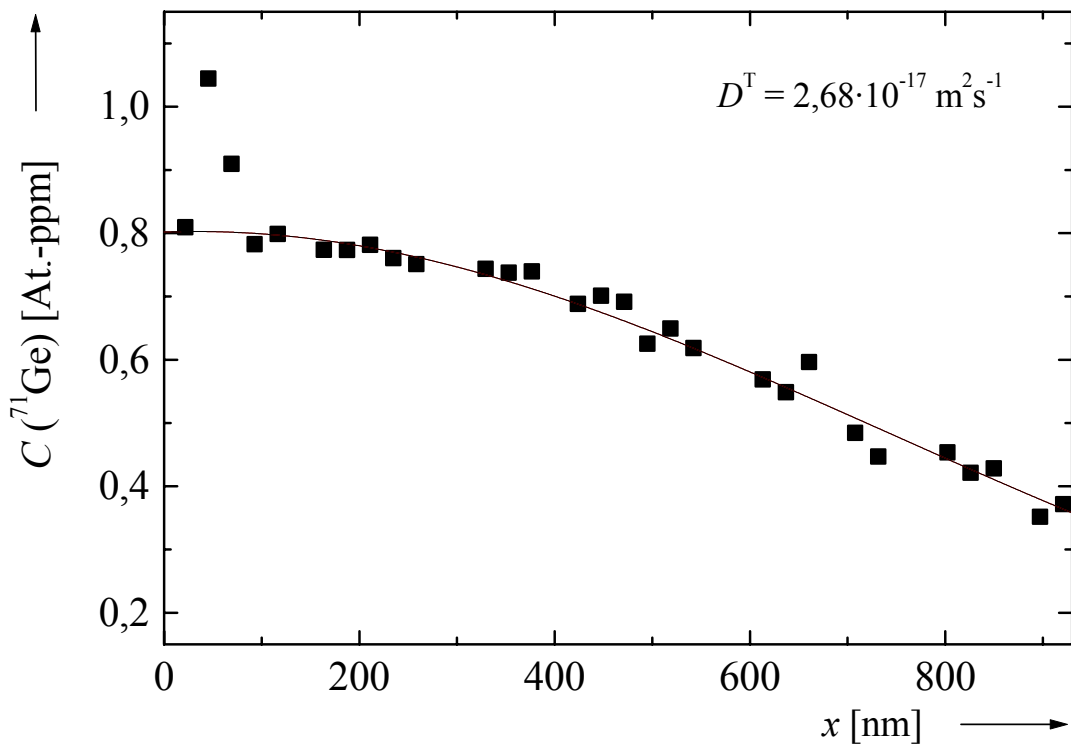


Abbildung 45: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,96}\text{Ge}_{0,04}$ nach Temperung bei 1263 °C für 160 min (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

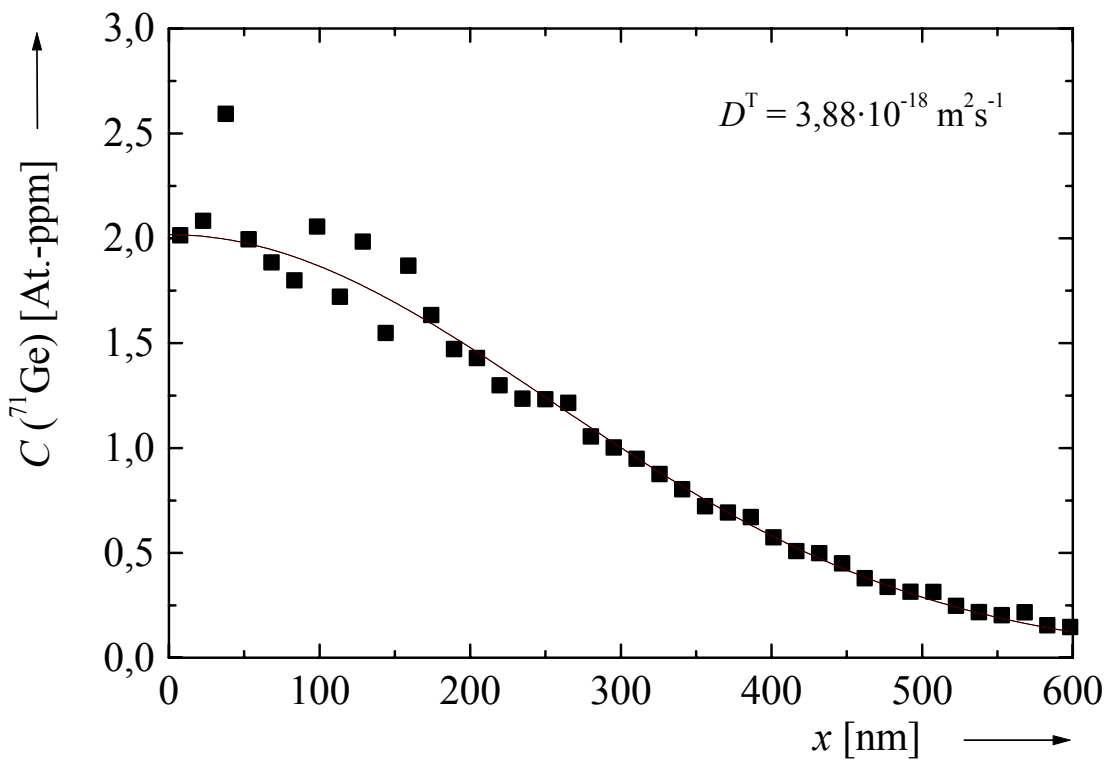


Abbildung 46: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,96}\text{Ge}_{0,04}$ nach Temperung bei 1187 °C für 2,25 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

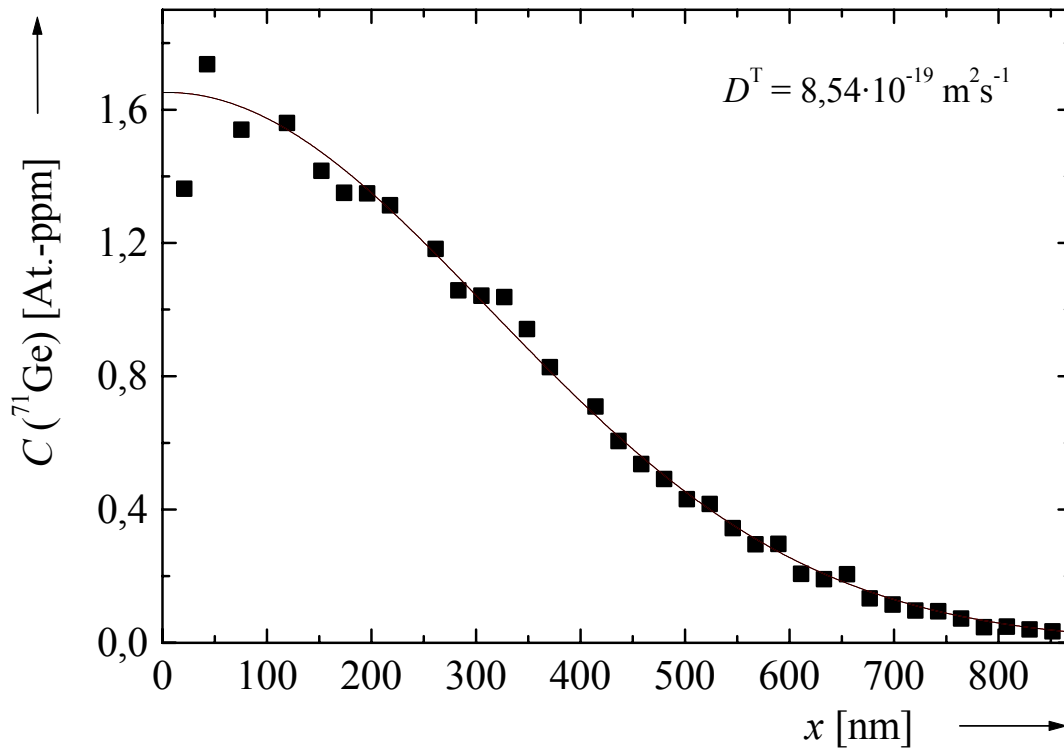


Abbildung 47: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,96}\text{Ge}_{0,04}$ nach Temperung bei 1133 °C für $15,25\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

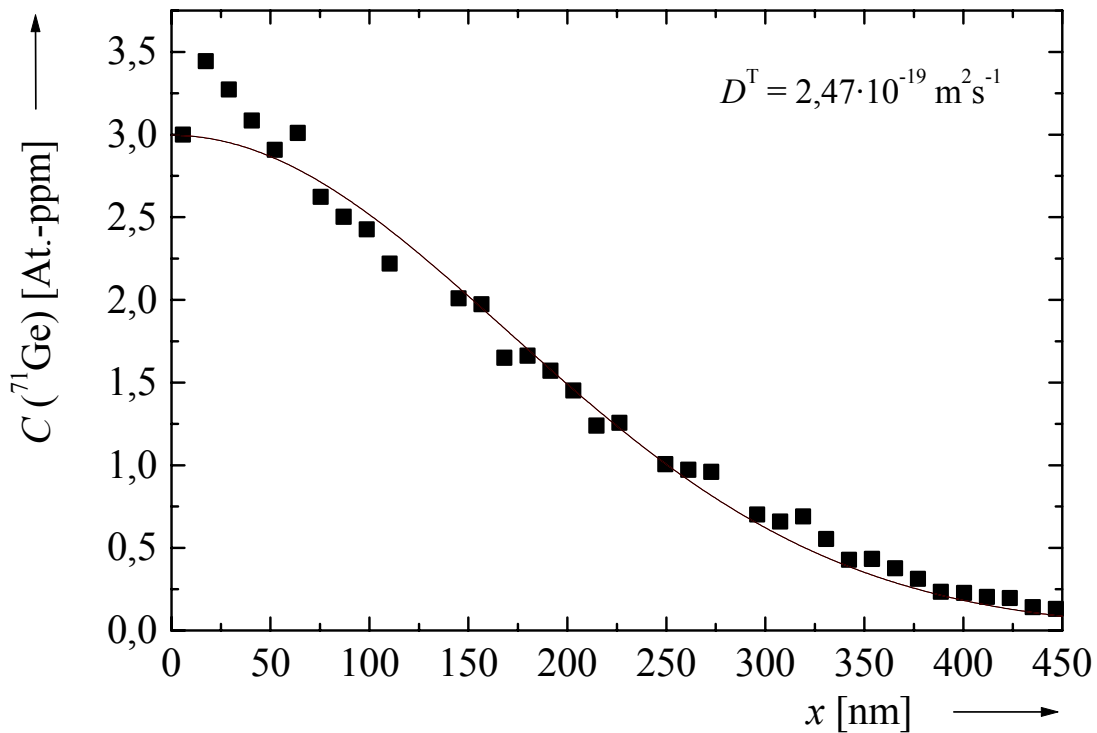


Abbildung 48: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,96}\text{Ge}_{0,04}$ nach Temperung bei 1095 °C für 18 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

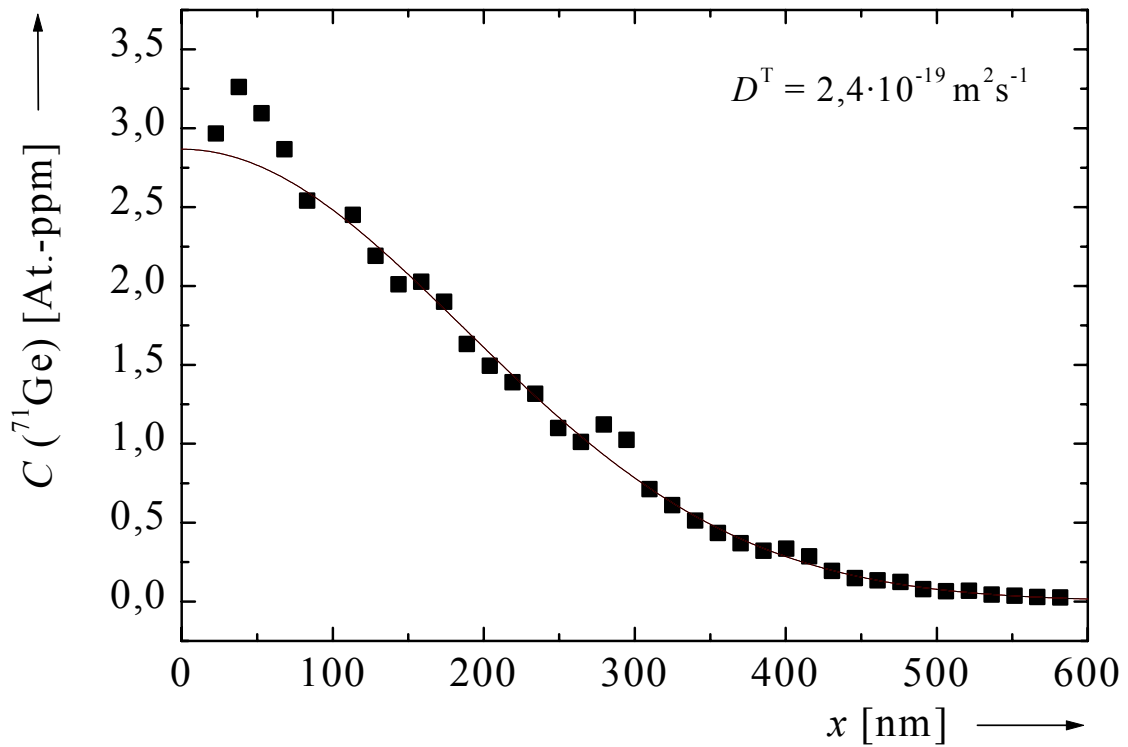


Abbildung 49: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,96}\text{Ge}_{0,04}$ nach Temperung bei 1092 °C für 18 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

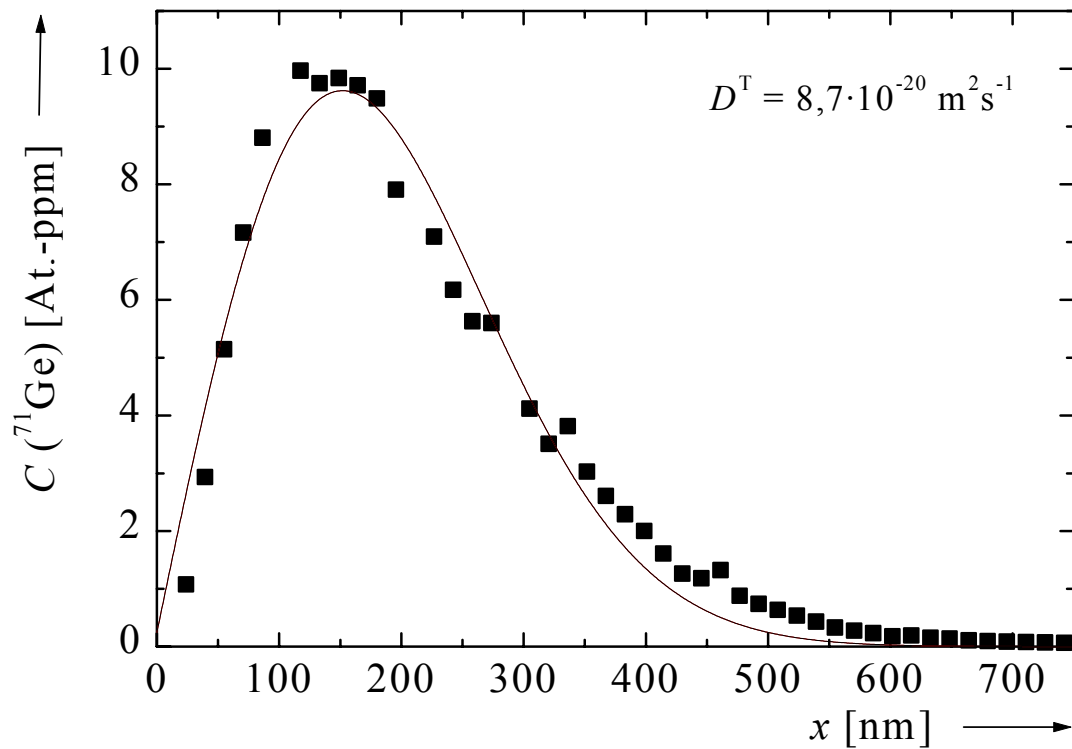


Abbildung 50: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,96}\text{Ge}_{0,04}$ nach Temperung bei 1057 °C für 113,5 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

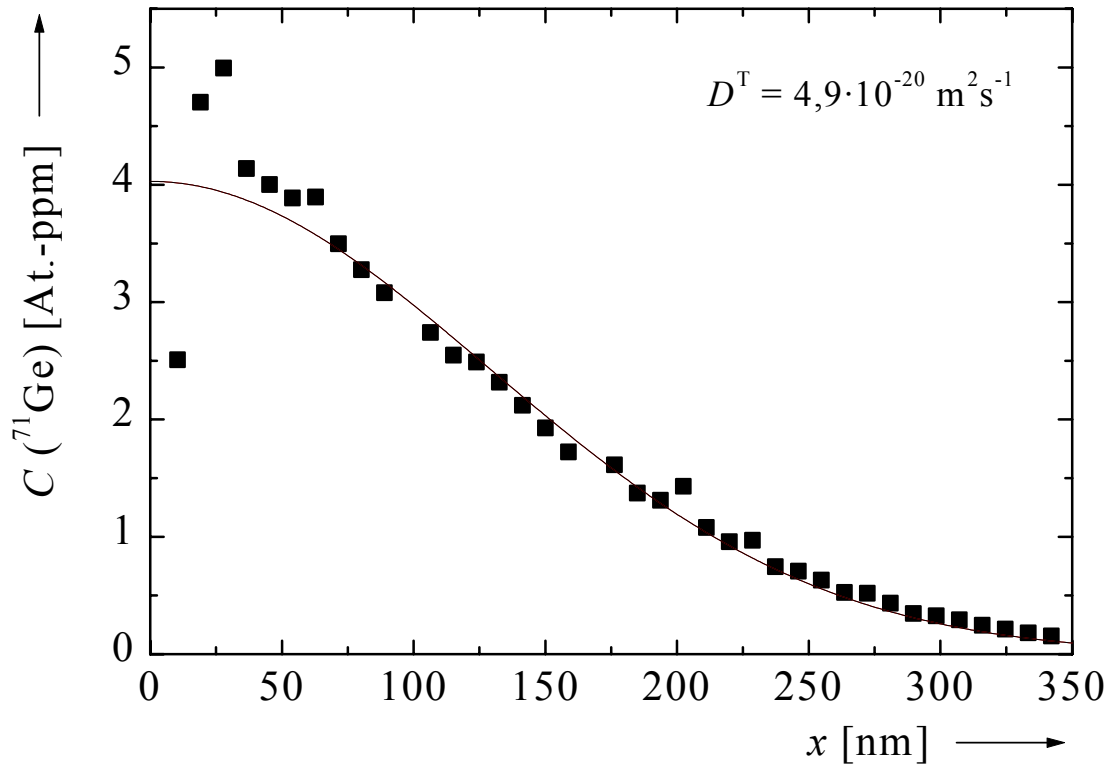


Abbildung 51: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,96}\text{Ge}_{0,04}$ nach Temperung bei 1043 °C für $38,5\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

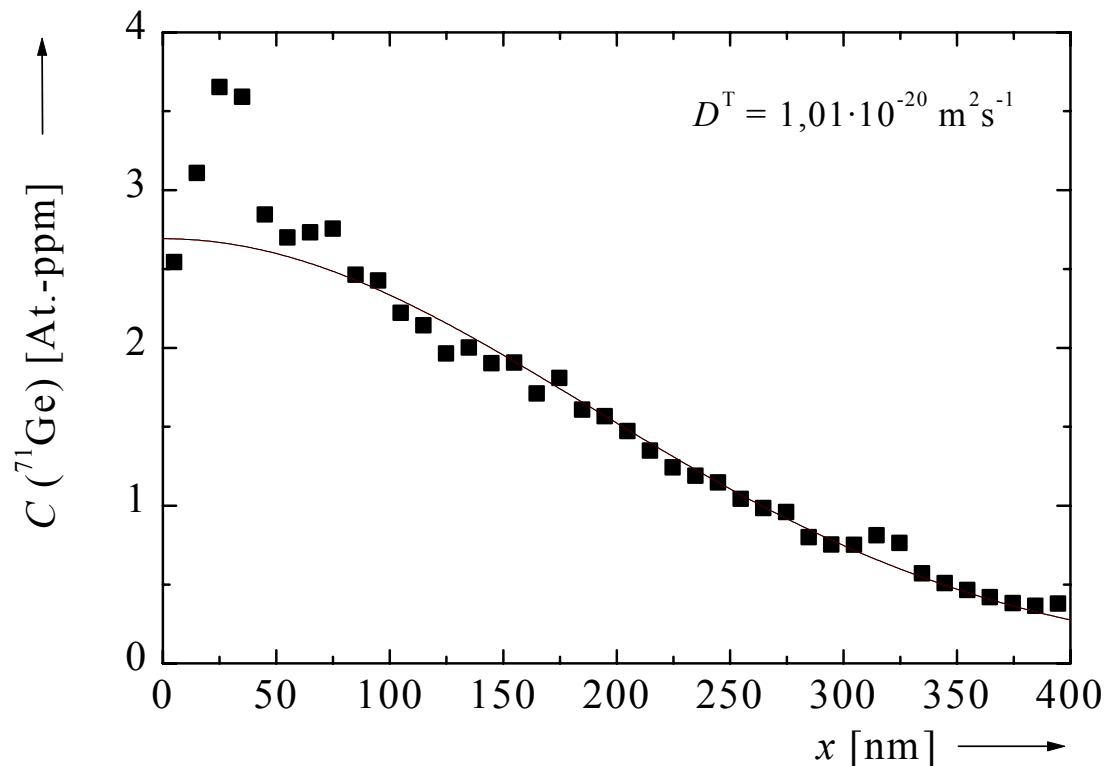


Abbildung 52: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,96}\text{Ge}_{0,04}$ nach Temperung bei 991 °C für 16 d (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

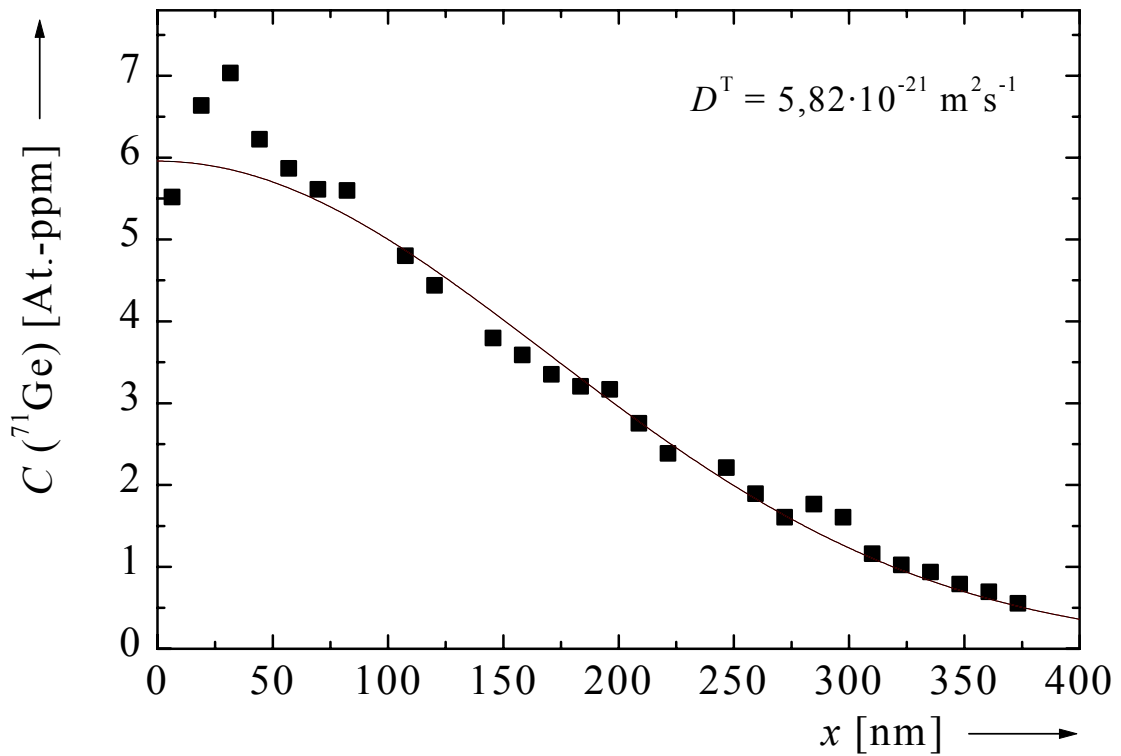


Abbildung 53: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,96}\text{Ge}_{0,04}$ nach Temperung bei 973 °C für 626 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

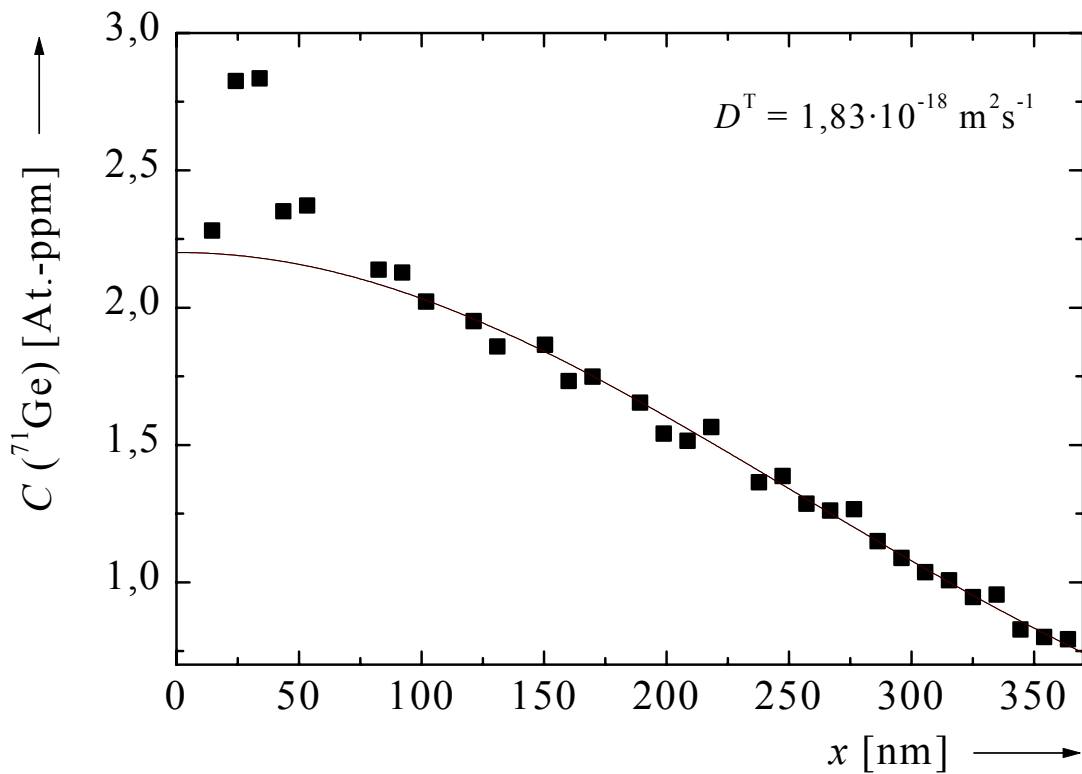


Abbildung 54: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,90}\text{Ge}_{0,10}$ nach Temperung bei 1143 °C für 6 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

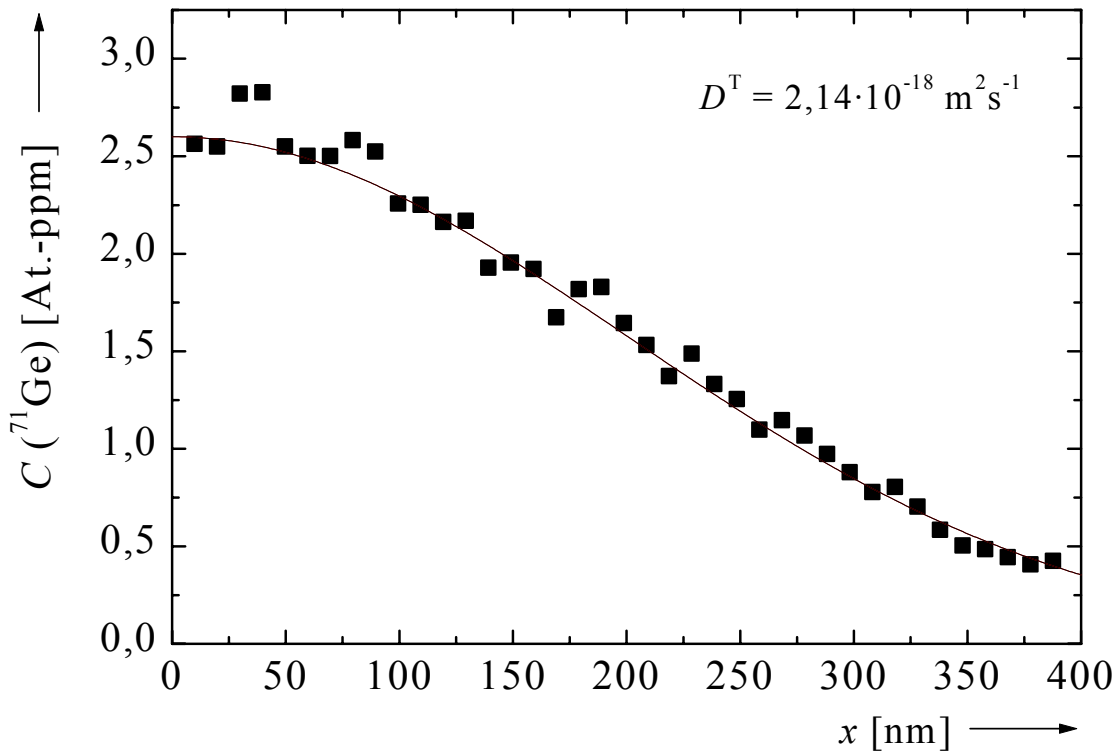


Abbildung 55: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,90}\text{Ge}_{0,10}$ nach Temperung bei 1141 °C für $2,5\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

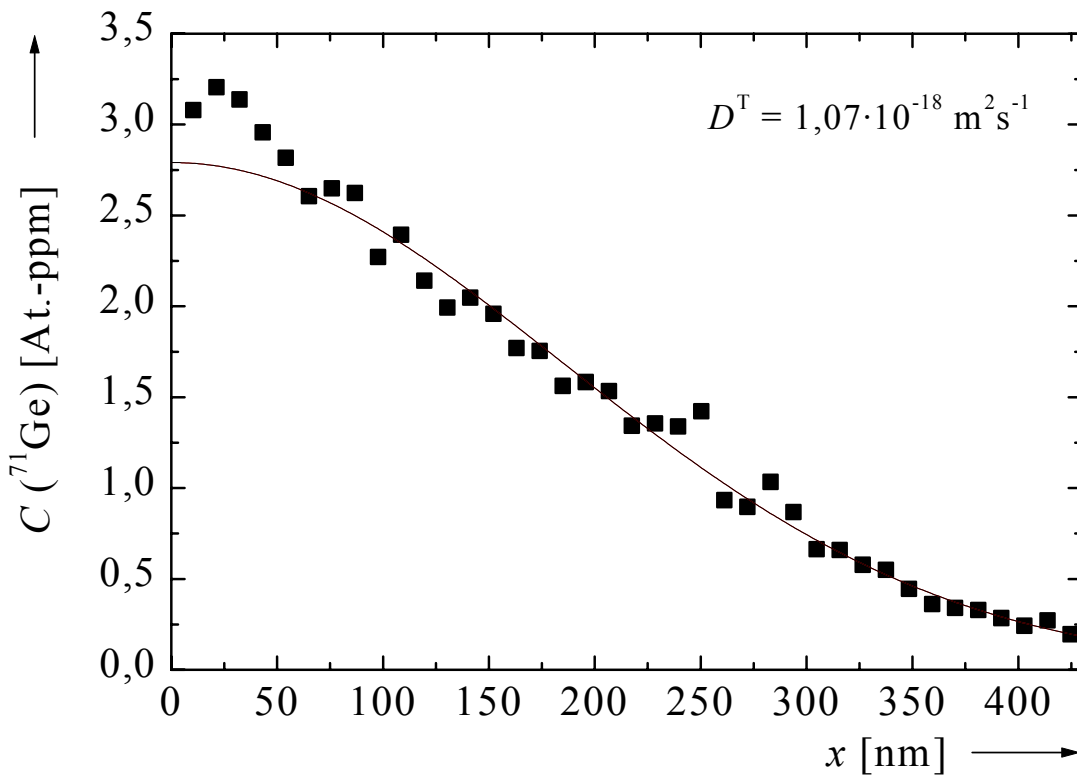


Abbildung 56: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,90}\text{Ge}_{0,10}$ nach Temperung bei 1123 °C für $4,25\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

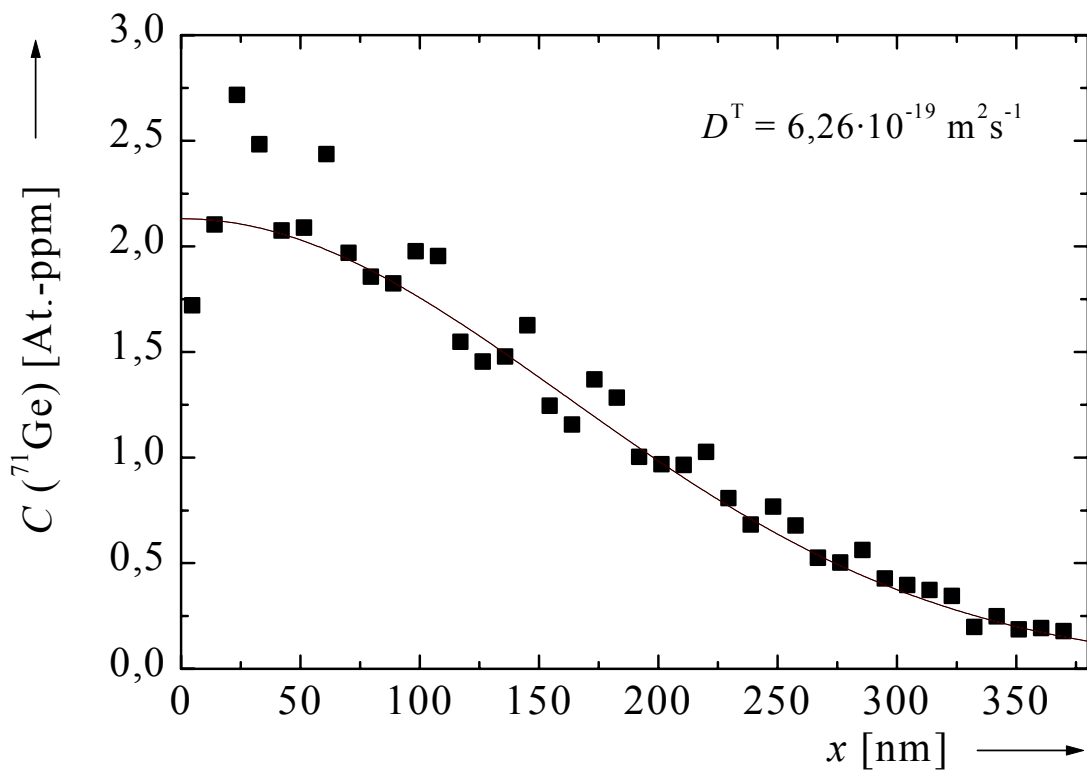


Abbildung 57: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,90}\text{Ge}_{0,10}$ nach Temperung bei 1102 °C für $17,25\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

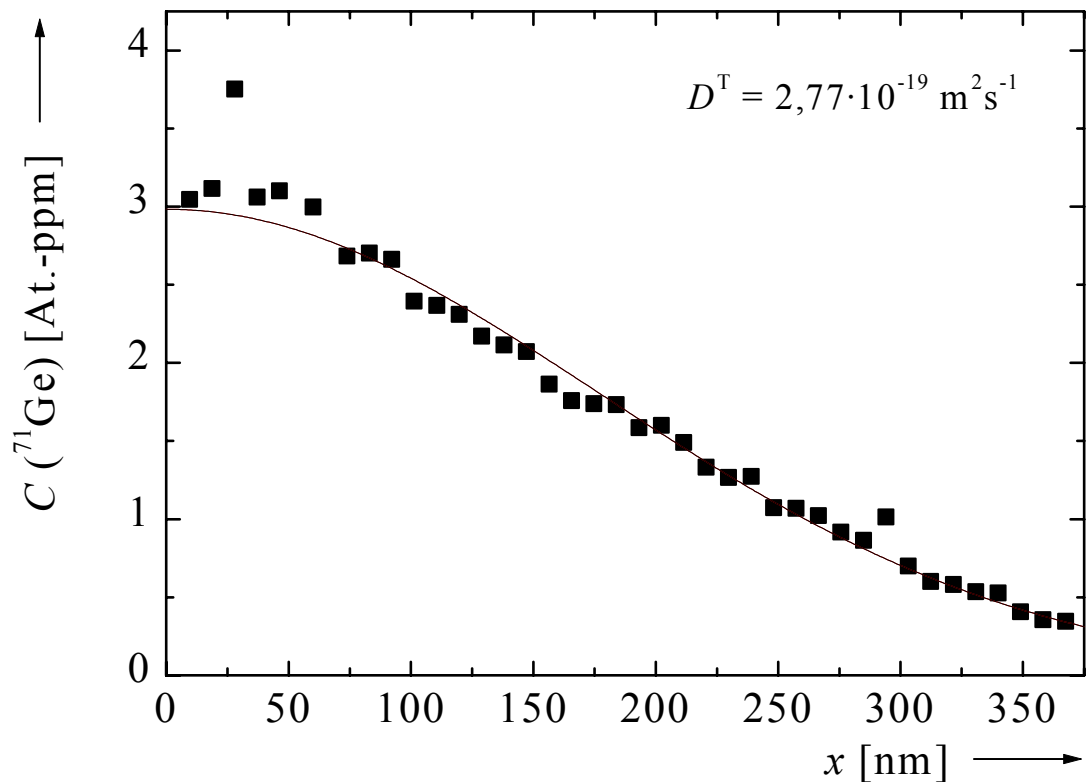


Abbildung 58: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,90}\text{Ge}_{0,10}$ nach Temperung bei 1076 °C für 15 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

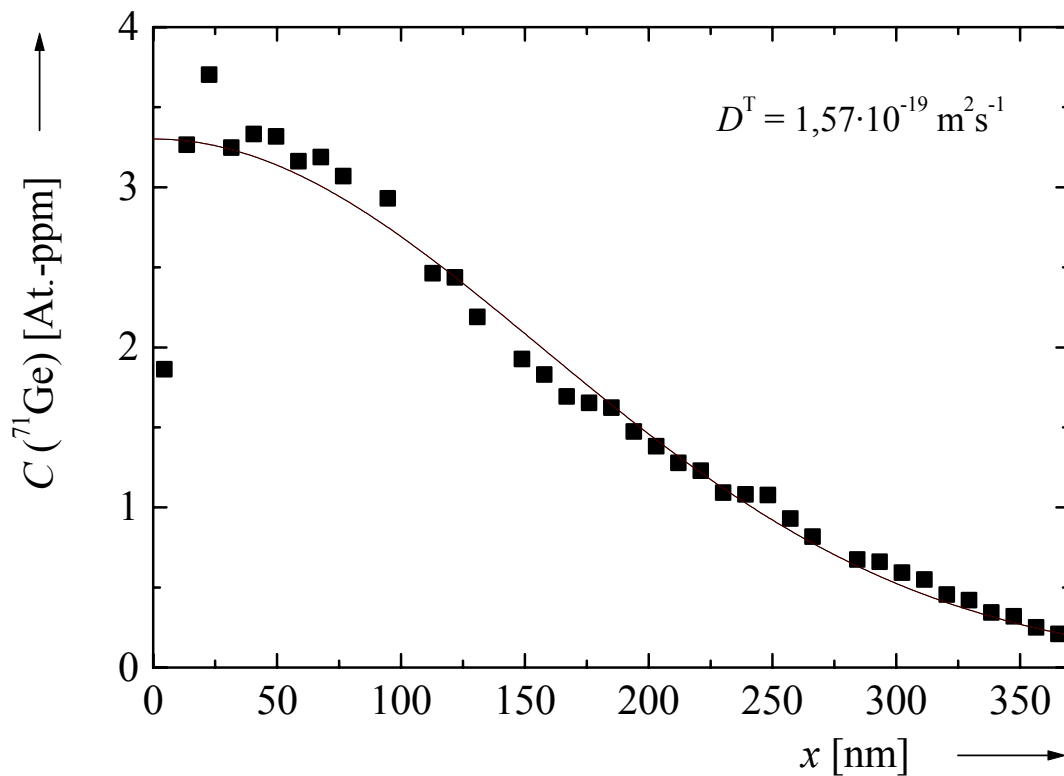


Abbildung 59: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,90}\text{Ge}_{0,10}$ nach Temperung bei 1049 °C für $17,5\text{ h}$ (\blacksquare). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

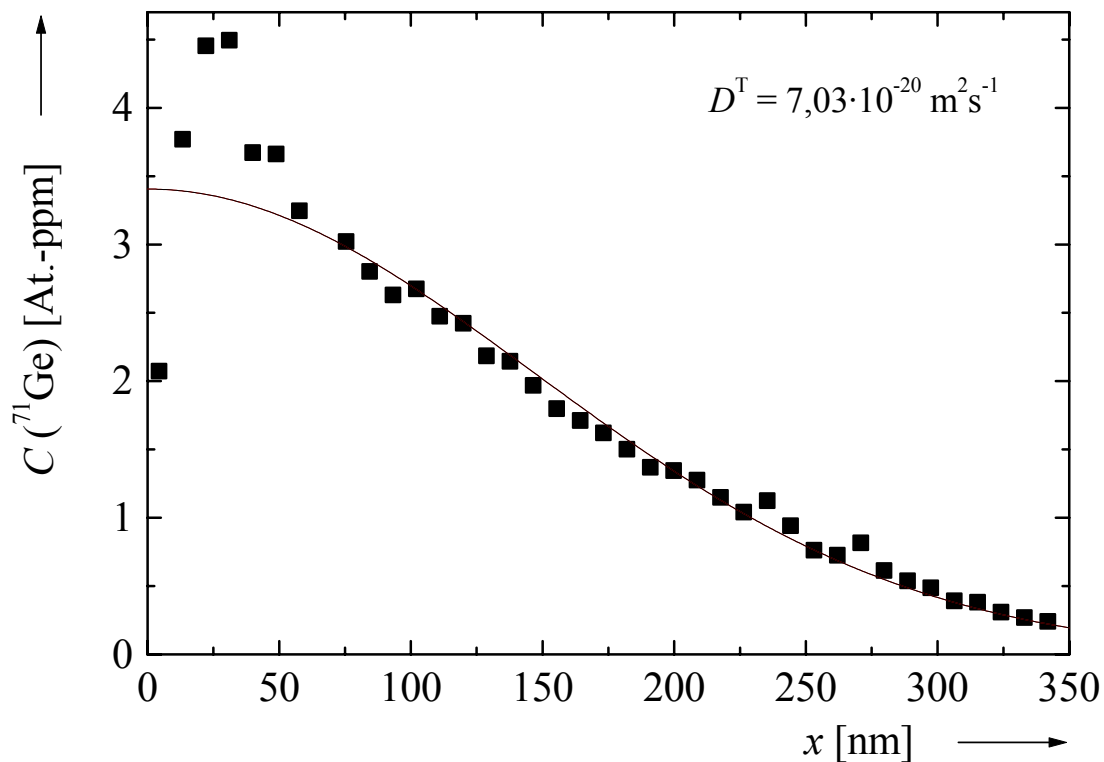


Abbildung 60: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,90}\text{Ge}_{0,10}$ nach Temperung bei 1029 °C für $53,67\text{ h}$ (\blacksquare). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

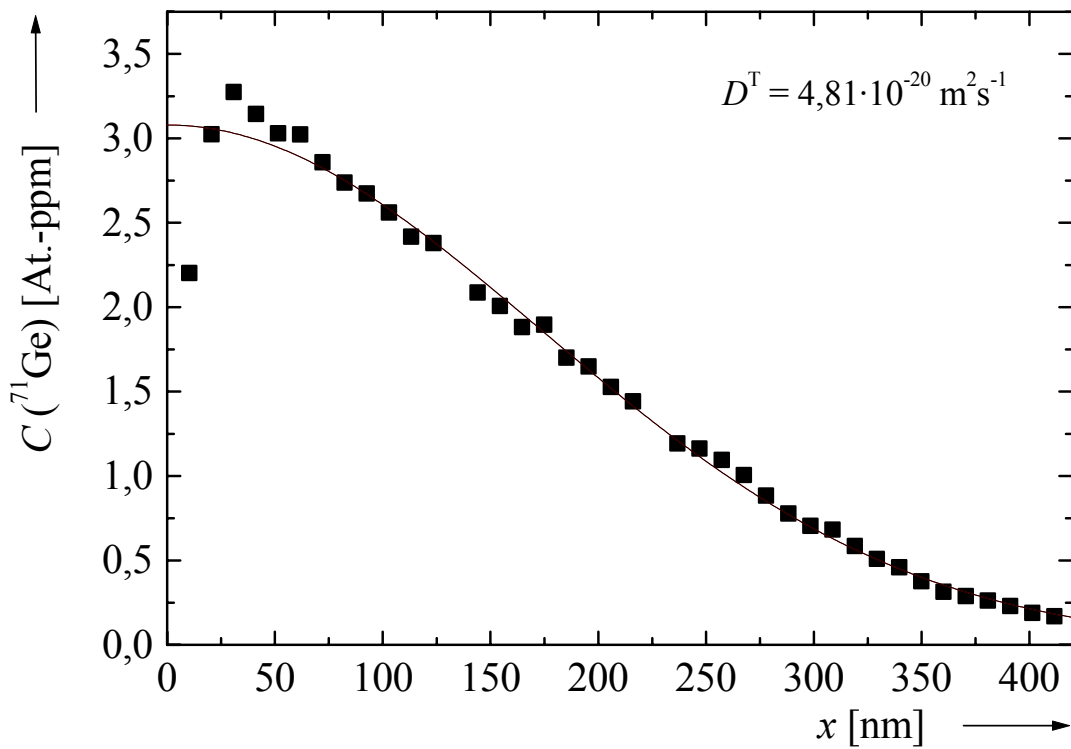


Abbildung 61: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,90}\text{Ge}_{0,10}$ nach Temperung bei 1019 °C für $88,5\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

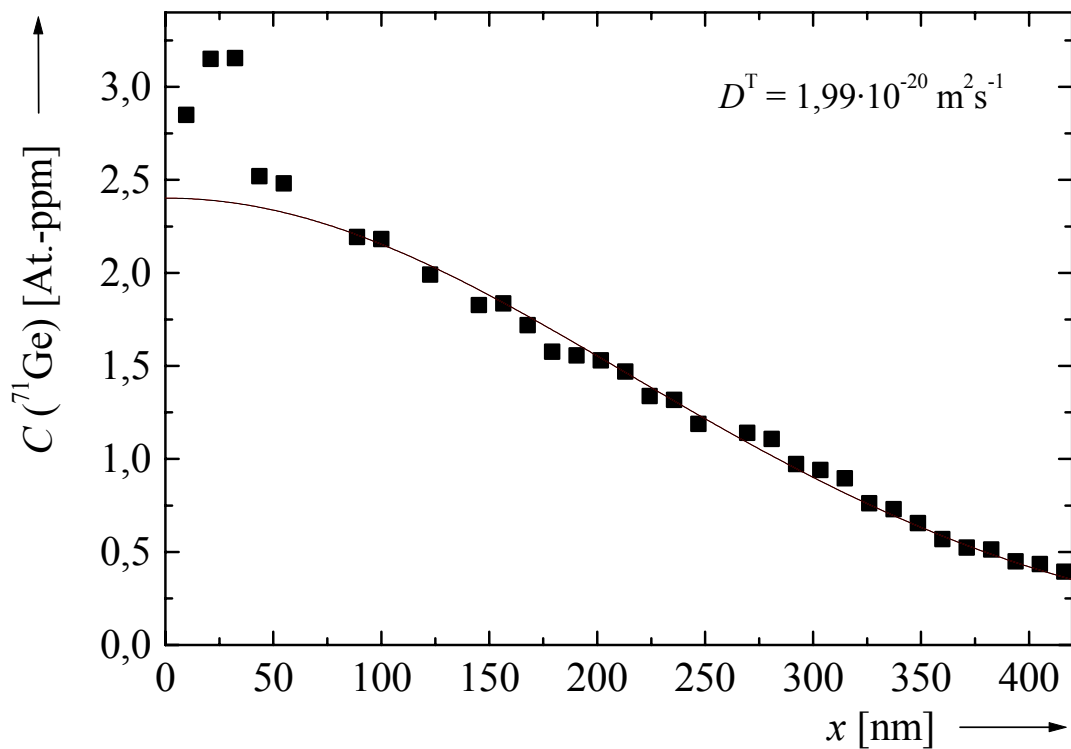


Abbildung 62: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,90}\text{Ge}_{0,10}$ nach Temperung bei 992 °C für 11 d (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

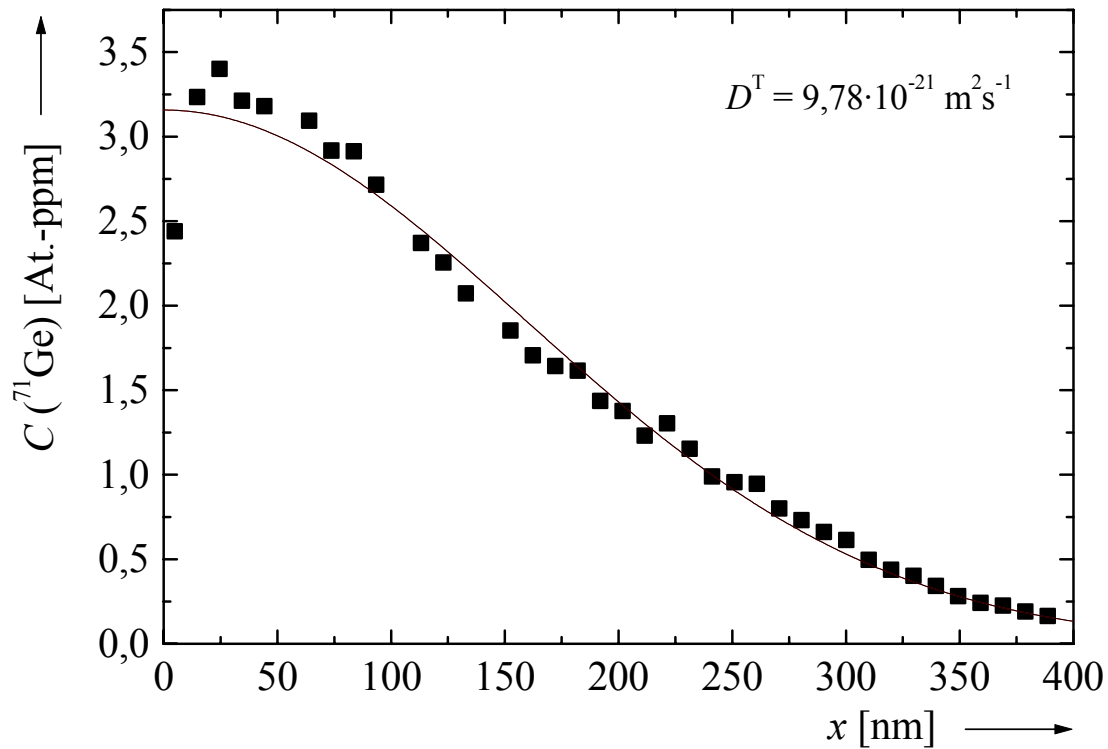


Abbildung 63: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,90}\text{Ge}_{0,10}$ nach Temperung bei 965 °C für $337,5\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

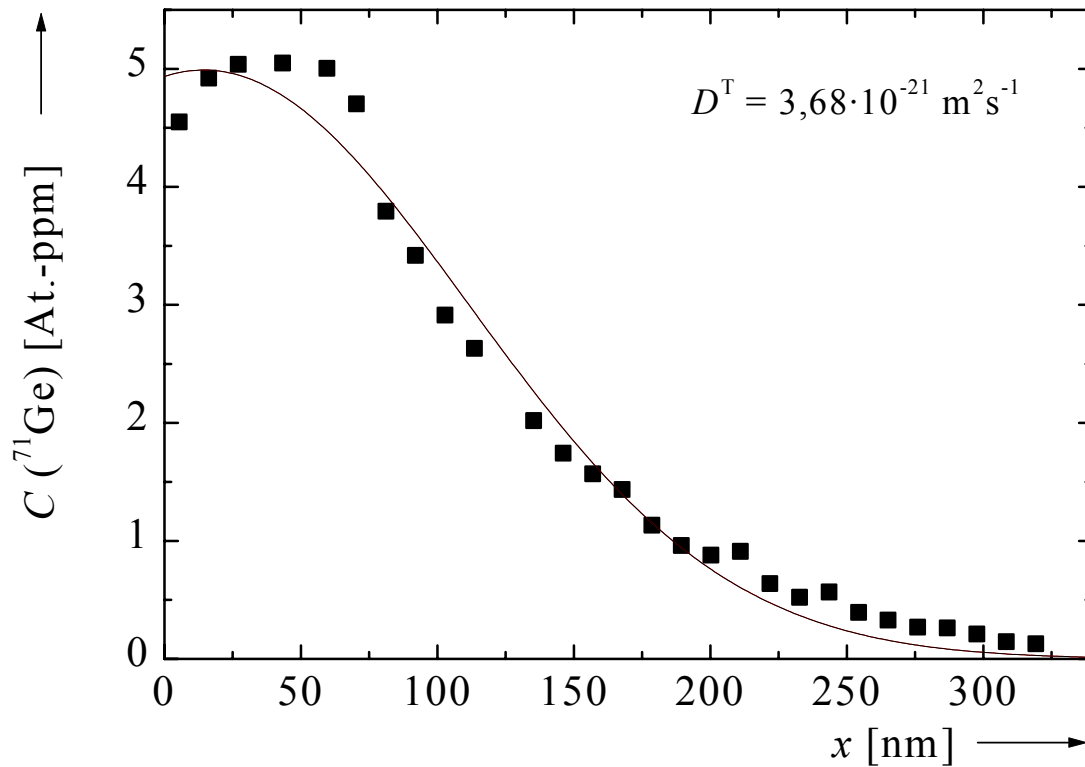


Abbildung 64: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,90}\text{Ge}_{0,10}$ nach Temperung bei 939 °C für 10 d (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

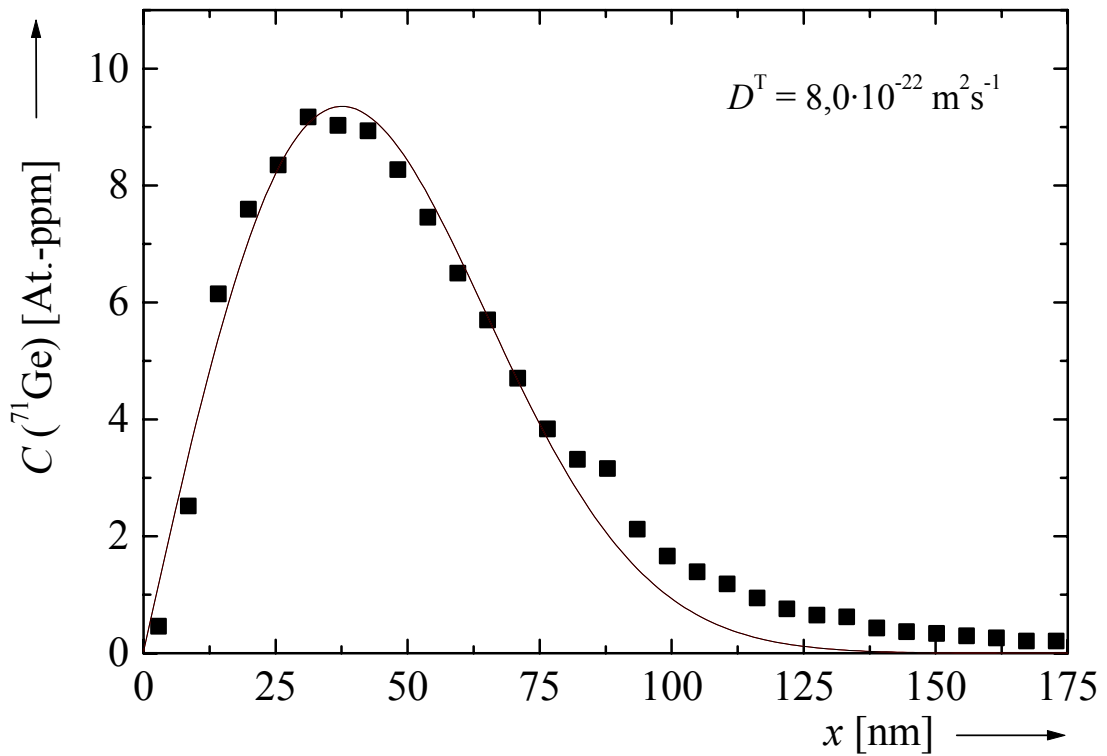


Abbildung 65: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,90}\text{Ge}_{0,10}$ nach Temperung bei 897 °C für 3,5 d (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

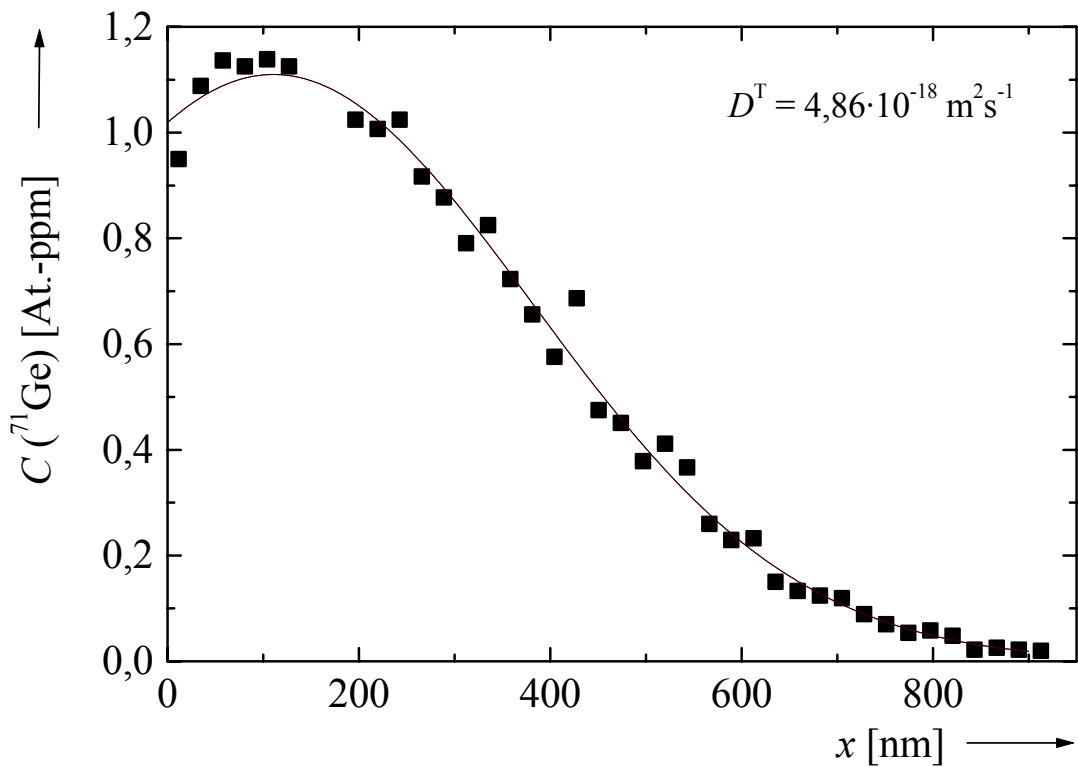


Abbildung 66: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,83}\text{Ge}_{0,17}$ nach Temperung bei 1151 °C für 2,5 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

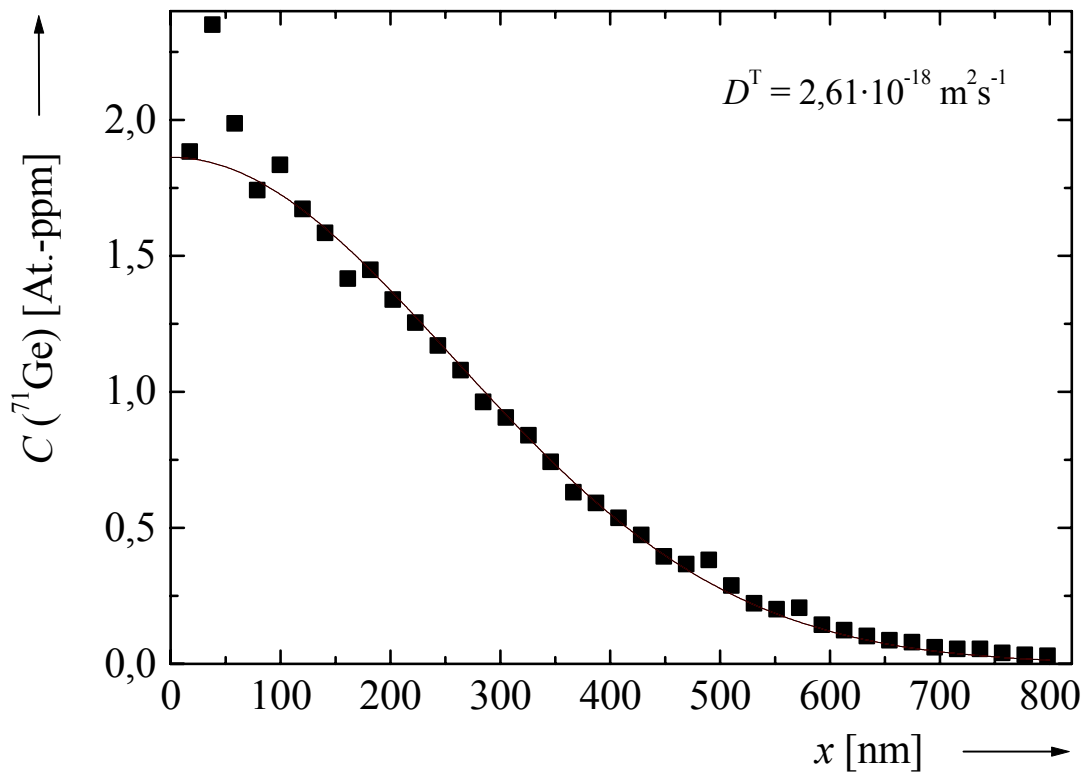


Abbildung 67: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,83}\text{Ge}_{0,17}$ nach Temperung bei 1132 °C für $3,5\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

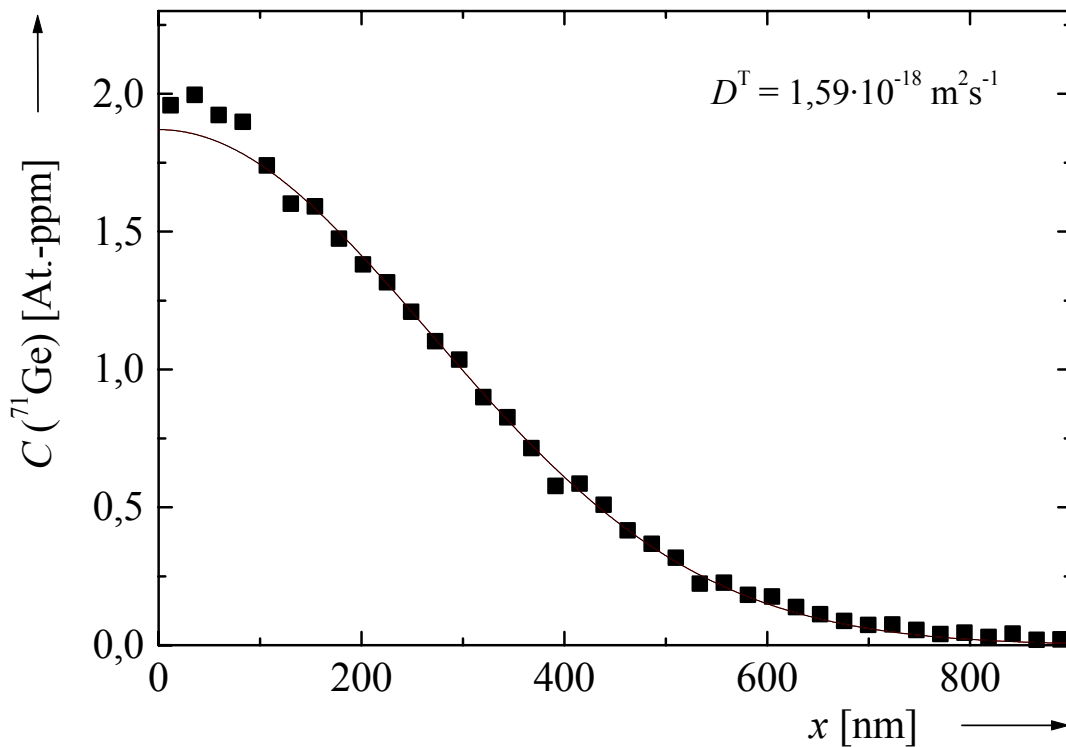


Abbildung 68: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,83}\text{Ge}_{0,17}$ nach Temperung bei 1114 °C für 7 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

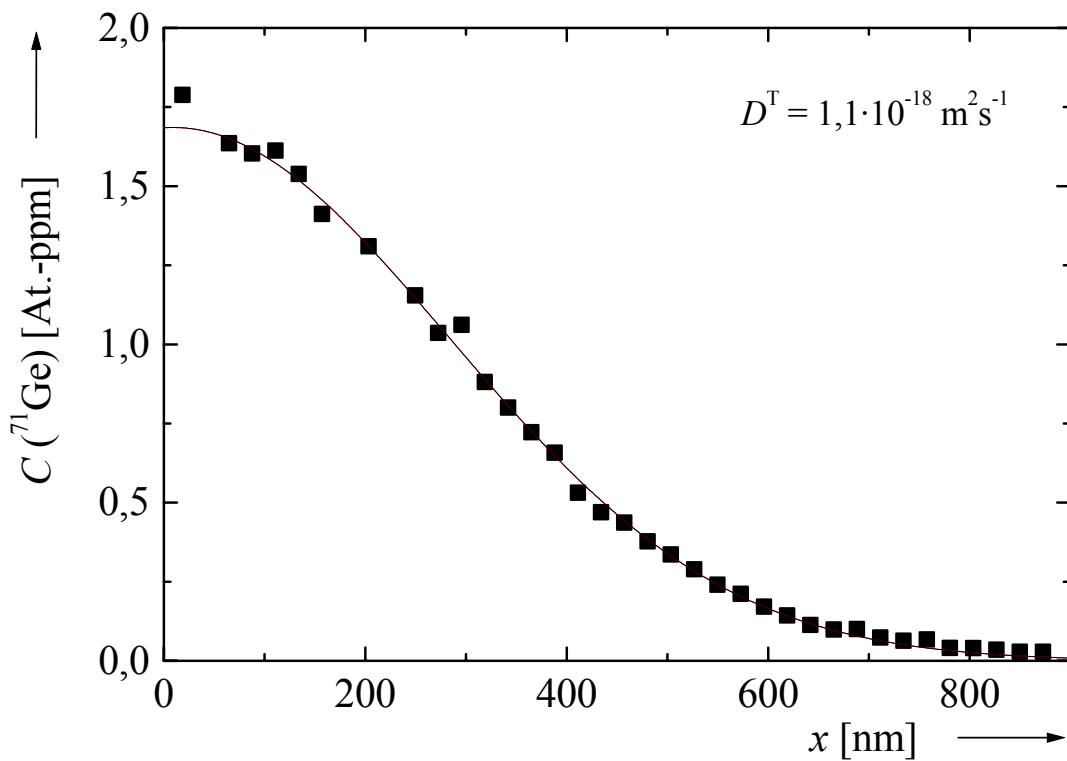


Abbildung 69: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,83}\text{Ge}_{0,17}$ nach Temperung bei 1095 °C für $8,5\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

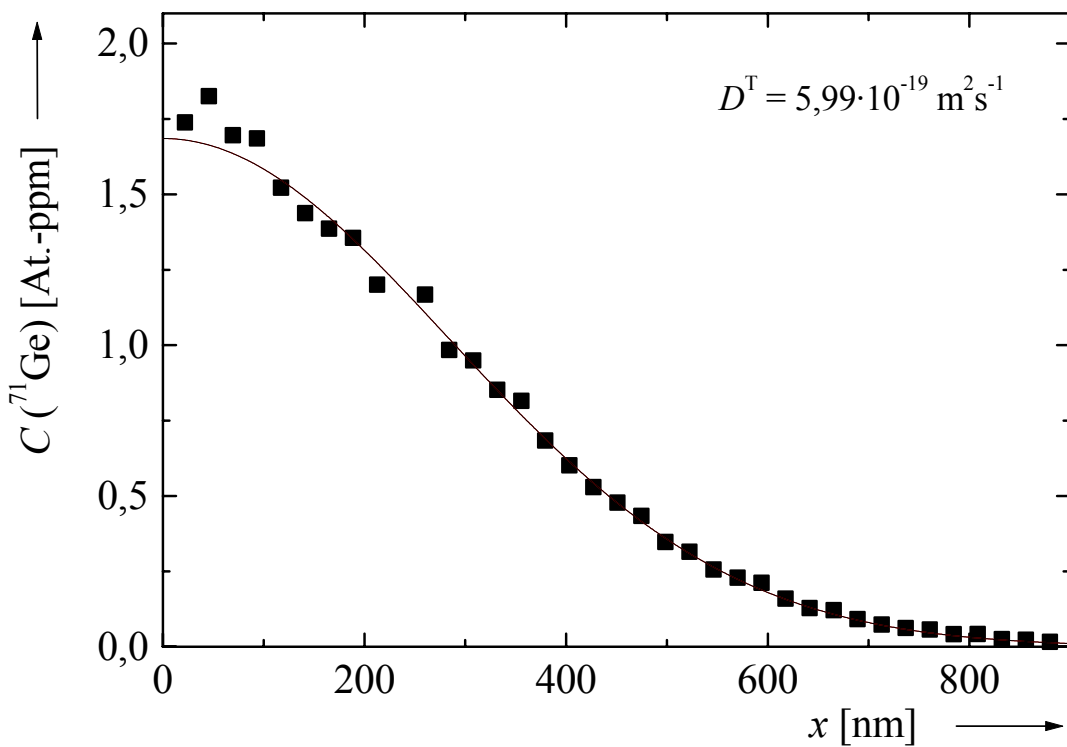


Abbildung 70: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,83}\text{Ge}_{0,17}$ nach Temperung bei 1075 °C für 18 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

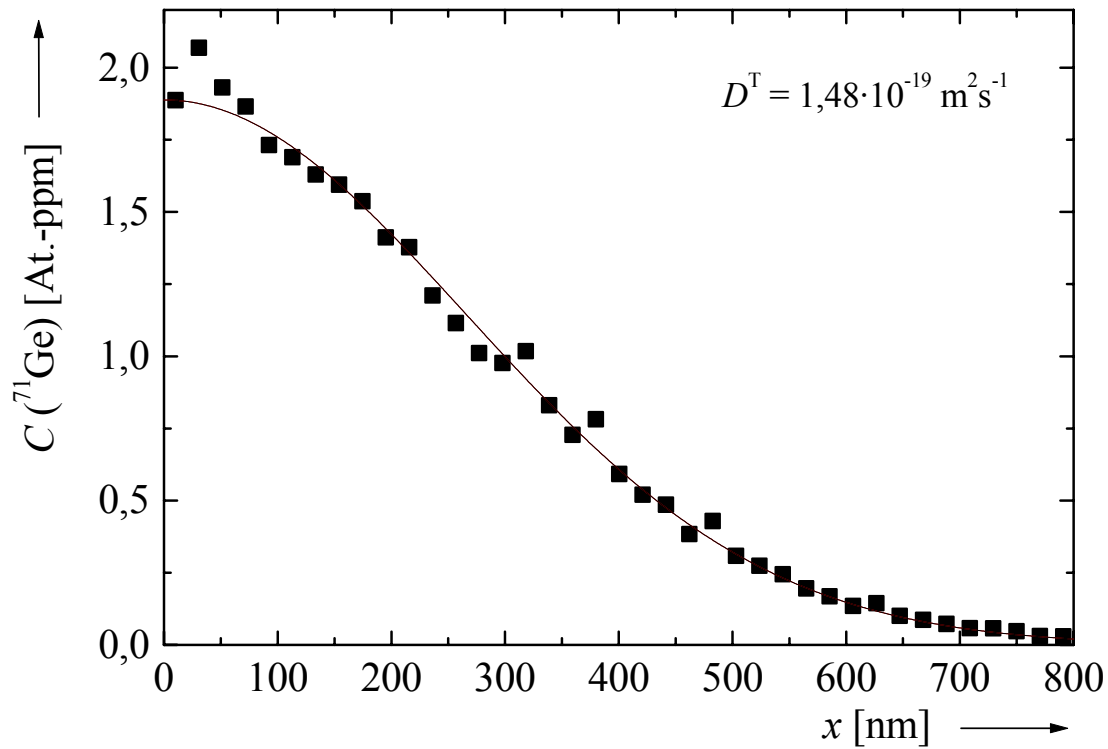


Abbildung 71: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,83}\text{Ge}_{0,17}$ nach Temperung bei 1028 °C für 65 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

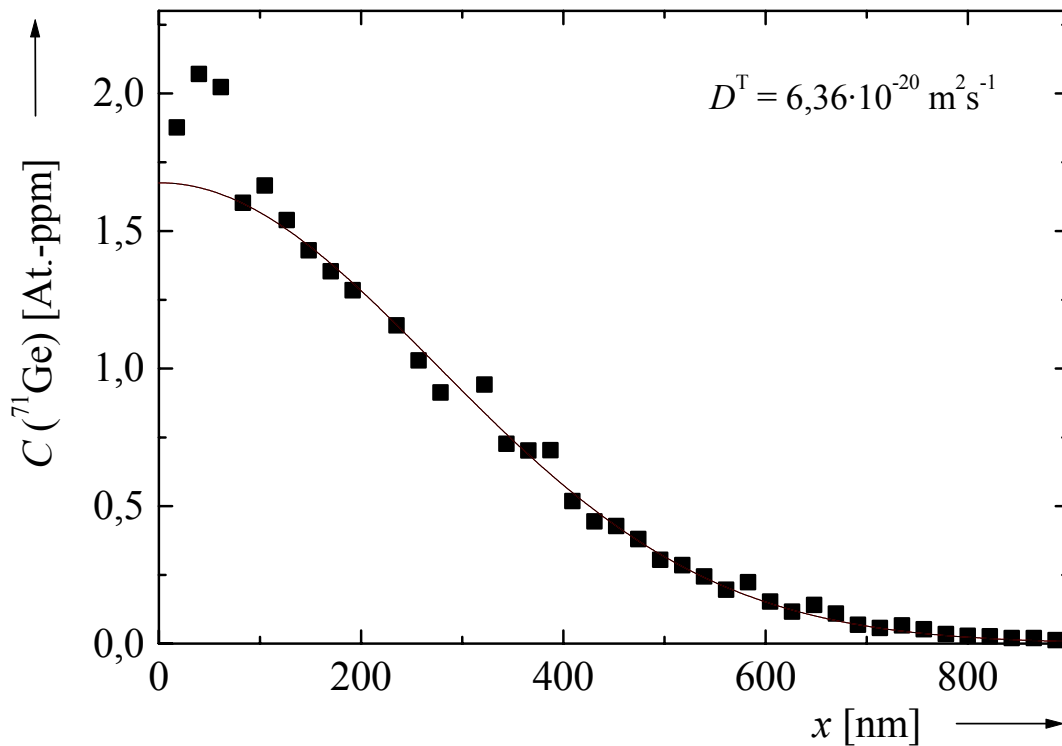


Abbildung 72: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,83}\text{Ge}_{0,17}$ nach Temperung bei 1003 °C für $160,25\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

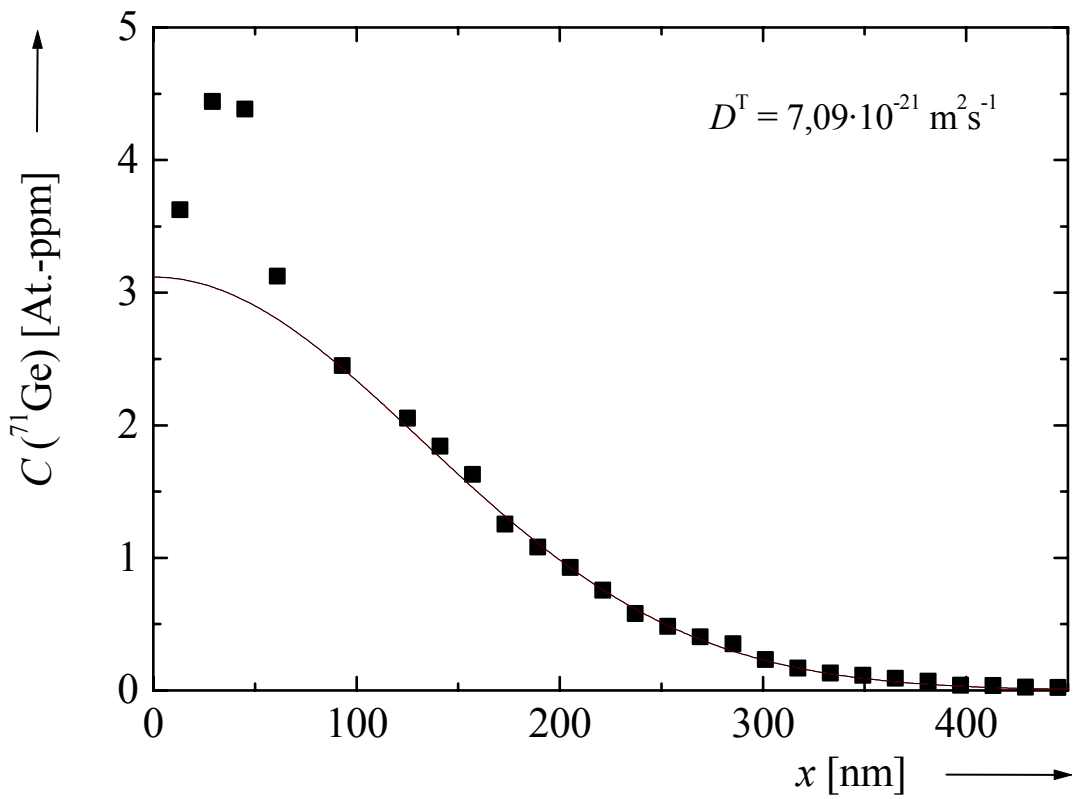


Abbildung 73: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,83}\text{Ge}_{0,17}$ nach Temperung bei 939 °C für 238,75 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

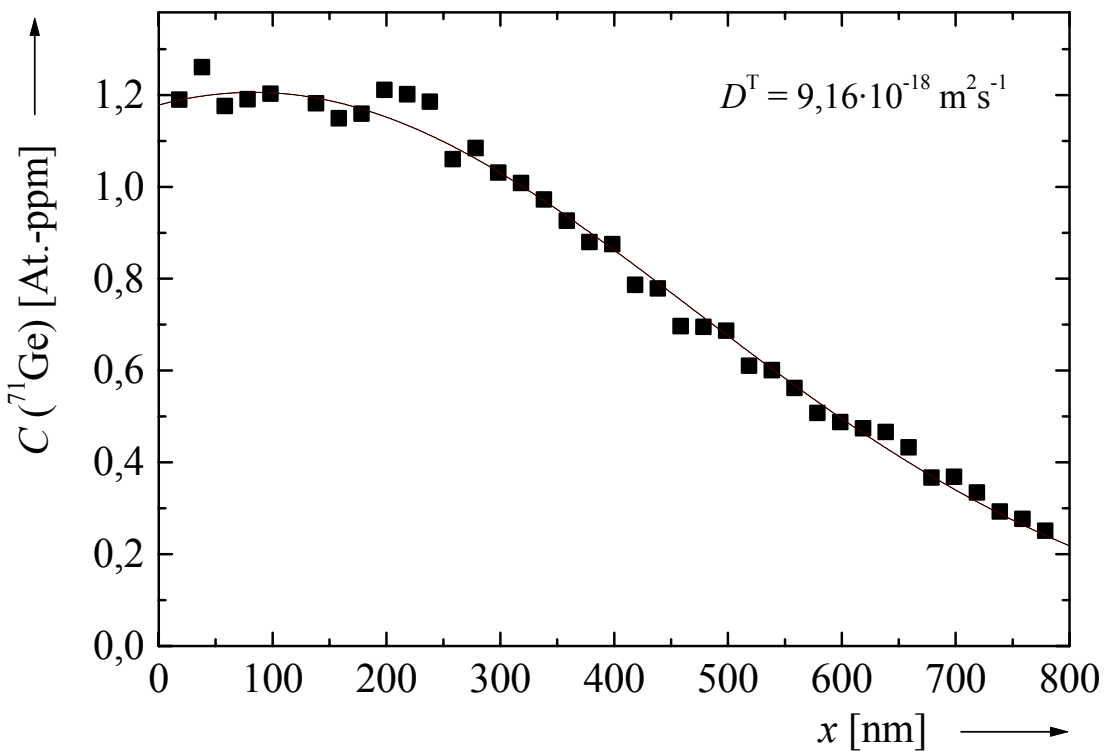


Abbildung 74: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ nach Temperung bei 1174 °C für 140 min (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

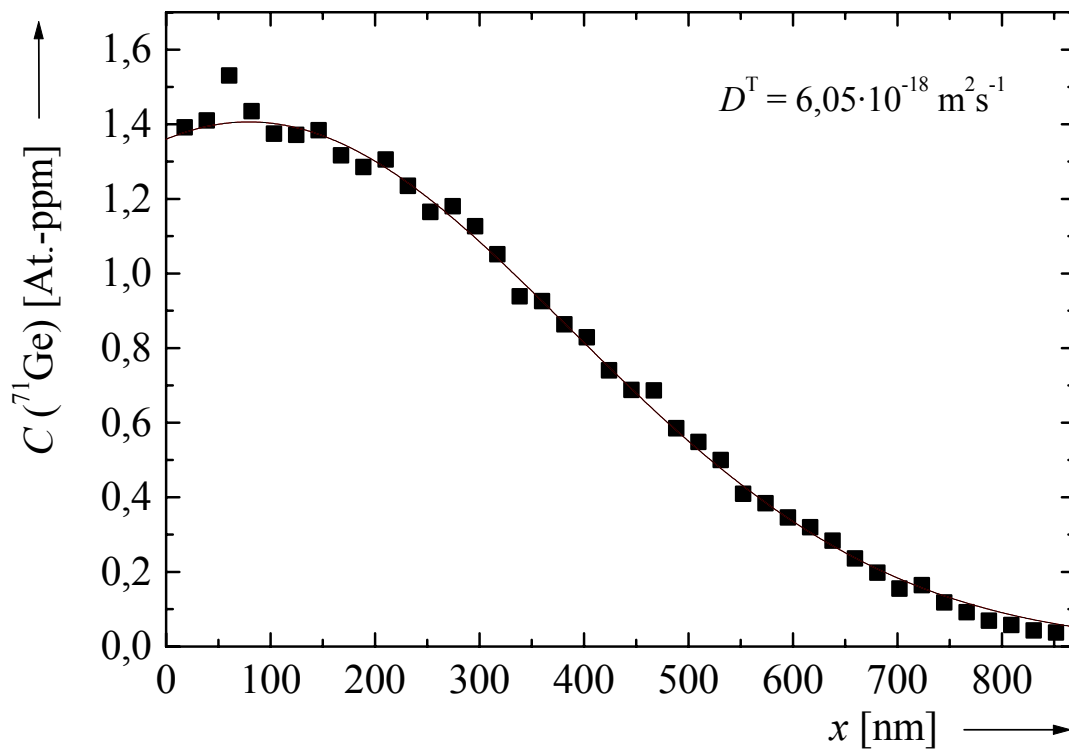


Abbildung 75: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ nach Temperung bei 1153 °C für $2,25\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

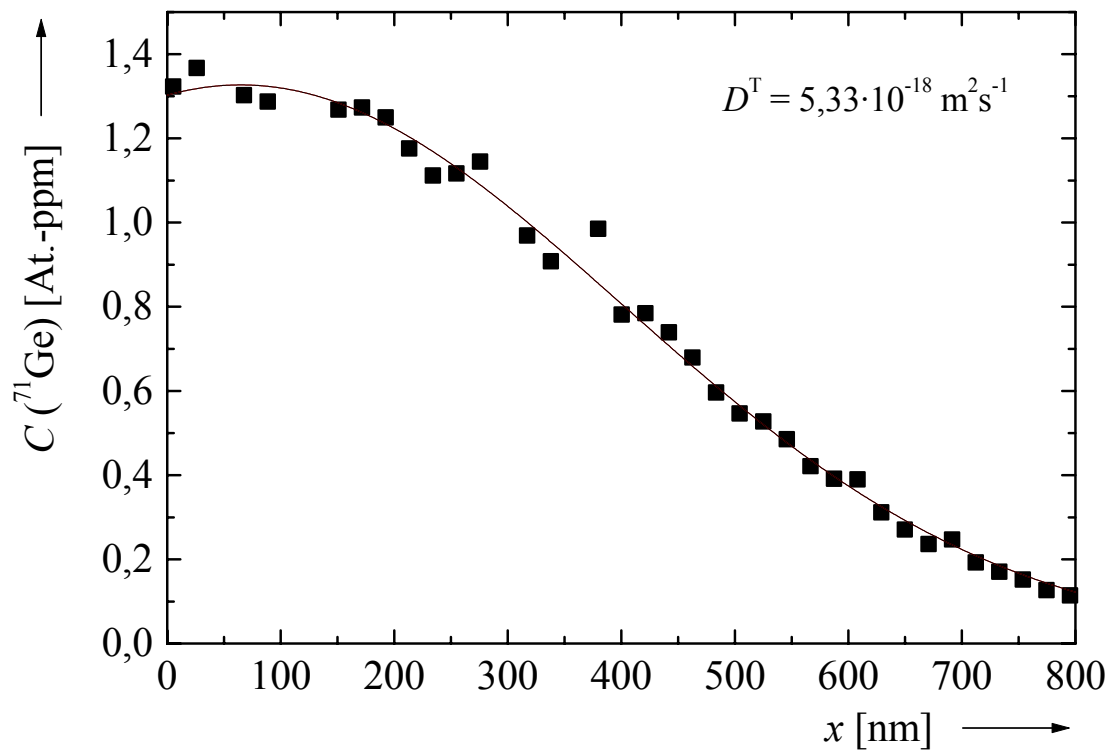


Abbildung 76: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ nach Temperung bei 1142 °C für 3 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

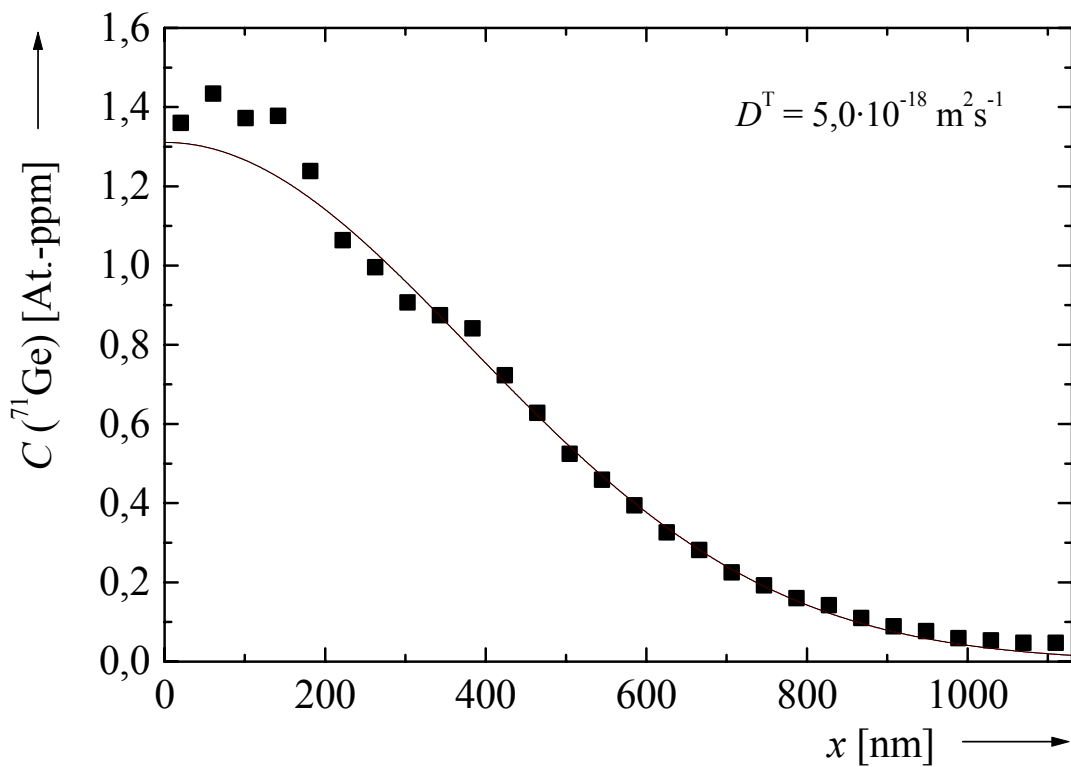


Abbildung 77: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ nach Temperung bei $1140\text{ }^\circ\text{C}$ für 2,5 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

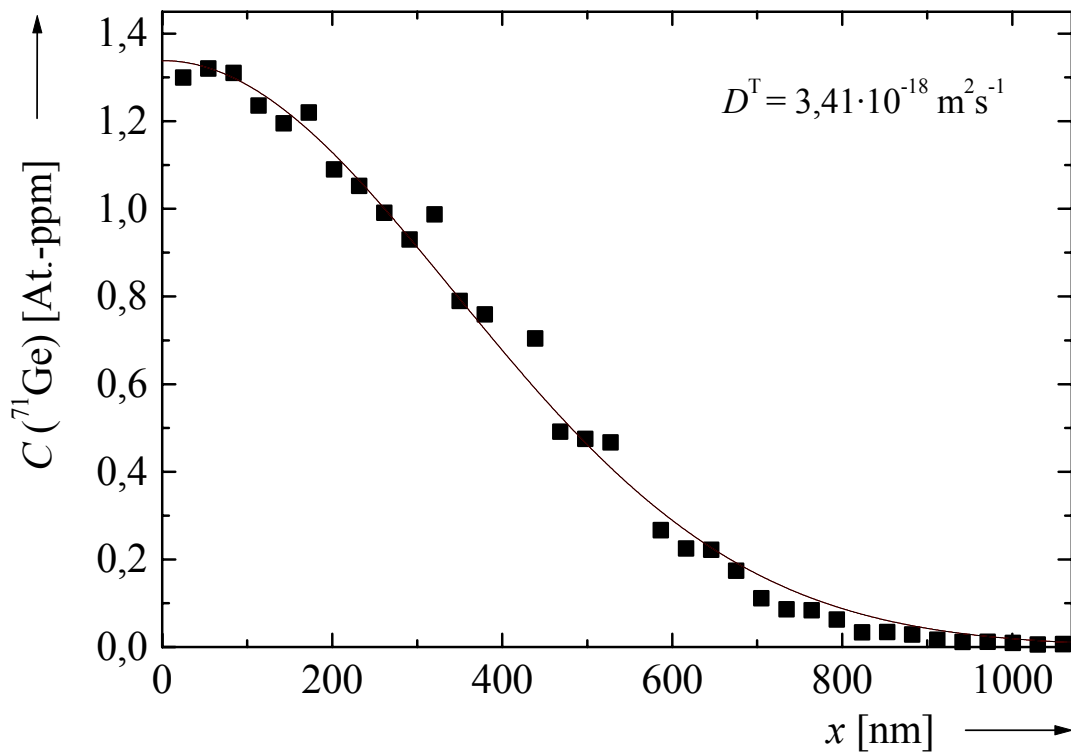


Abbildung 78: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ nach Temperung bei $1130\text{ }^\circ\text{C}$ für 5,5 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

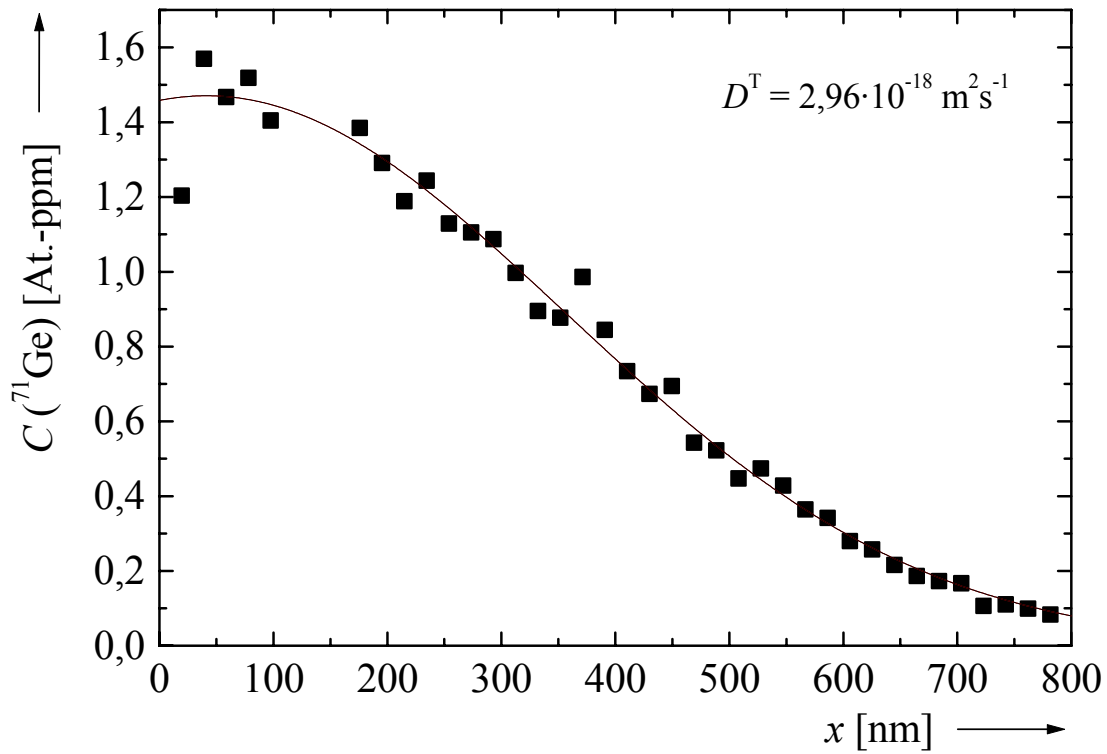


Abbildung 79: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ nach Temperung bei 1117 °C für 265 min (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

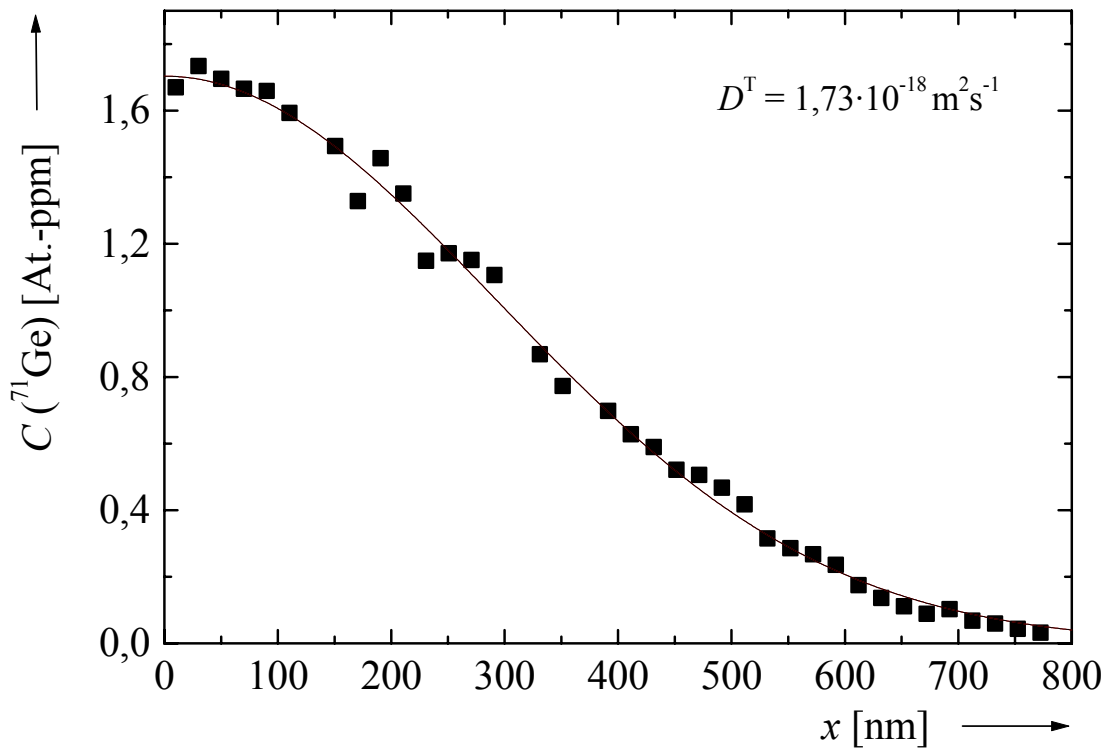


Abbildung 80: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ nach Temperung bei 1095 °C für $6,75\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

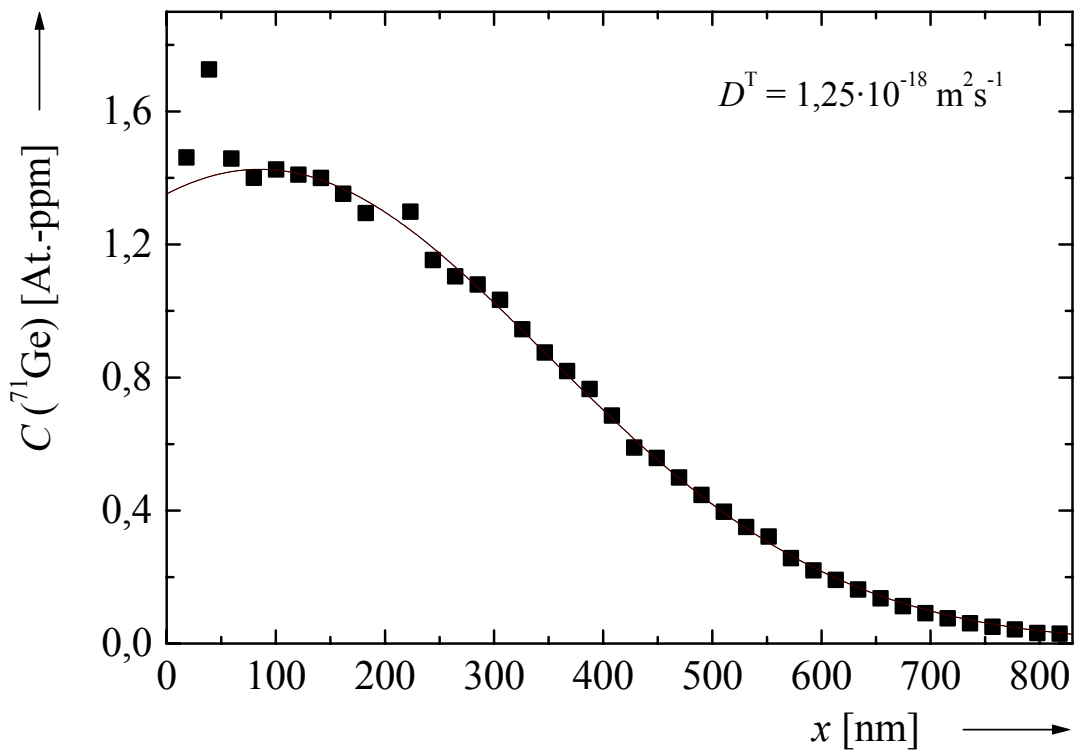


Abbildung 81: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ nach Temperung bei 1083 °C für $8,25\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

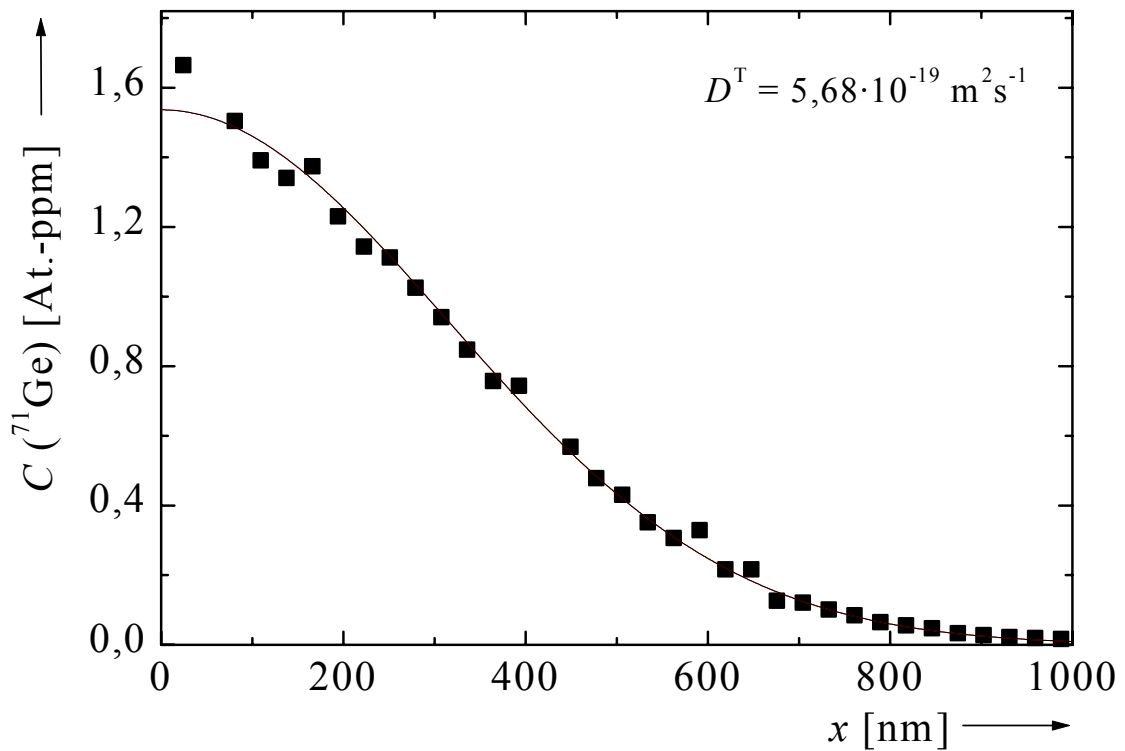


Abbildung 82: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ nach Temperung bei 1068 °C für $23,1\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

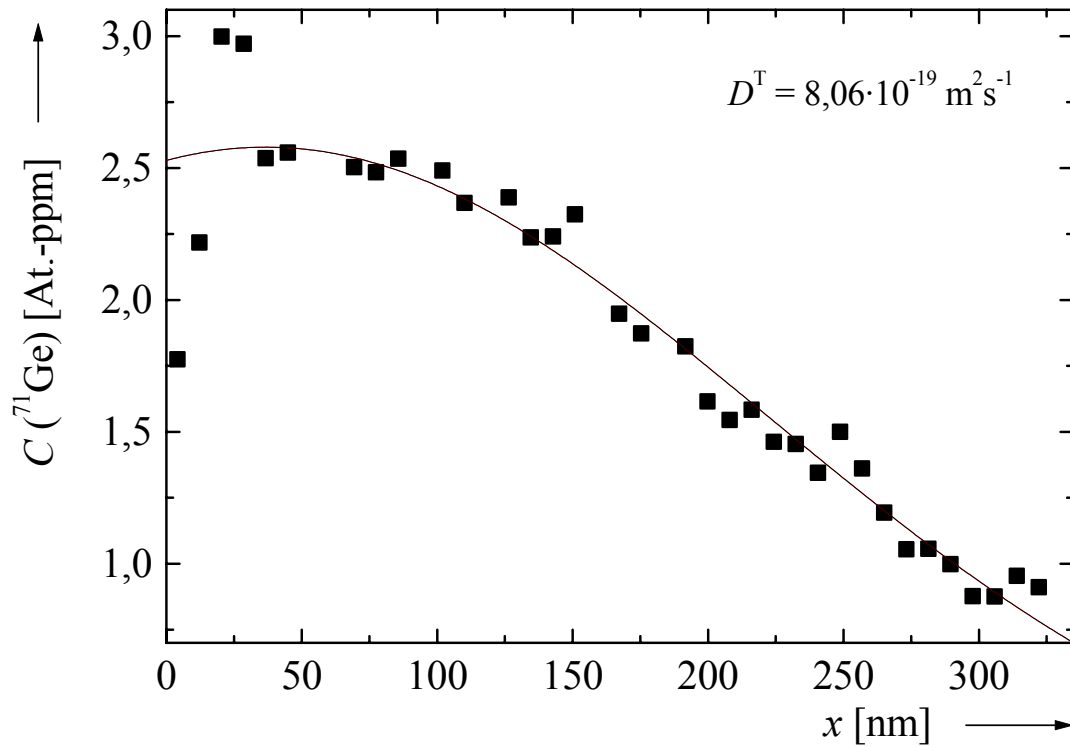


Abbildung 83: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ nach Temperung bei 1066 °C für $5,75\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

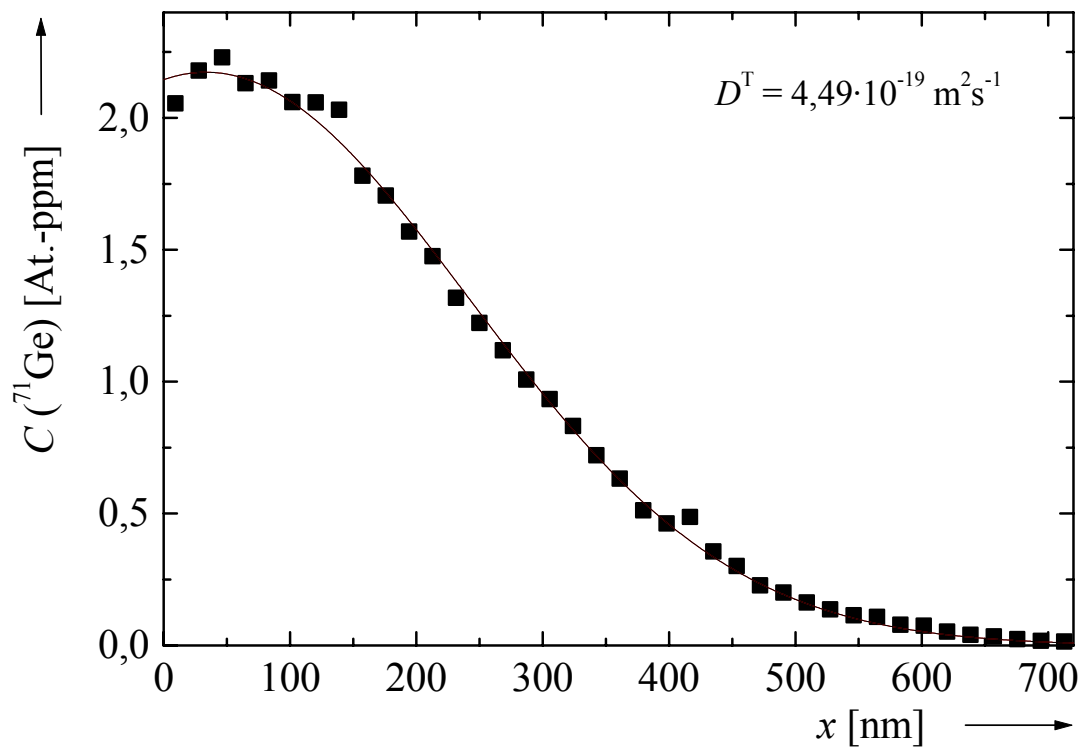


Abbildung 84: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ nach Temperung bei 1046 °C für $13,16\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

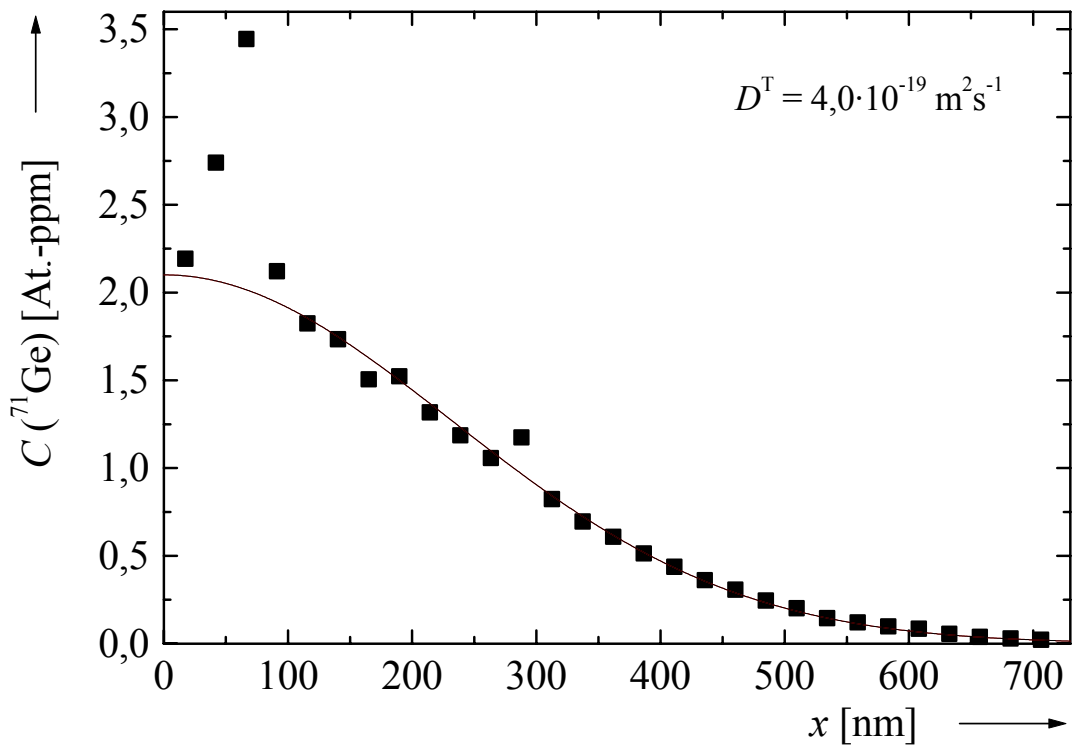


Abbildung 85: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ nach Temperung bei 1045 °C für $17,5\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

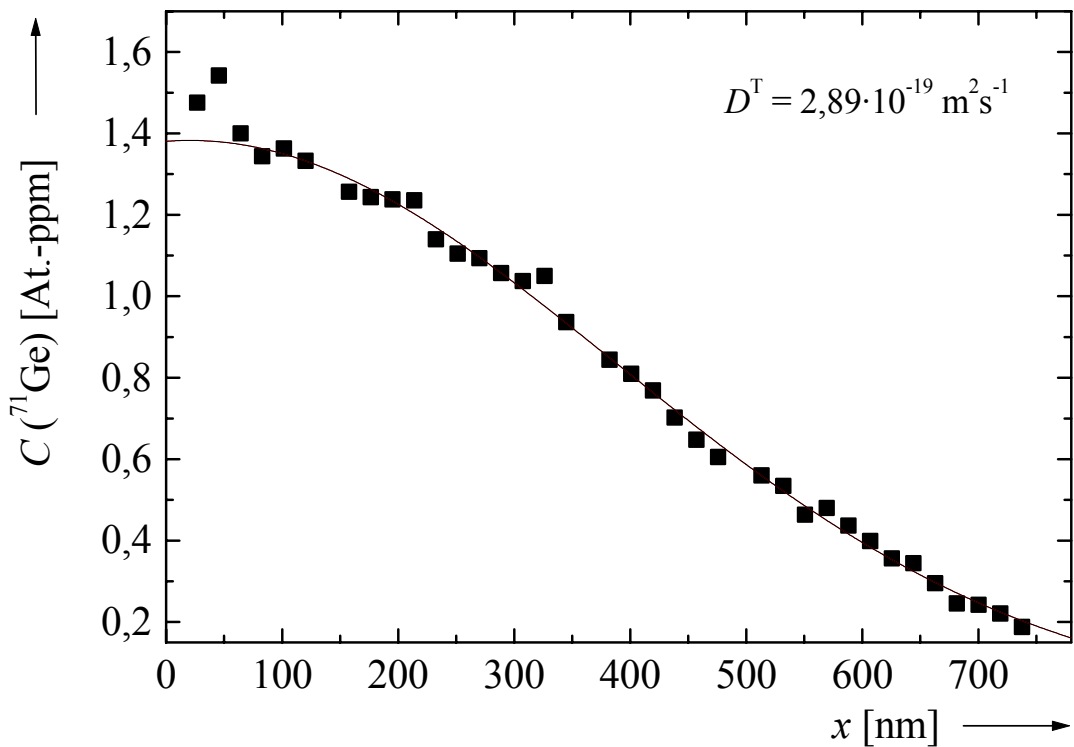


Abbildung 86: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ nach Temperung bei 1038 °C für 64 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

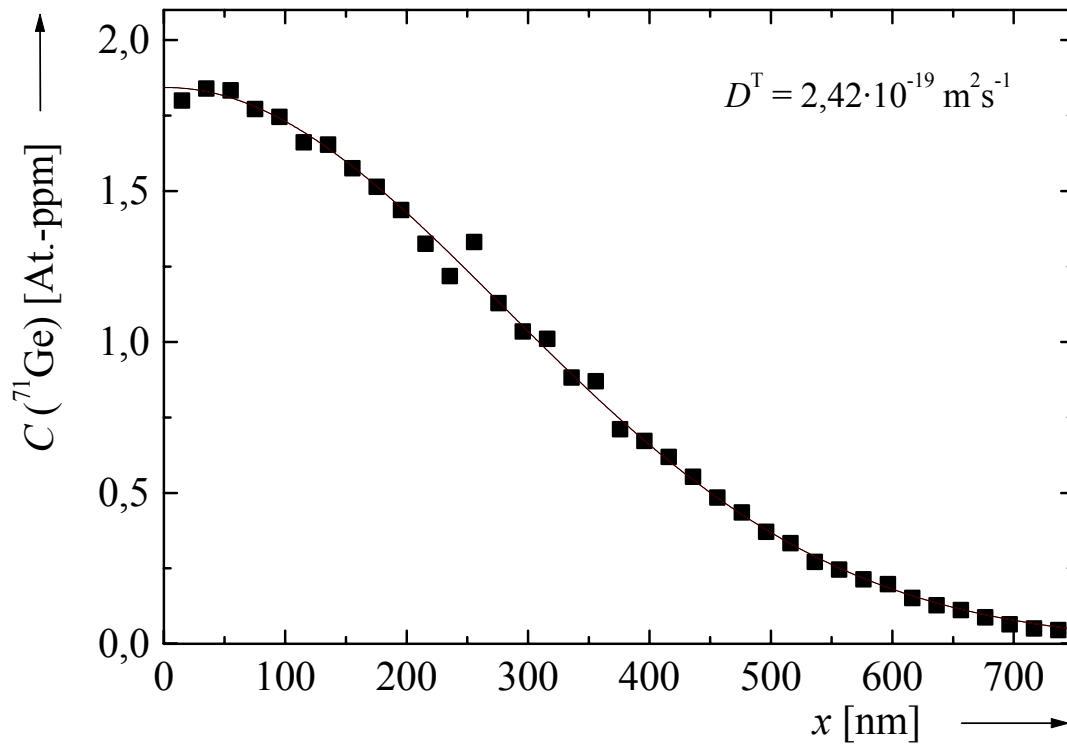


Abbildung 87: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ nach Temperung bei 1029 °C für $43,25\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

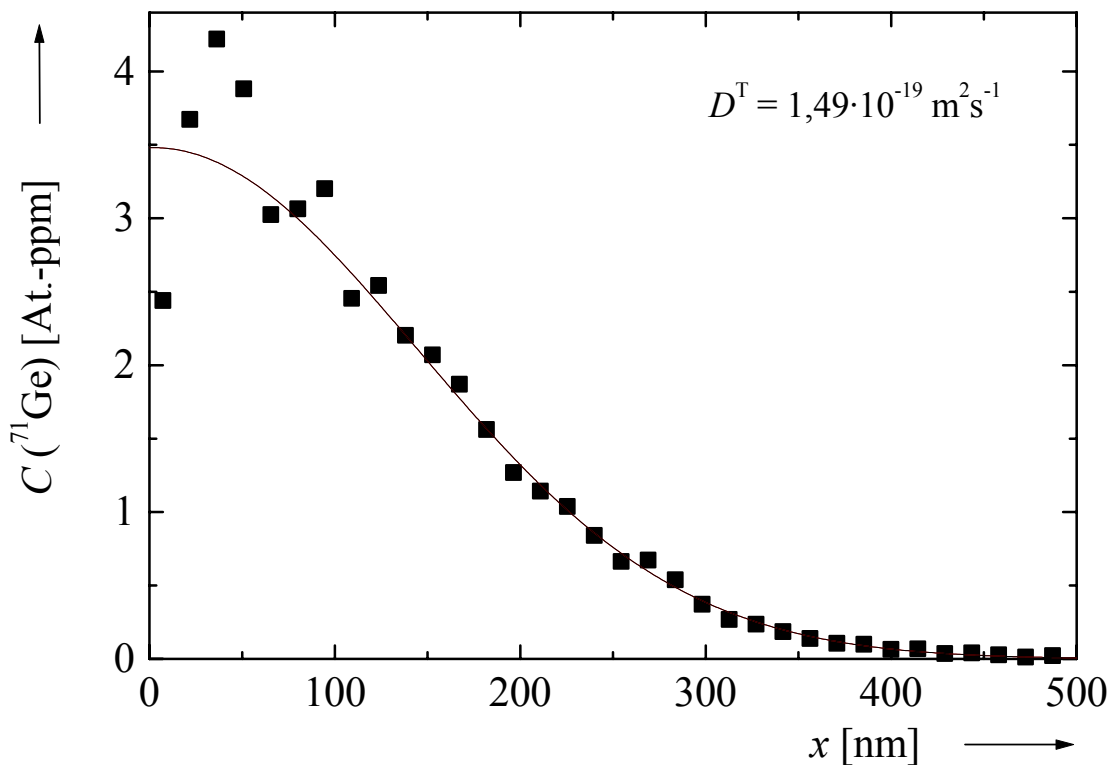


Abbildung 88: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ nach Temperung bei 1013 °C für $17,25\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

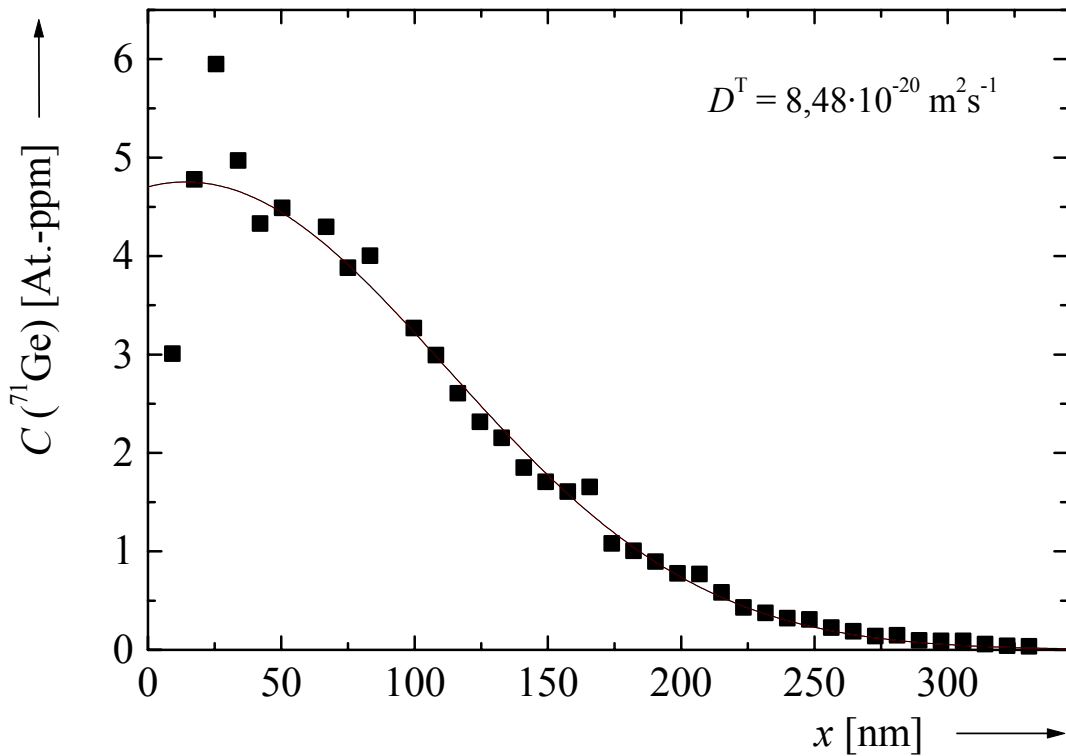


Abbildung 89: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ nach Temperung bei 992 °C für 13 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

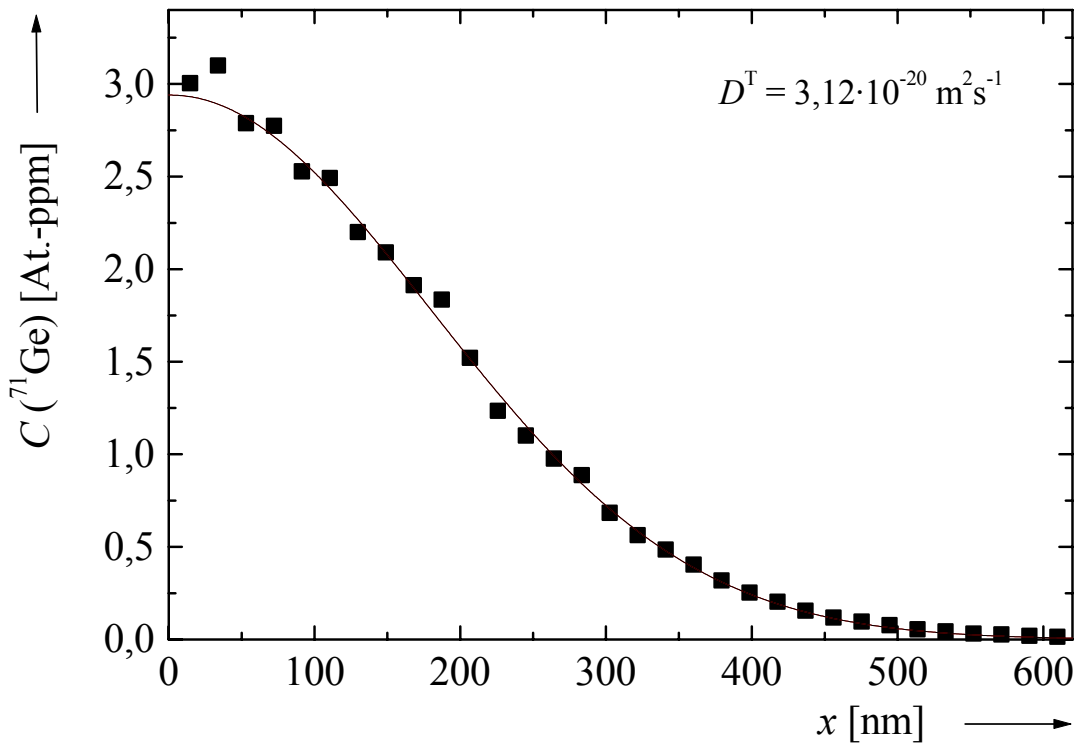


Abbildung 90: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ nach Temperung bei 958 °C für 91 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

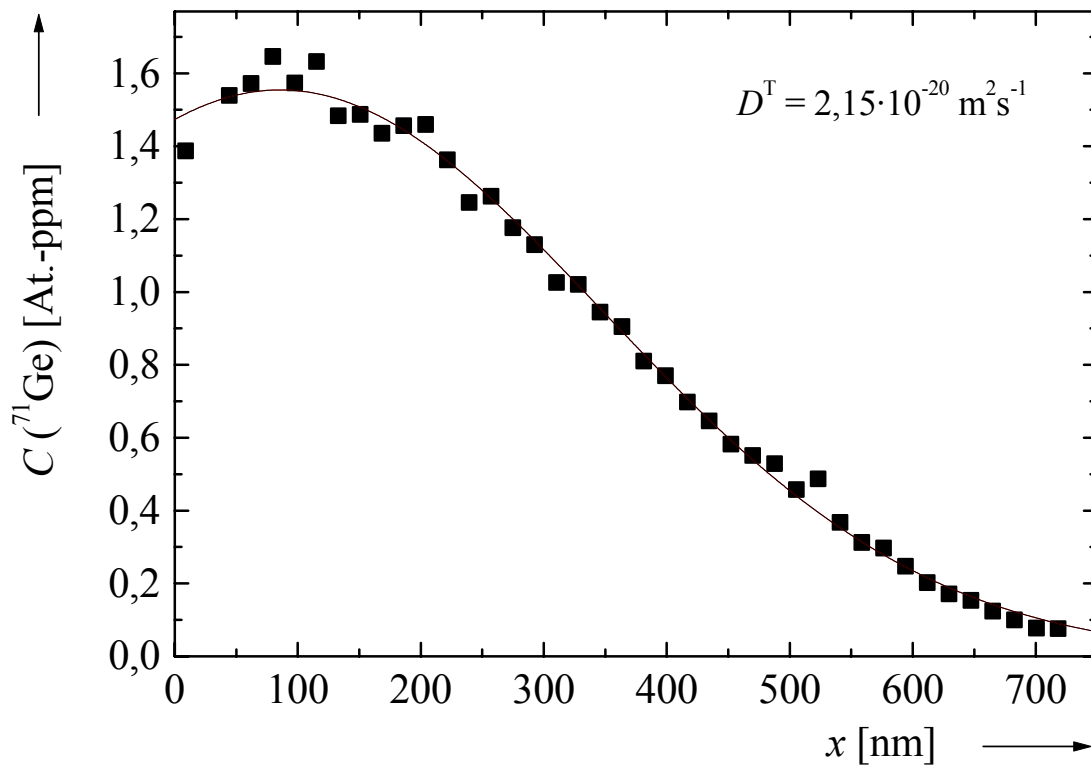


Abbildung 91: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ nach Temperung bei 947 °C für 477 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

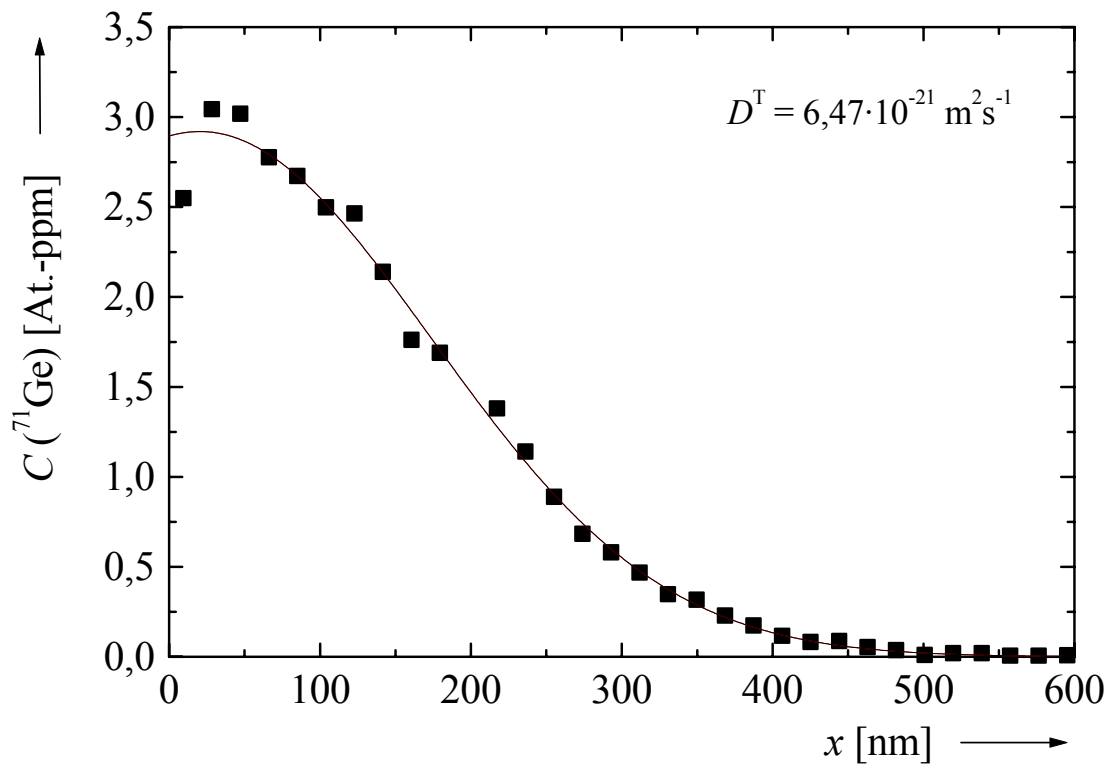


Abbildung 92: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ nach Temperung bei 918 °C für $278,25\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

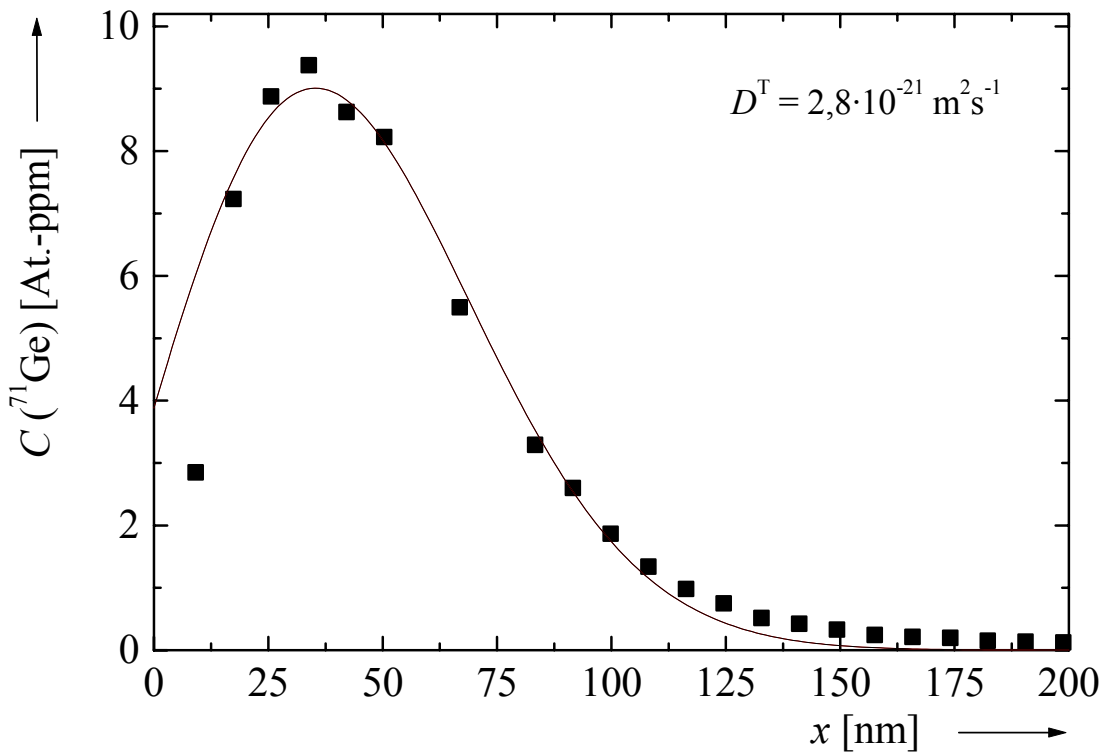


Abbildung 93: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ nach Temperung bei 891 °C für 28 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

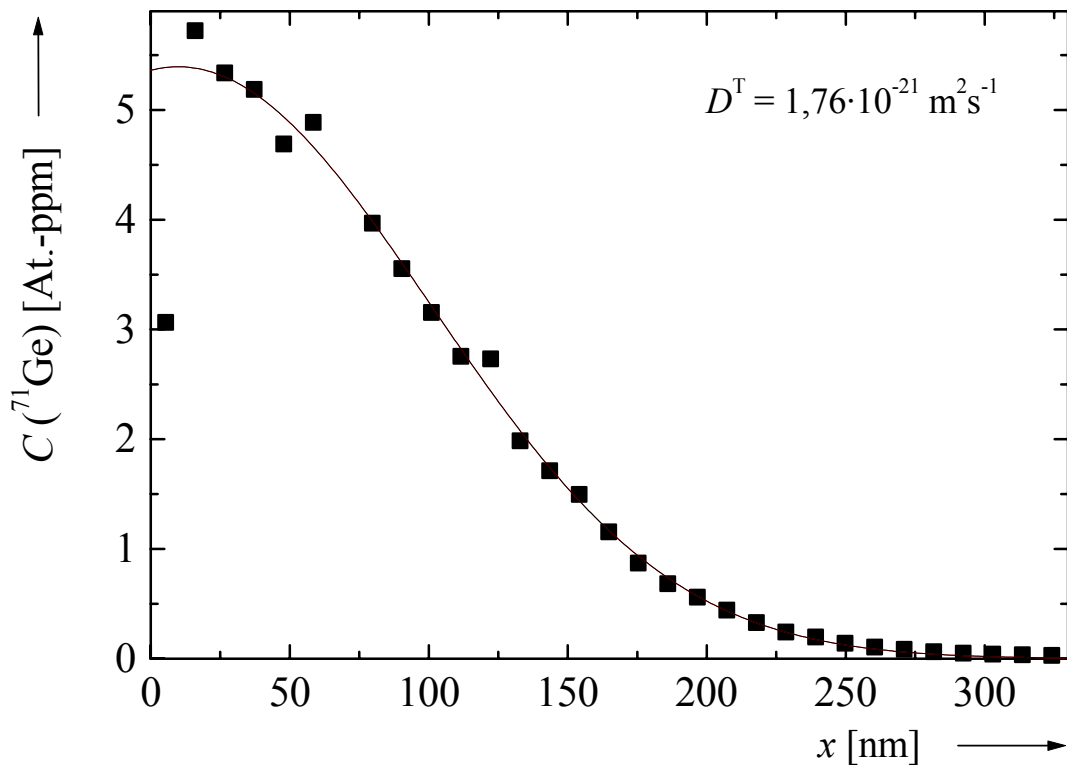


Abbildung 94: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ nach Temperung bei 883 °C für 498,5 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

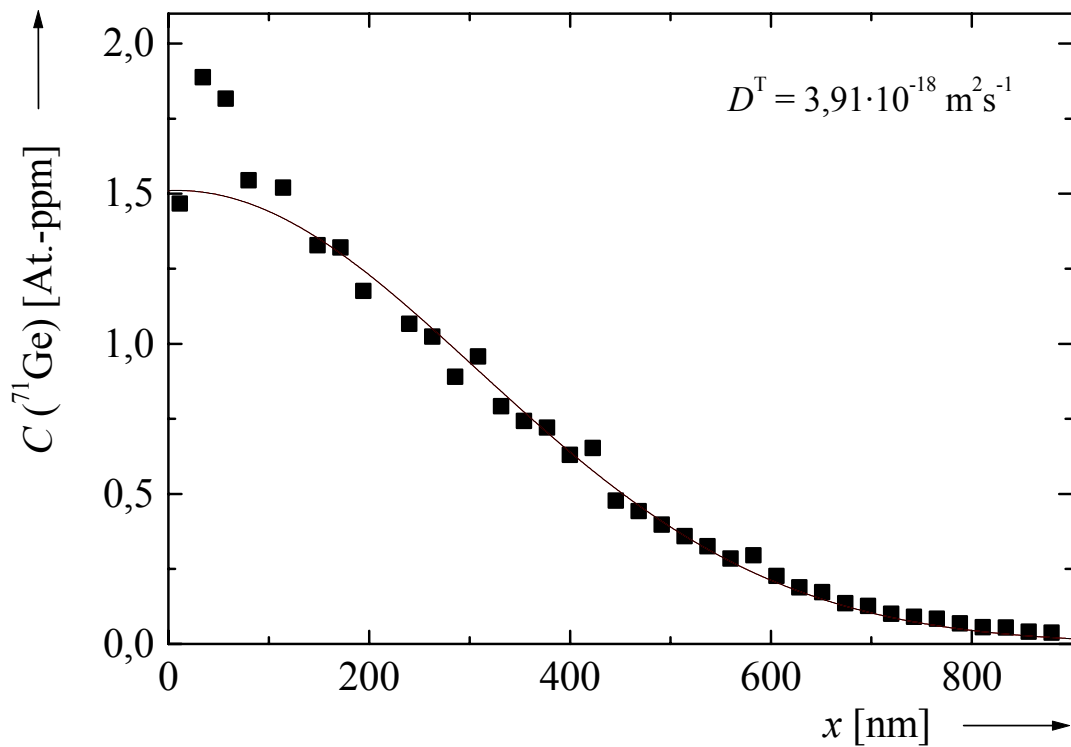


Abbildung 95: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,65}\text{Ge}_{0,35}$ nach Temperung bei 1102 °C für 3 h (\blacksquare). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

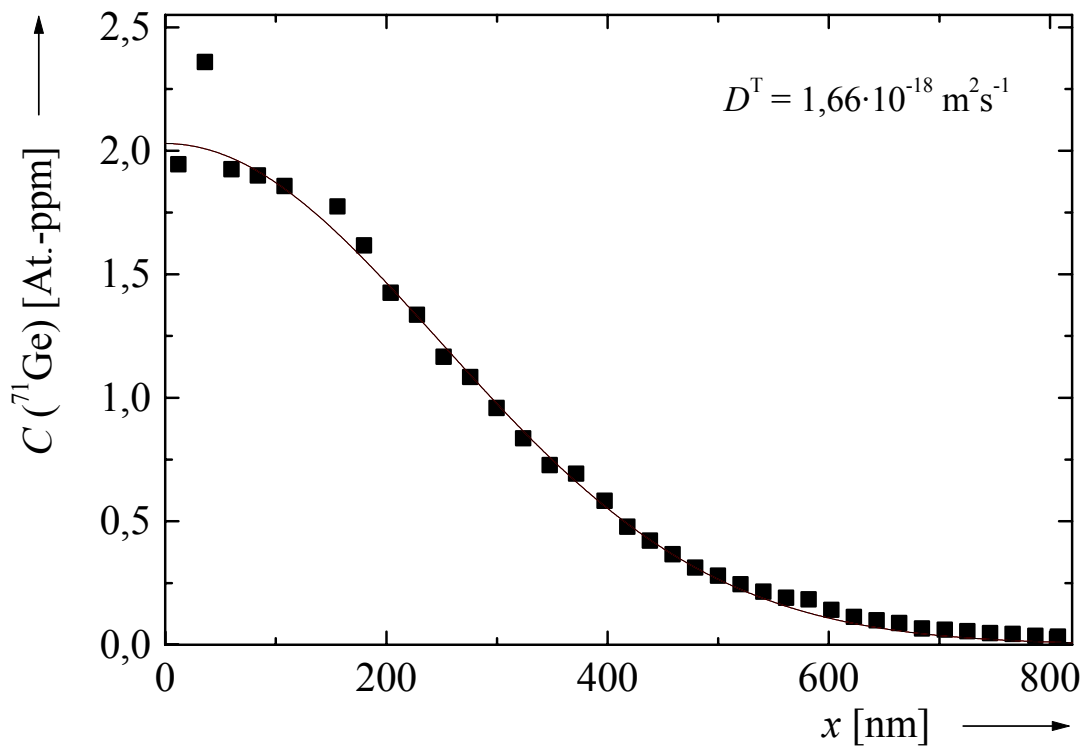


Abbildung 96: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,65}\text{Ge}_{0,35}$ nach Temperung bei 1071 °C für 5 h (\blacksquare). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

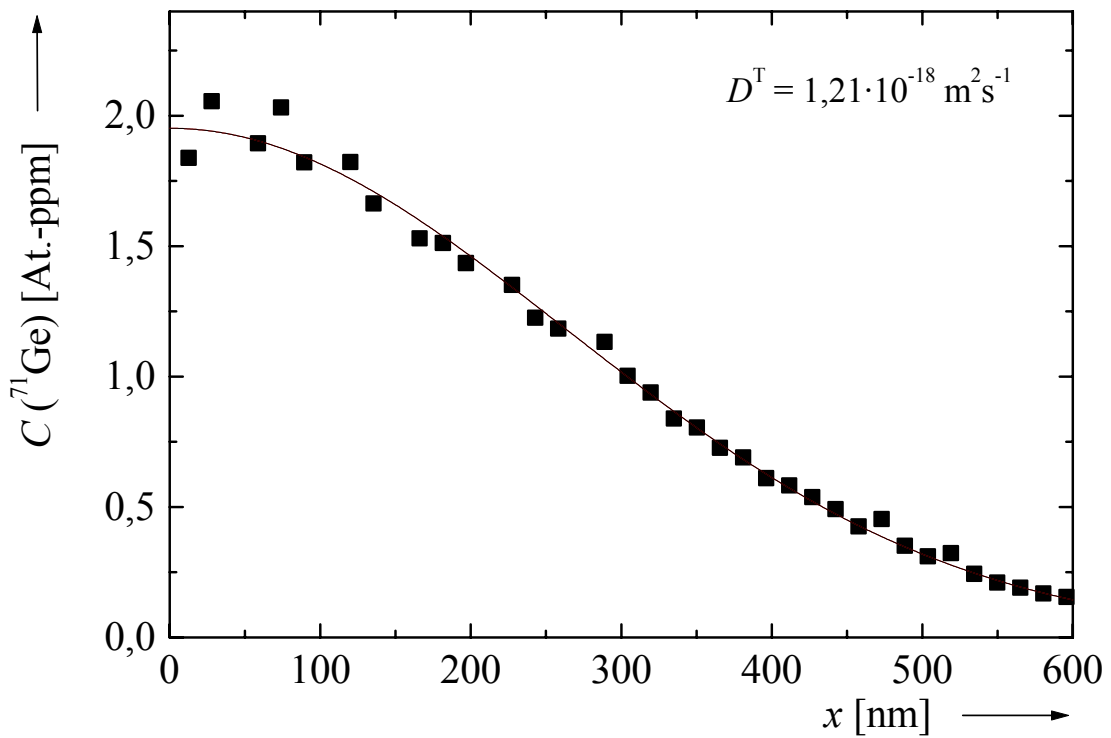


Abbildung 97: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,65}\text{Ge}_{0,35}$ nach Temperung bei 1055 °C für 7 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

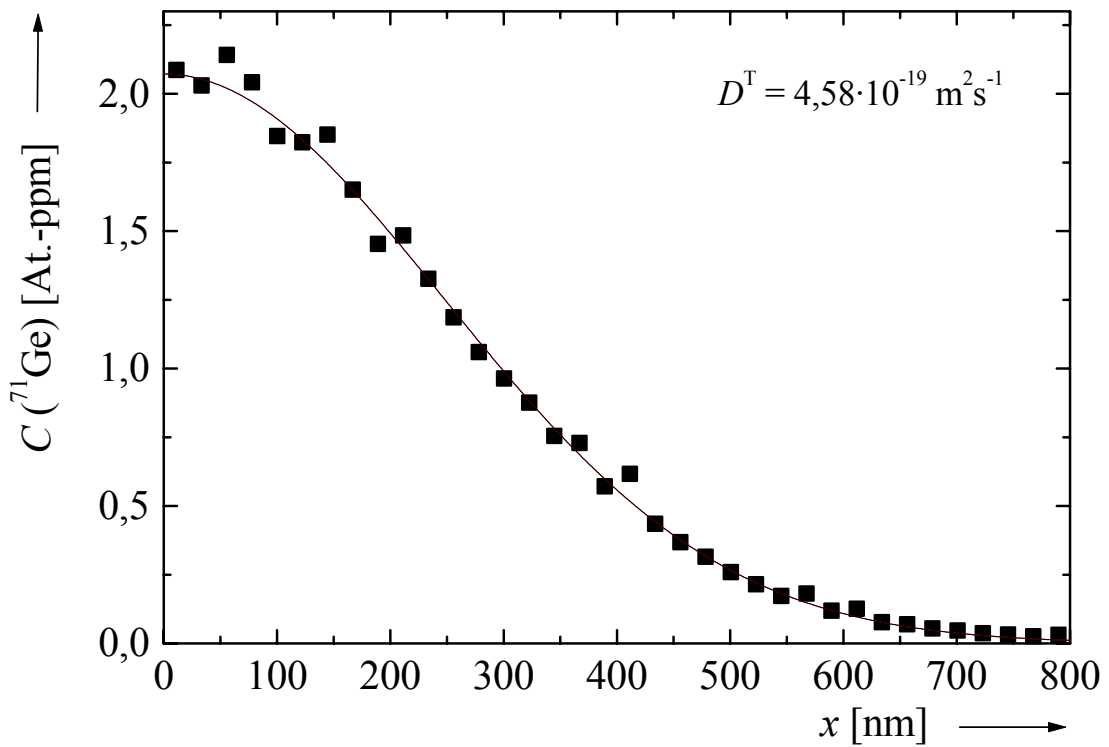


Abbildung 98: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,65}\text{Ge}_{0,35}$ nach Temperung bei 1022 °C für 18 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

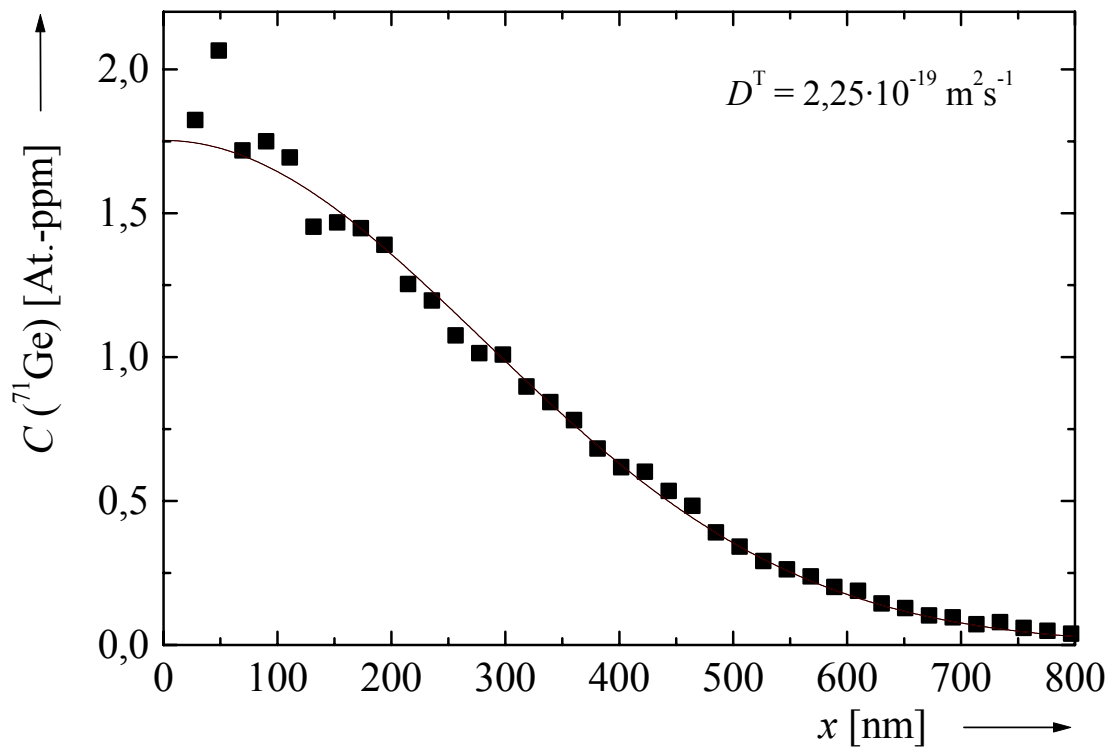


Abbildung 99: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,65}\text{Ge}_{0,35}$ nach Temperung bei 996 °C für $47,25\text{ h}$ (\blacksquare). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

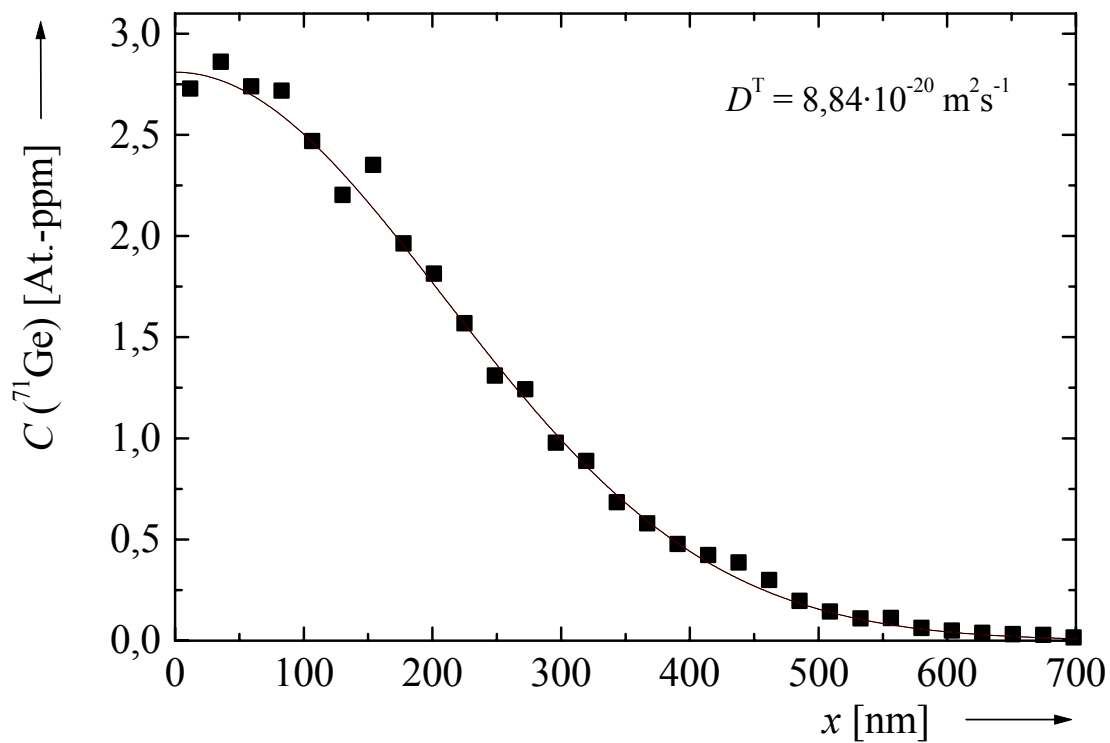


Abbildung 100: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,65}\text{Ge}_{0,35}$ nach Temperung bei 971 °C für 66 h (\blacksquare). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

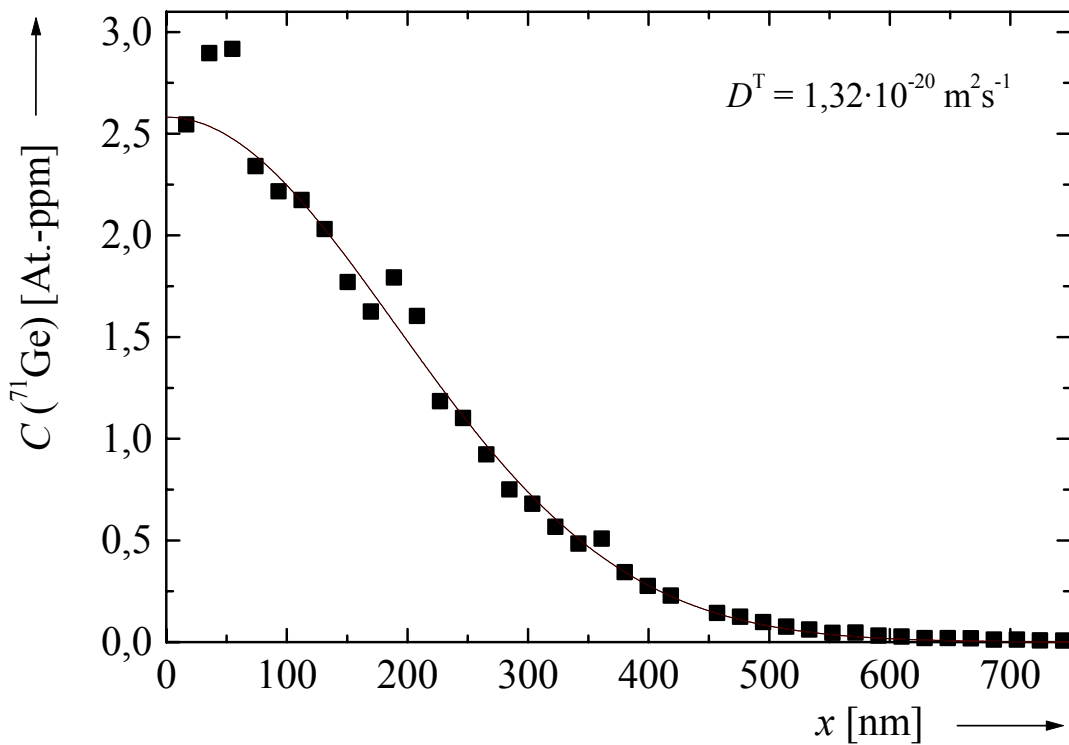


Abbildung 101: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,65}\text{Ge}_{0,35}$ nach Temperung bei $917 \text{ }^\circ\text{C}$ für 478,25 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

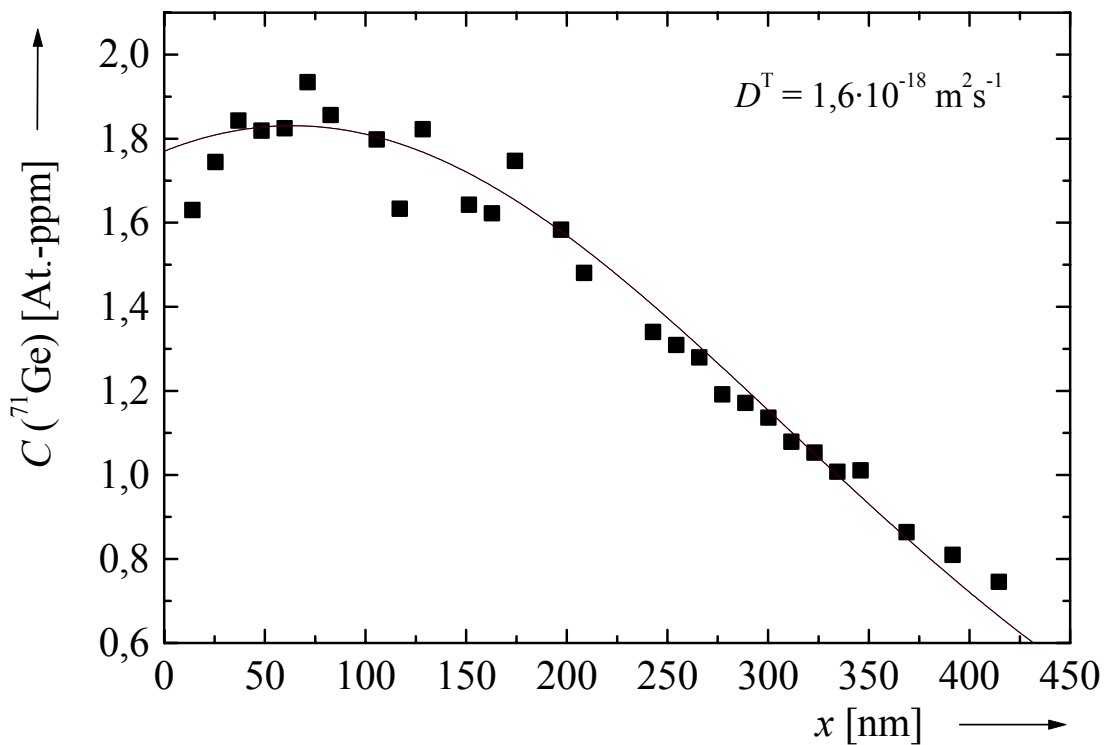


Abbildung 102: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,57}\text{Ge}_{0,43}$ nach Temperung bei $1032 \text{ }^\circ\text{C}$ für 200 min (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

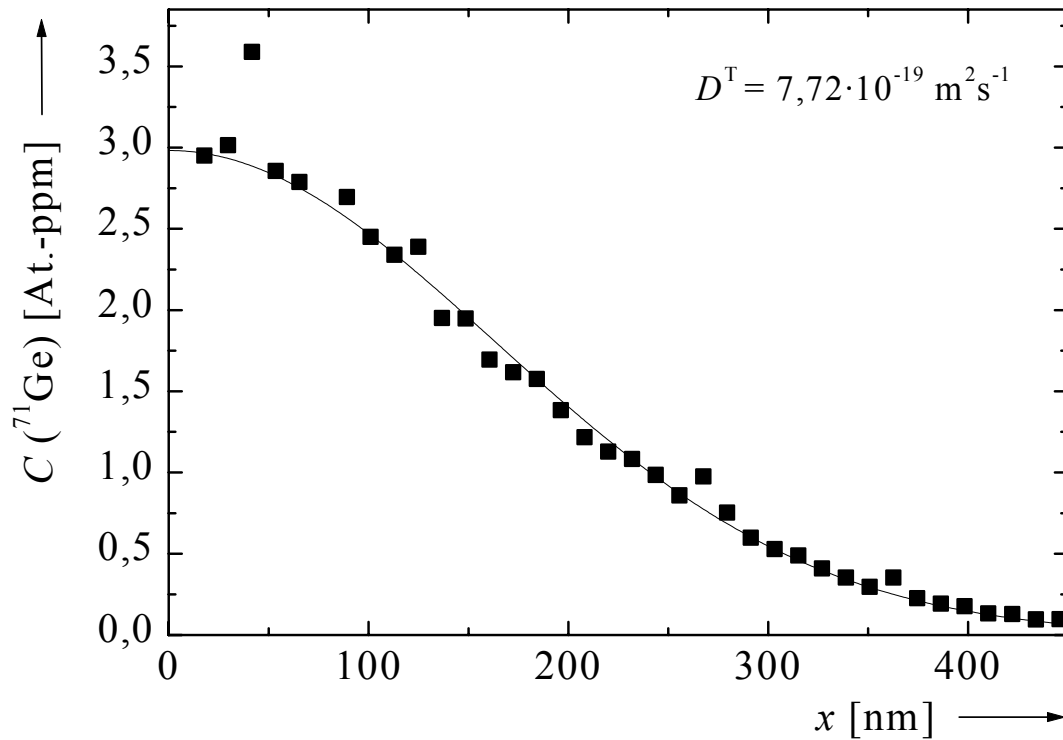


Abbildung 103: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,57}\text{Ge}_{0,43}$ nach Temperung bei 1007 °C für $4,5\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

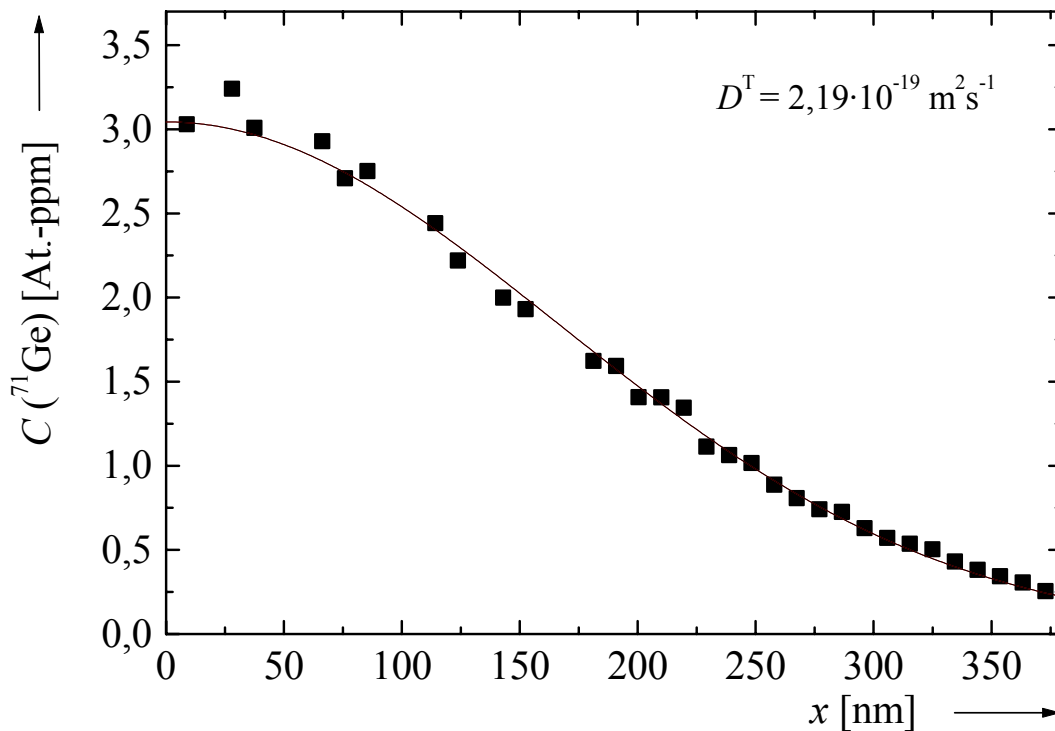


Abbildung 104: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,57}\text{Ge}_{0,43}$ nach Temperung bei 967 °C für $16,75\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

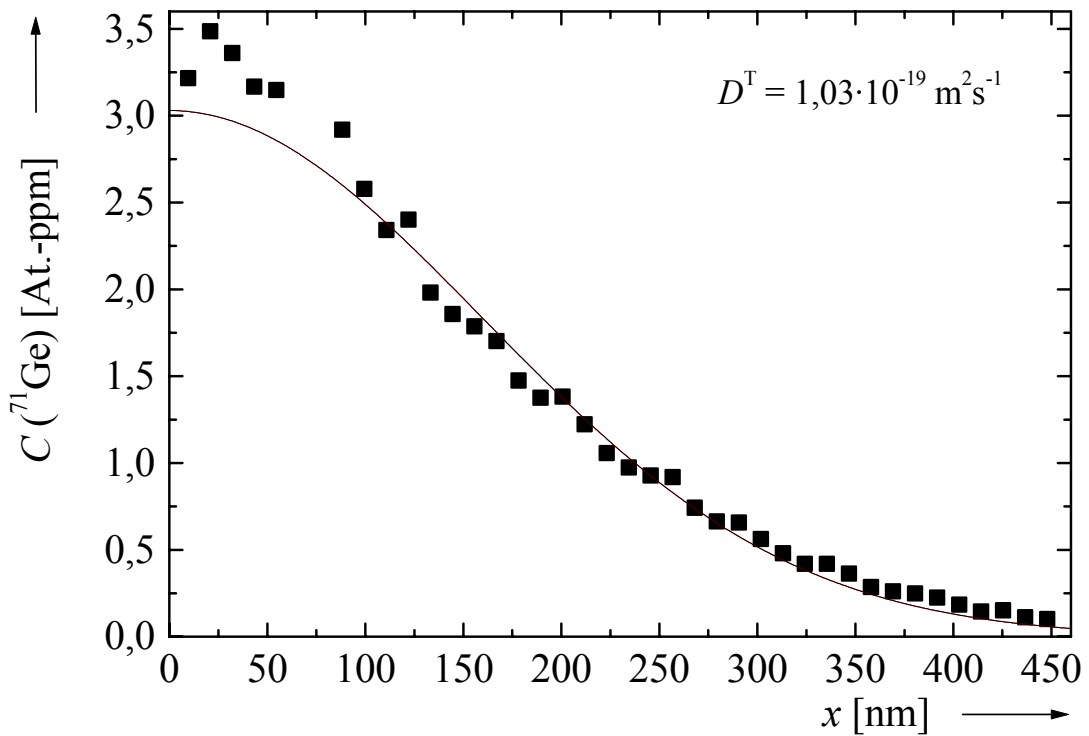


Abbildung 105: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,57}\text{Ge}_{0,43}$ nach Temperung bei 939 °C für $39,5\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

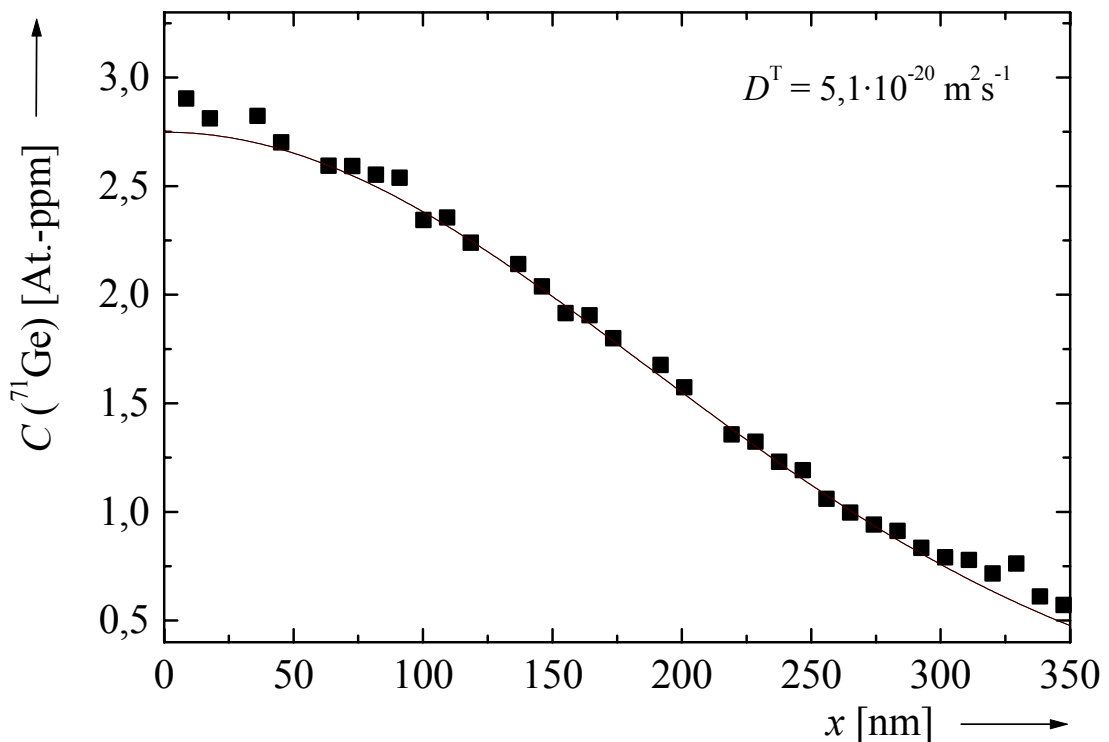


Abbildung 106: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,57}\text{Ge}_{0,43}$ nach Temperung bei 918 °C für 88 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

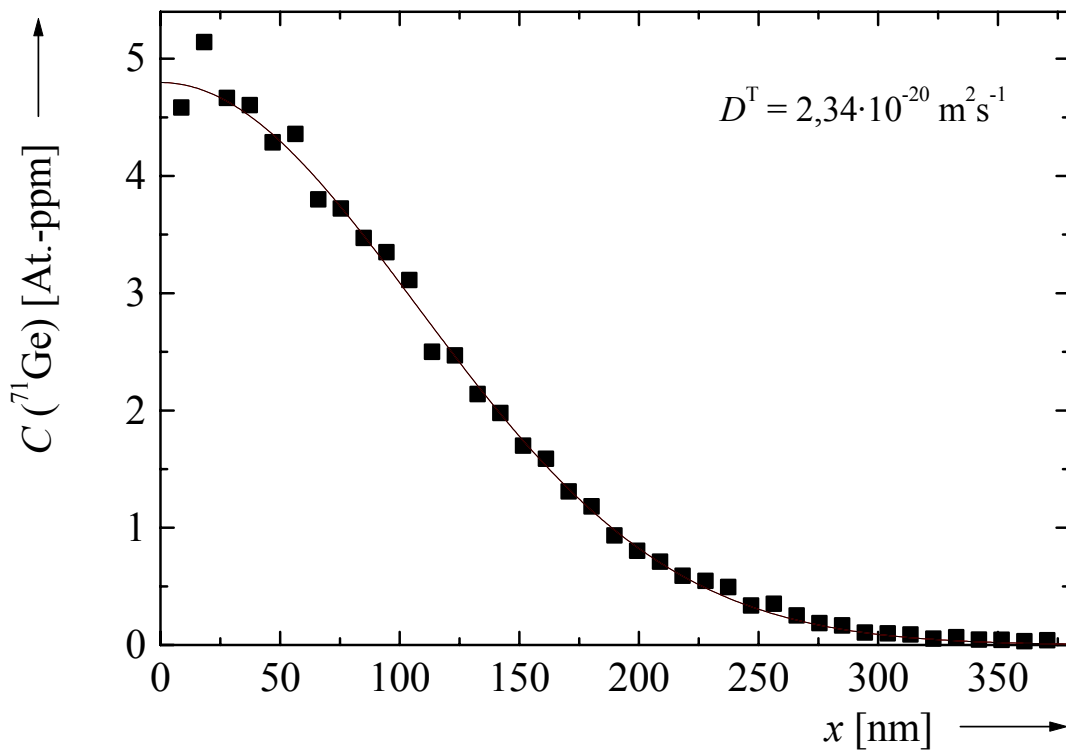


Abbildung 107: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,57}\text{Ge}_{0,43}$ nach Temperung bei 894 °C für $64,5\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

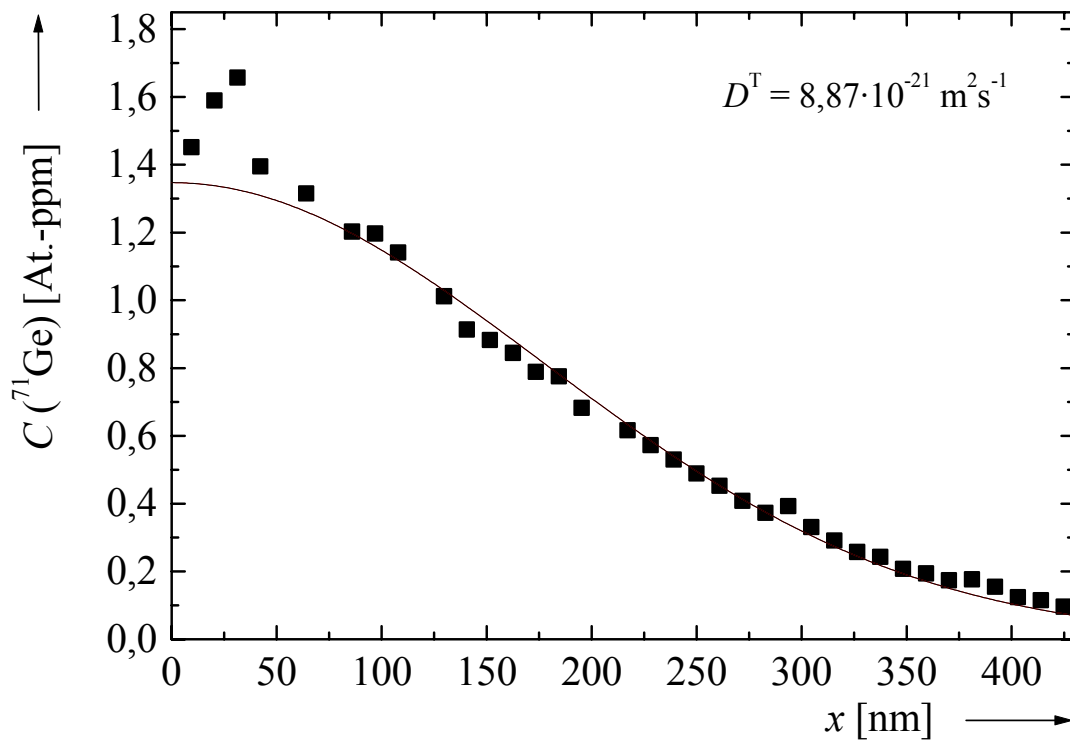


Abbildung 108: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,57}\text{Ge}_{0,43}$ nach Temperung bei 865 °C für 450 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

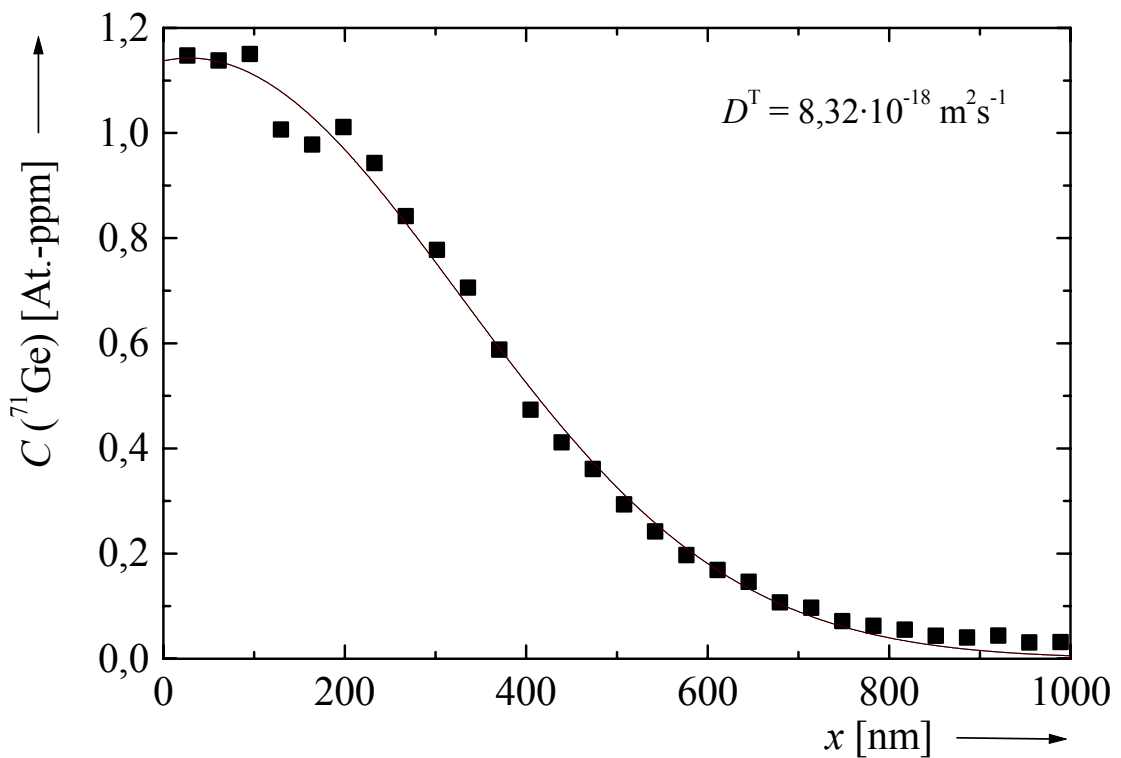


Abbildung 109: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$ nach Temperung bei 1066 °C für 1,5 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

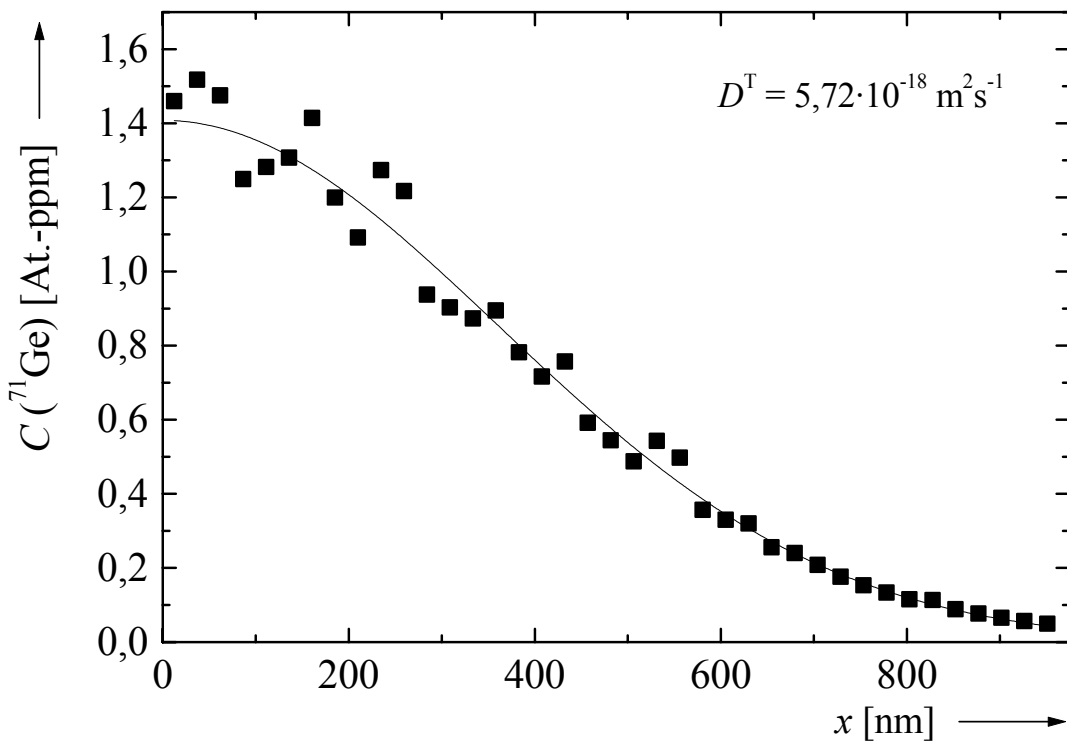


Abbildung 110: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$ nach Temperung bei 1054 °C für 3 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

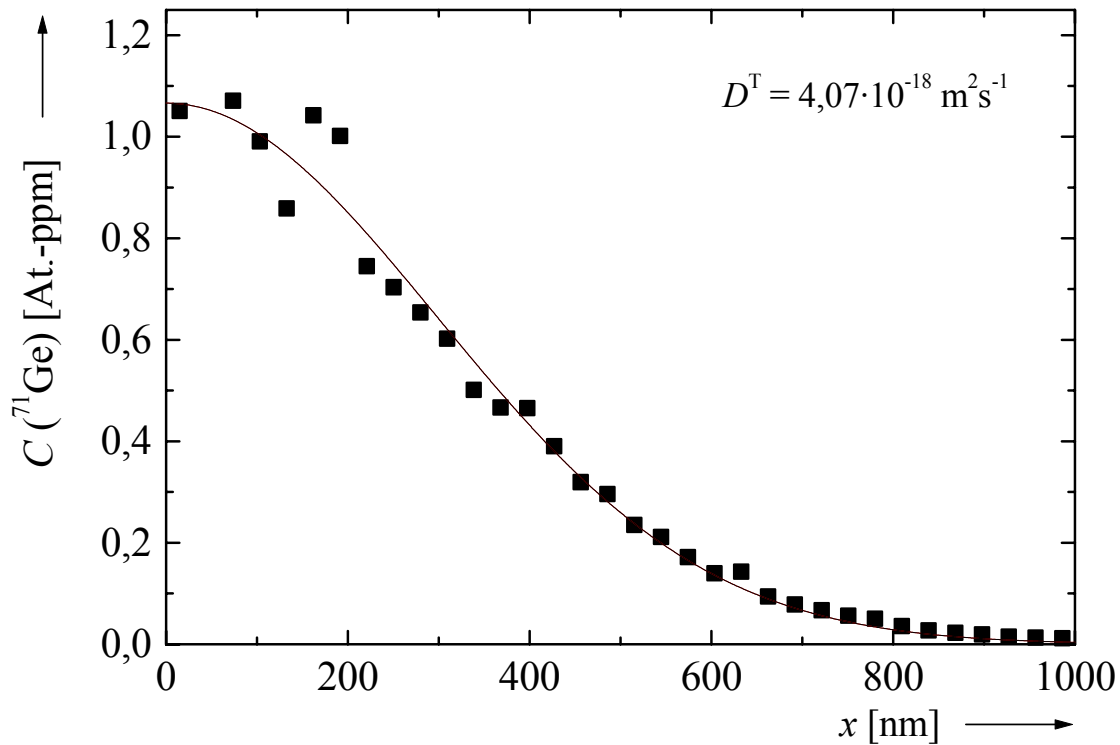


Abbildung 111: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$ nach Temperung bei 1044 °C für 3 h (\blacksquare). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

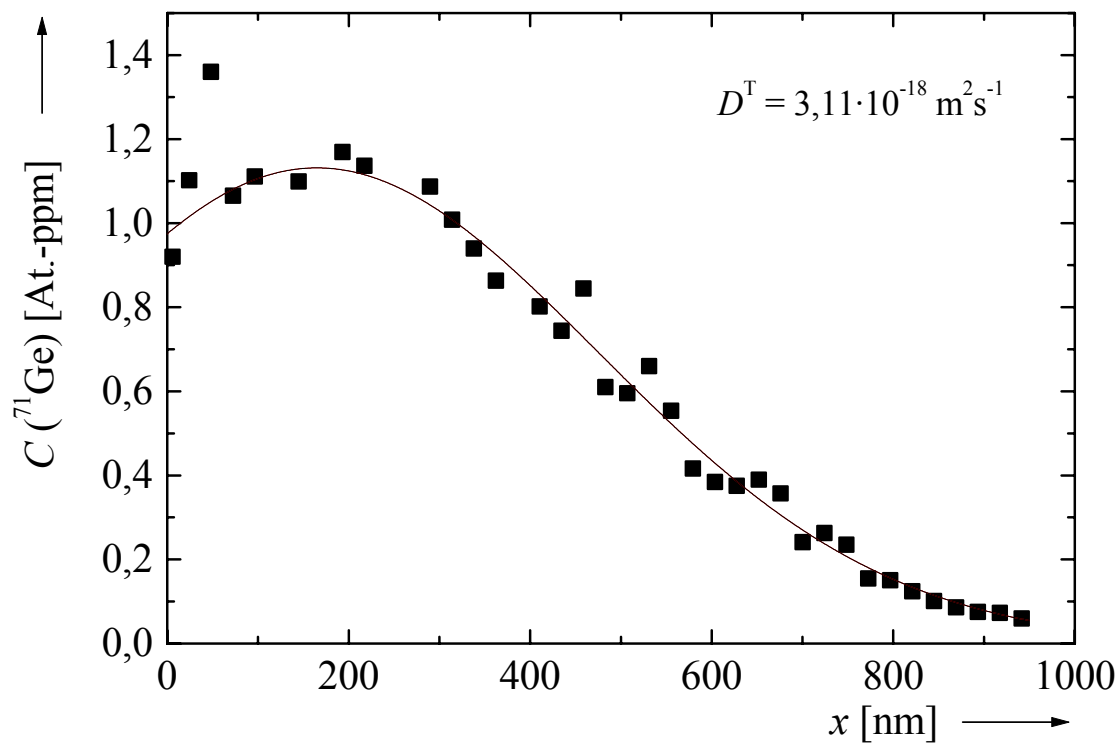


Abbildung 112: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$ nach Temperung bei 1023 °C für $5,25\text{ h}$ (\blacksquare). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

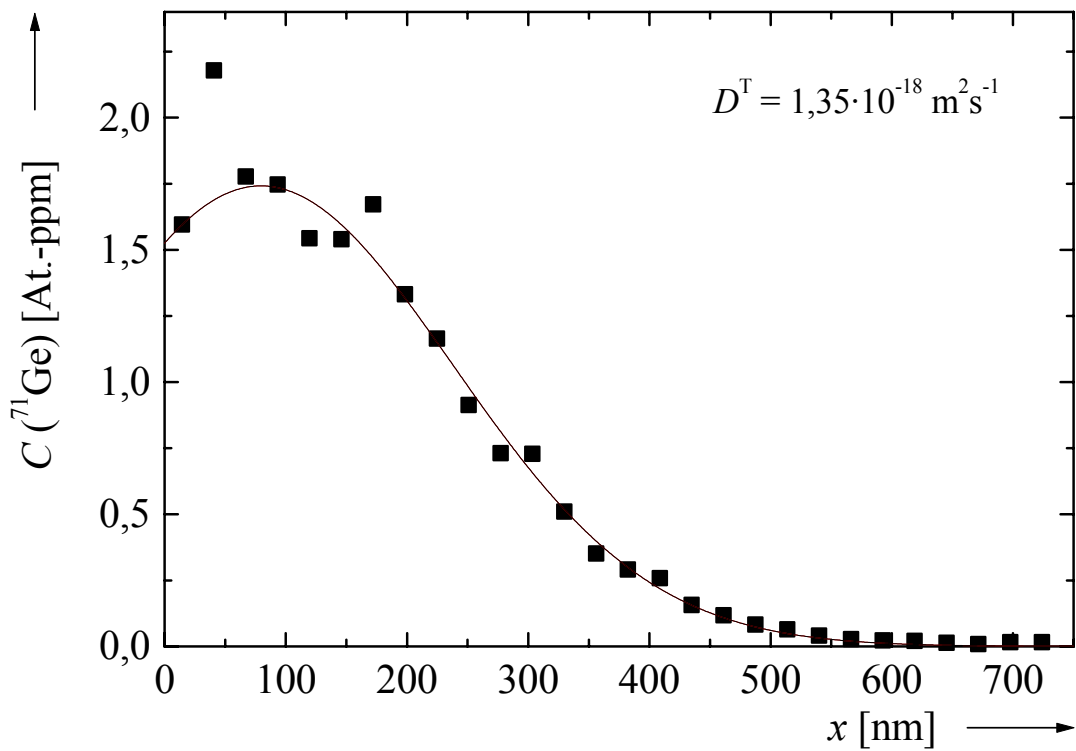


Abbildung 113: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$ nach Temperung bei 1003 °C für $3,25\text{ h}$ (\blacksquare). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt ($—$).

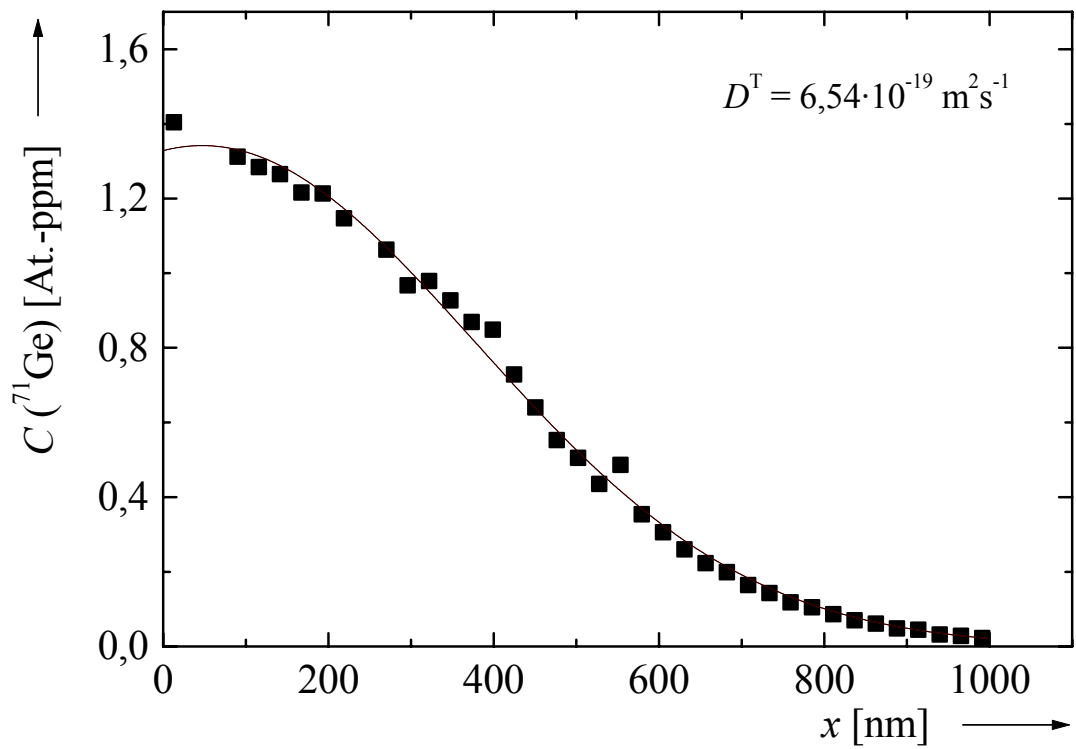


Abbildung 114: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$ nach Temperung bei 978 °C für $23,5\text{ h}$ (\blacksquare). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt ($—$).

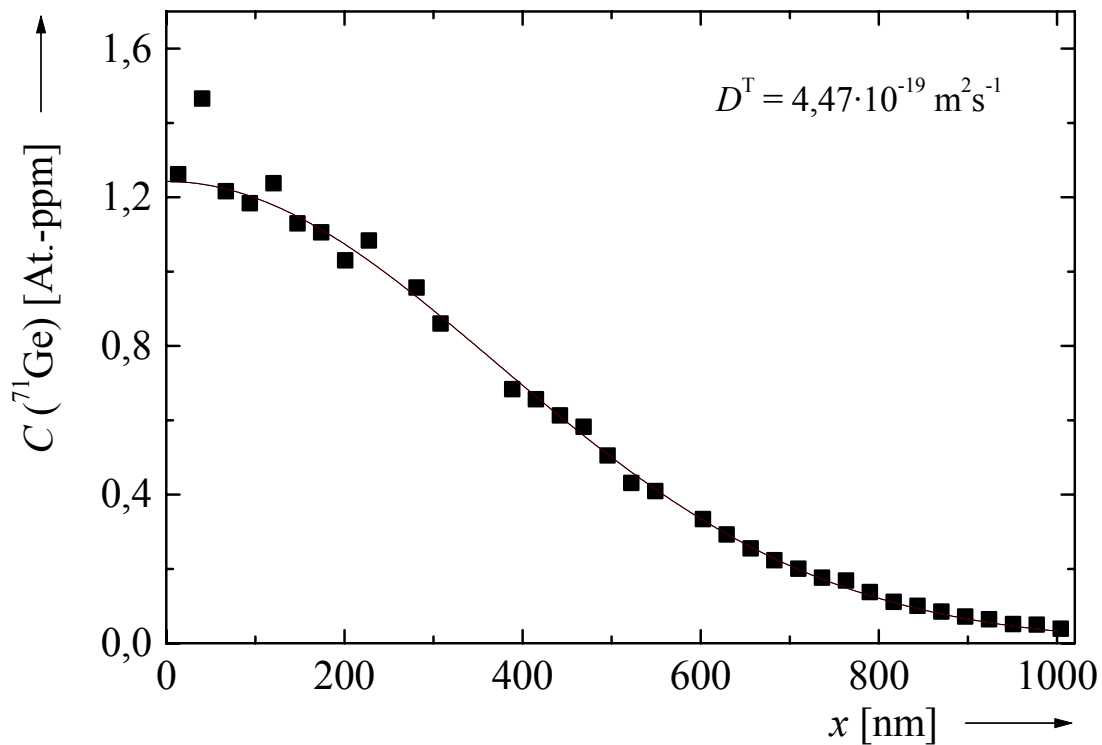


Abbildung 115: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$ nach Temperung bei 964°C für $40,75 \text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

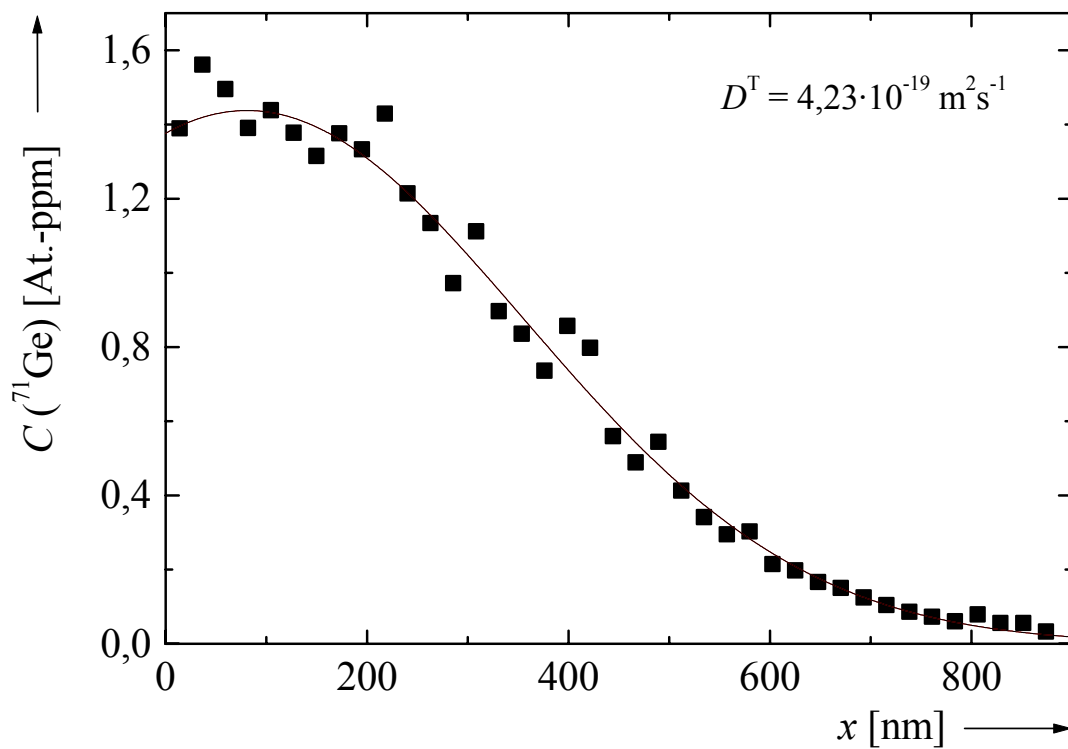


Abbildung 116: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$ nach Temperung bei 960°C für $33,5 \text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

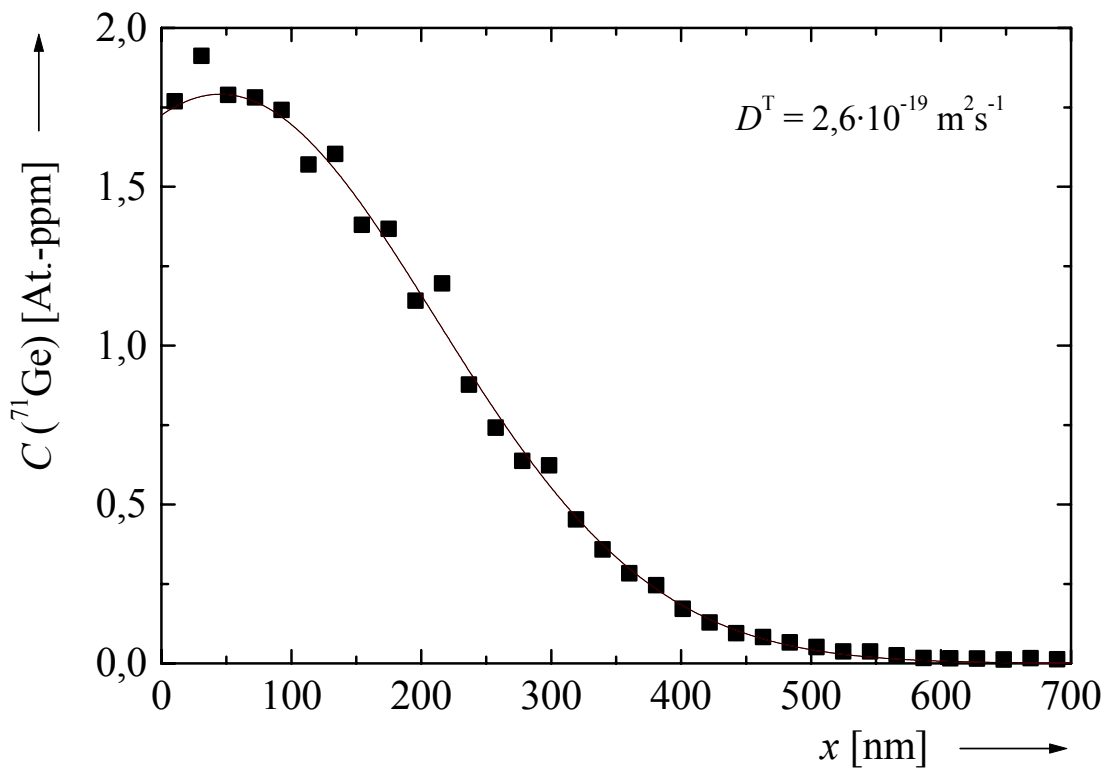


Abbildung 117: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$ nach Temperung bei 945 °C für $19,75\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

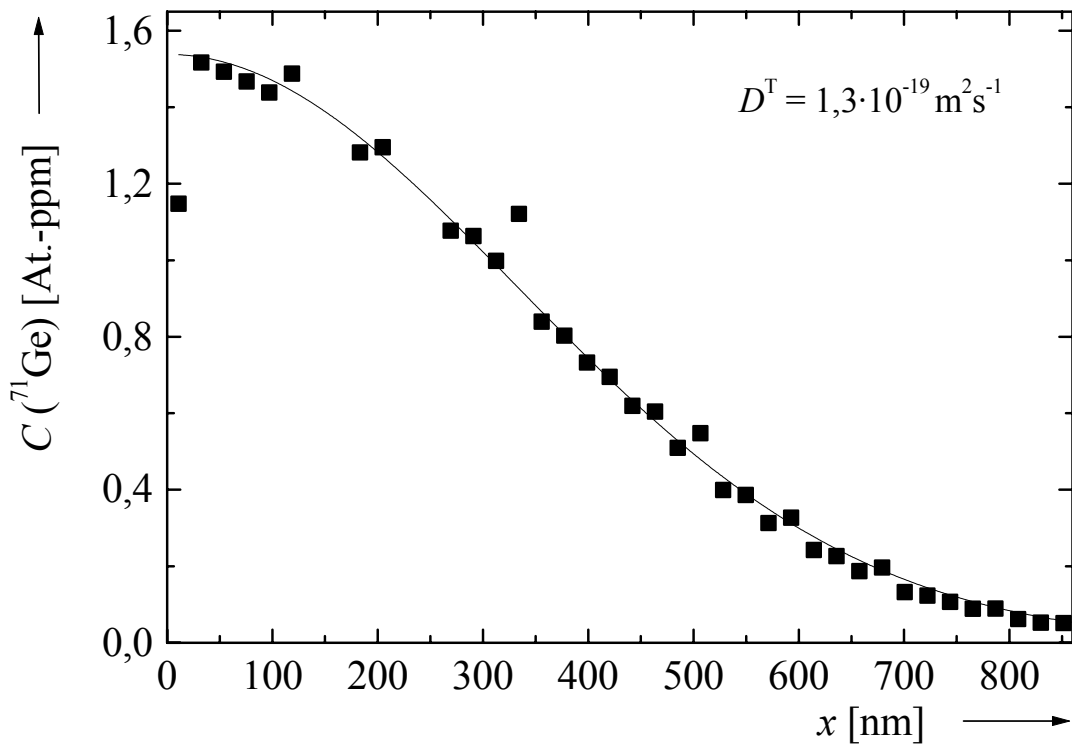


Abbildung 118: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,57}\text{Ge}_{0,43}$ nach Temperung bei 922 °C für $136,5\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

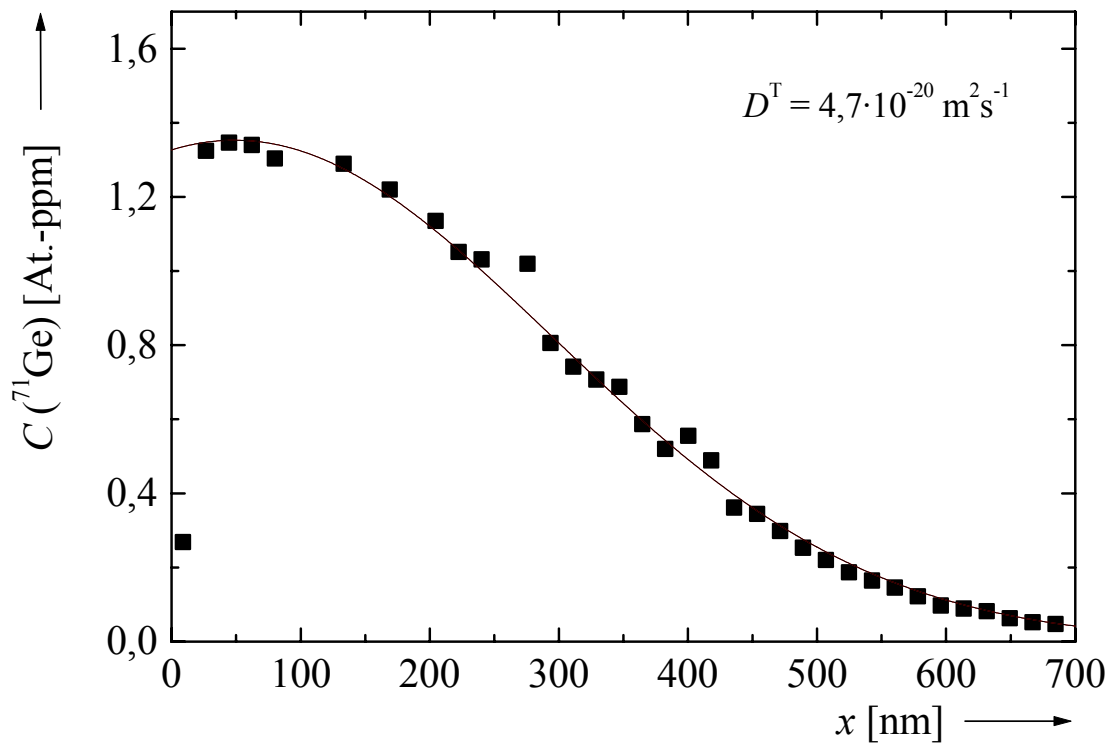


Abbildung 119: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$ nach Temperung bei $893 \text{ }^\circ\text{C}$ für $205,5 \text{ h}$ (\blacksquare). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

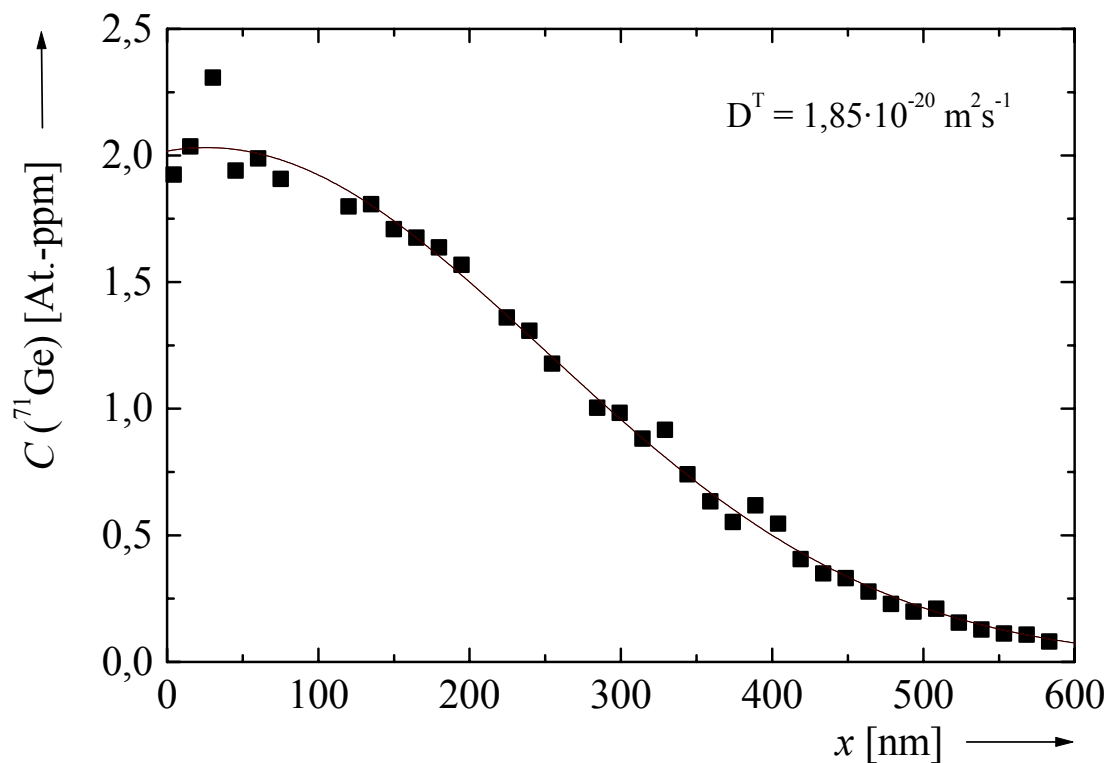


Abbildung 120: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$ nach Temperung bei $865 \text{ }^\circ\text{C}$ für 450 h (\blacksquare). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

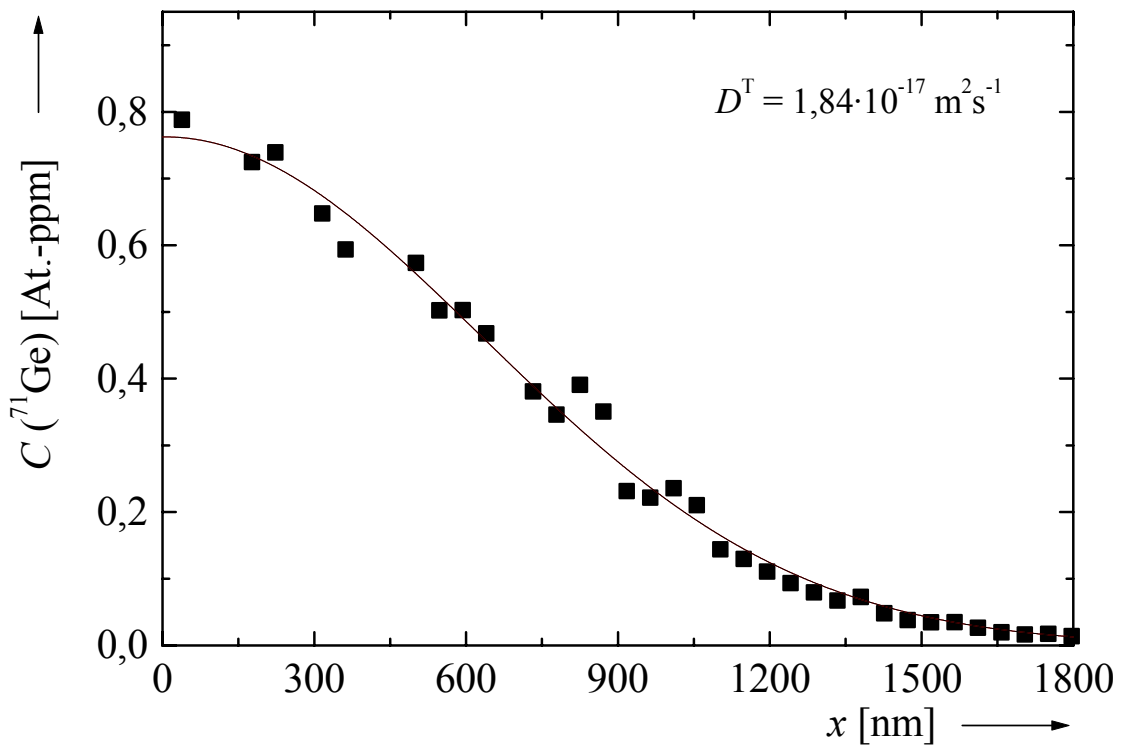


Abbildung 121: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,35}\text{Ge}_{0,65}$ nach Temperung bei 1000 °C für $2,75\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

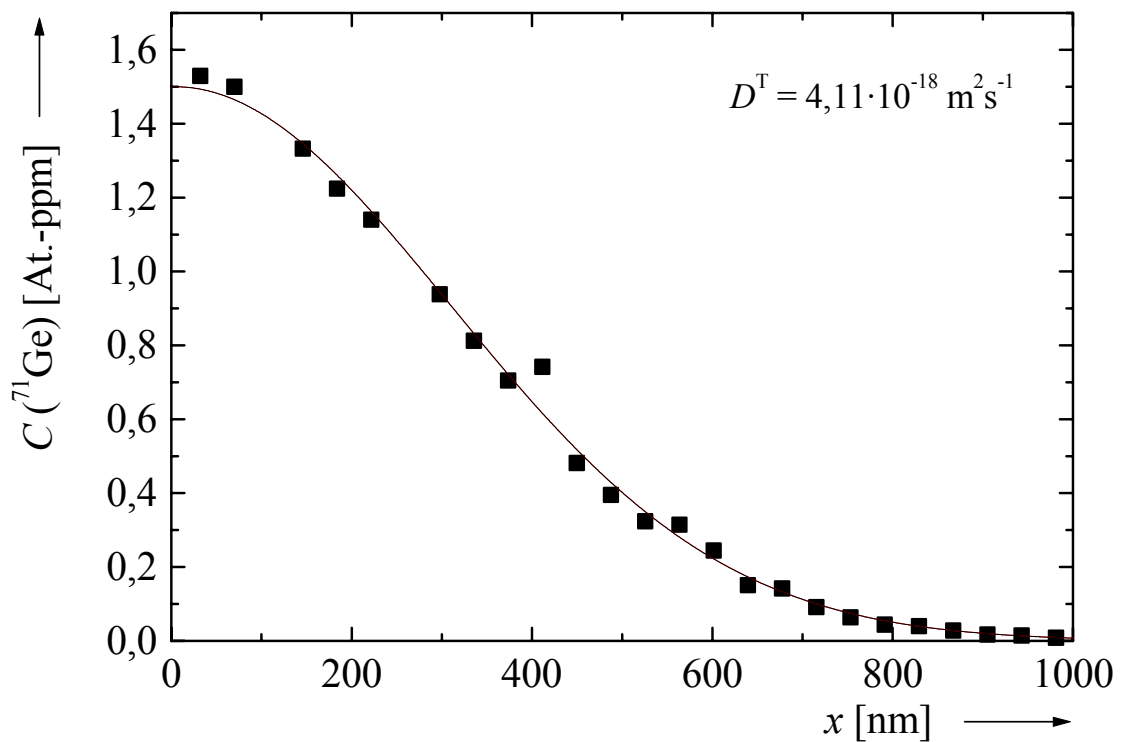


Abbildung 122: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,35}\text{Ge}_{0,65}$ nach Temperung bei 946 °C für 3 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

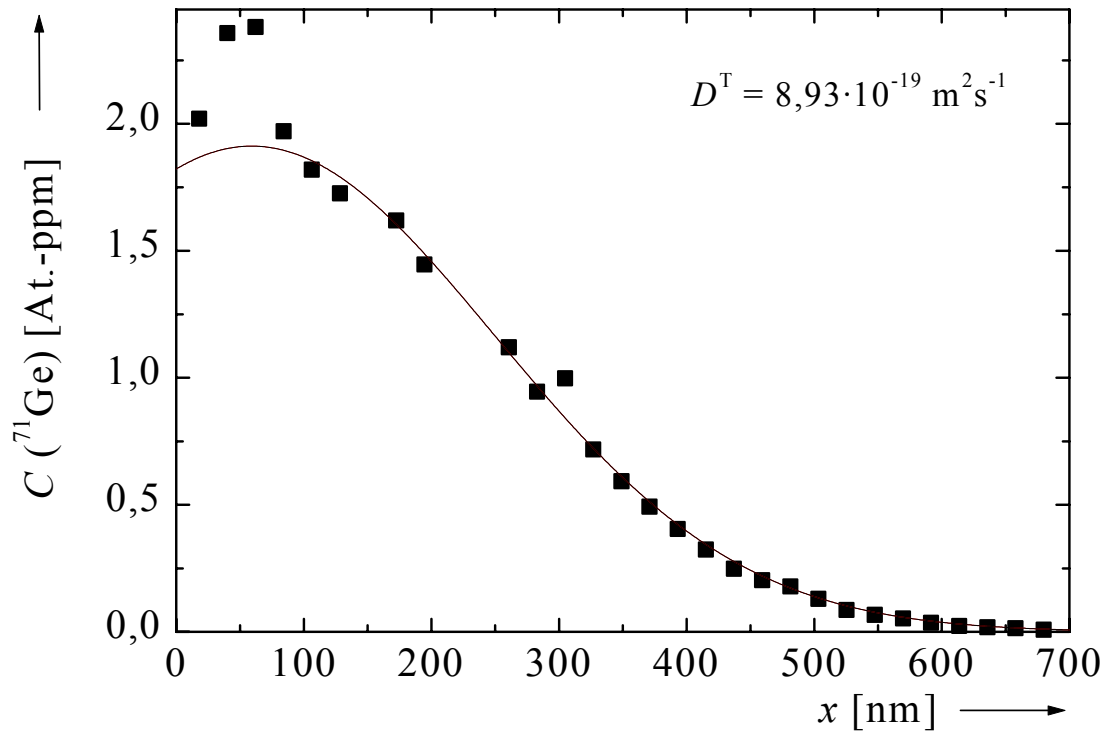


Abbildung 123: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,35}\text{Ge}_{0,65}$ nach Temperung bei 897 °C für 6 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

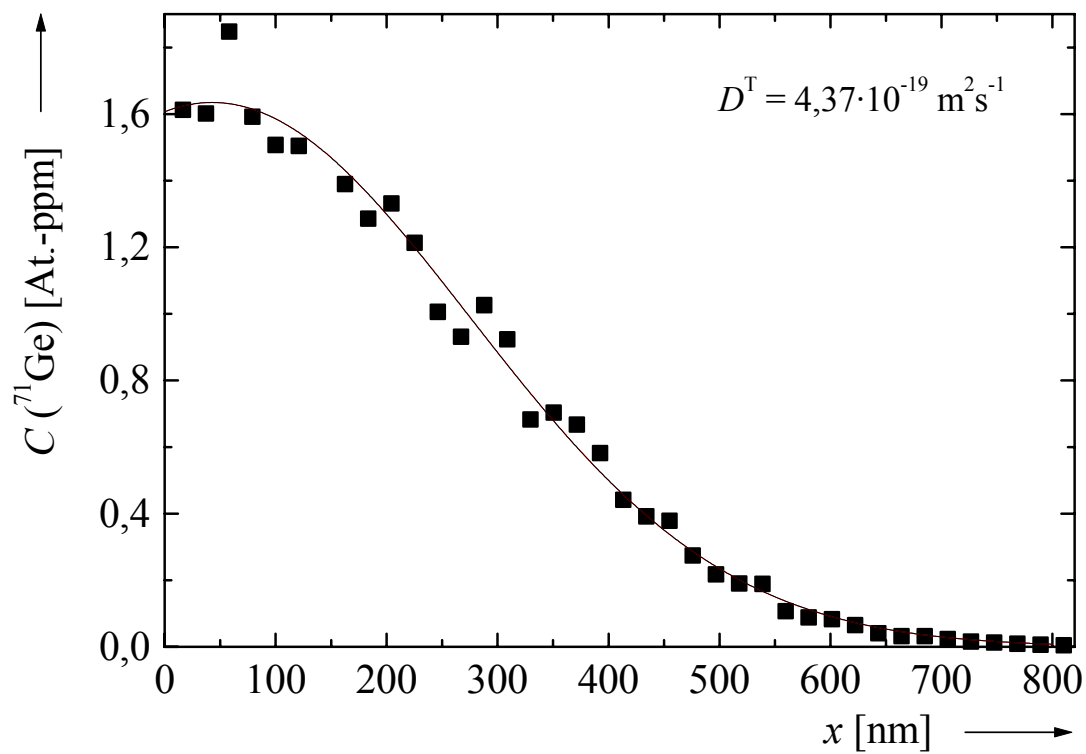


Abbildung 124: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,35}\text{Ge}_{0,65}$ nach Temperung bei 876 °C für 21 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

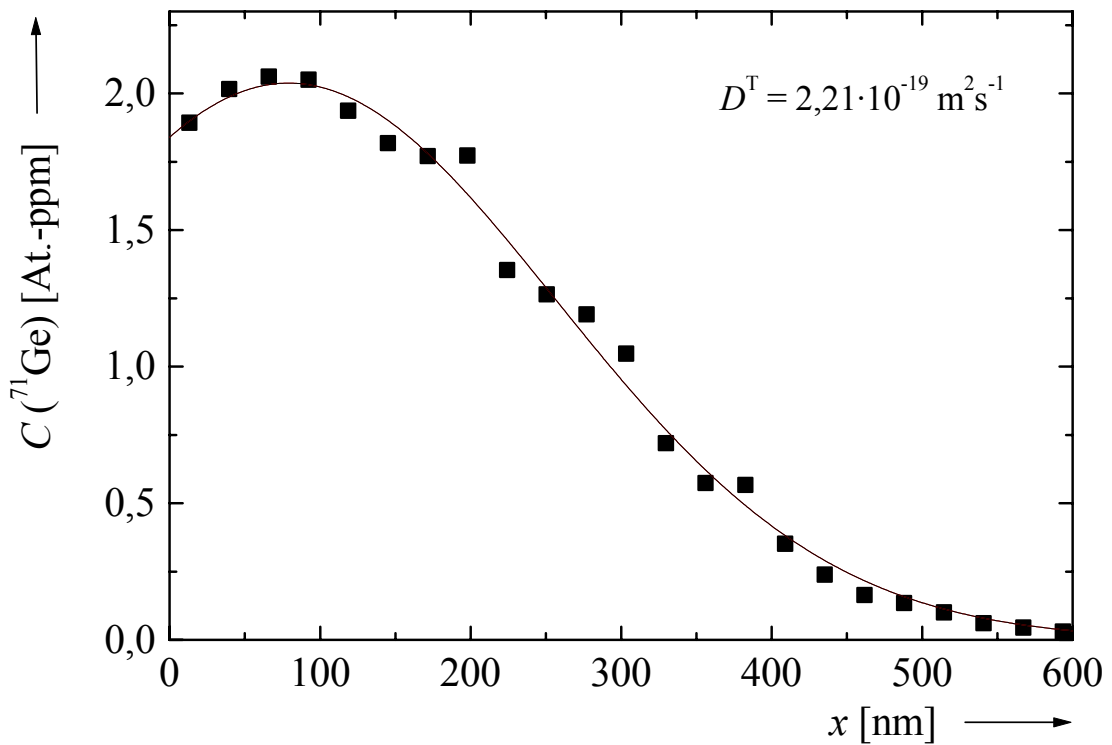


Abbildung 125: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,35}\text{Ge}_{0,65}$ nach Temperung bei 859 °C für $22,5\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

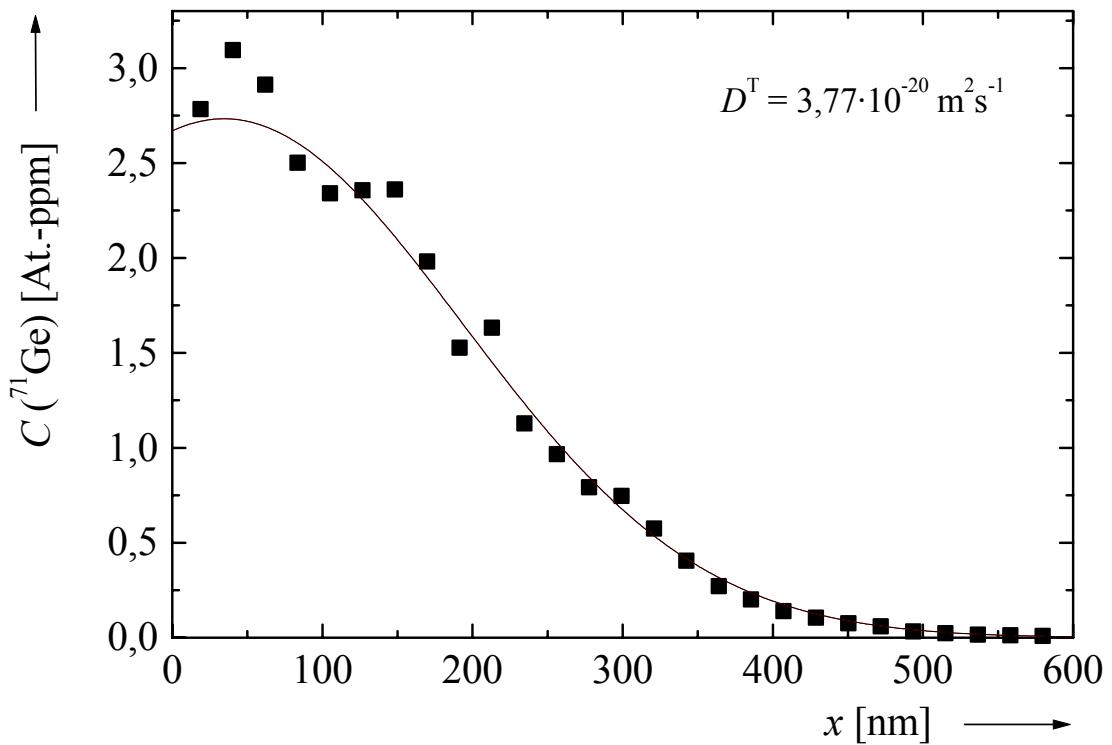


Abbildung 126: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,35}\text{Ge}_{0,65}$ nach Temperung bei 806 °C für $87,5\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

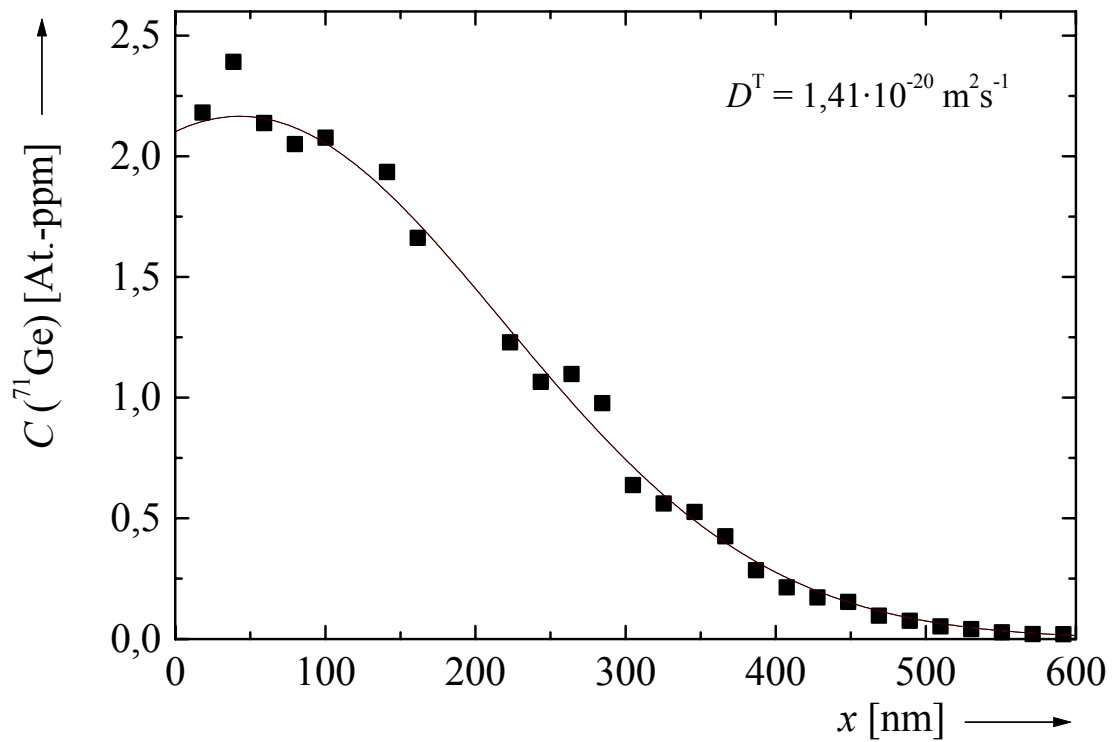


Abbildung 127: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,35}\text{Ge}_{0,65}$ nach Temperung bei 787 °C für $310,5\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

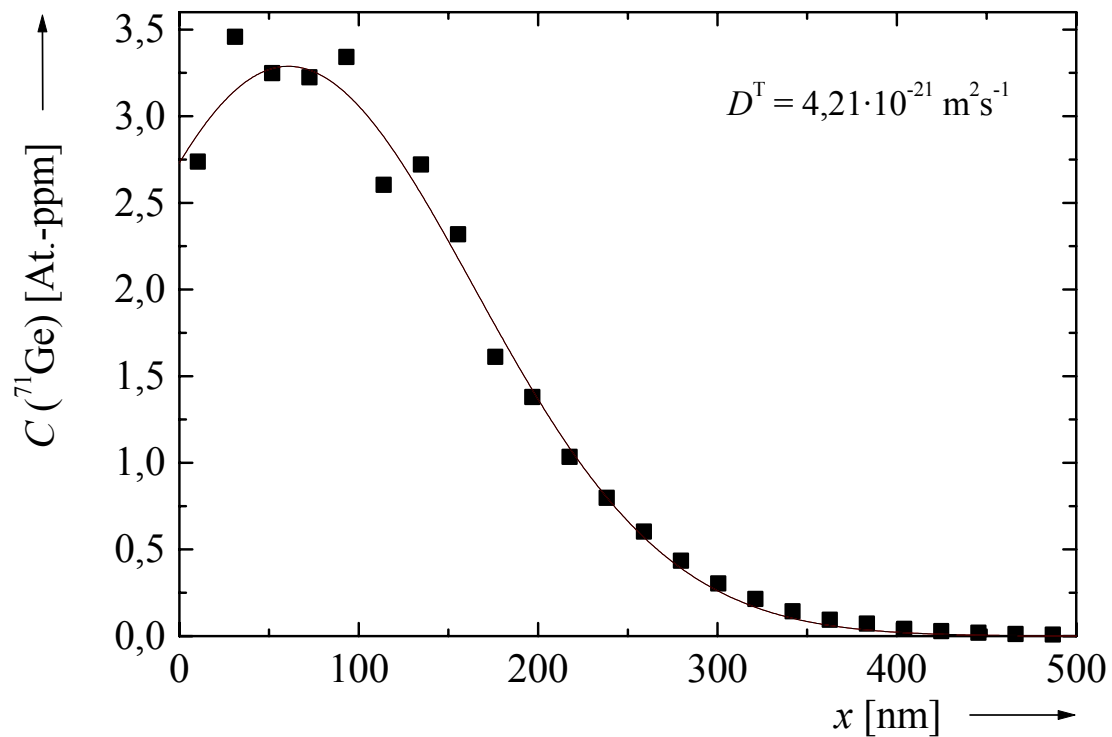


Abbildung 128: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,35}\text{Ge}_{0,65}$ nach Temperung bei 756 °C für 553 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

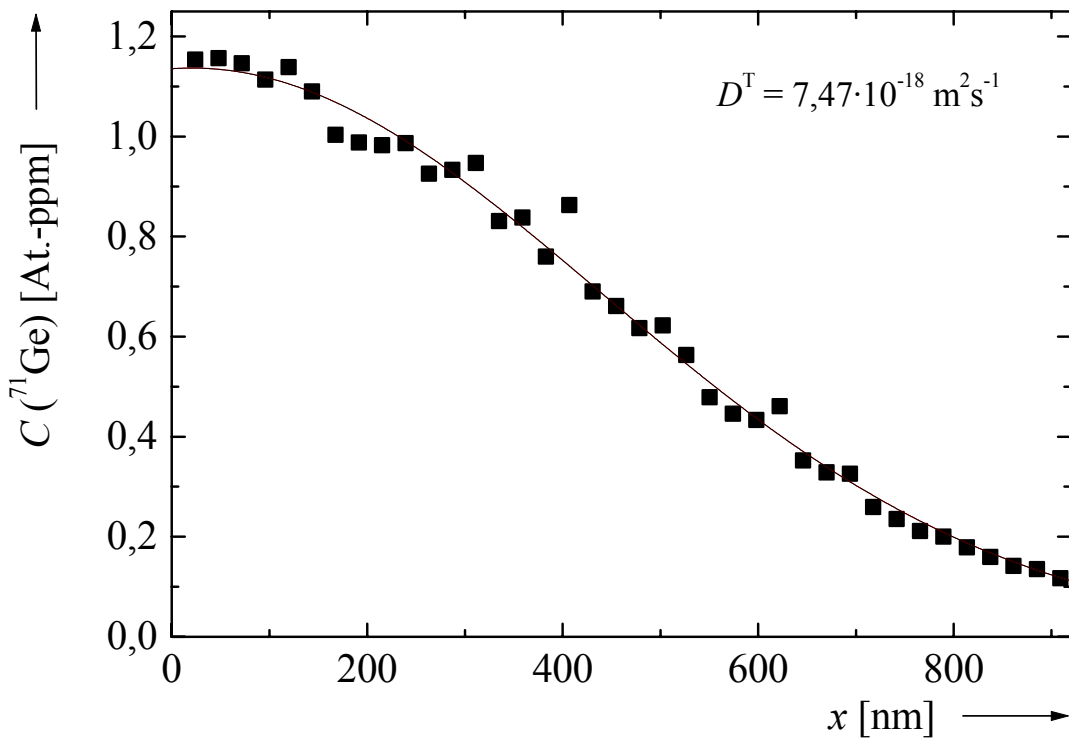


Abbildung 129: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$ nach Temperung bei 903 °C für 3 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

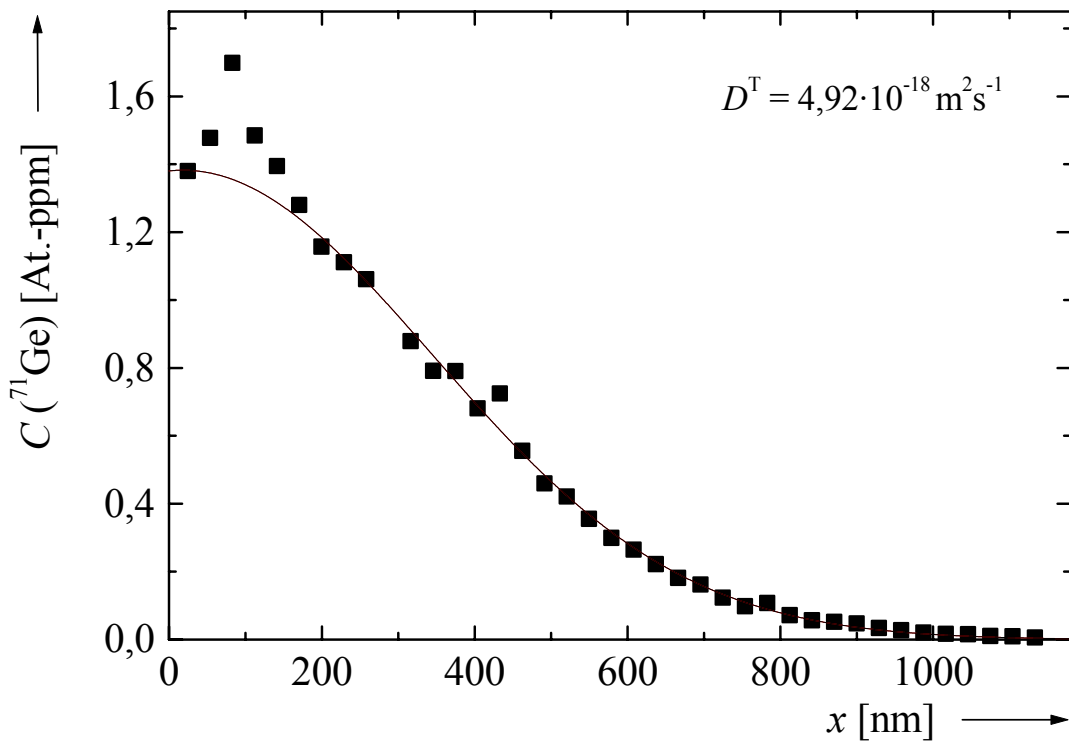


Abbildung 130: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$ nach Temperung bei 886 °C für 3 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

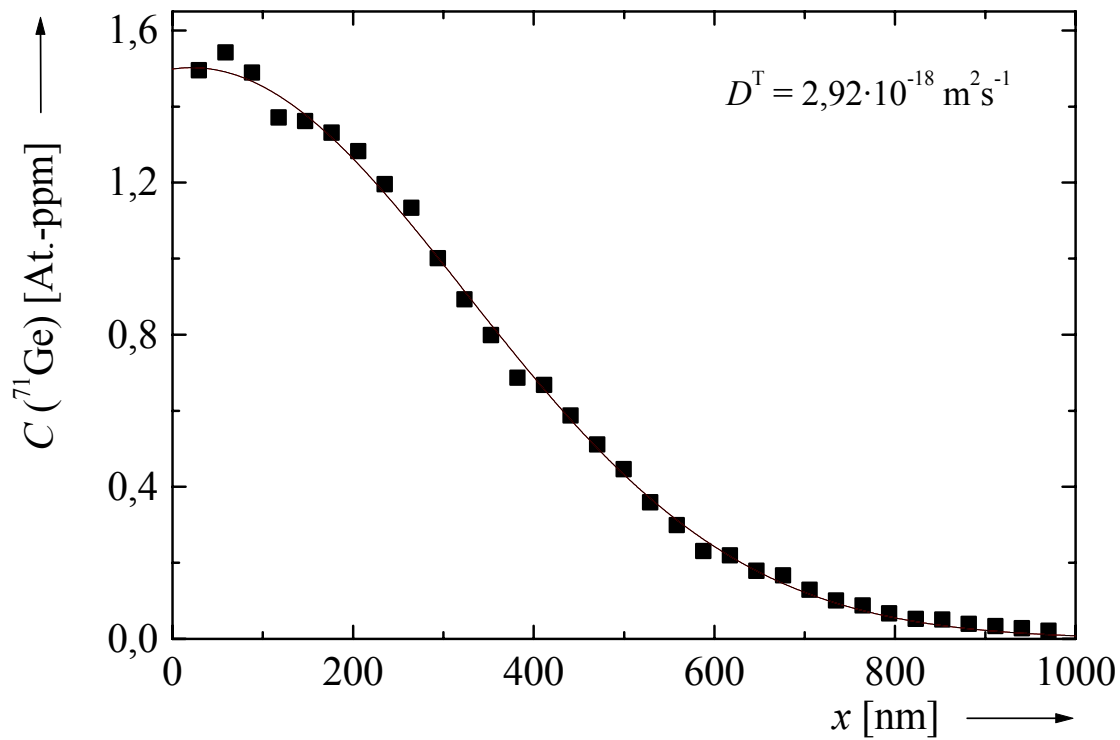


Abbildung 131: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$ nach Temperung bei 870 °C für $4,5\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepasst (—).

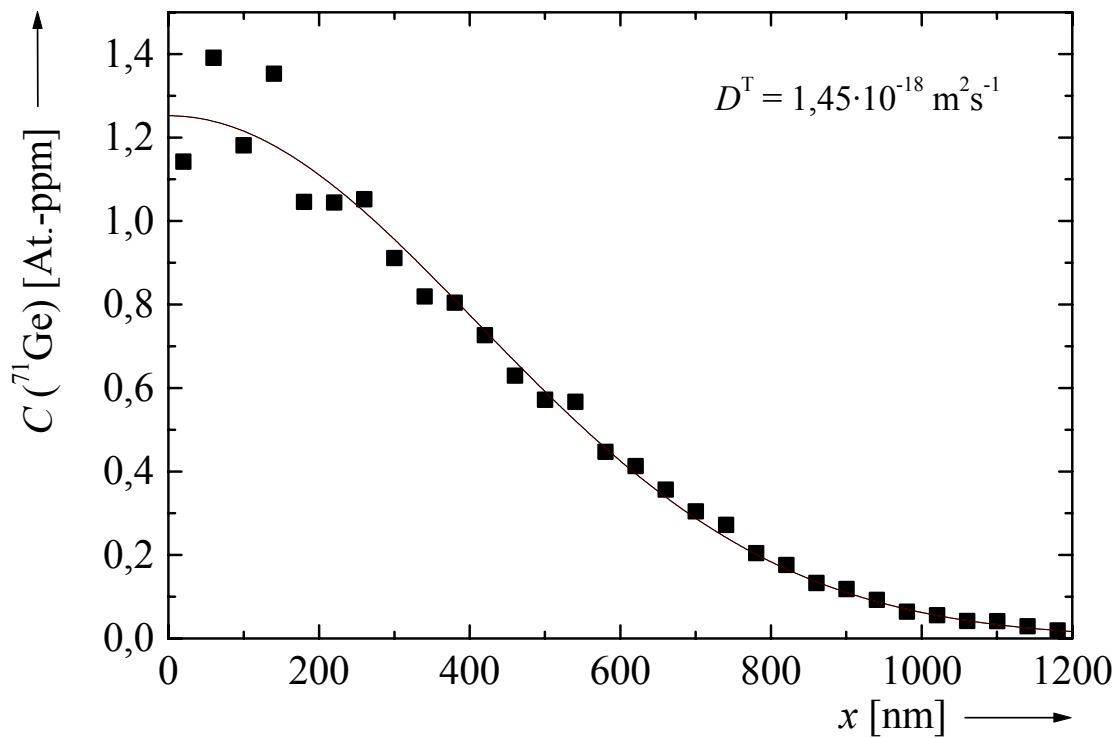


Abbildung 132: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$ nach Temperung bei 848 °C für $15,5\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepasst (—).

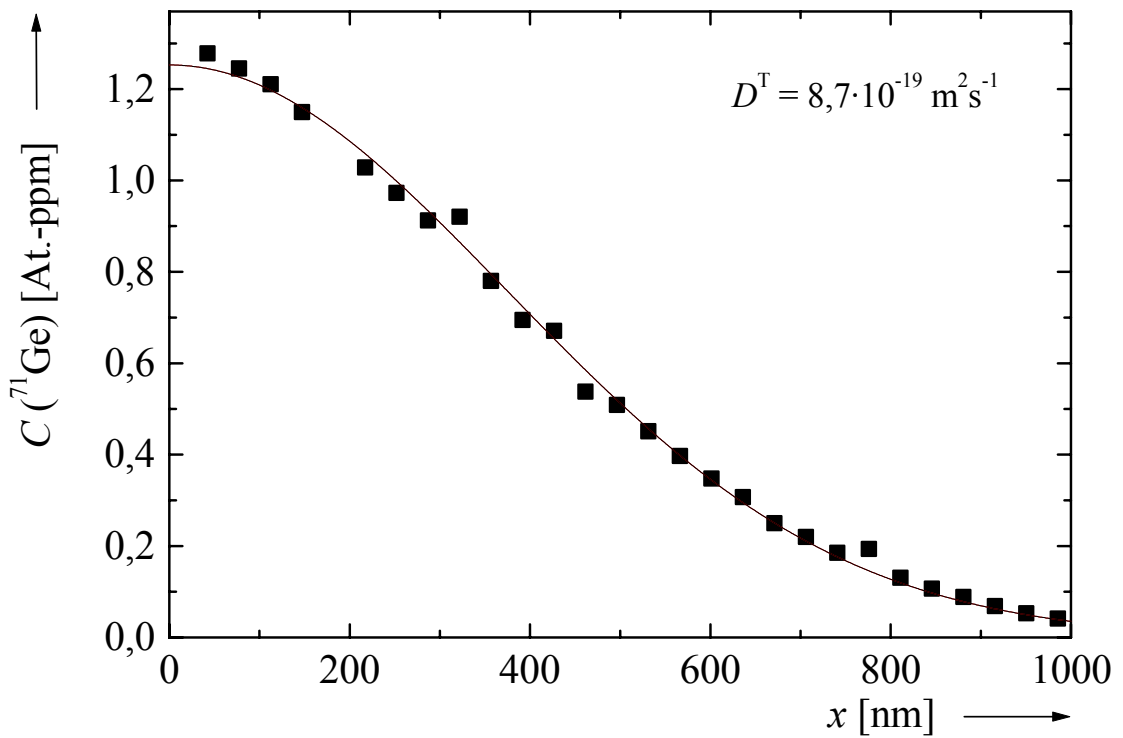


Abbildung 133: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$ nach Temperung bei 828 °C für 22 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

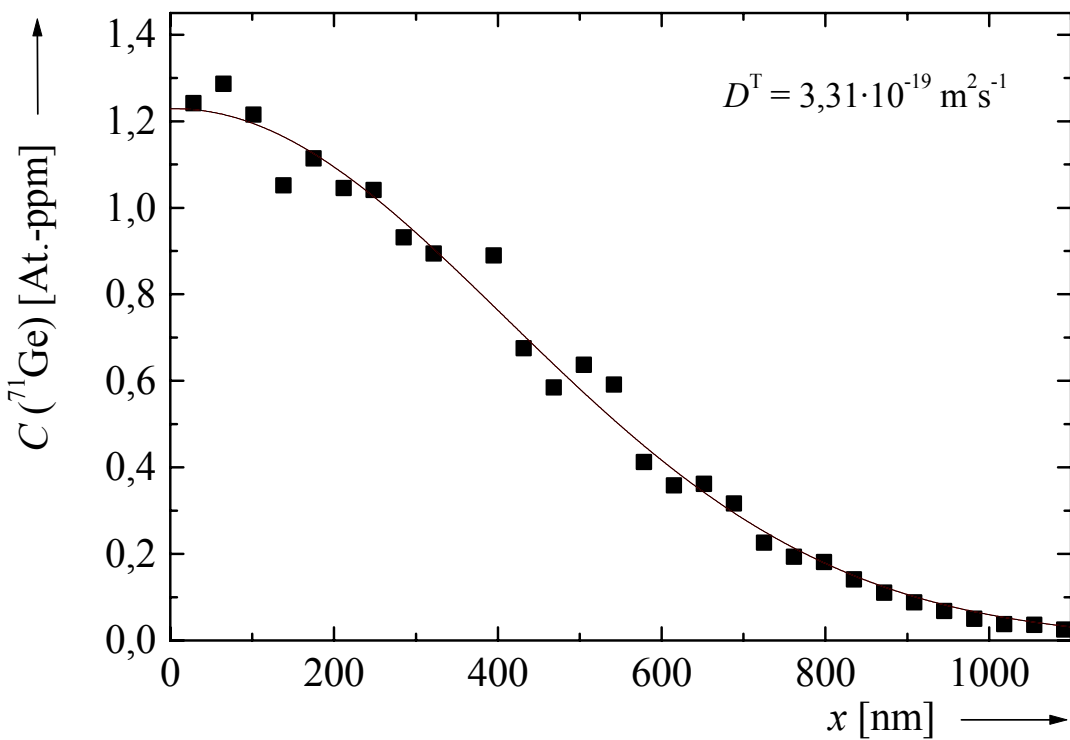


Abbildung 134: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$ nach Temperung bei 804 °C für 63,5 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

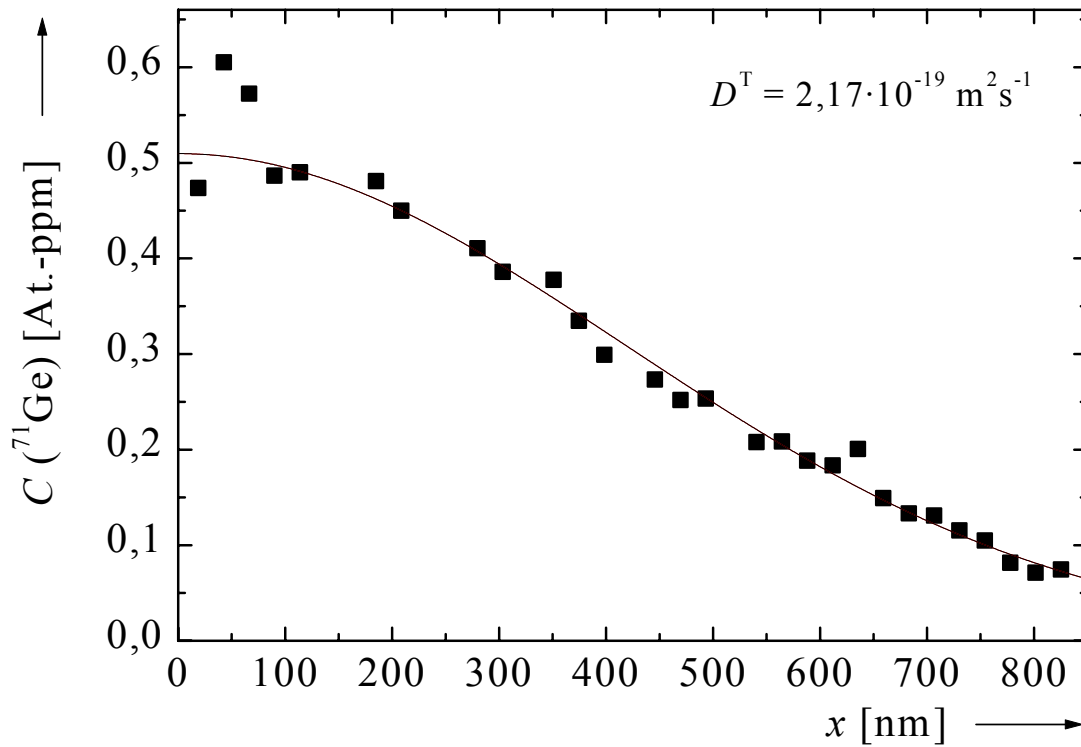


Abbildung 135: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$ nach Temperung bei 795 °C für $111,4\text{ h}$ (\blacksquare). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

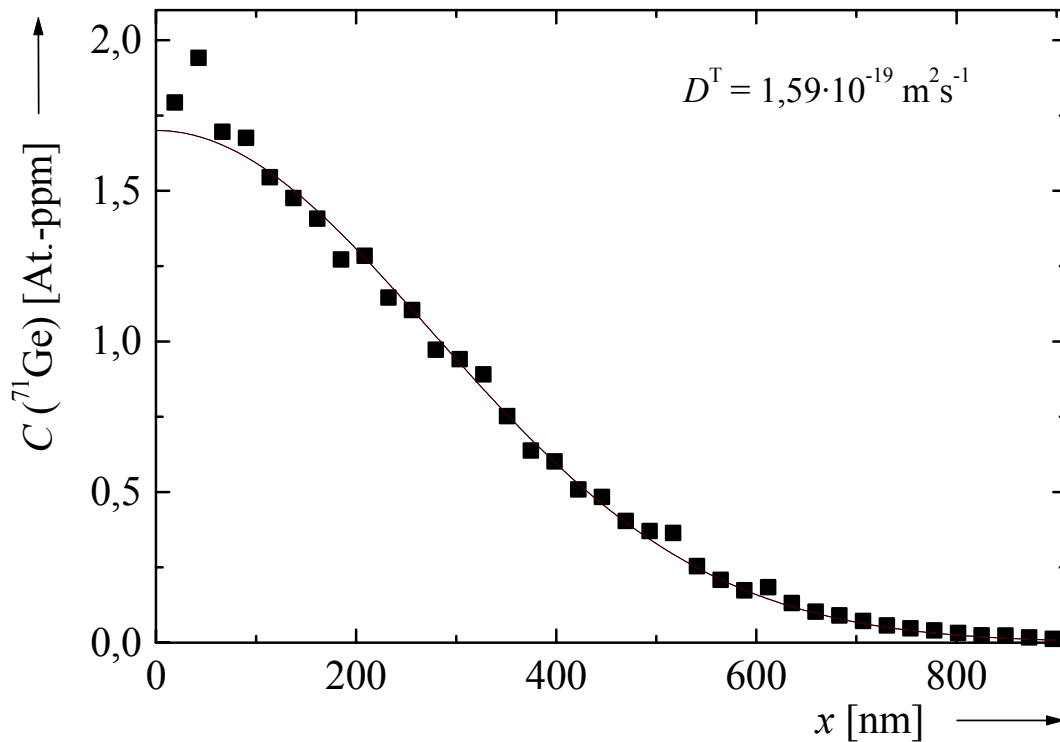


Abbildung 136: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$ nach Temperung bei 785 °C für 66 h (\blacksquare). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

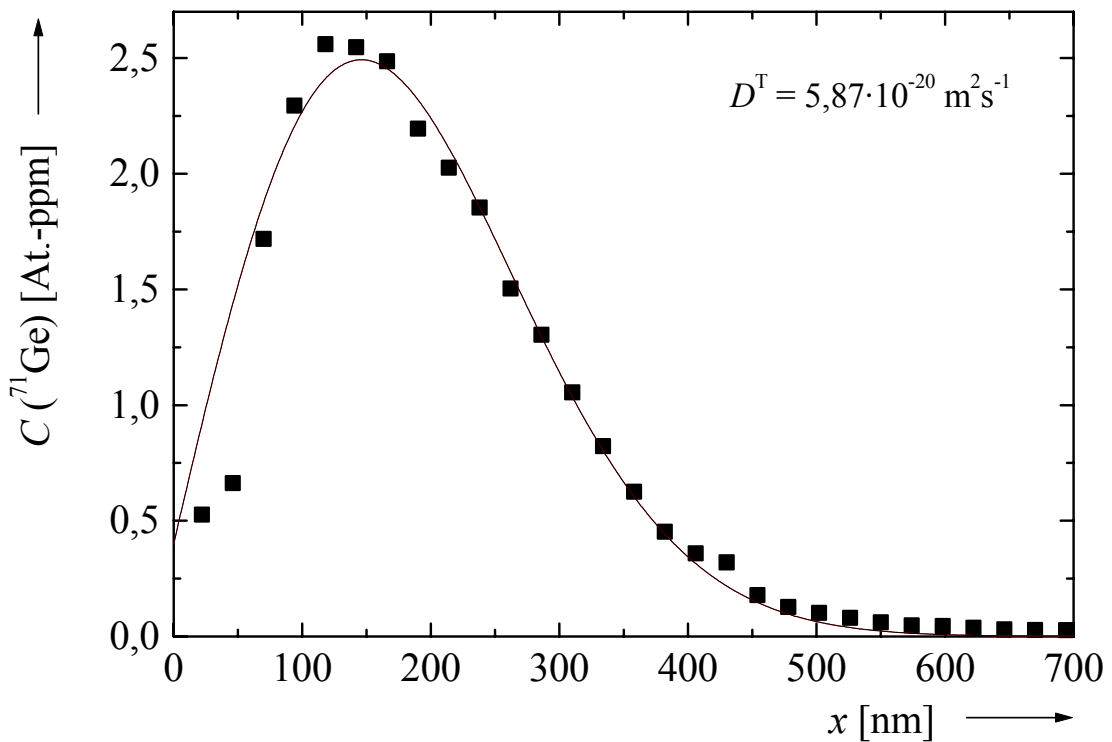


Abbildung 137: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$ nach Temperung bei 760 °C für 64,5 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

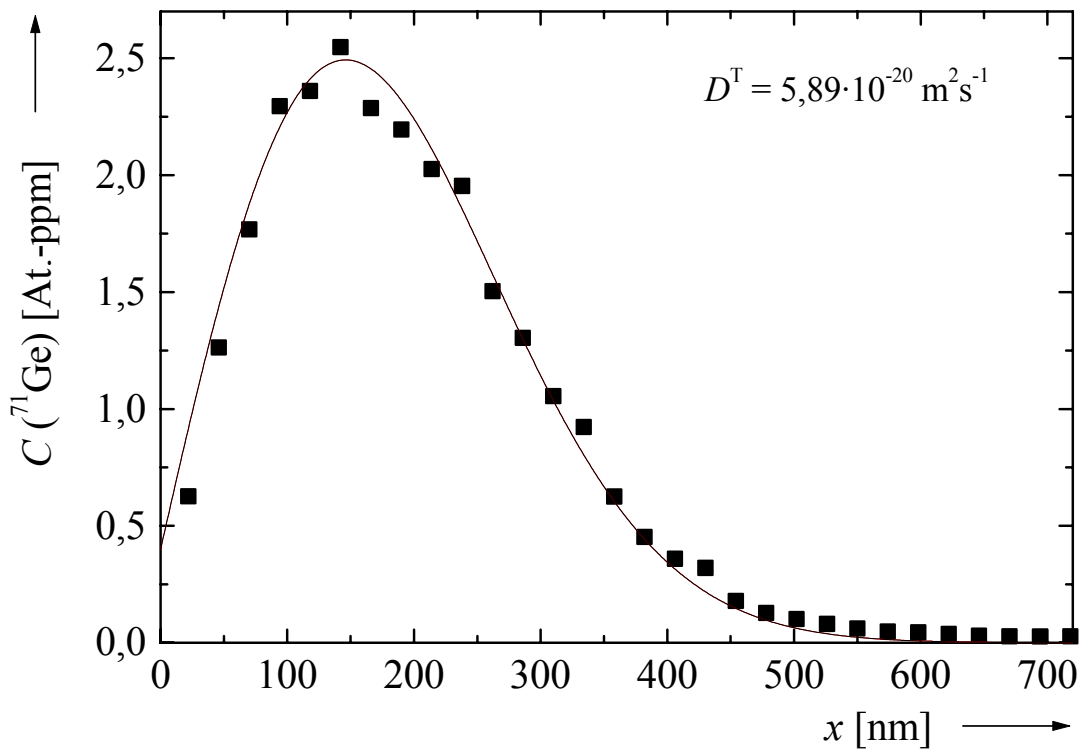


Abbildung 138: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$ nach Temperung bei 760 °C für 64,5 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

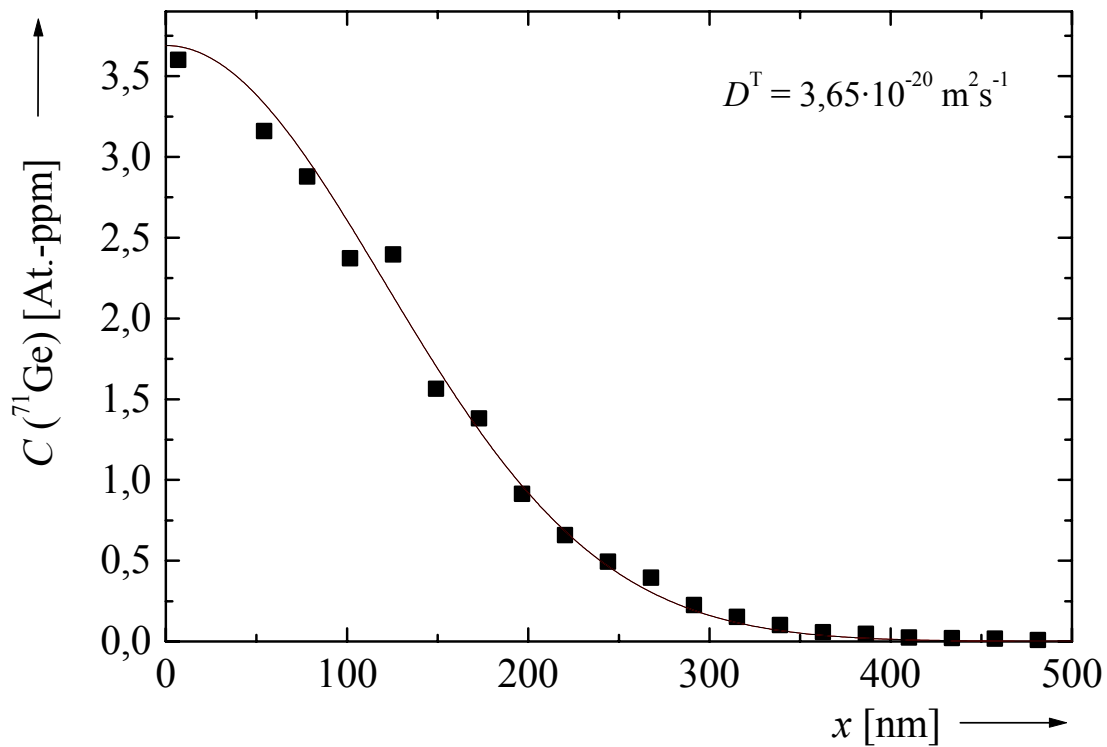


Abbildung 139: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$ nach Temperung bei 745 °C für $47,25\text{ h}$ (\blacksquare). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

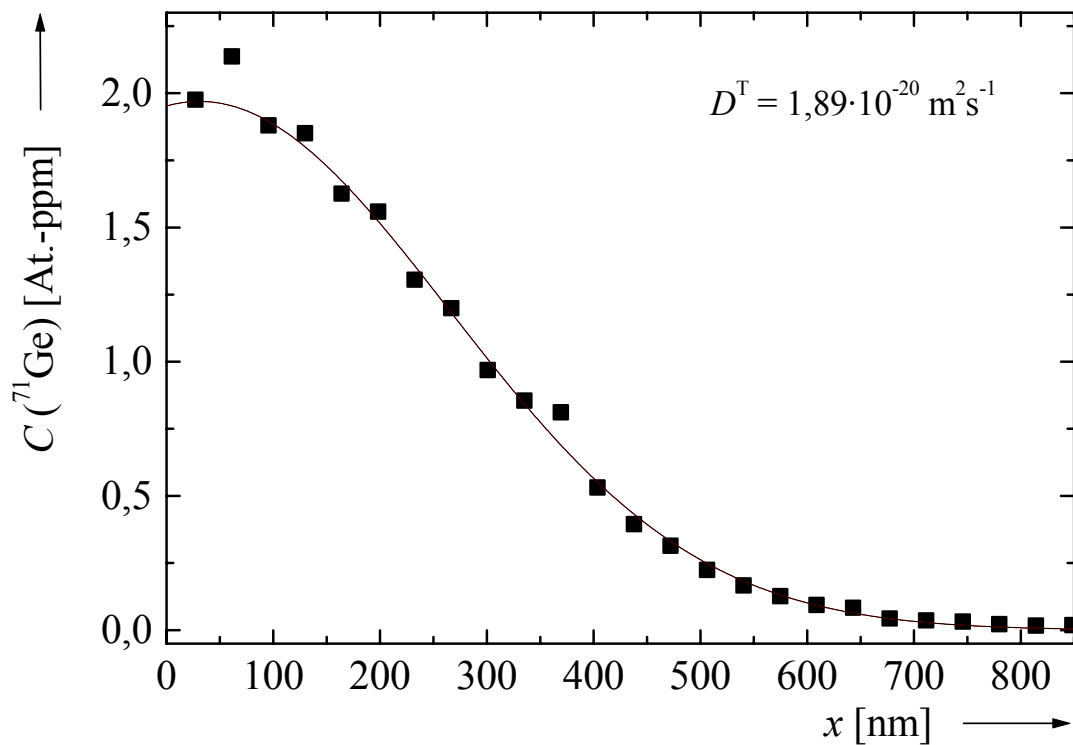


Abbildung 140: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$ nach Temperung bei 730 °C für 424 h (\blacksquare). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

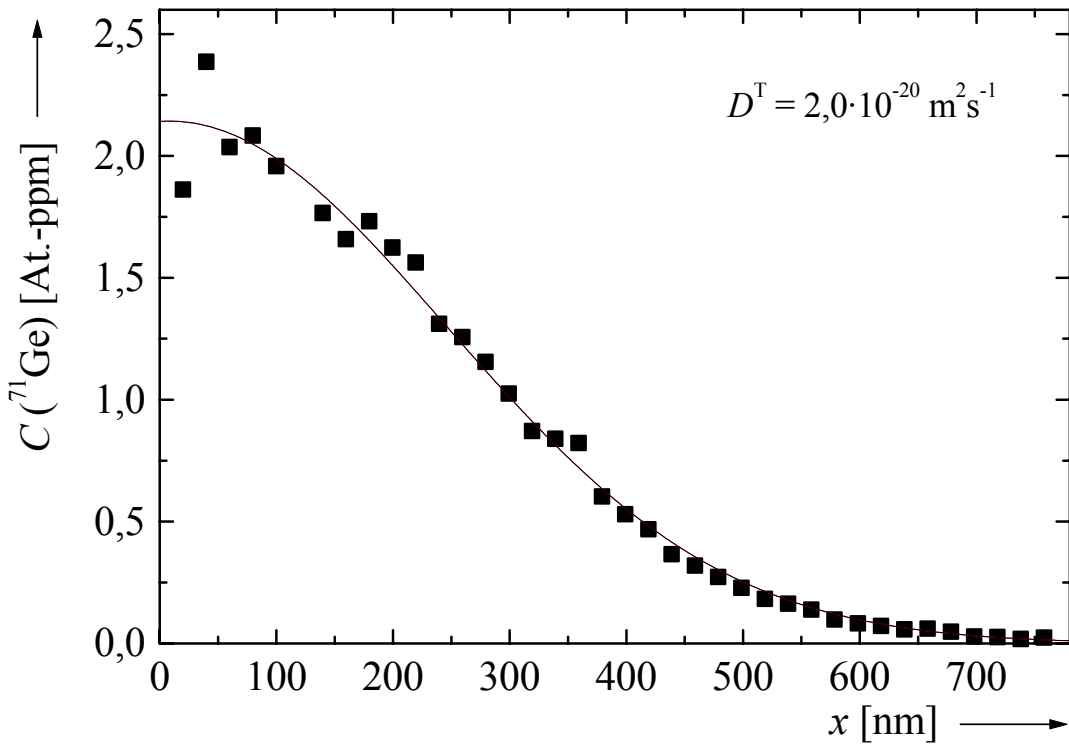


Abbildung 141: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$ nach Temperung bei $730 \text{ }^\circ\text{C}$ für 424 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

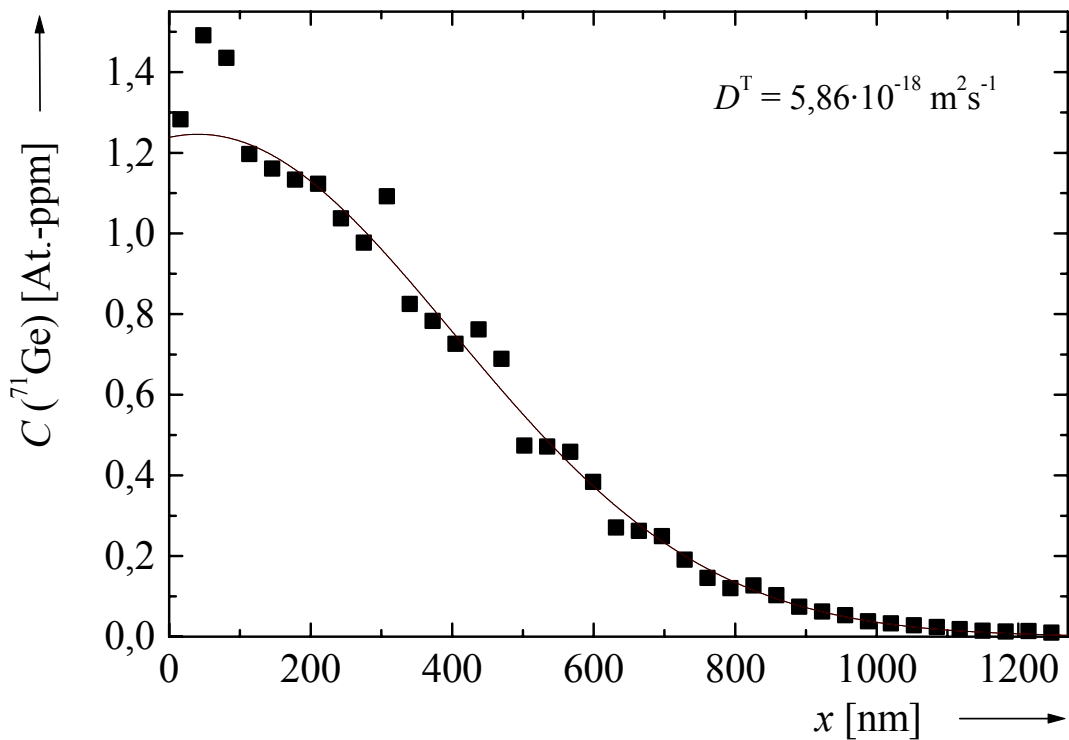


Abbildung 142: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,15}\text{Ge}_{0,85}$ nach Temperung bei $880 \text{ }^\circ\text{C}$ für 185 min (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

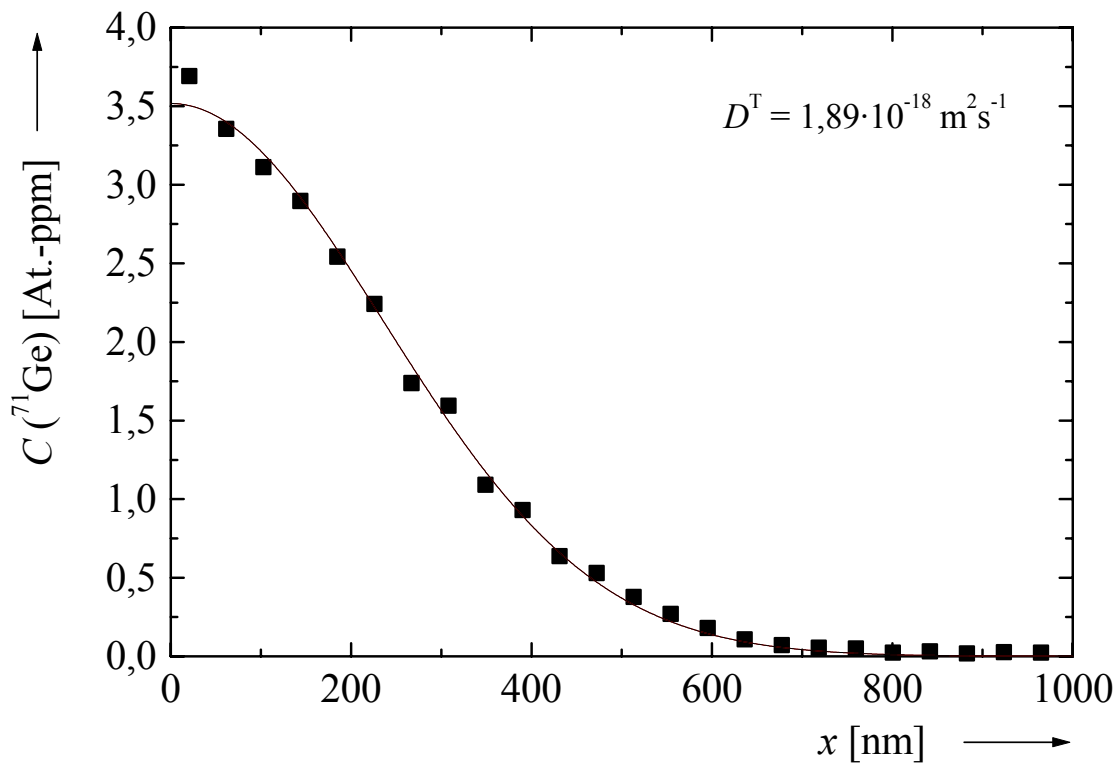


Abbildung 143: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,15}\text{Ge}_{0,85}$ nach Temperung bei 841 °C für 4 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

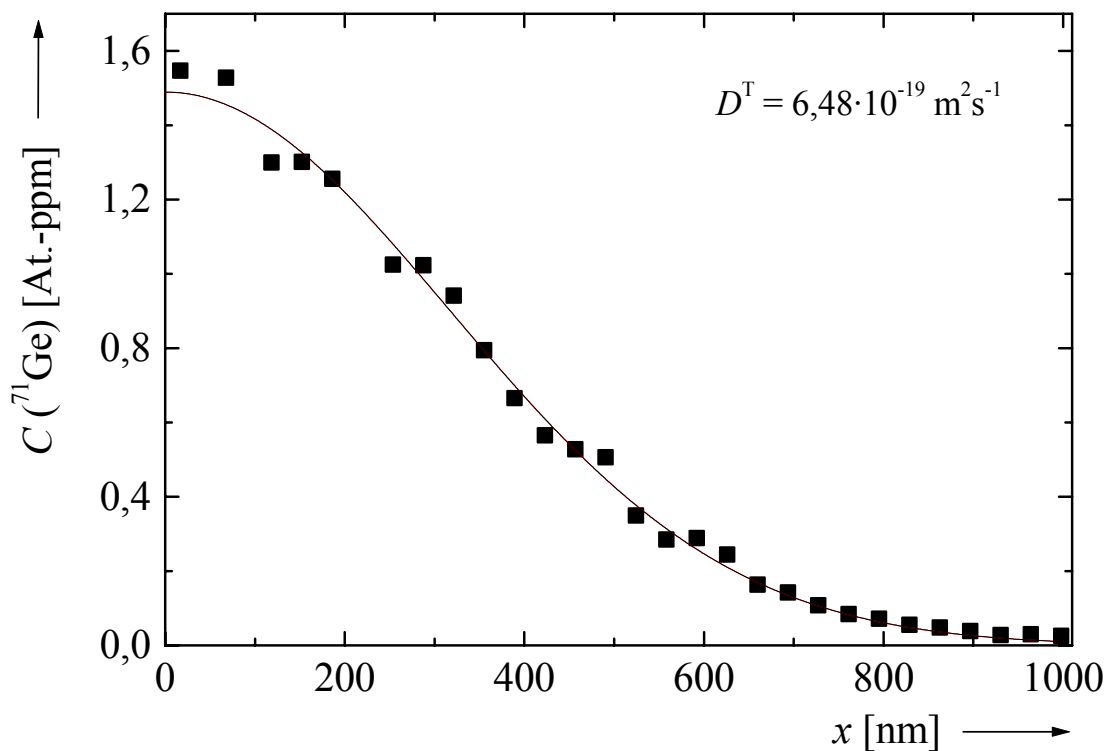


Abbildung 144: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,15}\text{Ge}_{0,85}$ nach Temperung bei 808 °C für $21,25\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

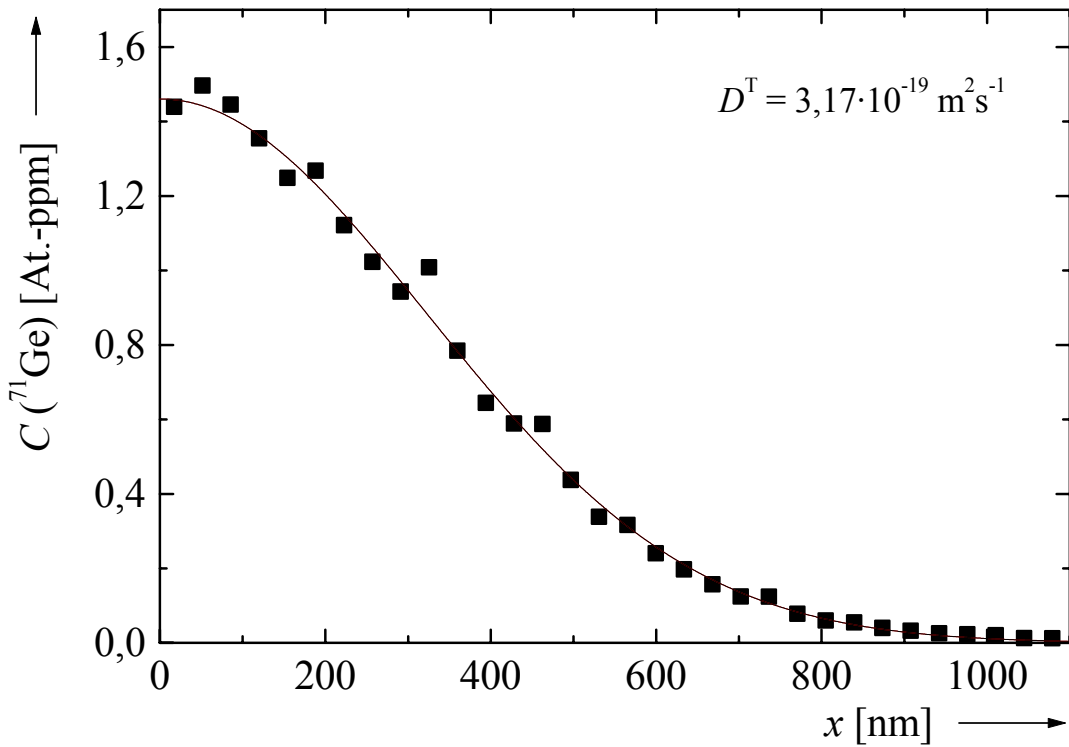


Abbildung 145: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,15}\text{Ge}_{0,85}$ nach Temperung bei 791 °C für 45 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

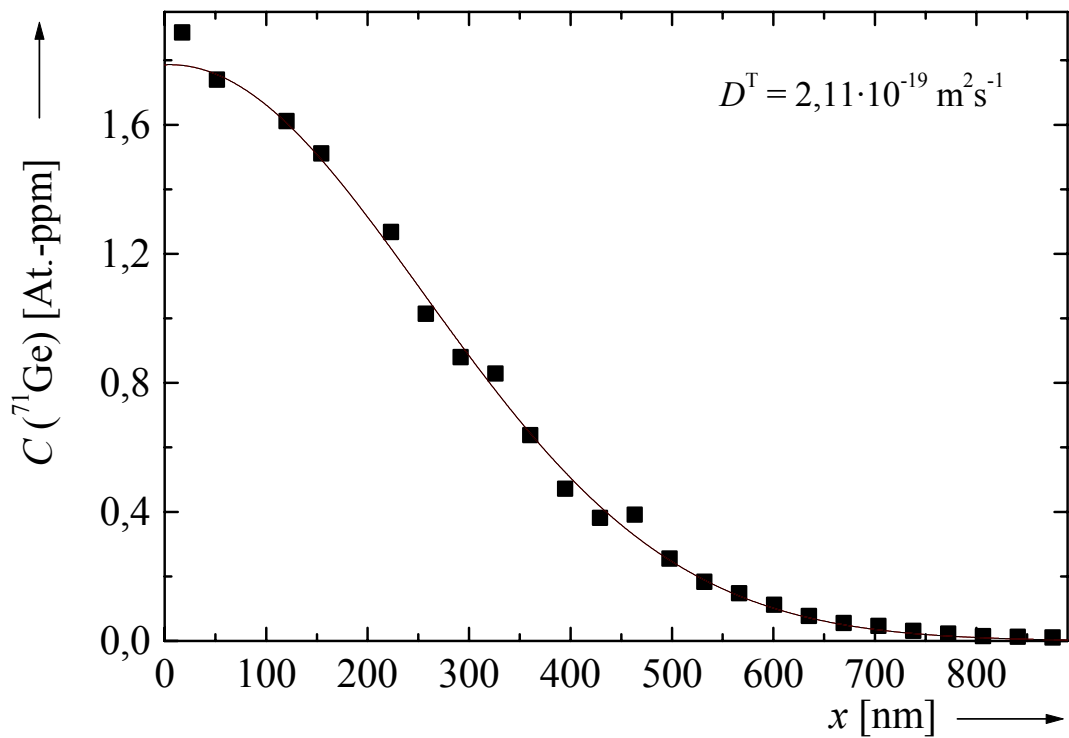


Abbildung 146: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,15}\text{Ge}_{0,85}$ nach Temperung bei 774 °C für 40 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

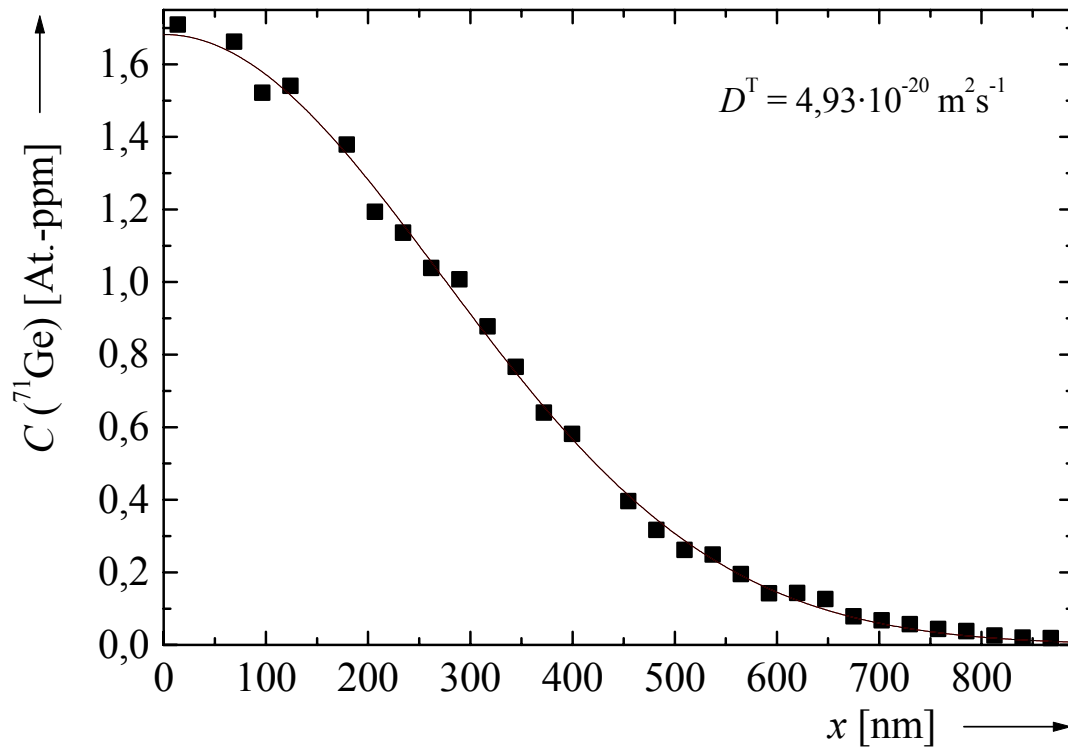


Abbildung 147: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,15}\text{Ge}_{0,85}$ nach Temperung bei 743 °C für $67,25\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

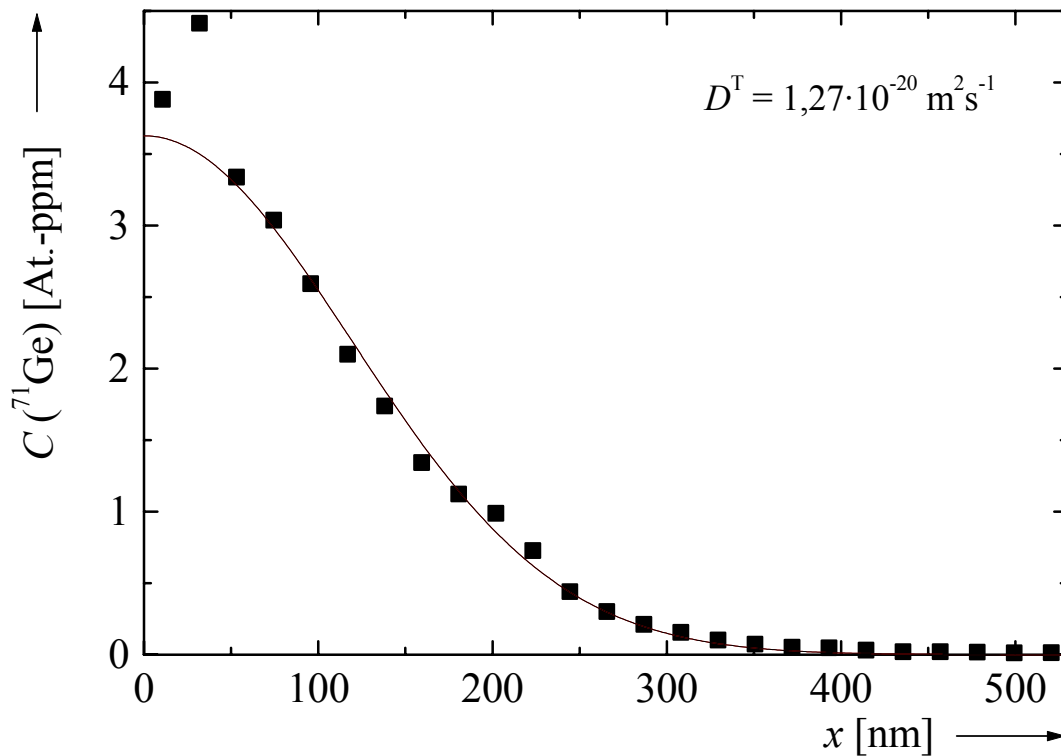


Abbildung 148: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,15}\text{Ge}_{0,85}$ nach Temperung bei 711 °C für $143,5\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

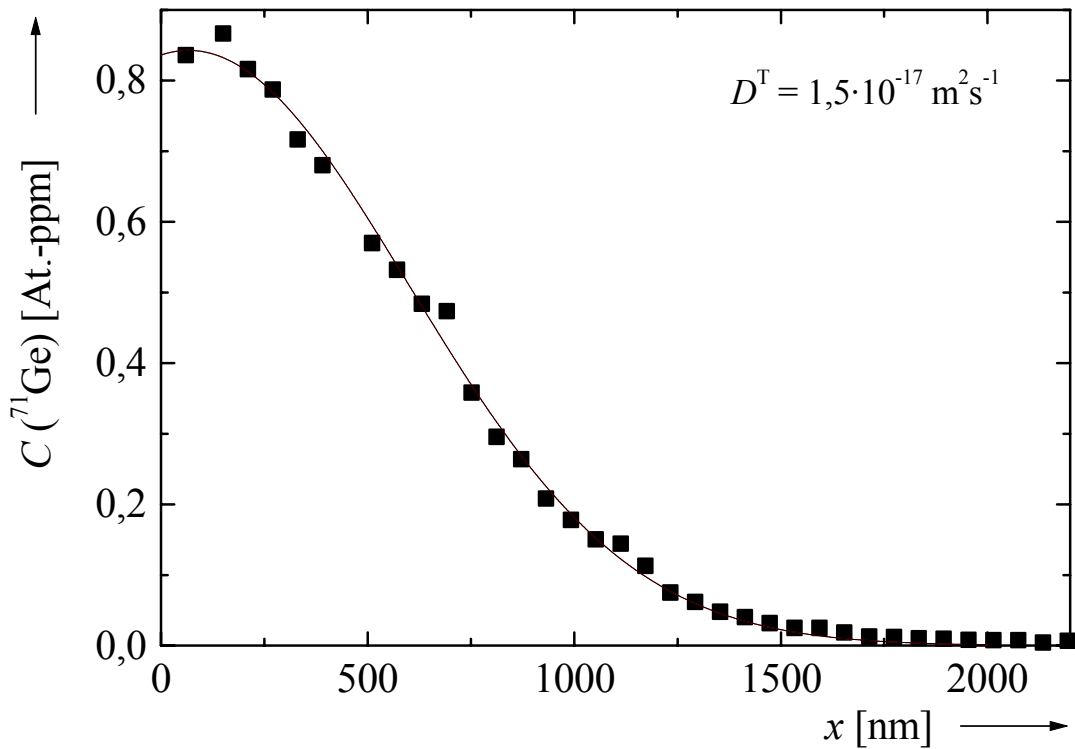


Abbildung 149: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,10}\text{Ge}_{0,90}$ nach Temperung bei 875 °C für 2,5 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

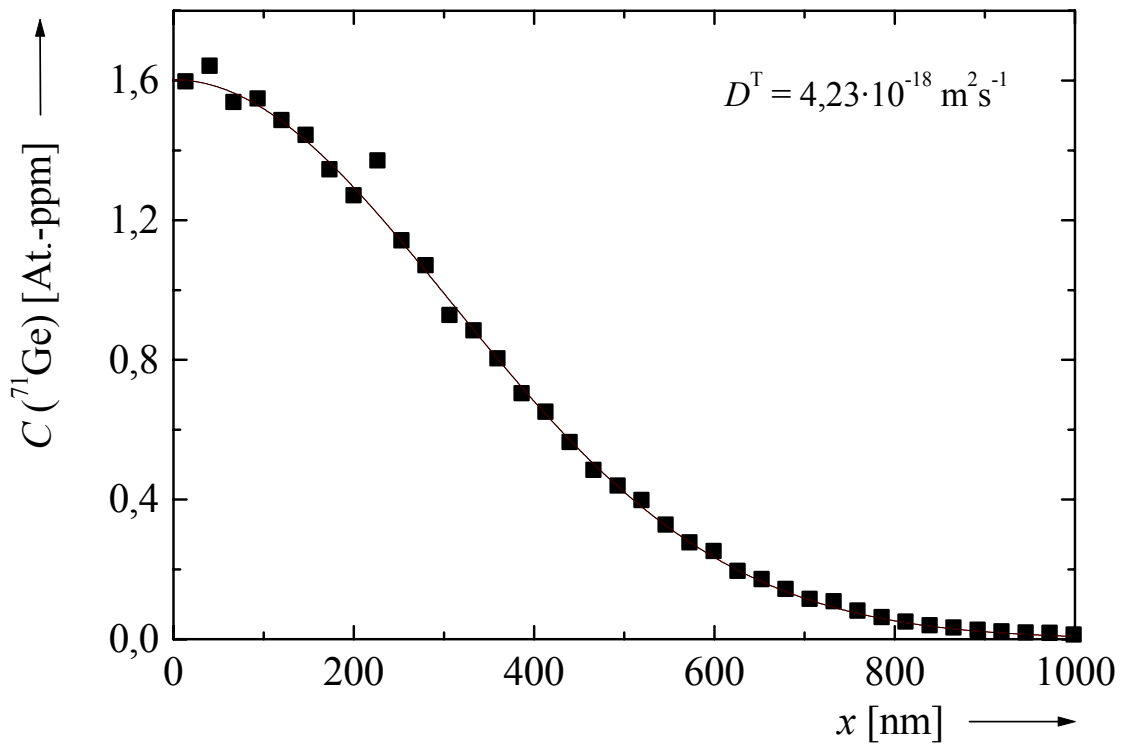


Abbildung 150: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,10}\text{Ge}_{0,90}$ nach Temperung bei 836 °C für 182 min (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

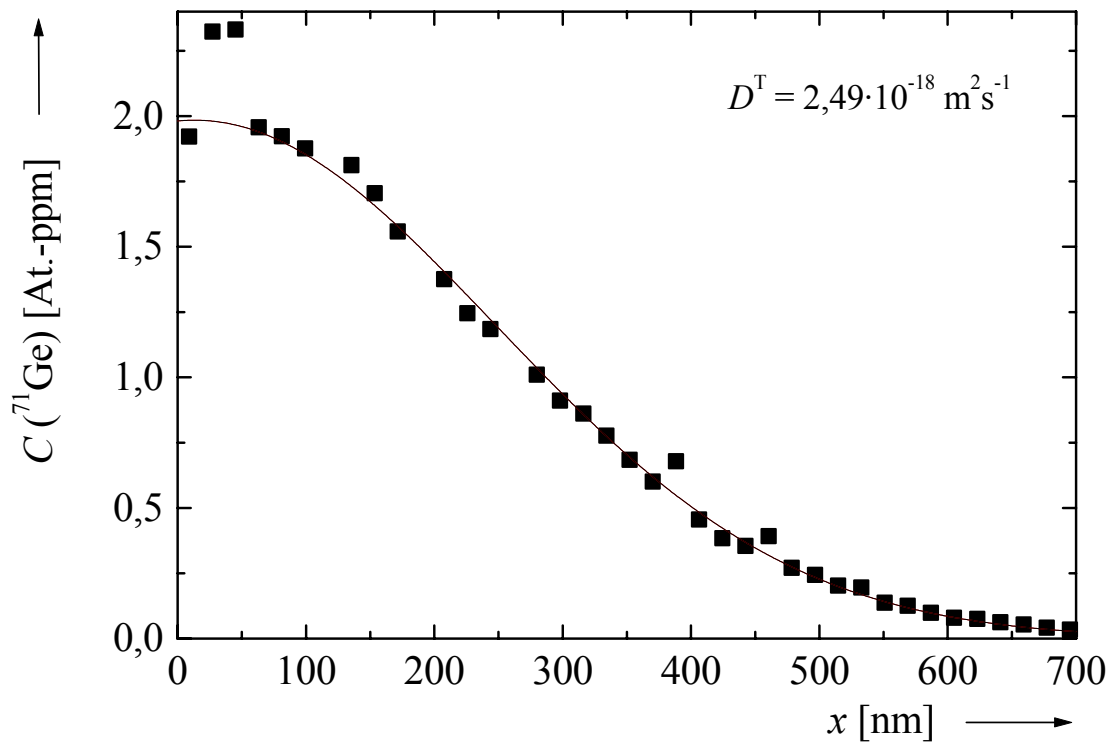


Abbildung 151: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,10}\text{Ge}_{0,90}$ nach Temperung bei 821 °C für 3 h (\blacksquare). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

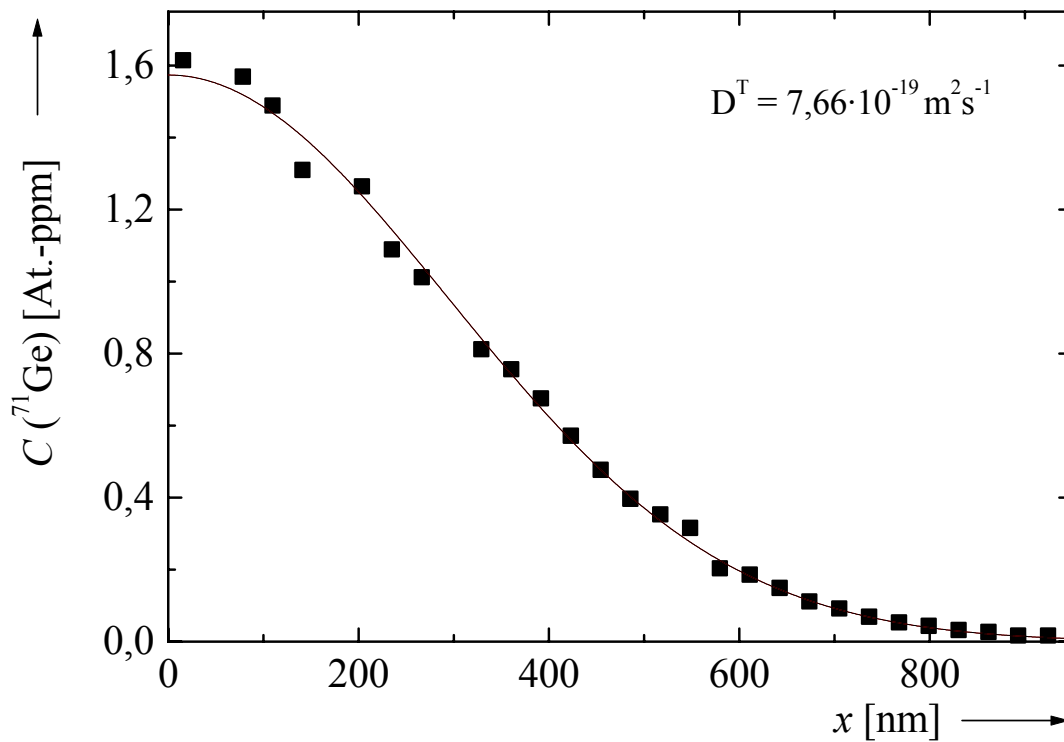


Abbildung 152: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,10}\text{Ge}_{0,90}$ nach Temperung bei 786 °C für $15,5\text{ h}$ (\blacksquare). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

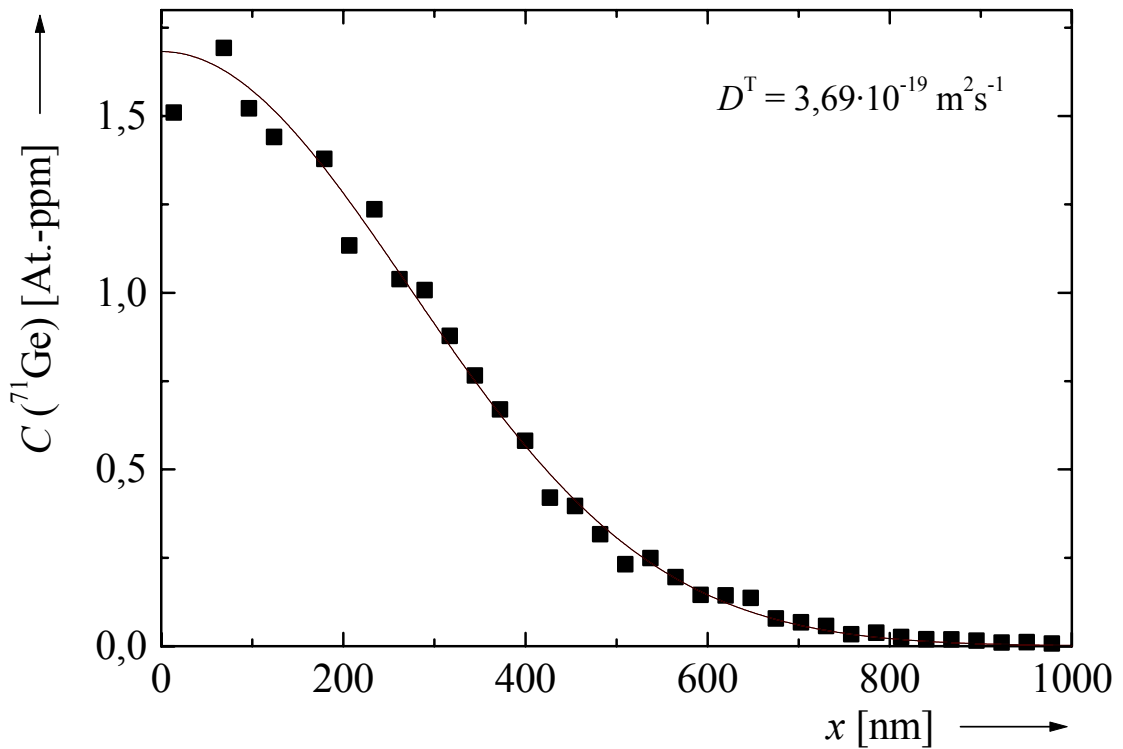


Abbildung 153: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,10}\text{Ge}_{0,90}$ nach Temperung bei 765 °C für 25 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

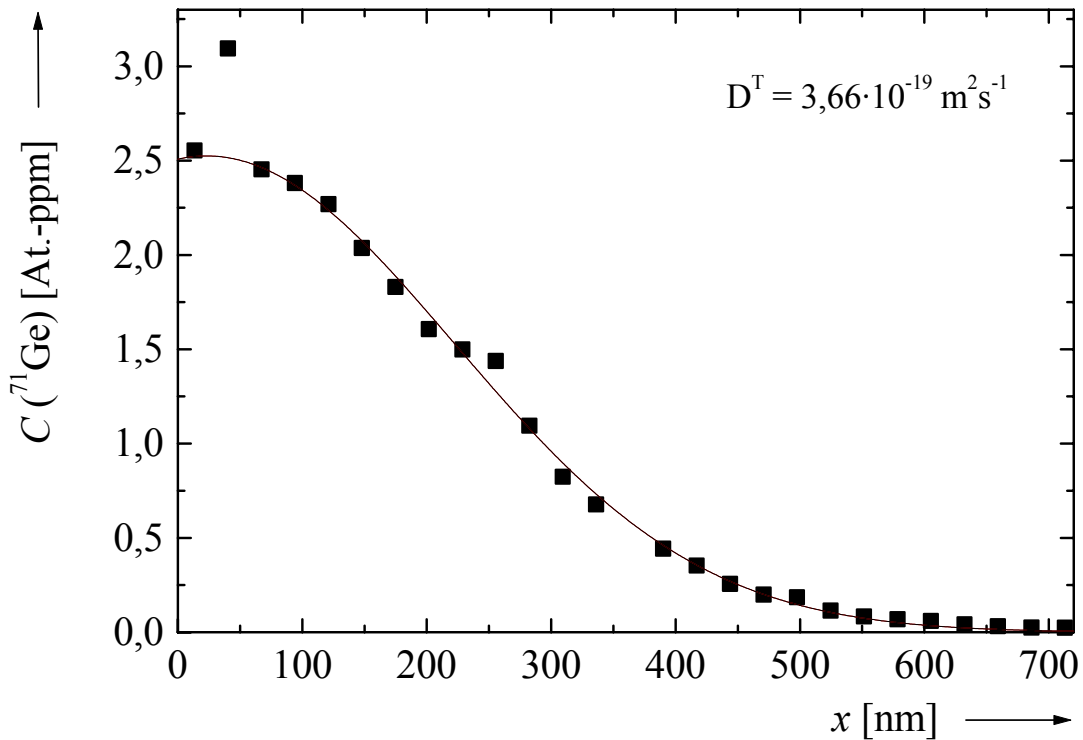


Abbildung 154: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,10}\text{Ge}_{0,90}$ nach Temperung bei 765 °C für 15,25 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

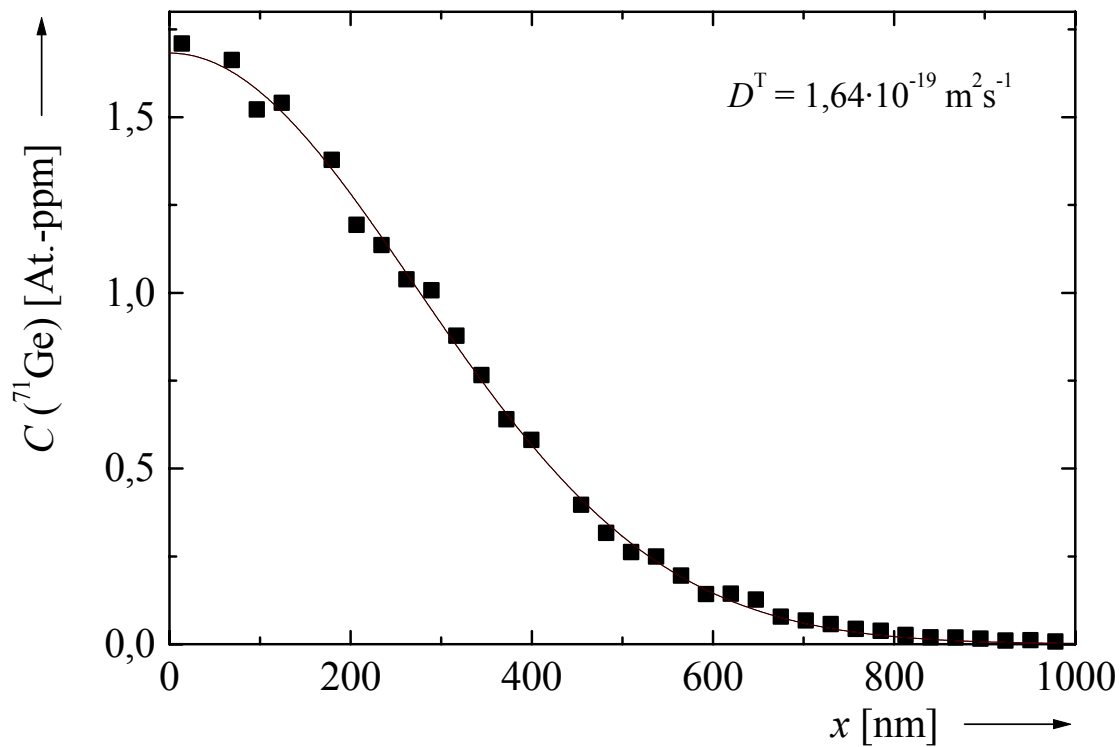


Abbildung 155: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,10}\text{Ge}_{0,90}$ nach Temperung bei $743 \text{ }^\circ\text{C}$ für $67,25 \text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

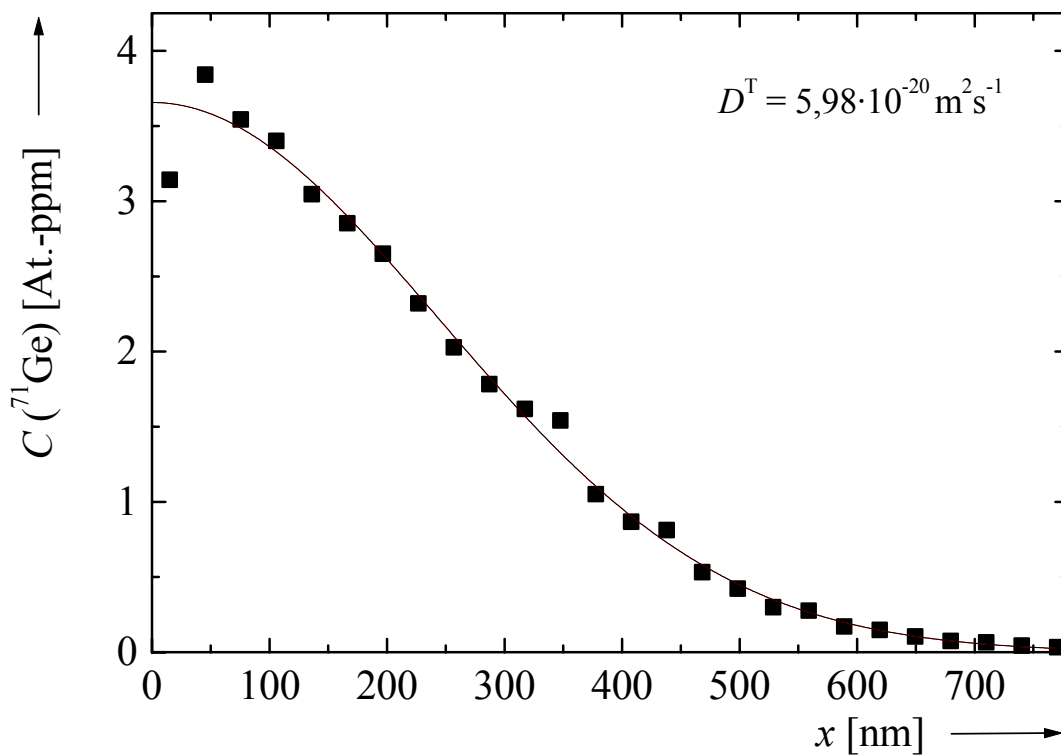


Abbildung 156: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,10}\text{Ge}_{0,90}$ nach Temperung bei $721 \text{ }^\circ\text{C}$ für $145,5 \text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

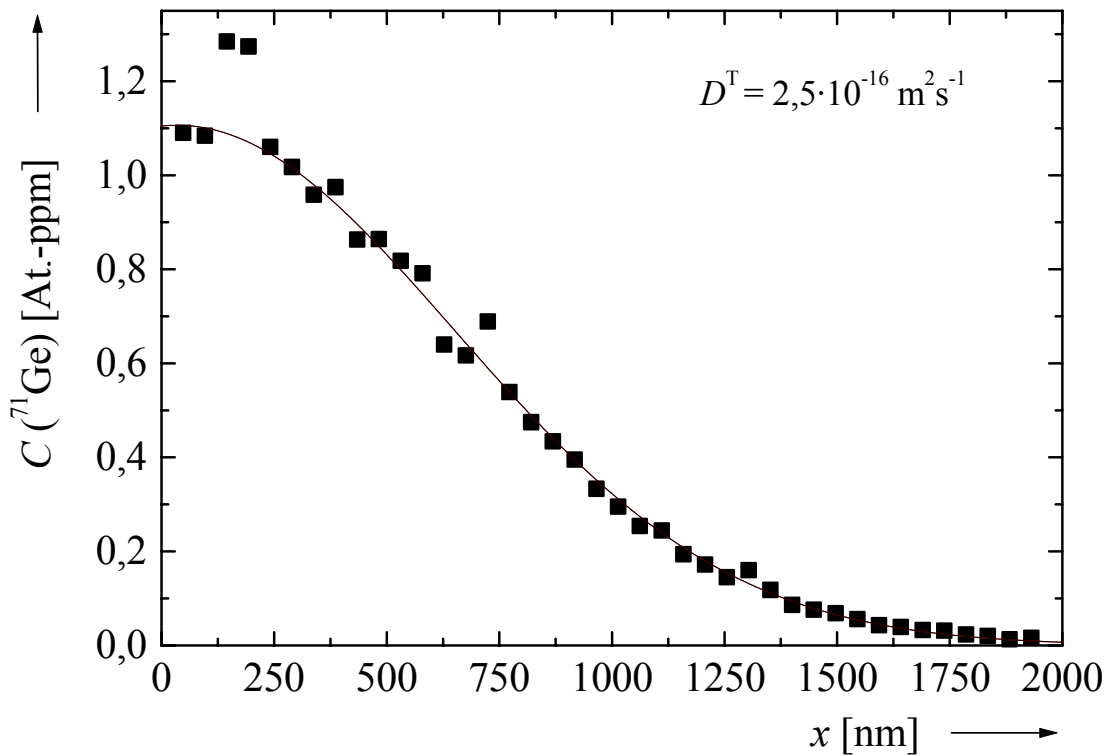


Abbildung 157: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,05}\text{Ge}_{0,95}$ nach Temperung bei 944 °C für $12,5\text{ min}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

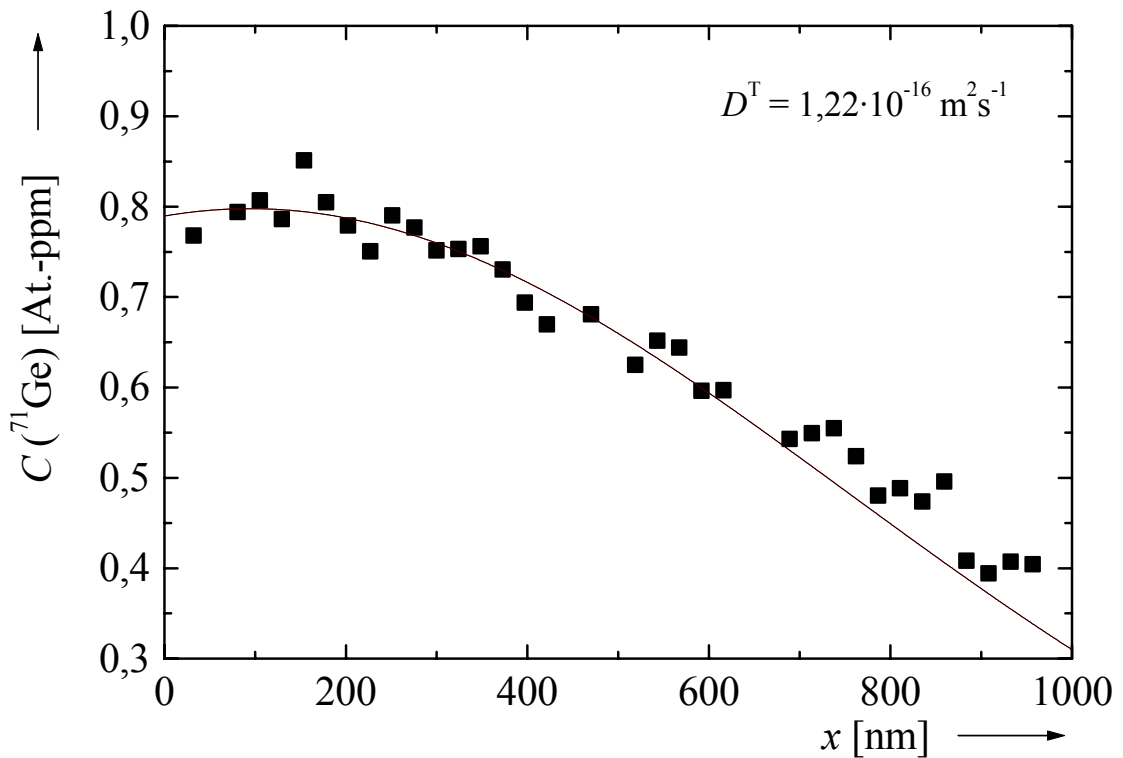


Abbildung 158: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,05}\text{Ge}_{0,95}$ nach Temperung bei 921 °C für 30 min (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

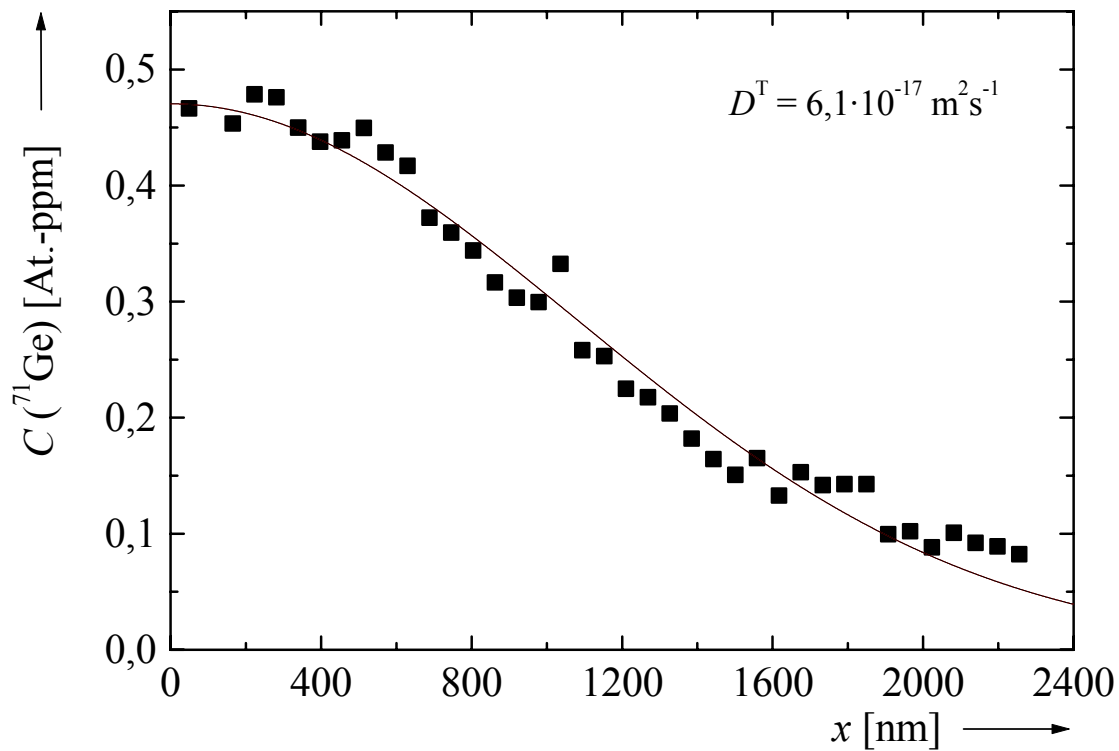


Abbildung 159: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,05}\text{Ge}_{0,95}$ nach Temperung bei 898 °C für 130 min (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

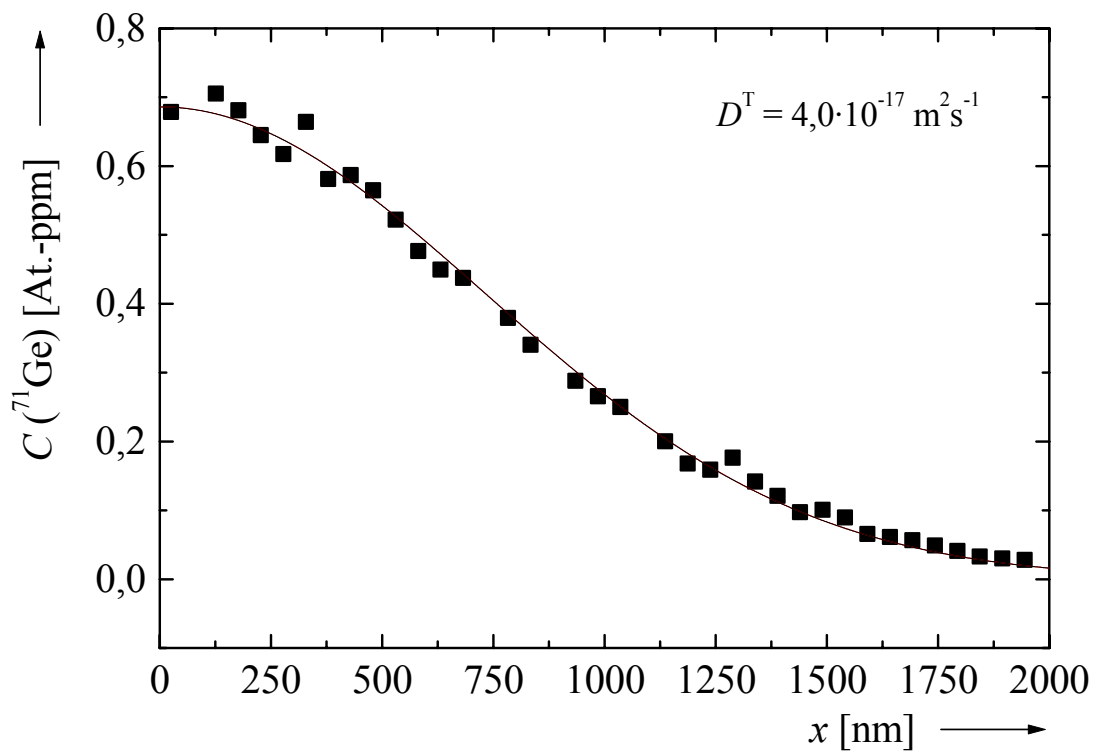


Abbildung 160: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,05}\text{Ge}_{0,95}$ nach Temperung bei 875 °C für 2 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

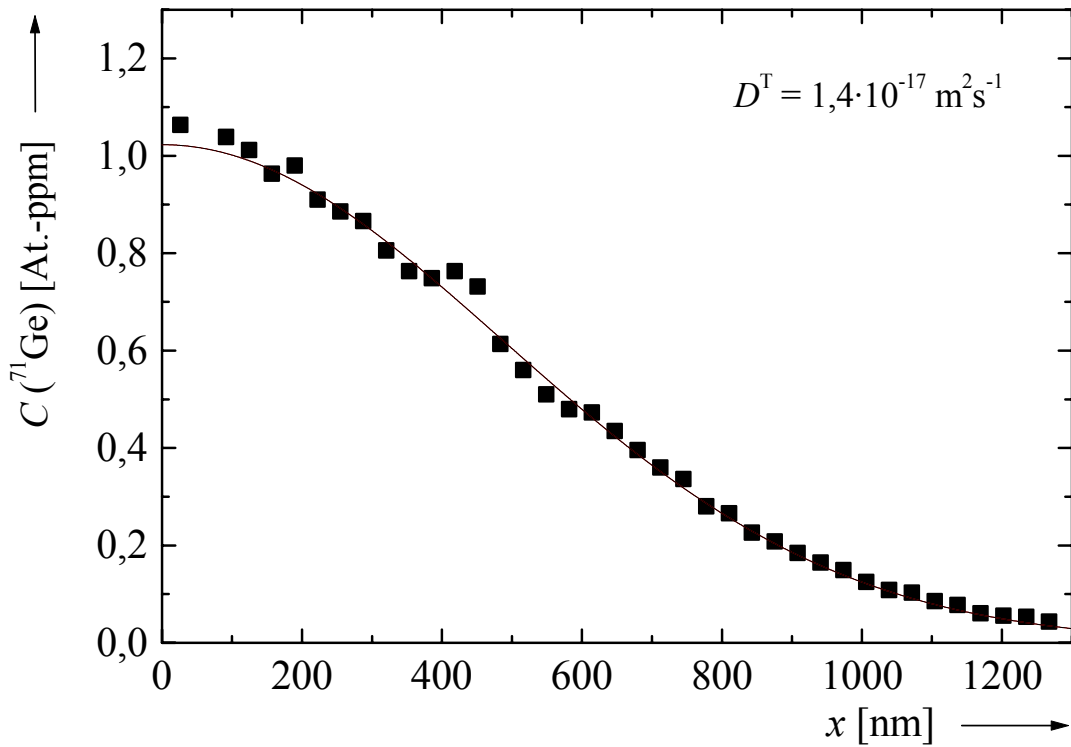


Abbildung 161: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,05}\text{Ge}_{0,95}$ nach Temperung bei 851 °C für 2 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

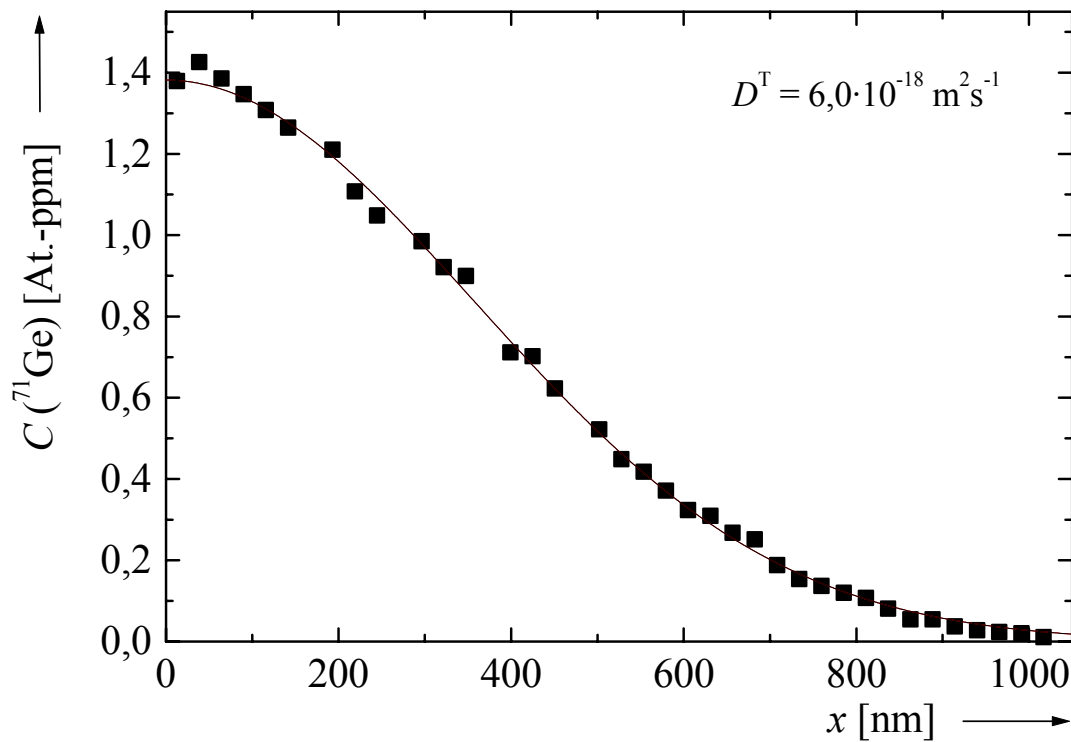


Abbildung 162: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,05}\text{Ge}_{0,95}$ nach Temperung bei 821 °C für 3 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

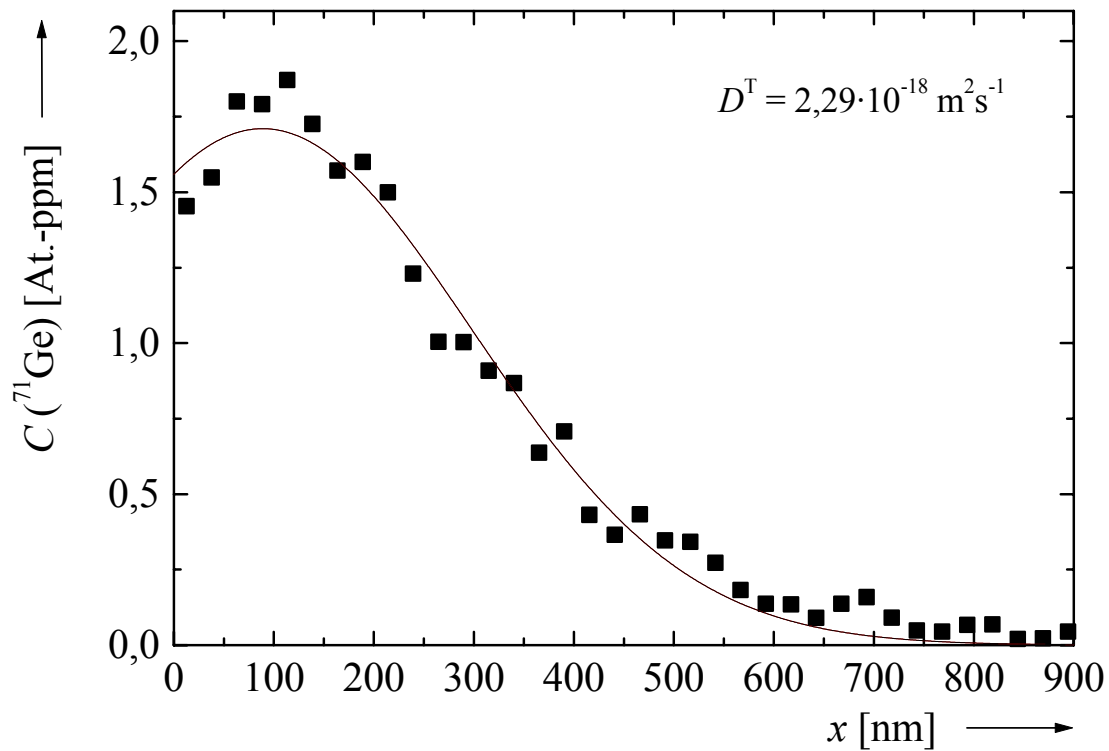


Abbildung 163: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,05}\text{Ge}_{0,95}$ nach Temperung bei 800 °C für 3 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

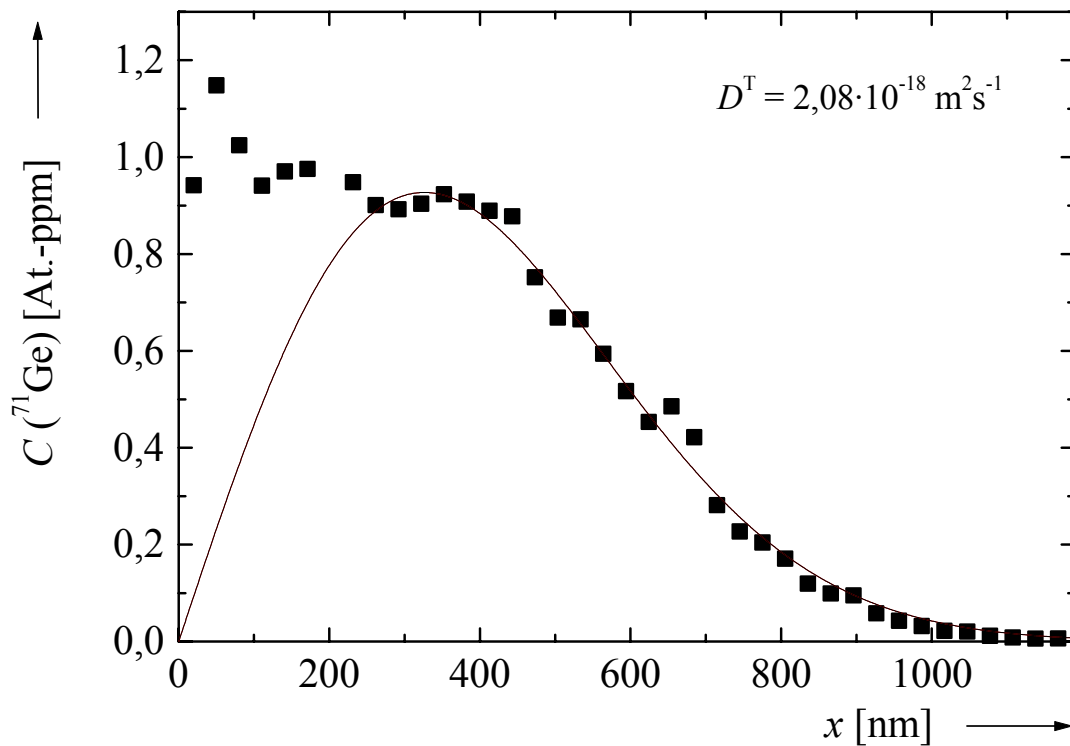


Abbildung 164: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,05}\text{Ge}_{0,95}$ nach Temperung bei 785 °C für 545 min (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

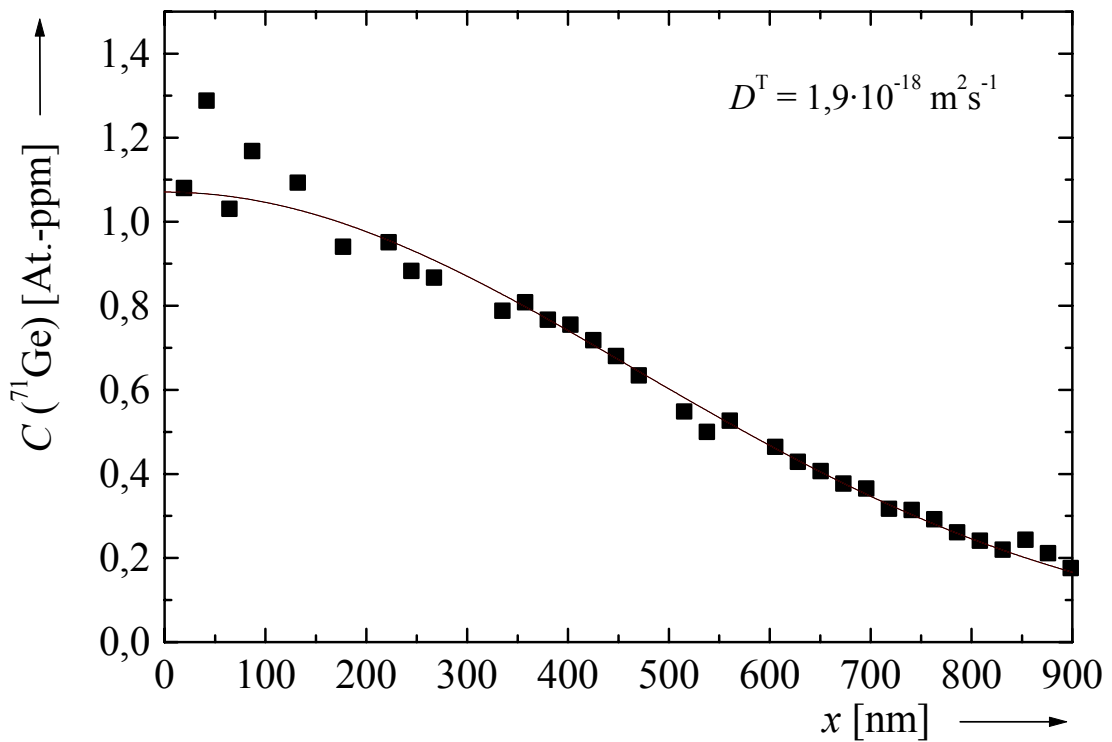


Abbildung 165: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,05}\text{Ge}_{0,95}$ nach Temperung bei 780 °C für 15,25 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

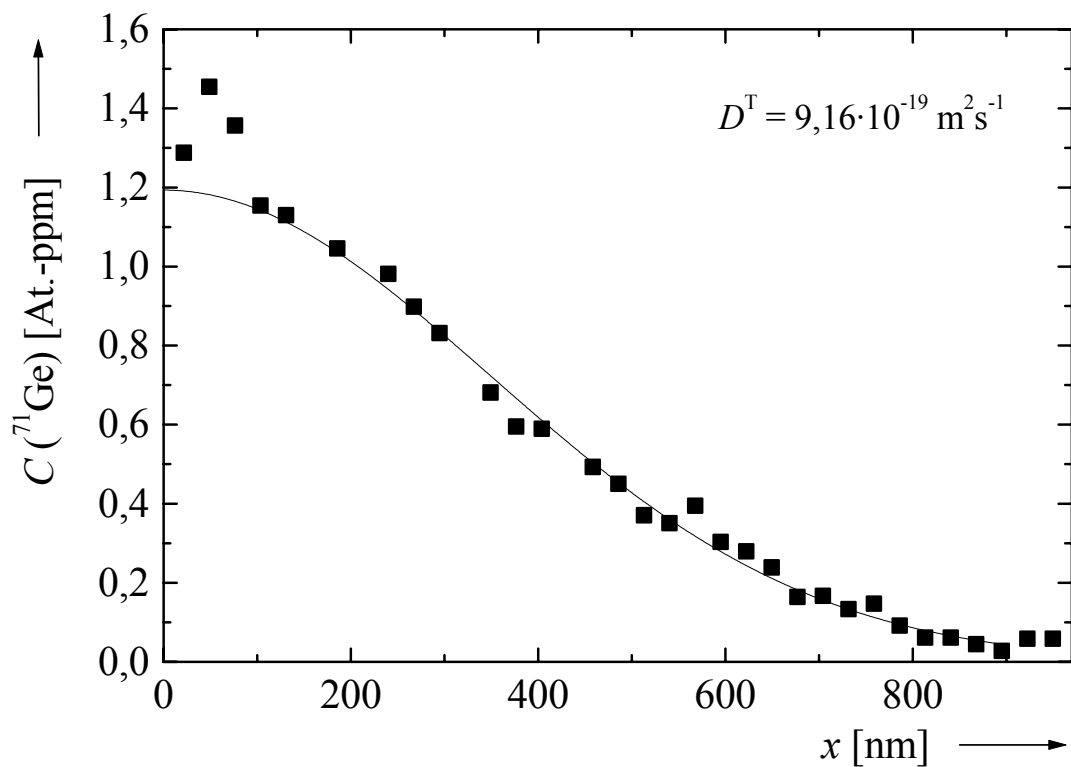


Abbildung 166: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,05}\text{Ge}_{0,95}$ nach Temperung bei 762 °C für 18,3 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

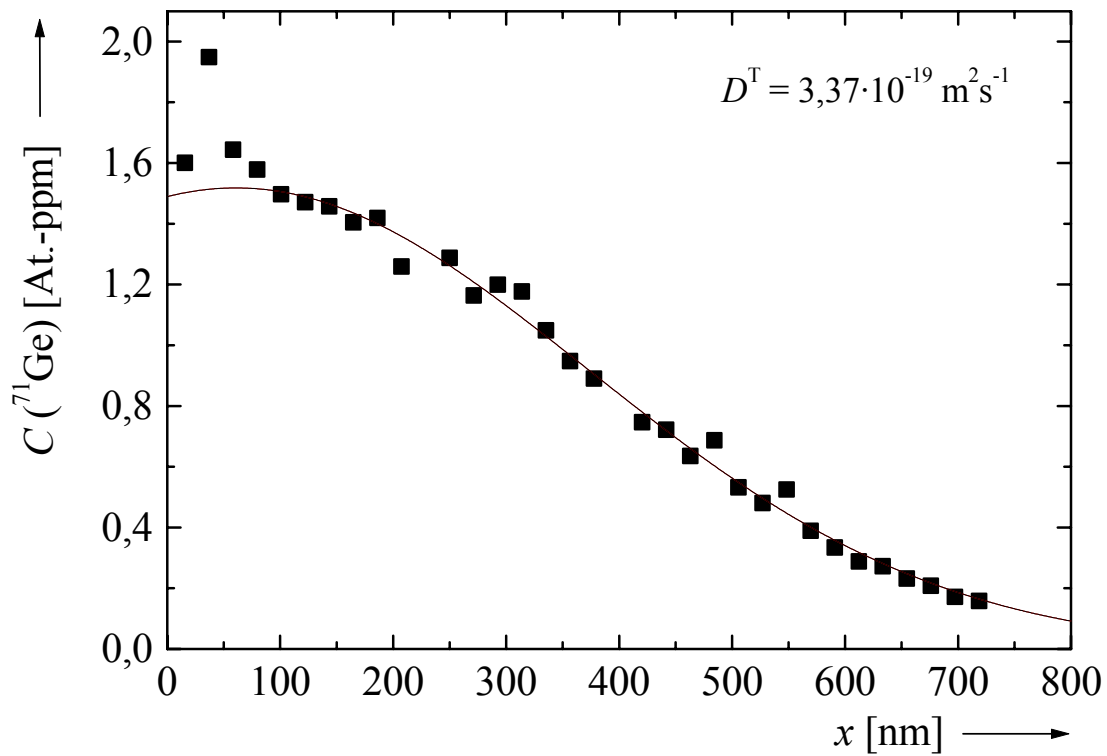


Abbildung 167: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,05}\text{Ge}_{0,95}$ nach Temperung bei 740 °C für 41 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

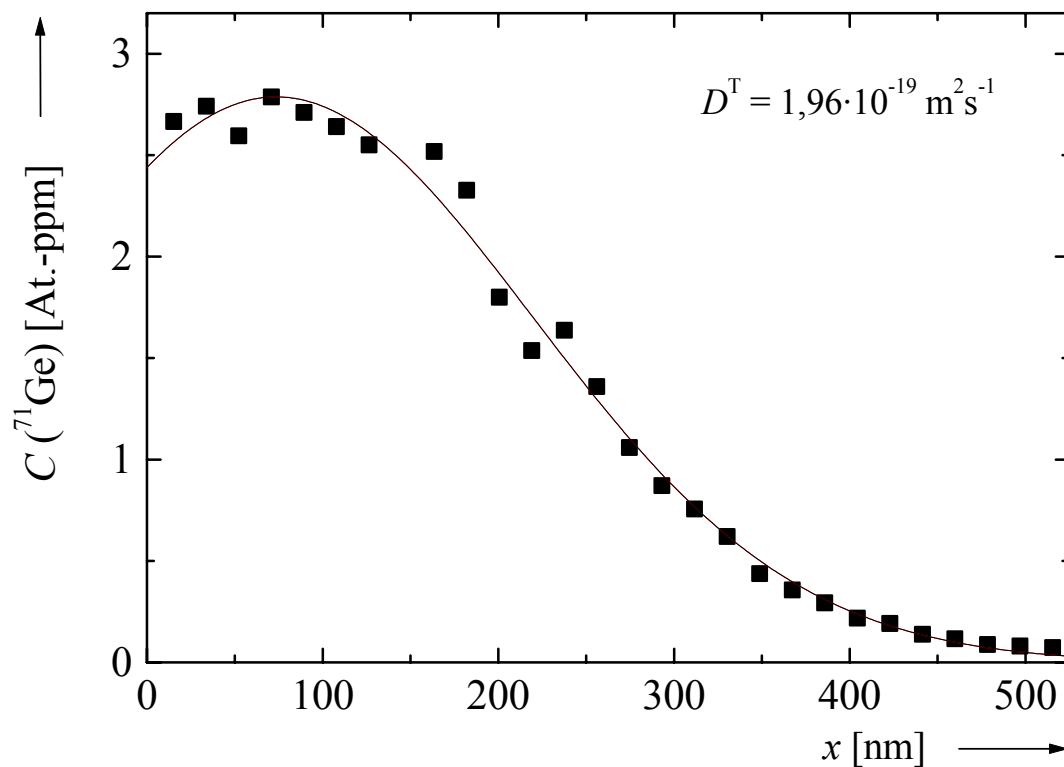


Abbildung 168: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,05}\text{Ge}_{0,95}$ nach Temperung bei 718 °C für $17,5\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

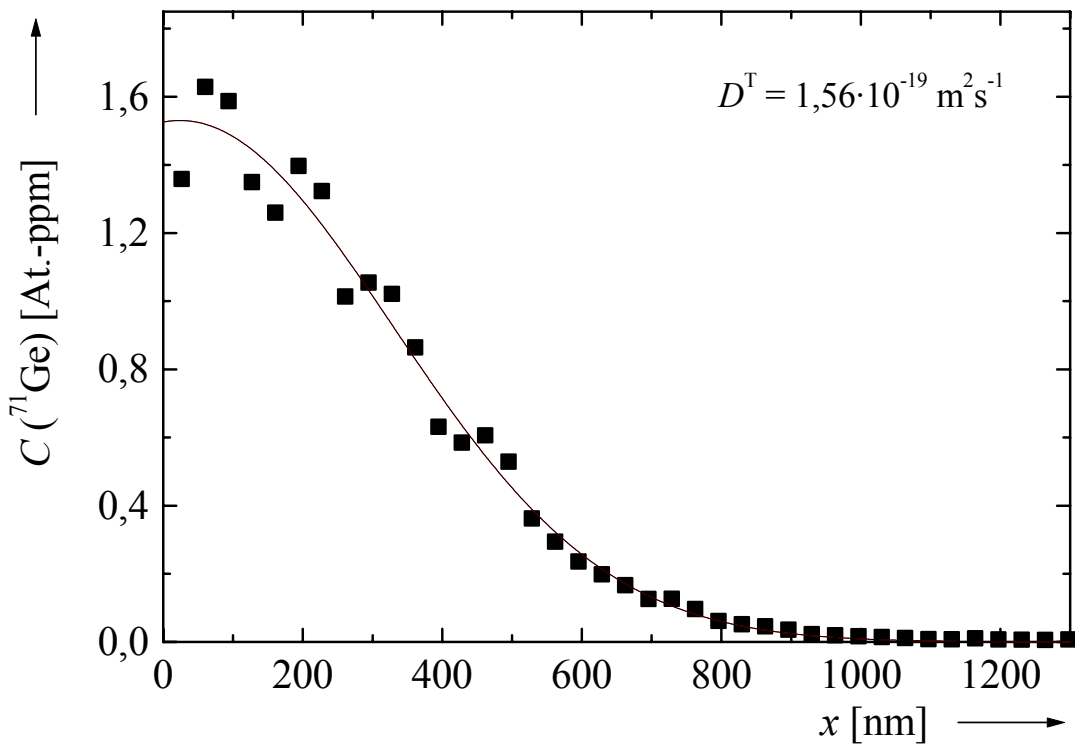


Abbildung 169: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,05}\text{Ge}_{0,95}$ nach Temperung bei 715 °C für 87,5 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

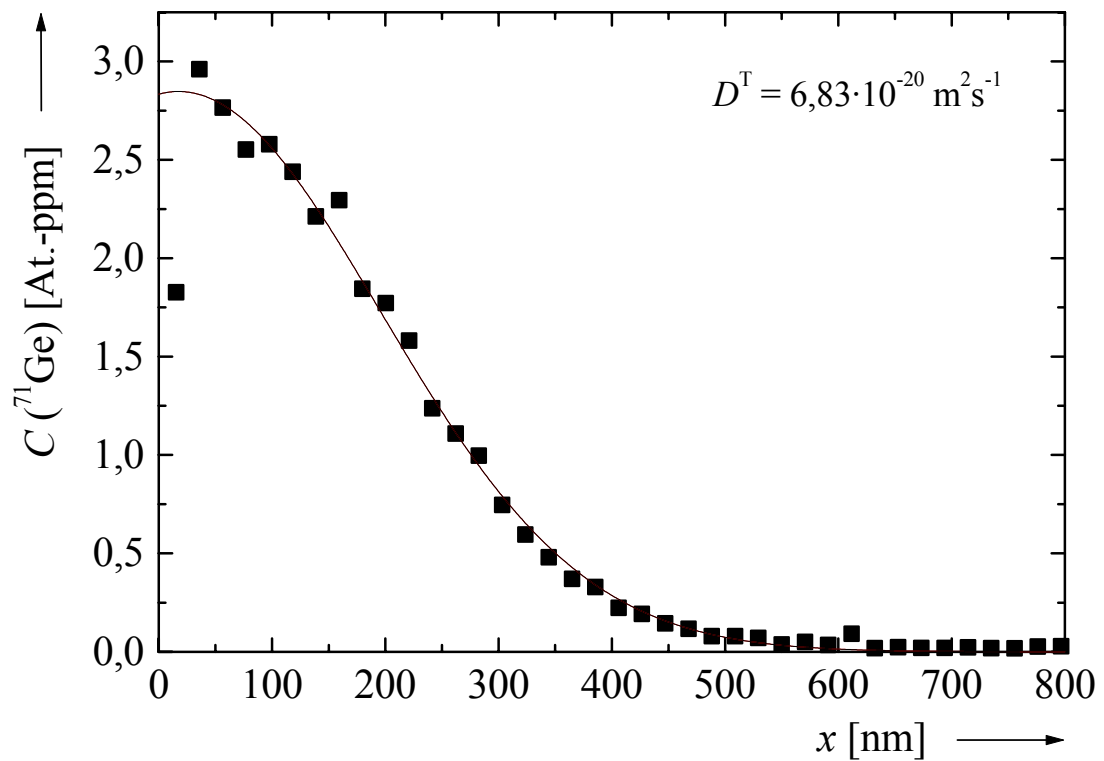


Abbildung 170: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,05}\text{Ge}_{0,95}$ nach Temperung bei 700 °C für 66,5 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

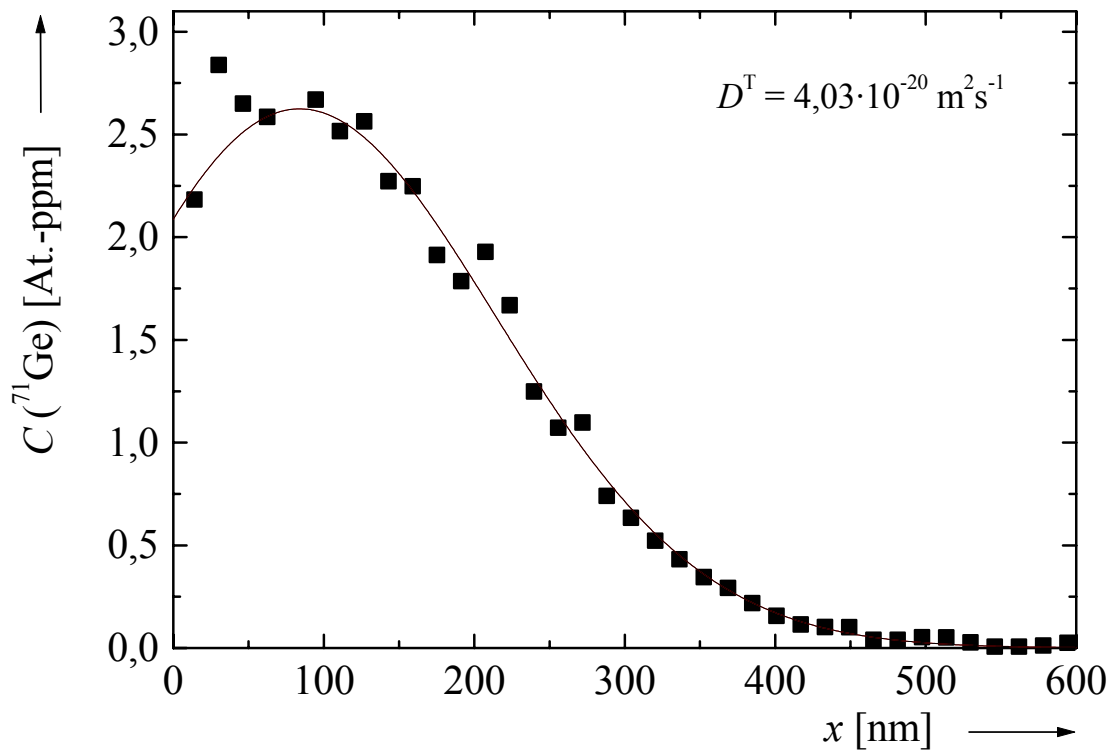


Abbildung 171: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,05}\text{Ge}_{0,95}$ nach Temperung bei 687 °C für 73 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

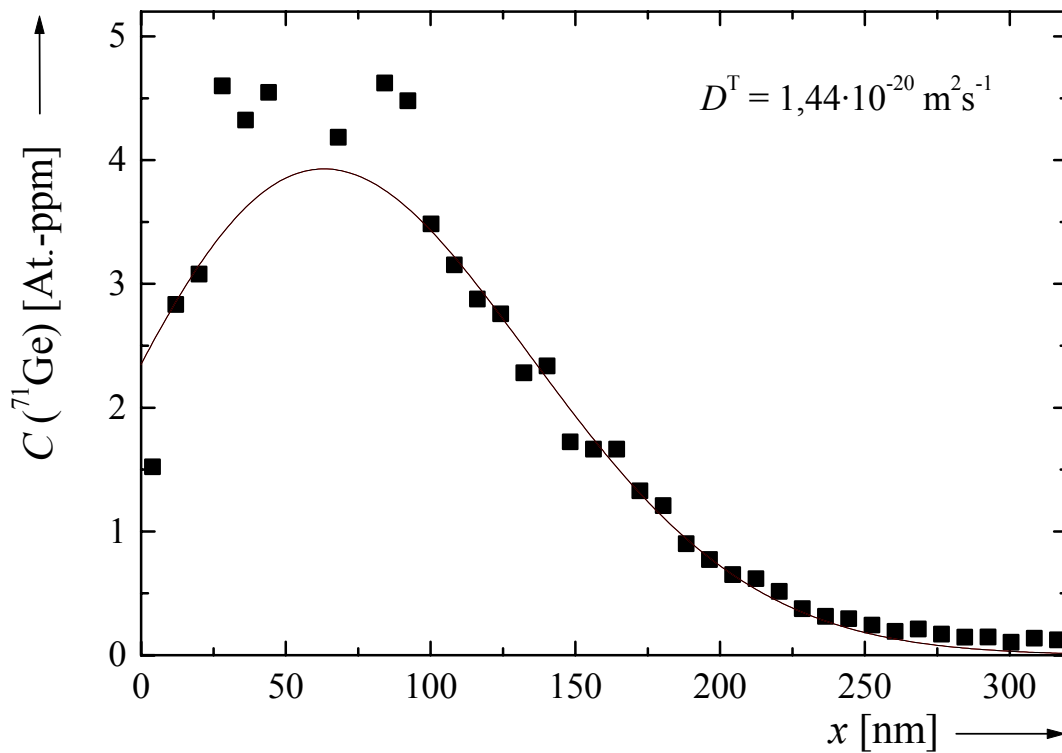


Abbildung 172: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,05}\text{Ge}_{0,95}$ nach Temperung bei 664 °C für $65,5\text{ h}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

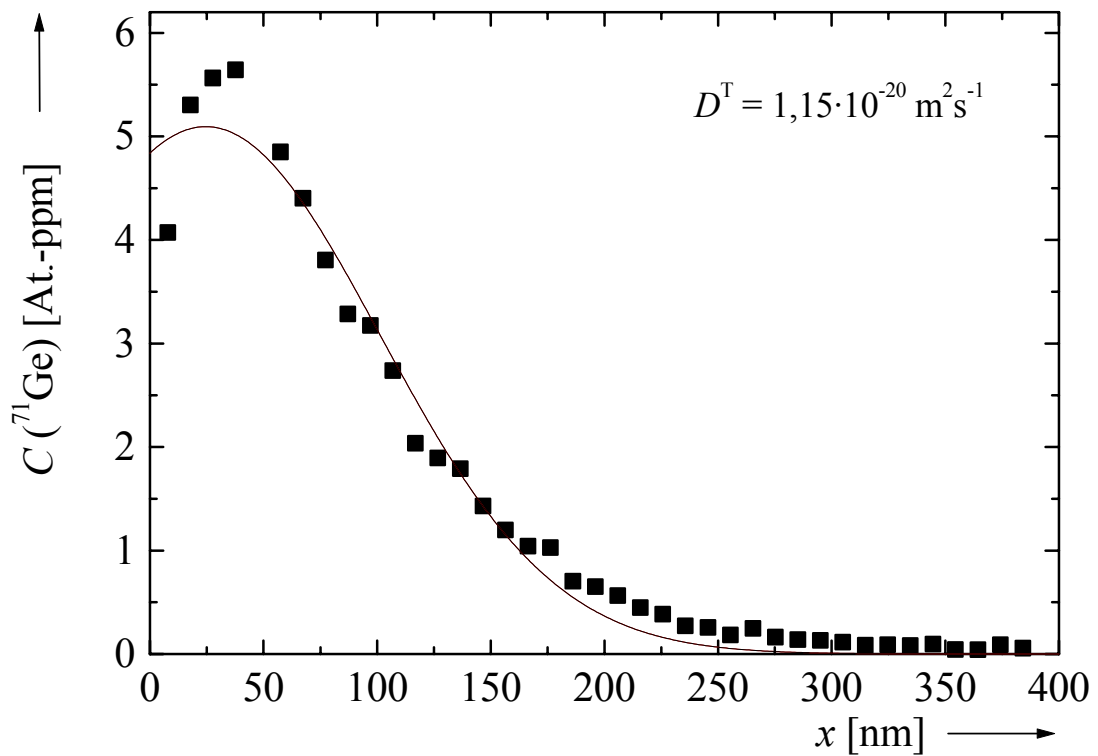


Abbildung 173: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in $\text{Si}_{0,05}\text{Ge}_{0,95}$ nach Temperung bei $656 \text{ }^\circ\text{C}$ für 5 d (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

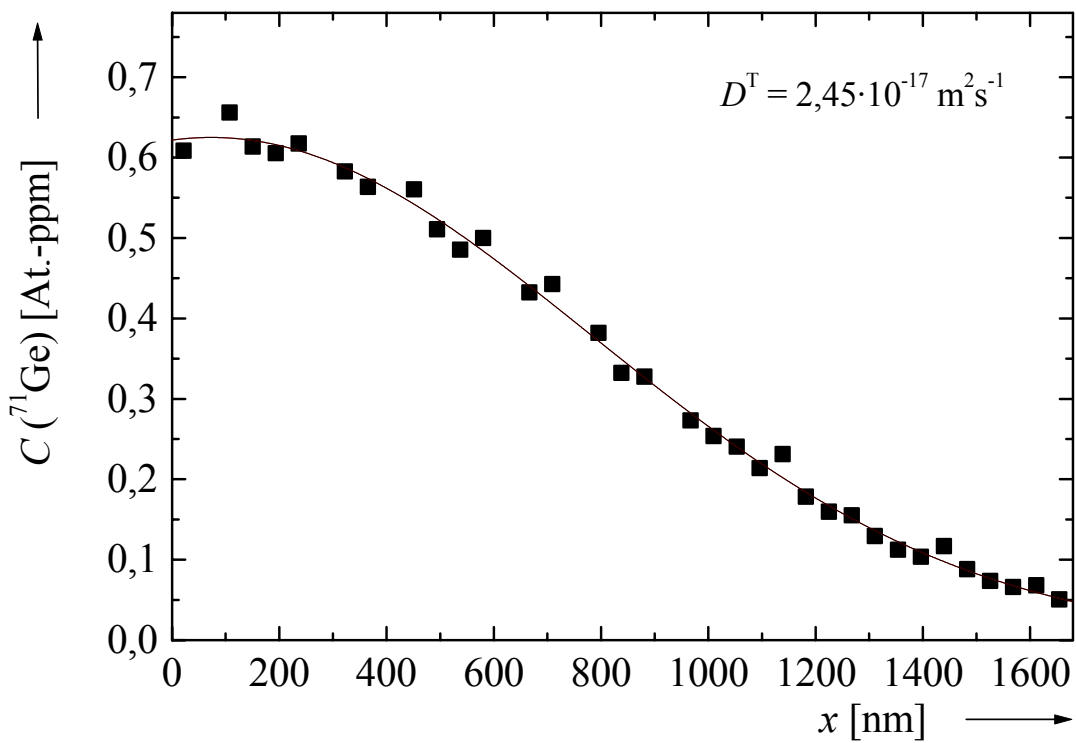


Abbildung 174: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in Ge nach Temperung bei $847 \text{ }^\circ\text{C}$ für 2,75 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

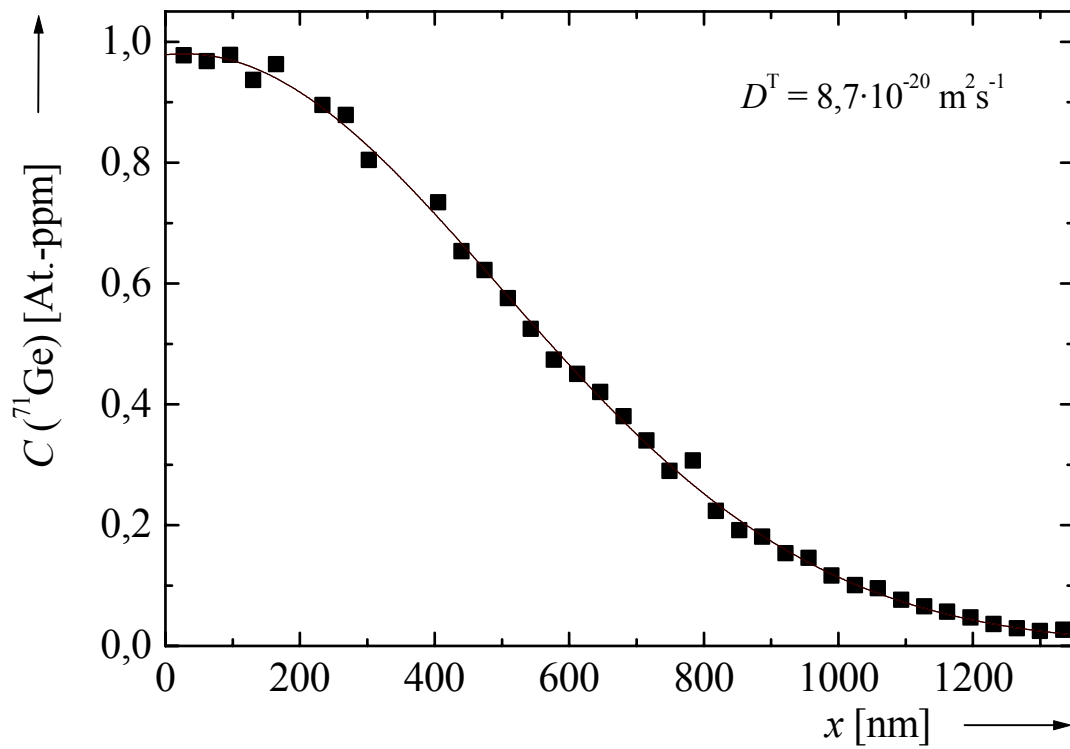


Abbildung 175: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in Ge nach Temperung bei 814 °C für 3 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

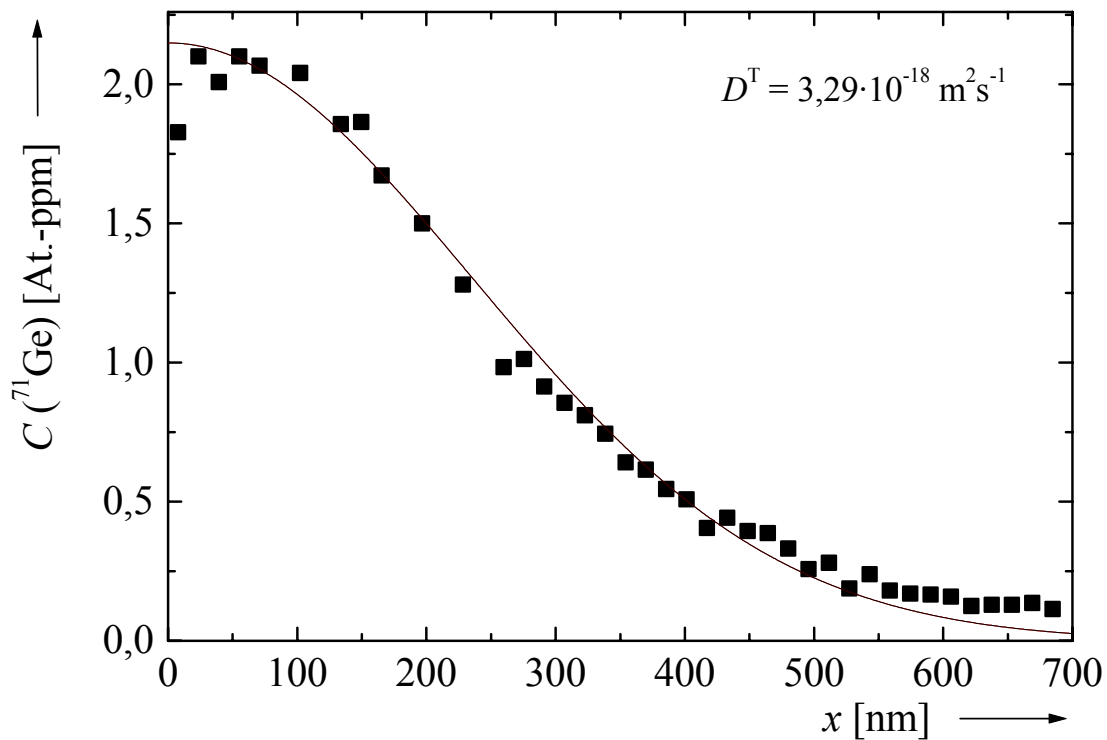


Abbildung 176: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in Ge nach Temperung bei 791 °C für 2,5 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

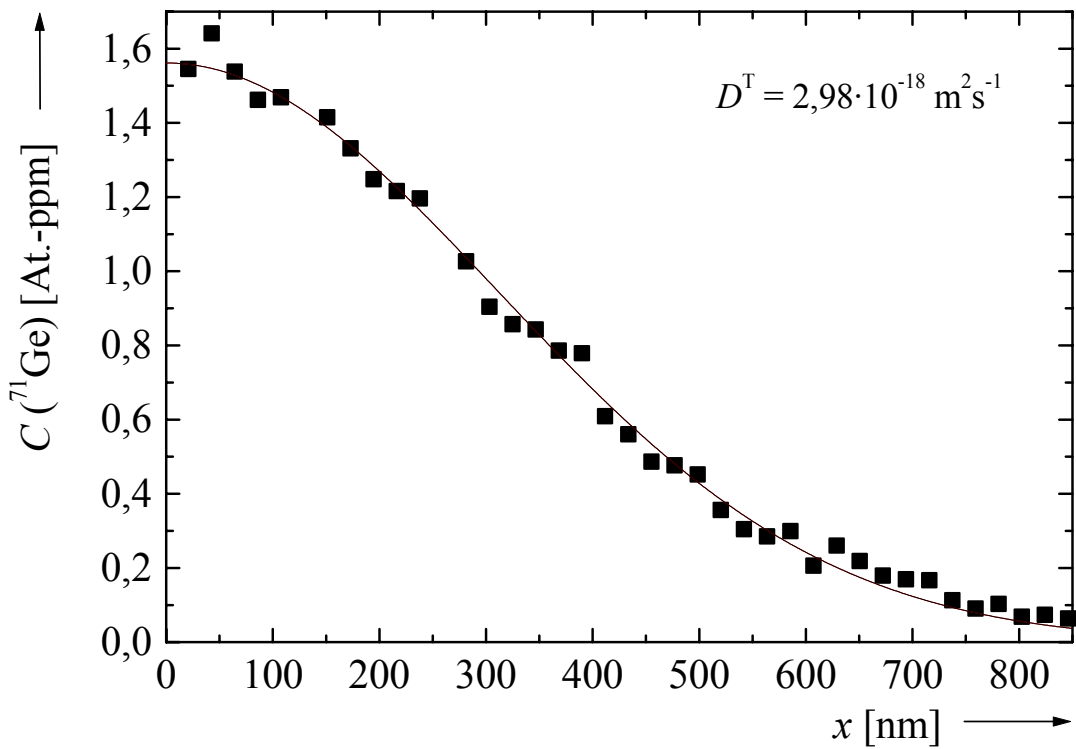


Abbildung 177: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in Ge nach Temperung bei 783 °C für 250 min (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

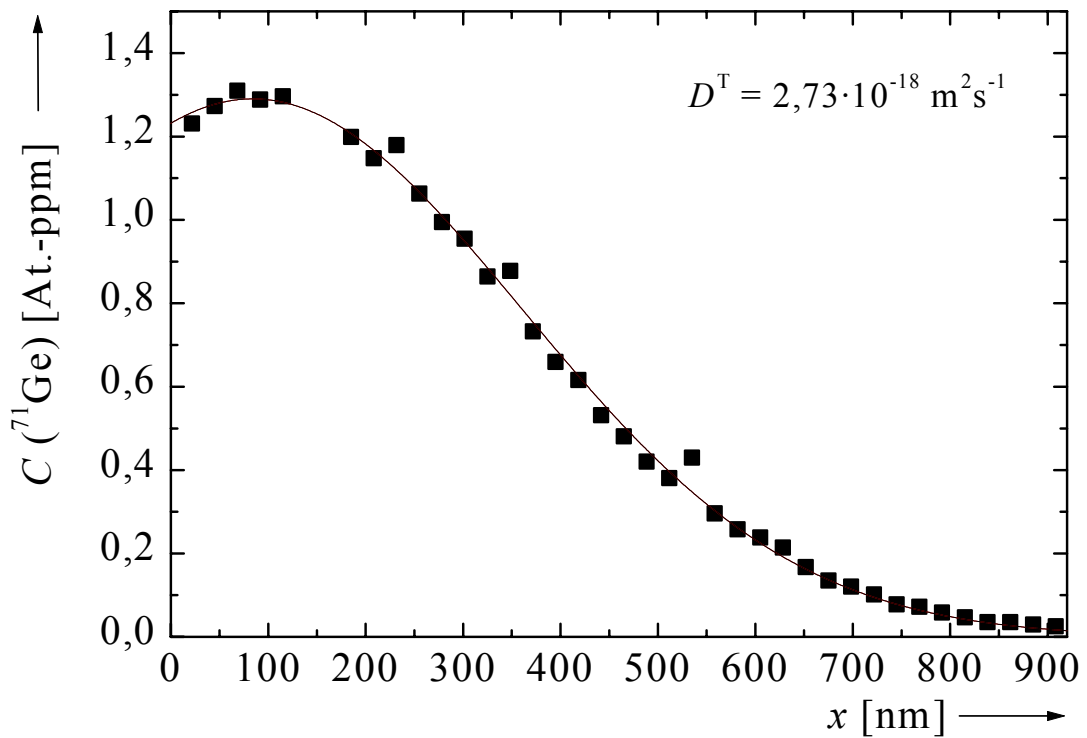


Abbildung 178: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in Ge nach Temperung bei 783 °C für 250 min (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

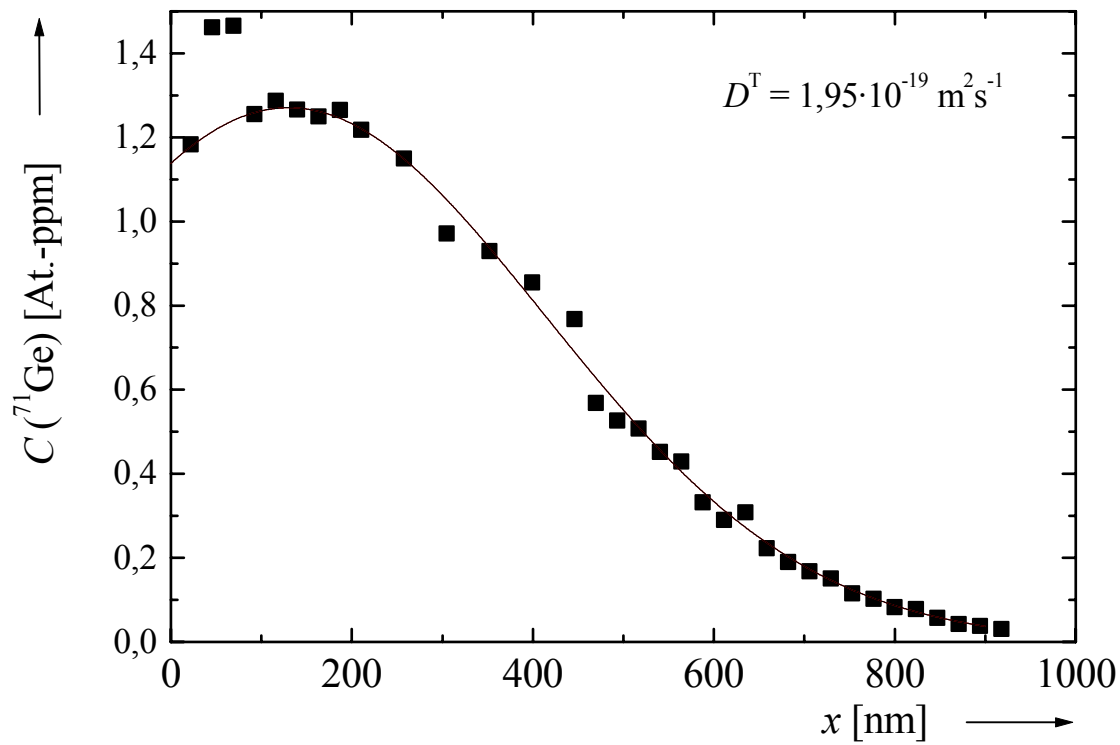


Abbildung 179: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in Ge nach Temperung bei 709 °C für 66 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

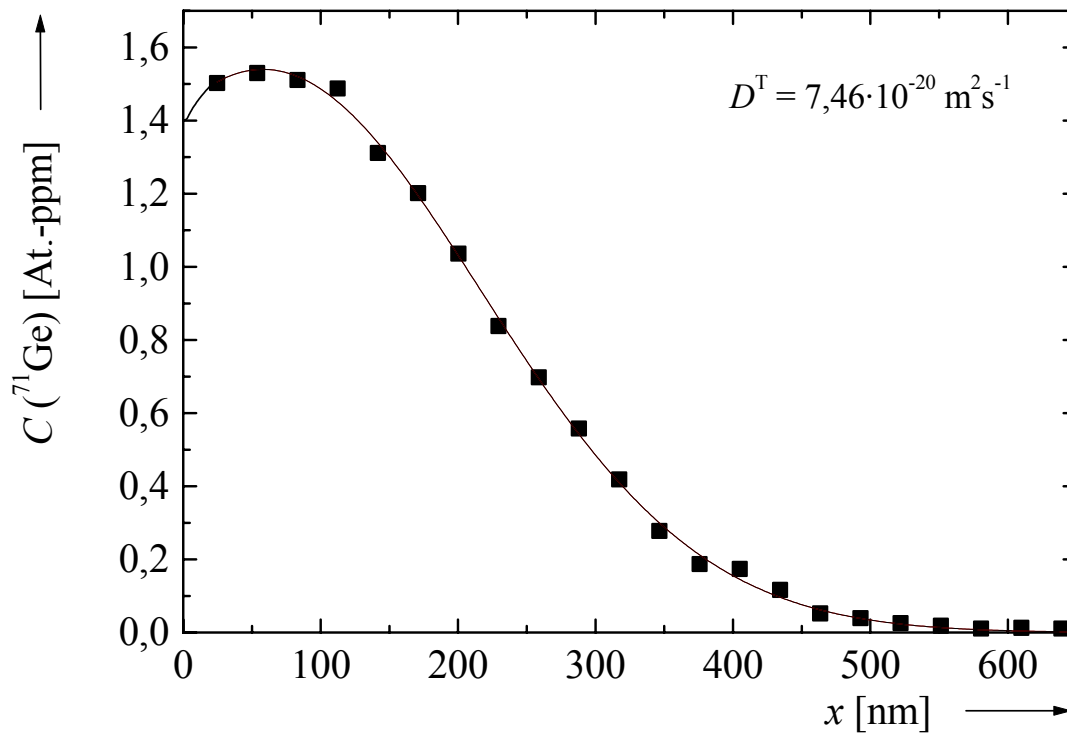


Abbildung 180: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in Ge nach Temperung bei 686 °C für 55 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

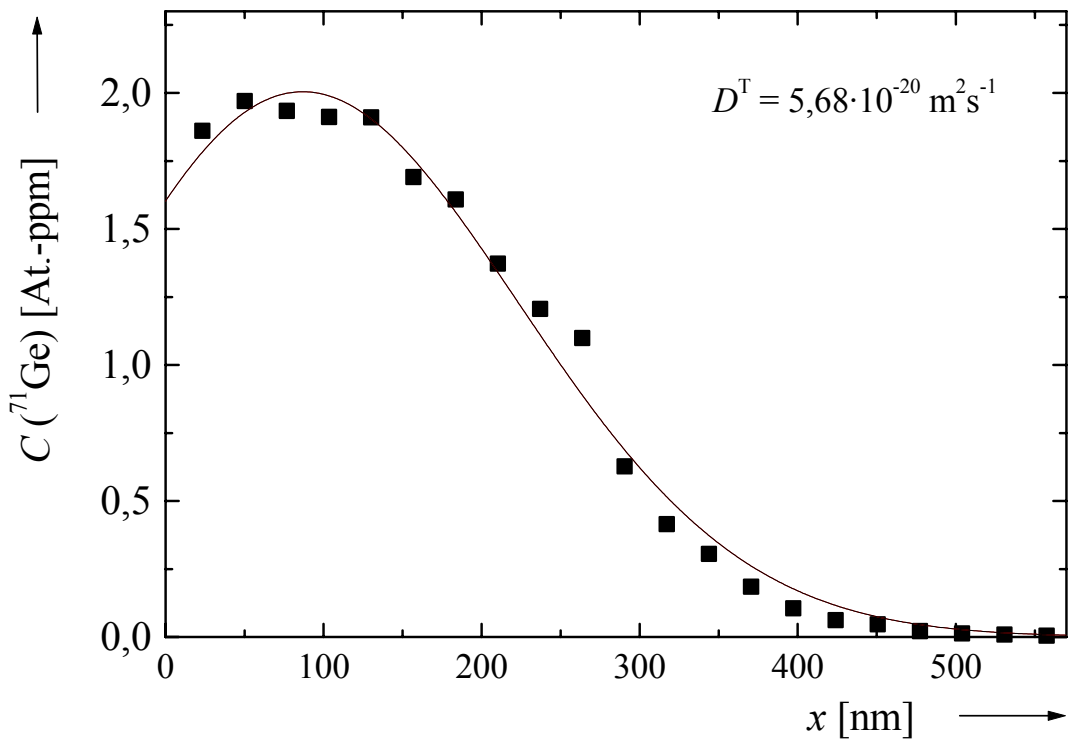


Abbildung 181: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in Ge nach Temperung bei 680 °C für 70 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

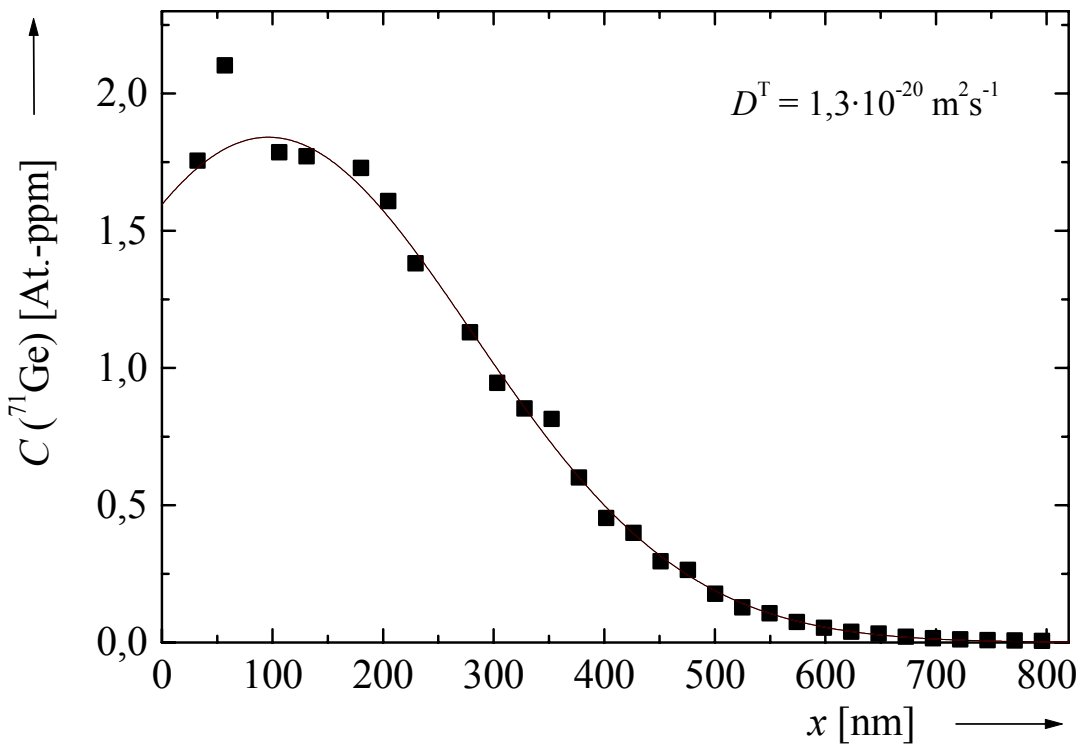


Abbildung 182: Diffusionsprofil von ^{71}Ge in Ge nach Temperung bei 643 °C für 477 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

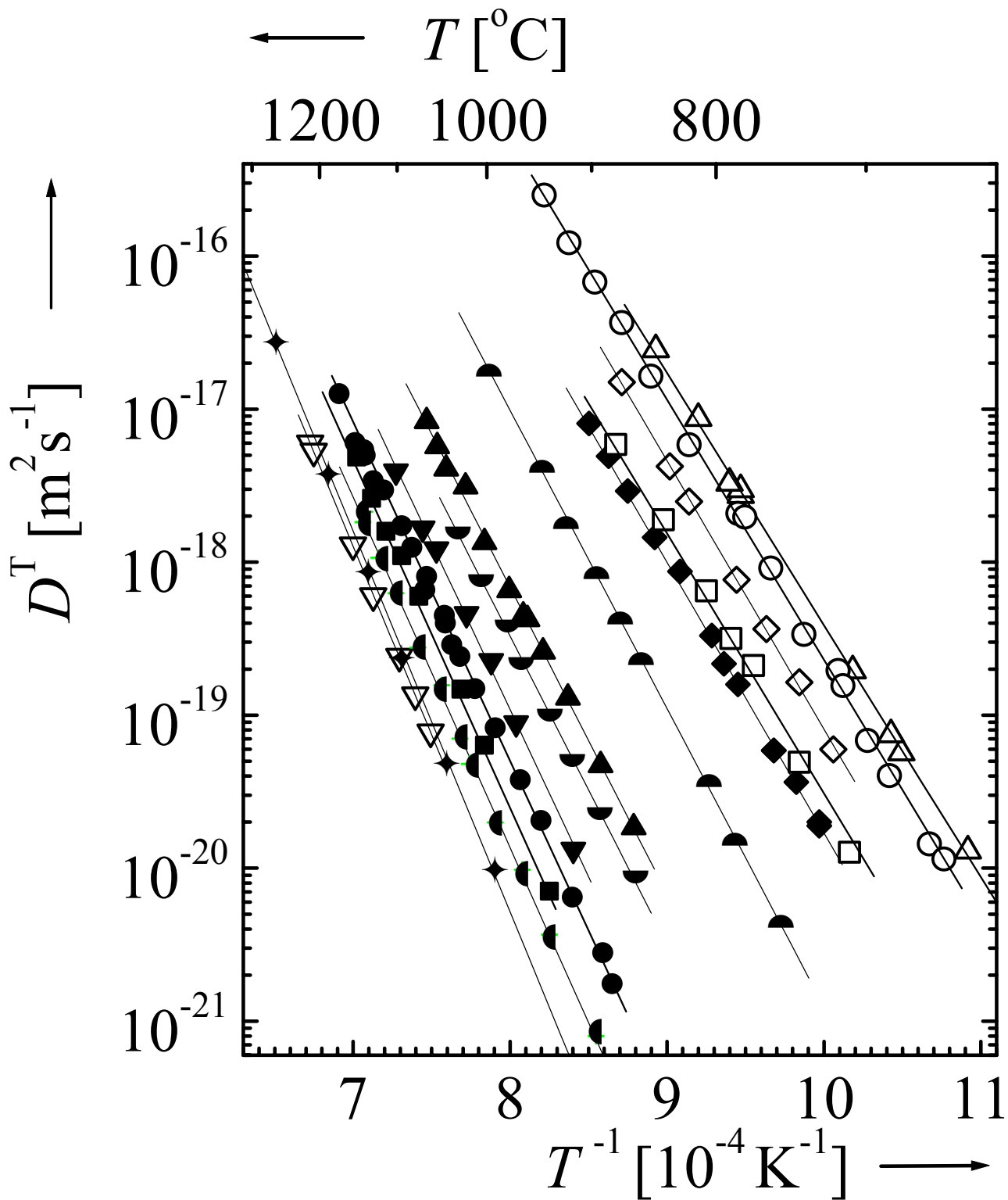


Abbildung 183: Arrhenius-Darstellung der ^{71}Ge -Tracer-Selbstdiffusionskoeffizienten D^T in $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ [∇ : $y = 0$; \blacklozenge : $y = 0,04$; \bullet : $y = 0,10$; \blacksquare : $y = 0,17$; \bullet : $y = 0,25$; \blacktriangledown : $y = 0,35$; \blacklozenge : $y = 0,43$; \blacktriangle : $y = 0,50$; \blacklozenge : $y = 0,65$; \blacklozenge : $y = 0,80$ \square : $y = 0,85$; \diamond : $y = 0,90$; \circ : $y = 0,95$; \triangle : $y = 1,0$]. Offene bzw. volle Symbole stehen für Messungen an bulk-Material bzw. an epitaktischen Schichten. Die Geraden sind numerische Anpassungen von Arrhenius-Gesetzen an die D^T -Werte der verschiedenen Zusammensetzungen.

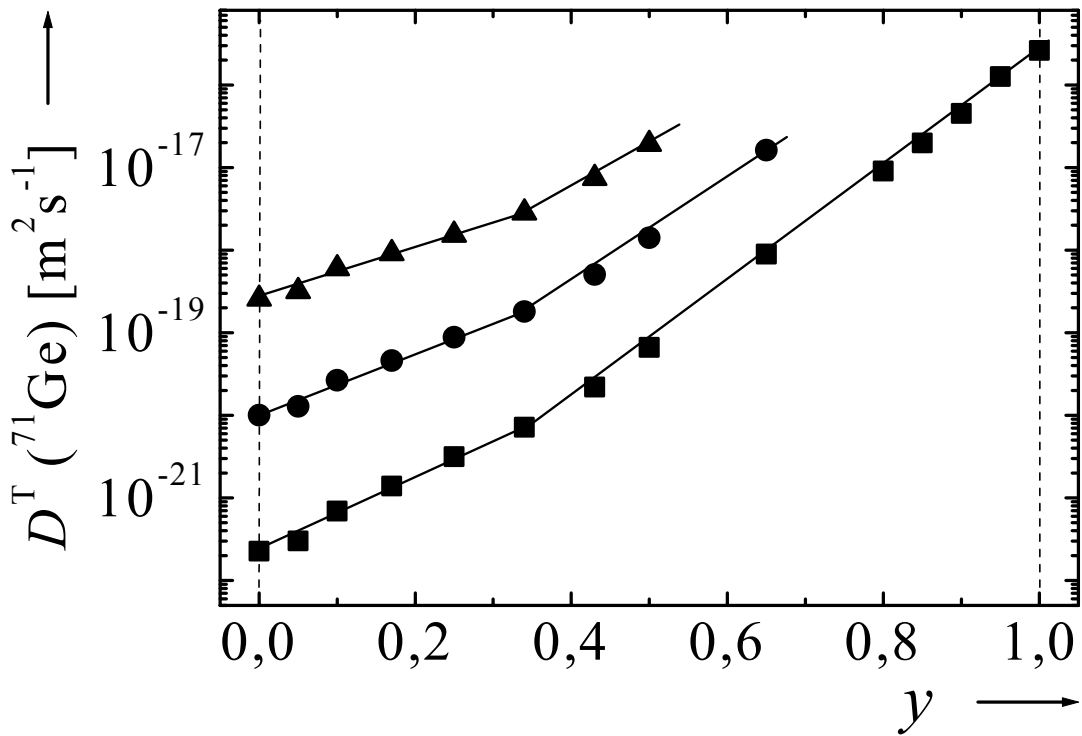


Abbildung 184: Tracer-Selbstdiffusionskoeffizient D^T von ^{71}Ge in $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ als Funktion des Ge-Gehalts y für 900 °C (■), 1000 °C (●) bzw. 1100 °C (▲).

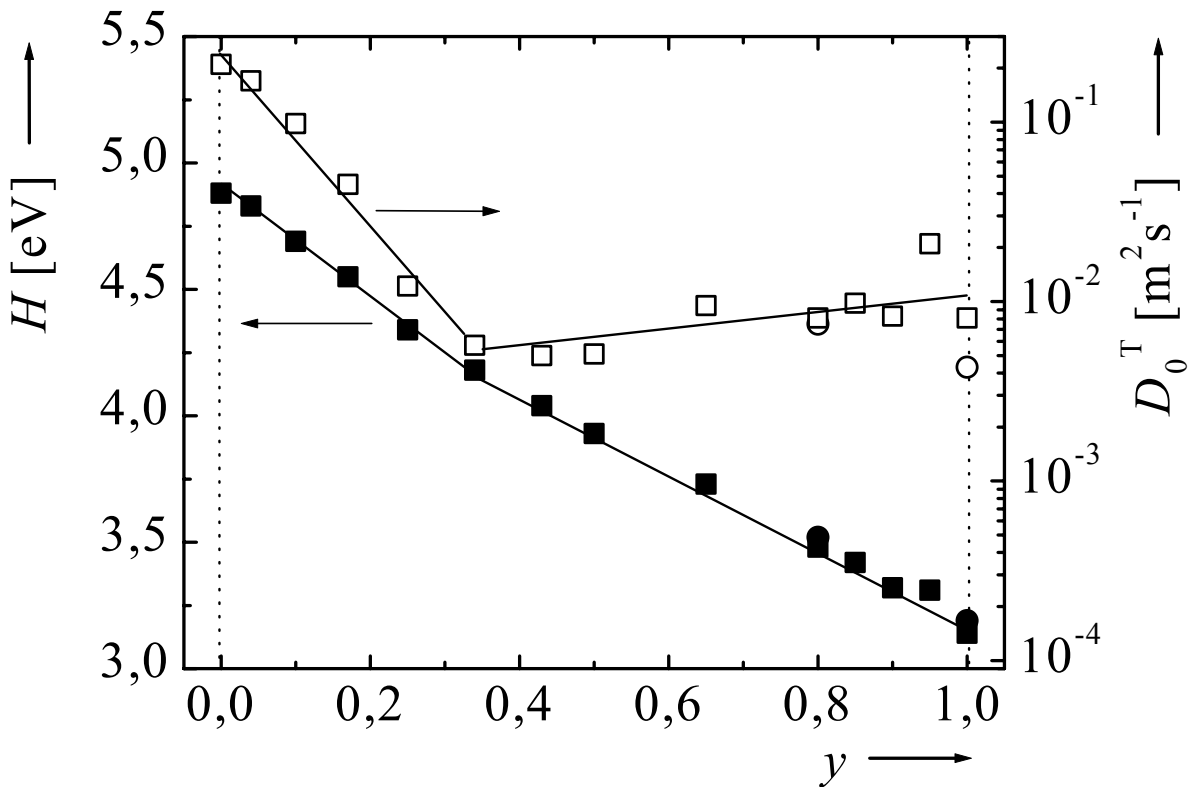


Abbildung 185: Selbstdiffusionsenthalpie H (volle Symbole) und präexponentieller Faktor D_0^T (offene Symbole) für ^{71}Ge (Quadrate) und ^{31}Si (Kreise) in $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ als Funktion des Ge-Gehalts y .

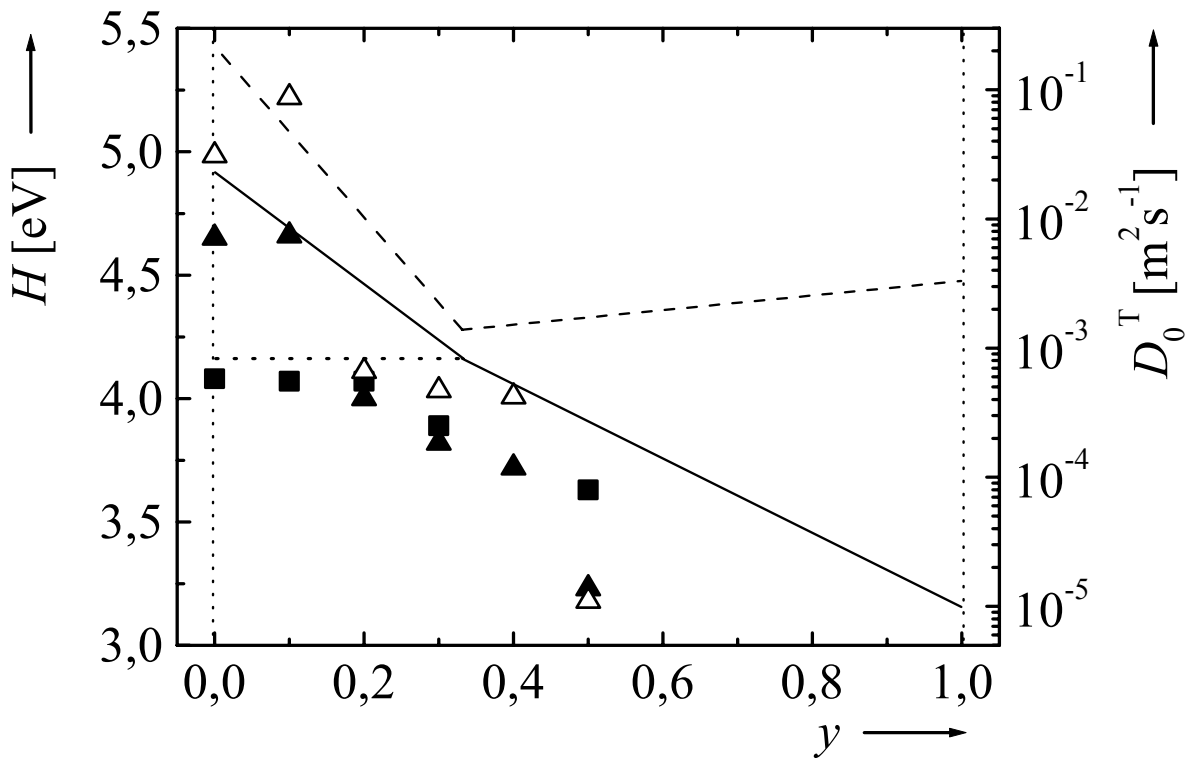


Abbildung 186: Selbstdiffusionsenthalpie H (\blacktriangle) und präexponentielle Faktoren D_0^T (\triangle) für ^{72}Ge -Selbstdiffusionsdaten von ZANGENBERG et al. [ZHF01] und Diffusionsenthalpie H (\blacksquare) für Sb-Diffusionsdaten in $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ von LARSEN et al. [LK96] als Funktion des Ge-Gehalts y . Die durchgezogene, punktierte bzw. gestrichelte Linie kennzeichnet den Verlauf der entsprechenden Werte für H , H_v bzw. D_0^T aus dieser Arbeit.

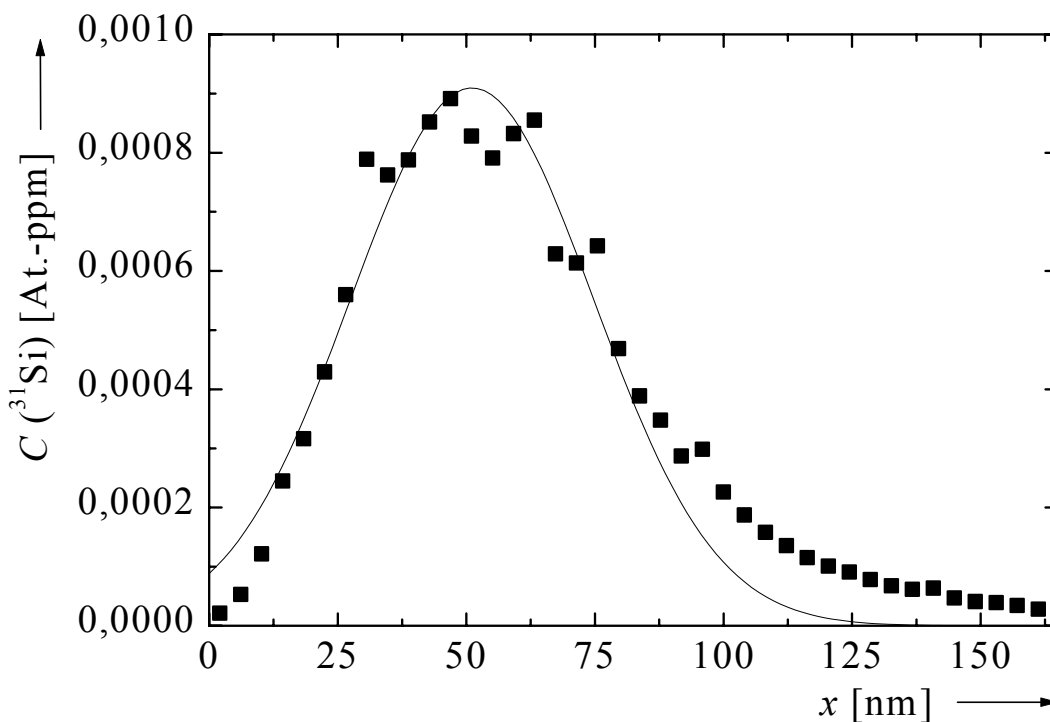


Abbildung 187: Implantationsprofil von ^{31}Si in Si (\blacksquare). An die Meßpunkte ist gemäß (3.5) eine Gauß-Kurve (—) mit $x_0 = 51,2$ nm und $\sigma = 33,4$ nm angepaßt.

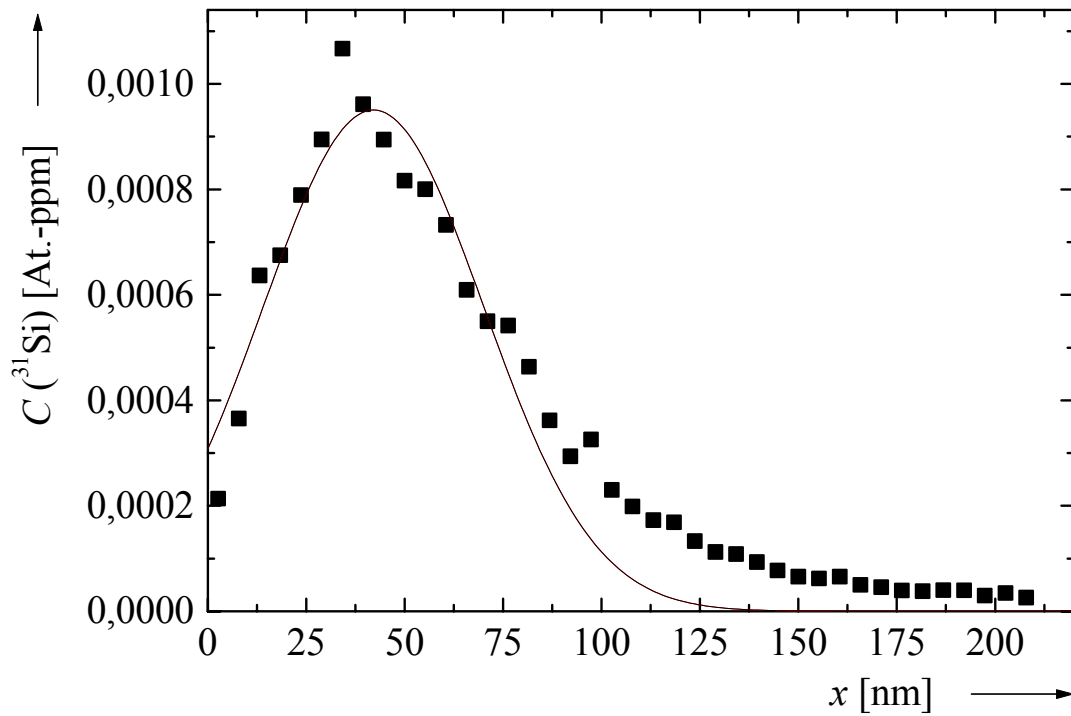


Abbildung 188: Implantationsprofil von ^{31}Si in $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$ (■). An die Meßpunkte ist gemäß (3.5) eine Gauß-Kurve (—) mit $x_0 = 42,9$ nm und $\sigma = 32,9$ nm angepaßt.

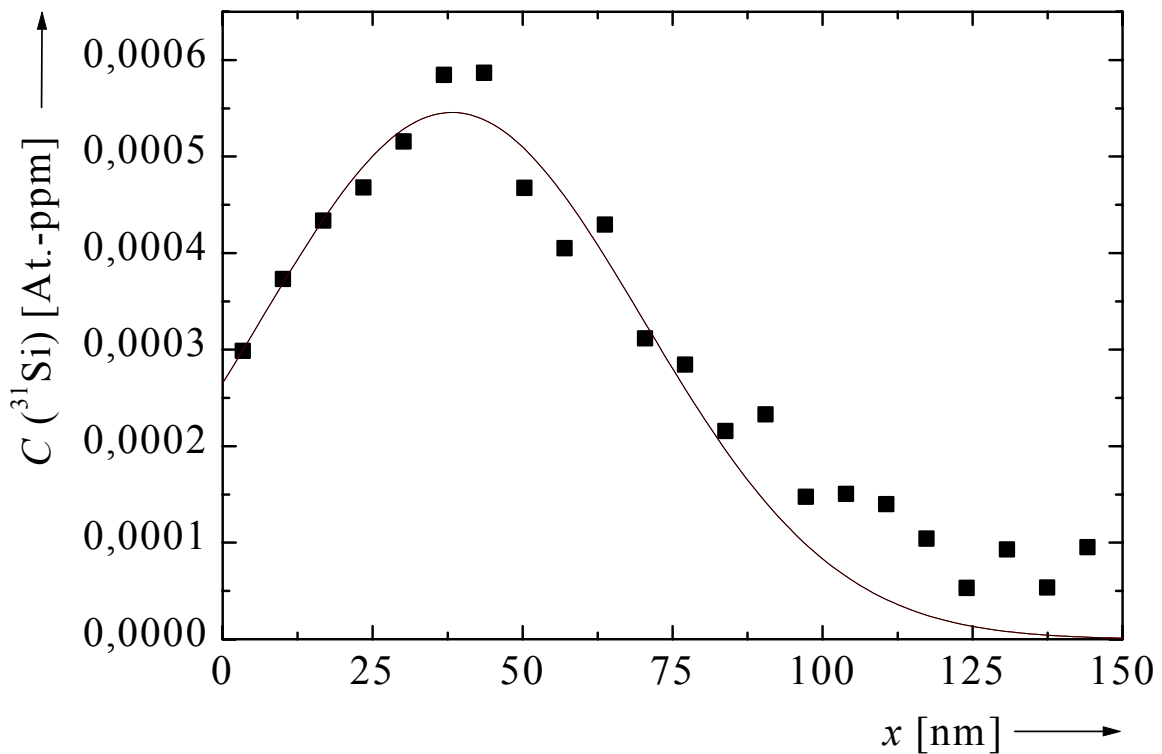


Abbildung 189: Implantationsprofil von ^{31}Si in $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$ (■). An die Meßpunkte ist gemäß (3.5) eine Gauß-Kurve (—) mit $x_0 = 38,5$ nm und $\sigma = 30,9$ nm angepaßt.

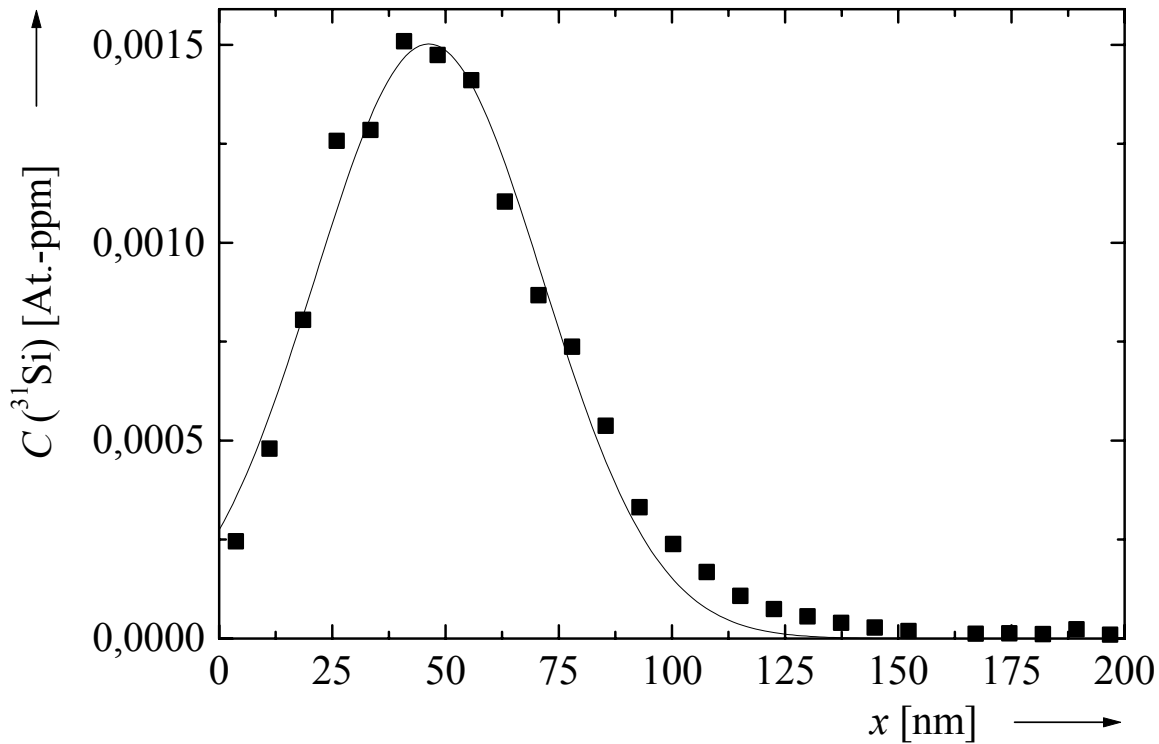


Abbildung 190: Implantationsprofil von ^{31}Si in Ge (■). An die Meßpunkte ist gemäß (3.5) eine Gauß-Kurve (—) mit $x_0 = 42,9$ nm und $\sigma = 32,9$ nm angepaßt.

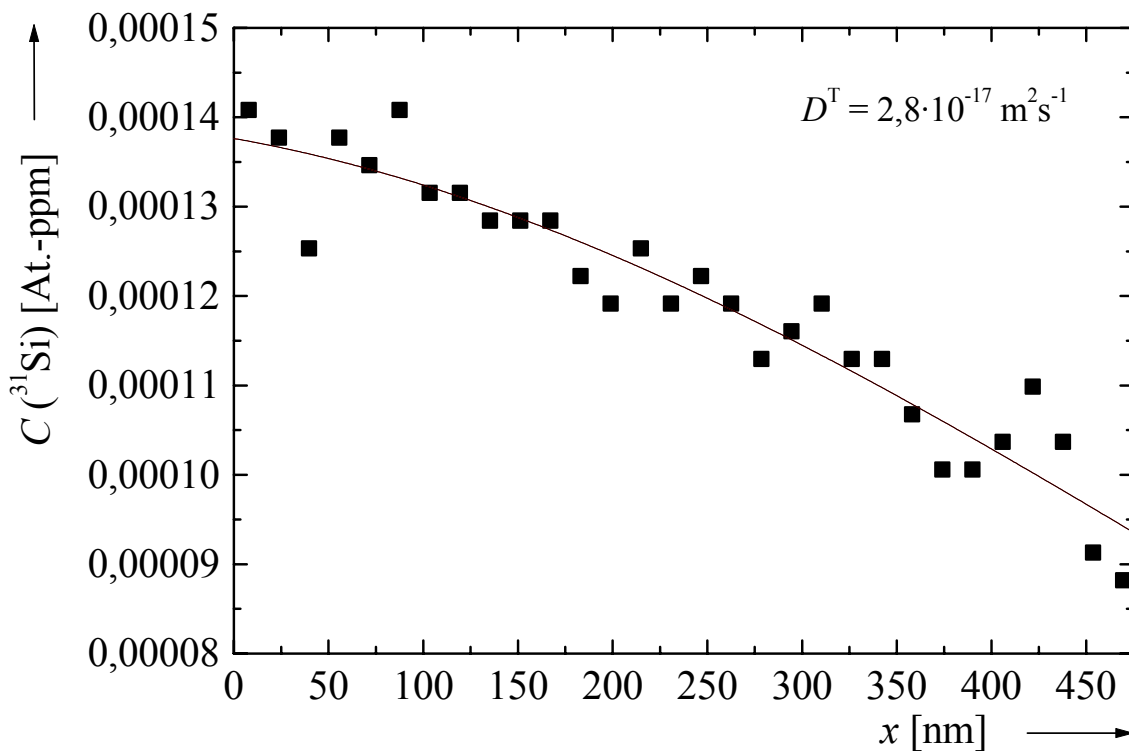


Abbildung 191: Diffusionsprofil von ^{31}Si in Si nach Temperatur bei 1273 °C für 1 h (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

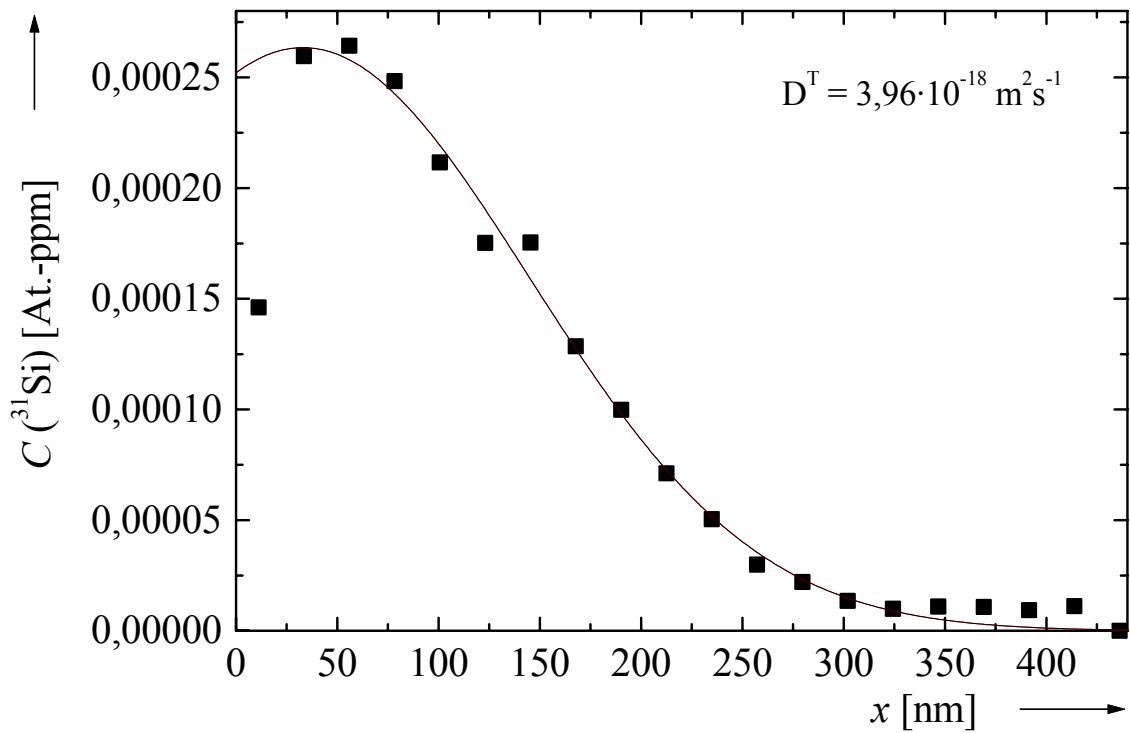


Abbildung 192: Diffusionsprofil von ^{31}Si in $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$ nach Temperung bei 1045 °C für 25 min (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

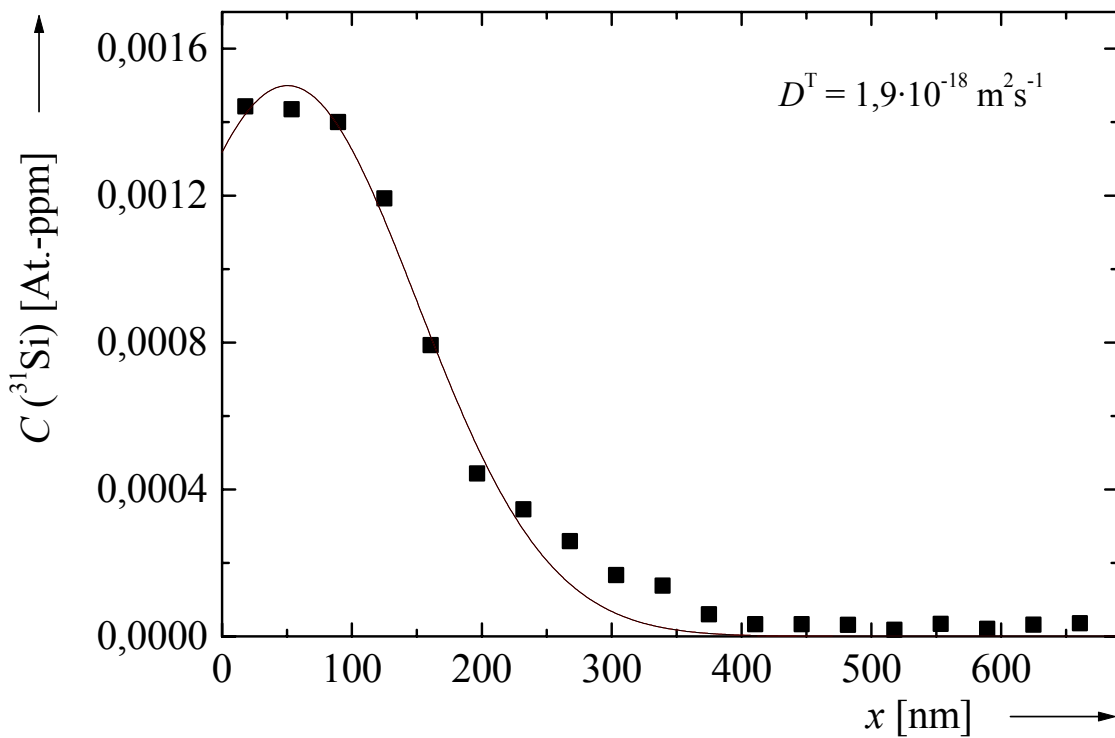


Abbildung 193: Diffusionsprofil von ^{31}Si in $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$ nach Temperung bei 1015 °C für 20 min (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

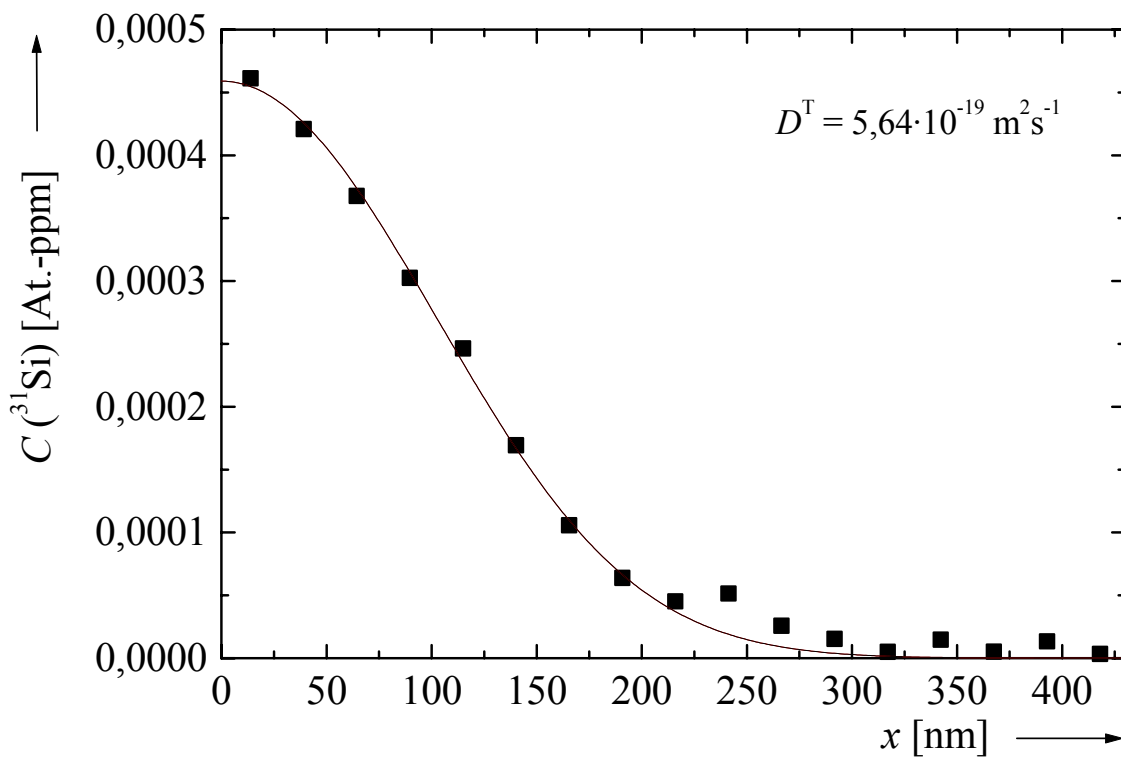


Abbildung 194: Diffusionsprofil von ^{31}Si in $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$ nach Temperung bei $975 \text{ }^\circ\text{C}$ für 90 min (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

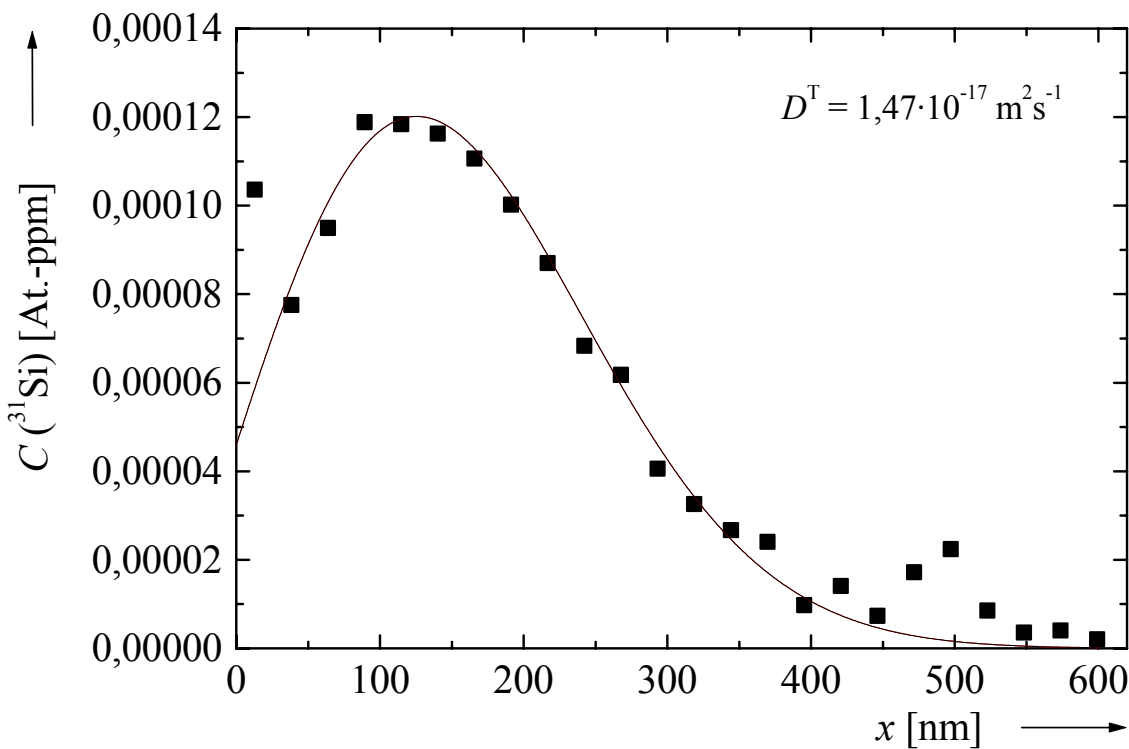


Abbildung 195: Diffusionsprofil von ^{31}Si in $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$ nach Temperung bei $952 \text{ }^\circ\text{C}$ für 21,2 min (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

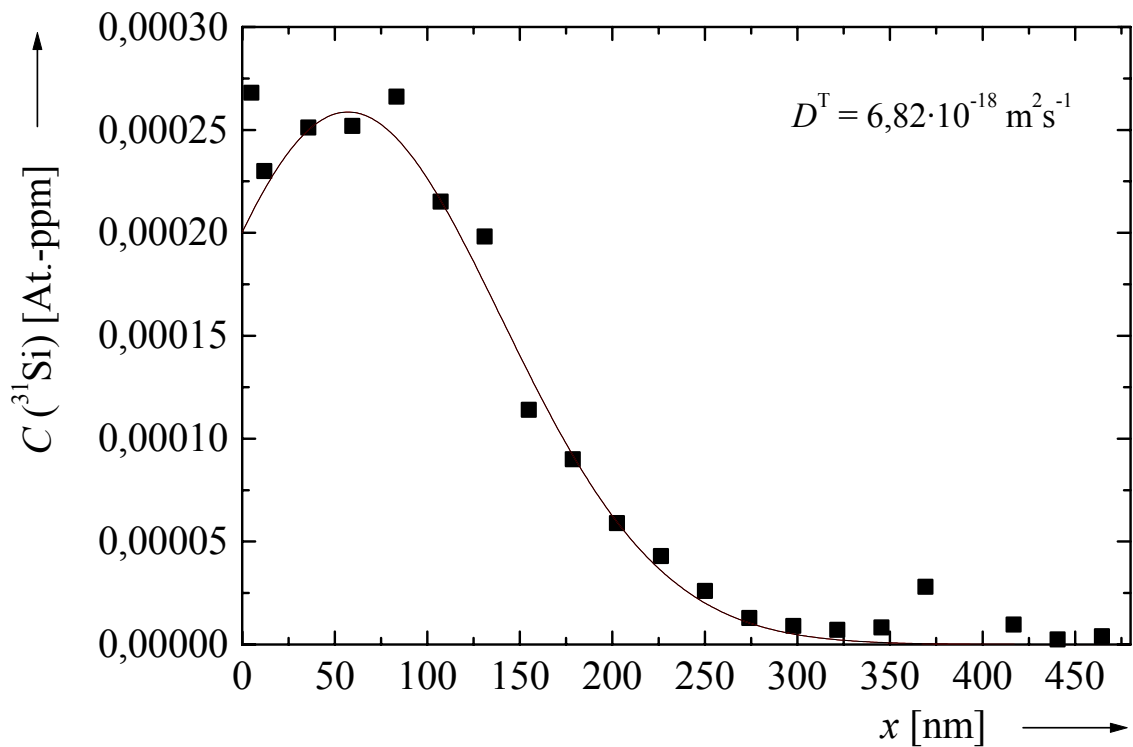


Abbildung 196: Diffusionsprofil von ^{31}Si in $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$ nach Temperung bei 924 °C für 20,9 min (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

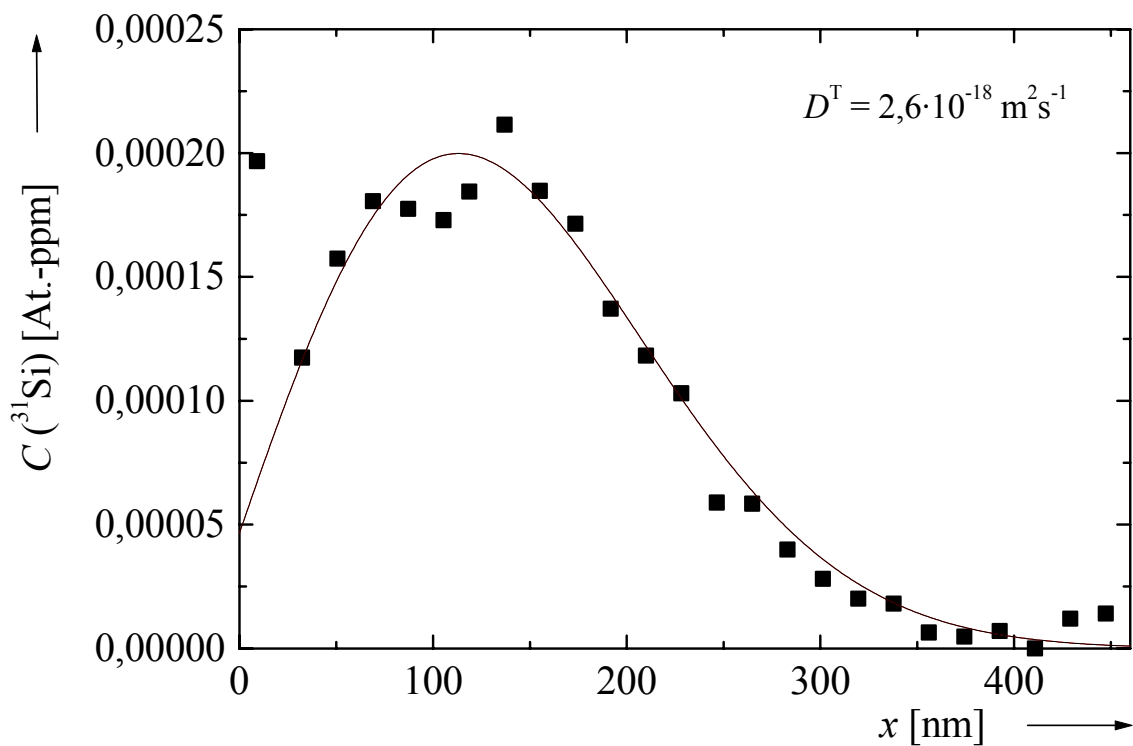


Abbildung 197: Diffusionsprofil von ^{31}Si in $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$ nach Temperung bei 897 °C für 51,1 min (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

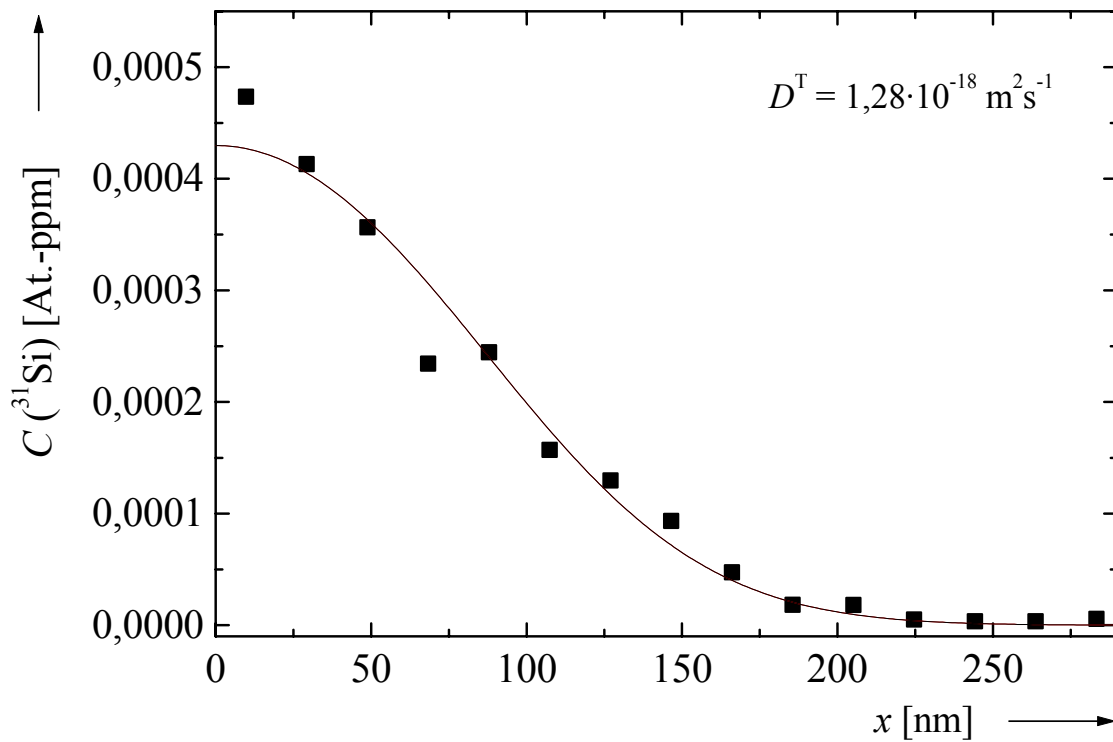


Abbildung 198: Diffusionsprofil von ^{31}Si in $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$ nach Temperung bei 869 °C für $21,1\text{ min}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

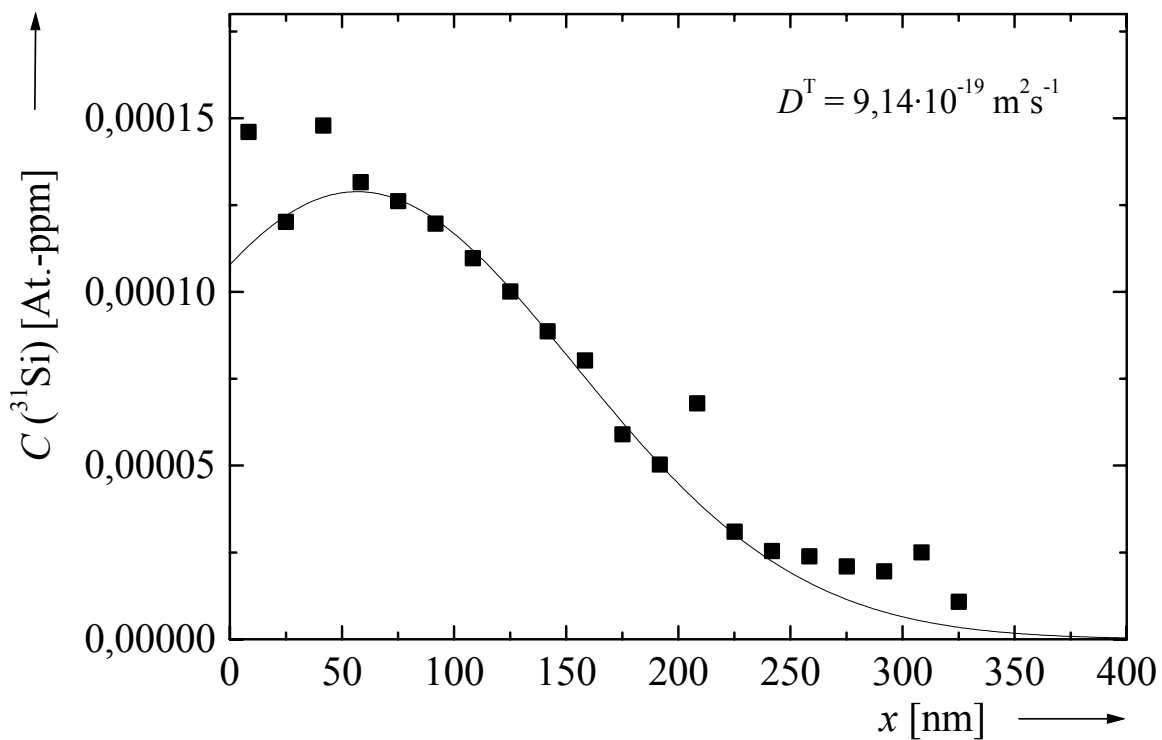


Abbildung 199: Diffusionsprofil von ^{31}Si in $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$ nach Temperung bei 859 °C für $90,7\text{ min}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

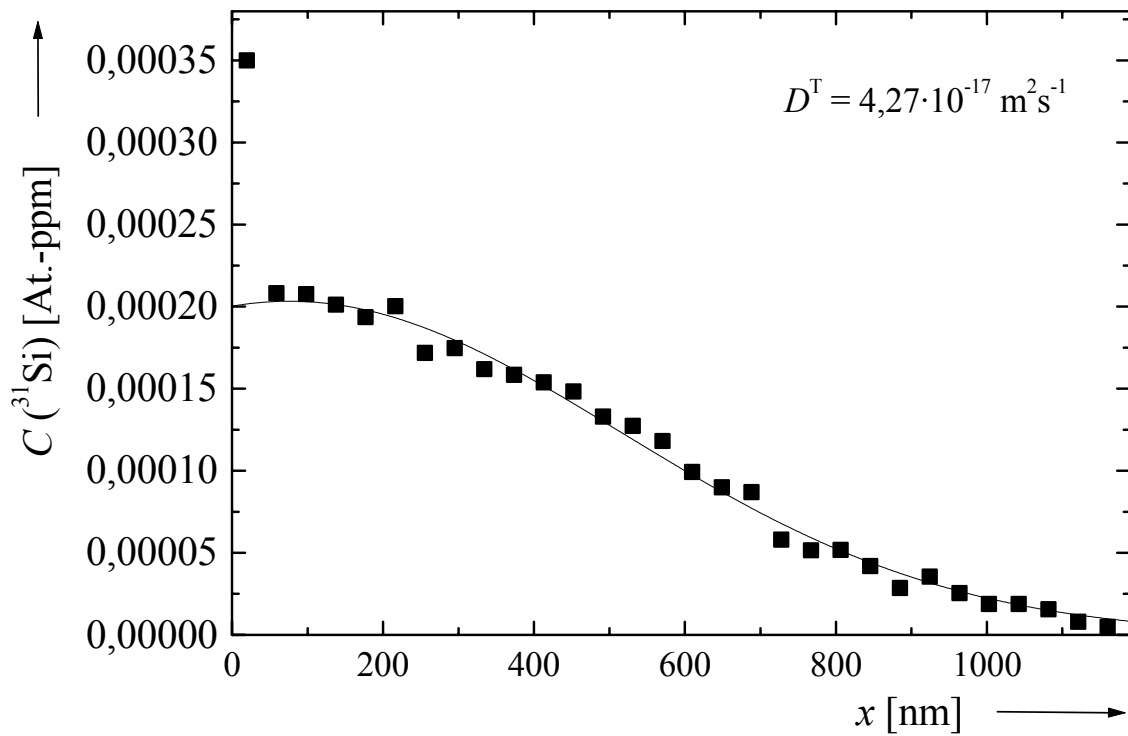


Abbildung 200: Diffusionsprofil von ^{31}Si in Ge nach Temperung bei 904 °C für $44,1\text{ min}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

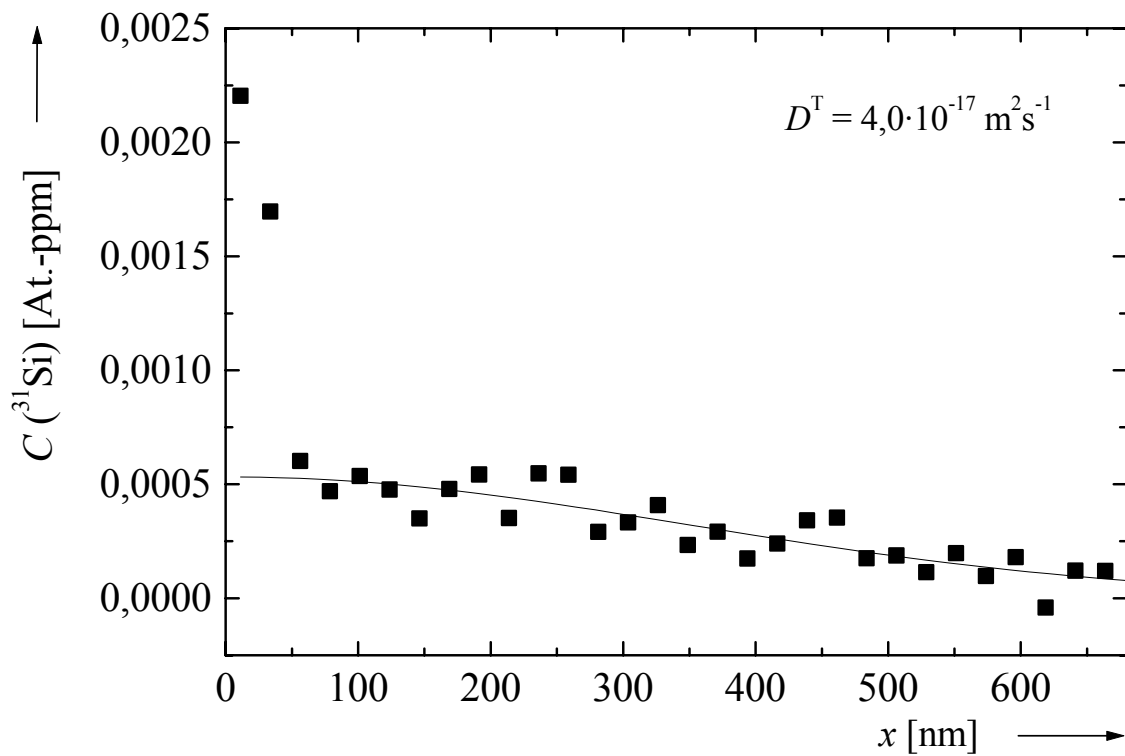


Abbildung 201: Diffusionsprofil von ^{31}Si in Ge nach Temperung bei 899 °C für $23,2\text{ min}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

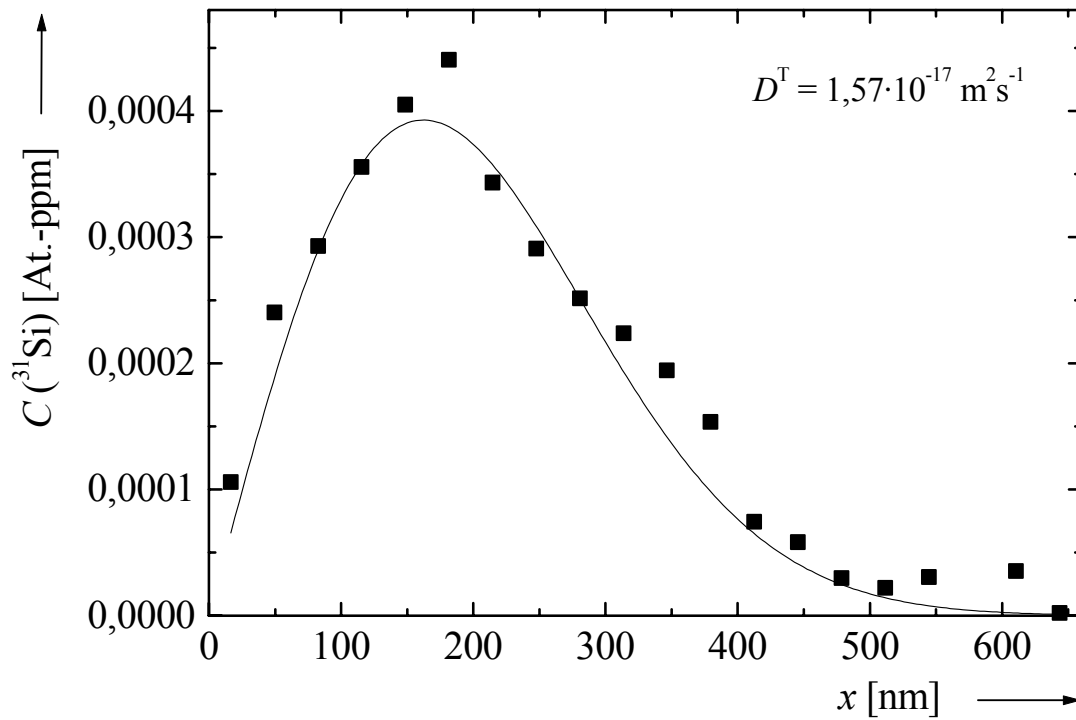


Abbildung 202: Diffusionsprofil von ^{31}Si in Ge nach Temperung bei 869 °C für $23,7\text{ min}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

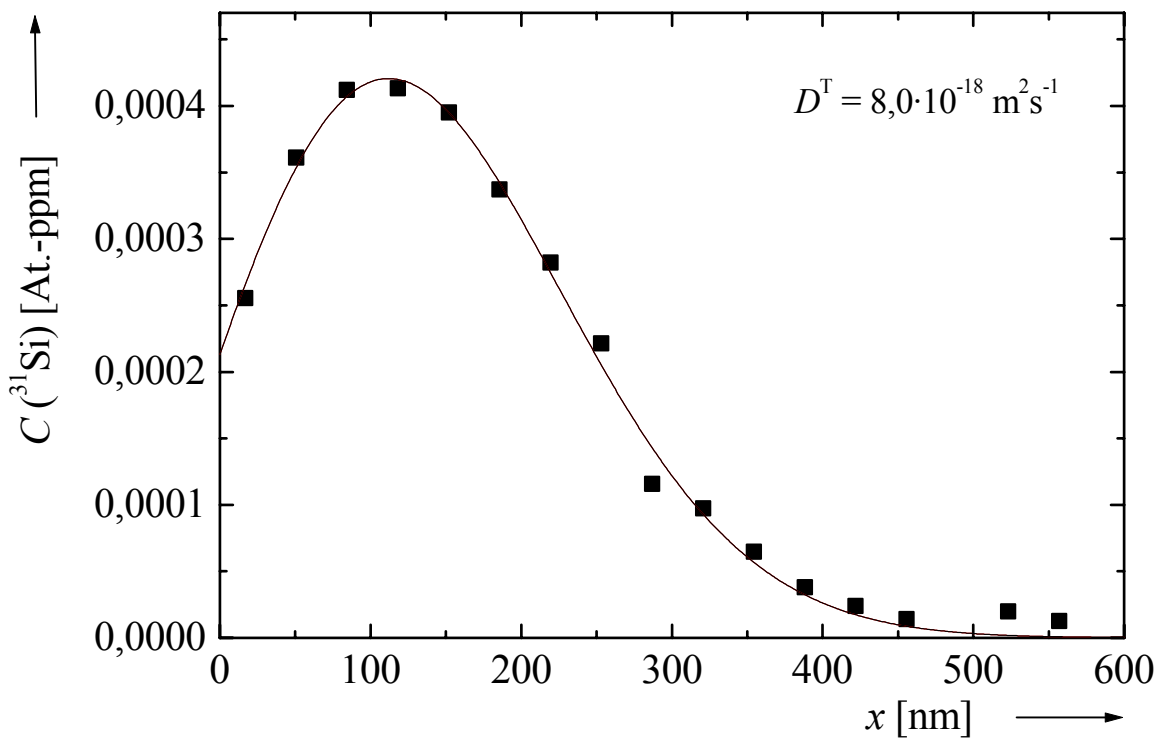


Abbildung 203: Diffusionsprofil von ^{31}Si in Ge nach Temperung bei 843 °C für $29,1\text{ min}$ (■). An die Meßpunkte ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

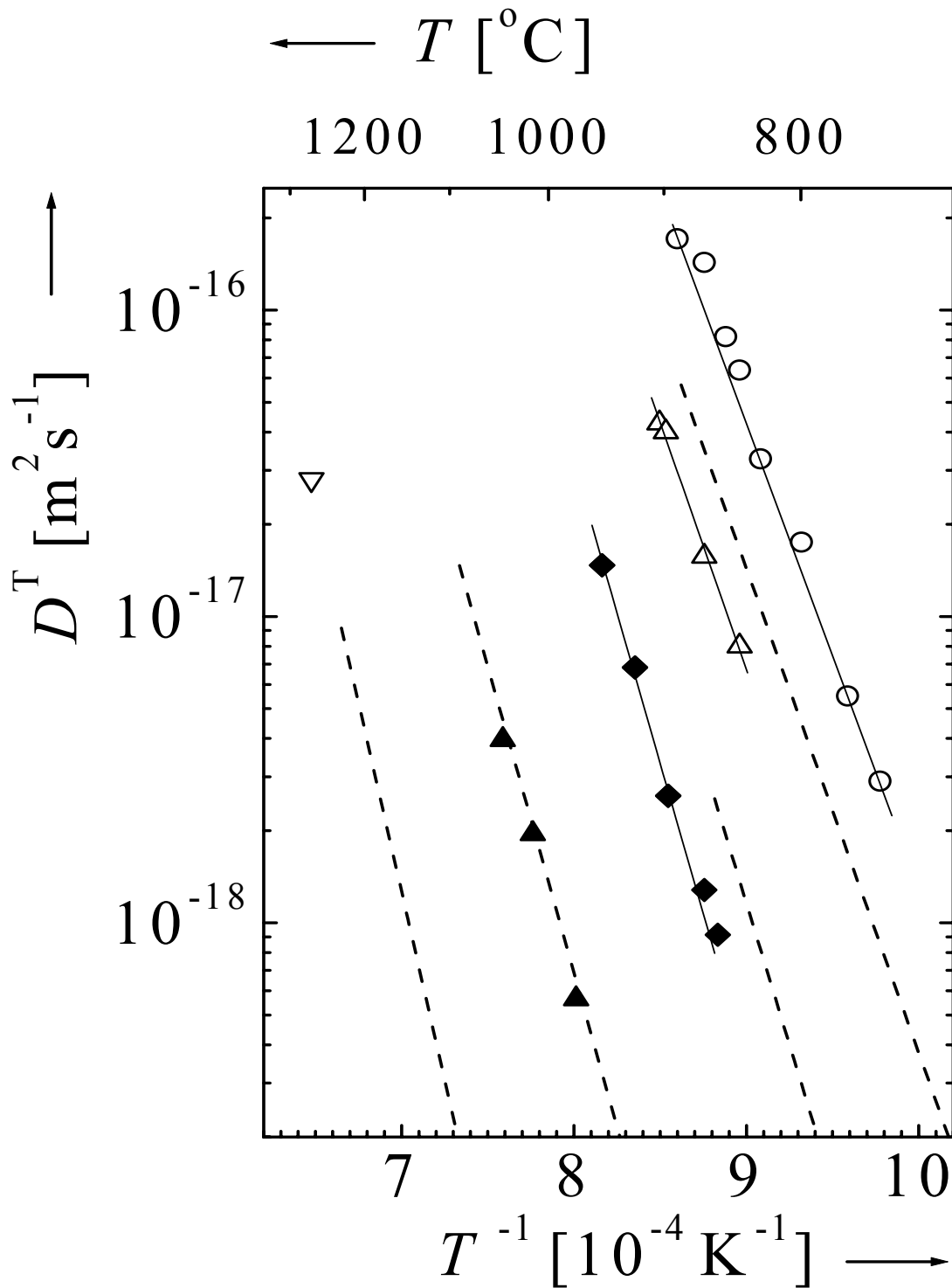


Abbildung 204: Arrhenius-Darstellung der ^{31}Si -Tracer-Selbstdiffusionskoeffizienten D^T in $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ [∇ : $y = 0$; \blacktriangle : $y = 0,50$; \blacklozenge : $y = 0,80$; \triangle : $y = 1,0$] sowie der ^{11}C -Tracer-Diffusionskoeffizienten D^T in Ge (\circ). Offene bzw. volle Symbole stehen für Messungen an bulk-Material bzw. an epitaktischen Schichten. Die durchgezogenen Linien sind an die D^T -Daten von ^{31}Si bzw. ^{11}C angepaßte Arrhenius-Geraden. Zum Vergleich wurden auch D^T -Daten aus ^{71}Ge -Diffusionsmessungen in Ge (ganz rechts), $\text{Si}_{0,20}\text{Ge}_{0,80}$, $\text{Si}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$, und Si (ganz links) als gestrichelte Linien eingetragen.

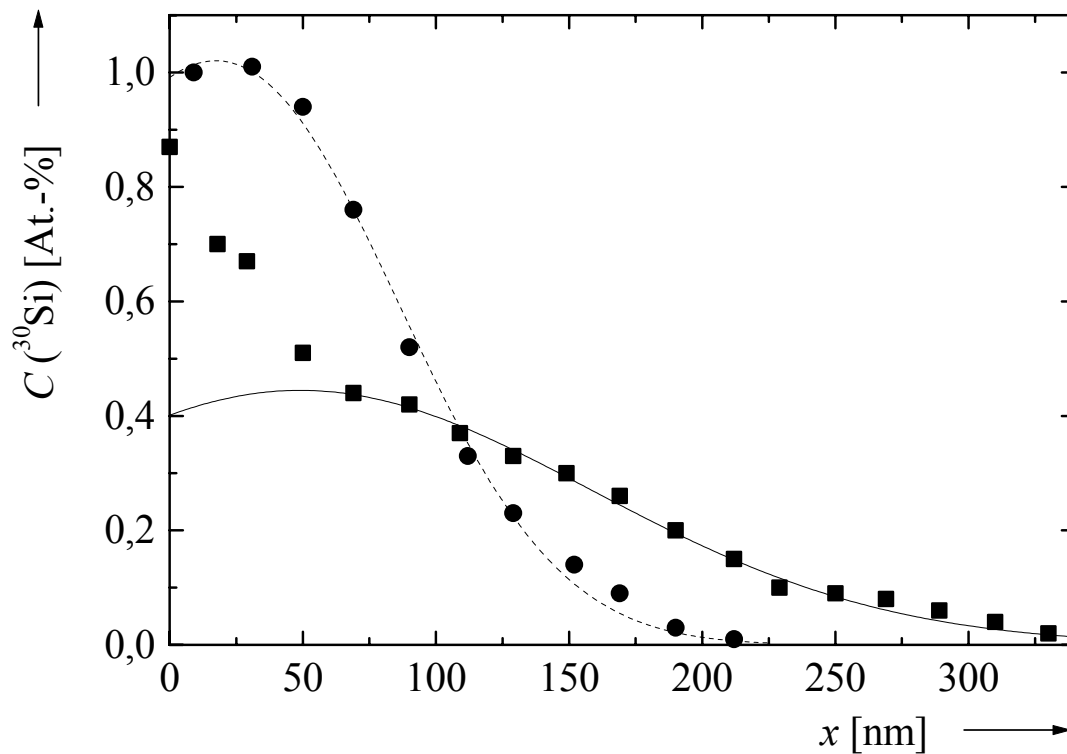


Abbildung 205: Diffusionsprofile von ^{30}Si aus [RHA81] nach Temperung bei 700 °C für 12 h (■) bzw. bei 850 °C für 0,5 h (●). An die Meßpunkte (■ bzw. ●) ist die Gleichung (5.1) angepaßt (— bzw. ----).

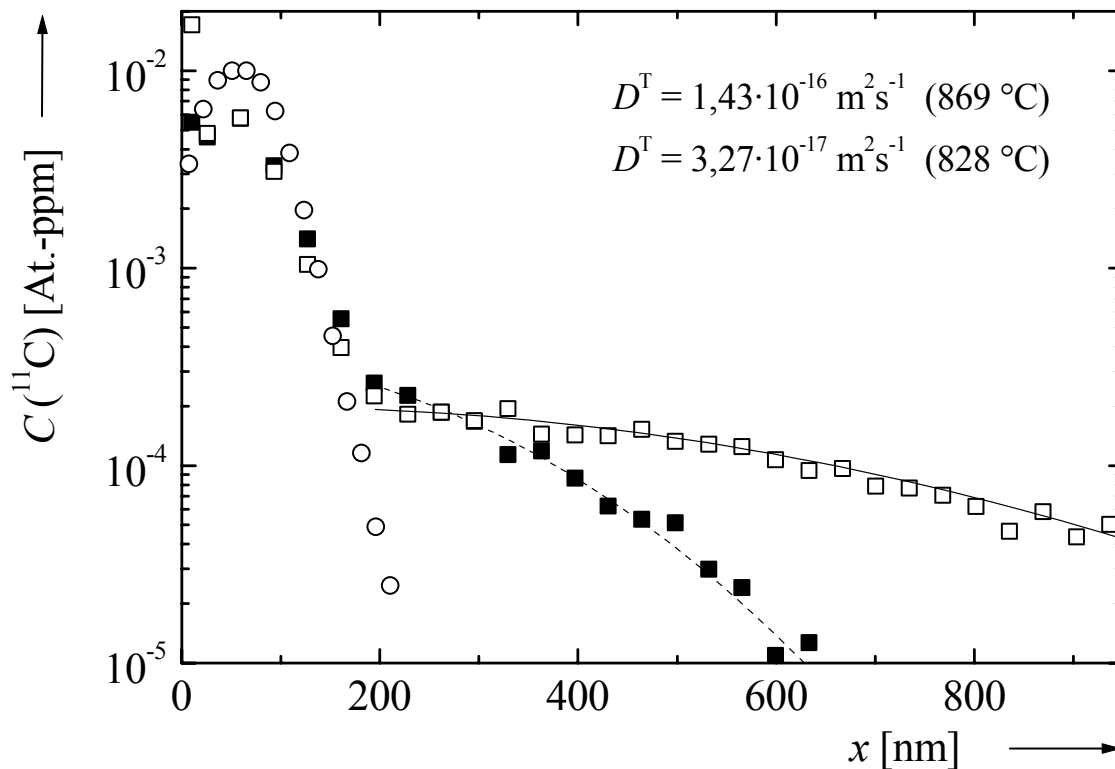


Abbildung 206: Implantationsprofil (○, $x_0 = 58 \text{ nm}$, $\sigma = 36 \text{ nm}$) und Diffusionsprofile von ^{11}C in Ge nach Temperung bei 869 °C für 18,55 min (□) bzw. bei 828 °C für 17,63 min (■). An die Meßpunkte (□ bzw. ■) ist jeweils die Gleichung (5.1) angepaßt (— bzw. ----).

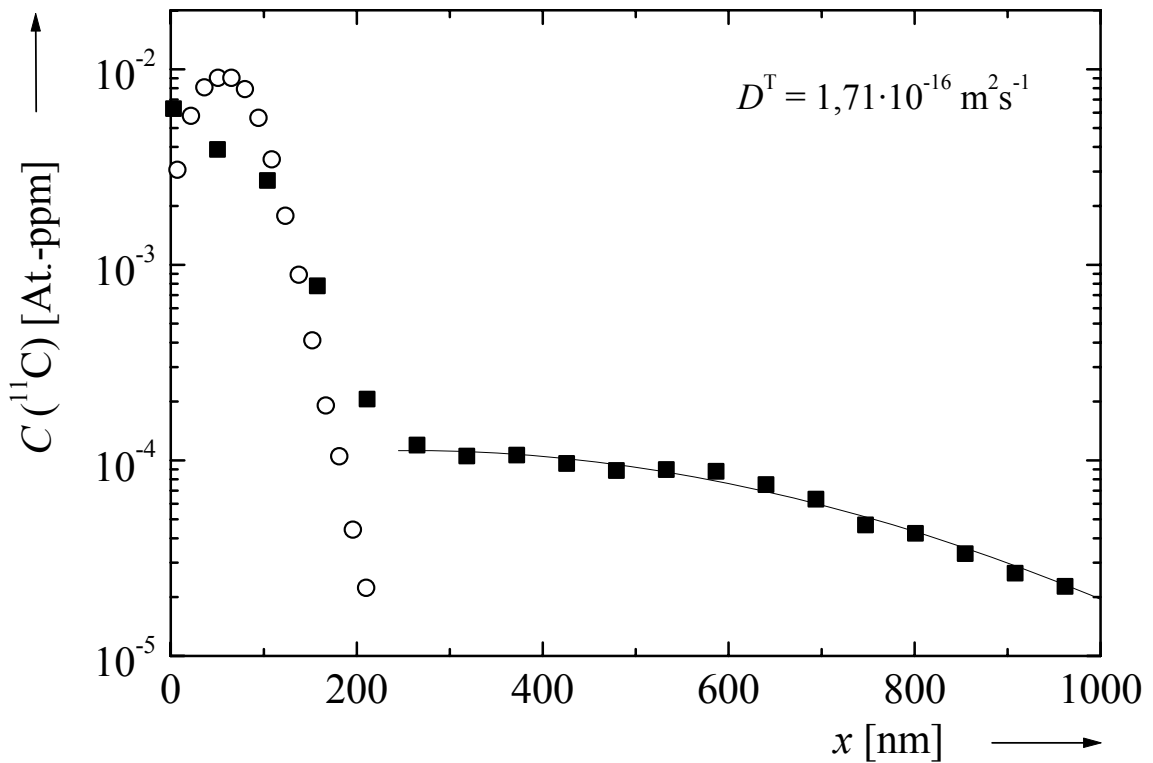


Abbildung 207: Implantations- (○) und Diffusionsprofil (■) von ^{11}C in Ge nach Temperatur bei 890 °C für 564 s. An das Diffusionsprofil ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

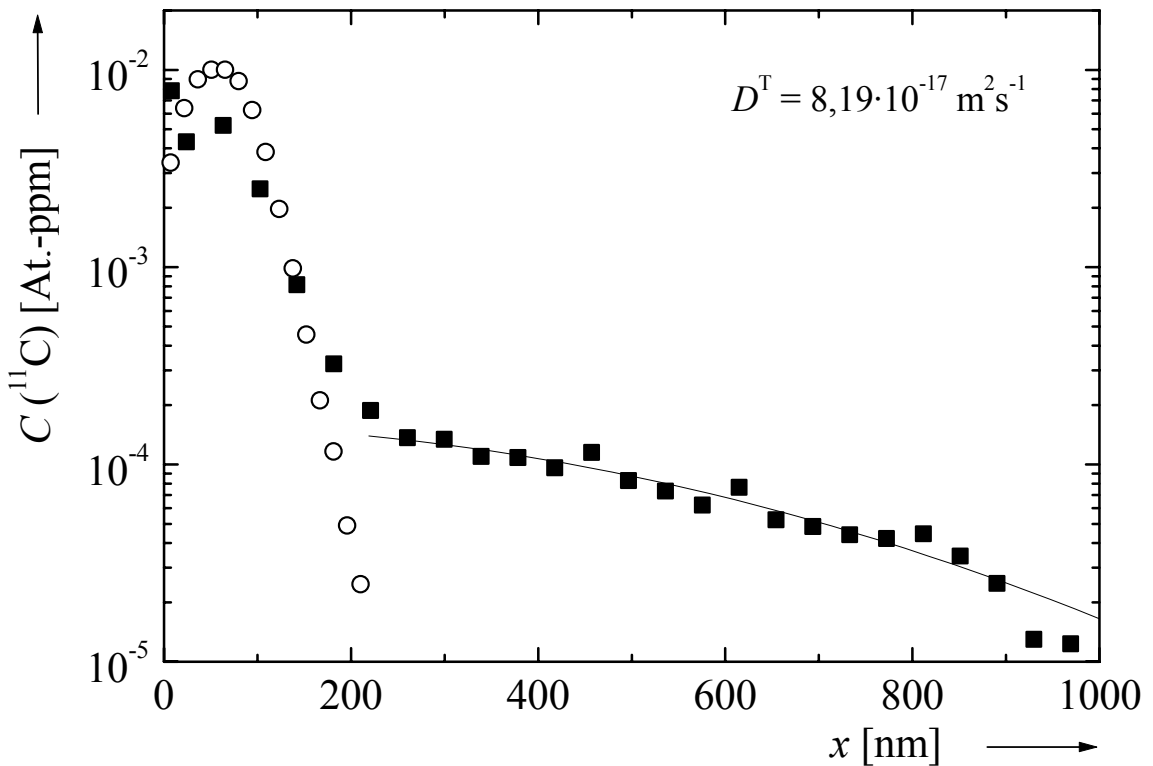


Abbildung 208: Implantations- (○) und Diffusionsprofil (■) von ^{11}C in Ge nach Temperatur bei 853 °C für 23,52 min. An das Diffusionsprofil ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

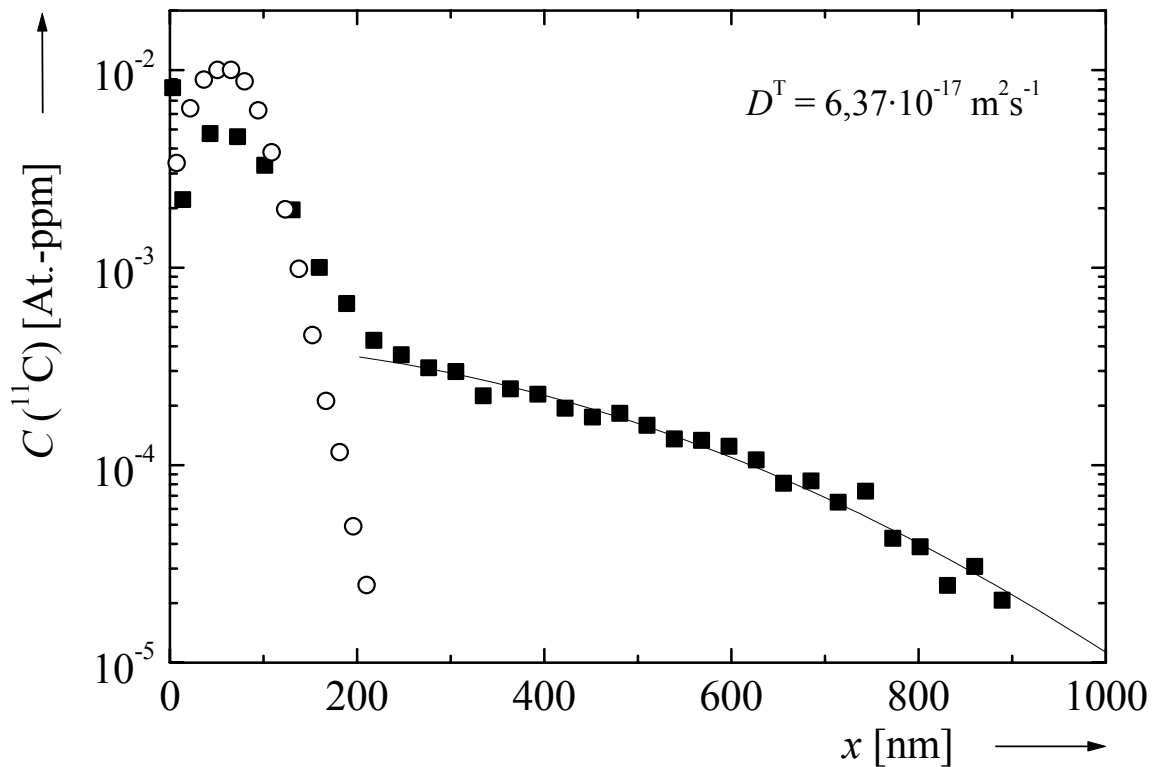


Abbildung 209: Implantations- (○) und Diffusionsprofil (■) von ^{11}C in Ge nach Temperatur bei 843 °C für 18,51 min. An das Diffusionsprofil ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

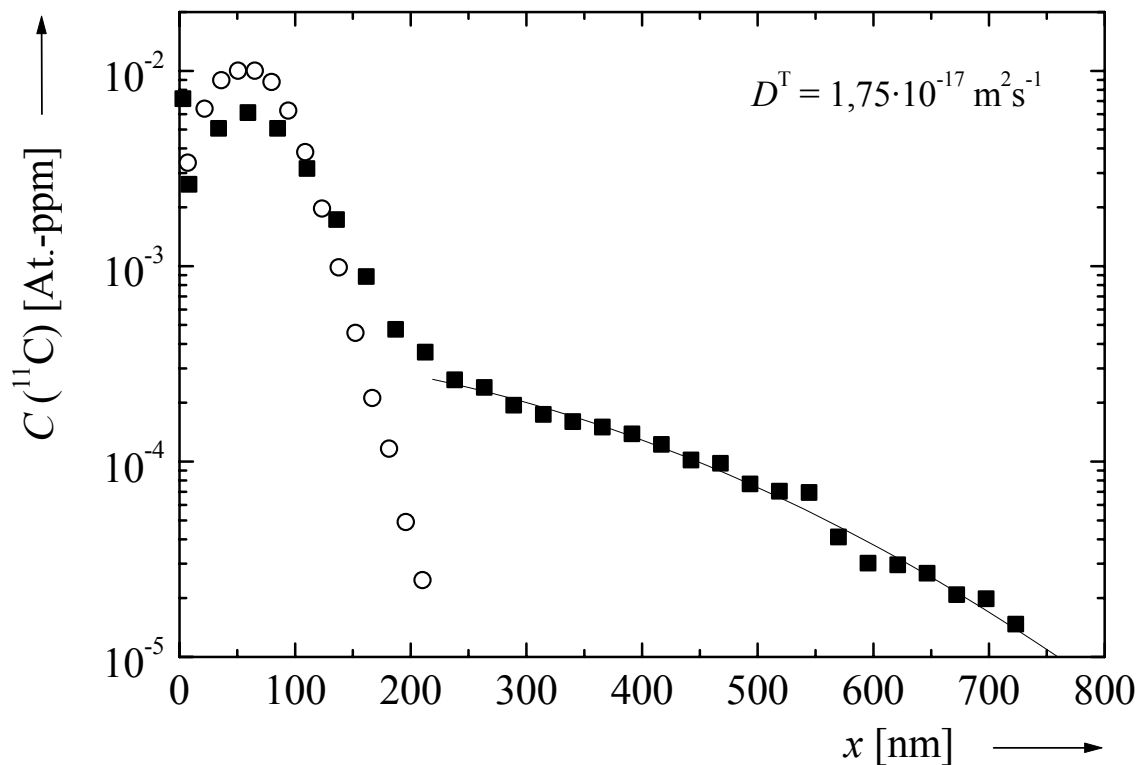


Abbildung 210: Implantations- (○) und Diffusionsprofil (■) von ^{11}C in Ge nach Temperatur bei 800 °C für 38,48 min. An das Diffusionsprofil ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

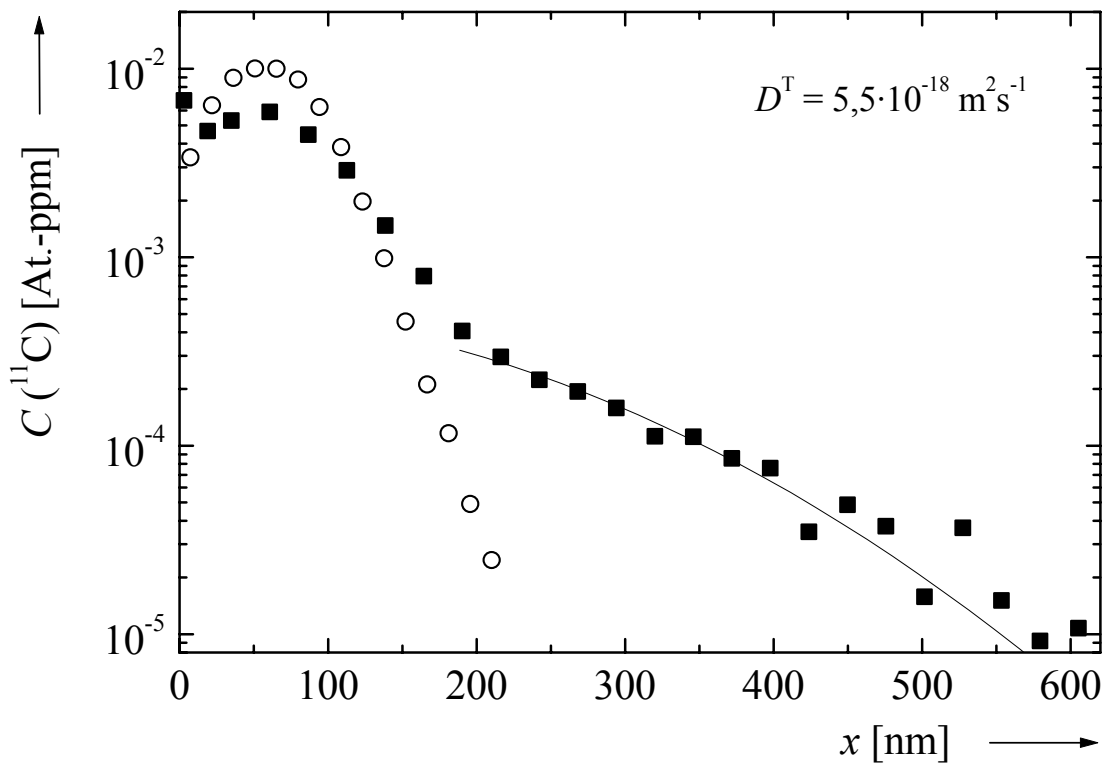


Abbildung 211: Implantations- (○) und Diffusionsprofil (■) von ^{11}C in Ge nach Temperatur bei 770 °C für 56,46 min. An das Diffusionsprofil ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

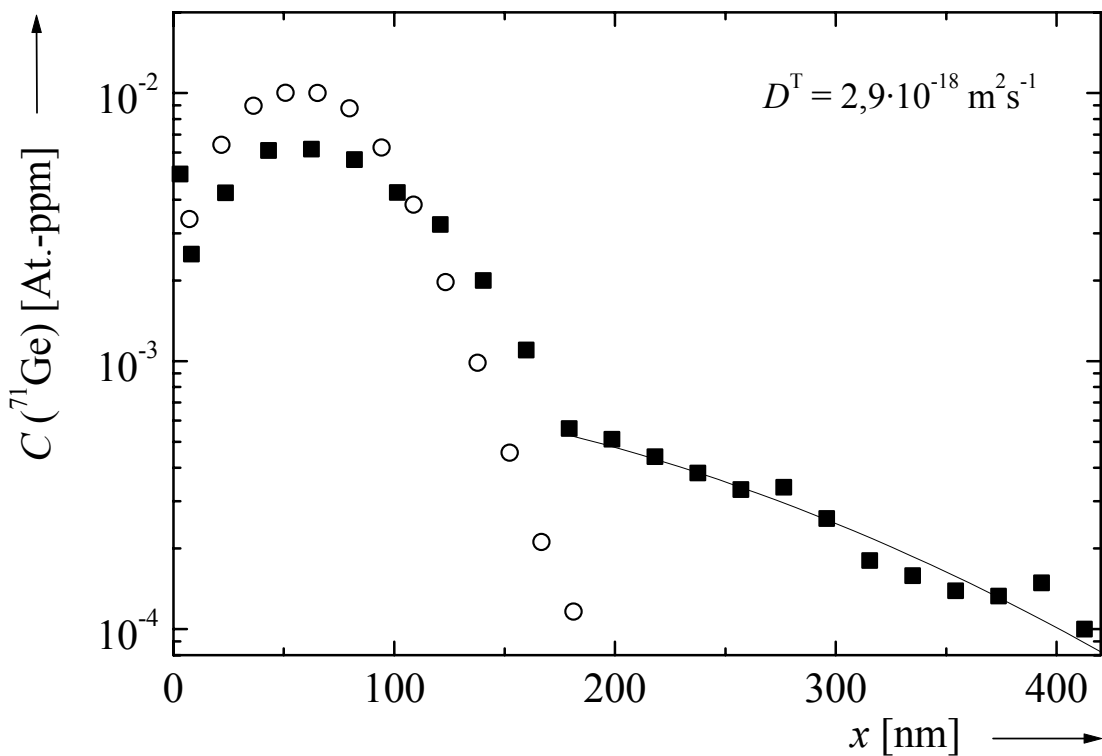


Abbildung 212: Implantations- (○) und Diffusionsprofil (■) von ^{11}C in Ge nach Temperatur bei 750 °C für 106,3 min. An das Diffusionsprofil ist die Gleichung (5.1) angepaßt (—).

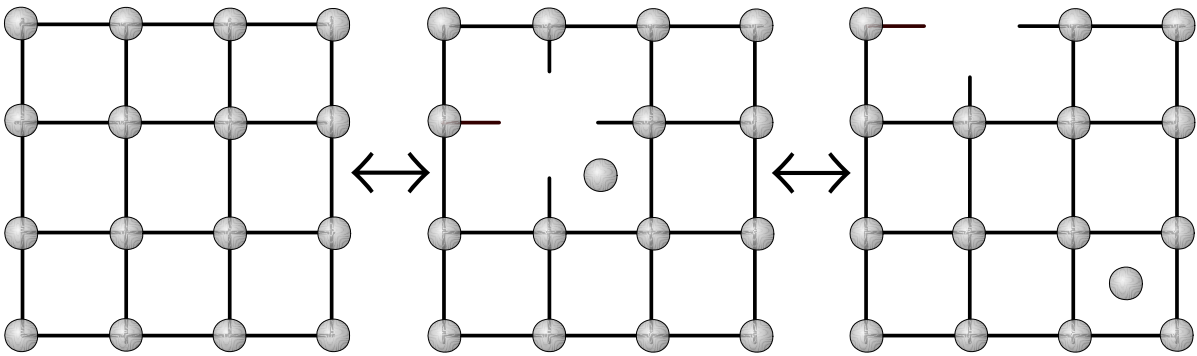


Abbildung 213: Spontane Produktion von Frenkel-Paaren.

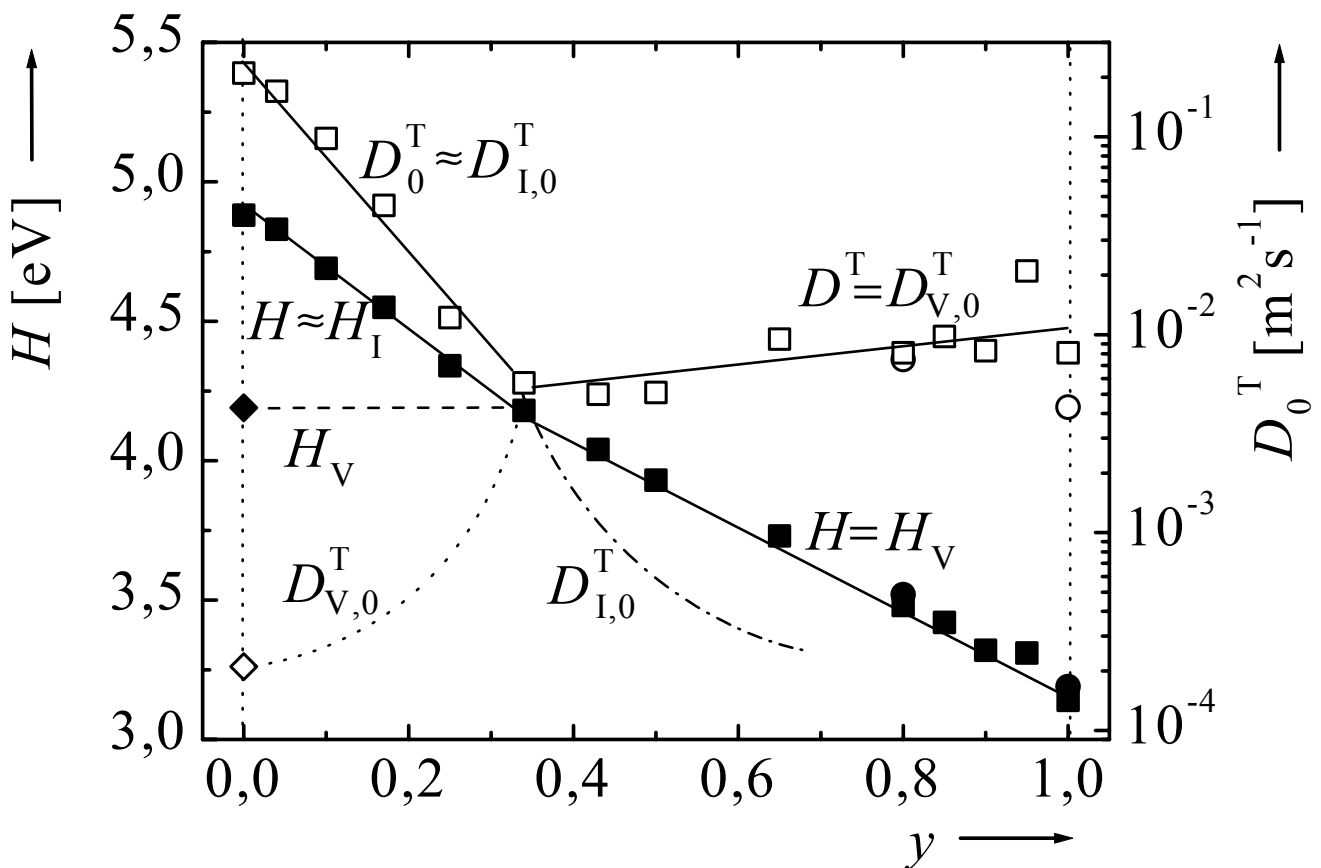


Abbildung 214: Interpretation der Ergebnisse über die Selbstdiffusion von ^{71}Ge (Quadrate) und ^{31}Si (Kreise) in $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ (H = volle Symbole, D_0^T = offene Symbole). Ebenfalls eingezeichnet sind Literaturwerte aus [BHC98, GBS00] für H_V (\blacklozenge) und $D_{V,0}^T$ (\blacklozenge). Die Linien für H_V (---), $D_{V,0}^T$ (.....) und $D_{I,0}^T$ (.....) ergeben sich aus den Abschätzungen in Abschn. 6.2.1.

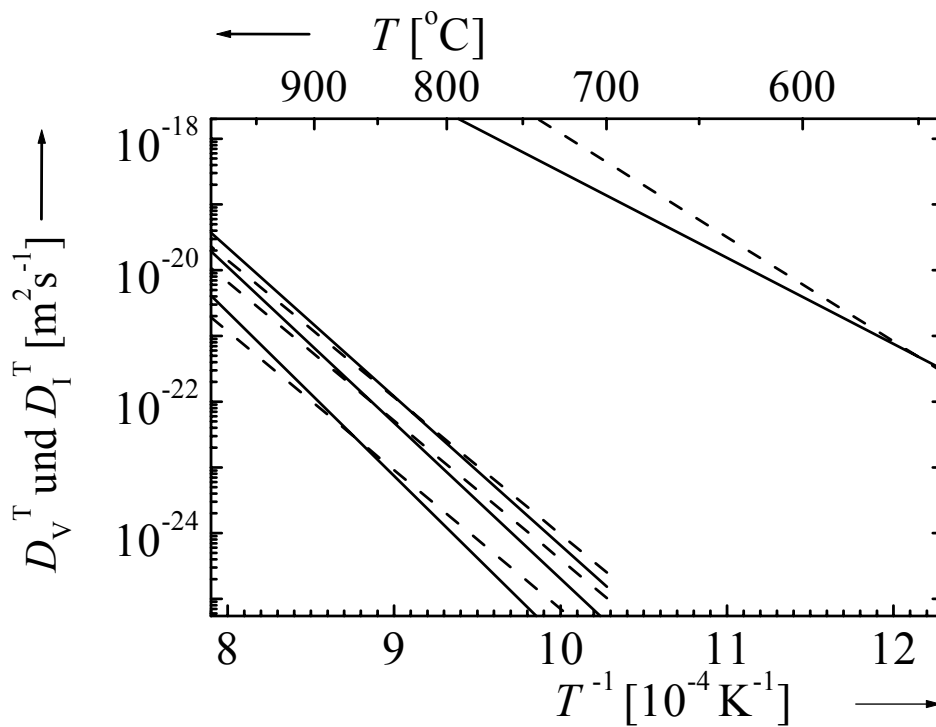


Abbildung 215: Abgeschätzte Verläufe der Eigenzwischengitteratom- bzw. Leerstellenbeiträge zur Selbstdiffusion (— bzw. ---) in Si (links), $\text{Si}_{0,83}\text{Ge}_{0,17}$, $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ und Ge (rechts). Als Arrhenius-Parameter für den Eigenzwischengitteratombeitrag in Ge wurden $H_1 = 2,6 \text{ eV}$ und $D_{1,0}^T = 10^{-5} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ angenommen.

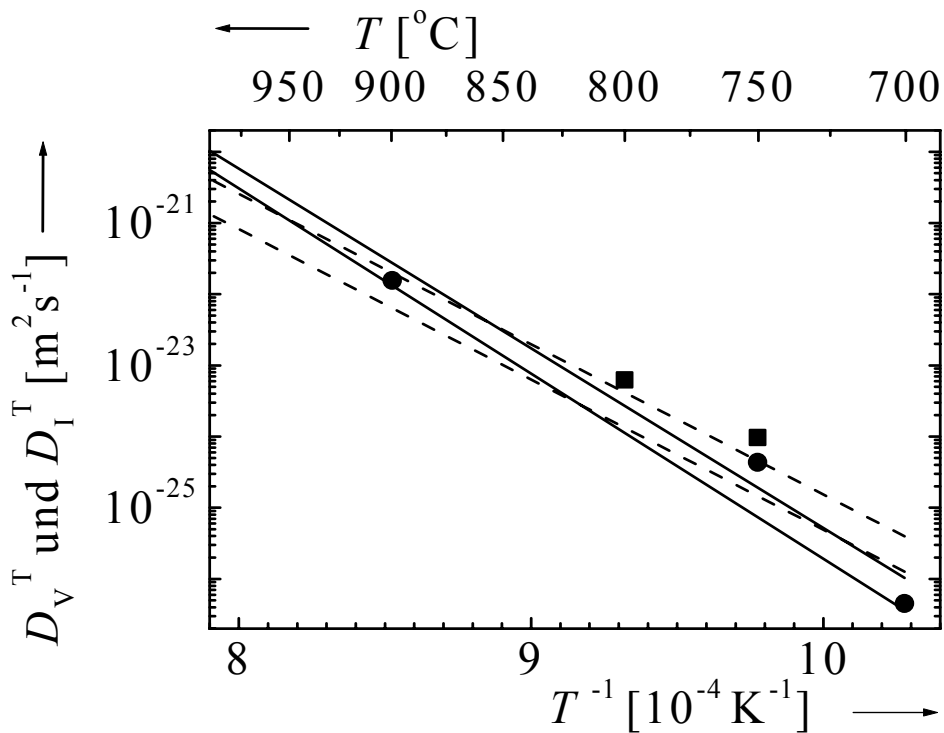


Abbildung 216: Abgeschätzte Verläufe der Eigenzwischengitteratom- bzw. Leerstellenbeiträge zur Selbstdiffusion (— bzw. ---) in $\text{Si}_{0,04}\text{Ge}_{0,96}$, (links) und $\text{Si}_{0,10}\text{Ge}_{0,90}$ (rechts) sowie aus Au-Diffusionsdaten von [Fis99] abgeschätzte Eigenzwischengitteratombeiträge in $\text{Si}_{0,05}\text{Ge}_{0,95}$, (■) und $\text{Si}_{0,09}\text{Ge}_{0,91}$ (●).

Abkürzungen und Symbole

a	Gitterkonstante
C	Konzentration der diffundierenden Teilchen
C_v	Konzentration der Diffusionsvehikel v
C_i^{eq}	Löslichkeit auf Zwischengitterplätzen
C_s^{eq}	Löslichkeit auf substitutionellen Gitterplätzen
C_v^{eq}	Löslichkeit der Diffusionsvehikel v
C_0	Konzentration der Teilchen im Implantationsmaximum
CVD	Chemical Vapour Deposition
D	Diffusionskoeffizient
d	SiGe-Schichtdicke
d_{krit}	kritische Schichtdicke
D_1	Diffusionskoeffizient der Eigenzwischengitteratome
D_v	Diffusionskoeffizient der Leerstellen
D_0	präexponentieller Faktor des Diffusionskoeffizienten D
D^{T}	Tracer-Selbstdiffusionskoeffizient
D_0^{T}	präexponentieller Faktor des Tracer-Selbstdiffusionskoeffizienten
$D_{v,0}^{\text{T}}$	präexponentieller Faktor des Beitrags der Diffusionsvehikel v zu D^{T}
DLTS	Deep Level Transient Spectroscopy
EDX	energieauflösende Röntgenspektroskopie
EXAFS	Extended X-ray Absorption Fine-Structure Spectroscopy
f_v	Korrelationsfaktor für Diffusion über Vehikel v
G	(Gibbssche) freie Enthalpie
g_v	Geometriefaktor in $D_{v,0}^{\text{T}}$ für Diffusion über Vehikel v
H	Diffusionsenthalpie (Aktivierungsenthalpie)
H_1	Selbstdiffusionsenthalpie des Eigenzwischengitteratombeitrags zur Selbstdiffusion
H_v	Selbstdiffusionsenthalpie des Leerstellenbeitrags zur Selbstdiffusion
H_{FP}^{F}	Bildungsenthalpie der Frenkel-Paare
H_v^{F}	Bildungsenthalpie der Diffusionsvehikel v
H_v^{M}	Wanderungsenthalpie der Diffusionsvehikel v
HBT	Heterobipolartransistor

I	Eigenzwischengitteratom
\vec{j}	Teilchenfluß
K_R	Rekombinationskoeffizient für Rekombination von Eigenzwischengitteratomen und Leerstellen
K_v	Effizienz für die Vernichtung von v-Typ-Defekten an ausgedehnten Senken
k	numerischer Parameter zur Beschreibung der Oberflächensenkeneffektivität
k_B	Boltzmann-Konstante
LEPECVD	Low-Energy Plasma-Enhanced CVD
MBE	Molecular Beam Epitaxy
MODFET	Modulation-Doped Field-Effect Transistor
MOSFET	Metal–Oxid–Semiconductor Field-Effect Transistor
P_v	Produktionsrate für Defekte vom Typ v
\vec{r}	Ortsvektor
RBS	Rutherford-Rückstreu-spektroskopie
S	Diffusionsentropie
SIMS	Sekundärionenmassenspektroskopie
S_v^F	Bildungsentropie der Diffusionsvehikel v
S_v^M	Wanderungsentropie der Diffusionsvehikel v
t	Dauer einer Diffusionstemperung
t_{eff}	bezüglich der Aufheiz- und Abkühlzeit korrigierte Dauer einer Diffusionstemperung
Δt	Fehler der Dauer einer Diffusionstemperung
T	Temperatur
T_m	Schmelzpunkt bzw. Liquiduspunkt
TEM	Transmissionselektronenmikroskopie
$t_{1/2}$	Halbwertszeit
UHV	Ultrahochvakuum
ULSI	Ultra Large Scale Integration
us	Ultraschall
V	Leerstelle
v	Diffusionsvehikel vom Typ v
x_D	mittlere Diffusionsverbreiterung
x_0	Lage des Schwerpunkts der Gauß-Verteilung
XPS	Röntgen-Photoelektronenspektroskopie

HRXRD	hochauflösende Röntgen-Beugung
X_i	Fremdatom auf Zwischengitterplatz
X_s	Fremdatom auf substitutionellem Gitterplatz
WDX	wellenlängenaufgelöste Röntgen-Spektroskopie
w.E.	willkürliche Einheiten
XPS	X-Ray Photoelectron Spectroscopy
y	Ge-Gehalt der SiGe-Proben
ν_0	Anlauffrequenz gegen die Potentialbarriere
θ	Ausfallswinkel des Röntgen-Strahls bei HRXRD-Messungen
ρ	Versetzungsdichte
ρ_D	Dichte der Durchstoßversetzungen
σ	Breite der Gauß-Verteilung
ω	Einfallswinkel des Röntgen-Strahls bei HRXRD-Messungen

Danksagung

Mein ganz herzlicher Dank gilt all denen, die zur erfolgreichen Durchführung dieser Arbeit ihren Beitrag geleistet haben:

Prof. Dr. Werner Frank für die hervorragende fachliche Unterstützung bei der Bearbeitung des Promotionsthemas, für die Gewährung einer außerordentlichen großen wissenschaftlichen Freiheit und darüber hinaus für das ausgesprochen freundschaftliche Miteinander,
Prof. Dr. U. Schumacher für die spontane Bereitschaft zur Übernahme des Mitberichts,
Prof. Dr. S. Dietrich, Prof. Dr. H. Dosch und *Prof. H.-R. Trebin* für die Aufnahme am Max-Planck-Institut für Metallforschung, Stuttgart, und am Institut für Theoretische und Angewandte Physik der Universität Stuttgart;

am Max-Planck-Institut für Metallforschung, Stuttgart:

B. Lemke für die zeitintensiven mechanischen Höhenmessungen von Sputter-Stufen,
H. Wendel und seiner Arbeitsgruppe für die sorgfältige Hilfe bei der Probenpräparation,
H. Kammerlander und *F. Schreiber* aus der Glaswerkstatt für ihre ausführliche Beratung,
Dr. K. Differt für die großzügige Genehmigung von 41 Vorbereitungs- und Meßreisen,
Dr. P. Graat und *Dr. B. Baretzky* für ihren Einsatz bei Ellipsometrie- und XPS-Messungen,
P. Neziraj für die tatkräftige Unterstützung bei Verwaltungsaufgaben aller Art;

am Institut für Theoretische und Angewandte Physik der Universität Stuttgart:

G. Wiederoder und *M. Schäfer* aus der mechanischen Werkstatt für die Unterstützung bei der Konstruktion der neuen Apparatur zur Messung der Diffusion kurzlebiger Radioisotope sowie der Konstruktion einer Vielzahl weiterer Bauteile für Experimente,
J. Quack, R. August und *J. Hientz* für ihre bewundernswerte Geduld und Ausdauer beim Anfertigen Hunderter von Glasampullen und bei deren Abschmelzen, teilweise im täglichen Akkord, sowie für eine Vielzahl nützlicher Ratschläge;

am Europäischen Kernforschungszentrum (CERN) in Genf:

Dr. M. Dietrich und *Dr. U. Köster* für die praktische Hilfe während der Strahlzeiten,
Dr. T. Nielsson und *Dr. H. Ravn* für die Strahlzeitplanung und für Hinweise für die Auswahl geeigneter Targets sowie die kollegiale Einbeziehung in die an ISOLDE tätigen Arbeitsgruppen,
Dr. S. Franchoo für die Vermittlung finanzieller Unterstützung im Rahmen des EU-Wissenschaftsförderungsprogramms HPRI;

am Institut für Strahlen- und Kernphysik der Universität Bonn:

Dr. D. Eversheim, J. Bartels, C. Noll und S. Hinderlich für ihren z.T. unvergüteten Einsatz bei der Durchführung der ^{71}Ge -Implantationen;

an der Universität von Jyväskylä:

Prof. Dr. J. Räisänen und P. Laitinen für eine dreijährige, fruchtbare Zusammenarbeit, *J. Huikari und A. Nieminen* für ihre Hilfe rund um die Uhr bei den ^{31}Si -Messungen, *Dr. V. Touboltsev* für RBS-Messungen und TEM-Aufnahmen;

den Herstellern des kostenlos zur Verfügung gestellten SiGe-Materials:

K. Schlingensiepen (Wacker-Siltronic, Burghausen),
Dr. K. Lyutovich (Institut für Elektronik der Akademie der Wissenschaften von Usbekistan),
V.-M. Airaksinen (Okmetik Ltd., Vantaa, Finnland),
Dr. T. Hackbarth (DaimlerChrysler Forschungszentrum, Ulm),
Prof. Dr. A. N. Larsen (Institute of Physics and Astronomy, Aarhus, Dänemark),
Dr. M. Kummer und Prof. Dr. H. von Känel (ETH Zürich, Schweiz),
Dr. P. Dold (Kristallographisches Institut der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg),
Dr. N. Abrosimov (Institut für Kristallzüchtung Berlin),
Prof. Dr. E. E. Haller (Lawrence Berkeley Laboratory, USA);

sowie folgenden Kollegen innerhalb und außerhalb von Stuttgart:

Prof. Dr. A. Domman (NTB Buchs, Schweiz) für die HRXRD-Messungen,
Dr. H. Bracht, J. Pöpping und Dr. N. Stolwijk (Universität Münster) für regen wissenschaftlichen Austausch und nette Abende auf Tagungen oder bei Strahlzeiten,
Prof. Dr. U. Kneißl für die Zur-Verfügung-Stellung eines Si-Sperrschichtdetektors,
meinen ehemaligen Kollegen *Dr. R. Blüher, Dr. R. Fischer, Dr. S. Matics, Dr. P. Schaaff*
und *Dr. T. Schuler* für alle Hilfestellungen und wertvollen Tips,
unseren wissenschaftlichen Hilfskräften *C. Grodon* und *M. Hennemann* für ihren tollen Beitrag zur Aufrechterhaltung des wissenschaftlichen Betriebs unserer Diffusionsgruppe,
und – ganz besonders – meinem Kollegen und Freund *Thilo Voss*, der mein regelmäßiger Begleiter bei allen Strahlzeiten war, ohne den kaum ein Experiment durchführbar gewesen wäre und mit dem ich in den letzten zwei Jahren alle Höhen und Tiefen des Forscherdaseins gemeinsam und in gegenseitiger vorbildlicher Ergänzung durchschritten habe. Herzlichen Dank für „teamwork at its best“!!!

Lebenslauf

ANDREAS STROHM

geboren am 9. Okt. 1971 in Ludwigsburg

Schule und Zivildienst

1978 – 1982	Grundschule in Großbottwar
1982 – 1991	Herzog-Christoph-Gymnasium in Beilstein
11. Juni 1991	Abitur
Juli 1991 – Sept. 1992	Zivildienst bei der Diakoniestation Marbach/N.

Universitätsausbildung

Sept. 1992 – März 1996	Physikstudium an der Universität Stuttgart
28. Sept. 1994	Vordiplom in Physik
Apr. 1996 – März 1997	Physik- und Jurastudium an der Universität Tübingen
Apr. 1997 – März 1999	Physikstudium an der Universität Stuttgart und Diplomarbeit am Institut für Theoretische und Angewandte Physik mit dem Thema “Diffusion von Gold in Germanium”
11. März 1999	Diplom in Physik
seit Mai 1999	Doktorand am Max-Planck-Institut für Metallforschung Stuttgart, und am Institut für Theoretische und Angewandte Physik der Universität Stuttgart bei Prof. Dr. W. Frank
14. Juli 2000	Artur-Fischer-Preis der Fakultät für Physik, Universität Stuttgart

Praktika und Fortbildung

Sept. – Okt. 1995	Praktikum im <i>Daimler-Benz Forschungszentrum</i> Ulm: Röntgencharakterisierung von Diamanthalbleiterschichten.
Febr. – März 1996	Praktikum bei <i>Bosch</i> , Stuttgart-Feuerbach: Entwicklung und Qualitätsanalysen von Drucksensoren.
Aug. – Sept. 1996	Praktikum bei <i>Mittatekniikan keskus</i> , Helsinki: Kalibrierung von Thermometern.
Juli –Sept. 1998	Praktikum bei <i>Ishikawajima-Harima Heavy Industries</i> , Tokio: MD-Simulation der Selbstdiffusion in flüssigem Blei.
März 2000	Grundkurs im Strahlenschutz am WIT, Universität Tübingen

Summary

S.1 Introduction

SiGe alloys have recently experienced a renaissance in semiconductor device technology [1]. The reasons for this are as follows. (a) The band structure and charge carrier mobility of SiGe alloys can be tailored by choosing appropriate compositions. (b) The conventional and thus inexpensive silicon technology can be conveyed, to a large extent, to SiGe alloys. Diffusion in SiGe is of great importance. On the one hand, doping of SiGe alloys for tuning their electric properties is done by diffusion, whereas, on the other hand, in-diffusion of impurities has to be avoided. From the scientific point of view, SiGe alloys are unique for testing and improving our understanding of diffusion in its components Si and Ge. This is particularly so since the SiGe system does not have a miscibility gap, i.e., irrespective of composition, SiGe alloys are disordered substitutional solutions.

It is generally accepted that Si and Ge differ considerably with respect to intrinsic-point-defect-mediated diffusion [2–4]. In Ge, the native point defects dominating under thermodynamic-equilibrium conditions at all solid-state temperatures accessible in diffusion experiments are vacancies, and therefore Ge self-diffusion is vacancy-controlled. In Si, by contrast, in thermodynamic equilibrium self-interstitials and vacancies coexist. Whereas in the most thoroughly investigated temperature regime above about 900–1000 °C Si self-diffusion is self-interstitial-controlled, it is vacancy-controlled at lower temperatures. Recent investigations have shown that also in SiGe alloys with Ge contents ≤ 24 % self-interstitials exist [5], as indicated by the diffusion of Au via the kick-out mechanism [3].

In simple cases, in which self-diffusion is mediated by a single defect species, v , the temperature dependence of the tracer self-diffusion coefficient, D_v^T , is given by an Arrhenius law,

$$D_v^T = f_v C_v^{\text{eq}} D_v = D_{v,0}^T \exp\left(\frac{-H_x}{k_B T}\right), \quad (\text{S1})$$

where f_v , C_v^{eq} , and D_v are the correlation factor, the atomic fraction in thermodynamic equilibrium, and the diffusivity of these v -type defects, respectively ($k_B =$ Boltzmann's constant, $T =$ diffusion temperature). The pre-exponential factor in Eq. (S1) may be written as

$$D_{v,0}^T = f_v g_v a^2 \nu_{v,0} \exp\left(\frac{S_v^F + S_v^M}{k_B}\right) \quad (\text{S2})$$

and the diffusion enthalpy as

$$H_v = H_v^F + H_v^M \quad . \quad (S3)$$

In Eq. (S2), S_v^F and S_v^M are the formation and the migration entropy of the defect species v , respectively; the enthalpies H_v^F and H_v^M in Eq. (S3) have corresponding meanings (g_v = numerical factor, a = lattice parameter, $\nu_{v,0}$ = attempt frequency of v -type defects).

In normal metals, in which the equilibrium defects are true point defects, $S_v^F \approx S_v^M \approx k_B$ and hence $10^{-5} \text{ m}^2\text{s}^{-1} \lesssim D_{v,0}^T \lesssim 10^{-4} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$. By contrast, in the case of the elemental semiconductors Si and Ge, in which, at least approximately, the tracer self-diffusion coefficients D^T obey Arrhenius laws (see below), their pre-exponential factors for Si ($\approx 2 \times 10^{-1} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$) and Ge ($\approx 10^{-2} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$) are extremely large. This has been related to large point-defect entropies and interpreted in terms of smeared-out, liquid-like self-interstitials in Si and smeared-out, amorphous-like vacancies in Ge [2–4].

In general, self-diffusion is mediated by m (> 1) kinds of point defects. Then the tracer self-diffusion coefficient measured in experiments, D^T , is

$$D^T = \sum_v^m D_v^T = \sum_v^m f_v C_v^{\text{eq}} D_v \quad . \quad (S4)$$

In Si, where self-interstitials ($x = \text{I}$) and vacancies ($x = \text{V}$) coexist, Eq. (S4) reads

$$D^T = D_{\text{I}}^T + D_{\text{V}}^T = f_{\text{I}} D_{\text{I}} C_{\text{I}}^{\text{eq}} + f_{\text{V}} D_{\text{V}} C_{\text{V}}^{\text{eq}} \quad . \quad (S5)$$

According to this, the change-over from self-interstitial-mediated to vacancy-mediated diffusion at about 900–1000 °C ought to be reflected by a bend in the Arrhenius plot of D^T . In fact, in early measurements, in which ^{71}Ge was used as a substitute to probe Si self-diffusion, such a bend occurred [6]. However, in more recent diffusion studies on Si, either using Ge [7] or Si [8, 9] tracer atoms, this bend has not been reproduced. This strongly implies that, by accident, in Si the expected bend is hardly visible, i.e., the tracer self-diffusion coefficient follows an *effective* Arrhenius law

$$D^T = D_0^T \exp\left(-\frac{H}{k_B T}\right) \quad . \quad (S6)$$

In agreement with this conclusion are data on the interstitial–substitutional diffusion of Au, Pt, Ni [10], and Zn in Si [11, 12], which allow to separately determine the contributions of self-interstitials and vacancies to Si self-diffusion.

The scenario described above clearly shows the need of systematic investigations of the ^{71}Ge and ^{31}Si self-diffusion in SiGe alloys which were carried out in the present work. These investigations aim at testing whether in SiGe alloys the emergence of a self-interstitial contribution to self-diffusion with increasing Si content shows up by a bend in the D^T – T^{-1}

plot that is more distinct than for Si. Previous measurements of the self-diffusion in SiGe alloys by ZANGENBERG et al. [7] and MCVAY and DUCHARME [13] were restricted to Ge self-diffusion. The studies of ZANGENBERG et al. were confined to Si-rich SiGe alloys and relatively narrow temperature regimes. The data of MCVAY and DUCHARME on polycrystalline SiGe are presumably erroneous. Their diffusion profiles show strange features which cannot be rationalized, let alone the fact that their diffusion coefficients differ by orders of magnitude from those obtained by other authors [3, 7, 14–17] and in the present work (Section 3).

S.2 Experimental

S.2.1 Material

The specimens used in the present investigations were platelets, 5 mm × 5 mm to 7 mm × 7 mm, sawn out from either monocrystalline, intrinsic, relaxed (100)-Si_{1-y}Ge_y epilayers or monocrystalline, intrinsic Si_{1-y}Ge_y bulk material:

- (i) Si wafers provided by Wacker-Siltronic, Burghausen, Germany.
- (ii) Si_{0.96}Ge_{0.04} epilayers (10 μm thick) provided by Institute of Electronics of the Academy of Sciences of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan. The density of the threading dislocations in the epilayers was estimated at 10⁶ cm⁻² from the pit densities on Secco-etched surfaces by optical microscopy [18].
- (iii) Si_{0.90}Ge_{0.10} and Si_{0.75}Ge_{0.25} epilayers (0.4 and 1.05 μm thick, respectively) provided by Okmetic Ltd., Vantaa, Finland.
- (iv) Si_{0.83}Ge_{0.17}, Si_{0.65}Ge_{0.35}, and Si_{0.57}Ge_{0.43} epilayers (0.98, 0.98, and 0.45 μm thick, respectively) provided by DaimlerChrysler Research Center, Ulm, Germany [19].
- (v) Si_{0.50}Ge_{0.50} epilayers (4 μm thick) grown by Institute of Physics and Astronomy, Aarhus, Denmark [20].
- (vi) Si_{0.35}Ge_{0.65} and Si_{0.20}Ge_{0.80} epilayers (4 μm thick, grown by molecular beam epitaxy on 6.5 and 8 μm thick graded SiGe buffer layers, respectively) produced by Laboratorium für Festkörperphysik der ETH Zürich, Switzerland [21].
- (vii) Si_{0.15}Ge_{0.85} and Si_{0.10}Ge_{0.90} wafers (bulk) provided by Kristallographisches Institut der Albert-Ludwigs-Universität, Freiburg, Germany [22].
- (viii) Si_{0.05}Ge_{0.95} wafers provided by Institut für Kristallzüchtung, Berlin, Germany [23].
- (ix) Ge wafers (1 mm thick, (100)-oriented, high-purity, 53 Ωcm, dislocation-free, CZ (Czochralski)-grown) provided by Lawrence Berkeley Laboratory, CA, USA [24].

S.2.2 Measuring technique

S.2.2.1 ^{71}Ge diffusion

The ^{71}Ge diffusion studies were performed by means of a modified radiotracer technique. At the mass separator of the Institut für Strahlen- und Kernphysik at Bonn University, Germany, or at the on-line isotope separator (ISOLDE) of the European Organization for Nuclear Research (CERN) in Geneva, Switzerland, the ^{71}Ge radiotracer atoms were implanted with an energy of 60 keV into the SiGe specimens in a non-channelling direction to depths ranging from 38 nm in Si to 19 nm in Ge. The cross-section and the current of the ^{71}Ge implantation beam were 18 mm^2 and about $(1-5)\times 10^8\text{ s}^{-1}$, respectively, the total number of ^{71}Ge atoms implanted per specimen amounted to about $(1-5)\times 10^{11}$. In Bonn the ^{71}Ge radioisotopes were produced by evaporating neutron-activated natural Ge, whereas in Geneva they were generated via spallation by bombarding a ZrO or Nb-foil target with 1.4 GeV protons.

After implantation, the $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ specimens with Ge contents $y < 0.65$ were cleaned in acetone, RCA I, RCA II, and citric acid, shortly dipped into HF, and finally rinsed with high-purity water, whereas cleaning of the Ge-rich specimens ($y \geq 0.65$) was done in acetone, KCN (10 %), and high-purity water. Then the specimens were sealed in HSQ-300 silica ampoules under 15% H_2 –85%Ar atmosphere of 99.9999 % purity, after these had been purified in HNO_3 –HCl (1:3) and HF. Next the specimens were isothermally diffusion-annealed in the temperature range 653–1263 °C. The durations of annealing lay in the regime 1.5–553 h, whose upper limit was dictated by the ^{71}Ge half-life of 11.2 d. Proceeding in this way guarantees that the thickness of the oxides growing on the samples during diffusion annealing is less than 6 nm and thus the implanted tracer atoms do not get stuck in the surface oxide.

After annealing, the ^{71}Ge distributions were measured perpendicular to the implanted surface $x = 0$. To this end, the specimens were serially sectioned by ion-beam sputtering at rates ranging from typically 20 nm/min in Ge to 6 nm/min in Si. By sectionwise counting the ^{71}Ge atoms in the removed material, which was achieved in a liquid-scintillation counter by monitoring the Auger electrons emitted as a result of the electron-capture decay of ^{71}Ge , it was possible to construct the ^{71}Ge concentration profiles $C(x)$ in the diffusion-annealed specimens. In the same way, (so-called implantation) profiles were measured on specimens that had not been exposed to diffusion annealing.

S.2.2.2 ^{31}Si diffusion

Since the durations of diffusivity measurements by means of a radiotracer technique are limited to some half-lives of the radiotracer atoms, the short half-life of ^{31}Si radioisotopes of 2.6 h poses quite a problem. This has been overcome by constructing a novel set-up which allows to perform diffusivity measurements of radioisotopes with half-lives shorter than about 1 d [25]. In this short-lived-radiotracer technique, the major steps (ion

implantation, diffusion annealing, and serial sectioning by ion-beam sputtering) are done in situ on a radioisotope beamline.

In the present diffusivity measurements of ^{31}Si in SiGe alloys, the ^{31}Si ions were produced by the ion-guide isotope-separator on-line technique (IGISOL) at University of Jyväskylä, Finland [26]. An isotopically pure radioactive ^{31}Si beam was obtained via the reaction $^{30}\text{Si}(d,p)^{31}\text{Si}$ using 19 MeV deuterons and a 0.5 mgcm^{-2} thick, 98 % enriched ^{30}Si target made by sputtering on a thin Havar backing. The ^{31}Si ions were implanted with a kinetic energy of 37 keV to depths ranging from 51 nm in Si to 43 nm in Ge. The cross-section and the current of the ^{31}Si beam were 7 mm^2 and about 10^3 s^{-1} , respectively, the total number of ^{31}Si atoms implanted per specimen amounted to about 1.5×10^7 . In determining the ^{31}Si profiles after ion-beam sectioning, the ^{31}Si atoms were counted by sectionwise measuring the high-energetic β^- -radiation emitted in the decay of ^{31}Si using a surface-barrier Si detector.

S.3 Results

Examples of implantation and diffusion profiles are shown in Fig. 1 (^{71}Ge in $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$) and Fig. 2 (^{31}Si in Ge). The solid lines fitted to the diffusion profiles represent solutions of the diffusion equation, which fulfil appropriate boundary conditions and contain the implantation profiles as initial conditions. From such fits, tracer self-diffusion coefficients D^T were extracted. Fig. 3 compiles the Arrhenius plots of D^T for ^{71}Ge in the $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ alloys introduced in Section S.2.1, which cover the entire composition range $0 \leq y \leq 1$ from Si to Ge. For all compositions the diffusion coefficients obey Arrhenius laws, as may be realized from the solid straight lines fitted to the data. Fig. 4 is the corresponding Arrhenius diagram for ^{31}Si in $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ alloys, in which D^T data of ^{71}Ge (dashed lines) have been included for comparison.

The most spectacular feature of Figs. 3 and 4 is that, at all alloy compositions investigated, the tracer self-diffusion coefficients of ^{71}Ge and ^{31}Si follow Arrhenius laws (S6), a subject which will be resumed in Section 4. Tables 1 and 2 summarize the activation enthalpies H and pre-exponential factors D_0^T of these effective Arrhenius laws.

From the fact that there is no visible bend in the Arrhenius plots of D^T one might raise doubts on whether in Si and SiGe alloys both self-interstitials and vacancies really coexist and contribute to self-diffusion. However, the present self-diffusion data hide a transition in the diffusion mechanism at $y \approx 0.35$, which is unveiled in Figs. 5 and 6. At this composition, the tracer self-diffusion coefficient $D^T(y)$ of ^{71}Ge for 900 °C, 1000 °C, and 1100 °C, the activation enthalpy $H(y)$, and the pre-exponential factor $D_0^T(y)$ show a distinct break.

Another noteworthy feature, which is evident from Figs. 3–5, is that, for a given temperature, D^T increases monotonically with increasing Ge content y . Finally, we emphasize that our D^T data, firstly, do not depend on whether they were measured on bulk

materials or relaxed epilayers and, secondly, are in reasonable agreement with the D^T data of other authors [3, 6–9, 14–17] except with those of MCVAY and DUCHARME [13], as discussed in Section 1, and of RÄISÄNEN et al. [27] on ^{30}Si diffusion in Ge, which turned out not to be tenable.

S.4 Discussion

The model, to be introduced in this section with the aid of Fig. 6, starts out from a generally accepted description of the chemical bonding [28–31] and the well established statistics of the atomic arrangements in SiGe alloys [32] to be briefly reminded of in what follows.

The Ge–Ge bonds are long (5.658 nm in pure Ge) and floppy, the Si–Si bonds short (5.431 nm in pure Si) and rigid, and the Si–Ge bonds intermediate. The Ge–Ge bond length decreases with decreasing Ge content, the Si–Ge bond length shows the same trend though decreasing more weakly, and the Si–Si bond length is independent of composition. Concerning the atomic arrangements in SiGe alloys, $y \approx 0.35$ constitutes a critical composition in the diamond lattice. For $y \lesssim 0.35$, the probability that a Si atom is exclusively surrounded by Ge atoms is negligibly small [32].

For Ge it is well established that self-diffusion takes place via vacancies. As a result of the floppiness of the Ge–Ge bonds, vacancies in Ge undergo strong relaxation by which their point-defect character is lost in favour of a smeared-out configuration extending over several atomic volumes (amorphous-like vacancies). Such smeared-out vacancies possess large entropies of formation (S_V^F) and migration (S_V^M), which is reflected by the unusually large D_0^T of $10^{-2} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ (Fig. 6). By addition of Si to Ge, the vacancy character is hardly altered up to $y \approx 0.35$, as indicated by the insignificantly small decrease of D_0^T ($= D_{V,0}^T$) between $y = 1$ and $y \approx 0.35$. In this y regime, the fraction of (strong) non-Ge–Ge bonds increases. This leads to the observed monotonic increase of the self-diffusion enthalpy H ($= H_V = H_V^F + H_V^M$), which is mainly due to an increase of H_V^F [33]. The preceding picture implies that in the composition regime $0.35 \lesssim y \leq 1$ self-diffusion in $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ occurs via vacancies.

For $y \lesssim 0.35$, almost all bonds are of Si–Si type, i.e., these Si-rich alloys are rigid. As a consequence, the vacancies are not relaxed but true point defects like in metals. This explains the rapid decrease of $D_{V,0}^T$ from $6 \times 10^{-3} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ at $y = 0.35$ to $2 \times 10^{-4} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ in pure Si [12], where this course of $D_{V,0}^T(y)$ (dotted curve in Fig. 6) is enforced by the self-consistency of the interpretation of our self-diffusion data. Because of the predominance of the Si–Si bonds for $y \lesssim 0.35$, one expects that in this y regime the nature of the (point-defect-like) vacancies does not change any more. In accordance with this, H_V possesses the value for Si (4.2 eV [12]) already at $y \approx 0.35$ (dashed horizontal line in Fig. 6). Most interestingly, in the entire composition range the course of $H_V(y)$ shown in Fig. 6 resembles that for (vacancy-mediated) Sb diffusion in relaxed SiGe epilayers [34].

In the regime $0 \leq y \lesssim 0.35$, a phenomenon occurs which, at first sight, is not expected in this composition range where the short and rigid Si–Si bonds prevail. Like H₂O, silicon shows a pronounced density anomaly at the melting temperature, i.e., liquid Si is denser than solid Si. Therefore, in accordance with LeChâtelier’s principle, squeezing of an extra self-atom into an interstice of the rigid crystal lattice of an Si-rich SiGe alloy induces a local transition to the liquid state and thus results in a droplet-like self-interstitial smeared-out over several atomic volumes. Since the sum of the entropies of formation (S_1^F) and migration (S_1^M) of such extended self-interstitials may amount to several Boltzmann’s constants (in pure Si $S_1^F + S_1^M \approx 10 k_B$) and thus distinctly exceeds $S_V^F + S_V^M \approx 2 k_B$ of the point-defect-type vacancies, in $0 \leq y \lesssim 0.35$ the self-interstitial contribution $f_1 D_1 C_1^{\text{eq}}$ may dominate the tracer self-diffusion coefficient D^T though H_1 is larger than H_V . In fact, this is the case above about 900 °C, as may be verified from Fig. 6, where in $0 \leq y \lesssim 0.35$ H and D_0^T have been assumed to be approximately equal to H_1 and $D_{1,0}^T$, respectively. A quantitative analysis of our data within the framework of the preceding interpretation shows that for $y \gtrsim 0.35$ $D_{1,0}^T$ (dashed–dotted line in Fig. 6) decreases drastically with decreasing Si content. This is in accordance with the expectation that, approaching pure Ge, the increase of the length and floppiness of the more and more dominating Ge–Ge bonds and the concomitant decrease of the density anomaly make the smearing-out of the self-interstitials disappear. Though for $y \gtrsim 0.35$ the data in Fig. 6 do not allow to extract H_1 , we expect that, as a result of the lattice softness, in Ge-rich SiGe alloys H_1^F and thus H_1 are fairly small.

According to the scenario evolved above, in SiGe alloys it is entropic effects that determine whether, in the respective composition range, self-diffusion is dominated by vacancies or self-interstitials. Whereas on the Ge-rich side the floppiness of the crystal lattice results in a smearing-out of the vacancies by relaxation-induced local amorphization and thus in their entropic favouring over the point-defect-type self-interstitials, on the Si-rich side – in spite of the lattice rigidity – the density anomaly leads to a smearing-out of the self-interstitials by local melting and thus to their entropic favouring over the point-defect-type vacancies.

Appendix

Diffusion of ¹¹C in Si, SiGe, and Ge alloys is of paramount interest since, e.g., C is an omnipresent contamination element in these semiconductors. In addition, with the increasing importance of SiGe:C-layers in semiconductor industry [35], knowledge about the diffusion of C in SiGe:C and in its components SiGe, Si, and Ge is highly desirable. However, the lack of suitable C-radiotracers makes diffusion studies of C rather difficult. By using the novel set-up for measuring the diffusivities of short-lived radiotracers, in the framework of this work diffusion of the radiotracer-isotope ¹¹C (half-life 20.38 min) in pure Ge was measured in the temperature range 643–847 °C.

Fig. 7 shows examples of an implantation and a diffusion profile. The D^T -values for ^{11}C diffusion in Ge are compiled in Fig. 4 together with the ^{71}Ge and ^{31}Si diffusion data in SiGe. The D^T -values of ^{11}C in Ge follow the Arrhenius law

$$D^T = 1,9 \cdot 10^{-3} \exp\left(-\frac{3,01 \text{ eV}}{k_{\text{B}}T}\right) \text{ m}^2\text{s}^{-1} \quad , \quad (\text{S7})$$

whose Arrhenius parameters H and D_0^T are very close to those for Ge self-diffusion (Table 1), which proceeds via the vacancy mechanism. From this it was concluded that also ^{11}C diffuses in Ge via the vacancy mechanism.

References

1. F. Schäffler, *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 1515 (1997)
2. A. Seeger and K. P. Chik, *Phys. Stat. Sol.* **29**, 455 (1968)
3. W. Frank, U. Gösele, H. Mehrer, and A. Seeger, in: *Diffusion in Crystalline Solids*, A. S. Nowick and G. Murch (eds.), Academic Press, Orlando 1984, p. 63, and Refs. therein.
4. W. Frank, *Def. Diff. Forum* **75**, 121 (1991)
5. R. Fischer, W. Frank, and K. Lyutovich, *Physica B* **273–274**, 598 (1999)
6. G. Hettich, H. Mehrer, and K. Maier, *Inst. Phys. Conf. Ser.* **46**, 500 (1979)
7. N. R. Zangenberg, J. Lundsgaard Hansen, J. Fage-Pedersen, and A. N. Larsen, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 125901-1 (2001)
8. H. Bracht, E. E. Haller, and R. Clark-Phelps, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 393 (1998)
9. A. Ural, P. B. Griffin, and J. D. Plummer, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3454 (1999)
10. T. Y. Tan and U. Gösele, *Appl. Phys. A* **37**, 1 (1985)
11. H. Bracht, N. A. Stolwijk, and H. Mehrer, *Phys. Rev. B* **52**, 16542 (1995)
12. A. Giese, H. Bracht, N. A. Stolwijk, and D. Baither, *Mat. Sci. Eng. B* **71**, 160 (2000)
13. G. L. McVay and A. R. Du Charmé, *Phys. Rev. B* **9**, 627 (1974)
14. P. Dorner, W. Gust, B. Predel, U. Roll, A. Lodding, and H. Odelius, *Phil. Mag. A* **49**, 557 (1984)

15. M. Werner, H. Mehrer, and H. D. Hochheimer, *Phys. Rev. B* **32**, 3930 (1985)
16. P. M. Fahey, P. B. Griffin, and J. D. Plummer, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 289 (1989), and Refs. therein.
17. H. D. Fuchs, W. Walukiewicz, E. E. Haller, W. Dondl, R. Schorer, G. Abstreiter, A. I. Rudnev, A. V. Tikhomirov, and V. I. Ozhogin, *Phys. Rev. B* **51**, 16817 (1995)
18. V. Nagesh, H. G. Grimmeiss, E.-L. Hellqvist, K. L. Ljutovich, and A. S. Ljutovich, *Semicond. Sci. Technol.* **5**, 566 (1990)
19. T. Hackbarth, H. Kibbel, M. Glueck, G. Hoeck, and H.-J. Herzog, *Thin Solid Films* **321**, 136 (1998)
20. A. N. Larsen, J. L. Hansen, R. S. Jensen, S. Y. Shiryaev, P. R. Ostergaard, J. Hartung, G. Davies, F. Jensen, and J. W. Petersen, *Physica Scripta T* **54**, 208 (1994)
21. M. Kummer, C. Rosenblad, A. Dommann, T. Hackbarth, G. Höck, M. Zeuner, E. Müller, and H. von Känel, *Mat. Sci. Eng. B* **89**, 288 (2002)
22. P. Dold, A. Barz, S. Recha, K. Pressel, M. Franz, and K. W. Benz, *J. Cryst. Growth* **192**, 125 (1998)
23. N. V. Abrosimov, S. N. Rossolenko, W. Thieme, A. Gerhardt, and W. Schröder, *J. Cryst. Growth* **174**, 182 (1997)
24. E. E. Haller, W. L. Hansen, and F. S. Goulding, *Advances in Physics* **30**, 93 (1981)
25. T. Voss, A. Strohm, S. Matics, P. Scharwaechter, and W. Frank, *Z. Metallkd.* **93**, 1077 (2002)
26. P. Dendooven, *Nucl. Instr. Meth. B* **126**, 182 (1997)
27. J. Räisänen, J. Hirvonen, and A. Anttila, *Solid-State Electronics* **24**, 333 (1981)
28. D. B. Aldrich, R. J. Neumann, and D. E. Sayers, *Phys. Rev. B* **50**, 15026 (1994)
29. M. C. Ridgway, K. M. Yu, C. J. Glover, G. J. Foran, C. Clerc, J. L. Hansen, and A. N. Larsen, *Phys. Rev. B* **60**, 10831 (1999)
30. J. C. Aubry, T. Tyliczszak, A. P. Hitchcock, J.-M. Baribeau, and T. E. Jackman, *Phys. Rev. B* **59**, 12872 (1999)
31. P. Venezuela, G. M. Dalpian, A. J. R. da Silva, and A. Fazzio, *Phys. Rev. B* **64**, 193202-1 (2001)
32. G. E. Pike, W. J. Camp, C. H. Seager, and G. L. McVay, *Phys. Rev. B* **10**, 4909 (1974)
33. P. Venezuela, G. M. Dalpian, A. J. R. da Silva, and A. Fazzio, *Phys. Rev. B* **65**, 193306-1 (2002)
34. A. N. Larsen and P. Kringhøj, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 2684 (1996)
35. J. J. Osten, G. Lippert, D. Knoll, R. Barth, B. Heinemann, H. Rücker, and P. Schley, in: *Technical Digest IEDM*, IEEE, Piscataway 1997, S. 803

Tables

Ge-content y	H [eV]	D_0^T [m^2s^{-1}]	T -range [$^\circ\text{C}$]
0.00	4.88	$2.1 \cdot 10^{-1}$	1062–1214
0.05	4.83	$1.7 \cdot 10^{-1}$	973–1263
0.10	4.69	$9.8 \cdot 10^{-2}$	897–1143
0.17	4.55	$4.5 \cdot 10^{-2}$	939–1151
0.25	4.34	$1.2 \cdot 10^{-2}$	883–1174
0.35	4.18	$5.7 \cdot 10^{-3}$	917–1102
0.43	4.04	$5.0 \cdot 10^{-3}$	865–1032
0.50	3.93	$5.1 \cdot 10^{-3}$	865–1066
0.65	3.73	$9.5 \cdot 10^{-3}$	756–1000
0.80	3.48	$8.1 \cdot 10^{-3}$	730–903
0.85	3.42	$9.8 \cdot 10^{-3}$	711–880
0.90	3.32	$8.3 \cdot 10^{-3}$	721–875
0.95	3.31	$2.1 \cdot 10^{-2}$	656–944
1.00	3.14	$8.1 \cdot 10^{-3}$	643–847

Table 1: Diffusion enthalpies (H) and pre-exponential factors (D_0^T) of the tracer self-diffusion coefficients of ^{71}Ge in $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ alloys for various compositions y .

Ge-content y	H [eV]	D_0^T [m^2s^{-1}]	T -range [$^\circ\text{C}$]
0.80	3.52	$7.5 \cdot 10^{-3}$	859–952
1.00	3.19	$4.3 \cdot 10^{-3}$	843–904

Table 2: Diffusion enthalpies (H) and pre-exponential factors (D_0^T) of the tracer self-diffusion coefficients of ^{31}Si in $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ alloys for various compositions y .

Figures

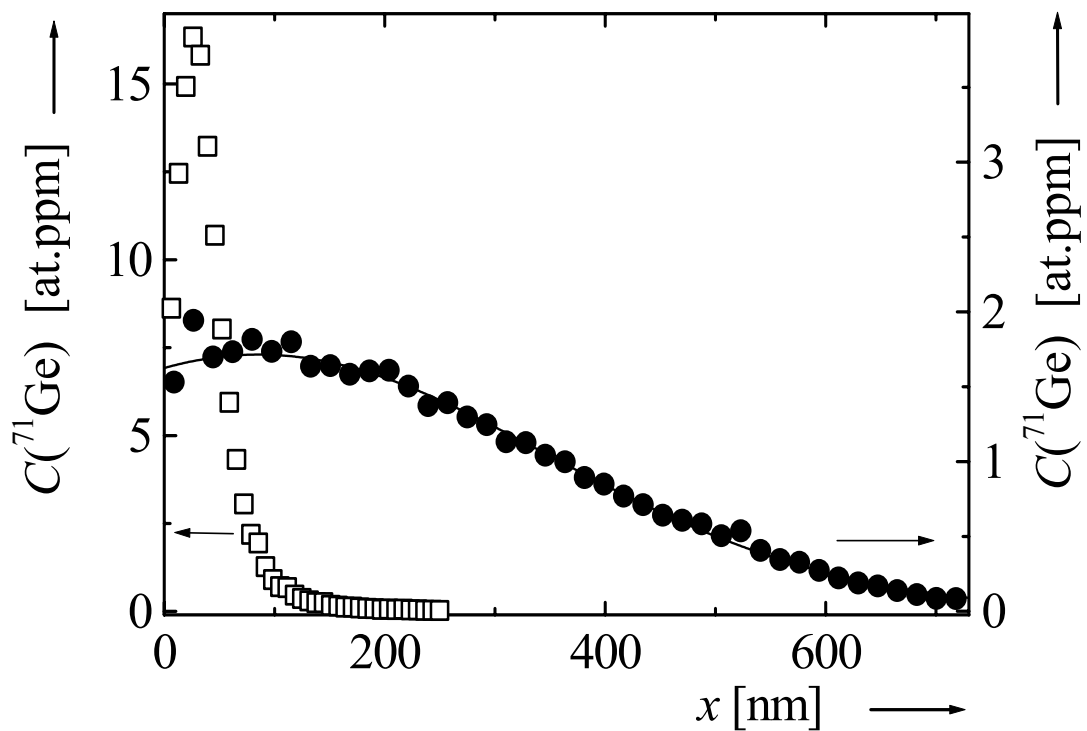


Fig. 1: ^{71}Ge profiles in $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$ produced by 60 keV implantation (\square , scale on left-hand side) and subsequent diffusion annealing at 1130 °C for 5 h (\bullet , scale on right-hand side). The curve is a fit of an appropriate solution of the diffusion equation to the diffusion profile.

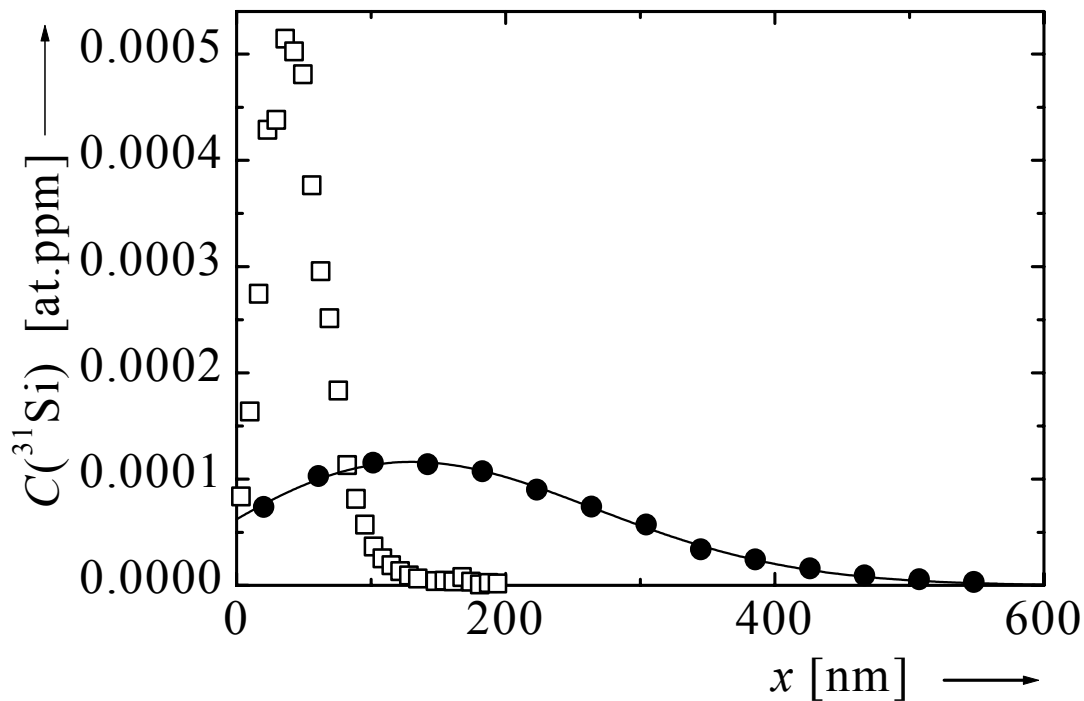


Fig. 2: ^{31}Si profiles in Ge produced by 37 keV implantation (\square) and subsequent diffusion annealing at 838 °C for 0.5 h (\bullet). The curve is a fit of an appropriate solution of the diffusion equation to the diffusion profile.

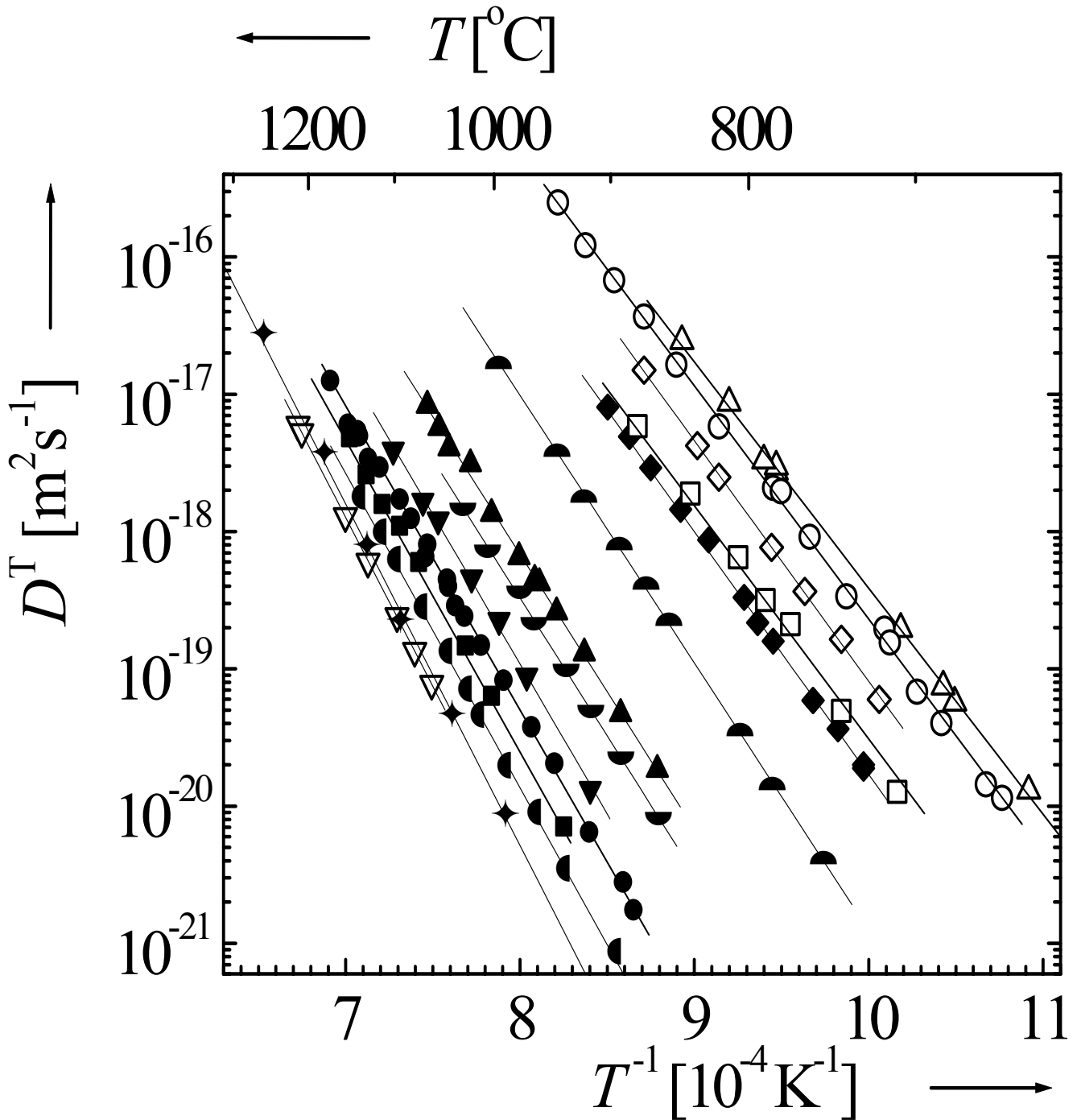


Fig. 3 : Arrhenius presentation of tracer self-diffusion coefficients D^T for ^{71}Ge in $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ alloys [∇ : $y = 0$; \blacklozenge : $y = 0.04$; \bullet : $y = 0.10$; \blacksquare : $y = 0.17$; \bullet : $y = 0.25$; \blacktriangledown : $y = 0.35$; \blacklozenge : $y = 0.43$; \blacktriangle : $y = 0.50$; \blacklozenge : $y = 0.65$; \blacklozenge : $y = 0.80$; \square : $y = 0.85$; \diamond : $y = 0.90$; \circ : $y = 0.95$; \triangle : $y = 1$]. Empty and filled symbols refer to bulk and epilayer specimens, respectively. Each straight solid line represents an Arrhenius law fitted to the D^T data measured on a given material.

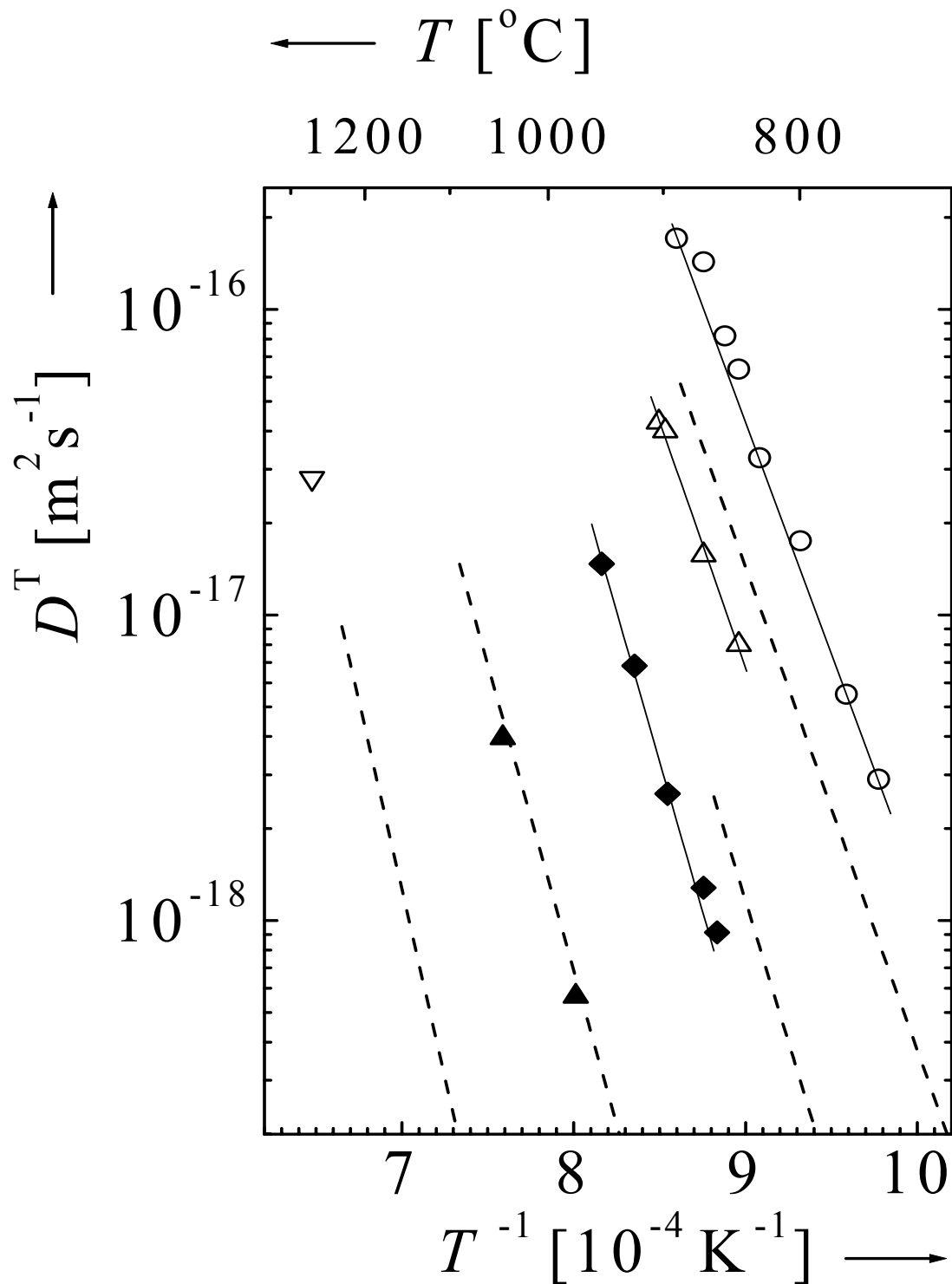


Fig. 4: Arrhenius presentation of tracer self-diffusion coefficients D^T for ^{31}Si in $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ alloys [∇ : $y = 0$; \blacktriangle : $y = 0.50$; \blacklozenge : $y = 0.80$; \triangle : $y = 1$] and for ^{11}C in pure Ge (O). Empty and filled symbols refer to bulk and epilayer specimens, respectively. The straight solid lines represent Arrhenius laws fitted to the D^T data for ^{31}Si in Ge (\triangle) and $\text{Si}_{0.20}\text{Ge}_{0.80}$ (\blacklozenge) and for ^{11}C in Ge (O). For comparison, dashed straight lines have been included which represent D^T data for ^{71}Ge in Ge (uttermost right), $\text{Si}_{0.20}\text{Ge}_{0.80}$, $\text{Si}_{0.50}\text{Ge}_{0.50}$, and Si (uttermost left).

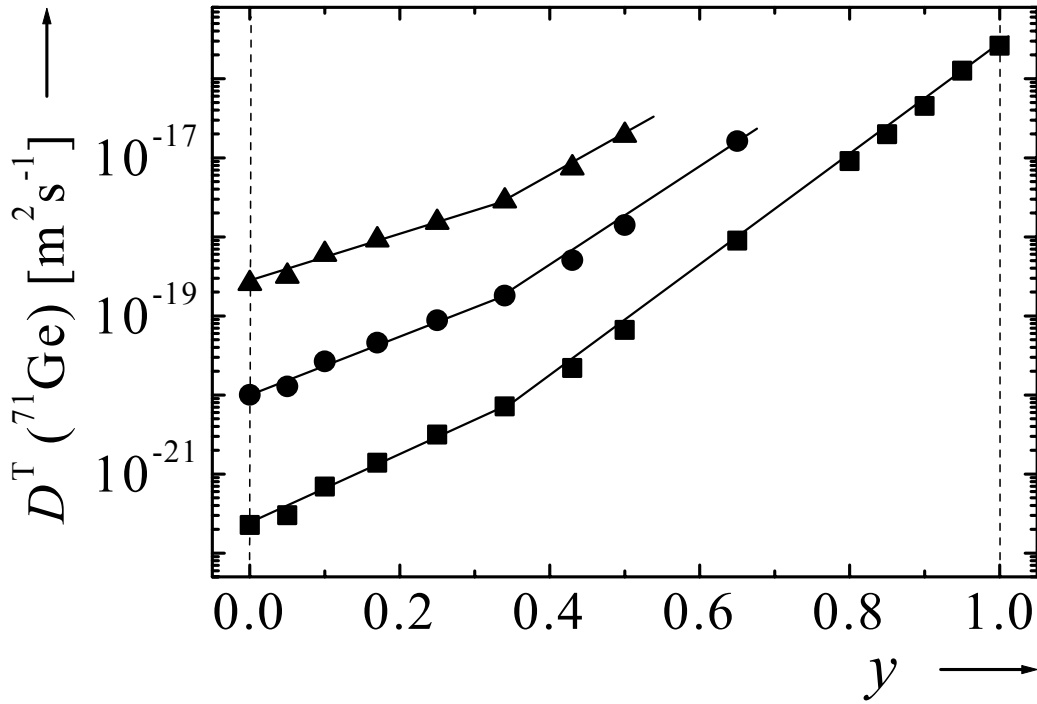


Fig. 5: Tracer self-diffusion coefficient D^T of ^{71}Ge in $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ as a function of the Ge content y for 900 °C (■), 1000 °C (●), and 1100 °C (▲), respectively.

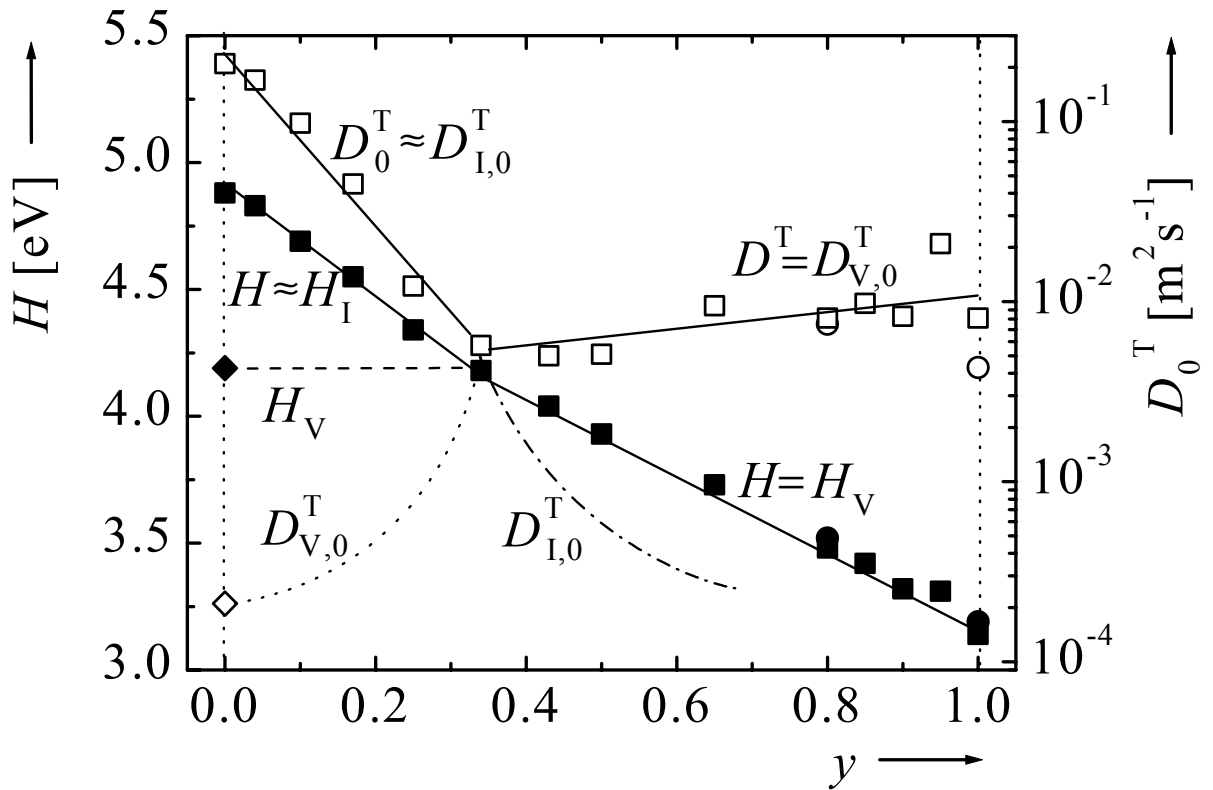


Fig. 6: Self-diffusion enthalpy H (filled symbols) and pre-exponential factor D_0^T (empty symbols) for ^{71}Ge (squares) and ^{31}Si (circles) in $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ as functions of the Ge content y . The solid lines are for eye guiding. Values of H_V (◆) and $D_{V,0}^T$ (◇) for Si from [11, 12] have been included. For further details see text.

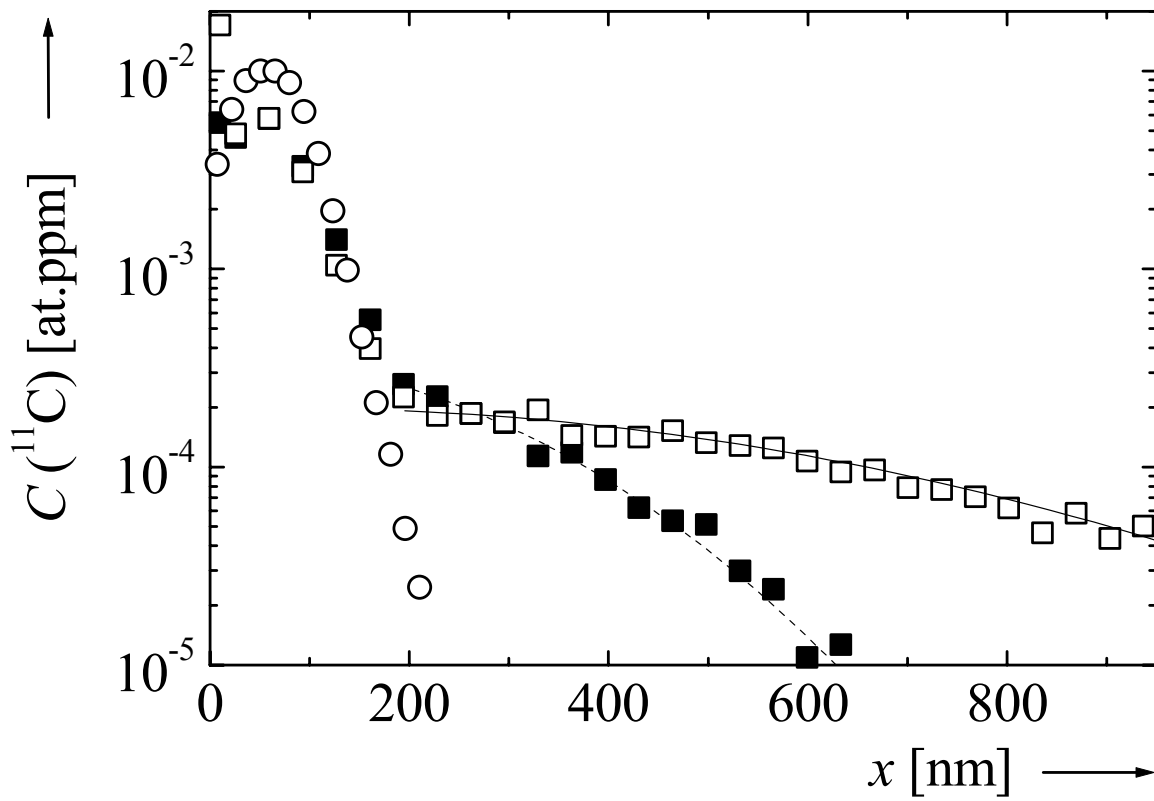


Fig. 7: ^{11}C profiles in Ge produced by 24 keV implantation (○) and subsequent diffusion annealing at 869 °C for 18,55 min (□) and at 828 °C for 17,63 min (■), respectively. The curves are fits of an appropriate solution of the diffusion equation to the diffusion profiles.