

Institut für Schicht- und Ionentechnik

**Ionenstrahlsynthese
einkristalliner CoSi_2 -Schichten
in Si und deren elektrische und
strukturelle Charakterisierung**

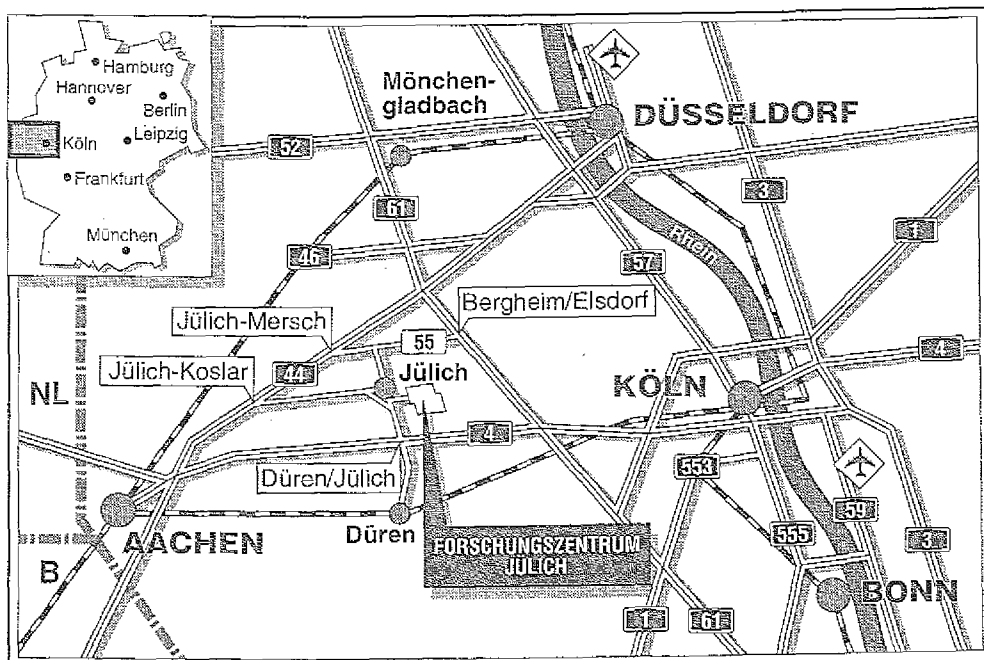
Rolf Jebasinski

Handwritten text at the top of the page, possibly a header or title.

Handwritten text in the middle of the page, consisting of several lines.

Handwritten text at the bottom left of the page.

Handwritten text at the bottom right of the page.



Berichte des Forschungszentrums Jülich ; 2738

ISSN 0366-0885

Institut für Schicht- und Ionentechnik JÜI-2738

D 38 (Diss. Universität Köln)

Zu beziehen durch: Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek

Postfach 1913 · D-5170 Jülich · Bundesrepublik Deutschland

Telefon: 02461/61-6102 · Telefax: 02461/61-6103 · Telex: 833556-70 kfa d

**Ionenstrahlsynthese
einkristalliner CoSi_2 -Schichten
in Si und deren elektrische und
strukturelle Charakterisierung**

Rolf Jebasinski

quantitative and qualitative
information about the population
as well as the impact of the
program on the community.

Appendix A: Data Collection and Analysis Methods

1. Quantitative Data Collection
2. Qualitative Data Collection
3. Data Analysis Methods

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	3
2. Theoretische Grundlagen	6
2.1. Ionenimplantation	6
2.1.1. Energieverlust	6
2.1.2. Reichweite	8
2.1.3. Defekterzeugung	11
2.2. Schichtbildung	13
2.2.1. Keimbildung und -wachstum während der Implantation	13
2.2.2. Ausscheidungsform	15
2.2.3. Ausscheidungswachstum während der Temperung	16
2.3. Strukturelle Eigenschaften von CoSi_2	20
2.3.1. Si/ CoSi_2 -Grenzflächenstruktur	21
2.3.2. Elastische Gitterverzerrung	23
3. Herstellungsmethoden	27
3.1. Festkörperepitaxie und Molekularstrahlepitaxie	27
3.2. Ionenstrahlsynthese und Allotaxie	28
4. Charakterisierungsmethoden	30
4.1. Ionenstreumethoden	30
4.1.1. RBS	30
4.1.2. Channeling	35
4.2. Widerstands - und Hallmessung	40
4.3. Messung der Schottkybarrierenhöhe	41
5. Ergebnisse	43
5.1. Wachstum und Bildung der CoSi_2 -Schicht	43
5.1.1. Dosisabhängigkeit	43
5.1.2. Wachstumskinetik der CoSi_2 -Ausscheidungen	47
5.2. Herstellung dünner CoSi_2 -Schichten	53
5.2.1. Dünne CoSi_2 -Schichten in (100) Si	54

5.2.2. Dünne CoSi_2 -Schichten in (111) Si	60
5.3. Strukturelle Eigenschaften der CoSi_2 -Schichten	65
5.3.1. Verzerrung der CoSi_2 -Schichten	65
5.3.2. MEIS an dünnen CoSi_2 -Schichten	68
5.4. Elektrische Eigenschaften der CoSi_2 -Schichten	73
5.4.1. Elektrische Transporteigenschaften	73
5.4.2. Schottkybarrierenhöhen von CoSi_2/Si - Dioden	77
5.5. Untersuchungen zur Mesotaxie in SIMOX-Wafern und SiGe-Schichten	80
5.5.1. Co-Implantation in SIMOX-Wafer	80
5.5.2. Co-Implantation in SiGe-Schichten	86
5.6. Strukturierung	92
6. Diskussion	98
6.1. Schichtbildung	98
6.2. Elastische Gitterverzerrung und Schichtorientierung	103
6.3. Elektrische Transporteigenschaften und Schottkybarrieren	105
6.4. Co-Implantation in SIMOX-Wafer und SiGe-Schichten	112
7. Zusammenfassung	116
8. Literaturverzeichnis	119
9. Veröffentlichungen im Rahmen dieser Arbeit	127

1. Einleitung

Metallsilizide werden in den letzten Jahren zunehmend in der Mikroelektronik als Ohm'sche Kontakte, Schottkykontakte, Gate-Elektroden und Leiterbahnen eingesetzt. Dies liegt einerseits daran, daß sie erst bei viel höheren Temperaturen degradieren als Aluminium. Andererseits haben sie einen deutlich kleineren Widerstand als das häufig als Gate-Elektrode verwendete Polysilizium. Neben den refraktären Siliziden (z.B. TiSi_2 , MoSi_2), welche schon in Speicherchips eingesetzt werden (4 MBit DRAM von Siemens), sind die Übergangsmetallsilizide NiSi_2 und CoSi_2 von besonderem Interesse. Sie kristallisieren in der CaF_2 -Struktur mit einer kleinen Gitterfehlانpassung zu Silizium (NiSi_2 : -0.4%, CoSi_2 : -1.21%) und können deshalb epitaktisch auf Silizium aufwachsen. Diese Silizid/Silizium Struktur bietet, wegen ihrer atomar scharfen Grenzfläche, in einmaliger Weise die Möglichkeit elektronische und strukturelle Eigenschaften einer Metall/Halbleiter - Grenzfläche zu untersuchen. Außerdem können durch Aufwachsen einer epitaktischen Silizium Schicht auf das Silizid Heterostrukturen der Form Si/Silizid/Si hergestellt werden. Solche Strukturen sind technologisch besonders mit Kobaltdisilizid (CoSi_2) interessant, da es bei Raumtemperatur einen sehr kleinen spezifischen elektrischen Widerstand ($\approx 14 \mu\Omega\text{cm}$) hat und die elektrischen Ladungsträger eine große mittlere freie Weglänge ($\approx 12 \text{ nm}$) besitzen [1].

CoSi_2 könnte somit zum einen als vergrabene Leiterbahn für dreidimensionale Integration [2] und als Hochfrequenzleiterbahn [3] verwendet werden. Zum anderen kann es als vergrabener Kollektor in Bipolar Transistoren [4] oder als metallische Basis für den "Metal Base Transistor" (MBT) [5] und den "Permeable Base Transistor" (PBT) [6,7,8,9] eingesetzt werden.

$\text{Si/CoSi}_2/\text{Si}$ -Heterostrukturen können allerdings mit herkömmlichen Herstellungsmethoden, wie Festkörperepitaxie oder Molekularstrahlepitaxie nur auf (111) Si-Substraten hergestellt werden [10]. Da aber der MBT nach Bandstrukturechnungen nur in (100) Si funktioniert [11] und auch die Halbleiterindustrie in der Chip - Fertigung fast ausschließlich (100) orientierte Si Wafer benutzt, wird gegenwärtig besonders das Wachstum von CoSi_2 auf (100) Si untersucht. Erst kürzlich gelang die Herstellung von einkristallinem CoSi_2 auf (100) Si mit MBE [12,13]. Der nächste Schritt, das Aufwachsen einer zusätzlichen Si-Schicht auf diese CoSi_2 -Schicht, bereitet aber weiterhin Schwierigkeiten [14].

Ein anderes Verfahren zur Herstellung von CoSi_2 ist die Ionenstrahlsynthese [15]. Dabei werden Co^+ -Ionen mit hohen Dosen ($\approx 10^{17} \text{ Co/cm}^2$) in geheizte Si-Substrate implantiert und anschließend getempert. Durch die Temperung werden die nach der Implantation gaußförmig verteilten Co-Atome so umgelagert, daß eine epitaktische Si/ CoSi_2 /Si-Heterostruktur mit scharfen Grenzflächen sowohl in (111) Si als auch in (100) Si entsteht. Diese Umlagerung beruht darauf, daß schon während der Implantation CoSi_2 -Ausscheidungen entstehen, welche während der Temperung vergrößern und schließlich zu einer Schicht zusammenwachsen.

Ziel dieser Arbeit ist es, die bei dem letztgenannten Verfahren während der CoSi_2 -Schichtbildung ablaufenden Prozesse zu untersuchen sowie die strukturellen und elektrischen Eigenschaften solcher Schichten zu charakterisieren.

Die Ionenstrahlsynthese besteht aus zwei Schritten, der Hochdosis-Implantation und der anschließenden Temperung, welche im ersten Teil dieser Arbeit detailliert untersucht werden. Voraussetzung für das Verständnis der bei der Hochdosis-Implantation in einem sich kontinuierlich veränderndem Target auftretenden Prozesse sind hinreichende Kenntnisse über das Tiefenprofil sowie die Strahlschädigung der implantierten Ionen. Daher wurde zunächst eine genaue Untersuchung des Co-Profiles und der Schädigung im Silizium mittels Rutherford Rückstreuung, He - Channeling und Widerstandsmessung in Abhängigkeit von der Dosis vorgenommen. Die nach der anschließenden Temperung entstehenden CoSi_2 -Schichten wurden im Hinblick auf Kristallinität und Morphologie untersucht. Die während der Temperung stattfindende Vergrößerung (Reifung) der CoSi_2 -Ausscheidungen wurde mit RBS und Transmissions-Elektronen-Mikroskopie im Bereich kleiner Dosen genau analysiert und eine Aktivierungsenergie für den Reifungsprozeß bestimmt.

Ein weiterer Schwerpunkt dieser Arbeit bildet die Herstellung und Charakterisierung sehr dünner CoSi_2 -Schichten in Hinblick auf deren Verwendung in Bauelementen. Dazu wurde die Implantationsenergie und -dosis im Vergleich zu den normalerweise verwendeten, um bis zu einer Größenordnung reduziert. Der Einfluß der Implantationsparameter Targettemperatur und Strahlstromdichte auf die Schichtbildung und Schichtqualität wurde eingehend analysiert, um optimale Schichtqualitäten zu erhalten.

Zur strukturellen Charakterisierung wurde die elastische Gitterverzerrung der unterschiedlich dicken Schichten gemessen. Die elektrischen Eigenschaften dieser Schichten wurden mittels temperaturabhängiger Widerstands- und Hallmessungen sowie Messungen der Schottkybarrierenhöhe untersucht.

Den letzten Teil der Arbeit bilden Untersuchungen zur CoSi_2 -Schichtbildung nach Co-Implantation in SIMOX-Wafer (SIMOX = Separation by IMplantation of OXYgen [16]; durch Ionenstrahlsynthese hergestellte vergrabene SiO_2 -Schichten in Si) und SiGe-Schichten in Hinblick auf die Kompatibilität der Ionenstrahlsynthese mit diesen Systemen. Diese sind besonders deswegen interessant, weil sowohl SIMOX-Wafer als auch SiGe-Schichten zunehmend in die Si - Technologie integriert werden. SIMOX-Wafer wurden z.B. schon zur Herstellung von Strahlungsresistenten 64K SRAM's benutzt [17]. Mit SiGe/Si-Schichtstrukturen werden im Augenblick die schnellsten Transistoren auf Si-Basis hergestellt [18].

2. Theoretische Grundlagen

2.1. Ionenimplantation

Bei dem Verfahren der Ionenimplantation werden Atome ionisiert, in einem elektrischen Feld beschleunigt und in einen Festkörper geschossen (implantiert). Die Beschleunigungsenergie liegt im allgemeinen zwischen einigen keV bis zu einigen MeV. Durch den Ionenbeschuss ist es möglich die Eigenschaften der Festkörperoberfläche bzw. der oberflächennahen Schicht des Festkörpers stark zu verändern. Im folgenden werden die Wechselwirkungen zwischen Ion und Festkörper, die die Reichweite bestimmen und auch zur Schädigung des Festkörpers führen können, kurz beschrieben.

2.1.1. Energieverlust

In dem hier interessierenden Energiebereich sind im wesentlichen zwei Mechanismen für die Abbremsung der Ionen im Target und damit für die Reichweitenverteilung verantwortlich. Dies sind inelastische Stöße der Ionen mit den Targetelektronen (elektronischer Energieverlust), die zu Anregung bzw. Ionisation der Targetatome führen, und elastische Stöße mit den Targetkernen (nuklearer Energieverlust), die zu Verlagerung der Targetatome führen. Beide Prozesse werden als unabhängig angesehen und getrennt behandelt. Der Gesamtbremsquerschnitt S , oder Energieverlust dE pro Tiefenintervall dx und atomarer Dichte N des Targets ($S = -1/N(dE/dx)$), setzt sich daher aus einem elektronischem Anteil S_e und einem nuklearem Anteil S_n zusammen:

$$S(E) = S_e(E) + S_n(E) \quad (2.1)$$

Bei bekanntem $S_e(E)$ und $S_n(E)$ kann die Gleichung (2.1.) integriert werden und man erhält:

$$R = \frac{1}{N} \int_0^{E_0} \frac{dE}{S_e(E) + S_n(E)} \quad (2.2)$$

R ist die mittlere Gesamtweglänge eines Teilchens der Anfangsenergie E_0 in einem amorphen Medium.

Bei hinreichend kleinen Projektilgeschwindigkeiten bewegt sich das Projektil im Target als weitgehend neutrales Atom. Zur Beschreibung der Abbremsung bei Energien unterhalb 0.1 MeV/amu wurde bisher meist die Theorie von Lindhardt, Scharff und Schiøtt (LSS-

Theorie) herangezogen [19]. Nach dieser Theorie ist der elektronische Bremsquerschnitt proportional zur Projektilgeschwindigkeit bzw. der Quadratwurzel der Teilchenenergie E:

$$S_e = -\frac{1}{N} \left(\frac{dE}{dx} \right)_e = k_{LSS} \sqrt{E} \quad (2.3)$$

Der k_{LSS} - Koeffizient ist eine Funktion der Kernladungszahl von Ion und Target sowie von der Projektilmasse.

Bei Energien oberhalb von etwa 20 MeV/amu bewegt sich das Projektil schneller als die Elektronen seiner K - Schale und ist daher mit hoher Wahrscheinlichkeit vollständig ionisiert. Der elektronische Bremsquerschnitt wird in diesem Fall, für nicht - relativistische Energien, durch die Bethe - Bloch - Theorie beschrieben [20,21].

Im Übergangsbereich zwischen hohen und niedrigen Ionenenergien wird der elektronische Bremsquerschnitt häufig durch eine Interpolationsformel von Biersack [22] beschrieben.

Zur Berechnung des nuklearen Bremsquerschnitts geben Lindhardt, Scharff und Schiøtt beruhend auf dem statistischen Thomas - Fermi - Atommodells einen differentiellen Streuquerschnitt in tabellierter Form an [19]. Aus diesem kann eine universal für alle Ion - Target Kombinationen gültiger Bremsquerschnitt abgeleitet werden. Eine genauere Beschreibung für den nuklearen Bremsquerschnitt gelingt mit Hilfe einer neueren Theorie von Ziegler, Biersack und Littmark [23] (ZBL - Theorie). Nach Berechnungen von Potentialen für eine große Anzahl von Ion - Targetkombinationen wird durch Anpassung das sogenannte "universal potential" bestimmt, das sich gegenüber dem Thomas - Fermi - Potential in der LSS - Theorie durch eine genauere Coulomb - Abschirmung auszeichnet.

Für Targets die aus mehreren Elementen aufgebaut sind, wird der Gesamtbremsquerschnitt gemäß der Bragg'schen Regel, additiv aus den Einzelbeiträgen S_i jeder vorkommenden Atomsorte, gewichtet nach ihrer Häufigkeit, berechnet [24].

Abb. 2.1. zeigt die mit Hilfe der ZBL - Theorie ausgerechnete nuklearen und elektronischen Energieverluste (dE/dx) von Co-Ionen in einem Si- und einem CoSi_2 -Target. Die Energieverluste für Co-Ionen im CoSi_2 -Target sind höher als im Si - Target, was zu einer stärkeren Abbremsung von Co in CoSi_2 führt. Der elektronische Energieverlust verhält sich in dem gezeigten Energiebereich entsprechend der LSS - Theorie. Der nukleare Energieverlust steigt im Bereich niedriger Energien kurz an und durchläuft in beiden Fällen bei ca. 50 keV ein Maximum, um dann mit steigender Energie langsam abzunehmen.

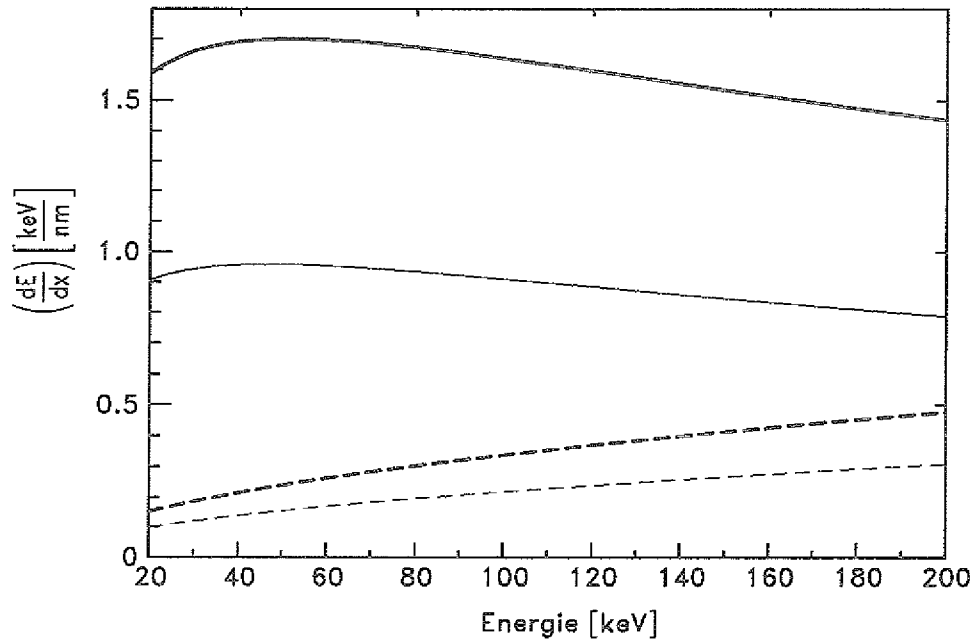


Abb. 2.1.: Elektronischer Energieverlust (gestrichelt) und nuklearer Energieverlust (durchgezogen) in Abhängigkeit von der Energie der Co-Ionen in einem Si-Target (dünne Linien) und einem CoSi₂-Target (dicke Linien).

2.1.2. Reichweite

Der Energieverlust entlang des Weges ist ein statistischer Prozeß. Daher werden die Ionen um eine mittlere, auf die Einfallsrichtung projizierte Reichweite R_p mit einer Streuung σ (auch Straggling genannt) verteilt, die in erster Näherung mit einer Gaußverteilungsfunktion beschrieben werden kann:

$$c(x) = \frac{\phi}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-R_p)^2}{\sigma^2}\right) \quad (2.4)$$

Die Konzentration im Maximum ist:

$$c_{peak} = \frac{\phi}{\sigma\sqrt{2\pi}} \quad (2.5)$$

wobei ϕ die Dosis ist.

Zur Simulation solcher Verteilungen werden im allgemeinen Monte - Carlo - Simulationen benutzt. Das häufig verwendete Simulationsprogramm TRIM (TRAnsport of Ion in Matter) [23] ermöglicht die Berechnung von Tiefenprofilen der elektronischen und nuklearen Bremsquerschnitte sowie der abgelagerten Ionen in amorphen Targets mit konstanter Dichte. Abb. 2.2. zeigt im Vergleich die Co-Verteilung sowie den elektronischen und nuklearen Energieverlust einer 200 keV Co-Implantation in Si, berechnet mit dem Programm TRIM89. Der elektronische Energieverlust nimmt mit der Tiefe ab, während der nukleare Energieverlust ein Maximum in einer Tiefe von 80 nm durchläuft.

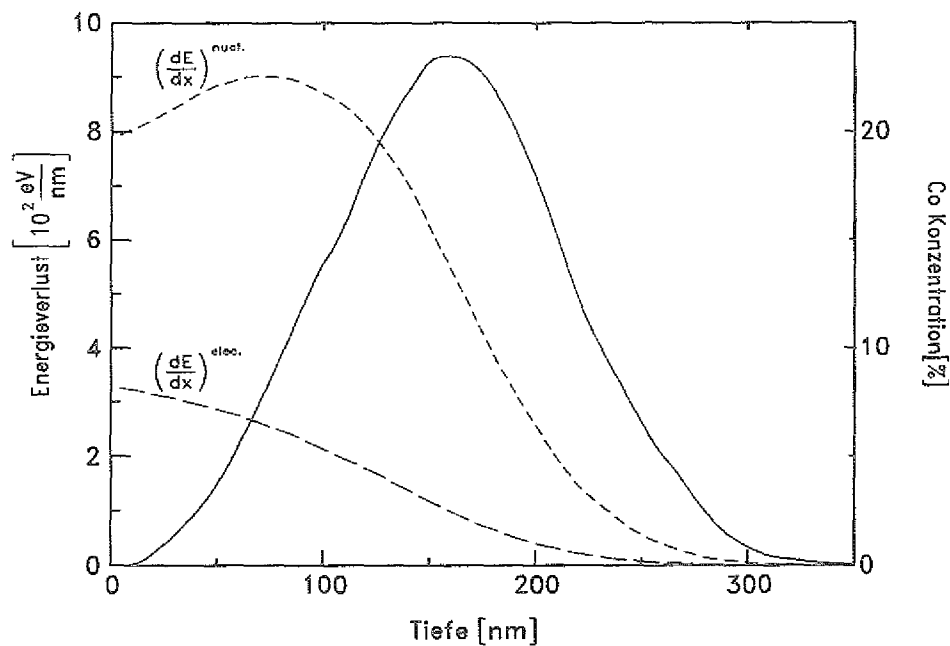


Abb. 2.2: TRIM89 Simulation der Co-Verteilung (durchgezogenen Linie) sowie des elektronischen und nuklearen Energieverlustes (gestrichelte Linie) einer 200 keV Implantation in Si.

Implantationen mit geringeren Energien führen, wie am Beispiel einer 20 und 200 keV Implantation in Abb. 2.3. zu sehen ist, wegen der geringeren Energiestreuung zu einer wesentlich schmaleren und oberflächennäheren Verteilung.

Da dieses Programm den gesamten Weg eines Ions im Festkörper simuliert, kann man somit auch das laterale Stragging, die Abweichung der Ionen senkrecht zur Einfallsrichtung, bestimmen. Die Kenntnis dieses lateralen Stragglings ist wichtig für die Implantation durch Masken und für 20 und 200 keV Co-Implantation in Si in Tabelle 2.1 aufgeführt.

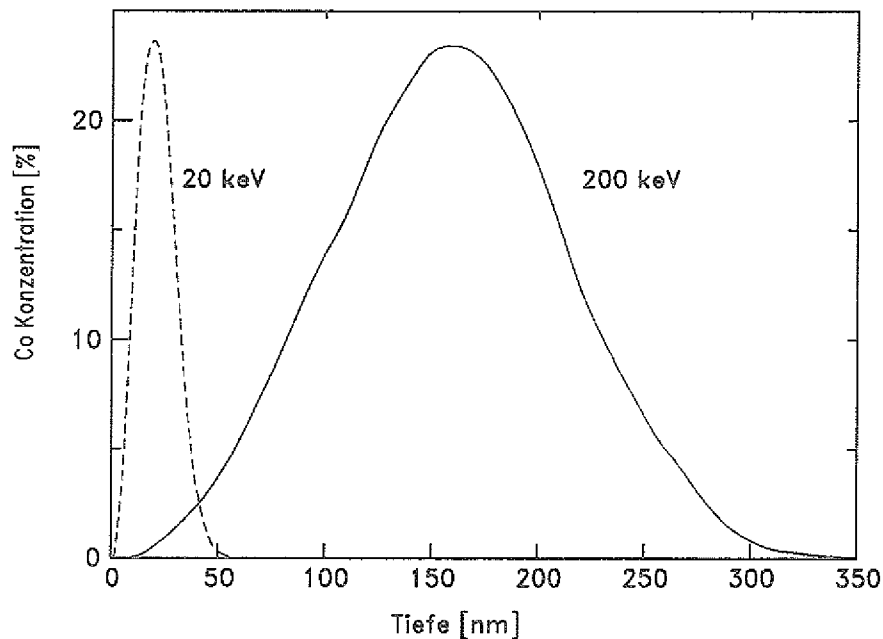


Abb. 2.3.: TRIM89 Simulation der Co-Verteilung nach 20 und 200 keV Implantation in Si.

Tabelle 2.1.: Reichweite und Streuung von Co-Implantationen in Si- und CoSi_2 -Substraten

Energie [keV]	Substrat	R_p [nm]	σ [nm]	σ_{lat} [nm]
200	CoSi_2	85	30	30
200	Si	158	46	48
20	Si	21	8	9
20	CoSi_2	11	5	5

Tabelle 2.1. kann man entnehmen, daß Co-Implantationen in CoSi_2 im Vergleich zu Implantationen in Si, aufgrund des höheren Energieverlustes, zu einer Verringerung der Reichweite und des Straggling führen. Bei Hochdosis-Implantationen, die bei der Ionenstrahlsynthese von Siliziden und SiO_2 notwendig sind, ergeben sich veränderte Bremsquerschnitte und Tiefenprofile dadurch, daß sich die Targetdichte und Zusammensetzung im

Laufe der Bestrahlung verändern (von Si zu CoSi_2) und die Targetoberfläche sukzessive durch Sputtern abgetragen wird.

Solche Implantation können mit dem Programm HDTRIM [25], welches auf der mehrfachen Anwendung von TRIM beruht, simuliert werden. Dazu wird das Substrat in etwa 20 Schichten aufgeteilt, in die dann sukzessive Bruchteile ($1/10$) der Gesamtdosis implantiert werden. Nach jeder TRIM - Rechnung werden für den nachfolgenden Simulationslauf für jede Teilschicht die Dichte, die Stöchiometrie und die Bremsquerschnitte neu berechnet. Um dem Sputtereffekt Rechnung zu tragen, wird als Ausgangsprofil für jeden Simulationslauf das entsprechend zur Oberfläche hin verschobenes Profil aus dem vorhergehenden Lauf benutzt.

Eine alternative Möglichkeit, Konzentrationstiefenprofile auch für Hochdosis-Implantationen zu berechnen, bietet das Programm PROFILE [26]. Dieses Programm benutzt vorberechnete Pearson - Verteilungen und ist dadurch wesentlich schneller als Monte-Carlo - Rechnungen, kann aber im Gegensatz zu TRIM keine Defektverteilung berechnen.

2.1.3. Defekterzeugung

Ionenimplantation in ein kristallines Target führt neben der Verteilung der Ionen im Target auch zu einer Schädigung des Targets. Bei einem nuklearen Stoß auf ein Targetatom kann dieses unter Bildung einer Leerstelle von seinem Gitterplatz verlagert werden. Wenn der Energieübertrag groß genug ist, kann dieses Atom wiederum andere Gitteratome verlagern und so eine Kaskade von verlagerten Atomen rund um den Pfad des einfallenden Ions bilden, die sogenannte Stoßkaskade. Diese Stoßkaskade ist eine inhomogene Ansammlung von Punktdefekten, Leerstellen und Zwischengitteratomen (Frenkeldefekten). Diejenige kinetische Energie, die nicht mehr ausreicht eine Verlagerung zu induzieren, wird in Form von Phononenanregungen abgegeben und markiert den Beginn der "Thermal Spike" Phase der Kaskade. Der "Thermal Spike" kann als eine hochangeregte Region am Ende eines Ionen-Weges angesehen werden, in dem die aus nuklearen elastischen Stößen übertragene Energie unter die versetzten Atome aufgeteilt ist. Viele Frenkelpaare, die in einer Entfernung von weniger als 1 nm liegen, rekombinieren in dieser Phase. Die Zeit, die für alle diese Verlagerungen ausgehend von einem einzelnen Ion benötigt wird, ist ca. 10^{-13} s. Darauf folgt die Phase der Phononenanregung. Dieser Zustand existiert einige ps bevor er auf die Umgebungstemperatur mit einer Rate von ca. 10^{10} - 10^{12} K/s abgekühlt wird [27].

Nach Kinchin und Pease [28] ist die Zahl $N(E)$ der verlagerten Atome in einem Festkörper

$$N(E) = \frac{E}{2E_d} \quad (2.6)$$

wobei E die Ionenenergie und E_d die Schwellenenergie zur Erzeugung eines stabilen Frenkelpaares (≈ 25 eV in Si [29]) ist. Diese Formel wurde für ein Modell harter Kugelstöße berechnet und von Sigmund [30] für eine realistischere Stoß-Wechselwirkung modifiziert zu

$$N(E) = \frac{\xi v(E)}{2E_d} \quad (2.7)$$

wobei $v(E)$ der Betrag der Energie ist, der nicht in elektronische Anregung verlorengegangen ist, und ξ ($\xi < 1$) ein Faktor ist, der von der Form des Streupotentials abhängt.

Im Falle von niedrigen Implantationstemperaturen, bei denen Frenkelpaare unbeweglich sind, nimmt die Dichte der Defekte mit zunehmender Dosis zu. Die Kaskaden überlappen dann und es bildet sich eine gleichmäßig ungeordnete Schicht (Amorphisierung). Die Tiefe dieser amorphen Schicht ist ungefähr vergleichbar mit der projizierten Reichweite der Ionen. Bei tiefen Temperaturen kann man ein Target schon mit einer Dosis, die einem Zehntel einer Monolage ($\approx 10^{14}$ at/cm²) entspricht, amorphisieren. Mit zunehmender Targettemperatur werden die Defekte beweglich und können ausheilen. Somit wird eine höhere Dosis zur vollständigen Amorphisierung des Targets benötigt. Bei höheren Temperaturen wird dann keine Amorphisierung mehr beobachtet, da die Punktdefekte sehr beweglich sind und schnell rekombinieren. Morehead et al. [31] beschreiben dieses Verhalten unter der Annahme, daß bei höheren Temperaturen ein Abbau des direkt geschädigten Volumens durch Leerstellendiffusion aus der Kaskade heraus mit anschließender Rekombination stattfindet. Eine Schlußfolgerung aus diesem Modell ist, daß es eine kritische Temperatur T_∞ gibt, oberhalb der Amorphisierung unabhängig von der Dosis nicht mehr stattfinden kann:

$$T_\infty = - \frac{U}{k_B \cdot \ln \left(\sqrt{\frac{dE}{dx}} \cdot K'^{-1} \right)} \quad (2.8)$$

mit $U = 0.06$ eV und $K' = 36.6$ (eV/A)^{0.5} für Implantation in Si ($U = 0.09$ eV und $K' = 63.2$ (eV/A)^{0.5} für Implantation in Ge). Für 200 keV Co-Implantationen in Si ergibt sich $T_\infty = 180^\circ\text{C}$. Im Vergleich dazu ergibt sich für 40 keV Implantationen in Si $T_\infty = 250^\circ\text{C}$. Im Falle der Hochdosis-Implantation sollte man also, zur Vermeidung der

Amorphisation des Targets, die geeignete Implantationstemperatur entsprechend hoch, abhängig von der Energie und Targettyp, einstellen.

2.2. Schichtbildung

2.2.1. Keimbildung und -wachstum während der Implantation

Die Gleichgewichtslöslichkeit von Co in Si ist $c_{\text{Co} \rightarrow \text{Si}} = 1 \times 10^{26} \exp(-2.83/k_B T)$ [32], d.h. bei 1000°C sind nur $6.2 \times 10^{14} \text{ Co/cm}^3$ und bei 350°C nur $1.3 \times 10^3 \text{ Co/cm}^3$ in Si gelöst. Aber schon nach einer Implantation von nur $3 \times 10^{16} \text{ Co/cm}^2$ wird eine Co-Peak-Konzentration von $2 \times 10^{21} \text{ Co/cm}^3$ erreicht. Dies liegt um nahezu 18 Größenordnungen oberhalb der Gleichgewichtslöslichkeit bei der typischen Implantationstemperatur (350°C). Es liegt also eine extreme Übersättigung vor. Thermodynamisch wird es deshalb günstiger sein, wenn benachbarte Co- und Si-Atome einen (noch instabilen) CoSi_2 Keim bilden, da dies einen Gewinn an freier Energie bedeutet. Die Änderung der freien Energie pro Volumeneinheit ΔG_V , die mit der Phasenbildung assoziiert ist, ist daher negativ. Für die Bildung von kohärenten CoSi_2 -Ausscheidungen muß aber zusätzlich noch die spezifische Grenzflächenenergie γ und eine zusätzliche Verzerrungsenergie pro Einheitsvolumen ΔG_E aufgebracht werden, so daß sich als gesamte Energieänderung ergibt [33]:

$$\Delta G = (\Delta G_V + \Delta G_E)V + \gamma A \quad (2.9)$$

mit V =Volumen und A =Oberfläche des Keims. Dabei hängt ΔG_E nicht nur von den elastischen Eigenschaften der Matrix und des Keims ab, sondern auch von der Form des Keims, z.B. ist ΔG_E für einen tellerförmigen Keim kleiner als für einen kugelförmigen Keim [34]. Abb. 2.4. zeigt den Verlauf von ΔG kugelförmiger Keime (mit Radius r) für zwei unterschiedliche Temperaturen.

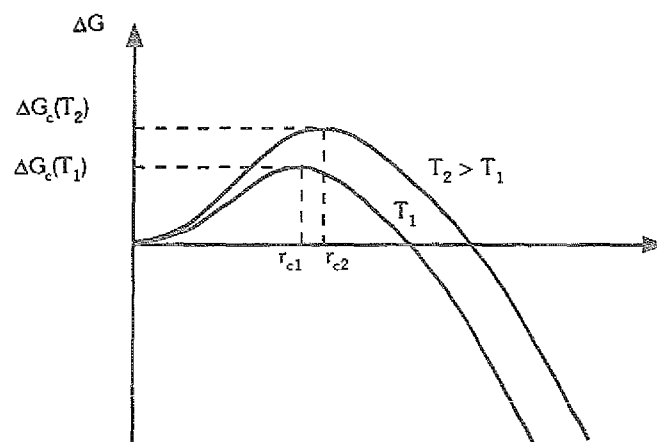


Abb. 2.4: Qualitativer Verlauf der Änderung der freien Energie $\Delta G(r)$ in Abhängigkeit vom Radius r der Ausscheidungen.

Keime mit Radien kleiner als dem kritischen Radius r_c sind instabil und lösen sich in der Matrix auf. Solche kleinen Keime können nur durch Fluktuationsprozesse wachsen. Wie in Abb. 2.4. zu sehen ist, wächst r_c mit der Temperatur und ist gegeben durch [33]:

$$r_c = 2\gamma / (\Delta G_V + \Delta G_E) \quad (2.10)$$

Die dazugehörige freie Enthalpie, die auch als Nukleationsbarriere aufgefaßt werden kann, ist

$$\Delta G_c = 16/3 \pi \gamma^3 / (\Delta G_V + \Delta G_E)^2 \quad (2.11)$$

Die Nukleation solcher Keime findet während der Implantation bevorzugt an Defekten statt [35].

Trinka et al. [36] beschreibt die Kinetik von Keimbildung und Keimwachstum anhand der zeitlichen und räumlichen (t und z) Entwicklung der in der Si-Matrix gelösten Co-Atome c_s und der Dichte der Keime C . Unter der Annahme, daß nur einzelne Co-Atome wandern können und zwei Co-Atome schon einen unbeweglichen Keim bilden, falls sie sich innerhalb des Reaktionsradius r_c aufhalten, sind c_s und C über folgende Diffusions - und Reaktionsgleichungen gekoppelt:

$$\frac{dc_s}{dt} = D\Delta c_s + P(z) + K[c_p(z)] - 2\frac{dC}{dt}V_a^2 - 4\pi r D c_s C \quad , \quad (2.12)$$

$$\frac{dC}{dt} = 4\pi r D c_s^2 / V_a^2 \quad (2.13)$$

Gleichung (2.12) beschreibt die Konzentrationsänderung aufgrund von Diffusion der gelösten Co-Atome ($D\Delta c_s(z,t)$), der lokalen Implantationsrate $P(z)$, durch die Implantation bedingte Auflösung von Keimen $K[c_p(z,t)]$ (c_p ist die Co-Konzentration in den Keimen), der Keimbildungsrate ($V_a^2 dC/dt$) und dem Keimwachstum ($4\pi r D c_s C$). Dabei ist die Keimbildungsrate (Gleichung (2.13)) quadratisch von der Konzentration der gelösten Co-Atome abhängig, da die Keimbildung unter der Annahme, daß schon 2 Co-Atome einen Keim bilden, eine Reaktion 2. Ordnung ist. Bedingt durch das gaußförmige Implantationsprofil ist die Co-Konzentration und somit auch die Keimbildungsrate im Zentrum des Profils am höchsten. Am Ende der Nukleationsphase (zur Zeit t_N) kann c_s als konstant angenommen werden (d.h. $dc_s/dt = 0$). Unter Vernachlässigung von K und Δc_s erhält man im Zentrum des Profils:

$$C \approx 0.3 \sqrt{\frac{d\phi}{r\sigma D}} \quad , r = r_c \quad (2.14)$$

wobei $d\phi/dt$ die Dosisrate und σ die Standardabweichung des Gaußprofils ist. Anschaulich besagt diese Gleichung, daß bei hoher Dosisrate bzw. geringer Diffusion häufiger zwei Co-Atome zeitgleich innerhalb des Reaktionsradius r_c sind und somit einen Keim bilden als bei kleiner Dosisrate oder hoher Diffusionskonstanten.

In der Wachstumsphase ist $P(z) \approx rDc_sC$ und $c_s \ll c_p$ ($\approx 2\pi r^3 C/3$ für Disilizide). Nach Elimination von c_s und Integration von Gleichung (2.13) ergibt sich für $t \gg t_N$:

$$C \approx c_p^4 \left(\frac{r_o}{V_a^2 D t} \right)^{\frac{4}{7}} \quad r \approx 0.8 \left(\frac{V_a^2 c_p D t}{r_o} \right)^{\frac{1}{7}} \quad (2.15)$$

Die Ausscheidungsichte nimmt also mit zunehmender Implantationszeit und hoher Diffusion ab, weil die Größe der Keime zunimmt. Während der Implantation kann man also mit einer hohen Dosisrate (oder Strahlstromdichte) eine hohe Dichte von Keimen erzeugen, die auch wegen der dadurch bedingten kurzen Implantationszeit in der Wachstumsphase der Keime kaum abnimmt. Erhöht man dagegen die Implantationstemperatur und damit den Diffusionskoeffizienten, so erzeugt man eine geringere Dichte von Keimen, die während der Wachstumsphase auch noch weiter abnimmt. Man erhält daher wenige große Ausscheidungen. Dosisrate und Implantationstemperatur haben also einen entgegengerichteten Einfluß auf die Größe und Dichte der Ausscheidungen.

2.2.2. Ausscheidungsform

Kugelförmige Ausscheidungen können sich nur bilden, wenn die Grenzflächenenergie isotrop ist. Anisotrope Grenzflächenenergien führen zu facettierten Ausscheidungen. Die Form einer isolierten Ausscheidung kann in diesem Fall und in Abwesenheit von Verspannung durch den Wulff'schen Plot [37] bestimmt werden. Die Grenzflächenenergie für die CoSi_2 - Si Grenzfläche ist stark von der Grenzflächenstruktur abhängig. Für {111} Grenzflächen erhält man mit der "lokal-density-functional" Methode 0.5 - 2.2 eV je nach Co-Koordination an der Grenzfläche [38]. Im Falle von A - Typ CoSi_2 -Schichten auf Si mit einem 7-fach koordiniertem Co-Atom an der Grenzfläche (siehe Kap. 2.3.1.) ergibt sich z.B. 1.1 J/m². Für {100} und {110} Grenzflächen gibt es solche Rechnungen bisher nicht.

Hier kann man die Grenzflächenenergie nur aus der Anisotropie des Faktors N_{xn} , wobei N die atomare Dichte der Grenzfläche und n die Zahl der nächsten Nachbarn ist, abschätzen. Das Verhältnis dieser Faktoren ist $1:\sqrt{2}:\sqrt{3}$ für $\{111\}, \{110\}, \{100\}$ Ebenen. Die $\{111\}$ Grenzfläche sollte daher die geringste Grenzflächenenergie haben. Ausscheidungen in (111) Si und (100) Si zeigen tatsächlich diese Grenzflächen. In (100) Si erhält man oktaedrisch geformte Ausscheidungen. Werden diese Ausscheidungen sehr groß können sich auch, wie in Abb. 2.5. skizziert, $\{100\}$ Flächen parallel zur Waferoberfläche ausbilden. In (111) Si erhält man plattenförmige Ausscheidungen deren Längsseite parallel zur Waferoberfläche ist oder mit dieser einen Winkel von 70.5° einschließt.

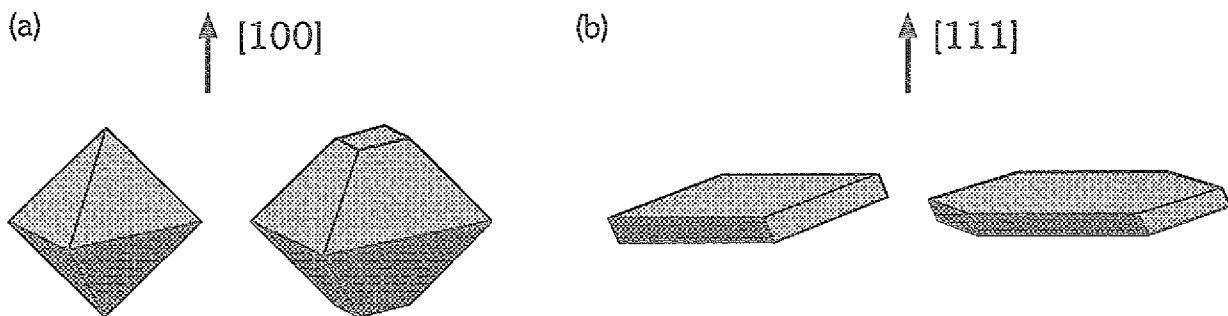


Abb. 2.5.: Skizze der Ausscheidungsformen in (100) Si (a) und (111) Si (b).

2.2.3. Ausscheidungswachstum während der Temperung

Nach der Implantation ist die Größenverteilung der Ausscheidungen stark gekoppelt mit dem Implantationsprofil [39]. Man findet große Ausscheidungen nur im Zentrum des Profils, während kleine Ausscheidungen nur am Rand des Profils vorkommen. Der Unterschied im chemischen Potential zwischen Ausscheidungen unterschiedlicher Größen bedingt eine Abhängigkeit der Co-Konzentration in der Si-Matrix in unmittelbarer Nähe der Ausscheidung von der Ausscheidungsgröße. Diese Abhängigkeit wird durch die Gibbs-Thomson Gleichung beschrieben:

$$c_s(r) = c_\infty \exp(2\gamma V_a / r k_B T) \quad (2.16)$$

wobei $c_s(r)$ die Konzentration des gelösten Atoms an der Oberfläche einer Ausscheidung mit dem Radius r , c_∞ die Konzentration an einer planaren Grenzfläche ($r \rightarrow \infty$), γ die spezifische Grenzflächenenergie, V_a das Atomvolumen und k_B die Boltzmannkonstante ist. Für nicht zu

kleine r ($r > 1 \text{ nm}$) kann man diese Gleichung linearisieren und erhält:

$$c(r) = c_{\infty} \left(1 + \frac{2V_a \gamma}{rk_B T} \right) \quad (2.17)$$

Demnach haben kleine Ausscheidungen eine gegenüber der Gleichgewichtslöslichkeit erhöhte Löslichkeit in ihrer näheren Umgebung, die aber mit zunehmender Ausscheidungsgröße kleiner wird. Dies bedingt einen Konzentrationsgradienten von kleinen Ausscheidungen zu großen und somit eine Diffusion der gelösten Atome von kleinen zu großen Ausscheidungen. Wegen des vorliegenden Größenprofils (siehe auch Abb. 2.7. (a)) führt dies zu einer Kontraktion des Profils. Das konkurrierende Wachstum von Ausscheidungen, die großen wachsen auf Kosten der kleinen, ist auch unter dem Namen Ostwald-Reifung bekannt [40]. Die Theorie zur Ostwald-Reifung oder Vergrößerung von Partikeln wurde speziell von Lifshitz, Slyzov und Wagner weiterentwickelt (LSW - Theorie) [41,42]. Sie haben gezeigt, daß kugelförmige Ausscheidungen die folgende Wachstumsrate besitzen:

$$\frac{dr}{dt} = \frac{2\gamma c_{\infty} D V_a^2}{k_B T} \cdot \frac{1}{r^2} \cdot \frac{r - r_c}{r_c} \quad (2.18)$$

mit $D = 0.02 \exp(-0.69/k_B T)$ Diffusionskonstante von Co in Si und r_c kritischer Radius der Ausscheidungen (siehe Gleichung (2.10)). Durch Integration erhält man die mittlere Ausscheidungsgröße in Abhängigkeit von der Zeit:

$$\langle r(t) \rangle^3 - \langle r_0 \rangle^3 = K t \quad (2.19)$$

mit

$$K = 8\gamma c_{\infty} D V_a^2 / (9k_B T)$$

und $\langle r_0 \rangle$: mittlerer Radius der Ausscheidungen zu Beginn der Reifung. Die obige Raten-gleichung wurde experimentell für sphärische und nahezu sphärische Partikel verifiziert. Für facettierte Ausscheidungen ergeben sich anisotrope Wachstumsraten [33]. Dabei sind c_{∞} und D die wesentlichen temperaturabhängigen Faktoren in dieser Gleichung. Die Aktivierungsenergie für das Wachstum der CoSi_2 -Ausscheidungen während einer Temperung ist also die Summe der Aktivierungsenergie für die Löslichkeit von Co in Si und der Diffusion von Co in Si. Man darf aber nicht außer acht lassen, daß die LSW - Theorie und auch modifizierte Versionen dieser Theorie [43,44] nur für homogen verteilte Ausscheidungen mit weniger als 8 % Volumenanteil in der Matrix gelten und daher nur als erste Näherung für die Beschreibung der Ionenstrahlsynthese verwendet werden können.

Ist die Reifung soweit fortgeschritten, daß sich einzelne Ausscheidungen berühren, setzt ein weiterer Wachstumsmechanismus ein, die Koaleszenz. Sie wurde auch von Lifshitz und Slyzov [41] untersucht.

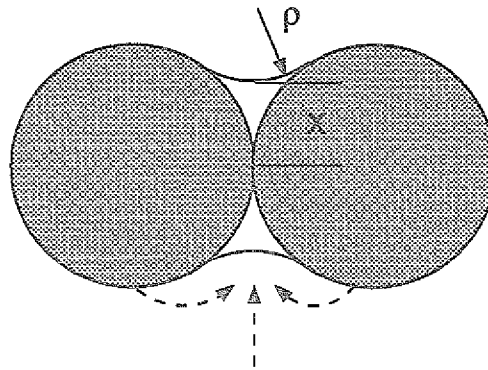


Abb. 2.6: Zusammenwachsen von Ausscheidungen durch Koaleszenz.

Auch hier ist wie bei der Reifung der treibende Faktor die Minimierung der Grenzflächenenergie. Wie in Abb. 2.6. illustriert, berühren sich Ausscheidungen beim fortschreitenden Wachstumsprozeß. Die Koaleszenz wird, wie die Reifung durch die Diffusion der gelösten Atome in der Matrix getrieben, da die Diffusion von Co in CoSi_2 viel langsamer ist als in Si. Nach Brown [45] ist die Konzentration der Atome am Berührungsbereich zwischen zwei Ausscheidungen:

$$c_s(\rho) = c_\infty \left(1 - \frac{\gamma V_a}{\rho k_B T} \right) \quad (2.20)$$

mit ρ wie in Abb. 2.6.. Diese Gleichung ähnelt der Gibbs - Thomson Gleichung mit dem Unterschied, daß die Löslichkeitskonzentration im Berührungsbereich kleiner ist als die Gleichgewichtslöslichkeit. Es ergibt sich daher ein Teilchenfluß zu diesem Bereich. Das Maß für die Größe des Berührungsbereiches x folgt dem Zeitgesetz:

$$x^5/r^2 = 5Kt \quad (2.21)$$

mit

$$K = 8\gamma c_\infty D V_a / (k_B T (c_\beta - c_\infty))$$

Interessanterweise ist die Grundform der kinetischen Gleichungen dieses Modells ähnlich der des LSW - Modells und es ergibt sich dieselbe Aktivierungsenergie wie für die Reifung. Dieser Prozeß ist nach Mantl [35] im wesentlichen für die Planarisierung der Schichten während der letzten Phase der Temperung verantwortlich.

Die Vergrößerung der Ausscheidungen und die nachfolgende Planarisierung ist begleitet von einer Umverteilung der gelösten Atome. In Abb. 2.7. ist diese Umverteilung schematisch zusammen mit der Größenverteilung der Ausscheidungen und der Löslichkeitskonzentration dargestellt.

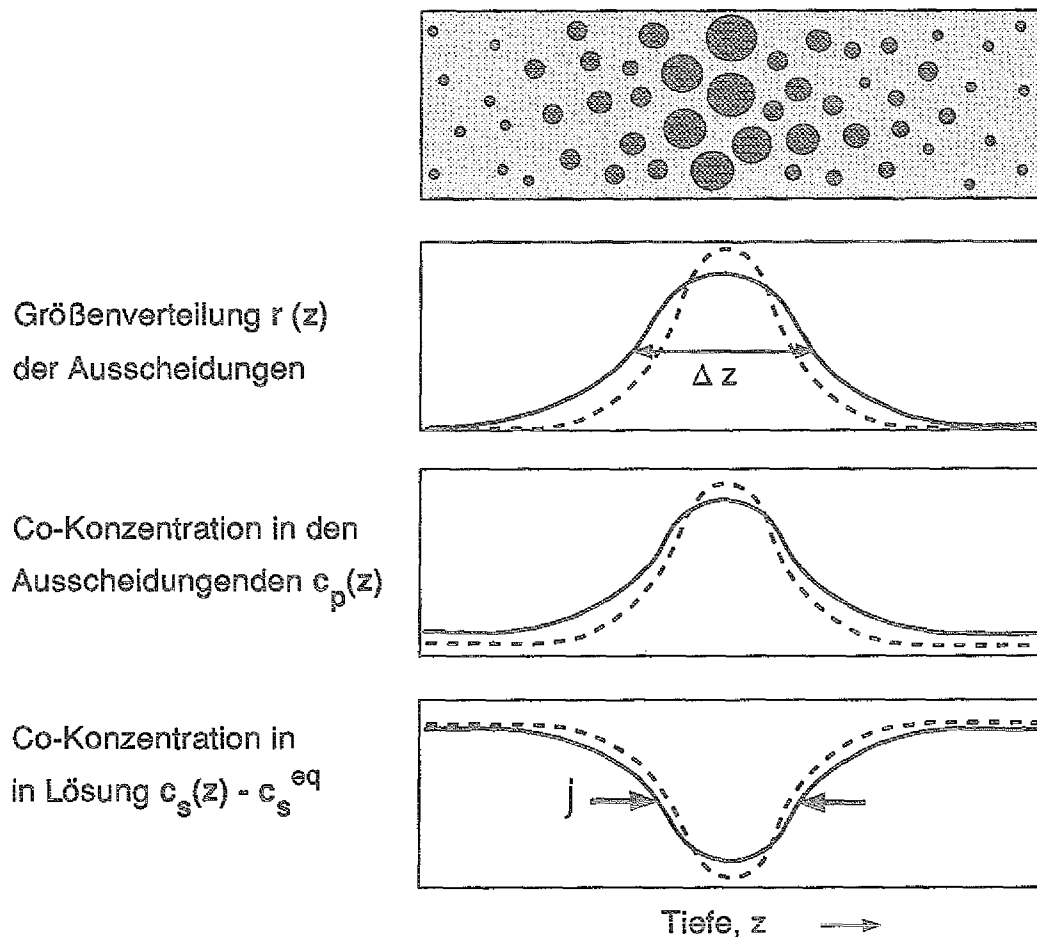


Abb. 2.7.: Schematische Tiefenverteilung der CoSi_2 -Ausscheidungsgröße, der Co-Konzentration c_p in den Ausscheidungen und der gelösten Co-Atome in der Si-Matrix vor (durchgezogene Linien) und nach (gestrichelte Linie) einer Temperung.

Wichtig ist, daß nach Gibbs-Thomson das Maximum von $\langle r \rangle$ mit dem Minimum von c_s übereinstimmt. Dies bedingt nämlich einen Teilchenfluß von den Seiten des Profils zum Maximum, der nach Ref. [35] wie folgt, abgeschätzt werden kann:

$$|j| = \frac{2\gamma V_a}{k_B T} \cdot D c_\infty \left(\frac{\Delta \frac{1}{r}}{\Delta z} \right) \quad (2.22)$$

mit $\Delta(1/r) = 1/r - 1/r_o$ (r_o und r Radius der Ausscheidungen in der Mitte bzw. am Rand des Profils) und Δz : Breite des Profils. Der Massentransport ist also proportional zum Produkt des Löslichkeits- und des Diffusionskoeffizienten. Daher ist die Aktivierungsenergie, die mit dem Umverteilungsprozeß assoziiert ist, ebenso wie in der Ostwald - Reifung, gegeben durch die Summe der Aktivierungsenergien von Lösung und Diffusion von Co in Si. Diese Summe beträgt: $2.83 + 0.69 = 3.52$ eV [32].

2.3. Strukturelle Eigenschaften von CoSi_2

CoSi_2 besitzt eine kubische CaF_2 -Struktur mit einer Gitterkonstanten von $a_{\text{CoSi}_2} = 0.536$ nm bei Raumtemperatur. Die Elementarzelle enthält 4 Kobalt und 8 Silizium Atome (siehe Abb. 2.8.). Die Gitterfehlpassung zum Si Diamantgitter ($a_{\text{Si}} = 0.5431$ nm) beträgt $f = -1.21$ %. Die Si-Atome haben in beiden Strukturen jeweils 4 nächste Nachbarn (4-fach Koordination), im CoSi_2 -Gitter 4 Co-Atome im Si-Gitter 4 Si-Atome. Die Co-Atome im CoSi_2 dagegen haben 8 Si-Atome als nächste Nachbarn (8-fach Koordination).

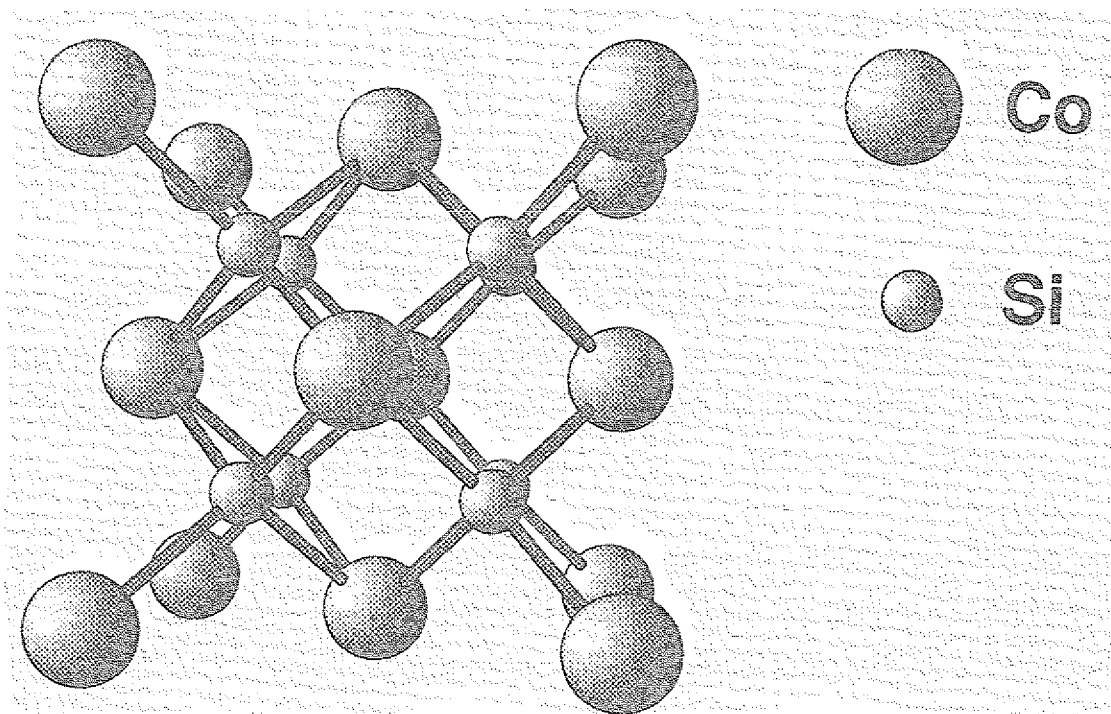


Abb. 2.8: CoSi_2 -Elementarzelle

2.3.1. Si/CoSi₂-Grenzflächenstruktur

In diesem Abschnitt werden die möglichen Grenzflächenstrukturen zwischen Si und CoSi₂ vorgestellt, da diese einen erheblichen Einfluß auf die elektrischen Eigenschaften der Grenzfläche (Schottky-Barriere) haben, wie am Beispiel von Si/NiSi₂ schon gezeigt wurde [46,47].

Grundsätzlich können Silizide mit CaF₂-Struktur auf (111) - orientierten Substraten in zwei unterschiedlichen Orientierungen aufwachsen. Bei der sogenannten A-Typ Orientierung stimmen alle Kristallrichtungen des Si-Gitters mit denen des CoSi₂-Gitters überein. Bei der B-Typ Orientierung ist das CoSi₂ -Gitter gegenüber dem Si-Substrat um 180° bezüglich der Oberflächennormalen gedreht. In diesem Fall entspricht die <110> - Richtung im Si der <114> - Richtung im CoSi₂. Die B-Typ Orientierung wird auch als Zwillingsorientierung bezeichnet, da mit der 180° Drehung ein Stapelfehler verbunden ist.

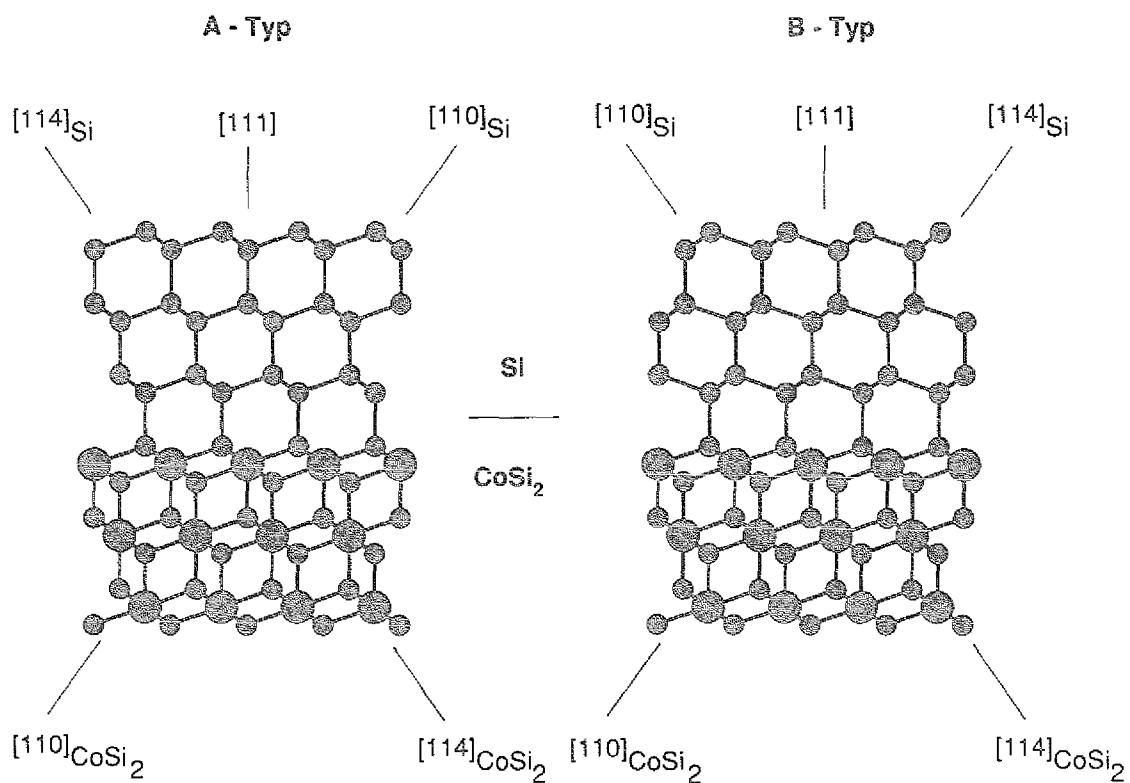


Abb. 2.9.: A- (links) und B-Typ (rechts) (111) CoSi₂/Si-Strukturen 7-fach koordiniertem Co an der Grenzfläche.

Auf (100) Si gibt es zwei Orientierungsmöglichkeiten für einkristallines CoSi_2 . Zum einem können alle Richtungen des Substrates mit denen des CoSi_2 -Gitters übereinstimmen, zum anderen kann das CoSi_2 -Gitter um 90° bzgl. der Oberflächennormalen gedreht sein.

Neben den Unterschieden in der Orientierung gibt es auch Unterschiede in der Art der Bindung der Atome in der Grenzfläche. Es kann dort eine Si - Si oder eine Co - Si Bindung vorliegen. In der ersten Arbeit über die Struktur der Grenzflächen in (111) orientierten Si/Silizid - Strukturen von Cherns et al. [48] wurde angenommen, daß die Si-Atome immer 4-fach koordiniert bleiben. Unter dieser Annahme gibt es zwei mögliche Grenzflächenstrukturen die in Abb. 2.10. (links und mitte) für B-Typ dargestellt sind.

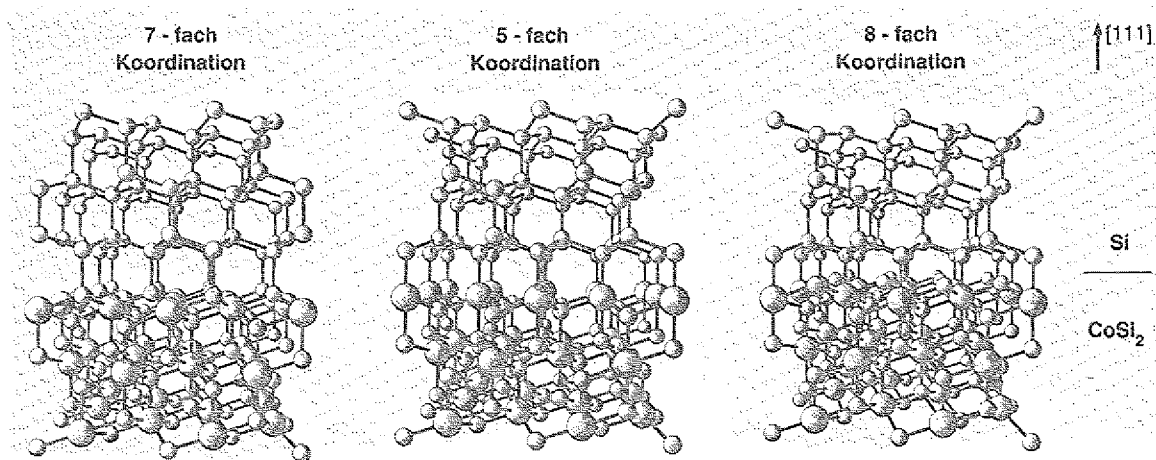


Abb. 2.10.: Grenzflächenstruktur von B-Typ CoSi_2 auf Si (111) mit 7-fach (links), 5-fach (mitte) und 8-fach koordiniertem (rechts) Co an der Grenzfläche.

Im Fall der Si - Si Bindung ist das Co -Atom an der Grenzfläche 7-fach koordiniert, im Fall der Co - Si Bindung 5-fach. Eine weitere Möglichkeit ist in Abb. 2.10. (rechts) gezeigt. In dieser Grenzfläche ist, im Vergleich zur 5-fach koordinierten Grenzfläche, eine zusätzliche Si - Ebene eingeschoben. An der Grenzfläche ist wie im 5-fach Fall eine Co - Si Bindung, das Si an der Grenzfläche ist aber nicht mehr 4-fach koordiniert sondern 3-fach und das Co wie im CoSi_2 -Einkristall 8-fach. Diese Struktur hat nach theoretischen Rechnungen speziell bei B-Typ Schichten die geringste Grenzflächenenergie [38].

Für (100) orientierte Strukturen gibt es eine Vielzahl von Modellen [49,50,51,52], von denen nur die wichtigsten hier aufgeführt werden. Die ersten Grenzflächenmodelle für (100) orientierte Silizid/Si-Strukturen wurden von Cherns [49] vorgeschlagen. In einem dieser

Modelle ist das Si wieder überall 4-fach koordiniert, während das Co an der Grenzfläche 6-fach koordiniert ist.

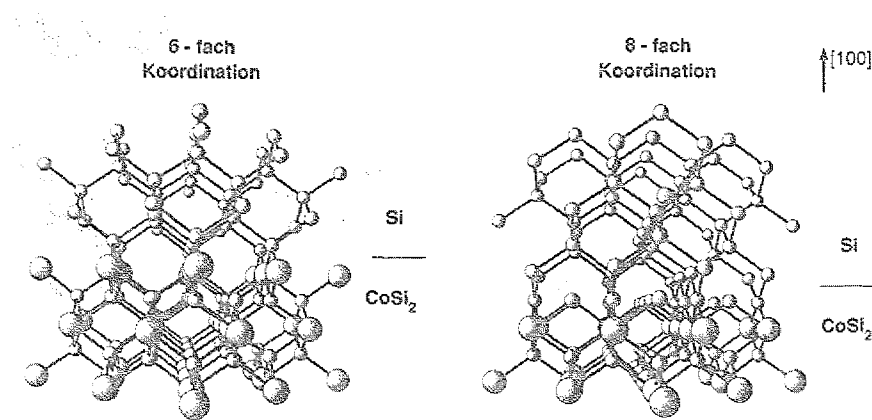


Abb. 2.11.: Grenzflächenstruktur von (100) CoSi_2/Si mit 6-facher (links) und 8-facher (rechts) Co-Koordination an der Grenzfläche.

In dem zweiten Modell von Cherns wurde eine zusätzliche Si - Ebene eingeschoben mit dem Ergebnis, daß das Co 8-fach und das Si an der Grenzfläche 2-fach koordiniert ist. Diese Si-Atome können nach einem Modell von Loretto et al. [52] Dimer - Ketten bilden, wodurch die Zahl der Dangling Bonds pro Si-Atom von 2 auf 1 reduziert wird und eine 2×1 Rekonstruktion entsteht.

2.3.2. Elastische Gitterverzerrung

Epitaktisches Wachstum zweier ähnlicher Gitterstrukturen erfolgt bei geringer Schichtdicke zunächst pseudomorph, d.h. das CoSi_2 -Gitter versucht durch Dilatation parallel zur Grenzfläche die Gitterkonstante des Si - Gitters anzunehmen. In diesem idealen Fall können die elastischen Verspannungen auf Basis des biaxialen Spannungsmodells berechnet werden [53]. Dabei muß man berücksichtigen, daß die Elastizität sowohl von Si als auch von CoSi_2 stark anisotrop ist [54,55]. Nach Hornstra und Bartels [54] ist die elastische Verspannung in anisotropen dünnen Schichten in (100) - Richtung :

$$\epsilon_{\parallel} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}} \cdot \epsilon_{\perp} \quad (2.23)$$

und in (111) - Richtung:

$$\epsilon^{\parallel} = -\frac{2C_{12}-\frac{2}{3}C}{C_{11}+\frac{2}{3}C} \cdot \epsilon^{\perp} \quad (2.24)$$

mit $C = 2C_{44} - C_{11} + C_{12}$, $\epsilon^{\parallel}$: Verspannung parallel zur Grenzfläche, $\epsilon^{\perp}$: Verspannung senkrecht zur Grenzfläche.

Setzt man nun die elastischen Konstanten [55] von CoSi_2 in die obigen Gleichungen ein und nimmt an, daß $\epsilon^{\parallel} = -f = 1.21\%$ ist, erhält man die in Tabelle 2.2. aufgeführten Werte.

Tabelle 2.2.: Berechnete Verspannung von CoSi_2 auf verschieden orientierten Si-Substraten

Orientierung	$\epsilon^{\parallel} = -f$ [%]	$\epsilon^{\perp}$ [%]	$\epsilon^{\perp} = \epsilon^{\perp} - \epsilon^{\parallel}$ [%]
{100}	1.21	-1.48	-2.64
{111}	1.21	-0.99	-2.20

Man erkennt, daß die Verspannung $\epsilon^{\perp}$ in (100) Richtung größer ist als in (111), d.h. (111) ist eine "steifere" Richtung. Wie oben erwähnt gelten diese Werte nur für pseudomorphe Schichten. Oberhalb der kritischen Schichtdicke kann die elastische Verspannung teilweise oder, bei sehr dicken Schichten, vollkommen durch den Einbau von Versetzungen an der Grenzfläche (Misfit-Versetzungen) nach jeweils n Einheitszellen ausgeglichen werden. Der Abstand der Misfitversetzungen $p = n a_{\text{CoSi}}$ ergibt sich bei vollkommen verspannungsfreiem Gitter aus der Komponente des Burgersvektors in der Grenzfläche b' und der Fehlpassung $b'/p = f$. Bei teilweise verspanntem Gitter ergibt sich näherungsweise $b'/p = -f - \epsilon^{\parallel}$. Diese Relaxation wird getrieben durch die Verzerrungsenergie E_s , die proportional mit der Schichtdicke zunimmt. Dagegen ist die Energie für die Erzeugung einer Versetzung E_F nach van der Merwe [56] unabhängig von der Schichtdicke. Die Gleichgewichtsverzerrung erhält man durch Minimierung der Summe dieser Energien ($d(E_s(\epsilon) + E_F(\epsilon))/d\epsilon^{\parallel} = 0$). Sie nimmt mit zunehmender Schichtdicke vom Wert bei idealem pseudomorphen Wachstum ($\epsilon^{\parallel} = -f$) ab. Als kritische Schichtdicke d_c ergibt sich nach diesem Modell:

$$d_c \approx -0.6b' \cdot \frac{(1-\nu)}{(1+\nu)} \cdot \frac{a_o}{f} \quad (2.25)$$

mit $\nu = C_{12}/(C_{11} + C_{12}) = 0.38$ (Poisson Zahl).

Bei Raumtemperatur erhält man $d_c = 1.2$ nm. Mit wachsender Temperatur nimmt d_c zu, da der Unterschied in den Gitterkonstanten zwischen Si und CoSi_2 , wegen der unter-

schiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten ($\alpha_{\text{Si}} = 0.29 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ [57], $\alpha_{\text{CoSi}_2} = 0.94 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ [58]), kleiner wird. In Abb. 2.12. ist der Verlauf der kritischen Schichtdicke in einem Temperaturbereich von 500°C bis 1200°C (typische Temperaturbedingungen) dargestellt.

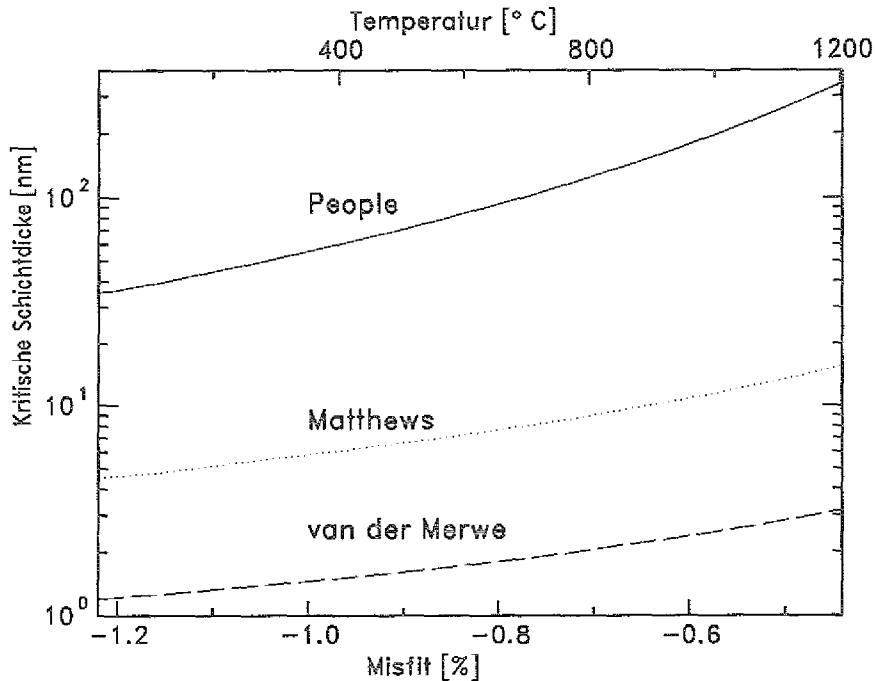


Abb. 2.12.: Kritische Schichtdicke, nach van der Merwe (gestrichelt), People (durchgezogen) und Matthews (gepunktet), in Abhängigkeit des Misfits von CoSi_2 auf Si mit steigender Temperatur. ($|b'| = 0.22 \text{ nm}$)

Da die van der Merwe Theorie z. B. für das System Si/SiGe kritische Schichtdicken liefert, die um Größenordnungen zu klein sind, wurde diese Theorie von People und Bean [59] modifiziert.

Der Unterschied zum van der Merwe Modell besteht darin, daß eine andere Energie zur Erzeugung von Misfitversetzungen hergeleitet wird, die nun logarithmisch von der Dicke der Schicht abhängt. Dies führte im Fall der Si/SiGe Heterostrukturen zu einer guten Übereinstimmung der kritischen Schichtdicken mit experimentell bestimmten Werten. Nach diesem Modell ist die kritische Schichtdicke:

$$d_c \approx 0.014 \cdot \left(\frac{1}{1+\nu} \right) \cdot \left(\frac{b'^2}{a_{\text{CoSi}}} \right) \cdot \left(\frac{1}{f^2} \cdot \ln \left(\frac{d_c}{b'} \right) \right) \quad (2.26)$$

Für CoSi_2 auf Si ergeben sich, nach diesem Modell Werte, die deutlich über denen der van der Merwe Theorie liegen (siehe Abb. 2.12.).

Einen anderen Ansatz wählen Matthew und Blakeslee [60]. In ihrem Modell beruht die Berechnung der kritischen Schichtdicke auf dem mechanischen Gleichgewicht der Linienspannung der Versetzungen. Es ergibt sich:

$$d_c = \frac{b'}{f} \left(\frac{1}{4\pi(1+\nu)} \right) \left(\ln \left(\frac{d_c}{b} \right) + 1 \right) \quad (2.27)$$

Die kritischen Schichtdicken nach Matthews et al. liegen zwischen denen von People et al. und denen von van der Merwe.

3. Herstellungsmethoden

In diesem Kapitel werden kurz die verschiedenen Methoden zur Herstellung von einkristallinen CoSi_2 -Schichten vorgestellt.

3.1. Festkörperepitaxie und Molekularstrahlepitaxie

Zur Schichtbildung durch Festkörperepitaxie (engl.: Solid Phase Epitaxy; SPE) wird zuerst eine Co-Schicht auf ein ungeheiztes einkristallines Si-Substrat im Ultrahochvakuum (UHV) aufgedampft. Die Silizidbildung erfolgt während der nachfolgenden Wärmebehandlung bei $600 - 800^\circ \text{C}$ mit der Reaktionsfolge $\text{Co}_2\text{Si} - \text{CoSi} - \text{CoSi}_2$ [61]. Auf (111) Si können mit dieser Methode sehr gute einkristalline CoSi_2 -Schichten hergestellt werden, während auf (100) Si nur polykristalline Schichten erzeugt werden können. Diese Methode führt zu kritischen Schichtdicken für pseudomorphes Wachstum von $d_c = 30 \text{ nm}$ auf Si (111) [62], welche in guter Übereinstimmung mit dem Wert der Theorie von People ist (siehe Kap. 2.3.2.). Bei Molekularstrahlepitaxie (engl.: Molecular Beam Epitaxy; MBE) werden Co und Si gleichzeitig in einem bestimmten Mischungsverhältnis (i.a. Co:Si wie 1:1.7-2) auf ein auf ca. $550 - 700^\circ \text{C}$ geheiztes Si-Substrat im UHV abgeschieden. Da bei $T > 550^\circ \text{C}$ nur CoSi_2 stabil ist, bildet sich auf dem Si-Substrat sofort CoSi_2 . Auf (111) orientierten Substraten können dabei wieder problemlos epitaktische CoSi_2 -Schichten hergestellt werden, die auch mit Si zur Herstellung von Si/ CoSi_2 /Si-Heterostrukturen überwachsen werden können. Die kritische Schichtdicke ist bei diesen Schichten aber im Gegensatz zur obigen Methode 5 nm [63] in Übereinstimmung mit der klassischen van der Merwe Theorie. Ein möglicher Grund für diesen Unterschied kann in den unterschiedlichen Prozessen, die zur Schichtbildung bei den verschiedenen Methoden führen, liegen. Das Wachstum von einkristallinen CoSi_2 -Schichten auf (100) Si ist auch mit MBE nicht möglich. Dies liegt daran, daß es mehrere gleichberechtigte Orientierungsmöglichkeiten für epitaktisches Wachstum von CoSi_2 auf (100) Si gibt [64]. Erst durch Kombination von SPE und MBE (sogenannte "Template" Methode) konnten epitaktische CoSi_2 -Schichten auf (100) Si hergestellt werden [12]. Dazu wird zuerst eine sehr dünne Co-Schicht auf das Si-Substrat aufgedampft und durch Tempern eine "Template" CoSi_2 -Schicht (ca. 0.2 nm dick) erzeugt, die ein weiteres einkristallines Wachstum der CoSi_2 -Schicht durch Kodeposition von Si und Co auf das nun geheizte Substrat ermöglicht. Das Aufdampfen einer weiteren Si-Schicht zur Herstellung von Si/ CoSi_2 /Si-Heterostrukturen auf (100) Si, die zur Herstellung von

Bauelementen wichtig sind, ist bisher nicht erfolgreich da dies zur Löcherbildung in der Silizidschicht führt [14]. Außerdem können auf (111) Si mit allen bisher vorgestellten Methoden nur B-Typ CoSi_2 -Schichten hergestellt werden können. Die Co-Atome an der Grenzfläche dieser CoSi_2/Si -Strukturen sind nach Untersuchungen mit Hochauflösender Elektronenmikroskopie (engl.: High Resolution TEM; HRTEM) [65], Mittelenergie-Ionenstreuung (MEIS) [66] und stehenden Röntgenwellen (engl.: X-Ray Standing Waves Method; XSW) [67] entweder 5- oder 8-fach koordiniert. Mit den genannten Methoden konnte bisher nicht zwischen diesen Koordinationen entschieden werden. Erst mit einer verfeinerten HRTEM - Methode konnte Bulle-Lieuwma et al. [68] feststellen, daß die Koordination 8-fach ist. Dies ist auch nach theoretischen Rechnungen die energetisch günstigste Konfiguration [38]. Die mit der Template - Methode hergestellten einkristallinen CoSi_2 -Schichten auf (100) Si besitzen nach HRTEM Untersuchungen, die schon in Kap. 2.3.1. erwähnte Dimer - Rekonstruktion in Verbindung mit einer 6-fach Koordinierung der Co-Atome an der Grenzfläche [52].

3.2. Ionenstrahlsynthese und Allotaxie

Eine Methode direkt $\text{Si}/\text{CoSi}_2/\text{Si}$ -Heterostrukturen herzustellen ist 1987 von A. E. White vorgeschlagen und durchgeführt worden [4]. Sie beruht, ähnlich wie die schon länger bekannte Herstellung von vergrabenen SiO_2 -Schichten mittels Sauerstoff Implantation in Si (SIMOX = Separation by IMplantation of OXYgen) [16], auf Hochdosis-Co-Implantation in ein geheiztes Si-Substrat. Eine Temperung bei Temperaturen oberhalb von 1000°C führt nach der Implantation zur Bildung einer vergrabenen epitaktischen CoSi_2 -Schicht im Si. Diese Methode wird als Ionenstrahlsynthese (engl.: Ion Beam Synthesis; IBS) oder auch als Mesotaxie bezeichnet. Die Hauptvorteile der Mesotaxie liegen, wie schon in der Einleitung erwähnt, in der Möglichkeit der Herstellung von epitaktischen $\text{Si}/\text{CoSi}_2/\text{Si}$ -Heterostrukturen in (100) Si und der in-situ Strukturierung mittels Implantation durch eine Maske (siehe Kap. 5.6.).

Alle Implantationen in dieser Arbeit wurden an einem Ionenbeschleuniger vom Typ EATON NV3204 mit Energien zwischen 20 und 200 keV durchgeführt. Der Strahlfleck wurde mittels einer Si Blende auf $16 \times 16\text{ mm}^2$ bzw. $20 \times 40\text{ mm}^2$ begrenzt. Die verwendeten Dosen und Strahlstromdichten werden in den verschiedenen Kapiteln aufgeführt. Als Substrat dienten sehr niedrig n- oder p-dotierte ($100 - 5000\ \Omega\text{cm}$) 3- oder 4-Zoll Si - Wafer in (111) und (100) Orientierung (Fehlorientierung $< 0.5^\circ$). Nur für Schottkydioden

wurden hoch n-dotierte ($0,1 - 1 \text{ } \Omega\text{cm}$) Si - Wafer benutzt. Die Proben wurden für die Implantation auf einen heizbaren Probenhalter montiert. Dieser Probenhalter besteht aus einem Kupferblock, der elektrisch bis 450°C geheizt werden kann. Die Temperatur wird während der Implantation über ein Ni/CrNi Thermoelement in diesem Block gemessen und über einen PID-Regler nachgeregelt. Zur Vermeidung von Channeling (siehe Kap. 4.1.2.) wurden die Proben i. a. um 7° gekippt. Teilweise wurden aber auch Implantationen entlang der Oberflächennormalen, d.h. in einer Channeling - Richtung vorgenommen. Diese werden im folgenden als "gechannelte" Implantationen bezeichnet. Das Nachtempern erfolgte entweder in einem auf 10^{-7} Torr evakuiertem Rohrofen bei 600°C 1h und 1000°C 30 min. oder in einem Halogenlampen-Schnellheizofen (engl.: Rapid Thermal Annealer, RTA) AET RMV4 in einer Ar oder N_2 Atmosphäre bei Temperaturen zwischen 750° und 1150°C . Zur Vermeidung von Löcherbildung in der Oberflächen Si-Schicht während der Temperung [69] wurde eine ca. 150 - 200 nm dicke SiO_2 - Schicht aufgebracht. Diese wurde nach der Temperung mit Flußsäure wieder entfernt.

Kürzlich hat S. Mantl und H. L. Bay [70] eine neue Methode, die Allotaxie, zur Silizidherstellung vorgeschlagen. Mit Allotaxie können auch direkt Si/Silizid/Si - Heterostrukturen hergestellt werden, wobei ähnliche Prozesse wie bei der Ionenstrahlsynthese zur Schichtbildung führen. In einer UHV - Kammer wird zuerst auf ein geheiztes ($\approx 550^\circ \text{C}$) Si-Substrat Si aufgewachsen. Dann wird zusätzlich Co mit einem trapez- oder dreieckförmigen Profil aufgedampft, wobei im Maximum des Profils das Verhältnis Si:Co nicht den stöchiometrischen Wert von 2:1 übersteigen darf. Da das Substrat auf 550°C geheizt wird, erhält man, wie bei der Ionenimplantation, CoSi_2 -Auscheidungen mit einer bestimmte Größen- und Tiefenverteilung, die während der nachfolgenden Temperung ($T \geq 1000^\circ \text{C}$) zu einer Schicht zusammenwachsen. Diese Methode hat gegenüber der Ionenstrahlsynthese den Vorteil, daß während der Herstellung keine Strahlenschäden produziert werden. Außerdem kann die CoSi_2 -Schicht mit einer im Prinzip beliebig dicken Si-Schicht überwachsen werden oder es können Multischichten hergestellt werden [71]. Dagegen kann aber keine in-situ Strukturierung wie bei IBS durchgeführt werden. Die Kristallqualität der Schichten sowohl in (100) als auch in (111) Si ist vergleichbar mit der Kristallqualität von Schichten die mit IBS erzeugt worden sind.

4. Charakterisierungsmethoden

Die chemische Zusammensetzung und Struktur der Proben wurde mit Rutherford - Rückstreuung (engl.: Rutherford Backscattering Spectrometry; RBS), He Ionengitterführung (engl.: Channeling), Sekundär-Ionen-Massenspektroskopie (SIMS), Auger-Spektroskopie, Röntgenbeugung und Transmissions-Elektronen-Mikroskopie (TEM) untersucht. Zur Untersuchung der elektrischen Transporteigenschaften der Schichten wurden Schichtwiderstands- und Hallmessungen durchgeführt. Strom - Spannungs Kennlinien des CoSi_2/Si Schottkykontakts wurden zur elektrischen Charakterisierung der CoSi_2/Si Grenzfläche aufgenommen. Die wesentlichen Untersuchungsmethoden in dieser Arbeit: RBS, Channeling, Schichtwiderstandsmessung und Messung der Schottkybarrierenhöhe, werden im folgenden kurz vorgestellt.

4.1. Ionenstremethoden

Unter RBS versteht man die Streuung monoenergetischer leichter Ionen (H^+ , He^+ ,) mit Energien von 0.1 - 5 MeV am Coulombpotential der Targetatomkerne, wobei die Energie der rückgestreuten Ionen analysiert wird [72]. RBS gibt Information über die in einer Probe vorkommenden Elemente (Massen), deren Tiefenverteilung und deren Stöchiometrie ohne einen Eichstandard zu benötigen. Ein Spezialfall von RBS ist Channeling [73], das auftritt, wenn man den einfallenden Ionenstrahl zu einer Hauptkristallachse eines kristallinen Targets ausrichtet. Die Rückstreurrate ist drastisch reduziert, während die Oberfläche oder Grenzfläche eines kristallinen Schichtsystems einen sogenannten "Oberflächen-" oder "Grenzflächen- Peak" verursachen. Channeling kann zur strukturellen Untersuchung eines kristallinen Targets (z. B. von Versetzungen, elastischen Gitterverzerrungen, Einbau von Fremdatomen und Oberflächenrekonstruktionen) dienen.

4.1.1. RBS

RBS beruht auf drei physikalischen Prinzipien, wovon jede mit einer speziellen Fähigkeit von RBS verknüpft ist. Diese sind in Tabelle 3.1. aufgeführt.

Tabelle 3.1.

Prinzip	Konzept	Analytische Fähigkeit
Energieübertrag bei einem Zweikörperstoß	kinematischer Faktor	Massenauflösung
Wahrscheinlichkeit für einen Zweikörperstoß	Streuquerschnitt	Quantifizierung
Energieverlust eines Projektils im Target	Bremsquerschnitt	Tiefenauflösung

Für die Energien, die bei RBS eine Rolle spielen, kann man den Zusammenstoß des einfallenden Ions mit den Targetatomen als klassischen Zweikörperstoß betrachten. Das heißt, das einfallende Ion benötigt Energien E_0 , die wesentlich größer sind als die typische Bindungsenergie der Atome im Target (≈ 10 eV), aber viel kleiner als die Schwellenenergie für Kernreaktionen zwischen Ionen- und Targetkernen bzw. Resonanzen. Unter der Annahme, daß sich die Atome im Target nicht bewegen und daß Energie- und Impulserhaltung gelten, erhält man das Verhältnis von Einfallenergie E_0 zur Rückstreuenergie E_1 , den kinematischen Faktor $k = E_1/E_0$:

$$k = \left[\frac{\sqrt{1-x^2 \sin^2 \Theta} + x \cos \Theta}{1+x} \right]^2 \quad (4.1)$$

wobei Θ der Rückstreuwinkel im Laborsystem ist (siehe Abb. 4.1.) und $x = M_1/M_2$ (M_1 = Masse des einfallenden Projektils, M_2 = Masse der Targetatome).

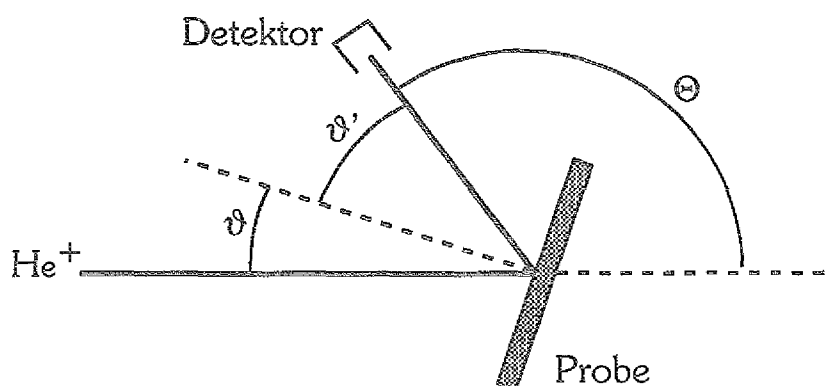


Abb. 4.1.: Schematische Darstellung der Streugeometrie bei der RBS - Analyse, mit Θ : Rückstreuwinkel, ϑ : Einfallswinkel und ϑ' : Winkel zwischen Detektor und Oberflächennormale.

Bei gegebener Primärenergie, Streugeometrie und Projektilmasse hängt die Rückstreuung nur von der Masse der Targetatome ab. In diesem Fall steigt k monoton mit der Masse M_2 und ermöglicht somit die Massenauflösung von RBS.

Die Rückstreuung eines einfallenden Ions ist in dem bei RBS verwendeten Energiebereich ein sehr seltenes Ereignis. Typischerweise werden ca. 10^{-8} Ionen zurückgestreut während der Ionenstrahl eine Monolage durchquert. Der primäre Prozeß ist somit nicht die Rückstreuung sondern das Eindringen bzw. die Implantation von Ionen in das Target. Es werden daher die schon im Kap. 2.1. behandelten Energieverlustmechanismen wichtig. Da für RBS meist Energien von einigen MeV verwendet werden, erfolgt der Energieverlust im wesentlichen durch inelastische Stöße mit den Targetelektronen. Die Differenz der Rückstreuung E_1 aus der Tiefe x gegenüber kE_0 ist in der Oberflächennäherung gegeben durch:

$$\Delta E = k E_0 - E_1 = [S] \cdot x \quad (4.2)$$

Dabei bezeichnet

$$[S] = \frac{k}{\cos\vartheta} \left(\frac{dE}{dx} \right)_{in} + \frac{1}{\cos\vartheta'} \left(\frac{dE}{dx} \right)_{out}$$

den Energieverlustfaktor des ein - und auslaufenden Ions in der Oberflächennäherung. Durch diese Beziehung kann aus dem Energieverlust ΔE die Tiefe x bestimmt werden, in der das Rückstreueignis stattgefunden hat. Hiermit liefert RBS das Tiefenprofil eines Targetelements.

Wenn monoenergetische Ionen ein dünnes Target durchqueren, erleiden sie, aufgrund des statistischen Charakters der Stöße, nicht alle denselben Energieverlust ΔE . Diese Energieunschärfe ("Straggling") zusammen mit der Detektorauflösung begrenzt die Tiefen - und Massenauflösung von RBS. Die gesamte Energieauflösung ergibt sich als quadratische Summe von Detektorauflösung und Straggling. Der Straggling - Anteil kann nach Bohr [74] abgeschätzt werden:

$$\delta E_{strag}^2 = 4\pi \cdot N \cdot Z_2 \cdot Z_1^2 \cdot e^4 \cdot \Delta x \quad (4.3)$$

Die Zahl der Ionen, welche nach der Definition des differentiellen Streuquerschnitts in einen Raumwinkel $\Delta\Omega \ll 1$ mit einem Rückstreuungswinkel Θ gestreut werden, ist

$$I = \frac{d\sigma(E,\Theta)}{d\Omega} \cdot \Delta\Omega \cdot Nd \cdot I_0 \quad (4.4)$$

wobei Nd die Flächendichte der Streuzentren und I_0 die Zahl der einfallenden Teilchen ist. Mit einer Genauigkeit von 5 % kann dieser Streuprozess mit der Coulombwechselwirkung beschrieben werden und ist deshalb durch den Rutherfordstreuquerschnitt gegeben:

$$\frac{d\sigma(E, \Theta)}{d\Omega} = \left[\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 E} \right]^2 \frac{1}{\sin^4\left(\frac{\Theta}{2}\right)} \quad (4.5)$$

mit Z_1 und Z_2 Ordnungszahlen des Projektils bzw. des Targetatoms. E ist die Projektilenergie kurz vor dem Stoß. Dieser Streuquerschnitt ist nur gültig, solange der kleinste Stoßparameter viel größer als der Kernradius und viel kleiner als der Radius der Elektronen auf der K-Schale a_0/Z_2 ist (a_0 : Bohrscher Radius). Dies ist für die Energien und Streuwinkel bei RBS der Fall. Gl. (4.4) kann man auch schreiben als

$$Nd = \frac{A}{Z_2^2} \cdot I \quad (4.6)$$

wobei A konstant ist. Das ermöglicht die absolute Bestimmung der Flächendichte einer Atomsorte in einem (dünnen) Target nur durch Integration der Zählereignisse in dem jeweiligen Peak des Gesamtspektrums.

Die Energieverluste eines Projektils entlang des Einfall- und Ausfallweges in einer dicken Schicht führen zu einem Wechsel des gaussförmigen Spektrums einer sehr dünnen Schicht zu einem rechteckig geformten Profil für eine dicke Schicht. In diesem Fall bezieht sich I auf die Zählrate in einem Kanal der Energieweite dE im Vielkanalanalysator, während die Dicke einem Bereich in der Probe entspricht, von der die Rückstreueignisse dedektiert werden. Für Streuung nahe der Oberfläche erhält man

$$H_0 = \frac{d\sigma(E_0, \Theta)}{d\Omega} \cdot \Delta\Omega \cdot I_{0[S]\cos\vartheta} \quad (4.7)$$

wobei $[S]$ der Energieverlust und ϑ der Winkel zwischen Probennormalen und Strahl ist. Ein auch in dieser Arbeit häufig verwendetes Simulationsprogramm für RBS-Spektren ist das Programm RUMP [75].

Obwohl der Rutherfordquerschnitt sehr präzise ist, gibt es Fälle, z. B. Oberflächen- oder Grenzflächen-Peak Messungen, die eine höhere Genauigkeit erfordern. Die Konvertierung von Schwerpunktskoordinaten (SK) zu Laborkoordinaten (LK) und eine Korrektur wegen Abschirmungseffekten (SCR) muß berücksichtigt werden:

$$\frac{d\sigma_{LK}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{SK}}{d\Omega} \cdot A_{SK}(\Theta, M_2) \cdot A_{SCR}(E, Z_2) \quad (4.8)$$

mit

$$A_{SK}(\Theta, M_2) \approx 1 - 2 \left(\frac{M_1}{M_2} \right)^2 \sin^4 \left(\frac{\Theta}{2} \right) \quad \text{für } M_1 \ll M_2$$

und

$$A_{SCR}(E, Z_2) = 1 - 0.042 \cdot \frac{Z_1 Z_2^3}{E[\text{keV}]}$$

Beide Korrekturen liegen in der Größenordnung bei 1. Die Konvertierung von Schwerpunktsystem zum Laborsystem wird mit A_{SK} berücksichtigt (Gleichung (4.5) gilt eigentlich nur im Schwerpunktsystem). A_{SCR} ersetzt das Coulombpotential, welches dem Rutherfordstreuquerschnitt zugrunde liegt, durch das Molière-Potential, welches die Abschirmung des Kerns durch die inneren Elektronen berücksichtigt.

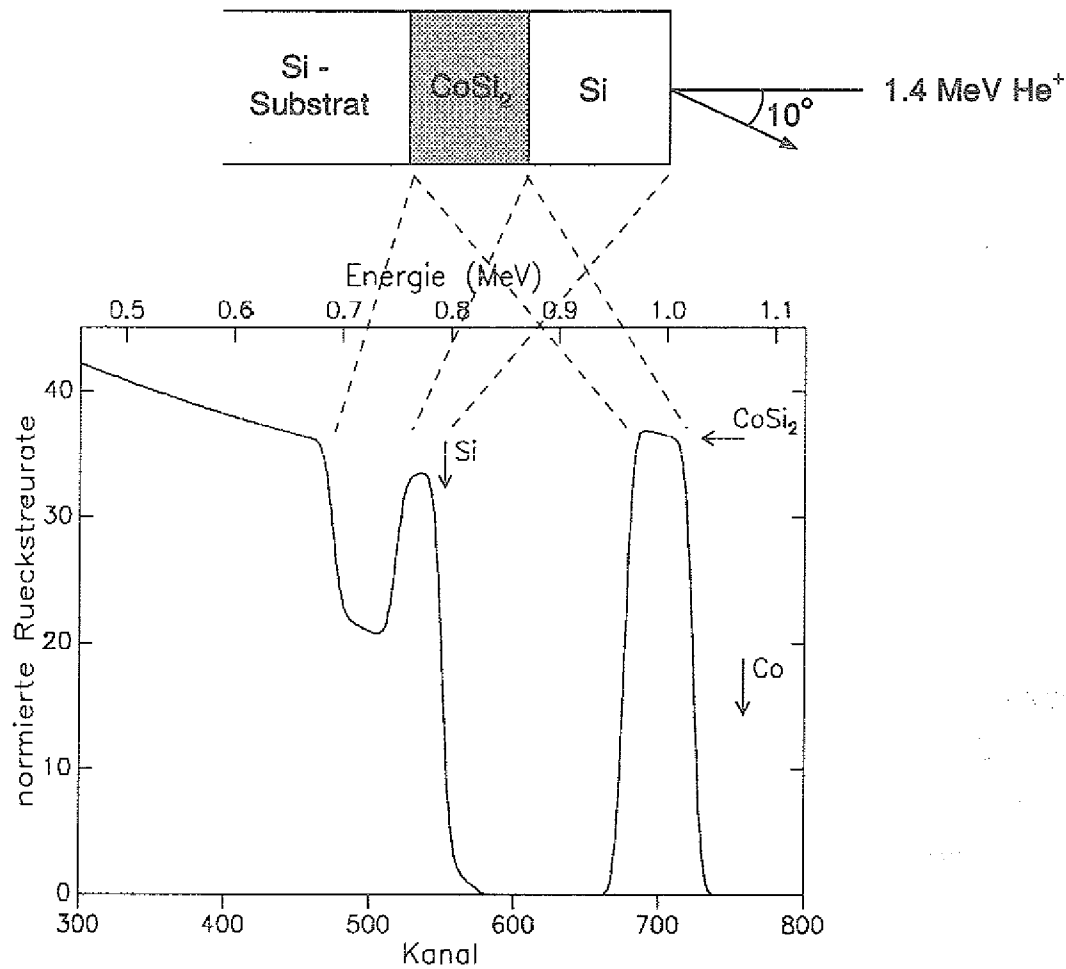


Abb. 4.2.: RUMP Simulation eines RBS-Spektrum von in Si vergrabemem CoSi_2 .

4.1.2. Channeling

Der Channeling - Effekt tritt auf, wenn man ein kristallines Target so ausrichtet, daß eine niedrig indizierte Kristallrichtung parallel zum Ionenstrahl ist. Die einfallenden Ionen werden dann durch korrelierte Kleinwinkelstöße an den Atomreihen wie in einem Kanal geführt. Die Rückstreurrate ist stark von der Kristallrichtung abhängig und kann in einer niedrig indizierten Richtung um einen Faktor 100 gegenüber dem "Random" - Spektrum (in einer zufälligen Richtung gemessen) abfallen.

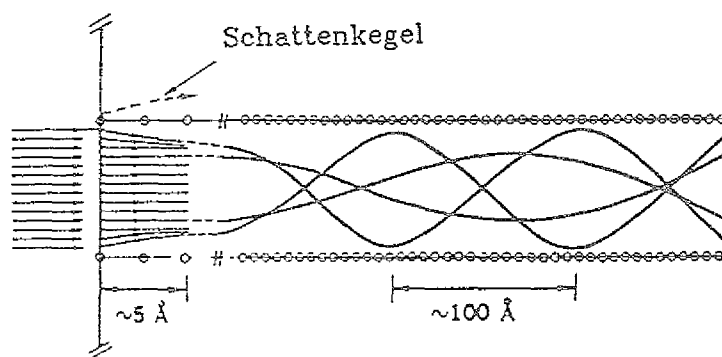


Abb. 4.3.: Schematische Darstellung der Trajektorien von Ionen in der Nähe der Oberfläche eines Einkristalls.

Abb. 4.3. zeigt die schematische Darstellung der Trajektorien entlang einer Channeling - Richtung in einem Einkristall. Die im Kanal geführten Ionen kommen nicht nahe genug an die tieferliegenden Atomkerne, um eine Rückstreuung unter großem Winkel zu erfahren. In einem statischen Kristall würde es nur Rückstreuung von dem obersten Atom jeder Atomreihe geben. Wegen der thermischen Bewegung der Gitteratome werden sich aber auch stets einige oberflächennahe Atome außerhalb des Schattenkegels befinden und somit zur Rückstreuung beitragen. Diese Beiträge addieren sich zum sogenannten Oberflächen-Peak. Sind in einem Kristall Defekte, wie z.B. auf Zwischengitterplätzen eingebaute Fremdatome, Versetzungen oder Stapelfehler, so werden dadurch die Atomreihen verzerrt oder unterbrochen. Das einfallende Ion kann dadurch aus dem Kanal herausgestreut werden und bedingt dann eine Erhöhung der Rückstreuintensität. Channeling kann zur Charakterisierung der Kristallqualität einer kristallinen Probe verwendet werden. Als Beispiel ist in Abb. 4.4. ein Channeling und ein Random Spektrum einer einkristallinen (100) Si Probe gezeigt.

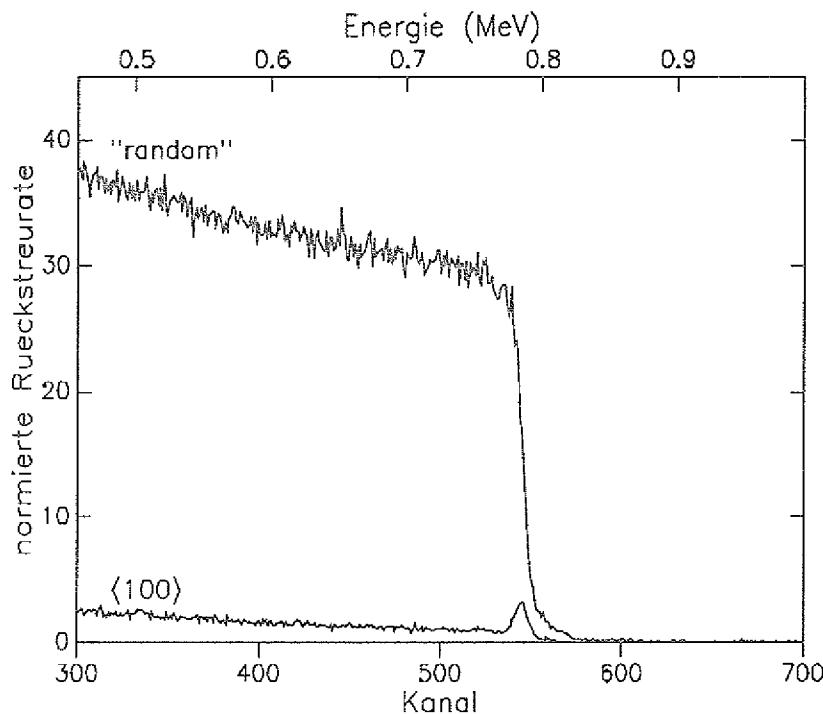


Abb. 4.4.: Random- und (100)-Channeling - Spektren eines (100) Si-Wafers

Das Verhältnis der Rückstreuraten entlang der (100) - Channeling Richtung und der Random Orientierung, gemessen direkt hinter dem Oberflächen-Peak, wird als Minimum Yield ($\chi_{\min}$) bezeichnet und beträgt in diesem Fall 3 %. In stark gestörten Kristallen ist es allerdings häufig schwierig das Minimum des Verhältnisses von Channeling zu Random Zählrate zu bestimmen. In diesem Fall wird das Verhältnis der, über einen bestimmten Kanalbereich integrierten, Zählraten (χ_{ave}) als Maß für die Kristallqualität benutzt. Diese Definition wird im folgenden zur Bestimmung der Kristallqualität nach der Implantation herangezogen.

Wichtig für den Channeling - Effekt ist die präzise Ausrichtung der Probe relativ zum Ionenstrahl. Je nach Energie, Ionen - und Targetmasse liegt der sogenannte kritische Winkel für Channeling bei ca. 1° . Näherungsweise kann der kritische Winkel ψ_c durch die Formel

$$\psi_c = \sqrt{\frac{2Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 E d}} \quad (4.9)$$

abgeschätzt werden.

Channeling kann auch zur Bestimmung der Verspannung von epitaktischen Schichten in Bezug auf das Substrat verwendet werden. Dazu wird die Winkelabhängigkeit des Rückstreusignals um eine nicht normale Kristallrichtung des Substrats und der Schicht gemessen. Solche sogenannten Winkelscans sind in Abb. 4.5. für eine pseudomorphe CoSi_2 -Schicht auf (100) Si dargestellt.

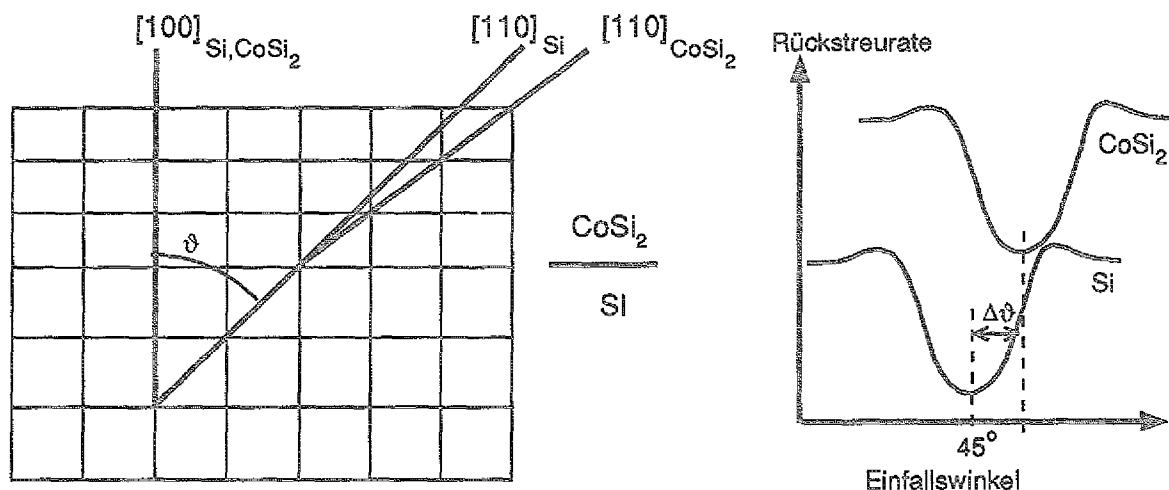


Abb. 4.5.: Schematische Darstellung von Winkelscans zur Bestimmung der tetragonalen Verzerrung.

Der Winkelscan erfolgt in diesem Fall um eine $\langle 110 \rangle$ Richtung. Da der Gitterparameter von CoSi_2 kleiner ist als der von Si, ist die CoSi_2 -Schicht aufgrund des Poisson-Effekts in der Vertikalen komprimiert, so daß die $\langle 110 \rangle$ Richtung des Silizides einen größeren Winkel mit der Probennormalen einschließt als die des Si-Substrats. Aus der Winkeldifferenz $\Delta\vartheta$ kann die tetragonale Verspannung der CoSi_2 -Schicht berechnet werden [76]:

$$\varepsilon^T = \varepsilon^\perp - \varepsilon^\parallel = \Delta\vartheta / (\sin\vartheta \cos\vartheta) \quad (4.10)$$

Die tetragonalen Verspannung von pseudomorphen CoSi_2 -Schichten auf (100) bzw. (111) Si sind in Kap. 2.3.2. berechnet worden. Für teilweise relaxierte Schichten ergeben sich kleinere Verspannungen und somit kleinere Winkeldifferenzen.

Wird Channeling in Zusammenhang mit Oberflächenrekonstruktionen oder -relaxations Messungen benutzt [77], wird es auch häufig als "Shadowing", in Anlehnung an den bei Channeling entstehenden Schattenkegel für die tieferliegenden Atome einer Atomreihe, be-

zeichnet. Diese Messungen beruhen auf Bestimmung der Intensität des Oberflächen-Peaks, die bei Vorlage einer Rekonstruktion oder Relaxation im Vergleich zum idealen Kristall erhöht ist (siehe Abb. 4.6.).

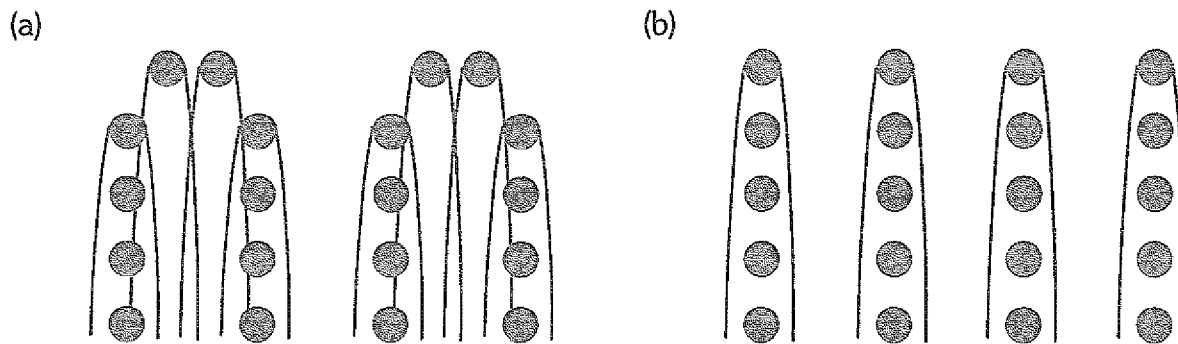


Abb. 4.6.: Shadowing an einer rekonstruierten (a) und an einer nicht-rekonstruierten Oberfläche (b).

Solche Messungen können aber nur als Test für ein Strukturmodell dienen. Es kann nicht die Position der relaxierten Atome bestimmt werden. Eine Strukturbestimmung von solchen Oberflächenphänomenen ist erst möglich wenn Shadowing im Zusammenhang mit "Blocking" benutzt wird [77].

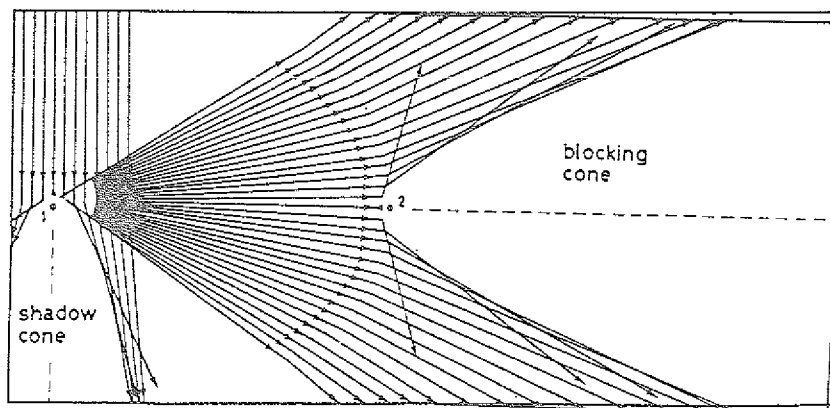


Abb. 4.7.: Schematische Darstellung von Shadowing und Blocking.

Atom 1 kann als Punktquelle für Ionen in verschiedene Richtungen aufgefaßt werden. Der Blockingkegel ergibt sich durch die Kleinwinkelstößen der Ionen an dem abgeschirmten Coulomb-Potential von Atom 2, so daß die Rückstreurrate in Richtung von Atom 2 stark reduziert ist. Mathematisch ist der Blocking - Effekt wegen der Zeitumkehrinvarianz analog dem Shadowing - Effekt zu behandeln. Abb. 4.8. zeigt als Beispiel eine Shadowing und Blocking Geometrie für eine Oberflächenrelaxation.

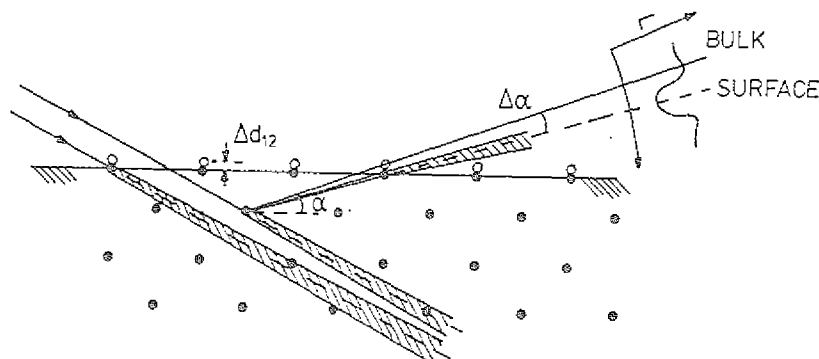


Abb. 4.8.: Schematische Darstellung einer Oberflächenrelaxationsmessung mit Shadowing und Blocking an der (001) Oberfläche eines fcc-Kristalls. Der Ionenstrahl fällt in eine [201] Richtung ein und wird unter einer [301] Richtung detektiert.

Der Ionenstrahl wird parallel zu einer Richtung eingestrahlt, in der ihm nur die obersten zwei Atomlagen ausgesetzt sind. Der Schattenkegel ist so groß, daß Rückstreuung von tieferliegende Atome nicht stattfindet. Die Relaxation bedingt einen Blockingkegel, d.h. eine geringere Rückstreuung, an einem anderen Ausfallwinkel als es im idealen Kristall der Fall gewesen wäre. Mit einem ortsempfindlichen Detektor, der die gestreuten Ionen simultan über einen Winkelbereich von mehreren Grad detektiert, kann die Winkeldifferenz $\Delta\alpha$ zwischen den Blockingminima der relaxierten Oberflächenatome und der Bulkorientierung gemessen werden. Aus dieser Winkeldifferenz kann nach einfachen geometrischen Überlegungen direkt auf die Relaxation Δd_{12} geschlossen werden.

Mit dieser Methode ist es auch möglich innere Grenzflächen zu untersuchen, wie es am Beispiel von allerdings nur einigen Monolagen dicken NiSi_2 - und CoSi_2 -Schichten auf (111) Si gezeigt wurde [78,67]. Hierbei kann aber nicht einfach aus den Blockingspektren und geometrischen Überlegungen auf die Grenzflächenstruktur geschlossen werden. Es ist viel-

mehr eine Monte-Carlo Simulation nötig, die den Weg des ein- und auslaufenden Ions und somit das zu erwartende Blockingspektrum in einer vorgegebenen Grenzflächenstruktur simuliert. Ein solches Simulationsprogramm ist das von Frenken et al. [79] entwickelte Programm VEGAS.

Solche Untersuchungen erfordern eine hohe Tiefenauflösung, welche nur mit H^+ oder He^+ Ionen in einem mittleren Energiebereich von 100 - 400 keV, daher auch der Name Mittelenergie-Ionenstreuung (MEIS), erzielt werden kann. In diesem Energiebereich ist der Energieverlust von H oder He in den meisten Materialien maximal, so daß nach Gleichung (4.2) auch eine sehr kurze Wegdifferenz Δx noch eine meßbare Energiedifferenz liefert. Eine weitere Steigerung der Auflösung erhält man durch Verwendung eines elektrostatischen Detektor, dessen Energieauflösung in dem Energiebereich von 100 - 400 keV bei 0.4 - 1.5 keV liegt und somit um eine Größenordnung besser ist als die typischerweise von Halbleiterdetektoren erreichte Auflösung von 12 keV.

4.2. Widerstands - und Hallmessung

Der spezifische Widerstand und der Halleffekt wurden mit der van-der-Pauw-Methode gemessen [80]. Wie bei der normalen Vierpunktmethode werden vier Kontakte benötigt, wobei sich jedoch die Kontakte nicht in der Mitte der Probe befinden, sondern am Rand. Der Vorteil ist, daß beliebig geformte Proben untersucht werden können, solange die Schicht homogen (d.h. konstante Dicke und keine Löcher) ist und die Kontakte genügend klein sind. Nach van der Pauw ergibt sich der spezifische Schichtwiderstand $\rho_s = \rho/d$ (d: Dicke der Schicht):

$$\rho_s = \frac{\pi}{\ln 2} \left(\frac{R_{1234} + R_{2341}}{2} \right) f \quad (4.11)$$

Dabei ist $R_{1234} = U_{34}/I_{12}$ mit U_{34} Spannungsdifferenz zwischen Kontakt 3 und 4, wenn ein Strom I_{12} durch die Kontakte 1 und 2 fließt. Entsprechendes gilt für R_{2341} usw.. f ist ein Korrekturfaktor, der Abweichungen von der quadratischen Form der Probe berücksichtigt. Für quadratische Proben ist $f = 1$. f hängt nur vom Widerstandsverhältnis R_{1234}/R_{2341} ab und läßt sich als Lösung einer transzendenten Gleichung numerisch bestimmen.

Zur Bestimmung des "Schicht"-Hallkoeffizienten $R_{H-sh} = R_H/d$ wird der Widerstand R_{2413} , nach Einschalten eines magnetischen Feldes senkrecht zur Schicht, gemessen. Das dadurch entstehende Hallfeld ändert den Potentialverlauf in der Schicht und somit die Potential-

differenz zwischen Kontakt 2 und 4. Damit ist $\Delta R_{2413} = \Delta V_{24}/I_{13}$. Es gilt dann

$$R_{H-sh} = \frac{1}{B} \cdot \Delta R_{2413} \quad (4.12)$$

Die obigen Formeln sind unter der Annahme hergeleitet worden, daß die Kontakte exakt am Schichtrand angebracht und punktförmig sind. Für kreisförmige Proben (Durchmesser D) ergeben sich z.B. für kreisförmige Kontakte des Durchmessers L folgende relative Fehler: $\Delta\rho/\rho \approx (L/D)^2$ bzw. $\Delta R_H/R_H \approx L/D$.

Die temperaturabhängigen Hall - und Widerstandsmessungen wurden in einem He-Verdampferkryostaten durchgeführt. Gemessen wurde beim langsamen Aufheizen von 4 - 300 K.

4.3. Messung der Schottkybarrierenhöhe

Als Charakterisierungsmethoden für die Schottkybarrierenhöhe zwischen CoSi_2 und Si wurden Strom-Spannungsmessungen $I(V)$ und Strom-Temperaturmessungen $I(T)$ durchgeführt. Aus der thermischen Emissionstheorie ergibt sich folgende Spannungsabhängigkeit des Stroms für einen Metall - Halbleiterkontakt (Schottkydiode) [81]:

$$I = I_0 \left[\exp\left(\frac{qU}{nk_B T}\right) - 1 \right] \quad (4.13)$$

mit

$$I_0 = AA^* T^2 \cdot \exp\left(-\frac{q\phi_B}{k_B T}\right)$$

Aus dem Sättigungsstrom I_0 kann die Barrierenhöhe bestimmt werden:

$$\phi_B = \frac{k_B T}{q} \ln\left(\frac{AA^* T^2}{I_0}\right) \quad (4.14)$$

A ist dabei die Diodenfläche und A^* die effektive Richardsonkonstante, in die Konzentration und effektive Massen der Ladungsträger eingehen. Ihr Wert beträgt für n-Si $112 \text{ AK}^{-2}\text{cm}^{-2}$ [81]. Der Idealitätsfaktor n berücksichtigt die "Nichtidealitäten" des Schottkykontaktes, wie z.B. parasitäre Stromanteile, Rekombinations-, Generations- oder Tunnelströme [81].

Es gilt:

$$n = \frac{q}{k_B T} \cdot \frac{\partial U}{\partial \ln I} \quad (4.15)$$

Der Wert dieser empirischen Größe liegt bei idealer thermischer Ladungsträger-Emission über die Barriere bei 1 und steigt auf 2 wenn Ladungsträger Rekombination in der Verarmungszone stattfindet.

Eine andere Methode zur Bestimmung der Barrierenhöhe, ohne Kenntnis der Diodenfläche, ist die Messung der $I(V)$ Kennlinien in Abhängigkeit von der Temperatur. Aus Gleichung (4.13.) folgt für positive Spannungen ($\exp(qU/(nk_B T)) \gg 1$):

$$\ln\left(\frac{I}{T^2}\right) = \ln(AA^*) + \frac{q}{k_B}(-\phi_B + \frac{U}{n})\frac{1}{T} \quad (4.16)$$

Die Barrierenhöhe lässt sich aus dem Arrheniusplot $\ln(I/T^2)$ gegen $1/T$ aus der Steigung bestimmen. Die elektrisch aktive Diodenfläche erhält man aus dem Schnittpunkt mit der y - Achse.

5. Ergebnisse

5.1. Wachstum und Bildung der CoSi_2 -Schicht

Die Ionenstrahlsynthese besteht aus zwei Schritten, der Implantation und einer anschließenden Temperung. In den folgenden Abschnitten wird der Einfluß der Implantationsdosis auf das Implantationsprofil sowie die Schädigung vor und nach der Temperung untersucht. Außerdem werden Experimente zur Untersuchungen der CoSi_2 -Schichtbildung während der Temperung vorgestellt.

5.1.1. Dosisabhängigkeit

Abb. 5.1. und 5.2 zeigt die Co-Peak-Konzentration (Co-Konzentration gemessen im Maximum des Co-Konzentrationsprofils) und als Maß für die Kristallqualität χ_{ave} (Verhältnis von integrierter Zählrate im Co-Signal von Channeling zu Random Spektrum) in Abhängigkeit von der Implantationsdosis.

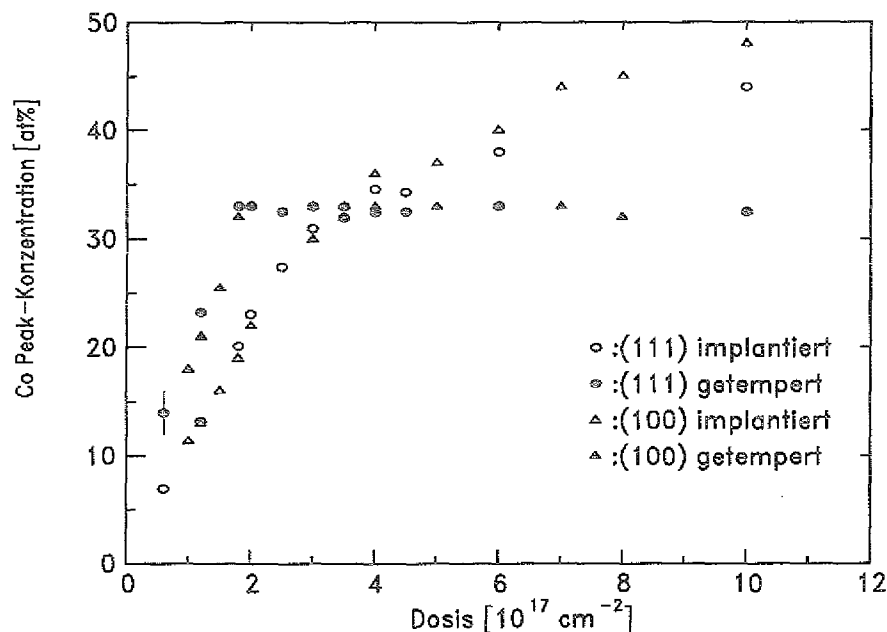


Abb. 5.1.: Co-Peak-Konzentration im Co-Signal (χ_{ave}) nach 200 keV Implantation und Temperung in Abhängigkeit von der Dosis.

Die Implantationen wurden alle bei 200 keV, 350° C Implantationstemperatur und 8-12 $\mu\text{A}/\text{cm}^2$ Strahlstromdichte durchgeführt. Es wurden sowohl (111) als auch (100) orientierte Si - Proben implantiert. Bis zu einer Dosis von $3 \times 10^{17} \text{ Co}/\text{cm}^2$ ist die Peak-Konzentration linear von der Dosis abhängig. Bei ca. $3.5 \times 10^{17} \text{ Co}/\text{cm}^2$ ändert sich der Verlauf dieser Abhängigkeit. Dieser Dosis entspricht eine Co-Peak-Konzentration von 33%, d.h. es hat sich während der Implantation eine kontinuierliche CoSi_2 -Schicht gebildet. Zu höheren Dosen hin steigt die Co-Konzentration nun viel schwächer mit der Dosis.

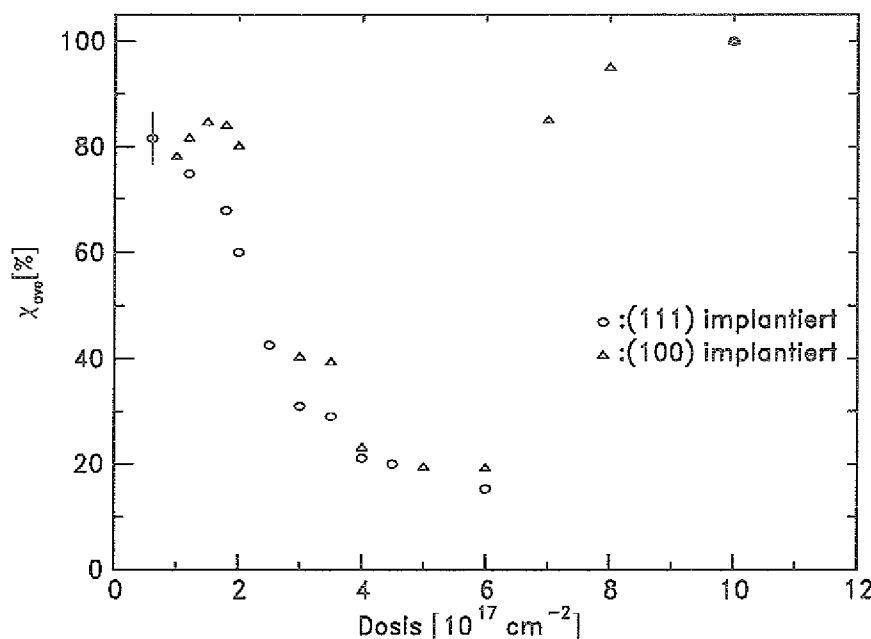


Abb. 5.2.: Kristallinität im Co-Signal (χ_{ave}) nach 200 keV Implantation in Abhängigkeit von der Dosis.

Die Kristallqualität verbessert sich überraschenderweise rapide mit steigender Dosis (siehe Abb. 5.2.), wobei auffällt, daß das Channeling in den (100) orientierten Proben immer etwas schlechter ist als in (111) orientierten Proben. Für sehr große Dosen ($\geq 7 \times 10^{17} \text{ Co}/\text{cm}^2$) erfolgt dann eine sprunghafte Verschlechterung. In Abb. 5.3. sind einige, aus RBS Spektren mit dem Programm SQUEAKIE [82] berechnete, Tiefenprofile dargestellt.

Zum Vergleich sind HDTRIM Simulationen eingezeichnet, wobei für die Simulation eine Sputterrate von 1.2 angenommen wurde. Übereinstimmung mit den Meßergebnissen ergibt

sich nur im Fall der 2×10^{17} Implantation. Bei höheren Dosen findet man im Gegensatz zur Simulation einen höheren Co-Anteil an der Probenoberfläche und eine geringere Peak-Konzentration.

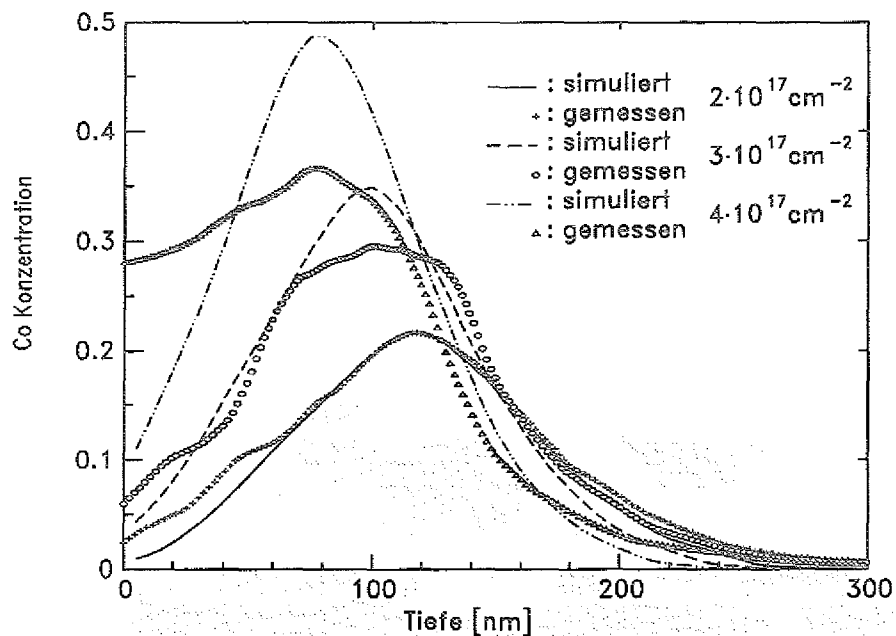


Abb. 5.3.: Co-Verteilung nach 200 keV Implantation in (100) Si. Die Kurven sind aus RBS Spektren, unter der Annahme, daß Co nur als CoSi_2 vorliegt, berechnet worden. HDTRIM Simulationen mit den entsprechenden Parametern sind mit unterschiedlichen Symbolen dargestellt.

Die Abhängigkeit der Co-Peak-Konzentration von der Dosis ändert sich, wie in Abb. 5.1. zu sehen ist, deutlich nach der Temperung bei 600° 1h und 1000° 30 min. im Rohröfen. Im Vergleich zum Verlauf der Peak-Konzentration nach der Implantation steigt die Co-Konzentration zuerst schneller an. Ab 1.8×10^{17} knickt der Verlauf der Co-Konzentration in eine konstante Abhängigkeit von der Dosis ab. Für alle höheren Dosen ergibt sich dieselbe Co-Konzentration von 33 %, d.h. es sind kontinuierliche CoSi_2 -Schichten erzeugt worden. Die Co-Konzentration nach Implantation von 1.8×10^{17} beträgt 18-19 % und wird als kritische Peak-Konzentration bezeichnet. Sie ist in Übereinstimmung mit den Ergebnissen von A. E. White et al. [4].

Die Schichtqualität der getemperten Proben ist hervorragend wie aus den in Tabelle 5.1. aufgeführten Widerstands- und Minimum-Yield-Werten für (100) Si ersichtlich ist.

Tabelle 5.1.: Schichtdicken und Kristallqualität von (100) Si/CoSi₂/Si-Heterostrukturen

Dosis [10 ¹⁷ cm ⁻²]	CoSi ₂ -Dicke [nm]	Si-Dicke [nm]	$\chi_{\min}(\text{Co})$ [%]	ρ [$\mu\Omega\text{cm}$]
2	70	88	6	13
3	110	48	7.5	13
4	140	0	4	14
5	160	0	3	14

(111) Proben haben einen etwas höheren Widerstand (14-15 $\mu\Omega\text{cm}$), obwohl ihre Kristallqualität besser ist ($\chi_{\min} \approx 4\%$) und sie nach TEM Untersuchungen auch glattere Grenzflächen besitzen.

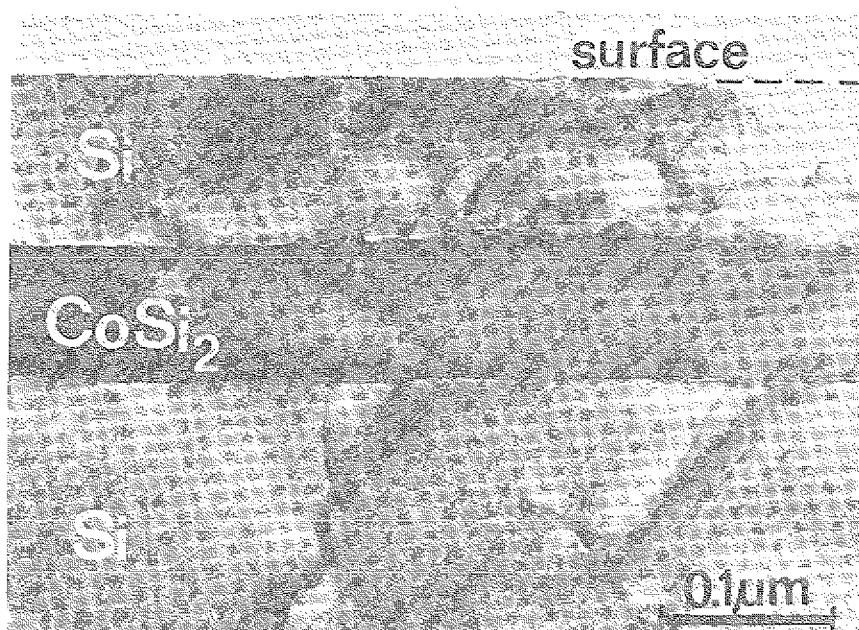


Abb. 5.4.: TEM-Querschnitt-Aufnahme einer mit 200 keV und $2 \times 10^{17} \text{ Co/cm}^2$ implantierten und im Rohofen getemperten CoSi₂-Schicht in (100) Si.

Wie man aus der die TEM-Querschnitt-Aufnahme einer (100) orientierten Heterostruktur sehen kann, sind die Grenzflächen scharf. Man findet aber eine gewisse Zahl von Stufen, deren Höhe ca. 10% der Dicke der Schicht ist. Die Stufen haben an den Seiten (111) Grenzflächen. Eine TEM-Querschnitts-Aufnahme einer (111) Heterostruktur mit sehr

glatten Grenzflächen ist z.B. in Abb. 5.21. in Kap. 5.2.2. zu sehen. Röntgenmessungen unter streifendem Einfall (engl.: Grazing Incidence Diffraction; GID) bestätigen, daß die Grenzflächen von (111)-Heterostrukturen wesentlich glatter sind als die von (100)-Heterostrukturen [83]. Bemerkenswert ist, daß mit Dosen von $4\text{-}6 \times 10^{17}$ und Standardtemperatur CoSi_2 -Oberflächenschichten auf (111) und (100) Si-Substraten mit einer hervorragenden Kristallqualität ($\chi_{\min} = 4\%$) hergestellt werden können.

In den mit höheren Dosen implantierten Proben bildet sich während der Temperung zwar auch eine CoSi_2 -Schicht, aber aufgrund des schwergeschädigten Ausgangszustandes mit einer schlechteren Kristallqualität ($\chi_{\min} \approx 12\%$).

5.1.2. Wachstumskinetik der CoSi_2 -Ausscheidungen

Zur Untersuchung des Reifungsprozesses während der Temperung wurde (111) Si mit 200 keV Co-Ionen bei 350°C mit Dosen von 1×10^{16} bzw. $6 \times 10^{16}\text{ cm}^{-2}$ implantiert. Die Dosen wurden so gering gewählt, damit nur wenige isolierte Ausscheidungen erzeugt werden und somit Wechselwirkung unter den Ausscheidung oder gar Koaleszenz der Ausscheidungen während der Temperung ausgeschlossen werden konnte. Außerdem ist dann der Volumenanteil der ausgeschiedenen Phase klein, welches eine gute Voraussetzung für die LSW - Theorie ist. Die Temperungen wurden isochron im Temperaturbereich $750 - 1150^\circ\text{C}$ mit 20 s bzw. 100 s Dauer durchgeführt. Isothermen wurden bei Temperaturen von 900° , 1000° und 1050°C mit Zeiten zwischen 5 und 600 s aufgenommen.

Abb. 5.5. zeigen TEM-Querschnitt-Aufnahmen der Ausscheidungsstruktur nach Implantation von $1 \times 10^{16}\text{ Co/cm}^2$ und Temperung bei 750°C bzw. 1100°C (Abb. 5.5. (a) bzw. (b)) in $\langle 110 \rangle$ Projektion. Zum Vergleich sind die entsprechenden, aus RBS Messungen berechneten, Co-Konzentrationsprofile eingezeichnet.

Nach Elektronenbeugung haben alle Ausscheidungen CoSi_2 -Struktur. Temperung bei 750°C (Abb. 5.5. (a)) führt in einem Tiefenbereich von 60 - 90 nm zu einer an CoSi_2 -Ausscheidungen verarmten Zone und einer Zone mit besonders großen Ausscheidungen in einer Tiefe von 150 - 210 nm. Bei 1100°C reduziert sich die Anzahl der Ausscheidungen und es befinden sich im wesentlichen nur noch einige sehr große Ausscheidungen in der Zone von 150 - 210 nm. Dies entspricht den RBS Ergebnissen, die eine Kontraktion des Co-Profils eben in diesem Tiefenintervall zeigen. Vereinzelt Ausscheidungen sind auch noch an der Oberfläche der Probe zu finden. Nach stereomikroskopische Untersuchungen an der bei 750°C getemperten Probe sind die meisten Ausscheidungen plattenförmig

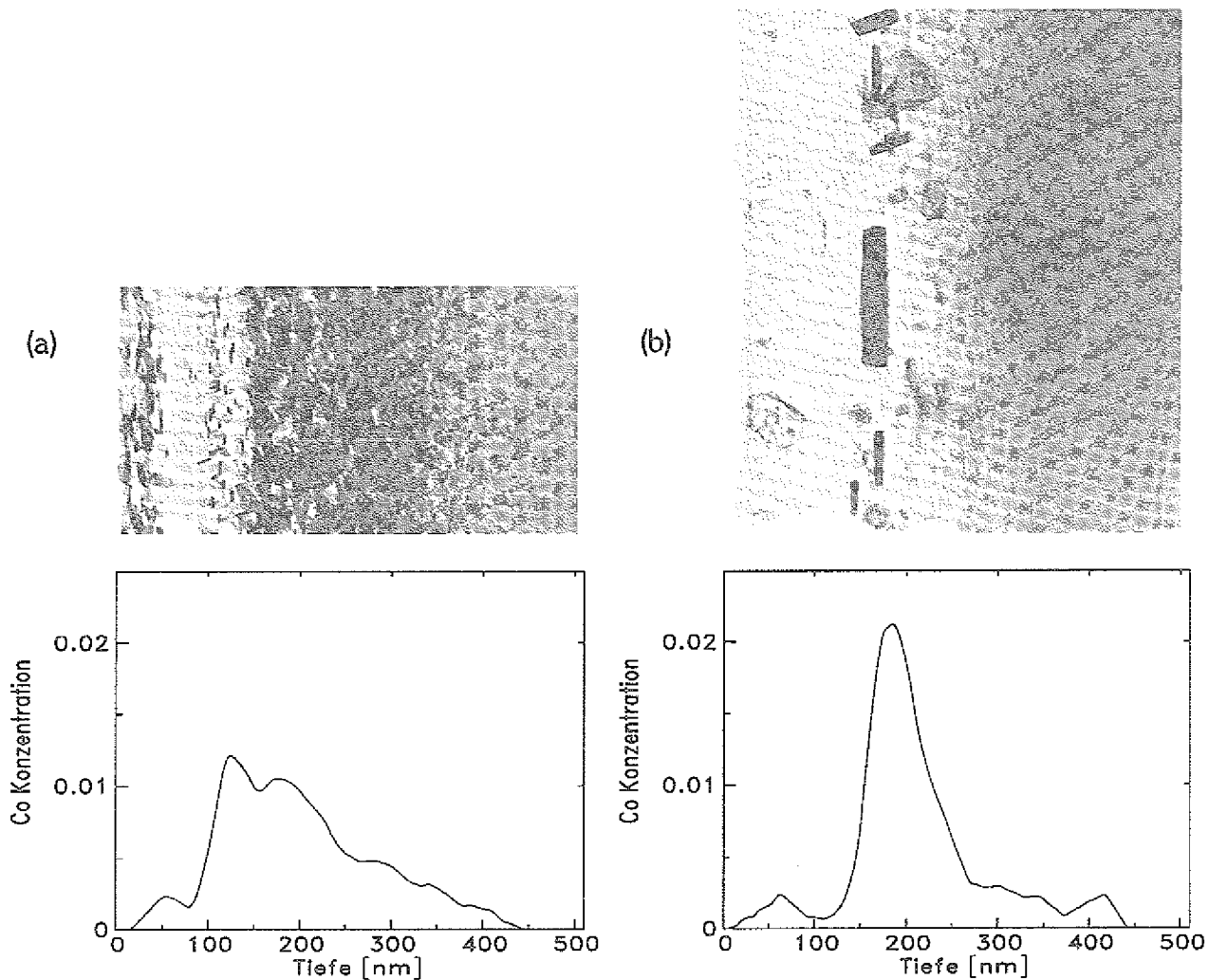


Abb. 5.5.(a): TEM-Querschnitt-Aufnahme nach 200 keV Co-Implantation in (111) Si und Temperung bei 750°C/100s zusammen mit dem Co-Konzentrationsprofil.

(b): TEM-Querschnitt-Aufnahme nach 200 keV Co-Implantation in (111) Si und Temperung bei 1100°C/100s zusammen mit dem Co-Konzentrationsprofil.

mit {111} Grenzflächen [84] (siehe auch Kap.2.2.2.). Die lange Seite der Ausscheidungen ist deshalb parallel zur Oberfläche oder schließt mit ihr einen Winkel von 70° ein. Anhand der stereomikroskopischen Aufnahmen konnte mittlere Durchmesser $\langle d \rangle$ und Dicke $\langle t \rangle$ der Ausscheidungen in bestimmten Tiefenintervallen gemessen werden. Die größte Änderung bei ansteigender Tempertemperatur ergab sich im Tiefenintervall von 150 - 210 nm. Dort stieg $\langle d \rangle$ von 12 nm bei 750° auf 55 nm bei 1100° an. Die mittlere

Dicke $\langle t \rangle$ zeigt dagegen einen kleineren Anstieg (von 4 nm auf 10 nm). Das Wachstum der Ausscheidungen ist offensichtlich stark Anisotrop.

Die Wachstumsrate der Ausscheidungen konnte aufgrund der wenigen vorliegenden TEM Aufnahmen nicht bestimmt werden. Um den Reifungsprozeß trotzdem näher zu charakterisieren, d.h. um eine Aktivierungsenergie für diesen Prozeß zu bestimmen, wurde aus RBS Spektren die Anzahl der während der Temperung umverteilten Co-Atome bestimmt. Um eine höhere Rückstreurrate zu erhalten, wurde für dieses Experiment eine Implantationsdosis von 6×10^{16} Co/cm² gewählt. Der Anteil der umverteilten Co-Atome wurde durch Subtraktion des Co RBS Profils nach der Implantation von dem RBS Profil nach der Temperung gemessen. Dies ist in Abb. 5.6. verdeutlicht. Der Anteil der umverteilten Co-Atome ist die Summe der beiden einfach schraffierten Bereiche bzw. des doppelt schraffierten Bereiches. Die Proben wurden in dem oben genannten Temperatur- und Zeitbereich isochron und isotherm getempert. Nach jeder Temperung wurde der Anteil der umverteilten Co-Atome bestimmt.

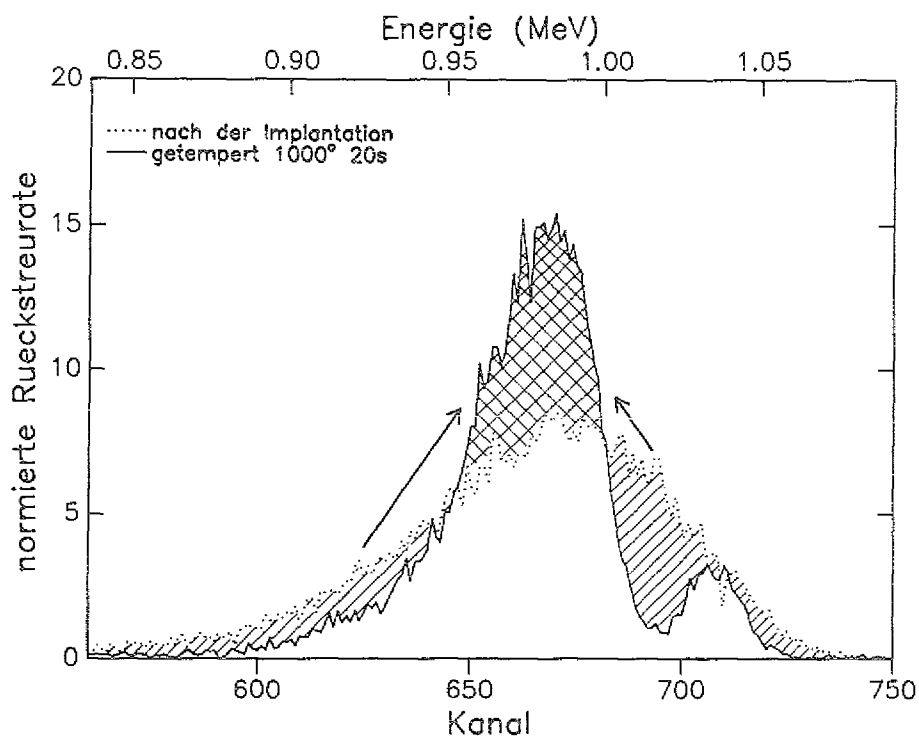


Abb. 5.6: Co-RBS-Signal nach Implantation von 6×10^{16} Co/cm² (durchgezogene Linie) und nach einer Temperung bei 1000°C/20 s (gepunktete Linie). Die Umverteilung der Co-Atome vom schraffierten Bereich zum doppelt schraffierten Bereich ist durch Pfeile angedeutet

Zur Bestimmung der Aktivierungsenergie wurde von folgender, eigentlich nur für homogene Systeme gültigen, Reaktionsgleichung ausgegangen:

$$\frac{dx(T,t)}{dt} = -\beta \cdot x^n(T,t) \cdot \exp\left(-\frac{Q}{k_B T}\right) \quad (5.1)$$

x ist der Anteil der umverteilten Co-Atome, n ist die Reaktionsordnung, β eine Konstante und Q die Aktivierungsenergie. Da die Reaktionsordnung unbekannt ist, wurde die Meechan-Brinkman Methode [85] und die "Change of Slope" Methode [86] benutzt, um die Aktivierungsenergie zu bestimmen. Bei diesen beiden Methoden ist es nicht nötig, die Reaktionsordnung zu kennen.

Für die Meechan-Brinkman Methode sind mindestens zwei identische Proben notwendig, von denen eine isotherm und eine isochron getempert wird. In einer Grafik wird $x(t')$ für die isotherm behandelte Probe zusammen mit $x(T)$ für die isochron behandelte Probe aufgetragen (siehe Abb. 5.7.). Daraus läßt sich die isotherme Wärmebehandlungszeit $\Delta t'$ und die

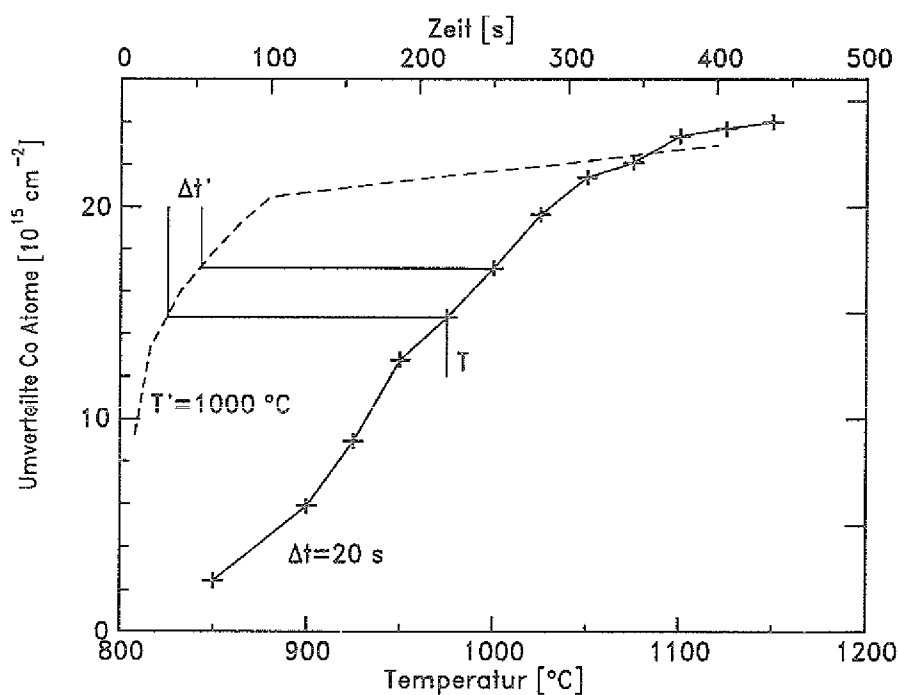


Abb. 5.7.: Meechan-Brinkman Methode zur Bestimmung einer Aktivierungsenergie am Beispiel einer Isothermen bei $T' = 1000^{\circ}\text{C}$ und $t' = 1 - 400 \text{ s}$ und einer Isochronen bei $\Delta t = 20 \text{ s}$ und $T = 850 - 1150^{\circ}\text{C}$.

entsprechende isochrone Anlaßtemperatur T ablesen, die für dieselbe Meßgrößenänderung von x_1 zu x_2 notwendig sind:

$$\begin{aligned}
 c(x_1, x_2) &:= \frac{1}{\beta} \cdot \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx'}{x'^n} \\
 &= \Delta t \cdot \exp\left(-\frac{Q}{k_B T}\right) \\
 &= \Delta t' \cdot \exp\left(-\frac{Q}{k_B T'}\right) \\
 \Rightarrow \quad \ln \frac{\Delta t'}{\Delta t} &= \frac{Q}{k_B} \cdot \left(\frac{1}{T'} - \frac{1}{T}\right) \quad (5.2)
 \end{aligned}$$

Alle auf diese Weise ermittelten Wertepaare $(T, \Delta t')$ werden in einem normalisierten Arrheniusplot $\ln(\Delta t'/\Delta t)$ gegen $(1/T' - 1/T)$ aufgetragen. Die Normalisierung erlaubt den Vergleich mehrerer Meßserien.

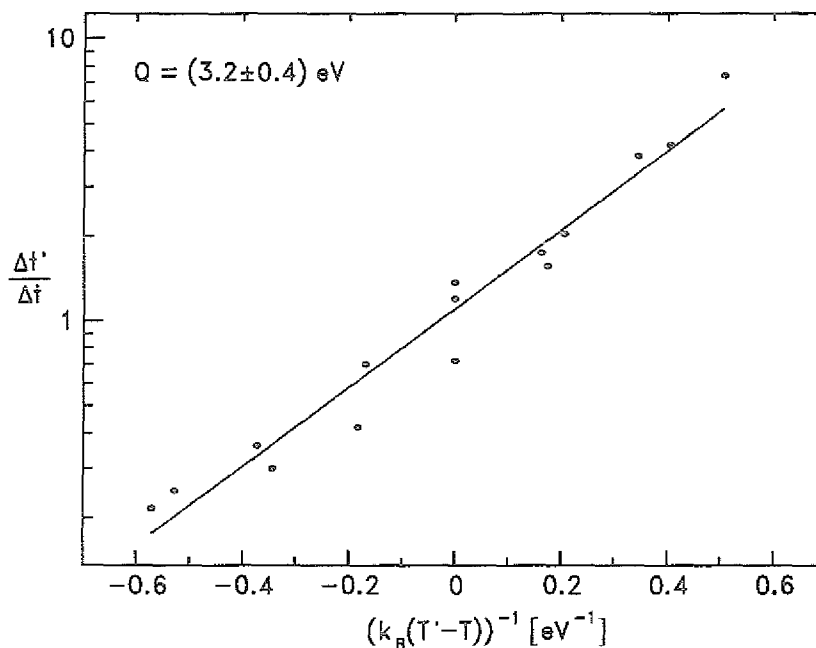


Abb. 5.8.: Normalisierter Arrheniusplot zur Bestimmung der Aktivierungsenergie nach der Meechan-Brinkman Methode.

Lineare Regression der Punkte in Abb. 5.8. ergibt eine Aktivierungsenergie von $Q = (3.2 \pm 0.4) \text{ eV}$.

Das Zeitgesetz für die Umverteilung kann aus der Steigung m einer Isothermen in einer doppelt logarithmischen Auftragung bestimmt werden (siehe Abb. 5.9.). Es ergibt sich $m = 2.7$, also $x^3(t) \sim t$.

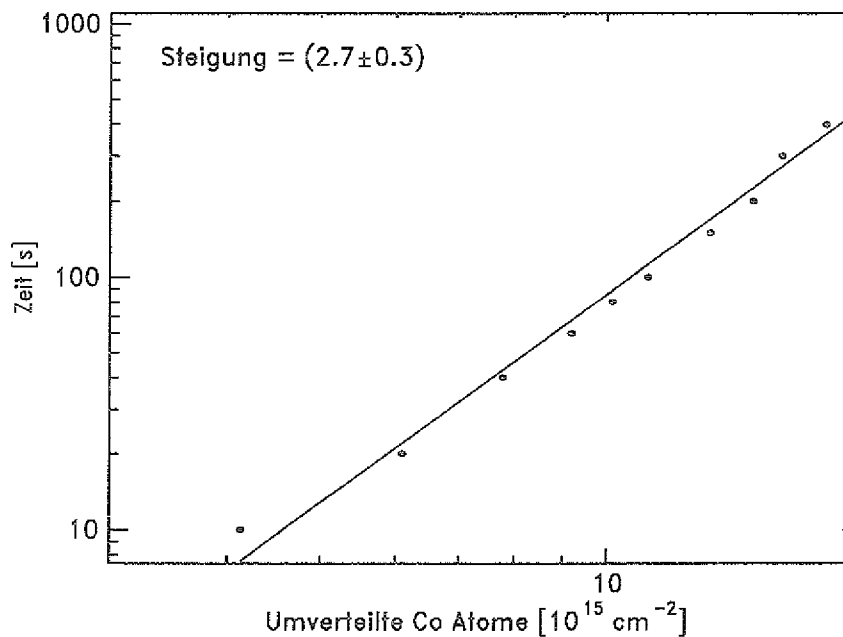


Abb. 5.9.: Doppelt-Logarithmische Auftragung der umverteilten Co-Atome gegen die Temperaturzeit bei $T = 1000^\circ\text{C}$.

Die zweite Methode die zur Bestimmung der Aktivierungsenergie benutzt wurde, ist die sogenannte "Change of Slope" Methode. Eine Probe wird zweimal hintereinander isotherm bei unterschiedlichen Temperaturen T_1 und T_2 getempert. Wenn der Wechsel in der Temperatur schnell genug ist, ändert sich der Anteil der umverteilten Co-Atome nicht während des Temperaturwechsels. Von der Steigung der Isothermen direkt vor bzw. nach dem Temperaturwechsel kann die Aktivierungsenergie mittels folgender Gleichung (folgt sofort aus Gleichung (5.1)) bestimmt werden:

$$Q = \frac{k \cdot T_1 \cdot T_2}{T_1 - T_2} \cdot \left[\ln\left(\frac{dx}{dt}\right)_{T_1} - \ln\left(\frac{dx}{dt}\right)_{T_2} \right] \quad (5.3)$$

Diese Methode wurde zweimal angewendet, einmal bei $T_1 = 850^\circ\text{C}$ und $T_2 = 1000^\circ\text{C}$ und bei $T_1 = 1000^\circ\text{C}$ und $T_2 = 1050^\circ\text{C}$. In Abb. 5.10. ist der Anteil der umverteilten Co-Atome für $T_1 = 850^\circ\text{C}$ und $T_2 = 1000^\circ\text{C}$ gegen die Zeit aufgetragen.

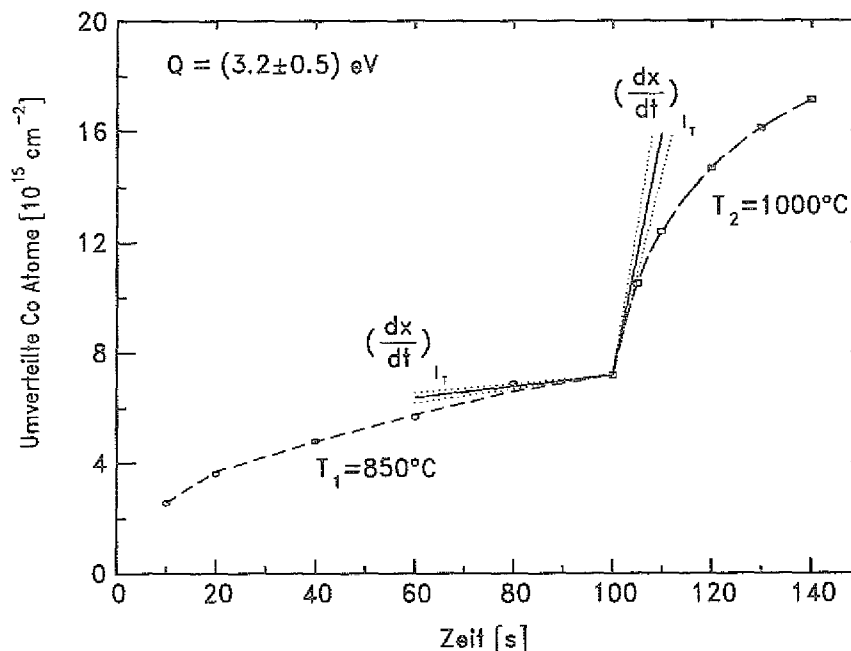


Abb. 5.10.: Umverteilte Co-Atome in Abhängigkeit von der Temperzeit nach isothermer Temperung bei 850°C und 1000°C . Die durchgezogene Linie zeigt die Steigung an dem Wechsellpunkt von 850°C zu 1000°C an. Die gepunkteten Linien geben den Fehler an.

Die Steigungen an dem Temperaturwechsel wurden graphisch bestimmt. Der Fehler beträgt ca. 15 %. Es ergaben sich $Q = (3.2 \pm 0.5) \text{ eV}$ und bei $T_1 = 1000^\circ\text{C}$, $T_2 = 1050^\circ\text{C}$ $Q = (3.6 \pm 0.5) \text{ eV}$ in guter Übereinstimmung mit dem aus der Meechan-Brinkman Methode erhaltenen Wert.

5.2. Herstellung dünner CoSi_2 -Schichten

Sehr dünne CoSi_2 -Schichten sind von großer Bedeutung in aktiven Bauelementen wie im PBT und MBT. Speziell der MBT sollte nach Bandstrukturrechnungen nur in (100) orientierten Heterostrukturen arbeiten [11]. Wie schon in Kapitel 3.2. erwähnt ist IBS die einzige Methode um vergrabene CoSi_2 -Schichten in (100) Si herzustellen. Bisher sind

Versuche sehr dünne Schichten mit guter Schichtqualität in (100) Si herzustellen, fehlgeschlagen. Die erzeugten Schichten hatten alle sehr rauhe Grenzflächen [87,88].

In diesem Kapitel wird nun die Schichtbildung von sehr dünnen Schichten in unterschiedlich orientierten Substraten und in Abhängigkeit der Implantationsparameter untersucht. Es wird gezeigt, daß es mit geeigneten Implantationsparametern auch in (100) Si möglich ist CoSi_2 -Schichten mit glatten Grenzflächen zu erhalten.

Die normalerweise bei 200 keV Implantationen verwendeten Dosen von $2\text{-}3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ ergeben nach der Temperung Schichtdicken von 70 - 100 nm. Um dünnere Schichten zu erzeugen, muß man die Dosis verringern. Wegen der Existenz der kritischen Peak-Konzentration (siehe Kap. 5.1.2.) muß man gleichzeitig auch die Implantationsenergie verringern, um nach der Temperung eine kontinuierliche Schicht zu erhalten. Man erhält dann durch das reduzierten Energiestraggling ein schmaleres Profil, welches auch näher an der Oberfläche liegt. Die Implantationen wurden mit Energien zwischen 20 und 40 keV und Dosen von $3.3 - 6.5 \times 10^{16} \text{ Co/cm}^2$ in (111) und (100) Si-Substraten durchgeführt.

5.2.1. Dünne CoSi_2 -Schichten in (100) Si

Am Beispiel der Implantation in (100) Si wurde der Einfluß der Implantationsparameter Temperatur T_i und Strahlstromdichte j_i systematisch untersucht. Dazu wurde speziell im Fall der 40 keV Implantation T_i zwischen 300° und 450°C und j_i zwischen 0.9 und $8 \mu\text{A/cm}^2$ variiert. Im Falle der kleineren Energien konnte mit dem zu Verfügung stehenden Ionenbeschleuniger nur maximale Stromstärken von $3 \mu\text{A/cm}^2$ bei 30 keV und $1.3 \mu\text{A/cm}^2$ bei 20 keV erreicht werden, so daß hier keine Optimierung vorgenommen werden konnte. Abb. 5.11. zeigt RBS und Channeling Spektren einer 40 keV Implantation bei $T_i = 425^\circ\text{C}$ und $j_i = 3 \mu\text{A/cm}^2$. Die projizierte Reichweite der Co-Ionen beträgt 32 nm, die Halbwertsbreite des Profils 27 nm und die Co Peak Konzentration ist 24 %. Die Probe ist durch die Implantation stark geschädigt. Wenn man χ_{ave} wie in Kapitel 5.1.1. definiert, ergibt sich $\chi_{\text{ave}} = 63 \%$. Für die anderen Energie ergeben sich die in Tabelle 5.2. (Kap. 5.2.2.) aufgeführten Werte.

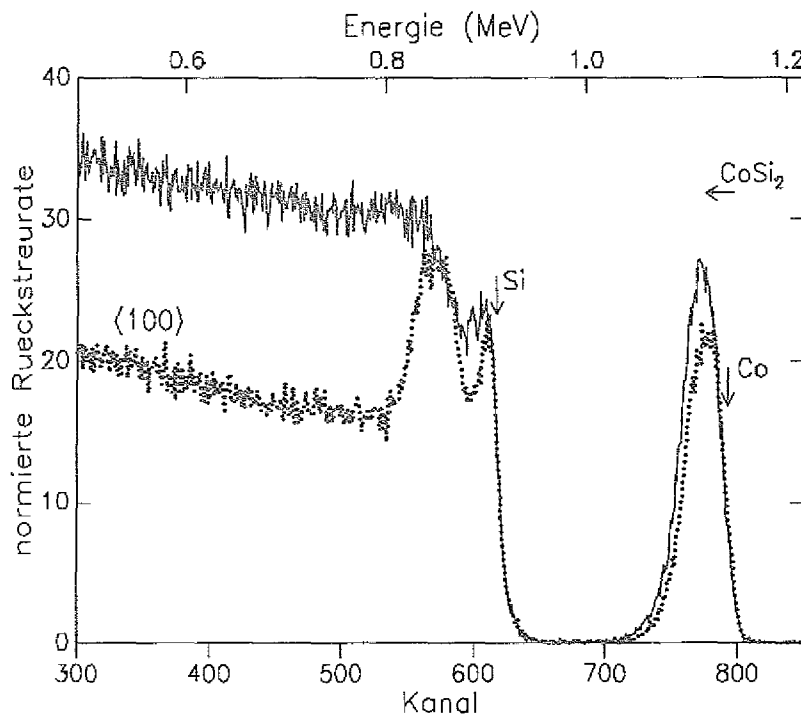


Abb. 5.11.: RBS und Channeling Spektren einer mit 40 keV und $6.5 \times 10^{16} \text{ Co/cm}^2$ bei $T_i = 425^\circ\text{C}$ und $j_i = 3 \mu\text{A/cm}^2$ implantierten (100) Si Probe.

Die Abhängigkeit der Kristallinität von der Implantationstemperatur im Falle der 40 keV Implantation mit $j_i = 3 \mu\text{A/cm}^2$ ist in Abb. 5.12. dargestellt. Bis zu einer Temperatur von 375°C zeigen die Proben kein Channeling im Co-Signal, welches auf eine schwere Schädigung dieser Proben durch die Implantation hindeutet. Erst bei Temperaturen größer als 400°C findet man Channeling. Der Kristall ist also nun nicht mehr so schwer geschädigt. Radermacher [89] hat für 200 keV Implantationen einen ähnlichen Temperaturverlauf beobachtet mit dem Unterschied, daß er Channeling schon ab 300°C fand. Dies stimmt zumindest qualitativ mit dem Modell von Morehead, welches, wie in Kap. 2.1.3. eine Erhöhung der kritischen Temperatur für die Amorphisierung von Si durch Co bei Reduzierung der Implantationsenergie von 200 keV auf 40 keV, vorhersagt. Zur Herstellung der CoSi_2 -Schichten wurden die Proben mit unterschiedlichen Temperaturen getempert.

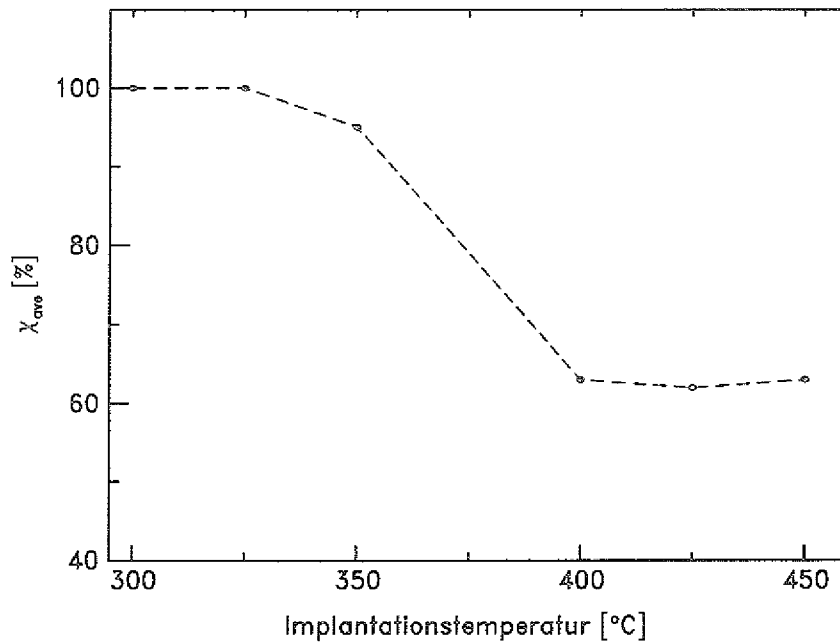


Abb. 5.12.: Kristallinität (χ_{ave}) in Abhängigkeit von der Implantationstemperatur nach 40 keV Implantationen mit $j_i = 3 \mu\text{A}/\text{cm}^2$

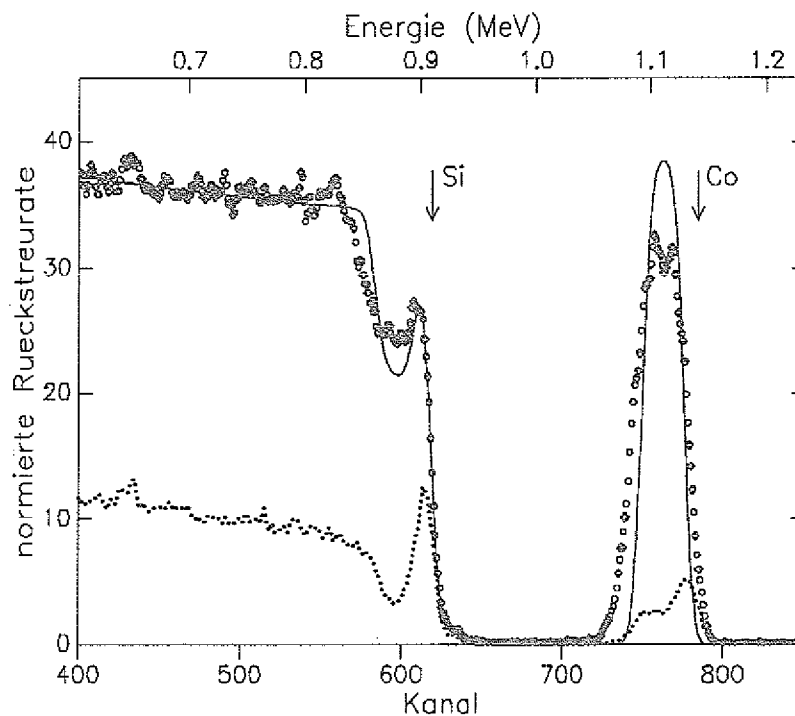


Abb. 5.13.: RBS und Channeling Spektren einer mit 40 keV implantierten Probe bei $T_i = 425^\circ\text{C}$ und $j_i = 6 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ nach Temperung im RTA bei $1100^\circ\text{C}/10\text{s}$. Die durchgezogene Linie ist eine RUMP Simulation einer 25 nm dicken zusammenhängenden CoSi_2 -Schicht abgedeckt mit 18 nm Si.

Abb. 5.13 zeigt RBS und Channeling Spektren einer 40 keV Implantation bei $T_i = 425^\circ\text{C}$ und $j_i = 6 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ nach Temperung bei $1100^\circ\text{C}/5 \text{ s}$ in N_2 . Dies sind typische Implantationsbedingungen für die Herstellung zusammenhängenden CoSi_2 -Schichten mit 100 - 200 keV Implantation [89,115]. Der Vergleich des RBS Spektrums mit der RUMP Simulation einer 25 nm dicken (entspricht der Dosis von $6.5 \times 10^{16} \text{ Co}/\text{cm}^2$) zusammenhängenden Schicht zeigt, daß die erzeugte Schicht nicht kontinuierlich ist. Die Co-Konzentration ist nur 27 % und das Profil ist breiter als das simulierte Spektrum. Nach TEM Untersuchungen an ähnlich hergestellten Schichten entstehen, anstelle einer zusammenhängenden Schicht, große oktaedrischen CoSi_2 -Ausscheidungen in der Si-Matrix [69]. Längere Temperungen oder Temperung bei höheren Temperaturen führten zu keiner Verbesserung. Dagegen konnte mit Temperungen bei Temperaturen unterhalb von 950°C eine zusammenhängende Schicht erzeugt werden. In Abb. 5.14 ist eine TEM-Querschnitt-Aufnahme einer solchen Schicht nach Temperung bei 750°C 30 min. im Rohrofen dargestellt.

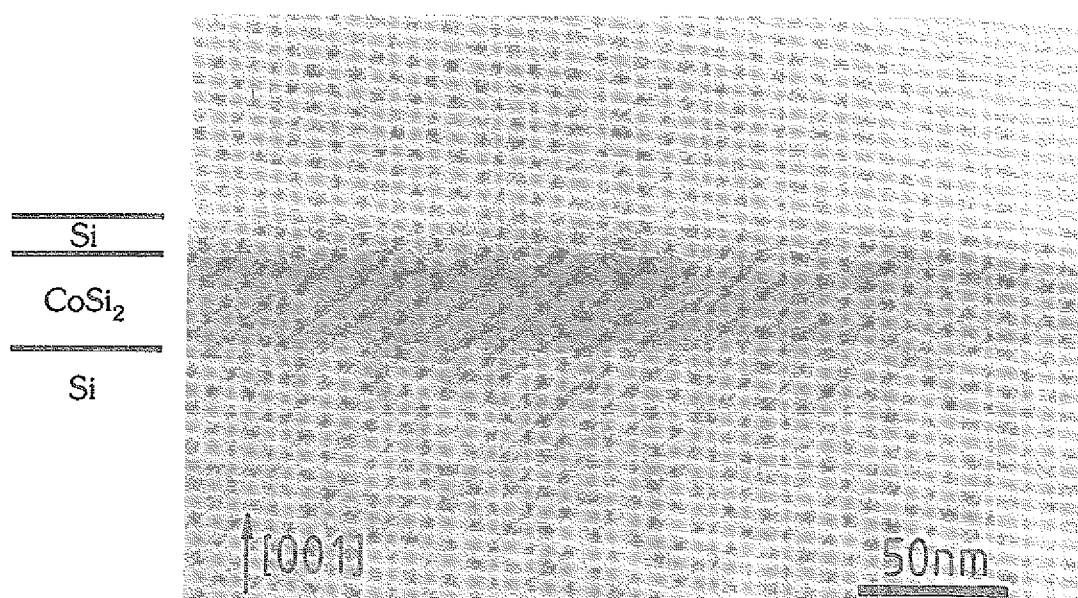


Abb. 5.14.: TEM-Querschnitt-Aufnahme einer mit 40 keV implantierten Probe bei $T_i = 425^\circ\text{C}$ und $j_i = 6 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ nach einer Temperung im Rohrofen bei 750° 30 min..

Die entstandene CoSi_2 -Schicht ist in Übereinstimmung mit RBS Ergebnissen 25 nm dick und liegt unter einer 16 nm dicken Si-Deckschicht. Wegen der niedrigen Temperatur ist die Kristallinität dieser Heterostruktur schlecht ($\chi_{\min} = 20\%$ im Co-Signal). Die Grenzflächen

zwischen CoSi_2 und Si sind, wie aus Abb. 5.14. ersichtlich, sehr rau und facettiert. Bei den mit 30 keV implantierten Proben ergab sich ein dasselbe Verhalten. Nach 20 keV Implantation konnte selbst mit niedrigen Temperaturnen keine zusammenhängende Schicht erzeugt werden. Über ähnliche Schwierigkeiten bei der Herstellung von dünnen CoSi_2 -Schichten in (100) Si wird in Ref. [87,88] berichtet.

In Abb. 5.15. ist der spezifische Widerstand von bei $1100^\circ\text{C}/5\text{s}$ getemperten CoSi_2 -Schichten in Abhängigkeit der Strahlstromdichte für drei verschiedene Implantations-temperaturen aufgetragen.

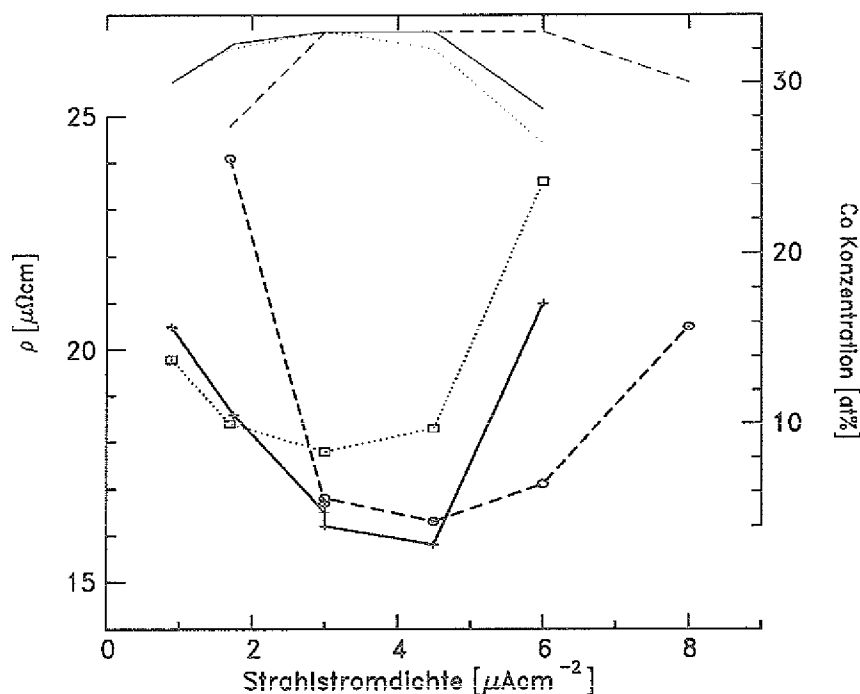


Abb. 5.15.: Abhängigkeit des spezifischen Widerstandes (dünne Linien, linke y - Achse) und der Co-Peak-Konzentration (dicke Linien, rechte y-Achse) getempelter Proben ($1100^\circ\text{C}/5\text{s}$) von der Strahlstromdichte bei $T_i = 400^\circ\text{C}$ (gepunktet), $T_i = 425^\circ\text{C}$ (durchgezogen) und $T_i = 450^\circ\text{C}$ (gestrichelt),

Der spezifische Widerstand ist dabei als Hinweis für die Schichtqualität aufzufassen. Dieser hat als Funktion der Strahlstromdichte (dicke Linien in Abb. 5.15.) bei jeder Implantationstemperatur ein Minimum. Es existiert also bei jeder der untersuchten Temperaturen eine optimale Strahlstromdichte. Dabei verschiebt sich mit steigender

Temperatur das Minimum zu höheren Strahlströmen. Zu hohe oder zu niedrige Strahlströme bei einer festen Temperatur führen zu hohen spezifischen Widerständen, was ein Hinweis auf nicht zusammenhängende Schichten ist. Messungen der Co-Konzentration dieser Schichten mit RBS bestätigen dies. Die Schichten mit den hohen Widerständen haben Co-Konzentrationen unterhalb des stöchiometrischen Wertes von 33 % (dünne Linien in Abb. 5.15.). Zusätzlich zeigt sich, daß der Widerstand bei der optimalen Strahlstromdichte mit wachsender Temperatur fällt, was auf ein effektiveres Ausheilen des Implantationsschadens mit wachsender Temperatur zurückzuführen ist. Unterhalb von $T_i = 400^\circ\text{C}$ konnten überhaupt keine zusammenhängenden Schichten erzeugt werden, da diese Proben schon nach der Implantation zu stark geschädigt waren. Abb. 5.16. zeigt das RBS und Channeling Spektren einer Probe die unter optimalen Bedingungen ($T_i = 425^\circ\text{C}$, $j_i = 4.5 \mu\text{A}/\text{cm}^2$) implantiert und bei $1100^\circ\text{C}/5\text{s}$ getempert worden ist.

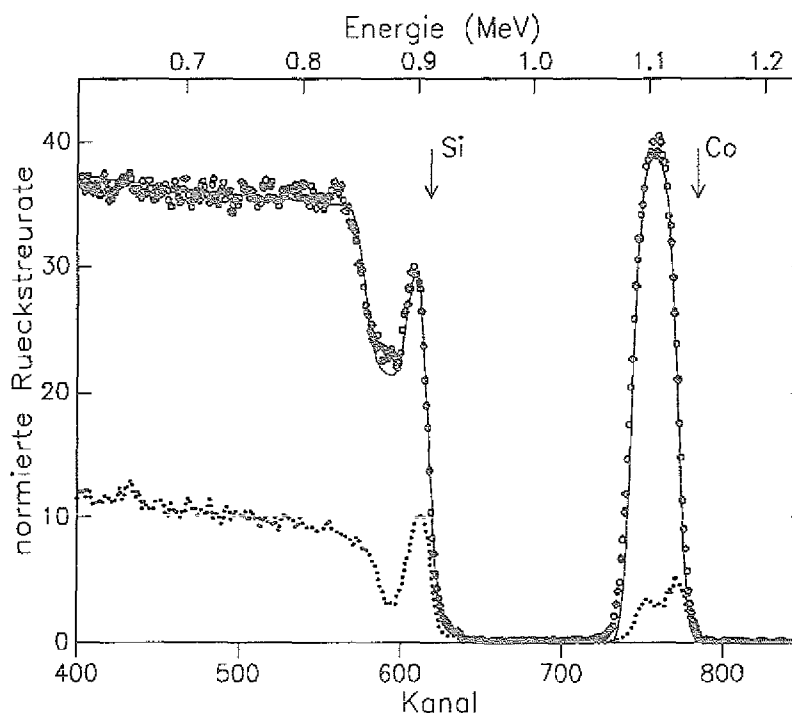


Abb. 5.16.: RBS und Channeling Spektren einer mit 40 keV implantierten Probe bei $T_i = 425^\circ\text{C}$ und $j_i = 4.5 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ nach Temperung im RTA bei $1100^\circ\text{C}/10\text{s}$. Die durchgezogene Linie ist eine RUMP Simulation einer 25 nm dicken zusammenhängenden CoSi_2 -Schicht abgedeckt mit 18 nm Si.

Die stöchiometrische CoSi_2 -Schicht ist 25 nm dick und unter einer 16 nm dicken Si-Deckschicht vergraben. Die Schichtqualität ist vergleichbar mit der durch 200 keV

Implantation erzeugten Schichten ($\chi_{\min} = 7\%$). Wie in der TEM-Querschnitt-Aufnahme in Abb. 5.17. zu sehen ist, hat die CoSi_2 -Schicht glatte Grenzflächen. Einzelne Stufen mit $\{111\}$ Facetten sind zu sehen, die aber für (100) orientierte Heterostrukturen typisch sind. Die mittlere Höhe der Stufen beträgt ca. 10 % der Schichtdicke.

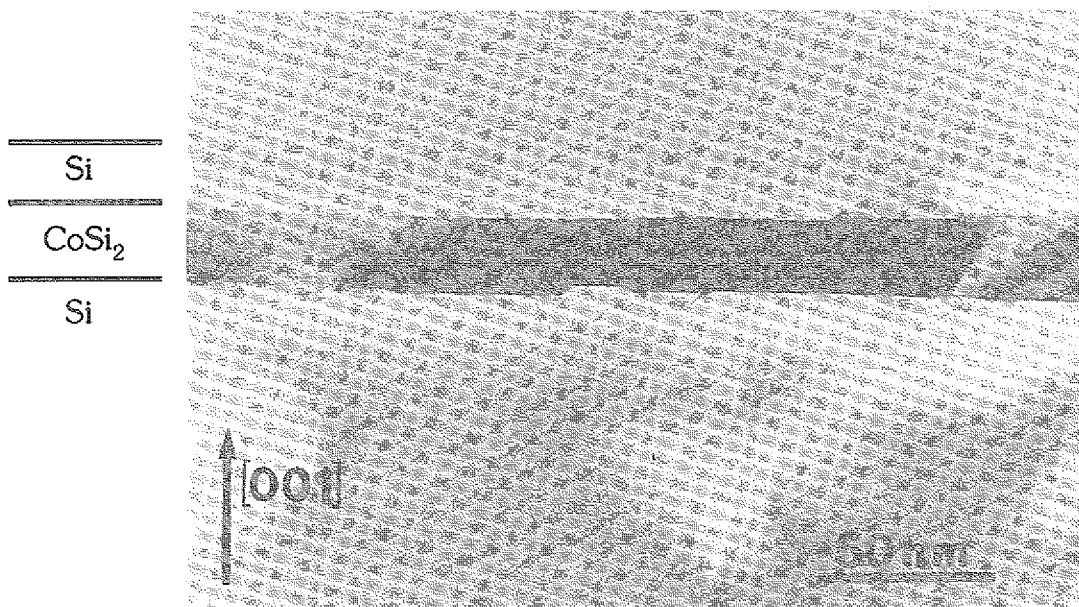


Abb. 5.17.: TEM-Querschnitt-Aufnahme der Probe aus Abb. 5.16..

5.2.2. Dünne CoSi_2 -Schichten in (111) Si

Alle Implantationen in (111) Si wurden bei 425°C und Strahlstromdichten von 1.3 - 4 $\mu\text{A}/\text{cm}^2$ durchgeführt. Um den oberflächennahen Schaden durch Implantationen bei geringen Energien zu verringern und damit eine bessere Si-Deckschicht für eine mögliche Si Epitaxie zu erhalten, wurde auch "gechannelt" (d.h. entlang der Oberflächen-normale, 0°) implantiert. In Abb. 5.18. sind die mit RBS gemessenen Konzentrationsprofile sowohl einer "gechannelten" als auch einer "random" (um 7° gekippt) 40 keV Implantation dargestellt.

Die gechannelte Implantation führt zu einer breiteren und tiefer liegenden Co-Verteilung als die random Implantation. Dies liegt zum einen an der reduzierten Sputterraten bei Channeling als auch an der erhöhten Eindringtiefe von gechannelten Ionen. Wegen der

größeren Breite dieser Profile ist die Co-Peak-Konzentration im Vergleich zur random Implantation geringer. Die mittleren Reichweiten, Halbwertsbreiten und Co-Peak-Konzentrationen aller durchgeführten Implantationen sind in Tabelle 5.2. aufgeführt.

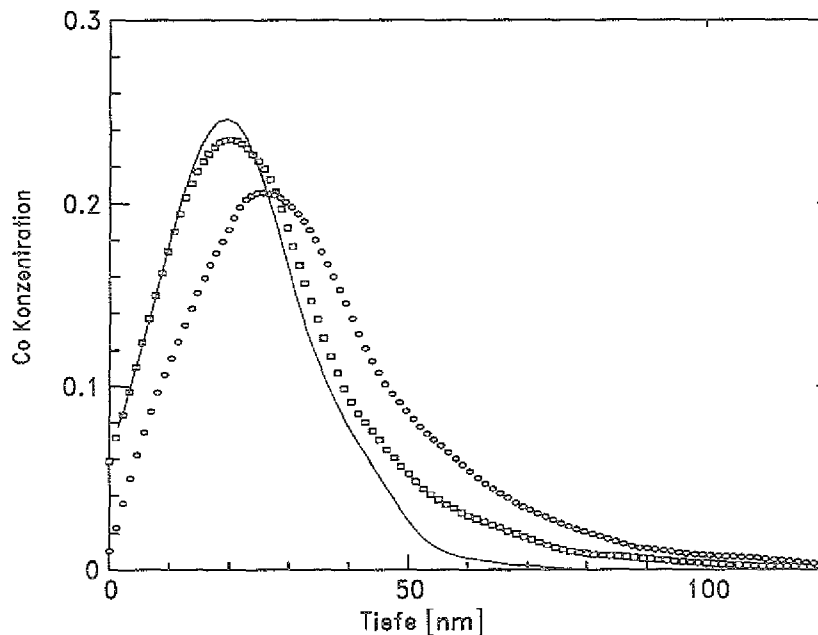


Abb. 5.18.: Co-Verteilung von 40 keV (6.5×10^{16} Co/cm²) "random" (Quadrate) und "gechannelten" Implantationen (Kreise) in (111) Si. Die durchgezogene Kurve zeigt eine HDTRIM Simulation der "random" Implantation.

Eine Simulation der 40 keV random Implantation mit dem Program HDTRIM zeigt eine gute Übereinstimmung mit dem gemessenen Profil (siehe Abb. 5.18.). Dabei wurde eine Sputterrate von 1.8 in der Simulation angenommen. Ebenso ergaben sich für die 20 und 30 keV Implantationen eine Sputterrate von 1.9. Diese Sputterraten sind nur wenig höher als die von Radermacher [69] für 100 und 200 keV Implantationen bestimmte Sputterrate von 1.7.

Die Implantationen in die [111]-Richtung können nicht mit HDTRIM Simulationen verglichen werden, da TRIM von einem strukturlosen Target ausgeht und daher nicht die reduzierten Bremsquerschnitte beinhaltet, die ein gechannelltes Projektil erfährt.

Tabelle 5.2.: Co-Implantation mit niedrigen Energien in (111) Si

Energie [keV]	Dosis [cm ²]	Impl. Richtung	R _p [nm]	FWHM [nm]	Co-Peak-Konz.	χ _{ave} [%]
20	3.3x10 ¹⁶	0°	14	28	15	73
20	3.3x10 ¹⁶	7°	11	23	18	70
30	4.5x10 ¹⁶	0°	21	31	19	71
30	34.5x10 ¹⁶	7°	16	28	21	62
40	6.5x10 ¹⁶	0°	27	36	20.5	66
40	6.5x10 ¹⁶	7°	20	32	23.5	55

Implantationen entlang niedrig indizierter Kristallachsen führen, wie von Dotierstoff-Implantationen in Si bekannt ist [90] zu einem reduziertem Schadensprofil im Si im Vergleich zu random Implantationen. Im Gegensatz dazu ist hier, wie aus Abb. 5.19. ersichtlich, kein Unterschied in der Kristallinität des Oberflächen-Si nach den verschiedenen Implantationen festzustellen.

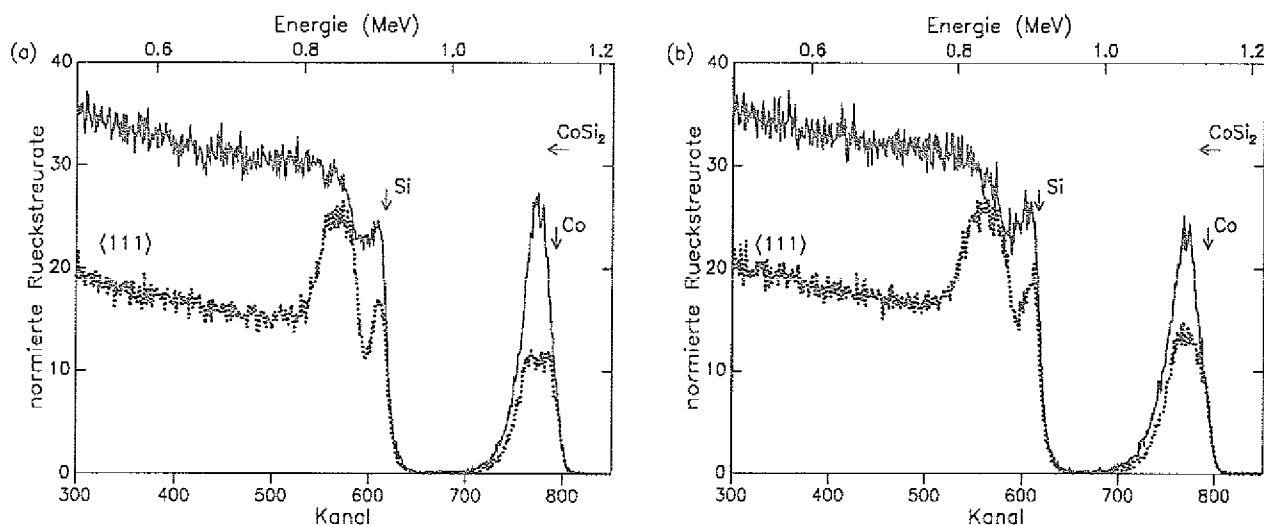


Abb. 5.19.: RBS und Channeling Spektren nach einer 40 keV "random" (a) und "gechannelten" (b) Implantation mit 6.5×10^{17} Co/cm² bei $T_i = 425^\circ\text{C}$ und $j_i = 3 \mu\text{A/cm}^2$.

Die Kristallinität des CoSi_2 ist sogar nach der random Implantation besser als nach der gechannelten Implantation. Es ergibt sich für die random Implantation $\chi_{\text{ave}} = 55\%$ und für die gechannelte Implantation $\chi_{\text{ave}} = 66\%$ im Co-Signal. Ähnliche Unterschiede ergaben sich bei den anderen Energien (siehe Tabelle 5.2.). Es handelt sich hier, um den schon in Kap. 5.1.1. beschriebenen Effekt, daß sich die Kristallinität mit steigender Dosis bzw. Volumenanteil der CoSi_2 -Ausscheidungen, stark verbessert. Die Co-Peak-Konzentration der "random" Implantation ist, wie oben erläutert, immer höher als im Fall des Channelings, weswegen dort ein höherer Anteil an CoSi_2 -Ausscheidungen vorliegt.

Temperung mit Temperaturen oberhalb von 1000°C führte, im Gegensatz zur Implantation in (100) Si, bei allen Implantationsenergien (20 - 40 keV) zu zusammenhängenden Schichten mit einer sehr guten Kristallqualität ($\chi_{\text{min}} = 4\%$). Nur im Fall der gechannelten 20 keV Implantation konnte keine Schicht hergestellt werden bedingt durch die in diesem Fall zu niedrigen Co-Peak-Konzentration ($< 18\%$) (siehe auch Tabelle 5.2.). Abb. 5.20. zeigt RBS und Channling Spektren einer 30 keV random Implantation nach Temperung im RTA bei $750^\circ\text{C}/30\text{ s}$ und $1150^\circ\text{C}/10\text{ s}$.

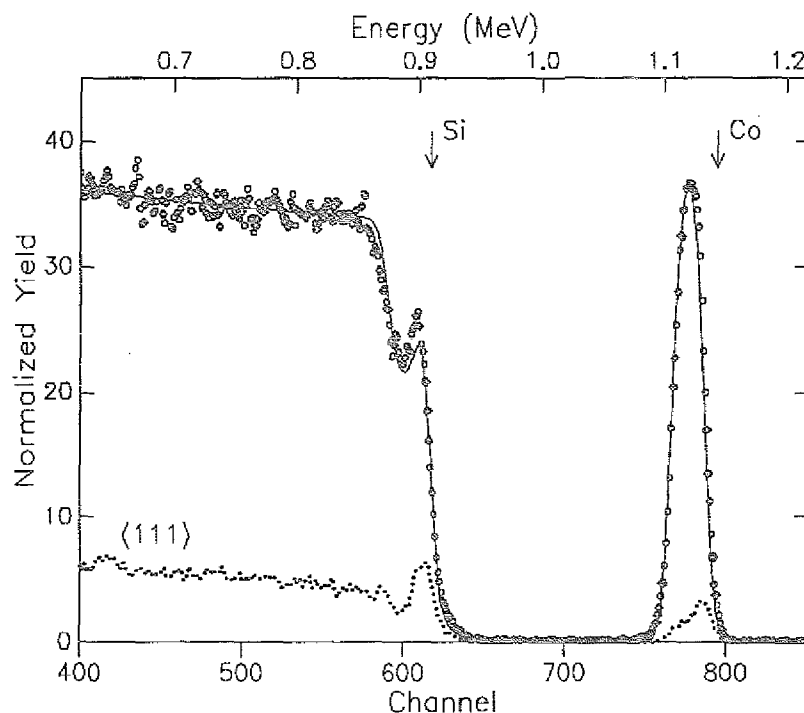


Abb. 5.20.: RBS und Channeling Spektren einer mit 30 keV ($\phi = 4.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$, $T_i = 425^\circ\text{C}$, $j_i = 3 \mu\text{A/cm}^2$, "random") implantierten Probe nach Temperung im RTA. Die durchgezogene Kurve zeigt eine RUMP Simulation einer 18 nm dicke CoSi_2 -Schicht unter einer 10 nm dicken Si-Deckschicht.

Der Minimum Yield Wert im Co-Signal von $\chi_{\min} = 4\%$ ist vergleichbar mit den besten Literaturwerten. Wegen der geringen Dicke der Si-Deckschicht konnten, bei den für RBS verwendeten Energien und Rückstreuwinkeln, der Si Oberflächen-Peak und der CoSi_2 Grenzflächen-Peak im Si Spektrum nicht einzeln aufgelöst werden. Es ist deshalb nicht möglich aus dem Channeling Spektrum eine quantitative Aussage über die Qualität der Si-Deckschicht zu erhalten. Eine Analyse des RBS Spektrums mit dem Program RUMP (durchgezogene Linie in Abb. 5.20.) zeigt, daß die CoSi_2 -Schicht zusammenhängend ist und eine Dicke von 18 nm hat. Die Si - Deckschicht ist 10 nm dick. Die entsprechende Probe, nur mit gechannelter Implantation, zeigt dieselbe Kristallqualität von CoSi_2 - und Si-Deckschicht. Die Si-Deckschicht ist in dieser Probe 15 nm dick. Die TEM-Querschnitt-Aufnahme der Probe aus Abb. 5.21. bestätigt, daß die CoSi_2 -Schicht zusammenhängend ist mit geradezu ideal scharfen Grenzflächen.

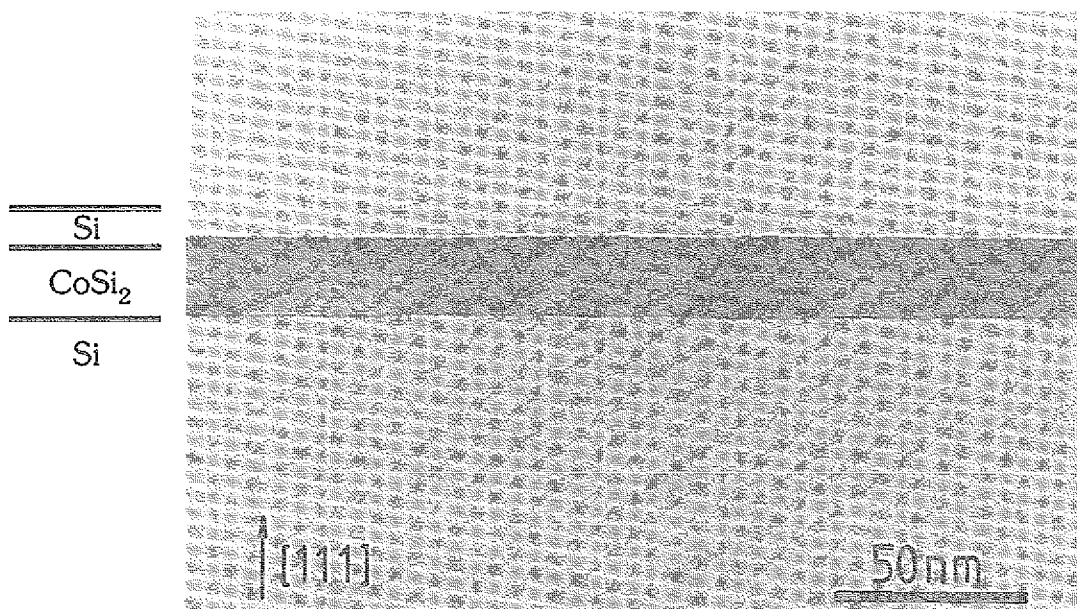


Abb. 5.21.: TEM-Querschnitt-Aufnahme der Probe aus Abb. 5.20.

Die Dicken der Schichten, Minimum Yield Werte und der spezifische Widerstand sind in Tabelle 5.3. in Abhängigkeit von den Implantationsparametern aufgeführt. Zum Vergleich sind auch die jeweiligen Werte einer 100 und 200 keV Implantation eingetragen.

Tabelle 5.3.: Schichtdicken und Kristallqualität von "random" Implantationen in (111) Si

Energie [keV]	CoSi ₂ -Dicke [nm]	Si-Dicke [nm]	$\chi_{\min}$ [%]	ρ [$\mu\Omega\text{cm}$]
20	12	7	4	15.5
30	18	10	4	16
40	25	13	4	14.5
100	44	50	5	14
200	70	88	5	14

5.3. Strukturelle Eigenschaften der CoSi₂-Schichten

Zur strukturellen Untersuchung der CoSi₂-Schichten wurden deren elastische Verzerrung in Abhängigkeit von der Schichtdicke und der Orientierung gemessen. Mittels Mittelenergie-Ionenstreuung in Verbindung mit Shadowing und Blocking wurde versucht die Grenzfläche der sehr dünnen (20 keV Impl.) (111) Si/CoSi₂/Si-Heterostrukturen zu untersuchen.

5.3.1. Verzerrung der CoSi₂-Schichten

Die elastische Verzerrung der Schichten wurde zum einen mit Röntgenbeugung (Bestimmung von $\epsilon^{\perp}$) und zum anderen mit Channeling (Bestimmung der tetragonalen Verzerrung ϵ^T) gemessen. Um "Beam Steering" [91] bei den Winkelscans in den vergrabenen CoSi₂-Schichten zu vermeiden, wurde die Si-Deckschicht abgeätzt. Aus demselben Grund wurden die Referenzmessungen im Si-Substrat in einer nicht implantierten Region neben dem CoSi₂ durchgeführt. Außer der tetragonalen Verzerrung kann im Falle der (111) orientierten Heterostrukturen auch die Orientierung der CoSi₂-Schicht (A-Typ oder B-Typ, siehe Kap. 2.3.1.) bestimmt werden. Dazu werden Winkelscans um die $\langle 110 \rangle$ und die $\langle 114 \rangle$ -Richtung durchgeführt, welche man ausgehend von der $\langle 110 \rangle$ -Richtung durch eine Rotation um 180° um die Probennormale, findet. Ist die CoSi₂-Schicht B - orientiert, d.h. um 180° gedreht, so ist in $\langle 110 \rangle$ -Richtung des Si-Substrats im CoSi₂ eine $\langle 114 \rangle$ -Richtung. Abb. 5.22. zeigt die Winkelscans um die diese Richtungen von einer 70 nm dicken (a) und einer 25 nm dicken (b) CoSi₂-Schicht in Si (111).

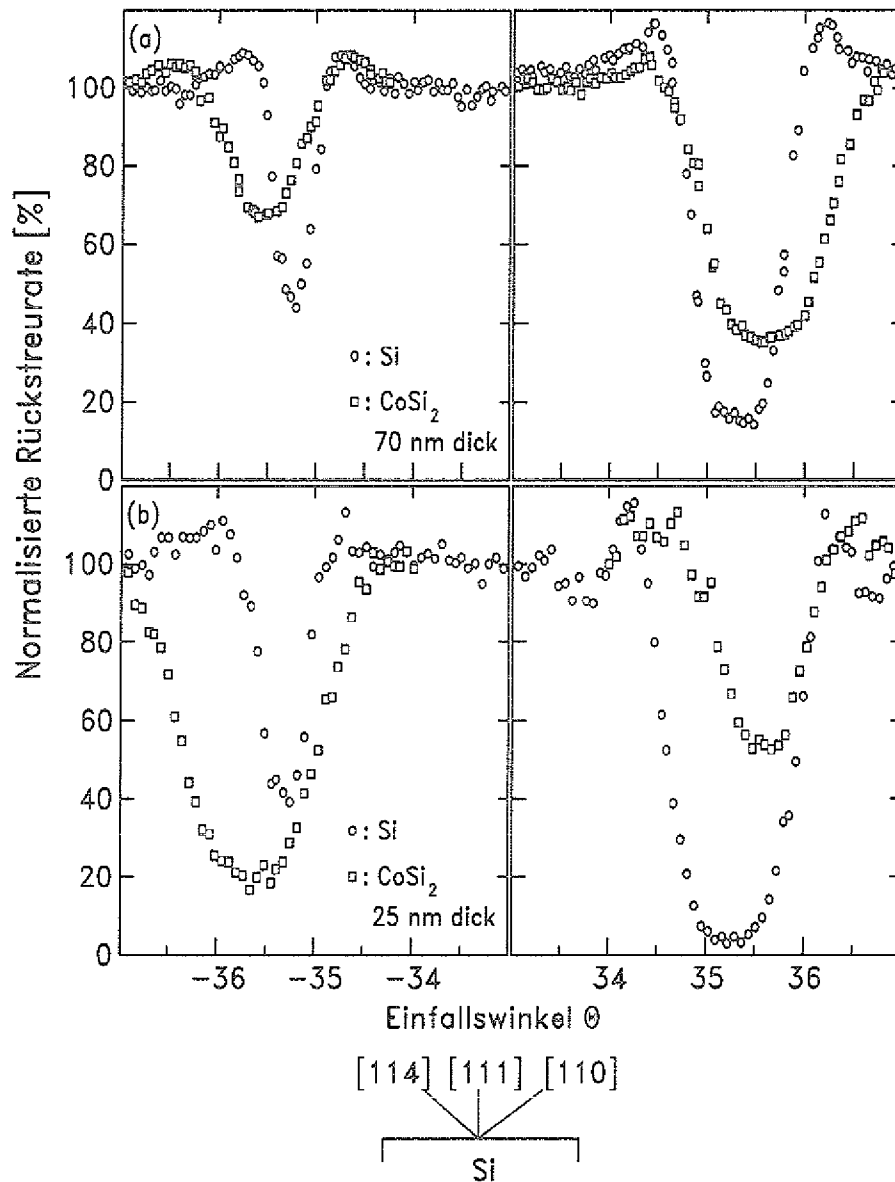


Abb. 5.22.: Winkelscans entlang einer $\{110\}$ Ebene um die $\langle 110 \rangle$ - und $\langle 114 \rangle$ -Richtung einer 70 nm dicken (a) und einer 25 nm dicken (b) CoSi_2 -Schicht in (111) Si.

Die Schichten wurden durch 200 keV bzw. 40 keV und RTA bei 750°C/30s + 1150°C/10s hergestellt. Die Winkelscans durch die $\langle 110 \rangle$ -Richtung des Si-Substrats zeigen in beiden Fällen niedrige Rückstreuraten im Minimum des Winkelscans (rechte Seite in Abb. 5.22.). Das Minimum ist dabei bei einem Winkel von 35.26° (entspricht Winkel zwischen Normale und $\langle 110 \rangle$). Die $\langle 114 \rangle$ -Richtung liegt wie erwartet bei -35.26°

(rechte Seite in Abb. 5.22.). Die Rückstreurrate dieser höher indizierten Richtung ist im Minimum des Winkelscans höher und auch die Halbwertsbreite ist geringer. Die Winkelscans der dicken CoSi_2 -Schicht zeigen denselben Verlauf wie die des Si-Substrats. Die Minima liegen allerdings bei größeren Winkeln. Die 70 nm dicke Schicht ist daher genauso orientiert wie das Si-Substrat (A-Typ), aber zu einem gewissen Grad verspannt. Aus der Winkeldifferenz $\Delta\vartheta = (0.34 \pm 0.03)^\circ$, zwischen dem Minima im Si und CoSi_2 , ergibt sich mit Gleichung (4.10) die tetragonale Verzerrung zu $\varepsilon^T = -1.26\%$. Überraschenderweise zeigt die dünne Schicht dieselbe Winkeldifferenz $\Delta\vartheta = 0.34^\circ$ und besitzt somit dieselbe tetragonale Verzerrung. Der Verlauf der Winkelscans ist aber gespiegelt (siehe Abb. 5.22. (b)), d.h. die dünne Schicht ist B-Typ. Eine mit 44 nm Schichtdicke zwischen den obigen Schichtdicken liegende CoSi_2 -Schicht (hergestellt mit 100keV , $1.1 \times 10^{17}\text{cm}^{-2}$, $T_i = 375^\circ\text{C}$, $j_i = 6\mu\text{A}/\text{cm}^2$ und RTA Temperung) ist nach dem Verlauf der Winkelscans noch vollständig A-Typ mit einer Verzerrung von $\varepsilon^T = -1.25\%$. Ein ähnliches Verhalten hat Vantomme [92] beobachtet, wobei die Orientierung nach diesen Messungen bei einer Schichtdicke von 36 nm von A- zum B-Typ wechselt. Die Verspannung ist nach den Messungen dieser Autoren ebenfalls nicht von der Schichtdicke abhängig und beträgt in Übereinstimmung mit den obigen Messungen $\varepsilon^T = -1.21\%$.

In Abb. 5.23. sind nun die Winkelscans um die $\langle 110 \rangle$ Richtung einer 70 nm dicken und einer 25 nm dicken CoSi_2 -Schicht in (100) Si dargestellt.

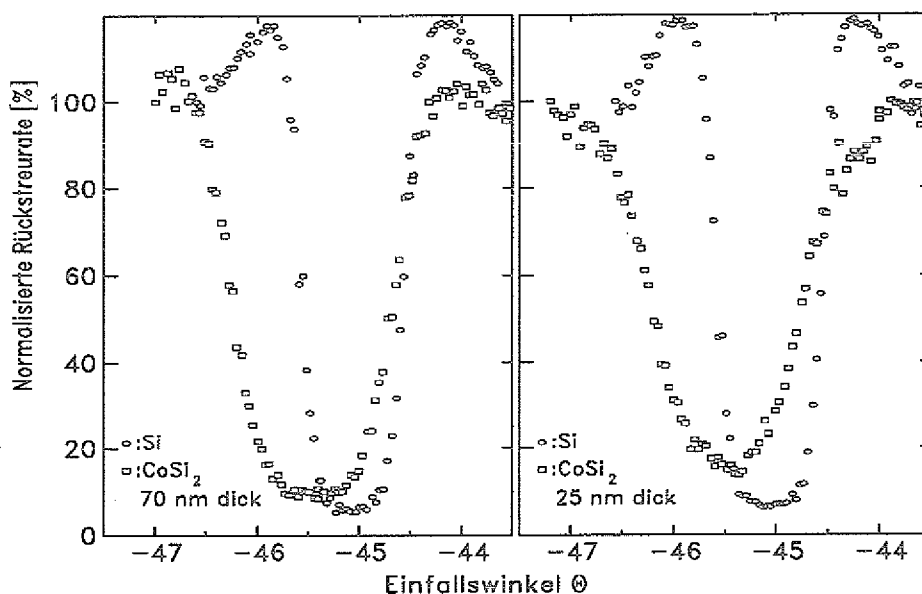


Abb. 5.23.: Winkelscans entlang einer $\{110\}$ Ebene um eine $\langle 110 \rangle$ -Richtung einer 70 nm dicken (a) und einer 25 nm dicken (b) CoSi_2 -Schicht in (100) Si.

Die Winkeldifferenz zwischen Si-Substrat und CoSi_2 -Schicht ist wieder unabhängig von der Schichtdicke $\Delta\vartheta = (0.45 \pm 0.04)^\circ$. Das entspricht einer tetragonalen Verzerrung von $\varepsilon^T = -1.58\%$. Abb. 5.24 zeigt als Beispiel einer Röntgenmessung die Rockingkurve der 70 nm dicken (100) orientierten Schicht.

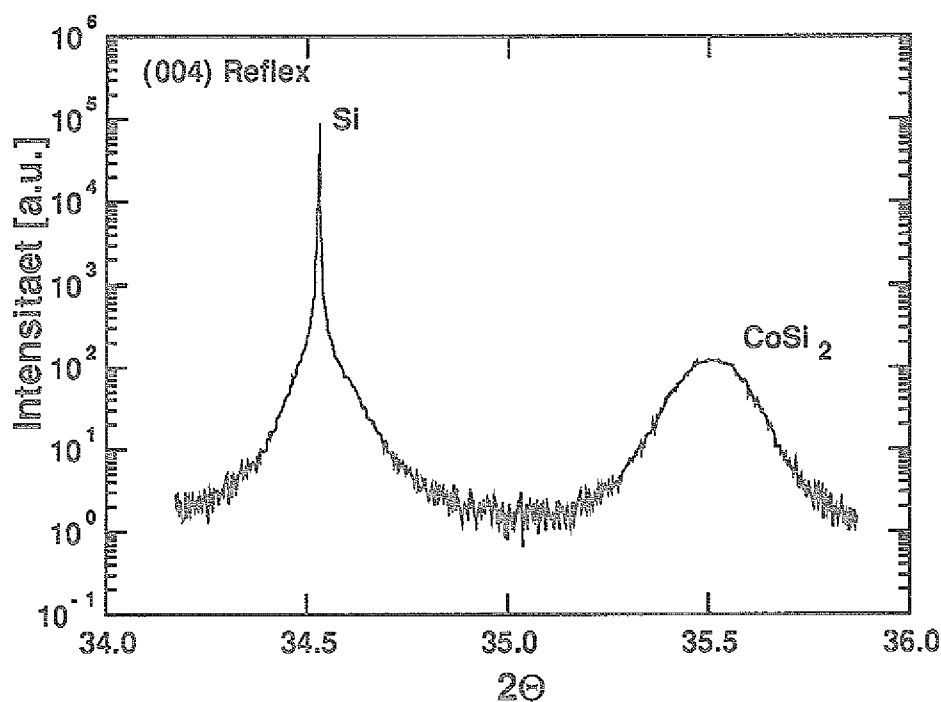


Abb. 5.24.: Rockingkurve einer 70 nm dicken CoSi_2 in (100) Si.

Dabei ist der linke sehr scharfe Peak der (004) Si Peak und der etwas breitere Peak rechts der (004) CoSi_2 -Peak. Aus der Winkeldifferenz dieser Peaks kann die Verspannung in Normalenrichtung der Probe $\varepsilon^\perp$ bestimmt werden. Sie beträgt $\varepsilon^\perp = -0.91\%$. Für die 70 nm dicke CoSi_2 -Schicht in Si (111) ergab sich $\varepsilon^\perp = -0.53\%$. Die 25 nm dicken Schichten waren zu dünn für eine Analyse mit der zu Verfügung stehenden Röntgenanlage.

5.3.2. MEIS an dünnen CoSi_2 -Schichten

Zur Grenzflächenstruktur der mit IBS hergestellten sehr dünnen (111) orientierten CoSi_2 -Schichten liegt bisher keine Untersuchung vor. Diese Schichten sind B - Typ (siehe Kap. 5.3.1.), so daß eine andere Grenzflächenstruktur als die in den dicken A - orientierten Schichten (Co 7-fach koordiniert an der Grenzfläche [39]) zu erwarten ist. In diesem Kapitel wird daher die Untersuchung dieser Grenzflächenstruktur mit Mittlerenergie-Ionenstreuung (MEIS) beschrieben. Wie schon in Kap. 4.1.2. gezeigt, kann man durch ge-

eignete Wahl der Einfallsrichtung und des Rückstreuwinkels eine Bestimmung von Oberflächenrekonstruktionen und in speziellen Fällen auch von vergrabenen Grenzflächenstrukturen durchführen. Da für solche Messungen eine hohe Tiefenauflösung erforderlich ist, werden i.a. H^+ oder He^+ Ionen mit Energien zwischen 50 und 300 keV in Verbindung mit einem elektrostatischen Analysator (ESA) benutzt. So ergibt sich z.B. im System 2.7 nm CoSi_2 auf Si mit 175 keV He^+ (oder 100 keV H^+) Ionen, einem Einfallswinkel von 54° und einem elektrostatischen Detektor (relative Energieauflösung $\Delta E/E = 3.8 \times 10^{-3}$) eine Tiefenauflösung von ca. 0.5 nm an der Grenzfläche. An solch einem Schichtsystem wurden von A. Fischer [67] unter den obigen Bedingungen erfolgreiche Untersuchungen zur Grenzflächenstruktur vorgenommen.

Die dünnste mit IBS hergestellte Schicht ist aber noch 13 nm dick und unter 7 nm Si vergraben (siehe Kap. 5.2.2.). Um die von Fischer benutzte Methode auf die Struktur $\text{Si}/\text{CoSi}_2/\text{Si}$ zu übertragen, muß die Energie der He^+ Ionen auf 280 keV erhöht werden, um das Co-Signal vom Si-Signal trennen zu können. Die Dicke der Si-Deckschicht führt zusammen mit dem geringeren Bremsquerschnitt (im Vergleich zu CoSi_2) und der höheren Energie zu einer deutlich schlechteren Tiefenauflösung an der Grenzfläche von ca. 2 nm. Die Simulation der Winkelabhängigkeit der Rückstreuintensität in Shadowing und Blocking Geometrie wurden mit dem Program VEGAS [79] durchgeführt. Dabei wurden dieselben Modelle der Grenzflächenstruktur wie von Fischer benutzt, mit dem Unterschied das 7 nm Si auf CoSi_2 sind und 282 keV He^+ Ionen verwendet wurden (Fischer: 2.7 nm CoSi_2 auf Si, 100 keV H^+ Ionen).

Eine günstige Geometrie zur Untersuchung der Grenzfläche besteht in einer Einstrahlrichtung in der Nähe der $\langle 001 \rangle$ -Achse der Oberflächenschicht und einer Detektion um die $\langle 110 \rangle$ -Richtung der Oberflächenschicht (d.h. ca. 90° Rückstreuwinkel) [67]. Ein Vergleich der aus der Simulation erhaltenen Winkelabhängigkeit der Rückstreurate der Si-Atome an der Grenzfläche mit der gemessenen Winkelabhängigkeit des Si-Grenzflächen-Peaks dient zur Bestimmung der Grenzflächenstruktur. Die verschiedenen Grenzflächenmodelle (Co 5-fach bzw. 7-fach koordiniert, siehe auch Kap. 2.3.1.) ergeben wie in Abb. 5.25. am Beispiel einer Si/B-Typ CoSi_2 -Struktur zu sehen ist, auch in der Simulation gut zu unterscheidende Spektren.

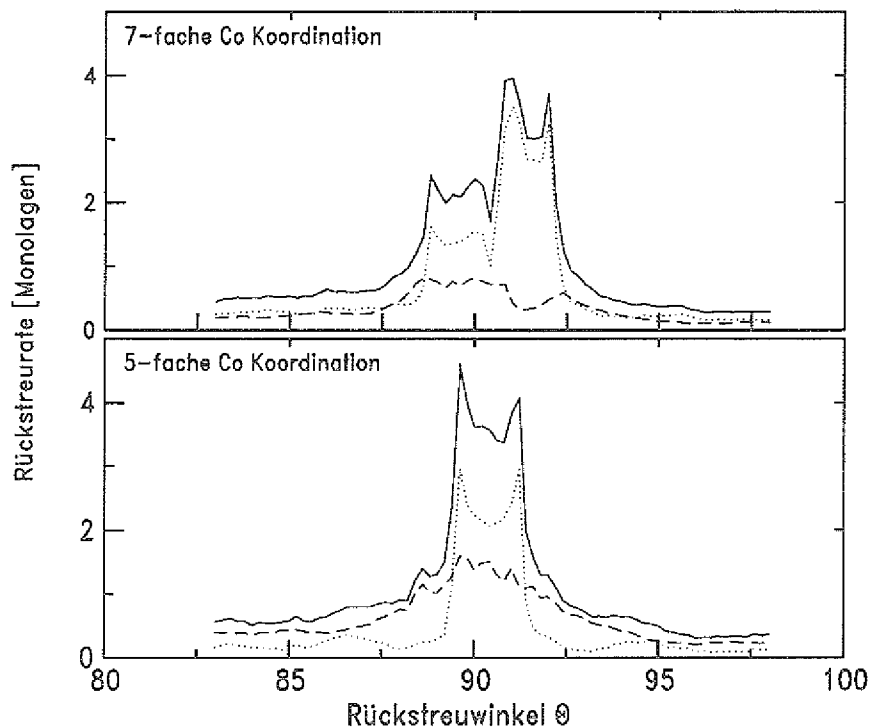


Abb. 5.25.: Simulation der Winkelabhängigkeit der Rückstreurrate von den Si-Atomen an der Grenzfläche (gepunktet) einer Si/B-Typ CoSi_2 - Struktur bei einem Einfallswinkel von $\vartheta = 54.5^\circ$ und Detektion unter $\Theta = 80 - 100^\circ$. Die Beiträge der in einem 2 nm breiten Bereich um die Grenzfläche liegenden Si-Atome sind gestrichelt eingezeichnet. Die Summe der Rückstreurrate von den Si-Atomen an der Grenzfläche und dem 2 nm Bereich um die Grenzfläche ist die durchgezogene Kurve. Die Rückstreurrate wird dabei direkt als Anzahl der sichtbaren Monolagen angegeben.

Dabei scheint auch die schlechte Tiefenauflösung keinen großen Einfluß zu haben. In Abb. 5.25. sind, neben den Beiträgen der Si-Atome an der Grenzfläche, auch die der Si-Atome in einem 2 nm breiten Bereich um die Grenzfläche, aufgetragen. Der Verlauf der Winkelabhängigkeit wird dabei im wesentlichen durch die Beiträge der Atome an der Grenzfläche verursacht. Abb. 5.26. zeigt die winkelabhängige Rückstreurrate um die $\langle 110 \rangle$ -Ausfallsrichtung ($\Theta = 80 - 100^\circ$) bei einem Einfallswinkel von $\vartheta = 54.5^\circ$ in bezug auf die Probennormale und einer Energie von 282 keV.

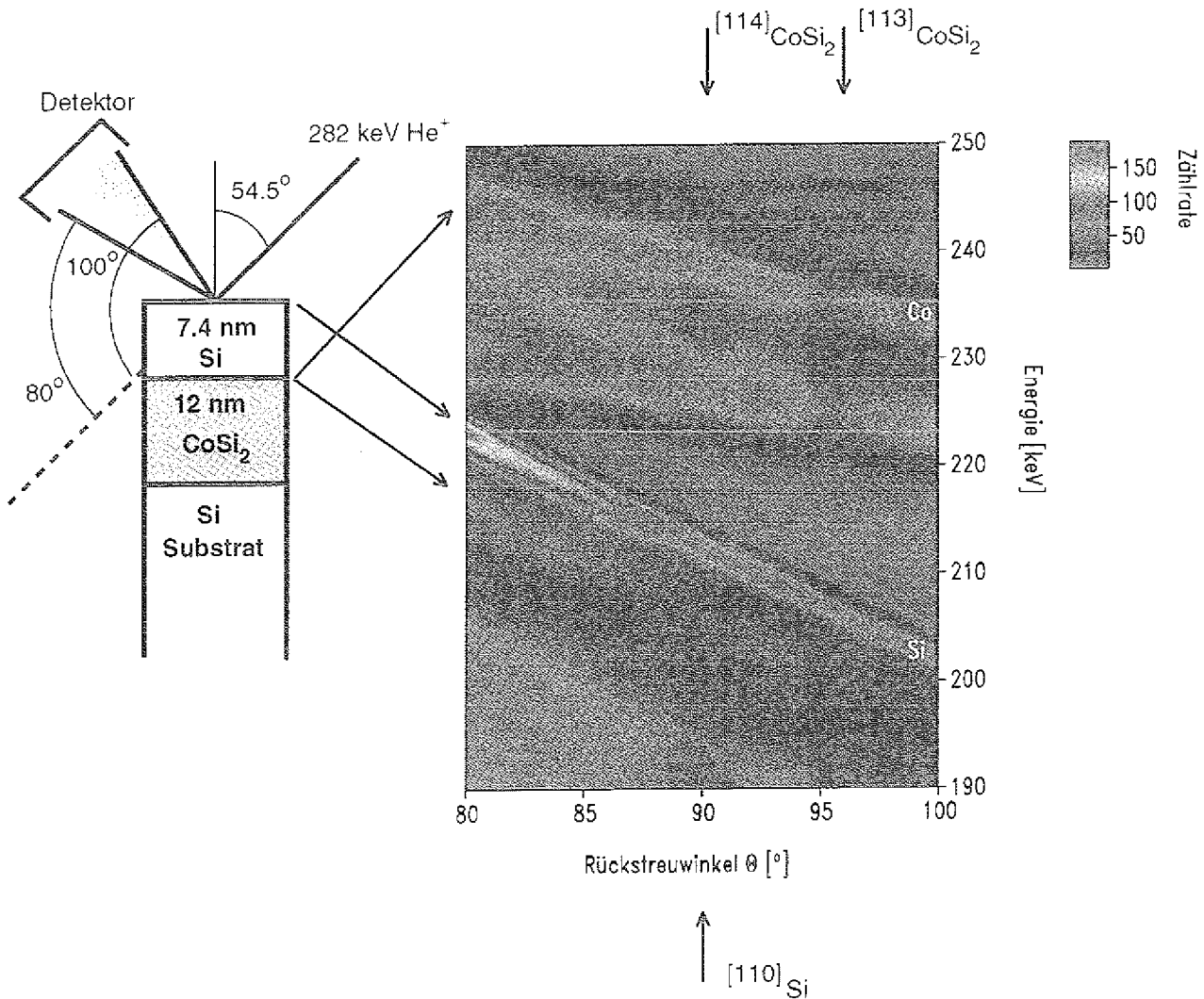


Abb. 5.26.: Winkelabhängige Rückstreurrate einer Si/CoSi₂/Si-Heterostruktur bei einem Einfallswinkel von $\vartheta = 54.5^\circ$ und Rückstreuung um die $\langle 110 \rangle$ -Richtung des Si ($\Theta = 80 - 100^\circ$).

Die Rückstreuintensität wird durch die Farbskala angedeutet. Deutlich kann man den Si-Oberflächenpeak und die Grenzflächenpeaks im Si- und Co-Signal sehen. Die monotone Abnahme der Rückstreurrate mit ansteigendem Rückstreuwinkel reflektiert die Winkelabhängigkeit des Rutherfordstreuquerschnitts. Dadurch ist eine Verminderung der Rückstreurrate in $\langle 110 \rangle$ -Richtung aufgrund von Blocking nur im Si-Substrat zu sehen und nicht in der Si-Deckschicht. Im CoSi₂ erkennt man Abnahmen der Rückstreuintensität durch Blocking in der $\langle 114 \rangle$ - und $\langle 113 \rangle$ -Richtung. Dies ist eine weitere Bestätigung, daß diese dünne CoSi₂-Schicht B-Typ ist. Die totale Rückstreurrate der Si-Atome an der Grenzfläche

100

[illegible]

unter einem bestimmten Rückstreuwinkel, wurden durch Integration über ein Energiefenster im Bereich der Grenzflächenpeaks erhalten. Die Anzahl der in diesem Bereich liegenden Si-Atome kann dann mit Gleichung (4.6) unter Berücksichtigung des Neutralteilchenanteils (bei Energien unterhalb 300 keV nimmt der Anteil der vom ESA nicht detektierbaren neutralen Teilchen stark zu) berechnet werden. Diese Anzahl wurde dann noch in sogenannte sichtbare Monolagen umgerechnet. Eine Monolage Si ist 7.8×10^{14} at/cm². Es ergibt sich für einen Einfallswinkel von $\vartheta = 54.5^\circ$, die in Abb. 5.27. dargestellte Winkelabhängigkeit um den $\langle 110 \rangle$ -Austrittskanal.

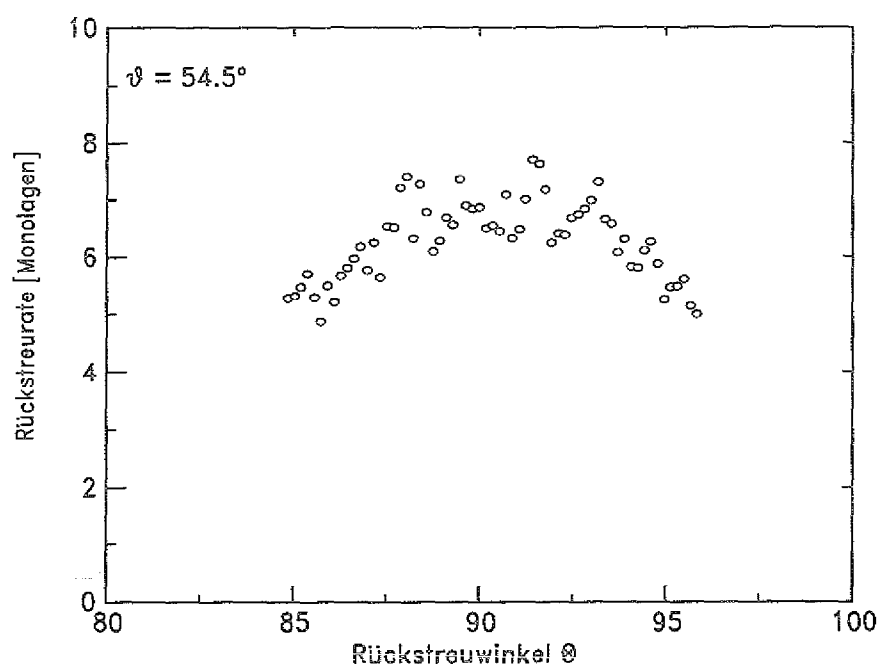


Abb. 5.27.: Winkelabhängigkeit des integrierten Si-Grenzflächenpeaks

Mit keiner der simulierten Winkelabhängigkeiten konnte unter den vorgegeben Meßbedingungen (Einfallswinkel und Energie) eine Übereinstimmung gefunden werden. Die Simulationen wurden an einem perfekten Bikristall durchgeführt, nur die Verspannung des CoSi_2 relativ zum Si wurde berücksichtigt. Nach TEM Untersuchungen [39] gibt es aber in der Si - Deckschicht der (111) orientierten Proben häufig Bereiche die verzwillingt sind und somit das Channeling beeinflussen. Das Shadowing ist daher nicht mehr so perfekt und es werden mehr Atome vor und hinter der Grenzfläche getroffen als in der Simulation vorgesehen. Dies führt zu einer Erhöhung des Grenzflächenpeaks und einem Verlust an

Information. Die augenblickliche Qualität der mit IBS hergestellten Si-Deckschichten ist daher für eine Methode wie die MEIS, die über die Probenfläche mittelt (Durchmesser Strahlfleck 0.5 mm), noch nicht gut genug.

5.4. Elektrische Eigenschaften der CoSi_2 -Schichten

Da mit IBS A- und B-Typ CoSi_2 -Schichten in (111) Si und CoSi_2 -Schichten in (100) Si hergestellt werden können, bietet sich nun erstmals die Möglichkeit die Schottkybarrierenhöhe in Abhängigkeit von der CoSi_2 -Orientierung zu untersuchen.

Neben den Schottkybarrierenhöhen ist aber auch die Kenntnis der elektrischen Transporteigenschaften in Hinblick auf Anwendungen in Bauelementen sehr wichtig. Daher werden zunächst Widerstands- und Hallmessungen vorgestellt. Danach werden dann Messungen der Schottkybarrierenhöhe dargestellt.

5.4.1. Elektrische Transporteigenschaften

In Abb. 5.28 ist der spezifischen Widerstand zweier 110 nm dicker CoSi_2 -Schichten in Si (100) und Si (111) in Abhängigkeit von der Temperatur dargestellt.

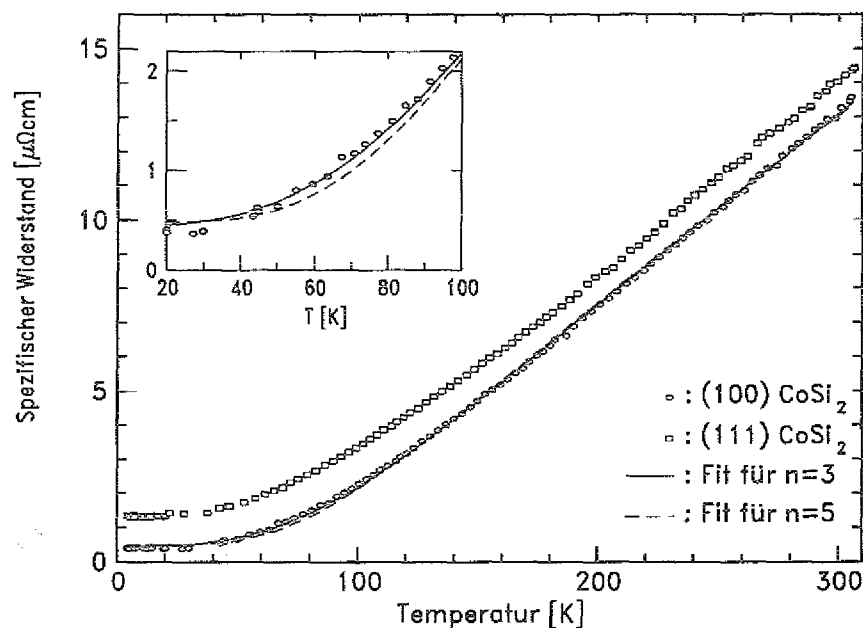


Abb. 5.28.: Temperaturabhängigkeit des spezifischen Widerstands von 110 nm dicken CoSi_2 -Schichten in (111) und (100) Si. Die Kurven sind Fits der Bloch - Grüneisen Formel an die Meßdaten für $n = 3$ und $n = 5$.

Beide Kurven zeigen eindeutig metallisches Verhalten. Der Restwiderstand ρ_0 der (100) orientierten Probe entspricht mit $\rho_0 = 0.45 \mu\Omega\text{cm}$ dem von hochreinem CoSi_2 -Einkristallen [93]. Bei Raumtemperatur ergibt sich $\rho_{\text{RT}} = 13.0 \mu\Omega\text{cm}$. Das Restwiderstandsverhältnis ist $\rho_{\text{RT}}/\rho_0 = 29$. Der Verlauf des spezifischen Widerstands der (111) Schicht ist im Vergleich zur (100) orientierten Probe zu höheren Widerständen parallel verschoben. Der Restwiderstand dieser Schicht ist $\rho_0 = 1.3 \mu\Omega\text{cm}$ und der Widerstand bei Raumtemperatur $\rho_{\text{RT}} = 13.8 \mu\Omega\text{cm}$ ($\rho_{\text{RT}}/\rho_0 = 10$). Auch andere Gruppen [94,95] beobachten diesen Unterschied von ca. $0.8 \mu\Omega\text{cm}$ zwischen (100) und (111) orientiertem CoSi_2 .

Der Widerstandsverlauf der beiden Schichten wurde mit Hilfe der Matthiessen Regel $\rho(T) = \rho_0 + \rho_{\text{th}}(T)$ analysiert. Der thermische Widerstandsbeitrag $\rho_{\text{th}}(T)$ ist durch die Bloch-Grüneisen Formel gegeben:

$$\rho(T)_{\text{th}} = A \cdot \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^n \cdot \int_0^{T/\Theta_D} dz \frac{z^n e^z}{(e^z - 1)^2} \quad (5.4)$$

wobei Θ_D die Debye-Temperatur und A eine Konstante ist. Für $T \ll \Theta_D$ ist $\rho \sim (T/\Theta_D)^n$, während für $T > 0.2\Theta_D$ $\rho \sim T$ ist. Die theoretische Behandlung der für die meisten Metalle charakteristischen Elektron - Phonon Streuung ergibt $n = 5$. Falls es sich um d-Metalle oder deren Silizide handelt, kann es auch zu der sogenannten s - d Elektron Streuung kommen, die in Systemen mit überlappenden s- und d-Bändern auftritt [96,97]. Dabei wird ein Elektron aus einem s-Band (mit einer hohen Fermigeschwindigkeit) über ein Phonon in ein d-Band (mit einer niedrigen Fermigeschwindigkeit) gestreut und trägt daher nicht mehr zum Ladungstransport bei. Dies ergibt $n = 3$.

Der beste Fit ergab sich für beide Orientierungen mit $n = 3$. In Abb. 5.28. sind zur Verdeutlichung beide Fits in den Widerstandsverlauf der (100) orientierten Schicht eingezeichnet. Die durch den Fit mit $n=3$ gefunden Debye Temperatur beträgt $\Theta_D = 590^\circ\text{C}$. $n = 3$ und eine ähnliche Debye-Temperatur wird auch durch Fits an das Widerstandsverhalten von CoSi_2 Einkristallen [98] sowie durch Messungen der spezifischen Wärme gefunden [99].

Die Abhängigkeit des Widerstands bei 4 K vom Magnetfeld (Magnetowiderstand) ist von Radermacher et al. [100] gemessen worden (siehe Abb.5.29.). Auch hier ergibt sich ein deutlicher Unterschied zwischen der (100) und (111) orientierter Schicht. Der Widerstand der (100) orientierten Schicht steigt wesentlich schneller mit dem Magnetfeld an. In beiden Fällen ist die Abhängigkeit bei höheren Magnetfeldern ($> 0.3 \text{ T}$) quadratisch vom Magnetfeld in Übereinstimmung mit Messungen an mit SPE hergestellte Proben [1].

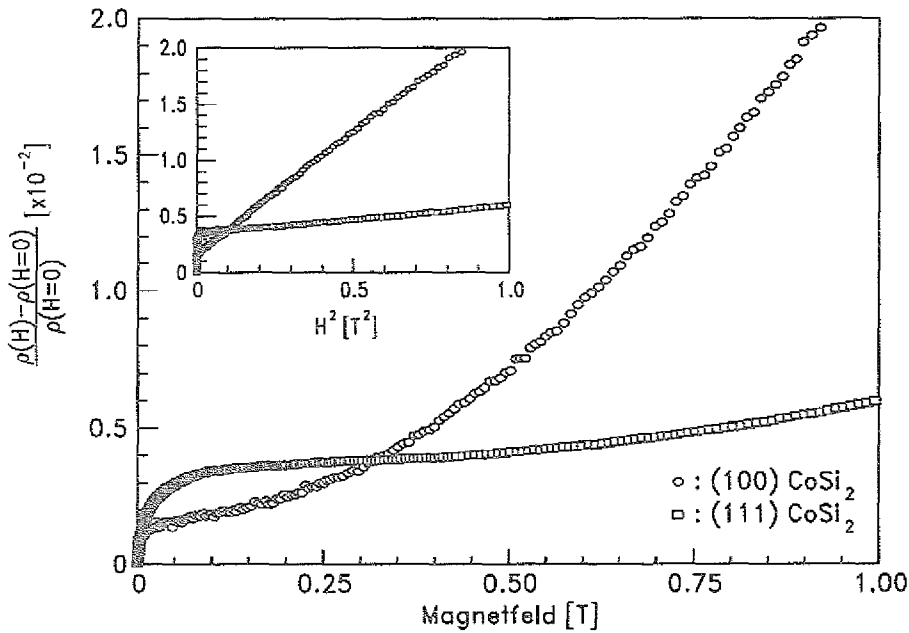


Abb. 5.29.: Magnetowiderstand von (111) und (100) orientierten CoSi_2 -Schichten nach Ref. [100].

Durch einen Fit der folgenden Gleichung an die Daten:

$$\frac{\rho(H) - \rho(H=0)}{\rho(H=0)} = \alpha_1 \cdot H^2 = \omega_c^2 \cdot \tau_o^2 \quad (5.5)$$

kann die elastische Streuzeit τ_o bestimmt werden ($\omega_c = eH/m$). Für die (111) Schicht erhält man $\alpha_1 = (1.37 \pm 0.07) \times 10^{-4} \text{ T}^{-2}$ und für die (100) Schicht $\alpha_1 = (2.0 \pm 0.03) \times 10^{-4} \text{ T}^{-2}$. Daraus ergibt sich die elastische Streuzeit zu $\tau_o((111) \text{ CoSi}_2) = 6.65 \times 10^{-14} \text{ s}$ und $\tau_o((100) \text{ CoSi}_2) = 2.54 \times 10^{-13} \text{ s}$. Hensel [1] findet für (111) orientierte Schichten (mit SPE hergestellt) einen ähnlichen Wert von $\alpha_1 = 2.1 \times 10^{-4} \text{ T}^{-2}$.

Der Hallkoeffizient R_H der CoSi_2 Proben wurde bei einem Magnetfeld von 0.37 T in Abhängigkeit von der Temperatur gemessen und ist in Abb. 5.30. für 70 nm dicke CoSi_2 Schichten in (111) und (100) Si dargestellt.

Der Hallkoeffizient ist für beide Orientierungen positiv und zeigt im Fall der (100) orientierten Probe nahezu keine Temperaturabhängigkeit. Bei 4 K ist $R_H^{(100)} = 2.1 \times 10^{-4} \text{ cm}^3/\text{C}$ in guter Übereinstimmung mit Literaturwerten ($R_H^{(111)} = 2.5 \times 10^{-4} \text{ cm}^3/\text{C}$ [1,101]). Im Gegensatz dazu zeigt der Hallkoeffizient der (111) orientierten CoSi_2 -Schicht eine deutliche Abhängigkeit von der Temperatur.

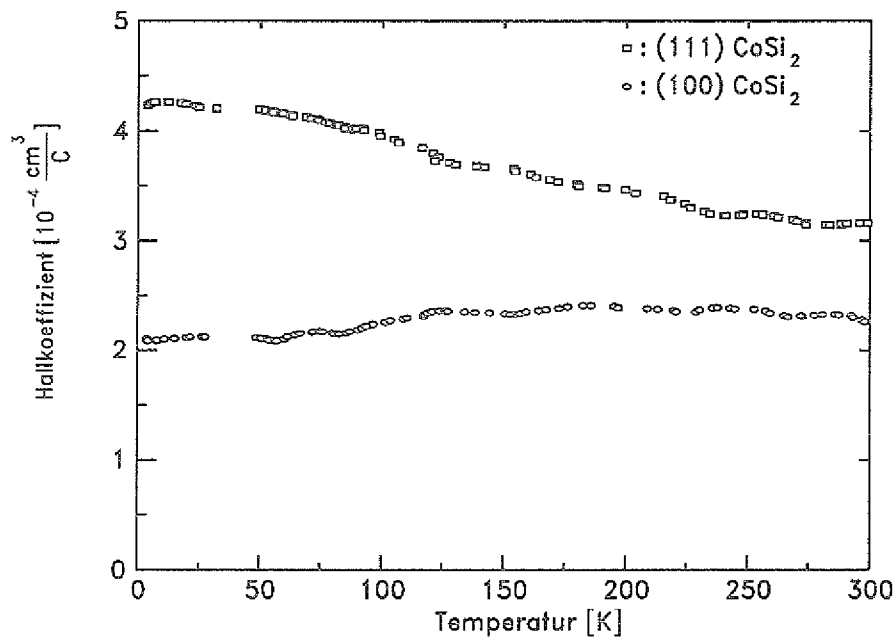


Abb. 5.30.: Temperaturabhängigkeit des Hallkoeffizienten von 70 nm dicken CoSi₂-Schichten in (111) und (100) Si.

Er ist schon bei Raumtemperatur mit $R_H = 3 \times 10^{-4} \text{ cm}^3/\text{C}$ höher als der Hallkoeffizient der (100) Schicht und steigt auf $R_H = 4.3 \times 10^{-4} \text{ cm}^3/\text{C}$ bei 4 K. Dasselbe Verhalten wurde auch von van Ommen [94] in mit IBS hergestellten (111) orientierten Schichten beobachtet.

Verringert man die CoSi₂-Schichtdicke, so ergeben sich die in Abb. 5.31. gezeigten temperaturabhängigen Widerstandsverläufe.

Der Restwiderstand nimmt mit abnehmender Schichtdicke zu, während der Raumtemperaturwiderstand erst bei sehr dünnen Schichten leicht ansteigt. Ein ähnliches Verhalten, wenn auch schwächer ausgeprägt, wurde auch an dünnen, mit SPE hergestellten, Schichten gefunden [1].

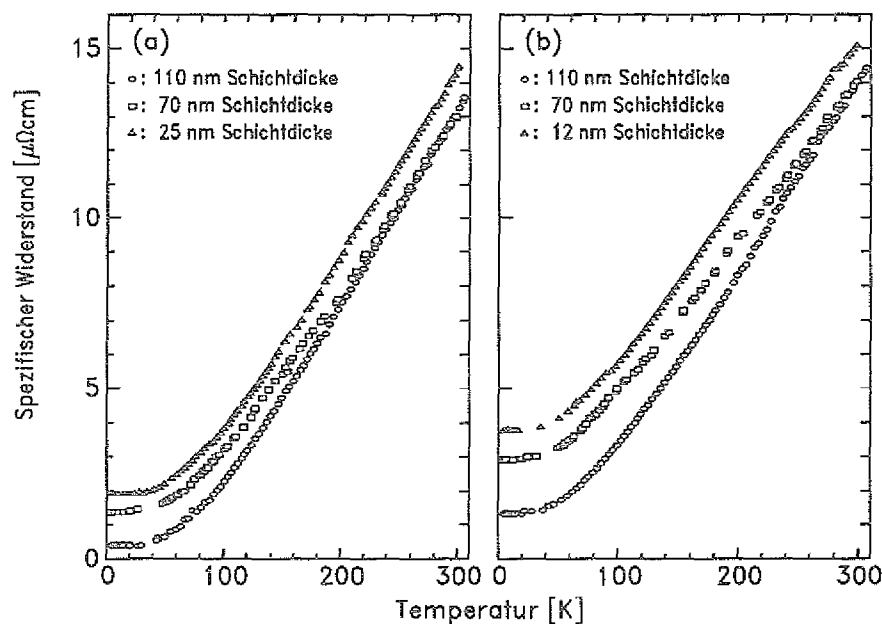


Abb. 5.31.: Temperaturabhängigkeit des spezifischen Widerstands unterschiedlich dicker CoSi_2 -Schichten in (100) Si (a) und (111) Si (b).

5.4.2. Schottkybarrierenhöhen von CoSi_2/Si - Dioden

Schottkydioden mit definierten Flächen wurden durch Co-Implantationen in strukturierte Si-Wafer hergestellt. Die Strukturierung wird in Kap. 5.6. beschrieben. Das vergrabene Metallsilizid bildet zum Si-Substrat und zur Si-Deckschicht hin einen Schottkykontakt (im folgenden als Bottom- und Topdiode bezeichnet). Als Substrat wurden n-dotierte (100) und (111) orientierte Si-Wafer mit einem spezifischen Widerstand von $1 \Omega\text{cm}$ verwendet. Durch Variation der Implantationsenergie wurden unterschiedlich dicke CoSi_2 -Schichten hergestellt. Die Temperung erfolgte dabei im RTA. In Tabelle 5.4. sind die entsprechenden Implantationsparameter aufgeführt.

Tabelle 5.6: Implantationsparameter zur Herstellung der Schottkydioden

Probe	Orientierung	Energie [keV]	Dosis [cm^{-2}]	CoSi ₂ -Dicke [nm]
100_1	(100)	100	1.1×10^{17}	44
100_2	(100)	200	2×10^{17}	70
111_1	(111)	30	4.5×10^{16}	18
111_2	(111)	200	2×10^{17}	70

Abb. 5.32. zeigt die $I(V)$ Kennlinie der Top- und Bottomdiode von Probe 100_1.

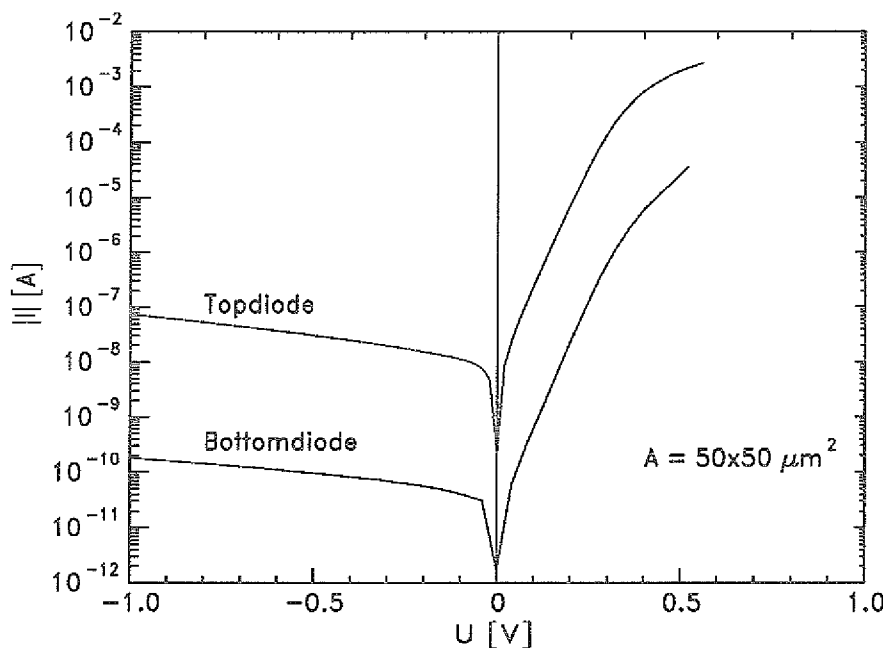


Abb. 5.32.: $I(V)$ Kennlinien der Top- und Bottomdiode einer 44 nm dicken CoSi₂-Schicht in (100) Si (Probe 100_1).

Es ergeben sich unterschiedliche Barrierenhöhen von (0.67 ± 0.03) eV für die Topdiode und (0.78 ± 0.03) eV für die Bottomdiode. Die Idealitätsfaktoren sind 1.05 bzw. 1.18. Für die dickere Probe (Probe 100_2) ergeben sich im Rahmen des Fehlers dieselben Barrierenhöhen nur die Idealitätsfaktoren sind grundsätzlich höher mit 1.1 bzw. 1.2 für Top- bzw. Bottomdiode. $I(T)$ Messungen an diesen Dioden bestätigen, daß im Falle der (100) orientierten Schichten die Topdiode eine niedrigere Barriere hat als die Bottomdiode. Als Beispiel ist in Abb. 5.33. die $I(T)$ Messung an Probe 100_2 dargestellt.

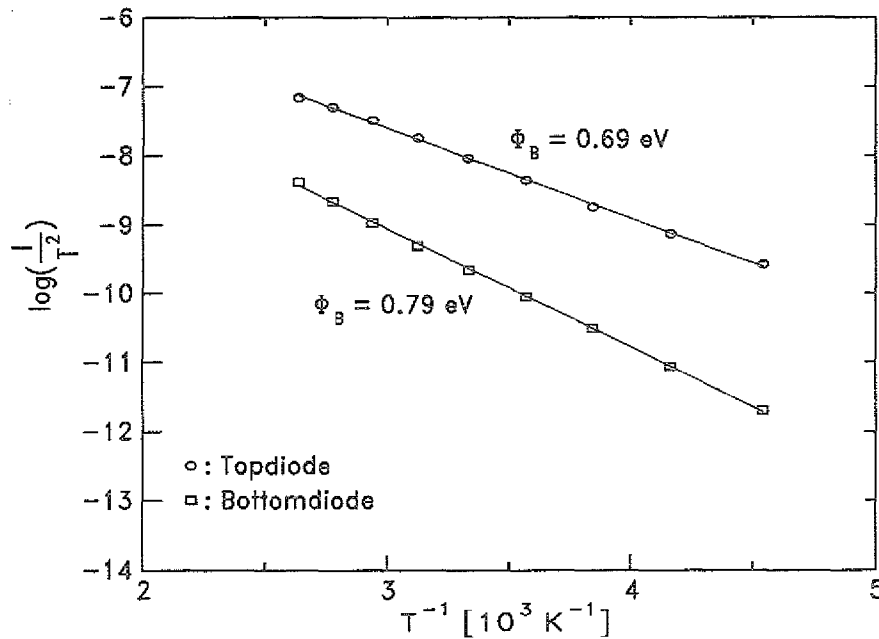


Abb. 5.33.: $I(T)$ Messung an der 70 nm dicken CoSi_2 -Schicht in (100) Si (Probe 100_2)

(111) orientierte Heterostrukturen zeigen ein anderes Verhalten. In Abb. 5.34. sind die $I(V)$ Messungen an den Topdioden der Proben 111_1 und 111_2 zu sehen.

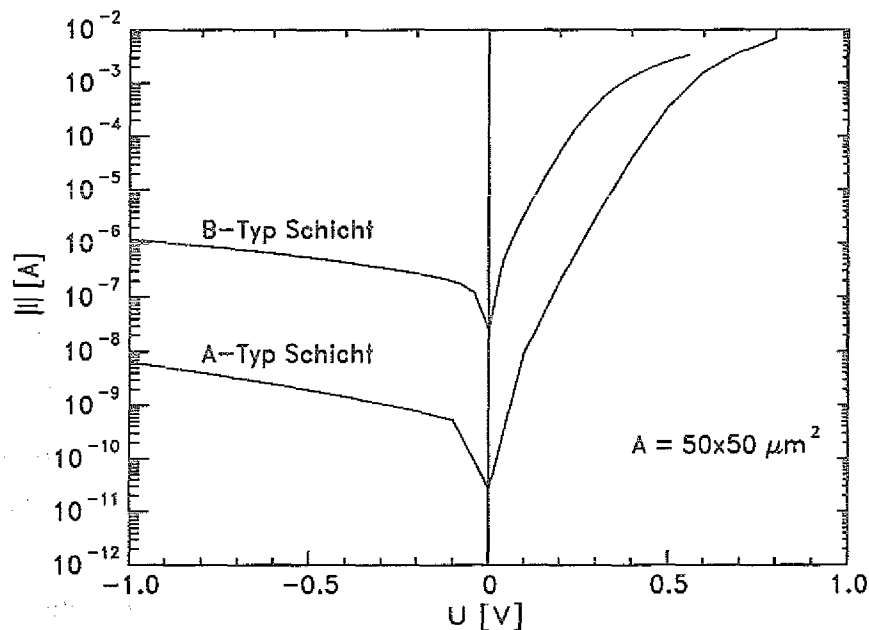


Abb. 5.34.: $I(V)$ Kennlinien der Topdioden einer 18 nm dicken B-orientierten CoSi_2 -Schicht (Probe 111_1) und einer 70 nm dicken A-orientierten CoSi_2 -Schicht (Probe 111_2) in (111) Si.

Als Schottkybarriere ergeben sich für die dünne B-orientierte Schicht (0.53 ± 0.03) eV und (0.72 ± 0.03) eV für die dicke A-orientierte Schicht. Die Schottkybarriere der Bottomdioden zeigt nahezu keine Abhängigkeit von der Dicke (Orientierung) und ist (0.77 ± 0.03) eV. Der Idealitätsfaktor ist 1.05 für die Topdiode und 1.2 für die Bottomdiode der dünnen Schicht. Für die dicke Schicht findet man 1.21 bzw. 1.3. $I(T)$ Messungen an diesen Dioden ergaben dieselben Barrierenhöhen. Alle Werte sind in Tabelle 5.6. nochmal zusammengefaßt.

Tabelle 5.6: Schottkybarrierenhöhe der unterschiedlich orientierten Proben

Probe	Schichtdicke	Typ	Topdiode		Bottomdiode	
			ϕ_B [eV]	n	ϕ_B [eV]	n
100_1	44	A	0.67	1.05	0.78	1.18
100_2	70	A	0.65	1.1	0.79	1.2
111_1	18	B	0.53	1.06	0.77	1.2
111_2	70	A	0.73	1.21	0.76	1.3

5.5. Untersuchungen zur Mesotaxie in SIMOX-Wafern und SiGe-Schichten

5.5.1. Co-Implantation in SIMOX-Wafer

Da für zukünftige Bauelemente auch Schichtfolgen bestehend aus Metall- und Isolatorschichten auf Si vorgeschlagen worden sind [102,103], ist es interessant die Ionenstrahl-synthese in SIMOX-Wafern (Si-Wafer mit vergrabener SiO_2 -Schicht) anzuwenden. Speziell wird im folgenden die Bildung von CoSi_2 -Schichten direkt auf der SiO_2 -Schicht, d.h. der Einfluß der Si/ SiO_2 -Grenzfläche auf die Schichtbildung, untersucht.

Als Target wurden (100) orientierte SIMOX-Wafer der Firma IBIS verwendet. Die Wafer waren n-dotiert mit einem spezifischen Widerstand von 9-15 Ωcm . Die Kristallinität Si-Deckschicht dieser Wafer ist nach den Channeling-Daten mit $\chi_{\min} = 5\%$ kaum schlechter als reines Si. Nach Herstellerangaben beträgt die Versetzungsdichte in dieser Schicht weniger als 10^5 cm^{-2} . Die verwendeten Wafer besitzen, nach RBS Messungen, eine 200 nm dicke Si-Deckschicht auf einer 360 nm dicken SiO_2 -Schicht. Die Co-Implantationen wurden, um die Lage der CoSi_2 -Schicht in bezug auf die SiO_2 -Schicht zu variieren, mit Energien zwischen 100 und 200 keV durchgeführt. Die verwendeten Dosen lagen zwischen $1.2 - 2.4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$. Die Implantationstemperatur war 400°C und der

Strahlstrom $6\text{--}8\text{ }\mu\text{A}/\text{cm}^2$. Die Temperungen wurden alle bei $750^\circ/30\text{ s}$ und $1150^\circ\text{C}/10$ im RTA durchgeführt

In Abb. 5.35. sind PROFILE Simulationen mit 100, 160 und 200 keV Co-Ionen in ein Target, das aus einer 200 nm dicken Si-Deckschicht und dann SiO_2 bestand, dargestellt.

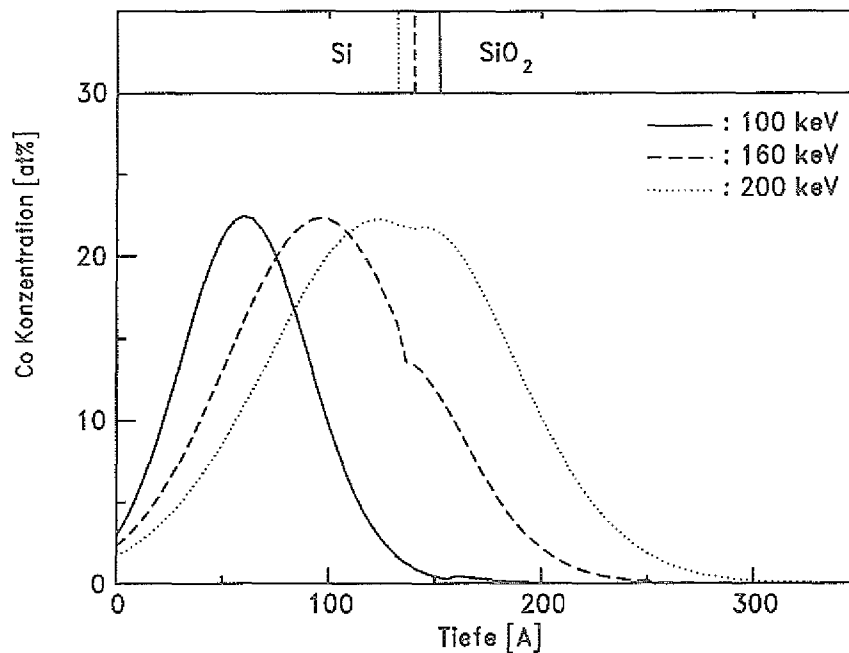


Abb. 5.35.: PROFILE Simulation von 100, 160 und 200 keV Co-Implantationen mit 1.2×10^{17} , 1.4×10^{17} und $2 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$ in 200 nm Si auf SiO_2 . Die verschiedenen Dicken der Si-Deckschicht ergeben sich durch den Sputtereffekt. (Es wurde eine Sputterrate von 1.7 angenommen.)

Man erkennt, daß die 100 keV Implantation zu einer Co-Verteilung führt, die sich vollständig in der Si-Deckschicht befindet. Die 160 keV Implantation ergibt eine Co-Verteilung deren Maximum kurz vor der SiO_2 Schicht liegt, während es für die 200 keV Implantation schon an der Si/ SiO_2 -Grenzfläche ist.

Das RBS Spektrum in Abb. 5.36.(a) zeigt die, nach 100 keV Implantation mit $1.2 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$ und Temperung im RTA, entstandene 40 nm dicke CoSi_2 -Schicht. Nach den Channeling Messungen ergeben sich $\chi_{\min} = 7\%$ für die CoSi_2 -Schicht und $\chi_{\min} = 9\%$ für die Si-Deckschicht. Der Widerstand der CoSi_2 -Schicht beträgt $15\text{ }\mu\Omega\text{cm}$.

Implantationen mit höheren Energien ergeben nach der Temperung ein etwas anderes Bild.

In Abb. 5.36.(b) sind die RBS Spektren einer 120 keV Implantation vor und nach einer Temperung im RTA zusammen mit dem Channeling Spektrum der getemperten Probe dargestellt.

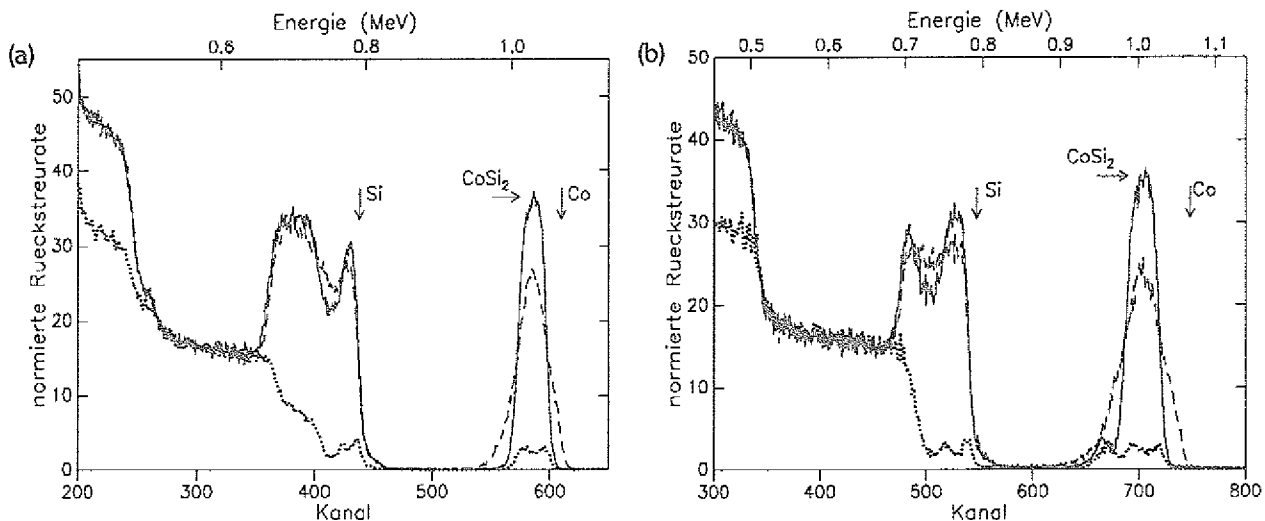


Abb. 5.36.: RBS Spektren von mit 100 keV (a) und 120 keV (b) und 1.2×10^{17} bzw. $1.4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ implantierten SIMOX-Wafern vor (durchgezogen) und nach der Temperung (gestrichelt) im RTA. Die Channeling Spektren nach der Temperung sind gepunktet eingezeichnet.

Die Schicht zieht sich während der Temperung zu einer homogenen 44 nm dicken CoSi_2 -Schicht, überdeckt mit 44 nm Si, zusammen, wobei jedoch die in der SiO_2 Schicht befindlichen Co-Atome nicht umverteilt werden. Die Si-Schicht zwischen CoSi_2 und SiO_2 ist 60 nm dick. Die CoSi_2 -Schicht ist in Kristallinität ($\chi_{\min} = 6\%$) und Widerstand ($15 \mu\Omega\text{cm}$) vergleichbar mit typischen CoSi_2 -Schichten in (100) Si. Ebenso ist das Channeling in der Si-Deckschicht mit $\chi_{\min} = 6\%$ sehr gut. Dagegen wird in der unter der CoSi_2 -Schicht liegenden Si-Schicht ein starkes Dechanneling beobachtet.

Abb. 5.37. zeigt SIMS Profile einer 160 keV Implantationen vor und nach der Temperung im RTA. Die Implantation ergibt, in Übereinstimmung mit den TRIM Simulationen, ein Profil dessen projizierte Reichweite noch innerhalb des Si, aber schon kurz vor der SiO_2 -Schicht liegt. Während der Temperung zieht sich die im Si liegende Co-Verteilung zu einer zusammenhängenden CoSi_2 -Schicht zusammen. Die Co-Verteilung im SiO_2 zeigt auch eine leichte Umverteilung, zur $\text{CoSi}_2/\text{SiO}_2$ -Grenzfläche hin.

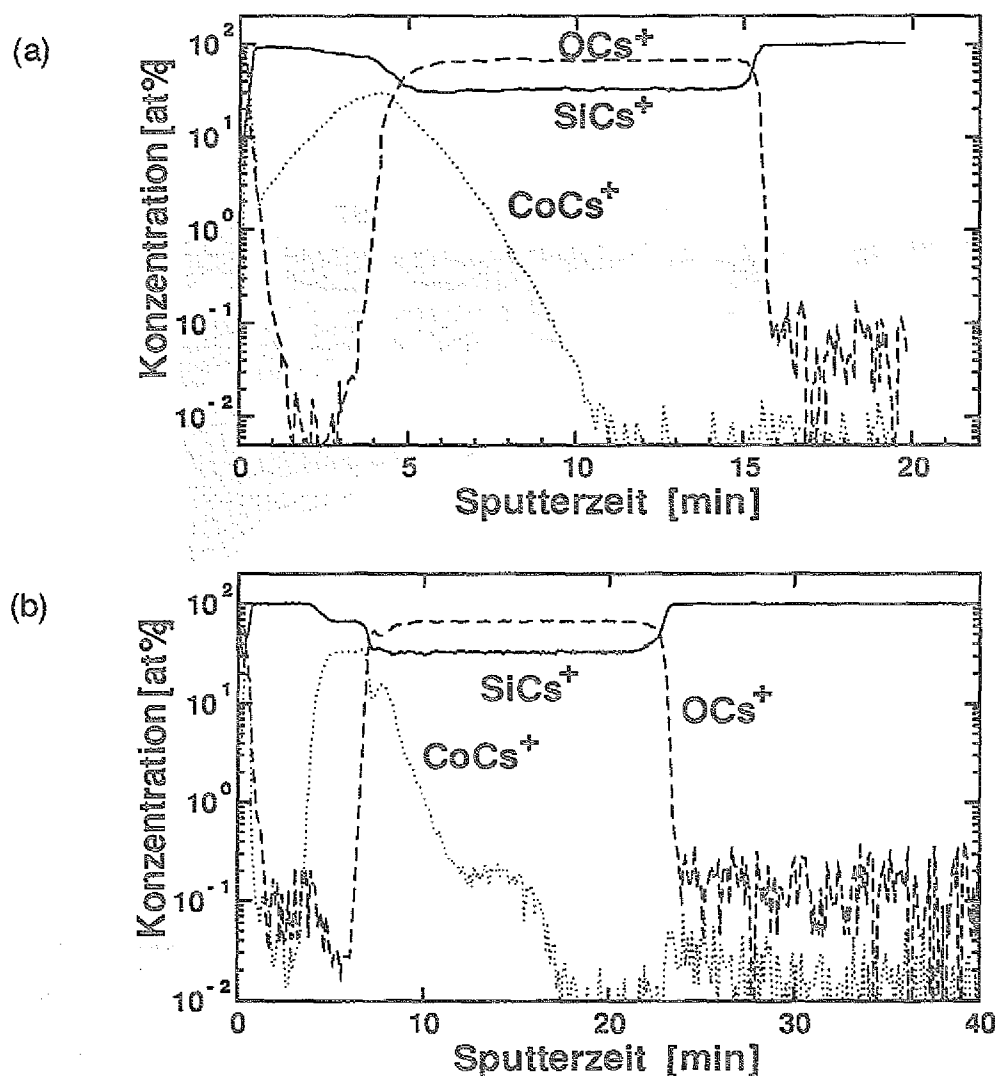


Abb. 5.37.: SIMS Profile der Co- und der O-Verteilung einer 160 keV Implantation mit $1.8 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ vor (a) und nach (b) der Temperung im RTA.

Unmittelbar an der Grenzfläche gibt es im SiO_2 eine leichte Verarmung an Co, aber danach steigt das Co-Signal bis zu einem maximalen Wert von 15 at% an.

Die 52 nm dicke CoSi_2 -Schicht liegt unter einer 71 nm dicken Si-Schicht und grenzt direkt an die SiO_2 Schicht wie in der TEM-Querschnitt-Aufnahme Abb. 5.38. zu erkennen ist. In der SiO_2 Schicht erkennt man Ausscheidungen deren Größe und Dichte mit zunehmender Tiefe abnimmt. Die Größenverteilung der Ausscheidungen entspricht qualitativ dem mit SIMS gemessenen abfallendem Co Profil im SiO_2 . Die Kristallqualität der Si-Deckschicht und der CoSi_2 -Schicht ist mit $\chi_{\min}(\text{Si}) = 7\%$ und $\chi_{\min}(\text{CoSi}_2) = 7\%$ wieder genauso gut wie die in reinem Si vergrabenen CoSi_2 -Schichten.

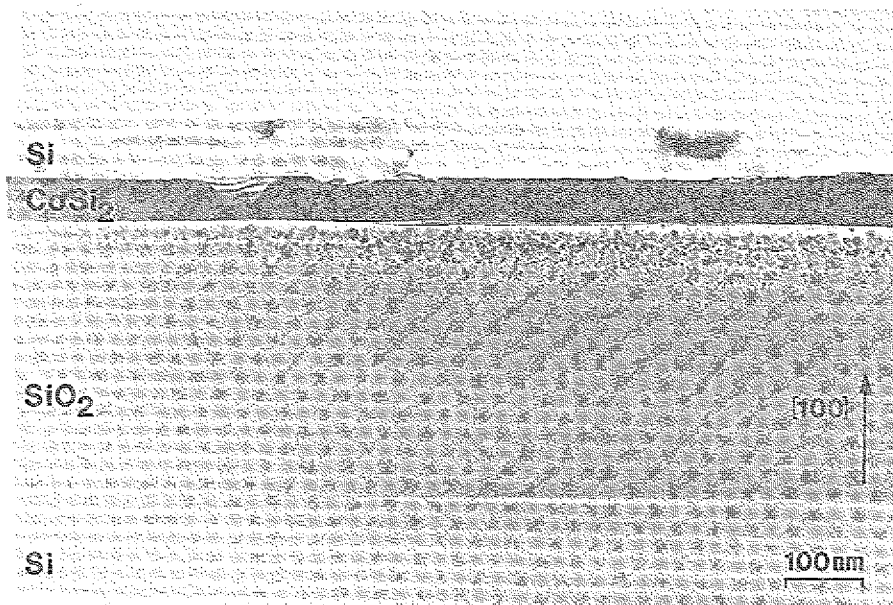


Abb. 5.38.: TEM-Querschnitt-Aufnahme der Probe aus Abb. 5.37. (b).

Bei weiterer Erhöhung der Implantationsenergie entsteht nach der Temperung zwar noch eine zusammenhängende Schicht, allerdings mit wesentlich schlechterer Kristallqualität, wie in Abb. 5.39. durch den Verlauf der Minimum Yield Werte in Abhängigkeit von der Energie ersichtlich ist. Dies ist in Einklang mit der Erhöhung des spezifischen Widerstand auf $30 \mu\Omega\text{cm}$ im Falle der 200 keV Implantation. In Abb. 5.39. ist zusätzlich der Minimum Yield der entsprechenden Proben nach der Implantation eingetragen, der eine ähnliche Abhängigkeit hat. Proben, die mit Energien bis zu 180 keV implantiert wurden, zeigen noch etwas Channeling, während nach Implantationen mit $E > 180$ keV kein Channeling nachzuweisen ist. Nach TEM Untersuchungen besteht die CoSi_2 -Schicht in diesem Fall aus verschieden orientierten CoSi_2 -Körnern auf der SiO_2 -Schicht (siehe Abb. 5.40.).

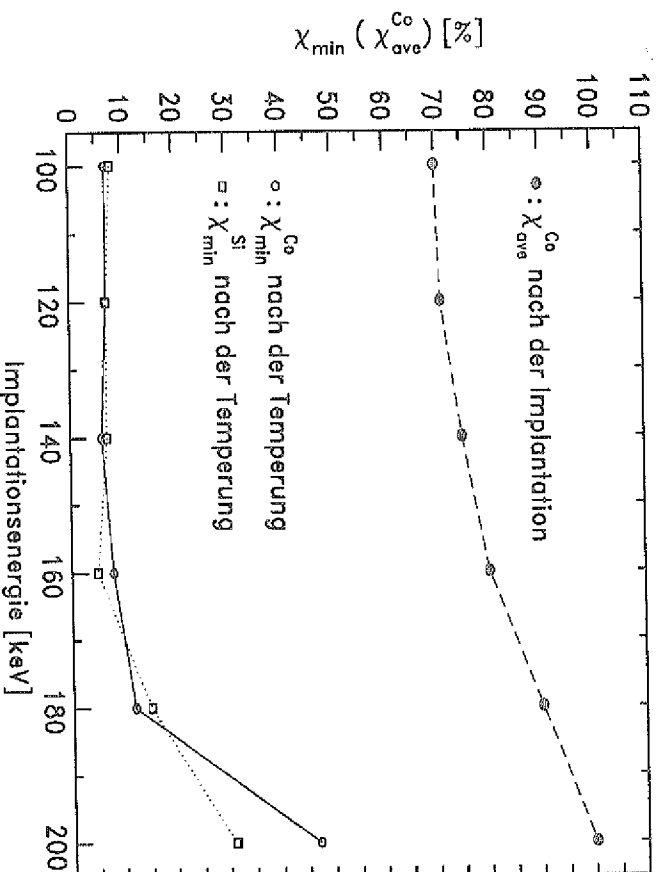


Abb. 5.39: χ_{min} der Si-Deckschicht und der CoSi_2 -Schicht nach Implantation und Temperung in Abhängigkeit von der Implantationsenergie.

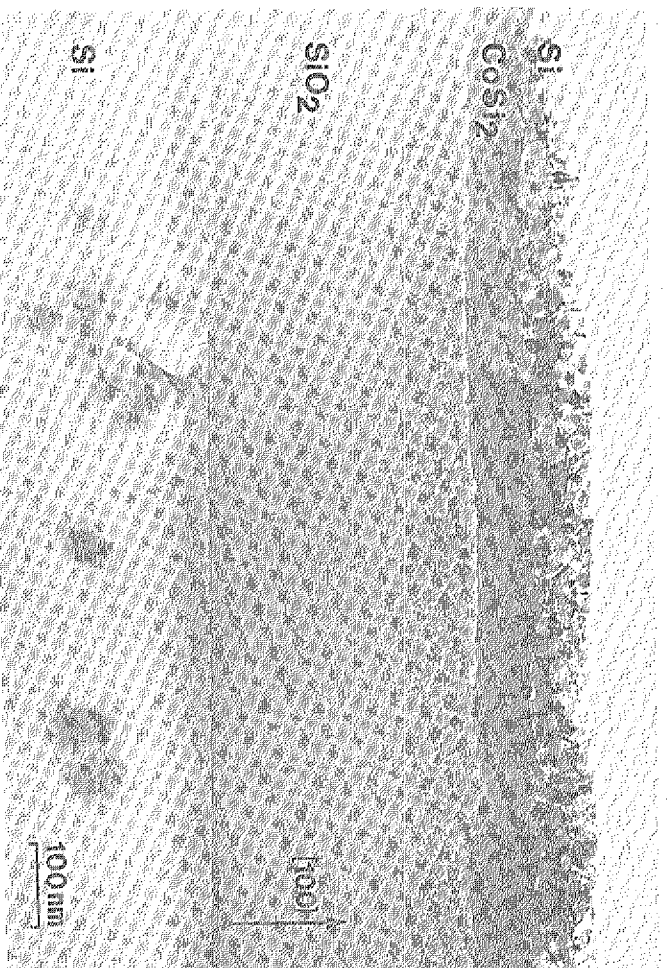


Abb. 5.40: TEM-Querschnitt-Aufnahme eines SIMOX-Wafers nach 200 keV Co-Implantation mit $2.4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ nach Temperung im RTA.

5.5.2. Co-Implantation in SiGe-Schichten

SiGe-Schichten werden zunehmend in die Si-Technologie integriert. Die Kontaktierung dieser Schichten mit Standardmethoden der Si-Technologie (z.B. Silizidierung) bereitet aber noch Schwierigkeiten. So bildet sich nach Aufdampfen von Ti und Temperung neben TiSi_2 auch Ti_xGe_y [102]. IBS könnte hier eine sinnvolle Alternative sein, wenn es gelänge nur eine Phase (entweder Silizid oder Germanid) zu bilden. Erste Experimente dazu werden im folgenden vorgestellt.

Als Substrat für die Co-Implantation wurden 200 nm und 350 nm dicke einkristalline $\text{Si}_{0.91}\text{Ge}_{0.09}$ -Schichten auf hochohmigem (2000 Ωcm) (100) Si verwendet. Diese Schichten wurden mit LPVPE bei 700°C und 0.1 Torr hergestellt und waren undotiert. Zusätzlich wurden Implantationen in 200 nm dicke, mit MBE bei 550°C hergestellte, $\text{Si}_{0.52}\text{Ge}_{0.48}$ -Schichten, durchgeführt. Die $\text{Si}_{0.91}\text{Ge}_{0.09}$ -Schichten sind nach Channeling Messungen kohärent verspannt, während die $\text{Si}_{0.52}\text{Ge}_{0.48}$ -Schichten relaxiert sind. Die Implantationen wurden mit Energien von 100 keV und 150 keV mit 1.4×10^{17} bzw. 2×10^{17} Co/cm² durchgeführt. Für die 200 nm dicken Schichten wurde eine Implantationstemperatur von 350°C und für die 350 nm dicken Schichten von 400°C gewählt. Abb. 5.41. zeigt RBS und Channeling Spektren nach 150 keV Implantation von 2×10^{17} Co/cm² in $\text{Si}_{0.52}\text{Ge}_{0.48}$ bei 350°C vor (a) und nach (b) der Temperung bei 1100°C/10s im RTA.

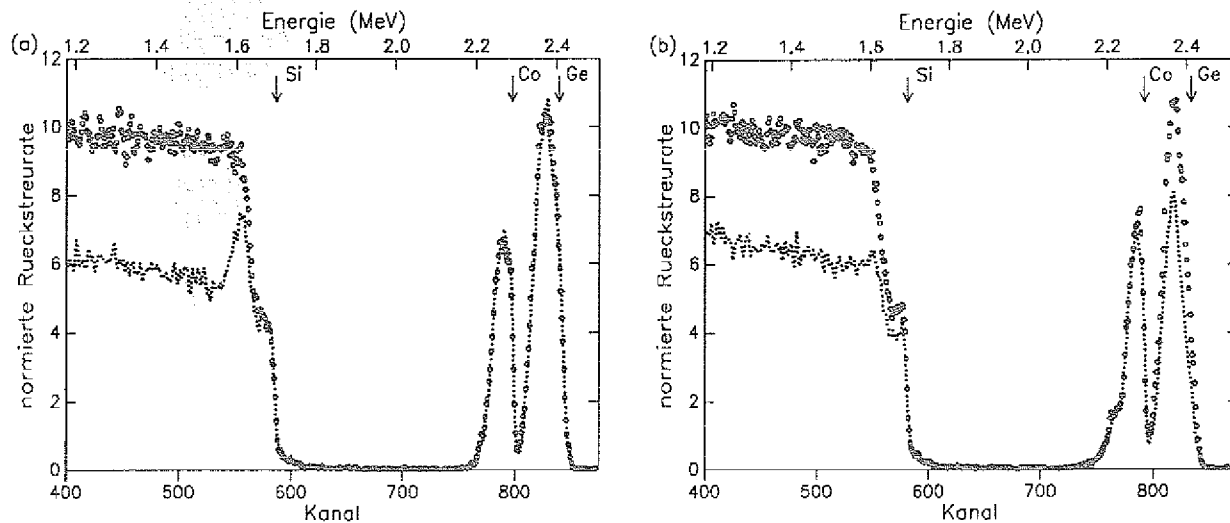


Abb. 5.41.: RBS und Channeling Spektren einer mit 150 keV Co implantierten $\text{Si}_{0.52}\text{Ge}_{0.48}$ -Schicht vor (a) und nach (b) der Temperung im RTA.

Im Maximum des Co-Profiles ergibt sich eine Komposition von 22 at% Co, 26 at% Ge und 52 at% Si nach der Implantation. Die oberflächennahe Region zeigt kein Channeling. Die Temperung bewirkt fast keine Veränderung der Co-Profilform und der Co-Konzentration. Auch das Channeling Spektrum bleibt nahezu unverändert. Nur der Widerstand fällt von 150 Ω/sq nach der Implantation auf 8 Ω/sq nach der Temperung. Implantation mit gleichen Parametern in die 200 nm dicke $\text{Si}_{0.91}\text{Ge}_{0.09}$ -Schicht ergibt ein anderes Verhalten.

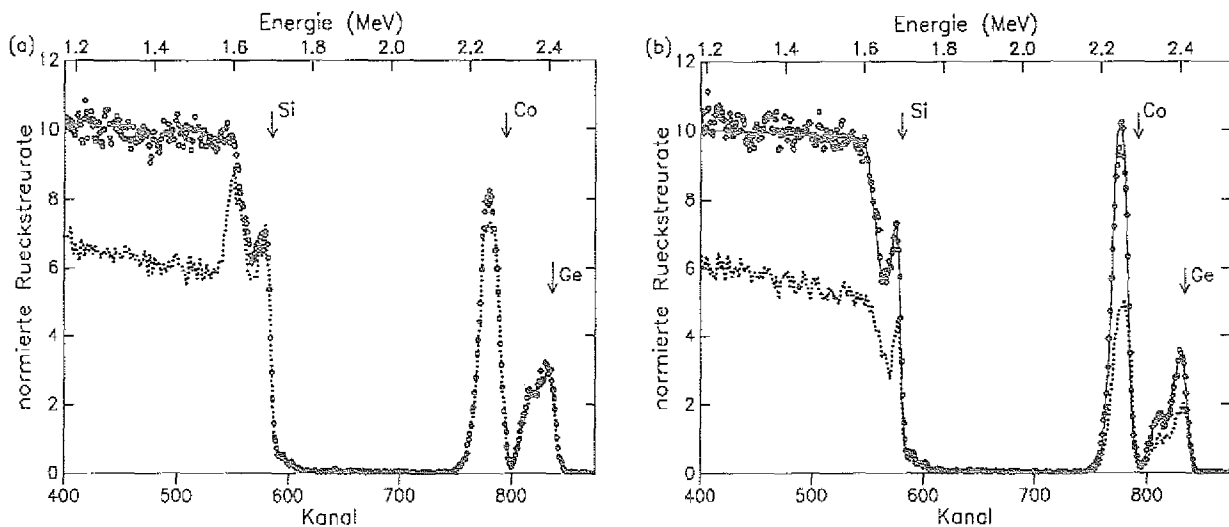


Abb. 5.42.: RBS und Channeling Spektren einer mit 150 keV Co implantierten $\text{Si}_{0.91}\text{Ge}_{0.09}$ -Schicht vor (a) und nach (b) der Temperung im RTA. Die durchgezogene Linie ist eine RUMP Simulation für die in Abb. 5.44. skizzierte Schichtstruktur.

Die Co-Konzentration nach der Implantation ist 25 at% (70% Si und 5 at% Ge). Die oberflächennahe Region zeigt wieder kein Channeling. Nur im Co-Signal ist etwas Channeling zu beobachten ($\chi_{\text{ave}} = 90\%$). Röntgenbeugungsuntersuchungen zeigen außer dem Signal vom Si-Substrat schwache Peaks, die CoSi_2 und SiGe zugeordnet werden konnten. Wie auch von A. Lauwers beobachtet [103], wurden keine Peaks anderer Phasen gefunden. Während der Temperung bei 1100°C für 10 s entsteht, wie in Abb. 5.42 (b) zu sehen ist, eine CoSi_2 -Schicht. Nach RUMP Simulationen hat sich eine 50 nm tief vergrabene 62 nm dicke CoSi_2 -Schicht mit einem Anteil von 2 % Ge gebildet. Die Ge-Konzentration der SiGe-Deckschicht hat sich, wie an dem Auger-Tiefenprofil in Abb. 5.43. gesehen werden kann, auf 13 % erhöht. Ein kleiner Anteil von Co (2%) ist in dieser Schicht vorhanden.

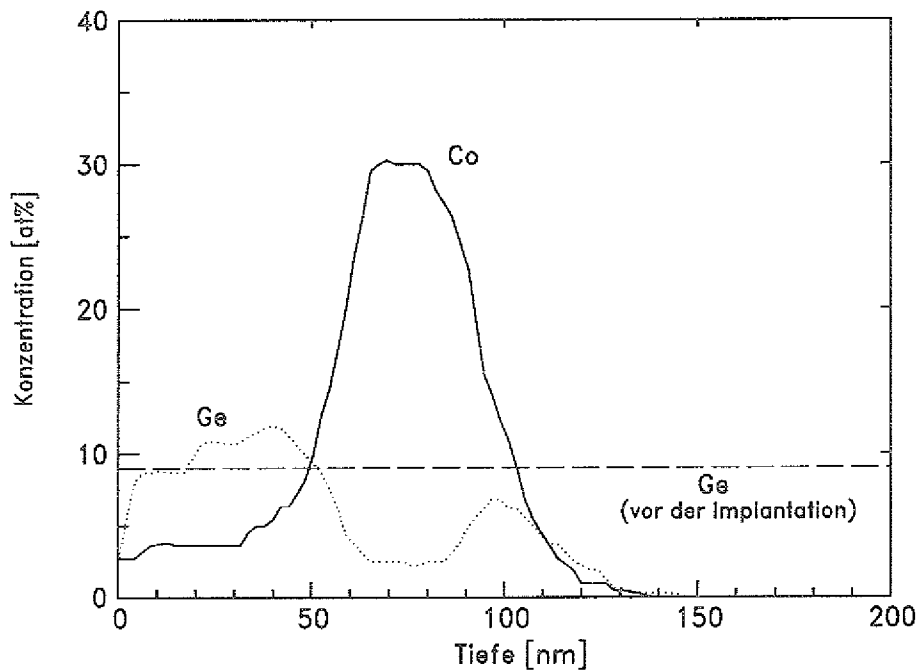


Abb. 5.43.: Auger-Tiefenprofil der Probe aus Abb. 5.42. (b)

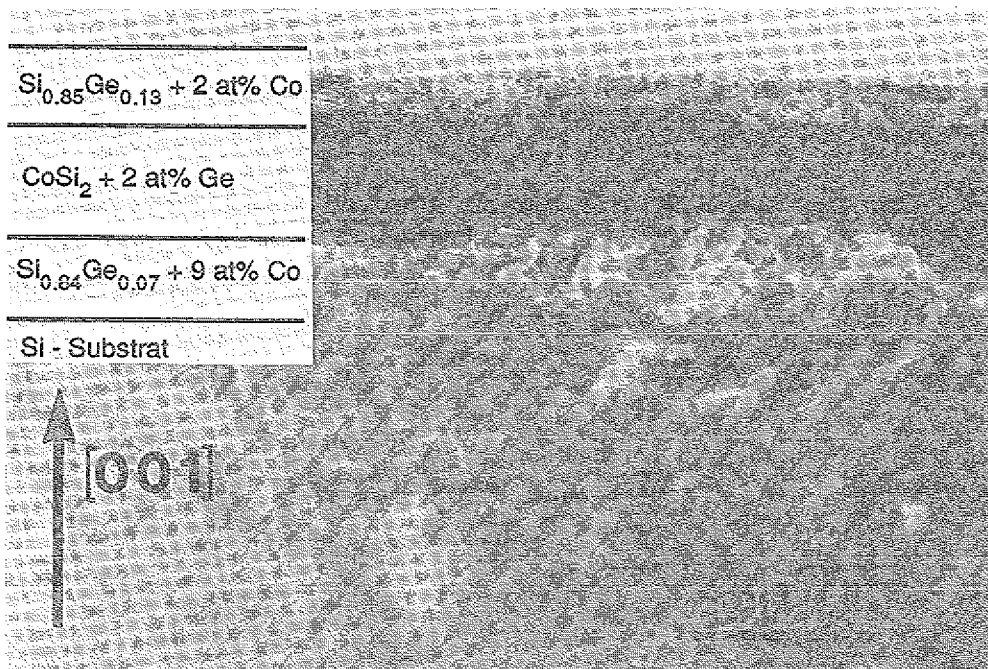


Abb. 5.44.: TEM-Querschnitt-Aufnahme der Probe aus Abb. 5.42. (b). Das zusätzlich eingezeichnete Kompositionsprofil wurde aus der RUMP Simulation des RBS Spektrums und der Augeranalyse gewonnen.

Nach den Channeling Untersuchungen ist die Schichtqualität dieser Heterostruktur nicht besonders gut. Es ergibt sich ein Minimum Yield von 50 % im CoSi_2 und von 60 % in der SiGe-Deckschicht. Röntgenbeugungsanalyse bestätigt, daß diese Schichtstruktur aus Si, CoSi_2 und SiGe besteht, nicht aber aus Co_xGe_y oder ternären Phasen.

Die gesamte Schichtstruktur ist in Abb. 5.44. zusammen mit einer TEM-Querschnitt-Aufnahme dieser Heterostruktur dargestellt. Man erkennt, daß die CoSi_2 -Schicht sehr rauhe Grenzflächen hat. Um die Mikrostruktur der CoSi_2 -Schicht genauer zu untersuchen, wurde die Probe von der Rückseite gedünnt (plan-view) und in einem STEM (Scanning Transmission Electron Microscope) analysiert.

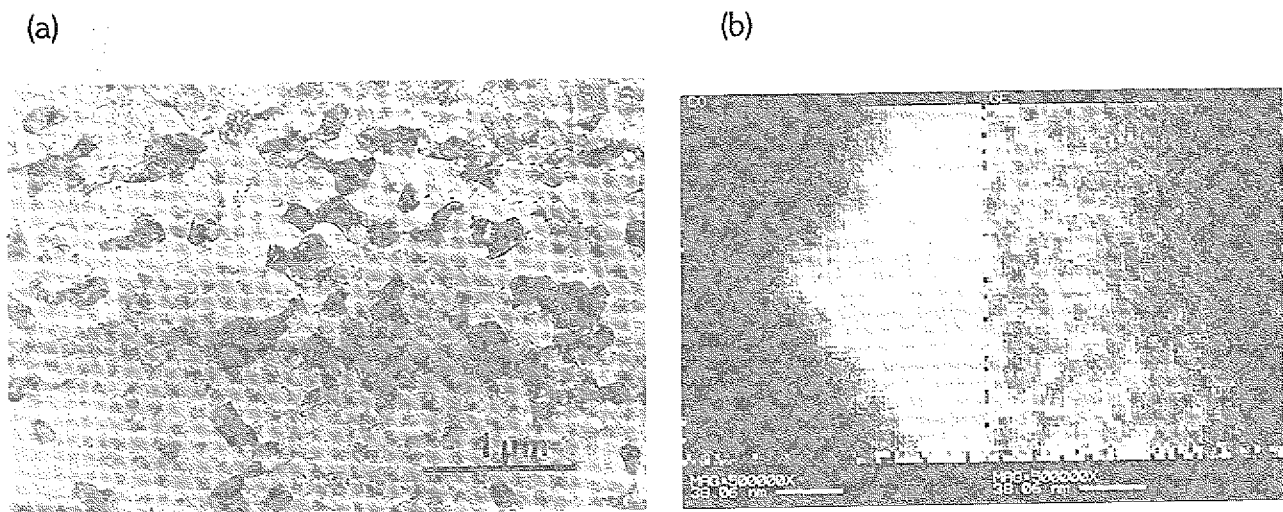


Abb. 5.45.: (a) Plan-view TEM Aufnahme der Probe aus Abb. 5.42. (b).

(b) 2-dimensionale EDX - Analyse an der Grenze einer der Inseln aus (a).

Die Helligkeit gibt die Intensität des EDX - Signals wieder (Hell: hohe Co- bzw. Ge-Konzentration, Dunkel: geringe Co- bzw. Ge-Konzentration).

In Abb. 5.45.(a) kann man dunkle Inseln erkennen, die einen Durchmesser bis zu 300 nm haben. Nach EDX Analyse bestehen diese Inseln aus $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, wobei x zwischen 84 und 87 % variiert, und einem geringen Anteil Co (6-8%). Die Matrix ist CoSi_2 mit weniger als 1 % Ge. Dieser Wechsel in der Stöchiometrie ist sehr gut in Abb. 5.45.(b) zu sehen, in der eine EDX Analyse im Scanning Modus des TEMs aufgenommen wurde.

Der spezifische Widerstand der CoSi_2 -Schicht ist mit $17 \mu\Omega\text{cm}$ etwas höher als der von

CoSi₂-Schichten in Si (100) (14 $\mu\Omega\text{cm}$).

Eine Verbesserung im Widerstand und der Schichtqualität konnte durch Implantation bei 400°C erzielt werden. In Abb. 5.46. sind RBS und Channeling Spektren einer Implantation bei $T_1 = 400^\circ\text{C}$ (sonst gleiche Implantationsbedingungen wie oben) in die 350 nm dicke Schicht abgebildet.

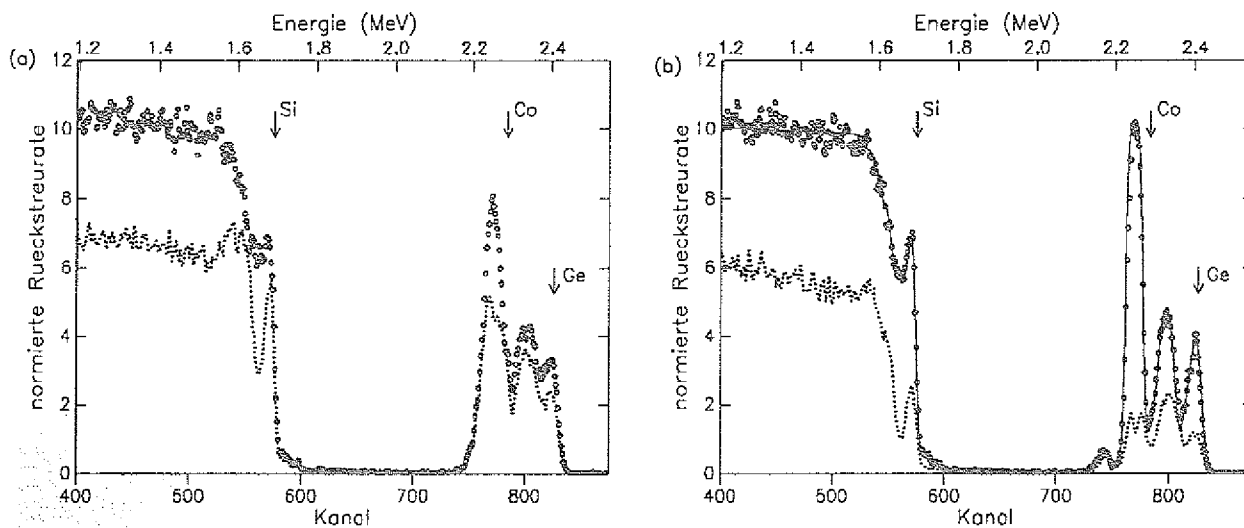


Abb. 5.46.: RBS und Channeling Spektren einer mit 150 keV Co implantierten 350 nm dicken Si_{0.91}Ge_{0.09}-Schicht vor (a) und nach (b) der Temperung im RTA. Die durchgezogene Linie ist eine RUMP Simulation für die in Abb. 5.48. skizzierte Schichtstruktur.

Jetzt zeigt die oberflächennahe Schicht ein Channeling ($\chi_{\text{ave}}(\text{Co}) = 58\%$ und $\chi_{\text{ave}}(\text{SiGe}) = 75\%$). Nach der Temperung bei 1100°C/10 s bildet sich eine CoSi₂-Schicht unter Verdrängung des Ge in die beiden angrenzenden SiGe-Schichten. Nach der RUMP Analyse des RBS Spektrums und den Auger-Tiefenprofilen hat sich eine 65 nm dicke CoSi₂-Schicht mit weniger als 1 % Ge gebildet. Mit einem Widerstand von 14 $\mu\Omega\text{cm}$ und einem Minimum-Yield von $\chi_{\text{min}} = 14\%$ sind diese Schichten kaum schlechter als die von CoSi₂-Schichten in (100) Si.

Die komplette Schichtstruktur ist in Abb. 5.47. zusammen mit einer TEM-Querschnitt-Aufnahme der Heterostruktur zu sehen. Man erkennt, daß die CoSi₂-Schicht scharfe Grenzflächen zu den angrenzenden SiGe-Schichten hat. Es sind die für (100) Orientierung üblichen Stufen zu sehen. Ober- und unterhalb der CoSi₂-Schicht befinden sich allerdings noch einige CoSi₂-Ausscheidungen.

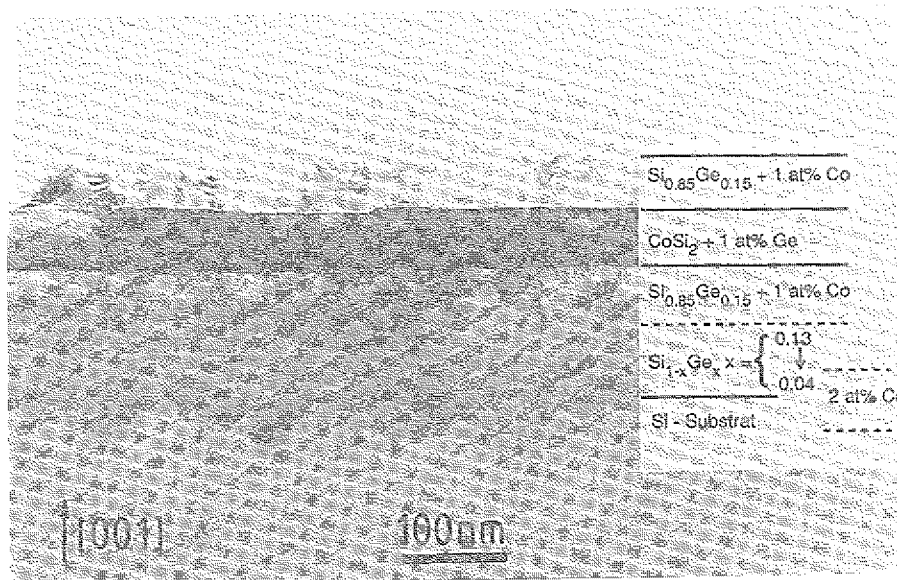


Abb. 5.47.: TEM-Querschnitt-Aufnahme der Probe aus Abb. 5.46. Das zusätzlich ein gezeichnete Kompositionsprofil wurde aus der RUMP Simulation des RBS Spektrums und der Augeranalyse gewonnen.

An der Grenzfläche zwischen SiGe und Si-Substrat sind, die schon von A. Lauwers [103] nach Co-Implantation in SiGe beobachteten, CoSi₂-Ausscheidungen zu finden, die auch für den kleinen Co Peak im RBS Spektrum verantwortlich sind. Diese Ausscheidungen an der Grenzfläche können durch Verringerung der Implantationsenergie auf 100 keV (Dosis: $1.4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$) wie aus der TEM-Querschnitts-Aufnahme in Abb. 5.48. ersichtlich ist, verhindert werden.

Die so hergestellten CoSi₂-Schichten sind dünner haben aber denselben Widerstand ($\approx 14 \mu\Omega\text{cm}$) und dieselbe Schichtqualität wie die dickeren Schichten.

Die tetragonale Verzerrung der SiGe- und CoSi₂-Schichten in bezug zum Si wurde mit Channeling gemessen. Um das Co-Signal gut vom Ge-Signal bei einem Einfallswinkel von 45° trennen zu können, wurde eine sehr hohe Energie von 3.6 MeV verwendet. "Beam Steering" sollte daher vernachlässigbar sein. Die SiGe-Schichten sind nach Implantation und Temperung nahezu relaxiert während die CoSi₂-Schichten eine tetragonale Verzerrung von $\epsilon^T = -2.23 \%$ ($\Delta\Theta = 0.65^\circ$) aufweisen.

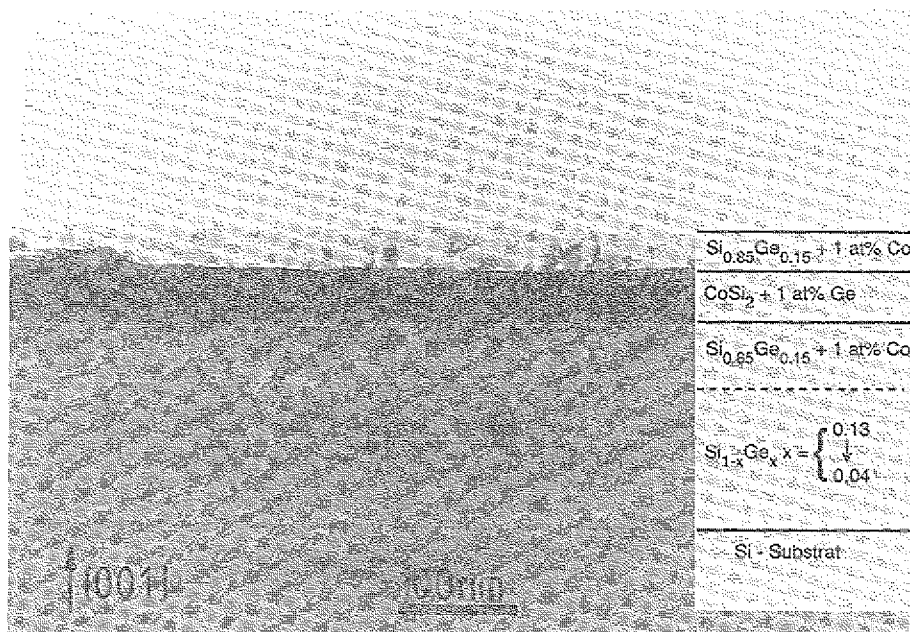


Abb. 5.48.: TEM-Querschnitt-Aufnahme einer mit 100 keV implantierten 350 nm dicken $\text{Si}_{0.91}\text{Ge}_{0.09}$ -Schicht nach der Temperung bei $1100^\circ\text{C}/10\text{s}$ im RTA.

5.6. Strukturierung

Die Strukturierung der CoSi_2 -Schichten ist sehr wichtig, um Bauelemente herzustellen. Da es aber kaum geeignete Ätzlösungen für CoSi_2 gibt, ist eine nachträgliche Strukturierung sehr schwierig. Die Ionenstrahlsynthese bietet durch die Möglichkeit der in-situ Strukturierung einen sehr großen Vorteil gegenüber MBE-Methoden.

Zur Strukturierung von CoSi_2 -Schichten erfolgt die Co-Implantation durch eine Maske. Die CoSi_2 -Schicht bildet sich dann nur an Stellen an denen das Si nicht durch die Maske abgedeckt war.

Als gut geeignetes Maskenmaterial für die Co - Implantation hat sich SiO_2 herausgestellt, da es sehr temperaturbeständig ist, zu keiner Kontamination des Si führt und auch leicht zu entfernen ist. Ein weiterer Vorteil ist, daß es selektive Ätzlösungen für SiO_2 gibt, die Si fast nicht angreifen. Nach Simulationsrechnungen und Testimplantationen in SiO_2 liegt die Co Verteilung einer 200 keV Implantation erst vollständig in der SiO_2 Schicht, wenn diese ca.

500 nm dick ist. Dies ist ein Nachteil der SiO_2 Maske. Wegen dem geringen Bremsquerschnitt von SiO_2 müssen im Verhältnis zur Strukturgröße sehr dicke Masken benutzt werden. Dies führt speziell bei Submikrometer-Strukturen zu Schatteneffekten. Eine Verbesserung hat A. Schüppen [106] durch die Benutzung einer Maskenstruktur SiO_2 /Metall, wobei das Metall (Wolfram) in bezug auf Co eine hohen Bremsquerschnitt und eine geringe Sputterrate besitzen sollte, erreicht. Die Maskendicke konnte auf diese Weise auf 300 nm für 200 keV Implantationen verringert werden. Für die meisten Fälle, wie z.B. von Strukturen oberhalb 1 μm reicht dennoch eine SiO_2 Maske.

Das SiO_2 wird dabei i.a. durch thermische Oxidation des Si-Wafers hergestellt und anschließend mit optischer Lithographie und Plasmaätzen strukturiert. Am Beispiel der Herstellung eines PBT [106] ist in Abb. 5.49. der Prozeßablauf verdeutlicht.

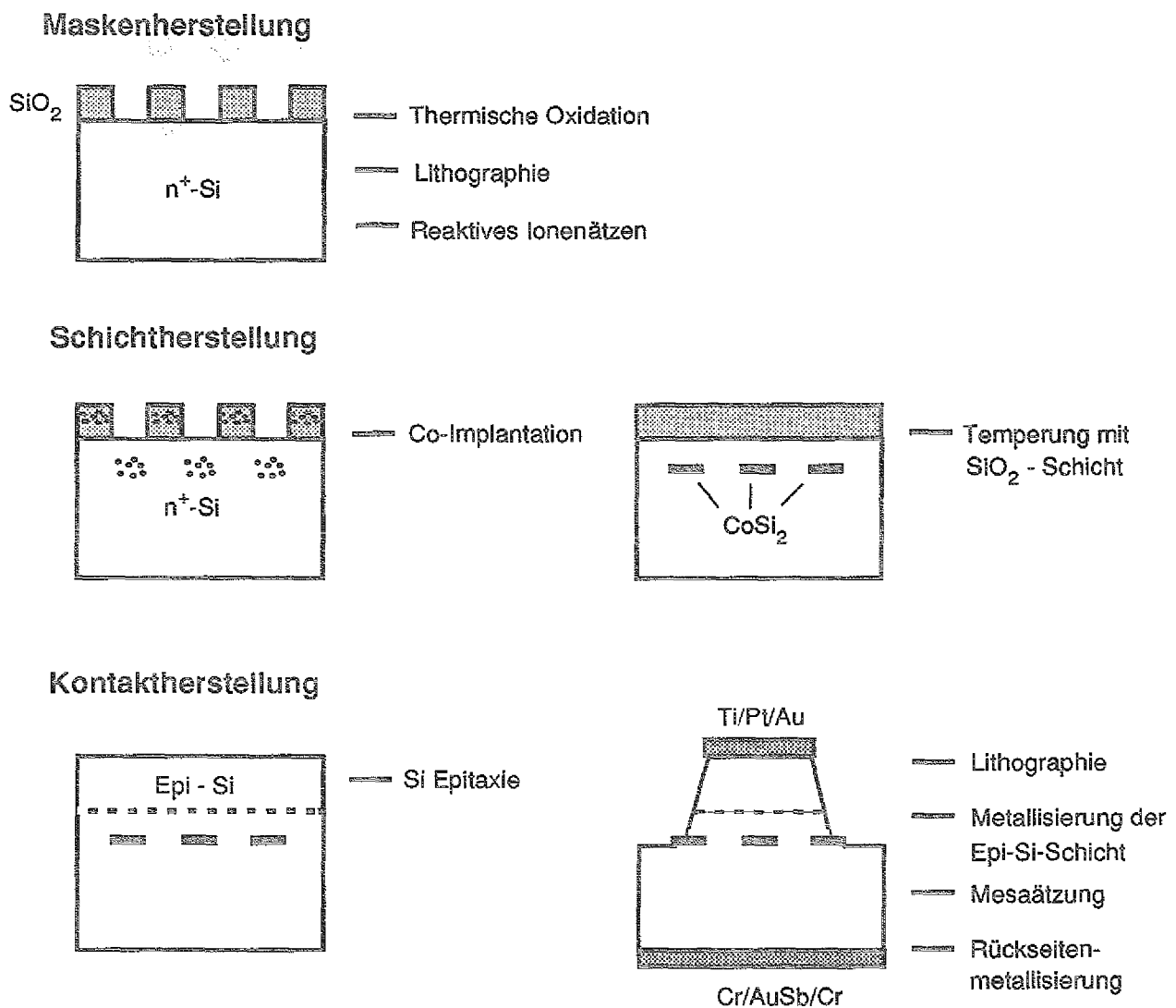


Abb. 5.49.: Prozeßablauf zur Herstellung eines PBT (oder Top- und Bottom-Schottkydioden).

Abb. 5.50. zeigt ein CoSi_2 -Gitter nach Co-Implantation und Temperung in dem mit SiO_2 -Maske und zusätzlicher SiO_2 -Schutzschicht versehenem Si-Wafer.



Abb. 5.50.: Rasterelektronenmikroskop-Aufnahmen eines mit SiO_2 strukturierten Wafers nach Co-Implantation und Temperung.

Das linke Bild ist mit Sekundärelektronen aufgenommen worden und zeigt die SiO_2 -Maske auf dem Si. Das rechte Bild ist mit Rückstreuielektronen aufgenommen worden, um einen hohen Materialkontrast zwischen Co und Si zu erhalten. Es ist zu erkennen, daß Co im oberen Maskenbereich zurückgehalten wurde (rechts) und daß sich zwischen den Oxidstreifen CoSi_2 -Schichten gebildet haben. Die TEM - Aufnahme in Abb. 5.51 (a) zeigt genau einen im Si liegenden CoSi_2 Streifen. In Abb. 5.51 (b) kann man sehr schön die bevorzugte Bildung von $\{111\}$ Grenzflächen an den Kanten solcher CoSi_2 Streifen in (100) Si und (111) Si sehen.

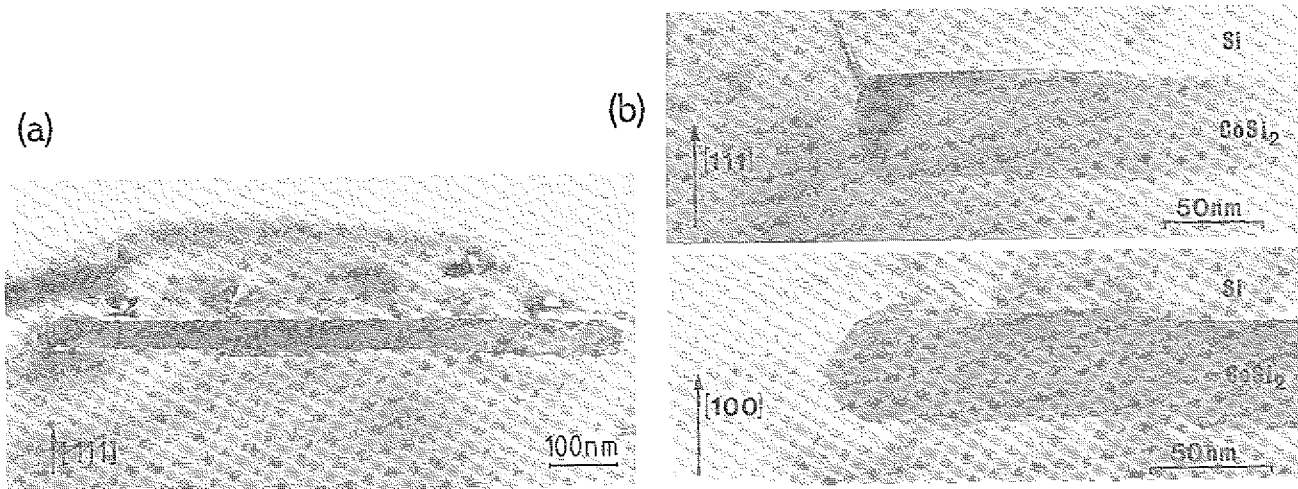


Abb. 5.51.: TEM-Querschnitt-Aufnahmen eines CoSi_2 Streifens in (111) Si (a), sowie der Kanten solcher Streifen in (111) Si und (100) Si.

Die durch IBS entstehende Si - Deckschicht ist zu dünn für einen PBT oder auch für eine Schottkytopdiode, so daß ein Überwachsen dieser Schicht mit epitaktischem Si notwendig ist. Dies konnte mit Niedrigdruck-Gasphasen Epitaxie (engl.: Low Pressure Vapor Phase Epitaxy; LPVPE) bei 1 Pa und 800°C hervorragend bewerkstelligt werden. Abb. 5.52. zeigt RBS und Channeling Spektren einer $\text{Si}/\text{CoSi}_2/\text{Si}$ -Heterostruktur nach Überwachsen von 690 nm Si mit LPVPE.

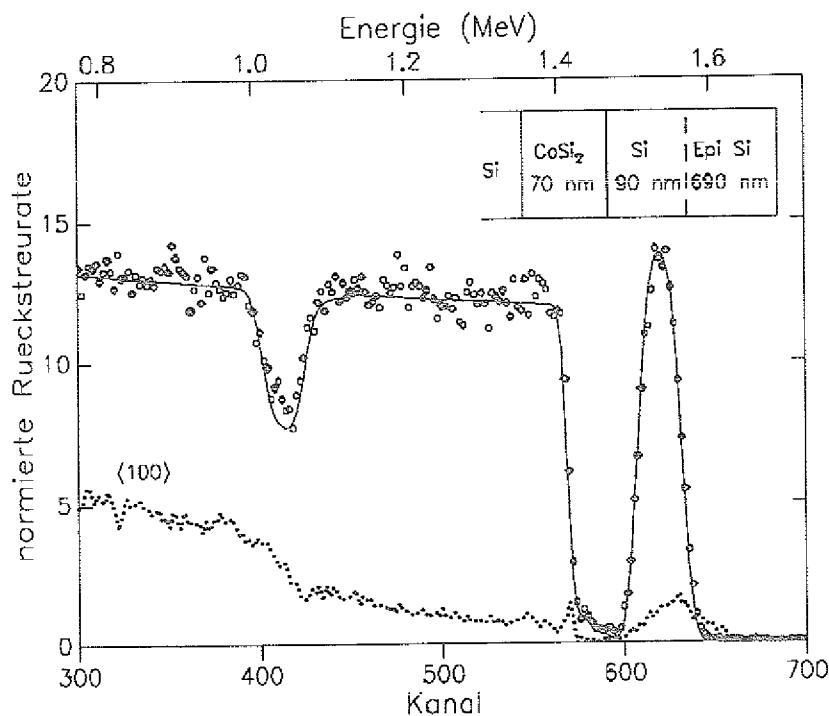


Abb. 5.52.: RBS und Channeling Spektren einer mittels LPVPE überwachsenen $\text{Si}/\text{CoSi}_2/\text{Si}$ -Heterostruktur.

100

100

100

Die Kristallinität des überwachsenen Si ist sehr gut ($\chi_{\min} = 5\%$). Ein weiterer Lithographie-schritt in Verbindung mit Metallisierung liefert den oberen Kontakt und zugleich die Ätzmasken für die Mesaätzung zum CoSi_2 -Gate hin. Der letzte Schritt ist die Herstellung des unteren Kontaktes durch Metallisierung der Waferrückseite.

Ein Problem das sich bei der Implantation durch Masken stellt, ist die mögliche Strukturbreite. Speziell im Fall des PBT sollte eine Verringerung des Abstandes zwischen den CoSi_2 -Fingern zu einer Verringerung der Schaltzeit führen [104]. Bei der Co-Implantation ergibt sich aufgrund der Streuung der Co-Ionen an den Targetatomen eine wie in Abb. 5.53. für 200 und 20 keV Co-Ionen dargestellte Verteilung der Ionen im Target.

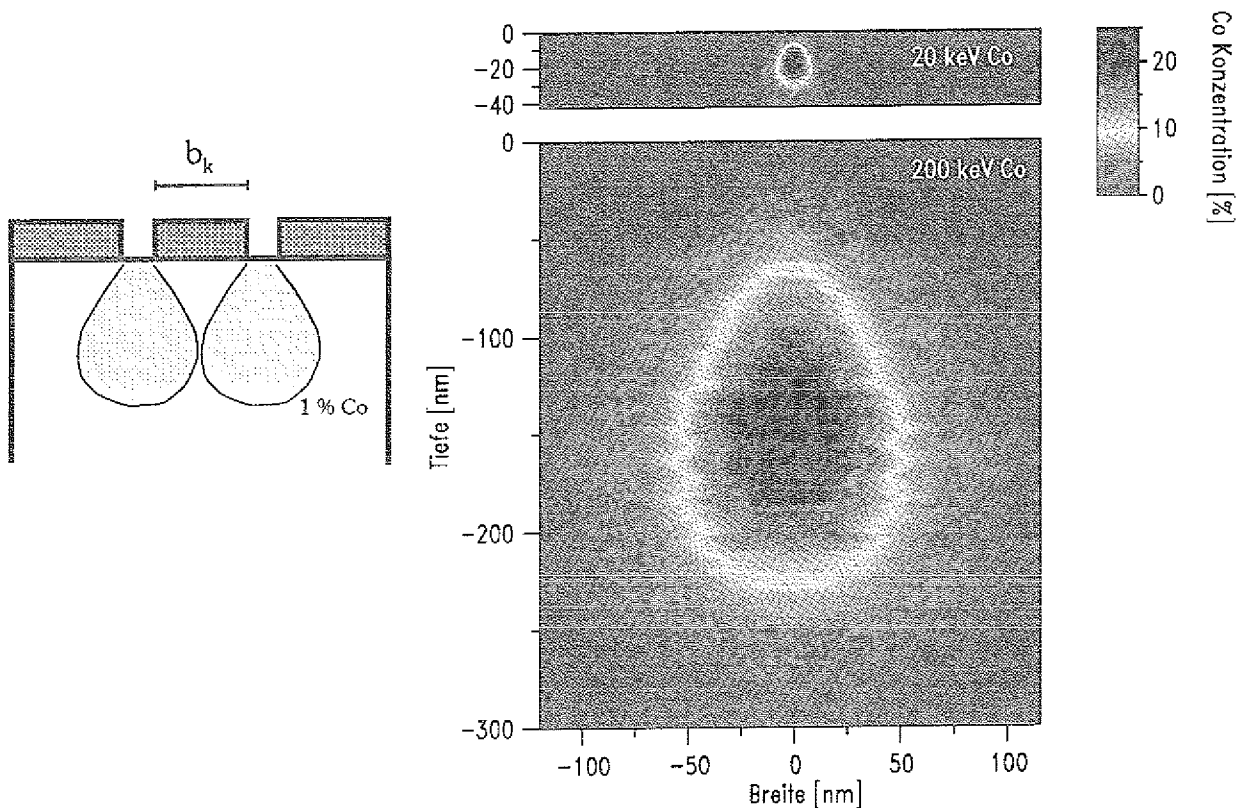
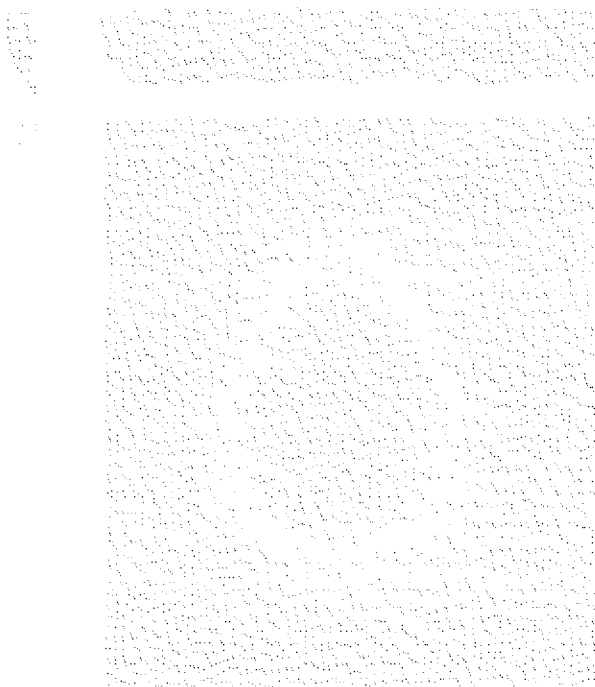


Abb. 5.53.: TRIM Simulation der longitudinalen und lateralen Verteilung der Co-Ionen in Si nach 20 und 200 keV Implantation.



Normalerweise ist dabei nur die auf die Einfallsrichtung der Ionen projizierte Reichweite interessant. Im Falle von strukturierten Targets gewinnt aber auch das laterale Straggling, d.h. die Verteilung der Ionen senkrecht zur Einfallsrichtung an Bedeutung. Geht man von einer perfekten Maske mit senkrechten Kanten aus, so kann man annehmen, daß sich eine Trennung der entstehenden CoSi_2 -Schichten auf jeden Fall ergibt, wenn die benachbarten Co-Profile nicht überlappen. Um dies sicher zu stellen, sollte die minimale Strukturbreite b_k so breit sein, daß sich benachbarte Profile erst berühren, wenn die Co-Konzentration auf wenige Prozent abgefallen ist. Für 1 % Co ergibt sich eine minimale Strukturbreite $b_k = 200 \text{ nm}$ für 200 keV und $b_k = 30 \text{ nm}$ für 20 keV Implantationen.

6. Diskussion

6.1. Schichtbildung

Während der Implantation entstehen durch die hohe Co-Übersättigung einzelne CoSi_2 -Keime, die im weiteren Verlauf wachsen oder sich wieder auflösen können. Die Größenverteilung dieser Ausscheidungen ist stark mit dem Implantationsprofil korreliert [39], d.h. große Ausscheidungen befinden sich in der Mitte und kleine am Rand des Profils. Mit steigender Dosis wachsen die Ausscheidungen bis, z.B. bei 200 keV Implantationen und einer Dosis von $3.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$, eine vergrabene stöchiometrische CoSi_2 -Schicht entsteht (Co-Peak-Konzentration 33 at%). Bis zu dieser Co-Konzentration steigt die Co-Peak-Konzentration nahezu linear in Abhängigkeit von der Dosis an, da sich in diesem Bereich die Breite des Profils kaum ändert [25]. Nachdem die Peak Konzentration 33 % erreicht hat, ändert sich der Verlauf der Abhängigkeit (siehe Abb. 5.1.). Dies deutet auf eine Änderung des Einbaumechanismus des implantierten Co im Substrat hin.

Von der Herstellung vergrabener SiO_2 -Schichten mit Implantation (SIMOX) ist bekannt, daß überstöchiometrischer Sauerstoff zu den Rändern des Implantationsprofils umverteilt wird [105]. Das stöchiometrische Limit wird also bei der O^+ -Implantation nie überschritten, so daß ab einer bestimmten Dosis die Peak-Konzentration nicht mehr zunimmt sondern nur noch das Implantationsprofil breiter wird. In früheren Arbeiten zur Ionenstrahlsynthese von CoSi_2 wurde daher auch von einer vollständigen Umverteilung bei überstöchiometrischer Co-Implantation ausgegangen [25].

Wir beobachten in der vorliegenden Arbeit aber anstatt eines Übergangs des linearen Anstiegs in eine konstante Konzentration, eine Änderung des Anstiegs zu einem langsameren Anwachsen der Peak-Konzentration mit der Dosis. Ein ähnliches Verhalten wird auch nach Fe-Implantation in Si, zur Herstellung von metallischem FeSi_2 , beobachtet [106]. Neben der Umverteilung muß daher noch ein anderer Mechanismus, der zu diesem weiteren Anwachsen der Konzentration führt, bei der Ionenstrahlsynthese von Metallsiliziden eine Rolle spielen.

Aus dem Vergleich der simulierten und gemessenen Tiefenprofile in Abb. 5.3. ist ersichtlich, daß eine Umverteilung stattfindet. Gute Übereinstimmung ergibt sich nämlich nur deutlich unterhalb des stöchiometrischen Wertes von 33 %. Für Dosen $\geq 3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ besitzt das simulierte Profil eine deutlich höhere Peak-Konzentration als das gemessene Profil. Ähnliche Ergebnisse wurden von van Ommen [107] publiziert. Nach den TRIM

Simulationen in Abb. 5.3. sollte die stöchiometrische Konzentration von 33 % Co nach einer Implantationsdosis von $3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ erreicht werden. Die nach einer Implantation mit dieser Dosis gemessene Peak-Konzentration ist aber deutlich geringer (30 %) und erst mit einer Dosis von $3.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ wird eine Peak-Konzentration von 33 % Co erreicht. Umverteilung muß daher sogar schon vor Erreichen des stöchiometrischen Limits auftreten. Oberhalb von $3.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ scheint die Umverteilung von einem Prozess begleitet zu sein, der einen überstöchiometrischen Einbau von Co in das Si-Substrat erlaubt. Nach den Channeling Ergebnissen, die eine Verbesserung des Kristallqualität bis zu einer Dosis von $6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ zeigen, ist die Bildung von Co-reichen nicht gitterangepaßten Phasen (CoSi , Co_2Si) sowie der interstitielle Einbau von Co ausgeschlossen. Auch Röntgenbeugungsexperimente geben keine Hinweise auf die Existenz dieser Phasen. Eine andere Möglichkeit wurde von Tan [108] beruhend auf EXAFS (= Extended X-Ray Absorption Fine Structure) Ergebnissen, vorgeschlagen. Danach wird Co auf dem unbesetzten Platz in der Mitte des Si-Kubus im CoSi_2 -Gitter, wie in Abb. 6.1. skizziert, eingebaut.

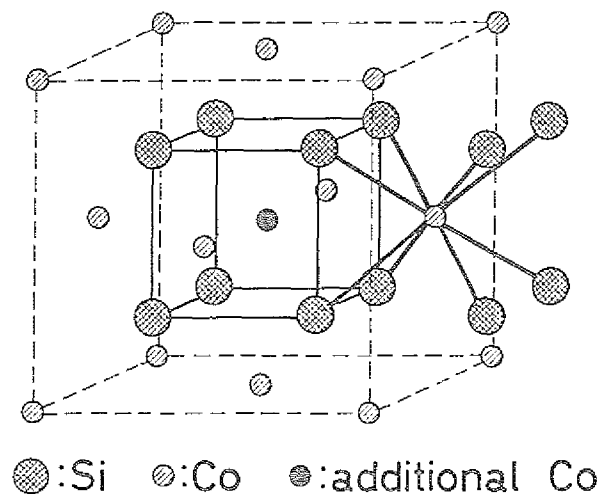


Abb. 6.1.: Einheitszelle von CoSi_2 mit einem zusätzlichem Co-Atom in der Mitte des Si-Kubus.

Die Koordination dieses Co-Atoms ist dann auch 8-fach. Diese Konfiguration ist in Einklang mit unseren Channeling Ergebnissen, da Channeling dadurch nicht beeinflusst wird. Eine Verbesserung der Kristallinität mit steigender Dosis wurde auch von Spraggs et al. [109] festgestellt. Diese Verbesserung ist begleitet von einem Anwachsen des Volumenanteils der

CoSi₂-Ausscheidungsphase. Wie Lindner [110] für Ni-Implantationen in Si gezeigt hat, ist die Kristallschädigung mit anwachsendem Ni-Gehalt stärker unterdrückt. Dieser Effekt kann durch einen Wechsel in den Bindungsstärken von den kovalent gebundenen Si-Kristall zu den metallisch gebundenen CoSi₂ erklärt werden. Metallbindungen sind leichter aufzubrechen, rekonstruieren aber auch leichter, d.h. die Atombeweglichkeit steigt und die Defekte heilen schneller aus. Tatsächlich ist die Kristallqualität nach der Implantation in den Proben am besten, in denen schon während der Implantation eine kontinuierliche CoSi₂-Schicht besteht.

Für Dosen größer $7 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ nimmt die Kristallqualität allerdings rapide ab. Das liegt wahrscheinlich daran, daß nun die Bildung Co-reicher Phasen möglich wird. Nach TEM [111] und EXAFS [108] Ergebnissen findet man nach solch hohen Implantationsdosen CoSi-Ausscheidungen. Mit EXAFS konnte nur noch eine Nahordnung und eine schwer geschädigte CoSi-Struktur, in Übereinstimmung mit unseren Channeling Ergebnissen, nachgewiesen werden.

Die Bildung einer zusammenhängenden Schicht während der Temperung erfolgt nur, wenn die Co-Peak-Konzentration nach der Implantation 18-19 % beträgt. Diese Konzentration, die sogenannte "kritische Peak-Konzentration" steht nach TEM Untersuchungen [112] in Zusammenhang mit der Morphologie der Ausscheidung im Zentrum des Profils. Unterhalb von 18 % Co sind die Ausscheidungen im Zentrum noch voneinander isoliert, während sie sich oberhalb von 18 % schon berühren. Auch nach einer kürzlich veröffentlichten theoretischen Abschätzung muß das Maximum des Implantationsprofils eine gewisse Höhe erreicht haben, damit eine kontinuierliche Schicht während der Temperung erzeugt werden kann [36]. Im Falle von Peak-Konzentrationen unterhalb von 18 % führt die Temperung zwar zu einer Kontraktion des Profils, aber nicht zur Bildung einer zusammenhängenden Schicht. Die TEM Untersuchungen in Kap. 5.1.2. (siehe Abb. 5.5.) zeigen in Übereinstimmung mit den Ergebnissen anderer Autoren [94,112,113], daß sich in diesem Fall große Ausscheidungen bilden. Dies ist begleitet von einer Umverteilung der Co-Atome von den Rändern des Konzentrations-Profils zur Mitte hin. Die Ausscheidungen an den Rändern des Profils verschwinden. Die schon nach der Implantation größeren Ausscheidungen in der Mitte des Profils wachsen also auf Kosten der kleineren Ausscheidungen am Rand. Dies ist die in Kap. 2.2.3. erläuterte Ostwald - Reifung. Die Aktivierungsenergie für den stattfindenden Umverteilungsprozeß ist nach Kap. 2.2.3. die Summe der Aktivierungsenergien von Löslichkeit und Diffusion von Co in Si. Diese Summe ist 3.52 eV und somit in guter

Übereinstimmung mit den experimentell im Bereich niedriger Co-Konzentrationen ermittelten Werten von 3.2 - 3.6 eV. Kohlhof hat ähnliche Werte mittels einer Widerstandsmeßmethode bei hohen Co-Konzentrationen erhalten [114].

Der in dieser Arbeit gemessene Wert der Aktivierungsenergie ist für das Anfangsstadium der Schichtbildung gültig in ausschließlich Ostwald-Reifung stattfindet. Sind die Co-Konzentrationen höher, so tritt im Verlauf der Temperung neben der Ostwald-Reifung auch die Koaleszenz auf. Nach Mantl [35] ist dieser Prozeß hauptsächlich für die Planarisierung der CoSi_2 -Schichten verantwortlich.

Neben der kritischen Peakkonzentration ist auch die Größenverteilung der Ausscheidungen von entscheidender Bedeutung für die Schichtbildung. Ist der Durchmesser der Ausscheidungen nach der Implantation in der Größenordnung der zu erwartenden Schichtdicke, dann bilden sich anstatt einer zusammenhängenden Schicht sehr große Ausscheidungen [35]. Diese Größenverteilung ist bei konstanter Dosis, wie in Kap. 2.2.1. gezeigt, von der Dosisrate (oder Strahlstromdichte) und der Implantationstemperatur abhängig. Dabei beeinflussen diese beiden Parameter die Größenverteilung der Ausscheidungen genau entgegengesetzt. Eine hohe Strahlstromdichte und eine hohe Implantationstemperatur können daher eine ähnliche Größenverteilung der Ausscheidungen liefern, wie eine niedrige Strahlstromdichte bei einer entsprechenden niedrigeren Implantationstemperatur.

Der Einfluß der Implantationstemperatur bei 200 keV Implantationen ist von Dekempeneer et al. [115] untersucht worden. Erst bei Temperaturen von 500°C (Strahlstromdichte: $3 \mu\text{A}/\text{cm}^2$) wurden die Ausscheidungen so groß, daß keine zusammenhängende Schicht mehr entstand. Nach der Literatur [69,115] sind mit 200 keV Implantationen CoSi_2 -Schichten in einem Bereich von $2 - 12 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ sowohl in (100) als auch in (111) Si hergestellt worden. Höhere oder kleinere Dosisraten sind bisher nicht benutzt worden.

Das Prozeßfenster für die erfolgreiche Herstellung von CoSi_2 -Schichten ist also in diesem Falle relativ groß. Kritisch dagegen werden die Implantationsparameter bzw. die Ausscheidungsverteilungen bei der Herstellung sehr dünner Schichten im Energiebereich ≤ 40 keV, wie in Kap. 5.2.1. am Beispiel der 40 keV Implantation in (100) Si gezeigt wurde.

Die obere Grenze für die Größe der Ausscheidungen ist die zu erwartende Schichtdicke. Wenn diese schon sehr gering ist, verkleinert sich auch das optimale Prozeßfenster für die Schichtherstellung. In Abb. 5.15. erkennt man, daß eine dünne zusammenhängende Schicht nur in einem sehr kleinem Dosisratenbereich hergestellt werden kann. Bei zu

niedrigen Strahlstromdichten entstehen bei einer festen Implantationstemperatur zu große Ausscheidungen, um während der Temperung eine kontinuierlichen Schicht zu bilden. Es entsteht eine Schicht aus sehr großen isolierten CoSi_2 -Ausscheidungen. Erhöht man die Strahlstromdichte entstehen zwar mehr kleinere Ausscheidungen, aber auch die Defekterzeugungsrate steigt dann an [28]. Ist diese zu hoch, können die stark geschädigten Ausscheidungen in der ebenso stark geschädigten Si-Matrix nicht mehr zu einer Schicht zusammenwachsen. Es gibt also wie in Abb. 5.15. ersichtlich einen optimalen Bereich, der sich, wie erwartet, mit steigenden Temperaturen zu höheren Strahlstromdichten bewegt.

Da das Ausheilen von Implantationsschäden bei höheren Temperaturen effektiver ist, sollte eine hohe Implantationstemperatur bei einer entsprechend hohen Strahlstromdichte, in Hinblick auf die Kristallqualität der Heterostruktur, günstiger sein, wie es auch in unseren Experimenten beobachtet wurde.

Die 20 keV und 30 keV Implantationen führten zu keinen guten Schichten in (100) Si, da offensichtlich noch kleinere Ausscheidungen erzeugt werden müßten als im Fall der 40 keV Implantation. Das war aber bei den zu Verfügung stehenden Strahlstromdichten nicht möglich. Eine Verringerung der Implantationstemperatur hätte auch nicht weitergeholfen, da diese unterhalb 400°C liegen müßte. In diesem Temperaturbereich ist aber die oberflächennahe Schicht nach der Implantation so schwer geschädigt (siehe Abb. 5.12.), daß keine einkristalline CoSi_2 -Schicht gebildet werden kann.

Im Gegensatz dazu konnten sehr dünne Schichten in (111) Si selbst mit so niedrigen Strahlstromdichten von $1.3 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ bei einer Implantationsenergie von 20 keV mit einer hervorragenden Schichtqualität hergestellt werden (siehe Abb. 5.20.). Der Unterschied zu (100) Si scheint mit der Ausscheidungsform zusammenzuhängen. In (100) orientiertem Si ergeben sich aus energetischen Gründen (siehe Kap. 2.2.2.) oktaedrisch geformte CoSi_2 -Ausscheidungen, die während der Temperung zunächst isotrop wachsen (in Richtung der $\{111\}$ Flächennormalen) und dadurch schnell größer werden können als die zu erwartende Schichtdicke. In (111) Si entstehen dagegen plattenförmige Ausscheidungen deren Längsseite meistens schon parallel zur Probenoberfläche ist und die während der Temperung, wie in Kap. 5.1.2. gezeigt, stark anisotrop wachsen (in Richtung der kurzen Seite). Daher ist in (111) Si die Ausscheidungsgröße wesentlich unkritischer bei der Herstellung dünner Schichten.

Außerdem ist die Ausscheidungsform für die unterschiedliche Rauigkeit der Schichten in (111) und (100) Si verantwortlich (vergleiche Abb. 5.17. und 5.21.). In (100) Si ergibt sich, bedingt durch die oktaedrische Form und der erst späten Ausbildung von $\{100\}$ Grenz-

flächen während der Temperung, eine gewisse Anzahl von Stufen auf der Grenzfläche. Diese entstehen durch nicht aufgelöste Teile der oktaedrischen Ausscheidungen, so daß die Seitenflächen der Stufen $\{111\}$ -Grenzflächen sind. Zur Verdeutlichung ist der Schichtbildungsprozeß in Abhängigkeit von der Substrat Orientierung in Abb. 6.3. skizziert.

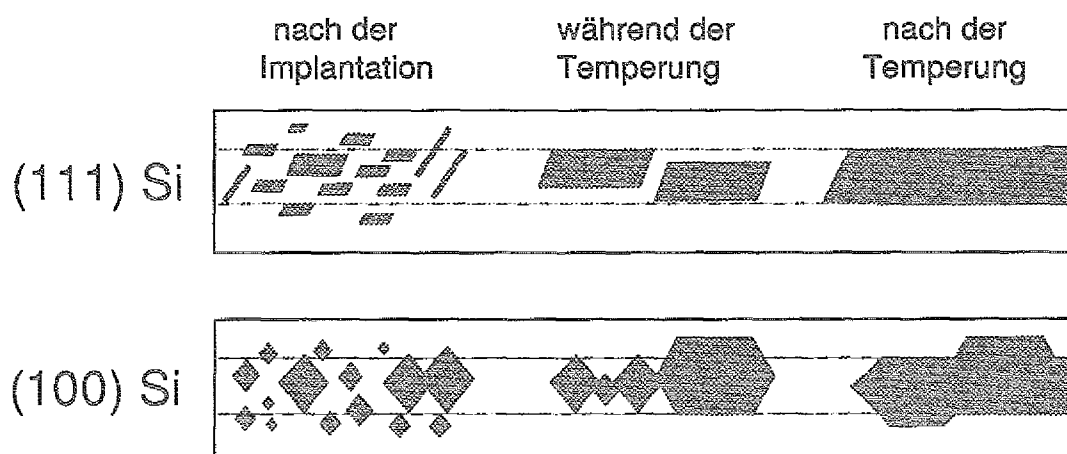


Abb. 6.3.: CoSi_2 -Schichtbildung in (111) Si und (100) Si.

6.2. Elastische Gitterverzerrung und Schichtorientierung

Die Verzerrung der CoSi_2 -Schichten ist nach den Ergebnissen aus Kap. 5.3.1. in einem Schichtdickenbereich von 25 - 70 nm konstant. Mithilfe der tetragonalen Verzerrung der Schichten und den aus Röntgenbeugungsmessungen erhaltenen Verzerrungen senkrecht zur Grenzfläche ($\epsilon^\perp$) kann man $\epsilon^\parallel$ bestimmen. Diese stimmt gut mit den direkt, durch GID Messungen an diesen Schichten [116], bestimmten Werten $\epsilon^\parallel(\text{GID})$ überein. Die mit Gleichung (2.23) bzw. (2.24) und $\epsilon^\perp$ berechneten Werten $\epsilon_F^\parallel$ weichen dagegen um ca. 10 % von $\epsilon^\parallel$ ab. Dies könnte aber in Ungenauigkeiten der elastischen Konstanten begründet sein.

Tabelle 6.1.: Gemessene und berechnete elastische Verzerrung von CoSi_2 -Schichten in (100) und (111) Si (K berechnet sich aus den elastischen Konstanten gemäß Gl. (2.23) und (2.24)).

Orientierung	$\epsilon^\perp$	$\epsilon^\parallel$	$\epsilon_F^\parallel = K\epsilon^\perp$	$\epsilon^\parallel = \epsilon^\perp - \epsilon^\perp$	$\epsilon^\parallel(\text{GID})$
(100)	-1.58	-0.91	0.79	0.68	0.72
(111)	-1.26	-0.53	0.65	0.73	0.66

Vandenberg et al. [95] erhält aus Röntgenmessungen an 100 nm dicken CoSi_2 -Schichten ähnliche Werte für $\epsilon^\perp$ (-0.53 in (111) und -0.93 in (100)). Die Verzerrung scheint daher nicht von der Schichtdicke sondern nur von der Substrat - Orientierung abzuhängen. Ein Vergleich der Verzerrung mit den in Kap. 2.3.2. berechneten theoretischen Werten für pseudomorphe Schichten, zeigt, daß es parallel zur Grenzfläche eine Relaxation von ca. 50 % gegeben hat. Die Experimente bestätigen die starke Anisotropie von $\epsilon^\perp$, wie es vom biaxialen Spannungsmodell vorhergesagt wird. Im Gegensatz zu den obigen Messungen ist die Verzerrung von CoSi_2 -Schichten, die mit SPE bei 600°C hergestellt wurden, von der Dicke abhängig. In Übereinstimmung mit dem Modell von People et al. [59] wird die kritische Schichtdicke dieser Schichten mit 30 nm angegeben [62]. Ebenso haben CoSi_2 -Ausscheidungen eine stärkere Verzerrung ($\epsilon^\perp = -1.1\%$) [94].

Die in den mit IBS hergestellten Schichten gefundene Verzerrung scheint daher nur mit der Temperung bei den sehr hohen Temperaturen zusammenzuhängen. Die Fehlpassung zwischen Si und CoSi_2 reduziert sich von -1.21 % bei Raumtemperatur zu -0.5 % bei 1150°C (Tempertemperatur der untersuchten Schichten). Für diese Abschätzung wurden die thermischen Ausdehnungskoeffizienten von CoSi_2 und Si benutzt (Kap. 2.3.2.). Wären die Schichten bei 1150°C vollständig verspannt (pseudomorph), wie es aufgrund des Modells von People et al. selbst für 100 nm dicke Schichten zu erwarten wäre (siehe Abb. 2.12.), müßte sich nach der Abkühlung auf Raumtemperatur pseudomorphe Schichten mit $\epsilon^\parallel = 1.21\%$ (Verzerrung aufgrund der Gitterfehlpassung bei 1150°C + thermische Verzerrung beim Abkühlen) ergeben. Relaxieren die Schichten dagegen bei 1150°C, so ergäbe sich wegen der während der Abkühlphase entstehenden thermischen Verzerrung ($\epsilon_{\text{th}} = 0.7\%$), eine Verzerrung parallel zur Grenzfläche von 0.7 %. Dies ist gerade die in den Schichten ge-fundene Verzerrung. Um pseudomorphe Schichten zu erhalten, müßten daher noch viel dünnere Schichten bei entsprechend niedrigen Implantationsenergien hergestellt werden.

Der Wechsel in der Orientierung der (111) orientierten Schichten von A- zu B-Typ mit abnehmender Schichtdicke scheint mit der Größe der Ausscheidungen im Maximum des Implantationsprofils zusammenzuhängen. Bei 200 keV Implantationen zur Herstellung der dicken Schichten entsteht, wie schon öfters erwähnt, eine Größenverteilung der CoSi_2 -Ausscheidungen, die stark an das Co-Konzentrationsprofil gekoppelt ist. Nach TEM Untersuchungen [39] sind die großen Ausscheidungen A-Typ während die kleinen Ausscheidungen am Rand des Profils B-Typ sind. Den kritischen Durchmesser für die Ent-

stehung von B-Typ Ausscheidungen wird von Bulle-Lieuwma et al. [39] mit 20-30 nm angegeben. Während der Temperung wachsen nun die großen Ausscheidungen auf Kosten der kleinen und es entsteht in diesem Fall eine A-Typ Schicht. Für die Herstellung der dünnen Schichten wird die Implantation bei niedrigen Energien (< 40 keV) durchgeführt, damit das Profil schmaler wird. Gleichzeitig werden dann aber auch die Ausscheidungen wegen der kleineren Implantationsdosen kleiner. Zur Herstellung einer kontinuierlichen Schicht müssen die Ausscheidungen nach der Implantation kleiner oder gleich der zu erwartenden Dicke der Schicht sein, d.h. in unserem Fall kleiner als 25 nm und damit unterhalb des kritischen Durchmessers für die Bildung von A-Typ Ausscheidungen. Es ist daher naheliegend anzunehmen, daß die während der Implantation bei niedrigen Energien entstehenden Ausscheidungen fast ausschließlich B-orientiert sind und aufgrund dessen während der Temperung eine B-Typ Schicht entsteht.

Nach den Ausführungen in Kapitel 6.1. müßte es auch bei höheren Energien möglich sein, mit entsprechend hohen Strahlstromdichten, genügend kleine B-Typ Ausscheidungen in der Mitte des Profils zur Bildung einer B-orientierten Schicht zu erzeugen. Dies ist tatsächlich von Hsieh et al. [117] gezeigt worden. Die Autoren haben eine 100 keV Implantation mit $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ bei einer sehr hohen Strahlstromdichte von $j_i = 12 \text{ } \mu\text{A/cm}^2$ ($T_i = 350^\circ\text{C}$) durchgeführt und erhielten danach ca. 60 % B-Typ Ausscheidungen, die während der Temperung zu einer Schicht mit 70 % B-Typ führte. Implantationen mit geringeren Strahlstromdichten aber sonst gleichen Bedingungen (siehe Kap. 5.3.1. und Ref. [92]) ergeben nach der Temperung A-Typ Schichten.

6.3. Elektrische Transporteigenschaften und Schottkybarrieren

Nach den Untersuchungen von Kap. 5.4.1. gibt es einen generellen Unterschied im elektrischen Transport von (100) und (111) orientierten Schichten. Bis jetzt gibt es dazu keine Erklärung, da der spezifische Widerstand und der Hallkoeffizient in einem kubischen Kristall, wie CoSi_2 , isotrop sein sollten. Der einzige offensichtliche Unterschied in den verschieden orientierten Schichten ist die Verspannung, die möglicherweise einer Veränderung der Bandstruktur und somit im Ladungstransport hervorruft. Da aber bisher keine Rechnungen zur Bandstruktur von CoSi_2 unter Verspannung vorliegen, ist dies nur eine Spekulation.

Auch der Magnetowiderstand ist abhängig von der Orientierung. Er zeigt aber für beide Orientierungen eine quadratische Abhängigkeit vom Magnetfeld (siehe Abb. 5.29.). Nach

der klassischen Theorie des Magnetwiderstands [120] müssen daher mindestens zwei Bänder zum elektrischen Transport beitragen, in Übereinstimmung mit Bandstrukturrechnungen [11] und Messungen des "deHaas van Alphen"-Effektes [93]. Nach diesen Rechnungen und Messungen existieren drei "lochartige" Bänder in CoSi_2 . Die Autoren von Ref. [11] geben als Ladungsträgerdichte $n_h = 2.59 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ an, d.h. exakt ein Loch pro Einheitszelle CoSi_2 ($3a_{\text{CoSi}}/4$) trägt zum Ladungstransport bei. Der positive Hallkoeffizient (siehe Abb. 5.30.) bestätigt, daß Löcher die dominanten Ladungsträger sind. Da die Hallmessungen aber im Grenzfall schwacher Felder ($\omega_c \tau = 6.5 \times 10^{-4} \ll 1$, mit $B = 0.37 \text{ T}$ und $\tau(4 \text{ K}) = 2.54 \times 10^{-13} \text{ s}$) durchgeführt worden sind, ist eine Interpretation der Daten nur schwer möglich. In diesem Fall ist der Hallkoeffizient nämlich von der Krümmung der Fermifläche, der Fermigeschwindigkeit, der effektiven Masse der Ladungsträger und der Variation der Relaxationszeit $\tau(k)$ über die Fermifläche abhängig [121]. Eine deutliche Vereinfachung ergibt sich bei kubischen Metallen im Grenzfall des freien Elektronengases, denn dann ist die Fermifläche eine Kugeloberfläche und die Relaxationszeit somit isotrop. In diesem Fall ist $R_{\text{fe}} = 1/(n^*e)$ mit n^* : effektive Dichte der Ladungsträger. In der (100) orientierten Schicht ergibt sich $n^* = 2.9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ in überraschend guter Übereinstimmung mit dem theoretischen Wert (siehe oben). Dies ist aber nur eine sehr grobe Näherung. Die Fermifläche von CoSi_2 ist nämlich keine Kugeloberfläche sondern ein kompliziertes Gebilde aus drei "Loch"-Flächen. Auch die Herkunft der Temperaturabhängigkeit des Hallkoeffizienten in (111) Schichten kann innerhalb dieses Modells nicht verstanden werden. Eine Temperaturabhängigkeit im Grenzfall schwacher Felder wird häufig durch eine temperaturabhängige Anisotropie der Relaxationszeit, bedingt durch einen Wechsel der dominanten Streumechanismen in den jeweiligen Temperaturbereichen, erklärt [121]. Ob dies die Erklärung für die beobachtete Temperaturabhängigkeit der Schichten in (111) Si ist, ist unsicher, da dann die Schichten in (100) Si eine ähnliche Temperaturabhängigkeit zeigen müßten. Zur genaueren Untersuchung dieses Effektes müßten Magnetowiderstandsmessungen speziell in dem Temperaturbereich in dem sich der Hallkoeffizient stark ändert durchgeführt werden, um die Relaxationszeiten zu bestimmen.

Als Streumechanismus ergibt sich, nach den Fits der Bloch-Grüneisen Formel an die Widerstandswerte, bei tiefen Temperaturen s-d Elektron Streuung ($\rho \sim T^3$). Dies weist auf überlappende s- und d-Bänder hin, wie es nach Bandstrukturrechnungen auch zu erwarten ist [11].

Mit dem Modell des freien Elektronengases kann man aus dem Restwiderstand ρ_0 die elastische Streulänge l_c der Ladungsträger berechnen. Es gilt:

$$l_c = \frac{mv_F}{ne^2\rho_o} \quad (6.1)$$

wobei m die effektive Masse der Ladungsträger, v_F die Fermigeschwindigkeit und n die Ladungsträgerdichte ist. In CoSi_2 ist $v_F = 1.06 \times 10^8 \text{ cm/s}$ [1] und $n = 2.59 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$. Für die sehr dicken CoSi_2 -Schichten (110 nm) ergeben sich bei 4 K ($m = m_e$) sehr große elastische Streulängen von $l_c = 360 \text{ nm}$ in (100) Si ($\rho_o = 0.45 \mu\Omega\text{cm}$) und $l_c = 110 \text{ nm}$ in (111) Si ($\rho_o = 1.3 \mu\Omega\text{cm}$). Hensel [5] findet in mit SPE hergestellten 100 nm dicken (111) orientierten CoSi_2 -Schichten auf die gleiche Weise eine mittlere freie Weglänge von $l_c = 60 \text{ nm}$. Da mit SPE hergestellte CoSi_2 -Schichten nur bei ca. 600° C getempert werden, ergeben sich wahrscheinlich leichte Stöchiometrieabweichungen, die dann zu dem höheren Restwiderstand im Vergleich zu den mit IBS hergestellten Schichten führen. Berechnet man aus den mittleren freien Weglängen die elastische Streuzeit $\tau = l_c/v_F$ so ergeben sich Werte, die gut mit den aus dem Magnetowiderstand berechneten elastischen Streuzeiten τ_o übereinstimmen.

Tabelle 6.2.: Elastische Streuzeiten bei 4 K, berechnet aus dem Restwiderstand und dem Magnetowiderstand.

Orientierung	$\tau = l_c/v_F$	τ_o
(100)	$3.4 \times 10^{-13} \text{ s}$	$2.54 \times 10^{-13} \text{ s}$
(111)	$1.0 \times 10^{-13} \text{ s}$	$6.65 \times 10^{-14} \text{ s}$

Mithilfe des Widerstandsverhältnisses und der elastischen Streulänge läßt sich eine Streulänge von 12 nm bei Raumtemperatur abschätzen. Diese ist selbst bei Raumtemperatur noch verhältnismäßig groß und liegt im Größenbereich der dünnsten in dieser Arbeit hergestellten Schichten.

Verringert man die Schichtdicke nur wenig (wie im Fall der 70 nm dicken Schichten), so macht sich eine Erhöhung des Restwiderstands bedingt durch Grenzflächenstreuung nur bei tiefen Temperaturen bemerkbar. Die Schichten sind zu dick, als daß Grenzflächenstreuung bei höheren oder sogar Raumtemperatur eine Rolle spielen könnte. Kommt die Schichtdicke allerdings in die Nähe der Streulänge bei Raumtemperatur (12 nm), so ergibt sich über den gesamten Temperaturbereich eine Erhöhung des Widerstandes (siehe Abb. 5.31.).

Die Erhöhung des Restwiderstandes bei 4 K kann aber nicht alleine aufgrund der klassischen, auf der Boltzmann-Gleichung beruhenden, Theorie von Fuchs verstanden werden [120,121]. Nach Fuchs ergibt sich das Widerstandsverhältnis von Widerstand einer dünnen Schicht zu Widerstand im Bulk-Material (ρ_∞):

$$\frac{\rho_\infty}{\rho_0} = 1 - \frac{3}{2\kappa} \int_0^1 \frac{(u-u^3)(1-p)[1-\exp(-\frac{\kappa}{u})]}{1-p\exp(-\frac{\kappa}{u})} du \quad (6.2)$$

mit $\kappa = d/l_c$ (d : Dicke der Schicht und l_c : mittlere freie Weglänge im Volumenmaterial). p ist die Wahrscheinlichkeit spiegelnd, d.h. ohne Verluste an der Grenzfläche gestreut zu werden ("Spiegelparameter"). Dabei bedeutet $p = 1$ eine spiegelnde Grenzfläche (kein Einfluß auf den Widerstand) und $p = 0$ diffuse Streuung an der Grenzfläche (deutliche Erhöhung des Restwiderstandes).

In Abb. 6.3. sind die, auf die mittlere freie Weglänge normalisierten, Dicken der Schichten gegen die, auf den Bulk-Restwiderstand normalisierten, Restwiderstände aufgetragen. Als Bulk-Restwiderstände wurden die Restwiderstände der 110 nm dicken Schichten verwendet, wobei zwischen (100) und (111) orientierten Schichten unterschieden wurde. Gleichzeitig sind die nach der Fuchs-Theorie zu erwartenden Verläufe des Restwiderstandes in Abhängigkeit von der Dicke für verschiedene Spiegelparameter eingezeichnet worden. Die dünnen Schichten hätten somit in beiden Orientierungen einen Spiegelparameter zwischen 0 und 0,3, d.h. sie müßten eine sehr raue Grenzfläche haben. Dies ist im Widerspruch zu den TEM und GID Ergebnissen (siehe Kap. 5.2. und [122]) nach denen die Grenzfläche, speziell der dünnen (111) orientierten Schichten, sehr glatt sind.

Da hier sehr reine, einkristalline Proben vorliegen ($k_F l_c \gg 1$) mit langen Phasenkohärenzlängen von $l_\phi = 2.3$ mm in (100) Si und $l_\phi = 0.75$ mm in (111) Si bei 4 K [100] können auch Quanteneffekte im Tieftemperaturbereich eine Rolle spielen. Nach Tesanovic [123] führt Grenzflächenrauhigkeit in diesem Fall, aufgrund von schwacher Lokalisierung, zu einem wesentlich stärkerem Anstieg des Restwiderstandes im Vergleich zur klassischen Theorie von Fuchs. Die quantenmechanische Behandlungseffekten des elektrischen Transports in dünnen Schichten ergibt:

$$\frac{\rho_\infty}{\rho} = \frac{1}{n_c} \cdot \sum_{n=1}^{n_c} \left(1 + \frac{\pi l_c H^2}{6d^3} n^2 \right)^{-1} \quad (6.3)$$

mit $n_c = k_F d / \pi \gg 1$ und k_F : Fermiwellenvektor. H^2 ist die mittlere quadratische Abweichung von der Schichtdicke.

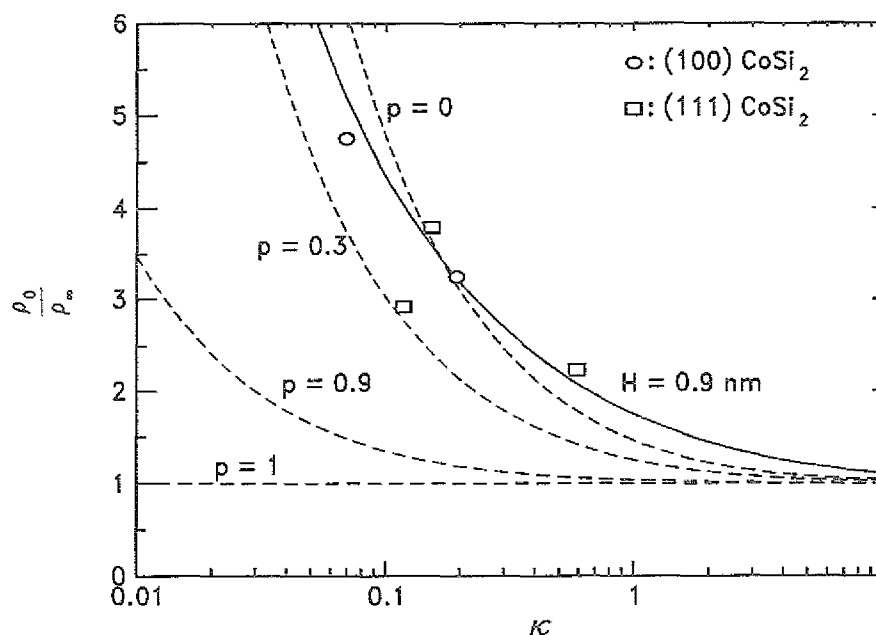


Abb. 6.3.: Abhängigkeit der normierten Restwiderstände ρ_0/ρ_∞ von der, auf die mittlere freie Weglänge, normierten Schichtdicke $\kappa = d/l_c$. Zusätzlich sind die, nach den Theorien von Fuchs (gestrichelt) bzw. Tesanovic (durchgezogen), zu erwartenden Abhängigkeiten des Restwiderstands von der Schichtdicke eingezeichnet.

Für die 70 nm dicken Schichten ergibt sich $H = 1$ nm, während man für die dünnen Schichten ein kleinerer Wert von $H = 0.7$ nm erhält. Diese Werte stimmen überraschend gut mit aus GID Untersuchungen bestimmten Schichtdickenschwankungen von 1 - 4 nm überein [122]. Ein Vergleich mit den aus TEM-Aufnahmen bestimmten maximalen Stufenhöhen (bis zu 10 nm in (100) Si) ist hier nicht zulässig, da es sich dabei nicht wie bei GID und den Widerstandsmessungen um eine über die ganze Probenfläche mittelnende Methode handelt. Zur Veranschaulichung ist in Abb. 6.3. auch die Abhängigkeit des Restwiderstandes von der Schichtdicke nach der Theorie von Tesanovic für $H = 0.9$ nm eingezeichnet. Im Tieftemperaturbereich kommt es daher wegen der langen Kohärenzlänge von CoSi₂ und dem Einfluß der Grenzfläche zu schwacher Lokalisierung in dünnen Schichten, die, eventuell auch mit einem Anteil an klassischer Grenzflächenstreuung, zu der starken Erhöhung der

Restwiderstände mit abnehmender Schichtdicke führen. Die geringe Erhöhung des Restwiderstandes sehr dünner Schichten bei Raumtemperatur ist dagegen nur durch die klassische Grenzflächenstreuung bedingt. Im Hinblick auf die, in der Einleitung erwähnten, Bauelemente mit CoSi_2 -Gate, ist die Erhöhung des Widerstandes mit abnehmender Schichtdicke ein Nachteil. Eine Optimierung der Grenzflächenrauigkeit der Schichten wäre vorteilhaft.

Von weiterer Bedeutung für die Transistoren mit CoSi_2 Gate ist die Höhe der Schottkybarriere, die sich zwischen CoSi_2 und Si bildet. Nach der ersten theoretischen Erklärung des Metall-Halbleiterkontaktes von Schottky und Mott [124] ist die Schottkybarrierenhöhe die Differenz zwischen Austrittsarbeit aus dem Metall und Elektronenaffinität des Halbleiters. Dies konnte jedoch experimentell nicht bestätigt werden, z.B. ergeben Al und Au auf GaAs gleiche Schottkybarrierenhöhen obwohl sie unterschiedliche Austrittsarbeiten haben ($\text{Au} = 4.2 \text{ eV}$ und $\text{Al} = 5.2 \text{ eV}$). Grenzflächenzustände, die Ladungen absorbieren können, wurden 1947 von Bardeen als zusätzliche Erklärung vorgeschlagen [125]. Mittlerweile gibt es eine Vielzahl von Theorien über den Ursprung dieser Grenzflächenzustände und deren Einfluß auf die Schottkybarrierenhöhe [126,127,128,129].

Im Falle von epitaktischen Grenzflächen, die mit NiSi_2 und CoSi_2 auf Si mit einer hervorragenden Qualität hergestellt werden können, scheint die Schottkybarrierenhöhe stark von der jeweiligen Grenzflächenstruktur abzuhängen. Tung [130] hat dies am Beispiel von NiSi_2 auf Si demonstriert. Auf (111) Si kann NiSi_2 in A- oder B-Orientierung hergestellt werden, wobei das Ni im Falle der A-Orientierung an der Grenzfläche 5-fach gebunden ist, während es im Falle der B-Orientierung 7-fach koordiniert ist. Als Schottkybarrierenhöhe gibt Tung 0.65 eV für A-Typ Schichten und 0.79 eV für B-Typ Schichten an. Dabei konnte durch eine kürzlich veröffentlichte strukturelle und elektrische Untersuchungen von Vrijmoeth et al. [131] ausgeschlossen werden, daß diese Erhöhung der Barriere von A- zu B-Orientierung durch elektrisch aktive Defekte verursacht ist [132]. Neueste Bandstruktur-Rechnungen bestätigen diesen Unterschied in der Schottkybarrierenhöhe zwischen A- und B-orientiertem NiSi_2 auf (111) Si [133].

Im Falle von CoSi_2 auf Si gibt es bis jetzt nur wenige Untersuchungen zur Schottkybarrierenhöhe. Dies liegt daran, daß CoSi_2 -Schichten nicht wie NiSi_2 in unterschiedlichen Orientierungen (A- und B-Typ) auf (111) Si hergestellt werden können (siehe Kap. 3.1.). Die Schottkybarrierenhöhe für mit SPE hergestelltem B-Typ CoSi_2 auf (111) Si ist nach Tung [134] 0.64 eV in Übereinstimmung mit Ergebnissen anderer Autoren [63,135].

Für CoSi_2 auf (100) Si ergibt sich in Abhängigkeit von den Herstellungsbedingungen 0.68 - 0.8 eV [13]. Ein ähnliches Verhalten hat sich für NiSi_2 auf (100) Si ergeben [47], wobei dort die verschiedenen Herstellungsbedingungen zu unterschiedlich rauhen Grenzflächen führen. Die Abhängigkeit der Schottkybarriere von der Grenzflächenrauigkeit wird in dieser Arbeit auf Barriereninhomogenitäten zurückgeführt. Dieser Theorie zufolge entstehen aufgrund unterschiedlicher Kristallorientierung und Koordination von Metallatom und Si an der Grenzfläche lokal unterschiedliche Barrierenhöhen. Je nach Verteilung und Größe dieser Barrierenhöhen kann der Stromtransport bevorzugt über die niedrigen Barrieren erfolgen oder falls diese abgeschirmt werden, über die hohen [129,136].

Nach den Untersuchungen in Kap. 5.4.2. (siehe Abb. 5.22.) ist die 70 nm dicke CoSi_2 -Schicht auf (111) Si A-Typ und die 18 nm dicke B-Typ. Die Koordination der Co-Atome an der Grenzfläche der mit IBS hergestellten dicken Schichten ist nach HRTEM Untersuchungen [39] 7-fach für obere und untere Grenzfläche. An den dünnen Schichten sind bisher noch keine Untersuchungen durchgeführt worden. Da die dünnen Schichten wie die mit SPE hergestellten Schichten B-Typ sind, ist anzunehmen daß sie dann auch wie diese an der Grenzfläche 5- oder 8-fach koordiniert sind.

Die Schottkybarrierenhöhe der dicken A-Typ Schicht ist daher für Top- und Bottomdiode gleich mit 0.78 eV. Die Schottkybarrierenhöhe der dünnen CoSi_2 -Schicht ist für die Topdiode 0.52 eV und 0.76 eV für die Bottomdiode. Dies könnte mit einem Unterschied in den Koordinationen des Co an der oberen bzw. unteren Grenzfläche zusammenhängen. (z.B. obere Grenzfläche 5-fach und untere Grenzfläche 8-fach). Nach Bandstrukturrechnungen [137] ist die Barrierenhöhe bei gleicher Koordination des Co-Atoms in A-Typ Schichten immer höher als in B-Typ Schichten, wobei diese Rechnungen allerdings nur für 8-fache und 5-fache Co-Koordination durchgeführt wurden. Bei gleicher Orientierung steigt die Barrierenhöhe mit Änderung der Koordination von 5-fach zu 8-fach um 0.4 eV. Die in Ref. [137] berechneten absoluten Barrierenhöhen stimmen aber weder mit denen dieser Arbeit noch mit Literaturwerten überein.

In (100) Si ist die Grenzfläche, wie in Kap. 6.1. erklärt wurde, wesentlich rauher als in (111) Si. Es existieren daher häufig die in Abb. 5.4. gezeigten Terrassen mit seitlichen (111)-Flächen. Dabei ist nach TEM die Rauigkeit der oberen Grenzfläche höher (bis zu 10 nm) als die der unteren (3 nm). Die Co-Koordination wechselt dabei nach HRTEM [51] an diesen Schichten gerade an den Terrassen von 6-fach (neben der Terrasse, siehe Abb. 6.4.) zu einer Co-reichen Grenzfläche (Co 4-fach koordiniert; auf der Terrasse).

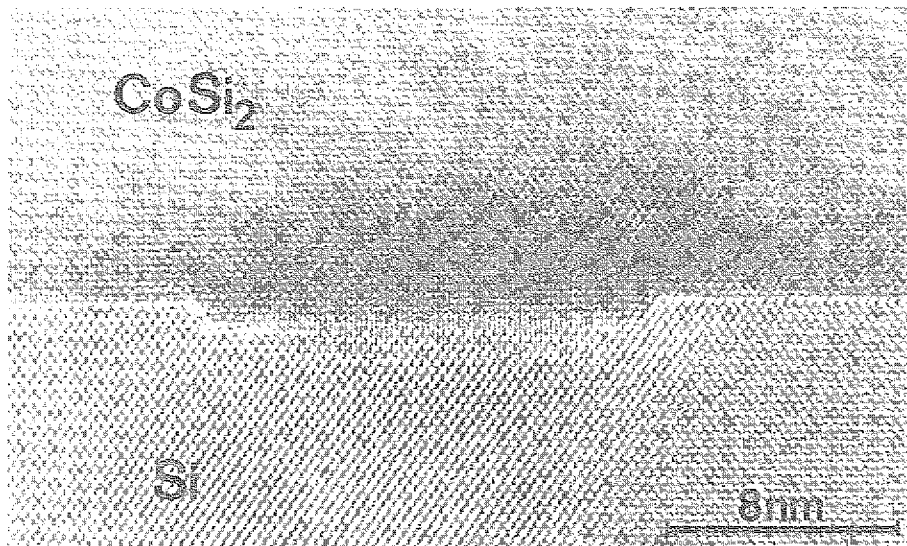


Abb. 6.4.: HRTEM-Aufnahme einer (100) CoSi₂/Si-Grenzfläche mit unterschiedlicher Koordination des Co auf und neben der Terrasse [51].

An der unteren Grenzfläche werden zudem auch Bereiche mit 8-fach koordiniertem Co gefunden [51]. Dies korrespondiert zu den Barrierenhöhen von 0.78 eV für die Bottomdiode (weniger Terrassen) und 0.62 eV für die Topdioden. Diese Mischung von Grenzflächenstrukturen (die (111) Facetten müssten strenggenommen auch dazu gezählt werden) an beiden Grenzflächen bedingt inhomogene Schottkybarrieren, so daß eine Zuordnung von Grenzflächenstruktur und Schottkybarrierenhöhe in diesem Fall nicht möglich ist. Eine Erhöhung der Barriere aufgrund von Defekten kann allerdings ausgeschlossen werden, da für eine Erhöhung der Schottkybarriere um 0.1 eV eine Dichte von 10^{13} cm^{-2} elektrisch aktiver Defekte vorhanden sein müßte [131]. Man kann also feststellen: Die Schottkybarrierenhöhe in Si/CoSi₂/Si-Heterostrukturen hängt von der kristallographischen Orientierung der Schichten ab. Die Ergebnisse weisen darauf hin, daß die atomare Grenzflächenstruktur die Höhe der Barriere beeinflussen und Inhomogenitäten zu lokal unterschiedlichen Barrieren führen.

6.4. Co-Implantation in SIMOX-Wafer und SiGe-Schichten

Die Experimente zur Mesotaxie in SIMOX-Wafern haben gezeigt, daß es möglich ist eine CoSi₂-Schicht in der Si-Deckschicht auf dem SiO₂ herzustellen. Die Kristallqualität dieser

CoSi_2 -Schichten hängt dabei empfindlich von der Dicke der Si-Deckschicht bzw. der Reichweite der Co-Ionen ab. Solange das Maximum des Implantationsprofils vor der Si/SiO₂-Grenzfläche liegt, erhält man einkristalline CoSi_2 -Schichten in der Si-Deckschicht. Diese können je nach verwendeter Implantationsenergie sogar direkt auf der SiO₂-Schicht liegen. Das im SiO₂ vorliegende Co bildet während der Temperung mit dem vorliegenden Si und O wahrscheinlich $\text{Co}_x\text{O}_y\text{Si}_z$ -Ausscheidungen und steht somit für die CoSi_2 -Schichtbildung nicht mehr zur Verfügung. Da diese Ausscheidungen sehr klein waren, konnte keine genaue Analyse zu ihrer Identifikation vorgenommen werden. Liegt das Maximum des Implantationsprofils direkt an der Si/SiO₂-Grenzfläche oder sogar im SiO₂, entsteht anstelle einer einkristallinen CoSi_2 -Schicht eine aus unterschiedlich orientierten CoSi_2 -Ausscheidungen bestehende Schicht. In diesem Fall ist das Si direkt an der Grenzfläche durch die Implantation sehr stark geschädigt worden (siehe Abb. 5.39.). Die Orientierungsinformation ist daher für Ausscheidungen in der Nähe der Grenzfläche, in deren Richtung die Umverteilung während der Temperung stattfindet, nicht mehr vorhanden, so daß sich eine polykristalline CoSi_2 -Schicht bildet.

Es ist bekannt, daß Sauerstoff die Silizidbildung verlangsamt [138]. Dies könnte auch die Bildung der Ausscheidung während der Implantation und somit den gesamten Schichtbildungsprozeß beeinflussen. Da die Sauerstoffkonzentration in der Si-Deckschicht der SIMOX-Wafer nach SIMS Untersuchungen weniger als 0.5 % beträgt, ist dies aber nahezu ausgeschlossen.

Bei Verwendung von geeigneten Implantationsenergien (abhängig von der Dicke der Si-Deckschicht) ist es möglich eine einkristalline CoSi_2 -Schicht mit guter Kristallqualität direkt auf dem SiO₂ herzustellen. Durch Oxidieren der Si-Deckschicht kann man eine SiO₂/CoSi₂/SiO₂-Heterostruktur erzeugen, die als Ausgangsstruktur für einen PBT dienen kann. Dieser hätte den Vorteil geringerer parasitärer Kapazitäten und Gateströme, da sich unter- und oberhalb der Gatefinger Isolatormaterial befindet [104].

Die Implantationen in SiGe haben gezeigt, daß die Ge-Konzentration in der SiGe-Schicht, aber auch die Implantationstemperatur, für die Bildung einer CoSi_2 -Schicht in SiGe bedeutend sind. Nach dem ternären Phasendiagramm von Co-Si-Ge gibt es eine Region, begrenzt durch die Punkte $\text{Si}_{0.66}/\text{Co}_{0.33}/\text{Ge}_0$, $\text{Si}_1/\text{Co}_0/\text{Ge}_0$, $\text{Si}_{0.29}/\text{Co}_0/\text{Ge}_{0.71}$, in der nur CoSi_2 und SiGe Mischkristalle erwartet werden [139]. Die 150 keV Implantation in $\text{Si}_{0.52}\text{Ge}_{0.48}$ ergab eine Komposition im Maximum des Co Profils von 22 at% Co, 52 at% Si und 26 at% Ge und liegt damit außerhalb der oben genannten Region liegt. Außer der

CoSi₂-Phase können daher noch andere Phasen wie CoGe₂ nach der Implantation in der SiGe-Schicht vorliegen, die die Bildung einer CoSi₂-Schicht während der Temperung bzw. verhindern könnten. Im Falle der Implantation in Si_{0.91}Ge_{0.09} liegen die Kompositionen, gemessen im Maximum des Co Profils, innerhalb des Bereiches in dem nur CoSi₂ und SiGe stabil sind. Diese beiden Phasen werden auch nur nach der Implantation gefunden. Nach A. Lauwers [105] werden sogar bis zu einem Ge Anteil von 21 % keine CoGe-Phasen gefunden.

Als zweiter Aspekt ist in Betracht zu ziehen, daß die Implantation in Si_{0.52}Ge_{0.48} schon zu einer Amorphisierung der Oberflächenschicht führt. Nach dem Modell von Morehead (siehe Kap. 2.1.3.) ergibt sich für Co-Implantationen in SiGe eine wesentlich höhere kritische Amorphisierungstemperatur als für Si. Dies liegt an der geringeren Energie zur Erzeugung eines Frenkelpaares in SiGe [31] und dem höheren Bremsquerschnitt von Co in SiGe. Mit Gleichung (2.8) ($K' = 63.2 \text{ (eV/\text{Å})}^{0.5}$ und $U = 0.09$ [31]) und den mit TRIM berechneten Bremsquerschnitt für Co-Implantationen in Si_{0.52}Ge_{0.48} ergibt sich $T_{\infty} = 290^{\circ}\text{C}$. Die kritische Temperatur liegt somit 100° oberhalb der kritischen Temperatur für 200 keV Co-Implantationen in Si. Da diese theoretischen Werte nach experimentellen Untersuchungen i.a. zu niedrig sind (z.B. ergibt sich die kritische Temperatur für 200 keV Implantation in Si zu 300°C [69]), ist eine Implantationstemperatur von 350°C für 150 keV Co-Implantation in Si_{0.52}Ge_{0.48} zu niedrig um eine Amorphisierung zu verhindern. Die Co-Implantation in Si_{0.52}Ge_{0.48} führte daher zu einer vollständigen Amorphisierung, so daß während der Temperung auch keine CoSi₂-Schicht entstehen konnte. Die Verringerung des Schicht-Widerstandes läßt vermuten, daß sowohl CoSi₂-Ausscheidungen als auch Co_xGe_y- Ausscheidungen während der Temperung entstanden sind. Diese besitzen aber, da auch die getemperte Probe kein Channeling zeigt, keine Orientierungsbeziehung zum Si-Substrat.

In SiGe Legierungsschichten mit kleinen Ge-Konzentrationen ($\leq 9 \%$) können zwar nach Implantation mit 350° CoSi₂-Schichten hergestellt werden. Nach Erhöhung der Implantationstemperatur auf 400°C , zeigt sich aber eine deutliche Verbesserung des Channelings in den Si_{0.91}Ge_{0.09}-Schichten nach der Implantation, bedingt durch das dann effizientere Defektausheilen. Ebenso wurde in diesem Fall die Kristallqualität der CoSi₂-Schichten nach der Temperung deutlich besser. Trotzdem ist die Schichtbildung durch die Gegenwart von nur 9 % Ge stark behindert, wie an den verbleibenden CoSi₂-Ausscheidungen in der SiGe-Schicht zu erkennen ist.

Durch die Bildung der CoSi_2 -Schicht kommt es zu einer Verdrängung der in diesem Bereich vorkommenden Ge Atome. Dies führt zu einer Erhöhung der Ge-Konzentration in den SiGe-Schichten an der Grenze zur CoSi_2 -Schicht.

Die SiGe-Schichten sind durch die Implantation relaxiert. Die CoSi_2 -Schicht ist aufgrund des größeren Misfits zu SiGe stärker verspannt.

Eine weitere Optimierung dieser Schichten zu Vermeidung der Ausscheidungen ist notwendig im Hinblick auf Messungen der Schottkybarrierenhöhe oder späteren Anwendungen in Bauelementen.

7. Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde gezeigt, daß sich CoSi_2 -Schichten mit Ionenstrahlsynthese über einen weiten Schichtdickenbereich (12 - 140 nm), durch Variation der Implantationsenergie und -dosis, mit einer sehr guten Schichtqualität in Si und mit gewissen Einschränkungen auch in SIMOX-Wafern und SiGe-Schichten herstellen lassen. Es ergeben sich Schichtstrukturen die mit konventionellen Methoden nicht realisiert werden können, für Anwendungen in Bauelementen aber von großer Bedeutung sind. So konnten erstmals sehr dünne CoSi_2 -Schichten (< 30 nm) in (100) Si sowie (100) Si/ CoSi_2 / SiO_2 - und SiGe/ CoSi_2 /SiGe-Heterostrukturen hergestellt werden.

Während der Co^+ -Implantation in Si entstehen CoSi_2 -Ausscheidungen, die mit wachsender Dosis schon während der Implantation eine zusammenhängende Schicht bilden. Bei weiterer Erhöhung der Dosis konnte aus RBS Messungen geschlossen werden, daß dann im Gegensatz zur O^+ -Implantation in Si (zur Herstellung vergrabener SiO_2 -Schichten) nur teilweise eine Umverteilung des Co von den Rändern des Implantationsprofils zur Mitte hin stattfindet. Zusätzlich werden Co-Atome auf Zwischengitterplätze des CoSi_2 Gitters bzw. in kleinen CoSi Einschlüssen eingebaut.

Die Temperung führt nur zu einer zusammenhängenden Schicht, wenn die Co-Peak-Konzentration nach der Implantation mindestens 18 at% beträgt. Im Anfangsstadium der Schichtbildung, während der Temperung, wachsen die großen Ausscheidungen auf Kosten der kleinen (Ostwald - Reifung). Mittels RBS wurde die dabei stattfindende Umverteilung der Co-Atome direkt quantitativ gemessen, so daß die Aktivierungsenergie dieses Prozesses bestimmt werden konnte. Es ergibt sich (3.4 ± 0.2) eV in Übereinstimmung mit der nach der Ostwald - Reifungs - Theorie zu erwartenden Aktivierungsenergie von 3.52 eV. Die Planarisierung der Schicht erfolgt dann durch Koaleszenz der Ausscheidungen.

Die TEM Untersuchungen zeigen einen Unterschied in der Rauigkeit der Grenzfläche zwischen (111) und (100) orientierten Heterostrukturen, der auf die Form der CoSi_2 -Ausscheidungen in den verschiedenen orientierten Substraten zurückgeführt wurde. In (100) Si bilden die {111} facettierten CoSi_2 -Ausscheidungen erst bei höheren Konzentrationen bzw. während der fortgeschrittenen Umverteilung {100} Grenzflächen aus, die dann häufig zu Stufen mit {111} Facetten führt.

Außer Implantationsenergie und -dosis spielen auch die Implantationstemperatur und die Strahlstromdichte eine große Rolle für die Schichtbildung. Mit diesen Parametern lassen sich die Größenverteilungen der Ausscheidungen einstellen, die für die Schichtbildung

während der Temperung entscheidend sind. Eine geeignete Größenverteilung ist, wie in dieser Arbeit erstmals gezeigt wurde, besonders bei der Herstellung sehr dünner Schichten in (100) Si Grundvoraussetzung für eine planare Schichtbildung. Falls die Ausscheidungen während der Implantation, bedingt durch ihre Form, größer werden als die zu erwartende Schichtdicke, können keine glatten Grenzflächen bzw. eine zusammenhängende Schicht entstehen. Das Prozeßfenster ist deshalb für Schichten dünner als 30 nm sehr klein. Der optimale Strahlstrom zur Herstellung einer zusammenhängenden Schicht steigt mit wachsender Implantationstemperatur. Dabei ist, im Hinblick auf ein besseres Defektaushalten während der Implantation, eine höhere Implantationstemperatur von Vorteil.

Messungen des Verzerrungszustandes der Schichten mittels Channeling und Röntgenbeugung legten den Schluß nahe, daß die CoSi_2 -Schichten während der Temperung bei 1150°C unabhängig von der Schichtdicke relaxieren. Die Verzerrung parallel zur Oberfläche von 0.7 % ergibt sich durch die thermische Verzerrung während der Abkühlung auf Raumtemperatur. Senkrecht zur Oberfläche wurde mit Röntgenbeugung eine Verzerrung der CoSi_2 -Schichten von -0.91 % in (100) Si und -0.53 % in (111) Si gemessen. Diese Orientierungsabhängigkeit ist durch die Anisotropie der Elastizität von CoSi_2 bedingt.

Mit abnehmender Schichtdicke findet in (111) orientierten Si/ CoSi_2 /Si-Heterostrukturen ein Wechsel der CoSi_2 Orientierung von A-Typ zu B-Typ statt, begründet durch die Zunahme von B-orientierten Ausscheidungen während der Implantation mit niedrigen Energien und Dosen.

Der Unterschied in der Verspannung zwischen (111) und (100) orientierten CoSi_2 -Schichten ist möglicherweise auch der Grund für die unterschiedlichen elektrischen Transporteigenschaften dieser Schichten. Durch einen Fit der Bloch - Grüneisen - Formel an die Widerstandsmessdaten, wurde festgestellt, daß s-d Elektron - Streuung, anstatt der normalen Elektron-Phonon Streuung, der dominante Streuprozess ist. In Übereinstimmung mit Bandstrukturechnungen ergaben die Hallmessungen, daß CoSi_2 ein p-leitendes Metall ist (wie z. B. auch Al).

Die mittlere freie Weglängen der Ladungsträger, bestimmt aus dem Restwiderstand dicker Schichten und Magnetowiderstandsmessungen bei 4 K, ist sehr groß mit 360 nm und 110 nm in (100) bzw. (111) CoSi_2 . Bei Abnahme der Schichtdicke kommt es daher zu einer Erhöhung des Widerstands aufgrund von klassischer Grenzflächenstreuung. Im Tieftemperaturbereich ($T < 20 \text{ K}$) wird durch schwache Lokalisierung aufgrund der langen Kohärenzlänge von CoSi_2 eine zusätzlichen Erhöhung des Restwiderstands verursacht.

Durch Variation der Schichtdicke konnte zum erstenmal die Schottkybarrierenhöhe in Abhängigkeit von der Orientierung und somit von der Koordination der Co-Atome an der Grenzfläche gemessen werden. Für A-Typ CoSi_2 -Schichten in (111) Si (Co 7-fach koordiniert) ergibt sich zur Si-Deckschicht und zum Si-Substrat eine Schottkybarrierenhöhe von $\phi_B = 0.76$ eV. B-Typ orientierte Schichten (Co 5- oder 8-fach koordiniert) haben dagegen eine Barrierenhöhe von 0.53 eV zur Si-Deckschicht, während zum Si-Substrat wieder 0.76 eV gemessen werden. In (100) orientierten Heterostrukturen scheint die Schottkybarriere mit der unterschiedlichen Rauigkeit der Grenzflächen und dem damit einhergehenden Wechsel in der Co-Koordination, zusammenzuhängen. Für die glatte CoSi_2 /Si-Substrat Grenzfläche ergibt sich $\phi_B = 0.79$ eV und für die raue Si-Deckschicht/ CoSi_2 Grenzfläche 0.68 eV.

Die Ionenstrahlsynthese kann, wie in dieser Arbeit gezeigt wurde, außer in Si auch zur Herstellung von einkristallinen CoSi_2 -Schichten in SIMOX-Wafern und SiGe-Schichten angewandt werden.

In SIMOX-Wafern können einkristalline CoSi_2 -Schichten hergestellt werden, wenn sich das Maximum des Implantationsprofils vor der Si/SiO₂ Grenzfläche befindet. Liegt das Maximum des Implantationsprofils in oder hinter der Si/SiO₂ Grenzfläche wird diese zerstört und es bildet sich eine polykristalline CoSi_2 -Schicht. Die im SiO₂ liegenden Co-Atome bilden dort $\text{Co}_x\text{Si}_y\text{O}_z$ -Ausscheidungen und tragen daher nicht mehr zur CoSi_2 -Schichtbildung bei.

In $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ Schichten ist die Bildung der CoSi_2 -Schicht von der Ge-Konzentration abhängig. Ist die Ge-Konzentration zu hoch ($x \geq 50$ %) wird die SiGe-Schicht während der Implantation amorphisiert, so daß sich keine CoSi_2 -Ausscheidungen und somit auch keine CoSi_2 -Schichten während der Temperung bilden können.

In $\text{Si}_{0.91}\text{Ge}_{0.09}$ entstehen dagegen während der Implantation CoSi_2 -Ausscheidungen, so daß durch Temperung eine einkristalline Schicht erzeugt werden kann. Dabei wird das Ge aus der CoSi_2 -Schicht verdrängt. Dies verursacht eine Erhöhung der Ge-Konzentration in den angrenzenden SiGe-Schichten.

Ein großer Vorteil der Ionenstrahlsynthese gegenüber konventionellen Aufdampftechniken ist die Möglichkeit, durch Verwendung einer SiO₂ Maske, bereits während der Implantation CoSi_2 Strukturen im μm Bereich herzustellen. Die Si-Deckschicht kann dann als Keimschicht für epitaktisches Wachstum einer weiteren Si-Schicht dienen, so daß die Herstellung spezieller Bauelemente (z.B. PBT und MBT) sowohl in (111) Si als auch in (100) Si möglich wird.

8. Literaturverzeichnis

- [1] J. C. Hensel, Mater. Res. Symp. Proc. Vol. 54 (1986), 499
- [2] S. P. Murarka, Silicides for VLSI Applications, Academic Press, New York, 1983
- [3] K. W. Goossen, A. E. White and K. T. Short, Electron. Lett. 26 (1990), 49
- [4] A. E. White, K. T. Short, K. Maex, R. Hull, Y. -F. Hsieh, S. A. Audet, K. W. Goossen, D. C. Jacobsen and J. M. Poate, Nucl. Instr. and Meth. B59/60 (1991), 693
- [5] J. C. Hensel, A. F. J. Levi, R. T. Tung and J. M. Gibson, Appl. Phys. Lett. 47 (1985), 151
- [6] K. Ishibashi and S Furukawa, IEDM (1984), 868
- [7] A. Schüppen, S. Mantl, L. Vescan and H. Lüth, in Proc. of the ESSDERC, Eds.: W Eccleston and P J. Rossen, Adam Hilger (1990), 45
- [8] H. von Känel, J. Henz, M. Ospelt and A. Gruhle, Physica Scripta T35 (1991), 287
- [9] D. D. Rathman and R. W. Mountain, IEEE Trans. Electron. Dev. ED-32 (1985), 2554
- [10] A. H. van Ommen, C. W. T. Bulle - Liewwma and C. Langereis, J. Appl. Phys. 64 (1988), 2706
- [11] L. F. Mattheiss and D. R. Hamann, Phys. Rev. B37 No.18 (1988), 10623
- [12] R. T. Tung, F. Schrey and S. M. Yalisove, Appl. Phys. Lett. 55 (19) (1989), 2005
- [13] J. R. Jimenez, L. M. Hsiang, K. Rajan, S. Hashimoto, R. D. Thompson and L. J. Schowalter, J. Vac. Sci. Technol. A8 (3) (1990), 3014
- [14] Q. F. Xiao, J. R. Jimenez, H. J. Schowalter, L. Luo, T. E Mitchell and W. M. Gibson, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 220 (1991), 519
- [15] A. E. White, K. T. Short, R. C. Dynes, J. P. Garno and J. M. Gibson, Appl. Phys. Lett. 50 (2) (1987), 95
- [16] K. Izumi, M. Doken and H. Arigoshi, Electron. Lett. 14 (1978), 593
- [17] M. A. Guerra, Solid State Technology Nov. 1990, 75

- [18] C. A. King, J. L. Hoyt, C. M. Gronet, J. Gibbons, M. P. Scott and J. Turner
Electr. Dev. Lett. **10** (1989), 52
- [19] J. Lindhard, M. Scharff and H. E. Schiøtt,
Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk **33** (1963), no. 14
- [20] H. A. Bethe, Ann. Phys. **5** (1930), 325
- [21] F. Bloch, Ann. Phys. **16** (1933), 285
- [22] J. P. Biersack and D. Fink in "Ion implantation in semiconductors",
Ed.: S. Namba, Plenum Press, New York, 1974, 211
- [23] J. F. Ziegler, J. P. Biersack and U. Littmark,
Stopping and Ranges of Ions in Matter, Pergamon Press, New York, 1985
- [24] W. H. Bragg, R. Kleemann, Phil. Mag. **10** (1905), 318
- [25] K. Kohlhof, Dissertation (Universität zu Köln 1989),
Berichte der KFA Jülich Nr. Jül-2299 (August 1989)
- [26] S. N. Bunker and A. J. Armani, Nucl. Instr. and Meth. **B39** (1989), 7
- [27] M. Nastasi and J. W. Mayer, Mater. Sci. Rep. **6** (1) (1991), 1
- [28] G. H. Kinchin and R. S. Pease, Rep. Progr. Phys. **18** (1955), 1
- [29] H. H. Anderson, Appl. Phys. **18** (1979), 131
- [30] P. Sigmund, Rev. Roum. Phys. **17** (1972), 823
Rad. Effects **1** (1969), 15
- [31] F. E. Morehead, J. R. and B. L. Crowder in "Ion Implantation" (C. Gordon and
Breach Science Publishers), eds.: F. H. Eisen and L. T. Chadderton, 25
- [32] E. R. Weber in "Properties of Silicon", EMIS Datareviews Series No. 4
(INSPEC, London, 1988), 435
- [33] R. D. Doherty, in "Physical Metallurgy", Eds. R. W. Cahn and P. Haasen
(North Holland, Amsterdam, 1983), 933
- [34] F. R. N. Nabarro, Proc. Phys. Soc. London **52** (1940), 90
- [35] S. Mantl, Mater. Sci. Rep. **8** No.1,2 (1992), 1
- [36] H. Trinkaus and S. Mantl, accepted for publication in Nucl. Instr. and Meth.

- [37] "Chemical Thermodynamics of Materials", ed. C. H. P. Lupis
(North Holland, Amsterdam, 1983), 368 ff
- [38] D. R. Hamann, Phys. Rev. Lett. **60** (4) (1988), 313
- [39] C. W. T. Bulle-Lieuwma, A. H. van Ommen, D. E. W. Vandenhoudt,
J. J. M Ottenheim and A. F. de Jong, J. Appl. Phys. **70**(6) (1991), 3093
- [40] W. Ostwald, Zeitschr. Phys. Chem. **34** (1900), 495
- [41] I. M. Lifshitz and V. V. Slyozov, J. Phys. Chem. Solids **19** (1961), 35
- [42] C. Wagner, Z. Elektrochem. **65** (1961), 35
- [43] M. Marder, Phys. Rev. **A36** (1987), 858
- [44] Y. Enomoto, M. Tokuyama and K. Kawasaki, Acta Metall. **34** (1986), 2119
- [45] L. C. Brown, Scripta Metall. **21** (1987), 693
- [46] R. T. Tung, Phys. Rev. Lett. **52** (1984), 461
- [47] R. T. Tung, A. F. Levi, J. P. Sullivan and F. Schrey, Phys. Rev. Lett. **66** (1991), 72
- [48] D. Cherns, J. C. H. Spence, G. R. Anstis and J. L. Hutchinson,
Phil. Mag. **A46** (1982), 849
- [49] D. Cherns, C. J. D. Hetherington and C. J. Humphreys,
Phi. Mag. **A49** (1) (1984), 165
- [50] C. W. T. Bulle-Lieuwma, A. F. de Jong and D. E. W. Vandenhoudt,
Phil. Mag. **A64** (2) (1991), 255
- [51] P. Werner, W. Jäger and A. Schüppen, accepted for publication in J. Appl. Phys.
- [52] D. Loretto, J. M. Gibson and S. M. Yalisove, Phys. Rev. Lett. **63** (3) (1989), 298
- [53] M. Murakami and T. S. Kuan in: Treatise on Materials Science and Technology,
(Academic Press, 1982) Vol. **24**, 163
- [54] J. Hornstra and W. Bartels, J. Crystal Growth **44** (1978), 513
- [55] G. Günin, M. Ignati and O. Thomas, J. Appl. Phys. **68** (1990), 6515
- [56] J. H. van der Merwe, J. Appl. Phys. **34** (1962), 123
- [57] K. N. Tu and J. W. Mayer in: Thin Films - Interdiffusion and Reaction,
Eds. J. M. Poate, K. N. Tu and J. W. Mayer (Wiley, New York, 1978), 382

- [58] G. V. Samsonov and I. M. Vinitiskii, Handbook of Refractory Compounds, (IFI/Plenum, New York, 1980), 206
- [59] R. People and J. C. Bean, Appl. Phys. Lett. **47** (3) (1985), 322
- [60] J. W. Matthews and A. E. Blakeslee, J. Cryst. Growth **27** (1974), 118
- [61] E. Chainet, M. deCrescenzi, J. Derrien, T. T. A. Nguyen and R. C. Cinti Surf. Sci. **168** (1986), 801
- [62] Y. C. Kao, K. L. Wang, E. deFresart, R. Hull, G. Bai, D. Jamieson and M.-A. Nicolet. J. Vac. Sci. and Techn. **B5** (1987), 745
- [63] H. von Känel, Mater. Sci. Rep. **8** (1992), 1
- [64] C. W. T. Bulle-Lieuwma, A. H. van Ommen, J. Hornstra and C. N. A. M. Aussems, J. Appl. Phys. **71** (1992), 2211
- [65] J. M. Gibson, J. C. Bean, J. M. Poate and R. T. Tung Appl. Phys. Lett. **41**(9) (1982), 818
- [66] A. E. M. J. Fischer, T. Gustafsson and J. F. van der Veen Phys. Rev. **B37** (1988), 6305
- [67] A. E. M. J. Fischer, E. Vlieg, J. F. van der Veen, M. Clausnitzer and G. Materlik Phys. Rev. **B36** (1987), 4769
- [68] C. W. T. Bulle-Lieuwma, A. F. deJong, A. H. van Ommen, J. F. van der Veen and J. Vrijmoeth, Appl. Phys. Lett. **55**(7) (1989), 648
- [69] K. Radermacher, S. Mantl, K. Kohlhof and W. Jäger, J. Appl. Phys. **68** (6) (1990), 3001
- [70] S. Mantl and H. Bay, Appl. Phys. Lett. **61**(3) (1992), 267
- [71] I. Michel, Diplomarbeit Aachen 1993
- [72] "Backscattering Spectrometry", W. K. Chu, J. M. Mayer and M. A. Nicolet, Academic Press, N.Y. 1978
- [73] "Materials Analysis by Ion Channeling", L.C. Feldman, J. M. Mayer and S. T. Picraux, Academic Press, N.Y. 1982
- [74] N. Bohr, Phil. Mag. **30** (1915), 581

- [75] L. R. Doolittle, Nucl. Instr. and Meth. **B9** (1985), 344
- [76] S.T. Picraux, W. K. Chu, W. R. Allen and J. E. Ellison, Nucl. Instr. and Meth. **B15** (1986), 306
- [77] J. F. van der Veen, Surf. Sci. Rep. **5** (5/6) (1985), 1
- [78] E. J. van Loenen, J. W. M. Frenken, J. F. van der Veen and S. Valeri, Phys. Rev. Lett. **54** (1985), 827
- [79] J. W. M. Frenken, R. G. Smeenk and J. F. van der Veen, Surf. Sci. **135** (1983), 147
- [80] L. J. van der Pauw, Philips Res. Repts. **13** (1958), 1
- [81] "Physics of Semiconductor Devices", S. M. Sze, John Wiley and Sons, New York 1981
- [82] P. Borgesen, R. Behrisch and B. M. U. Scherzer, Appl. Phys. **A27** (1982), 183
- [83] D. Bahr, W. Press, R. Jebasinski and S. Mantl, Phys. Rev. **B** in press
- [84] P. F. P. Fichtner, W. Jäger, K. Radermacher and S. Mantl, Nucl. Instr. and Meth. **B59/60** (1991), 632
- [85] G. Meechan and J. A. Brinkman, Phys. Rev. **103** (1956), 1193
- [86] A. W. Overhauser, Phys. Rev. **90** (1953), 393
- [87] K. Maex, J. Vanhellemont, S. Petersson and A. Lauwers Appl. Surf. Sci. **53** (1991), 273
- [88] E. H. A. Dekempeneer, J. J. M. Ottenheim, P. C. Zalm, C. W. T. Bulle-Lieuwma, D. E. W. Vandenhoudt and E. P. Naburgh, Appl. Phys. Lett. **58** (19) (1991), 2102
- [89] K. Radermacher, Diplomarbeit, Jülich 1990
- [90] R. J. Schreutelkamp, F. W. Saris, J. F. M. Westendorp, R. E. Kaim, G. B. Odium and K. T. F. Janssen, Mater. Sci. Eng. **B2** (1989), 139
- [91] S. Hashimoto, Y. Q. Feng, W. M. Gibson, L. J. Schowalter and B. D. Hunt, Nucl. Instr. and Meth. **B13** (1986), 45
- [92] A. Vantomme, M. F. Wu, G. Langouche, H. Vanderstraeten and Y. Bruynserade, Appl. Surf. Sci. **53** (1991), 278

- [93] G. C. F. Newcombe and G. G. Lonzarich, *Phys. Rev.* **B37**(18) (1988), 10619
- [94] A. H. van Ommen, C. W. T. Bulle-Lieuwma, J. J. M. Ottenheim and A. M. L. Theunissen, *J. Appl. Phys.* **67** (1990), 1767
- [95] J. J. M. Vandenberg, A. E. White, R. Hull, K. T. Short and S. M. Yalisove, *J. Appl. Phys.* **67** (1990), 787
- [96] G. W. Webb, *Phys. Rev.* **181** (1969), 1127
- [97] S. Sivaram, P. J. Ficalora and K. C. Cadien, *J. Appl. Phys.* **58** (1985), 1314
- [98] T. Hirano and M. Kaise, *J. Appl. Phys.* **68** (1990), 627
- [99] A. Briggs, O. Thomas, R. Madar and J. P. Senateur, *Appl. Surf. Sci.* **53** (1991), 240
- [100] K. Radermacher, D. Monroe, A. E. White, K. T. Short and R. Jebasinski, to be published in *Phys. Rev.* **B**
- [101] F. Nava, K. N. Tu, E. Mezzega, M. Michelini and G. Queirolo, *J. Appl. Phys.* **61** (3) (1987), 1085
- [102] T. Sakaguchi, M. Watanabe and M. Asada, *IEICE Transactions*, Vol. **E74** No.10 (1991), 3326
- [103] M. Watanabe, T. Suemasu, S. Muratake and M. Asada, *Appl. Phys. Lett.* **62** No.3 (1993), 300
- [104] O. Thomas, S. Delage, F. M. d'Heurle and G. Scilla, *Appl. Phys. Lett.* **54** (3) (1989), 228
- [105] A. Lauwers, K. Maex, W. Vandervorst, G. Brijs, J. Poortsmans, M. Caymax, L. Vanhellemont and S. Petersson, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **235** (1992), 299
- [106] A. Schüppen, Dissertation Aachen 1992
- [107] P. L. F. Hemment, E. Maydell-Ondrusz, K. G. Stevens, J. A. Kilner and J. Butcher, *Vacuum* **34** (1984), 203
- [108] K. Radermacher, S. Mantl, Chr. Dieker, H. Holzbrecher, W. Speier and H. Lüth, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **235** (1991), 273
- [109] A. H. van Ommen, J. J. M. Ottenheim, C. W. T. Bulle-Lieuwma and A. M. L. Theunissen, *Appl. Surf. Sci.* **38** (1989), 197

- [110] Z. Tan, J. F. Budnick, F. H. Sanchez, G. Tourillon, F. Navamar and H. C. Hayden, Phys. Rev. **B40** (1989), 6368
- [111] R. S. Spraggs, K. J. Reeson, R. M. Gwilliam, B. J. Sealy, A. deVeirman and J. van Landuyt, Nucl. Instr. and Meth. **B55** (1991), 836
- [112] J. K. Lindner and E. H. teKaat, J. Mater. Res. **3** (1988), 1238
- [113] A. deVeirman, J. van Landuyt, K. J. Reeson, R. Gwilliam, C. Jeynes and B. J. Sealy, J. Appl. Phys. **68** (1990), 3792
- [114] R. Hull, A. E. White, K. T. Short and J. M. Bonar, J. Appl. Phys. **68** (1990), 1629
- [115] K. Kohlhof, S. Mantl, B. Stritzker and W. Jäger, Nucl. Instr. and Meth. **B39** (1989), 276
- [116] K. Kohlhof, S. Mantl, B. Stritzker and W. Jäger, Appl. Surf. Sci. **38** (1989), 207
- [117] E. H. A. Dekempeneer, J. J. M. Ottenheim, D. E. W. Vandenhoudt, C. W. T. Bulle-Lieuwma and E. G. C. Lathouwers, Nucl. Instr. and Meth. **B55** (1991), 769
- [118] M. Müller, Diplomarbeit Universität Kiel 1992
- [119] Y. Hsieh, R. Hull, A. E. White and K. T. Short, J. Appl. Phys. **70**(12) (1991), 7354
- [120] "Solid State Physics", N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, Holt, Rinehart and Winston, Japan 1981
- [121] "The Hall Effect in Metals and Alloys", C. M. Hurd, Plenum Press, New York 1972
- [122] K. Fuchs, Proc. Cambridge Philos. Soc. **34** (1938), 100
- [123] J. R. Sambles, Thin Solid Films **106** (1983), 321
- [124] D. Bahr, Dissertation, Universität Kiel, 1992
- [125] Z. Tesanovic, M. V. Jaric and S. Maekawa, Phys. Rev. Lett. **57** (1986), 2760
- [126] W. Schottky, Z. Phys. **113** (1939), 367
- [127] J. Bardeen, Phys. Rev. **71** (1947), 717

- [128] W. Mönch, Rep. Prog. Phys. **53** (1990), 221
- [129] J. Tersoff, Phys. Rev. Lett. **52** (1984), 465
- [130] P. E. Schmid, Helvetica Physica Acta **58** (1985), 371
- [131] R. T. Tung, Phys. Rev. **B45** (1992), 13509
- [132] R. T. Tung, J. Vac. Sci. Technol. **B2** (1984), 465
- [133] J. Vrijmoeth, J. F. van der Veen, D. R. Heslinga and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. **B42** (15) (1990), 9598
- [134] M. Liehr, P. E. Schmidt, F. K. LeGouches and P. S. Ho, Phys. Rev. Lett. **54** (1985), 2139
- [135] G. P. Das, P. Bloechl, O. K. Andersen, N. E. Christensen and O. Gunnarson, Phys. Rev. Lett. **63** (1989), 1168
- [136] R. T. Tung in: "Silicon in Molecular Beam Epitaxy", Vol. 2, Eds.: E. Kasper and J. C. Bean (CRC Press, Boca Raton 1988), 13
- [137] S. Delage, P. A. Badoz, E. Rosencher and F. Arnaud D'Avitaya, Electronic Lett. **22** (4) (1986), 207
- [138] R. T. Tung, Phys. Rev. Lett. **66** (1) (1991), 72
- [139] H. Fujitani and S. Asano, Appl. Surf. Sci. **41/42** (1989), 164
- [140] H. C. Swart, G. L. P. Berning and J. DuPleissis, Thin Solid Films **189** (1990), 321
- [141] F. Wald and S. J. Michalik, J. Less-Common Metals **24** (1971), 277

9. Veröffentlichungen im Rahmen dieser Arbeit

Ionenstrahlsynthese von CoSi_2

R. Jebasinski and S. Mantl

Annual Report Institut für Schicht- und Ionentechnik, Forschungszentrum Jülich,,1990, 54

The effect of dose on the growth of buried CoSi_2 layers in (111) and (100) Si produced by ion implantation

S. Mantl, R. Jebasinski and D. Hartmann

Nucl. Instr. Meth. in Phys. Res. **B59/60** (1991), 666-670

CoSi_2 precipitate coarsening during formation of buried epitaxial CoSi_2 layers by ion beam synthesis

R. Jebasinski, S. Mantl, K. Rademacher, P. Fichtner, W. Jäger and Ch. Buchal

Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. **201** (1991), 411-416

Formation of buried CoSi_2 layers with ion beam synthesis at low implantation energies

R. Jebasinski, S. Mantl, Ch. Dieker and L. Vescan

Appl. Surf. Sci. **53** (1991), 264-272

Synthesis of thin buried CoSi_2 layers by low energy cobalt implantation

R. Jebasinski, S. Mantl and Ch. Dieker

Mater. Sci. and Eng. **B12** (1992), 135-138

Ion scattering investigations of buried CoSi_2 layers produced by ion beam synthesis

R. Jebasinski, S. Mantl, W. Jäger and Ch. Dieker

Nucl. Instr. Meth. in Phys. Res. **B64** (1992), 99-102

Buried single-crystal CoSi_2 layers in SiGe alloys made by ion beam synthesis

R. Jebasinski, S. Mantl, Chr. Dieker, G. Crecelius, H. Dederichs and L. Vescan

Appl. Phys. Lett. **61** (20) (1992), 2409

Fabrication of thin buried CoSi_2 layers in Si (100) with ion beam synthesis

R. Jebasinski, S. Mantl and Chr. Dieker

Thin Solid Films **223** (1993), 298

Ion beam synthesis of buried CoSi_2 layers in SiGe Alloys

R. Jebasinski, S. Mantl, Chr. Dieker, H. Dederichs, L. Vescan and R. Butz

to be published in Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 1993

Formation of CoSi₂ in SIMOX wafers by high dose cobalt implantation

T. P. Sjoreen, R. Jebasinski, S. Mantl, Holzbrecher and Speier

Mater. Sci. and Eng. **B12** (1992), 129-133

Permeable Base Transistors with Ion Implanted CoSi₂ - Gate

A. Schüppen, S. Mantl, L. Vescan, H. Lüth and R. Jebasinski

Mater. Sci. and Eng. **B12** (1992), 157-160

Effect of doping profiles on Si/CoSi₂ permeable base transistors

A. Schüppen, L. Vescan, R. Jebasinski, A. v.d. Hart and H. Lüth

Microelectronic Engineering **18** (1992), 259-266

Grating Incidence Diffraction on buried Silicides

D. Bahr, B. Burandt, F. Paul, W. Press, D. Degenhardt, R. Jebasinski and S. Mantl

Annual Report DESY 1990, 447

Depth Resolved Diffuse Scattering from Buried CoSi₂ Layers in Silicon

D. Bahr, B. Burandt, M. Toan, W. Press, R. Jebasinski and S. Mantl

to be published in "Surface X-Ray and Neutron Scattering", Springer Verlag, 1992

X-ray reflectivity and diffuse scattering study on CoSi₂ layers in Si produced by ion beam synthesis

D. Bahr, W. Press, R. Jebasinski and S. Mantl

Phys. Rev. **B** (1992), in press

Annealing dependence of Silicon implanted by a high dose of Cobalt ions investigated by in Situ X-ray diffraction

M. Müller, D. Bahr, W. Press, R. Jebasinski and S. Mantl

to be published in Phys. Rev. **B**

Electronic structure determination of ion beam synthesized CoSi₂ using photon in-photon out spectroscopies

S. Eisebitt, T. Böske, J.-E. Rubensson, J. Kojnok, W. Eberhardt, R. Jebasinski, S. Mantl, P.

Skytt, J. Guo, N. Wassdahl, J. Nordgren and K. Holldack

to be published in Phys. Rev. **B**

Quantum transport of buried, single-crystalline CoSi₂ layers in (111) Si and (100) Si substrates

K. Radermacher, D. Monroe, A. E. White, K. T. Short and R. Jebasinski

to be published in Phys. Rev. **B**

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich allen herzlich danken, die am Zustandekommen dieser Arbeit mitgewirkt haben. Insbesondere danke ich

Herrn Prof. Dr. B. Stritzker für die Möglichkeit diese Arbeit am Institut für Schicht- und Ionentechnik im Forschungszentrum Jülich durchführen zu können,

Herrn Priv.-Doz. Dr. S. Mantl für die wissenschaftliche Betreuung, die vielen Ratschläge und seine stetige Diskussionsbereitschaft,

Herrn Dipl. Phys. K. Radermacher für die vielen Diskussionen über die Eigenschaften von Siliziden,

Herrn Dr. A. Schüppen für die Strukturierung der Proben und die Hilfe bei IV und IT Messungen,

Herrn Dr. T. P. Sjoreen, Oak Ridge National Laboratory, USA, und O. Karpenko, University of Michigan, USA, für die gute Zusammenarbeit bei den Untersuchungen zur Co-Implantation in SIMOX - Wafer,

Frau Dipl. Ing. Chr. Dieker und Herrn Dr. W. Jäger für die TEM - Untersuchungen,

Herrn Dr. G. Crecelius für die STEM - Untersuchungen,

Frau S. Mesters für die schnelle Präparation der TEM - Proben,

Herrn M. Gebauer für die zuverlässige Bedienung des 200 keV Ionenbeschleunigers und Erfüllung aller meiner Implantationswünsche,

Herrn W. Michelsen für die Bedienung des 500 keV Beschleunigers,

Herrn Dr. D. Guggi, Herrn Dr. C. Freiburg sowie Herrn W. Reichert für die Röntgenuntersuchungen,

Herrn Dr. H. Dederichs für die Auger-Analysen,

Frau Dr. L. Vescan und Herrn Dr. R. Butz für die Herstellung epitaktischer Si - und SiGe - Schichten,

Herrn Dr. W. Speier und Herrn H. Holzbrecher für die SIMS - Analysen,

Herrn W. Jansen, der ein schnelles Arbeiten auf dem VAX - Rechner erst ermöglichte,

Herrn Stefan Blumen und Herrn M. Skotarzik für deren Hilfe bei einigen Auswerteprogrammen,

der Bedienungsmannschaft des Tandetron - Beschleunigers, bestehend aus den Herren Dr. Dworschak, S. Berger, W. Pieper, H. Schwalbach, H. Scheeren und D. Donimierski, für den reibungslosen Betrieb,

allen Mitarbeitern der Gruppe Ionentechnik für die außergewöhnlich gute Arbeitsatmosphäre und viele hilfreiche Diskussionen.

Schließlich danke ich Herrn Dr. L. Rehn, Argonne National Laboratory, USA, für die Möglichkeit drei Monate in seiner Arbeitsgruppe am "High Voltage Electron Microscope" zu arbeiten, sowie Herrn Dr. P. Okamoto für die Betreuung und gute Zusammenarbeit während dieser Zeit.

THE UNIVERSITY OF CHICAGO PRESS
1215 EAST 58TH STREET, CHICAGO, ILL. 60637
TEL: 773-936-5000 FAX: 773-936-5001
WWW.CHICAGO.PRESS.EDU

JüI-2738

März 1993

ISSN 0366-0885