

Plastische Deformation von amorphem Silizium
unter Hochenergie-Ionenbestrahlung

DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

vorgelegt dem Rat der Physikalisch-Astronomischen Fakultät
der Friedrich-Schiller-Universität Jena

von Diplom-Physiker André Hedler
geboren am 18.10.1975 in Jena

Gutachter:

1. Prof. Dr. Werner Wesch
Institut für Festkörperphysik
Friedrich-Schiller-Universität Jena

2. Prof. Dr. Wolfgang Bolse
Institut für Strahlenphysik
Universität Stuttgart

3. Prof. Dr. Reinhard Neumann
Abteilung Materialforschung
Gesellschaft für Schwerionenforschung mbH Darmstadt

Tag der letzten Rigorosumsprüfung:
Tag der öffentlichen Verteidigung:

7. Februar 2006
14. Februar 2006

*Nur wer die Stärken einer Methode kennt,
kann deren Vorzüge richtig nutzen.*
-Erich Florek-

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	vi
Tabellenverzeichnis	viii
1 Einleitung	1
2 Physikalische Grundlagen	3
2.1 Ionen-Festkörper-Wechselwirkung	3
2.1.1 Energieverlust eines Ions	3
2.1.2 Nuklearer Bremsquerschnitt	4
2.1.3 Elektronischer Bremsquerschnitt	5
2.1.4 Reichweite der Ionen	5
2.2 Materialmodifizierung durch einen hohen nuklearen Energieeintrag	6
2.2.1 Deplazierung von Gitteratomen	6
2.2.2 Amorphisierung kristalliner Materialien	7
2.3 Materialmodifizierung durch einen hohen elektronischen Energieeintrag	7
2.3.1 Energiedichte im Elektronensystem	7
2.3.2 Energietransfer vom Elektronensystem zum Gitter	8
2.3.2.1 Coulomb-Explosion	9
2.3.2.2 Nichtthermisches Schmelzen	9
2.3.2.3 Elektronen-Phononen-Kopplung	10
2.3.3 Energiedissipation im Gitter	11
2.3.3.1 Kohärente Bewegung aller Atome	11
2.3.3.2 Atomare Bewegung als Folge einer Wärmespitze	11
2.3.4 Auswirkung der Bestrahlung auf kristalline Materialien	12
2.3.5 Auswirkung der Bestrahlung auf amorphe Materialien	12
2.3.5.1 Ionen-Hämmerungseffekt	12
2.3.5.2 Ionenstrahlinduzierte Scherung	16
2.3.5.3 Plastisches Fließen	16
2.3.5.4 Anwendungen der plastischen Deformation	18
2.4 Erklärung der plastischen Deformation	19
2.4.1 Ordnung struktureller Defekte	19
2.4.2 Relaxation von Scherspannungen	21
2.4.2.1 Effektive-Fließtemperatur-Näherung (EFT-Näherung)	21
2.4.2.2 Anisotropes Wachstum in EFT-Näherung	21
2.4.2.3 Ionenstrahlinduziertes Kriechen in EFT-Näherung	24
2.5 Silizium	25
2.5.1 Materialeigenschaften	25
2.5.1.1 Kristallines Silizium (c-Si)	25
2.5.1.2 Amorphes Silizium (a-Si)	26

2.5.1.3	Flüssiges Silizium (l-Si)	27
2.5.2	Phasenübergänge	27
2.5.2.1	Phasenübergang zwischen c-Si und l-Si	27
2.5.2.2	Phasenübergang zwischen a-Si und l-Si	28
2.5.2.3	Phasenübergang zwischen a-Si und c-Si	29
2.5.3	Polymorphismus	30
2.5.3.1	Polymorphismus in c-Si	30
2.5.3.2	Polymorphismus in a-Si	31
2.5.3.3	Polymorphismus in unterkühltem l-Si	31
3	Experimente	32
3.1	Probenherstellung	32
3.1.1	Amorphisierung von kristallinem Silizium	32
3.1.2	Strukturierung der Proben-Oberfläche	33
3.2	Hochenergie-Ionenbestrahlung	33
3.2.1	Experimentelle Bedingungen	33
3.2.2	Experimente zur vertikalen Dehnung	35
3.2.3	Experimente zum plastischen Fließen	35
3.2.4	Experimente zur Biegung	36
3.3	Analyse-Verfahren	36
4	Ergebnisse	37
4.1	Charakterisierung der amorphen Schichten	37
4.1.1	Atomare Struktur und Dicke der amorphen Schicht	37
4.1.2	Deformations- und Spannungszustand	39
4.2	Schichtstruktur nach SHI-Bestrahlung	41
4.2.1	Atomare Struktur der amorphen Oberflächenschicht	41
4.2.2	Formierung einer amorphen Tiefenschicht	42
4.2.3	Berechnung der Schichtdicken	43
4.3	Deformationszustand nach SHI-Bestrahlung	45
4.3.1	Geometrie des bestrahlten Bereichs	45
4.3.2	Bestrahlung bei tiefen Temperaturen	46
4.3.2.1	Deformation im Zentralbereich	46
4.3.2.2	Deformation am y -Randbereich	48
4.3.2.3	Deformation am x -Randbereich	49
4.3.3	Bestrahlung bei Raumtemperatur	50
4.3.3.1	Deformation im Zentralbereich	50
4.3.3.2	Deformation am y -Randbereich	53
4.3.3.3	Deformation am x -Randbereich	54
4.3.4	Vergleich mit einem Kronglas	56
4.3.4.1	Deformation im Zentralbereich	56
4.3.4.2	Deformation am y -Randbereich	56
4.3.4.3	Deformation am x -Randbereich	57
4.3.5	Theoretische Beschreibung der Deformation	57
4.3.5.1	Deformation im Zentralbereich	58
4.3.5.2	Deformationsausbeute	61
4.3.5.3	Deformation am y -Randbereich	64
4.3.5.4	Deformation am x -Randbereich	71
4.4	Spannungszustand nach SHI-Bestrahlung	72

4.4.1	Biegung bei tiefen Temperaturen	73
4.4.2	Biegung bei Raumtemperatur	75
4.4.3	Berechnung der Spannungen	76
4.4.4	Theoretische Beschreibung des Spannungszustandes	78
5	Diskussion	80
5.1	Phasenübergänge in der Ionenspur	80
5.1.1	Interpretation des Schwellwertes der Deformation	80
5.1.2	Widerspruch zum Schmelzübergang	82
5.1.3	Nachweis eines Glasübergangs	83
5.2	Beschreibung des Deformationszustandes im Rahmen der EFT-Näherung	84
5.2.1	Modellierung der nv-Zone als elastische Inhomogenität	84
5.2.2	Berechnung der normierten Deformationsausbeute	85
5.2.3	Berechnung der effektiven Fließtemperatur	87
5.2.4	Vergleich mit anderen amorphen Materialien	89
5.3	Beschreibung des Spannungszustandes im Rahmen der EFT-Näherung .	90
5.3.1	Berechnung der planaren Sättigungsspannung	90
5.3.2	Berechnung der effektiven Fließtemperatur	91
6	Zusammenfassung	92
	Literaturverzeichnis	93
A	Ergänzungen zu den Experimenten	101
A.1	Ionenstrahllabor am HMI Berlin	101
A.2	Probenhalter mit verstellbarer Blende	102
A.3	Aufbau der in-situ Laser-Reflexionsmessung	103
A.4	Verwendete Analyse-Verfahren	104
B	Ergänzungen zu den Rechnungen	106
B.1	Fluiditätstensor in EFT-Näherung	106
B.2	Numerische Berechnung der normierten Deformationsausbeute in EFT-Näherung	107
B.2.1	Temperaturverteilung um die Ionenbahn	107
B.2.2	Modellierung der effektiven Eigendehnung der nv-Zone	107
B.2.3	Modellierung der Volumenkontraktion	108
B.2.4	Modifizierung der effektiven Eigendehnung	108
B.2.5	Verwendete Materialparameter	108
C	Ergänzungen zu den Ergebnissen	109
C.1	Formierung einer porösen nanokristallhaltigen Schicht	109
C.2	Modifizierung der Probenoberfläche	110
C.2.1	Experimente	110
C.2.2	Wellenformierung	110
C.2.3	Glättung der Probenoberfläche	111
D	Alternative Modelle zur plastischen Deformation	112
D.1	Rekombination von freiem Volumen	112

D.2	Plastisches Fließen und inverse Relaxation	113
D.3	Viskoelastische Feldtheorie	113
D.4	Verzögerte Elastizität	114
D.5	Makroskopischer Impulsübertrag	115
	Danksagung	116
	Ehrenwörtliche Erklärung	118
	Lebenslauf	119

Abbildungsverzeichnis

2.1	Bremsquerschnitte von Si Ionen in Si	4
2.2	Zeitliche Entwicklung der deponierten Energie in einer Ionenspur	8
2.3	Plastische Deformation amorpher Materialien unter Hochenergie-Ionenbestrahlung	13
2.4	Atomare Umordnung entlang der Ionenspur	15
2.5	Anisotropes Wachstum in EFT-Näherung	23
2.6	Ionenstrahlinduziertes Kriechen in EFT-Näherung	24
2.7	Verlauf der auf c-Si bezogenen freien Enthalpie	28
2.8	Berechnetes Phasendiagramm für stabile und metastabile Si Phasen	30
2.9	Polymorphismus in einer unterkühlten Flüssigkeit	31
3.1	Si-Mehrfachimplantation zur Amorphisierung von c-Si	33
3.2	Energieverluste von Au und Xe Ionen in Si	34
3.3	Geometrie der Hochenergie-Ionenbestrahlungen	35
4.1	TEM-Querschnittsaufnahmen	37
4.2	RBS-Messung.	38
4.3	IRR-Spektrum	38
4.4	Raman-Spektrum	38
4.5	Röntgenbeugungsmessung	38
4.6	DEKTAK-Messung	40
4.7	Laserprofilometer-Messung	40
4.9	Raman-Spektrum nach Bestrahlung	41
4.8	TEM-Aufnahmen einer porösen nanokristallhaltigen a-Si Schicht	41
4.10	Deplazierungen pro Gitteratom infolge des nuklearen Energieeintrags	42
4.11	Schichtsystem in einer a-Si Probe nach der SHI-Bestrahlung	43
4.12	Berechnung der Schichtdicken aus dem IRR-Spektrum	44
4.13	Plastisches Fließen von a-Si unter Bestrahlung bei tiefen Temperaturen	46
4.14	Abhängigkeit der Verschiebung von der Fluenz	47
4.15	Stufenhöhe nach SHI-Bestrahlung	48
4.16	Deformation am y -Randbereich	49
4.17	Deformation am x -Randbereich	49
4.18	Plastisches Fließen von a-Si unter Bestrahlung bei Raumtemperatur	50
4.19	Abhängigkeit der Verschiebung von der Fluenz bei Raumtemperatur	51
4.20	Vertikale Dehnung nach SHI-Bestrahlung bei Raumtemperatur	52
4.21	Veränderung der Au-Schicht durch Bestrahlung bei Raumtemperatur	53
4.22	Deformation am y -Randbereich	54
4.23	Deformation am x -Randbereich	54
4.24	Vergleich von DEKTAK-Messung und AFM-Messung	55
4.25	Plastisches Fließen des B270-Kronglases bei Raumtemperatur	56
4.26	Abhängigkeit der Verschiebung des B270-Kronglases von der Fluenz	57

4.27	Deformationsausbeute von a-Si in Abhängigkeit vom elektronischen Energieeintrag und von der Temperatur	62
4.28	Elektronischer Energieverlust des B270-Kronglases	63
4.29	Fluss am y -Randbereich	65
4.30	Stationäre Schergeschwindigkeit von a-Si am y -Randbereich	66
4.31	Verschiebung von a-Si an der Probenoberfläche am y -Randbereich	67
4.32	Vergleich der berechneten Verschiebung von a-Si mit dem Experiment	68
4.33	Stationäre Schergeschwindigkeit des B270-Kronglases am y -Randbereich	69
4.34	Vergleich der berechneten Verschiebung des B270-Kronglases mit dem Experiment	70
4.35	Biegung freitragender a-Si Proben unter SHI-Bestrahlung	73
4.36	Krümmung als Funktion der Fluenz für Bestrahlungen bei tiefen Temperaturen	74
4.37	Krümmung als Funktion der Fluenz für nachfolgende Rückseiten-Bestrahlungen bei tiefen Temperaturen	74
4.38	Krümmung als Funktion der Fluenz für senkrechte Bestrahlungen bei Raumtemperatur	75
4.39	Krümmung als Funktion der Fluenz für schräge Bestrahlungen bei Raumtemperatur	76
4.40	Spannungsverlauf in a-Si unter SHI-Bestrahlung	77
5.1	Schematische Darstellung der niederviskosen Zone um die Ionenbahn	82
5.2	Modellierung der Eigendehnung der nv-Zone	84
5.3	Berechnung der normierten Deformationsausbeute ohne Existenz einer LDL-Si Phase	85
5.4	Berechnung I der normierten Deformationsausbeute bei Existenz einer LDL-Si Phase	86
5.5	Berechnung II der normierten Deformationsausbeute bei Existenz einer LDL-Si Phase	86
5.6	Berechnung der effektiven Fließtemperatur aus den Messungen zur normierten Deformationsausbeute	87
5.7	Einschränkung des Wertebereichs der berechneten effektiven Fließtemperatur	88
5.8	Vergleich von berechneter und experimentell ermittelter normierter Deformationsausbeute	89
5.9	Berechnung der Fluidität aus der Deformationsausbeute	90
5.10	Berechnung der effektiven Fließtemperatur aus der planaren Sättigungsspannung	91
A.1	Ionenstrahllabor am HMI Berlin	101
A.2	Speziell angefertigter Probenhalter mit verstellbarer Blende	102
A.3	Messung des Krümmungsradius mittels in-situ Laserreflexion	103
C.1	Nachweis der Formierung von Nanokristallen mittels Röntgenbeugung	109

Tabellenverzeichnis

3.1	Bestrahlungsparameter zur Amorphisierung von c-Si	32
3.2	Hochenergie-Ionenbestrahlung von Si	34
3.3	Bestrahlungsparameter für die Experimente zur vertikalen Dehnung . .	35
3.4	Bestrahlungsparameter für die Experimente zum plastischen Fließen . .	36
3.5	Bestrahlungsparameter für die Experimente zur Biegung	36
4.1	Schergeschwindigkeit von a-Si bei tiefen Temperaturen	47
4.2	Querschnitte der Gräben und Wälle am x -Randbereich nach Bestrah- lung bei tiefen Temperaturen	49
4.3	Schergeschwindigkeit von a-Si bei Raumtemperatur	52
4.4	Querschnitte der Gräben und Wälle am x -Randbereich bei Raumtem- peratur	55
4.5	Berechnete Werte der Deformationsausbeute von a-Si	63
4.6	Beschreibung der Deformation am x -Randbereich	71
C.1	Aufräuen der Oberfläche	110
C.2	Bestrahlungsparameter für die Experimente zur Modifizierung der Ober- fläche	110

Kapitel 1

Einleitung

Bereits um 1900 nahmen Lenard und Rutherford die ersten Untersuchungen zur Streuung und Reichweite von schnellen geladenen Teilchen in Festkörpern vor und gewannen erste Einblicke in den Aufbau der Atome [1]. Seither hat sich die Ionen-Festkörper-Wechselwirkung in der Materialforschung sowohl als Analysemethode weiterentwickelt als auch als Verfahren zur gezielten Modifizierung der physikalischen und chemischen Eigenschaften des Substrats etabliert [1–3]. Dies führte zum Siegeszug der niederenergetischen Ionenimplantation, die bereits sehr mehreren Jahrzehnten in der Halbleitertechnologie als industrielles Standardverfahren zum Einsatz kommt. Dagegen wird die Wechselwirkung energiereicher Teilchen mit Materie bisher hauptsächlich in der Grundlagenforschung und Materialwissenschaft eingesetzt, wobei sie unaufhaltsam in die Gebiete der Werkstoffprüfung, Biophysik und Medizin vorrückt und in der Tumorthherapie bereits eine erste Anwendung mit großem Potential gefunden hat [4].

Die Bestrahlung von Festkörpern mit hochenergetischen schweren Ionen führt im oberflächennahen Bereich zur elektronischen Anregung und Ionisation der Substratatome entlang einer nahezu geraden Ionenbahn [1–3]. Im Volumen des Festkörpers kann somit mehr Energie mit einer stärkeren Anisotropie in das Elektronensystem deponiert werden, als es die derzeit leistungsstärksten Laser ermöglichen [4]. Dieser hohe elektronische Energieeintrag kann im atomaren System Phasentransformationen und Phasenübergänge induzieren, die in kristallinen Materialien zur Amorphisierung entlang der Ionenspur führen [5] und in konventionellen Gläsern eine plastische Deformation bewirken [6]. Diese nichtsättigende anisotrope Ionenstrahlinduzierte Deformation wurde bisher an allen untersuchten amorphen Materialien oberhalb eines material-spezifischen Schwellwertes des elektronischen Energieeintrags nachgewiesen, wobei diese um so stärker auftritt, je tiefer die Temperatur ist [6–34]. Eine mechanische Beschränkung der Deformation führt zum Aufbau von Spannungen in der bestrahlten amorphen Schicht, so dass sich freitragende Proben biegen [18]. Während die mikroskopische Ursache der 1983 von Klaumünzer *et al.* [6] entdeckten und sinnbildlich als Ionen-Hämmerungseffekt bezeichneten Deformation noch immer kontrovers diskutiert wird [21, 35–38], zeichnen sich bereits erste Anwendungen ab. So könnte der Effekt ausgenutzt werden, um photonische Kristalle auf der Basis ellipsoidaler Kolloide herzustellen [32], oder um Materialoberflächen verlustfrei zu glätten [25] oder definiert zu modifizieren [20].

Die bisher erfolgreichste Erklärung der plastischen Deformation amorpher Materialien unter Hochenergie-Ionenbestrahlung stellt das von Trinkaus *et al.* in den Jahren 1995-2000 entwickelte viskoelastische Modell dar [26,38–42]. Im Rahmen dieser Theorie werden die über die Anisotropie des Energieeintrags im atomaren System entstehenden Scherspannungen in jeder heißen und fluiden Ionenspur über viskoses Fließen relaxieren und zu einer Relaxationsdehnung führen. Während des Abkühlvorgangs werden diese Relaxationsdehnungen in amorphen Materialien entlang jeder Ionenspur auf der ps-Zeitskala einfrieren, so dass unter Bestrahlung mit Fluenzen von $\gtrsim 10^{12}$ Ionen/cm² eine makroskopische Deformation sichtbar wird. Es wird angenommen, dass in kristallinen Materialien die einsetzende Rekristallisation der fluiden Ionenspur die Relaxationsdehnung kompensiert. Die in konventionellen metallischen und dielektrischen Gläsern beobachteten Deformationen konnten mit diesem Modell exzellent quantitativ beschrieben werden, dessen Verifizierung für amorphe Halbleiter stand jedoch noch aus. Insbesondere galt es, den Einfluss des angenommenen unterschiedlichen Erstarrungsverhaltens, eines kinetisch blockierten Glasübergangs in konventionellen Gläsern einerseits und eines postulierten Flüssig-Fest-Phasenübergangs 1. Art in amorphen Halbleitern andererseits, auf die plastische Deformation zu klären.

In der vorliegenden Arbeit wird das Deformationsverhalten von amorphem Silizium unter Hochenergie-Ionenbestrahlung untersucht. Der in seiner kristallinen Form technologisch wichtigste Halbleiter Silizium wurde ausgewählt, da ein deutlicher struktureller Unterschied zwischen der halbleitenden, tetraedrischen amorphen Phase und der metallischen, hochkoordinierten flüssigen Phase besteht und somit ein starker Kontrast zu konventionellen Gläsern existiert [43]. Aufgrund dieser strukturellen Unterschiede tritt beim Phasenübergang zwischen flüssigem und amorphem Silizium eine Dichteänderung von $\sim 10\%$ auf [43], weshalb dieser als Flüssig-Fest-Phasenübergang 1. Art klassifiziert wurde. Als Konsequenz sollte der Ionen-Hämmerungseffekt in amorphem Silizium zu inversen Deformationserscheinungen gegenüber jenen von konventionellen Gläsern führen [22]. Alternative Modelle beschreiben den Phasenübergang jedoch als Flüssig-Flüssig-Phasenübergang 1. Art, der von einem Glasübergang zu amorphem Silizium gefolgt wird [44]. Somit würde dieses eine Glasphase darstellen und müsste sich unter Hochenergie-Ionenbestrahlung ähnlich wie ein konventionelles Glas deformieren. Zur endgültigen Klärung der Natur des Phasenübergangs ist eine experimentelle Methode erforderlich, die einerseits auf der ps-Zeitskala sensitiv ist, um Kristallisationsprozesse auszuschließen, und andererseits Informationen zur atomaren Beweglichkeit (Diffusion, Viskosität) und zur atomaren Struktur (Koordination, Eigendehnung) liefert. Im Gegensatz zur Laser-Bestrahlung oder der Levitationstechnik erfüllt die Hochenergie-Ionenbestrahlung von amorphem Silizium alle diese Anforderungen, so dass in dieser Arbeit nicht nur eine Verifizierung der Trinkaus-Theorie, sondern auch der Phasenübergang zwischen flüssigem und amorphem Silizium untersucht werden soll.

Kapitel 2

Physikalische Grundlagen

2.1 Ionen-Festkörper-Wechselwirkung

Werden Atome ionisiert und in einem elektrostatischen Feld der Spannung U beschleunigt, erhalten sie eine vom Ladungszustand q_i abhängige kinetische Energie $E = q_i e U$, wobei e die Elementarladung bezeichnet. Dringt ein solches energiereiches Teilchen in einen Festkörper ein, führen Stoß- und Streuprozesse an den Substratatom zu einem Energieverlust, wodurch das Ion abgebremst wird und nach einer bestimmten Wegstrecke zur Ruhe kommt. Auf diese Weise lassen sich Fremdatome mit hoher Genauigkeit und auch oberhalb ihrer Gleichgewichtslöslichkeit in einen Festkörper implantieren und somit gezielt dessen mechanische, elektrische, magnetische oder optische Eigenschaften modifizieren. Andererseits kann die entlang der Ionenbahn deponierte Energie Phasentransformationen und Phasenübergänge induzieren und die Formierung metastabiler Phasen außerhalb des thermodynamischen und mechanischen Gleichgewichts bewirken. Das Verständnis der Ionen-Festkörper-Wechselwirkung ist somit von fundamentaler Bedeutung für die Halbleitertechnologie und die Materialforschung.

2.1.1 Energieverlust eines Ions

Auf dem Weg durch einen Festkörper stoßen die Ionen sowohl elastisch mit den elektronisch abgeschirmten Atomen als auch unelastisch mit den Atomen (Anregung, Ionisation) und Atomkernen (Kernanregung, Kernreaktion) [1–3]. Der Energieverlust eines Ions $dE < 0$ auf einer Weglänge $d\xi'$ in einem Festkörper mit zufällig verteilten Atomen (amorphes Substrat) ist bestimmt durch die atomare Dichte des Substrats N_s und die im Einzelstoß übertragene Energie E_t gemäß

$$dE(E) = -N_s \int E_t d\sigma(E_t, E) d\xi' = -N_s \epsilon(E) d\xi', \quad (2.1)$$

wobei $d\sigma$ als *Wirkungsquerschnitt* und ϵ als *Bremsquerschnitt* bezeichnet werden [1–3]. Kristalline Materialien können für eine Verkipfung aus den Hauptachsen und Ebenen um 5° - 7° ebenfalls als Festkörper mit zufällig verteilten Atomen betrachtet werden. Im Energiebereich der Ionenimplantation ($E \sim \text{keV} \dots \text{MeV}$) und Ionenbestrahlung (Energie pro Nukleon $E_n \sim \text{MeV/u}$) tragen Kernanregungen und Kernreaktionen kaum zur

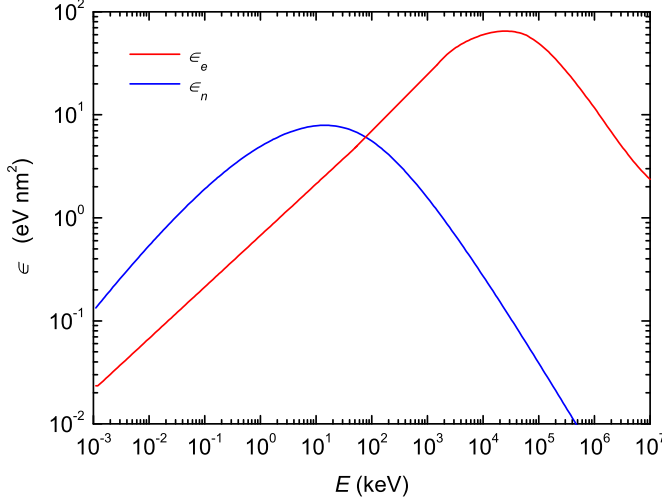


Abb. 2.1: Bremsquerschnitte von Si Ionen in Si. Abhängigkeit des nuklearen und elektronischen Bremsquerschnittes, ϵ_n bzw. ϵ_e , von der momentanen kinetischen Energie der Ionen. Die Daten stammen aus tabellierten Werten des Programms "SRIM 2003" [45].

Abbremsung bei. Je nach Energie E , Masse M_i und Ordnungszahl Z_i der Ionen, sowie Masse M_s und Ordnungszahl Z_s des Substrats dominieren die elastischen Atomstöße als *nuklearer Energieverlust* dE_n mit Wirkungsquerschnitt $d\sigma_n$, bzw. Bremsquerschnitt ϵ_n , oder die unelastischen Atomstöße als *elektronischer Energieverlust* dE_e mit Wirkungsquerschnitt $d\sigma_e$, bzw. Bremsquerschnitt ϵ_e . Beide Prozesse können meist als statistisch unabhängig voneinander betrachtet werden, so dass mit Gl. (2.1) folgt [1–3]

$$d\sigma(E_t, E) = d\sigma_n(E_t, E) + d\sigma_e(E_t, E) \quad \rightarrow \quad \epsilon(E) = \epsilon_n(E) + \epsilon_e(E). \quad (2.2)$$

Für niedrige Energien ($E \sim \text{keV}$) und große Ionenmassen ($M_i \gtrsim 10$) dominiert ϵ_n deutlich die Abbremsung. Das Maximum von ϵ_e liegt für leichte Ionen bei $E \sim \text{MeV}$, für schwere Ionen im Bereich $E \sim 100 \dots 1000 \text{ MeV}$. Der prinzipielle Verlauf der Abhängigkeiten $\epsilon_n(E)$ und $\epsilon_e(E)$ ist in Abb. 2.1 am Beispiel von Si-Ionen in Si dargestellt.

In der Praxis werden meist statt der Bremsquerschnitte die Energieverluste pro Weglänge, d.h. die *Bremskräfte* S , angegeben, so dass mit den Gln. (2.1) und (2.2) folgt

$$S(E) = -\frac{dE(E)}{d\xi'} \quad \rightarrow \quad S(E) = S_n(E) + S_e(E). \quad (2.3)$$

In dieser Arbeit werden, wie allgemein üblich, die nuklearen und elektronischen Bremskräfte, S_n bzw. S_e , kurz als nukleare und elektronische Energieverluste bezeichnet.

2.1.2 Nuklearer Bremsquerschnitt

Unter Kenntnis des interatomaren Potentials kann $\epsilon_n(E)$ aus $d\sigma_n(E_t, E)$ berechnet werden. Der elastische Stoßprozess wird dabei als klassisches Zweikörperproblem im Coulomb-Potential mit entsprechender elektronischer Abschirmung behandelt. Nach Lindhard, Scharff und Schiøtt kann $d\sigma_n(E_t, E)$ auf eine universelle Streufunktion zurückgeführt werden, die die Eigenschaften der Stoßpartner in normierter Form berück-

sichtigt [46]. Da die Wechselwirkungszeit für große Ionengeschwindigkeiten v_i klein ist, wird ϵ_n für hohe Energien klein. Andererseits schwächt die elektronische Abschirmung, deren Effektivität mit sinkender Teilchengeschwindigkeit wächst, die nuklearen Wechselwirkungskräfte, so dass ϵ_n für niedrige Energien auch klein wird und folglich für mittlere Energien ein Maximum aufweist (vgl. Abb. 2.1) [1–3].

2.1.3 Elektronischer Bremsquerschnitt

Im Gültigkeitsbereich der ersten Bornschen Näherung $E \gg E_B \sim M_i Z_i^{4/3} 25 \text{ keV/u}$, oder $v_i \gg v_B Z_i^{2/3}$ mit der Bohrschen Geschwindigkeit v_B , ist die Abhängigkeit $\epsilon_e(E)$ bereits grob aus den klassischen Betrachtungen von Bohr zu $d\sigma_e(E_t, E)$ ersichtlich, der Kollisionen vollständig ionisierter Projektile mit freien, quasi-ruhenden Elektronen beschrieb [47]. Die von Bethe und Bloch ausgeführten quantenmechanischen Berechnungen korrigierten die Bohrschen Ergebnisse nur im Vorfaktor und zeigen den gleichen funktionalen Abfall $\epsilon_e(E) \propto E^{-1} (\ln E + \text{const.})$ mit wachsender Energie [48, 49]. Im Bereich kleiner Energien $E \ll E_B$ betrachteten Lindhard und Scharff zunächst den Energieverlust in einem freien Elektronengas mit einer Fermi-Geschwindigkeit $v_F \gg v_i$, und zeigten, dass $\epsilon_e(E)$ mit wachsender Energie entsprechend $\epsilon_e(E) \propto v_i \propto \sqrt{E}$ ansteigt [3]. Eine Erweiterung ihrer Berechnungen auf Substratatom ergab in guter Übereinstimmung mit Experimenten ebenfalls einen Verlauf $\epsilon_e(E) \propto \sqrt{E}$ [50]. Einen anderen Ansatz entwickelte Firsov, der annahm, dass Ion und Substratatom für entsprechend lange Kollisionszeiten ein Quasimolekül bilden und ein Elektronenaustausch zwischen Ion und Atom stattfindet [51]. Während auch Firsov aus $d\sigma_e(E_t, E)$ eine Abhängigkeit $\epsilon_e(E) \propto \sqrt{E}$ ableitete [1–3], konnten auf der Basis seines Modells sogar die experimentell beobachteten Oszillationen von $\epsilon_e(Z_i, Z_s)$ durch quantenmechanische Verallgemeinerungen für die Elektronenfluktuation erklärt werden [52]. Schließlich folgt, dass $\epsilon_e(E)$ um $E \sim M_i Z_i 80 \text{ keV/u} \sim E_B$ ein Maximum durchläuft (vgl. Abb. 2.1) [1–3, 53].

2.1.4 Reichweite der Ionen

Sind die Werte für $\epsilon_n(E)$ und $\epsilon_e(E)$ bekannt, kann durch eine Integration der Gl. (2.1) die Reichweite eines Ions R_i berechnet werden. Da es sich um statistische Streuprozesse handelt, wird im Allgemeinen die auf die Einfallrichtung projizierte Weglänge ξ betrachtet, welche für hohe Energien näherungsweise der wahren Weglänge ξ' entspricht, und die über den Einfallswinkel der Ionen Θ bezogen auf das Lot zur Probenoberfläche in die entsprechende Tiefe $z = -\cos \Theta \xi < 0$ umgerechnet werden kann. Für eine kleine Anzahl an eingeschossenen Ionen kann die Fremdatomverteilung $N_i(\xi)$ grob durch die Gauß-Verteilung

$$N_i(\xi) = \frac{\Phi t}{\sqrt{2\pi} \cdot \Delta R_p} \cdot \exp\left(-\frac{(\xi - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right) \quad (2.4)$$

approximiert werden, wobei R_p die mittlere projizierte Reichweite und ΔR_p deren Streuung darstellen [1, 2]. Das als Fluenz bezeichnete Integral $\Phi t = \int N_i(\xi) d\xi$ gibt die Anzahl an eingeschossenen Ionen pro Flächeneinheit an, welche sich experimentell aus einer Stromintegration relativ genau ermitteln lässt. Erfolgt der Ionenbeschuss entlang einer Hauptachse eines kristallinen Substrats, führen verminderte Energieverluste zu einer Verbreiterung des Profils mit einem exponentiellen Abfall in der Tiefe [2].

Im Rahmen dieser Arbeit wurden zur Berechnung der Fremdatomverteilung $N_i(\xi)$ sowie der Energieverluste $S_n(\xi)$ bzw. $S_e(\xi)$ Monte-Carlo Computer-Simulationen mit dem Programm "SRIM 2003" vorgenommen, aus denen auch Momente höherer Ordnung (Schiefe, Kurtosis) entnommen werden können. [45].

2.2 Materialmodifizierung durch einen hohen nuklearen Energieeintrag

2.2.1 Deplazierung von Gitteratomen

Wird bei einem elastischen Stoßprozess die Deplazierungsenergie des Substratatoms E_d überschritten ($E_d \sim 14$ eV für Si [1]), wird dieses vom Gitterplatz versetzt, wodurch sich in kristallinen Festkörpern durch primäre Ionenstöße Strahlenschäden bilden. Für $E \gg E_t$ (vgl. Gl. (2.1)) können die deplazierten Atome ihrerseits weitere Atome versetzen, und es kommt zur Ausbildung sekundärer Defekte durch Stoßkaskaden. Die Größe und Art der primären und sekundären Strahlenschäden und deren Verteilung hängt von Ionenart, Energie, Fluenz, Proben temperatur T_0 und einem möglichen Kanalisierungseffekt ab [1–3]. Näherungsweise kann die Anzahl der in einem primären Stoß versetzten Atome N_d^p pro einfallendem Ion nach Kinchin und Pease über [1, 2, 54]

$$N_d^p = \frac{E_t}{2E_d} \quad , \quad \text{für } 2E_d < E_t < E_c \quad (2.5)$$

abgeschätzt werden, wenn E_t unterhalb eines kritischen Wertes $E_c(Z_i, Z_s, M_i, M_s)$ liegt. Ein Maß für die Anzahl $N_d(\xi)$ der bei einer projizierten Weglänge ξ durch primäre Stöße und Stoßkaskaden deplazierten Gitteratome eines Ions pro Wegeinheit kann aus den oben genannten Computer-Simulationen entnommen werden [45]. Um die zu einer bestimmten Fluenz in Stoßprozesse deponierte Energie zu beschreiben, wird $N_d(\xi)$ über

$$n_{dpa}(\xi) = \frac{N_d(\xi) \Phi t}{N_s} \quad (2.6)$$

in die entsprechende Anzahl an Deplazierungen pro Gitteratom $n_{dpa}(\xi)$ umgerechnet.

2.2.2 Amorphisierung kristalliner Materialien

Bei niedrigen Temperaturen, wenn thermische Ausheilprozesse ausgeschlossen werden können, beginnen sich die geschädigten Gebiete mit zunehmender Fluenz zu überlappen, bis es schließlich zur Ausbildung einer amorphen Schicht kommt. Nach Gibbons kann der amorphisierte Anteil an der bestrahlten Fläche aus den auf die Substratoberfläche projizierten Querschnittsflächen der einzelnen, durch jeweils ein Ion geschädigten Bereiche ausgedrückt werden [55]. Hierfür wird ein Überlappungsgrad m eingeführt, der angibt, wieviele je Ion erzeugte Schädencluster sich überlagern müssen, um eine Amorphisierung zu bewirken. Dieser Wert m sinkt mit steigender Ionenmasse aufgrund der höheren Werte ϵ_n , was für Si experimentell bestätigt wurde. Für $m = 0$ erzeugt bereits jedes einzelne Ion einen amorphen Bereich entlang seiner Bahn.

Im Modell der Vakanzen-Ausdiffusion nach Morehead und Crowder wird die durch thermische Diffusionsprozesse bestimmte Abhängigkeit der Schädigung und Amorphisierung von der Temperatur berücksichtigt [56]. Aus diesen Betrachtungen kann eine kritische Temperatur abgeleitet werden, oberhalb der keine amorphen Zonen mehr existieren sollten und der Kristall trotz Ionenbeschuss durch in-situ Ausheilprozesse weitgehend defektfrei bleibt.

2.3 Materialmodifizierung durch einen hohen elektronischen Energieeintrag

Im Energiebereich um $E \sim E_B$ gilt $\epsilon_e(E) \gg \epsilon_n(E)$ (vgl. Abb. 2.1), so dass die Wirkung des hohen elektronischen Energieverlustes separat untersucht werden kann. Bestrahlt man mit schnellen schweren Ionen, d.h. $E_n \sim \text{MeV/u}$, (im Folgenden als SHI-Bestrahlung bezeichnet), werden im oberflächennahen Bereich entlang der Ionenbahn ungefähr $S_e \sim (10 \dots 30) \text{ keV/nm}$ in das Elektronensystem deponiert, und damit mehr Energie, als es die derzeit leistungsstärksten Laser ermöglichen [4]. In Abb. 2.2 ist die zeitliche Entwicklung der deponierten Energie schematisch dargestellt [53]. In den folgenden Abschnitten werden die durch diesen hohen elektronischen Energieeintrag induzierten Strukturveränderungen und Materialmodifikationen in kristallinen und amorphen Festkörpern beschrieben.

2.3.1 Energiedichte im Elektronensystem

Das mit ca. (1...10)% der Lichtgeschwindigkeit in das Substrat eindringende Ion erfährt durch die inelastischen Atomstöße kaum eine Richtungsänderung, so dass die Energie auf einer Länge von $\sim (10 \dots 20) \mu\text{m}$ in einem zylindrischen Bereich um die Ionenbahn deponiert wird, und die Energiedosis im radialem Abstand r proportional

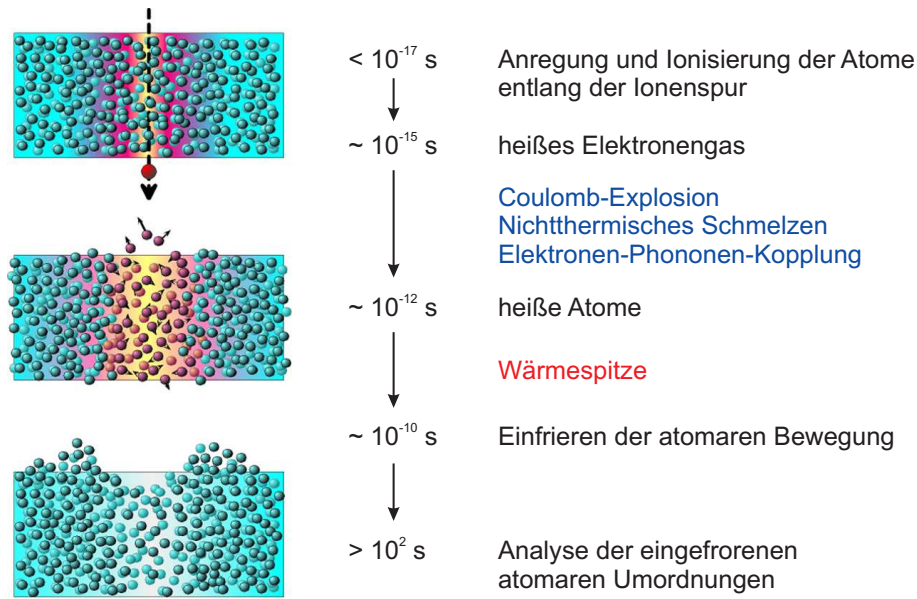


Abb. 2.2: Zeitliche Entwicklung der deponierten Energie in einer Ionenspur [53]. Die anfängliche elektronische Anregung und Ionisierung der Atome induziert atomare Bewegungen, die während des Abkühlens einfrieren und permanente Umordnungen hinterlassen können.

zu r^{-2} abfällt [57]. Der Kernbereich, in dem die höchste Energiedichte konzentriert ist, hat einen Radius, der für Isolatoren und Halbleiter aus deren Energiebandlücke E_g über $R_c \sim \hbar v_i / 2E_g$ zu $\sim (2 \dots 5)$ nm abgeschätzt werden kann [29]. In diesem Bereich werden die Atome innerhalb weniger 10^{-17} s stark angeregt und ionisiert. Da jedoch nur (30...40) % von S_e zu primären Anregungen und Ionisierungen führen, erhalten die befreiten Elektronen ("δ-Elektronen") eine hohe kinetische Energie und transportieren einen Teil der deponierten Energie in weitere Entfernungen [29]. Da $R_p \gg R_c$ gilt, beträgt die elektronische Energiedichte im Kernbereich,

$$E_{el} \sim \frac{S_e}{2\pi R_c^2} \left(1 + \frac{1}{1 + 2 \ln(R_p/R_c)} \right) \sim \frac{S_e}{2\pi R_c^2}, \quad (2.7)$$

grob nur ca. 50 % von S_e [58]. Nach etwa 10^{-15} s beginnen die im Kernbereich angeregten Elektronen zu thermalisieren, während die Atome noch in Ruhe sind. Auf einer Zeitskala von ungefähr 10^{-14} s liegen im Elektronensystem im Kernbereich Temperaturen von $T_{el} \sim (10^4 \dots 10^5)$ K vor (in Si: $T_{el} \gtrsim 2 \times 10^4$ K), und es setzen Energiedissipation innerhalb des Elektronensystems und Energiekonversion zum Gitter ein [53, 59, 60].

2.3.2 Energietransfer vom Elektronensystem zum Gitter

Gegenwärtig werden drei Mechanismen für die Konversion der im Elektronensystem gespeicherten potentiellen Energie in atomare Bewegung diskutiert [29].

2.3.2.1 Coulomb-Explosion

Der schnellste Mechanismus resultiert aus der elektrostatischen Abstoßung der hoch ionisierten, positiv geladenen Substratatom um die Ionenbahn, wenn die δ -Elektronen weit außerhalb des Kernbereiches eingefangen werden und nicht schnell genug eine Ladungsneutralisation bewirken. Überschreitet die Neutralisationszeit 10^{-14} s für leichte Substratatom, bzw. 10^{-13} s für schwere Substratatom, wird ein wesentlicher Anteil der Energie des Elektronensystems durch die Coulomb-Abstoßung in atomare Bewegung umgewandelt, die als *Coulomb-Explosion* bezeichnet wird [53, 61–63]. Untersuchungen zur Energieverschiebung von sekundären Auger-Elektronen belegen, dass in Isolatoren auf der fs-Zeitskala ein elektrostatisches Potential um die Ionenbahn existiert. Dagegen konnte in Festkörpern mit hoher elektronischer Beweglichkeit kein Ionenspurpotential nachgewiesen werden, so dass eine Coulomb-Explosion in metallischen Materialien wahrscheinlich ineffizient und eher in Isolatoren zu erwarten ist [53, 59, 60]. Entsprechende Auger-Messungen und Untersuchungen zur Beugung niederenergetischer Elektronen an bestrahltem kristallinem Si (c-Si) und amorphem Si (a-Si) zeigten eine 8-9 fache Ionisierung im Kernbereich und ein schwaches Ionenspurpotential, das jedoch zu gering ist, um eine Coulomb-Explosion auszulösen [64]. Vielmehr offenbarten diese Experimente, dass die Ladungsneutralisation in a-Si im wesentlichen nach ca. 10^{-15} s vollendet ist, und die gemessenen Auger-Verschiebungen auf eine schwache und langsame Komponente des Ionenspurpotentials zurückzuführen sind, die wahrscheinlich durch langlebige Störstellen (Exzitonen, Defektzustände) hervorgerufen wird.

2.3.2.2 Nichtthermisches Schmelzen

Auch wenn die Ladungsneutralität im Kernbereich schnell wieder hergestellt ist, befinden sich die Elektronen noch nicht in ihren Grundzuständen, da Rekombinationen je nach Elektronen- und Löcherbeweglichkeiten sehr langsam erfolgen können. Diese hohe Dichte an elektronischen Anregungen führt zu überwiegend abstoßenden oder antibindenden interatomaren Potentialen fern vom Gleichgewicht, welche kovalente Bindungen schwächen und abstoßende interatomare Kräfte induzieren [65–67]. So resultiert eine atomare Bewegung auf der sub-ps-Zeitskala, die als *nichtthermisches Schmelzen* bezeichnet wird [29, 53].

Die Hochenergie-Ionenbestrahlung von Si bewirkt eine Anregung von ca. 12% der Valenzbandelektronen ins Leitungsband [53]. Aus theoretischen Untersuchungen zur Wirkung von fs-Laserpulsen in c-Si ist bekannt, dass diese Anregung ausreicht, um transversale akustische und longitudinale optische Phononen instabil werden zu lassen [68, 69]. Somit würde das Diamantgitter durch atomare Versetzungen um mehr als 1 \AA innerhalb von ~ 120 fs in eine Struktur ähnlich der des kubischen Gitters zerfallen. Es wird daher erwartet, dass die Energiebandlücke verschwindet und sich eine metalli-

sche Phase bildet, die durch die hohe kinetische Energie der Atome sehr schnell flüssig wird [68, 69].

2.3.2.3 Elektronen-Phononen-Kopplung

Der am langsamsten, auf einer Zeitskala von $(10^{-13} \dots 10^{-12})$ s, und in allen Materialien ablaufende Konversionsmechanismus ist die *Elektronen-Phononen-Kopplung* über Kollisionen von Elektronen mit Atomen. Im Rahmen eines vereinfachten thermodynamischen Ansatzes wird der Energieübertrag vom Elektronensystem auf das Gitter und die Energiedissipation in beiden Subsystemen durch die zwei gekoppelten Wärmeleitungsgleichungen in zylindrischer Geometrie,

$$C_{el}(T_{el}) \frac{\partial T_{el}}{\partial t} = \nabla(\lambda_{el}(T_{el})\nabla T_{el}) - \tilde{g}(T_{el} - T) + E'_{el}, \quad (2.8)$$

$$\rho C(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(\lambda(T)\nabla T) + \tilde{g}(T_{el} - T), \quad (2.9)$$

beschrieben und die Elektronen-Phononen-Kopplung durch einen Parameter \tilde{g} quantifiziert, der auf die mittlere freie Weglänge der Elektronen zurückgeführt wird [70–74]. Die Terme $T_{el}, T, C_{el}, C, \lambda_{el}, \lambda$ entsprechen den Temperaturen, (spezifischen) Wärmekapazitäten und Wärmeleitfähigkeiten im Elektronensystem bzw. Gitter, ρ der Massendichte im Gitter und $E'_{el}(r, t)$ der Energiedichte im Elektronensystem, deren zeitliches und flächenmäßiges Integral S_e ergibt.

Die Wärmeleitungsgleichungen für das Elektronensystem (2.8) und das Gitter (2.9) beruhen jedoch auf dem Fourierschen Gesetz $Q_w = -\lambda\nabla T$ mit der Wärmestromdichte Q_w und setzen ein lokales thermodynamisches Gleichgewicht voraus. Im Falle vom Gitter betrachtet man gewöhnlich ein hinreichend großes, viele Atome enthaltendes Gebiet mit einer mittleren Phononenzahl \bar{n} . Daher ist fraglich, ob diese diffusive Beschreibung des Wärmetransports mit $Q_w(\bar{n})$ auf die Ionenspur mit Dimensionen um die mittlere freie Phononenweglänge (41.1 nm in Si) und die mittlere Phononenlebensdauer (6.32 ps in Si) angewendet werden kann. Aufgrund der durch Elektronen-Phononen-Kopplung im Gitter induzierten Energieverteilung fernab vom thermodynamischen Gleichgewicht sollte der Wärmetransport im Gitter mit der Geschwindigkeit \underline{v} eher durch die fundamentalere statistische Boltzmann-Transportgleichung für Phononen,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \underline{v}\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{streu}, \quad (2.10)$$

beschrieben werden, wobei f die orts-, zeit-, frequenz- und geschwindigkeitsabhängige Phononenverteilung darstellt und $(\partial f/\partial t)_{streu}$ alle Streuprozesse von Phononen und Elektronen enthält. Da Gl. (2.10) sowohl diffusive als auch ballistische Effekte beinhaltet, werden im Gegensatz zu Gl. (2.9) die wellenartige Ausbreitung der Wärme

mit Schallgeschwindigkeit und die Variation der Phononenverteilung in unterschiedliche Ausbreitungsrichtungen berücksichtigt, so dass z.B. Lösungen mit unendlich hohen Transportgeschwindigkeiten entfallen. Auch aus molekulardynamischen Simulationen geht hervor, dass die Energiedissipation im Anfangsstadium der Ionenspurbildung eher durch ballistische Kollisionen als durch Wärmediffusion erfolgt [75–77]. Da die Simulationen jedoch von der Wahl des interatomaren Potentials abhängen und das elektronische Subsystem nicht betrachtet wird, geben sie nur bedingt Auskunft.

Rechnungen zur Wärmeausbreitung in Si (unter Vernachlässigung von Phasenübergängen) nach Absorption von fs-, ps-, bzw. ns-Laserbestrahlung zeigen, dass die Lösungen der Wärmeleitungsgleichung und der Boltzmann-Transportgleichung nach etwa 10 ps auf nm-Dimensionen übereinstimmen [78]. Für kürzere Zeiten weist die Lösung der Boltzmann-Gleichung deutlich höhere Temperaturen im Maximum, einen verzögerten Wärmetransport in die Umgebung und die Ausbreitung thermischer Wellen aus.

2.3.3 Energiedissipation im Gitter

Die resultierende atomare Bewegung wird im Moment in der Literatur über zwei fundamental unterschiedliche Konzepte beschrieben.

2.3.3.1 Kohärente Bewegung aller Atome

In einem ersten, oft mit dem Auftreten einer Coulomb-Explosion verbundenen Konzept wird eine radiale, kohärente Bewegung aller Atome im Kernbereich der Ionenspur angenommen [62, 63]. Im Rahmen der Kontinuumsmechanik entspricht ein solcher Zustand einer fast instantanen mechanischen Belastung des Kernbereichs, der zur Entspannung eine elastische Welle oder eine Schockwelle aussendet und der selbst starken Vibrationen unterzogen wird [79]. Solange die Spannung unterhalb eines kritischen Grenzwertes bleibt, würde sich das Substrat elastisch verhalten und keine permanenten atomaren Umordnungen verbleiben [62]. Andererseits könnten auch die Vibrationen im Kernbereich und die ausgehende Schockwelle, möglicherweise durch niederfrequente Phononenmoden, lokal Phasentransformationen in Form von Versetzungen auslösen [63, 80]. In einigen Experimenten wird eine elektronisch-induzierte Zerstäubung an der Oberfläche beobachtet [81, 82]. Molekulardynamische Simulationen demonstrierten kürzlich, dass diese Abtragung durch eine Coulomb-Explosion ausgelöst werden könnte und die Ausbeute quadratisch mit der Ionisierung eines Ions pro Weglänge skaliert [76].

2.3.3.2 Atomare Bewegung als Folge einer Wärmespitze

Im zweiten Konzept geht man davon aus, dass die atomare Bewegung in deren Spätphase um $\sim (10^{-11} \dots 10^{-10})$ s, bis in einige $(10 \dots 20)$ μm Tiefe durch eine radiale Tem-

peraturverteilung $T(r, t)$ um die Ionenbahn charakterisiert, und das Abkühlen mittels Nichtgleichgewichts-Thermodynamik beschrieben werden kann. Für hinreichend hohe Energieeinträge S_e und folglich hohe Temperaturen T wäre dabei zu erwarten, dass die feste Materie entlang der Ionenbahn einen Phasenübergang zur flüssigen Phase vollführt. Die auftretenden verstärkten atomaren Umordnungen würden dann während des Erstarrens auf der Zeitskala einiger 10^{-10} s einfrieren [29]. Während die Elektronen-Phononen-Wechselwirkung ihrem Wesen nach zu einem solchen Konzept führt, kann auch nicht ausgeschlossen werden, dass die Coulomb-Explosion oder das nichtthermische Schmelzen in einer solchen *Wärmespitze* (engl. 'Thermal Spike') enden, und vielmehr Coulomb-Explosion und Wärmespitze frühe und späte Stadien der Ionen-spurbildung darstellen [75]. Solange man also eingefrorene atomare Umordnungen auf der Laborzeitskala analysiert, können keine eindeutigen Rückschlüsse auf den Konversionsmechanismus der ins Elektronensystem deponierten Energie geschlossen werden.

2.3.4 Auswirkung der Bestrahlung auf kristalline Materialien

In den meisten kristallinen Isolatoren, intermetallischen Verbindungen und reinen Metallen führt der hohe elektronische Energieeintrag S_e zur diskontinuierlichen bzw. kontinuierlichen Amorphisierung entlang der Ionenspur bis in einige μm Tiefe [5]. Die Experimente haben gezeigt, dass materialspezifische Schwellwerte der elektronischen Energie-deponierung S_{e0}^t zur Ausbildung amorpher Ionenspuren existieren, welche in vielen Halbleitern unter Bestrahlung mit einatomigen Ionen nicht überschritten wurden. So wurde in Si, Ge und GaAs keine ionenstrahlinduzierte Defektproduktion durch Einzelionen mit elektronischen Energieeinträgen von $S_e \lesssim 28 \text{ keV/nm}$ nachgewiesen [5, 83].

2.3.5 Auswirkung der Bestrahlung auf amorphe Materialien

An allen untersuchten amorphen Materialien wurde unter Bestrahlung mit hochenergetischen schweren Ionen eine nichtsättigende makroskopische plastische Deformation bzw. ein Spannungsaufbau nachgewiesen [6–34]. Die Art der Deformation bzw. der sich einstellende Spannungszustand hängt von den Materialeigenschaften und den Bestrahlungsbedingungen ab. In allen Fällen wurde eine Zunahme der Deformation mit abnehmender Temperatur und steigendem elektronischen Energieeintrag beobachtet.

2.3.5.1 Ionen-Hämmerungseffekt

Die Experimente an wenige μm dünnen freitragenden metallischen und dielektrischen Gläsern haben gezeigt, dass die Proben unter senkrechter Bestrahlung lateral wachsen und in ihrer Dicke schrumpfen, wobei das Volumen und damit die Dichte der Materialien unverändert bleiben [6, 7, 16, 25]. Der Ionenstrahl wirkt wie eine Art Hammer,

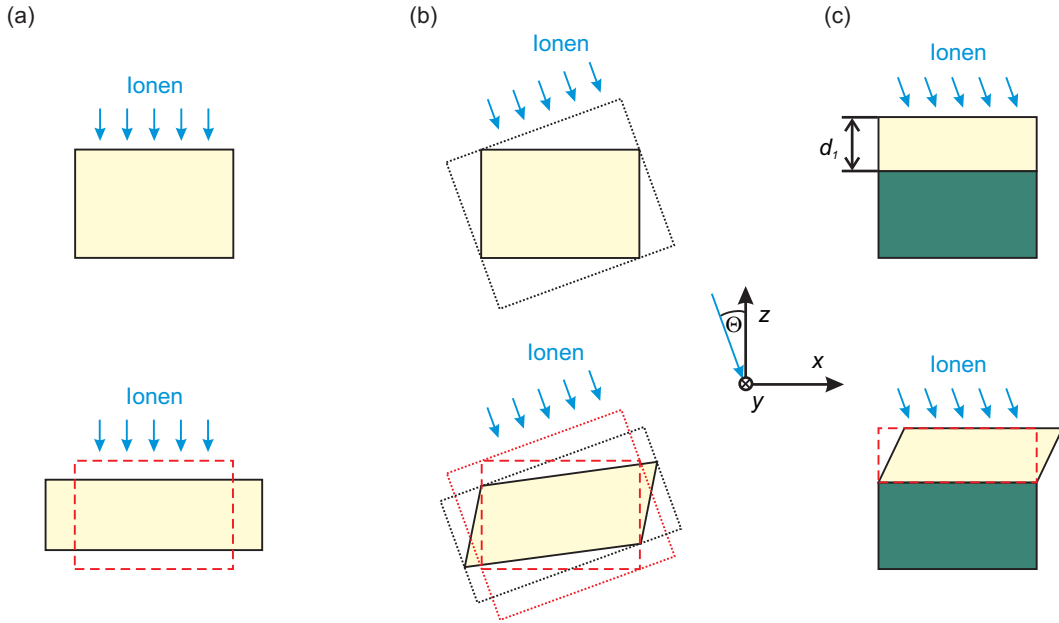


Abb. 2.3: Plastische Deformation amorpher Materialien unter Hochenergie-Ionenbestrahlung. (a) *Ionen-Hämmerungseffekt*: Eine senkrechte Bestrahlung freitragender dünner Proben (oben) führt zu einem Wachstum senkrecht zum Ionenstrahl und einem Schrumpfen parallel zum Ionenstrahl bei konstantem Volumen (unten). (b) *Ionenstrahlinduzierte Scherung*: Eine schräge Bestrahlung der Probe aus (a) entspricht der senkrechten Bestrahlung einer fiktiven Probe (oben). Diese fiktive Probe würde sich wie unter (a) beschrieben deformieren (unten). Die "eingebettete" reale Probe wird daher einer Scherung unterzogen. (c) *Plastisches Fließen*: Die Bestrahlung einer dünnen amorphen Oberflächenschicht auf einem dicken kristallinen Substrat führt zum Aufbau von Spannungen (oben). Diese verhindern eine Deformation unter senkrechter Bestrahlung. Unter schräger Bestrahlung kann der in (b) sichtbare Scherungsanteil des Hämmerungseffektes aufgrund der spannungsfreien Oberfläche nicht kompensiert werden, so dass die gesamte amorphe Schicht auf dem Substrat plastisch fließt (unten). Die roten Linien entsprechen der jeweiligen Situation vor der Bestrahlung. Alle Deformationen wurden für Materialien mit positiver Deformationsausbeute, $A_0 > 0$, dargestellt [84].

weshalb das anisotrope Wachstum den Namen *Ionen-Hämmerungseffekt* erhalten hat. In Bild 2.3a ist die beobachtete plastische Deformation schematisch dargestellt.

Der Deformationszustand der Probe $\underline{\underline{\epsilon}}^p$, bzw. die Deformationsrate $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^p$, lassen sich sehr gut durch einen linearen Zusammenhang mit der Ionenfluenz Φt , bzw. dem Ionenfluss Φ beschreiben [20, 29],

$$\underline{\underline{\epsilon}}^p = \underline{\underline{A}} (\Phi t - B) \quad \rightarrow \quad \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^p = \underline{\underline{A}} \Phi, \quad (2.11)$$

wobei unterhalb des Fluenz-Schwellwertes $B \sim 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ keine nachweisbare Deformation beobachtet wird. Die Auswirkung eines einzelnen Ions kann folglich dem Tensor

$$\underline{\underline{A}} = A_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

zugeschrieben werden, wobei die anisotrope Geometrie der Bestrahlung den tensoriellen Charakter von $\underline{\underline{A}}$ bestimmt. Diese Schreibweise gewährleistet sowohl die Volumen- bzw. Dichtekonstanz des Hämmerungseffektes, $dV/V = \text{Sp}(\underline{\underline{\epsilon}}^p) = \text{Sp}(\underline{\underline{A}}) = 0$, als auch

die lateral symmetrische Deformation unter senkrechter Bestrahlung. Die eigentliche Wechselwirkung des Ions mit dem amorphen Substrat wird durch die skalare *Deformationsausbeute pro Ion* A_0 ausgedrückt. Im makroskopischen Sinne bestimmt A_0 entsprechend den Gln. (2.11) und (2.12) die relative Änderung der Probenlänge l und der Probenbreite b , bzw. der bestrahlten Fläche $F = bl$, pro Einheit der Ionenfluenz $d(\Phi t)$ über [12]

$$\frac{1}{d(\Phi t)} \frac{dF}{F} = \frac{1}{d(\Phi t)} \frac{dl}{l} + \frac{1}{d(\Phi t)} \frac{db}{b} = A_0 + A_0 = 2A_0. \quad (2.13)$$

Da $F d(\Phi t) \equiv dp$ die Anzahl der eingeschossenen Ionen ist, entspricht die Größe $2A_0$ der absoluten Änderung der Substratoberfläche pro einfallendem Ion. Experimentell wurden für die Deformationsausbeute Werte in der Größenordnung $A_0 \sim (10^{-2} \dots 1) \text{ nm}^2$ ermittelt [12]. Für H-haltiges a-Si:H zeigten Bestrahlungen mit 360 MeV Xe Ionen unterhalb von $T_0 = 150 \text{ K}$ eine Ausbeute von $A_0 \sim (9 \pm 3) \times 10^{-2} \text{ nm}^2$ [10, 13, 25].

Aus Gl. (2.13) ergibt sich sofort die Anzahl dN_g der Atome, die zu den dimensionellen Änderungen pro $d(\Phi t)$ führt, zu

$$dN_g = 2A_0 N d(\Phi t), \quad (2.14)$$

wobei N die Gesamtanzahl an Substratatomen bezeichnet [12]. Vergleicht man dN_g mit der Anzahl an Atomen dN_d , die durch den nuklearen Energieeintrag S_n deplaziert wurden,

$$dN_d = PN d(\Phi t), \quad (2.15)$$

und berücksichtigt einen durch die Deplazierungsenergie von $E_d \sim (10 \dots 30) \text{ eV}$ bestimmten Wirkungsquerschnitt für elastische Kollisionen von $P \sim 10^{-2} \text{ nm}^2$, folgt ein Verhältnis $n = dN_g/dN_d = 2A_0/P \sim 20 \dots 300$ für die untersuchten Gläser [12]. Da E_d oft nicht genau bekannt ist, wären auch kleinere Werte n denkbar. Ein Wert $n < 1$ würde allerdings $E_d < 1 \text{ eV}$ fordern, mit der Konsequenz, dass unter geringer Spannungsbelastung bereits thermisch-induzierte Kriechprozesse aufträten, welche im Widerspruch mit der mechanischen Stabilität der Gläser bei Raumtemperatur ständen. Es wird daher deutlich, dass nur der elektronische Energieeintrag S_e für die plastische Deformation verantwortlich sein kann. Systematische Untersuchungen haben gezeigt, dass alle untersuchten amorphen Materialien oberhalb eines materialspezifischen, von der Temperatur unabhängigen Schwellwertes $S_{e0} \sim (2.5 \dots 23) \text{ keV/nm}$ einen linearen Anstieg der Deformationsausbeute A_0 mit S_e aufweisen [8, 16, 19],

$$A_0(S_e(\xi)) = \alpha (S_e(\xi) - S_{e0}) \quad \rightarrow \quad \alpha = \frac{\partial A_0}{\partial S_e}. \quad (2.16)$$

Für unterschwellige Bestrahlungen wurde zwar an Gläsern [16], sowie an mit 30 MeV Cu Ionen bestrahltem a-Si [31], als auch an mit 300 keV Xe Ionen bestrahlten Quarzglas-

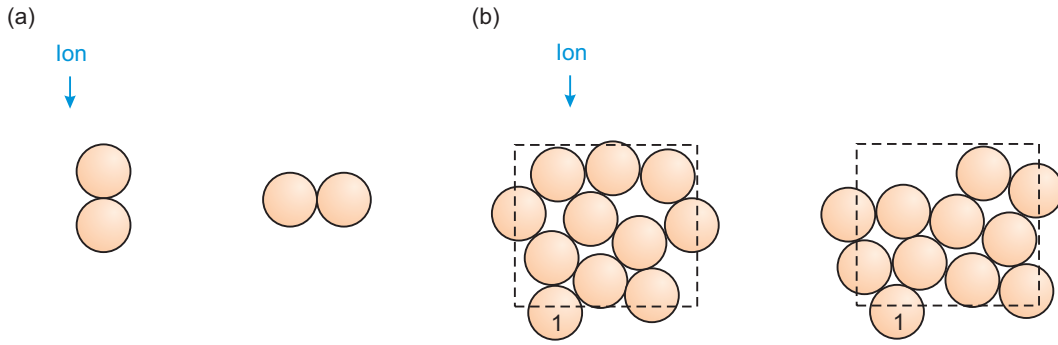


Abb. 2.4: Atomare Umordnung entlang der Ionenbahn. (a) Idealisierteres Bild: Die dimensionellen Änderungen werden vollständig durch die lokale Umordnung einzelner Atome von der linken in die rechte Konfiguration hervorgerufen. (b) Realistischeres Bild: Das gleiche Endergebnis wird durch eine weniger dramatische Umordnung einzelner Atome innerhalb eines Clusters hervorgerufen [12].

Kolloiden [27] eine ähnliche ionenstrahlinduzierte plastische Deformation beobachtet. Diese ist aber um Größenordnungen kleiner als jene für Bestrahlungen mit $S_e > S_{e0}$. Da in den betrachteten dünnen Proben $S_e(\xi) \sim \text{const.}$ und nach Gl. (2.16) auch $A_0 \sim \text{const.}$ gilt, zeigten die Experimente keine Abhängigkeit der Deformation von der Ionenweglänge ξ bzw. der Tiefe z .

Eine weitere über Gl. (2.13) hinausgehende Bedeutung der Deformationsausbeute A_0 folgt unmittelbar aus Gl. (2.14). Mit der atomaren Dichte des Substrats N_s und der Probendicke d_s geht diese Gleichung über in

$$\frac{1}{d_s} \frac{dN_g}{dp} = 2A_0N_s \equiv k, \quad (2.17)$$

so dass die Größe k einer Anzahl an Atomen pro Ionenweglänge entspricht, die ihre Position auf die in Bild 2.4a dargestellte Weise verändern. Für die untersuchten Gläser wurden Werte von $k = 15 \dots 250$ Atome/nm ermittelt [12]. Diese lokale atomare Umordnung entspricht allerdings eher einem extremen Fall. Es ist wahrscheinlich realistischer davon auszugehen, dass sich alle Atome in einem Cluster von einigen 10 bis 20 Atomen mit weniger dramatischen Verschiebungen umordnen (Bild 2.4b), so dass erheblich höhere Werte an versetzten Atomen pro Ionenweglänge existieren.

Da entlang einer angeregten Ionenbahn von einigen μm Länge und einem Radius von $R_0 \sim 3 \text{ nm}$ pro Ionenweglänge ca. $m = N_s \pi R_0^2 \sim 2000$ Atome/nm vorliegen, ist es sicher gerechtfertigt, die pro einfallendem Ion entstehende lokale Deformation ε_{loc} der Ionenbahn über die klassische mesoskopische Kontinuumsmechanik zu beschreiben. Mit der aus Gl. (2.13) folgenden Beziehung $dF/dp = 2\pi R_0 dR = 2A_0$ ergibt sich [12]

$$\varepsilon_{loc} = \frac{dR}{R_0} = \frac{A_0}{\pi R_0^2} = \frac{k}{2m}. \quad (2.18)$$

Die beobachteten makroskopischen Deformationen konnten somit auf lokale Deformationen $\varepsilon_{loc} \sim 5 \times 10^{-3} \dots 5 \times 10^{-2}$ zurückgeführt werden. Der für Bestrahlungen mit

$S_e \sim S_{e0}$ auftretende Fluenz-Schwellwert B wird dabei dem Erreichen eines stationären Zustandes zugeschrieben, bei dem ein substantieller Anteil des Probenvolumens mit plastisch deformierten Gebieten der Querschnittsfläche πR_0^2 vorhanden ist. Die gemessenen Werte B entsprechen ungefähr einer vollständigen Überdeckung der Oberfläche F mit derartigen Deformationseinheiten πR_0^2 , so dass $B \sim 1/(\pi R_0^2)$ folgt [12].

2.3.5.2 Ionenstrahlinduzierte Scherung

Wird die Probe nicht senkrecht, sondern schräg unter einem Winkel Θ zum Einfallslot mit Ionen bestrahlt (Bild 2.3b), wird der Tensor $\underline{\underline{A}}(\Theta = 0^\circ)$ zur Beschreibung des Ionen-Hämmerungseffekts in Gl. (2.12) durch eine Ähnlichkeitstransformation mit der Drehmatrix D , bzw. der transponierten Drehmatrix D^T , in die allgemeinere Darstellung

$$\underline{\underline{A}}(\Theta) = D \cdot \underline{\underline{A}}(\Theta = 0^\circ) \cdot D^T \quad (2.19)$$

überführt. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit kann der Ionenstrahl in die x - z -Ebene gelegt werden, so dass das Koordinatensystem der Ionenbahn effektiv um den Winkel Θ um die y -Achse gegen das Hauptachsensystem der Probe gedreht wird. Als Drehmatrix ergibt sich dann

$$D = \begin{pmatrix} \cos \Theta & 0 & -\sin \Theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \Theta & 0 & \cos \Theta \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

Daraus folgt für den Ionen-Hämmerungstensor $\underline{\underline{A}}(\Theta)$ allgemein [15, 17, 20]

$$\underline{\underline{A}}(\Theta) = A_0 \begin{pmatrix} 1 - 3 \sin^2 \Theta & 0 & 3 \sin \Theta \cos \Theta \\ 0 & 1 & 0 \\ 3 \sin \Theta \cos \Theta & 0 & 1 - 3 \cos^2 \Theta \end{pmatrix}. \quad (2.21)$$

Da $\underline{\underline{A}}$ durch die Anisotropie der Energiedeposition entlang der Ionenbahn nicht isotrop ist, enthält $\underline{\underline{A}}$ also in einem Koordinatensystem, das nicht dem Hauptachsensystem der Probe entspricht, Nichtdiagonalelemente. Diese induzieren über Gl. (2.11) *Scherkomponenten* im Deformationstensor der Probe $\underline{\underline{\varepsilon}}^p$, die an dünnen freitragenden amorphen Proben zu zusätzlichen makroskopischen Winkeländerungen führen (Bild 2.3b).

2.3.5.3 Plastisches Fließen

In dicken amorphen Proben führt die Abhängigkeit der Energiedeposition S_e von der Ionenweglänge ξ über Gl. (2.16) zu einer tiefenabhängigen Deformationsausbeute $A_0(z)$. Eine ähnliche Situation liegt im Falle der Bestrahlung einer amorphen Oberflächenschicht auf einem deutlich dickeren inerten kristallinen Substrat vor. Die Wirkung des Hämmerungseffektes ist in beiden Fällen durch die sich weniger bzw. nicht

deformierende Umgebung mechanisch eingeschränkt und es entstehen Spannungen $\underline{\underline{\sigma}}^s$ in der bestrahlten Schicht, die in freitragenden Proben zur Biegung führen [9, 18].

Zur Beschreibung des Deformationszustandes der amorphen Schicht $\underline{\underline{\varepsilon}}^s$ müssen deshalb deren elastische und viskose Eigenschaften unter dem Ionenstrahl berücksichtigt werden. Eine mögliche Beschreibung ist die im Rahmen eines modifizierten Maxwell-Modells entsprechend [20, 23, 25, 28]

$$\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^s = \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{elas} + \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{vis} + \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{ion}, \quad (2.22)$$

wobei $\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{ion} = \underline{\underline{A}}\Phi$ die aus den Gln. (2.11) und (2.21) bekannte Deformationsrate des Ionen-Hämmerungseffektes darstellt. Die elastische Deformationsrate $\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{elas}$ kann über das Hookesche Gesetz

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{elas} = \frac{1}{2G} \frac{d}{dt} \left[\sigma_{ij}^s - \frac{\nu}{\nu+1} \text{Sp}(\underline{\underline{\sigma}}^s) \delta_{ij} \right] \quad (2.23)$$

beschrieben werden, wobei G und ν das Schermodul und die Poisson-Zahl der amorphen Schicht bezeichnen. Die dem Spannungsaufbau entgegenwirkende Ionenstrahlinduzierte Spannungsrelaxation über viskoses Fließen kann näherungsweise über eine durch das Newtonsche Fließgesetz bestimmte Deformationsrate

$$\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{vis} = \underline{\underline{k}}(S_e(\xi))\Phi \underline{\underline{\tilde{\sigma}}}^s \quad (2.24)$$

charakterisiert werden, wobei $\underline{\underline{k}}\Phi$ einen vom Fluss Φ abhängigen total-symmetrischen Fluiditätstensor 4. Stufe, $\underline{\underline{\tilde{\sigma}}}^s = \underline{\underline{\sigma}}^s - \text{Sp}(\underline{\underline{\sigma}}^s)/3 \underline{\underline{I}}$ den Spannungsdeviator und $\underline{\underline{I}}$ den Einheitstensor 2. Stufe darstellen [19, 20, 23, 25, 28, 85, 86]. Ohne Bestrahlung, d.h. für $\Phi = 0$, verhält sich die Schicht nach Gl. (2.22) wie ein elastisches Medium, $\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^s = \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{elas}$. Aus der Deformationsrate $\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^s$ kann über die Beziehung

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^s = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right] \quad (2.25)$$

die Deformationsgeschwindigkeit \underline{v} abgeleitet werden. Die konstitutive Gleichung (2.22) wird noch ergänzt durch die Bewegungsgleichung, welche für kleine Geschwindigkeiten $v_i \sim \text{nm/s}$ die Form des quasi-statischen Gleichgewichts annimmt, so dass gilt

$$\text{Div} \underline{\underline{\sigma}}^s = 0. \quad (2.26)$$

Die den Deformations- und Spannungszustand charakterisierenden Größen v_i und σ_{ij}^s können somit unter Berücksichtigung der Rand- und Anfangsbedingungen und unter Annahme kleiner Scherungen, so dass $d/dt \sim \partial/\partial t$ gilt, berechnet werden. Zur Vereinfachung wird $\underline{\underline{k}}$ meist durch einen Skalar k_0 ersetzt und eine isotrope Fluidität angenommen. Als Lösung ergibt sich unter schräger Bestrahlung fern von Randbereichen der

Probe ein nichtsättigendes homogenes *plastisches Fließen* entlang einer Wirkungslinie, die der Projektion des Ionenstrahl auf die Probenoberfläche entspricht (Bild 2.3c). Als Schergeschwindigkeit ergibt sich mit der maximalen Deformationslänge ξ_0 [20, 23, 25]

$$v_x(z) = 3\Phi \sin 2\Theta \cos \Theta \int_{-z/\cos \Theta}^{\xi_0} A_0(S_e(\xi)) d\xi, \quad (2.27)$$

welche sich im Falle dünner amorpher Oberflächenschichten der Dicke d_1 vereinfacht zu

$$v_x(z) = 3\Phi \sin 2\Theta A_0(S_e) (z + d_1). \quad (2.28)$$

Weiterhin bildet sich nach einer Inkubationsfluenz $\Phi t \sim B$ ein Gleichgewicht aus zwischen dem Spannungsaufbau durch mechanisch eingeschränktes Ionen-Hämmern und der Spannungsrelaxation durch viskoses Fließen. Dieser stationäre Zustand ist charakterisiert durch die planaren und von $S_e(z)$ abhängigen Spannungen [20, 23, 25]

$$\sigma_{xx}^s(z) = -3 \frac{A_0(S_e(z))}{k_0(S_e(z))} \cos 2\Theta, \quad , \quad \sigma_{yy}^s(z) = -3 \frac{A_0(S_e(z))}{k_0(S_e(z))} \cos^2 \Theta \quad (2.29)$$

und einer verschwindenden Dehnungsgeschwindigkeit in z -Richtung, $v_z = 0$. Für alle anderen Größen folgt direkt aus den Randbedingungen $v_y = \sigma_{xy}^s = \sigma_{xz}^s = \sigma_{yz}^s = \sigma_{zz}^s = 0$. Wird der bestrahlte Bereich entlang der Wirkungslinie eingeschränkt, bildet sich an den Randbereichen eine Graben- und Wallstruktur aus [18, 23]. Erfolgt die Einschränkung senkrecht zur Wirkungslinie, wird das plastische Fließen ortsabhängig in der Nähe des Randbereiches reduziert [23]. Auf diese Weise konnten an a-Si und a-InP auch für Bestrahlungen im mittleren Energiebereich (mit 24 MeV Se Ionen) geringe Deformationen nachgewiesen werden [21, 22].

2.3.5.4 Anwendungen der plastischen Deformation

Seit ihrer Entdeckung durch Klaumünzer *et al.* im Jahr 1983 [6] hat die Ionenstrahlinduzierte Deformation bereits mehrfach Anwendung gefunden. Der reine Ionen-Hämmereffekt wird unter anderem zur gezielten Formgebung von Nanopartikeln und Kolloiden eingesetzt [32]. So werden runde Quarzglas-Partikel in abgeplattete Ellipsoide verformt, um beispielsweise Theorien zu Phasenübergängen in Kolloiden zu testen [27]. Aufgrund ihrer vergrößerten optischen Bandlücke haben ellipsoidale Kolloide auch ein großes Anwendungspotential für die Synthese photonischer Kristalle [28, 31–34, 87, 88]. Durch die Deformation von Metall-Quarzglas-Kern-Schale-Partikeln kann z.B. die Resonanzfrequenz der Oberflächenplasmonen gesteuert werden [32, 34]. Für die Herstellung spezieller Masken für die Nanolithographie könnte das komplexe Deformationsverhalten zweidimensionaler Kolloidkristalle von Bedeutung sein [32]. Das plastische Fließen wurde ausgenutzt, um metallische Gläser mit einer Oberflächenrauheit von

$R_q \sim 1 \mu\text{m}$ auf $R_q < 5 \text{ nm}$ zu glätten [25]. Hierfür wurden die Proben senkrecht bestrahlt. Für die vorhandenen Oberflächenstrukturen wirkte der senkrechte Ioneneinfall wie eine leicht schräge Bestrahlung und induzierte das plastische Fließen [20, 23]. Schräge Bestrahlungen metallischer Gläser [20, 24, 25] bewirkten eine Aufrauung und oberhalb eines kritischen Winkels die Formierung geordneter Wellenstrukturen, deren Amplitude exponentiell mit der Fluenz ansteigt und deren Wellenlänge mit der Dicke der deformierten Schicht korreliert [20].

2.4 Erklärung der plastischen Deformation

Während die plastische Deformation amorpher Materialien unter Hochenergie-Ionenbestrahlung makroskopisch sehr erfolgreich über die konsitutive Gleichung (2.22) beschrieben werden konnte, ist ihre mikroskopische Ursache immer noch Gegenstand kontroverser Diskussionen. Es wurden verschiedene Modelle vorgeschlagen, die teilweise auf fundamental unterschiedlichen Konzepten beruhen und in ihrer quantitativen Aussagekraft unterschiedlich weit entwickelt sind. In dieser Arbeit wird auf die bisher erfolgreichste Theorie von Trinkaus *et al.* (Kap. 2.4.2) zurückgegriffen, wobei ihre thermodynamische Grundlage im Rahmen des von Szenes vorgeschlagenen Modells (Kap. 2.4.1) eingeführt wird. Alternative Theorien sind im Anhang D zusammengestellt.

2.4.1 Ordnung struktureller Defekte

In dem von Szenes von 1992 bis 1996 modifizierten Wärmespitze-Modell wird neben der Bildung amorpher Spuren in kristallinen Materialien auch der Ionen-Hämmerungseffekt in amorphen Materialien durch eine kontinuierliche Bildung und Rekombination der entlang der Ionenbahn erzeugten strukturellen Defekte erklärt [35, 89–91]. Ausgehend von einer fiktiven Delta-förmigen Energiedichte im Gitter zum Zeitpunkt $t = 0$ wird die Energiedissipation mit klassischer Thermodynamik beschrieben. Als Lösung der zweidimensionalen Wärmeleitungsgleichung folgt eine Gaussförmige Verteilung für die Temperaturerhöhung $\Delta T(r, t)$ gegenüber der Proben temperatur T_0 um die Ionenbahn,

$$\Delta T(r, t) = T - T_0 = \frac{Q}{\pi a^2(t)} \exp \left[-\frac{r^2}{a^2(t)} \right]. \quad (2.30)$$

Die Zeitabhängigkeit ist dabei in der Breite der Verteilung $a^2(t) = 4\lambda t / (\rho C)$ enthalten, und die Konstante $Q = \int \Delta T(r, t) 2\pi r dr$ folgt aus der Energiebilanz pro Wegeinheit $Q\rho C = gS_e$. Die Größen λ, ρ, C bezeichnen effektive Werte für die Wärmeleitfähigkeit, Dichte und spezifische Wärmekapazität, und der Koeffizient g gibt an, welcher Anteil an S_e tatsächlich zur lokalen Wärmespitze führt. Im Modell verflüssigt sich die Materie entlang der Ionenbahn bei einer charakteristischen Temperatur T^* , die der Glastempe-

ratur T_g gleichgesetzt wird. Mit $\Delta T^* = T^* - T_0$ folgt für den Radius der fluiden Zone

$$R(t) = a(t) \sqrt{\ln \left[\frac{Q}{\pi a^2(t) \Delta T^*} \right]} \quad \rightarrow \quad R_{max} = \sqrt{\frac{Q}{e\pi \Delta T^*}}. \quad (2.31)$$

Dieser fluide zylindrische Bereich erreicht zur Zeit $t_{max} = gS_e/(4e\pi\lambda\Delta T^*)$ den maximalen Radius R_{max} und verschwindet zur Zeit $t_v = et_{max} \sim 10^{-10}$ s. Durch die hohe Abkühlrate von $\sim 10^{14}$ K/s verbleiben aber strukturelle Defekte. Unter Annahme einer räumlich konstanten Defekterzeugungsdichte ist die Anzahl an Defekten proportional zum maximalen Querschnitt der flüssigen Zone πR_{max}^2 . Ein Teil der Defekte wird über thermoelastische Wellen zur Oberfläche diffundieren und dort rekombinieren. Sobald das gesamte Volumen mindestens einmal mit fluiden Spuren überdeckt war, d.h. für Fluenzen $\Phi t > B \sim 1/(\pi R_{max}^2)$, wird sich die Oberfläche entsprechend $\Delta z/z = -2\alpha^V \pi R_{max}^2 (\Phi t - B)$ absenken. Der Parameter α^V stellt dabei die untere Grenze des ionenstrahlinduzierten überschüssigen freien Volumens dar. Mit Gl. (2.11) folgt für die Deformationsausbeute $A_0 = \alpha^V \pi R_{max}^2$, wodurch $R_0 \propto R_{max}$ aus Gl. (2.18) eine nähere Bedeutung zufällt. Da das Modell jedoch keine Aussagen zum vorangehenden Energietransfer vom Elektronensystem zum Gitter macht, wird ein realistischerer Bezugszeitpunkt $t = t_0$ gewählt, bei dem die Energiekonversion als abgeschlossen betrachtet wird und eine Breite $a_0 = a(t_0)$ vorliegt. Als Konsequenz ergeben sich ein Schwellwert $S_{e0} = \rho C \pi a_0^2 \Delta T^* / g$ für A_0 und in Abhängigkeit von $S_e > S_{e0}$ zwei Fälle für $R(t)$: (i) Für $t_0 \geq t_{max}$, bzw. $a_0 \geq R_{max}$ oder $S_e \leq eS_{e0}$, wird $R(t)$ sofort abnehmen, so dass $R_{max} \equiv R(t_0)$ gesetzt wird. (ii) Für $t_0 < t_{max}$, bzw. $a_0 < R_{max}$ oder $S_e > eS_{e0}$, steigt $R(t)$ zunächst an und nimmt ab $t = t_{max}$ wieder ab. Damit ergibt sich

$$A_0(S_e) = \frac{\alpha^V g}{e\rho C \Delta T^*} \begin{cases} eS_{e0} \ln\left(\frac{S_e}{S_{e0}}\right) & \text{für } S_e \leq eS_{e0} \\ S_e & \text{für } S_e > eS_{e0} \end{cases}. \quad (2.32)$$

Während das Modell die für $S_e \gg S_{e0}$ experimentell nachgewiesene Abhängigkeit $A_0 \propto S_e$ (Gl. (2.16)) richtig beschreibt, besteht jedoch Zweifel am hergeleiteten Verlauf $A_0(S_e)$. Die Experimente zeigen einen linear auf $A_0 = 0$ extrapolierten Schwellwert $S_{e0} > 0$ und unterhalb dieses Wertes einen konkaven Verlauf $A_0(S_e)$ mit sehr kleinen Werten A_0 [8, 11, 14, 16, 17, 21, 29]. Nach Gl. (2.32) folgt jedoch für $S_e \leq eS_{e0}$ ein konvexer Verlauf $A_0(S_e)$ zum abgeleiteten Schwellwert S_{e0} , während der linear auf $A_0 = 0$ extrapolierte Wert $S_{e0} = 0$ entspräche und damit im Widerspruch zum experimentellen Befund steht. Die aus der Regression der experimentellen Daten nach Gl. (2.32) für die drei freien Parameter ermittelten Werte $\alpha^V < 0.1\%$, $g \sim 0.1$ und $a_0 \sim 5$ nm [35] sind zwar in ihren Größenordnungen unbestritten, dennoch liefert dieses einfache thermodynamische Modell keine genaue Erklärung für den Mechanismus der Deformation und ihres anisotropen Charakters.

2.4.2 Relaxation von Scherspannungen

In dem von Trinkaus und Ryazanov im Jahr 1995 [38] vorgeschlagenen und von Trinkaus in den Jahren 1995-2000 [26, 39–42] und van Dillen *et al.* im Jahr 2005 [92] weiter entwickelten viskoelastischen Modell wird das anisotrope Wachstum und das ionenstrahlinduzierte Kriechen unter Spannungsbelastung auf die durch eine Relaxation von Scherspannungen in der heißen niederviskosen Ionenspur auf der ps-Zeitskala entstehende Deformation zurückgeführt. Im Rahmen einer *Effektiven-Fließtemperatur-Näherung* (EFT-Näherung) konnten die beobachteten Effekte mittels Kontinuumsmechanik und Thermodynamik bisher am erfolgreichsten quantitativ beschrieben werden. Das Modell mündet in seiner allgemeinen Form in einer viskoelastischen Feldtheorie, welche die EFT-Näherung als asymptotischen Grenzfall enthält (vgl. Anhang D.3).

2.4.2.1 Effektive-Fließtemperatur-Näherung (EFT-Näherung)

Ausgangspunkt des Modells ist der Abschluss des Energietransfers vom Elektronensystem auf das Gitter nach $t_0 \sim 1$ ps. Die Energiedissipation im Gitter wird wie im Wärmespitze-Modell von Szenes über die klassische Wärmeleitung beschrieben, wobei für die Temperaturerhöhung Gl. (2.30) mit Bezugszeitpunkt t_0 angenommen wird. Im Rahmen der EFT-Näherung wird postuliert, dass für hinreichend hohe Energieeinträge $S_e \gg S_{e0}$ Temperaturen oberhalb einer *effektiven Fließtemperatur* T^* erreicht werden, bei der die Materie entlang der Ionenbahn niederviskos wird und alle thermisch induzierten oder extern eingebrachten Scherspannungen relaxieren [38]. Die Temperatur T^* entspricht daher der Schmelztemperatur T_m im Falle einer Bestrahlung kristalliner Materialien, bzw. der Glastemperatur T_g für die Zeitskala der Relaxationszeit der Scherspannungen τ_s im Falle amorpher Materialien. Die Relaxationszeit $\tau_s = \eta_s/G_\infty$ ist bestimmt durch die Scherviskosität $\eta_s(T)$ und das Hochfrequenz-Schermodul der entsprechenden festen amorphen Phase G_∞ . Während dieser Zeit τ_s wird elastische Energie über viskoses Fließen als Relaxationsdeformation freigesetzt und Entropie produziert. Die Scherspannungen werden vollständig abgebaut, wenn die Lebensdauer der niederviskosen Zone (nv-Zone) $t_v \gg \tau_s$ ist. Daraus folgt asymptotisch $\eta_s \rightarrow 0$ für die nv-Zone mit $T > T^*$, bzw. $\eta_s \rightarrow \infty$ für die Randausläufer der Wärmespitze mit $T < T^*$. Der Rand der nv-Zone $R(t)$ ist durch die Bedingung $T = T^*$ festgelegt, so dass der zeitliche Verlauf der Erstarrungsfront durch Gl. (2.31) beschrieben wird. Da für die hohen Werte S_e weiterhin $t_0 < t_{max} \propto S_e$ gilt, wird $R(t)$ zunächst bis R_{max} ansteigen und während der Abkühlphase $t_{max} < t < t_v = et_{max} \sim 10^{-10}$ s wieder abnehmen.

2.4.2.2 Anisotropes Wachstum in EFT-Näherung

Infolge der Temperaturerhöhung erfährt die nv-Zone eine isotrope thermische Eigen-
dehnung und möglicherweise auch eine durch einen Phasenübergang induzierte Dich-

teänderung. Beide Effekte können zu einer effektiven isotropen Eigendehnung der nv-Zone $\varepsilon^*(T(r, t))$ zusammengefasst werden. Im räumlichen Mittel liegt somit in deren Volumen $V_Z(t)$ die mittlere effektive Eigendehnung $\varepsilon_m^*(t)$ vor,

$$\varepsilon_m^*(t) = \frac{1}{V_Z(t)} \int_0^{V_Z(t)} \varepsilon^*(T(r, t)) dV = \frac{1}{\pi R^2(t)} \int_0^{R(t)} \varepsilon^*(T(r, t)) 2\pi r dr. \quad (2.33)$$

Die zylindrische nv-Zone kann nun als Grenzfall einer homogenen ellipsoiden thermoelastischen Inklusion angesehen und ihr Deformations- und Spannungsfeld nach der Eshelby-Theorie beschrieben werden [93]. Trotz isotroper Eigendehnung $\varepsilon_m^*(t)$ induziert die Zylindersymmetrie über den Eshelby-Tensor $\underline{\underline{S}}$ eine anisotrope elastische Deformation im Substrat $\underline{\underline{\varepsilon}}^S(t) = \underline{\underline{S}} \underline{\underline{\varepsilon}}_m^*(t)$ und in der nv-Zone $\underline{\underline{\varepsilon}}^Z(t) = \underline{\underline{\varepsilon}}^S(t) - \underline{\underline{\varepsilon}}_m^*(t)$. Für die radialen, peripheren und axialen Spannungen der nv-Zone $\sigma_1^Z(t)$, $\sigma_2^Z(t)$ und $\sigma_3^Z(t)$ folgt damit

$$\sigma_1^Z(t) = \sigma_2^Z(t) = \frac{\sigma_3^Z(t)}{2} = -\frac{1+\nu}{1-\nu} G \varepsilon_m^*(t). \quad (2.34)$$

Der Spannungstensor der nv-Zone $\underline{\underline{\sigma}}^Z(t)$ enthält daher neben einem Druckanteil von $p^Z(t) = -4/3 \sigma_1^Z(t)$ auch Anteile an Scherspannungen. Unter Anwendung des viskoelastischen Maxwell-Modells verschwindet der Deviator $\underline{\underline{\tilde{\sigma}}}^Z(t)$ von $\underline{\underline{\sigma}}^Z(t)$ entsprechend

$$\underline{\underline{\tilde{\sigma}}}^Z(t) = 2G \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}^Z(t) = 2G (\underline{\underline{S}} - \underline{\underline{I}}) (\underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}_m^*(t) + \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}^R(t)) \rightarrow 0 \quad (2.35)$$

für die angenommenen Relaxationszeiten $\tau_s = \eta_s/G_\infty \rightarrow 0$ quasi-umittelbar über viskoses Fließen und führt zu einem Zuwachs der Eigendehnung $\underline{\underline{\varepsilon}}_m^*(t)$ um eine entsprechende Relaxationsdehnung $\underline{\underline{\varepsilon}}^R(t)$. Für die radiale, periphere und axiale Relaxationsdehnung $\varepsilon_1^R(t)$, $\varepsilon_2^R(t)$ und $\varepsilon_3^R(t)$ ergibt sich dadurch

$$\varepsilon_1^R(t) = \varepsilon_2^R(t) = \frac{\varepsilon_3^R(t)}{-2} = \frac{1+\nu}{5-4\nu} \varepsilon_m^*(t). \quad (2.36)$$

Als Ergebnis liegt in der nv-Zone zu jeder Zeit $t_0 < (t + \tau_s \rightarrow t) < t_v$ ein mechanischer Gleichgewichtszustand mit dem hydrostatischen Druck $p_h^Z(t) = 6G\varepsilon_1^R(t)$ vor. Für $t_0 < t < t_{max}$ ist dieser Prozess, da $R(t)$ ansteigt, relativ unbedeutend. Hingegen geht während der Abkühlphase der nv-Zone, $t_{max} \leq t \leq t_v$, der reversible Anteil der Eigendehnung $\underline{\underline{\varepsilon}}_m^*(t)$ zurück und der durch die irreversible Scherspannungsrelaxation induzierte Anteil $\underline{\underline{\varepsilon}}^R(t)$ wird an der Erstarrungsfront $R(t)$ eingefroren. Somit verbleibt um jede Ionenbahn eine mittlere eingefrorene Relaxationsdehnung in radialer, peripherer und axialer Richtung $\varepsilon_{m,1}^R = \varepsilon_{m,2}^R = \varepsilon_{m,3}^R/(-2)$ entsprechend

$$\varepsilon_{m,1}^R = \frac{1}{V_Z(t_{max})} \int_0^{V_Z(t_{max})} \varepsilon_1^R(t) dV = \frac{1}{\pi R_{max}^2} \int_0^{R_{max}} \varepsilon_1^R(t) 2\pi R(t) dR(t). \quad (2.37)$$

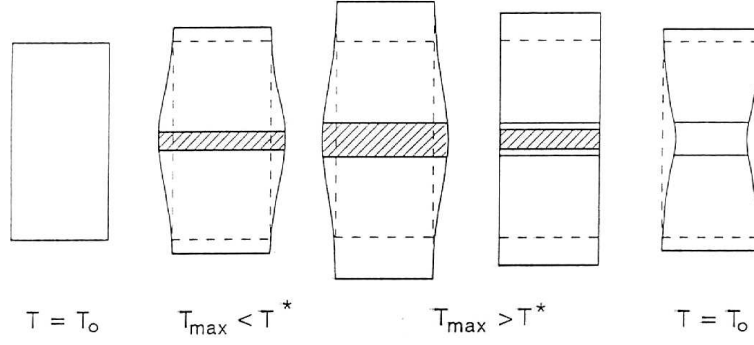


Abb. 2.5: Anisotropes Wachstum in EFT-Näherung. Für Temperaturen oberhalb einer effektiven Fließtemperatur T^* liegt entlang der Ionenbahn eine zylindrische niederviskose Zone mit isotroper Eigendehnung und anisotropem Spannungszustand vor. In dieser Zone relaxieren die Scherspannungsanteile über viskoses Fließen und generieren entsprechende Relaxationsdehnungen. Während der Abkühlphase frieren diese in amorphen Materialien an der Erstarrungsfront ein [38, 40].

Mit Hilfe fundamentaler Theoreme zur Auswirkung der Deformation von Inklusionen auf die umgebende Matrix lässt sich die makroskopisch sichtbare Deformationsrate der amorphen Schicht $\dot{\underline{\varepsilon}}^s$ bestimmen [94]. Es gilt z.B. für die radiale Komponente

$$\dot{\varepsilon}_1^s = \frac{d}{dt} \frac{1}{V} \int_0^V \varepsilon_{m,1}^R dV = \frac{d}{dt} \frac{1}{F} \int_0^F \varepsilon_{m,1}^R dF = \varepsilon_{m,1}^R \pi R_{max}^2 \Phi. \quad (2.38)$$

Entsprechend folgt für die periphere und axiale Komponente $\dot{\varepsilon}_2^s = \dot{\varepsilon}_3^s / (-2) = \dot{\varepsilon}_1^s$. Diese Erklärung des anisotropen Wachstums ist in Abb. 2.5 schematisch dargestellt. In Bezug auf die Gln. (2.11) und (2.12) ergibt sich als Deformationsausbeute [38, 40, 84]

$$A_0 = \varepsilon_{m,1}^R \pi R_{max}^2. \quad (2.39)$$

Der Vergleich mit der phänomenologischen Gl. (2.18) zeigt, dass das Modell neben der Größe $R_0 = R_{max}$ auch die lokale Deformation $\varepsilon_{loc} = \varepsilon_{m,1}^R$ näher quantifiziert. Sollte $\varepsilon_{m,1}^R$ unabhängig von S_e sein, folgt mit $R_{max}^2 \propto S_e$ nach Gl. (2.31) sofort die aus den Experimenten (vgl. Gl. (2.16)) bekannte Abhängigkeit $A_0 \propto S_e$ für große Werte S_e . Ein solcher Fall wird im Rahmen des Modells abgeleitet. Unter der Annahme, dass die Eigendehnung nur durch die thermische Expansion $\varepsilon^*(T) = \alpha^{th} \Delta T = \alpha^{th} (T - T_0)$ mit konstantem linearen thermischen Ausdehnungskoeffizienten α^{th} bestimmt ist, folgt eine von T^* unabhängige Deformationsausbeute [38, 40, 84]

$$A_0(S_e) \sim (1.164 \frac{1 + \nu}{5 - 4\nu} \alpha^{th} \Delta T^*) \pi R_{max}^2 = 1.164 \frac{1 + \nu}{5 - 4\nu} \frac{\alpha^{th} g S_e}{\rho C}. \quad (2.40)$$

Im Allgemeinen enthält $A_0(S_e)$ nach Gl. (2.39) jedoch die beiden unbekannt Parameter g und T^* . Der Vergleich von Gl. (2.40) mit den Experimenten zeigt aber, dass diese vereinfachte Beschreibung bereits für alle untersuchten Gläser mit $0.4 \leq g \leq 1.0$ zum Erfolg führt (vgl. Abb. 5.8). In kristallinen Materialien wird in der nv-Zone auch ei-

ne Relaxation von Scherspannungen angenommen, jedoch bewirkt die Rekristallisation eine Inversion des Relaxationsprozesses, so dass effektiv $A_0 = 0$ folgt.

Da das Modell nur Deformationen für $S_e \gg S_{e0}$ beschreibt, wird die Größe des Schwellwertes S_{e0} der Relation zwischen der Energietransferrate vom Elektronensystem auf das Gitter und der Wärmediffusionsraten in beiden Systemen zugeschrieben [38, 40]. Die Existenz eines Fluenz-Schwellwertes B könnte die Konsequenz der Reduzierung von T^* unter Bestrahlung sein und würde entstehen, wenn S_e bezogen auf den unbestrahlten amorphen Zustand unerschwellig und bezogen auf den modifizierten bestrahlten Zustand erschwellig ist. B sollte demnach für hinreichend hohe Werte S_e verschwinden. Die Reduzierung von A_0 mit steigender Temperatur T_0 wird durch die lokale Reduzierung der Scherviskosität $\eta_S \ll \infty$ innerhalb der Wärmespitze für $T < T^*$ und dem resultierenden partiellen Abbau der eingefrorenen Relaxationsdehnungen erklärt.

2.4.2.3 Ionenstrahlinduziertes Kriechen in EFT-Näherung

Im Rahmen der EFT-Näherung kann auch die Wirkung externer oder durch eine inerte Umgebung induzierter interner Spannungen $\underline{\underline{\sigma}}^A$ für hohe S_e und tiefe Temperaturen $T_0 \ll T^*$ erklärt werden [39–41]. Die Deformation der nv-Zone ist nun zusätzlich von der zu $\underline{\underline{\sigma}}^A$ gehörigen elastischen Deformation $\underline{\underline{\varepsilon}}^A$ abhängig, $\underline{\underline{\varepsilon}}^Z(t) = \underline{\underline{\varepsilon}}^A + \underline{\underline{\varepsilon}}^S(t) - \underline{\underline{\varepsilon}}^*(t)$. Für die Relaxation der vorhandenen Scherspannungsanteile folgt analog Gl. (2.35)

$$\underline{\underline{\sigma}}^Z(t) = 2G \underline{\underline{\varepsilon}}^Z(t) = 2G [\underline{\underline{\varepsilon}}^A + (\underline{\underline{S}} - \underline{\underline{I}}) (\underline{\underline{\varepsilon}}^*(t) + \underline{\underline{\varepsilon}}^R(t))] \rightarrow 0. \quad (2.41)$$

Betrachtet man nur den Anteil, der durch $\underline{\underline{\varepsilon}}^A$ hervorgerufen wird, folgt eine Relaxationsdehnung $\underline{\underline{\varepsilon}}^R(\underline{\underline{\varepsilon}}^A)$, die über die Mittelung der Gl. (2.37) die Deformationsrate der Schicht $\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^s$ analog Gl. (2.38) bestimmt. Daraus folgt als Newtonsches Fließgesetz

$$\underline{\underline{\sigma}}^A = \frac{2G}{\pi R_{max}^2 \Phi} \underline{\underline{E}} \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^s = 2\underline{\underline{\eta}}^{irr} \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^s \rightarrow \underline{\underline{E}} = \frac{\pi R_{max}^2 \Phi}{2G} 2\underline{\underline{\eta}}^{irr}, \quad (2.42)$$

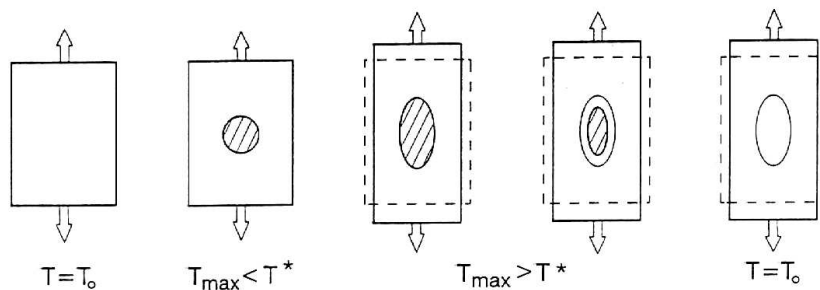


Abb. 2.6: Ionenstrahlinduziertes Kriechen in EFT-Näherung. Illustration der makroskopischen Deformation amorpher Materialien, die unter einer internen (durch eine inerte Umgebung induzierte) oder externen Spannung durch viskoses Fließen in der niederviskosen Zone entsteht [39, 40].

das den Kriechprozess über eine effektive ionenstrahlinduzierte Viskosität $\underline{\underline{\eta}}^{irr}$, bzw. einen normierten Viskositätstensor $\underline{\underline{E}}$ beschreibt. In Abb. 2.6 ist dieser Kriechprozess schematisch dargestellt. Der entsprechende normierte Fluiditätstensor $\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{E}}^{-1}$ weist somit dem Fluiditätstensor $\underline{\underline{k}}\Phi$ aus der phänomenologischen Gl. (2.24) eine mikroskopische Bedeutung zu. Der skalare Anteil $k_0\Phi = 1/(2\eta_0^{irr})$ ergibt sich dabei in der EFT-Näherung aus dem Wert für F_0 entsprechend der Beziehung (vgl. Anhang B.1) [40]

$$\underline{\underline{k}}\Phi = \frac{\pi R_{max}^2 \Phi}{2G} \underline{\underline{F}} \rightarrow k_0\Phi = \frac{\pi R_{max}^2 \Phi}{2G} F_0, \quad \text{mit } F_0 = \frac{2(33 - 47\nu + 16\nu^2)}{5(5 - 4\nu)}. \quad (2.43)$$

Die Überlagerung von $\underline{\underline{\varepsilon}}^A$ mit $\underline{\underline{\varepsilon}}_m^*(t)$ in Gl. (2.41) führt zu dem aus den Experimenten bekannten Gleichgewicht von anisotropem Wachstum und ionenstrahlinduziertem Kriechen unter senkrechter Bestrahlung. In diesem Fall verschwindet $\underline{\underline{\varepsilon}}^s$ durch eine Kompensation der Scherkomponenten der während der Abkühlung der nv-Zone eingefrorenen elastischen Deformation $\underline{\underline{\varepsilon}}_m^Z = (\underline{\underline{S}} - \underline{\underline{I}}) \underline{\underline{\varepsilon}}_m^R$ mit der durch $\underline{\underline{\varepsilon}}^A$ induzierten gesamten mittleren elastischen Scherung [40]. Mit dieser Bedingung ergibt sich der aus Gl. (2.29) bekannte kompressive Spannungszustand im Gleichgewicht näherungsweise zu

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} \sim -3 \frac{A_0}{k_0} = -6G \frac{\varepsilon_{m,1}^R}{F_0}. \quad (2.44)$$

Da A_0 und k_0 nach den Gln. (2.31), (2.40) und (2.43) für Gläser in gleicher Weise von S_e und damit von der Ionenweglänge ξ abhängen, sollten diese Spannungen unabhängig von der Tiefe z , aber im Allgemeinen abhängig von T^* sein. Die mit $T^* \sim T_g$ ermittelten Werte von $\sigma_{xx} \sim (1 \dots 2)$ GPa für metallische Gläser zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit den aus Biegunsexperimenten bestimmten Werten [26, 40].

2.5 Silizium

2.5.1 Materialeigenschaften

2.5.1.1 Kristallines Silizium (c-Si)

Das zweithäufigste Element der Erdkruste Silizium stellt in seiner kristallinen Form den technologisch wichtigsten Halbleiter dar. Wie die Gruppe IV Elemente Ge und C kristallisiert auch Si unter Normaldruck in kubisch-flächenzentrierter Diamantstruktur und besitzt eine Koordinationszahl von $N_c = 4$ [95]. Die Gitterkonstante beträgt 5.43 \AA [95]. Die gerichteten kovalenten sp^3 -Hybrid-Bindungen haben eine Bindungslänge von 2.352 \AA und bilden unter einem Bindungswinkel von 109.5° einen Tetraeder [95]. Bei 300 K besitzt c-Si eine Massendichte von $\rho = 2.329 \text{ g cm}^{-3}$ [95], bzw. eine atomare Dichte von $N_s = 5.00 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, und den linearen thermischen Ausdehnungskoeffizienten $\alpha^{th} = 2.56 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ [43]. Aufgrund der kubischen Symmetrie

verbleiben als elastische Konstanten in Voigt-Notation bei 300 K und Normaldruck $c_{11} = 166$ GPa, $c_{12} = 64$ GPa und $c_{44} = 80$ GPa, wobei für das biaxiale Elastizitätsmodul folgt $Y_{100} = 180.7$ GPa [43]. Die Wärmeleitfähigkeit nimmt mit zunehmender Temperatur von $\lambda = 156$ Wm⁻¹K⁻¹ (300 K) auf $\lambda = 22$ Wm⁻¹K⁻¹ (1600 K) ab [43].

2.5.1.2 Amorphes Silizium (a-Si)

Die Struktur und die Materialeigenschaften der metastabilen amorphen Phase hängen vom Herstellungsverfahren ab [96]. Während a-Si über schnelles Erstarren einer laserinduzierten Schmelze mit Abkühlraten von mehr als 10⁹ K/s [97], oder über die Abscheidung aus der Gasphase [98] hergestellt werden kann, erhält man besonders reines a-Si mit reproduzierbarer struktureller Unordnung durch eine Amorphisierung von c-Si über Versetzung der Gitteratome während einer Si-Ionenimplantation [99]. Da die Herstellungsverfahren Nichtgleichgewichtsprozesse sind, existieren unendlich viele metastabile Zustände mit jeweils leicht unterschiedlicher freier Enthalpie G , die temperaturabhängig gegenüber der von c-Si um $\Delta G \sim (6 \dots 12)$ kJ/Mol erhöht ist (vgl. Abb. 2.7) [100]. Die a-Si Phase ist wie c-Si halbleitend, enthält gerichtete kovalente sp³-Hybrid-Bindungen und strebt eine tetraedrische Struktur mit $N_c = 4$ an. Die intakte Nahordnung (SRO), aber fehlende Fernordnung (LRO) äußert sich jedoch in einer breiten Verteilung der Bindungswinkel und Bindungslängen. Der mittlere Bindungswinkel entspricht dem von c-Si, es existiert aber eine Streubreite von $\sim 13^\circ$ [101]. Der Abstand der nächsten Nachbaratome schwankt ebenfalls um den Wert von c-Si und wird mit $\sim (2.351 \dots 2.371)$ Å angegeben [102, 103]. Die strukturelle Unordnung resultiert aus einer mit Hohlräumen und Defekten, sowie unabgesättigten als auch fließenden Bindungen versetzten Netzwerkstruktur [104]. Da die Anzahl an 3-fach koordinierten Atomen im Allgemeinen die der 5-fach koordinierten Atome überwiegt, folgt eine mittlere Koordinationszahl von $N_c \sim 3.60 \dots 3.96$ [103, 105] und eine makroskopisch homogene, aber vom Herstellungsverfahren abhängige Dichte, die (70...100)% des Wertes von c-Si beträgt [106]. Über Ionenimplantation hergestelltes a-Si besitzt bei 300 K eine gegenüber c-Si um $(1.8 \pm 0.1)\%$ reduzierte Dichte von $\rho = 2.287$ g cm⁻³ [107] und $N_c \sim 3.79 \pm 0.01$ [102, 104]. Die elastischen Konstanten des isotropen a-Si betragen $G_\infty = 38.8$ GPa, $K = 78.2$ GPa und $\nu = 0.287$ [84]. Der lineare thermische Ausdehnungskoeffizient ist bei 300 K mit $\alpha^{th} = 2.83 \times 10^{-6}$ K⁻¹ leicht größer als der Wert von c-Si [108]. Die Wärmeleitfähigkeit beträgt bei 300 K ungefähr $\lambda \sim 1$ Wm⁻¹K⁻¹ und wird für $T > 400$ K mit $\lambda \sim 0.7$ Wm⁻¹K⁻¹ nur unwesentlich kleiner [106].

Da im Experiment nur mittlere Größen beobachtet werden und kein eindeutiges atomares Strukturmodell für a-Si existiert, ist der Überlapp zwischen Experiment und Computer-Simulationen oft nur gering [104]. Es wird deshalb entweder auf die Netzwerktheorie von Zachariasen (CRN-Modell) zurückgegriffen [109], oder a-Si auf dem Rechner aus der Schmelze durch rapides Abkühlen präpariert. Wie alle kovalenten

amorphen Festkörper besitzt a-Si im CRN-Modell eine vorhandene SRO und fehlende LRO. Die resultierende a-Si Phase ist perfekt vierfach koordiniert, hat eine mittlere kovalente Bindungslänge, die nahe der energetisch günstigsten liegt, und zeigt eine Verteilung der Bindungswinkel um den Wert von c-Si. Im Gegensatz zum CRN-Modell liegt bei dem aus der Schmelze erstarrten a-Si ein Wert $N_c \sim 3.9 \dots 4.2$ vor [104]. Unabhängig vom Präparationsverfahren ergeben die Simulationen jedoch sowohl mit dem von Tersoff [110] als auch mit dem von Stillinger und Weber [111] vorgeschlagenen Potential einen Wert von $N_c \gtrsim 4$.

2.5.1.3 Flüssiges Silizium (l-Si)

Die oberhalb der Gleichgewichts-Schmelztemperatur ($T_m = 1685$ K unter Normaldruck [43]) stabile flüssige Phase hat im Gegensatz zu c-Si und a-Si einen metallischen Charakter. Das Verschwinden der Energie-Bandlücke ist auf eine vergrößerte Ausdehnung der Wellenfunktion zurückzuführen, die aus einer veränderten atomaren Struktur resultiert. In Röntgenstreuexperimenten wurden zwar bestehende kovalente Bindungsanteile nachgewiesen [112]. Die Bindungswinkel haben aber eine sehr breite Verteilung von $40^\circ \dots 180^\circ$ mit einem schwach ausgeprägten Maximum bei 60° und einem deutlichen Maximum bei 90° [113, 114]. Der interatomare Abstand von l-Si beträgt $\sim 2.44 \text{ \AA}$ für $T < 2000$ K [115, 116]. Daraus resultieren sowohl eine gegenüber c-Si und a-Si erheblich höhere Koordinationszahl von $N_c \sim 4.9 \dots 6.4$ [115, 116], als auch mit $\rho = (2.55 \pm 0.03) \text{ g cm}^{-3}$ bei T_m eine um $\sim (10 \dots 11) \%$ höhere Dichte als die von c-Si bei 300 K [117]. Der experimentell ermittelte lineare thermische Ausdehnungskoeffizient liegt bei $\alpha^{th} \sim 2.23 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ [117]. Die elastischen Konstanten sind $G_\infty = 38.8 \text{ GPa}$, $K = 38.0 \text{ GPa}$ und $\nu = 0.119$ [84]. Die mit zunehmender Temperatur über ein Arrhenius-Verhalten abnehmende Scherviskosität nimmt Werte von $\eta_s \sim 0.8 \times 10^{-3} \text{ Pa s}$ (1685 K) bis $\eta_s \sim 0.6 \times 10^{-3} \text{ Pa s}$ (1900 K) an [118, 119]. In diesem niederviskosen Bereich gilt die Stokes-Einstein-Beziehung [120], so dass sich einerseits Diffusionskoeffizienten von $D \sim 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ ergeben [121], und andererseits strukturelle Relaxationen und Scherspannungsrelaxationen auf der gleichen Zeitskala von $\tau_s \ll 1 \text{ ps}$ erfolgen [84]. Die Wärmeleitfähigkeit von l-Si wird meist über das Wiedemann-Franz-Gesetz aus gemessenen Werten für die elektrische Leitfähigkeit abgeleitet und liegt im Bereich von $\lambda \sim (70 \dots 210) \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ [122, 123].

2.5.2 Phasenübergänge

2.5.2.1 Phasenübergang zwischen c-Si und l-Si

Der Phasenübergang zwischen c-Si und l-Si stellt einen Phasenübergang 1. Art dar, bei dem eine latente Wärme ΔH_{lc} umgesetzt wird. Dieser als *Schmelzprozess* bezeichnete Phasenübergang findet im thermodynamischen Gleichgewicht bei konstan-

ter Temperatur $T_m(p)$ und konstantem Druck p statt. Zur Beschreibung wird daher das thermodynamische Potential der freien Enthalpie $G(T, p)$ verwendet, wobei für ein Volumen V mit der Entropie S gilt $dG = -S dT + V dp$. Die im stabilen Gleichgewicht befindliche Phase besitzt einen minimalen Wert $G(T, p)$. Am Phasenübergang ändert sich $G(T, p)$ stetig, während die ersten Ableitungen von $G(T, p)$ Sprünge erfahren [124]. Für konstanten Druck gilt für die auf c-Si bezogene freie Enthalpie von l-Si $\Delta G(T) \sim \Delta H_{lc}(T_m - T)/T_m$ [125]. Für Normaldruck ergibt sich mit dem Schmelzpunkt $T_m = 1685$ K und $\Delta H_{lc} = 50.55$ kJ/Mol [43] der in der Abb. 2.7 gezeigte Verlauf $\Delta G(T)$ [100]. Die beim Phasenübergang durch den Koordinationszahlwechsel induzierte Dichteerhöhung bewirkt wie im Falle von Wasser über das Clausius-Clapeyron-Gesetz einen negativen Anstieg der Schmelzdruckkurve $T_m(p)$ (vgl. Abb. 2.8a) [44].

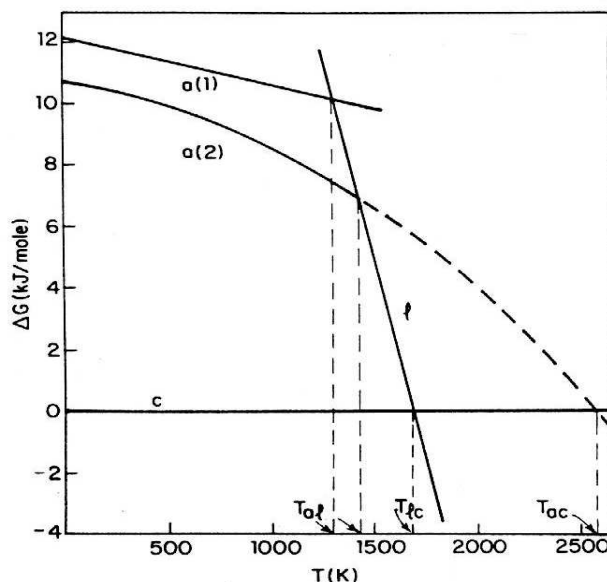


Abb. 2.7: Verlauf der auf c-Si bezogenen freien Enthalpie. Am Schmelzpunkt $T_m \equiv T_{lc}$ ändert $\Delta G(T)$ stetig seinen Anstieg von c-Si (c) zu l-Si (l). Die Extrapolation der Kurve von l-Si zu denen von a-Si (a(1), a(2)) lässt die Existenz eines Schmelzpunktes von a-Si, $T_{al} < T_m$, vermuten [100].

2.5.2.2 Phasenübergang zwischen a-Si und l-Si

Der Phasenübergang zwischen dem metastabilen a-Si und der für $T > T_m$ stabilen, bzw. für $T < T_m$ metastabilen l-Si Phase ist seit den 1980er Jahren Gegenstand kontroverser Diskussionen [106, 126, 127]. Die Änderung der Koordinationszahl und als Konsequenz die der elektrischen und optischen Eigenschaften bekräftigen die Annahme, dass a-Si bei einer diskreten Temperatur T_{al} über einen Phasenübergang 1. Art schmilzt [97, 100, 122, 123, 128–141]. Aus Rechnungen zur Energiedissipation laserbestrahlter a-Si Schichten wurde für Normaldruck ein "Schmelzpunkt" von $T_{al} \sim (1450 \pm 50)$ K ermittelt [100, 106, 140]. Da $T_{al} \sim T_m - 200$ K gilt, wäre die beim Schmelzen entstehende flüssige Phase stark unterkühlt. Die Extrapolation der Kurve $\Delta G(T)$ von l-Si bis zu T_{al} einerseits, sowie der aus kalorimetrischen Untersuchungen für a-Si abgeleitete Wert $\Delta G(T = 0 \text{ K}) \sim 11.9$ kJ/Mol andererseits, zeigen einen möglichen Verlauf von $\Delta G(T)$

für a-Si, welcher in Abb. 2.7 als Kurve a(1) dargestellt ist [100, 123, 142]. In Analogie zu $\Delta G(T)$ von l-Si wird für a-Si die Beziehung $\Delta G(T) \sim \Delta H_{ac}(T_{ac} - T)/T_{ac}$ angenommen, über die der virtuelle Koexistenzpunkt von a-Si und c-Si, $T_{ac} \gg T_m$, und die Kristallisationswärme $\Delta H_{ac} = \Delta G(0)$ festgelegt werden [125]. Daraus folgt eine latente Wärme $\Delta H_{al} = \Delta H_{lc} - \Delta H_{ac} \sim (38.6 \pm 2)$ kJ/Mol [106], die dem *Schmelzprozess von a-Si* zugeschrieben wird. In den letzten Jahren haben sich jedoch sowohl experimentell als auch theoretisch die Hinweise verdichtet, dass der Übergang zwischen a-Si und l-Si auf einem zweistufigen Prozess beruht, einem *Glasübergang* zu einer 4-fach koordinierten Glasschmelze und einem *Flüssig-Flüssig-Phasenübergang* 1. Art mit der latenten Wärme $\sim \Delta H_{al}$ zum unterkühlten l-Si (vgl. Kap. 2.5.3) [44]. Da der Übergangsbereich aber im metastabilen Gebiet des (T, p) -Konfigurationsraums liegt, verhindert die auf der ns-Zeitskala einsetzende Kristallisation eine Beobachtung mit konventionellen Methoden [123]. Zur endgültigen Klärung der Natur des Phasenübergangs ist daher eine experimentelle Methode erforderlich, die auf der ps-Zeitskala sensitiv ist und mittels derer Aussagen zur atomaren Struktur (Koordinationszahl, Dichte, Eigendehnung) und Beweglichkeit (Viskosität, Diffusionskoeffizient) gewonnen werden können. Eine solche Methode stellt die SHI-Bestrahlung von a-Si dar.

2.5.2.3 Phasenübergang zwischen a-Si und c-Si

Der Phasenübergang zwischen a-Si und c-Si ist ein Festphasenprozess, bei dem das metastabile Gleichgewicht durch Überwinden von energetischen Barrieren verlassen wird, um den stabilen Zustand zu erreichen (vgl. Abb. 2.7). Dies wird durch Fluktuationen der Teilchenkonfiguration unter Bildung wachstumsfähiger (kritischer) Keime realisiert. Die Kinetik der Kristallisation kann über die thermisch aktivierten Prozesse der Keimbildung und des Keimwachstums beschrieben werden [125]. Für $T > 1000$ K liegt die Zeitkonstante der Keimbildungsprozesse im Bereich einiger 10^{-9} s [123]. Kalorimetrische Untersuchungen haben gezeigt, dass für konventionelle Heizraten von 40 K/min Nukleationsprozesse bereits ab $T \sim 800$ K einsetzen [140, 143]. Reicht dagegen die zugeführte Energie nicht aus, um kritische Keimgrößen zu bilden, bewirkt eine durch Teilchenfluktuationen induzierte und mit einer Wärmeabgabe von bis zu $\Delta H_{ac}/3$ verbundene *strukturelle Relaxation* eine Ausheilung von Defekten und eine Reduzierung der Bindungswinkelstrebweite [96, 140, 143]. Damit verbunden ist eine Änderung der Bindungslängen und als Konsequenz ein leichter Anstieg der Dichte um 0.1% [144]. Als Ergebnis entsteht eine relaxierte metastabile a-Si Phase, die in Abb. 2.7 z.B. durch die Kurve a(2) repräsentiert wird. Die Zeitskala der strukturellen Relaxation liegt bei 1070 K im Bereich einiger Sekunden, dagegen ist die aus einer laserinduzierten l-Si Schmelze hergestellte a-Si Phase nahezu vollständig relaxiert [96].

2.5.3 Polymorphismus

2.5.3.1 Polymorphismus in c-Si

Die Existenz weiterer stabiler und metastabiler Modifikationen von c-Si unter hohen Drücken wird seit 1962 intensiv untersucht [145–149]. Diese als Hochdruck-Polymorphismus bezeichnete Erscheinung ist immer noch nicht vollständig verstanden. In Abb. 2.8a ist das T - p -Phasendiagramm für den mittleren Druckbereich dargestellt und die berechnete Schmelzdruckkurve $T_m(p)$ von c-Si mit kubischer Diamantstruktur (Si-I) eingezeichnet [44]. Unterhalb dieser Kurve stellt diese die thermodynamisch stabile Phase dar, oberhalb ist l-Si stabil. Bei $p \sim (10 \dots 12)$ GPa erfolgt ein Phasenübergang 1. Art von Si-I zu einer metallischen c-Si Phase mit raumzentrierter tetraedrischer β -Sn Struktur und $N_c = 6$ (Si-II) [146]. Bis $p \sim 248$ GPa wurden insgesamt mindestens 11 kubische, tetraedrische und hexagonale; metallische, halbmetallische und halbleitende Modifikationen mit meist $N_c > 4$ entdeckt, die teils erst unter Druckentlastung als metastabile Phasen entstehen [149, 150]. Der Polymorphismus von c-Si ähnelt dem von c-Ge. Für c-C wurde keine weitere Hochdruck-Modifikation als das Diamant gefunden.

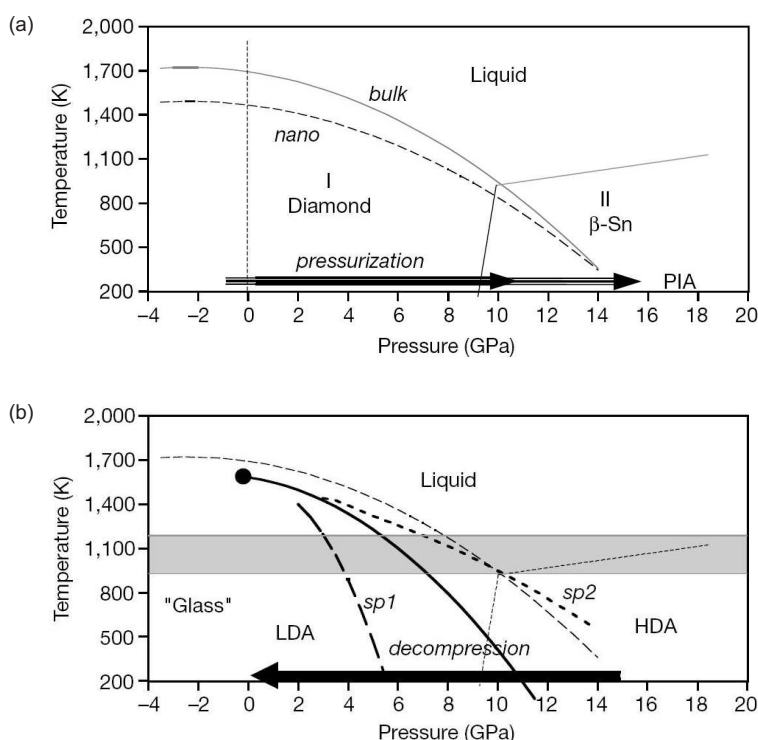


Abb. 2.8: Berechnetes Phasendiagramm für stabile und metastabile Si Phasen. (a) Dargestellt sind Gebiete des (T, p) -Konfigurationsraums, in denen die Phasen Si-I, Si-II und l-Si als thermodynamisch stabile Phasen vorliegen. Die Schmelzdruckkurven von Si-I und Si-II, sowie die Kurve ihres Festphasenübergangs stellen die Koexistenzkurven dar. Gestrichelt gezeichnet ist die Schmelzdruckkurve von nanokristallinem Si-I. Beide Schmelzdruckkurven von Si-I wurden in den Bereich, in dem Si-II stabil ist, extrapoliert [44]. (b) Dargestellt sind die Bereiche, in denen die Phasen LDA (a-Si) und HDA (a-Si Phase hoher Dichte) beobachtet wurden. Die durchgezogene Linie zeigt eine berechnete Kurve für den postulierten Flüssig-Flüssig-Phasenübergang 1. Art, die den vermuteten Glasübergangsbereich (grau) durchkreuzt und somit zum HDA-LDA-Phasenübergang führt [44].

2.5.3.2 Polymorphismus in a-Si

Die experimentelle Beobachtung einer Hochdruck-Amorphisierung (PIA, Abb. 2.8a) von nanoporösem Si-I bei $p \sim 14$ GPa zu einer der Si-II Phase ähnlichen a-Si Hochdruckphase (HDA-Si) mit hoher Dichte und $N_c > 4$ zeigte, dass auch die amorphe Phase einen Polymorphismus aufweist [44]. Das Einsetzen der PIA wird mit dem Überschreiten der in den metastabilen Bereich extrapolierten Schmelzdruckkurve von Si-I in Verbindung gebracht. Die Druckentlastung bewirkte bei $p \sim 10$ GPa einen Phasenübergang zur bekannten a-Si Phase (LDA-Si) mit geringer Dichte und $N_c \sim 4$ (Abb. 2.8b). Dieser für Si [44,151,152], Ge [153] sowie H₂O [154] beobachtete *Polyamorphismus* wird auf einen Polymorphismus der unterkühlten flüssigen Phase zurückgeführt (Abb. 2.9).

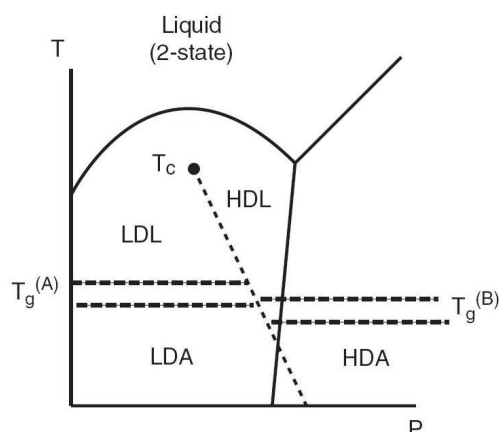


Abb. 2.9: Polymorphismus in einer unterkühlten Flüssigkeit. Dargestellt sind die Gebiete des (T, p) -Konfigurationsraums, in denen die metastabilen flüssigen Phasen LDL und HDL vorliegen, sowie deren Koexistenzkurve (gepunktet) und Glasübergangsbereiche (gestrichelt) zu den jeweiligen Glasphasen LDA und HDA. Die durchgezogenen Linien zeigen die Koexistenzkurven der stabilen kristallinen und flüssigen Phasen [155].

2.5.3.3 Polymorphismus in unterkühltem l-Si

Für alle Materialien mit negativem Anstieg der Gleichgewichtsschmelzdruckkurve $T_m(p)$ (wie z.B. Si, Ge, C, SiO₂, GeO₂, H₂O [156, 157], oder Al₂O₃-Y₂O₃ [158]) wird im Rahmen des von Rapoport im Jahr 1967 [159] vorgeschlagenen und von Aptekar im Jahr 1979 [126] weiter entwickelten Zwei-Zustandsmodell die Koexistenz von hoch- und niederkoordinierten Bereichen in der stabilen flüssigen Phase angenommen. Getrieben von Entropie und Dichte wird im unterkühlten Bereich eine Phasenseparation einsetzen, die ausgehend von einem zweiten kritischen Punkt T_c zu einem *Flüssig-Flüssig-Phasenübergang 1. Art* zwischen einer hochkoordinierten dichten flüssigen Phase (HDL) und einer niederkoordinierten weniger dichten flüssigen Phase (LDL) bei $T_l(p)$ führt [44, 114, 121, 151, 154–158, 160–174]. Unter Abkühlung frieren diese Phasen kinetisch blockiert über einen *Glasübergang* zu den entsprechenden amorphen Phasen HDA und LDA ein und die Kurve $T_l(p)$ beschreibt den HDA-LDA-Phasenübergang (Abb. 2.9). Hinter dem "Schmelzprozess" von a-Si bei Normaldruck vermutet man daher einen LDA-LDL Glasübergang gefolgt von einem LDL-HDL-Phasenübergang 1. Art (Abb. 2.8b) [44].

Kapitel 3

Experimente

3.1 Probenherstellung

3.1.1 Amorphisierung von kristallinem Silizium

Die a-Si Schichten wurden durch Amorphisierung von c-Si mittels Si-Mehrfachimplantation hergestellt. Die bezogen auf den Aufwand des Herstellungsprozesses und den Bedarf der nachfolgenden Experimente zur Hochenergie-Ionenbestrahlung optimale Dicke der amorphen Schicht betrug $d_1 \sim 5 \mu\text{m}$. Die entsprechenden Energien und Fluenzen der Teilimplantationen wurden basierend auf den Ergebnissen von Lulli *et al.* [175] aus Monte-Carlo Computer-Simulationen mit dem Programm "SRIM 2003" [45] ermittelt. Die verwendeten Bestrahlungsbedingungen der Teilimplantationen sowie die Mittelwerte für den jeweiligen Strom und Fluss sind in Tab. 3.1 aufgelistet. Abb. 3.1 zeigt die berechneten Versetzungen pro Gitteratom n_{dpa} der Teilschritte und der Mehrfachimplantation als Funktion der Ionenweglänge. Für den berechneten Wert $n_{dpa} \gtrsim 6$ dpa ist für Implantationen bei tiefen Temperaturen ($T_0 \lesssim 150$ K) eine von der Oberfläche ausgehende homogene a-Si Schicht zu erwarten [175].

Die Amorphisierung erfolgte am 3 MV-Tandetron-Beschleuniger des Instituts für Festkörperphysik (IFK) der FSU Jena unter N-Kühlung auf 120 K, bzw. He-Kühlung auf 16 K, bei einem Druck von $p \sim 10^{-8}$ mbar. Im Allgemeinen wurden einseitig polierte, (001)-orientierte, p-dotierte ((6...10) Ωcm) c-Si Wafer der Firma CrysTec mit einer

Nr.	E (MeV)	Ion	q_i	F_B (cm^2)	Θ	I (nA)	Φ ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)	Φt (cm^{-2})
1	9.5	Si	4 ⁺	0.48	7°	272	8.0×10^{11}	7×10^{15}
2	8.0	Si	3 ⁺	0.96	7°	811	1.6×10^{12}	5×10^{15}
3	6.5	Si	3 ⁺	0.96	7°	703	1.4×10^{12}	4×10^{15}
4	5.0	Si	2 ⁺	0.96	7°	890	2.6×10^{12}	4×10^{15}
5	3.5	Si	2 ⁺	0.96	7°	848	2.5×10^{12}	4×10^{15}
6	2.0	Si	2 ⁺	0.48	7°	577	3.4×10^{12}	5×10^{15}
7	1.0	Si	1 ⁺	0.48	7°	208	2.4×10^{12}	5×10^{15}
8	0.5	Si	1 ⁺	0.48	7°	94	1.1×10^{12}	4×10^{15}
9	0.25	Si	1 ⁺	0.96	7°	51	3.0×10^{11}	3×10^{15}

Tab. 3.1: Bestrahlungsparameter zur Amorphisierung von c-Si. Angegeben sind die 9 Teilschritte der Si-Mehrfachimplantation mit mittleren Werten für den jeweiligen Strom und Fluss. Die einzelnen Implantationen wurden in der angegebenen Reihenfolge vorgenommen. Die gesamte Fluenz beträgt $\Phi t = 4.1 \times 10^{16} \text{cm}^{-2}$ und die gesamte reine Strahlzeit im Mittel 9 h 46 min. F_B bezeichnet die bestrahlte Fläche an Faraday-Bechern zur Stromintegration.

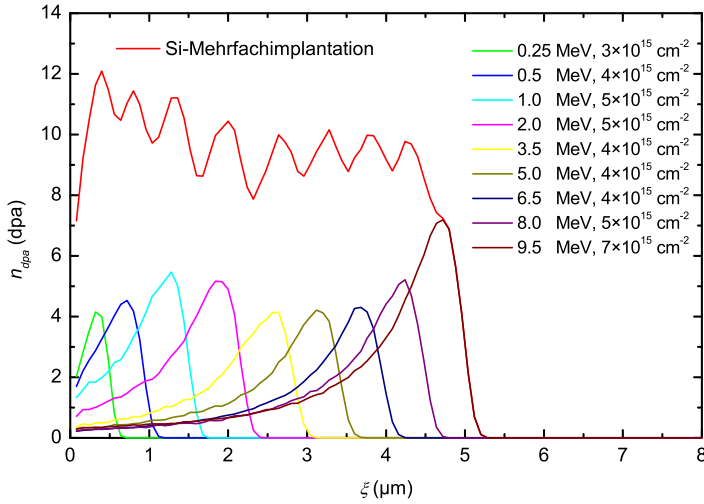


Abb. 3.1: Si-Mehrfachimplantation zur Amorphisierung von c-Si. Dargestellt sind die Versetzungen pro Gitteratom der einzelnen Teilimplantationen sowie deren Summe [45].

Dicke von $370 \mu\text{m}$ und einer Größe von $7 \text{ mm} \times 7 \text{ mm}$ verwendet, die durch kreisförmige Blenden mit einem Durchmesser von 3 mm amorphisiert wurden. Für die Experimente zur Biegung wurden von der Firma CrysTec auf eine Größe von $10 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$, bzw. $20 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$, zugeschnittene beidseitig polierte, (001)-orientierte, n-dotierte ($(0.1 \dots 1) \Omega\text{cm}$) c-Si Wafer der Dicke $275 \mu\text{m}$ verwendet. Die Amorphisierung dieser Proben erfolgte über die gesamte Breite bei einer Länge von 10 mm .

3.1.2 Strukturierung der Proben-Oberfläche

Für die Experimente zum plastischen Fließen wurden die betreffenden a-Si Proben am IFK durch Ni-Netzchen der Firma ATHENE mit Au bedampft. Die Dünnstegnetzchen mit einem Durchmesser von 3.05 mm und einer Dicke von $(12 \dots 15) \mu\text{m}$ lagen während der Bedampfung als Masken direkt auf den Proben auf. Es wurden Netzchen mit einer Stegbreite von $10 \mu\text{m}$ und einer Gitterdichte von 300 mesh (Stegabstand $84.7 \mu\text{m}$, Transmission 78%), bzw. 400 mesh (Stegabstand $63.5 \mu\text{m}$, Transmission 70%), verwendet. Unter Kenntnis der Aufdampfraten konnten je nach Au Einwaage strukturierte Schichtdicken von $(20 \dots 40) \text{ nm}$ aufgebracht werden. Somit wurden für die Experimente zum Plastischen Fließen selbsteichende Proben präpariert, wobei Verschiebungen mit einer Ortsauflösung von $\sim 1 \mu\text{m}$ nachgewiesen werden konnten.

3.2 Hohenenergie-Ionenbestrahlung

3.2.1 Experimentelle Bedingungen

Die Bestrahlung der a-Si und c-Si Proben mit hochenergetischen schweren Ionen erfolgte im Ionenstrahllabor (ISL) des Hahn-Meitner-Instituts Berlin (HMI) (vgl. Anhang A.1). Die technischen Voraussetzungen erlaubten es, hinreichend hohe elektro-

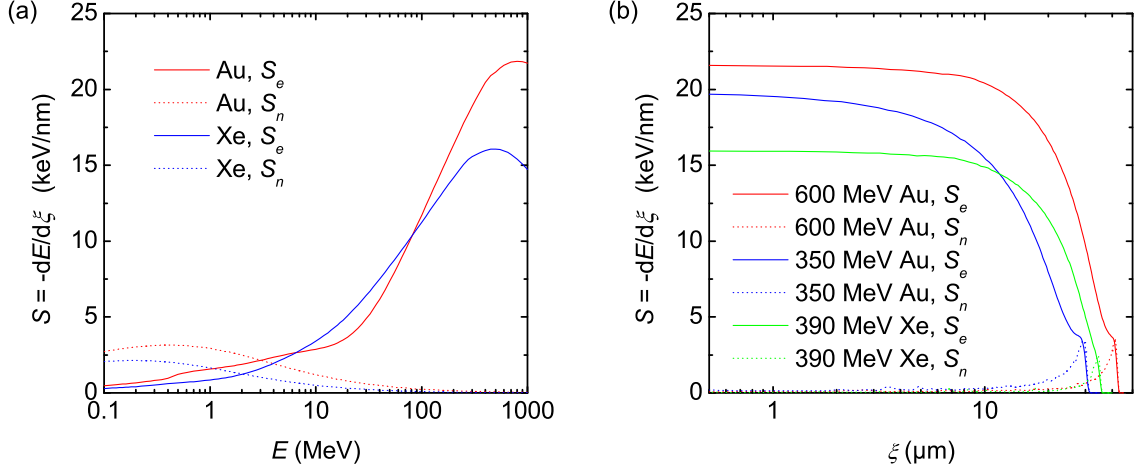


Abb. 3.2: Energieverluste von Au und Xe Ionen in Si [45]. (a) Energieabhängigkeit des elektronischen und nuklearen Energieverlustes. (b) Abhängigkeit des elektronischen und nuklearen Energieverlustes für die vorgenommenen Bestrahlungen von der Ionenweglänge.

nische Energieeinträge in möglichst kurzer Strahlzeit in den Festkörper einzubringen. Entsprechend hohe Ströme wurden für Au bzw. Xe Ionen bereitgestellt. Deren elektronische und nukleare Energieverluste in Si wurden mittels "SRIM 2003" [45] ermittelt und sind in Abb. 3.2a als Funktion der Energie dargestellt. Um einen möglichst konstanten elektronischen Energieverlust über die Dicke der a-Si Schichten zu gewährleisten, fiel die Wahl der kinetischen Energie der Ionen auf 600 MeV Au, 350 MeV Au und 390 MeV Xe. Die Abhängigkeiten der elektronischen und nuklearen Energieverluste dieser Ionen von deren Weglänge ξ ist in Abb. 3.2b dargestellt. Deutlich sichtbar ist, dass im oberflächennahen Bereich, $\xi \lesssim 6 \mu\text{m}$, $S_e \sim \text{const.} \gg S_n$ gilt. Die mittleren Werte für S_e und S_n , sowie die projizierten Reichweiten R_p der Ionen sind in Tab. 3.2 neben den experimentellen Bedingungen zusammengestellt. Es kann davon ausgegangen werden, dass sich die anfänglichen Ladungszustände der Ionen q_i innerhalb weniger nm Weglänge zu dem zur jeweiligen Energie entsprechenden Gleichgewichtsladungszustand \bar{q} geändert haben [53]. Die Experimente zum plastischen Fließen und zur vertikalen Dehnung wurden mit der in Abb. 3.3a dargestellten Strahlgeometrie vorgenommen. Hierfür wurde ein Probenhalter entwickelt, der einen Teil der Probe ($y > 0$) abdeckt,

E (MeV)	Ion	m_u (u)	E_n (MeV u $^{-1}$)	v/c (%)	q_i	\bar{q}	S_n (keV nm $^{-1}$)	S_e (keV nm $^{-1}$)	R_p (μm)
390	Xe	131	3.0	8.0	21 $^{+}$	35 $^{+}$	0.03	15.8 \pm 0.2	34.6
350	Au	197	1.8	6.2	26 $^{+}$	41 $^{+}$	0.09	18.8 \pm 1.0	29.8
600	Au	197	3.0	8.0	30 $^{+}$	47 $^{+}$	0.06	21.3 \pm 0.3	41.8

Tab. 3.2: Hochenergie-Ionenbestrahlung von Si [45]. Angegeben sind die Bestrahlungsbedingungen, die Masse m_u und Ladungszustände der Ionen an der Oberfläche q_i im Vergleich zum entsprechenden Gleichgewichtszustand \bar{q} [53], sowie die mittleren Energieverluste in einer 5.7 μm dicken Oberflächenschicht. Alle Bestrahlungen erfolgten bei einem Restgasdruck von $p \sim 10^{-6}$ mbar.

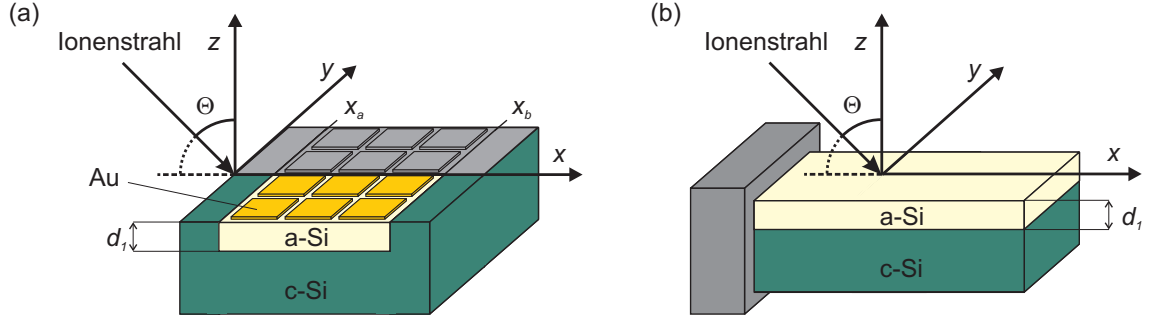


Abb. 3.3: Geometrie der Hochenergie-Ionenbestrahlungen. Die Ionen treffen unter dem Winkel Θ zum Einfallslot auf die Probe. Die Projektion des Ionenstrahls auf die Probenoberfläche definiert die Richtung der x -Achse. (a) Für die Experimente zum plastischen Fließen und zur vertikalen Dehnung wurde der Bereich $y < 0$ mit einem Fokus von $5\text{ mm} \times 5\text{ mm}$ bestrahlt. An x_a und x_b befinden sich Grenzflächen zwischen a-Si und c-Si. (b) Für die Experimente zur Biegung wurden die Proben freitragend mit einem Fokus von $9\text{ mm} \times 3\text{ mm}$ bestrahlt.

so dass der Rest ($y < 0$) bestrahlt wird (vgl. Anhang A.2). Die Abdeckung konnte gegebenenfalls von außen regelbar entfernt werden. Die Experimente zur Biegung fanden an freitragenden Proben unter der in Abb. 3.3b dargestellten Strahlgeometrie statt.

3.2.2 Experimente zur vertikalen Dehnung

An allen bestrahlten Proben erfolgten Untersuchungen zur vertikalen Dehnung, bzw. Höhenstufenänderung. Spezielle Experimente zu deren Fluenzabhängigkeit wurden mit 600 MeV Au Ionen bei Raumtemperatur unter senkrechter und schräger Bestrahlung durchgeführt. In Tab. 3.3 sind die entsprechenden Bestrahlungsbedingungen aufgelistet.

Substrat	E (MeV)	Ion	q_i	T_0 (K)	Θ	I (nA)	Φ ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)	Φt (cm^{-2})
a-Si	600	Au	30^+	300	0°	87	7.2×10^{10}	3.8×10^{15}
c-Si	600	Au	30^+	300	0°	71	5.9×10^{10}	3.5×10^{15}
a-Si	600	Au	30^+	300	45°	60	5.0×10^{10}	3.0×10^{15}
c-Si	600	Au	30^+	300	45°	54	4.5×10^{10}	3.1×10^{15}

Tab. 3.3: Bestrahlungsparameter für die Experimente zur vertikalen Dehnung. Angegeben sind mittlere Werte für den Strom und den Fluss, sowie die jeweiligen Endwerte der Fluenz.

3.2.3 Experimente zum plastischen Fließen

Die Experimente zum plastischen Fließen wurden an a-Si und c-Si Proben unter schräger Bestrahlung in Abhängigkeit von Fluenz, Fluss, Temperatur und elektronischer Energieabgabe vorgenommen. In Tab. 3.4 sind die experimentellen Bedingungen zusammengetragen. Zum Vergleich wurden zusätzlich $5\text{ mm} \times 5\text{ mm}$ große und 1.5 mm dicke Kronglas-Proben (B270, Deutsche Spezialglas AG) der Zusammensetzung (in wt%) 69.5 SiO_2 , $8.3\text{ K}_2\text{O}$, $8.1\text{ Na}_2\text{O}$, 7.1 CaO , 4.2 ZnO , 2.1 BaO , 0.5 TiO_2 und $0.5\text{ Sb}_2\text{O}_3$ schräg mit 600 MeV Au Ionen bei Raumtemperatur bestrahlt.

Substrat	E (MeV)	Ion	q_i	T_0 (K)	Θ	I (nA)	Φ (cm ⁻² s ⁻¹)	Φt (cm ⁻²)
a-Si, c-Si	390	Xe	21 ⁺	80	45°	53	6.3×10^{10}	7.4×10^{15}
a-Si, c-Si	390	Xe	21 ⁺	300	45°	69	8.3×10^{10}	9.3×10^{15}
a-Si, c-Si	350	Au	26 ⁺	80	45°	24	2.3×10^{10}	7.0×10^{14}
a-Si, c-Si	350	Au	26 ⁺	80	45°	48	4.6×10^{10}	1.7×10^{15}
a-Si, c-Si	350	Au	26 ⁺	300	45°	26	2.5×10^{10}	8.3×10^{14}
a-Si, c-Si	600	Au	30 ⁺	80	45°	68	5.7×10^{10}	3.1×10^{15}
a-Si, c-Si	600	Au	30 ⁺	300	45°	63	5.3×10^{10}	2.6×10^{15}
B270	600	Au	30 ⁺	300	45°	52	4.3×10^{10}	3.3×10^{14}
B270	600	Au	30 ⁺	300	45°	53	4.4×10^{10}	1.0×10^{14}

Tab. 3.4: Bestrahlungsparameter für die Experimente zum plastischen Fließen. Angegeben sind mittlere Werte für den Strom und den Fluss, sowie die jeweiligen Endwerte der Fluenz.

3.2.4 Experimente zur Biegung

Die Experimente zur Bestimmung des Spannungszustandes aus dem Krümmungsradius freitragender a-Si und c-Si Proben erfolgten temperaturabhängig unter senkrechter und schräger 600 MeV Au Bestrahlung. In Tab. 3.5 sind die zugehörigen experimentellen Bedingungen zusammengefasst.

Substrat	E (MeV)	Ion	q_i	T_0 (K)	Θ	I (nA)	Φ (cm ⁻² s ⁻¹)	Φt (cm ⁻²)
a-Si, c-Si	600	Au	30 ⁺	80	0°	7.6	0.3×10^{10}	2.0×10^{13}
a-Si	600	Au	30 ⁺	300	0°	59	4.9×10^{10}	1.0×10^{15}
a-Si*, c-Si*	600	Au	30 ⁺	300	0°	23	0.6×10^{10}	2.7×10^{14}
a-Si	600	Au	30 ⁺	300	45°	5	0.1×10^{10}	5.0×10^{12}
a-Si*, c-Si*	600	Au	30 ⁺	300	45°	35	0.9×10^{10}	1.8×10^{14}

Tab. 3.5: Bestrahlungsparameter für die Experimente zur Biegung. Angegeben sind mittlere Werte für den Strom und den Fluss, sowie die jeweiligen Endwerte der Fluenz. Die mit * gekennzeichneten Bestrahlungen erfolgten auf jeweils zwei a-Si und zwei c-Si Proben.

3.3 Analyse-Verfahren

Die bestrahlten a-Si und c-Si Proben sowie die entsprechenden unbestrahlten Referenzproben wurden mit verschiedenen Analyse-Verfahren untersucht. Die Analyse der Probenoberfläche und der Probenkrümmung erfolgte sowohl in-situ als auch extern nach der Bestrahlung mit einem Lichtmikroskop sowie mit einem Laser-Reflexionsprofilometer (vgl. Anhang A.3). Weiterhin wurden Messungen mit einem DEKTAK-Profilometer und einem Rasterkraftmikroskop (AFM) vorgenommen und ergänzende Aufnahmen über Rasterelektronenmikroskopie (REM) erstellt. Untersuchungen zur atomaren Struktur der Schichten erfolgten mittels Infrarot-Reflexionsmessungen (IRR), Rutherford-Weitwinkelstreuung (RBS), Raman-Spektroskopie (RS), Röntgendiffraktometrie (XRD) und Transmissionselektronenmikroskopie (TEM). Weitere Details zu den einzelnen Analyse-Verfahren werden im Anhang A.4 beschrieben.

Kapitel 4

Ergebnisse

4.1 Charakterisierung der amorphen Schichten

4.1.1 Atomare Struktur und Dicke der amorphen Schicht

Die Qualität der hergestellten a-Si Oberflächenschichten wurde mit TEM, RBS, IRR, sowie RS und XRD untersucht. Aus den in Abb. 4.1 dargestellten TEM-Aufnahmen geht hervor, dass die Si-Mehrfachimplantation zu einer homogenen amorphen Schicht von der Oberfläche bis in eine Tiefe von $z \sim (5.71 \pm 0.05) \mu\text{m}$ geführt hat, wobei der Übergang zum unterliegenden c-Si Substrat auf 100 nm begrenzt ist. In Abb. 4.2 ist die aus RBS-Messungen ermittelte Minimalausbeute χ_{min} der a-Si Schicht in (001)-Richtung des c-Si Substrats gezeigt. In Übereinstimmung mit den TEM-Aufnahmen nimmt χ_{min} bis in die Tiefe $z \sim (5.64 \pm 0.05) \mu\text{m}$ den für eine amorphe Schicht charakteristischen Wert $\chi_{min} \sim 1$ an und fällt beim Übergang zum c-Si Substrat leicht ab, erreicht aber aufgrund der hohen Dekanalisation der verwendeten H^+ -Ionen nicht den Wert einer reinen c-Si Referenzschicht. Die in Abb. 4.3 dargestellte IRR-Messung zeigt eine deutlich sichtbare Interferenz, die durch die Überlagerung der Reflexion an der Probenoberfläche mit der an der Grenzfläche zum c-Si Substrat entsteht. Die Messung bestätigt damit sowohl die Homogenität der a-Si Schicht als auch den Wert für die Tiefe der Grenzfläche zum c-Si Substrat, $z \sim -N/(2\Delta\nu n) \sim -(5.3 \dots 5.7) \mu\text{m}$, wobei

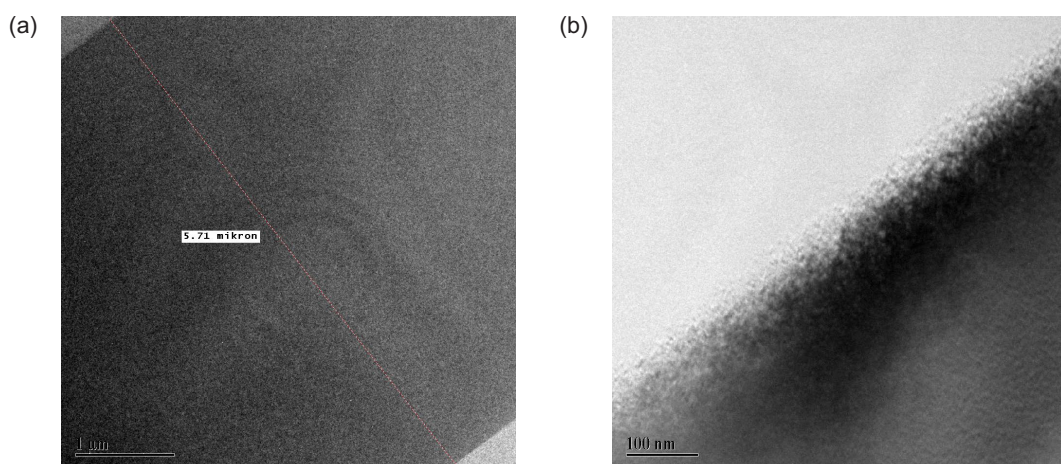


Abb. 4.1: TEM-Querschnittsaufnahmen. (a) Gesamtansicht der $5.71 \mu\text{m}$ dicken a-Si Schicht. Die Probenoberfläche befindet sich links oben und der Übergang der a-Si Schicht zum unterliegenden c-Si Substrat rechts unten. Dieser etwa 100 nm breite Übergangsbereich ist in (b) vergrößert dargestellt.

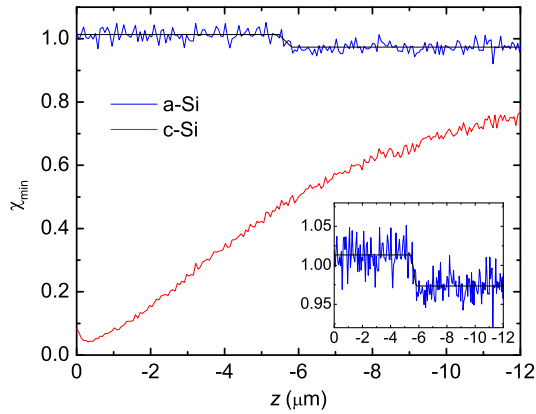


Abb. 4.2: RBS-Messung. Dargestellt ist die Minimalausbeute χ_{min} in (001)-Richtung des c-Si Substrats als Funktion der Tiefe z für eine implantierte Probe und eine c-Si Referenzprobe.

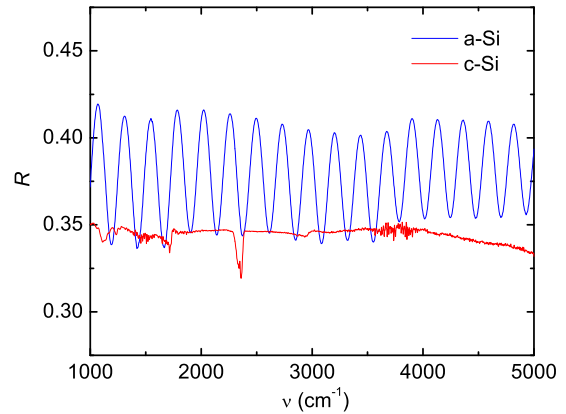


Abb. 4.3: IRR-Spektrum. Dargestellt ist die Reflektivität R als Funktion der Wellenzahl ν für eine implantierte Probe und eine c-Si Referenzprobe. Als Referenz diente ein Au-Spiegel.

$N = 17$ die Anzahl der Interferenzmaxima im Spektralbereich $\Delta\nu = 4000 \text{ cm}^{-1}$ und $n \sim 3.77 \dots 4.03$ die Brechzahl von a-Si bezeichnen [176]. Da über Mehrfachimplantationen in Oberflächennähe je nach Energie und Fluenz der Teilimplantationen oft nur ein stark geschädigter kristalliner Bereich erzeugt wird, wurden oberflächensensitive RS und XRD Messungen vorgenommen. Der in Abb. 4.4 stark ausgeprägte 1-O Raman-Peak von c-Si bei $\nu \sim 520 \text{ cm}^{-1}$ verbreitert und verschiebt sich infolge der Implantationen und es entsteht der für a-Si charakteristische TO-Peak bei $\nu \sim 480 \text{ cm}^{-1}$. Die Verschiebung und Verbreiterung des Peaks wird auf die Änderung der Bindungswinkel und des Spannungszustandes sowie auf Streuungen und räumliche Beschränkungen der Phononen zurückgeführt [177]. Die in Abb. 4.5 dargestellten Ergebnisse der XRD-Messungen zeigen ebenfalls, dass die implantierte Schicht auch im oberflächennahen Bereich amorph ist. Die unter Ausblendung der Reflexe der Netzebenen des c-Si

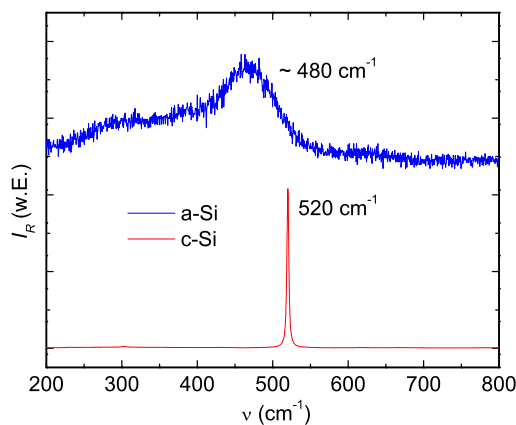


Abb. 4.4: Raman-Spektrum. Dargestellt ist die Raman-Intensität I_R einer implantierten Probe und einer c-Si Referenzprobe in willkürlichen Einheiten als Funktion der Wellenzahl ν .

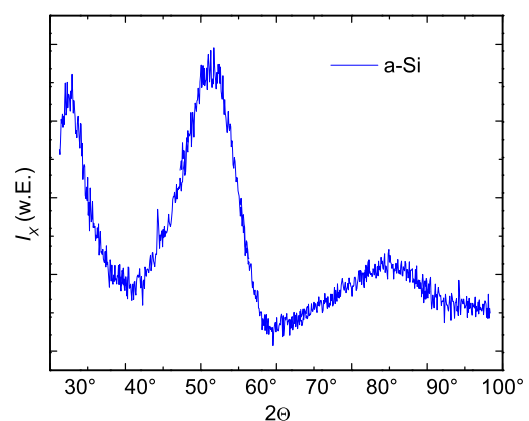


Abb. 4.5: Röntgenbeugungsmessung. Dargestellt ist die XRD-Intensität I_X einer implantierten Probe in willkürlichen Einheiten als Funktion des doppelten Scan-Winkels 2θ .

Substrats aufgenommene Kurve zeigt die für a-Si charakteristischen breiten Maxima. Im Rahmen dieser Arbeit wird daher für die Dicke der a-Si Schicht der mittels TEM bestimmte Wert $d_1 \sim (5.71 \pm 0.05) \mu\text{m}$ verwendet, der leicht größer als der aus den SRIM-Simulationen erwartete Wert von $d_1 \sim 5 \mu\text{m}$ ist (vgl. Abb. 3.1).

4.1.2 Deformations- und Spannungszustand

Mit der Amorphisierung ist eine strukturelle Dichteverringerng von $\Delta\rho/\rho = -1.8\%$ verbunden [107], die eine isotrope Eigendehnung von $\varepsilon_{ii}^* = -\Delta\rho/(3\rho)$ induziert. Die unbestrahlte Umgebung behindert jedoch die volle Entfaltung der Dichteänderung und führt über die elastischen und viskosen Eigenschaften der Schicht zu einem Deformationszustand $\underline{\underline{\varepsilon}}^s$ und einem Spannungszustand $\underline{\underline{\sigma}}^s$. Im Rahmen eines analog Gl. (2.22) modifizierten viskoelastischen Maxwell-Modells lässt sich die Deformationsrate $\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^s$ über

$$\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^s = \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{elas} + \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{vis} + \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^* \quad (4.1)$$

als Überlagerung von $\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^*$ mit der aus Gl. (2.23) bekannten elastischen Deformationsrate $\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{elas}$ und einer analog Gl. (2.24) über das Newtonsche Fließgesetz beschreibbaren viskosen Deformationsrate $\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{vis} = \underline{\underline{\tilde{\sigma}}}^s/(2\eta_{irr})$ ausdrücken, wobei eine isotrope ionenstrahlinduzierte Scherviskosität η_{irr} angenommen wird [144, 178]. Mit der in Gl. (2.26) angegebenen Bedingung für einen quasi-statischen Gleichgewichtszustand, $\text{Div } \underline{\underline{\sigma}}^s = 0$, sowie mit den Randbedingungen für eine planare spannungsfreie Probenoberfläche, $\sigma_{xz}^s = \sigma_{yz}^s = \sigma_{zz}^s = 0$ an $z = 0$, ergibt sich fern vom Randbereich, d.h. $\partial/\partial x = \partial/\partial y = 0$, sowie für $d/dt \sim \partial/\partial t$ ein biaxialer planarer kompressiver Spannungszustand in der a-Si Oberflächenschicht mit $\sigma_{xx}^s = \sigma_{yy}^s < 0$ und $\sigma_{xy} = \sigma_{xz} = \sigma_{yz} = \sigma_{zz} = 0$, sowie ein Deformationszustand mit $\varepsilon_{xx}^s = \varepsilon_{yy}^s = \varepsilon_{xy}^s = \varepsilon_{xz}^s = \varepsilon_{yz}^s = 0$ und $\varepsilon_{zz}^s > 0$. Es entsteht daher eine Volumenänderung im implantierten Bereich von $\text{Sp}(\underline{\underline{\varepsilon}}^s) = \varepsilon_{zz}^s = \Delta z/d_1$, die sich in einer vertikalen Dehnung $\Delta z > 0$ bezüglich der unimplantierten c-Si Umgebung äußert. Die Größe der Spannungen σ_{xx}^s und σ_{yy}^s sowie der Dehnung Δz ist nach Gl. (4.1) vom Wert der Scherviskosität η_{irr} abhängig, der im Allgemeinen unbekannt ist.

Für den oberen Grenzfall $\eta_{irr} \rightarrow 0$, für den σ_{xx}^s und σ_{yy}^s noch während der Implantationen vollständig relaxieren würden, ergäbe sich eine maximale vertikale Dehnung von $\Delta z_{max} \sim 102 \text{ nm}$, so dass die strukturelle Dichteänderung vollständig als Volumenänderung $\text{Sp}(\underline{\underline{\varepsilon}}^s)_{max} = \Delta z_{max}/d_1 \sim 1.8\%$ sichtbar würde. Für den unteren Grenzfall $\eta_{irr} \rightarrow \infty$ hingegen, für den Spannungsrelaxationen verhindert würden, ergäbe sich mit dem biaxialen Elastizitätsmodul von a-Si von $Y = 2G(1 + \nu)/(1 - \nu) \sim 140.1 \text{ GPa}$ ein Spannungszustand von $\sigma_{xx}^s = \sigma_{yy}^s = -Y\varepsilon_{ii}^* \sim -840 \text{ MPa}$. Die vertikale Dehnung würde den Minimalwert $\Delta z_{min} = d \sigma_{xx}^s/(2G) \sim 62 \text{ nm}$ annehmen, welcher einer minimalen Volumenänderung von $\text{Sp}(\underline{\underline{\varepsilon}}^s)_{min} = \Delta z_{min}/d_1 \sim 1.1\%$ entspricht.

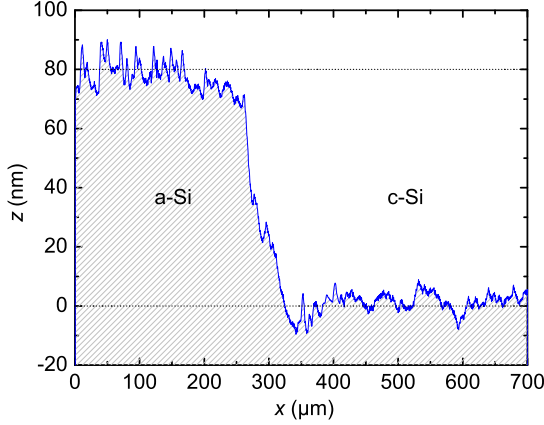


Abb. 4.6: DEKTAK-Messung. Dargestellt ist das Höhenprofil $z(x)$ der Probenoberfläche einer a-Si Schicht am lateralen Übergang zur c-Si Umgebung. Die Stufenhöhe beträgt $\Delta z \sim 80$ nm.

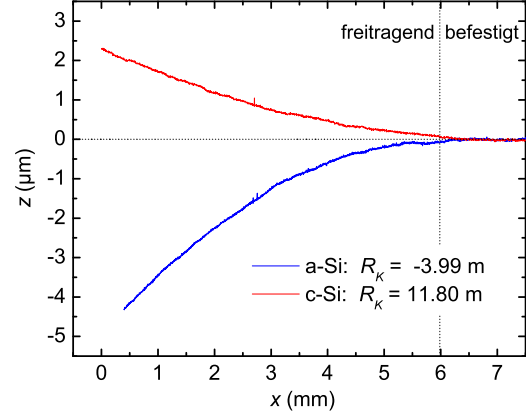


Abb. 4.7: Laserprofilometer-Messung. Dargestellt ist die Krümmung der Probenoberfläche einer a-Si Probe und einer c-Si Referenzprobe, sowie der jeweilige Krümmungsradius R_K .

Wie in Abb. 4.6 dargestellt, zeigen die DEKTAK-Messungen eine vertikale Dehnung der a-Si Schicht von $\Delta z = (80 \pm 8)$ nm, so dass $\text{Sp}(\underline{\underline{\varepsilon}}^s) = \Delta z/d_1 \sim 1.4\%$ folgt, wobei die Rauheit infolge der Amorphisierung von $R_q^c \sim 1.6$ nm (c-Si) auf $R_q^a \sim 2.9$ nm (a-Si) zunimmt. Aus der Relation $\Delta z_{\min} < \Delta z < \Delta z_{\max}$ folgt, dass die a-Si Schicht verspannt ist. Da die Amorphisierung bei $T_0 \lesssim 150$ K vorgenommen wurde, die Höhenstufenmessungen jedoch erst nach der Erwärmung auf $T \sim 300$ K erfolgten, können die Spannungen $\sigma_{xx}^s = \sigma_{yy}^s$ nicht auf der Basis der Gl. (4.1) berechnet werden, weil diese nur die unter dem Ionenstrahl auftretenden Scherspannungsrelaxationen berücksichtigt, aber nicht die während der Erwärmung auftretenden strukturellen Relaxationen [144, 178]. Der planare Spannungszustand kann aber experimentell aus der resultierenden Biegung freitragender Proben abgeleitet werden [144, 178]. In Abb. 4.7 sind die Ergebnisse der Laserprofilometer-Messungen dargestellt, aus denen die Krümmungsradien der a-Si Probe zu $R_K^a = (-3.99 \pm 0.40)$ m und der c-Si Referenzprobe zu $R_K^c = (11.80 \pm 2.00)$ m ermittelt wurden. Die Spannungen $\sigma_{xx}^s = \sigma_{yy}^s$ in der a-Si Oberflächenschicht können aus diesen Radien über die im Jahr 1909 von Stoney aufgestellte Gleichung [179]

$$S \equiv \int_{d_p/2-d_1}^{d_p/2} \sigma_{xx}^s z dz = \frac{Y_{c-Si} d_p^2}{6} \left[\frac{1}{R_K^a} - \frac{1}{R_K^c} \right] \quad (4.2)$$

abgeschätzt werden, wobei S die über die amorphe Schicht integrierte Spannung und d_p die Probendicke bezeichnen. Daraus ergibt sich ein Wert für die planaren Spannungen von $\sigma_{xx}^s = \sigma_{yy}^s \sim S/d_1 = (-130 \pm 50)$ MPa [180], welcher viel kleiner als die elastische Grenze von ~ 2 GPa ist und mit Literaturangaben gut übereinstimmt [144, 178].

4.2 Schichtstruktur nach SHI-Bestrahlung

4.2.1 Atomare Struktur der amorphen Oberflächenschicht

Alle mit schnellen schweren Ionen bestrahlten a-Si und c-Si Proben wurden mittels RS und IRR untersucht. Unabhängig vom Einfallswinkel Θ , der Temperatur T_0 , dem Energieeintrag S_e , dem Fluss Φ , sowie der Fluenz Φt zeigen die Raman-Spektren für alle Bestrahlungen eine Koinzidenz der jeweils unbestrahlten und bestrahlten Kurven, so dass von einer unveränderten atomaren Struktur ausgegangen werden kann. Ein Vergleich der Spektren ausgewählter bestrahlter und unbestrahlter a-Si und c-Si Proben zeigt Abb. 4.9. Die in den IRR-Messungen sichtbaren Interferenzen zeigen weiterhin, dass die atomare Struktur aller bestrahlter a-Si und c-Si Proben über die Tiefe homogen ist (vgl. Kap. 4.2.3).

Eine Ausnahme bildet die 600 MeV Au Bestrahlung bei $T_0 = 300$ K unter $\Theta = 45^\circ$ für hohe Fluenzen $\Phi t \gtrsim 2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$. Unter diesen speziellen Bedingungen wird eine Verschiebung des Raman-Peaks in Richtung des c-Si beobachtet (Abb. 4.9) und die XRD-Messungen zeigen kristalline Reflexe (vgl. Anhang C.1). Die in Abb. 4.8 darge-

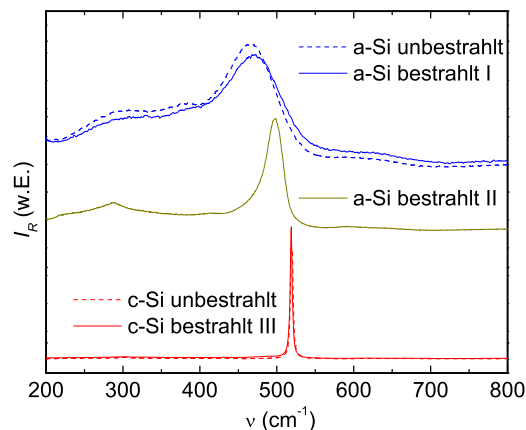


Abb. 4.9: Raman-Spektrum nach Bestrahlung. Dargestellt ist die Raman-Intensität I_R in willkürlichen Einheiten als Funktion der Wellenzahl ν von unbestrahlten und unter $\Theta = 45^\circ$ bestrahlten a-Si und c-Si Proben. Bestrahlung (I) erfolgte mit 390 MeV Xe, $\Phi t = 9.3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ bei $T_0 = 300$ K; (II) mit 600 MeV Au, $\Phi t = 2.6 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ bei $T_0 = 300$ K; und (III) mit 350 MeV Au, $\Phi t = 1.65 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ bei $T_0 = 80$ K.

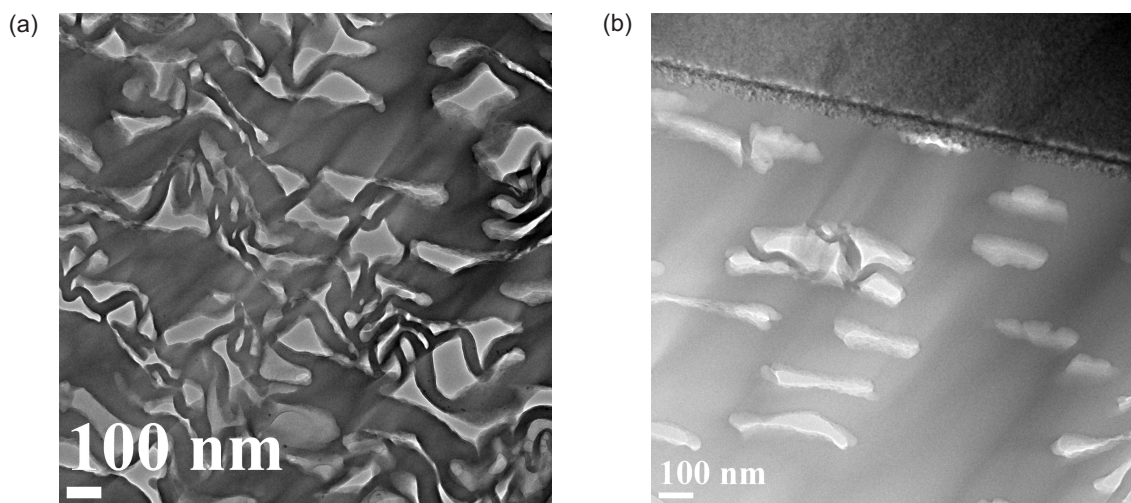


Abb. 4.8: TEM-Aufnahmen einer porösen nanokristallhaltigen a-Si Schicht. Die TEM-Aufnahmen zeigen eine a-Si Schicht nach 600 MeV Au Bestrahlung bei $T_0 = 300$ K unter $\Theta = 45^\circ$ mit Fluenz $\Phi t = 3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$. In (a) ist der oberflächennahe Bereich und in (b) der Bereich nahe der Grenzfläche zum c-Si Substrat dargestellt. Die hellen Gebiete stellen Hohlräume dar.

stellten TEM-Aufnahmen belegen die Formierung einer porösen Schicht mit amorpher Struktur, die wenige nahezu zufallsorientierte Nanokristalle nahe der Grenzfläche zum c-Si enthält. Eine quantitative Analyse der XRD-Ergebnisse zeigt, dass die Kristallite eine Größe von (10...30) nm besitzen. Die TEM-Aufnahmen zeigen riesige Poren, die zumindest nahe dem c-Si Substrat parallel zur Grenzfläche verlaufen (Abb. 4.8b). Zur Oberfläche hin nimmt die Porendichte zu, so dass nur noch eine schwammartige Struktur ohne bevorzugte Orientierung der Poren zu erkennen ist (Abb. 4.8a).

4.2.2 Formierung einer amorphen Tiefschicht

Infolge des nuklearen Energieeintrags S_n , der am Ende der Ionenbahn den elektronischen Energieeintrag S_e überwiegt (vgl. Kap. 2.1), werden mit wachsender Fluenz zunehmend mehr Gitteratome durch elastische Stöße versetzt. Die Anzahl an Deplazierungen pro Gitteratom n_{dpa} kann aus der Anzahl an erzeugten Vakanzen $N_d(\xi)$ pro Ionenweglänge ξ nach Gl. (2.6) abgeschätzt werden [45]. In Abb. 4.10 sind die ermittelten Tiefenabhängigkeiten $n_{dpa}(z)$ für die in den Experimenten verwendeten Bestrahlungsbedingungen als Beispiel für die Fluenz $\Phi t = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ dargestellt. Im Vergleich zu konventionellen Ionenimplantationen sollten die berechneten Werte $n_{dpa}(z)$ zumindest im Tiefenbereich $z \lesssim -15 \mu\text{m}$ ausreichen, um eine vergrabene amorphe Schicht zu formieren. Folglich ist davon auszugehen, dass für die verwendeten Fluenzen sowohl in den a-Si Proben als auch in den c-Si Proben ein Schichtsystem entsteht, das eine durch die Bestrahlung induzierte amorphe Tiefschicht enthält. Die obere Grenze dieser Schicht wird aufgrund des sehr flachen Abfalls der Kurven $n_{dpa}(z)$ in Richtung Oberfläche nicht sehr scharf sein und vielmehr ein kontinuierlicher Übergang zu einer teils stark geschädigten c-Si Zwischenschicht vorliegen. Die Existenz der amorphen Tiefschicht wird im folgenden Kapitel anhand von IRR-Messungen nachgewiesen.

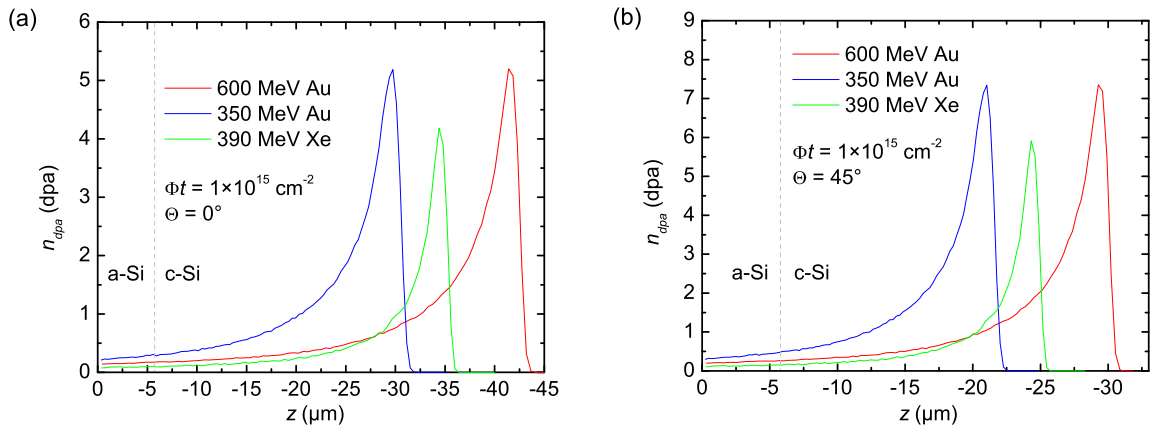


Abb. 4.10: Deplazierungen pro Gitteratom infolge des nuklearen Energieeintrags. Dargestellt ist der aus der Anzahl an Vakanzen $N_d(\xi)$ pro Weglänge ξ nach Gl. (2.6) für eine Fluenz von $\Phi t = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ ermittelte Wert an Deplazierungen pro Gitteratom n_{dpa} infolge des nuklearen Energieeintrags S_n für eine Bestrahlung mit $\Theta = 0^\circ$ (a), bzw. $\Theta = 45^\circ$ (b) [45].

4.2.3 Berechnung der Schichtdicken

In Abb. 4.11 ist das sich in einer a-Si Probe unter SHI-Bestrahlung ergebende Schichtsystem dargestellt und die Nomenklatur der jeweiligen Schichtdicken d_i angegeben. In einer c-Si Referenzprobe würde die a-Si Oberflächenschicht fehlen, so dass $d_1 = 0$ gilt. Sollten die Schichten in ihrer atomaren Struktur homogen und deren Grenzflächen scharf sein, würden in den IRR-Spektren Interferenzen zwischen den in Abb. 4.11 nummerierten Reflexen auftreten, wobei die Maxima durch den optischen Gangunterschied

$$\Delta s_{ij} = k_{ij}\lambda = \sum_{m=i+1}^j 2n_m d_m \quad (\text{mit } j \geq i + 1) \quad (4.3)$$

charakterisiert sind, und k_{ij} die Ordnung der Interferenz zwischen dem i -ten und j -ten Reflex und n_m die mittlere Brechzahl der m -ten Schicht angeben. Da die Rückseite der Proben im Allgemeinen unpoliert ist, folgt $\Delta s_{i4} = 0$. Im Falle einer a-Si Probe bestimmen somit die drei Schichtdicken d_1 , d_2 und d_3 die sechs Interferenzen mit den Gangunterschieden Δs_{01} , Δs_{02} , Δs_{03} , Δs_{12} , Δs_{13} und Δs_{23} . Da die Probenoberfläche poliert ist, und die obere Grenze der a-Si Tiefenschicht aufgrund der weiten Ausläufer der Schädigung $n_{dpa}(z)$ in Richtung Probenoberfläche weniger scharf ist (vgl. Abb. 4.10), sollten die Reflexe 0, 1 und 3 am intensitätsreichsten und folglich die Interferenzen mit dem Gangunterschied Δs_{01} bzw. Δs_{03} am stärksten ausgeprägt sein. In analoger Weise bestimmen im Falle einer c-Si Probe die zwei Schichtdicken d_2 und d_3 die drei Interferenzen mit den Gangunterschieden Δs_{02} , Δs_{03} und Δs_{23} , wobei jene mit dem Gangunterschied Δs_{03} am stärksten ausgeprägt sein sollte.

Im IRR-Spektrum $R(\nu)$ überlagern sich alle vorhandenen Interferenzen, so dass zur Berechnung der Schichtdicken d_i das Fourier-transformierte IRR-Spektrum (FT-IRR-Spektrum) $G(\Delta s)$ analysiert werden muss. Da nach Gl. (4.3) der Abstand zweier Inter-

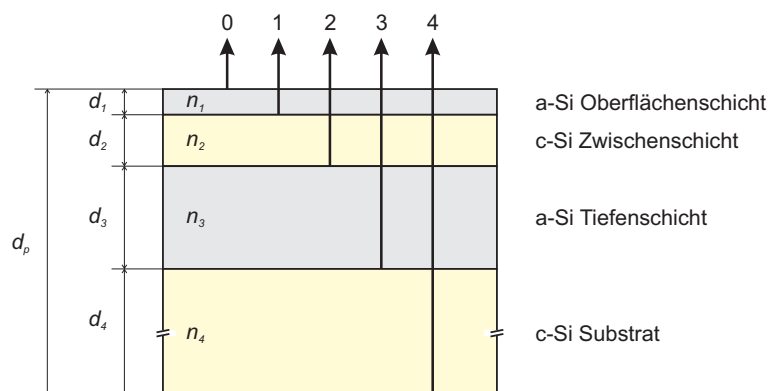


Abb. 4.11: Schichtsystem in einer a-Si Probe nach der SHI-Bestrahlung. Dargestellt ist der schematische Querschnitt einer durch die SHI-Bestrahlung erzeugten Schichtstruktur in einer a-Si Probe, sowie die Nomenklatur der Schichtdicken d_i und der Brechzahlen n_i . In einer c-Si Probe würde $d_1 = 0$ gelten. Die Grenzflächen der Schichten erzeugen in der Infrarot-Reflexion die nummerierten Reflexe. Der Übergang von der c-Si Zwischenschicht zur a-Si Tiefenschicht ist meist kontinuierlich.

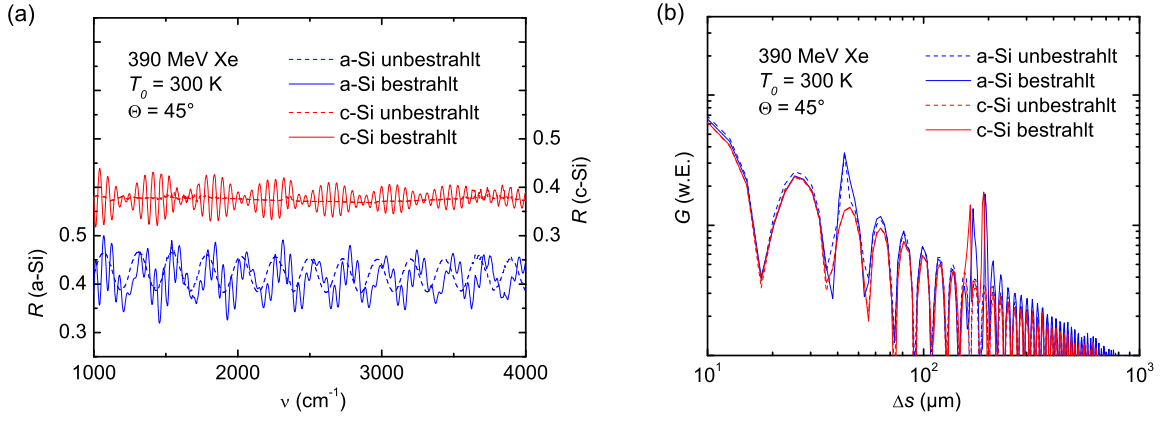


Abb. 4.12: Berechnung der Schichtdicken aus dem IRR-Spektrum. Dargestellt ist als Beispiel das IRR-Spektrum einer mit 390 MeV Xe Ionen unter dem Einfallswinkel $\Theta = 45^\circ$ bei $T_0 = 300 \text{ K}$ mit der Fluenz $\Phi t = 9.3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ bestrahlten a-Si bzw. c-Si Probe **(a)**, bzw. deren Fourier-Spektren **(b)**. In **(a)** ist die Reflektivität R als Funktion der Wellenzahl ν , und in **(b)** die Fourier-Amplitude G in willkürlichen Einheiten als Funktion des optischen Gangunterschieds Δs aufgetragen.

ferenzmaxima mit dem Gangunterschied Δs_{ij} im IRR-Spektrum $\Delta \nu = 1/\Delta s_{ij}$ beträgt, entspricht dieser Interferenz im FT-IRR-Spektrum ein Maximum bei $\Delta s = \Delta s_{ij}$.

In Abb. 4.12a sind als Beispiel die vor und nach einer schrägen 390 MeV Xe Bestrahlung bei $T_0 = 300 \text{ K}$ an a-Si und c-Si Proben gemessenen IRR-Spektren dargestellt, und in Abb. 4.12b die zugehörigen FT-IRR-Spektren aufgetragen. Während in den IRR-Spektren charakteristische schwebungsähnliche Interferenzerscheinungen auftreten, zeigen die FT-IRR-Spektren drei Maxima im Falle der a-Si Proben, bzw. zwei Maxima im Falle der c-Si Proben. Unter der Annahme, dass $n_1 \sim n_3 \sim n_a \sim 1.10 n_c$ und $n_2 \sim n_4 \sim n_c \sim 3.42$ gilt [176], und mit der Randbedingung $d_1 + d_2 + d_3 \sim R_p \cos \Theta$ (vgl. Abb. 4.10b) können diese Maxima nach einer detaillierten Fallunterscheidung über Gl. (4.3) eindeutig identifiziert werden. So wird das Maximum an $\Delta s_{01} \sim 43 \mu\text{m}$ durch die Schichtdicke der a-Si Oberflächenschicht mit $d_1 \sim 5.7 \mu\text{m}$ bestimmt, wobei der Wert von d_1 durch die SHI-Bestrahlung unverändert bleibt. Die weiteren Interferenzen können mit $\Delta s_{23} \sim 165 \mu\text{m}$ bzw. $\Delta s_{03} \sim 190 \mu\text{m}$ angegeben werden, aus denen sich die Werte für die Dicke der c-Si Zwischenschicht zu $d_2 \sim 24.2 \mu\text{m}$, bzw. jene der a-Si Tiefenschicht zu $d_3 \sim 3.3 \mu\text{m}$ ergeben. Da für diese spezielle Bestrahlungsbedingung die Interferenz mit dem Gangunterschied Δs_{23} nachgewiesen wurde, konnten Werte für die Schichtdicken d_2 und d_3 abgeschätzt werden. Im Allgemeinen wurden jedoch nur die intensitätsstarken Interferenzen Δs_{01} und Δs_{03} beobachtet. Da die Randbedingung $d_1 + d_2 + d_3 \sim R_p \cos \Theta$ zu grob ist, konnten nur funktionale Abhängigkeiten $d_2(d_3)$ abgeleitet werden, die keine eindeutige Angabe der Dicken $d_2 > 0$ und $d_3 > 0$ erlauben. Die IRR-Messungen bestätigen dennoch einerseits die Formierung einer a-Si Tiefenschicht in allen bestrahlten Proben, welche wegen $d_2 > 0$ von der a-Si Oberflächenschicht separiert ist. Andererseits belegen die IRR-Ergebnisse, dass sich die Dicke der a-Si Oberflächenschicht d_1 nicht ändert, solange diese die atomare Struktur beibehält.

Für die unter schräger Hochenergie- und Hochfluenz-Bestrahlung bei Raumtemperatur entstehende poröse amorphe Schicht mit nanokristallinen Einschlüssen (vgl. Kap. 4.2.1) wurde ebenfalls ein unveränderter Wert von $\Delta_{s_{01}} \sim 43 \mu\text{m}$ nachgewiesen, der auf eine unveränderte Tiefe der unteren Grenzfläche der bestrahlten Schicht bezüglich der Oberfläche der unbestrahlten a-Si Schicht hindeutet. Da sich jedoch mit der Massenbelegung auch die Brechzahl n_1 ändert, kann aus $\Delta_{s_{01}}$ kein Wert für d_1 ermittelt werden.

4.3 Deformationszustand nach SHI-Bestrahlung

4.3.1 Geometrie des bestrahlten Bereichs

Im Rahmen dieser Arbeit wird zur Beschreibung des Deformations- und Spannungszustandes der a-Si Oberflächenschicht unter SHI-Bestrahlung das in Abb. 3.3 dargestellte Koordinatensystem verwendet. Die unbestrahlte Probenoberfläche liegt bei $z = 0$ und die Oberflächennormale bildet die z -Achse. Die Projektion des Ionenstrahls auf die Probenoberfläche (*Wirkungslinie*) definiert die Richtung der x -Achse, und die y -Achse trennt den bestrahlten Bereich ($y < 0$) vom unbestrahlten Bereich ($y > 0$).

Die Deformationsrate der Schicht $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^s(x, y, z, t)$ unter Bestrahlung mit zeitlich konstantem Fluss $\Phi(x, y)$ enthält im Allgemeinen die Normalkomponenten $\dot{\epsilon}_{ii}^s(x, y, z, t)$ und die Scherkomponenten $\dot{\epsilon}_{ij}^s(x, y, z, t)$. Diese 6 Komponenten sind über Gl. (2.25) mit den 3 Komponenten der Deformationsgeschwindigkeit $\underline{v}(x, y, z, t)$ verknüpft. In analoger Weise enthält der Spannungstensor der Schicht $\underline{\underline{\sigma}}^s(x, y, z, t)$ im Allgemeinen die Normalspannungen $\sigma_{ii}^s(x, y, z, t)$ und die Scherspannungen $\sigma_{ij}^s(x, y, z, t)$.

Zur Vereinfachung der Beschreibung der auftretenden Effekte kann der bestrahlte Bereich bezüglich der Ortsabhängigkeiten der physikalischen Größen in die drei wie folgt bezeichneten Gebiete zerlegt werden:

- *Zentralbereich:* Fernab von Randbereichen, d.h. $y \ll 0$ und $x_a \ll x \ll x_b$ wird ein homogener Fluss Φ_0 angenommen. Es verbleiben $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^s(z, t)$, bzw. $\underline{v}(z, t)$, und $\underline{\underline{\sigma}}^s(z, t)$. Solange die Probenoberfläche eben bleibt, gilt $\partial/\partial x = \partial/\partial y = 0$.
- *y-Randbereich:* In der Nähe einer Bestrahlungsgrenze, die parallel zur Wirkungslinie verläuft ($y = 0$), verbleiben die Abhängigkeiten $\Phi(y)$, $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^s(y, z, t)$, bzw. $\underline{v}(y, z, t)$, und $\underline{\underline{\sigma}}^s(y, z, t)$. Die y - z -Ebene ist eine Symmetrieebene, so dass $\partial/\partial x = 0$ gilt.
- *x-Randbereich:* In der Nähe einer Bestrahlungsgrenze, die senkrecht zur Wirkungslinie verläuft ($x = x_a$, bzw. $x = x_b$), verbleiben die Abhängigkeiten $\Phi(x)$, $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^s(x, z, t)$, bzw. $\underline{v}(x, z, t)$, und $\underline{\underline{\sigma}}^s(x, z, t)$. Die x - z -Ebene ist eine Symmetrieebene, so dass $\partial/\partial y = 0$ gilt. Der Bereich um $x \sim x_a$ wird als x_a -Randbereich und der Bereich um $x \sim x_b$ als x_b -Randbereich bezeichnet.

4.3.2 Bestrahlung bei tiefen Temperaturen

4.3.2.1 Deformation im Zentralbereich

An allen mit $\Theta > 0^\circ$ bei $T_0 = 80$ K bestrahlten a-Si Schichten wurde das von Gläsern bekannte und in Abb. 2.3c schematisch veranschaulichte plastische Fließen beobachtet. In Abb. 4.13 ist eine Mikroskopaufnahme der Probenoberfläche einer bestrahlten a-Si Schicht dargestellt, in der die homogene laterale Verschiebung $\Delta x(z = 0, t) > 0$ im Zentralbereich entlang der Wirkungslinie deutlich sichtbar ist. Ein Vergleich mit Aufnahmen bestrahlter Gläser [23] zeigt, dass sich a-Si unter schräger Bestrahlung qualitativ wie ein konventionelles Glas verhält [84, 180, 181]. Auch unter Bestrahlung mit $\Theta = 0^\circ$ ähnelt a-Si einem Glas, es konnte kein plastisches Fließen nachgewiesen werden. Wie alle kristallinen Materialien zeigt c-Si unter SHI-Bestrahlung keine Deformation und ist für die verwendeten Energieeinträge wie erwartet inert [83].

In Abb. 4.14 ist die an der Probenoberfläche des Zentralbereichs von a-Si gemessene Verschiebung $\Delta x(z = 0, t)$ in Abhängigkeit von der Fluenz $\Phi_0 t$ dargestellt. Für die verwendeten Bestrahlungsbedingungen wurde ein linearer Zuwachs $\Delta x(z = 0, t) \propto \Phi_0 t$ nachgewiesen, wobei eine Änderung des Flusses Φ_0 keine Auswirkung auf den Anstieg hat [84, 180, 181]. Aus dem Anstieg folgt eine zeitunabhängige Schergeschwindigkeit an der Probenoberfläche $v_x(z = 0) = \Phi_0 \partial/\partial(\Phi_0 t) (\Delta x(z = 0, t))$, die in Abhängigkeit vom Energieeintrag S_e und Fluss Φ_0 die in Tab. 4.1 aufgelisteten Werte annimmt. Da diese alle im Bereich $v_x(z = 0) \sim \text{Å/s}$ liegen und damit gegenüber denen von Gläsern mit $v_x(z = 0) \sim 100 \text{ Å/s}$ sehr klein sind, waren zur Untersuchung des plastischen Fließens von a-Si Fluenzen von $\Phi_0 t \sim 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, und folglich Strahlzeiten von $t \sim 30$ h, erforderlich, wodurch eine möglicher Schwellwert, der im Bereich von $B \sim 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ zu erwarten gewesen wäre, nicht aufgelöst werden konnte [180].

Da aus Symmetriegründen die Zeitunabhängigkeit der Schergeschwindigkeit nicht nur

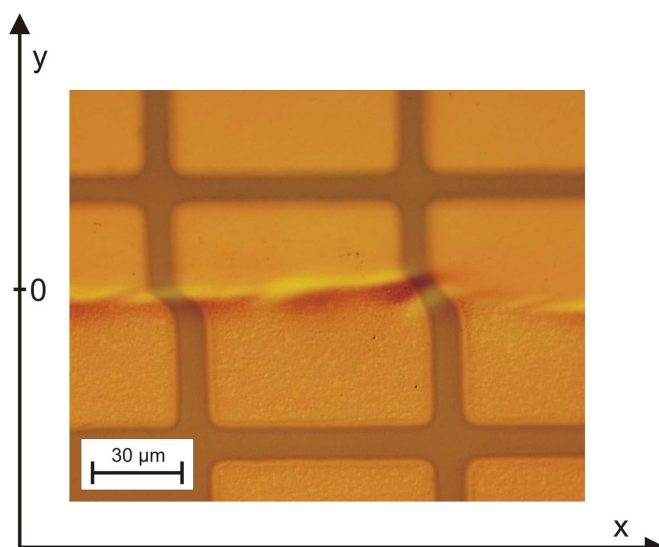


Abb. 4.13: Plastisches Fließen von a-Si unter Bestrahlung bei tiefen Temperaturen. Die Lichtmikroskopaufnahme zeigt die Probenoberfläche einer a-Si Schicht, die im Bereich $y < 0$ mit 350 MeV Au Ionen, Fluenz $\Phi_0 t = 1.65 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ und Einfallswinkel $\Theta = 45^\circ$ bei $T_0 = 80$ K bestrahlt wurde [84]. Die hellen Bereiche sind mit Au bedampft. Der Gitterabstand beträgt $85 \mu\text{m}$.

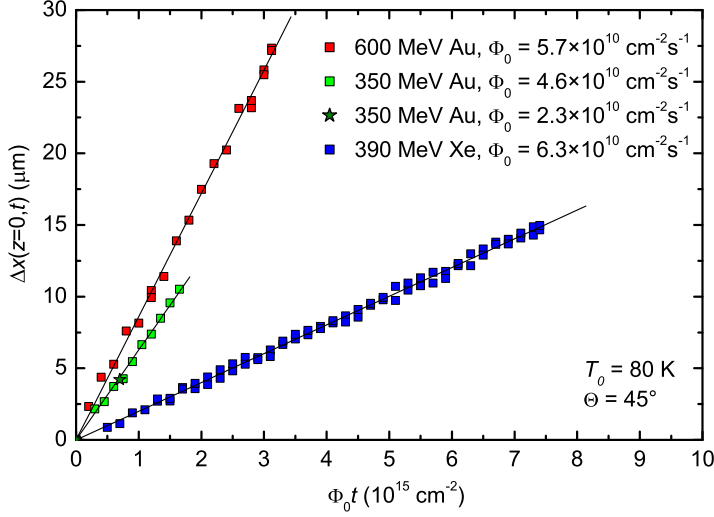


Abb. 4.14: Abhängigkeit der Verschiebung von der Fluenz. Dargestellt ist die Verschiebung $\Delta x(z = 0, t)$ von a-Si an der Probenoberfläche des Zentralbereichs als Funktion der Fluenz $\Phi_0 t$ für alle vorgenommenen schrägen Bestrahlungen bei $T_0 = 80 \text{ K}$ [84, 180, 181].

an der Probenoberfläche, sondern auch innerhalb der a-Si Schicht gilt, bestimmt $v_x(z)$ die stationäre Scherkomponente der Deformationsrate $\dot{\epsilon}_{xz}^s(z)$. Nach Gl. (2.25) verschwinden die Normalkomponenten $\dot{\epsilon}_{xx}^s(z, t)$ und $\dot{\epsilon}_{yy}^s(z, t)$, sowie die Scherkomponente $\dot{\epsilon}_{xy}^s(z, t)$. Da in den Experimenten keine Deformationsgeschwindigkeit in y -Richtung nachgewiesen wurde, d.h. $v_y(z, t) = 0$, verschwindet auch die Scherkomponente $\dot{\epsilon}_{yz}^s(z, t)$. Letztlich verbleibt die Normalkomponente $\dot{\epsilon}_{zz}^s(z, t)$, welche über die vertikale Dehnungsgeschwindigkeit $v_z(z, t)$ eine Volumenänderungsrate $\text{Sp}(\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(z, t)) \neq 0$ induzieren könnte. In Abb. 4.15a ist das DEKTAK-Profil der Probenoberfläche einer unbedampften a-Si Schicht am y -Randbereich dargestellt, aus dem eine vertikale Dehnung von $\Delta z \sim 160 \text{ nm}$ hervorgeht. Ein Vergleich mit der in Abb. 4.15b dargestellten analogen Messung an einer mit Au bedampften c-Si Referenzprobe zeigt jedoch, dass diese sogar eine leicht höhere vertikale Dehnung von $\Delta z \sim 170 \text{ nm}$ aufweist. Offensichtlich ist die Stufenhöhe also nicht durch eine Dehnung der a-Si Oberflächenschicht entstanden, sondern hat ihren Ursprung in einer vertikalen Dehnung der a-Si Tiefenschicht, die durch die mechanisch eingeschränkte strukturelle Dichteverringerung von $\Delta\rho/\rho = -1.8\%$ [107] infolge der Amorphisierung induziert wird (vgl. Kap. 4.2.2). Die geringe Abweichung kann auf den Einfluss der bestrahlten dünnen Au-Schicht zurückgeführt werden. Untersuchungen an allen anderen sowohl schräg als auch senkrecht bestrahlten Schichten ergaben ähnliche Resultate. Für die verwendeten Energie- und

E (MeV)	Ion	S_e (keV nm $^{-1}$)	Φ_0 (cm $^{-2}$ s $^{-1}$)	$v_x(z = 0)$ (nm s $^{-1}$)
390	Xe	15.8	6.3×10^{10}	0.13
350	Au	18.8	2.3×10^{10}	0.15
350	Au	18.8	4.6×10^{10}	0.29
600	Au	21.3	5.7×10^{10}	0.49

Tab. 4.1: Schergeschwindigkeit von a-Si bei tiefen Temperaturen. Angegeben sind die berechneten Werte der stationären Schergeschwindigkeit $v_x(z = 0)$ an der Probenoberfläche im Zentralbereich der a-Si Schicht für die bei $T_0 = 80 \text{ K}$ vorgenommenen schrägen Bestrahlungen.

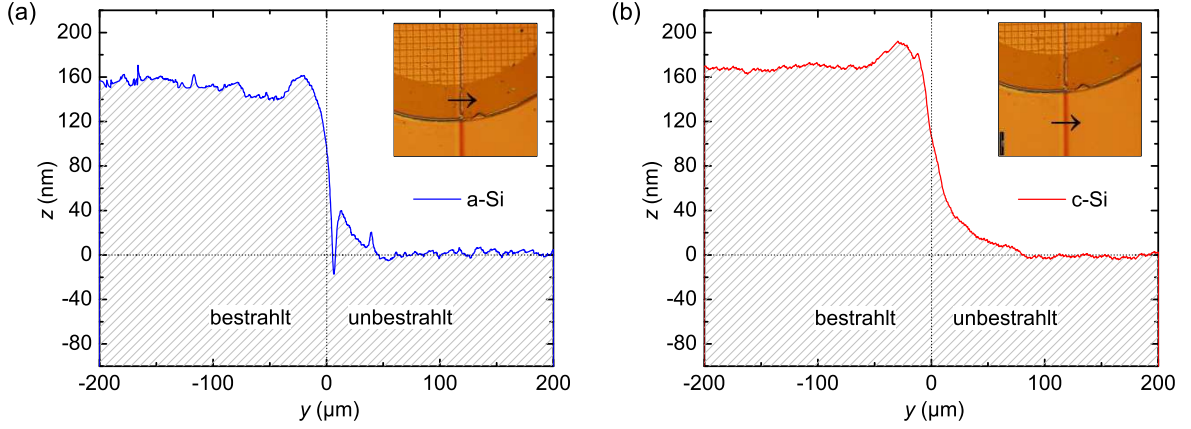


Abb. 4.15: Stufenhöhe nach SHI-Bestrahlung. Dargestellt ist das mittels DEKTAK-Profilometer aufgenommene Höhenprofil $z(y)$ der Probenoberfläche einer a-Si Schicht ohne Au Bedampfung **(a)**, bzw. einer c-Si Schicht mit Au Bedampfung **(b)** am y -Rand des bestrahlten Bereichs. Die Stufenhöhen betragen $\Delta z \sim 160$ nm **(a)**, bzw. $\Delta z \sim 170$ nm **(b)**. Die Bestrahlungen fanden bei $T_0 = 80$ K mit 350 MeV Au Ionen der Fluenz $\Phi_0 t = 7 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ unter dem Einfallswinkel $\Theta = 45^\circ$ statt.

Fluenzbereiche gilt demnach $v_z(z, t) = 0$ und als Folge $\dot{\epsilon}_{zz}^s(z, t) = 0$, so dass im Einklang mit den Ergebnissen der IRR-Messungen (vgl. Kap. 4.2.3) eine Volumen- bzw. Dichteänderung der bestrahlten a-Si nicht nachweisbar war.

Somit konnte gezeigt werden, dass sich a-Si unter SHI-Bestrahlung bei tiefen Temperaturen auch quantitativ wie ein konventionelles Glas verhält [84, 180, 181].

4.3.2.2 Deformation am y -Randbereich

Auch am y -Randbereich zeigen die Untersuchungen an den bestrahlten a-Si Schichten weder eine Deformation in y -Richtung noch eine vertikale Dehnung in z -Richtung (vgl. Abb. 4.15a und Abb. 4.15b), so dass für die verwendeten Bestrahlungsbedingungen $v_y(y, z, t) = v_z(y, z, t) = 0$ gilt. Als Konsequenz verschwinden die Normalkomponenten der Deformationsrate $\dot{\epsilon}_{xx}^s(y, z, t)$, $\dot{\epsilon}_{yy}^s(y, z, t)$ und $\dot{\epsilon}_{zz}^s(y, z, t)$, sowie die Scherkomponenten $\dot{\epsilon}_{xy}^s(y, z, t)$ und $\dot{\epsilon}_{yz}^s(y, z, t)$ und es verbleibt als einzige Deformation eine vom Ort y abhängige Scherungsrate $\dot{\epsilon}_{xz}^s(y, z, t)$. Diese wird durch eine Schergeschwindigkeit $v_x(y, z, t)$ bestimmt, welche ausgehend vom homogenen Wert im Zentralbereich bei $y \ll 0$ mit zunehmender Nähe zum unbestrahlten Bereich kontinuierlich auf $v_x(y, z, t) = 0$ für $y \gg 0$ abnimmt. In Abb. 4.16 ist das reduzierte plastische Fließen am y -Randbereich anhand einer Mikroskopaufnahme einer schräg mit 350 MeV Au Ionen bestrahlten Probe dargestellt, in der die ortsabhängige Verschiebung an der Probenoberfläche $\Delta x(y, z = 0, t)$ deutlich sichtbar ist. Da im Zentralbereich $v_x(z)$ zeitunabhängig ist, sollte am y -Randbereich auch eine stationäre Schergeschwindigkeit $v_x(y, z)$ vorliegen. Wie im Zentralbereich wurde am y -Randbereich unter senkrechter Bestrahlung keine Deformation nachgewiesen, so dass $\dot{\epsilon}_{xz}^s(y, z, t) = 0$ gilt. Es konnte damit gezeigt werden, dass sich a-Si unter SHI-Bestrahlung bei tiefen Temperaturen auch am y -Rand wie ein konventionelles Glas verhält [84, 180, 181].

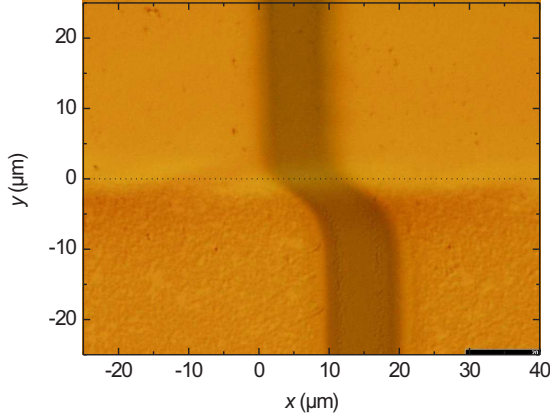


Abb. 4.16: Deformation am y -Randbereich. Die Mikroskopaufnahme zeigt das ortsabhängige reduzierte plastische Fließen am y -Randbereich einer mit 350 MeV Au Ionen, Fluenz $\Phi_0 t = 1.65 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ und Einfallswinkel $\Theta = 45^\circ$ bei $T_0 = 80 \text{ K}$ bestrahlten a-Si Schicht.

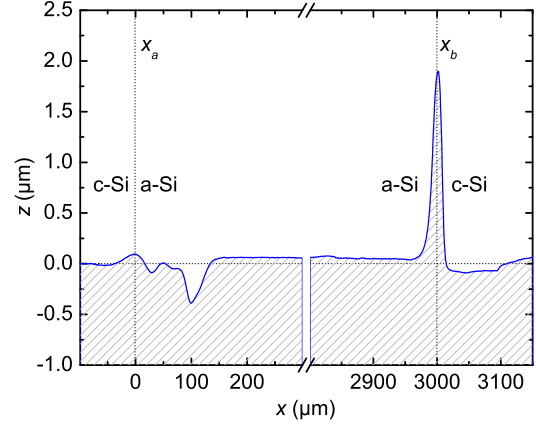


Abb. 4.17: Deformation am x -Randbereich. Dargestellt ist das mittels DEKTAK-Profilometer aufgenommene Höhenprofil $z(x)$ der Probenoberfläche einer a-Si Schicht am x_a -, bzw. x_b -Randbereich. Die Bestrahlungsbedingungen entsprechen denen aus Abb. 4.16.

4.3.2.3 Deformation am x -Randbereich

An den x -Randbereichen der bestrahlten a-Si Schichten wurde ebenfalls keine Deformation in y -Richtung nachgewiesen. Folglich verschwindet $v_y(x, z, t)$ für die verwendeten Bestrahlungsbedingungen und damit auch die Normalkomponente der Deformationsrate $\dot{\epsilon}_{yy}^s(x, z, t)$, sowie die Scherkomponenten $\dot{\epsilon}_{xy}^s(x, z, t)$ und $\dot{\epsilon}_{yz}^s(x, z, t)$. Das im Zentralbereich mit der homogenen stationären Schergeschwindigkeit $v_x(z) > 0$ auftretende plastische Fließen reduziert sich nun infolge der lateralen Begrenzungen entlang der Wirkungslinie zu $\underline{v}(x, z, t) = 0$ für den c-Si Bereich mit $x \leq x_a$, bzw. $x \geq x_b$. Demnach gilt für die Normalkomponente $\dot{\epsilon}_{xx}^s(x, z, t) > 0$ am x_a -Randbereich, bzw. $\dot{\epsilon}_{xx}^s(x, z, t) < 0$ am x_b -Randbereich. Die Deformationsgeschwindigkeit $v_x(x, z, t)$ enthält also an den x -Randbereichen sowohl Scher- als auch Dehnungsanteile.

Bleibe die Oberfläche planar, d.h. $v_z(x, z, t) = \dot{\epsilon}_{zz}^s(x, z, t) = 0$, würde das plastische Fließen an den x -Randbereichen zu einer stetigen Volumenänderung eines Massenelements führen, mit $\text{Sp}(\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(x, z, t)) > 0$ am x_a -Randbereich, bzw. $\text{Sp}(\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(x, z, t)) < 0$ am x_b -Randbereich, welche sich in einer stetigen Verringerung der atomaren Dichte am x_a -Randbereich, bzw. Erhöhung der atomaren Dichte am x_b -Randbereich äußern

E (MeV)	Ion	S_e (keV nm $^{-1}$)	$\Phi_0 t$ (cm $^{-2}$)	F_G (μm^2)	F_W (μm^2)	F_m (μm^2)
390	Xe	15.8	7.4×10^{15}	28	54	41
350	Au	18.8	1.7×10^{15}	26	32	29
600	Au	21.3	3.1×10^{15}	43	94	69

Tab. 4.2: Querschnitte der Gräben und Wälle am x -Randbereich nach Bestrahlung bei tiefen Temperaturen. Angegeben sind die integrierten Gesamt-Querschnitte der in den DEKTAK-Profilen sichtbaren Gräben F_G und Wälle F_W , sowie deren Mittelwert F_m , die unter schräger SHI-Bestrahlung bei $T_0 = 80 \text{ K}$ an den x -Randbereichen entstehen.

würde. Da jedoch ständig Materie in den bzw. aus dem Zentralbereich fließt, müsste die Dichte sukzessive in unrealistische Dimensionen vorstoßen, so dass die Probenoberfläche nicht planar bleiben kann. Der laterale Massentransport induziert daher über eine vertikale Deformationsgeschwindigkeit $v_z(x, z, t) \neq 0$, die ebenfalls Scher- und Dehnungsanteile enthält, eine Änderung der Geometrie der Probenoberfläche an den x -Randbereichen. In Abb. 4.17 ist ein Beispiel für ein aufgenommenes DEKTAK-Höhenprofil dargestellt, aus der diese von Gläsern bekannte vertikale Deformation sichtbar wird. An allen schräg bei $T_0 = 80$ K bestrahlten Proben wurde am x_a -Randbereich eine Formierung einer bzw. mehrerer Gräben und am x_b -Randbereich eine Formierung einer oder mehrerer Wälle nachgewiesen, deren Gesamt-Querschnitte und Mittelwerte in Tab. 4.2 aufgelistet sind. Da sich die Geometrie der Probenoberfläche bezüglich des Ionenstrahls ständig ändert, konnte auch kein stationärer Zustand beobachtet werden, vielmehr ändern sich die Formen, Höhen bzw. Tiefen, sowie Querschnitte der Gräben und Wälle mit der Fluenz. Da unter senkrechter Bestrahlung im Zentralbereich $v_x(z, t) = 0$ gilt, ist wie am y -Randbereich auch an den x -Randbereichen für Bestrahlungen mit $\Theta = 0^\circ$ keine Deformation nachweisbar, d.h. $\underline{\underline{\epsilon}}^s(x, z, t) = 0$. Folglich verhält sich a-Si unter SHI-Bestrahlung bei tiefen Temperaturen auch an den x -Randbereichen wie ein konventionelles Glas [84, 180, 181].

4.3.3 Bestrahlung bei Raumtemperatur

4.3.3.1 Deformation im Zentralbereich

Auch an allen mit $\Theta > 0^\circ$ bei $T_0 = 300$ K bestrahlten a-Si Proben wurde das plastische Fließen entlang der Wirkungslinie beobachtet [84, 180, 181]. Abbildung 4.18 zeigt eine Mikroskopaufnahme der Probenoberfläche einer bestrahlten a-Si Schicht, in der die homogene laterale Verschiebung $\Delta x(z = 0, t) > 0$ im Zentralbereich zu sehen ist.

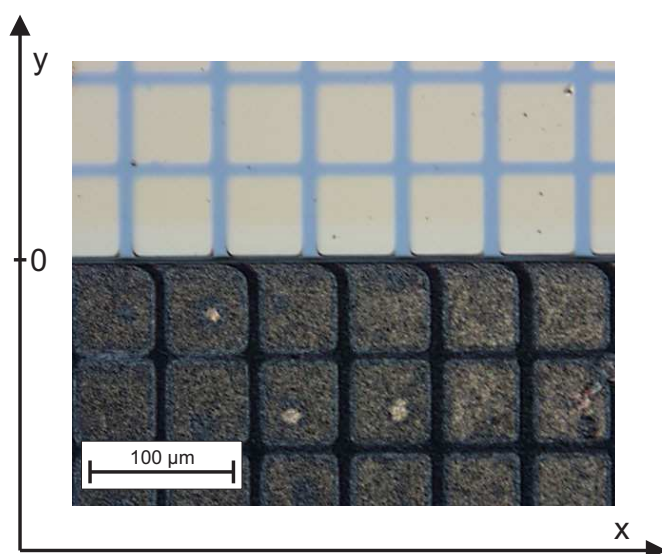


Abb. 4.18: Plastisches Fließen von a-Si unter Bestrahlung bei Raumtemperatur. Die Lichtmikroskopaufnahme zeigt die Probenoberfläche einer a-Si Schicht, die im Bereich $y < 0$ mit 600 MeV Au Ionen, Fluenz $\Phi_0 t = 2.6 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ und Einfallswinkel $\Theta = 45^\circ$ bei $T_0 = 300$ K bestrahlt wurde [84, 180, 181]. Die hellen Bereiche sind mit Au bedampft, diese werden jedoch mit zunehmender Fluenz immer dunkler. Der Gitterabstand beträgt $63 \mu\text{m}$.

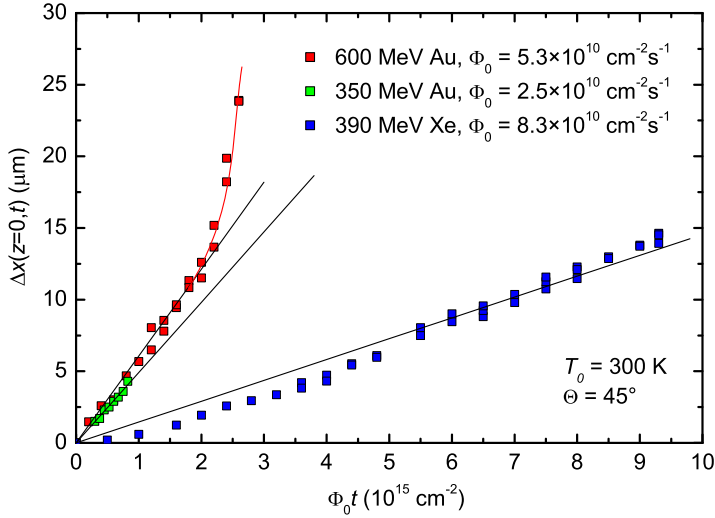


Abb. 4.19: Abhängigkeit der Verschiebung von der Fluenz bei Raumtemperatur. Dargestellt ist die Verschiebung $\Delta x(z = 0, t)$ von a-Si an der Probenoberfläche des Zentralbereichs als Funktion der Fluenz $\Phi_0 t$ für alle vorgenommenen schrägen Bestrahlungen bei $T_0 = 300 \text{ K}$ [84, 180, 181]. Die rote Linie ist willkürlich eingezeichnet, um das nichtlineare Verhalten herauszuheben.

Bemerkenswert ist jedoch, dass der ursprünglich gut reflektierende Bereich mit der dünnen Au-Schicht während der Bestrahlung immer rauer und dunkler wurde, so dass die Probenoberfläche zunehmend schlechter reflektierte. Die umgebende und homogen mit Au bedampfte c-Si Schicht zeigte erwartungsgemäß keine plastische Deformation und von einigen Au-Ablösungen abgesehen auch keine Veränderung an der Au-Schicht. An allen senkrecht bestrahlten a-Si und c-Si Proben wurde weder eine plastische Deformation, noch eine Veränderung der Au-Schicht beobachtet.

Zur Quantifizierung des plastischen Fließens bei $T_0 = 300 \text{ K}$ ist in Abb. 4.19 die an der Probenoberfläche des Zentralbereichs von a-Si gemessene Verschiebung $\Delta x(z = 0, t)$ als Funktion der Fluenz $\Phi_0 t$ dargestellt. Für die verwendeten Bestrahlungsbedingungen wurde eine lineare Abhängigkeit $\Delta x(z = 0, t) \propto \Phi_0 t$, und als Konsequenz eine stationäre Schergeschwindigkeit $v_x(z = 0) = \Phi_0 \partial/\partial(\Phi_0 t) (\Delta x(z = 0, t))$, nur für geringe Fluenzen bzw. für geringe Energieeinträge nachgewiesen. Die aus den Anstiegen der stationären Bereiche ermittelten Werte der Schergeschwindigkeit $v_x(z = 0) \sim \text{Å/s}$ sind in Tab. 4.3 in Abhängigkeit vom Energieeintrag S_e und Fluss Φ_0 aufgelistet.

Aus den gleichen Gründen wie für die Bestrahlungen bei $T_0 = 80 \text{ K}$ verschwinden auch für die Bestrahlungen bei $T_0 = 300 \text{ K}$ alle Komponenten der Deformationsrate $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}^s(z, t)}$ im Zentralbereich außer der Scherkomponente $\dot{\epsilon}_{xz}^s(z, t)$, die durch $v_x(z, t)$ bestimmt wird, und der Normalkomponente $\dot{\epsilon}_{zz}^s(z, t)$. Diese könnte über eine vertikale Dehnungsgeschwindigkeit $v_z(z, t)$ eine Volumenänderungsrate $\text{Sp}(\underline{\underline{\dot{\epsilon}}^s(z, t)}) \neq 0$ induzieren und sich in einer vertikalen Dehnung der a-Si Schicht äußern. Mittels DEKTAK-Profilometer-Messungen wurde sowohl an den a-Si Proben als auch an den c-Si Referenzproben eine strahlungsinduzierte vertikale Dehnung $\Delta z(t) > 0$ nachgewiesen. In den Energie- und Fluenzbereichen, in denen eine stationäre Schergeschwindigkeit $v_x(z = 0)$ vorliegt, stimmen allerdings die Werte von $\Delta z(t)$ der a-Si Proben mit denen der c-Si Proben überein. Wie für die Bestrahlungen bei $T_0 = 80 \text{ K}$ können diese gleichermaßen ausgeprägten vertikalen Dehnungen auf jene der amorphen Tiefenschicht zurück-

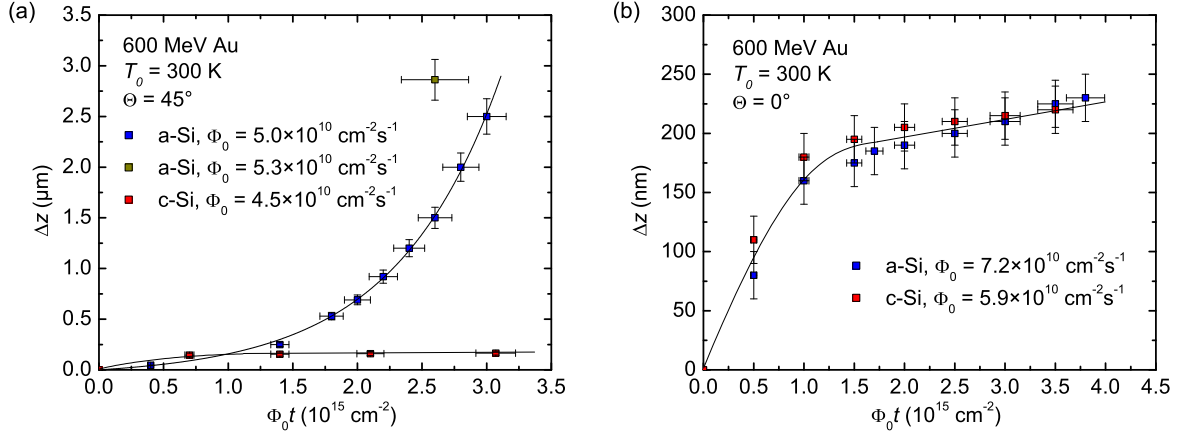


Abb. 4.20: Vertikale Dehnung nach SHI-Bestrahlung bei Raumtemperatur. Dargestellt ist die aus DEKTAK-Profilometer-Messungen ermittelte Stufenhöhe $\Delta z(t)$ der bestrahlten Probenoberfläche einer a-Si bzw. c-Si Probe bezogen auf den jeweils unbestrahlten Bereich als Funktion der Fluenz $\Phi_0 t$. Die Bestrahlungen fanden bei $T_0 = 300$ K mit 600 MeV Au Ionen unter $\Theta = 45^\circ$ (a), bzw. $\Theta = 0^\circ$ (b) statt. [181]. Zur besseren Veranschaulichung wurden die Daten interpoliert.

geführt werden, die infolge der Amorphisierung durch den nuklearen Energieeintrag und der damit verbundenen mechanisch eingeschränkten strukturellen Dichteverringern von $\Delta\rho/\rho = -1.8\%$ [107] induziert wird (vgl. Kap. 4.2.2). Die betrachteten a-Si Schichten weisen also im Einklang mit den Ergebnissen der IRR-Messungen (vgl. Kap. 4.2.3) keine vertikale Dehnung infolge der SHI-Bestrahlung auf, d.h. $\Delta z(t) = \varepsilon_{zz}^s(z, t) = 0$. Für die Bestrahlungen mit hohem elektronischen Energieeintrag wurde jedoch im Fluenzbereich, in dem die nichtlinear steigende Schergeschwindigkeit $v_x(z = 0, t)$ vorliegt, eine deutlich erhöhte und näherungsweise gemäß $\Delta z(t) \sim a[\exp(\Phi_0 t/b) - 1]$ mit $a \sim 66.02$ nm und $b \sim 8.18 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ exponentiell wachsende vertikale Dehnung beobachtet, die weit über die einer ähnlich bestrahlten c-Si Schicht hinausgeht (Abb. 4.20a). Analoge Bestrahlungen unter senkrechtem Ioneneinfall zeigten hingegen wieder eine Übereinstimmung der Stufenhöhen von a-Si und c-Si Schichten (Abb. 4.20b), welche als Konsequenz der Amorphisierung in der Tiefe entstehen (vgl. Kap. 4.2.2). So kann davon ausgegangen werden, dass die für Bestrahlungen mit $\Theta > 0^\circ$ auftretende vertikale Dehnung innerhalb der a-Si Schicht mit dem nichtlinearen plastischen Fließen und der Formierung einer porösen amorphen Schicht (vgl. Kap. 4.2.1) gekoppelt ist. Offensichtlich ist mit diesen Effekten auch eine Bewegung der Au Atome in die Tiefe verbun-

E (MeV)	Ion	S_e (keV nm $^{-1}$)	Φ_0 (cm $^{-2}$ s $^{-1}$)	$v_x(z = 0)$ (nm s $^{-1}$)
390	Xe	15.8	8.3×10^{10}	0.13
350	Au	18.8	2.5×10^{10}	0.12
600	Au	21.3	5.3×10^{10}	0.32

Tab. 4.3: Schergeschwindigkeit von a-Si bei Raumtemperatur. Angegeben sind die berechneten Werte der stationären Schergeschwindigkeit $v_x(z = 0)$ an der Probenoberfläche im Zentralbereich der a-Si Schicht für die bei $T_0 = 300$ K vorgenommenen schrägen Bestrahlungen.

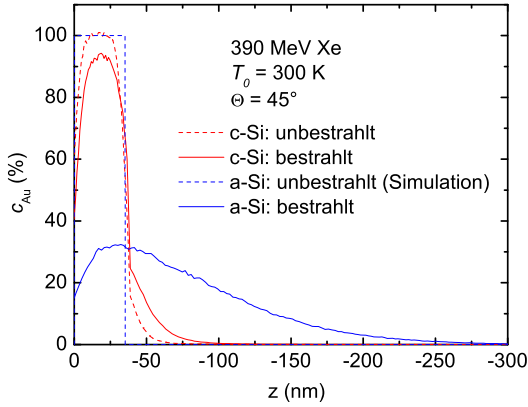


Abb. 4.21: Veränderung der Au-Schicht durch Bestrahlung bei Raumtemperatur. Dargestellt ist das aus RBS-Messungen ermittelte Konzentrationsprofil der aufgedampften dünnen Au-Schicht $c_{Au}(z)$ vor und nach einer schrägen Bestrahlung mit 390 MeV Xe Ionen, Fluenz $\Phi_0 t = 9.3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ unter $\Theta = 45^\circ$ bei $T_0 = 300 \text{ K}$. Die Integrale der Kurven sind gleich.

den, so dass die Probenoberfläche während der Bestrahlung dunkler wird (Abb. 4.18). Eine Auswertung der Kontraste der Mikroskopaufnahmen als Funktion der Fluenz zeigt, dass der Fluenzbereich, bei dem der Kontrast merklich abnahm, mit demjenigen, bei dem das Einsetzen des nichtlinearen plastischen Fließens aufgelöst werden konnte (Abb. 4.19), sowie mit demjenigen, bei dem die vertikale Dehnung von a-Si die von c-Si deutlich überwiegt (Abb. 4.20), gut übereinstimmt und mit $\Phi_0 t \sim (1 \dots 2) \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ angegeben werden kann. In Abb. 4.21 ist das aus RBS-Messungen ermittelte Tiefenprofil der ursprünglich an der Probenoberfläche befindlichen Au-Schicht nach einer Bestrahlung mit 390 MeV Xe Ionen dargestellt, für welche ebenfalls eine deutliche Au-Umverteilung in die Tiefe beobachtet wurde.

Zusammenfassend kann geschlussfolgert werden, dass sich a-Si unter SHI-Bestrahlung bei Raumtemperatur nur für geringe Fluenzen wie ein konventionelles Glas verhält. Die Formierung einer porösen amorphen Schicht mit nanokristallinen Einschlüssen für hohe Energieeinträge und hohe Fluenzen ist mit einer nichtstationären Schergeschwindigkeit $v_x(z, t)$ sowie einer nichtsättigenden vertikalen Dehnung $\Delta z(t)$ gekoppelt. Für eine Fluenz von $\Phi_0 t = 2.6 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ äußert sich diese in einer Volumenänderung von $\text{Sp}(\underline{\underline{\epsilon}}^s(z, t)) \sim \Delta z(t)/d_1 \sim 50 \%$. Die entstehenden Hohlräume begünstigen dabei eine Verlagerung der Atome der dünnen Au Oberflächenschicht in die Tiefe.

4.3.3.2 Deformation am y -Randbereich

Am y -Randbereich verhält sich a-Si unter Raumtemperatur-Bestrahlungen im Allgemeinen genau wie unter Bestrahlungen bei $T_0 = 80 \text{ K}$. Die Schergeschwindigkeit $v_x(y, z, t)$ reduziert sich kontinuierlich vom homogenen Wert $v_x(z, t)$ im Zentralbereich $y \ll 0$ auf $v_x(y, z, t) = 0$ im unbestrahlten Bereich $y \gg 0$ und bestimmt auf diese Weise die Scherkomponente der Deformationsrate $\dot{\epsilon}_{xz}^s(y, z, t)$. In Abb. 4.22a ist eine repräsentative Mikroskopaufnahme eines y -Randbereiches dargestellt, in dem das ortsabhängige reduzierte plastische Fließen deutlich erkennbar ist. Aus den gleichen Gründen wie für die Bestrahlungen bei $T_0 = 80 \text{ K}$ verschwinden auch für die Bestrahlungen bei $T_0 = 300 \text{ K}$ die Normalkomponenten $\dot{\epsilon}_{xx}^s(y, z, t)$, $\dot{\epsilon}_{yy}^s(y, z, t)$ und $\dot{\epsilon}_{zz}^s(y, z, t)$, sowie die

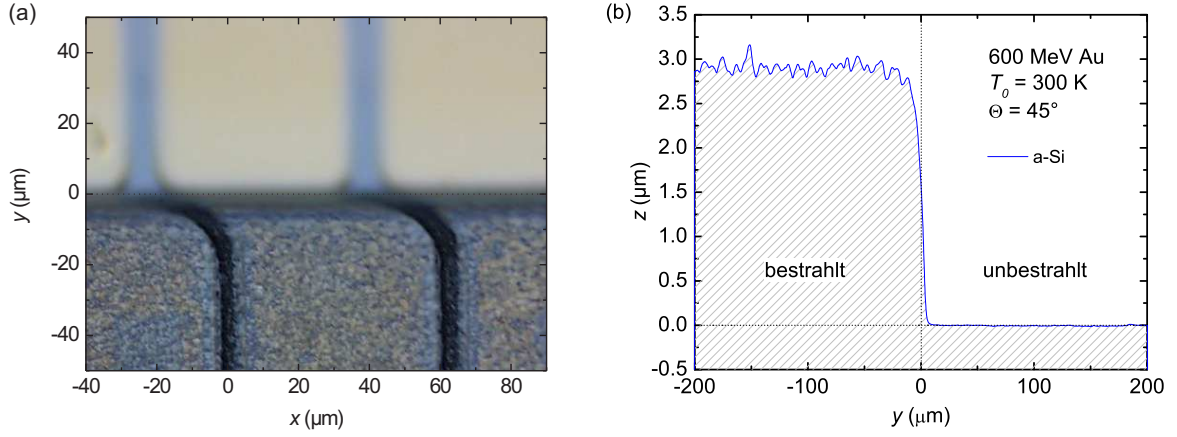


Abb. 4.22: Deformation am y -Randbereich. Die Mikroskopaufnahme (a) zeigt das ortsabhängige plastische Fließen und die DEKTAK-Messung (b) das Höhenprofil $z(y)$ einer mit 600 MeV Au Ionen, Fluenz $\Phi_0 t = 2.6 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ und Einfallswinkel $\Theta = 45^\circ$ bei $T_0 = 300 \text{ K}$ bestrahlten a-Si Probe.

Scherkomponenten $\dot{\epsilon}_{xy}^s(y, z, t)$ und $\dot{\epsilon}_{yz}^s(y, z, t)$. Lediglich im Energie- und Fluenzbereich, in dem im Zentralbereich eine nichtlinear steigende Schergeschwindigkeit $v_x(z, t)$ sowie eine vertikale Dehnungsgeschwindigkeit $v_z(z, t)$ vorliegt, wurde am y -Randbereich eine kontinuierlich von $v_z(z, t)$ im Zentralbereich auf $v_z(z, t) = 0$ im unbestrahlten Bereich abnehmende vertikale Dehnung der a-Si Schicht beobachtet, so dass $\dot{\epsilon}_{zz}^s(y, z, t) > 0$ und $\dot{\epsilon}_{zy}^s(y, z, t) > 0$ ortsabhängig werden. In Abb. 4.22b ist eine DEKTAK-Messung der Stufenhöhe $\Delta z(y, t)$ einer bestrahlten a-Si Probe dargestellt, die nach Abb. 4.20a deutlich größer ist, als die einer c-Si Referenzprobe, und somit die ortsabhängige vertikale Dehnung der a-Si Oberflächenschicht enthält.

4.3.3.3 Deformation am x -Randbereich

Die für Bestrahlungen mit $\Theta > 0^\circ$ bei $T_0 = 80 \text{ K}$ beobachtete Formierung von Gräben und Wällen an den x_a -, bzw. x_b -Randbereichen wurde auch für Bestrahlungen mit $\Theta > 0^\circ$ bei $T_0 = 300 \text{ K}$ nachgewiesen. In Abb. 4.23 ist das mittels DEKTAK-Messungen erhaltene Höhenprofil der Probenoberfläche für eine 390 MeV Xe Bestrahlung dargestellt, in der die Formierung eines einzigen Grabens, bzw. Walls deutlich sichtbar ist. Die integrierten Querschnitte der Gräben und Wälle aller vorgenommenen Bestrahlungen sind in Tab. 4.4 zusammengestellt. Für die 600 MeV Au Bestrahlungen, unter denen im Zentralbereich eine deutliche vertikale Dehnung

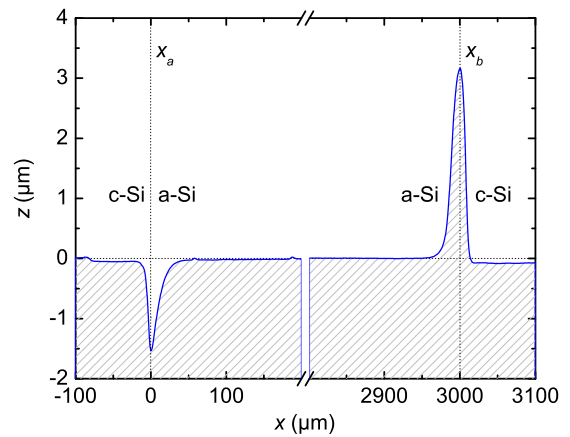


Abb. 4.23: Deformation am x -Randbereich. Dargestellt ist das mittels DEKTAK-Profilometer aufgenommene Höhenprofil $z(x)$ der Probenoberfläche einer a-Si Schicht am x_a -, bzw. x_b -Randbereich. Die Bestrahlungsbedingungen entsprechen denen aus Abb. 4.24.

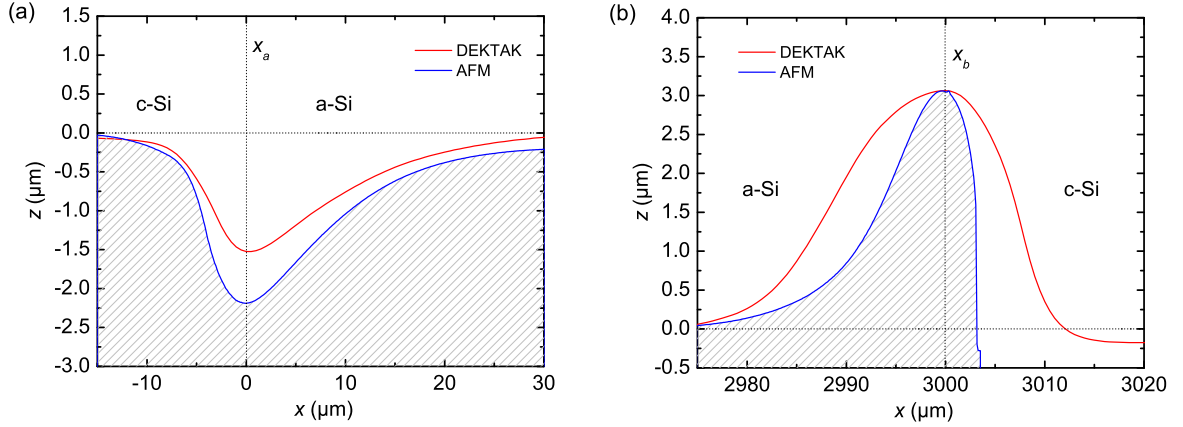


Abb. 4.24: Vergleich von DEKTAK-Messung und AFM-Messung. Dargestellt ist das mittels DEKTAK-Profilometer und AFM-Messung aufgenommene Höhenprofil $z(x)$ der Probenoberfläche einer a-Si Schicht am x_a -Randbereich (a), bzw. x_b -Randbereich (b). Die Probe wurde mit 390 MeV Au Ionen, Fluenz $\Phi_0 t = 9.3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ und Einfallswinkel $\Theta = 45^\circ$ bei $T_0 = 300 \text{ K}$ bestrahlt.

$v_z(z, t)$ entsteht, konnte keine Größe für den Graben ermittelt werden, da sich die durch $v_z(x, z, t)$ induzierte vertikale Dehnung am x_a -Randbereich mit der Grabenformierung überlappt. Für die 350 MeV Au Bestrahlungen existierte leider kein x_a -Randbereich der a-Si Schicht.

In Abb. 4.24 ist ein Vergleich der DEKTAK-Messung aus Abb. 4.23 mit entsprechenden AFM-Messungen dargestellt. Aufgrund der verbesserten Auflösung des AFM-Profilometers enthüllen diese Messungen einen exakteren Verlauf des Grabens bzw. Walls. Es ist daher davon auszugehen, dass die über eine Integration der DEKTAK-Kurven ermittelten Querschnitte der Gräben unterschätzt und die der Wälle überschätzt werden. Da das AFM-Profilometer aber lateral auf max. $50 \mu\text{m}$ Länge beschränkt ist, und das Laser-Profilometer nicht die notwendige Auflösung besitzt, kann der Mittelwert der aus den DEKTAK-Messungen abgeleiteten Querschnitte der Gräben und Wälle F_m sowohl für die Bestrahlungen bei $T_0 = 300 \text{ K}$ (Tab. 4.4) als auch für jene bei $T_0 = 80 \text{ K}$ (Tab. 4.2) als quantitatives Maß für die Charakterisierung der Wirkung der Deformationskomponenten $\dot{\epsilon}_{xx}^s(x, z, t)$, $\dot{\epsilon}_{xz}^s(x, z, t)$ und $\dot{\epsilon}_{zz}^s(x, z, t)$ dienen.

Für SHI-Bestrahlungen bei $T_0 = 300 \text{ K}$ verhält sich a-Si an den x -Randbereichen also genau wie für jene bei $T_0 = 80 \text{ K}$, d.h. in gleicher Weise wie ein konventionelles Glas.

E (MeV)	Ion	S_e (keV nm $^{-1}$)	$\Phi_0 t$ (cm $^{-2}$)	F_G (μm^2)	F_W (μm^2)	F_m (μm^2)
390	Xe	15.8	9.3×10^{15}	29	63	46
350	Au	18.8	0.8×10^{15}	-	12	(12)
600	Au	21.3	2.6×10^{15}	-	31	(31)

Tab. 4.4: Querschnitte der Gräben und Wälle am x -Randbereich bei Raumtemperatur. Angegeben sind die integrierten Gesamt-Querschnitte der Gräben F_G und Wälle F_W , sowie deren Mittelwert F_m , die unter schräger SHI-Bestrahlung bei $T_0 = 300 \text{ K}$ am x -Randbereich entstehen.

4.3.4 Vergleich mit einem Kronglas

4.3.4.1 Deformation im Zentralbereich

Die zum Vergleich durchgeführte Bestrahlung eines B270-Kronglases zeigte erwartungsgemäß das von allen Gläsern bekannte Verhalten. Wie bereits für a-Si beschrieben, verschwinden aus Symmetriegründen im Zentralbereich alle Komponenten der Deformationsrate $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(z, t)$ außer der Scherkomponente $\dot{\epsilon}_{xz}^s(z, t)$, die durch die Schergeschwindigkeit $v_x(z, t)$ repräsentiert wird, und der Normalkomponente $\dot{\epsilon}_{zz}^s(z, t)$, die über eine vertikale Dehnungsgeschwindigkeit $v_z(z, t)$ eine Volumenänderungsrate $\text{Sp}(\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(z, t)) \neq 0$ induzieren könnte. In Abb. 4.25 ist als Beispiel eine Mikroskopaufnahme dargestellt, in der die durch das homogene plastische Fließen hervorgerufene Verschiebung der Probenoberfläche $\Delta x(z = 0, t)$ ersichtlich ist. Aus der in Abb. 4.26 dargestellten linearen Abhängigkeit der Verschiebung $\Delta x(z = 0, t)$ von der Fluenz $\Phi_0 t$ folgt, dass das B270-Kronglas bei einer Bestrahlung mit einem Fluss von $\Phi_0 = 4.3 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ mit einer stationären Schergeschwindigkeit von $v_x(z = 0) \sim 14 \text{ nm/s}$ fließt, welche deutlich über der von a-Si liegt (vgl. Tab. 4.3). Für die Bestrahlung mit einer Fluenz von $\Phi_0 t = 1.0 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ wurde mittels DEKTAK-Messungen eine vertikale Dehnung von $\Delta z(t) \sim 300 \text{ nm}$ nachgewiesen. Da die projizierte Reichweite der Ionen $R_p \sim 40 \mu\text{m}$ beträgt [45], wodurch für die maximale Deformationstiefe $z_0 = -\xi_0 \cos \Theta \sim -R_p \cos \Theta \sim -28 \mu\text{m}$ folgt, entsteht durch $v_z(z, t)$ eine Volumenerhöhung von $\text{Sp}(\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(z, t)) \sim 1 \%$.

4.3.4.2 Deformation am y -Randbereich

Auch am y -Randbereich verhält sich das B270-Kronglas wie a-Si und alle konventionellen Gläser. Wie Abb. 4.25 zu entnehmen ist, wurde ein reduziertes stationäres plastisches Fließen mit einer ortsabhängigen Schergeschwindigkeit $v_x(y, z)$ beobachtet, welche kontinuierlich vom homogenen Wert $v_x(z)$ im Zentralbereich $y \ll 0$ auf

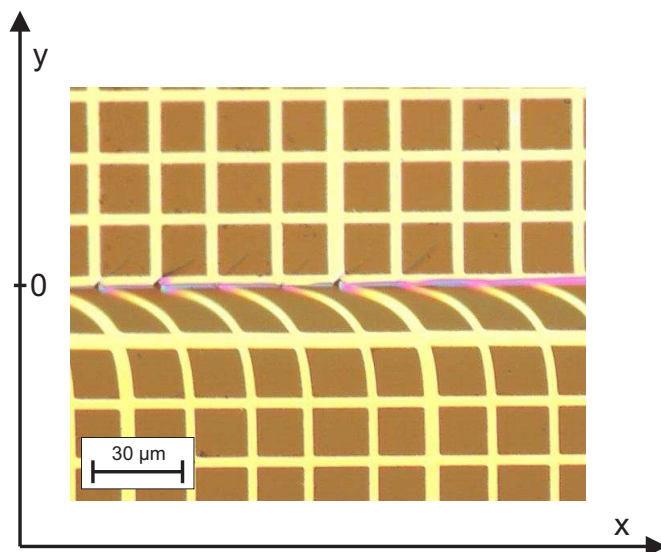


Abb. 4.25: Plastisches Fließen des B270-Kronglases bei Raumtemperatur. Die Lichtmikroskopaufnahme zeigt die Probenoberfläche eines B270-Kronglases, das im Bereich $y < 0$ mit 600 MeV Au Ionen, Fluenz $\Phi_0 t = 1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ und Einfallswinkel $\Theta = 45^\circ$ bei $T_0 = 300 \text{ K}$ bestrahlt wurde. Der Gitterabstand beträgt $20 \mu\text{m}$. Im Zentralbereich ($y \ll 0$) fließt das Glas homogen in die positive x -Richtung, und es zeigt am y -Randbereich eine reduzierte Verschiebung $\Delta x(y, z = 0, t)$ [84, 180, 181].

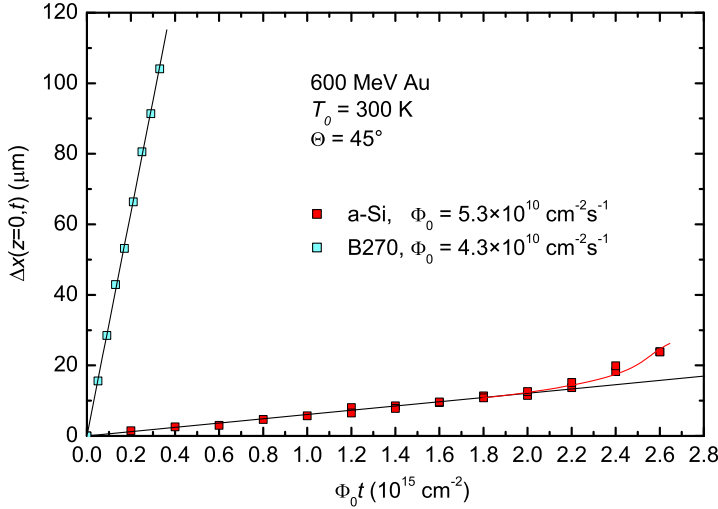


Abb. 4.26: Abhängigkeit der Verschiebung des B270-Kronglases von der Fluenz. Dargestellt ist die Verschiebung $\Delta x(z = 0, t)$ des B270-Kronglases an der Probenoberfläche des Zentralbereichs als Funktion der Fluenz $\Phi_0 t$ für alle vorgenommenen schrägen Bestrahlungen bei $T_0 = 300 \text{ K}$. Zum Vergleich sind die Daten für a-Si aus Abb. 4.19 mit eingezeichnet [180].

$v_x(y, z) = 0$ im unbestrahlten Bereich $y \gg 0$ abfällt. Entsprechend verhält sich auch die vertikale Dehnungsgeschwindigkeit $v_z(y, z, t)$.

4.3.4.3 Deformation am x -Randbereich

Aufgrund der geringen Probengröße wurden die B270-Kronglas-Schichten entlang der Wirkungslinie vollständig bestrahlt, so dass die lateralen Probenränder die x -Randbereiche darstellten und deshalb auftretende Deformationen nicht aufgelöst werden konnten.

4.3.5 Theoretische Beschreibung der Deformation

Im Folgenden werden die beobachteten Deformationserscheinungen im Rahmen des makroskopischen modifizierten viskoelastischen Maxwell-Modells der Gln. (2.21) bis (2.26) beschrieben. Die den Deformationszustand der amorphen Schicht $\underline{\underline{\varepsilon}}^s(x, y, z, t)$ charakterisierende Deformationsgeschwindigkeit $\underline{v}(x, y, z, t)$ wird unter Berücksichtigung der Rand- und Anfangsbedingungen für den Zentralbereich (Kap. 4.3.5.1) und den y -Randbereich (Kap. 4.3.5.3) hergeleitet, sowie deren Auswirkungen auf die x -Randbereiche (Kap. 4.3.5.4) diskutiert. Diese allgemeinen Lösungen werden jeweils mit den experimentellen Ergebnissen von a-Si und denen des B270-Kronglases verglichen. Zur Vereinfachung der theoretischen Beschreibung wird eine isotrope Fluidität angenommen, so dass der Tensor 4. Stufe $\underline{\underline{\underline{k}}}$ aus Gl. (2.24) durch einen Skalar k_0 ersetzt wird (vgl. Anhang B.1). Weiterhin wird $d/dt \sim \partial/\partial t$ angenommen, womit sich die Beschreibung auf kleine Deformationsgeschwindigkeiten $\underline{v}(x, y, z, t) \lesssim \text{nm/s}$ bezieht.

Als Basis für die Diskussion der Ergebnisse von a-Si (vgl. Kap. 5) im Rahmen des mikroskopischen viskoelastischen Modells zur ionenstrahlinduzierten Deformation nach Trinkaus [38–42], werden die Werte der Deformationsausbeute $A_0(S_e, T_0)$ von a-Si aus $\underline{v}(x, y, z, t)$ extrahiert (Kap. 4.3.5.2).

4.3.5.1 Deformation im Zentralbereich

Da die Probenoberfläche im Zentralbereich planar bleibt, gilt $\partial/\partial x = \partial/\partial y = 0$ und das Gleichungssystem der Gln. (2.21) bis (2.26) reduziert sich auf

$$0 = \frac{1}{2G} \frac{\partial}{\partial t} \left[\sigma_{xx}^s - \frac{\nu \hat{\sigma}^s}{\nu + 1} \right] + k_0 \Phi_0 \left[\sigma_{xx}^s - \frac{\hat{\sigma}^s}{3} \right] + A_0 \Phi_0 (1 - 3 \sin^2 \Theta), \quad (4.4)$$

$$0 = \frac{1}{2G} \frac{\partial}{\partial t} \left[\sigma_{yy}^s - \frac{\nu \hat{\sigma}^s}{\nu + 1} \right] + k_0 \Phi_0 \left[\sigma_{yy}^s - \frac{\hat{\sigma}^s}{3} \right] + A_0 \Phi_0, \quad (4.5)$$

$$\dot{\epsilon}_{zz}^s = \frac{1}{2G} \frac{\partial}{\partial t} \left[\sigma_{zz}^s - \frac{\nu \hat{\sigma}^s}{\nu + 1} \right] + k_0 \Phi_0 \left[\sigma_{zz}^s - \frac{\hat{\sigma}^s}{3} \right] + A_0 \Phi_0 (1 - 3 \cos^2 \Theta), \quad (4.6)$$

$$0 = \frac{1}{2G} \frac{\partial}{\partial t} \sigma_{xy}^s + k_0 \Phi_0 \sigma_{xy}^s, \quad (4.7)$$

$$\dot{\epsilon}_{xz}^s = \frac{1}{2G} \frac{\partial}{\partial t} \sigma_{xz}^s + k_0 \Phi_0 \sigma_{xz}^s + A_0 \Phi_0 3 \sin \Theta \cos \Theta, \quad (4.8)$$

$$\dot{\epsilon}_{yz}^s = \frac{1}{2G} \frac{\partial}{\partial t} \sigma_{yz}^s + k_0 \Phi_0 \sigma_{yz}^s, \quad (4.9)$$

$$0 = \frac{\partial \sigma_{xz}^s}{\partial z} = \frac{\partial \sigma_{yz}^s}{\partial z} = \frac{\partial \sigma_{zz}^s}{\partial z}, \quad (4.10)$$

wobei $\hat{\sigma}^s = \text{Sp}(\underline{\underline{\sigma}}^s)$ beschreibt. Da die Probenoberfläche ursprünglich spannungsfrei ist und während der Bestrahlung auch bleibt, gilt

$$\sigma_{xz}^s(z = 0, t) = \sigma_{yz}^s(z = 0, t) = \sigma_{zz}^s(z = 0, t) = 0. \quad (4.11)$$

Nach Gl. (4.10) gilt dies unabhängig von der Tiefe z und es folgt als Lösung

$$\sigma_{xz}^s(z, t) = \sigma_{yz}^s(z, t) = \sigma_{zz}^s(z, t) = 0. \quad (4.12)$$

Als Konsequenz verschwindet nach Gl. (4.9) die Scherkomponente

$$\dot{\epsilon}_{yz}^s(z, t) = 0. \quad (4.13)$$

Durch eine Eliminierung der Normalspannungen $\sigma_{xx}^s(z, t)$ und $\sigma_{yy}^s(z, t)$ in Gl. (4.6) mittels der Gln. (4.4) und (4.5) verbleiben daher als mögliche Deformationsraten infolge des mechanisch eingeschränkten Ionen-Hämmerungseffektes

$$\dot{\epsilon}_{zz}^s(z, t) = \Phi_0 \frac{1 - 2\nu}{1 - \nu} \left[2\beta_3 A_0(z) - \frac{2}{3} \sigma_0 k_0(z) \right] \exp\left(\frac{-t}{\tau_Y(z)}\right), \quad (4.14)$$

$$\dot{\epsilon}_{xz}^s(z, t) = A_0(z) \Phi_0 3 \sin \Theta \cos \Theta, \quad (4.15)$$

wobei $\beta_3 = \frac{1}{2}(1 - 3 \cos^2 \Theta)$ gilt, und der Spannungszustand $\underline{\underline{\sigma}}^s(z, t = 0)$ vor der Bestrahlung entweder durch die biaxialen planaren Spannungen $\sigma_{xx}^s(t = 0) = \sigma_{yy}^s(t = 0) \equiv \sigma_0$ (wie im Falle von a-Si) oder durch einen spannungsfreien Zustand $\underline{\underline{\sigma}}^s(z, t = 0) = 0$

(wie im Falle des B270-Kronglases) charakterisiert ist. Die Zeitkonstante $\tau_Y(z)$ gibt die zum Erreichen des Gleichgewichtszustandes von Ionen-Hämmern und viskosem Fließen charakteristische Fluenz $\Phi_0 \tau_Y(z) = 3/(Y k_0(z))$ an (vgl. Kap 4.4.4).

Nach Gl. (2.25) ergeben sich mit den Gln. (4.13), (4.14) und (4.15), sowie der Randbedingung $\underline{v}(z \leq -d_1, t) = 0$ für die Komponenten der Deformationsgeschwindigkeit

$$v_x(z, t) = \int_{z_0}^z A_0(z) 3\Phi_0 \sin 2\Theta \, dz, \quad (4.16)$$

$$v_y(z, t) = 0, \quad (4.17)$$

$$v_z(z, t) = \int_{z_0}^z \Phi_0 \frac{1-2\nu}{1-\nu} \left[2\beta_3 A_0(z) - \frac{2}{3}\sigma_0 k_0(z) \right] \exp\left(\frac{-t}{\tau_Y(z)}\right) dz. \quad (4.18)$$

Eine Überführung der Tiefenabhängigkeit der mikroskopischen Parameter A_0 und k_0 in deren Abhängigkeit vom elektronischen Energieeintrag $S_e(\xi)$ mit $z = -\xi \cos \Theta$ ergibt

$$v_x(z, t) = 3\Phi_0 \sin 2\Theta \cos \Theta \int_{-z/\cos \Theta}^{\xi_0} A_0(S_e(\xi)) \, d\xi, \quad (4.19)$$

$$v_y(z, t) = 0, \quad (4.20)$$

$$v_z(z, t) = \Phi_0 \frac{1-2\nu}{1-\nu} \cos \Theta \int_{-z/\cos \Theta}^{\xi_0} \left[2\beta_3 A_0(S_e(\xi)) - \frac{2}{3}\sigma_0 k_0(S_e(\xi)) \right] \exp\left(\frac{-t}{\tau_Y(S_e(\xi))}\right) d\xi. \quad (4.21)$$

Diese Lösungen stellen die theoretische Beschreibung der experimentell beobachteten Deformationen im Zentralbereich dar [180].

(A) Während senkrecht zur Wirkungslinie in y -Richtung keine Deformation auftritt, entsteht entlang der Wirkungslinie in x -Richtung eine lateral homogene Schergeschwindigkeit $v_x(z, t)$, die als plastisches Fließen sichtbar wird. Folglich entspricht Gl. (4.19) der bereits für Gläser abgeleiteten Beziehung (2.27), welche den Einfluss des Einfallswinkels Θ und den linearen Anstieg mit dem Fluss Φ_0 klar herausstellt.

(i) Sollte sich die Deformationslänge ξ_0 , bzw. die Deformationstiefe $z_0 = -\xi_0 \cos \Theta$, während der Bestrahlung nicht ändern, bleibt auch $v_x(z, t)$ von Beginn der Bestrahlung an konstant und es resultiert eine stationäre Schergeschwindigkeit $v_x(z)$. Da $v_x(z)$ unabhängig von der Vorspannung ist, gilt die Beziehung (4.19) sowohl für konventionelle Gläser als auch für a-Si. Eine weitere Vereinfachung ergibt sich für die a-Si Schichten mit $S_e \sim \text{const.}$,

$$v_x(z) = 3\Phi_0 \sin 2\Theta A_0(S_e) (z + d_1), \quad (4.22)$$

welche der Beziehung (2.28) für dünne konventionelle Gläser entspricht. Diese Lösung beschreibt somit das plastische Fließen von a-Si für Bestrahlungen bei tiefen Temperaturen, sowie bei Raumtemperatur mit kleinen Fluenzen, für die sowohl eine stationäre Schergeschwindigkeit (vgl. Kap. 4.3.2 und Kap. 4.3.3) als auch eine unveränderte

Schichtdicke (vgl. Kap. 4.2.3) beobachtet wurde. Offensichtlich ist $v_x(z)$ für den verwendeten Einfallswinkel von $\Theta = 45^\circ$ maximal und verschwindet für $\Theta = 0^\circ$. Nach Gl. (4.22) existiert weiterhin ein linearer Anstieg der Schergeschwindigkeit mit zunehmender Nähe zur Probenoberfläche von $v_x(z = -d_1) = 0$ an der Grenze zum unterliegenden c-Si Substrat zum Maximalwert $v_x(z = 0) = 3d_1\Phi_0 \sin 2\Theta A_0(S_e)$ an der Probenoberfläche. Als Konsequenz ergibt sich eine Verschiebung der a-Si Schicht von

$$\Delta x(z, t) = 3\Phi_0 t \sin 2\Theta A_0(S_e) (z + d_1). \quad (4.23)$$

(ii) Sollte sich hingegen die Deformationstiefe $z_0(t)$, bzw. die Dicke der a-Si Schicht $d_1(t)$, unter der Bestrahlung ändern, wäre $v_x(z, t)$ in Gl. (4.19) zeitabhängig und an die jeweils betrachtete Tiefe $z(t)$ gekoppelt. Folglich könnte sich kein stationärer Fall mehr ausbilden. Diese Erkenntnis deckt sich mit der beobachteten nichtlinearen Erhöhung von $v_x(z, t)$ für Bestrahlungen bei Raumtemperatur mit hohen Energieeinträgen und hohen Fluenzen (vgl. Kap. 4.3.3), die mit einer Erhöhung der Schichtdicke $d_1(t)$ verbunden sind. Um die Abhängigkeit $v_x(z, t)$ über Gl. (4.19) hinaus theoretisch beschreiben zu können, ist allerdings die Kenntnis der zeitlichen Änderung der Schichtdicke $d_1(t)$ notwendig, welche sich im Rahmen des vorliegenden Modells nur durch die vertikale Dehnungsgeschwindigkeit $v_z(z, t)$ nach Gl. (4.21) ergeben dürfte. Da diese jedoch nicht den experimentell beobachteten exponentiellen Anstieg aus Abb. 4.20a beschreiben kann (vgl. (B) unten), ist zur Beschreibung des nichtlinearen plastischen Fließens eine geeignete Erweiterung der konstitutiven Gl. (2.22) um eine Deformationsrate erforderlich, welche die Änderung der atomaren Struktur beinhaltet.

(B) Nach Gl. (4.21) ergibt sich in z -Richtung eine vertikale Dehnungsgeschwindigkeit $v_z(z, t)$, welche exponentiell mit der Zeitkonstanten τ_Y abnimmt. Als Konsequenz resultiert eine vertikale Dehnung der deformierten Schicht, die an der Probenoberfläche gegeben ist durch [180]

$$\Delta z(t) = \Phi_0 \frac{1 - 2\nu}{1 - \nu} \cos \Theta \int_0^{\xi_0} \left[2\beta_3 A_0(S_e(\xi)) - \frac{2}{3} \sigma_0 k_0(S_e(\xi)) \right] \tau_Y(S_e(\xi)) \left[1 - \exp\left(\frac{-t}{\tau_Y(S_e(\xi))}\right) \right] d\xi. \quad (4.24)$$

Während die Richtung von $\Delta z(t)$ allgemein von der Größe der Vorspannung σ_0 abhängt, zeigt sich für spannungsfreie amorphe Schichten mit $\sigma_0 = 0$, dass $\Delta z(t) > 0$ gilt für Bestrahlungen mit $\Theta \gtrsim 55^\circ$, bzw. $\Delta z(t) < 0$ gilt für jene mit $\Theta \lesssim 55^\circ$. Nach der charakteristischen Fluenz $\Phi_0 \tau_Y = 3/(Y k_0)$ ist $v_z(z, t) \rightarrow 0$ abgefallen und $\Delta z(t) \sim \text{const.}$ verharrt in einem stationären Zustand, welcher gegeben ist durch [180]

$$\Delta z = \Phi_0 \frac{1 - 2\nu}{1 - \nu} \cos \Theta \int_0^{\xi_0} \left[2\beta_3 A_0(S_e(\xi)) - \frac{2}{3} \sigma_0 k_0(S_e(\xi)) \right] \tau_Y(S_e(\xi)) d\xi. \quad (4.25)$$

Dieses komplizierte Integral lässt sich nur unter Kenntnis der Abhängigkeiten $A_0(S_e(\xi))$ und $k_0(S_e(\xi))$ auswerten. Eine Abschätzung der Größe von $\Delta z(t)$ soll hier dennoch gegeben werden. Im Rahmen des viskoelastischen Modells nach Trinkaus (vgl. Kap. 2.4.2) [38–42] ergeben sich mit den entsprechenden Materialeigenschaften und mit einem maximalen Radius der niederviskosen Zone von $R_{max} \sim 3$ nm nach Gl. (2.43) die Werte $k_0 \sim 0.8 \times 10^{-21} \text{ m}^2/\text{MPa}$ für a-Si, bzw. $k_0 \sim 1.1 \times 10^{-21} \text{ m}^2/\text{MPa}$ für das B270-Kronglas [180]. Als Konsequenz resultiert in beiden Fällen ein Wert für die charakteristische Fluenz von $\Phi_0\tau_Y \sim 0.8/\pi R_{max}^2 \sim 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ [180]. Es wird also deutlich, dass $\Phi_0\tau_Y$ in der Größenordnung der einfachen Überdeckung der Probenoberfläche mit Ionenspuren ist, und folglich $\Phi_0\tau_Y \sim B$ gilt. Für die vorgenommenen Bestrahlungen mit $\Phi_0 t \gg B$ müsste also immer ein stationärer Zustand $\Delta z \sim \text{const.}$ vorliegen.

Die Größe von Δz ergibt sich unter Verwendung der experimentell abgeleiteten Deformationsausbeuten $A_0(S_e(\xi))$ (vgl. Kap. 4.3.5.2) mit Gl. (4.25). Unter Berücksichtigung der Vorspannungen (vgl. Kap. 4.1.2) folgen Werte von $\Delta z \sim 10$ nm für a-Si und $\Delta z \sim -250$ nm für das B270-Kronglas [180]. Während diese theoretischen Werte für a-Si im Rahmen des Auflösungsvermögens mit den experimentellen Werten von $\Delta z < 50$ nm übereinstimmen, bestehen im Falle des B270-Kronglases geringe Abweichungen. Diese entstehen vermutlich durch sekundäre und nicht berücksichtigte Defektformierungsprozesse, welche nach der charakteristischen Fluenz von $\Phi_0\tau_Y$ in die Sättigung gehen. Offensichtlich ist also generell zur Beschreibung der Bestrahlungen bei Raumtemperatur die konstitutive Gl. (2.22) um eine Deformationsrate zu erweitern, welche die Änderung der atomaren Struktur beinhaltet.

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass das verwendete Modell zwar sehr gut die beobachteten Deformationen von a-Si im Zentralbereich für Bestrahlungen bei tiefen Temperaturen beschreibt, es jedoch für Bestrahlungen bei Raumtemperatur sowohl im Falle von a-Si als auch des B270-Kronglases für hohe Fluenzen an seine Grenzen stößt.

4.3.5.2 Deformationsausbeute

Für die Fluenzbereiche, für die im Zentralbereich des bestrahlten Gebietes eine stationäre Schergeschwindigkeit $v_x(z)$ ermittelt wurde (vgl. Abb. 4.14 und Abb. 4.19), konnte die Deformationsausbeute pro einfallendem Ion $A_0(S_e)$ nach Gl. (4.23) aus dem linearen Anstieg der Verschiebung der Probenoberfläche $\Delta x(z = 0, t)$ mit der Fluenz $\Phi_0 t$ berechnet werden. Die sich ergebenden Werte sind in Tab. 4.5 aufgelistet und in Abb. 4.27a als Funktion des elektronischen Energieeintrages S_e , bzw. in Abb. 4.27b als Funktion der Temperatur T_0 graphisch dargestellt [84, 180, 181]. Mit diesen Ergebnissen wurde gezeigt, dass sich a-Si unter SHI-Bestrahlung in gleicher Weise wie ein konventionelles Glas verhält. Während in Abb. 4.27a das in Gl. (2.16) beschriebene lineare Anwachsen von A_0 mit S_e oberhalb eines materialspezifischen Schwellwertes S_{e0} ,

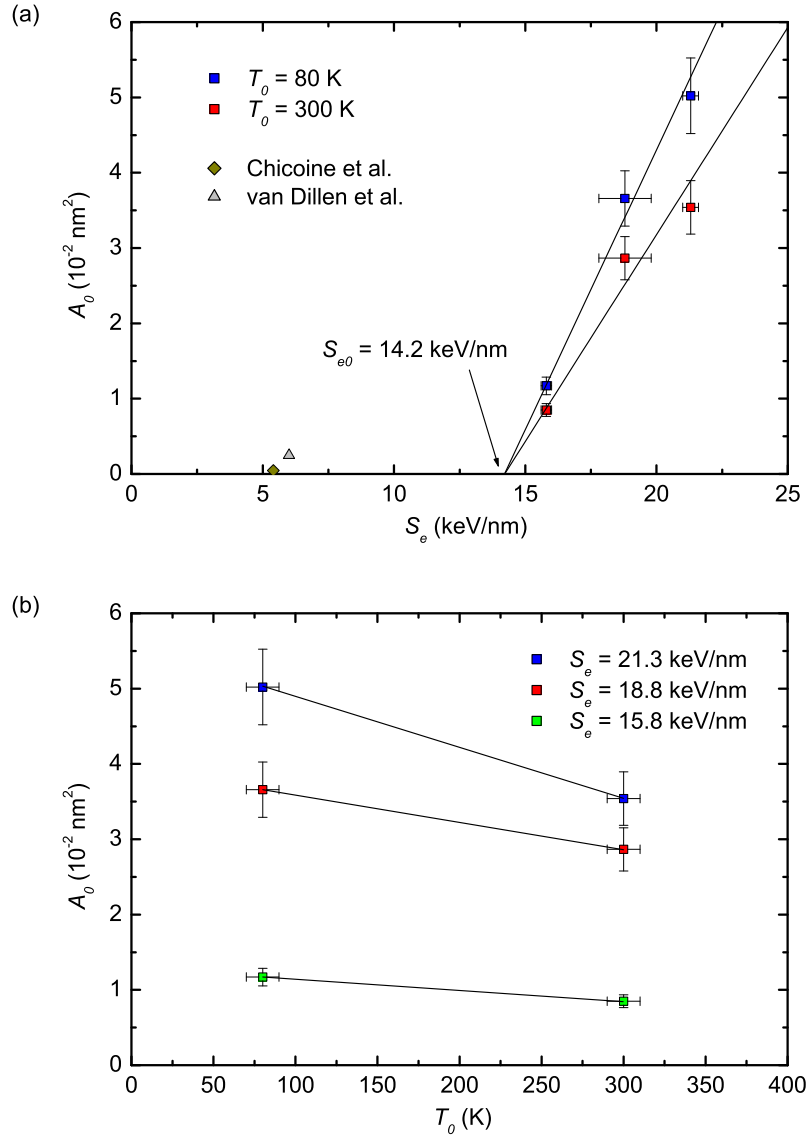


Abb. 4.27: Deformationsausbeute von a-Si in Abhängigkeit vom elektronischen Energieeintrag und von der Temperatur. Dargestellt ist die aus den Experimenten zum plastischen Fließen berechnete Deformationsausbeute A_0 von a-Si als Funktion des elektronischen Energieeintrags S_e (a), bzw. der Bestrahlungstemperatur T_0 (b). Die in (a) eingezeichneten linearen Extrapolationen der Kurven für $T_0 = 80 \text{ K}$ und $T_0 = 300 \text{ K}$ ergeben einen von der Temperatur T_0 unabhängigen Schwellwert für den Ionen-Hämmerungseffekt von $S_{e0} = 14.2 \text{ keV/nm}$ [84, 180, 181]. Die aus der Literatur bekannten Ergebnisse unterschwelliger Bestrahlungen sind ebenfalls eingezeichnet [22, 31]. Die Verbindungsgeraden in (b) wurden eingezeichnet, um den generellen Verlauf hervorzuheben [84, 180, 181].

$$A_0(S_e(\xi), T_0) = \alpha(T_0) (S_e(\xi) - S_{e0}) \quad \rightarrow \quad \alpha(T_0) = \frac{\partial}{\partial S_e(\xi)} A_0(S_e(\xi), T_0), \quad (4.26)$$

erkennbar ist, zeigt Abb. 4.27b auch für a-Si die an Gläsern nachgewiesene nahezu lineare Reduzierung von A_0 mit steigender Temperatur T_0 . Auch die Größenordnung des von der Temperatur unabhängigen Schwellwertes von a-Si von $S_{e0} = (14.2 \pm 0.5) \text{ keV/nm}$, sowie diejenige der Anstiege von $\alpha(T_0 = 80 \text{ K}) = (7.4 \pm 0.7) \times 10^{-3} \text{ nm}^3/\text{keV}$, bzw. von $\alpha(T_0 = 300 \text{ K}) = (5.5 \pm 0.6) \times 10^{-3} \text{ nm}^3/\text{keV}$, ist vergleichbar mit denen von Gläsern.

E (MeV)	Ion	S_e (keV nm $^{-1}$)	T_0 (K)	A_0 (10 $^{-2}$ nm 2)
390	Xe	15.8 \pm 0.2	80	1.17 \pm 0.12
390	Xe	15.8 \pm 0.2	300	0.85 \pm 0.09
350	Au	18.8 \pm 1.0	80	3.66 \pm 0.37
350	Au	18.8 \pm 1.0	300	2.87 \pm 0.29
600	Au	21.3 \pm 0.3	80	5.02 \pm 0.50
600	Au	21.3 \pm 0.3	300	3.54 \pm 0.36

Tab. 4.5: Berechnete Werte der Deformationsausbeute von a-Si. Angegeben sind die aus den Experimenten zum plastischen Fließen berechneten Werte der Deformationsausbeute A_0 von a-Si in Abhängigkeit vom elektronischen Energieeintrag S_e und der Bestrahlungstemperatur T_0 [84, 180, 181].

Für SiO $_2$ wurden z.B. $S_{e0} = 2.5$ keV/nm, $\alpha(T_0 = 80 \text{ K}) = 5.3 \times 10^{-3}$ nm 3 /keV, und für glasiges Pd $_{80}$ Si $_{20}$ $S_{e0} = 23$ keV/nm, $\alpha(T_0 = 80 \text{ K}) = 4.8 \times 10^{-2}$ nm 3 /keV ermittelt [16]. Die Abhängigkeit $A_0(S_e)$ des zum Vergleich bei $T_0 = 300$ K bestrahlten B270-Kronglases kann aus dessen linearem Anstieg der Verschiebung der Probenoberfläche $\Delta x(z = 0, t)$ mit der Fluenz $\Phi_0 t$ (vgl. Abb. 4.26) über die zeitlich integrierte Gl. (4.19) abgeschätzt werden. Aufgrund des hinsichtlich des plastischen Fließens gleichen Verhaltens des B270-Kronglases unter SHI-Bestrahlung wie das aller anderer bestrahlter Gläser ist anzunehmen, dass zwischen A_0 und S_e ebenfalls eine Linearität nach Gl. (4.26) besteht. Aufgrund des hohen Anteils an SiO $_2$ im B270-Kronglas kann davon ausgegangen werden, dass der Schwellwert S_{e0} sehr klein ist, so dass er vernachlässigt werden kann. Folglich verbleibt mit den Gln. (4.19) und (4.26) und der Ionenenergie E die Beziehung

$$\Delta x(z = 0, t) = 3\Phi_0 t E \sin 2\Theta \cos \Theta \alpha(T_0 = 300 \text{ K}), \quad (4.27)$$

aus welcher sich ein Anstieg von $\alpha(T_0 = 300 \text{ K}) \sim 2.6 \times 10^{-2}$ nm 3 /keV ergibt, der gegenüber dem von a-Si im Faktor 4 größer ist [180]. Mit der in Abb. 4.28 dargestellten, über ein Polynom 4. Grades interpolierten Abhängigkeit des elektronischen Energieverlustes von der Ionenweglänge $S_e(\xi)$ [45] würde an der Probenoberfläche des B270-Kronglases nach Gl. (4.26) ein Wert für die Deformationsausbeute von $A_0(S_e(\xi = 0)) \sim 61.8 \times 10^{-2}$ nm 2 vorliegen. Diese ist im Vergleich zu dem entsprechenden Wert von a-Si (vgl. Tab. 4.5) um eine Größenordnung höher und erklärt somit den deutlichen Unterschied zwischen den im Zentralbereich beobachteten stationären Schergeschwindigkeiten $v_x(z = 0)$ (vgl. Abb. 4.26).

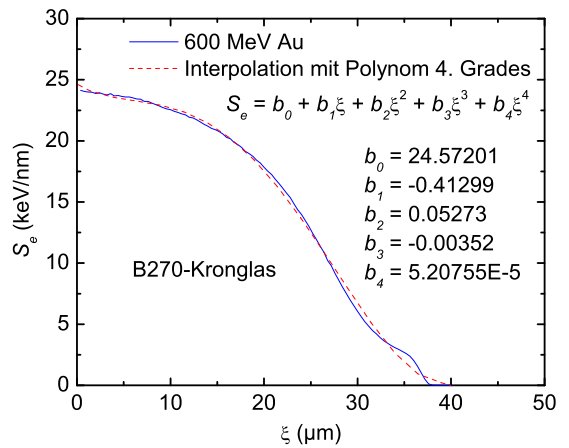


Abb. 4.28: Elektronischer Energieverlust des B270-Kronglases. Dargestellt ist der elektronische Energieverlust S_e des B270-Kronglases als Funktion der Ionenweglänge ξ , sowie die Interpolation der Werte über ein Polynom 4. Grades [45].

4.3.5.3 Deformation am y -Randbereich

Im Rahmen des vorliegenden Modells der Gln. (2.21) bis (2.26) lassen sich auch die im stationären Fluenzbereich beobachteten Deformationen am y -Randbereich beschreiben. Da im Zentralbereich das stationäre Gleichgewicht von Ionen-Hämmern und viskosem Fließen bereits nach einer Fluenz von $\Phi_0\tau_Y \sim 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ erreicht wird, kann direkt nach Lösungen für $\Phi(y)t \gg \Phi(y)\tau_Y$ gesucht werden. Somit verschwinden alle elastischen Terme mit $\partial/\partial t$ und weiterhin aus Symmetriegründen alle Terme mit $\partial/\partial x$, so dass sich das Gleichungssystem reduziert sich auf

$$0 = k_0\Phi \left[\sigma_{xx}^s - \frac{\hat{\sigma}^s}{3} \right] + A_0\Phi (1 - 3 \sin^2 \Theta), \quad (4.28)$$

$$\dot{\epsilon}_{yy}^s = k_0\Phi \left[\sigma_{yy}^s - \frac{\hat{\sigma}^s}{3} \right] + A_0\Phi, \quad (4.29)$$

$$\dot{\epsilon}_{zz}^s = k_0\Phi \left[\sigma_{zz}^s - \frac{\hat{\sigma}^s}{3} \right] + A_0\Phi (1 - 3 \cos^2 \Theta), \quad (4.30)$$

$$\dot{\epsilon}_{xy}^s = k_0\Phi \sigma_{xy}^s, \quad (4.31)$$

$$\dot{\epsilon}_{xz}^s = k_0\Phi \sigma_{xz}^s + A_0\Phi 3 \sin \Theta \cos \Theta, \quad (4.32)$$

$$\dot{\epsilon}_{yz}^s = k_0\Phi \sigma_{yz}^s \quad (4.33)$$

$$0 = \frac{\partial \sigma_{xy}^s}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xz}^s}{\partial z}, \quad (4.34)$$

$$0 = \frac{\partial \sigma_{yy}^s}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{yz}^s}{\partial z}, \quad (4.35)$$

$$0 = \frac{\partial \sigma_{yz}^s}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}^s}{\partial z}. \quad (4.36)$$

Mit den Gln. (4.28) bis (4.30) folgt $\text{Sp}(\underline{\underline{\epsilon}}^s) = \text{div } \underline{v} = 0$. Sollte am y -Randbereich eine Deformationsgeschwindigkeit $v_y(y, z, t) \neq 0$ senkrecht zur Wirkungslinie auftreten, müsste daher ebenfalls eine Deformationsgeschwindigkeit in z -Richtung $v_z(y, z, t) \neq 0$ existieren. Dies würde zur Formierung einer Graben- oder Wallstruktur führen, die Probenoberfläche wäre also nicht mehr planar und die spannungsfreie Oberfläche änderte ständig ihre Geometrie. Es könnte sich somit kein stationärer Gleichgewichtszustand ausbilden. Die Suche nach einem solchen Zustand ist also mit der Bedingung $v_y(y, z, t) = v_z(y, z, t) = 0$ verknüpft, was auch in den Experimenten beobachtet wurde. Als Konsequenz ergeben sich unmittelbar die Lösungen

$$\dot{\epsilon}_{yy}^s(y, z, t) = \dot{\epsilon}_{zz}^s(y, z, t) = \dot{\epsilon}_{yz}^s(y, z, t) = 0, \quad (4.37)$$

sowie eine stationäre ortsabhängige Schergeschwindigkeit entlang der Wirkungslinie $v_x(y, z) \neq 0$, welche Scheranteile sowohl in y -, als auch in z -Richtung enthält, und daher zu $\dot{\epsilon}_{xy}^s(y, z) \neq 0$ und $\dot{\epsilon}_{xz}^s(y, z) \neq 0$ führt. Eine Beziehung für $v_x(y, z)$ kann durch die Eliminierung der Scherspannungen σ_{xy}^s und σ_{xz}^s in Gl. (4.34) mittels der Gln. (4.31)

und (4.32) ermittelt werden. Somit ergibt sich die Differentialgleichung

$$0 = \frac{\partial^2}{\partial y^2} v_x(y, z) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} v_x(y, z) + \lambda(y) \frac{\partial}{\partial y} v_x(y, z) + \mu(z) \frac{\partial}{\partial z} v_x(y, z). \quad (4.38)$$

Der Koeffizient $\lambda(y)$ wird dabei durch die Größe des Flusses $\Phi(y)$ bestimmt,

$$\lambda(y) = -\frac{1}{\Phi(y)} \frac{\partial \Phi(y)}{\partial y}. \quad (4.39)$$

In einer ersten Näherung kann $\Phi(y)$ durch die in Abb. 4.29 dargestellte Funktion

$$\Phi(y) = \frac{\Phi_0}{2} \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{4y}{\Gamma} \right) \right] \quad (4.40)$$

modelliert werden, wobei Γ die Übergangsbreite vom homogen bestrahlten Zentralbereich $y \ll 0$ zum unbestrahlten Bereich $y \gg 0$ angibt. Die Fehlerfunktion (erf) beinhaltet sowohl Ionenstreuungen an der verstellbaren Blende, als auch geringe Positionsänderungen der Blende selbst, sowie evtl. Drifteffekte des Ionenstrahls, die mit einer Änderung des Einfallswinkels Θ verbunden sind. Mit den experimentellen Gegebenheiten des Beschleunigersystems gilt $\Gamma \lesssim 50 \mu\text{m}$.

Der Koeffizient $\mu(z)$ in Gl. (4.38) hingegen beschreibt den Einfluss des elektronischen Energieeintrags $S_e(\xi)$ in der Form $S_e(z)$. Im Rahmen des viskoelastischen Modells nach Trinkaus [38–42] müsste $k_0(S_e)$ nach Gl. (2.43) ebenso wie auch $A(S_e)$ für $S_e \gg S_{e0}$ nach Gl. (4.26) linear mit S_e anwachsen, so dass sich ergibt

$$\mu(z) = -\frac{1}{k_0(z)} \frac{\partial k_0(z)}{\partial z} = -\frac{1}{A_0(z)} \frac{\partial A_0(z)}{\partial z} = -\frac{1}{S_e(z)} \frac{\partial S_e(z)}{\partial z}. \quad (4.41)$$

(A) Lösung für dünne amorphe Oberflächenschichten

In dünnen amorphen Schichten gilt $S_e(\xi) \sim \text{const.}$, so dass nach Gl. (4.41) $\mu(z) = 0$ folgt. Im Idealfall einer perfekten Blende mit Übergangsbreite $\Gamma = 0$ verschwindet nach den Gln. (4.39) und (4.40) auch $\lambda(y)$, so dass sich Gl. (4.38) zu einer Laplace-Gleichung reduziert,

$$0 = \frac{\partial^2}{\partial y^2} v_x(y, z) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} v_x(y, z). \quad (4.42)$$

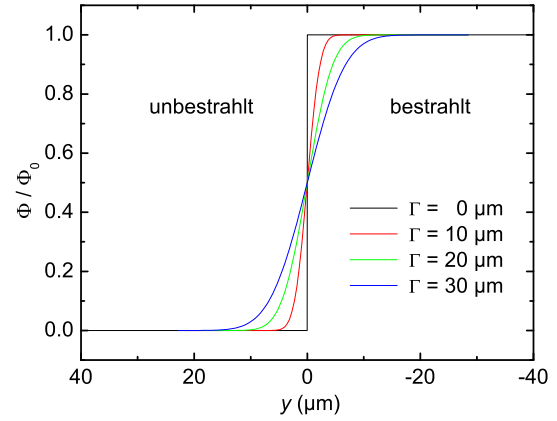


Abb. 4.29: Fluss am y -Randbereich. Dargestellt ist der modellierte Fluss am y -Randbereich für unterschiedliche Werte der Übergangsbreite Γ vom bestrahlten zum unbestrahlten Gebiet.

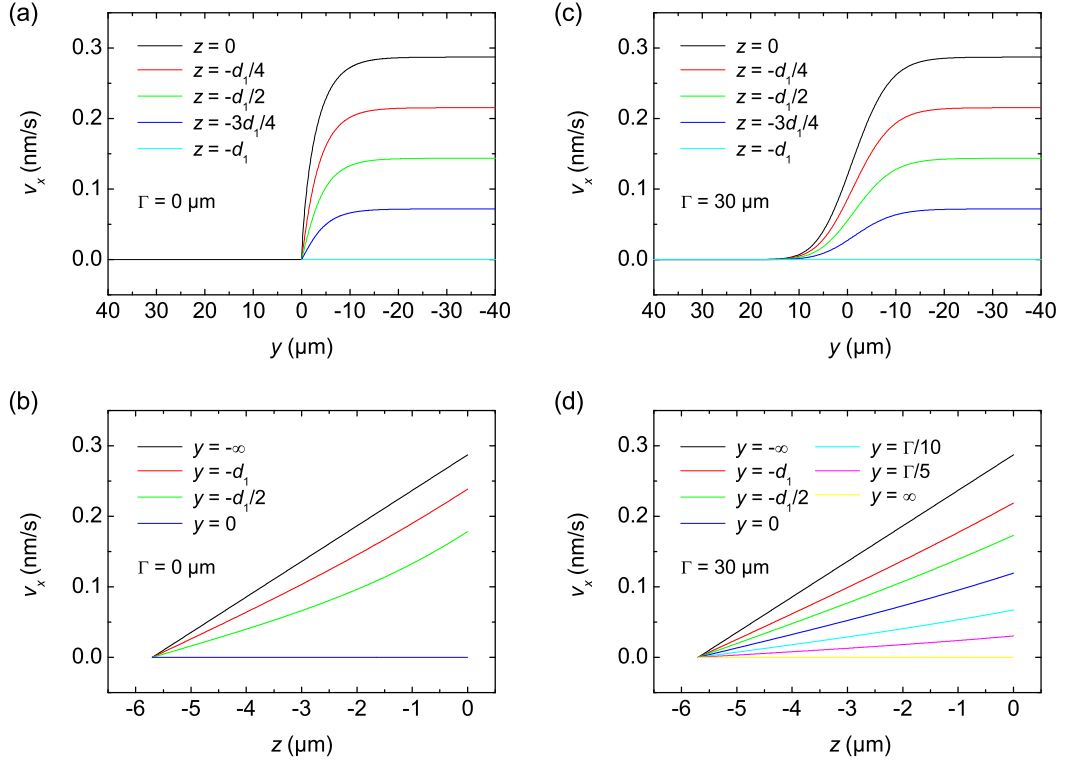


Abb. 4.30: Stationäre Schergeschwindigkeit von a-Si am y -Randbereich. Dargestellt ist die Lösung für die stationäre Schergeschwindigkeit $v_x(y, z)$ am y -Randbereich mit einer Übergangsbreite von $\Gamma = 0 \mu\text{m}$ (a) und (b), bzw. von $\Gamma = 30 \mu\text{m}$ (c) und (d). Die Kurven in (a) und (c) zeigen die Abhängigkeit $v_x(y)$ für konstante Tiefen z , jene in (b) und (d) die Abhängigkeit $v_x(z)$ für konstante Werte y . Die Berechnungen erfolgten für eine 350 MeV Au Ionenbestrahlung der $d_1 = 5.71 \mu\text{m}$ dicken a-Si Schichten mit Fluss $\Phi_0 = 4.6 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ und Einfallswinkel $\Theta = 45^\circ$ bei $T_0 = 80 \text{ K}$ [180].

Die Randbedingungen zur Lösung dieser Gleichung sind einerseits gegeben durch eine spannungsfreie planare Probenoberfläche und andererseits durch das Verschwinden von $v_x(y, z)$ im unbestrahlten Bereich sowie im c-Si Substrat, so dass folgt

$$\begin{aligned}
 y \geq 0 : \quad v_x &= 0, \\
 y \rightarrow -\infty : \quad v_x &= v_x^c, \\
 z = -d_1 : \quad v_x &= 0, \\
 z = 0 : \quad \sigma_{xz}^s &= \sigma_{yz}^s = \sigma_{zz}^s = 0,
 \end{aligned} \tag{4.43}$$

wobei $v_x^c(z) = \kappa(z + d_1)$ mit $\kappa = 3A_0\Phi_0 \sin 2\Theta$ die Lösung von $v_x(z)$ im Zentralbereich entsprechend Gl. (4.22) bezeichnet. Die Bedingung an $z = 0$ lässt sich dabei mittels Gl. (4.32) umformen in $\partial v_x / \partial z = \kappa$. Dies führt zu der analytischen Lösung [180]

$$v_x(y, z) = v_x^c(z) + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos(b_n z) \exp(b_n y), \tag{4.44}$$

mit den Koeffizienten

$$a_n = \frac{-2\kappa}{b_n^2 d_1}, \quad b_n = (2n - 1) \frac{\pi}{2d_1}. \tag{4.45}$$

In den Abbn. 4.30a und 4.30b ist diese Lösung für die bei $T_0 = 80$ K mit dem Fluss $\Phi_0 = 4.6 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ und Einfallswinkel $\Theta = 45^\circ$ vorgenommenen 350 MeV Au Bestrahlungen der $d_1 = 5.71 \mu\text{m}$ dicken a-Si Schichten dargestellt, wobei Abb. 4.30a die funktionale Abhängigkeit $v_x(y)$ für konstante Werte z und Abb. 4.30b die Abhängigkeit $v_x(z)$ für konstante Werte y zeigt. Der entsprechende Wert der Deformationsausbeute $A_0(S_e, T_0)$ stammt aus Tab. 4.5. Die experimentell ermittelte und in Tab. 4.1 aufgelistete stationäre Schergeschwindigkeit an der Probenoberfläche im Zentralbereich von $v_x(y, z = 0) \sim 3 \text{ \AA/s}$ wurde durch die Lösung reproduziert und deren kontinuierliche Abnahme auf $v_x = 0$ am y -Randbereich analytisch beschrieben. Die Lösungen zeigen weiterhin, dass dieses Übergangsgebiet nur eine Breite von $\Gamma_y \lesssim 5d_1$ hat [180]. Die zeitliche Integration der Gl. (4.44) ergibt die Verschiebung $\Delta x(y, z, t)$, welche an der Probenoberfläche gegeben ist durch

$$\Delta x(y, z = 0, t) = \Delta x^c(z = 0, t) + \sum_{n=1}^{\infty} c_n(t) \exp(b_n y), \quad (4.46)$$

wobei $\Delta x^c(z = 0, t) = v_x^c(z = 0)t = \kappa t d$ die Lösung im Zentralbereich entsprechend Gl. (4.23) angibt und der Koeffizient $c_n(t)$ gegeben ist durch

$$c_n(t) = a_n t = \frac{-2\Delta x^c(z = 0, t)}{b_n^2 d_1^2}. \quad (4.47)$$

In Abb. 4.31 ist die sich nach Gl. (4.46) an der Probenoberfläche ergebende Verschiebung $\Delta x(y, z = 0, t)$ für die Bestrahlungsbedingungen von Abb. 4.30 und die im Experiment verwendete Fluenz $\Phi_0 t = 1.65 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ als schwarze Linie dargestellt. Diese Lösung wurde in Abb. 4.32a über eine Mikroskopaufnahme gelegt, welche nach der entsprechenden Bestrahlung angefertigt wurde. Es ist deutlich erkennbar, dass die in Gl. (4.46) allgemein und unabhängig vom Material abgeleitete Lösung das beobachtete plastische Fließen der a-Si Schichten in sehr guter Weise beschreibt. Die bestehende Diskrepanz kann sowohl durch die unbekannt Position der Grenzlinie $y = 0$ als auch durch die idealisierte Blendenunschärfe $\Gamma = 0$ erklärt werden.

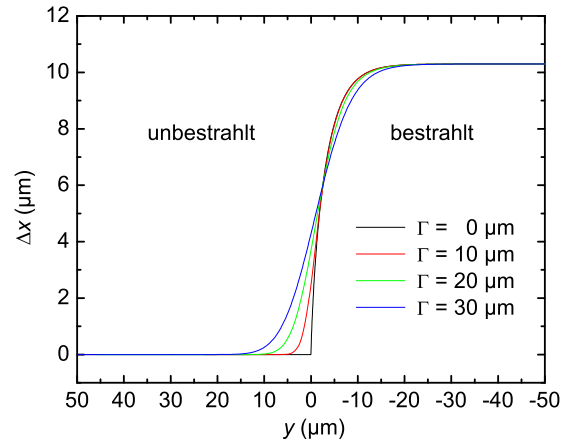


Abb. 4.31: Verschiebung von a-Si an der Probenoberfläche am y -Randbereich. Dargestellt sind die Lösungen für die Verschiebung $\Delta x(y, z = 0, t)$ am y -Randbereich für verschiedene Übergangsbreiten Γ . Die zugrundeliegenden Bestrahlungsbedingungen entsprechen denen aus Abb. 4.30, die Fluenz beträgt $\Phi_0 t = 1.65 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ [180].

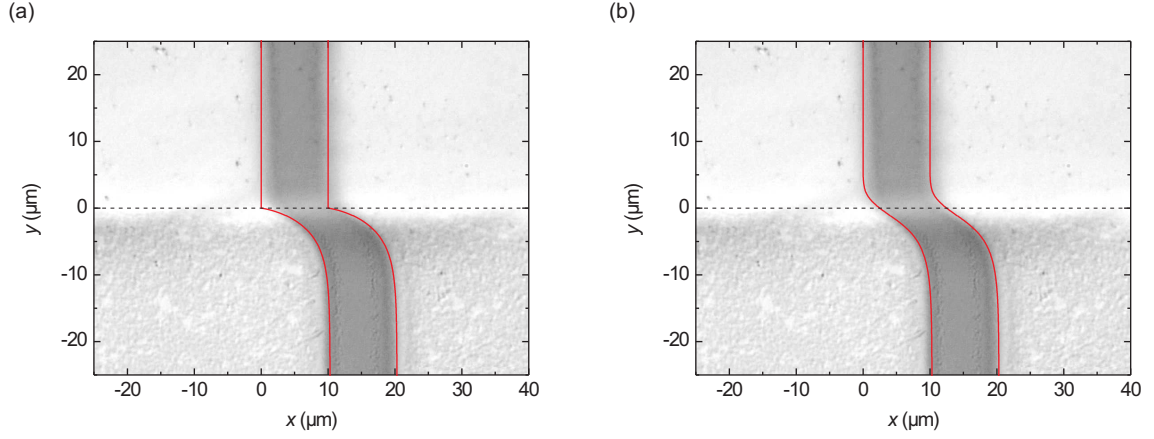


Abb. 4.32: Vergleich der berechneten Verschiebung von a-Si mit dem Experiment. Die Abbildungen zeigen einen Vergleich der in Abb. 4.31 dargestellten Lösungen für die Verschiebung $\Delta x(y, z = 0, t)$ von a-Si am y -Randbereich für eine Übergangsbreite von $\Gamma = 0 \mu\text{m}$ (a), bzw. von $\Gamma = 10 \mu\text{m}$ (b), mit einer und derselben Mikroskopaufnahme der entsprechenden Bestrahlung. $y = 0$ wurde so gewählt, dass optimale Übereinstimmung vorliegt, $x = 0$ dagegen willkürlich festgelegt [180].

Der realistischere Fall beinhaltet eine endliche Übergangsbreite $\Gamma > 0$. Als Konsequenz muss $\lambda(y)$ nach Gl. (4.39) berücksichtigt werden und Gl. (4.38) reduziert sich auf

$$0 = \frac{\partial^2}{\partial y^2} v_x(y, z) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} v_x(y, z) + \lambda(y) \frac{\partial}{\partial y} v_x(y, z), \quad (4.48)$$

mit den leicht veränderten Randbedingungen

$$\begin{aligned} y \rightarrow \infty : \quad v_x &= 0, \\ y \rightarrow -\infty : \quad v_x &= v_x^c, \\ z = -d_1 : \quad v_x &= 0, \\ z = 0 : \quad \sigma_{xz}^s &= 0. \end{aligned} \quad (4.49)$$

Die Gl. (4.48) kann in eine Ricatti-Differentialgleichung transformiert werden, im Rahmen dieser Arbeit wurde jedoch keine analytische Lösung gefunden. Deshalb wurde Gl. (4.48) numerisch mit Hilfe des Finite-Elemente-Programms "Macsyma PDEase 2D" gelöst. Die Verlässlichkeit des Programmcodes wurde dabei zunächst für den Fall $\Gamma = 0$ geprüft, wobei die erhaltene numerische Lösung für $v_x(y, z)$ mit der analytischen Lösung aus Gl. (4.44) übereinstimmte. Die für $\Gamma = 30 \mu\text{m}$ und die Bestrahlungsbedingungen aus Abb. 4.30 erhaltene numerische Lösung für $v_x(y, z)$ ist zum Vergleich in Abb. 4.30c als Abhängigkeit $v_x(y)$ für konstante Werte z und in Abb. 4.30d als Abhängigkeit $v_x(z)$ für konstante Werte y dargestellt. In Abb. 4.31 wurden die sich mit einer Fluenz von $\Phi_0 t = 1.65 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ entsprechend ergebenden Verschiebungen an der Probenoberfläche $\Delta x(y, z = 0, t)$ für verschiedene Werte $\Gamma > 0$ mit eingezeichnet. Es ist ersichtlich, dass sich die Übergangsbreite Γ_y von $\Delta x(z)$ im Zentralbereich zu $\Delta x = 0$ im unbestrahlten Bereich nicht dramatisch ändert, selbst wenn ein Wert von $\Gamma = 6d_1$

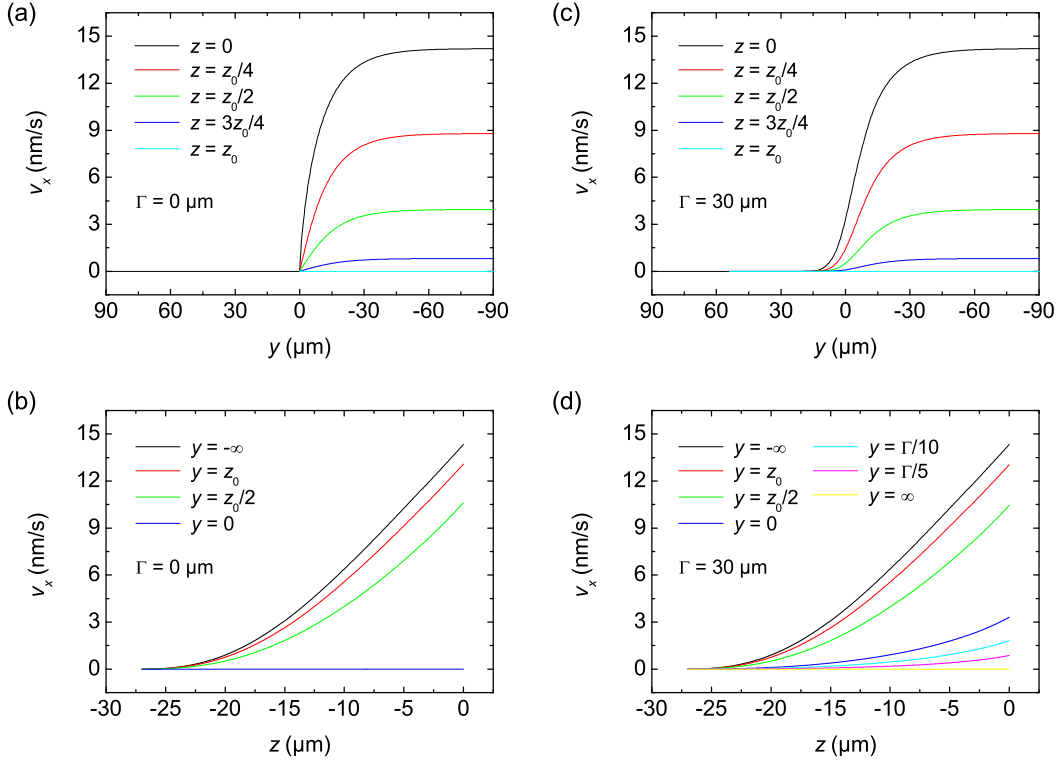


Abb. 4.33: Stationäre Schergeschwindigkeit des B270-Kronglases am y -Randbereich. Dargestellt ist die Lösung für die stationäre Schergeschwindigkeit $v_x(y, z)$ am y -Randbereich mit einer Übergangsbreite von $\Gamma = 0 \mu\text{m}$ (a) und (b), bzw. von $\Gamma = 30 \mu\text{m}$ (c) und (d). Die Kurven in (a) und (c) zeigen die Abhängigkeit $v_x(y)$ für konstante Tiefen z , jene in (b) und (d) die Abhängigkeit $v_x(z)$ für konstante Werte y . Die Berechnungen erfolgten für eine 600 MeV Au Ionenbestrahlung mit Fluss $\Phi_0 = 4.4 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ und Einfallswinkel $\Theta = 45^\circ$ bei der Temperatur $T_0 = 300 \text{ K}$. Die entsprechende maximale Deformationstiefe des B270-Kronglases beträgt $z_0 \sim -28.3 \mu\text{m}$ (vgl. Abb. 4.28) [180].

angenommen wird. Vielmehr repräsentiert der unbekannte Parameter Γ einen Freiheitsgrad, um die experimentell beobachteten Effekte besser beschreiben zu können. So zeigt sich, dass die bestmögliche Übereinstimmung der Herleitungen im Rahmen des verwendeten Modells mit der zugrundeliegenden Mikroskopaufnahme von Abb. 4.32a durch eine Übergangsbreite von $\Gamma = 10 \mu\text{m}$ erreicht wird (vgl. Abb. 4.32b) [180].

(B) Lösung für dicke amorphe Schichten

Für dicke amorphe Schichten muss die Abhängigkeit $S_e(\xi)$ berücksichtigt werden, so dass sich nach Gl. (4.41) für jene Materialien mit $S_{e0} \sim 0$ ergibt

$$\mu(z) = -\frac{1}{S_e(z)} \frac{\partial S_e(z)}{\partial z} = \frac{1}{\cos \Theta S_e(\xi)} \frac{\partial S_e(\xi)}{\partial \xi}. \quad (4.50)$$

Die Differentialgleichung (4.38) kann daher nur in ihrer ursprünglichen Form mit Γ als freien Parameter numerisch gelöst werden, wobei die Randbedingungen gegeben sind

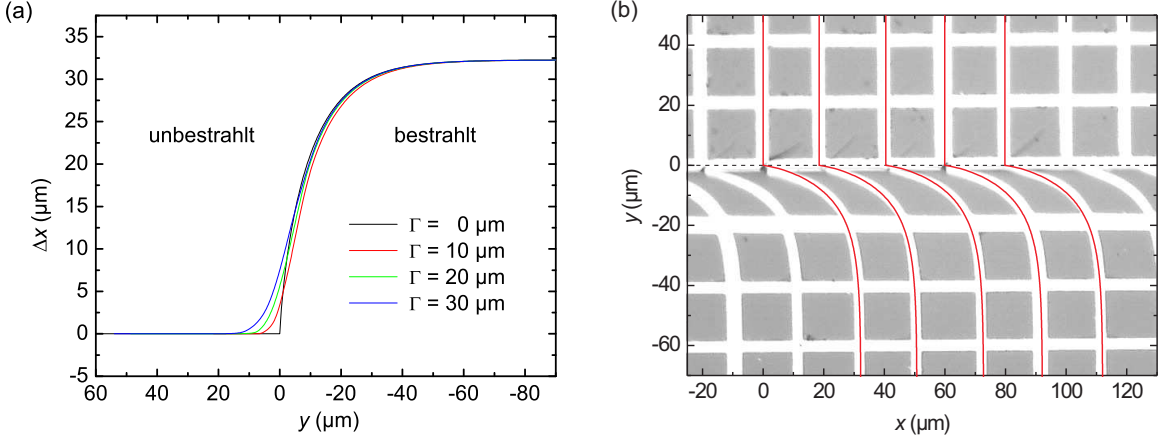


Abb. 4.34: Vergleich der berechneten Verschiebung des B270-Kronglases mit dem Experiment. (a) Dargestellt sind die Lösungen für die Verschiebung $\Delta x(y, z = 0, t)$ am y -Randbereich für verschiedene Übergangsbreiten Γ . Die zugrundeliegenden Bestrahlungsbedingungen entsprechen denen aus Abb. 4.33, die Fluenz beträgt $\Phi_0 t = 1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ [180]. (b) Die Abbildung zeigt einen Vergleich der in (a) dargestellten Lösung für die Verschiebung $\Delta x(y, z = 0, t)$ für eine Übergangsbreite von $\Gamma = 0 \mu\text{m}$ mit einer Mikroskopaufnahme der entsprechenden vorgenommenen Bestrahlung. $y = 0$ wurde so gewählt, dass optimale Übereinstimmung vorliegt, $x = 0$ dagegen willkürlich [180].

durch

$$\begin{aligned}
 y \geq 0 \quad (\Gamma = 0), \quad \text{bzw.} \quad y \rightarrow \infty \quad (\Gamma > 0) : \quad v_x &= 0, \\
 y \rightarrow -\infty : \quad v_x &= v_x^c, \\
 z = -\xi_0 \cos \Theta : \quad v_x &= 0, \\
 z = 0 : \quad \sigma_{xz}^s &= 0.
 \end{aligned} \tag{4.51}$$

In Abb. 4.33 ist die Lösung für die stationäre Schergeschwindigkeit $v_x(y, z)$ für die bei $T_0 = 300 \text{ K}$ mit dem Fluss $\Phi_0 t = 4.4 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ und Einfallswinkel $\Theta = 45^\circ$ vorgenommenen 600 MeV Au Bestrahlungen des B270-Kronglases dargestellt, wobei Abb. 4.33a und Abb. 4.33b die Lösung für den Parameter $\Gamma = 0 \mu\text{m}$ und Abb. 4.33c und Abb. 4.33d die Lösung für den Parameter $\Gamma = 30 \mu\text{m}$ zeigen. In Abb. 4.33a und Abb. 4.33c sind die jeweiligen Abhängigkeiten $v_x(y)$ für konstante Werte z und in Abb. 4.33b und Abb. 4.33d die entsprechenden Abhängigkeiten $v_x(z)$ für konstante Werte y dargestellt. Für die Rechnungen wurde die Funktion $S_e(\xi)$ von Abb. 4.28 mit einer maximalen Deformationslänge von $\xi_0 = 40 \mu\text{m}$ verwendet, und der Wert von $\alpha(T_0) = \partial A_0(S_e, T_0) / \partial S_e$ stammt über Gl. (4.27) aus dem Experiment. Es zeigt sich, dass, wie im Falle dünner amorpher Schichten, der eigentliche Übergang von der homogenen stationären Schergeschwindigkeit $v_x(z)$ im Zentralbereich auf $v_x(y, z) = 0$ im unbestrahlten Gebiet auf eine Breite $\Gamma_y \lesssim -5z_0$ beschränkt ist [180]. Da die maximale Deformationstiefe des B270-Kronglases mit $z_0 = -\cos \Theta \xi_0 \sim -28.3 \mu\text{m}$ viel größer ist als die der a-Si Schichten mit $z_0 = -d_1 = -5.71 \mu\text{m}$, erscheint der y -Randbereich des B270-Kronglases räumlich stärker ausgedehnt als jener der a-Si Schichten (vgl. Abb. 4.30).

In Abb. 4.34a ist die aus $v_x(y, z)$ durch Integration ermittelte Verschiebung an der Probenoberfläche $\Delta x(y, z = 0, t)$ für die Bestrahlungsbedingungen von Abb. 4.33 sowie eine Fluenz von $\Phi_0 t = 1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ für verschiedene Werte des Parameters Γ dargestellt. In dieser Darstellung ist der gegenüber a-Si (vgl. Abb. 4.31) für das B270-Kronglas weniger dominierende Einfluss der Größe Γ deutlicher sichtbar. In Abb. 4.34b ist ein Vergleich der ermittelten Lösungen $\Delta x(y, z = 0, t)$ mit der unter gleichen Bedingungen experimentell beobachteten Verschiebung gezeigt. Da die Blende während dieser Bestrahlung nicht bewegt wurde, ergibt die dargestellte Lösung mit $\Gamma = 0 \mu\text{m}$ auch die beste Übereinstimmung [180].

Obwohl die vom Material unabhängige theoretische Beschreibung des plastischen Fließens dicker amorpher Schichten am y -Randbereich nach Gl. (4.38) für das Beispiel des B270-Kronglases gute Übereinstimmung mit dem experimentellen Befund zeigt, bestehen dennoch Abweichungen. Diese können nicht wie im Falle von a-Si auf die ungenaue Position der Grenzlinie $y = 0$ zurückgeführt werden. Wahrscheinlich haben diese ihre Ursache im vernachlässigten Schwellwert S_{e0} , der Modellierung von $k_0(z)$ und $A_0(z)$ in Gl. (4.41) und der Vernachlässigung des Tensorcharakters der Fluidität in Gl. (2.24).

4.3.5.4 Deformation am x -Randbereich

Die beobachtete Formierung von Gräben und Wällen an den x_{a^-} , bzw. x_b -Randbereichen lassen sich mit dem vorliegenden Modell der Gln. (2.21) bis (2.26) ohne großen numerischen Aufwand nur grob beschreiben. Da jede x - z -Ebene eine Symmetrieebene darstellt, verschwinden alle Ableitungen $\partial/\partial y$. Die Experimente zeigen weiterhin, dass $v_y(x, z, t) = 0$ gilt, so dass sich unmittelbar als Lösungen ergeben

$$\dot{\varepsilon}_{yy}^s(x, z, t) = \dot{\varepsilon}_{xy}^s(x, z, t) = \dot{\varepsilon}_{yz}^s(x, z, t) = 0. \quad (4.52)$$

Die permanente Änderung der Form und Größe der Gräben und Wälle zeigt, dass an den x -Randbereichen kein stationärer Zustand existiert. Als Konsequenz muss zur Bestimmung der Deformationsgeschwindigkeiten $v_x(x, z, t)$ und $v_z(x, z, t)$ das vorliegende Gleichungssystem mit sich ständig ändernder Oberfläche zeitabhängig gelöst werden,

E (MeV)	Ion	S_e (keV nm ⁻¹)	T_0 (K)	$\Phi_0 t$ (cm ⁻²)	F_m (μm^2)	F_Z (μm^2)	$\Delta F/F_Z$ (%)
390	Xe	15.8	80	7.4×10^{15}	41	43	-5
390	Xe	15.8	300	9.3×10^{15}	46	41	+12
350	Au	18.8	80	1.7×10^{15}	29	31	-6
350	Au	18.8	300	0.8×10^{15}	12	11	+9
600	Au	21.3	80	3.1×10^{15}	69	75	-8
600	Au	21.3	300	2.6×10^{15}	(31)	(44)	(-29)

Tab. 4.6: Beschreibung der Deformation am x -Randbereich. Angegeben sind die mittleren integrierten Gesamt-Querschnitte F_m der Gräben und Wälle, der Querschnitt der lateral transportierten Materie im Zentralbereich F_Z , sowie die relative Abweichung $\Delta F/F_Z = (F_m - F_Z)/F_Z$.

was analytisch unmöglich ist, und vielmehr ein dreidimensional sowie zeitlich auswertbares Finite-Elemente-Programm erfordert. Da diese Berechnungen den Umfang der Arbeit gesprengt hätten, wurde auf eine solche Beschreibung verzichtet.

Die durch $v_x(x, z, t)$ und $v_z(x, z, t)$ induzierten Deformationsraten $\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_{xx}^s(x, z, t)$, $\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_{xz}^s(x, z, t)$ und $\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_{zz}^s(x, z, t)$ können jedoch hinsichtlich der entstehenden mittleren Querschnitte F_m der Gräben und Wälle für die Fluenzbereiche, in denen im Zentralbereich eine stationäre Schergeschwindigkeit $v_x(z)$ vorliegt, näher charakterisiert werden. Sollte das plastische Fließen an den x -Randbereichen wie im Zentralbereich ohne Änderung der Dichte erfolgen, d.h. $\text{Sp}(\underline{\underline{\epsilon}}^s(x, z, t)) = 0$, müssten die aus den Experimenten in Kap. 4.3.2.3 und Kap. 4.3.3.3 abgeleiteten mittleren Querschnitte F_m mit jenen der lateral transportierten Materie im Zentralbereich $F_Z(t)$ übereinstimmen. Dieser ergibt sich aus der Integration der stationären Schergeschwindigkeit $v_x(z)$ entsprechend

$$F_Z(t) = \int_{z_0}^0 \Delta x(z, t) dz = \int_{z_0}^0 \int_0^t v_x(z) dt dz. \quad (4.53)$$

Nach Gl. (4.19) erfolgt dabei die eigentliche Integration über die Deformationsausbeute $A_0(S_e(\xi))$ entlang der Ionenweglänge ξ . Für dünne amorphe Schichten mit $S_e \sim \text{const.}$ kann für die Verschiebung im Zentralbereich $\Delta x(z, t)$ sofort Gl. (4.23) verwendet werden, wodurch sich Gl. (4.53) mit $z_0 = -d_1$ vereinfacht zu

$$F_Z(t) = \frac{3}{2} d_1^2 A_0 \Phi_0 t \sin 2\Theta = \frac{d_1}{2} \Delta x(z = 0, t). \quad (4.54)$$

In Tab. 4.6 sind die für die vorgenommenen Bestrahlungen ermittelten Deformationsquerschnitte im Zentralbereich F_Z im Vergleich zu den mittleren Querschnitten am x -Randbereich F_m aufgelistet. Es ist deutlich erkennbar, dass die Werte sehr gut miteinander übereinstimmen solange ein stationärer Zustand für das plastische Fließen im Zentralbereich vorliegt. Die einzige Ausnahme bildet die 600 MeV Au Bestrahlung bei $T_0 = 300$ K, für welche eine poröse Schicht formiert wurde und aufgrund von $\text{Sp}(\underline{\underline{\epsilon}}^s) > 0$ kein Grabenquerschnitt ermittelt werden konnte [180].

4.4 Spannungszustand nach SHI-Bestrahlung

Zur Untersuchung des durch die Bestrahlung in der a-Si Oberflächenschicht induzierten Spannungszustandes $\underline{\underline{\sigma}}^s(x, y, z, t)$ wurden freitragende a-Si und c-Si Proben unter der in Abb. 3.3b dargestellten Geometrie sowohl senkrecht als auch schräg mit 600 MeV Au Ionen bestrahlt. Da a-Si für diese Energieeinträge die höchste Deformationsausbeute A_0 besitzt (vgl. Kap. 4.3.5.2), war nach der für konventionelle Gläser abgeleiteten Gl. (2.29) zu erwarten, dass auch die induzierten Spannungen maximale Werte annehmen. Im Rahmen dieser Arbeit konnte $\underline{\underline{\sigma}}^s(x, y, z, t)$ nur im Zentralbereich untersucht werden, so

dass $\underline{\underline{\sigma}}^s(z, t)$ gilt, alle Ableitungen $\partial/\partial x = \partial/\partial y = 0$ verschwinden und sich aufgrund der spannungsfreien Probenoberfläche nach Gl. (2.26) ergibt

$$\sigma_{xz}^s(z, t) = \sigma_{yz}^s(z, t) = \sigma_{zz}^s(z, t) = \sigma_{xy}^s(z, t) = 0. \quad (4.55)$$

Folglich verbleiben nur die Normalspannungen $\sigma_{xx}^s(z, t)$ und $\sigma_{yy}^s(z, t)$, wobei aus Symmetriegründen im Falle senkrechter Bestrahlungen $\sigma_{xx}^s(z, t) = \sigma_{yy}^s(z, t)$ gilt. Die Werte der Spannungen $\sigma_{xx}^s(z, t)$ werden aus den sich jeweils in x -Richtung ergebenden und über in-situ Laserreflexionsmessungen ermittelten Krümmungsradien R_K der a-Si Proben berechnet, wobei der Einfluss der Spannungen in der amorphen Tiefenschicht durch Messungen an c-Si Referenzproben eliminiert wird.

4.4.1 Biegung bei tiefen Temperaturen

Abbildung 4.35 zeigt als Beispiel die Biegung einer bei $T_0 = 80$ K senkrecht bestrahlten a-Si Probe. Die Veränderung der nach der Probenherstellung vorhandenen Krümmung durch die Bestrahlung ist offensichtlich. In Abb. 4.36a ist der Krümmungsradius R_K und in Abb. 4.36b der die Krümmung beschreibende Kehrwert $1/R_K$ der senkrecht bei $T_0 = 80$ K bestrahlten a-Si Proben und c-Si Referenzproben in Abhängigkeit von der Fluenz $\Phi_0 t$ dargestellt. Während sich die c-Si Probe kontinuierlich vom Ausgangswert mit zunehmender Fluenz vom Strahl weg krümmt, d.h. $R_K < 0$, verschwindet die durch die Amorphisierung induzierte Krümmung der a-Si Probe zunächst bis zu einer Fluenz von $\Phi_0 t \sim 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ fast vollständig. Mit steigender Fluenz tritt die Krümmung jedoch wieder deutlicher zum Vorschein. Ab einer Fluenz von $\Phi_0 t \sim 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ wächst die Krümmung in den a-Si und c-Si Proben in gleicher Weise. Diese stetige Zunahme der Krümmung kann durch Spannungen erklärt werden, die durch die mechanisch eingeschränkte strukturelle Dichteverringering von $\Delta\rho/\rho = -1.8\%$ [107] in der mit der Fluenz wachsenden amorphen Tiefenschicht induziert werden (vgl. Kap. 4.2.2).

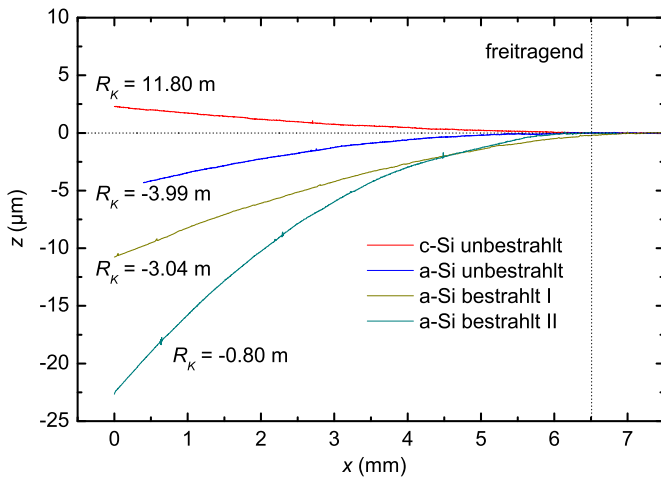


Abb. 4.35: Biegung freitragender a-Si Proben unter SHI-Bestrahlung. Dargestellt ist die Krümmung der Probenoberfläche einer freitragenden a-Si Probe infolge einer senkrechten 600 MeV Au Bestrahlung bei $T_0 = 80$ K mit $\Phi_0 t = 4 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ (I), bzw. bei $T_0 = 300$ K mit $\Phi_0 t = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ (II). Zum Vergleich sind die in Abb. 4.7 dargestellten Kurven einer unbestrahlten a-Si, bzw. c-Si Probe mit eingezeichnet.

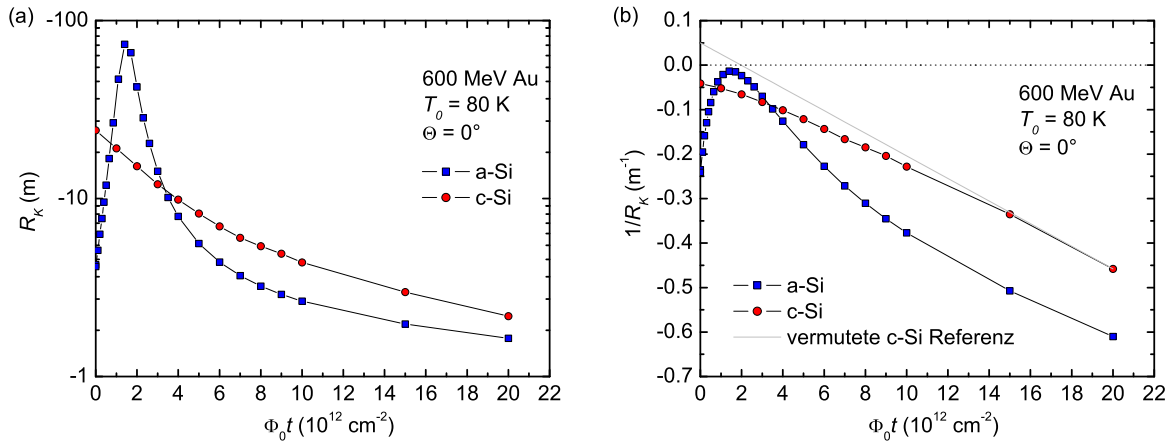


Abb. 4.36: Krümmung als Funktion der Fluenz für Bestrahlungen bei tiefen Temperaturen. Dargestellt ist der mittels in-situ Laserreflexionsmessungen ermittelte Krümmungsradius R_K (a), sowie dessen Kehrwert $1/R_K$ (b), in Abhängigkeit von der Fluenz $\Phi_0 t$ für senkrechte Bestrahlungen freitragender a-Si und c-Si Proben mit 600 MeV Au Ionen bei $T_0 = 80$ K.

Um die in der a-Si Oberflächenschicht vorliegende mittlere Spannung $\sigma_{xx}^s(t)$ bestimmen zu können, muss jedoch der Einfluss dieser amorphen Tiefenschicht eliminiert werden. Hierfür wurden drei Methoden verfolgt. (i) Zunächst kann die in Abb. 4.36 dargestellte Messung von R_K an der c-Si Probe als Bezugskurve angenommen werden. (ii) Da jedoch im Nachhinein nicht mehr klar ist, ob die a-Si Schicht auf der positiv oder negativ gekrümmten c-Si Waferseite hergestellt wurde, könnte sich auch eine c-Si Referenzkurve ergeben, die vom entsprechenden positiven Anfangswert $1/(-R_K) > 0$ ausgeht und im Folgenden einen ähnlichen Kurvenverlauf wie die gemessene c-Si Probe annimmt. Dieser Fall ist in Abb. 4.36b versuchsweise durch eine lineare Funktion dar-

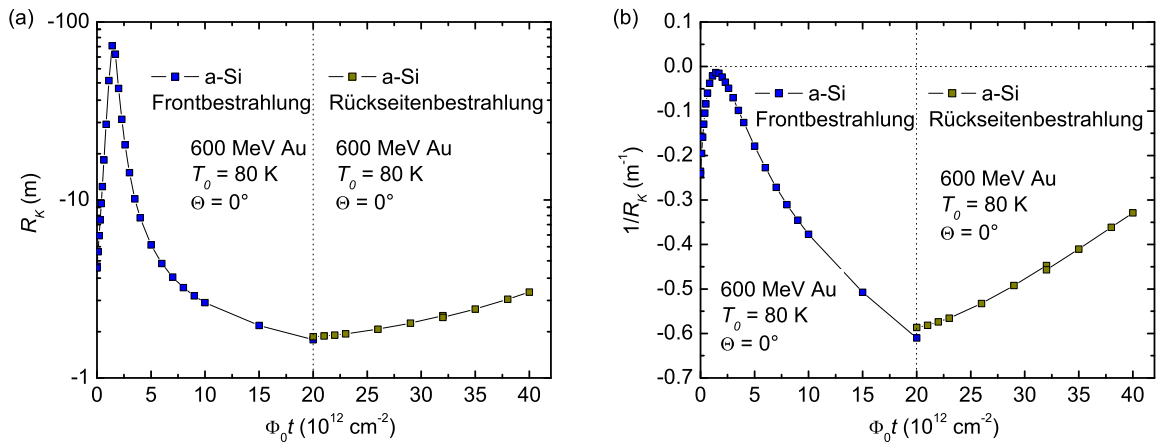


Abb. 4.37: Krümmung als Funktion der Fluenz für nachfolgende Rückseiten-Bestrahlungen bei tiefen Temperaturen. Dargestellt ist der mittels in-situ Laserreflexionsmessungen ermittelte Krümmungsradius R_K (a), sowie dessen Kehrwert $1/R_K$ (b), in Abhängigkeit von der Fluenz $\Phi_0 t$ für senkrechte Bestrahlungen freitragender a-Si Proben mit 600 MeV Au Ionen bei $T_0 = 80$ K. Bis zur Fluenz von $\Phi_0 t = 2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ wurde die Frontseite der Proben bestrahlt, so dass die Messwerte denen aus Abb. 4.36 entsprechen. Anschließend wurden die Proben in-situ um 180° gedreht und deren c-Si Rückseite bis zur gleichen Endfluenz von $\Phi_0 t = 2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ bestrahlt.

gestellt. (iii) In einer dritten Methode wurde die bis $\Phi_0 t = 2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ bestrahlte a-Si Probe in-situ um 180° gedreht und deren c-Si Rückseite bis zur gleichen Endfluenz von $\Phi_0 t = 2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ nachbestrahlt. Die in Abb. 4.37 dargestellten Ergebnisse zeigen, dass sich infolge der Tiefenamorphisierung in der Probenrückseite das gleiche Verhalten wie in der eigentlichen c-Si Probe ergibt und somit bezüglich der Probenvorderseite eine deutlich verminderte Krümmung einstellt. Die Berechnung von $\sigma_{xx}^s(t)$ bezüglich dieser drei Referenzmethoden erfolgt im Kap. 4.4.3.

4.4.2 Biegung bei Raumtemperatur

Auch die Bestrahlungen bei $T_0 = 300 \text{ K}$ führten zur Biegung der freitragenden c-Si und a-Si Proben. In Abb. 4.35 ist als Beispiel die sehr deutliche Krümmung einer senkrecht mit einer relativ hohen Fluenz von $\Phi_0 t = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ bestrahlten a-Si Probe mit eingezeichnet. Die Abhängigkeit des Krümmungsradius R_K senkrecht bestrahlter a-Si Proben und c-Si Referenzproben von der Fluenz $\Phi_0 t$ ist in Abb. 4.38a aufgetragen und der berechnete Kehrwert $1/R_K$ in Abb. 4.38b dargestellt. Da die Untersuchungen bei Raumtemperatur mit Fluenzen bis $\Phi_0 t \leq 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ vorgenommen wurden, geben die Ergebnisse einen guten Überblick über die verschiedenen charakteristischen Fluenzbereiche. Wie die Experimente bei $T_0 = 80 \text{ K}$ zeigen auch die bei $T_0 = 300 \text{ K}$ vorgenommenen Bestrahlungen einen Anstieg der Krümmung der c-Si Probe im gesamten Fluenzbereich. Auch im Falle der a-Si Probe ähneln die Krümmungsmessungen jenen, die bei $T_0 = 80 \text{ K}$ aufgenommen wurden. Zunächst wird die nach der Probenherstellung vorliegende und durch die kompressive Ausgangsspannung σ_0 induzierte Krümmung im Fluenzbereich bis $\Phi_0 t \sim (1 \dots 2) \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ abgebaut. Anschließend wächst die Krümmung wieder mit steigender Fluenz, bleibt aber gegenüber jener der

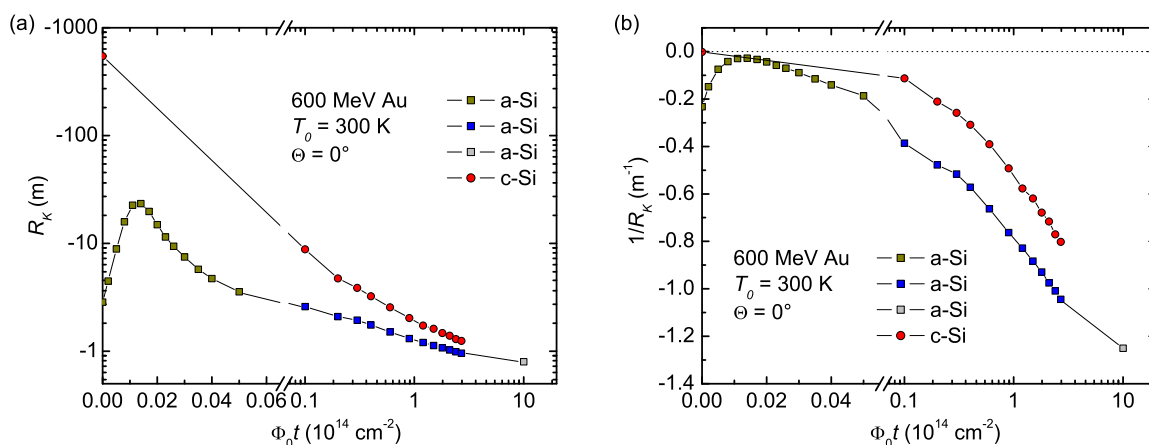


Abb. 4.38: Krümmung als Funktion der Fluenz für senkrechte Bestrahlungen bei Raumtemperatur. Dargestellt ist der mittels in-situ Laserreflexionsmessungen ermittelte Krümmungsradius R_K (a), sowie dessen Kehrwert $1/R_K$ (b), in Abhängigkeit von der Fluenz $\Phi_0 t$ für senkrechte Bestrahlungen freitragender a-Si und c-Si Proben mit 600 MeV Au Ionen bei $T_0 = 300 \text{ K}$.

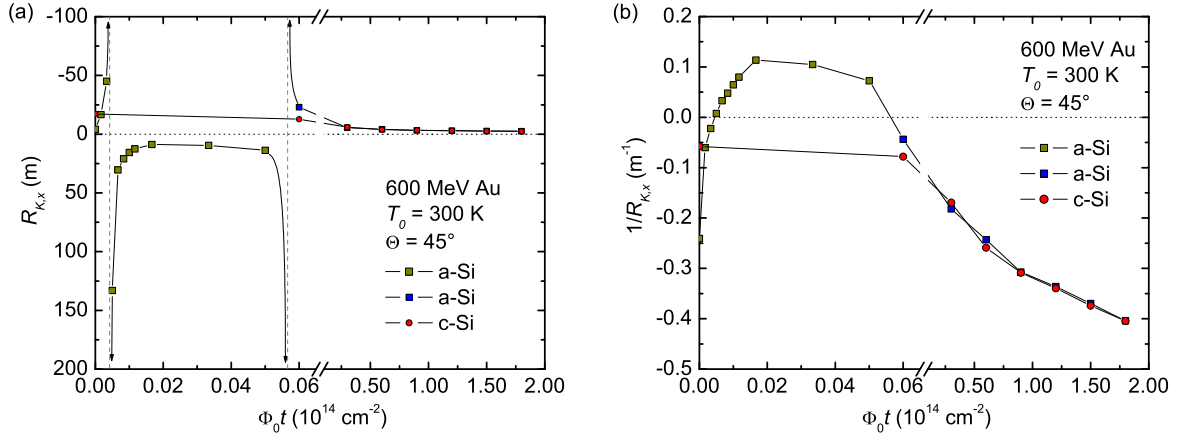


Abb. 4.39: Krümmung als Funktion der Fluenz für schräge Bestrahlungen bei Raumtemperatur. Dargestellt ist der mittels in-situ Laserreflexionsmessungen ermittelte Krümmungsradius entlang der Wirkungslinie $R_{K,x}$ (a), sowie dessen Kehrwert $1/R_{K,x}$ (b), in Abhängigkeit von der Fluenz $\Phi_0 t$ für schräge 600 MeV Au Bestrahlungen freitragender a-Si und c-Si Proben bei $T_0 = 300 \text{ K}$.

c-Si Probe deutlich größer. Folglich verhalten sich beide Proben ab einer Fluenz von $\Phi_0 t \sim 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ gleichermaßen. Der experimentelle Aufbau ließ es zu, dass die Untersuchungen durch Bestrahlungen mit $\Theta = 45^\circ$ ergänzt werden konnten, wobei R_K entlang der Wirkungslinie des auftretenden plastischen Fließens gemessen wurde (vgl. Kap. 4.3.3). Da die Bestrahlungen nur bis $\Phi_0 t \lesssim 2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ erfolgten, können die mit der Formierung einer porösen Schicht verbundenen Effekte ausgeschlossen werden (vgl. Kap. 4.3.3). Die in Abb. 4.39 dargestellten Ergebnisse zeigen, dass sich die c-Si Probe wie unter senkrechter Bestrahlung verhält. Dagegen biegt sich die a-Si Probe bis $\Phi_0 t \sim 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ soweit in Strahlrichtung, dass sich vorübergehend bis $\Phi_0 t \sim 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ das Vorzeichen der Krümmung ändert. Im weiteren Verlauf führen die schrägen Bestrahlungen ab $\Phi_0 t \gtrsim 6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ zu einer in ihrem Wert gleichen Krümmung der a-Si und c-Si Proben in x -Richtung.

4.4.3 Berechnung der Spannungen

Im Folgenden wird die in der a-Si Oberflächenschicht vorliegende Spannung $\sigma_{xx}^s(z, t)$ aus den gemessenen Krümmungsradien $R_K(t)$ berechnet. Dies könnte prinzipiell durch eine Lösung des makroskopischen modifizierten viskoelastischen Maxwell-Modells der Gln. (2.21) bis (2.26) unter Zulassung einer die Biegung beschreibenden Deformation der freitragenden Probe $\varepsilon_{xx}^p(z, t) \propto 1/R_K(t)$ [182] und unter geeigneter Modellierung der durch die Amorphisierung in der Tiefe entstehenden Deformation erfolgen. Um auf die Größe von $\sigma_{xx}^s(z, t)$ schließen zu können, müsste die sich ergebende Spannung $\sigma_{xx}^p(z, t)$ in einer a-Si Probe mit $A_0 > 0$ mit der einer c-Si Probe mit $A_0 = 0$ verglichen und somit der Einfluss der amorphen Tiefenschicht eliminiert werden. Da dieses Vorgehen sehr aufwendig ist, wird im Folgenden von einem stationären Zustand $\sigma_{xx}^s(z)$ ausgegangen. Unter der Annahme $d_1, d_2, d_3 \ll d_p$ ergibt sich eine im Vergleich zur

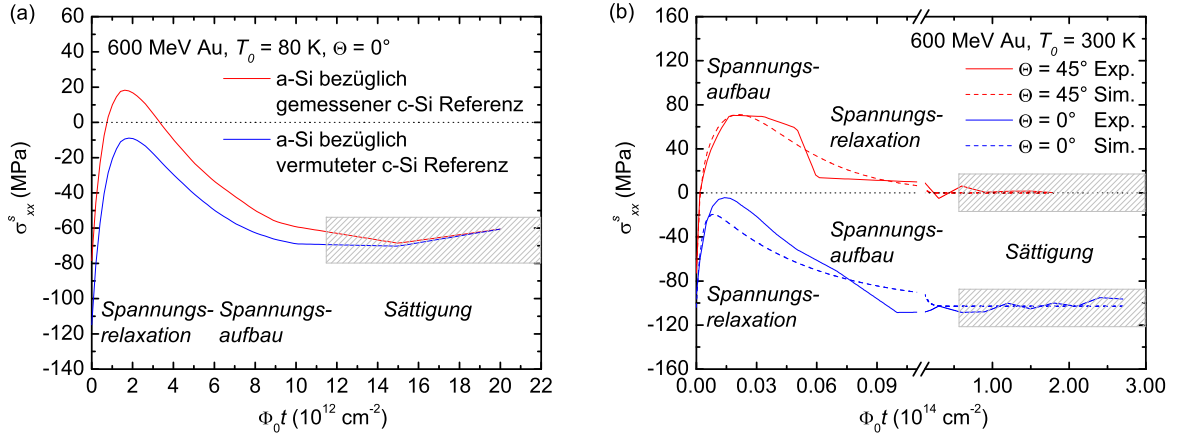


Abb. 4.40: Spannungsverlauf in a-Si unter SHI-Bestrahlung. Dargestellt ist die aus dem Krümmungsradius R_K über Gl. (4.57) ermittelte Spannung σ_{xx}^s als Funktion der Fluenz $\Phi_0 t$, wobei nur der qualitative Kurvenverlauf und der Wert der Sättigungsspannung eine Bedeutung besitzen. In (a) sind die Kurven für $T_0 = 80$ K und $\Theta = 0^\circ$ bezüglich der gemessenen c-Si Referenz sowie der vermuteten c-Si Referenz eingezeichnet. In (b) sind die Kurven für $T_0 = 300$ K und $\Theta = 0^\circ$ bzw. $\Theta = 45^\circ$ dargestellt, sowie die nach Gl. (4.59) berechneten Simulationen mit eingezeichnet [183].

Stoney-Gleichung (4.2) modifizierte Beziehung für die in der a-Si Oberflächenschicht, bzw. a-Si Tiefenschicht, vorliegende mittlere Spannung $\sigma_{xx}^s(z)$, bzw. $\sigma_{xx}^{s3}(z)$,

$$S \equiv \int_{d_p/2-d_1}^{d_p/2} \sigma_{xx}^s(z) z dz + \int_{d_p/2-(d_1+d_2)}^{d_p/2-(d_1+d_2)} \sigma_{xx}^{s3}(z) z dz \sim \frac{Y_{c-Si} d_p^2}{6R_K^a}. \quad (4.56)$$

Da die c-Si Referenzprobe keine a-Si Oberflächenschicht enthält, d.h. $d_1 = 0$, kann der durch $\sigma_{xx}^{s3}(z)$ charakterisierte Einfluss der amorphen Tiefenschicht in Gl. (4.56) durch den gemessenen Krümmungsradius der c-Si Probe R_K^c ausgedrückt werden. Als Konsequenz ergibt sich für die mittlere Spannung in der a-Si Oberflächenschicht mit dem Krümmungsradius R_K^a der entsprechend bestrahlten a-Si Probe analog Gl. (4.2)

$$\sigma_{xx}^s \sim \frac{Y_{c-Si} d_p^2}{6d_1} \left[\frac{1}{R_K^a} - \frac{1}{R_K^c} \right]. \quad (4.57)$$

Die sich nach Gl. (4.57) aus den interpolierten Kurven der experimentellen Daten ergebenden Werte σ_{xx}^s sind in Abb. 4.40a für die senkrechten Bestrahlungen bei $T_0 = 80$ K und in Abb. 4.40b für die senkrechten Bestrahlungen bei $T_0 = 300$ K dargestellt. Für die schrägen Bestrahlungen wurde σ_{xx}^s ebenfalls nach Gl. (4.57) berechnet und in Abb. 4.40b eingezeichnet. Da Gl. (4.57) einen stationären Zustand voraussetzt, können die ermittelten Kurvenverläufe nur qualitativ interpretiert werden, wohingegen die jeweiligen Sättigungswerte quantifiziert werden können.

(A) Aus dem Vergleich der senkrechten Bestrahlungen kann unabhängig von der Temperatur T_0 geschlossen werden, dass die kompressive Anfangsspannung infolge der Amorphisierung von $\sigma_0 \sim (-130 \pm 50)$ MPa (vgl. Kap. 4.1.2) innerhalb einer Fluenz von $\Phi_0 t \lesssim (1 \dots 2) \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ vollständig relaxiert, sich aber gleichzeitig von Beginn

der Bestrahlung an durch den Ionen-Hämmerungseffekt eine kompressive Spannung aufbaut, die ab $\Phi_0 t \sim B \sim 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ einen stationären Sättigungswert annimmt. Dieser beträgt $\sigma_{xx}^s(t \rightarrow \infty) \sim (-70 \pm 10) \text{ MPa}$ für Bestrahlungen bei $T_0 = 80 \text{ K}$, bzw. $\sigma_{xx}^s(t \rightarrow \infty) \sim (-100 \pm 10) \text{ MPa}$ für Bestrahlungen bei $T_0 = 300 \text{ K}$. Nach dem allgemeinen Verlauf der Kurven ist wahrscheinlicher, dass für die Bestrahlungen bei $T_0 = 80 \text{ K}$ die vermutete c-Si Referenz die eigentliche Bezugskurve darstellt (vgl. Abb. 4.36b), so dass stets $\sigma_{xx}^s < 0$ gilt. Für die alternative Methode zur Eliminierung der Spannung $\sigma_{xx}^{s3}(z)$ über eine rückseitige Nachbestrahlung der a-Si Probe bei $T_0 = 80 \text{ K}$ (vgl. Abb. 4.37) könnte analog Gl. (4.56) die Beziehung

$$S \equiv \sigma_{xx}^s d_1 + \sigma_{xx}^{s3} d_3 + \sigma_{xx}^{s5} d_5 \sim \frac{Y_{\text{c-Si}} d_p^2}{6R_K^a} \quad (4.58)$$

hergeleitet werden, wobei die Schicht 5 die rückseitige amorphe Tiefenschicht bezeichnet. Unter der Annahme, dass nach äquivalenter Vorder- und Rückseitenbestrahlung $d_3 \sim d_5$ und $\sigma_{xx}^{s3} \sim -\sigma_{xx}^{s5}$ gilt, ergäbe sich nach Gl. (4.58) mit dem Radius $R_K \sim -3.04 \text{ m}$ für die Spannung $\sigma_{xx}^s(t \rightarrow \infty) \sim (-130 \pm 20) \text{ MPa}$ und damit ein doppelt so großer Wert wie direkt über die Frontbestrahlungen berechnet. Aufgrund des komplizierten Schichtsystems ist es jedoch fraglich, ob dieses so vereinfacht beschrieben werden kann. Diese Vorgehensweise wird deshalb nicht als Referenzmethode in Betracht gezogen.

(B) Die mit einem Einfallswinkel von $\Theta = 45^\circ$ bei $T_0 = 300 \text{ K}$ vorgenommenen Bestrahlungen ergaben einen qualitativ anderen Verlauf der Spannung $\sigma_{xx}^s(t)$. Die bis $\Phi_0 t \sim (1 \dots 2) \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ auftretende Relaxation der Vorspannung wird durch den unmittelbaren Aufbau einer Zugspannung $\sigma_{xx}^s > 0$ dominiert. Diese relaxiert im Anschluss vollständig, so dass ab $\Phi_0 t \sim 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ein stationärer Zustand mit einer in x -Richtung verschwindenden Spannung $\sigma_{xx}^s = 0$ vorliegt. Aufgrund der Geometrie der Probenkammer konnten leider keine Messungen in y -Richtung vorgenommen werden, so dass der Spannungsverlauf σ_{yy}^s nicht ermittelt werden konnte.

4.4.4 Theoretische Beschreibung des Spannungszustandes

Im Rahmen des makroskopischen modifizierten viskoelastischen Maxwell-Modells der Gln. (2.21) bis (2.26) können die in einer amorphen Schicht durch den mechanisch eingeschränkten Hämmerungseffekt induzierten Spannungen $\underline{\underline{\sigma}}^s(z, t)$ theoretisch beschrieben werden. Für die im Zentralbereich verbleibenden Normalspannungen $\sigma_{xx}^s(z, t)$ und $\sigma_{yy}^s(z, t)$ ergibt sich nach den Gln. (4.4) und (4.5) als Lösung [180]

$$\sigma_{xx}^s(z, t) = \sigma_c(z) \left[\beta_1 + \beta_2 \exp \frac{-t}{\tau_G(z)} + \beta_3 \exp \frac{-t}{\tau_Y(z)} \right] + \sigma_0 \exp \frac{-t}{\tau_0(z)}, \quad (4.59)$$

$$\sigma_{yy}^s(z, t) = \sigma_c(z) \left[\gamma_1 + \gamma_2 \exp \frac{-t}{\tau_G(z)} + \gamma_3 \exp \frac{-t}{\tau_Y(z)} \right] + \sigma_0 \exp \frac{-t}{\tau_0(z)}. \quad (4.60)$$

Die vom Einfallswinkel Θ abhängigen Koeffizienten β_i und γ_i sind gegeben durch

$$\begin{aligned} \beta_1 &= \cos 2\Theta, & \beta_2 &= \frac{1}{2} \sin^2 \Theta, & \beta_3 &= \frac{1}{2}(1 - 3 \cos^2 \Theta), \\ \gamma_1 &= \cos^2 \Theta, & \gamma_2 &= -\frac{1}{2} \sin^2 \Theta, & \gamma_3 &= \frac{1}{2}(1 - 3 \cos^2 \Theta). \end{aligned} \quad (4.61)$$

Die Zeitkonstanten $\tau_G(z) = 1/(2Gk_0(z)\Phi_0)$ und $\tau_Y = 3/(Yk_0(z)\Phi_0)$ beschreiben die über viskoses Fließen erfolgenden Spannungsrelaxationen, die dem Spannungsaufbau durch den Ionen-Hämmerungseffekt entgegenwirken. Die Zeitkonstante für die Relaxation der Anfangsspannung ergibt sich zu $\tau_0(z) = \tau_Y(z)$. Da generell $\tau_G < \tau_Y$ gilt und τ_G auch nur für schräge Bestrahlungen von Bedeutung ist, liegt im Fluenzbereich $\Phi_0 t \gg \Phi_0 \tau_Y$, d.h. oberhalb der charakteristischen Fluenz $\Phi_0 \tau_Y$, ein stationärer Gleichgewichtszustand von Ionen-Hämmern und viskosem Fließen vor. Für hohe Fluenzen nehmen $\sigma_{xx}^s(z, t)$ und $\sigma_{yy}^s(z, t)$ folglich den Sättigungswert

$$\sigma_{xx}^s(z) = \sigma_c(z) \cos 2\Theta, \quad \text{bzw.} \quad \sigma_{yy}^s(z) = \sigma_c(z) \cos^2 \Theta, \quad (4.62)$$

an, wobei $\sigma_c(z) = -3A_0(z)/k_0(z)$ der maximalen stationären kompressiven Spannung entspricht. Im Rahmen des viskoelastischen Modells zur Ionenstrahlinduzierten Deformation nach Trinkaus [38–42] müsste $k_0(S_e)$ nach Gl. (2.43) ebenso wie auch $A(S_e)$ für $S_e \gg S_{e0}$ nach Gl. (4.26) linear mit S_e anwachsen, so dass im Falle dünner Schichten mit $S_e \sim \text{const.}$ auch die Spannungen $\sigma_{xx}(z, t)$ und $\sigma_{yy}(z, t)$ über die Tiefe der amorphen Schicht konstant sind und alle z -Abhängigkeiten entfallen. Nach den Gln. (4.59) und (4.60) stellt sich im Falle $\sigma_0 = 0$ für $\Theta < 45^\circ$ eine kompressive Spannung $\sigma_{xx}^s(t) < 0$ ein, für $\Theta = 45^\circ$ wirkt $\sigma_{xx}^s(t)$ vorübergehend als Zugspannung und verschwindet vollständig für $\Phi_0 t \gg \Phi_0 \tau_Y$, und für $\Theta > 45^\circ$ ist $\sigma_{xx}^s(t) > 0$ und wirkt als Zugspannung. Die Spannung $\sigma_{yy}^s(t)$ dagegen ist unabhängig vom Einfallswinkel Θ stets kompressiv.

Der sich auf Basis der vom Material unabhängigen Gl. (4.59) für $\Theta = 0^\circ$ bzw. $\Theta = 45^\circ$ ergebende qualitative Verlauf der Spannung $\sigma_{xx}^s(t)$ ist in Abb. 4.40b mit eingezeichnet. Die Parameter $(\sigma_c, \sigma_0, \tau_G, \tau_Y, \tau_0)$ wurden dabei so gewählt, dass die Kurven eine optimale Anpassung an die qualitativen Ergebnisse der Biegungsexperimente von a-Si bei $T_0 = 300$ K ergeben. Die sehr gute Übereinstimmung mit den speziellen experimentellen Befunden zeigt, dass die während der Bestrahlung im Zentralbereich der a-Si Schicht induzierten Spannungen $\underline{\underline{\sigma}}^s(z, t)$ zumindest qualitativ mit dem makroskopischen modifizierten viskoelastischen Maxwell-Modell beschrieben werden können, und sich daher a-Si auch bezüglich der Spannungsverhältnisse wie ein konventionelles Glas verhält.

Kapitel 5

Diskussion

Die im Rahmen dieser Arbeit erzielten Ergebnisse haben gezeigt, dass sich a-Si unter SHI-Bestrahlung bei tiefen Temperaturen makroskopisch wie ein konventionelles Glas verhält. In diesem Kapitel werden die experimentellen Befunde hinsichtlich der mikroskopischen Vorgänge in der Ionenspur diskutiert und eine selbstkonsistente Interpretation sowie eine quantitative Beschreibung der beobachteten Effekte gegeben [84].

5.1 Phasenübergänge in der Ionenspur

5.1.1 Interpretation des Schwellwertes der Deformation

Die Bestrahlung von Si mit Laserpulsen der Photonen-Energie $E_\gamma \sim 2 \text{ eV}$ und der Pulsdauer $\tau_L \sim 100 \text{ fs}$ hat gezeigt, dass dieses für Fluenzen von $f_0 \gtrsim 0.23 \text{ J/cm}^2$ auf der fs-Zeitskala durch eine Instabilität des Diamantgitters nichtthermisch schmilzt und eine elektronisch hoch angeregte metallische Flüssigkeit entsteht, die sehr schnell zur metallischen Si-Schmelze l-Si relaxiert (vgl. Kap. 2.3.2.2) [65–69]. Dieser Fluenz-Schwellwert entspricht einer in das Elektronensystem deponierten Energiedichte von $E_0^L \sim f_0(1-r)k$, wobei mit der Reflektivität $r \sim 0.44$ und dem Absorptionskoeffizienten $k \sim 10^5 \text{ cm}^{-1}$ für a-Si der Wert $E_0^L \sim 14 \text{ kJ/cm}^3$ abgeschätzt werden kann [43].

Ein solche elektronische Anregung kann durch eine Bestrahlung mit schnellen schweren Ionen leicht übertroffen werden [4]. Der aus den Experimenten ermittelte Schwellwert des elektronischen Energieverlustes für das Einsetzen der plastischen Deformation von $S_{e0} \sim 14.2 \text{ keV/nm}$ entspricht einer in das Elektronensystem deponierten Energiedichte von $E_0^I \sim gS_{e0}/(\pi R_0^2) \sim 40 \text{ kJ/cm}^3$, wenn angenommen wird, dass die Effizienz der Energiedeponierung $g \sim 0.5$ beträgt, so dass ein Teil der Energie durch sekundäre Elektronen aus dem Kernbereich der Ionenspur mit einem Radius von $R_0 \sim 3 \text{ nm}$ dissipiert. Der Energietransfer vom Elektronensystem ins Gitter kann zwar anhand der vorgenommenen Experimente nicht näher spezifiziert werden, da das Auftreten einer Coulomb-Explosion jedoch ausgeschlossen werden kann [64], sollte die Energiedichte $E_0^I > E_0^L$ entweder über das nichtthermische Schmelzen oder die Elektronen-Phononen-Kopplung zur Formierung einer fluiden niederviskosen Zone (nv-Zone) entlang der Ionenbahn führen. Der Schwellwert S_{e0} kann daher in Analogie zur theoretischen Beschreibung der plastischen Deformation von Gläsern [38–42] als erforderlicher

Energieeintrag zur Formierung einer solchen *nv*-Zone interpretiert werden [84].

Für unterschwellige Bestrahlungen mit $S_e < S_{e0}$ kann sich wie im Falle von Gläsern entlang der Ionenspur keine *nv*-Zone ausbilden. Die unter Bestrahlungen im niederen und mittleren Energiebereich in *a*-Si beobachteten kleinen Deformationen (vgl. Abb. 4.27a) sind wahrscheinlich auf moderate Spannungen zurückzuführen, die infolge der thermischen Eigendehnung unter der Bestrahlung entstehen und über ein defektinduziertes Fließen innerhalb der festen *a*-Si Phase abgebaut werden. Desweiteren kann der nukleare Energieeintrag in diesen Energiebereichen nicht vernachlässigt werden und könnte ebenfalls zu einem defektinduzierten Fließen führen [84].

Im folgenden wird angenommen, dass die Abkühlung der für überschwellige Bestrahlungen mit $S_e > S_{e0}$ induzierten *nv*-Zone über die diffusive Wärmeleitung beschrieben werden kann, die auf der ps-Zeitskala mit der Beschreibung über die Boltzmann-Transport-Gleichung für Phononen übereinstimmt [78]. Aufgrund der hohen Anzahl an Atomen in der Ionenspur von einigen 2000 Atomen/nm wird wie zur Beschreibung der plastischen Deformation von Gläsern weiterhin angenommen, dass die Gesamtbewegung dieser Atome adäquat im Rahmen der Kontinuumsmechanik beschrieben werden kann [12]. Da die Abkühlperiode der *nv*-Zone auf einer Zeitskala von einigen (10...100) ps erfolgt, können Kristallisationsprozesse ausgeschlossen werden. Die fluide Materie in der *nv*-Zone liegt daher für Temperaturen unterhalb der Gleichgewichts-Schmelztemperatur von *c*-Si, d.h. für $T < T_m = 1685$ K, als unterkühlte Flüssigkeit vor. Aus inelastischen Röntgenstreuexperimenten [112] und Daten zur Scherviskosität [118, 121] ist bekannt, dass in diesem Temperaturbereich sowohl strukturelle Relaxationen als auch Scherspannungsrelaxationen auf einer Zeitskala von $\tau_s \lesssim 10$ ps stattfinden. Die *nv*-Zone befindet sich deshalb spätestens während der Abkühlperiode im mechanischen Gleichgewicht, das durch einen hydrostatischen (scherspannungsfreien) Druckzustand p mit verschwindendem Deviatoranteil des Spannungstensors $\underline{\underline{\tilde{\sigma}}} = 0$ gekennzeichnet ist.

Mit Hilfe der SHI-Bestrahlung von *a*-Si ist es daher möglich, den Phasenübergang von der unterkühlten Flüssigkeit *l*-Si in der *nv*-Zone zur festen *a*-Si Phase LDA-Si ohne einsetzende Kristallisationsprozesse zu untersuchen. Da die während der Lebensdauer der *nv*-Zone auf der ps-Zeitskala eingefrorenen atomaren Umordnungen als plastische Deformation auf der Labor-Zeitskala nachweisbar sind (vgl. Abb. 2.2), kann somit die Existenz einer LDL-Si Phase geprüft werden (vgl. Kap. 2.5.3.3).

In den folgenden Abschnitten wird dieser indirekte experimentelle Nachweis eines Glasübergangs zwischen einer LDL-Si Phase und der LDA-Si Phase während der Abkühlperiode der *nv*-Zone erbracht und damit die angenommene Existenz eines Flüssig-Fest-Phasenübergangs 1. Art widerlegt [84].

5.1.2 Widerspruch zum Schmelzübergang

Sollte die LDL-Si Phase nicht existieren, würde die nv-Zone aus der hochkoordinierten dichten metallischen l-Si Schmelze bestehen, die im unterkühlten Bereich als metastabile HDL-Si Phase vorliegt. Am Rand der nv-Zone würde diese HDL-Si Phase über einen Phasenübergang 1. Art zur umgebenden tetraedrischen halbleitenden a-Si Phase LDA-Si erstarren (Abb. 5.1a). Dieser Flüssig-Fest-Phasenübergang entspräche dem Erstarrungsäquivalent zum bisher postulierten Schmelzübergang von LDA-Si zu HDL-Si. Aufgrund des strukturellen Dichteunterschiedes zwischen beiden Phasen von ungefähr 10% besitzt die nv-Zone über einen großen Temperaturbereich eine Eigendehnung $\varepsilon^*(T) < 0$, so dass ein hydrostatischer Druck $p < 0$ vorliegt. In einem konventionellen Glas, dessen nv-Zone aus der entsprechenden thermisch expandierten Glaschmelze mit $\varepsilon^*(T) > 0$ besteht und folglich $p > 0$ gilt, frieren an der Erstarrungsfront atomare Umordnungen kinetisch blockiert über einen Glasübergang ein, die innerhalb der nv-Zone durch die Relaxation thermisch induzierter Scherspannungen über viskoses Fließen entstehen. Da die Scherspannungsrelaxationen innerhalb der aus HDL-Si bestehenden nv-Zone wegen $\varepsilon^*(T) < 0$ in die entgegengesetzte Richtung verlaufen, frieren die damit verbundenen Deformationen an der Phasengrenze von HDL-Si zu LDA-Si mit entgegengesetztem Vorzeichen gegenüber dem von Gläsern ein. Diese eingefrorenen

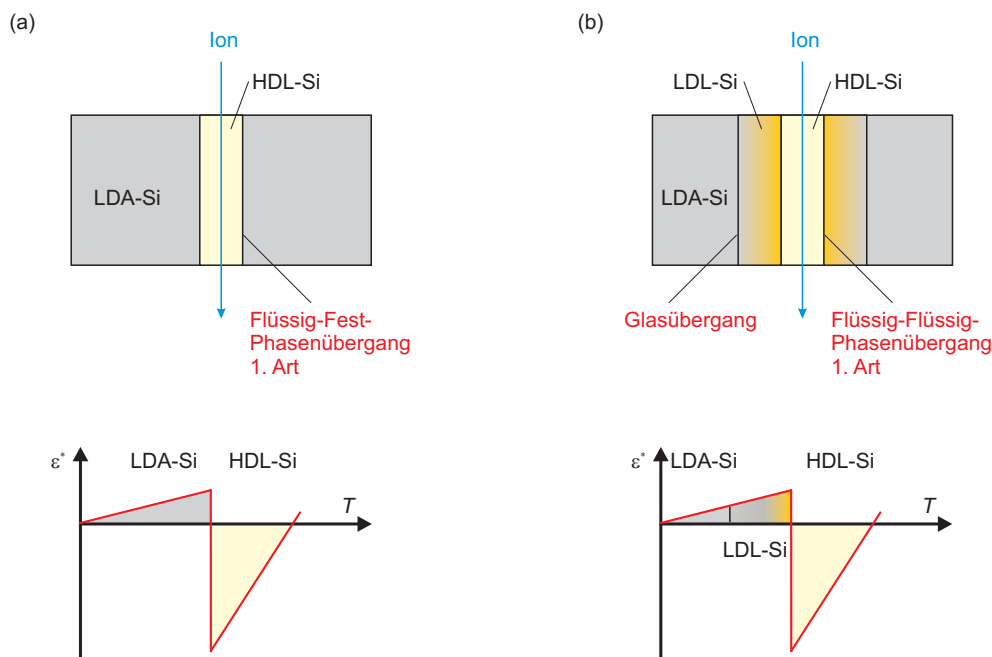


Abb. 5.1: Schematische Darstellung der niederviskosen Zone um die Ionenbahn. Sollte die LDL-Si Phase nicht existieren, besteht die nv-Zone aus der metallischen l-Si Phase, die im unterkühlten Bereich als metastabile HDL-Si Phase vorliegt (a). Diese erstarrt am Zonenrand direkt zur a-Si Phase LDA-Si. In diesem Falle besitzt die nv-Zone überwiegend eine Eigendehnung $\varepsilon^*(T) < 0$. Wenn die LDL-Si Phase dagegen existiert, wird der Rand der nv-Zone durch diese metastabile LDL-Si Phase bestimmt, die über einen Glasübergang zu LDA-Si einfriert, während im Inneren zudem die HDL-Si Phase vorliegen könnte (b). In diesem Falle besitzt die nv-Zone einen hohen Anteil an $\varepsilon^*(T) > 0$.

Deformationen könnten in der erstarrten LDA-Si Phase getrieben von den zugehörigen eingefrorenen elastischen Spannungen über Defektdiffusionen relaxieren, sich aber nicht im Vorzeichen ändern. Daher müsste eine Deformationsausbeute $A_0 \leq 0$ resultieren (vgl. Kap. 5.2), was im klaren Widerspruch zum experimentellen Befund steht [84]. Sollte hingegen bei der Erstarrung von HDL-Si am Rand der nv-Zone eine a-Si Phase entstehen, die den strukturellen Dichtesprung kompensiert, so dass $p = 0$ resultiert, müsste diese a-Si Phase entsprechend ca. 10% Vakanzen ausbilden. Dies würde für einen angenommenen maximalen Radius der nv-Zone von $R_0 \sim 3$ nm nach einer Fluenz von $\Phi_0 t \sim 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ zur Formierung einer porösen Schicht mit einer Stufenhöhe von mehreren μm führen. Auch dieses wurde im Experiment für $T_0 = 80$ K nicht beobachtet. Möglicherweise wäre diese poröse Struktur aber auch sehr schnell zur LDA-Si Phase kollabiert, die nach den Bestrahlungen nachgewiesen wurde. Dann würde allerdings wieder $p < 0$ gelten und eine Deformationsausbeute $A_0 \leq 0$ vorliegen [84].

Die obige Argumentation führt also im Rahmen der Kontinuumsmechanik zu einem Widerspruch mit der Annahme, dass die HDL-Si Phase direkt über einen Flüssig-Fest-Phasenübergang 1. Art erstarrt. Im Umkehrschluss stehen die im Rahmen dieser Arbeit erzielten Ergebnisse damit auch im Widerspruch zum postulierten Schmelzprozess der metastabilen LDA-Si Phase zur ebenfalls metastabilen HDL-Si Phase [84].

5.1.3 Nachweis eines Glasübergangs

Wenn die metastabile tetraedrische halbleitende LDL-Si Phase existiert, besteht die nv-Zone am Rand aus dieser LDL-Si Phase und je nach Höhe der Temperatur im Inneren außerdem aus der HDL-Si Phase bzw. der l-Si Schmelze (Abb. 5.1b). Am Rand der nv-Zone würde die LDL-Si Phase über einen Glasübergang kinetisch blockiert zur LDA-Si Phase einfrieren, so dass die unter Normaldruck existierende a-Si Phase LDA-Si als Glas und die LDL-Si Phase als entsprechende Glasschmelze bezeichnet werden können. Für höhere Temperaturen im Inneren der nv-Zone würde der bisher als "Schmelzprozess von LDA-Si" deklarierte Phasenübergang 1. Art als Flüssig-Flüssig-Phasenübergang zwischen der LDL-Si Phase und der HDL-Si Phase erfolgen. Da die thermisch expandierte LDL-Si Phase strukturell der LDA-Si Phase entspricht, hätte die nv-Zone einen hohen Anteil an Eigendehnung $\varepsilon^*(T) > 0$. Im mechanischen Gleichgewicht könnte daher in der nv-Zone ein hydrostatischer Druck $p > 0$ vorliegen. Somit bestände die Möglichkeit, dass an der Erstarrungsfront Deformationen mit gleichem Vorzeichen wie jene in konventionellen Gläsern eingefroren werden, was zu einer Deformationsausbeute $A_0 > 0$ führen würde (vgl. Kap. 5.2). In der Tat zeigen die experimentellen Ergebnisse genau diesen Fall, so dass allein aus der Richtung des beobachteten plastischen Fließens, d.h. dem Vorzeichen von A_0 , geschlossen werden kann, dass die LDL-Si Phase existiert und diese über einen Glasübergang zur LDA-Si Phase erstarrt [84].

5.2 Beschreibung des Deformationszustandes im Rahmen der EFT-Näherung

Die in den Kapn. 5.1.2 und 5.1.3 qualitativ diskutierte Interpretation der experimentellen Ergebnisse wird in den folgenden Abschnitten quantitativ im Rahmen der von Trinkaus *et al.* vorgeschlagenen EFT-Näherung (vgl. Kap. 2.4.2) [38–42] bestätigt. Während in diesem Kapitel der als *normierte Deformationsausbeute* bezeichnete Anstieg $\partial A_0/\partial S_e$ für Bestrahlungen mit $S_e > S_{e0}$ bei $T_0 = 80$ K berechnet und mit dem Experiment verglichen wird [84], schließt sich im Kap. 5.3 eine quantitative Analyse der induzierten Spannungen an [183]. Für die Rechnungen im Rahmen der EFT-Näherung werden die Effizienz der Energiekonversion vom Elektronensystem zum Gitter g , die effektive Fließtemperatur T^* und die Temperatur für den Phasenübergang 1. Art T_l zunächst als freie Parameter behandelt. Die experimentellen Befunde erlauben es jedoch, einen Wertebereich für diese Parameter aus den Ergebnissen zu extrahieren.

5.2.1 Modellierung der nv-Zone als elastische Inhomogenität

Um die Werte $\partial A_0/\partial S_e(g, T^*, T_l)$ über die Gln. (2.31), (2.33) bis (2.39) berechnen zu können, bedarf es nach Gl. (2.33) einer Modellierung der Eigendehnung der nv-Zone $\varepsilon^*(T)$ unter der zunächst hypothetischen Annahme der Existenz einer LDL-Si Phase. Im Gegensatz zu konventionellen Gläsern darf $\varepsilon^*(T)$ jedoch nicht nur den Anteil an thermischer Eigendehnung $\varepsilon_{th}^*(T) = \int_{T_0}^T \alpha^{th}(T') dT'$ enthalten, sondern muss sowohl

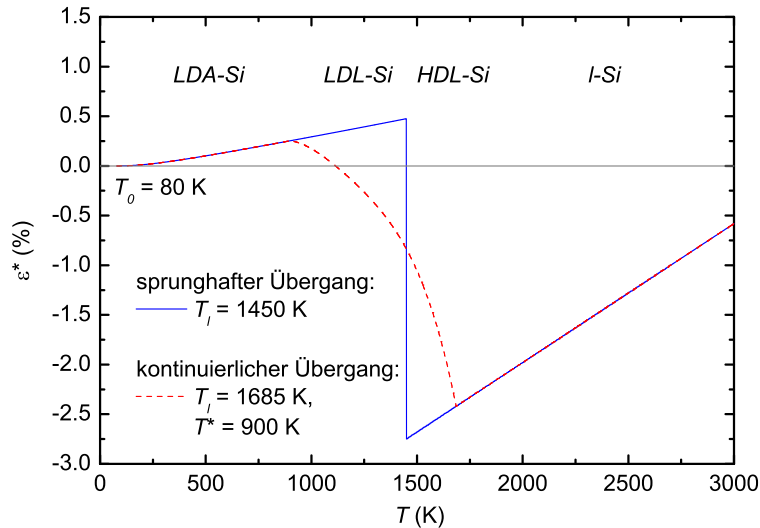


Abb. 5.2: Modellierung der Eigendehnung der nv-Zone. Dargestellt ist die zur Berechnung der normierten Deformationsausbeute $\partial A_0/\partial S_e(g, T^*, T_l)$ notwendige Modellierung der effektiven Eigendehnung $\varepsilon^*(T)$ der für $T \geq T^*$ vorliegenden nv-Zone bezüglich $T_0 = 80$ K. Die blaue Kurve zeigt $\varepsilon^*(T)$ im Falle einer abrupten strukturellen Dichteänderung von LDL-Si zu HDL-Si bei $T_l = 1450$ K. Die rote Kurve stellt $\varepsilon^*(T)$ für einen kontinuierlichen Übergang von LDA-Si zu l-Si im Bereich $T^* \leq T \leq T_l = T_m = 1685$ K dar, wobei als Beispiel $T^* = 900$ K angenommen wurde [84].

die strukturelle Dichteerhöhung als auch die Änderung der elastischen Konstanten beim Übergang von LDA-Si zu l-Si berücksichtigen. Somit entspricht die nv-Zone im Sinne der Eshelby-Theorie einer elastischen Inhomogenität [93]. Um die EFT-Näherung dennoch anwenden zu können, wird die Inhomogenität über ein etabliertes Substitutionsverfahren durch eine äquivalente elastische Inklusion ersetzt [94]. Für die Modellierung der resultierenden effektiven Eigendehnung $\varepsilon^*(T)$ wurden hinsichtlich der strukturellen Dichteänderung zwei Fälle angenommen: (i) ein abrupter Übergang zwischen LDL-Si und HDL-Si bei $T = T_l$, und (ii) ein kontinuierlicher Übergang im Bereich $T^* \leq T \leq T_l$ mit gleichem Verlauf wie der von ähnlich großen Korngrenzen in c-Si [162]. Die sich mit den entsprechenden Materialparametern bezüglich $T_0 = 80$ K ergebenden Kurven $\varepsilon^*(T)$ sind in Abb. 5.2 dargestellt (vgl. Anhang B.2). Während für die Darstellung des abrupten Übergangs als Beispiel $T_l = 1450$ K $\sim T_{al}$ gewählt wurde, bezieht sich der gezeichnete kontinuierliche Übergang auf $T^* = 900$ K und $T_l = 1685$ K = T_m . Da T^* und T_l für die Berechnung von $\partial A_0/\partial S_e$ als freie Parameter wirken sollten, wurden die Kurven $\varepsilon^*(T)$ zu jedem Parametersatz neu berechnet [84].

5.2.2 Berechnung der normierten Deformationsausbeute

Sollte die LDL-Si Phase nicht existieren, gilt $T^* = T_l$ und die beiden in Abb. 5.2 exemplarisch gezeigten Fälle sind identisch. Die im Rahmen der EFT-Näherung infolge analytischer Vereinfachungen numerisch ermittelten Lösungen für die normierte Deformationsausbeute $\partial A_0/\partial S_e(g, T^*)$ sind in Abb. 5.3 als Farbverlauf dargestellt. Da stets $\partial A_0/\partial S_e(g, T^*) < 0$ gilt, wird der bereits aus qualitativen Überlegungen erwartete Widerspruch zum Experiment (vgl. Kap. 5.1.2) hiermit quantitativ bekräftigt.

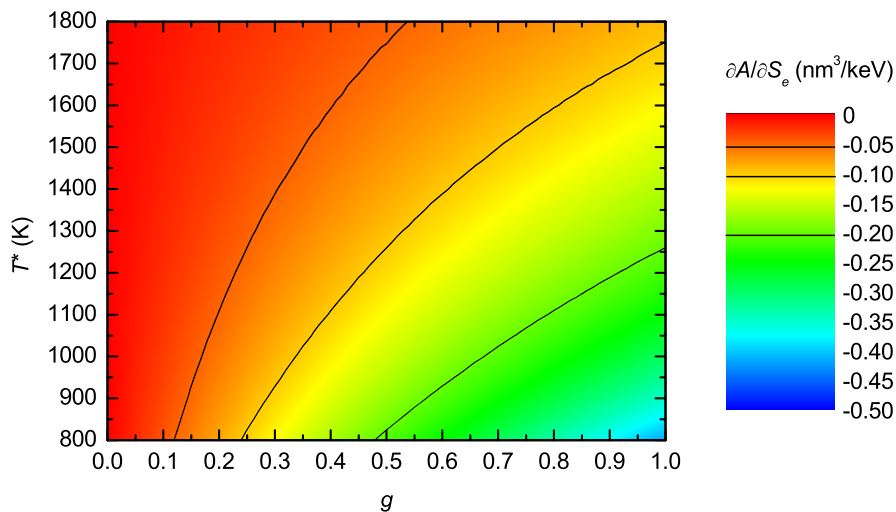


Abb. 5.3: Berechnung der normierten Deformationsausbeute ohne Existenz einer LDL-Si Phase. Der Farbverlauf stellt die für $T_0 = 80$ K berechnete normierte Deformationsausbeute $\partial A_0/\partial S_e$ als Funktion der freien Parameter g und $T^* = T_l$ im Falle einer vollständig aus HDL-Si bzw. l-Si bestehenden nv-Zone dar. Für einige Werte $\partial A_0/\partial S_e = \text{const.}$ wurden zudem Linien eingezeichnet [183].

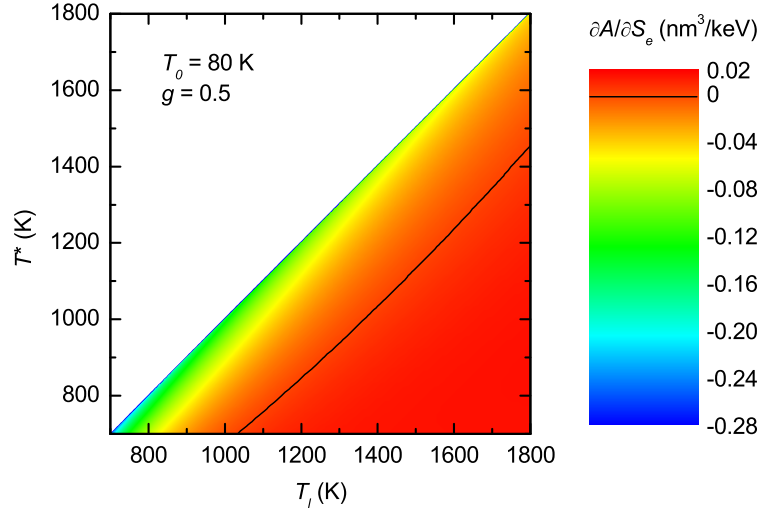


Abb. 5.4: Berechnung I der normierten Deformationsausbeute bei Existenz einer LDL-Si Phase. Der Farbverlauf stellt die für $T_0 = 80 \text{ K}$ mit $g = 0.5$ berechnete normierte Deformationsausbeute $\partial A_0 / \partial S_e$ als Funktion der freien Parameter T^* und T_l dar, wobei $T^* \leq T_l$ gilt und der in Abb. 5.2 dargestellte Sprungübergang mit variablem Wert für T_l angenommen wurde. Die eingezeichnete Linie hebt den Vorzeichenwechsel der Deformationsausbeute A_0 bei $\partial A_0 / \partial S_e = 0$ hervor [183].

Sollte die LDL-Si Phase dagegen existieren, ergeben sich je nach Wahl der Parameter (g, T^*, T_l) für beide in Abb. 5.2 betrachtete Modellierungen von $\varepsilon^*(T)$ auch Lösungen $\partial A_0 / \partial S_e(g, T^*, T_l) > 0$. Die für den abrupten Übergang von LDL-Si zu HDL-Si ermittelten Lösungen $\partial A_0 / \partial S_e(g, T^*, T_l)$ sind in Abb. 5.4 als Schnitt $\partial A_0 / \partial S_e(T^*, T_l)$ bei $g = 0.5$ und in Abb. 5.5 als Schnitt $\partial A_0 / \partial S_e(g, T^*)$ bei $T_l = 1450 \text{ K}$ jeweils als Farbverlauf dargestellt. Der experimentelle Befund $A_0 > 0$ kann somit auch infolge einer quantitativen Analyse als Nachweis für die Existenz von LDL-Si interpretiert werden.

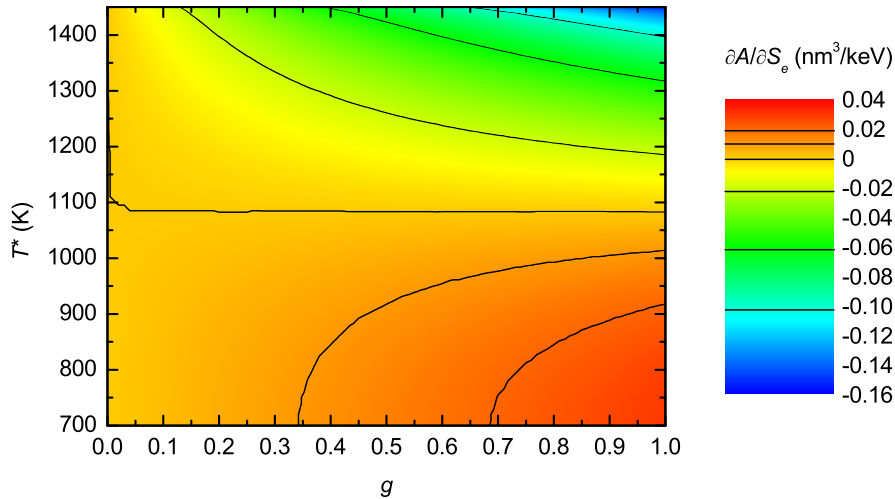


Abb. 5.5: Berechnung II der normierten Deformationsausbeute bei Existenz einer LDL-Si Phase. Der Farbverlauf stellt die für $T_0 = 80 \text{ K}$ berechnete normierte Deformationsausbeute $\partial A_0 / \partial S_e$ als Funktion der freien Parameter g und T^* dar, wobei der in Abb. 5.2 dargestellte Sprungübergang bei $T_l = 1450 \text{ K}$ angenommen wurde. Für einige Werte $\partial A_0 / \partial S_e = \text{const.}$ wurden zudem Linien eingezeichnet. Die Ergebnisse für $g = 0.5$ entsprechen denen aus Abb. 5.4 mit $T_l = 1450 \text{ K}$ [183].

5.2.3 Berechnung der effektiven Fließtemperatur

Aus den auf Basis der in Kap. 5.2.1 modellierten Kurven für die effektive Eigendehnung der nv-Zone $\varepsilon^*(T)$ für $T_0 = 80$ K berechneten Werten für die normierte Deformationsausbeute $\partial A_0/\partial S_e(g, T^*, T_l)$ können diejenigen Lösungen herausgefiltert werden, die mit dem experimentell ermittelten Wert von $\partial A_0/\partial S_e^{exp} = 7.4 \times 10^{-3} \text{ nm}^3/\text{keV}$ übereinstimmen. Tatsächlich kann der experimentelle Befund im Rahmen der EFT-Näherung unter geeigneter Wahl der freien Parameter (g, T^*, T_l) beschrieben werden. In Abb. 5.6 sind die sich im Falle eines abrupten Übergangs von LDL-Si zu HDL-Si ergebenden Lösungen als Farbverlauf $T^*(g, T_l)$ im physikalisch relevanten Temperaturbereich $1300 \text{ K} \leq T_l \leq 1600 \text{ K}$ (vgl. Kap. 2.5.3) und im Vertrauensbereich der EFT-Näherung $0.4 \leq g \leq 1.0$ (vgl. Abb. 5.8) dargestellt. Für die Berechnung wurde ein Fehlerintervall für $\partial A_0/\partial S_e^{exp}$ von $\pm 10\%$ zugelassen, so dass zu einem festen Parametersatz (g, T_l) der Mittelwert des sich ergebenden Wertebereichs für T^* eingezeichnet ist. Während die Streuung um diesen Mittelwert für $g \geq 0.4$ ungefähr $\Delta(T^*) \sim \pm 10 \text{ K}$ betrug, stieg diese für $g < 0.4$ mit fallendem g auf $\Delta(T^*) \sim \pm 250 \text{ K}$ stark an, so dass die ermittelten Werte T^* für $g < 0.4$ nicht aussagekräftig sind. In Abb. 5.6 ist ersichtlich, dass die für $g \geq 0.4$ ermittelte effektive Fließtemperatur im Bereich $800 \text{ K} \leq T^* \leq 1200 \text{ K}$ und damit deutlich unterhalb der Temperatur T_l des Flüssig-Flüssig-Phasenübergangs 1. Art liegt [84]. Da die Scherspannungsrelaxationszeit der unterkühlten l-Si Phase in diesem Temperaturbereich $\tau_s \sim 10 \text{ ps}$ beträgt [84, 121], nimmt T^* auf dieser Zeitskala die physikalische Bedeutung der Glastemperatur T_g an, welche für konventionelle Gläser auf der 10^2 s -Zeitskala angegeben wird [184].

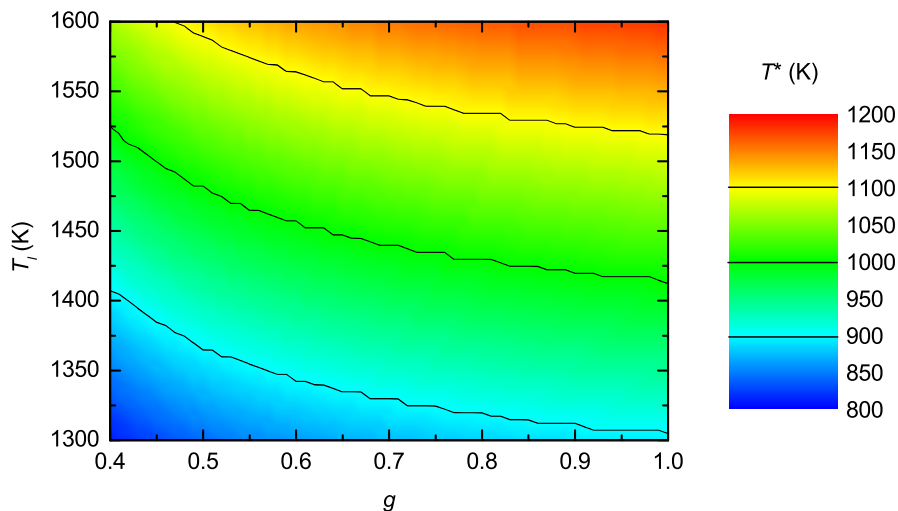


Abb. 5.6: Berechnung der effektiven Fließtemperatur aus den Messungen zur normierten Deformationsausbeute. Der Farbverlauf stellt alle jene Werte T^* als Funktion der freien Parameter g und T_l dar, für welche die für $T_0 = 80$ K berechnete normierte Deformationsausbeute $\partial A_0/\partial S_e$ mit dem experimentellen Wert $\partial A_0/\partial S_e^{exp} = 7.4 \times 10^{-3} \text{ nm}^3/\text{keV}$ mit einem relativen Fehler von $\pm 10\%$ übereinstimmt. Die Rechnungen basieren auf dem in Abb. 5.2 gezeigten Sprungübergang mit einem variablem Wert T_l . Für einige Werte $T^* = \text{const.}$ wurden zudem Linien eingezeichnet [183].

Da die aus Experimenten zur Laserbestrahlung von LDA-Si abgeleitete Temperatur für den Phasenübergang 1. Art, die bisher als Schmelztemperatur von a-Si bezeichnet wurde, bei $T_{al} \sim 1450$ K liegt [100, 106, 140], können die in Abb. 5.6 veranschaulichten Lösungen $T^*(g, T_l)$ durch die Bedingung $T_l = 1450$ K $\sim T_{al}$ weiter eingeschränkt werden. In Abb. 5.7 ist die zur Beschreibung der Experimente ermittelte Kurve für die beiden verbleibenden freien Parameter $T^*(g)$ über dem gesamten Wertebereich $0 \leq g \leq 1$ blau dargestellt. Während für $g < 0.4$ die beschriebene deutliche Streuung der Werte T^* bei festem Wert g ersichtlich wird, zeigen die Ergebnisse im Vertrauensbereich der EFT-Näherung $0.4 \leq g \leq 1.0$ (vgl. Abb. 5.8) sowohl eine geringe Streuung von T^* bei festem Wert g als auch eine allgemein über den gesamten Bereich $g \geq 0.4$ relativ konstante effektive Fließtemperatur von $T^* \sim (1000 \pm 50)$ K [84].

Die analog vorgenommenen Rechnungen auf Basis der in Kap. 5.2.1 modellierten kontinuierlichen strukturellen Dichteänderung im Bereich $T^* \leq T \leq T_l = T_m = 1685$ K führen im Einklang mit dem experimentellen Wert der normierten Deformationsausbeute zu der in Abb. 5.7 rot dargestellten Kurve $T^*(g)$. Während diese Rechnungen allgemein kleinere Werte für T^* ergeben, zeigen sie dennoch für $g \geq 0.7$ eine relativ gute Übereinstimmung mit den Interpretationen der Ergebnisse kalorimetrischer Untersuchungen [140, 143] und jenen von Computer-Simulationen [173]. Da die Glastemperatur von LDA-Si jedoch im Bereich 950 K $\leq T_g \leq 1200$ K vermutet wird [44], kann das Ergebnis der Rechnung für den abrupten Übergang als realistischer angesehen werden [84].

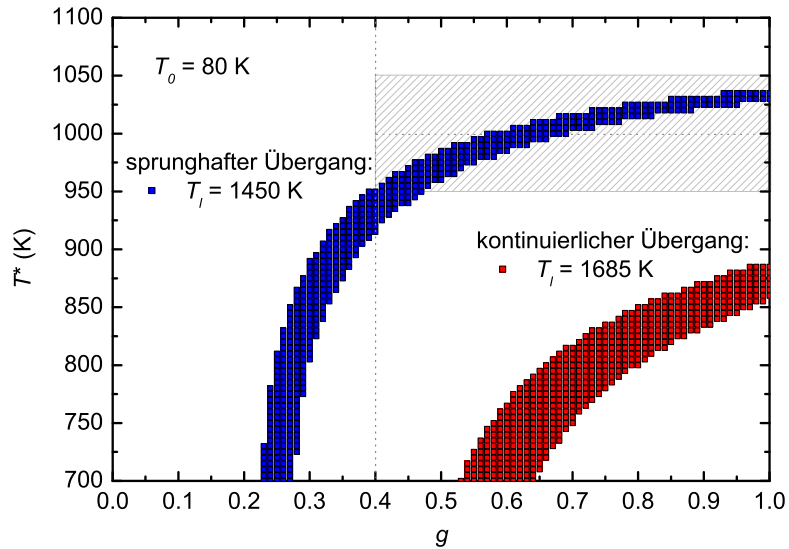


Abb. 5.7: Einschränkung des Wertebereichs der berechneten effektiven Fließtemperatur. Dargestellt sind jene für $T_l = \text{const.}$ ermittelten Werte der freien Parameter T^* und g , für welche die für $T_0 = 80$ K berechnete normierte Deformationsausbeute $\partial A_0 / \partial S_e$ mit dem experimentellen Wert von $\partial A_0 / \partial S_e^{\text{exp}} = 7.4 \times 10^{-3} \text{ nm}^3 / \text{keV}$ mit einem relativen Fehler von $\pm 10\%$ übereinstimmt. Die in blau dargestellte Kurve basiert auf dem in Abb. 5.2 gezeigten Sprungübergang bei $T_l = 1450$ K und verkörpert damit einen Schnitt der in Abb. 5.5 dargestellten Ergebnisse bei dem Wert $\partial A_0 / \partial S_e^{\text{exp}}$, bzw. entspricht den zum Teil in Abb. 5.6 dargestellten Ergebnissen für $T_l = 1450$ K. Die in rot gezeichnete Kurve basiert auf dem in Abb. 5.2 modellierten Fall einer kontinuierlichen strukturellen Dichteänderung mit einem variablem Wert T^* und $T_l = T_m = 1685$ K [84].

5.2.4 Vergleich mit anderen amorphen Materialien

Der im Rahmen der EFT-Näherung [38–42] theoretisch erklärbare Wert der experimentell ermittelten normierten Deformationsausbeute $\partial A_0/\partial S_e^{exp}$ von LDA-Si bei $T_0 = 80$ K kann nun mit entsprechenden theoretischen und experimentellen Werten anderer äquivalent bestrahlter amorpher Materialien verglichen werden. In Abb. 5.8 ist ein solcher Vergleich zwischen $\partial A_0/\partial S_e^{exp}$ und $\partial A_0/\partial S_e^{theo}$ dargestellt. Da die theoretischen Werte der konventionellen Gläser über Gl. (2.40) mit $g = 1$ berechnet wurden, können aus den jeweiligen Verhältnissen $(\partial A_0/\partial S_e^{exp})/(\partial A_0/\partial S_e^{theo})$ die Werte von g ermittelt werden. Es zeigt sich, dass alle g -Werte im Bereich $0.4 \leq g \leq 1.0$ liegen, so dass die experimentell ermittelten Anstiege $\partial A_0/\partial S_e^{exp}$ in diesem Vertrauensbereich sehr erfolgreich im Rahmen der EFT-Näherung beschrieben werden können (vgl. Kap. 2.4.2). Da zur Berechnung von $\partial A_0/\partial S_e^{theo}$ für LDA-Si aufgrund der strukturellen Dichteänderung beim Übergang zu l-Si die allgemeinere Gl. (2.39) gelöst werden musste und somit neben g auch T^* und T_l freie Parameter bilden, konnte mit der Einschränkung $T_l = 1450$ K der Wert $T^* \sim 1000$ K abgeschätzt werden, jedoch für g nur der Vertrauensbereich $0.4 \leq g \leq 1.0$ angegeben werden. Folglich kann für LDA-Si in Abb. 5.8 nur eine Linie eingezeichnet werden. Auf jeden Fall folgt aus Abb. 5.8, dass sich LDA-Si auch im Rahmen der mikroskopischen EFT-Näherung wie ein Glas verhält [84].

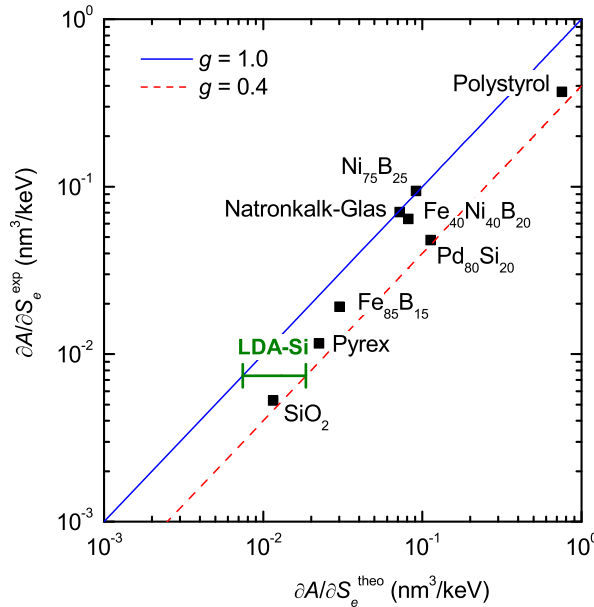


Abb. 5.8: Vergleich von berechneter und experimentell ermittelter normierter Deformationsausbeute. Dargestellt sind die experimentell ermittelten Werte der normierten Deformationsausbeute $\partial A_0/\partial S_e^{exp}$ über dem jeweiligen theoretischen Wert $\partial A_0/\partial S_e^{theo}$ für verschiedene bei $T_0 = 80$ K bestrahlte amorphe Materialien. Die Werte für $\partial A_0/\partial S_e^{theo}$ wurden über die EFT-Näherung mit $g = 1$ berechnet [38]. Aus den bestehenden Abweichungen $\partial A_0/\partial S_e^{exp} \leq \partial A_0/\partial S_e^{theo}$ folgt ein Vertrauensbereich von $0.4 \leq g \leq 1.0$, so dass die blaue Linie bei $g = 1$ die obere Grenze und die rote Linie bei $g = 0.4$ die untere Grenze der Gültigkeit der EFT-Näherung entspricht. Für die a-Si Phase LDA-Si kann nur der markierte Bereich angegeben werden, da in die Berechnung von $\partial A_0/\partial S_e^{theo}$ gegenüber der von konventionellen Gläsern neben g noch zusätzlich der freie Parameter T^* eingeht [84].

5.3 Beschreibung des Spannungszustandes im Rahmen der EFT-Naherung

5.3.1 Berechnung der planaren Sattigungsspannung

Um die in der a-Si Schicht durch die Bestrahlung induzierten Spannungen $\underline{\underline{\sigma}}^s$ im Rahmen der EFT-Naherung zu beschreiben, muss die in Gl. (2.24) bisher als isotrop angenommene und durch den Skalar $k_0\Phi_0$ vereinfachte Fluiditat $\underline{\underline{k}}\Phi_0$ nach Gl. (2.43) durch die entsprechenden Komponenten des Fluiditatstensors $\underline{\underline{F}}$ ausgedruckt werden (vgl. Anhang B.1). Fur die Bestrahlungen, die mit $\Theta = 0^\circ$ vorgenommen wurden, liegt im Zentralbereich x - y -Symmetrie vor, und es ergibt sich eine den Gln. (4.4) und (4.5) entsprechende Differentialgleichung fur die planaren Spannungen $\sigma_{xx}^s(z, t) = \sigma_{yy}^s(z, t)$,

$$0 = \frac{1}{2G} \frac{\partial}{\partial t} \left[\sigma_{xx}^s - \frac{\nu \hat{\sigma}^s}{\nu + 1} \right] + k_s \Phi_0 \left[\sigma_{xx}^s - \frac{\hat{\sigma}^s}{3} \right] + A_0 \Phi_0, \quad (5.1)$$

wobei sich der Tensor $\underline{\underline{k}}\Phi_0$ auf den sich unter senkrechter Bestrahlung ergebenden Fluiditatsterm $\underline{\underline{k}}_s\Phi_0$ reduziert (vgl. Gl. (5.3)). Mit der Anfangsspannung σ_0 und der Bedingung fur dunne Schichten $S_e \sim \text{const.}$ resultiert eine den Gln. (4.59) und (4.60) entsprechende, von der Tiefe z unabhangige Losung in EFT-Naherung

$$\sigma_{xx}^s(t) = \sigma_{yy}^s(t) = \sigma_c \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_Y}\right) \right] + \sigma_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau_Y}\right) \quad (5.2)$$

wobei $\sigma_{xx}^s(t) = \sigma_{yy}^s(t)$ fur $\Phi_0\tau_Y \gg 3/(Yk_s)$ den Sattigungswert $\sigma_c = -3A_0/k_s$ annimmt.

In Abb. 5.9 ist der aus dem experimentellen Wert der Deformationsausbeute A_0 fur die senkrechte 600 MeV Bestrahlung

bei $T_0 = 80$ K berechnete Fluiditatsterm $k_s = -3A_0/\sigma_c$ und die sich daraus ergebende charakteristische Fluenz $\Phi_0\tau_Y$ als Funktion von σ_c dargestellt. Der experimentell im Fluenzbereich $\Phi_0 t \sim 10^{13} \text{ cm}^{-2} \gg \Phi_0\tau_Y$ ermittelte Wert der Sattigungsspannung von $\sigma_c \sim (-70 \pm 10) \text{ MPa}$ (vgl. Kap. 4.4.3) lasst sich daher in EFT-

Naherung durch den Fluiditatsterm $k_s \sim (2.2 \pm 0.3) \times 10^{-21} \text{ m}^2/\text{MPa}$ beschreiben und aus diesem die effektive Flietemperatur T^* uber eine alternative Methode bestimmen.

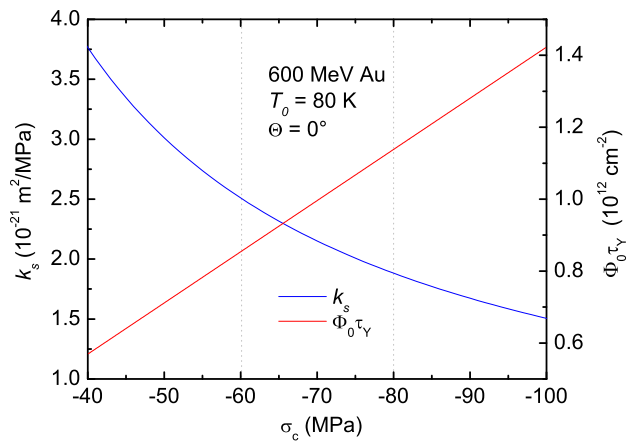


Abb. 5.9: Berechnung der Fluiditat aus der Deformationsausbeute. Dargestellt ist der aus dem experimentellen Wert der Deformationsausbeute A_0 ermittelte Fluiditatsterm k_s und die resultierende charakteristische Fluenz $\Phi_0\tau_Y$ als Funktion des Sattigungswertes der planaren Spannung σ_c fur die bei $T_0 = 80$ K vorgenommene senkrechte 600 MeV Bestrahlung [183].

5.3.2 Berechnung der effektiven Fließtemperatur

Aus der zur Beschreibung der Sättigungsspannung σ_c ermittelten Fluidität $k_s\Phi_0$ kann im Rahmen der EFT-Näherung über die Beziehung (vgl. Anhang B.1)

$$\underline{\underline{k_s\Phi_0}} = \frac{\Phi_0}{2G} \pi R_{max}^2 \underline{\underline{F}} \quad \rightarrow \quad k_s\Phi_0 = \frac{\Phi_0}{2G} \pi R_{max}^2 F_s, \quad \text{wobei } F_s = 2 \frac{1-\nu}{5-4\nu} \quad (5.3)$$

auf Basis der Energieerhaltung nach Gl. (2.31) die effektive Fließtemperatur zu

$$T^*(g) = T_0 + \frac{1-\nu}{5-4\nu} \frac{gS_e}{e\rho C k_s G} = T_0 - \frac{1-\nu}{5-4\nu} \frac{gS_e}{e\rho C} \frac{\sigma_c}{3GA_0} \quad (5.4)$$

berechnet werden. Da diese Methode der Bestimmung von T^* unabhängig von der Modellierung der Eigendehnung der nv-Zone $\varepsilon^*(T)$ ist, und Gl. (5.4) neben Materialeigenschaften nur die aus den Experimenten abgeleiteten Werte der Deformationsausbeute $A_0(S_e, T_0)$ und der Sättigungsspannung unter senkrechter Bestrahlung $\sigma_c(S_e, T_0)$ sowie den freien Parameter g enthält, kann eine analytische Lösung unmittelbar angegeben werden. In Abb. 5.10 ist die sich mit den entsprechenden Werten für die vorgenommenen 600 MeV Au Bestrahlungen bei $T_0 = 80$ K ergebende Kurve $T^*(g)$ im Vergleich zu der aus der normierten Deformationsausbeute $\partial A_0/\partial S_e$ für $T_0 = 80$ K ermittelten Kurve $T^*(g)$ (vgl. Abb. 5.7) dargestellt. Da beide Kurven im Bereich $0.7 \leq g \leq 0.9$ mit $T^* \sim (1000 \pm 100)$ K eine exzellente Übereinstimmung aufweisen, zeigen die in dieser Arbeit erzielten Ergebnisse eine Selbstkonsistenz im Rahmen der EFT-Näherung [183].

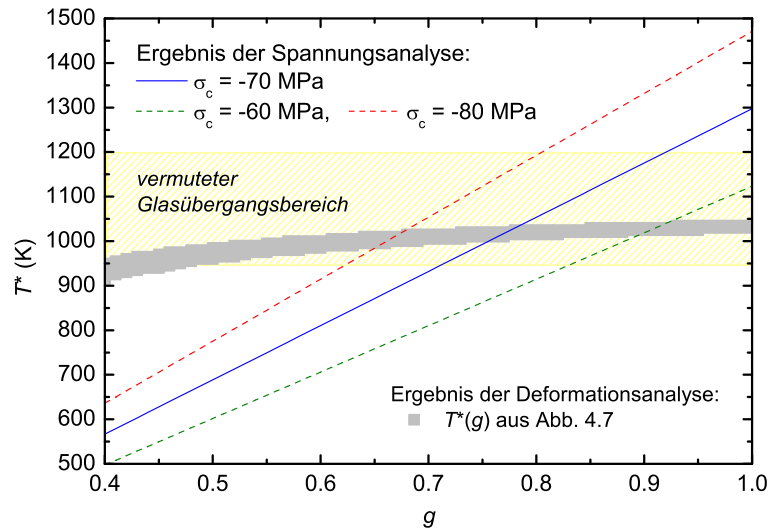


Abb. 5.10: Berechnung der effektiven Fließtemperatur aus der planaren Sättigungsspannung. Dargestellt ist die in EFT-Näherung berechnete Kurve $T^*(g)$, die sich unter 600 MeV Au Bestrahlung bei $T_0 = 80$ K aus den experimentellen Werten der Sättigungsspannung $\sigma_c = (-70 \pm 10)$ MPa für $\Theta = 0^\circ$ (vgl. Abb. 4.40a) und der Deformationsausbeute $A_0 = (5.02 \pm 0.50) \times 10^{-2} \text{ nm}^2$ (vgl. Tab. 4.5) ergibt [183]. Zum Vergleich ist die aus der normierten Deformationsausbeute $\partial A_0/\partial S_e$ in EFT-Näherung ermittelte und in Abb. 5.7 blau dargestellte Kurve $T^*(g)$ grau eingezeichnet. Der bisher vermutete Glasübergangsbereich zwischen LDA-Si und LDL-Si ist zudem gelb hervorgehoben [44].

Kapitel 6

Zusammenfassung

Für die Untersuchungen zur plastischen Deformation von a-Si unter SHI-Bestrahlung wurden zunächst $5.7 \mu\text{m}$ dicke, H-freie, amorphe Oberflächenschichten über niederenergetische Si Ionenimplantationen in c-Si hergestellt. Der dabei ausgenutzte hohe nukleare Energieeintrag S_n führt auch unter SHI-Bestrahlung zu einer Amorphisierung des c-Si Substrats, allerdings je nach Ioneneinfallswinkel Θ in der Tiefe $z \sim -(15 \dots 40) \mu\text{m}$, so dass die Wirkung des an der Oberfläche dominierenden elektronischen Energieeintrags $S_e \gg S_n$ separat untersucht werden konnte. Während c-Si für Bestrahlungen mit $S_e \lesssim 21 \text{ keV/nm}$ wie erwartet inert ist, bleibt auch die a-Si Oberflächenschicht amorph. Diese wird jedoch unter schräger Bestrahlung bei $T_0 = 300 \text{ K}$ für hohe Fluenzen $\Phi_0 t \gtrsim 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ und hohe Energieeinträge $S_e \sim 21 \text{ keV/nm}$ porös und enthält nanokristalline Einschlüsse nahe der Grenzfläche zum c-Si Substrat.

Der zur plastischen Deformation konventioneller Gläser führende Hämmerungseffekt der SHI-Bestrahlung wurde in a-Si oberhalb des Schwellwertes $S_{e0} \sim 14.2 \text{ keV/nm}$ ebenfalls nachgewiesen. Die unbestrahlte bzw. kristalline Umgebung wirkt jedoch als mechanische Beschränkung, so dass in der bestrahlten a-Si Schicht Spannungen induziert werden, welche eine Deformation unter senkrechter Bestrahlung verhindern. Der Spannungsaufbau konnte über in-situ Messungen der Krümmungsradien freitragender Proben nachgewiesen werden, wobei für $\Phi_0 t \gtrsim 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ eine Sättigung beobachtet wurde, die im Falle einer 600 MeV Au Bestrahlung bei $T_0 = 80 \text{ K}$ durch die biaxialen kompressiven Spannungen $\sigma_{xx}^s = \sigma_{yy}^s \sim (-70 \pm 10) \text{ MPa}$ gekennzeichnet ist. Die Ausbildung eines stationären Zustandes entsteht durch ein Gleichgewicht des Spannungsaufbaus mit einer Spannungsrelaxation über viskoses Fließen, welches im Fluenzbereich $\Phi_0 t \lesssim 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ auch zur Relaxation der durch die Probenherstellung induzierten biaxialen kompressiven Vorspannung $\sigma_0 \sim (-130 \pm 50) \text{ MPa}$ führt.

Aufgrund der spannungsfreien Probenoberfläche kann die anisotrope Deformation des Hämmerungseffektes unter schräger Bestrahlung jedoch nicht vollständig durch einen Spannungsaufbau kompensiert werden, so dass die a-Si Schicht auf dem c-Si Substrat entlang der Projektion des Ionenstrahls auf die Probenoberfläche plastisch fließt und in Richtung dieser Wirkungslinie eine Sättigungsspannung von $\sigma_{xx}^s = 0$ enthält. Für alle schrägen Bestrahlungen, die nicht zur Formierung einer porösen a-Si Schicht führten, wurde eine stationäre Schergeschwindigkeit $v_x(z) \sim \text{\AA}/\text{s}$ ermittelt. Der Vergleich mit der plastischen Deformation eines B270-Kronglases zeigt, dass sich a-Si unter diesen

Bedingungen wie ein konventionelles Glas verhält. Hingegen scheint die Formierung einer porösen Schicht mit einer nichtstationären Schergeschwindigkeit $v_x(z, t)$ und einer nichtsättigenden vertikalen Dehnung $\Delta z(t)$ verbunden zu sein, die beide nahezu exponentiell mit steigender Fluenz zunehmen. Eine 600 MeV Au Bestrahlung mit $\Phi_0 t \sim 2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ führte somit zu einer Volumenänderung von $\sim 50\%$ [181].

Die unter Bestrahlung bei tiefen Temperaturen beobachteten Effekte wurden in sehr guter Übereinstimmung durch ein um den Hämmerungseffekt erweitertes makroskopisches viskoelastisches Maxwell-Modell theoretisch beschrieben. Es konnten allgemeingültige Lösungen zur Charakterisierung des homogenen Deformations- bzw. Spannungszustandes im Zentralbereich der Bestrahlung sowie der ortsabhängigen Deformation am Randbereich parallel zur Wirkungslinie angegeben werden, und die Formierung einer Graben- und Wallstruktur an den Randbereichen senkrecht zur Wirkungslinie qualitativ erklärt und quantitativ begründet werden [180]. Diese theoretische Modellierung ermöglichte es, Werte für die Deformationsausbeute von a-Si von $A_0 \sim (1 \dots 5) \times 10^{-2} \text{ nm}^2$ zu extrahieren, sowie deren linearen Anstieg für $S_e > S_{e0}$ mit $\partial A_0 / \partial S_e = (7.4 \pm 0.7) \times 10^{-3} \text{ nm}^3 / \text{keV}$ für $T_0 = 80 \text{ K}$ anzugeben [84].

Die ermittelten Werte der normierten Deformationsausbeute $\partial A_0 / \partial S_e$ einerseits und der Sättigungsspannungen σ_{xx}^s andererseits konnten im Rahmen des mikroskopischen viskoelastischen Modells zur Erklärung der ionenstrahlinduzierten Deformation nach Trinkaus *et al.* [38–42] selbstkonsistent quantitativ beschrieben werden [84]. Da die plastische Deformation eingefrorene Informationen zur Eigendehnung und zur Fluidität der auf der ps-Zeitskala existierenden heißen Ionenspur enthält, ist es im Gegensatz zur in-situ Analyse der Wirkung kurzzeitiger Laserpulse [185, 186] oder der Levitationstechnik [115] mittels SHI-Bestrahlung möglich, nähere Aussagen zum Phasenübergang zwischen l-Si und a-Si zu erhalten. So stehen die in dieser Arbeit erzielten Ergebnisse in ihrer Interpretation im Widerspruch zum bisher postulierten aber angezweiferten Flüssig-Fest-Phasenübergang 1. Art und belegen vielmehr die Existenz eines Polymorphismus in der unterkühlten Flüssigkeit mit einem Flüssig-Flüssig-Phasenübergang 1. Art zwischen einer hochkoordinierten metallischen HDL-Si Phase und einer tetraedrischen halbleitenden LDL-Si Phase, die über einen Glasübergang zur strukturell identischen a-Si Phase LDA-Si erstarrt [84]. Aus der selbstkonsistenten quantitativen Analyse der plastischen Deformation von a-Si folgt in exzellenter Übereinstimmung mit dem vermuteten p - T -Phasendiagramm der unterkühlten l-Si Phase [44] eine Glastemperatur von $T^* \sim 1000 \text{ K}$ für die Zeitskala von $\sim 10 \text{ ps}$ [84].

Auf der Basis dieser Ergebnisse wurden bereits weitergehende Untersuchungen zum Phasenübergang zwischen der halbleitenden amorphen Phase LDA-Si und der hochkoordinierten metallischen amorphen Phase HDA-Si vorgenommen [187] sowie ein Relaxationsdiagramm für amorphes Si und unterkühltes l-Si vorgeschlagen [184].

Literaturverzeichnis

- [1] H. RYSSEL, I. RUGE: *Ionenimplantation*. Akad. Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1978
- [2] M. NASTASI, J.W. MAYER, J.K. HIRVONEN: *Ion-Solid Interactions: Fundamentals, Applications*. Cambridge University Press, 1996
- [3] G. GÖTZ, K. GÄRTNER: *High Energy Ion Beam Analysis of Solids*. Akademie-Verlag Berlin, 1988
- [4] H. HOMEYER, A. DENKER, J. RÖHRICH: *ISL Berlin*. enka-druck, Berlin, 2001
- [5] W. WESCH, A. KAMAROU, E. WENDLER: In: *Nucl. Instr. Meth. B* **225** (2004), S. 111
- [6] S. KLAUMÜNZER, G. SCHUMACHER: In: *Phys. Rev. Lett.* **51** (1983), S. 1987
- [7] S. KLAUMÜNZER, M.D. HOU, G. SCHUMACHER: In: *Phys. Rev. Lett.* **57** (1986), S. 850
- [8] A. AUDOUARD, E. BALANZAT, G. FUCHS, J.C. JOUSSET, D. LESUEUR, L. THOMÉ: In: *Europhys. Lett.* **3** (1987), S. 327
- [9] A. AUDOUARD, E. BALANZAT, J.C. JOUSSET, G. FUCHS, D. LESUEUR, L. THOMÉ: In: *Nucl. Instr. Meth. B* **39** (1989), S. 18
- [10] S. KLAUMÜNZER, C. LI, S. LÖFFLER, M. RAMMENSEE, G. SCHUMACHER, H.C. NEITZERT: In: *Rad. Eff. Def. Solids* **108** (1989), S. 131
- [11] S. KLAUMÜNZER, C. LI, S. LÖFFLER, M. RAMMENSEE, G. SCHUMACHER: In: *Nucl. Instr. Meth. B* **39** (1989), S. 665
- [12] M.D. HOU, S. KLAUMÜNZER, G. SCHUMACHER: In: *Phys. Rev. B* **41** (1990), S. 1144
- [13] S. KLAUMÜNZER, M. RAMMENSEE, S. LÖFFLER, H.C. NEITZERT, G. SAEMANN-ISCHENKO: In: *J. Mater. Res.* **6** (1991), S. 2109
- [14] S. KLAUMÜNZER: In: *Int. J. Radiat. Appl. Instrum. D* **19** (1991), S. 91
- [15] S. KLAUMÜNZER, A. BENYAGOUR : In: *Phys. Rev. B* **43** (1991), S. 7502
- [16] S. KLAUMÜNZER: In: *Mat. Sci. For.* **97-99** (1992), S. 623
- [17] A. BENYAGOUR, S. KLAUMÜNZER: In: *Rad. Eff. Def. Solids* **126** (1993), S. 105
- [18] A. GUTZMANN, S. KLAUMÜNZER, A. BENYAGOUR, D. NAGENGAST: In: *Rad. Eff. Def. Solids* **126** (1993), S. 133
- [19] A. AUDOUARD, E. BALANZAT, J.C. JOUSSET, D. LESUEUR, L. THOMÉ: In: *J. Phys. Condens. Matter* **5** (1993), S. 995
- [20] A. GUTZMANN, S. KLAUMÜNZER, P. MEIER: In: *Phys. Rev. Lett.* **74** (1995), S. 2256
- [21] L. CLICHE, S. ROORDA, M. CHICOINE, R.A. MASUT: In: *Phys. Rev. Lett.* **75** (1995), S. 2348
- [22] M. CHICOINE, S. ROORDA, L. CLICHE, R.A. MASUT: In: *Phys. Rev. B* **56** (1997), S. 1551
- [23] A. GUTZMANN, S. KLAUMÜNZER: In: *Nucl. Instr. Meth. B* **127/128** (1997), S. 12

- [24] A. AUDOUARD, R. MAMY, M. TOULEMONDE, G. SZENES, L. THOMÉ: In: *Europhys. Lett.* **40** (1997), S. 527
- [25] S. KLAUMÜNZER: In: *Multisc. Phenom. in Plast.* **367** (2000), S. 441
- [26] C. TRAUTMANN, S. KLAUMÜNZER, H. TRINKAUS: In: *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000), S. 3648
- [27] T. VAN DILLEN, A. POLMAN, C.M. VAN KATS, A. VAN BLAADEREN: In: *Appl. Phys. Lett.* **83** (2003), S. 4315
- [28] S. KLAUMÜNZER: In: *Nucl. Instr. Meth. B* **215** (2004), S. 345
- [29] S. KLAUMÜNZER: In: *Nucl. Instr. Meth. B* **225** (2004), S. 136
- [30] T. VAN DILLEN, M.Y.S. SIEM, A. POLMAN: In: *Appl. Phys. Lett.* **85** (2004), S. 389
- [31] T. VAN DILLEN, M.J.A. DE DOOD, J.J. PENNINKHOF, A. POLMAN, S. ROORDA, A.M. VREDENBERG: In: *Appl. Phys. Lett.* **84** (2004), S. 3591
- [32] T. VAN DILLEN, A. VON BLAADEREN, A. POLMAN: In: *Mat. Today* **7-8** (2004), S. 40
- [33] C. D'ORLÉANS, J.P. STOQUERT, C. ESTOURNÈS, J.J. GROB, D. MULLER, C. CERRUTI, F. HAAS: In: *Nucl. Instr. Meth. B* **225** (2004), S. 154
- [34] S. ROORDA, T. VAN DILLEN, A. POLMAN, C. GRAF, A. VON BLAADEREN, B.J. KOOI: In: *Adv. Mater.* **16** (2004), S. 235
- [35] G. SZENES: In: *Mat. Sci. For.* **97-99** (1992), S. 647
- [36] A.I. RYAZANOV, A.E. VOLKOV, S. KLAUMÜNZER: In: *Phys. Rev. B* **51** (1995), S. 12107
- [37] V.A. BORODIN, A.E. VOLKOV, D.N. KOROLEV: In: *Nucl. Instr. Meth. B* **209** (2003), S. 122
- [38] H. TRINKAUS, A.I. RYAZANOV: In: *Phys. Rev. Lett.* **74** (1995), S. 5072
- [39] H. TRINKAUS: In: *J. Nucl. Mater.* **223** (1995), S. 196
- [40] H. TRINKAUS: In: *Nucl. Instr. Meth. B* **107** (1996), S. 155
- [41] H. TRINKAUS: In: *J. Nucl. Mater.* **246** (1997), S. 244
- [42] H. TRINKAUS: In: *Nucl. Instr. Meth. B* **146** (1998), S. 204
- [43] LANDOLT-BÖRNSTEIN: *Group III Condensed Matter*. New Series Vol. 41E/17i. Springer-Verlag Berlin, 2003
- [44] S.K. DEB, M.C. WILDING, M. SOMAYAZULU, P.F. McMILLAN: In: *Nature* **414** (2001), S. 528
- [45] J.F. ZIEGLER, J.P. BIRSACK, U. LITTMARK: *The Stopping, Range of Ions in Solids*. Pergamon Press, New York, 2003
- [46] J. LINDHARD, M. SCHARFF, H.E. SCHIØTT: In: *Kgl. Danske Videnskab. Selskab., Mat.-Fys. Medd.* **33** (1963), Nr. 14
- [47] N. BOHR: In: *Phil. Mag.* **25** (1913), S. 10
- [48] H. BETHE: In: *Ann. Phys.* **5** (1930), S. 325
- [49] F. BLOCH: In: *Z. Phys.* **81** (1933), S. 363
- [50] J. LINDHARD, M. SCHARFF: In: *Phys. Rev.* **124** (1961), S. 128
- [51] O.B. FIRSOV: In: *Sov. Phys. -JETP* **9** (1959), S. 1076

- [52] I.M. CHESHIRE, G. DEARNALEY, J.M. POATE: In: *Phys. Lett. A* **27** (1968), S. 318
- [53] G. SCHIWIEZ, K. CZERSKI, M. ROTH, F. STAUFENBIEHL, P.L. GRANDE: In: *Nucl. Instr. Meth. B* **225** (2004), S. 4
- [54] G.H. KINCHIN, R.S. PEASE: In: *Rep. Progr. Phys.* **18** (1955), S. 1
- [55] J.F. GIBBONS: In: *Proc. IEEE* **60** (1972), S. 1062
- [56] F.F. MOREHEAD, B.L. CROWDER: In: *Rad. Eff.* **6** (1970), S. 27
- [57] M.P.R. WALIGÓRSKI, R.N. HAMM, R. KATZ: In: *Nucl. Tracks & Radiat. Meas. - Int. J. Radiat. Appl. Instrum. D* **11** (1986), S. 309
- [58] A. CHATTERJEE, H.J. SCHAEFER: In: *Radiat. Environment. Biophys.* **13** (1976), S. 215
- [59] G. SCHIWIEZ, G. XIAO, P.L. GRANDE, E. LUDERER, R. PAZIR, U. STETTNER: In: *Nucl. Instr. Meth. B* **146** (1998), S. 131
- [60] G. SCHIWIEZ, G. XIAO, E. LUDERER, P.L. GRANDE: In: *Nucl. Instr. Meth. B* **164-165** (2000), S. 353
- [61] R.L. FLEISCHER, P.B. PRICE, R.M. WALKER: In: *J. Appl. Phys.* **36** (1965), S. 3645
- [62] R.L. FLEISCHER, P.B. PRICE, R.M. WALKER: *Nuclear Tracks in Solids*. University of California Press, Berkeley, 1975
- [63] D. LESUEUR, A. DUNLOP: In: *Rad. Eff. Def. Solids* **126** (1993), S. 163
- [64] G. SCHIWIEZ, M. ROTH, K. CZERSKI, F. STAUFENBIEHL, M. RÖSLER, P.L. GRANDE: In: *Nucl. Instr. Meth. B* **209** (2003), S. 26
- [65] S.K. SUNDARAM, E. MAZUR: In: *Nature Materials* **1** (2002), S. 217
- [66] A. CAVALLERI, K. SOKOLOWSKI-TINTEN, J. BIALKOWSKI, M. SCHREINER: In: *J. Appl. Phys.* **85** (1999), S. 3301
- [67] P.L. SILVESTRELLI, A. ALAVI, M. PARRINELLO, D. FRENKEL: In: *Phys. Rev. B* **56** (1997), S. 3806
- [68] P. STAMPFLI, K.H. BENNEMANN: In: *Phys. Rev. B* **49** (1994), S. 7299
- [69] P. STAMPFLI: In: *Nucl. Instr. Meth. B* **107** (1996), S. 138
- [70] M. TOULEMONDE, C. DUFOUR, E. PAUMIER: In: *Phys. Rev. B* **46** (1992), S. 14362
- [71] M. TOULEMONDE, E. PAUMIER, C. DUFOUR: In: *Rad. Eff. Def. Solids* **126** (1993), S. 201
- [72] Z.G. WANG, C. DUFOUR, E. PAUMIER, M. TOULEMONDE: In: *J. Phys. Condens. Matter* **6** (1994), S. 6733
- [73] M. TOULEMONDE, J.M. COSTANTINI, CH. DUFOUR, A. MEFTAH, E. PAUMIER, F. STUDER: In: *Nucl. Instr. Meth. B* **116** (1996), S. 37
- [74] M. TOULEMONDE, CH. DUFOUR, A. MEFTAH, E. PAUMIER: In: *Nucl. Instr. Meth. B* **166-167** (2000), S. 903
- [75] E.M. BRINGA, R.E. JOHNSON: In: *Phys. Rev. Lett.* **88** (2002), S. 165501
- [76] E.M. BRINGA: In: *Nucl. Instr. Meth. B* **203** (2003), S. 1
- [77] BEUVE: In: *Phys. Rev. B* **68** (2003), S. 125423
- [78] J. XU, X. WANG: In: *Physica B* **351** (2004), S. 213

- [79] R. BULLOUGH, J.J. GILMAN: In: *J. Appl. Phys.* **37** (1966), S. 2283
- [80] A. DUNLOP, P. LEGR., D. LESUEUR, N. LORENZELLI, J. MORILLO, A. BARBU, S. BOUFFARD: In: *Europhys. Lett.* **15** (1991), S. 765
- [81] P.K. HAFF: In: *Appl. Phys. Lett.* **29** (1976), S. 443
- [82] T. SCHENKEL, A.V. HAMZA, A.V. BARNES, D.H. SCHNEIDER, J.C. BANKS, B. L. DOYLE: In: *Phys. Rev. Lett.* **81** (1998), S. 2590
- [83] A. DUNLOP, G. JASKIEROWICZ, S. DELLA-NEGRA: In: *Nucl. Instr. Meth. B* **146** (1998), S. 302
- [84] A. HEDLER, S. KLAUMÜNZER, W. WESCH: In: *Nature Materials* **3** (2004), S. 804
- [85] E. SNOEKS, A. POLMAN, C.A. VOLKERT: In: *Appl. Phys. Lett.* **65** (1994), S. 2487
- [86] M.L. BRONGERSMA, E. SNOEKS, T. VAN DILLEN, A. POLMAN: In: *J. Appl. Phys.* **88** (2000), S. 59
- [87] E. SNOEKS, A. VAN BLAADEREN, T. VAN DILLEN, C.M. VAN KATS, M.L. BRONGERSMA, A. POLMAN: In: *Adv. Mater.* **12** (2000), S. 1511
- [88] T. VAN DILLEN, A. VAN BLAADEREN, W. FUKAREK, A. POLMAN: In: *Appl. Phys. Lett.* **78** (2001), S. 910
- [89] G. SZENES: In: *Phys. Rev. B* **51** (1995), S. 8026
- [90] G. SZENES: In: *Nucl. Instr. Meth. B* **107** (1996), S. 150
- [91] G. SZENES, Z.E. HORVATH, B. PECZ, F. PASZTI, L. TOTH: In: *Phys. Rev. B* **65** (2002), S. 045206
- [92] T. VAN DILLEN, A. POLMAN, P.R. ONCK, E. VAN DER GIESSEN: In: *Phys. Rev. B* **71** (2005), S. 024103
- [93] J.D. ESHELBY: In: *Proc. R. Soc. London Sect. A* **241** (1957), S. 376
- [94] MURA, T.: *Micromechanics of Defects in Solids*. 2. Martinus Nijhoff Publishers, 1987
- [95] C. KITTEL: *Introduction to Solid State Physics*. 7. John Wiley & Sons, 1996
- [96] S. ROORDA, W.C. SINKE, J.M. POATE, D.C. JACOBSON, S. DIERKER, B.S. DENNIS, D.J. EAGLESHAM, F. SPAEPEN, P. FUOSS: In: *Phys. Rev. B* **44** (1991), S. 3702
- [97] P.L. LIU, R. YEN, N. BLOEMBERGEN, R.T. HODGSON: In: *Appl. Phys. Lett.* **34** (1979), S. 864
- [98] H. MATSUMURA, H. TACHIBANA: In: *Appl. Phys. Lett.* **47** (1985), S. 833
- [99] E. GLASER, G. GÖTZ, N. SOBOLEV, W. WESCH: In: *Phys. Stat. Sol. A* **69** (1982), S. 603
- [100] E.P. DONOVAN, F. SPAEPEN, D. TURNBULL, J.M. POATE, D.C. JACOBSON: In: *Appl. Phys. Lett.* **42** (1983), S. 698
- [101] W.C. SINKE, S. ROORDA, F.W. SARIS: In: *J. Mater. Res.* **3** (1988), S. 1201
- [102] K. LAAZIRI, S. KYCIA, S. ROORDA, M. CHICOINE, J.L. ROBERTSON, J. WANG, S.C. MOSS: In: *Phys. Rev. B* **60** (1999), S. 13520
- [103] M. WAKAGI, K. OGATA, A. NAKANO: In: *Phys. Rev. B* **50** (1994), S. 10666
- [104] C.J. CLOVER: *Formation, Modification and Relaxation of Atomic Structures in Ion Implanted Semiconductors*. Dissertation. Australian National University, 2002

- [105] A. FILIPPONI, F. EVANGELISTI, M. BENFATTO, S. MOBILIO, C.R. NATOLI: In: *Phys. Rev. B* **40** (1989), S. 9636
- [106] EMIS DATAREVIEW SERIES NO.1: *Properties of Amorphous Silicon*. 2. INSPEC, 1989
- [107] J.S. CUSTER, M.O. THOMPSON, D.C. JACOBSON, J.M. POATE, S. ROORDA, W.C. SINKE, F. SPAEPEN: In: *Appl. Phys. Lett.* **64** (1994), S. 437
- [108] J. FABIAN, P.B. ALLEN: In: *Phys. Rev. Lett.* **79** (1997), S. 1885
- [109] W.H. ZACHARIASEN: In: *J. Am. Chem. Sc.* **54** (1932), S. 3841
- [110] J. TERSOFF: In: *Phys. Rev. B* **38** (1988), S. 9902
- [111] F.H. STILLINGER, T.A. WEBER: In: *Phys. Rev. B* **31** (1985), S. 5262
- [112] S. HOSOKAWA, W.C. PILGRIM, Y. KAWAKITA, K. OHSHIMA, S. TAKEDA, D. ISHIKAWA, S. TSUTSUI, Y. TANAKA, A.Q.R. BARON: In: *J. Phys. Condens. Matter* **15** (2003), S. L623
- [113] V. ROSATO, M. CELINO: In: *Comp. Mat. Sci.* **17** (2000), S. 374
- [114] N. JAKSE, L. HENNET, D.L. PRICE, S. KRISHNAN, T. KEY, E. ARTACHO, B. GLORIEUX, A. PASTUREL, M.-L. SABOUNGI: In: *Appl. Phys. Lett.* **83** (2003), S. 4734
- [115] D. HOLLAND-MORITZ: *Ordnungsphänomene, fest-flüssig Grenzfläche und Phasenselektion in unterkühlten Metallschmelzen*. Habilitation. Universität Bochum, 2003
- [116] S. ANSELL, S. KRISHNAN, J.J. FELTEN, D.L. PRICE: In: *J. Phys. Condens. Matter* **10** (1998), S. L73
- [117] S.V. STANKUS, R.A. KHAIRULIN, P.V. TYAGEL'SKII: In: *High Temp.* **37** (1999), S. 529
- [118] Y. SATO, Y. KAMEDA, T. NAGASAWA, T. SAKAMOTO, S. MORIGUCHI, T. YAMAMURA, Y. WASEDA: In: *J. Cryst. Growth* **249** (2003), S. 404
- [119] W.-K. RHIM, K. OHSAKA: In: *J. Cryst. Growth* **208** (2000), S. 313
- [120] V.I. DIMITROV: In: *J. Metastab. Nanocryst. Mat.* **20-21** (2004), S. 541
- [121] S. SASTRY, C.A. ANGELL: In: *Nature Materials* **2** (2003), S. 739
- [122] M.O. THOMPSON, J.W. MAYER, A.G. CULLIS, H.C. WEBBER, N.G. CHEW, J.M. POATE, D.C. JACOBSON: In: *Phys. Rev. Lett.* **50** (1983), S. 896
- [123] R.F. WOOD, D.H. LOWNDES, J. NARAYAN: In: *Appl. Phys. Lett.* **44** (1984), S. 770
- [124] G. KLUGE, G. NEUGEBAUER: *Grundlagen der Thermodynamik*. Spektrum Akademischer Verlag GmbH, 1994
- [125] D. STOCK: *Phänomenologische Beschreibung laserinduzierter Phasenübergänge 1. Art aus metastabilen Zuständen*. Dissertation. Friedrich-Schiller-Universität Jena, 1986
- [126] L.I. APTEKAR: In: *Sov. Phys. Dokl.* **24** (1979), S. 993
- [127] L. GUTTMAN: In: *Solid State Commun.* **45** (1983), S. 551
- [128] B.G. BAGLEY, H.S. CHEN: . Bd. **50**. 1978. – 97 S
- [129] R. TSU, R.R. HODGSON, T.Y. TAN, J.E.E. BAGLIN: In: *Phys. Rev. Lett.* **42** (1979), S. 1356
- [130] P. BAERI, G. FOTI, J.M. POATE, A.G. CULLIS: In: *Phys. Rev. Lett.* **45** (1980), S. 2036
- [131] J. BOK: In: *Phys. Lett. A* **84A** (1981), S. 448

- [132] P. BAERI, S.U. CAMPISANO, M.G. GRIMALDI, E. RIMINI: In: *J. Appl. Phys.* **53** (1982), S. 8730
- [133] A.G. CULLIS, H.C. WEBBER, N.G. CHEW, J.M. POATE, P. BAERI: In: *Phys. Rev. Lett.* **49** (1982), S. 219
- [134] H.C. WEBBER, A.G. CULLIS, N.G. CHEW: In: *Appl. Phys. Lett.* **43** (1983), S. 669
- [135] M.O. THOMPSON, G.J. GALVIN, J.W. MAYER, P.S. PEERCY, J.M. POATE, D.C. JACOBSON, A.G. CULLIS, N.G. CHEW: In: *Phys. Rev. Lett.* **52** (1984), S. 2360
- [136] D.H. LOWNDES, R.F. WOOD, J. NARAYAN: In: *Phys. Rev. Lett.* **52** (1984), S. 561
- [137] P.H. BUCKSBAUM, J. BOKOR: In: *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984), S. 182
- [138] M.O. THOMPSON, P.S. PEERCY, J.Y. TSAO, M.J. AZIZ: In: *Appl. Phys. Lett.* **49** (1986), S. 558
- [139] G.E. JELLISON JR., D.H. LOWNDES, D.N. MASHBURN, R.F. WOOD: In: *Phys. Rev. B* **34** (1986), S. 2407
- [140] E.P. DONOVAN, F. SPAEPEN, J.M. POATE, D.C. JACOBSON: In: *Appl. Phys. Lett.* **55** (1989), S. 1516
- [141] M.G. GRIMALDI, P. BAERI, M.A. MALVEZZI: In: *Phys. Rev. B* **44** (1991), S. 1546
- [142] J.M. POATE: In: *Nucl. Instr. Meth.* **209-210** (1983), S. 211
- [143] S. ROORDA, S. DOORN, W.C. SINKE, P.M.L.O SCHOLTE, E. VAN LOENEN: In: *Phys. Rev. Lett.* **62** (1989), S. 1880
- [144] C.A. VOLKERT: In: *J. Appl. Phys.* **74** (1993), S. 7107
- [145] S. MINOMURA, H.G. DRICKAMER: In: *J. Phys. Chem. Solids* **23** (1962), S. 451
- [146] J.Z. HU, L.D. MERKLE, C.S. MENONI, I.L. SPAIN: In: *Phys. Rev. B* **34** (1986), S. 4679
- [147] J.M. BESSON, E.H. MOKHTARI, J. GONZALEZ, G. WEILL: In: *Phys. Rev. Lett.* **59** (1987), S. 473
- [148] J. CRAIN, G.J. ACKLAND, J.R. MACLEAN, R.O. PILTZ, P.D. HATTON, G.S. PAWLEY: In: *Phys. Rev. B* **50** (1994), S. 13043
- [149] R.O. PILTZ, J.R. MACLEAN, S.J. CLARK, G.J. ACKLAND, P.D. HATTON, J. CRAIN: In: *Phys. Rev. B* **52** (1995), S. 4072
- [150] V.V. BRAZHKIN, A.G. LYAPIN, S.V. POPOVA, R.N. VOLOSHIN: In: *Phys. Rev. B* **51** (1995), S. 7549
- [151] M. DURANDURDU, D.A. DRABOLD: In: *Phys. Rev. B* **64** (2001), S. 014101
- [152] T. MORISHITA: In: *Phys. Rev. Lett.* **93** (2004), S. 0555031
- [153] E. PRINCIPI, A. DI CICCIO, F. DECREMPS, A. POLIAN, S. DE PANFILIS: In: *Phys. Rev. B* **69** (2004), S. 201201
- [154] O. MISHIMA, H.E. STANLEY: In: *Nature* **396** (1998), S. 329
- [155] P.F. McMILLAN, M. WILSON, M.C. WILDING: In: *J. Phys. Condens. Matter* **15** (2003), S. 6105
- [156] C.A. ANGELL: In: *Science* **267** (1995), S. 1924
- [157] P.F. McMILLAN: In: *J. Mater. Chem.* **14** (2004), S. 1506

- [158] S. AASLAND, P.F. McMILLAN: In: *Nature* **369** (1994), S. 633
- [159] E. RAPOPORT: In: *J. Chem. Phys.* **46** (1967), S. 2891
- [160] C.A. ANGELL, H. KANNO: In: *Science* **193** (1976), S. 1121
- [161] P.H. POOLE, T. GRANDE, C.A. ANGELL, P.F. McMILLAN: In: *Science* **275** (1997), S. 322
- [162] P. KEBLINSKI, D. WOLF, S.R. PHILLPOT, H. GLEITER: In: *Phil. Mag. Lett.* **76** (1997), S. 143
- [163] S. SASTRY: In: *Nature* **398** (1999), S. 467
- [164] J.N. GLOSLI, F.H. REE: In: *Phys. Rev. Lett.* **82** (1999), S. 4659
- [165] C.A. ANGELL, K.L. NGAI, G.B. MCKENNA, P.F. McMILLAN, S.W. MARTIN: In: *J. Appl. Phys.* **88** (2000), S. 3113
- [166] Y. KATAYAMA, T. MIZUTANI, W. UTSUMI, O. SHIMOMURA, M. YAMAKATA, K.I. FUNAKOSHI: In: *Nature* **403** (2000), S. 170
- [167] P.F. McMILLAN: In: *Nature* **403** (2000), S. 151
- [168] V. VELIKOV, S. BORICK, C.A. ANGELL: In: *Science* **294** (2001), S. 2335
- [169] O. MISHIMA, Y. SUZUKI: In: *Nature* **419** (2002), S. 599
- [170] P. KEBLINSKI, M.Z. BAZANT, R.K. DASH, M.M. TREACY: In: *Phys. Rev. B* **66** (2002), S. 064104
- [171] M. WILSON, P.F. McMILLAN: In: *Phys. Rev. Lett.* **90** (2003), S. 135703
- [172] S.S. ASHWIN, U.V. WAGHMARE, S. SASTRY: In: *Phys. Rev. Lett.* **92** (2004), S. 175701
- [173] C.R. MIRANDA, A. ANTONELLI: In: *J. Chem. Phys.* **120** (2004), S. 11672
- [174] P. BEAUCAGE, N. MOUSSEAU: In: *J. Phys. Condens. Matter* **17** (2005), S. 2269
- [175] G. LULLI, E. ALBERTAZZI, M. BIANCONI, R. NIPOTI, M. CERVERA, A. CAMERA, C. CELLINI: In: *J. Appl. Phys.* **82** (1997), S. 5958
- [176] K. HEHL, W. WESCH: In: *Phys. Stat. Sol. A* **58** (1980), S. 181
- [177] B.C. JOHNSON, J.C. MCCALLUM: In: *J. Appl. Phys.* **95** (2004), S. 1096
- [178] C.A. VOLKERT: In: *J. Appl. Phys.* **70** (1991), S. 3521
- [179] G. STONEY: In: *Proc. Roy. Soc. A* **82** (1909), S. 172
- [180] A. HEDLER, S. KLAUMÜNZER, W. WESCH: In: *Phys. Rev. B* **72** (2005), S. 054108
- [181] A. HEDLER, S. KLAUMÜNZER, W. WESCH: In: *Nucl. Instr. Meth. B* **242** (2006), S. 85
- [182] H. STEPHANI, G. KLUGE: *Theoretische Mechanik*. Spektrum Akad. Verlag, 1995
- [183] A. HEDLER, S. KLAUMÜNZER, W. WESCH. – zur Veröffentlichung bereit.
- [184] P.F. McMILLAN: In: *Nature Materials* **3** (2004), S. 755
- [185] A. HEDLER, S. URBAN, F. FALK, H. HOBERT, W. WESCH: In: *Appl. Surf. Sci.* **205** (2003), S. 240
- [186] A. HEDLER, S. URBAN, T. KUPS, U. KAISER, W. WESCH: In: *Nucl. Instr. Meth. B* **218** (2004), S. 337
- [187] P.F. McMILLAN, M. WILSON, D. DAISENBERGER, D. MACHON: In: *Nature Materials* **4** (2005), S. 680

Anhang A

Ergänzungen zu den Experimenten

A.1 Ionenstrahllabor am HMI Berlin

Alle SHI-Bestrahlungen wurden im Ionenstrahllabor (ISL) des Hahn-Meitner-Instituts (HMI) in Berlin vorgenommen. In Abb. A.1 ist eine schematische Darstellung des Teilchenbeschleunigers dargestellt. Die Ionen werden von der 14.5 GHz ECR-Quelle über die RFQ-Struktur in das Zyklotron geleitet, dort auf hohe Geschwindigkeiten beschleunigt und über die Strahlführung in das Strahlrohr im Experimentierraum geleitet, wo sie in der Probenkammer auf das Substrat treffen. Die Justierung, Fokussierung und Steuerung des Ionenstrahls wird außerhalb des dargestellten Strahlenschutzbereiches durch technische Mitarbeiter vorgenommen, während die Regelung der Bestrahlungsparameter vom Experimentator selbst vom Rechnerraum aus übernommen wird.

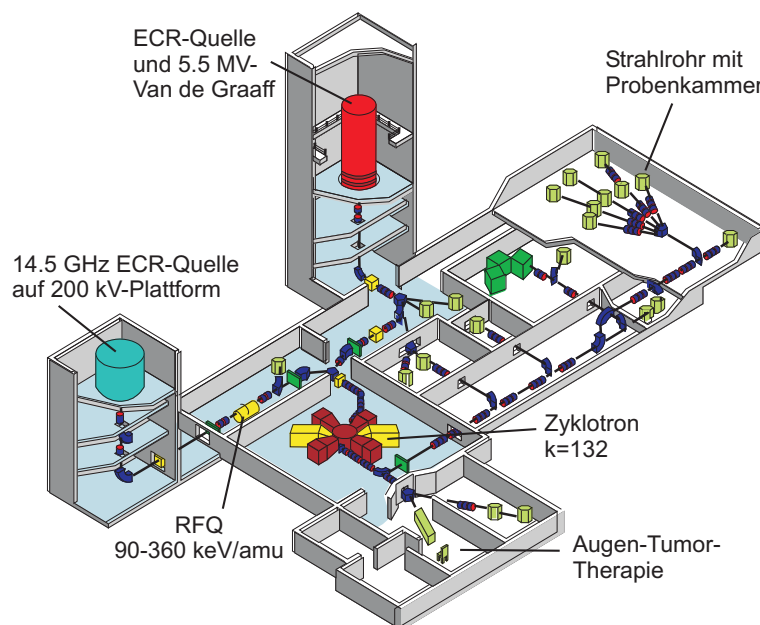


Abb. A.1: Ionenstrahllabor am HMI Berlin. Die schematische Abbildung zeigt die Teilchenbeschleunigeranlage am ISL. Diese wird vorwiegend für die Materialmodifikation und Materialanalyse eingesetzt, aber auch für medizinische Anwendungen und radioaktive Untersuchungen genutzt [4].

A.2 Probenhalter mit verstellbarer Blende

Für die Experimente zum plastischen Fließen, zur vertikalen Dehnung und zur Modifizierung der Probenoberfläche von a-Si, c-Si und des B270-Kronglases unter SHI-Bestrahlung wurde am IFK der FSU Jena ein spezieller Probenhalter entwickelt. Auf diesem in Abb. A.2 dargestellten Halter befindet sich auf der strahlzugewandten Seite eine Cu-Blende, die einen gewünschten Teil der Probe abdeckt. Da die Blende in einer Teflon-Schiene vertikal verstellbar montiert wurde, konnte diese über einen Elektromagneten "GBM 75" von der strahlabgewandten Seite in-situ geöffnet werden. Somit war es möglich, fluenzabhängige Untersuchungen bezüglich einer unbestrahlten Referenzschicht an einer einzigen Probe vorzunehmen. Auf diese Weise konnte einerseits der Aufwand der Probenherstellung reduziert und andererseits Hochfluenzuntersuchungen selbstkalibrierter Proben unter geringem Strahlzeitaufwand und mit hoher Ortsauflösung vorgenommen werden. Diese innovative Erweiterung der Probenkammer findet gegenwärtig einen hohen Zuspruch am ISL und wird seither standardmäßig für Experimente zum plastischen Fließen amorpher Materialien benutzt.

Die Messung der Bestrahlungstemperatur erfolgte über ein Thermoelement, das direkt neben der Probe auf dem Probenhalter befestigt wurde. Die zusätzlich angebrachte Cu-Litze verstärkte die Wärmeabfuhr des bestrahlten Teils der Cu-Blende. Da Cu und Si selbst unter Xe Ionenbestrahlung eine Coulomb-Barriere von 671 MeV bzw. 666 MeV besitzen, konnten Kernreaktionen mit den vorgenommenen Xe und Au Bestrahlungen ausgeschlossen werden.

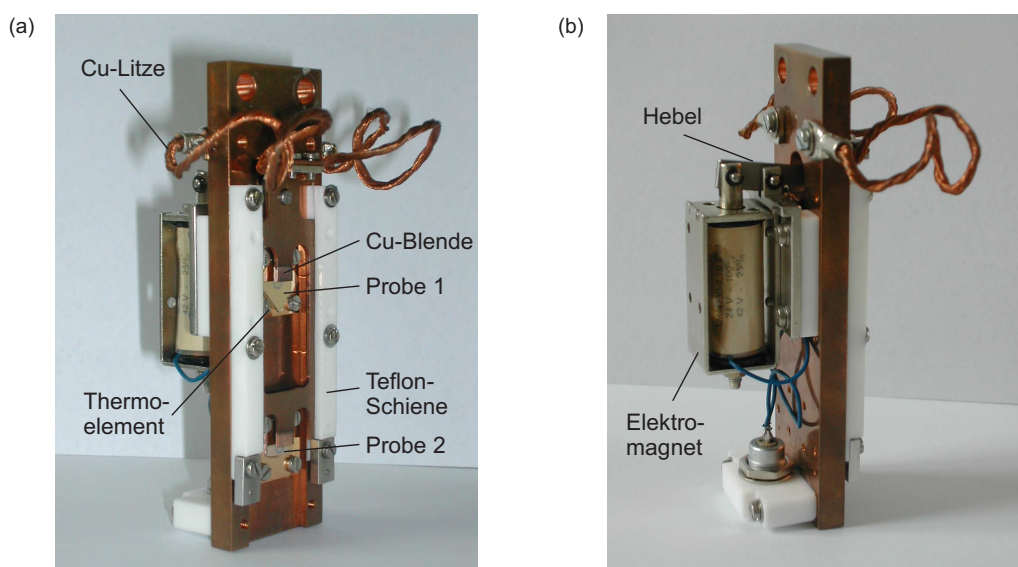


Abb. A.2: Speziell angefertigter Probenhalter mit verstellbarer Blende. Die Fotos zeigen die strahlzugewandte (a) und strahlabgewandte Seite (b) des speziell für Hochfluenzbestrahlungen selbstkalibrierter Proben entwickelten Probenhalters. Auf diesem finden zwei Proben Platz, die jeweils zum Teil durch die Cu-Blende abgedeckt sind. Die Blende kann über einen Hebel von der strahlabgewandten Seite durch einen Elektromagneten in-situ geöffnet und mit einer hohen Genauigkeit von $\pm 10 \mu\text{m}$ auf die gleiche Position wieder geschlossen werden. Die Cu-Litze dient der Kühlung der Blende.

A.3 Aufbau der in-situ Laser-Reflexionsmessung

Für die Experimente zur Biegung freitragender a-Si und c-Si Proben unter SHI-Bestrahlung wurde die in Abb. A.3 dargestellte Apparatur verwendet, mit welcher die Reflexion eines Laserstrahls auf der vom Ionenstrahl abgewandten Probenseite gemessen wird. Diese von Volkert und Polman *et al.* am FOM-Institut in Amsterdam entwickelte Apparatur [178] wurde extra für die in-situ Krümmungsmessungen am ISL aufgebaut und wird seither für entsprechende Messungen eingesetzt. Als Probenhalter diente eine Cu-Platte mit zwei Aussparungen, in welche jeweils zwei bis vier Proben nebeneinander (quasi-)freitragend an einem Ende befestigt wurden. Die Messung der Bestrahlungstemperatur erfolgte wieder über ein Thermoelement, das direkt neben der Probe auf dem Probenhalter befestigt wurde. Für die Experimente bei Raumtemperatur wurden ebenfalls ex-situ DEKTAK-Messungen der Krümmungsradien vorgenommen.

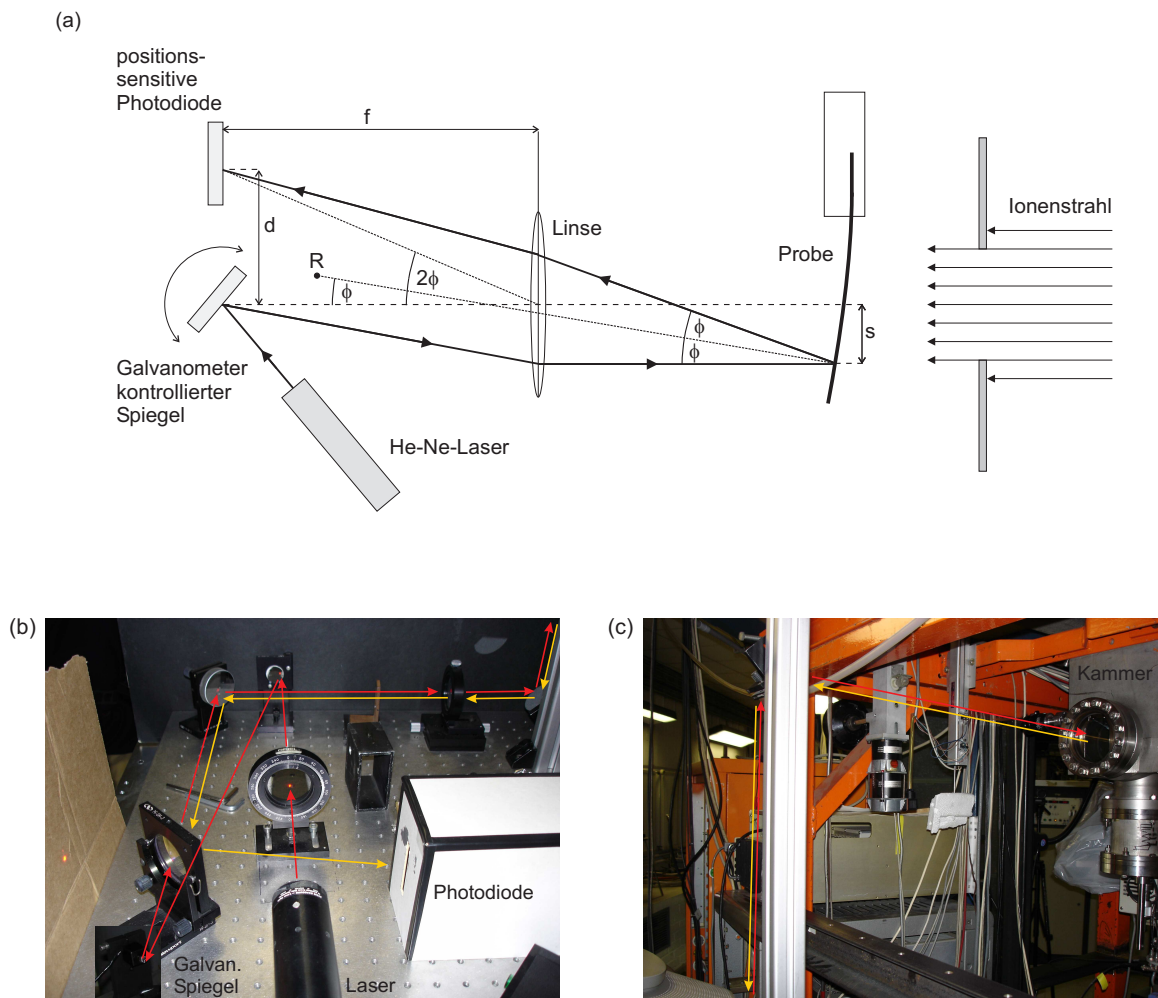


Abb. A.3: Messung des Krümmungsradius mittels in-situ Laserreflexion. Die schematische Darstellung in (a) zeigt das Messprinzip der Krümmungsmessung an der vom Ionenstrahl abgewandten Probenseite [178]. In (b) ist die horizontale Laserstrahlführung auf dem Tisch dargestellt, wobei jene zur Probenkammer rot und die zur Photodiode gelb gezeichnet sind. In (c) ist die vertikale Führung des primären (rot) und reflektierten (gelb) Strahls zur bzw. von der Probenkammer dargestellt.

A.4 Verwendete Analyse-Verfahren

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden folgende Analyse-Verfahren verwendet:

Lichtmikroskop

Die Oberflächen aller Proben wurden mit einem Lichtmikroskop am IFK aufgenommen. Die Proben für die Experimente zum plastischen Fließen wurden außerdem fluenzabhängig in situ mit einem Lichtmikroskop durch ein Fenster in der Probenkammer am ISL beobachtet. Als Referenz diente der unbestrahlte Bereich, der durch Öffnung der verstellbaren Abdeckung am Probenhalter sichtbar wurde.

Profilometrie

Die Rauheit, der Krümmungsradius und die ionenstrahlinduzierte Höhenänderung wurden am IFK mit dem Profilometer "DEKTAK 3030ST" und dem Rasterkraftmikroskop "Veritekt 3" gemessen. Fluenzabhängige Untersuchungen während der Hochenergie-Bestrahlungen fanden am ISL mit einem Laser-Reflexionsprofilometer statt.

Infrarot-Reflexionsmessungen (IRR)

Am Institut für Physikalische Chemie (IPC) der FSU Jena wurden Infrarot-Reflexionsspektren im Wellenzahl-Bereich $500 \text{ cm}^{-1} \leq \nu \leq 6000 \text{ cm}^{-1}$ aufgenommen und am IFK über Fourier-Analyse ausgewertet. Als Referenz diente ein Au-bedampfter Spiegel.

Raman-Spektroskopie (RS)

Am IPC wurden Raman-Spektren aufgenommen und die durch optische Phononen im Si-Gitter induzierte Stokes-Verschiebung bei Raumtemperatur gemessen. Die Anregungswellenlänge betrug 532 nm (NdYAG frequenzverdoppelt) bei einer Intensität von $I \sim 20 \text{ mW}$. Mit der verwendeten Methode der μ -Raman-Spektroskopie war eine spektrale Auflösung von $\Delta\nu \sim 2 \text{ cm}^{-1}$ bei einer Ortsauflösung von $\sim 500 \text{ nm}$ möglich.

Rutherford-Weitwinkelstreuung (RBS)

Am 3 MV-Tandetron-Beschleuniger des IFK wurden Spektren zur Rutherford-Weitwinkelstreuung von H^+ -Ionen der kinetischen Energie 1.5 MeV bzw. 1.8 MeV unter einem Rückstreuwinkel von 170° aufgenommen. Die a-Si Probe sowie eine c-Si Referenzprobe wurden jeweils in (001)-Kanaliserungsrichtung des Substrates und in Zufallsrichtung bestrahlt. Die Tiefenauflösung der Spektren betrug $\sim 60 \text{ nm}$. Weiterhin wurden an den mit hochenergetischen Ionen bestrahlten Schichten RBS-Spektren in Zufallsrichtung von He^+ -Ionen der kinetischen Energie 1.0 MeV unter einem Rückstreuwinkel von 170° aufgenommen. Diese oberflächennahen Untersuchungen erfolgten mit einer Tiefenauflösung von $\sim 2 \text{ nm}$.

Röntgendiffraktometrie (XRD)

Im BESSY-Labor des HMI wurden an ausgewählten Proben Weitwinkel- und Kleinwinkelmessungen zur Röntgendiffraktometrie mittels Synchrotronstrahlung vorgenommen.

Transmissionselektronenmikroskopie (TEM)

Einige ausgewählte Proben wurden mechanisch poliert und mit Ar-Ionen gedünnt, und von diesen eine Querschnitts-Transmissionselektronenmikroskopie-Aufnahme am Elektronenmikroskop des IFK, bzw. der Universität Augsburg erstellt.

Rasterelektronenmikroskopie (REM)

Von einer bestrahlten a-Si Probe wurde zum Vergleich mit Lichtmikroskopaufnahmen eine Aufnahme am Rasterelektronenmikroskop (HV 15 V, SE 40°) des IFK erstellt.

Anhang B

Ergänzungen zu den Rechnungen

B.1 Fluiditätstensor in EFT-Näherung

Der im Rahmen der EFT-Näherung von Trinkaus eingeführte normierte total symmetrische Fluiditätstensor 4. Stufe $\underline{\underline{F}}$ (vgl. Kap 2.4.2) soll hier in der Voigt-Notation $F_{ijkl} \rightarrow F_{mn}$ angegeben werden. In dieser Art der Darstellung vierstufiger Tensoren werden die Indizes $ij \rightarrow m$ und $kl \rightarrow n$ paarweise entsprechend der Vorschrift

$$\begin{aligned} 11 \rightarrow 1 \quad , \quad 23 \rightarrow 4 \quad , \quad 32 \rightarrow 4 \\ 22 \rightarrow 2 \quad , \quad 13 \rightarrow 5 \quad , \quad 31 \rightarrow 5 \\ 33 \rightarrow 3 \quad , \quad 12 \rightarrow 6 \quad , \quad 21 \rightarrow 6 \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

umgeschrieben. Der Fluiditätstensor $\underline{\underline{F}}$ enthält in der Voigt-Notation nur drei voneinander unabhängige Komponenten. Im Hauptachsensystem der Ionenspur gilt [40]

$$\underline{\underline{F}} \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|ccc} f_{11} & f_{21} & f_{31} & f_{41} & f_{51} & f_{61} \\ f_{12} & f_{22} & f_{32} & f_{42} & f_{52} & f_{62} \\ f_{13} & f_{23} & f_{33} & f_{43} & f_{53} & f_{63} \\ \hline f_{14} & f_{24} & f_{34} & f_{44} & f_{54} & f_{64} \\ f_{15} & f_{25} & f_{35} & f_{45} & f_{55} & f_{65} \\ f_{16} & f_{26} & f_{36} & f_{46} & f_{56} & f_{66} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{ccc|ccc} \frac{a}{4} + c & \frac{a}{4} - c & -\frac{a}{2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{a}{4} - c & \frac{a}{4} + c & -\frac{a}{2} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & a & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c \end{array} \right), \quad (\text{B.2})$$

wobei für die drei unabhängigen Werte gilt

$$a = 4 \frac{1 - \nu}{5 - 4\nu}, \quad b = 1, \quad c = 2(1 - \nu). \quad (\text{B.3})$$

Unter senkrechtem Ioneneinfall entspricht das Hauptachsensystem der Ionenspur dem der Probe, so dass für die in Kap. 5.3 diskutierten Spannungen entsprechend den Gln. (B.2) und (B.3) nur die als $F_s = a/2$ bezeichnete Komponente von $\underline{\underline{F}}$ Bedeutung besitzt.

Die in Kap. 2.3.5.3, Kap. 4.3.5.1 und Kap. 4.4.4 verwendeten Vereinfachungen des Tensors $\underline{\underline{F}}$ zu einem Skalar F_0 , bzw. zur Größe k_0 nach Gl. (2.43), basiert auf der Hess-Repräsentation von $\underline{\underline{F}}$. In dieser Art der Darstellung wird $\underline{\underline{F}}$ in die orthogonalen Komponenten 0. Ordnung (Skalar) F_0 , 2. Ordnung F_2 und 4. Ordnung F_4 entwickelt.

Für diese Komponenten ergeben sich die folgenden Werte [40]

$$F_0 = \frac{2(33 - 47\nu + 16\nu^2)}{5(5 - 4\nu)}, \quad F_2 = -\frac{12(12 - 29\nu + 16\nu^2)}{7(5 - 4\nu)}, \quad F_4 = -\frac{1 + 11\nu - 8\nu^2}{5 - 4\nu}. \quad (\text{B.4})$$

Für a-Si ergeben sich mit $\nu = 0.287$ die Werte $F_0 \sim 2.16$, $F_2 \sim -2.22$ und $F_4 \sim -0.91$, so dass die Terme F_2 und F_4 eigentlich nicht vernachlässigbar klein sind. Somit stellt die Reduzierung von $\underline{\underline{F}}$ auf den isotropen Anteil F_0 nur eine grobe Vereinfachung dar.

B.2 Numerische Berechnung der normierten Deformationsausbeute in EFT-Näherung

B.2.1 Temperaturverteilung um die Ionenbahn

In direkter Anlehnung an das mikroskopische viskoelastische Modell zur Erklärung der Ionenstrahlinduzierten Deformation nach Trinkaus *et al.* [38–42] wird die in Gl. (2.30) beschriebene Temperaturverteilung $T(r, t)$ um die Ionenbahn auf der ps-Zeitskala angenommen. Die Beschreibung des Gauss-Profiles $T(r, t)$ erfolgt dabei über effektive, von der Temperatur unabhängige Werte für die spezifische Wärmekapazität C , die Wärmeleitfähigkeit λ und die Dichte ρ . Um diese analytisch einfach beschreibbare Verteilung aufrechtzuerhalten, wurde die beim Phasenübergang 1. Art auftretende latente Wärme ignoriert. Der genaue Wert von λ ist hingegen weniger kritisch, da dieser die Ergebnisse der normierten Deformationsausbeute $\partial A_0 / \partial S_e$ nicht beeinflusst.

B.2.2 Modellierung der effektiven Eigendehnung der nv-Zone

Für die Modellierung der effektiven Eigendehnung der nv-Zone $\varepsilon^*(T)$ bezüglich der Bestrahlungstemperatur T_0 wurde der Anteil an thermischer Expansion der LDA-Si, HDL-Si und l-Si Phasen über deren jeweilige lineare thermische Ausdehnungskoeffizienten $\alpha_{\text{LDA-Si}}^{\text{th}}(T)$ [108] bzw. $\alpha_{\text{l-Si}}^{\text{th}}(T)$ [117] beschrieben, wobei $\alpha_{\text{HDL-Si}}^{\text{th}} = \alpha_{\text{l-Si}}^{\text{th}}$ angenommen wurde. Im Temperaturbereich $T^* \leq T \leq T_l$ wurde $\varepsilon^*(T)$ bezüglich der beiden folgenden Fälle modelliert: (i) thermische Expansion der LDL-Si Phase mit dem linearen thermischen Ausdehnungskoeffizienten $\alpha_{\text{LDL-Si}}^{\text{th}}(T) = \alpha_{\text{LDA-Si}}^{\text{th}}(T)$ gefolgt von einer diskontinuierlichen Volumenkontraktion bei $T = T_l$, (ii) kontinuierliche Volumenkontraktion über den gesamten Bereich $T^* \leq T \leq T_l$. Für den zweiten Fall wurde die strukturelle Dichteänderung bzw. die Volumenänderung entsprechend der MD-Simulationsergebnisse von Keblinski *et al.* [162] modelliert, die den Phasenübergang hochenergetischer amorpher Korngrenzen in c-Si zu l-Si untersucht haben. Diese Ergebnisse wurden als Basis ausgewählt, da die räumliche Ausdehnung der Korngrenzen im nm-Bereich liegt und somit mit der einer fluiden Ionenspur vergleichbar ist.

B.2.3 Modellierung der Volumenkontraktion

Die Größe der Volumenänderung beim HDL-LDL-Phasenübergang 1. Art wurde über eine Extrapolation der Messwerte zur Dichte von l-Si bei $T_m = 1685$ K und der von c-Si bei $T = 293$ K ermittelt. Hierfür wurde die Dichte von LDA-Si aus der Volumenexpansion infolge der Amorphisierung von c-Si berechnet [107] und die Extrapolation auf Basis der in Kap. B.2.2 beschriebenen thermischen Expansion vorgenommen.

B.2.4 Modifizierung der effektiven Eigendehnung

Aufgrund der unterschiedlichen elastischen Konstanten von LDL-Si und HDL-Si stellt eine nv-Zone, die HDL-Si enthält, im Rahmen der Eshelby-Theorie eine Inhomogenität dar [93]. Um diese Theorie dennoch anwenden zu können, wurde die Inhomogenität über ein etabliertes Substitutionsverfahren durch eine äquivalente elastische Inklusion mit modifizierter Eigendehnung ersetzt [94]. Die effektive Eigendehnung $\varepsilon^*(T)$ von HDL-Si bzw. l-Si aus Kap. B.2.2 musste daher durch eine Multiplikation mit einem Faktor von 0.7 korrigiert werden. Im Falle der kontinuierlichen Volumenkontraktion wurde die Kurve $\varepsilon^*(T)$ im gesamten Bereich $T^* \leq T \leq T_l$ korrigiert.

B.2.5 Verwendete Materialparameter

Die Materialparameter der LDL-Si Phase beruhen auf einer Extrapolation der Parameter von LDA-Si und diejenigen der HDL-Si Phase auf einer Extrapolation der Parameter von l-Si. Für LDA-Si und LDL-Si wurde für das Schermodul $G_\infty = 38.8$ GPa, das Kompressionsmodul $K = 78.2$ GPa und für die Poisson-Zahl $\nu = 0.287$ verwendet, für HDL-Si und l-Si $G_\infty = 38.8$ GPa, $K = 38.0$ GPa und $\nu = 0.119$. Diese Daten sind Mittelwerte verschiedener experimenteller Ergebnisse [84]. Basierend auf der Dichte von c-Si bei $T = 293$ K von $\rho = 2.329$ g/cm³ [117] und der Volumenexpansion infolge der Amorphisierung von $\Delta V/V = 1.8\%$ [107] wurde für die Dichte von LDA-Si bei $T = 293$ K ein Wert von $\rho = 2.287$ g/cm³ bestimmt. Für die Dichte von l-Si bei $T_m = 1685$ K wurde der Wert $\rho = 2.555$ g/cm³ verwendet [117]. Der Wert für $\alpha_{\text{LDA-Si}}^{\text{th}}$ stammt von den Ergebnissen von Fabian *et al.* [108], während für HDL-Si und l-Si der experimentelle Wert von l-Si von $\alpha_{\text{l-Si}}^{\text{th}} = 2.23 \times 10^{-5}$ K⁻¹ verwendet wurde [117]. Zur Beschreibung der Gauss-förmigen Temperaturverteilung $T(r, t)$ um die Ionenbahn wurden die Werte $C = 1000$ J/(kgK), $\rho = 2.287$ g/cm³ und $\lambda = 1$ W/(mK) benutzt [84].

Anhang C

Ergänzungen zu den Ergebnissen

C.1 Formierung einer porösen nanokristallhaltigen Schicht

Eine 600 MeV Au Bestrahlung bei $T_0 = 300$ K unter dem Einfallswinkel $\Theta = 45^\circ$ bewirkt für hohe Fluenzen $\Phi t \gtrsim 2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ die Umwandlung der a-Si Oberflächenschicht in eine poröse amorphe Schicht (vgl. Kap. 4.2.1). Die Existenz von Hohlräumen führt zu einer Dichtereduzierung von ungefähr 50 % (vgl. Kap. 4.3.3). Unter diesen speziellen Bedingungen wird eine Verschiebung des Raman-Peaks in Richtung des c-Si beobachtet (Abb. 4.9) und in der Röntgenbeugung werden kristalline Reflexe nachgewiesen (Abb. C.1). Eine quantitative Analyse der XRD-Ergebnisse sowie eine Auswertung der TEM-Aufnahmen (Abb. 4.8) zeigt, dass die a-Si Oberflächenschicht Nanokristalle enthält, welche eine Größe von (10...30) nm besitzen und aufgrund der Sichtbarkeit aller Reflexe in der XRD-Messung keine bevorzugte Orientierung aufweisen. Die Nanokristalle befinden sich laut TEM-Aufnahmen nahe der Grenzfläche zum c-Si Substrat.

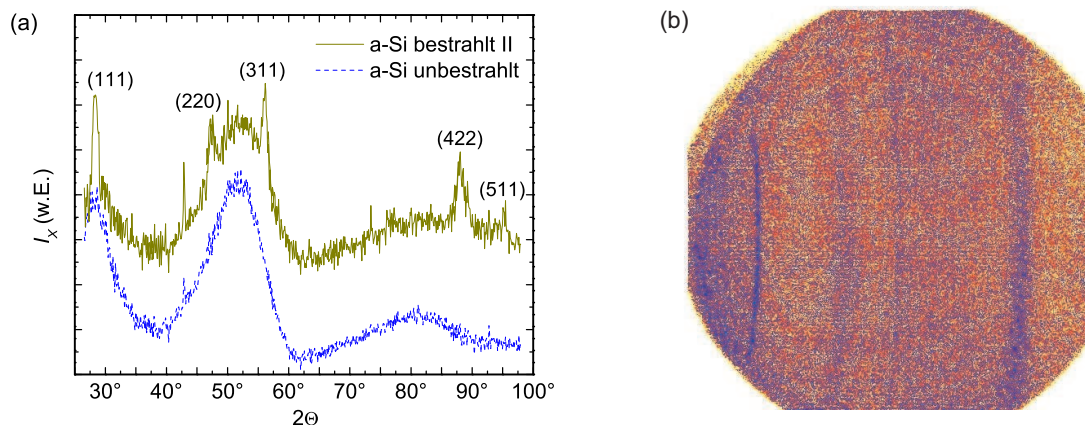


Abb. C.1: Nachweis der Formierung von Nanokristallen mittels Röntgenbeugung. In (a) ist die XRD-Intensität I_X einer unbestrahlten a-Si Probe sowie einer a-Si Probe nach einer 600 MeV Au Bestrahlung bei $T_0 = 300$ K unter $\Theta = 45^\circ$ mit $\Phi t = 2.6 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ (Bestrahlung II in Abb. 4.9) in willkürlichen Einheiten als Funktion des doppelten Scan-Winkels 2Θ dargestellt, und die auftretenden Reflexe sind beschriftet. In (b) ist das zugehörige entzerrte 2D-Detektorbild dargestellt, wobei die kristallinen Reflexe aus (a) in (b) als Ringe erscheinen.

C.2 Modifizierung der Probenoberfläche

C.2.1 Experimente

Es wurden zusätzliche Experimente zur Modifizierung der Probenoberfläche unter SHI-Bestrahlung vorgenommen. Hierfür wurden die Oberflächen einiger a-Si Proben durch kurzzeitiges Ätzen in einem Säurebad mit der Zusammensetzung HF:HNO₃=1:10 aufgeraut. In Tab. C.1 sind die Parameter des Ätzprozesses zusammengefasst.

Substrat	t (s)	Δz (nm)	R_q (nm)
a-Si	0	0	2.9
a-Si	5	-600	20.6
a-Si	60	-800	28.4
a-Si	60+5	-1400	53.5

Tab. C.1: Aufrauen der Oberfläche. Aufgelistet sind die jeweiligen Ätzzeiten, die erhaltenen Höhenstufen und mittleren quadratischen Rauheiten. Die Ätzraten unterscheiden sich entsprechend der Lagerungszeiten der Säurebäder.

Die SHI-Bestrahlungen zur fluenzabhängigen Oberflächenmodifizierung (Wellenformierung, Glättung) dieser a-Si Proben erfolgten unter schräger Bestrahlung mit der maximal möglichen elektronischen Energiedeposition und bei tiefen Temperaturen. Die Bestrahlungsparameter sind in Tab. C.2 zusammengestellt.

Substrat	R_q (nm)	E (MeV)	Ion	q_i	T_0 (K)	Θ	I (nA)	Φ (cm ⁻² s ⁻¹)	Φt (cm ⁻²)
a-Si	2.9	600	Au	30 ⁺	80	45°	81	6.8×10^{10}	4.0×10^{15}
a-Si	20.6	600	Au	30 ⁺	80	45°	81	6.8×10^{10}	4.0×10^{15}
a-Si	28.4	600	Au	30 ⁺	80	45°	81	6.8×10^{10}	4.0×10^{15}
a-Si	53.5	600	Au	30 ⁺	80	45°	81	6.8×10^{10}	4.0×10^{15}

Tab. C.2: Bestrahlungsparameter für die Experimente zur Modifizierung der Oberfläche. Angegeben sind mittlere Werte für den Strom und den Fluss, sowie die jeweiligen Endwerte der Fluenz.

C.2.2 Wellenformierung

Die für das metallische Glas Fe₄₀Ni₄₀B₂₀ unter schräger 340 MeV Xe Bestrahlung im Fluenzbereich $\Phi_0 t = (2 \dots 5) \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ und Temperaturbereich $T_0 = (70 \dots 300) \text{ K}$ beobachtete Wellenformierung mit einer von $\Phi_0 t$ und T_0 unabhängigen Wellenlänge von $\lambda \sim (20 \dots 30) \mu\text{m}$ [20] konnte für a-Si selbst unter 600 MeV Au Bestrahlung mit Fluenzen von $\Phi_0 t \leq 4 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ nicht nachgewiesen werden. Da für das Glas Fe₄₀Ni₄₀B₂₀ die Amplitude der Wellenfronten, d.h. die Rauheit R_q , exponentiell vom Anfangswert $R_q \sim 50 \text{ nm}$ mit steigender Fluenz $\Phi_0 t$ zunahm, wäre die wahrscheinlich über eine Grinfeld-Instabilität induzierte Wellenformierung im Falle des a-Si mit Anfangsrauheiten von $R_q \lesssim 60 \text{ nm}$ für hinreichend hohe Fluenzen ebenfalls zu erwarten gewesen. Das Ausbleiben der Wellenformierung für a-Si ist sicher wie im Falle von SiO₂ auf deren um den Faktor 10 kleinere Deformationsausbeute A_0 gegenüber jener von Fe₄₀Ni₄₀B₂₀ zurückzuführen.

C.2.3 Glättung der Probenoberfläche

Die für metallische Gläser unter senkrechtem Ioneneinfall beobachtete Glättung rauer Probenoberflächen [20] konnte für a-Si unter den verwendeten Bestrahlungsbedingungen mit Energieeinträgen von $S_e \lesssim 21.3 \text{ keV/nm}$ und Fluenzen von $\Phi_0 t \lesssim 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ nicht beobachtet werden. Da die Rauheit der untersuchten Gläser nahezu exponentiell vom Anfangswert $R_q \sim 1 \mu\text{m}$ mit steigender Fluenz $\Phi_0 t$ abnahm, die Anfangsrauheiten der a-Si Schichten mit $R_q \lesssim 60 \text{ nm}$ jedoch deutlich geringer waren, und die für die Effizienz der Glättung verantwortliche Deformationsausbeute A_0 von a-Si auch um eine Größenordnung kleiner als diejenige der metallischen Gläser ist, reichte zu einer Beobachtung der Reduzierung der Rauheit das Auflösungsvermögen der verwendeten Analysemethoden AFM, DEKTAK, LP und SEM nicht aus.

Anhang D

Alternative Modelle zur Erklärung der plastischen Deformation

Die mikroskopische Ursache der plastischen Deformation amorpher Materialien unter SHI-Bestrahlung ist immer noch Gegenstand kontroverser Diskussionen (vgl. Kap. 2.4). Es wurden verschiedene Modelle vorgeschlagen, die teilweise auf fundamental unterschiedlichen Konzepten beruhen und in ihrer quantitativen Aussagekraft unterschiedlich weit entwickelt sind. Während in dieser Arbeit die bisher erfolgreichste Theorie von Trinkaus *et al.* (Kap. 2.4.2) für LDA-Si verifiziert wurde, wobei ihre thermodynamische Grundlage im Rahmen des von Szenes vorgeschlagenen Modells (Kap. 2.4.1) eingeführt wurde, existieren alternative Theorien, die im Folgenden kurz zusammengestellt sind.

D.1 Rekombination von freiem Volumen

In einem ersten Erklärungsversuch diskutierten Klaumünzer *et al.* im Jahr 1986 die anisotrope atomare Umordnung entlang der Ionenspur in metallischen Gläsern als Konsequenz einer radialen Coulomb-Explosion [7]. Den Autoren zufolge wäre die Materie nach der Abschirmung der ionisierten und kollektiv versetzten Substratome durch die Leitungselektronen entlang der Ionenbahn mechanisch polarisiert und würde allmählich relaxieren. Da in Gläsern ein großer Betrag an freiem Volumen besteht, könnten diese Regionen als Schereinheiten wirken, in denen die Atome unter den entstehenden transienten Scherspannungen $\sigma_s \propto S_e$ leicht neue Positionen besetzen. Durch die nicht-thermische Bildung von freiem Volumen durch das Projektil und dessen sowohl thermisch aktivierte Rekombination als auch die durch Schertransformationen induzierte Rekombination an der freien Oberfläche liegt eine Konzentration an Schereinheiten von $n_D \sim 10^{-5} \dots 10^{-3}$ vor, die eine effektive Scherrate bestimmt. Als direkte Folge würde sich mit einer Debye-Wellenlänge von $\lambda_D \sim 2.5 \text{ \AA}$ eine Deformationsausbeute von $A_0 = 2\pi^2 n_D R_0^3 / \lambda_D \sim (0.02 \dots 2) \text{ nm}^2$ ergeben, die in guter Übereinstimmung mit den gemessenen Werten steht [7, 10–12, 14, 16]. In kristallinen Materialien sollte die mechanische Polarisation auch auftreten, jedoch wäre die anschließende Relaxation, da $n_D = 0$ gilt, von der kristallinen Umgebung dominiert. Dieses einfache Modell konnte jedoch zur Erklärung der zunehmenden Anzahl an experimentellen Daten und untersuchten Materialien nicht mehr aufrecht erhalten werden.

D.2 Plastisches Fließen und inverse Relaxation

Das von Ryazanov *et al.* im Jahr 1995 vorgeschlagene Modell zur Ionenspurbildung geht näher auf den Prozess der anisotropen plastischen Deformation ein [36]. Infolge des Energie- und Impulsübertrags vom Elektronensystem auf die ionisierten Substrat- atome kommt es durch eine Coulomb-Explosion oder einen elektronischen Druck zu initialen Versetzungen und Impulsen senkrecht zur Ionenbahn. Nach Abschluss der Energiekonversion nach etwa 1 ps liegt eine heiße Ionenspur vor, die durch einen steilen Temperaturgradienten, eine hohe Defektdichte und eine stark reduzierte Scherviskosität gekennzeichnet ist. Die heiße Materie wird als viskoelastisch betrachtet und die atomare Umordnung im Rahmen der Kontinuumsmechanik als plastisches Fließen mit einer mittleren Scherviskosität beschrieben. Nach dem Abkühlen der deformierten Materie wird diese unter dem Druck der äußeren Matrix über viskoses Fließen in die inverse Richtung relaxieren. Die Dauer und die Stärke dieser Relaxation hängt dabei von der deutlich höheren Scherviskosität bei der Bestrahlungstemperatur T_0 ab. Unter der Annahme, dass die initiale Temperaturerhöhung nicht die Schmelztemperatur erreicht, und unter Berücksichtigung der elastischen Kollisionen wurden funktionale Abhängigkeiten für $A_0(S_e)$ und $A_0(T_0)$ abgeleitet. Durch eine geeignete Wahl der freien Parameter konnten diese zwar die Effekte in einigen Materialien recht erfolgreich beschreiben, das Modell ist aber generell in seiner quantitativen Aussagekraft beschränkt.

D.3 Viskoelastische Feldtheorie

Der allgemeine Fall der Trinkaus-Theorie (vgl. Kap. 2.4.2) berücksichtigt die Abhängigkeit $\eta_s(T)$ und beschreibt die durch die Scherspannungsrelaxation entstehende Deformation in der heißen Ionenspur als Lösung der konstitutiven viskoelastischen Feldgleichungen

$$\begin{aligned}
 \text{Maxwell – Modell : } \quad \varepsilon_{ij} &= \varepsilon_{ij}^{elas} + \varepsilon_{ij}^{vis} + \varepsilon_{ij}^* \\
 \text{Elastizität : } \quad \sigma_{ij} &= K \text{Sp}(\underline{\underline{\varepsilon}}^{elas}) \delta_{ij} + 2G \tilde{\varepsilon}_{ij}^{elas} \\
 \text{Viskosität : } \quad \tilde{\sigma}_{ij} &= 2\eta_s \dot{\varepsilon}_{ij}^{vis} \\
 \text{Gleichgewicht : } \quad \partial_j \sigma_{ij} &= 0,
 \end{aligned} \tag{D.1}$$

wobei K das Kompressionsmodul bezeichnet [42]. Mit den zur Beschreibung des anisotropen Wachstums gültigen Anfangs- und Randbedingungen

$$\tilde{\varepsilon}_{ij}^{vis}(r, t = 0) = 0 \quad , \quad \tilde{\varepsilon}_{ij}^{elas}(r \rightarrow \infty, t) = 0, \tag{D.2}$$

ergibt sich mit $\varepsilon^*(T) = \alpha^{th} \Delta T = \alpha^{th} (T - T_0)$ für die radiale viskose Deformationskomponente

$$\tilde{\varepsilon}_1^{vis}(r, t) = \frac{1}{3} \frac{1 + \nu}{5 - 4\nu} \int_0^t \text{Sp}(\underline{\underline{\varepsilon}}^*) \exp[-I'(r; t', t)] / \tau'_s(r, t') dt' \tag{D.3}$$

mit einer reduzierten internen Zeitskala

$$I'(r, t', t) = \int_{t'}^t 1/\tau'_s(r, t') dt' \quad (\text{D.4})$$

und einer modifizierten Relaxationszeit $\tau'_s = \tau'_s(\tau_s)$. Die den charakteristischen Wirkungsquerschnitt beschreibende Deformationsausbeute $A_0(S_e)$ kann aus der Integration von $\varepsilon_1^{vis}(r, t = t_a)$ über den Querschnitt der Wärmespitze am Ende ihrer 'Lebensdauer' ermittelt werden, welche durch den Überlapp mit einer Wärmespitze des nachfolgenden Ions limitiert wird. Über dieses Integral könnte durch Division mit $\varepsilon_1^{vis}(0, t = t_a)$ ein effektiver Radius $R(t)$ und eine effektive Fließtemperatur T^* definiert werden, so dass sich die EFT-Näherung als asymptotischer Grenzfall ergibt.

Während mit diesem allgemeinen Modell der konkave Verlauf $A_0(S_e)$ um den Schwellwert S_{e0} unter bestimmten Annahmen für $\eta_s(T)$ und für die Wärmeleitung prinzipiell erklärt werden kann, sind quantitative Aussagen zu den Abhängigkeiten $A_0(S_e, T_0)$ nur aus komplexen numerischen Rechnungen ableitbar [42].

D.4 Verzögerte Elastizität

Das im Jahr 2003 von Borodin *et al.* vorgeschlagene viskoelastische Modell stellt eine Modifizierung des Trinkaus-Modells dar [37]. Die Autoren nehmen auch eine durch eine Wärmespitze induzierte nv-Zone mit entsprechender Eigendehnung an, erklären die atomare Umordnung aber im Rahmen des viskoelastischen Kelvin-Voigt-Modells durch eine über viskoses Fließen verzögerte Elastizität. Im Gegensatz zum Maxwell-Ansatz wird der Spannungszustand der nv-Zone $\underline{\underline{\sigma}}^Z = \underline{\underline{\sigma}}^{elas} + \underline{\underline{\sigma}}^{vis}$ als Überlagerung von thermoelastischen $\underline{\underline{\sigma}}^{elas}$ und viskosen Anteilen $\underline{\underline{\sigma}}^{vis}$ beschrieben. Unter der Annahme einer Gauss-förmigen Temperaturverteilung, bei der die Schmelztemperatur nicht überschritten wird, sowie unter Berücksichtigung temperaturabhängiger Viskositäten sowohl in der nv-Zone als auch im umgebenden Substrat wird eine dimensionslose Wellengleichung für die Dichtefluktuations hergeleitet. Die numerischen Lösungen zeigen, dass die Kinetik der atomaren Umordnung durch die Lebensdauer der nv-Zone, die inverse Vibrationsfrequenz und die Verzögerungszeit durch die viskose Dämpfung bestimmt ist. In Abhängigkeit von der Relation dieser Zeitkonstanten werden drei unterschiedliche Moden für die Dichteänderung diskutiert. Die während der Abkühlung eingefrorenen Dichtefluktuations werden als Ursache der Deformation des Substrats und somit des anisotropen Wachstums angesehen. Die bestehende Diskrepanz der abgeleiteten Werte von $A_0 \sim 10^{-4} \text{ nm}^2$ zu den experimentellen Werten von $A_0 \sim (10^{-2} \dots 1) \text{ nm}^2$ wird zwar durch die ausschließliche Berücksichtigung radialer Umverteilungen unter Vernachlässigung des Materieflusses in axialer Richtung erklärt, verdeutlicht aber die geringe quantitative Aussagekraft dieses Modells.

D.5 Makroskopischer Impulsübertrag

In dem von Cliche *et al.* im Jahr 1995 [21] vorgeschlagenen und von Chicoine *et al.* im Jahr 1997 [22] näher spezifizierten Modell wird die anisotrope atomare Umordnung auf einen Impulsübertrag vom Ion über das Elektronensystem auf die Atome zurückgeführt. Unter schräger Bestrahlung mit Einfallswinkel Θ induziert die Bremskraft $S_e(z)$ über ihre laterale Komponente die Scherspannung

$$\sigma_{xz}(z) = \frac{\sin \Theta}{\pi R_0^2} S_e(z) \equiv -\eta_s \frac{\partial}{\partial z} v_{xz}(z). \quad (\text{D.5})$$

Wie im Trinkaus-Modell wird angenommen, dass für hinreichend hohe S_e die Materie entlang der Ionenbahn durch eine Wärmespitze fluid wird und eine geringe Scherviskosität η_s besitzt. In dieser nv-Zone mit effektivem Radius R_0 würde σ_{xz} durch viskoses Fließen mit einer lateralen Schergeschwindigkeit v_{xz} relaxieren. Unter Annahme einer thermisch aktivierten Viskosität $\eta_s(T)$ wird die Anzahl der versetzten Atome in Abhängigkeit von S_e und Θ durch numerische Integration berechnet. Die aus den beobachteten Graben- und Wallstrukturen abgeleitete Anzahl versetzter Atome konnte somit zwar recht erfolgreich erklärt werden. Das Modell zeigt jedoch Mängel in der quantitativen Erklärung des anisotropen Wachstums. Es wird angenommen, dass die senkrecht gerichtete Kraft durch das unterliegende Substrat zu einer kompressiven Spannung konvertiert wird, der die bestrahlte Region durch eine laterale Deformation ausweicht. Aufgrund des Vektorcharakters des dem Modell zugrundeliegenden Impulsübertrags besteht jedoch Zweifel, ob die tensoriellen Eigenschaften des Deformations- und Spannungsfeldes der nv-Zone und des umgebenden Substrates ohne die Grundgleichungen der Kontinuumsmechanik richtig beschrieben werden.

Danksagung

Abschließend möchte ich die Gelegenheit nutzen, mich bei all denen zu bedanken, die direkt oder indirekt zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Ich danke Prof. Dr. Werner Wesch (IFK, FSU Jena) für die Betreuung meiner Promotion, die hervorragenden Arbeitsbedingungen sowie die freundliche und konstruktive Atmosphäre in seiner Arbeitsgruppe. Darüber hinaus bedanke ich mich für die Möglichkeit der Präsentation meiner Ergebnisse auf mehreren internationalen Konferenzen.

Weiterhin danke ich Prof. Dr. Wolfgang Witthuhn (IFK, FSU Jena) und Dr. Heinrich Homeyer (ISL, HMI Berlin) für die Organisation des Projektes meiner Promotion und für die exzellente Kooperation beider Institute.

Mein besonderer Dank gilt Dr. Siegfried Klaumünzer (ISL, HMI Berlin), dem ich für die enge und sehr erfolgreiche fachliche Zusammenarbeit sowie die experimentelle Betreuung während der Strahlzeiten am ISL sehr herzlich danke.

Außerdem möchte ich mich bei meinen Kollegen Dipl.-Phys. Andrey Kamarou und Dr. Elke Wendler (beide IFK, FSU Jena) für viele anregende fachliche Diskussionen und ihre experimentelle Unterstützung bedanken.

Die Ergebnisse dieser Arbeit wären ebenfalls nicht ohne die zahlreichen konstruktiven fachlichen Diskussionen auf internationalen Konferenzen und auf Basis persönlicher Kommunikation entstanden. Mein Dank gilt vor allem Dr. Helmut Trinkaus (Forschungszentrum Jülich), Dr. Arjen Vredenberg (Universität Utrecht, Niederlande), Prof. Dr. Christian Dufour (SIFCOM-ENSICAEN Caen, Frankreich), Prof. Dr. Marcel Toulemonde (CIRIL-GANIL Caen, Frankreich), Prof. Dr. Sjoerd Roorda (Université de Montréal, Kanada), Prof. Dr. Harry Bernas (CSNSM-CNRS Orsay, Frankreich), Dr. Christina Trautmann (GSI Darmstadt), Prof. Dr. Michael Nastasi (LANL Los Alamos, USA), Prof. Dr. György Szenes (Universität Budapest, Ungarn), sowie Dr. Dirk Holland-Moritz und Prof. Dr. Ivan Egry (beide DLR Köln).

Für die fruchtbare fachliche und experimentelle Zusammenarbeit sowie das freundliche Arbeitsklima danke ich meinen Kollegen Dr. Konrad Gärtner, Dr. Frank Schrempel, Oliver Picht und Claudia Schnohr (alle IFK, FSU Jena).

Ich danke Herrn Dieter Scholz (PAF, FSU Jena) für die Konstruktion der Probenhalter und der Mechanik-Werkstatt der FSU Jena für deren Anfertigung.

Frau Carmen Voigt (IFK, FSU Jena) danke ich für die Anfertigung der DEKTAK- und AFM-Messungen sowie für die Lichtmikroskop-Aufnahmen, und ganz besonders für die entscheidenden Impulse für meine Literatur-Recherche.

Herrn Ullrich Barth (IFK, FSU Jena) danke ich für die 'sportliche' Begeisterung während der von ihm betreuten Probenherstellung, die Unterstützung bei der RBS-Analyse sowie die Anfertigung zahlreicher Computer-Programme zur Daten-Verwaltung.

Die Messungen zur in-situ Laser-Reflexion wären nicht möglich gewesen ohne die Bereitsstellung des experimentellen Aufbaus von Dr. Teun van Dillen und Prof. Dr. Albert Polman (beide AMOLF, FOM Amsterdam), sowie dessen Justierung und Optimierung von Dr. Thomas Zumkley (ISL, HMI Berlin).

Ich danke weiterhin Prof. Dr. Ute Kaiser (Universität Ulm) und Dr. Jörg Lindner (Universität Augsburg) für die Anfertigung der TEM-Aufnahmen, sowie Michael Mans (IFK, FSU Jena) für die Aufnahme am REM.

Für die Aufnahme und Diskussion der IRR-Messungen danke ich Dr. Hartmut Hobert und Dr. Thomas Mayerhöfer (beide IPC, FSU Jena).

Meinem Studienfreund Dipl.-Phys. Torsten Frosch (IPC, FSU Jena) danke ich ganz herzlich für die Aufnahme der Raman-Spektren.

Für die Aufnahme und Auswertung der XRD-Messungen danke ich Dr. Ivo Zizak und Dr. Nora Darowski (beide ISL, HMI Berlin).

Außerdem danke ich meinem ehemaligen Kollegen Dr. C. Schubert (vormals IFK, FSU Jena; jetzt HMI Berlin) für die stets hilfsbereite und freundliche Zusammenarbeit.

Nicht zu vergessen sei mein Dank an die Techniker des ISL am HMI Berlin, die stets mit energischem Einsatz für einen reibungslosen Ablauf meiner Strahlzeiten sorgten.

Schließlich danke ich meinem Vater Dr. Harry Hedler, meinem Bruder Dipl.-Betriebswirt Martin Hedler und meiner Freundin Dipl.-Psych. Sarah Thomann für ihre liebevolle Unterstützung im Privatleben und das entgegengebrachte Vertrauen.

Ehrenwörtliche Erklärung

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

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

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

Die geltende Prüfungsordnung der Physikalisch-Astronomischen Fakultät ist mir bekannt.

Ich versichere ehrenwörtlich, dass ich nach bestem Wissen die reine Wahrheit gesagt und nichts verschwiegen habe.

Jena, den 24. April 2006

.....

André Hedler

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name	Hedler
Vorname	André
Geburtsdatum	18. Oktober 1975
Geburtsort	Jena

Schulbildung

1982–1990	Grundschule POS „Werner Seelenbinder“ in Jena
1990–1994	Naturwiss. Gymnasium Spezialschule „Carl Zeiss“ in Jena
25.06.1994	Abitur, Prädikat „sehr gut“, Gesamtnote 1.3

Grundwehrdienst

07.1994–06.1995	Stabs- und Fernmelderegiment in Regensburg
-----------------	--

Studium

10.1995–02.1999	Physik-Studium an der Friedrich-Schiller-Universität Jena
02.1999–02.2000	Physik-Studium an der University of New South Wales, Sydney, Australia
02.2000–10.2000	Physik-Studium an der Friedrich-Schiller-Universität Jena
10.2000–10.2001	Diplomarbeit: „Experimentelle und theoretische Untersuchungen zur Formierung von Ge-Nanokristallen in SiC durch Ionenimplantation und Nachfolgeprozesse“
18.10.2001	Physik-Diplom, Prädikat „sehr gut“, Gesamtnote 1.1

Berufliche Tätigkeit

seit 01.2002	wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Festkörperphysik der Friedrich-Schiller-Universität Jena
--------------	---

Jena, den 24. April 2006

.....
André Hedler